

Моделирование технологических процессов

Лекция 5

Вопросы к экзамену

1. Особенности процесса постимплантационной диффузии. TED-эффект.
2. Термическое окисление кремния. Модель Дила-Гроува.
3. Допущения при выводе модели Дила-Гроува. Константы линейного и параболического роста.
4. Основные этапы численного моделирования процесса окисления. Модель Массуда для начального этапа процесса окисления.

Особенности процесса постимплантационной диффузии. TED-эффект

Формирование очень мелких, менее 40 нм, легированных слоев в кремнии с высокой концентрацией электрически активной примеси и профилем распределения примеси, близким к прямоугольному, стало значительным достижением в интегральной технологии

Однако с уменьшением размеров требуются все более мелкие области с все более низким сопротивлением. Создание таких слоев без введения дефектов в кремний и без влияния материалов других слоев почти невозможно

В процессе ионной имплантации создается большое число дефектов в подложке, что сильно влияет на процесс постимплантационного отжига.

Высокие дозы имплантации приводят к аморфизации поверхности кремния и формированию распределенных дефектов, дислокаций (линейных дефектов кристаллической решетки, «лишних» полуплоскостей).

Временно ускоренная диффузия, или TED-эффект

Экспериментально обнаружено, что существует временной интервал, в процессе постимплантационного отжига, когда диффузия идет с существенно более высокой скоростью, примерно постоянной в течение этого интервала. Затем скорость диффузии падает до обычного значения.

Длительность временного интервала ускоренной диффузии падает с ростом температуры отжига.

В результате при исследовании быстрого постимплантационного отжига может возникать **аномальный эффект**: при более высокой температуре отжига могут наблюдаться меньшие глубины p-n переходов.

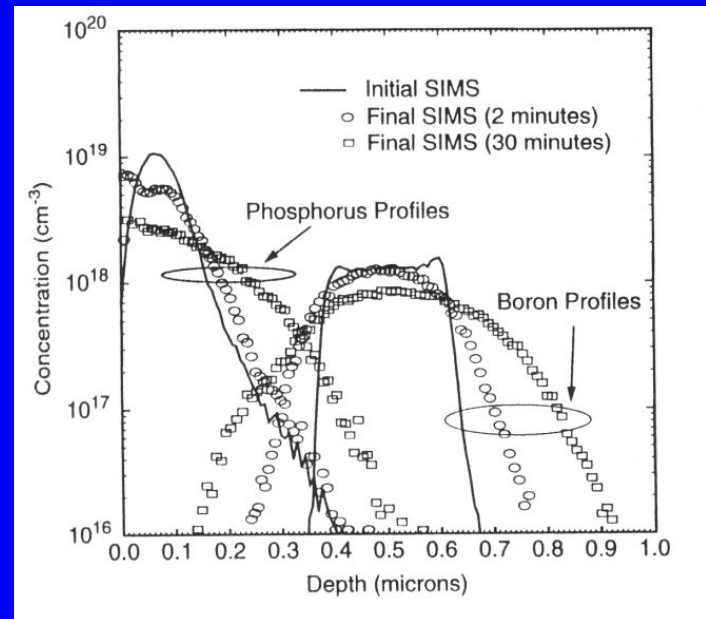
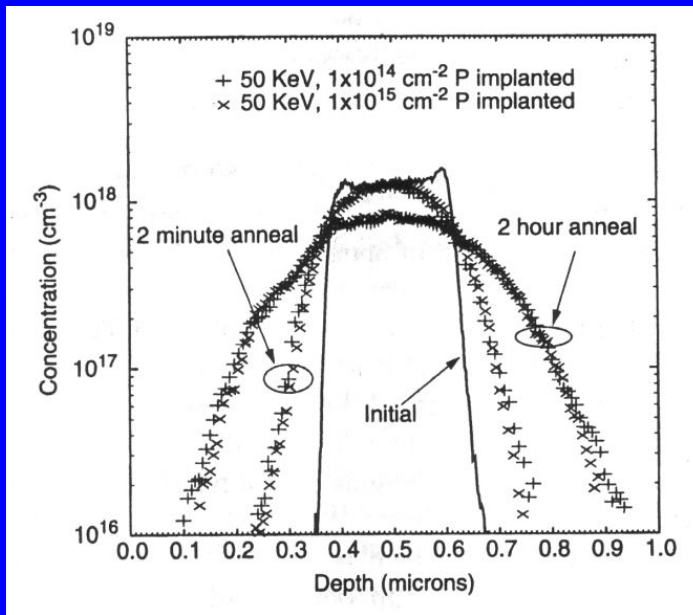
Этот эффект получил название эффект временно-ускоренной диффузии или *TED-эффект*.

