

11. Rabbat N. B., Hsieh H. Y. A latent macromodular approach to large-scale sparse networks.— IEEE Trans., 1976, v. CAS-23, N 12.
12. Tsividis Y. P., Gray P. R. An integrated NMOS operational amplifier with internal compensation.— IEEE J. Solid-State Circuits, 1976, v. SC-11, p. 748—754.

Поступила в редакцию 16 июля 1986 г.

УДК 621.315

В. И. КОЛЬДЯЕВ, В. А. МОРОЗ, С. А. НАЗАРОВ

(Новосибирск)

ИССЛЕДОВАНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ О ЛЕГИРОВАНИИ И ОКИСЛЕНИИ КРЕМНИЯ

1. Введение. В основе технологии сверхбольших интегральных схем (СБИС) лежат процессы создания легированных областей посредством ионной имплантации и диффузии легирующих примесей и получения диэлектрических пленок двуокиси кремния SiO_2 с помощью термического окисления. Для моделирования этих процессов «классическим» стало рассмотрение диффузии примеси по законам Фика, окисления в соответствии с законом Дила — Гроува и ионной имплантации по закону Линдхарда — Шарфа — Шютта [1—8]. Показано, что эти законы, отражающие механизмы переноса частиц в объемном Si и SiO_2 , выполняются достаточно корректно при низких концентрациях примеси (менее 10^{19} см $^{-3}$), больших глубинах p - n -переходов (более 1—2 мкм) и толстых слоях SiO_2 (свыше 50—100 нм).

В результате миниатюризации элементов СБИС в современной субмикронной технологии достигнуты, глубины легированных слоев 0,1—1,0 мкм, толщины слоев SiO_2 20 нм и менее, топологические размеры областей менее 1 мкм. Поэтому для субмикронной технологии требуется более детальное рассмотрение физико-химических процессов в приповерхностном слое кремния, который насыщен дефектами, определяющими механизмы переноса примесей [2—9].

В настоящей работе сделана попытка проанализировать совокупность процессов в приповерхностном слое кремния и выделить из них основные, а затем с учетом их поставить краевую задачу о легировании и окислении кремния в двумерном приближении и исследовать асимптотические свойства этой краевой задачи.

II. Обобщенная нестационарная краевая задача. Перечислим физико-химические процессы при формировании структуры интегрального МДП-транзистора (рис. 1), определяющие основные закономерности термического окисления и переноса примесей в Si.

Процессы в слое A1. 1. Перенос молекул окислителя из объема окислительной атмосферы (ОА) к поверхности SiO_2 (граница S1). Характеристики процесса переноса молекул зависят от состава ОА и конфигурации рабочей зоны окислительной установки.

2. Адсорбция молекул окислителя на поверхности SiO_2 [4].

Процессы в слое A2. 3. Диффузия молекул окислителя через слой A2 к поверхностям кремния и нитрида кремния Si_3N_4 к границам S2, S3 и S8.

4. Ускорение процесса 3 в присутствии в ОА хлорсодержащих соединений [2, 4].

5. Формирование слоя SiO_2 постоянной толщины в области I и переменной толщины под маскирующим слоем Si_3N_4 (в области II) за счет диффузии молекул окислителя под слой Si_3N_4 . (Область II слоя окисла за свою форму получила название «птичий клюв» [6].)

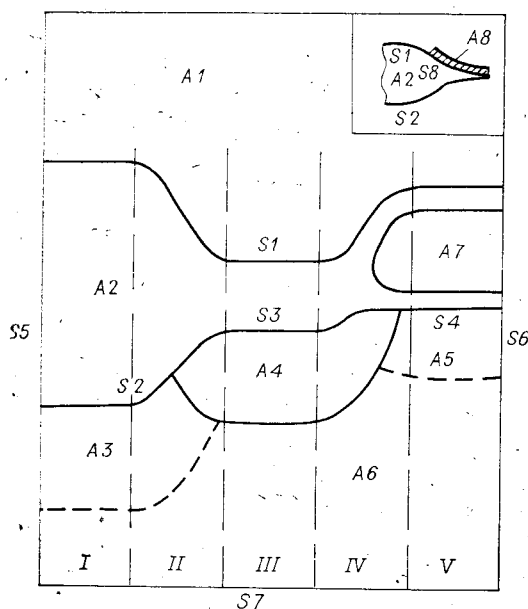


Рис. 1. Фрагмент физической структуры МДП-транзистора в процессе формирования:

