

低压化学蒸汽淀积的三维计算机模拟

王季陶 张世理 王焕杰 连美华

(复旦大学)

1983年12月5日收到

本文在一维 LPCVD 计算机模拟算式的基础上,考虑到反应管中,径向浓度不均匀的影响,进一步提出三维 LPCVD 计算机模拟算式,以便同时解决片内和片间均匀性问题。在形式上,整个三维模拟算式可以分解为片内和片间两个独立的部分,但二者是相互影响的。计算结果同一些实验结果具有相同的结论。在三维 LPCVD 计算机模拟的指导下,我们在研制 LPCVD 工艺和设备中取得了片内、片间均匀性和批间重复性都极为良好的结果。

一、引言

大规模和超大规模集成电路的发展,对集成电路制造工艺的生产成本、生产效率及淀积薄膜的均匀性提出了越来越高的要求。低压化学蒸汽淀积 (Low Pressure Chemical Vapor Deposition 简称 LPCVD) 工艺正是以其显著的优越性——降低生产成本、提高劳动生产率和改善薄膜均匀性而迅速、广泛地应用于集成电路和其它半导体器件工业的薄膜制备中。同时,用 LPCVD 技术淀积薄膜的种类也在逐步增多。为了更好地掌握和推广 LPCVD 技术的应用,人们希望能从理论上对具体工艺参数的选择给予指导。1980 年我们曾经通过引入反应气体分子的转化率 η 提出了 LPCVD 计算机模拟算式^[1]。这个模拟计算中包含了一个基本假定,“反应管中径向浓度梯度近似为零”,即假定片内是均匀的,因而只需要对沿轴向的片间淀积速率分布进行模拟计算,下面把这种模拟称为一维 LPCVD 计算机模拟。对于一些片内均匀性良好 ($\sim \pm 1\%$) (如 LPCVD 多晶硅,氯硅烷和氨法制取氮化硅等) 的反应,作反应管径向浓度梯度为零的假定不会带来太大的偏差,用一维模拟能够较好地描述整个淀积反应过程;但对某些 LPCVD 反应,例如:硅烷 (SiH_4) 和氨气 (NH_3) 制取氮化硅,硅烷、磷烷 (PH_3) 和氧气 (O_2) 制取磷硅玻璃 (PSG) 等,片内均匀性就不是很理想 ($\sim \pm 5\%$),这个时候仅用一维模拟是不够的,必须考虑反应管中径向浓度梯度不为零对反应系统中片内和片间均匀性的影响,将一维模拟进一步发展为三维模拟 (即三维 LPCVD 计算机模拟),同时计算片内和片间淀积速率的分布情况,对 LPCVD 系统给予更完善的理论模拟。

二、LPCVD 多晶硅的三维模拟算式的推导

H. Huppertz 和 W. L. Engl^[2] 在一些基本假设下,曾对直立装片方式、以正硅酸乙酯 ($\text{SiO}_4\text{C}_8\text{H}_{20}$) 为硅源气体淀积二氧化硅 (SiO_2) 的反应,就片内均匀性作了理论分析和

计算,得到了一些规律性的结果。J. P. Charlier^[3] 则通过分别求解 Laplace 方程和 Poisson 方程获得片内和片间浓度分布的数学表达式,并对片间淀积速率分布作了一些计算。由于数学推导繁琐、计算量太大,不得不在计算过程中采用粗糙的近似——仅取基频项来代替无穷级数的累加。此外, A. E. T. Kuiper 等人^[4]及 M. L. Hichman 等人^[5,6]也曾对这个问题作了不同程度的探讨。但是,他们的计算对片内均匀性和片间淀积速率分布之间的关联作用、相互影响考虑较少。

考虑到反应管中,径向浓度梯度不为零的影响,我们可以建立图 1 所示的理论模型,并进一步把整个问题分解为主气流区 (I) 和扩散-迁移区 (II),以便同时解决片内和片间的均匀性问题。图中, R' 是反应管内壁半径; R 是硅片半径; $2l$ 是片间距; L 是装片格数(相应地,装片量为 $2L$)。

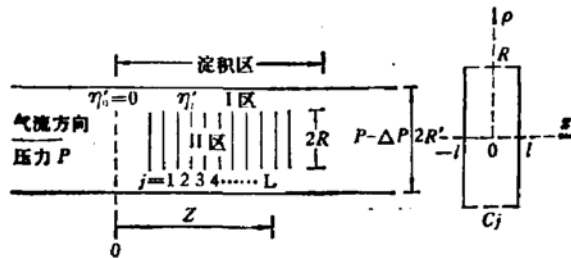


图 1 模拟计算理论模型整体剖面图(左)及第 j 个圆柱形小反应腔示意图(右)

