

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАТИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ**

Кафедра микроэлектроники

В.В. НЕЛАЕВ, В.Р. СТЕМПИЦКИЙ

**ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ
ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ.
ПРОГРАММА SSUPREM 4**

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

для курсов лекций и лабораторных работ по дисциплинам
для студентов специальностей

41 01 02 “Микро- и нанoeлектронные технологии и системы”

41 01 03 “Квантовые информационные системы”

всех форм обучения

Минск 2004

УДК 621.382.8.049.77(075)
ББК 32.859 я 7
Н 49

Рецензент:

профессор кафедры ЭТТ БГУИР, д-р техн. наук С.П. Кундас

Нелаев В.В.

Н 49 Технологическое проектирование интегральных схем. Программа SSuprem 4: Учеб. пособие для курсов лекций и лаб. работ по дисц. “Расчет и проектирование элементов интегральных схем и полупроводниковых приборов”, “Основы САПР в микроэлектронике”, “Моделирование технологических процессов микроэлектроники” для студ. спец. 41 01 02 “Микро- и нанозлектронные технологии и системы”, 41 01 03 “Квантовые информационные системы” всех форм обучения / В.В. Нелаев, В.Р. Стемпицкий.- Мн.: БГУИР, 2004.- 102 с.: ил.

ISBN 985-444-556-9

В пособии приведено описание физических моделей, используемых в программном комплексе ATHENA фирмы Silvaco для компьютерного моделирования, проектирования и оптимизации технологических процессов формирования приборов микроэлектроники, а также технологического маршрута изготовления интегральной схемы в целом.

УДК 621.382.8.049.77(075)
ББК 32.859 я 7

ISBN 985-444-556-9

© Нелаев В.В., Стемпицкий В.Р., 2004
© БГУИР, 2004

СОДЕРЖАНИЕ

Введение

Литература

1. Модели диффузии легирующих примесей

1.1. Модели диффузии легирующих примесей в кремнии

1.1.1. Математическое описание диффузии примесей

1.1.2. Общие уравнения

1.1.3. Модель диффузии Ферми

1.1.4. Модель сегрегации примесей

1.1.5. Двухмерная модель диффузии

1.1.6. Модель диффузии связанных пар примесь-дефект

1.1.7. Другие модели диффузии и их расширения

1.2. Модель диффузии легирующих примесей в поликремнии

1.2.1. Два потока диффузии примесей в поликремнии

1.2.2. Модель роста зерна поликремния

Литература

2. Модели окисления кремния

2.1. Математическое описание процесса окисления кремния

2.2. Численная реализация модели окисления кремния

2.3. Модель COMPRESS

2.4. Модель VISCOUS

2.5. Линейная константа скорости окисления

2.5.1. Ориентационная зависимость

2.5.2. Зависимость толщины оксида кремния от давления

2.5.3. Зависимость толщины оксида кремния от содержания хлора

2.5.4. Зависимость толщины оксида кремния от степени легирования

2.6. Параболическая константа скорости окисления

2.6.1. Зависимость толщины оксида кремния от давления

2.6.2. Зависимость толщины оксида кремния от содержания хлора

2.7. Смешанная окислительная среда

2.8. Аналитические модели окисления

Литература

3. Модель формирования силицидов

Литература

4. Модели ионной имплантации

4.1. Аналитические модели имплантации

4.1.1. Гауссово распределение ионно-имплантированных примесей

4.1.2. Распределение Пирсона ионно-имплантированных примесей

4.1.3. Моделирование имплантации в многослойную структуру

4.1.4. Построение двухмерных профилей

4.2. Моделирование имплантации методом Монте-Карло

Литература

5. Модели процесса осаждения

- 5.1. Алгоритм струны
- 5.2. Модель конформного осаждения
- 5.3. Модель химического осаждения из газовой фазы
- 5.4. Модель однонаправленного осаждения
- 5.5. Модель двунаправленного осаждения
- 5.6. Модель полусферического осаждения
- 5.7. Модель планетарного осаждения
- 5.8. Модель конического осаждения
- 5.9. Модели осаждения с использованием метода Монте-Карло

Литература

6. Модели травления

- 6.1. Изотропная модель травления
- 6.2. Модель реактивного ионного травления
- 6.3. Модель плазменного травления
- 6.4. Модель травления, ускоренного легированием
- 6.5. Модель травления с использованием метода Монте-Карло

7. Модели химико-механического полирования

- 7.1. Модель жесткого полирования
- 7.2. Модель мягкого полирования

Литература

8. Особенности моделей диффузии и ионной имплантации в сложных полупроводниках

- 8.1. Модели диффузии в сложных полупроводниках
- 8.2. Уравнение Пуассона
- 8.3. Модели диффузии в GaAs
 - 8.3.1. Донорные типы примесей
 - 8.3.2. Акцепторные примеси

Литература

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование, проектирование и оптимизация технологических процессов формирования приборов микроэлектроники, а также технологического маршрута изготовления интегральной схемы в целом (Technology Computer Aided Design – TCAD) являются важными и актуальными задачами современной микроэлектроники. Ознакомление и приобретение навыков работы в среде TCAD являются необходимыми компонентами подготовки и повышения квалификации профессиональных инженеров-проектировщиков интегральных схем.

Лидирующими разработчиками TCAD – международного стандарта в полупроводниковой промышленности являются фирмы Silvaco [1] и Avant! [2]. Поскольку программное обеспечение для TCAD фирмы Silvaco имеет определенные традиции использования на предприятиях электронной промышленности в странах СНГ и потенциально более распространено в Республике Беларусь, данное пособие посвящено описанию физических моделей технологических процессов микроэлектроники, реализованных в пакете ATHENA фирмы Silvaco. Очевидно, что эти физические модели с различными модификациями используются и в других пакетах TCAD.

ATHENA является составной частью программного комплекса с модульной архитектурой фирмы Silvaco, предназначенного для двумерного численного физического моделирования технологических процессов изготовления интегральных микросхем, включающего следующие пакеты и отдельные программы:

- SSuprem 4 –двухмерное проектирование, анализ и оптимизация технологического маршрута формирования кремниевых полупроводниковых структур. С ее помощью производится моделирование таких базовых технологических операций, как диффузия, окисление и ионная имплантация;
- ELITE –двухмерное топологическое проектирование, в том числе моделирование процессов осаждения и травления;
- OPTOLITH – моделирование двумерной оптической литографии;
- FLASH – моделирование технологии обработки сложных полупроводниковых материалов;
- ATLAS – моделирование приборов на основе кремниевой (программа S-Pisces), аморфной и поликристаллической (программа TFT) технологии, а также МОП приборов (программа Mercury) и HEMT (High Electron Mobility Transistor – транзистор на основе электронов с высокой подвижностью) – программа FastBlaze;
- Fast ATLAS и VICTORY – улучшенные модели для трехмерного моделирования технологии и приборов;
- VIPER – экстракция параметров Spice моделей из результатов натуральных и компьютерных экспериментов;
- CRUSADE – моделирование интегральных схем;
- RESILIENCE – физическое моделирование надежности интегральных схем;

- DISCOVERY – экстракция паразитных эффектов межсоединений;
- CELEBRITY – моделирование интегральных схем и верификация результатов моделирования.

Комплексы ATHENA и ATLAS реализуют современную концепцию виртуального проектирования технологии и производства интегральных схем Virtual Wafer Fabrication (VWF). Все этапы замкнутого процесса проектирования в среде TCAD Silvaco связаны через общую базу данных, что позволяет проектировщику оперативно рассчитать влияние изменений в схеме или технологии.

Для эффективного освоения пакета ATHENA рекомендуется предварительно ознакомиться с учебными пособиями [4, 5], в которых изложены физические модели и входной язык для задания на моделирование в среде одномерной программы Suprem II – одной из первых версий программы SSuprem 4.

Изложенный в пособии материал основан на Руководстве пользователю программного комплекса ATHENA [6].

Литература

1. <http://www.silvaco.com>
2. <http://www.synopsys.com>
3. МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов / Под ред. П. Антонетти и др.: Пер. с англ.- М.: Радио и связь, 1988.- 490 с.
4. Нелаев В.В. Программа Suprem II моделирования технологии изготовления интегральных схем: Метод. пособие.- Мн.: БГУИР, 1998, 26 с.
5. Нелаев В.В. Физическое моделирование технологических процессов в программе Suprem II: Учеб. пособие.- Мн.: БГУИР, 1998. 37 с.
6. ATHENA User's Manual. 2D Process simulation software. SILVACO International. November, 1998.

1. МОДЕЛИ ДИФФУЗИИ ЛЕГИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ

1.1. Модели диффузии легирующих примесей в кремнии

Модели диффузии в программе SSuprem 4 описывают перераспределение примесей и дефектов при термической обработке, обусловленное градиентом концентрации и внутренними электрическими полями.

Диффузия примесей и точечных дефектов описывается тремя основными моделями, которые выбираются пользователем:

- диффузионная модель Ферми;
- двухмерная диффузионная модель;
- полностью связанная диффузионная модель.

Все три модели основаны на концепции парной диффузии, согласно которой атом примеси диффундирует только в совокупности с точечным дефектом (междоузельным атомом кремния или вакансией). Если между ними существует постоянная связь, то они могут перемещаться только как единое целое (как пара). Точечный дефект, с другой стороны, может диффундировать как свободно, так и как компонент пары примесный атом-дефект, так что коэффициент диффузии свободного точечного дефекта может значительно отличаться от коэффициента диффузии точечного дефекта, связанного в паре. Указанные модели являются естественными расширениями друг друга в том смысле, что модель Ферми включается в двухмерную диффузионную модель, которая, в свою очередь, включается в полностью парную модель.

Диффузионная модель Ферми

В этой модели предполагается, что совокупность точечных дефектов находится в термодинамическом равновесии. Преимущество использования диффузионной модели Ферми состоит в быстром выполнении расчетов. Поскольку в этой модели точечные дефекты не рассматриваются отдельно, проводится моделирование только диффузии примесных атомов. По этой же причине модель Ферми не работает в том случае, когда совокупность точечных дефектов не находится в термодинамическом равновесии. Такая ситуация возникает при рассмотрении диффузии, усиленной окислением (Oxidation Enhanced Diffusion – OED), а также при моделировании диффузии в условиях высокого уровня радиационных повреждений, вызванных имплантацией примесей.

Двухмерная диффузия

В этой модели совокупность точечных дефектов представляется в явном виде, и при этом рассматривается ее эволюция со временем. В условиях перенасыщения точечными дефектами увеличение коэффициента диффузии примесей моделируется просто посредством введения масштабного множителя, который принимается равным единице при достижении равновесной

концентрации точечных дефектов. Следовательно, при равновесной концентрации точечных дефектов двухмерная модель сводится к модели Ферми, что с точки зрения вычислительной процедуры не является эффективным, поскольку не требуется строгого учета точечных дефектов. Диффузия примесей в существенной степени определяется диффузией точечных дефектов, тогда как диффузия точечных дефектов, с другой стороны, совершенно не зависит от диффузии примесей. С физической точки зрения это соответствует состоянию примесь – точечный дефект с нулевой энергией связи.

Модель диффузии связанных пар примесный атом – дефект

Эта модель совершенно идентична двухмерной модели диффузии, за исключением того, что в данной модели диффузия дефектов определяется диффузией примесей посредством добавления к потоку дефектов потока связанных пар примесь – точечный дефект. Таким образом, в этой модели учитываются два потока – поток примесей и поток дефектов, что и дало название этой модели. Однако с физической точки зрения эта оригинальная модель обладает недостатком, заключающимся в том, что при ее использовании затруднительно строго учесть доли дефектов и примесей, связанных и не связанных в пары. Таким образом, эта модель не может воспроизвести эффект насыщения коэффициента диффузии примеси, который наблюдается при очень высокой концентрации примесей, когда все дефекты связаны в пары. Другими словами, эта модель основана на предположении, что концентрация связанных пар гораздо ниже концентраций как примесей, так и вакансий.

Кроме того, во всех трех моделях используются следующие предположения:

- выполняется статистика Больцмана и отсутствуют внешние источники носителей заряда, так что справедливо использование следующего выражения для потенциала [1]:

$$\frac{q}{kT} \nabla \psi = \ln \left(\frac{n}{n_i} \right). \quad (1.1)$$

Если это предположение не выполняется, то необходимо решать уравнение Пуассона для расчета потенциала:

$$\nabla(\varepsilon \nabla \psi) = -\rho, \quad (1.2)$$

где ψ – потенциал; ε – диэлектрическая постоянная; ρ – плотность заряда;

- электрические процессы происходят гораздо быстрее, чем остальные процессы (адиабатическое приближение);
- взаимодействие примесей и дефектов в парах всегда носит равновесный характер;
- подвижные примеси являются электрически активными.

1.1.1. Математическое описание диффузии примесей

Для каждой рассматриваемой диффундирующей частицы (примеси или точечного дефекта) математическое описание диффузионной модели включает:

- уравнение непрерывности (часто называемое уравнением диффузии);
- один или более членов, описывающих потоки;
- граничные условия и условия на границах раздела фаз.

Поскольку примеси могут диффундировать только в составе пары примесь – точечный дефект, уравнение непрерывности для примеси представляет собой уравнение непрерывности для дефектно-примесных пар. В табл. 1.1 приведены стандартные обозначения для диффундирующих частиц, принятые в литературе.

Таблица 1.1

Стандарты обозначений диффузионных терминов

Физическая единица	Общий символ	Конкретные символы
Примесь	A	B, P, As, Sb, \dots
Точечный дефект	X	I, V
Зарядовое состояние	c	$x, -, =, +, ++$

Через x обозначается нейтральное зарядовое состояние частицы. Кроме того, в том случае, если используемая физическая величина или параметр зависят от температуры и отсутствует соответствующая формула, то полагается, что эта закономерность выражается в форме зависимости Аррениуса:

$$Q(T) = Q_0 \exp\left(-\frac{Q_E}{k_B T}\right). \quad (1.3)$$

Здесь, как обычно, Q_0 – предэкспоненциальный множитель; Q_E – энергия активации; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

1.1.2 Общие уравнения

Уравнение непрерывности для диффузии определенных частиц P в объеме полупроводникового материала представляется в форме простого уравнения Фика второго порядка [2]:

$$\frac{\partial C_P}{\partial t} = \nabla(-J_P) + S, \quad (1.4)$$

где C_P – полная концентрация частиц данного сорта, а свободный член S в

правой части уравнения учитывает все источники и стоки.

Уравнение непрерывности выражает закон сохранения количества частиц в данном объеме, а именно: скорость изменения количества частиц в единице объема равна скорости ухода частиц из объема вследствие диффузии плюс скорость создания новых частиц или их аннигиляции в объеме благодаря различным физическим механизмам источников или стоков. Поток частиц J_p представляется в виде следующего выражения:

$$J_p = -D_p(C_p)\nabla C_{p+} + C_{p+}\sigma E, \quad (1.5)$$

где через C_{p+} обозначается доля подвижных (из общего количества C_p), а также электрически активных частиц, а через σ – их подвижность. Из уравнения (1.5) следует, что в задаче о диффузии в полупроводнике имеются два основных вклада в поток частиц:

- вклад, определяющийся энтропией и пропорциональный градиенту концентрации подвижных частиц (коэффициент пропорциональности D_p называется коэффициентом диффузии);
- вклад дрейфового потока, пропорциональный величине локального электрического поля.

Если в рассматриваемой системе имеется несколько типов электрически заряженных частиц, то C_p устанавливает связь между ними, поскольку все заряженные частицы вносят вклад в общий поток частиц и в то же время зависят от локального электрического поля. Следует также отметить, что уравнение (1.5) нелинейно относительно C_p , поскольку как коэффициент диффузии D_p , так и электрическое поле E зависят от концентрации всех присутствующих частиц.

При условии термодинамического равновесия подвижность и коэффициент диффузии связаны между собой посредством соотношения Эйнштейна $D = \frac{kT}{q}\sigma$. Подставляя σ в (1.5), представляя заряд частицы как целое число Z_p , умноженное на элементарный заряд e , и используя выражение $E = -\Delta\Psi$, получаем выражение для потока:

$$J_p = -D_p(C)\left(\nabla C_{p+} + Z_p C_{p+} \frac{e}{kT} \nabla \Psi\right). \quad (1.6)$$

Граничные условия в математической форме выражаются в следующем виде:

$$\alpha \cdot C_p + \beta \cdot \partial_n C_p = R, \quad (1.7)$$

где α и β – действительные числа, а $\partial_n C_p$ обозначает поток C_p через границу. Член в правой части уравнения учитывает все источники на границе.

Используемые граничные условия:

- верхняя часть области моделирования (“поверхность”);
- границы раздела, где рассматриваемые частицы, значимые для данной области материалов (например, междоузлия на границе раздела кремний/диоксид кремния).

Условия на границах раздела используются для частиц, которые существуют в обеих областях материалов. Для каждой такой поверхности раздела необходимо определить:

- условие “скачка” концентрации;
- условие “скачка” потока.

Условие “скачка” концентрации учитывает нарушение непрерывности распределения концентрации частиц на границе раздела и объясняется как явлением сегрегации примесей, так и разностью в величинах твердой растворимости частиц в разных материалах. [Если имеется опция `ILFEM=TRUE` в директиве `METHOD`, то условие “скачка” концентрации на поверхности раздела выполняется по умолчанию вместо предположения о равновесии, что соответствует бесконечно высокой скорости переноса частиц через поверхность раздела. Следовательно, при наличии этой опции невозможно промоделировать явление нестационарной сегрегации].*

Условие “скачка” потока предполагает наличие на границе раздела источников или стоков частиц, таких как рекомбинация, инжекция частиц или скопление частиц на движущейся границе раздела.

Для всех частиц используются нулевые граничные условия для боковых сторон и для верхней части моделируемой структуры. Эти граничные условия не могут быть изменены пользователем.

1.1.3. Модель диффузии Ферми

[Модель диффузии Ферми устанавливается командой: `METHOD FERMI`].

В модели диффузии Ферми поведение каждой частицы описывается уравнением непрерывности в следующей форме:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \nabla \cdot \left[(D_{AV} + D_{AI})C_A + \nabla \ln \left(C_A + \left(\frac{n}{n_i} \right)^Z \right) \right], \quad (1.8)$$

где коэффициент $\frac{n}{n_i}$ под логарифмом учитывает эффект поля. Собственная концентрация n_i рассчитывается следующим образом:

* Здесь и далее по тексту в квадратных скобках приводится информация, выделенная курсивом, которая необходима при формировании задания на моделирование в SSuprem 4 на специализированном языке. При ознакомлении с физическими моделями, используемыми в SSuprem 4, эту информацию можно пропустить.

$$n_i = n_{i_0} \cdot \exp\left(-\frac{n_{iE}}{kT}\right) T^{n_{iPOW}}, \quad (1.9)$$

[где n_{i_0} , n_{iE} и $T^{n_{iPOW}}$ устанавливаются в директиве *MATERIAL* с помощью параметров *NI.0*, *NI.E* и *NI.POW* соответственно]. Показатель степени Z учитывает направление вектора электрического поля, действующего на диффундирующую частицу, и равен +1 для доноров и -1 для акцепторов.

Величины D_{AV} и D_{AI} представляют собой вклады в коэффициент диффузии примесей от пар примесь – вакансия и примесь – междоузлие в различных зарядовых состояниях [3]. Эти члены зависят как от положения уровня Ферми, так и от температуры и выражаются следующим образом:

$$D_{AV}\left(T \frac{n}{n_i}\right) = D_{AV}^X + D_{AV}^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^1 + D_{AV}^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 + D_{AV}^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + D_{AV}^{++} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}, \quad (1.10)$$

$$D_{AI}\left(T \frac{n}{n_i}\right) = D_{AI}^X + D_{AI}^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^1 + D_{AI}^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 + D_{AI}^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + D_{AI}^{++} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}, \quad (1.11)$$

где температурная зависимость в неявном виде включена в собственный коэффициент диффузии пары, который определяется законом Аррениуса в виде

$$D_{AX}^C = D_{AX_0}^C \cdot \exp\left(-\frac{D_{AXE}^C}{kT}\right). \quad (1.12)$$

Таблица 1.2

Обозначения предэкспоненциальных коэффициентов и энергий активации различных дефектно-примесных пар

Пара	Зарядовое состояние	Предэкспоненциальный коэффициент	Энергия активации
AV	x	DVX.0	DVS.E
AV	-	DVM.0	DVM.E
AV	=	DVMM.0	DVMM.E
AV	+	DVP.0	DVP.E
AV	++	DVPP.0	DVPP.E
AI	x	DIX.0	DIX.E
AI	-	DIM.0	DIM.E
AI	=	DIMM.0	DIMM.E
AI	+	DIP.0	DIP.E
AI	++	DIPP.0	DIPP.E

В табл. 1.2 приведены обозначения, используемые в задании на моделирование в SSuprem 4 для предэкспоненциальных коэффициентов и энергий активации различных дефектно-примесных пар.

