

3. B o s e T. K. Renewable energy systems based on hydrogen for remote applications / K. Agbossou, R. Chahine, J. Hamelin et al. // Journal of Power Sources. – 2001. – Vol. 96. – P. 168–172.

4. H y d r o g e n as a future transportation fuel / G. D. Berry, A. D. Pasternak, G. D. Rambach et al. // Energy. – 1996. – Vol. 21, № 4. – P. 289–303.

5. Г е н к и н К. И., Х а з а н о в З. С. Исследование механизма сгорания в двигателе // Горение и взрыв: Материалы третьего всесоюзного симпозиума по горению и взрыву. – М.: Наука, 1972. – С. 409–415.

6. В о и н о в А. Н. Сгорание в быстроходных поршневых двигателях. – М.: Машиностроение, 1977. – 277 с.

7. С е м е н о в Н. Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. – М.: АН СССР, 1958. – 686 с.

8. С о к о л и к А. С. Самовоспламенение, пламя и детонация в газах / АН СССР. – М.: 1960. – 428 с.

Представлена кафедрой
физико-математических дисциплин

Поступила 9.01.2006

УДК 621.382

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОКИСЛЕНИЯ КРЕМНИЯ В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

Канд. техн. наук, доц. БОНДАРЕВ В. А.

Белорусский национальный технический университет

Предлагаемый метод разработан для расчета толщины оксида кремния SiO_2 при окислении через окна в защитной маске. Полученные автором формулы позволяют рассчитать диффузию окислителя и толщину X_0 оксида 1 с учетом уменьшения X_0 под маской из нитрида кремния 2 (рис. 1). Так как в настоящее время методы для расчета реальных трехмерных процессов не найдены, разработка современных технологий требует многочисленных дорогостоящих экспериментов.

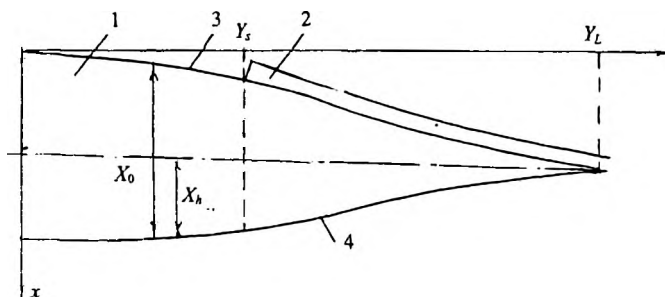


Рис. 1. Схема окисления кремния: 1 – окисел; 2 – нитридная маска; 3 – наружная поверхность оксида; 4 – окисляемая поверхность; X_0 – толщина оксида; X_h – толщина окисленного слоя кремния; Y_s – край маски; Y_L – длина слоя оксида

Анализ показывает, что концентрация окислителя, например кислорода, при его диффузии в слое окисла SiO_2 определяется трехмерным уравнением диффузии для стационарных условий

$$C''_{xx} + C''_{yy} + C''_{zz} = 0. \quad (1)$$

Это обусловлено тем обстоятельством, что реакция происходит только на поверхности окисления 4 и при диффузии через оксидный слой количество окислителя не изменяется. Уравнение (1) определяет баланс массы окислителя в зависимости от изменений градиентов концентрации C'_x , C'_y и C'_z в направлениях x , y и z . Поэтому в случае выбора функций, удовлетворяющих (1), величины потока через поверхность 3 и толщины окисла X_0 могут быть получены из физических граничных условий на поверхностях 3 и 4.

В дальнейшем функции, которые удовлетворяют (1) и учитывают боковую диффузию в направлениях y и z , будем определять следующим образом:

$$H_w = C_m(U_1 - U_2); \quad (2)$$

$$U_1 = \text{ch}\varphi_1 (X_0 - x) \sin\mu_1 y \sin\nu_1 z; \quad (3)$$

$$U_2 = \beta \text{ch}2\varphi_1 (X_0 - x) \sin\mu_2 y \sin\nu_2 z; \quad \mu < 0; \nu < 0, \quad (4)$$

где C_m – концентрация окислителя в газообразной среде; φ , μ , ν , β – коэффициенты.

Функции (2)–(4) удовлетворяют дифференциальному уравнению диффузии (1) при условии

$$\varphi^2 = \mu^2 + \nu^2. \quad (5)$$

Концентрация окислителя в области окна $y < Y_s$ вычисляется из соотношения

$$C = A_h C_0 + H_w. \quad (6)$$

Распределение окислителя

$$C_0 = (C_1 - C_2) x / X_0 \quad (7)$$

соответствует линейному закону изменения концентрации C_0 в слое окисла X_0 при одномерной диффузии и постоянном значении коэффициента диффузии окислителя в SiO_2 $D = \text{const}$. Величина C_0 определяется в зависимости от концентрации C_1 на внешней поверхности окисла 3 и концентрации C_2 на окисляемой поверхности 4. Коэффициент $A_h < 1$ учитывает уменьшение потока окислителя $Q = -D(C_0)'_x$ в результате боковой диффузии в направлениях y и z .

