

В. И. КОЛЬДЯЕВ, В. А. МОРОЗ, С. А. НАЗАРОВ
(Новосибирск)

ДВУМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ И ОКИСЛЕНИЯ КРЕМНИЯ

Введение. Рост степени интеграции кремниевых интегральных схем (ИС) связан с миниатюризацией элементов ИС, которая достигается за счет постоянного усложнения технологии их изготовления. Тенденции уменьшения размеров и усложнения технологии приводят к тому, что физико-химические процессы, происходящие в приповерхностной области формируемой структуры, начинают оказывать все большее влияние на геометрию и электрофизические характеристики элементов ИС. Кроме того, соизмеримость горизонтальных (топологических) и вертикальных размеров элементов сверхбольших интегральных схем (СБИС) делает существенными 2-, 3-мерные эффекты как при изготовлении, так и при функционировании элементов. Таким образом, для имитации технологии изготовления современных СБИС необходимо применение 2-, 3-мерного моделирования совокупности физико-химических процессов, определяющих основные закономерности формирования интегральной структуры.

Постановка задачи об ионной имплантации и диффузии примесей в структуре Si—SiO₂ при легировании и окислении кремния с учетом подвижных границ и неравновесных концентраций точечных дефектов сформулирована в [1, 2]. В рамках исследования этой постановки в настоящей работе ставится двумерная краевая задача. С помощью программы ФАКТ2 (физический анализ кремниевой технологии в 2-мерной области), реализующей на ЭВМ решение этой задачи, анализируются некоторые двумерные эффекты, возникающие в процессе формирования элементов СБИС.

Постановка задачи. Рассмотрим процессы термического окисления и переноса примесей в кремнии и обоснуем выбор математических моделей для имитации этих процессов в двумерной области. Для изоляции активных элементов СБИС наибольшее распространение получил метод локального окисления кремния. Эволюция формы SiO₂ при локальном окислении схематически изображена на рис. 1. Штрихпунктиром показана исходная поверхность кристалла, частично покрытая двухслойной маской, состоящей из слоя SiO₂ толщиной d_0 и слоя нитрида кремния Si₃N₄, сплошными линиями — форма области локального окисления. Область SiO₂ переменной толщины, получающаяся под маской в результате локального окисления кремния, называется «птичьим клювом» (ПК), который характеризуется длиной l .

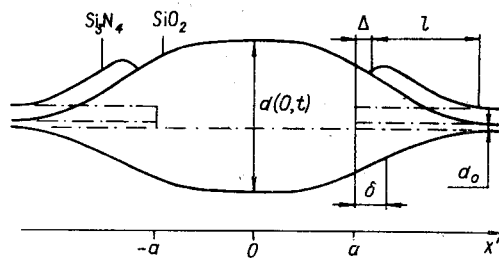


Рис. 1. Форма области локального окисления кремния

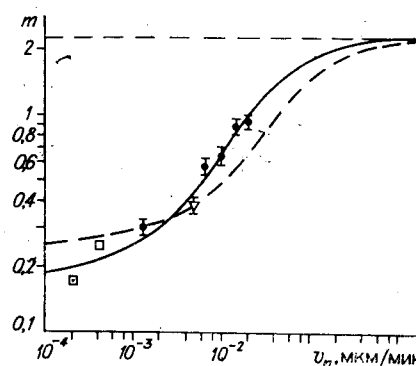


Рис. 2. Зависимость эффективного коэффициента сегрегации от скорости окисления. Расчет по формуле (3) (°C): 1000 (сплошная линия), 920 (штриховая). Измерение m методом ВИМС (°C): □ — 1000 [3]; □ — 920 [3]; ● — 920 [4]; ▽ — 1000 [5]

Для имитации формы ПК в [3] предложена аналитическая аппроксимация зависимости толщины ПК от координаты и времени окисления

$$d(x', t) = [(d(0, t) - d_0)/2] \operatorname{erfc}[(x' - \delta - a)/\gamma] + d_0, \quad (1)$$

где $d(0, t)$ — толщина SiO_2 , рассчитанная по одномерной аналитической модели Дила — Гроува; a — исходная координата края нитридной маски; δ — смещение геометрического центра области ПК относительно края нитридной маски; γ — крутизна ПК. С помощью численного моделирования по программе КВАРЦ [2] получены зависимости параметров аппроксимации (1) от режимов окисления:

$$\delta = (0,97 - 6,0 \cdot 10^{-4} T + 0,034 \ln d_0)/(1 + 3\kappa) + d(0, t) (0,49 - 2,1 \cdot 10^{-4} T - 0,03\kappa) \text{ [мкм];}$$

$$\gamma = (0,83 - 4,5 \cdot 10^{-4} T + 0,039 \ln d_0)/(1 + 3\kappa) + d(0, t) (0,76 - 3,5 \cdot 10^{-4} T - 0,03\kappa) \text{ [мкм];}$$

$$\Delta = 0,1d(0, t) (1 + \kappa);$$

$$\partial d(0, t)/\partial t = K_p/(K_L + 2d(0, t)),$$

где K_p и K_L — константы линейно-параболической модели окисления Дила — Гроува; Δ — смещение края нитридной маски во время окисления; κ — постоянная, равная 0 для собственного кремния и 1 — для не-собственного; T — температура в градусах Кельвина. Формула (1) с указанными численными значениями параметров δ и γ позволяет имитировать форму области локального окисления в диапазоне температур 800—1100°С с погрешностью, не превышающей 15% при толщинах нитридной маски менее 0,15 мкм. Вычисление координат движущейся криволинейной границы Si—SiO₂ по аналитической модели (1), наряду с высокой точностью, обеспечивает гораздо более низкие вычислительные затраты, что и определяет ее выбор для целей данной работы.

