

Эффект ориентации поверхности кремния в модели объемного термического окисления

© О.В. Александров[¶], А.И. Дусь

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 15 января 2009 г. Принята к печати 9 февраля 2009 г.)

На основе объемной модели термического окисления кремния [О.В. Александров, А.И. Дусь. ФТП, **41** (11), 1400 (2008)] проведен анализ ориентационной зависимости скорости окисления кремния в сухом кислороде. Определены ориентационные и температурные зависимости коэффициента диффузии в напряженном диоксиде кремния и характеристического времени его релаксации. Ориентационная зависимость коэффициента диффузии окислителя в диоксиде кремния на границе реакционной зоны, $D_1(110) > D_1(111) > D_1(100)$, связывается с ориентирующим влиянием монокристаллической подложки кремния на структуру и плотность прилегающего к нему диоксида кремния. Ориентационная зависимость характеристического времени релаксации, $\tau(100) > \tau(110) > \tau(111)$, обратно коррелирует с ориентационной зависимостью D_1 для ориентаций (100) и (111) и прямо — с внутренними механическими напряжениями для ориентаций (110) и (111).

PACS: 81.65.Ps, 81.05.Cy, 68.35.Md

1. Введение

Термический диоксид кремния остается основным диэлектриком в современных сверхбольших и ультрабольших интегральных схемах (СБИС и УБИС) на основе монокристаллического кремния. С увеличением степени интеграции толщина используемых в технологии СБИС и УБИС пленок диоксида кремния уменьшается до единицы нанометров и становится соизмеримой с толщиной переходного слоя на границе раздела $\text{SiO}_2\text{—Si}$. При этом еще более важным становится выбор кристаллографической ориентации поверхности кремниевых подложек, которая влияет как на скорость термического окисления, так и на электрофизические параметры границы раздела $\text{SiO}_2\text{—Si}$ и пленки диоксида кремния [1].

Ориентация поверхности кремния оказывает сложное влияние на скорость термического окисления. При небольших толщинах оксида соотношение между скоростями окисления в сухом кислороде или водяном паре кремния простых ориентаций имеет вид $v(110) > v(111) > v(100)$ [2–4]. В рамках классической модели термического окисления Дила–Гроува [5] и в других линейно-параболических моделях (см. обзор в [1]) такое соотношение объяснялось зависимостью константы скорости пограничной реакции, входящей в выражение для константы скорости линейного окисления, от плотности и расположения связей Si—Si на плоскостях кремния этих ориентаций [2,6]. Соотношение между константами линейного окисления качественно отвечает соотношению между ретикулярными плотностями атомов кремния на плоскостях этих ориентаций: $N_s(110) = 9.59 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, $N_s(111) = 7.83 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, $N_s(100) = 6.78 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ [2–4,6–8]. В линейно-параболической модели Дила–Гроува [5] константа скорости параболического окисления определяется коэффициентом диффузии окисления в диоксиде

кремния и от ориентации не зависит, что подтверждается в ряде экспериментов [4,7,8]. Однако в некоторых работах [9–11] такая зависимость была обнаружена: $k_p(111) > k_p(110) \geq k_p(100)$ и связывалась со структурным фактором [9,10] или с механическими напряжениями [11] в диоксиде кремния.

Другим отклонением от линейно-параболической модели является пересечение ориентационных зависимостей, наблюдаемое с ростом толщины диоксида кремния при увеличении давления окислителя [12,6] или времени окисления [13–15]. Ван дер Мулен [12] и Райдер и Форгет [6] наблюдали пересечение скоростей окисления или толщин диоксида для ориентаций кремния (111) и (100) при повышении давления кислорода от 0.01 атм. Ван дер Мулен [12] связывал это явление с двумя состояниями окисляющих частиц кислорода — молекулярным O_2 и продуктом его диссоциации атомарным O , которые могут взаимодействовать с указанными плоскостями кремния с разной скоростью. Райдер и Форгет [6] объясняли явление разной направленностью связей Si—Si на поверхности кремния, приводящей, по мнению авторов, к большей толщине переходной области для границы $\text{SiO}_2\text{—Si}(111)$.

