

Ein Simulationsmodell für die Layoutabhängigkeit der Wachstumsrate bei der selektiven Siliziumepitaxie

Ronny Schomacker*, Dietmar Temmler[◦],
Rainer G. Spallek*, Thomas Preußner*, Torsten Rönsch*
{ronny.schomacker, dietmar.temmler}@infineon.com,
{rgs, preusser, roensch}@ite.inf.tu-dresden.de

*Technische Universität Dresden, Institut für Technische Informatik
[◦]Infineon Technologies Dresden

Kurzfassung

In dieser Arbeit wird ein bestehendes Simulationsmodell für die selektive Siliziumepitaxie [5] um den Einfluss des Loading-Effekts erweitert. Der Loading-Effekt ist die Veränderung der Wachstumsrate der Epitaxie aufgrund eines sich ändernden Layouts. Das ursprüngliche Modell folgt dem Arrhenius-Ansatz und beschreibt die Abhängigkeit der Wachstumsrate von der Prozesstemperatur und dem Druck. Für die Erweiterung um den Einfluss des Loading-Effekts wurden Experimente durchgeführt, die erstens das Wachstumsverhalten auf eine sich ändernde Strukturanordnung auf Si-Wafern und zweitens die Verkleinerung der Strukturgrößen untersuchten. Die Auswertung der Messreihen, die Modellierung der epitaktischen Wachstumsrate und der Vergleich zwischen Messwerten und Simulationsergebnissen werden detailliert erläutert.

1 Einleitung

In der Halbleiterindustrie erfährt die selektive Siliziumepitaxie eine zunehmend größer werdende Beachtung. So wird sie heute schon als ein Teilprozess bei der Herstellung von Transistoren genutzt (ESD-Konzept – Elevated-Source-Drain) und soll zukünftig auch im Trench-Kondensator einer DRAM-Speicherzelle eingesetzt werden (EBS-Konzept – Epi-Buried-Strap). Das hier verfolgte Ziel ist die Verschiebung des Auswahltransistors dieser Zelle in die Richtung DT (Deep Trench). Dadurch wird Platz auf der Waferoberfläche gewonnen, um die Integrationsdichte auf den Chips erhöhen zu können. Beide Konzepte sind schematisch in Abbildung 1 dargestellt.

Mit der zunehmenden Nutzung der selektiven Epitaxie in Bauelementen wächst auch das Interesse an einer angemessenen Modellierung und Simulation. Das bereits in [5] vorgestellte Geradenmodell soll hier um weitere prozessbestimmende Parameter ergänzt werden, mit dem Ziel, eine realitätsnahe Modellierung der epitaktischen Wachstumsrate zu ermöglichen.

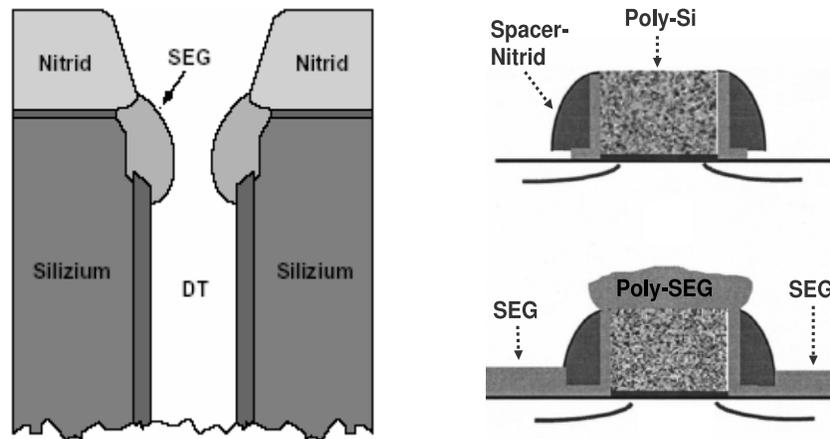


Abbildung 1: Selektive Epitaxie in Bauelementen – links im Kondensator: Epi-Buried-Strap-Konzept, rechts im Transistor: Elevated-Source-Drain-Konzept

2 Physikalische Grundlagen

Epitaxie ist das monokristalline Aufwachsen einer Schicht auf einem monokristallinen Substrat. Von selektiver Epitaxie (SEG – Selective Epitaxial Growth) spricht man, wenn dieses Wachstum nur in ausgewählten Bereichen der Waferoberfläche stattfindet. Bei der Si-Epitaxie bedeutet dies, dass das Silizium nur auf den Flächen des freigelegten Siliziums abgeschieden wird, nicht auf den z.B. durch SiO_2 oder Si_3N_4 maskierten Bereichen.

