



普通高等教育“十五”国家级规划教材

硅集成电路 工艺基础

关旭东 编著

GUJICHENG DIANJI GONGYI JICHU



北京大学 出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

普通高等教育“十五”国家级规划教材

硅集成电路工艺基础

关旭东 编著

北京大学出版社
北 京

内 容 提 要

本书系统地讲述了硅集成电路制造的基础工艺,重点放在工艺物理基础和基本原理上。全书共十章,其中第一章简单地讲述了硅的晶体结构,第二章到第九章分别讲述了硅集成电路制造中的基本单项工艺,包括氧化、扩散、离子注入、物理气相淀积、化学气相淀积、外延、光刻与刻蚀、金属化与多层互连,最后一章讲述的是工艺集成。

本书可作为高等学校微电子专业本科生和研究生的教材或参考书,也可供从事集成电路制造的工艺技术人员阅读。

图书在版编目(CIP)数据

硅集成电路工艺基础/关旭东编著. —北京:北京大学出版社, 2003. 10

ISBN 7-301-06507-8

I. 硅… II. 关… III. 硅栅 MOS 集成电路—生产工艺 IV. TN432

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 077196 号

书 名: 硅集成电路工艺基础

著作责任者: 关旭东 编著

责任编辑: 沈承凤

标准书号: ISBN 7-301-06507-8/TP·0733

出版者: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区中关村 北京大学校内 100871

网 址: <http://cbs.pku.edu.cn> 电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

电 话: 邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62752038

排 版 者: 兴盛达打字服务社 82715400

发 行 者: 北京大学出版社

印 刷 者: 北京大学印刷厂

787 毫米×1092 毫米 16 开本 19.5 印张 487 千字

2003 年 10 月第 1 版 2003 年 10 月第 1 次印刷

定 价: 28.00 元

前 言

《硅集成电路工艺基础》一书是为微电子专业本科生所编写的、内容涉及硅集成电路制造工艺的教材,也可作为从事集成电路研发和生产的科技人员的参考书。本书是根据作者多年教学经验并结合当今集成电路制造中新技术及新工艺编写而成的。全书取材兼顾了基础知识和集成电路工艺技术的最新发展,在以集成电路制造工艺的物理基础和基本原理作为重点的同时,还注重介绍最新发展起来的包括铜互连在内的多种新工艺、新技术。

本书系统讲述了硅集成电路制造中的单项工艺,内容主要包括硅的晶体结构、氧化、扩散、离子注入、物理气相淀积、化学气相淀积、外延、光刻与刻蚀、金属化与多层互连,最后介绍了CMOS集成电路、双极集成电路以及BiCMOS集成电路的工艺集成。此外,对新工艺、新技术、集成电路工艺技术的发展趋势以及新结构器件对集成电路制造工艺提出的新要求等方面也作了介绍。近年来,集成电路工艺技术的发展非常迅猛,日新月异,作为教科书不可能囊括全部的新工艺、新技术。本书在着重阐述集成电路工艺的基本原理的基础上,尽可能完整地介绍了集成电路工艺及其最新技术的各个方面,同时还兼顾了部分集成电路发展早期的工艺如蒸发,其目的是为了对集成电路工艺及其发展作一个比较全面的介绍。

集成电路发展至今已进入甚大规模(ULSI),但是大部分的单项工艺与集成电路的集成度没有直接的关系,而本书中介绍的工艺集成和金属化中的大部分内容则主要是面向 ULSI 的。

特别感谢武国英教授,武国英教授不辞辛苦审阅了全书,对原稿提出了很多宝贵的修改意见。孙雷博士、杜刚博士参与了本书部分章节的编写工作,并协助进行了文字整理工作。刘晓彦博士、杨胜齐博士、王漪博士在本书编写过程中给予了许多帮助。罗文哲博士和贾霖博士帮助收集了许多资料。赵宝瑛教授、张天义教授在本书的编写过程中也给予了支持和帮助。翟霞云、韩德栋、王文平、陈剑鸣、郭德超、苏明、周晓君、杨红、盖博、史小蒙、王志远等完成了许多文字和图表的处理工作。在此一并表示深深的谢意。

北京大学出版社的沈承凤老师和其他工作人员对本书的出版付出了辛勤劳动,作者也一并致谢。如果没有上面各位的支持和帮助,本书将很难完成。

由于集成电路工艺技术的发展非常迅速,加上作者的水平所限,书中难免还存在一些错误和不妥之处,诚请读者批评指正。

关旭东

2003年6月于北京大学

目 录

第一章 硅的晶体结构	(1)	5.1 真空蒸发法制备薄的基本原理 (101)
1.1 硅晶体结构的特点	(1)	5.2 蒸发源 (104)
1.2 晶向、晶面和堆积模型	(3)	5.3 气体辉光放电 (107)
1.3 硅晶体中的缺陷	(8)	5.4 溅射 (112)
1.4 硅中杂质	(12)	参考文献 (121)
1.5 杂质在硅晶体中的溶解度	(15)	第六章 化学气相淀积	(122)
参考文献	(17)	6.1 CVD 模型 (122)
第二章 氧化	(18)	6.2 化学气相淀积系统 (128)
2.1 SiO ₂ 的结构及性质	(18)	6.3 CVD 多晶硅的特性和淀积方法 (134)
2.2 SiO ₂ 的掩蔽作用	(21)	6.4 CVD 二氧化硅的特性和淀积方法 (138)
2.3 硅的热氧化生长动力学	(24)	6.5 CVD 氮化硅的特性及淀积方法 (145)
2.4 决定氧化速率常数和影响氧化速率的各种因素	(30)	6.6 金属的化学气相淀积 (149)
2.5 热氧化过程中的杂质再分布	(37)	参考文献 (156)
2.6 初始氧化阶段以及薄氧化层的生长	(41)	第七章 外延	(159)
2.7 Si-SiO ₂ 界面特性	(46)	7.1 硅气相外延的基本原理 (160)
参考文献	(51)	7.2 外延层中的杂质分布 (166)
第三章 扩散	(55)	7.3 低压外延 (170)
3.1 杂质扩散机构	(55)	7.4 选择外延 (171)
3.2 扩散系数与扩散方程	(57)	7.5 硅烷热分解法外延 (173)
3.3 扩散杂质的分布	(59)	7.6 SOS 技术 (174)
3.4 影响杂质分布的其他因素	(63)	7.7 分子束外延 (175)
3.5 扩散工艺	(72)	7.8 层错、图形漂移及利用层错法测量厚度 (177)
3.6 扩散工艺的发展	(75)	7.9 外延层电阻率的测量 (180)
参考文献	(76)	参考文献 (182)
第四章 离子注入	(79)	第八章 光刻与刻蚀工艺	(183)
4.1 核碰撞和电子碰撞	(80)	8.1 光刻工艺流程 (184)
4.2 注入离子在无定形靶中的分布	(84)	8.2 分辨率 (189)
4.3 注入损伤	(91)	8.3 光刻胶的基本属性 (191)
4.4 热退火	(94)	8.4 多层光刻胶工艺 (196)
参考文献	(99)		
第五章 物理气相淀积	(101)		

