

300 mm Si 外延片表面颗粒缺陷的研究

刘大力^{*}, 冯泉林, 周旗钢, 何自强, 常麟, 闫志瑞
(北京有色金属研究总院有研半导体材料股份有限公司, 北京 100088)

摘要: 研究了不同拉晶速率对 300 mm 硅外延片表面缺陷的影响, SPI(表面激光颗粒扫描仪) 测试结果表明: 较低的拉晶速率下, 外延片表面出现环状颗粒缺陷分布带; 较高的拉晶速率下, 外延片表面的环形缺陷带消失。利用 Femag-CZ 软件模拟了不同速率下晶体的生长结果, 结合其 c_i-c_v 分布图, 分析出这种环状分布的颗粒缺陷是由于晶体中间隙原子富集区产生的微缺陷, 在外延过程中(1050 °C) 聚集长大, 从而在界面处造成晶格畸变引起的。随着衬底拉速的降低, 间隙原子富集区的面积增大, 硅片外延后越容易出现环状分布的颗粒缺陷。因此在单晶拉制过程中, 为了避免这种环状缺陷的产生, 应当适当提高晶体的拉速。

关键词: 颗粒缺陷; 外延; SPI; 拉速

doi: 10.3969/j.issn.0258-7076.2012.03.021

中图分类号: TG127.2 文献标识码: A 文章编号: 0258-7076(2012)03-0446-04

Particle Defects on Epitaxial Surface with 300 mm Si Substrates

Liu Dali^{*}, Feng Quanlin, Zhou Qigang, He Ziqiang, Chang Lin, Yan Zhirui

(General Research Institute for Nonferrous Metals, Semiconductor Materials Co., Ltd., Beijing 100088, China)

Abstract: SPI was used to study particle defects on the surfaces of 300 mm epitaxial wafers with substrates of different pulling rates. The results showed that at low pulling rate ring-distribution particle defects were observed while at higher pulling rate the ring-distribution particle defects disappeared. Femag-CZ was used to simulate the growth of crystals under different pulling rates. With the c_i-c_v distribution diagram got from the simulation, the reason for the particle defects was explained as that interstitial-related defects in the interstitial-rich area assemble to the interface between the epitaxial layer and the substrate which contributed to the deformation of the crystal lattice during the epitaxial process at 1050 °C. With the decrease of the pulling rate, the interstitial-rich area increased and the particle defects were more likely to appear. To avoid this kind of ring-distribution particle defects higher pulling rate of the crystal was suggested.

Key words: particle defects; epitaxy; SPI; pulling rate

硅外延片在 20 世纪 80 年代被引入市场, 当时主要用于制造 CMOS 器件, 随着半导体工业的发展^[1-3], 目前硅外延片已广泛用于生产高密度存储器, IGBT 等新型电子器件。相比于 CZ 材料, 外延层没有与空位有关的扩展缺陷, 从而降低了栅氧化层的厚度, 提高了器件的性能^[4-7]。近年来, 国内在生产 300 mm 硅外延片时, 发现外延层表面出现环状分布的颗粒缺陷, 从而大大降低了外延片的成品率, 增加了生产成本。关于这种环

状分布的缺陷, Borionetti 等^[6]认为其和硅衬底中间隙型缺陷有关, 并在同一单晶中的相邻硅片中, 利用 Secco 腐蚀液发现了这种间隙型缺陷。Takahashi 等^[8]提出, 可以通过提高硅单晶拉速的方法来避免外延后这种环状缺陷的产生。本文在二者研究的基础上, 利用 Femag-CZ 软件模拟得出的 c_i-c_v 图, 将这种环状缺陷和晶体的生长结果联系起来, 从而具体分析了这种环状缺陷形成的原因, 以及它在整个单晶中的分布, 这对于提高外延硅

收稿日期: 2011-07-11; 修订日期: 2011-09-29

基金项目: 国家科技重大专项(200802401)资助项目

作者简介: 刘大力(1987-), 男, 江苏宿迁人, 硕士, 研究方向: Si 外延片, Si/SiGe 外延

* 通讯联系人(E-mail: liudali87@sina.com)

