

**Dreidimensionale Simulation von
Schichtabscheideprozessen in der
Halbleitertechnologie**

Der Technischen Fakultät der
Universität Erlangen-Nürnberg

zur Erlangung des Grades

D O K T O R - I N G E N I E U R

vorgelegt von

Eberhard Bär

Erlangen - 1998

Als Dissertation genehmigt von
der Technischen Fakultät der
Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der Einreichung:	10. Oktober 1997
Tag der Promotion:	13. Februar 1998
Dekan:	Prof. Dr. G. Herold
Berichterstatter:	Prof. Dr. H. Ryssel Prof. Dr. S. Selberherr

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	3
Abstract	6
1. Einleitung	9
2. Grundlagen der chemischen Gasphasenabscheidung	13
2.1 Herstellung dünner Schichten	13
2.2 Chemische Gasphasenabscheidung	14
3. Simulation von Topographieprozessen	19
3.1 Zelluläre Topographiebeschreibung	20
3.2 Segmentäre Topographiebeschreibung	25
3.2.1 Zweidimensionale Diskretisierung	25
3.2.2 Dreidimensionale Diskretisierung	32
4. Dreidimensionale Simulation der chemischen Niederdruckgasphasenabscheidung	35
4.1 Modell für die chemische Niederdruckgasphasenabscheidung	35
4.2 Dreidimensionale Implementierung des Modells	40
4.3 Anwendung des Modells im zweidimensionalen Fall	51
4.4 Verschiebung der Oberfläche	54
4.4.1 Berechnung des Verschiebungsvektors	55
4.4.2 Verfahren zur Beseitigung von Artefakten	59
4.4.3 Verfeinerung des Gitters	63
4.5 Simulationsbeispiele	65

5.	Simulation von Sputterabscheidung	71
5.1	Simulation von Sputterabscheidung mit dem LPCVD-Modell	71
5.2	Simulation der Sputterabscheidung mit Oberflächendiffusion	73
6.	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	77
6.1	Abscheidung von Niedertemperaturoxid	77
6.1.1	Anwendung des Modells	77
6.1.2	Vergleich mit Experimenten	78
6.2	Abscheidung von Wolfram aus Wolframhexafluorid und Silan	86
6.2.1	Anwendung des Modells	87
6.2.2	Vergleich mit dem Experiment	88
6.3	Abscheidung von Polysilicium	90
6.4	Abscheidung von Titanitrid durch reaktives Sputtern	92
7.	Zusammenfassung und Ausblick	94
	Literaturverzeichnis	97
	Index	102

Zusammenfassung

Es wurde ein 3D-Simulationsprogramm entwickelt, das die Vorhersage der Topographie abgeschiedener Schichten ermöglicht. Die 3D-Geometrie wird dabei durch eine Triangulierung der Oberfläche diskretisiert. Dieser Ansatz wurde gewählt, da die Oberflächennormalenrichtung direkt bestimmt werden kann und die Anwendung von Teilchenbilanzierungsmodellen bezogen auf Flächenstücke der Oberfläche möglich ist. Weiterhin lassen sich Raumwinkel, die von Teilen der Oberfläche abgedeckt werden, in einfacher Weise berechnen. Diese Aspekte sind bei der Implementierung physikalischer Modelle für Schichtabscheideprozesse von hoher Bedeutung.

Es wurde ein Modell für die chemische Niederdruckgasphasenabscheidung (LPCVD) implementiert, das in früheren Arbeiten für 2D-Geometrien entwickelt und experimentell verifiziert wurde. Das Modell geht von reaktiven Teilchen aus, die auf die Oberfläche der Halbleiterscheibe auftreffen. Es wird angenommen, daß die freie Weglänge im Gas groß ist im Vergleich zu den Strukturdimensionen des Substrats. Es müssen somit nur Stöße von Teilchen mit der Oberfläche berücksichtigt werden. Die Teilchen reagieren nach dem Auftreffen auf die Oberfläche mit der sogenannten Haftwahrscheinlichkeit. Durch Adsorption und Desorption stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht der Teilchenflüsse mit einer entsprechenden Schichtwachstumsrate für jede Stelle der Oberfläche ein. Eine Erweiterung des Modells nimmt zwei zu bestimmten Anteilen beitragende Teilchenarten mit verschiedenen Haftwahrscheinlichkeiten an.

Bei der 3D-Implementierung wurden Ausdrücke für den Teilchentransport zwischen verschiedenen Oberflächendreiecken und zwischen dem Gas und den Stellen auf der Oberfläche abgeleitet. Es wurden dazu Algorithmen zur Berechnung der von den Dreiecken zum Gas hin offenen Raumwinkel sowie der durch andere Dreiecke verdeckten Raumwinkel entwickelt. Weiterhin war es erforderlich, Verfahren, welche die Sichtbarkeit zwischen Oberflächendreiecken überprüfen, zu entwickeln. Spezielle adaptive Verfeinerungstechniken für die Berechnung des Teilchentransportes zwischen Dreiecken dienen zur Reduzierung des numerischen Fehlers. Die Teilchenflüsse und damit die Wachstumsraten für alle Dreiecke werden als Lösung eines linearen Gleichungssystems bestimmt. Es wurde gezeigt, daß die

bei den 2D-Rechnungen verwendeten Ausdrücke aus der 3D-Rechnung für sehr lange Gräben folgen, so daß die aus Vergleichen von 2D-Simulationen mit Messungen des Schichtprofils auf langen Gräben gewonnenen Parameter auch in 3D gültig sind und zur Vorhersage des Schichtprofils auf 3D-Geometrien verwendet werden können.

Für sehr kleine Haftwahrscheinlichkeiten ergeben sich isotrope Schichtprofile, so daß damit Prozesse wie die Abscheidung von Polysilicium, Siliciumnitrid oder Tantalpentoxid simuliert werden können. Eine Haftwahrscheinlichkeit von 1 ermöglicht die Beschreibung von Sputterabscheidung.

Für die Verschiebung der triangulierten Oberfläche entsprechend der berechneten Schichtwachstumsraten wurde ein 3D-Stringalgorithmus entwickelt. Die Knoten der Triangulierung werden dabei in Abhängigkeit von den Wachstumsraten der angrenzenden Dreiecke verschoben. Spezielle Prozeduren wurden implementiert zur Reduktion artifizierlicher Verzerrungen bei der Verschiebung der Oberfläche, zur Verhinderung lokaler und globaler Schnitte der Oberfläche mit sich selbst und zur adaptiven Verfeinerung der Triangulierung.

Simulationsbeispiele zeigen den Einfluß der Haftwahrscheinlichkeit. Je größer diese ist, desto weniger können sich die reaktiven Teilchen in der Struktur verteilen und desto schlechter wird die Kantenbedeckung. Das Programm wurde zur Simulation der Abscheidung von Niedertemperaturoxid (LTO) mit dem Modell ausgehend von zwei Haftwahrscheinlichkeiten angewendet. Es wurde dabei auf Parameter aus früheren Arbeiten, die aus dem Vergleich von 2D-Simulationen mit 2D-Messungen gewonnen wurden, zurückgegriffen. Zur Überprüfung wurden pyramidenförmige Löcher mittels anisotropen Ätzens in Kaliumhydroxid (KOH)-Lösung hergestellt und als Ausgangsstrukturen für die LTO-Abscheidung verwendet. Es besteht eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Schichtprofilen und den Simulationen. Die Abscheidung von Wolfram aus Wolframhexafluorid (WF_6) und Silan (SiH_4) läßt sich mit einer Haftwahrscheinlichkeit simulieren. Mit einem Wert für die Haftwahrscheinlichkeit aus der Literatur ergibt sich gute Übereinstimmung zwischen publizierten experimentellen Profilen der Abscheidung in ein Kontaktloch und der Simulation. Die isotrope Abscheidung von Polysilicium auf pyramidenförmigen Löchern wurde simuliert. Auch hier zeigte sich gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen.

Es wurden Sputterabscheidungen simuliert unter Annahme einer Haftwahrscheinlichkeit der Metallatome von eins sowie einer isotropen Geschwindigkeitsverteilung der Metallatome. Es wurden Simulationen ohne und mit Berücksichtigung von Oberflächendiffusion durchgeführt. Ein Modell zur Berechnung der Oberflächendiffusion wurde implementiert. Mit zunehmender Diffusionslänge ergibt sich dabei eine Verbesserung der Konformität der abgeschiedenen Schichten. Es wurden Simulationen der Abscheidung von TiN durch reaktives Sputtern in Kontaktlöcher mit verschiedenen Aspektverhältnissen durchgeführt und die Bodenbedeckung der abgeschiedenen Schichten bestimmt. Die Ergebnisse stimmen gut mit experimentellen Daten aus der Literatur überein.

Abstract

Shrinking device dimensions and increasing complexity of integrated circuits require the use of three-dimensional (3D) simulators for predicting the topography of deposited layers. A 3D simulation program has been developed which is capable of calculating the 3D shape of deposited layers.

For discretizing the surface, a set of triangles is used which allows the direct calculation of the surface normals as well as the evaluation of particle fluxes and solid angles, necessary for the implementation of physical models.

A model for low-pressure chemical vapor deposition (LPCVD) has been implemented. This model had been developed and verified within earlier work. Reactive particles are assumed to impinge onto the structured substrate, having a mean free path far larger than the device feature size. In consequence, only particle wall collisions have to be considered. After hitting the surface, a particle reacts with a certain probability, the so-called sticking coefficient. Adsorption and desorption lead to a dynamical equilibrium and a corresponding layer growth rate for each surface position. An extension of the model assumes two contributing species with two sticking coefficients.

For the 3D implementation of the model, expressions for calculating particle transport between surface triangles and between surface triangles and the gas volume were derived. Specific algorithms for calculating the solid angle covered by free gas space or other triangles with respect to each triangle have been developed. Furthermore, procedures to check the view between triangles have been implemented. Adaptive refinement for calculating the particle transport reduces the numerical error. The layer growth rates are obtained as solution of a system of linear equations. It has been shown that the formulas used within earlier work on 2D simulation can be derived from the 3D equations in the case of long trenches. Therefore, the simulation parameters extracted by comparing 2D simulations to cross sections of trenches can be used for predictive 3D simulations.

Small values of the sticking coefficient lead to isotropic deposition. This allows the

simulation of deposition of materials such as polysilicon, silicon nitride, and tantalum pentoxide. Assuming a sticking coefficient of one allows simulation of sputter deposition.

For shifting the triangulated surface according to the calculated growth rates, a 3D string algorithm has been developed. The shift vector for a node depends on the growth rates of the triangles adjacent to this node. Additional procedures have been developed for reducing artificial distortions, for preventing local and global surface self intersections, and for the adaptive refinement of the triangulation.

Simulation examples are shown to demonstrate the influence of the sticking coefficient. Step coverage becomes worse with an increasing sticking coefficient, as the particles cannot distribute uniformly over the entire structure. The program was used to simulate the deposition of low-temperature oxide (LTO) assuming two contributing species with two sticking coefficients determined within earlier work. To check the predictions, pyramidal holes were prepared by anisotropic etching of silicon in potassium hydroxide (KOH) solution. Good agreement between simulation and experiment for LTO layers deposited on these structures was observed. Tungsten LPCVD from tungsten hexafluoride (WF_6) and silane (SiH_4) can be simulated assuming one sticking coefficient. Using a value from literature, good agreement between simulation and published experimental data can be achieved. Isotropic deposition of polysilicon into pyramidal holes was simulated and good agreement with experimental results was observed.

Sputter deposition was simulated assuming a unity sticking coefficient and an isotropic velocity distribution of the metal atoms. Simulations were carried out both for negligible and significant surface diffusion. A model for the description of surface diffusion has been implemented. With increasing surface diffusion length, the conformity of the deposited layers is improved. Simulations of reactive sputtering of TiN into contact holes with different aspect ratios were carried out to determine the bottom coverage of the deposited layers. The results agree well with experimental data from literature.

The basic algorithms, such as those for shifting the surface and for calculating solid angles covered by parts of the surface, allow implementation of physical models for further deposition systems, e.g. evaporation, specific sputter processes (e.g. collimated sputtering)

or other CVD processes. The model equations for calculating the growth rates have to be incorporated into the code to allow determination of the surface movement according to the particular deposition process. In the case of sputtering or evaporation, this mainly concerns geometrical aspects, e.g. additional shadowing by a collimator.

1. Einleitung

Die ständig zunehmende Komplexität von integrierten Schaltkreisen sowie die kleiner werdenden Bauelementedimensionen stellen neue, erhöhte Anforderungen an die technologischen Prozesse, die zur Herstellung von integrierten Schaltungen verwendet werden. Es wird in besonderem Maße wichtig, die Prozesse genau kontrollieren zu können, da sich selbst geringfügige Abweichungen der hergestellten Strukturen massiv im elektrischen Verhalten auswirken können. Die bei der Entwicklung neuer Generationen von Schaltungen anfallenden Kosten steigen mit der Abnahme der Strukturdimension weiter an und die Komplexität der entsprechenden Produktions- und Forschungsstätten nimmt immer mehr zu.

Der Einsatz von Simulationsprogrammen wird in diesem Zusammenhang immer wichtiger, da er zeit- und kostensparende Verfahren bietet, um die Resultate von Technologieprozessen in Abhängigkeit von Prozeß- und Geräteparametern sowie den Einfluß auf die entstehenden Bauelemente zu studieren. Mithilfe von Bauelementesimulatoren zur Berechnung des elektrischen Verhaltens des Bauelementes und Schaltkreissimulatoren zur Ermittlung des Schaltkreisverhaltens können dann die Prozesse in Hinblick auf die Funktionsfähigkeit der Schaltung untersucht und optimiert werden.

Weiterhin erlauben Modelle für die bei den Halbleiterfertigungsprozessen ablaufenden Vorgänge und deren Verwendung in Simulationsprogrammen eine Untersuchung und Klärung der entsprechenden physikalischen oder chemischen Grundlagen, was letztendlich auch für die Verbesserung der Prozesse genutzt werden kann. Auch Untersuchungen, die wegen relativ geringer Erfolgsaussichten, beispielsweise bei neuen Entwicklungen mit erheblichem Risiko, aufgrund der hohen Kosten nicht im Labor durchgeführt würden, können mit Hilfe eines Rechners mit vertretbarem Zeit- und Kostenaufwand realisiert werden.

Die Möglichkeiten zur Durchführung von Simulationen haben sich in den letzten Jahren durch die erheblich gesteigerte Leistungsfähigkeit, sowohl in Hinblick auf die Rechengeschwindigkeit als auch den Speicherplatz der zur Verfügung stehenden Rechner, beträchtlich verbessert. Dies erlaubt die Implementierung auch von umfangreichen und komplexen

Algorithmen, wie sie bei modernen, insbesondere bei dreidimensional (3D) rechnenden, Simulationsprogrammen benötigt werden. Dennoch ist darauf zu achten, daß die verwendeten Algorithmen effizient arbeiten, um sicherzustellen, daß die Simulationen auch auf üblichen an Arbeitsplätzen vorhandenen Rechnern (Workstations) innerhalb akzeptabler Rechenzeiten durchgeführt werden können.

Da es in der Regel schwierig sein wird, von grundlegenden physikalischen Gesetzen auszugehen, um Prozesse auf atomarer Skala zu beschreiben, werden im Bereich der Prozeßmodellierung meist Modelle entwickelt, die physikalische oder chemische Gesetzmäßigkeiten berücksichtigen und anhand von empirischen Untersuchungen an den entsprechenden makroskopischen Systemen auf ihre Eignung für den jeweiligen Prozeß untersucht werden. Mithilfe dieser Modelle, die auf mathematische Gleichungen führen, werden Prozeßsimulationsprogramme erstellt, in denen die Modellgleichungen gelöst werden, um die Ergebnisse von Technologieprozessen zu berechnen. Weiterführende Auswertungen können dann zur Verfeinerung oder unter Umständen auch zur Korrektur des Modells eingesetzt werden.

Eingesetzt werden Prozeßsimulatoren für die Beschreibung von Lithographie, Ätzen, Schichtabscheidung, Epitaxie und Oxidation, d.h. für Prozesse, die mit einer Veränderung der Topographie verbunden sind, sowie für Ionenimplantation und Diffusion, die zum Einbringen bzw. Aktivieren von Dotierungen verwendet werden. Weiterhin kann der Einfluß einer thermischen Behandlung auf spezielle Eigenschaften des Materials, beispielsweise in Hinblick auf Mikrostruktur, Phasenbildung oder auch Modifikationen der Oberfläche durch Materialflüsse, untersucht werden.

Prozesse, welche die Topographie verändern, haben eine hohe Bedeutung hinsichtlich der weiteren Verkleinerung der Bauelementedimensionen. Die erreichbaren Auflösungen, z.B. bei Lithographie- oder Ätzschritten, wirken sich direkt auf die minimal möglichen Größen der Bauelemente aus. Simulatoren für Topographieschritte haben eine entsprechend hohe Bedeutung. Weiterhin ermöglichen diese Programme auch, die Geometrie von Bauelementen oder Kontaktierungsleitungen in geeigneter diskretisierter Form auszugeben, so daß sie beispielsweise für Bauelemente- oder Signalübertragungssimulationen als Eingabeinformation verwendet werden können.

Bei neuen Generationen von integrierten Schaltungen wird die Signalverarbeitungsgeschwindigkeit in immer höherem Maße durch die parasitären Kapazitäten und Widerstände der Kontaktierungsleiterbahnen der Bauelemente bestimmt. Die Kontaktierungen müssen daher so vorgenommen werden, daß diese störenden Einflüsse möglichst gering werden. Hierzu ist es nötig, eine Technologie zur Verfügung zu haben, die neben geeigneten Dielektrika mit niedrigen Dielektrizitätskonstanten für Zwischenisolierungsschichten auch die Herstellung von Leiterbahnen mit geringem Durchmesser ermöglicht. Hiermit sind jedoch Probleme verbunden, die z.B. durch die höhere Anfälligkeit für Elektromigration oder durch die Schwierigkeit, schmale und tiefe Kontaktlöcher aufzufüllen, hervorgerufen werden. Hier ergeben sich wichtige Anwendungen für Programme zur Topographiesimulation, um Prozesse wie das Ätzen oder das Auffüllen von Kontaktlöchern zu berechnen. Auftretende Gaseinschlüsse nach Abscheidung eines Metalls in ein Kontaktloch können vorausbestimmt werden, und die Prozesse können hinsichtlich der Minimierung der Einschlüsse verbessert werden. Die Oberfläche der abgeschiedenen Schicht steht in diskretisierter Form zur Verfügung und kann als Eingabe für Simulatoren zur Berechnung des elektrischen oder thermischen Verhaltens verwendet werden.

Eine andere Anwendung ist die Abscheidung von Siliciumdioxid (SiO_2) in Isolationsgräben, wo eine nicht gleichförmige Schichtdicke kritisch ist, da nach Schließen des Grabens, z.B. durch Auffüllen des Grabens mit Polysilicium, Gaseinschlüsse zurückbleiben können, die bei nachfolgenden Ätzschritten wieder geöffnet werden und damit negative Einflüsse haben könnten.

Früher war in vielen Fällen eine zweidimensionale (2D) Beschreibung der Geometrie für Simulationen mit akzeptabler Genauigkeit ausreichend. Man konnte davon ausgehen, daß sich die betrachtete Struktur in einer Raumdimension nur sehr wenig oder gar nicht ändert. Im Zusammenhang mit Bauelementen, die Abmessungen von einigen Mikrometern hatten, war diese Annahme oft gerechtfertigt. Für aktuelle Strukturdimensionen im Submikrometer-Bereich stellt die zweidimensionale Betrachtungsweise in der Regel keine befriedigende Näherung mehr dar. Es ist daher nötig, auf 3D-Simulationsprogramme umzustellen. An diese Programme sind als Anforderungen zu stellen, daß sie über eine geeignete Datenstruktur zur Repräsentierung beliebiger Strukturen verfügen, und daß die Berechnungen entsprechend der verwendeten Modelle vollständig dreidimensional sind.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein 3D-Topographiesimulator entwickelt und ein physikalisches Modell für die chemische Niederdruckgasphasenabscheidung (LPCVD) implementiert. Dieses Modell war für die Verwendung in 2D-Prozeßsimulatoren entwickelt [Wil92a][Isl91][Cal90a][Cal91a] und für verschiedene Abscheidesysteme, z.B. Siliciumdioxid [Wil92b][Wil92c], Wolframsilicid [Sai92][Has93] und Wolfram [Has93], anhand von Messungen an 2D-Geometrien, d.h. langen Gräben, experimentell bestätigt worden. Hier bietet sich damit die Möglichkeit, die extrahierten Parameter, die auch für den dreidimensionalen Fall gültig sein müssen, wenn das Modell die Vorgänge korrekt beschreibt, für die 3D-Simulationen zu verwenden, um die Ergebnisse der entsprechenden Abscheideprozesse für 3D-Geometrien wie z.B. tiefe Kontaktlöcher vorauszusagen und damit Messungen, die für 3D-Strukturen in der Regel mit beträchtlichen Schwierigkeiten verbunden sind, zu ersetzen. Die Möglichkeit, physikalische Modelle durch 2D-Messungen zu kalibrieren und dann mit Hilfe der gewonnenen Parameter 3D-Simulationen durchzuführen, um damit schwierige oder gar nicht durchführbare Messungen zu ersetzen, gilt nicht nur für die Simulation von Topographieprozessen sondern allgemein und stellt einen wichtigen Aspekt der 3D-Prozeßsimulation dar. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das LPCVD-Modell durch spezielle Parameterwahl ebenfalls zur Simulation der Schichtabscheidung durch Sputtern eingesetzt, wobei Simulationen ohne und mit Berücksichtigung von Oberflächendiffusion der Metallatome durchgeführt wurden.

2. Grundlagen der chemischen Gasphasenabscheidung

2.1 Herstellung dünner Schichten

Dünne Schichten treten bei der Herstellung hochintegrierter Schaltkreise in großer Vielfalt auf und besitzen eine hohe Bedeutung hinsichtlich ihrer Eigenschaften. Diese können sich in erheblichem Maße von denen des massiven Körpers aus dem gleichen Material unterscheiden. Der Grund hierfür liegt in den Proportionen einer dünnen Schicht, da die Eigenschaften entscheidend von Oberflächeneffekten bestimmt werden. Auch die Methode der Herstellung ist von erheblicher Bedeutung für die sich ergebenden Eigenschaften. Die Struktur abgeschiedener Schichten kann von einkristallin bei der Epitaxie über polykristallin bis hin zu amorph sein.

Man kann die Verfahren zur Herstellung von dünnen Schichten in zwei Kategorien einteilen. Bei den Verfahren der ersten Kategorie wird eine Schicht durch Wechselwirkung mit dem Substratmaterial im Sinne einer chemischen Reaktion aufgebracht. Dies trifft zum Beispiel auf den Vorgang der Oxidation zu, wo sich das Oxid durch Reaktion von angeliefertem Sauerstoff und Substratmaterial bildet.

Die andere Klasse von Verfahren sind solche, bei denen keine direkte Reaktion mit dem Substratmaterial stattfindet. Oberflächeneigenschaften können natürlich dabei durchaus einen Einfluß auf die ablaufenden Vorgänge haben. Unter diese Kategorie fallen die physikalischen (physical vapor deposition, PVD) und die chemischen (chemical vapor deposition, CVD) Verfahren. Bei den PVD-Verfahren wird Material auf physikalischem Wege, z.B. durch Sputtern oder durch Elektronenbeschuß, von einem Festkörper abgetragen, lagert sich an der Oberfläche des Substrates an und führt damit zur Schichtbildung. Bei den CVD-Verfahren werden Gasphasenbestandteile an der Oberfläche oder im Gasvolumen zur Reaktion gebracht. Das Reaktionsprodukt bildet den aufwachsenden Film. Weiterhin kann eine dünne Schicht auch noch durch Aufbringen einer Flüssigkeit und anschließendes Trocknen hergestellt werden.

Für die Verwendung in integrierten Schaltkreisen müssen die abgeschiedenen Filme bestimmten Kriterien genügen. Erwünscht sind in der Regel eine gleichmäßige Dicke über

eine Halbleiterscheibe, gute Kantenbedeckung, gute Haftung, hohe Reinheit, steuerbare Zusammensetzung bzw. Stöchiometrie, möglichst wenige Unregelmäßigkeiten des Materials auf mikroskopischer Skala, sowie gute elektrische Eigenschaften. Die chemische Gasphasenabscheidung (CVD) bietet in dieser Hinsicht viele Vorteile, wie zum Beispiel die Möglichkeit, die chemische Zusammensetzung zu variieren, die hohen erreichbaren Reinheiten der Schichten, sowie eine wirtschaftliche und gut kontrollierbare Prozeßführung.

2.2 Chemische Gasphasenabscheidung

Einen CVD-Prozeß kann man in mehrere Schritte unterteilen. Die Gasmischung wird in eine Reaktionskammer gebracht. Es können Reaktionen in der Gasphase stattfinden, die bestimmte Zwischenprodukte liefern. Die Moleküle der eingeleiteten Gase sowie eventuelle Zwischenprodukte bewegen sich zum Substrat und werden dort adsorbiert. Durch eine Reaktion können die Teilchen in den Film eingebaut werden und somit zum Schichtwachstum führen. Die bei den Reaktionen entstehenden Nebenprodukte diffundieren vom Substrat weg und werden durch die Gasströmung abgeführt. Finden Reaktionen in der Gasphase statt, spricht man von homogenen Reaktionen, finden sie direkt an der Substratoberfläche statt, sind es heterogene Reaktionen. Für eine gute Schichtqualität sind in der Regel heterogene Reaktionen zur Bildung des abzuscheidenden Materials erwünscht. Es können aber auch in der Gasphase durch homogene Reaktionen Zwischenprodukte gebildet werden, die nach einer Reaktion an der Oberfläche des Substrates, d.h. einer heterogenen Reaktion, zur Abscheidung des Materials führen.

Je nachdem, ob die Anlieferung der Bestandteile, die zur Reaktion gebracht werden, an die Oberfläche oder die Reaktionsrate der bestimmende Schritt für die resultierende Abscheiderate ist, spricht man von massentransportbegrenzter bzw. reaktionsbegrenzter Abscheidung. Die Massentransportrate hängt nur relativ schwach von der Temperatur ab, während die Reaktionsrate einem Arrhenius-Gesetz folgt. Daher begrenzt bei tiefen Temperaturen die Reaktionsrate und bei höheren der Massentransport die Abscheiderate. Für eine gleichmäßige Beschichtung ist im ersten Fall eine möglichst konstante Temperatur anzustreben, im zweiten Fall ist auf eine gleichmäßige Versorgung mit den Reaktions-

gasen zu achten. Je nach dem Druck, bei dem ein CVD-System betrieben wird, unterscheidet man Atmosphärendruck (atmospheric pressure CVD, APCVD)-Systeme und Niederdruck (low pressure CVD, LPCVD)-Systeme. APCVD-Systeme arbeiten oft massentransportbegrenzt, während bei LPCVD-Systemen aufgrund des hohen Diffusionskoeffizienten der Moleküle bei reduziertem Druck in der Regel von einer reaktionsbegrenzten Abscheidung auszugehen ist.

Ein CVD-Abscheidesystem besteht im wesentlichen aus einer beheizten oder anderweitiger Energiezufuhr ausgesetzten Reaktionskammer (auch Reaktor genannt), in welche die Prozeßgase, deren Einlaßrate mittels Massenfluß-Kontrollgeräten gemessen und eingestellt werden kann, kontinuierlich zugeführt werden. Die bei der Abscheidereaktion entstehenden Nebenprodukte sowie unverbrauchte Reaktionsgase und gegebenenfalls Trägergase werden ebenfalls kontinuierlich aus der Reaktionskammer abgepumpt.

CVD-Systeme werden in verschiedene Kategorien eingeteilt. Neben der Differenzierung hinsichtlich des Druckes, bei dem sie betrieben werden (wie oben erläutert), unterscheidet man Heißwand- und Kaltwandreaktoren, je nachdem ob die Wände der Reaktionskammer mit erwärmt werden, wie bei der Beheizung mittels eines Widerstandes, oder nicht. Kaltwandreaktoren haben den Vorteil, daß an den Wänden keine Schicht abgeschieden wird und damit die regelmäßigen Reinigungsprozeduren des Systems, die bei Heißwandreaktoren erforderlich sind, entfallen. Die Beheizung kann bei den Kaltwandreaktoren z.B. durch Lampen erfolgen, welche die Scheiben, auf denen abgeschieden wird, nicht aber die Wände des Reaktors erwärmen. Dies ist bei der schnellen thermischen CVD (rapid thermal CVD, RTCVD) der Fall. Weiterhin ist es möglich, Suszeptoren (Substrathalter) zu verwenden, die sich durch die Strahlung der Lampen erwärmen. Eine zusätzliche Kühlung der Reaktorwände (durch Wasser oder Gas) kann in beiden Fällen noch erforderlich sein.

Im Fall der LPCVD-Systeme werden neben der Methode der Beheizung durch einen Widerstand noch andere Methoden der Energiezufuhr angewendet, um bei niedrigerer Temperatur eine akzeptable Reaktionsfreudigkeit der Prozeßgase und damit eine hinreichend große Abscheiderate zu erreichen. Die niedrige Temperatur ist erwünscht, um Schädigungen des Substrates, z.B. an Aluminiumleiterbahnen, wie sie bei zu hohen

Temperaturen auftreten können, zu verhindern.

Bei der plasmaunterstützten CVD (plasma enhanced CVD, PECVD) wird eine Niederdruck-Glimmentladung zur Erzeugung einer hohen Konzentration von reaktiven freien Radikalen benutzt. In der Regel wird das Plasma durch eine Hochfrequenzentladung erzeugt. Temperaturen ab etwa 200 °C ermöglichen dann die Abscheidung mit hinreichender Abscheiderate und akzeptabler Schichtqualität. Die bei PECVD auftretenden Abscheidereaktionen sind sehr verschiedenartig und komplex, so daß PECVD-Schichten in der Regel nicht stöchiometrisch zusammengesetzt sind. Weiterhin kann der Einschluß von Nebenprodukten in die Schichten ein Problem darstellen. Photonenerstütztes CVD (photon induced CVD, PHCVD) bietet die Möglichkeit, bei besonders niedrigen Temperaturen bis hinab zu Raumtemperatur arbeiten zu können. Photonen mit hoher Energie und Intensität werden dabei entweder zum Heizen der Substratoberfläche oder zum Dissoziieren und Anregen der Moleküle verwendet. Die Anregung der Moleküle kann auch über einen beigemischten Katalysator, in der Regel ist das Quecksilberdampf, erfolgen. Bei Anregung der Gasmoleküle sind besonders niedrige Substrattemperaturen erreichbar. Als Photonenquellen werden entweder UV-Lampen, meistens Niederdruckentladung-Quecksilberlampen, oder Excimer-Laser verwendet.

Da die Abscheidung bei LPCVD-Prozessen in der Regel reaktionsbegrenzt stattfindet, ist die genaue Kontrolle der Gasflüsse nicht so kritisch wie die Regelung der Temperatur, die meist einfacher zu handhaben ist, und die Systeme können auf eine größere Kapazität von Scheiben, die gleichzeitig prozessiert werden, ausgelegt werden.

Ein Beispiel für einen Reaktor, wie er in vielen Fällen bei LPCVD-Prozessen eingesetzt wird, ist in Abb. 2.1 dargestellt. Es handelt sich um einen Horizontalrohr-Heißwand-LPCVD-Reaktor, bei dem die Erwärmung mittels einer 3-Zonen-Widerstandsheizung durchgeführt wird. Die Scheiben stehen aufrecht in Quarzglas-Booten und haben einen Abstand von typischerweise 10 mm. Die Aufnahmekapazität derartiger Reaktoren kann bis zu 200 Scheiben betragen. Bei dem gezeigten System werden die Prozeßgase auf der linken Seite zugeführt und rechts am anderen Ende des Rohres abgepumpt. Die Beschikung des Systems erfolgt durch die Tür auf der linken Seite des Reaktors. Eine Abnahme der Reaktandenkonzentration längs des Rohres durch den Verbrauch zur Schichtabschei-

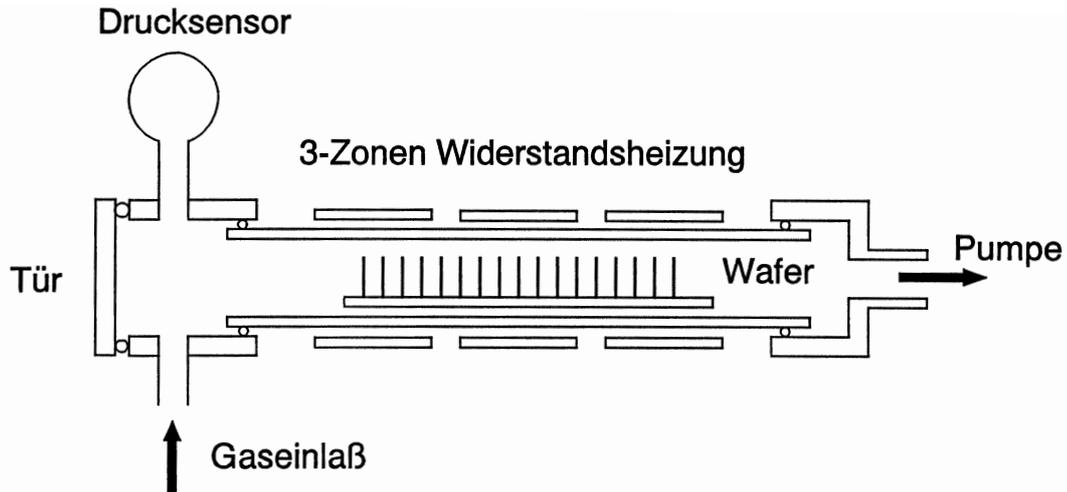


Abb. 2.1 Horizontalrohr-Heißwand-LPCVD-Reaktor [Kle95].

nung kann durch ein Temperaturgefälle entlang des Rohres ausgeglichen werden, wobei eine Abhängigkeit der Schichteigenschaften von der Abscheidetemperatur problematisch sein kann. Eine Alternative besteht darin, die Reaktandenverarmung dadurch zu reduzieren, daß die Gase an mehreren Stellen, verteilt über das Rohr, durch sogenannte Injektoren eingeführt werden, so daß die Temperatur im gesamten Rohr auf einem Wert gehalten werden kann.