Отношение объема оксида V_0 к объему кремния до окисления V_s составляет $V_0 / V_s = 2,27$. Поэтому толщина слоя окисла X_0 всегда соответствует соотношению $X_0 = 2,27 X_h$, где X_h – толщина слоя кремния, который окислен в сечении y . При этом отсчет координаты x в функциях (3) и (4) производится от поверхности 3 (рис. 1).

В области под маской $y > Y_s$ распределение концентрации окислителя рассчитывается с помощью соотношения

$$C = H_w - C_m(U_3 - U_4), \quad (8)$$

которое содержит функции, аналогичные (3) и (4):

$$U_3 = \text{ch}\varphi_2 (X_0 - x) \sin \mu_3 (y - Y_s) \sin \nu_3 (z - Z_s); \quad (9)$$

$$U_4 = \beta_1 \text{ch}2\varphi_2 (X_0 - x) \sin \mu_4 (y - Y_s) \sin \nu_4 (z - Z_s); \quad (10)$$

$$Y_s = L_w/2; Y_s = Z_s,$$

где L_w – размер окна в нитридной маске 2.

Величина потока окислителя Q_1 через внешнюю поверхность 3 зависит от коэффициента массообмена h на этой поверхности

$$Q_1 = h(C_m - C_{s1}). \quad (11)$$

Коэффициент h также определяет концентрацию C_{s1} на поверхности 3. Коэффициент A_h может быть вычислен из граничного условия на этой поверхности

$$h(C_m - C_{s1}) + D_1 C'_x = 0, \quad (12)$$

где D_1 – коэффициент диффузии окислителя в области окна $y < Y_s$.

Концентрация C_{s1} , которая зависит от толщины оксидного слоя X_0 , находится при различных значениях y или z с помощью решения (2). Для определения коэффициентов φ , μ и ν в выбранных математических функциях (3), (4), (9) и (10) также используется граничное условие на поверхности окисления 4

$$Q_2 = k_s C_2. \quad (13)$$

Это соотношение, которое соответствует закону действующих масс, определяет поток окислителя в зависимости от константы скорости реакции k_s и концентрации окислителя C_2 на поверхности 4.

Как известно из экспериментов, в области под нитридной маской коэффициенты диффузии D_1 окислителя в SiO_2 значительно уменьшаются в случае увеличения толщины маски 2 (рис. 1). Это обычно обусловлено механическими напряжениями, которые имеют место при расширении кремния в процессе его окисления. Поэтому граничные условия у края маски $Y_s = Z_s$ должны быть представлены следующим образом:

$$D_1(H_w)'_y = D_2 C_m((U_3)'_y + (U_4)'_y); \quad (14)$$

$$D_1(H_w)'_z = D_2 C_m((U_3)'_z + (U_4)'_z). \quad (15)$$

Эти выражения используются для определения коэффициентов φ , μ и ν в функциях U_1 и U_2 . Так как эти коэффициенты также зависят от толщины

слоя SiO_2 , при интегрировании уравнений для потоков массы они вычисляются при различных значениях x , y и z .

В области окна толщина окисла X_0 в различные моменты времени t находится из баланса массы на границе 4

$$N_1 dx/dt = Q_2. \quad (16)$$

Величина N_1 равна числу молекул окислителя в 1 см^3 окисла, и при окислении в среде кислорода она находится по формуле, которая учитывает абсолютную температуру T и давление газа p :

$$N_1 = 2,2 \cdot 10^{22} (273/T)(p/p_a), \quad (17)$$

где p_a – атмосферное давление.

Поток окислителя Q_2 , который идет к поверхности 4, вычисляется с помощью граничных условий (11) и (13) с использованием линейного распределения концентрации окислителя (7). Если исключить промежуточные значения концентрации C_1 и C_2 , то формула для расчета Q_2 может быть представлена следующим образом:

$$Q_2 = C_m/k_h. \quad (18)$$

Коэффициент k_h определяет общее сопротивление потоку окислителя

$$k_h = 1/h + X_0/D + 1/k_s. \quad (19)$$

Для некоторых важных условий коэффициенты h , D и k_s в этом выражении могут быть определены из [1, 2].

В начальной стадии окисление, которое называется кинетическим, зависит от кинетики химической реакции, что определяется константой скорости реакции k_s и условием (13), соответствующим закону действующих масс. В дальнейшем влияние слоя окисла X_0 и его сопротивления X_0/D возрастает, что соответствует так называемому диффузионному окислению, которое в основном определяет возможную толщину окисла. В этих условиях $X_0/D > 1/k_s$, и поэтому рост X_0 зависит от скорости диффузии окислителя. Для увеличения скорости окисления необходимо увеличивать коэффициент диффузии окислителя D , что может быть выполнено только путем повышения температуры.

