

УДК 538.931:621.382

**Динамическая модель изменения
структурного микрорельефа
на поверхности кремниевой пластины
под воздействием технологического процесса
высокотемпературного водородного отжига**

Ю. А. Романов, аспирант, *contact@spacecorp.ru*

АО «Российские космические системы», Москва, Российская Федерация

П. С. Приходько, д. т. н., профессор, *contact@spacecorp.ru*

Российский технологический университет «МИРЭА», г. Москва, Российская Федерация

АО «Российские космические системы», Москва, Российская Федерация

Д. В. Тарасов, *contact@spacecorp.ru*

АО «Эпиэл», г. Зеленоград, Российская Федерация

*Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники» (МИЭТ),
г. Зеленоград, Российская Федерация*

Аннотация. Предложена динамическая модель, позволяющая оценить изменение формы поверхности микроструктурированной кремниевой пластины под воздействием поверхностной самодиффузии атомов кремния по поверхности, происходящей благодаря высокотемпературному водородному отжигу. Численная реализация предложенной модели позволяет предсказать изменение профиля поверхности под воздействием поверхностной самодиффузии при любом исходном профиле, например полученном экспериментально. На основе созданной модели рассчитано изменение профиля затворной канавки вертикального силового МОП-транзистора через заданное эквивалентное время технологического процесса при исходных параметрах начального профиля. Показано, что при аспектном соотношении вертикальной канавки 1 : 4 затворная структура МОП-транзистора может быть сформирована, если водородный отжиг проводился не более 10 минут. Полученные результаты использовались для оптимизации технологических процессов изготовления вертикальных силовых МОП-транзисторов с вертикальным затвором. Предложенная динамическая модель также может быть использована при разработке и изготовлении любых других приборов, технологический процесс изготовления которых предполагает наличие поверхностной самодиффузии кремния.

Ключевые слова: высокотемпературный водородный отжиг, поверхностная самодиффузия, моделирование

Dynamic Model of Structural Microrelief Changes on the Surface of a Silicon Wafer under the Influence of the High-Temperature Hydrogen Annealing Process

Yu.A. Romanov, *postgraduate, contact@spacecorp.ru*

Joint Stock Company "Russian Space Systems", Moscow, Russian Federation

P.S. Prihodyko, *Dr. Sci. (Engineering), Professor, contact@spacecorp.ru*

Russian Technological University "MIREA", Moscow, Russian Federation

Joint Stock Company "Russian Space Systems", Moscow, Russian Federation

D.V. Tarasov, *contact@spacecorp.ru*

Joint Stock Company "Epiel", Zelenograd, Russian Federation

National Research University of Electronic Technology (MIET), Moscow, Russian Federation

Abstract. The paper proposes a dynamic model that makes it possible to evaluate the change in the shape of the surface of a microstructured silicon wafer under the influence of surface self-diffusion of silicon atoms over the surface, which takes place due to high-temperature hydrogen annealing. Numerical implementation of the proposed model allows predicting the change in the surface profile under the influence of surface self-diffusion at any initial profile, for example, obtained experimentally. Based on the created model the change in the gate groove profile of a vertical power MOSFET through a given equivalent process time with initial profile parameters is calculated. It is shown that at the aspect ratio of the vertical groove 1 : 4 the gating structure of the MOSFET can be formed if the hydrogen annealing was carried out not more than 10 minutes. The results obtained were used to optimize the technological processes of manufacturing vertical power MOSFETs with a vertical gate. The proposed dynamic model can also be used in the design and fabrication of any other devices whose manufacturing process involves the presence of silicon surface self-diffusion.

Keywords: high-temperature hydrogen annealing, surface self-diffusion, modeling

Введение

Процесс высокотемпературного водородного отжига — это отжиг пластин со сформированным на них микрорельефом в водородсодержащей атмосфере при высокой (от 700 °С до 1150 °С) температуре и атмосферном либо пониженном давлении. Если микрорельеф сформирован в кремнии, то отжиг в таких условиях приводит к изменению рельефа — сглаживанию; поверхность оказывается ограниченной по кристаллографическим плоскостям и становится атомарно-гладкой. Возникновение изменений микрорельефа во время отжига происходит исключительно за счет миграции атомов твердой фазы по поверхности. При этом атомы чаще покидают положения, где они имеют большую потенциальную энергию, и чаще занимают положения с меньшей потенциальной энергией, что приводит к микроогранке поверхности множеством кристаллографических плоскостей.

