

Лабораторная работа № 1

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ТЕРМИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ КРЕМНИЯ

Цель работы

Изучение режимов технологической операции термического окисления кремния.

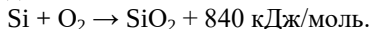
Краткие теоретические сведения

В производстве дискретных приборов и интегральных микросхем (ИМС) используются полупроводниковые материалы (германий, кремний, арсенид галлия и др.), легированные различными примесями, что позволяет существенно изменять их свойства.

Основным материалом для изготовления ИМС до настоящего времени остается кремний. Использование кремния в качестве основного материала для изготовления ИМС обусловлено высоким качеством маскирующей и защитной пленки двуокиси кремния, получаемой относительно простым технологическим способом.

На обнаженной поверхности кремниевой пластины, находящейся на воздухе, даже при комнатной температуре быстро образуется слой окисла толщиной около 2 нм. Более толстые слои двуокиси кремния (обычно от 20 нм до 1 мкм), используемые для экранировки поверхности кремния во время введения легирующих примесей, могут быть образованы путем термического окисления или путем осаждения. Если двуокись кремния получается путем осаждения, то и кремний, и кислород подаются к поверхности пластины и взаимодействуют друг с другом. При термическом окислении происходит непосредственная реакция между атомами вблизи поверхности пластины, а кислород подается в высокотемпературную печь. Термически выращенный окисел обычно имеет более высокое качество, чем окисел, полученный осаждением. Хотя его структура аморфна, он обычно имеет точный стехиометрический состав (SiO_2) и его связь с поверхностью кремния очень прочна. Граница раздела между кремнием и термически выращенным SiO_2 имеет стабильные и контролируемые электрические свойства.

Окисел кремния образуется уже при комнатной температуре в результате адсорбции кислорода на поверхности кремния, например сразу после травления полупроводника. Адсорбированный монослой кислорода взаимодействует с кремнием с образованием окисла и выделением значительного количества тепла:



При этом адсорбированные атомы кислорода в силу их высокой электроотрицательности захватывают электроны из кремния и заря-

жаются отрицательно, а атомы кремния - положительно. После образования монослоя окисла кремния при дальнейшей адсорбции кислорода электроны из подложки кремния туннелируют через образовавшуюся диэлектрическую пленку, в результате чего возникает двойной электрический слой (отрицательно заряженные атомы кислорода на поверхности окисла и положительно заряженные атомы кремния на поверхности кремния). Так как диэлектрик очень тонкий, между ними создается электрическое поле, напряженность которого достигает 10^7 В/см, что достаточно для отрыва атома кремния от решетки. Ионы кремния дрейфуют через окисел к его поверхности, где вступают в реакцию с кислородом, так что образуется очередной слой окисла. Вновь адсорбируется кислород на поверхности окисла, заряжается отрицательно за счет туннелирования электронов из подложки, опять возникают двойной электрический слой и электрическое поле, вырывающее ионы кремния и вытягивающее их через окисел. Этот процесс продолжается до толщины окисла порядка 10 нм.

Значение электрического поля E определяется потенциалом ионизированных атомов кислорода, в окисле возникает разность потенциалов U , не зависящая от толщины окисла x . Скорость роста окисла имеет экспоненциальную зависимость от напряженности электрического поля для иона кремния, находящегося на расстоянии α от границы Si-SiO₂.

$$\frac{dx}{dt} \sim \exp\left(\frac{\alpha e E}{k T}\right) = \exp\left(\frac{\alpha e U}{k T x}\right), \quad (1.1)$$

где e - заряд электрона; k - постоянная Больцмана; T - абсолютная температура.

Поэтому с увеличением толщины окисла x скорость его роста экспоненциально уменьшается. При этом растет также толщина барьера для туннелирования электронов, уменьшая вероятность протекания этого процесса.

Вследствие этих причин толщина пленки окисла, вырастающего при комнатной температуре (естественный или первоначальный окисел), ограничивается толщиной 5-10 нм. Малая толщина и низкое качество этого окисла не позволяют использовать его в технологии интегральных микросхем.

Высококачественный окисел может быть получен лишь при окислении кремния при высокой температуре от 700 до 1150 °С. Окисел Si, с одной стороны, имеет высокую проницаемость, с другой – является одним из лучших диэлектриков с очень высоким сопротивлением вплоть до температур, близких к температуре плавления.

Рост окисла кремния SiO₂ происходит на границе раздела

«кремний – окисел» в атмосфере сухого кислорода или паров воды согласно реакциям:



При этом граница двух фаз Si – SiO₂ движется вглубь полупроводника, часть кремния поглощается окислом.

Толщина пленки SiO₂, равная x , поглощает слой кремния толщиной $0,44x$. Таким образом, можно считать, что толщина окисла примерно в два раза больше толщины поглощенного им кремния.

Оксид кремния SiO₂, полученный методом термического окисления, широко используется в технологии интегральных микросхем для различных целей:

1) пассивации поверхности интегральных структур – оксидная пленка наносится для компенсации оборванных связей, которые могут заполняться атомами различных примесей и приводить к увеличению поверхностных токов;

2) изоляции приборов в схеме;

3) маскирования поверхности полупроводника при ионном легировании и диффузии – это позволяет защитить области, в которых не надо проводить диффузию;

4) в качестве подзатворного диэлектрика в МДП–структурах.

На рис. 1.1 показаны толщины пленок SiO₂, которые применяются в микроэлектронике.

Методы окисления кремния

1. Окисление кремния в парах воды

Для получения защитных диэлектрических пленок на кремнии используют термическое окисление в парах воды высокой чистоты (удельное сопротивление порядка 10 - 20 МОм·см). Высокотемпературную реакцию кремния с водяным паром используют в том случае, когда количество пара не ограничивает скорость реакции. Для поддержания необходимого парциального давления водяных паров у поверхности кремниевых пластин воду подогревают.

Структурное формирование пленки оксида происходит за счет диффузионного переноса воды через слой оксида к поверхности кремния. На структурное формирование пленки оксида оказывает влияние водород, образующийся в процессе реакции окисления и диффундирующий вглубь пластины. Так как коэффициент диффузии водорода ($2 \cdot 10^{-6}$ см²/с при 1050 °С) значительно больше, чем коэффициент диффузии воды ($9 \cdot 10^{-10}$ см²/с при 1050 °С), то образование гидроксильных групп у границы раздела «кремний – оксид» объясняется наличием не только молекул воды, но и водорода.

Достоинством данного способа является высокая скорость

окисления.

Толщина оксида



Рис. 1.1. Применение SiO₂ в кремниевой технологии

2. Окисление кремния в сухом кислороде

При окислении в сухом кислороде сквозь растущую пленку оксида диффундирует не вода, а ионы кислорода. Коэффициент диффузии кислорода в пленке оксида ($2,8 \cdot 10^{-14}$ см²/с при 1050 °С) значительно меньше, чем у водорода и воды при тех же условиях. Поэтому скорость роста оксидной пленки в сухом кислороде меньше, чем в парах воды.