为了简化计算,我们在主气流区作这样的近似:与扩散-迁移区中第 j 个小腔体对应的环形区内,气体分子有统一的浓度 C_j 。另外,浓度在两个区域的界面 ($\rho = R$) 处应满足连续性条件。对于 LPCVD 多晶硅工艺,按一级化学反应来处理^[7,8,9],并参照文献 [2] 的计算方法,可以得到第 j 个小腔体片内淀积速率分布为:

$$r_j(\rho, \pm l) = K_j \cdot P_j \cdot C_j(\rho, \pm l)$$

$$= 2 \cdot r_j \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_0\left(\alpha_n \frac{\rho}{l}\right)}{I_0\left(\alpha_n \frac{R}{l}\right)} \cdot \frac{1}{1 + K_j \cdot P_j \cdot l/h_j + \alpha_n^2 \cdot h_j/K_j \cdot P_j \cdot l}$$

式中, α_n 是超越方程 $\alpha_n \cdot \tan \alpha_n = K_j \cdot P_j \cdot l/h_j$ 的根; h_j 是 j 区硅烷分子的广义迁移系数; $r_j = K_j \cdot P_j \cdot C_j$ 是主气流区 j 区的淀积速率; $K_j = A \cdot e^{-\Delta E/R \cdot T_j}$ (Arrhenius 公式); $P_j = P - j \cdot \frac{\Delta P}{L}$; I_0 是零阶虚宗量 Bessel 函数; ΔE 是反应活化能; T_j 是 j 区的温度; 其它符号的意义可参考图 1。

片内淀积速率径向分布的不均匀性,正是反应管中径向浓度梯度不为零的结果。考虑这个不均匀性后,怎样把一维模拟算式推广到三维模拟中主气流区的算式,是完善三维模拟的关键。根据以上理论模型以及所作的近似,经过推导可知,只要用“有效面积” S'_j 代替 S_j ,一维模拟算式便能用来模拟三维问题中主气流区的淀积速率分布。 S'_j 同 S_j 的关系是:

$$S'_j = 4\pi l R' + 2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r_j(\rho, \pm l) \rho d\rho = S_j - \Delta S_j$$

而 $S_j = 4\pi l R' + 2\pi R^2$, 其中第一项是小反应腔所对应的反应管内壁的面积;第二项是面

对面两块衬底圆片的面积。

$\tau_j(\rho, \pm l) = r_j(\rho, \pm l)/r_j$ 是片内的归一化淀积速率。

$$\Delta S_j = 2\pi R^2 - 2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \tau_j(\rho, \pm l) \rho d\rho$$

$$= 2\pi R \left[R - 4l \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_1\left(\alpha_n \frac{R}{l}\right)}{\alpha_n \cdot I_0\left(\alpha_n \frac{R}{l}\right)} \cdot \frac{1}{1 + K_j \cdot P_j \cdot l/h_j + \alpha_n^2 h_j/K_j \cdot P_j \cdot l} \right]$$

ΔS_j 就是考虑片内不均匀后引入的面积修正项。式中, I_1 是一阶虚宗量 Bessel 函数。为了表述面积修正的程度, 也可引入“面积修正因子” θ_j , 使得:

$$S'_j = 4\pi l R' + \theta_j \cdot 2\pi R^2,$$

即 $\theta_j = 1 - \Delta S_j/2\pi R^2$ 。

为了同一维算式区分开, 用 η'_j 代表三维模拟算式中的转化率。经过这些变动, 我们得到三维 LPCVD 计算机模拟算式, 在形式上该算式可分解为两个相互独立的部分:

(1) 主气流区

$$\eta'_0 = 0,$$

.....

$$\eta'_{j+1} = \sum_{i=0}^j S'_i \cdot r_j \cdot 1.85 \cdot 10^{-3} / F \cdot C_0,$$

$$S'_j = 4\pi l R' + 8\pi l R \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_1\left(\alpha_n \frac{R}{l}\right)}{\alpha_n \cdot I_0\left(\alpha_n \frac{R}{l}\right)} \cdot \frac{1}{1 + K_j \cdot P_j \cdot l/h_j + \alpha_n^2 \cdot h_j/K_j \cdot P_j \cdot l},$$

$$r_j = K_j \cdot P_j \cdot C_0 \cdot (1 - \eta'_j) / (1 + C_0 \cdot \eta'_j),$$

$$K_j = A \cdot e^{-\Delta E/R \cdot T_j},$$

$$P_j = P - j \cdot \frac{\Delta P}{L}.$$

(2) 扩散-迁移区

$$r_j(\rho, \pm l) = 2 \cdot r_j \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_0\left(\alpha_n \frac{\rho}{l}\right)}{I_0\left(\alpha_n \frac{R}{l}\right)} \cdot \frac{1}{1 + K_j \cdot P_j \cdot l/h_j + \alpha_n^2 \cdot h_j/K_j \cdot P_j \cdot l}.$$