Следует отметить, что существование пар с зарядовыми состояниями больше, чем 2, маловероятно, поэтому такие данные в табл. 1.2 отсутствуют.

1.1.4. Модель сегрегации примесей

Под явлением сегрегации подразумевается перенос частиц через поверхность раздела двух материалов с различными значениями предела твердой растворимости.

Граничные условия, а также условия на границе двух сред представляются в виде двух вкладов: один обусловлен сегрегацией, а другой – скоплением примесей на границах раздела.

В многослойной структуре явление сегрегации примесей возникает вдоль поверхности раздела двух материалов твердое тело/твердое тело или твердое тело/газ. Такая сегрегация описывается эмпирическими соотношениями посредством кинетической модели первого порядка для потока через границу раздела:

$$F_S = h_{12} \left(\frac{C_1}{M_{12}} - C_2 \right), \quad (1.13)$$

где C_1 и C_2 – концентрации частиц в непосредственной близости от поверхности раздела сред 1 и 2 соответственно; h_{12} – скорость переноса частиц через границу раздела и M_{12} – коэффициент сегрегации, определяемый следующим соотношением:

$$M_{12} = \frac{\text{твердая растворимость примеси в материале}_1}{\text{твердая растворимость примеси в материале}_2}. \quad (1.14)$$

Последние два коэффициента в выражении (1.13) – температурно-независимые параметры, которые учитывают перенос частиц через поверхность раздела и отношение растворимостей примесей в каждой области материала.

Из уравнения (1.14) следует соотношение

$$M_{21} = \frac{1}{M_{12}}. \quad (1.15)$$

Путем несложных алгебраических преобразований из уравнений (1.13) и (1.15)

получается соотношение для скорости переноса частиц через поверхность раздела:

$$h_{21} = M_{12}h_{12}. \quad (1.16)$$

Таким образом, для каждой совокупности (примесь, материал₁, материал₂) необходимо знать соответствующие параметры сегрегации.

Таблица 1.3
Системные параметры

Физическая величина	Предэкспоненциальный коэффициент	SEG.E
M	SEG.0	SEG.E
h	TRANS.0	TRANS.E

[Величины h и M могут быть определены в директиве `IMPURITY` посредством подстановки параметров из табл. 1.3.

Наименования двух материалов, разделенных значком (/), используются, чтобы показать их названия и порядок следования, а также соответствующие им параметры, например:

`IMPURITY I.PHOSPHORUS SILICON/OXIDE SEG.0=30 TRN.0=1.66E-7].`

Поскольку по определению в модели Ферми предполагается, что все точечные дефекты находятся в равновесии, нет необходимости для этих частиц вводить отдельные уравнения непрерывности или граничные условия. Кроме того, ни концентрация вакансий C_V , ни концентрация междоузлий C_I не присутствуют в явном виде в уравнениях (1.8), (1.10) и (1.11).

1.1.5 Двухмерная модель диффузии

[Двухмерная модель устанавливается по команде: `METHOD TWO.DIM`].

Двухмерная модель основана на модели Ферми, но пригодна также для точного расчета совокупности неравновесных точечных дефектов. В связи с этим имеется три различных уравнения: одно для примесей и по одному для каждого типа точечных дефектов.

Примеси

Уравнение непрерывности для примесей в этой модели имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \sum_{X=I,V} \nabla \left[\left(\frac{C_X}{C_X^*} D_{AX} \right) \left(C_A + \nabla \ln \left(C_A + \frac{C_X}{C_X^*} \left(\frac{n}{n_i} \right)^Z \right) \right) \right], \quad (1.17)$$

где C_x – концентрация точечных дефектов и обозначает соответствующую равновесную концентрацию точечных дефектов.

Следует отметить, что полный коэффициент диффузии зависит от равновесной совокупности точечных дефектов посредством умножения коэффициентов диффузии пар точечный дефект – примесь из уравнения (1.8) на нормализованную концентрацию дефектов [4]. Несмотря на феноменологический характер этой зависимости, она физически разумна и используется в большинстве моделей, учитывающих усиление диффузии примесей при окислении (Oxidation Enhanced Diffusion – OED) или в условиях переходных процессов (Transient Enhanced Diffusion – TED).

Выражение под оператором градиента представляет собой коэффициент, определяемый внешними дефектами. Он важен при рассмотрении той области моделирования, где резко изменяется профиль концентрации точечных дефектов.

Концентрации равновесных точечных дефектов зависят от температуры и уровня Ферми и могут быть рассчитаны из следующих выражений:

$$C_V^* = C_V^{*i} \frac{neu + neg \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+1} + dneg \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+2} + pos \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + dpos \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}}{neu + neg + dneg + pos + dpos}, \quad (1.18)$$

$$C_I^* = C_I^{*i} \frac{neu + neg \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+1} + dneg \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+2} + pos \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + dpos \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}}{neu + neg + dneg + pos + dpos}. \quad (1.19)$$

Величины C_V^{*i} и C_I^{*i} представляют собой собственные равновесные концентрации точечных дефектов, а весовые факторы neu , neg , $dneg$, pos и $dpos$ вводятся для учета распределения дефектов в различных зарядовых состояниях. Полагается, что все эти величины зависят от температуры и эта зависимость подчиняется закону Аррениуса согласно следующему выражению:

$$neu = neu_0 \exp\left(-\frac{neu_E}{kT}\right), \quad (1.20)$$

[где предэкспоненциальные коэффициенты и энергии активации назначаются пользователем в директивах `VACANCY` и `INTERSTITIAL` в соответствии с обозначениями, приведенными в табл. 1.4].

Таблица 1.4

Обозначения параметров для зарядовых состояний
и собственных концентраций точечных дефектов

Физическая величина	Предэкспоненциальный коэффициент	Энергия активации
<i>neu</i>	NEU.0	NEU.E
<i>neg</i>	NEG.0	NEG.E
<i>dneg</i>	DNEG.0	DNEG.E
<i>pos</i>	POS.0	POS.E
<i>dpos</i>	DPOS.0	DPOS.E
C_X^{*i}	CSTAR.0	CSTAR.E

Граничные условия и условия на границах раздела идентичны тем, которые используются в модели Ферми.

Междоузлия

Профиль распределения междоузлий рассчитывается согласно следующему уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = \nabla(-J_I) - R + \frac{\partial C_{ET}}{\partial t} + R_{\langle 311 \rangle}, \quad (1.21)$$

где R – скорость рекомбинации в объеме. Скорость рекомбинации представляет собой простую реакцию между междоузлиями и вакансиями и выражается следующим образом:

$$R = K_r (C_I C_V - C_I^* C_V^*). \quad (1.22)$$

Здесь K_r – коэффициент, [который можно установить, используя параметры $KR.0$ и $KR.E$ в директиве *INTERSTITIAL*].

Выражение для потока междоузлий [3]

$$-J_I = D_I C_I^* \nabla \left(\frac{C_I}{C_I^*} \right) \quad (1.23)$$

точно учитывает влияние электрического поля на заряженные междоузлия посредством градиента нормализованной концентрации междоузлий $\frac{C_I}{C_I^*}$, где D_I – коэффициент диффузии свободных междоузлий, который нельзя

смешивать с парным коэффициентом диффузии D_{Al} , описанным в разделе, посвященном модели Ферми.

[D_I можно назначить посредством использования директивы INTERSTITIAL SILICON D.0=<n> D.E=<n>].

Член $\frac{\partial C_{ET}}{\partial t}$ в уравнении (1.21) описывает эмиссию и захват междоузлий ловушками. Модель взаимодействия примесей с ловушками была предложена в работе [5] для объяснения широкого диапазона изменений коэффициентов диффузии при различных экспериментальных условиях. Уравнение для ловушек, которое описывает эволюцию совокупности ловушек в зависимости от времени, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_{ET}}{\partial t} = -K_T \left[C_{ET} C_I - \frac{e^*}{1 - e^*} C_I^* (C_T - C_{ET}) \right], \quad (1.24)$$

где C_T – полная концентрация ловушек, [определяемая параметром TOTAL в директиве TRAP]; K_T – скорость захвата ловушками; C_{ET} – концентрация ловушек; C_I – концентрация междоузлий; C_I^* – равновесная концентрация междоузлий; e^* – отношение концентраций ловушек, находящихся в равновесном состоянии, к полной концентрации ловушек ($e^* \equiv C_{ET} / C_T$) – табл. 1.5.

Таблица 1.5

Обозначения параметров для междоузельных ловушек

Физическая величина	Предэкспоненциальный коэффициент	Энергия активации
K_T	KT.0	KT.E
e^*	FRAC.0	FRAC.E
C_T	TOTAL	—

Уравнение для ловушек выводится из простой реакции:



или из простого уравнения:

$$\frac{\partial C_{ET}}{\partial t} = -K_T C_I C_{ET} + K_r (C_T - C_{ET}), \quad (1.26)$$

где K_r – скорость эмиссии из ловушек. В условиях равновесия левая часть уравнения (1.26) равна нулю, что дает

$$K_T C_I^* C_{ET}^* = K_r (C_T - C_{ET}^*) \Leftrightarrow K_r = K_T \frac{C_I^* (C_{ET}^* / C_T)}{1 - (C_{ET}^* / C_T)} = K_T C_I^* \frac{e^*}{1 - e^*}. \quad (1.27)$$

Подстановка этого значения для K_r в уравнение (1.26) приводит к выражению (1.24).

Член $R_{\langle 311 \rangle}$ в уравнении (1.21) обозначает скорость выхода междоузельных кластеров $\langle 311 \rangle$ из ловушек, которые наблюдаются посредством трансмиссионной электронной микроскопии в виде стержней, образуемых в результате высокодозной имплантации примесей в кремний. Поскольку большая доля (если не все) междоузлий существует в таком виде после имплантации [6], время растворения $\langle 311 \rangle$ междоузлий играет решающую роль в длительности TED. Такие объемные дефекты могут рассматриваться как карманы для междоузлий, распределенные в определенных частях областей легирования, и играют роль объемных источников точечных дефектов.

Полагается, что $\langle 311 \rangle$ дефекты образуются из избыточных междоузлий на ранней стадии термообработки сразу же после имплантации.

Скорость ухода кластеров из системы подчиняется простой экспоненциальной зависимости от времени:

$$R_{\langle 311 \rangle} = -\frac{\partial C_{\langle 311 \rangle}}{\partial t} = f(x) \left(\frac{1}{\tau} \right) \exp\left(-\frac{t}{\tau} \right), \quad (1.28)$$

где $f(x)$ – профиль распределения $\langle 311 \rangle$ кластеров (подобный имплантационному профилю); τ – временная константа в зависимости Аррениуса, которая задается в директиве CLUSTER (см. ниже). В зависимости от условий имплантации этот член может быть активным или неактивным. [Чтобы ввести профиль $\langle 311 \rangle$ кластеров в структуру, необходимо ввести следующие команды перед директивой, определяющей условия имплантации:

`METHOD CLUSTER.DAM`

`CLUSTER BORON MIN.CLUSTER=1.0E17 MAX.CLUSTER=1.0E19`

`CLUST.FAC=1.4 TAU.311.0=8.33e-16 TAU.311.E=-3.6 SILICON`

·
·
·

`IMPLANT ...`

По первой директиве подключается модель, а вторая директива задает условия для выдачи профиля распределения дефектов $\langle 311 \rangle$ соответственно заданному распределению примесей и временной константе. В этом примере кластеры располагаются в области подложки, а концентрация бора имеет значения между $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ с коэффициентом масштабирования, равным 1,4, относительно концентрации бора].

Отметим, что энергия активации для τ должна быть определена как

отрицательная величина, поскольку временная константа должна уменьшаться с увеличением температуры.

Как показано в работе [7], распределение междоузлий зависит от граничных условий для уравнения баланса потока:

$$\partial_n C_I + K_S (C_I - C_I^*) = g, \quad (1.29)$$

где $\partial_n C_I$ – проекция вектора потока междоузлий на единичный вектор, перпендикулярный границе; K_S – эффективная скорость рекомбинации междоузлий; g – генерационный член для учета инжекции междоузлий при отжиге в окислительной среде.

Другими словами, уравнение (1.29) описывает количество междоузлий, генерируемое на границе, минус количество рекомбинированных междоузлий и должно быть равно количеству междоузлий, которые диффундируют из поверхности раздела в подложку.

Эффективная скорость рекомбинации междоузлий K_S зависит от смещения поверхности раздела при окислении согласно выражению:

$$K_S = K_{surf} \left[K_{rat} \left(\frac{v_i}{v_{i-max}} \right)^{K_{pow}} + 1 \right], \quad (1.30)$$

где K_{surf} – коэффициент поверхностной рекомбинации для фиксированных поверхностей раздела; v_i – скорость смещения поверхности раздела; v_{i-max} – максимальная скорость смещения поверхности раздела; K_{rat} и K_{pow} – эмпирические параметры, используемые для калибровки скорости поверхностной рекомбинации междоузлий.

Поверхностная рекомбинация играет важную роль при релаксации измененных профилей распределения дефектов обратно к их равновесным значениям, что не может происходить только за счет объемной рекомбинации.

Движущая поверхность раздела может инжектировать точечные дефекты в кремний и поликремний.

[Для расчета скорости инжекции используются две модели - *TIME.INJ* и *GROWTH.INJ*].

1. Параметр *TIME.INJ* в директиве *VACANCY* или *INTERSTITIAL* активирует инжекционную модель, в которой присутствует зависимость от времени:

$$g = A(t + t_0)^{T_{pow}}, \quad (1.31)$$

где t – полное время диффузии в секундах; A , t_0 и T_{pow} – свободные параметры, используемые для калибровки.

Это выражение может быть использовано и для описания инжекции

вакансий из слоя нитрида кремния.

[Инжекционную модель с временной зависимостью можно использовать только при наличии опции `ILFEM=TRUE` в директиве `METHOD`].

2. Параметр `GROWTH.INJ` в директиве `VACANCY` или `INTERSTITIAL` активирует инжекционную модель, в которой присутствует зависимость от роста подложки:

$$g = \theta v_{mole} v_i \left(\frac{v_i}{v_{i-max}} \right)^{G_{pow}}, \quad (1.32)$$

где θ – доля атомов кремния, “затраченных” на окисление подложки и инжектируемых в объем; v_{mole} – решеточная плотность “затраченного” материала;

G_{pow} – параметр мощности.

Как правило, отношение $\theta / (K_{rat} - K_{surf})$ должно оставаться постоянной величиной при калибровке. Величины v_i и v_{i-max} имеют одинаковое значение, как показано выше.

[Максимальная скорость перемещения границы раздела v_{i-max} не может быть назначена пользователем. Она изменяется только при изменении параметров окисления].

В табл. 1.6 приведены обозначения параметров, используемых для назначения граничных и инжекционных условий при описании эволюции точечных дефектов.

Таблица 1.6

Обозначения параметров, используемых для назначения граничных и инжекционных условий при описании эволюции точечных дефектов

Физическая величина	Предэкспоненциальный множитель	Энергия активации
K_{surf}	KSURF.0	KSURF.E
K_{rat}	KRAT.0	KRAT.E
K_{pow}	KPOW.0	KPOW.E
A	A.0	A.E
t_0	t0.0	t0.E
T_{pow}	TPOW.0	TPOW.E
θ	THETA.0	THETA.E
v_{mole}	VMOLE	—
G_{pow}	GPOW.0	GPOW.E
K_{surf}	KSURF.0	KSURF.E

Вакансии

Уравнения для диффузии и потока вакансий, в основном, подобны соответствующим уравнениям для междоузлий:

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = \nabla(-J_V) - R, \quad (1.33)$$

где R – скорость объемной рекомбинации. Объемная рекомбинация представляет собой простую реакцию между вакансиями и междоузлиями и выражается следующим соотношением:

$$R = K_r (C_I C_V - C_I^* C_V^*). \quad (1.34)$$

Здесь K_r – коэффициент объемной рекомбинации, [который устанавливается посредством использования параметров $KR.0$ и $KR.E$ в директиве *INTERSTITIAL*].

Поток вакансий рассчитывается следующим образом:

$$-J_V = D_V C_V^* \nabla \left(\frac{C_V}{C_V^*} \right) \quad (1.35)$$

с корректным учетом влияния электрического поля на заряженные вакансии посредством использования градиента нормализованной концентрации $\frac{C_V}{C_V^*}$.

D_V – коэффициент диффузии свободных вакансий, который не следует смешивать с коэффициентом диффузии D_{AV} пары атом примеси – дефект, описанным в разделе, посвященном модели диффузии Ферми.

[Значение D_V может быть установлено по директиве: *VACANCY SILICON D.0 = <n> D.E = <n>*. Все установки, относящиеся к описанию вакансий, подобны установкам для междоузлий. При этом директиву *INTERSTITIAL* следует заменить на *VACANCY*].

Точечные дефекты имеют большее значение коэффициента диффузии, чем примесь, поэтому они могут диффундировать в глубь моделируемой структуры. Если моделируемая структура мелкая, то может быть получена нефизично высокая концентрация дефектов в тех областях, где присутствуют примеси, что, следовательно, приведет к повышенной диффузии примесей. Таким образом, необходимо увеличить размер моделируемой области, чтобы обеспечить адекватный сток для точечных дефектов. Для определения необходимой глубины моделируемой области следует оценить характерные длины диффузии для дефектов, используя формулу

$$l = \sqrt{D_X \Delta t}, \quad (1.36)$$

где D_X – коэффициент диффузии дефекта, а Δt – полное время диффузии. Опыт показывает, что глубина 20-50 мкм достаточна в большинстве случаев. Такое

ограничение на минимальную глубину структуры может привести к увеличению времени расчетов. Тем не менее использование диффузионных моделей, учитывающих присутствие точечных дефектов, вполне оправдано с точки зрения точности расчетов. Кроме того, можно порекомендовать уменьшить расчетную сетку вблизи этой области.

1.1.6. Модель диффузии связанных пар примесь – дефект

[Эта модель запускается командой `METHOD FULL.CPL`].

Полностью связанная диффузионная модель устанавливает двойную связь между диффузией примесей, с одной стороны, и диффузией точечных дефектов, с другой, посредством добавления в член, описывающий поток в уравнениях для дефектов, потока пар примесь – точечный дефект, что приводит к следующим выражениям:

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = \nabla \left(-J_V - \sum_{A,c} J_{AV}^C \right) - R, \quad (1.37)$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = \nabla \left(-J_I - \sum_{A,c} J_{AV}^C \right) - R + \frac{\partial C_{ET}}{\partial t} - \frac{\partial C_{<311>}}{\partial t}, \quad (1.38)$$

где суммирование производится по всем зарядовым состояниям примесей и точечных дефектов. Остальные уравнения полностью связанной диффузионной модели идентичны уравнениям двухмерной модели, описанной в предыдущем разделе. Влияние дополнительного члена проявляется только при очень высоких концентрациях примесей и большой дозе имплантации, когда существенно увеличивается коэффициент диффузии примесей вследствие повышения уровня Ферми и увеличения степени пересыщения точечными дефектами, что следует из уравнений (1.10), (1.11) и (1.17).

Обобщением уравнений (1.37) и (1.38) являются, как показано в работе [3], выражения:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(C_V^{free} - \sum_{A,c} C_{AV^c} \right) = \nabla \left(-J_V^{free} - \sum_{A,c} J_{AV}^C \right) - R, \quad (1.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(C_I^{free} - \sum_{A,c} C_{AI^c} \right) = \nabla \left(-J_I^{free} - \sum_{A,c} J_{AI}^C \right) - R + \frac{\partial C_{ET}}{\partial t} - \frac{\partial C_{<311>}}{\partial t}, \quad (1.40)$$

которые показывают, что скорость изменения полной концентрации точечных дефектов X определяется вкладами дефектов, диффундирующих свободно, дефектов, диффундирующих в парах, а также вкладов различных истоков и

стоков. Истоки и стоки также должны быть разделены на вклады от спаренных и неспаренных дефектов. Что касается примесей, то в работе [8] показано, что уравнение (1.17) для примесей необходимо изменить посредством подстановки концентрации неспаренных активных примесей в полную концентрацию активных примесей, что приводит к следующему выражению:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \sum_{X=I,V} \nabla \left[\left(\frac{C_X}{C_X^*} D_{AX} \right) C_{A_+}^{unpaired} \nabla \ln \left(C_{A_+}^{unpaired} \frac{C_X}{C_X^*} \left(\frac{n}{n_i} \right)^Z \right) \right]. \quad (1.41)$$

1.1.7. Другие модели диффузии и их расширения

[Описываемые ниже модели и их расширения подключаются по директиве `METHOD ILFEM=FALSE`].

Модель диффузии для крупных структур (Power Diffusion model)

Эта модель является простейшей из всех диффузионных моделей и используется, когда время, отведенное на расчеты, ограничено. [Эта модель иницируется по команде `METHOD POWER`].

