

Г. М. ГОЛЕМШТОК, В. А. ПАНТЕЛЕЕВ, Н. А. УГОДЧИКОВ
(Горький)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДИФфуЗИОННОГО ЛЕГИРОВАНИЯ ПРИ СОЗДАНИИ ЛОКАЛЬНЫХ $p-n$ -ПЕРЕХОДОВ

Введение. Одним из направлений современной микроэлектроники является увеличение степени интеграции микросхем [1]. При этом существенно повышаются требования к операциям планарной технологии и, в частности, к локальному диффузионному легированию.

При введении в полупроводниковый кристалл примеси с достаточно высокой концентрацией в нем возникают механические напряжения, которые могут привести к пластической деформации легированной области, изменению ширины запрещенной зоны и другим эффектам, вызывающим ухудшение качества изготавливаемых приборов [2].

Несомненно поэтому, что для разработки оптимальной технологии производства необходимо не только качественное, но и количественное описание процессов, сопутствующих локальному легированию.

Рассмотрим последовательно отдельные составляющие требующих моделирования процессов. При этом, не уменьшая общности, проведем конкретные исследования на примере диффузии фосфора в кремний.

1. Модель. Комплексное моделирование физико-механических процессов при создании локальных $p-n$ -переходов должно включать в себя основные компоненты:

модель миграции легирующих примесей, позволяющую описывать основные экспериментально наблюдаемые особенности профилей легирования;

модель деформирования кристаллов с учетом всех видов воздействий — концентрационных, температурных и т. д.;

в рамках модели должно быть учтено взаимное влияние процессов миграции примеси и деформирования кристалла.

Остановимся на каждом из компонентов подробнее.

А. Модель миграции легирующей примеси. Ввиду интенсивного развития производства кремниевых интегральных схем диффузионные явления в этом полупроводнике изучены к настоящему моменту наиболее полно. При этом были обнаружены «аномалии» в распределении диффузанта при высоких поверхностных концентрациях [3]. Двухпотоковая модель диффузии по узлам и междоузлиям фосфора в кремний и механизмы взаимодействия дефектов, сопутствующие диффузии, предложены в [4, 5]. В работе [4] показано, что при соответствующих значениях параметров результаты расчетов с применением предложенной модели хорошо совпадают с экспериментально измеренными профилями распределения концентрации легирующей примеси.

Б. Модель деформирования кристаллов. При создании локальных легированных областей в системе полупроводник — защитная маска на различных технологических этапах этого процесса возникают механиче-

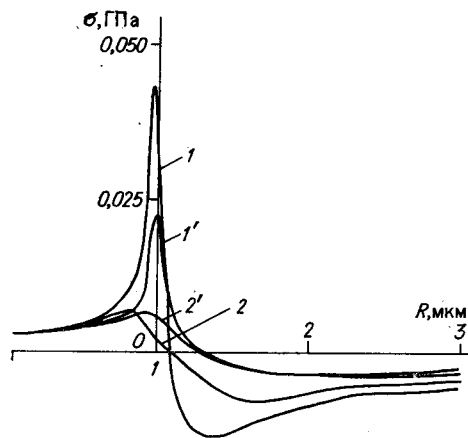


Рис. 1. Зависимость температурных напряжений ($\Delta T = 200^\circ\text{C}$) в подложке от координаты R вблизи поверхности раздела (σ_R — кривая 1, σ_θ — 1') и на расстоянии $z = 0,5d$ от границы раздела (σ_R — кривая 2, σ_θ — 2').
Момент времени 1800 с

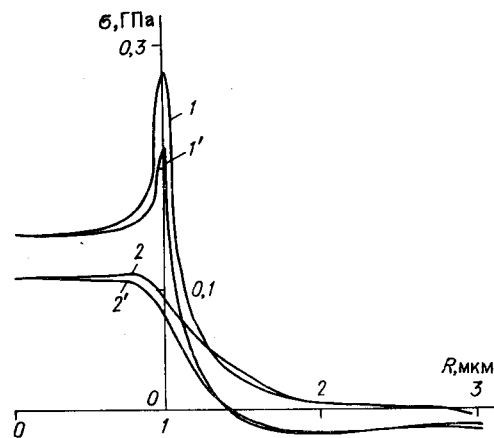


Рис. 2. Зависимость полных напряжений в подложке от координаты R вблизи поверхности раздела (σ_R — кривая 1, σ_θ — 1') и на расстоянии $z = 0,5d$ (σ_R — кривая 2, σ_θ — 2')

ские напряжения и деформации. В системах $\text{Si} - \text{SiO}_2$ и $\text{Si} - \text{Si}_3\text{N}_4$, получивших широкое распространение в соответствующих технологических процессах, разделяют в соответствии с механизмом их возникновения три типа деформаций и вызванных ими механических напряжений: температурные, структурные, концентрационные [6—11].