TED-эффект объясняется ускорением диффузии за счет неравновесной концентрации междоузлий, которые отжигаются более быстро при высокой температуре.

Моделирование TED – эффекта

Построение эксперимента для моделирования TED – эффекта:

- Использовались подложки с ориентацией $\langle 100 \rangle$ 10-15 Омсм p- и n-типа.
- Методом эпитаксиального наращивания создавался маркирующий слой толщиной 0.2 мкм и концентрацией бора $1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$.
- Выращивался слой нелегированного кремния толщиной 0.4 мкм.
- Имплантация ионов фосфора, мышьяка или кремния с энергией 50 КэВ и дозами в диапазоне $1 \times 10^{13} - 1 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$.
- Одна подложка оставалась в качестве контрольного образца нелегированной.
- Полученные образцы отжигались при температуре 750С в течение различных периодов времени, часть образцов оставлены не отожженными.



Модели, задействованные при расчете TED-эффекта

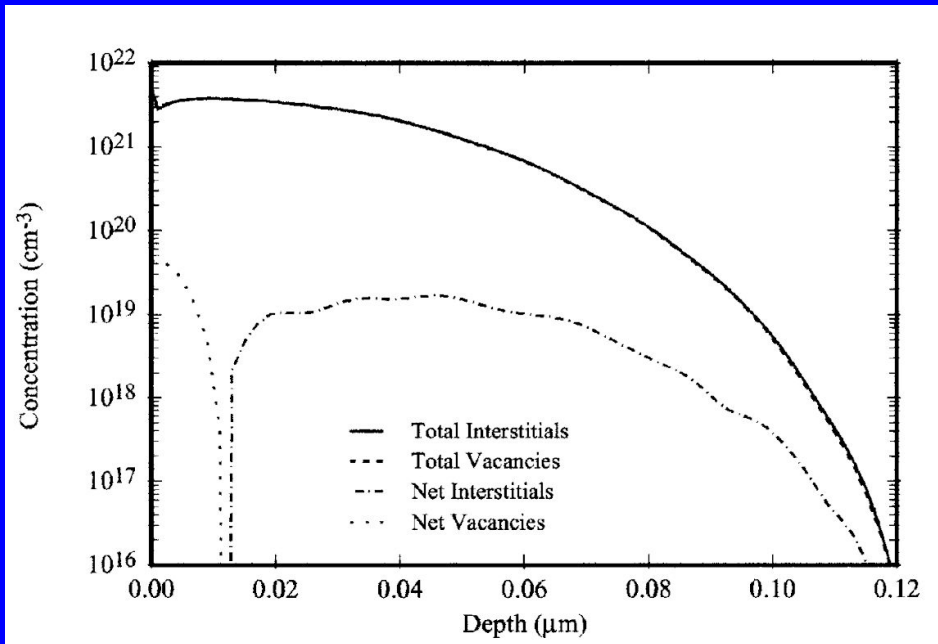
- +1 модель
- Дислокационные кольца
- Модель кластеризации междоузлий

Постимплантационные дефекты +1 модель

Имплантируемый атом создает траекторию разрушений, соударяясь с атомами решетки и смещая их, создавая междоузлия и вакансии. Каждый имплантированный ион может создавать порядка 100 междоузлий (I) и вакансий (V), прежде чем он остановится.

Считается, что, хотя полное количество постимплантационных дефектов значительно выше, каждый ион в результате имплантации смещает в среднем 1 атом из решетки, причем распределение междоузлий смещено в глубину подложки, а вакансий - к поверхности.

