.....
 原 著 論 文

反射によりトレンチ対向側壁に注入された イオン分布の実測とシミュレーション

田 村 かよ子・小 川 久・布 施 玄 秀・岩 崎 裕

松下電器産業(株)半導体研究センター 〒570 大阪府守口市八雲中町 3-15

(1989年9月14日 受理)

Measurement and Simulation of Impurity Distribution in the Opposite Trench Sidewall Implanted by Reflection

Kayoko TAMURA, Hisashi OGAWA, Genshu FUSE and Hiroshi IWASAKI

Semiconductor Research Center, Matsushita Electric Ind. Co., Ltd.
 3-15 Yagumonakamachi, Moriguchi-shi, Oosaka 570

(Received September 14, 1989)

Ion implantation is employed for trench sidewall doping. Aspect ratios of trenches for high Mbit DRAM become very large, so that very small grazing incidence ion implantation to sidewall is necessary to avoid shadowing effect. In this case, ion reflection in trenches occurs at a high rate and these reflected ions are implanted to the opposite sidewall, so it is very important to know this effect to apply real devices. We have studied these ion reflection effects in trenches by SIMS, and spatial and energy distributions by Monte Carlo Simulation. It is found that reflected atoms were concentrated at the specular reflection angle. The reflected ions were also scattered with large angles because of diffuse and inelastic scattering. These diffusely scattered atoms are implanted to the region facing to the directly implanted region. The experimental results are reproduced well by using distribution functions for an amorphous surface.

1. はじめに

イオン注入技術は、超 LSI の製作プロセスには欠かせない技術であるが、半導体メモリーのダイナミック RAM 素子の微細化により容量形成部の面積が不足し、容量を得るためには三次元的に面積を利用できるトレンチ構造等にすることが必要¹⁾。このトレンチ構造では側壁への不純物ドーピングをイオン注入により行う場合、イオンビームの入射角度はトレンチ側壁面に対してすれすれになる。このように入射イオンビームが標的表面の法線から極めて大きな角度で入射する場合、イオンの表面反射の現象が顕著となる^{2,3)}。反射したイオンは、トレンチの対向側壁に注入されるため、実デバイスにおいてこれを考慮する必要がある⁴⁾。本論文では、このイオン

の反射と対向側壁への注入についての模擬実験およびそのシミュレーション結果との比較について述べる。

2. イオン注入効率の入射角度依存性

イオンの注入効率の計算をモンテカルロシミュレーション (MARLOWE)⁵⁾ によりおこなった。As⁺, B⁺, P⁺ についての注入効率の入射角度依存性を Fig. 1 に示す。注入エネルギーについては、それぞれ 150 keV, 50 keV, 70 keV を採用した。イオンの入射角度が 60° を越えるあたりから注入角度が大きくなるにつれて急激に反射イオンが増大することがわかる。また、軽いイオンほど低い角度から反射し始め、注入角度が 85° を越すとどのイオンもほとんど同じ反射量となる。トレンチ側壁にイオン注入を行う場合、これらの反射したイオンはト

Fig. 1 Rate of implanted to incident ions vs. polar angle of incidence for these ions incident on amorphous Si calculated by MARLOWE.

Fig. 2 Schematic arrangements of samples for depth profile measurement by complementary experiments of trench sidewall doping.

レンチの対向側壁に注入されることになる。

3. 不純物の深さ方向濃度分布

トレンチ内における反射イオンによる対向側壁へのドーピングの様子を観察するために模擬実験を行った。実デバイスの大きさで、トレンチ側壁の原子濃度の深さ分布を測定することは、トレンチがあまりにも微細なため、高精度な測定は期待できない⁶⁾。そこで、実トレンチの代わりに $10 \times 30 \text{ mm}$ のウェーハ片2枚を 1 mm と 2 mm の間隔で相対して並べることでトレンチと相似形の構造を作成して模擬実験を行った。**Fig. 2** に実際の実験の系を示す。測定点は図中に示す4点で、④は直接イオン注入された点、③は下から 25 mm 、⑤は 20 mm 、⑥は 10 mm 。つまり③は直接入射領域のほぼ中心付近の対向側壁、⑤は直接入射領域の底付近の対向側壁、⑥はほぼミラー反射の領域を示す。イオン注入角度は 4° と 7.5° で、これはトレンチ側壁に対しては 86° と

Fig. 3 Depth profiles of As implanted to parallel Si slices shown by insets at 150 keV at incident angles of 7.5° .

Fig. 4 Depth profiles at the directly implanted point ④ and at the indirectly implanted point ③ in Fig. 3. The curves are aligned so that the peaks coincide.