Так как в процессе образования оксидных пленок отсутствуют водород и пары воды, то в структуре выращенного оксида нет гидроксильных групп (ОН). Отсутствие гидроксильных групп приводит к образованию прочных связей кислорода с кремнием.

3. Окисление кремния во влажном кислороде

Процесс окисления кремния во влажном кислороде представляет собой комбинацию двух ранее рассмотренных процессов окисления: в парах воды и в сухом кислороде. Сухой и очищенный от примесей кислород пропускают через водяную баню, где он насыщается горячими водяными парами, и затем подают его в рабочую камеру. Содержание влаги в потоке кислорода определяется температурой водяной бани и скоростью потока кислорода.

Так как скорость образования оксидного слоя в парах воды значительно выше, чем в сухом кислороде, то скорость процесса окисления кремния зависит от содержания влаги в потоке кислорода.

Основным достоинством данного метода является то, что он позволяет легко изменять концентрацию паров воды в потоке кислорода и варьировать скорость окисления.

Энергия активации реакции окисления во влажном кислороде уменьшается с увеличением концентрации паров воды. Энергия активации лежит в диапазоне от 1,3 эВ, что соответствует процессу окисления в сухом кислороде, до 0,8 эВ, что соответствует процессу окисления в атмосфере водяного пара.

4. Комбинированный метод окисления

В производстве полупроводниковых приборов и интегральных

микросхем широкое применение нашли двух- и трехступенчатый способы термического окисления кремния. Этот метод основан на последовательном использовании в качестве окислителей сухого кислорода, влажного кислорода или водяного пара и снова сухого кислорода. Такой технологический процесс образования защитной диэлектрической пленки оксида кремния вызван тем, что оксид, выращенный в атмосфере сухого кислорода, имеет более совершенную структуру пленки, но малую скорость ее роста, а выращенный в атмосфере влажного кислорода и паров воды имеет менее совершенную структуру, но более высокую скорость роста.

Математическое описание роста оксидных слоев

1. Модель Дила - Гроува

Основной моделью роста оксида является модель Дила - Гроува, рассматривающая процесс окисления в два этапа – массоперенос окислителя в растущем окисле и протекание химической реакции кремния с окислителем. В модели рассматриваются три потока (рис. 1.2).

1. Массоперенос окислителя через внешнюю границу растущего оксида SiO_2 из газовой фазы (поток F_1)

$$F_1 = h(C^* - C_0), \quad (1.3)$$

где h - коэффициент переноса окисляющихся частиц через внешнюю границу оксида, C^* и C_0 - концентрации окисляющихся частиц вне оксида и вблизи поверхности внутри оксида в любой момент времени окисления (C_0 обычно принимают равной предельной растворимости окислителя в SiO_2).

2. Диффузия окисляющихся частиц через окисел x к границе раздела $\text{SiO}_2 - \text{Si}$ (поток F_2)

$$F_2 = D \frac{C_0 - C_i}{x}, \quad (1.4)$$

где D - коэффициент диффузии окисляющихся частиц; C_i - концентрация окислителя на границе $\text{SiO}_2 - \text{Si}$; x - толщина оксида.

3. Химическая реакция взаимодействия окислителя с кремнием на межфазной границе x_0 (поток F_3)

$$F_3 = k \cdot C, \quad (1.5)$$

где k - скорость реакции.

В условиях установившегося

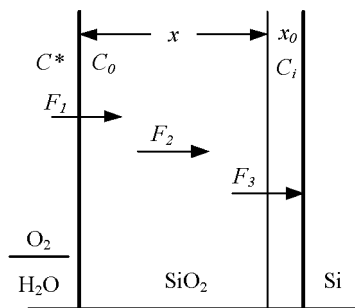


Рис. 1.2. Диаграмма высокотемпературного окисления кремния

равновесия (поток $F = F_1 = F_2 = F_3$) решается дифференциальное уравнение для скорости окисления

$$\frac{dx}{dt} = \frac{F}{N} = \left(\frac{kC^*}{N} \right) / \left(1 + \frac{k}{h} + \frac{kx}{D} \right), \quad (1.6)$$

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

Введем обозначения:

$$A = 2D \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h} \right), \quad B = \frac{2DC^*}{N}. \quad (1.7)$$

Тогда можно записать, что:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{B}{A + 2x}. \quad (1.87)$$

Термическое окисление кремния может проводиться многократно. Для такого процесса следует иметь в виду, что при $t = 0$ на поверхности кремния уже мог быть слой окисла толщиной x_0 . Поэтому интегрирование уравнения (1.8) ведется в пределах $x_0 - x$, и решение его имеет вид

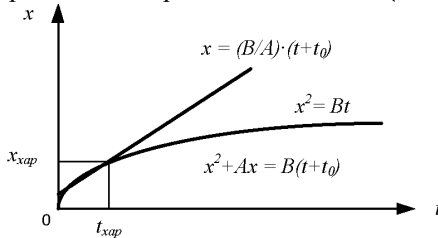
$$x^2 + Ax = B(t + t_0), \quad (1.9)$$

где t_0 - время, соответствующее начальной толщине окисла x_0 .

Зависимость толщины окисла от времени окисления при высокой (от 700 до 1200 °С) температуре изображена на рис. 1.3. При малых временах окисления ($t < A^2/4B$) рост окисла описывается линейным законом

$$x = \frac{B}{A}(t + t_0) \equiv k_l t, \quad (1.10)$$

при больших временах окисления ($t > A^2/4B$) - параболическим



окисла кремния от времени окисления при высокой температуре

$$x^2 = Bt \equiv k_p t, \quad (1.11)$$

где k_l и k_p – константы линейного и параболического роста соответственно.

Имеется некоторое характерное время $t_{хар}$, при превышении которого линейный закон роста окисла переходит в параболический (рис. 1.3).

Уравнение (1.9) можно записать в виде:

$$\frac{x^2}{B} + \frac{A}{B}x = t, \quad (1.12)$$

если $t_0 \ll t$, то t_0 можно не учитывать.

Поделив все части уравнения (1.12) на x и проведя небольшие преобразования, получим

$$x = B \left(\frac{t}{x} - \frac{A}{B} \right). \quad (1.13)$$

Уравнение (1.13) есть уравнение прямой в координатах $[x, t/x]$, которая отсекает на оси абсцисс отрезок, численно равный обратной величине линейной константы $A/B \equiv k_l$, и имеет угол наклона, тангенс которого равен параболической константе роста окисла $B \equiv k_p$.

