

УДК 621.382.049.77+548.526

ФОРМИРОВАНИЕ ЯМОК НА ПОВЕРХНОСТИ Si (111) ПРИ ТЕРМООБРАБОТКЕ СТРУКТУР Si/Al

Л.П. ХОДАРИНА¹, В.А. ЗЕЛЕНИН¹, Л.И. ГУРСКИЙ²

¹Физико-технический институт НАН Беларуси
Купревича, 10, Минск, Беларусь

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровки, 6, Минск, 220013, Беларусь

Поступила в редакцию 6 ноября 2008

The paper discusses the mechanisms responsible for formation of dimples on the Si (111) surface during heat treatment of Si/Al structures. The determination is made of the major regularities of their formation in actual structures.

Введение

В связи с постоянным уменьшением размеров элементов кремниевых ИС и приближением их к фундаментальным пределам требуется дальнейшее углубление теоретических представлений о строении и свойствах поверхностей, о протекающих на поверхностях и на границах раздела многослойных структур твердофазных реакциях и диффузионных процессах.

Снижение размеров контактных окон и глубины залегания *p-n*-переходов накладывает жесткие ограничения на процессы, протекающие при термообработке и токовых нагрузках на границе раздела контактов кремний–металл. При температурах 700–820 К на границе раздела структур Si/Al и Si/SiO₂/Al протекают процессы взаимодиффузии атомов кремния и алюминия, приводящие к образованию ямок на поверхности кремниевой пластины. При термообработке контактов кремний–переходный металл формируются силициды соответствующего металла с перемещением границы раздела в глубь кремниевой подложки. Как в том, так и в другом случае необходим контроль температуры и длительности термообработки из-за возможности короткого замыкания мелкозалегających *p-n*-переходов.

Исследование процессов взаимодиффузии атомов в структурах Si/Al и Si/SiO₂/Al, изготовленных на кремниевых монокристаллических пластинах ориентации (111), (001) и (110), показало существенное влияние кристаллографических факторов на скорость протекания процессов и конфигурацию образующихся при этом ямок [1]. Однако физическая природа формирования ямок остается малоисследованной.

В статье рассмотрены механизмы процесса формирования ямок на поверхности Si (111) в результате взаимодиффузии атомов при термообработке структур Si/Al.

Формирование ямок на поверхности (111) кремния в структурах Si/Al

На основании известных представлений о строении идеальной (111) поверхности монокристалла кремния, о распределении и связях поверхностных атомов с кристаллической решеткой [2] была разработана модель процесса формирования ямок на поверхности Si (111). В основу модели положено то обстоятельство, что при удалении с идеальной поверхности монокристалла одного или нескольких атомов часть оказавшихся на вновь образованной поверхности атомов, вследствие обрыва связей с удаленными, может быть менее прочно связана с решеткой.

На идеальной поверхности (111) кремниевой пластины все поверхностные атомы связаны с атомами приповерхностного слоя тремя ковалентными связями (рис. 1,а). При удалении атома 1 формируется ямка, которую можно изобразить контурами, показанными на рис. 1,б (здесь и далее для наглядности атомы нижних слоев условно показаны уменьшенными, а атомы поверхности ямки, не попавшие в плоскость сечения, — полупрозрачными). Эта ямка может быть названа стабильной, поскольку все оставшиеся атомы, принадлежащие ее поверхности, имеют не менее трех связей с решеткой.