В процессе термического окисления кремния химическая реакция окисления примесей вызывает сегрегацию примесей на границе Si—SiO₂. Эту реакцию принято характеризовать коэффициентом сегрегации, который определяется как отношение приповерхностных концентраций примеси в кремнии C_+ и в окисле C_- : $m = C_+/C_-$. Термодинамические оценки m дают значения с точностью до нескольких порядков [4]. Прямые измерения коэффициента сегрегации бора, проведенные разными авторами методом масс-спектропии вторичных ионов (ВИМС) [5—7], показали существенные различия в полученных ими величинах m . Объяснить их можно на основе кинетического уравнения [8], описывающего поток атомов примеси через границу раздела двух твердых фаз. В соответствии с [2] это уравнение дает выражение для потока F_n атомов примеси по нормали к подвижной границе раздела Si—SiO₂:

$$F_n = \lambda (C_- - C_+/m_*) + v_n \alpha C_+, \quad (2)$$

где λ — константа скорости реакции сегрегации; m_* — термодинамически равновесный коэффициент сегрегации; v_n — нормальная скорость окисления кремния; $\alpha = 0,44$. Из (2), пренебрегая диффузией примеси в окисле ввиду малости коэффициента диффузии примеси в окисле по сравнению с кремнием, находим

$$C_- = C_+ (\lambda/m_* + v_n \alpha)/(\lambda + v_n).$$

Использование последнего соотношения позволяет получить краевое условие для C_+ в Si на границе Si—SiO₂:

$$F_n = D \partial C_+ / \partial X' = \lambda (C_- - C_+/m_*) = C_+ (\alpha - 1/m_*) \lambda v_n / (\lambda + v_n). \quad (3)$$

На рис. 2 построена зависимость эффективного коэффициента сегрегации m от скорости окисления, рассчитанная по формуле (3) для двух различных температур. При малой скорости окисления ($v_n \ll \lambda$) величина m асимптотически стремится к своему равновесному значению m_* .

При равенстве v_n и λ m увеличивается до $2m_*$, а в случае $v_n \gg \lambda$, что достигается при окислении под давлением, m стремится к величине $1/\alpha = 2,26$. Такое поведение объясняется тем, что при малых v_n поток примеси через границу Si—SiO₂ определяется главным образом процессом установления термодинамически равновесных концентраций бора в Si и SiO₂. При больших v_n поток примеси обуславливается в основном скоростью продвижения границы Si—SiO₂ внутрь кремниевого кристалла. В асимптотике m достигает значения больше единицы за счет увеличения объема вещества при окислении (единичный объем SiO₂ образуется при потреблении в α раз меньшего объема Si).

На рис. 2 приведены также величины m , измеренные с помощью ВИМС [5—7]. Скорость v_n для экспериментальных точек рассчитана по модели Дила — Гроува из условий экспериментов, указанных в этих работах. В [5] окисление производилось в кислороде при парциальном давлении паров воды около 20 Па и температурах 920 и 1000°C. В [6] окисление осуществлялось в парах воды при 920°C и нескольких повышенных значениях давлений. В [7] образцы окислялись в парах воды при 1000°C и атмосферном давлении. Из рисунка видно хорошее согласие экспериментальных данных с расчетными по формуле (3), что свидетельствует о справедливости применения кинетического уравнения к рассматриваемому процессу сегрегации.

Отметим три важных следствия, вытекающих из соотношения (3): 1) при окислении в парах воды под давлением 10⁶ Па и выше эффективный коэффициент сегрегации должен превысить 1 (экспериментально такой факт пока не обнаружен); 2) при локальном окислении эффективный коэффициент сегрегации на длине «птичьего клюва» изменяется в несколько раз от равновесного значения под нитридной маской до неравновесного под областью «толстого» окисла; 3) в качестве m_* можно выбрать значения m , измеренные в [5], так как они получены в условиях, близких к термодинамически равновесным.

Путем подгонки (3) к имеющимся литературным данным по прямым измерениям коэффициента сегрегации бора [5—7] для λ получена зависимость: $\lambda = 7,5 \cdot 10^5 \exp(-E/kT)$ мкм/мин, где $E = 2$ эВ. Эта зависимость, по-видимому, требует уточнения на более обширном экспериментальном материале. Проведенный анализ процесса сегрегации бора справедлив и для случая сегрегации доноров с той разницей, что $m_* \approx 100$. Опубликованных данных по сегрегации доноров пока недостаточно для определения численных значений λ в зависимости от T . Имеющиеся данные [4] показывают, что сегрегация доноров практически всегда термодинамически равновесна, поэтому можно положить $\lambda \geq 1,0$ мкм/мин.