Dem hier genutzten Dichlorsilan-Prozess zur Gewinnung der SEG liegen zwei chemische Gleichgewichtsreaktionen zugrunde:



Dabei bezeichnen (g) und (f) den Aggregatzustand (g–gasförmig, f–fest). Die effektive Wachstumsrate resultiert aus dem Verhältnis der Geschwindigkeiten der Hin- und Rückreaktion dieses chemischen Vorgangs.

Der Dichlorsilan-Prozess gehört zu den Verfahren der chemischen Gasphasenabscheidung (CVD – Chemical Vapor Deposition). Die Siliziumschicht entsteht dabei durch eine chemische Reaktion von gasförmigen Ausgangsstoffen (SiH_2Cl_2 , HCl), die in einem inerten Trägergas (H_2) in den CVD-Reaktor geleitet werden. Das gewünschte Produkt (Si) fällt dabei als Feststoff auf dem Substrat an. Entstehende Nebenprodukte (HCl) desorbieren wieder vom Wafer in die Gasphase. Das Dichlorsilan (SiH_2Cl_2 , auch DCS) dient hier als Siliziumquelle, HCl wird zur Steuerung des Grades der Selektivität genutzt.

Aufgrund der starken Abhängigkeit der Aufwachsrate von der kristallographischen Orientierung der Oberfläche kommt es zum Phänomen der Facettierung. Facetten bilden sich beim Aufwachsen entsprechend den bevorzugten Netzebenen heraus. Wie in Abbildung 2

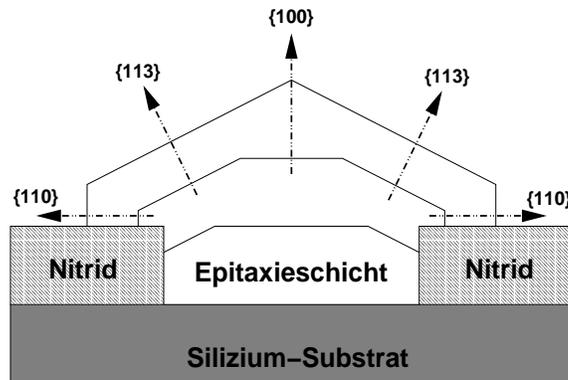


Abbildung 2: Facettierung bei der Si-Epitaxie

schematisch dargestellt, sind im hier beschriebenen Prozess die $\{113\}$ - und $\{110\}$ -Facetten besonders stark ausgeprägt.

Bei der epitaktischen Materialabscheidung über strukturierten Substraten sind sogenannte Loading-Effekte beobachtbar. Damit bezeichnet man die Abhängigkeit der Wachstumsrate vom Verhältnis S der Fläche des freigelegten Siliziums zur Fläche der Maskierungsschicht. Es wird zwischen dem globalen und dem lokalen Einfluss unterschieden:

- Der GLOBALE LOADING-EFFEKT ist die Abhängigkeit der Wachstumsrate von diesem Verhältnis S auf dem gesamten Wafer.
- Der LOKALE LOADING-EFFEKT beschreibt die direkte Wachstumsratenabhängigkeit der Epitaxie von der Fenstergröße des freigelegten Siliziums [1].

Allgemein gilt die Aussage, dass die Wachstumsrate der Epitaxie mit abnehmendem Verhältnis S , d.h. mit weniger freier Siliziumfläche, zunimmt [3, 4]. Laut [1] ist im Gegensatz zum globalen Loading-Effekt der lokale eher vernachlässigbar. Die prozessbestimmenden Epitaxieparameter Temperatur, Druck und HCl-Anteil in der Gasphase haben entscheidenden Anteil daran, mit welcher Intensität der Loading-Effekt auftritt.

3 Versuchsreihen

Die Experimente wurden auf 200-mm-Wafern in der Single-Wafer-Epitaxieanlage EPI Centura durchgeführt. Die Scheiben wurden vorbereitend mit einer Si_3N_4 -Hartmaske mit verschiedenen Layouts auf mehreren Technologiestufen (140- .. 90-nm-Technologie) versehen. Durch die gewählten Layouts unterschieden sich erstens die Anordnung der Siliziumfenster (Löcher in der Si_3N_4 -Maske, siehe Abbildung 3) und zweitens deren Strukturgröße. Die freigelegte Siliziumfläche dieser Fenster war dabei über den gesamten Wafer hinweg konstant. Die anschließenden Epitaxieuntersuchungen wurden mit den variierten

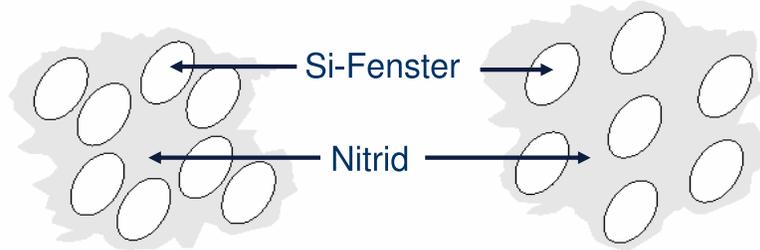


Abbildung 3: Layouttypen – variierte Anordnung der Si-Fenster

Eingangsgrößen Prozesstemperatur (850 .. 900 °C), Druck (15 .. 50 Torr) und dem Verhältnis aus DCS-Gasfluss (0,26 .. 0,10 slm [Standardliter pro Minute]) zu HCl-Gasfluss (0,18 .. 0,30 slm) durchgeführt.