Известно применение данного процесса для производства МОП-транзисторов с вертикальным затвором [1]; в этом случае, во-первых, снижается пиковая напряженность электрического поля около затвора, во-вторых, проводится очистка поверхности, в-третьих, производится сглаживание поверхности. Сглаживание поверхности перед формированием диэлектрика МОП-транзистора, особенно в случае, когда канавка формируется Vosh-методом [3], приводит к снижению рассеяния носителей заряда на дефектах структуры и тем самым снижают сопротивление открытого канала. Также процесс высокотемпературного водородного отжига нашел свое применение везде, где требуется гладкая поверхность кремния: в фотонике для повышения добротности дисковых [3] и кольцевых [4] резонаторов, при изготовлении волноводов для повышения соотношения «сигнал–шум» [5–7], при изготовлении металлизированных сквозных отверстий в кремниевых платах микросборок [8].

Еще одной особенностью процесса высокотемпературного водородного отжига является возможность образования замкнутых микропустот в кремнии (silicon on nothing). Это пустоты внутри кремниевой пластины, специфичные для данного процесса. Они образуются из канавок или ячеек-«колодцев» вследствие поверхностной диффузии и окру-

жены монокристаллическим кремнием. Эффект образования микропустот используется при изготовлении МЭМС-устройств, особенно датчиков давления, где за счет этого из массива ячеек образуется чувствительный элемент — мембрана [9, 10]; рассматривается возможность изготовления транзистора на такой мембране [11], в этом случае мембрана выступает в роли структуры «кремний на изоляторе». В России также проводились работы по исследованию высокотемпературного водородного отжига, направленные на оптимизацию формы канавки перед формированием вертикальной затворной структуры МОП-транзистора, носившие чисто экспериментальный характер [12].

Несмотря на столь широкое применение данного процесса, практически отсутствуют или недостаточны методы и средства моделирования результата воздействия поверхностной самодиффузии кремния, возникающей под действием высокотемпературного водородного отжига и дающие адекватные результаты. Поэтому целью данной работы была разработка простого алгоритма моделирования процесса поверхностной самодиффузии. Для достижения данной цели необходимо решить следующие задачи: на основе имеющихся литературных данных предложить метод моделирования; реализовать метод программно, получив средства моделирования; проверить адекватность полученных средств моделирования на опубликованных ранее экспериментальных данных.

Поскольку в качестве исходных данных выступает форма поверхности, целесообразно смоделировать этот процесс путем решения дифференциального уравнения (1) (выведенного на основе представления о поверхностной диффузии как о потоке атомов, движущихся по границе кристаллической решетки; подробный вывод этого уравнения приведен в [12]):

$$v_n(t) = -\frac{D\Omega^2\gamma X_s}{k_B T} \frac{d^2 K}{ds^2}. \quad (1)$$

Уравнение (1) приведено для двумерного случая, т. е. когда рассматривается сечение массива канавок в перпендикулярном направлении; длина канавок на результат не влияет, поэтому считается, что в третьем измерении они имеют единичную длину. Уравнение (1) в каждый конкретный момент времени t связывает скорость смещения отдельной

точки кривой v_n в направлении нормали в этой точке со второй производной кривизны по длине дуги кривой d^2K/ds^2 коэффициентом пропорциональности. В коэффициент пропорциональности входит коэффициент поверхностной диффузии D , объем атома Ω , поверхностное натяжение (или энергия образования единицы поверхности) γ , количество атомов на единицу поверхности X_s , постоянная Больцмана k_B , абсолютная температура T . Коэффициент пропорциональности характеризует скорость протекания процесса поверхностной самодиффузии, зависящую от физико-химических свойств твердого тела, часть которых определяется газообразной средой, в которую это тело помещено. При этом время процесса, в течение которого достигается заданная форма поверхности, и коэффициент пропорциональности связаны: при меньшем коэффициенте можно получить ту же форму поверхности за большее время. Поэтому целесообразно ввести эквивалентное время $\tau = -\frac{k_B T}{D\Omega^2\gamma X_s}t$ и получить уравнение (2), имеющее более простой вид, а уже потом, зная конкретные значения коэффициента для имеющегося оборудования, вычислить реальное время процесса:

$$v_n(\tau) = -\frac{d^2K}{ds^2}. \quad (2)$$

Существуют эмпирические методы оценки профиля поверхности [13, 14], выведенные на основе аналитического решения уравнения (2), однако они слабо применимы к реальным структурам. Численные методы, реализованные в коммерческих продуктах, найти не удалось, а то, что предлагается в составе Comsol Multiphysics [13], дает результаты, лишь отдаленно напоминающие экспериментальные. Поэтому нами был разработан простой численный метод решения уравнения (2), дающий результаты, хорошо описывающие экспериментальные данные.

Для уравнения (2) опубликован ряд методов решения. Например, в работе [15] предложен алгоритм для решения на фиксированной сетке. Использование фиксированной сетки приводит к необходимости на каждом этапе вычислять параметры гладкой кривой, проходящей наиболее близко к узлам, которые относятся к границе раздела; следова-

тельно, разрабатываемый нами метод должен использовать в качестве представления кривой список точек, принадлежащих кривой. Существуют достаточно продвинутые пакеты программного обеспечения, реализующие метод конечных элементов с использованием триангулированных поверхностей [16], однако при прямом использовании данного метода вычисления второй производной кривизны поверхности в каждой точке могут привести к существенным ошибкам, а их реализация не всегда доступна; следовательно, разрабатываемый метод должен преодолеть и этот недостаток. Существуют методы функции уровня и фазового поля, которые также имеют свои ограничения. Например, для замкнутой поверхности было показано, что для получения адекватных результатов метод фазового поля в данном случае требуется модифицировать; прямое применение данного метода к диффузии по поверхности капли жидкости приводит к изменению объема этой капли, что невозможно с физической точки зрения [17]. Следовательно, необходимо предложить оригинальный метод вычисления кривизны поверхности.

Кроме того, для повышения сходимости желательнее заменить численное представление изменяющейся границы раздела фаз в виде ломаной на гладкую кривую. Это можно сделать, используя сплайны. При вычислении точек сплайна естественным образом вычисляется вторая производная для каждой отдельно взятой точки, что можно использовать для повышения сходимости алгоритма моделирования. Сплайны широко применяются для гладкой интерполяции функций; при вычислении параметров сплайна для данного набора точек автоматически задаются первая и вторая производные [18], причем первая производная — гладкая функция. Сплайны позволяют повысить сходимость при решении сингулярно-возмущенных задач [19], к числу которых также можно отнести рассматриваемую задачу, т. к. на острых углах возможного (произвольного) профиля кривизна может достигать очень высоких значений. То есть в предлагаемый алгоритм целесообразно ввести сплайны. Таким образом, для моделирования рассматриваемого процесса представляется возможным предложить алгоритм численного решения уравнения (2), использующий сплайны для повышения сходимости.

Алгоритм решения уравнения

Кривая представима как в виде набора точек, так и в виде зависимости кривизны от длины дуги, причем длина дуги вычисляется путем суммирования длин отрезков, составляющих ломаную, а кривизна кривой вычисляется с учетом единичных векторов-нормалей. Для каждой точки рассматриваются две соседние точки с единичными векторами-нормальными, для каждой из них вычисляется кривизна по алгоритму, описанному далее, и берется их среднеарифметическое.

На рис. 1 представлена схема, поясняющая вычисление кривизны для узла n : a — вычисление кривизны с учетом данных предыдущего узла, b — вычисление с учетом данных следующего узла. Считается, что угол α — малый, $\cos \alpha = (v_{n-1} \cdot v_n)$. Пусть длина участка равна L , тогда расстояние от участка до точки пересечения U приблизительно равно $L/\cos \alpha$ и оно же приблизительно равно радиусу окружности при малом α , а кривизна обратно пропорциональна этому радиусу.