Степень неравновесности сегрегационных процессов будет возрастать со временем из-за продолжающихся тенденций снижения температур и повышения давления окислителей. Поэтому для моделирования сегрегации примесей при проектировании современных и перспективных операций термического окисления необходимо применять соотношение (3).

Диффузия легирующих примесей (элементов III и V групп таблицы Менделеева) происходит по смешанному вакансионно-эстафетному механизму [9]. Моделирование перераспределения примесей с учетом особенностей вакансионно-эстафетного механизма диффузии, согласно [2], связано с решением жесткой системы из пяти связанных дифференциальных уравнений, что в двумерном приближении приводит к существенным вычислительным затратам. Приемлемым для практики является приближение эффективного коэффициента диффузии [3].

Для одномерного моделирования влияния окисления на диффузию будем использовать эмпирическую модель Танигучи [10], которая представляется нам наиболее точной из всех опубликованных моделей этого явления. Как показал анализ результатов упрощенного моделирования двумерного распределения междоузельных атомов кремния в случае локального окисления [11], для приповерхностного слоя кремния толщиной

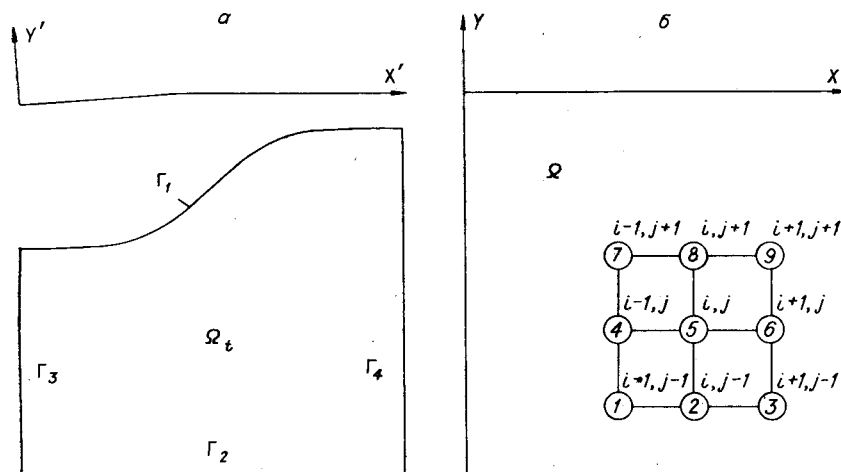


Рис. 3. Область моделирования и преобразование координат:
а — физическая, б — модельная

порядка 1 мкм справедливо следующее приближение:

$$D(X', Y') = D_i(C(X', Y')) + D_0(C(X', Y'), v_n(X'), Y'), \quad (4)$$

где X', Y' — система координат (рис. 3, а); D — эффективный коэффициент диффузии; D_i — коэффициент диффузии при термообработке в инертной атмосфере; D_0 — добавка к D_i за счет окисления; $C(X', Y')$ — функция двумерного распределения примеси; $v_n(X')$ — скорость окисления кремния.

С учетом рассмотренных физико-химических процессов получаем следующую математическую модель легирования и окисления кремния в двумерном приближении в области Ω_t с границами $\Gamma_1 - \Gamma_4$ (см. рис. 3, а):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{уравнение непрерывности} \\ \partial C / \partial t = \partial / \partial X' (D(X', Y') \partial C / \partial X') + \partial / \partial Y' (D(X', Y') \partial C / \partial Y'); \quad (5) \\ \text{граничные условия} \\ \Gamma_1: D(X', Y') \mathbf{n} \nabla C = C_+ (\alpha - 1/m_*) \lambda v_n / (\lambda + v_n), \\ \partial G_1 / \partial t = -\alpha v_n = -\alpha d(X', t) / dt; \\ \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4: D(X', Y') \mathbf{n} \nabla C = 0, \\ \partial G_2 / \partial t = v_2, \partial G_3 / \partial t = 0, \partial G_4 / \partial t = 0; \\ \text{начальные условия} \\ C(X', Y') = C_0(X', Y'), \end{array} \right.$$

где C — концентрация примеси; \mathbf{n} — единичный вектор нормали к границе; $G_1 - G_4$ — функции, определяющие координаты границ $\Gamma_1 - \Gamma_4$ соответственно; v_2 — скорость движения Γ_2 (границы области определения функции C), связанная с необходимостью адаптации сетки в области определения; v_n вычисляется дифференцированием соотношения (1); C_0 — распределение примеси в результате процесса ионной имплантации, рассчитываемое по соотношениям из [3].

Алгоритм решения. Основная трудность, возникающая при решении задачи (5), обусловливается наличием подвижной криволинейной границы. Один из эффективных методов решения подобных задач заключается в отображении области моделирования на неподвижную прямоугольную область [12]. Это отображение может быть осуществлено различными способами. В [13] применено численное конформное отображение, сохраняющее канонический вид уравнения непрерывности, но требующее существенных вычислительных затрат на генерацию сетки. В [3, 14] ис-

пользовано более простое преобразование координат, которое требует минимальных вычислительных затрат, но значительно усложняет вид уравнения непрерывности. При этом появляются трудности, связанные как с аппроксимацией членов со смешанными производными, так и с ухудшением сходимости [12]. В настоящей работе применен второй способ построения преобразования координат и сделана попытка улучшить сходимость алгоритма за счет использования модифицированного метода

$$\begin{cases} Y' = Y(G_1 - G_2) + G_1, & -1 \leq Y \leq 0; \\ t' = tt_m, & 0 \leq t \leq 1, \end{cases} \quad (6)$$

где X' , Y' — оси координат в физической области Ω_i ; X , Y — оси координат в модельной области Ω ; X_m — размер области моделирования по оси X' ; t_m — длительность моделируемой технологической операции; t' — физическая шкала времени; t — модельная шкала времени.

