

УДК 519.2:541.1

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ РОСТА ПЛЕНКИ ОКИСЛА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПОДЛОЖКАХ НА ОСНОВЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ПОДХОДА И МЕТОДА ДИЛА–ГРОУВА

А. Л. Александров¹, Г. А. Тарнавский¹, С. И. Шпак¹, А. И. Гулидов¹, М. С. Обреخت²

Разработана идеология приближенного моделирования динамики роста пленки окисла в полупроводниковых подложках, в которой на основе геометрического подхода проведено расширение 1D метода Дила–Гроува на 2D класс задач. Приводятся примеры расчетов роста подобласти двуокиси кремния SiO₂ при его окислении в различных средах (O₂ или H₂O) и динамики границ SiO₂/Si и SiO₂/окислитель в широком диапазоне определяющих параметров и позиций нитридных масок, закрывающих часть поверхности кремния.

Ключевые слова: численные методы, краевые задачи, сегрегационные эффекты, диффузия, процессы окисления, математическое моделирование, параллельные вычисления.

Введение. Одной из главных проблем компьютерного моделирования полупроводниковых материалов с заданными свойствами является проблема моделирования процессов окисления базового материала с образованием сложных конфигураций границ окисел/материал и окисел/окислитель, в частности, SiO₂/Si, SiO₂/O₂ или SiO₂/H₂O. Эти конфигурации определяются технологическими аспектами задачи — начальным положением масок, динамикой процесса (эпитаксия, травление, сдвиг масок и т.п.). В свою очередь, конфигурации этих границ, в особенности SiO₂/Si, существенным образом определяют другие физические процессы.

Моделирование высокого уровня (метод квантовой механики, статистической физики) для решения этой проблемы наталкивается на значительные трудности и практически нереализуемо даже на современной вычислительной технике. Это приводит к необходимости применения более упрощенных подходов и создания приближенных моделей [1–7] для разработки реально функционирующих алгоритмов не только для 1D, но и 2D (и даже 3D) задач. Вообще говоря, численное моделирование полупроводниковых свойств кремния с легирующими примесями в основном проводится при комплексном рассмотрении сразу нескольких процессов: имплантации примесей в базовый материал, его окисления, сегрегации примесей на границе волны окисления и диффузии примеси в окисле и материале. В простейших случаях результаты расчетов такой полной задачи коррелируют с экспериментальными данными с более или менее приемлемой точностью. В сложных задачах (в частности, с существенно криволинейными границами окисления) трактовка полученных результатов может быть весьма затруднительной, поскольку становится неясным, какой из перечисленных процессов моделируется с достаточной точностью, а какой — нет. Так, например, недостаточно качественный расчет процесса сегрегации, носящий осцилляционный характер, может быть завуалирован расчетом диффузии, обладающим высокими сглаживающими свойствами. Это, на наш взгляд, делает совершенно необходимым раздельную отработку численного моделирования различных физических процессов для возможности адекватного сравнения с экспериментальными результатами на пути создания новых технологий получения полупроводниковых материалов.

1. Задача окисления. Физико-математические законы, гипотезы, приближения

1.1. Постановка задачи. Общая область исследуемого физического процесса состоит из трех подобластей

$$R = R_0 \cap R_1 \cap R_2, \quad (1)$$

где R_0 , R_1 , R_2 — подобласти, занятые соответственно окислителем, базовым материалом и окислом, в частности O₂, Si и SiO₂, отделены друг от друга границами G_1 и G_2 :

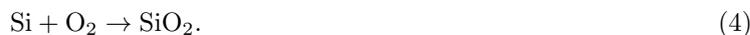
$$G_1 : y = y_1(x), \quad \text{SiO}_2/\text{Si}, \quad (2)$$

¹ Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, ул. Институтская, 4/1, 630090, г. Новосибирск; e-mail: shpak@itam.nsc.ru

² Siborg Systems Inc., University of Waterloo, Department of Electrical and Computer Engineering, Waterloo, Ontario, Canada, N2L3G1; e-mail: obrecht@siborg.ca

$$G_2 : y = y_2(x), \quad \text{SiO}_2/\text{O}_2. \quad (3)$$

Физический процесс определяется наличием окислителя в R_0 , его просачиванием через G_2 , дальнейшей диффузией в R_2 и взаимодействием на G_1 с материалом R_1 :



Граница G_2 движется вглубь R_0 , а G_1 — вглубь R_1 , при этом на их движение дополнительно к законам движения фронтов (см. ниже) налагается условие

$$\Delta_1 = \alpha \cdot \Delta_2, \quad (5)$$

называемое “законом объемов” и связывающее объем прореагировавшего вещества Δ_1 с объемом возникшего из него окисла; в частности для Si и SiO_2 $\alpha = 0,44$, т.е.

$$\Delta_{\text{Si}} = 0,44 \cdot \Delta_{\text{SiO}_2}.$$

Подчеркнем, что часть G_1 может быть закрыта маской, препятствующей доступу окислителя в окисел.

Вопрос моделирования: определить эволюцию границ G_1 и G_2 с возможным их самопересечением и образованием многосвязных областей в R_0 , R_1 и R_2 .

1.2. Модель диффузии. Эта приближенная модель основана на замене сложной физико-химической природы процесса ее существенно осредненным аналогом — процессом диффузии окислителя через окисел к материалу с использованием достаточно эмпирического описания взаимодействия на границах.

Ставится следующая эволюционно-краевая задача: в R_2 отыскивается решение уравнения диффузии

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} = 0, \quad (6)$$

где диффузионный поток \vec{F} связан с коэффициентом диффузии D и градиентом концентрации окислителя C соотношением

$$\mathbf{F} = D(x, y, C) \cdot \nabla C. \quad (7)$$

Краевые условия определяются равенством диффузионного потока (7) с потоками окислителя через границы в R_2 :

$$\text{из } R_0 \text{ на } G_1 \Rightarrow \mathbf{F} = k_s \cdot C \cdot \mathbf{n}_1, \quad (8)$$

$$\text{из } R_1 \text{ на } G_2 \Rightarrow \mathbf{F} = h \cdot (C^* - C) \cdot \mathbf{n}_2. \quad (9)$$

Система (6)–(9) замыкается на границах $x = 0$ и $x = x_{\max}$ условием Неймана

$$\mathbf{F} = 0. \quad (10)$$

Здесь k_s , h , C^* — физические константы задачи (см., например, [1]), а \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 — нормали к G_1 и G_2 соответственно.

Скорость движения \mathbf{V}_1 каждой точки границы G_1 определяется скоростью проникновения окислителя в R_1 :

$$\mathbf{V}_1 = \frac{\mathbf{F}}{N_1}, \quad (11)$$

где N_1 — число молекул окислителя, необходимых для формирования единицы объема окисла. По (11) можно однозначно определить эволюцию границы G_1 . Эволюция границы G_2 связана с эволюцией границы G_1 только условием (5), что является необходимым, но не достаточным для однозначного определения динамики G_2 . Эта проблема требует специального моделирования и рассматривается ниже.

1.3. Линейно-параболическая модель Дила–Гроува. Эта одномерная, точнее, квазидвумерная модель, разработанная в [1], является основой для построения двумерной модели в настоящей работе, поэтому представляется целесообразным напомнить ее ключевые моменты, построив ее несколько другим способом.

Рассмотрим (см. рис. 1) эволюционно-краевую задачу (6)–(10) в “свободной” области, вдали от маски в одномерном приближении, положив для определенности $\partial f / \partial x = 0$, где f — любая функция. Учтем физическую особенность процесса, которая заключается в следующем: характерное время τ_d диффузии окислителя через окисел значительно меньше, чем характерное время τ_c протекания химической реакции окисления материала

$$\tau_d \ll \tau_c. \quad (12)$$

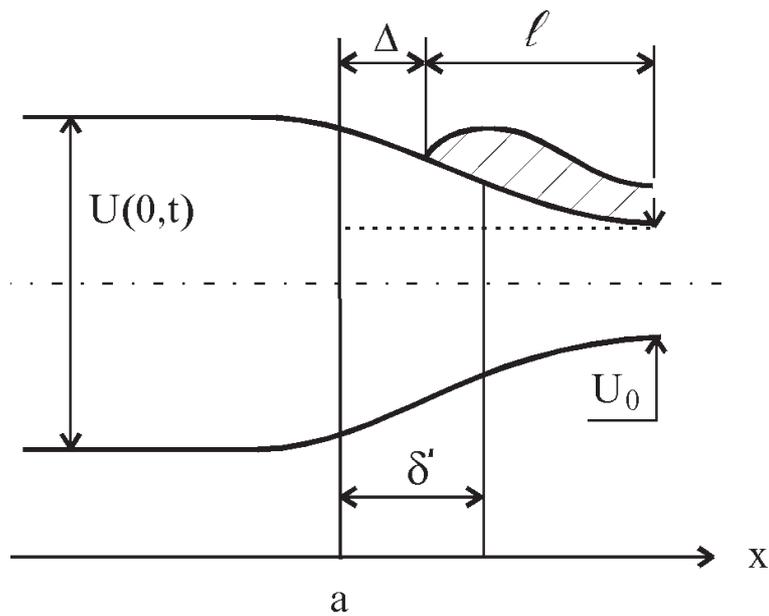


Рис. 1. Линейно-параболическая модель Дила-Гроува

Условие (12) можно переформулировать другим образом: процесс диффузии в задаче (6)–(10) протекает значительно быстрее движения границы G_1 и, соответственно, границы G_2 . В связи с этим, положив $\partial C/\partial t \approx 0$, эволюционно-краевая задача может быть сведена к стационарной задаче

$$\frac{d}{dy} D \frac{dC}{dy} = 0. \quad (13)$$

Вообще говоря, эволюционно-краевая задача сводится к эволюционно-псевдостационарной, двухэтапной задаче: на первом этапе, полагая положение границ $y_1(t)$ и $y_2(t)$ фиксированным при некотором t , решается стационарная задача (13), затем отыскивается новое положение $y_1(t + \tau_c)$ и $y_2(t + \tau_c)$, с учетом чего вновь решается стационарная задача (13). Положим далее, что окисел является однородным и изотропным, т.е. $D = \text{const}$. Тогда (13) сведется к

$$\frac{d^2 C}{dy^2} = 0. \quad (14)$$

Общее решение (14) в “свободной” области записывается в виде

$$C(y) = \alpha y + \beta, \quad (15)$$

где константы α и β могут быть найдены из граничных условий (8)–(9) с учетом (7):

$$hC^* - h \cdot (\alpha y_2 + \beta) = D\alpha, \quad (16)$$

$$k_s \cdot (\alpha y_1 + \beta) = D\alpha, \quad (17)$$

откуда

$$\alpha = \frac{k_s h C^*}{(k_s + h)D + k_s h \cdot (y_2 - y_1)}, \quad (18)$$

$$\beta = \frac{h C^* \cdot (D - k_s y_1)}{(k_s + h)D + k_s h \cdot (y_2 - y_1)}. \quad (19)$$

