

Diplomarbeit Nr. 752 286

HF-Studienarbeit Nr.

PF-Studienarbeit Nr.

Thema:	Charakterisierung von Eigenspannungen in Multi-Layer-Systemen
Kandidat:	Kai Hiltmann
Anschrift:	Adlerstr. 42 7030 Böblingen
Beginn:	1. 12. 1989
Abgabe:	29. 6. 1990
Betreuer:	Dr.Ing. H. Kockelmann, Dipl.Ing. G. Samland

(Alle Rechte vorbehalten)

STUDIEN - DIPLOM - ARBEIT	Nr. 752 286
----------------------------------	-------------

<input type="checkbox"/> im Pflichtfach <input type="checkbox"/> im Hauptfach Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre	Ausgabe: 1.12.1989
---	-----------------------

KANDIDAT: Kai Hiltmann

BETREUER: Dr.-Ing. H. Kockelmann Dipl.-Ing. G. Samland	Tel. 2578 2574	Abt. Festigkeitsanalyse
--	-------------------	-------------------------

ART DER ARBEIT:

<input checked="" type="checkbox"/> theoretisch	<input type="checkbox"/> konstruktiv
<input type="checkbox"/> rechnerisch	<input type="checkbox"/> Literaturrecherche
<input type="checkbox"/> experimentell	

TITEL und AUFGABENSTELLUNG:

Finite-Elemente-Berechnung zur Charakterisierung von Eigenspannungen in Multilayersystemen angewendet in der Halbleiterindustrie

Hochintegrierte Schaltkreise basieren üblicherweise auf einem Siliziumeinkristall, an dessen Oberfläche die gewünschten elektronischen Funktionen durch verschiedene Prozesse (z.B. Diffusion, Implantation, Abscheidung) mit unterschiedlichsten Materialien realisiert werden. Dabei treten zwangsläufig Spannungen in den Materialien auf, die sich in Störungen der Kristallstruktur äußern und das zuverlässige Funktionieren des Bauelements stark beeinträchtigen können.

Mit Hilfe der Rechenmethode der Finiten-Elemente sollen die Einflußfaktoren auf diese Spannungen (Geometrie und Prozeßführung) an einem Strukturelement eines CMOS Speicherchips simuliert werden.

Als Basis für die FE-Berechnung ist hierzu eine Literaturrecherche bezüglich der erforderlichen thermo-elasto-plastischen Werkstoffkennwerte durchzuführen.

Die Arbeit erfolgt in Zusammenarbeit mit der Firma IBM, Sindelfingen.

Ucc
Stuttgart, den 9. August 1990

Genehmigt:

Prof. Kußmaul	<i>[Signature]</i> : 21.8.90
Prof. Dietmann	<i>[Signature]</i> 22.8.90

Charakterisierung von Eigenspannungen in Multi-Layer-Systemen

Kai Hiltmann

29. Juni 1990

Abstract

In this thesis, a finite-element calculation of the mechanical tensions at certain structures of an integrated circuit memory chip has been undertaken. A first step to this purpose was an extensive data collection of the mechanical properties of Silicon, Silicon Dioxide, and Silicon Nitride. These data are listed in section 3.1 of this work. Section 5 describes the numerical calculations of selected structures. These were,

1. Wafer covered with CVD-Oxide
2. CVD-Oxide plus LPCVD-Nitride
3. Process simulation of trench etching and filling
4. Qualitative investigation of an array of trenches, and
5. Stresses in the trench region after the LOCOS process.

It is shown that the calculated results are fitting well with experimental data.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Zielsetzung; Problemstellung	1
2	Physikalische Methoden der Spannungsmessung	3
1.	Zerstörende Spannungsmessung: Ätzmethoden	3
2.	Methode nach Stoney	7
3.	Röntgenographische Spannungsmessung	8
4.	Ramanspektroskopie	9
5.	Indirekte Spannungsmessung: Versetzungskonzentrationen	12
3	Werkstoffmechanik	14
1.	Grundlagen	14
1.	Spannungszustand	14
2.	Hookesches Gesetz	15
3.	Plastische Verformung	18
2.	Silizium	24
1.	Vorkommen, Metallurgie	24
2.	Herstellen von Wafern	26
3.	Kristallstruktur	28
4.	Eigenstressungen	32
5.	Verformungsverhalten	34
6.	Materialwerte von einkristallinem Silizium	37
7.	Materialwerte von polykristallinem und dotiertem Silizium	43
3.	Siliziumoxid SiO_2	45
1.	Eigenschaften	45
2.	SiO_2 in der Halbleitertechnik	51
3.	Materialwerte	52
4.	Eigenstressungen in SiO_2 -Filmen	58
4.	Siliziumnitrid Si_3N_4	60
1.	Filmherstellung	60
2.	Filmstressungen	62
3.	Materialwerte	62
5.	Wechselwirkung zwischen Silizium-Kristall und Oberflächenfilmen	64
4	Die Methode der Finiten Elemente	67
1.	Grundlagen	68
2.	Das Programmsystem Patran	71
3.	Das Programmsystem Abaqus	73
1.	Elementarten	73
2.	Materialverhalten	75
3.	Aufbau des Eingabefiles	75
5	Ablauf der Simulationsrechnung	79
1.	Wafer mit Oxidschicht	79
1.	Problemstellung	79
2.	Zweidimensionales Modell	81
3.	Zweidimensionale Rechnung	81
4.	Dreidimensionales Modell	85
5.	Dreidimensionale Rechnung	85
2.	Wafer mit Oxid- und Nitridschicht	87
1.	Modell und Rechnung	91

3. Prozeßsimulation Grabenätzung	97
1. Modell	97
2. Schritt 1—Abkühlen des Modells	100
3. Schritt 2—Ätzen von Film und Substrat	106
4. Auffüllen des Grabens mit Polysilizium	112
4. Reihe von Grabenstrukturen mit Unterbrechung	118
1. Erste Rechnung	118
2. Zweite Rechnung	128
5. Trenchstruktur mit SROX	133
1. Rechnung	133
2. Ergebnisse	136
6 Zusammenfassung und Diskussion	159
7 Schlußbemerkung	160
8 Anhang (vertraulich)	161
9 Literatur	165

Formelzeichen und Konstanten

Zeichen	Einheit	Bedeutung
A	m^2	Fläche
α_T	K^{-1}	Thermische Ausdehnung
c_{ik}	MPa	Verallgemeinerter Elastizitätsmodul
c_p	J/(kg K)	Wärmekapazität bei konstantem Druck
d	m	Schichtdicke
E	MPa	Elastizitätsmodul (Youngmodul)
$\bar{\epsilon}$	1	Dehnung
$\dot{\bar{\epsilon}}$	s^{-1}	Verformungsgeschwindigkeit
$\bar{\bar{\epsilon}}$	1	Dehnungstensor
η	d Pa s	dynamische Viskosität
f	N	Reaktionskraft oder -moment
\bar{F}	N	Kraft
G	MPa	Schubmodul
k	$8,617607 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$	Boltzmann-Konstante
k	MPa	Steifigkeit eines finiten Elements
l	m	Länge
λ	W/(K m)	Wärmeleitfähigkeit
m_R	u	Relative Atommasse
μ	1	Querkontraktionskoeffizient (Poissonzahl)
R	m	Krümmungsradius
R_e	MPa	Makroskopische Elastizitätsgrenze
ρ	kg/m^3	Dichte
\bar{s}, \underline{s}	MPa	Spannungsvektor
s_{ik}	MPa^{-1}	Verallgemeinerte Nachgiebigkeit
$\bar{\bar{s}}, \underline{\underline{s}}$	MPa	Spannungstensor
σ	MPa	Normalspannung
t	s	Zeit
t_R	s	Relaxationszeit, Zeitkonstante
T	K	Absolute Temperatur
τ	MPa	Schubspannung
τ_{eff}	MPa	effektive Schubspannung
τ_i	MPa	innere Schubspannung
τ_y	MPa	kritische Schubspannung, bei der im Kristall Abgleiten einsetzt
τ_{ly}	MPa	untere kritische Schubspannung
τ_{uy}	MPa	obere kritische Schubspannung
T_S	K	Schmelztemperatur
θ	$^{\circ}C$	Celsius-Temperatur
ϕ	rad	Winkel
u	m	Verschiebung
U	eV	Aktivierungsenergie
v	m	Verschiebung, Verdrehung
x	m	räumliche Koordinate
y	m	räumliche Koordinate
z	m	räumliche Koordinate



1 Einleitung und Zielsetzung

Moderne elektronische Bauelemente werden häufig in sogenannter monolithischer Bauweise hergestellt. Mit diesen Verfahren ist die hochgradige Miniaturisierung möglich geworden, die die Entwicklung der Elektronik in den letzten Jahrzehnten entscheidend geprägt hat. Elektronische Funktionen werden hier auf der Oberfläche von Halbleiterkristallen - vorzugsweise Silizium - realisiert, indem Isolator- oder Leiterschichten auf diese aufgebracht und die Kristallstruktur lokal durch Eindiffundieren anderer Elemente gezielt verändert wird. Beispiele für die Darstellung solcher Funktionen zeigt Bild 1.1.

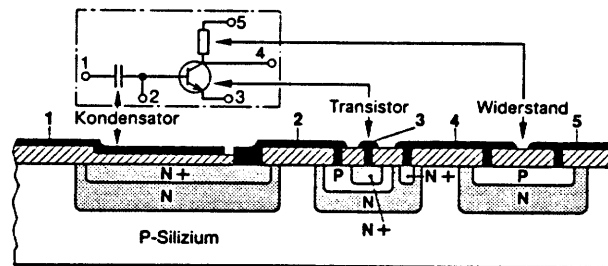


Bild 1.1: Realisierung elektronischer Funktionen in monolithischer Bauweise (bipolar), Schaltung und Ausführung; 1 - 5: Anschlüsse [168]

Die Forderung, die Dichte der Bauelemente zu vergrößern und damit die Abmessungen der einzelnen Strukturen zu verkleinern, stößt inzwischen auf ihre physikalischen Grenzen. Um dennoch pro Flächeneinheit die Anzahl der Elemente weiter zu erhöhen und gleichzeitig die Verbindungswege möglichst kurz zu halten, wird zunehmend dreidimensional gebaut, d.h., durch eine entsprechende Anzahl aufgebrachtter Schichten werden Bauteile mehrlagig als einander bedeckende Strukturen angeordnet.

Diese Materiallagen werden bei charakteristischen Temperaturen aufgebracht: Durch Sputtern bei Raumtemperatur, Glühentladung (250°C), chemischem Abscheiden ($400 - 900^{\circ}\text{C}$) oder thermischer Oxidation (Glühen bei ca. 1000°C). Als Materialien werden neben dem Halbleiterkristall, der je nach Fremdstoffgehalt unter verschiedenen mechanischen Spannungen steht, häufig SiO_2 als Isolatormaterial und Chrom für Leiterbahnen eingesetzt. Hinzu kommen Maskenmaterialien für Diffusions-, Ätz-, Abscheide- und Oxidationsprozesse (Fotolacke, Siliziumnitrid), die nach Prozeßende wieder entfernt werden.

Die Tatsache, daß ein Temperaturintervall von 1000K im Herstellungsablauf mehrmals durchfahren wird und die feste Verbindung ganz unterschiedlicher Stoffe miteinander kann lokal zu sehr hohen Spannungskonzentrationen in der Größenordnung von 1 GPa (z.B. in Si_3N_4 -Filmen) führen. Hierbei können Falten oder Risse in Filmen auftreten [55, 103], aufgebraute Schichten abplatzen [150] oder plastisches Fließen in Film oder Substrat eintreten. Während die Filme infolge des Abscheideprozesses oder ihrer geringen Dicke meist amorph sind [55], führt Fließen im Substratkristall zu exponentieller Vermehrung von Versetzungen und zu starker Schädigung oder Zerstörung der elektronischen Funktionen.

Halbleiter bilden kovalente Bindungen. Eine Stufenversetzung stellt somit eine Reihe nicht abgesättigter Bindungen dar, die wie ein Akzeptor- oder Donatorzustand wirken kann [66] und die Rekombination von Ladungsträgern erleichtert. Hiervon abgesehen sammeln sich an Versetzungen durch die lokale Gitteraufweitung bevorzugt Fremdstoffe an, die die Leitfähigkeit stark erhöhen, die Durchbruchsspannung an p-n-Übergängen senken und zu Kurzschlüssen an Transistoren oder Kondensatoren führen können. Ansammlungen des ständig vorhandenen Sauerstoffs reagieren zu SiO_2 -Phasen, die ihrerseits wieder als Mikrokerben und Versetzungsquellen wirken [66,71]. Auch in Abwesenheit von Versetzungen ist nachgewiesen worden, daß mechanische Spannungen und die damit verbundene Änderung der Gitterparameter ab ca. 1000 MPa elektronische Funktionen zu beeinträchtigen vermögen [80].

Es wurde deswegen in den letzten zwei Jahrzehnten eine Vielzahl von Untersuchungen über das mechanische Verhalten der verwendeten Filmwerkstoffe durchgeführt. Als besonderes Problem wurde dabei der als Oxidationsmaske verwendete Nitridfilm erkannt. Die publizierten Untersuchungen befassen sich jedoch nur mit allgemeinen Fragen dieses Komplexes und geben nur beschränkten Aufschluß über das Verhalten einer konkreten geometrischen Anordnung. Aus diesem Grunde wurde die Aufgabe gestellt, mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente die Spannungsverteilung bei bestimmten Fertigungsstufen eines Bauteils nachzurechnen und beobachtete Spannungs- und Versetzungskonzentrationen zu erklären.

2 Physikalische Methoden der Spannungsmessung

Die von außen auf elektronische Bauteile wirkenden Kräfte sind zumeist sehr gering, und die einzigen auftretenden Spannungen sind Eigenspannungen, die durch unterschiedliche thermische Ausdehnung der Verbundmaterialien und verschiedene Gitterparameter, zum Teil auch durch die Art des Aufbringens, hervorgerufen werden.

Die Verfahren zur Untersuchung dieses Eigenspannungszustandes lassen sich ähnlich wie die an großen Bauteilen üblichen einteilen [1023] in zerstörende und zerstörungsfreie oder

- mechanische
- röntgenographische
- spezielle Verfahren.

Zu den zerstörenden zählen hier in erster Linie die verschiedenen Ätztechniken wie Zungen-, Brücken- und Grabenätzmethode; zu den nicht zerstörenden die Methode nach Stoney (mechanisch), röntgenographische Messung und Ramanspektroskopie. Schließlich ist es bei der Untersuchung einkristalliner Werkstoffe auch noch möglich, Auswirkungen von Spannungskonzentrationen wie Versetzungsanhäufungen zu Abschätzungen über den Spannungszustand heranzuziehen.

2.1 Zerstörende Spannungsmessung: Ätzmethoden

Ein unter Eigenspannungen stehendes Bauteil befindet sich nach außen hin im Gleichgewicht, d.h. das Spannungsfeld im Bauteil ist in sich geschlossen. Ein Grundgedanke der mechanischen Messung von Eigenspannungen besteht nun darin, dieses Spannungsfeld durch Materialabtrag zu unterbrechen. Aus der Art der Deformation, über die das Bauteil in einen neuen Gleichgewicht zurückkehrt, kann dann der vorherige Zustand bestimmt werden.

Im Fall beschichteter Wafer befinden sich Film und Substrat einander gegenüber im Gleichgewicht. Durch lokales Trennen der Komponenten, z.B. durch Ätzen, läßt sich die Filmspannung ermitteln. Die erreichbare räumliche Auflösung wird dann begrenzt durch die Feinheit der Ätzstrukturen.

Zungenätztechnik Bei diesem von der Auswertung her einfachsten Verfahren werden Filmstreifen auf drei Seiten freigelegt, Bild 2.1 und das Substrat darunter herausgeätzt.

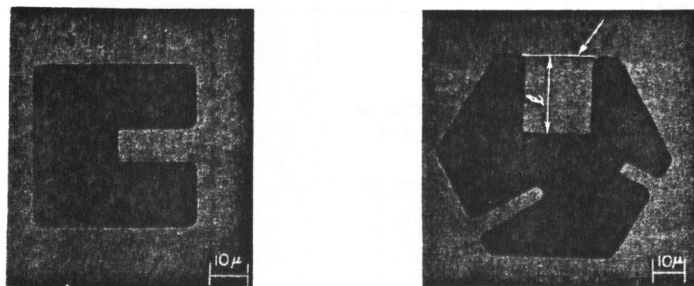


Bild 2.1: Masken für die Zungenätzung und Referenzmaße [80].

Die Längenänderung wird anhand von Aufnahmen vor und nach der Unterätzung gemessen.

Durch unterschiedliche Orientierung der Zungen lassen sich auch Anisotropien der Filmspannung sofort erkennen.

Die Genauigkeit dieser Methode ist nach [80] aus zwei Gründen gering:

1. Die Unterätzung greift auch das Filmmaterial an und verändert damit die Referenzlänge.
2. Lange Zungen aus dünnen Filmen biegen sich unter ihrem Eigengewicht durch und erscheinen in der Aufsicht damit kürzer.

Brückenätztechnik Hier werden Filmstreifen an beiden Enden festgehalten und die Weite ihres Ausknickens zur Spannungsmessung verwendet, Bild 2.2. Im Unterschied zur

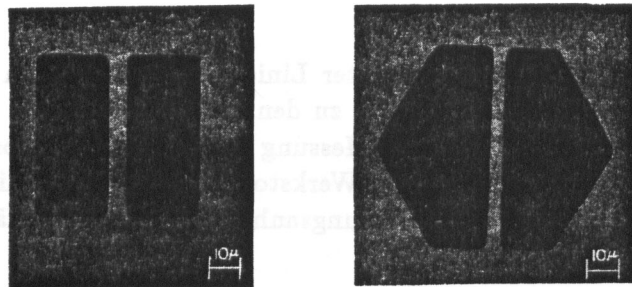


Bild 2.2: Masken zur Brückenätzung für alle Orientierungen (links), für $\langle 111 \rangle$ -orientierte Substrate (rechts) [80].

Zungenmethode sind mit dieser nur Druckeigenspannungen meßbar. Mit den Abmessungen wie in Bild 2.3 errechnet sich die Filmspannung nach der Formel

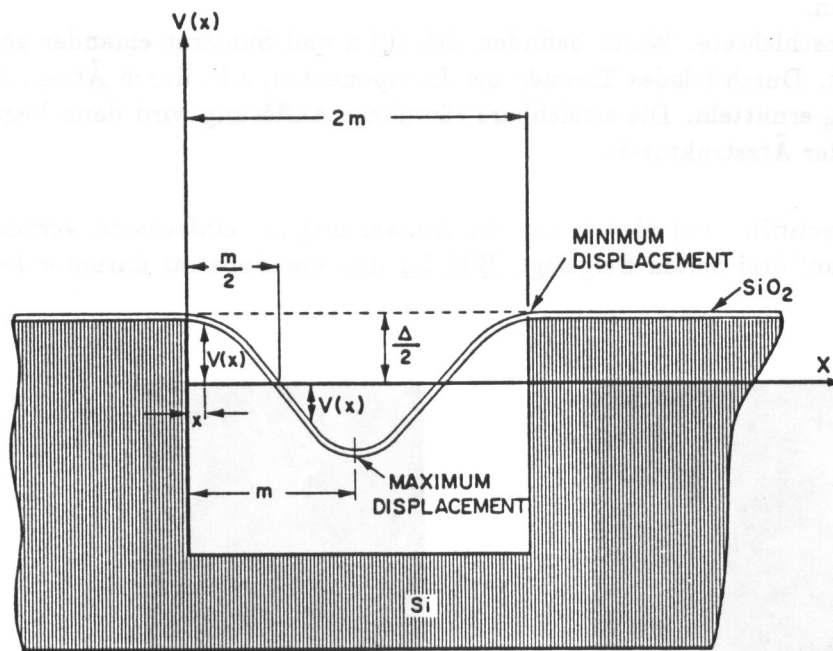


Bild 2.3: Verformung der Filmbrücke unter Druckspannung [80].

$$\sigma = -\frac{E}{1-\mu} \left(\frac{m}{k E \pi} - 1 \right) + \frac{\Delta t E}{m^2}$$

mit $\alpha = \arcsin \frac{\Delta}{\pi} [4m^2 + \Delta^2 \pi^2]^{-\frac{1}{2}}$

$$k = \frac{\sqrt{4m^2 + \Delta^2 \pi^2}}{2\pi}$$

$E :=$ E-Modul

$\mu :=$ Querkontraktion

$t :=$ Filmdicke

Die Genauigkeit dieser Methode ist am höchsten für dünne Filme. Die maximale Filmdicke wird von [80] zu $t \approx 25 \text{ nm}$ angegeben.

Eine Variante dieser Methode, die Einflüsse aus nichtlinearer Werkstoffverformung weitgehend vermeidet, mißt nicht die tatsächliche Knickweite, sondern bestimmt anhand eines Sets von Brücken unterschiedlicher Abmessung wie in Bild 2.4 die Spannung aus der

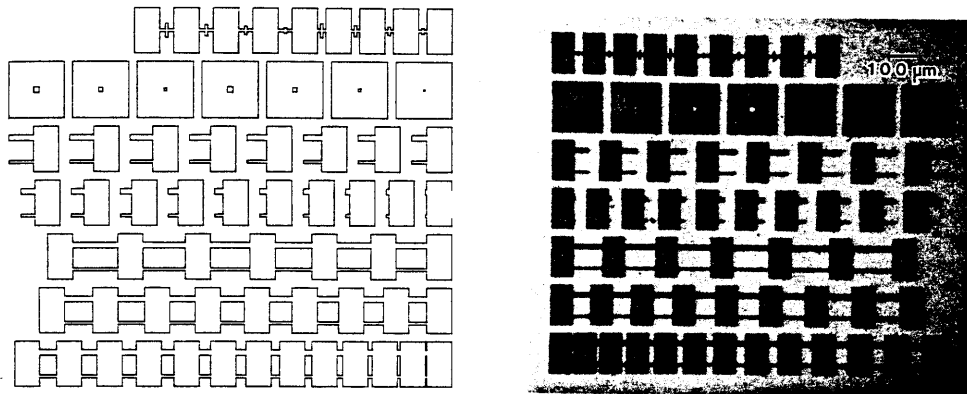


Bild 2.4: Maske mit Brücken verschiedener Länge (5 bis $160 \mu\text{m}$) und Breite ($10 \mu\text{m}$ und $20 \mu\text{m}$). Links: Maske; rechts: Verformte Struktur [95].

kritischen Länge, die zum Knicken führt.

Als weitere Variation wird in [97] eine Anordnung vorgeschlagen, mit der sowohl Zug- als auch Druckspannungen gemessen werden können, Bild 2.5.

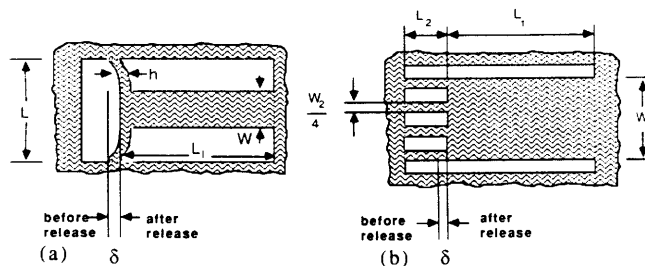


Bild 2.5: Modifizierte Struktur. (a) T-Form, (b) H-Form [97]

Grabenätztechnik Wird ein Graben in die Oberfläche eines beschichteten Wafers geätzt, Bild 2.6, der den Film auf eine Breite a hinterschneidet, so wellt sich der Film unter Druckspannungen an dieser Stelle, Bild 2.7. Die Periode dieses Wellensaumes ist eine Funktion von Hinterschneidungstiefe/Saumlänge und des herrschenden Spannungszustandes. Für die Dehnung ϵ_F gibt Borden in [90] an:

$$\epsilon_F \approx \left(\frac{\pi \Delta}{2m} \right)^2$$

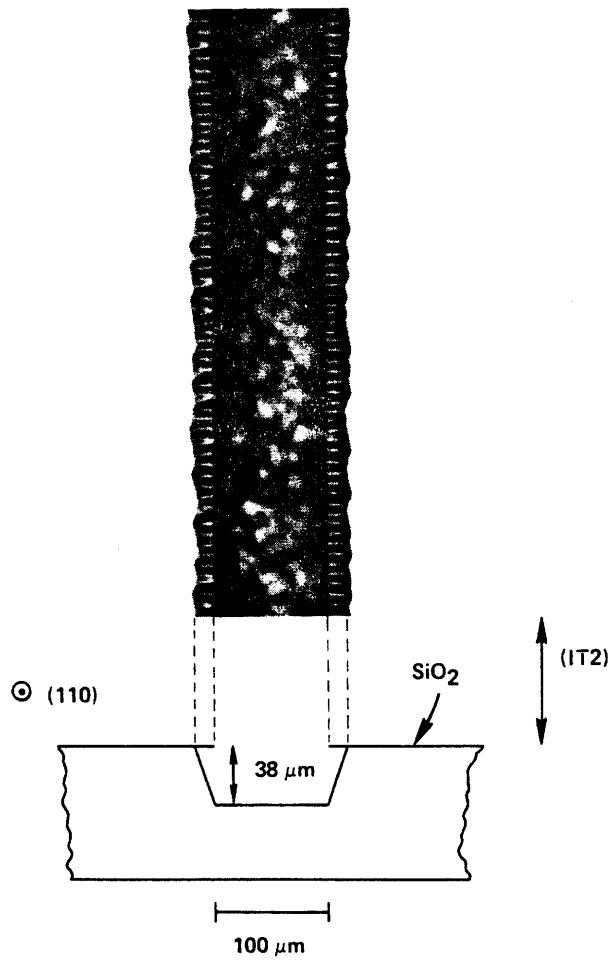


Bild 2.6: Wird ein Graben in Film und Substrat geätzt, der den Film hinterschneidet, dann wirft dieser unter Druckspannung Falten. Aus deren Periode lassen sich Dehnung und Spannung errechnen [90].

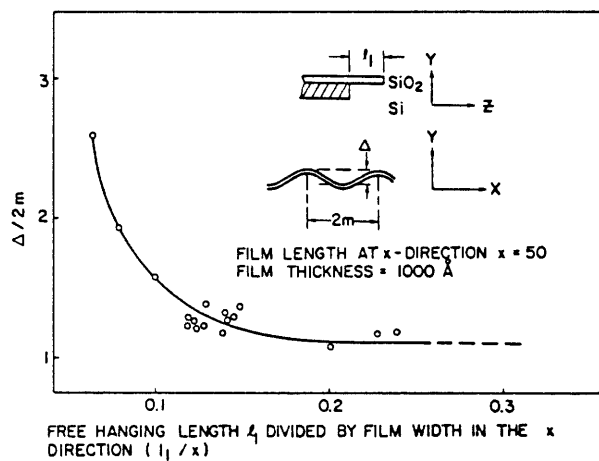


Bild 2.7: Der Parameter $\Delta/2m$ als Funktion von Hinterschneidungstiefe l_1 und Saumlänge x [80].

2.2 Methode nach Stoney

Bereits Ende des 19. Jahrhunderts wurde entdeckt, daß elektrolytisch abgeschiedene Metallfilme unter Spannung — in der Regel Zugspannung — stehen. Stoney veröffentlichte im Jahre 1909 einen Vorschlag, nach dem aus der Verbiegung einer beschichteten Platte auf die Filmspannung geschlossen werden kann.

Betrachtet man eine Platte der Breite b , Dicke d mit einem dünnen Film der Dicke t , Bild 2.8, so gilt für die Biegemomente M :

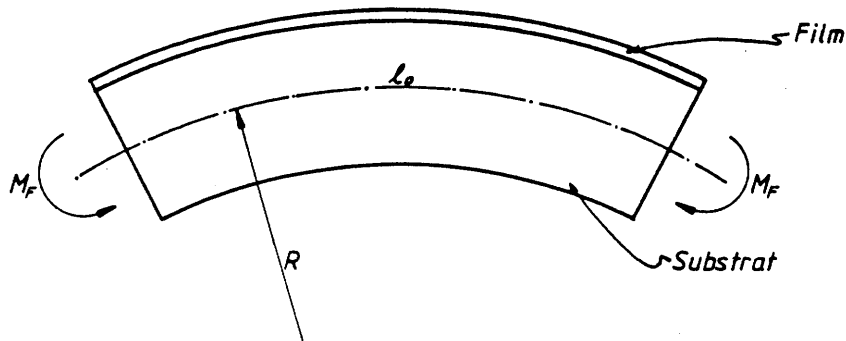


Bild 2.8: Platte mit dünnem Film

$$\begin{array}{ll} \text{Film:} & M_F = \sigma_F t b \frac{d}{2} \\ \text{Substrat:} & M_S = E_S \epsilon_{max} \frac{bd^2}{6} \end{array}$$

und mit $\epsilon_{max} = \frac{d}{2R}$ für die Spannungen:

$$\sigma_F = \frac{1}{6} E_S \frac{d^2}{tR} \quad \text{einachsig} \quad (1)$$

$$\sigma_F = \frac{1}{6} \frac{E_S}{1 - \mu_S} \frac{d^2}{tR} \quad \text{zweiachsig} \quad (2)$$

$$\text{für } t \ll d \ll R$$

Hier sind t die Dicke des Films, d jene des Substrats, R der Biegeradius, E der E-Modul und μ die Querkontraktion.

Diese Methode hat sich durch ihre äußerst einfache Durchführung als Standardverfahren zur Messung von Filmspannungen auf Wafern etabliert. An Stelle des Biegeradius wird häufig die Durchbiegung $z = l^2/8R$ gemessen. Scheuermann zählt hier in [67] die folgenden Möglichkeiten auf:

Mikroskop — einfach, zuverlässig

Kapazitiv — der Wafer wird als Teil eines Kondensators geschaltet

Mechanisch — mit Meßuhr oder induktivem Feinmeßgerät

Elektromechanisch — die Platte wird über einen Hebel mit einer elektromagnetischen Waage verbunden

Elektromagnetisch — die Rückbiegekraft wird als Funktion des Spulenstroms gemessen

Interferometrisch — Verbiegungsmessung über Laserinterferometrie

Zur Online-Messung während der Waferbeschichtung wird weiterhin eine Variation genannt [z.B. 180], in der die Waferrückseite als Spiegel wirkt und die Krümmung aus der Winkeldifferenz zweier ursprünglich paralleler Laserstrahlen ermittelt wird.

Der gravierende Nachteil des Verfahrens nach Stoney besteht jedoch darin, daß nur ein Spannungsmittel über ganze Scheiben, keine lokale Spannungen gemessen werden können.

2.3 Röntgenographische Spannungsmessung

Grundlage für die Messungen mit Röntgenstrahlung ist die sogenannte Bragg-Beugung von Strahlen an Kristallgitterebenen, Bild 2.9. Beugungsmaxima ergeben sich hier, wenn die

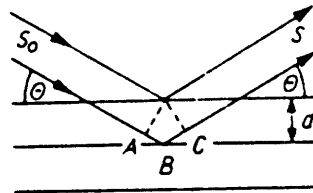


Bild 2.9: Braggsche Reflexionsbedingung [1025]

Wegdifferenz $ABC = 2d \sin \Theta$ der beiden Teilstrahlen ein ganzes Vielfaches der Wellenlänge beträgt. Dies ist die Aussage des *Braggschen Gesetzes*:

$$n\lambda = 2d \sin \Theta \quad (3)$$

Die Messung des "Reflexions-"Winkels erlaubt damit die Berechnung des Gitterabstands d . Wirkt auf einen Kristall die Zugspannung p , Bild 2.10, so bewirkt die Querdehnung

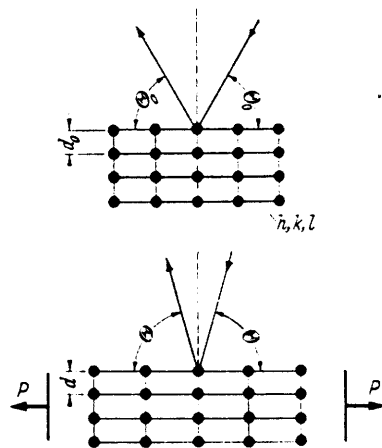


Bild 2.10: Änderung der Netzebenenabstände und des Bragg-Winkels unter Einwirkung äußerer Kräfte auf das Kristallgitter [234].

eine Verringerung des Gitterabstandes senkrecht zur Oberfläche:

$$d = d_0(1 - \epsilon_q) = d_0(1 - \mu/E p)$$

$$p = \frac{E}{\mu} (1 - d/d_0) = \frac{E}{\mu} \left(1 - \frac{\sin \Theta_0}{\sin \Theta}\right)$$

Quantitative Spannungsmessung Das oben beschriebene Prinzip der Spannungsmessung ist in dieser Form nur auf Einkristalle anwendbar. In der metallkundlichen Praxis werden in der Regel polykristalline Werkstoffe untersucht. Ein möglicher Meßaufbau hierfür findet sich in Bild 2.11. Ein monochromatischer Röntgenstrahl fällt in Richtung \bar{P} auf eine feinkristalline Probe. Die Bedingung der Braggschen Reflexion ist nun für alle Kristalle erfüllt, deren Gitterebenen mit dem einfallenden Strahl den Winkel Θ einschließen. Die Richtung aller Beugungsmaxima 1. Ordnung liegt damit auf einem Interferenzkegel I mit dem halben Öffnungswinkel $2\eta = 180^\circ - 2\Theta$ (vgl. auch das vorherige Bild). Dieser Kegel ist nur bei symmetrischem Spannungszustand ein reiner Kreiskegel. Aus seiner Deformation, d.h. dem Öffnungswinkel in der jeweiligen Meßrichtung, lassen sich deswegen auch die Komponenten des dreiachsigen Spannungszustandes ermitteln.

Röntgentopographie nach Lang Auch dieses Verfahren beruht auf dem Bragg-Effekt. Der Kristall wird hier in Richtung des Beugungsmaximums orientiert, Bild 2.12 und in dieser Orientierung am Primärstrahl vorbeigeführt. Bei einem idealen Kristall würde in einer derartigen Anordnung der Film konstant mit dem Beugungsmaximum strukturlos belichtet werden. Sind jedoch Gitterbaufehler oder äußere Spannungen vorhanden, dann ist in ihrer Umgebung der regelmäßige Gitteraufbau gestört. Ein veränderter Atomabstand bedeutet nach Gleichung (3) einen veränderten Bragg-Winkel, sodaß die Photoplatte aus dem Beugungsmaximum gerät. Eine derartige Aufnahme zeigt Bild 2.13. Mit Hilfe der Lang-Topographie können einzelne Versetzungen bis zu einer Dichte von ca. $10^4/\text{cm}$ [1021] aufgelöst und Spannungskonzentrationen deutlich — allerdings nur qualitativ — gefunden werden.

Sektionstopographie Beim Lang-Verfahren wird ein Röntgenstrahl mit linienförmigem Querschnitt über das Material geführt. Verwendet man statt dessen einen punktförmigen Strahl oder bewegt die Probe in der Lang-Apparatur nicht, so erhält man eine Querschnitts- oder Sektionsaufnahme. Die Meßanordnung für dieses Verfahren ist in Bild 2.14 dargestellt. Beim Eintritt des Strahls in den Kristall tritt Braggsche Beugung auf, und er teilt sich in zwei Äste, die sich aufgrund von Mehrfachbeugung noch weiter auffächern, Bild 2.15. Die Teilstrahlen in diesem Gebiet (Wellenfeld) sind jedoch nicht unabhängig voneinander. Vielmehr bilden sie ein System, in dem die Gesamtenergie sich ähnlich wie bei gekoppelten Pendeln periodisch umverteilt [234a]. Aus ihrer Wechselwirkung resultiert daher eine Interferenzverteilung wie in Bild 2.16, die auf der Photoplatte ein für perfekte Kristalle typisches Muster, die Pendellösungsstreifen, erzeugt.

Ist das Kristallgitter durch lokale Dehnungen oder partielle Versetzungen deformiert, so wird dieses regelmäßige Bild gestört, und helle und dunkle Bereiche werden sichtbar, Bild 2.17.

Das Geschehen, auf dem entsprechend der kinematischen und der dynamischen Beugungstheorie die Bildentstehung beruht, ist im einzelnen sehr komplex und soll hier nicht weiter behandelt werden, statt dessen sei auf die Literatur [z.B. 79 und 234] verwiesen.

Auch diese Topographie wird überwiegend qualitativ eingesetzt. Es gibt Ansätze zu einer quantitativen Spannungsermittlung aus dem Beugungsbild, z.B. [24,82], jedoch sind diese sehr aufwendig und lassen sich noch nicht allgemein anwenden.

2.4 Ramanspektroskopie

Trifft monochromatisches Licht auf eine Substanz, dann weist das Streulicht noch neben der ursprünglichen im allgemeinen schwächere weitere Linien auf. Die Frequenz dieser zusätzlichen Linien kann sowohl ober- als auch unterhalb der Erregerfrequenz liegen. Diese

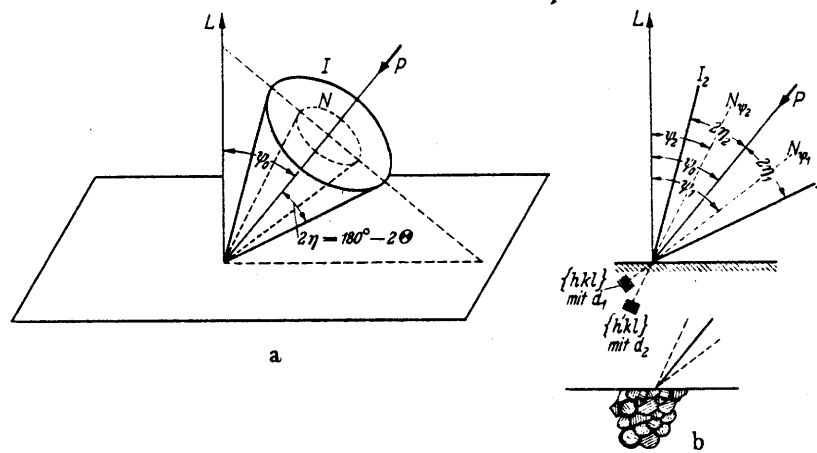


Bild 2.11: Geometrische Verhältnisse bei der Rückstrahlinterferenzerscheinung eines feinkristallinen metallischen Werkstoffs [234].

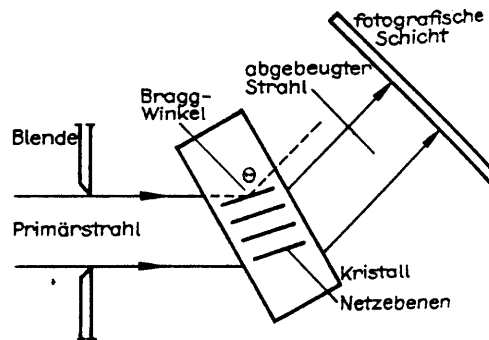


Bild 2.12: Prinzip der Transmissionstopographie [1020].

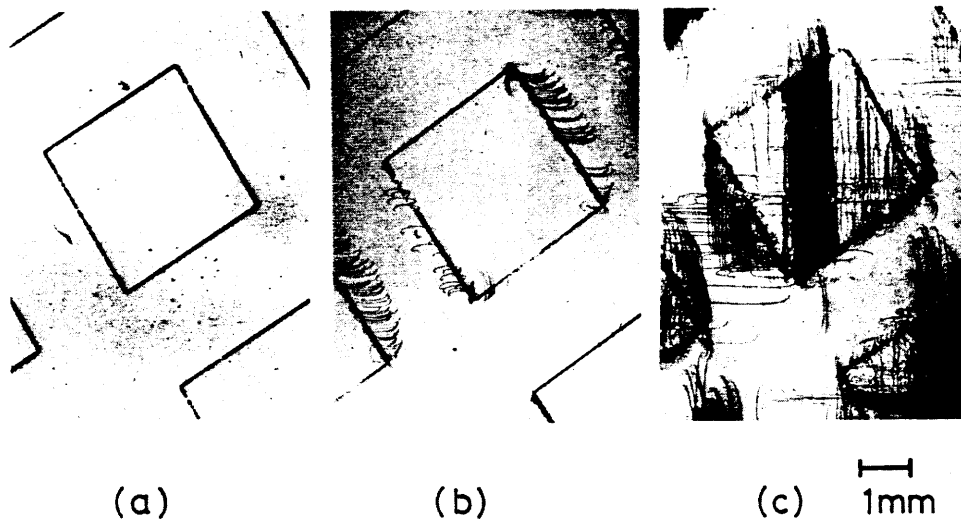


Bild 2.13: Lang-Topographie eines Siliziumwafers mit Si_3N_4 -Strukturen, die bei unterschiedlicher Temperatur abgeschieden wurden. Das Auftreten von Versetzungen an den Nitridkanten in Bild (b) und (c) ist deutlich zu erkennen [89].

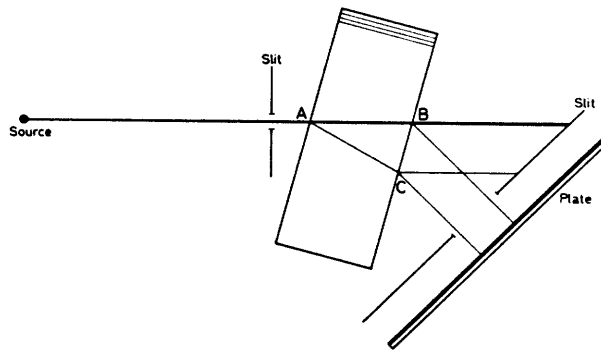


Bild 2.14: Meßanordnung bei der Sektionstopographie [234b].

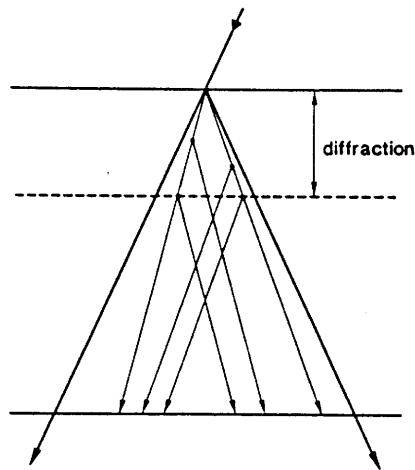


Bild 2.15: Strahlengang mit Mehrfachbeugung bei der Sektionstopographie [89].

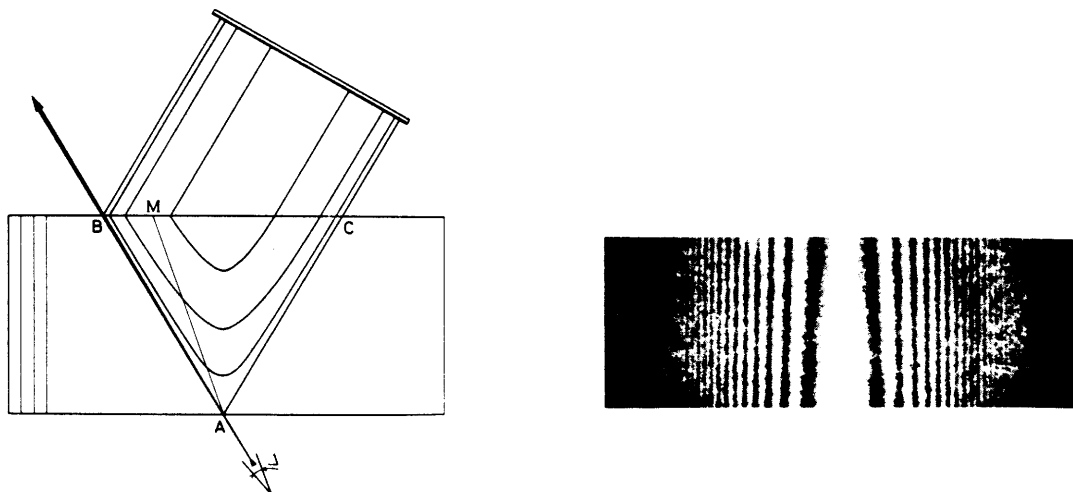


Bild 2.16: Interferenzmaxima im Wellenfeld und Pendellösungsstreifen [234].

Modulation des eingestrahnten Lichts wird durch eine vom Bindungszustand abhängige Anregung der Substanz zu Gitterschwingungen hervorgerufen. Aus der Frequenzverschiebung lassen sich daher Rückschlüsse auf Bindungsverhältnisse, Bindungswinkel und mechanische Spannungen ziehen [1018]. Das laterale Auflösungsvermögen dieser quantitativen Methode ist verglichen mit den vorher beschriebenen sehr hoch. Es wird im wesentlichen vom Durchmesser des anregenden Lichtbündels begrenzt. Die gemessenen Spannungen bilden damit den Mittelwert aus einer Halbkugel mit dem Bündeldurchmesser [101]. Es ist jedoch notwendig, vor der Spannungsmessung eine Kalibrationsmessung an einer Probe mit bekanntem Spannungszustand vorzunehmen. Auch hohe Spannungen bewirken nur geringe Linienverschiebungen, die im allgemeinen nicht sauber voneinander getrennt werden können. Die Meßgenauigkeit dieser Methode ist daher nicht sehr hoch.

2.5 Indirekte Spannungsmessung: Versetzungskonzentrationen

Nach den Fortschritten der Halbleitermetallurgie der letzten Jahrzehnte ist es inzwischen möglich, Kristalle versetzungsfrei herzustellen [207]. Während ihrer Weiterverarbeitung läßt sich jedoch die Entstehung von Versetzungen nicht vollkommen vermeiden. Dies liegt an stets auftretenden Spannungskonzentrationen, vor allem an Strukturkanten, vgl. Bild 2.11, und lokaler Gitterauflösung durch chemische Vorgänge wie bei der thermischen Oxidation [160]. Wegen der schädlichen Auswirkungen von Versetzungen auf das Betriebsverhalten ist die prozeßinduzierte Versetzungsentstehung in mehreren Arbeiten für einfache Fälle untersucht worden [z.B. 28, 41, 181].

Versetzungskonzentrationen können demnach bei reinen Werkstoffen auf lokale Spannungen in der Höhe der Streckgrenze (siehe Abschnitt 3.2.5) zurückgehen — also an Ort und Stelle erzeugt — oder durch den Spannungszustand in Bewegung gebracht und an der betreffenden Stelle festgehalten worden sein. Dieser Vorgang des Versetzungseinfangs läßt sich berechnen mit Hilfe der auf eine Versetzung wirkenden längenbezogenen Kraft:

$$\frac{1}{l} \underline{F} = \underline{t} \times (\underline{s} \underline{b})$$

mit: \underline{t} : Vektor parallel zur Versetzungsrichtung
 \underline{s} : Spannungstensor
 \underline{b} : Burgersvektor

Vanhellemont et al. [28c] untersuchten einen derartigen Versetzungseinfang an den Kanten der Nitridmasken beim Oxidationsprozeß, Bild 2.18.

In hochdotierten Kristallen können Versetzungen auch allein aufgrund des inneren Vegardschen [178] Spannungszustandes auftreten. Für die Dotierungselemente Bor und Phosphor werden derartige Versetzungen in [72 und 222] behandelt.

Versetzungskonzentrationen sind also das Produkt mehrerer Faktoren, die allerdings oft gegen die Spannungskonzentration vernachlässigt werden können. Bei genauer Kenntnis von Geometrie-, Material- und Prozeßwerten ist es im Prinzip möglich, aus der Versetzungsverteilung den Spannungszustand zum Teil zu rekonstruieren. Praktikabler ist allerdings, qualitativ eine Korrelation zwischen dem Auftreten von Versetzungen und Spannungsspitzen zu betrachten.

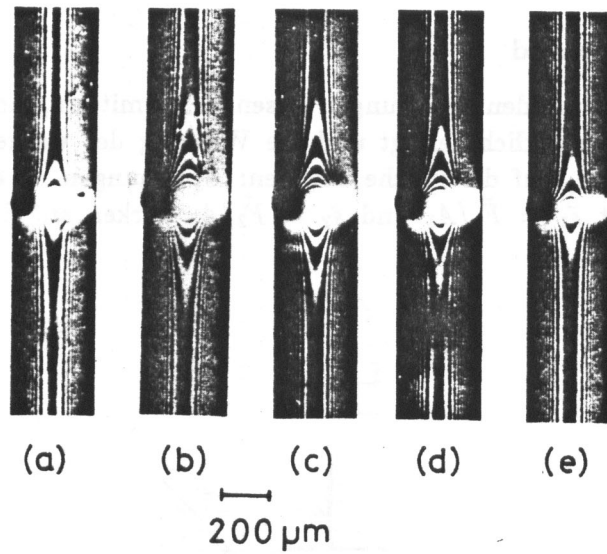


Bild 2.17: Sektionstopogramme von Wafern mit einer Spannungsspitze auf der linken Oberfläche. Die Spannung ist in Teilbild (a) am größten, in (e) am kleinsten [89].

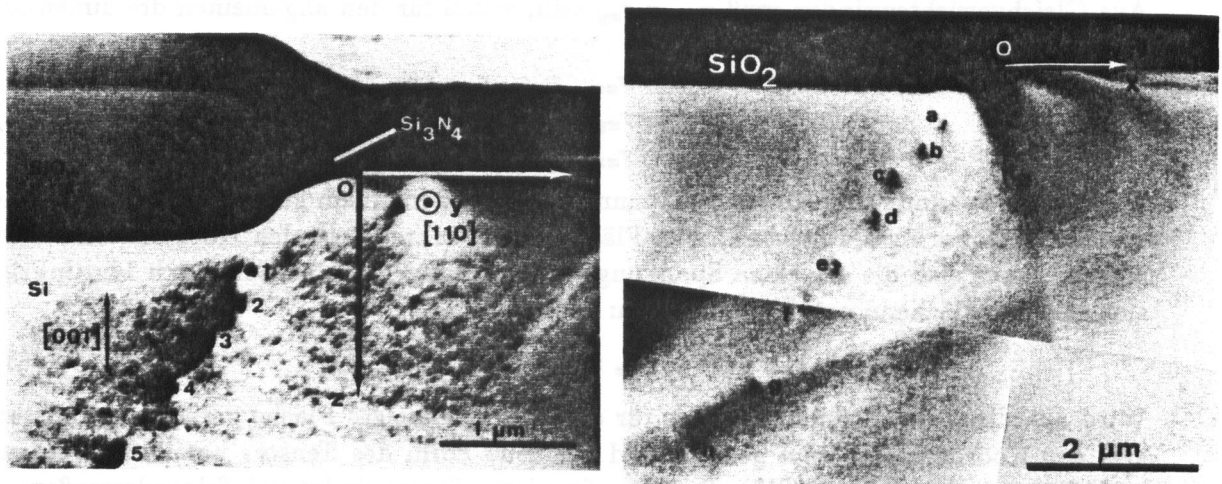


Bild 2.18: Versetzungseinfang im Spannungsfeld des Bird's Beak beim LOCOS-Prozeß [28c].

3 Werkstoffmechanik

3.1 Grundlagen

3.1.1 Spannungszustand

Die in einem Körper wirkenden Spannungen lassen sich ermitteln, indem man den Körper durch einen Schnitt gedanklich zerlegt und die Wirkung des weggefallenen Teils durch einzelne Kräfte — oder, auf die Fläche bezogen: Spannungen — auf die Schnittfläche ersetzt, Bild 3.1. Mit $\vec{s}_1 = \vec{F}_1/A_1$ und $\vec{s}_2 = \vec{F}_2/A_2$ wirken auf die einzelnen Flächen

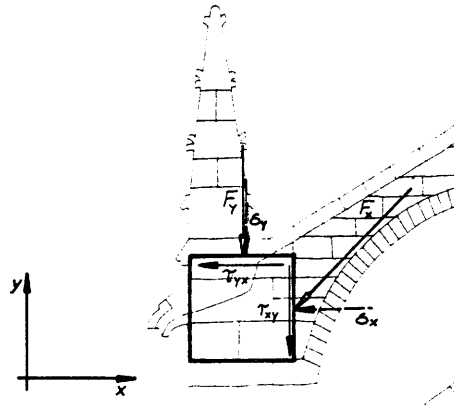


Bild 3.1: Kräfte und Spannungen

Spannungsvektoren

$$\vec{s}_x = (\sigma_x, \tau_y)^T = (\sigma_{xx}, \tau_{yx})^T$$

Die Spannungsvektoren auf die Flächen aller Richtungen lassen sich zusammenfassen zum Spannungstensor:

$$\bar{\bar{s}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{yx} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$$

Aus Gleichgewichtsgründen muß $\tau_{yx} = \tau_{xy}$ sein, sodaß für den allgemeinen dreidimensionalen Fall gilt:

$$\bar{\bar{s}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (4)$$

Mit diesem Spannungstensor ist der Spannungszustand in einem gegebenen Koordinatensystem vollkommen beschrieben. Für Flächen, die senkrecht zu den Koordinatenachsen stehen, lassen sich die einzelnen Spannungsvektoren umgekehrt wieder durch Multiplikation mit der Flächennormalen \vec{n} erhalten:

$$\vec{s}_x = \vec{n}_x * \bar{\bar{s}} \quad (5)$$

Wird allerdings der Spannungstensor für eine hierzu geneigte Fläche gesucht, so müssen erst das Koordinatensystem gedreht und die neue Form des Tensors bestimmt werden; anschließend gilt wieder Gl. (5). Der transformierte Tensor findet sich folgendermaßen:

- Man drehe das Koordinatensystem um den Winkel ϕ , Bild 3.2, und bilde die Transformationsmatrix aus den Cosinus der Winkel zwischen den neuen und den alten Basisvektoren. Hier ist

$$\bar{\bar{K}} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Die neue Form des Spannungstensors lautet:

$$\bar{\bar{s}}_\phi = \bar{\bar{K}} \bar{\bar{s}} \bar{\bar{K}}^T \quad (6)$$

oder: $S_{ik}^\phi = K_{il} K_{km} S_{lm}$

Hier stellt sich oft die Frage, warum bei der Tensortransformation zweimal mit der Matrix $\bar{\bar{K}}$ multipliziert werden muß, während für die neuen Koordinaten eines Vektors gilt

$$\vec{v}_\phi = \bar{\bar{K}} \vec{v}$$

Nach (1) kann jedoch der Tensor als das äußere Produkt aus Spannungs- und Normalenvektor aufgefaßt werden:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yz} \end{pmatrix} (1, 0, 0) + \begin{pmatrix} \tau_{xy} \\ \sigma_{yy} \\ \tau_{yz} \end{pmatrix} (0, 1, 0) + \begin{pmatrix} \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \\ \sigma_{zz} \end{pmatrix} (0, 0, 1)$$

$$\begin{aligned} \bar{\bar{s}} &= \vec{s}_x \vec{n}_x^T + \vec{s}_y \vec{n}_y^T + \vec{s}_z \vec{n}_z^T \\ \bar{\bar{s}}_\phi &= \bar{\bar{K}} \bar{\bar{s}} \bar{\bar{K}}^T + \dots \\ &= \bar{\bar{K}} (\vec{s}_x \vec{n}_x^T + \dots) \bar{\bar{K}}^T \\ &= \bar{\bar{K}} \bar{\bar{s}} \bar{\bar{K}}^T \end{aligned}$$

Da die Eigenschaften eines Tensors als einem Bündel von Vektoren unabhängig vom Koordinatensystem sind und sich bei einer Drehung der Koordinatenachsen nicht verändern, besitzt er — entsprechend beispielsweise der Länge eines Vektors — gewisse konstante Werte (Invarianten):

$$\begin{aligned} I_1 &= \sigma_x + \sigma_y + \sigma_z \\ I_2 &= \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_x - \tau_{xy}^2 - \tau_{yz}^2 - \tau_{xz}^2 \\ I_3 &= \det \bar{\bar{s}} \end{aligned}$$

3.1.2 Hookesches Gesetz

Während die Spannungen, die in jeder Schnittebene eines Körpers wirken, über den Spannungstensor beschrieben werden, läßt sich ein entsprechender Tensor $\bar{\bar{e}}$ für die von ihnen

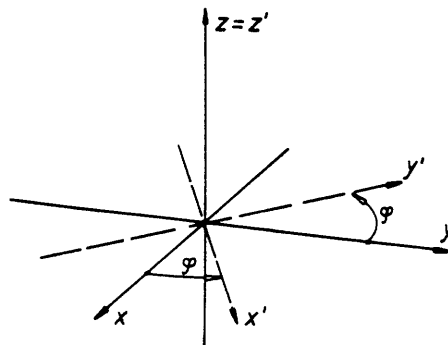


Bild 3.2: Ursprüngliches (ausgezogen) und gedrehtes (unterbrochen) Koordinatensystem

verursachten Dehnungen aufstellen:

$$\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \frac{1}{2}\gamma_{xz} \\ \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \epsilon_{yy} & \frac{1}{2}\gamma_{yz} \\ \frac{1}{2}\gamma_{xz} & \frac{1}{2}\gamma_{yz} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (7)$$

Das Verhältnis zwischen beiden liefert das Materialgesetz. Es gibt für elastische Körper bei kleinen Deformationen einen linearen Zusammenhang vor, allerdings im allgemeinen anisotropen Fall lineare Abhängigkeit zwischen den Tensorelementen. Dann gilt [1004]:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\epsilon_{kl}$$

Das heißt beispielsweise für σ_x ($= \sigma_{xx} = \sigma_{11}$):

$$\begin{aligned} \sigma_{11} = & c_{1111}\epsilon_{11} + c_{1112}\epsilon_{12} + c_{1113}\epsilon_{13} + \\ & c_{1121}\epsilon_{21} + c_{1122}\epsilon_{22} + c_{1123}\epsilon_{23} + \\ & c_{1131}\epsilon_{31} + c_{1132}\epsilon_{32} + c_{1133}\epsilon_{33} \end{aligned}$$

Der Tensor c_{ijkl} besitzt $3^4 = 81$ Koeffizienten. Er läßt sich jedoch abkürzen, da nach dem Gesetz von den Zugeordneten Schubspannungen und -Dehnungen

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad \text{und} \quad \epsilon_{kl} = \epsilon_{lk}$$

das heißt:

$$c_{ijkl} = c_{jilk}$$

Hiermit bleiben nur noch 36 Koeffizienten übrig, die sich handlicherweise als Matrix anordnen lassen. Abgekürzt ergibt sich der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= c_{11}\epsilon_{xx} + c_{12}\epsilon_{yy} + c_{13}\epsilon_{zz} + c_{14}\epsilon_{yz} + c_{15}\epsilon_{zx} + c_{16}\epsilon_{xy} \\ \sigma_{yy} &= c_{21}\epsilon_{xx} + c_{22}\epsilon_{yy} + c_{23}\epsilon_{zz} + c_{24}\epsilon_{yz} + c_{25}\epsilon_{zx} + c_{26}\epsilon_{xy} \\ \sigma_{zz} &= c_{31}\epsilon_{xx} + c_{32}\epsilon_{yy} + c_{33}\epsilon_{zz} + c_{34}\epsilon_{yz} + c_{35}\epsilon_{zx} + c_{36}\epsilon_{xy} \\ \sigma_{yz} &= c_{41}\epsilon_{xx} + c_{42}\epsilon_{yy} + c_{43}\epsilon_{zz} + c_{44}\epsilon_{yz} + c_{45}\epsilon_{zx} + c_{46}\epsilon_{xy} \\ \sigma_{zx} &= c_{51}\epsilon_{xx} + c_{52}\epsilon_{yy} + c_{53}\epsilon_{zz} + c_{54}\epsilon_{yz} + c_{55}\epsilon_{zx} + c_{56}\epsilon_{xy} \\ \sigma_{xy} &= c_{61}\epsilon_{xx} + c_{62}\epsilon_{yy} + c_{63}\epsilon_{zz} + c_{64}\epsilon_{yz} + c_{65}\epsilon_{zx} + c_{66}\epsilon_{xy} \end{aligned}$$

oder:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (8)$$

bzw:

$$\begin{aligned} \sigma_i &= c_{ik}\epsilon_k \\ \epsilon_i &= c_{ik}^{-1}\sigma_k \quad \text{mit} \quad c_{ik}^{-1} = s_{ik} \end{aligned}$$

Die Koeffizienten c_{ik} werden auch als verallgemeinerte Elastizitätsmoduln bezeichnet.

Diese Matrix mit 36 unabhängigen Koeffizienten gilt jedoch nur für vollkommen anisotrope Körper wie triklone Kristalle ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$). Für kubische Kristalle reduziert sie sich zu:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \text{ bzw. } \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$s_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})} \quad (10)$$

$$s_{12} = \frac{-c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})} \quad (11)$$

$$s_{44} = \frac{1}{c_{44}} \quad (12)$$

Im isotropen Körper sind nur noch zwei Konstanten unabhängig:

$$c_{44, \text{iso}} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \quad ; \quad s_{44, \text{iso}} = 2(s_{11} - s_{12}) \quad (13)$$

Elastizitäts-, Schubmodul und Querkontraktion: Nach Gl. (4) gilt für den Elastizitätsmodul [1008], bzw. wie in der Technik gebräuchlich:

$$\epsilon_x = s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3 \quad \epsilon_x = \frac{1}{E}(\sigma_x + \mu[\sigma_y + \sigma_z])$$

$$\epsilon_y = s_{12}\sigma_1 + s_{11}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3 \quad \epsilon_y = \frac{1}{E}(\sigma_y + \mu[\sigma_x + \sigma_z])$$

$$\epsilon_z = s_{12}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{11}\sigma_3 \quad \epsilon_z = \frac{1}{E}(\sigma_z + \mu[\sigma_x + \sigma_y])$$

$$\gamma_{yz} = 2s_{44}\tau_{yz} \quad \gamma_{yz} = \frac{\tau_{yz}}{G}$$

$$\gamma_{zx} = 2s_{44}\tau_{zx} \quad \gamma_{zx} = \frac{\tau_{zx}}{G}$$

$$\gamma_{xy} = 2s_{44}\tau_{xy} \quad \gamma_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{G}$$

Durch Vergleich zeigt sich:

$$\begin{aligned} \frac{1}{E} &= s_{11} & E &= \frac{1}{s_{11}} = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{c_{11} + c_{12}} \\ -\frac{\mu}{E} &= s_{12} & \mu &= -\frac{s_{12}}{s_{11}} = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}} \\ \frac{1}{G} &= s_{44} & G &= \frac{1}{s_{44}} = c_{44} \end{aligned} \quad (14)$$

Diese Entsprechung gilt, wenn Spannungen und Dehnungen in Richtung des Elastizitätstensors auftreten, d.h. normalerweise in den Kristallachsen. Wirken sie in hierzu verdrehten Richtungen, so muß der Tensor angepaßt werden. Hier ist es notwendig, sich daran zu erinnern, daß die Form (8) nur eine Abkürzung des in Wirklichkeit vierstufigen Tensors darstellt. Die Transformation erfolgt also nach

$$\begin{aligned} c_{ijkl} &= k_{im}k_{jn}k_{ko}k_{lp}c_{mnop} \\ s_{ijkl} &= k_{im}k_{jn}k_{ko}k_{lp}s_{mnop} \end{aligned} \quad (15)$$

Danach kann (8) weiter verwendet werden.

Ist k_{ik} die Transformationsmatrix:

$$\bar{k} = \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(x', x) & \cos(x', y) & \cos(x', z) \\ \cos(y', x) & \cos(y', y) & \cos(y', z) \\ \cos(z', x) & \cos(z', y) & \cos(z', z) \end{pmatrix}$$

dann liefert (12) für kubische Kristalle:

$$s'_{11} = s'_{1111} = s_{11}(k_{11}^4 + k_{12}^4 + k_{13}^4) + (2s_{12} + s_{44})(k_{11}^2 k_{12}^2 + k_{12}^2 k_{13}^2 + k_{13}^2 k_{11}^2)$$

da $k_{11}^2 + k_{12}^2 + k_{13}^2 = 1$, ergibt sich:

$$s'_{11} = s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(k_{11}^2 k_{12}^2 + k_{12}^2 k_{13}^2 + k_{13}^2 k_{11}^2)$$

ebenso ist [46]:

$$s'_{12} = s_{12} + (s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(k_{11}^2 k_{21}^2 + k_{12}^2 k_{22}^2 + k_{13}^2 k_{23}^2)$$

und, nach eigener Berechnung:

$$\begin{aligned} s'_{44} = & s_{11}(k_{21}^2 k_{31}^2 + k_{22}^2 k_{32}^2 + k_{23}^2 k_{33}^2) \\ & + 2s_{12}(k_{21} k_{22} k_{31} k_{32} + k_{21} k_{23} k_{31} k_{33} + k_{22} k_{23} k_{32} k_{33}) \\ & + s_{44}([k_{22} k_{33} + k_{23} k_{32}]^2 + [k_{23} k_{31} + k_{21} k_{33}]^2 + [k_{22} k_{31} + k_{21} k_{32}]^2) \end{aligned}$$

3.1.3 Plastische Verformung bei kubisch-flächenzentrierten Kristallen

Feste Körper verhalten sich im allgemeinen bis zu einer charakteristischen Belastung elastisch, d.h. in diesem Bereich aufgebrachte Verformungen sind reversibel, und im Probenwerkstoff wird keine bleibende Veränderung erzeugt. Oft stehen hier Spannungen und Verformungen auch in einem linearen Verhältnis (Hookesches Gesetz). Oberhalb einer gewissen Maximalspannung jedoch, der Streckgrenze (Elastizitäts-, Fließgrenze) ändert sich das Verhalten des Werkstoffs. Die Spannung, die er aufnehmen kann, nimmt nicht weiter zu, und die Verformung läuft mit näherungsweise konstanter Geschwindigkeit ab. Mikroskopisch ist dieser Vorgang mit der Erzeugung bzw. Aktivierung von Versetzungen im kristallinen Gefüge zu erklären, durch deren Bewegung kleine Bereiche des Werkstoffs gegeneinander verschoben und Spannungen abgebaut werden.

Diese Relativ-Verschiebung von Atomlagen ist die Wirkung von Schubspannungen. In quasi-isotropen Werkstoffen mit Kristalliten jeder Orientierung erfolgt sie daher in Richtung der größten auftretenden Schubspannung, also unter 45° zur Normalspannung im einachsigen Zug.

Kristalline Werkstoffe können sich jedoch nur in bestimmten Richtungen und Ebenen, den Gleitrichtungen und Gleitebenen, verschieben. Dies sind Richtungen des Kristallgitters mit geringstem Atomabstand, im kubisch-flächenzentrierten Gitter $\langle 110 \rangle$ -Richtungen, die in $\{111\}$ -Ebenen liegen, Bild 3.3 und Bild 3.4.

Ein Zusammenhang zwischen äußeren Normalspannungen σ und der Schubspannung τ in Gleitrichtung kann über das Schmid'sche Schubspannungsgesetz hergestellt werden, Bild 3.5:

$$\tau = \sigma \cos \lambda \cos \psi \quad (16)$$

In dieser Arbeit werden Kristalle betrachtet, deren $[010]$ -Achse parallel zur y-Achse des Koordinatensystems steht, jedoch um den Winkel ϕ gegen die x-Achse verdreht ist, Bild 3.6.

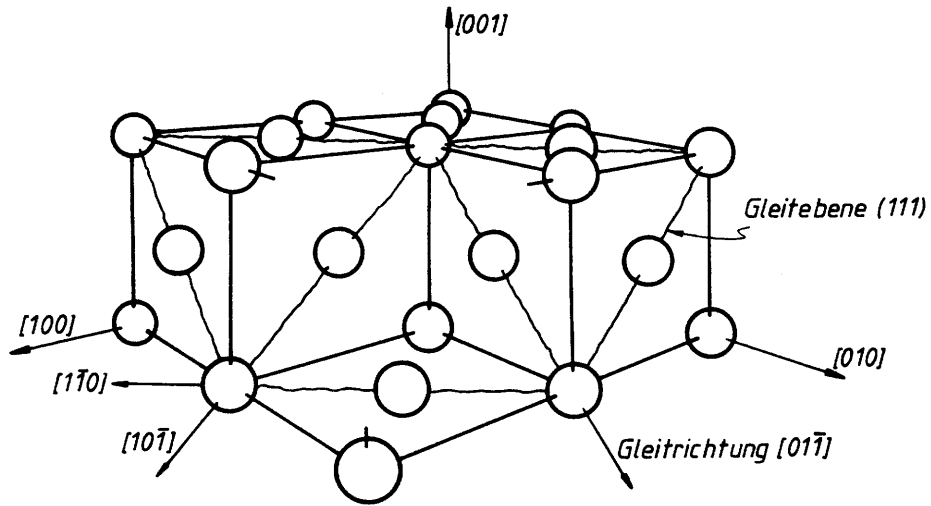


Bild 3.3: Gleitsysteme im kubisch-flächenzentrierten Kristall.

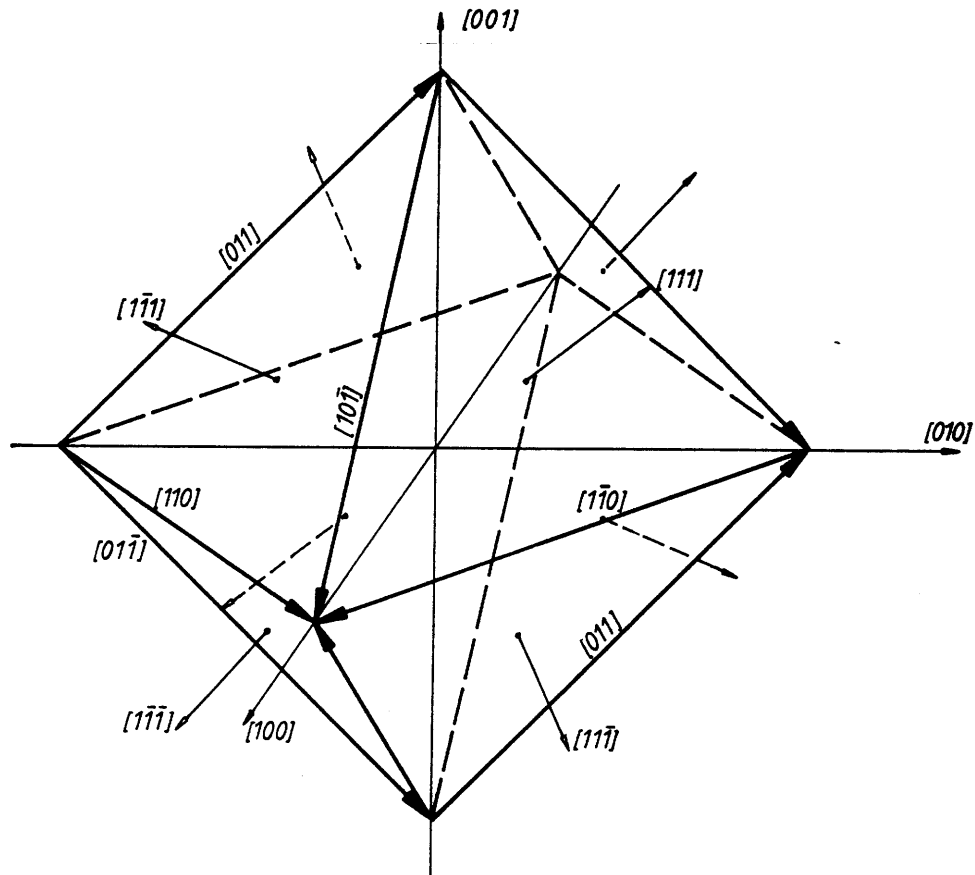


Bild 3.4: Der kfz-Kristall besitzt 12 Gleitsysteme:

1	(111)	$[1\bar{1}0]$	7	$(1\bar{1}\bar{1})$	$[110]$
2		$[10\bar{1}]$	8		$[01\bar{1}]$
3		$[01\bar{1}]$	9		$[101]$
4	$(11\bar{1})$	$[1\bar{1}0]$	10	$(1\bar{1}\bar{1})$	$[110]$
5		$[101]$	11		$[011]$
6		$[011]$	12		$[10\bar{1}]$

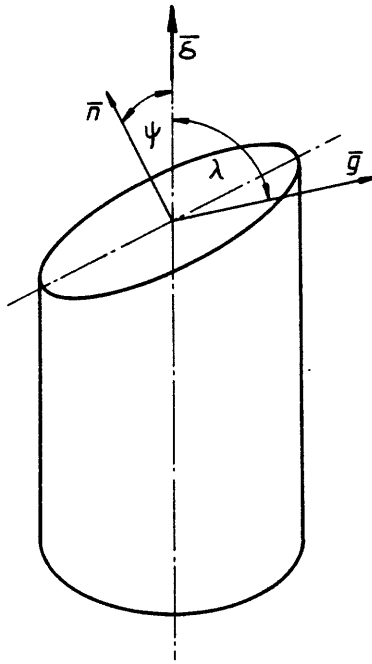


Bild 3.5: Schubspannung im Gleitsystem, nach [208].

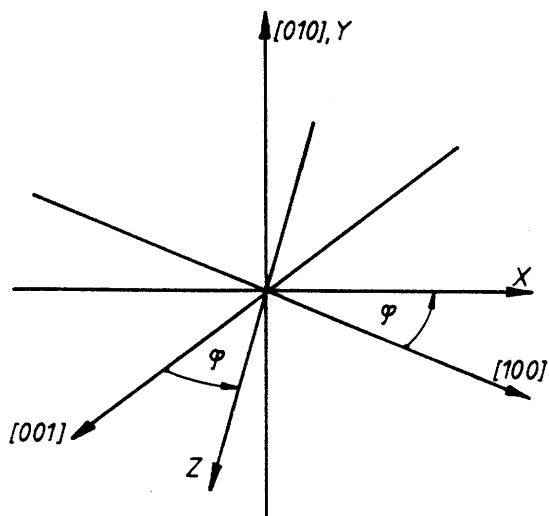


Bild 3.6: Kristallachsen im Koordinatensystem des Modells.