片的质量有着重要意义,同时,对于硅单晶的生长也具有一定的指导意义。

1 实 验

实验选用 A, B 两组 300 mm P(100) Si 抛光片,其中 A 衬底的晶体提拉速度为 $0.6 \text{ mm} \cdot \text{min}^{-1}$, B 衬底为 $1.0 \text{ mm} \cdot \text{min}^{-1}$ 。通过 RPCVD 技术在 $1050 \text{ }^\circ\text{C}$ 下生长 $1 \text{ } \mu\text{m}$ Si 外延层, Dichlorosilane (DCS) 作为沉积源,所用设备为 ASM 公司研制的 Epsilon E3200。

使用 Femag-CZ 软件模拟不同拉速下晶体的生长结果, Femag-CZ 是 FEMAGSoft 公司开发的数值模拟软件,适用于 Czochralski 直拉法生长工艺。模拟过程中,熔体流动及热传导的控制方程和晶

体实际生长过程一致,其他实验条件(如炉体结构、热屏形状、磁场等)和 A, B 的实际生长条件略有出入。

2 结果与讨论

图 1, 2 分别给出了 A, B 外延前后 SP1(表面激光颗粒扫描仪)扫描图以及表面缺陷的变化情况,从图中可以看出:低速时,硅抛光片表面的 crystal-originated particles (COPs) 数量较少(12 个),但外延后表面出现了大量的颗粒缺陷,且这些缺陷呈环状分布;拉速较高时,抛光片表面 COPs 显著增加,但外延后,这些 COPs 的数量急剧减少,由 153 减少为 10,并且未出现图 1 所示的环状分布颗粒缺陷。