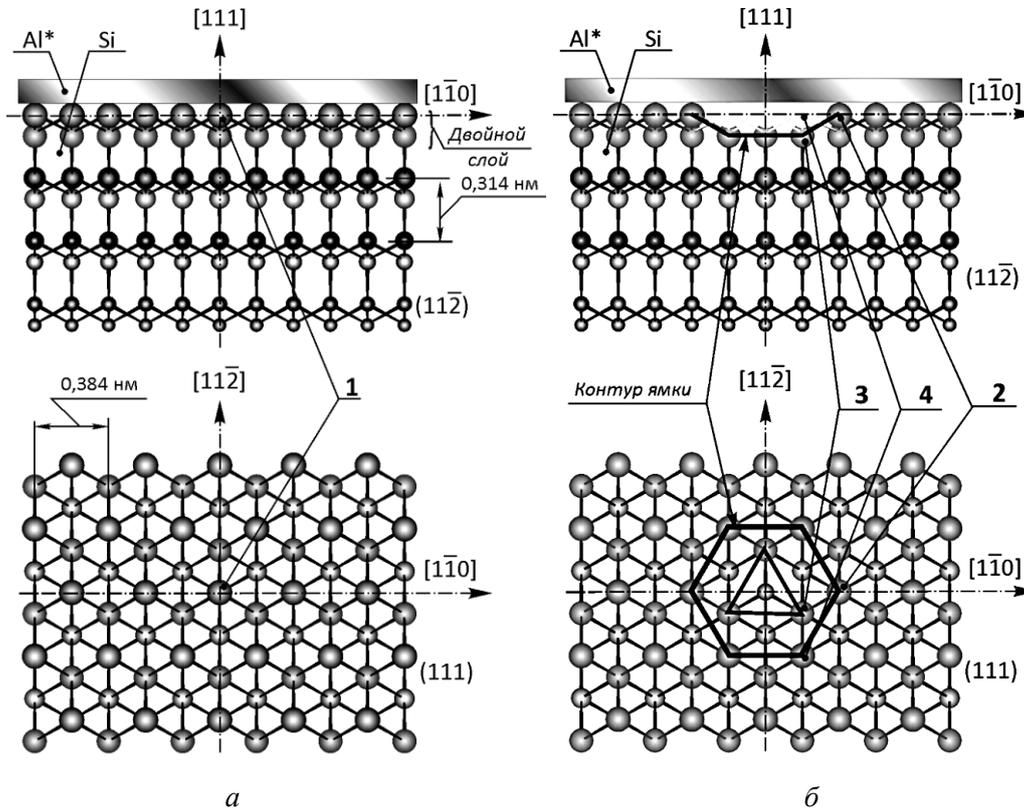


Рис. 1. Структура Si/Al с идеальным строением поверхности Si (111) (а) и конфигурация ямки, образующейся на поверхности Si (111) при удалении атома 1 (б); * — здесь и далее на виде сверху пленка Al не показана

При удалении атома 1 и соседнего атома 2 (рис. 1,б) формируется нестабильная ямка, так как при этом появляется атом 3, имеющий только две связи с решеткой, который при термообработке структур Si/Al ($T_0 \geq 670$ К) легко отрывается от решетки и диффундирует в пленку Al. Удаление атома 3 приводит к появлению слабосвязанного (имеющего только две связи с решеткой) атома 4. Оставшиеся атомы поверхности ямки имеют не менее трех связей с решеткой. Контур стабильной ямки, формирующейся после удаления атомов 1–4, представлены на рис. 2.

Дальнейший анализ механизма формирования ямок показал, что:

– удаление атома из контура ямки на исходной поверхности Si (111) приводит к увеличению ширины ямки на одно расстояние между плоскостями (110) ($\Delta b = 0,384$ нм);

– ступени и дно ямки, имеющее более трех атомов, образующие стабильную конфигурацию, формируются на верхней плоскости двойного слоя (рис. 1,а [3]), все атомы которой имеют по три связи с атомами его нижней плоскости (рис. 3,а);

– удаление двух атомов со дна ямки приводит к увеличению глубины ямки на одно расстояние между плоскостями (111) ($\Delta h = 0,314$ нм) и к образованию ступени (горизонтальной площадки) на боковой поверхности;

– удаление атома с боковой поверхности ямки приводит к увеличению ширины ямки на одно расстояние между плоскостями (110), если не было ступеней в данном и вышележащих слоях, или к уменьшению ширины ступени, если она существовала;

– при удалении атома с поверхности ямки последовательное образование слабосвязанных с решеткой атомов происходит до момента формирования ямки стабильной формы.

Показанная на рис. 3,б ямка представляет собой правильный тетраэдр, ограниченный плоскостями типа $\langle 111 \rangle$ с усеченными на одно межплоскостное расстояние ребрами и вершиной — назовем такую конфигурацию ямкой правильной формы (рис. 3,б).