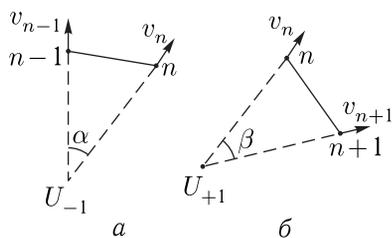


Рис. 1. Вычисление кривизны на заданном сегменте

Векторы-нормали, представленные на рис. 1, определяются как единичные векторы, расположенные на биссектрисах углов, составленных сегментами ломаной. Вычисленные для заданной кривой, они позволяют найти не только кривизну для каждой точки, но и первую производную — очевидно, вектор-нормаль в точке кривой перпендикулярен касательной к кривой в этой же точке, а коэффициент пропорциональности касательной и есть первая производная. Это позволяет вычислить первую производную для зависимости кривизны от длины дуги кривой.

Вторая производная зависимости кривизны от длины дуги кривой вычисляется с использованием сплайнов как первая производная от первой производной.

Когда найдена зависимость второй производной от длины дуги кривой, естественным образом вычисляется смещение каждой точки. Для этого также используются те же векторы-нормали, которые ранее использовались для вычисления кривизны: в каждый малый интервал времени каждая точка смещается вдоль соответствующего вектора на величину, пропорциональную второй производной кривизны по длине дуги.

Очевидно, сформулированный алгоритм достаточно прост для его реализации и последующего применения.

Средства и результаты моделирования

Для реализации предложенного алгоритма было создано собственное программное обеспечение, чтобы не привязываться к сторонним (особенно зарубежным коммерческим) продуктам. Его можно разделить на ядро и интерфейс взаимодействия. Ядро отвечает за расчеты, в нем собраны собственно функции моделирования, которые принимают и возвращают специальным образом структурированные данные. Интерфейс взаимодействия включает в себя графический интерфейс с окном графического ввода данных и редактором кода языка Python, а также модуль Python, содержащий функции для запуска процесса моделирования с заданными исходными данными и сохранением результатов моделирования в отдельный файл. Окно графического ввода позволяет масштабировать изображение прокручиванием колеса мыши, что сильно облегчает ввод исходных данных. На рис. 2 представлено окно программы. В левой части окна расположена графическая область ввода данных, где находится РЭМ-снимок, на котором зеленой линией обведен профиль канавки в кремниевой пластине. Этот профиль является исходным при дальнейшем моделировании. Исследуемые нами профили получались с использованием растрового электронного микроскопа JEOL JCM-6000 [12], входящего в состав технологической линейки АО «Российские космические системы», хотя для этих целей можно брать любой другой растровый электронный микроскоп.

