

# КОМП'ЮТЕРНІ ЗАСОБИ, МЕРЕЖІ ТА СИСТЕМИ

---

*Рассматриваются вопросы формирования пленочных структур силицидных материалов путем бомбардировки конденсата частицами ионизированных компонентов потоком металла. Исследуются новые технологические подходы к изготовлению перспективной элементной базы вычислительной техники.*

© В. Г. Вербицкий, 2002

УДК 681.3

В.Г. ВЕРБИЦКИЙ

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ СИЛИЦИДНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКИ ПРИ ВСТРЕЧНЫХ ПОТОКАХ ДИФFUZАНТОВ К ГРАНИЦАМ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИИ

Для получения силицидных пленок все более активно применяются методы, использующие бомбардировку конденсата ионами испаряемого материала, поскольку можно создать путем подбора характеристик ионного потока температурное поле, способное обеспечить подачу в зоны протекания реакции таких величин потоков диффузانتов, которые могут способствовать формированию монокристаллической структуры силицидной пленки. Если преимущественным диффузантом является один из компонент реакции, металл или кремний, их распределение в силицидном слое, согласно экспериментальным данным [1], носит почти линейный характер. Тем самым задача упрощается и для ее решения не требуется применение сложных численных методов.

Исследуем более общий случай формирования силицидной пленки, когда имеет место перекрестная диффузия обоих компонентов реакции к межфазным границам, где происходит реакция силицидообразования. Перенос вещества в ту или другую сторону будет характеризоваться теперь коэффициентом взаимной диффузии, который можно определить как математическое ожидание (среднее значение дискретной случайной величины  $D$ ) для фиксированного значения координаты  $x$ , взятой в пределах силицидного слоя, [2]:

$$D_{\text{вз}}(x) = D_{\text{Me}} \cdot \frac{c_{\text{Si}}(x)}{c(x)} + D_{\text{Si}} \cdot \frac{c_{\text{Me}}(x)}{c(x)}. \quad (1)$$

Здесь  $D_{\text{вз}}$  – коэффициент взаимной диффузии;  $D_{\text{Me}}$  и  $D_{\text{Si}}$  – собственные коэффициенты диффузии компонент металла ( $\text{Me}$ ) и кремния ( $\text{Si}$ ) в силициде;  $c_{\text{Me}}$  и  $c_{\text{Si}}$  – концентрация свободных атомов металла и кремния в силициде в сечении  $x$ ;  $c_{\text{Me}}/c$  и  $c_{\text{Si}}/c$  – вероятности того, что коэффициент взаимной диффузии при заданном  $x$  будет равен  $D_{\text{Si}}$  или  $D_{\text{Me}}$ .

Переходим к постановке задачи. Предположим, что кремниевая пластина занимает область  $x \in [0, L]$  и подвержена бомбардировке ионами металла и напылению нейтральными атомами металла в виде пара со стороны свободной поверхности  $x=0$  (см. рисунок).