82.5° の入射角度に相当する。

なお、以下においてトレンチ構造の基板にイオン注入する場合に示す角度は基板平面部に対する入射角度を示す。また、反射角度は反射面の法線からの角度とする。

Fig. 3 にトレンチに As^+ を注入角度 7.5° 、加速エネルギー 150 keV 、ドーズ量 $1.07 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ でイオン注入を行った場合の、注入直後の原子濃度の深さ分布を、**Fig. 4** に、領域③と領域④での原子濃度の深さ分布をピーク濃度値で規格化したときの、濃度の深さ分布を示す。直接注入領域の対向側壁にもかなりのイオンが注入されていることがわかる。直接イオン注入された領域④の濃度の約 25% のイオンが対向側壁の領域③にも注入

Fig. 5 Depth profiles of As implanted to parallel Si slices shown by insets at 150keV at incident angles of 4°.

されている。反射により注入された領域②, ③, ④は直接入射領域①に比べて、ピーク位置が浅い方に存在しており、分布の広がりも小さくなる特徴がある。領域②のイオンの入射角度は領域①に比べて小さいにもかかわらず、浅く形成されていることから、領域①に比べてエネルギーの低いイオンが注入されたと考えられる。また、鏡面反射方向の③に比べ②の方が濃度が高く、②と③の濃度はほぼ同じぐらいになる。同様に Fig. 5 にトレンチに As^+ を注入角度 4°, 加速エネルギー 150 keV, ドーズ量 $2.00 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ でイオン注入を行った場合の、注入直後の原子濃度の深さ分布を示す。反射するイオンの量がイオン注入角度 7.5° に比べて多いために対向側壁の濃度が多くなる。領域②においては直接入射領域の約 45% にも達している。しかしこの反面、領域③ではイオン注入角度 7.5° の場合に比べて立体角がますます小さくなるため一桁程度低濃度になる。

4. 反射イオンの角度分布の計算結果

モンテカルロシミュレーション (MARLOWE) を用いて反射イオンの角度分布の計算を行った。10000 個の As^+ イオンを注入角度 4° (トレンチ側壁に対しては 86°), 加速エネルギー 150 keV で、単結晶シリコンと非晶質シリコンへイオン注入した場合の、反射の角度分布を Fig. 6 に示す。単結晶シリコンの場合には、ほぼ入射角度に等しい鏡面方向の反射がきわめて多くなるが、これは単結晶における結晶のチャネリング効果が反射に大きく影響することを示す。しかし現実の結晶シリコンの表面には自然酸化膜があることおよび、イオン注入中に高密度の欠陥が表面に形成されるため、後に実験との比較

Fig. 6 Number of reflected atoms vs. (90° - reflection angle) for 10000 incident atoms for As implantation to single crystal and amorphous Si at an incident angle of 4° with energy of 150 keV by Monte Carlo Simulation.

Fig. 7 Number of reflected atoms vs. azimuthal angle for 10000 incident atoms for As implantation at an incident angle of 7.5° with energy of 150 keV by Monte Carlo Simulation.

で示すように、非晶質シリコンとして扱う方が現実によく相応する。なお実験において酸化膜表面から反射させた場合と、いわゆる自然酸化膜表面を持つ単結晶シリコン表面から反射させた場合とではほぼ同様の結果を得ることを確認した。 As^+ イオンを注入角度 7.5° (トレンチ側壁に対しては 82.5°), 加速エネルギー 150 keV で、非晶質シリコンへイオン注入した場合の反射の方位角分布を Fig. 7 に示す。

Fig. 8 Energy carried by reflected atoms vs. reflection angle for 10000 incident atoms for As implantation at an incident angle of 4° with energy of 150 keV by Monte Carlo Simulation.

Fig. 6, Fig. 7 より、鏡面反射方向に反射のピークがあるが、かなり広範囲の反射角度分布を持っていることがわかる。また、大部分のイオンが前方へ反射していることもわかる。

つぎに、反射イオンの角度分布に対して、イオンのもつ平均加速エネルギーを Fig. 8 に示す。入射角度は 4° (トレンチ側壁に対しては 86°) である。トレンチ側壁面の法線からの反射角が小さなイオンの持つエネルギーは小さくなっている。反射イオンには基板の表面もしくは表面近傍で反射した弾性散乱による成分と、基板の内部で衝突を繰り返してエネルギーと方向の記憶を失ったのち表面からとびだした散乱散乱の成分の 2 つの成分があることがわかる。

トレンチにイオン注入を行う場合、直接入射面に直面したトレンチ対向側壁には幾何学的にトレンチ面での反射角度が小さいイオンが入射されていることになる。これらの反射イオンの持つエネルギーは小さいので、Fig. 4 に示した領域③の濃度分布の広がりが直接入射領域⑤より小さくなることと一致する。