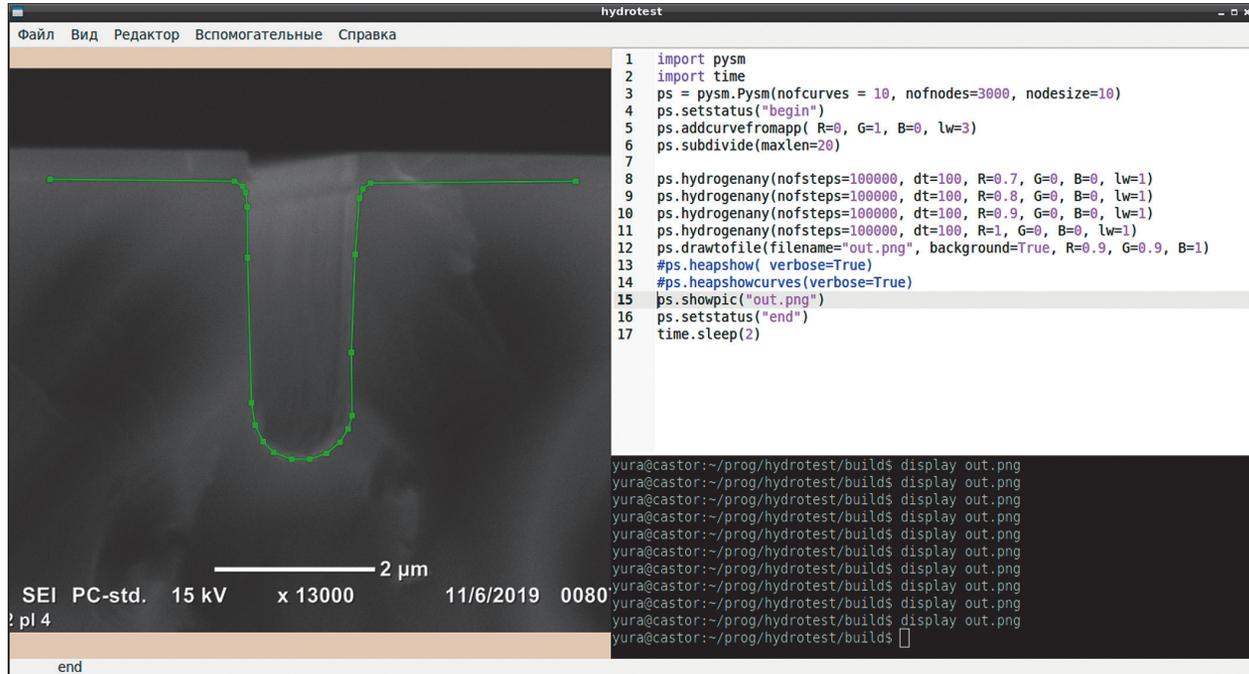


Рис. 2. Окно программ: слева — графическая область для ввода исходных данных, справа — редактор программы расчета и консоль

Заданный профиль в виде ломаной линии через интерфейс взаимодействия загружается в программу моделирования, куда также загружается шаг по эквивалентному времени; перед процессом моделирования ломаная дробится на более мелкие звенья с указанной максимальной длиной; результат моделирования записывается в графический файл. Результат моделирования можно сравнить с экспериментальным результатом, если наложить линию из этого файла на исходный РЭМ-снимок. РЭМ-снимок (экспериментальные данные) и наложенная на этот снимок линия (теоретические данные) представлены на рис. 3. Использованы экспериментальные данные, полученные ранее [12], на рис. 3 приведен скол пластины, отожженной при 1150 °С в течение 5 мин в атмосфере чистого водорода. При этом исходные канавки формировались на технологической линейке АО «Российские космические системы», процесс высокотемпературного водородного отжига проводился на технологической линейке АО «Эпиэл». Красная линия, наложенная на приведенный РЭМ-снимок, и есть результат моделирования. Очевидно, совпадение хорошее, следовательно, полученный нами инструмент (численная реализация алгоритма в составе

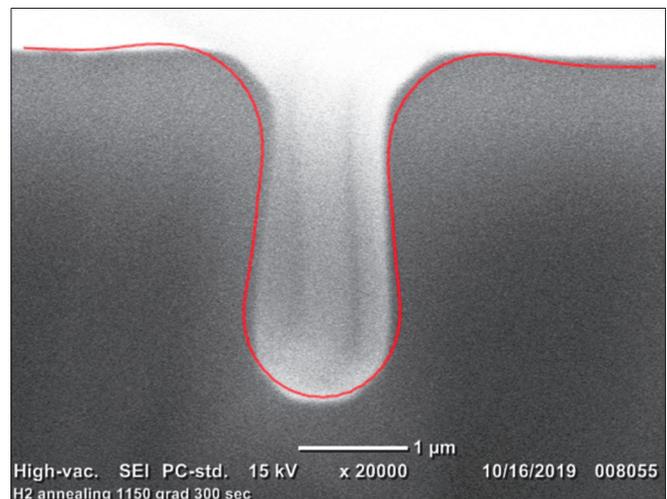


Рис. 3. Результаты моделирования изменения опубликованной ранее структуры (красная линия), наложенные на соответствующий РЭМ-снимок (аспектное соотношение для исходной канавки приблизительно 1 : 4)

собственного программного обеспечения) пригоден для дальнейшей работы.

Далее нами было промоделировано изменение формы отдельных канавок с аспектными соотношениями 1 : 4 и 1 : 10 с целью определения

пути дальнейшего формообразования в зависимости от глубины канавки и последующего сравнения результатов.

На рис. 4 представлены результаты моделирования для канавок с аспектным соотношением 1 : 4 для достаточно длительных промежутков времени. Синим показан исходный профиль канавки, остальные линии — результаты моделирования, показывающие постепенное изменение профиля канавки. Результаты моделирования выводились в виде тонких линий 1, 2, 3, 4, 5, 6 через равные промежутки эквивалентного времени, примерно соответствующего 5 мин, 10 мин, 15 мин, 20 мин, 25 мин, 30 мин реального времени при условии отжига в атмосфере сверхчистого водорода при давлении 100 бар (ширина канавки 1 мкм, глубина 4 мкм). Здесь следует отметить изменение наклона стенок при одновременном уменьшении глубины канавки.