8.5 抗反射涂层工艺	(199)	10.4 BiCMOS 的工艺集成	(292)
8.6 紫外光曝光	(201)	参考文献	(295)
8.7 掩模版的制造	(207)	附录	(297)
8.8 X 射线曝光	(209)	附录 1 常用金属元素材料及其电学	
8.9 电子束直写式曝光	(212)	特性	(297)
8.10 ULSI 对图形转移的要求	(215)	附录 2 金属硅化物、金属合金的电学	
8.11 湿法腐蚀	(216)	特性	(297)
8.12 干法刻蚀技术	(218)	附录 3 常用的金属材料和合金的晶格	
8.13 刻蚀速率	(225)	结构参数	(298)
参考文献	(229)	附录 4 半导体材料的晶格结构	
第九章 金属化与多层互连	(232)	参数	(299)
9.1 集成电路对金属化材料特性的		附录 5 金属材料薄膜在硅衬底上的晶格	
要求	(232)	常数失配因子	(299)
9.2 铝在集成电路技术中的应用 ..	(235)	附录 6 常用的半导体和绝缘介质的	
9.3 铜及低 K 介质	(242)	电学特性	(300)
9.4 多晶硅及硅化物	(250)	附录 7 铝、铜、金合金电阻率随杂质	
9.5 大规模集成电路与多层互连 ..	(260)	原子数比的变化率	(300)
参考文献	(270)	附录 8 物理常数	(301)
第十章 工艺集成	(273)	附录 9 部分常用材料的性质	(302)
10.1 集成电路中的隔离	(273)	附录 10 硅片鉴别方法(SEMI	
10.2 CMOS 集成电路的工艺		标准)	(303)
集成	(277)	缩略语及物理量	(304)
10.3 双极集成电路的工艺集成	(287)		

第一章 硅的晶体结构

自然界中的固态物质,简称为固体,可分为晶体和非晶体两大类。晶体类包括单晶体和多晶体。晶体和非晶体在物理性质、内部结构等方面都存在着明显的差别。

集成电路和各种半导体器件制造中所用的材料,目前主要是硅、锗和砷化镓等单晶体,其中又以硅为最多。硅器件占世界上出售的所有半导体器件的 90% 以上,所以本章只讲述硅晶体的有关特点^[1]。

1.1 硅晶体结构的特点

1.1.1 晶胞

晶体的重要特点是组成晶体的原子、分子、离子是按一定规则周期排列着。任一晶体都可以看成是由质点(原子、分子、离子)在三维空间中按一定规则作周期性排列所构成的。晶体的这种周期性结构称为晶体格子,简称为晶格。立方晶系的简单立方、体心立方和面心立方晶格如图 1.1 所示。如果整个晶体是由单一的晶格连续组成,就称这种晶体为单晶体。如果一个晶体是由相同结构的很多小晶粒无规则地堆积而成,称为多晶体。

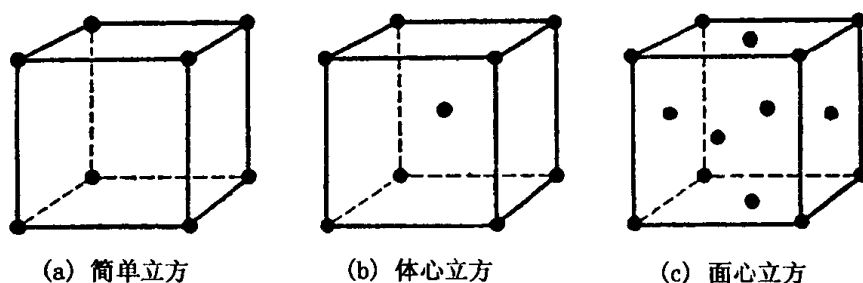


图 1.1 三种立方晶体原胞

图 1.2 示意地表示硅晶体中原子排列情况。图中的立方体是反映硅晶体中原子排列基本特点的一个单元,整个晶体可以看成是由这个单元沿立方体三个边的方向周期重复排列构成。这个单元不是最小的周期性重复单元,但是它能反映出晶体结构的立方对称性,因而在讨论晶体结构中常被采用。这种能够最大限度地反映晶体对称性质的最小单元,称为晶胞,图 1.2 所示的就是硅的晶胞。

在图 1.1 所示的面心立方单元中心到顶角引八条对角线,在其中不相邻的四条中点各加一个原子,所得到的就是硅的晶胞结构,由这个晶胞所表示的晶格称为金刚石结构。金刚石、硅、锗具有相同的晶格结构,但它们的晶胞边长 a 不同。通过 X 射线结构分析,已确定在 300K 时,硅的晶格常数 $a = 5.4305\text{\AA}$, 锗的晶格常数 $a = 5.6463\text{\AA}$ 。

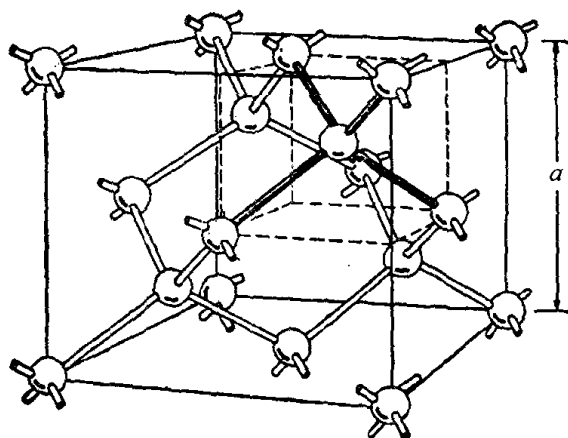


图 1.2 金刚石结构的立方晶胞

1.1.2 原子密度

知道了晶格常数,就可以计算出硅晶体中的原子密度。先由图 1.2 所示的立方体来分析一下每个晶胞中所含的原子数。因为晶格中相邻的晶胞都是邻面重合的,因此,顶角上虽然共有 8 个原子,但每个原子都是属于 8 个晶胞所有。面心上共有 6 个原子,但每个原子都是属于 2 个晶胞所有。只有位于内部对角线上的 4 个原子不在邻面上,完全属于该晶胞所有。所以实际上每个晶胞所含的原子数是 8。晶胞体积为 a^3 ,每个原子所占的空间体积就为 $a^3/8$,所以硅晶体中的原子密度就为 $8/a^3 = 5 \times 10^{22}/\text{cm}^3$ 。对锗晶体来说,其原子密度为 $4.42 \times 10^{22}/\text{cm}^3$ 。

