

# Analiza debljine silicijum dioksida pomoću TCAD simulatora

Miloš Marjanović, *Student Member, IEEE*, Vesna Paunović, *Member, IEEE*, Aneta Prijjić, *Member, IEEE*, Danijel Danković, *Member, IEEE*, Zoran Prijjić, *Member, IEEE*

**Apstrakt**— Silicijum dioksid ( $\text{SiO}_2$ ) ima veliki broj uloga u procesu proizvodnje integriranih kola, kao i uticaj na karakteristike komponenata. Deblina  $\text{SiO}_2$  slojeva kreće se od 1-2nm do 1-2 $\mu\text{m}$ . Proces oksidacije odvija se na visokim temperaturama (700-1300) $^\circ\text{C}$ . Silicijumska pločica se izlaže protoku kiseonika (suva oksidacija) ili vodenoj pari (vlažna oksidacija). Proces se može tačno modelirati linearno paraboličnim modelom (Deal – Grove model). Cilj ovog rada je da se korišćenjem Athena, procesnog simulatora, pokaže koncept procesa oksidacije i ispita uticaj promene različitih faktora na debljinu  $\text{SiO}_2$  sloja. Dobijeno je dobro slaganje rezultata dobijenih simulacijom i analitičkim putem.

**Ključne reči**—oksidacija; silicijum dioksid; TCAD simulacija.

## I. UVOD

OKSIDACIJA je proces formiranja silicijum dioksidnog sloja ( $\text{SiO}_2$ ) na površini silicijuma (Si). Uloga oksida u savremenoj elektronici je ogromna, počevši od izolacije komponenata u kolu, izolacije u samoj komponenti, preko upotrebe oksida kao maske u termičkoj difuziji ili jonskoj implantaciji do oksida gejt u MOS strukturama. Debljina oksidnih slojeva koji se koriste u savremenoj CMOS tehnologiji je od 1-2nm do 1-2 $\mu\text{m}$ .  $\text{SiO}_2$  slojevi se mogu dobiti u atmosferi bogatoj kiseonikom ili vodenom parom. Oksidacija koja se vrši u atmosferi bogatoj kiseonikom naziva se termička ili suva oksidacija. S druge strane, kada je atmosfera za dobijanje oksida vodena para radi se o hemijskoj ili vlažnoj oksidaciji ili CVD (Chemical Vapour Deposition) procesu. Brzinu rasta  $\text{SiO}_2$  sloja na površini Si određuje temperatura u komori u kojoj se odvija proces oksidacije. Temperature za dobijanje oksida kreću se od 800-1100 $^\circ\text{C}$  za termičku oksidaciju, odnosno od 200-600 $^\circ\text{C}$  za hemijsku oksidaciju [1-3]. Formirani sloj  $\text{SiO}_2$  ima dielektrična svojstva i amorfnu strukturu. Svaki atom Si je povezan sa četiri atoma O, ali ne postoji uređenje strukture na makroskopskom nivou.

Oksidacija može biti termička i hemijska. Termička oksidacija se koristi za dobijanje tankih oksida sa malom gustinom naelektrisanja na međupovršini Si/ $\text{SiO}_2$ . Proces se

Miloš Marjanović – Elektronski fakultet, Univerzitet u Nišu, Aleksandra Medvedeva 14, 18000 Niš, Srbija (e-mail: milos.marjanovic@elfak.ni.ac.rs).

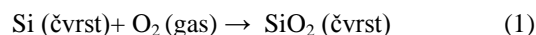
Vesna Paunović – Elektronski fakultet, Univerzitet u Nišu, Aleksandra Medvedeva 14, 18000 Niš, Srbija (e-mail: vesna.paunovic@elfak.ni.ac.rs).

Aneta Prijjić – Elektronski fakultet, Univerzitet u Nišu, Aleksandra Medvedeva 14, 18000 Niš, Srbija (e-mail: aneta.prijjic@elfak.ni.ac.rs).

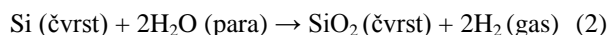
Danijel Danković – Elektronski fakultet, Univerzitet u Nišu, Aleksandra Medvedeva 14, 18000 Niš, Srbija (e-mail: danijel.dankovic@elfak.ni.ac.rs).

