

## Prozeßsimulation der Diffusion in dünnen polykristallinen Schichten

---

H.-D. Langer, A. Fröhlich  
TU Karl-Marx-Stadt

### Einführung

Die Zusammenführung der Tantal-Technologie mit der Silizium-Planartechnologie (STIC-Silicon Tantalum Integrated Circuits) erfordert die Weiterentwicklung der Beschichtungsverfahren und die genaue Kenntnis der zulässigen Prozeßtemperaturen. Es wurden folgende Schichtsysteme untersucht (geordnet nach steigender Prozeßtemperatur):

- anodisches  $Ta_2O_5$  auf Ta/Si ( $85^\circ C$ , 0,1 %ige  $H_3PO_4$  /1/, /2/)
- gesputterte Ta-Schichten auf Si und  $SiO_2/Si$   
(Planarplasmatron<sup>1)</sup>,  $Tu_{Su}-250^\circ C$  /3/)
- thermisches  $Ta_2O_5$  auf Si und Ta/Si  
( $500^\circ C$  /4/)
- CVD-Ta-Schichten auf Si  
( $700^\circ C$ , Normaldruck /5/)
- CVD- $Ta_2O_5$ -Schichten auf Si und Ta/Si  
( $900^\circ \dots 1100^\circ C$ , Normaldruck /6/)

### Ergebnis:

Bei der Abscheidung von Ta- bzw.  $Ta_2O_5$ -Schichten auf Si-Substraten kommt es zur Diffusionsreaktion Schicht/Substrat, die bei erhöhter Temperatur die gesamte Schicht erfaßt. Man stellt erhebliche Änderungen der Schichteigenschaften fest, insbesondere wurden eine drastische Abnahme der Isolations-

---

<sup>1)</sup>Eigenbauanlage

festigkeit (s. Bild 1) und Zunahme des Brechungsindex von HT-CVD-Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (im Vergleich z. B. zu anodischem Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) ermittelt. Damit ist die Eignung als Gate- bzw. Feldoxid, Kondensator-dielektrikum, Kreuzungs- bzw. Abdeckisolator in Frage gestellt.

Der auffälligste Unterschied zu üblicherweise eingesetzten amorphen SiO<sub>2</sub>- bzw. Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-Schichten ist die Polykristallinität des HT-CVD-Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (s. Bild 2). Gesputterte Ta-Schichten sind ebenfalls polykristallin (Bild 3). Charakteristisch ist in beiden Fällen die Säulenstruktur des Gefüges.

Aus Auger-Untersuchungen folgt:

- deutliche Verbreiterung der Grenzschicht Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/Si
- Anwesenheit des Si im gesamten Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-Querschnitt
- Si-Nachweis an der Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-Oberfläche.

Als repräsentatives Beispiel zeigt Bild 4 ein Auger-Tiefenprofil einer bei ca. 700°C auf eine Poly-Si-Schicht abgeschiedenen CVD-Tantalschicht. (Die auf Null absinkende Sauerstoffkonzentration markiert die Ta-Si-Grenzfläche.)

### Schlußfolgerung:

Obgleich eine Volumendiffusion des Si im Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (bzw. im Ta) sehr wahrscheinlich ist, wird als Hauptursache für die beobachteten Phänomene eine Korngrenzendiffusion (Kurzschlußdiffusion) des Si im poly-Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (bzw. im poly-Ta) angenommen.

Um eine höhere Aussagekraft im Detail zu erlangen, wird die theoretische Prozeßanalyse herangezogen.

Dabei wird davon ausgegangen, daß die Simulation der Korngrenzendiffusion in Dünnschichtsystemen von prinzipiellem Interesse ist.

Man hat grundsätzliche Modelle zu unterscheiden, z. B.

- a) Diffusion durch eine Schicht konstanter Dicke  
(Diffusionssystem mit fester Grenze, z. B. Tempern von Ta auf Si)

- b) Diffusion mit bewegtem Schichttrand  
(Diffusionssystem mit bewegter Grenze, z. B. Aufwachsen von  $Ta_2O_5$  auf Si).