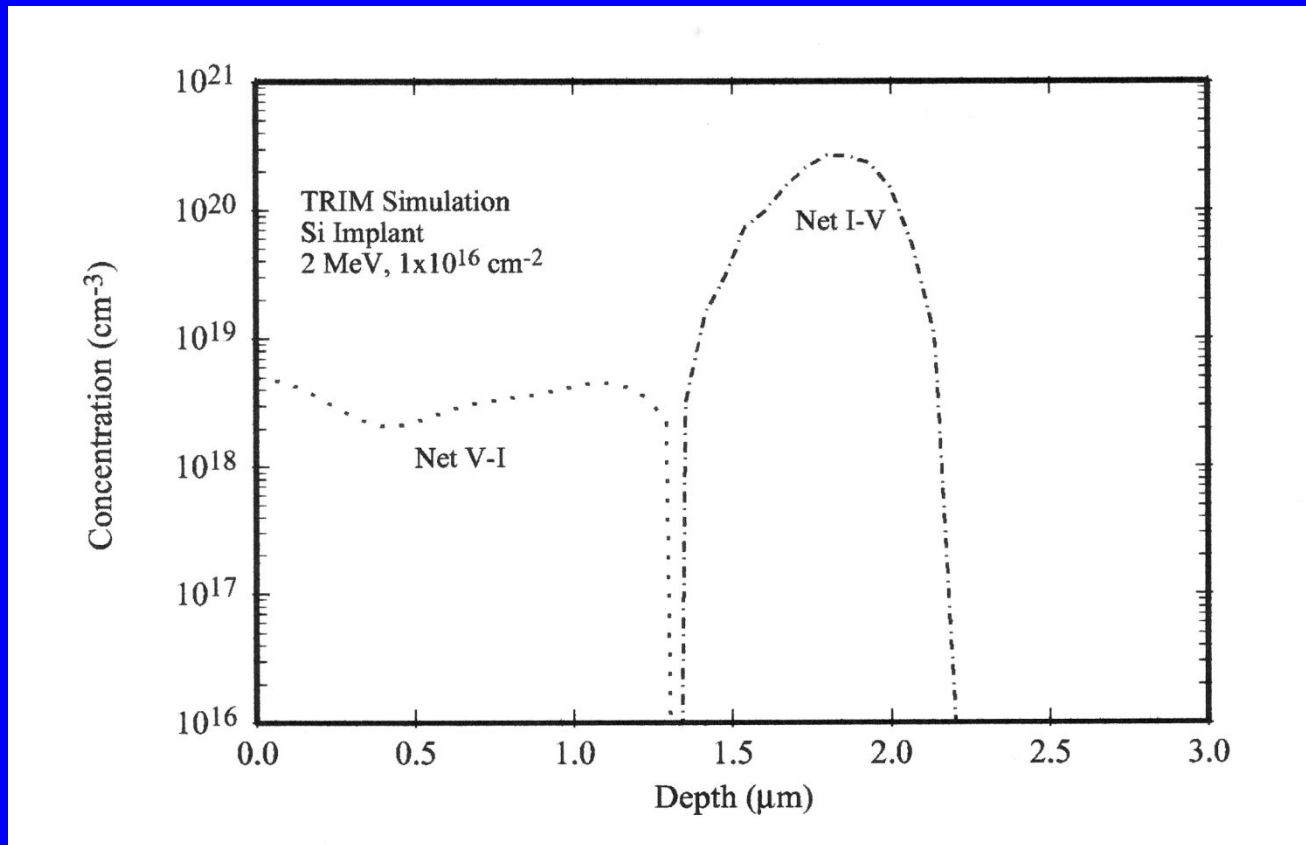
Расчетные зависимости концентрации вакансий и междоузлий после имплантации: — I, V; |V-I|



Окончательным результатом имплантации является распределение всех ионов по узлам решетки, в результате чего каждый ион смещает один атом решетки в междоузлие.

Прямые имплантационные разрушения вдоль траектории иона исчезают в результате рекомбинации I-V – пар за время сравнимое с коротким периодом TED процесса