Zoran Prijjić – Elektronski fakultet, Univerzitet u Nišu, Aleksandra Medvedeva 14, 18000 Niš, Srbija (e-mail: zoran.prijjic@elfak.ni.ac.rs).

opisuje hemijskom reakcijom:



Tokom procesa termičke oksidacije debljina supstrata se smanji za  $0.44d_{\text{ox}}$ , gde je  $d_{\text{ox}}$  – debljina oksidnog sloja. Naime, izgubi se deo Si koji učestvuje u reakciji sa  $\text{O}_2$ , stvarajući sloj  $\text{SiO}_2$ . Vlažna oksidacija je nanošenje  $\text{SiO}_2$  sloja na supstrat procesom depozicije u pari – CVD. Reakcija koja opisuje proces vlažne, ili hemijske oksidacije je:



Matematički model koji daje zavisnost debljine oksida u funkciji vremena oksidacije naziva se Deal Grove model, nastao je još 1960-tih godina i još uvek je u upotrebi. Prema ovom modelu, za proces oksidacije odgovorna je difuzija molekula gasa kojim se obavlja oksidacija (oksidant) kroz već narasli oksid i hemijska reakcija koja se odigrava na međupovršini Si/ $\text{SiO}_2$ . Deal Grove model oksidacije je linearno parabolički model dat relacijom:

$$x^2 + Ax = B(t + \tau) \quad (3)$$

gde je  $x$  – debljina oksida, a  $t$  vreme rasta oksida. Vrednost konstante  $\tau$  zavisi od debljine oksida ~~na početku~~ procesa oksidacije. Mogu se koristiti aproksimacije:  $x^2 = Bt_1$  i  $x = (B/A)t_2$ , tako da je ukupno vreme rasta oksida  $t = t_1 + t_2$ . B je konstanta parabolične brzine rasta i data je izrazom:

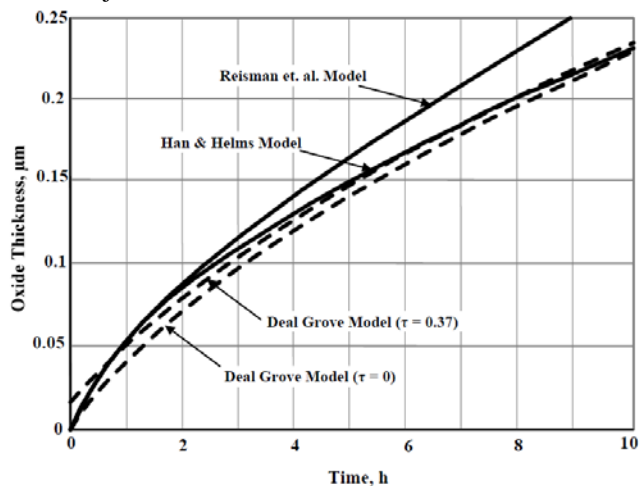
$$B = C_1 e^{\left(\frac{-E_1}{kT}\right)} \quad (4)$$

gde su  $C_1$ ,  $E_1$  – koeficijenti,  $T$  – temperatura oksidacionog ambijenta. B/A je konstanta linearne brzine rasta, u kojoj figurišu koeficijenti  $C_2$  i  $E_2$ :

$$\frac{B}{A} = C_2 e^{\left(\frac{-E_2}{kT}\right)} \quad (5)$$

Vrednosti pojedinih koeficijenata date su u [4]. Brzina rasta  $\text{SiO}_2$  sloja pored vremena oksidacije i temperature, zavisi i od pritiska, koncentracije pojedinih rastvora, tipa oksidacionog ambijenta. Pored opisanog modela u literaturi postoje i drugi modeli za opis procesa oksidacije. Poređenje zavisnosti

debljine oksidnog sloja od vremena oksidacije u ambijentu bogatom kiseonikom na 1000°C za različite modele oksidacije prikazano je na slici 1.



Sl. 1. Poređenje modela oksidacije – zavisnosti debljine oksida u funkciji vremena oksidacije u ambijentu bogatom kiseonikom na 1000°C [2].

