

ДОСЛІДЖЕННЯ ЛОКАЛЬНОЇ БУДОВИ НАНОРОЗМІРНОЇ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ Si(111)/Si₃N₄(0001) НА ПІДСТАВІ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

О.Ю. Тарасова, Р.М. Балабай

*Криворізький державний педагогічний університет
Україна*

Надійшла до редакції 10.12.2011

Багатошарові напівпровідникові структури, наприклад двошарова структура Si(111)/Si₃N₄(0001), представляють собою неоднорідні тіла як по перерізу, так і по площі. Внаслідок цього в наноелектронних виробках у процесі виготовлення виникають пружні механічні напруження, величина і характер розподілу яких значно впливають на електричні та інші характеристики приладів. Тому при виготовленні інтегральних схем важливим є знання величини і характеру розподілу механічних напружень у залежності від топологічних параметрів зразка. Результатами моделювання оцінена можливість існування різкої бездефектної границі Si(111)/Si₃N₄(0001) для шарів розмірами порядку 2 нм. Розрахована карта механічних напружень в гетеропереході з боку шару Si₃N₄(0001), на основі якої визначено, що напруження мають розтягуючий характер і їх максимум приходить на границю розділу.

Ключові слова: багатошарові напівпровідникові структури, пружні механічні напруження, бездефектна границя, гетеропереходи, наноелектронні вироби.

Многослойные полупроводниковые структуры, например двухслойная структура Si(111)/Si₃N₄(0001), представляют собой неоднородные тела, как по сечению, так и по площади. Вследствие этого в нанoeлектронных изделиях в процессе изготовления возникают упругие механические напряжения, величина и характер распределения которых значительно влияют на электрические и другие характеристики приборов. Поэтому при изготовлении интегральных схем важным есть знания величины и характера распределения механических напряжений в зависимости от топологических параметров образца. Результатами моделирования оценена возможность существования резкой бездефектной границы Si(111)/Si₃N₄(0001) для слоев размерами порядка 2 нм. Рассчитана карта механических напряжений в гетеропереходе со стороны слоя Si₃N₄(0001), на основе которой определено, что напряжения имеют растягивающий характер и их максимум приходится на границу раздела.

Ключевые слова: многослойные полупроводниковые структуры, упругие механические напряжения, бездефектная граница, гетеропереходы, нанoeлектронные изделия.

Multi-layered semiconductor structures, for example double-layer structure of Si(111)/Si₃N₄(0001), are heterogeneous bodies, both on a section and on an area. Hereupon in nanoelectronic wares in the process of making there are resilient mechanical tensions, a size and character of distribution of which considerably influence on electric and other descriptions of devices. Therefore at making of the integrated circuits it is important the knowledge of size and character of distribution of mechanical tensions depending on the topological parameters of standard. Design results are appraised possibility of existence of the sharp defect-free interface Si(111)/Si₃N₄(0001) for layers by sizes about 2 nm. Map of mechanical tensions in a heterotransition from the side of the Si₃N₄(0001), layer was calculated on the base of this map it was determined, tensions have stretching character and their maximum is on the border of division.

Keywords: multi-layered semiconductor structures, resilient mechanical tensions, defect-free interface, heterotransitions, nanoelectronic wares.

Формування високоякісного тонкого Si₃N₄ на підкладці Si в даний час є дуже важливим для мікроелектроніки. Підвищеному інтересу до гетероструктури Si/Si₃N₄ сприяє стійкість нітриду кремнію до сильних електричних полів і до високих температур, а також його хіміч-

на стабільність. Фізичні і хімічні властивості плівок нітриду кремнію великою мірою визначаються структурою поверхні і границею розділу зразка, що в свою чергу впливає на експлуатаційні показники електронних пристроїв.

Проведений розрахунок механічних напруг двошарової структури Si(111)/Si₃N₄(0001) із товщинами шарів близько 2 нм. При створенні моделі гетеросистеми Si(111)/Si₃N₄(0001) ми розробили оригінальну методику розрахунку координат атомів для кристалічного Si з орієнтацією поверхні (111) для комп'ютерного використання.