三、应 用

1. 我们首先根据 R. S. Rosler^[20] 一文中图 6 的反应参数用三维模拟进行了计算, 片内均匀性的计算结果符合该文中报道的结果 ($\pm 1.5\%$ 左右)。从图 2 看到, 计算曲线与实验曲线很相似。计算中取的参数分别是:

流量 $F = 650$ 标准厘米³/分 (即 sccm); 硅烷浓度 $C_0 = 23\%$; 系统总压力 $P = 0.5$ 托

(torr); 淀积区前后温差 $G = 0^\circ\text{C}$; 反应管半径 $R' = 6.5\text{cm}$; 硅片半径 $R = 3.8\text{cm}$ (即 3 英寸硅片); 片间距 $2l = 0.95\text{cm}$ (即 3/8 英寸); 反应活化能 $\Delta E = 37.3$ 千卡/摩尔。显然, 三维模拟是能反应实验规律的。

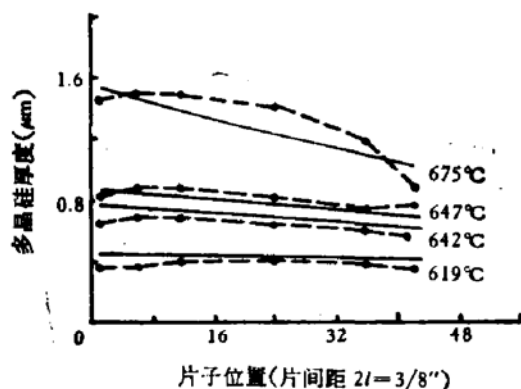


图2 R. S. Rosler 的实验曲线与本文计算曲线比较
实线表示计算曲线, 虚线则代表实验曲线, 参数为: $F = 650\text{sccm}$, 硅烷浓度 $C_0 = 0.23$, $p = 0.5\text{torr}$, 时间 30 分, 片间距 $2l = 0.95\text{cm}$, 反应管半径 $R' = 6.5\text{cm}$, 硅片半径 $R = 3.8\text{cm}$

性基本无影响, 而对片间淀积速率分布有直接的影响。流量越大, 淀积区前后淀积速率越趋向于均匀分布。图 3(a) 中淀积速率系指衬底片边缘处的淀积速率; 图 3(b) 中归一化淀积速率就是指 $\tau_i(\rho, \pm l)$ 。后同。

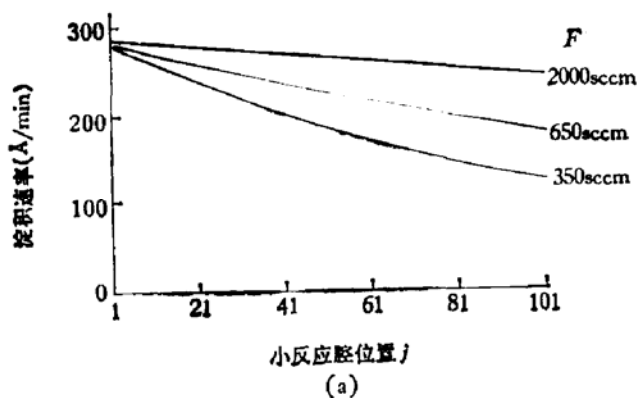


图3 (a) 流量对片间淀积速率分布的影响
参数为: $C_0 = 0.23$, $T = 647^\circ\text{C}$, $G = 0^\circ\text{C}$, $P = 0.5\text{torr}$, $R' = 6.5\text{cm}$, $R = 3.8\text{cm}$, $l = 0.238\text{cm}$

