

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_2 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

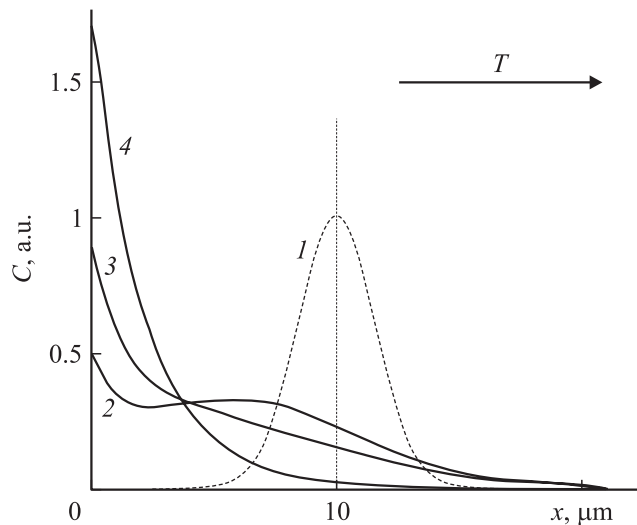


Рис. 1. Концентрационные профили для первого краевого условия при $T_0 = 1000^\circ\text{C}$, $Q^* \sim 2.6 \text{ eV}$, $\nabla T = 10^5 \text{ deg/cm}$. 1 — начальное распределение, 2 — $t \sim 10^4 \text{ s}$, 3 — $t \sim 1.5 \cdot 10^4 \text{ s}$, 4 — стационарный случай $t > 3.6 \cdot 10^5 \text{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

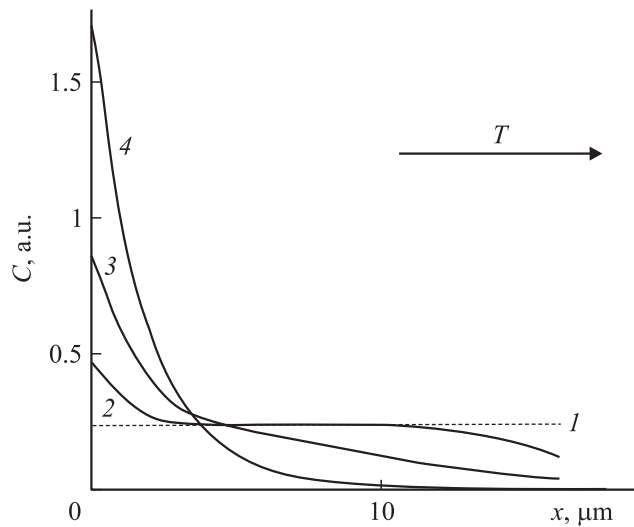


Рис. 2. Концентрационные профили для второго краевого условия при $T_0 = 1000^\circ\text{C}$, $Q^* \sim 2.6 \text{ eV}$, $\nabla T = 10^5 \text{ deg/cm}$. 1 — начальное распределение, 2 — $t \sim 10^4 \text{ s}$, 3 — $t \sim 1.5 \cdot 10^4 \text{ s}$, 4 — стационарный случай $t > 3.6 \cdot 10^5 \text{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

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.