Моделирование методом Монте-Карло



Кольца дислокаций

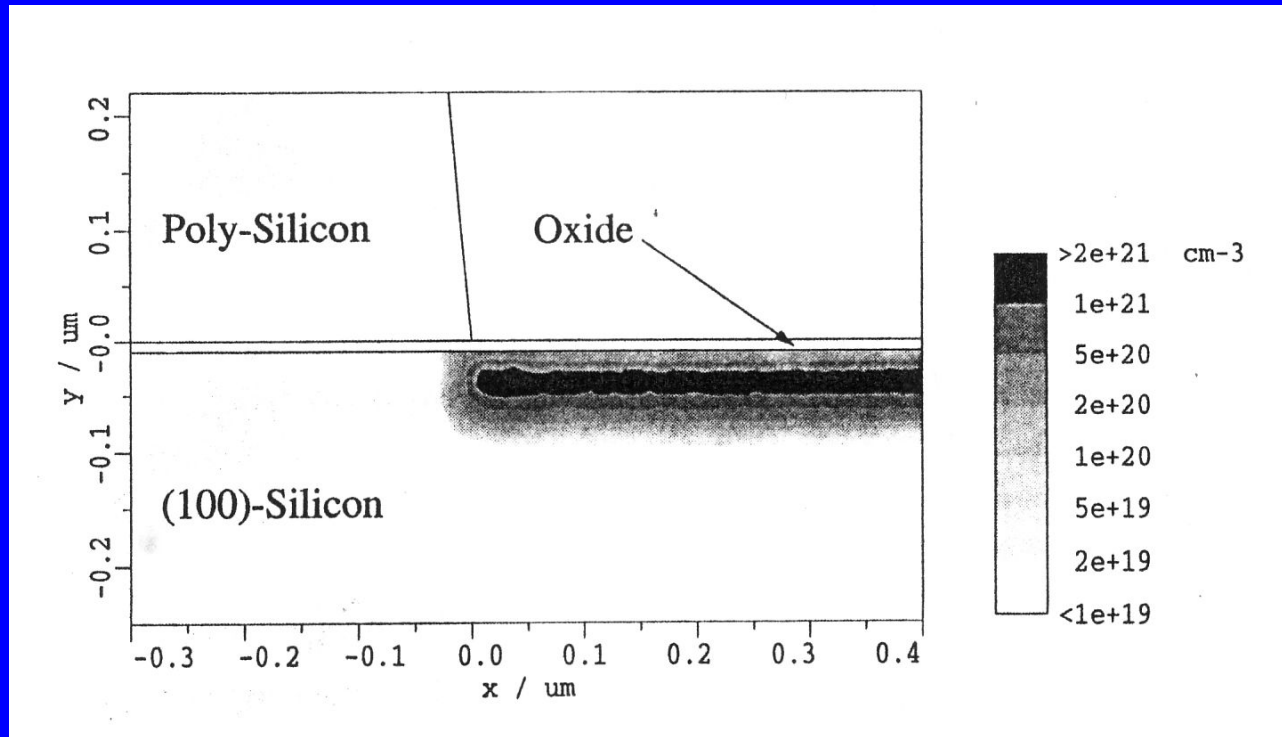
Для случая аморфизирующей имплантации известно о формировании протяженных дефектов на границе между аморфизированной и кристаллической областями.

Эти протяженные дефекты известны как кольца дислокаций.

При моделировании дислокационные кольца считаются имеющими одинаковый радиус и плотность и оцениваются по результатам исследований с помощью просвечивающей электронной микроскопии.

Расположение колец определяется по глубине аморфного слоя.