1.1.3 共价四面体

由图 1.2 还可以看出,处在立方体顶角和面心的原子,它们构成一套面心立方格子,处在体对角线上的原子也构成一套面心立方格子。因此可以认为硅晶体是由两套面心立方格子沿体对角线位移四分之一长度套构而成的。

硅晶体虽然是由同一种化学元素硅组成,但其晶格原子所处的环境不同,在几何位置上是不等价的。仔细考查一下图 1.2 就会发现,两套面心立方格子的原子,它们近邻都有 4 个原子,这 4 个原子在空间的取向方位,对同一套面心立方上的原子是相同的,而对于不同套面心立方则是不同的。这说明硅晶体的晶格为复式晶格,因为晶格中有两种不等价原子。

在硅晶体中虽然不等价原子的环境不完全相同,但任一原子都有 4 个最近邻的原子,它们处于正四面体的顶点上,如图 1.3 所示。这是由于共价键的性质所决定的,因为硅是周期表中第 IV 族元素,每个原子最外层轨道上有 4 个价电子,在形成晶体时,可以同 4 个近邻原子共有电子对,形成 4 个共价键。一个原子在正四面体的中心,另外 4 个同它共价的原子在正四面体的 4 个顶角上,这种四面体

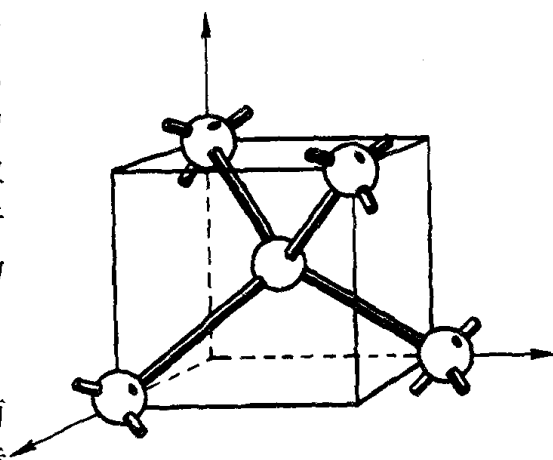


图 1.3 四面体结构示意图

也称共价四面体。按这种规律分布的键,称为四面体的键。键之间的夹角为 $109^{\circ}28'$ 。同时也可求出最小原子间距,即正四面体中心原子到顶角原子的距离,也就是晶胞体对角线线长的四分之一。如果以晶格常数 a 来表示这个距离,那么最小原子间距就为 $\sqrt{3}a/4$ 。

1.1.4 晶体内部的空隙

金刚石结构的另一个特点是内部存在着相当大的“空隙”。正因如此,某些半径较小的原子,不但能存在于体内,而且在体内还能比较容易地运动,我们通过简单地计算就可以看到这一点。如果把每个原子都看成是一个个硬球,这样就可以根据硬球的半径计算出所有硬球(原子)所占晶体体积的百分比,即所谓“空间利用率”。晶体中最小的原子间距的二分之一定义为硬球半径,我们可直接求出硅原子(硬球)的半径 $r_{\text{Si}} = \sqrt{3}a/8 \approx 1.17\text{\AA}$ 。

硬球的半径也称为共价半径,是金刚石结构特有的一个结构参数。球的体积为 $4\pi r_{\text{Si}}^3/3$,每个硅原子在晶体内所占的空间体积为 $a^3/8$,所以空间利用率等于

$$\frac{4\pi r_{\text{Si}}^3/3}{a^3/8} \approx 34\%$$

可见硅晶体内大部分是“空”的。另外,由图 1.2 中也可看出,在面心立方单元中心到顶角的八条对角线中,只有四条对角线的中点放有原子,而另外四条对角线的中点附近就对应有较大的空隙。正因如此,一些间隙杂质能很容易地在晶体内运动并存在于体内,同时对替位杂质的扩散运动也提供了足够的条件。

1.2 晶向、晶面和堆积模型

硅晶体中不同晶向和晶面上的原子排列情况是不相同的,不同的排列对器件的制造有着重要的影响。本节主要讲述晶面、晶向以及晶体的堆积模型。

1.2.1 晶向

对于任何一种晶体来说,晶格中的原子总可以被看作是处在一系列方向相同的平行直线上,这种直线系称为晶列。而同一晶体中存在许多取向不同的晶列,在不同取向的晶列上原子排列情况一般是不同的。晶体的许多性质都与晶列方向有关,所以,实际工作中就要求对不同晶列方向有所标记。通常用“晶向”来表示一族晶列所指的方向。

金刚石结构是由两个面心立方晶格套构而成的,面心立方晶格属于立方晶系,对于立方晶系实际上都是以简单立方晶格为基础,也可以说是以晶胞为基础来标志晶向的。

我们以简单立方晶格原胞的三个边作为基矢 x, y, z ,并以任一格点作为原点,则其他所有格点的位置可由矢量

$$L = l_1x + l_2y + l_3z \quad (1.1)$$

给出,其中 l_1, l_2, l_3 为任意整数。而任何一个晶列的方向可由连接晶列中相邻格点的矢量

$$A = m_1x + m_2y + m_3z \quad (1.2)$$

的方向来标记,其中 m_1, m_2, m_3 必为互质的整数。若 m_1, m_2, m_3 不为互质,那么这两个格点之间一定还包含有格点。对于任何一个确定的晶格来说, x, y, z 是确定的,实际上只用这三个互质的整数 m_1, m_2, m_3 来标记晶向,一般写作 $[m_1, m_2, m_3]$,称为晶向指数。

如图 1.4 所示,以这个简单立方晶格原胞共顶点 O 的三个边为矢量 x, y, z , OA 为连接晶列中相邻格点的矢量,它在 x, y, z 方向上的分量相等,都等于 a ,所以 $m_1 = m_2 = m_3 = 1$,则这个晶列的晶向指数就为 $[111]$ 。实际上它就是体对角线的方向,共有八个等价的方向,可以用尖括号 $\langle 111 \rangle$ 来概括表示这些等价方向。对于 $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 晶向可作类似的分析。