### Prozeßmodelle

Die Volumendiffusion in der Schicht wird gegenüber der Korn-  
grenzendiffusion vernachlässigt. Es wird eine Oberflächensegre-  
gation (Ausbildung einer Oberflächenschicht durch Oberflä-  
chendiffusion) des Diffusanten zugelassen.

Das Schichtmodell wird dahingehend vereinfacht, daß Körner kon-  
stanter Abmessung mit senkrecht zur Substratebene bis zur  
Schichtoberfläche durchgehenden Korngrenzen angenommen werden.  
Damit ergibt sich die in Bild 5 dargestellte schematische  
Schichtstruktur. Die gewählte Lage des Koordinatensystems ist  
daraus ebenfalls zu ersehen. Aus Symmetriegründen hat das  
2D-Simulationsmodell somit nur das durch  $(l + w_g) \cdot (b + w_b)$   
aufgespannte Gebiet zu berücksichtigen. Dies erfordert eine  
Zusatzbedingung, wonach der Teilchenstrom in der Oberflächen-  
schicht in der Mitte zwischen zwei benachbarten Korngrenzen zu  
verschwinden hat.

Es wird an dieser Stelle auf die mathematischen Ausdrücke ver-  
zichtet. Sie berücksichtigen folgende Beziehungen und Be-  
dingungen:

- Korngrenzendiffusion im Bereich  $-l < y < 0$
- Oberflächendiffusion im Bereich  $0 < x < b$
- Anfangsbedingung: verschwindende Diffusantenkonzentrationen  
in der Korngrenze und an der Oberfläche zum Zeitpunkt  $t = 0$
- Segregation des Diffusanten beim Übergang Korngrenze/Ober-  
fläche
- Quellenfreiheit des Teilchenstromes an diesem Übergang  
(Punkt  $x = y = 0$ )
- Diffusion aus konstanter Quelle (Segregationsbedingung  
Substrat/Korngrenzeneingang.)

Die beiden gewählten Prozeßmodelle unterscheiden sich quantitativ wie folgt:

- a) Diffusionssystem mit fester Grenze. Es gilt  $l = \text{konstant}$ .
- b) Diffusionssystem mit bewegter Grenze

Die Teilchenstromdichte (2. Ficksches Gesetz) ist durch den scheinbaren Teilchenstrom infolge der Bewegung des Koordinatensystems in  $y$ -Richtung zu erweitern.

Ferner gilt bei gegebener Schichtwachstumsgeschwindigkeit  $v$  die Beziehung  $l = v \cdot t$ , d. h., die Quelle entfernt sich vom Koordinatensprung mit der Geschwindigkeit  $-v$ .

Ohne auf den Rechenweg zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen mit Anfangs- und Randbedingungen hier eingehen zu wollen, sei bemerkt, daß eine quantitative Auswertung u. a. von der Verfügbarkeit der konkreten Stoffparameter (z. B. Korngrenzendiffusions-, Oberflächendiffusions-, Segregationskoeffizient) abhängt.

#### Literatur

- /1/ V. Köhler           Dissertation A, TH Karl-Marx-Stadt (1985)
- /2/ B. Hannemann,     im vorliegenden Berichtsband  
H.-D. Langer
- /3/ U. Bröhl,           Vortr. "Ergebnisse des Einsatzes verschie-  
H.-D. Langer         dener Zerstäubungsverfahren von Tantal"  
Probleme-seminar Passive Bauelemente,  
TH Karl-Marx-Stadt (1985)
- /4/ H. Kremp           Diplomarbeit, TH Karl-Marx-Stadt (1984 )
- /5/ E. Erben           unveröffentlichte Ergebnisse
- /6/ E. Hänel,           im Berichtsband zur 3. Fachtagung Kondens-  
(jetzt E. Erben)     satoren, Karl-Marx-Stadt (1985)  
H. Cebulla,  
H.-D. Langer
- /7/ Präparation und Aufnahme: E. Erben, TH Karl-Marx-Stadt
- /8/ Präparation:       U. Bröhl, TH Karl-Marx-Stadt;  
Aufnahme         : H. Podlesak, VEB Elektronische Bauelemente  
Teltow
- /9/ Präparation:       E. Erben, TH Karl-Marx-Stadt;  
Aufnahme         : H. Albrecht, VEB ZFTM Dresden