Уравнение Аррениуса констант скорости можно записать в виде:

$$B = C_1 \exp\left(-\frac{E_1}{kT}\right), \quad (1.14)$$

$$\frac{B}{A} = C_2 \exp\left(-\frac{E_2}{kT}\right), \quad (1.15)$$

где C_1 и C_2 – предэкспоненциальные константы; E_1 и E_2 – энергии активации; k – постоянная Больцмана; T – температура.

Значения предэкспоненциальных констант C_1 и C_2 и энергий активаций E_1 и E_2 для ориентации кристалла (111) представлены в табл. 1.1.

Таблица 1.1

Режим	B	B/A
Сухой O_2	$C_1 = 7,72 \cdot 10^2 \text{ мкм}^2/\text{ч}$	$C_2 = 6,23 \cdot 10^6 \text{ мкм}/\text{ч}$
	$E_1 = 1,23 \text{ эВ}$	$E_2 = 2,00 \text{ эВ}$
Влажный O_2	$C_1 = 3,86 \cdot 10^2 \text{ мкм}^2/\text{ч}$	$C_2 = 1,63 \cdot 10^8 \text{ мкм}/\text{ч}$
	$E_1 = 0,78 \text{ эВ}$	$E_2 = 2,05 \text{ эВ}$

Минимальное значение C_2 соответствует протеканию процесса в направлении ориентации кремния (100), максимальное – для (111). Зависимость от ориентации подложки для линейной константы $A/B = k_l$ весьма существенна, особенно при низких температурах: $k_l(111) > k_l(110) > k_l(100)$ при окислении в любой среде. Кристаллическая плоскость, имеющая более высокую плотность атомов на поверхности кремния, должна окисляться быстрее (рис. 1.4).

Модель Дила - Гроува описывает достаточно точно экспериментальные результаты в широком диапазоне температур и толщин окисла, за исключением начального участка роста окисного слоя (особенно в сухом кислороде) толщиной примерно до 30 нм.

2. Модель Массоуда

На начальном этапе окисления при $x < 30$ нм скорость окисления dx/dt оказывается значительно выше той, которая предсказывается моделью Дила – Гроува. Существующая модель Массоуда лучше всего подходит для описания роста тонких оксидных пленок на начальном этапе окисления и также работает и для других толщин.

Скорость роста тонких пленок SiO_2 для различных условий эксперимента представляется в виде

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{B}{2x_0 + A} + C_1 \exp\left(-\frac{x_0}{L_1}\right) + C_2 \exp\left(-\frac{x_0}{L_2}\right), \quad (1.16)$$

где x_0 – начальная толщина окисла; C_1 и C_2 – предэкспоненциальные константы описывают увеличение скорости на начальном этапе; L_1 и L_2 – характерные длины. Первая затухающая экспонента имеет характерную длину L_1 порядка 1 нм, вторая экспонента имеет характерную длину L_2 порядка 7 нм.

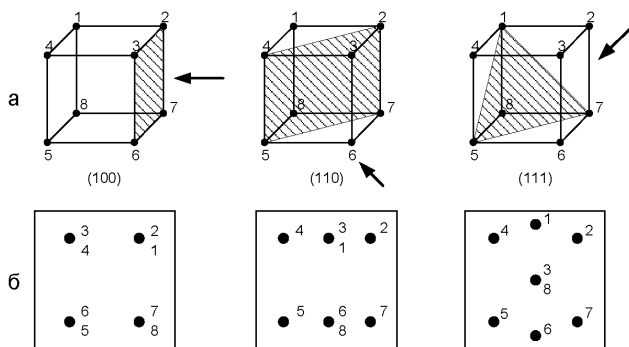


Рис. 1.4. Ориентация кристалла кремния:

а – кристаллографические плоскости; б – расположение атомов в кристаллографических плоскостях

Первое слагаемое в правой части является линейно-параболическим выражением, которое включает в себя и параболическую, и линейную константы скорости роста окисла соответственно, как это определено Дилом и Гроувом, но эти величины в модели Массоуда совершенно другие. Уравнение Аррениуса констант скорости можно записать в виде:

$$B = C_B \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right), \quad (1.17)$$

$$\frac{B}{A} = C_{B/A} \exp\left(-\frac{E_{B/A}}{kT}\right), \quad (1.18)$$

где C_B и $C_{B/A}$ – предэкспоненциальные константы; E_B и $E_{B/A}$ – энергии активации; k – постоянная Больцмана; T – температура.

Значения предэкспоненциальных констант C_B и $C_{B/A}$ и энергий активаций E_B и $E_{B/A}$ для различных ориентаций кристалла представлены в табл. 1.2. Недостатком этой модели является то, что значения констант C_x и E_x зависят от температуры.

Таблица 1.2

Параметр	Температурный диапазон				
	$T < 1000$ °C			$T > 1000$ °C	
Ориентация кристалла	(100)	(111)	(110)	(100)	(111)
C_B , нм ² /мин	$1,7 \cdot 10^{11}$	$1,34 \cdot 10^9$	$3,73 \cdot 10^8$	$1,31 \cdot 10^5$	$2,56 \cdot 10^5$
E_B , эВ	2,22	1,71	1,63	0,68	0,76
$C_{B/A}$, нм/мин	$7,35 \cdot 10^6$	$1,32 \cdot 10^7$	$4,73 \cdot 10^8$	$3,53 \cdot 10^{12}$	$6,5 \cdot 10^{11}$
$E_{B/A}$, эВ	1,76	1,74	2,1	3,2	2,95

Другая формулировка (1.16), где два слагаемых, которые представляют собой скорости роста в режиме роста тонкой пленки, экспоненциально затухают и могут быть выражены как

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{B + K_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + K_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right)}{2x_0 + A} \quad (1.19)$$

где все 4 параметра K_1 , K_2 , τ_1 и τ_2 описываются уравнениями Аррениуса:

$$K_1 = K_1^0 \exp\left(-\frac{E_{k1}}{kT}\right), \quad (1.20)$$

$$K_2 = K_2^0 \exp\left(-\frac{E_{k2}}{kT}\right), \quad (1.21)$$

$$\tau_1 = \tau_1^0 \exp\left(-\frac{E_{\tau1}}{kT}\right), \quad (1.22)$$

$$\tau_2 = \tau_2^0 \exp\left(-\frac{E_{\tau2}}{kT}\right), \quad (1.23)$$

где K_1^0 , K_2^0 , τ_1^0 , τ_2^0 – предэкспоненциальные константы; E_{k1} , E_{k2} , $E_{\tau1}$, $E_{\tau2}$ – энергии активации.

Предэкспоненциальные константы и энергии активации из этих уравнений для различных кристаллических ориентаций при окислении в сухом кислороде в диапазоне температур 800 – 1000 °C представлены в табл. 1.3.