Gleit-system	σ_x			σ_y		
	$\sqrt{3} \cos \psi$	$\sqrt{2} \cos \lambda$	s_x	$\sqrt{3} \cos \psi$	$\sqrt{2} \cos \lambda$	s_y
1	$c - s$	c	$c(c - s)$	1	-1	-1
2	$c - s$	$c + s$	$c^2 - s^2$	1	0	1
3	$c - s$	s	$s(c - s)$	1	1	1
4	$c + s$	c	$c(c + s)$	1	-1	-1
5	$c + s$	$c - s$	$c^2 - s^2$	1	0	0
6	$c + s$	$-s$	$-s(c + s)$	1	1	1
7	$c + s$	c	$c(c + s)$	-1	1	-1
8	$c + s$	s	$s(c + s)$	-1	1	-1
9	$c + s$	$c - s$	$c^2 - s^2$	-1	0	0
10	$c - s$	c	$c(c - s)$	-1	1	-1
11	$c - s$	$-s$	$-s(c - s)$	-1	1	-1
12	$c - s$	$c + s$	$c^2 - s^2$	-1	0	0

Gleit-system	σ_x			$\sigma_x = \sigma_z$
	$\sqrt{3} \cos \psi$	$\sqrt{2} \cos \lambda$	s_x	$s_x + s_z$
1	$s + c$	s	$s(s + c)$	$c(c - s) + s(s + c) = 1$
2	$s + c$	$s - c$	$s^2 - c^2$	$c^2 - s^2 + s^2 - c^2 = 0$
3	$s + c$	$-c$	$-c(s + c)$	$s(c - s) - c(s + c) = -1$
4	$s - c$	s	$s(s - c)$	$c(c + s) + s(s - c) = 1$
5	$s - c$	$s + c$	$s^2 - c^2$	$c^2 - s^2 + s^2 - c^2 = 0$
6	$s - c$	c	$c(s - c)$	$-s(c + s) + c(s - c) = -1$
7	$s - c$	s	$s(s - c)$	$c(c + s) + s(s - c) = 1$
8	$s - c$	$-c$	$c(c - s)$	$s(c + s) + c(c - s) = 1$
9	$s - c$	$s + c$	$s^2 - c^2$	$c^2 - s^2 + s^2 - c^2 = 0$
10	$s + c$	s	$s(s + c)$	$c(c - s) + s(s + c) = 1$
11	$s + c$	c	$c(s + c)$	$-s(c - s) + c(s + c) = 1$
12	$s + c$	$s - c$	$s^2 - c^2$	$c^2 - s^2 + s^2 - c^2 = 0$

Tabelle 3.1: Auflösung des dreiachsigen Spannungszustands mit dem Schmid-schen Schubspannungsgesetz. Abkürzung: $c := \cos \phi$, $s := \sin \phi$

Die Spannungen in den Richtungen des Modellsystems σ_x , σ_y , σ_z stellen sich in diesem Fall dar als:

$$\bar{\sigma}_x = \sigma_x \bar{e}_x = \begin{pmatrix} \cos \phi \\ 0 \\ -\sin \phi \end{pmatrix}$$

$$\bar{\sigma}_y = \sigma_y \bar{e}_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\bar{\sigma}_z = \sigma_z \bar{e}_z = \begin{pmatrix} \sin \phi \\ 0 \\ \cos \phi \end{pmatrix}$$

Mit dem Schmid'schen Schubspannungsgesetz Gl. (16) läßt sich dann der Spannungszustand auf die Gleitsysteme nach Bild 3.4 wie in Tabelle 3.1 auflösen. Ist $\sigma_z = \sigma_x$ wie hier, dann läßt sich zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \text{Gleitsystem 1:} & \quad \tau = (\sigma_x - \sigma_y)/\sqrt{6} \\ 2: & \quad \tau = 0 \\ 3: & \quad \tau = -(\sigma_x - \sigma_y)/\sqrt{6} \\ \dots: & \quad |\tau|_{\max} = (\sigma_x - \sigma_y)/\sqrt{6} \end{aligned} \tag{17}$$

Fließen in einem Gleitsystem tritt also ein, wenn

$$\sigma_x - \sigma_y \geq \sqrt{6} \tau_y \quad (18)$$

Mit τ_y : Elastizitätsgrenze der Oktaederspannung und $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$: Hauptspannungen.

Da Schmid's Gesetz für Normalspannungen gegeben ist, liefert Gl. (18) also nur das Fließkriterium in einem Hauptspannungssystem. Im Normalfall treten jedoch neben den Normalspannungen auch Schubspannungen auf. Es ist klar, daß diese nicht ohne Einfluß auf den Fließbeginn sein können. Um die Wirkung von Schubspannungen zu berücksichtigen, ist ein anderer Weg naheliegend: Die im Gleitsystem auftretende Schubspannung wird dem Spannungstensor entnommen, der dafür allerdings in die Gleitebene transformiert werden muß.

Die Lage der nun verwendeten Koordinatensysteme geht aus Bild 3.7 hervor. Die

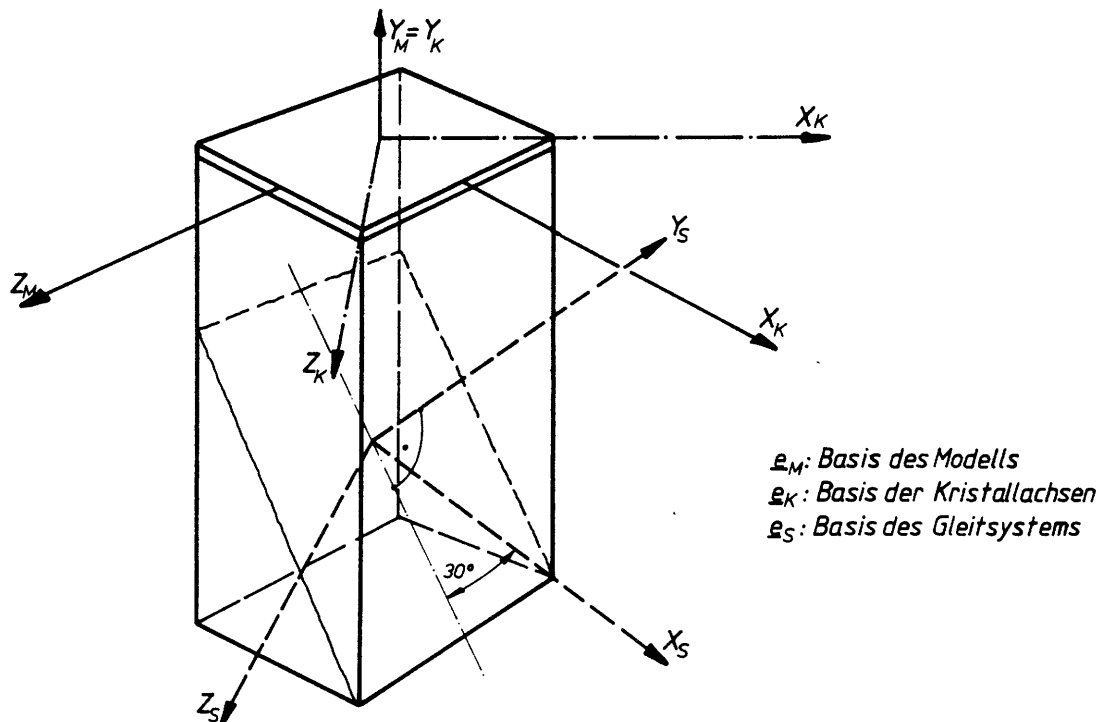


Bild 3.7: Kristallachsen im Koordinatensystem des Modells.

Berechnung des Modells findet im System $\overline{\overline{M}}$ statt; es ist zu den Kristallachsen ($\overline{\overline{K}}$) um den Winkel 45° verdreht. Das Gleitebenen- (Slip-) System $\overline{\overline{S}}$ schließlich ist definiert durch die Gleitebene ($\overline{\overline{y_S}}$) und die Gleitrichtung $\overline{\overline{x_S}}$. Diese nimmt gegenüber der Projektion der x-Achse (M) auf die Gleitebene den Winkel ϕ ein. Für den Übergang zwischen Slipsystem und Modellsystem gilt:

$$\overline{\overline{S}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sqrt{2} & \sin \phi \\ -\sqrt{2} \cos \phi & 1 & -\sqrt{2} \sin \phi \\ -\sqrt{3} \sin \phi & 0 & \sqrt{3} \cos \phi \end{pmatrix}$$

$$\overline{\overline{M}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sqrt{2} \cos \phi & -\sqrt{3} \sin \phi \\ \sqrt{2} & 1 & 0 \\ \sin \phi & -\sqrt{2} \sin \phi & \sqrt{3} \cos \phi \end{pmatrix}$$

Der Spannungstensor für das Modell lautet:

$$\bar{\bar{\Sigma}}_M = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{pmatrix}$$

Im Slipsystem ergibt sich dann:

$$\bar{\bar{\Sigma}}_S = \bar{\bar{M}} \bar{\bar{\Sigma}}_M \bar{\bar{M}}^T$$

$$= \frac{1}{3} \left\{ \begin{pmatrix} \cos^2 \phi (\sigma_x - 2\sigma_y - 2\sqrt{2}\tau_{xy}) - 2\sqrt{3}\tau_{xy} \cos \phi \sin \phi + 3\sigma_z \sin^2 \phi & 0 & 0 \\ \cos \phi (\sqrt{2}\sigma_x - \sqrt{2}\sigma_y - \tau_{xy}) - \sin \phi (\sqrt{6}\tau_{xz} + \sqrt{3}\tau_{yz}) & 0 & 0 \\ (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi)(\sqrt{3}\tau_{xz} - \sqrt{6}\tau_{yz}) + \cos \phi \sin \phi (\sigma_x + 2\sigma_y - 3\sigma_z - 2\sqrt{2}\tau_{xy}) & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\ + \begin{pmatrix} 0 & \cos \phi (\sqrt{2}\sigma_x - \sqrt{2}\sigma_y - \tau_{xy}) - \sin \phi (\sqrt{6}\tau_{xz} + \sqrt{3}\tau_{yz}) & 0 \\ 0 & 2\sigma_x + 2\sqrt{2}\tau_{xy} + \sigma_y & 0 \\ 0 & \cos \phi (\sqrt{6}\tau_{xz} + \sqrt{3}\tau_{yz}) + \sin \phi (\sqrt{2}\sigma_x - \sqrt{2}\sigma_y - \tau_{xy}) & 0 \end{pmatrix} \\ \left. + \begin{pmatrix} 0 & 0 & (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi)(\sqrt{3}\tau_{xz} - \sqrt{6}\tau_{yz}) + \cos \phi \sin \phi (\sigma_x + 2\sigma_y - 3\sigma_z - 2\sqrt{2}\tau_{xy}) \\ 0 & 0 & \cos \phi (\sqrt{6}\tau_{xz} + \sqrt{3}\tau_{yz}) + \sin \phi (\sqrt{2}\sigma_x - \sqrt{2}\sigma_y - \tau_{xy}) \\ 0 & 0 & 3\sigma_z \cos^2 \phi + 2 \cos \phi \sin \phi (\sqrt{3}\tau_{xz} - \sqrt{6}\tau_{yz}) + \sin^2 \phi (\sigma_x + 2\sigma_y - 2\sqrt{2}\tau_{xy}) \end{pmatrix} \right\}$$

Bild 3.7 zeigt, daß die gesuchte Schubspannung in $\langle 110 \rangle$ -Richtung gleich der Spannung s_{12} dieses Tensors ist:

$$\tau = \frac{1}{3} (\cos \phi [\sqrt{2}\sigma_x - \sqrt{2}\sigma_y - \tau_{xy}] - \sin \phi [\sqrt{6}\tau_{xz} + \sqrt{3}\tau_{yz}])$$

Setzt man nun entsprechend der Gleitrichtung $\phi = 30^\circ$ und, da die Belastung symmetrisch zur y-Richtung ist, $\tau_{xz} = 0$ und $\tau_{yz} = \tau_{zx}$, dann bleibt übrig:

$$\tau = (\sigma_x - \sigma_y - \sqrt{2}\tau_{xy})/\sqrt{6}$$

Da das Vorzeichen der Schubspannung eine Frage der Definition ist und nur das konkrete Gleitsystem, nicht aber den Fließbeginn bestimmt, muß die Fließbedingung heißen:

$$\tau_v = (\sigma_x - \sigma_y + \sqrt{2}\tau_{xy})/\sqrt{6} \quad (19)$$

(Index v: Vergleich)

Sind σ_x und σ_y Hauptspannungen, dann ist Gl. (19) identisch mit Gl. (16). Werte für die Elastizitätsgrenze dieser Spannung finden sich in dem folgenden Abschnitt über Silizium.

3.2 Silizium

3.2.1 Vorkommen, Metallurgie

Silizium - Ordnungszahl 14, Atommasse 28,09 u - ist ein Element der 4. Hauptgruppe. In Pulverform ist Silizium braun, als Film gelblich, und Kristalle sind von grauer Farbe [19] und metallischem Glanz. In der Erdrinde ist Silizium nach Sauerstoff das häufigste Element; in Verbindungen mit ihm stellt es ein Drittel ihrer Masse. Während Silizium vorher überwiegend als Legierungselement (Ferrosilizium) oder als Prozeßchemikalie (Desoxidationsmittel) benötigt wurde, stieg der Bedarf an reinen Kristallen nach der Erfindung des Transistors im Jahr 1948 sprunghaft an [132A]. Heute wird Silizium als einziges großtechnisches Produkt mit einer Fremdstoffkonzentration von unter $10^{-8}\%$ hergestellt. Rohsilizium wird im Lichtbogenofen wie in Bild 3.8 mit einer Reinheit von

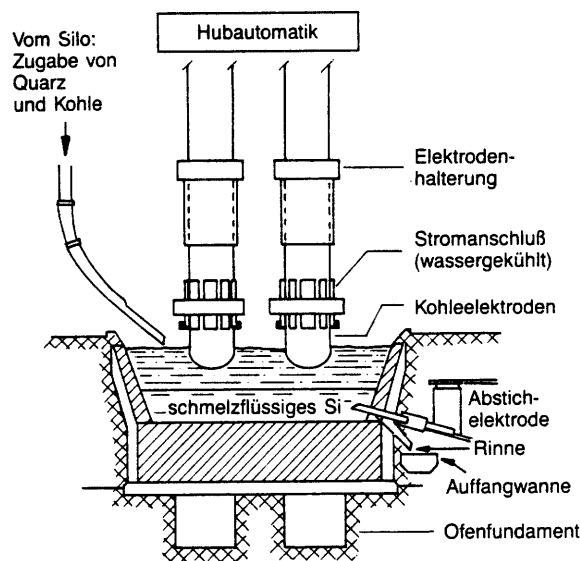


Bild 3.8: Darstellung der carbothermischen Reduktion von Quarz zu Silizium nach dem Lichtbogenverfahren [132A].

98% erschmolzen. Die für die Verarbeitung zu elektronischen Bauteilen verlangte Qualität läßt sich mit klassischer Metallurgie nicht erreichen, sondern nur auf synthetischem Weg. Hierzu wird das Rohsilizium zunächst mit Hydrogenchlorid zu Trichlorsilan umgesetzt, Bild 3.9, dieses destilliert und unter Zugabe von Wasserstoff in Silizium und Siliziumchlorid aufgespalten. Die Spaltung erfolgt in einem Reaktor wie in Bild 3.10: Mit Wasserstoff versetztes Silan wird verdampft und umspült elektrisch auf 1150°C geheizte dünne Stäbe aus Reinsilizium. Durch Zersetzung an deren Oberfläche wächst Silizium polykristallin bis auf eine Dicke von ca. 200 mm auf. Dieses Reinstsilizium wird anschließend zu Einkristallen umgeschmolzen. Hierfür haben sich zwei Verfahren durchgesetzt: Das wirtschaftlichere Tiegelzieh- (Czochralski-, CZ-) Verfahren und das noch höhere Reinheit liefernde Zonenziehverfahren (Float Zoning, FZ).

Tiegelziehverfahren Bild 3.11 Polykristallines Reinstsilizium wird in einem Graphit-/Quarztiegel wenig über seine Schmelztemperatur erwärmt. Ein Impfkristall wird in der gewünschten kristallographischen Richtung in die Schmelze abgesenkt. Der Einkristallkeimling wird dann mit einer Geschwindigkeit von einigen cm/Stunde aus dem Bad gezo-

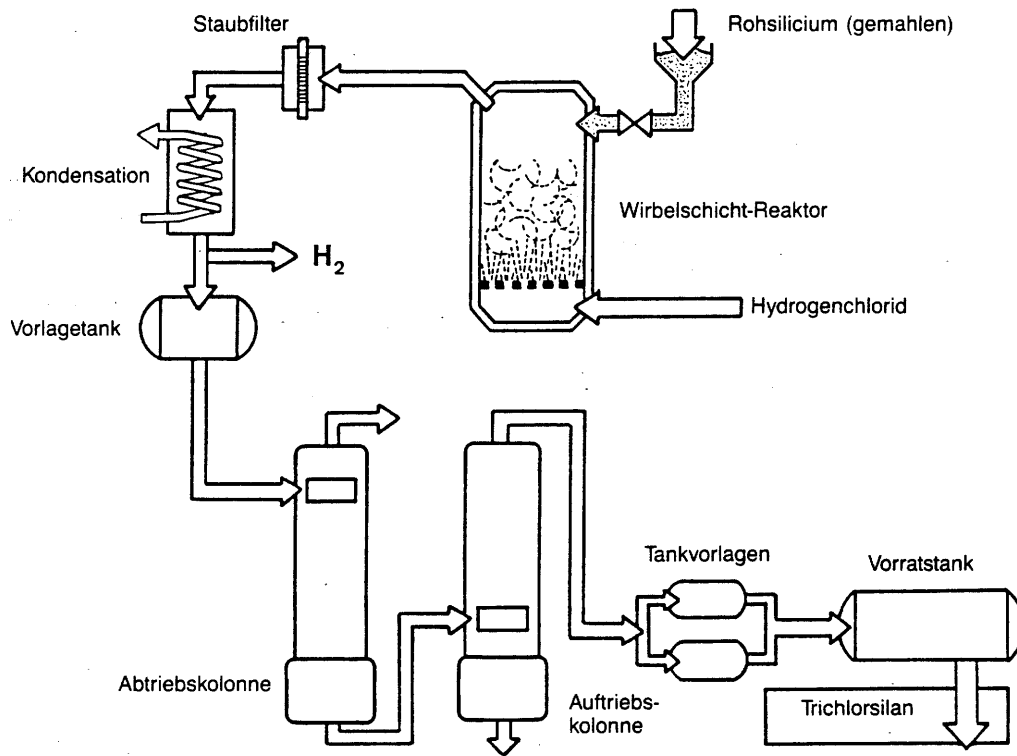


Bild 3.9: Schema der Trichlorsilansynthese und Reinigung durch Destillation [132A].

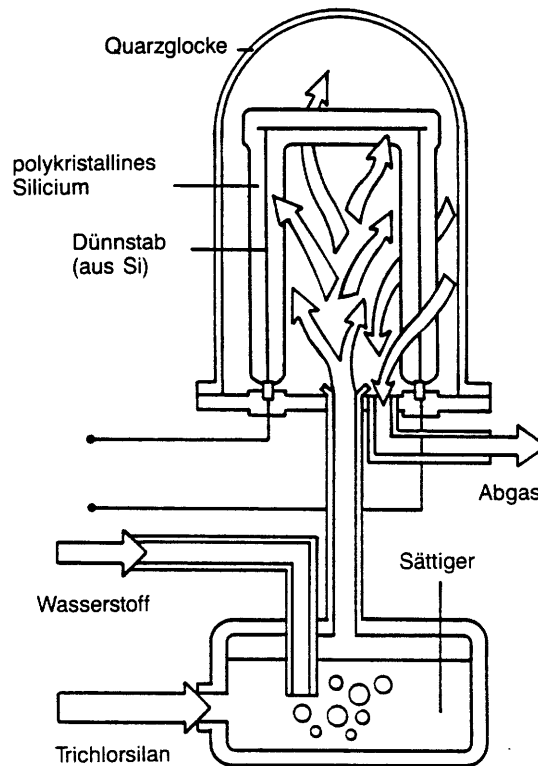


Bild 3.10: Schema des Siemens-Verfahrens zur Abscheidung von polykristallinem Reinstsilizium aus Trichlorsilan [132A].

gen. Sein Wachstum wird neben der Ziehgeschwindigkeit von der genauen Temperaturführung und der Konvektion der Schmelze bestimmt. Um die Konvektionsströmung zu optimieren, werden deswegen Tiegel und Ziehkristall in gegenläufige Rotation versetzt. Konnten Anfang der Sechziger Jahre noch Kristalle mit einem Durchmesser von maximal 30 mm gezogen werden, so ist es heute möglich, Kristalle von 200 mm Durchmesser und bis zu 70 kg Gewicht (Festigkeit des Impfkristalls) versetzungsfrei herzustellen. Tiegelgezogenes Silizium weist andererseits durch Anschmelzen des Quarz- und durch Diffusion von Kohlenstoff aus dem Graphittiegel immer ein gewisses Minimum an Sauerstoff- und Kohlenstoffverunreinigungen in der Größenordnung von 10^{18} Atomen/cm³ auf. Durch das schalenförmige Aufwachsen Bild 3.12 sammeln sich derartige Fremdstoffe bevorzugt zwischen einzelnen Schichten in sogenannten Wirbel- (Swirl-) Defekten an.

Zonenziehen Bild 3.13 Fast fehler- und verunreinigungsfreie Kristalle lassen sich mit diesem Verfahren erhalten. Es basiert darauf, daß der Schmelzpunkt von Gemischen unter dem von Reinstoffen liegt. Beim Erreichen der Solidustemperatur reichern sich deswegen Fremdstoffe in der Schmelze an, während die gebildeten Kristalle bei dieser Temperatur hochrein sind. Beim Zonenziehen wird ein kleiner Querschnitt, der durch die Oberflächenspannung des flüssigen Siliziums zwischen den festen Stabenden gehalten wird, induktiv aufgeschmolzen. Bewegt man den polykristallinen Stab langsam durch die Spule, so wandert der flüssige Bereich über den ganzen Stab, löst den größten Teil der Verunreinigungen und kristallisiert homogen. Die Verunreinigungen sammeln sich am Ende des Stabes an; durch Ziehen im Vakuum können sie sogar weitgehend aus dem Stab entfernt werden.

3.2.2 Herstellung von Wafern

An das Ziehen von Einkristallen schließt sich eine Vielzahl von Bearbeitungsschritten an, die hier — auch weil Details von den Herstellern nicht veröffentlicht werden — nur kurz in Anlehnung an [207] und [132A] aufgeführt werden sollen.

Rondieren: Der gezogene Kristall ist nicht vollkommen rund, sondern weist Verdickungen in den Kristall-Vorzugsrichtungen auf. Da jedoch für die späteren Lithographieprozesse die exakte Positionierung des Wafers äußerst wichtig ist, wird der Kristall mit Aufmaß für folgende Ätzbehandlungen auf genauen Durchmesser geschliffen.

Orientierungsmarke: In Längsrichtung werden eine oder mehrere Markierungen geschliffen, die Kristallorientierung anzeigen. Bisher wurden in der Regel Flächen angebracht, deren größte sich in $\langle 110 \rangle$ -Richtung befand; die heutigen größeren Wafer von 200 mm Durchmesser werden mit einer Nut in derselben Richtung und mit vom jeweiligen Typ abhängigen Zusatzmarken gekennzeichnet.

Ätzen: Die Kristalloberfläche und die Orientierungsmarke des Rohlings werden abgeätzt, um mechanische Beschädigungen, Mikrokerben und Werkstoffverdichtungen abzutragen. Da die Oberfläche den Rand der späteren Wafer bildet, soll sie keine mechanischen Spannungen aufweisen.

Sägen: Durch diesen Schritt werden die wichtigsten Eigenschaften des Wafers wie Orientierung, Ebenheit, Dicke etc. definiert. Um den Materialverlust so gering wie möglich zu halten und gleichzeitig eine exakte Schnittfläche zu erreichen, geschieht das Trennen mit Innenlochsägen, deren Sägeblatt aus einer gespannten mit Diamant beschichteten Stahlmembran besteht.

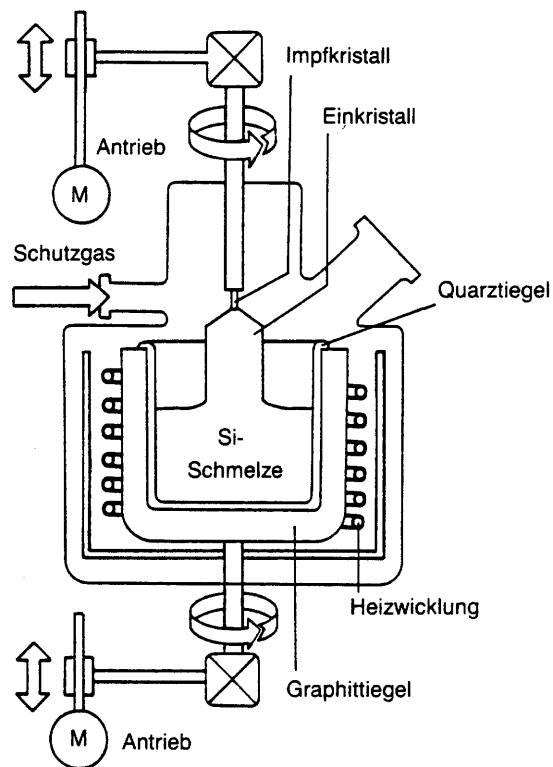


Bild 3.11: Schema des Tiegelziehverfahrens zur Herstellung von Einkristallen aus einer Siliziumschmelze [132A].

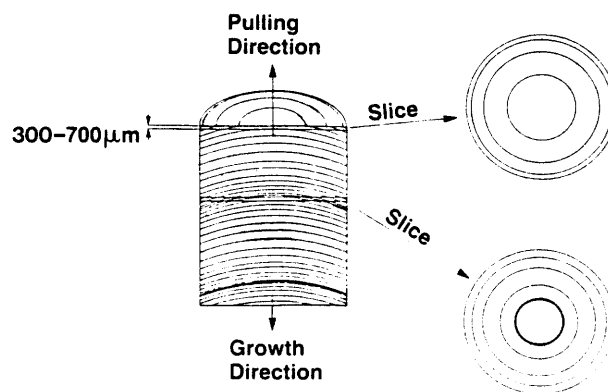


Bild 3.12: Schematisierter Querschnitt durch einen Czochralski-Kristall mit gewölbten Erstarrungsflächen und an verschiedenen Stellen herausgeschnittenen ebenen Scheiben [207].

Kantenrundung: Ungerundete Kanten brechen schon durch leichte Stöße schalenförmig aus und stehen unter hohen Spannungen, die bei erhöhter Temperatur zur Entstehung von Versetzungen führen. Während der späteren Epitaxiebehandlung, bei der eine dotierte Siliziumschicht auf die Waferoberfläche abgeschieden wird, würde sich zudem an ungerundeten Kanten besonders viel Material absetzen und die Gleichförmigkeit der epitaktischen Schicht vermindern.

Läppen: Beide Seiten der Scheibe werden geläppt. Hierdurch wird einerseits die vom Sägen rauhe Oberfläche geglättet, andererseits die Parallelität der Flächen erhöht.

Ätzen der Scheiben: Vom Läppen verbliebene Rauheit und Spannungen an der Oberfläche werden in diesem Arbeitsgang weiter vermindert.

Polieren: Mechanisch-chemisches Polieren einer oder in Sonderfällen beider Waferseiten ergibt eine spannungsfreie, spiegelnde Oberfläche mit Parallelitätstoleranzen im Bereich weniger Mikrometer. Der Polierprozeß gilt neben dem Ziehen der Kristalle als kritischstes Glied in der Herstellung der Siliziumscheiben.

Reinigung: Molekulare Verschmutzungen wie die verwendeten Schmier- und Kühlfüssigkeiten, Abrieb von Handschuhen und Behältern haften durch schwache elektrostatische Kräfte an der Scheibenoberfläche. Während diese und haftende Ionen durch geeignete Waschvorgänge physikalisch entfernt werden können, müssen chemisch adsorbierte Fremdstoffe (vor allem Metallatome) in chemischen Reinigungsprozessen (siehe z.B. [207]) beseitigt werden.

3.2.3 Kristallstruktur

Silizium gehört zum kubischen System und kristallisiert in der Diamantstruktur, Bild 3.14. Diese Struktur läßt sich aus dem kubisch flächenzentrierten (kfz) Kristall erhalten, indem man jedes Atom verdoppelt und das zweite Gitter dann um $\frac{a}{4}$ [111] (a : Gitterkonstante; $a_{Si} = 0,357$ nm) verschiebt [164].

Die Diamantstruktur ist sehr offen gebaut. Gegenüber dem kubisch raumzentrierten Gitter mit 68% und dem reinen flächenzentrierten mit 74% [1013] erreicht das Diamantgitter nur 34% Raumerfüllung. Dies bedeutet zum einen niedrige Dichte des Werkstoffs und zum anderen ein hohes Aufnahmevermögen für Fremdstoffe auf Zwischengitterplätzen, was besonders in Bild 3.15 deutlich wird.

Der ungestörte Kristall der Diamantstruktur ist in Bild 3.16 dargestellt. Die dichtest gepackten Ebenen sind wie im kfz-Kristall die 111-Ebenen; der kürzeste Atomabstand, der als Burgers-Vektor möglich ist, beträgt dort $\frac{a}{2}$ $\langle 110 \rangle$. Mit diesem Burgersvektor ergeben sich drei Grundtypen von vollständigen Versetzungen wie in Bild 3.17. Teilbild (a) zeigt die engere Form der beiden Schraubenversetzungen (eine alternative Form ist breiter und weist eine Doppelbindung auf [164]). Ihr Grundmuster wird klar, wenn man das aus den Atomen 7 - 8 - 9 - 10 - 11 - 12 - 7 gebildete Sechseck mit jenem aus den Atomen 13 - 2 - 3 - 14 - 15 - 16 - 17 vergleicht [207]. Der Weg Atom 13 - Atom 17 entspricht dem Burgersvektor. Achse und Burgersvektor der Schraubenversetzung liegen also in $\langle 110 \rangle$ -Richtung einer (111)-Ebene.

Die Gleitebene der reinen Stufenversetzung aus Teilbild (c) ist dagegen (100) mit Gleitrichtung $[\bar{1}\bar{1}2]$. Dies ist kein Haupt-Gleitsystem und auch niemals [207,236] praktisch identifiziert worden. Oft tritt dagegen die sogenannte 60° -Versetzung aus Teilbild (b) auf. An ihrer Kante befindet sich eine dichte Kette offener Bindungen, die eine große Rolle bei der Beurteilung der elektrischen Eigenschaften eines Kristalls besitzen [164].

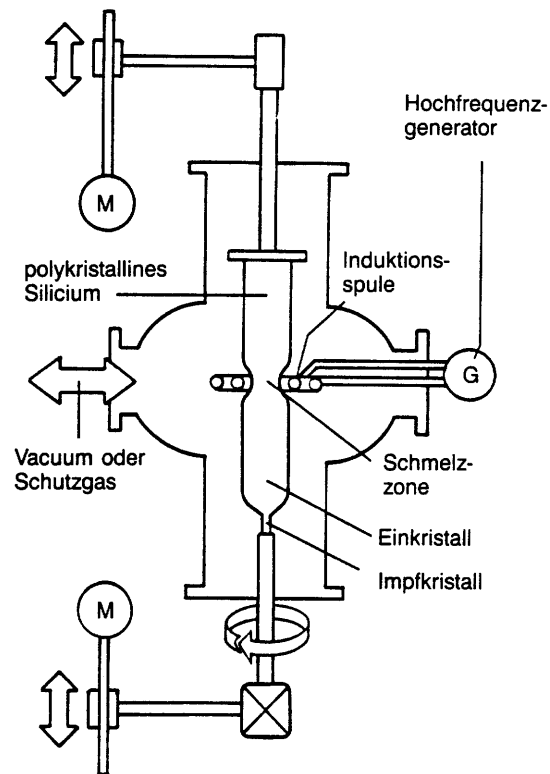


Bild 3.13: Schema des Zonenziehverfahrens zur Herstellung besonders reiner Silizium-Einkristalle [132A].

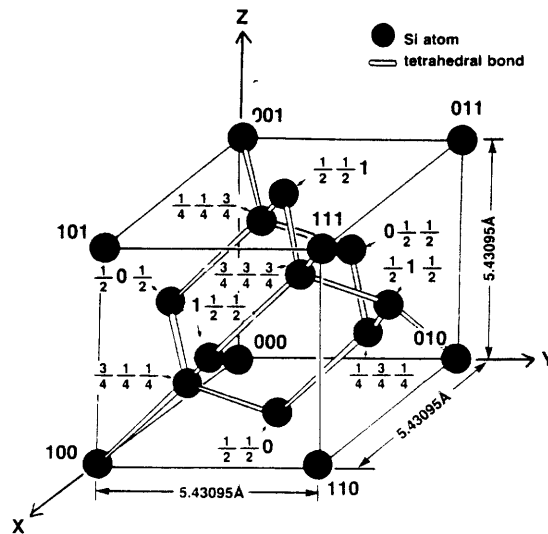


Bild 3.14: Einheitszelle des Siliziumkristalls, Aufbau [207].

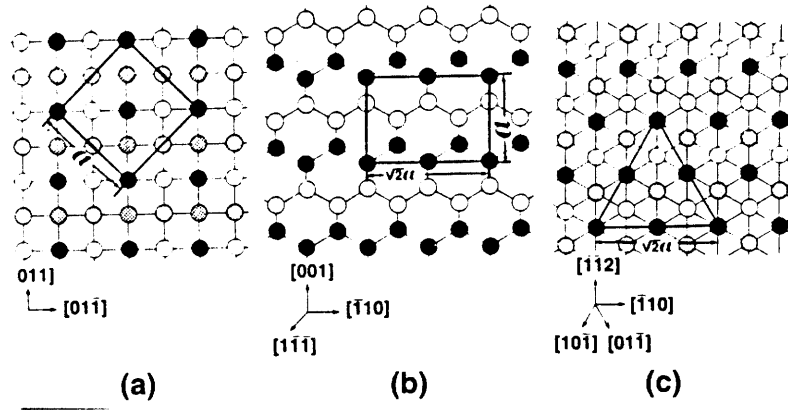


Bild 3.15: Projektion der Atomanordnung entlang der $[100]$ -Achse (a), $[110]$ (b) und $[111]$ (c). Aus [207].

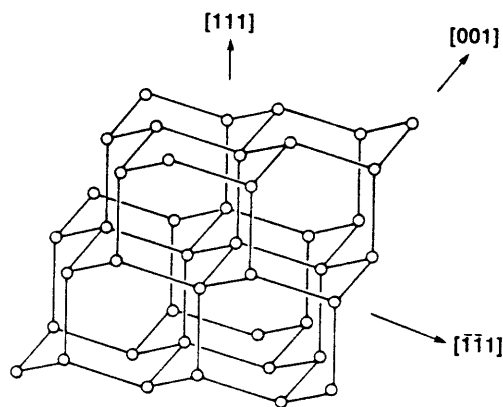


Bild 3.16: Das Diamant-Gitter mit $[111]$ als Vertikale [207].

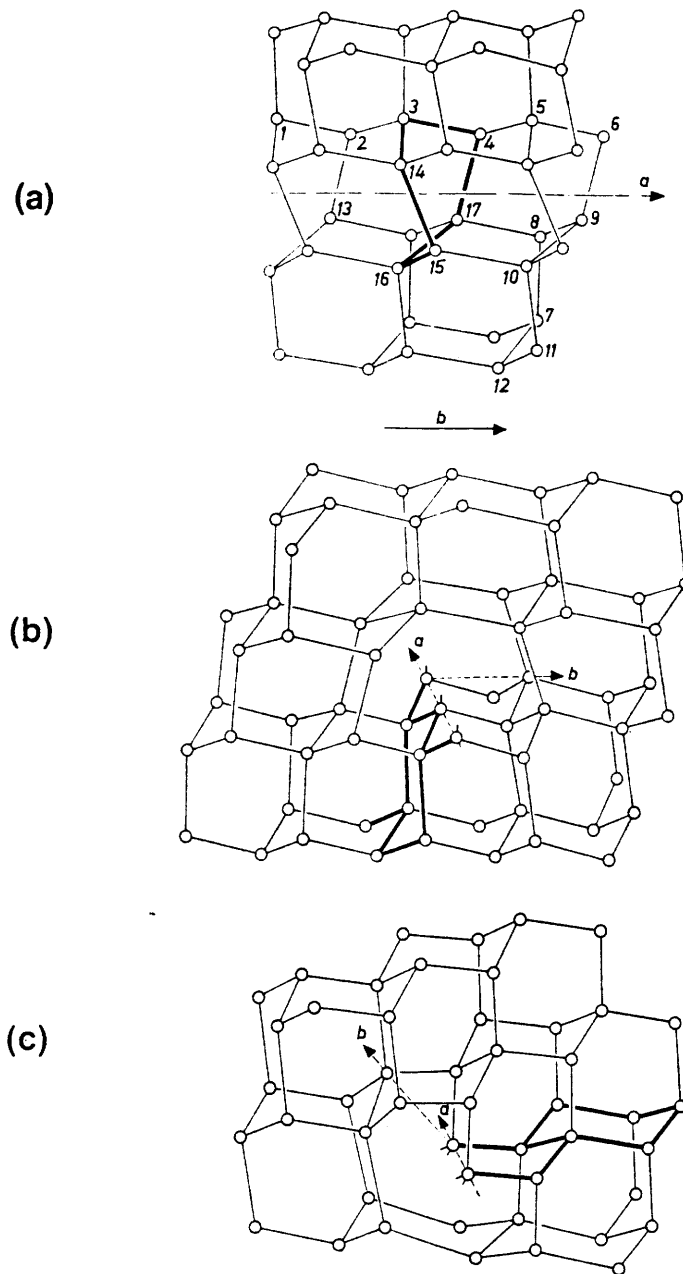


Bild 3.17: Vollständige Versetzungen in der Diamantstruktur: (a) Schraubenversetzung, (b) 60° -Versetzung, (c) reine Stufenversetzung [236].

3.2.4 Eigenspannungen

Eigenspannungen lassen sich ihrer räumlichen Ausdehnung nach in drei Kategorien einteilen [1023]: Eigenspannungen Erster Art erstrecken sich über eine Vielzahl von Kristalliten im Werkstoff. Sie entstehen in den meisten Fällen durch inhomogene Spannungs- oder Temperaturverteilungen, die lokale Plastifizierung des Materials zur Folge hatten.

Eigenspannungen Zweiter Art sind über Werkstoffbereiche in Kristallitgröße nahezu homogen [1023]. Ihre Ursache liegt oft in mehrphasigem Gefügebau, der zu thermischen Mikrospannungen führt. Eigenspannungen Dritter Art sind inhomogen auch über kleinste Gefügebereiche (mehrere Atomabstände).

In diesem Abschnitt soll nur Silizium als einkristallines oder homogenes polykristallines Material betrachtet werden, womit nur Eigenspannungen dritter Art in Frage kommen. Diese werden durch Gitterfehlstellen hervorgerufen, also:

- Leerstellen
- Substitutions- und interstitiell gelöste Atome
- Versetzungen
- Mikroausscheidungen

Aufgrund des hohen Standes der Siliziummetallurgie kann davon ausgegangen werden, daß Wafer primär frei von Versetzungen sind und keine hohe Dichte an Leerstellen oder interstitiellen Siliziumatomen aufweisen. Strukturschäden sind allerdings während der Verarbeitung unvermeidlich (Process Induced Defects). Beispiele hierfür sind:

- Fremdstoffe im Ausgangsmaterial, vor allem Sauerstoff und Kohlenstoff
- Dotierungselemente: Bor, Phosphor, Arsen etc.
- Wärmespannungen durch ungleichmäßige Erwärmung oder Abkühlung
- Schäden durch chemische Prozesse wie der thermischen Oxidation

Sauerstoff und Kohlenstoff werden im Unterschied zu den Dotierungselementen, die im Gitter substituiert werden, interstitiell gelöst. In dieser Position sind sie auf die Kristalleigenschaften nur von geringem Einfluß [34]. Liegen jedoch Versetzungen vor, so können diese von den gelösten Atomen blockiert werden (Cottrell-Effekt), und der Kristall versprödet. Steigt die Konzentration von Sauerstoff über seine Löslichkeitsgrenze von $2,5 \cdot 10^{17}$ Atomen/cm³ (bei 1050°C [34]), so bilden sich Ausscheidungen, die zu amorphen SiO₂-Phasen reagieren, Bild 3.18. Kohlenstoff bildet analog nadel- oder plattenförmige SiC-Ausscheidungen [19]. Unter der Einwirkung von Spannungen wirken diese Präzipitate als Mikrokerben und Frank-Read-Quellen und sorgen damit für schnelle Versetzungsmultiplikation.

Die Elemente B, P und As unterscheiden sich in ihrem Atomdurchmesser von den Siliziumatomen des Wirtsgitters und rufen durch die Verspannung der Elementarzelle nach Vegards Gesetz [178] Eigenspannungen hervor, die sogar die Elastizitätsgrenze erreichen können [38,44]. Für P wurde so eine Spannung von bis zu +500 MPa errechnet [222]. Eine ausführliche Untersuchung von bordotiertem Silizium findet sich in [72]. Die dort gemessene — vom Verhalten einer Vegard-Legierung abweichende — Gitterverzerrung ϵ_{dot} ist in Bild 3.19 wiedergegeben. Die Eigenspannung bei $c_B = 8 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$ wurde zu $\sigma_{dot} = E \cdot \epsilon_{dot} \simeq (230 \dots 300)\text{MPa}$ bestimmt.

Im Zusammenhang mit Arsendiffusion wird in [203] die Entstehung von Versetzungen beschrieben, allerdings keine quantitativen Spannungsangaben gemacht.

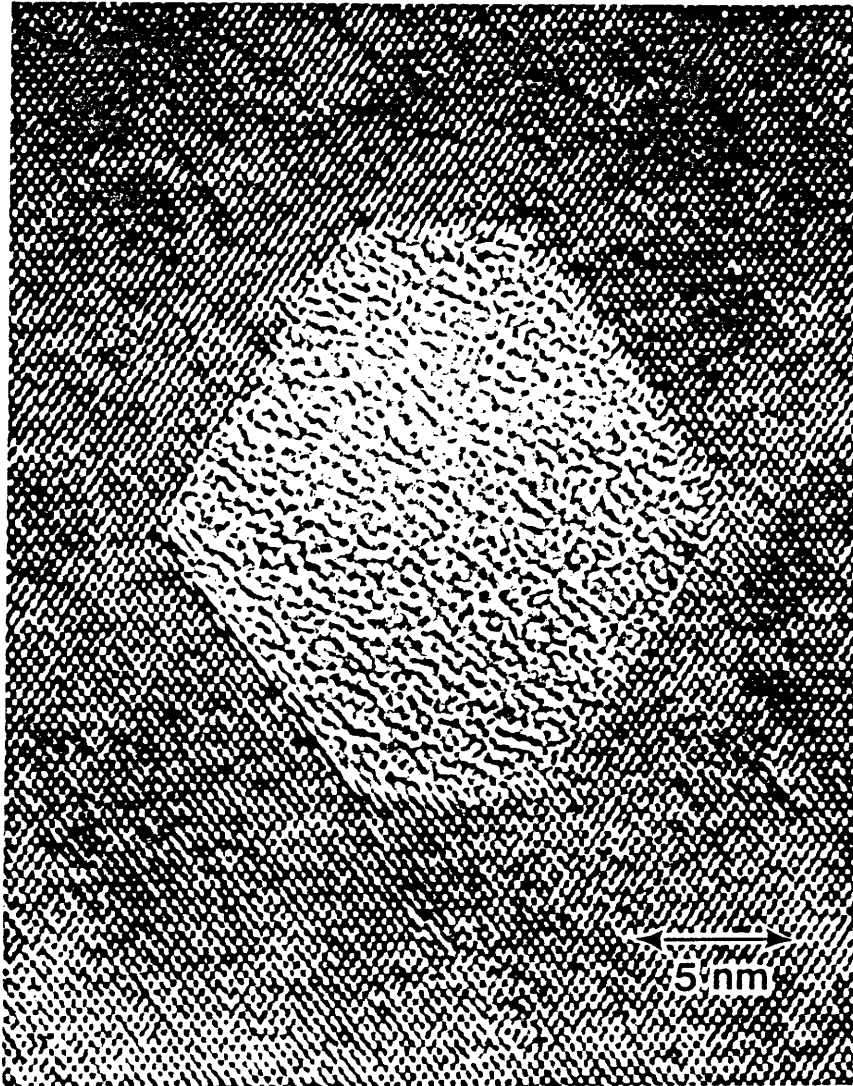


Bild 3.18: High-Resolution-TEM-Aufnahme einer amorphen Sauerstoffauscheidung in CZ-Silizium [207].

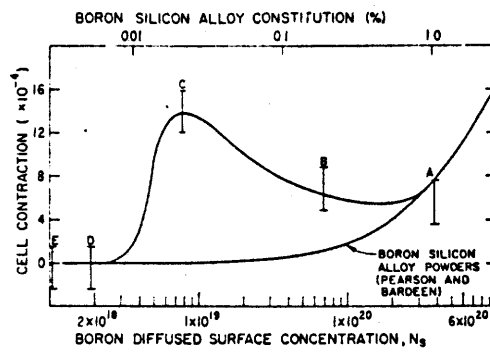


Bild 3.19: Verkleinerung der Elementarzelle in Bor-dotiertem Silizium [72].

3.2.5 Verformungsverhalten

Bedingt durch das Diamantgitter und die kovalente Bindung ist Silizium bei Raumtemperatur ein äußerst spröder Werkstoff. Bei Erwärmung über $0,6 \cdot T_S$ (T_S : Schmelztemperatur) sinkt die Streckgrenze unter die — angenähert temperaturunabhängige — Zugfestigkeit, und plastisches Fließen wird möglich, Bild 3.20.

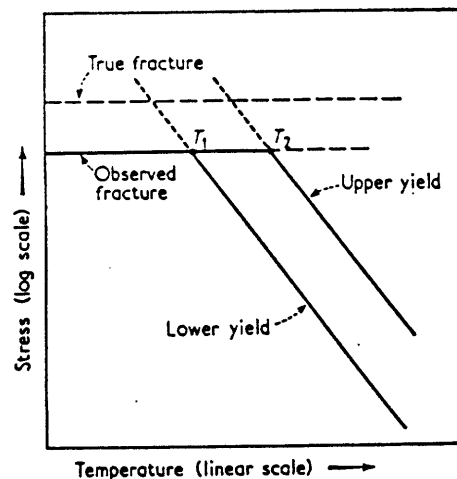


Bild 3.20: Temperaturabhängigkeit von Trennfestigkeit, Zugfestigkeit und Streckgrenze von Silizium (qualitativ) [176].

Nach dem Beginn der Siliziummetallurgie Anfang des Jahrhunderts soll erstmals während des Zweiten Weltkriegs plastisches Verhalten von Silizium beobachtet worden sein: Auf Rotglut erwärmte Proben verformten sich unter Hammerschlägen anisotrop vor dem Zerspringen [212, zit. nach 14]. Die eigentliche Untersuchung von Fließ- und Kriechvorgängen in der Diamantstruktur begann mit Gallagher [125A] 1952, der an Germaniumkristallen bei 500°C Fließen nachweisen konnte.

Gleitsysteme Das Diamantgitter wurde bereits vorgestellt (Bild 3.11). Die dichtest gepackten Ebenen sind auch hier wie im kfz-Kristall die $\langle 111 \rangle$ -Ebenen mit (110) als Gleitrichtung. Experimentell wurde bestätigt [125A,210], daß diese Gleitsysteme von 1000°C bis hinunter zu 300°C dominieren.

Fließparameter Typische Fließkurven für Silizium zeigt Bild 3.21.

Anders als bei Metallen mit kfz-Struktur fällt hier besonders das hohe Streckgrenzenverhältnis τ_{uy}/τ_{ly} auf. Es nimmt mit der Verformungsgeschwindigkeit und dem Fremdstoffgehalt zu und sinkt mit zunehmender Zahl an beweglichen Versetzungen sowie mit steigender Temperatur. Für dieses Verhalten gibt es zwei Ursachen. Zum einen weist Silizium durch die Art seiner Bindung eine sehr hohe Schubfestigkeit auf — die theoretische Fließgrenze beträgt etwa $13\,700\text{ MPa}$ gegenüber $6\,600\text{ MPa}$ von Eisen [62]. Die tatsächliche obere Streckgrenze stellt sich infolge der Mobilisation von Versetzungen — bzw. der Aktivierung auch sekundärer Gleitsysteme bei versetzungsfreien Kristallen [217] — und ihrer exponentiellen Vermehrung als Instabilitätspunkt ein. Die untere Streckgrenze ist dann gekennzeichnet durch einen erhöhten Inneren Spannungszustand, der der angelegten Spannung entgegengerichtet ist [119]:

$$\tau_{eff} = \tau - \tau_i$$

Zum Zweiten ist für viele Verunreinigungselemente nachgewiesen worden, daß sie die Bewegung von Versetzungen behindern. Ein großer Einfluß wird hier dem Dotierelement Phos-

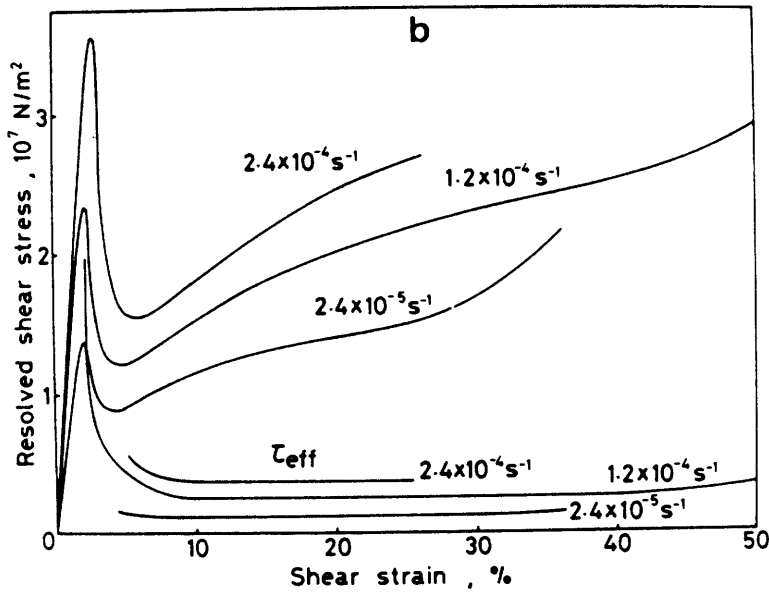
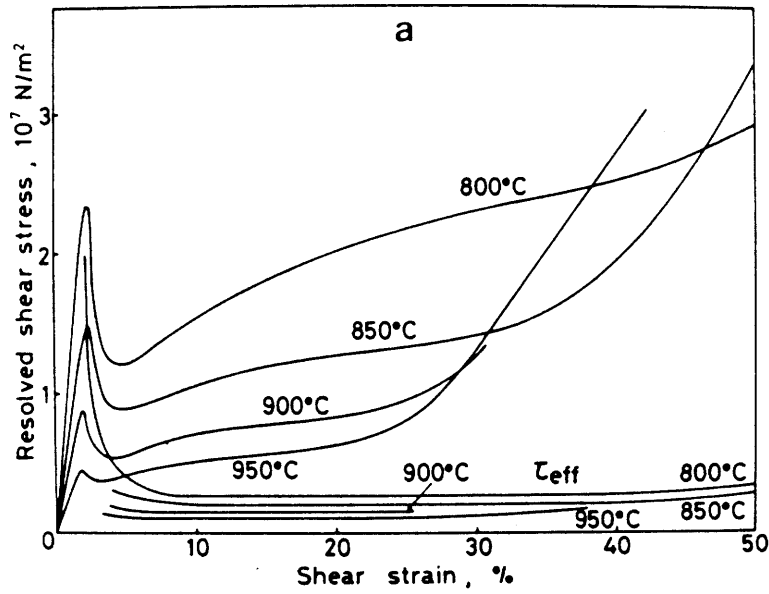


Bild 3.21: Abhängigkeit der Fließparameter von Silizium — (a): Abhängigkeit der Fließkurve von der Temperatur bei einer Verformungsgeschwindigkeit $\dot{\epsilon}$ von $1,2 \cdot 10^{-4}/\text{s}$; (b): Abhängigkeit von $\dot{\epsilon}$ bei $\theta = 800^\circ\text{C}$ [119].

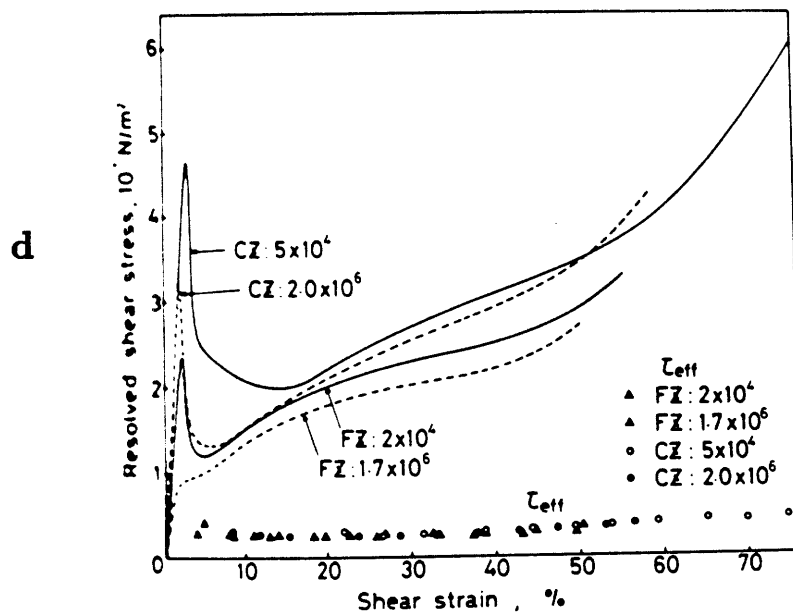
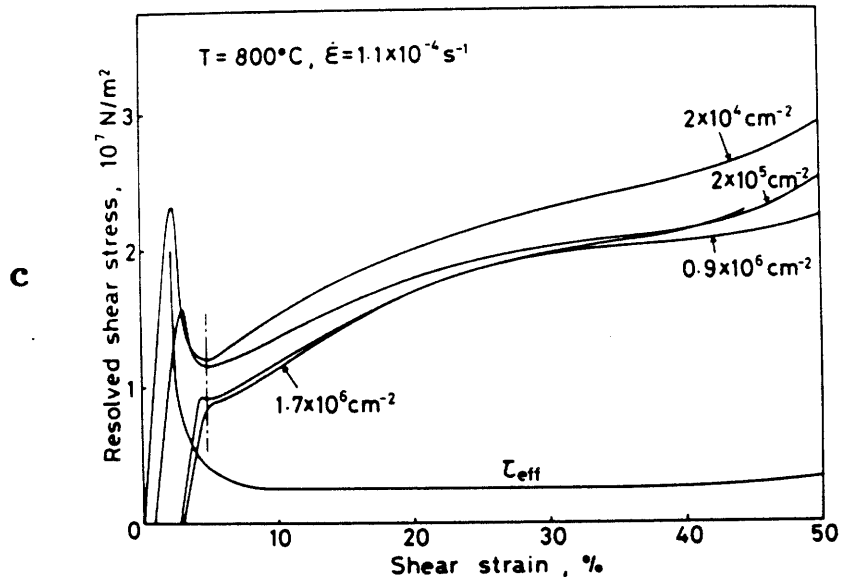


Bild 3.21: (c): Abhängigkeit der Fließkurve von der Versetzungsdichte vor der Verformung; (d): Wie (c), Vergleich zwischen CZ- und FZ-Kristallen [119].

phor und dem in CZ-Kristallen immer anzutreffenden Sauerstoff zugeschrieben, während Kohlenstoff und Bor die Streckgrenze nur wenig erhöhen sollen, Tabelle 3.2.

Kristall	hauptsächliches Verunreinigungselement (cm^{-3})	τ_c (MPa)
FZ-Si	$c_B = 2,0 * 10^{12}$	< 1,2
	$c_C = 1,0 * 10^{17}$	< 1,2
	$c_N = 5,4 * 10^{15}$	4,2
	$c_P = 1,2 * 10^{19}$	
CZ-Si	{ $c_O = 2,5 * 10^{17}$ $c_B = 5,0 * 10^{13}$ }	1,8
	{ $c_O = 7,4 * 10^{17}$ $c_P = 7,0 * 10^{14}$ }	3,0
	{ $c_O = 6,0 * 10^{17}$ $c_P = 6,2 * 10^{18}$ }	4,5
	{ $c_O = 9,0 * 10^{17}$ $c_P = 1,5 * 10^{19}$ }	11,0
	{ $c_O = 7,0 * 10^{17}$ $c_B = 1,4 * 10^{19}$ }	5,0

Tabelle 3.2: Kritische Spannung τ_c , unterhalb derer im Temperaturbereich von 600 - 800°C Versetzungen blockiert werden, nach [119].

Die Höhe der Streckgrenze kann abgeschätzt werden nach der Formel von Haasen [175]:

$$\tau_{ly} = c_{ly} * \dot{\epsilon}^{\frac{1}{2+m}} * \exp \frac{U}{(2+m)kT}$$

mit: $m_{ly} + 2 = 2,9$
 $m_{uy} + 2 = 2,1$
 $U_{ly} = 2,3 \text{ eV}$
 $U_{uy} = 2,3 \text{ eV}$
 $c_{ly} = 45 \text{ MPa}$
 $C_{uy} = f(\tau)$

3.2.6 Materialwerte von einkristallinem Silizium

1. Dichte ρ und Elastizität E , G und μ

Die Dichte von Silizium wird übereinstimmend zu 2,33 g/cm³ bei 25°C angegeben. Phasenumwandlungen treten bis zum Schmelzen bei 1420°C nicht auf. Eine zweite Modifikation mit vermutlich hexagonalem Gitter ist nicht stabil und sehr selten [19].

Die Eigenschaften von Kristallen sind, wie in Abschnitt 3.1 behandelt, anisotrop. Die Elastizität läßt sich im allgemeinsten Fall mit 81 unabhängigen Parametern beschreiben, für kubische Kristalle mit den drei Größen c_{11} , c_{12} und c_{44} . Elastizitätsmodul E , Torsionsmodul G und Poissonzahl μ errechnen sich dann nach den Formeln

$$E^{-1} = (c_{11} + c_{12}) / [(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})]$$

$$\mu = c_{12} / (c_{11} + c_{12})$$

$$G = c_{44}$$

Für diese Elastizitätsmoduln wird angegeben (in 10^5 MPa):

Quelle	Jahr	c_{11}	c_{12}	c_{44}	Temperatur	Bemerkungen
[60]	1951	1.6740	0.6523	0.7957	298K	
[6]	1966	1.658	0.639	0.796	298K	
[10]	1966	1.66	0.64	0.796		
[3]	1971	1.648	0.635	0.79	298K	
[15]	1971	1.674	0.652	0.796	300K	
[174]	1974	1.601	0.578	0.800	293K	Tabelle von 0 bis 1000°C
[11]	1981	1.601	0.578	0.800	293K	Tabelle von 20 bis 600°C

Die Werte aus [174] werden zwischen 0°C und 1000°C, also gerade im benötigten Intervall, angegeben. Der Unterschied zu älteren Angaben ist nicht groß, und da Kompilationen neueren Datums wie [11] diese Werte übernehmen, scheint ihre Verwendung gerechtfertigt.

2. Thermische Ausdehnung α_T

α_T ist in kubischen Kristallen isotrop [1008].

Quelle	Jahr	α_T in $10^{-6}/K$	T in K	Bemerkungen
[63]	1960	2.5	323-373	gemessen; Tabelle 50—850°C für α_{111} und α_{110}
[9]	1961	2.33		empfohlen
[52]	1967	3.65	1073	gemessen
		3.74	1273	
[110]	1969	2.56	300	gemessen; Tabelle 20—8500K
[48]	1969	2.56	300	gemessen; Formel: $\alpha_T * 10^6 K = 7,81 - 5,35 * \exp(-\theta * 6,83 * 10^{-4})$
[1]	1971	2.33	298	
[3]	1971	2.44	300	[63], [110]
		4.08	850	
[8]	1977	2.6	293	Tabelle, Diagramm 20-1600K
[11]	1981	2.56	300	Literatur, Tabelle 2—1400K
[13]	1982	2.33		
[133A]	1983	2.60.3	298	
[133B]	1983?	2.9		0—1400°C
[214]	1983	2.65	300	[Swenson] Diagramm 20—850K
[132C]	1989?	2.33	300	

Der Temperaturbereich von 0 bis 1100°C wird von [8] und [48] abgedeckt. Da die Werte von [8] etwas dichter gegeben sind und sonst [48] entsprechen, sollen sie hier verwendet werden.

3. Thermische Parameter: Wärmekapazität c_p und Wärmeleitfähigkeit λ						
Quelle	Jahr	c_p in $J/(kg * K)$		λ in $W/(K * m)$		Bemerkungen
[14]	1965	754	291-373K	126	293K	Literatur
[1]	1971	703	298K	163,3	313K	
[3]	1971	691	273K			
		716	300K	140	300K	
		770	373K			Literatur
				73,6	500K	
				30,6	1000K	
		927	1073K			
[11]	1981	691	273K			
				155	300K	Formel I: $\lambda^{-1} = a + bT + cT^2$ $a = 0,03 \text{ cm K/W}$ $b = 1,56 * 10^{-3} \text{ cm/W}$ $c = 1,65 * 10^{-6} \text{ cm/K W}$
				131	300K	Formel II: $a = 0,1598 \text{ cm K/W}$ $b = 1,532 * 10^{-3} \text{ cm/W}$ $c = 1,583 * 10^{-6} \text{ cm/K W}$
		982	1373K			
[13]	1982		157			
[132c]	1990			147	300	Hersteller

Zur Wärmekapazität konnte in der zur Verfügung stehenden Literatur keine Formel und keine Tabelle gefunden werden; es wird daher auf die hier genannten Werte zurückgegriffen.

Die beiden Formeln, die [11] für die Wärmeleitfähigkeit aufführt, scheinen beide zu den übrigen Werten zu passen. Da sie hier nicht weiter beurteilt werden können, wird hier Formel I verwendet.

4. Festigkeit Bild 3.22 stellt die Versagensweise von Silizium bei verschiedenen Temperaturen dar, vgl. auch Bild 2.8. Im Temperaturbereich oberhalb von 600-700°C zeigt sich eine ausgeprägte Streckgrenze, während zwischen 300 und 600°C Versagen plastisch oder durch Sprödbbruch eintreten kann und darunter spröder Bruch erfolgt. Der Größeneinfluß, der sich aus der Sprödigkeit ergibt, wird in Bild 3.23 sichtbar. Man geht davon aus, daß der Bruch an Mikrokerben beginnt, die zur Konzentration von Spannungen führen. Proben mit geringerem Durchmesser (Fadenkristalle) und chemisch polierter Oberfläche weisen daher höhere Festigkeit auf. Bild 3.24 stellt den Verlauf der Wahren Bruchspannung bis 1100°C und die Zugfestigkeit bis in die Nähe des Schmelzpunktes dar.

Die Streckgrenze ist, wie bereits dargestellt wurde, eine Funktion mehrerer Variablen: Vor allem die Obere Streckgrenze wird neben Temperatur und Verformungsgeschwindigkeit von der Versetzungsdichte und dem Fremdstoffgehalt bestimmt. Die quantitativen Werte, die sich in der Literatur finden lassen, streuen erheblich. Zum Teil kann dies daran liegen, daß sich die genaue Bedeutung der Spannungsangaben nicht rekonstruieren läßt. Während die Elastizitätsgrenze in den meisten Quellen als obere und untere Fließspannung in der Oktaederebene, τ_{xy} bzw. τ_{ly} , oder auf Gleitsysteme bezogen wird, dürften die Spannungen aus [118] Zugspannungen in (111)-Richtung darstellen.

Die in der folgenden Übersicht verwendeten Abkürzungen bedeuten:

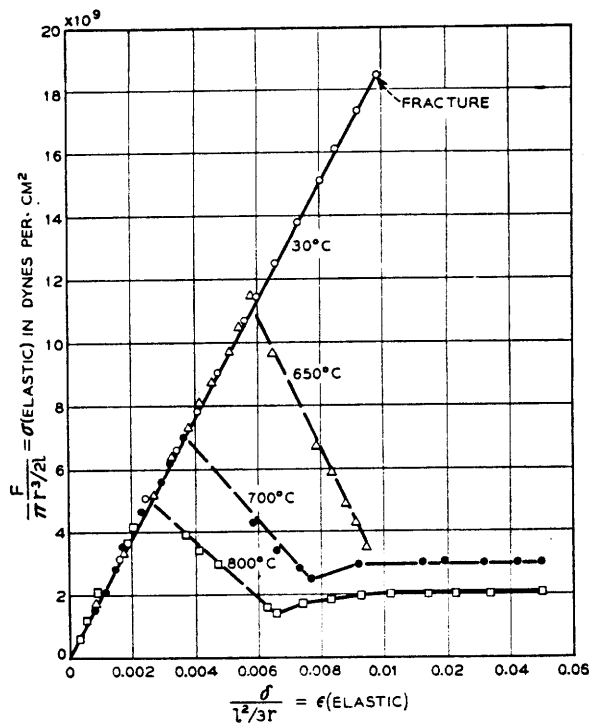


Bild 3.22: Fließkurven von Silizium-Fadenkristallen bei verschiedenen Temperaturen [59].

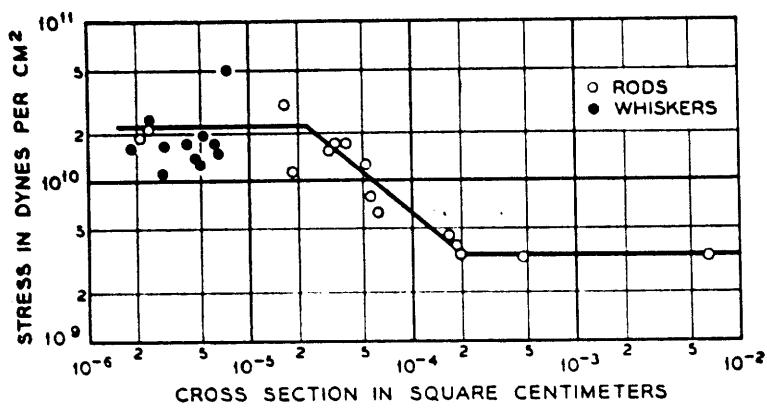
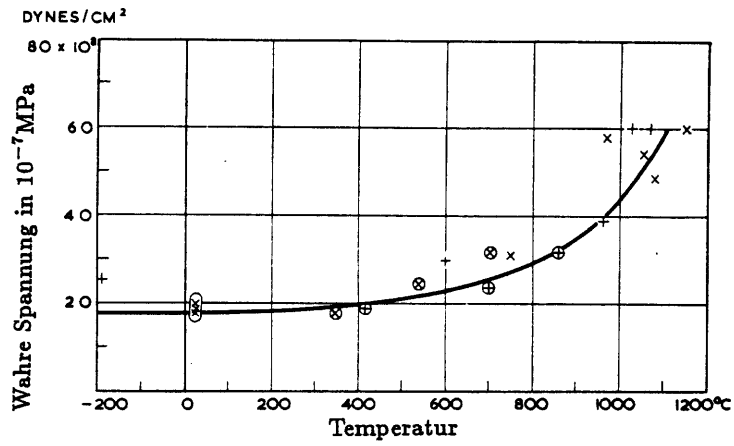


Bild 3.23: Größeneinfluß auf die maximale Formänderungsfestigkeit bei Raumtemperatur [59]



+ Hoher Sauerstoffgehalt, geringe Versetzungsdichte
 x geringer Sauerstoffgehalt, hohe Versetzungsdichte
 o rein spröder Bruch

Trennfestigkeit von Silizium

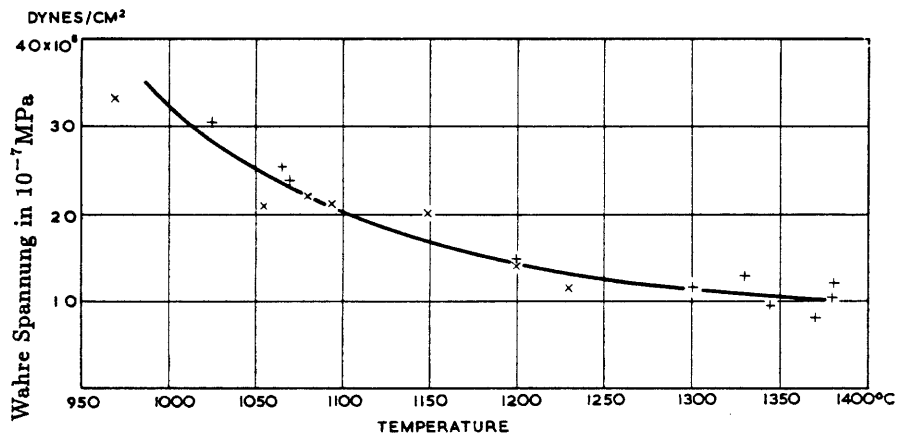


Bild 3.24: Zugfestigkeit von Silizium [71]

θ	$^{\circ}\text{C}$	Celsius-Temperatur
$\sigma_{[ijk]}$	MPa	Spannung in Richtung (vermutlich) [ijk]
$\dot{\epsilon}$	s^{-1}	Abzugsgeschwindigkeit
τ_{uy}, τ_{ly}	MPa	obere / untere Gleitschubspannung in der $\langle 111 \rangle$ -Ebene
T	K	absolute Temperatur

[59] 1957: Die Autoren maßen [111]-Whisker vom Durchmesser 16-28 μm unter Biegung. Die aufgenommenen Fließkurven finden sich in Bild 3.16. Aus der Umrechnung nach Gl. 3.2 ergibt sich für die Gleit-Schubspannung:

$\theta/^{\circ}\text{C}$	$\sigma_{[111]u}$ in MPa	$\sigma_{[111]l}$	τ_{uy}	τ_{ly}
650	1100	350	300	95
700	700	300	190	80
800	500	200	140	55

Gl. 16?

[71] 1962: $\dot{\epsilon} = 3,3 \cdot 10^{-4}/\text{s}$
Spannungen vermutlich auf die [111]-Richtung bezogen. Dann ist, vgl. Gl. 3.1: $\tau = \sigma \cdot \cos \phi \cdot \cos \lambda$.

$\theta/^{\circ}\text{C}$	$\sigma_{[111]u}$ in MPa	$\sigma_{[111]o}$	τ_{ly}	τ_{uy}
600	200	260	54	71
700	200	260	54	71
800	175	245	48	67
900	130	200	35	54
1000	104	148	28	40
1050	70	113	19	31

16

[57] 1963: $\dot{\epsilon} = 10^{-5}/\text{s}$, $\theta = 815^{\circ}\text{C}$
Versetzungsdichte: 0 $\tau_{uy} = 45 \text{ MPa}$ $\tau_{ly} = 15 \text{ MPa}$
 $10^3/\text{cm}^2$ 35 MPa 15 MPa
 $5 \cdot 10^4/\text{cm}^2$ 25 MPa 12 MPa
 $10^6/\text{cm}^2$ 18 MPa 15 MPa

[205] 1964: $\dot{\epsilon} = 10^{-5}/\text{s}$, $\theta = 800^{\circ}\text{C}$, $\tau \simeq 5 \text{ MPa}$

[175] 1968: $\tau_{ly} = c \cdot \dot{\epsilon}^{\frac{1}{2+m}} \exp \frac{U}{(2+m)kT}$
 $c = 0,045 \text{ MPa}$
 $2 + m = 2,9$
 $U = 2,3 \text{ eV}$

Die Autoren von [33] haben diesen Ausdruck bei statischen Rechnungen erfolgreich verwendet. Als Dehngeschwindigkeit $\dot{\epsilon}$ wurde von ihnen $\dot{\epsilon} = 4,8 \cdot 10^{-5}$ eingesetzt.

[118] 1982: $\dot{\epsilon} = 10^{-5}/\text{s}$

$\theta/^{\circ}\text{C}$	σ/MPa	(τ_y/MPa)
700	900	245
800	630	171
900	390	106
1000	100	27

[37] 1983: $\tau = f(T, \dot{\epsilon})$
 Nach Extrapolation auf $\dot{\epsilon} = 5 * 10^{-5}/s$ ergibt sich:

$\theta = 800^{\circ}\text{C}$	$\tau_{ly} = 10$ MPa
900 $^{\circ}\text{C}$	4 MPa
1000 $^{\circ}\text{C}$	2 MPa
1100 $^{\circ}\text{C}$	1,2 MPa

[119] 1983: $\dot{\epsilon} = 1,2 * 10^{-4}/s$

$\theta = 800^{\circ}\text{C}$	$\tau_{uy} = 24$ MPa	$\tau_{ly} = 13$ MPa
850	15	9
900	8	6
950	5	4

Das folgende Diagramm, Bild 3.25, zeigt eine Zusammenfassung dieser Werte. Für Temperaturen über 600 $^{\circ}\text{C}$ überrascht der weite Streubereich der Angaben. Erklärungen hierfür gehen aus den Veröffentlichungen nicht hervor, auch scheinen alle Versuche sehr sorgfältig durchgeführt worden zu sein.

Ein Vergleich der Erscheinungsdaten zeigt allerdings, daß die Werte von [59], [71] und [118] (die DMM basieren auf Angaben von [164] und [226]) in der Zeit bis 1969 gemessen wurden. Hier darf sicherlich ein geringerer Reinheitsgrad der verwendeten Proben vermutet werden, sodaß die erhaltene höhere Festigkeit auf Ausscheidungs- oder Mischkristallhärtung zurückgehen könnte. Nach den Erfahrungen von [33] werden auch hier die dort verwendeten Werte benutzt:

$\theta/^{\circ}\text{C}$	τ_{ly}/MPa
600	55
700	19
800	7,7
900	3,7
1000	2
1100	1,2

Eine Zusammenstellung aller hier verwendeten Materialparameter findet sich in Tabelle 3.3.