Ирене, Массоуд и Тирней [13] наблюдали явление пересечения кинетических зависимостей толщин диоксида, полученных при окислении в сухом кислороде при температуре 800°C , для плоскостей (110) и (111), которое происходило при толщине диоксида $x_{\text{ок}} \approx 15 \text{ нм}$. Ориентационную зависимость скорости окисления при малых толщинах диоксида авторы связывали с разной поверхностной плотностью атомов кремния, а при больших — с анизотропией модуля упругости кремния и вязкоупругим течением аморфного диоксида кремния. Левис и Ирене [14] изучали кинетику термического окисления в сухом кислороде кремния пяти ориентаций: (110), (111), (311), (511) и (100) при температурах 700, 1000 и 1100°C . Пересечение скоростей окисления на-

[¶] E-mail: Aleksandr_ov@mail.ru

блюдалось для ориентаций (110) и (111) при температурах 700 и 1000°С. Явление объяснялось появлением при толщинах диоксида свыше ~ 25 нм внутренних механических напряжений, уменьшающих концентрацию окислителя и тем самым скорость реакции окисления Si(110) в большей степени, чем Si(111). Нгау с соавт. [15] аналогичным образом объясняли явление пересечения зависимостей скорости окисления от времени $v_{\text{ок}}(t)$ для ориентаций (110) и (111) при $x_{\text{ок}} \approx 240$ нм, наблюдавшееся при термическом окислении Si в парах воды при температуре 785°С. Ими была получена ориентационная зависимость для внутренних механических напряжений в диоксиде кремния, выращенном в парах воды: $\sigma(110) > \sigma(100) \geq \sigma(111)$, аналогичная обнаруженной ранее в работе [16] для диоксида, выращенного в сухом кислороде, $\sigma(110) > \sigma(100) > \sigma(111)$.

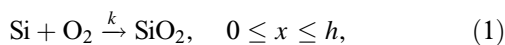
Отметим, что все вышеприведенные объяснения ориентационных зависимостей носят феноменологический характер и опираются на линейно-параболическую модель окисления, в которой коэффициент диффузии окислителя полагается постоянным по толщине диоксида кремния, а реакция окисления происходит на плоской межфазной границе.

В работе [17] нами была предложена модель, в которой термическое окисление кремния происходит на фронте объемной реакции, а коэффициент диффузии окислителя в диоксиде кремния релаксирует при удалении от границы раздела со временем окисления к равновесному значению в плавленном кварце.

Цель настоящей работы состоит в количественном описании ориентационной зависимости скорости окисления в рамках предложенной ранее объемной модели.

2. Описание модели

В отличие от модели Дила–Гроува [5] и других линейно-параболических моделей (см. обзор в [1]), в модели объемного окисления [17] полагается, что реакция окисления кремния идет не на плоской границе раздела SiO₂–Si, а может происходить по всему объему рассматриваемой системы SiO₂–Si между поверхностью SiO₂ ($x = 0$) и некой плоскостью в глубине подложки Si ($x = h$), до которой могут продиффундировать молекулы окислителя,



где k — константа скорости объемной реакции окисления. Диффузия кислорода в рассматриваемой системе SiO₂–Si с учетом объемной реакции его взаимодействия с кремнием (1) описывается системой диффузионно-реакционных уравнений:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) - k C_A C_B, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -k C_A C_B, \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = k C_A C_B, \quad (4)$$

где x — координата, отсчитываемая от поверхности диоксида, t — время окисления, C_A , C_B и C_C — концентрации окислителя, кремния и диоксида кремния соответственно, D_A — коэффициент диффузии кислорода, который линейно зависит от состава

$$D_A = \frac{D_{AC} C_C + D_{AB} C_B}{C_C + C_B}, \quad (5)$$

где D_{AB} и D_{AC} — коэффициенты диффузии кислорода в кремнии ($D_{AB} = 0.13 \exp(-2.53/k_B T)$ см²/с [18]) и в диоксиде кремния. Полагается, что коэффициент диффузии кислорода в каждом элементе диоксида кремния изменяется со временем по дополнительной экспоненциальной зависимости:

$$D_{AC} = D_0 + (D_1 - D_0) \exp[-t(x)/\tau], \quad (6)$$

где D_0 — равновесный коэффициент диффузии кислорода в плавленном кварце ($D_0 = 4.5 \cdot 10^{-5} \times \exp(-0.93/k_B T)$ см²/с [19]), D_1 — коэффициент диффузии кислорода в диоксиде кремния на границе реакционной зоны, $t(x)$ — время существования элемента диоксида кремния dx с координатой от x до $x + dx$, τ — характеристическое время релаксации коэффициента диффузии. Константа скорости объемной реакции окисления в диффузионном приближении, характерном для взаимодействия точечных дефектов в твердых телах, определяется выражением $k = 4\pi R D_A$, где R — радиус взаимодействия частиц окислителя с атомами кремния. При достаточно большой константе скорости реакции k или радиусе взаимодействия R реакция (1) сосредоточивается на фронте реакции — в реакционной зоне между растущей пленкой диоксида кремния и кремниевой подложкой. Это реакционная зона является аналогом переходного слоя между диоксидом кремния и кремнием, наблюдаемого экспериментально с помощью различных физических методик [20–22], в котором происходит изменение стехиометрии SiO_y от $y = 0$ на границе с кремниевой подложкой до $y = 2$ на границе со стехиометрическим диоксидом кремния.