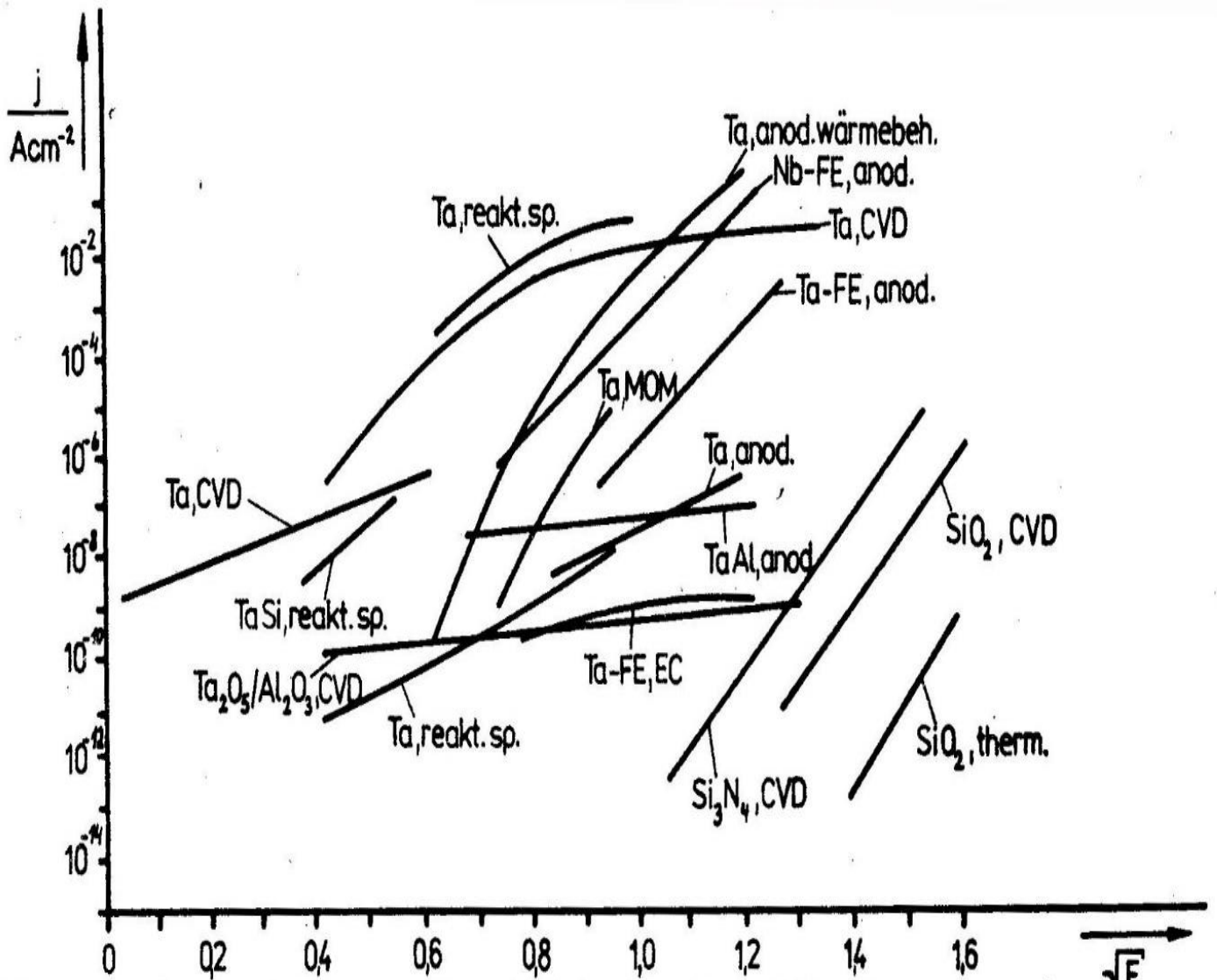