3.2.7 Materialwerte von polykristallinem und dotiertem Silizium

Polysilizium Poly- und monokristalline Werkstoffe unterscheiden sich in zwei Punkten: Der Gitterorientierung und dem Einfluß der Korngrenzen. Es ist also zu erwarten, daß vor allem in den im Kristall anisotropen, wie z.B. den elastischen, Eigenschaften Unterschiede auftreten. Die thermische Ausdehnung ist hingegen isotrop, hier kann sich nur der Korngrenzeneinfluß auswirken.

Über Werkstoffwerte von Polysilizium finden sich wenig Angaben. B. Leroy [66] gibt zu beiden Siliziumarten die gleichen Werte an, und zwar sowohl für α_T , als auch für die elastischen Parameter E und μ . Bei King wird als E-Modul $(1,61 \dots 1,62) * 10^5$ MPa und als Querkontraktion $\mu = 0,21 \dots 0,22$ genannt ($\theta = 293\text{K}$)[214]. Murarka und Retajczyk geben in [38] an: $E/(1 - \mu) = 1,5 * 10^5$ MPa. Mit $\mu = 0,22$ ergibt dies einen E-Modul von $E = 1,17 * 10^5$ MPa. Sie nennen dort weiterhin $\alpha_T = (2,81 \pm 0,2) * 10^{-6}/\text{K}$. Dies liegt innerhalb der Unsicherheit von [44] mit $\alpha_T = (2,3 \dots 4,2) * 10^{-6}/\text{K}$.

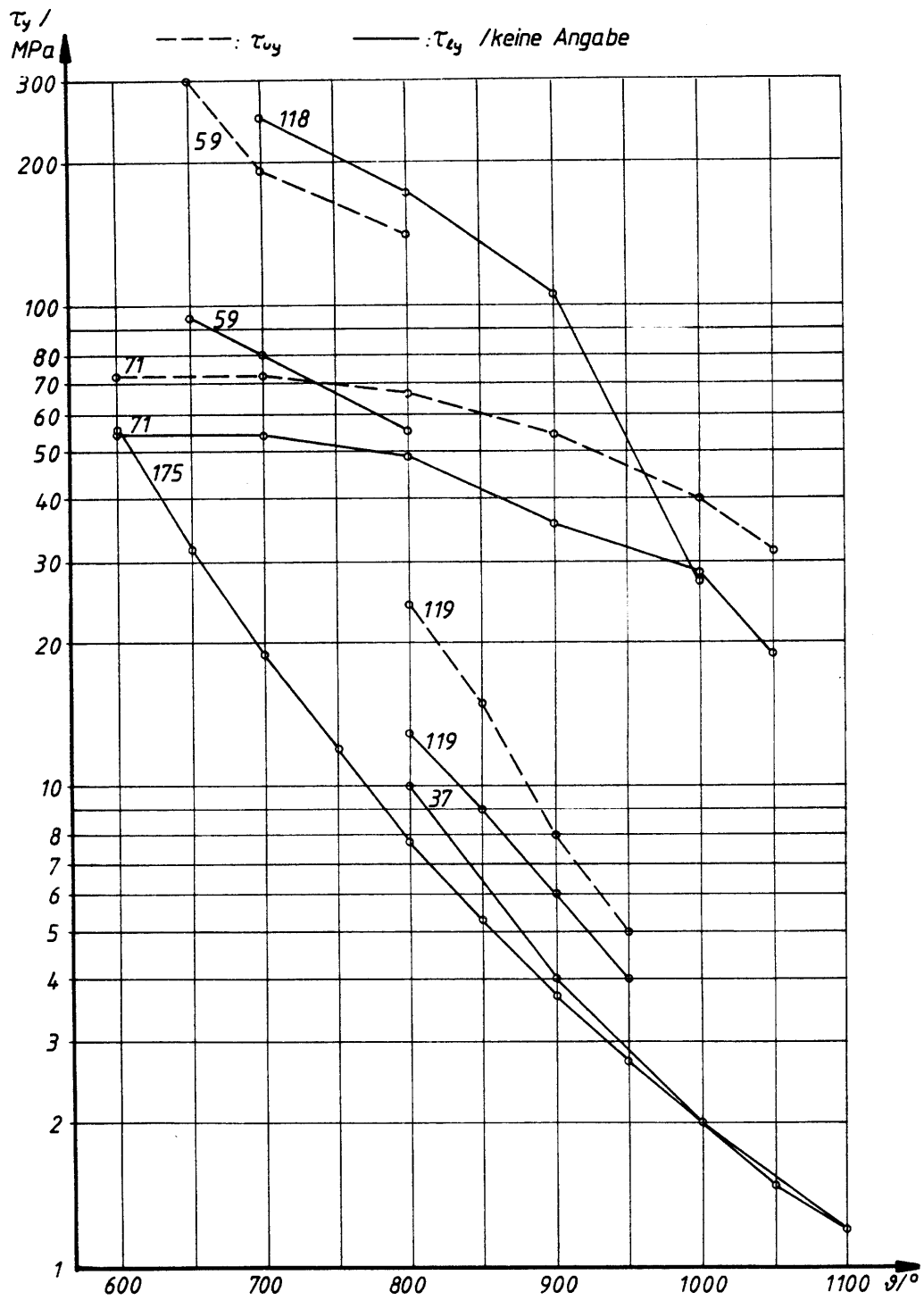


Bild 3.25: Vergleich der kristallinen Streckgrenze τ_{ly} von Si über der Temperatur nach verschiedenen Quellen.

Sicherlich spielen bei diesen Angaben Prozeßparameter eine wichtige Rolle. Da hierüber aber keine Erkenntnisse vorliegen, sollen als Mittelwerte benutzt werden:

$$\bar{E} = 1,5 * 10^5 \text{ MPa}$$

bei $\theta = 0^\circ\text{C}$ und

$$\alpha_T = 2,81 * 10^{-6} / \text{K}$$

von $\theta = 20 \dots 400^\circ\text{C}$ [38].

Hinsichtlich des Spannungszustands herrscht keine Klarheit. Toncheva und Vassilev haben bei der Abscheidung von Polysiliziumfilmen ($0,4 \mu\text{m}$ und $0,6 \mu\text{m}$ dick) Druckspannungen gefunden, erwähnen jedoch einen anderen Autor, bei dem Zugspannungen aufgetreten sind [44].

Dotiertes Silizium Von Phosphor-dotiertem Polysilizium werden in [38] Ausdehnungskoeffizient und Steifigkeit angegeben:

$$\alpha_T = (2,95 \pm 0,24) * 10^{-6} / \text{K}$$

$$\frac{E}{1 - \mu} = (1,24 \pm 0,16) * 10^5 \text{ MPa}$$

Wird die Löslichkeitsgrenze lokal überschritten und kommt es zu Ausscheidungen, so können Siliziumverbindungen auftreten. Hiervon listet Tabelle 3.4 bekannte Verbindungen Silizium-Bor auf [11].

3.3 Siliziumdioxid SiO_2

3.3.1 Eigenschaften

Siliziumdioxid zeichnet sich unter anderen Isolatormaterialien dadurch aus, daß es gute dielektrische Eigenschaften aufweist, ausreichende Festigkeit besitzt und vor allem wegen seiner niedrigen thermischen Ausdehnung geringe mechanische Spannungen erzeugt. Besonders vorteilhaft ist, daß es als Oxidationsprodukt des Substratmaterials Silizium durch einfache Glühbehandlung in oxidierender Atmosphäre auf dieses aufwächst. Die so entstehende Grenzfläche Silizium - Siliziumoxid ist sehr homogen, was bei elektronischen Anwendungen sehr gewünscht wird.

Chemisch gesehen ist SiO_2 reines Quarzglas. Die Siliziumatome sind von jeweils vier Sauerstoffatomen tetraedrisch umgeben und bilden nach der Hypothese von Zachariasen [19,65] dreidimensionale regellose Netzwerke, Bild 3.26. Bedingt durch diese Struktur sind die Eigenschaften von SiO_2 stark temperaturabhängig. So nimmt die Festigkeit ab ca. 700°C ab, und die Substanz beginnt sich viskoelastisch zu verhalten. Dieser Umstand wurde in der Halbleitertechnik lange nicht beachtet und fand erst mit zwei Arbeiten von E.P. EerNisse [180,196] Aufmerksamkeit.

Gläser sind bei Raumtemperatur vollkommen spröde und sehr kerbempfindlich. So wird der starke Einfluß der Probengröße auf die Festigkeit darauf zurückgeführt, daß kleinere Proben mit einer geringeren Wahrscheinlichkeit scharfe Kerben enthalten. Bild 3.27a und b stellen die Zugfestigkeit in Abhängigkeit von Probendurchmesser und der Tiefe des chemischen Polierens dar.

Neben Temperatur und Geometrie üben die Umgebungsbedingungen, vor allem Feuchtigkeit, einen starken Einfluß auf das Verhalten von Glas aus, Bild 3.28. Es wird angenommen, daß OH-Gruppen in das offene Netzwerk eindiffundieren und mit ihrer freien Bindung Si-O-Ketten unterbrechen. Wegen dieser vielfältigen Abhängigkeiten streuen Festigkeitswerte sehr stark. Gegenüber einer Druckfestigkeit von -1230 MPa [65] zeigt Bild 3.29 den

θ	ρ	c_{11}	c_{12}	c_{44}	α_T	τ_{ly}	τ_{uy}	c_p	λ
25	2,33	16,00	5,78	7,99	2,6	—	—	703	156
100	2,33	15,95	5,78	7,95	3,1	—	—	770	119
200	2,33	15,86	5,77	7,90	3,4	—	—	799	87,9
300	2,32	15,73	5,71	7,84	3,7	—	—	828	68,2
400	2,32	15,57	5,62	7,78	3,9	—	—	857	54,7
500	2,32	15,42	5,56	7,72	4,1	—	—	885	45,0
600	2,32	15,27	5,50	7,66	4,3	55	110	914	37,7
700	2,31	15,14	5,48	7,59	4,4	19	38	943	32,2
800	2,31	14,96	5,39	7,52	4,5	7,7	15	972	27,8
900	2,30	14,75	5,28	7,45	4,6	3,7	5,4	975	24,2
1000	2,30	14,51	5,15	7,37	4,6	2,0	4,0	979	21,3
1100	2,30	14,32	4,80	7,08	4,6	1,2	2,4	982	18,9

Tabelle 3.3: Die hier verwendeten Materialparameter für Silizium. Dichte ρ in g/cm^3 , c_{ik} und τ_y in 10^5 MPa, α in $10^{-6}/K$.

Verbindung	Dichte ρ (g/cm^3)	T_S K	α_T $10^{-6}/K$	Intervall $^{\circ}C$	E-Modul 10^5 MPa	λ $W/(m * K)$
$Si_{11}B_{31}$						
SiB_3						
SiB_4	2,41-2,44 ($127^{\circ}C$)	1269	6	20-1000	2,8	5,9 ($100^{\circ}C$) 4,7 ($500^{\circ}C$) 3,5 ($1000^{\circ}C$)
SiB_8	2,39-2,43 ($27^{\circ}C$)	1864				
SiB_{14}	2,48-2,51 ($27^{\circ}C$)					1,5-3 ($27^{\circ}C$)
SiB_{12}						
$SiB_{\approx 36}$						

Tabelle 3.4: Bekannte Silizium-Bor-Verbindungen [11]

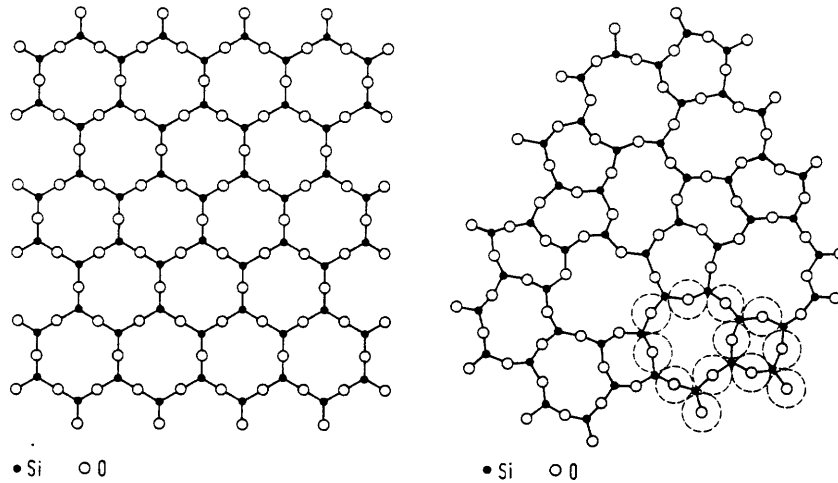


Bild 3.26: a) Ebene Darstellung eines regelmäßigen SiO_2 -Netzwerks (die vierten Valenzen der Si ragen nach oben oder unten aus der Zeichenebene heraus).
 b) Ebene Darstellung eines unregelmäßigen SiO_2 -Netzwerks (gestrichelt rechts unten der wirkliche relative Flächenbedarf der Sauerstoffe) [65].

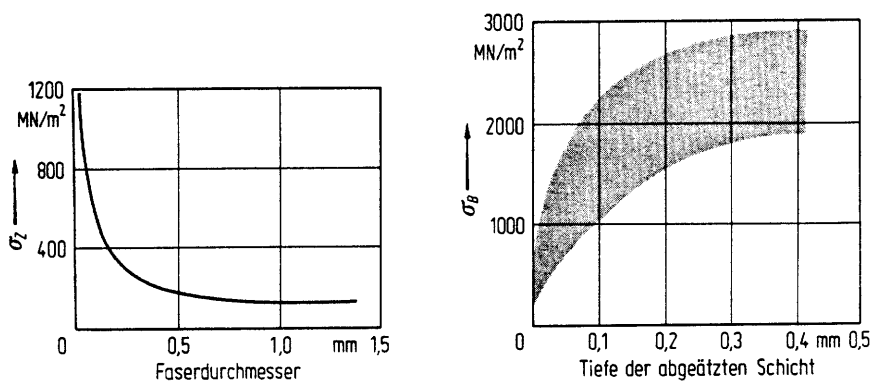


Bild 3.27: a) Zugfestigkeit von Glasfasern in Abhängigkeit vom Durchmesser,
 b) Biegefestigkeit von Pyrex-Glas nach Ätzung mit 15%iger Flußsäure [65].

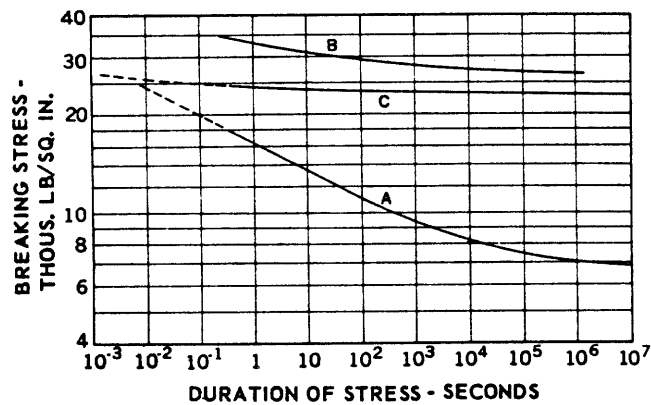


Bild 3.28: Festigkeit von Glas im Biegeversuch bei Raumtemperatur. (A): Entspanntes Glas, in Luft; (B): Wärmebehandelt, in Luft; (C): Entspannt, im Vakuum [17].

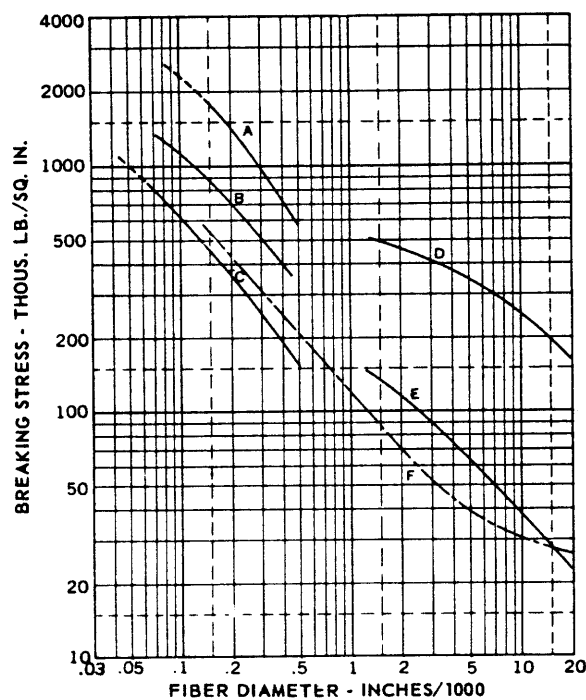


Bild 3.29: Mittlere Zugfestigkeit von Glasfasern. (A) Quarzglas im Vakuum nach dem Glühen; (B) Quarzglas in getrockneter Atmosphäre; (C) Quarzglas in feuchter Atmosphäre; (D)-(F) andere Gläser [17].

Bereich der Zugfestigkeit (Kurven A - C: Quarzglas).

Die Viskosität von Glas kann durch die Gleichung

$$\lg \eta = a + \frac{b}{\theta - c}$$

angenähert beschrieben werden. Mit den Konstanten a, b und c für SiO_2 lautet sie [65]:

$$\lg k \eta_{\text{SiO}_2} = -2,49 + \frac{15004}{\theta - 253}$$

mit $k = 1/\text{dPa s}$

Den Verlauf der Viskositätskurve zeigt Bild 3.30. Da Glas nicht sofort auf Zustands-

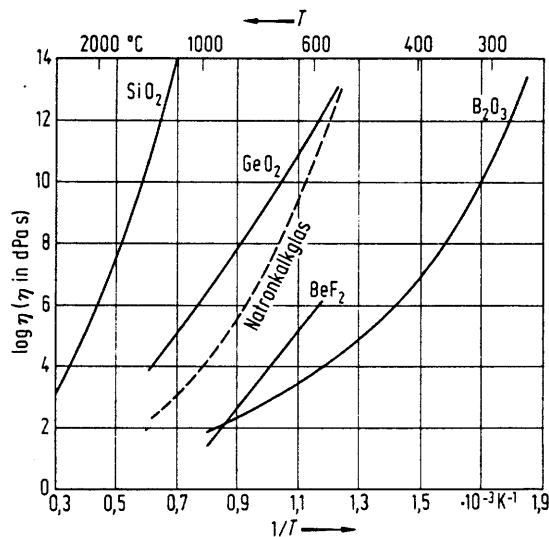


Bild 3.30: Temperaturabhängigkeit der Viskosität η einiger Einkomponentenglassschmelzen (mit einer Natronkalkglasschmelze zum Vergleich) [65].

veränderungen reagiert, gilt auch der theoretische Viskositätswert erst dann, wenn thermodynamisches Gleichgewicht erreicht ist. Bild 3.31 stellt die asymptotische Annäherung der Viskosität zweier Gläser nach unterschiedlicher Temperaturänderung an ihren Endwert dar. Es ist zu erkennen, daß Anfangs- und Endwert um mehr als eine Größenordnung auseinander liegen können. Bild 3.32 zeigt die Viskosität von Quarzglas, das vorher bei verschiedenen Temperaturen entspannt wurde. Die Streuung erstreckt sich hier über mehr als drei Größenordnungen. Auch der Spannungszustand besitzt, wie gezeigt wurde [154, 158], Einfluß auf das viskose Verhalten. Ähnlich dem Kriechen von Metallen fällt beim Überschreiten einer kritischen Spannung oder kritischen Dehngeschwindigkeit die Viskosität plötzlich auf einen Bruchteil ihres vorherigen Wertes ab, und beschleunigtes Fließen tritt ein, Bild 3.33.

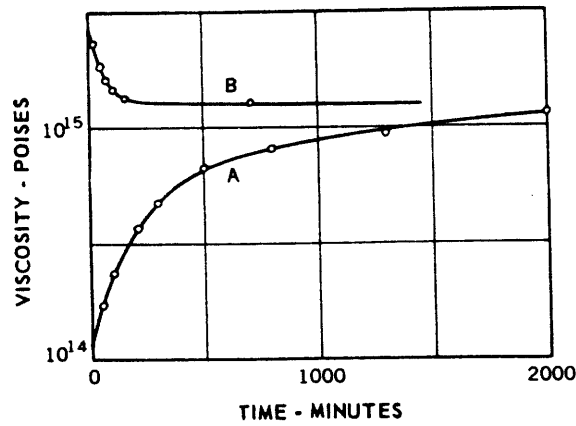


Bild 3.31: $\eta - t$ -Diagramm eines Natronkalkglases bei 468,7°C. (A) Frisch gezogene Glasfaser, (B) Nach 64-stündiger Stabilisation bei 477,8°C [17].

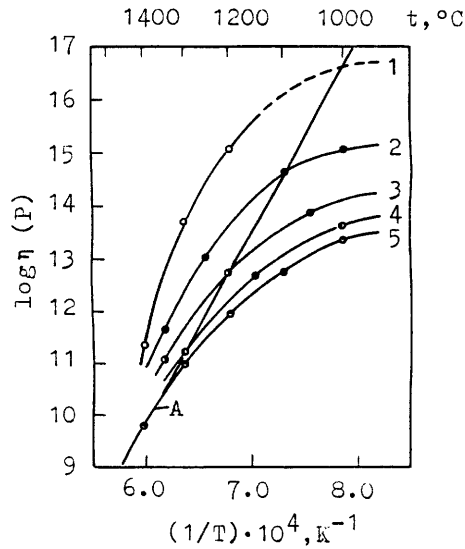


Bild 3.32: Viskosität von Quarzglas. Fiktive Temperatur, in °C: 1 - 1000, 2 - 1100, 3 - 1200, 4 - 1300, 5 - 1400. A - Gleichgewichtskurve [5].

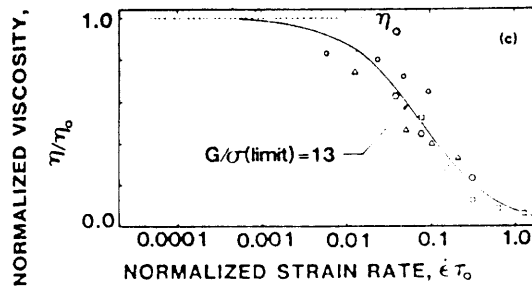


Bild 3.33: Abweichung der Viskosität vom Newtonschen Wert als Funktion der Abzugsgeschwindigkeit $\dot{\epsilon}\tau_0$ für verschiedene Temperaturen (normiert) [157].

Die viskoelastischen Eigenschaften von Glas bringen mit sich, daß durch Deformation aufgebrauchte Spannungen nach gewisser Zeit abgebaut werden, vgl. Abschnitt 3.1. Nach dem Gesetz von Maxwell gilt für die Relaxation von Spannungen:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp(-t/t_R) \quad \text{mit } t_R = E/\eta$$

Die Gültigkeit dieses Ansatzes konnte experimentell für Gläser nicht nachgewiesen werden, weshalb als Modifikation unter anderem vorgeschlagen wurde [65]:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp[-\sqrt{t/t_R}] \quad \text{mit } t_R = 340 * E/\eta$$

E in Pa; η in $dPa s$

3.3.2 Siliziumoxid in der Halbleitertechnik

Die Eigenschaften eines gerade durch chemische Reaktion erzeugten Filmes unterscheiden sich in gewissem Umfang von denen massiven Materials. Dies gilt besonders wegen seiner ausgeprägten Abhängigkeit von der Vorbehandlung für SiO_2 . Die Werkstoffpaarung Si-SiO₂ gehört zwar inzwischen zu den besterforschten, und viele Autoren geben auch identische Werte für SiO₂-Filme und massives Quarzglas an [127], aber genaue Messungen beispielsweise der elastischen Parameter sind allein schon wegen der geometrischen Abmessungen schwierig. Vor allem chemisch niedergeschlagene Filme weisen ein poröses Gefüge auf, das sich durch Diffusion nach der Abscheidung noch verdichtet [92] und weiter verändert. Jansen et al. [27] berichten, daß für unterhalb von 50°C abgeschiedene CVD-Filme gar keine Eigenschaften definiert werden könnten. Da thermische Filme bei höheren Temperaturen erzeugt werden, können Entspannungsvorgänge um viele Größenordnungen schneller ablaufen und kann bei Prozeßende nahezu Gleichgewicht erreicht sein.

Zur Frage nach der Viskosität sind einige Forschungsanstrengungen unternommen worden, seit EerNisse trotz eines erwarteten Wertes von ca. 10^{16} dPas bei 970°C vollkommenen Spannungsausgleich beschrieben hat. Demnach stellt sich durch die Volumenzunahme von 125% im Moment der Oxidation eine Druckspannung von etwa 450 MPa [186, 190] ein, die bei anfangs geringer Viskosität durch Fließen senkrecht zur Oberfläche abgebaut wird. Die Viskosität ist eine Funktion des momentanen durchschnittlichen Vernetzungsgrades, des OH-Gehaltes [147] und des Spannungszustandes [157]. Über das zugrundeliegende Materialgesetz dieses nicht im Gleichgewicht befindlichen Systems ist noch keine Einigkeit erzielt worden. Während rein viskose Ansätze [180] inzwischen abgelehnt werden, sehen einige Autoren [z.B. 92] gute Übereinstimmung des Materialverhaltens mit einem Ansatz nach Maxwell, andere greifen zu nichtlinearen Modellen [z.B. 156, 157].

3.3.3 Materialwerte

1. Dichte bei Raumtemperatur

Quelle	Jahr	Dichte ρ in g/cm ³	Bemerkungen
[1]	1971	2.20	N.A.
[4]	1970	2.2	N.A.
[9]	1961	2.33	Literatur
[11b]	1984	2.21	Literatur
[17]	1958		Literatur
[151a]	1979	2.20	Hersteller
[151b]	1989	2.202	Hersteller
[151c]	1982	2.2	Literatur

Hier soll als Wert $\rho = 2.20$ übernommen werden.

2. Elastische Parameter bei Raumtemperatur

Quelle	E in 10 ⁵ MPa	G in 10 ⁵ MPa	μ	Jahr	Bemerkungen
[1]	0.731	—	—	1971	Quarzglas (QG)
[4]	0.64-0.70	0.26-0.29	0.25	1970	QG
[5]	0.78	0.31	0.17	1983	QG, Literatur
[17]	0.72	0.31	0.17	1958	QG
	0.81	0.34	0.19		900°C
[19]	0.60-0.722	—	—	1959	QG, Literatur
[32]	0.66	—	0.17	1985	aus [46]
[52]	0.70	—	—	1967	Quelle fehlt
[151a]	0.726	—	0.16	1979	QG, Hersteller
[151b]	0.73	0.31	0.17	1989	QG, Diag. -200- +900°C
[151c]	0.73	—	0.17	1982	QG, Literatur

Die zitierten Werte liegen alle im selben Bereich, sind jedoch nur in [151b] für alle interessierenden Temperaturen angegeben. Sie wurden zwar nicht für dünne Filme erstellt, sind aber nach [127] hierauf übertragbar. Die Angaben für den ganzen Temperaturbereich finden sich in Bild 3.34. Da [5] keine Werte für $\mu(T)$ angibt, sollen hier jene aus [151b] übernommen werden. Diese wurden auch von [153] verwendet und angeblich bestätigt.

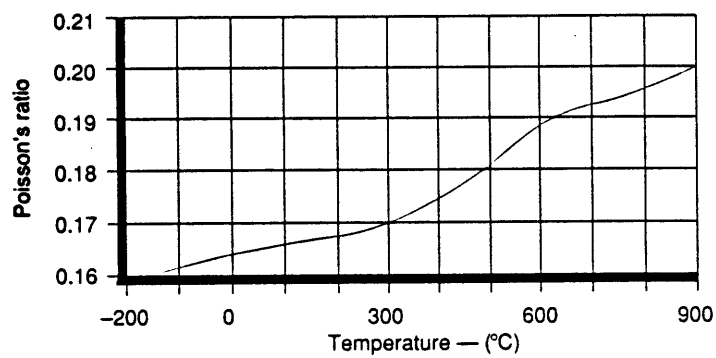
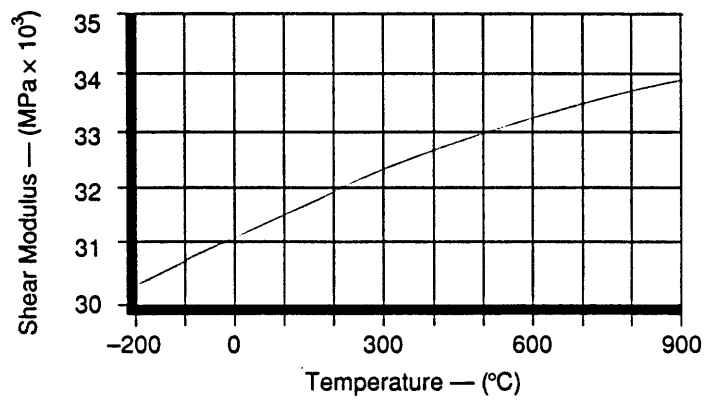
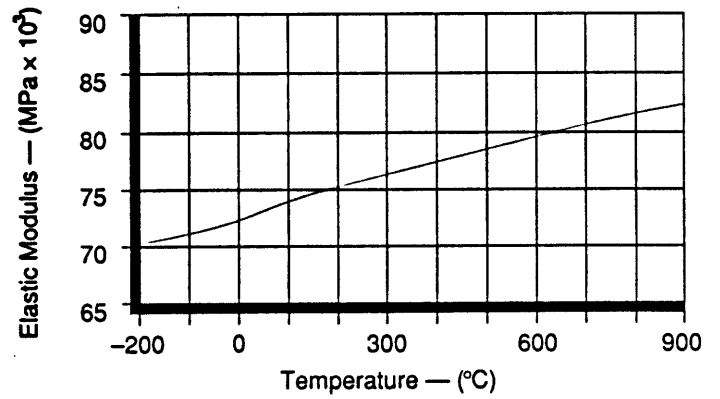


Bild 3.34: Elastizitätsmodul, Schubmodul und Poissonkoeffizient von Quarzglas [151b]

T	$\Delta L/L_0$	α_T	T	$\Delta L/L_0$	α_T
80	0,0001	-0,70	500	0,0124	0,63
100	-0,0013	-0,53	550	0,0154	0,61
120	-0,0022	-0,38	600	0,0184	0,59
140	-0,0028	-0,24	650	0,0213	0,56
160	-0,0032	-0,10	700	0,0240	0,53
180	-0,0032	0,02	750	0,0267	0,50
200	-0,0031	0,13	800	0,0292	0,47
250	-0,0018	0,35	850	0,0315	0,44
293	0,0000	0,49	900	0,0336	0,41
350	0,0033	0,57	950	0,0355	0,40
400	0,0064	0,61	1000	0,0371	0,37
450	0,0094	0,63			

Tabelle 3.5: Dilatometerwerte und thermische Ausdehnungskoeffizienten für Quarzglas nach Typ III [8].

3. Thermische Ausdehnung α_T bei Raumtemperatur

Quelle	α_T in $10^{-6}/K, \theta = 25^{\circ}C$	Jahr	Bemerkungen
[17]	0.60	1958	von 25 - 600 $^{\circ}C$
[52]	0.55	1967	$\alpha = f(T)$
[53]	0.60	1967	von 20 - 350 $^{\circ}C$
	0.61		von 50 - 350 $^{\circ}C$
	0.60		von 50 - 400 $^{\circ}C$
[1]	0.55	1971	N.A.
[8]	0.49	1977	Tabellen 180K - 1250K, Formeln
[65]	0.50	1977	von 0 - 200 $^{\circ}C$ Tabelle
[151a]	0.55	1979	von 0 - 300 $^{\circ}C$ Tabelle
[151c]	0.70	1982	Formel von 27 - 973 $^{\circ}C$ ¹
[11b]	0.43	1984	Formel von 0 - 500 $^{\circ}C$ ²
	0.60		von 20 - 400 $^{\circ}C$ Tabelle
	ca 0.47		von 20 - 1000 $^{\circ}C$ versch. Sorten
[196]	0.48	1985(?)	von 0 - 900 $^{\circ}C$ Tabelle
[151b]	0.52	1989	Diagramm von -200 - +300 $^{\circ}C$

Die Werte aus [8] decken als einzige den geforderten Bereich von 25 - 1000 $^{\circ}C$ ab und sollen hier benutzt werden. Es sind drei Formeln für verschiedene Entspannungstemperaturen angegeben, von denen Typ II am besten geeignet erscheint. In Tabelle 3.5 finden sich die Dilatometerwerte aus [8] sowie dazu errechnete Ausdehnungskoeffizienten.

$$^1\alpha_T = -0,8218 + 7,606 * 10^3/K * T - 1,266 * 10^{-5}/K^2 + 6,487 * 10^{-9}/K^3 * T^3$$

$$^2\alpha(\theta) = 0,395 + 1,282 * 10^{-3}/^{\circ}C * \theta - 1,698 * 10^{-6}/^{\circ}C * \theta^2$$

4. Wärmekapazität c_p und Wärmeleitfähigkeit λ

Quelle	c_p in $J/(kg * K)$	λ in $W/(K * m)$	Jahr	Bemerkungen
[17]	769 373K		1958	Tabelle von 100 - 1000°C
[19]		1.482 373K	1959	Formel, Tabellen 100 - 820°C
[1]	754 298K	1.382 298K	1971	N.A.
[65]	182 323K		1977	Formel von 0 - 1300°C
[151a]	708 273K	1.256 273K	1979	Diagramm von 0 - 900°C (λ) Diagramm von 0 - 1000°C (c_p)
[151c]	700 273K	1.370 300K	1982	Tabelle von -173 - 327°C
[151b]	741 298K	1.380 298K	1989	Diagramm von 0 - 900°C (λ) von -200 - 1000°C (c_p)

Die Formel aus [65] liefert in ihrem unteren Bereich sehr stark von der allgemeinen Tendenz abweichende Werte, sodaß es zweifelhaft erscheint, sie unkritisch übernehmen zu können. Der geforderte Temperaturbereich wird jedoch von den Quellen [17], [151a] und [151b] abgedeckt, deren Angaben zudem miteinander übereinstimmen. In [17] ist neben der Mittleren \bar{c}_p auch die Wahre Wärmekapazität c_p angegeben, Bild 3.35, sodaß hier diese

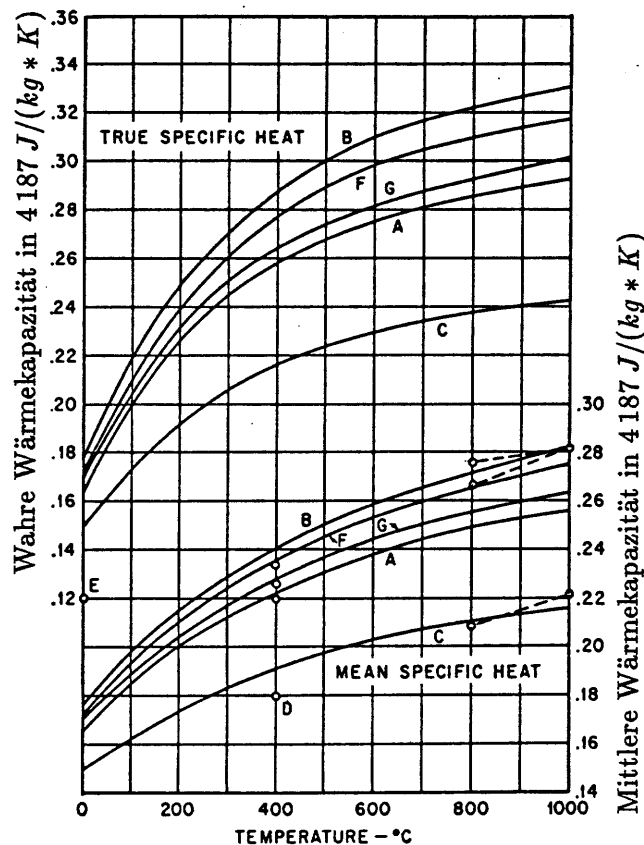


Bild 3.35: Wärmekapazität einiger Gläser; (A) - Quarzglas. Die mittlere Wärmekapazität gilt ab 0°C [17].

Werte verwendet werden sollen.

Die in [19] genannten Meßreihen für die Wärmeleitfähigkeit widersprechen einander

sehr; lediglich die Formel

$$\lambda(T) = (3,83 * 10^{-6}T + 0,00163K) * 418,68 \frac{W}{K * m}$$

entspricht den anderswo gefundenen Werten. [151a] liegt für $T < 700K$ unterhalb, für $T > 700K$ oberhalb von [151b] und der genannten Formel. Da nach [65] aber der effektive Wärmetransport ohnehin nach oben korrigiert werden muß, wird hier $\lambda(T)$ aus [151a] verwendet.

5. Viskosität η

a. Massives SiO₂

Quelle	$\lg \eta = 14,5$	13	7,6	Jahr	Bemerkungen
[17]	1070°C	1140	1667	1958	
[65]	1136	1222	1740	1977	Formel
	1120	1220	1500		Diagramm
[151a]	956	1084	1580	1979	
[151c]	1000	1100	1600	1982	$\lg \eta = -10.14 + 38020/[\theta + 542,9]$
[5]	1000	1000		1983	Meßreihen
[151b]	990	1075	1585	1989	Diagramm

b. SiO₂-Film

[153] (1980):

Aus röntgentopografischen Kontrastmessungen werden folgende Relaxationszeiten t_R , aus denen sich die Viskosität über die die Gleichung

$$\eta = t_R * E \text{ bzw. } \eta = t_R * G \text{ (E,G aus [151b])}$$

errechnen läßt, angegeben:

θ in °C	900	950	1 000	1 050	1 100
t_R in sec	25 000	5 000	1 000	250	60
$t_R * E$ in d Pa s	$2,1 * 10^{16}$	$4,2 * 10^{15}$	$8,4 * 10^{14}$	$2,1 * 10^{14}$	$5,2 * 10^{13}$
$t_R * G$ in d Pa s	$8,5 * 10^{15}$	$1,7 * 10^{15}$	$3,4 * 10^{14}$	$8,5 * 10^{13}$	$2,0 * 10^{13}$

[160] (1984): Formel für nasse Oxide von EerNisse:

$$\eta = 2 * 10^{-7} \text{dPas} * \exp(5,4 \text{ eV}/kT) \quad \text{Gleichgewicht (1)}$$

$$\eta = 2 * 10^{+8} \text{dPas} * \exp(1,3 \text{ eV}/kT) \quad \text{außerhalb GG (2)}$$

Daraus folgt:

θ in $^{\circ}\text{C}$	$\eta_{(1)}$ in $dPa s$	$\eta_{(2)}$ in $dPa s$
500	$3,2 * 10^{28}$	$6,0 * 10^{16}$
600	$3,0 * 10^{24}$	$6,4 * 10^{15}$
700	$1,9 * 10^{21}$	$1,1 * 10^{15}$
800	$4,6 * 10^{18}$	$2,6 * 10^{14}$
850	$3,4 * 10^{17}$	$1,4 * 10^{14}$
900	$3,2 * 10^{16}$	$7,7 * 10^{13}$
950	$3,6 * 10^{15}$	$4,5 * 10^{13}$
1000	$4,8 * 10^{14}$	$2,8 * 10^{13}$
1050	$7,4 * 10^{13}$	$1,8 * 10^{13}$
1100	$1,3 * 10^{13}$	$1,2 * 10^{13}$

[198] (1988): Für ein Oxidationsmodell wurden Viskositäten gemessen:

θ in $^{\circ}\text{C}$	η in $dPa s$
800	$1,0 * 10^{15}$
900	$3,0 * 10^{14}$
1000	$3,0 * 10^{13}$
1100	$6,0 * 10^{12}$
1200	$6,0 * 10^{11}$

[157] (1989): Relaxationszeiten wurden aus einem nichtlinearen Ansatz nach Eyring [195] errechnet. Daraus lassen sich hypothetische Maxwell-Viskositäten ermitteln:

θ in $^{\circ}\text{C}$	t_R	$\eta = t_R * E$	$\eta = t_R * G$
700	10000	$8,1 * 10^{15}$	$3,4 * 10^{15}$
800	2000	$1,6 * 10^{15}$	$8,0 * 10^{14}$
900	300	$2,5 * 10^{14}$	$1,0 * 10^{14}$
1000	40	$3,4 * 10^{13}$	$1,4 * 10^{13}$
1100	7	$6,0 * 10^{12}$	$2,4 * 10^{12}$
1200	0,8	$6,9 * 10^{11}$	$2,7 * 10^{11}$

[126] (1989): Relaxationszeiten wurden aus optischer Vermessung der Waferverbiegung sowie aus Infrarotmessungen bei $\nu = 1075 \text{ cm}^{-1}$ (Bindungsschwingungen) ermittelt und mit Werten für Quarzglas aus [92] verglichen.

θ in $^{\circ}\text{C}$	t_R , Spannungsm.	t_R , IR	t_R , [92]
700	$4,6 * 10^6 \text{ s}$	$1,2 * 10^6 \text{ s}$	$1,9 * 10^7 \text{ s}$
1000	$3,1 * 10^3$	$2,3 * 10^3$	$0,72 * 10^3$

und $\eta = t_R * G$ in $dPa s$:

700	$3,7 * 10^{18}$	$9,7 * 10^{17}$	$1,5 * 10^{19}$
1000	$2,6 * 10^{15}$	$1,9 * 10^{15}$	$6,0 * 10^{14}$

Eine Zusammenstellung dieser Werte zeigt Bild 3.36. Es fällt auf, daß die Viskosität im Bereich ab ca. 900°C innerhalb von 2 Größenordnungen liegt, und zwar sowohl für massive als auch für Filmproben. In dieser Arbeit wird, da hinsichtlich des richtigen

keine Einigkeit besteht und um die viskoelastische Rechnung nicht unnötig kompliziert zu machen, ein Maxwell-Modell verwendet und in einer ersten Rechnung den Angaben von EerNisse [160] gefolgt. Da diese bis 1000°C oberhalb des Durchschnitts liegen und deswegen zu hohe Spannungen liefern werden, kann auf diese Weise eine obere Schranke für die Werkstoffbelastung ermittelt werden.

Die folgende Tabelle Tabelle 3.6 stellt zum Abschluß alle für SiO₂ verwendeten Materialwerte noch einmal zusammen.

Größe Einheit	Dichte ρ g/cm ³	E-Modul 10 ⁵ MPa	G-Modul 10 ⁵ MPa	μ	c_p J/(kg K)	λ W/(K m)	α_T 10 ⁻⁶ /K	η dPas
25°C	2,20	0,73	0,31	0,17	691	1,256	0,609	10 ³⁰
100°C	2,20	0,74	0,31	0,17	769	1,340	0,609	10 ³⁰
200°C	2,20	0,75	0,32	0,17	835	1,465	0,595	10 ³⁰
300°C	2,20	0,76	0,32	0,17	887	1,549	0,536	10 ³⁰
400°C	2,20	0,77	0,33	0,17	926	1,758	0,480	10 ³⁰
500°C	2,20	0,78	0,33	0,18	965	1,968	0,392	3,2 * 10 ²⁸
600°C	2,20	0,79	0,33	0,19	992	2,260	0,392	3,0 * 10 ²⁴
700°C	2,20	0,80	0,34	0,19	1020	2,721	0,392	1,9 * 10 ²¹
800°C	2,20	0,81	0,34	0,20	1044	3,224	0,371	4,6 * 10 ¹⁸
900°C	2,20	0,82	0,34	0,20	1057	—	0,371	3,2 * 10 ¹⁶
1000°C	2,20	0,83	0,34	0,20	1070	—	0,371	4,8 * 10 ¹⁴
1100°C	2,20	—	—	—	—	—	—	1,3 * 10 ¹³

Tabelle 3.6: Zusammenstellung der hier verwendeten Materialwerte für SiO₂.

3.3.4 Eigenspannungen in SiO₂-Filmen

Die Spannungen, die bei Raumtemperatur in Oxidfilmen herrschen, setzen sich aus zwei Anteilen, einem thermischen $\sigma_{th} = \Delta\alpha \Delta T \frac{E}{1-\mu}$ und einem inneren, Eigenspannungsanteil, zusammen:

$$\sigma = \sigma_{th} + \sigma_i$$

Bild 3.37 zeigt den thermischen Anteil σ_{th} an der Gesamtspannung σ für verschiedene Oxidationstemperaturen [190]. Mit den hier verwendeten Werten für α_T und E ergeben sich niedrigere Spannungen von -285 MPa bei $\theta_{ox} = 1000^\circ\text{C}$ und -186 MPa ($\theta_{ox} = 700^\circ\text{C}$). Während jedoch σ_{th} leicht zu berechnen ist, vorausgesetzt, die Materialdaten stehen zur Verfügung, liegen hinsichtlich des inneren Spannungszustandes sehr widersprüchliche Messungen vor. Offensichtlich ist hier ein bestimmender Parameter das Herstellungsverfahren des Oxidfilms.

Thermische Oxidation Bei der Oxidation vergrößert sich das Volumen des reagierenden Siliziums erheblich: Silizium besitzt eine Dichte von $5 \cdot 10^{22}$ Atome/cm³; das aus der dreifachen Menge an Atomen bestehende SiO₂ jedoch nur $2,2 \cdot 10^{22}$ Atome/cm³ [66]. Diese Volumendehnung erzeugt im Moment der Reaktion Druckspannungen in der Größenordnung von 500 MPa [186,197], die dann durch Fließen des Oxids (und möglicherweise des Substrats) abklingen. Es ist deshalb zu vermuten, daß die gemessene Eigenspannung in erster Linie eine Funktion der Abkühlgeschwindigkeit ist, daß sie also bei genügend langsamer Abkühlung sehr klein wird [86]. Die Gesamtspannung ist dann unabhängig von der Oxidationstemperatur ($\theta_{ox} > 900^\circ\text{C}$) [100]. Tatsächlich liegt der Durchschnitt der Literaturangaben ¹ über gemessene Filmspannungen in dem oben für den thermischen Anteil genannten Bereich, sodaß man davon ausgehen kann, daß in thermisch oxidierten und langsam abgekühlten Filmen keine Eigenspannung mehr auftritt.

¹[39, 64, 80, 86, 89, 91, 92, 101, 111, 126, 127, 147, 157, 159, 190]

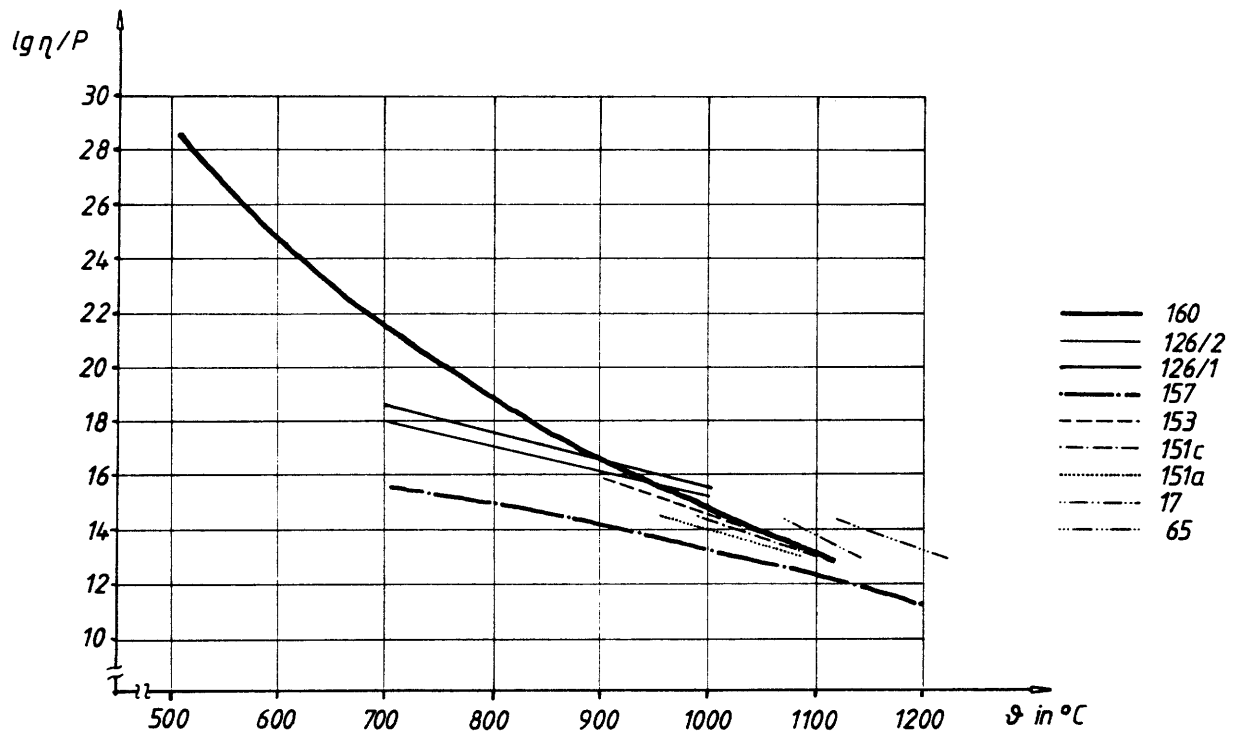


Bild 3.36: Übersicht über den von verschiedenen Autoren angegebenen Viskositätsverlauf von SiO₂.

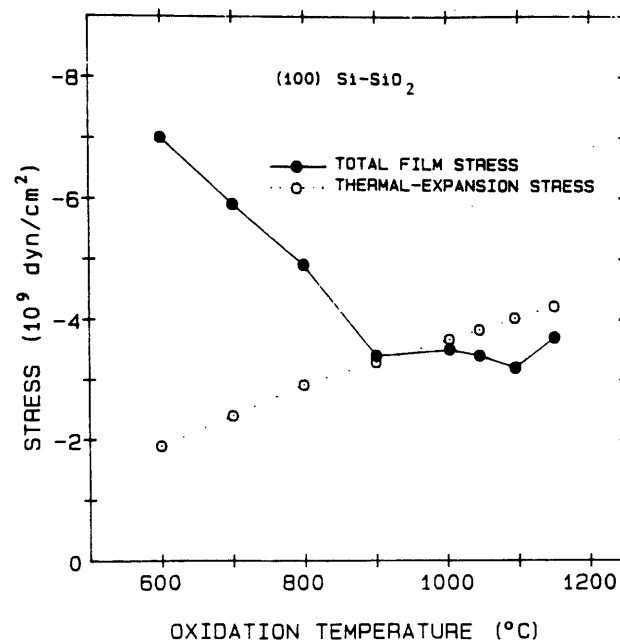


Bild 3.37: Zusammensetzung der Filmspannung (100)-orientierter Proben bei verschiedenen Oxidationstemperaturen und Abhängigkeit der Inneren Spannung von der Oxidationstemperatur [190].

Chemische Abscheidung Die Angaben über Spannungen in CVD-Filmen streuen zwischen -300 und $+350$ MPa. Wichtigster Parameter ist hier der Wassergehalt [39]. Wasserfreie Filme stehen unter Zugspannung (!), für die [157] den Wert $240 - 370$ MPa angibt. Dies paßt gut zu den übrigen gefundenen Messungen².

Steigt jedoch der Wassergehalt im Film durch nasse Abscheidung (Liquid-Phase-CVD) oder Einwirkung natürlicher Luftfeuchtigkeit, so bildet sich ein Druckspannungszustand heraus, der den aus hoher Leerstellenkonzentration herrührenden [157] Zug vollkommen kompensieren kann.

Andere Verfahren Für *aufgedampfte* Filme gibt [67] an: -160 MPa (trocken), -290 MPa (feucht); [111] nennt für *gesputterte* Filme $-(150-300)$ MPa und [157] $-(130-160)$ MPa.

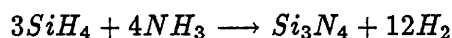
3.4 Siliziumnitrid Si_3N_4

In den Jahren 1964/65 wurde bei der Forschung nach geeigneten Materialien für die Halbleitertechnik Siliziumnitrid untersucht [220]. Si_3N_4 wies zahlreiche Eigenschaften auf, die für seine Verwendung sprachen, vor allem sein thermischer Ausdehnungskoeffizient, der nur wenig über dem von Silizium liegt. Weiterhin ist Siliziumnitrid äußerst hart ($HK = 34$ GPa), chemisch inert [68] und undurchlässig für Metallionen, Sauerstoff und Wasserdampf noch bei Temperaturen über $1000^\circ C$ [220]. Dies und hohes Isolationsvermögen führten zu extensiver Verwendung von Siliziumnitrid als Deckschicht auf Bauelementen (Passivation), als Dielektrikum und schließlich als Oxidationsmaske, was die Herstellung feiner Oxidstrukturen (Local Oxidation of Silicon, LOCOS) ermöglichte.

Andererseits stehen Filme aus Si_3N_4 fast immer unter hoher innerer Spannung: Diese betragen je nach Verfahren von $-1\ 000$ bis $+1\ 000$ MPa. Zusammen mit der Härte des Materials können sie entweder zur Zerstörung des Films durch Beulen oder Risse, Bild 3.38 oder zur überelastischen Verformung des Substrats führen. Dieses Dilemma initiierte mehrere Arbeiten auf dem Gebiet der Filmherzeugung, der Filmkomposition und des Strukturdesigns, vgl. Literaturverzeichnis.

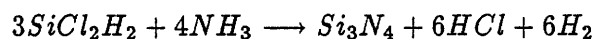
3.4.1 Filmherstellung

Das weitestverbreitete Verfahren zur Erzeugung von Nitridfilmen in der Halbleitertechnik ist die chemische Abscheidung (Chemical Vapor Deposition, CVD). [166] nennt hier zwei Reaktionen:



bei $\theta = 700 - 900^\circ C$.

Oder, bei vermindertem Druck und $\theta = 700 - 800^\circ C$:



Weitere chemische Reaktionen finden sich in [68].

Während in der Anfangszeit der Nitridtechnologie noch Probleme mit der Kristallbildung in Filmen auftraten [54, 104], werden die so erzeugten als qualitativ gut, gleichmäßig und amorph beschrieben [146, 166]. Eine Übersicht über gängige Nitrierungsverfahren nach [68] findet sich in Tabelle 3.7

²[39, 86, 140]

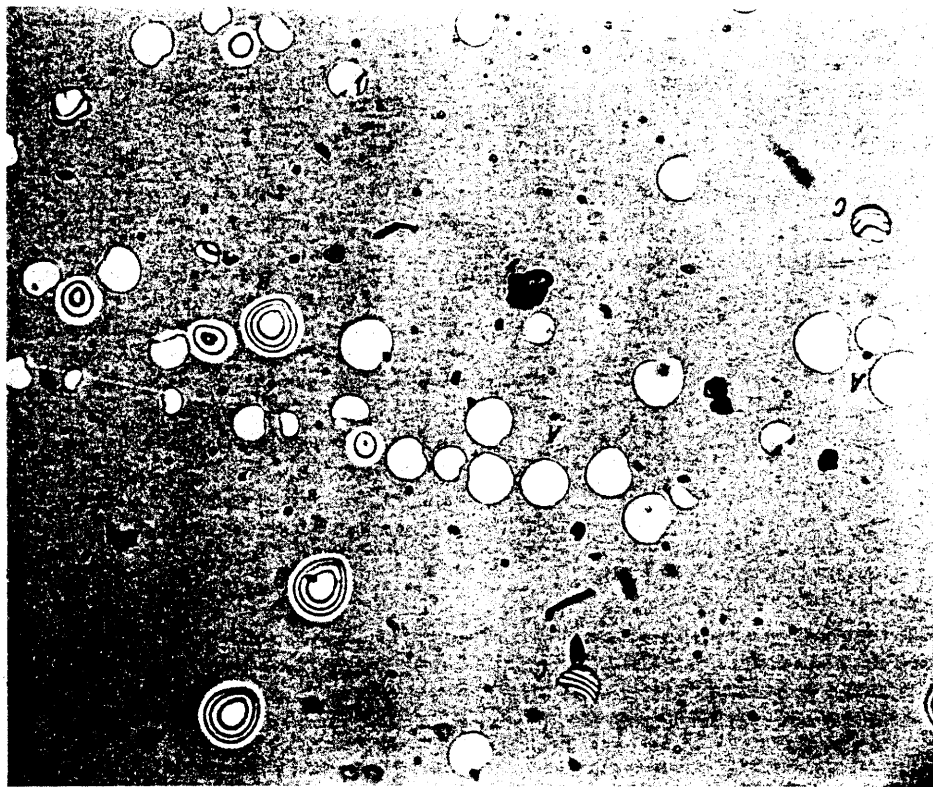


Bild 3.38: Beulen in einem 300 nm dicken Siliziumnitridfilm. Nitriertemperatur θ_N war 300°C ; 15 min. geglüht bei 700°C [150].

Abscheidung	Temperatur	Bemerkungen
CVD	$750 - 1100^\circ\text{C}$	Meistverbreitete Methode; $\text{SiH}_4 + \text{NH}_3$
direktes Sputtern	$\simeq 200$	Hochreines Material schwer erhältlich
reaktives Sputtern	$\simeq 200$	komplexer Prozeß
Glühentladung	$\simeq 300 - 600$	Filmeigenschaften unterschiedlich
Plasmaanodisierung	—	nur dünne Filme
thermisches Aufdampfen	—	teilweise Zersetzung
direktes Nitrieren	> 1400	hohe Temperatur, Kristallbildung
beizen	?	nur dünne Filme

Tabelle 3.7: Nitrierungsverfahren [68]

3.4.2 Filmspannungen

Die in den Filmen auftretenden Spannungen stellen ein ernstes Problem bei der Verwendung von Siliziumnitrid dar. Aus dem Unterschied der Ausdehnungskoeffizienten von Silizium und Si_3N_4 errechnet sich mit den hier benutzten Werten und einer Abscheidetemperatur von 900°C eine Druckspannung im Film von ca. 270 MPa. Die gemessenen Spannungen liegen bei plasma-abgeschiedenen (Reactive-Plasma-Deposited) Filmen tatsächlich in diesem Bereich [68], bei gesputterten Filmen aber um $-(800 - 1200)$ MPa [68] und bei CVD-Filmen gar um +1000 MPa [42, 66, 68, 89, 140]. Chemisch abgeschiedene Filme stehen also unter einer positiven Eigenspannung, neben der die thermische fast zu vernachlässigen ist [100]. Diese Spannung wird auf eine hohe Defektdichte im CVD-Film zurückgeführt. Tatsächlich verringert sie sich durch eine Glühbehandlung bei 1000°C nach der Abscheidung um etwa 200 MPa [42, 140]. Eigenartigerweise treten während des Abscheidens und der folgenden Abkühlung unter kontinuierlichen Si_3N_4 -Filmen bis zu einer Dicke von 400 nm keine Versetzungen im Substrat auf [69]. Die Spannung im Wafer muß also während des Heißprozesses noch knapp unterhalb der Streckgrenze von Silizium liegen. Inhomogenitäten wie Risse oder Filmkanten führen indessen bei direktem Kontakt stets zu Fließen des Substrats, Bild 3.39.

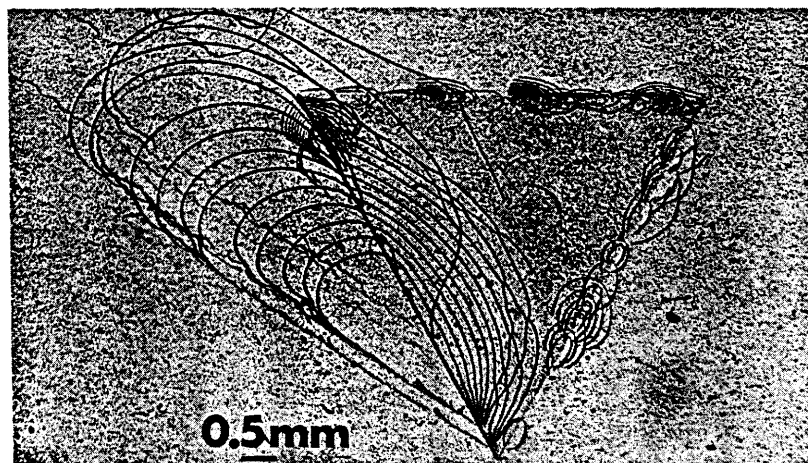


Bild 3.39: Röntgentopographie einer 200 nm dicken Nitridstruktur auf 0,2 mm $\langle 111 \rangle$ Siliziumsubstrat nach 2 Stunden Wärmebehandlung bei 1200°C . (Mit Zwischenlage 50 nm SiO_2) [69].

3.4.3 Materialwerte

1. Dichte bei Raumtemperatur

Quelle	Jahr	ρ in g/cm^3	Bemerkungen
[55]	1966	3,02—3,21	
[2]	1967	2,78—3,01	steigt mit Abscheidetemperatur
[47]	1970	3,18	theoret. Wert (massiv)
[166]	1983	2,9—3,1	
[13]	1982	3,1	
[43]	1979	3,1	angenommen
[68]	1969	3,0—3,1	

Auch hier soll $\rho = 3,1 \text{ g/cm}^3$ angenommen werden. Dieser Wert liegt einerseits im Durchschnitt der Angaben und paßt andererseits zu dem Umstand, daß die hier berechneten Filme bei höheren Temperaturen (s. Anhang) abgeschieden werden. Mit α_T (s.u.) ergibt sich dann für eine Temperatur von $\theta = 1000^\circ\text{C}$ der Wert $\rho = 3,06 \simeq 3,1$. Die Dichte wird hier deswegen als konstant betrachtet.

2. Elastizitätskonstanten E und μ

Quelle	Jahr	E in 10^5MPa	μ	Bemerkungen
[43]	1979	1,46		CVD
		1,3		gesputtert
[104]	1967	0,66		CVD
[47]	1970	2,07		Kristall
[28c]	1987	3,89		
[13]	1982	3,85		Literatur
[211]	1990	3,89	0,3	
[52]	1967	39,2 (3,92?)		gemessen bei 800 u. 1000°C Druckfehler?
[32]	1985	3,89	0,3	Lit. (nicht zuordenbar)

Mangels genauerer Werte soll auch hier $E(T) = 3,89 * 10^5 \text{MPa}$ und $\mu(T) = 0,3$ gesetzt werden.

3. Thermische Dehnung

Quelle	Jahr	α_T in $10^{-6}/\text{K}$	Temperatur	Bemerkungen
[52]	1967	3,85	800°C 1000°C	gemessen
[104]	1967	4,2		
[48]	1969	1,15	50°C	gesputtert; Formel $50-900^\circ\text{C}$ ³
[8]	1977	0,8	20°C	polykristallin Tabelle, Diagramm 293—2000K
[23]	1988	3,85		
[13]	1982	0,8		Literatur

Diese Angaben streuen sehr stark und dürften zum Teil Durchschnittswerte sein. [8] und [48] sind nur wenig unterschiedlich. Da [8] für amorphes Material erstellt wurde, soll hier nach dieser Formel vorgegangen werden.

4. Wärmekapazität c_p und Wärmeleitfähigkeit λ Die Wärmekapazität wird von [2] zu $711 \text{ J}/(\text{kg K})$ und die Leitfähigkeit zu $28,1 \text{ W}/(\text{m K})$ für kristallines Si_3N_4 angegeben. Ein weiterer Wert findet sich in [13] mit $\lambda = 19 \text{ W}/(\text{m K})$.

5. Zugfestigkeit R_m Petersen gibt in [13] eine Festigkeit von $14\,000 \text{ MPa}$ an; in [104] wird ein Versuch beschrieben, in dem an größeren Strukturen $4\,600$ und an kleinen $9\,300 \text{ MPa}$ erreicht wurden.

³ $\alpha * 10^6 \text{K} = 4,01 - 3,78 * \exp(-5,6 * 10^{-3}\theta)$

3.5 Wechselwirkung zwischen Siliziumkristall und Oxidfilmen

Bereits in der Einleitung wurde erwähnt, daß bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen mehrere Materialschichten aufgebracht werden. Isolatorstoffe werden dabei benötigt, um Bereiche verschiedenen Potentials zu trennen, aber auch, um die Oberfläche eines Schaltkreises gegen Umgebungseinflüsse zu schützen (Passivierung), Bild 3.40. Besondere

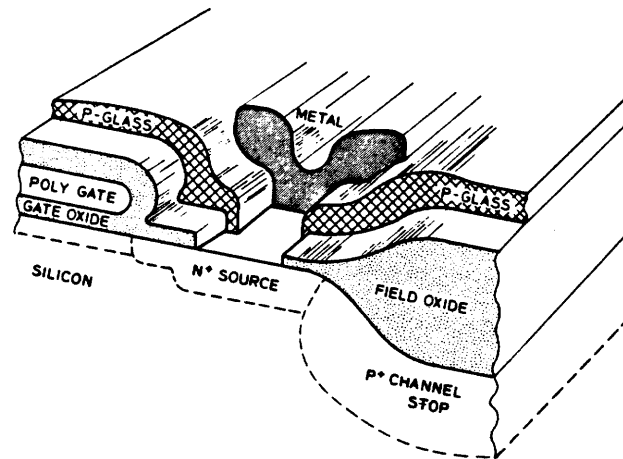


Bild 3.40: Schnitt durch einen oxid-isolierten MOS-Transistor [183].

Bedeutung kommt hier SiO_2 zu. SiO_2 kann auf verschiedene Weise aufgebracht werden, wobei die besten dielektrischen Eigenschaften durch Oxidation bei hohen Temperaturen ($800 - 1200^\circ\text{C}$) erreicht werden [39]. Bei diesen Temperaturen laufen jedoch auch Diffusionsvorgänge beschleunigt ab, und lokale Gefügeveränderungen werden homogenisiert. Daher müssen Oxidfilme in fortgeschrittenen Prozeßstufen bei tieferen Temperaturen erzeugt werden, dh. durch Chemisches Abscheiden (Chemical Vapor Deposition, CVD) zwischen 400 und 950°C [166] oder plasmaunterstützte (PCVD) Abscheidung bei $200 - 350^\circ\text{C}$.

Zur thermischen Herstellung einer Oxidstruktur werden die nicht zu oxidierenden Bereiche abgedeckt — hier hat sich wegen seiner Dichtigkeit gegenüber Sauerstoff Siliziumnitrid Si_3N_4 bewährt — und die Siliziumscheibe (Wafer) der oxidierenden Atmosphäre ausgesetzt. Die Zunahme des Molvolumens auf mehr als das Doppelte führt dazu, daß das Oxid aus der Siliziumoberfläche herausragt und eine aus mehreren Gründen unerwünschte Falte bildet — darüberliegende Schichten werden beispielsweise gestört und mechanische Spannungen konzentriert. Um dies zu verhindern und eine ebene Oberfläche zu erzeugen, ist es möglich, vor der Oxidation Substratmaterial der entsprechenden Tiefe herauszuzüthen und so ein "versenktes" Oxid, Recessed Oxide (ROX) zu bilden, Bild 3.41. Es zeigte sich jedoch, daß die im Oxid entstehenden starken horizontalen Druckspannungen während des ROX-Prozesses weniger leicht abgebaut werden können und das Material durch Fließen an den Oxidrändern Wulste aufwirft. Zudem laufen chemische Reaktionen an Orten gestörter Kristallstruktur mit erhöhter Geschwindigkeit ab, weswegen der Oxidationsvorgang sich seitlich in der Grenzfläche $\text{Si-Si}_3\text{N}_4$ ausbreitet (laterale Oxidation). Der Aufbau des Wulstes an den ROX-Rändern verstärkt diesen Prozeß, biegt den Nitridfilm an den Kanten hoch und bildet eine, im Mikroskop an einen Vogelkopf erinnernde, Struktur — den sogenannten Bird's Beak, Bild 3.42.

Zahlreiche Veränderungen, die im Zusammenhang mit dem Oxidationsvorgang beobachtet wurden, haben es notwendig gemacht, die Kinetik der Reaktion und die auftretenden Spannungen intensiv zu untersuchen. Zu diesen Beobachtungen gehören unter anderem:

- Konzentration von Versetzungen an den Rändern und unterhalb von Oxid- und

θ	ρ	E	μ	α_T	c_p	λ
25	3,10	3,89	0,3	0,80	711	25
100	3,10	3,89	0,3	1,85	711	25
200	3,10	3,89	0,3	2,78	711	25
300	3,10	3,89	0,3	3,31	711	25
400	3,10	3,89	0,3	3,61	711	25
500	3,10	3,89	0,3	3,78	711	25
600	3,10	3,89	0,3	3,88	711	25
700	3,10	3,89	0,3	3,94	711	25
800	3,10	3,89	0,3	3,97	711	25
900	3,10	3,89	0,3	3,99	711	25
1000	3,10	3,89	0,3	4,00	711	25
1100	3,10	3,89	0,3	4,00	711	25

Tabelle 3.8: Die hier verwendeten Materialparameter für Si_3N_4 . Dichte ρ in g/cm^3 , E in 10^5 MPa, α in $10^{-6}/\text{K}$, c_p in $\text{J}/(\text{kgK})$, λ in $\text{W}/(\text{mK})$.

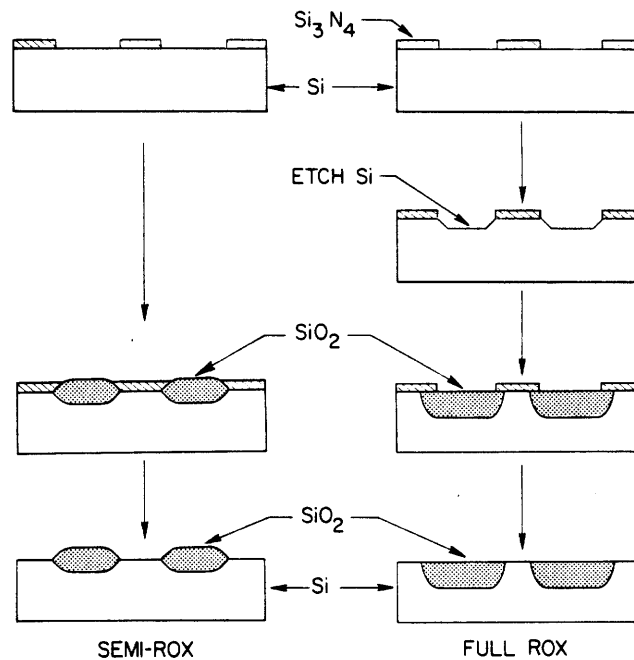


Bild 3.41: Bildung von halbversenkten (Semi-ROX) und ganz versenkten (ROX) Oxidstrukturen mit Si_3N_4 als Oxidationsmaske (idealisiert) [136].

Nitridfilm (Hu-Loops).

- Risse im Nitridfilm.
- Starke Zunahme von Stapelfehlern unter dem ROX-Gebiet (Oxidations-Stapelfehlerbildung, OSF).
- beschleunigte Diffusionsvorgänge unter dem oxidierten Bereich (Oxidation-Enhanced Diffusion, OED).

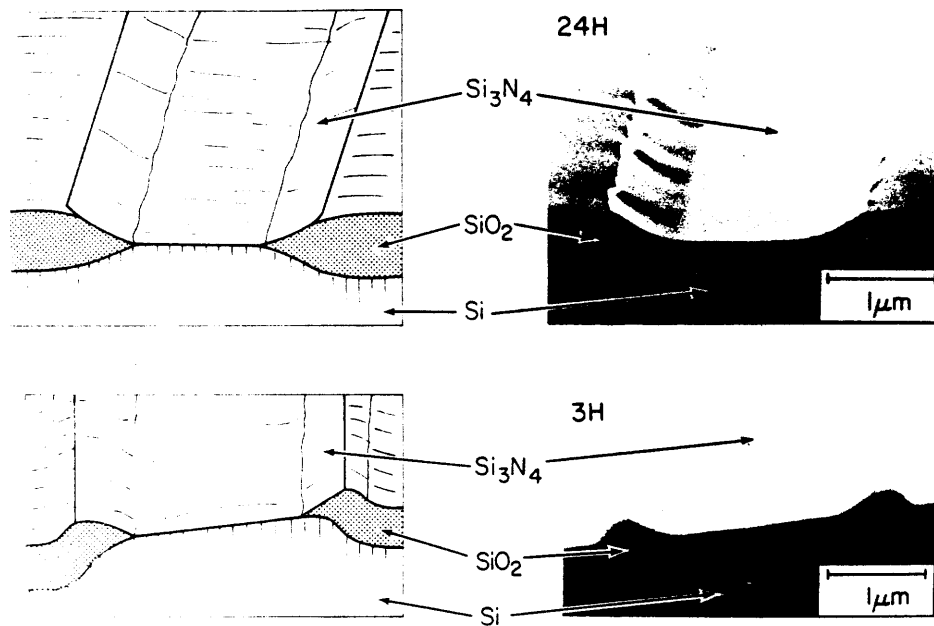


Bild 3.42: Bird's Beak-Bildung bei ROX-Strukturen [136].

4 Die Methode der Finiten Elemente

Die Finite-Elemente-Methode (FEM) ist ein Näherungsverfahren, das komplexe Kontinuen in Teilkörper einfacher Gestalt zerlegt und Funktionen über dem Kontinuum für diese löst.

Nachdem bereits um 1909 von Ritz und 1943 von Courant Näherungsverfahren für Probleme der Elastizitätstheorie vorgeschlagen worden waren [1015], wurden diese in den Fünfziger Jahren für Fachwerke und Kontinuen weiterentwickelt und schlugen sich um 1970 in den ersten leistungsfähigen EDV-Programmen nieder.