Generalno, proces oksidacije je spor. Na primer, u procesu suve oksidacije za 2 sata, na 1000°C, narašće oko 70nm SiO<sub>2</sub> sloja, dok će za isto vreme i pri istoj temperaturi u procesu vlažne oksidacije narasti oko 600nm oksidnog sloja. Na brzinu rasta oksidnog sloja utiču i kristalografska orijentacija, nivo dopiranja silicijumskog supstrata, procenat hlorovodonične kiseline (HCl) ili hlora (Cl<sub>2</sub>). Uloga hlorovodonične kiseline i hlora je da štite od kontaminacije metala i da spreče ugradnju defekata u oksidni sloj. Jako dopirani supstrati brže oksidišu u odnosu na slabo dopirane, i to 3-4 puta. Efekat je izraženiji kod n<sup>+</sup> nego kod p<sup>+</sup> supstrata i to pri niskim temperaturama oksidacije. Brži je rast SiO<sub>2</sub> sloja na (111) nego na (100) supstratima. Izuzetak je rast tankih oksida pri niskim pritiscima pri suvoj oksidaciji i na vrlo visokim pritiscima i niskim temperaturama pri vlažnoj oksidaciji. Takođe, treba napomenuti da različito oksidišu glatke i hrapave strukture silicijuma [5].

TCAD (Technology Computer-Aided Design) alati omogućavaju ubrzavanje analiza koje bi eksperimentalnim putem jako dugo trajale. Takođe, kada nije moguća praktična karakterizacija datog materijala, ovakvi softverski paketi su od velike pomoći, pogotovu u edukativne svrhe. Cilj ovog rada je da pokaže kako se korišćenjem TCAD alata može simulirati i analizirati proces oksidacije.

## II. SIMULACIJA PROCESA OKSIDACIJE

Proces oksidacije simuliran je korišćenjem softverskog paketa Silvaco. Silvaco je TCAD softverski paket za projektovanje procesa, komponenti i tehnološku karakterizaciju materijala i komponenti. Silvaco TCAD se sastoji iz više programa: Athena [6], za simulaciju procesa, Atlas, za električnu simulaciju, itd. Da bi simulirali proces oksidacije, neophodno je definisati domen simulacije i osnovne karakteristike supstrata.

U ovom slučaju, biće definisana supstratska pločica

dimenzija (2x4) µm. Simulator rešava jednačine korišćenjem metoda konačnih elemenata, numerički proračun vrši se u svakoj tački mreže sa ciljem određivanja rešenja diferencijalnih jednačina. Naredbom `init` definisana je supstratska pločica od silicijuma, kristalografske orijentacije (100). Pločica je n-tipa s obzirom da je dopirana fosforom koncentracije 3·10<sup>15</sup>cm<sup>-3</sup>. Komanda `two.d` označava da se radi dvodimenzionalna (2D) simulacija.

Ključna naredba za simulaciju procesa oksidacije je `diffuse`. Naime, proces oksidacije je u suštini difuzovanje atoma kiseonika do međupovršine Si/SiO<sub>2</sub>, gde reaguju sa Si i grade SiO<sub>2</sub>. Parametri ove naredbe su: `time` – vreme oksidacije dato u minutina, `temperature` – temperatura oksidacionog ambijenta izražena u °C. Kao parametar naredbe zadaje se tip ambijenta: `wetO2` – za vlažnu oksidaciju i `dryO2` – za suvu oksidaciju.

Na kraju se definiše izlazni fajl naredbom `structure` i poziva program `Tonyplot`, istoimenom naredbom, koji služi za grafički prikaz rezultata simulacije. Ulazni fajl završava se naredbom `quit`. Ulazni fajl za simulaciju procesa oksidacije opisan u ovom radu dat je u nastavku:

```
1. go athena
2. line x loc=0.0 spacing=0.02
3. line x loc=2.0 spacing=0.25
4. line y loc=0.0 spacing=0.05
5. line y loc=4.0 spacing=0.25
6. init silicon orient=100 c.phos=3e15 two.d
7. diffuse time=90 temperature=900 wetO2
8. structure outfile=oksidacija.str
9. tonyplot -st oksidacija.str
10. quit
```