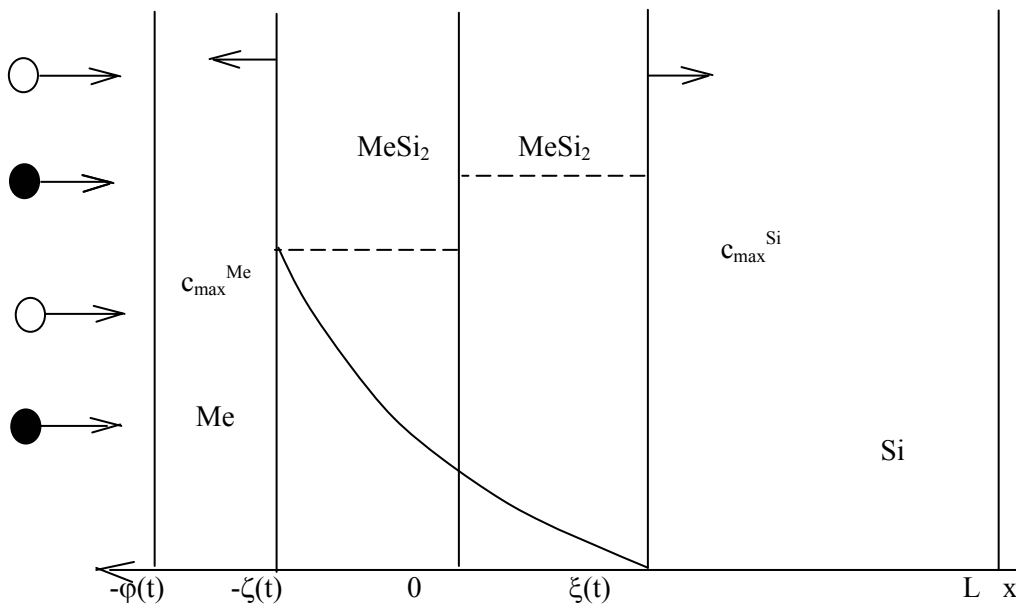


РИСУНОК. Модель образования нанослоя силицида при наличии встречных потоков диффузантов

Скорость перемещения свободной поверхности напыляемой металлической пленки  $x = -\varphi(t)$  определится из уравнения

$$v = - \frac{d\varphi}{dt} = - \frac{(c_{\text{иМ}} \cdot v_{\text{иМ}} + c_{\text{нМ}} \cdot v_{\text{нМ}})}{c_{\text{Me}}} \quad (2)$$

при начальном условии  $\varphi(0) = 0$ .

Здесь  $c_{\text{иМ}}$ ,  $c_{\text{нМ}}$  и  $v_{\text{иМ}}$ ,  $v_{\text{нМ}}$  – соответственно концентрации и скорости ионов металла и нейтральных атомов металла в непосредственной близости от подлож-

ки;  $c_{Me}$  – концентрация (количество) атомов металла в единице объема напыляемой металлической пленки.

Решение уравнения (2) имеет вид

$$\varphi(t) = \frac{(c_{Si} \cdot \nu_{Si} + c_{Me} \cdot \nu_{Me}) \cdot t}{c_{Me}}$$

Следует отметить, что при определении времени полного завершения формирования силицидного слоя требуемой толщины  $H$  очень сложно теоретическим путем учесть время, необходимое для взаимной диффузии друг в друга атомов металла и кремния и образования начальной прослойки силицида, ограничивающей в дальнейшем подачу диффузانتов к границам протекания реакции (межфазным границам) и силу предельной (максимальной) растворимости свободных атомов диффундирующих компонент в кристаллической решетке выращиваемого силицида. Время протекания переходного (начального) этапа  $t_0$  определяется экспериментальным путем либо в процессе проведения численного эксперимента. Таким образом, будем считать, что в момент времени  $t=t_0$  силицидная пленка некоторой малой толщины  $d=d_{Me} + d_{Si} \approx 20$  нм уже сформировалась. Величины  $d_{Me}$  и  $d_{Si}$  в процессе проведения численного счета из условия получения плавного поведения решения уточняются. Из соображений технологического характера, т.е. качества формируемой силицидной пленки, продолжительность  $t_0$  переходного этапа должна быть минимальной, что достигается подбором характеристик потоков нейтральных атомов и ионов металла к кремниевой подложке.

Время формирования силицидной пленки при заданных характеристиках потоков определяется из совместного решения уравнения диффузии свободных атомов металла и кремния в силицидном слое и уравнения теплопередачи в исследуемом объекте.

Поскольку толщина формируемой силицидной пленки  $H$  мала и значительно меньше толщины  $L$  кремниевой подложки, падением температуры в силицидном слое по толщине в первом приближении можно пренебречь. При данном предположении достаточно рассмотреть распределение температуры только в кремниевой подложке, приняв температуру в силицидной пленке по всей ее толщине одинаковой по величине в любой момент времени  $t$  и равной значению температуры в кремнии при  $x = 0$ .