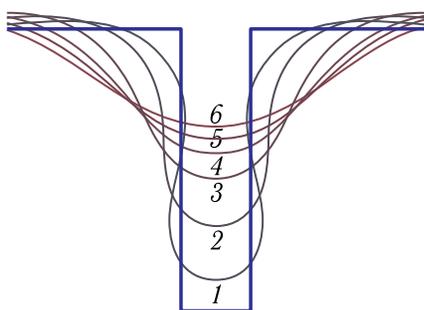


Рис. 4. Результаты моделирования для канавок с аспектным соотношением 1 : 4

На рис. 5 представлены уже результаты моделирования для канавок с аспектным соотношением 1 : 10, также синим показан исходный профиль канавки, а линиями 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 — промежуточные результаты моделирования через рав-

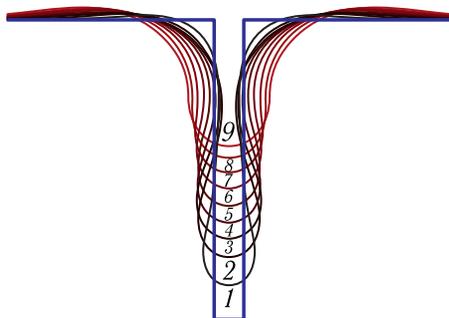


Рис. 5. Результаты моделирования для канавок с аспектным соотношением 1 : 10

ные интервалы эквивалентного времени. Если считать, что отжиг проводится в атмосфере сверхчистого водорода при давлении 100 бар, ширина канавки составляет 0,4 мкм, глубина 4 мкм, то реальное время составляет 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 мин для соответствующих кривых, описывающих изменяющийся профиль канавки.

Таким образом, численные эксперименты с динамической моделью показывают, что с течением времени при аспектном соотношении не более чем 1 : 10 форма поверхности стремится к плоскости, что также согласуется с физической сущностью процесса. При большем аспектном соотношении канавок (приблизительно 1 : 20), согласно модели, происходит образование микропустот в кремнии. Таким образом, модель адекватно описывает данный процесс на интервале времени любой длительности.

Выводы

В работе предложена модель результата воздействия поверхностной самодиффузии на микроструктуры в кремнии в предположении, что коэффициент поверхностной диффузии не зависит от кристаллографической ориентации каждого участка поверхности. Модель реализована программным образом. Программная реализация позволяет вычислить изменение любого исходного профиля поверхности с течением времени, обусловленного проведением технологического процесса. В качестве примера приведены результаты моделирования изменения формы одиночных канавок в исходном кремнии в зависимости от времени процесса и аспектного соотношения канавки. Из приведенных результатов следует, что, например, при изготовлении вертикальных МОП-транзисторов наиболее целесообразно проводить отжиг пластин со сформированными в них канавками, имеющими небольшое аспектное соотношение, например 1 : 4, и достаточно ограниченным временем отжига (5–10 мин). В противном случае возникнут проблемы с формированием затвора — он будет иметь повышенное паразитное сопротивление. На основе полученных данных можно предположить, что оптимальным является отжиг при 1150 °С в течение 10 мин — в этом случае последующее формирование затвора из поликристаллического кремния

пройдет без образования пустот (за счет положительного наклона стенок). Кроме того, скругление формы исходной канавки значительно снизит пиковую напряженность электрического поля, возникающего при работе уже готового транзистора с вертикальным затвором.

Также было выявлено, что образование микропустот в кремнии из массива канавок невозможно вплоть до аспектных соотношений 1 : 10 и более.

Предложенная модель универсальна и может быть использована для анализа изменений формы любых микроструктур, поверхность которых можно однозначно задать сечением. Модель допускает обобщение на трехмерный случай, в этом случае возможно моделирование формоизменения любых структур в кремнии под воздействием поверхностной самодиффузии.