Die Substanzen, die mittels CVD-Prozessen in der Halbleitertechnologie abgeschieden werden, sind hauptsächlich Polysilicium, Siliciumdioxid, Siliciumnitrid, aber auch Metalle. Polysilicium wird bei Niederdruck und Temperaturen zwischen 550 und 650 °C durch die thermische Zersetzung von Silan (SiH_4) abgeschieden. Siliciumdioxid (SiO_2) kann in verschiedenen Temperaturbereichen und bei verschiedenen Drücken abgeschieden werden. Bei der Tieftemperaturabscheidung (300 bis 450 °C) durch LPCVD, APCVD oder PECVD wird SiH_4 mit Sauerstoff zur Reaktion gebracht. Im mittleren Temperaturbereich (650 bis 750 °C) wird SiO_2 in LPCVD-Prozessen durch die Zersetzung von Tetraethylorthosilicat ($\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$, auch TEOS genannt) abgeschieden. Bei hohen Temperaturen um 900 °C kann SiO_2 (high-temperature-oxide: HTO) in einem LPCVD-Prozeß durch die Reaktion von Dichlorsilan mit Distickstoffoxid gebildet werden. Siliciumnitrid kann in LPCVD-Prozessen bei 700 bis 800 °C durch Reaktion von Dichlorsilan mit Ammoniak oder in PECVD-Prozessen bei 200 bis 400 °C durch Reaktion von Silan mit Ammoniak oder Stickstoff abgeschieden werden.

CVD-Verfahren werden in letzter Zeit auch vermehrt zur Abscheidung der Metalle Wolfram [Hai95], Kupfer [Tor95] und Titan [Web95] sowie von Titanitrid [Web95] oder Wolframsilicid [Sai92] eingesetzt, da sie den Sputter- und Aufdampfverfahren hinsichtlich der Kantenbedeckung der abgeschiedenen Schichten deutlich überlegen sind. Dies kommt insbesondere bei Kontaktlöchern mit großem Verhältnis von Tiefe und Durchmesser, die bei hochintegrierten Schaltungen auftreten und besonders schwierig aufzufüllen sind, zum Tragen. Weiterhin können auch die Dielektrika Tantalpentoxid (Ta_2O_5) [Rau93a] und Titandioxid (TiO_2) [Rau93b] mittels CVD-Prozessen abgeschieden werden.

In Kap. 6 wird die Anwendung des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programmes zur 3D-Simulation der Topographie von Schichten, die mit LPCVD abgeschieden wurden, anhand der LPCVD von Niedertemperaturoxid (LTO), anhand der LPCVD von Wolfram aus Wolframhexafluorid (WF_6) und SiH_4 und anhand der LPCVD von Polysilicium erläutert, und es werden Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten verglichen.

3. Simulation von Topographieprozessen

Die Topographiesimulation im Bereich der Halbleitertechnologie befaßt sich mit allen Prozeßschritten, die eine Veränderung der Geometrie der betrachteten Struktur herbeiführen. Darunter zu rechnen sind Lithographie, Ätzen, Schichtabscheidung und in bedingtem Maße auch Epitaxie und Oxidation. Bei der Epitaxie müssen dabei noch die strukturellen Eigenschaften ermittelt werden, bei der Oxidation müssen die Konzentration des Sauerstoffs und sich ausbildende Spannungen im Material ebenfalls simuliert werden.

Zweidimensionale Simulatoren, welche die Simulation von Topographieschritten ermöglichen, stehen in ausgereifter Form zur Verfügung, z.B. STORM [Lor93], SPEEDIE [McV90], EVOLVE [Zir93] oder SIMBAD [Smy91]. Auf dem Gebiet der dreidimensionalen Topographiesimulation sind verschiedene, zum Teil kommerziell erhältliche Programme zur Simulation der Lithographie vorhanden, z.B. SOLID [Hen90] und SAMPLE [Sch93], während im Bereich Ätzen und Schichtabscheidung die entsprechenden Programme größtenteils noch im Entwicklungsstadium sind.

Besonders wichtig ist die Anwendung der dreidimensionalen Topographiesimulation für Geometrien, bei denen eine 2D-Beschreibung bzw. Modellrechnung zu sehr großen Fehlern führt. Dies sind z.B. tiefe Kontaktlöcher, bei denen die Berechnungen, die aus dem verwendeten Modell resultieren, dreidimensional durchgeführt werden müssen. Unter der Annahme, daß es sich bei dem betrachteten Loch um eine rotationssymmetrische Geometrie handelt, kann die Topographiebeschreibung jedoch zweidimensional vorgenommen werden, da die Geometrie durch Definition ihres Querschnittsprofils vollständig bestimmt ist. Programme, die 3D-Modellrechnungen und 2D-Geometriebeschreibung verwenden [Cal90b][Wul91], sind damit eingeschränkt auch für 3D-Geometrien verwendbar.

Im allgemeinen Fall läßt sich die Geometrie einer Struktur aber nicht durch ein 2D-Profil beschreiben. Ein einfaches Beispiel hierfür ist bereits ein würfelförmiges Kontaktloch, das zwar eine gewisse Symmetrie aufweist, jedoch insbesondere nach Aufwachsen einer ungleichmäßig dicken Schicht nicht mehr vollständig durch ein 2D-Profil beschrieben werden kann. In der Regel wird man also darauf angewiesen sein, sowohl das Modell als

auch die Geometrie dreidimensional zu behandeln.

Im folgenden werden die beiden hauptsächlich verwendeten Ansätze zur Topographiediskretisierung beschrieben und hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit für bestimmte Topographieprozesse diskutiert.

Zusätzlich gibt es noch das sogenannte Ray-Trace Verfahren [Jew77][Mat85], das überwiegend zur Simulation von Lithographieprozessen eingesetzt wird und bei dem eine Oberfläche oder Grenzfläche durch eine Menge von Punkten beschrieben wird, die während der Simulation auf Trajektorien bewegt werden, welche aus dem jeweils verwendeten Modell berechnet werden.

3.1 Zelluläre Topographiebeschreibung

Bei der zellulären Topographiebeschreibung einer geometrischen Anordnung von Materialien wird das Gebiet, das für die Simulation von Interesse ist, in einzelne Zellen aufgeteilt. Im einfachsten Fall sind diese Zellen Quadrate (2D) oder Würfel (3D). Jeder Zelle wird dabei ein bestimmter Materialindex zugeordnet, wodurch die resultierende Struktur vollständig charakterisiert ist und eine explizite Angabe von Grenzflächen zwischen verschiedenen Materialien nicht mehr notwendig ist. Bestimmte Programme verwenden zusätzlich eine explizite Charakterisierung der Grenzzellen, um den Diskretisierungsfehler zu vermindern, indem z.B. für jede Zelle ein Zähler gesetzt wird, der es ermöglicht, eine Zelle, die nicht vollständig mit Material gefüllt ist, zu beschreiben [Hen90].

Angewandt wurde die Zellendiskretisierung zunächst hauptsächlich zur Simulation von Lithographieschritten [Jon81][Hen90], dient aber mittlerweile auch als Grundlage für Simulatoren, die Ätz- oder Abscheideprozesse simulieren [Str95][Sch94]. Modifizierte Zellbeschreibungen verwenden allgemeine quaderförmige Zellen [Wes94], die je nach den notwendigen Genauigkeitsanforderungen entsprechend verfeinert und angepaßt werden.

Beispiele für zelluläre Topographiediskretisierungen sind in Abb. 3.1 und Abb. 3.2 gezeigt. Es handelt sich dabei um die Diskretisierung eines zylinderförmigen Kontaktlo-

ches. Für die 2D-Diskretisierung, bei der die Querschnittsfläche der Geometrie durch quadratische Zellen repräsentiert wird, ist das Ergebnis in Abb. 3.1 gezeigt. Die eingezeichneten Zellen stellen Materialzellen (z.B. Silicium) dar, während das Vakuum (oder Gas) ebenfalls in Zellen der gleichen Größe unterteilt ist, die der Übersicht wegen nicht mit eingezeichnet sind. Die 3D-Beschreibung verwendet Würfel, um die Geometrie darzustellen. In Abb. 3.2 ist die Grenzfläche zwischen Material und Vakuum dargestellt.

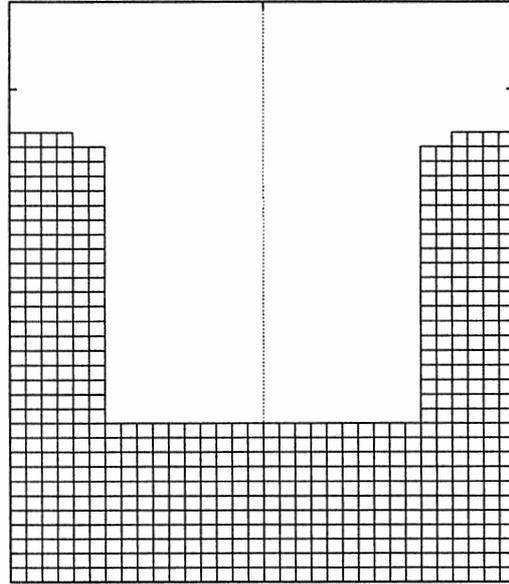


Abb. 3.1 2D-Darstellung eines Kontaktloches, diskretisiert mit quadratischen Zellen.

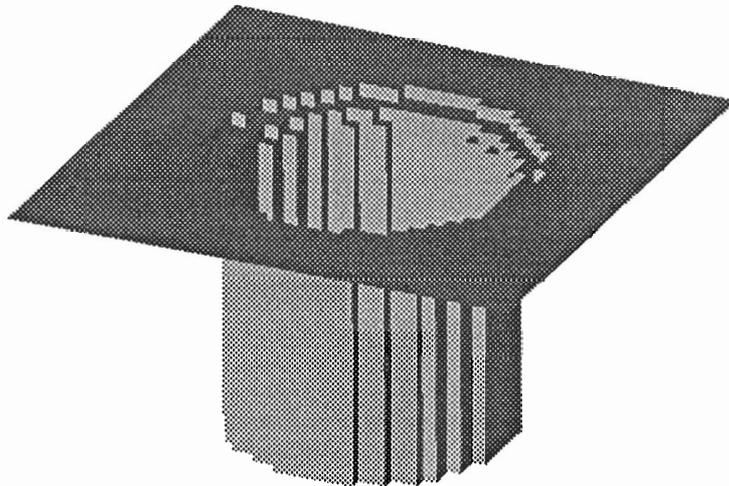


Abb. 3.2 3D-Darstellung eines Kontaktloches, das mit Würfeln diskretisiert ist. Dargestellt ist die Grenzfläche zwischen Material und Vakuum.

Aus den Darstellungen ist auch erkennbar, daß die Aufnahme der entsprechenden Datensätze erheblichen Speicherplatz benötigt, da innerhalb der einzelnen Materialien alle Zellen explizit mit dem jeweiligen Materialindex versehen abgespeichert werden müssen. Für eine hinreichend gute Auflösung, z.B. für eine detaillierte Darstellung eines Kontaktloches, muß man im dreidimensionalen Fall von einer Zellenzahl von etwa 10^6 ausgehen. Das Simulationsgebiet wird dabei in jeder Raumrichtung in etwa 100 diskrete Abschnitte unterteilt. Darstellungen mittels verschieden großer Würfel oder Quader reduzieren diesen Bedarf, erfordern aber höheren Implementierungsaufwand und längere Rechenzeiten bei der Behandlung.

Ein weiteres Problem bei der Zellendiskretisierung ist, daß die Oberflächen und Grenzflächen eine künstliche Stufung aufweisen, die, neben Problemen hinsichtlich des Speicherplatzes für eine genaue Beschreibung, zu prinzipiellen Problemen bei der Implementierung bestimmter Modelle führen kann. Die Normalenrichtung, die bei vielen Modellen benötigt wird, ist nicht direkt aus der Diskretisierung zu ermitteln, sondern es sind spezielle zusätzliche Algorithmen erforderlich. Eine Möglichkeit, die Normalenrichtung an einem Oberflächenpunkt zu bestimmen, besteht darin, in einem gewissen Raumbereich um den Punkt herum die Normalenrichtungen der exponierten Zellenflächen zu mitteln [Lei95]. Ein schwieriger zu lösendes Problem ist, daß die Oberflächenelemente der durch Zellen diskretisierten Oberfläche keine realen Oberflächenelemente repräsentieren. Auch die Gesamtoberfläche der diskretisierten Struktur liegt in nicht planaren Gebieten in der Regel über dem Wert für die reale Oberfläche. Diese Phänomene sind zweidimensional in Abb. 3.3 am Beispiel eines V-förmigen Grabens demonstriert.

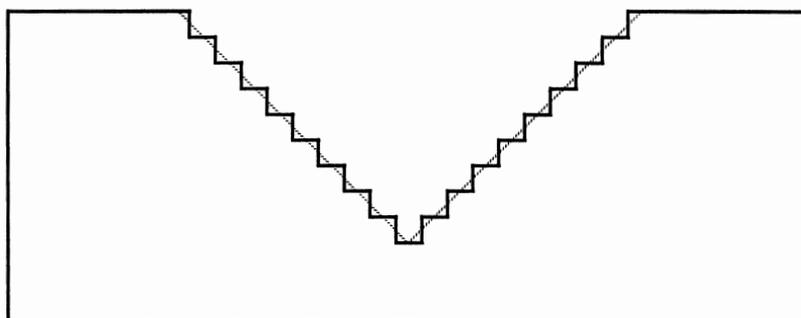


Abb. 3.3 2D-Diskretisierung eines V-förmigen Grabens. Durchgezogene Linie: Oberfläche der diskretisierten Struktur; gestrichelte Linie: reale Struktur.

Eingezeichnet sind die reale Oberfläche und die Oberfläche der diskretisierten Struktur. Die Oberfläche im Bereich der Seitenwände des Grabens, wie sie sich bei der diskretisierten Struktur ergibt, ist um einen Faktor von etwa 1,4 größer als die Oberfläche der realen Struktur. Dazu kommt noch, daß die Orientierungen der Oberflächenelemente der diskretisierten Struktur nicht die Orientierung der realen Oberfläche wiedergeben, da sie stets in Richtung der Koordinatenachsen zeigen. Diese künstliche Vergrößerung der Oberfläche und Modifizierung der Normalenrichtung führt dazu, daß Modelle, die mit Teilchenbilanzen und Adsorptions- und Emissionsraten bezogen auf Flächen und Flächenorientierung rechnen, nicht oder nur unter paralleler Verwendung einer polygonalen Diskretisierung angewandt werden können. Beispielsweise wäre für die Struktur in Abb. 3.3 unter Annahme einer konstanten richtungsunabhängigen Zahl eintreffender Teilchen pro Zeit und Fläche die angelieferte Teilchenzahl im Bereich der Grabenflanken für die diskretisierte Struktur etwa 1,4 mal so groß wie für die reale Struktur. Für die Implementierung von Modellen, die eine Oberflächendiskretisierung mit realen Flächenelementen erfordern, ist es daher zweckmäßig, auf polygonale Oberflächendiskretisierungen zurückzugreifen.

Zur Simulation von Prozessen mit einer durch Zellen gegebenen Geometrie müssen entsprechend dem verwendeten Modell Zellen entfernt (bei Ätzprozessen oder Entwicklung von Fotolack) oder hinzugefügt werden (bei Abscheideprozessen). Die Entfernung bzw. Hinzufügung der Zellen während der Simulation hängt dann von der Abtrage- bzw. Abscheiderate, von der Simulationszeit und von der Zahl der zum angreifenden bzw. als Quelle für die Abscheidung agierenden Medium hin freien Flächen der jeweils betrachteten Zelle ab. Zusätzlich kann die Oberflächennormalenrichtung Berücksichtigung finden, um z.B. einen anisotropen Ätzprozeß mit richtungsabhängiger Ätzrate zu simulieren.

Eine andere Methode [Str95] verwendet sogenannte strukturierende Elemente, deren räumliche Abmessungen von der jeweiligen Abtrage- bzw. Abscheiderate abhängen. Im zweidimensionalen Fall ist ein solches Element ein Kreis oder eine Ellipse, im dreidimensionalen Fall eine Kugel oder ein Ellipsoid. Bei der Simulation werden dann die Zellen entfernt bzw. hinzugefügt, die innerhalb der Elemente liegen, wobei die Mittelpunkte der Elemente auf die Mittelpunkte der Oberflächenzellen gesetzt werden.

Angewandt wird die Zellendiskretisierung auch zur Monte-Carlo-Simulation von Abscheideprozessen. Ein Ansatz zur Simulation der chemischen Gasphasenabscheidung (CVD) [Cor94] benutzt repräsentative Teilchen, die auf einem 2D-Zellen-Gitter bewegt werden. Berücksichtigt werden dabei Stöße zwischen Teilchen im Gas, Stöße zwischen Teilchen und der Oberfläche, sowie die Bewegung von Teilchen entlang der Oberfläche. Die Zahl der Stöße zwischen Teilchen im Gas hängt ab von der Knudsen-Zahl K_n (definiert als das Verhältnis zwischen mittlerer freier Weglänge der Teilchen im Gas und der Strukturbreite). Für sehr große K_n können die Stöße zwischen Teilchen gegenüber denen der Teilchen mit der Struktur vernachlässigt werden. Dieser Grenzfall ist bei niedrigen Drücken (z.B. bei LPCVD-Prozessen) gegeben. Für die Beschreibung der Teilchenstöße mit der Wand wird die sogenannte Haftwahrscheinlichkeit verwendet, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Teilchen nach Auftreffen auf eine Wand in den aufwachsenden Film eingebaut wird. Zur Verbesserung der Genauigkeit wird das Simulationsgebiet in der Nähe der Oberfläche in eine feinere Zellenstruktur unterteilt. Ein Beispiel für eine solche Simulation [Cor94] ist in Abb. 3.4 dargestellt.

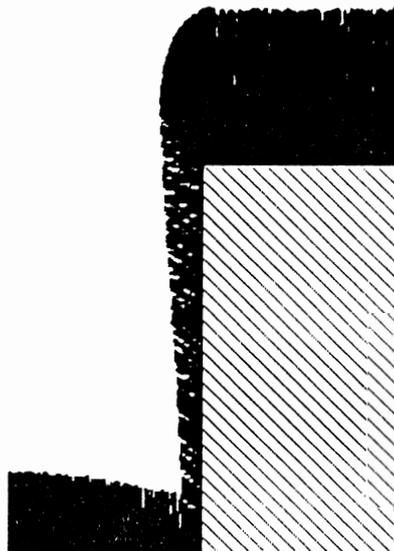


Abb 3.4 Monte-Carlo-Simulation von CVD-Abscheidung in einen langen Graben. Knudsen Zahl = 0,1; Haftwahrscheinlichkeit = 1,0 [Cor94].

Es handelt sich dabei um die Simulation einer CVD-Abscheidung für einen unendlich lang ausgedehnten Graben unter Annahme einer Knudsen Zahl von 0,1 und einer Haftwahrscheinlichkeit von 1, d.h. jedes auf eine Wand auftreffende Teilchen wird in die

aufwachsende Schicht eingebaut. Ferner wurde der Einfluß der Oberflächendiffusion vernachlässigt, d.h. die Bewegung der Teilchen entlang der Oberfläche blieb unberücksichtigt. Die Struktur wurde als symmetrisch bezüglich der Grabenmitte angenommen. Man erkennt, daß es mit dieser Methode möglich ist, die Mikrostruktur der abgeschiedenen Filme zu simulieren. Ein weiterer Vorteil dieses Verfahrens ist es, daß Stöße zwischen den Teilchen im Gas oder Oberflächendiffusion einfach mitsimuliert werden können. Ein Hauptproblem bei den Monte-Carlo-Verfahren ist jedoch der hohe Bedarf an Rechenleistung, insbesondere bei Geometrien, bei denen keine bestimmten Symmetrien vorliegen und die damit vollständig dreidimensional behandelt werden müssen. Für Rechnungen wie das gezeigte Beispiel werden auf einer modernen Workstation Zeiten um 1 Stunde benötigt [Cor94], während analytische Simulationen [Wil92a] mit Rechenzeiten von kleiner als 1 Minute auskommen.

3.2 Segmentäre Topographiebeschreibung

3.2.1 Zweidimensionale Diskretisierung

Die geometrische Anordnung von Materialien kann zweidimensional beschrieben werden, indem ein Querschnitt des Systems betrachtet wird. Unter der Voraussetzung, daß Änderungen in der dritten Raumrichtung senkrecht zum betrachteten Querschnitt vernachlässigbar sind bzw. die Topographie durch Angabe des Querschnittsprofils vollständig charakterisiert ist, wie dies bei langen Gräben oder rotationssymmetrischen Anordnungen der Fall ist, reicht diese Beschreibung aus, um Simulationen von Topographieschritten durchzuführen.

Bei der 2D-Diskretisierung werden nur die Grenzflächen und Oberflächen explizit dargestellt bzw. diskretisiert. In der Regel werden dazu Polygonzüge verwendet, d.h. Ketten von Punkten in der Ebene, die durch Geradenstücke (Segmente) miteinander verbunden sind, stellen eine näherungsweise Beschreibung der entsprechenden Ober- oder Grenzfläche dar. Die Zahl der Punkte muß so groß gewählt werden, daß die Abweichungen zwischen wirklicher und diskretisierter Geometrie vernachlässigbar sind. Ein einfaches Beispiel für eine 2D-Diskretisierung ist in Abb. 3.5 dargestellt. Es handelt

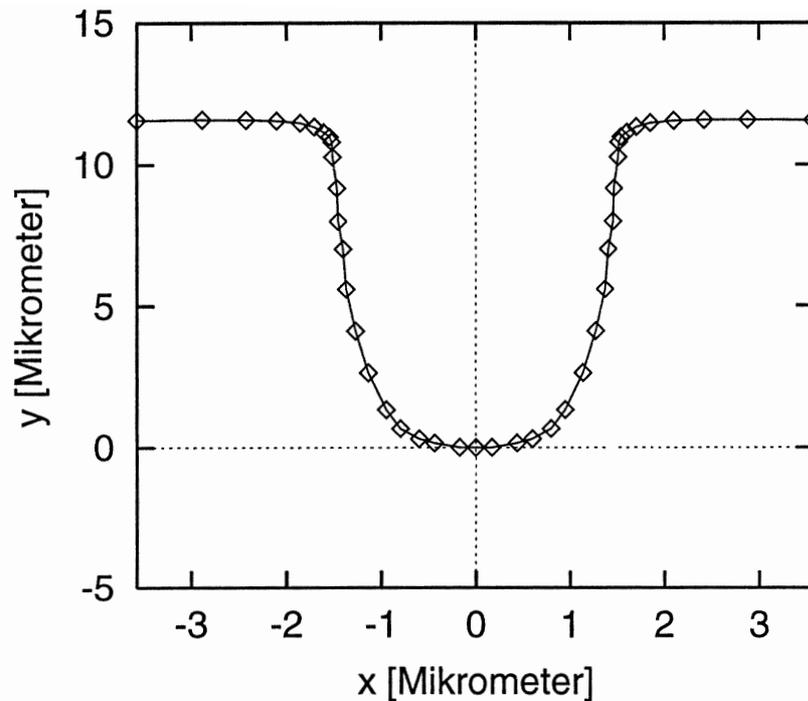


Abb. 3.5 2D-Diskretisierung eines Grabens durch einen Polygonzug.

sich um einen Graben in einem Material, für den die Diskretisierung des Querschnittes der Grenzfläche zwischen dem Material (z.B. Silicium) und Vakuum durch einen Polygonzug ausreichend zur Beschreibung des Systems ist. Eingezeichnet sind die Punkte und die Polygonsegmente, die sie verbinden. Man erkennt, daß der Punktabstand bzw. die Segmentlänge kleiner sein muß in den Gebieten, in denen sich die Topographie stark ändert, z.B. an den Oberkanten des Grabens, d.h. dort, wo eine genaue Beschreibung der Geometrie eine verfeinerte Diskretisierung erfordert.

Die Möglichkeit der Adaption ist ein Vorteil der polygonalen Topographiebeschreibung im Vergleich zur Zello-diskretisierung, wo diese Option im Falle einer festen Zellengröße nicht besteht und die Beschreibung durch verschiedene Zellengrößen in der Regel mit beträchtlichem Implementierungsaufwand verbunden ist. Für die Abspeicherung der Geometrie ist es bei der vorliegenden polygonalen Diskretisierung ausreichend, einen Satz von etwa 40 Punkten in der Ebene abzuspeichern. Eine Diskretisierung mit der gleichen Auflösung, abgesehen von der artifiziellen Stufung der Oberfläche, durch Zellen würde erheblich mehr Speicherplatz benötigen, da explizit jede Stelle des Simulationsgebietes durch einen den jeweiligen Zellen zugehörigen Materialindex beschrieben werden müßte.

Weiterhin ist erkennbar, daß keine künstliche Modifizierung der Oberfläche stattfindet. Die einzelnen Segmente entsprechen in guter Näherung Stücken des realen Querschnittsprofils. Die Normalenrichtung für jede Stelle der Oberfläche kann einfach berechnet werden. Für jedes Segment wird dazu seine Senkrechte verwendet, und die Normalenrichtung in den Punkten wird durch Mitteln der Normalenrichtungen der jeweils angrenzenden Segmente bestimmt.

Für die Simulation von Topographieprozessen ist es nötig, die diskretisierte Oberfläche zu verschieben. Der erste Algorithmus dafür wurde zur Simulation von Ätzprozessen entwickelt [Jew79]. Die Verschiebung der Oberfläche kann punktweise oder segmentweise entsprechend den vorgegebenen Ätz- oder Abscheideraten vorgenommen werden.

Bei der punktweisen Verschiebung wird man in der Regel in Richtung der gemittelten Normalen der an einen Punkt angrenzenden Segmente verschieben. Der Betrag der Verschiebung kann aus einer Rate, die direkt für den Punkt vorgegeben ist, beispielsweise einer ortsabhängigen Ätzrate, oder aus einer Mittelung der Raten, die für die angrenzenden Segmente gelten, bestimmt werden. Während der Algorithmus in Gebieten, wo sich

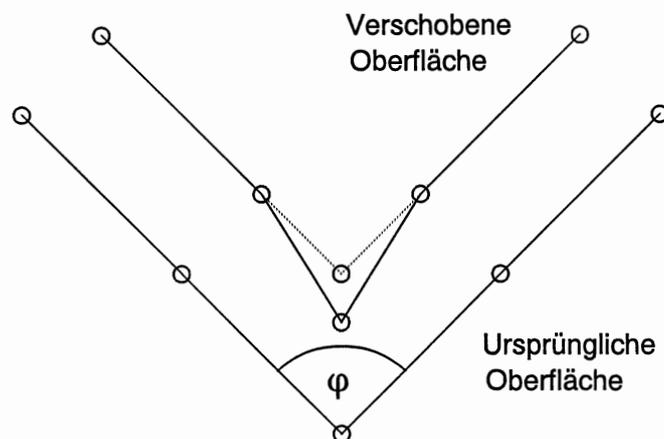


Abb. 3.6 Ausbildung von Artefakten bei der punktweisen Verschiebung und Möglichkeit zur Korrektur. Durchgezogen: Algorithmus ohne Korrektur, gestrichelt: Algorithmus mit Korrektur.

die Normalenrichtung von einem Segment zum nächsten nur wenig ändert, gut arbeitet, kann es an Kanten zu Störungen kommen, so daß zusätzliche Korrekturen erforderlich werden. Ein Beispiel dafür ist in Abb. 3.6 gezeigt. Es handelt sich um den Spezialfall einer isotropen Abscheidung, d.h. die Wachstumsrate ist ortsunabhängig auf einen festen Wert gesetzt, der für alle Punkte der Topographie gilt. Ohne zusätzliche physikalische Effekte (beispielsweise aufgrund von Oberflächendiffusion) sollte sich der Winkel, den die Segmente an der Ecke bilden, nicht ändern. Die Verschiebung der Punkte um jeweils dieselbe Strecke wird in Richtung der gemittelten Normalen vorgenommen. An der Ecke bildet sich eine künstliche Einschnürung aus, die vermieden werden kann, indem die Strecke, um die ein Punkt verschoben wird, um einen Korrekturfaktor von

$$f_{cor} = \frac{1}{\sin \frac{\varphi}{2}} \quad (3.1)$$

vergrößert wird, wobei φ der Winkel ist, den die beiden Segmente an dem betrachteten Punkt einschließen. Als Resultat erhält man eine Oberfläche ohne Störung der Oberflächenorientierung.

Die Alternative zur punktweisen Verschiebung besteht darin, daß die an einen Punkt angrenzenden Segmente jeweils in Richtung ihrer Normalen um eine Strecke verschoben werden, die einer auf das Segment bezogenen Ätz- oder Abscheiderate entspricht. Der Schnittpunkt der verschobenen Segmente bzw. der entsprechenden Geraden wird dann als neuer Punkt gesetzt. Bei dieser Vorgehensweise werden die Störungen an Ecken automatisch vermieden. Problematisch ist dieses Verfahren aber wiederum in Gebieten mit annähernd parallelen benachbarten Segmenten. Im Extremfall, zwei exakt parallelen Segmenten, die einen gemeinsamen Punkt haben und denen unterschiedliche Verschiebungsraten zugewiesen sind, existiert kein gemeinsamer Punkt der verschobenen Geraden.

Ein Beispiel für die segmentweise Verschiebung ist in Abb. 3.7 gezeigt. Es handelt sich um eine Stufe, auf der mit zwei verschiedenen Abscheideraten (Rate 1, Rate 2), die für die auftretenden Segment-Orientierungen willkürlich spezifiziert wurden, abgeschieden wird. Durch die Verschiebung der Segmente entsprechend der jeweiligen Abscheiderate und Bestimmung der Schnittpunkte als neue Punkte des Polygonzuges wird die Ober-

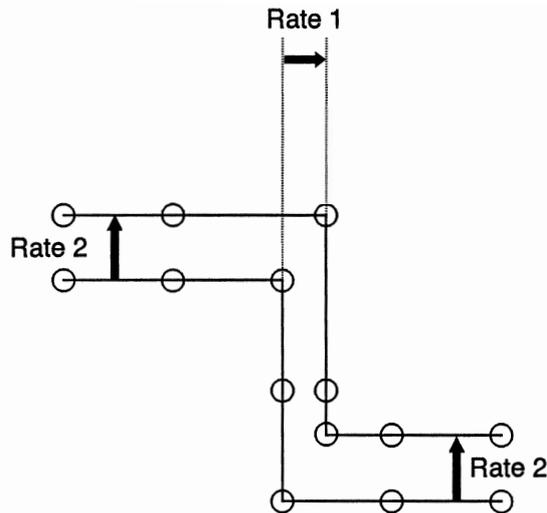


Abb. 3.7 Segmentweise Verschiebung einer Oberfläche mit zwei verschiedenen Raten (Rate 1, Rate 2) für unterschiedliche Orientierungen der Segmente.

flächenorientierung an keiner Stelle gestört. Allerdings ist das Profil, das sich an der konvexen Ecke ergibt, nicht realistisch, da man im Experiment an diesen Ecken in der Regel eine Verrundung beobachten wird. Dies läßt sich erklären, wenn man die Ecke als einen Bogen mit kleinem Radius ansieht, auf dem durch Anlagerung und Reaktion der aus allen Richtungen auftreffenden Moleküle eine Schicht aufwächst, so daß der Radius der die aktuelle Oberfläche beschreibenden Bogens zunimmt. Die Algorithmen, welche die Simulation dieser Verrundung in 3D erlauben, werden in Kap. 4 beschrieben.

Es bietet sich somit eine Kombination der punktweisen und der segmentweisen Verschiebung an, wobei spezifiziert werden muß, für welche Punkte die beiden Verfahren jeweils angewandt werden sollen. Wille [Wil92c] implementierte ein Verfahren, bei dem ein Grenzwert für den Winkel zwischen den Normalen benachbarter Segmente spezifiziert werden kann. Ist der Winkel zwischen den Normalen größer als dieser Grenzwinkel, so wird segmentweise verschoben, ist er kleiner, wird punktweise verschoben. Dadurch kommt für jeden Punkt das jeweils günstigere Verfahren zur Anwendung. Problematisch können bei einem derartigen Verfahren allerdings Übergänge von einem zum anderen Verfahren werden, wenn sich an den Übergangsstellen im Polygonzug künstliche Verzerrungen bilden. Ein Beispiel hierfür ist in Abb. 3.8 dargestellt, das eine Simulation von Sputterabscheidung mit dem von Wille [Wil92c] für den 2D-Simulator STORM [Lor93] entwickelten Programmmodul zeigt. Die Einschnürung des Schichtprofils an der

Oberkante der Struktur ist auf den beschriebenen Übergang zwischen den beiden Verschiebungsalgorithmen zurückzuführen. Weiterhin ergibt sich durch die Verzerrungen ein asymmetrisches Profil. Dies ist aufgrund der symmetrischen Ausgangsstruktur und der angenommenen Prozeßführung ohne ausgezeichnete Richtung nicht zu rechtfertigen.