Для больших структур мощных приборов эта модель эффективна с точки зрения времени расчетов. При использовании этой модели время выполнения расчетов уменьшается в 2-3 раза по сравнению с моделью Ферми. В модели диффузии для крупных структур не рассматриваются сегрегационные эффекты, и полагается простая модель для диффузии примесей. Ее можно использовать с теми же диффузионными параметрами, что и в модели Ферми.

Стационарная модель диффузии

Стационарная модель диффузии является разновидностью двумерной модели диффузии, в которой полагается, что профили распределения точечных дефектов стационарны. [Модель включается по команде `METHOD STEADY`].

Модель диффузии связанных пар примесей – дефект при высокой концентрации

Эта модель является расширением базовой модели диффузии связанных пар примесей – дефект с включением рассмотрения пар более высокого порядка и учета механизмов рекомбинации точечных дефектов. Модель, разработанная в Стенфордском университете [9], включает взаимодействие примеси и дефектов более высокого порядка в тех случаях, когда число дефектно-примесных пар существенно велико (при высокой концентрации примесей в кремнии). Модель включает две дополнительные реакции рекомбинации в объеме и две дополнительные реакции рекомбинации на поверхности раздела

Si/SiO₂.

[Модель иницируется по команде `METHOD HIGH.CONC FULL.CPL`. Поскольку эта модель является расширением полностью спаренной модели, ее можно использовать только при наличии команды `METHOD FULL.CPL`].

В объеме дополнительные члены, описывающие рекомбинацию точечных дефектов, применимы при высоких концентрациях, когда превалирует высокий уровень дефектно-примесных пар:

$$K_r^{PI-V} = iifactor \left(\frac{D_{PI} + D_V}{D_I + D_V} \right) K_r, \quad (1.42)$$

$$K_r^{I-PV} = ivfactor \left(\frac{D_I + D_{PV}}{D_I + D_V} \right) K_r. \quad (1.43)$$

Дополнительные параметры модели учитывают отношение эффективного сечения захвата примесь – дефект к сечению рекомбинации дефект – дефект.

[Эти параметры устанавливаются по команде `INTERSTITIAL SILICON IVFACTOR=<n> IIFACTOR=<n>`].

Подобным образом на поверхности раздела скорости поверхностной рекомбинации междоузлий управляются парными и непарными механизмами согласно отношению:

$$K_{surf}^{PI} = isurfact \left(\frac{D_{PI}}{D_I} \right) K_{surf}^I. \quad (1.44)$$

Это отношение связывает поверхностную рекомбинацию дефектов, осуществляемую через пары, с рекомбинацией, происходящей непосредственно на поверхности.

[Модель запускается командой `INTERSTITIAL SILICON/OXIDE ISURFACT=<n>`].

Повышенная объемная рекомбинация на дислокационных петлях

Дислокационные петли играют роль стоков для точечных дефектов. Модель вводит дополнительный сток для междоузлий, зависящий от распределения дислокационных петель в некоторой пространственной области.

[Модель запускается по команде `METHOD I.LOOP.SINK INTERSTITIAL DAMALPHA=<n>`].

При использовании этой модели учитывается усиление рекомбинации междоузлий в областях дислокационных петель [команды `IMPLANT` и `DISLOC.LOOP`].

Рекомбинация описывается выражением

$$R_{loop} = d\alpha(C_I - C_I^*). \quad (1.45)$$

Моделирование диффузии при быстром термическом отжиге (RTA модель)

Программа SSuprem4 позволяет моделировать процессы быстрого термического отжига (Rapid Thermal Annealing – RTA), используя описанные диффузионные модели, а именно, двухмерную модель и полностью спаренную модель. Поскольку RTA является быстрым термическим циклом, включающим плавное повышение температуры до высоких температур, в этом процессе будет доминировать так называемая переходная повышенная диффузия (Transient Enhanced Diffusion – TED), сопровождающаяся существенным повреждением кристаллической решетки. Поскольку диффузия примесей связана с эволюцией точечных дефектов, есть возможность связать эти модели с условиями RTA посредством подгонки соответствующих параметров точечных дефектов. Важными параметрами при включении RTA в директивы программы SSuprem 4 являются отношение количества междоузлий в форме <311> кластеров к количеству свободных междоузлий, а также характеристическое время, необходимое для перерастворения междоузельных кластеров. В табл. 1.7 представлены данные, характеризующие указанные параметры при различных температурах.

Таблица 1.7

Длительность TED при различных температурах отжига

Температура отжига (°C)	Время до достижения 95% TED
600	390 ч
700	3,3 ч
750	30 мин
800	3,7 мин
850	43 сек
900	8,3 сек
950	1,9 сек
1000	0,48 сек
1050	0,13 сек

Модели электрической деактивации и кластерообразования

При высокой степени легирования концентрация электрически активных примесей C_{A+} может быть ниже соответствующей химической концентрации C_A . Чтобы примесь в полупроводниковом материале стала электрически активной, ее следует поместить в узел замещения кристаллической решетки, с

тем чтобы носитель заряда находился либо в валентной зоне (акцепторная примесь), либо в зоне проводимости (донорная примесь). Однако выше определенного уровня легирования невозможно поместить большее количество примесей в узлы замещения кристаллической решетки – лишние примеси будут неактивными. Порог, при котором происходит деактивация примесей, часто называется “пределом твердой растворимости”, что отчасти терминологически неверно, поскольку примеси могут существовать в различных фазовых состояниях кристалла. Следовательно, трудно определить, к какому фазовому переходу следует отнести “предел твердой растворимости”. Например, избыточные примеси могут существовать в виде небольших кластеров или в виде больших преципитатов. “Порог деактивации” является более точным обозначением для такого предела и будет далее по тексту использоваться именно в таком смысле. В дальнейшем через C_{A+}^{th} будет обозначаться порог деактивации. В научной терминологии “неактивный” означает неподвижный. Таким образом, во всех описываемых здесь моделях для каждого типа примесей принимаются следующие предположения:

- примеси, находящиеся в состоянии, превышающем порог деактивации, считаются электрически неактивными, т.е. они не вносят вклад в совокупность носителей заряда;
- такие примеси считаются неподвижными, т.е. они не могут диффундировать.

Цель использования модели электрической активации – расчет концентрации примесей, при которой происходит деактивация. Для этого во всех моделях диффузии используются две различные модели электрической активации:

- 1) модель кластерообразования AsV для мышьяка;
- 2) полуэмпирическая активационная модель (с использованием табличных данных) для всех других примесей.

Модель кластерообразования AsV основана на простой реакции:



Полагая, что уравнение (1.46) всегда является равновесным, можно использовать следующее выражение для установления связи между химической и активной концентрациями мышьяка:

$$C_A = C_{A+} + C_{clust} = C_{A+} + C_{tn} C_{A+} \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \frac{C_V}{C_V} = C_{A+} \left\{ 1 + C_{tn} \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \frac{C_V}{C_V} \right\}. \quad (1.47)$$

Поскольку существует циклическая зависимость между активной концентрацией мышьяка C_{A+} и концентрацией носителей заряда n , можно оценить величину n в начале моделирования. Кроме того (по определению),

можно предположить, что отношение C_V / C_V^* равно единице при использовании модели диффузии Ферми. [Коэффициент кластерообразования C_m обозначается через $CTN.0$ и через $CTN.E$ в директиве `IMPURITY`].

В полуэмпирической активационной модели (с использованием табличных данных) для всех примесей, за исключением мышьяка, используется двухступенчатая схема при расчете концентрации активных примесей:

1. Прежде всего программа интерполирует в виде таблицы экспериментальные данные (температура, порог деактивации) и определяет концентрацию, не зависящую от порога деактивации, что соответствует текущей температуре, для которой производится моделирование. Эти данные могут быть установлены по директиве `IMPURITY` посредством присвоения соответствующим параметрам `SS.TEMP` и `SS.CONC` их определенных значений. Температура устанавливается в градусах Цельсия.

2. Вводится логарифмическая зависимость посредством задания величины порога деактивации:

$$C_{A+}^{th'} = \begin{cases} C_{A+}^{th} \left[1 + (1,0 - b) \ln \frac{\left(\frac{C_A}{C_{A+}^{th}} \right) - b}{1,0 - b} \right]; & C_A > C_{A+}^{th}, \\ C_A; & C_A \leq C_{A+}^{th} \end{cases} \quad (1.48)$$

где параметр b имеет значение в интервале $[0,8, 1,0]$. Использование уравнения (1.48) способствует сглаживанию профиля распределения активных примесей, который в основном соответствует полному (“химическому”) профилю.

Модель диффузии, учитывающая высокий уровень концентрации примесей

Главной целью моделирования является расчет электрических характеристик рассматриваемого прибора, используя в качестве входных параметров результаты моделирования технологии. Поскольку электрические характеристики прибора в существенной степени зависят от распределения электрически активных примесей, формирующегося в результате проведения последовательных термических обработок, важно, чтобы используемые модели диффузии были как можно более точными, что особенно важно при моделировании глубокой субмикронной технологии. При этом приобретает критическое значение двухмерное и даже трехмерное моделирование. Однако, к сожалению, достаточно точные методики измерения многомерных профилей распределения примесей в настоящее время отсутствуют. Поэтому двухмерные профили активных примесей могут быть получены только посредством моделирования.

Очевидно, что различные аномальные явления диффузии примесей в кремнии вызываются неравновесными точечными дефектами. Эти дефекты вводятся или непосредственно в процессе диффузии (пример – эффект сдвига эмиттера в процессе диффузии фосфора с высокой концентрацией), или инжектируются в подложку при таких обработках, как окисление или нитридизация, или возникают при ионной имплантации примесей в кремниевую подложку. С уменьшением размера формируемого прибора указанные переходные явления являются ключевыми моментами для точного моделирования процесса диффузии примесей. Модель диффузии примесей CNET, применяемая в пакете ATHENA, разработана фирмой CNET-Grenoble (France Telecom). Ниже описывается указанная модель и показаны ее отличия от стандартной FULL.CPL модели, используемой в пакете ATHENA.

Описание модели CNET

Основной подход для описания системы пар дефектов примесь – точечный дефект описан в работе [3] и он заложен в модели FULL.CPL, реализованной в программе ATHENA. Таким образом, CNET модель (METHOD FULL.CPL CNET) является расширением FULL.CPL модели, в частности для случая модели диффузии с высокой концентрацией примесей. Основные физические предпосылки, заложенные в CNET модель:

- диффузия примесей происходит с участием как вакансий (V), так и междоузлий (I). Эти точечные дефекты существуют в различных зарядовых состояниях, относительные концентрации которых зависят от локального положения уровня Ферми, т.е. от локальной концентрации примесей.
- Как междоузлия, так и вакансии имеют большие энергии связи с примесными атомами, следствием чего является тот факт, что диффузия примесей осуществляется посредством пар дефект – примесь (изолированные примеси, находящиеся в виде атомов внедрения в кристаллической решетке, являются неподвижными). Полагается, что такие примесно-дефектные пары в своих зарядовых состояниях находятся в локальном равновесии с атомами примеси, располагающимися в положении замещения, и со свободными дефектами. Считается, что при высоком уровне легирования концентрации таких пар нельзя считать пренебрежимо малыми по сравнению с концентрациями примесей, находящихся в состоянии замещения. В результате их концентрации строго учитываются при расчете полной концентрации примесей и положения уровня Ферми (т.е. концентрации носителей заряда). Прямым следствием этого является частичная самокомпенсация при высоком уровне концентрации примесей, что дает определенный вклад в разницу между полной и активной концентрациями и в изменение собственного коэффициента диффузии как функции полной концентрации примесей.
- Мышьяк и бор при концентрациях, превышающих порог твердой растворимости, образуют нейтральные и неподвижные комплексы (AS_2V или

V_2I), которые увеличивают эффективный коэффициент диффузии и вносят вклад в концентрацию неактивных примесей. Полагается, что эти комплексы находятся в состоянии локального равновесия с другими примесями и дефектами. Дальнейшим развитием этой модели является модель для описания кластерообразования [10].

- При превышении концентрации примесей до величины порядка 10^{20} см⁻³ дефектно-примесные пары уже нельзя рассматривать как изолированные частицы, поскольку вакансии могут взаимодействовать уже с большим числом, чем один примесный атом. В CNET модели этот эффект описывается существованием перколяционного кластера из примесных атомов, находящихся друг от друга на расстоянии вплоть до пятого соседа кристаллической решетки [11]. В таком кластере значительно увеличиваются как коэффициент диффузии, так и концентрация вакансий, что вызывает значительное повышение концентрации компонента, диффундирующего совместно с вакансией. Этот механизм позволяет точно описать известную форму высококонцентрационного профиля распределения фосфора с перегибом (ступенькой) и “хвостом”. [Перколяционная модель иницируется командами METHOD PERCO и IMPURITY].
- Поток каждой диффундирующей пары примесь-дефект, а также свободных дефектов включает дрейфовые члены, вызываемые встроенным электрическим полем и градиентом концентрации.
- Полагается, что (I) и (V) не находятся в локальном равновесии, но они могут аннигилировать посредством механизма бимолекулярной рекомбинации. Особенность CNET модели состоит в том, что в аннигиляции участвуют не только свободные дефекты, но также и дефектно-примесные пары, которые играют роль рекомбинационных центров. В результате скорость $I-V$ рекомбинации существенно усиливается при высоком уровне концентрации примесей.

Примеры расчетов

Для иллюстрации эффективности CNET модели ниже приведены результаты моделирования профилей распределения фосфора, формируемых в процессе его диффузионной загонки при высоких и средних поверхностных концентрациях. На рис. 1.1 и 1.2 приведены результаты сравнения концентрационных зависимостей, полученных по CNET модели, с SIMS данными [12, 13] в диапазоне температур от 900 до 1100 °С. Эти данные иллюстрируют особенности распределений примесей с высокой концентрацией и отражают сложный характер взаимодействия между примесями и точечными дефектами.

Как видно из рис. 1.1, CNET модель точно воспроизводит особенности экспериментальных профилей. В частности, учет в модели перколяционного эффекта позволяет описать изменение формы профилей при высокой

концентрации примеси. В случае средних поверхностных концентраций в рассчитанных профилях появляется “хвост” с заметной модуляцией в приповерхностной области. Такая модуляция является результатом сильной связи между градиентами дефектов и примесей, а ее величина зависит от температуры: чем ниже температура, тем сильнее связь, что подтверждается как расчетными, так и экспериментальными кривыми. При превышении концентрации $\approx 2,5 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ модель позволяет воспроизвести как образование плато в приповерхностной области, так и появление ярко выраженного “хвоста”, являющегося следствием высокого пересыщения точечных дефектов, генерируемых при диффузии фосфора. На рис. 1.2 показаны рассчитанные профили распределения концентрации активных примесей. Как показано экспериментально, для профиля с наибольшей поверхностной концентрацией рассчитанные концентрации активных примесей значительно ниже по сравнению с полными (химическими) концентрациями. В CNET модели эта особенность объясняется тем фактом, что пары дефект-примесь имеют концентрации, не пренебрежимые по сравнению с высокой концентрацией примесей.

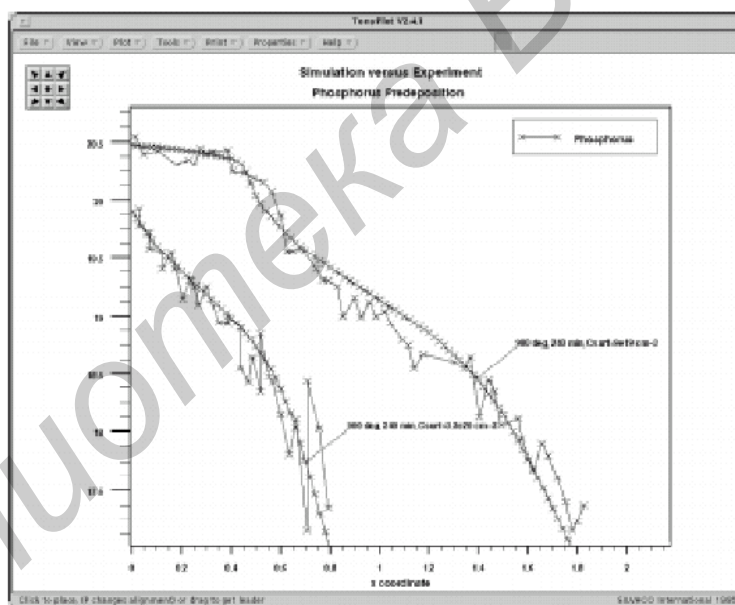


Рис. 1.1. Сравнение экспериментальных [12, 13] и рассчитанных по CNET модели профилей при 900 °С

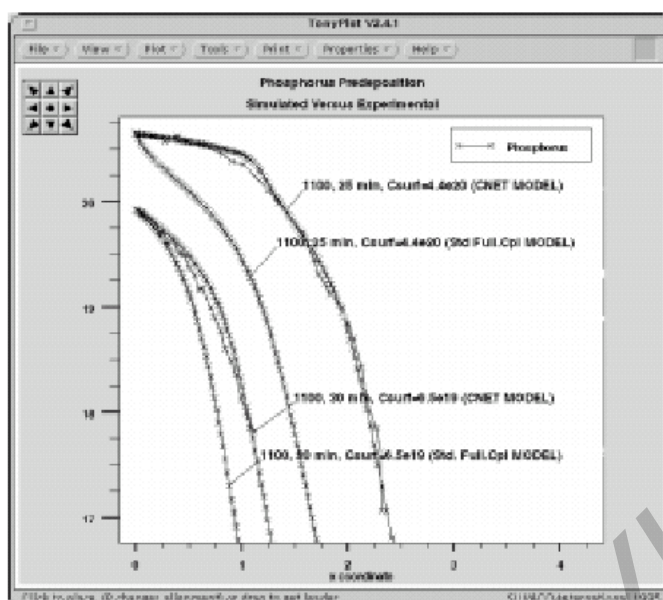


Рис. 1.2. Сравнение экспериментальных [12, 13] и рассчитанных по CNET модели профилей при 1100 °С. Приведены также результаты, полученные по стандартной FULL.CPL модели

Компоненты CNET модели

CNET модель состоит из пяти компонентов. В каждой из них используется свое физическое представление. Полная CNET модель использует одновременно все пять компонентов.

1. Непренебрежимые концентрации пар

Эта модель учитывает эффекты высокой концентрации примесей. В ней не пренебрегаются концентрации пар дефект-примесь. [Эта часть полной CNET модели запускается по команде: `METHOD PAIR.DEFEC`].

Для фосфора каждый из пяти компонентов модели описывается следующим образом:

$$\begin{aligned}
 P^{chem} &= PV^{-} + PV^{0} + PI^{+} (PI^{0} + PI^{-}) + P^{+} = \\
 &= [P^{+}] \{ 1 + Kp + v = [V =] + Kp + v - [V^{-}] + p + li[Li] \} + [P]_{Precipitate} \cdot
 \end{aligned}
 \tag{1.49}$$

Последний член учитывает атомы фосфора, которые уходят в преципитаты, когда $[P]^{chem}$ больше предела растворимости.

Образование кластеров

Кроме ухода в преципитаты, при моделировании профилей

распределения примесей мышьяка и бора учитывается образование неподвижных нейтральных комплексов. В CNET.MOD кластеры обозначаются как As_2V и B_2I (в модели FULL.CPL они неподвижны и превращаются в пары AsV).

При использовании простой статической (равновесной) модели:

$$KA_S^+ AsV^- [As^+] [AsV^-], \quad (1.50)$$

$$K_{B^-BI^+} [B^-] [BI^+]. \quad (1.51)$$

[Этот компонент модели запускается по команде METHOD CLUSTER.DEF]. При этом включаются члены в уравнениях непрерывности как для примесей, так и для дефектов (V или I).

2. Уравнение нейтральности

Этот компонент модели учитывает концентрацию заряженных пар, т.е. решается уравнение

$$n - p = \sum (Donor)^\varepsilon + \varepsilon \sum (DonorV)^\varepsilon + \varepsilon \sum (DonorI)^\varepsilon + \varepsilon \sum (AcceptV)^\varepsilon + \varepsilon \sum (AcceptI)^\varepsilon - \sum (Accept)^\varepsilon \quad (1.52)$$

[и запускается по команде METHOD CHARGE.DEF].

В уравнении (1.52) ε равно 1, 0 или -1 в зависимости от зарядового состояния пары для случаев:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= 1 \text{ for } PV^- = (P^+, V^-), \\ \varepsilon &= 0 \text{ for } PV^0 = (P^+, V^-), \\ \varepsilon &= +1 \text{ for } BV^+ = (B^-, V^{++}). \end{aligned} \quad (1.53)$$

Знак Σ означает суммирование по всем донорам (P, As, Sb) и по всем акцепторам (B, In). Следуя этой процедуре, “активная” концентрация в конце диффузии просто задается соответствующей долей атомов, находящихся в состоянии замещения, в полной концентрации примесей. Это осуществляется посредством присвоения соответствующего знака при суммировании.