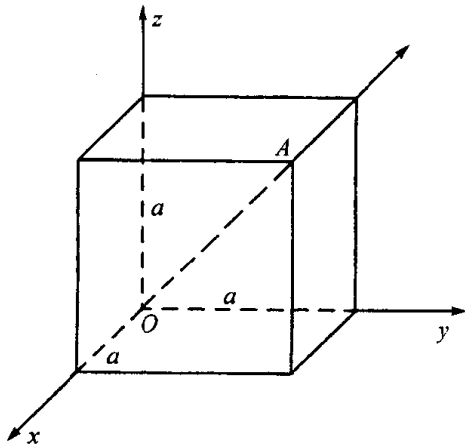


图 1.4 晶向的表示法

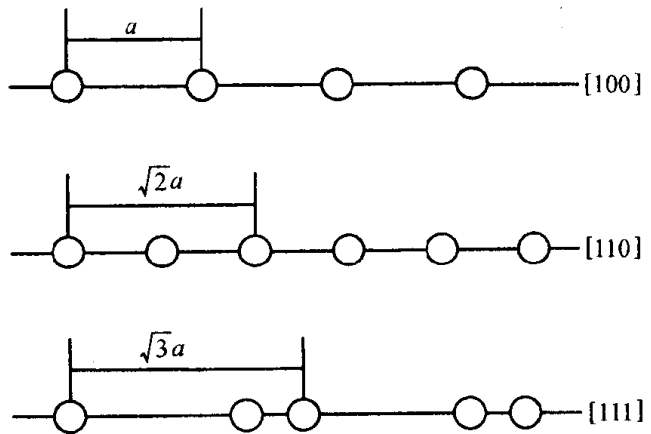


图 1.5 硅的常用晶向上的原子分布

硅晶体的不同晶向上,原子排列的情况是不相同的,仔细分析图 1.2 晶格结构,就可以得到各个晶向上原子分布情况。图 1.5 给出了几个主要晶向上的分布情况,我们可以很容易计算出这几个晶向上单位长度内的原子数目,即原子线密度, $\langle 110 \rangle$ 方向上的原子线密度最大。各方向上的原子线密度值如下:

$$\langle 100 \rangle: \quad \frac{2 \times \frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a} \quad (1.3)$$

$$\langle 110 \rangle: \quad \frac{2 \times \frac{1}{2} + 1}{\sqrt{2}a} = \frac{2}{\sqrt{2}a} \approx \frac{1.41}{a} \quad (1.4)$$

$$\langle 111 \rangle: \quad \frac{1 + 2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{3}a} = \frac{2}{\sqrt{3}a} \approx \frac{1.15}{a} \quad (1.5)$$

1.2.2 晶面

晶格中的所有原子不但可以看作是处于一系列方向相同的平行直线上,而且也可以看作是处于一系列彼此平行的平面系上,这种平面系称为晶面。通过任何一个晶列都存在许多取向不同的晶面,不同晶面上的原子排列情况一般是不相同的,因此,也应该对不同晶面作出标记。可以用相邻的两个平行晶面在矢量 x, y, z 上的截距来标记,它们总可以表示为 $x/h_1, y/h_2, z/h_3$ 。 h_1, h_2, h_3 为整数或负整数。因为在任意两个格点之间所通过的平行晶面总是整数个,可以证明 h_1, h_2, h_3 是互质的。通常就用 h_1, h_2, h_3 标记晶面,记作 (h_1, h_2, h_3) ,并称它们为晶面指数(或米勒指数)。对于立方晶格,不难看出图 1.6 中阴影所表示的晶面分别为 (100) , (110) 和 (111) 晶面。例如,对 (111) 晶面,即阴影所示的平面,不但与通过原点 O 的一个晶面平行,而且在 x, y, z 轴上截距 a 也是相等的,所以 $h_1 = h_2 = h_3 = 1$,在互质的条件下,这个晶面就为 (111) 晶面。同时还可以看到 $\langle 111 \rangle$ 晶向是垂直于 (111) 晶面的。由于晶格的

对称性,有些晶面是彼此等效的,例如(100),(010)等六种晶面等效,通常用花括号表示{100}该晶面族。

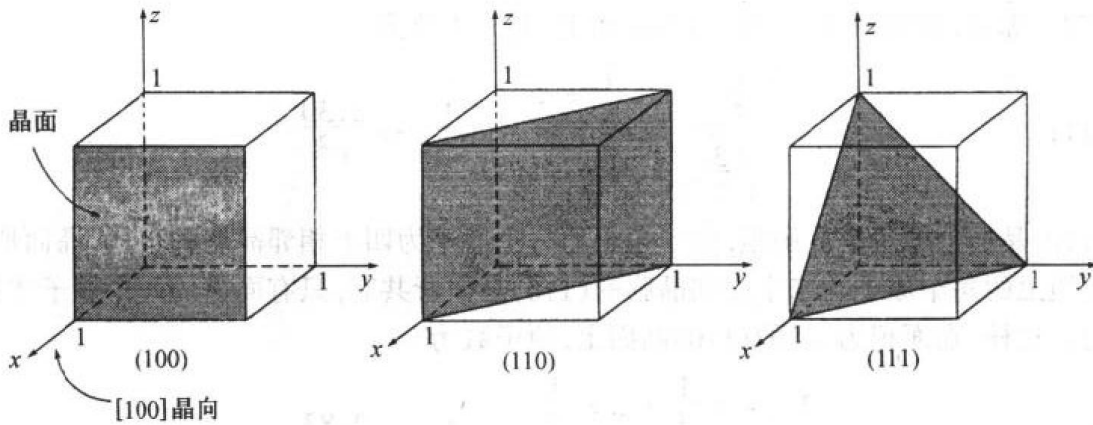


图 1.6 立方晶系的几种主要晶面

硅晶体不同晶面上的原子分布情况是不同的,图 1.7 所示的是几个主要晶面上原子分布情况。我们可以计算出这几个晶面上单位面积的原子数,即面密度。在(100)晶面上,每个晶胞里,位于晶面角上的每个原子是属于四个相邻晶胞的(100)晶面所共有,而位于面心上的原子为一个晶胞的(100)晶面所有,所以在面积为 a^2 的(100)晶面上,其原子数为

$$(100): \quad \frac{1 + 4 \times \frac{1}{4}}{a^2} = \frac{2}{a^2} \quad (1.6)$$