Аморфизация кремния



Имплантация As+ 60 КэВ, $5e15 \text{ cm}^{-2}$

Кластеризация точечных дефектов

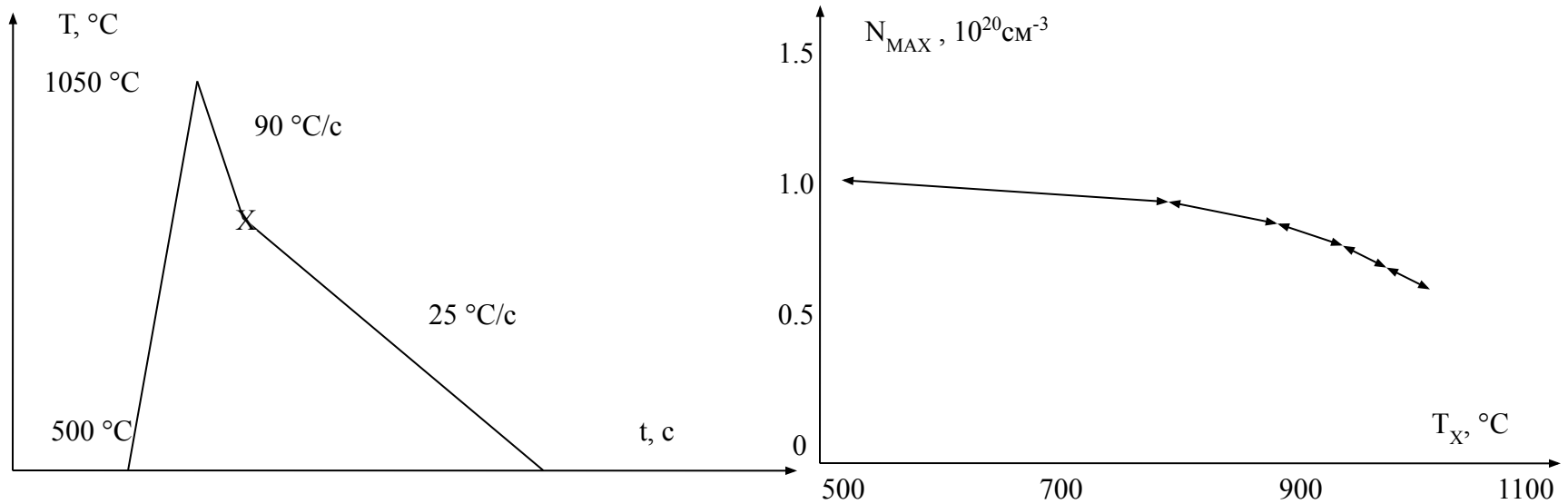
Согласно экспериментальным исследованиям междоузлия группируются в плоскости $\{311\}$.

Найдено, что эти кластеры диссоциируют во время отжига и скорость диссоциации экспоненциально падает. Поэтому за короткое время только часть имплантированных дефектов способна внести вклад в TED-эффект.

Если время увеличивается, то число высвобождаемых дефектов возрастает, и вклад в TED – эффект увеличивается.

Если отжиг идет при высокой температуре, большинство кластеров активно диссоциируют в процессе роста температуры. Поэтому должен быть произведен тщательный учет диссоциации кластеров при моделировании подъема температуры в процессе отжига

Быстрый термический отжиг для создания сверхмелких p-n переходов



Вид временной диаграммы

Зависимость максимальной концентрации электрически активного бора в p⁺- слое от положения точки перегиба X

Теоретические основы процесса окисления кремния

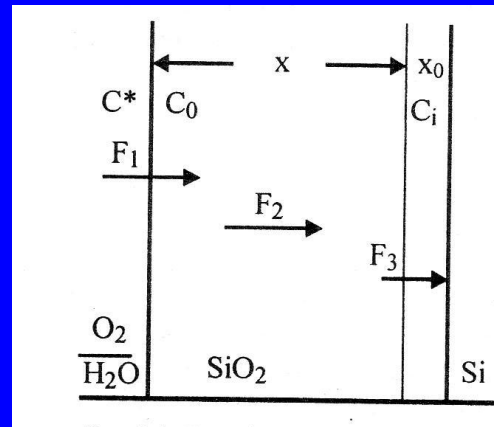
- *Модель Дила-Гроува* рассматривает процесс термического окисления кремния, как состоящий из двух этапов
 - массопереноса окислителя в растущем окисле
 - протекания химической реакции кремния с окислителем.

Модель включает три потока

$F_1 = h(C^* - C_0)$ – массоперенос через внешнюю границу окисла, C^* , C_0 – концентрации окисляющих частиц;

$F_2 = D(C_0 - C_i)/x$ – диффузия окислителя через окисел к границе раздела окисел/кремний.

$F_3 = kC_i$ – химическая реакция на границе раздела окисел/кремний.