Heute ist eine Vielzahl von FEM-Software auf dem Markt erhältlich und zum Teil an der MPA Stuttgart vorhanden. In dieser Arbeit wurden die Programme Patran (PDA Engineering, Costa Mesa, Kalifornien) zum sogenannten Pre- und Postprocessing, Bild 4.1, und Abaqus (Hibbitt, Karlsson & Sorensen, Rhode Island, USA) zur eigentlichen Rech-

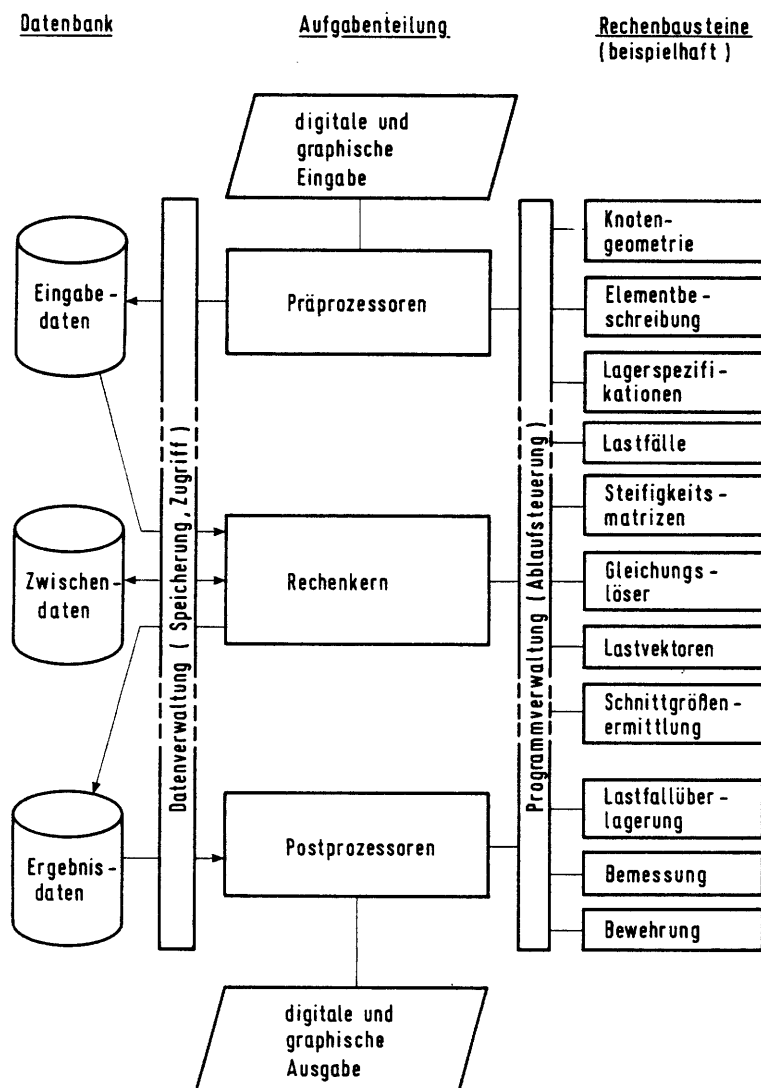


Bild 4.1: Gliederung von Rechenprogrammen [1014].

nung verwendet.

Im folgenden sollen die mechanischen Grundlagen der FEM dargestellt und im Anschluß hieran der prinzipielle Rechenablauf, die Programmsysteme Patran und Abaqus und schließlich der Aufbau eines Eingabefiles für die FEM-Rechnung erläutert werden.

4.1 Grundlagen

Die Spannungsrechnung muß im Inneren eines belasteten Körpers vor allem zwei Bedingungen erfüllen: Das Kräftegleichgewicht und die Verträglichkeit der Verschiebungen (kinematisches Gleichgewicht). Beide sind miteinander verbunden über das Materialgesetz, vgl. Abschnitt 3.1.

Gleichgewichtsbedingungen In einem Kontinuum werde ein ebenes Element der Dicke 1 mit zu den Koordinatenachsen parallelen Kanten betrachtet, Bild 4.2. Vernachlässigt

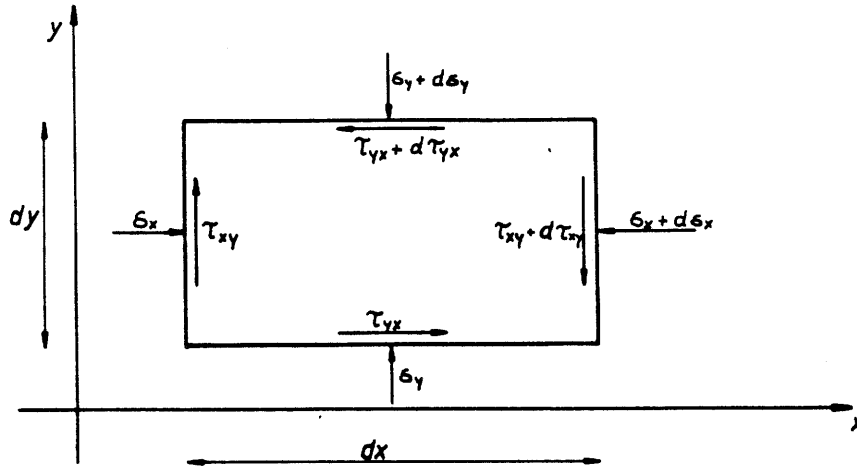


Bild 4.2: Kräftegleichgewicht an einem Körperelement.

man Volumenkräfte, dann läßt sich das Kräftegleichgewicht anschreiben als:

$$\begin{aligned} \sum F_x &= \sigma_x dy + \tau_{yx} dx - (\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy) dx - (\sigma_x + \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} dx) dy = 0 \\ \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dx dy + \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} dx dy &= 0 \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \sum F_y &= \sigma_y dx + \tau_{xy} dy - (\tau_{xy} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} dx) dy - (\sigma_y + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} dy) dx = 0 \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} dx dy + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} dx dy &= 0 \end{aligned} \quad (21)$$

Diese beiden Gleichungen lassen sich mit $\tau_{yx} = \tau_{xy}$ (Momentengleichgewicht) zusammenfassen zu

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

oder, dreidimensional:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \end{pmatrix} = \underline{0} \quad (22)$$

Kompatibilitätsbedingungen In Bild 4.3 ist die Deformation (gestrichelt) eines ebenen Körperelementes mit den Abmessungen $dx * dy * 1$ dargestellt. Neben der reinen Translation um (u, v, w) lassen sich hier unterscheiden

$$\begin{array}{lll} \text{Dehnung } \epsilon_x & = \frac{\partial u}{\partial x} & \epsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y} & \epsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z} \\ \text{Scherung } \gamma_{xy} & = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \gamma_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} & \gamma_{xz} = \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \end{array}$$

Hieraus ergeben sich [1015] die 6 Kompatibilitätsbedingungen (St Venant, 1860):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_y}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \epsilon_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_z}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial y \partial z} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \epsilon_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \gamma_{xz}}{\partial z \partial x} &= 0 \\ 2 \frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \gamma_{xz}}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial z} &= 0 \\ 2 \frac{\partial^2 \epsilon_y}{\partial z \partial x} - \frac{\partial^2 \gamma_{xz}}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial x \partial y} &= 0 \\ 2 \frac{\partial^2 \epsilon_z}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 \gamma_{xz}}{\partial y \partial z} &= 0 \end{aligned} \tag{23}$$

Diese Gleichungen sind nicht an elastisches Werkstoffverhalten gebunden. Sie besagen allein, daß keine Risse oder Hohlräume und keine Verdichtungen im Werkstoff auftreten können.

Den Zusammenhang zwischen Spannungen und Dehnungen gibt das Materialgesetz mit

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \epsilon_{kl}$$

im elastischen, linearen Fall an (vgl. Abschnitt 3.1).

Kraft- und Verschiebungsmethode Die drei oben genannten Bedingungen (Gleichgewichtsbedingung, Kompatibilitätsbedingung, Stoffgesetz) müssen im gesamten Körper erfüllt werden. In der Praxis wird hier versucht, durch geeignete Ansätze entweder die statische oder die kinematische Verträglichkeit exakt und die restlichen näherungsweise zu erfüllen [1015]. Die sogenannte Verschiebungsmethode nimmt eine im ganzen Körper stetige Verschiebungsverteilung an. Die Gleichgewichtsbedingungen werden hier — beispielsweise an den Grenzen unterschiedlicher Materialien — nicht von vornherein erfüllt, sondern erst später werden aus den erhaltenen Knotenverschiebungen Spannungen ermittelt. Eine Übersicht über verschiedene Verfahren gibt Bild 4.4. Im Innern der Elemente sind die Zustandsgrößen angegeben, für die Ansatzfunktionen zur Lösung der Differentialgleichungen verwendet werden [1014]; die Größen an den Elementrändern werden zur Behandlung der Übergangsbedingungen zwischen Elementen und die Knotenvariablen zur Lösung des Gleichungssystems herangezogen.

Verschiebungsmodelle kommen häufig mit einer geringeren Anzahl von Gleichungen aus [1015] und unterscheiden nicht zwischen kinematisch bestimmten und unbestimmten Systemen. Die meisten Programme arbeiten daher nach diesem Verfahren.

Verschiebungsmethode Entsprechend dem Materialgesetz des Werkstoffs, das die Ermittlung von Spannungen aus Dehnungen erlaubt, wird die Steifigkeit von Elementen als Quotient von verallgemeinerten Reaktionskräften und Verschiebungen definiert:

$$\bar{f} = \bar{k} \bar{v}$$

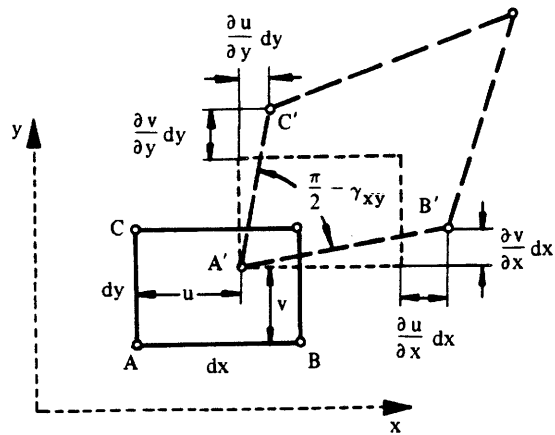
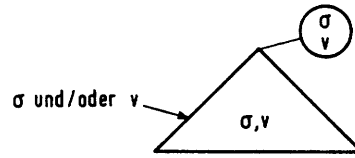
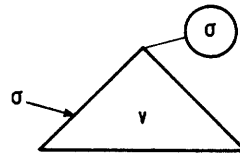


Bild 4.3: Ebene Verzerrung eines rechteckigen Elements $dx dy$ [1015].

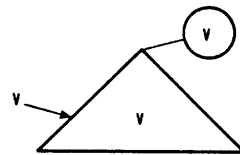
Gemischte Modelle:



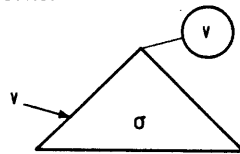
Hybride Deformationsmodelle:



Deformationsmodelle:



Hybride Spannungsmodelle:



Spannungsfunktionsmodelle:

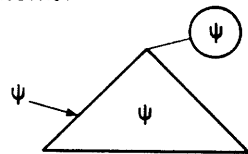


Bild 4.4: Wichtige Finite-Elemente-Modelle [1014].

Mit dem Vektor der Kräfte und Momente \bar{f} , der Steifigkeitsmatrix \bar{k} und dem Vektor der Verschiebungen und Verdrehungen \bar{v} .

Eine beispielhafte Steifigkeitsmatrix für einen mit Längskraft, Biege- und Torsionsmoment belasteten in x-Richtung orientierten Balken mit zwei Knotenpunkten zeigt Bild 4.5. Der eingekreiste Index gibt den entsprechenden Knoten an.

$i_1 \textcircled{1}$	$i_m \textcircled{1}$	$i_n \textcircled{1}$	$\phi_1 \textcircled{1}$	$\phi_m \textcircled{1}$	$\phi_n \textcircled{1}$	$i_1 \textcircled{2}$	$i_m \textcircled{2}$	$i_n \textcircled{2}$	$\phi_1 \textcircled{2}$	$\phi_m \textcircled{2}$	$\phi_n \textcircled{2}$	
$\frac{EA}{l}$	0	0		0	0	$-\frac{EA}{l}$	0	0	0	0	0	$F_1 \textcircled{1}$
0	$12 \frac{EI_n}{l^3}$	0		0	$6 \frac{EI_n}{l^2}$	0	$-12 \frac{EI_n}{l^3}$	0	0	0	$6 \frac{EI_n}{l^2}$	$F_m \textcircled{1}$
0	0	$12 \frac{EI_m}{l^3}$		$-6 \frac{EI_m}{l^2}$	0	0	0	$-12 \frac{EI_m}{l^3}$	0	$-6 \frac{EI_m}{l^2}$	0	$F_n \textcircled{1}$
0	0	0	$\frac{GI_t}{l}$	0	0	0	0	0	$-\frac{GI_t}{l}$	0	0	$M_1 \textcircled{1}$
0	0	$-6 \frac{EI_m}{l^2}$		$4 \frac{EI_m}{l}$	0	0	0	$6 \frac{EI_m}{l^2}$	0	$2 \frac{EI_m}{l}$	0	$M_m \textcircled{1}$
0	$6 \frac{EI_n}{l^2}$	0		0	$4 \frac{EI_n}{l}$	0	$-6 \frac{EI_n}{l^2}$	0	0	0	$2 \frac{EI_n}{l}$	$M_n \textcircled{1}$

$-\frac{EA}{l}$	0	0	0	0	0	$\frac{EA}{l}$	0	0	0	0	0	$F_1 \textcircled{2}$
0	$-12 \frac{EI_n}{l^3}$	0	0	0	$-6 \frac{EI_n}{l^2}$	0	$12 \frac{EI_n}{l^3}$	0	0	0	$-6 \frac{EI_n}{l^2}$	$F_m \textcircled{2}$
0	0	$-12 \frac{EI_m}{l^3}$	0	$6 \frac{EI_m}{l^2}$	0	0	0	$12 \frac{EI_m}{l^3}$	0	$6 \frac{EI_m}{l^2}$	0	$F_n \textcircled{2}$
0	0	0	$-\frac{GI_t}{l}$	0	0	0	0	0	$\frac{GI_t}{l}$	0	0	$M_1 \textcircled{2}$
0	0	$-6 \frac{EI_m}{l^2}$	0	$2 \frac{EI_m}{l}$	0	0	0	$6 \frac{EI_m}{l^2}$	0	$4 \frac{EI_m}{l}$	0	$M_m \textcircled{2}$
0	$6 \frac{EI_n}{l^2}$	0	0	0	$2 \frac{EI_n}{l}$	0	$-6 \frac{EI_n}{l^2}$	0	0	0	$4 \frac{EI_n}{l}$	$M_n \textcircled{2}$

Bild 4.5: Steifigkeitsmatrix eines Balkenelementes [1014].

Analog hierzu kann auch für die ganze Konstruktion eine Steifigkeitsmatrix \bar{K} aufgestellt werden, die den Verformungen an den Knotenpunkten resultierende Kräfte zuordnet:

$$\bar{F} = \bar{K}\bar{V}$$

Diese Matrix setzt sich additiv nach Knoten geordnet aus den ins globale Koordinatensystem transformierten Elementmatrizen \bar{k} zusammen, Bild 4.6.

Vor allem bei Modellen mit vielen Elementen ist der größte Teil der Matrixelemente gleich Null. Um Speicherplatz zu sparen, werden nun die Knoten umnummeriert, d.h. Spalten und Zeilen vertauscht, bis die von Null verschiedenen Elemente auf einen schmalen Bereich möglichst geringer Bandbreite um die Hauptdiagonale konzentriert sind, Bild 4.7. Die entstandene Matrix kann nun effektiv nach dem Algorithmus von Gauss oder Cholesky aufgelöst werden.

4.2 Das Programmsystem Patran

Patran ist ein interaktives, universelles Grafiksystem, das zur Unterstützung vieler ingenieurmäßiger Arbeitsprozesse konzipiert wurde [1016]. Als solches ist es ausgelegt auf den Einsatz in Verbindung mit marktüblichen CAD-, Fertigungs- und Analyseprogrammen

$k^{(1)}$

$$K = \frac{EI}{l^3} \cdot$$

12	6l	-12	6l		
6l	4l ²	-6l	2l ²		
-12	-6l	12 + 12	-6l + 6l	-12	6l
6l	2l ²	-6l + 6l	4l ² + 4l ²	-6l	2l ²
		-12	-6l	12	-6l
		6l	2l ²	-6l	4l ²

$k^{(2)}$

Bild 4.6: Zusammensetzung der globalen Steifigkeitsmatrix aus den Matrizen der Elemente [1013].

$K = \frac{2EI}{l^3}$

	①	②	③	④	
	6	-3l	-6	-3l	0
	-3l	2l ²	3l	l ²	0
	-6	3l	12	0	-6
	-3l	l ²	0	4l ²	3l
	0	0	-6	3l	12
	0	0	-3l	l ²	0
	0	0	0	0	-6
	0	0	0	0	-3l

Bild 4.7: Bandstruktur der globalen Steifigkeitsmatrix [1014].

wie dem hier verwendeten Finite-Elemente-Programm Abaqus. Es bietet die Möglichkeit zur Erstellung von Geometrien, zur automatischen Netzerzeugung für FE-Anwendungen, Darstellung von Analyseergebnissen und ein breites Spektrum graphischer Funktionen wie dreidimensionale, verdeckte Darstellung, Animation zeitabhängiger Vorgänge, Schaubilder etc.

Dementsprechend wurde in dieser Arbeit der Aufbau der FE-Modelle, die Generierung des Finite-Elemente-Netzes sowie die Auswertung der Rechenergebnisse mit diesem Programm durchgeführt.

4.3 Das Programmsystem Abaqus

Zur Durchführung der FE-Rechnung wird in Abaqus ein Eingabe- (Input-) File erstellt, das anschließend vom Rechner im Batch-Betrieb abgearbeitet wird. Dieses Hauptfile enthält alle Prozeßoptionen, Geometrie-, Material- und Prozeßdaten, soweit sie nicht auf zusätzlichen Datenfiles bereitliegen. Es teilt sich in zwei bis drei Einheiten verschiedener Funktion auf:

- **Modelldaten** — hier wird das Modell durch seine Elemente und Knoten sowie die den Elementen zugeordneten Materialeigenschaften beschrieben. Hierher gehören weiterhin die Rand- und die Anfangsbedingungen, z.B. Einspannungen und Temperatur, unter denen die Rechnung abläuft.
- **Belastungsgeschichte** — zu jedem Belastungsschritt (step) wird in einem Block die Analysemethode (statisch, dynamisch, transient,...) vorgegeben, die Belastung (Kräfte, Temperaturen etc.) aufgebracht und die Ausgabeweise der Daten in Klartext, Plot, File oder Zwischenfile bestimmt.
- **Befehle zur Datenaufbereitung (Post-Processing).**

Im Eingabefile werden die Befehle hintereinander "Karten"-weise als Begriffs- und Datenkarten geschrieben. Begriffskarten sind mit einem Stern * beginnende Befehle, die um bestimmte Parameter erweitert sein können, z.B. *ELEMENT, TYPE=C3D8. Datenkarten bestehen aus in vorgeschriebenem Format eingegebenen Zahlenwerten.

Im folgenden werden kurz die wichtigsten von Abaqus verwendeten Elementtypen und Arten des Materialverhaltens beschrieben und dann als Beispiel der Aufbau des in der ersten Rechnung verwendeten Eingabefiles erläutert.

4.3.1 Elementarten

Abaqus unterstützt die Berechnung verschiedener, teilweise gekoppelter Feldvariablen, denen jeweils eine Klasse von Elementen zugeordnet ist. In der gegenwärtigen Version 4.8 sind die folgenden 11 Klassen von Elementen verfügbar:

- Spannungs- und Verformungsberechnung
- Wärmeübergang
- Effektive Spannung und Porendruck (Bodenmechanik)
- Grenzflächen (Risse, Kontaktstellen, Relativgleitung)
- gekoppelte Temperatur- und Verformungsberechnung
- Grenzflächen bei der gekoppelten Temperatur- und Verformungsberechnung

- Starrkörpergrenzflächen
- Gleitliniengrenzflächen
- Benutzer-definierte Elemente
- akustische Elemente
- Grenzflächen für die Akustik-Rechnung

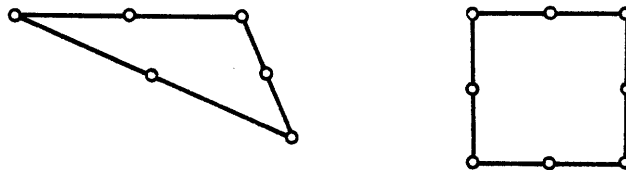
In all diesen Klassen sind Elemente verschiedener Formen vorhanden. Da in dieser Arbeit Spannungs- und Verformungselemente eingesetzt wurden, soll ein kleiner Überblick über die Palette der Formen dieser Klasse mit Elementcode und -Skizze gegeben werden.

Kontinuummselemente

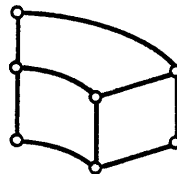
- Stäbe, c1d



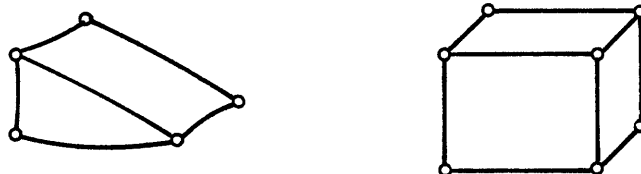
- Ebener Spannungszustand, cps, und Ebener Verformungszustand, cpe



- Rotationssymmetrische Elemente, cax



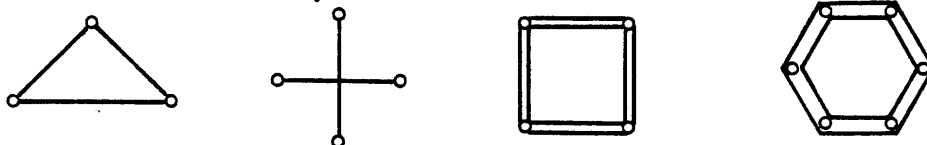
- Dreidimensionale Elemente, c3d



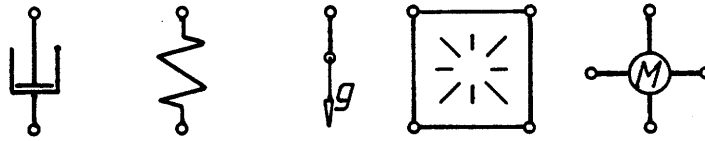
- Membranen, m3d



- Balken mit verschiedenen Querschnittsformen



- Spezielle Elemente: Dämpfer, Federn, Gewichte, Hohlräume, Punktmassen



4.3.2 Materialverhalten

Nach Angabe von Art und Lage der einzelnen Elemente müssen diese den in der Simulation verwendeten Werkstoffmodellen zugeordnet werden. Dies geschieht, indem man die entsprechenden Elemente mit dem Befehl `*ELSET, ELSET= MATERIALNAME` zusammenfaßt und dann den Werkstoff in der `*SOLID SECTION` definiert. Die folgende Tabelle faßt die Optionen zusammen, anhand derer das Verhalten der in dieser Arbeit eingesetzten Materialien modelliert wurde.

Eigenschaft	Parameter		Option
Dichte	ρ	Temperatur	*DENSITY
Elastizität	E	μ Temperatur	*ELASTIC
Fließverhalten	σ	ϵ_{plast} Temperatur	*PLASTIC
Kriechen			*CREEP
Therm. Dehnung	α_T	Temperatur	*EXPANSION
Wärmekapazität	c_P	(Temperatur)	*SPECIFIC HEAT
Wärmeleitfähigkeit	λ	(Temperatur)	*CONDUCTIVITY

4.3.3 Aufbau des Eingabefiles

Das Input-File der ersten Rechnung, die zweidimensional und rein elastisch durchgeführt wurde, zeigt Bild 4.8. Doppelte “**” geben Kommentarzeilen, die vom Programm nicht gelesen werden, an. Auf die Angabe der Knotenkoordinaten folgt die Definition der Elemente mit Elementtyp, zugeordnetem Material und in den Datenkarten die Elementknoten nach der Elementnummer. Im nächsten Abschnitt werden die Materialien mit den oben erwähnten Kommandos beschrieben. Jeder Materialblock beginnt mit “*SOLID SECTION”, zugeordnetem Elementset und Materialnamen. Nach den Materialien werden die Randbedingungen festgelegt mit `*BOUNDARY`. Jede Datenkarte enthält die Nummer des angesprochenen Knotens, den zu beschränkenden Freiheitsgrad und den Betrag der vorgeschriebenen Knotenverschiebung. Da das Modell in diesem Fall zweidimensional ist, treten nur Randbedingungen an zwei Rändern in x- und y-Richtung auf. Von den anderen beiden Rändern blieb der eine frei, während der andere über eine “Mehrpunktbeschränkung”, Multi-Point-Constraint (MPC), beweglich, aber gerade gehalten wurde. In Abaqus ist ein Katalog derartiger MPC-Optionen vorhanden, deren eigentlicher Sinn es ist, das Verbinden von Elementen unterschiedlicher Form zu ermöglichen. MPC Nr. 12 zwingt einen Knotenpunkt p auf eine gerade Verbindung zwischen zwei Referenzpunkten a und b und ist damit geeignet zur Modellierung einer freien aber ebenen Kante, die sich noch dazu geometrisch ähnlich ausdehnen darf. Eine entsprechend für die Modellierung von Ebenen geeignete Option ist in der gegenwärtigen Programmversion nicht enthalten.

Als letztes Kommando des Modell-Abschnitts sind die Anfangsbedingungen mit einer Anfangstemperatur aller Knoten im Set “all” von 400°C angegeben. In dieser Rechnung sollte von der Anfangstemperatur aus kontinuierlich (`AMPLITUDE=RAMP`) abgekühlt werden. Da die Rechnung statisch ablief (`*STATIC`) und keine zeitabhängigen Prozesse beteiligt waren, ist die Abkühldauer in der Belastungsgeschichte nicht enthalten. Der Parameter `PTOL` stellt die Spannungstoleranz dar, nach deren Erreichen die Iteration abgebrochen

```

*HEADING
ABKUEHLUNG EINES WAFERS
** NEUTRAL FILE GENERATED ON: 6-FEB-90
**DATA CHECK
**WAVEFRONT MINIMIZATION,SUPPRESS
**PREPRINT,ECHO-NO,HISTORY-NO
*****
**FE-MODELL
*****
**
**NODE,NSET-ALL
  1, 0.782558143E+00, -0.200000048E+00
  2, 0.114999998E+01, -0.200000048E+00
  3, 0.966279089E+00, -0.200000048E+00
  .
  .
1454, -0.136379933E+01, -0.263227844E+01
**
*****
**DEFINITION DER ELEMENTE
*****
**
*ELEMENT, TYPE-DC2D8 , ELSET-MONOSIL
  1, 78, 76, 81, 83, 77, 79, 82, 80
  2, 73, 71, 76, 78, 72, 74, 77, 75
  3, 68, 66, 71, 73, 67, 69, 72, 70
  .
  .
411, 717, 2, 3, 716, 746, 5, 748, 747
*ELEMENT, TYPE-DC2D8 , ELSET-POLYSIL
127, 832, 830, 520, 522, 831, 837, 521, 838
128, 834, 832, 522, 515, 833, 838, 523, 839
148, 828, 822, 834, 515, 824, 829, 839, 836
  .
  .
413, 420, 666, 651, 570, 667, 674, 652, 566
*ELEMENT, TYPE-DC2D8 , ELSET-SROX
412, 584, 582, 1107, 1128, 583, 590, 1118, 591
416, 572, 570, 582, 584, 571, 578, 583, 579
417, 536, 420, 570, 572, 535, 566, 571, 567
  .
  .
447, 433, 431, 439, 441, 432, 435, 440, 436
*ELEMENT, TYPE-DC2D8 , ELSET-PID4
  31, 241, 239, 298, 300, 240, 274, 299, 275
  32, 243, 241, 300, 302, 242, 275, 301, 276
  33, 239, 237, 296, 298, 238, 273, 297, 274
  .
  .
290, 269, 267, 326, 328, 268, 288, 327, 289
*ELEMENT, TYPE-DC2D8 , ELSET-PID5
  14, 143, 145, 150, 148, 144, 147, 149, 146
  15, 148, 150, 155, 153, 149, 152, 154, 151
  16, 138, 140, 145, 143, 139, 142, 144, 141
  .
  .
425, 418, 416, 424, 426, 417, 421, 425, 422
**
*****
**DEFINITION DER MATERIALIEN
*****
**
**SOLID SECTION, ELSET-PID1, MATERIAL-MONOSIL
**MATERIAL, NAME-MONOSIL
**CONDUCTIVITY
1.4E-4 27.
.74E-4 227.
.31E-4 727.
.24E-4 1077.

```

Bild 4.8: Aufbau eines Eingabefiles (verkürzt).

```

*ELSET
*DENSITY
2.329E-15
*SPECIFIC HEAT
688. 0.
978. 1100.
*SOLID SECTION, ELSET-PID2, MATERIAL-POLYSIL
*MATERIAL, NAME-POLYSIL
*CONDUCTIVITY
1.4E-4 27.
.74E-4 227.
.31E-4 727.
.24E-4 1077.
*DENSITY
2.329E-15
*SPECIFIC HEAT
688. 0.
978. 1100.
*SOLID SECTION, ELSET-PID3, MATERIAL-SROX
*MATERIAL, NAME-SROX
*CONDUCTIVITY
1.38E-6
*DENSITY
2.24E-15
*SPECIFIC HEAT
750.
*SOLID SECTION, ELSET-PID4, MATERIAL-PADOX
*MATERIAL, NAME-PADOX
*CONDUCTIVITY
1.38E-6
*DENSITY
2.24E-15
*SPECIFIC HEAT
750.
*SOLID SECTION, ELSET-PID5, MATERIAL-NITRID
*MATERIAL, NAME-NITRID
*CONDUCTIVITY
19.0E-6
*DENSITY
3.E-15
*SPECIFIC HEAT
700.
**
*****
**RANDBEDINGUNGEN
*****
**
*INITIAL CONDITIONS,TYPE-TEMPERATURE
ALL,1050.
*****
**BELASTUNGSSCHRITT
*****
**
** SCHRITT 1
**
**STEP, INC=500
**
** TOLERANZEN FUER DEN WAERMEUEBERGANG
**
**HEAT TRANSFER, DELTMX=50., TEMTOL=2.
1000., 31.5E3, 30.
**DFLUX
1, S3, -2.5E-11
17, S4, -2.5E-11
16, S4, -2.5E-11
.
.
.
447, S1, -2.5E-11
**
**DATENAUSGABE
**
**NODE FILE, FREQ=1
NT
**NODE PRINT, FREQ=1
NT
**END STEP
**

```

Bild 4.8: (Fortsetzung)

wird. Die folgende Datenkarte enthält das (normierte) Zeitinkrement und die ebenfalls normierte Schrittdauer. Als Belastung wurde hier mit `TEMPERATURE ALL, 25` nur die Abkühlung auf Raumtemperatur eingegeben. Am Ende der Rechnung in diesem Schritt werden ein Binärfile (`FILE`) und ein Klarschriftfile (`PRINT`) erzeugt, auf die die Ergebnisse ausgegeben werden. Der Binärfile kann nach Abschluß der gesamten Rechnung übersetzt und mit Hilfe des Programmsystems Patran grafisch ausgewertet werden, deswegen wurde auf den oben erwähnten Post-Processing-Abschnitt, der nun folgen würde, verzichtet.

5 Ablauf der Simulationsrechnung

In dieser Arbeit sollten, vgl. Abschnitt 1, während bestimmter Fertigungsschritte eines elektronischen Bauteils auftretende mechanische Spannungen berechnet werden. Hierzu lagen allerdings weder überprüfte Materialdaten noch Erfahrungen mit dem verwendeten Modell und dem Rechenverfahren vor. Daher erschien es sinnvoll, vor der Spannungsberechnung in komplexen Waferstrukturen zunächst einfache Belastungsfälle nachzubilden. Hierzu gehört beispielsweise ein mit einer kontinuierlichen Filmschicht versehener Wafer. An mehreren derartigen Proben sind im Jahr 1989 in einer Studie [101] nach verschiedenen Methoden Spannungen gemessen worden. Anhand dieser Ergebnisse soll das hier verwendete Verfahren überprüft werden.

Die gesamte Untersuchung gliedert sich damit in fünf Schritte:

1. Verifizierung der eingesetzten Materialdaten, des Modells und des Rechenverfahrens an einer Reihe experimentell untersuchter Wafer mit Oxidschicht.
2. Weitere Überprüfung an einer Meßreihe oxid- und nitridbedeckter Wafer.
3. Abschätzung der im Verlauf bestimmter Ätzprozesse auftretenden Spannungen.
4. Spannungen am Rand von Strukturfeldern
5. Spannungsverteilung an thermisch oxidierten Bereichen

Diese einzelnen Rechnungen werden im folgenden dargestellt, wobei jeweils der spezifische Aufgabenhintergrund, das verwendete Modell, der Ablauf der FE-Rechnung und die Ergebnisse erläutert werden.

5.1 Wafer mit Oxidschicht

5.1.1 Problemstellung

Die Siliziumscheibe mit einem unter thermischer Druckspannung stehenden Film stellt eine typische Bimetallaufgabe dar, wie sie von Timoshenko 1925 gerechnet wurde [224, 1011].

Es seien zwei miteinander verschweißte Platten mit Rechteckquerschnitt und freien Rändern wie in Bild 5.1 gegeben. Ihre Dicken seien t_1 und t_2 , ihre Elastizitätsmoduln

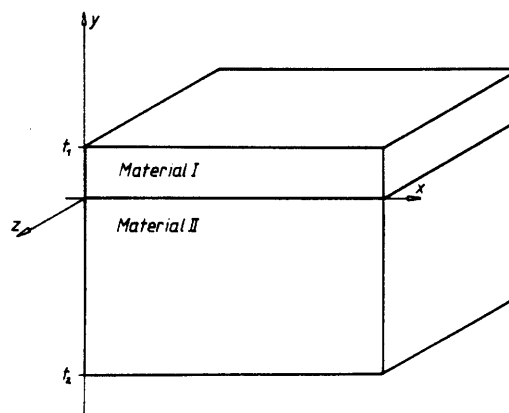


Bild 5.1: Zwei Platten in Bimetallanordnung.

E_1 und E_2 , ihre Ausdehnungskoeffizienten α_1 und α_2 , und der Temperaturunterschied

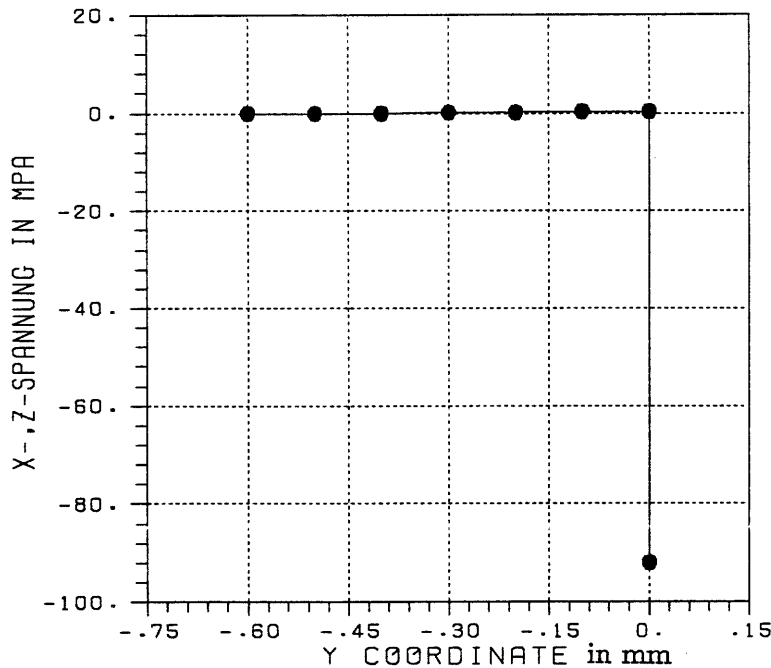


Bild 5.2: Spannungsverlauf in den beiden Platten nach analytischer Rechnung. Die y-Achse steht senkrecht auf der Platte, und die Bereiche von Oxid und Substrat liegen zwischen $y_{ox} = 4,5 \cdot 10^{-4}$ mm und $y_{ox} = 0$ bzw. $y_{si} = 0$ und $y_{si} = -0,6$ mm.

zwischen spannungsfreiem und betrachtetem Zustand ΔT . Dann ergibt sich für den Krümmungsradius R:

$$\frac{1}{R} = \frac{6(\alpha_2 - \alpha_1) \Delta T (1 + m)^2}{h(3[1 + m]^2 + [1 + mn][m^2 + \frac{1}{mn}])}$$

mit den Abkürzungen

$$m = \frac{t_1}{t_2} \quad e_i = \frac{E_i}{1 - \mu_i} \quad n = \frac{e_1}{e_2}$$

Für den Spannungsverlauf folgt entsprechend dem eingezeichneten Koordinatensystem:

$$\sigma_1(y) = \frac{1}{R} \left(-\frac{e_1 t_1^3 + e_2 t_2^3}{6 h t_1} + e_1 \left[y - \frac{t_1}{2} \right] \right) \quad \text{von } y = 0 \text{ bis } y = t_1$$

$$\sigma_{1,\max} = -\frac{1}{R} \left(\frac{e_1 t_1^3 + e_2 t_2^3}{6 h t_1} + \frac{1}{2} e_1 t_1 \right) \quad \text{bei } y = 0$$

$$\sigma_2(y) = \frac{1}{R} \left(\frac{e_1 t_1^3 + e_2 t_2^3}{6 h t_2} + e_2 \left[y + \frac{t_2}{2} \right] \right) \quad \text{von } y = 0 \text{ bis } y = -t_2$$

$$\sigma_{2,\max} = +\frac{1}{R} \left(\frac{e_1 t_1^3 + e_2 t_2^3}{6 h t_2} + \frac{1}{2} e_2 t_2 \right) \quad \text{bei } y = 0$$

Den hiermit, α_T , E und μ aus Abschnitt 3 und den Angaben im Anhang berechneten Spannungsverlauf zeigt **Bild 5.2**. Da die Ränder der beiden Platten frei sind, treten im Randbereich Schubspannungen und Scherungen auf, **Bild 5.3**. Diese sind jedoch lokal auf den Rand begrenzt und setzen sich ins Waferinnere nur um ca. die Waferdicke (1mm) fort [224].

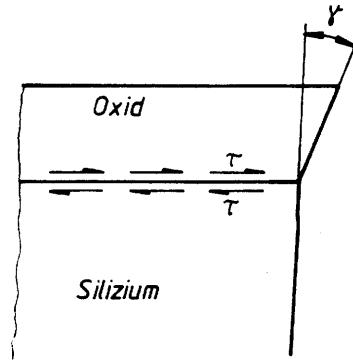


Bild 5.3: Scherbeanspruchung im Randbereich.

5.1.2 Zweidimensionales Modell

Zur Begrenzung des Rechenaufwands wurde das Problem zunächst zweidimensional modelliert, **Bild 5.4**, und in Richtung der Kristallachsen orientiert, sodaß keine Transformation des Elastizitätstensors (vgl. Abschnitt 3.1) notwendig wurde. Unter der Annahme, daß der untersuchte Bereich aus der Mitte des Wafers stammt, wurde ein ebener Verformungszustand in der x - y -Ebene — d.h. $\epsilon_z = 0$, $\sigma_z = \mu \sigma_x$ — vorgegeben. Dieser Ansatz ist eine bessere Näherung als der ebene Spannungszustand ($\sigma_z = 0$). Als Elemente wurden achtknotige Vierecke vom Typ CPE8, vgl. Abschnitt 4, ausgewählt. Nachdem Probeläufe gezeigt hatten, daß, wie von der analytischen Rechnung her erwartet, der Spannungsgradient unter der Grenzschicht Substrat–Oxid schnell gegen Null geht, wurden im Modell Oxidschicht und angrenzender Substratbereich fein aufgelöst und das FE-Netz dann schrittweise vergrößert. Insgesamt ergab sich eine Zahl von 294 Elementen und 965 Knoten für das Modell.

Randbedingungen: Neben der Vorgabe der ebenen Dehnung wurde angenommen, daß in der x - y -Ebene keine Scherung aufträte, daß also ursprünglich ebene Querschnitte eben bleiben (Bernoullische Hypothese). Hierzu wurden alle Knoten mit der Koordinate $x = 0$ in x -Richtung fest, in y -Richtung lose gelagert. Die Knoten auf der gegenüberliegenden Kante wurden über eine "Multi-Point-Constraint"-Bedingung derart eingeschränkt, daß ihr einziger Freiheitsgrad auf der Verbindungslinie Knoten 1 — 80 lag. Knoten 78 ($0 / - 600 \mu m$) wurde in y -Richtung festgelegt, während die obere Modellkante frei von Behinderungen blieb. Somit war gewährleistet, daß eine rein thermische Volumenänderung keine Spannungen hervorrief und die einzigen Spannungen aus der Verbiegung herrührten.

5.1.3 Zweidimensionale Rechnung

Wegen der niedrigen Oxidationstemperatur (vgl. Anhang 9.1) wurden während der — kontinuierlichen — Abkühlung von Oxidations- auf Raumtemperatur plastische Effekte vernachlässigt und rein elastisch gerechnet. **Bild 5.5a** zeigt die Darstellung der Spannungsverteilung durch das Programm Patran. Das Spannungsfeld, wie es hier wiedergegeben wird, entspricht so nicht der Realität, sondern ist ein Artefakt der Auswertung. Dies wird deutlicher in **Bild 5.5b**. Hier ist ein Element an der Grenzfläche vergrößert dargestellt. Aus den an den Knoten angegebenen Spannungswerten und den Patran-Interpolationswegen läßt sich der gegenüber der Elementgröße sehr hohe Spannungsgradient an der Grenzfläche als Ursache der Schleifenformen aus dem vorigen Bild erkennen.

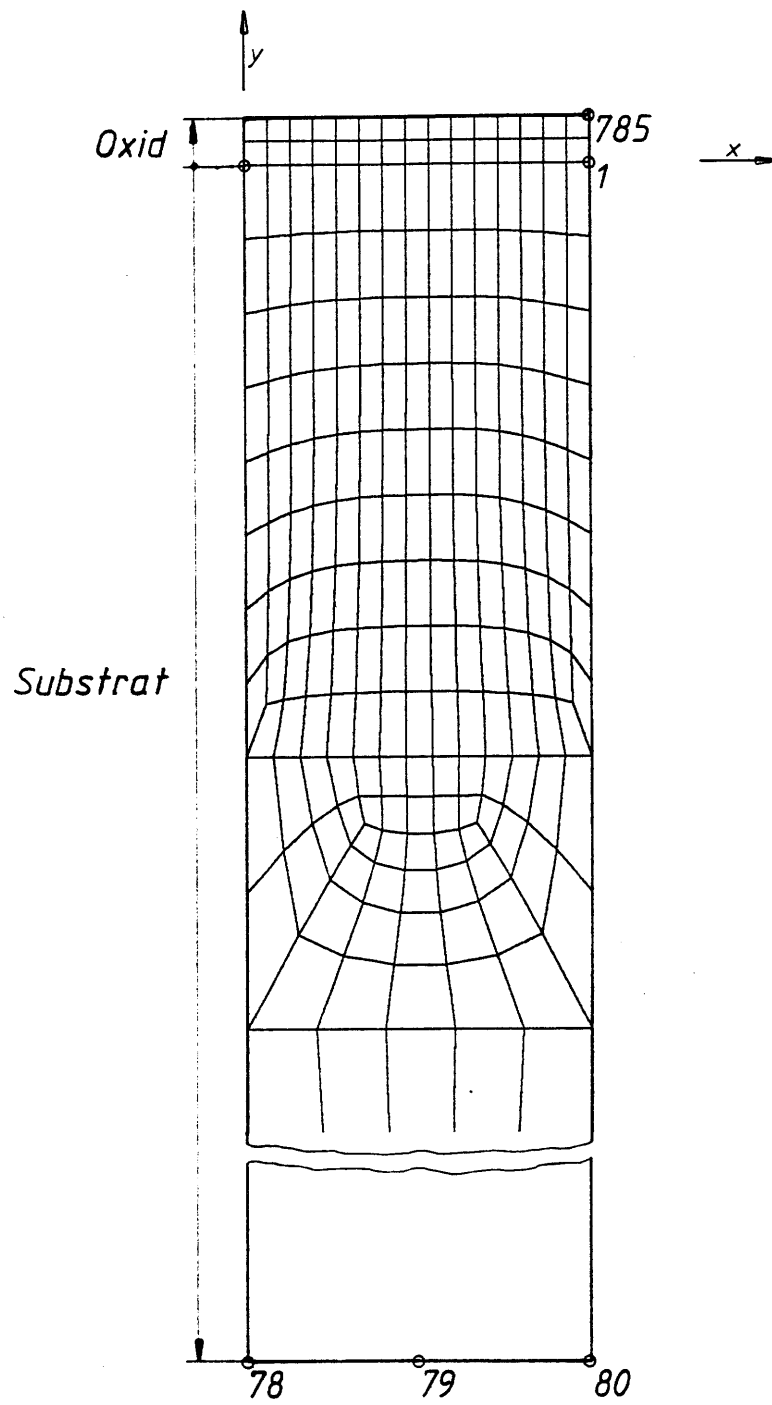


Bild 5.4: Zweidimensionales FE-Modell.

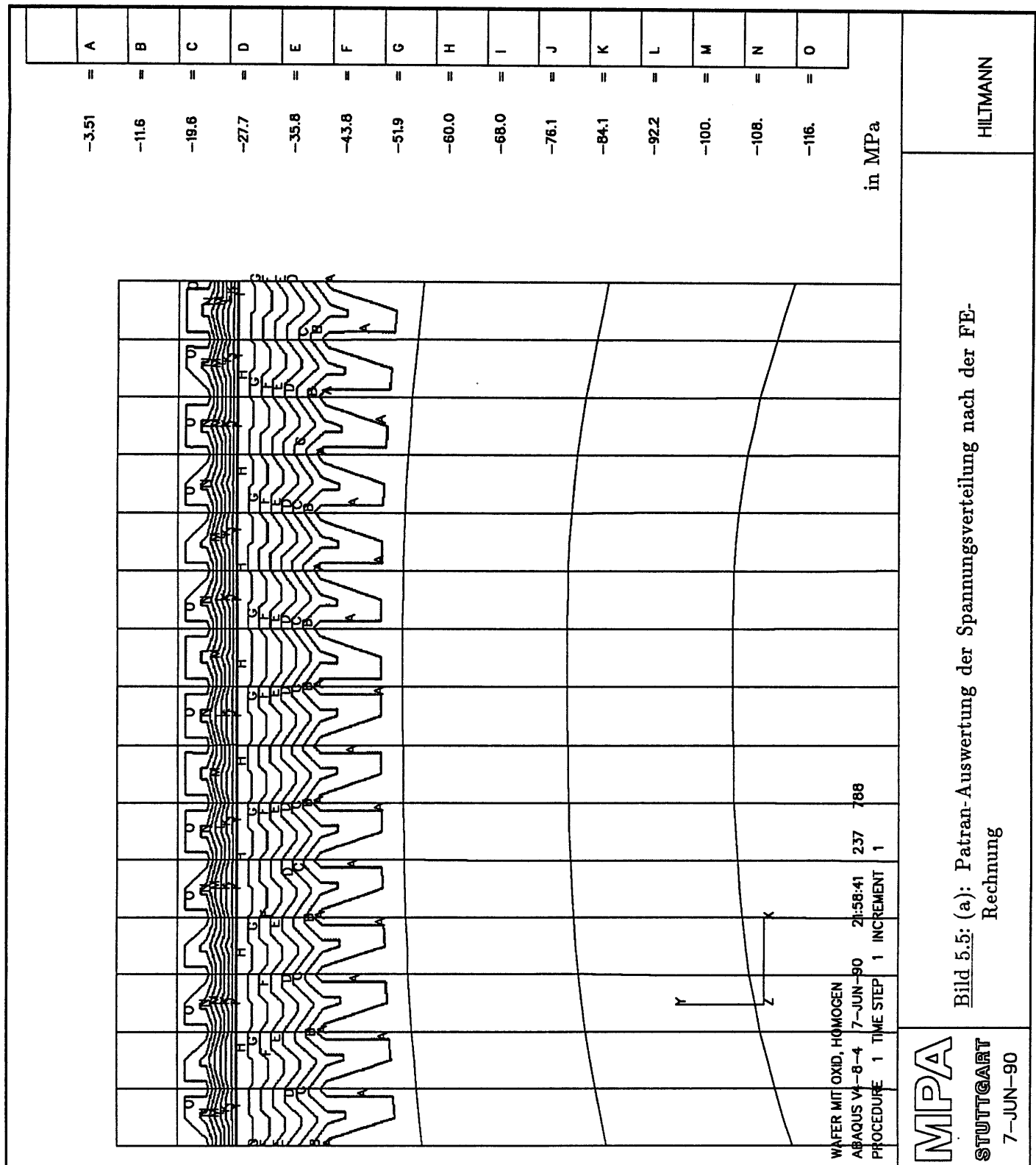


Bild 5.5: (a): Patran-Auswertung der Spannungsverteilung nach der FE-Rechnung

MPA
STUTTGART
 7-JUN-90

HILTMANN

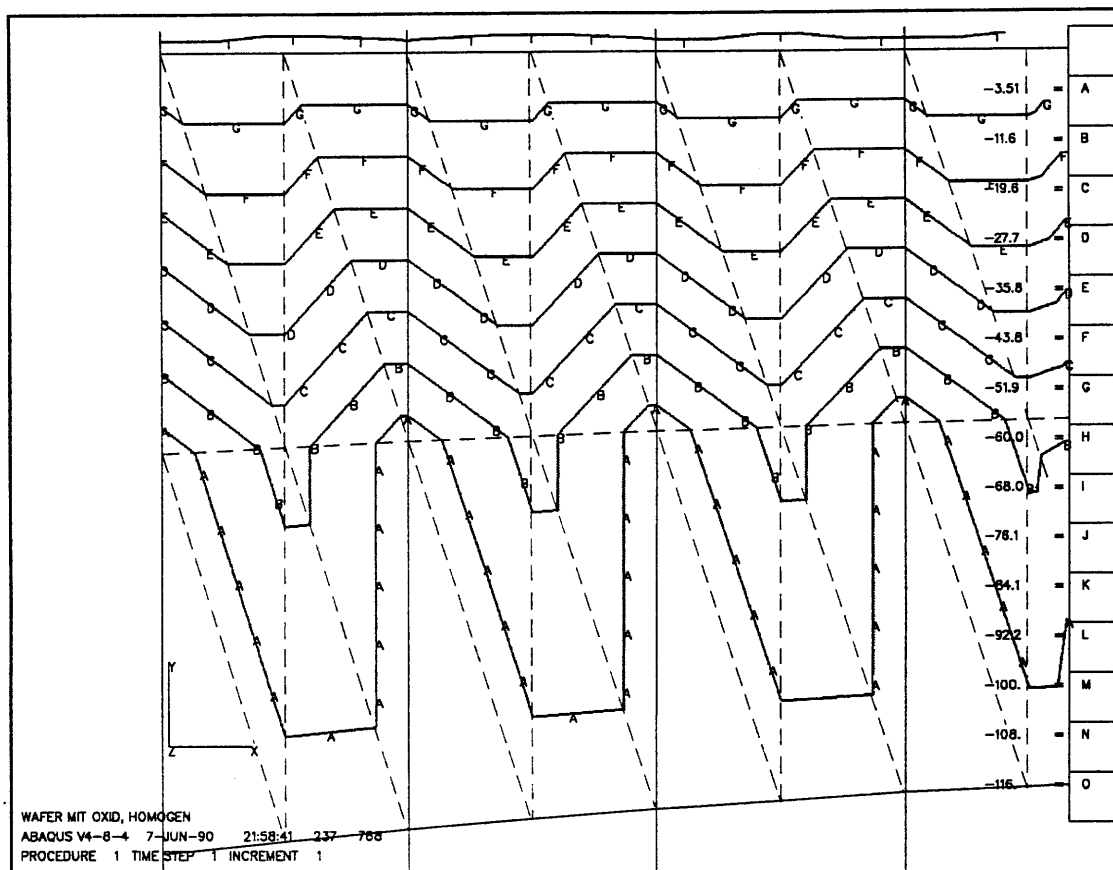


Bild 5.5: b): Grenzflächenelement mit errechneten Spannungen (durchgezogen). Gestrichelt: Von Patran verwendete Interpolationswege zwischen den Knoten. Hierdurch entsteht das Muster vom vorangegangenen Bild. Die Linien gleicher Spannung verlaufen in Wahrheit natürlich horizontal.

Aus den Knotenverschiebungen in x-Richtung wurde der Krümmungsradius nach

$$R = d * \frac{x_1 - u_1}{u_1 - u_{80}} \quad \begin{array}{l} x_1 : \text{ x-Koordinate des Knotens 1} \\ u_i : \text{ Verschiebung des Knotens i} \end{array} \quad (24)$$

zu $R = -1,07 * 10^5$ mm errechnet. Der Unterschied zu den gemessenen Werten von R aus [101] kann allein damit erklärt werden, daß die Biegung um die x-Achse jene um die z-Achse behindert. Für die Darstellung der Dehnungen erwies sich ein ebenes Modell also als nicht geeignet, wenn es auch richtige Spannungen liefert (vgl. hierzu Bild 5.8).

5.1.4 Dreidimensionales Modell

Nach den Erfahrungen mit zweidimensionaler Rechnung wurde ein dreidimensionales Modell wie in Bild 5.6 erstellt. Die verwendeten Elemente sind achtknotige lineare Quaderelemente vom Typ C3D8, vgl. Abschnitt 4. Als Randbedingung wurden ähnlich wie in der vorausgegangenen Rechnung die Knoten mit der Koordinate $x = 0$ in x-Richtung und jene mit $z = 0$ in der z-Richtung beschränkt. Knoten 1857 (0/0/ - 600µm), Bild 5.7, wurde auch in y-Richtung festgelegt. Die obere Fläche $y = d_{ox}$ blieb frei, während für die beiden restlichen wieder die Ebenheitsbedingung gelten und über einen "Multi-Point-Constraint"-Befehl realisiert werden sollte. Zunächst wurde hierzu, vgl. Abschnitt 4, MPC 3 verwendet. Die hiermit festgelegten Flächen bleiben auch tatsächlich eben, doch erlaubt diese Funktion offensichtlich nur geometrisch ähnliche Verformung und führte zu starkem Druck auf die Oxidkanten und zur Verwölbung der Oberfläche. Eine MPC-Funktion, die Knoten auf einer definierten Ebene hält, ihnen aber die Bewegung in dieser Ebene erlaubt, ist in dem verwendeten Programm Abaqus noch nicht enthalten. Als Lösung wurde deswegen wieder zum in der ebenen Rechnung verwendeten Befehl MPC 12 zurückgegriffen. Hiermit wurden alle Flächenknoten auf einer geraden Verbindung mit den Kanten gehalten und diese wieder auf der Verbindungslinie der Eckpunkte. Diese Vorgehensweise bewirkte ebene Flächen und gute Spannungssymmetrie. Da jedoch die Lage jedes Knotens in zwei Schritten berechnet werden muß, sind erhöhte Rundungsfehler zu vermuten. Nach der Rechnung trat auch ein Verschiebungsunterschied zwischen den Randknoten 8 - 1864 bzw. 57 - 1913 und jenen an der Kante 64 - 1920 von maximal $1,1 * 10^{-5}$ µm auf. Dieser Unterschied beträgt weniger als $0,4^0/_{00}$ der Gesamtverschiebung, ergibt aber um ca. 20% unterschiedliche Krümmungsradien. Für deren Berechnung werden im folgenden die als exakter angesehenen Kanten 8 - 1864 bzw. 57 - 1913 verwendet.

5.1.5 Dreidimensionale Rechnung

Das Ergebnis der Rechnung findet sich in den Bildern 5.8 und 5.9. Das Mittel der Filmspannung ($-\frac{1}{2}(54,7 + 106)$ MPa = 82,5MPa) stimmt mit den Meßwerten überein. Der Biegeradius wurde wieder nach Gl. (5.1) mit den Knoten 121 und 1913 bzw. 72 und 1864 zu $2,17 * 10^5$ mm berechnet. Dieser Wert liegt noch immer etwas unter dem gemessenen. Die Differenz beider Werte ist zweifellos eine Folge der Modellidealisierung. Wird eine Platte in Kugelform gebogen, dann wird der Randbereich in tangentielle Richtung gestaucht und behindert damit die Verbiegung. Das in der Rechnung betrachtete Modell stellt jedoch einen gegen die Plattendicke sehr schmalen Bereich aus der Mitte des Wafers dar, an dem diese Randstauchung nicht auftritt und das deswegen bei gleichen Spannungen stärkere Durchbiegung liefert.

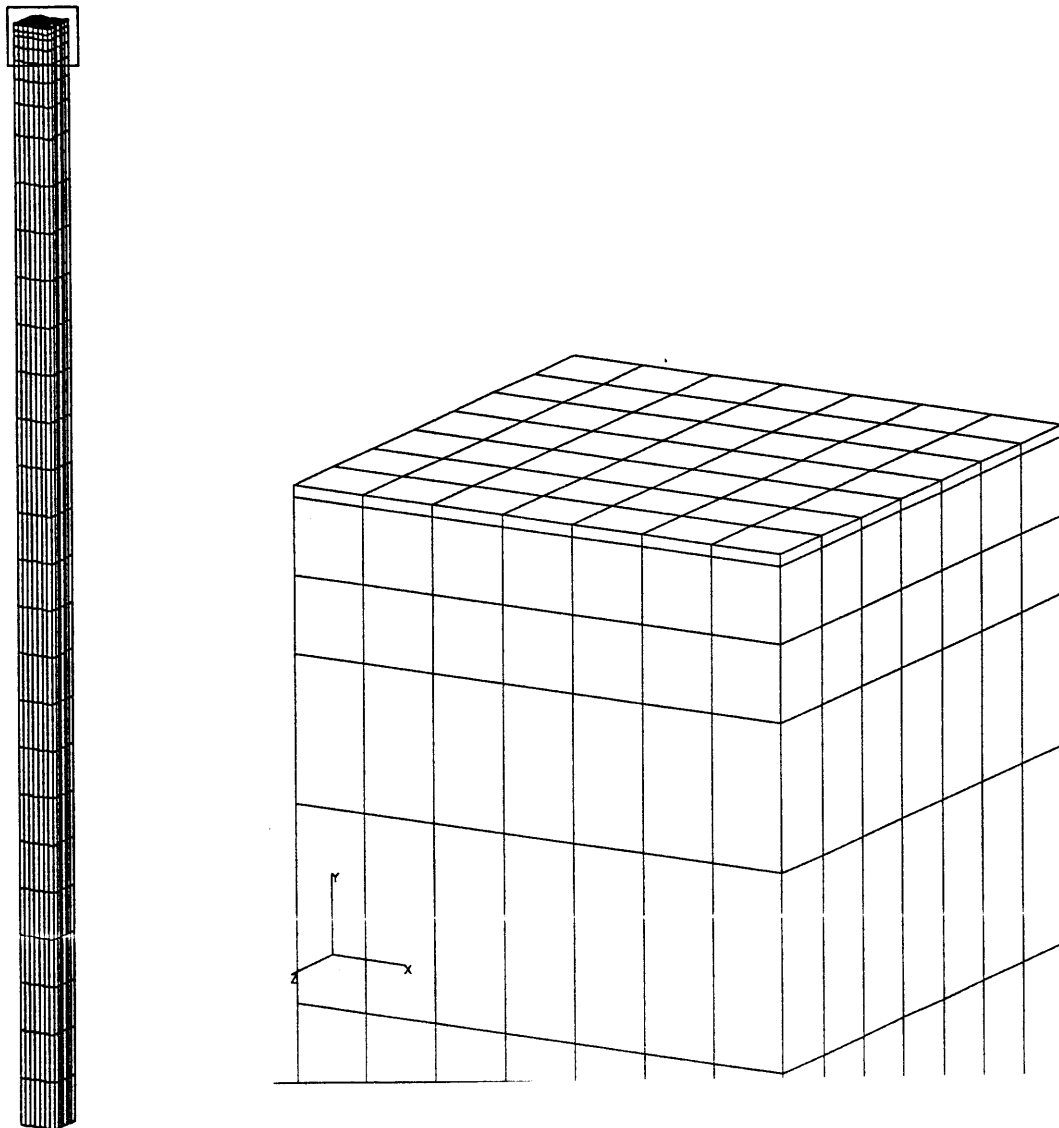


Bild 5.6: Dreidimensionales FE-Modell, die oberste Elementlage repräsentiert den Oxidfilm.

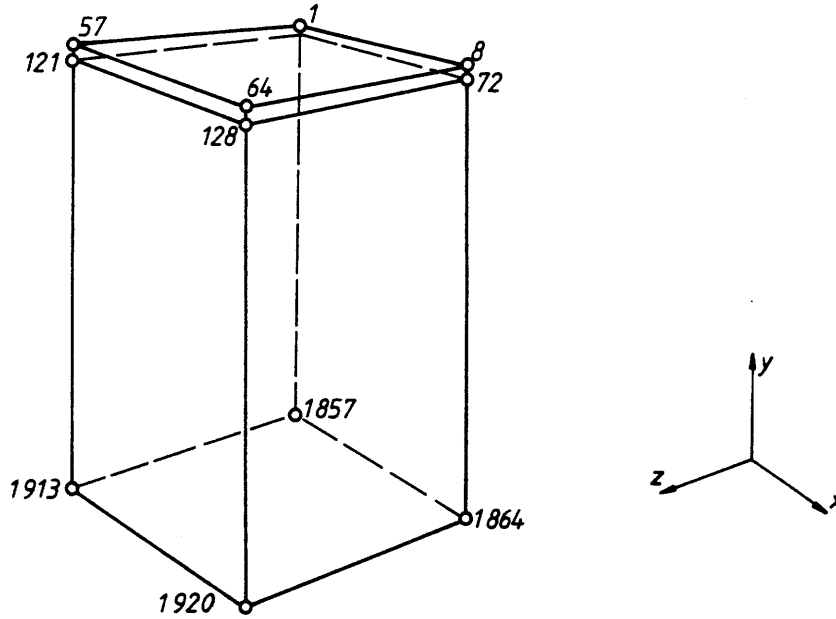


Bild 5.7: Lage einiger Knoten im dreidimensionalen Modell.

5.2 Wafer mit Oxid- und Nitridschicht

Ein mit mehreren Filmschichten bedeckter Wafer stellt eine Erweiterung der Bimetallaufgabe dar. Speziell im Hinblick auf Halbleiteranwendungen wurde dieser Fall in der Literatur bereits verschiedentlich untersucht [93,227-231]. So geben Z.C.Feng und H.D.Liu in [93] zu einer Mehrschichtstruktur wie in Bild 5.10 allgemein an:

$$\frac{1}{R} = \frac{z}{n}$$

mit

$$z = 6 \sum_i E_i d_i (2 \sum_{j < i} d_j + d_i) \sum_k E_k d_k [\sum_{l < i} (\alpha_{l+1} - \alpha_l) \Delta T_l - \sum_{l < k} (\alpha_{l+1} - \alpha_l) \Delta T_l]$$

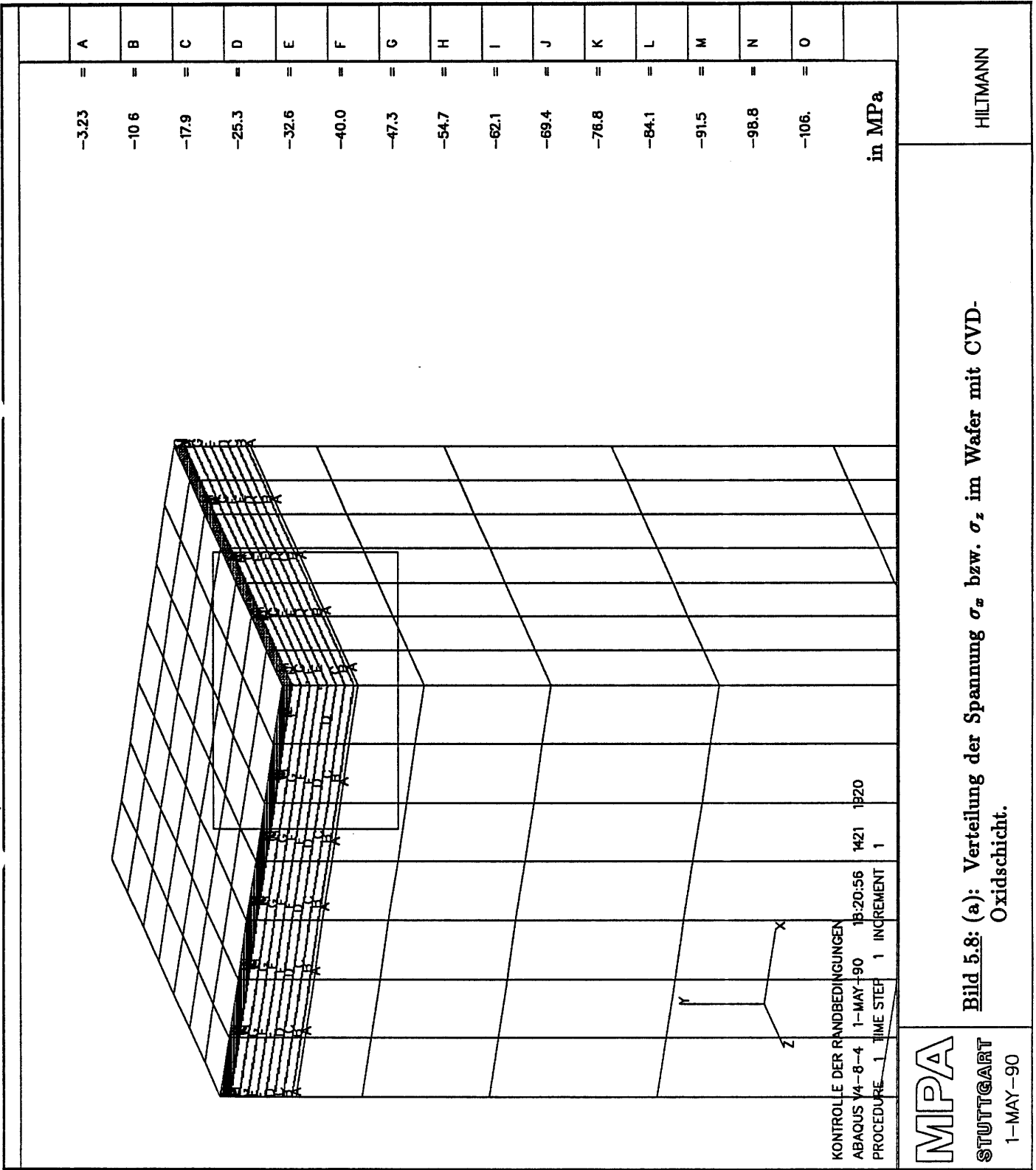
$$n = \sum_i E_i d_i [\sum_j E_j d_j^3 + 3(2 \sum_{j < i} d_j + d_i) \sum_k E_k d_k (d_i - d_k + 2 \sum_{l < i} d_l - 2 \sum_{l < k} d_l)]$$

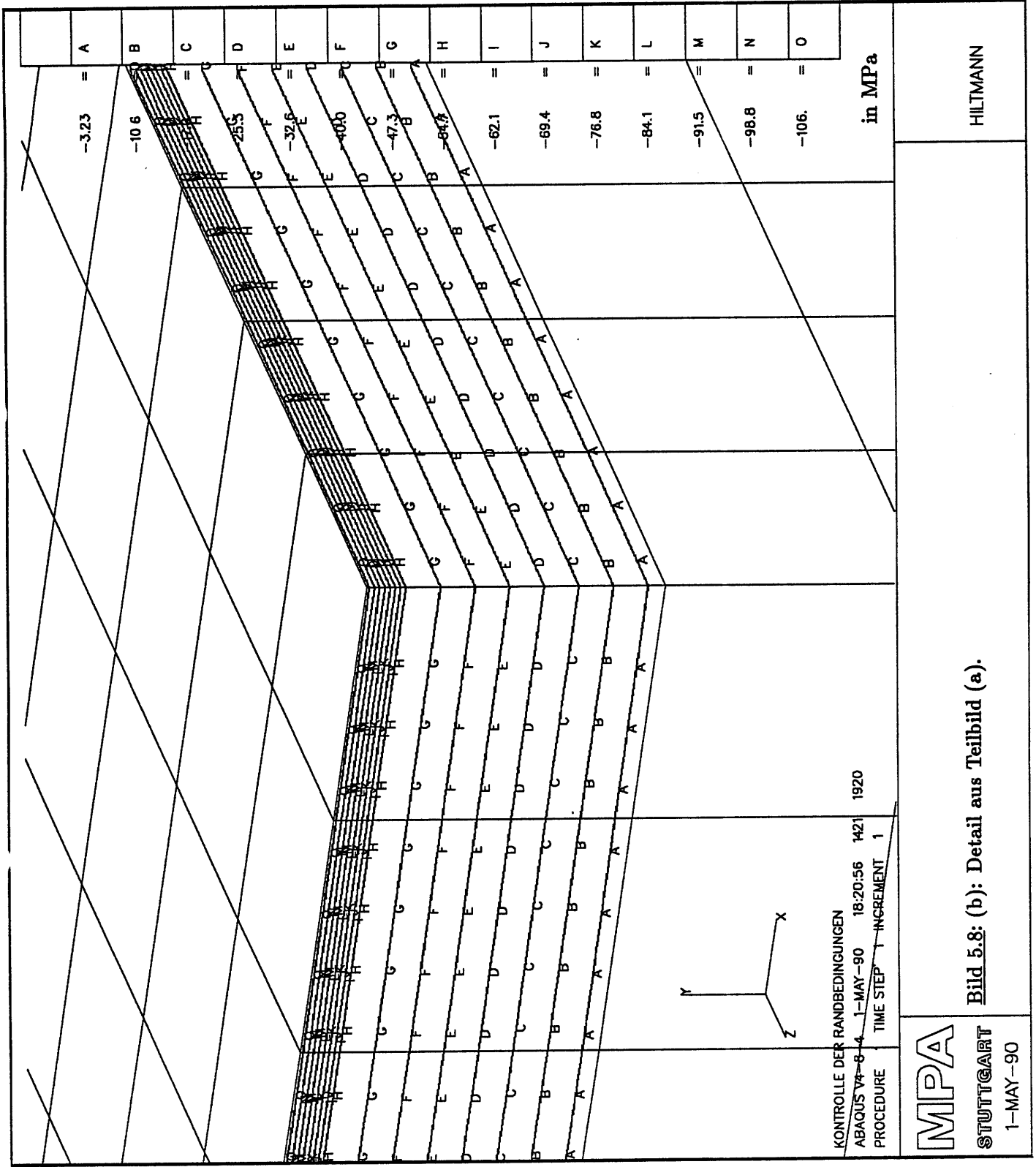
$$i, j, k, l = 1, 2, \dots, N$$

Der erste Index l im Nenner ist hier sicherlich als i zu lesen. Für $E_i = E = const$, $\Delta T_i = \Delta T = const$ vereinfacht sich diese folgende Formel zu:

$$\frac{1}{R} = \frac{6 \Delta T}{d^3} \sum_i \sum_{j > i} d_i d_j (\alpha_j - \alpha_i)$$

$$\sigma_i(x_i) = \frac{E \Delta T}{d} \sum_j d_j (\alpha_j - \alpha_i) + \frac{E}{2R} (\sum_{j < i} d_j - \sum_{j > i} d_j + 2x_i)$$





MPA
STUTTGART
 1-MAY-90

KONTROLLE DER RANDBEDINGUNGEN
 ABACUS V4-8-4 1-MAY-90 18:20:56 1421 1920
 PROCEDURE TIME STEP INCREMENT 1

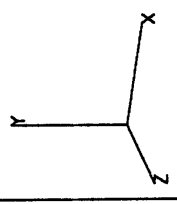


Bild 5.8: (b): Detail aus Teilbild (a).

HILTMANN

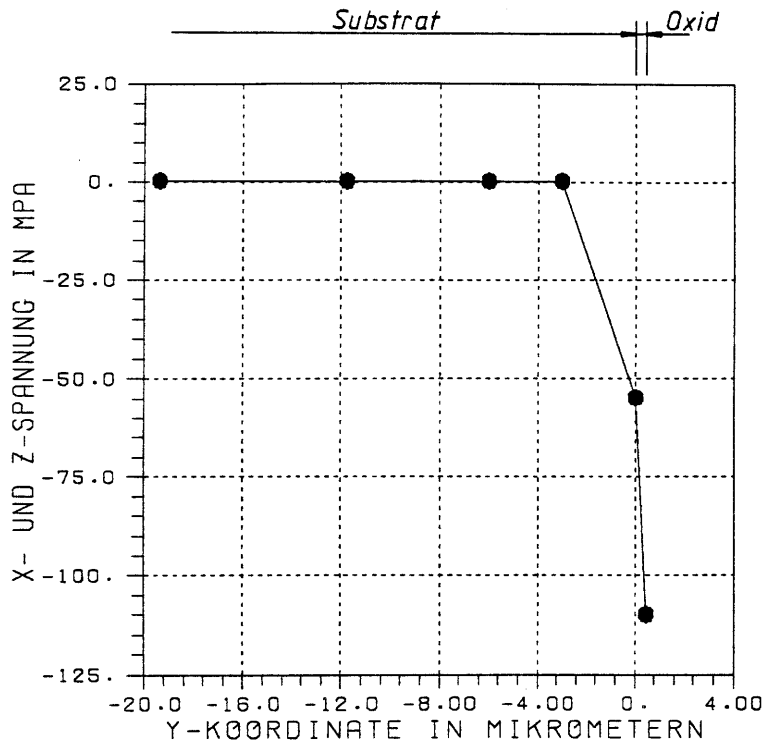


Bild 5.9: Spannungsverlauf $\sigma_x(y)$. Die Abweichung von den Ergebnissen der analytischen Rechnung erklärt sich durch hier benutzte genauere Materialwerte. Der Übergang im Spannungsverlauf an der Grenzfläche entsteht durch die Diskretisierung der Rechnung.