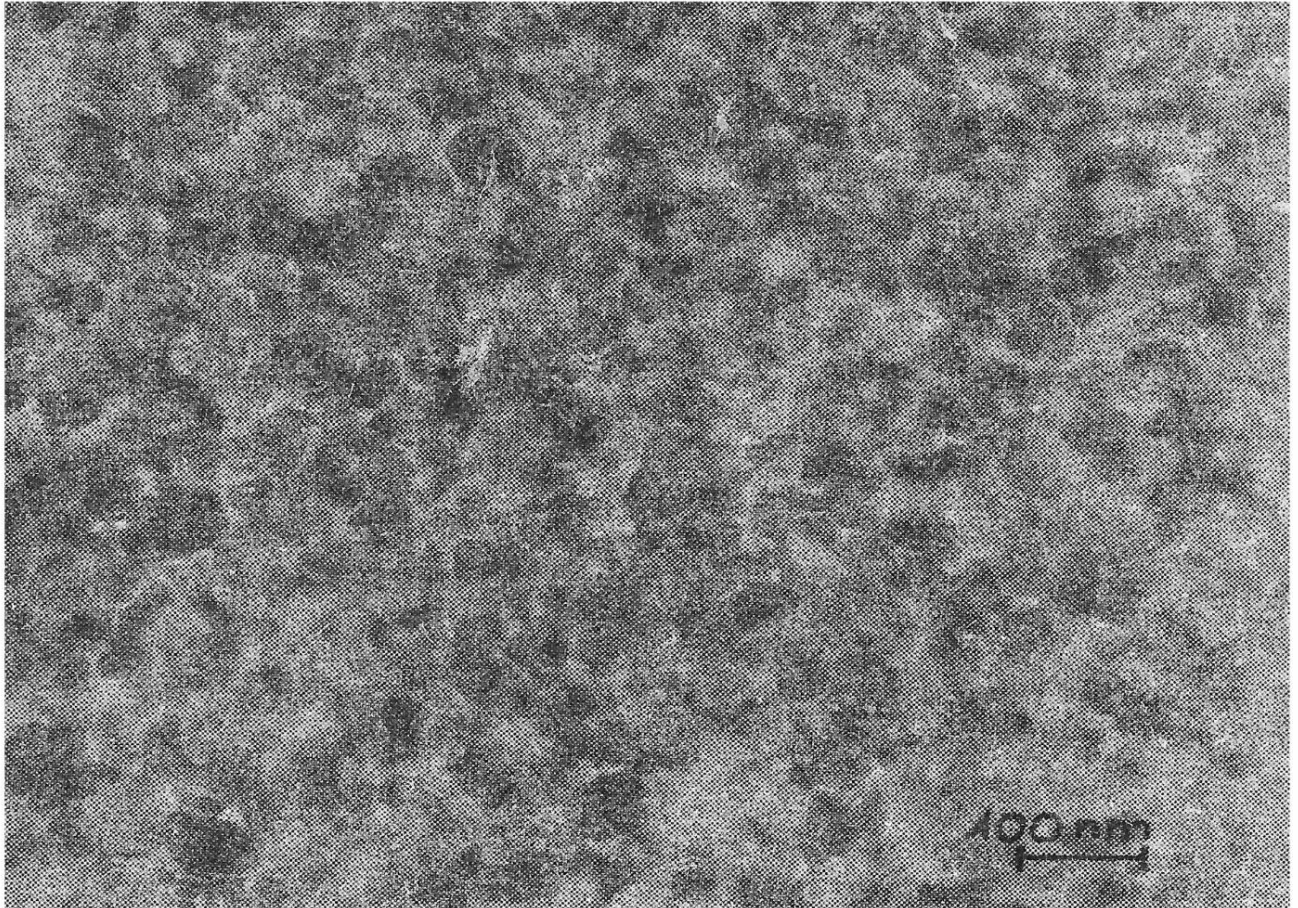