Для вычисления толщины окисла X_0 или необходимой продолжительности процесса t_0 уравнение баланса (16) должно быть проинтегрировано. После разделения переменных получим

$$\int_{t_k}^{t_0} dt = \int_{X_k}^{X_0} (N_1/Q_2) dx, \quad (20)$$

где t_k , X_k – время кинетического окисления и толщина слоя окисла при кинетическом процессе соответственно.

Значения t_k и X_k определяются аналогично путем интегрирования баланса массы (16) в пределах $0 - t_k$ и $0 - X_k$.

Так как коэффициент A_h , который находится из граничного условия (12), зависит от X_0 , интеграл (20) может быть вычислен только с использованием численного интегрирования.

Длины слоев окислов Y_L и Z_L а также координаты y_1 и z_1 поверхности 4 под маской определяются с помощью баланса массы, аналогичного уравнению баланса (16):

$$N_1 dy/dt = Q_2(y); \quad (21)$$

$$N_1 dz/dt = Q_2(z) \quad (22)$$

в зависимости боковых потоков окислителя $Q_2(y)$ и $Q_2(z)$ в направлениях y и z .

Эти потоки вычисляются из соотношения (8) и функций (9) и (10). В дальнейшем длина слоя окисла определяется интегрированием (21) и (22):

$$\int_0^{t_0} dt = \int_0^{y_L} (N_1/Q_2(y)) dy; \quad (23)$$

$$\int_0^{t_0} dt = \int_0^{z_L} (N_1/Q_2(z)) dz. \quad (24)$$

Значения координат y_1 и z_1 поверхности 4 вычисляются аналогично. Интегрирование производится в пределах $t_j - t_0$; $Y_s - y_1$ и $Z_s - z_1$, где t_j - время, которое соответствует $Y_s - y = 0$ или $Z_s - z = 0$ при толщине слоя $x = X_0$.

В качестве примера в табл. 1 приводятся результаты расчета толщины слоя окисла X_0 при окислении кремния в кислороде через окно 0,25 микрон в нитридной маске.

Таблица 1

Время окисления - 30 мин; температура составляет 1273 К; y - координата, мкм; X_0 - толщина окисла, мкм; концентрация окислителя в среде $C_m = 1,7 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$; толщина окисла после кинетического окисления $X_k = 0,004$ мкм; продолжительность кинетического окисления $t_k = 35$ с					
y	0,00	0,02	0,04	0,06	0,08
X_0	0,0421	0,0405	0,0395	0,0382	0,0361
y	0,10	0,12	0,16	0,20	0,24
X_0	0,0346	0,0316	0,0221	0,0082	0,0006

Расчет выполнен при следующих значениях коэффициентов: $h = 4,8 \cdot 10^{-4} \text{ см/с}$; $D_1 = 7,54 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$; $D_2 = 0,15 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$; $k_s = 1,25 \cdot 10^{-6} \text{ см/с}$. Толщина нитридной маски 2 составляет $\delta_m = 0,12$ мкм. Результаты в табл. 1

соответствуют толщине окисла вдоль оси y при $z = 0$ (рис. 1). В этом случае диффузия окислителя может быть рассчитана с помощью двумерного уравнения диффузии

$$C_{xx}^* + C_{yy}^* = 0. \quad (25)$$

Интегрирование баланса массы (16) при использовании потока Q_2 , который вычисляется при условиях (18) и (19), приводит к уравнению

$$N_1 X_0^2 + 2D(1/h + 1/k_s)N_1 X_0 + 2DC_m t_2 = 0. \quad (26)$$

С помощью этого соотношения можно рассчитать толщину окисла X_0 в сечении $y = 0$ (рис. 1). Подобное выражение используется для расчета X_0 в некоторых коммерческих программах. Так как при этом коэффициенты h , D и k_s не определяются, в таких программах уравнение (27) фактически оказывается эмпирической формулой для оценки некоторых максимальных значений X_0 . Однако при таких условиях невозможно определить переменную толщину окисла в различных точках в области окна и под маской [2, 3].

ВЫВОД

Аналитические решения уравнения диффузии, основанные на предложенных математических функциях, позволяют выполнить физически обоснованные расчеты слоя оксида под нитридной пленкой. При использовании экспериментальных результатов полученные решения могут также применяться для определения коэффициентов диффузии окислителя D и значений константы скорости реакции k_s в зависимости от температуры, а также коэффициентов массоотдачи h . Это значительно уменьшает объем экспериментальной работы и оптимизирует технологические условия.

ЛИТЕРАТУРА

1. Технология СБИС. – М.: Мир, 1986.
2. Guillemot N., Panakakis G., Chenevier P. A New Analytical Model of the «Bird's Beak» // Transaction on Electronic Devices. – Vol. ED-34, No. 5. – May 1987.
3. Б у б е н н и к о в А. Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. – М.: Высш. шк., 1989.

Представлена кафедрой
промышленной теплоэнергетики
и теплотехники

Поступила 12.12.2005