К сожалению, в литературе практически отсутствовали работы по исследованию реальных напряжений и деформаций в системе полупроводник — защитная маска при локальном легировании.

Проведенные нами исследования [12—14] показали, что при высоких поверхностных концентрациях фосфора при локальном легировании величины упругих механических напряжений могут достигать величин $\sim 1,0$ ГПа и выше, что близко к критическим прочностным характеристикам кремния. Максимальные напряжения возникают в кристалле вблизи края окна защитной маски без SiO_2 . Для примера на рис. 1 и 2 приведены графики зависимости компонент тензора напряжений соответственно температурных и полных. Решение проводилось для случая локального легирования бором кремния через круглое окно радиусом $R_0 = 1$ мкм в защитной маске на двуокиси кремния SiO_2 , толщиной $d = 0,3$ мкм. Все значения технологических параметров приведены в [14]. Время диффузии $t = 1,8 \cdot 10^3$ с.

В. Влияние упругих напряжений на процессы миграции примеси. Проведенное исследование напряженно-деформированного состояния кристалла при локальном легировании и имеющиеся в литературе [15] оценки влияния напряжений на процессы миграции примеси свидетельствуют, что возможно значительное как количественное, так и качественное изменение геометрии и характеристик планарных структур при высоких поверхностных концентрациях диффузанта в связи с появлением больших механических напряжений.

В работе [16] рассмотрено влияние упругих концентрационных напряжений на процессы миграции примеси при многокомпонентной диффузии. Показано, что наличие поля механических напряжений приводит к изменению коэффициентов диффузии узлов электрически активной примеси, концентрации вакансий, а также самого потока дефектов. В [17] соответствующие зависимости получены в случае не только концентрационных, но и температурных напряжений, возникающих при осуществлении технологического процесса локального легирования.

На основе результатов приведенных работ [4, 12—14, 16, 17] может

быть сформулирована модель процессов, сопутствующих диффузионному легированию.

Г. Математическая формулировка модели процессов при диффузионном легировании.

Полная система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial N_s}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{\text{seff}}^{\sigma} \frac{\partial N_s}{\partial x_i} \right) + K_1 N_m N_v - \tilde{K}_1 N_s - \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\beta_s N_s}{kT} D_{\text{seff}}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sigma_{ee} + \frac{2E}{1-\nu} \beta_e N_e \right) \right]; \\ \frac{\partial N_m}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_m \frac{\partial N_m}{\partial x_i} \right) - K_1 N_m N_v + \tilde{K}_1 N_s - K_2 N_m N_E + \frac{1}{2} \tilde{K}_2 N_c - \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\beta_m N_m D_m}{kT} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sigma_{ee} + \frac{2E}{1-\nu} \beta_e N_e \right) \right]; \\ \frac{\partial N_c}{\partial t} &= 2K_2 N_m N_E - \tilde{K}_2 N_c; \\ \sigma_{ij,j} + F_i &= 0; \\ \sigma_{ij} &= 2\mu \varepsilon_{ij} + [(K - 2/3\mu) \varepsilon_{ee} - K(\alpha \Delta T + \beta_e N_e)] \delta_{ij}; \\ \varepsilon_{ij} &= 1/2 (U_{i,j} + U_{j,i}); \\ D_{\text{seff}}^{\sigma} &= D_{\text{seff}} \exp \left(2/3 \frac{K}{kT} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \Omega_v \sum_e \Omega_e N_e + \frac{\Omega_v \sigma_{ee}}{kT} \right); \\ N_v &= f_1(N_s, N_T, \sigma_{ee}); \\ N_E &= f_2(N_s, N_T, \sigma_{ee}),\end{aligned}$$

где $N_s, N_m, N_c, N_v, N_E, N_T$ — соответственно концентрации узловой, междуузельной компонент, комплексов, вакансий, E -центров и полной концентрации примеси; $D_{\text{seff}}^{\sigma}, D_{\text{seff}}, D_m$ — коэффициенты диффузии узловой примеси с учетом и без учета влияния напряжений и междуузельной компоненты; $K_1, K_2, \tilde{K}_1, \tilde{K}_2$ — коэффициенты перехода примесных частиц из одного состояния в другое; $\beta_s, \beta_m, \beta_v$ — коэффициенты линейного концентрационного расширения; $\Omega_s, \Omega_m, \Omega_v$ — коэффициенты объемного концентрационного расширения; $\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$ — компоненты тензоров напряжений и деформаций; F_i, U_i — компоненты векторов сил и перемещений; α — коэффициент линейного температурного расширения; ΔT — перепад температур; f_1, f_2 — соответствующие функции, полученные в [16]. По одинаковым индексам производится суммирование.