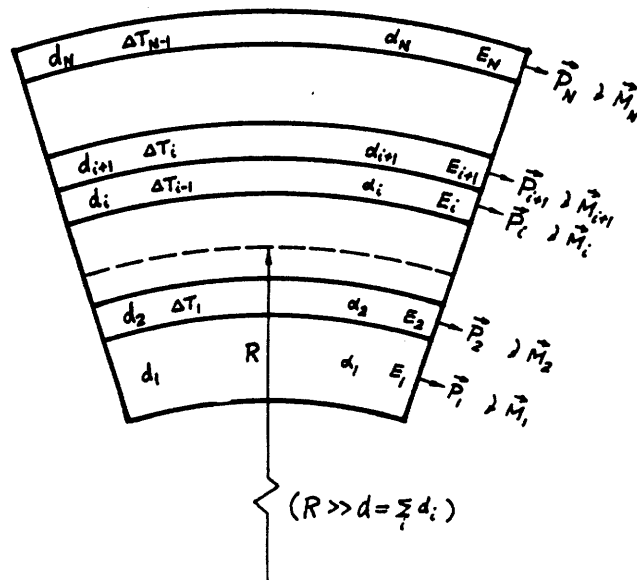


Bild 5.10: Verbundstruktur mehrerer Filmlagen mit Dicke d_i , die bei den Temperaturen T_i aufgebracht wurden [93].

Hier ist:

R	$:=$	Krümmungsradius
ΔT	$:=$	Reaktions- bzw. Abscheidetemperatur
d_i	$:=$	Dicke der i-ten Schicht
d	$:=$	$\sum_i d_i$
α_i	$:=$	thermischer Ausdehnungskoeffizient der i-ten Schicht
E	$:=$	E-Modul
x_i	$:=$	Abstand von der Mitte der i-ten Schicht

Hieraus läßt sich der Biegeradius mit den Werten aus 3.1 und dem Anhang zu

$$R \simeq -10^5 \text{ mm}$$

und die Spannungen zu

$$\sigma_{si} \simeq -0,3 \text{ MPa}$$

$$\sigma_{ox} \simeq 80 \text{ MPa}$$

$$\sigma_{nit} \simeq 90 \text{ MPa}$$

abschätzen. Die Annahme $E_i = E = const$ ist nach [224] erlaubt, da die Verformung dieser Anordnung nur wenig von den einzelnen E-Moduln abhängt.

5.2.1 Modell und Rechnung

In dieser Rechnung wurde das Modell der vorherigen Berechnung, ergänzt um die Nitridschicht, verwendet, Bild 5.11a. Auch hier wurden "C3D8"-Elemente benutzt und die Ebenheitsbedingung mit Hilfe von "MPC 12" realisiert. Die für die Abkühlung Nitrierungstemperatur - Raumtemperatur errechneten Spannungen sind in den Bildern 5.11b bis 5.13 dargestellt. Die Waferverbiegung wurde wie in der vorangegangenen Rechnung, 5.1.5, ermittelt. Hier ergab sich ein Biegeradius von

$$R = -1.34 * 10^5 \text{ mm}$$

Dies liegt im unteren Vertrauensbereich der in [101] gemessenen Radien. Berücksichtigt man wieder die geringe Modellgröße und den Staucheffect an den Kanten (s.o.), so ist der erhaltene Wert sicher gut vertretbar.

Es ist allerdings bei diesem Ergebnis zu beachten, daß Nitridfilme je nach Art ihrer Erzeugung verschiedene Eigenschaften besitzen. Während diese für gesputterte und hochtemperatur-abgeschiedene inzwischen zum Teil bekannt sind, fanden sich über "Reactive Plasma Deposited" Filme wie den hier verwendeten keine Angaben. Es wurden deswegen die in Abschnitt 3.4 angegebenen Materialwerte, jedoch keine Eigenspannung, für die Rechnung eingeben. Nachdem in 3.4 zitierte Autoren an bei niedriger Temperatur erzeugten Filmen geringere Zug- oder sogar Druckeigenspannung festgestellt hatten, wurde hier auf Vorspannung verzichtet - was bei CVD-Filmen nicht zulässig wäre. Eine Kontrollrechnung ergab bei Vorspannung 1000 MPa einen Biegeradius von

$$-3,24 * 10^4 \text{ mm},$$

also fast ein Zehntel des gemessenen. Andere Materialwerte als die hier benutzten könnten jedoch in Verbindung mit einem Eigenspannungszustand ähnliche Verbiegung bei veränderter Spannungsverteilung im Wafer ergeben.

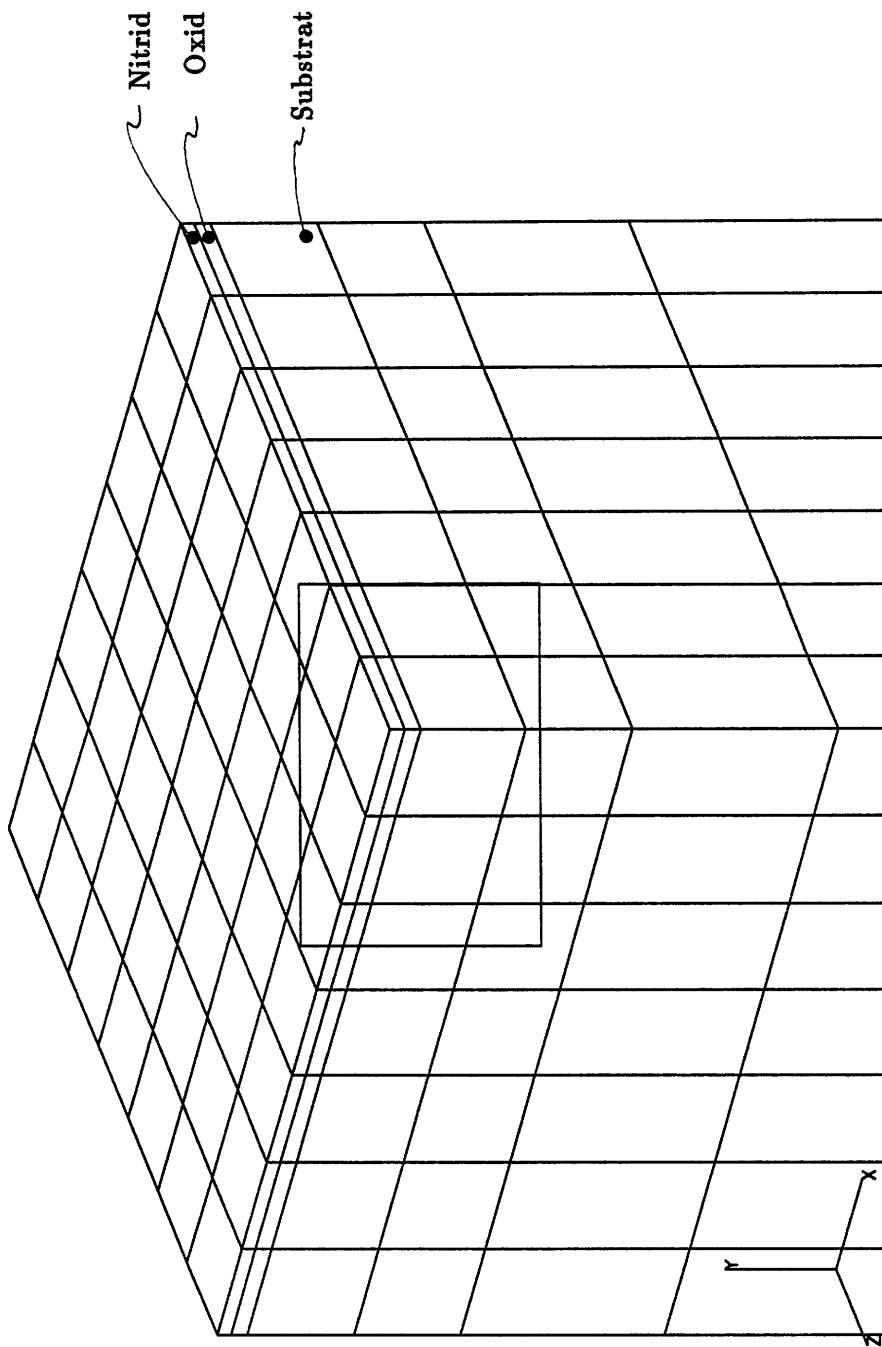
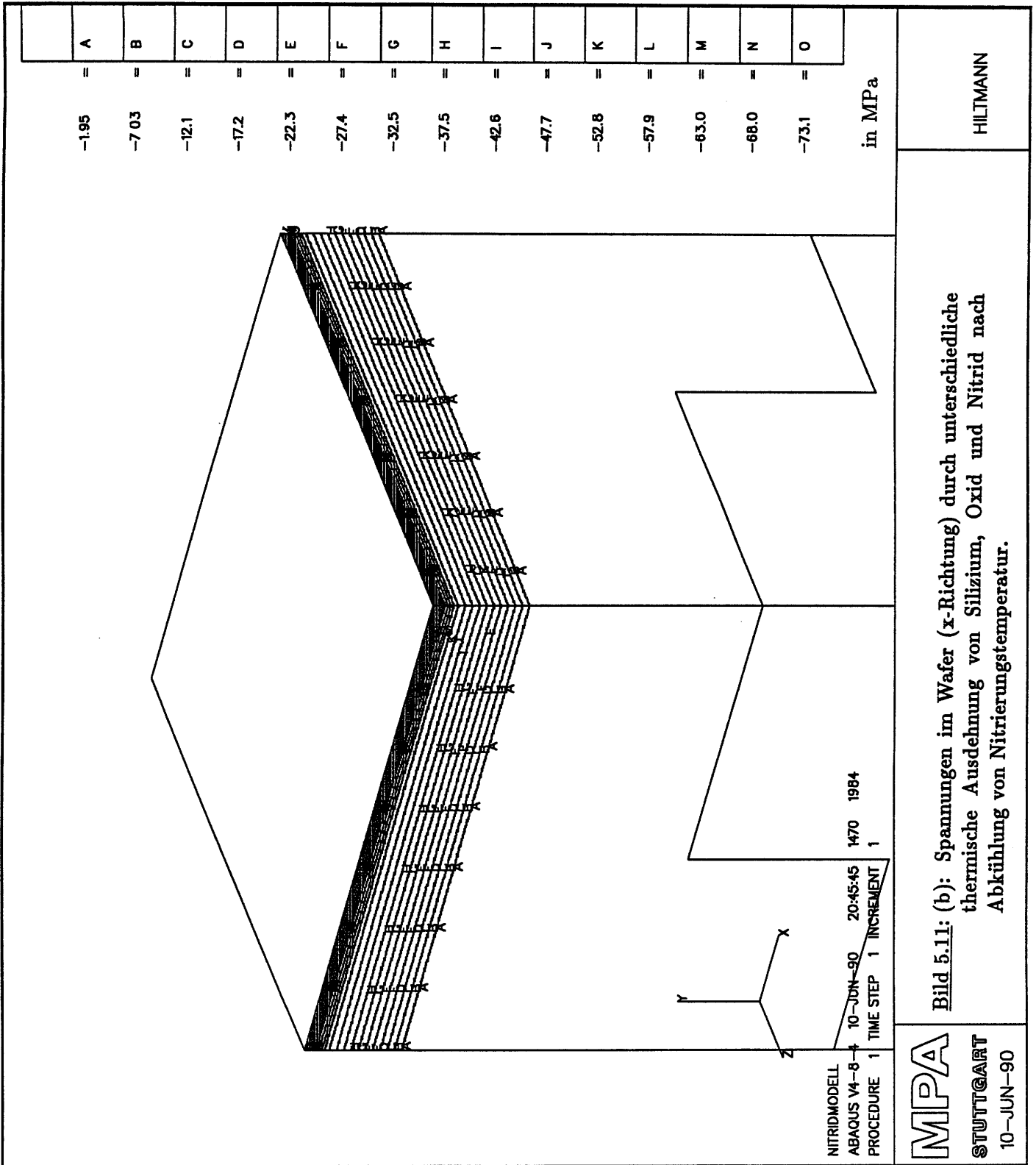


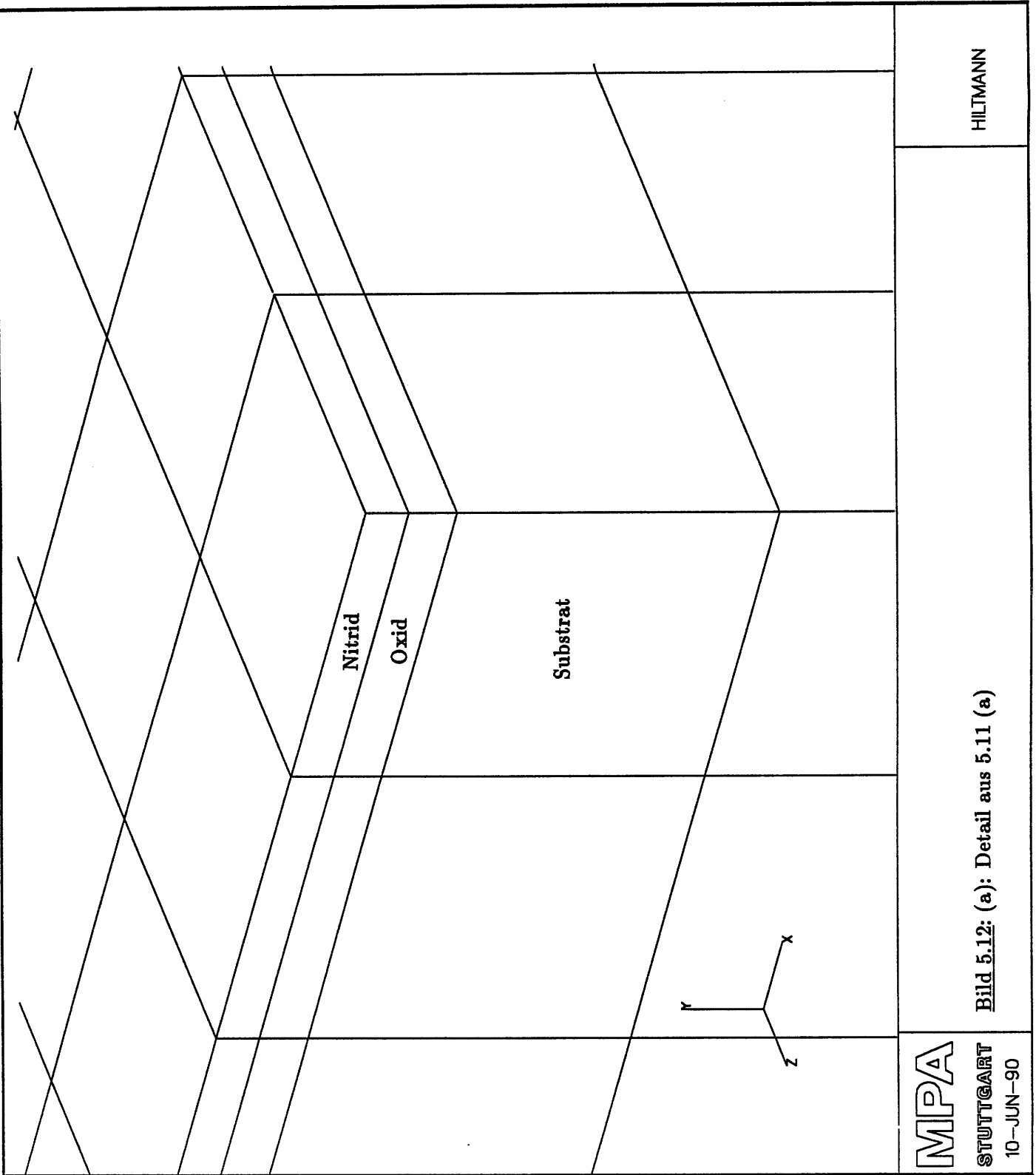
Bild 5.11: (a): Dreidimensionales Modell des Wafers mit Oxid- und Nitridschicht.

HILTMANN

MPA

STUTTGART
10-JUN-90



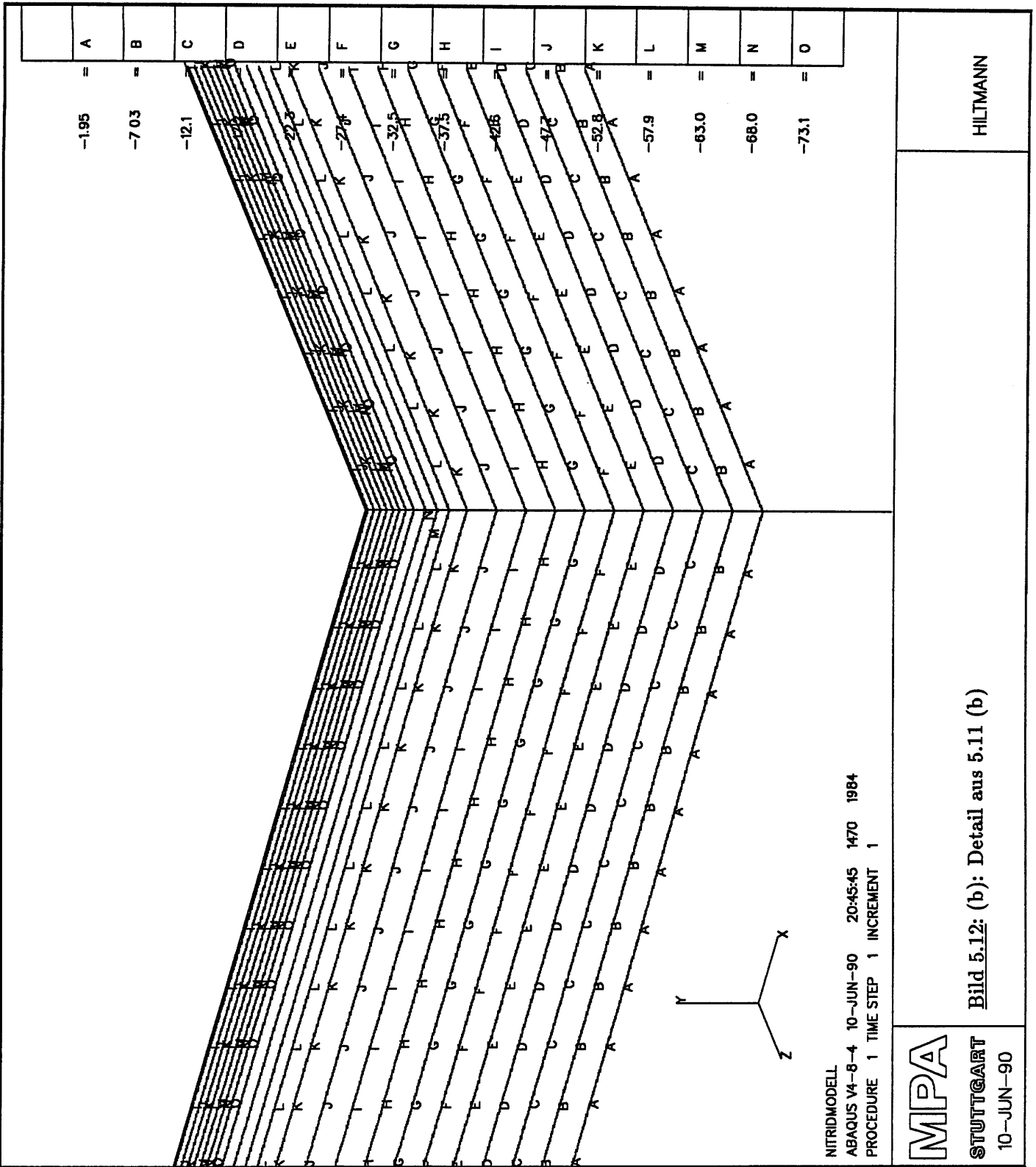


HILTMANN

Bild 5.12: (a): Detail aus 5.11 (a)

MPA

STUTTGART
10-JUN-90



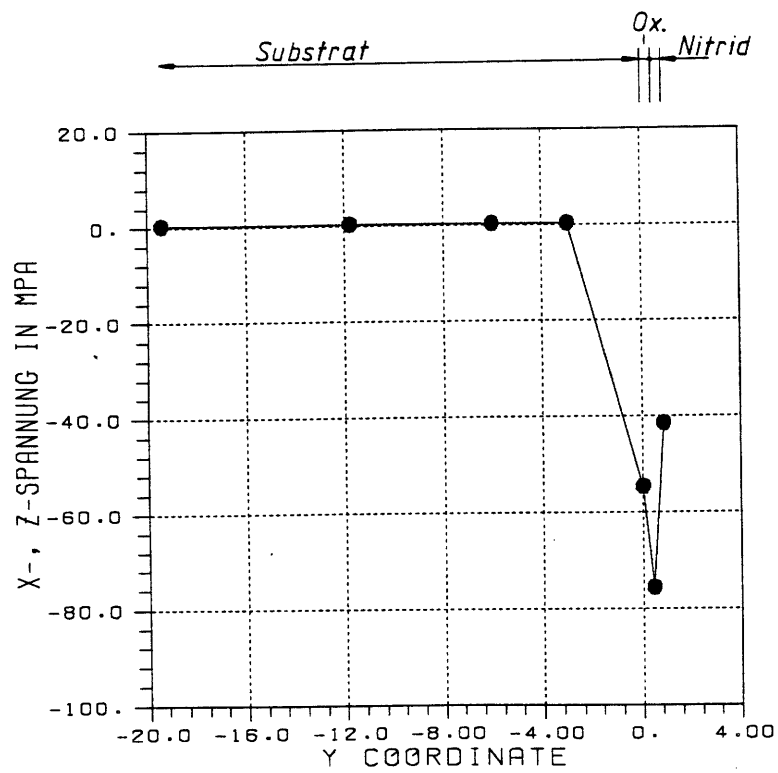


Bild 5.13: Spannungsverlauf (σ_x) senkrecht zur Oberfläche nach der Abkühlung.

5.3 Prozeßsimulation Grabenätzung

Die Verfahren zur Strukturherstellung integrierter Schaltkreise gliedern sich neben solchen der Materialveränderung (Dotierung, Ionenimplantation) in Abscheide- und Ätzprozesse. Ein charakteristischer Bearbeitungsschritt ist die Ätzung von Vertiefungen und deren Füllung mit einem anderen Material. Die hier rechnerisch nachzubildende Situation umfaßt die Abkühlung eines mit Oxid- und Nitridfilm versehenen Wafers von 1000°C auf Raumtemperatur, Ätzen eines Grabens (Trench) und Auffüllen dieser Vertiefung mit polykristallinem Silizium (Polysilizium) oberhalb von 600°C . Hierauf wird das ganze System wieder auf Raumtemperatur abgekühlt, Bild 5.14. Das Interesse gilt hier in erster Linie der Frage,

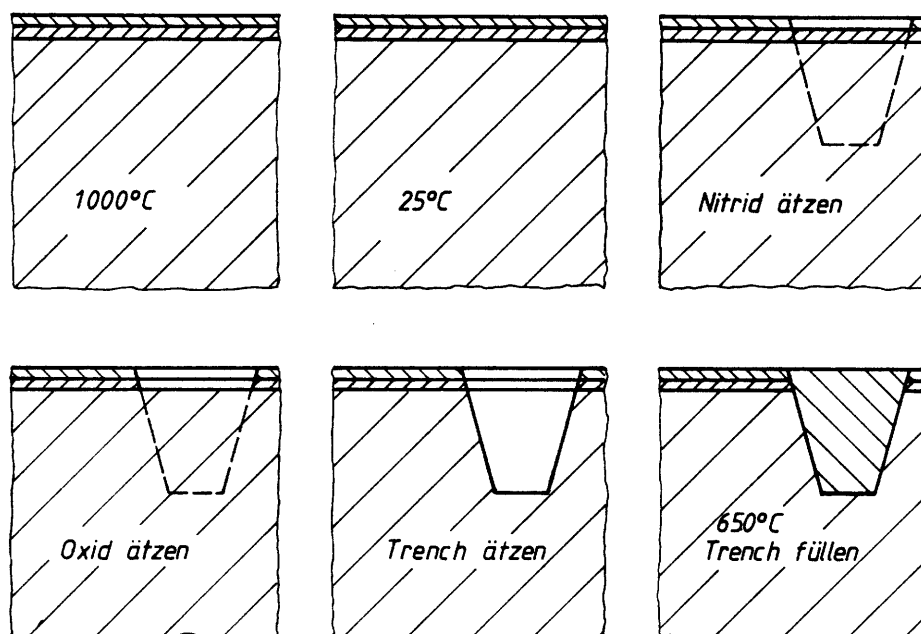


Bild 5.14: Zu simulierende Prozeßschritte bei der Grabenätzung.

wo während dieses Prozesses Spannungskonzentrationen auftreten und ob sie Fließen des einkristallinen Grundwerkstoffs (Monosilizium) bewirken können.

5.3.1 Modell

Das für die Rechnungen verwendete Modell ist in Bild 5.15 dargestellt. Zur Verkürzung der Rechenzeit und des Speicherbedarfs beschränkt sich die Simulation auf einen ebenen Schnitt durch die Struktur und verwendet ebene, achtknotige Viereckelemente wie in den ersten Rechnungen aus 5.1. Auch hier wurden erst Elemente für ebenen Dehnungszustand ($\epsilon = 0$) eingesetzt. Ungewöhnlich hohe Spannungen während der Abkühlung in z -Richtung zeigten jedoch, daß die vom Programm in diesem Fall gesetzten Randbedingungen auch keine thermische Ausdehnung des gesamten Bauteils in dieser Richtung erlauben. Da diese Grundlage nicht realistisch ist, wurde mit ebenem Spannungszustand ($\sigma_z = 0$) gerechnet. Eine Option, die Spannung in z -Richtung für jedes Element gleich der x -Spannung zu setzen, ist in Version 4.8 des Programms Abaqus noch nicht enthalten.

Im Bild läßt sich erkennen, daß das FE-Netz nicht mehr gleichmäßig über das Modell gelegt ist, sondern sich an der Form des Grabens orientiert. Dessen Elemente werden zum entsprechenden Zeitpunkt aus dem Modell herausgenommen.

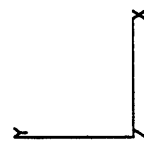
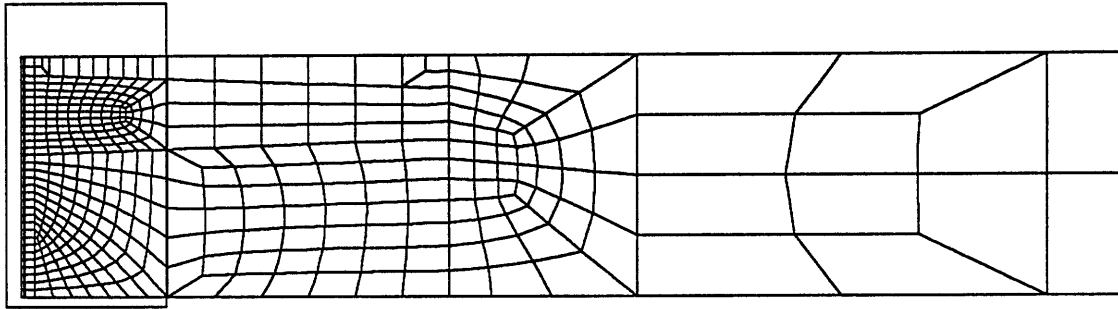
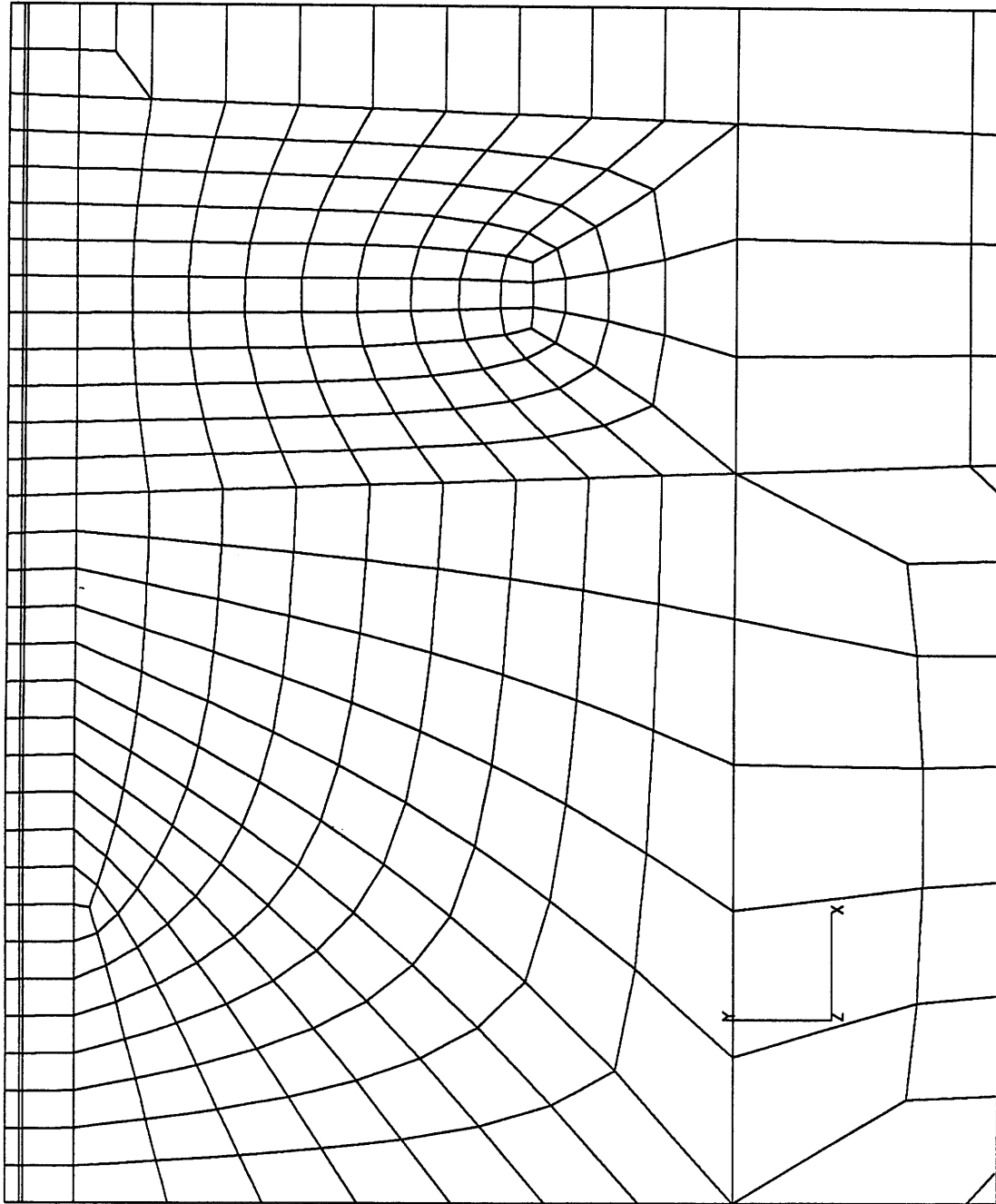


Bild 5.15: a): Modell zur Simulation der Grabenätzung (oberer Teil).

HILTMANN

MPA
STUTTGART
4-JUN-90



HILTMANN

Bild 5.15: b): Detail aus Bild 5.15 (a).

MIPA
STUTTGART
12-JUN-90

5.3.2 Schritt 1 — Abkühlen des Modells

Die Struktur aus Siliziumkristall, Oxid- und Nitridfilm soll von 1000°C abgekühlt werden. Hier ist neben der Temperaturabhängigkeit der einzelnen Materialwerte insbesondere die plastische Verformbarkeit des Kristalls und viskoelastisches Verhalten des Oxidfilmes zu berücksichtigen. Tatsächlich ist die Frage, ob allein durch die Filmspannung im Substrat Fließen eintreten kann oder nicht, in der Literatur noch ungeklärt. Das Programm Abaqus bietet sowohl die Möglichkeiten, viskoelastisches Materialverhalten darzustellen, als auch die der überelastischen plastischen Verformung. Das Erreichen der Elastizitätsgrenze wird hier nach dem von-Mises-Kriterium (Gestaltänderungs-Energie-Hypothese, GEH) bestimmt:

$$\sigma_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_y - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_x)^2 + 6(\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{zx}^2)}$$

bzw, für den ebenen Spannungszustand:

$$\sigma_v = \sqrt{\sigma_x^2 - \sigma_x \sigma_y + \sigma_y^2 + 3\tau_{xy}^2}$$

Fließen tritt dann ein bei $\sigma_v = R_e$ ($R_e :=$ Elastizitätsgrenze). In Abschnitt 3.1.3 ist bei der Betrachtung plastischer Verformung im kubisch-flächenzentrierten Gitter als Fließbedingung in der x-y-Ebene gefunden worden:

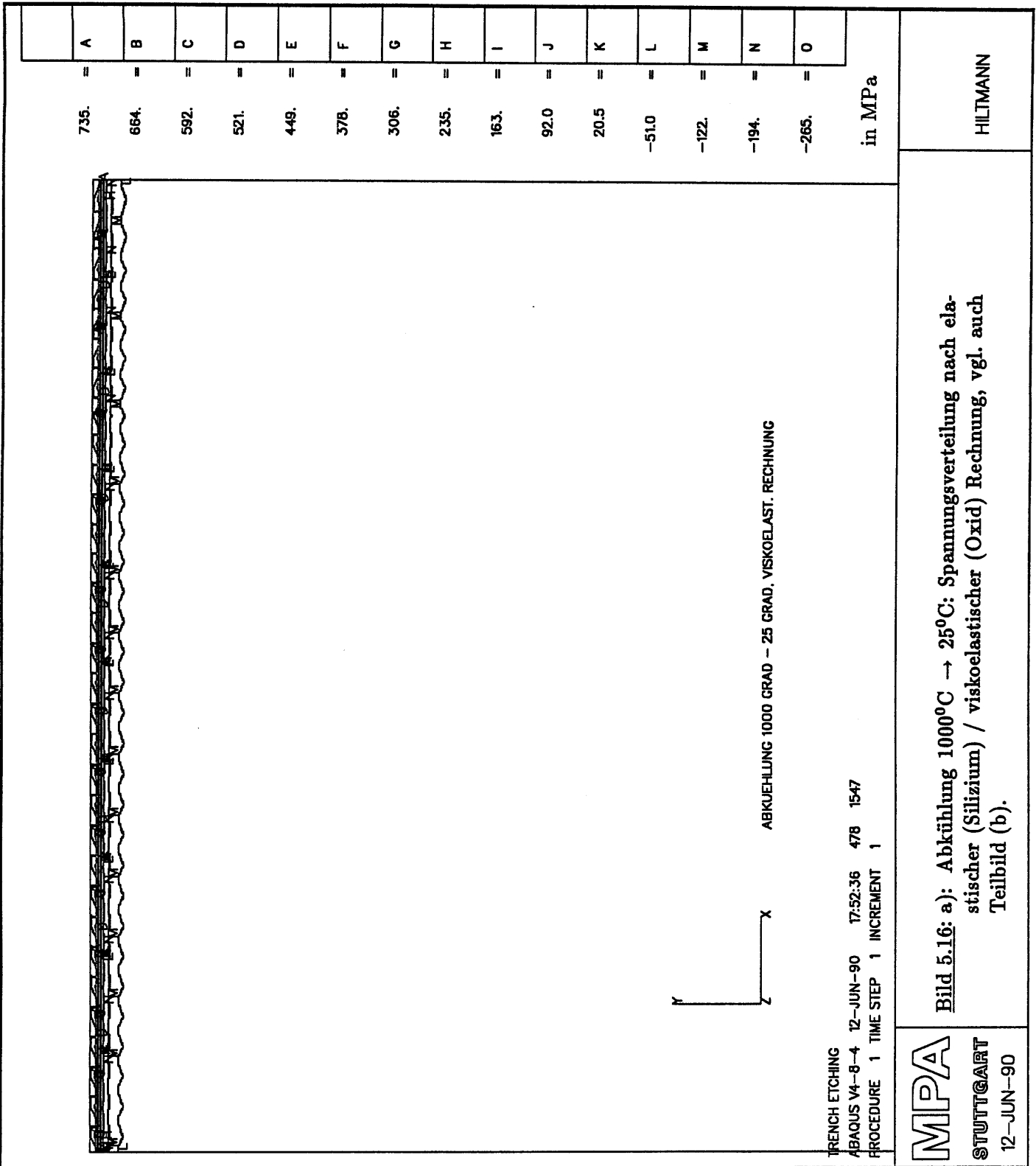
$$\tau_{(110)} = (\sigma_x - \sigma_y + \sqrt{2}\tau_{xy})/\sqrt{6}$$

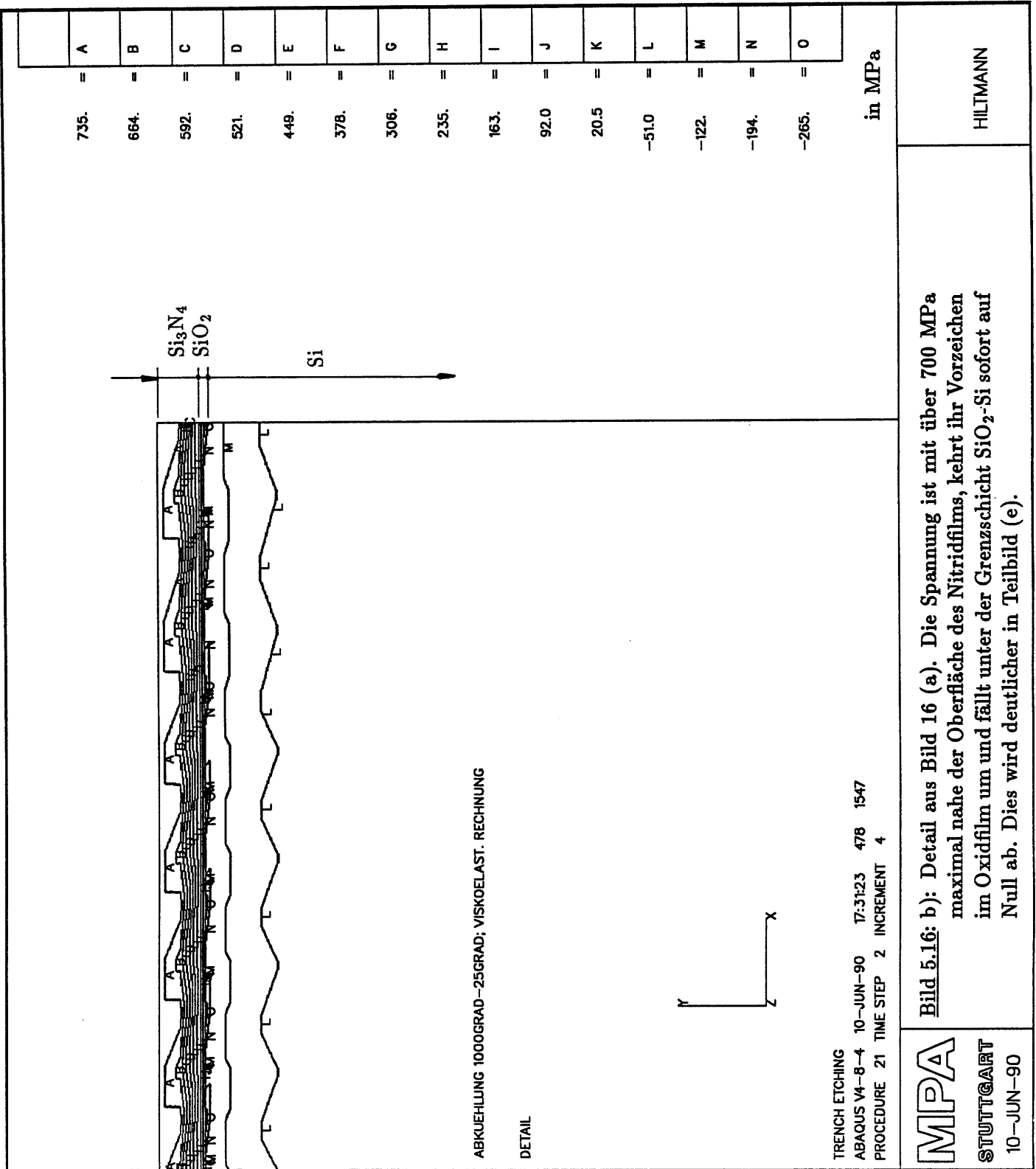
Diese Fließbedingung läßt sich jedoch nicht als Vielfaches des Mises-Kriteriums darstellen, womit eine automatische Bestimmung der Fließgrenze ausschied. Aus diesem Grunde wurde in drei Schritten vorgegangen:

1. Abkühlungsrechnung mit Si und Si₃N₄ (elastisch), SiO₂ (viskoelastisch)
2. Alle 50°C-Schritte: Nachrechnung für jeden Knoten des Grundmaterials:
Ist die Elastizitätsgrenze erreicht worden?
- 2a. Gegebenenfalls plastische Rechnung mit einer fiktiven Streckgrenze;
den Bereich des Fließens notieren.
3. Vergleichen mit einer parallelen, vollelastischen Rechnung.

Das Ergebnis der Abkühlungsrechnung findet sich in Bild 5.16, wo die Teilbilder (c) bis (e) zum Vergleich das Ergebnis rein elastischer Rechnung vorstellen. Es zeigt sich kein Unterschied zur viskoelastischen Spannungsverteilung. Dies ist vor allem auf die geringe Dicke des Oxidfilms zurückzuführen; zusammen mit der hohen Viskosität von Quarzglas kann kaum Spannungsabbau durch Fließen erfolgen.

Nach dem ersten Rechendurchgang (elastisch/viskoelastisch) wurden die Spannungswerte jedes zu Monosilizium gehörenden Knotens in eine Fortran-Routine eingelesen, Bild 5.17 und mit der für die jeweilige Temperatur geltenden Gleitschubspannung verglichen. Bild 5.18 zeigt die höchste jeweils ermittelte Spannung im Vergleich zum Verlauf der Gleitspannung. Es ist zu erkennen, daß sogar die untere Fließgrenze in keinem Schritt erreicht wird.





ABKUEHLUNG 1000GRAD-25GRAD; VISKOELAST. RECHNUNG

DETAIL

TRENCH ETCHING
 ABAQUS V4-8-4 10-JUN-90 17:31:23 478 1547
 PROCEDURE 21 TIME STEP 2 INCREMENT 4

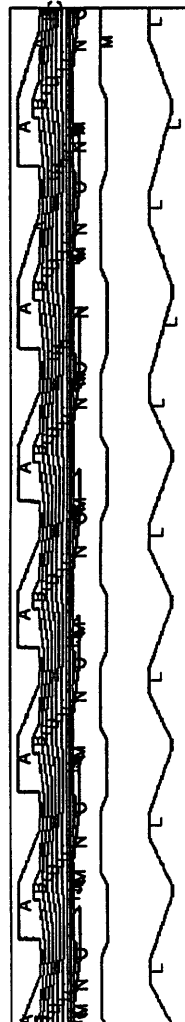
MPA
 STUTTGART
 10-JUN-90

Bild 5.16: b): Detail aus Bild 16 (a). Die Spannung ist mit über 700 MPa maximal nahe der Oberfläche des Nitridfilms, kehrt ihr Vorzeichen im Oxidfilm um und fällt unter der Grenzschicht SiO₂-Si sofort auf Null ab. Dies wird deutlicher in Teilbild (e).

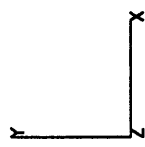
HILTMANN

735.	=	A
664.	=	B
592.	=	C
521.	=	D
449.	=	E
378.	=	F
306.	=	G
235.	=	H
163.	=	I
92.0	=	J
20.5	=	K
-51.0	=	L
-122.	=	M
-194.	=	N
-265.	=	O

in MPa



ABKUEHLUNG 1000 - 25 GRAD; ELASTISCHE RECHNUNG



TRENCH ETCHING
 ABAQUS V4-8-4 10-JUN-90 17:11:16 478 1547
 PROCEDURE 1 TIME STEP 1 INCREMENT 1

MPA
STUTTGART
 10-JUN-90

Bild 5.16: c): Abkühlung 1000°C → 25°C: Spannungsverteilung nach voll-elastischer Rechnung. Ein Unterschied zu (b) ist nicht erkennbar, d.h. Spannungsabbau durch Fließen des Oxids findet praktisch nicht statt.

HILTMANN

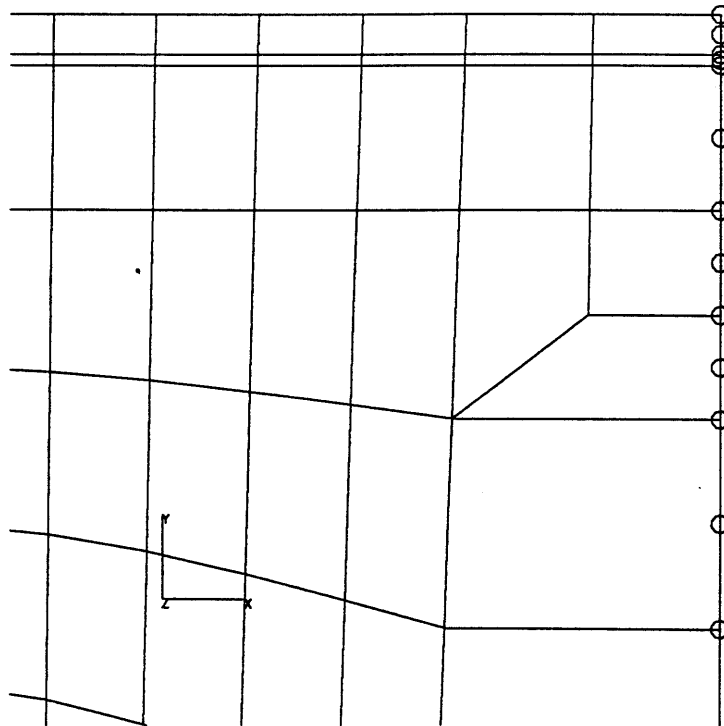


Bild 5.16: d): Lage der Knotenpunkte des folgenden Diagramms.

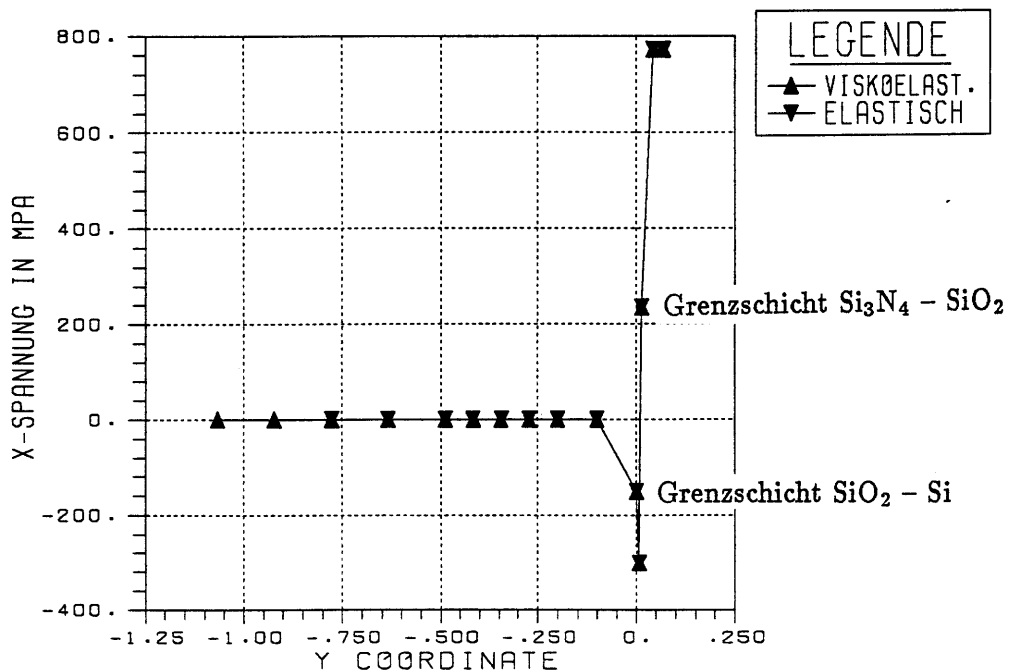


Bild 5.16: e): Spannungsverlauf $\sigma_x(y)$ (senkrecht zur Waferoberfläche). Null-Linie ist die Grenzfläche Si-SiO₂. Die zugehörigen Knoten sind in Bild 16.d eingezeichnet. Die Vorzeichenumkehr zwischen Nitrid und Oxid und die Entlastung des Substrats sind deutlich erkennbar.

```

*****
*****
PROGRAM FLOW
*****
c Diese Routine soll aus einem Datenfile mit den Spannungen SigmaX,
c SigmaY und TauXY die Schubspannung in der [110]-Richtung ermitteln
c und feststellen, ob die Elastizitaetsgrenze ueberschritten wurde
*****
c Variablen:
real s11,s22,s12,tau,re,max
integer node,nodmax
*****
s11 = 0.
s22 = 0.
s12 = 0.
tau = 0.
re = 0.
max=0.
node = 1
nodmax=1
*****
write (*,'(' Bitte geben Sie die geltende Fließspannung an'))
read (*,'(f5.1)') re
open (10, name = daten, status = 'old')
open (11, name = result, status = 'new')
*****
10 continue
read (10,*,end=20) node, s11, s22, s12
tau = (abs(s11 - s22)+ abs(s12)*1.4142 ) / 2.4495
if (tau.ge.re) then
write (11,'(i4, 3f12.4,' FLOW ',f6.2)') node,s11,s22,s12,tau
endif
if (tau.gt.max) then
max=tau
nodmax=node
endif
goto 10
20 continue
write (11,'(' Maximum: ',i4,f6.2)')nodmax,max
end

```

Bild 5.17: Fortran-Routine, mit der der Fließbeginn überprüft werden soll.

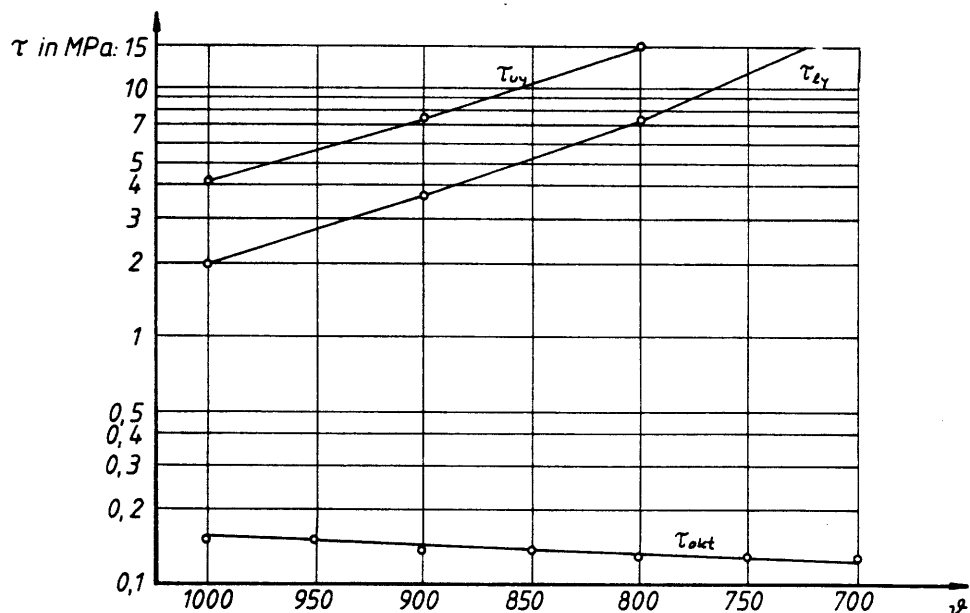
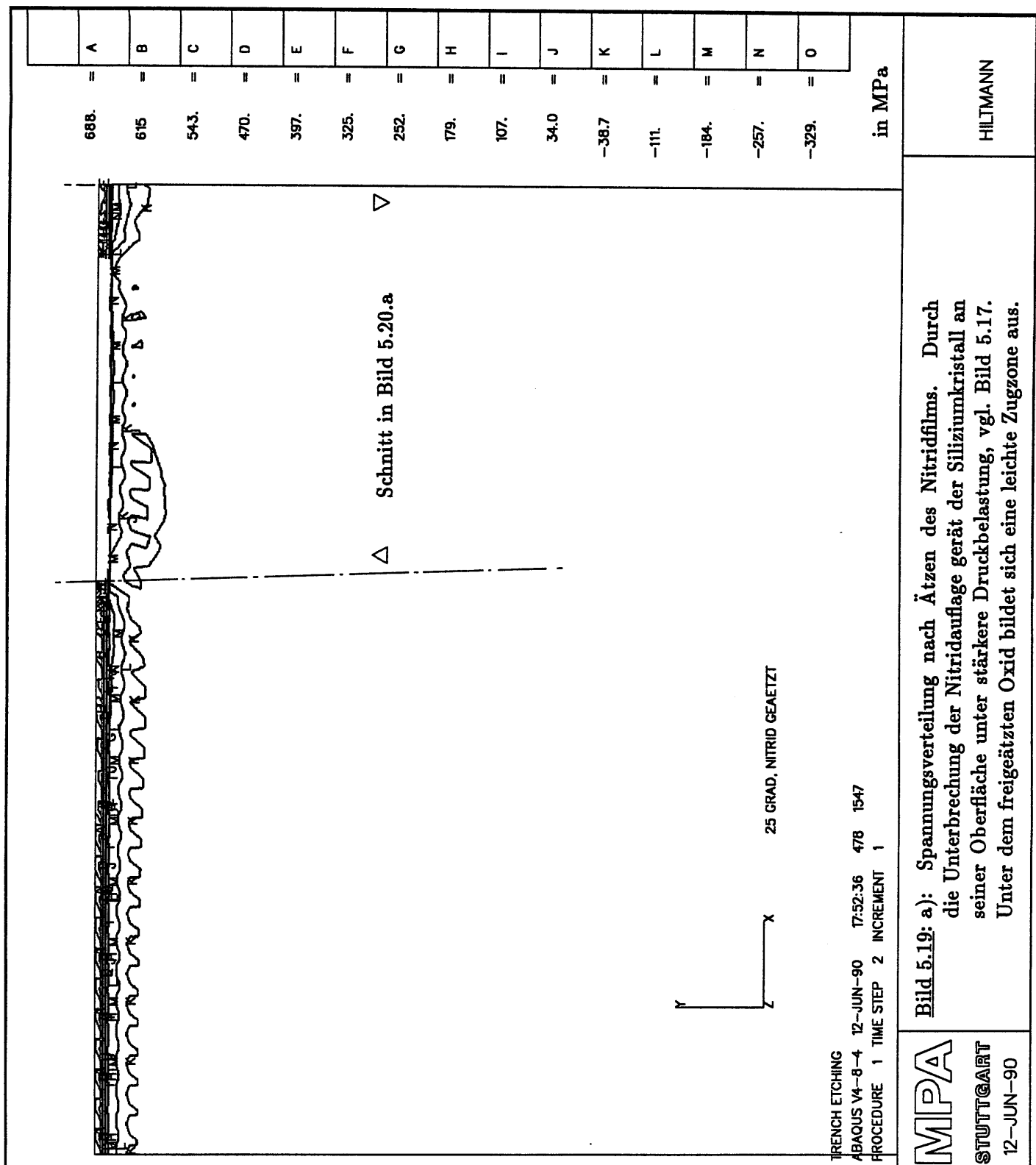
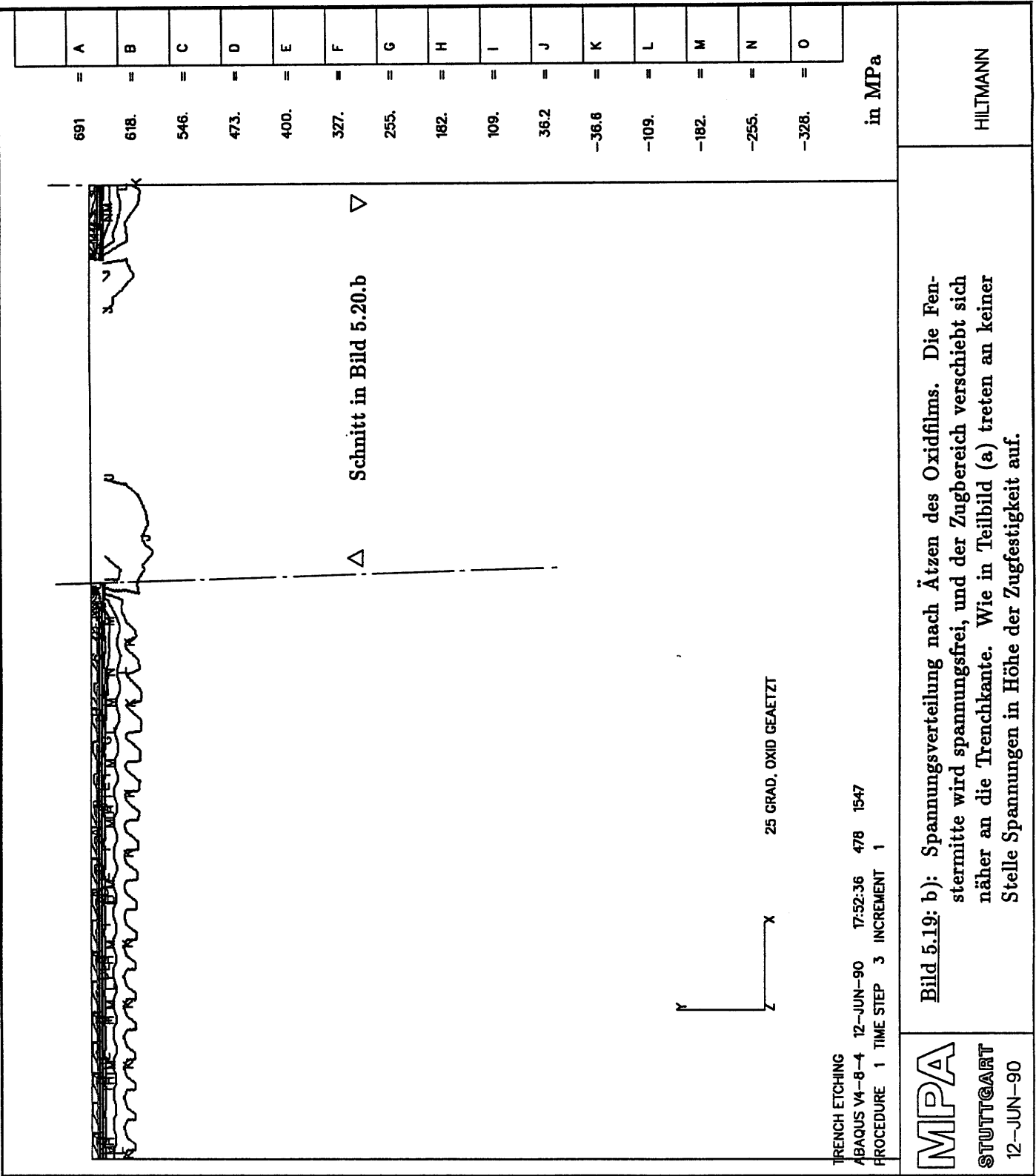


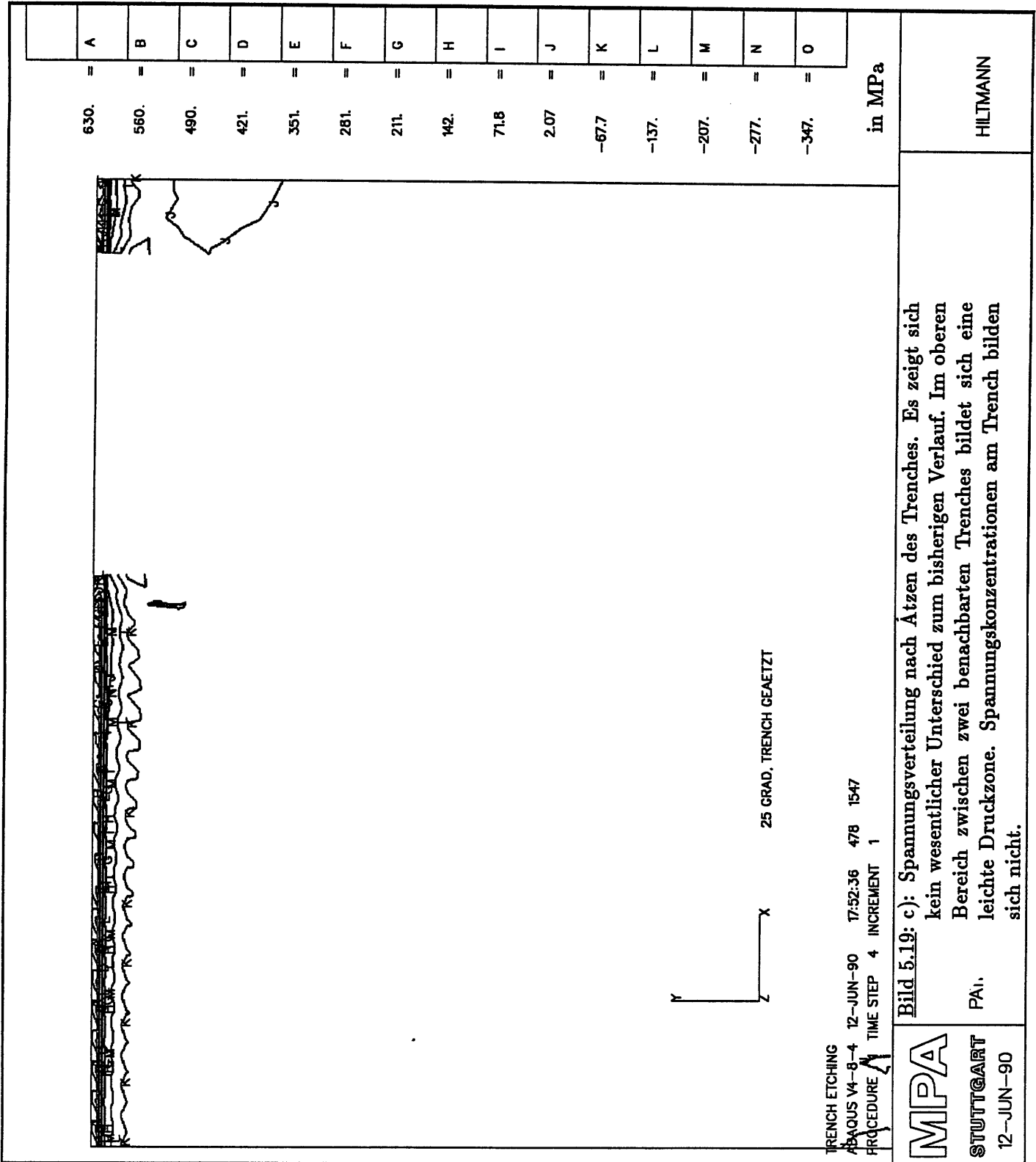
Bild 5.18: Maximale Schubspannung in der Gleitebene und Elastizitätsgrenze während der Abkühlung.

5.3.3 Schritt 2 — Ätzen von Filmen und Substrat

Über die *MODEL CHANGE-Option erlaubt Abaqus das Entfernen von Elementgruppen während des Programmlaufs. Nacheinander wurden so ein Teil des Nitridfilms, des Oxidfilms und des Substrats aus dem Modell herausgenommen. Die Spannungsverteilungen nach jedem Schritt sind in den Bildern 5.19 und 5.20 wiedergegeben. Ein interessantes Ergebnis ist hier, daß nach dem Ätzprozeß die Grabenumgebung — wie allerdings elastizitätstheoretisch zu erwarten — nahezu frei von Spannungen ist. Der Ätzvorgang kann somit nicht mit dem Auftreten von Versetzungen in diesem Gebiet in Verbindung stehen.







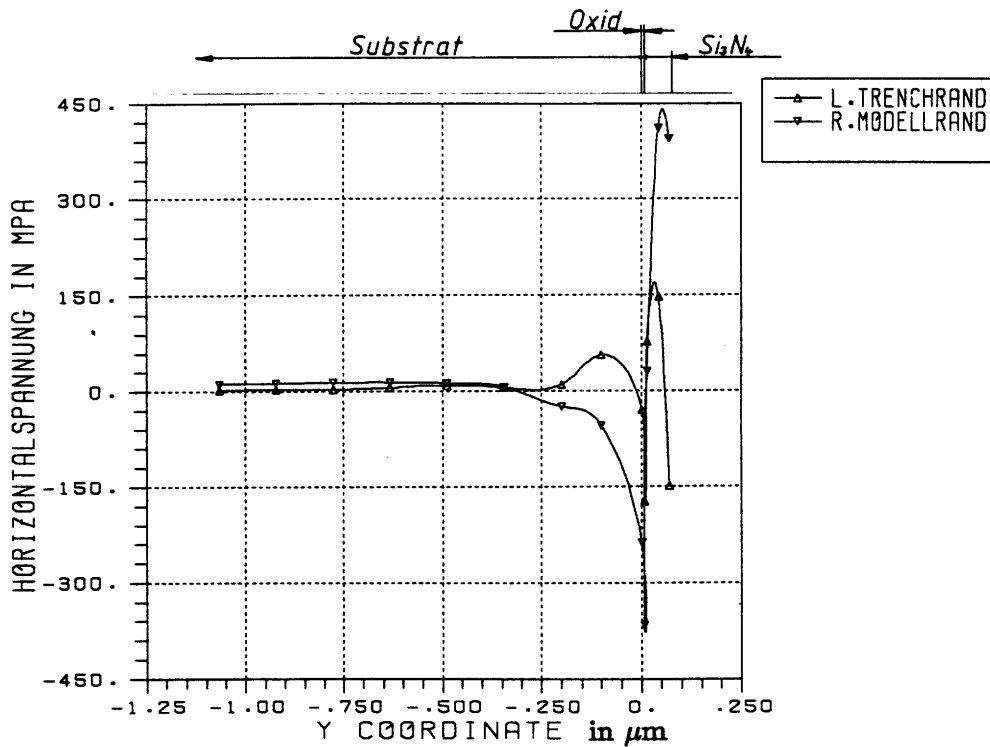


Bild 5.20: a): $\sigma_x(y)$ nach Entfernen des Nitridfilms am linken Trenchrand und am rechten Modellrand, vgl. Bild 5.20.a. Die Grenzfläche Si-SiO₂ hat die Höhe $y = 0 \mu\text{m}$.

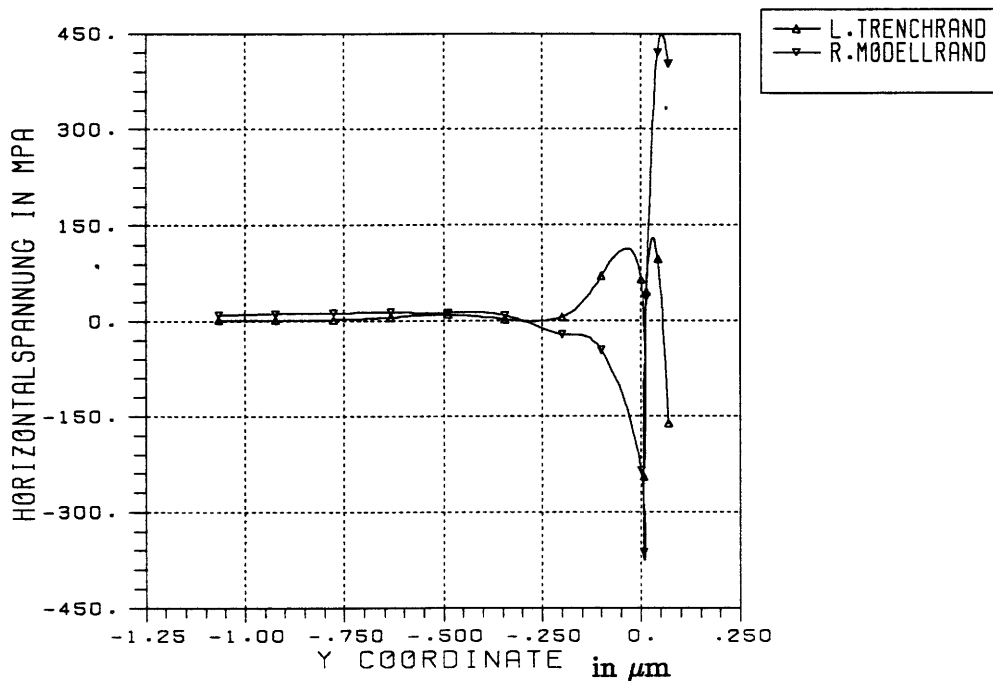


Bild 5.20: b): $\sigma_x(y)$ nach Entfernen des Oxidfilms am linken Trenchrand und am rechten Modellrand, vgl. Bild 5.20.b. Der Vergleich mit Teilbild (a) zeigt eine Zunahme der Zugspannung an der linken Trenchkante und höheren Druck zwischen zwei Trenches. Die Höhe der Spannungen ist jedoch bei Raumtemperatur unkritisch.

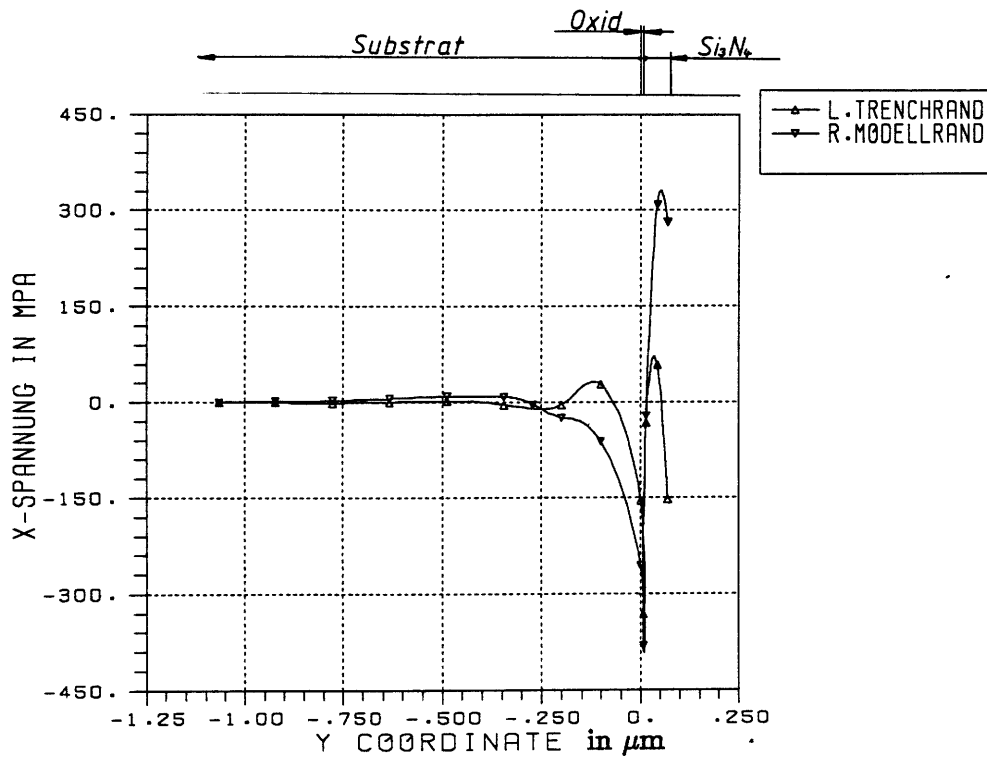


Bild 5.20: c): $\sigma_x(y)$ nach der Trenchätzung am linken Trenchrand und am rechten Modellrand. Beim Ätzen des Trenches fällt die Zugspannung am Trenchrand (∇) weiter ab; der Druck in der Grenzschicht Si-SiO₂ im Bereich zwischen zwei Trenches (Δ) steigt bis nahe -300 MPa. In dieser Zone entstehen zwar bei Erwärmung sicher Versetzungen, sie liegt jedoch innerhalb des späteren SROX-Gebietes.

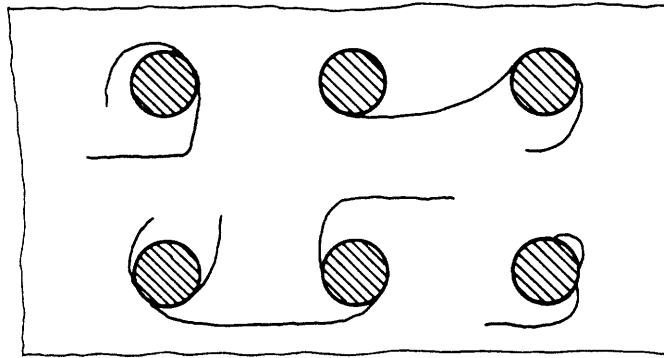


Bild 5.21: Aufsicht auf den Wafer mit gefüllten Gräben (schematisch), Versetzungslinien am Trenchrand.

5.3.4 Auffüllen des Grabens mit Polysilizium

Nach dem Ätzen wird der gesamte Wafer auf eine Temperatur oberhalb von 600°C erwärmt — in der Rechnung wurde hierfür $\theta = 650^{\circ}\text{C}$ eingesetzt — und dotiertes Polysilizium chemisch abgeschieden. Zwischen Trenchfüllung und Matrix treten hohe Spannungen auf, die im Kristall plastische Verformung erzeugen können, Bild 5.21. Aus der Literatur ist, vgl. 3.4, bekannt, daß CVD-Silizium Eigenspannungen enthält, jedoch besteht noch Unsicherheit bezüglich deren Vorzeichen. Einerseits trägt die Dotierung des Füllmaterials mit Zugspannungen in der Größenordnung von ca. 50 MPa hierzu bei, andererseits lassen Beobachtungen an einer Reihe von Grabenstrukturen (s.u.) Druckspannungen vermuten. Es wurden aus diesem Grunde zwei Rechnungen durchgeführt, in denen einmal eine Vorspannung von +300 MPa und einmal von -300 MPa bei Abscheidetemperatur eingegeben wurde.