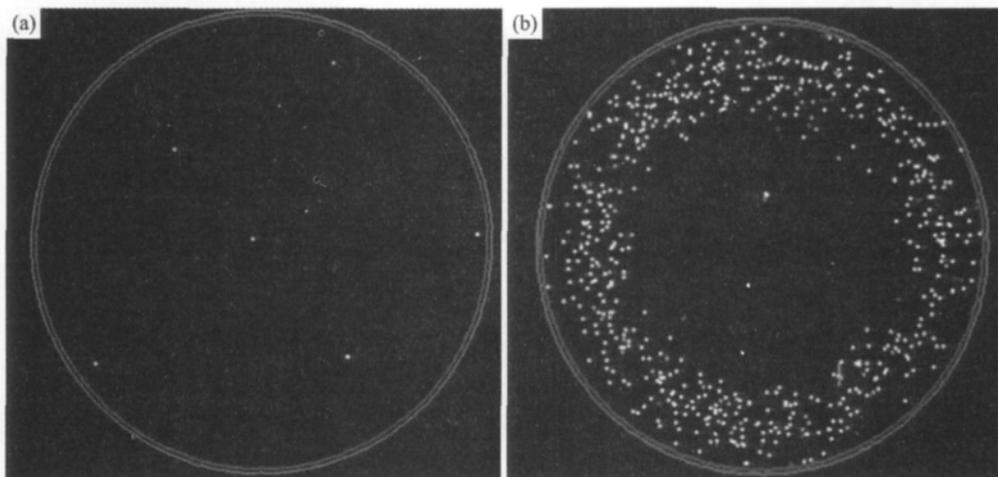


图 1 A 组外延前后表面 SP1 扫描情况

Fig. 1 SP1 results of A group before (a) and after (b) epitaxy

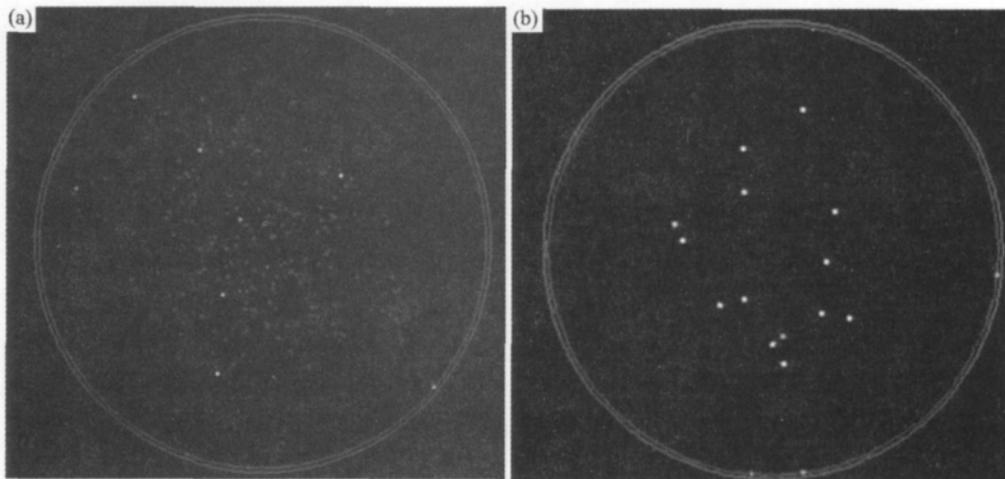


图 2 B 外延前后 SP1 扫描图

Fig. 2 SP1 results of B before (a) and after (b) epitaxy

环状分布的缺陷是由于硅衬底中过量的间隙原子引起的。CZ 法生长单晶时, 由于 G (轴向温度梯度) 在径向方向的变化, 晶体一般存在两个区域: 处在中心部分的空位富集区和处在圆周外缘的间隙原子富集区^[9-11], 两个区域的边界称为 $i-v$ 边界^[12]。在间隙原子富集区, 过量的间隙原子形成间隙型微缺陷^[13]; 这些微缺陷在外延过程中聚集长大, 使得外延层和衬底的界面处产生晶格畸变; 这样沉积的硅原子在晶格畸变处发生失配, 并逐渐聚集从而形成了颗粒缺陷。根据以上分析可以得出: 颗粒缺陷的分布应当和间隙原子富集区的分布一致, 为了更清楚的看出间隙原子富集区在晶体中随径向位置和纵向位置的变化, 分别模拟了低速和高速下晶体的生长结果。

图 3 为两种不同拉速下 c_i-c_v 在晶体径向和纵向的分布图 (c_i, c_v 分别为间隙原子和空位的浓度), 图中可以清楚地看出间隙原子富集区 (即 $c_i-c_v > 0$ 区域) 在整个晶体中的分布: 对于晶体中同一位置处, 低速时, $i-v$ 边界靠近晶体内部, 晶体外缘的间隙原子富集区面积较大, 间隙型缺陷在此区域产生, 这和图 1 所示的外延层颗粒缺陷的分布一致; 拉速较高时, $i-v$ 边界向晶体外缘移动, 间隙原子富集区显著减少, 当 $i-v$ 边界接近晶体外缘时, 这时由于间隙原子富集区很窄, 即使在这个区域产生极少量的微缺陷, 在外延过程中这些微缺陷也难以聚集, 因此不会在外延层衬底的界面处产生晶格畸变, 这解释了图 2 外延层中没出现颗粒污染的原因。

观察图 3 中间隙原子富集区沿晶体纵向的分布, 可以看出: 随着距离籽晶位置的增加, $i-v$ 边界也呈向外缘移动的趋势, 间隙原子富集区减少; 也就是说, 即使在拉速不是很高时, 只要选取的硅衬底距离籽晶的位置足够远, 外延层中也不会出现这种环状分布的缺陷。

图 4 为较低拉速下, 同一单晶中不同位置的硅衬底在外延前后的 SP1 扫描结果, 由图可以看出, 硅衬底在单晶中所处的位置不同, 外延后颗粒缺陷的增加程度也有所不同, 从籽晶到尾端, 颗粒缺陷呈明显下降趋势, 在快接近尾端时, 环状的颗粒缺陷消失, 这和上图 3 中间隙原子富集区纵向分布的分析一致; 至于图 4 中个别不符合规律的硅片, 是拉晶过程中速度的波动造成 $i-v$ 边界的变化^[12]或是仪器本身的误差而引起的。

由以上分析可以看出, 通过提高拉速的方法可以使间隙原子富集区减少, 从而避免外延后出现环状分布的颗粒缺陷。但拉速提高后, 空位富集区增大, 空位型缺陷如 COPs 等增加。对于传统的 CZ 抛光片, 可以通过氢退火^[14-15]和氩退火^[16]的方法来消除这些 COPs; 而对于外延片来说, 表面的 COPs 在外延过程中基本被沉积的硅原子覆盖 (如图 2 所示), 不影响外延层的质量, 这也正是外延片相比于其他 CZ 材料所具有的优势。