Определим толщину окисла (см. рис. 2)

$$U(x, t) = y_2(0, t) - y_1(x, t), \quad (20)$$

в частности, в “свободной” области, вдали от маски

$$U(0, t) = y_2(0, t) - y_1(0, t). \quad (21)$$

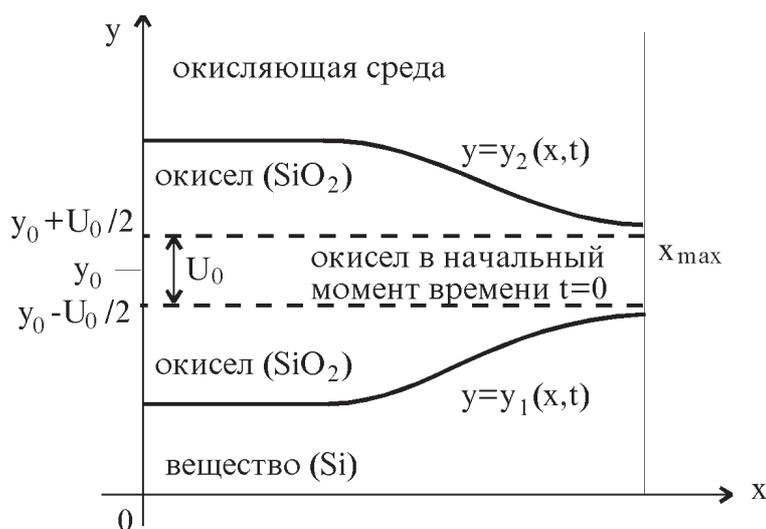


Рис. 2. Структура материала и положение границ

Запишем решение (15) через U :

$$C(y) = \frac{k_s h C^* y + h C^* \cdot (D - k_s y_1)}{(k_s + h)D + k_s h U}. \tag{22}$$

На границе G_1 , т.е. при $y = y_1$, из (2) имеем

$$C_1 \stackrel{\text{def}}{=} C(y_1) = \frac{h C^* D}{(k_s + h)D + k_s h U}. \tag{23}$$

Согласно (11) и (8) скорость проникновения окислителя в материал, физически означающая скорость движения границы окисла, есть

$$V_1 = \frac{k_s C_1}{N_1}. \tag{24}$$

С другой стороны, эта же скорость математически есть изменение положения границы y_1

$$-\frac{dy_1}{dt} = V_1. \tag{25}$$

Из (24) и (25) с учетом (23) получаем:

$$\frac{dy_1}{dt} = \frac{k_s}{N_1} \left(\frac{h C^* D}{(k_s + h)D + k_s h U} \right). \tag{26}$$

Используем закон “объемов” (5) в приложении к рассматриваемой одномерной задаче. За время dt при смещении границ dy_1 и dy_2 имеем изменение материала dy_1 и изменение окисла dU . Связывая их через (5), получим:

$$dy_1 = \alpha \cdot dU. \tag{27}$$

Подставляя (27) в (26), получаем известную формулу Дила-Гроува для роста толщины окисла в “свободной” области:

$$\frac{dU(0, t)}{dt} = \frac{B}{A + 2U(0, t)}, \tag{28}$$

где $A = 2D \cdot (1/h + 1/k_s)$, $B = (2C^* D)/(\alpha N_1)$. A и B — константы, зависящие от среды-окислителя и температуры процесса (см. [2]).

Для отжига в сухом кислороде (давление 1 атм):

$$\begin{aligned} [\text{мкм}^2/\text{ч}] &= 772 \cdot \exp(-(1,23 \text{ эВ})/kT), \\ B/A [\text{мкм}/\text{ч}] &= 6,23 \cdot 10^6 \cdot \exp(-(2 \text{ эВ})/kT). \end{aligned}$$

Для отжига в парах воды:

$$\begin{aligned} [\text{мкм}^2/\text{ч}] &= 420 \cdot \exp(-(0,78 \text{ эВ})/kT), & T > 950^\circ \text{C}, \\ &= 17000 \cdot \exp(-(1,17 \text{ эВ})/kT), & T < 950^\circ \text{C}, \\ /A [\text{мкм}/\text{ч}] &= 1,77 \cdot 10^8 \cdot \exp(-(2,05 \text{ эВ})/kT), & T > 900^\circ \text{C}, \\ &= 2,07 \cdot 10^6 \cdot \exp(-(1,6 \text{ эВ})/kT), & T < 900^\circ \text{C}. \end{aligned}$$

Решение (28) имеет вид:

$$U(0, t) = \sqrt{(U_0 + A/2)^2 + Bt} - A/2, \quad (29)$$

где U_0 — толщина начального слоя в окисле. Двумерность формы окисла $U(x, t)$ описывается приближением “птичьего клюва” [3]:

$$U(x, t) = U_0 + 0,5 [U(0, t) - U_0] \cdot \text{erf} [(x - \delta - a)/\gamma], \quad (30)$$

где $U(0, t)$ и U_0 — см. (2), a — исходная координата края маски, δ, γ — смещение маски и крутизна “птичьего клюва”:

$$\begin{aligned} \delta(\text{мкм}) &= (0,97 - 6,0 \cdot 10^{-4}T + 0,034 \ln U_0)/(1 + 3\eta) + (0,49 - 2,1 \cdot 10^{-4}T - 0,03\eta) \cdot U(0, t), \\ \gamma(\text{мкм}) &= (0,83 - 4,5 \cdot 10^{-4}T + 0,039 \ln U_0)/(1 + 3\eta) + (0,76 - 3,5 \cdot 10^{-4}T - 0,03\eta) \cdot U(0, t), \end{aligned}$$

$\eta = \text{const} = 0$ собственный Si < 100 >, $\eta = 1$ несобственный Si < 111 >, T — температура по шкале Кельвина, $\text{erf}(Z) = 2/\pi \int_0^Z \exp(-\xi^2) d\xi$. Погрешность моделирования по (30) “не превышает” 15% в диапазоне $T \in [800^\circ, 1100^\circ] \text{C}$ при толщине маски до 0,15 мкм.

1.4. Анализ движения границ окислитель/окисел и окисел/материал. Проведем общий математический анализ проблемы. Рис. 2 иллюстрирует структуру материала в произвольный момент времени t и момент $t = 0$ (штриховая линия).

Целью приближенного (без учета физики процесса) решения этой задачи является нахождение с учетом гипотезы (5) функции эволюции границы окисел/материал $y = y_1(x, t)$ и границы окислитель/окисел $y = y_2(x, t)$ по функции роста толщины окисла $U(x, t)$, определяемой (30).

Объем материала в момент времени t

$$V_{\text{Si}}(t) = \int_0^{x_{\text{max}}} y_1(x, t) dx \quad (31)$$

и его изменение от $t = 0$

$$\Delta V_{\text{Si}}(t) = V_{\text{Si}}^0 - V_{\text{Si}} = x_{\text{max}}(y_0 - U_0/2) - \int_0^{x_{\text{max}}} y_1 dx. \quad (32)$$

Объем окисла в момент времени t

$$V_{\text{SiO}_2}(t) = \int_0^{x_{\text{max}}} [y_2(x, t) - y_1(x, t)] dx = \int_0^{x_{\text{max}}} U(x, t) dx \quad (33)$$

и его изменение с момента t

$$\Delta V_{\text{SiO}_2}(t) = V_{\text{SiO}_2}(t) - V_{\text{SiO}_2}^0 = \int_0^{x_{\text{max}}} U(x, t) dx - U_0 x_{\text{max}}. \quad (34)$$

Из закона объемов (5) следует:

$$\frac{\Delta V_{\text{Si}}(t)}{\Delta V_{\text{SiO}_2}(t)} = \text{const} = 0,44 = C_1. \quad (35)$$

Подставляя (32) и (34) в (35), имеем интегральную связь $y_1(x, t)$ и $U(x, t)$:

$$x_{\max} \left(y_0 - \frac{U_0}{2} \right) - \int_0^{x_{\max}} y_1(x, t) dx = C_1 \left[\int_0^{x_{\max}} U(x, t) dx - U_0 x_{\max} \right]. \quad (36)$$

Перегруппировывая (36), получим:

$$\int_0^{x_{\max}} y_1(x, t) dx = -C_1 \int_0^{x_{\max}} U(x, t) dx + x_{\max} [y_0 + U_0(C_1 - 1/2)] \quad (37)$$

или, укорачивая (37), получим окончательно:

$$\int_0^{x_{\max}} y_1(x, t) dx = -C_1 \int_0^{x_{\max}} U(x, t) dx + C_2, \quad (38)$$

где

$$C_2 = x_{\max} [y_0 + U_0(C_1 - 1/2)].$$

Уравнение (38) представляет собой уравнение Вольтерра первого рода, и эта задача является **некорректно** поставленной, решение которой представляет самостоятельную, весьма трудоемкую проблему.

1.5. Некоторые квазиодномерные способы решения задачи. Таким образом, для определения согласованной динамики границ окисел/материал и окисел/окислитель, связанных между собой лишь законом объемов (5), необходимо решать некорректную задачу (38). Рассмотрим несколько приближенных моделей, позволяющих существенно упростить ее решение.

1.5.1. Модель геометрического подобия. Основной постулат этой квазиодномерной модели — движение границы окисла геометрически подобно нарастанию толщины окисла по модели “птичьего клюва” — приводит к следующей цепочке выкладок.