В области Ω краевая задача (5) принимает вид:

$$\begin{aligned} A_{XX} \partial/\partial X (D \partial C/\partial X) + A_{YY} \partial/\partial Y (D \partial C/\partial Y) + A_{XY} \partial/\partial X (D \partial C/\partial Y) + \\ + A_{YX} \partial/\partial Y (D \partial C/\partial X) + (A_Y + A_{Yd} D) \partial C/\partial Y + A_t \partial C/\partial t = 0; \end{aligned} \quad (7)$$

на границе Γ_1 :

$$D (B_X \partial C/\partial X + B_Y \partial C/\partial Y) = C_+ (\alpha - 1/m_*) \lambda v_n / (\lambda + v_n),$$

где $A_{XX} = 1$; $A_{YY} = (((1 + Y) \partial G_1/\partial X - Y \partial G_2/\partial X)^2 + 1) X_m^2 (G_1 - G_2)^2$;

$$A_{XY} = A_{YX} = - ((Y \partial G_1/\partial X - \partial G_2/\partial X) + \partial G_1/\partial X) X_m / (G_1 - G_2);$$

$$A_t = - X_m^2 / t_m; \quad A_Y = ((1 + Y) \partial G_1/\partial t - Y \partial G_2/\partial t) X_m^2 / (G_1 - G_2);$$

$$\begin{aligned} A_{Yd} = - X_m \left(((1 + Y) \partial^2 G_1/\partial X^2 - Y \partial^2 G_2/\partial X^2) / (G_1 - G_2) - ((1 + Y) \partial G_1/\partial X - \right. \\ \left. - Y \partial G_2/\partial X) (\partial G_1/\partial X - \partial G_2/\partial X) / (G_1 - G_2)^2 \right) + \end{aligned}$$

$$+ X_m^2 (\partial G_1/\partial X - \partial G_2/\partial X) ((1 + Y) \partial G_1/\partial X - Y \partial G_2/\partial X) / (G_1 - G_2)^2;$$

$$B_X = - (\partial G_1/\partial X) / (X_m \sqrt{1 + (\partial G_1/\partial X)^2});$$

$$B_Y = \sqrt{1 + (\partial G_1/\partial X)^2} / (G_1 - G_2).$$

Аналогично преобразуются граничные условия на границах $\Gamma_2 - \Gamma_4$ [14].

Краевая задача (7) аппроксимируется схемой Кранка — Николсона по времени, разностной схемой второго порядка для эллиптического оператора по пространству и схемой первого порядка на границах области на равномерной сетке [14, 16]:

$$\begin{aligned} A_{XX} (\tau/2h_X^2) [(D_6^{n+} + D_5^{n+}) (C_8^{n+} - C_5^{n+}) - (D_5^{n+} + D_4^{n+}) (C_5^{n+} - C_4^{n+})] + \\ + A_{YY} (\tau/2h_Y^2) [(D_8^{n+} + D_5^{n+}) (C_8^{n+} - C_5^{n+}) - (D_5^{n+} + D_2^{n+}) (C_5^{n+} - C_2^{n+})] + \\ + A_{XY} (\tau/4h_X h_Y) [D_6^{n+} (C_9^{n+} - C_3^{n+}) - D_4^{n+} (C_7^{n+} - C_1^{n+})] + \\ + A_{YX} (\tau/4h_X h_Y) [D_8^{n+} (C_9^{n+} - C_7^{n+}) - D_2^{n+} (C_3^{n+} - C_1^{n+})] + \\ + (A_Y + A_{Yd} D) (\tau/h_Y) [\Theta C_3^{n+} + (1 - 2\Theta) C_5^{n+} + (\Theta - 1) C_2^{n+}] + \\ + A_t (C_5^{n+1} - C_5^n) = 0; \end{aligned} \quad (8)$$

$$\Theta = (0; 0,5; 1).$$

На границе Γ_1 :

$$B_X D_2^{n+} (1/4h_X) (C_6^{n+} - C_4^{n+} + C_3^{n+} - C_1^{n+}) + B_Y D_2^{n+} (1/h_Y) (C_5^{n+} - C_2^{n+}) =$$

$$= \begin{cases} C_5^{n+} (\alpha - 1/m_*) \lambda v_n / (\lambda + v_n) & \text{для акцепторов;} \\ C_5^n (\alpha - 1/m_*) \lambda v_n / (\lambda + v_n) & \text{для доноров,} \end{cases}$$

здесь h_X — шаг сетки по X ; h_Y — шаг сетки по Y ; $n+ \equiv n + 1/2$; τ — шаг по времени. Верхние индексы в разностной схеме обозначают номер шага по времени, а вместо двух нижних индексов нумерации узлов сетки используются порядковые номера точек шаблона (см. рис. 3, б). Разностные уравнения на $\Gamma_2 - \Gamma_4$ аналогичны уравнениям на Γ_1 . Основные свойства схемы (8) обсуждаются в [14, 16]. Система разностных уравнений (8) линеаризуется методом Ньютона. Полученная матрица системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) имеет девять ненулевых диагоналей. Три главных диагонали образованы точками шаблона с номерами 4—6. Ниже главных с некоторым интервалом расположены подряд еще три диагонали, образованные точками шаблона 1—3. Симметрично над главными диагоналями находятся диагонали, образованные точками 7—9.