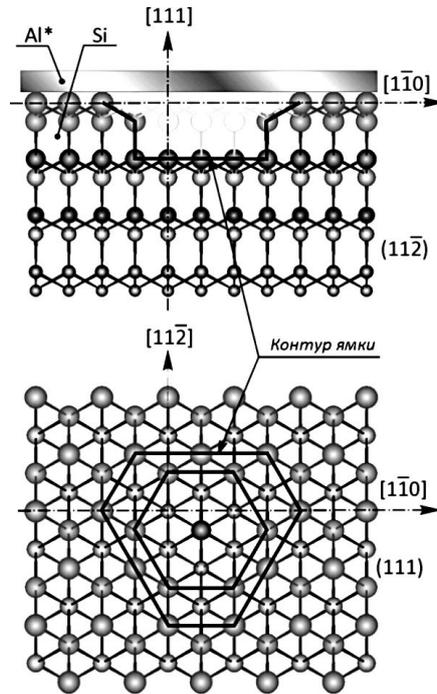


Рис. 2. Конфигурация ямки, образующейся на поверхности Si (111) при удалении атомов 1–4 (рис. 1,б)

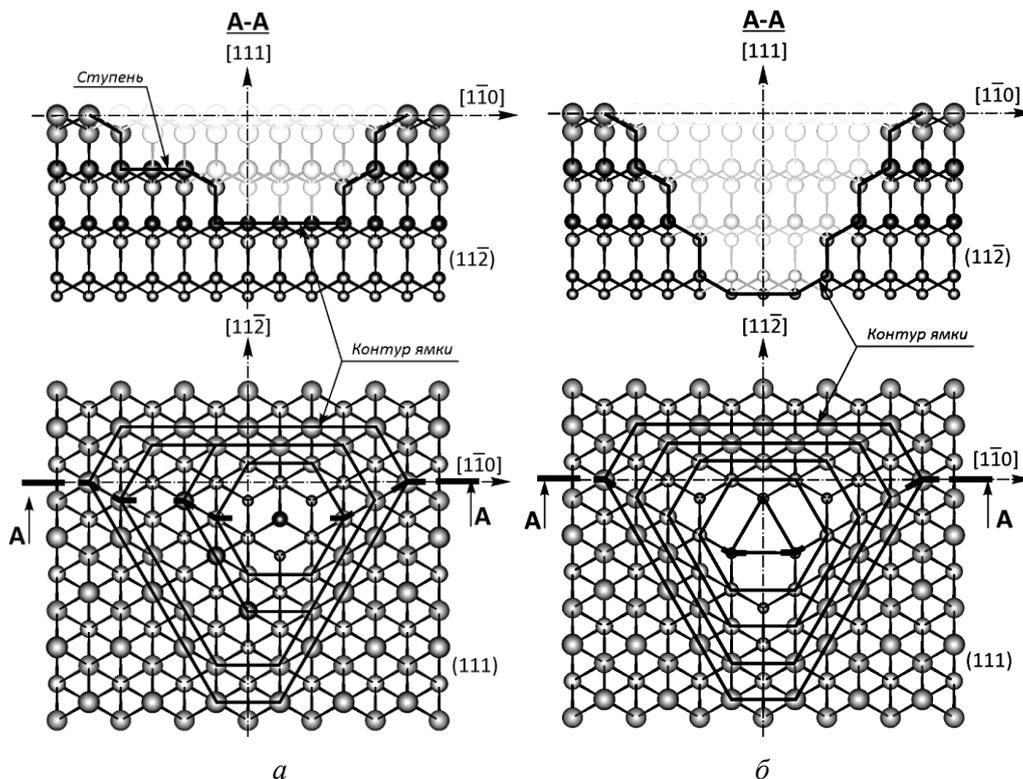


Рис. 3. Конфигурации стабильных ямок: а — сформированы ступени и плоское дно стабильной конфигурации; б — стабильная ямка правильной формы

Анализ результатов моделирования процесса формирования ямки

В рассматриваемом случае совершенного строения решетки процесс формирования ямки носит вероятностный характер, поскольку любой из поверхностных атомов ямки стабильной конфигурации может положить начало образованию новой цепочки слабосвязанных атомов.