2. Методика численного моделирования. Из анализа системы уравнений, описывающей процессы при диффузионном легировании, следует, что необходимо решать четыре связанные задачи — диффузии узловой и междуузельной компонент, расчета концентрации комплексов и расчета напряженно-деформированного состояния кристалла. На рис. 3 приведена функциональная схема расчета процессов при диффузионном легировании. Во внешнем цикле вычисляются распределения диффузатов на следующем временном слое через предыдущие с использованием соответствующих двухслойных временных схем [18, 19]. Во внутреннем цикле осуществляется итерационное уточнение решения на каждом временном слое. Линеаризация уравнений проводится следующим образом. Вначале вычисляются две последовательные итерации по методу простой итерации, а затем при необходимости используется метод релаксации [20]. Этот алгоритм позволил получить требуемое по точности решение при числе итераций, не превышающем 5–6. Решение всех перечисленных выше задач осуществлялось методом конечных элементов [18] с использованием инженерно-физических пакетов программ реше-

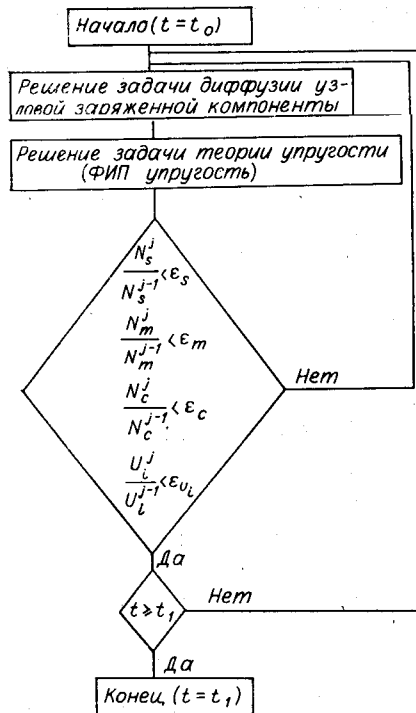


Рис. 3. Функциональная схема расчета

температура диффузии $T_{\text{диф}} = 1100^\circ\text{C}$; радиус окна $R_0 = 1$ мкм; толщина маски $d = 0,5$ мкм; время процесса $t = 420$ с; поверхностные концентрации $N_s^s = 4 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$, $N_m^s = 0,15N_s^s$. (Остальные характеристики модели взяты из [4, 14].)

Задача решена в трех вариантах: а) по полной системе уравнений с учетом взаимного влияния процессов диффузии и деформирования; б) без учета взаимного влияния диффузии и деориентировки уравнения; в) расчет диффузии с постоянным коэффициентом диффузии примеси. На рис. 4 приведены изоконцентрационные линии распределения узловой электрически активной компоненты в конце процесса легирования. На рисунке сплошная линия — результаты расчета с постоянным коэффициентом диффузии $D_s = 10^{-12}$ см 2 /с; штриховая и штрихпунктирная — результаты расчета по полной системе уравнений соответственно без и с учетом взаимного влияния процессов миграции и деформирования.

Из анализа результатов следует, что расчет с постоянным коэффициентом диффузии, обычно применяемый на практике, не дает верную картину распределения примеси. В частности, глубина проникновения примеси увеличивается на 25—30% при учете зависимости коэффициента диффузии от концентрации. Кроме того, при учете влияния напряженно деформированного состояния на процессы диффузии увеличилась глубина проникновения примеси в приповерхностной области, вблизи поверхности наблюдался значительно более глубокий примесный слой с концентрацией, близкой к поверхностной; изменилась форма $p-n$ -перехода (радиус кривизны в центре и на краю окна). Отметим также,

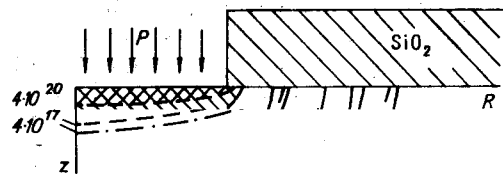


Рис. 4. Распределение узловой электрически активной примеси N_s при локальном легировании фосфором кремния через окно круглой формы ($R_0 = 1$ мкм)

ния задач диффузии [21] и теории упругости на основе принципа Германна [22].