Таблица 1.3

Константа	Размерность	Ориентация кристалла		
		(100)	(111)	(110)
K_1^0	нм ² /мин	$2,49 \cdot 10^{11}$	$2,7 \cdot 10^9$	$4,07 \cdot 10^8$
E_{k1}	эВ	2,18	1,74	1,54
K_2^0	нм ² /мин	$3,72 \cdot 10^{11}$	$1,33 \cdot 10^9$	$1,2 \cdot 10^8$
E_{k2}	эВ	2,28	1,76	1,56
τ_1^0	мин	$4,14 \cdot 10^{-6}$	$1,72 \cdot 10^{-6}$	$5,38 \cdot 10^{-9}$
E_{t1}	эВ	1,38	1,45	2,02
τ_2^0	мин	$2,71 \cdot 10^{-7}$	$1,56 \cdot 10^{-7}$	$1,63 \cdot 10^{-8}$
E_{t2}	эВ	1,88	1,9	2,12

Аналитическое выражение для толщины окисла x_0 выглядит следующим образом:

$$(2x_0 + A)dx_0 = \left[B + K_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + K_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right) \right] dt. \quad (1.24)$$

После интегрирования по времени от 0, где x_i является толщиной естественного окисла, до времени окисления t , при котором толщина окисла равна x_0 , получим:

$$x_0^2 + Ax_0 = Bt + M_1 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) \right] + M_2 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right) \right] + M, \quad (1.25)$$

с заменой

$$M_0 = (x_i^2 + Ax_i), M_1 = K_1\tau_1, M_2 = K_2\tau_2. \quad (1.26)$$

Уравнение (1.25) является квадратичным и может быть решено получением аналитического выражения зависимости толщины оксида от времени окисления:

$$x_0 = \sqrt{\left(\frac{A}{2}\right)^2 + Bt + M_1 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) \right] + M_2 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right) \right] + M_0 - \frac{A}{2}}. \quad (1.27)$$

Параметры, влияющие на процесс термического окисления кремния

На процесс термического окисления кремния влияют следующие факторы: температура окисления, давление окислителя в окружающей среде, ориентация окисляемой поверхности кремния, уровень легирования и тип примеси в подложке.

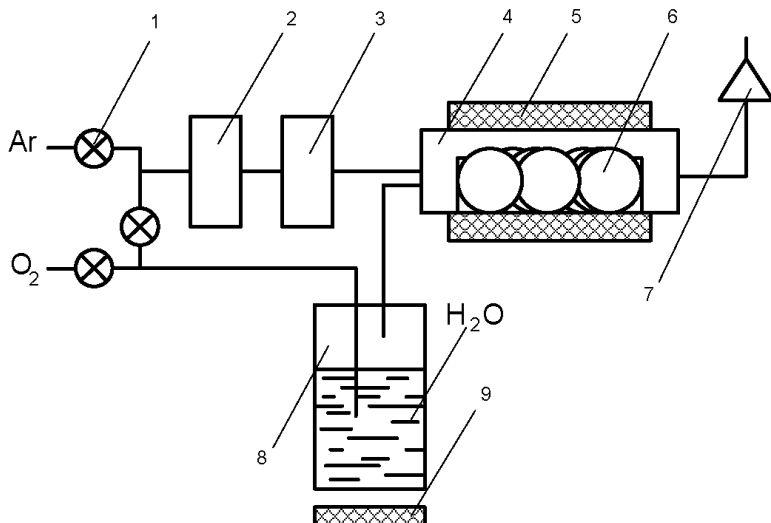


Рис. 1.5. Схема установки для проведения процесса термического окисления кремния: 1 – краны; 2 – осушитель; 3 – фильтр; 4 – рабочая камера; 5 – печь; 6 – пластины кремния; 7 – вытяжная вентиляция; 8 – увлажнитель; 9 – подогреватель

Основным технологическим параметром, влияющим на процесс термического окисления, является температура окисления. В уравнении (1.11) температурная зависимость параболической константы скорости B описывается уравнением Аррениуса. Константа B в модели Дила – Гроува линейно зависит от парциального давления окислителя, вследствие чего может быть использован закон Генри

$$C = HP_S, \quad (1.28)$$

где C – концентрация окислителя; H – постоянная Генри; P_S – парциальное давление окислителя.

На рис. 1.5 показана схема установки для термического окисления кремния.

Порядок выполнения работы

Провести моделирование процесса термического окисления кремния с помощью программы, созданной в среде NI LabVIEW (рис. 1.6), исследовать влияние различных факторов на процесс окисления.

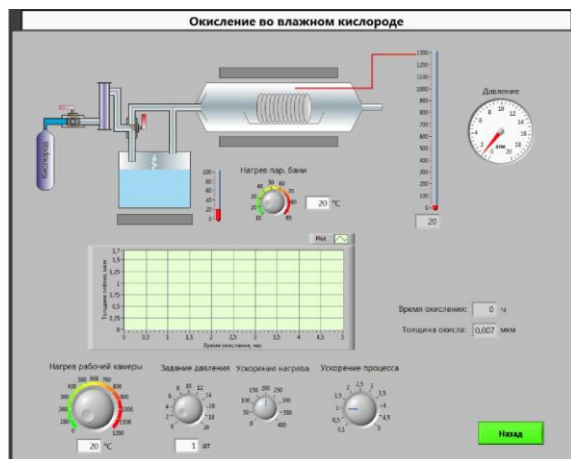


Рис. 1.6. Главный вид программы для выполнения виртуального эксперимента

Варианты заданий представлены в табл. 1.4 и табл.1.5.

Таблица 1.4

№ п/п	Режим окисления	Si	x, нм	P_1 , атм	P_2 , атм	T_1 , °C	T_2 , °C
1	Сухой	100	20	2,7	1,2	938	1062
2	Влажный	111	510	1,6	3,0	1017	119
3	Сухой	110	10	1,0	2,9	1113	1045
4	Влажный	100	260	3,2	2,1	1167	1112
5	Сухой	111	22	1,1	2,2	1133	916
6	Влажный	110	651	1,5	1,1	992	957
7	Сухой	100	45	2,0	3,3	949	1003
8	Влажный	111	399	1,7	1,0	967	1027
9	Сухой	110	25	2,8	2,5	919	976
10	Влажный	100	288	3,0	1,9	1067	999
11	Сухой	111	58	3,4	3,4	1181	923
12	Влажный	110	333	2,2	3,3	1112	1143
13	Сухой	100	34	1,2	3,7	931	939
14	Влажный	111	700	2,6	3,5	1131	996
15	Сухой	110	60	1,6	3,6	1200	1076
16	Влажный	100	513	2,5	1,8	1060	1109
17	Сухой	111	37	1,0	2,8	970	929
18	Влажный	110	271	1,8	1,4	940	1085
19	Сухой	100	42	1,6	2,4	1035	1046
20	Влажный	111	630	1,4	2,4	1199	1182