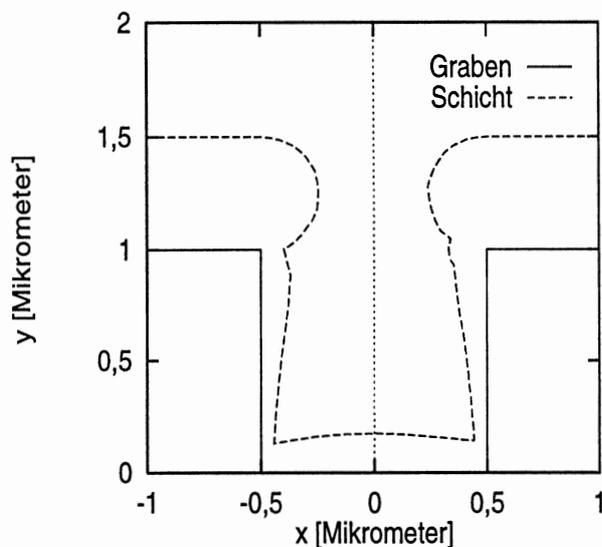


Abb. 3.8 2D-Simulation von Sputterabscheidung mit dem Programm STORM. Erkennbar ist die Verzerrung des Schichtprofils an der Oberkante der Struktur.

Ein weiterer Gesichtspunkt ist die Verfeinerung der Diskretisierung bzw. das Zusammenfassen mehrerer Segmente während der Simulation. Eine Verfeinerung muß z.B. vorgenommen werden, wenn an einer konvexen Kante, beispielsweise der Oberkante eines Grabens, eine Schicht aufwächst, was in der Regel zu einer Verrundung führen wird, so daß eine höhere Anzahl von Segmenten zur genauen Beschreibung des Profils erforderlich ist. Zusammenfassen lassen sich Segmente beispielsweise in planaren Gebieten, wo sich hierdurch keine nennenswerte Veränderung der Topographie und somit kein unzulässiger Genauigkeitsverlust ergibt.

Ein Hauptproblem bei der polygonalen Oberflächendiskretisierung und -verschiebung ist das Auftreten sogenannter Schleifen, die sich ausbilden, wenn die Oberfläche bei der Verschiebung mit sich selbst zum Schnitt kommt. Diese Situation ist in Abb. 3.9 für den Fall einer konkaven Topographiekante dargestellt. Nach dem Wachstumsschritt weist das Oberflächenpolygon eine Schleife auf, die sich im Verlauf der weiteren Abscheidung noch vergrößern würde. Die Schleifen können sich bilden, wenn Punkte an Ecken der Topogra-

phie um eine Strecke verschoben werden, die größer als die Länge der an den Punkt angrenzenden Segmente ist.

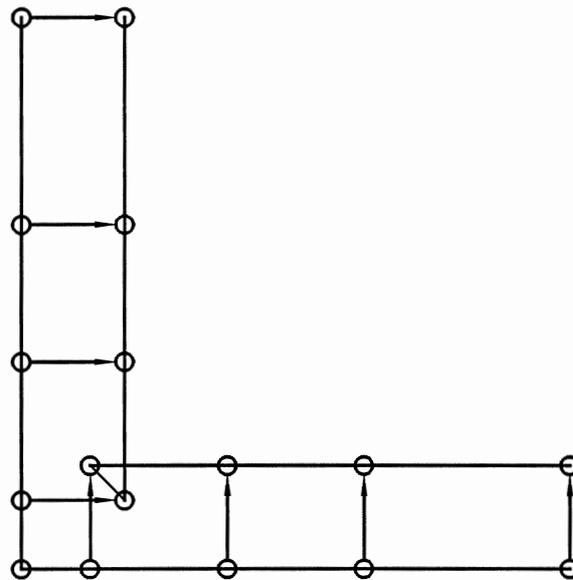


Abb. 3.9 Auftreten von Schleifen bei der Verschiebung des Oberflächenpolygons.

Es gibt zwei Möglichkeiten, die Schleifenbildung zu verhindern. Die Polygonsegmente können nach jedem Verschiebungsschritt auf gegenseitige Schnitte überprüft werden und die detektierten Schleifen zwischen den Schnittpunkten aus dem Oberflächenpolygon entsprechend entfernt werden. Die andere Möglichkeit besteht darin, die Verschiebung der Oberfläche in kleinen Schritten durchzuführen und kleine Segmente, die sonst zu Schleifenbildung führen würden, zu beseitigen, so daß Schleifen erst gar nicht entstehen. Insbesondere in Hinblick auf die Erweiterung des Algorithmus auf den dreidimensionalen Fall ist das zweite Verfahren von besonderer Bedeutung, da es in der Regel sehr schwierig sein wird, einmal entstanden Schleifen (in 3D Blasen genannt) zu detektieren und wieder zu entfernen.

Ein Beispiel für die Simulation eines Abscheideprozesses mit dem von Wille [Wil92c] für das Programm STORM [Lor93] entwickelten Programmmodul ist in Abb. 3.10 gezeigt. Es handelt sich um einen isotropen Abscheideprozeß, wie er z.B. bei der chemischen Gasphasenabscheidung von Polysilicium oder Siliciumnitrid vorliegt, in einen Graben mit quadratischem Querschnitt. An den konvexen Kanten, d.h. den Oberkanten des Grabens,

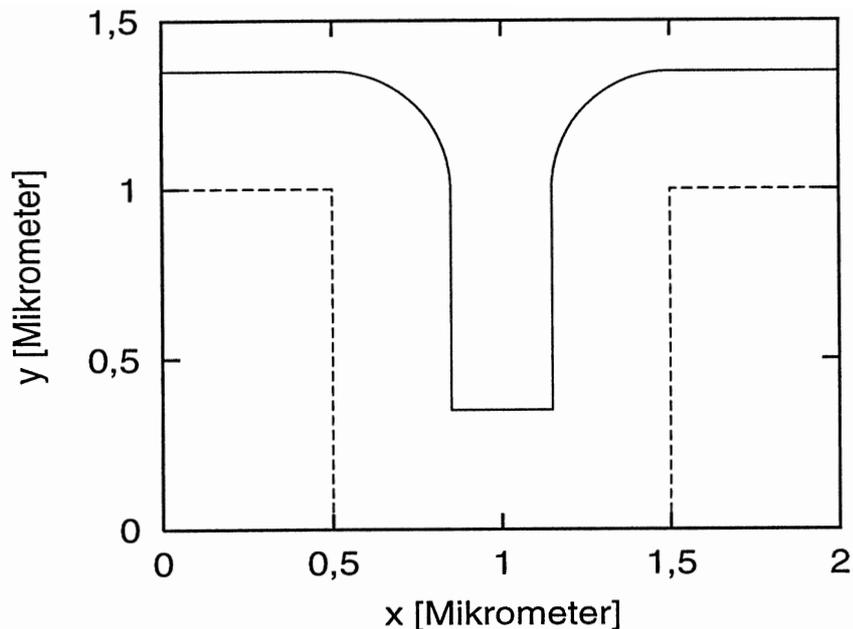


Abb. 3.10 2D-Simulation einer isotropen Schichtabscheidung nach dem Modell von Wille [Wil92c] in einen Graben mit quadratischem Querschnitt. Gestrichelt: Ausgangsgeometrie, durchgezogen: Oberfläche der abgeschiedenen Schicht.

verrundet sich die Oberfläche während der Abscheidung, während die konkaven Kanten im Profil der abgeschiedenen Schicht erhalten bleiben. Bei der Implementierung des Abscheidemoduls in STORM wird an den konvexen Kanten ein kleiner Kreisbogen aus vielen Segmenten eingesetzt, der im Verlauf der Simulation zu dem runden Schichtprofil führt, das, wie bereits erläutert, realistisch ist und experimentell beobachtet wurde [Wil92c], so daß diese Vorgehensweise sinnvoll ist.

3.2.2 Dreidimensionale Diskretisierung

Bei der dreidimensionalen Topographiediskretisierung in segmentärer Beschreibung liegt keine Beschränkung auf Geometrien mit bestimmter Symmetrie mehr vor. Es werden hier die Ober- und Grenzflächen der beteiligten Materialien direkt in diskretisierter Form beschrieben.

Die Diskretisierung der Flächen erfolgt in den meisten Fällen durch einen Satz von Dreiecken. Dreiecke haben den Vorteil, daß sie numerisch einfach zu handhaben sind. Die drei Punkte im Raum, die das Dreieck bilden, liegen immer in genau einer Ebene, falls

das Dreieck nicht entartet ist, was durch geeignete Prüfalgorithmen bei der Implementierung vermieden wird. Die Oberflächenorientierung, d.h. die Normalenrichtung des Dreiecks, ist daher in einfacher Weise direkt bestimmbar.

Ein Beispiel für die Diskretisierung einer dreidimensionalen Oberfläche ist in Abb. 3.11 dargestellt. Es handelt sich um einen Graben mit nichtplanarer Umgebung. Eine zweidimensionale Beschreibung ist hier in der Regel nicht mehr ausreichend, da sich Größen wie die Dicke einer abgeschiedenen Schicht auch längs des Grabens bei dem vorliegenden Verhältnis von Länge zu Breite schon signifikant ändern können. Weiterhin ist schon aus rein geometrischen Gründen eine zweidimensionale Beschreibung der kompletten Topographie nicht möglich.

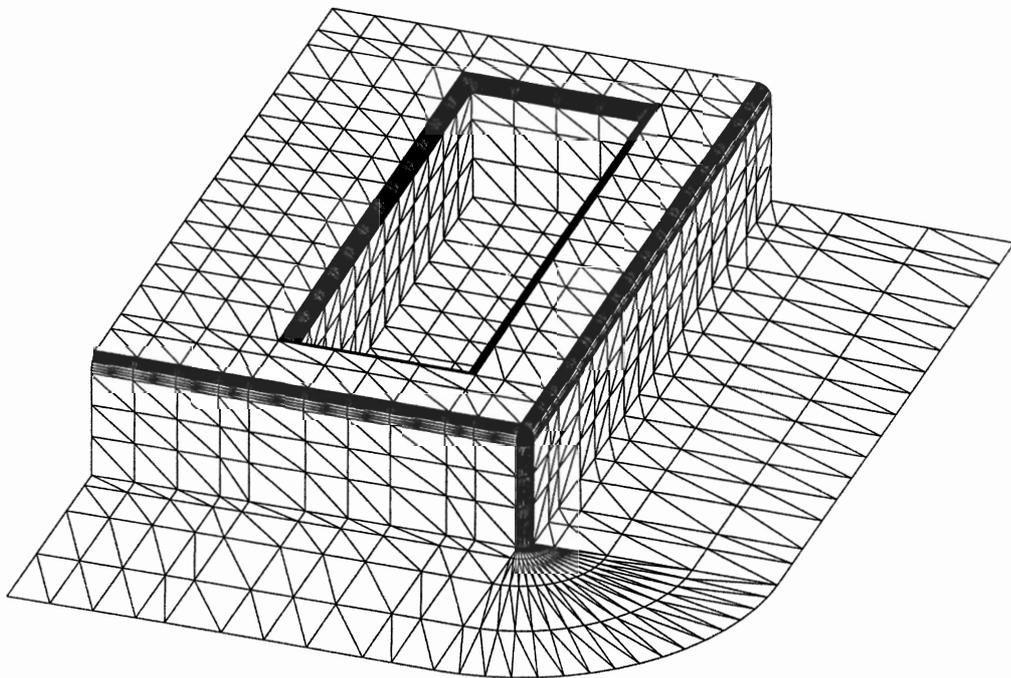


Abb. 3.11 3D-Diskretisierung eines Grabens mit Umgebung.

Die Diskretisierung im Bereich starker Topographieänderungen an konvexen Ecken und Kanten ist besonders fein, um die bei der Abscheidung von Schichten dort entstehenden

Verrundungen mit hinreichender Genauigkeit simulieren zu können. Für die Diskretisierung werden in diesem Beispiel etwa 3300 Dreiecke verwendet. Die Zahl der Dreiecke ist damit erheblich höher als die Polygonsegmentzahl bei typischen zweidimensionalen Beschreibungen von Grabenstrukturen. Der Informationsgehalt der dreidimensionalen Beschreibung ist dementsprechend höher und bei Strukturen wie dem vorliegenden Beispiel zur vollständigen Beschreibung erforderlich.

Die Übertragung der zweidimensionalen Algorithmen zur Topographiebewegung auf den dreidimensionalen Fall erfordert zusätzliche neue Verfahren. Dies folgt aus den prinzipiellen Unterschieden der beiden Darstellungen. Im Dreidimensionalen können an einen Gitterpunkt der Triangulierung prinzipiell beliebig viele Dreiecke angrenzen, während im Zweidimensionalen an jeden Punkt der Diskretisierung genau zwei Segmente angrenzen. Die punktweise Verschiebung der Oberfläche kann im Dreidimensionalen im Wesentlichen analog wie in zwei Dimensionen durchgeführt werden, indem für jeden Gitterpunkt die mittlere Normalenrichtung und die mittlere Verschiebungsrate aller an den Punkt angrenzenden Dreiecke bestimmt werden.

Problematisch wird die Bestimmung des Korrekturfaktors zur Verhinderung der Störungen an Ecken und Kanten der Topographie, wie sie für den zweidimensionalen Fall in Kap. 3.2.1 erläutert wurden. Ein eindeutiger Winkel zwischen den Normalen der an einen Knoten angrenzenden Dreiecke ist nicht bestimmbar. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein spezielles Verfahren entwickelt und implementiert, mit dem der Korrekturfaktor bestimmt werden kann und das in Kap. 4.4.1 im Detail beschrieben ist.

Die segmentweise Verschiebung ist ebenfalls nicht wie im zweidimensionalen Fall möglich, da die Ebenen, die durch Verschiebung der Ebenen der an den Punkt angrenzenden Dreiecke entstehen, im allgemeinen keinen gemeinsamen Schnittpunkt besitzen. Eine spezielle Methode zur segmentweisen Verschiebung wurde entwickelt und implementiert, die ebenfalls in Kap. 4.4.1 erläutert und demonstriert wird.

4. Dreidimensionale Simulation der chemischen Niederdruckgasphasenabscheidung

4.1 Modell für die chemische Niederdruckgasphasenabscheidung

Für die modellhafte Beschreibung der Vorgänge bei der chemischen Niederdruckgasphasenabscheidung (LPCVD) wurde ein Modell aus der Literatur [Wil92a][Isl91][Cal90a][Cal91b] benutzt, das reaktive Teilchen in der Gasphase annimmt, die nach Auftreffen auf die Substratoberfläche durch Reaktion in die aufwachsende Schicht eingebaut werden können und damit zum Schichtwachstum führen. Diese reaktiven Teilchen können Moleküle der beteiligten Prozeßgase sein, oder auch Zwischenprodukte, die etwa bei einer homogenen Gasphasenreaktion erst gebildet werden. Es wird angenommen, daß nahe der Oberfläche keine Gasphasenreaktionen mehr stattfinden. Dazu muß die freie Weglänge im Gas groß gegenüber den Strukturabmessungen des Substrats sein. Weiter unten wird ausgeführt, daß dies für LPCVD-Prozesse in der Regel der Fall ist.

Das Modell wurde für Geometrien, die durch eine 2D-Profilbeschreibung vollständig charakterisiert werden, entwickelt und implementiert. Es handelt sich bei diesen Arbeiten um die Simulation von LPCVD-Schichtprofilen in langen Gräben mit unveränderlichem Querschnitt längs des Grabens [Wil92a][Isl91][Cal90a] bzw. von Schichtprofilen in perfekt rotationssymmetrischen Strukturen [Isl91][Cal90b]. Die Symmetrie darf dabei aufgrund der 2D-Beschreibung auch während des Abscheidvorgangs nicht gebrochen werden. Dies ist bei dem verwendeten LPCVD-Modell der Fall, allerdings ist die Beschreibung von Prozessen mit bestimmten ausgezeichneten Richtungen, wie sie beispielsweise bei der Metallisierung mittels Aufdampfen auftreten können, nicht mehr in jedem Fall möglich, selbst wenn eine vollständig zweidimensionale Ausgangsstruktur vorliegen sollte.

Diese Nachteile werden durch die vollständig dreidimensionale Topographiebeschreibung, wie sie im Rahmen dieser Arbeit implementiert wurde, vermieden. Damit ist eine Simulation beliebiger Geometrien möglich, und Beschränkungen ergeben sich nur durch die mit der Komplexität unter Umständen verbundenen Probleme hinsichtlich des Bedarfs an Rechenleistung und Speicherplatz.

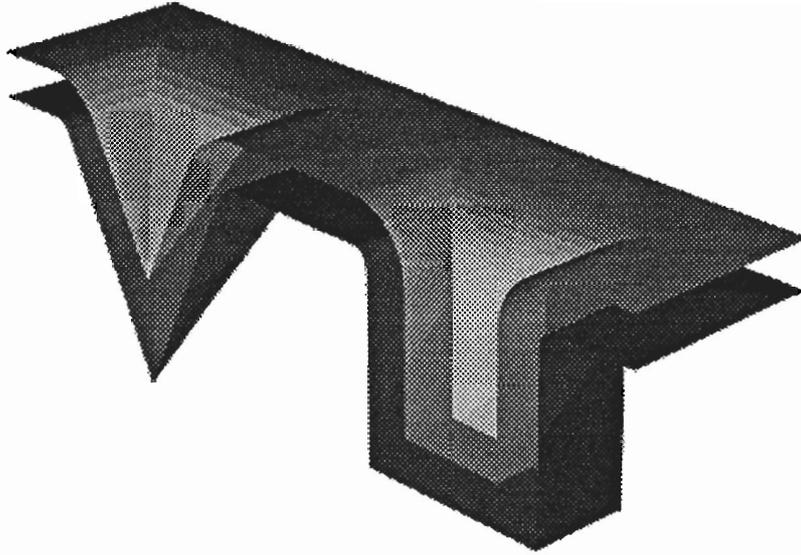


Abb. 4.1 Beispiel für die Simulation von isotroper Schichtabscheidung.

Ein Beispiel für eine 3D-Geometrie ist in Abb. 4.1 gezeigt. Bei der Ausgangsstruktur handelt es sich um die Kombination eines pyramidenförmigen Loches, wie es exakt bei anisotropem Naßätzen von Silicium mit wäßrigem Kaliumhydroxid (KOH) entsteht, mit einem würfelförmigen Loch, das näherungsweise das Ergebnis eines Trockenätzprozesses beschreibt, in beiden Fällen jeweils unter Annahme einer quadratischen Maskenöffnung. Es wurde die isotrope Abscheidung einer Schicht simuliert, d.h. mit gleicher Dicke an allen Stellen der Oberfläche, wie sie sich z.B. bei der Abscheidung von Polysilicium, Siliciumnitrid oder Tantalpentoxid ergibt. Für diese Simulation ist daher kein spezielles Modell nötig, da die Abscheideraten für jede Stelle der Oberfläche auf den gleichen Wert gesetzt werden. Später wird noch erläutert werden, daß sich die isotrope Abscheidung als ein bestimmter Grenzfall des verwendeten LPCVD-Modells ergibt. Um das Schichtprofil besser erkennen zu können, ist in der Abbildung nur die eine Hälfte der Struktur gezeigt, wobei der dunklere Teil die ursprüngliche Oberfläche, der hellere die Oberfläche der abgeschiedenen Schicht repräsentiert.

Das Modell geht davon aus, daß die Zahl der Stöße zwischen den Teilchen im Bereich nahe der strukturierten Scheibenoberfläche gegenüber der Zahl der Stöße der Teilchen mit

den Wänden, d.h. mit der Oberfläche des Substrats, vernachlässigt werden kann. Die freie Weglänge im Gas, welche einen Mittelwert für die Strecke angibt, die ein Teilchen zwischen zwei Stößen mit einem anderen Teilchen zurücklegt, muß dazu groß gegenüber der typischen Strukturdimension des Substrats sein. Die freie Weglänge ist gegeben durch [Kle95]

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n \sigma^2}, \quad (4.1)$$

wo σ der Stoßdurchmesser der Moleküle und n die Zahl der Moleküle pro Volumen ist. Für LPCVD beispielsweise von Niedertemperaturoxid (LTO) bei 430 °C und einem Druck von 0,2 Torr erhält man mit Werten für σ von etwa $4 \cdot 10^{-10}$ m [Kle91] eine freie Weglänge von etwa 500 μm . Die freie Weglänge ist demnach groß gegenüber typischen Strukturdimensionen des Substrats von größenordnungsmäßig einem Mikrometer. Weiterhin können alle im Gas vorliegenden Teilchensorten damit hinsichtlich ihrer Bewegung als unabhängig voneinander betrachtet werden.

Das Gas oberhalb der Oberfläche wird als ideal angenommen, mit einer isotropen Verteilung der Teilchengeschwindigkeiten entsprechend eines thermodynamischen Gleichgewichtes und keiner zusätzlichen translatorischen Geschwindigkeitskomponente, etwa durch eine vorhandene Strömung des Gases. Letzteres ist bei aufrecht stehenden Scheiben in einem Horizontalrohrreaktor mit typischen Zwischenräumen zwischen den Scheiben von etwa 10 mm erfüllt.

Die reaktiven Teilchen können nach Auftreffen auf die Oberfläche durch Reaktion in die aufwachsende Schicht eingebaut werden. Die Wahrscheinlichkeit dafür ist durch die sogenannte Haftwahrscheinlichkeit ("sticking coefficient") s_c gegeben. Falls das Teilchen nicht reagiert, desorbiert es nach einer bestimmten Verweildauer an der Oberfläche wieder und kann zum Gasvolumen hin entweichen oder aber erneut an einer anderen Stelle auf die Oberfläche auftreffen, wo sich der beschriebene Prozeß dann wiederholt.

Die Teilchen verteilen sich also durch Adsorptions- und Desorptionsvorgänge sowie durch Adsorption aus dem Gasraum über die gesamte Oberfläche und es können auch Stellen

von den Teilchen erreicht werden, die nicht direkt vom Gasvolumen aus für die Teilchen zugänglich sind. Je kleiner die Haftwahrscheinlichkeit ist, desto mehr Stöße hat ein Teilchen im Mittel mit der Oberfläche, bevor es reagiert, und desto gleichmäßiger können sich demnach die Teilchen über die Oberfläche verteilen. Das Resultat ist eine über der Struktur homogene Dicke der abgeschiedenen Schicht.

Es wird angenommen, daß sich die Teilchen nur durch Adsorption und Desorption über die Struktur verteilen, d.h. daß eine Bewegung der Teilchen entlang der Oberfläche, die sogenannte Oberflächendiffusion, einen vernachlässigbaren Einfluß hat. Für die Abscheidesysteme, die im Rahmen dieser Arbeit anhand experimenteller Ergebnisse untersucht wurden (LPCVD von Siliciumdioxid, Polysilicium und Wolfram), ist dies in früheren Arbeiten [McV90][Che91] anhand spezieller Teststrukturen, die eine Separierung der beiden Mechanismen erlauben, nachgewiesen worden. Auch wurde bei den eigenen experimentellen Untersuchungen kein Hinweis auf eine signifikante Oberflächendiffusion gefunden (siehe Kap. 6).

Die Haftwahrscheinlichkeit wird als eine Konstante angesetzt, die unabhängig von der jeweiligen Stelle auf der Oberfläche und von der Einfallsrichtung des Teilchens ist. Es wird eine Reaktionskinetik erster Ordnung angenommen, so daß s_c unabhängig von der jeweils vorliegenden Teilchenkonzentration ist. Die Vorgeschichte eines Teilchens hat im Modell ebenfalls keinen Einfluß auf die Haftwahrscheinlichkeit. Diese Annahmen treffen z.B. auf die LPCVD von Siliciumdioxid, Polysilicium und Wolfram zu (siehe Kap. 6). Eine Erweiterung für Systeme mit nicht konstanter Haftwahrscheinlichkeit kann durchgeführt werden, wenn Meßreihen (Aufnahmen von Schichtprofilen unter verschiedenen Abscheidebedingungen), die zur Kalibrierung herangezogen werden können, zur Verfügung stehen. Insbesondere in Hinblick auf neue CVD-Prozesse zur Abscheidung von Metallen und Dielektrika wird dies zukünftig von Interesse sein.

Eine Erweiterung des Modells [Wil92b][Wil92c] benutzt zwei verschiedene Teilchensorten mit verschiedenen Haftwahrscheinlichkeiten, die jeweils zu einem bestimmten Teil zum Schichtwachstum beitragen. In diesem Fall sind als Parameter die beiden Haftwahrscheinlichkeiten sowie der relative Anteil der beiden Teilchensorten anzugeben, während für den Fall nur einer Teilchensorte dessen Haftwahrscheinlichkeit der einzige Modell-

parameter ist. Allgemein müssen der oder die Parameter für den jeweils betrachteten Abscheideprozeß in Abhängigkeit von den Prozeßparametern bekannt sein.

Um die Vorgänge mathematisch zu beschreiben, führt man eine Bilanzierung der auftretenden Teilchenflüsse für jede Stelle der Oberfläche durch. Der Teilchenfluß wird hierbei definiert als Zahl von Teilchen pro Zeit und Fläche, die auf die Oberfläche auftreffen bzw. sie verlassen. Die Situation für eine Stelle am Boden eines Grabens bzw. Kontaktloches mit den auftretenden Teilchenflüssen ist in Abb. 4.2 veranschaulicht.

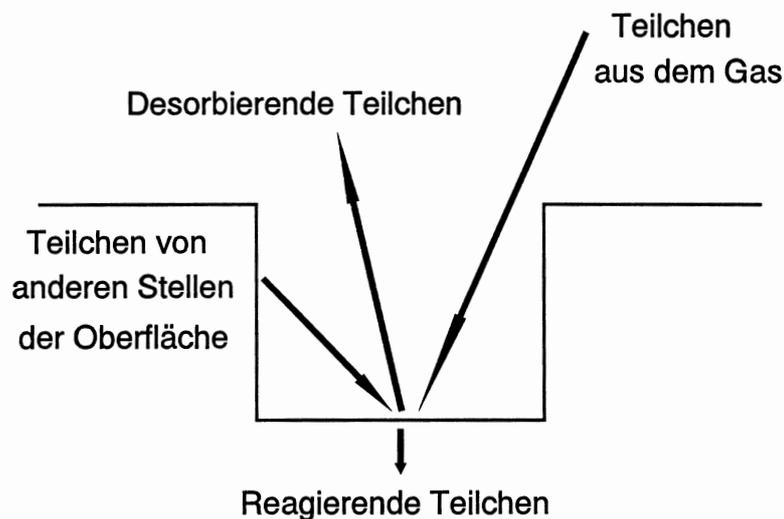


Abb. 4.2 Bei LPCVD auftretende Teilchenflüsse für eine Stelle am Boden eines Grabens oder Kontaktloches.

Als teilchenliefernde Flüsse treten die Teilchen direkt vom Gas sowie von anderen Stellen der Oberfläche auf. Teilchenverbrauchende Flüsse ergeben sich durch die desorbierenden und reagierenden Teilchen.

Die Desorption eines Teilchens von der Oberfläche wird als unabhängig von der Einfallrichtung des Teilchens beim Auftreffen auf die Oberfläche angenommen. Nimmt man diffuse Desorption und ein thermodynamisches Gleichgewicht der desorbierenden Teilchen direkt an der Oberfläche mit isotroper Geschwindigkeitsverteilung an, so ergibt sich eine Kosinusverteilung für die desorbierenden Teilchen [Ca191b]. Die Zahl der von einem Flächenstück der Oberfläche in eine bestimmte Raumrichtung emittierten Teilchen ist dabei proportional zum Kosinus des Winkels zwischen der Oberflächennormalen an der betrachteten Stelle und dem Vektor, der die jeweilige Desorptionsrichtung definiert.

Es wird angenommen, daß für jeden Zeitpunkt der Abscheidung ein dynamisches Gleichgewicht der Flüsse vorliegt, d.h. daß die Einstellung dieses Gleichgewichtes schnell im Vergleich zur Bewegung der Oberfläche durch den Abscheidvorgang vor sich gehen muß. Bei typischen thermischen Teilchengeschwindigkeiten der Gasmoleküle bei LPCVD-Prozessen von etwa 25 m/s und typischen Schichtwachstumsraten von 1 $\mu\text{m}/\text{h}$ ist diese Annahme gerechtfertigt. Aufgrund der Teilchenerhaltung sind daher die Summe der beiden teilchenliefernden Flüsse und die Summe der beiden teilchenverbrauchenden Flüsse gleich groß und zeitlich konstant, bezogen auf Zeitabschnitte, in denen sich die Topographie nicht nennenswert ändert. Eine Veränderung der Topographie durch die aufgewachsene Schicht muß berücksichtigt werden, indem der Gleichgewichtszustand nach signifikanter Änderung der Geometrie neu berechnet wird.

Die Wachstumsrate für jede Stelle auf der Oberfläche folgt dann aus den im dynamischen Gleichgewicht vorliegenden Teilchenflüssen und ist direkt proportional zu dem Fluß, der den durch Reaktionen verbrauchten Teilchen entspricht.

4.2 Dreidimensionale Implementierung des Modells

Um Berechnungen entsprechend dem verwendeten Modell anstellen zu können, d.h. um die Teilchenflüsse für eine gegebene Geometrie ermitteln zu können, ist es notwendig, daß die Oberfläche in diskretisierter Form vorliegt. In dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulationsprogramm wird die Oberfläche durch einen Satz von N Dreiecken beschrieben. Ein Beispiel für eine derartige Triangulierung ist in Abb. 4.3 dargestellt. Die Oberfläche eines Kontaktloches, das die Form eines Würfels mit einer Kantenlänge von einem Mikrometer hat, ist vor und nach der Abscheidung einer gleichmäßig dicken Schicht gezeigt (isotrope Abscheidung). Die Ausgangsoberfläche besteht aus 640, die Oberfläche der abgeschiedenen Schicht aus 460 Dreiecken.

Zur Erzeugung von Ausgangsdiskretisierungen beliebiger quaderförmiger Kontaktlöcher wurde ein Programm entwickelt, das für eine angegebene Quadergestalt eine Triangulierung erzeugt. Die Feinheit der Triangulierung kann durch Vorgabe einer mittleren Dreiecksgröße, je nach der gewünschten Genauigkeit, ebenfalls gewählt werden. Weiterhin

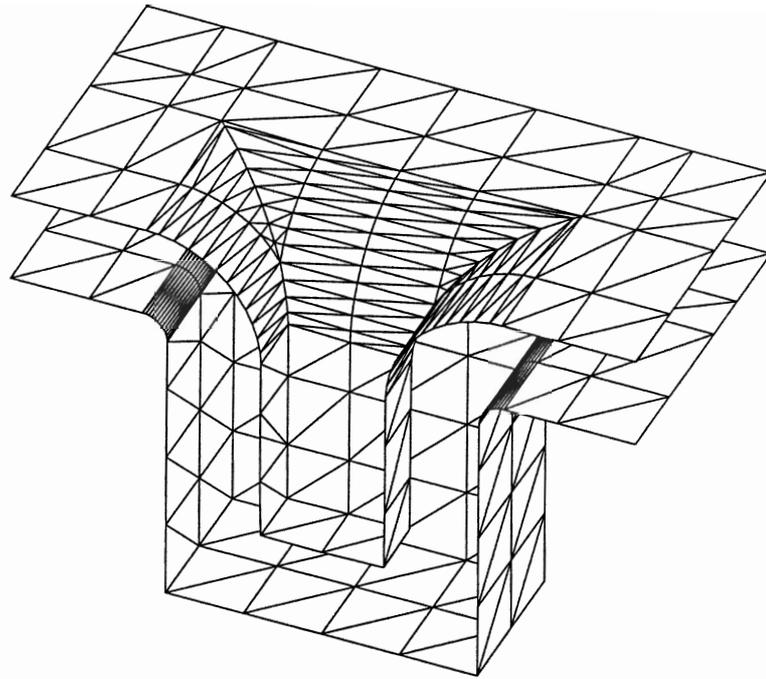


Abb. 4.3 Triangulierung einer Oberfläche am Beispiel der isotropen Schichtabscheidung.

werden an den konvexen Ecken der Geometrie vom Programm automatisch lange, schmale Dreiecke eingesetzt, um im Verlauf der Simulation eines Abscheidungsprozesses die typische Verrundung an den konvexen Kanten zu erhalten. Dieses Verfahren ist eine Alternative zu der ebenfalls implementierten Verfeinerung der Triangulierung während der Simulation, die in Kap. 4.4.3 erläutert wird.

Es wird davon ausgegangen, daß die Triangulierung hinreichend fein ist, so daß die auftretenden Teilchenflüsse jeweils als konstant über das Dreieck betrachtet werden können. Der Reaktionsfluß R_i wird definiert als Zahl der Teilchen für Dreieck i , die pro Zeiteinheit und Fläche durch Reaktion in die aufwachsende Schicht eingebaut werden. Der Anzahl der Teilchen, die bei Dreieck i von einem anderen Dreieck j , sowie der Teilchen, die direkt vom Gasvolumen ankommen, entsprechen die Teilchenflüsse S_{ij} bzw. A_i . Von den ankommenden Teilchen reagiert der Anteil s_c , d.h.

$$R_i = s_c \left(A_i + \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} S_{ij} \right) . \quad (4.2)$$

Der Index i bezeichnet dabei das jeweils betrachtete Dreieck.