A1 — окислительная атмосфера; A2 — слой двуоксида кремния; A3—A5 — слои легирования подложки; A6 — слой кремниевой подложки; A7 — слой затвора; A8 — слой нитрида кремния; I — область изоляции активных элементов; II — переходная область между изоляцией и областью активного элемента; III — область стока (истока) транзистора; IV — переходная область; V — область затвора и канала МДП-транзистора; S1—S8 — границы между перечисленными слоями

Процессы в слое A8. 7. Возникновение в слое A8 в результате изгиба механического напряжения. Если это напряжение достаточно велико, то оно вызывает образование дислокаций в кремнии под областью «птичьего клюва» [6].

Процессы на границах S2—S4. 8. Окисление кремния, в результате которого формируется слой SiO_2 и генерируются междуузельные атомы кремния (МАК). МАК инжектируются в подложку и влияют на перенос примесей в ней [4—5].

9. Поверхностная рекомбинация МАК с вакансиями [5].

10. Ускорение процесса 8 в присутствии в ОА хлорсодержащих соединений [2].

11. Генерация и инжекция в подложку вакансий при взаимодействии хлорсодержащих соединений с атомами кремния [2].

12. Ускорение процесса 8 при окислении несобственного кремния (на границе S3) за счет отклонения уровня Ферми от своего собственного значения [4]. Несобственным называется легированный слой кремния, где концентрация легирующей примеси превышает концентрацию собственных носителей заряда n_i при температуре процесса [8].

13. Окисление примесей, приводящее к их сегрегации на границе [2, 4, 8].

Процессы в слоях A3—A6. 14. Внедрение легирующих примесей в подложку методом ионной имплантации, сопровождающееся образованием точечных дефектов кремния МАК и вакансий. При больших дозах имплантации, превышающих дозу аморфизации, точечные дефекты образуют макроскопические разупорядоченные области [7].

15. Существование атомов примеси в кремнии в узельном или междуузельном состояниях. Переход атома примеси из междуузельного состояния в узельное сопровождается генерацией МАК либо поглощением вакансий. Обратный переход происходит с поглощением МАК либо с генерацией вакансии [1, 3, 8].

16. Диффузия точечных дефектов кремния (самодиффузия) [1—4, 8].

17. Диффузия легирующих примесей (элементов III и V групп) одновременно по двум механизмам диффузии: вакансионному (с участием вакансий) и эстафетному (с участием МАК). Коэффициенты диффузии примесей по каждому из механизмов зависят от зарядовых состояний вакансий и МАК из-за кулоновского взаимодействия ионизированных атомов примеси с точечными дефектами [1—3, 8].

18. Дрейф заряженных частиц (примесей и дефектов) в электрическом поле, индуцированном градиентом концентрации этих частиц.

Влияние дрейфа на перенос примесей становится существенным в несобственном кремнии [8].

19. Ускорение процесса 17 в несобственном кремнии (в слое A4) за счет изменения концентрации заряженных точечных дефектов в соответствии с локальным уровнем Ферми [8].

20. Взаимодействие нескольких различных примесей при их совместной диффузии из-за изменения концентраций заряженных точечных дефектов и электрического поля. Это взаимодействие наблюдается только в несобственном кремнии (области II и IV) [3, 8].

21. Осаждение атомов примеси с образованием электрически нейтральных кластеров или преципитатов. Кластерами называются микроскопические комплексы из нескольких атомов примеси; преципитаты — это макроскопические образования химических соединений примесей с кремнием (фосфиды, бориды и т. п.) [3, 8, 9].

Процессы, протекающие в области материала затвора A7 и в прилегающих к ней границах, в настоящей работе не рассматриваются.

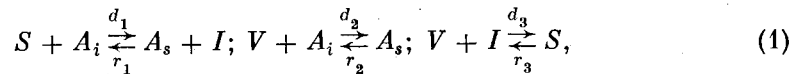
Сделаем упрощающие предположения, необходимые для получения приемлемого математического описания задачи. Моделирование процесса 1 представляет собой самостоятельную задачу о массопереносе в газовой фазе. Однако в данном случае скорости процессов 1 и 2 на несколько порядков превышают скорости процессов 3 и 8 [4, 6]. Поэтому справедливо предположение, что на границе S1 поддерживается постоянная концентрация молекул окислителя, равная концентрации молекул окислителя в объеме ОА. Таким образом, моделирование процессов 1 и 2 сводится к заданию граничного условия на границе S1. Пренебрегая переходными процессами при загрузке и выгрузке физической структуры в ОА получаем условие стационарности процесса 3.