Kada je potrebno analizirati uticaj određenog parametra na određeni proces neophodno je korišćenje `for` petlje. Mogu se zadati i pritisak u komori (parametar `press`) izražen u torr-ima, kao i procenat hlorovodonične kiseline u komori kroz parametar `hcl`. `for` petlja se u Atheni zadaje korišćenjem naredbe `foreach`, zatim se navodi naziv promenljive u petlji, i u zagradama vrednosti parametra. Prvo se navodi vrednost od koje startuje petlja, nakon toga ključna reč `to`, pa vrednost s kojom se izlazi iz petlje. Sledi zadavanje koraka `for` petlje korišćenjem rezervisane reči `step`. U okviru željene naredbe, u ovom slučaju `diffuse`, umesto fiksne vrednosti parametra koji se menja navodi se naziv promenljive zadat na početku `for` petlje. Da bi bio sačuvan izlazni fajl za svaku vrednost parametra iz `for` petlje, u okviru naredbe `structure outfile=` navodi se naziv promenljive. U datom primeru: `primer_gas.str`, biće sačuvani fajlovi: `primer_2.str`, `primer_4.str`, itd. Kraj `for` petlje označava se navođenjem naredbe `end`. Da bi bili prikazani svi rezultati simulacije koristi se pokazivač u okviru naredbe `tonyplot`. U ovom slučaju `primer*.str`. Listing ulaznog fajla procesa oksidacije u kome se kroz `for` petlju menja vrednost udela O<sub>2</sub> u komori dat je u nastavku:

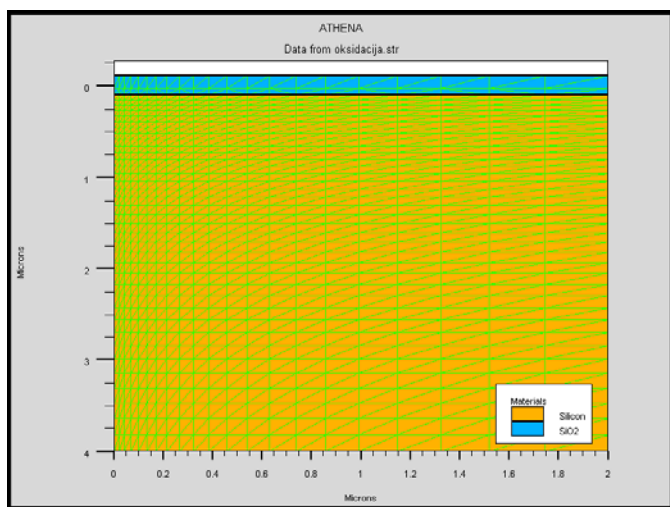
```

1.go athena
2.foreach gas (2. to 8. step 2.)
3.line x loc=0.0 sp=1.0
4.line x loc=1.0 sp=1.0
5.line y loc=0.0 sp=0.05
6.line y loc=1.0 sp=0.05
7.init silicon orient=100 c.phos=3e15 two.d
8.diffuse time=60 temperature=1000 f.o2=gas
   f.h2=20.
9.structure outfile=primer_gas.str
10. end
11. tonyplot -st primer*.str
12. quit

```

### III. REZULTATI I DISKUSIJA

Simulirana struktura prikazana je na slici 2. Korišćenjem alata ruler moguće je odrediti debljinu formiranog SiO<sub>2</sub> sloja. Analizom dolazimo do zaključka da je 0.117μm debljina oksidnog sloja iznad originalne površine silicijumske pločice, tj. da je 0.0957μm debljina SiO<sub>2</sub> ispod originalne površine. Ukupna debljina oksida je 0.2127μm. Dakle, 55% oksida je iznad, a 45% ispod originalne površine supstrata, što se objašnjava činjenicom da prilikom reakcije O<sub>2</sub> sa Si, dolazi do trošenja silicijuma, na račun izgradnje SiO<sub>2</sub> sloja. Korišćenjem alata Cutline, vrši se prelazak iz 2D u 1D domen simulacije. Na slici 3 prikazan je presek duž simulirane strukture (oblast oksida) sa profilom raspodele O<sub>2</sub> atoma. Vidi se da je koncentracija O<sub>2</sub> u oksidnom sloju (2-3)·10<sup>19</sup>cm<sup>-3</sup>.



Sl. 2. Rezultati 2D simulacije oksidacije.