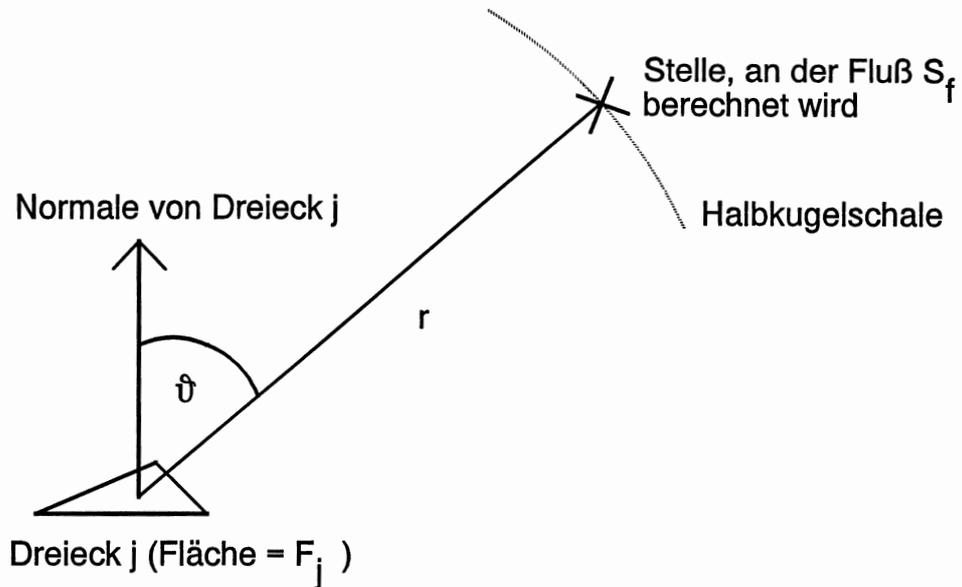


Abb. 4.4 Geometrie bei der Ermittlung des von Dreieck j ausgehenden Teilchenflusses in eine bestimmte Richtung.

Unter Annahme eines Kosinusetzes für die Teilchendesorption (folgt aus einer isotropen Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen an der Oberfläche [Cal91b]), kann man den Teilchenfluß S_f , der von den Teilchen, die Dreieck j verlassen, hervorgerufen wird, an einer beliebigen Stelle folgendermaßen ansetzen:

$$S_f = S_0 F_j \frac{\cos\vartheta}{r^2} \quad (4.3)$$

Um die Konstante S_0 zu berechnen, denken wir uns um den Schwerpunkt des Dreiecks j eine Halbkugelschale, auf der wir den Teilchenfluß berechnen. Die in Gl. (4.3) auftretenden geometrischen Größen sind in Abb. 4.4 veranschaulicht. S_f ist der Teilchenfluß im Abstand r vom Dreieck j , der in radialer Richtung angenommen wird, d.h. senkrecht durch die Halbkugelschale. F_j ist die Fläche des Dreiecks j . Der Winkel zwischen der

Normalen des Dreiecks j und dem Vektor in die betrachtete Richtung ist ϑ . Die Normalenrichtung ist dabei so definiert, daß sie für ein Dreieck aus dem Material heraus in das Gas zeigt. Der Faktor $1/r^2$ folgt aus der Teilchenerhaltung, da die Fläche einer Halbkugelschale mit Radius r $2\pi r^2$ beträgt und somit der Fluß proportional zu $1/r^2$ abnehmen muß.

Mit dem Reaktionsfluß R_j und der Haftwahrscheinlichkeit s_c kann man die Gesamtzahl n_s der von Dreieck j pro Zeit desorbierenden Teilchen berechnen:

$$n_s = F_j R_j \frac{1 - s_c}{s_c} \quad (4.4)$$

Dabei wird ausgenutzt, daß sich der Desorptionsfluß zum Reaktionsfluß verhält wie $1-s_c$ zu s_c . Diese Zahl muß gleich dem über eine beliebige Halbkugelschalenfläche integrierten Fluß gemäß Gl. (4.3) sein. Wir betrachten eine Halbkugelschale K_R mit dem Radius R um den Schwerpunkt des Dreiecks j und erhalten dann:

$$\begin{aligned} n_s &= \int_{K_R} S_f dA = \frac{S_0 F_j}{R^2} \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos\vartheta \cdot (R^2 \sin\vartheta d\varphi d\vartheta) \\ &= 2\pi S_0 F_j \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \cos\vartheta \sin\vartheta d\vartheta = \pi S_0 F_j \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die Integration wurde dabei in Kugelkoordinaten mit dem Ursprung im Schwerpunkt des Dreiecks j durchgeführt, wobei φ der Winkel ist, der die Lage der Projektion des jeweiligen Punktes der Halbkugelschale auf die Dreiecks-Ebene im Sinne von Kugelkoordinaten beschreibt.

Aus Gl. (4.4) und Gl. (4.5) folgt damit

$$S_0 = \frac{1 - s_c}{\pi s_c} \cdot R_j, \quad (4.6)$$

und nach Einsetzen von Gl. (4.6) in Gl. (4.3) ergibt sich S_f :

$$S_f = R_j F_j \frac{1-s_c}{\pi s_c} \cdot \frac{\cos\vartheta}{r^2} \quad (4.7)$$

Der Teilchenfluß für Dreieck i der Teilchen, die direkt aus dem Gasvolumen kommen, ist gegeben durch:

$$A_i = G \int_{\Omega_{\text{frei}}} \cos\vartheta \, d\Omega \quad (4.8)$$

G ist dabei eine Konstante, die zunächst von den Eigenschaften des Gases abhängt, was sich durch eine später vorzunehmende Normierung der Reaktionsflüsse noch ändern wird. Zur Erläuterung der auftretenden Größen dient Abb. 4.5. Dort ist als Beispiel ein Dreieck i am Boden eines zylindrischen Kontaktloches gezeigt. Ω_{frei} ist der Raumwinkelbereich, der von Dreieck i aus gesehen zum Gas hin offen ist, ϑ ist der Winkel zwischen der Normalen des Dreiecks i und dem Vektor vom Dreieck i zum Raumwinkelement $d\Omega$. Die Teilchen kommen isotrop aus allen Richtungen aus dem Gasvolumen. Daher ist nur noch der Faktor $\cos\vartheta$ zu berücksichtigen, der dafür sorgt, daß bei flacherem Einfall der Teilchen auf die Oberfläche die Intensität, d.h. der Teilchenfluß, der durch diese Teilchen hervorgerufen wird, entsprechend reduziert wird.

Um den Ausdruck für den Fluß der vom Dreieck j desorbierten und anschließend beim Dreieck i ankommenden Teilchen, herzuleiten, ist die Geometrie für zwei beliebige Dreiecke im dreidimensionalen Raum in Abb. 4.6 dargestellt. P_i und P_j bezeichnen die Schwerpunkte des Dreiecks i bzw. des Dreiecks j . ϑ_{ij} ist der Winkel zwischen der Normalen des Dreiecks i und dem Vektor von P_i zu P_j . Analog ist ϑ_{ji} der Winkel zwischen der Normalen des Dreiecks j und dem Vektor von P_j zu P_i . Der Übersicht wegen ist nur ϑ_{ij} in der Abbildung enthalten. $\Delta\Omega_{ij}$ ist das Raumwinkelement, welches das Dreieck j von P_i aus betrachtet abdeckt. Der Fluß S_{ij} der bei einem beliebigen Dreieck i ankommenden Teilchen, die von Dreieck j stammen, ergibt sich aus Gl. (4.7), wobei ϑ durch ϑ_{ji} zu

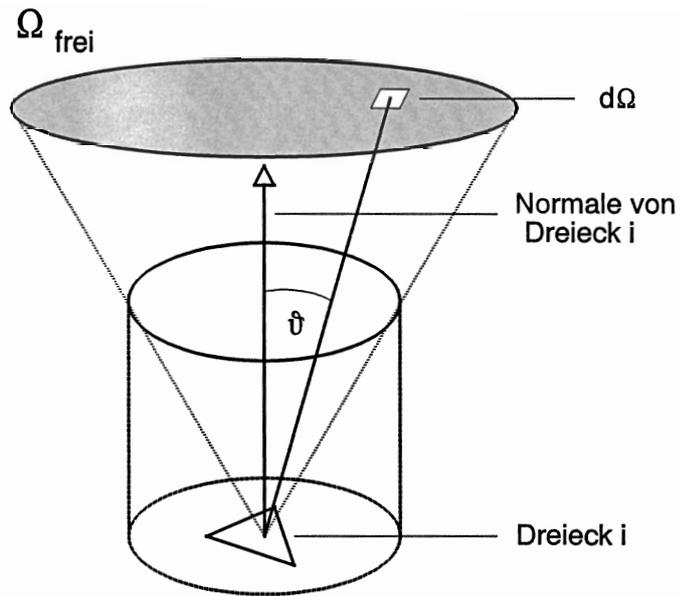


Abb. 4.5 Raumwinkelbereich der freien Sicht zum Gasvolumen Ω_{frei} für ein Dreieck i am Boden eines zylindrischen Kontaktloches.

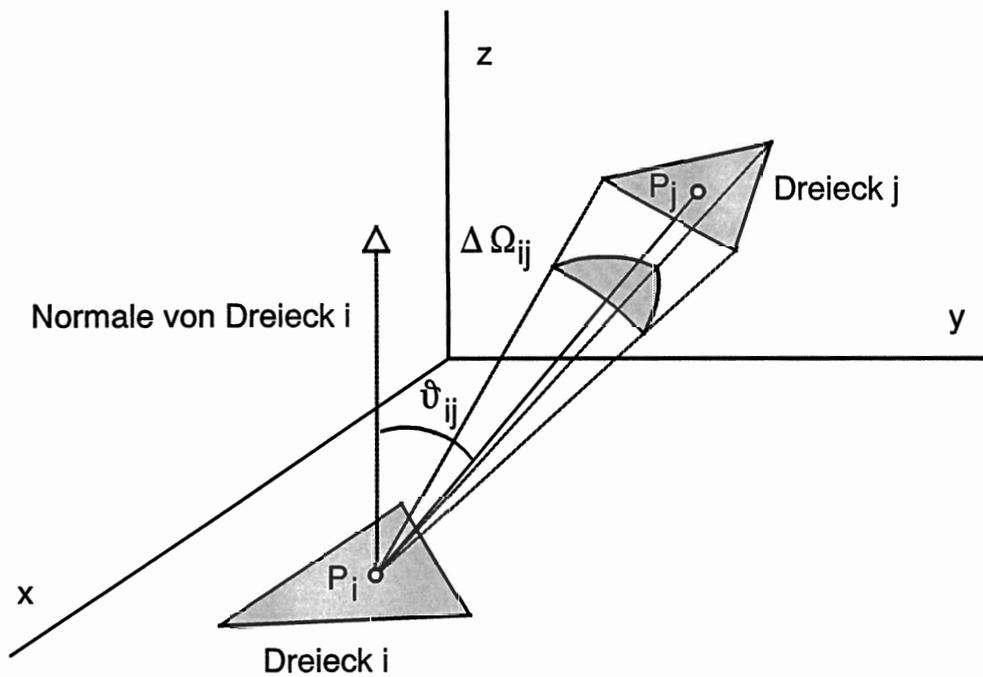


Abb. 4.6 Geometrie für zwei Dreiecke, zwischen denen die Teilchentransportrate bestimmt werden soll.

ersetzen ist, das in diesem Fall die Richtung der Desorption vom Dreieck j beschreibt. Weiterhin kommt noch ein Faktor $\cos\vartheta_{ij}$ hinzu, der den Auftreffwinkel der Teilchen auf

das Dreieck i berücksichtigt, wo ein flacherer Einfall (analog wie bei den Teilchen aus dem Gas) zu einem reduzierten Teilchenfluß führt. Es wird noch ein Faktor κ_{ij} eingeführt, der die Sichtbarkeit zwischen zwei Dreiecken i und j charakterisiert. Besteht freie Sicht zwischen den Dreiecken, d.h. die Möglichkeit zum Teilchenaustausch, wird κ_{ij} auf 1 gesetzt, ansonsten wird κ_{ij} auf 0 gesetzt. Der Teilchenfluß S_{ij} ist damit gegeben durch

$$S_{ij} = \kappa_{ij} R_j F_j \frac{1-s_c}{\pi s_c} \cos\vartheta_{ji} \cdot \frac{1}{r_{ij}^2} \cos\vartheta_{ij} , \quad (4.9)$$

wo r_{ij} der Abstand der beiden Dreiecksschwerpunkte P_i und P_j ist. Berücksichtigt man, daß der Raumwinkelbereich $\Delta\Omega_{ij}$ gegeben ist durch

$$\Delta\Omega_{ij} = \frac{F_j \cos\vartheta_{ji}}{r_{ij}^2} , \quad (4.10)$$

so kann Gl. (4.9) geschrieben werden als

$$S_{ij} = \kappa_{ij} R_j \frac{1-s_c}{\pi s_c} \cos\vartheta_{ij} \cdot \Delta\Omega_{ij} . \quad (4.11)$$

Für die Berechnung des Raumwinkels $\Delta\Omega_{ij}$ wurden zwei Verfahren implementiert. Beim ersten Verfahren wird $\Delta\Omega_{ij}$ direkt gemäß Gl. (4.10) bestimmt. Beim zweiten Verfahren wird das Dreieck j auf die Einheitskugel um P_i projiziert (mit P_i als Projektionszentrum). Die Fläche des planaren Dreiecks gegeben durch die Projektionspunkte auf der Einheitskugel wird dann gleich $\Delta\Omega_{ij}$ gesetzt. Beide Verfahren sind mit einem numerischen Fehler behaftet, es zeigte sich jedoch, daß nach Anwendung der weiter unten beschriebenen Verfeinerungsmethode der Dreiecke bei der Teilchentransportberechnung die Abweichungen zwischen den beiden Verfahren sehr gering werden. In der aktuellen Version des Simulationsprogrammes wird $\Delta\Omega_{ij}$ aus Gl. (4.10) ermittelt.

Die Sichtbarkeit zwischen zwei beliebigen Dreiecken i und j wird ermittelt, indem zunächst geprüft wird, ob die Dreiecke einander zugewandt sind, d.h. ob man von einem der beiden Dreiecke aus das jeweils andere sehen würde. Als Blickrichtungen sind dabei nur die Richtungen zugelassen, die einen Winkel von kleiner als $\pi/2$ zur Dreiecksnormalen haben, d.h. die vom Dreieck aus in das angrenzende Gas zeigen. Sind die Dreiecke einander zugewandt, so wird die Verbindungsstrecke zwischen den Dreiecksschwerpunkten auf Schnitte mit anderen Dreiecken der Oberfläche geprüft, d.h. es wird nach Stücken der Oberfläche gesucht, welche die Sicht zwischen den Dreiecken i und j blockieren. Sind die Dreiecke einander zugewandt und wird die Verbindungslinie zwischen den Dreiecken durch kein anderes Dreieck geschnitten, so besteht Sicht und κ_{ij} wird auf 1 gesetzt, andernfalls ergibt sich ein κ_{ij} von 0.

Mit Gl. (4.8) und Gl. (4.11) kann Gl. (4.2) geschrieben werden als

$$R_i = s_c \left(G \int_{\Omega_{frei}} \cos\vartheta \, d\Omega + \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} \kappa_{ij} R_j \frac{1-s_c}{\pi s_c} \cos\vartheta_{ij} \cdot \Delta\Omega_{ij} \right) . \quad (4.12)$$

Wir führen nun eine Normierung der Reaktionsflüsse R_i durch, indem wir diese in planaren Gebieten, d.h. außerhalb jeglicher 2D- oder 3D-Strukturen, auf den Wert 1 setzen. Ein Dreieck in solch einem planaren Gebiet hat volle Sicht zum Gas, d.h. Ω_{frei} ist 2π . Entsprechend kann das Dreieck nicht von Teilchen, die von anderen Dreiecken kommen, erreicht werden, d.h. die S_{ij} sind alle 0. Man erhält dann für Gl. (4.12)

$$1 = s_c G \int_{2\pi} \cos\vartheta \, d\Omega = s_c G \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos\vartheta \sin\vartheta \, d\varphi \, d\vartheta = \pi s_c G , \quad (4.13)$$

und damit für G einen Term, der unabhängig von den Eigenschaften des Gases ist:

$$G = \frac{1}{\pi s_c} \quad (4.14)$$

Setzen wir G aus Gl. (4.14) in Gl. (4.12) ein, so ergibt sich

$$\pi R_i - (1-s_c) \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} \kappa_{ij} R_j \cos \vartheta_{ij} \cdot \Delta \Omega_{ij} = \int_{\Omega_{frei}} \cos \vartheta \, d\Omega \quad (4.15)$$

Das Integral auf der rechten Seite von Gl. (4.15) kann bestimmt werden, indem man vom Integral über den maximalen Raumwinkel, der sichtbar sein kann (2π), das Integral über den verdeckten Bereich Ω_{deck} abzieht:

$$\int_{\Omega_{frei}} \cos \vartheta \, d\Omega = \int_{2\pi} \cos \vartheta \, d\Omega - \int_{\Omega_{deck}} \cos \vartheta \, d\Omega = \pi - \int_{\Omega_{deck}} \cos \vartheta \, d\Omega \quad (4.16)$$

Nun stellen gerade die Dreiecke den von Dreieck i aus gesehen bedeckten Teil dar, die Sicht zu Dreieck i haben. Damit gilt näherungsweise für das Integral über den bedeckten Teil

$$\int_{\Omega_{deck}} \cos \vartheta \, d\Omega = \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} \kappa_{ij} \cos \vartheta_{ij} \cdot \Delta \Omega_{ij} \quad (4.17)$$

Unter Einführung der Abkürzung

$$T_{ij} = \kappa_{ij} (1-s_c) \cos \vartheta_{ij} \cdot \Delta \Omega_{ij} \quad (4.18)$$

ergibt sich dann insgesamt für Dreieck i :

$$\pi R_i - \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} T_{ij} R_j = \pi - \frac{1}{1-s_c} \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} T_{ij} \quad (4.19)$$

Da diese Gleichung für alle N Dreiecke i , d.h. für $i=1 \dots N$, gilt, stellt (4.19) ein System von N linearen Gleichungen in den N unbekanntem Reaktionsflüssen R_i dar.

Gl. (4.18) gilt exakt für infinitesimal kleine Dreiecke. Bei endlicher Dreiecksgröße ist sie mit einem numerischen Fehler behaftet, der umso größer ist, je kleiner der Abstand der Dreiecksschwerpunkte P_i und P_j relativ zur Dreiecksgröße und damit zu den Seitenlängen der Dreiecke ist. Es ist daher nötig, die Dreiecke gegebenenfalls für die Berechnung der T_{ij} zu verfeinern. Als Kriterium wird das Verhältnis der maximalen Seitenlänge der beiden Dreiecke i und j zum Abstand der Schwerpunkte P_i und P_j gewählt. Liegt dieses Verhältnis über einem Grenzwert r_{lim} , so werden die beiden Dreiecke jeweils in kleinere Dreiecke zerlegt, so daß das Verhältnis der maximalen Seitenlänge der Unterteilungsdreiecke zum Abstand P_i nach P_j unter r_{lim} liegt. In der Praxis hat sich ein Wert von r_{lim} von etwa 0,25 als zweckmäßig erwiesen. Bei diesem Wert ist das Verhältnis zwischen maximaler Seitenlänge der betrachteten Dreiecke zu ihrem Abstand schon hinreichend klein, so daß der numerische Fehler wie oben erläutert vernachlässigt werden kann. Bei weiterer Verkleinerung von r_{lim} ändern sich die Simulationsergebnisse in der Regel dann nicht mehr signifikant.

Zu beachten ist, daß die Unterteilung der Dreiecke nur im Zusammenhang mit der Berechnung der Teilchentransportraten angewandt wird und nicht für die jeweilige Oberflächendiskretisierung, so daß die Zahl der Dreiecke der Triangulierung erhalten bleibt. Dies kommt der Rechengeschwindigkeit bei der Verschiebung der Triangulierung entsprechend dem Schichtwachstum zugute. Weiterhin wird die Effizienz bei dieser Methode dadurch gewährleistet, daß die Verfeinerung entsprechend den jeweiligen Gegebenheiten (Verhältnis der maximalen Seitenlänge zum Abstand P_i nach P_j) durchgeführt wird. Die Verfeinerung der aktuellen Oberflächendiskretisierung wird in Kap. 4.4.3 dargestellt.

Das Gleichungssystem der N linearen Gleichungen, das durch Gl. (4.19) für $i=1 \dots N$ gegeben ist, wird unter Anwendung des Gauß-Seidel-Verfahrens [Tör88] gelöst, da dieses

iterative Verfahren den direkten Methoden hinsichtlich der Geschwindigkeit deutlich überlegen ist. Dies liegt darin begründet, daß die Matrix des Gleichungssystems voll besetzt ist, so daß sich für die in Frage kommenden direkten Verfahren Rechenzeiten proportional zu N^3 ergeben würden. Die iterativen Verfahren führen hingegen auf Rechenzeiten proportional zu N^2 . Für eine Triangulierung aus 1000 Dreiecken ergibt sich beim verwendeten Verfahren eine Rechenzeit, die um etwa zwei Größenordnungen unter der bei Verwendung des Gauß-Verfahrens liegt. Konvergenzprobleme konnten in keinem Fall festgestellt werden. Als Lösung des Systems erhält man die Reaktionsflüsse R_i für alle Dreiecke i .

Da sich die Oberfläche während des Schichtabscheideprozesses ändert und sich dies natürlich auch auf die sich ergebenden Teilchenflüsse auswirkt, ist es notwendig, die Reaktionsflüsse mehrmals während der Simulation eines Abscheideprozesses zu bestimmen. Typischerweise sind während einer Abscheidung wie etwa dem Füllen eines Kontaktloches die Flüsse 5 bis 10 mal zu berechnen, um eine hinreichende Genauigkeit zu erreichen, da sich die Oberfläche zwischen den Berechnungen der Reaktionsflüsse dann so wenig ändert, daß die Flüsse während der entsprechenden Zeitintervalle als konstant angesehen werden können. Eine weitere Erhöhung der Schrittzahl führt zu keiner signifikanten Veränderung des Ergebnisses, was für verschiedenartige Geometrien überprüft wurde.

Vom Benutzer des Programms wird die Schichtdicke in den planaren Gebieten X_{1D} vorgegeben. Wird die Simulation in M Schritten durchgeführt, d.h. werden die Reaktionsflüsse M mal während des Simulationsvorgangs berechnet, so ist die Schichtdicke für ein beliebiges Dreieck i mit dem Reaktionsfluß R_i , die bei einem Schritt aufwächst, gegeben durch

$$X_i = \frac{X_{1D} \cdot R_i}{M} . \quad (4.20)$$

Dabei wurden die Normierung der R_i auf 1 in den planaren Gebieten und die Tatsache, daß die aufwachsende Schichtdicke proportional zum Reaktionsfluß ist, ausgenutzt.

Bei dem erweiterten Modell, das zwei beitragende reaktive Teilchen annimmt [Wil92b] [Wil92c], sind zwei Haftwahrscheinlichkeiten s_{c1} und s_{c2} anzugeben, die den beiden Teilchensorten entsprechen. Ferner ist der Anteil A des Teilchens mit s_{c1} am Wachstum in planaren Gebieten zu spezifizieren. Man erhält dann in diesem Fall die Dicke der in einem Simulationsschritt auf Dreieck i aufwachsenden Schicht analog zu Gl. (4.20), indem die Beiträge der beiden Teilchensorten gewichtet werden:

$$X_i = A \frac{X_{1D} \cdot R_{i1}}{M} + (1 - A) \frac{X_{1D} \cdot R_{i2}}{M} \quad (4.21)$$

R_{i1} und R_{i2} sind dabei die Reaktionsflüsse der beiden Teilchenarten, die man erhält, wenn das Gleichungssystem Gl. (4.19) für s_{c1} bzw. s_{c2} gelöst wird.

4.3 Anwendung des Modells im zweidimensionalen Fall

Ein wichtiger Aspekt bei der Anwendung von 3D-Simulationen ist die Verwendung von Parametern, die aus dem Vergleich von 2D-Messungen mit 2D-Simulationen bestimmt wurden. Im Falle des LPCVD-Modells werden die 2D-Messungen in der Regel Querschnittsprofile von langen Gräben sein. Da es sich bei den Modellparametern um physikalische Parameter handelt, sollten die so ermittelten Werte auch für den dreidimensionalen Fall Gültigkeit besitzen. Dennoch ist es nötig, die Konsistenz der Implementierung zu überprüfen, d.h. die Rechnungen entsprechend der 3D-Implementierung müssen sich für lange Gräben auf die Ausdrücke, die bei der 2D-Implementierung verwendet werden [Wil92b][Wil92c], zurückführen lassen. Da die Normierung sowohl bei der 2D-Implementierung als auch bei der 3D-Implementierung im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurde, reicht es aus, die Proportionalitäten für die Teilchentransportterme zu überprüfen.

Bei der 2D-Implementierung [Wil92b][Wil92c] wurden dieselben physikalischen Modellannahmen gemacht wie bei der 3D-Implementierung, es wird aber nur in einer Ebene gerechnet und statt der Raumwinkel treten hier ebene Winkel auf. Für den Fluß $A(\mathbf{r})$ der Teilchen von einem Winkelement $\Delta\varphi$ aus dem Gasvolumen an einer Stelle \mathbf{r} auf der

Oberfläche ergab sich dabei

$$A(\mathbf{r}) \sim \cos\vartheta \cdot \Delta\varphi, \quad (4.22)$$

wobei ϑ der Winkel zwischen der Oberflächennormalen an der Stelle \mathbf{r} und dem Vektor von \mathbf{r} in die betrachtete Richtung ist. Entsprechend ist der Fluß der Teilchen an der Stelle \mathbf{r} , die von einem Polygonsegment Δx stammen, gegeben durch

$$S(\mathbf{r}) \sim \cos\vartheta_1 \cdot \Delta\varphi, \quad (4.23)$$

wo ϑ_1 der Winkel zwischen der Normalen bei \mathbf{r} und dem Vektor von \mathbf{r} zu Segment Δx ist und $\Delta\varphi$ der planare Winkel ist, der von Segment Δx relativ zu \mathbf{r} abgedeckt wird. Es ist also zu zeigen, daß sich die Raumwinkelbereiche der 3D-Rechnung auf Bereiche ebener Winkel reduzieren.

Es wird ein unendlich langer Graben mit konstantem Querschnitt betrachtet, d.h. eine Geometrie, die mit einem 2D-Simulationsprogramm behandelt werden kann. Ein Beispiel ist in Abb. 4.7 gezeigt.

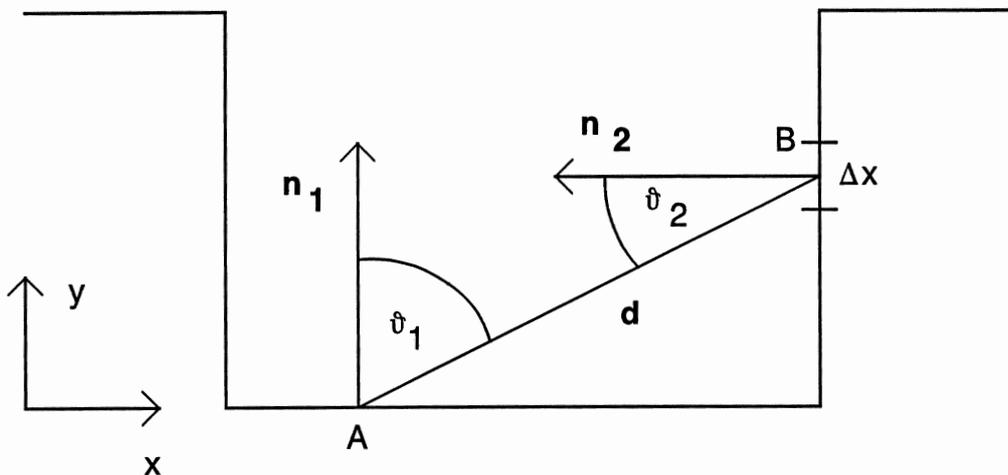


Abb. 4.7 Querschnitt eines in z-Richtung unendlich ausgedehnten Grabens.

Die z-Achse stellt die Richtung der unendlichen Ausdehnung dar und steht senkrecht zur Zeichenebene. Es soll der Fluß von Teilchen an der Stelle A berechnet werden, der von Teilchen, die von dem unendlich langen Streifen der Breite Δx bei B desorbiert sind, herrührt. A liegt in der Ebene $z=0$ und B sei der Schnittpunkt des Streifens mit der Ebene $z=0$, wobei Δx als sehr klein angenommen wird. Es werden die normierten Normalenvektoren $\mathbf{n}_1=(n_{1x},n_{1y},0)^T$ und $\mathbf{n}_2=(n_{2x},n_{2y},0)^T$ eingeführt. Weiterhin wird der Vektor von A nach B $\mathbf{d}=(d_x,d_y,0)^T$ mit $|\mathbf{d}|=d$ definiert. Der Vektor von A zu einem Punkt des Streifens mit $z=l$ ist dann gegeben durch $\mathbf{d}_l=(d_x,d_y,l)^T$. Der Fluß an der Stelle A durch Teilchen, die aus dem Streifen herrühren, ergibt sich durch Integration über den Streifen und unter Verwendung von Gl. (4.9):

$$\begin{aligned}
S_A &= S_1 \int_{-\infty}^{\infty} dl \cdot \Delta x \cdot \frac{\mathbf{n}_1 \mathbf{d}_l}{|\mathbf{n}_1| |\mathbf{d}_l|} \cdot \frac{-\mathbf{n}_2 \mathbf{d}_l}{|\mathbf{n}_2| |\mathbf{d}_l|} \cdot \frac{1}{d^2 + l^2} \\
&= S_1 \int_{-\infty}^{\infty} dl \cdot \Delta x \cdot \frac{n_{1x} d_x + n_{1y} d_y}{\sqrt{d^2 + l^2}} \cdot \frac{-n_{2x} d_x - n_{2y} d_y}{\sqrt{d^2 + l^2}} \cdot \frac{1}{d^2 + l^2} \\
&= S_1 \int_{-\infty}^{\infty} dl \cdot \Delta x \cdot \frac{d \cdot \cos \vartheta_1}{\sqrt{d^2 + l^2}} \cdot \frac{d \cdot \cos \vartheta_2}{\sqrt{d^2 + l^2}} \cdot \frac{1}{d^2 + l^2} \\
&= S_1 d^2 \Delta x \cos \vartheta_1 \cdot \cos \vartheta_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{(d^2 + l^2)^2} \\
&= \frac{\pi S_1}{2} \cdot \frac{\Delta x \cdot \cos \vartheta_1 \cdot \cos \vartheta_2}{d} \tag{4.24} \\
&= \frac{\pi S_1}{2} \cos \vartheta_1 \cdot \Delta \varphi .
\end{aligned}$$

$\Delta \varphi$ ist dabei der Winkel, der durch Δx von A aus gesehen abgedeckt wird. S_1 ist eine Konstante, die alle nicht geometrischen Größen enthält. Gl. (4.23) ist damit aus der 3D-Betrachtung abgeleitet, da die Normierung sowohl bei der 2D-Implementierung als auch

bei der 3D-Implementierung durchgeführt wird.

Für einen entsprechenden Streifen der freien Sicht zum Gasraum geht die Herleitung analog. Das Raumwinkelement $d\Omega$ gemäß Gl. (4.8) ergibt sich als

$$d\Omega = dl \cdot \Delta x \cdot \frac{\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{d}_l}{|\mathbf{n}_2| |\mathbf{d}_l|} \cdot \frac{1}{d^2 + l^2}, \quad (4.25)$$

wobei \mathbf{n}_2 entgegengesetzt zu \mathbf{d} orientiert ist. Damit ergibt sich dieselbe Herleitung wie für Gl. (4.24), wobei $\cos\vartheta_2$ auf 1 zu setzen ist.

Der Teilchentransport in langen Gräben läßt sich demnach zweidimensional unter Verwendung der planaren Winkel rechnen, und die entsprechenden physikalischen Parameter haben auch für die 3D-Simulationen Gültigkeit.

4.4 Verschiebung der Oberfläche

In diesem Kapitel wird der Algorithmus beschrieben, der dazu dient, die triangulierte Oberfläche entsprechend den für alle Dreiecke gemäß Gl. (4.20) (für eine Sorte reaktiver Teilchen) bzw. Gl. (4.21) (für zwei beitragende Teilchenarten) berechneten Schichtdicken zu verschieben. Es wird zunächst in Kap. 4.4.1 die Methode erläutert, die Verschiebungsvektoren für die Dreieckspunkte zu ermitteln. Insbesondere für die Simulation der Abscheidung von Schichten mit einer Dicke vergleichbar den typischen Abmessungen der Struktur müssen daneben noch weitere Algorithmen bereitgestellt werden, die Artefakte wie Schnitte der Oberfläche mit sich selbst verhindern. Weiterhin kann es nötig sein, die Triangulierung während der Simulation an bestimmten Stellen zu verfeinern, um eine nicht nur ausreichende Genauigkeit, sondern überhaupt die Stabilität des Algorithmus zu gewährleisten. Die für diese Aufgaben implementierten Algorithmen werden in den Kap. 4.4.2 bzw. 4.4.3 dargestellt.

4.4.1 Berechnung des Verschiebungsvektors

Zur Verschiebung der Oberfläche wird ein Algorithmus angewandt, der die triangulierte Oberfläche punktweise verschiebt, da an einen Punkt der Triangulierung (im folgenden Knoten genannt) prinzipiell beliebig viele Dreiecke angrenzen können, so daß die Verschiebung der Dreiecksebenen und Bestimmung eines Schnittpunktes der verschobenen Ebenen im allgemeinen nicht möglich ist. Später wird eine spezielle Methode erklärt, die unter bestimmten Voraussetzungen die Berechnung des verschobenen Punktes durch Schnittbildung verschobener Ebenen durchführen kann.

Es wurde ein 3D-Programm neu entwickelt, das die Knoten der Triangulierung in Abhängigkeit von den Normalenrichtungen und abzuschneidenden Schichtdicken der an den jeweiligen Knoten angrenzenden Dreiecke verschiebt. Dieses Programm ist ein 3D-Analogon zum 2D-Stringalgorithmus [Jew79]. Als Beispiel ist in Abb. 4.8 ein Knoten mit 4 angrenzenden Dreiecken dargestellt. Die Normalenrichtung des Dreiecks i ist durch \mathbf{n}_i gegeben, der Winkel, mit dem Dreieck i an den Knoten angrenzt, wird als γ_i bezeichnet.