3. Расчет планарной структуры.

В соответствии с описанной выше моделью был проведен расчет реальной структуры на примере локального легирования кремниевого кристалла фосфором через окно круглой формы в защитной маске, выполненной из SiO_2 . Считалось, что диффузия идет из постоянного источника с поверхностной концентрацией заряженной примеси N_s^s и междоузельной соответственно N_m^s . Приняты для расчета следующие технологические параметры: температура образования пленки $T_{\text{ос}} = 500^\circ\text{C}$;

что полная концентрация примеси становится порядка 10^{21} см⁻³. Напряжения, возникающие в кристалле при диффузии, при данной концентрации фосфора достигают ~2 ГПа. Такие величины напряжений могут приводить к нежелательным механическим эффектам как вблизи окна маски, так и во всей приповерхностной области.

Изменение распределения концентрации примеси, вызванное наличием поля механических напряжений, приводит к изменению некоторых электрофизических характеристик [23] на 10—20% (в частности, изменение плотности обратных токов на уровне $p-n$ -перехода ($0,01N_3$ составило ~15% в сторону увеличения).

В заключение отметим, что полученные результаты и разработанные программные средства дают возможность более глубокого изучения технологических процессов локального легирования при высоких концентрациях примеси и могут быть использованы при обосновании и выборе упрощенных расчетных моделей, а также для решения конкретных задач анализа процессов диффузионного легирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Валиев К. А. Проблемы создания элементной базы сверхвысокой степени интеграции для ЭВМ // Микроэлектроника.— 1980.— Т. 9, № 6.
2. Концевой Ю. А., Литвинов Ю. М., Фаттахов Э. А. Пластичность и прочность полупроводниковых материалов и структур.— М.: Радио и связь, 1982.
3. Ху С. Диффузия в кремнии и германии // Атомная диффузия в полупроводниках/Под ред. Д. Шоу.— М.: Мир, 1975.
4. Пантелеев В. А. и др. Механизмы миграции элементов V группы в кремнии // ФТТ.— 1986.— Т. 28, № 10.
5. Василевский М. И., Пантелеев В. А. Влияние собственного электрического поля на диффузию элементов V группы в кремний // ФТТ.— 1984.— Т. 26, № 1.
6. Ажажа Э. Г., Верховский Е. И. Экспериментальное определение внутренних напряжений в окисных пленках, термически выращенных на кремнии // Электрон. техника. Сер. 2. Полупроводниковые приборы.— 1969.— № 3.
7. Гаврилюк В. К. и др. Напряжения в системе Si—SiO₂ // Там же.— 1977.— № 5.
8. Blech I. A., Merigan E. S. Enhanced X-ray diffraction from substrate crystals containing discontinuous surface films // J. Appl. Phys.— 1967.— V. 38, N 7.— P. 2913.
9. Serebrinsky J. H. Stress concentration in silicon-insulator interfaces // Solid-State Electron.— 1970.— V. 13.— P. 1435.
10. Литвиненко С. А., Митрофанов В. В., Соколов В. И. Внутренние напряжения в системе кремний—окисел и их влияние на образование пор в окисле // ЖТФ.— 1981.— Т. 51, № 4.
11. Соколов В. И. и др. Влияние механических напряжений на диффузию бора в кремний // ФТТ.— 1979.— Т. 21, № 5.
12. Големшток Г. М., Пантелеев В. А., Урман П. Н. Напряжения и деформации в полупроводниковом кристалле при локальном легировании // Микроэлектроника.— 1983.— Т. 12, № 5.
13. Големшток Г. М., Пантелеев В. А., Угодчиков Н. А. Напряженно-деформированное состояние приповерхностной области полупроводникового кристалла при локальном легировании // Поверхность. Сер. Физика, химия, механика.— 1983.— № 4.
14. Големшток Г. М., Пантелеев В. А., Угодчиков Н. А. Напряжения и деформации в системе полупроводник—защитная маска при локальном легировании // Микроэлектроника.— 1984.— Т. 13, № 1.
15. Гайдуков Г. Н., Любов Б. Я. Термодинамическая теория неоднородных твердых растворов, обладающих концентрационным расширением // ФТТ.— 1979.— Т. 21, № 6.
16. Василевский М. И., Големшток Г. М., Пантелеев В. А. Влияние собственных упругих напряжений и искажения колебательного спектра на дефектообразование и диффузию в полупроводниках // ФТТ.— 1985.— Т. 27, № 1.
17. Големшток Г. М. Процессы атомной миграции и напряженно-деформированное состояние кристалла при локальном диффузионном легировании кремния (численное исследование): Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— Горький, 1984.
18. Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными.— М.: Мир, 1981.
19. Големшток Г. М., Константинов В. Н. Исследование некоторых неявных схем решения нестационарных задач диффузии и теплопроводности методом конечных элементов // Прикладные проблемы прочности и пластичности: Всесоюз. межвуз. сб.— Горький: ГГУ, 1983, № 25.
20. Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными.— М.: Мир, 1975.