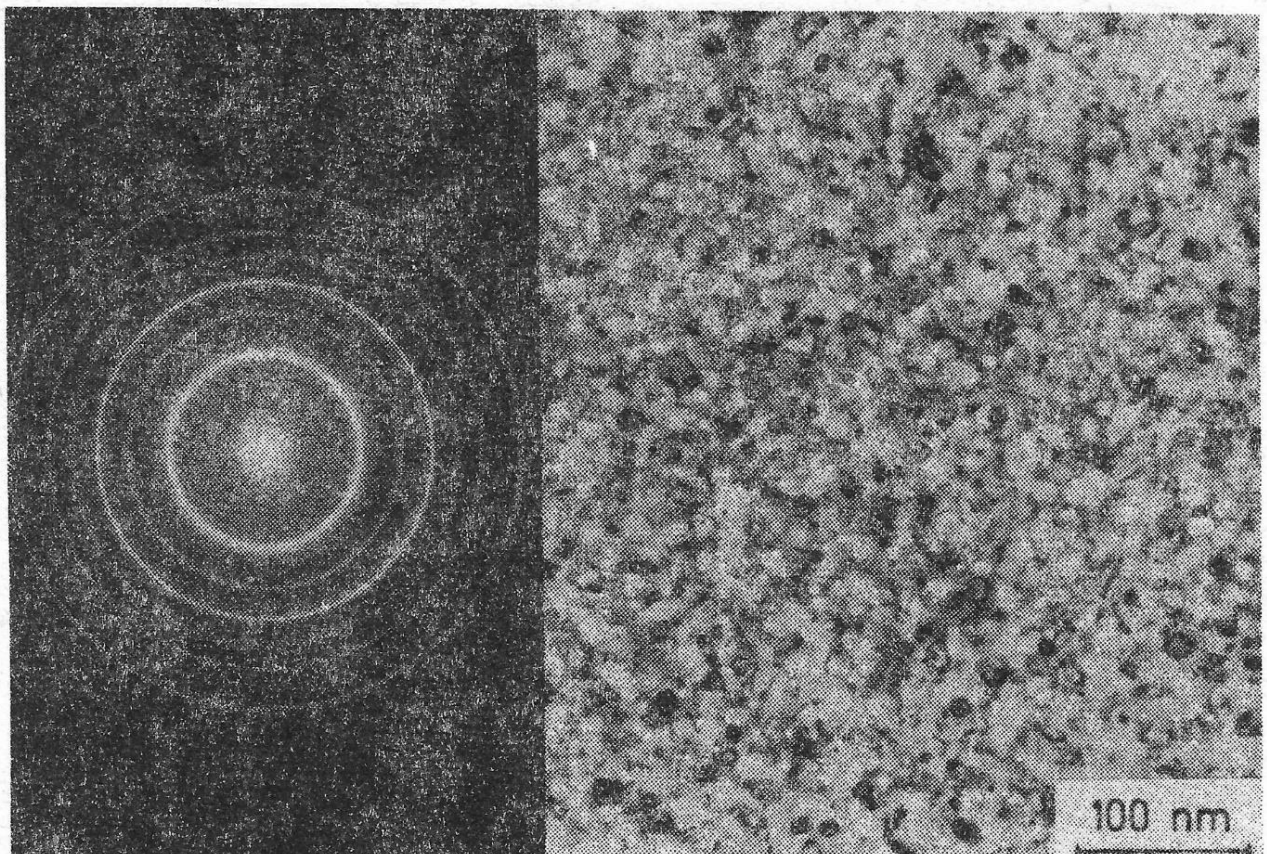