Запишем уравнение теплопроводности для кремниевой пластины

$$\frac{\partial T_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ X(T_k) \frac{\partial T_k}{\partial x} \right], \quad (3)$$

которое удовлетворяет следующим граничным условиям:

а) со стороны свободной поверхности кремниевой подложки  $x = 0$ , бомбардируемой ионами металла, величина выделяемого на подложке потока тепла  $Q$  имеет постоянное значение, т.е.

$$\lambda(T_k) \frac{\partial T_k}{\partial x} \Big|_{x=0} = Q, \quad (4)$$

б) при  $x = L$  выполняется условие равенства нулю потока тепла

$$\lambda(T_k) \frac{\partial T_k}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0. \quad (5)$$

Здесь  $T_k(x, t)$  – температура,  $\chi(T_k) = \lambda(T_k) / (\rho c_v)$  – коэффициент температуропроводности;  $\lambda(T_k)$  – коэффициент теплопроводности,  $\rho$  – плотность кремния;  $c_v$  – удельная теплоемкость при постоянном объеме;  $Q$  – поток тепла, определяемый работой, выполняемой при ударе ионного пучка о подложку в единицу времени.

Уравнение (3) удовлетворяет начальному условию

$$T_k(x, 0) = T_0. \quad (6)$$

Величина начальной температуры кремниевой подложки  $T_0$  должна иметь значение, которое при заданном тепловом потоке  $Q$  обеспечивает минимальную продолжительность начального этапа формирования силицидного слоя.

Значение теплового потока  $Q$  определяется плотностью ионного потока и скоростью ионов, которые, в свою очередь, зависят от интенсивности ионизации испаряемых атомов металла и напряженности электрического поля, в котором происходит движение ионов металла. Величина  $Q$  может быть найдена теоретическим или экспериментальным путем.

Перейдем теперь к исследованию процесса взаимной диффузии свободных атомов металла и кремния в силицидном слое при его формировании.

Запишем уравнение диффузии свободных атомов кремния в силицидном слое:

$$\frac{\partial c_{Si}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{\text{вз}}(T_c) \frac{\partial c_{Si}}{\partial x} \right]. \quad (7)$$

Уравнение (7) должно удовлетворять следующим граничным условиям:

$$c_{Si}[\xi(t), t] = c_{\text{max}}^{Si}(T_c) \quad x = \xi(t), \quad (8)$$

$$c_{Si}[-\zeta(t), t] = 0 \quad (\varepsilon_1) \rightarrow 0, \quad (9)$$

$$c_{Si}(x, t_0) = c_{\text{max}}^{Si}(T_w) \frac{(x + d_{Si})}{d}. \quad (10)$$

Процесс диффузии свободных атомов металла в силицидном слое описывается уравнением:

$$\frac{\partial c_{Me}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{\text{вз}}(T_c) \frac{\partial c_{Me}}{\partial x} \right] \quad (11)$$

при дополнительных условиях:

$$c_{Me}[-\zeta(t), t] = c_{\text{max}}^{Me}(T_c) \quad x = -\zeta(t), \quad (12)$$

$$c_{Me}[\xi(t), t] = D(\varepsilon_2) \rightarrow 0, \quad (13)$$

$$c_{Me}(x, t_0) = c_{\max}^{Me}(T_n) \cdot (d_{Me} - x). \quad (14)$$

Здесь  $T_c(x, t)$  – распределение температуры в силицидном слое;  $c_{\max}^{Me}$  и  $c_{\max}^{Si}$  – максимальные растворимости свободных атомов металла и кремния в силициде соответственно, которые являются функциями от температуры и определяются экспериментальным путем;  $x = \xi(t)$  и  $x = -\zeta(t)$  – уравнения движения межфазных границ, где происходит реакция силицидообразования, силицид-кремний и силицид-металл;  $0(\varepsilon_1)$  и  $0(\varepsilon_2)$  – концентрации диффузانتов в силицидном слое в зонах протекания реакции, которые являются малыми величинами и могут быть определены опытным путем.

В соответствии с ранее сделанным предположением для температуры  $T_c$  в силицидном слое по всей толщине будем иметь:  $T_c(t) = T_k(0, t)$ .

Температура  $T_n$  соответствует начальной температуре формирования данной фазы силицида.

Коэффициенты диффузии  $D_{Me}(T_c)$  и  $D_{Si}(T_c)$  задаются в виде [2]

$$D = D_0 \cdot \exp \frac{-E}{RT_c},$$

где  $E$  – энергия активации,  $R$  – газовая постоянная.