5. シミュレーションにより求めたトレンチ対向側壁内への反射イオンの濃度分布

モンテカルロシミュレーションによって求めたこれらの結果に基づいて、トレンチ対向側壁の位置に対するイオンの濃度分布を求めるための計算を行った。Fig. 9 に示すように、 ds の微小部分に入射したイオンが反射して対向側壁に達するまでの距離を r とし、反射角度すな

Indirect Doping Intensity

$$F(\theta, \phi) \times \frac{1}{r^2} \times \cos \theta \times I(\theta) \times ds$$

$F(\theta, \phi)$: Reflected Ions / Unit Solid Angle · Area

$I(\theta)$: IMPLANTED EFFICIENCY

Fig. 9 Schematic diagram of calculation.

わち対向側壁への入射角度を θ とし、 ϕ は方位角とする。モンテカルロシミュレーションにより求めた反射イオンの角度分布関数を $F(\theta, \phi)$ とし、入射角度によるイオン注入効率を $I(\theta)$ とすると、対向側壁に入射するイオンはつぎの式で表される。

$$F(\theta, \phi) \times (1/r^2) \times \cos \theta \times I(\theta) \times ds \quad (1)$$

ここで、 $1/r^2$ は一定の立体角で広がる効果による密度の低下を表し、 $\cos \theta$ はビームが斜めに照射されるための角度に対する密度の低下を表す。この式において反射したイオンの再注入角度 θ が大きくなる場合、すなわち領域③のあたりにおいては、まずイオン注入効率 $I(\theta)$ の項によって反射イオンが増加して基板に入る原子が減少する。また、 $\cos \theta$ の項が小さくなり注入密度が減少してさらに濃度が低下する。その上、距離 r は θ が大きくなるとトレンチの幅が一定であるため $\cos \theta$ に反比例して大きくなる。つまり θ が大きな値をとる場合、(1) 式は次式のように表すことができる。

$$F(\theta, \phi) \times \cos^3 \theta \times I(\theta) \times ds \quad (2)$$

そのために、係数 $\cos^3 \theta$ に従って低濃度となってしまう。Fig. 10 に $(1/r^2) \times \cos \theta$ の項だけをとりあげて計算した結果を示す。これは、全てのイオンについて同様である。反射したイオンの再注入角度 θ が大きい場合、入射効率が極めて悪くなることがわかる。このため $F(\theta, \phi)$ は Fig. 6 に示したように鏡面反射方向の原子の量が多いにもかかわらず低濃度となってしまう。逆に領域③や⑤においては $F(\theta, \phi)$ は小さいものの、再注入角度 θ が小さく距離も近いため、 $I(\theta)$ と $\cos^3 \theta$ の項により効率よく注入され高濃度となる。その結果 Fig. 3, Fig. 5 に示したように、領域③よりも領域⑤の方が濃度が高くなる。

Fig. 10 Factor $(\cos \theta / r^2)$ vs. re-implantation angle θ .

Fig. 11 Experimental and calculated spatial impurity distributions of As implantation at 4° . Solid line is for single crystal Si and broken line for amorphous Si.

このようにモンテカルロシミュレーションで求めた反射イオンの角度分布と(1)式または(2)式を用いて、対向側壁中のイオンのドーピング量を計算することができる。トレンチに As^+ を注入角度 4° 、加速エネルギー 150 keV でイオン注入を行った場合の、対向側壁中のドーピング量を計算した結果を Fig. 11 に示す。単結晶シリコンと非晶質シリコンの両方の場合の結果を示している。左上部に示す影を施した領域は、直接入射し反射を起こした領域を示す。横軸はトレンチの上部から底へ向かっての距離を示し、縦軸は原子濃度に相当する強度を示す。④、⑤、⑥は Fig. 5 の SIMS による結果を深さ

方向に積分して求めたもので、○印は非晶質シリコン、△印は単結晶シリコンの場合の値を示している。④点の値を実験値と一致させて、規格化しシミュレーション結果と実験結果の比較を行った。反射面を非晶質シリコンとして求めた反射分布により計算した値の方が、実験値と極めて良く一致しており、実際のシリコン表面は、非晶質として扱う方が実験結果をよく説明することが明らかになった。また、同様にトレンチに As^+ を注入角度 7.5° 、加速エネルギー 150 keV でイオン注入を行った場合にも、シミュレーション結果は実験結果を極めて良く説明していることがわかった。