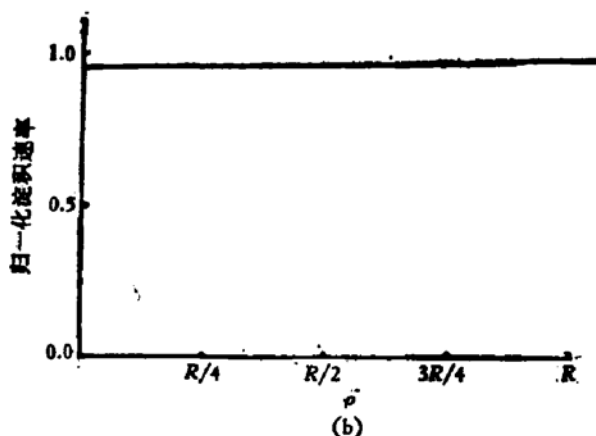


图3 (b) 流量对片内均匀性的影响

(2) 浓度对片间淀积速率分布和片内均匀性的影响

同样, 浓度对片内均匀性基本无影响[图 4(a)]; 而浓度的大小将单调地影响片间淀积速率绝对值的大小[图 4(b)], 不同浓度的分布曲线形状几乎是按比例变化的。

(3) 压力对片间淀积速率分布和片内均匀性的影响

从图 5 可以看到, 压力不仅对片间淀积速率分布, 而且对片内均匀性都有影响。压力

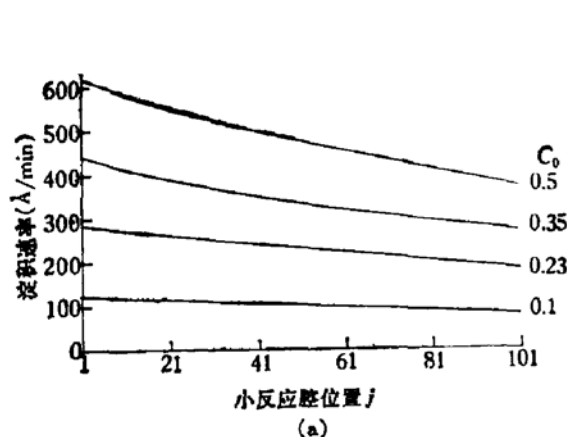


图 4 (a) 浓度对片间淀积速率分布的影响

参数为: $F=650\text{sccm}$, $T=647^\circ\text{C}$, $G=0^\circ\text{C}$, $P=0.5\text{torr}$,
 $R'=6.5\text{cm}$, $R=3.8\text{cm}$, $l=0.238\text{cm}$

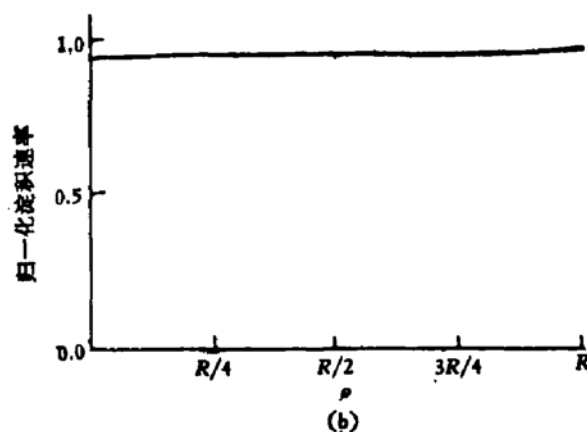


图 4 (b) 浓度对片内均匀性的影响

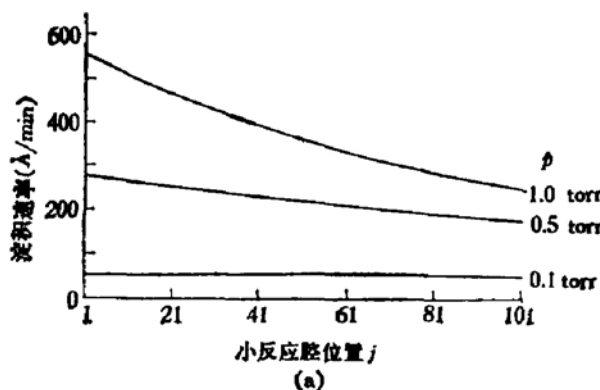


图 5 (a) 压力对片间淀积速率分布的影响

参数为: $F=650\text{sccm}$, $C_0=0.23$, $T=647^\circ\text{C}$, $G=0^\circ\text{C}$,
 $R'=6.5\text{cm}$, $R=3.8\text{cm}$, $l=0.238\text{cm}$