3 结 论

拉速较低时, 硅片在外延后表面出现环状分布的颗粒缺陷; 拉速较高时, 环状分布的颗粒缺陷

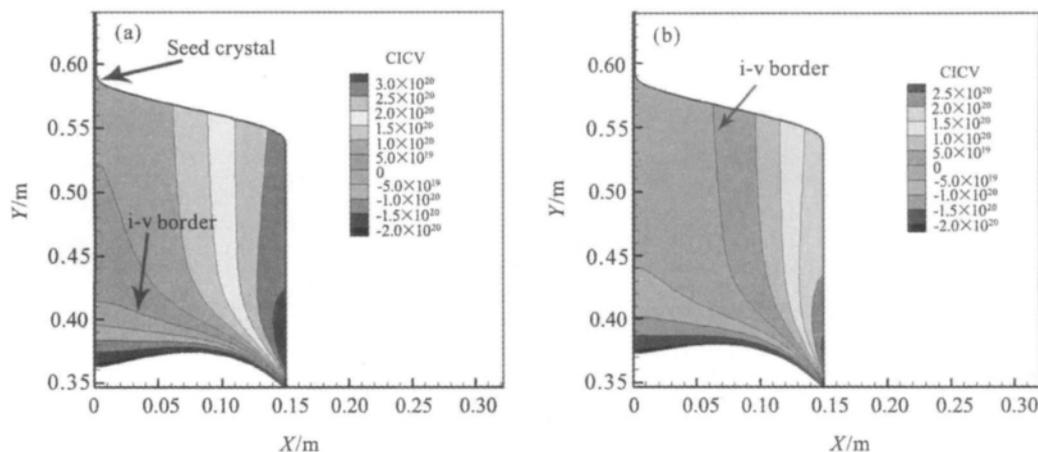


图 3 不同拉速下, c_i-c_v 在单晶中的分布图

Fig. 3 c_i-c_v distributions in the crystal of low pulling rate (a) and high pulling rate (b)

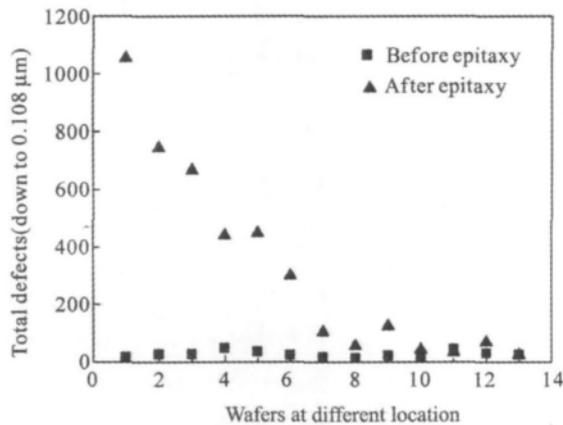


图4 低速下,单晶不同位置处的硅片外延前后颗粒缺陷的变化情况(其中横坐标为硅片的序号,代表硅片在单晶中的位置,序号大小代表硅片距离籽晶的远近)

Fig. 4 Quantities of particle defects on the surfaces of wafers in the same crystal of low pulling rate before and after epitaxy (distance from the seed increasing with the number of the horizontal axe increasing)

消失。通过 Femag-CZ 得到的 c_i-c_v 分布图,分析出这种环状分布的颗粒缺陷是由于晶体中间隙原子富集区产生的微缺陷,在外延过程中聚集长大,从而在界面处造成晶格畸变而引起的;随着衬底拉速的降低,间隙原子富集区的面积增大,硅片外延后越容易出现环状分布的颗粒缺陷;同一单晶中,硅片距离籽晶的位置越远,外延后颗粒缺陷的数量越少。为了避免环状缺陷的产生,CZ 法生长硅单晶时应适当提高晶体的拉速。

参考文献:

- [1] Xu W T, Tu H L, Chang Q, Xiao Q H. Reviews on application and preparation methods of Black Silicon [J]. Chinese Journal of Rare Metals, 2010, 34(6): 930.
(徐文婷,屠海令,常青,肖清华. 黑硅制备技术及应用的研究进展 [J]. 稀有金属, 2010, 34(6): 930.)
- [2] Jiang J, Deng S J, Dai X L, Wu Z Q, Zhu Q F, Liu B. Optimization of PID control parameters for large diameter silicon crystal growth [J]. Chinese Journal of Rare Metals, 2010, 34(6): 945.
(姜舰,邓树君,戴小林,吴志强,朱秦发,刘冰. 大直径直拉硅单晶等径的 PID 参数优化 [J]. 稀有金属, 2010, 34(6): 945.)
- [3] Hang H J, Zhou Q G, Dai X L. Effects of nitrogen on oxidation-induced stacking faults in 300 mm CZ silicon [J]. Chinese Journal of Rare Metals, 2009, 33(2): 223.
(韩海建,周旗钢,戴小林. 300 mm 直拉单晶硅中的氮元素对氧化诱生层错的影响 [J]. 稀有金属, 2009, 33(2): 223.)
- [4] Gräf D, Lambert U, Brohl M, Ehlert A, Wahlich R, Wagner P. Comparison of high temperature annealed Czochralski Silicon wafers and epitaxial wafers [J]. Material Science and Engineering B, 1996, 36(1-3): 50.
- [5] Hansson Per-Ove, Fuerfanger Martin. 300 mm Epitaxy: challenges and opportunities from a wafer manufacture's point of view [J]. Microelectronic Engineering, 1999, 45(2-3): 127.
- [6] Borionetti G, Gambaro D, Santi S, Borgini M, Godio P, Pizzini S. Crystal-related defects evolution during thin epitaxial layer growth on silicon wafers [J]. Materials science and Engineering B. 2000, 73(1-3): 218.
- [7] Imai M, Mayusumi M, Inoue K, Nakahara S, Gima S. Issue for the larger diameter epitaxial wafer [J]. Microelectronic, 2001, 56(1-2): 109.
- [8] Takahashi Kenji, Kawashima Kenichi. Evaluation of 300 mm Si wafer performances for giga ULSI device processes [J]. Microelectronic Engineering, 2001, 56(1-2): 27.
- [9] Voronkov V V, Falster R. Grow-in microdefects, residual vacancies and oxygen precipitation bands in Czochralski silicon [J]. Journal of Crystal Growth, 1999, 204(4): 462.
- [10] Sadamitsu S, Umeno S, Koike Y, Hourai M, Sumita S, Shigematsu T. Dependence of the grown-in defects distribution on growth rates in Czochralski Silicon [J]. Jpn. J. Appl. Phys., 1993, 32: 3675.
- [11] Nishimura M, Yoshino S, Motorura H, Shimura S, Mehdilidze T, Hikone T. The direct observation of grown-in laser scattering tomography defects in Czochralski [J]. J. Electrochem. Soc., 1996, 143(10): L243.
- [12] Park Bong Mo, Seo Gyeong Ho, Kim Gun. Effects of pulling rate fluctuation on the interstitial-vacancy boundary formation in CZ-Si single crystal [J]. Journal of Crystal Growth, 1999, 203(1-2): 67.
- [13] Brown Robert A, Wang Zhihong, Mori Tatsuo. Engineering analysis of microdefect formation during silicon crystal growth [J]. Journal of Crystal Growth, 2001, 225(2-4): 97.
- [14] Zhong L, Takeda R, Izunome K, Matsushita Y, Aiba Y, Matsushita J, Yoshikawa J, Hayashi K, Shirai H, Saito H. Surface modification of silicon (111) by annealing at high temperature in hydrogen [J]. Appl. Phys. Letter, 1996, 68(17): 2349.
- [15] Yanase Y, Nishihata H, Ochiai T, Tsuya H. Atomic force microscope observation of the change in shape and subsequent disappearance of "crystal-originated particles" after hydrogen-atmosphere thermal annealing [J]. Jpn. J. Appl. Phys., 1998, 37: 1.
- [16] Müller T, Wahlich R, Krottenthaler P, Studener J, Kuhhorn A, Ammon W V. Modeling and experimental verification of the 300 mm Ar anneal process [J]. Material Science and Engineering B, 2005, 124-125: 235.