Предположим, что можно пренебречь процессом 6. Справедливость этого предположения будет показана далее.

Процесс 7 приводит к возникновению в кремнии дислокаций, которые ухудшают электрофизические характеристики элементов СБИС. Для того чтобы избежать таких нежелательных последствий, на практике используются достаточно тонкие слои нитрида кремния, которые легко изгибаются и не создают значительных механических напряжений. Поэтому в настоящей работе процессы, связанные с механическими напряжениями, не рассматриваются. Следует заметить, что моделирование механических напряжений является самостоятельной задачей. Важным применением такого моделирования может стать решение проблемы минимизации механических напряжений в элементах СБИС.

Для расчета электрического поля используем достаточно обоснованное в [8] предположение об электронейтральности рассматриваемой структуры.

Реакции, соответствующие процессу 15, имеют вид [1—3]



где S — атом кремния, располагающийся в узле кристаллической решетки; I — МАК; V — вакансия; A_i и A_s — атомы примеси, находящиеся в междоузельном и узельном положениях соответственно; d_j , r_j , $j=1, 2, 3$, — константы скоростей реакций. Вся совокупность вышеперечисленных процессов с учетом приведенных допущений описывается следующей системой уравнений:

$$\text{в области A2 } \nabla (D_R \nabla C_R) = 0; \quad (2)$$

$$\text{в областях A3 — A6 } \partial C_s / \partial t = \nabla (D_s \nabla C_s + Z_s D_s C_s E) + U_s + (d_1 + d_2 V) \times C_i - (r_1 I + r_2) C_s; \quad (3)$$

$$\partial C_i / \partial t = \nabla (D_i \nabla C_i + Z_i D_i C_i E) + U_i + (r_1 I + r_2) C_s - (d_1 + d_2 V) C_i; \quad (4)$$

$$\partial I / \partial t = \nabla (D_I \nabla I + Z_I D_I I E) - U_i + d_1 C_i - r_1 C_s I - d_3 (IV - I^* V^*); \quad (5)$$

$$\partial V/\partial t = \nabla (D_V \nabla V + Z_V D_V V E) - U_s + r_2 C_s - d_1 C_i V - d_3 (IV - I^* V^*); \quad (6)$$

$$\partial C_p/\partial t = -U_s - U_i. \quad (7)$$

Здесь C_R , C_s , C_i , I , V и C_p обозначают отыскиваемые в результате решения концентрации молекул окислителя, атомов примеси замещения, атомов междоузельной примеси, МАК, вакансий и осадков соответственно; I^* , V^* — термически равновесные величины I и V . Уравнение (2) описывает стационарную диффузию молекул окислителя в SiO_2 с коэффициентом диффузии D_R . В присутствии в ОА нескольких окислительных веществ, например кислорода и паров воды, необходимо записать уравнение (2) для каждого из них. Уравнения (3)–(7) описывают перенос атомов примеси и точечных дефектов в кремнии и связаны с уравнением (2) через граничные условия на границе раздела Si-SiO_2 . Первое слагаемое в правой части уравнений (3)–(6) учитывает диффузию различных частиц с коэффициентами диффузии, зависящими от локальной концентрации точечных дефектов, и дрейф заряженных частиц в электрическом поле. Параметрами Z_s , Z_i , Z_I , Z_V определены величины заряда соответствующих частиц в единицах заряда электрона. Символами U_i и U_s обозначены локальные скорости осаждения междоузельных и узельных атомов примеси. Присутствие членов U_i и U_s в уравнениях непрерывности для МАК и вакансий (5), (6) означает, что осаждение междоузельного атома примеси и примеси замещения происходит с выделением МАК или соответственно сопровождается генерацией вакансий. Остальные слагаемые в уравнениях (3)–(6) учитывают изменения концентраций частиц в соответствии с реакциями (1). При совместной диффузии нескольких различных примесей необходимо записать уравнения непрерывности (3), (4), (7) для каждой из них.