Рассмотрим движение границы окисла в отсутствие маски. Тогда здесь

$$y_1(x, t) \Rightarrow y_1(0, t) \stackrel{def}{=} \tilde{y}_1(t); \quad U(x, t) \Rightarrow U(0, t) \stackrel{def}{=} \tilde{U}(t). \quad (39)$$

Подставляя (39) в (38) и интегрируя, имеем

$$\tilde{y}(t)x_{\max} = -C_1 \tilde{U}(t)x_{\max} + C_2 \quad (40)$$

и

$$\tilde{y}(t) = -C_1 \tilde{U}(t) + C_3, \quad (41)$$

где $C_3 = C_2/x_{\max} = y_0 + U_0(C_1 - 1/2)$. Запишем $y_1(x, t)$ в виде, аналогичном $U(x, t)$ в (30),

$$y_1(x, t) = \tilde{y}_0 + 0,5 \cdot [\tilde{y}(t) - \tilde{y}_0] \cdot \operatorname{erf}[(x - \delta + a)/\gamma] \quad (42)$$

с неизвестной константой \tilde{y}_0 , и проверим выполнение интегрального закона (38). Обозначая для краткости $Z = (x - \delta + a)/\gamma$, $I = \int_0^{x_{\max}} \operatorname{erf}(Z) dx$ и подставляя (42) в (38), получим

$$\int_0^{x_{\max}} \{ \tilde{y}_0 + 0,5 \cdot [\tilde{y}_1(t) - \tilde{y}_0] \cdot \operatorname{erf}(Z) \} dx = -C_1 \cdot \int_0^{x_{\max}} U(x, t) dx + C_2. \quad (43)$$

Подставив в правую часть (43) выражение для $U(x, t)$ с учетом обозначений (42), имеем

$$\int_0^{x_{\max}} \{ \tilde{y}_0 + 0,5 \cdot [\tilde{y}_1(t) - \tilde{y}_0] \cdot \operatorname{erf}(Z) \} dx = -C_1 \cdot \int_0^{x_{\max}} \{ U_0 + 0,5 \cdot [\tilde{U}(t) - U_0] \cdot \operatorname{erf}(Z) \} dx + C_2.$$

Далее, интегрируя, получим

$$\tilde{y}_0 x_{\max} + 0,5 \cdot [\tilde{y}_1(t) - \tilde{y}_0] \cdot I = -C_1 \{ U_0 x_{\max} + 0,5 \cdot \tilde{U}(t) \cdot I \} + C_2. \quad (44)$$

Подставляя в (44) $\tilde{y}_1(t)$, из (41) получим

$$\tilde{y}_0 x_{\max} + 0,5 \cdot [-C_1 \tilde{U}(t) + C_3 - \tilde{y}_0] \cdot I = -C_1 U_0 x_{\max} - 0,5 C_1 \cdot [\tilde{U}(t) - U_0] \cdot I + C_2. \quad (45)$$

Сократим член $0,5 C_1 \tilde{U}(t) I$ и перегруппируем (45)

$$x_{\max}(\tilde{y}_0 + C_1 U_0) - C_2 = 0,5 \cdot I \cdot [C_1 U_0 + \tilde{y}_0 - C_3]. \quad (46)$$

Для выполнения (46) требуются связи коэффициентов

$$x_{\max}(\tilde{y}_0 + C_1 U_0) - C_2 = 0, \quad (47)$$

$$0,5 \cdot I \cdot [C_1 U_0 + \tilde{y}_0 - C_3] = 0. \quad (48)$$

Из (47)–(48) вытекает требование к \tilde{y}_0 :

$$\begin{aligned} \tilde{y}_0 &= C_2/x_{\max} - C_1 U_0, \\ \tilde{y}_0 &= C_3 - C_1 U_0. \end{aligned} \quad (49)$$

Поскольку $C_3 = C_2/x_{\max}$ (см. (41)), оба условия тождественны; с учетом обозначений C_2 (см. (38))

$$\tilde{y}_0 = y_0 + U_0(C_1 - 1/2) - C_1 U_0. \quad (50)$$

Приводя подобные, окончательно имеем **важное** условие, накладываемое на константу \tilde{y}_0 в приближенной модели геометрического подобия закона движения границы окисел/материал (42) и роста толщины пленки окисла (40):

$$\tilde{y}_0 = y_0 - \frac{U_0}{2} - C_1 \frac{U_0}{2}. \quad (51)$$

Подставляя (51) в (42) с учетом (41) и опуская выкладки, окончательно имеем:

$$y_1(x, t) = y_1^0 - C_1 U(x, t) + 0,5 C_1 U_0 \left[1 + 0,5 \cdot \operatorname{erf} \left(\frac{x - \delta - a}{\gamma} \right) \right], \quad (52)$$

где $y_1^0 = y_0 - U_0/2$ есть начальная координата прямолинейной границы.

Таким образом, (52) определяет закон движения границы окисел/материал по закону нарастания толщины окисла (30) и заданным начальной толщине пленки окисла и коэффициенту порождения объема окисла из материала в приближении их геометрического подобия.

Анализируя рис. 2 и уравнение (52), приходим к нескольким выводам.

а) При отсутствии в начальный момент времени $t = 0$ пленки окисла, т.е. при $U_0 = 0$, условие (51) имеет естественный смысл: $\tilde{y}_0 = y_0$, т.е. начальная граница физического процесса окисления (рис. 2) и некоторая начальная координата приближенной численной модели совпадают.

б) В общем виде условие (51) представляется несколько странным. Более естественным было бы условие $\tilde{y}_0 = y_0 - U_0/2$, являющееся первой частью (51).

в) Наличие члена $C_1 U_0/2$ (именно, множителя C_1) в условии для начального момента времени означает “память” задачи о конкретном материале и его количестве, ушедшем на образование пленки окисла U_0 . По-видимому, это есть неустранимый дефект модели (52).

г) Таким образом, чем тоньше пленка в момент $t = 0$, тем ближе приближенная модель к реальному физическому процессу.

Вообще говоря, использование приближенной модели (42) для решения некорректной (обратной) задачи (38), тоже опирающейся на ряд приближенных постулатов, в сложных ситуациях, требующих точного решения, иногда может привести к существенно неверным результатам, даже в одно- или квазидвумерных ситуациях.

1.5.2. Модель согласованного движения границы окисел/материал и роста толщины окисла. Эта квазиодномерная модель достаточно близка к приведенной выше модели геометрического подобия, однако отличается от нее тактикой решения, кратко излагаемой ниже.

Обратная задача имеет вид (рис. 2)

$$\int_0^{x_{\max}} y_1(x, t) dx = -C_1 \int_0^{x_{\max}} U(x, t) dx + C_2, \quad (53)$$

где $C_1 = \Delta V_{Si}/\Delta V_{SiO_2} = 0,44$, $C_2 = x_{\max} \cdot [y_0 + U_0(C_1 - 1/2)]$, U_0 — начальная толщина прямоугольной пленки окисла, y_0 — координата середины начальной пленки окисла. В качестве основного постулата модели используем предположение линейного подобия $y_1(x, t)$ и $U(x, t)$:

$$y_1(x, t) = \alpha \cdot U(x, t) + \beta, \tag{54}$$

где α и β — неизвестные константы. Необходимо найти связь α и β с известными константами задачи:

$$\alpha = \alpha(C_1, C_2), \quad \beta = \beta(C_1, C_2). \tag{55}$$

Подставляя (54) в (55), имеем

$$\alpha \int_0^{x_{\max}} U(x, t) dx + \beta \cdot x_{\max} = -C_1 \int_0^{x_{\max}} U(x, t) dx + C_2. \tag{56}$$

Подчеркнем, что это определенные интегралы, и при фиксированном t из (56) следует только “число” = “числу”. Кроме того, уравнение (56) дает всего лишь одну связь констант

$$f(\alpha, \beta, C_1, C_2) = 0. \tag{57}$$

Это типичная задача, например для томографии. Дополним постулат (54) связями констант

$$\alpha = -C_1, \quad \beta = C_2/x_{\max} = y_0 + U_0(C_1 - 1/2). \tag{58}$$

Таким образом, мы определили закон движения границы

$$y_1(x, t) = -C_1 U(x, t) + (y_0 - U_0/2) + C_1 U_0. \tag{59}$$

Обозначим

$$y_1^0 \stackrel{def}{=} y_0 - U_0/2. \tag{60}$$

Здесь y_1^0 — есть действительное (см. рис. 2) положение границы окисел/материал в момент $t = 0$ в свободной (вдали от маски) области $x = 0$. Уравнение (59) с учетом (60) окончательно записывается в виде

$$y_1(x, t) = -C_1 U(x, t) + y_1^0 + C_1 U_0. \tag{61}$$

Так же, как и модель геометрического подобия, данная модель при $U_0 \neq 0$ содержит “нелогичный” член $C_1 U_0$, не имеющий никакого отношения к стартовым условиям для $y_1(x, t)$ и фактически содержащий память процесса о том, что было до момента $t = 0$.

Проведем сравнительный анализ моделей. Приводя модель (52), изложенную в первом варианте, к виду (61) и выписывая их рядом, получим

$$y_1(x, t) = -C_1 U(x, t) + y_1^0 + C_1 U_0, \\ y_1(x, t) = -C_1 U(x, t) + y_1^0 + C_1 U_0 - C_1 \frac{U_0}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \operatorname{erf}(Z) \right].$$

Модели несколько отличаются, и их отличие зависит от величины U_0 . Дефекты моделей также определены величиной U_0 , так что выбрать из этих двух моделей “лучшую” затруднительно.

Таким образом, достаточно хорошо функционирующая в квазиодномерных ситуациях модель геометрического подобия движения границы окисел/материал и роста толщины пленки окисла, вообще говоря, несовместна с условием наличия в начальный момент времени пленки окисла толщиной U_0 , и чем больше U_0 , тем больше дефект модели.

1.5.3. Модель зеркального отражения границ окисел/материал и окисел/окислитель.

Приближенная физико-математическая модель процесса, используемая в данном разделе, опирается на следующий ряд постулатов:

- физические механизмы окисления здесь не рассматриваются;
- опорным уравнением модели является заданная квазидвумерная нестационарная зависимость роста толщины пленки окисла $\delta Y = U(x, t)$;
- дополнительным условием модели является полученный тем или иным способом (см. соответствующий раздел) закон эволюции границы окисел/материал $Y = y_1(x, t)$.

Топологическая карта проблемы представлена на рис. 2.