Таблица 1.5

№	Si	$T_{\text{раб.кам.}}, ^\circ\text{C}$	$P, \text{атм}$	$t_1, \text{ч}$	$t_2, \text{ч}$	$t_3, \text{ч}$
1	111	1062	1,2	0,81	1,50	2,31
2	100	1190	1,6	0,36	1,10	1,47
3	110	1045	2,9	0,60	1,30	1,90
4	110	1112	2,1	0,64	1,00	1,70
5	100	916	2,2	0,68	1,20	3,00
6	111	957	1,1	0,99	1,50	2,00
7	100	1003	3,3	0,52	1,20	1,75
8	100	1027	1,0	0,82	1,40	2,10
9	111	976	2,5	0,48	1,00	1,70
10	110	999	1,9	0,30	1,00	1,50
11	111	923	3,4	0,59	1,30	2,10
12	100	1143	3,3	0,73	1,10	1,56
13	100	939	3,7	0,65	1,25	2,13
14	110	996	3,1	1,00	1,50	3,00
15	111	1076	3,6	0,62	1,15	2,20
16	110	1109	1,8	0,83	1,33	2,60
17	100	929	2,8	0,56	1,20	2,00
18	110	1085	1,4	0,33	1,12	1,90
19	111	1046	2,4	0,80	1,43	2,80
20	100	1182	1,3	0,67	1,00	1,61

1. Запустите программу моделирования. Далее нажмите кнопку  для перехода в главное меню виртуального стенда.

2. Выберите кристаллографическую ориентацию кремниевой подложки согласно варианту задания (рис. 1.7). Нажмите кнопку «Далее».

3. Выберите режим окисления: «В сухом O_2 » или «Во влажном O_2 » согласно варианту задания, представленному в табл. 1.4. В появившемся окне введите все необходимые исходные данные (табл. 1.4).

3.1. Установите значения температуры T_1 и давления P_1 в рабочей камере установки. Произведите моделирование процесса. Для этого нажмите на первый (для режима сухого O_2) или второй кран (для режима влажного O_2), показанные на функциональной схеме (рис. 1.8). Получив необходимую толщину SiO_2 , остановите процесс повторным нажатием на кран. Сохраните



Рис. 1.7. Выбор кристаллографической ориентации

график роста пленки, щелкнув по нему правой кнопкой мыши. Выберите Export → ExportDatatoExcel. По полученным числовым значениям постройте график зависимости толщины пленки окисла от времени окисления.

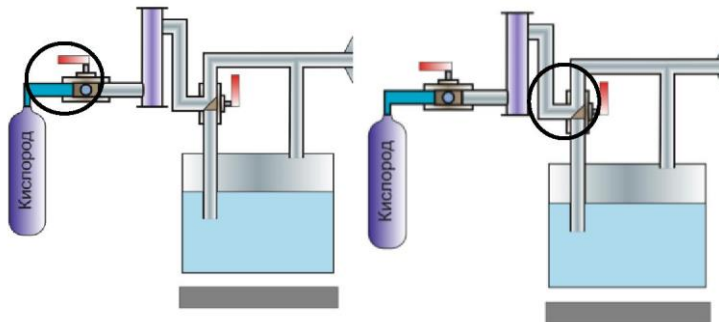


Рис. 1.8. Функциональная схема

3.2. Нажмите кнопку «Назад». Измените значения давления и температуры на P_2 и T_2 (табл. 1.4) соответственно и повторите действия п. 3.1. Сравните результаты и сделайте выводы о влиянии давления и температуры на рост пленки.

4. Проведите моделирование процесса окисления в режиме «Комбинированный». Установите исходные значения согласно варианту задания (табл. 1.5). Для начала процесса на функциональной схеме поверните первый кран для запуска окисления в сухом O_2 . Затем поверните второй кран на схеме для окисления во влажном O_2 . Далее закройте второй кран для продолжения окисления кремния только в сухом O_2 . Сохраните график роста пленки.

5. Занесите в отчет исходные данные и результаты экспериментов в виде графиков зависимостей.

Контрольные вопросы

1. Какова роль окисления пленок в технологии ИМС?
2. Опишите физическую сущность процесса термического окисления кремния.
3. Перечислите особенности режимов окисления кремния.
4. Какие параметры влияют на скорость окисления и как?
5. Какие существуют модели описания роста окисла кремния?
6. В чем суть и отличия моделей Дила – Гроува и Массоуда?
7. Расскажите о методах окисления диэлектрических пленок на поверхности кремниевых подложек.
8. В чем преимущества и недостатки методов сухого, влажного окисления кремния?

Лабораторная работа № 2

РАСЧЕТ ДИФфуЗИОННЫХ СТРУКТУР

Цель работы

Изучить процессы диффузии, исследовать зависимости профиля распределения концентрации примеси от параметров диффузии.

Краткие теоретические сведения

Диффузия легирующих примесей в полупроводниковые монокристаллические подложки является основным методом формирования р-п-переходов в дискретных приборах и интегральных микросхемах (ИМС). Помимо р-п-переходов, с помощью процессов диффузии создаются резистивные слои, емкости, высоколегированные проводящие слои. Метод диффузии состоит в миграции через кристалл, нагретый до температуры порядка 1000 °С, легирующих атомов в сторону уменьшения их концентрации. При указанной температуре тепловые колебания кристаллической решетки полупроводника становятся столь значительными, что некоторые атомы основного вещества покидают узлы решетки, образуя точечные дефекты: вакансии и междоузлия. Атомы примеси перемещаются по вакансиям в кристалле в сторону уменьшения концентрации. Следовательно, различают два основных вида диффузии: соответственно диффузию замещения и диффузию внедрения. Скорость распространения атомов при диффузии по типу внедрения, как правило, больше, так как междоузлия свободны, а для осуществления замещения приходится ждать образования вакансий. Кроме того, в некоторых случаях имеют место и другие механизмы диффузии: эстафетный, краудинный. Теоретически следует учитывать комбинацию указанных видов диффузии. Некая доля примеси совершает диффузию внедрения, а остальная часть – диффузию замещения. Экспериментально установлено, что, например, в кремнии диффузия основных легирующих примесей (бор, фосфор) совершается, как правило, по вакансиям, тогда как прочих примесей – по междоузлиям. Кроме того, диффузия внедрения наиболее вероятна в случае диффузии атомов малых размеров.

В основу теории диффузии положена аналогия между процессами переноса вещества в жидких растворах и тепла за счет теплопроводности. Скорость переноса вещества через сечение единичной площади J , или диффузионный поток, описывается следующим уравнением:

$$J = -D[C(x,t)/x], \quad (2.1)$$

где C – концентрация растворенного вещества, которая, как предполагается, зависит только от x и t ; x – ось координат, совпадающая с направлением потока вещества; t и D – соответственно время и коэффициент диффузии. Знак минус в правой части (2.1) означает, что перенос вещества осуществляется в направлении уменьшения концентрации. Уравнение (2.1) называют первым законом Фика. Предполагая равновероятное перемещение атомов легирующей примеси во всех направлениях в кристалле, (2.1) записывают в виде

$$\partial C(x,t)/\partial t = D \left[\partial^2 C(x,t) / \partial x^2 \right]. \quad (2.2)$$

Уравнение (2.2) называют вторым законом Фика. Общее решение (2.2) имеет сложный вид. Однако при введении определенных начальных и граничных условий решение упрощается. В полупроводниковой технологии наибольший интерес представляют два случая распределения примесных атомов.