СЛАУ с 9-диагональной матрицей решается методом ММС, который эффективно использует разреженность структуры матрицы. Если решать СЛАУ методом LU-факторизации для ленточных матриц, то нулевые диагонали внутри ленты становятся ненулевыми. Чтобы этого не происходило, в ММС к 9-диагональной матрице СЛАУ добавляется дополнительная 4-диагональная матрица, зависящая от одного итерационного параметра. Вклад дополнительной матрицы в решение рассматривается как возмущение и устраняется итерационно.

Численные эксперименты показали, что время решения СЛАУ методом ММС сокращается приблизительно в 5 раз по сравнению с методом ПВР. Обнаружилось также, что ММС слабо чувствителен к изменению итерационного параметра. В таблице приведено сравнение убывания невязки СЛАУ с ростом числа итераций K при решении тестового примера с различными значениями итерационного параметра β . Количество итераций, необходимых для достижения заданного уровня невязки при изменении β от 0 до 0,95, изменяется в пределах 30%. Такая слабая чувствительность ММС к вариациям итерационного параметра позволяет упростить алгоритм путем отказа от оптимизации величины β .

Тестирование. В настоящее время программы численного моделирования диффузии в двумерной области тестируются сравнением результатов моделирования с известными аналитическими решениями или с экспериментами. Однако аналитические решения получены только для очень простых примеров и не позволяют протестировать программу в режимах, близких к реальным. Прямых экспериментальных методов определения двумерного распределения примеси не существует, а косвенными методами можно оценить не все распределение, а только отдельные его параметры. Поэтому для отладки программы ФАКТ2, реализующей численное решение краевой задачи (5), была разработана комплексная система тестирования.

K	$\beta=0,0$	$\beta=0,2$	$\beta=0,4$	$\beta=0,6$	$\beta=0,8$	$\beta=0,95$
1	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
2	$-9,1 \cdot 10^{-2}$	$-8,3 \cdot 10^{-2}$	$-7,4 \cdot 10^{-2}$	$-6,5 \cdot 10^{-2}$	$-5,4 \cdot 10^{-2}$	$-4,7 \cdot 10^{-2}$
3	$1,1 \cdot 10^{-2}$	$8,8 \cdot 10^{-3}$	$7,0 \cdot 10^{-3}$	$5,4 \cdot 10^{-3}$	$4,4 \cdot 10^{-3}$	$6,1 \cdot 10^{-3}$
4	$2,5 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$4,8 \cdot 10^{-4}$	$-4,2 \cdot 10^{-4}$	$-1,2 \cdot 10^{-3}$
5	$6,3 \cdot 10^{-4}$	$4,1 \cdot 10^{-4}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$	$9,2 \cdot 10^{-5}$	$9,4 \cdot 10^{-5}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$
10	$7,9 \cdot 10^{-7}$	$2,8 \cdot 10^{-7}$	$6,0 \cdot 10^{-8}$	$5,2 \cdot 10^{-9}$	$-3,2 \cdot 10^{-8}$	$-2,1 \cdot 10^{-7}$
15	$9,2 \cdot 10^{-10}$	$1,7 \cdot 10^{-10}$	$1,5 \cdot 10^{-11}$	$3,6 \cdot 10^{-13}$	$1,5 \cdot 10^{-11}$	$2,4 \cdot 10^{-10}$
20	$1,1 \cdot 10^{-12}$	$1,1 \cdot 10^{-13}$	$6,3 \cdot 10^{-15}$	$2,1 \cdot 10^{-15}$	$-7,3 \cdot 10^{-15}$	$-2,9 \cdot 10^{-13}$