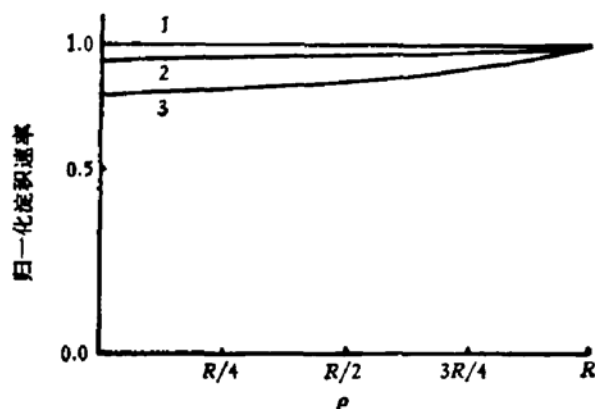


图 5 (b) 压力对片内均匀性的影响

图中, 1— $P=0.1\text{torr}$, 2— $P=0.5\text{torr}$,
 3— $P=1.0\text{torr}$

升高, 片内和片间均匀性都变差; 反之, 均匀性好转。

(4) 温度对片间淀积速率分布和片内均匀性的影响

同压力的影响类似, 随着温度的升高, 片间淀积速率分布变陡; 片内均匀性变差。为了便于比较, 图 6(b) 中增加了两条更高温度的曲线。

(5) 差值 ($R' - R$) 对片间淀积速率分布和片内均匀性的影响

我们模拟计算了在同一口径的炉管内分别放入 1 英寸 (2.54 cm) 到 3 英寸 (7.6 cm) 的衬底片的情况 (图 7)。结果表明, 在 R' 不变时增大 R , 即减小炉管内壁与硅片边缘的间距, 可以改善片内均匀性; 而此时片间淀积速率分布将稍变陡峭

(6) 片间距对片间淀积速率分布和片内均匀性的影响

考虑到实际情况, 我们在计算中保持总装片量不变进行比较。图 8 中给出了前 51 个小反应腔的情况。可见, 片间距越大, 片内均匀性越好; 反之, 越差。而对片间淀积速率分

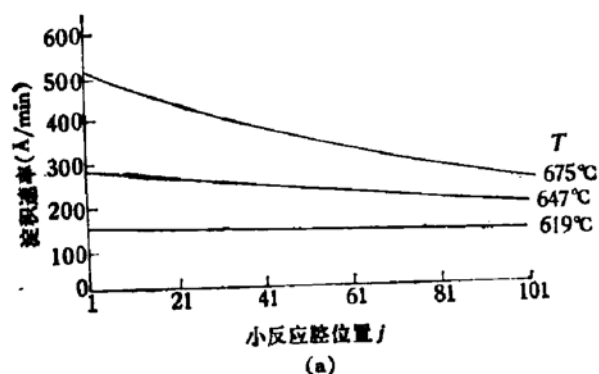


图 6 (a) 温度对片间沉积速率分布的影响

参数为: $F=650\text{ sccm}$, $C_0=0.23$, $G=0^\circ\text{C}$, $p=0.5\text{ torr}$, $R'=6.5\text{ cm}$, $R=3.8\text{ cm}$, $l=0.238\text{ cm}$

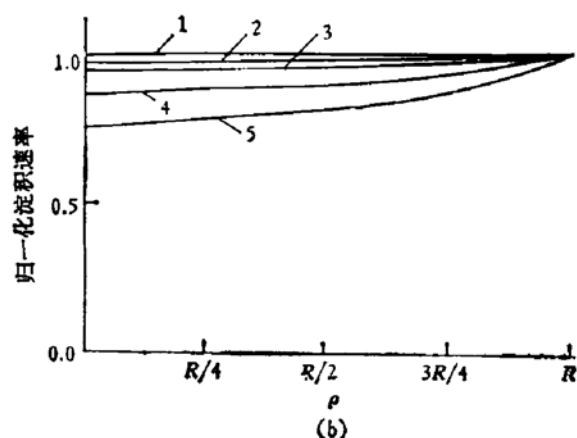


图 6 (b) 温度对片内均匀性的影响

图中, 1— $T=619^\circ\text{C}$, 2— $T=647^\circ\text{C}$, 3— $T=675^\circ\text{C}$, 4— $T=715^\circ\text{C}$, 5— $T=755^\circ\text{C}$