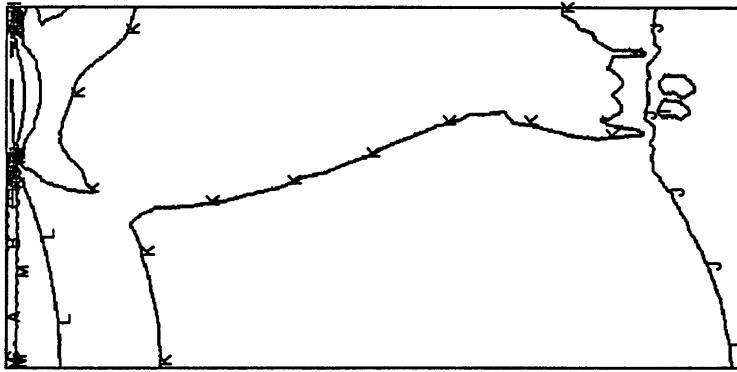
Vorgehen: Das Programm Abaqus läßt eine Veränderung von Materialwerten und vor allem von Vorspannungen während Laufes nicht ohne weiteres zu. Die vorige Rechnung wurde deswegen bis zum Ätzen des Grabens durchgeführt und die Ergebnisse auf ein "Restart"-File geschrieben. In einem neuen Durchgang wurden auf die Trench-Elemente die entsprechende Vorspannung aufgebracht und die bisherige Spannungsverteilung vom Restart-File eingelesen. Auch bei diesem Verfahren ist es allerdings nicht möglich, für das neue Material Polysilizium veränderte Kennwerte anzugeben. Das Auftreten von Wärmespannungen zwischen Matrix und Füllmaterial kann deswegen nicht dargestellt werden.

Ziel dieser Rechnung ist es jedoch, Bereiche plastischer Verformung zu finden. Da Silizium unterhalb von 600°C nicht (und zwischen 600 und 700°C nur bedingt) plastisch verformbar ist, beeinträchtigt diese Näherung das Ergebnis nur unwesentlich.

Ergebnisse Die errechneten Spannungsverteilungen für positive Vorspannung 300 MPa (Zug) sind in den Bildern 5.22.a und 5.22.b wiedergegeben.

Die Bilder 5.23 zeigen die Ergebnisse für negative (Druck-) Vorspannung. Die Asymmetrie gegenüber der ersten Serie erklärt sich durch die nicht veränderte Spannung am Nitridfilm.

SPANNUNGSVERTEILUNG NACH
TRENCHFUELLUNG (ABSCHNEIDETEMP.)
EIGENSPANNUNG +300 MPa



TRENCHFUELLUNG
ABAQUS V4-8-4 16-JUN-90 21:48:15 478 1547
PROCEDURE 1 TIME STEP 6 INCREMENT 1

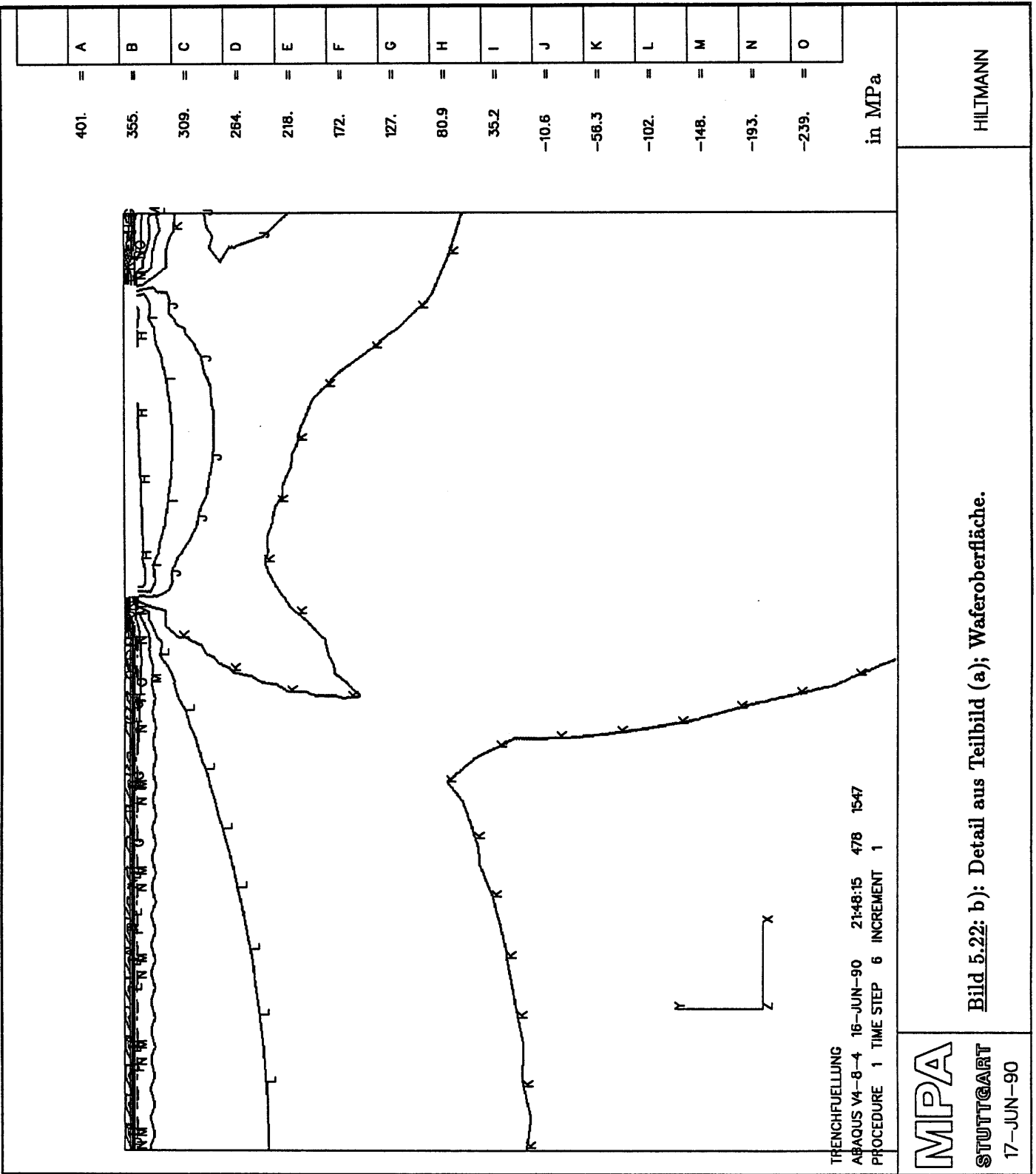
MPA
STUTTGART
17-JUN-90

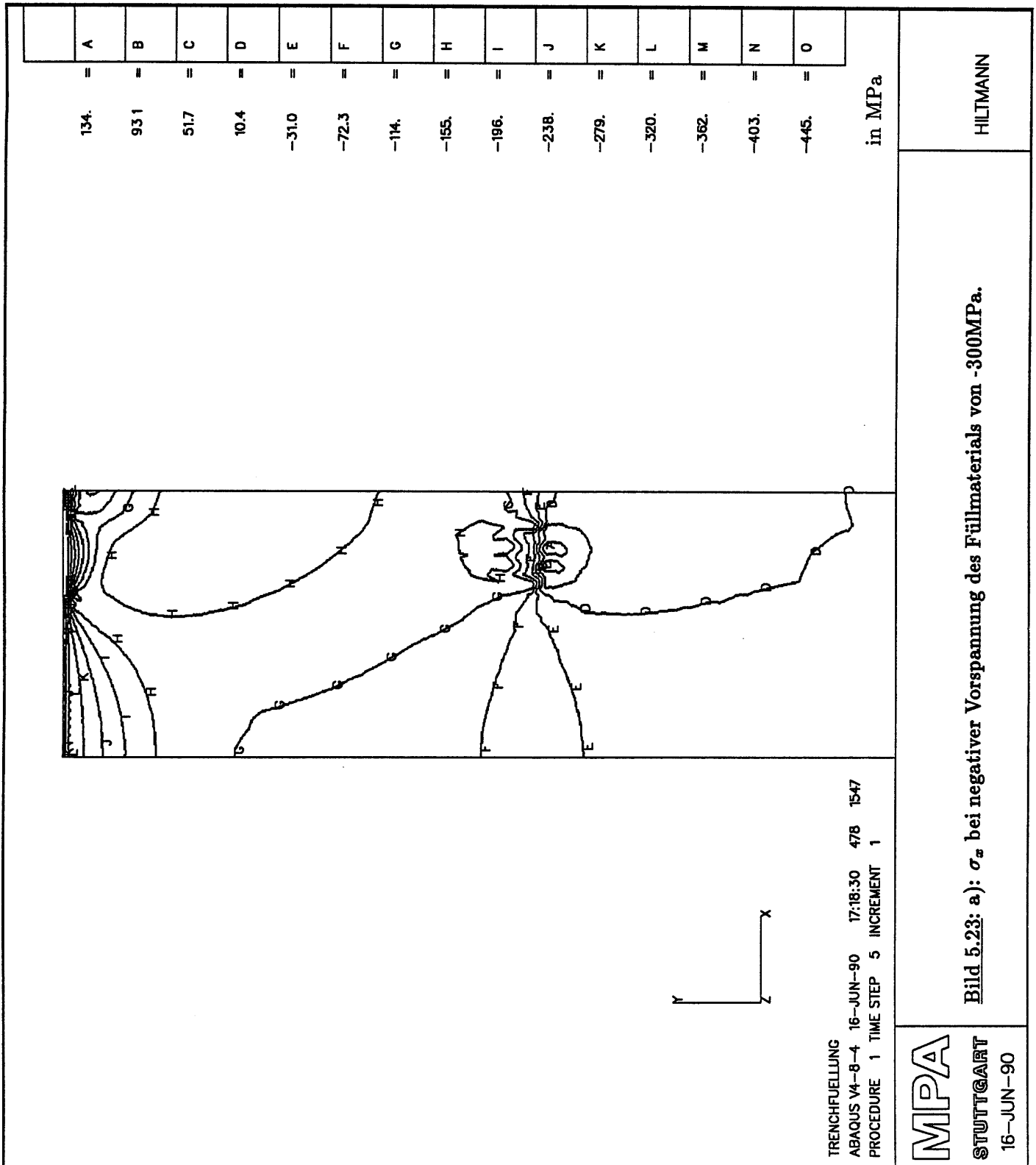
Bild 5.22: a): Verteilung der Spannung σ_z nach der Trenchfüllung bei $\theta = 650^\circ\text{C}$. Vorspannung im Füllmaterial: $\sigma = +300\text{MPa}$.

in MPa

	A
401.	=
	B
355.	=
	C
309.	=
	D
264.	=
	E
218.	=
	F
172.	=
	G
127.	=
	H
80.9	=
	I
35.2	=
	J
-10.6	=
	K
-56.3	=
	L
-102.	=
	M
-148.	=
	N
-193.	=
	O
-239.	=

HILTMANN



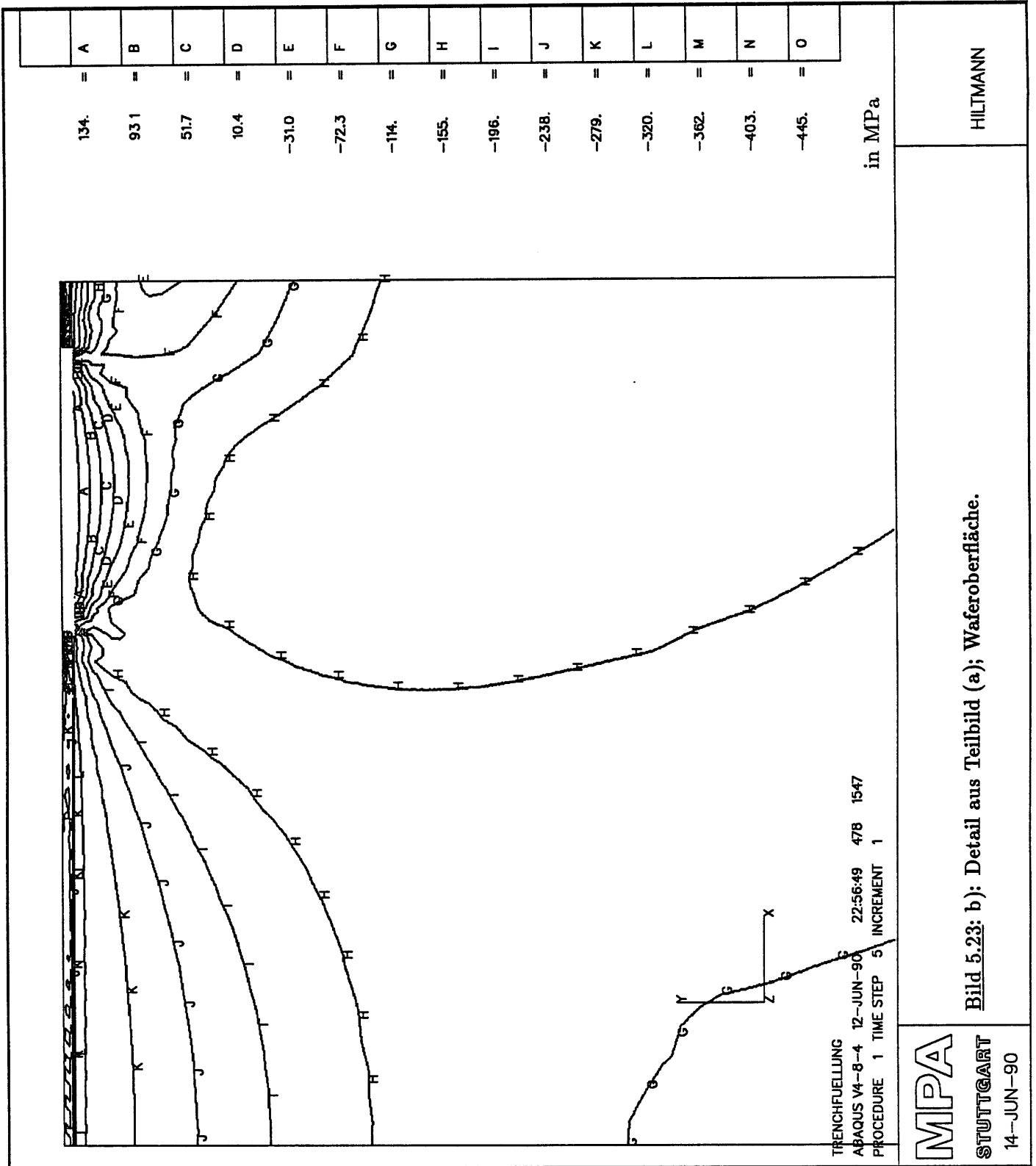


TRENCHFUELLUNG
 ABAQUS V4-8-4 16-JUN-90 17:18:30 478 1547
 PROCEDURE 1 TIME STEP 5 INCREMENT 1

MPA
STUTTGART
 16-JUN-90

Bild 5.23: a): σ_x bei negativer Vorspannung des Füllmaterials von -300MPa.

HILTMANN



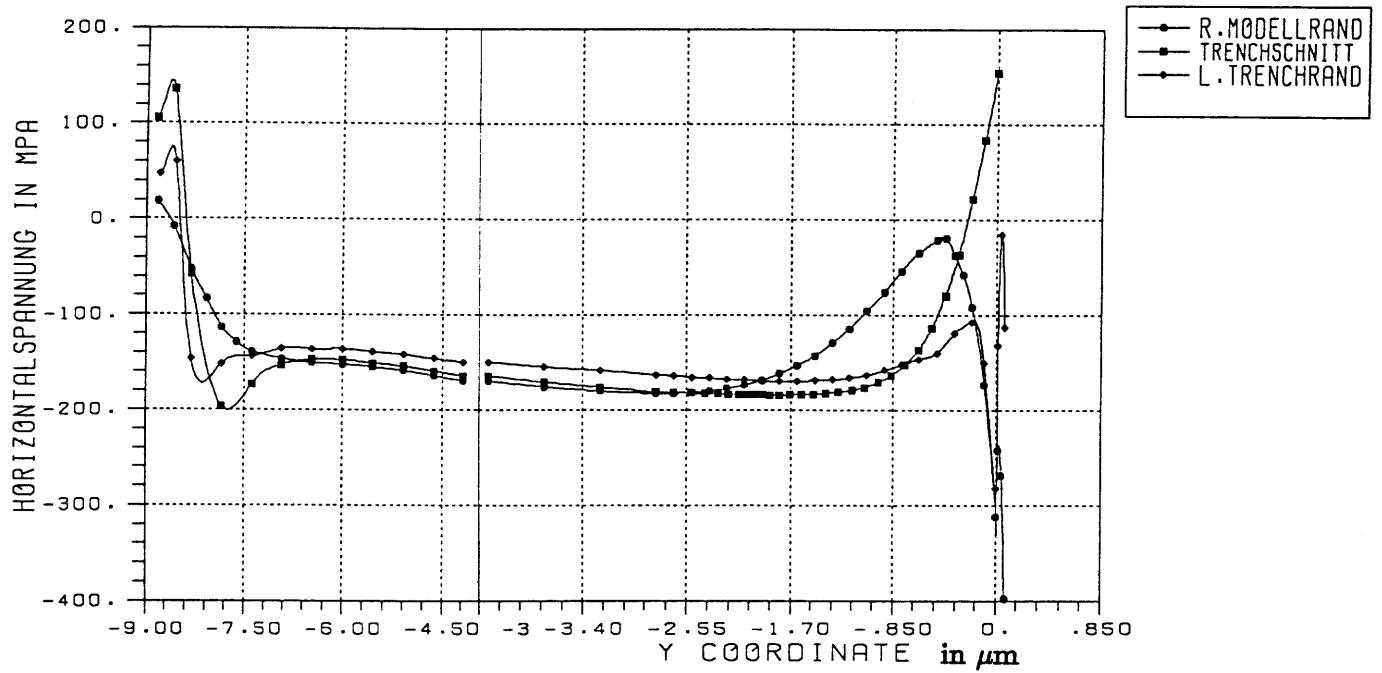


Bild 5.23: c): $\sigma_x(y)$ am rechten Modellrand, etwa in Trenchmitte sowie am linken Trenchrand.

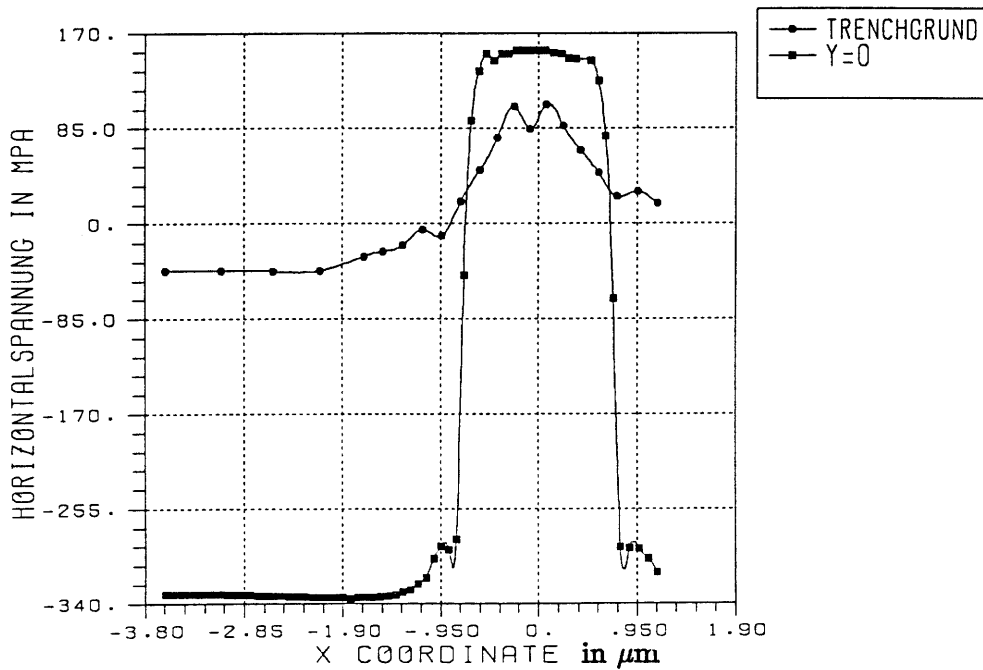


Bild 5.23: d): $\sigma_x(x)$: Vergleich der Horizontalspannung am oberen und unteren Trenchende.

5.4 Reihe von Grabenstrukturen mit Unterbrechung

Die bisher untersuchte Grabenanordnung wird in der Praxis nicht isoliert angeordnet, sondern ist Teil einer ausgedehnten Reihe oder eines Feldes. Beobachtungen haben ergeben, daß Versetzungen am häufigsten an den Feldrändern auftreten. Während schon die Aussagefähigkeit der bisherigen Rechnungen durch fehlende Material-, Geometrie- und Prozeßwerte mehr oder weniger vermindert war, kann eine derartige Beobachtung auf die verschiedensten Einflüsse, über die keine Informationen vorliegen, zurückzuführen sein. Ein einfaches mechanisches Modell wie die in dieser Arbeit erstellten berücksichtigt bekannte Faktoren und muß nicht notwendigerweise Erklärungen für Phänomene an größeren Systemen liefern. Aufgrund dieser Einschränkung und um keine unrealistische Genauigkeit vorzutäuschen, soll dieses Problem daher in erster Linie qualitativ betrachtet werden.

5.4.1 Erste Rechnung

Zunächst wird ein ebener Schnitt durch eine Reihe von Strukturen entsprechend 5.3 gelegt, Bild 5.24. Die Reihe wurde durch Mehrfachspiegelung des vorherigen Modells erzeugt und wieder mit einem Nitridfilm (der Einfachheit halber ohne Oxid-Zwischenlage) bedeckt. Gegenüber dem Substrat sind die mit Polysilizium gefüllten Gräben etwas dunkler getönt. Ein Graben wurde ausgelassen, d.h. seine Elemente wurden dem Grundmaterial zugeordnet, um ein Feldende zu markieren. Es wurde rein elastisch von 1000°C auf 25°C abgekühlt. Die Nitridschicht erhielt eine Vorspannung von 1000 MPa, die Polysiliziumfüllung wurde in drei Variationen

- ohne Vorspannung
- mit Vorspannung +300MPa
- mit Vorspannung -300MPa

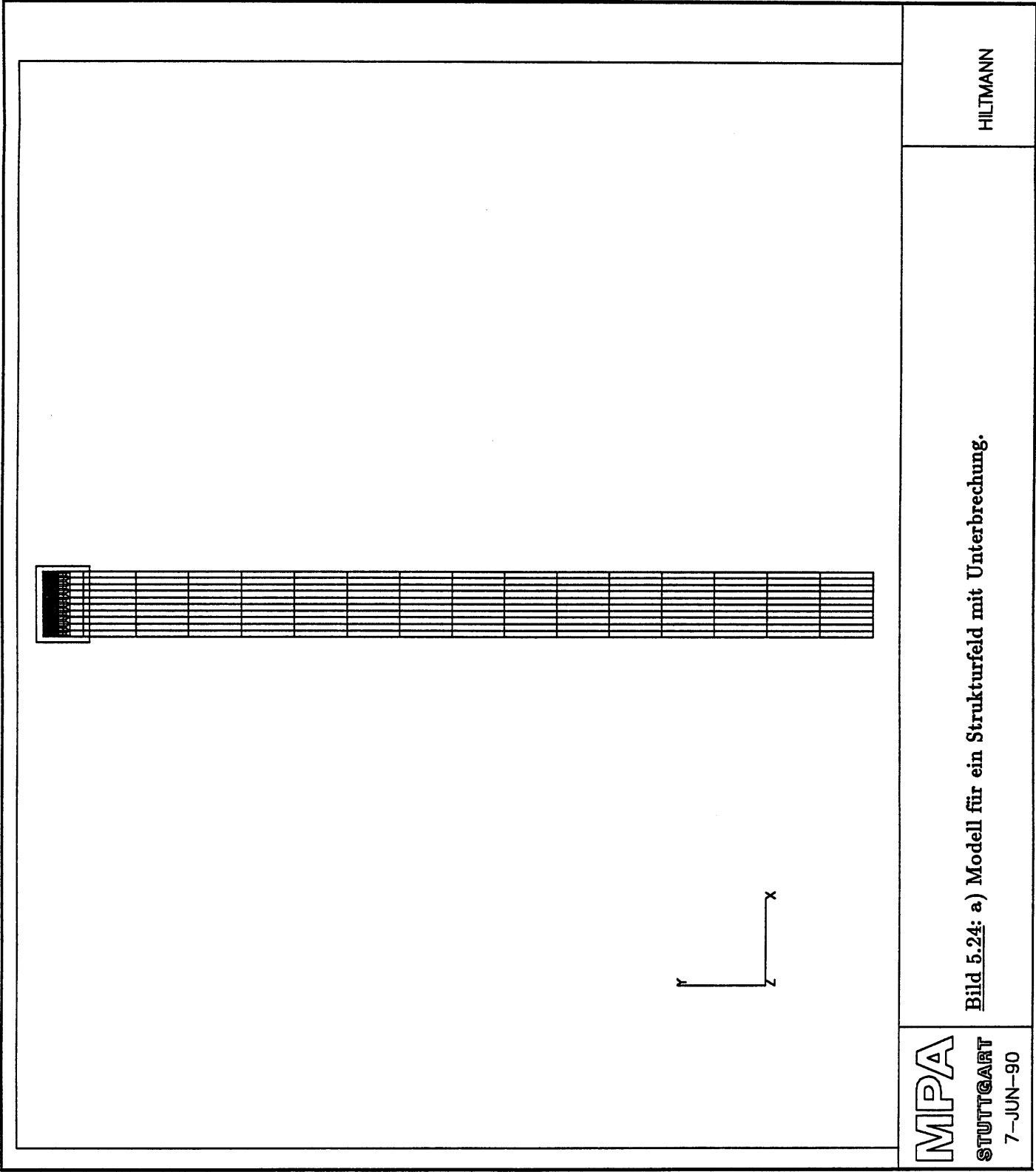
eingetragen. Die errechneten Spannungsverteilungen finden sich in den Bildern 5.25 bis Bild 5.30. Teilbild (b) stellt jeweils einen vergrößerten Ausschnitt im Bereich des Feldendes dar.

Der Spannungszustand, der sich nach der simulierten Abkühlung einstellt, besteht aus zwei Komponenten: Die für das Füllmaterial eingegebene Vorspannung wird von der Umgebung aufgenommen und dabei reduziert (Gleichgewichtszustand), während die unterschiedliche thermische Ausdehnung der Materialien zu Wärmespannungen führt.

Vergleicht man die Bilder der Spannungsverteilungen, so zeigt sich bei der Vorspannung $\sigma_{PS} = 0$ kaum ein erkennbarer Unterschied zwischen Feldrand und Feldinnerem. Bei Zugeigenspannung $\sigma_{PS} = 300$ ist am Feldrand die Grenzkurve zum Null-Spannungsgebiet etwas in das Substrat hinein verschoben, der Spannungsverlauf an der Oberfläche jedoch unverändert. Theoretisch wäre die bevorzugte Entstehung von Versetzungen in Höhe des Trenchgrundes wohl denkbar; aufgrund der geringen Differenz zwischen beiden Bereichen trotz der hohen Vorspannung ist jedoch zu bezweifeln, ob das Ergebnis der Rechnung in diesem Sinne ausgelegt werden darf.

Wird in das Trenchmaterial negative Vorspannung eingegeben, so verändert sich das Verlaufsbild grundlegend. Zum einen steigt das gesamte Spannungsspektrum durch die gegensätzliche Polarität von Polysilizium und Nitridfilm auf das Doppelte an, zum anderen bildet sich zwischen zwei Trencharrays eine verstärkte Druckzone aus.

Der tatsächliche Eigenspannungszustand des Füllmaterials ist zur Zeit noch unbekannt; unter der Voraussetzung von Druckspannungen — trotz dem Zugspannungsanteil der Dotierungselemente — scheint das Auftreten von Versetzungen an den Feldrändern durchaus möglich zu sein.



HILTMANN

Bild 5.24: a) Modell für ein Strukturfeld mit Unterbrechung.

MPA
STUTTGART
 7-JUN-90

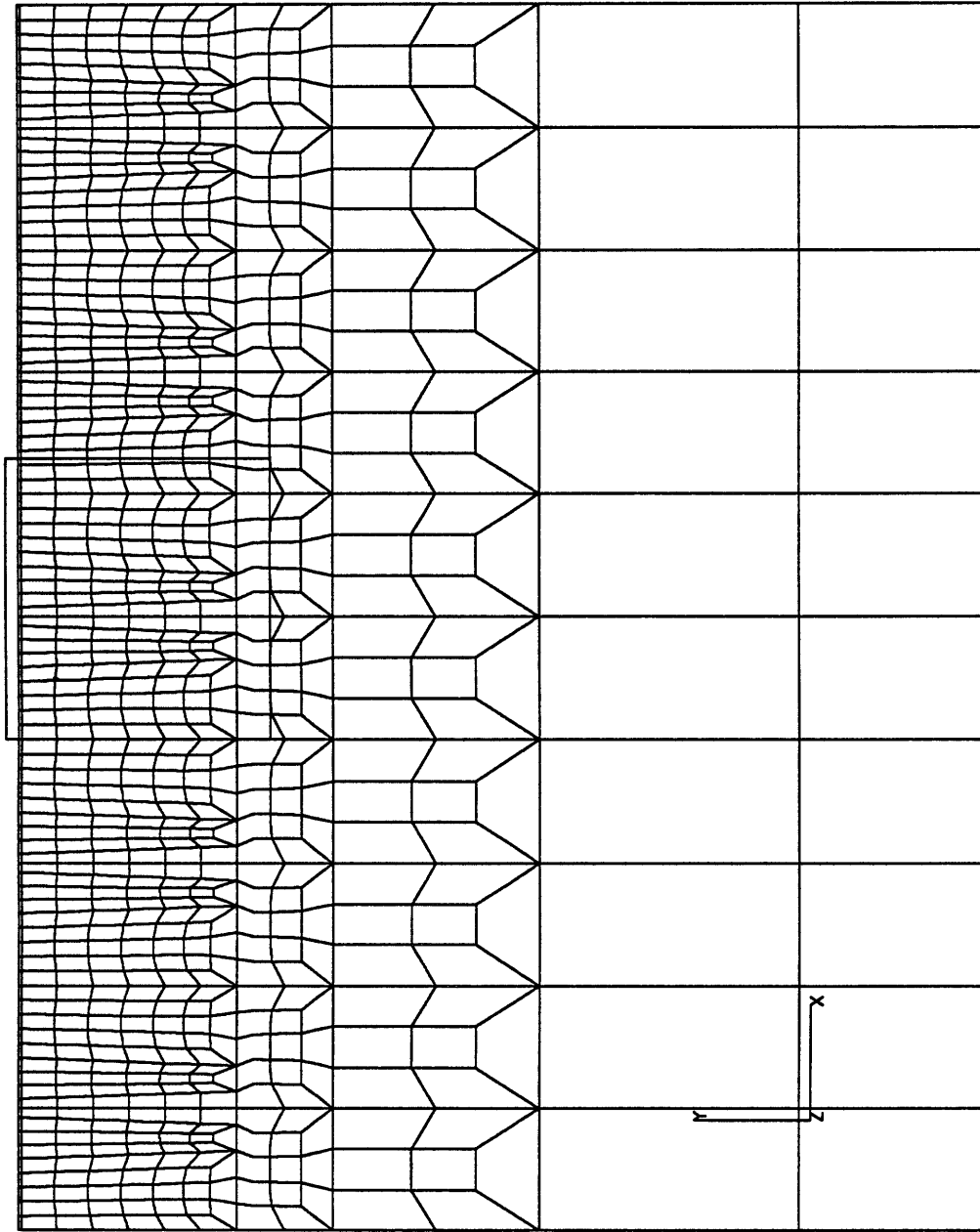
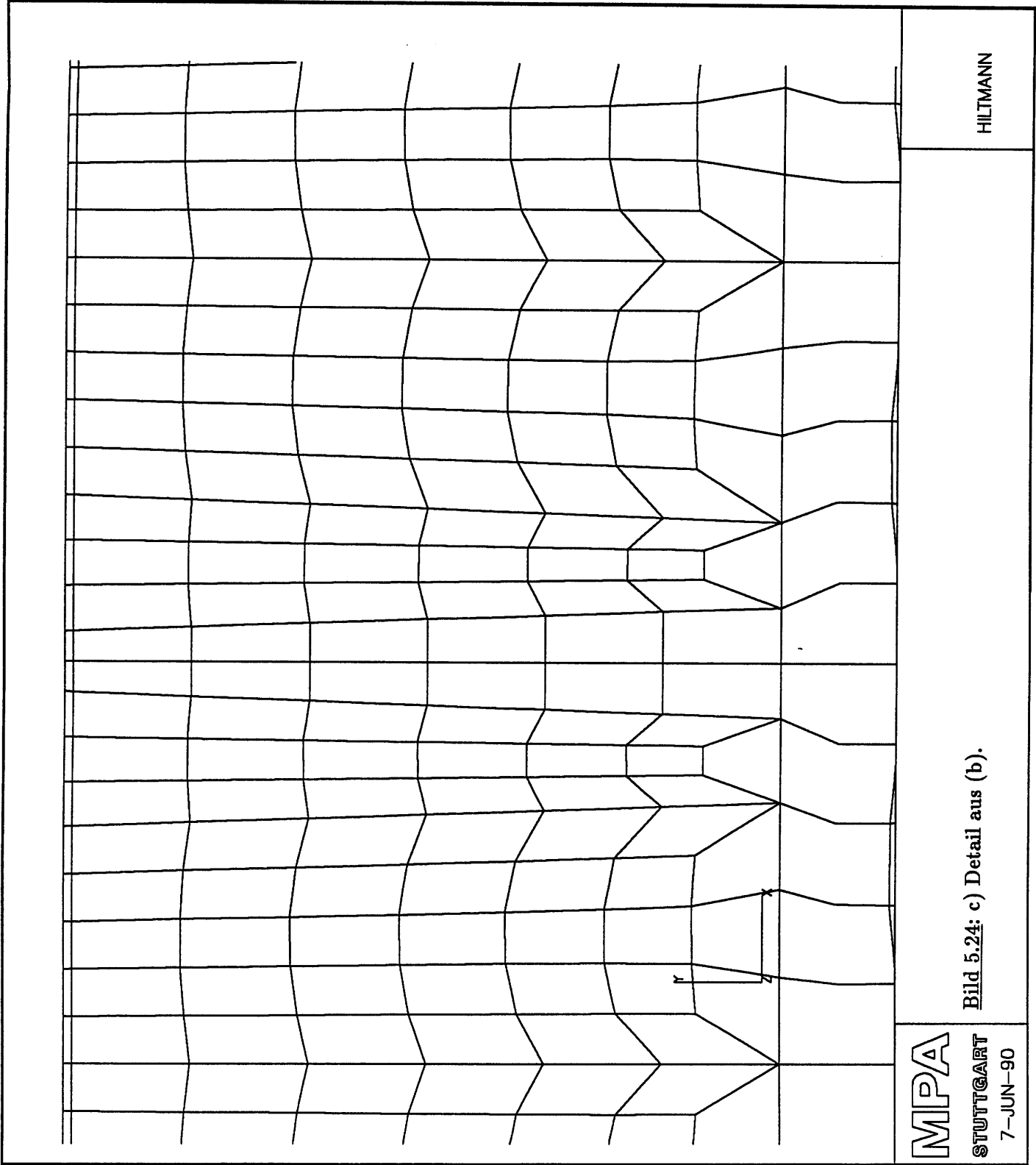


Bild 5.24: b) FE-Modell eines Waferabschnitts mit gefüllten Gräben und Nitridfilm (Bereich an der Oberfläche).

MPA
STUTTGART
7-JUN-90

HILTMANN



HILTMANN

Bild 5.24: c) Detail aus (b).

MPA
STUTTGART
 7-JUN-90

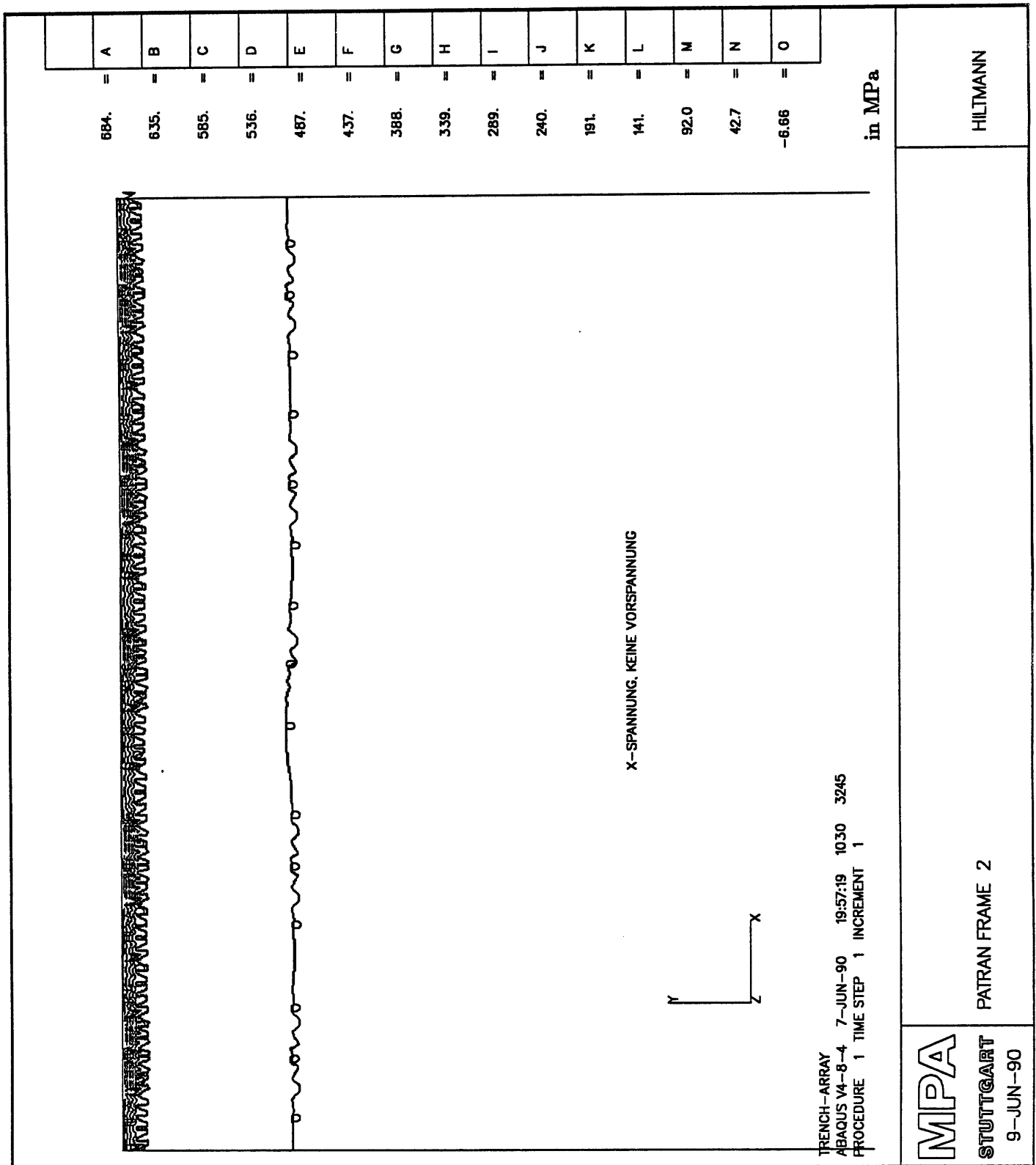
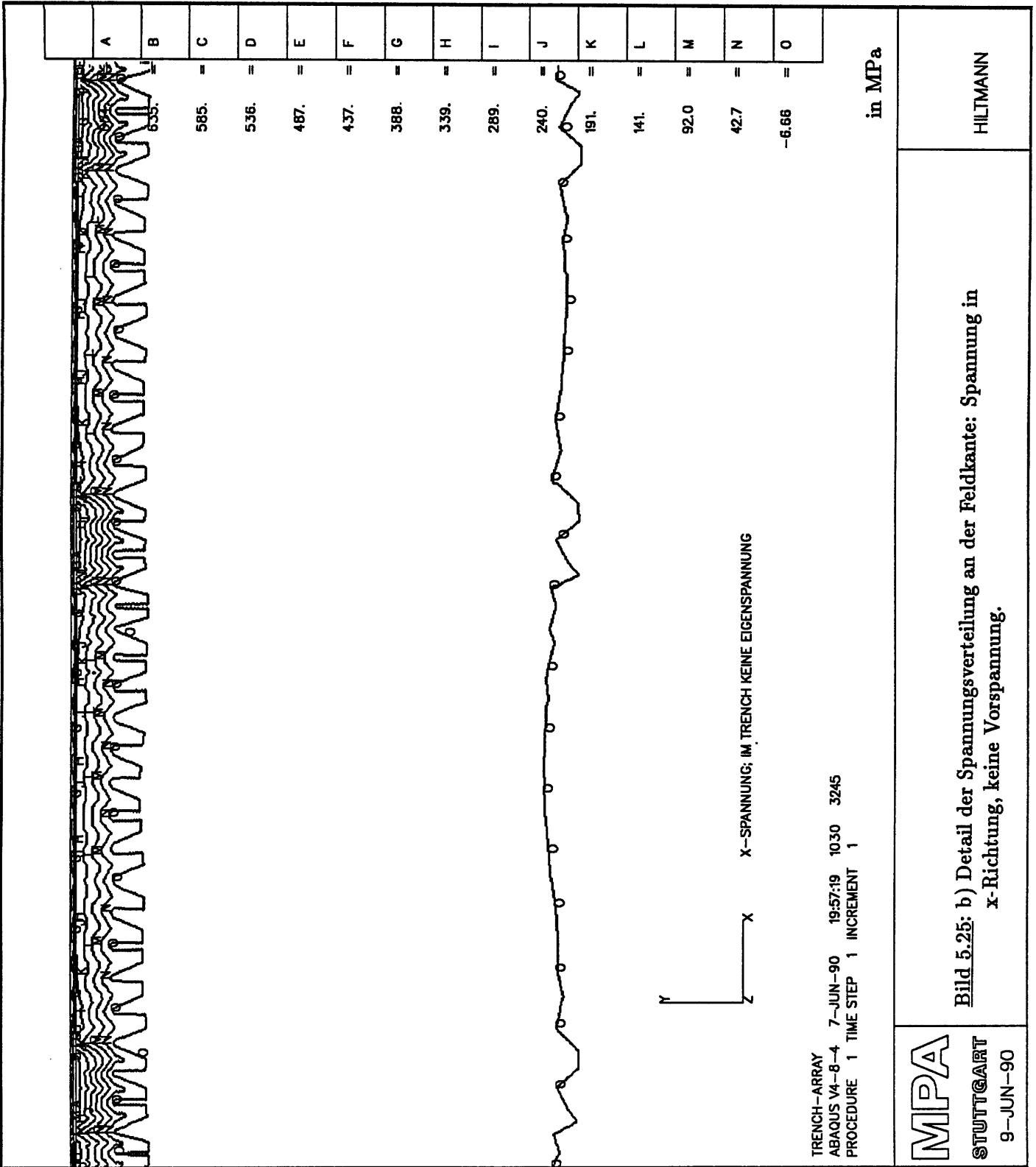


Bild 5.25: a) Abkühlung $1000^{\circ}\text{C} \rightarrow 25^{\circ}\text{C}$, Polysilizium nicht vorgespannt; Spannungsverteilung in x-Richtung. Der Spannungsverlauf ist nahezu homogen. Durch den gegenüber dem Substratmaterial geringeren thermischen Ausdehnungskoeffizienten von polykristallinem Silizium wird die zum Ausgleich der Filmspannung auftretende Druckzone von der Oberfläche in die Trenchzone hinein verlagert.



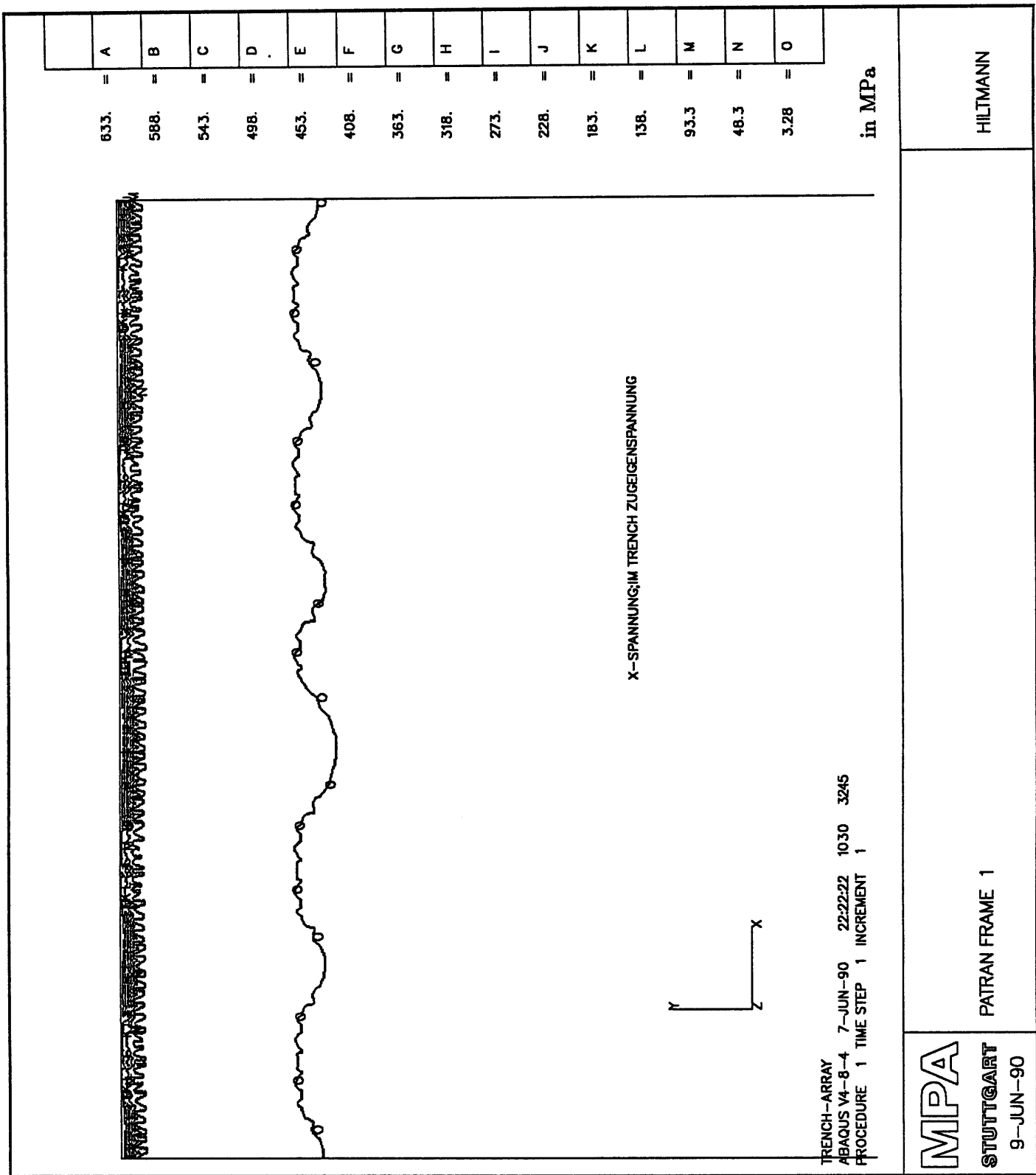


Bild 5.26: a) Abkühlung $1000^{\circ}\text{C} \rightarrow 25^{\circ}\text{C}$, Vorspannung $+300\text{MPa}$; Spannungsverteilung in x-Richtung. Durch die hohe innere Zugspannung kann sich kein oberflächennaher Druckbereich mehr ausbilden. Der leichte Zug in der Trenchzone dringt im Feld zwischen zwei Trenches sinusförmig in das Substrat hinein vor. Zwischen Feldgrenzen ist diese Zone zwar ausgeprägter, jedoch ist wegen der geringen Spannung die Bildung von Versetzungen unwahrscheinlich.

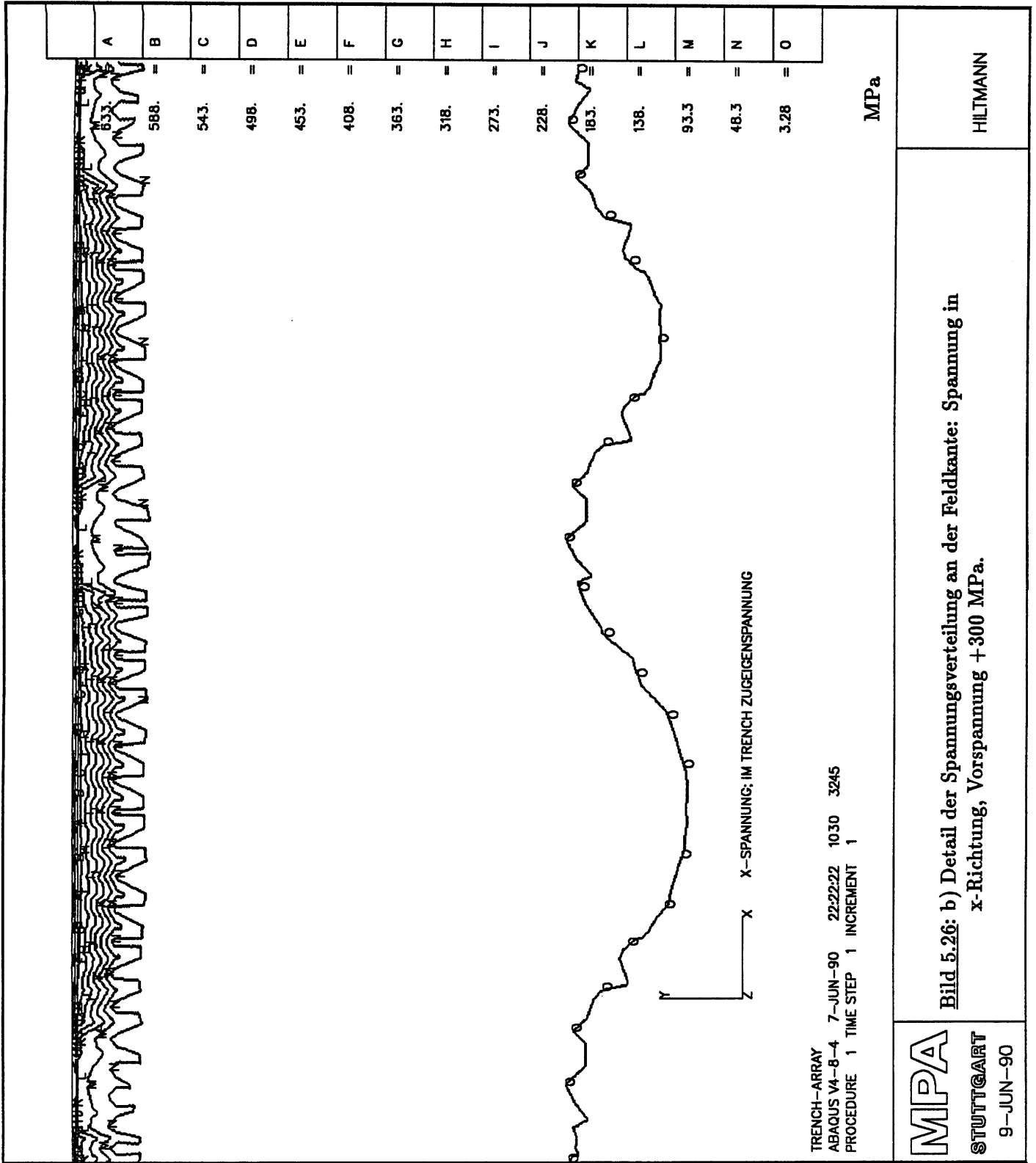


Bild 5.26: b) Detail der Spannungsverteilung an der Feldkante: Spannung in x-Richtung, Vorspannung +300 MPa.

MPA
STUTTGART
 9-JUN-90

HILTMANN

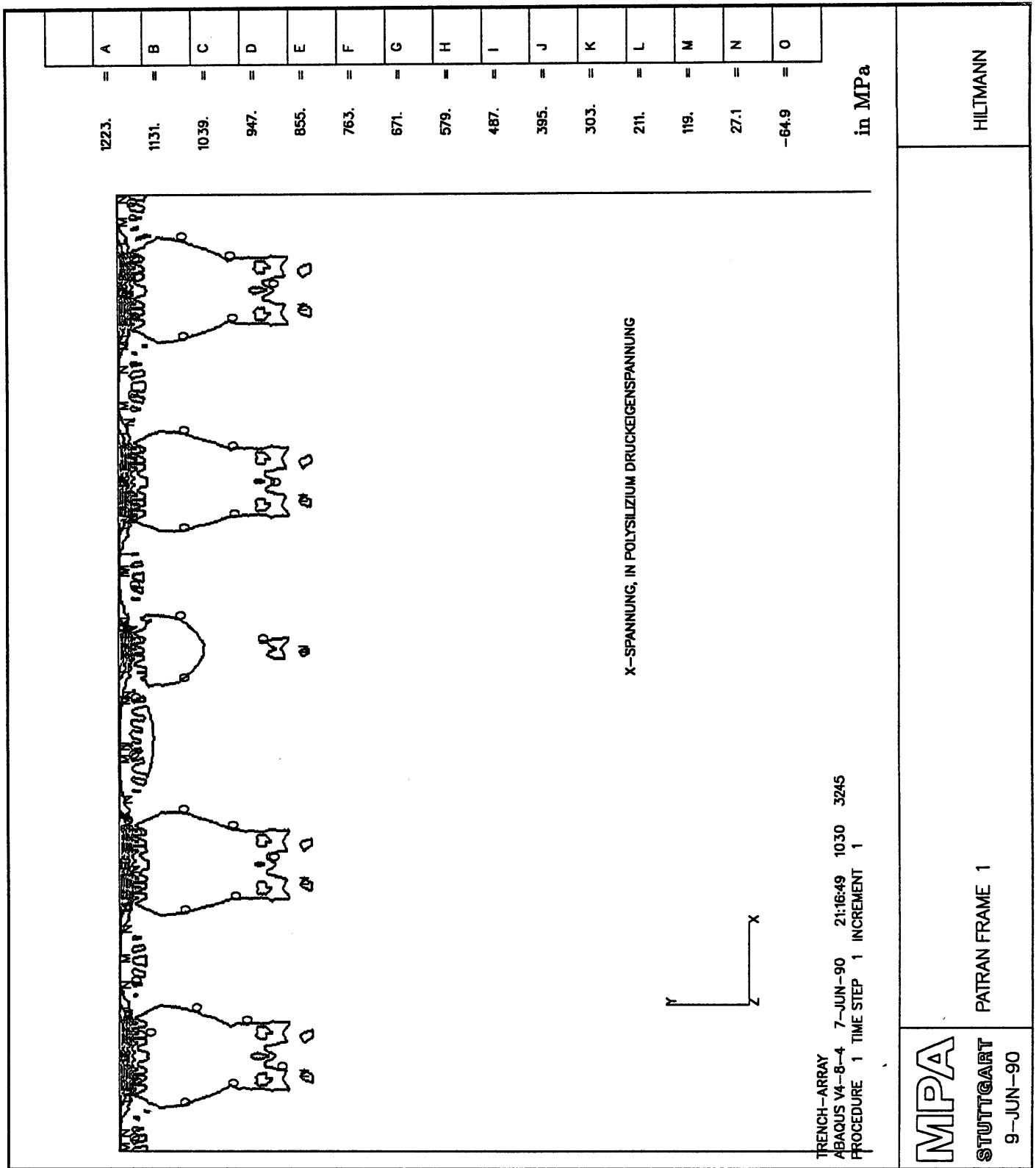
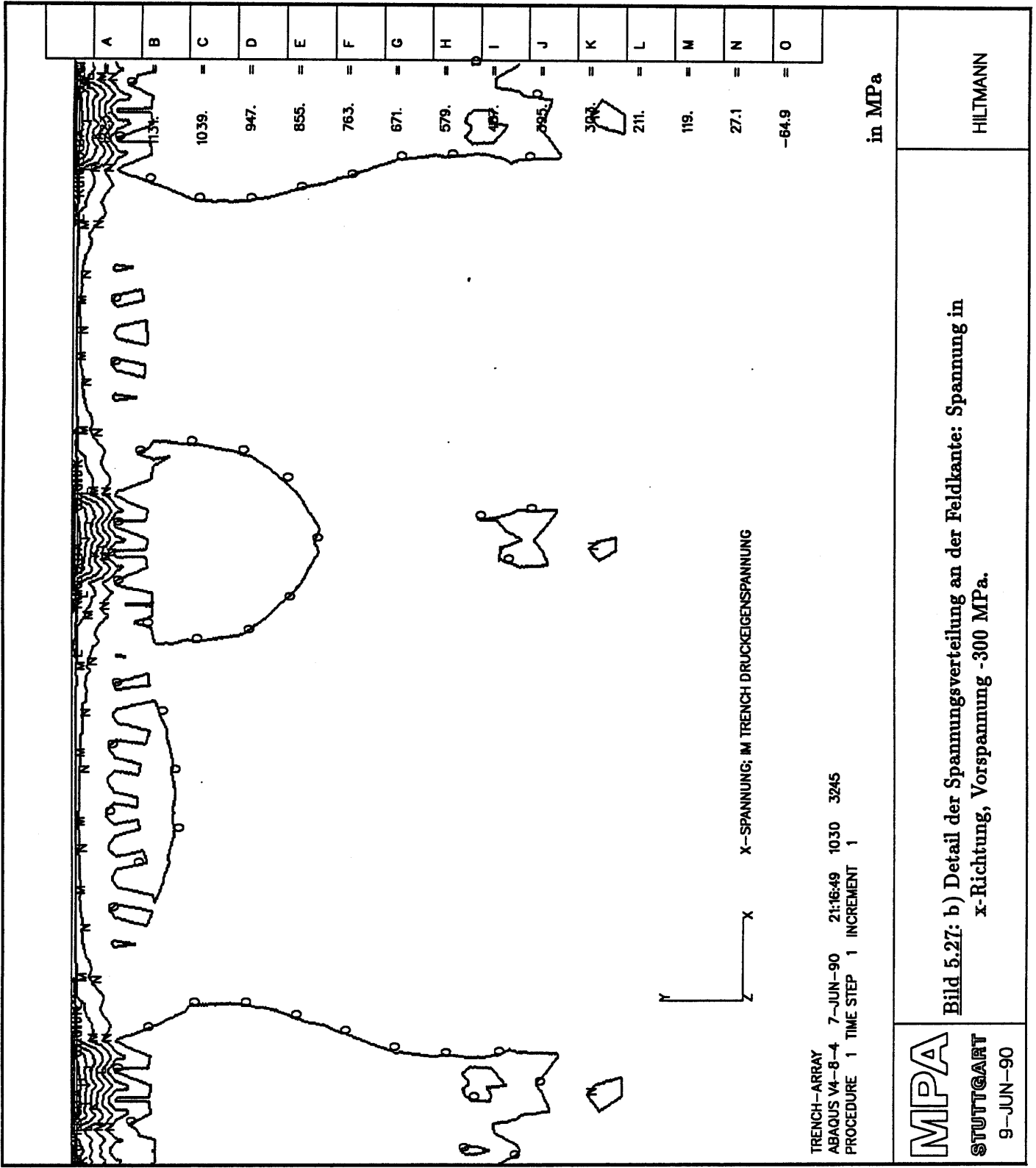


Bild 5.27: a) Abkühlung $1000^{\circ}\text{C} \rightarrow 25^{\circ}\text{C}$, Vorspannung -300MPa ; Spannungsverteilung in x-Richtung. Druckeigenspannungen im Füllmaterial entlasten die Waferoberfläche und führen statt dessen in ca. $1\mu\text{m}$ Tiefe zu inselförmigen Zugspannungsbereichen. Zwischen zwei Feldern wachsen diese, während die Spannung an der Oberfläche sinkt. Dieser Effekt könnte die Versetzungsbildung an Feldgrenzen begünstigen.

MPA
 STUTTGART
 9-JUN-90

PATRAN FRAME 1

HILTMANN



MPA
STUTTGART
 9-JUN-90

Bild 5.27: b) Detail der Spannungsverteilung an der Feldkante: Spannung in x-Richtung, Vorspannung -300 MPa.

HILTMANN

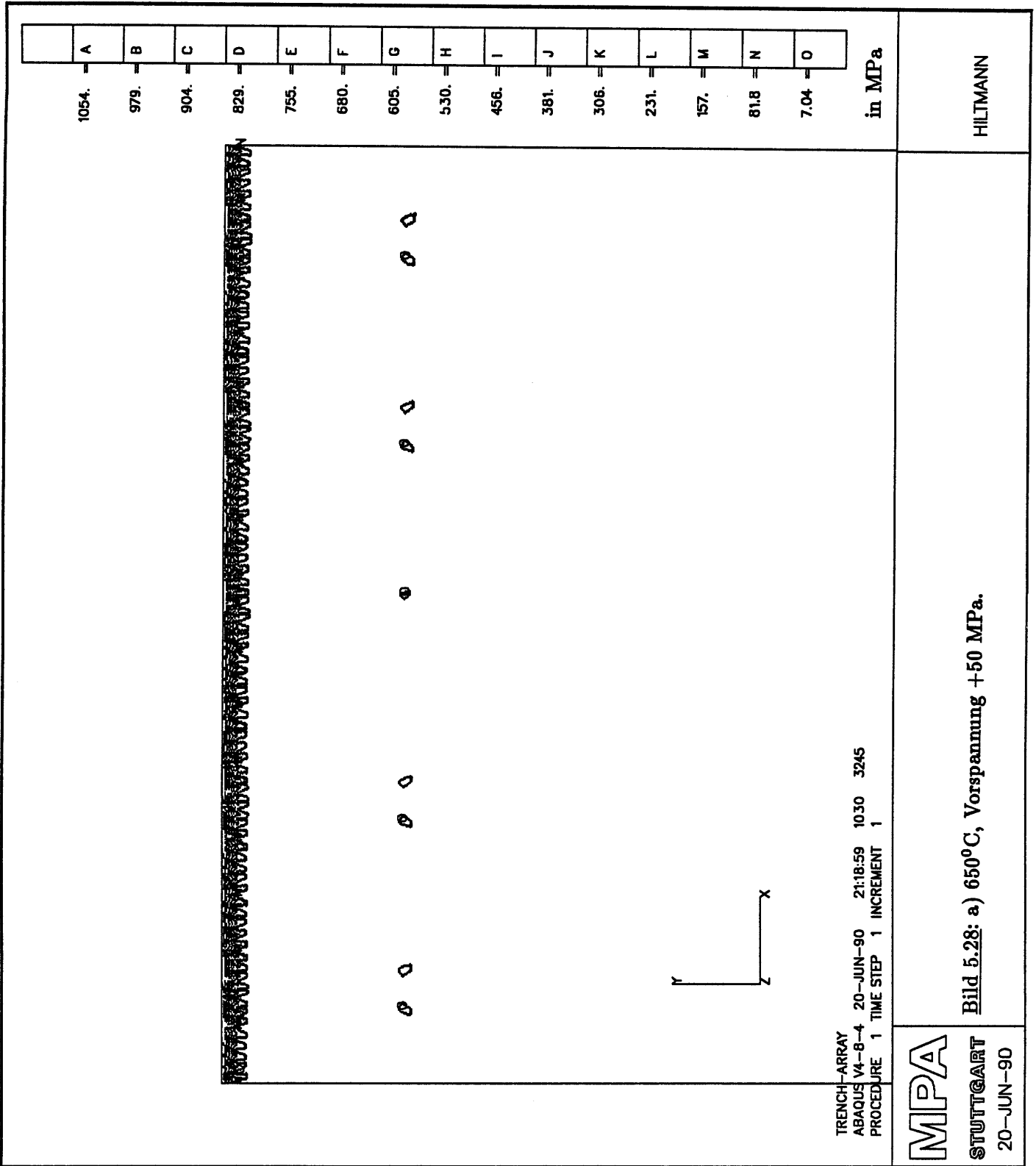
5.4.2 Zweite Rechnung

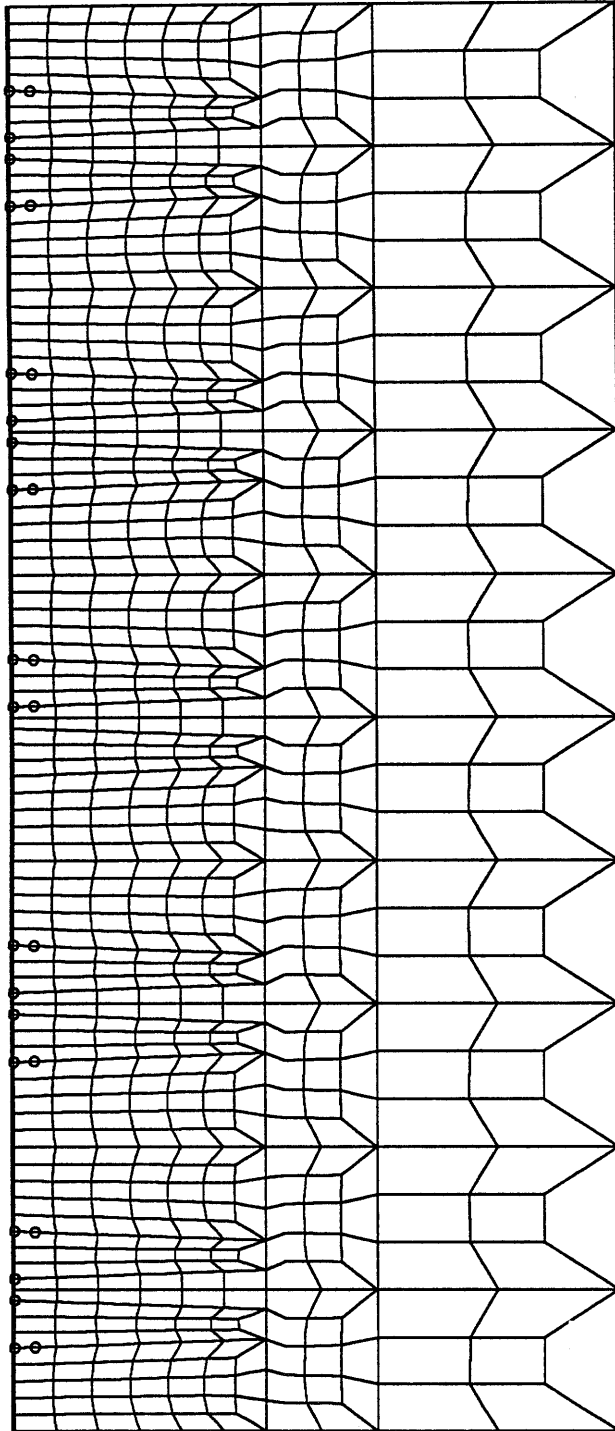
In der vorausgegangenen Rechnung wurde, da die Spannungsverteilung nur qualitativ betrachtet wurde, und um die Effekte deutlicher zu machen, eine hohe Vorspannung von $\sigma_{PS} = \pm 300$ MPa eingesetzt. Es stellt sich jedoch die Frage, ob hier mit beliebigen Spannungswerten gerechnet werden darf, da die resultierende Verteilung vor allem ein Produkt der Wechselwirkung von Nitridfilm und Polysilizium ist.

Aus den Erfahrungen mit den Ergebnissen des folgenden Abschnitts (5.5) heraus wurde eine neue Rechnung durchgeführt, als Vorspannung $\sigma_{PS} = \pm 50$ MPa eingesetzt und die erhaltenen Spannungen mit der Elastizitätsgrenze bei 650°C verglichen. Diese Temperatur wurde als wahrscheinliche untere Verformungstemperatur gewählt, da hier auftretende Versetzungen nicht mehr ausheilen können. Die Spannungsverläufe und die errechneten maximalen Schubspannungen in $\langle 110 \rangle$ -Richtung sind in den Bildern 5.28 bis 5.29 dargestellt.

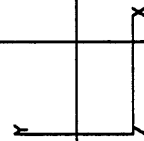
Wie oben (5.4.1) bildet sich unter Zugspannung kein oberflächennaher Druckbereich mehr aus; nach dem Gradienten von ca. $1000 \text{ MPa}/\mu\text{m}$ an der Oberfläche ist der Kristall entlastet, und nur im Trenchgrund finden sich noch kleine Inseln von Zugspannung. Die errechneten Oktaederspannungen erreichen nirgendwo die Streckgrenze.

Die hier angenommene Druckeigenspannung von -50 MPa genügt nicht, um die oben gefundenen Zugbereiche zwischen Feldrändern zu erzeugen. Im oberen Abschnitt der Trenchränder kommt es zwar zum Fließen, jedoch an den Arrayrändern weniger als im Innern. Falls also eine Druckeigenspannung des Füllmaterials für Versetzungen an Feldgrenzen verantwortlich sein sollte, so müssen Spannung oder Feldabstand größer sein als in dieser Rechnung angenommen.





POLYSILIZIUM: -50 MPA: ORTE HOECHSTER OKTAEDERSpannung



MPA
STUTTGART
 20-JUN-90

Bild 5.28: b) Orte höchster Schubspannung in $\langle 110 \rangle$ -Richtung. Diese maximalen Spannungen liegen zwischen 30 und 40 MPa ($\tau_{1y} = 55$ MPa).

HILTMANN

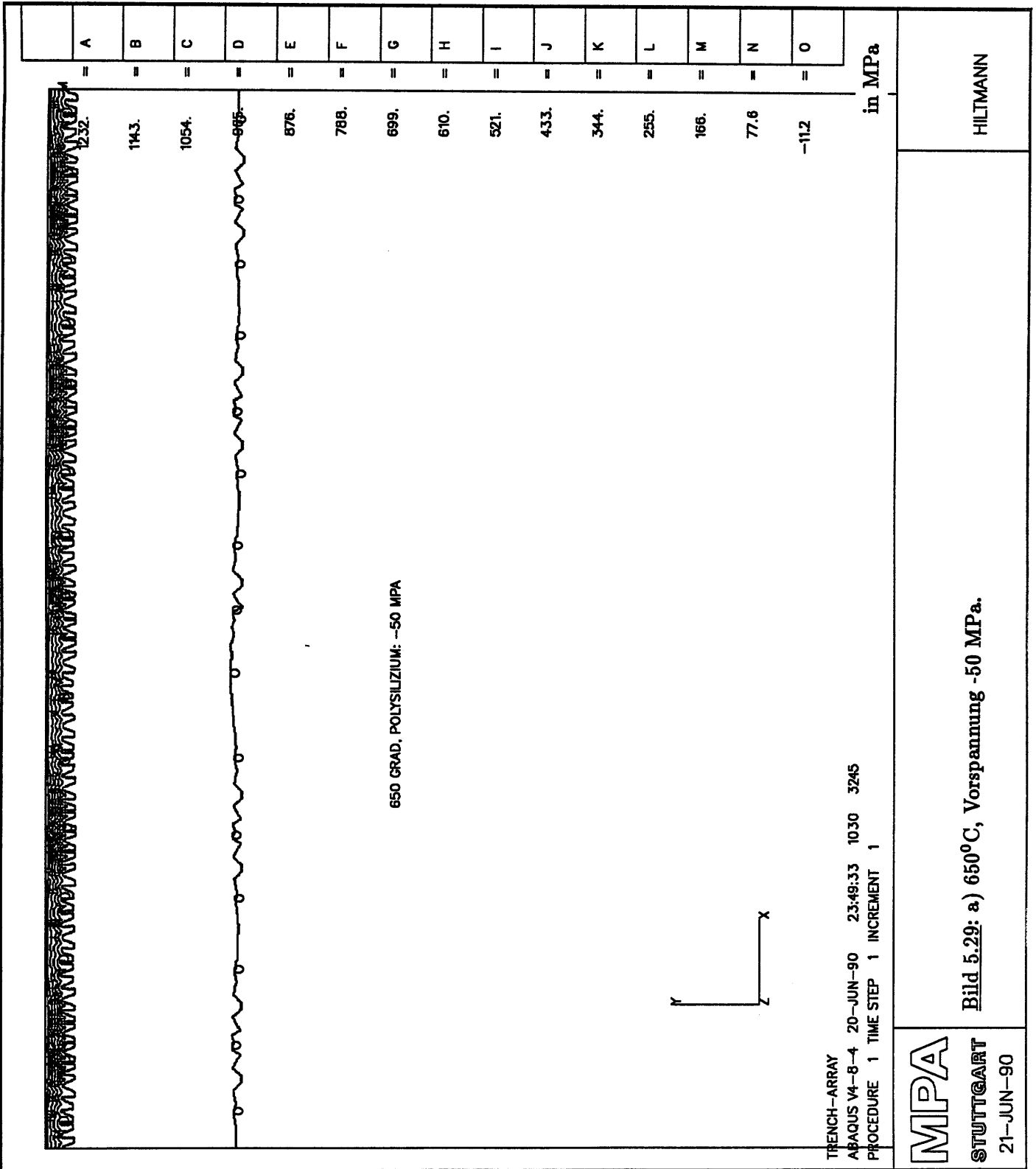


Bild 5.29: a) 650°C, Vorspannung -50 MPa.