Диффузия из бесконечного источника

Под термином «бесконечный источник» следует понимать источник с постоянной во времени концентрацией примеси C . Таким бесконечным источником может быть газовая фаза при диффузии в открытой трубе. Начальные и граничные условия можно записать:

- 1) $C(x, 0) = 0$,
- 2) $C(0, t) = C_0$,
- 3) $C(\infty, t) = 0$.

При этих условиях решение уравнения (2.2) имеет вид

$$C(x,t) = C_0 \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right), \quad (2.3)$$

где erf – сокращенное обозначение функции ошибок Гаусса

$$\operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}} \exp(-t^2) dt; \quad x - \text{глубина, соответствующая}$$

заданной концентрации, см; t – длительность диффузии, с. В этом уравнении коэффициент диффузии D имеет размерность $\text{см}^2/\text{с}$, а поверхностная концентрация $C_0 - \text{см}^{-3}$.

Уравнение (2.3) может быть переписано в виде

$$C(x,t) = C_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right), \quad (2.4)$$

где $\operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = 1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$ – дополненная до единицы функция ошибок Гаусса.

Вместо $erfc$ -функции можно использовать аппроксимацию

$$erfc \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \approx \exp \left[\left(-\frac{x}{2\sqrt{Dt}} + 0.3 \right)^2 \right]. \quad (2.5)$$

График функции (2.4) представлен на рис. 2.1. Глубина, отсчитываемая от $x = 0$, на которой концентрация диффундирующей примеси равняется концентрации примеси в исходной пластине полупроводника (C_B), называется глубиной залегания р-п-перехода x_j (рис. 2.1). При диффузии из бесконечного источника глубина залегания р-п-перехода рассчитывается по формуле (2.6).

$$x_j = 2\sqrt{Dt} \left(\sqrt{\ln(C_0/C_B)} - 0.3 \right) \quad (2.6)$$

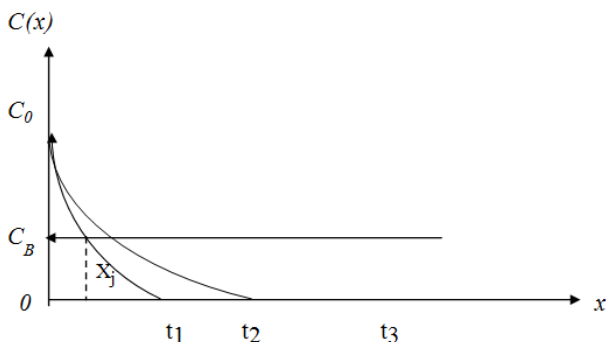


Рис. 2.1. Распределение примеси и определение глубины залегания р-п-перехода

Диффузия из источника с ограниченным содержанием примеси

Термин «ограниченное содержание примеси» означает, что перед началом диффузии на поверхности полупроводниковой пластины в бесконечно тонком слое содержится заданное количество атомов легирующей примеси N (см^{-2}). Причем обеспечивается условие, препятствующее испарению примеси с поверхности, так как диффузия осуществляется при высоких температурах. Примером этого является диффузия в кремний из тонкого поверхностного слоя, защищенного пленкой SiO_2 , которая представляет собой отражающую границу. Используя начальные и граничные условия

- 1) $C(x, 0) = 0$,
- 2) $C(x, \infty) = 0$,
- 3) $N = \int_0^{\infty} C(x) dx$,

получают:

$$C(x, t) = \frac{N}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right), \quad (2.7)$$

$$C_0 = \frac{N}{\sqrt{\pi Dt}}. \quad (2.8)$$

Полагая $x = 0$, определяют величину поверхностной концентрации

$$x_j = 2\sqrt{Dt} \sqrt{\ln(C_0/C_B)}. \quad (2.9)$$

Уравнение (2.8) называют гауссовым распределением. Глубина залегания р-п-перехода для этого случая

$$x_j \approx 6\sqrt{Dt}. \quad (2.10)$$

Двухстадийная диффузия

В планарной технологии ИМС при создании базовых областей биполярных транзисторов диффузию проводят в две стадии. Вначале в течение короткого времени t_1 при температуре T_1 , лежащей в пределах 900-1000 °С, осуществляют загонку примеси, представляющую собой диффузию из бесконечного источника с постоянной поверхностной концентрацией C_{01} . Тонкий диффузионный слой, сформированный на первой стадии диффузии, является источником с ограниченным содержанием примеси для второй стадии – разгонки. Разгонку проводят при более высокой температуре T_2 порядка 1150 °С и времени t_2 . Температура T_1 задает коэффициент диффузии примеси D_1 и поверхностную концентрацию C_{01} , определяемую предельной растворимостью примеси. Зависимость предельной растворимости основных легирующих примесей в кремнии от температуры приведена на рис. 2.2.

Необходимым условием двухстадийной диффузии является соблюдение неравенства $D_2 t_2 \gg D_1 t_1$, что обеспечивается правильным выбором четырех основных параметров процесса: t_1 , T_1 , t_2 , T_2 . Введенное при загонке количество примесных атомов N (см⁻²) определяют интегрированием (1.5) в пределах от 0 до ∞.

Распределение примеси после разгонки определяется выражениями:

$$C(x, t) = \frac{N}{\sqrt{\pi D_2 t_2}} \exp\left[-\frac{x^2}{4D_2 t_2}\right], \quad (2.11)$$

$$N = 2C_{01}\sqrt{D_1 t_1/\pi}, \quad (2.12)$$

где D_2 – коэффициент диффузии примеси при температуре разгонки T_2 . Если условие $D_1 t_1 \ll D_2 t_2$ не выполняется, при расчетах используют комбинированное распределение примеси, которое имеет вид:

$$C(x, t_1, t_2) = \frac{2C_{01}}{\pi} \int_{\sqrt{z}}^{\infty} \exp(-y^2) \operatorname{erf}(ay) dy, \quad (2.13)$$

$$z = \frac{x^2}{4(D_1 t_1 + D_2 t_2)},$$

$$a = \sqrt{D_1 t_1 / D_2 t_2}. \quad (2.14)$$

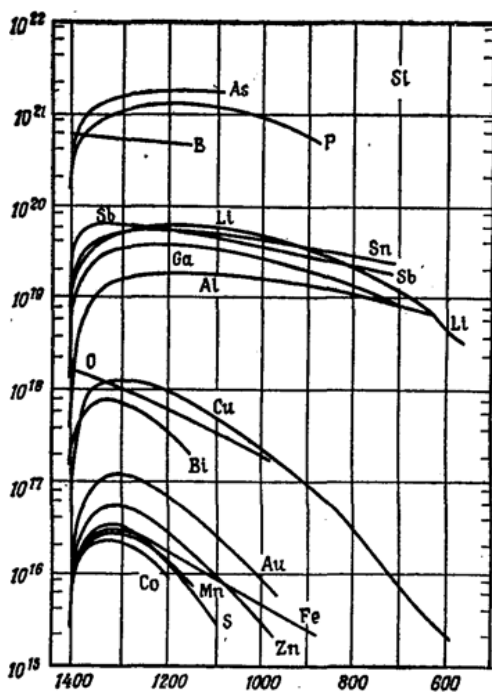


Рис. 2.2. Зависимость предельной растворимости основных легирующих примесей в кремнии от температуры