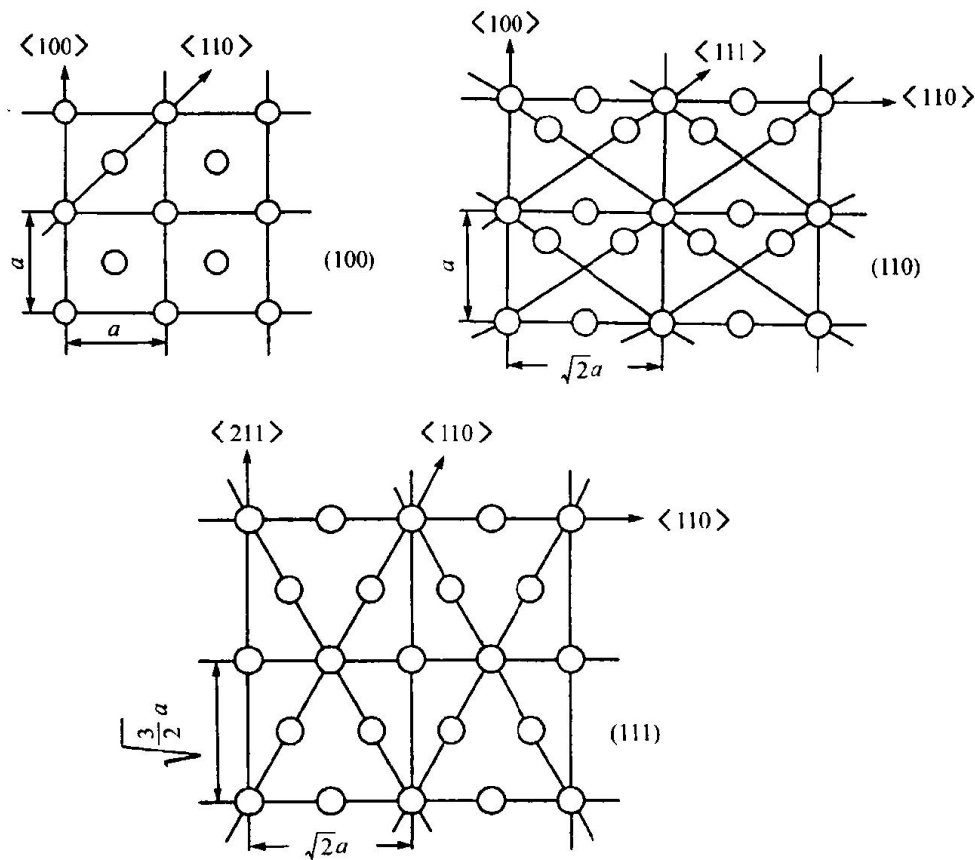


图 1.7 硅的常用晶面上的原子分布

在(111)晶面上的每个晶胞里,位于角上的每个原子为四个相邻晶胞的(111)晶面所共有,而位于晶面边上的每个原子为二个相邻晶胞的(111)晶面所共有,只有面内的两个原子才是该晶面独有的,那么,在面积为 a^2 的(111)晶面上,其原子数为

$$(111): \quad \frac{4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} + 2}{\sqrt{\frac{3}{2}}a \times \sqrt{2}a} = \frac{4}{\sqrt{3}a^2} \approx \frac{2.30}{a^2} \quad (1.7)$$

在(110)晶面上的每个晶胞里,位于角上的每个原子为四个相邻晶胞的(110)晶面所共有,位于晶面边上的每个原子为二个相邻晶胞的(110)晶面所共有,只有面内的两个原子才是该晶面独有的。这样,在面积为 a^2 的(110)晶面上,原子数为

$$(110): \quad \frac{2 + 4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{2}a \times a} = \frac{4}{\sqrt{2}a^2} \approx \frac{2.83}{a^2} \quad (1.8)$$

通过上面的简单计算可以看到,(110)面上的原子密度最大,但原子分布是不均匀的。

1.2.3 堆积模型图

硅晶体结构是金刚石型的,我们知道金刚石结构可由两套面心立方结构套构而成,面心立方晶格又称为立方密排晶格,我们先来讨论面心立方晶格的堆积模型。在平面上最紧密的排列方式如图 1.8(a)所示,由图可以看出每个刚球(我们把每个粒子看作为一个刚球)的周围均匀对称地分布有六个球,每三个相切球的中心形成一个间隙,每个球周围有六个这样的间隙,这就是平面上最紧密的排列情况。第一层球的每个球体用A表示,每个球周围的六个间隙,分别用B和C表示,B和C是相间分布的。

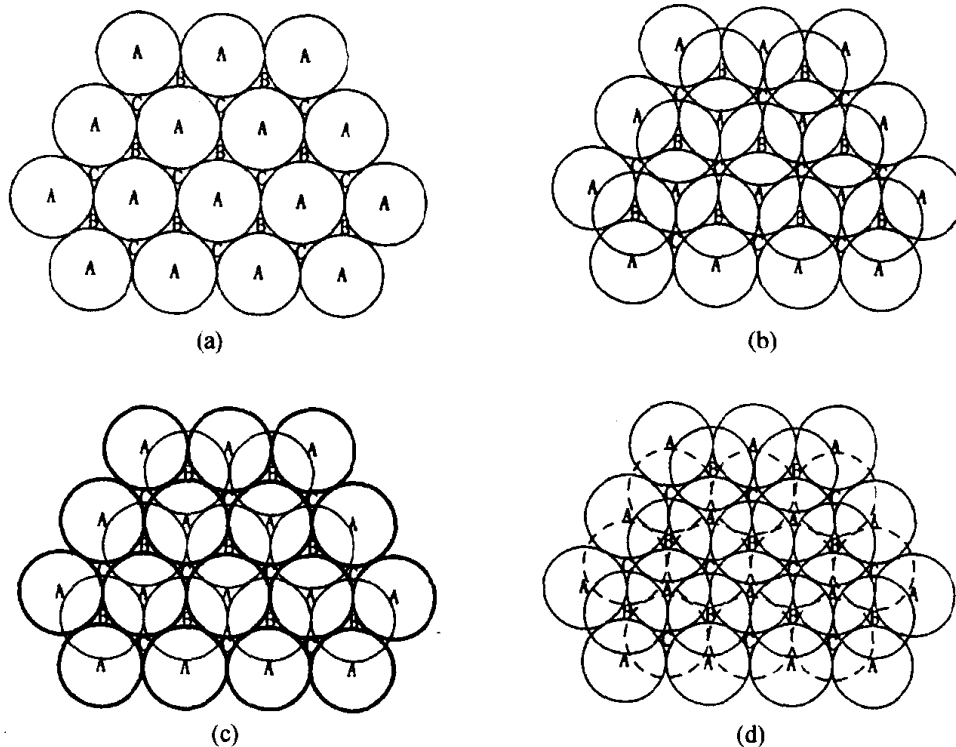


图 1.8 密堆积模型

我们来分析一下密排面与密排面之间是如何堆积的。第一层按密排面排好之后,第二层要在第一层上面排列,不论怎样排列,首先要保证第二层本身是密排面。如果把第二层的每个球放到第一层相间的空隙 B 的正上方,那么就保证了第二层本身是密排面,如图 1.8(b)所示。第二层的每一个球不但与本层六个球相切,而且还与第一层的三个球相切,同时,第二层中的每个球周围同样也有六个间隙,而且其中三个不相邻的间隙刚好在第一层球的球心正上方。我们用 B 表示放在第一层空隙 B 上方的第二层球的每个球体。