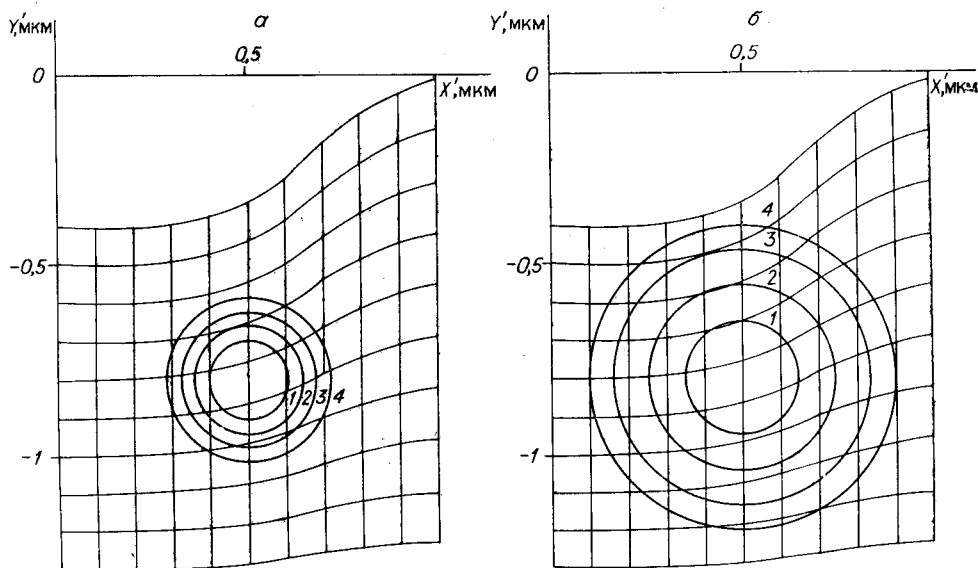


Рис. 4. Результаты расчета диффузии бора в течение 30 мин при $T = 1000^\circ\text{C}$ по контрольному примеру для тестирования алгоритма на сетке 51×51 с шагом 1 микс с невязкой по «ньютоновским» итерациям 0,01 и погрешностью решения СЛАУ 0,001:

кривые 1—4 обозначают изоконцентрационные линии: 1 — 10^{16} , 2 — 10^{15} , 3 — 10^{14} , 4 — 10^{13} см $^{-3}$

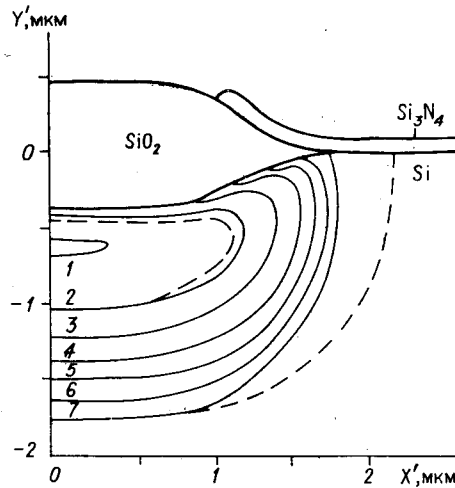
В одномерном приближении результаты моделирования контрольных примеров сравнивались с результатами моделирования этих примеров по программе ТРОПА (следующей версии программы одномерного моделирования технологии ТЕХИС1В [2]).

Для отладки алгоритма моделирования диффузии в двумерной области разработан набор тестов, основанных на использовании свойств симметрии решения. В качестве начального условия выбрано распределение примеси, изолинии которого образуют семейство концентрических окружностей (рис. 4, а). Диффузия примеси моделируется при использовании в качестве коэффициента диффузии D_i из (4) с различными конфигурациями области Ω_i : а) прямоугольная неподвижная область; б) прямоугольная подвижная область; в) криволинейная неподвижная область. В этих вариантах в системе уравнений (7) зануляются различные коэффициенты: а) A_{xx} , A_{yx} , A_y , A_{yd} ; б) A_{xy} и A_{yx} ; в) A_y и A_{yd} . Во всех трех тестах должно получаться одинаковое результирующее распределение примеси, которое на рис. 4, б показано для варианта в. Критерием правильности выполнения теста служит условие совпадения формы изолиний результирующего распределения с концентрическими окружностями. Отклонение формы изолиний от окружностей свидетельствует об ошибках или погрешностях алгоритма, оно достигало $\sim 1\%$. Тесты а — в позволяют независимо рассматривать вклад в решение различных коэффициентов уравнения (7), что бывает полезно при отладке алгоритма.

Для тестирования моделей физико-химических процессов в двумерном приближении результаты имитации технологии по программе ФАКТ2 передавались в качестве исходных данных программе ЭФЕС [17], моделирующей электрофизические характеристики элементов СВИС. Рассчитанные таким образом электрофизические характеристики сравнивались с экспериментальными. Сравнение показало хорошее соответствие расчетных и измеренных величин пороговых напряжений активных и паразитных МДП-транзисторов, а также напряжений лавинного пробоя $p-n$ -переходов. Достигнутое хорошее соответствие свидетельствует о приемлемости разработанных моделей и алгоритма для анализа технологии изготовления СВИС.

Рис. 5. Результаты моделирования процесса перераспределения бора в кремнии при изготовлении изолирующего элемента СБИС.

Начальные условия: имплантация ионов бора с энергией 100 кэВ и дозой 4 мкКл/см² через слой SiO₂ толщиной 30 нм. Изоконцентрационные кривые 1—7 (сплошные) и 2, 7 (штриховые) приведены после отжига в окислительной атмосфере при давлении 1·10⁵ Па, T = 950°C, t = 300 мин: кривая 1 соответствует концентрации 1·10¹⁷, 2 — 3·10¹⁶, 3 — 1·10¹⁶, 4 — 3·10¹⁵, 5 — 1·10¹⁵, 6 — 3·10¹⁴, 7 — 1·10¹⁴ см⁻³. Сплошные кривые — расчет по программе ФАКТ2, штриховые — расчет в предположении термодинамически равновесной сегрегации и однородности коэффициента диффузии