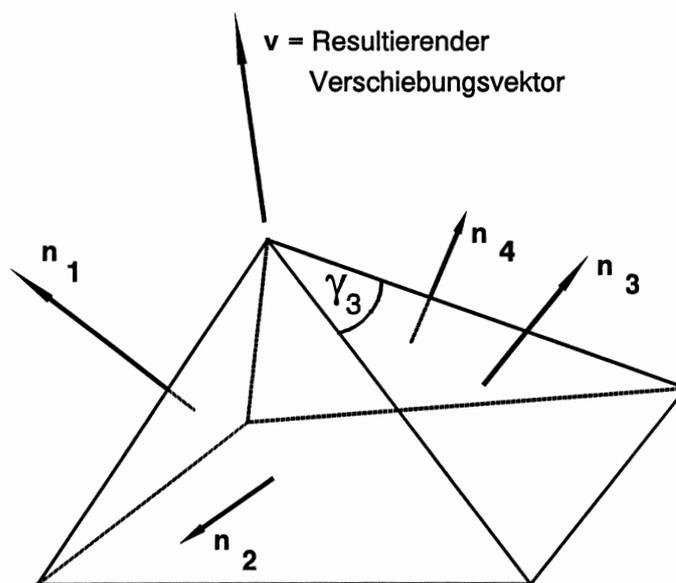


Abb. 4.8 Knoten mit 4 angrenzenden Dreiecken, die bei der Bestimmung des Verschiebungsvektors berücksichtigt werden.

Die Schichtdicken X_i für die Dreiecke i sind gemäß Gl. (4.20) bzw. Gl. (4.21) gegeben. Diese Dicken entsprechen der Abscheidedicke in einem Simulationsschritt, d.h. zwischen

zwei Berechnungen der Teilchenflüsse. Die Verschiebung der Oberfläche für diesen Simulationsschritt wird wiederum in m Schritten durchgeführt. Zwischen diesen m Schritten werden die Teilchenflüsse nicht neu berechnet, die Verschiebung in m Schritten dient jedoch dazu, eine effektive Kontrolle der Oberfläche zu ermöglichen, so daß die Bildung von Artefakten und Instabilitäten verhindert werden kann, wie in Kap. 4.4.2 erläutert wird. Die Verschiebungsstrecken der Dreiecke i bei einem Verschiebungsschritt der Oberfläche ergeben sich damit zu X_i/m .

Es werden nun die mittlere Normalenrichtung und die mittlere Verschiebungsstrecke der an den betrachteten Knoten angrenzenden Dreiecke bestimmt. Die Beiträge der Dreiecke werden jeweils mit dem Winkel γ_i gewichtet. Bei der Berechnung der mittleren Normalenrichtung werden die Dreiecksnormalen noch zusätzlich mit der Verschiebungsstrecke des Dreiecks gewichtet. Der entsprechende Verschiebungsvektor ergibt sich zunächst als Produkt aus der mittleren Normalenrichtung und der mittleren Verschiebungsstrecke zu:

$$\mathbf{v}' = \frac{\sum_i \gamma_i X_i \mathbf{n}_i}{|\sum_i \gamma_i X_i \mathbf{n}_i|} \cdot \frac{\sum_i \gamma_i \frac{X_i}{m}}{\sum_i \gamma_i} . \quad (4.26)$$

Die Summierung wird jeweils über die an den Knoten grenzenden Dreiecke durchgeführt. Der erste Faktor stellt einen Einheitsvektor in die gemittelte Normalenrichtung dar, der zweite Faktor ist die mittlere Verschiebungsstrecke.

Es hat sich jedoch gezeigt, daß die Verwendung allein von \mathbf{v}' zu Artefakten, wie sie in Kap. 3.2.1 für den zweidimensionalen Fall erläutert wurden, führen kann. Als geeignetes Analogon zu Gl. (3.1) für den dreidimensionalen Fall wurde ein Korrekturfaktor f_{cor} mit

$$f_{cor} = \left(\frac{\sum_i \gamma_i \cos \varphi_i}{\sum_i \gamma_i} \right)^{-1} = \frac{\sum_i \gamma_i}{\sum_i \gamma_i \cos \varphi_i} \quad (4.27)$$

eingeführt. φ_i ist dabei der Winkel zwischen dem Vektor \mathbf{v}' und der Normalen \mathbf{n}_i des

Dreiecks i . Für den zweidimensionalen Fall ergibt sich mit $\gamma_1=\gamma_2=1$ (wird definiert, da in 2D keine anliegenden Winkel vorhanden sind und die Gewichtung der beiden Segmente gleich ist) und $\varphi_1=\varphi_2=\pi/2-\varphi/2$ das Resultat von Gl. (3.1). Der Ausdruck $\cos\varphi_i$ ist damit ein Maß für die Abweichung der einzelnen Normalenrichtungen der Dreiecke von der mittleren Normalenrichtung. Je größer die Abweichung ist, desto kleiner wird $\cos\varphi_i$. Wieder gewichtet mit den Winkeln γ_i wird $\cos\varphi_i$ gemittelt und vom Resultat der Kehrwert gebildet, da der Korrekturfaktor umso größer sein muß, je stärker die Normalen variieren. Es hat sich gezeigt, daß mit diesem Korrekturfaktor insbesondere an konkaven Ecken und Kanten ein natürliches Schichtprofil ohne artifizielle Verzerrung erreicht wird. Der endgültige Verschiebungsvektor nach dieser Methode ergibt sich damit zu

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}' \cdot f_{cor} . \quad (4.28)$$

Bei den Ausgangstriangulierungen von quaderförmigen Kontaktlöchern werden, wie in Kap. 4.2 dargestellt, an den konvexen Kanten zahlreiche schmale Dreiecke eingefügt, die zu dem runden Schichtprofil an diesen Kanten nach der Abscheidung führen. In den Ecken, wo diese runden Kanten zusammenstoßen, wurden Verzerrungen bei Berechnung des Verschiebungsvektors gemäß Gl. (4.28) beobachtet. Dies ist in Abb. 4.9 (a) am Beispiel der isotropen Abscheidung dargestellt. Daher wurde eine Methode entwickelt, die in gewisser Weise analog zur der in Kap. 3.2.1 segmentweisen Verschiebung arbeitet. Da die Ebenen, die durch Verschiebung der Ebenen der an einen Knoten angrenzenden Dreiecke nicht notwendigerweise genau einen Schnittpunkt haben, sind spezielle Verfahren nötig. Es wurde dazu ein Algorithmus implementiert, der bei jedem Knoten prüft, ob drei an den Knoten angrenzende Dreiecke vorhanden sind, deren drei Normalenvektoren linear unabhängig sind. Darüberhinaus wird verlangt, daß das Spatprodukt dieser drei (normierten) Normalenvektoren über einem vorgegebenen Grenzwert liegt (typischerweise verwendeter Wert 0,05). Damit wird ein quantitatives Maß für den Grad der linearen Unabhängigkeit bereitgestellt. Kann das Kriterium nicht erfüllt werden, wird der Knoten nach Gl. (4.28) verschoben. Ist das Kriterium erfüllbar, d.h. gibt es mindestens einen Satz von Dreiecken, für den das Spatprodukt der Normalenvektoren über dem vorgegebenen Grenzwert liegt, wird eine alternative Verschiebungsmethode angewandt. Dazu werden die drei Normalen unter den Normalen aller an den Knoten angrenzenden Dreiecke gesucht, von denen das Spatprodukt maximal ist. Der verschobene Knoten wird dann ermittelt,

indem die Ebenen der drei entsprechenden Dreiecke i jeweils um die Verschiebungsstrecke X_i/m verschoben werden und der Schnittpunkt berechnet wird. Da die drei Normalenvektoren linear unabhängig sind, ist der Schnittpunkt existent und eindeutig. In Abb. 4.9 (b) ist das Ergebnis der Simulation unter Verwendung der alternativen Methode dargestellt. Die Verzerrungen sind nicht mehr vorhanden. Durch die Vorgabe des Grenzwertes für das Spatprodukt der Normalenvektoren wird sichergestellt, daß die alternative Methode nur bei den Knoten angewendet wird, bei denen keine Instabilitäten, etwa durch fast parallele Dreiecke, entstehen können.

Verschiebt man alle Dreiecke, die an einen Knoten angrenzen, in Richtung ihrer Normalen, müssen im allgemeinen Fall zur Erhaltung einer geschlossenen triangulierten Oberfläche zusätzliche Dreiecke eingefügt werden. Da dies bei jedem Verschiebungsschritt der Fall sein wird, würde die Zahl der Dreiecke sehr stark zunehmen, so daß eine derartige Implementierung für die Simulation der Abscheideprozesse nicht in Frage kommt. Weiterhin ist eine solche Parallelverschiebung für allgemeine Abscheideprozesse problematisch, da sich die Oberflächenorientierung in der Regel (außer bei isotroper Schichtabscheidung) durch örtlich variierende Wachstumsraten während der Abscheidung ändert.

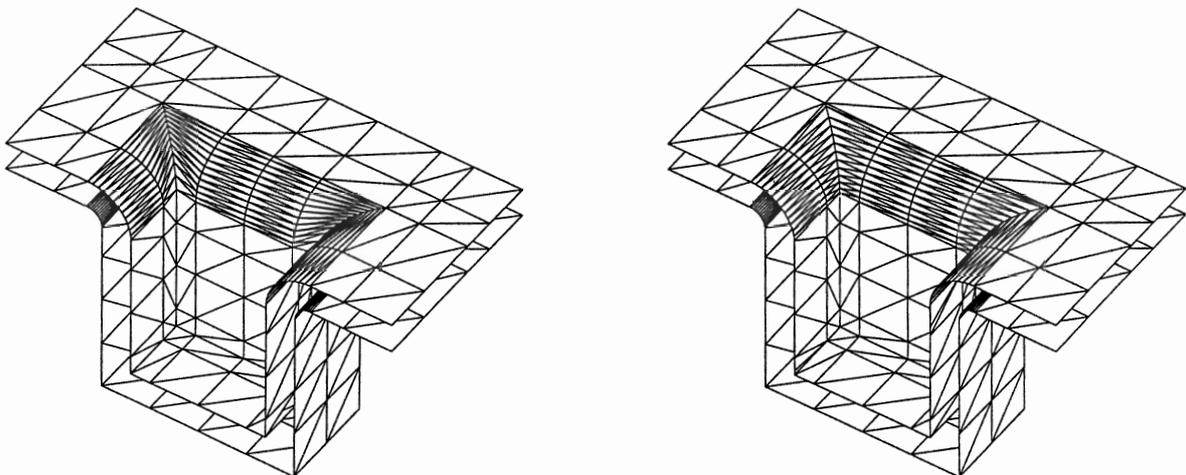


Abb. 4.9 Verzerrung der Oberfläche nach der Verschiebung im Bereich der Verfeinerung an der Öffnung der Struktur (links) und Beseitigung der Verzerrung durch Verwendung eines zusätzlichen Algorithmus (rechts).

4.4.2 Verfahren zur Beseitigung von Artefakten

Wie in Kap. 3.2.1 schon für den zweidimensionalen Fall dargelegt wurde, sind Schnitte der Oberfläche mit sich selbst ein Problem bei der polygonalen Geometriebeschreibung. Die Komplexität der Artefakte ist in 3D noch höher als in 2D. Es ist in 3D nur sehr schwer möglich, einmal entstandene Schnitte der Oberfläche mit sich selbst (in 3D Blasen genannt) wieder zu entfernen. Daher ist es zweckmäßig, durch geeignete Algorithmen die Entstehung dieser Schnitte zu verhindern.

Man unterscheidet lokale und globale Schnitte. Lokale Schnitte entstehen in der Regel an konkaven Kanten und Ecken der Topographie, wenn die Länge der Verschiebungsvektoren größer als die Seitenlänge oder Höhe der Dreiecke ist. Für den zweidimensionalen Fall wurde dies in Abb. 3.9 demonstriert. Analog ergibt sich das Problem für den dreidimensionalen Fall. Globale Schnitte liegen vor, wenn zunächst getrennte Teile der Oberfläche im Verlauf der Simulation einer aufwachsenden Schicht ineinanderlaufen. Dies kann zum Beispiel beim Schließen der Öffnung eines Kontaktloches durch Schichtabscheidung auftreten. Im folgenden werden die implementierten Verfahren zur Verhinderung des Auftretens der Schnitte vorgestellt.

Um die Bildung der lokalen Schnitte zu verhindern, wurde ein Algorithmus implementiert, der nahezu zu einer Linie entartete Dreiecke beseitigt. Diese Dreiecke würden sonst zu lokalen Schnitten führen, wie sie in 2D in Abb. 3.9 dargestellt sind. Den kurzen Polygonsegmenten entsprechen in 3D die Dreiecke mit kleiner Höhe, d.h. solche, die nahezu zu einer Linie entartet sind. Als Kriterium wird dabei die kleinste der drei Höhen in einem Dreieck benutzt. Ist diese kleiner als ein vorgegebener Grenzwert h_{lim} , ist das Dreieck zu entfernen. Dieser Grenzwert muß wesentlich größer sein als die maximale Verschiebungsstrecke $X_{1D} / (M \cdot m)$, die bei einem Verschiebungsschritt der Topographie auftreten kann. Typische Werte für h_{lim} im Fall von Geometrien mit Strukturdimensionen von etwa $1 \mu\text{m}$ sind $0,01 \mu\text{m}$, so daß der durch die Beseitigung der entsprechenden Dreiecke entstehende Fehler nur gering ist.

Bei der Beseitigung der Dreiecke ist nun darauf zu achten, daß die Triangulierung so wenig wie möglich gestört wird. Es werden daher zwei Fälle unterschieden, die in Abb.

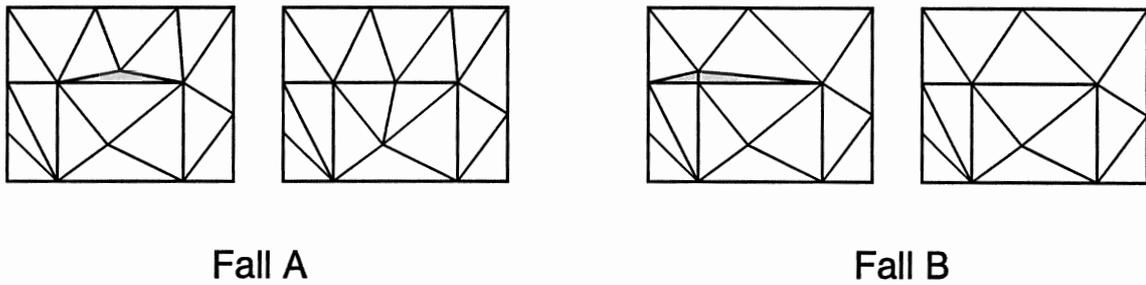


Abb. 4.10 Verfahren zur Beseitigung nahezu entarteter Dreiecke (schattiert) in zwei verschiedenen Fällen A und B.

4.10 schematisch dargestellt sind. In Fall A besitzt das Dreieck zwar eine kleine Höhe, aber keine Seite mit einer Seitenlänge, die vergleichbar mit der Höhe des Dreiecks ist. Es wird daher so vorgegangen, daß der Punkt, der die kleinste Höhe repräsentiert, auf die gegenüberliegende Seite heruntergezogen wird. Damit wird auf dieser Seite ein zusätzlicher Knoten induziert, so daß das ebenfalls an diese Seite angrenzende gegenüberliegende Dreieck unterteilt werden muß. Besitzt das Dreieck mit der kleinen Höhe auch eine Seite mit kleiner Seitenlänge (Fall B), kann die Beseitigung des Dreiecks einfach durch Zusammenziehen der beiden Endpunkte der Seite auf einen Punkt erreicht werden. Die Triangulierung wird dabei nur wenig beeinflusst. Das Kriterium, das überprüft wird, um zu entscheiden, welche der beiden Methoden angewandt wird, benutzt den maximalen Winkel des Dreiecks, das beseitigt werden soll. Liegt dieser über einem bestimmten Wert (typischerweise verwendet: 160°), so handelt es sich um ein Dreieck, das keine kleine Seite besitzt und das Verfahren A gelangt zur Anwendung. Liegt der Winkel unter dem Grenzwert, wird das Dreieck gemäß Methode B beseitigt.

Es hat sich gezeigt, daß die Verhinderung von lokalen Schnitten der Oberfläche durch die Beseitigung der Dreiecke kleiner Höhe mit dem beschriebenen Algorithmus effizient und stabil möglich ist.

Für spezielle Geometrien wie rotationssymmetrische Kontaktlöcher oder Kontaktlöcher mit quadratischer Öffnung, die aufgrund der Symmetrie des Prozesses auch im Verlauf der Abscheidung quadratisch bleibt, führt die Anwendung des Verfahrens zur Verhinderung von lokalen Schnitten auch zur Verhinderung von globalen Schnitten, da sich das Volumen des Gaseinschlusses von der oberen Schichtoberfläche abschnüren kann. Beim

Zuwachsen der Öffnung werden durch das Zusammenziehen der Dreieckspunkte wie oben beschriebene Dreiecke mit der Fläche null gebildet, die dann bei den darauffolgenden Wachstumsschritten der Oberfläche aus dem Satz der Dreiecke entfernt werden, so daß die zwei getrennten triangulierten Flächen entstehen. Die Triangulierung vor Entfernung der Dreiecke mit der Fläche null besteht dabei aus den beiden triangulierten Flächen, wobei eines oder mehrere zu einer Linie entartete Dreiecke diese beiden Flächen verbinden in einer Weise, daß das eine Ende der Linie mit der oberen, das andere mit der unteren Triangulierung verbunden ist, so daß nach Entfernen der Linien die Trennung erfolgt ist. Beispiele hierzu werden in Kap. 4.5 gezeigt. Für diese Fälle wird die Oberfläche nach Schließen des Kontaktloches durch zwei voneinander getrennte Sätze von Dreiecken beschrieben. Ein geschlossener triangulierter Hohlkörper beschreibt das Gaseinschlußvolumen, die obere Grenzfläche des abgeschiedenen Materials zum Gas hin wird durch den zweiten Satz von Dreiecken beschrieben.

Bei allgemeinen Geometrien, etwa Gräben, die sich im Verlauf der Abscheidung schließen, liegt diese Symmetrie nicht mehr vor, und eine Bildung von zwei Volumen in der beschriebenen Weise findet nicht statt, da die zu einer Linie entarteten Dreiecke an der Öffnung mit beiden Endpunkten der Linie sowohl mit dem oberen als auch mit dem unteren Teil der triangulierten Fläche verbunden sind, so daß die Entfernung nicht zur Trennung der beiden Teile führt. Um im allgemeinen Fall das Schließen der Struktur simulieren zu können, wurden Algorithmen implementiert, die testen, ob Teile der Oberfläche bei vorzunehmenden Wachstumsschritten mit anderen Teilen der Oberfläche kollidieren. Dazu wird für jeden Verschiebungsschritt der Oberfläche geprüft, ob ein Knoten, der entsprechend des berechneten Verschiebungsvektors bewegt wird, durch eines der Oberflächendreiecke hindurchtritt, d.h. ein Teil der Oberfläche in einen anderen hineinläuft. Ist dies der Fall, wird der Verschiebungsvektor des Knotens für den jeweiligen Verschiebungsschritt der Oberfläche auf 0 gesetzt. Das Kriterium wird auf jeden Knoten angewandt. Es kann außerdem vorkommen, daß ein Knoten nicht durch die eigene Verschiebung sondern durch die sich für irgendein Dreieck ergebende Verschiebung durch dieses Dreieck tritt. Daher wird ebenfalls geprüft, ob die Verschiebung eines Dreiecks gemäß seiner Normalenrichtung und Verschiebungstrecke zum Durchtreten eines Knotens durch das Dreieck führt. Trifft dies für mindestens einen Knoten zu, werden die Verschiebungsvektoren der Eckpunkte des Dreiecks für den jeweiligen Oberflächenverschie-

bungsschritt auf 0 gesetzt. Für jedes Dreieck der Oberfläche ist der Test auf Durchtreten eines Knotens bei Verschiebung des Dreiecks durchzuführen.

Es ist jeweils mit der schon verschobenen Oberfläche zu arbeiten, d.h. es wird geprüft, ob der Knoten bei seiner Verschiebung durch eines der schon verschobenen Dreiecke durchtritt und analog ob die Verschiebung des Dreiecks zum Durchtreten eines Knotens, der bereits verschoben ist, durch dieses Dreieck führt. Die Rechenzeit ist proportional zum Produkt aus Dreieckszahl und Knotenzahl. Diese Zeit ist damit deutlich kleiner als die für die Sichtprüfung zwischen den Dreiecken benötigte, die proportional zur dritten Potenz der Dreiecksanzahl ist, so daß keine nennenswerte Verschlechterung der Rechenzeiten resultiert.

Als Resultat erhält man nach dem Schließen der Struktur durch die Abscheidung einer Schicht eine einzige triangulierte Oberfläche, die jedoch zwei Gebiete umfaßt: die Oberfläche des Gaseinschlusses und die obere Schichtoberfläche. Die beiden Gebiete sind durch eine dünne Gashaut im abgeschiedenen Material miteinander verbunden. Ein Beispiel dafür ist in Abb. 4.11 gezeigt. Es handelt sich dabei um eine Simulation einer Schichtabscheidung in einen Graben unter Annahme einer Haftwahrscheinlichkeit von $s_c=0,5$.

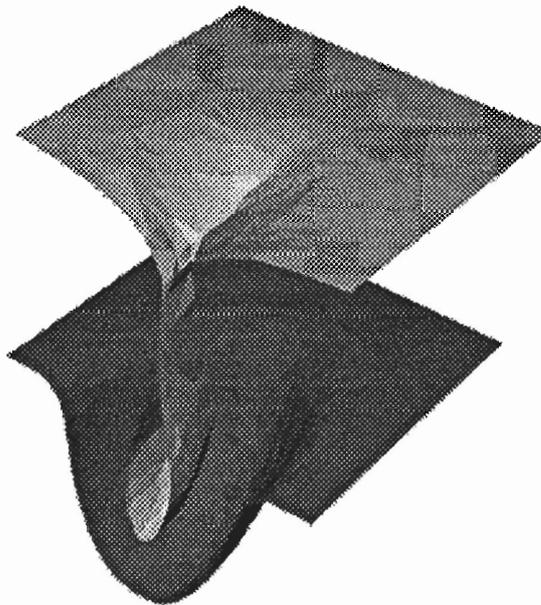


Abb. 4.11 Simulation der Schichtabscheidung in einen Graben mit Schließen der Öffnung.

4.4.3 Verfeinerung des Gitters

Im Verlauf der Simulation von Abscheideprozessen kommt es in bestimmten Gebieten (hauptsächlich an konvexen Kanten und Ecken) zu einer sich erweiternden Oberfläche. Um eine hinreichend genaue Beschreibung zu ermöglichen, kann man, wie in Kap. 4.2 erläutert, schon zu Beginn schmale Dreiecke an den kritischen Stellen einfügen, um im Verlauf der weiteren Simulation die genaue Beschreibung der expandierenden Oberfläche zu ermöglichen. Die Alternative dazu ist eine Verfeinerung der Oberflächentriangulierung während der Simulation entsprechend den jeweiligen Erfordernissen, so daß anfangs mit einer relativ kleinen Zahl von Dreiecken gearbeitet werden kann, die sich im Verlauf der Simulation erhöht, um expandierende Gebiete der Oberfläche mit ausreichender Genauigkeit zu beschreiben.

Es wurde ein Verfahren zur Gitterverfeinerung implementiert, daß zwei Kriterien überprüft, um zu entscheiden, ob ein Dreieck durch Unterteilung in kleinere Dreiecke zu verfeinern ist. Ein Dreieck wird verfeinert, wenn beide Kriterien erfüllt sind.

Zum einen muß die größte Seitenlänge des Dreiecks über einem bestimmten Grenzwert liegen, zum anderen muß das Dreieck in einem Bereich liegen, der nicht näherungsweise als planar angesehen werden kann. Letzteres folgt daraus, daß größere Dreiecke in planaren Bereichen, d.h. Gebieten ohne nennenswerte Oberflächenstruktur, nicht problematisch sind und daher nicht verfeinert werden müssen. Die Nicht-Planarität wird quantitativ überprüft, indem die Winkel zwischen der Normalen des betrachteten Dreiecks und den Normalen aller an dieses Dreieck angrenzenden Dreiecke berechnet werden. Liegt mindestens einer dieser Winkel über einem vorgegebenen Grenzwert, ist das Kriterium hinsichtlich der Nicht-Planarität erfüllt. Zwei Dreiecke werden dabei als aneinander-grenzend betrachtet, wenn sie einen oder zwei Eckpunkte gemeinsam haben. Ein stärkeres Kriterium wäre, Dreiecke als angrenzend zu betrachten, wenn sie eine gemeinsame Kante haben. Bei den Tests zeigte sich jedoch, daß die Verfeinerung gemäß des verwendeten Kriteriums keine zu feinen Triangulierungen ergab, d.h. die Verfeinerung beispielsweise im Bereich der konvexen Kanten war angemessen zur Beschreibung der Oberfläche, so daß in der aktuellen Programmversion über gemeinsame Punkte die Nachbarschaft von Dreiecken definiert wird.

Das Vorgehen bei der Verfeinerung eines Dreiecks ist in Abb. 4.12 dargestellt. Die längste Seite des Dreiecks wird in der Mitte unterteilt, indem ein neuer Knoten eingeführt wird. Das Dreieck wird damit zu zwei Dreiecken verfeinert. Das andere an die unterteilte Seite angrenzende Dreieck (falls vorhanden) ist ebenfalls zu unterteilen, um eine gültige Triangulierung zu gewährleisten. Es zeigte sich, daß dieses Verfahren der Unterteilung im allgemeinen zu stabilen Ergebnissen und nicht wesentlich verzerrten Triangulierungen, d.h. solchen mit vielen schmalen Dreiecken, führt. Aus diesem Grunde wurde auch nicht versucht, den Unterteilungspunkt in einer anderen Weise zu wählen, was prinzipiell natürlich möglich wäre.

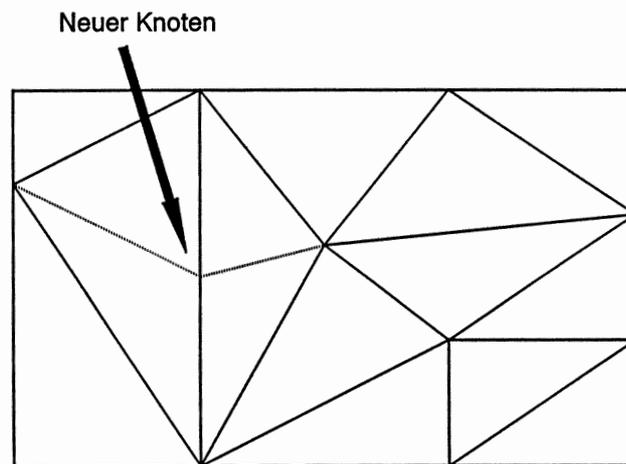


Abb. 4.12 Verfahren zur Verfeinerung der Triangulierung.

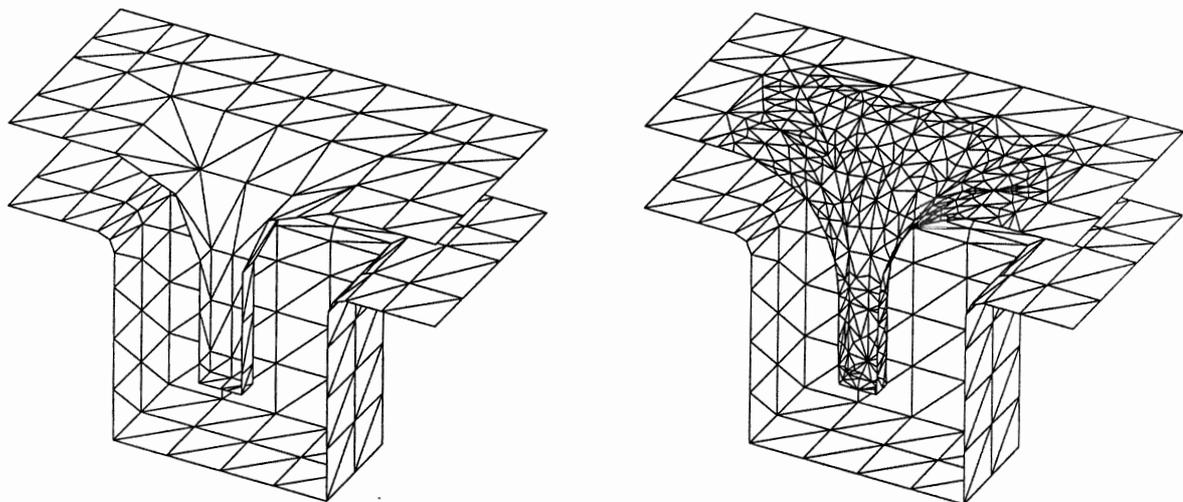


Abb. 4.13 Simulation einer isotropen Schichtabscheidung ohne (linke Seite) und mit (rechte Seite) Verfeinerung der Triangulierung.

Als ein Beispiel für die Anwendung des Verfeinerungsalgorithmus ist in Abb. 4.13 die Simulation einer isotropen Schichtabscheidung in eine Kontaktlochstruktur dargestellt. Gegenübergestellt sind die Simulation ohne und mit Verfeinerung der Triangulierung. Ohne Verfeinerung wird die Verrundung an der Oberkante nicht hinreichend genau aufgelöst.

4.5 Simulationsbeispiele

Um das Modell bzw. das Simulationsprogramm auf bestimmte Abscheideprozesse anwenden zu können, ist es notwendig, für den betreffenden Abscheideprozeß die Modellparameter in Abhängigkeit von den jeweiligen Abscheidebedingungen zu kennen. Die Haftwahrscheinlichkeit bzw. die beiden Haftwahrscheinlichkeiten und der relative Anteil der beiden Teilchenarten im Falle von zwei beitragenden Teilchensorten an der Wachstumsrate in planaren Gebieten müssen dazu gegeben sein.

Die Anwendung auf die LPCVD von Niedertemperaturoxid (LTO), auf die LPCVD von Wolfram durch die Reduktion von Wolframhexafluorid (WF_6) durch Silan (SiH_4) sowie auf die LPCVD von Polysilicium wird in Kap. 6 behandelt, und Simulationsergebnisse werden mit experimentellen Ergebnissen verglichen.

Im folgenden soll der prinzipielle Einfluß der Haftwahrscheinlichkeit auf die sich ergebenden Schichtprofile anhand des Modells unter Annahme einer reaktiven Teilchenart aufgezeigt werden. Es werden Simulationen exemplarisch für verschiedene Geometrien und für die Haftwahrscheinlichkeiten $s_c \rightarrow 0$ und $s_c = 0,1$ gezeigt. Die Beschreibung von Sputterprozessen mit $s_c = 1$ wird in Kap. 5.1 diskutiert.

Wenn die Haftwahrscheinlichkeit gegen null geht, bedeutet dies, daß ein reaktives Teilchen im Mittel sehr viele Stöße mit der Oberfläche der Struktur hat, bevor es endgültig in die aufwachsende Schicht eingebaut wird. Der zum Gasvolumen offene Raumwinkel für eine bestimmte Stelle auf der Oberfläche hat damit kaum noch eine Bedeutung für die Zahl der ankommenden sowie durch Reaktion in die Schicht eingebauten Teilchen. Das Resultat ist eine über die gesamte Struktur konstante Wachstumsrate, die gleich der für die planaren

Gebiete spezifizierten ist. Dies konnte anhand von Simulationen mit sehr kleinen Haftwahrscheinlichkeiten bestätigt werden. Man kann dies auch aus Gl. (4.19) ableiten. Wenn man $s_c=0$ setzt, erhält man als Lösung einen Reaktionsfluß von 1 für alle Dreiecke, d.h. eine konstante Wachstumsrate. Daher wird für sehr kleine Haftwahrscheinlichkeiten die Durchführung der Berechnungen entsprechend des Modells mit Bestimmung der Raumwinkel und Teilchentransportraten zwischen den Dreiecken übergangen und die Wachstumsrate für alle Dreiecke auf denselben Wert gesetzt, um Rechenzeit zu sparen. Als Grenzwert für die Haftwahrscheinlichkeit wurde 10^{-4} festgelegt, da bei Simulationen mit diesem Wert keine Abweichungen mehr zur isotropen Abscheidung festgestellt werden konnten. Dieser Fall der isotropen Abscheidung trifft beispielsweise auf die LPCVD von Polysilicium, Siliciumnitrid und Tantalpentoxid zu. Simulationen der Abscheidung dieser Materialien sind somit durch Vorgabe einer sehr kleinen Haftwahrscheinlichkeit möglich.

Die Haftwahrscheinlichkeit $s_c = 0,1$ steht exemplarisch für Prozesse, die nicht mehr perfekt isotrope Abscheidung ergeben, aber dennoch in der Regel bei nicht zu extremen Geometrien, wie tiefen Kontaktlöchern, gute Kantenbedeckung der Schichten liefern. Haftwahrscheinlichkeiten dieser Größenordnung treten etwa bei der Abscheidung von Wolframsilicid [Sai92] oder Wolfram (siehe Kap. 6.2) auf. Bei dieser Haftwahrscheinlichkeit hat ein Teilchen im Mittel mehrere Stöße mit der Oberfläche, bevor es in die aufwachsende Schicht eingebaut wird. Diese mittlere Zahl der Stöße hängt auch von der Geometrie ab, da die Teilchen wieder zum Gas hin entkommen können. Eine Verteilung der Teilchen über die Struktur ist damit möglich.