Начальные условия для моделирования переноса примеси при термических обработках после ионной имплантации имеют вид

$$C_s = C_s^{im}, C_i = C_i^{im}, I = I^* + I^{im}, V = V^* + V^{im}. \quad (8)$$

Здесь индексом im отмечены функции распределения (профили) различных частиц после имплантации. В настоящее время отсутствует многомерная теория имплантации, дающая все профили (8). Хорошо исследованы лишь суммарные профили примеси: $C^{im} = C_s^{im} + C_i^{im}$. В (8) концентрация неравновесных дефектов имплантации I^{im} и V^{im} на несколько порядков превышает концентрацию равновесных точечных дефектов [7]. В начале процесса диффузии эти дефекты аннигилируют. Неравновесные дефекты имплантации оказывают определяющее воздействие на перенос примесей при формировании мелких легированных областей глубиной $x_k \approx 3-5R_p$, где R_p — средняя проекция пробега имплантированных ионов. При формировании легированных областей глубже x_k в (8) можно пренебречь вызванным имплантацией возмущением в концентрации точечных дефектов. Граничные условия для уравнения (2) описаны в [6].

Для уравнений (3)–(7) можно записать условия на границах S_2 , S_3 и S_4 :

$$\hat{F}n = \lambda(C^{ox} - C^{si}/m_{eq}) - \hat{n}v(C^{ox} - \alpha C^{si}); \quad (9)$$

$$-D_I \nabla I = G_I - d_I(I - I^*); \quad -D_V \nabla V = G_V - d_V(V - V^*) \quad (10)$$

и

$$D_i \nabla C_i = 0; D_s \nabla C_s = 0; D_I \nabla I = 0; D_V \nabla V = 0 \text{ на } S_5, S_6; \quad (11)$$

$$C_i = 0; C_s = 0; D_i \nabla I = 0; D_V \nabla V = 0 \text{ на } S_7, \quad (12)$$

где $F = D_i \nabla C_i + D_s \nabla C_s$; C^{ox} и C^{si} — концентрации примеси около границы Si-SiO_2 в окисле и кремнии соответственно; λ — константа скорости реакции сегрегации примеси; m_{eq} — равновесный коэффициент сегрегации примеси; $\alpha = 0,44$; G_I и G_V — скорости генерации МАК и вакансий на границе Si-SiO_2 , зависящие от скорости окисления $v(C_R)$;

d_1 и d_v — скорости захвата МАК и вакансий на поверхности. Уравнение (9) описывает процесс перераспределения примеси на границе Si—SiO₂. Уравнение (10) характеризует кинетику поверхностной генерации — рекомбинации точечных дефектов. Границы S5, S6 структуры (см. рис. 1) являются осями симметрии, что отражено в равенствах (11). Условия (12) получаем, выбрав границу S7 достаточно далеко от поверхности.

III. Исследование асимптотик задачи. В [10, 11] моделирование легирования и окисления в двумерной области проведено в одночастичном приближении. Суть этого приближения сводится к рассмотрению частиц одного типа, которые диффундируют с эффективным коэффициентом диффузии без учета взаимодействия с точечными дефектами. В случае технологических процессов без окисления это приближение достаточно корректно. Однако при локальном окислении величина эффективного коэффициента диффузии на длине «птичьего клюва» изменяется в несколько раз из-за изменения скорости генерации неравновесных дефектов. Таким образом, двумерное моделирование необходимо проводить в пятичастичном приближении, описанном во II разделе. Определение всей совокупности физических параметров, необходимых для перехода к двумерной задаче, требует обработки данных экспериментов с помощью одномерного моделирования. Кроме того, одномерное моделирование имеет самостоятельный практический интерес. Рассмотрим подробнее физические и математические аспекты одномерного моделирования.

