

06;11

## **Моделирование процесса удаления примесей из полупроводниковых пластин в неоднородном температурном поле**

© В.И. Рудаков, А.В. Башмаков, В.В. Овчаров

Институт микроэлектроники и информатики РАН, Ярославль  
E-mail: vir@uniyar.ac.ru

Поступило в Редакцию 21 июля 2003 г.

Показано, что при высоких значениях градиента температуры, приложенного перпендикулярно поверхностям полупроводниковой пластины, можно добиться выхода примеси, распределенной в приповерхностной области пластины, на ее поверхность. Проведено машинное моделирование термодиффузии примеси из гауссова источника, залегающего в приповерхностной области, и для случая равномерного распределения примеси. Получены кривые, иллюстрирующие накопление примеси вблизи поверхности, и найдены стационарные решения, совпадающие в обоих случаях при условии одинакового количества загнанной примеси.

Важной задачей технологии изготовления интегральных схем (ИС) является предварительное геттерирование нежелательных примесей в кремниевых пластинах, направленное на поддержание чистоты и совершенства кристаллической структуры подложек. Так как для изготовления ИС в основном используются приповерхностные области полупроводниковых пластин, то первоочередной задачей становится геттерирование примесей именно в этих областях. В настоящее время для этого используются методы, основанные на выведении примесей к нерабочей поверхности подложки или в ее объем при формировании глубоко залегающих преципитатов. При этом нежелательные примеси, хотя и удаляются из рабочих областей полупроводниковой пластины, но все же присутствуют в их окрестностях [1]. Представляет интерес поиск таких новых способов геттерирования примесей, при которых их можно полностью удалить из подложки. В работе [2] предложено использовать градиент температуры для зонной очистки слитков от примесей веществ в твердом состоянии. Предполагается, что под воздействием градиента

температуры примесь выводится на торцевую поверхность слитка и затем стравливается. Косвенным подтверждением применения этой идеи для геттерирования примеси в полупроводниковых пластинах является движение атомов кислорода под воздействием градиента температуры при формировании скрытых слоев SiO<sub>2</sub> с помощью неизотермического отжига ионно-имплантированных кислородом областей кремния, направление движения которого зависит от направления приложенного градиента температуры [3].

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию возможности удаления примесей из рабочих областей полупроводниковых подложек с помощью градиента температуры.

Рассмотрим одномерный поток атомов примеси, связанный с градиентами концентрации и температуры [4],

$$J = -D \left( \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{CQ^*}{kT^2} \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (1)$$

где  $C = C(x, t)$  — концентрация примеси,  $T = T(x)$  — абсолютная температура,  $D = D_0 \exp[-E/kT(x)]$  — коэффициент диффузии,  $D_0$  — предэкспоненциальный множитель,  $E$  — энергия активации примеси,  $k$  — постоянная Больцмана,  $Q^*$  — теплота переноса.

Как видно из уравнения (1), при заданном градиенте температуры значение теплоты переноса определяет величину и направление потока примеси в неоднородном температурном поле.

В этом случае процесс перераспределения примеси в пространстве  $x$  и во времени  $t$  будет описываться следующим уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D \left( \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{Q^* C}{kT^2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right]. \quad (2)$$

В качестве модели рассмотрим тонкую пленку с отражающими границами толщиной  $l \sim 25 \mu\text{m}$ , нанесенную на полупроводниковую пластину, поверхности которой имеют различные температуры. Если коэффициент теплопроводности пленки является постоянным и не зависит от координаты, то в течение достаточно короткого времени в пленке установится линейное распределение температуры  $T(x) = T_0 + Gx$ , где  $G$  — постоянный градиент температуры.

Решение уравнения (2) будем искать для двух случаев, которые практически имеют место в полупроводниковой технологии.