$$F_2 = F_3 : C_i = C_0 / (1 + kx/D)$$

$$F_1 = F_3 : C_i = C^* / (1 + k/h + kx/D)$$

В условиях равновесия $F_1 = F_2 = F_3$

$$dx/dt = F_3 / N$$

Зависимость толщины окисла кремния от времени при термическом окислении

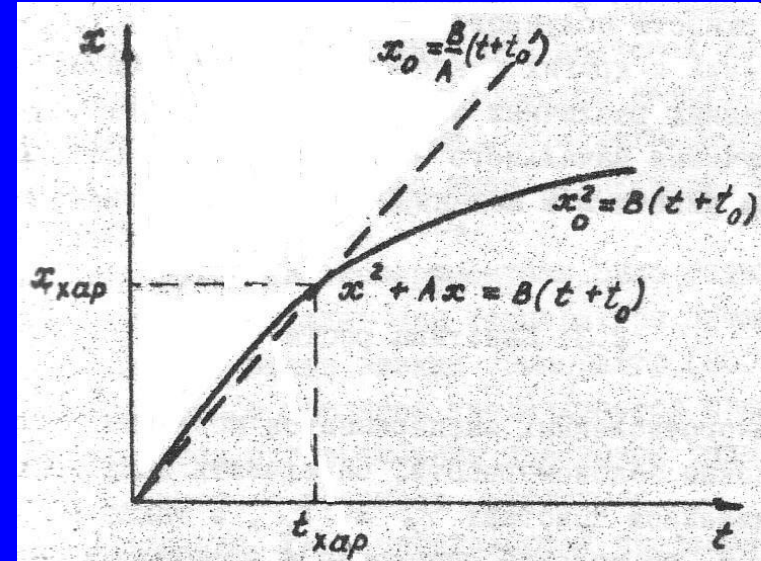
$$\frac{dx}{dt} = \frac{kC^* / N}{1 + \frac{k}{h} + \frac{kx}{D}}$$

$$B = 2DC^* / N \quad A = 2D \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h} \right)$$

N – число частиц окислителя, необходимое для создания единицы объема окисла

$$\frac{dx}{dt} = \frac{B}{A + 2x}$$

$k_p = B$ и $k_L = B/A$ – константы параболического и линейного роста



После интегрирования

$$x^2 + Ax = B(t+t_0)$$

$$\frac{x^2 - x_0^2}{k_p} + \frac{x - x_0}{k_L} = t - t_0$$

Допущения, лежащие в основе модели Дила – Гроува

- Для первого этапа – адсорбции окислителя на внешней поверхности слоя SiO_2 предполагается, что молекулы O_2 не диссоциируют.
- В этом случае справедлив закон Генри $C^* \sim P$.
- В случае полной диссоциации $C^* \sim P^{0.5}$ для реакции $\text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{O}$.
- В настоящее время состояние молекул кислорода в момент адсорбции и заряд частиц окислителя окончательно не выявлены

Допущения, лежащие в основе модели Дила – Гроува (продолжение)

- На этапе диффузии окислителя к поверхности кремния теоретически возможен и обратный процесс.
- Эксперименты показывают, что вероятность обратного процесса – диффузии кремния через пленку окисла навстречу кислороду ничтожно мала.
- Неясно, в каком точно виде диффундирует окислитель.
- Наиболее вероятное предположение – диффузия O_2^- по междоузлиям оксида без взаимодействия с кислородом решетки
- Уравнение для потока F_2 , описывающее процесс диффузии, является упрощенным представлением диффузионного уравнения

Допущения, лежащие в основе модели Дила – Гроува (продолжение)

- Относительно химической реакции на границе Si - SiO₂: считается, что ее порядок равен единице.
- Изменение внутренней структуры образующегося окисла не учитывается.
- Экспериментальные данные говорят о том, что в приграничной области имеются механические напряжения и идет генерация дефектов, что обязательно влияет на скорость протекающей химической реакции

Допущения, лежащие в основе модели Дила – Гроува (продолжение)

- Неявно присутствуют следующие допущения:
- - процессы переноса и протекание химической реакции рассматриваются отдельно и независимо друг от друга;
- - наличие растворенного в кремнии кислорода считается не существенным;
- - все процессы считаются квазистационарными, т.е.

$$\partial C / \partial t = 0$$

Константы линейного и параболического роста

уравнение Дила-Гроува,
описывающее рост окисла

$$\frac{x^2 - x_0^2}{k_P} + \frac{x - x_0}{k_L} = t - t_0$$

k_P и k_L – константы
параболического и линейного
роста

k_P определяет диффузию окислителя через пленку,

k_L определяет скорость химической реакции на границе раздела

Факторы, влияющие на значение констант линейного и параболического роста

температура: константа параболического роста B и константа линейного роста B/A зависят от температуры по закону Аррениуса.

$$k_p = k_{p0} \exp[-E_p/kT],$$

$$k_L = k_{L0} \exp[-E_L/kT].$$

-парциальное давление окислителя

k_p от парциального давления зависит линейно, по закону Генри $k_p \sim p$;

$k_L \sim p^n$; $n=0.5 \div 1.0$ в зависимости от температуры и окислительной среды.