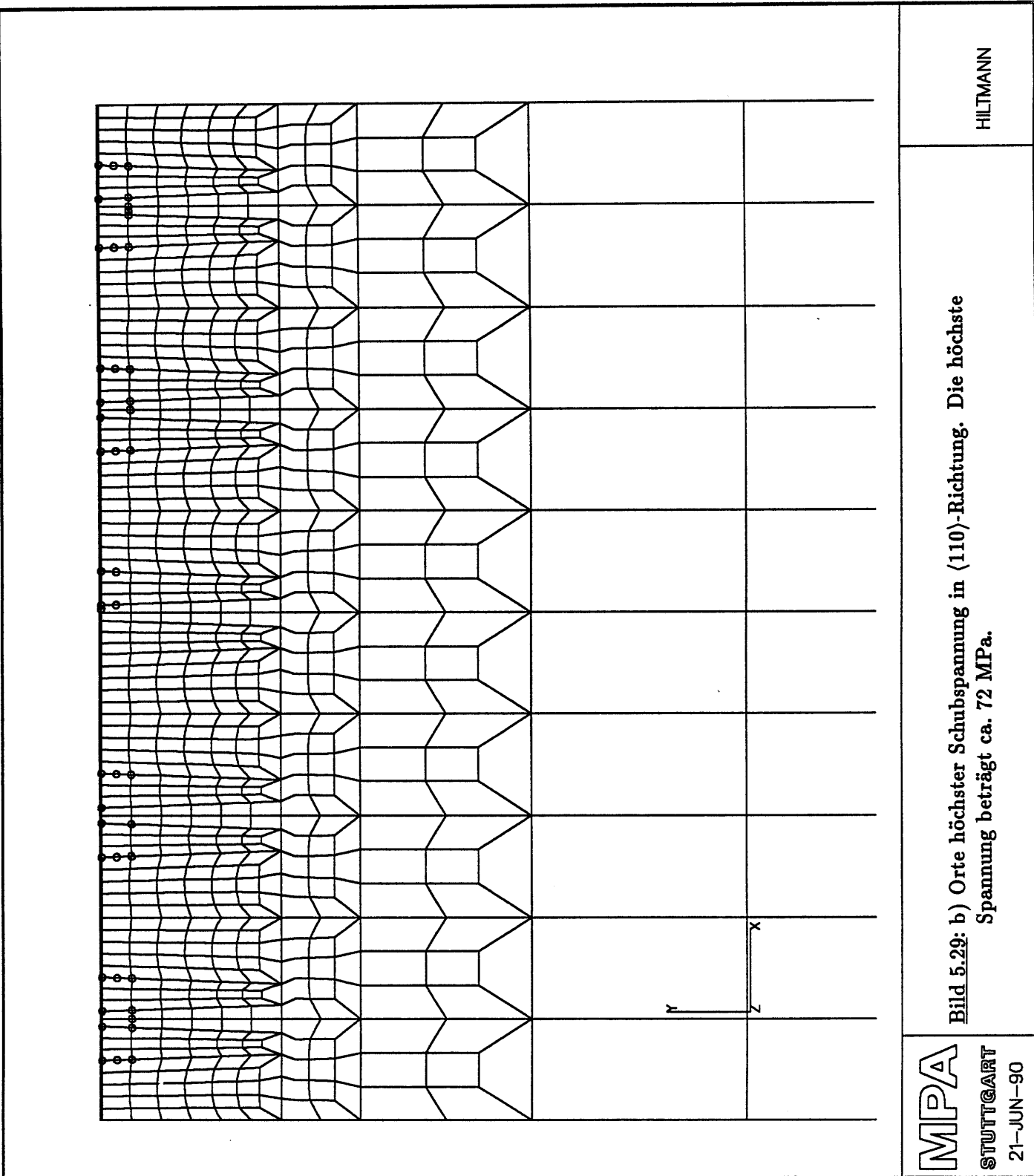


Bild 5.29: b) Orte höchster Schubspannung in (110)-Richtung. Die höchste Spannung beträgt ca. 72 MPa.

HILTMANN

MPA
STUTTGART
 21-JUN-90

5.5 Trenchstruktur mit SROX

Als letzte Untersuchung in dieser Arbeit wurde die Spannungsverteilung in einem späteren Prozeßschritt, in dem die Hälfte des Trenches mit halbversenktem Oxid (Semi-Recessed Oxide, SROX) bedeckt ist, untersucht. Bild 5.30 gibt den vereinfachten Aufbau dieser

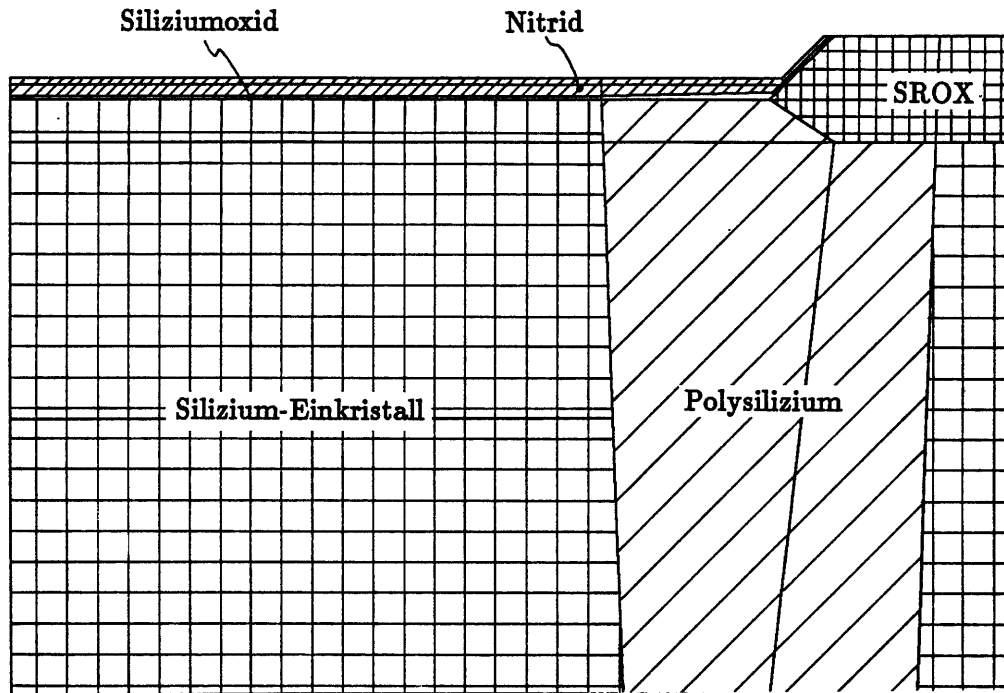


Bild 5.30: Geometrisches Modell der Trenchumgebung nach Erzeugen des halbversenkten Oxids

Struktur wieder.

5.5.1 Rechnung

Der verwendete Abaqus-Eingabefile ist in Bild 5.31 abgekürzt wiedergegeben. Beobachtungen in diesem Bearbeitungsstadium hatten gezeigt, daß in verschiedenen im Bild markierten Zonen der Trenchumgebung Versetzungen auftreten. Wenn auch schon (S.12) erwähnt wurde, daß Versetzungen nicht immer die Folge von Spannungskonzentrationen sind, sollte doch nach solchen gesucht und möglichst ein Zusammenhang mit der Strukturgeometrie gefunden werden. Bei der Simulation des Ätzprozesses hatte sich bereits der starke Einfluß von Materialeigenspannungen gezeigt. Hier sind nun neben dem Siliziumkristall vier Materialien zu berücksichtigen: Der Nitridfilm, das darunterliegende CVD-Oxid, Polysilizium und das thermische Oxid. Während für die Nitridschicht eine Vorspannung von 1000 MPa aus der Literatur feststand, wurde das CVD-Oxid nicht vorbelastet und zur Berücksichtigung des unbekanntenen Spannungszustandes der anderen beiden folgende Rechnungen durchgeführt:

1. SROX: $\sigma_v = 0$, Polysilizium: $\sigma_v = 0$
2. SROX: $\sigma_v = -200$ MPa, Polysilizium: $\sigma_v = 0$
3. SROX: $\sigma_v = 0$, Polysilizium: $\sigma_v = -50$ MPa
4. SROX: $\sigma_v = 0$, Polysilizium: $\sigma_v = +50$ MPa

```

*HEADING
KLEIN
** NEUTRAL FILE GENERATED ON: 6-FEB-90 15:57:15 PATABA
**
** NODE DEFINITIONS
**
**DATA CHECK
**WAVEFRONT MINIMIZATION,SUPPRESS
**PREPRINT,ECHO-NO,HISTORY-NO
**
**NODE,NSET-ALL
1, 0.782558143E+00, -0.200000048E+00, 0.000000000E+00
2, 0.114999998E+01, -0.200000048E+00, 0.000000000E+00
3, 0.966279089E+00, -0.200000048E+00, 0.000000000E+00
**
** ELEMENT DEFINITIONS
**
**ELEMENT, TYPE-CPS8 , ELSET-PID1
1, 78, 76, 81, 83, 77, 79, 82, 80
2, 73, 71, 76, 78, 72, 74, 77, 75
3, 68, 66, 71, 73, 67, 69, 72, 70
**ELEMENT, TYPE-CPS8 , ELSET-PID2
127, 832, 830, 520, 522, 831, 837, 521, 838
128, 834, 832, 522, 515, 833, 838, 523, 839
148, 828, 822, 834, 515, 824, 829, 839, 836
**ELEMENT, TYPE-CPS8 , ELSET-PID3
412, 584, 582, 1107, 1128, 583, 590, 1118, 591
416, 572, 570, 582, 584, 571, 578, 583, 579
417, 536, 420, 570, 572, 535, 566, 571, 567
**ELEMENT, TYPE-CPS8 , ELSET-PID4
31, 241, 239, 298, 300, 240, 274, 299, 275
32, 243, 241, 300, 302, 242, 275, 301, 276
33, 239, 237, 296, 298, 238, 273, 297, 274
**ELEMENT, TYPE-CPS8 , ELSET-PID5
14, 143, 145, 150, 148, 144, 147, 149, 146
15, 148, 150, 155, 153, 149, 152, 154, 151
**
**ELEMENT PROPERTIES
**
**
**SOLID SECTION, ELSET-PID1, MATERIAL-SILEK
**MATERIAL, NAME-SILEK
**CONDUCTIVITY
140.E-6 27.
74.E-6 227.
31.E-6 727.
24.E-6 1077.
**DENSITY
2.329E-15
**ELASTIC
1.3E5 0.27 0.
1.2E5 0.26 600.
**EXPANSION,ZERO-650.
2.6E-06 25.
3.1E-06 100.
3.4E-06 200.
3.7E-06 300.
3.9E-06 400.
4.1E-06 500.
4.3E-06 600.
4.4E-06 700.
4.5E-06 800.
4.6E-06 900.
**SPECIFIC HEAT
688. 0.
978. 1100.
**SOLID SECTION, ELSET-PID2, MATERIAL-PSILI
**MATERIAL, NAME-PSILI
**ELASTIC
1.5E5 0.22
**EXPANSION,ZERO-650.
2.81E-06
**SOLID SECTION, ELSET-PID3, MATERIAL-SROX
**MATERIAL, NAME-SROX
**CONDUCTIVITY
1.38E-6
**DENSITY
2.24E-15
**ELASTIC
.73E5, 0.17, 25.
.74E5, 0.17, 100.
.75E5, 0.17, 200.
.76E5, 0.17, 300.
.77E5, 0.17, 400.
.78E5, 0.18, 500.
.79E5, 0.19, 600.
.80E5, 0.19, 700.
.81E5, 0.20, 800.
.82E5, 0.20, 900.
.83E5, 0.20, 1000.
**EXPANSION,ZERO-650.
.609E-6 25.
.609E-6 100.
.595E-6 200.
.536E-6 300.
.480E-6 400.
.392E-6 500.
.392E-6 700.
.371E-6 800.
**CREEP, LAW-TIME
1.00E-30,1.,0,400.
3.13E-29,1.,0,500.
3.33E-24,1.,0,600.
5.26E-22,1.,0,700.
2.17E-19,1.,0,800.
3.13E-17,1.,0,900.
2.08E-15,1.,0,1000.
7.69E-14,1.,0,1100.
**SOLID SECTION, ELSET-PID4, MATERIAL-PADOX
**MATERIAL, NAME-PADOX
**CONDUCTIVITY
1.38E-6
**DENSITY
2.24E-15
**ELASTIC
.73E5, 0.17, 25.
.74E5, 0.17, 100.
.75E5, 0.17, 200.
.76E5, 0.17, 300.
.77E5, 0.17, 400.
.78E5, 0.18, 500.
.79E5, 0.19, 600.
.80E5, 0.19, 700.
.81E5, 0.20, 800.
.82E5, 0.20, 900.
.83E5, 0.20, 1000.
**EXPANSION,ZERO-650.
.609E-6 25.
.609E-6 100.
.595E-6 200.
.536E-6 300.
.480E-6 400.
.392E-6 500.
.392E-6 700.
.371E-6 800.
**CREEP, LAW-TIME
1.00E-30,1.,0,400.
3.13E-29,1.,0,500.
3.33E-24,1.,0,600.
5.26E-22,1.,0,700.
2.17E-19,1.,0,800.
3.13E-17,1.,0,900.
2.08E-15,1.,0,1000.
7.69E-14,1.,0,1100.

```

Bild 5.31: Eingabefile für die Strukturberechnung (verkürzt).

```

*SOLID SECTION, ELSET=PID5, MATERIAL=NITRID
*MATERIAL, NAME=NITRID
*ELASTIC
3.9E5      0.3
*EXPANSION,ZERO=650.
0.8E-06,25.
1.9E-06,100.
2.8E-06,200.
3.3E-06,300.
3.6E-06,400.
3.8E-06,500.
3.9E-06,600.
4.0E-06,800.
**
*BOUNDARY
      6, 1,, 0.0
      9, 1,, 0.0
     11, 1,, 0.0
*MPC
12  2   854 855
12  8   854 855
12 10   854 855
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL,1000.
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=STRESS
PID5,1000.
**PID1,-200.
PID2,-50.,-50.
** LOAD CASE      1
**
*STEP
LOAD CASE      1
*STATIC,PTOL=1.
1.,1.
**
*EL FILE, POSITION=AVERAGED AT NODES
S
*EL PRINT, POSITION=AVERAGED AT NODES
S
*END STEP
**
** LOAD CASE      2
**
*STEP
LOAD CASE      2
*VISCO,PTOL=1.
2500.,7500.
*TEMPERATURE
ALL,650.
**
*EL FILE, POSITION=AVERAGED AT NODES
S
*EL PRINT, POSITION=AVERAGED AT NODES
S
*END STEP
**

```

Bild 5.31: (Fortsetzung)

Ursprünglich war auch hier als Richtwert für die Eigenspannung wie in den vorausgegangenen Modellen ± 300 MPa eingesetzt worden. Dieser Wert führte jedoch nicht nur bei 1000°C , sondern auch bei tiefen Temperaturen zu starkem Fließen und ist möglicherweise unrealistisch. Angesichts der Spannungen, die an dotiertem Material gemessen wurden, erschien die Größenordnung von 50 MPa wahrscheinlicher.

Jede Rechnung wurde in zwei Schritten durchgeführt:

- Vorbelastung und Spannungsgleichgewicht bei $\theta = 1000^{\circ}\text{C}$.
- Abkühlung unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Oxidschichten mit ca. 3K/min.

Nach jedem Schritt wurde mit Hilfe des Programms von Bild 5.19 das Erreichen der Elastizitätsgrenze überprüft.

5.5.2 Ergebnisse

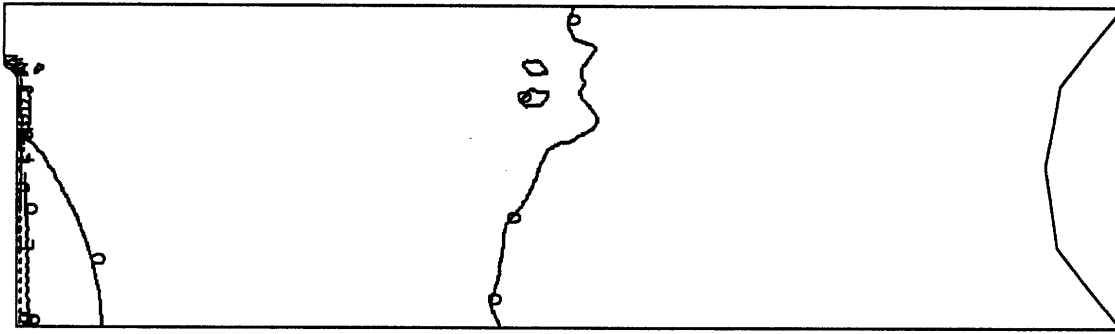
Die folgenden Bilder stellen die Ergebnisse der einzelnen Rechnungen in der oben genannten Reihenfolge dar. Besonders bemerkenswert ist, daß demnach bei $\theta = 1000^{\circ}\text{C}$ sogar ohne Vorspannung von Füllmaterial oder thermischen Oxid an der Oberfläche weitgehendes Fließen eintreten sollte. Dies ist nur durch die Unterbrechung des Nitridfilmes zu erklären (während des Ätzprozesses fand kein Fließen statt, da dieser bei niedriger Temperatur verläuft). Es ist denkbar, daß diese Versetzungen nach Erreichen des Gleichgewichtszustandes wieder ausheilen und somit nach der Abkühlung in den meisten Fällen nicht mehr nachweisbar sind. Zu beachten ist weiterhin, daß weder die auf das Oxid aufgebraachte Vorspannung von -200 MPa noch die Eigenspannung des Polysilizium-Materials von ± 50 MPa unterhalb von 650°C Fließen erzeugen oder aufrechterhalten konnten.

Die markierten Bereiche, deren Vergleichsspannung oberhalb der Streckgrenze liegt, stellen *keine Bereiche tatsächlichen Fließens* dar. Hier wurde allein elastisch gerechnet. In Wirklichkeit jedoch kann die Spannung nicht über die Streckgrenze hinaus ansteigen. Da trotz Spannungsbeschränkung Kräftegleichgewicht erreicht werden muß, stimmt der tatsächliche Fließbereich nicht genau mit dem markierten überein.

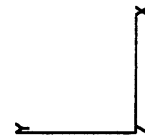
1. SROX: $\sigma_v = 0$, Polysilizium: $\sigma_v = 0$, Bild 5.32. Bei $\theta = 1000^{\circ}\text{C}$ führt die Eigenspannung des Nitridfilmes zur Konzentration hoher Spannungen ($\sigma \simeq 2000$ MPa) im Bereich des Bird's Beak. Durch die Unterbrechung des Films wird der gesamte Trenchbereich auf Biegung beansprucht. Das Füllmaterial mit höherem Elastizitätsmodul als der Siliziumkristall ($1,5 \cdot 10^5$ MPa gegenüber $1,2 \cdot 10^5$) versteift diesen Bereich. Die Fließgrenze wird bei 1000°C bis auf eine Tiefe von etwa $3 \mu\text{m}$ generell überschritten.

Diese Spannungsverteilung bleibt in der elastischen Rechnung bis 650°C mit nur wenig Änderung erhalten. Wegen der höheren Streckgrenze bei dieser Temperatur tritt kein Fließen mehr auf; die am stärksten beanspruchte Stelle des Substratkristalls ist die linke Trenchkante.

2. SROX: $\sigma_v = -200$ MPa, Polysilizium: $\sigma_v = 0$, Bild 5.33. Die Eigenspannungen von SROX und Nitridfilm wirken unter dieser Annahme in die gleiche Richtung. Das bewirkt stärkere Verformung der Trenchzone und Verminderung der Spannungen. Durch die höhere Steifigkeit des Füllmaterials wird die Fließgrenze bei 1000°C auf der dem SROX abgewandten Seite bis auf eine Tiefe von $8 \mu\text{m}$ überschritten, Teilbild (c). Während der Abkühlung auf 650°C fließt das SROX unter der anliegenden Spannung, die bis unter 80 MPa abfällt. Außer in der Grenzschicht Si-Si₃N₄ ist der Wafer spannungsfrei.



KLEIN
 ABAQUS V4-8-4 19-JUN-90 19:04:10 447 1454
 PROCEDURE 1 TIME STEP 1 INCREMENT 1



1992.	=	A
1853.	=	B
1713.	=	C
1574.	=	D
1435.	=	E
1296.	=	F
1156.	=	G
1017.	=	H
878.	=	I
738.	=	J
599.	=	K
460.	=	L
321.	=	M
181.	=	N
42.2	=	O

in MPa

Bild 5.32: a) 1000°C — Vorspannungen: Si₃N₄ stets +1 000 MPa, Polysilizium hier 0 MPa, SiO₂ hier 0 MPa.

MPA
 STUTTGART
 19-JUN-90

HILTMANN

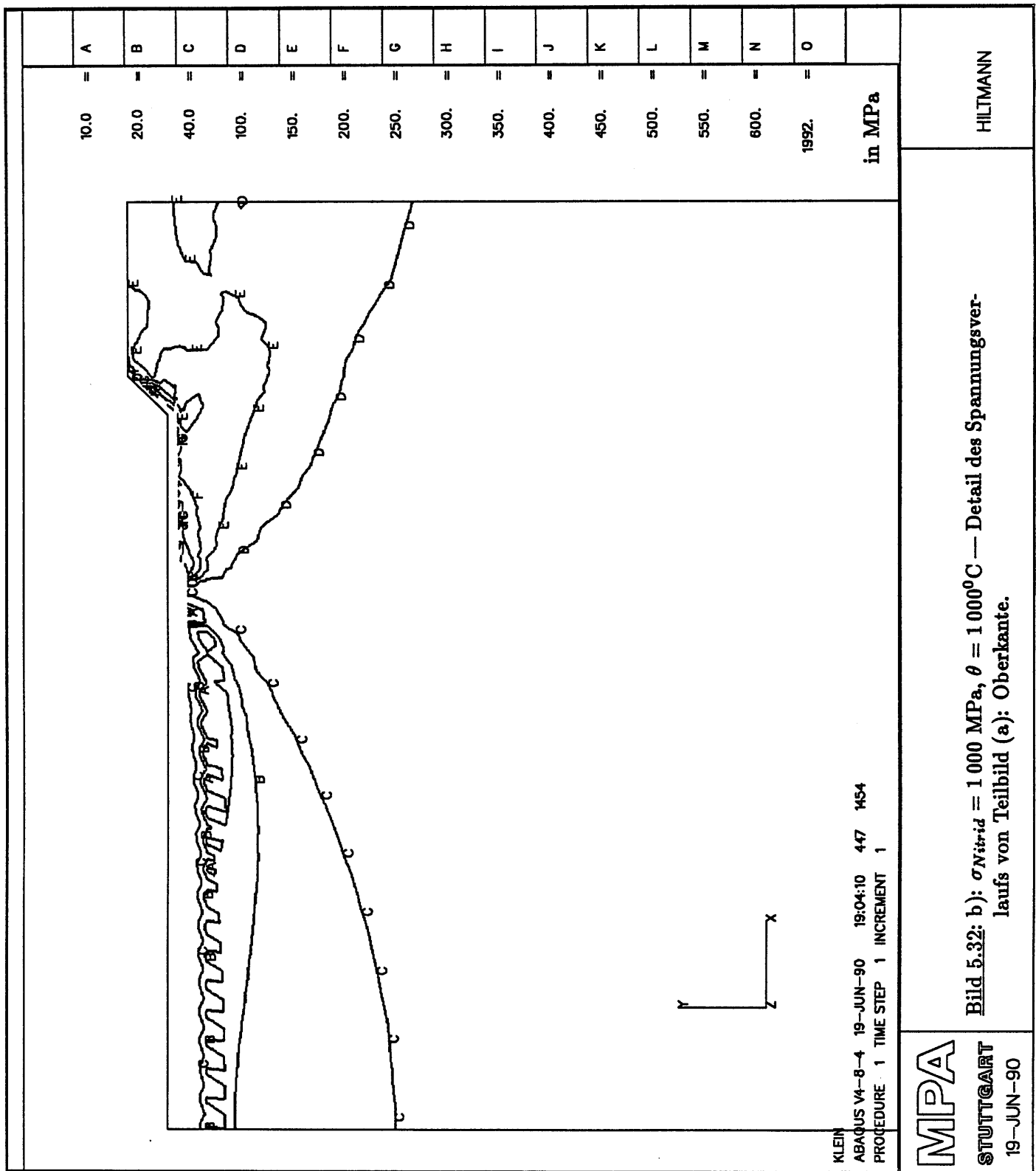


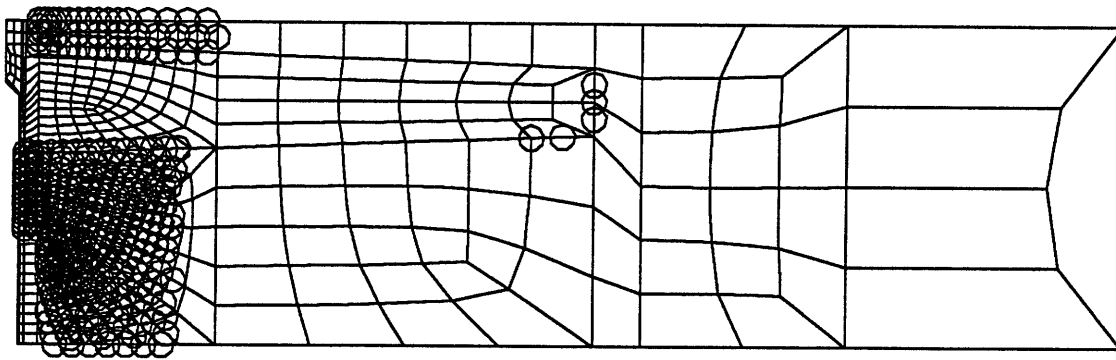
Bild 5.32: b) $\sigma_{Nitrid} = 1\,000\text{ MPa}$, $\theta = 1\,000^\circ\text{C}$ — Detail des Spannungsverlaufs von Teilbild (a): Oberkante.

MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

HILTMANN

POLYSILIZIUM: NULL; 1000 GRAD

HOECHSTE SPANNUNG

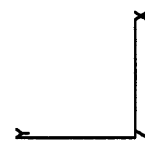
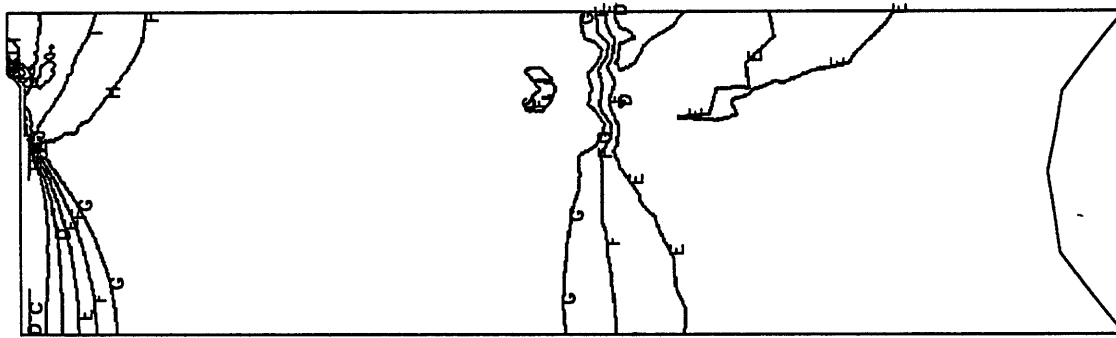


MPA

STUTTGART
19-JUN-90

Bild 5.32: c): $\sigma_{Nitrid} = 1\,000\text{ MPa}$, $\theta = 1\,000^\circ\text{C}$ — Überschreiten der Elastizitätsgrenze.

HILTMANN



KLEIN
 ABAQUS V4-8-4 19-JUN-90 19:04:10 447 1454
 PROCEDURE 21 TIME STEP 2 INCREMENT 3

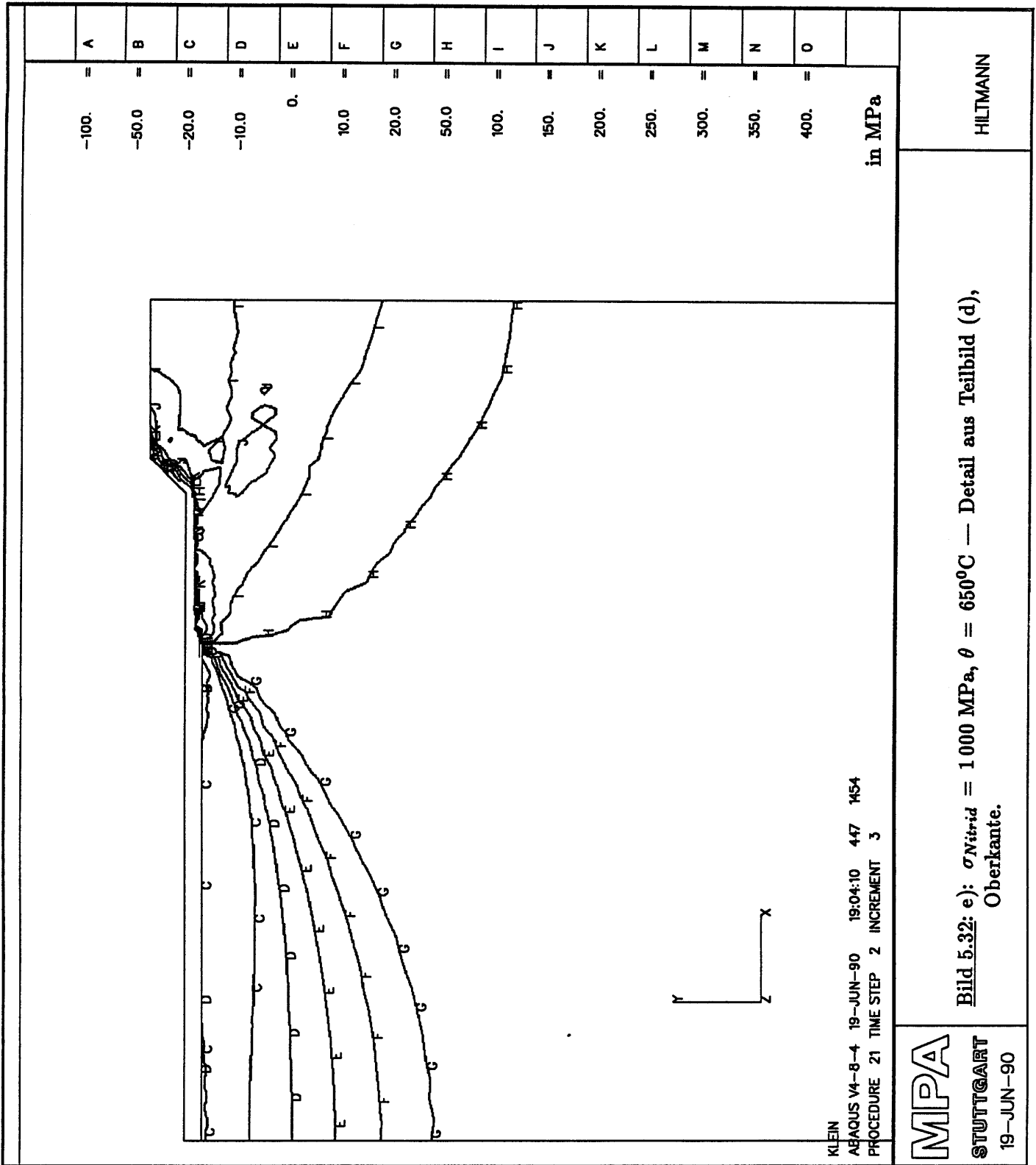
	A
-100.	=
	B
-50.0	=
	C
-20.0	=
	D
-10.0	=
	E
0.	=
	F
10.0	=
	G
20.0	=
	H
50.0	=
	I
100.	=
	J
150.	=
	K
200.	=
	L
250.	=
	M
300.	=
	N
350.	=
	O
400.	=

in MPa

MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

Bild 5.32: d) $\sigma_{Nitrid} = 1\,000\text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Trenchbereich nach visko-elastischer Abkühlung.

HILTMANN



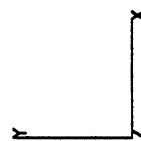
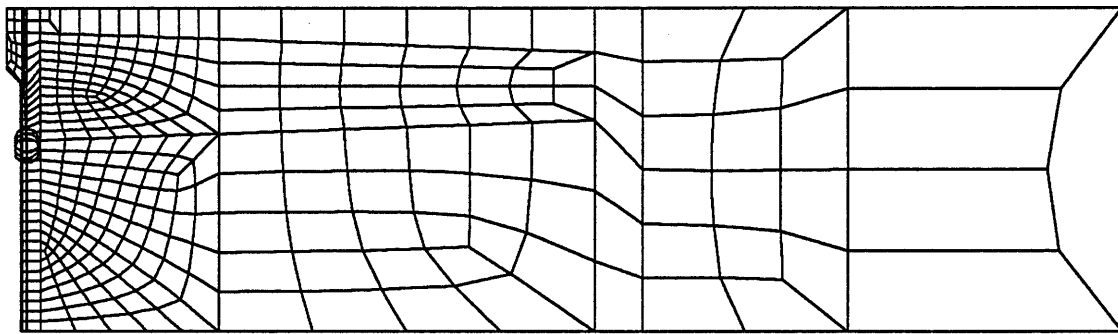
KLEIN
 ABAQUS V4-8-4 19-JUN-90 19:04:10 447 1454
 PROCEDURE 21 TIME STEP 2 INCREMENT 3

MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

Bild 5.32: e): $\sigma_{Nirrid} = 1\,000\text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Detail aus Teilbild (d), Oberkante.

HILTMANN

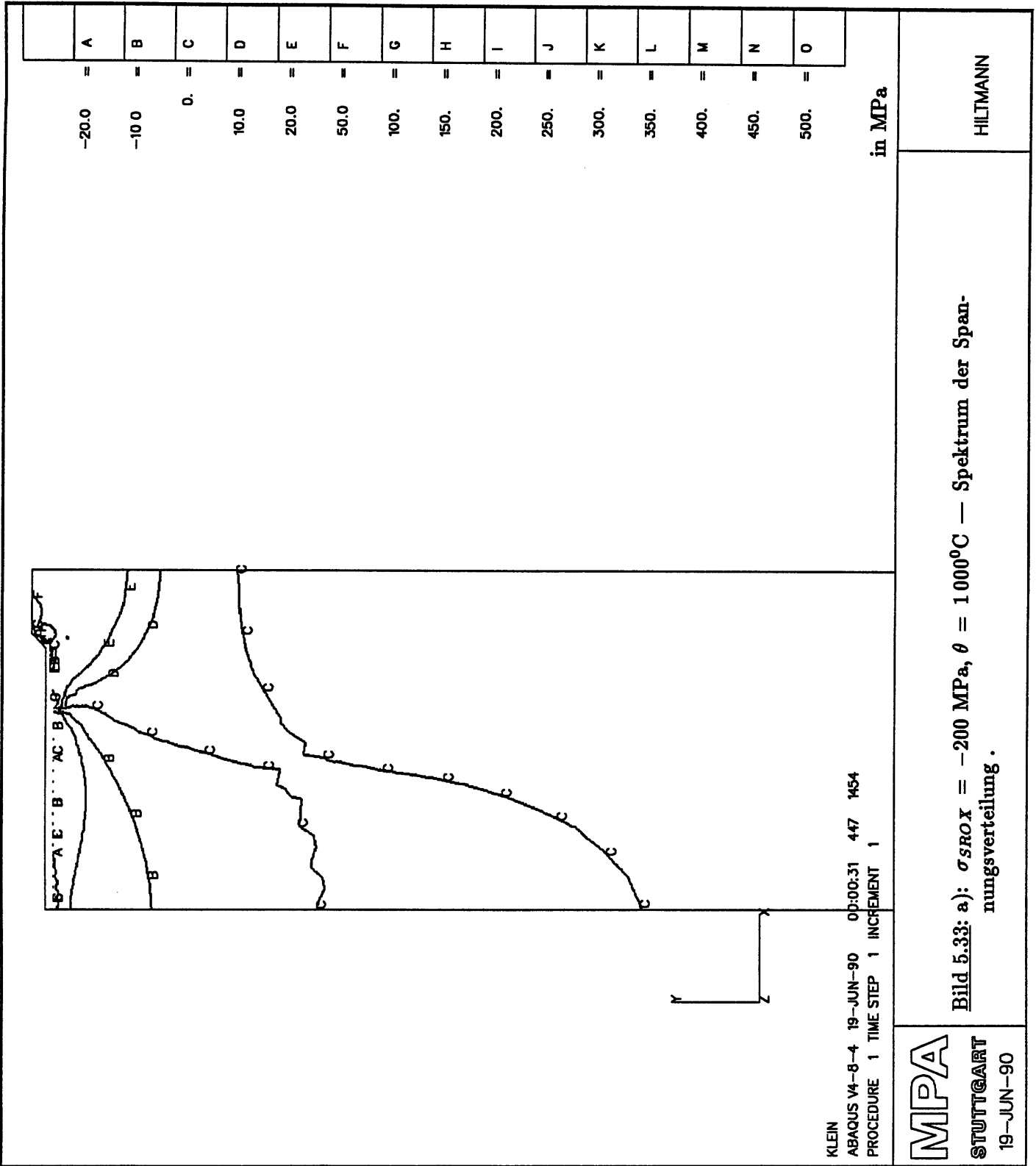
SROX: -200 MPa; FLIESSGRENZE
NICHT ERREICHT.

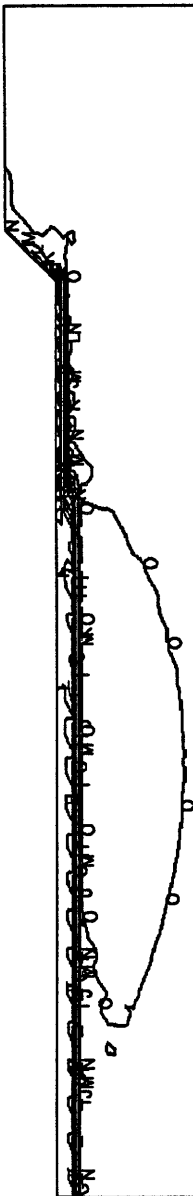


MPA
STUTTGART
19-JUN-90

Bild 5.32: f) $\sigma_{Nitrid} = 1\,000\text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Höchste Oktaederspannung, jedoch kein Fließen.

HILTMANN





KLEIN
 ABAQUS V4-8-4 19-JUN-90 00:00:31 447 1454
 PROCEDURE 1 TIME STEP 1 INCREMENT 1

1219.	=	A
1131.	=	B
1042.	=	C
953.	=	D
865.	=	E
776.	=	F
687.	=	G
599.	=	H
510.	=	I
422.	=	J
333.	=	K
244.	=	L
156.	=	M
67.0	=	N
-21.7	=	O

in MPa

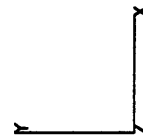
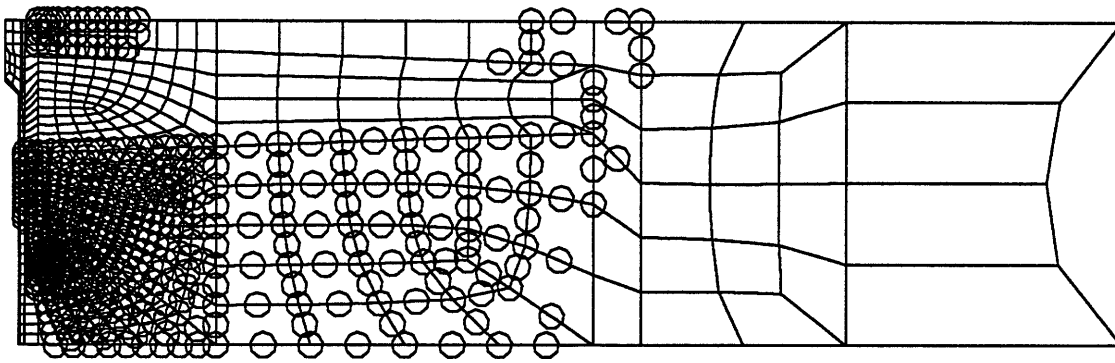
MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

Bild 5.33: b): $\sigma_{SROX} = -200 \text{ MPa}$, $\theta = 1000^\circ\text{C}$ — Detail des Spannungsverlaufs von Teilbild (a): Oberkante.

HILTMANN

SROX -200 MPA, 1000 GRAD

FLIESSEN



MPA
STUTTGART
19-JUN-90

Bild 5.33: c): $\sigma_{SROX} = -200 \text{ MPa}$, $\theta = 1000^\circ\text{C}$ — Überschreiten der Elastizitätsgrenze.

HILTMANN

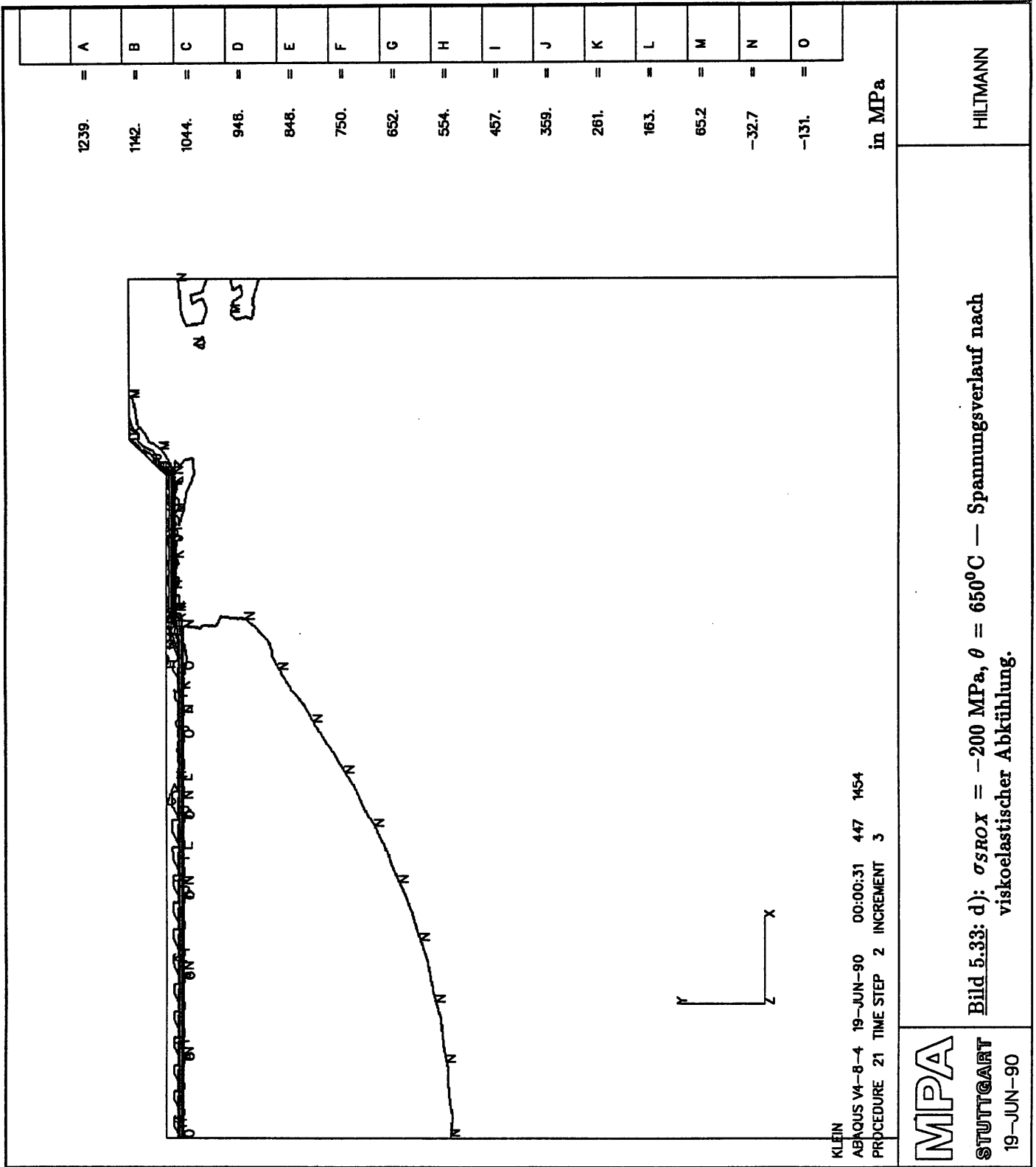


Bild 5.33: d) $\sigma_{SROX} = -200 \text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Spannungsverlauf nach viskoelastischer Abkühlung.

MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

HILTMANN

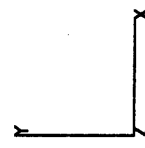
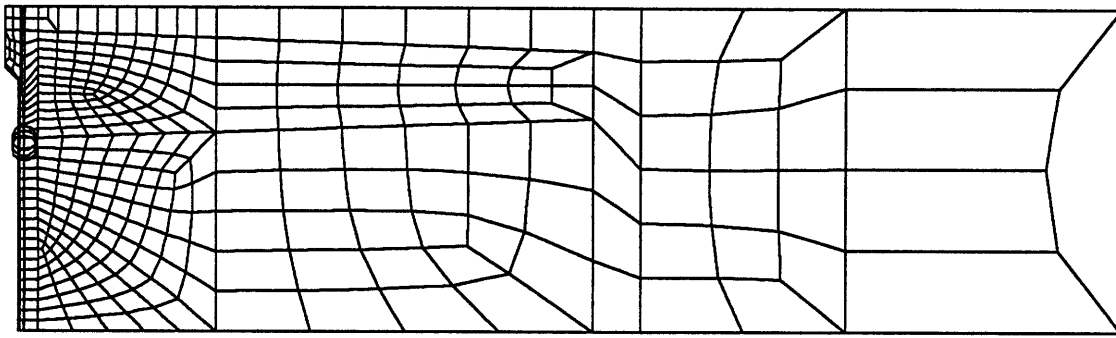


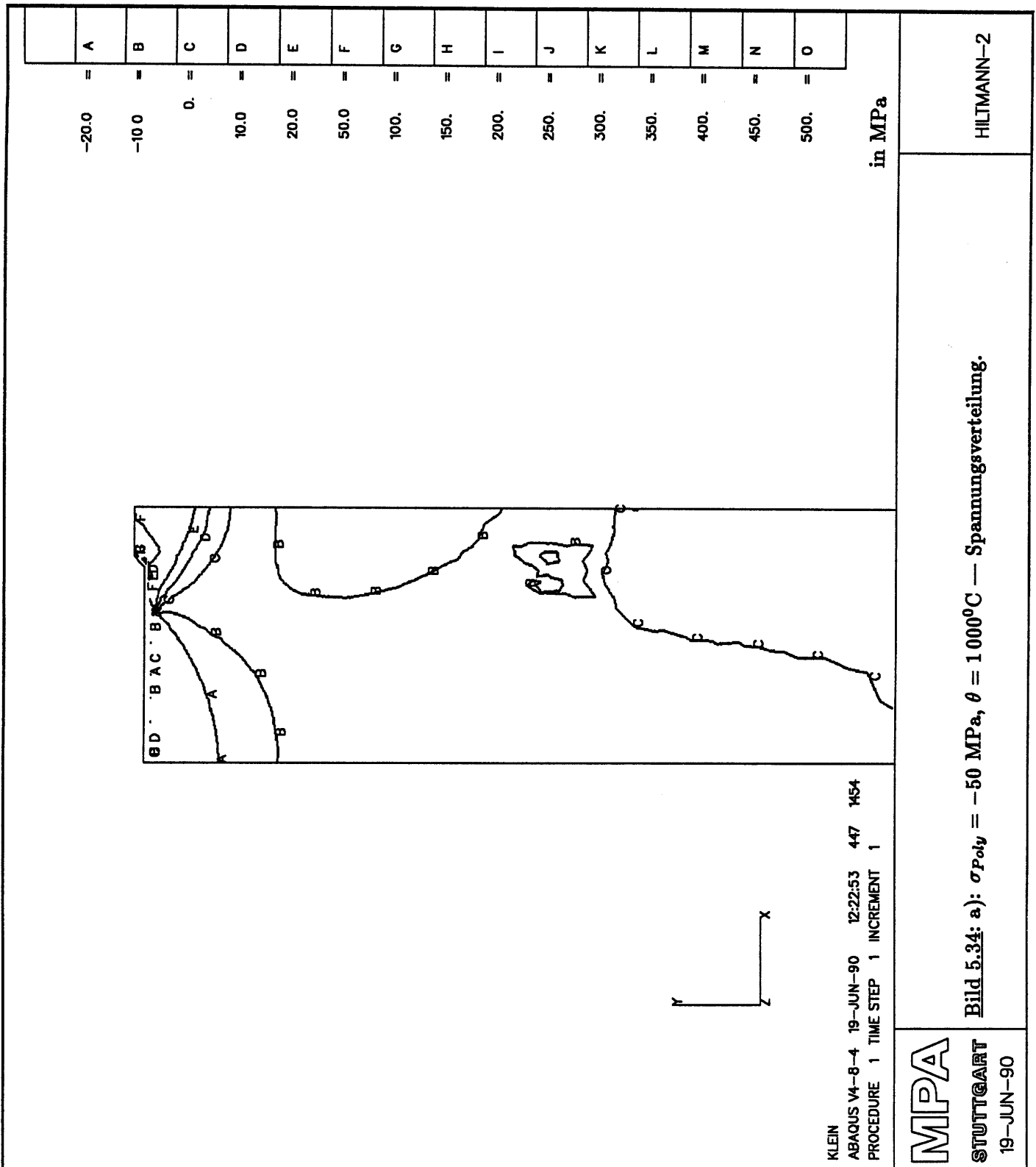
Bild 5.33: e): $\sigma_{SROX} = -200 \text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Knoten höchster Oktaederspannung.

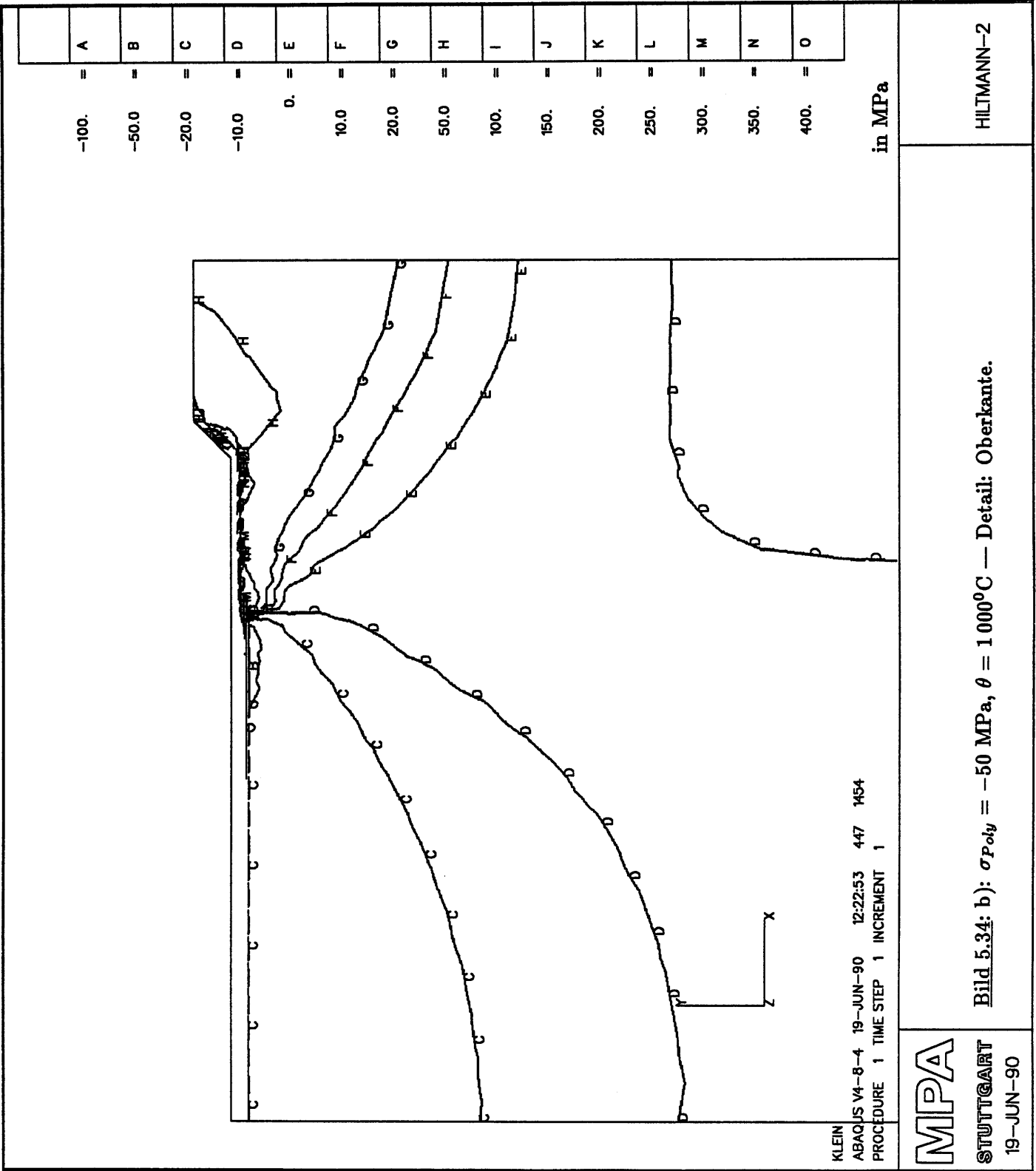
HILTMANN

MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

3. SROX: $\sigma_v = 0$, Polysilizium: $\sigma_v = -50$ MPa, Bild 5.34. Die Vorspannung des Polysiliziums bewirkt leichten Druck in der ganzen Trenchzone, vgl. Abschnitt 5.4. Abgesehen vom Nitridfilm über dem Trench wird hierdurch die Waferoberfläche entlastet. Fließen dürfte, Teilbild (c), hauptsächlich auf den Spannungen in y-Richtung beruhen.

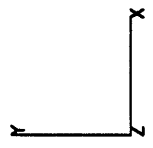
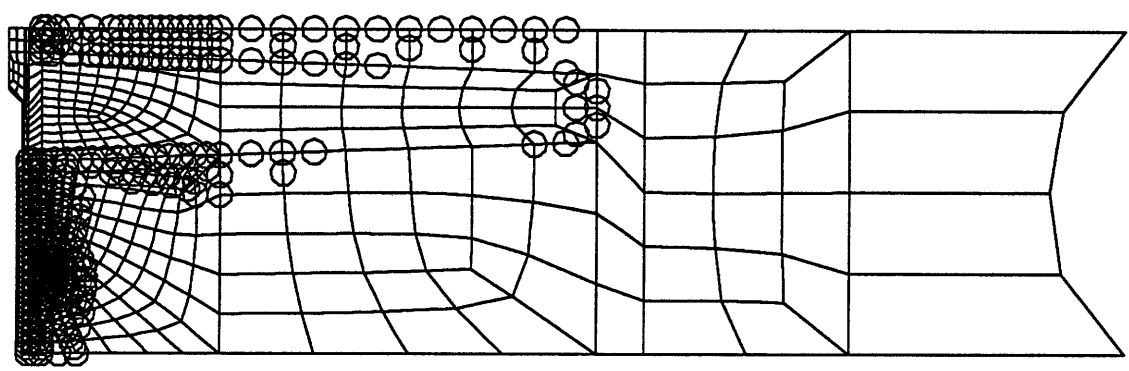
4. SROX: $\sigma_v = 0$, Polysilizium: $\sigma_v = +50$ MPa, Bild 5.35. Positive Vorspannung des Polysiliziums erzeugt eine dem Nitridfilm entgegenwirkende Zugzone. Mehr als in den vorigen Rechnungen konzentriert sich die Spannung daher an der linken Trenchkante. Die SROX-Seite wird dagegen vom steiferen Trench entlastet: Zwischen benachbarten Trenches bildet sich ein homogenes Spannungsfeld (< 50 MPa). Lediglich direkt unter dem SROX entsteht eine Zugzone mit $\sigma > 50$ MPa, die sich während der Abkühlung verbreitert.





POLYSILIZIUM: -50; 1000 GRAD

FLIESSEN

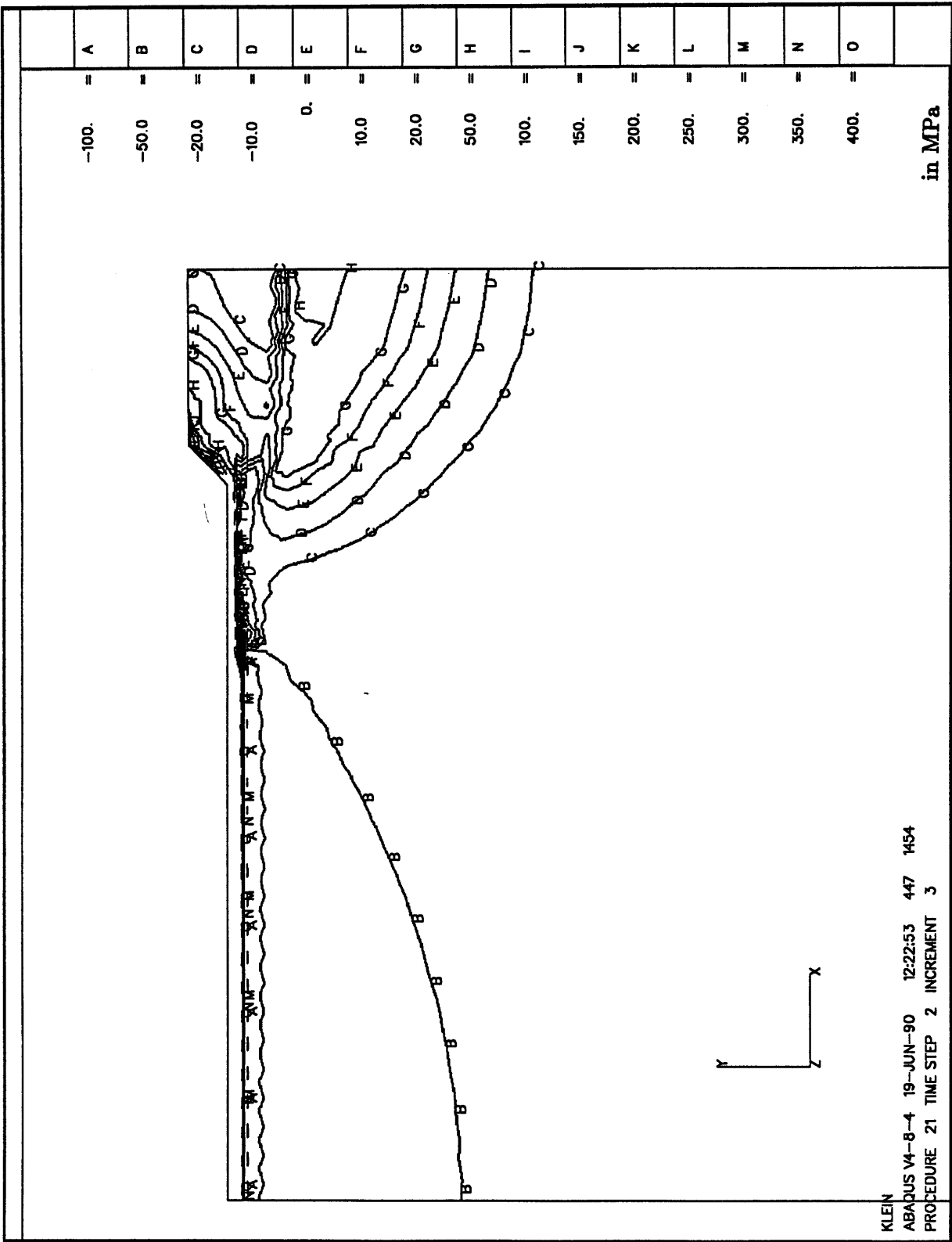


MPA

STUTTGART
19-JUN-90

Bild 5.34: c): $\sigma_{Poly} = -50 \text{ MPa}$, $\theta = 1000^\circ\text{C}$ — Mindest-Fließbereich.

HILTMANN



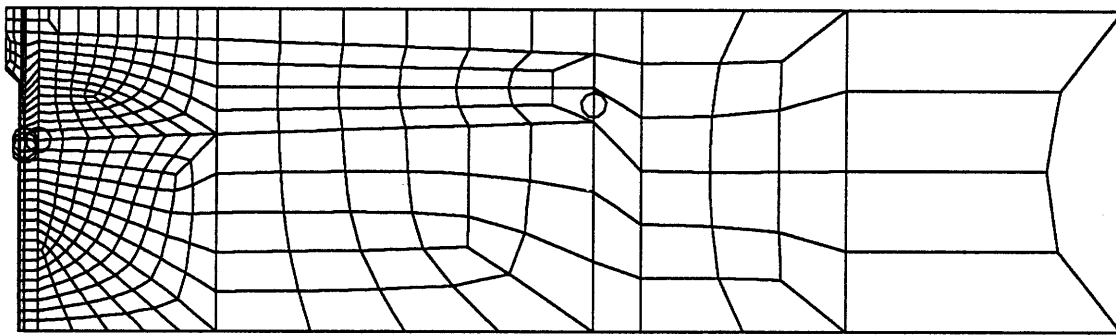
KLEIN
 ABAQUS V4-8-4 19-JUN-90 12:22:53 447 1454
 PROCEDURE 21 TIME STEP 2 INCREMENT 3

MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

Bild 5.34: d): $\sigma_{Poly} = -50 \text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Detail: Oberkante.

HILTMANN-2

POLYSILIZIUM: -50 MPa; 650 GRAD
FLIESSGRENZE NICHT ERREICHT

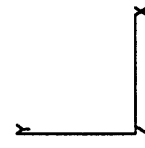
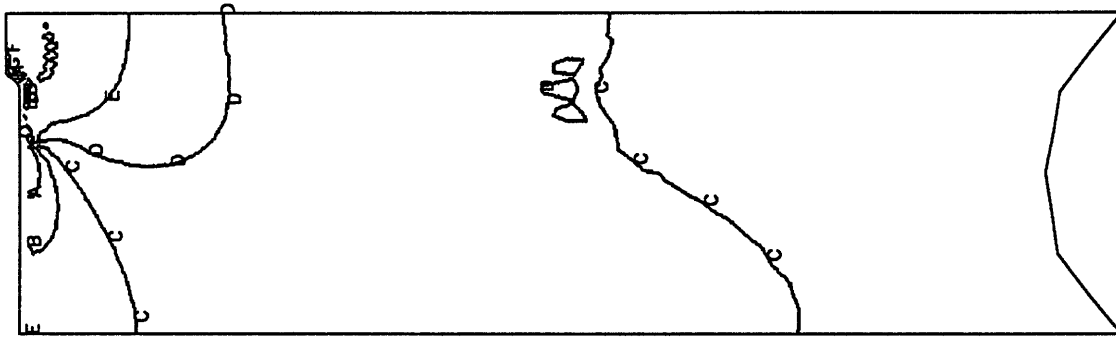


MPA
STUTTGART
19-JUN-90

Bild 5.34: e): $\sigma_{P_{0.2y}} = -50 \text{ MPa}$, $\theta = 1000^\circ\text{C}$ — Maximale Oktaederspannung.

HILTMANN

POLYSILIZIUM: +50 MPa, 1000 GRAD



KLEIN
 ABAQUS V4-R-4 19-JUN-90 20:53:51 447 1454
 PROCEDURE 1 TIME STEP 1 INCREMENT 1

	=	A
-22.6	=	A
	=	B
-10.0	=	B
	=	C
0.	=	C
	=	D
10.0	=	D
	=	E
20.0	=	E
	=	F
50.0	=	F
	=	G
100.	=	G
	=	H
150.	=	H
	=	I
200.	=	I
	=	J
250.	=	J
	=	K
300.	=	K
	=	L
350.	=	L
	=	M
400.	=	M
	=	N
450.	=	N
	=	O
1116.	=	O

in MPa

MPA
STUTTGART
 19-JUN-90

Bild 5.35: a) $\sigma_{Poly} = +50 \text{ MPa}$, $\theta = 1000^\circ\text{C}$ --- Spannungsverteilung.

HILTMANN

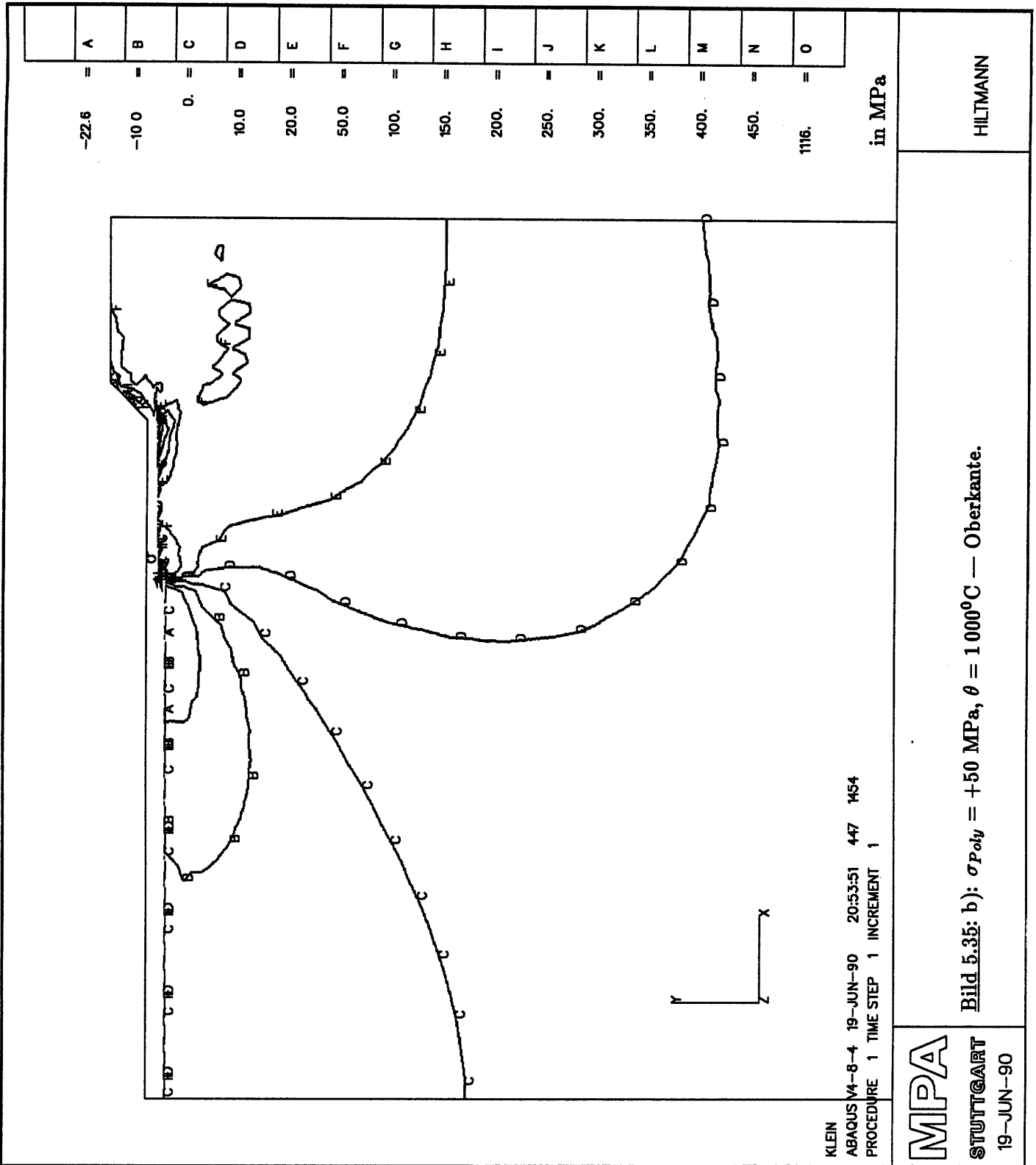
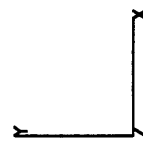
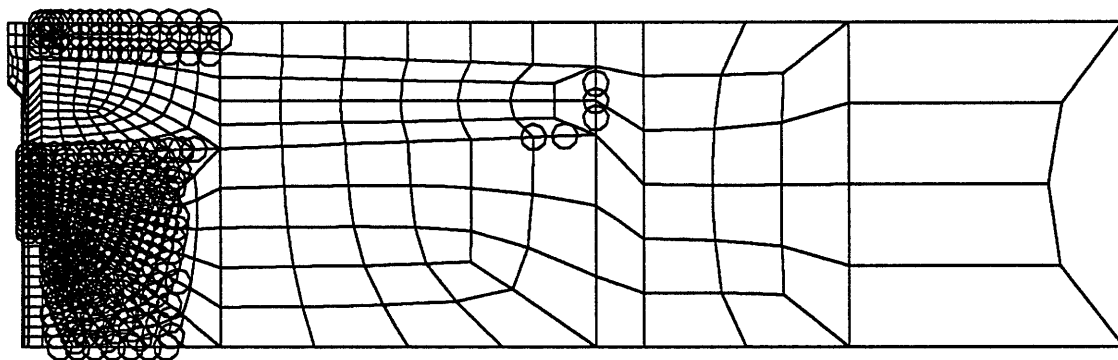


Bild 5.35: b): $\sigma_{Poly} = +50 \text{ MPa}$, $\theta = 1000^\circ\text{C}$ — Oberkante.

POLYSILIZIUM: -50 MPA, 1000 GRAD
GROESSTE SPANNUNG

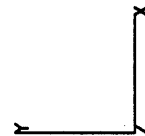
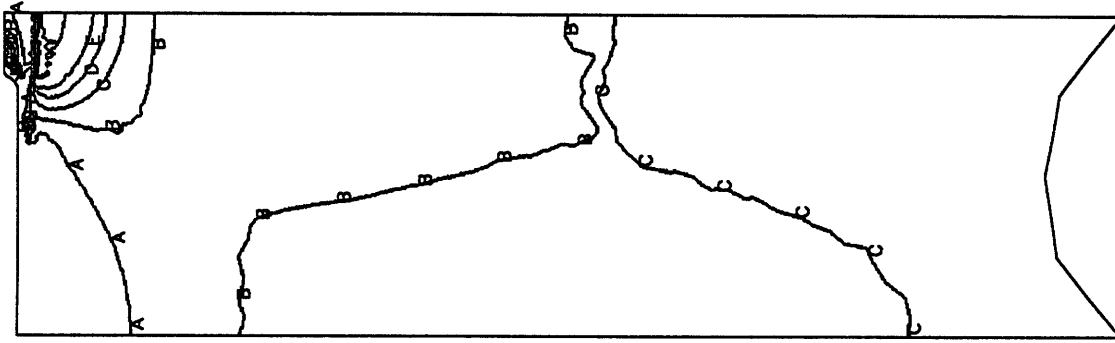


MPA
STUTTGART
19-JUN-90

Bild 5.35: c): $\sigma_{Poly} = +50 \text{ MPa}$, $\theta = 1000^\circ\text{C}$ — Fliesen.

HILTMANN

POLYSILIZIUM: +50 MPa, 650 GRAD



KLEIN
 ABAQUS V4-8-4 19-JUN-90 20:53:51 447 1454
 PROCEDURE 21 TIME STEP 2 INCREMENT 3

	A
-22.6	=
	B
-10.0	=
	C
0.	=
	D
10.0	=
	E
20.0	=
	F
50.0	=
	G
100.	=
	H
150.	=
	I
200.	=
	J
250.	=
	K
300.	=
	L
350.	=
	M
400.	=
	N
450.	=
	O
1116.	=

in MPa

MPA
 STUTTGART
 19-JUN-90

Bild 5.35: d): $\sigma_{Poly} = +50 \text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Spannungsverteilung.

HILTMANN

POLYSILIZIUM: +50 MPa, 650 GRAD

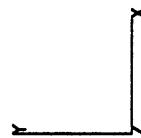
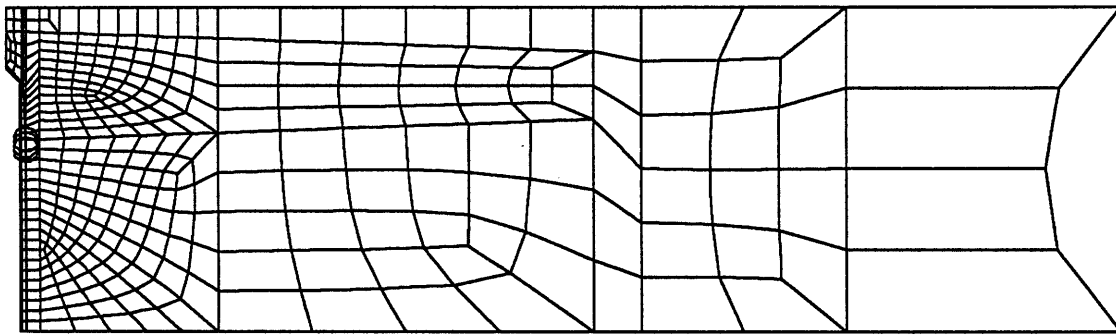


Bild 5.35: e): $\sigma_{\text{Poliv}} = +50 \text{ MPa}$, $\theta = 650^\circ\text{C}$ — Knoten maximaler Oktaeder-
spannung.

HILTMANN

MPA
STUTTGART
19-JUN-90

6 Zusammenfassung und Diskussion

Zielsetzung dieser Arbeit war neben der Sammlung von Werkstoffkennwerten die Spannungsberechnung für fünf verschiedene Prozeßschritte:

1. Wafer mit chemisch abgeschiedener (CVD-) Oxidschicht.
2. Wafer mit CVD-Oxidschicht und Low-Pressure-CVD-Nitridschicht.
3. Ätzen eines Grabens in eine mit Oxid und Nitrid bedeckte Oberfläche und Füllen des Grabens mit Polysilizium.
4. Spannungsverteilung an den Rändern eines Gebietes hoher Trenchdichte.
5. Mit Semi-Recessed Oxide teilweise überdeckte Trenchstruktur auf einem Wafer.

Bei allen diesen Rechnungen zeigte sich, daß der Spannungszustand eine empfindliche Funktion der in den einzelnen Werkstoffen herrschenden, aus dem Urformverfahren herrührenden Eigenspannungen ist. Diese Materialspannungen können außergewöhnlich hoch sein (1000 MPa bei Si_3N_4), sie sind jedoch nur zum Teil bekannt. Der Einfluß der Eigenspannungen v.a. von Polysilizium und Siliziumoxid stellt daher einen bedeutenden Unsicherheitsfaktor bei allen durchgeführten Rechnungen dar.

Oxid- und nitridbedeckter Wafer: Das Ergebnis dieser beiden Rechnungen konnte quantitativ anhand der Waferverbiegung überprüft werden. Unter der Annahme, daß bei niedriger Temperatur abgeschiedene Oxid- und Nitridfilme keine nennenswerte Eigenspannung aufweisen, konnte eine Waferverwölbung errechnet werden, die nur wenig über der im Experiment gemessenen lag. Dieser Unterschied wird auf die Größe des betrachteten Waferausschnittes zurückgeführt. Biegt man nämlich eine Platte halbkugelförmig, so wird das Zentrum gedehnt und der Rand gestaucht. Bei einem Wafer von \varnothing 20cm macht sich dieser Effekt bemerkbar und behindert die Verbiegung, bei dem betrachteten, gegenüber der Dicke sehr schmalen Ausschnitt jedoch nicht (die Beschränkung auf diesen Ausschnitt war notwendig, um Rechenzeit und Speicherbedarf in Grenzen zu halten.) Die etwas zu hohe Dehnung steht deswegen nicht im Widerspruch zum Experiment, und das Rechenergebnis dürfte, soweit die Annahmen gültig sind, der Realität nahekommen.