下面再来看看第三层的排列情况。第三层在保证本层是密排面的前提下,与第二层之间有两种堆积方式。其一,我们可以把第三层球放到第二层三个相间的空隙上,并且使第三层的球恰好是第一层球的正上方,即在 A 的正上方。在这样的放法中,第二层的每个球周围的三个相间空隙同时被上下两层球占据,按这种放法的第三层球的每个球体也用 A 来表示。如果我们以第一层的球心所在平面为坐标平面,那么第三层和第一层所对应的球心在这个坐标平面上的位置完全一致。如此每两层为一组不断地堆积下去,这样的堆积方式可用 $\dots ABAB\dots$ 表示,我们称这种堆积为六角密积,如图 1.8(c)所示,图中的 A 球用粗实线画出,表示第一层和第三层球是重合的。这是第三层的第一种堆积方式。

第二种堆积方式同样也是把第三层球放到第二层相间的空隙上,但不在第一层球的正上方,而是放在第一层的空隙 C 的正上方。如果以第二层上的某个球为中心,这个球周围的六个空隙中的三个相间空隙是被第一层球由下面占据,另外三个相间空隙被第三层球由上面占据,如图 1.8(d)所示。图中第一层和第二层球均用细实线表示,而第三层球用虚线表示。在这种放法中,第三层球的每个球体实际上是在第一层间隙 C 的正上方,我们用 C 表示放在第一层空隙 C 正上方的第三层球的每个球体。那么各密排面之间的堆积次序就为 $\dots ABCABC\dots$,我们称这种堆积为立方密积。

不论是六角密积,还是立方密积,每一个球在同一层内与六个球相切,另外还分别同上层三个球和下层三个球相切。所以每个球最近邻的球数是 12,即配位数是 12,这是晶体结构中的最大配位数值。

图 1.9 所示的是面心立方晶格中原子的分布情况。图中通过 A 层的(111)面只画出一个原子,通过 B 层和 C 层的(111)面各画出 6 个原子。仔细观察就会发现,面心立方晶格的(111)面是密排面。因而整个晶体就可以看成是由许多密排面沿 $[111]$ 方向堆积而成的。

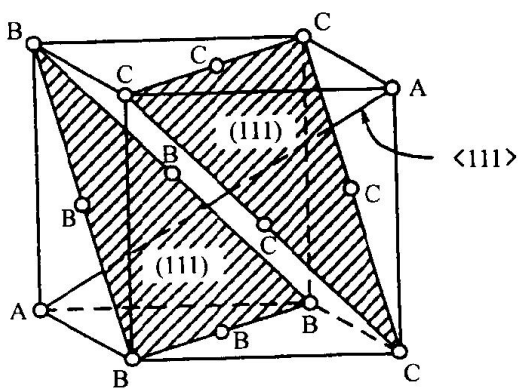


图 1.9 面心立方中的原子排列

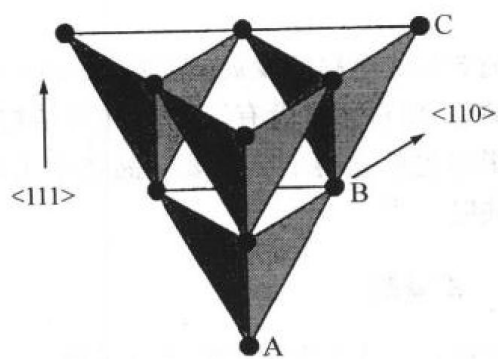


图 1.10 ABC 结构示意图

下面来分析面心立方的(111)面之间的堆积情况。如果把图 1.9 中 A 层的那个原子、B 层

中处于面心上的三个原子和 C 层上的六个原子画成立体排列形式, 则形成如图 1.10 所示的结构。仔细分析就可以看出, 各层密排面之间的堆积情况同立方密堆积结构是一样的。所以面心立方晶体结构是立方密堆积, (111) 面是密排面。

1.2.4 双层密排面

金刚石晶格是由两套面心立方晶格套构而成, 所以它的 $\{111\}$ 晶面也是原子密排面。如果

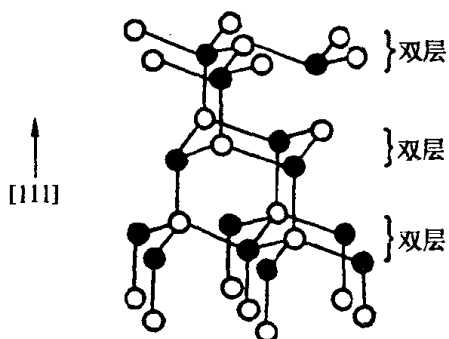


图 1.11 双层密排面结构示意图

把图 1.9 中各原子沿体对角线平移体对角线线长的 $1/4$ 距离, 刚好是由晶胞内所组成的面心立方原子所在的位置。设晶胞内原子所组成的面心立方晶格的 $\{111\}$ 面之间堆积次序为 A', B', C' , 那么, 硅晶体原子密排面之间的堆积次序就为 $\dots AA'BB'CC' \dots$ 。所以, 硅晶体的密排面都是双层的, 如图 1.11 所示。通过简单计算可知, 各双层密排面的面内距离为 $\sqrt{3}a/12$, 各双层密排面之间的距离为 $\sqrt{3}a/4$ 。双层原子密排面的一个重要特点是: 在晶面内原子结合力强, 晶面与晶面之间的距离较大, 结合薄弱。

由图 1.11 可以看到, 在双层密排面内, 每层原子都有三个共价键与另一层相结合, 所以双层密排面内结合很强。而在两个双层面之间, 间距很大, 而且共价键稀少, 平均两个原子才有一个共价键, 致使双层密排面之间结合脆弱。金刚石晶格的晶面, 因有这样的特点而具有以下性质:

(1) 由于 $\{111\}$ 双层密排面本身结合牢固, 而双层密排面之间相互间结合脆弱, 在外力作用下, 晶体很容易沿着 $\{111\}$ 晶面劈裂。晶体中这种易劈裂的晶面称为晶体的解理面。

(2) 由于 $\{111\}$ 双层密排面结合牢固, 化学腐蚀就比较困难和缓慢, 所以腐蚀后容易暴露在表面上。

(3) 因 $\{111\}$ 双层密排面之间距离很大, 结合弱, 晶格缺陷容易在这里形成和扩展。

(4) $\{111\}$ 双层密排面结合牢固, 表明这样的晶面能量低。由于这个原因, 在晶体生长中有一种使晶体表面为 $\{111\}$ 晶面的趋势。

1.3 硅晶体中的缺陷

随着集成电路的发展, 无位错单晶已经成为基本材料, 但是在集成电路制造过程中必然会引进缺陷, 使得原来没有缺陷的硅片结构变得不完整^[2]。因此, 了解缺陷的产生及对器件参数的影响也就显得十分重要。晶体中主要有以下几种缺陷: ①点缺陷, ②线缺陷, ③面缺陷, ④体缺陷^[3~4]。