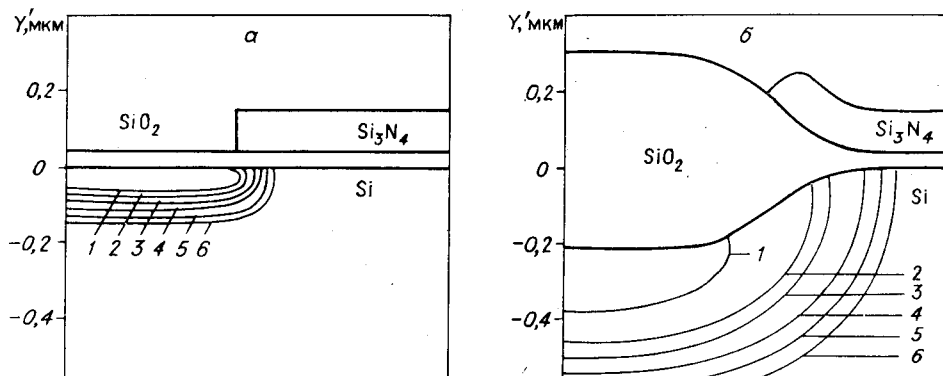


Обсуждение результатов моделирования. Диффузия примесей в области кремния с неподвижными границами (т. е. при термообработке в инертном газе) представляет собой частный случай рассматриваемой задачи. Моделирование этого случая предусмотрено в программе ФАКТ2, но наибольший практический интерес представляет диффузия примесей при непланирном окислении.

Рис. 5 иллюстрирует моделирование последовательности технологических операций изготовления элемента СБИС, изолирующего активные МДП-транзисторы друг от друга. Сплошными линиями на рисунке показаны изоконцентрационные кривые распределения бора, рассчитанные по программе ФАКТ2. Для сравнения штриховыми линиями изображено распределение бора в предположении постоянства добавки D_0 коэффициента диффузии и равновесной сегрегации, принятом в имеющихся программах двумерной имитации технологии СБИС [3, 13, 14]. Штриховой изолинии уровня $1 \cdot 10^{17}$ см⁻³ нет потому, что в последнем приближении максимальная концентрация меньше 10^{17} , а изолинии уровней от $1 \cdot 10^{16}$ до $3 \cdot 10^{14}$ не приведены, чтобы не загромождать рисунок. Из различий штриховой и сплошной изолиний уровня $1 \cdot 10^{14}$ видно, что пренебрежение неоднородной в области Ω_1 зависимостью коэффициента диффузии от скорости окисления может привести к ошибочным результатам в оценке боковой диффузии бора в область активного элемента СБИС. Различия рассматриваемых распределений вблизи максимума неизбежно приведут к расхождению в оценках порогового напряжения паразитного МДП-транзистора и пробивного напряжения стокового $p-n$ -перехода. Таким образом, для имитации электрофизических параметров изолирующего элемента СБИС необходимо решать систему уравнений (5) с учетом выражений (3) и (4) для коэффициентов.

Для иллюстрации возможностей программы ФАКТ2 рассмотрим наиболее трудный для моделирования пример окисления кремния, легированного мышьяком, в котором нелинейная диффузия (коэффициент диффузии мышьяка в кремнии с ростом концентрации увеличивается на полтора порядка) сочетается с быстро перемещающейся криволинейной границей Si—SiO₂. Быстрое перемещение границы и большая крутизна ПК в соответствии с моделью (1) вызваны резким увеличением константы скорости окисления k в случае окисления несобственного кремния. На рис. 6, а показано распределение мышьяка после имплантации, которое служит начальным условием для моделирования термообработок. На рис. 6, б приведено окончательное распределение мышьяка после окисления в парах воды и отжига в инертной атмосфере.

В настоящее время программа ФАКТ2 интенсивно используется в анализе и оптимизации технологических маршрутов изготовления СБИС в цикле с программой ЭФЕС. ФАКТ2 реализован на языке Фортран-IV.



нием паров воды $1 \cdot 10^5$ Па, $T = 1050^\circ\text{C}$ в течение 30 мин.
 Изоконцентрационные кривые: а — 1 — $5 \cdot 10^{20}$, 2 — $1 \cdot 10^{20}$, 3 — $1 \cdot 10^{19}$, 4 — $1 \cdot 10^{18}$, 5 — $1 \cdot 10^{17}$, 6 — $1 \cdot 10^{16}$ см^{-3} ; б — 1 — $5 \cdot 10^{19}$, 2 — $2 \cdot 10^{19}$, 3 — $1 \cdot 10^{19}$, 4 — $1 \cdot 10^{18}$, 5 — $1 \cdot 10^{17}$, 6 — $1 \cdot 10^{16}$ см^{-3}

Объем оперативной памяти, требуемой для работы программы, 950 Кбайт, время имитации типовых технологических маршрутов на ЭВМ ЕС1061 составляет от 5 до 50 мин.