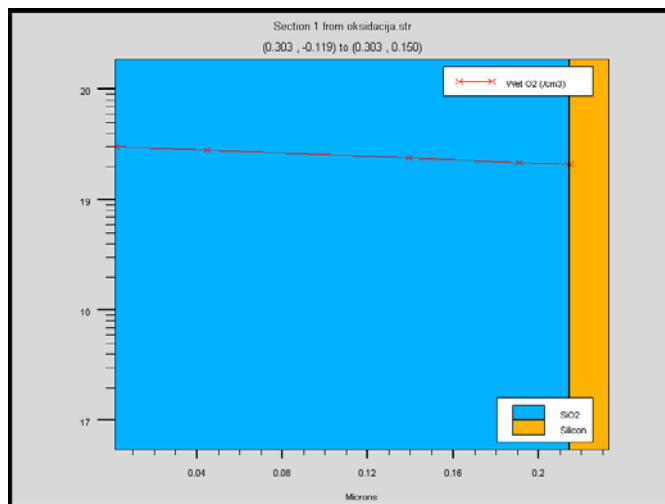
Debljinu SiO<sub>2</sub> sloja je moguće odrediti i automatski korišćenjem komande extract. Komanda extract se koristi za analizu simulirane strukture, tj. ekstrakciju debljine materijala, dubine spoja, nivoa dopiranja, slojne otpornosti materijala, napona praga i CV parametara kod MOS struktura. U ovom slučaju korišćena je naredba extract gde je naveden string koji se štampa, parametar koji se ekstrahuje thickness, naziv materijala čija se debljina određuje i u kom preseku x-ose x.val:

```
1.extract name= " Debljina oksida je"
```

```
thickness material="SiO~2" x.val=0.5
```

U izlaznom prozoru programa DeckBuild ispisuje se tražena vrednost:

```
Debljina oksida je=2133.18 angstroms
(0.213318 um) X.val=0.5
```



Sl. 3. Rezultati 1D simulacije oksidacije.

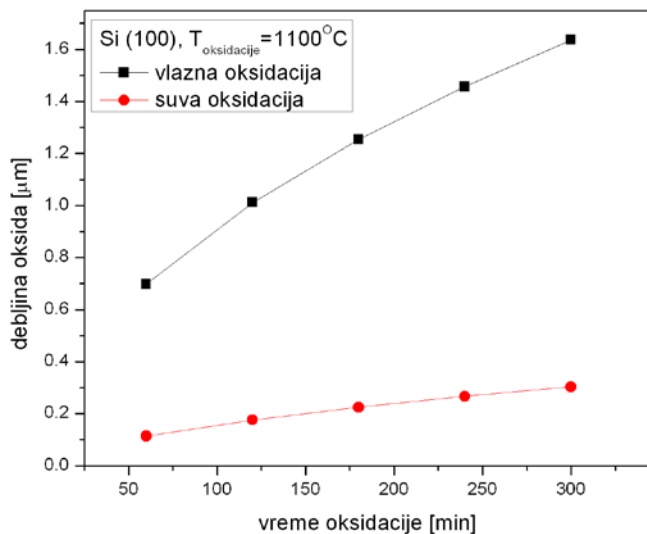
Analitičkim putem, primenom Deal Grove modela, dobija se debljina oksida koji je narastao u ambijentu bogatom vodonom parom, na temperaturi 900°C u trajanju od 90 minuta. U tabeli 1 date su vrednosti parametara koje figurišu u jednačinama (4) i (5) za date uslove oksidacije. Rešavanjem ovih jednačina za date uslove dobijaju se vrednosti:  $A=1.35\mu\text{m}$ ,  $B=0.192\mu\text{m}^2/\text{h}$ . Rešavanjem kvadratne jednačine (3), za  $\tau=0\text{s}$ , s obzirom da nije bilo prethodnog narastanja oksida, dobija se  $x=0.19\mu\text{m}$ , što je saglasno sa rešenjem dobijenim korišćenjem simulatora.