Таким образом, из постулатов можно выписать закон эволюции границы окислитель/окисел:

$$y_2(x, t) = y_1(x, t) + U(x, t). \quad (62)$$

Проведем анализ возможности использования приближения зеркальной симметрии $y_2(x, t)$ и $y_1(x, t)$ и определим, насколько эта модель отклоняется от закона объемов (5). Пусть имеется некоторая линия

$$y = y^* = \text{const}, \quad (63)$$

относительно которой кривые y_2 и y_1 обладают зеркальной симметрией

$$y_2(x, t) - y^* = y^* - y_1(x, t). \quad (64)$$

Определим условия, необходимые и достаточные для этого. С учетом (62), из (64) следует

$$y_1(x, t) = y^* - 0,5 \cdot U(x, t). \quad (65)$$

Из (65) найдем положение линии симметрии:

$$y^* = y_1(x, t) + 0,5 \cdot U(x, t). \quad (66)$$

Выпишем условия подобия движения границы окисел/материал толщине пленки окисла:

$$y_1(x, t) = \alpha \cdot U(x, t) + \beta, \quad (67)$$

$$U(x, t) = U_0 + 0,5 \cdot [U(0, t) - U_0] \cdot \text{erf}[Z(x)] \stackrel{\text{def}}{=} U_0 + \phi(x, t), \quad (68)$$

где $\phi(x, t)$ — функция, не содержащая свободных констант. Подставим (67) и (68) в (64)

$$\text{const} = y^* = (\alpha + 0,5) \cdot \phi(x, t) + (\beta + 0,5 U_0). \quad (69)$$

Для выполнения (69) при всех $x, t \in \{X \times T\}$ необходимо выполнение условий:

$$\alpha + 0,5 = 0, \quad (70)$$

$$y^* = \beta + 0,5 U_0. \quad (71)$$

Ранее, в предыдущем разделе, для представления $y_1(x, t)$ в форме (69) были приняты следующие значения коэффициентов (58):

$$\alpha = -C_1, \quad (72)$$

$$\beta = y_0 + U_0 \cdot (C_1 - 0,5). \quad (73)$$

Совместный анализ (70)–(71) и (72)–(73) приводит к следующим условиям, требующимся для зеркальной симметрии:

$$C_1 = 0,5 \quad (\text{для Si } C_1 = 0,44), \quad (74)$$

$$y^* = y_0 + 0,5 U_0, \quad (75)$$

выражающим значение координаты линии зеркальной симметрии через значение начальной толщины пленки окисла U_0 и координату ее середины y_0 . При $U_0 = 0$ имеем логичный результат $y^* = y_0$.

Этот результат должен предупредить, что использование свойств зеркальной симметрии границ окисла для SiO_2 ($C_1 = 0,44$) приведет к ошибке порядка 12% ($= 100\% \times |1 - 0,44/0,5|$); применение этого подхода возможно, если в системе постулатов заложена требуемая общая точность решения задачи, не превосходящая 10–20% (т.е. когда точность применяемого к данному физическому процессу математического метода недостаточно высока или сама физическая модель отражает физику процесса только в общих чертах).

2. Расширение 1D метода Дила–Гроува на 2D класс задач. Следует сделать несколько замечаний по вопросу разработки новой модели для решения задачи о росте окисла, входящей как составная часть в полную комплексную задачу создания полупроводниковых материалов с определенными свойствами. Представляемая модель носит более “геометрический” характер по сравнению с моделями, применяющимися для расчета данной задачи, из которых достаточно широкое распространение получили “сжимаемая” модель, или модель “давления” [4], “вязкая” модель [5], “вязко-эластичная” модель [6]. На наш взгляд,

эти модели обладают принципиальными, идейными недостатками. Сущность всех перечисленных моделей заключается в представлении физического процесса образования окисла некоторым аналогом из области гидродинамики, при этом окисел рассматривается как жидкость: в простых моделях как несжимаемая и идеальная (без вязкости и теплопроводности), в других — как сжимаемая и идеальная, в третьих — как сжимаемая и вязкая, в четвертых, наиболее продвинутых, для описания процесса как гидродинамического добавляются еще некоторые понятия из теории упругости (эластичность) и пластичности. Однако вопрос о точности этого пути моделирования по-прежнему остается весьма и весьма дискуссионным. В данных моделях имеют место существенно искусственные элементы, такие, например, как способы построения “вязкого тензора напряжений”, определение коэффициентов переноса, а также замыкание гидродинамической части системы уравнений некоторым аналогом уравнения состояния, устанавливающим связи между “давлением”, “плотностью” и “температурой”. Эти модели ориентированы на решение вариантов конкретных задач и фактически не могут быть расширены за их рамки. Об этом свидетельствует сам факт появления усложняющихся в гидродинамическом описании моделей: несжимаемая–сжимаемая, невязкая–сжимаемая, вязкая–сжимаемая, вязко-эластичная.

На наш взгляд, это усложнение недостаточно оправдано и в определенном смысле превышает уровень общей точности моделирования полной задачи. Данный вопрос затрагивался при обсуждении в [7] другой части этой проблематики — методов моделирования сегрегации легирующих примесей в базовом материале при движении в нем фронта волны окисления. В данной работе предлагается “псевдоодномерный” метод решения задачи об определении согласованного движения границ окисла вглубь материала и в сторону окислителя. Термин “псевдоодномерный” отражает сущность применяемой идеологии — метод основан на “одномерном” базисном описании процесса, однако эта “одномерность” не является фиксированной по отношению к какому-либо координатному направлению. Например, изложенные выше методы определялись как “квазиодномерные” в том смысле, что базисные направления этих моделей связаны с определенным и фиксированным координатным направлением, а именно Y -направлением, вдоль которого проводилось более или менее точное физическое моделирование, а двумерность учитывалась путем “приписывания” к полученным Y -закономерностям некоторых сугубо эмпирических зависимостей по X -направлению.

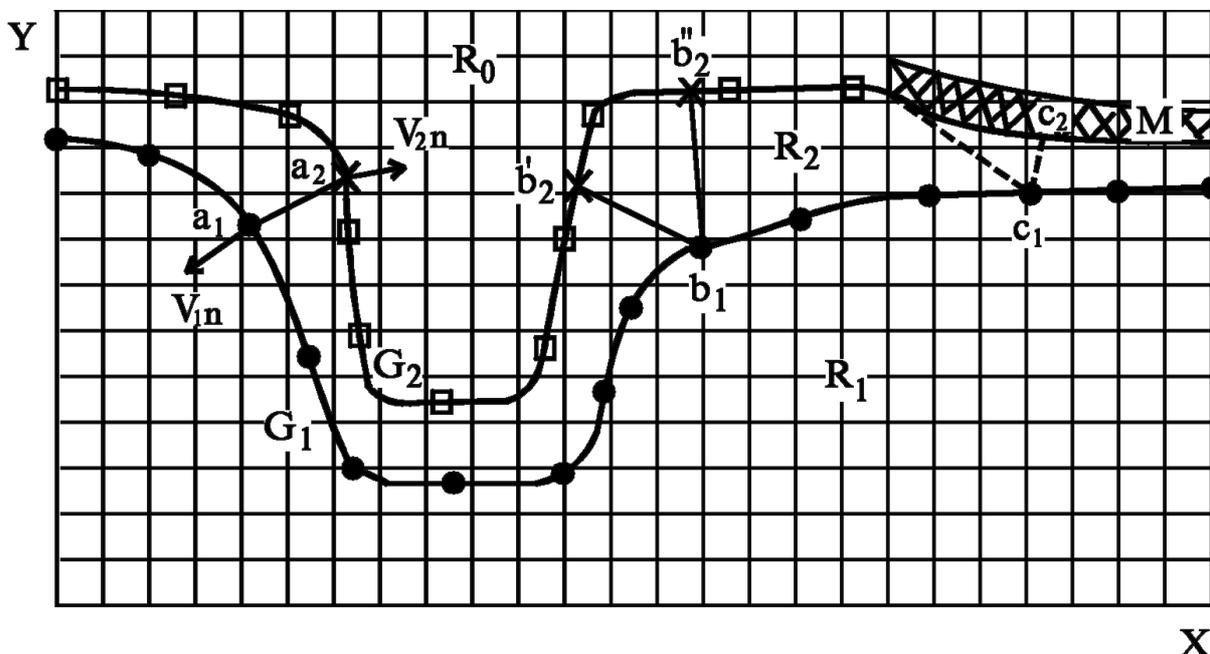


Рис. 3. Топология задачи. Области: материала (R_1), окисла (R_2) и окислителя (R_0). Границы: окисел/материал (G_1), окисел/окислитель (G_2) и маска (M). Здесь \bullet — узлы, задающие G_1 ; Δ — узлы, задающие G_2 ; \times — узлы на G_2 , сопряженные узлам на G_1

Псевдоодномерная модель основана на следующей системе постулатов (см. рис. 3).

1. Каждой точке a_1 границы G_1 окисел/материал соответствует одна и только одна точка a_2 границы G_2 окисел/окислитель.
2. Положение точки a_2 , сопряженной точке a_1 , определяется принципом минимизации расстояния

от a_1 до кривой G_2 .

3. Движение границы G_1 в точке a_1 происходит по нормали к G_1 в сторону материала со значением модуля скорости V_1 , определяемой по закону Дила–Гроува.

4. Значение толщины окисла, входящей в одномерную модель Дила–Гроува, есть длина отрезка a_1a_2 , независимо от его ориентации относительно координатных осей.

5. Движение границы G_2 в точке a_2 происходит по нормали к G_2 в сторону окисла со значением модуля скорости V_2 , согласованной с V_1 по закону объемов нарастания окисла из материала.

6. Движение точек c_1 и c_2 границ G_1 и G_2 под маской происходит аналогично точкам свободной поверхности без маски со специальной коррекцией скорости движения V_1 .

7. Коррекция V_1 , отражающая затрудненность проникновения окислителя в область материала под маской, моделируется специальным корректирующим членом, зависящим от расстояния R точки c_1 до края маски.

2.1. Основная математика модели. Наиболее приемлемым в данной задаче способом представления границ G_1 и G_2 является параметрическое описание кривых:

$$G_1 : \quad x = x_1(s_1), \quad y = y_1(s_1), \quad (76)$$

$$G_2 : \quad x = x_2(s_2), \quad y = y_2(s_2), \quad (77)$$

где s — параметр (длина кривой), отсчитываемый единообразно для G_1 и G_2 (например, от левой границы расчетной области). Представление (76)–(77) позволяет работать даже с самопересекающимися кривыми, в отличие от представления типа $y = y(x)$, которое не может быть использовано в случае неоднозначной зависимости y от x или наоборот, x от y .

В одномерном пространстве G_1 и G_2 вводятся дискретные сетки, узлы которых перенумерованы соответственно индексами

$$k \in [1, K], \quad \ell \in [1, L]. \quad (78)$$

В узлах определены значения параметров

$$s_{1k} = s_1(k), \quad s_{2\ell} = s_2(\ell) \quad (79)$$

и значения декартовых координат в n -момент времени

$$\begin{aligned} G_1^n : \quad x_{1k}^n &= x_1^n(s_{1k}), & y_{1k}^n &= y_1^n(s_{1k}), \\ G_2^n : \quad x_{2\ell}^n &= x_2^n(s_{2\ell}), & y_{2\ell}^n &= y_2^n(s_{2\ell}). \end{aligned} \quad (80)$$

Математическая задача формулируется следующим образом: по известным положениям границ G_1^n и G_2^n определить их положение G_1^{n+1} и G_2^{n+1} в следующий момент времени, используя модель Дила–Гроува с учетом того, что часть поверхности окисла (границы G_2) закрыта маской, затрудняющей доступ окислителя в область окисла под ней, уменьшающей скорости перемещения границ G_1 и G_2 в этой под-области.