6. まとめ

大入射角度でのイオン注入の反射におけるトレンチ基板中の原子濃度の深さ分布を検討した。大入射角度においてはイオンのシリコン表面からの反射現象が顕著に起こる。反射によりトレンチ対向側壁に注入された原子濃度分布を解析するために、ウェーハ片を2枚並べ立てる模擬実験により分析した。また、モンテカルロシミュレーションによりこれらの結果の考察を行った。その結果つぎのことが明らかになった。

- 1) イオン注入角度が 60° を越えると、表面からの反射が顕著に生じるためドーピングされる不純物の効率が低下する。
- 2) 実用的エネルギー範囲では As^+ 、 P^+ 、 B^+ の順に反射率が増加する。つまり軽いイオンほど反射率が高い。
- 3) トレンチ側壁にイオン注入を行う場合、イオンの反射により対向側壁にも比較的均一にドーピングされる。
- 4) 鏡面反射方向に相当する対向トレンチ側壁にドーピングされる原子濃度は比較的低い。
- 5) イオン注入角度 4° と 7.5° を比較すると 4° の場合の方が反射率が高くなることから、 4° の方がはるかに対向側壁内の濃度が高くなる。
- 6) イオンの反射には弾性散乱と散漫散乱の2成分があり、このため反射の角度分布は広がりを持っている。
- 7) 反射により対向側壁に注入されるイオンは主に散漫散乱したもので、これらのイオンは基板内へいったん入射しているため、方向の記憶とエネルギーを失っており、対向側壁中での注入レンジの広がりには小さくなる。この現象については実験とモンテカルロシミュレーションによって確認された。
- 8) モンテカルロシミュレーションによる反射の検討では、単結晶シリコンにより計算した結果は実験と

の一致が良くない。非晶質シリコンとして計算した場合が現実とよく相応している。

- 9) シミュレーションによりほぼ正確に反射による対向側壁のイオン分布を予測することができる。

文 献

- 1) G. Fuse, K. Tateiwa, S. Odanaka, T. Yamada, I. Nakao, H. Shimoda, O. Shippou, M. Fukumoto, J. Yasui, Y. Naito and T. Ohzone: Proceedings of the 19th Conference on Solid State Devices and Materials, The Japan Society of Applied Physics, Tokyo, 11 (1987).
- 2) G. Fuse, H. Umimoto, S. Odanaka, M. Wakabayashi, M. Fukumoto and T. Ohzone: J. Electrochem. Soc. **133**, 996 (1986).
- 3) R. Kakoschke, H. Binder, S. Röhl, K. Masseli, I. W. Rangelow, S. Saler and R. Kassing: Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. **B 21**, 299 (1987).
- 4) G. Fuse, H. Ogawa, K. Tamura, Y. Naito and H. Iwasaki: Applied Physics Letters **54** (16), 1534 (1989).
- 5) M. T. Robinson and I. M. Torrens: Phys. Rev. **B 9**, 5009 (1974).
- 6) R. von Criegern, H. Zeiniger and S. Rohl: "Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS-VI", ed. by A. Benninghoven, A. M. Huber and H. W. Werner (Wiley, New York, 1988) p. 419.

会 員 の 皆 様 へ

表面に関するイメージ・写真提供のお願い

日本表面科学会では本会編“表面図鑑—表面のミクロな世界とその科学—”シリーズの発刊を計画しております。現在、第1巻“半導体表面を見る”(仮題)の企画を進めています。その主旨および構成は以下の通りです。

『近年急速に進歩発展している表面の解析および観察装置は、コンピュータの汎用化による画像処理の精密化と相まって物質表面のミクロ構造をかつて想像できなかったほどの速さで明らかにしつつあります。このような時期にあたって本書は、一般の学生、技術者および研究者が表面科学に興味を深め、“表面”を身近に考えられる契機となると同時に、研究および技術の最先端に従事している専門家にも参考となる資料を提供することを目的としています。主に写真や図面により構成され、特に“表面”に関わりの少ない人達にも表面特有の構造や現象をできる限りカラーまたは多色刷りを用いて、視覚的に容易に理解できるよう配慮いたします。』

第1巻は、半導体表面の原子レベルでの姿を各種分析・評価法によるイメージを通して、専門外の読者にも分かりやすく理解できることを編集の基本方針にしています。そこでこれまで報告されたもの、あるいは未報告のオリジナル写真・図面の会員からの提供をお願いいたします。また、会誌“表面科学”に掲載された写真・図面に対しても御協力をお願いいたします。

問い合わせ先：出版担当理事 真下 正夫(東芝総研) Tel. 044-549-2136 Fax. 044-555-2074

日本表面科学会事務局 Tel. 03-812-0266 Fax. 03-812-2897