Bild 1:  $j$ -  $E$ -Charakteristiken von Dünnechichtkondensatoren (Literaturangaben und unterstrichen-eigene Ergebnisse);  $j$  Stromdichte bei gegebener Feldstärke  $\sqrt{E}$ ; die weiteren Angaben haben folgende Bedeutung: Ta(bzw.Nb) - Ta(bzw.Nb) als Grundlektrode, Ta205 (bzw.Nb205) als Dielektrikum, Metall (bzw.FE,d.h.MnO2-Festelektrolyt) als Deckelektrode; TaAl - binäre metallische Grundlektrode; TaSi - (Ta, Si)-Oxid, reaktiv gesputtert, als Dielektrikum; Ta,MOM - Ta/Ta205/Al-Struktur; Ta-FE,EC - Ta/anod.Ta205/elektrochem.MnO2-Struktur; Ta,CVD - Si/CVD-Ta205/Al-Struktur; Ta205/Al203,CVD - Si/CVD-Ta205/CVD-Al203/Al-Struktur

Zum Vergleich sind Bestwerte aus der Literatur für monolithisch gebräuchliche Isolatorschichten (SiO2, Si3N4) angegeben.



**Bild 2: TEM-Aufnahme von einer Hochtemperatur-CVD-Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-Schicht /7/**



**Bild 3: TEM-Aufnahme (Beugungs- und Hellfeldaufnahme) einer auf NaCl gesputterten Ta-Schicht /8/**

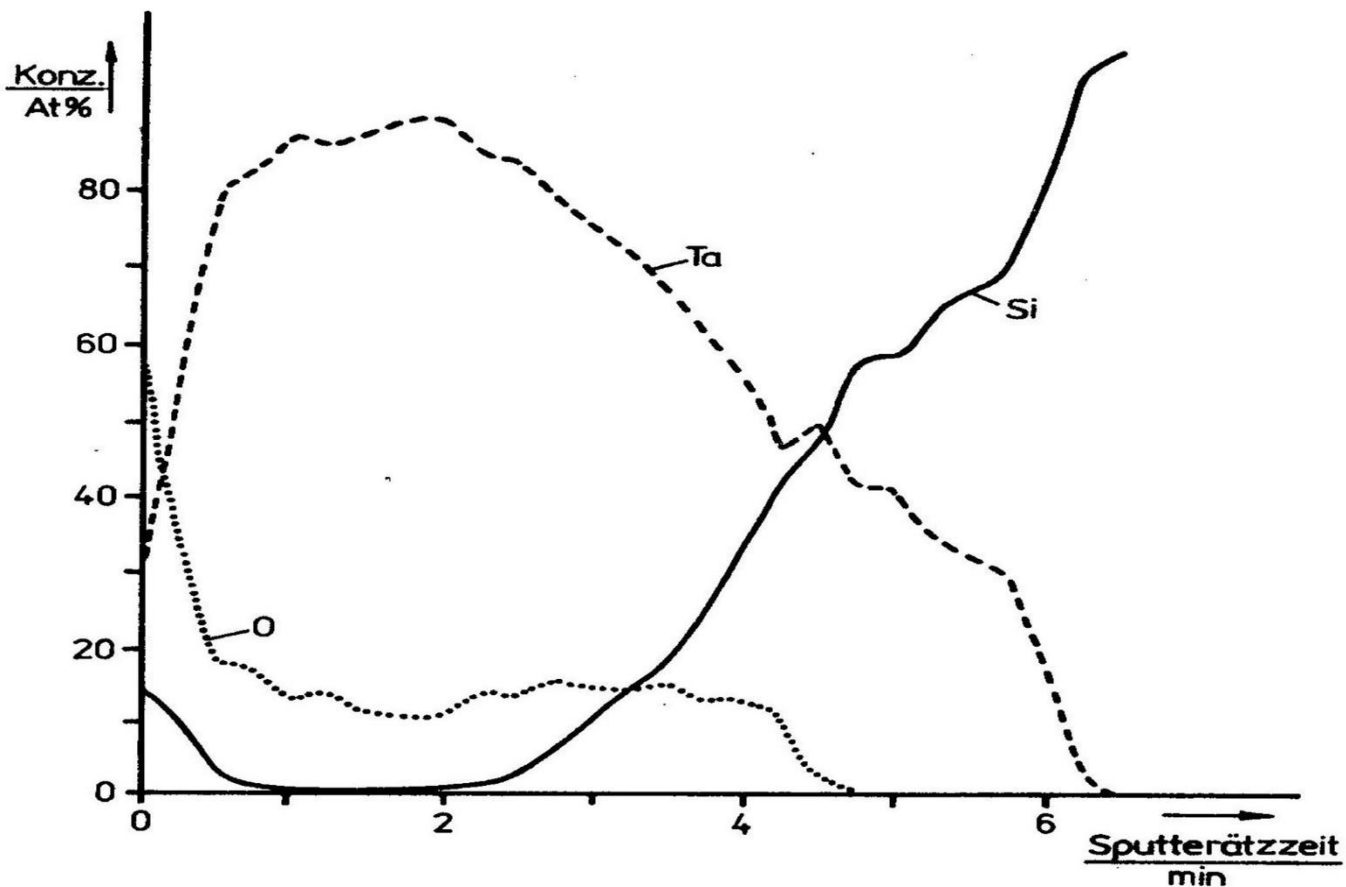
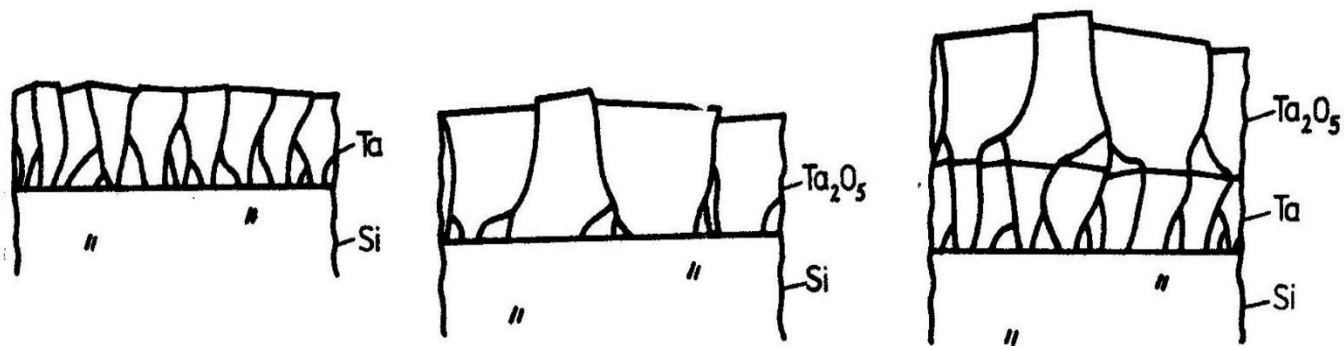
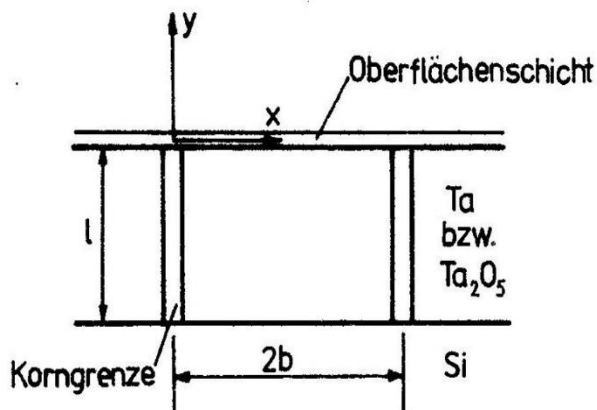


Bild 4: Auger-Tiefenprofil einer bei ca. 700°C auf eine poly-Si-Schicht abgeschiedenen CVD-Ta-Schicht



a) Schichtgefüge (schematisch)



b) Schichtmodell und Koordinatensystem

Bild 5: Stark vereinfachte Schichtstrukturen als Grundlage für Prozeßmodelle