21. Големшток Г. М., Угодчиков Н. А., Фиров А. Н. Пакет прикладных программ (ППП) решения нестационарных нелинейных задач диффузии и теплопроводности // Комплексы программ математической физики: Труды VIII Всесоюз. семинара по комплексам программ математической физики/Под ред. Н. Н. Яненко.— Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1985.
22. Големшток Г. М. Программная реализация вариационного принципа Германна для решения плоской и осесимметричной задач термоупругости методом конечных элементов // Алгоритмы и программы.— М.: ВЗИИТ ГУУЗа МПС СССР, 1982, № 11.— Рукопись деп. в ВИНТИ, № 1302—84.
23. Wortman J. J., Hauser J. R., Burger R. M. Effect of mechanical stress on $p-n$ junction device characteristics // J. Appl. Phys.— 1966.— V. 37, N 7.— P. 2122.

Поступила в редакцию 12 июня 1987 г.

УДК 537.311.322

С. Г. САЗОНОВ, Ю. Н. ЮРЬЕВ

(Ленинград)

ПРОВОДИМОСТЬ СОБСТВЕННЫХ ОКСИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ СОЕДИНЕНИЙ $A^{III}B^V$

Широкое использование полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$ в современной микро- и оптоэлектронике поставило весьма важный с практической точки зрения вопрос о проводимости собственных оксидов (СО) на поверхности этих материалов. В данной работе изложены некоторые результаты экспериментального исследования и численного моделирования химического состава и кинетики переноса заряда в таких структурах.

Электронные свойства аморфных материалов, к которым можно отнести СО на поверхности $A^{III}B^V$, обусловлены их ближним порядком и химическим составом [1]. Изменение элементно-фазового состава (ЭФС) оксидов по мере роста [2] приводит к появлению в запрещенной зоне широкого спектра зарядовых центров. Их ионизация определяет объемную проводимость оксидов. На сквозной проводимости диэлектрика сказывается также неоднородность распределения этих ловушек, в частности, повышенная концентрация вблизи границы раздела (ГР) полупроводник — СО.

Численное моделирование процессов переноса заряда на высокопроизводительных ЭВМ дает возможность рассматривать все более сложные нестационарные модели, учитывающие нелинейные эффекты и особенности электронной зонной структуры оксидов.

В работе проведено численное моделирование и экспериментальное изучение процессов переноса заряда в МДП-структурах на основе антимона, арсенида и фосфида индия.

Методами ВФХ, ВАХ и импульсных ВАХ в интервале температур 77—423 К изучен захват, накопление и растекание заряда в объеме оксида и на границе раздела с полупроводником.

Слои СО (7—250 нм) выращивались на поверхности n — InSb $(1-2) \cdot 10^{14}$ см⁻³, n — InAs $(2 \cdot 10^{16}$ см⁻³), n — InP $(2-4) \cdot 10^{16}$ см⁻³ в идентичных условиях методом планарного анодного окисления [3] в электролите типа АГВ. Для определения ЭФС использовался эмиссионный спектральный анализ, Оже, ЭСХА и ДВА [4]. Проводился низкотемпературный отжиг структур (353—523 К) в ампулах, очищенных от кислорода с помощью молибденовых геттеров и наполненных аргоном.

Исследование ЭФС показало [2], что уже в сверхтонких слоях ($d_{ox} < 10$ нм) относительное содержание In и B^V больше 1 и растет при увеличении плотности тока анодного окисления (табл. 1) и толщины оксида, достигая для внешних анализируемых слоев СО величины не