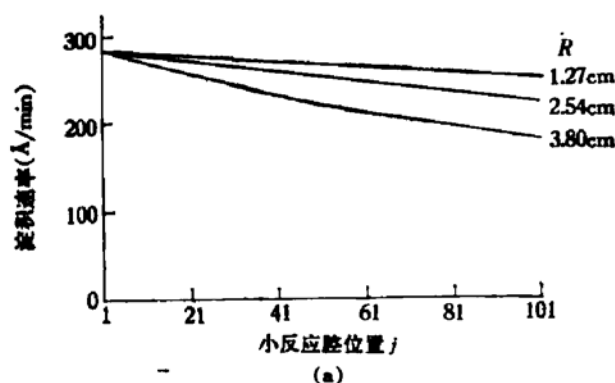


图 7 (a) 硅片半径对片间沉积速率分布的影响

参数为: $F=650\text{ sccm}$, $C_0=0.23$, $T=647^\circ\text{C}$, $G=0^\circ\text{C}$, $p=0.5\text{ torr}$, $R'=6.5\text{ cm}$, $l=0.238\text{ cm}$

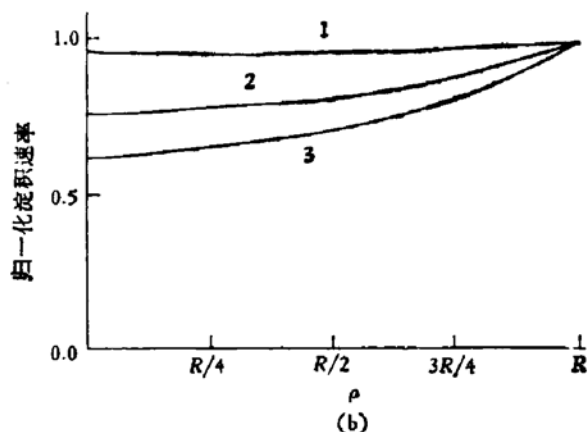


图 7 (b) 硅片半径对片内均匀性的影响

图中, 1— $R=3.8\text{ cm}$, 2— $R=2.54\text{ cm}$, 3— $R=1.27\text{ cm}$

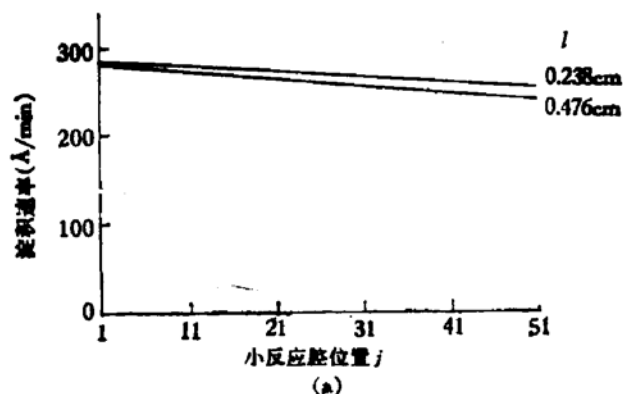


图 8 (a) 片间距对片间沉积速率分布的影响

参数为: $F=650\text{ sccm}$, $C_0=0.23$, $T=647^\circ\text{C}$, $G=0^\circ\text{C}$, $p=0.5\text{ torr}$, $R'=6.5\text{ cm}$, $R=2.54\text{ cm}$

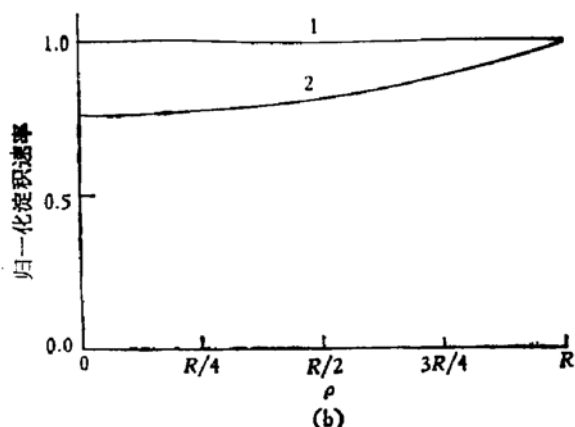


图 8 (b) 片间距对片内均匀性的影响

图中, 1— $l=0.476\text{ cm}$, 2— $l=0.238\text{ cm}$

布的影响则不同,片间距小的,片间沉积速率分布就平坦些。

文献 [2, 6, 10] 中所报道的关于压力 (P)、温度 (T)、反应器壁与衬底片边缘的间

距 ($R' - R$) 及片间距 ($2l$) 对片内均匀性影响的实验结果同上述计算具有相同的结论。

3. 讨论

(1) 以上各组计算曲线中, 片间淀积速率分布曲线都呈现前高后低, 即气流入口端淀积速率高于气流出口端。这是由于计算中前后温差 G 均取为零。为了改善片间均匀性, 需在淀积区加以适当的温度梯度^[1,7]。由于温度对片内均匀性的影响, 同一炉内前后片内的淀积薄膜均匀性将随温度的不同而不同。这个差别可以用“面积修正因子” θ_i 的大小来表示。 θ_i 越大, 表示片内均匀性越差; θ_i 越小, 则片内越均匀。表 1 给出了不同温度及不同前后温差下 θ_i 的数值。