Поверхностная концентрация C_{02} после разгонки рассчитывается по формуле

$$C_{02} = \frac{2}{\pi} C_{01} \operatorname{arctg}(a). \quad (2.15)$$

Порядок выполнения работы

1. Диффузия из источника с бесконечным содержанием примеси

Используя данные табл. 2.1, построить распределение примеси и рассчитать глубину залегания р-п-перехода. Сравнить полученную аналитически глубину залегания р-п-перехода и значение, полученное из графика. Рассчитать поверхностное сопротивление диффузионного слоя. Расчёт проводится в программе MathCad.

Таблица 2.1

№ задания	t , ч	T , °C	ρ , Ом·см	Si	Примесь
1	1	1000	4	n	B
2	0.5	1100	10	p	P
3	1.3	900	20	n	Al
4	2	900	2	p	Sb
5	2.5	1000	1	p	P
6	1.2	1100	8	n	B
7	1.6	1050	10	n	B
8	2.2	1000	14	p	Sb
9	3	900	20	n	B
10	2.6	1000	2	p	P
11	1.8	1100	10	n	Al
12	2.1	900	4	p	Sb
13	2	1000	16	n	B
14	1.5	1100	8	p	P
15	2.8	900	4	n	B
16	2.6	1000	20	p	Sb
17	2.4	1000	14	n	Al
18	1.2	1100	6	p	P
19	0.8	1100	10	n	B
20	2.5	1000	4	p	Sb

2. Диффузия из источника с ограниченным содержанием примеси

Используя данные табл. 2.2, построить распределение примеси и рассчитать глубину залегания р-п-перехода. Сравнить полученную аналитически глубину залегания р-п-перехода и значение, полученное из графика. Рассчитать поверхностное сопротивление диффузионного слоя. Результаты расчетов и графическую зависимость концентрации примеси представить преподавателю.

Таблица 2.2

№ задания	$T, ^\circ\text{C}$	$t, \text{ч}$	$N, \text{см}^{-2}$	$\rho, \text{Ом}\cdot\text{см}$	Si	Примесь
1	1000	1	$1\cdot 10^{14}$	10	n	B
2	1100	1.5	$1\cdot 10^{14}$	4	p	P
3	1000	2.0	$2\cdot 10^{14}$	8	n	B
4	1100	1.2	$1\cdot 10^{14}$	12	p	P
5	1050	2.2	$1\cdot 10^{14}$	20	p	P
6	1000	1.5	$5\cdot 10^{14}$	18	n	B
7	950	3.0	$1\cdot 10^{14}$	2	p	As
8	1100	1.0	$1\cdot 10^{14}$	6	p	P
9	1150	1.8	$4\cdot 10^{14}$	4	n	B
10	1000	3.0	$1\cdot 10^{14}$	10	n	B
11	1100	2.6	$1\cdot 10^{14}$	12	n	B
12	1050	1.8	$5\cdot 10^{14}$	16	p	As
13	950	3.5	$1\cdot 10^{14}$	20	n	B
14	1000	2.5	$1\cdot 10^{14}$	20	p	P
15	1100	2.0	$1\cdot 10^{14}$	10	p	As
16	1150	4.0	$2\cdot 10^{14}$	20	n	B
17	950	4.0	$1\cdot 10^{14}$	20	p	As
18	1000	3.5	$8\cdot 10^{14}$	18	n	B
19	1100	2.5	$1\cdot 10^{14}$	10	p	P
20	1150	1.8	$5\cdot 10^{14}$	10	n	B

3. Двухстадийная диффузия

Используя данные табл. 2.3, построить распределение примеси и рассчитать глубину залегания р-п-перехода. Рассчитать поверхностное сопротивление диффузионного слоя. Результаты расчета и графическую зависимость распределения примеси представить преподавателю.

Таблица 2.3

№ задания	$T_{\text{заг}}, ^\circ\text{C}$	$T_{\text{раз}}, ^\circ\text{C}$	$t_{\text{заг}}, \text{ч}$	$t_{\text{раз}}, \text{ч}$	$\rho, \text{Ом}\cdot\text{см}$	Si	Примесь
1	1000	1100	0.5	2.0	10	n	B
2	900	1000	1.0	1.5	4	p	As
3	1000	1000	0.5	3.0	4	p	P
4	1100	1150	1.0	3.0	15	n	B
5	900	1100	1.0	1.5	6	n	B
6	950	1000	1.0	3.0	8	p	As
7	1000	1150	1.0	3.0	10	p	P
8	1000	1100	1.2	2.0	4	n	B
9	950	1100	1.0	1.5	4	p	As

Окончание табл. 2.3

10	1000	1100	1.0	2.0	8	n	B
11	1100	1200	1.0	2.0	12	p	P
12	1100	1200	0.5	1.0	12	n	B
13	1000	1100	1.0	3.0	20	p	As
14	950	1100	2.0	3.0	10	n	B
15	1000	1200	2.0	2.0	20	n	B
16	1000	1000	1.5	4.0	18	p	P
17	1000	1100	1.0	2.5	14	p	As
18	950	1100	2.0	2.5	20	p	P
19	1000	1100	1.0	2.5	10	n	B
20	1100	1200	1.0	2.0	4	n	B

Ниже представлены результаты расчёта в программе MathCad.