Концентрация кислорода на поверхности диоксида кремния равна предельной растворимости кислорода в аморфном диоксиде кремния при давлении 1 атм [19]

$$C_A(0, t) = 4.8 \cdot 10^{15} \exp(0.18/k_B T) \text{ см}^{-3}. \quad (7)$$

Толщина диоксида кремния рассчитывалась по соотношению $x_{\text{ок}}(t) = \int_0^h C_C(x, t) dx / C_{C0}$, а скорость окисления рассчитывалась как $v_{\text{ок}} = dx_{\text{ок}}(t)/dt$.

Решение системы (2)–(4) с граничным условием (7) проводилось численными методами по неявной и явной разностным схемам. Искомые параметрами модели являлись: D_1 и τ . Значение радиуса взаимодействия

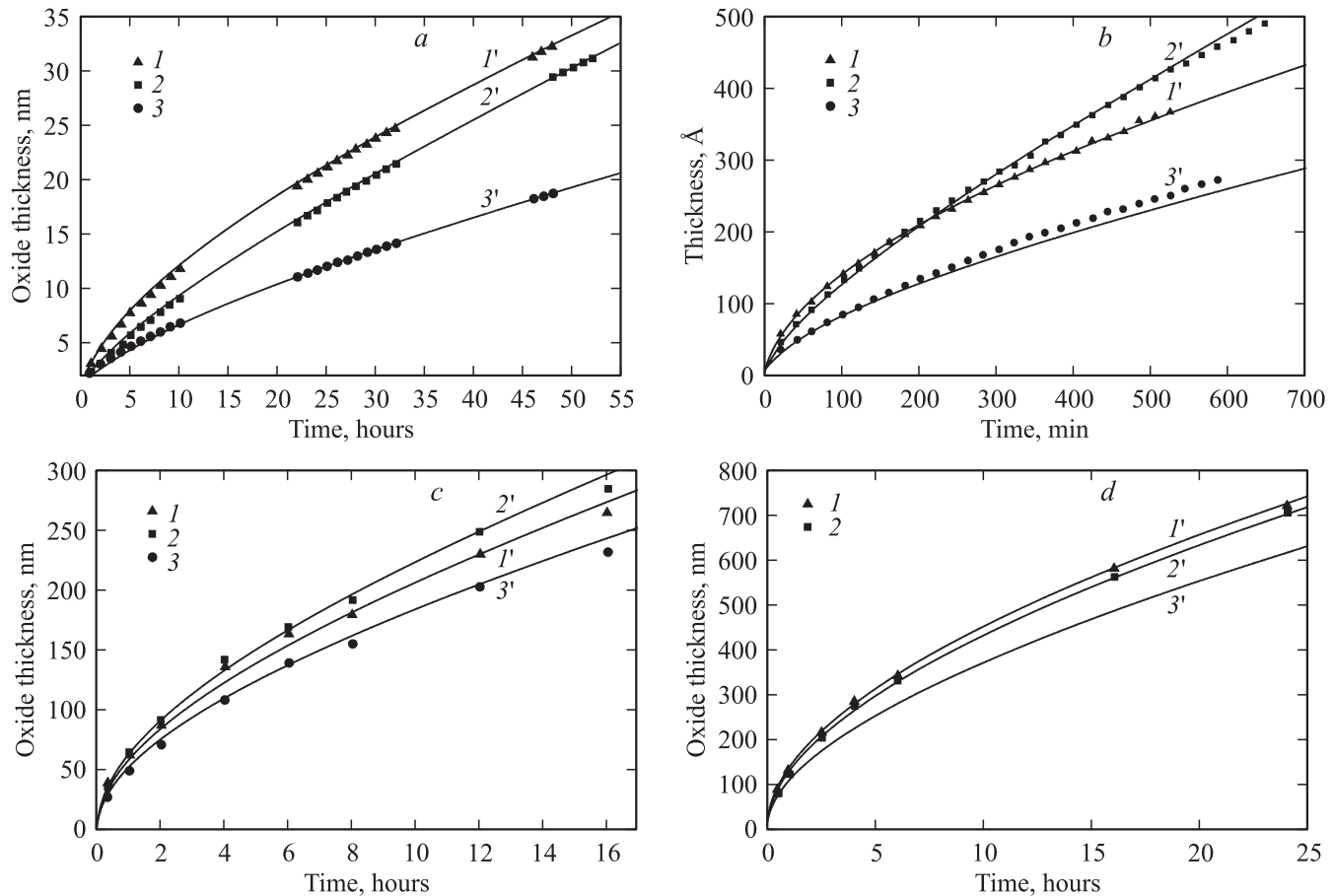


Рис. 1. $a-d$ — кинетические зависимости толщины диоксида кремния на кремнии ориентаций: $1, 1'$ — (110), $2, 2'$ — (111), $3, 3'$ — (100). Точки $1-3$ — эксперимент [13,14], сплошные линии $1'-3'$ — расчет по модели при следующих значениях температуры $T^\circ\text{C}$: $a - 700$, $b - 800$, $c - 1000$, $d - 1100$.

$R = 0.15 \text{ \AA}$ было определено ранее в [17] по среднему значению ширины переходного слоя $\delta \cong 7.5 \text{ \AA}$ из литературного интервала ($5-10 \text{ \AA}$). Отметим, что ширина переходного слоя в модели практически не зависит от толщины диоксида и ориентации кремниевой подложки, что соответствует экспериментальным данным [20–22].

3. Результаты расчета

Результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными по кинетике термического окисления кремния простых ориентаций (110), (111) и (100), полученными в работах [13,14] методом эллипсометрии пластин непосредственно в термической печи (*in situ*). Окисление проводилось в сухом кислороде при атмосферном давлении при температурах 700, 1000, 1100°C [14], а также при 800°C [13]. Экспериментальные кинетики толщин диоксида из работ [13,14] показаны на рис. 1, $a-d$ значками $1-3$. Сплошными линиями $1'-3'$ показаны расчетные зависимости. На рис. 2 показана зависимость скорости окисления от толщины диоксида при температуре 700°C.

Как видно из рисунка, расчет по модели позволяет удовлетворительно описать экспериментальные данные по кинетике окисления кремния простых ориентаций

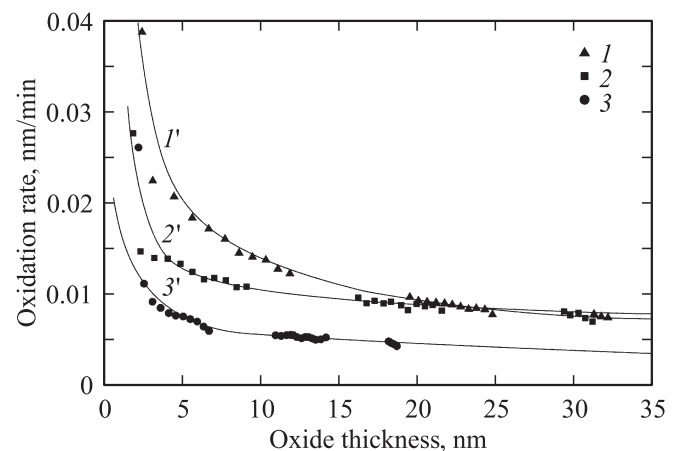


Рис. 2. Зависимость скорости окисления от толщины диоксида кремния при $T = 700^\circ\text{C}$ для ориентаций кремния: $1, 1'$ — (110), $2, 2'$ — (111), $3, 3'$ — (100). Точки $1-3$ — эксперимент [14], сплошные линии $1'-3'$ — расчет по модели.

(110), (111) и (100), включая явление пересечения толщин $x_{\text{ок}}(t)$ при $x_{\text{ок}} \approx 50$ нм (рис. 1, *b, c*) или скоростей $v(x_{\text{ок}})$ при $x_{\text{ок}} \approx 25$ нм (рис. 2) для ориентаций (110) и (111) при температурах 700, 800 и 1000 °С. При повышении температуры до 1100 °С (рис. 1, *d*) влияние ориентации практически исчезает. Найденные значения D_1 и τ в зависимости от обратной температуры аппроксимированы аррениусовскими зависимостями и построены на рис. 3 и 4:

$$D_1(110) = 0.65 \exp(-2.13/k_B T) \text{ см}^2/\text{с},$$

$$\tau(110) = 0.12 \exp(1.56/k_B T) \text{ с}, \quad (8)$$

$$D_1(111) = 3.2 \exp(-2.31/k_B T) \text{ см}^2/\text{с},$$

$$\tau(111) = 0.94 \exp(1.3/k_B T) \text{ с}, \quad (9)$$

$$D_1(100) = 3.2 \exp(-2.35/k_B T) \text{ см}^2/\text{с},$$

$$\tau(100) = 0.06 \exp(1.67/k_B T) \text{ с}. \quad (10)$$

Как видно из рис. 3 и 4, во всем интервале температур, кроме максимальной температуры 1100 °С, имеем $D_1(110) > D_1(111) > D_1(100)$ и $\tau(100) > \tau(110) > \tau(111)$. Отметим отклонение точек $\tau(100)$ и $\tau(111)$ при 800 °С на рис. 4, рассчитанных по данным эксперимента [13] (пустые значки), от зависимости, рассчитанной по данным эксперимента [14]. Подобное отклонение может быть связано с недостаточно хорошей воспроизводимостью экспериментов по термическому окислению пластин кремния,

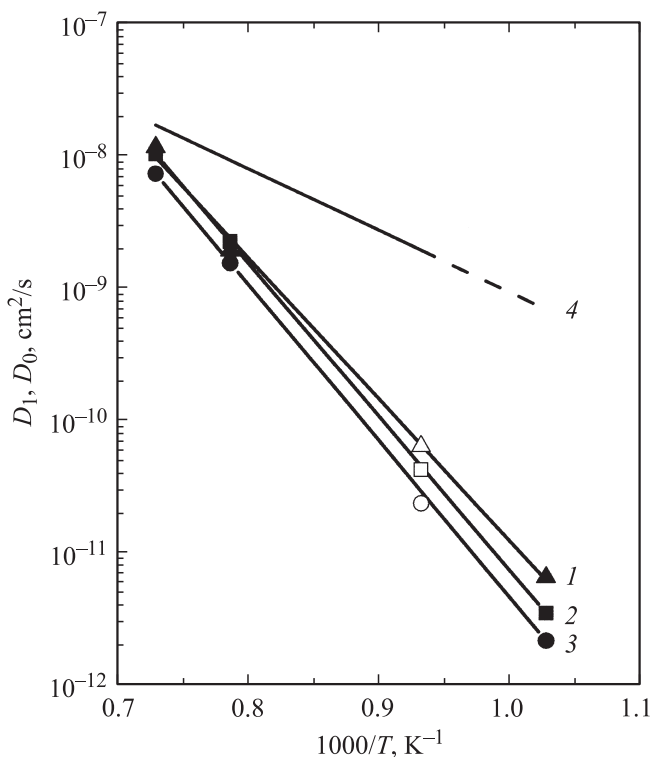


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента диффузии окислителя в диоксиде кремния D_1 (1–3) и D_0 (4) на кремнии ориентаций: 1 — (110), 2 — (111), 3 — (100).

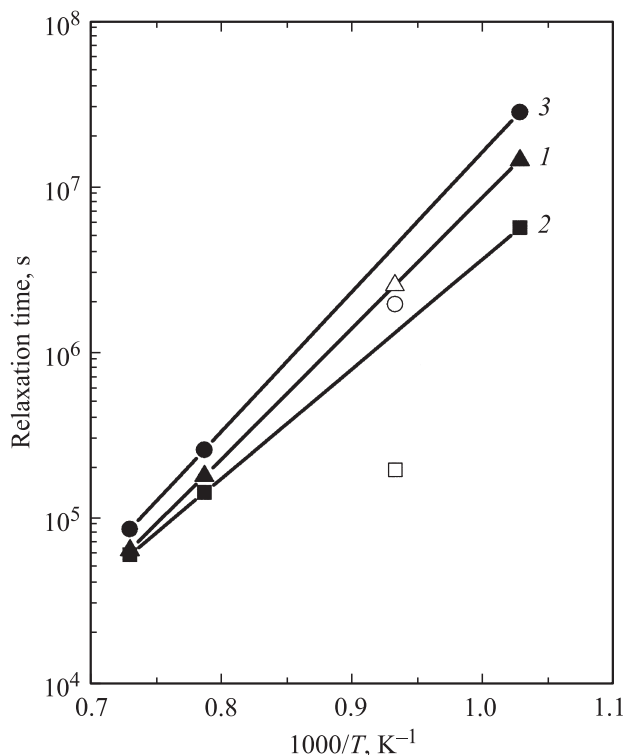


Рис. 4. Температурная зависимость времени релаксации τ диоксида кремния на кремнии ориентаций: 1 — (110), 2 — (111), 3 — (100).

которое отмечалось и ранее, например в [14], и которое может быть связано с попаданием в диоксид кремния примесей, изменяющих его релаксационные свойства.