1.3.1 点缺陷

点缺陷在各个方向上都没有延伸, 主要包括以下几种: 自间隙原子、空位、肖特基缺陷、弗仑克尔缺陷和外来原子(替位式或间隙式)等, 如图 1.12 所示。自间隙原子和空位是本征缺陷, 只要温度不是绝对零度时, 就会出现本征缺陷。点缺陷在扩散和氧化的动力学中很重要, 许多杂质的扩散依赖于缺陷浓度, 硅的氧化速率也是如此。

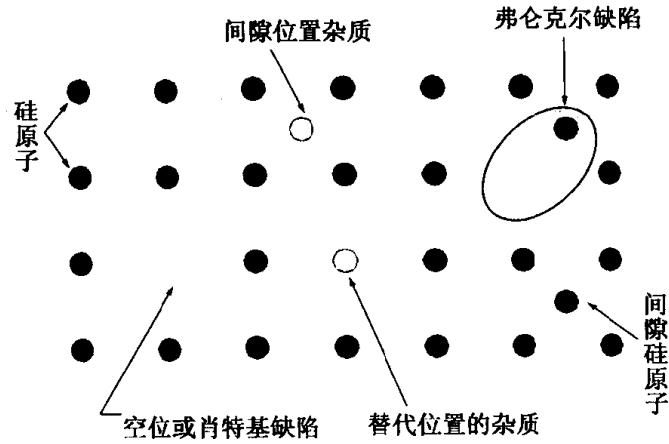


图 1.12 晶格中的点缺陷和类型

自间隙原子 自间隙原子是晶体中最简单的点缺陷,是指存在于硅晶格间隙中的硅原子。我们知道在室温下,晶格上的原子热振动平均能量仅是 0.026eV ,即使是在 2000K 的高温下也只有 0.17eV 。对密堆积的晶体来说,格点位置上的原子要跑到间隙中大约需要几个电子伏的能量(约 4.5eV),所以晶格原子靠热振动或辐射所得到的平均能量是很难离开格点位置。但是,晶格振动的能量存在涨落,因而晶体中仍会有少量的原子能获得足够的能量,离开正常格点位置进入间隙之中。表面的原子也可能进入附近的晶格间隙,成为自间隙原子。另外,对于具有金刚石型结构的硅晶体来说,因为从中心到顶角的八条对角线中,只有四条的中点有原子,其余四条没有,这样就提供了容纳间隙原子的较大空间。因此对硅晶体来说,自间隙原子的形成和迁移所需要的激活能也就比较小。根据理论分析,在热平衡情况下,间隙原子的密度 n_i 为

$$n_i = N_i e^{-E_i/kT} \quad (1.9)$$

其中 N_i 代表单位体积内的间隙数目, E_i 为晶体内形成一个间隙原子所需要的激活能。一般为几个电子伏。

空位 当晶格上的硅原子进入间隙,形成自间隙原子的同时,它们原来的晶格位子上就无原子占据,是空格点,即为空位。晶格位置上的原子可以从晶格热振动的涨落中获得足够能量,离开原位置,进入间隙或跑到晶体表面,在原位置形成空位。如果一个晶格正常位置上的原子跑到表面,在体内产生一个晶格空位,这种缺陷称为肖特基缺陷。如果一个晶格原子进入间隙并产生一个空位,间隙原子和空位是同时产生的,这种缺陷称为弗仑克尔缺陷。空位的多少与温度有着密切的关系,在热平衡情况下,空位密度与温度关系如下:

$$n_v = N_v e^{-E_v/kT} \quad (1.10)$$

其中 N_v 为单位体积内的格点数目(硅为 $5 \times 10^{22}\text{cm}^{-3}$), E_v 为形成一个空位所需要的激活能,对硅材料来说为 2.6eV 量级, k 为玻尔兹曼常数。产生肖特基缺陷所需要的能量约为 2.79eV ,如果取激活能为 2.8eV ,则在 1700K 时的平衡肖特基缺陷浓度为 $3 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ 数量级。

实际晶体中的空位浓度与热力学平衡浓度不同,这是因为晶体中在高温下形成的大量空位来不及依靠扩散方式运动到晶体表面,就被“冻结”在体内,使实际浓度大于平衡浓度。另外,因空位可以与许多杂质原子形成复合体,这又会使实际浓度低于平衡浓度。

晶体中的空位有很高的迁移能力,它们可以形成空位对或者空位团,其迁移激活能一般为

1eV左右。空位和间隙原子的产生都密切依赖于晶体温度,因此通常把空位和间隙原子称为热缺陷。硅晶体中的每个原子与四个最近邻的原子形成共价键,当空位形成时,四个共价键被断开,自由电子很容易与断开的键配对,形成能量较低的杂化键,所以晶体中的空位起受主作用。

外来原子 在晶体生长、加工和集成电路制造等过程中,不可避免要玷污一些杂质,一般称为外来原子。这些杂质可以占据晶格的正常位置,也可能存在于间隙之中。外来原子破坏了晶格的完整性,引起点阵的畸变,对晶体的电学性质产生重要影响,在下一节中将具体讨论这方面的问题。

1.3.2 线缺陷

线缺陷只在某一方向上延伸,在延伸方向的尺寸很大,在另外两个方向的尺寸很小。位错是晶体中常见的线缺陷,它可以通过范性形变产生。在位错附近,原子排列偏离了严格的周期性,相对位置发生错乱,位错一般可分为刃位错和螺位错。

晶体中的位错可以设想是由滑移所形成的,滑移以后两部分晶体重新吻合。滑移的晶面中,在滑移部分和未滑移部分的交界处形成位错。滑移量的大小和方向可用滑移矢量 b (也称柏格斯矢量)来描述。当位错线与滑移矢量垂直时,这样的位错称为刃位错,如果位错线与滑移矢量平行,称为螺位错。

刃位错如同把半个额外晶面挤到规则晶体中的晶面之间,如图 1.13 所示。图中的 ABCD 表示挤入的半个晶面,畸变区集中在位错线 AD 周围。沿位错线多挤入的一行原子,各具有一个未成键的电子,常把这种状态称为悬挂键。悬挂键可以通过给出一个电子或从晶体中接受一个电子而对晶体的电学性质产生影响。