Одномерная диффузия. Задача переноса примеси и дефектов в одномерной области легко сводится к краевой задаче для одного типа частиц. Вместо уравнений непрерывности для точечных дефектов кремния и атомов примеси в различных состояниях, вводятся эффективные поправки к коэффициенту диффузии примеси и рассматривается одно уравнение непрерывности для суммарной концентрации примеси C :

$$\partial C / \partial t = \partial / \partial x (D \partial C / \partial x) + U, \quad (13)$$

где D — эффективный коэффициент диффузии примеси: $U = U_s + U_i$. Уравнение непрерывности (13) с подвижной границей (9) решается численно методом конечных разностей с использованием неявной разностной схемы первого порядка. В качестве начального условия берутся хорошо исследованные для различных типов примесей одномерные профили имплантации $C^{im}(x)$. На границе Si—SiO₂ ставится условие (9), где $F = D \partial c / \partial x$, а условие (12) преобразуется в $C(\infty) = 0$. В результате задача в математическом отношении резко упрощается, тем не менее остаются широкие возможности для исследования физических явлений и моделирования технологии легирования и окисления кремния.

Если реально атомы примеси диффундируют по двум механизмам, то в одночастичном приближении эстафетной компоненте диффузии приписывается доля θ , а $(1 - \theta)$ — вакансионной компоненте [5]. Тогда в условиях неравновесной концентрации точечных дефектов эффективный коэффициент диффузии D связан со своим значением в условиях термического равновесия D^* соотношением

$$D/D^* = \theta I/I^* + (1 - \theta) V/V^* = 1 + \theta \Delta I/I^* + (1 - \theta) \Delta V/V^*. \quad (14)$$

Такая форма представления коэффициента диффузии позволяет определять избыточную концентрацию точечных дефектов при различных условиях их инжекции или обеднения.

В рассмотренном одночастичном приближении на основе алгоритмов [12] разработана программа ТЕХИСІВ, предназначенная для моделирования в одномерной области технологических маршрутов изготовления СБИС. Программа использует полуэмпирические модели легирования и окисления кремния, справедливые в широком диапазоне условий технологических операций. ТЕХИСІВ позволяет рассчитывать кинетику выращивания SiO₂ при термическом окислении в сухом и влаж-

ном кислороде в диапазоне давлений ОА 10^3 — 10^7 Па. Предусмотрено моделирование внедрения легирующих примесей бора, фосфора, мышьяка, сурьмы с помощью ионной имплантации или термической загонки. Перераспределение легирующих примесей в течение последовательности термообработок моделируется с учетом зависимости коэффициента диффузии от концентрации примеси и скорости окисления кремния. Результаты моделирования распределения примесей используются в программе расчета пробивного напряжения p — n -перехода и порогового напряжения МДП-транзистора со встроенным или индуцированным каналом.

Программа позволяет подбирать технологические режимы, обеспечивающие определенную геометрию и требуемые электрофизические характеристики полупроводниковой структуры. Программа реализована на языке Фортран-IV ЕС ЭВМ. Объем требуемой оперативной памяти 160 Кбайт, время расчета на ЭВМ ЕС-1061 технологического маршрута из 10 операций составляет от 1 до 5 мин. Ниже приведены примеры использования программы для анализа характерных маршрутов.

При определении профиля легирования в области АЗ представляет значительный практический интерес исследование кинетики процесса перераспределения бора на границе Si—SiO₂ в течение роста толстого окисла, так как профиль бора в приграничной области определяет пороговое напряжение паразитного МДП-транзистора и пробивные напряжения стоковых p - n -переходов. Первое слагаемое в правой части уравнения (9) характеризует поток примеси за счет химической реакции сегрегации, имеющей константу скорости λ . Второе слагаемое описывает поглощение примеси растущим окислом за счет его движения со скоростью v . При окислении кремния в ОА с атмосферным или пониженным давлением скорость окисления мала настолько, что всегда выполняется условие $\lambda \gg v$ и перераспределение примеси полностью определяется сегрегационным потоком. При окислении в ОА с высоким давлением скорость окисления увеличивается ($\lambda \lesssim v$) и делает поток, вызванный движением границы, сравнимым или даже преобладающим над сегрегационным потоком. На рис. 2, а приведены результаты численного расчета перераспределения бора по программе ТЕХИСИВ. Кремний, легированный бором (кривая 1), подвергался окислению в парах воды при атмосферном (кривые 2, 4) и при высоком давлении ОА (кривые 3, 5). Кривые 2, 3 рассчитаны с учетом зависимости коэффициента диффузии бора от избыточной концентрации МАК в соответствии с (14). Расчетные профили как в SiO₂ (левее точки b_2), так и в кремнии (правее точки b_2) хорошо согласуются с профилями, измеренными методом масс-спектрометрии вторичных ионов [13]. Экспериментальная кривая 5 скорректирована, чтобы удовлетворить условию сохранения полного количества примеси в Si и SiO₂. Различие между кривыми 2 и 3 в Si вызвано разницей во временах выращивания SiO₂ одинаковой толщины при различных давлениях. Различие между этими кривыми в SiO₂ свидетельствует о разной кинетике перераспределения бора на границе Si—SiO₂. В случае атмосферного давления перераспределение происходит за счет сегрегации, а при высоком давлении ОА этот процесс определяется быстрым движением границы Si—SiO₂ и слабо зависит от равновесного коэффициента сегрегации m_{eq} .