4. Обсуждение результатов

В линейно-параболических моделях ориентационная зависимость скорости термического окисления связывается с константой линейного окисления, которая в свою очередь определяется константой скорости химической реакции окисления, происходящей на плоской границе раздела $\text{SiO}_2\text{--Si}$. Полагается, что она определяется плотностью и расположением связей Si–Si на поверхностях кремния разных ориентаций [2,6]. Константа скорости параболического окисления, определяемая коэффициентом диффузии окислителя в диоксиде кремния, при этом от ориентации поверхности кремния не зависит [4,7,8].

В рассматриваемой модели объемного окисления радиус взаимодействия частиц окислителя с атомами кремния является постоянным, не зависящим от ориентации поверхности кремния ($R = 0.15 \text{ \AA}$). Ориентационная зависимость скорости окисления определяется объемными свойствами диоксида кремния, выросшего на кремнии разных ориентаций. При малых временах или толщинах оксида — коэффициентом диффузии окислителя на границе с реакционной зоной, $D_1(110) > D_1(111) > D_1(100)$. При больших временах

(D_1) или толщинах оксида — характеристическим временем релаксации, $\tau(100) > \tau(110) > \tau(111)$.

Влияние ориентации монокристаллической кремниевой подложки на некоторые свойства термического диоксида кремния наблюдалось ранее. Тафт [23] наблюдал, что показатель преломления диоксида кремния на Si(100) больше, чем на Si(111), $n(100) > n(111)$, при окислении как в сухом кислороде (при $T < 1100^\circ\text{C}$), так и в парах воды (при $T < 950^\circ\text{C}$). В работе [24] наблюдалась более высокая скорость травления в HF-содержащем травителе тонких пленок термического диоксида кремния на Si(111) по сравнению с Si(100). О влиянии ориентации на коэффициент диффузии окислителя в диоксиде кремния свидетельствует и зависимость константы скорости параболического окисления от ориентации, $k_p(111) > k_p(100)$, обнаруженная в некоторых работах [9–11].

В рассматриваемой модели полагается, что коэффициент диффузии окислителя в термическом диоксиде кремния изменяется со временем окисления, стремясь к коэффициенту диффузии в плавленом кварце по дополнительной экспоненциальной зависимости — в соответствии с выражением (6). Изменение коэффициента диффузии может быть связано с внутренними механическими напряжениями, спадающими при удалении от межфазной границы, или их релаксацией по механизму вязкоупругого пластического течения [25], а также с псевдополиморфной трансформацией диоксида кремния [26]. Было показано, что изменение свойств термического диоксида кремния во время термического окисления или при отжиге связано с изменением углов поворота структурных тетраэдров SiO_4 относительно друг друга и углов связи Si—O—Si [27,28], а также с полимеризацией кремний-кислородных кластеров [1,29]. Результатом такой структурной перестройки является уменьшение плотности диоксида кремния, которая с увеличением температуры и времени окисления или отжига релаксирует к равновесной плотности плавленого кварца при удалении от межфазной границы с кремнием. Градиент плотности по толщине слоев термического диоксида кремния был обнаружен по измерению проницаемости водорода [30], методами ИК-спектроскопии [31], позитронной аннигиляции [32], а также из эллипсометрических измерений показателя преломления [33].

На скорость релаксации структуры диоксида могут оказывать влияние внутренние механические напряжения. Причиной их возникновения является разница молекулярных объемов Si (20 \AA^3) и SiO_2 (45 \AA^3), а также квазикристаллическость диоксида, непосредственно прилегающего к монокристаллической подложке. Как показано в работах [34,35], слои диоксида кремния на границе с монокристаллическим кремнием растут квазиэпитаксиально, наследуя кристаллически упорядоченную структуру, которая была идентифицирована как тридимит [34], или α -кристобалит [35] с более высокой плотностью, чем у плавленого кварца. В зависимости от ориентации кремниевой подложки может реализоваться

та или иная квазикристаллическая модификация диоксида кремния со своей величиной несоответствия и внутренними напряжениями [36]. При удалении от границы ориентирующее влияние кристаллической подложки ослабевает, структура диоксида релаксирует к аморфной структуре плавленого кварца. Экспериментально установлено, что на границе с Si(110) напряжения максимальны, $\sigma(110) > \sigma(100) > \sigma(100) > \sigma(111)$ [15,16]. Этот результат согласуется с расчетами по методу молекулярной динамики [37], показывающими, что диоксид на Si(111) менее деформирован и имеет меньшую плотность, чем на Si(100). Именно влиянием напряжений на концентрацию окислителя и тем самым на скорость химической реакции окисления объяснялось явление пересечения ориентационных кинетических зависимостей в работах [14,15].