наличие примеси в атмосфере: вода, натрий, хлор ускоряют окисление.

ориентация подложки: на k_p практически не влияет;

$$k_L (111) > k_L (110) > k_L (100).$$

Основные процессы, учитываемые при численном моделировании окисления

Точное моделирование окисления и других термических операций, которые изменяют состав и структуру слоев должно включать моделирование следующих процессов:

- химические реакции на границах раздела слоев, состоящие из растворения частиц, реакции частиц с материалом слоя,
- образование нового слоя;

Основные процессы, учитываемые при численном моделировании окисления

- сегрегация примеси на границах раздела слоев;
- диффузия примеси;

Основные процессы, учитываемые при численном моделировании окисления

экранирование потоков частиц слоями и границами раздела;

- механическая деформация слоевой структуры как результат протекания химических реакций.

Расчет окислительного процесса

- - решение уравнения растворения – диффузии – химической реакции для частиц окислителя,
- т.е. расчет **процесса диффузии частиц окислителя** с граничными условиями на границах раздела в виде уравнений химических реакций/растворения;

Расчет окислительного процесса

- - оценка скоростей образования и поглощения на границе раздела и определение граничных условий для расчета механических напряжений;
- - расчет механических напряжений;

Расчет окислительного процесса

- вычисление граничных условий и решение уравнения диффузии примеси;
- расчет изменения толщин слоев;
- локальное обновление сетки в окрестности движущихся границ раздела,
- интерполяция концентраций,
- если необходимо, полное обновление сетки.

Модель Массуда

- Позволяет с более высокой точностью моделировать ускоренный начальный этап окисления за счет введения дополнительных параметров C и L , определяющих начальный этап роста окисла

$$\frac{dx_{ox}}{dt} = \frac{B}{2x_{ox} + A} + C \exp\left(-\frac{x_{ox}}{L}\right)$$

В присутствии N_2O
(оксинитридизация)
скорость роста снижается

$$r_{thin} = C \exp\left(-\frac{x_{ox}}{L}\right) \left(1 - \frac{\sigma_N}{\sigma_{max}}\right)$$

Моделирование окисления в программе Sprocess.

- Используются три реагента – кислород, пары воды и N_2O .
- Основной моделью, устанавливаемой по умолчанию при расчете скорости роста окисла в одномерном случае, является модель Массуда
- Константы A, B, C, L определяются в зависимости от парциального давления окислительных реагентов, в общем случае для смешанной окислительной атмосферы произвольного состава

Константа параболического роста

$$B(T) = \begin{cases} B0.h \cdot \exp\left(-\frac{BW.h}{k_B T}\right), & \text{if } T > BT.break \\ B0.l \cdot \exp\left(-\frac{BW.l}{k_B T}\right), & \text{else} \end{cases}$$

$$B = B(p, T) = B(T) p_{Comp}^{Bp.dep/[bar]}$$

Oxide H2O | O2 | N2O.

Константа линейного роста

$$\frac{B}{A}(T) = \begin{cases} \text{BA0.h} \cdot \exp\left(-\frac{\text{BAW.h}}{k_B T}\right), & \text{if } T > \text{BAT.break} \\ \text{BA0.l} \cdot \exp\left(-\frac{\text{BAW.l}}{k_B T}\right), & \text{else} \end{cases}$$

Oxide_Silicon	H2O		O2		N2O	100		110		100
Oxide_PolySilicon	H2O		O2		N2O	100		110		100

Параметры модели Массуда

$$C(T) = \begin{cases} C0.h \cdot \exp\left(-\frac{CW.h}{k_B T}\right), & \text{if } T > \text{MBAT.break} \\ C0.l \cdot \exp\left(-\frac{CW.l}{k_B T}\right), & \text{else} \end{cases}$$

$$L(T) = \begin{cases} L0.h \cdot \exp\left(-\frac{LW.h}{k_B T}\right), & \text{if } T > \text{MBAT.break} \\ L0.l \cdot \exp\left(-\frac{LW.l}{k_B T}\right), & \text{else} \end{cases}$$

Зависят от температуры и ориентации подложки

```
Oxide_Silicon O2 | H2O | N2O 100 | 110 | 111  
Oxide_PolySilicon O2 | H2O | N2O 100 | 110 | 111
```