

Diss. ETH No. 14220

Stress-Related Problems in Process Simulation

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Technical Sciences

presented by
STEFAN ZELENKA
Dipl. Phys. (University of Konstanz)
born 05/06/1966
citizen of Germany

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Wolfgang Fichtner, examiner
Prof. Dr. Siegfried Selberherr, co-examiner

2001

Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit mechanischen Spannungen die während des Herstellungsprozesses von Halbleiterbauteilen in hochintegrierten Schaltungen auftreten können. Hierbei wurde das kommerzielle Simulationsprogramm *DIOS-ISE*, nebst anderem, um eine Materialgleichung erweitert, welche eine Behandlung von rein viskosen über viskoelastische zu rein elastischen Materialien erlaubt. Die temperaturabhängige Viskosität kann zudem von den lokalen Scherspannungen im Material abhängen. Dies führt zu einer nichtlinearen Materialgleichung. Zur exakten Simulation der thermischen Oxidation von Silizium können der lokale Diffusionskoeffizient des Oxidanten und die Reaktionsrate an der Oxidationsfront von den lokalen Spannungen abhängen. Mechanische Spannungen können im gesamten Bauteil, also auch im Substrat berechnet werden. Materialien, die aus der Gasphase abgeschieden werden, wie z.B. Si_3N_4 verfügen direkt nach dem Aufbringen über Initialspannungen. Diesem Phänomen kann während der Simulation ebenfalls Rechnung getragen werden. Ebenso können Effekte wie richtungsabhängige Oxidation und das damit verbundene „Herauswachsen“ von Kristallebenen – Faceting – simuliert werden. Neben der thermischen Oxidation kann auch die Silizierung behandelt werden.

Wie bereits erwähnt erlaubt das Materialgesetz die Behandlung rein elastischer Materialien. Da die meisten Materialien, die zur Herstellung integrierter Schaltungen verwendet werden, bei moderaten Temperaturen elastisches Verhalten aufweisen, erlaubt *DIOS-ISE* nun auch die Simulation zur Herstellung eines kompletten Bauteils einschließlich sämtlicher Temperaturrampen. Somit enthält das Endergebnis einer Simulation die lückenlose Geschichte der mechanischen Größen. Die zugrundeliegenden mechanischen Gleichungen und deren Implementierung

werden ausführlich diskutiert. Zudem wird die Funktionalität des Simulators anhand zahlreicher Beispiele aus der Literatur demonstriert und bestätigt.

Abstract

This thesis deals with mechanical stress which can develop during the manufacturing process of semiconductor devices in highly integrated circuits. The commercial simulation software DIOS.*ISE* was extended by a constitutive equation which allows the treatment from purely viscous via viscoelastic to purely elastic materials. Additionally, the temperature-dependent viscosity can depend on the local shear stress in the material. This leads to a non-linear constitutive equation. To obtain accurate results for the thermal oxidation of silicon the diffusivity and reaction rate of the oxidants can depend on the local stress in the material and at the oxidation front. Mechanical stress can be calculated within the whole device, i.e. also in the substrate. Deposited materials such as Si_3N_4 show initial stress directly after deposition. During simulation this phenomenon can also be taken into account. Additionally, effects such as orientation-dependent oxidation and the related “outgrowth” of crystal planes, known as faceting, can be included. Besides thermal oxidation, as a related process, silicidation can be simulated.

As already mentioned the constitutive equation is capable of accounting for purely elastic materials. Since most of the materials used in semiconductor technology show elastic behavior at moderate temperatures the complete manufacturing process of a device can be simulated additionally with respect to mechanical properties. Thereby the final result of a simulation contains the complete history of mechanical stress. The underlying mechanics equations and the corresponding implementation will be discussed in detail. In addition the functionality of the simulator will be demonstrated and validated by numerous examples taken out of literature.