Математика численной модели решения поставленной задачи и определяемый ею алгоритм компьютерного расчета основан на ряде положений и постулатов.

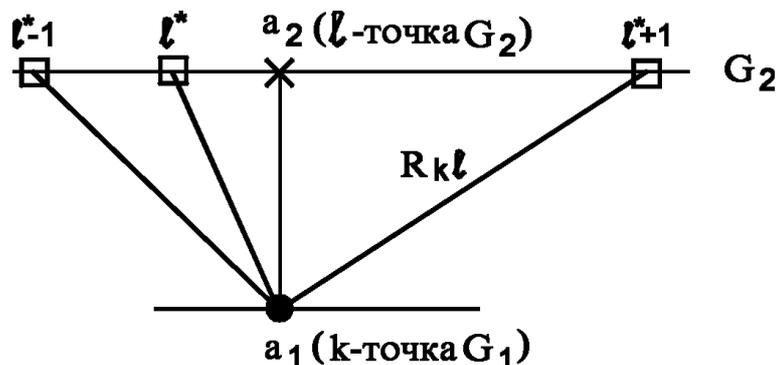


Рис. 4. Построение сопряженных точек a_1 и a_2 на границах G_1 и G_2

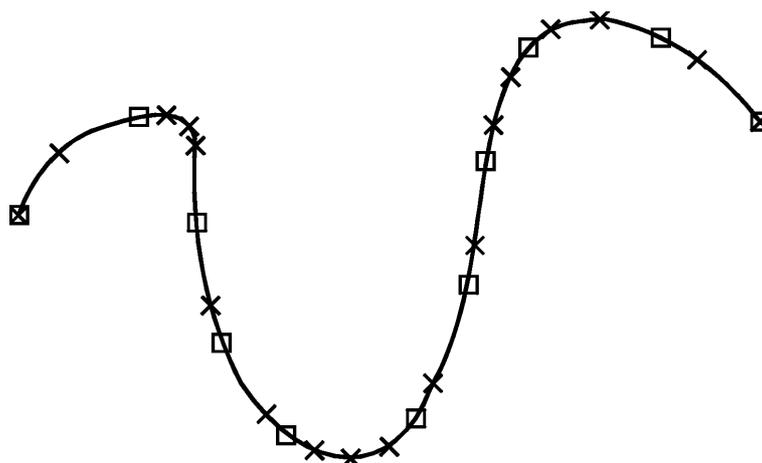


Рис. 5. Граница G_2^n : \square — ℓ -точки, $\ell \in [1, L]$; \times — k -точки, $k \in [1, K]$

2.2. Сопряженные точки. Пять постулатов и определение модели. Основой геометрической части предлагаемой модели является понятие сопряженных точек границ G_1^n и G_2^n , для которых определяются пять постулатов.

1. Каждой k -точке границы G_1^n соответствует одна и только одна сопряженная k -точка на границе G_2^n , $k \in [1, K]$.

Эти сопряженные точки в общем случае могут не совпадать с ℓ -точками, задающими границу G_2^n , $\ell \in [1, L]$.

2. Сопряженные точки определяются минимумом расстояния от k -точки границы G_1^n до кривой G_2^n .

На рис. 4 показан фрагмент расчетной области (см. рис. 3) для иллюстрации алгоритма построения сопряженных точек. Рассмотрим произвольную внутреннюю (точка a_1 на рис. 4) k -точку G_1^n , $k \in [2, K-1]$ (граничные точки сопрягаются особо) с координатами (x_{1k}, y_{1k}) . Расстояние $R_{k\ell}$ от k -точки G_1^n до любой ℓ -точки G_2^n с координатами $(x_{2\ell}, y_{2\ell})$ (точка a_2 на рис. 4) определяется как

$$R_{k\ell} = \sqrt{(x_{1k} - x_{2\ell})^2 + (y_{1k} - y_{2\ell})^2}. \tag{81}$$

Ближайшая к k -точке G_1^n ℓ^* -точка G_2^n определяется из условия

$$R_{k\ell^*} = \min(R_{k\ell}), \quad \ell \in \overline{1, L}. \tag{82}$$

3. В случае, когда условию (82) удовлетворяют несколько ℓ -точек G_2^n , в качестве ℓ^* -точки выбирается точка со “средним” значением индекса.

Координаты сопряженной точки

$$a_2(x_{2k}^*, y_{2k}^*) = a_2(x_2(s_k), y_2(s_k)), \quad k \in [2, K-1], \tag{83}$$

могут быть найдены по координатам точек $(x_1(k), y_1(k))$, $(x_2(\ell^*), y_2(\ell^*))$, $(x_2(\ell^* - 1), y_2(\ell^* - 1))$ и $(x_2(\ell^* + 1), y_2(\ell^* + 1))$, с тем или иным порядком интерполяции.

4. Граничные точки кривых G_1^n и G_2^n всегда являются попарно сопряженными.

Из этого постулата следуют соотношения, замыкающие построение кривой G_2^n k -точками, сопряженными k -точками кривой G_1^n :

$$x_2(k=1) = x_2(\ell=1), \quad y_2(k=1) = y_2(\ell=1); \quad x_2(k=K) = x_2(\ell=L), \quad y_2(k=K) = y_2(\ell=L). \tag{84}$$

Таким образом, на n -слое по времени по k -точкам границы G_1^n построены сопряженные им k -точки границы G_2^n , $k \in [1, K]$. Граница G_2^n , в свою очередь, исходно задана совокупностью ℓ -точек, $\ell \in [1, L]$ (см. рис. 5).

Заключительным постулатом данного раздела является следующий:

5. Обобщенной локальной толщиной $\delta(k)$ пленки окисла является расстояние между сопряженными точками границ G_1^n и G_2^n :

$$\delta(k) = R(a_{1k}, a_{2k}) = \sqrt{(x_{1k} - x_{2k}^*)^2 + (y_{1k} - y_{2k}^*)^2}. \tag{85}$$

Отметим физический смысл δ : обобщенная локальная толщина пленки есть минимальная трасса движения окислителя из своей подобласти через подобласть окисла к границе окисел/материал.

2.3. 2D модификация модели Дила–Гроува. Три постулата и определения. Второй главной позицией модели является определение скорости движения точек границы G_1^n , основанная на трех постулатах.

6. Скорость движения $V_1(k)$ каждой k -точки границы G_1^n определяется по закону Дила–Гроува, записанного в виде

$$V_1(k) = \frac{B \cdot \xi(k)}{A + 2\delta_v(k)}, \quad (86)$$

где A и B — константы Дила–Гроува, зависящие от физических параметров задачи (температуры процесса, давления окислителя); ξ — эмпирический корректирующий множитель, δ_v — минимальное расстояние от области окислителя до k -точки.

В стандартной 1D модели Дила–Гроува [1] под δ_v понималась толщина пленки окисла, последующие ее расширения [2, 3] на 2D задачи оставляли смысл δ_v аналогичным — толщина по одному из координатных направлений, объявляемому доминирующим, по второму направлению использовалась корректирующая 1D зависимость. Таким образом, все “двумерные” модели этого типа имеют вид

$$V_1(x, y) = f(x) \cdot g(y) \quad (87)$$

и фактически являются псевдодвумерными. В предлагаемом пятом постулате (85) ориентация δ_v относительно координатных направлений является произвольной и зависит только от взаимного положения сопряженных точек границ G_1^n и G_2^n . Поэтому $V_1 = V_1(x, y)$ и данный метод является строго двумерным (с точностью моделирования, определяемой своей системой постулатов).

Смысл δ_v , определяющей скорость k -точки границы G_1^n , зависит от позиции сопряженной k -точки границы G_2^n в физико-химической постановке задачи.

7. Если k -точка G_1^n имеет сопряженную k -точку G_2^n , лежащую на свободном участке границы окисел/окислитель, то $\delta_v(k)$ есть обобщенная локальная толщина $\delta(k)$; если сопряженная k -точка G_2^n лежит на участке, закрытом маской, то $\delta_v(k)$ есть расстояние $R^*(k)$ от k -точки G_1^n до края маски.

Этот постулат формализуется следующим образом (см. рис. 6):

$$\delta_v(k) = \begin{cases} \delta(k), & \text{если } x_{2k} < x^*, \\ \frac{(x^{**} - x_{1k})\delta(k) + (x_{1k} - x^*)R^*(k)}{x^{**} - x^*}, & \text{если } x^* \leq x_{2k} \leq x^{**}, \\ R^*(k), & \text{если } x_{2k} > x^{**}, \end{cases} \quad (88)$$

где $X^* = (1 - \lambda)x_{\text{mask}}$, $x^{**} = (1 + \lambda)x_{\text{mask}}$, а эмпирически подбираемый коэффициент $\lambda \in [0, x_{1k}/x_{\text{mask}} - 1]$. В (88) $\delta(k)$ определено по (85), а

$$R^*(k) = \sqrt{(x_{1k} - x_{\text{mask}})^2 + (y_{1k} - y_{\text{mask}})^2}. \quad (89)$$

Корректирующий множитель ξ в (86) выбирается следующим образом:

$$\delta_v(k) = \begin{cases} 1, & \text{если } x_{1k} < x_{\text{mask}}, \\ f_1(\delta(k)) \cdot f_2(x_{1k}, x_{\text{mask}}), & \text{если } x_{1k} > x_{\text{mask}}. \end{cases} \quad (90)$$

Выбор корректирующих функций f_1 и f_2 в (90) опирается на постулат:

8. Функция $f_1(\delta)$ должна учитывать уменьшение доступа окислителя под маску, вызванное сужением “канала окисла”, а функция f_2 — уменьшение концентрации окислителя под маской вдоль ее поверхности из-за процесса реакции части окислителя с материалом на границе окисел/материал.