Список литературы

1. Kim J., Roh T. M., Kim S.-G. et al. A novel technique for fabricating high reliable trench DMOSFETs using self-align technique and hydrogen annealing // IEEE Transactions on Electron Devices, 2003, vol. 50, № 2. P. 378–383.
2. Ануров А. Е., Заботин Ю. М., Подгородецкий С. Г. Особенности процесса глубинного анизотропного травления кремния в технологии изготовления траншейных МОП-транзисторов // Ракетно-космическое приборостроение и информационные системы, 2015, т. 2, № 4. С. 66–73.
3. Okatani T., Sato Y., Imai K. et al. Improvement of silicon microdisk resonators with movable waveguides by hydrogen annealing treatment // Journal of Vacuum Science & Technology B, 2021, vol. 39. P. 030602.
4. Sabattoli F. A., el Dirani H., Garrisi F. et al. A Source of Heralded Single Photon Using High Quality Factor Silicon Ring Resonators // 2019 21st International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON). 2019.07. P. 1–4.
5. Li Z., Yan J., Tang B. et al. Silicon photonics process development based on a 200-mm CMOS platform // Nanophotonics and Micro/Nano Optics III, 2016, 10. P. 1002706.
6. Bellegarde C., Pargon E., Sciancalepore C. et al. Improvement of Sidewall Roughness of Sub-Micron SOI Waveguides by Hydrogen Plasma and Annealing // IEEE Photonics Technology Letters, 2018, vol. 1. P. 1.
7. Bellegarde C., Pargon E., Sciancalepore C. et al. Improvement of sidewall roughness of sub-micron silicon-on-insulator waveguides for low-loss on-chip links // Silicon Photonics XII, 2017, 02, P. 1010816.
8. Mohammed Z., Olimpo M., Poenar D. et al. Smoothing of scalloped DRIE trench walls // Materials Science in Semiconductor Processing, 2017, vol. 63. P. 83–89.
9. Wong Y., Lorenzo S., Miao Y. et al. Extended Design Space of Silicon-on-Nothing MEMS // Journal of Microelectromechanical Systems, 2019, vol. 28, № 5. P. 850–858.
10. Su J., Zhang X., Zhou G. et al. Fabrication of a Piezoresistive Barometric Pressure Sensor by a Silicon-on-Nothing Technology // Journal of Sensors, 2019, vol. 2019. P. 1–10.
11. Banerjee P., Sarkar S. 3-D Analytical Modeling of Dual-Material Triple-Gate Silicon-on-Nothing MOSFET // IEEE Transactions on Electron Devices, 2017, vol. 64. P. 368–375.
12. Романов Ю. А., Строганов Д. А., Тарасов Д. В. и др. Высокотемпературный водородный отжиг для модификации поверхности канавок в кремнии // Приборы, 2021, т. 252, № 6. С. 43–50.
13. Turuelo C., Bergmann B., Breitkopf C. Void Shape Evolution of Silicon Simulation: Non-linear Three-dimensional Curvature Calculation by First Order Analysis // Universal Journal of Computational Analysis, 2014, vol. 2, № 1. P. 27–45.
14. Turuelo C., Breitkopf C. Simple Algebraic Expressions for the Prediction and Control of High-Temperature Annealed Structures by Linear Perturbation Analysis // Mathematical and Computational Applications, 2021, vol. 26. P. 43.
15. Zhang Y., Ye W. A High-Order Level-Set Method with Enhanced Stability for Curvature Driven Flows and Surface Diffusion Motion // Journal of Scientific Computing, 2016, vol. 69.
16. Walker S. FELICITY: A Matlab/C++ Toolbox for Developing Finite Element Methods and Simulation Modeling // SIAM Journal on Scientific Computing, 2018, vol. 40. P. C234–C257.
17. Zhang Y., Ye W. A Flux-Corrected Phase-Field Method for Surface Diffusion // Communications in Computational Physics, 2017, vol. 22. P. 422–440.
18. Волков Ю. С., Богданов В. В., Мирошниченко В. Л. и др. Формосохраняющая интерполяция кубическими сплайнами // Математические заметки, 2010, т. 88, № 6.
19. Блатов И. А., Задорин А. И., Китаева Е. В. Об интерполяции параболическим сплайном функций с большими градиентами в пограничном слое // Сибирский математический журнал, 2017, т. 58, № 4. С. 745–760.