Заключение. Сформулирована постановка задачи об окислении и легировании кремния в двумерном приближении с учетом зависимости коэффициента диффузии от скорости окисления, распределенной неравномерно вдоль окисляемой границы, на которой происходит неравновесная сегрегация примесей. С помощью кинетического уравнения для сегрегации объяснены разногласия в литературных данных по определению величины коэффициента сегрегации примесей. На основе расчетов по программе КВАРЦ определены параметры аналитической аппроксимации формы области «птичьего клюва» для имитации локального окисления собственного и несобственного кремния. Разработан алгоритм, на основе которого реализована данная постановка задачи в программе ФАКТ2. Предложена система контрольных примеров для тестирования программы. Показана применимость программы для проектирования технологии 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.
2. Кольдяев В. И., Мороз В. А., Назаров С. А. Исследование асимптотических свойств краевой задачи о легировании и окислении кремния // *Автометрия.*— 1986.— № 6.
3. Maldonado C. D. ROMANS II. A two-dimensional process simulator // *Appl. Phys.*— 1983.— V. A31, N 1.— P. 119.
4. Grove A. S., Leistiko O., Sah C. T. Redistribution of acceptor and donor impurities during thermal oxidation of silicon // *J. Appl. Phys.*— 1964.— V. 35, N 9.— P. 2695.
5. Fair R. B., Tsai J. C. C. Theory and direct measurement of boron segregation in SiO_2 during dry, near dry, and wet O_2 oxidation // *J. Electrochem. Soc.*— 1978.— V. 125, N 12.— P. 2050.
6. Deroux-Dauphin P., Gonchard J. P. The influence of high pressure oxidation on boron redistribution in LOCOS structures // *J. Electrochem. Soc.*— 1984.— V. 131, N 6.— P. 1418.
7. Dao Khac An, Pavlyak F. Use of SIMS for determining the segregation coefficient of boron at the Si — SiO_2 interface in steam oxidation following ion implantation // *Phys. Stat. Sol.*— 1986.— V. a95, N 2.— P. K117.
8. Чеботин В. Н. Физическая химия твердого тела.— М.: Химия, 1982.
9. Tan T. Y., Gösele U. Point defects, diffusion processes, and swirl defect formation in silicon // *Appl. Phys.*— 1985.— V. A37, N 1.— P. 1.

10. Taniguchi K., Kurosawa K., Kashiwagi M. Oxidation enhanced diffusion of boron and phosphorus in (100) silicon // J. Electrochem. Soc.—1980.— V. 127, N 10.— P. 2243.
11. Shin Y.-S., Kim C.-K. A two-dimensional model for the excess interstitial distribution in silicon during thermal oxidation // IEEE Trans. Electron Devic.—1984.— V. ED-31, N 6.— P. 797.
12. Yeng R. W. Numerical methods in free-surface flows // Ann. Rev. Fluid Mech.—1982.— V. 14.— P. 395.
13. Seidl A., Svoboda M. Numerical conformal mapping for treatment of geometry problem in process simulation // IEEE Trans. Electron Devic.—1985.— V. ED-32, N 10.— P. 1960.
14. Tielert R. Two-dimensional numerical simulation of impurity redistribution in VLSI processes // IEEE Trans. Electron Devic.—1980.— V. ED-27, N 8.— P. 1479.
15. Schneider G. E., Zedan M. A modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problem // Numerical Heat Transfer.—1981.— V. 4.— P. 1.
16. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем.— М.: Наука, 1971.
17. Горбенко Н. И., Катешов В. А., Майоров Ю. К. ППП ЭФЕС (автоматизация решения краевых задач для уравнения Пуассона на ЕС ЭВМ).— Новосибирск, 1985.— (Препринт/АН СССР, Сиб. отд-ние, ВЦ; 552).

Поступила в редакцию 20 февраля 1987 г.

УДК 548.5 : 539.23

Л. Н. АЛЕКСАНДРОВ, Р. В. БОЧКОВА, А. Н. КОГАН,
Н. П. ТИХОНОВА

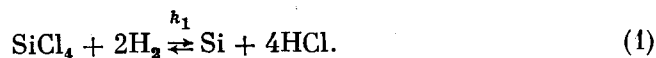
(Новосибирск — Саранск)

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ОСОБЕННОСТЕЙ РОСТА ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК КРЕМНИЯ В ХЛОРИДНОЙ СИСТЕМЕ

Методом Монте-Карло исследованы особенности роста эпитаксиальных пленок кремния в хлоридной системе при взаимодействии SiCl_4 с водородом. Определена связь параметров эпитаксии со скоростью роста и шероховатостью поверхности пленок. Прослежен механизм встраивания атомов кремния в растущий кристаллический слой. Показана реализация различных конкурирующих реакций на поверхности и в исходной фазе в зависимости от условий роста. Получена информация о составе адсорбционного слоя.

Цель настоящей работы — статистическое моделирование на ЭВМ роста полупроводниковых пленок в ходе химических транспортных реакций получения кремния (предыдущие работы [1—3] посвящены моделированию синтеза методом молекулярно-лучевой эпитаксии). Особенность этого вида эпитаксии [4] заключается в том, что к поверхностям поступает не только исходный материал, но и промежуточные продукты. Благодаря этому кристаллизация приобретает черты саморегулирующегося процесса: при изменении ее параметров автоматически поддерживаются условия, близкие к равновесным, и происходит «исправление ошибок» в структуре. Однако механизм роста при этом значительно сложнее, чем, например, при конденсации из паров.

Исходными продуктами цепи химических реакций получения Si в хлоридных системах являются SiCl_4 и H_2 , конечными — Si и HCl [5]:



При высоких температурах и больших концентрациях SiCl_4 в потоке водорода нужно учесть также травление поверхности