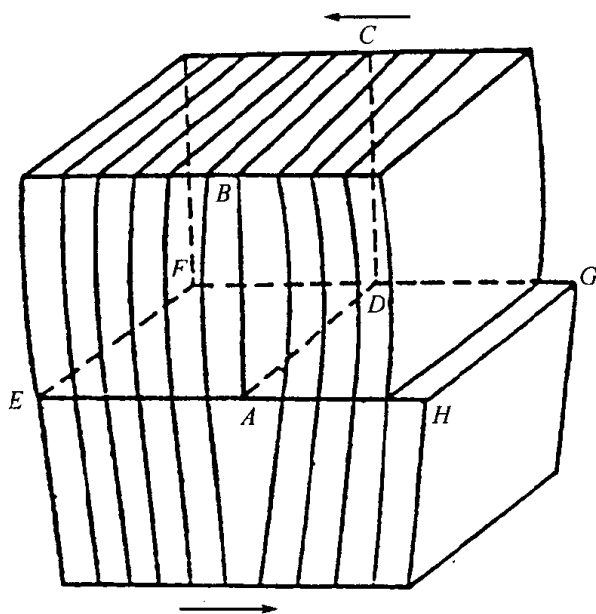


图 1.13 刃位错

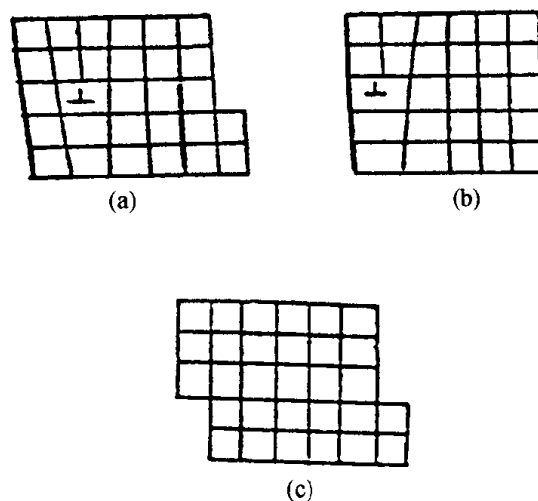


图 1.14 刃位错的滑移和滑移面痕迹

位错线在应力作用下可以在滑移面上沿滑移方向运动,如图 1.14 所示。另外,位错还可以作攀移运动,晶体中的空位或间隙原子依靠热运动可移到位错处,使额外半平面边界的原子增加或减少,引起半平面扩展或收缩,这就是位错攀移运动,如图 1.15 所示。

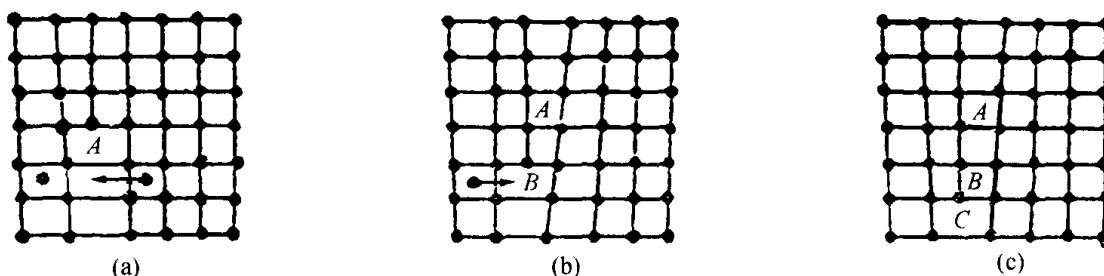


图 1.15 刃位错的攀移运动

螺位错的特点是位错线和滑移方向相互平行,图 1.16 示意地表明螺位错和滑移的关系。对螺位错的产生可作如下的设想,把晶体沿 $ABCD$ 面切开,并使两边的晶体前后相对滑移一个原子间距,然后黏合起来,这样在 AD 线附近的局部区域内的原子排列位置就会发生错乱,形成所谓螺位错缺陷。

在晶体中,滑移区与未滑移区的交界线实际上往往是曲线,也就是说位错线是一曲线。整个位错线中的某些部分与滑移矢量是垂直的,形成刃位错,某些部分与滑移矢量是平行的,形成螺位错,位错线的某些部分可能与滑移矢量既不垂直也不平行,一般称为混合位错。

对一般晶体来说,沿某些晶面往往容易发生滑移,这样的晶面称为滑移面。构成滑移面的条件是该面上的原子面密度大,而晶面之间的原子价键密度小,且间距大。对硅晶体来说, $\{111\}$ 晶面中,双层密排面之间原子价键密度最小,结合最弱,因此滑移常沿 $\{111\}$ 面发生,位错线也就常在 $\{111\}$ 晶面之间。

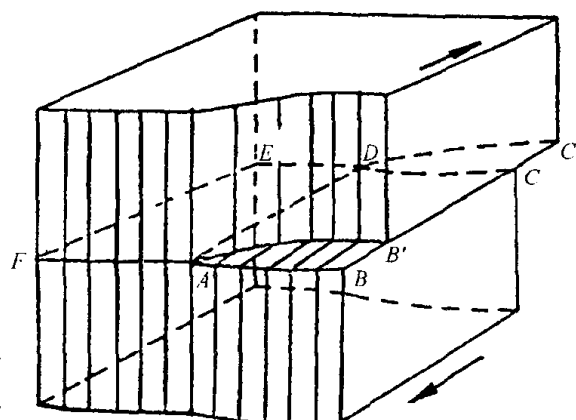


图 1.16 螺位错

除了由范性形变可以产生位错以外,晶格的失配也可引起位错^[2]。替位杂质的共价半径不是大于就是小于硅的共价半径,当在同一硅晶体中,若某一部分掺入数量较多的外来原子,就会使晶格发生压缩或膨胀,晶格常数将有所改变。在这种情况下,在掺杂和未掺杂的两部分晶体界面上,将产生一定数量的位错,以减少因晶格失配所产生的应力。产生的应力取决于杂质原子的大小和浓度。因此,在需要进行局部掺杂的情况下,掺入和硅原子半径相近的杂质将有利于减少这种类型的缺陷。如果硅原子的四面体半径为 r_0 ,则杂质原子的四面体半径可以写成 $r_0(1 \pm \epsilon)$,这里的 ϵ 定义为失配因子,表示由于引入这种杂质在晶格中产生应变程度,也表示能够在晶格中结合到电活性位置的掺杂剂的量^[5]。

1.3.3 面缺陷

晶体中的面缺陷是二维缺陷,面缺陷在两个方向上的尺寸都很大,另外一个方向上的尺寸很小。多晶的晶粒间界就是最明显的面缺陷,晶粒间界是一个原子错排的过渡区。在密堆积的晶体结构中,由于堆积次序发生错乱,称为堆垛层错,简称层错。层错是一种区域性的缺陷,在层错以外及以内的原子都是规则排列的,只是在两部分交界面处原子排列才发生错乱,所以它是一种面缺陷。层错的产生及堆积情况将在第七章详细讨论。