Случай 1. Примесь сосредоточена на определенном расстоянии от поверхности полупроводниковой пленки. Пусть начальное распределение примеси имеет вид функции Гаусса, смещенной от поверхности ( $x = 0$ ) на величину  $10 \mu\text{m}$ ,

$$C = \exp(-\alpha \times x^2), \quad (3)$$

где  $\alpha \sim 2 \cdot 10^{-11} \text{ m}^{-2}$ . Граничные условия имеют вид

$$\begin{cases} J(0, t) = 0, \\ C(l, t) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Случай 2. Равномерное распределение примеси в пленке  $C = \text{const}$ . Этому случаю соответствуют следующие граничные условия:

$$\begin{cases} J(0, t) = 0, \\ J(l, t) = 0. \end{cases} \quad (5)$$

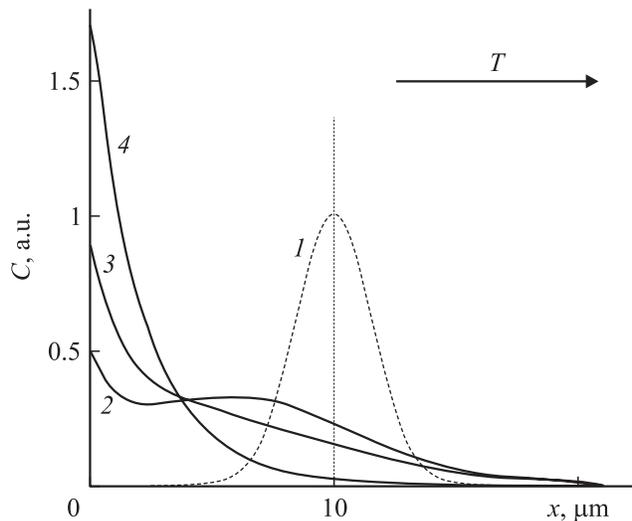
Для простоты положим, что в обоих случаях количество атомов примеси одинаковое:

$$\int_0^l C_1(x) dx = \int_0^l C_2(x) dx = M, \quad (6)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — концентрации примеси для первого и второго условий соответственно.

Данная задача решалась численным методом с использованием ЭВМ. При этом были использованы следующие значения параметров. Температура на поверхности пластины  $T_0 = 1000^\circ\text{C}$ , градиент температуры  $G = 10^5 \text{ deg/cm}$ , теплота переноса  $Q^* \sim 2.6 \text{ eV}$ .

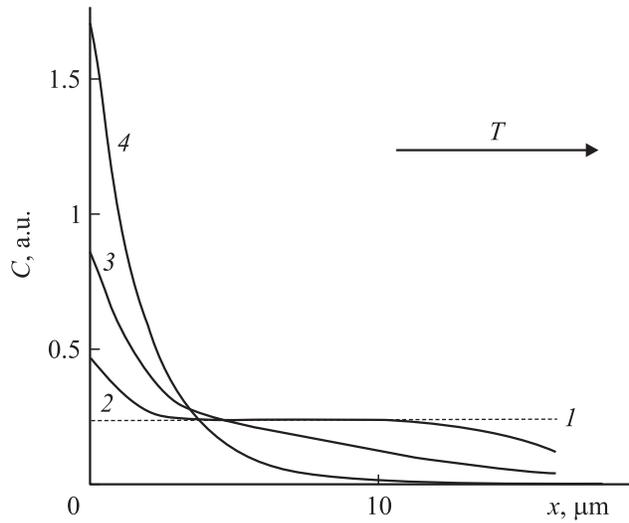
На рис. 1 приведены расчетные концентрационные профили примеси для первого краевого условия при разных временах термодиффузии. Из рисунка видно, что при времени  $t \sim 10^4 \text{ s}$  (кривая 2) происходит смещение максимума кривой Гаусса в сторону начала координат с одновременным уменьшением ее амплитуды. Это означает, что на все атомы примеси действует сила, обусловленная градиентом температуры. Эта сила направлена к поверхности пленки ( $x = 0$ ). Так как поверхность пленки является отражающей, то вблизи нее происходит накопление



**Рис. 1.** Концентрационные профили для первого краевого условия при  $T_0 = 1000^\circ\text{C}$ ,  $Q^* \sim 2.6 \text{ eV}$ ,  $\nabla T = 10^5 \text{ deg/cm}$ . 1 — начальное распределение, 2 —  $t \sim 10^4 \text{ s}$ , 3 —  $t \sim 1.5 \cdot 10^4 \text{ s}$ , 4 — стационарный случай  $t > 3.6 \cdot 10^5 \text{ s}$ . (Стрелкой показано направление нарастания температуры).