Решітка кремнію в напрямі (211) має кубічну трьохшарову упаковку ...ABCABC... (AB = BC = AC = 0,728 Å), яка в напрямку (111) створює періодичність ...A*B*C*A*B*C... (A₁*B₁* = B₁*C₁* = C₁*A₁* = 2,059 Å) гофрованих, тобто розщеплених на два підшари (A₁*A₂* = B₁*B₂* = C₁*C₂* = 0,515 Å) шарів, які зміщені відносно один одного в напрямку [211] на величину AB = BC = CA = 1,43 Å. В проекції на площину (111) атоми шарів А, В, і С утворюють правильні шестикутники. Враховуючи цю геометрію раціонально для виконання прямих розрахунків розташувати вісі координат X, Y, Z паралельно напрямкам (011), (211) і (111) відповідно (рис. 1, 2).

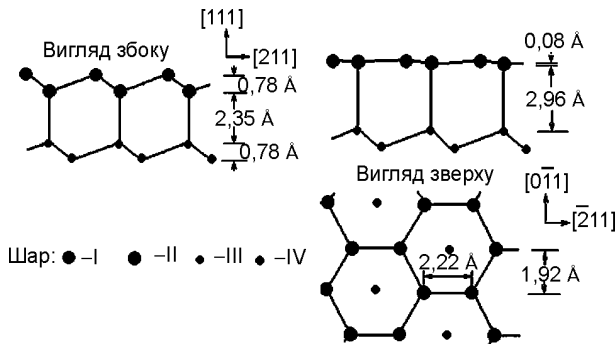


Рис. 1. Схема решітки Si для розрахунку координат атомів базису в елементарній комірці кристалічного Si з орієнтацією поверхні (111).

Міжатомну взаємодію в розрахунках описували потенціалом Терсоффа [1], загальний вигляд якого:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad (1)$$

де V_{ij} – узагальнені потенціали Морзе.

Взаємодія між атомами i та j , елементів I та J відповідно, описується явною функцією, що залежить лише від відстані r_{ij} між ними

$$V_{ij} = f_{ij}^{IJ} \left[A_{IJ} e^{-\lambda_{IJ} r_{ij}} - b_{ij}^{IJ} B_{IJ} e^{-\mu_{IJ} r_{ij}} \right], \quad (2)$$

де функція f_{ij}^{IJ} визначається радіусом обрізання:

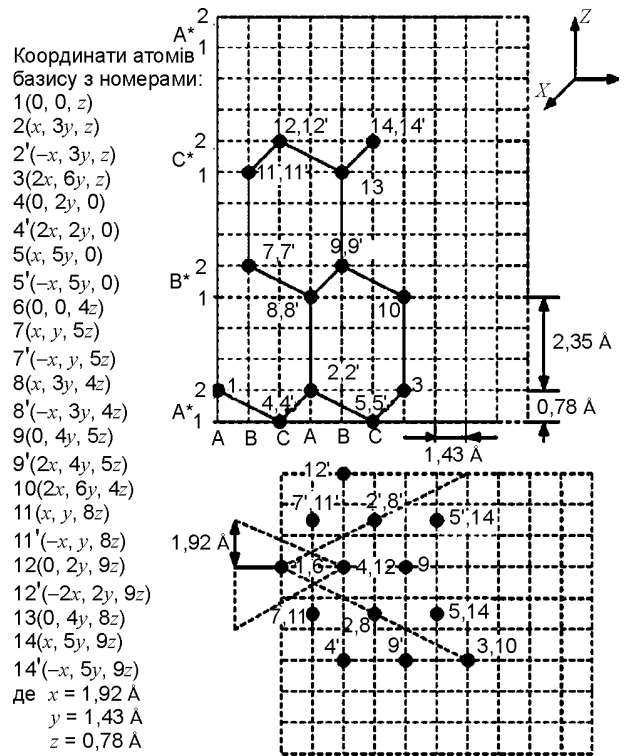


Рис. 2. Методика розрахунку координат атомів атомного базису в елементарній комірці кристалічного Si з орієнтацією поверхні (111) для комп'ютерного використання: кількість атомів атомному базису – 23, вектори елементарної трансляції мають розміри: $A_x = 7,68 \text{ Å}$, $A_y = 8,58 \text{ Å}$, $A_z = 9,36 \text{ Å}$.

$$f_{ij}^{IJ} = \begin{cases} 1, & r_{ij} \leq R_{IJ} \\ \frac{1}{2} [1 + \cos(\pi \frac{r_{ij} - R_{IJ}}{S_{IJ} - R_{IJ}})], & R_{IJ} < r_{ij} \leq S_{IJ} \\ 0, & S_{IJ} < r_{ij} \end{cases}, \quad (3)$$

де R_{IJ} та S_{IJ} – радіуси обрізання.