В рассматриваемой модели явление пересечения кинетических зависимостей для Si(110) и Si(111) при увеличении толщины диоксида связано с более быстрым ростом коэффициента диффузии в оксиде на Si(111) по сравнению с Si(110), $\tau(111) < \tau(110)$, от более низкого начального значения, $D_1(111) < D_1(110)$, до более высокого значения D_0 в плавленом кварце. Полученное в модели неравенство $D_1(110) > D_1(111) > D_1(100)$ согласуется с меньшим значением показателя преломления и соответственно плотности для диоксида на Si(111), чем на Si(100) [23]. Более высокий коэффициент диффузии в диоксиде кремния на Si(111) по сравнению с Si(100) показывают и распределения изотопа кислорода O^{18} по толщине диоксида, определенные методом ВИМС в работе [38].

Полученное в модели неравенство для времени релаксации диоксида кремния к равновесному состоянию, $\tau(100) > \tau(110) > \tau(111)$, обратно коррелирует с начальным коэффициентом диффузии D_1 в отношении ориентаций (100) и (111). Релаксацию диоксида кремния на кремнии ориентации (110) могут тормозить внутренние механические напряжения сжатия, которые максимальны для этой ориентации, $\sigma(110) > \sigma(100) > \sigma(111)$ по данным [15,16]. С повышением температуры ориентационная зависимость D_1 и τ ослабевает — наблюдается тенденция сближения как коэффициентов диффузии в реакционной зоне D_1 , так и времен релаксации τ для диоксида кремния на кремнии всех трех ориентаций (рис. 3,4). Этот эффект объясняется все более полной релаксацией плотности диоксида, внутренних механических напряжений и связанного с ними коэффициента диффузии окислителя в диоксиде.

5. Заключение

Ориентационная зависимость скорости окисления описывается в рамках модели объемного окисления [17] с помощью параметров D_1 и τ , характеризующих объемные свойства термического диоксида кремния. Определены ориентационные и температурные зави-

симости параметров D_1 и τ (8)–(10). Ориентационная зависимость коэффициента диффузии окислителя в диоксиде кремния на границе реакционной зоны, $D_1(110) > D_1(111) > D_1(100)$, связывается с ориентирующим влиянием монокристаллической подложки кремния на структуру и плотность прилегающего к нему диоксида кремния. Ориентационная зависимость характеристического времени релаксации, $\tau(100) > \tau(110) > \tau(111)$, обратно коррелирует с ориентационной зависимостью D_1 для ориентаций (100) и (111) и прямо — с внутренними механическими напряжениями для ориентаций (110) и (111). Найденные параметры позволяют описать кинетику термического окисления кремния простых ориентаций (100), (110) и (111) в сухом кислороде в диапазоне температур 700–1100°C, включая явление пересечения кинетических зависимостей с ростом толщины диоксида для ориентаций кремния (110) и (110), наблюдаемое при невысоких температурах окисления ($T \leq 1000^\circ\text{C}$).