Могут быть предложены следующие эмпирические формулы, реализующие этот постулат:

$$f_1(k) = f_1(\delta(k)) = (\delta(k)/\delta^*)^\mu, \quad (91)$$

$$f_2(k) = f_2(x_{1k}, x_{\text{mask}}) = \left(1 - \frac{x_{1k} - x_{\text{mask}}}{x_{1K} - x_{11}}\right)^\nu. \quad (92)$$

Здесь: $\delta(k)$ — локальная толщина окисла (85); δ^* — локальная толщина окисла в “горле канала окисла” (см. рис. 6); x_{1k} , x_{1K} , x_{11} , x_{mask} — абсциссы соответственно k -точки границы G_1^n , левого и правого края

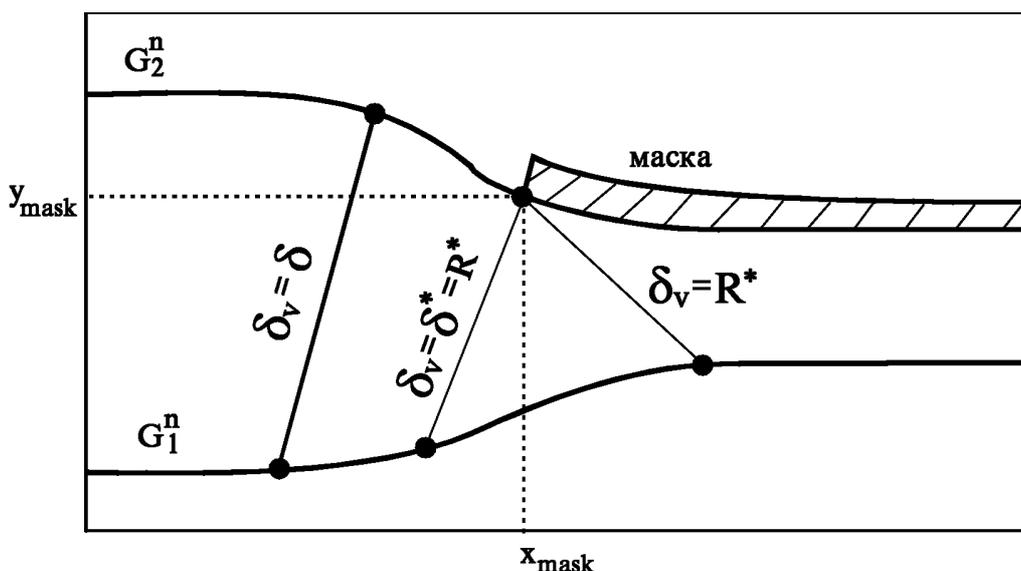


Рис. 6. Схема переключения расчета δ_v

границы G_1^n , угла маски. В (91) – (92) введены эмпирические константы μ и ν , позволяющие “регулировать доступ окислителя под маску”. При этом их увеличение в области положительных значений уменьшает, а уменьшение в области отрицательных значений — наоборот увеличивает “пропускную способность горла канала” и “запираания канала по длине” соответственно.

Отметим, что ветви (88)–(90) гладко сопрягаются в “горле канала”, где $\delta = \delta^*$, $x_{1k} = x_{\text{mask}}$, откуда вытекает $f_1^* = 1$, $f_2^* = 1$ и, следовательно, $\xi^* = 1$. Определить порядок сопряжения можно, взяв последовательно первую, вторую и т.д. производные от обеих ветвей (86). Ветви (86) имеют в широком диапазоне параметров второй порядок гладкости (непрерывны функция и ее первая производная), а при некотором подборе параметров можно обеспечить и третий порядок (непрерывность второй производной). Формулы (88) и (90) выписаны для “правостороннего” (см. рис. 6) расположения маски в расчетной области. Аналогично записываются алгоритмы для “левосторонней” и “центральной” позиции маски.

2.4. Сопряженные скорости, движение границ. Четыре постулата модели. Третьей главной позицией модели является определение скорости движения границы G_2^n по скорости движения границы G_1^n и перемещение границ на следующий временной слой, т.е. вычисление конфигураций G_1^{n+1} и G_2^{n+1} .

Здесь следует кратко остановиться на физике процесса. Движение границы G_2^{n+1} окисел/окислитель определяется движением границы G_1^{n+1} окисел/материал в связи с тем, что объемные плотности окисла и материала различаются, т.е. из единичного объема материала нарабатывается $1/\alpha$ объема окисла. Если $\alpha < 1$, то при окислении, т.е. движении G_1^{n+1} , возникает “лишний” объем, который приводит к “разбуханию” области окисла, т.е. к движению G_2^{n+1} . Заметим, что при $\alpha > 1$ (другими словами, в случае, когда плотность окисла больше плотности материала) происходило бы уменьшение общего объема “окисел + материал”, т.е. “проседание” пленки окисла вглубь материала (этот случай реализуется крайне редко, нас не интересует и нами не рассматривается). Попытка интегрального учета движения всей границы G_2^{n+1} в соответствии с движением всей границы G_1^{n+1} приводит к уравнению Вольтерра первого рода и некорректной задаче (см. раздел 1), что требует применения приближенных способов моделирования, и опирается в данной работе на три постулата.

9. Скорость движения каждой k -точки границы G_2^{n+1} однозначно определяется скоростью движения сопряженной ей k -точки границы G_1^{n+1} , и только ей.

Этот постулат неявно содержит в себе следующее физическое положение: “наработанное” в k -точке G_1^{n+1} из материала количество окисла частично “перебрасывается” в k -точку G_2^{n+1} . Из постулата 9 следуют и количественные характеристики. Пусть за время τ в k -точке G_1^{n+1} объем материала ΔSi перешел в окисел объемом ΔSiO_2 со связью между ними

$$\Delta Si = \alpha \cdot \Delta SiO_2. \tag{93}$$

С другой стороны, за это время движение k -точки G_1^{n+1} со скоростью V_{1k}^n обеспечивает превращение (в одномерном смысле) материала в окисел объемом $V_{1k}^n \cdot \tau$, а движение k -точки G_2^{n+1} со скоростью V_{2k}^n —

“наработку” его окисла объемом $V_{2k}^n \cdot \tau$. Таким образом,

$$\Delta \text{Si} = V_{1k}^n \cdot \tau, \quad (94)$$

$$\Delta \text{SiO}_2 = V_{1k}^n \cdot \tau + V_{2k}^n \cdot \tau. \quad (95)$$

Подставляя (94)–(95) в (93), имеем связь между скоростями в сопряженных точках G_1^n и G_2^n :

$$V_{2k}^n = \frac{1 - \alpha}{\alpha} \cdot V_{1k}^n. \quad (96)$$

В частности, для кремния (Si) $\alpha = 0,44$ и

$$V_{2k}^n = 1,27 \cdot V_{1k}^n. \quad (97)$$

Движение границы G_1^n опирается на постулат:

10. *Перемещение k -точки границы G_1^n осуществляется со скоростью V_{1k}^n по нормали к G_1^n в этой же точке в сторону материала.*

Вычислив нормаль к G_1^n в k -точке с координатами (x_{1k}^n, y_{1k}^n) , с привлечением, например, значений координат соседних $(k+1)$ - и $(k-1)$ -точек с той или иной аппроксимационной точностью, можно получить значение координат k -точки на новом временном слое:

$$(x_{1k}^n, y_{1k}^n) \xrightarrow{\text{нормаль}} (x_{1k}^{n+1}, y_{1k}^{n+1}). \quad (98)$$

В (98) использована символическая запись (элементарные, но громоздкие выкладки опущены).

Таким образом, из конфигурации границы G_{1k}^n получена ее новая конфигурация G_{1k}^{n+1} , $k \in [1, K]$. На этом операции с границей G_1 на данном временном шаге завершены.

Несколько иначе обстоит дело с границей G_2 . В принципе, зная значения V_{2k}^n в k -точках G_2^n , можно найти новое положение G_2^{n+1} , аналогично G_1^{n+1} . Однако теоретический анализ показал, а вычислительные эксперименты подтвердили необходимость следующего положения-постулата:

11. *Более эффективным является перемещение границы G_2 не как совокупности k -точек $G_{2k}^n \rightarrow G_{2k}^{n+1}$, а ее исходного описания, совокупности ℓ -точек $G_{2\ell}^n \rightarrow G_{2\ell}^{n+1}$.*

Для этого вдоль кривой G_2 производится переинтерполяция значений скорости V_{2k}^n (96) с k -сетки на ℓ -сетку

$$V_{2\ell}^n = \text{Int}(V_{2k}^n), \quad \ell \in [1, L], \quad k \in [1, K], \quad (99)$$

линейными, квадратичными или кубическими сплайнами, в зависимости от требований к точности расчета.

Далее применяется следующий постулат.

12. *Перемещение ℓ -точки границы $G_{2\ell}^n$ осуществляется со скоростью $V_{2\ell}^n$ по нормали к G_2^n в этой точке в сторону окислителя.*

Вычислив нормаль к G_2^n в ℓ -точке с координатами $(x_{2\ell}^n, y_{2\ell}^n)$ с привлечением, например, значений координат соседних $(\ell+1)$ - и $(\ell-1)$ -точек с той или иной аппроксимационной точностью, можно получить значения координат ℓ -точки на новом временном слое:

$$(x_{2\ell}^n, y_{2\ell}^n) \xrightarrow{\text{нормаль}} (x_{2\ell}^{n+1}, y_{2\ell}^{n+1}). \quad (100)$$

В (100) использована символическая запись (элементарные, но громоздкие выкладки опущены).

Таким образом, из конфигурации границы $G_{2\ell}^n$ получена ее новая конфигурация $G_{2\ell}^{n+1}$, $\ell \in [1, L]$. На этом операции с границей G_2 на данном временном шаге завершены.

2.6. Подготовка к операциям на следующем временном шаге. Реорганизация описания границ. После завершения операций по определению конфигурации границ G_1^{n+1} и G_2^{n+1} начинается дальнейший цикл вычислений программного комплекса расчета полной задачи создания полупроводниковых материалов с заданными свойствами. В подобласти дислокации нового окисла между границами G_1^n и G_1^{n+1} производится расчет процесса сегрегации легирующих примесей [7], в новой подобласти материала с учетом прошедшей сегрегации выполняется расчет диффузии (перераспределения) этих примесей; в зависимости от постановки задачи возможен учет некоторых других физических факторов.

После этого наступает этап очередного расчета движения границ $(G_1^{n+1}, G_2^{n+1}) \rightarrow (G_1^{n+2}, G_2^{n+2})$. Однако полученная новая информация требует возвращения к анализу G_1^{n+1} и G_2^{n+1} для подготовки нового расчетного цикла с целью повышения его точности.