Для решения общей задачи взаимной диффузии (7) - (14) необходимо знать уравнения движения межфазных границ  $x = \xi(t)$  и  $x = -\zeta(t)$ . Приведем их вывод.

Запишем выражение для потока свободных атомов металла в силицидном слое:

$$j_{Me}(x, t) = -D_{e3}(T_c) \frac{\partial c_{Me}(x, t)}{\partial x}. \quad (15)$$

Аналогично для кремния будем иметь

$$j_{Si}(x, t) = D_{e3}(T_c) \frac{\partial c_{Si}(x, t)}{\partial x}. \quad (16)$$

Тогда количества атомов диффузантов, поступающих в зоны протекания реакции за время  $(t - t_0)$ , определяются выражениями:

$$N_{me}(t) = - \int_{t_0}^t D_{e3}(T_c(\tau)) \frac{\partial c_{Me}(-\zeta(\tau), \tau)}{\partial x} d\tau, \quad (17)$$

$$N_{Si}(t) = \int_{t_0}^t D_{e3}(T_c(\tau)) \frac{\partial c_{Si}(\xi(\tau), \tau)}{\partial x} d\tau. \quad (18)$$

Запишем очевидные соотношения:

$$N_{Me}(t) \approx [c_0^{Me} + c_{\max}^{Me}(T_c)] \xi(t), \quad (19)$$

$$N_{Si}(t) \approx [c_0^{Si} + c_{\text{Max}}^{Si}(T_c)] \zeta(t). \quad (20)$$

Здесь  $c_0^{Me}$  и  $c_0^{Si}$  – концентрации химически связанных атомов металла и кремния в единице объема силицида соответственно, причем  $c_0^{Me} \gg c_{\text{max}}^{Me}$  и  $c_0^{Si} \gg c_{\text{max}}^{Si}$ .

Продифференцировав соотношения (19) и (20) по  $t$ , для определения уравнений движения межфазных границ получаем систему двух дифференциальных уравнений,

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{-D_{\text{e3}}(T_c(t)) \frac{\partial c_{Me}(-\zeta(t), t)}{\partial x}}{c_0^{Me} + c \frac{Me_{\text{max}}(T_c)}{2}}, \quad (21)$$

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{D_{\text{e3}}(T_c(t)) \frac{\partial c_{Si}(\xi(t), t)}{\partial x}}{c_0^{Si} + c \frac{Si_{\text{max}}(T_c)}{2}}, \quad (22)$$

удовлетворяющих начальным условиям

$$\xi(t_0) = d_{Me}, \quad (23)$$

$$\zeta(t_0) = -d_{Si}. \quad (24)$$

При решении системы уравнений (21), (22) значения потоков  $j_{Me}$  и  $j_{Si}$  при  $x = -\zeta(t)$  и  $x = \xi(t)$  находятся из совместного решения задачи диффузии (7) - (14) и задачи теплопроводности (3) - (6) с организацией итерационного процесса.

Время завершения процесса формирования силицидного слоя соответствует моменту времени  $t = t_k$ , при котором свободная поверхность напыляемой металлической пленки  $x = -\varphi(t)$  совпадает с движущейся границей силицидного слоя  $x = -\zeta(t)$ , т.е. металлическая пленка исчезает [ $\varphi(t_k) = \zeta(t_k)$ ], полностью продиффундировав в силицидную пленку.

В заключение отметим, что с помощью вышеприведенной математической модели теоретически можно получить, изменяя начальную температуру подложки и характеристики потоков ионов и нейтральных атомов металла, спектр силицидных пленок и построить номограммы для выбора оптимальных режимов их формирования.

1. Змий В.И., Картмазов Г.Н., Полтавцев Н.С., Семенов Н.А. Исследование концентрационных границ диффузионного слоя  $WSiO_2$ . – Изд. АН СССР. Сер. Неорганические материалы. – 1981. - Т.17. - №5. - С. 916 - 917.
2. Тонкие пленки – взаимная диффузия и реакции /Под ред. Дж.Поута, К.Ту, Дж. Майера. – М.: Мир, 1982. – 576с.

Получено 01.07.2002