表 1 不同温度 (T) 及不同前后温差 (G) 对面积修正因子 (θ_i) 的影响*

$T(^{\circ}\text{C})$	$G(^{\circ}\text{C})$	θ_1	θ_{21}	θ_{41}	θ_{61}	θ_{81}	θ_{101}
619	0	0.988	0.988	0.988	0.988	0.988	0.988
619	15	0.988	0.987	0.986	0.985	0.984	0.983
619	30	0.988	0.986	0.984	0.982	0.980	0.977
647	0	0.978	0.978	0.978	0.978	0.978	0.978
647	15	0.978	0.977	0.976	0.974	0.973	0.971
647	30	0.978	0.976	0.973	0.969	0.966	0.962
675	0	0.963	0.963	0.963	0.963	0.963	0.963
675	20	0.963	0.960	0.957	0.954	0.951	0.947
657	40	0.963	0.957	0.951	0.943	0.935	0.926

* 计算中均取 $R' = 6.5\text{cm}$, $R = 3.8\text{cm}$, $l = 0.238\text{cm}$ 。

从表中数据可以知道, θ_i 的前后差值随 T 和 G 的升高而增大。在通常的淀积温度 ($\sim 650^{\circ}\text{C}$) 和前后温差 ($< 40^{\circ}\text{C}$) 下, 把面积修正因子 θ_i 近似作为常数, 将不会引起太大的误差。这个近似给我们的计算带来了方便: 在计算片间淀积速率分布时, 可以避免直接计算表示繁琐、计算费时的有效面积 S'_i , 而仅需以一小于 1 的常数因子乘上衬底的面积 ($2\pi R^2$) 来代替由于片内不均匀而引起的面积修正结果。

(2) 计算结果表明, 片内和片间的淀积速率分布是相互关联、互相影响的: 主气流区的浓度分布决定了扩散-迁移区边界处的浓度数值; 片内淀积速率的分布又直接决定了主气流区硅烷消耗量的大小。同一维计算结果相比较, 相同条件下, 由于考虑片内不均匀性, 气流上游的硅烷消耗量没有一维模拟中假设均匀时那么大, 从而使气流下游处的硅烷浓度比一维中的高

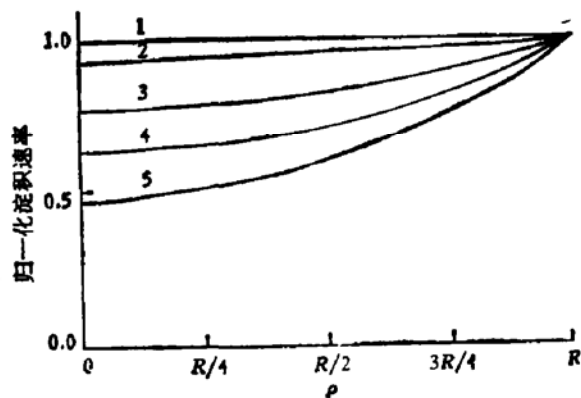


图 9 $K \cdot P/h$ 值对片内均匀性的影响

图中, 1— $\frac{K \cdot P}{h} = 8.51 \times 10^{-3}/\text{cm}$,

2— $\frac{K \cdot P}{h} = 3.05 \times 10^{-1}/\text{cm}$,

3— $\frac{K \cdot P}{h} = 1.10/\text{cm}$,

4— $\frac{K \cdot P}{h} = 1.98/\text{cm}$,

5— $\frac{K \cdot P}{h} = 3.47/\text{cm}$

些。也就是说,当温度梯度为零时,片间淀积速率分布比一维模拟的计算结果平坦些。

(3) 通过计算我们知道,比值 $K_i \cdot P_i/h_i$ 的大小决定了片内均匀性。 $K_i \cdot P_i/h_i$ (简写作 $K \cdot P/h$) 越大,越不均匀;反之,越均匀。图 9 是不同 $K \cdot P/h$ 值时的计算结果比较。