TABELA I  
PARAMETRI ZA IZRAČUNAVANJE KOEFICIJENATA U DEAL GROVE MODELU

Oksidacioni ambijent	Parabolična brzina $B$ ( $\mu\text{m}^2/\text{h}$ )	Linearna brzina $B/A$ ( $\mu\text{m}/\text{h}$ )
Wet O <sub>2</sub>	$C_1=2.14 \cdot 10^2 \mu\text{m}^2/\text{h}$	$C_2=8.95 \cdot 10^7 \mu\text{m}^2/\text{h}$
	$E_1=0.71\text{eV}$	$E_2=2.05\text{eV}$

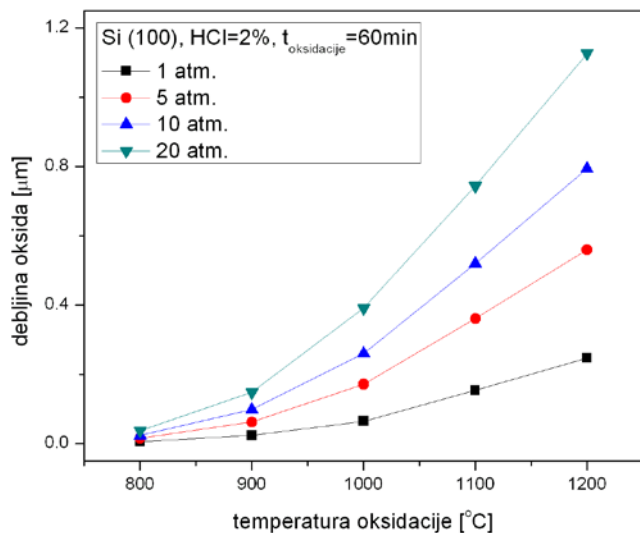
Na slici 4 prikazana je zavisnost debljine oksida od vremena oksidacije pri vlažnoj i suvoj oksidaciji. Simulirana je oksidacija na silicijumskom supstratu kristalografske orijentacije (100), na temperaturi 1100°C. Vreme oksidacije menja se kroz for petlju od 60 do 300 minuta sa korakom 60 minuta. Sa slike 4 može se zaključiti da je za isto vreme naraslo više oksida pri vlažnoj, nego pri suvoj oksidaciji. Takođe, zaključuje se da je vlažna oksidacija brža od suve. U istom vremenskom intervalu od 240 minuta, debljina oksida pri vlažnoj oksidaciji povećala se za 0.939μm, dok je promena debljine oksida pri suvoj oksidaciji 0.189μm. Razlozi brže vlažne oksidacije su brža difuzija kroz narasli oksid i veća

rastvorljivost vodene pare u silicijum dioksidu. Nedostatak vlažne oksidacije je oslobađanje molekula vodonika, koji ostaju zarobljeni u  $\text{SiO}_2$  sloju (trapovi).



Sl. 4. Zavisnost debljine oksida od vremena oksidacije pri vlažnoj i suvoj oksidaciji.

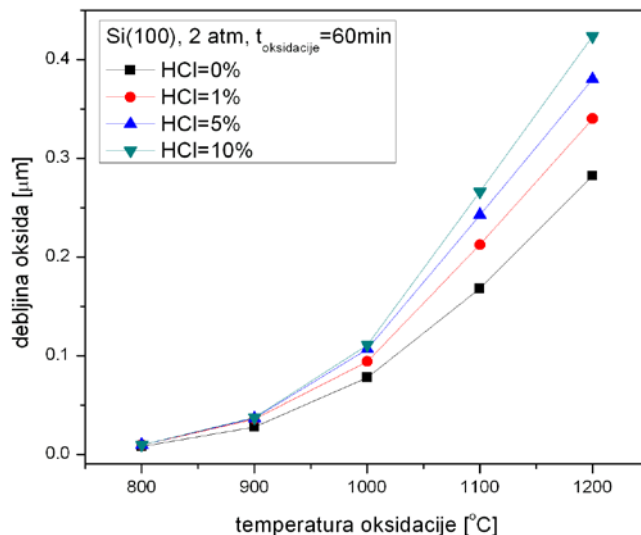
Zavisnost debljine oksida u funkciji temperature oksidacije za različite vrednosti pritiska u komori tokom procesa data je na slici 5. Prikazani su rezultati simulacije oksidacije na Si pločici orijentacije (100), u trajanju od 60 minuta, kada je koncentracija HCl u komori 2%. Može se zaključiti da pri većim pritiscima u komori narasta veći sloj oksida. Tako je pri pritisku vrednosti 1 atmosfere, posle 60 minuta, na  $1200^\circ\text{C}$  naraslo  $0.25\mu\text{m}$   $\text{SiO}_2$  sloja. U istim uslovima pri pritisku od 20 atmosfera naraslo  $1.13\mu\text{m}$  oksida.