Результаты моделирования легирования стока (истока) (область А4 на рис. 1) приведены на рис. 2, б. Полная концентрация мышьяка отличается от концентрации носителей заряда вследствие осаждения (член U уравнения (13)). Из рис. 2, б видно хорошее согласие расчетного профиля электрически активного мышьяка и полученного экспериментально методом послойного травления в работе [14]. Практически интересны расчеты профилей легирования канала активных МДП-транзисторов (область А5, см. рис. 1) для случаев ионного легирования в Si ионов с одной и двумя энергиями. Для окончательного распределения примеси на основе решения одномерного уравнения Пуассона для

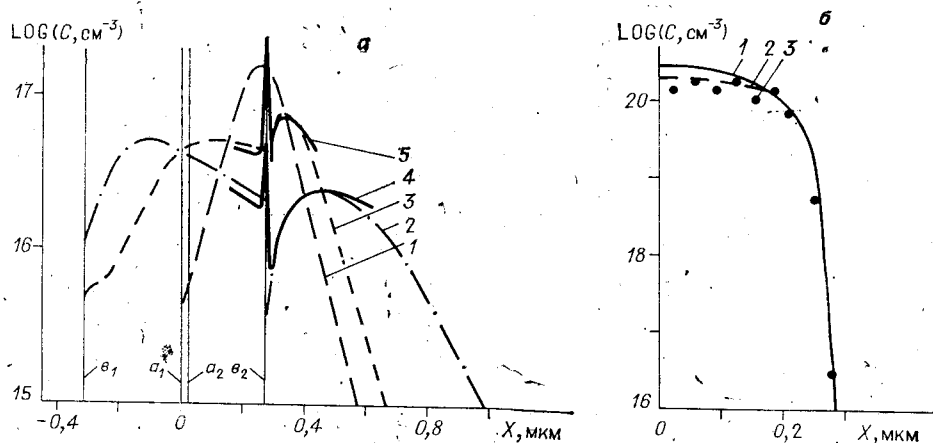


Рис. 2. Сравнение расчетных профилей легирования с экспериментальными: а — профили антипаразитного легирования в окисле и кремнии: a_1 — координата исходной поверхности структуры (внешняя поверхность имплантационного окисла); a_2 — внутренняя поверхность имплантационного окисла; b_1, b_2 — внешняя и внутренняя поверхность полевого окисла соответственно; 1 — профиль бора, имплантированного через имплантационный окисел толщиной 25 нм с энергией 100 кэВ и дозой $3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$; 2 — профиль бора после выращивания полевого окисла толщиной 0,6 мкм при температуре 920°C и давлении паров воды 10^8 Па; 3 — профиль бора после выращивания полевого окисла при давлении $1,5 \cdot 10^8$ Па; 4, 5 — экспериментальные профили [13]; б — профили высококонцентрационного легирования, полученного конной имплантацией мышьяка энергией 100 кэВ и дозой $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ и последующих отжигов в парах воды при температуре 900°C и в инертной атмосфере при температуре 950°C: 1 — расчетный профиль полной концентрации мышьяка; 2 — расчетный профиль концентрации электрически активного мышьяка; 3 — экспериментальные данные [14]

заряда в МДП-структуре определялась зависимость порогового напряжения МДП-транзистора от смещения на подложке. При этом использовались величины напряжения плоских зон из экспериментальных данных. Сравнение результатов расчета и эксперимента по зависимости порогового напряжения от смещения на подложке МДП-транзистора показало, что погрешность полученных таким образом оценок не превышает 5%.