В ямке правильной формы, сторона основания которой содержит n атомов, количество поверхностных атомов в разных слоях, имеющих по три связи с кристаллической решеткой, представляет собой следующий ряд: $3 \times 1, 3 \times 2, 3 \times 3, \dots, 3 \times (n-1), 3 \times n$, т.е. арифметическую прогрессию с первым членом $a_1=3$, последним членом $a_m=3n$ и количеством членов прогрессии $m=n$. Исходя из этого, общее количество трехсвязных атомов на поверхности ямки равно

$$S_{\Sigma_{\text{пр}}} = \frac{a_1 + a_m}{2} m = \frac{3 + 3n}{2} n = \frac{3n}{2} (n + 1). \quad (1)$$

Начало процесса взаимодиффузии атомов из разных слоев не равновероятно. Условием выравнивания вероятности является равенство количества трехсвязных атомов на поверхности ямки в вышележащем слое и количества трехсвязных атомов на поверхности ямки в нижележащем слое. Это условие может быть выполнено при формировании плоского дна ямки или ступеней на боковой поверхности, образующих ямку стабильной формы.

Количество трехсвязных атомов в исходном слое, принадлежащих контуру ямки равно

$$N^k \quad n = 3n, \quad (2)$$

где n — количество атомов на стороне контура стабильной формы в данном слое.

Количество трехсвязных атомов на поверхности нижележащего двойного слоя s стабильной формы определится как

$$N^s \quad n = \frac{n+2}{2} (n+1) - 3n. \quad (3)$$

Условие выравнивания вероятностей начала процесса взаимодиффузии из вышележащего и нижележащего слоев будет определено следующим образом:

$$N^k \quad n_0 + \Delta n = N^s \quad n_0 + \Delta n. \quad (4)$$

Расчеты и анализ модели процесса взаимодиффузии показали, что увеличение длины стороны основания ямки на 6 расстояний между плоскостями (110) решетки (т.е. при $(\Delta n=6)$ приводит к увеличению глубины ямки на одно межплоскостное расстояние в направлении [111] ($\Delta h=0,314$ нм). При соблюдении этого условия количества поверхностных атомов ямки, принадлежащих верхним подслоям двойных слоев, и вероятности начала процесса в них выравниваются.

Таким образом, приходим к выводу, что в связи с разной вероятностью начала процесса взаимодиффузии в различных слоях образование ямок правильной формы в структурах Si/Al при совершенном строении кристаллической решетки кремния маловероятно. Ямки будут иметь ступени на боковой поверхности и плоское дно. Уравнение для расчета общего количества трехсвязных атомов во всех слоях, формирующих поверхность ямки при условии достижения равной вероятности, примет вид:

$$S_{\Sigma} = \frac{6 + 3n}{2} (n-1) = \frac{3n}{2} (n+1) - 2. \quad (5)$$

Экспериментальные исследования

Установленные закономерности формирования ямок на поверхности Si (111) при термообработке структур Si/Al были получены для размеров порядка 3–20 межатомных расстояний решетки. С целью выяснения особенностей формирования ямок в реальных кремниевых

структурах были проведены исследования процессов их образования при термообработке структур Si/Al.

При проведении исследований использовали кремниевые пластины марки КДБ 0,3 (111) $\varnothing 76$ мм. Пленку алюминия толщиной ~ 1 мкм наносили методом магнетронного распыления на установке "Оратория-5". Термообработку структур проводили в вакууме не хуже $5 \cdot 10^{-3}$ Па при температурах 570–820 К в течение 5–25 мин. Затем удаляли пленку алюминия травителем состава $\text{HCl}:\text{NiCl}_2:\text{H}_2\text{O}=40$ мл : 0,5 г : 60 мл и проводили исследование структур с помощью оптического микроскопа "Neophot 2".

На рис. 4,б представлены фотографии ямок различной конфигурации, сформированных на поверхности (111) пластины при термообработке.