Im folgenden sollen nun Simulationsergebnisse von Schichtabscheideprozessen mit den Haftwahrscheinlichkeiten $s_c \rightarrow 0$ und $s_c = 0,1$ gezeigt werden, und zwar jeweils für drei unterschiedliche Kontaktlochgeometrien. Das eine Kontaktloch hat die Form eines Würfels mit der Kantenlänge $1 \mu\text{m}$. Das zweite Kontaktloch ist durch einen Quader mit den Maßen $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ gegeben. Es hat dieselbe Öffnung wie das erste Kontaktloch ($1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$) aber die doppelte Tiefe. Das sogenannte Aspektverhältnis, das definiert ist als der Quotient aus Tiefe und Breite des Kontaktloches oder auch eines Grabens, ist damit doppelt so groß wie beim ersten Kontaktloch. Das Füllen von Kontaktlöchern mit hohen Aspektverhältnissen ist ein Problem, was bei zunehmender Integrationsdichte in integrierten Schaltungen stark an Bedeutung gewinnt. Schließlich wird noch ein zylinderförmiges Kontaktloch mit einer Tiefe und einem Durchmesser von $1 \mu\text{m}$ simuliert. Die Dicke der aufgewachsenen Schicht

in den planaren Gebieten, d.h. an der Oberseite der Struktur, wurde bei allen Simulationen auf $0,8 \mu\text{m}$ gesetzt, so daß ein Vergleich der Ergebnisse möglich ist.

Abb. 4.14, 4.15 und 4.16 zeigen die Simulationen der isotropen Abscheidung mit $s_c \rightarrow 0$ für die drei verschiedenen Ausgangsgeometrien. Es wird jeweils eine Hälfte der Struktur dargestellt, wobei die Ausgangsgeometrie und die Oberfläche der abgeschiedenen Schicht sichtbar sind. Alle drei Kontaktlöcher werden vollständig aufgefüllt, es bleiben keine Gaseinschlußvolumina zurück. Dies ist der Idealfall, wie er bei technologischen Prozessen erwünscht ist. In Kap. 5.2 wird gezeigt werden, daß man auf eine ähnlich gleichmäßige Schichtdicke auch unter Annahme einer hohen Oberflächenbeweglichkeit der Teilchen kommen kann. Die gleichmäßige Verteilung erfolgt dann nicht durch Adsorption und Desorption sondern durch Oberflächendiffusion.

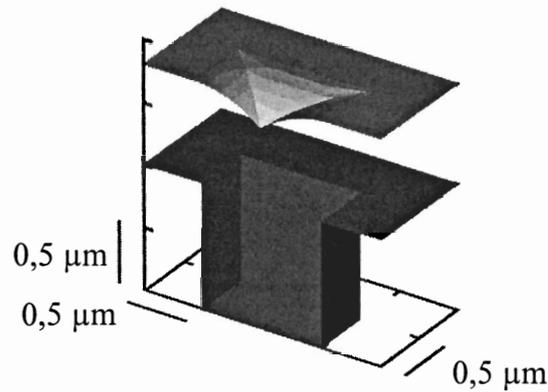


Abb. 4.14 Simulation einer isotropen Schichtabscheidung in ein würfelförmiges Kontaktloch.

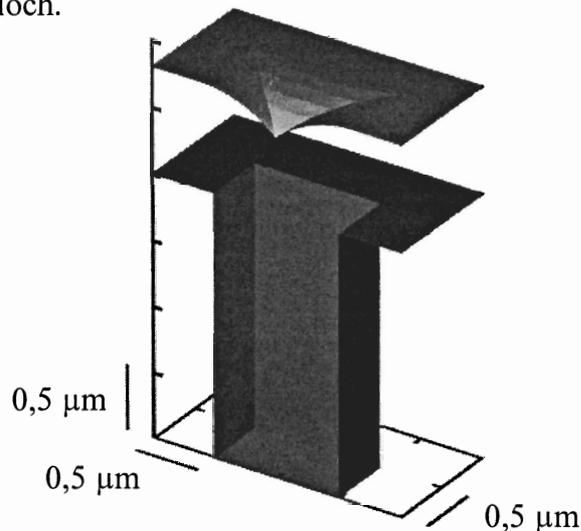


Abb. 4.15 Simulation einer isotropen Schichtabscheidung in ein quaderförmiges Kontaktloch mit einem Aspektverhältnis von 2.

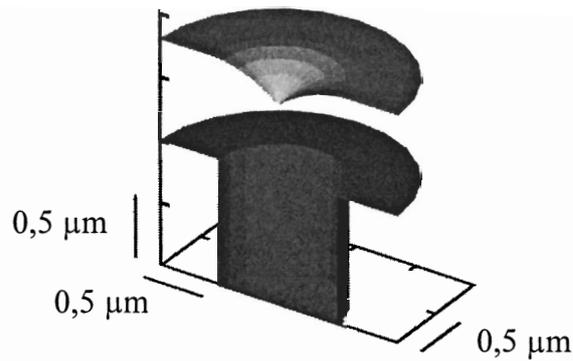


Abb. 4.16 Simulation einer isotropen Schichtabscheidung in ein zylindrisches Kontaktloch mit einem Aspektverhältnis von 1.

Abb. 4.17, 4.18 und 4.19 zeigen die Simulationen mit $s_c = 0,1$. Die sich ergebende Schichtdicke ist hier schon nicht mehr homogen. Es bleiben signifikante Volumina in den Kontaktlöchern, die nicht gefüllt werden. Man erkennt, daß bei dem tiefen Kontaktloch die Kantenbedeckung deutlich schlechter als bei dem würfelförmigen ist. Eine derartige Haftwahrscheinlichkeit ist damit besonders für tiefe Kontaktlöcher schon problematisch.

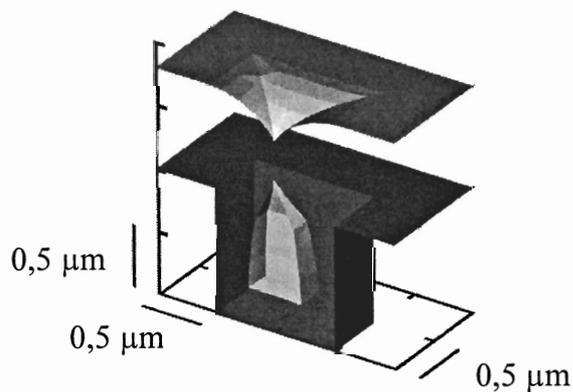


Abb. 4.17 Simulation einer Schichtabscheidung mit $s_c = 0,1$ in ein würfelförmiges Kontaktloch.

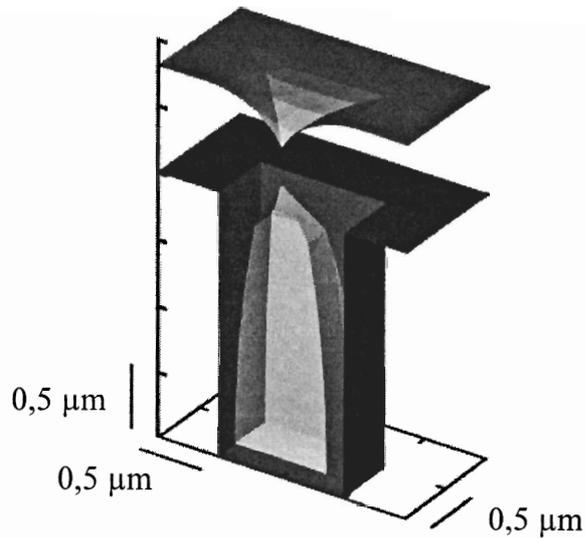


Abb. 4.18 Simulation einer Schichtabscheidung mit $s_c = 0,1$ in ein quaderförmiges Kontaktloch mit einem Aspektverhältnis von 2.

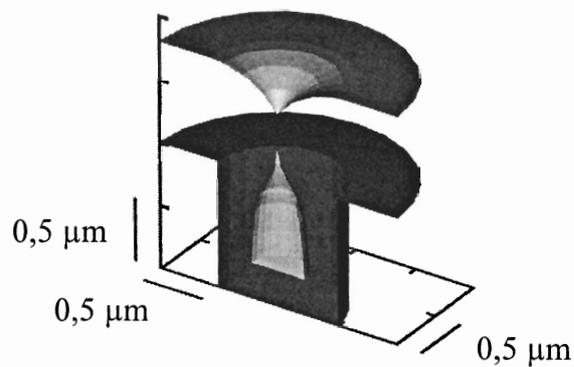


Abb. 4.19 Simulation einer Schichtabscheidung mit $s_c = 0,1$ in ein zylindrisches Kontaktloch mit einem Aspektverhältnis von 1.

Um die 3D-Effekte zu untersuchen, kann man die 3D-Simulationen einer Schichtabscheidung in ein Kontaktloch mit den entsprechenden 2D-Simulationen vergleichen. Eine 2D-Simulation beschreibt dabei die Abscheidung in einen unendlich langen Graben, der das gleiche Querschnittsprofil besitzt wie das Kontaktloch. In Abb. 4.20 ist ein Vergleich zwischen einer 2D- und einer 3D-Simulation der Schichtabscheidung in ein würfelförmiges Kontaktloch

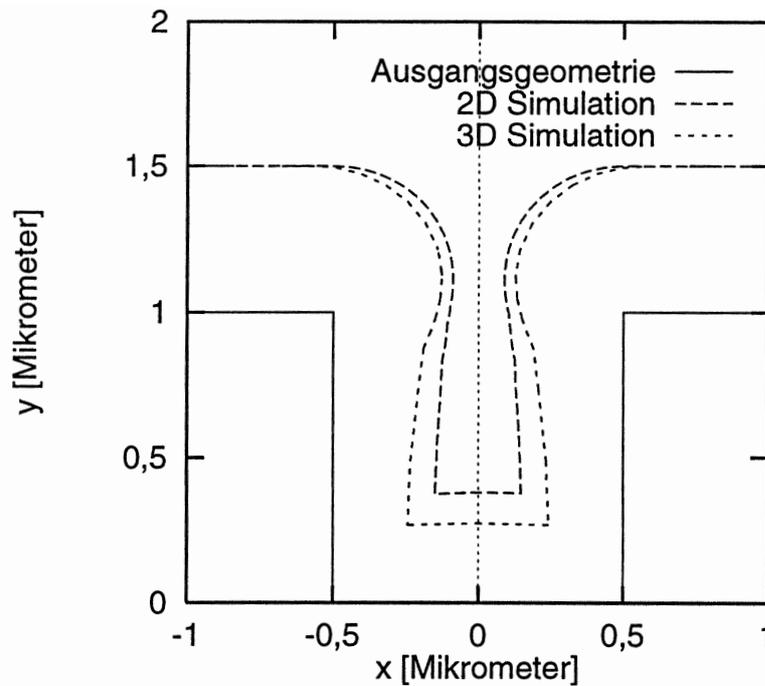


Abb. 4.20 Vergleich zwischen 2D- und 3D-Simulation von Schichtabscheidung mit $s_c = 0,1$ in ein würfelförmiges Kontaktloch.

dargestellt. Die angenommene Haftwahrscheinlichkeit ist $s_c = 0,1$, die abgeschiedene Schichtdicke in den planaren Gebieten wurde auf $0,5 \mu\text{m}$ gesetzt. Eingezeichnet sind die 2D-Simulation sowie das Querschnittsprofil der 3D-Simulation in der Mitte des Kontaktloches. Die durch die 2D-Simulation vorhergesagte Kantenbedeckung ist wesentlich besser als diejenige, die sich aus der 3D-Simulation ergibt. Die Erklärung hierfür liegt darin, daß die 2D-Simulation einen langen Graben beschreibt, wo Stellen im Innern der Struktur (beispielsweise am Boden des Grabens) durch die lang ausgedehnte Öffnung einen größeren zum Gas hin offenen Raumwinkel haben und damit von mehr Teilchen direkt erreicht werden können als die entsprechenden Stellen in dem Kontaktloch, das eine quadratische, d.h. begrenzte Öffnung zum Gas hin hat. Die Notwendigkeit, 3D-Simulationen zu verwenden, wenn es um die Beschreibung hochgradig dreidimensionaler Geometrien wie Kontaktlöchern geht, wird damit deutlich. Die 3D-Effekte werden dabei umso stärker ausgeprägt sein, je größer das Aspektverhältnis der Struktur und je größer die Haftwahrscheinlichkeit für das betreffende Schichtsystem ist.

5. Simulation von Sputterabscheidung

5.1 Simulation von Sputterabscheidung mit dem LPCVD-Modell

Bei der Abscheidung mittels Sputtern wird in einem Reaktor eine Gasentladung (meistens in Argon) durch Anlegen einer Gleich- oder Hochfrequenzspannung gezündet. Durch das elektrische Feld zum Sputtertarget (Kathode) hin beschleunigte Gasionen schlagen aus diesem Metallatome heraus, die sich auf dem Substrat anlagern und damit zum Schichtwachstum führen. Nimmt man eine Haftwahrscheinlichkeit der Metallatome am Substrat von $s_c = 1$ an und geht weiter davon aus, daß die Geschwindigkeiten der Metallatome isotrop verteilt sind, so kann man die Sputterabscheidung mit dem Modell zur Beschreibung der LPCVD-Vorgänge simulieren. Die freie Weglänge im Gas muß dazu klein gegenüber dem Abstand zwischen Sputtertarget und Substratoberfläche sein, was bei nicht zu niedrigen Drücken (ab etwa 10 mTorr) gut erfüllt ist. Die abgesputterten Teilchen haben dann auf ihrem Weg vom Sputtertarget zum Substrat eine ausreichende Anzahl von Stößen mit den Atomen oder Molekülen des Gases, um eine eventuell durch den Prozeß der Emission vom Sputtertarget vorgegebene Richtungscharakteristik aufzuheben. Weiterhin gilt die Annahme, daß die typischen Strukturabmessungen auf dem Substrat wesentlich kleiner als die freie Weglänge der Metallatome im Gas sein müssen, ganz analog zu den Überlegungen für LPCVD-Prozesse.

Die Simulationen der Sputterabscheidung ($s_c = 1$) sind in Abb. 5.1, 5.2 und 5.3 wiedergegeben. Es ergibt sich für alle drei Kontaktlöcher sehr schlechte Kantenbedeckung, da die Teilchen am Ort ihres Auftreffens in die Schicht eingebaut werden und keine Verteilung über die Oberfläche stattfinden kann. Zum Auffüllen von Kontaktlöchern, besonders von solchen mit großen Aspektverhältnissen, sind die konventionellen Sputterverfahren damit schlecht geeignet. Man ist hier auf verbesserte Sputterverfahren angewiesen, wie z.B. kollimiertes Sputtern, wo durch einen Kollimator eine stärker gerichtete Verteilung der Geschwindigkeiten erreicht werden kann. Abhilfe kann auch die Sputterabscheidung bei erhöhter Temperatur schaffen, bei der die Oberflächenbeweglichkeit verbessert wird, so daß sich die Metallatome gleichmäßiger über die Struktur verteilen können. Die Simulation der Sputterabscheidung mit Oberflächendiffusion der Metallatome wird in Kap. 5.2 beschrieben.

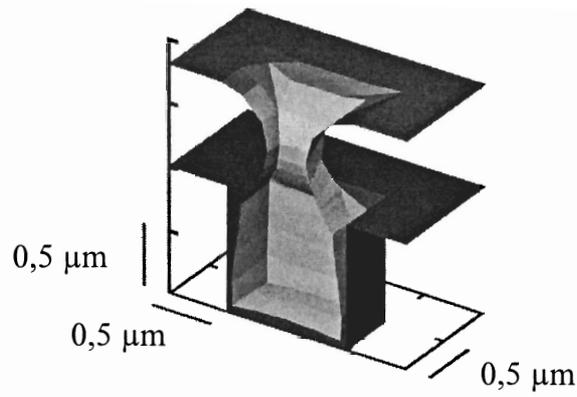


Abb. 5.1 Simulation einer Sputterabscheidung in ein würfelförmiges Kontaktloch.

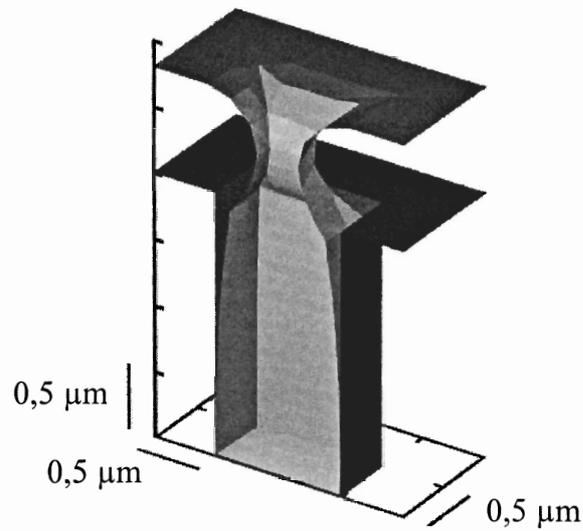


Abb. 5.2 Simulation einer Sputterabscheidung in ein quaderförmiges Kontaktloch mit einem Aspektverhältnis von 2.

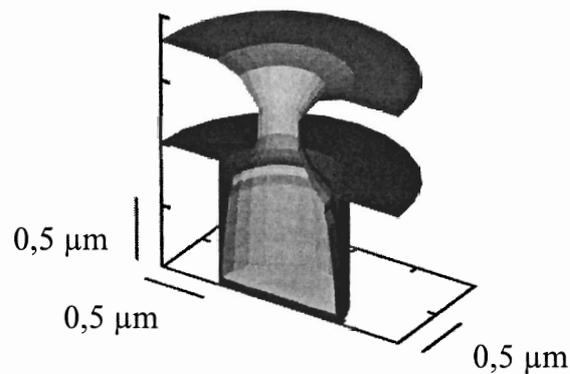


Abb. 5.3 Simulation einer Sputterabscheidung in ein zylindrisches Kontaktloch mit einem Aspektverhältnis von 1.

5.2 Simulation der Sputterabscheidung mit Oberflächendiffusion

Bei den in Kap. 5.1 gezeigten Simulationen der Sputterabscheidung wurde von vernachlässigbarer Oberflächendiffusion ausgegangen. Als Resultat ergab sich eine schlechte Kantenbedeckung der abgeschiedenen Schichten. Diese kann verbessert werden, wenn die Sputterabscheidung bei höherer Temperatur durchgeführt wird, so daß die Metallatome eine bestimmte Strecke auf der Oberfläche diffundieren, bevor sie in die aufwachsende Schicht eingebaut werden [Che90]. Um dies zu simulieren, wird bei der Implementierung im Programm neben dem Transport zwischen den Dreiecken durch Adsorption und Desorption auch noch der durch Oberflächendiffusion mitberücksichtigt. Die folgende Herleitung gilt für Oberflächendiffusion bei Prozessen mit beliebiger Haftwahrscheinlichkeit.

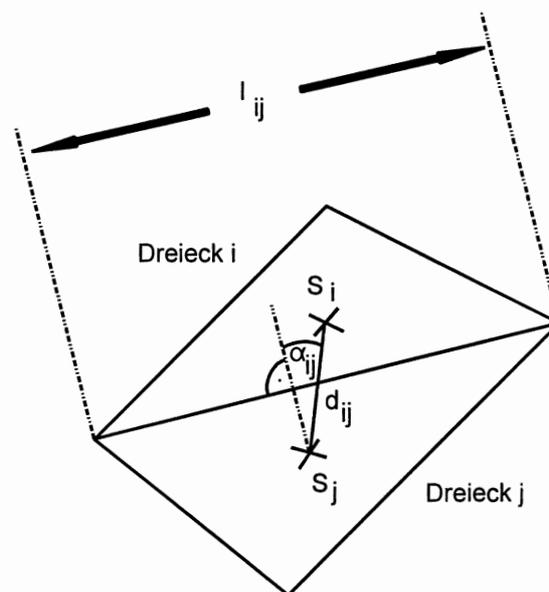


Abb. 5.4 Zwei Dreiecke i und j, zwischen denen durch Oberflächendiffusion Teilchenaustausch stattfindet. S_i und S_j : Schwerpunkte der Dreiecke.

Um eine mathematische Beschreibung für die Oberflächendiffusion herzuleiten, betrachten wir zwei Dreiecke i und j, die eine gemeinsame Kante haben, über die Teilchentransport stattfinden soll. Die Anordnung und die auftretenden Größen sind in Abb. 5.4 dargestellt.

Das 1. Ficksche Gesetz wird in einer zweidimensionalen Form aufgestellt, wobei der Konzentrationsgradient durch den Quotient aus den Differenzen der Reaktionsflüsse und dem

Abstand der beiden Schwerpunkte beschrieben wird. Es wird dabei davon ausgegangen, daß die Konzentration der adsorbierten Teilchen proportional zum Reaktionsfluß ist. Man erhält dann

$$j = K \frac{R_j - R_i}{d_{ij}}, \quad (5.1)$$

wobei j hier die Dimension Zahl pro Länge und Zeit (2D Stromdichte) hat und K ein Transportkoeffizient ist, dessen Bedeutung weiter unten erläutert wird. Die Richtung von j ist die der Strecke von S_j nach S_i . Die Größe d_{ij} ergibt sich wie in Abb. 5.4, wenn die Dreiecke durch Rotation eines Dreieckes um die Seite l_{ij} in eine Ebene gebracht werden. Dies wird gemacht, da die Diffusion entlang der Oberfläche stattfinden soll, ohne Berücksichtigung des Winkels zwischen den Dreiecken. Aufgrund der Kompatibilität mit dem Modell, das die Teilchenbilanzierung bezogen auf die Dreiecke durchführt, wurde hier nicht das sonst übliche Diskretisierungsverfahren mit der Berechnung der Teilchenflüsse durch die Wände von Voronoizellen angewandt. Um die Zahl der Teilchen, die von Dreieck j nach Dreieck i gelangen, zu berechnen, muß man die Komponente von j senkrecht zur Seite l_{ij} verwenden und mit l_{ij} multiplizieren:

$$j l_{ij} \cos \alpha_{ij} = K \frac{l_{ij}}{d_{ij}} (R_j - R_i) \cos \alpha_{ij} \quad (5.2)$$

Dies umgerechnet auf die Reaktionsflüsse, d.h. pro Flächenstück F_i , ergibt einen Beitrag für Dreieck i von

$$\Delta R_i = \frac{j l_{ij} \cos \alpha_{ij}}{F_i} = K \frac{l_{ij}}{d_{ij} F_i} (R_j - R_i) \cos \alpha_{ij}. \quad (5.3)$$

Fügt man diesen Term noch zu den anderen Beiträgen (A_i und S_{ij}) in Gl. (4.2), so erhält man ein modifiziertes lineares Gleichungssystem für die Berechnung der Reaktionsflüsse:

$$(T_{ii})_{neu} R_i - \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} (T_{ij})_{neu} R_j = \pi - \frac{1}{1 - s_c} \sum_{j=1 \dots N, j \neq i} T_{ij}, \quad i = 1 \dots N \quad (5.4)$$

Dabei sind die neuen Diagonalelemente:

$$(T_{ii})_{neu} = \pi + \frac{\pi K}{F_i} \sum_j \frac{l_{ij}}{d_{ij}} \cos \alpha_{ij}, \quad (5.5)$$

wobei die Summe über alle Dreiecke j geht, die mit Dreieck i eine gemeinsame Kante haben. Die neuen Nichtdiagonalelemente ergeben sich für eben diese j zu

$$(T_{ij})_{neu} = T_{ij} + \frac{\pi K}{F_i} \frac{l_{ij}}{d_{ij}} \cos \alpha_{ij} . \quad (5.6)$$

Die anderen Nichtdiagonalelemente für Dreiecke, die keine gemeinsame Kante mit dem Dreieck i haben, bleiben unverändert. Die R_i können dann wie in Kap. 4.2 beschrieben durch Lösen des Gleichungssystems bestimmt werden.

Um die Bedeutung von K abzuschätzen, betrachten wir Gl. (5.3). Ein signifikanter Teilchen-transport zwischen Dreieck i und Dreieck j ergibt sich für

$$\frac{\Delta R_i}{R_j - R_i} \approx 1 . \quad (5.7)$$

d.h. für

$$K \frac{l_{ij} \cos \alpha_{ij}}{d_{ij} F_i} \approx 1 . \quad (5.8)$$

Die linke Seite von Gl. (5.8) kann abgeschätzt werden durch

$$K \frac{l_{ij} \cos \alpha_{ij}}{d_{ij} F_i} = K \frac{2 \cos \alpha_{ij}}{h_i d_{ij}} \approx \frac{2 K}{d_{ij}^2} , \quad (5.9)$$

wobei h_i die Höhe des Dreiecks i zur Grundseite mit der Länge l_{ij} ist. Man erkennt also, daß ein signifikanter Einfluß durch Oberflächendiffusion über Strecken der Größenordnung $K^{1/2}$ stattfindet, so daß man $K^{1/2}$ als ein Maß für die Diffusionslänge betrachten kann. Ist $K^{1/2}$ in derselben Größenordnung wie die Abmessung der Struktur, sollte man einen deutlichen Einfluß durch die Oberflächendiffusion feststellen können. Die Beziehung zum Diffusionskoeffizienten D kann über $K=D \cdot t$ hergestellt werden, wobei t die mittlere Diffusionszeit eines Atoms entlang der Oberfläche ist.

Es wurden Simulationen von Sputterabscheidung in ein würfelförmiges Loch durchgeführt. Eine Haftwahrscheinlichkeit von 1 und verschiedene Werte für K (0 ; $1 \mu\text{m}^2$ und $10 \mu\text{m}^2$) wurden verwendet. Die für planare Gebiet vorgegebene Schichtdicke war $1 \mu\text{m}$. Abb. 5.5 zeigt

einen Vergleich der sich ergebenden Querschnittsprofile. Für $K=0$ ergibt sich das Schichtprofil ohne Oberflächendiffusion, dasselbe Ergebnis wie in Kap. 5.1 schon gezeigt. Für $K=1 \mu\text{m}^2$ zeigt sich in Übereinstimmung mit der beschriebenen Abschätzung bereits ein deutlicher Effekt. Für einen Wert von $K=10 \mu\text{m}^2$ ergibt sich eine nahezu konforme Abscheidung, die Diffusionslänge von etwa $3 \mu\text{m}$ liegt deutlich über der Abmessung der Struktur von $1 \mu\text{m}$. Ein weiterer Effekt ist, daß sich durch die Oberflächendiffusion eine Verringerung der Schichtdicke weit in den planaren Bereich hinein ergibt.

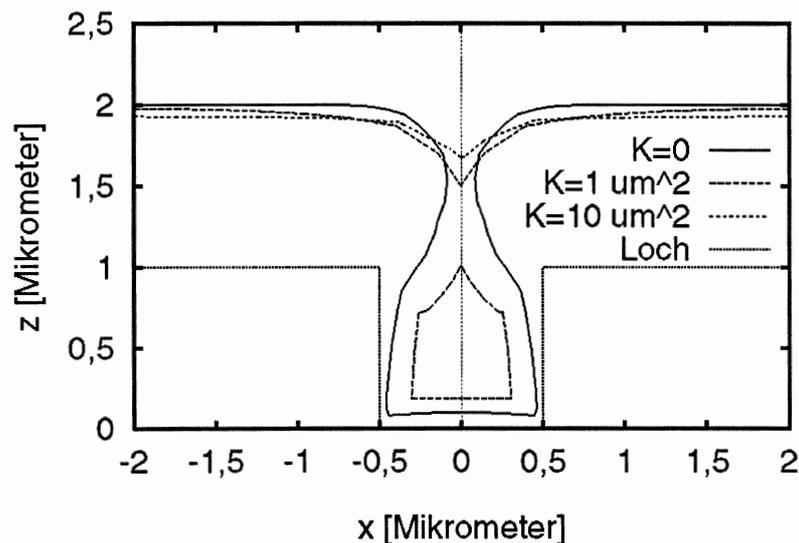


Abb. 5.5 Simulation von Sputterabschneidprozessen mit verschiedenen Oberflächendiffusionskoeffizienten in ein würfelförmiges Loch.

Um eine Abschätzung für K unter realistischen Prozeßbedingungen zu erhalten, kann man Sputterprozesse bei erhöhten Temperaturen betrachten, die zum vollständigen Füllen von Kontaktlöchern der Größenordnung $1 \mu\text{m}$ führen. Nach experimentellen Untersuchungen [Cha96] liegt dies für Aluminium-Sputterabscheidung bei Temperaturen von etwa $400 \text{ }^\circ\text{C}$ vor, d.h. die Kontaktlöcher werden ohne Gaseinschluß gefüllt, so daß unter diesen Bedingungen die Werte für K größer als etwa $10 \mu\text{m}^2$ sein sollten. Eine sehr niedrige Oberflächenbeweglichkeit, die keinen signifikanten Einfluß auf das Schichtprofil hat, wird bei Temperaturen bis etwa $200 \text{ }^\circ\text{C}$ beobachtet [Cha96]. Dies entspricht dann Werten für K , die sehr viel kleiner als $1 \mu\text{m}^2$ sind.

6. Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

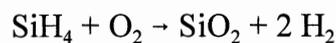
6.1 Abscheidung von Niedertemperaturoxid

Siliciumdioxid (SiO_2) hat eine sehr hohe Bedeutung in der Halbleitertechnologie. Es kann dotiert oder undotiert abgeschieden werden. Es wird benutzt als Isolationsmaterial zwischen Polysilicium und Metallen oder zwischen Metallen bei Mehrlagenmetallisierung, als Implantations- oder Diffusionsmaske, für Deckschichten über dotierten Regionen zur Verhinderung der Ausdiffusion, als Getter-Material, als Diffusionsquelle und für Passivierungsschichten. Neben anderen Eigenschaften ist auch eine gute Kantenbedeckung der abgeschiedenen Schichten erforderlich, ein Aspekt der insbesondere bei der Verwendung von SiO_2 als Zwischenisolationsschicht bei Mehrlagenmetallisierung von Bedeutung ist.

SiO_2 kann bei verschiedenen Temperaturen und unter verschiedenen Bedingungen abgeschieden werden. Bei der im folgenden betrachteten Abscheidung als Niedertemperaturoxid (LTO) arbeitet man bei Temperaturen zwischen 300 °C und 450 °C. Es besteht die Möglichkeit, bei Atmosphärendruck (APCVD), bei Niederdruck (LPCVD) und mit Unterstützung eines Plasmas (PECVD) abzuscheiden.

6.1.1 Anwendung des Modells

Für LPCVD von LTO wird Silan (SiH_4) mit Sauerstoff (O_2) zur Reaktion gebracht:



Beim Vergleich von Schichtprofilen von mittels LPCVD in langen Gräben abgeschiedenen LTO-Schichten, d.h. 2D-Messungen, mit 2D-Simulationen, die das auch im Rahmen dieser Arbeit verwendete Modell benutzen [Wil92c], zeigte sich, daß es nötig ist, zwei verschiedene Radikalsorten anzunehmen, die zum Schichtwachstum beitragen. Es wird davon ausgegangen, daß die Radikale bei homogenen Gasphasenreaktionen gebildet werden. Durch Meßreihen bestimmte Wille die drei Modellparameter Haftwahrscheinlichkeit der Radikalsorte 1,

Haftwahrscheinlichkeit der Radikalsorte 2 und relativer Beitrag von Radikalsorte 1 zum Schichtwachstum in planaren Gebieten in Abhängigkeit von den Prozeßbedingungen [Wil92c]. Die Parameter wurden für Temperaturen zwischen 370 °C und 570 °C, sowie für Drücke zwischen 0,1 Torr und 0,5 Torr ermittelt. Wie in Kap. 4.3 erläutert, bietet sich damit die Möglichkeit, mittels dieser Parameter eine Vorhersage des Schichtprofils für Abscheidung auf 3D-Geometrien zu treffen. Im folgenden werden Simulationen und Experimente mit speziell gewählten 3D-Ausgangsgeometrien beschrieben und miteinander verglichen.

6.1.2 Vergleich mit Experimenten

Um 3D-Simulationen mit Experimenten an 3D-Geometrien vergleichen zu können, ist es notwendig, Ausgangsstrukturen für die Abscheidung zu verwenden, die genau definiert sind. In der Regel wird man als Ergebnis von Ätzprozessen Geometrien (z.B. Löcher) erhalten, die keine regelmäßige Form aufweisen, so daß eine vollständige Kenntnis der 3D-Geometrie schwer zu erlangen ist. Es wurde daher ein spezielles Ätzverfahren verwendet, das regelmäßige und genau definierte 3D-Geometrien ergibt: das anisotrope Naßätzen mit Kaliumhydroxid (KOH)-Lösung [Bea78][Bas78]. Bei diesem Verfahren werden (100) oder (110) Siliciumscheiben in einer KOH-Lösung geätzt. Die Ätzraten für verschiedene Kristallrichtungen unterscheiden sich dabei sehr stark. Die Ätzrate in $\langle 100 \rangle$ Richtung liegt um mehr als zwei Größenordnungen über der für die $\langle 111 \rangle$ Richtung. Dies führt zu speziellen Geometrien der geätzten Strukturen hervorgerufen durch einen Ätzstopp an den (111) Ebenen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden (100) Siliciumscheiben verwendet. Bringt man eine Oxidschicht auf und strukturiert diese mit quadratischen bzw. sehr langen rechteckigen Öffnungen, so erhält man nach einem Ätzprozeß in KOH-Lösung pyramidenförmige Löcher bzw. V-förmige Gräben. Die Seitenflächen der Pyramiden und Gräben sind dabei durch (111) Ebenen gegeben, an denen der Ätzvorgang praktisch stoppt. Die Winkel zwischen den Flächen sind, da es Kristallebenen sind, genau bekannt. Zwischen der (100) Oberfläche und den (111) Seitenflächen beträgt der Winkel

$$\varphi = \arccos (n_{(100)} \cdot n_{(111)}) \approx 54,74^\circ , \quad (6.1)$$

wobei

$$\mathbf{n}_{(100)} = (1,0,0)^T, \quad \mathbf{n}_{(111)} = \frac{1}{\sqrt{3}} (1,1,1)^T \quad (6.2)$$

die Normalenvektoren auf der (100) bzw. auf der (111) Ebene sind. Ein weiterer Aspekt ist, daß die Kanten zwischen den (111) Ebenen sehr scharf sind. Dies ermöglicht eine Kontrolle der Modellvorhersagen für das Schichtprofil an solchen scharfen konkaven Kanten. Ein Schnitt durch einen Graben bzw. ein pyramidenförmiges Loch ist in Abb. 6.1 dargestellt.