3. Зарядовые состояния пар

[Этот компонент модели запускается по команде METHOD CHARGE.DEFE].

Для бора хорошо известно, что существуют только пары BV^0 , BV^+ и BI^- , BI^+ . Их концентрации задаются следующим образом:

$$\begin{aligned}
[BV^o] &= K_{B^-V^+} [B^-][V^+], \\
[BV^+] &= K_{B^-V^{++}} [B^-][V^{++}], \\
[BI^-] &= K_{B^-I^0} [B^-][I^0], \\
[BI^+] &= K_{B^-I^{++}} [B^-][I^{++}].
\end{aligned} \tag{1.54}$$

[Соответствующие значения коэффициента K являются параметрами NEU. 0, ..., директив VACANCY и INTERSTITIAL при наличии опции BORON].

Для фосфора (как и для других доноров) существуют пары PV^0 и PV^- . (Информация о существовании пары PI отсутствует). Здесь:

$$\begin{aligned}
[PV^o] &= K_{P^+V^-} [P^+][V^-], \\
[PV^-] &= K_{P^+V^=} [P^+][V^=], \\
[PI^+] &= K_{P^+I^0} [P^+][I^o], \\
[PI^0] &= K_{P^+I^-} [P^+][I^-], \\
[PI^-] &= K_{P^+I^=} [P^+][I^=].
\end{aligned} \tag{1.55}$$

[при значениях параметров K , определяемых по опции NEU. 0 в директивах VACANCY и INTERSTITIAL, если задана опция PHOSPHORUS].

4. Эффективный коэффициент диффузии

Этот компонент модели запускается по команде METHOD DIFFSVTY.DE и при этом осуществляется точный расчет величин C из общего уравнения (при использовании FULL.CPL модели):

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \nabla \left[D_X^V C_A \frac{C_V C}{C_V^*} \nabla \log \left(C_A \frac{C_V C}{C_V^* n_i} \right) + D_X^I C_A \frac{C_I C}{C_I^*} \nabla \log \left(C_A \frac{C_I C}{C_I^* n_i} \right) \right]. \tag{1.56}$$

При значениях $C=n$ или p легко показать, что в модели диффузии пар, основанной на моделях FULL.CPL или CNET, полагается, что величины D_x^V и D_x^I рассчитываются из базисных параметров пар.

В уравнениях:

$$D_X^V = \sum_i K_{x,v} \delta^i \left(\frac{C}{n_i} \right)^i D_{XV^{i-1}},$$

$$D_X^I = \sum_i K_{x,i} \delta^i \left(\frac{C}{n_i} \right)^i D_{XI^{i-1}}$$
(1.57)

коэффициенты δ^i и δ^i из (1.57) описывают относительные доли заряженных вакансий и междоузлий соответственно. [Параметры NEU , NEG , ... задаются в директивах $VACANCY$ или $INTERSTITIAL$]. Это приводит к выражениям, аналогичным для стандартной модели диффузии фосфора посредством пар примесный атом – дефект, которые отличаются от соответствующих выражений для бора, мышьяка и олова. Фактически в стандартной модели диффузии посредством пар отношение D_x^V / D_x^I не зависит

от концентрации примесей, тогда как при использовании CNET модели это отношение зависит от n , что наблюдается экспериментально (OED эксперименты при высоких концентрациях примеси показывают меньшее усиление диффузии, чем для собственных концентраций P, As.)

Следует подчеркнуть, что существуют различные соотношения для разных параметров, что сокращает число подгоночных параметров. Во-первых, из физических соображений следует, что отношения D_{xV^-} / D_{xV^0} и D_{xV^0} / D_{xV^+} должны быть равны:

$$D_{PV^-} / D_{PV^0} = D_{PV^0} / D_{PV^+} = D_P^V,$$

$$D_{PI^-} / D_{PI^0} = D_{PI^0} / D_{PI^+} = D_P^I,$$

$$D_{BI^+} / D_{BI^0} = D_{BI^0} / D_{BI^-} = D_B^I,$$

$$D_{BV^+} / D_{BV^0} = D_{BV^0} / D_{BV^-} = D_B^V.$$
(1.58)

Эти коэффициенты диффузии являются свободными параметрами, соответствующими параметрам для пар (K). Кроме того, они могут быть рассчитаны через известные экспериментальные собственные коэффициенты диффузии (D_i) и через междоузельный компонент f_i при собственных условиях. Члены в (1.58), представляющие собой долю концентрации примесей, входящих в соответствующие пары, имеют очевидный физический смысл и их, в принципе, можно определить экспериментально (изолированные параметры K_{XV}^i невозможно определить экспериментально, поскольку величины C_V^* и C_I^* неизвестны).

Таким образом, при использовании CNET модели параметры K_{XV}^i доступны для редактирования пользователем посредством изменения физического значения параметров NEU, NEG..., если задана примесь в директивах VACANCY или INTERSTITIAL.

Влияние примесей на скорость бимолекулярной рекомбинации

[Эта часть модели запускается командой METHOD PERCO.DEFEC].

При использовании FULL.CPL модели рекомбинация точечных дефектов в объеме подчиняется следующей зависимости:

$$G - R = K_R (C_I C_V - C_I^* C_V^*), \quad (1.59)$$

где C_I и C_V представляют собой полные концентрации точечных дефектов, а скорость определяется параметром K_R .

Используя общие реакции:



где X обозначает примесь, легко показать, что член $G-R$ необходимо переписать следующим образом:

$$G - R = K_{BM} (C_I C_V - C_I^* C_V^*). \quad (1.61)$$

Коэффициент K_{BM} существенно зависит от концентрации примесей и включает концентрации нейтральных дефектов. Таким образом, K_R можно вывести из K_{BM} следующим образом:

$$K_R = \frac{K_{BM}}{\left[\sum_i \partial_i \left(\frac{C}{n_i} \right)^i + \sum_i \partial_i \left(\frac{C}{n_i} \right)^i \right]} \quad (1.62)$$

и

$$K_{BM} = K_{BM}^0 + \sum_X K_{BM}^X, \quad (1.63)$$

где K_{BM}^0 – скорость отсутствующих пар, а K_{BM}^X обозначает вклад данной примеси.

Даже при пренебрежении влиянием пар значение K_{BM}^0 будет зависеть от уровня легирования вследствие различных состояний дефектов:

$$I^o + V^o \rightarrow 4\pi R(D_I + D_V) \left| I^o \right| \left| V^o \right|, \quad (1.64)$$

$$I^+V^0 \rightarrow 4\pi R(D_I + D_V) + \partial^+ \left(\frac{n^i}{n} \right) \left[I^o \right] \left[V^0 \right], \quad (1.65)$$

$$I^-V^0 \rightarrow 4\pi R(D_I + D_V) + \partial^- \left(\frac{n}{n_i} \right) \left[I^o \right] \left[V^0 \right]. \quad (1.66)$$

Это утверждение относится и к I^0 , V^{++} , V^- , $V^=$. Следовательно:

$$K_{R^0} = \frac{4\pi R(D_I + D_V) \sum_i \delta^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i + \sum_i \delta^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i}{\left[\sum_i \delta^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i + \sum_i \delta^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i \right]}. \quad (1.67)$$

Компонент модели, в которой учитывается зависимость от концентрации пар примесный атом – дефект, в свою очередь, можно разделить на два компонента, соответствующих рекомбинации вакансий с парами примесь – дефект и рекомбинации междоузлий с парами примесь – дефект:

$$K_{BM}^X = K_{BM}^{XI,V} + K_{BM}^{XV,I}. \quad (1.68)$$

При расчете реакций между отдельными рассматриваемыми частицами, имеющими одинаковый (ненулевой) заряд, можно пренебречь знаком заряда по причине кулоновского отталкивания. Вследствие эффектов, связанных с уровнем Ферми, такие пары не могут иметь высокие концентрации в один и тот же момент времени. Это объясняется выражениями (1.64-1.67) при одинаковом радиусе захвата R в этих уравнениях. В первом приближении $R \geq 2,35 \text{ \AA}$ (межатомное расстояние в кремнии) [для удобства этот параметр вводится по директиве MATERIAL, а не по директиве VACANCY/INTERSTITIAL, как и параметр K_R , поскольку пользователь не может изменить этот параметр независимо в уравнениях непрерывности для I и для V].

5. Модель проницаемости

[Этот компонент модели запускается по команде `METHOD PERCO.DEFEC`].

Если концентрация примеси превышает величину C_{perc} ($\approx 5 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$), то основной механизм диффузии изменяется (для той области моделирования, где присутствуют вакансии) вследствие сильного взаимодействия между примесями и дефектами (вплоть до расстояний в пределах пятых соседей кристаллической решетки). В этом случае диффузия описывается таким

образом, как если бы “эффективная” концентрация увеличилась с коэффициентом F_{PERC} , а соответствующие потоки будут описываться согласно следующему выражению:

$$J_V^{PERC} = F_{PERC} J_V^{LOW} \quad (1.69)$$

с обычным потоком вакансий J_V^{low} при $C_{dopant} < C_{PERC}$ и

$$J_V^{PERC} = F_{PERC}^V D_V \frac{C_v^{tot}}{N_S} \left(\frac{\partial X^+}{\partial X} + X^+ \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \right). \quad (1.70)$$

Аналогичное выражение, используется для модели диффузии посредством пар:

$$J_X^{PERC} = F_{PERC}^X D_x \frac{C_x}{N_S} [X^+] \nabla \log \left([X^+] \frac{n}{n_i} \right). \quad (1.71)$$

Таким образом, полный поток, который следует рассматривать, является комбинацией потоков с и без проницаемости (перколяции) согласно выражениям:

$$J_X = p J_X^{PERC} + (1-p) J_X^V + J_X^I, \quad (1.72)$$

$$J_V = p J_V^{PERC} + (1-p) J_V^{LOW} = [p F_{PERC} + (1-p)] J_V^{LOW}, \quad (1.73)$$

где P – вероятность проявления эффекта проницаемости, которая рассчитывается из выражений:

$$p = 0 \text{ for } \sum [X_S] < C_{PERC}, \quad (1.74)$$

$$p = \min \left\{ 1; 0,85 \left(\frac{\sum [X_S]}{C_{PERC}} \right)^{0,4} \right\}. \quad (1.75)$$

Таким образом, примеси при низкой концентрации будут обладать повышенным коэффициентом диффузии вследствие присутствия других примесей с концентрацией, превышающей C_{PERC} .

1.2. Модель диффузии легирующих примесей в поликремнии

Механизмы диффузии в поликремнии отличаются от соответствующих

механизмов в кристаллическом кремнии.

1.2.1. Два потока диффузии примесей в поликремнии

Поликремний имеет микроструктуру в виде малых (по сравнению с областями формируемого прибора) кристаллических областей, называемых зёрнами. Зёрна отделяются друг от друга границами, занимают определенный пространственный объем и образуют сложную сеть. Текстура и морфология границ зёрен зависят от условий осаждения поликремния и от последующей термической обработки, в процессе которой происходит рекристаллизация поликремния. Примеси внутри зёрна диффундируют различным образом по сравнению с диффузией по границам зёрен. Примеси переносятся также через зёрно и через поверхности раздела зёрен. Прямое моделирование диффузии во всех областях поликремния с такой геометрически сложной микроструктурой связано с большими вычислительными затратами и поэтому требует использования специальных математических методов. В программе SSuprem 4 используется двухмерная численная модель, изложенная в работах [14, 15]. Согласно этой модели, поликремниевая микроструктура математически описывается в гомогенизационном приближении. Суть ее заключается в том, что пространственно разделенные области зёрен и их границ представляются в виде пространственно перекрывающихся гомогенной объемной области зёрна и гомогенной области сети границ зёрна. Каждый локальный элемент поликремниевого материала включает два компонента: собственно зёрно и границу зёрна. Сеть границ зёрна характеризуется скалярной функцией плотности, описывающей размер зёрна, и векторной функцией, описывающей кристаллографическое направление границы зёрна. Соответственно каждая примесь подразделяется на два диффузионных компонента: внутри объема зёрна и в области границы зёрна. Эти два компонента связываются с сегрегацией на границах зёрен. При рассмотрении термического цикла моделируется также и рекристаллизация поликремния, чтобы включить в модель и эффект роста зёрна.

[Модель диффузии поликремния запускается заданием “флага” POLY.DIFF в директиве METHOD, а контроль модели осуществляется с использованием директивы MATERIAL. Время моделирования диффузии и температура устанавливаются в директиве DIFFUSE. Результирующий профиль примесей может быть выведен в виде отдельных компонентов для собственно зёрна, границ зёрен, а также в виде полного профиля].

Соотношение между диффузионными компонентами для зёрен и границ зёрен, согласно [15], имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = \nabla(D_g \nabla C_g) - G, \quad (1.76)$$

$$D_g = D_{g0} \exp\left(-\frac{D_{gE}}{kT}\right), \quad (1.77)$$

$$\frac{\partial C_{gb}}{\partial t} = \nabla_i (F_{ij} D_{gb} \nabla_j C_{gb}) + G, \quad (1.78)$$

$$G = (\tau^{-1}) \left(\frac{C_g}{P_{seg}} - C_{gb} \right), \quad (1.79)$$

$$D_{gb} = D_{gb0} \exp\left(-\frac{D_{gbE}}{kT}\right) \frac{1}{t}, \quad (1.80)$$

$$F_{ij} = \frac{1}{L_g(x,y,z)} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (1.81)$$

где C_g – компонент концентрационного профиля, относящегося к зернам; C_{gb} – компонент концентрационного профиля, относящегося к границам зерен; D_g и D_{gb} – коэффициенты диффузии в объеме зерна и по границам зерен соответственно; G – член, относящийся к сегрегационному потоку на границах зерен; τ – константа для описания скорости сегрегации; P_{seg} – коэффициент сегрегации; F_{ij} – тензор для учета эффекта направленности границ зерна; L_g – размер зерна (он предполагается одинаковым в x , y , z направлениях).

Сегрегация на границах зерен моделируется согласно выражению [16]:

$$P_{seg} = \frac{1}{L_g} \frac{Q_S}{N_{si}} A \exp\left(-\frac{\delta_0}{kT}\right), \quad (1.82)$$

где Q_S – плотность сегрегации на границах зерен; N_{si} – плотность атомов в кристаллическом кремнии; A – энтропийный коэффициент; δ_0 – энергия активации сегрегации.

1.2.2. Модель роста зерна поликремния

Величина L_g в (1.81) и (1.82) является пространственной функцией, зависящей от времени, и характеризует размер зерна, изменяющийся в процессе термообработки поликремния, и рассчитывается по модели, предложенной в работе [14]:

$$L_g(x, y, z) = \left[\frac{2}{g_0} + \frac{2,6b^2}{kT} \lambda D_{gb/Si} \tau \right]^{1/2}, \quad (1.83)$$

где g_0 – начальный размер зерна; b – постоянная решетки; $D_{gb/Si}$ – собственный коэффициент диффузии кремния по границам зерна; λ – энергия границы зерна; τ – время проведения диффузии.

Для задания процесса моделирования диффузии необходимо установить два набора физических параметров:

- 1) параметры, относящиеся к поликремниевому материалу, задаются в директиве MATERIAL;
- 2) параметры, относящиеся к данной примеси, задаются по директиве IMPURITY.

Векторная функция, описывающая направленность границ зерен, рассчитывается при моделировании процесса осаждения поликремния. [Перед моделированием осаждения поликремния следует задать векторную функцию, используя директиву METHOD вместе с POLY.DIFF].

Литература

1. Penumalli B.R. A Comprehensive Two-Dimensional VLSI Process Simulation Program, BICEPS // IEEE Trans. on Electron Dev. Sept. 1983. Vol. ED-30(9). P. 986.
2. Shockley W., and Last J.T. Statistics of the charged Distribution for a Localized Flow in a Semiconductor // Phys. Rev. July 1957. Vol. 107. No. 2. P. 392.
3. Mathiot D. and Pfister J.C. Dopant Diffusion in Silicon: A Consistent View Involving Nonequilibrium Defects // J. of Appl. Physics. May, 1984. Vol. 55. No. 10. P. 3518.
4. Fahey P.M. Point Defects and Dopant Diffusion in Silicon // PhD Thesis, Integrated Circuits Laboratory, Department of Electrical Engineering, Stanford University. June 1985.
5. Griffin P.B. and Plummer J.D. Process Physics Determining 2-D Impurity Profiles in VLSI Devices // International Electron Devices Meeting. Dec. 1986. P. 522.
6. Fahey P.M. Point Defects and Dopant Diffusion in Silicon // PhD Thesis, Integrated Circuits Laboratory, Department of Electrical Engineering, Stanford University. June 1985.
7. Hu S.M. On Interstitial and Vacancy Concentration in Presence of Injection // J. Appl. Phys. 1985. Vol. 57. P. 1069.
8. Hobler G. and Selberherr S. // IEEE Trans. on CAD. 1988. No. 7. P. 174.
9. Park & Law, Point Defect based Modeling in Silicon University of Florida // J.A.P Oct. 1993. P. 3431.
10. Mathiot D. and Scheiblin P. ULSI Science and Technology, 1995.
11. Middlesworth E.M. and Massoud H. // Electrochemical Soc. Proc. 95-5. 1995. P. 13.
12. Mathiot D. and Pfister J.C. // J. Phys. Lettres (Paris) No. 43, 1982. L-453.
13. Yoshida M. // J. Appl. Phys. 1979. No. 18. P. 479.
14. Matsumoto S. and Niimi T. // J. Appl. Phys. 1976. No. 15. P. 2077.
15. Mulvaney B.J., Richardson W.B., Crandle T.L. PEPPER – A Process Simulator for VLSI // IEEE Trans. on Computer-Aided Design, April 1989. Vol. 8. No. 4.
16. Jones S.K. and Gerodolle A. 2D Process Simulation Of Dopant Diffusion In Polysilicon // NASECODE-VII Conference Copper Mountain (Colorado), Copper Mountain. May 1991.
17. Mei L. and Dutton R.W. A Process Simulation Model For Multilayer Structures Involving Polycrystalline Silicon // IEEE Trans. Electron Devices. 1982. Vol. ED-29. P. 1726-1734.

2. МОДЕЛИ ОКИСЛЕНИЯ КРЕМНИЯ

При изготовлении структур и приборов микроэлектроники важным технологическим процессом является термическое окисление, используемое для формирования диэлектрического затвора, областей изоляции и имплантационной маски. При этом особенное значение имеет строгий контроль толщины слоя двуокиси кремния по мере перехода к субмикронным размерам приборов.

Окисление происходит, когда имеется поверхность раздела между кремнием (или поликремнием) и двуокисью кремния или когда поверхность кремния (или поликремния) находится в окислительной среде. В программе SSuprem 4 окисление поликремния моделируется точно так же, как и окисление кремния (почти все параметры окисления поликремния имеют те же значения, что и при моделировании окисления кремния). С помощью программы SSuprem 4 можно также моделировать окисление через слой кремния (поликремния). Это очень важно в тех процессах (например, при формировании буферного слоя в LOCOS технологическом процессе), в которых области поликремния полностью снимаются в процессе окисления. Поскольку обрабатываемые поверхности кремния обычно имеют тонкий исходный слой окисла, программа SSuprem 4 проводит автоматически моделирование осаждения тонкого исходного слоя окисла на обрабатываемые поверхности кремния (поликремния) в начале каждого окислительного процесса. При этом толщина исходного окисного слоя по умолчанию равна 20 Å.

2.1. Математическое описание процесса окисления кремния

Двухмерные модели окисления основаны на хорошо известной линейно-параболической теории Дила-Гроува [1], в которой окисление моделируется посредством рассмотрения трех процессов:

1. Окислитель (например, H_2O или O_2) переносится из газа в слой SiO_2 на поверхность раздела газ/ SiO_2 .
2. Окислитель переносится через слой SiO_2 до достижения поверхности раздела Si/SiO_2 .
3. Окислитель, находящийся на поверхности раздела Si/SiO_2 , реагирует с кремнием с образованием нового слоя SiO_2 .

Расчет переноса окислителя через поверхность раздела газ/ SiO_2 проводится с помощью следующего выражения:

$$\vec{F}_1 = h(C^* - C_0)\hat{n}_0, \quad (2.1)$$

где h – газофазный коэффициент переноса массы; C^* – равновесная концентрация окислителя в SiO_2 ; C_0 – концентрация окислителя в SiO_2 на поверхности раздела газ/ SiO_2 ; \hat{n}_0 – единичный вектор, нормальный к поверхности раздела газ/ SiO_2 и направленный в сторону слоя кремния.

Равновесная концентрация окислителя в SiO_2 линейна относительно парциального давления окислителя P согласно закону Генри:

$$C^* = K \cdot P, \quad (2.2)$$

где K – константа.