Двумерное окисление. Задача моделирования термического окисления кремния в двумерной области наиболее актуальна при исследовании локального окисления кремния, предназначенного для изоляции активных элементов СВИС. В последнее время установлено, что использование в качестве маски для локального окисления кремния слоев Si_3N_4 толщиной 0,3—1,0 мкм приводит к эффекту выдавливания SiO_2 из-под маски (процесс б) и уменьшению размера «птичьего клюва» со стороны SiO_2 — Si_3N_4 . Как оказалось, этот эффект нельзя использовать для уменьшения размера «птичьего клюва» области локального окис-



Рис. 3. Форма области «птичьего клюва» (получена на РЭМе)

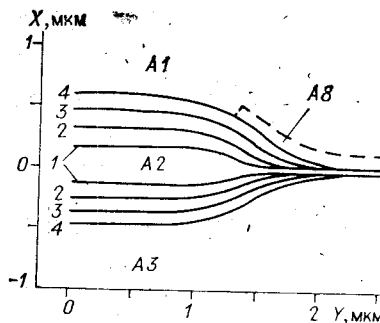


Рис. 4. Расчет формы области «птичьего клюва». Области обозначены теми же символами, что и на рис. 1; цифрами — границы области А2 в различные моменты времени термического окисления: 1 — 3,5; 2 — 10; 3 — 20; 4 — 32 мин

ления, так как размер «клюва» со стороны Si—SiO₂ остается практически таким же, как и в отсутствие эффекта вытеснения (при толщинах Si₃N₄ менее 100 нм). Для слоев маски Si₃N₄ толщиной менее 100 нм в широких практически интересных диапазонах давлений 10⁵—2·10⁶ Па, температур 900—1100°C и толщин исходных слоев SiO₂ под Si₃N₄ экспериментально обнаружено, что форма области локального окисления, измеренная с помощью РЭМ с точностью до 100 нм, симметрична относительно оси, проходящей параллельно плоскости Si—SiO₂ через середину исходного слоя SiO₂ под маской Si₃N₄ (рис. 3). Это свидетельствует о том, что процессом в действительности можно пренебречь. Тогда в двумерном приближении стационарная диффузия молекул окислителя в SiO₂ подчиняется выражению

$$D_R(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)C_R(x, y, t) = 0, \quad (15)$$

а к граничным условиям добавляются соотношения для скорости движения окисла v и координаты границы Si—SiO₂ x_{ox} :

$$v = -\alpha(k_R C_R/C_0)\hat{n}, \quad x_{ox} = \int_0^t \hat{v}(x, y, t) dt + x_0(y), \quad (16)$$

где k_R — константа скорости химической реакции окисления кремния; C_0 — количество молекул окислителя в единице объема SiO₂; x_0 — начальная толщина SiO₂. Для решения краевой задачи (15) с подвижными границами (16) методом функции Грина для гармонической в слое A2 (см. вставку к рис. 1) функции ψ класса C^1 (A2,) имеем

$$\psi(r) = \int_{s_i} [\partial\psi/\partial n'(r')g(r', r) - \psi(r')\partial g(r', r)/\partial n'] dS, \quad (17)$$

где двумерная функция Грина есть $g(r', r) = -(1/2\pi)\ln|r' - r|$. Интегральное уравнение (17) может быть сведено к линейному уравнению путем задания граничных условий ψ или $\partial\psi/\partial n$ и разбиения границы на сегменты. Контурный интеграл в правой части уравнения (17) в узле l может быть выражен через значения функций и их нормальные производные

$$J^l = -(1/2\pi) \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} [\sigma(\xi)\ln|r(\xi) - r_l| - \psi(\xi)\{r(\xi) - r_l\} \hat{n}/|r(\xi) - r_l|] d\xi = \sum_{j=1}^N (A_j\sigma_j + B_j\psi_j), \quad (18)$$

где $\sigma = \partial\psi/\partial n$; Γ_j — сегмент j ; r_l — вектор положения узла l ; $r(\xi)$ — радиус-вектор из узла l в точку ξ на Γ_j . Таким образом сводим задачу к решению системы линейных алгебраических уравнений. Однако полученная система уравнений плохо обусловлена в связи с тем, что скорость процесса I много больше k_R . Проводилось исследование нескольких методов решения плохо обусловленных систем. Удовлетворительные результаты дает использование метода сингулярного разложения. Алгоритм решения задачи (18) состоит в вычислении концентрации молекул окислителя на границе S2 и определении по формулам (16) новых границ S1, S2 и S8 слоя A2 для следующего временного шага.