1. Диффузия из бесконечного источника

Подложка кремния р-типа имеет удельное сопротивление

$$\rho = 2 \text{ Ом} \cdot \text{см},$$

тогда концентрация примеси в этой подложке:

$$C_{\Phi} = \frac{1}{\rho \cdot q \cdot \mu_p}; \quad C_{\Phi} = 6.002 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}.$$

Предельная растворимость Sb в кремнии при температуре 900 °C

$$C_s = 2.58 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}.$$

Рассчитаем коэффициент диффузии:

$$D_0 = 5.6 \text{ см}^2/\text{с}, \quad \Delta E_a = 3.95 \text{ эВ},$$

$$D(T) = D_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E_a}{k \cdot T}} \text{ см}^2/\text{с}.$$

$$C(x, t, T) = C_s \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D(T) \cdot t}}\right) \text{ см}^3.$$

$$C(x) = C(x, 7200, 1173) \text{ см}^{-3}.$$

$$t_x = 4 \cdot 10^{-6}.$$

Given

$$C(t_x) = C_{\Phi}.$$

$$x_j = \operatorname{Minerr}(t_x) \quad x_j = 3.414 \times 10^{-6} \text{ см}.$$

Подвижность основных носителей заряда в слое

$$C(x) = C(x) - C_{\Phi}.$$

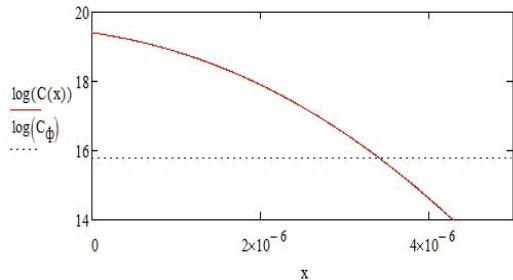
$$\mu_{\max} = 1416 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с},$$

$$\mu_{\min} = 60.5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с},$$

$$\alpha = 0.719,$$

$$C_0 = 9.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}.$$

$$\mu(x) = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{C(x)}{C_0} \right)^\alpha}.$$



Средняя
проводимость равна:

$$\sigma = \frac{q}{x_j} \int_0^{x_j} \mu(x) \cdot C(x) dx,$$

$$\sigma = 96.688 \text{ 1/Ом} \cdot \text{м}.$$

Величина поверхностного сопротивления:

$$R_s = \frac{1}{\sigma \cdot x_j},$$

$$R_s = 3029 \text{ Ом/м}.$$

2. Диффузия из источника с ограниченным содержанием примеси

Подложка кремния р-типа имеет удельное сопротивление

$$\rho = 12 \text{ Ом} \cdot \text{см},$$

тогда концентрация примеси в этой подложке:

$$C_\phi = \frac{1}{\rho \cdot q \cdot \mu_p}; \quad C_\phi = 1 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}.$$

Рассчитаем коэффициент диффузии:

$$D_0 = 3.85 \text{ см}^2/\text{с},$$

$$\Delta E_a = 3.66 \text{ эВ},$$

$$D(T) = D_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E_a}{k \cdot T}} \text{ см}^2/\text{с}.$$

Концентрация примеси в источнике

$$Q = 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}.$$

$$C(x, t, T) = \frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot D(T) \cdot t}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4 \cdot D(T) \cdot t}}.$$

$$C(x) = C(x, 4320, 1373) \text{ см}^{-3}.$$

$$tx = 1 \cdot 10^{-4}.$$

Given

$$C(tx) = C_\phi.$$

$$x_j = \text{Minerr}(tx), \quad x_j = 1.375 \times 10^{-4} \text{ см}.$$

Подвижность основных носителей заряда в слое

$$C(x) = C(x) - C_{\phi}$$

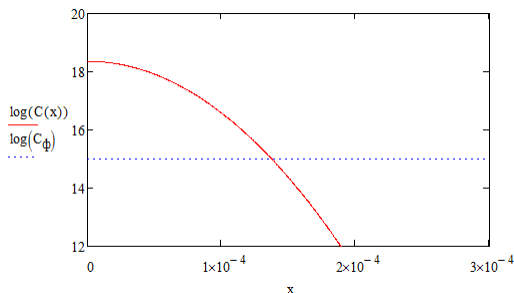
$$\mu_{\max} = 1414 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с},$$

$$\mu_{\min} = 52.5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с},$$

$$\alpha = 0.719,$$

$$C_0 = 9.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}.$$

$$\mu(x) = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{C(x)}{C_0} \right)^{\alpha}}.$$



Средняя проводимость равна:

$$\sigma = \frac{q}{x_j} \int_0^{x_j} \mu(x) \cdot C(x) dx, \quad \sigma = 27.429 \text{ 1/Ом} \cdot \text{м}.$$

Величина поверхностного сопротивления:

$$R_s = \frac{1}{\sigma \cdot x_j}, \quad R_s = 265.243 \text{ Ом/м}.$$

3. Двухстадийная диффузия

Подложка кремния n-типа имеет удельное сопротивление $\rho = 15 \text{ Ом} \cdot \text{см}$,

тогда концентрация примеси в этой подложке:

$$C_{\phi} = \frac{1}{\rho \cdot q \cdot \mu_n}; \quad C_{\phi} = 2.943 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}.$$

Предельная растворимость В в кремнии при температуре 1100°C
 $C_s = 4.4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}.$

Коэффициент диффузии атомов бора в кремнии:

$$D_0 = 10.5 \text{ см}^2/\text{с},$$

$$\Delta E_a = 3.69 \text{ эВ},$$

$$D(T) = D_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E_a}{k \cdot T}} \text{ см}^2/\text{с}.$$

Параметры процесса диффузии:

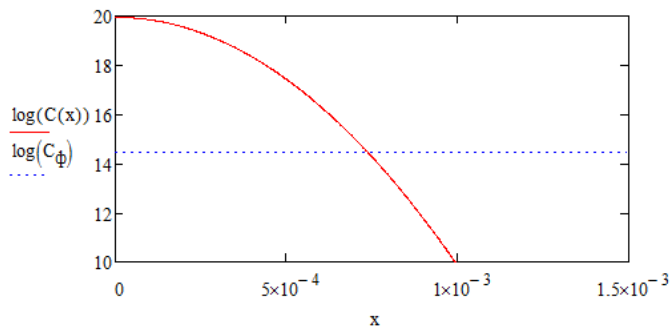
$$T_{\text{заг}} = 1373 \text{ К} \quad t_{\text{заг}} = 3600 \text{ с},$$

$$T_{\text{раз}} = 1423 \text{ К} \quad t_{\text{раз}} = 10800 \text{ с},$$

$$Dt = D(T_{\text{заг}}) \cdot t_{\text{заг}} + D(T_{\text{раз}}) \cdot t_{\text{раз}}.$$

Распределение концентрации примет вид

$$C(x) = \frac{2}{\pi} \cdot C_s \cdot \sqrt{\frac{D(T_{\text{заг}}) \cdot t_{\text{заг}}}{Dt}} \cdot \exp\left[-\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{Dt}}\right)^2\right]$$



Контрольные вопросы

1. Чем определяется поверхностная концентрация примеси?
2. От каких параметров зависит глубина залегания эмиттерного перехода?
3. От каких параметров зависит коэффициент диффузии?
4. Из каких основных элементов состоит установка для проведения диффузии?
5. От чего зависит скорость процесса диффузии?