Als Ergebnisse der Untersuchungen wurde eine exponentielle Abhängigkeit der Wachstumsrate von der Temperatur, eine lineare vom Druck und eine lineare vom DCS/HCl-Verhältnis festgestellt. Die Layout-Untersuchungen zeigten, dass die reine Umverteilung der Siliziumfenster auf dem Wafer (Abbildung 3), ohne Variation des Flächenverhältnisses S (Si/Si₃N₄), keine Veränderung des Wachstumsverhaltens der Epitaxie zur Folge hat. Beim Wechsel der verwendeten Technologiestufen, d.h. bei schrittweiser Verkleinerung der Strukturgrößen, konnte dagegen eine Zunahme der Wachstumsrate beobachtet werden, und zwar für jede Kombination aus Prozesstemperatur und Druck. Diese strukturelle Abhängigkeit wurde als globaler Loading-Effekt interpretiert.

4 Simulationsmodell

In [5] wurde ein Modell der Epitaxie vorgestellt, welches ausgehend von der Grundorientierung des Siliziumwafers die Ausprägungen der einzelnen Facetten während des Wachstums berücksichtigt. Ausgangspunkt ist die Arrhenius-Gleichung:

$$R = R(T) = A \cdot e^{-\frac{E_A}{k \cdot (T+273,15)}} \quad (2)$$

Dabei sind R die Epitaxiewachstumsrate, A die Aktivierungskonstante, E_A die Aktivierungsenergie, k die Boltzmannkonstante und T die Prozesstemperatur in Grad Celsius.

Das Modell sollte nun um weitere prozessbestimmende Parameter (des Dichlorsilan-Prozesses) ergänzt werden. Dazu wurde jede Einflussgröße Schritt für Schritt als Korrekturfaktor in die Ausgangsgleichung 2 eingefügt, so dass am Ende die Gleichung folgende Form hatte:

$$R = R(T, P, G, S) = A \cdot e^{-\frac{E_A}{k \cdot (T+273,15)}} \cdot f_p(P) \cdot f_g(G) \cdot f_s(S) \quad (3)$$

Hier bezeichnen die Funktionen f_p die Ratenabhängigkeit vom Gesamtdruck P , f_g die vom Gasflussverhältnis G (DCS in slm/HCl in slm) und f_s die vom Flächenverhältnis S (Silizium/Maskierungsschicht).

Die Ratenabhängigkeit vom während der Epitaxie vorherrschenden Gesamtdruck hatte einen linearen Charakter. Die Funktion $f_p(P)$ des Drucks P (in Torr) wurde durch Ratenverhältnisse ermittelt, das heißt, zu jeder Rate $R(T, P)$ wurde das Verhältnis zur Rate $R(T, 15 \text{ Torr})$ gebildet. Für die Druckfunktion ergab sich somit:

$$f_p(P) = 0,0612 \cdot P \quad (4)$$

Auch die Abhängigkeit der Wachstumsrate vom Gasflussverhältnis G (DCS-Gasfluss in slm/HCl-Gasfluss in slm) hatte einen linearen Charakter, allerdings übte die Temperatur Einfluss auf den Anstieg dieser Funktion $f_g(G)$ aus. Folglich wurden der Anstieg m und das Absolutglied n von $f_g(G)$ als Funktionen der Temperatur interpretiert. Analog zur Druckabhängigkeit $f_p(P)$ wurde $f_g(G)$ auch mittels eines Ratenverhältnisses gebildet. Bezogen auf $G = 0,7$ (DCS/HCl=0,18 slm/0,26 slm), ergibt sich für $f_g(G)$:

$$f_g(G) = m(T) \cdot G + n(T) \quad (5)$$

$$\text{mit: } m(T) = -0,0377 \cdot T + 35,911 \quad (6)$$

$$\text{und: } n(T) = 0,0264 \cdot T - 24,138 \quad (7)$$

Nachdem die Parameter Druck und Gasflussverhältnis im Modell berücksichtigt wurden, sollte nun auch der globale Loading-Effekt mit einbezogen werden. Der Parameterraum für diese Experimente erstreckte sich über folgende Eckdaten: Temperatur ($T=850 \dots 900 \text{ }^\circ\text{C}$), Druck ($p=15 \dots 50 \text{ Torr}$), Layout (140- .. 90-nm-Technologie). Die Funktion des Loading-Effekts $f_s(S)$ konnte als eine lineare Abhängigkeit beobachtet werden. Es wurden immer Messwerte der Epitaxiewachstumsrate verglichen, bei denen sich nur das Verhältnis S unterschied, nicht die Kombination der Prozessparameter Temperatur und Druck. Bei jedem dieser Wertepaare trat eine Wachstumsratenzunahme mit abnehmendem S auf. Die Funktion $f_s(S)$ wurde wieder über Ratenverhältnisse bezogen auf das Flächenverhältnis S der 140-nm-Technologie ($S = 0,2029$) aufgestellt.

$$f_s(S) = -2,7535 \cdot S + 1,5587 \quad (8)$$

Das Simulationsmodell nach Gleichung 3 beinhaltete alle untersuchten Parameter und konnte nun mit den experimentell erzielten Werten verglichen werden. Dabei zeigte sich eine Abweichung von ca. 10 %. In diesem Bereich unterschieden sich jedoch auch die ermittelten Daten der experimentellen Untersuchungen der Wachstumsrate, so dass man diese Abweichung auf die Prozessschwankungen der Epitaxie zurückführen kann.

Bei allen experimentellen Ergebnissen wurde während der Epitaxie die Ausbildung der $\{100\}$ -, $\{110\}$ - und $\{113\}$ -Facetten beobachtet. Das Wachstumsverhalten (d.h. das Ratenverhältnis $V = \frac{R_{xyz}}{R_{100}}$ der betrachteten Facette xyz bezüglich der Wachstumsrate der 100-Facette) änderte sich auch bei der Verringerung der Strukturmaße nicht.

Zum Abschluss zeigt Abbildung 4 einen Vergleich einer Simulation mit einem entsprechenden Experiment. Das entwickelte Modell wurde in dieser Form im 2D-Simulator DUP-SIM implementiert und ist für die Nachbildung der Epitaxie geeignet.

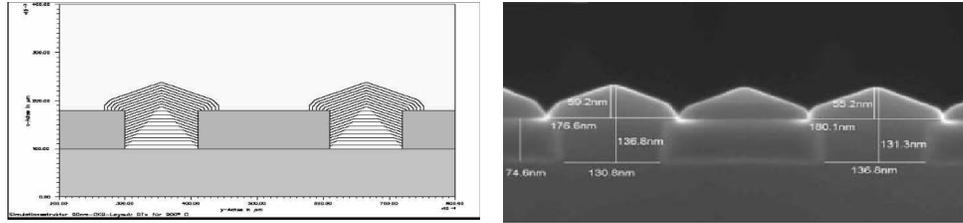


Abbildung 4: Vergleich Simulation vs. Experiment – Epitaxie bei 900 °C, 15 Torr, 90 nm-Layout

5 Zusammenfassung

Das bestehende Geradenmodell wurde durch weitere Untersuchungen um die Prozessparameter Druck, Gasflussverhältnis und Layout (bzw. Si/Maskierungsschicht-Flächenverhältnis) erweitert. Diese Parameter sowie deren Einfluss auf die Wachstumsrate wurden im einzelnen vorgestellt und analysiert. Zum Schluss erfolgte die Validierung der Simulationsergebnisse mit den experimentell erzielten Werten.

Literatur

- [1] Bodnar, S.; de Barrenger, E.; Boullion, P.; Mouis, M.; Skotnicki, T.; Rogolini, J.L.: Selective Si and SiGe epitaxial heterostructures grown using an industrial low-pressure chemical vapor deposition module. *Journal of Vacuum Science and Technology* (1997).
- [2] Kongetira, P.; Neudeck, G.W.; Takoudis, C.G.: Expression for the growth rate of selective epitaxial growth of silicon using dichlorosilane, hydrogen chloride and hydrogen in a low pressure chemical vapor deposition pancake reactor. *American Vacuum Society* (1997).
- [3] Menon, C.; Bentzen, A.; Radamson, H.H.: Loading effect in SiGe layers grown by dichlorosilane- and silane-based epitaxy. *Journal of Applied Physics* (2001).
- [4] Ribot, P.; Dutartre, D.: Low-temperature selective epitaxy of silicon with chlorinated chemistry by RTCVD. *Materials Science and Engineering* (2002), S.306–309.
- [5] Ulbrich, S.; Spallek, R.G.; Temmler, D.; Preußner, T.; Rönsch, T.: Ein Simulationsmodell für die selektive Epitaxie im 2D-Prozesssimulator DUPSIM. *Symposium Simulationstechnik (ASIM 2003, Magdeburg)* (2003), S.509–514.