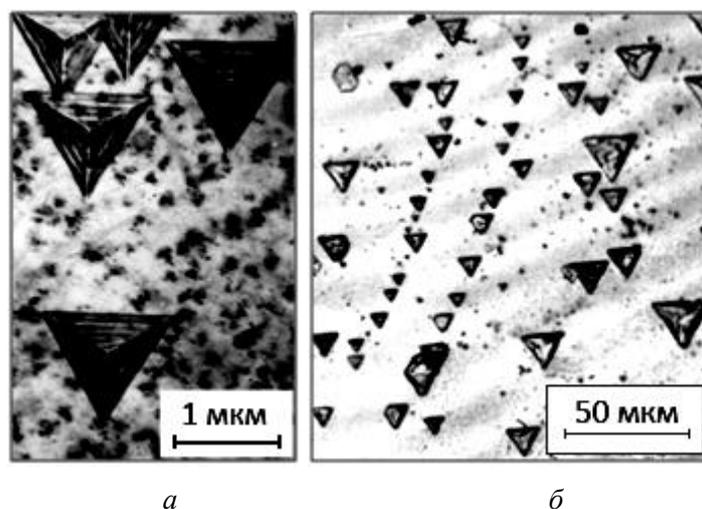


Рис. 4. Вид ямок, на поверхности (111): *a* — сформировавшихся при селективном травлении пластины кремния (ямки травления); *б* — сформировавшихся при термообработке структуры Si/Al, $T=770$ К, 10 мин (пленка алюминия стравлена)

Результаты расчетов размеров ямок, проведенные на основании компьютерного моделирования, сведены в таблицу. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными измерения ширины и глубины ямок [4].

Соотношение ширины и глубины ямок на поверхности Si (111)

Параметры ямки	Количество атомов ямки, принадлежащих исходной поверхности, $3 \times n$				
	3×10	3×10^2	3×10^3	3×10^4	3×10^5
Вероятное количество нижележащих плоскостей	2	17	167	1667	16667
Вероятное количество трехсвязных атомов на поверхности ямки	163	15148	15×10^5	15×10^7	15×10^9
Ширина ямки b , мкм	$3,84 \times 10^{-3}$	$3,84 \times 10^{-2}$	0,384	3,84	38,4
Вероятная глубина ямки h , мкм	$6,28 \times 10^{-4}$	$5,34 \times 10^{-3}$	0,0523	0,523	5,23
Соотношение b/h	6,12	7,19	7,34	7,34	7,34

Заключение

Анализ процесса формирования ямок на поверхности (111) при термообработке структур Si/Al показал, что в случае удаления поверхностных атомов появляются слабосвязанные с кристаллической решеткой атомы кремния. Их удаление заканчивается формированием ямки стабильной конфигурации, все поверхностные атомы которой прочно связаны с решеткой.

Скорость взаимодиффузии атомов кремния и алюминия контролируется стадией разрыва связей атомов кремния с решеткой.

Учет полученных результатов при проектировании топологии кремниевых интегральных микросхем с глубиной залегания p - n -переходов менее 1 мкм позволит повысить стабильность их электрических характеристик и надежность.

FORMATION OF DIMPLES ON THE Si (111) SURFACE DURING HEAT TREATMENT OF Si/Al STRUCTURES

L.P. KHODARINA, V.A. ZELENIN, L.I. GURSKII

Abstract

The mechanisms responsible for formation of dimples on the Si (111) surface during heat treatment of Si/Al structures are discussed. The determination is made of the major regularities of their formation in actual structures.

Литература

1. Гурский Л.И., Зеленин В.А., Ходарина Л.П. // Наноструктурные материалы-2008 (НАНО-2008): Материалы 1-й Междунар. науч. конф. Минск, 22–25 апр. 2008 г. Минск, 2008. С. 608.
2. Сангвал К. Травление кристаллов: Теория, эксперимент, применение / Пер. с англ. М., 1990.
3. Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А. и др. Введение в физику поверхности. М., 2006.
4. Волокобинский Ю.М., Литвиненко С.А., Пастухов А.Ю. // Пути повышения стабильности и надежности микроэлементов и микросхем: Материалы IV ВНТС. Рязань, 1988. С. 135–138.