На основе приведенного алгоритма разработана программа КВАРЦ, предназначенная для моделирования топографии области локального окисления кремния. В программу заложены полуэмпирические модели, позволяющие моделировать локальное окисление в сухом кислороде или парах воды в диапазоне давлений 10³—10⁷ Па и в диапазоне температур 700—1100°C. Программа реализована на языке Фортран-IV ЕС ЭВМ. Объем требуемой оперативной памяти 500 Кбайт, время расчета типового процесса на ЭВМ ЕС-1061 составляет около 1 мин.

На рис. 3 представлена полученная на растровом электронном микроскопе топография области локального окисления для образца, окисленного под давлением паров воды 10^6 Па при температуре 1000°C . Ее сопоставление с результатами расчета топографии для этих же условий окисления (рис. 4) показывает их достаточно хорошее согласие, подтверждающее справедливость сделанных допущений.

Программа КВАРЦ применялась для исследования пределов миниатюризации при изоляции элементов СБИС методом локального окисления. В результате исследования были выработаны рекомендации по выбору условий окисления для достижения минимально возможных размеров области «птичьего клюва».

IV. Заключение. Впервые сформулирована многомерная многочастичная постановка задачи об окислении и легировании кремния с учетом подвижных границ и диффузии примесей одновременно по двум механизмам в условиях неравновесных концентраций точечных дефектов кремния.

Проведен анализ характерных асимптотических решений. Разработаны пакеты прикладных программ для анализа типичных технологических маршрутов изготовления СБИС.

ЛИТЕРАТУРА

1. Mathiot D., Pfister J. C. Dopant diffusion in silicon: A consistent view involving nonequilibrium defects.— J. Appl. Phys., 1984, v. 55, N 10, p. 3518—3530.
2. Fair R. B. Oxidation, impurity diffusion, and defect growth in silicon — an overview.— J. Electrochem. Soc., 1981, v. 128, N 6, p. 1360—1368.
3. Hu S. M., Fahey P., Dutton R. W. On models of phosphorus diffusion in silicon.— J. Appl. Phys., 1983, v. 54, N 12, p. 6912—6922.
4. Hu S. M. Thermal oxidation of silicon: chemisorption and linear rate constant.— J. Appl. Phys., 1984, v. 55, N 11, p. 4095—4105.
5. Hu S. M. Interstitial and vacancy concentrations in the presence of interstitial injection.— J. Appl. Phys., 1985, v. 57, N 4, p. 1069—1075.
6. Chin D., Oh S. Y., Hu S. M., Dutton R. W., Moll B. Two-dimensional oxidation.— IEEE Trans. Electron. Dev., 1983, v. ED-30, N 7, p. 744—749.
7. Вопросы радиационной технологии полупроводников/Под ред. Л. С. Смирнова.— Новосибирск: Наука, 1980.
8. Ху С. М. Диффузия в кремнии и германии.— В кн.: Атомная диффузия в полупроводниках. М.: Мир, 1975.
9. Nobili D., Carabelas A., Celotti G., Solmi S. Precipitation as the phenomenon responsible for the electrically inactive arsenic in silicon.— J. Electrochem. Soc., 1983, v. 130, N 4, p. 922—928.
10. Maldonado C. D. ROMANS II. A two-dimensional process simulator.— Appl. Phys., 1983, v. A 31, N 1, p. 119—138.
11. Guillemot N., Chenevier P., Deroux-Dauphin P., Gonchand J. P. Presentation et validation du programme QSIRIS de simulation bidimensionnelle des processus technologiques.— Rev. Phys. Appl., 1984, v. 19, N 12, p. 987—995.
12. Садовников А. Д. Программа одномерного моделирования технологии изготовления ИС.— М., 1980. Деп. в ВИНТИ, № 5456—80.
13. Deroux-Dauphin P., Gonchand J. P. The influence of high pressure oxidation on boron redistribution in LOCOS structures.— J. Electrochem. Soc., 1984, v. 131, N 6, p. 1418—1423.
14. Рубцов А. Е., Бучельникова В. И. Изучение распределения примеси в кремнии. Тез. докл. конф. Сер. 3, М.: ЦНИИ «Электроника», 1985, вып. 1, с. 38—39.

Поступила в редакцию 4 октября 1985 г.