примеси. С увеличением времени  $t \sim 1.5 \cdot 10^4 \text{ s}$  наблюдается практически размытие кривой Гаусса (кривая 3). При дальнейшем увеличении времени термодиффузии  $t \sim 3.6 \cdot 10^5 \text{ s}$  наступает стационарный случай, когда в каждой точке пластины поток атомов, связанный с градиентом концентрации, уравновешивается противоположным по направлению потоком, вызванным градиентом температуры (кривая 4). В этом случае изменения профиля не происходит и устанавливается стационарная поверхностная концентрация  $C = C_s$ . Согласно уравнению (1), математически этому случаю соответствует условие  $J = 0$ .

На рис. 2 приведены расчетные концентрационные профили для второго случая. При равномерном распределении диффузанта в глубь образца (кривая 1) начальный поток атомов, обусловленный градиентом концентрации примеси, отсутствует, и соответственно перераспределение атомов вызывает термоградиентный поток. При этом можно видеть (кривая 2), что в глубине образца на некотором отдалении



**Рис. 2.** Концентрационные профили для второго краевого условия при  $T_0 = 1000^\circ\text{C}$ ,  $Q^* \sim 2.6 \text{ eV}$ ,  $\nabla T = 10^5 \text{ deg/cm}$ . 1 — начальное распределение, 2 —  $t \sim 10^4 \text{ s}$ , 3 —  $t \sim 1.5 \cdot 10^4 \text{ s}$ , 4 — стационарный случай  $t > 3.6 \cdot 10^5 \text{ s}$ .

в глубь от границ концентрация атомов остается постоянной в течение времени  $t \sim 10^4 \text{ s}$ . Поток атомов диффузанта в этих точках остается постоянным. Это согласуется с уравнением (2). Если в окрестности некоторой точки  $x = x_0$  сохраняется постоянная концентрация  $C(x, t) = C(x_0, t) = C_0$ , то в течение времени существования такой окрестности концентрация  $C(x_0, t)$  будет оставаться постоянной. Дальнейшая диффузия приводит к изменению выпуклости правой части кривой (кривая 3). При продолжительном времени диффузии (кривая 4) профиль распределения примеси становится идентичен кривой 4 для первого краевого условия, что соответствует стационарному случаю. Следовательно, стационарное решение при прочих равных условиях и при одинаковом количестве залегающей примеси остается одинаковым.

Таким образом, полученные результаты показывают, что независимо от начального распределения примеси в приповерхностной области под влиянием градиента температуры она концентрируется на поверхности пластины. Если начальное количество примеси является одинаковым

для всех случаев, то в стационарном состоянии профили концентрации примеси будут иметь один и тот же вид, при условии, что концентрация примеси на поверхности пластины не превышает предела ее растворимости.

## Список литературы

- [1] *Технология СБИС* / Пер. с англ. Под ред. С. Зи. В 2-х кн. Кн. 1 М.: Мир, 1986. 404 с.
- [2] *Каменецакая Д.С., Пилецкая И.Б., Ширяев В.И.* // Докл. Академии наук СССР. 1968. Т. 178. № 2. С. 323–326.
- [3] *Рудаков В.И., Денисенко Ю.Н., Мочалов Б.В.* // Микроэлектроника. 2000. Т. 29. № 5. С. 367–373.
- [4] *Rudakov V.I., Ovcharov V.V.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 2002. V. 45. P. 743–753.