Ätzen und Füllen eines Grabens: Die Rechnung lief in zwei Schritten (Ätzen, Füllen) ab, deren erster routinemäßig durchgeführt werden kann, während der zweite die Grenzen des hier verwendeten FE-Programms erreichte. Zu den Ergebnissen ist folgendes zu bemerken:

- Das Aufbringen eines Doppelfilmes Siliziumoxid/Siliziumnitrid und die Abkühlung der Struktur verläuft ohne plastisches Fließen. Soweit dem Verfasser bekannt, ist hier zum ersten Mal das Verhältnis von Maximal- und Fließspannung quantitativ bestimmt worden.
- Die höchste Beanspruchung dieser Struktur tritt wegen der hohen inneren Spannung des Nitridfilmes bei Nitrierungstemperatur und nicht bei tiefen Temperaturen auf.
- Die versetzungsunterdrückende Wirkung des "Pad Oxide", des dünnen Oxidfilms zwischen Nitrid und Substrat, beruht nicht auf Spannungsabbau durch Fließen bei hohen Temperaturen, sondern allein darauf, daß der hohe Spannungsgradient unter dem Nitridfilm von der Siliziumoberfläche entfernt wird.

- Die kritischen Parameter beim Füllen des Trenches mit Polysilizium sind innerer Spannungszustand des Füllmaterials und Prozeßtemperatur. Es ist im Moment noch unbekannt, ob im Füllmaterial Zug- oder Durchspannung herrscht. Im Falle von Druckspannung könnte diese durch verstärktes Dotieren gemindert werden. Da Silizium unter 650°C als nicht plastisch verformbar gilt, sollte die Füllung möglichst bei niedriger Temperatur vorgenommen werden. Die elastische Verformungsenergie ist dann allerdings im Kristall metastabil gespeichert und kann bei späteren Erwärmungen wieder zu plastischem Fließen führen.

Rand eines Arrays: Diese Rechnung sollte die Frage beantworten, ob am Rand eines Gebietes hoher Trenchdichte Spannungskonzentrationen mit erhöhter Versetzungsbildung auftreten. Es stellte sich heraus, daß hierzu die Kenntnis des Verhältnisses der Eigenspannungen von Polysilizium und Nitridfilm von Bedeutung ist. Die Spannungsverteilungen sind bei der Vorgabe von Zug oder Druck im Trenchmaterial grundsätzlich verschieden. Druckspannung führte tatsächlich im Gebiet zwischen zwei Arrays zu einer Spannungserhöhung; Fließen konnte jedoch bei den angenommenen Spannungen nicht nachgewiesen werden.

Trenchstruktur mit SROX: In diesem letzten hier untersuchten Prozeßschritt sind in der Praxis an mehreren Stellen — (1) unter dem SROX, (2) am Trenchgrund und (3) an der nitridbedeckten Trenchkante — Versetzungen beobachtet worden.

Erhöhte Spannungen wurden auch am Modell in den Bereichen (2) und (3) nachgewiesen. Sie hängen, vor allem bei (3), von der Schärfe der Kanten einzelner Materialbereiche ab. Da diese Kerben in der einfachen Geometrie des Modells sicherlich extrem sind, sollten die Rechenergebnisse eine obere Grenze darstellen. Aus Zeitgründen konnten keine Versuche mit Variationen in der Kantenschärfe angestellt werden. Dies bleibt damit eine Aufgabe für spätere Arbeiten.

Die Konzentration von Versetzungen im Bereich (1) kann nicht durch hohe Spannungen begründet werden. Sie geht vermutlich auf Störung des Kristallgitters durch die thermische Oxidation (Oxidation Induced Stacking Faults) oder auf Versetzungseinfang in diesem Gebiet zurück. Dieser Vorgang wird v.a. in [28c] ausführlich erklärt und auch hier in Bild 2.18 dargestellt.

7 Schlußbemerkung

In dieser Arbeit wurde gezeigt, daß die Finite-Elemente-Methode, die längst zu den Standardverfahren der Statik gehört, bei Entwicklung und Produktion von Halbleiterbauelementen wertvolle Informationen liefern kann. Voraussetzung hierfür ist allerdings die genaue Kenntnis von Eigenschaften und Zustand der verwendeten Materialien. Einige Informationen hierüber wurden in dieser Arbeit gesammelt; anschließend wurden die Spannungen an ausgewählten Strukturen eines elektronischen Bauteils berechnet. Hier wurde zum Teil, etwa bei der Bestimmung der Fließgrenze, durchaus Neuland beschritten.

Die gewonnenen Erkenntnisse über wichtige Parameter wie Kerben, Eigenspannungen und Prozeßtemperaturen bestätigen zum großen Teil nur aus der Erfahrung Bekanntes. Es ist auch nicht sehr wahrscheinlich, in einer Arbeit von wenigen Monaten die Entwicklungsarbeit von vielen Jahren entscheidend verbessern zu können. Den hier begonnenen Ansatz weiter auszubauen bleibt damit weiteren Arbeiten vorbehalten.

Zum Abschluß möchte ich hier Herrn S. Weeren (IBM Sindelfingen) und den Herren Samland und Dr. Kockelmann (Staatliche Materialprüfungsanstalt Stuttgart) für ihre Betreuung bei und ihr Interesse an dieser Arbeit danken.

8 Anhang (vertraulich)

In der Studie [101] wurden im Jahr 1989 an 6 Wafern (Nr. 96 22 93 – 01 bis –06) der Krümmungsradius gemessen und daraus nach der Formel von Stoney [189] mit $E/(1-\mu) = 1,805 \cdot 10^5 \text{MPa}$ die durchschnittlichen Filmspannungen bestimmt.

Waferdicke: $(625 \pm 25) 10^{-3} \text{ mm}$
 Daten: Dicke des Oxidfilms: $(450 \pm 45) 10^{-6} \text{ mm}$
 Abscheidetemperatur: $(400 \pm 5) ^\circ \text{C}$

Ergebnisse der Messung:

Wafersnummer	Krümmungsradius (mm)	Spannung (MPa)	
01	$3,47880 \cdot 10^5$	73,9	
02	$3,13092 \cdot 10^5$	82,8	
03	$15,65458 \cdot 10^5$	16,4	
04	$2,60910 \cdot 10^5$	99,2	
05	$3,47880 \cdot 10^5$	74,2	
06	$1,93567 \cdot 10^5$	133,6	
Durchschnitt:	$(2,927 \pm 0,66 \cdot 10^5)$	$92,7 \pm 25$	ohne Nr. 3)

Die zweidimensionale Rechnung lieferte — vgl. Bild 5.4 — folgende Knotenverschiebungen in x-Richtung:

Knoten 1	$u_x = 8,6098 \cdot 10^{-3} \mu\text{m}$
80	$8,6364 \cdot 10^{-3} \mu\text{m}$
785	$8,6098 \cdot 10^{-3} \mu\text{m}$

Modellbreite: $b = 4,75 \mu\text{m}$

damit ergibt sich der Krümmungsradius nach Gl. (5.1):

$$R = 0,6 \text{ mm} \cdot \frac{(4,75 - 8,6098 \cdot 10^{-3}) \mu\text{m}}{(8,6098 - 8,6364) \cdot 10^{-3} \mu\text{m}}$$

$$= -1,07 \cdot 10^5 \text{ mm}$$

Für das dreidimensionale Modell wurden drei Rechenläufe mit entsprechend den oben angegebenen Fertigungstoleranzen leicht veränderter Geometrie durchgeführt.

1. Sollmaße

Knoten	72	$u_x = -3,0005 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$
	1864	$-3,0063 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$
	121	$u_z = -3,0005 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$
	1913	$-3,0063 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$

$$R = 0,6 \text{ mm} \cdot \frac{20,97 \mu\text{m}}{5,8 \cdot 10^{-5} \mu\text{m}} = 2,17 \cdot 10^5 \text{ mm}$$

2. Oxiddicke $t_{ox} = 0,405 \mu\text{m}$, Waferdicke $t_w = 650 \mu\text{m}$

Knoten	72	$u_x = -3,0011 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$
	1864	$-3,0060 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$
	121	$u_z = -3,0011 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$
	1913	$-3,0060 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$

$$R = 2,57 \cdot 10^5 \text{ mm}$$

3. Oxiddicke $t_{ox} = 0,495\mu\text{m}$, $t_W = 600\mu\text{m}$

Knoten	72	$u_x = -3,0001 * 10^{-2}\mu\text{m}$
	1864	$-3,0065 * 10^{-2}\mu\text{m}$
	121	$u_z = -3,0001 * 10^{-2}\mu\text{m}$
	1913	$-3,0065 * 10^{-2}\mu\text{m}$

$$R = 1,97 * 10^5 \text{ mm}$$

Eine zweite Serie von Wafern mit auf den Oxidfilm im LPCVD-Verfahren bei 400°C 450 nm dick abgeschiedener Nitridschicht wurde analog zur ersten untersucht. Hier wurden die folgenden Werte gemessen:

Wafernummer	Krümmungsradius (mm)	Spannung (MPa)
07	$-1,73676 * 10^5$	-157,8
08	$-3,13092 * 10^5$	-86,7
09	$-1,30455 * 10^5$	-208,1
10	$-1,64785 * 10^5$	-163,9
11	$-3,13092 * 10^5$	-87,5
12	$-1,42314 * 10^5$	-189,4
Durchschnitt:	$-(2,06 \pm 0,84) * 10^5$	$-(148,9 \pm 51,2)$

Der Vergleich dieser Messung mit der Rechnung aus Abschnitt 5 zeigt, daß beide innerhalb der Meßungenauigkeit miteinander übereinstimmen. Wird zusätzlich noch der Kanteneffekt mit berücksichtigt, so nähert sich das Rechenergebnis noch weiter dem Mittelwert der Messung.

Die Geometrie der Trenchstruktur, nach der die FE-Modelle erstellt wurden, geht aus Bild 8.1 hervor. Für die einzelnen Rechnungen wurde sie entsprechend der Fertigungsstufe abgewandelt.

Als Oxidierungs- und als Nitrierungstemperatur wurde $\theta = 1000^\circ\text{C}$ eingesetzt und als Temperatur für die Trenchfüllung $\theta = 650^\circ$ verwendet. Diese liegt etwas oberhalb der tatsächlichen Prozeßtemperatur; wegen der niedrigeren Elastizitätsgrenze sollten jedoch die so erhaltenen Ergebnisse über die Wahrscheinlichkeit der Versetzungsbildung auf der sicheren Seite liegen.

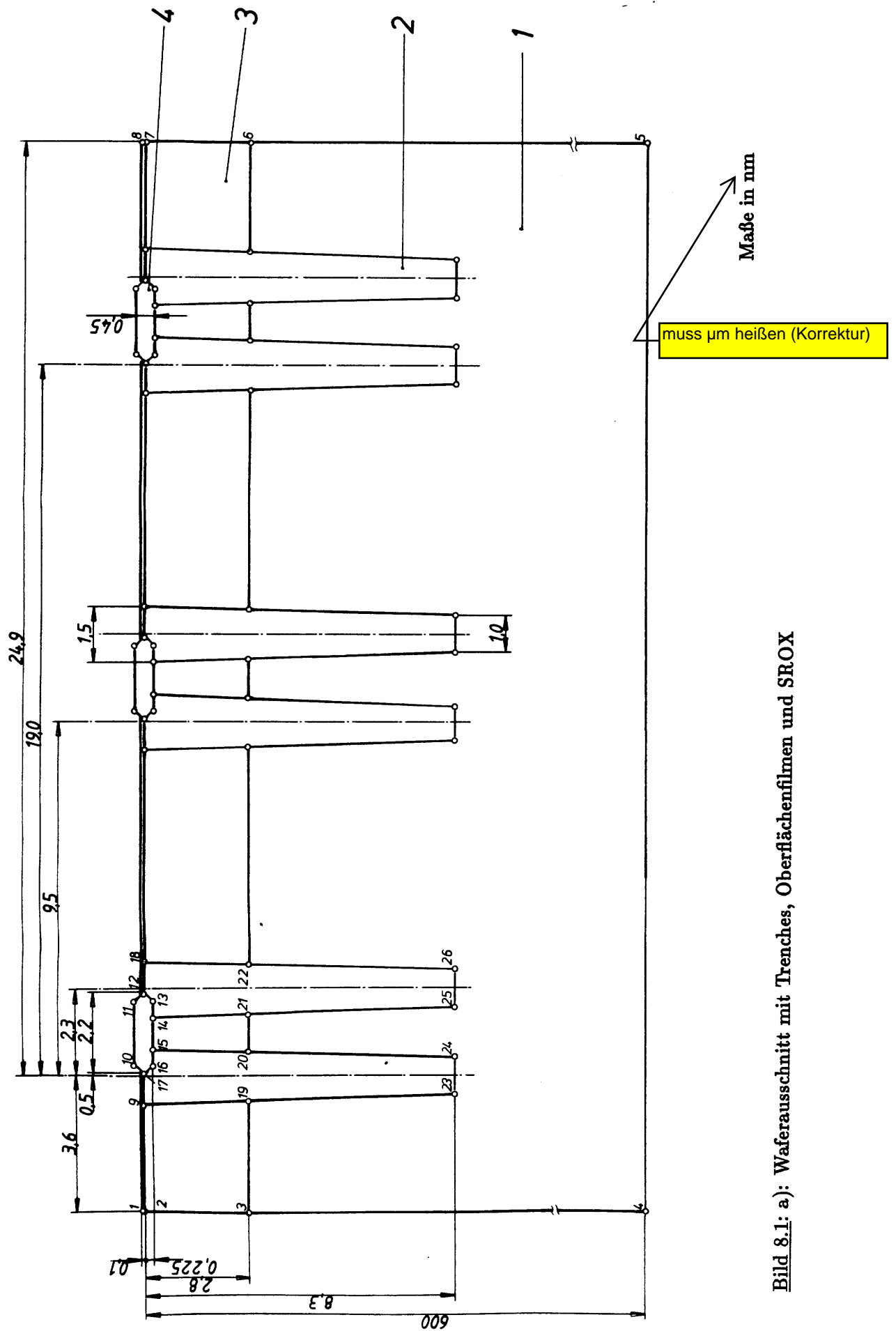


Bild 8.1: a): Waferschnitt mit Trenches, Oberflächenfilmen und SROX

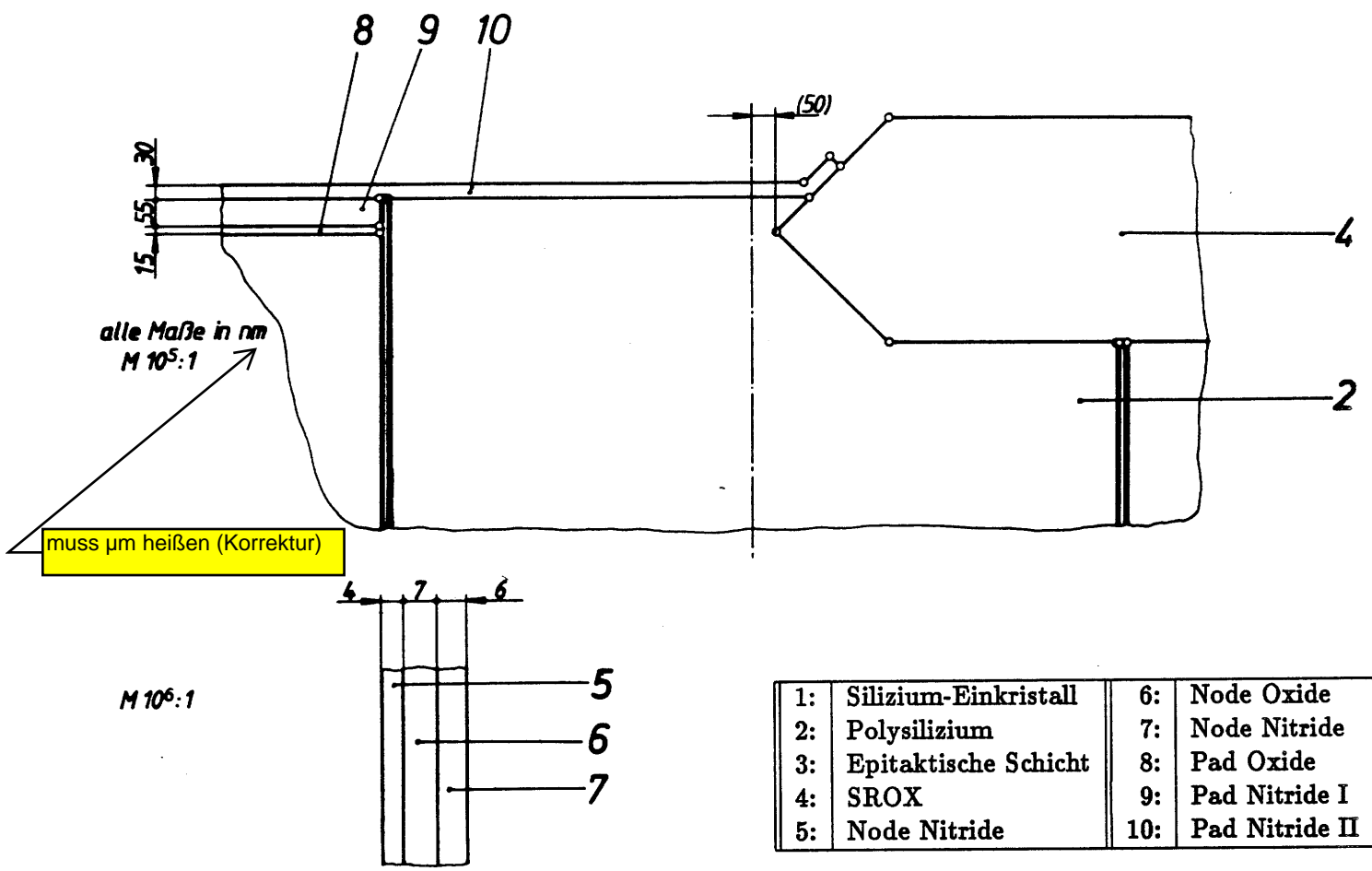


Bild 8.1: b): Detail aus Teilbild (a), obere Trenchkante.

9 Literatur

- [1] N.N.: **Silicon**. In: Handbook of Electronic Materials, Band 1, Seite 66-70. New York: IFI/Plenum, 1971.
- [2] J.T.MLEK: **Silicon Nitride for Microelectronic Applications**. In: Handbook of Electronic Materials, Band 3, Seite 61-63. New York: IFI/Plenum, 1971
- [3] M.NEUBERGER: **Group IV Semiconducting Materials**. In: Handbook of Electronic Materials, Band 5, Seite 36ff New York: IFI/Plenum, 1971
- [4] W.HINZ: **Silikate**, Band 1, Seite 199-201 Berlin: VEB Bauwesen, 1970
- [5] O.V.MAZURIN, M.V.STRELTINA, T.P.SHVAIKO-SHVAIKOVSKAYA: **Handbook of Glass Data**. Amsterdam: Elsevier, 1983.
- [6] S.P.CLARK (ED.): **Handbook of Physical Constants**. New York: Geological Society of America, 1966.
- [7] A.PETZOLD: **Anorganisch-nichtmetallische Werkstoffe**. Leipzig: VEB Grundstoffindustrie, 2.Auflage 1986
- [8] Y.S.TOULOUKIAN: **Thermophysical Properties of Matter**, Band 13, Seite 154-157, 358-365, 1140-1143. New York: IFI/Plenum, 1977.
- [9] A.GOLDSMITH, T.E.WATERMAN, H.J.HIRSCHHORN: **Handbook of Thermophysical Properties of Solid Materials**. Oxford: Pergamon Press, 1961.
- [10] R.BECHMANN, R.F.S.HEARMON: **Elastische, Piezoelektrische, Piezooptische und Elektro-optische Konstanten von Kristallen**. Landolt-Börnstein, NS III 1. Berlin: Springer, 1966.
- [11] T.MITSUI, S.NOMURA: **Oxide**. Landolt-Börnstein, NS III 17a. Berlin: Springer, 1981.
- [11a] O.MADELUNG ET AL. (EDS): **Halbleiter**. Landolt-Börnstein NS III 17g. Berlin: Springer, 1984.
- [11b] A.S.BHALLA ET AL.(EDS.): **Elastische, piezooptische, elektrooptische Konstanten und nichtlineare dielektrische Suszeptibilität von Kristallen**. Landolt-Börnstein NS III 18. Berlin: Springer, 1984.
- [12] : IBM-Hausmitteilung.
- [13] K.E.PETERSEN: **Silicon as a Mechanical Material**. In: Proceedings of the IEEE, Band 70, Nr. 5, (May 1982), Seite 420-457
- [14] W.RUNYAN: **Silicon Semiconductor Technology**. New York: McGraw-Hill, 1965.
- [15] H.F.WOLF: **Semiconductors**. New York: Wiley-Interscience, 1971
- [16] N.N.: **Key Engineering Materials**. in: Trans Tech Publications, Band 34/35 (1989).
- [17] E.B. SHAND: **Glass Engineering Handbook**, Seite 36-55. New York: Mc Graw Hill, 1958.
- [18] A. HEUBERGER (ED.): **Mikromechanik**. Berlin: Springer, 1989.
- [19] N.N.: **Silicium**. In: Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie, Band 15, Seite 36-72, 318-349 Weinheim: Verlag Chemie, 8. Auflage 1959
- [20] M. SUGO ET AL: **Residual strains in heteroepitaxial III-IV semiconductor films on Si (100) substrates**. In: Journal of Applied Physics , Band 65, Nr. 2, (15.1.1989), Seite 591-595

- [21] S.JOHANSSON, E.ERICSON, J.Å.SCHWETZ: Influence of surface coatings on elasticity, residual stresses, and fracture properties of silicon microelements. In: Journal of Applied Physics, Band 65, Nr. 1, (1.1.1989), Seite 122-128
- [22] H.SHIMIZU, T.AOSHIMA: Thermal Warpage of Large Diameter Czochralski-Grown Silicon Wafers. In: Japanese Journal of Applied Physics, Band 27, Nr. 12, (Dec. 1988), Seite 2315-23
- [23] V.M.KOLESHKO, V.F.BELITSKY, I.V.KIRYUSHIN: Stresses in Thin Polycrystalline Silicon Films. In: Thin Solid Films, Band 162, (1988), Seite 365-374
- [24] Y.EPELBOIN: X-ray topographs of silicon crystals with superposed oxide film. A theoretical study by means of simulations. In: Journal of Applied Physics, Band 64, Nr. 1, (1.7.1988), Seite 109-113
- [25] S.JOHANSSON ET AL.: Fracture testing of silicon microelements in situ in a scanning electron microscope. In: Journal of Applied Physics, Band 63, Nr. 10, (15.5.1988), Seite 4799-4803
- [26] H.KAWARADA, T.UENO, I.OHDOMARI, Y.KUNII: Characterization of roughness and defects at an Si/SiO₂ interface formed by lateral solid-phase epitaxy using high-resolution electron microscopy. In: Journal of Applied Physics, Band 63, Nr. 8, (14.4.1988), Seite 2641-2644
- [27] F.JANSEN, M.A.MACHONKIN, N.PALMIERI, D.KUHMAN: Thermomechanical properties of amorphous silicon and nonstoichiometric silicon oxide films. In: Journal of Applied Physics, Band 62, Nr. 12, (15.12.1987), Seite 4732-4736
- [28a] J.VANHELLEMONT ET AL.: Local oxidation induced dislocation generation near Si₃N₄ edges. In: Applied Physics Letters, Band 43, Nr. 12, (15.12.83), Seite 1120-1122
- [28b] J.VANHELLEMONT, S.AMELYCKX, C.CLAEYS: Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. I Theoretical model. In: Journal of Applied Physics, Band 61, Nr. 6, (15.3.1987), Seite 2170-2175
- [28c] J.VANHELLEMONT, S.AMELYCKX, C.CLAEYS: Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. II Application of the theoretical model for local oxidation processes on (001) silicon substrates. In: Journal of Applied Physics, Band 61, Nr. 6, (15.3.1987), Seite 2176-2188
- [29] T.KODAMA, T.IWAOKA, Y.OSAKA: Raman Scattering Study of Thermal SiO₂ Layers Grown on Silicon. In: Japanese Journal of Applied Physics, Band 24, Nr. 11, (Nov. 1985), Seite 1467-70
- [30] S.ISOMAE: Stress in silicon at Si₃N₄/SiO₂ film edges and viscoelastic behavior of SiO₂ films. In: Journal of Applied Physics, Band 57, Nr. 2, (15.1.1985), Seite 216-223
- [31] T.IWAOKA, S.YOKOYAMA, Y.OSAKA: A New Method of Measuring Internal Stress in Thin Films Deposited on Silicon by Raman Spectroscopy. In: Japanese Journal of Applied Physics, Band 24, Nr. 1, (1985), Seite 112-113
- [32] A. PONCET: Finite-Element Simulation of Local Oxidation of Silicon. In: IEEE Transactions on Computer-Aided Design, Band CAD-4, Nr. 1, (Jan.1985), Seite 41-53
- [33] G.BENTINI, L.CORRERA, C.DONOLATO: Defects introduced in silicon wafers during rapid isothermal annealing: Thermoplastic and thermoelastic effects. In: Journal of Applied Physics, Band 56, Nr. 10, (15.11.1984), Seite 2922-2929
- [34] I.YONENAGA, K.SUMINO, K.HOSHI: Mechanical strength of silicon crystals as a function of the oxygen concentration. In: Journal of Applied Physics, Band 54, Nr. 8, (15.10.1984), Seite 2346-2350

- [35] L.CORRERA, G.G.BENTINI: **Thermal profiles and thermal stresses introduced on silicon during scanning line shaped beam annealing.** In: Journal of Applied Physics, Band 54, Nr. 8, (Aug.1983), Seite 4330-4337
- [36] R.T.HOWE, R.S.MULLER: **Stress in polycrystalline and amorphous silicon films.** In: Journal of Applied Physics, Band 54, Nr. 8, (Aug.1983), Seite 4674-4675
- [37] W.SCHRTER, H.G.BRION, H.SIETHOFF: **Yield point and dislocation mobility in silicon and germanium.** In: Journal of Applied Physics, Band 54, Nr. 4, (April 1983), Seite 1816-1820
- [38] S.P.MURARKA, T.F. RETAJCZYK: **Effect of phosphorous doping on stress in silicon and polycrystalline silicon.** In: Journal of Applied Physics, Band 54, Nr. 4, (April 1983), Seite 2069-2072
- [39] I.BLECH, U.COHEN: **Effects of humidity on stress in thin silicon dioxide films.** In: Journal of Applied Physics, Band 53, Nr. 6, (June 1982), Seite 4202-4207
- [40] S.M.HU: **Critical stress in silicon brittle fracture, and effect of ion implantation and other surface treatments.** In: Journal of Applied Physics, Band 53, Nr. 5, (May 1982), Seite 3576-3580
- [41] S.ISOMAE: **Stress distributions in silicon crystal substrates with thin films.** In: Journal of Applied Physics, Band 52, Nr. 4, (April 1981), Seite 2782-2791
- [42] R.HEZEL, E.W.HEARN: **Mechanical Stress and Electrical Properties of MNOS Devices as a Function of the Nitride Deposition Temperature.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 125, Nr. 11, (Nov. 1978), Seite 1848-1853
- [43] K.E.PETERSEN, C.R.GUARNIERI: **Young's modulus measurements of thin films using micromechanics.** In: Journal of Applied Physics, Band 50, Nr. 11, (Nov. 1979), Seite 6761-6766
- [44] L.T.TONCHEVA, I.S.VASSILEV: **The Bending of Silicon Wafers by Thin Polycrystalline Film Deposition and by Film Doping Using Boron Diffusion.** In: Thin Solid Films, Band 60, (1979), Seite 353ff
- [45] B.LEROY: **Origin of the Warpage....** In: IBM Confidential, Dept.1627.B2 (21.9.76), 50 Seiten
- [46] W.A.BRANTLEY: **Calculated elastic constants for stress problems associated with semiconductor devices.** In: Journal of Applied Physics, Band 44, Nr. 1, (Jan. 1973), Seite 534-535
- [47] C.W.DEE: **Silicon nitride. Tribological applications of a ceramical material.** In: Tribology, (May 1970), Seite 89-92
- [48] P.J.BURKHARDT, R.F.MARVEL: **Thermal Expansion of Sputtered Silicon Nitride Films.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 116, Nr. 6, (June 1969), Seite 864-866
- [49] C.M.DRUM, M.J.RAND: **A Low-Stress Insulating Film on Silicon by Chemical Vapor Deposition.** In: Journal of Applied Physics, Band 39, Nr. 9, (Aug.1968), Seite 4458-4459
- [50] M.V.COLEMAN, D.J.D.THOMAS: **The Structure of Amorphous Silicon Nitride Films.** In: Physica Status Solidi, Band 25, (1968), Seite 241-252
- [51] T.L.CHU, C.H.LEE, G.A.GRUBER: **Preparation and Properties of Amorphous Silicon Nitride Films.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 114, Nr. 7, (July 1967), Seite 717-722

- [52] T.TOKUYAMA, Y.FUJII, Y.SUGITA, S.KISHINO: **Thermal Expansion Coefficient of a Pyrolytically Deposited Silicon Nitride Film.** In: Japanese Journal of Applied Physics, Band 6, (1967), Seite 1252-1253
- [53] O.ADAMS: **Leserbrief zu "A Bakeable Quartz-Metal Sealed Window".** In: Journal of Scientific Instruments, Band 44, (1967), Seite 1059
- [54] K.OKADA, H.SAKANE, Y.SUGIOKA: **Properties of Thermally Grown Silicon Nitride Films.** In: Journal of the Physical Society of Japan, Band 23, (1967), Seite 655ff
- [55] V.Y.DOO, D.R.NICHOLS, G.A.SILVEY: **Preparation and Properties of Pyrolytic Silicon Nitride.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 113, Nr. 12, (Dec.1966), Seite 1279-1281
- [56] B.E.DEAL, A.S.GROVE: **General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon.** In: Journal of Applied Physics, Band 36, Nr. 12, (Dec. 1965), Seite 3770-3778
- [57] J.R.PATEL, A.R.CHAUDHURI: **Macroscopic Plastic Properties of Dislocation-Free Germanium and Other Semiconductor Crystals. I. Yield Behavior.** In: Journal of Applied Physics, Band 34, Nr. 9, (Sept. 1963), Seite 2788-2799
- [58] T.D.RINEY: **Residual Thermoelastic Stresses in Bonded Silicon Wafers.** In: Journal of Applied Physics, Band 32, Nr. 3, (March 1961), Seite 454-460
- [59] G.L.PEARSON, W.T.READ JR., W.L.FELDMANN: **Deformation and Fracture of Small Silicon Crystals.** In: Acta Metallurgica, Band 5, (April 1957), Seite 181-191
- [60] H.J.MCSKIMIN, W.L.BOND, E.BUEHLER, G.K.TEAL: **Measurement of the Elastic Constants of Silicon Single Crystals and Their Thermal Coefficients.** In: The Physical Review, 2nd series, Band 83, Nr. 6, (15.9.1951), Seite 1080
- [61] P.POPPER, S.N.RUDDLESDEN: **The Preparation, Properties and Structure of Silicon Nitride.** In: British Ceramic Society, (Sept. 1961), Seite 603ff
- [62] A.KELLY: **Strong Solids.** Oxford: Clarendon Press, 1973.
- [63] L.MAISSEL: **Thermal Expansion of Silicon.** In: Journal of Applied Physics, Band 31, Nr. 1, (Jan.1960), Seite 211
- [64] M.W.WHELAN, A.H.GOEMANS, L.M.C.GOOSSENS: **Residual Stresses at an Oxide-Silicon Interface.** In: Applied Physics Letters, Band 10, Nr. 10, (15.5.1967), Seite 262-264
- [65] H.SCHOLZE: **Glas. Natur, Struktur, Eigenschaften.** Berlin: Springer, 2.Auflage 1977.
- [66] B.LEROY: **Passivation-Induced Phenomena in Silicon Substrates.** In: G.Barbottin, A.Vapaille (Eds.): **Instabilities in Silicon Devices**, Kapitel 3. Den Haag: Elsevier, 1986.
- [67] R.J.SCHEUERMANN: **Stresses in Dielectric Films.** In: F.Vratny (Ed.): **Thin Film Dielectrics**, (1969), Seite 561-576 New York: The Electrochemical Society, 1969.
- [68] L.V.GREGOR: **Silicon Nitride: Deposition and Application.** In: F.Vratny (Ed.): **Thin Film Dielectrics**, (1969), Seite 447-487 New York: The Electrochemical Society, 1969.
- [69] W.A.WESTDORP, G.H.SCHWUTTKE: **Stress Effects of Silicon Nitride on Silicon.** In: F.Vratny (Ed.): **Thin Film Dielectrics**, (1969), Seite 546-560 New York: The Electrochemical Society, 1969.
- [70] P.HAASEN: **Zur plastischen Verformung von Germanium und InSb.** In: Zeitschrift für Physik, Band 167, (1962), Seite 461-467

- [71] W.D.SYLWESTROWICZ: **Mechanical Properties of Single Crystals of Silicon.** In: *Philosophical Magazine*, series 8, Band 7, (1962), Seite 1825-1845
- [72] D.P.MILLER, J.E.MOORE, C.R.MOORE: **Boron Induced Dislocations in Silicon.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 33, Nr. 8, (Aug. 1962), Seite 2648-2652
- [73] A.R.CHAUDHURI, J.R.PATEL, L.G.RUBIN: **Velocities and Densities of Dislocations in Germanium and Other Semiconductor Crystals.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 33, Nr. 9, (Sept. 1962), Seite 2736-2746
- [74] R.W.KEYES: **Elastic Properties of Diamond-Type Semiconductors.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 33, Nr. 11, (Nov. 1962), Seite 3371-3372
- [75a] M.N.KABLER: **Dislocation Mobility in Germanium.** In: *The Physical Review*, Band 131, Nr. 1, (1.7.1963), Seite 54-58
- [75b] V.CELLI, M.KABLER, T.NINOMIYA, R.THOMSON: **Theory of Dislocation Mobility in Semiconductors.** In: *The Physical Review*, Band 131, Nr. 1, (1.7.1963), Seite 58-72
- [76] E.S.MEIERAN, I.A.BLECH: **X-Ray Extinction Contrast Topography of Silicon Strained by Thin Surface Films.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 36, Nr. 10, (Oct. 1965), Seite 3162-3167
- [77] J.K.HOWARD, G.H.SCHWUTTKE: **X-Ray Diffraction Topography of Planar Diffused Junction Structures.** In: *Advances in X-Ray Analysis*, Band 10, (1966), Seite 118-133
- [78] V.V.TARASSOV: **Heat Capacity and Structure of Vitreous Silica and Diamond-Like Lattices.** In: *Physica Status Solidi*, Band 20, (1967), Seite 37
- [79] G.H.SCHWUTTKE, J.K.HOWARD: **X-Ray Stress Topography of Thin Films on Germanium and Silicon.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 39, Nr. 3, (15.2.1968), Seite 1581-1591
- [80] S.C.H.LIN, I.PURGACZ-MURASZKIEWICZ: **Local Stress Measurement in Thin Thermal SiO₂ Films on Si Substrates.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 43, Nr. 1, (Jan. 1972), Seite 119-125
- [81] N. TAMURA, H.SUNAMI: **Generation of Dislocations Induced by Chemical Vapor Deposited Si₃N₄ Films on Silicon.** In: *Japanese Journal of Applied Physics* Bd. 11, Nr. 8 (Aug. 1972), Seite 1097-1105
- [82a] N.KATO, J.R.PATEL: **X-ray diffraction topographs on silicon crystals with superposed oxide film. I Theory and computational procedures.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 44, Nr. 3, (March 1973), Seite 965-970
- [82b] J.R.PATEL, N.KATO: **X-ray diffraction topographs on silicon crystals with superposed oxide film. II Pendellösung fringes: comparison of experiment with theory.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 44, Nr. 3, (March 1973), Seite 971-977
- [82c] Y.ANDO, J.R.PATEL, N.KATO: **X-ray diffraction topographs on silicon crystals with superposed oxide film. III Intensity distribution.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 44, Nr. 10, (Oct. 1973), Seite 4405-4412
- [83] K.SUMINO: **A model for the dynamical state of dislocations in crystals during deformation.** In: *Materials Science and Engineering*, Band 13, (1974), Seite 269-275
- [84] H.NAGAI: **Structure of vapor-deposited Ga_xIn_{1-x}As crystals.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 45, Nr. 9, (Sept. 1974), Seite 3789-3794
- [85] W.K.WU, J.WASHBURN: **On the climb of dislocations in boron-implanted silicon.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 48, Nr. 9, (Sept. 1977), Seite 3747-3751

- [86] A.K.SINHA, H.J.LEVINSTEIN, T.E.SMITH: **Thermal stresses and cracking resistance of dielectric films (SiN, Si₃N₄, and SiO₂) on Si substrates.** In: Journal of Applied Physics, Band 49, Nr. 4, (April 1978), Seite 2423-2426
- [87] H.KOBAYASHI: **Anharmonicity and elastic hysteresis of fused SiO₂ fibers.** In: Journal of Applied Physics, Band 49, Nr. 9, (Sept. 1978), Seite 4776-4778
- [88] M.SUEZAWA, K.SUMINO, I.YONENAGA: **Dislocation Dynamics in the Plastic Deformation of Silicon Crystals. II Theoretical analysis of experimental results.** In: Physica Status Solidi a, Band 51, (1979), Seite 217-226
- [89] S.ISOMAE, T.TAMAKI, A.YAJIMA, M.NANBA, M.MAKI: **Dislocation Generation at Si₃N₄ Edges on Silicon Substrates and Viscoelastic Behavior of SiO₂ Films.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 126, Nr. 6, (June 1979), Seite 1014-1019
- [90] P.G.BORDEN: **A simple technique for determining the stress at the Si/SiO₂ interface.** In: Applied Physics Letters, Band 36, Nr. 10, (15.5.1980), Seite 829-830
- [91] G.FRANZ, G.HARTMANN: **High-Temperature Real-Time Studies of Lattice Strains Induced by Localized Oxidation of Silicon.** In: Applied Physics, Band 23, (1980), Seite 107-112
- [92] E.A.IRENE, E.TIERNEY, J.ANGILELLO: **A Viscous Flow Model to Explain the Appearance of High Density Thermal SiO₂ at Low Oxidation Temperatures.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 129, Nr. 11, (Nov. 1982), Seite 2594-2597
- [93] Z.C.FENG, H.D.LIU: **Generalized Formula for curvature radius and layer stresses caused by thermal strain in semiconductor multilayer structures.** In: Journal of Applied Physics, Band 54, Nr. 1, (Jan. 1983), Seite 83-85
- [94] T.HATTORI, T.SUZUKI: **Si-SiO₂ interface structures on Si(100), (111), and (110) surfaces.** In: Applied Physics Letters, Band 43, Nr. 5, (1.9.1983), Seite 470-472
- [95] H.GUCKEL, T.RANDAZZO, D.W.BURNS: **A simple technique for the determination of mechanical strain in thin films with applications to Polysilicon.** In: Journal of Applied Physics, Band 57, Nr. 5, (1.3.1985), Seite 1671-1675
- [96] R.PEOPLE, J.C.BEAN: **Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for Ge_xSi_{1-x}/Si strained-layer heterostructures.** In: Applied Physics Letters, Band 47, Nr. 3, (1.9.85), Seite 322-324
- [97] M.G.ALLEN, M.MEHREGANY, R.T.HOWE, S.D.SENTURIA: **Micofabricated structures for the in situ measurement of residual stress, Young's modulus, and ultimate strain of thin films.** In: Applied Physics Letters, Band 51, Nr. 4, (27.7.1987), Seite 241-243
- [98] W.ZULEHNER: **Reinstsilizium für die Mikroelektronik.** In: mikroelektronik, Band 2, (1988), Seite 154-157
- [99] V.M.KOLESHKO, V.F.BELITSKY, I.V.KIRYUSHIN: **Mechanical stresses in low pressure chemical vapor deposited silicon films.** In: Thin Solid Films, Band 165, (1988), Seite 181-191
- [100] Y.NISHINO, T.IMURA: **Viscoelastic Behavior of Oxide Films on Silicon Crystals.** In: Physica Status Solidi a, Band 74, (1982), Seite 193-200
- [101] D.SPITZER, G.STEINMANN: **Stress study oxide, nitride.** In: IBM confidential, Kst. 0348 (Aug. 1989)
- [102] DR. BISCHOFF, HERAEUS GMBH: **Materialwerte Si.** W.C.Heraeus GmbH, Postfach 1553, 6450 Hanau 1, 11.1.1990

- [103] C.W.WILMSEN, E.G.THOMPSON, G.E.MEISSNER: **Buckling of Thermally-Grown SiO₂ Thin Films.** In: IEEE Transactions on Electron Devices, (Jan. 1972), Seite 122
- [104] K.E.BEAN, P.S.GLEIM, R.L.YEAKLEY, W.R.RUNYAN: **Some Properties of Vapor-Deposited Silicon Nitride Films Using the SiH₄-NH₃-H₂-System.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 114, Nr. 7, (July 1967), Seite 733ff
- [105] N.KATO: **Dynamical Diffraction Theory of Waves in Distorted Crystals. I General Formulation and Treatment for Perfect Crystals. II Perturbation Theory.** In: Acta Crystallographica, Band 16, (1963), Seite 282
- [106] S.TAKAGI: **Dynamical Theory of Diffraction Applicable to Crystals with Any Kind of Small Distortion.** In: Acta Crystallographica, Band 15, (1962), Seite 1311-1312
- [107] C.M.DRUM, M.J.RAND: **Chemical Vapor Deposition of a Low-Stress Insulating Film on Silicon.** (Abstract) In: Journal of the Electrochemical Society, Band 115, Nr. 7, (July 1968), Seite 194C
- [108] H.J.LEU, R.O.SCATTERGOOD: **Sliding contact fracture on glass and silicon.** In: Journal of Materials Science, Band 23, (1988), Seite 3006-3014
- [109] Y.EPELBOIN: **A Varying-Step Algorithm for Numerical Integration of Takagi-Taupin Equations.** In: Acta Crystallographica, Band A39, (1983), Seite 761-767
- [110] H.IBACH: **Thermal Expansion of Silicon and Zinc Oxide (I).** In: Physica Status Solidi, Band 31, (1969), Seite 625-634
- [111] J.M.FAIRFIELD, J.K.HOWARD, G.H.SCHWUTTKE: **Stress Effects in Masking Films on Silicon.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 6, Nr. 3-4, (March-April 1968), Seite 110-113
- [112] M.MURAKAMI: **Thermal Strain in Lead Thin Films. II: Strain Relaxation Mechanisms.** In: Thin Solid Films, Band 55, (1978), Seite 101-111
- [113] G.SIMMONS, H.WANG: **Single Crystal Elastic Constants.** Cambridge, MA, : MIT Press, 2nd 1971
- [114] W.A.WESTDORP, G.H.SCHWUTTKE: **Stress Effects in Silicon Nitride Films on Silicon.** (Abstract) In: Journal of the Electrochemical Society, Band 115, Nr. 11, (Nov. 1968), Seite 326C
- [115] M.MURAKAMI, T.S.KUAN: **Thermal Strain in Lead Thin Films. V: Strain Relaxation Above Room Temperature.** In: Thin Solid Films, Band 66, (1980), Seite 381-394
- [116] V.M.KOLESHKO, V.F.BELITSKY, I.V.KIRYUSHIN: **Stress Relaxation in Thin Aluminium Films.** In: Thin Solid Films, Band 142, (1986), Seite 199-212
- [117] G.HARBEKE, L.KRAUSBAUER, E.F.STEGMEIER, H.F.KAPPERT, G.NEUGEBAUER: **LPCVD Polycrystalline Silicon: Growth and Physical Properties of In-Situ Phosphorus Doped and Undoped Films.** In: RCA Review, Band 44, (1983), Seite 287
- [118] H.J.FROST, M.F.ASHBY: **Deformation-Mechanism-Maps.** Oxford OX3 0BW, England: Pergamon Press, 1.Aufl. 1982.
- [119] K.SUMINO: **Dislocations in Silicon Crystals.** In: J.Nishizawa (ed.): Semiconductor Technologies, Kap. 3. Amsterdam: North Holland, 1983.
- [120] E.A.IRENE: **Silicon oxidation studies: A revised model for thermal oxidation.** In: Journal of Applied Physics, Band 54, Nr. 9, (Sept. 1983), Seite 5416-5420

- [123] T.C.TAYLOR: **Thermally-Induced Cracking in the Fabrication of Semiconductor Devices.** In: IRE Transactions on Electron Devices, Band ED6, (July 1959), Seite 299-310
- [124] E.M.CONWELL: **Properties of Silicon and Germanium.** In: Proceedings of the IRE, (Nov. 1952), Seite 1327-1337
- [125a] C.J.GALLAGHER: **Plastic Deformation of Germanium and Silicon.** In: The Physical Review, Band 88, Nr. 4, (Nov. 1952), Seite 721-722
- [125b] F.SEITZ: **The Plasticity of Silicon and Germanium.** In: The Physical Review, Band 88, Nr. 4, (Nov. 1952), Seite 722-724
- [126] J.T.FITCH, G.LUCOVSKY, E.KOBEDA, E.A.IRENE: **Effects of thermal history on stress-related properties of very thin films of thermally grown silicon dioxide.** In: Journal of Vacuum Science and Technology, Band B7, Nr. 2, (March-April 1989), Seite 153-162
- [127] E.KOBEDA, E.A.IRENE: **In situ stress measurements during thermal oxidation of silicon.** In: Journal of Vacuum Science and Technology, Band B7, Nr. 2, (March-April 1989), Seite 163-166
- [128] G.SCHORER, G.STEINMANN: **Charakterisierung Strukturanalyse.** In: IBM intern, (März 1989), 22 Seiten
- [129] IBM / MARCUS,SHENG: **Fotos von Bird's-Beak-Querschnitten.**
- [130] M.FRÖHLICH, K.VIELHAUER: **Process Description.** IBM Confidential, 26 Seiten, 4.6.1989
- [131] IBM CONFIDENTIAL: **Prozessführung Gazelle.**
- [132] WACKER-CHEMITRONIC: **Wacker-Chemitronic GmbH, Postfach 1140, 8263 Burghausen**
- [133a] A.D.WEISS: **Substrates Review: Silicon, Sapphire, & GaAs.** In: Semiconductor International, (June 1966)
- [133b] H.C.AUFDERHAAR, UNION CARBIDE CORP.: **Silicon.** Heraeus GmbH, Postfach 1553, 6450 Hanau
- [134] IBM BURLINGTON: **Videofilm: Die FEM-Programme FIELDAY, FEDSS und Damocles.**
- [135] A.BOHG, A.K.GAIND: **Influence of film stress and thermal oxidation on the generation of dislocations in silicon.** In: Applied Physics Letters, Band 33, Nr. 10, (15.11.1978), Seite 895-897
- [136] E.BASSOUS, H.N.YU, V.MANISCALCO: **Topology of Silicon Structures with Recessed SiO₂.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 123, Nr. 11, (Nov. 1976), Seite 1729-1736
- [137] A.K.GAIND, G.K.ACKERMANN, V.J.LUCARINI, R.L.BRATTER: **Oxynitride Deposition Kinetics in a SiH₄-CO₂-NH₃-H₂- System.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 124, (1977), Seite 599
- [138] A.K.GAIND, G.K.ACKERMANN, V.J.LUCARINI, R.L.BRATTER: **Preparation and Properties of SiO₂ Films from SiH₄-CO₂-H₂.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 123, (1976), Seite 111
- [139] I.MAGDO, A.BOHG: **Framed Recessed Oxide Scheme for Dislocation-Free Planar Si Structures.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 125, Nr. 6, (June 1978), Seite 932-936

- [139] I.MAGDO, A. BOHG: **Framed Recessed Oxide Scheme for Dislocation-Free Planar Si Structures.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 125, Nr. 6, (June 1978), Seite 932-936
- [140] A.K.GAIND, E.W.HEARN: **Physicochemical Properties of Chemical Vapor-Deposited Silicon Oxynitride from a $\text{SiH}_4\text{-CO}_2\text{-NH}_3\text{-H}_2$ System.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 125, Nr. 1, (Jan. 1978), Seite 139-145
- [141] D.F.GIBBONS: **Thermal Expansion of Some Crystals With the Diamond Structure.** In: The Physical Review, Band 112, Nr. 1, (1.10.1958), Seite 136-140
- [142] P.R.DAWSON, E.G.THOMPSON: **Finite Element Analysis of Steady-State Elasto-Visco-Plastic Flow by the Initial Stress-Rate Method.** In: International Journal for Numerical Methods in Engineering, Band 12, (1978), Seite 47-57
- [143] RH.CARR, RD.McCAMMON, GK.WHITE: **Thermal Expansion of Germanium and Silicon at Low Temperatures.** In: The Philosophical Magazine, Band 12, (July-Dec 1965), Seite 157-163
- [144] H.G.BRION, H.SIETHOFF, W.SCHERTER: **New stages in stress-strain curves for germanium at high temperatures.** In: The Philosophical Magazine, Band A43, (1981), Seite 1505
- [145] H.MIYOSHI, N.TSUBOUCHI, A.NISHIMOTO: **Selective Oxidation of Silicon in High Pressure Steam.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 125, Nr. 11, (Nov. 1978), Seite 1824-1829
- [146] S.M.HU: **Properties of amorphous silicon nitride films.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 113, Nr. 7, (July 1966), Seite 693-698
- [147] S.M.HU: **Effect of process parameters on stress development in two-dimensional oxidation.** In: Journal of Applied Physics, Band 64, Nr. 1, (1.7.1988), Seite 323-330
- [148] A.B.KINZEL, T.R.CUNNINGHAM: **Pure Silicon.** In: Metals Technology, Band 6, (Jan 1939), Seite T.P.1138
- [149] A.AUTHIER, C.MALGRANGE, M.TOURNAIRE: **Etude Théorique de la Propagation des Rayons X dans un Crystal Parfait ou Légèrement Déformé.** In: Acta Crystallographica, Band A24, (1968), Seite 126-136
- [150] D.J.D.THOMAS: **The Effect of Heat Treatment on Silicon Nitride Layers on Silicon.** In: Physica Status Solidi, Band 20, (1967), Seite 131-142
- [151a] CORNING GLASS WORKS: **Properties of Corning's Glass and Glass Ceramic Families.** Corning NY: Corning Glass Works, 1979
- [151b] CORNING GLASS WORKS: **Fused Silica.** Corning NY: Corning Glass Works, 1989.
- [151c] KIRK-OTHMER: **Vitreous Silica** In: Encyclopedia of Chemical Technology, vol. 30 New York: John Wiley, 3.Auflage 1982.
- [152] P.DONNADIEU, O.JAOUL, M.KLÉMAN: **Plasticité de la silice amorphe de part et d'autre de la transition vitreuse.** In: The Philosophical Magazine A, Band 52, Nr. 1, (1985), Seite 5-17
- [153] W.HARTMANN, G.FRANZ: **Real-time x-ray topography studies of the viscoelastic behavior of SiO_2 in the system Si/ SiO_2 .** In: Applied Physics Letters, Band 37, Nr. 11, (1.12.1980), Seite 1004-1005
- [154] J.S.SIMMONS, R.K.MOHR, C.J.MONTROSE: **Non-Newtonian viscous flow in glass.** In: Journal of Applied Physics, Band 53, Nr. 6, (June 1982), Seite 4075-4080

- [156] C.S.RAFFERTY, L.M.LANDSBERGER, R.W.DUTTON, W.A.TILLER: **Nonlinear viscoelastic dilation of SiO₂ films.** In: Applied Physics Letters, Band 54, Nr. 2, (9.1.1989), Seite 151-152
- [157] C.S.RAFFERTY, L.BORUCKI, R.W.DUTTON: **Plastic flow during thermal oxidation of silicon.** In: Applied Physics Letters, Band 54, Nr. 16, (17.4.1989), Seite 1516-1518
- [158] J.H.LI, D.R.UHLMANN: **The Flow of Glass at High Stress Levels. I Non-Newtonian Behavior of Homogeneous 0,08Rb₂O-0,92SiO₂ Glasses.** In: Journal of Non-Crystalline Solids, Band 3, (1970), Seite 127-147
- [159] H.SUNAMI, Y.ITOH, K.SATO: **Stress and Thermal Expansion of Chemical-Vapor-Deposited Glass Films.** In: Journal of Applied Physics, Band 41, Nr. 13, (Dec. 1970), Seite 5115-5117
- [160] G.CHARITAT, A.MARTINEZ: **Stress evolution and point defect generation during oxidation of silicon.** In: Journal of Applied Physics, Band 55, Nr. 4, (15.2.84), Seite 909-913
- [161] D.HARDIE, K.H.JACK: **Crystal Structures of Silicon Nitride.** In: Nature, Band 180, Nr. 4581, (17.8.1957), Seite 332-333
- [162] D.B.FRASER: **Factors Influencing the Acoustic Properties of Vitreous Silica.** In: Journal of Applied Physics, Band 39, Nr. 13, (Dec. 1968), Seite 5868-5878
- [163] S.M.HU: **A method for finding critical stresses of dislocation movement.** In: Applied Physics Letters, Band 31, Nr. 3, (1.9.1977), Seite 139-141
- [164] H.ALEXANDER, P.HAASEN: **Dislocations and Plastic Flow in the Diamond Structure.** In: Solid State Physics, Band 22, (1968), Seite 27
- [165a] J.W.EDINGTON: **Interpretation of Transmission Electron Micrographs.** Philips Technical Library, Band 3. London: MacMillan Press, 1.Auflage 1975
- [165b] J.W.EDINGTON: **Typical Electron Microscope Investigations.** Philips Technical Library, Band 4. London: MacMillan Press, 1.Auflage 1975
- [166] S.M.SZE: **VLSI Technology.** New York: McGraw-Hill, 1983.
- [167] E.RANK: **Local Oxidation of Silicon - A Finite Element Approach.** In: R.E. Bank, R.Bulirsch, K.Merten (Eds.): **Mathematical Modelling and Simulation of Electrical Circuits and Semiconductor Devices.** Basel: Birkhuser, 1990.
- [168] ROBERT BOSCH GMBH (ED.): **Kraftfahrtechnisches Taschenbuch.** Düsseldorf: VDI-Verlag, 20. Aufl. 1987.
- [169] J.D.MEINDL: **Chips für künftige Computergenerationen.** In: Spektrum der Wissenschaft, Nr. 12, (Dez. 1987), Seite 64-71
- [170] T.Y.TAN, U.GSELE: **Growth kinetics of oxidation-induced stacking faults in silicon: A new concept.** In: Applied Physics Letters, Band 39, Nr. 1, (1.7.1981), Seite 86-88
- [171a] W.A.TILLER: **On the Kinetics of the Thermal Oxidation of Silicon. I A Theoretical Perspective.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 127, Nr. 3, (March 1980), Seite 619-624
- [171b] W.A.TILLER: **On the Kinetics of the Thermal Oxidation of Silicon. II Some Theoretical Evaluations.** In: Journal of the Electrochemical Society, Band 127, Nr. 3, (March 1980), Seite 625-631
- [172] S.P.NIKANOROV, Y.A.BURENKOV, A.V.STEPANOV: **Elastic Properties of Silicon.** In: Soviet Physics of the Solid State, Band 13, Nr. 10, (April 1972), Seite 2516-2518

- [172] S.P.NIKANOROV, Y.A.BURENKOV, A.V.STEPANOV: **Elastic Properties of Silicon.** In: Soviet Physics of the Solid State, Band 13, Nr. 10, (April 1972), Seite 2516-2518
- [173] A.I.GUBANOV, S.Y.DAVIDOV: **Temperature Dependence of the Elastic Constants for Crystals Having the Diamond Structure.** In: Soviet Physics of the Solid State, Band 14, Nr. 2, (Aug. 1972), Seite 372-375
- [174] Y.A.BURENKOV, S.P.NIKANOROV: **Temperature Dependence of Elastic Constants of Silicon.** In: Soviet Physics of the Solid State, Band 16, Nr. 5, (Nov. 1974), Seite 963-964
- [175] H.SIETHOFF, P.HAASEN: **Yield Point and Dislocation Mobility in Silicon.** In: R.R.Hasiguti (Ed.): Lattice Defects in Semiconductors. Tokyo: University of Tokyo, 1968.
- [176] G.L.PEARSON, F.L.VOGEL: **Plastic Deformation of Semiconductors.** In: A.F. Gibson (Ed.): Progress in Semiconductors. London: Heywood & Co., 1968.
- [177] H.F.STERLING, R.C.G.SWANN: **Chemical Vapour Deposition Promoted by r.f. Discharge.** In: Solid-State-Electronics, Band 8, (1965), Seite 653-654
- [178] L.VEGARD: **Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome.** In: Zeitschrift für Physik, Band 5, (1921), Seite 17-26
- [179] H.J.MCSKIMIN, P.ANDREATCH JR.: **Elastic Moduli of Silicon vs Hydrostatic Pressure at 25.0°C and -195.8°C.** In: Journal of Applied Physics, Band 35, Nr. 7, (July 1964), Seite 2161-2165
- [180] E.P.EERNISSE: **Viscous flow of thermal SiO₂.** In: Applied Physics Letters, Band 30, Nr. 6, (15.3.1977), Seite 290-292
- [181] S.M.HU: **Film-edge induced stress in silicon substrate.** In: Applied Physics Letters, Band 32, Nr. 1, (1.1.1978), Seite 5-7
- [182a] A.SEIDL: **A Multigrid Method for Solution of the Diffusion Equation in VLSI Process Modeling.** In: IEEE Transactions on Electron Devices, Band ED-30, Nr. 9, (Sept. 1983), Seite 999-1004
- [182b] K.A.SALSBURG, H.H.HANSEN: **FEDSS - Finite-Element Diffusion-Simulation System.** In: IEEE Transactions on Electron Devices, Band ED-30, Nr. 9, (Sept. 1983), Seite 1004-1011
- [183a] R.W.DUTTON: **Modeling of the Silicon Integrated-Circuit Design and Manufacturing Process.** In: IEEE Transactions on Electron Devices, Band EC-30, Nr. 7, (July 1983), Seite 968-986.
- [183b] B.R.PENUMALLI: **A Comprehensive Two-Dimensional VLSI Process Simulation Program, BICEPS.** In: IEEE Transactions on Electron Devices, Band EC-30, Nr. 7, (July 1983), Seite 986-992
- [184] D.CHIN, S.Y.OH, R.W.DUTTON: **A General Solution Method for the Two-Dimensional Nonplanar Oxidation.** In: IEEE Transactions on Electron Devices, Band EC-30, Nr. 7, (July 1983), Seite 993-998
- [185] D.CHIN, S.Y.OH, S.M.HU, R.W.DUTTON, J.L.MOLL: **Two-Dimensional Oxidation.** In: IEEE Transactions on Electron Devices, Band EC-30, Nr. 7, (July 1983), Seite 744-749
- [186] E.KOBEDA, E.A.IRENE: **SiO₂ film stress distribution during thermal oxidation of Si.** In: Journal of Vacuum Science and Technology, Band B6, Nr. 2, (March/April 1988), Seite 574-578.

- [187] S.M.HU, S.P.KLEPNER, R.O.SCHWENKER, D.K.SETO: **Dislocation propagation and emitter edge defects in Silicon wafers.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 47, Nr. 9, (Sept. 1976), Seite 4098-4106
- [188] Y.A.BURENKOV, S.P.NIKANOROV, A.V.STEPANOV: **Elastic Properties of Germanium.** In: *Soviet Physics of the Solid State*, Band 12, Nr. 8, (Feb. 1971), Seite 1940-1942
- [189] G.G.STONEY: **The Tension of Metallic Films Deposited by Electrolysis.** In: *Proceedings of the Royal Society of London*, Band A82, (Jan. 1909), Seite 172-175
- [190] E.KOBEDA, E.A.IRENE: **A measurement of intrinsic SiO₂ film stress resulting from low temperature thermal oxidation of silicon.** In: *Journal of Vacuum Science and Technology*, Band B4, Nr. 3, (May/June 1986), Seite 720-722
- [191] B.E.DEAL: **Thermal Oxidation Kinetics of Silicon in Pyrogenic H₂O and 5% HCl/H₂O Mixtures.** In: *Journal of the Electrochemical Society*, Band 125, Nr. 4, (April 1978), Seite 576ff
- [192] D.W.HESS, B.E.DEAL: **Kinetics of the Thermal Oxidation of Silicon in O₂/HCl Mixtures.** In: *Journal of the Electrochemical Society*, Band 124, Nr. 5, (März 1977), Seite 735-739
- [193] W.D.KINGERY ET AL.: **Introduction to Ceramics.** New York: Wiley-Interscience, 1976.
- [194] D.R.UHLMANN, N.J.KREIDL: **Glass: Science and Technology. Volume 3: Viscosity and Relaxation.** Orlando: Academic Press, 1986.
- [195] H.EYRING: **Viscosity, Plasticity, and Diffusion as Examples of Absolute Reaction Rates.** In: *Journal of Chemical Physics*, Band 4, (April 1936), Seite 283-291
- [196] HERAEUS QUARZSCHMELZE: **Quarzglas und Quarzglas.** Heraeus Quarzschmelze GmbH, 6450 Hanau 1, Pf.1554, 1985.
- [197] E.P.EERNISSE: **Stress in thermal SiO₂ during growth.** In: *Applied Physics Letters*, Band 35, Nr. 1, (1.7.1979), Seite 8-10
- [198] D.B.KAO, J.P.VITTIE, W.D.NIX, K.C.SARASWAT: **Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon - II. Modeling Stress Effects in Wet Oxides.** In: *IEEE-Transactions on Electron Devices*, Band ED-35, Nr. 1, (Jan. 1988), Seite 25-37
- [199] M.SAUVAGE, D.SIMON: **Reactions between Perfect Dislocations in Semiconductor Devices.** In: *Physica Status Solidi*, Band 35, (1969), Seite 173-176
- [200a] P.PENNING, G.DEWIND: **Plastic Creep of Germanium Single Crystals in Bending.** In: *Physica*, Band 25, (1959), Seite 765-774
- [200b] H.G.VAN BUEREN: **Theory of Creep of Germanium Crystals.** In: *Physica*, Band 25, (1959), Seite 775-791
- [201] D.G.BRANDON, D.ELIEZER: **The Mechanical Properties of Anodically Formed Aluminium Oxide Films.** In: *Materials Research Bulletin*, Band 6, (1971), Seite 153-162
- [202] J.OTTO, W.THOMAS: **Die thermische Ausdehnung von Quarzglas im Temperaturbereich von 0 bis 1060°C.** In: *Zeitschrift für Physik*, Band 175, (1963), Seite 337-344
- [203] S.MADER: **Interaction of Mechanical Stress with Residual Defects in Implanted Si.** In: *JEM*, Band 9, Nr. 6, (1980), Seite 963-976
- [204] E.A.IRENE: **Residual Stress in Silicon Nitride Films.** In: *JEM*, Band 5, Nr. 3, (1976), Seite 287-298

- [205] B.REPPICH, P.HAASEN, B.ILSCHNER: **Kriechen von Silizium-Einkristallen.** In: *Acta Metallurgica*, Band 12, (November 1964), Seite 1283-1288
- [206] R.J.JACCODINE, W.A.SCHLEGEL: **Measurements of Strains at Si-SiO₂-Interface.** In: *Journal of Applied Physics*, Band 37, Nr. 6, (May 1966), Seite 2429-2434
- [207] F.SHIMURA: **Semiconductor Silicon Crystal Technology.** London: Academic Press, 1988.
- [208] R.W.K.HONEYCOMBE: **The Plastic Deformation of Metals.** London: Arnold, 2.Auflage, 1984.
- [209] D.L.PULFREY, N.G.TARR: **Introduction to Microelectronic Devices.** London: Prentice-Hall, 1989.
- [210] J.CASTAING, P.VEYSSIRE, L.P.KUBIN, J.RABIER: **The plastic deformation of silicon between 300°C and 600°C.** In: *The Philosophical Magazine a*, Band 44, Nr. 6, (1981), Seite 1407-1413
- [211] Y.PARK, IBM BURLINGTON: **Materialwerte Si und Si₃N₄.** Private Mitteilung: IBM-Note 28.3.1990
- [212] J.S.SMOTKO: **Experiments to Produce Ductile Silicon.** In: London: Field Information Agency, Technical (FIAT) Final Report Nr. 789, (1946). (in Deutschland z.Zt. nicht erhältlich).
- [214] J.A.KING (ED.): **Materials Handbook for Hybrid Microelectronics.** Norwood, MA: Artech House, 1988.
- [215] P.SUTARDJA, W.G.OLDHAM: **Modeling of Stress Effects in Silicon Oxidation.** In: *IEEE Transactions on Electron Devices*, Band 36, Nr. 11, (Nov. 1989), Seite 2415-2421
- [216] D.B.KAO, J.P.McVITTIE, W.D.NIX, K.C.SARASWAT: **Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon - I. Experiments.** In: *IEEE-Transactions on Electron Devices*, Band ED-34, Nr. 5, (May 1987), Seite 1008-1017
- [217] I.YONENAGA, K.SUMINO: **Dislocation Dynamics in the Plastic Deformation of Silicon Crystals. I Experiments.** In: *Physica Status Solidi a*, Band 50, (1978), Seite 685-693
- [218] S.MAHAJAN, D.BRASEN, P.HAASEN: **Lüders Bands in Deformed Silicon Crystals.** In: *Acta Metallurgica*, Band 27, (1979), Seite 1165-1173
- [219] P.HAASEN, A.SEEGER: **Plastische Verformung von Halbleitern und ihr Einfluß auf die elektrischen Eigenschaften.** In: W.Schottky (Ed.): *Halbleiterprobleme IV.* Braunschweig: F.Vieweg & Sohn, 1958.
- [220] V.I.BELYI, A.V.RZHANOV (ED.): **Silicon Nitride in Electronics: Materials Science Monographs, 34.** Amsterdam: Elsevier, 1988.
- [221] L.SPIELHOFER: **Deutsche haben die Hand auf der Siliziumproduktion: Vor allem der Kauf von amerikanischen Unternehmen brachte "Old Germany" auf dem Weltmarkt voran.** In: *Stuttgarter Zeitung*, (17.4.90)
- [222] R.K.JAIN, R.J.VAN OVERSTRAETEN: **Calculation of the Diffusion Induced Stresses in Silicon.** In: *Physica Status Solidi a*, Band 25, (1974), Seite 125-130
- [223] R.A. EVANS: **Young's Modulus, Shear Modulus, and Poisson's Ratio of Silicon and Germanium.** In: *Journal of Applied Physics*, Band.36, Nr.1, (Jan.1965), Seite 153-156
- [224] S.TIMOSHENKO: **Analysis of Bi-Metal Thermostats.** In: *Journal of the Optical Society of America*, Bd.11 (1925) S.233

- [225] P.BALK: **The Si-SiO₂ System**. Amsterdam: Elsevier, 1988.
- [226] M.M.MYSHLYAEV, V.I.NIKITENKO, V.I.NESTERENKO: **Dislocation Structure and Macroscopic Characteristics of Plastic Deformation at Creep of Silicon Crystals**. In: *Physica Status Solidi a*, Band 36 (1969), Seite: 89-96
- [227] H.SHIMIZU, K.ITOH, T.SUGINO, I.TERAMOTO: **Improvement in Operation Lives of GaAlAs Visible Lasers by Introducing GaAlAs Buffer Layers**. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Band QE-17, Nr. 5, (May 1981), Seite 763-767
- [228] R.DINGLE, W.WIEGMANN: **Optical investigation of stress in the central GaAs layer of molecular-beam-grown Al_xGa_{1-x}As - GaAs - Al_xGa_{1-x}As structures**. In: *Journal of Applied Physics*, Band 46, Nr. 10, (Okt. 1975), Seite 4312-4315
- [229] F.K.REINHART, R.A.LOGAN: **Interface stresses of Al_xGa_{1-x}As - GaAs layer structures**. In: *Journal of Applied Physics*, Band 44, Nr. 7, (July 1973), Seite 3171-3175
- [230] G.HETHERINGTON, K.H.JACK, J.C.KENNEDY: **The viscosity of vitreous silica**. In: *Physics and Chemistry of Glasses*, Band 5, Nr.5, (Oct. 1964), Seite 130-136
- [231] S.PRUSSIN: **Generation and Distribution of Dislocations by Solute Diffusion**. In: *Journal of Applied Physics*, Band 32, Nr. 10, (Oct. 1961), Seite 1876-1881
- [232] S.M.HU: **Temperature Distribution and Stress in Circular Wafers in a Row During Radiative Cooling**. In: *Journal of Applied Physics*, Band 40, Nr. 11, (Oct. 1969), Seite 4413-4423
- [233] H.J.MCSKIMIN: **Measurement of Elastic Constants at Low Temperatures by Means of Ultrasonic Waves - Data for Silicon and Germanium Single Crystals, and for Fused Silicon**. In: *Journal of Applied Physics*, Band 24,(1953), Seite 988
- [234a] S.WEISSMANN: **Various topographic methods and their combination applied to materials science**. In: S.Weissmann, F.Balibar, J.F.Petroff (Eds.): *Applications of X-Ray Topographic Methods to Materials Science*. New York: Plenum Press, 1984.
- [234b] J.F.PETROFF: **Basic understanding of image formation in x-ray topography**. In: S.Weissmann, F.Balibar, J.F.Petroff (Eds.): *Applications of X-Ray Topographic Methods to Materials Science*. New York: Plenum Press, 1984.
- [235a] K.H.YANG, J.A.ENGELBRECHT: **Wafer Warpage and Stress Measurements Using a Simple Optical Imaging Technique**. In: G.H.Schwuttke (Ed.): *Characterization of Silicon*. IBM Technical Report, May 1981, Seite 55-64
- [235b] K.H.YANG, J.A.ENGELBRECHT, C.HOOGENDOORN: **A Comparison of the Optical Imaging Method with X-Ray and the Optical Interferometry Methods for Warpage and Stress Measurements**. In: G.H.Schwuttke (Ed.): *Characterization of Silicon*. IBM Technical Report, May 1981, Seite 65-72
- [236] J.HORNSTRA: **Dislocations in the Diamond Lattice**. In: *Journal of the Physics and Chemistry of Solids*, Band 5, (1958), Seite 129-141.
- [237] C.A.SWENSON: **Recommended Values for the Thermal Expansivity of Silicon from 0 to 1000 K**. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Band 12, Nr. 2, (1983), Seite 179-182.
- [1000] G.CERBE, H.HOFFMANN: **Einführung in die Wärmelehre**. Braunschweig: Westermann, 1968
- [1001] E.SCHMIDT: **Technische Thermodynamik**. Berlin: Springer, 10.Auflage 1963
- [1003] I.SZABÓ: **Höhere Technische Mechanik**. Berlin: Springer, 1977.

- [1005] K.A.RECKLING: **Plastizitätstheorie und ihre Anwendung auf Festigkeitsprobleme.** Berlin: Springer, 1967.
- [1006] H.LIPPMANN: **Mechanik des Plastischen Fließens.** Berlin: Springer, 1981.
- [1007] W.KLEBER: **Einführung in die Kristallographie.** Berlin: VEB Technik, 1969.
- [1008] J.F.NYE: **Physical Properties of Crystals.** Oxford: Clarendon Press, 1985.
- [1009] F.ZIEGLER: **Technische Mechanik der flüssigen und festen Körper.** Wien: Springer, 1985.
- [1010] B.A.BOLEY, J.H.WEINER: **Theory of Thermal Stresses.** New York: John Wiley, 1960.
- [1011] S.P.TIMOSHENKO: **Theory of Elastic Stability.** New York: McGraw-Hill, 1936.
- [1012] S.BHAGAVANTAM: **Crystal Symmetry and Physical Properties.** London: Academic Press, 1966.
- [1013] H.DIETMANN: **Vorlesungsskript: Methoden der elastisch-plastischen Festigkeitsberechnung.** Stuttgart: Lehrstuhl für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre: Prof. Dr. Ing. K.Kußmaul, 1988.
- [1014] H.G.HAHN: **Methode der finiten Elemente in der Festigkeitslehre.** Frankfurt: Akademische Verlagsgesellschaft, 1975.
- [1015] U.MEISSNER, A.MENZEL: **Die Methode der finiten Elemente.** Berlin: Springer, 1989.
- [1016] N.N.: **Abaqus User's Manual: Version 4.8.** Hibbitt, Karlsson & Sorensen, Inc. 35 South Angell Str., Providence, Rhode Island 02906
- [1017] N.N.: **Patran Plus User's Manual: Version 2.4.** Cosa Mesa, Cal 92626, 2975 Redhill Ave.: PDA Engineering, 1989
- [1018] M.V.ARDENNE, G.MUSIOL, S.REBALL (EDS): **Effekte der Physik und ihre Anwendungen.** Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1988.
- [1019] H.KOCKELMANN: **Vorlesungsmanuskript: Angewandte Spannungsanalyse.** Stuttgart: Lehrstuhl für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre: Prof. Dr. Ing. K.Kußmaul, 1988.
- [1020] N.N.: **Kleine Enzyklopädie Physik.** Frankfurt: Harri Deutsch, 1987.
- [1021] F.KOHLRAUSCH: **Praktische Physik.** Stuttgart: Teubner, 1985.
- [1022] K.WELLINGER, H.DIETMANN: **Festigkeitsberechnung.** Stuttgart: Kroener, 3. Aufl. 1976.
- [1023] DEUTSCHE GESELLSCHAFT FR METALLKUNDE: **Eigenstressungen: Entstehung-Berechnung-Messung-Bewertung.** Bericht eines Symposiums in Bad Nauheim 1979. Oberursel, Deutsche Gesellschaft fr Metallkunde, 1980.
- [1024] R.GLOCKER: **Materialprüfung mit Röntgenstrahlen.** Berlin: Springer, 1985.