Диффузия молекул окислителя в SiO_2 определяется градиентом его концентрации и описывается законом Фика:

$$\vec{F}_2 = -D_{eff} \nabla C, \quad (2.3)$$

где D_{eff} – эффективный коэффициент диффузии окислителя (H_2O или O_2) в растущем слое SiO_2 ; C – концентрация окислителя в окисле.

Реакция на поверхности раздела $\text{Si}(\text{polySi})/\text{SiO}_2$ между кремнием и окислителем выражается следующим образом:

$$\vec{F}_3 = kC_i \hat{n}_i, \quad (2.4)$$

где k – константа скорости реакции на поверхности; C_i – концентрация окислителя на поверхности раздела $\text{Si}(\text{polySi})/\text{SiO}_2$; \hat{n}_i – единичный вектор, нормальный к поверхности раздела Si/SiO_2 и направленный в поверхность кремния.

В стационарных условиях все три потока определяются следующим образом:

$$\vec{F} = \vec{F}_1 = \vec{F}_2 = \vec{F}_3. \quad (2.5)$$

Разделив этот поток на N_1 (число молекул окислителя в единице объема SiO_2) и рассматривая лишь одномерный рост, получаем скорость роста слоя окисла:

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{F}{N_1}, \quad (2.6)$$

где x_0 – толщина окисла. Из уравнений (2.1) и (2.3) – (2.5) уравнение (2.6) может быть выражено в следующем виде:

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{B}{A + 2x_0}, \quad (2.7)$$

$$\text{где } A = 2D_{eff} \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h} \right), \quad (2.8)$$

$$B = 2D_{eff} \frac{C^*}{N_1}. \quad (2.9)$$

2.2. Численная реализация модели окисления кремния

Численные модели окисления, основанные на теории окисления Дила-Гроува, позволяют моделировать произвольные двухмерные структуры. Численные модели окисления требуют решения уравнения диффузии окислителя с приращением времени по шагам на дискретной пространственной сетке в растущем слое SiO_2 . Уравнение диффузии окислителя имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{F}, \quad (2.10)$$

где C – концентрация окислителя в SiO_2 ; t – время окисления; F – поток окислителя.

Уравнение (2.10) решается посредством подстановки уравнения (2.3) для F и выбора соответствующих граничных условий на поверхности раздела, где присутствует SiO_2 . На поверхности раздела газ/ SiO_2 уравнение (2.1) описывает транспортный поток молекул окислителя с учетом граничных условий на этой поверхности раздела. Граничные условия на поверхности раздела $\text{Si}(\text{polySi})/\text{SiO}_2$ описываются уравнением (2.4). Поток на границах между SiO_2 и другими материалами полагается равным нулю. Посредством решения уравнения (2.10) определяется концентрация окислителя в каждой точке пространственной сетки слоя SiO_2 . Скорость роста SiO_2 или скорость V_s перемещения поверхности раздела Si/SiO_2 определяется посредством совместного решения уравнений (2.4) и (2.6), что приводит к следующему выражению:

$$\vec{V}_s = \frac{kC_i \hat{n}_i}{N_1}. \quad (2.11)$$

Уравнение (2.11) решается на каждом временном шаге, при этом рассчитывается приращение толщины окисла посредством умножения уравнения (2.11) на величину временного шага. В процессе окислительной реакции атомы кремния связываются с окислителем и образуют соединение SiO_2 . Таким образом, материал кремния расходуется в процессе окисления.

Уравнения (2.10) достаточно для описания движения поверхности раздела Si/SiO_2 , если окисел движется в том же направлении, в каком он растет (для планарных окисляемых структур). В большинстве структур окисел движется в двухмерном пространстве, следовательно, необходимо решать дополнительные уравнения. В моделях COMPRESS и VISCOUS

рассчитывается двухмерное движение элементов окисла посредством решения упрощенного уравнения гидродинамической ползучести.

2.3. Модель COMPRESS

В модели COMPRESS дополнительно к решению уравнений (2.10) и (2.11) решается упрощенное уравнение гидродинамического течения для получения потока окисных элементов [2]. При пренебрежении ускорительными и гравитационными членами в уравнении гидродинамического течения, уравнение ползучести имеет вид

$$\mu \nabla^2 \vec{V} = \nabla P, \quad (2.12)$$

где P – гидродинамическое давление; V – скорость элемента окисла; μ – вязкость окисла.

Вязкость окисла рассчитывается из выражения:

$$\mu = \frac{YOUNG.M}{(2 + 2POISS.R)}, \quad (2.13)$$

где $YOUNG.M$ – модуль Юнга; $POISS.R$ – коэффициент Пуассона.

Поток окисла рассматривается как несжимаемая жидкость. Полагается, что плотность окисла постоянна во времени. При таком предположении в уравнении непрерывности массы получаем следующее условие несжимаемости:

$$\vec{\nabla} \vec{V} = 0. \quad (2.14)$$

Условие несжимаемости в уравнении (2.14) при слабой сжимаемости выражается следующим образом:

$$\vec{\nabla} \vec{V} = -\frac{1 - (2POISS.R)}{\mu} P. \quad (2.15)$$

Решение уравнения (2.15) на каждом временном шаге дает поле скоростей элементов окисла.

Модель COMPRESS рекомендуется использовать при моделировании планарных и непланарных структур, когда эффекты напряжения играют небольшую роль при определении формы окисла. Если эффекты напряжения существенны, можно использовать модель окисления VISCOUS. На рис. 2.1 показана двухмерная структура, полученная при моделировании LOCOS окисления посредством использования модели COMPRESS.

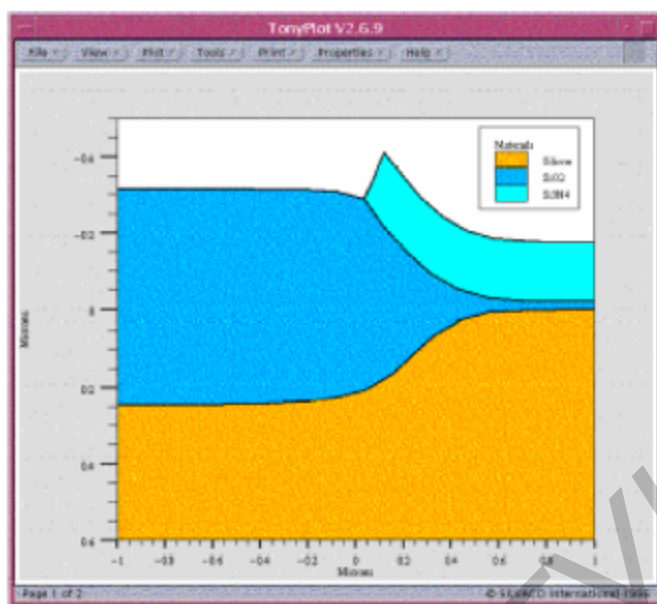


Рис. 2.1. Двухмерная структура, полученная при моделировании LOCOS окисления посредством использования модели COMPRESS

2.4. Модель VISCOUS

В модели VISCOUS решаются те же уравнения, что и в модели COMPRESS. В модели VISCOUS рассчитываются напряжения в растущем окисле и формируются те же формы, что и в модели COMPRESS.

Напряжения в окисле рассчитываются следующим образом [3]:

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \frac{2VISC.0 \exp\left(\frac{-VISC.E}{k_b T}\right)}{1 - (2POISS.R)} \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} \right), \quad (2.16)$$

$$\sigma_{xx} - \sigma_{yy} = 2VISC.0 \exp\left(\frac{-VISC.E}{k_b T}\right) \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} - \frac{\partial V_y}{\partial y} \right), \quad (2.17)$$

$$\sigma_{xy} = VISC.0 \exp\left(\frac{-VISC.E}{k_b T}\right) \left(\frac{\partial V_x}{\partial y} + \frac{\partial V_y}{\partial x} \right), \quad (2.18)$$

где V_x и V_y – x и y компоненты скорости потока V ; $VISC.0$ и $VISC.E$ – предэкспоненциальный коэффициент и энергия активации для вязкости.

Нелинейная модель с зависимостью от напряжения, предложенная в работе [4], позволяет описать реальную форму LOCOS профиля с перегибами на поверхности раздела. С помощью уравнений (2.12) и (2.15)-(2.18) вначале решается линейная задача нахождения скоростей и напряжений, а затем

рассчитываются коэффициенты для определения коэффициента диффузии окислителя D_{eff} , вязкости окисла μ и константы скорости реакции на поверхности раздела k :

$$D_{eff}^{(i)} = D_{eff}^{(i-1)} \exp\left(\frac{V_d(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{k_b T}\right), \quad (2.19)$$

$$\mu^{(i)} = \mu^{(i-1)} \frac{\left(\frac{\tau V_c}{2k_b T}\right)}{\sinh\left(\frac{\tau V_c}{2k_b T}\right)}, \quad (2.20)$$

$$k^{(i)} = k^{(i-1)} \exp\left(-\frac{\sigma_r V_r + \sigma_t V_t}{k_b T}\right), \quad (2.21)$$

где i – номер итерации; V_d , V_c , V_r и V_t – активационные объемы; τ – полное напряжение сдвига:

$$\tau = \frac{1}{2} \sqrt{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\sigma_{xy}^2}, \quad (2.22)$$

σ_r – нормальная компонента полного напряжения:

$$\sigma_r = \sigma_{xx} n_x^2 + \sigma_{yy} n_y^2 + 2\sigma_{xy} n_x n_y, \quad (2.23)$$

σ_t – тангенциальная компонента полного напряжения:

$$\sigma_t = \sigma_{xx} n_y^2 + \sigma_{yy} n_x^2 - 2\sigma_{xy} n_x n_y, \quad (2.24)$$

где n_x и n_y – x и y компоненты единичного нормального вектора.

Найденные параметры подставляются на следующей итерации, и этот процесс продолжается до достижения заданной точности. Быстрая сходимость этого процесса не гарантируется. Следует отметить, что время расчета по модели VISCOUS больше, чем по модели COMPRESS.

На рис. 2.2 приведена результирующая структура LOCOS окисления, полученная по модели VISCOUS.

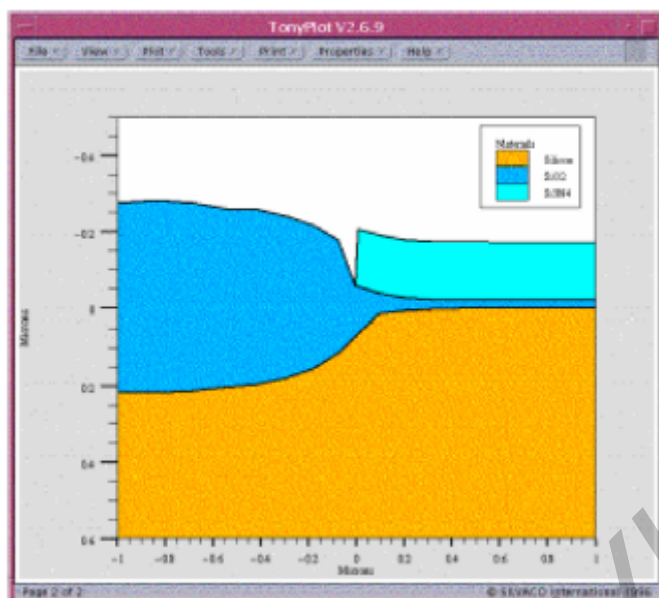


Рис. 2.2. Результирующая структура LOCOS окисления, полученная по модели VISCOUS

2.5. Линейная константа скорости окисления

Для короткого времени и низкой температуры окисления рост окисла линеен относительно времени окисления. Процессы на границе раздела (перенос окислителя через границу раздела газ/ SiO_2 и окислительная реакция на границе раздела Si/SiO_2) являются определяющими факторами при описании кинетики роста окисла. В этом режиме толщину окисла можно аппроксимировать в следующем виде:

$$x_0 \cong \left(\frac{B}{A} \right) t, \quad (2.25)$$

где $\frac{B}{A}$ – линейная константа скорости окисления. Ее можно получить, разделив уравнение (2.9) на (2.8), что приводит к следующему результату:

$$\left(\frac{B}{A} \right) = \frac{C^*}{N_1} \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{k} \right). \quad (2.26)$$

Равновесная концентрация окислителя в окисле C^* определяется уравнением (2.2). Коэффициент газофазного массопереноса h определяется следующим соотношением Аррениуса:

$$h = TRN.0 \exp \left(- \frac{TRN.E}{k_b T} \right). \quad (2.27)$$

Константа скорости реакции на поверхности раздела k определяется из уравнения (2.26) и из экспериментально определяемых величин B/A . Линейная константа скорости состоит из нескольких зависимостей, включая ориентацию, давление, добавки хлора и эффектов легирования:

$$\left(\frac{B}{A}\right) = \left(\frac{B}{A}\right)_i \left(\frac{B}{A}\right)_{ori} \left(\frac{B}{A}\right)_P \left(\frac{B}{A}\right)_{Cl} \left(\frac{B}{A}\right)_{doping}. \quad (2.28)$$

$\left(\frac{B}{A}\right)_i$ определяется следующим образом:

$$\left(\frac{B}{A}\right)_i = \begin{cases} LIN.L.0 \exp\left(-\frac{LIN.L.E}{k_b T}\right) & T < L.BREAK, \\ LIN.H.0 \exp\left(-\frac{LIN.H.E}{k_b T}\right) & (T \geq L.BREAK). \end{cases} \quad (2.29)$$

Это выражение представляет собой линейную константу скорости окисления слаболегированной структуры, отожженной при атмосферном давлении без хлора.

2.5.1. Ориентационная зависимость

Известно, что ориентация кремниевой подложки влияет на кинетику окисления [2, 5]. Это влияние на линейную константу скорости окисления моделируется членом $\left(\frac{B}{A}\right)_{ori}$ в уравнении (2.28). Ориентационная зависимость для $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ ориентаций моделируется соответствующими коэффициентами, а для $\langle 111 \rangle$ подложек $\left(\frac{B}{A}\right)_{ori}$ равен единице. На рис. 2.3 приведены зависимости толщины окисла кремния от ориентации подложки для нескольких температур окисления.

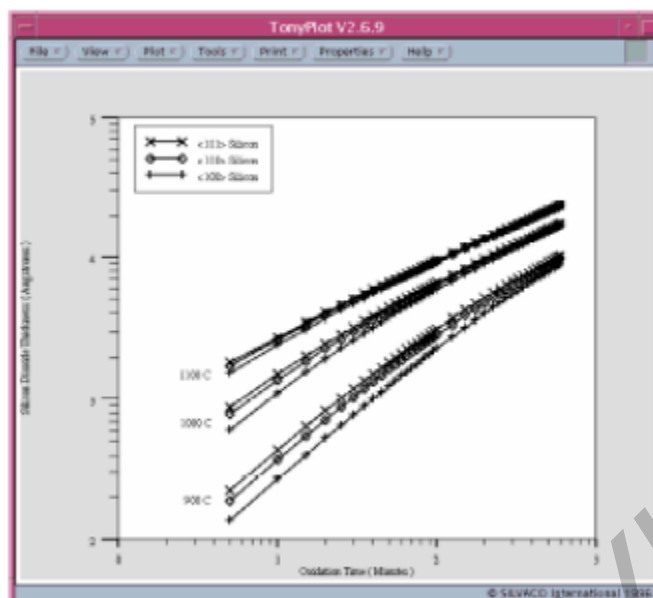


Рис. 2.3. Зависимость толщины оксида кремния от времени для разных ориентаций подложки и для нескольких температур

2.5.2. Зависимость толщины оксида кремния от давления

Окисление кремния при высоких давлениях позволяет вырастить относительно толстые пленки SiO_2 при пониженных температурах, что уменьшает перераспределение примесей [6]. Зависимость линейной константы скорости окисления от давления определяется следующим соотношением:

$$\left(\frac{B}{A}\right)_P = P^{L.PDEP}, \quad (2.30)$$

где P – парциальное давление окислительного газа.

На рис. 2.4 показана зависимость толщины оксида кремния от времени окисления для различных парциальных давлений окислительного газа.

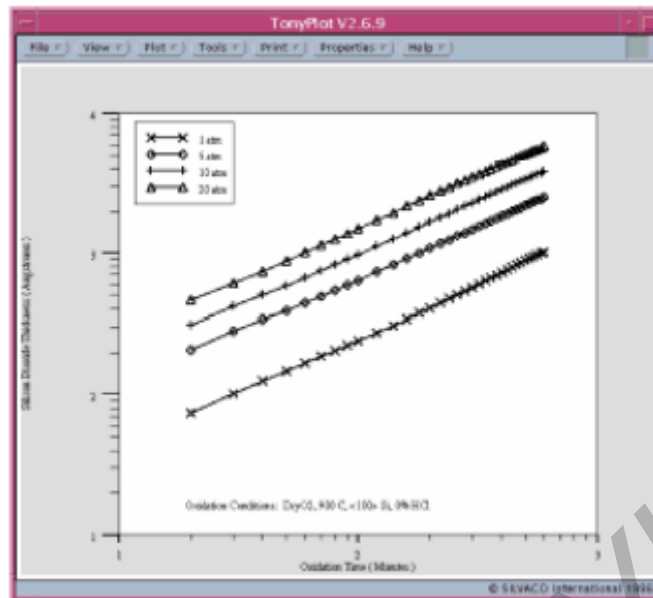


Рис. 2.4. Толщина окисла кремния в зависимости от времени окисления для различных парциальных давлений окислительного газа

2.5.3. Зависимость толщины окисла кремния от содержания хлора

Добавка хлора в окислительную систему приводит к лучшей пассивации и к повышенным диэлектрическим свойствам окисла [1, 5]. В сухой окислительной среде введение хлора приводит к повышению скорости окисления. Показано [5], что хлор реагирует с O_2 и при этом образуются молекулы H_2O и Cl_2 . Скорость окисления выше в среде H_2O , чем в среде O_2 , поскольку молекулы H_2O повышают равновесную концентрацию в окисле по сравнению с O_2 . Линейная константа скорости окисления в уравнении (2.26) модели окисления получается из таблиц и зависит от изменения коэффициента $\left(\frac{B}{A}\right)_{Cl}$ и процентного содержания хлора и температуры. Параметры для зависимости скорости окисления от содержания хлора приведены в специальных таблицах, содержащих данные, полученные из экспериментов.

Влияние добавки хлора в окислительную среду иллюстрируется рис. 2.5. Толщина окисла кремния увеличивается с повышением содержания хлора.

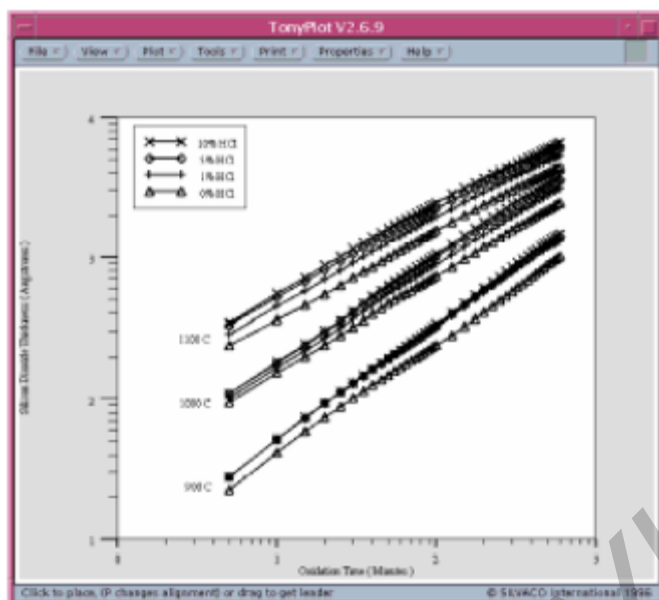


Рис. 2.5. Толщина окисла кремния в зависимости от времени окисления в среде, содержащей HCl, и температуры

2.5.4. Зависимость толщины оксида кремния от степени легирования

Известно, что формирование SiO_2 на высоколегированных подложках n -типа и p -типа может быть улучшено по сравнению с формированием SiO_2 на слаболегированных подложках [7, 8]. Зависимость кинетики роста оксида от концентрации примесей проявляется в изменении линейной константы скорости окисления. Физический смысл влияния высокого уровня концентрации примесей объясняется прежде всего электрическим эффектом [7, 9]:

$$\left(\frac{B}{A}\right)_{doping} = \left[1 + BAF \cdot K_0 \exp\left(-\frac{BAF \cdot KE}{k_b T}\right) \left(\frac{V^*}{V_i^*} - 1\right) \right], \quad (2.31)$$

где V^* – равновесная концентрация вакансий в кремнии вблизи поверхности раздела Si/SiO₂; V_i^* – равновесная концентрация вакансий в кремнии; $BAF \cdot K_0$ и $BAF \cdot KE$ – константы.