Список литературы

- [1] Г.Я. Красников, Н.А. Зайцев. *Система кремний–диоксид кремния субмикронных СБИС* (М., Техносфера, 2003).
- [2] J.R. Ligenza. *J. Phys. Chem.*, **65**, 2011 (1961).
- [3] В.Е. Deal. *J. Electrochem. Soc.*, **110**, 527 (1963).
- [4] W.A. Pliskin. *IBM J. Res. Dev.*, **10**, 198 (1966).
- [5] В.Е. Deal, А.С. Grove. *J. Appl. Phys.*, **36**, 3770 (1965).
- [6] S.I. Raider, L.E. Forget. *J. Electrochem. Soc.*, **127**, 1783 (1980).
- [7] D.W. Hess, В.Е. Deal. *J. Electrochem. Soc.*, **124**, 735 (1977).
- [8] В.Е. Deal, D.W. Hess, J.D. Plummer, С.Р. Ho. *J. Electrochem. Soc.*, **125**, 339 (1978).
- [9] E.A. Irene. *J. Electrochem. Soc.*, **121**, 1613 (1974).
- [10] H.Z. Massoud, J.D. Plummer, E.A. Irene. *J. Electrochem. Soc.*, **132**, 1745 (1985).
- [11] E.A. Taft. *J. Electrochem. Soc.*, **132**, 2487 (1985).
- [12] J. van der Meulen. *J. Electrochem. Soc.*, **119**, 530 (1972).
- [13] E.A. Irene, H.Z. Massoud, E. Trierney. *H.Z.J. Electrochem. Soc.*, **133**, 1253 (1986).
- [14] E.A. Lewis, E.A. Irene. *J. Electrochem. Soc.*, **134**, 2332 (1987).
- [15] J.L. Ngau, P.B. Griffin, J.D. Plummer. *J. Electrochem. Soc.*, **149**, F98 (2002).
- [16] E. Kobeda, E.A. Irene. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **5**, 15 (1987).
- [17] О.В. Александров, Д.И. Дусь. *ФТП*, **42**, 1400 (2008).
- [18] M. Stavola, J.R. Patel, L.C. Kimerling, P.E. Freeland. *Appl. Phys. Lett.*, **42**, 73 (1983).
- [19] K. Kajihara, M. Hirano, M. Uramoto, Y. Morimoto, L. Skuja, H. Hosono. *J. Appl. Phys.*, **98**, 013 527 (2005).
- [20] G. Holinger, F.J. Himpelk. *Appl. Phys. Lett.*, **44**, 93 (1984).
- [21] В.В. Монахов, О.В. Романов, С.Н. Кириллов, В.Я. Урицкий, В.А. Смирнов. *ФТП*, **20**, 477 (1986).
- [22] A.R. Chowdhuri, D.-U. Jin, C.G. Takoudis. *Thin Sol. Films*, **457**, 402 (2004).
- [23] E.A. Taft. *J. Electrochem. Soc.*, **127**, 993 (1980).
- [24] K. Nakamura, K. Ohmi, K. Yamamoto, K. Makihara, T. Ohmi. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **33**, 500 (1994).
- [25] A. Fargeix, G. Ghibaudo. *J. Appl. Phys.*, **56**, 589 (1984).

- [26] B.J. Mrstik, G. Revesz, M. Ancona, H.L. Hughes. *J. Electrochem. Soc.*, **134**, 2020 (1987).
- [27] A.G. Revesz, H.L. Hughes. *J. Non-Cryst. Sol.*, **254**, 47 (1999).
- [28] A.G. Revesz, H.L. Hughes. *J. Non-Cryst. Sol.*, **328**, 48 (2003).
- [29] Г.Я. Красников, Н.А. Зайцев, И.В. Матюшкин. *ФТП*, **37**, 44 (2003).
- [30] B.J. Mrstik, P.J. McMarr. *Phys. Rev. B*, **48**, 17 972 (1993).
- [31] Y. Sugita, S. Watanabe, N. Awaji, S. Komiya. *Appl. Surf. Sci.*, **100/101**, 268 (1996).
- [32] A.G. Revesz, W. Anwand, G. Brauer, H.L. Hughes, W. Scorupa. *Appl. Surf. Sci.*, **194**, 101 (2002).
- [33] Б.М. Аюпов, С.Ф. Девятова, В.Г. Ерков, Л.А. Семёнова. *Микроэлектроника*, **37**, 163 (2008).
- [34] A. Ourmazd, D.W. Taylor, J.A. Rentschler. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 213 (1987).
- [35] P.H. Fuoss, L.J. Norton, S. Brennan, A. Fischer-Colbrie. *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 600 (1988).
- [36] А.В. Емельянов, В.В. Егоркин. *Поверхность*, № 11, 44 (1987).
- [37] K. Tatsumura, T. Watanabe, D. Yamasaki, T. Shimura, M. Umeno, I.A. Ohdomary. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **43**, 492 (2004).
- [38] K. Imai, K. Yamabe. *J. Appl. Phys.*, **83**, 3849 (1998).

Редактор Л.В. Беляков

Silicon surface orientation effect in volume thermal oxidation model

O.V. Aleksandrov, A.I. Dusi

St. Petersburg State Electrotechnical University „LETI“,
197376 St. Petersburg, Russia

Abstract Orientation dependence of oxidation rate in dry oxygen analysis based on volume model thermal oxidation of silicon [O.V. Alexandrov, A.I. Dusi. *Semiconductors* **41** (2008)] is carried out. Orientation and temperature dependences of diffusion coefficient in stressed silicon dioxide and its characteristic relaxation time are defined. Orientation dependence of oxygen diffusion coefficient in silicon dioxide at interface, $D_1(110) > D_1(111) > D_1(100)$, is associated with orientation influence of monocrystalline silicon substrate on structure and density of nearest silicon dioxide. Orientation dependence of characteristic relaxation time, $\tau(100) > \tau(110) > \tau(111)$, is inversely correlated with orientation dependence of D_1 for orientations (100) and (111) and directly correlated with internal mechanical stress for orientations (110) and (111).