13. Перед началом очередного цикла проводится реорганизация описания границ G_1 и G_2 с новым количеством и новой расстановкой точек (101)–(102):

$$G_{1k}^{n+1}, \quad k \in [1, K], \quad \tilde{G}_{1k'}^{n+1}, \quad k' \in [1, K'], \quad (101)$$

$$G_{2\ell}^{n+1}, \quad \ell \in [1, L], \quad \tilde{G}_{2\ell'}^{n+1}, \quad \ell' \in [1, L']. \quad (102)$$

Расстановка новых k' -точек на границе G_1 и ℓ' -точек на границе G_2 основана на сгущении (стягивании) узлов к участкам границ G_1 и G_2 с большой кривизной и опирается на постулат модели:

14. *Переинтерполяция границ производится так, что произведение локального шага узлов сетки $\Delta s_{1k'}$ и $\Delta s_{1\ell'}$ на значение локальных кривизн $\aleph_{1k'}$ и $\aleph_{2\ell'}$ соответствующих границ \tilde{G}_1 и \tilde{G}_2 есть величина постоянная:*

$$\Delta s_{1k'}^{n+1} \cdot \aleph_{1k'}^{n+1} = \text{const}_1^{n+1}, \quad k' \in [1, K'], \quad (103)$$

$$\Delta s_{2\ell'}^{n+1} \cdot \aleph_{2\ell'}^{n+1} = \text{const}_2^{n+1}, \quad \ell' \in [1, L']. \quad (104)$$

Из (103)–(104) следует, что чем больше кривизна участка границы, тем ближе друг к другу дислоцируются k' - и ℓ' -точки, составляющие эти границы. Формулы для \aleph и Δs могут быть выписаны с разной аппроксимационной точностью и здесь не приводятся из-за громоздкости. Количество точек K' и L' , задающих кривые $\tilde{G}_{1k'}^{n+1}$ и $\tilde{G}_{2\ell'}^{n+1}$ на $(n + 1)$ -м временном шаге, скорректированные перед началом операций на $(n + 2)$ -м шаге, могут быть определены из постулата:

15. *Описание кривых G_1 и G_2 производится с равномерной точностью на каждом временном шаге.*

Этот постулат формализуется в виде равенства констант, входящих в (103) и (104):

$$\text{const}_1^{n+1} = \text{const}_1^n, \quad (105)$$

$$\text{const}_2^{n+1} = \text{const}_2^n. \quad (106)$$

Заметим, что условия равномерности (103)–(104) могут быть расширены; в частности, дополнены учетом изменения длин границ G_1 и G_2 .

2.7. Заключение к разделу. Таким образом, представляемый алгоритм 2D моделирования динамики роста пленки окисла в полупроводниковых подложках на основе геометрического подхода и метода Дила–Гроува, учитывающего диффузионные процессы окислителя в окисле, его проникновение через границу окислитель/окисел и взаимодействие с материалом на границе окисел/материал, опирается на следующие 15 постулатов и положений.

1. Однозначная сопряженность точек границ G_1 и G_2 .
2. Построение точки границы G_2 , сопряженной точке границы G_1 , как минимума расстояния между границами.
3. Правило однозначности выбора сопряженных точек.
4. Сопряжение крайних точек границ.
5. Обобщенная локальная толщина пленки окисла.
6. Физическая модель Дила–Гроува.
7. Соответствие параметра Дила–Гроува обобщенной локальной толщине на свободном участке границы окислитель/окисел и на участке под защитной маской.
8. Коррекция закона Дила–Гроува в пленке окисла под защитной маской.
9. Однозначность связи скоростей движения сопряженных точек границ G_1 и G_2 .
10. Скорость движения точек границы G_1 и ее направление.
11. Переинтерполяция скоростей движения границы G_2 от сопряженных точек на исходные.
12. Скорость движения точек границы G_2 и ее направление.
13. Реорганизация описания границ G_1 и G_2 перед началом нового цикла.
14. Равномерность описания границ G_1 и G_2 на каждом отдельном временном шаге.
15. Равномерность описания границ на всех временных шагах.

Численные эксперименты показали устойчивость, хорошую точность и безотказное функционирование алгоритма в достаточно широком диапазоне параметров.

3. Вычислительные эксперименты. После отработки всех элементов метода и реализующего его компьютерного алгоритма на большом спектре модельных задач, завершающий цикл вычислительных экспериментов проводился на 2D задаче, наиболее часто встречающейся как сегмент в технологиях получения полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами.

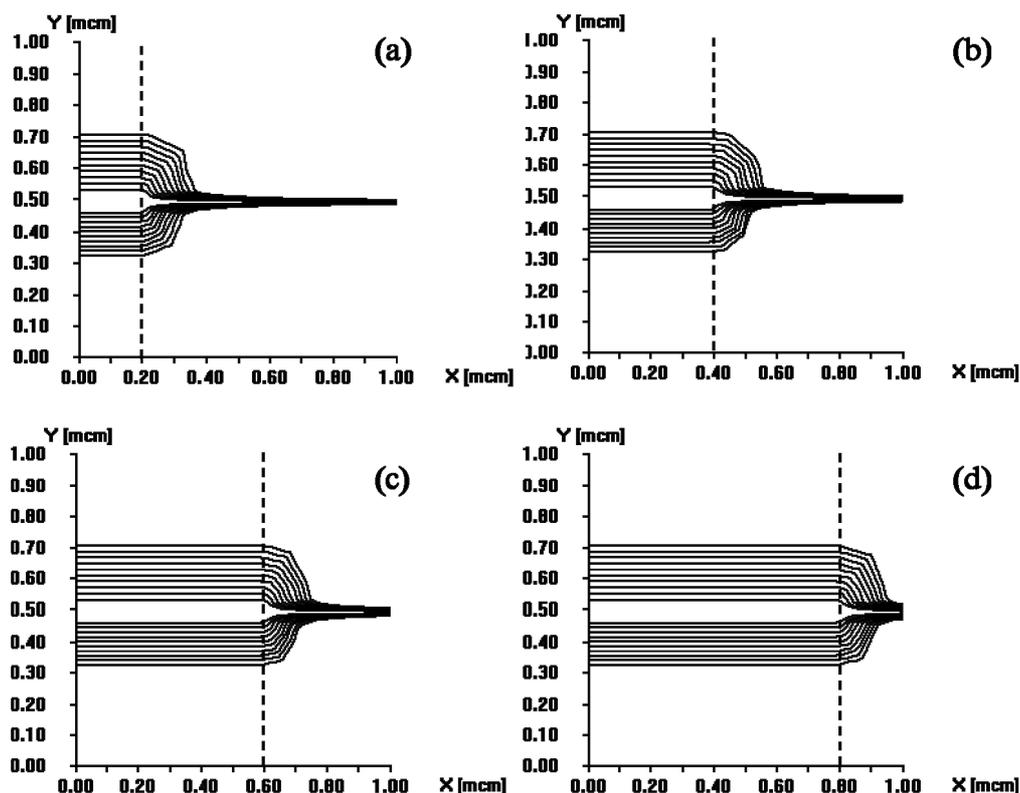


Рис. 7. Цикл расчетов: фиксированные $T = 1100^\circ \text{C}$, $P_0 = 0,9$ атм и вариации $x_{\text{mask}} = 0,2$ (а), $0,4$ (б), $0,6$ (с) и $0,8$ мкм (д)

3.1. Постановка задачи. Задача представляет собой частный случай общей задачи, на которую ориентирован метод (см. п. 1.1). Начальная (в момент времени $t = 0$) конфигурация области проведения расчета есть прямоугольник, в котором расположены три прямоугольные подобласти:

- 1) материала $R_1 = \{[0, 1 \text{ мкм}] \times [0, 0,5 \text{ мкм}]\}$,
- 2) окисла $R_2 = \{[0, 1 \text{ мкм}] \times [0,5 \text{ мкм}, 0,5 \text{ мкм}]\}$,
- 3) окислителя $R_0 = \{[0, 1 \text{ мкм}] \times [0,5 \text{ мкм}, 1 \text{ мкм}]\}$.

Часть поверхности материала закрыта защитной маской, препятствующей контакту и взаимодействию окислителя с веществом, расположенной в подобласти $\{[x_{\text{mask}}, 1 \text{ мкм}] \times [0,5 \text{ мкм}, 0,5 \text{ мкм}]\}$. Таким образом, в начальный момент времени подобласти окислителя и материала занимают по половине области каждая. Между ними расположена бесконечно тонкая пленка окисла, закрытая с правой стороны границы материала маской, левая граница (x_{mask}) которой варьировалась от $0,2$ до $0,8$ мкм. В качестве материала принимается кремний ($\text{Si} < 110 >$), в качестве окислителя — пары воды (H_2O). Варьировались давление окислителя P_0 и температура процесса T . Электрохимические константы и параметры, входящие в модель, взяты из [1, 2].

3.2. Параметрическая верификация метода. Топология выбранной для эксперимента задачи определяет динамику роста пленки окисла, в математическом смысле — эволюцию границ G_1 и G_2 во времени, приводящую к образованию конфигурации так называемого «птичьего клюва». В квазиодномерных (псевдодвумерных) моделях [1–3] эволюция этой конфигурации, фактически заданной в виде $F(x, y) = f_1(x) \cdot f_2(y)$, определяется эволюцией $U_0(t)$ в (29) — толщины окисла вдали от маски, и коррекцией профиля границы G_1 по (30). Отметим, что эволюция профиля G_2 в этих моделях вообще не определяется.

Приводимые ниже верификационные циклы расчетов представляют результаты применения разработанной модели к задаче окисления ($\text{Si} < 110 >$) окислителем H_2O , что ограничивает параметрическое пространство задачи тремя входными физическими параметрами x_{mask} , P_0 и T . Для анализа влияния этих параметров применяется схема расчета вариации одного из них при фиксации двух других. На всех приводимых далее графиках используется одна и та же стандартизованная форма представления информации: динамика эволюции границ SiO_2/Si (нижние наборы кривых) и $\text{SiO}_2/\text{H}_2\text{O}$ (верхние наборы кривых) в моменты времени от $t = 0$ (внутреннее положение границ) до $t = 50$ мин (внешнее положение) реального