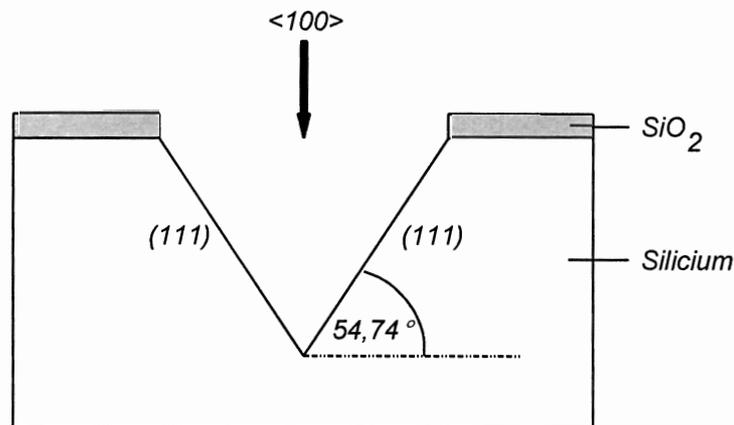


Abb. 6.1 Querschnitt durch ein pyramidenförmiges Loch bzw. durch einen V-förmigen Graben, hergestellt durch Ätzen einer mit strukturiertem Oxid maskierten (100) Siliciumscheibe in KOH-Lösung.

Bei den eigenen Experimenten wurde auf (100) Siliciumscheiben 1 μm SiO_2 durch feuchte Oxidation aufgewachsen. Auf das Oxid wurde Photolack aufgebracht, der in einem Lithographieschritt strukturiert wurde. Es wurde eine Maske verwendet, die quadratische, kreisförmige und lange rechteckige Öffnungen verschiedener Größe enthält. Durch Ätzen in einer Ammoniumfluorid-Ätzmischung wurde das Oxid strukturiert. Nach Entfernen des Photolacks verblieb das strukturierte Oxid, das als Ätzmaske für den nachfolgenden Ätzschritt diente. Die Scheiben wurden für 1 h in 40-prozentiger KOH-Lösung bei 65 $^\circ\text{C}$ geätzt. Die Ätzrate in $\langle 100 \rangle$ Richtung betrug dabei etwa 15 $\mu\text{m}/\text{h}$. Diese Ätzrate wurde bestimmt durch Ausmessen von geätzten Strukturen, die sich bei den quadratischen Maskenöffnungen der Größe 40 μm mal 40 μm ergaben, wo nicht vollständig bis zum Ätzstopp geätzt wurde, so daß Pyramidenstümpfe als Ätzprofile resultierten. Es wurde somit in eine Tiefe von 15 μm geätzt, so daß für Maskenöffnungen bis etwa 21 μm pyramidenförmige Löcher bzw. V-förmige Gräben entstehen. Die Pyramiden ergeben sich dabei sowohl bei den quadratischen als auch bei den kreisförmigen Maskenöffnungen, Erklärungen hierfür sind in der Literatur, z.B. bei

Bean [Bea78], gegeben. Nach dem Ätzen wurde die Oxidschicht in Ammoniumfluorid-Ätzmischung entfernt. Beispiele für die geätzten Strukturen sind in Abb. 6.2 und Abb. 6.3 gezeigt. Abb. 6.2 zeigt eine rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme eines pyramidenförmigen Loches mit einer Öffnung von $4\ \mu\text{m}$ mal $4\ \mu\text{m}$. Abb. 6.3 zeigt eine REM-Aufnahme der Enden von V-förmigen Gräben der Breite $2\ \mu\text{m}$.

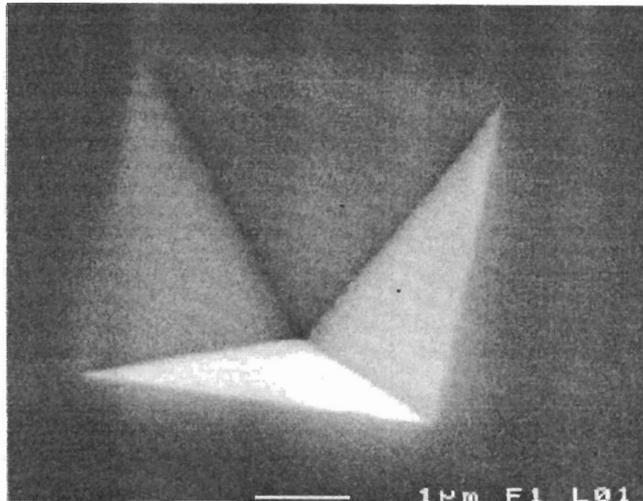


Abb. 6.2 REM-Aufnahme eines pyramidenförmigen Loches, das durch anisotropes Ätzen von (100) Silicium in KOH-Lösung hergestellt wurde.

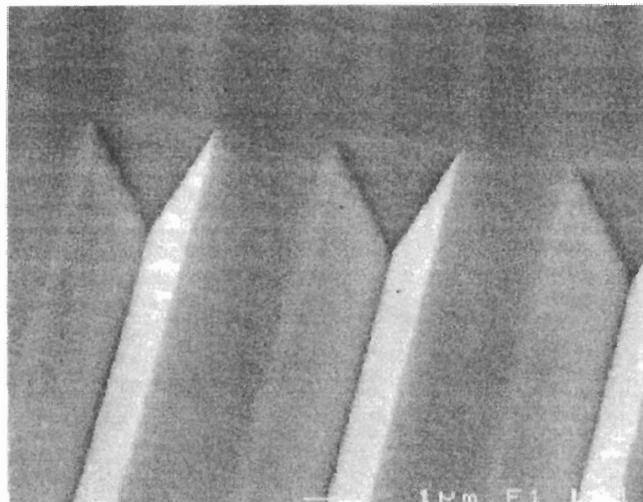


Abb. 6.3 REM-Aufnahme der Enden von V-förmigen Gräben, die durch anisotropes Ätzen von (100) Silicium in KOH-Lösung hergestellt wurden.

Für die Abscheidung von LTO standen somit genau definierte 3D-Ausgangsstrukturen zur Verfügung. Ein Vergleich von gemessenen Schichtprofilen mit den entsprechenden Simulationen ist damit möglich.

Die Abscheidung von LTO durch LPCVD wurde in einem Horizontalrohrreaktor der Art wie in Abb. 2.1 (Kap. 2.2) dargestellt durchgeführt. Die Zufuhr der Prozeßgase O_2 und SiH_4 erfolgt durch Injektoren, die von beiden Seiten des Reaktors mit den Prozeßgasen beschickt werden, um eine möglichst gleichförmige Versorgung mit den Gasen längs des Reaktors zu erreichen. Die Siliciumscheiben befinden sich stehend in Quarzglasbooten mit geschlitzten Abdeckhauben in der mittleren Zone des Reaktors. Bei den vorliegenden Experimenten befanden sich wie bei der üblichen Prozeßführung drei Boote mit jeweils 10 Scheiben (Scheibenabstand 15 mm) im Reaktor. Die Scheibe mit den geätzten Teststrukturen befand sich jeweils in der Mitte des mittleren Bootes.

Als Standardeinstellungen werden eine Reaktortemperatur von 430 °C und ein Druck von 150 mTorr benutzt. Der O_2 - bzw. SiH_4 -Gasfluß liegt bei 100 sccm bzw. 60 sccm. Es wurden Abscheidungen unter diesen Standardbedingungen durchgeführt. Zusätzlich wurden Abscheidungen bei 500 °C, einem Druck von 260 mTorr und O_2 - bzw. SiH_4 -Gasflüssen von 125 sccm bzw. 75 sccm durchgeführt. Die Schichtdicke wurde entsprechend den Dimensionen der Teststrukturen gewählt (kleinste Pyramiden: 4 µm mal 4 µm Grundfläche). Angestrebt wurde jeweils eine Schichtdicke von 2 µm. In Abb. 6.4 ist eine REM-Aufnahme einer unter Standardbedingungen in ein pyramidenförmiges Loch abgeschiedenen Oxidschicht dargestellt. Abb. 6.5 zeigt eine REM-Aufnahme der auf V-förmige Gräben abgeschiedenen Oxidschicht. Es ist erkennbar, daß die Oxidschicht auf den konvexen Kanten der Ausgangsstruktur ein rundes Profil zeigt, während die konkaven Kanten der Ausgangsstruktur zu konkaven Kanten der Oxidschicht führen.

Um Simulationen und Experimente zu vergleichen, wurden REM-Aufnahmen der auf die pyramidenförmigen Löcher abgeschiedenen LTO-Schichten aus einer bestimmten Richtung gemacht. Die Pyramiden wurden dabei direkt von vorne unter einem Winkel von etwa 45° aufgenommen. Es wurden 3D-Simulationen durchgeführt und die sich ergebenden Schichtprofile mittels eines 3D-Visualisierungsprogrammes aus derselben Richtung betrachtet wie

die realen Strukturen, so daß ein Vergleich möglich ist. Für die Simulationen wurden dabei die Parameter (2 Haftwahrscheinlichkeiten s_{c1} und s_{c2} , relativer Anteil der Radikale mit s_{c1} am Schichtwachstum in planaren Gebieten A aus Gl. (4.21)) zugrundegelegt, die durch den Vergleich von 2D-Simulationen mit 2D-Experimenten, d.h. Abscheidungen in langen Gräben, ermittelt wurden [Wil92c].

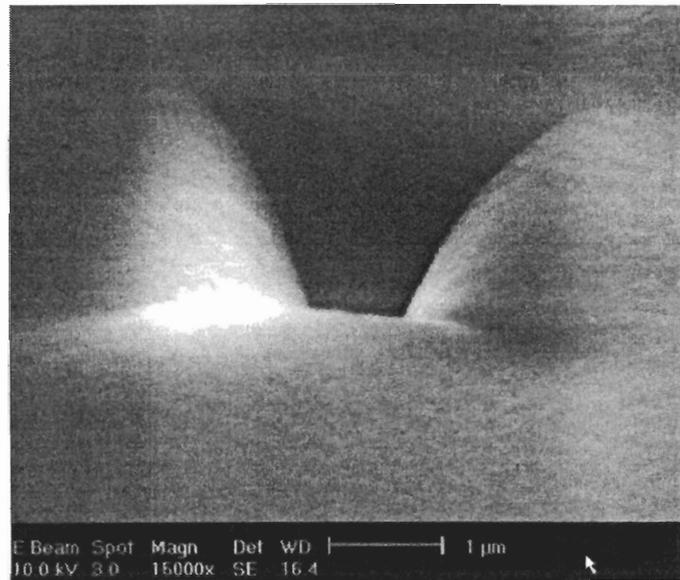


Abb. 6.4 REM-Aufnahme einer unter Standardbedingungen in ein pyramidenförmiges Loch abgeschiedenen Oxidschicht.

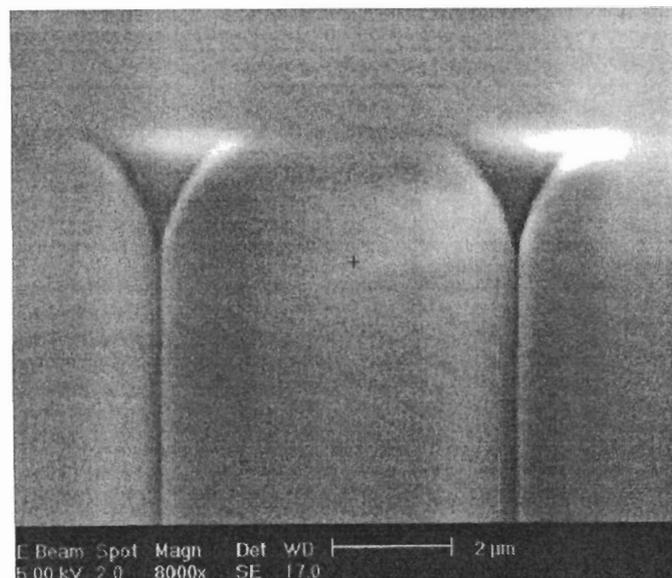


Abb. 6.5 REM-Aufnahme einer unter Standardbedingungen auf V-förmige Gräben abgeschiedenen LTO-Schicht.

Abb. 6.6 zeigt eine REM-Aufnahme einer unter Standardbedingungen (430 °C, 150 mTorr) abgeschiedenen LTO-Schicht. Die Oxiddicke in den planaren Gebieten wurde mittels Interferometrie bestimmt und betrug 2,2 μm . Die entsprechende Simulation ($s_{c1}=0,05$; $s_{c2}=0,9$; $A=0,49$) ist in Abb. 6.7 im Vergleich mit dem Experiment dargestellt.

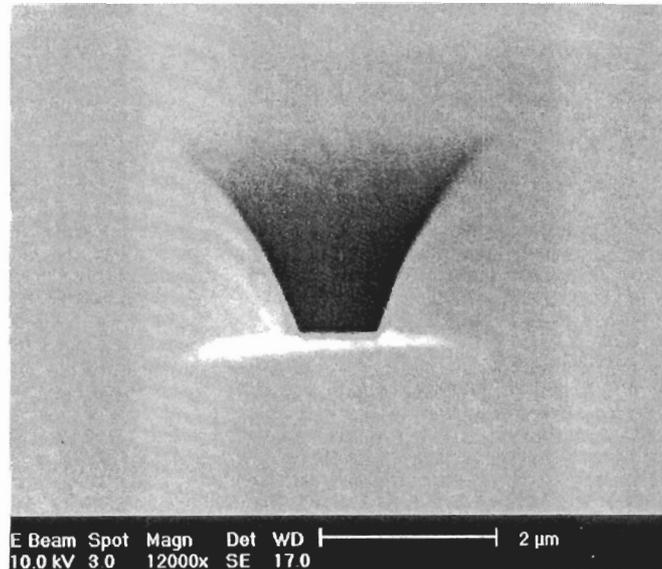


Abb. 6.6 REM-Aufnahme einer unter Standardbedingungen abgeschiedenen LTO-Schicht.

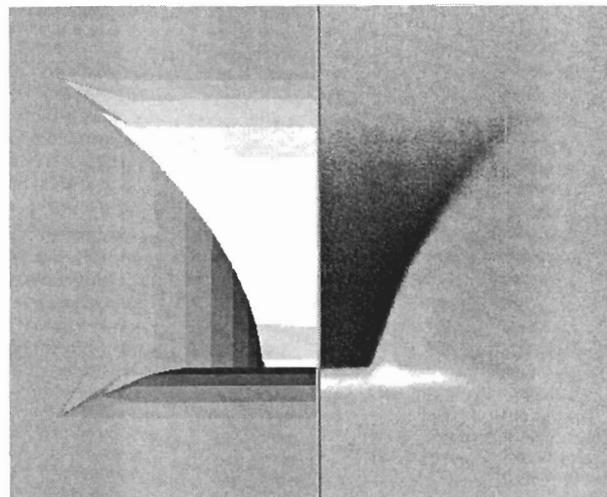


Abb. 6.7 3D-Simulation der LTO-Abscheidung unter Standardbedingungen (Parameter: $s_{c1}=0,05$; $s_{c2}=0,9$; $A=0,49$) im Vergleich zum Experiment.

Mittels einer FIB-Anlage (fokussierter Ionenstrahl, engl. focused ion beam) wurden Löcher derart in die Struktur geätzt, daß die Schnittkante durch die Mitte der Struktur verlief, so daß ein Querschnittsprofil aufgenommen werden konnte. Die Aufnahme des Querschnittes im Ionenstrahlbild ist in Abb. 6.8 gezeigt. Das Schichtprofil wurde digitalisiert und stand damit für einen Vergleich zwischen Simulation und Experiment zur Verfügung. Dieser ist in Abb. 6.9 wiedergegeben. Es zeigt sich gute Übereinstimmung zwischen dem gemessenen Querschnitt und dem durch die 3D-Simulation. Die Abweichungen liegen im Rahmen der Meßgenauigkeit. Zudem sind auch die Simulationsparameter mit einer Unsicherheit behaftet [Wil92c].

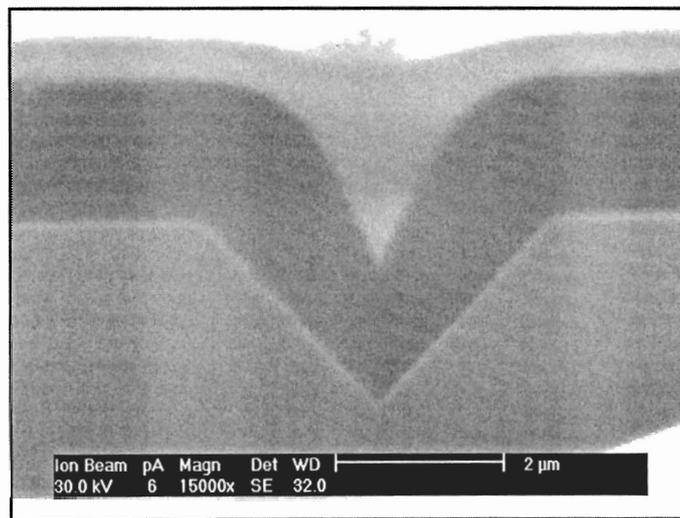


Abb. 6.8 Querschnitt durch eine unter Standardbedingungen abgeschiedene LTO-Schicht.

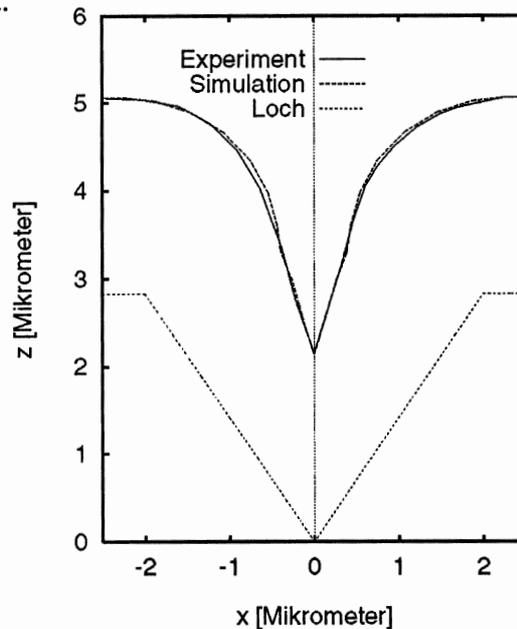


Abb. 6.9 Vergleich zwischen Querschnitten von Simulation und Experiment für eine unter Standardbedingungen abgeschiedene LTO-Schicht.

Abb. 6.10 zeigt eine bei 500 °C und 260 mTorr abgeschiedene LTO-Schicht mit einer Dicke in planaren Gebieten von 1,85 µm. Die Simulation ($s_{c1}=0,05$; $s_{c2}=0,8$; $A=0,68$) im Vergleich zum Experiment ist in Abb. 6.11 wiedergegeben. Für die beiden untersuchten Prozeßbedingungen ergibt sich gute Übereinstimmung der Profile aus Experiment und Simulation. Da die Parameter für die Simulation unabhängig von den vorliegenden Abscheidungen ermittelt wurden, zeigt sich damit die Anwendbarkeit des Modells mit zwei Haftwahrscheinlichkeiten für die LPCVD von LTO auch im dreidimensionalen Fall.

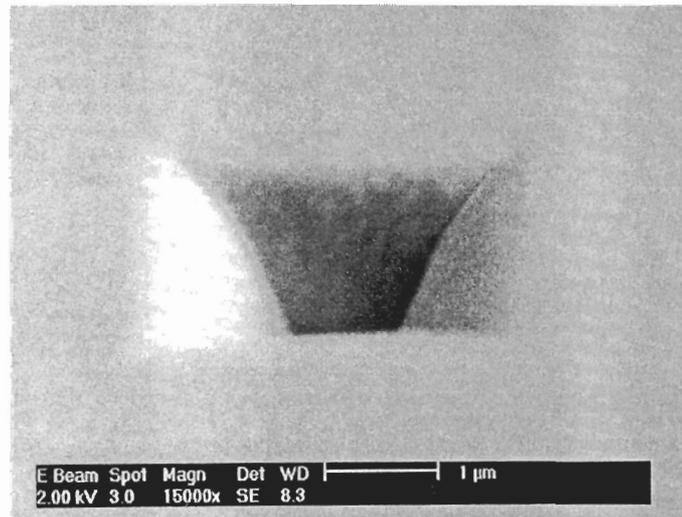


Abb. 6.10 REM-Aufnahme einer bei 500 °C und 260 mTorr abgeschiedenen LTO-Schicht.

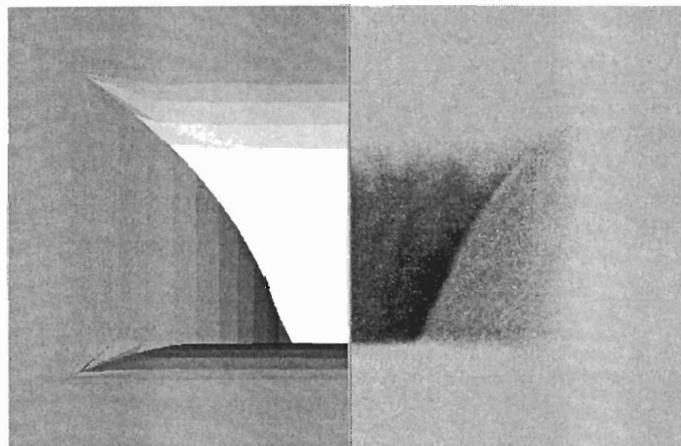


Abb. 6.11 3D-Simulation der LTO-Abscheidung bei 500 °C und 260 mTorr ($s_{c1}=0,05$; $s_{c2}=0,8$; $A=0,68$) im Vergleich zum Experiment.

6.2 Abscheidung von Wolfram aus Wolframhexafluorid und Silan

Mit zunehmender Strukturverkleinerung und Komplexität von integrierten Schaltungen steigen die Anforderungen an die Verfahren, die zur Herstellung der leitenden Verbindungen verwendet werden. Insbesondere das Auffüllen von Kontaktlöchern mit hohen Aspektverhältnissen ist mit Schwierigkeiten hinsichtlich einer guten Kantenbedeckung, d.h. einer möglichst guten Auffüllung des Loches mit dem leitenden Material verbunden. CVD-Verfahren sind hier der Abscheidung mittels Sputtern oder Aufdampfen überlegen.

Für die Abscheidung von Wolfram (W) mittels LPCVD werden selektive und nicht selektive Verfahren zum Auffüllen von Kontaktlöchern eingesetzt. Bei der selektiven Abscheidung wächst das Wolfram nur auf dem Silicium bzw. dort wo schon Wolfram abgeschieden ist, auf. Die Kontaktlöcher werden somit von unten her aufgefüllt, ohne daß die Öffnung des Loches zuwächst, so daß sich in der Regel eine sehr gute Kantenbedeckung ergibt. Bei der nicht selektiven Abscheidung wächst das Wolfram an allen Stellen der Oberfläche auf, so daß nach dem Abscheidvorgang noch ein Ätzprozeß gefahren werden muß, um das Wolfram außerhalb des Kontaktloches zu entfernen. Die beiden Verfahren sind schematisch in Abb. 6.12 dargestellt.

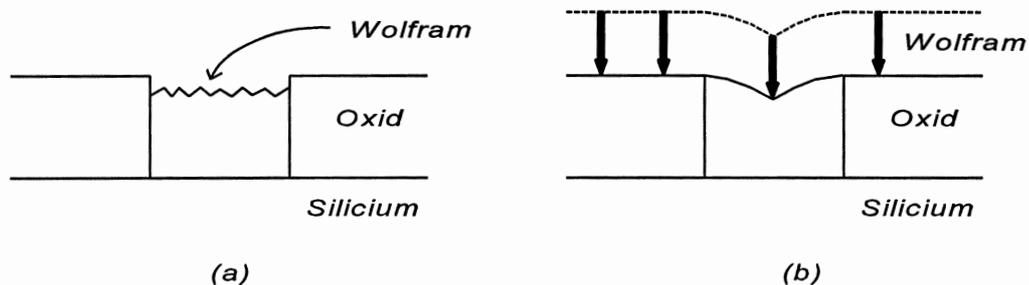
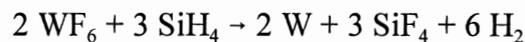


Abb. 6.12 (a): Selektive Wolframabscheidung; (b): nicht selektive Wolframabscheidung und nachfolgender Ätzschritt.

Bei der LPCVD von Wolfram wird Wolframhexafluorid (WF_6) reduziert. Als Reduktionsmittel werden dabei hauptsächlich Wasserstoff (H_2) und Silan (SiH_4) verwendet. Die Vorteile bei der Verwendung von SiH_4 liegen in einer nur schwach temperaturabhängigen Wachstumsrate und einer relativ kleinen Korngröße der abgeschiedenen Schichten [Sch88]. Die Kantenbedeckung bei nicht selektiver Abscheidung ist jedoch problematischer als bei der Verwendung von H_2 als Reduktionsmittel, so daß die Simulation der Topographie im Falle der Abscheidung mit SiH_4 von besonderem Interesse ist.

6.2.1 Anwendung des Modells

Die Abscheidung von Wolfram durch Reduktion von WF_6 durch SiH_4 findet gemäß der Reaktion



statt. Für hinreichend hohe WF_6 Partialdrücke und in einem Temperaturbereich von 250 bis 400 °C hängt die Abscheiderate, d.h. die Zahl der pro Zeit und Fläche reagierenden SiH_4 -Moleküle, linear vom SiH_4 -Partialdruck p_{SiH_4} ab und ist unabhängig vom WF_6 -Partialdruck und von der Temperatur [Sch91][Amm93]. Die mittlere Geschwindigkeit v_m der SiH_4 -Moleküle ist proportional zu $T^{0,5}$ (T: absolute Temperatur), die Teilchenzahldichte der SiH_4 -Moleküle ist proportional zu p_{SiH_4} / T , und die Zahl der SiH_4 -Moleküle, die pro Zeit und Fläche auf die Oberfläche auftreffen, ist proportional zu $n \cdot v_m$.

Daraus läßt sich ableiten, daß die Haftwahrscheinlichkeit der SiH_4 -Moleküle unabhängig von den vorliegenden Partialdrücken und proportional zu $T^{0,5}$ ist. Es liegt somit eine Reaktionskinetik erster Ordnung vor, so daß das LPCVD-Modell unter Zugrundelegung einer konstanten Haftwahrscheinlichkeit angewendet werden kann, wobei die betrachteten reaktiven Teilchen die SiH_4 -Moleküle sind. Veröffentlichte Abschätzungen aus dem Vergleich von Wachstumsrate und aus der Thermodynamik berechenbaren Teilchenflüssen zur Oberfläche, wie oben beschrieben, führen auf Werte der Haftwahrscheinlichkeit der SiH_4 -Moleküle von 0,05 [Sch88].

6.2.2 Vergleich mit dem Experiment

Um eine 3D-Simulation mit einem Experiment zu vergleichen, wurde eine Querschnitts-REM-Aufnahme eines Kontaktloches mit einer nicht selektiv abgeschiedenen Wolframschicht [Has91] verwendet. Die Abscheidung erfolgte dabei bei 400 °C unter einem WF_6 -Partialdruck von 10 Pa und einem SiH_4 -Partialdruck von 1,5 Pa, so daß die Forderung nach einem hinreichend hohen WF_6 -Partialdruck erfüllt ist. Das LPCVD-Modell kann für dieses Abscheideexperiment somit angewandt werden, und eine 3D-Simulation der Abscheidung mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulator ist möglich.

Die Oberflächenprofile sowohl des Kontaktloches vor der Abscheidung als auch der abgeschiedenen Wolframschicht wurden dabei durch punktweises Digitalisieren der Aufnahme in diskretisierter Form gewonnen. Die 3D-Geometrie, die das Kontaktloch vor der Abscheidung darstellt, wurde aus dem entsprechenden 2D-Profil durch Rotation um eine Achse längs des Kontaktloches gewonnen, d.h. die Ausgangsgeometrie wurde für die Simulation durch eine rotationssymmetrische Struktur approximiert.

Die 3D-Simulation von Wolfram-LPCVD wurde unter Annahme einer Haftwahrscheinlichkeit von $s_c = 0,04$ durchgeführt, für die sich die beste Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation ergibt. Die 3D-Simulation ist in Abb. 6.13 dargestellt. Zum Vergleich von Experiment und Simulation wurde ein Querschnitt durch die Mitte der 3D-Simulation berechnet und mit dem digitalisierten Profil der abgeschiedenen Wolframschicht verglichen. Das Ergebnis ist in Abb. 6.14 dargestellt. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation.

Die verwendete Haftwahrscheinlichkeit $s_c = 0,04$ stimmt mit dem Wert 0,05, der unabhängig von der vorliegenden Simulation abgeschätzt wurde [Sch88], gut überein. Dies zeigt, daß das LPCVD-Modell mit einer Haftwahrscheinlichkeit auf das vorliegende Abscheidesystem angewandt werden kann und somit die Vorhersage des Schichtprofils in beliebig geformten Kontaktlöchern oder auch anderen Geometrien durch die Durchführung der entsprechenden 3D-Simulationen möglich ist.

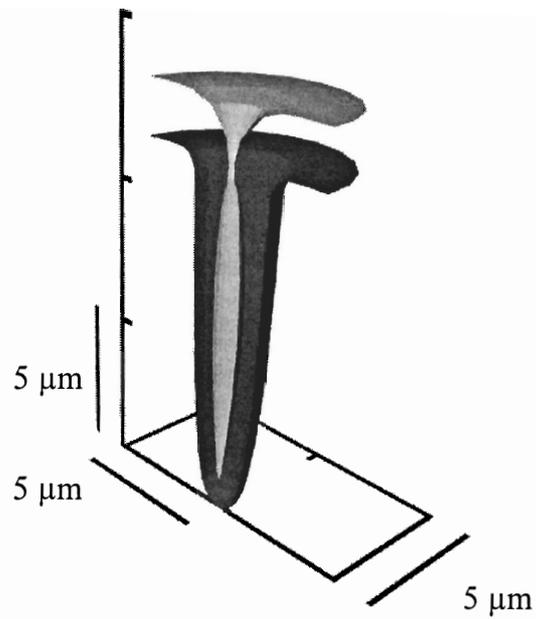


Abb. 6.13 3D-Simulation von Wolfram-LPCVD in ein Kontaktloch, das aus einer REM-Aufnahme [Has91] entnommen wurde. Die Haftwahrscheinlichkeit wurde auf $s_c = 0,04$ gesetzt.

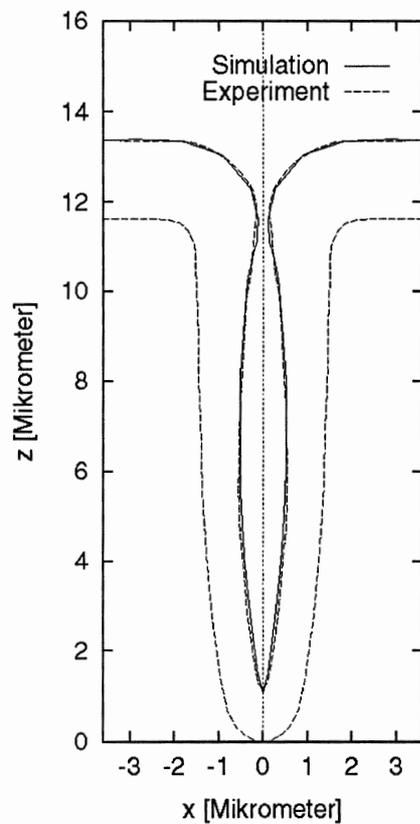


Abb. 6.14 Profil einer LPCVD-Wolframschicht, das durch Digitalisieren aus einer REM-Aufnahme [Has91] gewonnen wurde, sowie Querschnitt durch die entsprechende 3D-Simulation.

6.3 Abscheidung von Polysilicium

Polysilicium wird in der Halbleitertechnologie für verschiedene Anwendungen eingesetzt. Hochdotiertes Polysilicium wird als Gateelektrode oder Leiterbahn in MOS-Strukturen angewandt. Niedrig dotiertes Polysilicium wird zur Herstellung von Widerständen oder zum Auffüllen von Isolationsgräben benutzt. Polysilicium scheidet sich konform, d.h. mit gleichmäßiger Dicke über strukturiertem Substrat ab.

Die Abscheidung von Polysilicium erfolgt durch LPCVD durch die thermische Zersetzung von Silan (SiH_4) im Temperaturbereich von 560 bis 650 °C:



Die Struktur des abgeschiedenen Polysiliciums hängt stark von der Abscheidetemperatur, der Anwesenheit von Dotierstoffen oder Verunreinigungen und von der thermischen Behandlung nach der Abscheidung ab. Bis zu Temperaturen von 580 °C sind die abgeschiedenen Schichten amorph, während bei Abscheidetemperaturen darüber polykristallines Silicium mit Säulenstruktur beobachtet wird.

Bei den eigenen Experimenten wurde amorphes Silicium bei 560 °C abgeschieden. Der Druck betrug 250 mTorr, der SiH_4 -Gasfluß 50 sccm. Als Ausgangsstrukturen wurden wieder die durch anisotropes Ätzen in KOH-Lösung hergestellten Geometrien benutzt. Es wurde eine Schichtdicke von 1 µm aufgewachsen.