Равновесная концентрация вакансий (дефектов в различных зарядовых состояниях) зависит от положения уровня Ферми [10, 11] и определяется следующим выражением:

$$V^* = V_i^* \left\{ \frac{1 + \left(\frac{n_i}{n}\right)\phi^+ + \left(\frac{n_i}{n}\right)^2\phi^{++} + \left(\frac{n}{n_i}\right)\phi^- + \left(\frac{n}{n_i}\right)^2\phi^=}{1 + \phi^+ + \phi^{++} + \phi^- + \phi^=} \right\}, \quad (2.32)$$

где n – концентрация электронов; n_i – собственная концентрация носителей заряда,

$$\phi^+ = \sqrt{BAF \cdot EBK} \exp\left(-\frac{BAF \cdot PE}{k_b T}\right), \quad (2.33)$$

$$\phi^{++} = \sqrt{BAF \cdot EBK} \exp\left(-\frac{BAF \cdot PPE}{k_b T}\right), \quad (2.34)$$

$$\phi^- = \sqrt{BAF \cdot EBK} \exp\left(-\frac{BAF \cdot NE}{k_b T}\right), \quad (2.35)$$

$$\phi^= = \sqrt{BAF \cdot EBK} \exp\left(-\frac{BAF \cdot PE}{k_b T}\right). \quad (2.36)$$

Здесь ϕ^+ , ϕ^{++} , ϕ^- и $\phi^=$ – доли концентраций вакансий соответственно в положительных, двукратно-положительных, отрицательных и двукратно-отрицательных зарядовых состояниях.

На рис. 2.6 приведен график зависимости V^* от V_i^* при 950 °С для типичных примесей в кремнии. Отметим, что с увеличением степени легирования для примесей n-типа зависимость V^* от V_i^* увеличивается, а для примесей p-типа остается почти неизменной. Увеличение зависимости V^* от V_i^* для примесей n-типа связано с увеличением линейной константы скорости окисления, что приводит к формированию более толстых пленок окисла. Это объясняется более высокой способностью к внедрению в кристаллическую решетку кремниевой подложки вакансий или молекул окислителя при окислении высоколегированной подложки n-типа.

Тенденция к изменению толщины окисла иллюстрируется рис. 2.7, на котором приведена зависимость толщины SiO_2 от концентрации типичных примесей.

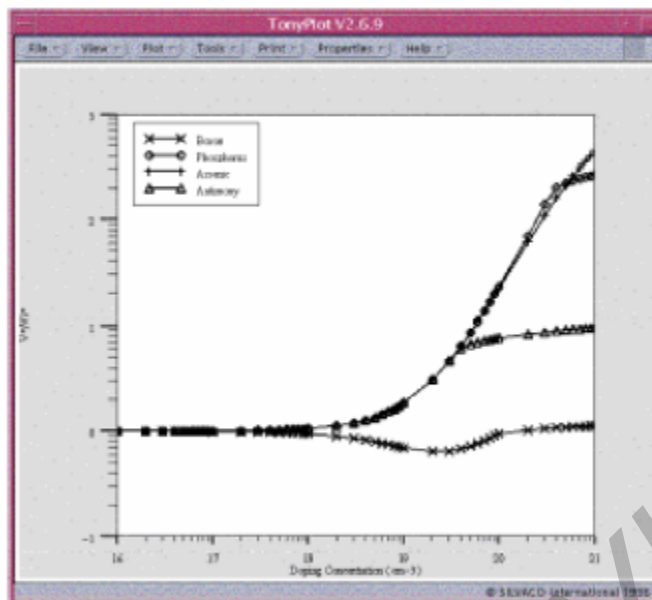


Рис. 2.6. Зависимости V^* от V_i^* для различных концентраций примесей

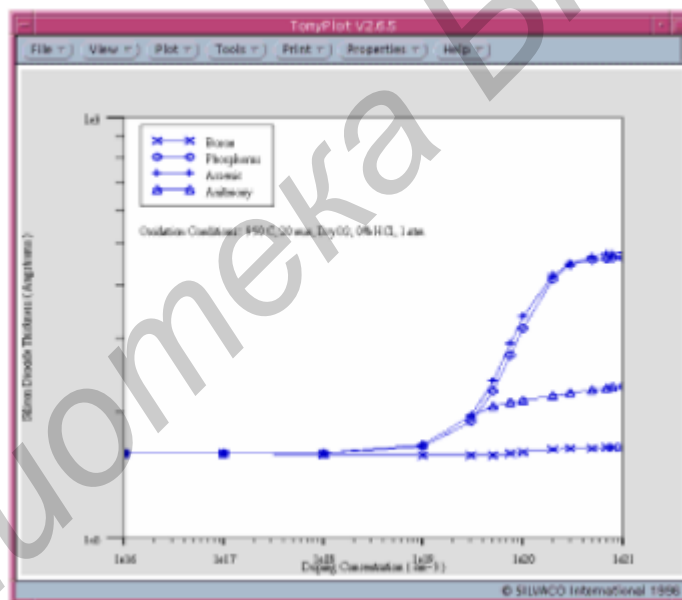


Рис. 2.7. Рассчитанная величина толщины окисла кремния в зависимости от концентраций примесей

2.6. Параболическая константа скорости окисления

При длительном окислении и высоких температурах скорость роста окисла связывается со временем окисления параболической зависимостью. Диффузия окислителя в окисел является определяющим фактором при описании кинетики роста окисла. Для таких длительностей и температур толщина окисла аппроксимируется выражением

$$x_0^2 \cong Bt, \quad (2.37)$$

где B – так называемая параболическая константа скорости окисления, которая присутствует в уравнении (2.9). Используя это уравнение, коэффициент диффузии окислителя D_{eff} определяется из заданных значений C^* , N_l и экспериментально определенных значений B . Параболическая константа скорости окисления зависит от давления и содержания хлора в процессе окисления и описывается следующим выражением:

$$B = B_i B_p B_{HCl}, \quad (2.38)$$

где

$$B_i = \begin{cases} PAR.L.0 \exp\left(-\frac{PAR.L.E}{k_b T}\right) & T < P.BREAK, \\ PAR.H.0 \exp\left(-\frac{PAR.H.E}{k_b T}\right) & (T \geq P.BREAK). \end{cases} \quad (2.39)$$

Величина B_i является функцией температуры и длительности термообработки слаболегированных подложек, отжигаемых при атмосферном давлении и без хлора в окислительной среде.

2.6.1. Зависимость толщины оксида кремния от давления

Влияние давления на кинетику процесса окисления кремния исследовано в работе [6] для пирогенного пара и в работе [12] для сухого кислорода. Параболическая константа скорости окисления изменяется с давлением вследствие ее зависимости от равновесной концентрации окислителя C^* , которая прямо пропорциональна парциальному давлению газа-окислителя и описывается следующим соотношением:

$$B_p = P^{P.PDEP}, \quad (2.40)$$

где P – парциальное давление газа-окислителя; $P.PDEP$ – константа.

2.6.2. Зависимость толщины оксида кремния от содержания хлора

Добавка хлора в процессе термического окисления также влияет на параболическую константу скорости окисления. Одно из возможных объяснений этого влияния состоит в том, что хлор внедряется в окисную пленку, что приводит к деформации решетки SiO_2 , что, в свою очередь, вызывает повышение коэффициента диффузии окислителя [5]. Влияние концентрации хлора на параболическую константу скорости окисления моделируется таким же образом, как и для линейной константы скорости окисления. Обычно используется табличное представление при определении увеличения параболической константы скорости окисления.

2.7. Смешанная окислительная среда

На практике окислительной средой может быть смесь газа, состоящая из более чем одного окислителя и разных примесей. Полная скорость окисления будет зависеть от всех составляющих. При моделировании окисления в многокомпонентной газовой среде программа SSuprem 4 одновременно учитывает диффузию и окисление всех газовых составляющих. Парциальные давления каждого газа рассчитываются следующим образом:

$$P_j = P_{total} \frac{F_j}{\sum F_i}, \quad (2.41)$$

где P_j и F_j – парциальное давление и скорость потока газа соответственно для каждой j -й компоненты; P_{total} – полное давление газовой смеси.

Если только один окислительный газ имеется в газовом потоке (например, только O_2 или H_2O с другими газами), то окисление моделируется так, как описано выше. Давление окислительного газа определяется с помощью уравнения (2.41).

Для сред, содержащих более чем один окислитель (например O_2 и H_2O), используется парциальное давление каждого окислителя при расчете C^* для каждого компонента. Из полученного значения C^* рассчитываются k и D_{eff} для каждого составляющего окислителя таким же образом, как описано ранее. Уравнение (2.10) решается для каждого окислителя с целью получения распределения концентрации окислителя в растущем SiO_2 . Вклады от каждого составляющего окислителя в скорость смещения поверхности раздела Si/SiO_2 рассчитываются с помощью выражения

$$\vec{V}_s = \sum_i \frac{k_j C_{ij} \hat{n}_{ij}}{N_{ij}}, \quad (2.42)$$

если используется уравнение (2.11), а j соответствует j -му окислительному газу.

Уравнения для потока также рассчитываются для смешанной среды, в которой присутствуют как O_2 , так и H_2O . Величины D_{eff} и k зависят как от напряжения, так и от содержания сухого и влажного кислорода, которые в свою очередь зависят от процессов окисления, проводимых ранее.

2.8. Аналитические модели окисления

Аналитические модели окисления могут использоваться только для описания формирования простых структур, например кремниевой подложки с осажденным (или выращенным) окислом на ней. Поскольку маска может быть задана только в левой части моделируемой структуры, окисление может

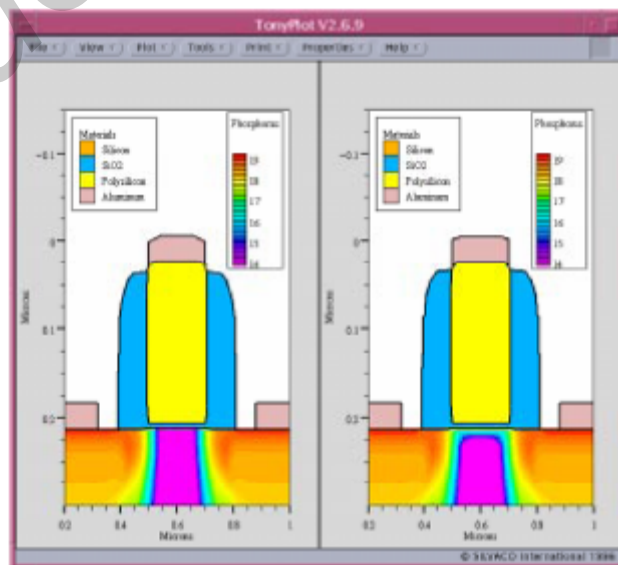
происходить только в правой части края маски. Аналитические модели не учитывают реальный слой материала, расположенный в правой части рассматриваемого края маски. По мере утолщения слоя окисла сам слой поднимается, однако это не влияет на скорость роста и на форму окисла. Во всех аналитических моделях предполагается, что исходная поверхность кремния планарна.

В модели ERFG рассчитывается форма «птичьего клюва» окисла под нитридными масками различной толщины [13]. Модель ERFG состоит из двух моделей: ERF1 и ERF2. Модель ERF1 описывает рост окисла под тонким слоем нитрида, когда напряжения от слоя нитридной маски пренебрежимо малы. Модель ERF2 описывает рост окисла, когда толщина слоя нитрида достаточно велика, и напряжения в окисле могут вызвать «вспучивание» слоя окисла. Обе модели основаны на конструировании поверхностей раздела окисел/кремний, окисел/окружающая среда или окисел/нитрид с использованием функции ошибок:

$$Z = A \operatorname{erfc}(By + C) + D, \quad (2.43)$$

где параметры A , B , C и D являются комплексными функциями нескольких геометрических параметров: начальной толщины окисла l_{ox} и нитрида l_n , текущей толщины окисла E_{ox} , рассчитанной по модели Дила-Гроува, длины бокового окисления под слоем нитрида L_{bb} и поднятия маски H в процессе окисления.

На рис. 2.8 показано сечение n-МОП транзистора с высоколегированным фосфором поликремниевым затвором, полученным в результате моделирования процесса формирования тонкого (порядка 50 ангстрем) слоя окисла в качестве подзатворного диэлектрика.



а

б

Рис. 2.8. МОП структура, полученная с использованием

мелкой (а) и более крупной (б) пространственной сетки

Литература

1. Deal B.E. and Grove A.S. General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon // J. Appl. Phys. 1965. Vol. 36. P. 3770.
2. Deal B.E. Thermal Oxidation Kinetics of Silicon in Pyrogenic H₂O and 5% HCl/H₂O Mixtures / J. Electrochem. Soc. Apr. 1978. Vol. 125. No. 4. P. 576-579.
3. Chin D. Two Dimensional Oxidation. Modeling and Applications // Ph.D Thesis, Department of Electrical Engineering, Stanford University. Jun. 1983.
4. Eyring H. Viscosity, Plasticity and Diffusion as Examples of Absolute Reaction Rate // J. Chem. Phys. 1936. Vol. 4. P. 283.
5. Hess D.W. and Deal B.E. Kinetics of the Thermal Oxidation of Silicon in O₂/HCl Mixtures // J. Electrochem. Soc. May 1977. Vol. 124. No. 5. P. 735-739.
6. Razouk R.R., Lie L.N. and Deal B.E.. Kinetics of High Pressure Oxidation of Silicon in Pyrogenic Steam // J. Electrochem. Soc. Oct. 1981. Vol. 128. No. 10. P. 2214-2220.
7. Ho C.P. and Plummer J.D. // J. Electrochem. Soc. Sep. 1979. Vol. 126. No. 9. P. 1576.
8. Law M.E. Two Dimensional Numerical Simulation of Dopant Diffusion in Silicon // PhD Thesis, Department of Electrical Engineering, Stanford University. Jan. 1988.
9. Watkins G.D. (ed. Huntley F.A.). EPR Studies of the Lattice Vacancy and Low Temperature Damage Processes in Silicon, Lattice Defects in Semiconductors, 1974 // Inst. Phys. Conf. Ser. 23. London, 1975.
10. Crowder S. Processing Physics in SOI Material / PhD Dissertation, Department of Electrical Engineering, Stanford University. 1995.
11. Park H. and Law M.E. Point Defect based Modeling of low Dose Silicon Implant Damage and Oxidation Effects on Phosphorous and Boron Diffusion in Silicon // J. Appl. Phys. Oct. 1992. Vol. 72(8). P. 3431.
12. Bowyer M.D.J., Ashworth D.G., Owen R. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1996. Vol. 29. P. 1274.
13. Guillemot N. A New Analytical Model of the Bird's Beak // IEEE Trans. on ED. May 1987. Vol. ED-34. No. 5.

3. МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ СИЛИЦИДОВ

Силициды (соединения металлов с кремнием) образуются при взаимодействии металла с кремнием с образованием промежуточной фазы. Типичная проводимость силицидов на несколько порядков выше по сравнению с проводимостью высоколегированных областей n^+ и p^+ . В современных СБИС технологиях силициды используются для снижения сопротивления контактов и межсоединений. Кроме того, использование силицидов (самосовмещенных силицидов) приводит к снижению сопротивления поликремниевых затворов и слоевого сопротивления истоков и стоков МОП транзисторов.

Рост силицидов – это процесс движения границ многослойной структуры вдоль поверхностей раздела металл/силицид и кремний/поликремний – силицид при взаимодействии атомов кремния и металла с образованием силицида. Скорости движения границ рассчитываются с использованием коэффициентов, характеризующих скорость взаимодействия атомов кремния и металла и концентрации кремния и металла в силициде. Диффузия атомов кремния и металла внутри слоев силицида рассматривается посредством использования уравнений, описывающих диффузию точечных дефектов. Моделируются также сегрегация примесей, их диффузия в силициде, а также инжекция точечных дефектов из движущихся границ раздела. Может также рассматриваться комбинация сложных материалов, например, дисилицид платины ($PtSi_2$), силицид титана ($TiSi_2$) и силицид вольфрама (WSi_2).

Нанесение силицидов осуществляется посредством моделирования осаждения слоев тугоплавких материалов на поверхность кремний/поликремний с последующей термической обработкой.

Моделирование процесса формирования силицидов осуществляется таким же образом, что и моделирование окисления. На каждом временном шаге в каждой точке поверхности раздела рассчитываются скорости роста силицидов с учетом температуры, коэффициентов скоростей реакции на поверхности и концентраций металла/кремния. Скорости затем используются в качестве граничных условий при решении диффузионных уравнений для кремния металла и различных примесей. Скорость роста в i -й точке поверхности раздела рассчитывается следующим образом:

$$\frac{dX_i}{dt} = k_i C_i \frac{n_{in}}{N_{1i}}, \quad (3.1)$$

где $k_i = k_s \cdot 0 \exp\left[-\frac{k_s \cdot E}{kT}\right]$ – коэффициент скорости реакции на поверхности раздела; N_{1i} – число молекул кремния или металла на единичную плотность силицида; C_i – концентрация металла или кремния; n_{in} – вектор, нормальный к поверхности раздела, который направлен в сторону кремния/поликремния или металла.

Диффузия молекул металла и кремния в слой силицида моделируется как

и процесс диффузии точечных дефектов, при котором молекулы металла и кремния могут реагировать с образованием силицида подобно процессу рекомбинации междоузлий и вакансий:

$$\frac{dC}{dt} = \nabla(D\nabla C) - R, \quad (3.2)$$

где C – концентрация молекул или металла, или кремния; R – скорость объемной рекомбинации молекул кремния и металла; D – коэффициент диффузии кремния или металла в силициде.

Кроме объемной рекомбинации используются коэффициенты сегрегации и переноса на поверхности раздела с растущим слоем силицида для моделирования химических реакций и переноса диффундирующих молекул через поверхность раздела.

Формирование силицидов обычно приводит к существенному увеличению объема, что объясняет возникновение деформаций, наблюдаемых в силицидах. Такое изменение объема моделируется посредством использования атомных объемов реагирующих молекул и молекулярного объема силицида [1]. Для реакции типа



изменение объема ΔV рассчитывается следующим образом:

$$\Delta V = \frac{(xV_M + yV_{Si}) - V_{M_xSi_y}}{xV_M + yV_{Si}} 100, \quad (3.4)$$

где ΔV , V_M , V_{Si} и $V_{M_xSi_y}$ – соответственно изменение молекулярного объема, молекулярные объемы металла, кремния и силицида; x и y – число атомов металла и кремния в силициде M_xSi_y .

Двухмерное движение границы раздела и изменение объема, связанное с возникающими напряжениями, вызывают вязкий поток движения силицида. Этот поток силицида моделируется аналогично модели окисления COMPRESS посредством решения уравнений [2]:

$$\mu \nabla^2 V = \nabla P, \quad (3.5)$$

$$\nabla \nabla = - \left(\frac{1-2\nu}{\mu} \right) P, \quad (3.6)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad (3.7)$$

где V – скорость; P – давление; μ – вязкость; ν – коэффициент Пуассона; E – модуль Юнга.

Литература

1. Murarka S.P. Silicides for VLSI Applications // Academic Press, Orlando, Florida 32887. 1983. P. 60.
2. Conor S. Rafferty Stress Effects in Silicon Oxidation - Simulation and Experiments // Integrated Circuits Laboratory, Department of Electrical Engineering, Stanford University, Stanford, CA 94305. 1989. P. 123-125.

Библиотека БГУИР

4. МОДЕЛИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

В программе SSuprem 4 используются аналитические и статистические приближения для моделирования ионной имплантации. Аналитические модели основаны на построении профилей имплантированных ионов из рассчитанных или измеренных моментов распределений. В статистическом подходе используются результаты расчетов траекторий ионов методом Монте-Карло в физическом приближении с целью определения окончательного распределения остановившихся частиц.

4.1. Аналитические модели имплантации

Для расчета распределений ионно-имплантированных примесей используются пространственные моменты. Этот метод основан на концепции пробегов Линдхарда [1], в котором профиль ионно-имплантированных примесей строится на основании ранее рассчитанных или измеренных моментов. Двухмерное распределение может рассматриваться как суперпозиция продольного (вдоль направления имплантации) и поперечного (перпендикулярно направлению имплантации) одномерных распределений.

4.1.1. Гауссово распределение ионно-имплантированных примесей

Гауссово одномерное распределение имеет следующий вид:

$$C(x) = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right], \quad (4.1)$$

где ϕ – доза; R_p – проективный пробег; ΔR_p – страгглинг проективного пробега, или стандартное отклонение.

4.1.2. Распределение Пирсона ионно-имплантированных примесей

Для большинства реальных профилей гауссово распределение неадекватно, поскольку реальные профили несимметричны. Простейшим и наиболее широко используемым методом расчета асимметричных продольных профилей распределения ионно-имплантированных примесей является распределение Пирсона, и в особенности функция распределения Пирсон IV.