Коефіцієнти A_{IJ} та B_{IJ} , обернені довжини затухання λ_{IJ} та μ_{IJ} , відстані обрізання R_{IJ} та S_{IJ} залежать тільки від типу двох взаємодіючих атомів. Якщо два елементи однакові, використовують один індекс, наприклад $A_{II} = A_{II}$. Для комбінованих систем використовуються вирази:

$$A_{IJ} = (A_I A_J)^{1/2}, B_{IJ} = (B_I B_J)^{1/2}, \\ R_{IJ} = (R_I R_J)^{1/2}, S_{IJ} = (S_I S_J)^{1/2} \quad (4)$$

і для обернених довжин затухання:

$$\lambda_{IJ} = \frac{\lambda_I + \lambda_J}{2}, \mu_{IJ} = \frac{\mu_I + \mu_J}{2}. \quad (5)$$

Головною особливістю потенціалу Терсоффа є присутність члену b_{ij}^{IJ} . Сила зв'язку залежить від локального оточення і змен-

шується тоді, коли кількість сусідів достатньо велика. Така поведінка характеру зв'язку визначається членом b_{ij}^{IJ} , котрий збільшує або зменшує відношення сили притягання до сили відштовхування згідно наступної функціональної форми:

$$b_{ij}^{IJ} = X_{IJ} \left[1 + (\beta_I \xi_{ij}^{IJ})^{n_I} \right]^{-1/2n_I} \quad (6)$$

де

$$\xi_{ij}^{IJ} = \sum_{k \neq i, j} f_{ik}^{IK} e_{ijk}^{IJK} t_{ijk}^I \quad (7)$$

– відображає ефективне координаційне число атома i , тобто число найближчих сусідів, що визначається шляхом врахування відносної відстані між двома сусідами $r_{ij} - r_{ik}$ і кута зв'язку θ_{ijk} .

Член

$$t_{ijk}^I = 1 + \frac{C_I^2}{d_I^2} - \frac{C_I^2}{d_I^2 + [h_I - \cos(\theta_{ijk})]^2} \quad (8)$$

характеризує залежність координаційного числа від кута зв'язку θ_{ijk} між атомами i та k навколо атома j . Параметр d визначає, наскільки швидко змінюється функція $t_{ijk}^I(\theta_{ijk})$, C_I – задає характер зміни сили в залежності від кута θ_{ijk} .

Член

$$e_{ijk} = \exp[(\mu_I r_{ij} - \mu_I K r_{ij})^{m_I}] \quad (9)$$

містить додатковий параметр m_I , для елементів, відмінних від кремнію $m_I = 1$. Для кремнію $m_I = 3$.

Досліджуваний об'єм заповнювали атомами в позиціях близьких до ідеальних кристалічних і у шарі нітриду і у шарі кремнію. У зв'язку з тим, що невідповідність параметрів решіток для Si(111) і Si₃N₄(0001) складає 1,1%, стартова атомна конфігурація була сконструйована без механічних напружень, тобто шари були просто “під'єднанні” один до одного.

Рівноважна атомна конфігурація знаходилась шляхом застосування до моделі процедури Монте-Карло, при зниженні температури від 1000 К до 300 К.

Загальний алгоритм застосування методу Монте-Карло наступний:

1. Задати початкову конфігурацію.
2. Генерувати нову конфігурацію.
3. Обчислити зміну енергії δH .

4. При $\delta H \leq 0$ прийняти нову конфігурацію і повернутись до кроку 2.
5. Обчислити $\exp[-\delta H/k_B T]$.
6. Генерувати випадкове число $R \in [0; 1]$.
7. Якщо $R < \exp[-\delta H/k_B T]$, прийняти нову конфігурацію і перейти до кроку 2.

Схема алгоритму приведена на рис. 3.