由此我们可以解释压力和温度对片内均匀性的影响[图 5(b)和图 6(b)]。 $K \cdot P/h$ 值随压力 P 升高而单调上升,故有图 5(b) 所示的结果; h 虽然也是随温度 T 上升的函数,但 K 随 T 的变化更为显著,故温度升高, $K \cdot P/h$ 增大,片内变得不均匀。

(4) 虽然我们仅对硅烷热分解淀积多晶硅的反应作了理论算式的推导和计算。但这个方法并不局限于类似这个反应的一级反应,它也能用来解决具有其它反应级数的淀积反应,即通过数值解的方法决定片内淀积速率分布情况^[2],使三维模拟计算能够进行下去。

另外,上述计算所给出的规律性的结果具有一定的普适性,对其它淀积反应也同样具有指导作用。

4. 实验结果

在三维 LPCVD 计算机模拟计算的指导下,我们在研制 $\phi 75$ 硅片的 LPCVD 工艺与设备中取得了均匀性很好的结果。表 2 列出了我们淀积的氮化硅膜片间均匀性和批间重复性的结果。相应地,片内均匀性 $\leq \pm 0.9\%$ (折射率 $n = 1.98$)。

表 2 片间和炉间均匀性(厚度单位: Å)

炉次 厚度 片位	<3>	<4>	<5>	炉间均匀性
6	1308	1358	1238*	$\pm 1.9\%$
11	1308	1348	1308	$\pm 1.5\%$
16	1308	1348	1308	$\pm 1.5\%$
26	1328	1378	1308	$\pm 2.6\%$
36	1338	1358	1318	$\pm 1.5\%$
46	1338	1328	1318	$\pm 0.8\%$
56	1358	1348	1308	$\pm 1.9\%$
61	1338	1348	1318	$\pm 1.1\%$
66	1358	1348	1298	$\pm 2.3\%$
71	1358	1348	1288	$\pm 2.6\%$
片间均匀性	$\pm 1.9\%$	$\pm 1.8\%$	$\pm 1.2\%$	

* 片子是倒片,计算均匀性时没有考虑这一片。

四、结 论

经过三维 LPCVD 计算机模拟计算,可以得到如下结论:

1. 改善片间均匀性,可以通过降低系统总压力,或者加大气体总流量,或使淀积区有

一个平滑而尾部略高的温区;

2. 改善片内均匀性, 则可以通过降低系统总压力, 或适当加大片间距, 并且注意反应管半径和硅衬底片半径之间的合理搭配。另外, 还应适当降低淀积温度。

总之, 既要得到片内和片间均匀性良好的薄膜, 又要达到一定的生产效率、收到较好的经济效益, 就必须协同考虑各种工艺条件和设备的几何参数, 以达最佳效果。

参 考 文 献

- [1] 王季陶, 中国科学, A辑, 第一期, 89(1983).
- [2] H. Huppertz and W. L. Engl, *IEEE, Trans. on Electron Devices*, ED-26, 658 (1979).
- [3] J.-P. Charlier, *IEEE, Trans. on Electron Devices*, ED-28, 501 (1981).
- [4] A. E. T. Kuiper, et al., *J. Electrochem. Soc.*, 129, 2288 (1982).
- [5] M. L. Hitchman, et al., *Thin Solid Films*, 59, 231 (1979).
- [6] M. L. Hitchman, and J. Kane, *J. Crystal Growth*, 55, 485 (1981).
- [7] 王季陶, 半导体学报, 1, 6(1980); 自然杂志, 3, 316(1980).
- [8] R. J. Gieske, et al., *Proceedings of Sixth International Conference, The Electrochem. Soc. Inc., U. S. A* (1977), p. 183.
- [9] F. Hottier and R. Cadoret, *J. Crystal Growth*, 61, 245 (1983).
- [10] R. S. Rosler, *Solid State Technology*, 20, 63 (1977).

Three Dimensional Computer Simulation of Low Pressure Chemical Vapor Deposition

Wang Jitao, Zhang Shili, Wang Huangjie and Lian Meihua
(Fudan University)

Abstract

Based on one-dimensional LPCVD computer simulation formulae reported previously, three-dimensional LPCVD computer simulation formula is reported so as to calculate within-wafer and wafer-to-wafer uniformity simultaneously. In form, this new simulation formula can be divided into two parts: the solution in the part of within-wafer uniformity can be obtained by solving a diffusion-transference problem, while the part of wafer-to-wafer uniformity can be simulated just by one-dimensional LPCVD computer simulation formulae in which only the deposition areas are modified. Success has been achieved in the research of LPCVD equipment and technology by using this three-dimensional LPCVD computer simulation.