Функция Пирсона относится к семейству распределений как результат решения следующего дифференциального уравнения:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{(x - a)f(x)}{b_0 + b_1x + b_2x^2}, \quad (4.2)$$

в котором $f(x)$ – частотная функция. Константы a , b_0 , b_1 и b_2 связаны с моментами функции $f(x)$ следующими соотношениями:

$$a = -\frac{\Delta R_p \gamma (\beta + 3)}{A}, \quad (4.3)$$

$$b_0 = -\frac{\Delta R_p^2 (4\beta - 3\gamma^2)}{A}, \quad (4.4)$$

$$b_1 = a, \quad (4.5)$$

$$b_2 = -\frac{2\beta - \gamma^2 - 6}{A}, \quad (4.6)$$

где $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$, а γ и β – параметры, называемые соответственно асимметрией (skewness) и скошенностью или эксцессом (kurtosis).

Эти параметры распределения Пирсона непосредственно связаны с четырьмя моментами (μ_1 , μ_2 , μ_3 и μ_4) функции распределения $f(x)$:

$$R_p = \mu_1; \Delta R_p = \sqrt{\mu_2}; \gamma = \frac{\mu_3}{R_p^3}; \beta = \frac{\mu_4}{R_p^4}. \quad (4.7)$$

μ_i определяется следующими выражениями:

$$\mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx, \quad (4.8)$$

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^i f(x) dx \quad i = 2, 3, 4... \quad (4.9)$$

Формы решения дифференциального уравнения Пирсона зависят от природы корней уравнения $b_0 + b_1x + b_2x^2 = 0$. Существуют различные формы кривых распределения Пирсона. Их полная классификация содержится в работе [2]. Очевидно, что только колоколообразные кривые подходят для профилей распределения имплантированных ионов. В работе [3] показано, что функция $f(x)$ имеет максимум, когда $b_0 + b_1x + b_2x^2 = 0$. Это выражение можно представить в виде следующего соотношения между β и γ :

$$\beta > \frac{9\left\{(6\gamma^2 + 5) + \left[\frac{9\gamma^6}{16} + 8\gamma^4 + 25(\gamma^2 + 1)\right]^{1/2}\right\}}{50 - \gamma^2} \quad (4.10)$$

с дополнительным ограничением $\gamma^2 < 50$.

Только распределение Пирсон IV имеет единственный максимум при $x = a + R_p$, и оно монотонно спадает до нуля по обе стороны распределения. Таким образом, именно распределение Пирсон IV обычно используется для построения профиля распределения ионно-имплантированных примесей. Распределение Пирсон IV является решением уравнения (4.1) при удовлетворении следующих условий:

$$\beta = \frac{39\gamma^2 + 48 + 6(\gamma^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma^2}, \quad 0 < \gamma^2 < 32, \quad (4.11)$$

что дает следующую формулу для распределения Пирсон IV:

$$f(x) = K \left[b_0 + b_1(x - R_p) + b_2(x - R_p)^2 \right]^{1/(2b_2)} \times \exp \left[-\frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_1b_2 - b_1^2}} \operatorname{atan} \left(\frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_1b_2 - b_1^2}} \right) \right], \quad (4.12)$$

где K определяется ограничением

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1. \quad (4.13)$$

В узкой области, где критерий распределения Пирсон IV (4.13) не выполняется, но выполняется критерий колоколообразной формы распределения (4.10), используются другие типы функции Пирсона. Эти функции являются колоколообразными, но это свойство не выполняется по всему интервалу изменения x . Обычно это не влияет на качество рассчитанных профилей, поскольку пределы изменения этих функций располагаются достаточно далеко от положения их максимума. Во всех случаях, когда не удовлетворяется ни один из приведенных выше критериев, автоматически будут находиться условия, при которых этот критерий будет выполняться. В стандартной модели с использованием распределения Пирсон IV продольное распределение концентрации примесей пропорционально дозе ионов:

$$C(x) = \phi f(x). \quad (4.14)$$

Приближение с использованием распределения Пирсон IV дает

адекватные результаты для многих комбинаций ион /подложка/доза. Однако во многих практически важных случаях, когда необходимо учитывать эффект каналирования, использование приближения Пирсона приводит к неадекватным результатам.

Модель со сдвоенным распределением Пирсона

Для расширения применимости аналитического приближения с целью учета эффекта каналирования в работе [4] предложена модель профиля распределения ионно-имплантированных примесей с использованием сдвоенного распределения Пирсона. В этой модели распределение концентрации примесей представляется в виде линейной комбинации двух функций:

$$C(x) = \phi_1 f_1(x) + \phi_2 f_2(x), \quad (4.15)$$

где $\phi_1 + \phi_2 = \phi$ - полная доза, а $f_1(x)$ и $f_2(x)$ – нормализованные функции Пирсон IV, каждая со своими моментами.

Первая функция Пирсона описывает случайные столкновения (вблизи пика профиля), а вторая – область хвоста каналирования. Уравнение (4.14) можно переписать в другой форме:

$$C(x) = \phi [R f_1(x) + (1 - R) f_2(x)], \quad (4.16)$$

где $R = \phi_1 / \phi_2$.

Чтобы использовать распределение Пирсона в таком виде, необходимо иметь 9 параметров: по 4 момента для каждой части такого распределения плюс отношение доз.

Модель со сдвоенным распределением Пирсона, проверенная по SIMS данным (SVDP модель)

Эти модели основаны на табличных данных, в которых содержатся моменты сдвоенных распределений Пирсона для B , BF_2 , P и As . Эти данные получены в точных экспериментах по имплантации. В таблицах содержится информация о дозе, энергии, углах наклона и поворота имплантации, а также о толщине окисла (см. табл. 4.1):

Экспериментальные данные, используемые в SVDP модели

Ион	Энергия (кэВ)	Доза (см ⁻²)	Угол наклона (град)	Угол поворота (град)	Толщина оксида (Å)
B	1-100	$10^{14} - 8 \cdot 10^{15}$	0-10	0-360	Исходный оксид, 500
BF ₂	1-80	$10^{14} - 8 \cdot 10^{15}$	0-10	0-360	Исходный оксид
P	12-200	$10^{14} - 8 \cdot 10^{15}$	0-10	0-360	- // -
As	1-200	$10^{14} - 8 \cdot 10^{15}$	0-10	0-360	- // -

Толщина исходного оксида ≤ 50 нм.

4.1.3. Моделирование имплантации в многослойную структуру

Чтобы использовать любую из приведенных выше аналитических функций распределения для структур, состоящих из слоев с различными материалами, следует применить специальную методику для изменения параметров пробегов в этих функциях, соответствующих для каждого материала.

Метод подгонки к дозе

Этот метод впервые предложен в работе [5]. Сегмент профиля внутри i -го слоя рассчитывается следующим образом:

$$C_i(x) = \phi f(x - x_t + x_{eff}), \quad (4.17)$$

где $f(x)$ – функция распределения (Гаусс, Пирсон или сдвоенный Пирсон) с моментами, соответствующими i -тому слою; x – расстояние от поверхности подложки до верхней поверхности i -го слоя; x_t – толщина k -го слоя:

$$x_t = \sum_{1 \leq k \leq i-1} t_k; \quad (4.18)$$

x_{eff} – эффективная толщина, рассчитываемая из выражения

$$\int_0^{x_{eff}} C_i(x) dx = \sum_{1 \leq k \leq i-1} \phi_k, \quad (4.19)$$

где ϕ_k – доля полной дозы имплантации в k -том слое. Очевидно, что для первого слоя $x_{eff}=0$ и $x_t=0$.

Методы коррекции глубины проективного пробега и максимальной глубины имплантации

Два других метода в аналитическом приближении для многослойных структур состоят в изменении глубины проективного пробега и максимальной глубины. Эти два метода отличаются от метода подгонки к дозе в способе расчета эффективной глубины x_{eff} , а также в способе нормализации парциальных профилей в слоях. Как и в методе подгонки к дозе, распределение в первом слое рассчитывается с использованием моментов для первого слоя. Для последующих слоев распределение примесей рассчитывается следующим образом:

$$C_i(x) = Nf(x - x_t + x_{eff}) \quad (4.20)$$

и

$$N = \left(\phi - \sum_{1 \leq k \leq i-1} \phi_k \right) / \phi_i, \quad (4.21)$$

где N – коэффициент нормализации; ϕ – доза имплантации; x_{eff} – эффективная глубина, рассчитываемая следующим образом. При расчете проективного пробега x_{eff} для i -го слоя:

$$x_{eff} = \sum_{1 \leq k \leq i-1} \frac{t_k R_p^{k+1}}{R_p^k}, \quad (4.22)$$

где R_p^k – проективный пробег иона в материале k -го слоя. При масштабировании максимального пробега x_{eff} рассчитывается по формуле

$$x_{eff} = \sum_{1 \leq k \leq i-1} \frac{t_k}{R_p^k + 3\Delta R_p^k} (R_p^{k+1} + 3\Delta R_p^{k+1}), \quad (4.23)$$

где ΔR_p^k – страгглинг проективного пробега в k -м слое. В этом приближении рассчитанная величина максимального пробега используется как показатель внедрения иона в соответствующий материал.

Метод коррекции моментов

Во всех трех описанных выше моделях параметры пробегов считаются независимыми от наличия других слоев. Однако очевидно, что распределение торможения ионов в более глубоких слоях может зависеть от толщины и характеристик торможения более высоких слоев, поскольку каждая траектория

ионов проходит через указанные более высокие слои. Метод коррекции моментов (Moment Correction Method – MCM) частично учитывает этот эффект. В MCM модели проективный пробег и страгглинг в данном слое нормализуются в соответствии с вероятностью проникновения иона в данный слой. Единственной доступной мерой этой вероятности является доля дозы в данном слое. Таким образом, скорректированные проективный пробег R_{pc} и страгглинг в i -том слое рассчитываются следующим образом:

$$R_{pc} = \phi_i R_p^i + \sum_{1 \leq k \leq i-1} \phi_k R_p^k, \quad (4.24)$$

$$\Delta R_{pc} = \phi_i R_p^i + \sum_{1 \leq k \leq i-1} \phi_k R_p^k, \quad (4.25)$$

где

$$\phi_i = \phi - \sum_{1 \leq k \leq i-1} \phi_k. \quad (4.26)$$

4.1.4. Построение двухмерных профилей

Метод свертки

Метод свертки заключается в следующем. Прежде всего устанавливается направление имплантации относительно рассматриваемой плоскости, используя угловые параметры θ (угол между направлением пучка ионов и осью y) и φ (угол между направлением пучка ионов и рассматриваемой поверхностью). Например, $\varphi = 0^\circ$ и $\theta > 0^\circ$ соответствуют ионному пучку, параллельному рассматриваемой плоскости и направленному в нижний правый угол рассматриваемой плоскости. $\varphi = 90^\circ$ и $\theta > 0^\circ$ соответствуют ионному пучку в плоскости, перпендикулярному рассматриваемой плоскости. Эффективный угол имплантации в рассматриваемой плоскости определяется из следующего выражения:

$$\tan(\alpha) = \tan(\theta) \cos(\varphi). \quad (4.27)$$

Фронт имплантации, перпендикулярный направлению α , разделяется на ряд слоев N_s (обычно >100) шириной a . Концентрация ионно-имплантированных примесей в каждой точке сетки i с координатами (x_i, y_i) рассчитывается путем суммирования вкладов от каждого k -го слоя:

$$C(x_i, y_i) = \sum_{1 \leq k \leq N_s} C_k(x_i, y_i). \quad (4.28)$$

Вклад от каждого слоя C_k рассчитывается посредством интегрирования частотной функции $F_{2D}(x, y)$ двухмерного источника (начиная с начальной точки

в сечении, нормальном к центральному слою поверхности структуры) по ширине слоя:

$$C_k(x_i, y_i) = \phi \int_{-a/2}^{a/2} f_{2D}(d_i, t_i) dt, \quad (4.29)$$

где d_i – глубина вдоль направления имплантации (т.е. расстояние между начальной точкой и проекцией точки i на вектор \vec{n}), а t_i – поперечное расстояние (т.е. расстояние между точкой i и вектором \vec{n}).

Моделирование бокового распределения в зависимости от глубины

Простейшей формой двухмерной частотной функции является произведение продольной функции $f_1(x)$ (которая может быть функцией Гаусса, Пирсона или двойной функцией Пирсона) на не зависящую от глубины поперечную функцию $f_i(y)$:

$$f_{2D}(x, y) = f_1(x)f_i(y). \quad (4.30)$$

Очевидно, что функция $f_i(y)$ должна быть симметричной и иметь колоколообразную форму.

Функция Гаусса для бокового распределения

Такая функция используется в том случае, если величина эксцесса отличается от значения 3,0, задаваемого по умолчанию. В этом случае интегрирование уравнения (4.1) дает

$$C(x_i, y_i) = \frac{1}{2} \phi f_1(d_i) \left[\operatorname{erfc} \frac{t_i - a/2}{\sqrt{2\Delta Y}} - \operatorname{erfc} \frac{t_i + a/2}{\sqrt{2\Delta Y}} \right], \quad (4.31)$$

где ΔY – продольное стандартное отклонение, определяемое из выражения:

$$\Delta Y = \phi \int_{-\infty}^{\infty} \int f_{2D}(x, y) y^2 dx dy. \quad (4.32)$$

Параболическое приближение для бокового распределения, зависящего от глубины

В работах [6–9] показано, что продольная функция $f_1(x)$ не зависит от глубины, поскольку имеется существенная корреляция между поперечным и

продольным движениями имплантируемых ионов. Эту корреляцию можно учесть, используя поперечную функцию с независимым от глубины боковым стандартным отклонением. Как показано в работах [7, 9], если используются пространственные моменты вплоть до четвертого порядка, наилучшим приближением является параболическая функция

$$\sigma_y^2(x) = c_0 + c_1(x - R_p) + c_2(x - R_p)^2. \quad (4.33)$$

Чтобы найти коэффициенты этой функции, следует использовать два дополнительных пространственных момента: так называемую смешанную асимметрию

$$\gamma_{xy} = \int_{-\infty}^{\infty} \int f_{2D}(x, y)(x - R_p)y^2 dx dy \quad (4.34)$$

и смешанный эксцесс

$$\beta_{xy} = \int_{-\infty}^{\infty} \int f_{2D}(x, y)(x - R_p)^2 y^2 dx dy. \quad (4.35)$$

Параметры c_0 и c_2 можно определить, подставив уравнение (4.30) в уравнения (4.32), (4.34) и (4.35) и принимая во внимание уравнения (4.13) – (4.19) при интегрировании по x . Это приводит к системе уравнений, из которой можно получить следующие соотношения:

$$c_0 = \Delta Y^2(1 - B), \quad (4.36)$$

$$c_1 = \frac{\Delta Y^2}{\Delta R_p}(\gamma_{xy} - \gamma B), \quad (4.37)$$

$$c_2 = \frac{\Delta Y^2}{\Delta R_p^2} B, \quad (4.38)$$

где

$$B = \frac{\beta_{xy} - 1 - \gamma\gamma_{xy}}{\beta - 1 - \gamma^2}. \quad (4.39)$$

Негауссовы функции для бокового распределения

Результаты моделирования методом Монте-Карло [10] показывают, что в большинстве случаев функция поперечного распределения является

негауссовой. Другими словами, поперечный эксцесс, рассчитываемый по формуле

$$\beta_y = \iint_{-\infty}^{\infty} f_{2D}(x,y)y^4 dx dy, \quad (4.40)$$

не всегда равен 3,0 и, кроме того, зависит от глубины. Несколько негауссовых поперечных функций распределения исследованы в работе [11], где показано, что применимы симметричные функции Пирсона (типа II для $\beta_y \leq 3.0$ и типа VII для $\beta_y \geq 3.0$), которые обеспечивают хорошее согласие с результатами расчетов методом Монте-Карло для аморфного кремния и обладают высокими вычислительными характеристиками, поскольку их можно интегрировать по x в замкнутой форме через неполные β -функции [12].

Другой альтернативой для функции поперечного распределения является использование модифицированной функции Гаусса, предложенной в работе [10]. В [12] показано, что ее также можно интегрировать в замкнутой форме с использованием γ -функции. Выбор типа функции поперечного распределения в определенной степени субъективен, поскольку он основан на сравнении с боковым сечением двумерных распределений, полученных методом Монте-Карло, точность которого уменьшается вдали от положения его максимума. Анализ, проведенный в работе [13] на основании ВСА моделирования (см. раздел «Моделирование имплантации методом Монте-Карло»), показал, что функция типа Пирсон II несколько недооценивает концентрации, полученные в ВСА расчетах, тогда как расчеты в MGF приближении переоценивают эти концентрации. Поэтому в программе SSuprem 4 используется среднее приближение между Пирсон II и MGF для всех $\beta_y < 3.0$. Если $\beta_y = 3.0$, то обе функции сводятся к функции Гаусса. И, наконец, в случае более высоких значений β_y в работе [13] показано, что MGF модель является самым лучшим приближением.

Задача определения функции $\beta_y(x)$ является более трудной, чем сделанное выше определение функции $\sigma_y(x)$, поскольку в этом случае необходимо использовать пространственные моменты пятого и шестого порядков, чтобы построить аналитическую функцию для зависимости $\beta_y(x)$. Поэтому в нынешней версии SSuprem 4 используется постоянное значение β_y , не зависящее от x . В будущем будут использоваться более совершенные приближения для $\sigma_y(x)$ и для $\beta_y(x)$, когда будут получены более полные таблицы поперечных параметров с использованием результатов моделирования методом Монте-Карло.

4.2. Моделирование имплантации методом Монте-Карло

Аналитические модели дают хорошие результаты только при рассмотрении ионной имплантации в простые планарные структуры (в чистый

кремний или в кремний, покрытый тонким слоем другого материала). Однако для структур, содержащих много непланарных слоев, необходимы более сложные модели. Наиболее гибким и универсальным приближением для моделирования ионной имплантации в нестандартных условиях является метод Монте-Карло. Это приближение позволяет рассчитывать имплантационные профили в произвольных структурах с точностью, сравнимой с точностью аналитических моделей для однослойной структуры.

Программа SSuprem 4 содержит три модели Монте-Карло: для аморфного материала, для кристаллического материала и ВСА модель для кристаллического материала. Все они основаны на приближении бинарных столкновений (Binary-Collision Approximation – ВСА), но используют различные приближения относительно структурного материала и распространения в нем ионов.

Сущность физической проблемы

Пучок быстрых ионов (с энергией от 1 эВ до 25 КэВ) в кристаллическом или аморфном твердом теле замедляется или рассеивается вследствие ядерных столкновений и электронного взаимодействия. На своем пути каждый ион может образовывать атомы отдачи, которые в свою очередь образуют каскады атомных столкновений. Они могут покинуть поверхность подложки (эффект распыления) или застревать в узлах кристаллической решетки. Вместе с ионами, осажденными на подложке, это приводит к локальным изменениям в составе, повреждению кристаллической решетки и, наконец, к аморфизации мишени. В зависимости от ориентации кристаллической подложки и/или направления пучка имплантируемые ионы, а также создаваемые ими радиационные повреждения имеют различное пространственное распределение. При больших потоках эти явления будут создавать перемешивание в локальных областях, изменения в составе приповерхностных областей вследствие распыления и установления стационарных профилей имплантированных ионов.

Метод решения задачи

Траектории отдельных движущихся частиц и их столкновения моделируют посредством приближения бинарных столкновений в кристаллических, поликристаллических и аморфных веществах, используя экранированный кулоновский потенциал для ядерных столкновений и комбинацию локального и нелокального приближения электронного газа для электронных энергетических потерь. Для каждого ядерного столкновения определяют параметр столкновения и азимутальный угол отклонения частицы в соответствии с рассматриваемой кристаллической структурой, используя ее трансляционную симметрию. Для аморфных материалов параметр столкновения и азимутальный угол отклонения частицы определяются по закону случайных чисел.

Ядерное торможение

При прохождении через вещество ионы взаимодействуют не только с атомами кристаллической решетки, но и с электронами. На рис. 4.1 показана геометрия рассеяния двух частиц в лабораторной системе координат. В расчетной модели предполагается, что ионы движутся из одной точки по отрезкам прямой линии, являющимся асимптотами их траекторий. При каждом столкновении ион теряет свою энергию посредством квазиупругого рассеяния на атомах решетки и посредством электронных потерь.