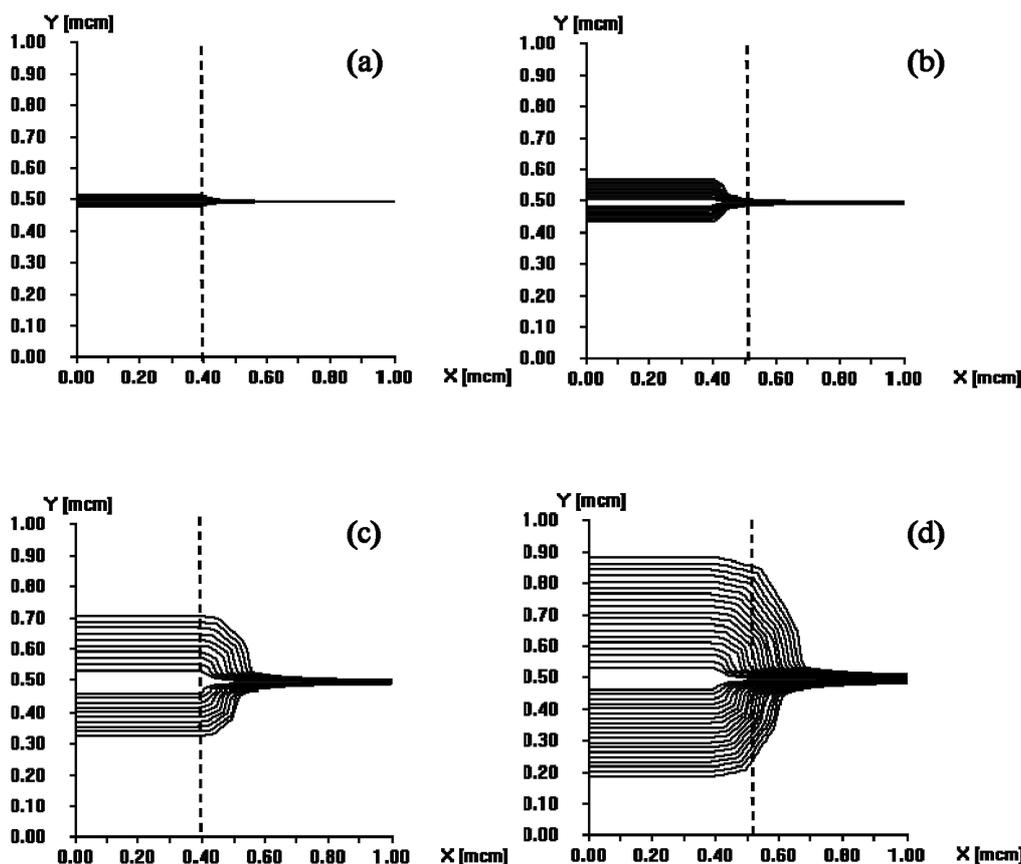


Рис. 8. Цикл расчетов: фиксированные $x_{\text{mask}} = 0,4$ мкм, $P_0 = 0,9$ атм и вариации $T = 900$ (a), 1000 (b), 1100 (c) и 1200°C (d)

моделируемого физического процесса с информационным шагом 5 мин, если это не оговаривается особо. Заметим, что шаг расчетного времени, естественно, меньше, иногда существенно, информационного шага и зависит от конкретных значений набора определяющих параметров.

3.3. Вариация положения защитной маски. Данный пункт (см. рис. 7) представляет результаты расчетов задачи при фиксированных $P_0 = 0,9$ атм, $T = 1100^\circ\text{C}$ и вариации начального положения края защитной маски $x_{\text{mask}} = 0,2$ (a), $0,4$ (b), $0,6$ (c) и $0,8$ (d) мкм, отмеченные на всех рисунках штриховой линией. Главной целью этого цикла являлась верификация геометрических параметров, поскольку сам метод существенно опирается на геометрию кривых в пространстве с отслеживанием степени точности их эволюционных изменений.

Цикл расчетов показывает стадии развития из прямоугольной начальной конфигурации “птичьего клюва” [3]. Положение края маски мало влияет на динамику границ вдали от нее (левая часть расчетной области). Над собственно маской движение границ, в том числе подъем маски вверх границей G_2 , существенно определяется значением x_{mask} — при его уменьшении, т.е. удлинении маски, увеличивается и зона “острия птичьего клюва” в правой части расчетной области. Рис. 7d дает возможность оценить степень влияния краевых условий на структуру решения — весьма небольшую, во всяком случае, для данной постановки задачи.

Сравнение с расчетом по аналитической формуле “птичьего клюва” (30) позволяет сделать вывод о практически нулевом отличии результатов в свободной области и отличии непосредственно в переходной области порядка 20%. Напомним, что метод “птичьего клюва” не моделирует динамику границ по отдельности — лишь эволюцию толщины пленки окисла (по этому параметру и проводилось сравнение), а попытка моделировать и границы окисла приводит к некорректной задаче и интегральному уравнению Вольтерра первого рода. Возможности сравнения результатов с решениями, полученными по моделям [4–6] ограничены в существенной степени точностью “скальвания” данных с графиков. Можно констатировать лишь, что во всяком случае принципиальных отличий не наблюдается — отклонения не превышают 50% в худшем случае (по градиентам наклонов кривых в переходной области). Хотя, на наш взгляд, более точное совпадение результатов с [4–6] было бы, наоборот, “плохой рекомендацией” представляемому

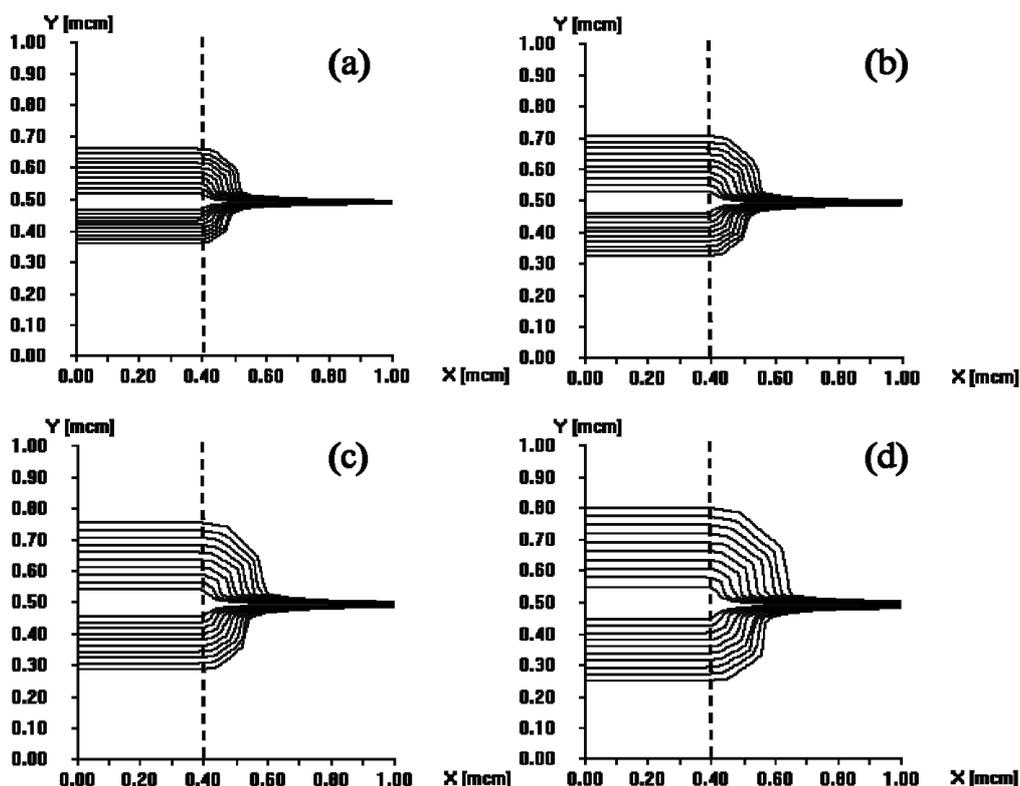


Рис. 9. Цикл расчетов: фиксированные $x_{\text{mask}} = 0,4$ мкм, $T = 1100^\circ\text{C}$ и вариации $P_0 = 0,7$ (a), $0,9$ (b), $1,1$ (c) и $1,3$ атм (d)

методу.

3.4. Вариация температуры процесса. Данный цикл (см. рис. 8) представляет результаты расчетов при фиксированных значениях $x_{\text{mask}} = 0,4$ мкм, $P_0 = 0,9$ атм и вариации температуры процесса $T = 900$ (a), 1000 (b), 1100 (c) и 1200°C (d). В последнем случае был вдвое уменьшен шаг расчета, число проведенных шагов увеличено вдвое, т.е. общее физическое время процесса осталось неизменным.

Сравнение рис. 8, a, b, c, d дает возможность сделать вывод о весьма существенном влиянии T на протекание процесса окисления. При $T = 900^\circ\text{C}$ процесс становится настолько медленным, что за отведенный отрезок времени рост окисла весьма невелик; этот рост представляется на рис. 8 a, вследствие плотного расположения линий, одной сплошной “залитой” подобластью, хотя структуры “птичьего клюва” уже просматриваются. Увеличение T всего на 25 %, от 900 до 1200°C , кардинально меняют скорость процесса и, соответственно, нарастание толщины окисла и динамику его границ.

3.5. Вариация давления окислителя. Этот цикл (см. рис. 9) представляет результаты расчетов при фиксированных значениях $x_{\text{mask}} = 0,4$ мкм, $T = 1100^\circ\text{C}$ и вариации давления окислителя $P_0 = 0,7$ (a), $0,9$ (b), $1,1$ (c) и $1,3$ атм (d). Кратко анализируя полученные данные, укажем лишь, что зависимость скорости роста толщины окисла от давления в свободной области вдали от маски линейная, соответственно положения границ окисла в один и тот же момент времени геометрически подобны при различных P_0 .

Краткое изложение полученных вычислительных результатов, фактически, их демонстрационное представление, связано с тем, что основной целью настоящей работы является подробное описание методологии и алгоритма решения физико-химической проблемы роста пленки окисла. В последующем цикле статей будут представлены и подробно обсуждены результаты расчетов ряда задач.

Заключение. Приведенный выше теоретический метод и вычислительный алгоритм расчета задач окисления в данной постановке показал приемлемую точность и безотказность функционирования в широком диапазоне определяющих параметров и является одним из аспектов компьютерного конструирования полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Deal B.E., Grove A.S. General relationship for the thermal oxidation of silicon // J. Appl. Phys. 1965. **36**. 3770.

2. *Razon R.R., Lie L.N., Deal B.E.* Kinetics of high pressure oxidation on silicon in pirogenic steam // J. Electrochem. Soc. 1982. **120**, N 1. 2828.
3. *Guillemot N., Pananakakis G., Chenevier P.* A new analitical model of "Bird's Beak" // IEEE Trans. Elec. Dev. 1987. **ED-34**, N 5. 1033.
4. *Chin D., Oh S.Y., Hu S.M., Dutton R.W., Moll J.L.* Two-dimensional oxidation // IEEE Trans. Elec. Dev. 1983. **ED-30**, N 4. 744.
5. *Masetti G., Severi M., Solmi S.* Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus- and boron-doped silicon // IEEE Trans. Elec. Dev. 1983. **ED-30**, N 7. 764.
6. *Senez V., Ferreiza P., Vaccus B.* Two-dimensional simulation of local oxidation of silicon: calibrated viscoelastic flow analysis // IEEE Trans. Elec. Dev. 1996. **43**, N 5. 720.
7. *Тарнавский Г.А., Шнак С.И., Обрект М.С.* Численное моделирование и компьютерный алгоритм процесса сегрегации легирующих примесей на границе волны окисления в полупроводниковых подложках // Вычислительные методы и программирование. 2001. **2**, № 1. 16–30 (электронный адрес журнала: <http://num-meth.srcc.msu.su>).

Поступила в редакцию
08.05.2001