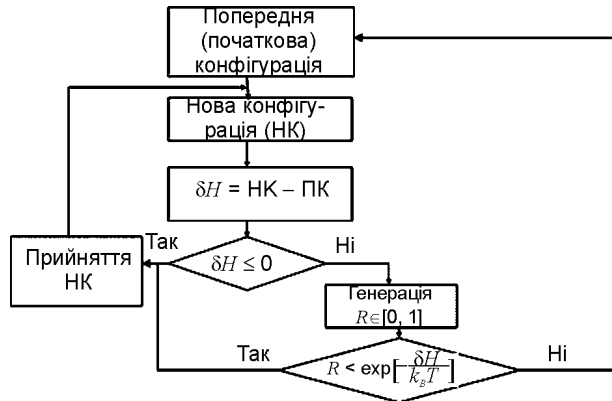


Рис. 3. Схема застосування алгоритму Монте-Карло.

Через кожні 50 К виконувалося 1000 зсувів атомної системи. При цьому амплітуда зсувів залежала від температури.

Просторова картина розміщення атомів демонструє неперервний (без обривів зв'язків) перехід зв'язків атомів в шарах Si(111) через границю розділу до зв'язків в шарах Si₃N₄(0001) (рис. 4).

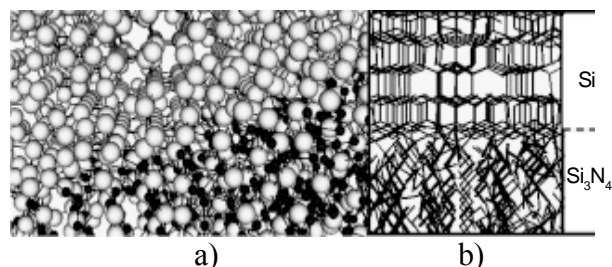


Рис. 4. Просторова картина: (а) розміщення атомів із наведенням зв'язків між ними у Si(111)/Si₃N₄(0001); (б) розміщення зв'язків між атомами у Si(111)/Si₃N₄(0001).

Останній факт підтверджується дослідженням [2], автори якого виконали розрахунки механічних напруг атомної структури Si(111)/Si₃N₄(0001) методом молекулярної динаміки. В результаті їх моделювання концентрація напруги спостерігалась поблизу границі і на границях мезообласть/підкладка. Неузгодженість решіток (1,1 %) на границі Si(111)/Si₃N₄(0001) проявилась у підвищенні напруги в центрі мезообласті, а не у її знятті за рахунок обривання напружених зв'язків.