Sl. 5. Zavisnost debljine oksida od temperature oksidacije za različite vrednosti pritiska u komori tokom procesa.

Na slici 6 prikazana je zavisnost debljine oksidnog sloja od temperature oksidacije za različite koncentracije HCl u

komori pri suvoj oksidaciji. Prikazani rezultati dati su za simulaciju oksidacije na Si pločici orijentacije (100), pri pritisku od 2 atmosfere u trajanju od 1 časa. Na osnovu rezultata sa slike 6 može se zaključiti da prisustvo HCl u komori nema velikog uticaja na debljinu oksida pri nižim temperaturama oksidacije. Uloga HCl je da štite od kontaminacije metala i sprečavaju ugradnju defekata u oksidni sloj. Pri temperaturama većim od  $1000^\circ\text{C}$  postoji značajan uticaj HCl na debljinu. Što je koncentracija HCl veća, veća je debljina oksidnog sloja.



Sl. 6. Zavisnost debljine oksida od temperature oksidacije za različite vrednosti procenta HCl u komori tokom procesa.

#### IV. ZAKLJUČAK

Tri karakteristike  $\text{SiO}_2$  sloja nastalog kontrolisanim procesom u komori čine ga pogodnim za primenu u izradi integrisanih kola: dobre izolatorske osobine, mali koeficijent difuzije za većinu primesa i velika zaustavna moć za većinu implantiranih primesa. Prva karakteristika čini oksid pogodnim za realizaciju dielektrika za gejt MOS tranzistora i izolaciju MOS tranzistora. Druga i treća karakteristika znače da se  $\text{SiO}_2$  može koristiti kao maska pri difuziji i implantaciji primesa.

Rezultati simulacije procesa oksidacije pokazali su da se tokom procesa oksidacije izgubi deo sloja silicijuma usled reakcije stvaranja  $\text{SiO}_2$  sloja. Debljina oksidnog sloja dobijena pomoću simulacije u saglasnosti je sa izračunatom vrednosti korišćenjem analitičkog modela. Simulacijom je pokazano da je vlažna oksidacija brža od suve zbog veće rastvorljivosti vodene pare u  $\text{SiO}_2$ . U radu je ispitivan i uticaj pritiska i koncentracije HCl u komori tokom procesa oksidacije. Pokazano je da HCl utiče na debljinu oksida samo pri većim temperaturama oksidacije.

#### ZAHVALNICA

Istraživanja su deo projekata OI-172057, TR-32026. Autori se zahvaljuju finansiskoj podršci Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije.

## LITERATURA

- [1] G. May, S. Sze, *Fundamentals of Semiconductor Fabrication*: Wiley, 2004.
- [2] V. Barzdenas, R. Navickas, *Microtechnologies, A Laboratory Manual*: Vilnius Technika, 2012.
- [3] Z. Prijić, A. Prijić, *Uvod u poluprovodničke komponente I njihovu primenu*: Elektronski fakultet Niš, 2014.
- [4] D. Pantić, *Modeliranje i simulacija u mikroelektronici*: Elektronski fakultet Niš, 2006.
- [5] M. Tadić, *Mikroelektronika i nanoelektronika, predavanja*: Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu, 2011.
- [6] *Athena Users Manual*, vol. 1-2, Silvaco International, 2010.

## ABSTRACT

Silicon dioxide ( $\text{SiO}_2$ ) serves a number of important functions in integrated circuit fabrication and performance. Thickness of  $\text{SiO}_2$  layer used from 1-2 nm to 1-2 $\mu\text{m}$ . Oxidation process uses high

temperatures (700-1300) °C. The silicon wafer is exposed to oxygen gas (dry oxidation) or water vapour (wet oxidation). This process can be accurately modeled by the linear parabolic model (The Deal – Grove model). The aim of this paper is to use the Athena semiconductor process simulator to study the concept of the oxidation process and to investigate how the variation of different influent factors on oxidation affects the  $\text{SiO}_2$  thickness. The good agreement between the simulation and analytical results was obtained.

## **Analysis of silicon dioxide thickness by using TCAD simulator**

Miloš Marjanović, Vesna Paunović, Aneta Prijić, Danijel Danković, Zoran Prijić