Da die Abscheidung konform erfolgt, ist für diesen Abscheideprozeß nicht die Variation der Schichtdicke an verschiedenen Stellen der Oberfläche des strukturierten Substrats von Interesse, sondern nur das Verhalten an den Kanten der Topographie, um die Vorhersagen des Simulators zu überprüfen. Die Simulation kann aufgrund der konformen Abscheidung unter Annahme einer sehr kleinen Haftwahrscheinlichkeit ($s_c \rightarrow 0$) durchgeführt werden.

Abb. 6.15 zeigt eine REM-Aufnahme der in ein pyramidenförmiges Loch abgeschiedenen Polysiliciumschicht. Das Verhalten an den Kanten ist wie bei der LTO-Abscheidung: Die konvexen Kanten verrunden im Verlauf der Abscheidung, während die konkaven Kanten

erhalten bleiben. Die dem Simulationsprogramm zugrundeliegenden Modellvorstellungen treffen somit auch für das vorliegende Abscheidesystem zu. In Abb. 6.16 ist eine Simulation der Schichtabscheidung von Polysilicium (unter Annahme isotroper Abscheidung) im Vergleich zum Experiment wiedergegeben. Aufgrund früherer Untersuchungen [McV90] wurde angenommen, daß die gleichmäßige Verteilung der reaktiven Teilchen durch Adsorption und Desorption mit sehr kleiner Haftwahrscheinlichkeit erfolgt. Es zeigt sich gute Übereinstimmung zwischen dem Experiment und der Simulation.

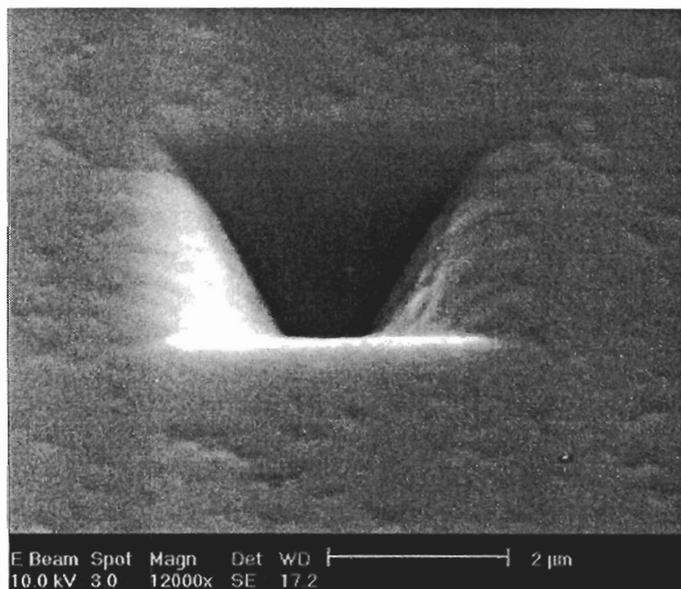


Abb. 6.15 REM-Aufnahme einer in ein pyramidenförmiges Loch abgeschiedenen Polysiliciumschicht.

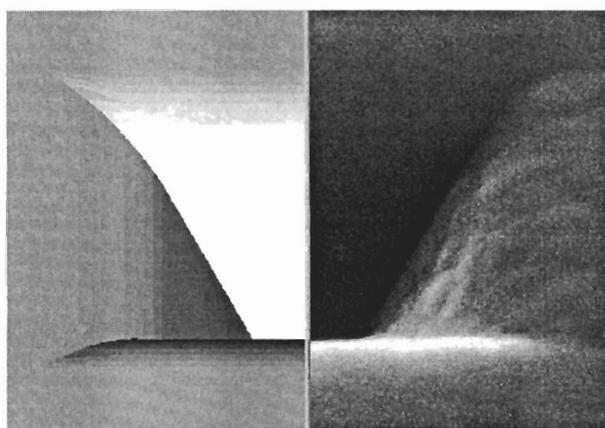


Abb. 6.16 Simulation der Abscheidung von Polysilicium (isotrope Abscheidung) in ein pyramidenförmiges Loch im Vergleich zum Experiment.

6.4 Abscheidung von Titannitrid durch reaktives Sputtern

Titannitrid (TiN) wird in der Halbleitertechnologie als Diffusionsbarriere und Haftschiicht für Aluminium- und Wolframmetallisierung verwendet. Es kann durch reaktives Sputtern abgeschieden werden. Man arbeitet dabei mit einem Ti-Target und führt den Stickstoff als Gas zu. Die Ti-Atome lagern sich auf dem Substrat an, und durch Reaktion mit dem Stickstoff aus der Gasphase bildet sich das TiN. Man kann von einer Haftwahrscheinlichkeit der Ti-Atome von eins ausgehen und von einer Haftwahrscheinlichkeit der Stickstoffatome, die auf reinem Titan eins beträgt und mit zunehmendem Stickstoffanteil in der Schicht auf null (für Ti:N=1) abfällt [Tsa95]. Nimmt man an, daß ein ausreichender Stickstofffluß vorliegt, so daß eine Zusammensetzung der TiN-Schicht von Ti:N=1 erreicht wird, läßt sich die Topographie der Schicht unter Annahme einer Haftwahrscheinlichkeit von eins simulieren, die der Verteilung des Ti über die Struktur entspricht, das durch Reaktion mit Stickstoff in TiN umgewandelt wird. Die Topographie bei reaktivem Sputtern ergibt sich dann so wie im Falle der Abscheidung von einem Element. Dies wurde experimentell für Sputterabscheidung von Ti bzw. TiN auch beobachtet [Rya95].

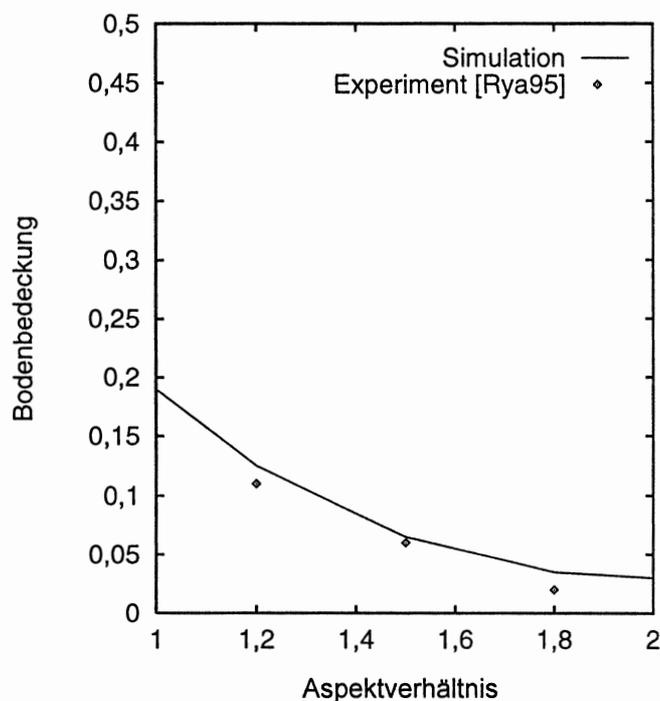


Abb. 6.17 Vergleich zwischen simulierter und gemessener Bodenbedeckung von durch reaktives Sputtern abgeschiedenen TiN Schichten.

Ein Vergleich zwischen Simulationen von reaktiver Sputterabscheidung von TiN und experimentellen Ergebnissen [Rya95] wurde für Kontaktlöcher mit verschiedenen Aspektverhältnissen durchgeführt. Es handelte sich um Löcher mit einer Tiefe von $0,8\ \mu\text{m}$ und verschiedenen Durchmessern. Die Dicke der abgeschiedenen TiN-Schichten an der Oberseite der Löcher betrug $0,15\ \mu\text{m}$. In Abb. 6.17 werden die experimentellen Daten mit den Simulationen verglichen. Dargestellt ist die Bodenbedeckung (Verhältnis der Schichtdicke am Boden des Kontaktloches zur Schichtdicke an der Oberseite des Kontaktloches). Es zeigt sich gute Übereinstimmung zwischen den Messungen und den Simulationen. Die Abweichungen können durch den Meßfehler erklärt werden, wenn man bedenkt, daß die Schichtdicken am Boden des Loches in der Größenordnung von $10\ \text{nm}$ liegen.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Die zunehmende Verkleinerung der Bauelementedimensionen in integrierten Schaltungen sowie die anwachsende Komplexität der Schaltungen macht die Verwendung von dreidimensionalen (3D) Simulationsprogrammen erforderlich, wenn es um die Vorhersage der Topographie abgedeckter Schichten geht. Es wurde daher ein 3D-Simulationsprogramm entwickelt, das die Berechnung von 3D-Schichtprofilen ermöglicht.

Die 3D-Geometrie wird dabei durch eine Triangulierung der Oberfläche diskretisiert. Dieser Ansatz wurde gewählt, da die Oberflächennormalenrichtung direkt bestimmt werden kann und die Anwendung von Teilchenbilanzierungsmodellen bezogen auf Flächenstücke der Oberfläche möglich ist. Weiterhin lassen sich Raumwinkel, die von Teilen der Oberfläche abgedeckt werden, in einfacher Weise berechnen. Diese Aspekte sind bei der Implementierung physikalischer Modelle für Schichtabscheideprozesse von hoher Bedeutung.

Es wurde ein Modell für die chemische Niederdruckgasphasenabscheidung (LPCVD) implementiert, das in früheren Arbeiten für 2D-Geometrien entwickelt und experimentell verifiziert wurde. Das Modell geht von reaktiven Teilchen aus, die auf die Oberfläche der Halbleiterscheibe auftreffen. Es wird angenommen, daß die freie Weglänge im Gas groß ist im Vergleich zu den Strukturdimensionen des Substrats. Es müssen somit nur Stöße von Teilchen mit der Oberfläche berücksichtigt werden. Die Teilchen reagieren nach dem Auftreffen auf die Oberfläche mit der sogenannten Haftwahrscheinlichkeit. Durch Adsorption und Desorption stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht der Teilchenflüsse mit einer entsprechenden Schichtwachstumsrate für jede Stelle der Oberfläche ein. Eine Erweiterung des Modells nimmt zwei zu bestimmten Anteilen beitragende Teilchenarten mit verschiedenen Haftwahrscheinlichkeiten an.

Bei der 3D-Implementierung wurden Ausdrücke für den Teilchentransport zwischen verschiedenen Oberflächendreiecken und zwischen dem Gas und den Stellen auf der Oberfläche abgeleitet. Es wurden dazu Algorithmen zur Berechnung der von den Dreiecken zum Gas hin offenen Raumwinkel sowie der durch andere Dreiecke verdeckten Raumwinkel

entwickelt. Weiterhin war es erforderlich, Verfahren, welche die Sichtbarkeit zwischen Oberflächendreiecken überprüfen, zu entwickeln. Spezielle adaptive Verfeinerungstechniken für die Berechnung des Teilchentransportes zwischen Dreiecken dienen zur Reduzierung des numerischen Fehlers. Die Teilchenflüsse und damit die Wachstumsraten für alle Dreiecke werden als Lösung eines linearen Gleichungssystems bestimmt. Es wurde gezeigt, daß die bei den 2D-Rechnungen verwendeten Ausdrücke aus der 3D-Rechnung für sehr lange Gräben folgen, so daß die aus Vergleichen von 2D-Simulationen mit Messungen des Schichtprofils auf langen Gräben gewonnenen Parameter auch in 3D gültig sind und zur Vorhersage des Schichtprofils auf 3D-Geometrien verwendet werden können.

Für sehr kleine Haftwahrscheinlichkeiten ergeben sich isotrope Schichtprofile, so daß damit Prozesse wie die Abscheidung von Polysilicium, Siliciumnitrid oder Tantalpentoxid simuliert werden können. Eine Haftwahrscheinlichkeit von 1 ermöglicht die Beschreibung von Sputterabscheidung.

Für die Verschiebung der triangulierten Oberfläche entsprechend der berechneten Schichtwachstumsraten wurde ein 3D-Stringalgorithmus entwickelt. Die Knoten der Triangulierung werden dabei in Abhängigkeit von den Wachstumsraten der angrenzenden Dreiecke verschoben. Spezielle Prozeduren wurden implementiert zur Reduktion artifizierlicher Verzerrungen bei der Verschiebung der Oberfläche, zur Verhinderung lokaler und globaler Schnitte der Oberfläche mit sich selbst und zur adaptiven Verfeinerung der Triangulierung.

Simulationsbeispiele zeigten den Einfluß der Haftwahrscheinlichkeit. Je größer diese ist, desto weniger können sich die reaktiven Teilchen in der Struktur verteilen und desto schlechter wird die Kantenbedeckung. Das Programm wurde zur Simulation der Abscheidung von Niedertemperaturoxid (LTO) mit dem Modell ausgehend von zwei Haftwahrscheinlichkeiten angewendet. Es wurde dabei auf Parameter aus früheren Arbeiten, die aus dem Vergleich von 2D-Simulationen mit 2D-Messungen gewonnen wurden, zurückgegriffen. Zur Überprüfung wurden pyramidenförmige Löcher mittels anisotropen Ätzens in Kaliumhydroxid (KOH)-Lösung hergestellt und als Ausgangsstrukturen für die LTO-Abscheidung verwendet. Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Schichtprofilen und den Simulationen. Die Abscheidung von Wolfram aus Wolframhexafluorid (WF_6) und Silan (SiH_4) läßt sich mit einer Haftwahrscheinlichkeit

simulieren. Mit einem Wert für die Haftwahrscheinlichkeit aus der Literatur konnte gute Übereinstimmung zwischen publizierten experimentellen Profilen der Abscheidung in ein Kontaktloch und der Simulation erreicht werden. Die isotrope Abscheidung von Polysilizium auf pyramidenförmigen Löchern wurde simuliert. Auch hier zeigte sich gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen.

Es wurden Sputterabscheidungen simuliert unter Annahme einer Haftwahrscheinlichkeit der Metallatome von eins sowie einer isotropen Geschwindigkeitsverteilung der Metallatome. Es wurden Simulationen ohne und mit Berücksichtigung von Oberflächendiffusion durchgeführt. Ein Modell zur Berechnung der Oberflächendiffusion wurde implementiert. Mit zunehmender Diffusionslänge ergibt sich dabei eine Verbesserung der Konformität der abgeschiedenen Schichten. Es wurden Simulationen der Abscheidung von TiN durch reaktives Sputtern in Kontaktlöcher mit verschiedenen Aspektverhältnissen durchgeführt und die Bodenbedeckung der abgeschiedenen Schichten bestimmt. Die Ergebnisse stimmen gut mit experimentellen Daten aus der Literatur überein.

Die grundlegenden Algorithmen, etwa zur Verschiebung der Oberfläche oder zur Bestimmung der durch Teile der Oberfläche bedeckten Raumwinkel, ermöglichen die Implementierung weiterer physikalischer Modelle für Abscheidevorgänge, wie z.B. Aufdampfen, spezielle Sputterprozesse (z.B. kollimiertes Sputtern) oder andere CVD-Prozesse. Es sind dann jeweils die Modellgleichungen zur Berechnung der Wachstumsrate zu erstellen und in das Programm aufzunehmen, so daß die sich ergebenden Wachstumsraten für die entsprechende Verschiebung der Oberfläche verwendet werden können. Im Falle von Aufdampfen und Sputtern wird die Erweiterung hauptsächlich hinsichtlich der geometrischen Gegebenheiten vorzunehmen sein, z.B. die zusätzliche Berücksichtigung der Abschattung der Oberfläche durch einen Kollimator beim kollimierten Sputtern.

Literaturverzeichnis

- [Amm93] J.A.M. Ammerlaan, J.P. van der Put, J. Schoonmann, Kinetics of Tungsten Low-Pressure Chemical Vapor Deposition Using WF_6 and SiH_4 Studied by In Situ Growth-Rate Measurements, *J. Appl. Phys.* **73**, 4631 (1993).
- [Bea78] K.E. Bean, Anisotropic Etching of Silicon, *IEEE Trans. Electron Devices* **25**, 1185 (1978).
- [Bas78] E. Bassous, Fabrication of Novel Three-Dimensional Microstructures by the Anisotropic Etching of (100) and (110) Silicon, *IEEE Trans. Electron Devices* **25**, 1178 (1988).
- [Cal90a] T.S. Cale, G.B. Raupp, T.H. Gandy, Free Molecular Transport and Deposition in Long Rectangular Trenches, *J. Appl. Phys.* **68**, 3645 (1990).
- [Cal90b] T.S. Cale, G.B. Raupp, Free Molecular Transport and Deposition in Cylindrical Features, *J. Vac. Sci. Technol.* **B 8**, 649 (1990).
- [Cal91a] T.S. Cale, T.H. Gandy, G.B. Raupp, A Fundamental Feature Scale Model for Low Pressure Deposition Processes, *J. Vac. Sci. Technol.* **A 9**, 524 (1991).
- [Cal 91b] T.S. Cale, Flux Distributions in Low Pressure Deposition and Etch Models, *J. Vac. Sci. Technol.* **B 9**, 2551 (1991).
- [Cha96] C.Y. Chang, S.M. Sze, *ULSI Technology*, McGraw Hill, New York, 1996.
- [Che90] F.S. Chen, Y.S. Lin, G.A. Dixit, R. Sundaresan, C.C. Wei, F.T. Liou, Planarized Aluminum Metallization for Sub-0.5 μm CMOS Technology, *Proc. IEDM 1990*, 51.
- [Che91] L.-Y. Cheng, J.P. McVittie, K.C. Saraswat, New Test Structure to Identify Step Coverage Mechanisms in Chemical Vapor Deposition of Silicon Dioxide, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 2147 (1991).

- [Cor94] D.G. Coronell, K.F. Jensen, Simulation of Rarefied Gas Transport and Profile Evolution in Nonplanar Substrate Chemical Vapor Deposition, *J. Electrochem. Soc.* **141**, 2545 (1994).
- [Hai95] M. Hain, H. Körner, B. Neureither, S. Röhl, A Highly Reliable, Low Cost 0.5 μm Three Level Tungsten Metallization, *Appl. Surf. Sci.* **91**, 374 (1995).
- [Has91] A. Hasper, J. Holleman, J. Middelhoek, C.R. Kleijn, C.J. Hoogendoorn, Modeling and Optimization of the Step Coverage of Tungsten LPCVD in Trenches and Contact Holes, *J. Electrochem. Soc.* **138**, 1728 (1991).
- [Has93] T. Hasegawa, J. Sato, A Novel Topographic Simulation for LPCVD Using Simple Equations, *Proc. 12th Int. Symp. CVD* (Ed. K.F. Jensen, G.W. Cullen), *ECS Proc.* **93-2**, p. 78 (1993).
- [Hen90] W. Henke, G. Czech, Simulation of Lithographic Images and Resist Profiles, *Microel. Eng.* **11**, 629 (1990).
- [Isl91] M. Mazhar IslamRaja, M.A. Cappelli, J.P. McVittie, K.C. Saraswat, A 3-Dimensional Model for Low-Pressure Chemical-Vapor-Deposition Step Coverage in Trenches and Circular Vias, *J. Appl. Phys.* **70**, 7137 (1991).
- [Jew77] R.E. Jewett, P.I. Hagouel, A.R. Neureuther, T. Van Duzer, Line Profile Resist Development Simulation Techniques, *Polymer Eng. Sci.* **17**, 381 (1977).
- [Jew79] R. Jewett, A String Model Etching Algorithm, Memorandum No. UCB/ERL M79/68, SAMPLE Report No. SAMD-3, Electronics Research Laboratory, College of Engineering, University of California, Berkeley (1979).
- [Jon81] F. Jones, J. Paraszczak, RD3D (Computer Simulation of Resist Development in Three Dimensions), *IEEE Trans. Electron Devices* **28**, 1544 (1981).

- [Kle91] C.R. Kleijn, Transport Phenomena in Chemical Vapor Deposition Reactors, Dissertation TU Delft (1991).
- [Kle95] C.R. Kleijn, Chemical Vapor Deposition Processes, in: Computational Modeling in Semiconductor Processing (Ed. M. Meyyappan), Artech House, Boston-London, p. 97 (1995).
- [Lei95] E. Leitner, W. Bohmayr, P. Fleischmann, E. Strasser, S. Selberherr, 3D TCAD at TU Vienna, in: 3-Dimensional Process Simulation (Ed. J. Lorenz), Springer-Verlag, Wien New York, p. 136 (1995).
- [Lor93] J. Lorenz, C. Hill, H. Jaouen, C. Lombardi, C. Lyden, K. De Meyer, J. Pelka, A. Poncet, M. Rudan, S. Solmi, The STORM Technology CAD System, in: Technology CAD Systems (Ed. F. Fasching, S. Halama, S. Selberherr) Springer-Verlag, Wien New York, p. 163 (1993).
- [Mat85] T. Matsuzawa, T. Ito, M. Tanuma, Three-Dimensional Photoresist Image Simulation on Flat Surfaces, IEEE Trans. Electron Devices **32**, 1781 (1985).
- [McV90] J.P. McVittie, J.C. Rey, L.Y. Cheng, M.M. IslamRaja, K.C. Saraswat, LPCVD Profile Simulation Using a Re-Emission Model, Proc. IEDM 90, 917 (1990).
- [Rau93a] N. Rausch, E.P. Burte, Thin Ta₂O₅ Films Prepared by Low Pressure Metal Organic CVD, Microelectronics J. **24**, 421 (1993).
- [Rau93b] N. Rausch, E.P. Burte, Thin TiO₂ Films Prepared by Low Pressure Chemical Vapor Deposition, J. Electrochem. Soc. **140**, 145 (1993).
- [Rya95] J.G. Ryan, S.B. Brodsky, T. Katata, M. Honda, N. Shoda, H. Aochi, Collimated Sputtering of Titanium and Titanium Nitride Films, MRS Bulletin, Nov. 1995, p. 42.

- [Sai92] T. Saito, Y. Shimogaki, Y. Egashira, H. Komiyama, Y. Yuyama, K. Sugawara, Conformal Deposition of WSi_x Films on Micron-Sized Trenches: The Reactivity of Film Precursors, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 764 (1992).
- [Sch88] J.E.J. Schmitz, R.C. Ellwanger, A.J.M. van Dijk, Characterization of Process Parameters for Blanket Tungsten Contact Fill, in: *Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications III* (E. V.A. Wells), MRS Pub., Pittsburgh, p. 55 (1988).
- [Sch93] E.W. Scheckler, N.N. Tam, A.K. Pfau, A.R. Neureuther, An Efficient Volume-Removal Algorithm for Practical Three-Dimensional Lithography Simulation with Experimental Verification, *IEEE Trans. Computer Aided Design* **12**, 1345 (1993).
- [Sch94] E.W. Scheckler, A.R. Neureuther, Models and Algorithms for Three-Dimensional Topography Simulation with SAMPLE-3D, *IEEE Trans. Computer Aided Design* **13**, 219 (1994).
- [Smy91] T. Smy, N. Tait, M.J. Brett, Ballistic Deposition Simulation of Via Metallization Using a Quasi-Three-Dimensional Model, *IEEE Trans. Computer Aided Design* **10**, 130 (1991).
- [Str95] E. Strasser, S. Selberherr, Algorithms and Models for Cellular Based Topography Simulation, *IEEE Trans. Computer Aided Design* **14**, 1104 (1995).
- [Tör88] W. Törnig, P. Spellucci, *Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker*, Bd. 1, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (1988).
- [Tor95] J. Torres, Advanced Copper Interconnections for Silicon CMOS Technologies, *Appl. Surf. Sci.* **91**, 112 (1995).
- [Tsa95] W. Tsai, D. Hodul, T. Sheng, S. Dew, K. Robbie, M.J. Brett, T. Smy, Variation of Composition of Sputtered TiN Films as a Function of Target Nitridation, Thermal Anneal, and Substrate Topography, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 220 (1995).

- [Web95] A. Weber, R. Nikulski, C.-P. Klages, M.E. Gross, R.M. Charatan, R.L. Opilan, W.L. Brown, Aspects of TiN and Ti Deposition in an ECR Plasma Enhanced CVD Process, *Appl. Surf. Sci.* **91**, 314 (1995).
- [Wes94] M. Westermann, P. Regli, N. Strecker, W. Fichtner, Improving Three-Dimensional Semiconductor Modeling Through Layout and Process Flow Analysis, *Proc. ESSDERC 94* (Ed. C. Hill, P. Ashburn) Edition Frontieres, Gif-sur-Yvette Cedex, p. 351 (1994).
- [Wil92a] H. Wille, E. Burte, H. Ryssel, Simulation of the Step Coverage for Chemical Vapor Deposited Silicon Dioxide, *J. Appl. Phys.* **71**, 3532 (1992).
- [Wil92b] H. Wille, E. Burte, A Dual Sticking Coefficient Chemical Vapor Deposition Model, *Microel. Eng.* **19**, 503 (1992).
- [Wil92c] H. Wille, Topographie und Kantenbedeckung von abgeschiedenen Schichten am Beispiel des Siliciumdioxids, Dissertation Universität Erlangen-Nürnberg (1992).
- [Wul91] H.C. Wulu, K.C. Saraswat, J.P. McVittie, Simulation of Mass Transport for Deposition in Via Holes and Trenches, *J. Electrochem. Soc.* **138**, 1831 (1991).
- [Zir93] T.E. Zirkle, S.R. Wilson, S.L. Sundaram, T.S. Cale, G.B. Raupp, Sequential Deposition of SiO₂ and poly-Si in Isolation Trenches, *J. Vac. Sci. Technol. A* **11**, 905 (1993).

Index

- Adsorption 37,67
APCVD 15,77
anisotropes Ätzen 78
Aspektverhältnis 66,92
Ätzprozeß 10,19,23,27,78
Ätzstopp 78
- Bauelementesimulator 9
Bodenbedeckung 93
- CVD-Verfahren 14
- Desorption 37,39,42,67
Dielektrika 11,38
Diffusionskoeffizient 75
Diskretisierung 20,25,40
Dreiecksdiskretisierung 32
dünne Schichten 13
dynamisches Gleichgewicht 40
- entartetes Dreieck 59
- FIB-Querschnitt 84
freie Weglänge 37
- Gitterverfeinerung 63
globale Schnitte der Oberfläche 59
Graben 26,51,70,78,80
- Haftwahrscheinlichkeit 24,37,65,77,87,90
Heißwandreaktor 15,17
heterogene Reaktion 14
homogene Reaktion 14,77
Horizontalrohrreaktor 16,81
- Injektor 17
integrierte Schaltung 9
Isolationsgraben 11
isotrope Schichtabscheidung 36,67
- Kaliumhydroxid 78
Kaltwandreaktor 15
Kantenbedeckung 14,66,71,87
Knudsen-Zahl 24
- Kollimator 71
konkave Kante 81,90
Kontaktloch 19,21,66,88,93
konvexe Kante 33,41,63,81,90
Korrekturfaktor 28,34,56
Kosinusetz 39,42
Kupfer 18
- Lithographie 10,19
lokale Schnitte der Oberfläche 59
LPCVD 15,35,77,86,90
- Materialindex 20
Modellgleichung 10
Modellparameter 77
Monte-Carlo-Simulation 24
- Niedertemperaturoxid 77,81
Normalenrichtung 28,33,52,56
- Oberflächendiffusion 38,67,73
Oxidation 13
- PECVD 16,77
PHCVD 16
Polygonzug 25
Polysilicium 17,36,90
Prozeßmodellierung 10
Prozeßsimulator 10
punktweise Verschiebung 27,55
PVD-Verfahren 13
pyramidenförmiges Loch 78
- Raumwinkel 44,46,65
Ray-Trace-Verfahren 20
Reaktionsfluß 41
Reaktionskinetik 38,87
reaktive Teilchen 35
reaktives Sputtern 92
rotationssymmetrische Geometrie 25
RTCVD 15
- Schaltkreissimulator 9
Schleife 30

segmentäre Topographiebeschreibung 25
segmentweise Verschiebung 28,57
selektive Wolframabscheidung 86
Sichtbarkeit 47
Signalverarbeitungsgeschwindigkeit 11
Silan 17,77,86,90
Siliciumdioxid 11,12,17,77
Siliciumnitrid 17,36
Simulationsprogramm 9
Sputterabscheidung 71,73,92
Stoßdurchmesser 37
Stringalgorithmus 55
Symmetrie 35

Tantalpentoxid 18,36
Teilchenfluß 39,42
thermodynamisches Gleichgewicht 37,39
Titan 18
Titandioxid 18
Titannitrid 18,92
Topographie 10,19
Topographiesimulation 19
Triangulierung 40

Verfeinerung 30,49,63
Verrundung von Kanten 65,90
Verschiebungsvektor 55
Verzerrung 57

Wolfram 12,18,86
Woframhexafluorid 86
Wolframsilicid 12,18,66

zelluläre Topographiebeschreibung 20
Zwischenisolierungsschicht 11

Eigene Veröffentlichungen

1. E. Bär, J. Lorenz, 3-D Simulation of Low-Pressure Chemical Vapor Deposition, in: Proceedings ESSDERC'94, Ed. C. Hill, P. Ashburn, Edition Frontieres, Gif-sur-Yvette Cedex, 1994, p. 335.
2. J. Lorenz, E. Bär, A. Bourenkov, W. Henke, K. Tietzel, M. Weiß, 3D Simulation of Topography and Doping Processes at FhG, in: 3-Dimensional Process Simulation, Ed. J. Lorenz, Springer-Verlag, Wien, New York, 1995, p. 109.
3. E. Bär, J. Lorenz, 3D Simulation of Tungsten Low-Pressure Chemical Vapor Deposition in Contact Holes, Appl. Surf. Sci. **91**, 321 (1995).
4. E. Bär, J. Lorenz, 3-D Simulation of LPCVD Using Segment-Based Topography Discretization, IEEE Trans. Semicond. Manufact. **9**, 67 (1996).
5. E. Bär, J. Lorenz, H. Ryssel, Three-Dimensional Simulation of Low-Pressure Chemical Vapour Deposition, in: Software for Electrical Engineering Analysis and Design, Ed. P.P. Silvester, Computational Mechanics Publications, Southampton, Boston, 1996, p. 437.
6. E. Bär, J. Lorenz, H. Ryssel, 3D Simulation for Sub-Micron Metallization, Microelectronic Engineering **33**, 397 (1997).
7. E. Bär, J. Lorenz, The PROMPT Project and its Application to the Three-Dimensional Simulation of Low-Pressure Chemical Vapor Deposition Processes, Solid-State Electronics **41**, 939 (1997).
8. E. Bär, A. Benvenuti, W. Henke, B. Jünemann, C. Kalus, P. Niedermaier, J. Lorenz, Integrated Three-Dimensional Topography Simulation of Contact Hole Processing, in: Proceedings of the 6th International Symposium on Ultralarge Scale Integration Science and Technology, Ed. H.Z. Massoud, H. Iwai, C. Claeys, R.B. Fair, The Electrochemical Society, Proc. Vol. 97-3, Pennington, NJ, 1997, p. 633.
9. E. Bär, J. Lorenz, H. Ryssel, 3D Simulation of Sputter Deposition of Titanium Layers in Contact Holes with High Aspect Ratios, Microelectronic Engineering **37/38**, 389 (1997).

10. E. Bär, J. Lorenz, H. Ryssel, Three-Dimensional Simulation of Conventional and Collimated Sputter Deposition of Ti Layers into High Aspect Ratio Contact Holes, in: SISPAD'97, Technical Digest, IEEE, Piscataway, 1997, p. 297.
11. E. Bär, J. Lorenz, H. Ryssel, Three-Dimensional Simulation of Contact Hole Metallization using Aluminum Sputter Deposition at Elevated Temperatures, in: Proceedings ESSDERC'97, Ed. H. Grünbacher, Editions Frontieres, Paris, 1997, p. 476.
12. E. Bär, J. Lorenz, H. Ryssel, Three-Dimensional Simulation of Layer Deposition, erscheint in: Microelectronics Journal, 1997.
13. E. Bär, J. Lorenz, H. Ryssel, Experimental Verification of Three-Dimensional Simulations of LTO Layer Deposition on Structures Prepared by Anisotropic Wet Etching of Silicon, erscheint in: Microelectronics and Reliability, 1997.

Lebenslauf

Name: Eberhard Bär

Geburtstag: 30. Dezember 1967

Geburtsort: Darmstadt

Schulbildung: 1973 - 1977: Friedrich-Ebert-Schule (Grundschule),
Schöneck
1977 - 1979: John-F.-Kennedy-Schule (Förderstufe),
Bad Vilbel
1979 - 1986: Georg-Büchner-Gymnasium, Bad Vilbel
Juni 1986: Abitur

Studium: Oktober 1986 - April 1992: Physikstudium an der
Technischen Hochschule Darmstadt
Oktober 1988: Vordiplom
April 1992: Diplom

Berufliche Tätigkeit: Oktober 1992 - September 1996: wissenschaftlicher
Mitarbeiter am Fraunhofer-Institut für Integrierte
Schaltungen, Bereich Bauelementetechnologie, Erlangen
seit Oktober 1996: wissenschaftlicher Mitarbeiter am
Lehrstuhl für Elektronische Bauelemente, Universität
Erlangen-Nürnberg

Danksagung

Bei Herrn Prof. Dr. H. Ryssel bedanke ich mich für die Vergabe und Betreuung dieser Doktorarbeit. Besonders möchte ich mich dafür bedanken, daß er mir die Teilnahme an zahlreichen internationalen Konferenzen ermöglicht hat.

Herrn Prof. Dr. S. Selberherr danke ich für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Herrn Dipl.-Phys. Dipl.-Math. J. Lorenz möchte ich meinen Dank für hilfreiche Diskussionen und Anregungen aussprechen.

Den Kollegen aus der Technologieabteilung danke ich für die Unterstützung bei den experimentellen Untersuchungen.

Den Mitarbeitern der Simulationsabteilung möchte ich für die sehr gute freundschaftliche Arbeitsatmosphäre danken.