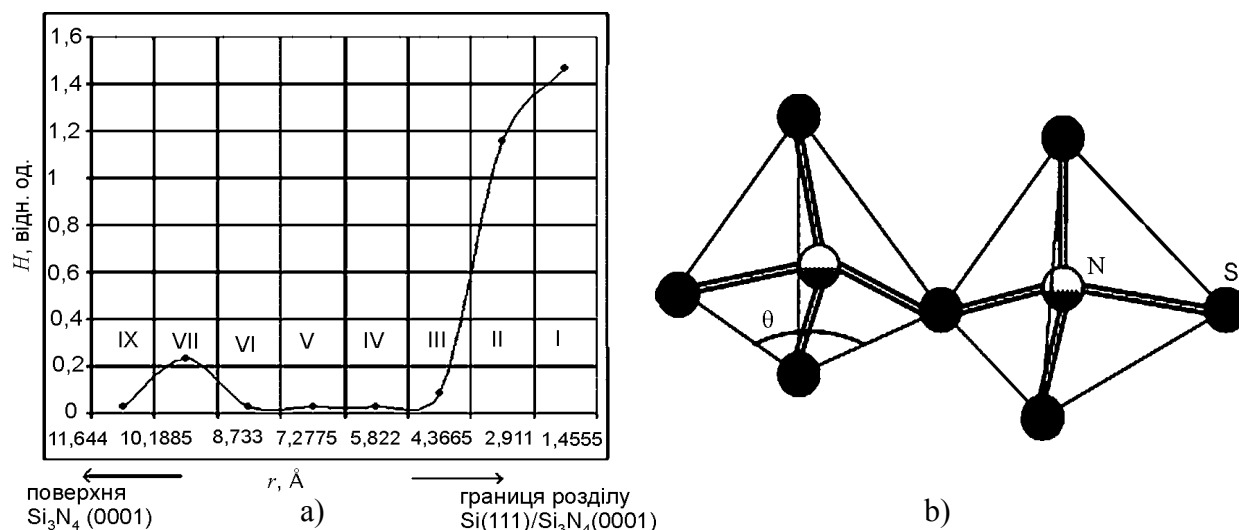


Рис. 5. Карта механічних напружень в $\text{Si}_3\text{N}_4(0001)$ (а) (вважається, що величина механічних напружень прямо пропорційна величині кута θ_e між сторонами основи в тетраедрах зв'язків (б)): r – відстань від поверхні розділу $\text{Si}(111)/\text{Si}_3\text{N}_4(0001)$; $H = (\theta_i - \theta_e)/\theta_i$ – відносне відхилення кута θ_e між сторонами основи в тетраедрах зв'язків до кута θ_i в тій самій позиції в ідеальному кристалі Si_3N_4 .

Автори [3] пов'язують виникнення механічних напруг у структурі $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4$ із різними коефіцієнтами теплового розширення кремнієвої підкладки і тонкої плівки Si_3N_4 .

Аналізуючи розподіли кутів між сторонами основи в тетраедрах зв'язків атомів N із атомами Si (рис. 5b) на різних відстанях від границі розділу $\text{Si}(111)/\text{Si}_3\text{N}_4(0001)$ нами зроблений висновок про наявність механічного напруження в шарах Si_3N_4 , яке має характер розтягування, і найбільш сконцентроване на границі розділу.

Під час оцінювання величини механічного напруження ми вважали, що величина механічного напруження прямо пропорційна величині кута θ_e між сторонами основи в тетраедрах зв'язків. Видно, що вже на третьому атомному шарі від границі розділу, кут приймає значення характерне для масивного кристалу (рис. 5a).

Розрахунки [4] свідчать, що механічні напруги, що виникають в тонкій плівці Si_3N_4 пропорційні її товщині і температурі осадження, що узгоджується із експериментальними даними [5]. В дослідженнях [5] експериментально підтверджено, що величина прогину плівок (що відповідає величині пружних механічних напруг у них) пропорційна товщині плівки і температурі осадження і обернено пропорційна товщині підкладки.

ЛІТЕРАТУРА

1. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems//Phys. Rev. – 1989. – Vol. B39, No. 8. – P. 5566-5568.
2. Bachlechner M.E., Srivastava D., Owens E.T. et. al. Mechanisms of pit formation at strained crystalline $\text{Si}(111)/\text{Si}_3\text{N}_4(0001)$ interfaces: Molecular-dynamics simulations//Physical Review B. – 2006. – Vol. 74. – P. 075327.
3. Keršys T., Anilionis R., Eidukas D. Simulation of Stress Distribution in the Silicon Substrate// Electronics and electrical engineering. Microelectronics. – 2007. – Т. 171, № 4 (76). – P. 3-8.
4. Касимов Ф.Д., Лютфелибекова А.Е. Расчет упругих механических напряжений в неоднородных полупроводниковых структурах// Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2002. – № 2. – С. 13-14.
5. Колешко В.М., Ковалевский А.А. Поликристаллические пленки полупроводников в микроэлектронике. – Минск: Наука и техника, 1978. – 344 с.

LITERATURA

1. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems //Phys. Rev. – 1989. – Vol. B39, No. 8. – P. 5566-5568.
2. Bachlechner M.E., Srivastava D., Owens E.T. et. al. Mechanisms of pit formation at strained crystalline $\text{Si}(111)/\text{Si}_3\text{N}_4(0001)$ interfaces: Molecular-dynamics simulations//Physical Review B. – 2006. – Vol. 74. – P. 075327.

3. Keršys T., Anilionis R., Eidukas D. Simulation of Stress Distribution in the Silicon Substrate// Electronics and electrical engineering. Microelectronics. – 2007. – Т. 171, № 4 (76). – P. 3-8.
4. Kasimov F.D., Lyutfelibekova A.E. Raschet uprugih mehanicheskikh napryazhenij v neodnorodnyh poluprovodnikovyh strukturah//Tehnologiya i konstruirovanie v elektronnoj apparature. – 2002. – № 2. – S. 13-14.
5. Koleshko V.M., Kovalevskij A.A. Polikristallicheskie plenki poluprovodnikov v mikroelektronike. – Minsk: Nauka i tehnika, 1978. – 344 s.