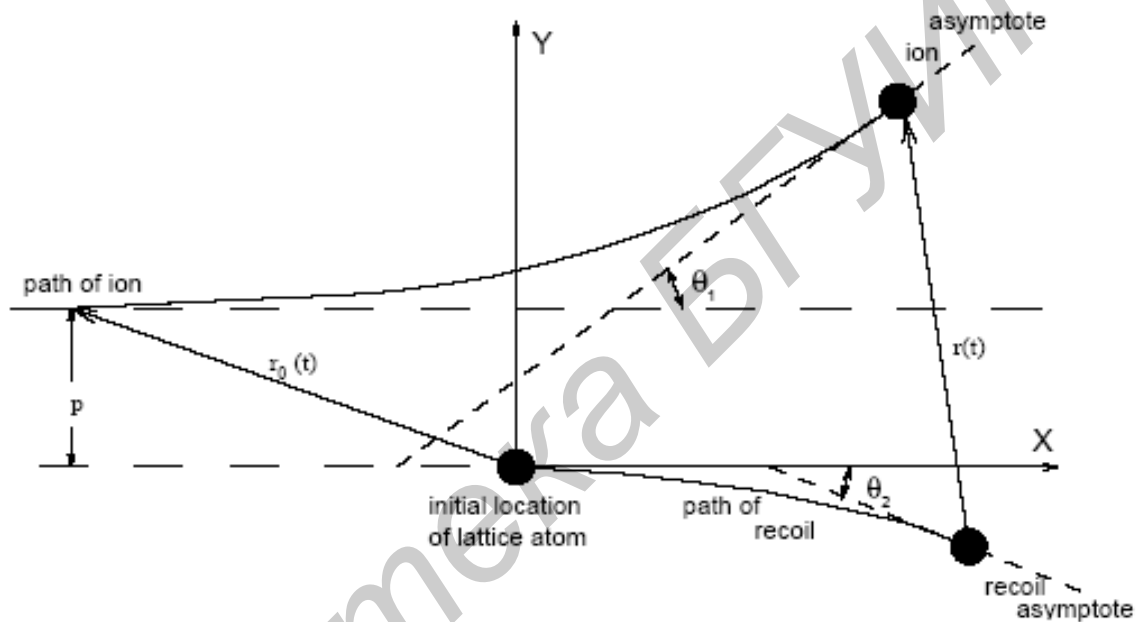


Рис. 4.1. Траектории иона (ion) и атома решетки (атома отдачи (recoil)) в процессе их столкновения

Углы рассеяния иона и атома отдачи выражаются следующим образом:

$$\tan \vartheta_y = Af \sin \theta / (1 + Af \cos \theta), \quad (4.41)$$

$$\tan \vartheta_2 = f \sin \theta / (1 + f \cos \theta), \quad (4.42)$$

где

$$f = \sqrt{1 - Q/E_r}, \quad (4.43)$$

здесь Q – потеря энергии на электронное возбуждение; $A = M_2 / M_1$ – отношение массы атома мишени (рассеянного атома) к массе налетающего (имплантированного иона); θ – угол рассеяния, определяемый следующим образом:

$$\theta = \pi - 2p \int_R^{\infty} \frac{1}{r^2 g(r)} dr, \quad (4.44)$$

где

$$g(r) = \sqrt{1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_r}}, \quad (4.45)$$

здесь p – параметр столкновения; $E_r = AE_0/(1+A)$ – относительная кинетическая энергия иона; E_0 – энергия падающего иона; r – межатомное расстояние; $V(r)$ – межатомный потенциал; R – величина, определяемая из уравнения $g(R)=0$.

Сечения падающей и рассеянной частиц определяются посредством использования приближения твердых сфер временного интеграла:

$$x_1 = p \tan(\theta/2), \quad (4.46)$$

$$x_2 = 0. \quad (4.47)$$

Межатомный потенциал

В программе SSuprem 4 используются двухчастичные кулоновские потенциалы с экранирующей функцией, которая является численной подгонкой к решению, полученному Фирсовым [14], и которая сохраняет такую же аналитическую форму, что и для изолированного атома:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \chi\left(\frac{r}{a_0}\right), \quad (4.48)$$

где Z_1 и Z_2 – атомные номера обоих атомов; a_0 – радиус экранировки, определяемый согласно выражению:

$$a_0 = 0,8853 a_B \bar{Z}^{-1/3}, \quad (4.49)$$

где \bar{Z} – средний атомный номер обоих атомов, рассчитываемый следующим образом:

$$\bar{Z}^{-1/3} = \left(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}\right)^{-1} M. \quad (4.50)$$

Основной недостаток этих двухчастичных потенциалов заключается в их относительно медленном затухании при $r \rightarrow \infty$. Параметр экранировки a_0 часто рассматривается как подгоночный параметр для каждой двухчастичной комбинации, который можно подогнать к самосогласованным расчетам или к

экспериментальным данным. Экранирующая функция имеет следующую форму:

$$\chi = \sum_{i=1} a_i \exp(-b_i x), \quad (4.51)$$

где a_i и b_i взяты из работы [15].

Электронное торможение

Электронное торможение, используемое при моделировании, состоит из двух отдельных механизмов неупругих энергетических потерь – локального и нелокального. Эти два механизма электронного торможения совершенно различны как по физической природе, так и по поведению – они имеют разные энергетические и пространственные зависимости [16]. Локальные неупругие энергетические потери основаны на модели, предложенной Фирсовым [17]. Согласно этой модели, расчет электронных энергетических потерь на столкновение основан на предположении о квазиклассической картине электронов, а именно, на средней энергии возбуждения электронных оболочек, а также на распределении и движении электронов согласно модели атома Томаса-Ферми. В этом квазиклассическом представлении перенос энергии ΔE от иона к атому обусловлен переходом электронов от одной частицы к другой, что приводит к изменению момента иона (пропорционально его скорости v) и к увеличению силы, действующей на ион. Когда ионы движутся от атома, то, несмотря на его захват ионом, электроны возвращаются на атом. Не происходит передачи момента, поскольку электроны переходят на более высокие энергетические уровни. Энергетические потери, согласно модели Фирсова, рассчитываются следующим образом:

$$-\Delta E = \frac{0,05973(Z_1 + Z_2)^{5/3} \sqrt{E/M_1}}{(1 + 0,31(Z_1 + Z_2)^{1/3} R_0)^5} eV, \quad (4.52)$$

где R_0 – расстояние наибольшего сближения ионов в ангстремах, которое приблизительно равно параметру столкновения в случае соударений под малыми углами; E – энергия движущегося атома (иона) в эВ; M_1 – масса в атомных единицах массы.

В бинарном столкновении углы рассеяния зависят от неупругих энергетических потерь (4.52) через параметр f .

Нелокальные электронные энергетические потери основаны на модели, описанной в работе Брандта и Китагава [18]. Замедляющая способность среды

$S = \frac{dE}{dx}$ для иона в первом приближении пропорциональна среднеквадратичному эффективному заряду иона. Эффективный заряд иона, ответственный за замедляющую способность, выводится из данного ионизационного состояния q . Дробный эффективный заряд иона в данном ионизационном состоянии q можно записать в следующем виде:

$$\zeta \equiv \frac{Z_1^*}{Z_1} = \left[\frac{S_q}{S_{q=1}} \right]^{1/2}, \quad (4.53)$$

где $S_{q=1}$ – замедляющая способность для чистого ядра. Теория Брандта и Китагава дает следующее простое выражение дробного эффективного заряда иона:

$$\zeta \approx q + C(k_F)(1 - q) \ln(1 + (2\Lambda v_F a_0 r_0)^2), \quad (4.54)$$

где $q = (Z_1 - N/Z)_1$ – степень ионизации; N – число электронов, связанных с ядром падающего иона; a_0 и r_0 – скорость падающего иона и радиус боровской орбиты; k_F и v_F – волновой вектор Ферми и скорость Ферми.

Для радиуса экранировки Брандт и Китагава используют экспоненциальную форму распределения, что дает:

$$\Lambda = \frac{0,48N^{2/3}}{Z_1(1 - N/(7N_1))}. \quad (4.55)$$

Единственной неопределенной величиной в выражении (4.54) является C , примерно равная 0,5 и слабо зависящая от материала мишени. Степень ионизации q можно выразить так:

$$q = 1 - \exp\left(\frac{-0,92v_r}{v_0 Z_1^{2/3}}\right), \quad (4.56)$$

где $v_r \equiv \langle v_I - v_e \rangle$ – относительная скорость между падающим ионом и электронами мишени, которая рассчитывается следующим образом:

$$v_r = \frac{3v_F}{4} \left[1 + \left(\frac{2v_1^2}{3v_F^2} \right) - \frac{1}{15} \left(\frac{v_1}{v_F} \right) \right] \text{ для } v_1 < v_F, \quad (4.57)$$

$$v_r = v_1 \left(1 + \frac{v_F^2}{5v_1^2} \right) \text{ для } v_1 \geq v_F \quad (4.58)$$

Модель повреждения кристаллической решетки

Описываемая модель включает рассмотрение динамических процессов превращения мишени из кристаллического состояния в аморфное в процессе ионной имплантации. С каждым налетающим ионом связана следующая характеристика реальной дозы:

$$\Delta\Phi = \frac{\Phi}{N}, \quad (4.59)$$

где N – число падающих ионов. Для каждой точки пространственной сетки рассчитывается запасенная энергия, связанная с общим числом имплантированных ионов. С увеличением дозы имплантации величина запасенной энергии возрастает, и кристаллическая структура постепенно превращается в аморфную. Такой процесс характеризуется вероятностной функцией аморфизации:

$$f(r) = 1 - \exp\left[-\frac{\Delta E(r)}{E_c}\right], \quad (4.60)$$

где $\Delta E(r)$ – энергия, запасенная в единице объема, в данной точке пространственной сетки; E_c – критическая плотность энергии, представляющая собой энергию, запасенную в единице объема, необходимую для аморфизации структуры в рассматриваемом объеме, которая выражается в следующем виде:

$$E_c(T) = E_{c0} \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{E_0(T - T_\infty)}{2k_B T T_\infty}\right] \right\}^{-2}, \quad (4.61)$$

где E_c – энергия активации; k_B – постоянная Больцмана; T_∞ – температура, необходимая для превращения кристалла в аморфное состояние при неограниченной дозе.

Экспериментальные значения $E_c(E_{c0})$ приведены в работе [19]. В ВСА модели величина $F(r)=0,6$ соответствует полностью аморфизированному состоянию, и любая дополнительная энергия, запасенная в точке r , не вносит вклад в процесс аморфизации.

Геометрия имплантации

На рис. 4.2 представлена схема ориентации ионного пучка относительно

кристаллографической ориентации подложки. Имеется три основные плоскости относительно направления ионного пучка:

- плоскость имплантации α ;
- плоскость поверхности Σ ;
- плоскость моделирования β .

Плоскость имплантации – это плоскость, в которой лежит исходный пучок. Она характеризуется параметрами падающего пучка – углами наклона и поворота. Если ориентация плоскости поверхности равна $\{100\}$, соответствующей единственной ориентации подложки в модуле модели *BCA*, то сдвиг угла поворота соответствует направлению $\langle 101 \rangle$ на этой плоскости. Это означает, что угол наклона ν , задаваемый параметром TILT в директиве IMPLANT, будет полярным углом в этой плоскости, а угол поворота φ , задаваемый параметром ROTATION, представляет собой разницу азимутов линии, вдоль которой рассматриваемая плоскость пересекает поверхность подложки, и направления $\langle 101 \rangle$.

По умолчанию плоскость, в которой проводится моделирование, ориентирована вдоль направления $\langle 101 \rangle$.

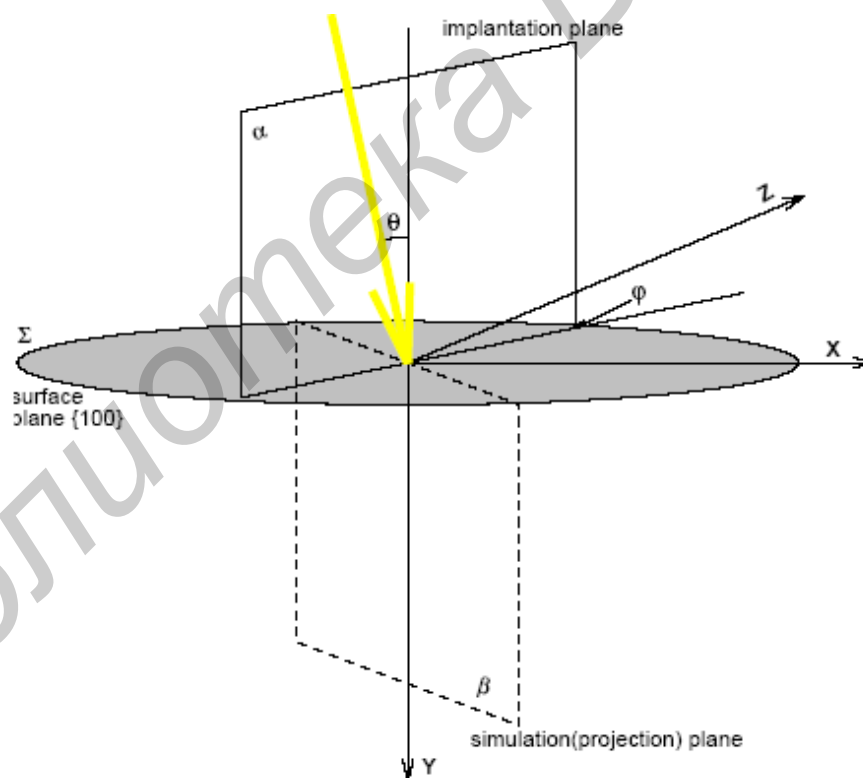


Рис. 4.2. Геометрия имплантации

Использование метода Монте-Карло для аморфного материала

В легированном полупроводнике остаточное распределение имплантированных примесей имеет принципиальное значение. Проникновение ионов в аморфные мишени наиболее простым способом описывается с

использованием статистической транспортной модели – транспортных уравнений или посредством моделирования методом Монте-Карло. Среди этих двух подходов метод Монте-Карло является наиболее удобным для многокомпонентных, а также для двух- и трехмерных мишеней. В методе Монте-Карло рассматривается явная цепочка столкновений, так что состав мишени можно менять на произвольных границах пространства и времени. Окончательное распределение ионов определяется из обширного числа траекторий ионов, статистическая точность которого непосредственно зависит от числа ($\propto \sqrt{N}$). По мере проникновения иона в твердое тело он участвует в цепочке столкновений с атомами мишени до тех пор, пока не останавливается. Упрощенная модель таких рассматривает бинарные ядерные столкновения, разделенные отрезками прямых линий (длины свободных пробегов), в процессе которых ион испытывает непрерывные (нелокальные) электронные энергетические потери. Столкновения разделяются, т.е. состояние иона после столкновения зависит единственно от состояния иона перед столкновением. В модели предполагается, что расположение атомов мишени полностью случайно после каждого столкновения, т.е. материал мишени не имеет структуры и памяти. В результате цепочка столкновений описывается случайным выбором следующего партнера при столкновении и зависит от положения иона перед столкновением и направления его скорости. Это означает, что в модели не может описываться аномальный хвост проникновения иона в мишень, который наблюдается для ионов, имплантированных в упорядоченные монокристаллические мишени. Модель адекватно описывает распространение ионов в многослойных непланарных мишенях.

Моделирование распространения ионов в кристаллическом материале методом Монте-Карло

Имеются два разных модуля для моделирования имплантации в кристаллические мишени. Первый основан на программе PEPPER [20], а более поздний вариант – программа CRYSTAL [11]. Чтобы рассчитать окончательное распределение ионно-имплантированных примесей, оба модуля моделируют атомные столкновения посредством использования приближения бинарных столкновений (BCA). Алгоритм решения задачи состоит в рассмотрении цепочек столкновений, инициированных энергетическими ионами. Мишени могут иметь области с различными материалами (кристаллическими или аморфными) и с различными сортами атомов. Замедление имплантированных ионов будет происходить до тех пор, пока они или не покинут мишень, или их энергия не станет меньше определенной пороговой энергии.

[Новая BCA модель устанавливается по параметру BCA в директиве, согласно которой “запускается” модуль имплантации, тогда как старая модель устанавливается с использованием двух параметров – MONTE и CRYSTALLINE].

Существенное преимущество BCA модуля состоит в том, что программа

имеет лучший алгоритм моделирования – он позволяет более точно моделировать движение частиц вдоль открытых каналов (эффект каналирования). Кроме того, этот модуль оптимизирован для моделирования электронного торможения. В то же время результаты моделирования с использованием этого модуля дают адекватные результаты по сравнению со старым модулем.

Литература

1. Lindhard J., Scharff M. and Schiott H.E. Range Concepts and Heavy Ion Ranges // Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-fys. Medd. 1963. Vol.33. No 14.
2. Simulation Standard. 1996.
3. Smith R. (Ed.) Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces // Cambridge University Press. 1997.
4. Tasch A.F. An Improved Approach to Accurately Model Shallow B and BF₂ Implants in Silicon // J. Electrochem. Soc. March 1989. Vol. 136. No. 3.
5. Amaratunga G.A.J., Sabine K. and Evans A.G.R. The Modeling of Ion Implantation in a Three-Layer Structure Using the Method of Dose Matching // IEEE Trans. Electron. Dev. Sep. 1985. Vol. ED-32. No. 9. P. 1899.
6. Burenkov A.F. Komarov F.F. and Temkin M.M. Analytical Calculation of Ion Implantation through Mask Windows” (in Russian) // Microelektronika, Jan. 1987. Vol. 16. No. 1. P. 15.
7. Parab K.B., Yang D.H., Morris S.J., Tian S., Tasch A.F., Kamenitsa D., Simonton R. and Magee C. Analysis of Ultra-Shallow Doping Profiles Obtained by Low Energy Ion Implantation // J. Vac. Sci, Technol. 1996. No. 1. Vol. B14.
8. Burenkov A.F., Kurganov A.G., Konoplyanik G.G., Two-Dimensional Local Ion Implantation Distribution (in Russian) // Povekhnost (Surface Sciences). 1989. Vol. 8. P. 52-58.
9. Lorenz J., Kruger W., Barthel A. Simulation of the Lateral Spread of Implanted Ions: Theory // NASECODE-VI, Ed. Miller J.J.H., Boole Press. 1989. P. 513-520.
10. Ashworth D.G., Bowyer M.D.J. and Owen R. // J. Phys. D. Vol. 24. 1991. P. 1120.
11. Bowyer M.D.J., Ashworth D.G., Owen R. // J. Phys. D. Appl. Phys. Vol. 29. 1996. P. 1274.
12. Griffin P.B. and Plummer J.D., Process Physics Determining 2-D Impurity Profiles in VLSI Devices // International Electron Devices Meeting. Dec. Los Angeles. 1986. P.522.
13. Hobler G., Langer E., and Selberherr S. Two-Dimensional Modeling of Ion Implantation with Spatial Moments // Solid-State Electronics 30. 1987. 445. IEDM 91. P. 693.
14. Penumalli B.R. A Comprehensive Two-Dimensional VLSI Process Simulation Program, BICEPS // IEEE Trans. on Electron Dev. Sept. 1983. Vol. ED-30(9). P. 986.

15. Shockley W. and Last J.T. Statistics of the Charged Distribution for a Localized Flow in a Semiconductor. // Phys. Rev. July. 1957. Vol. 107. No. 2. P. 392.
16. Fichtner W. (ed. S.M. Sze), Process Simulation. // VLSI Technology, McGraw-Hill. 1988. P. 422.
17. Fair R.B. (ed. F.F.Y. Wang), Concentration Profiles of Diffused Dopants in Silicon // Impurity Doping Process in Silicon, North Holland. New York. 1981.
18. Fahey P.M., Point Defects and Dopant Diffusion in Silicon // PhD Thesis, Integrated Circuits Laboratory. Department of Electrical Engineering. Stanford University. June 1985.
19. Mathiot D. and Pfister J.C., Dopant Diffusion in Silicon, A Consistent View involving Nonequilibrium Defects // J. of Appl. Phys. May 1984. Vol. 55. No. 10. P. 3518.
20. Mulvaney B.J., Richardson W.B., Crandle T.L. PEPPER – A Process Simulator for VLSI // IEEE Trans. on Computer-Aided Design. April 1989. Vol. 8. No. 4.

Библиотека БГУИР

5. МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ

В состав пакета ATHENA входит модуль ELITE, с помощью которого моделируются процессы осаждения и травления. Во всех моделях модуля ELITE, кроме расчетов осаждения и травления методом Монте-Карло, используется алгоритм струны для описания топологических изменений, сопровождающих процессы осаждения и травления.

5.1. Алгоритм струны

Моделируемое пространство представляет собой совокупность треугольников, каждый из которых содержит информацию о материале, в котором проводится моделирование. Алгоритм струны рассматривает каждую такую поверхность раздела как совокупность движущихся сегментов. Смещение сегментов рассчитывается по соответствующей модели.

Два главных предположения ограничивают общность алгоритма струны. Во-первых, среда, в которой проводится осаждение/травление, полагается равномерной в одном направлении, так что рассматриваемая задача по существу является двумерной. Второе важное предположение состоит в том, что скорость осаждения/травления является скалярной функцией положения и не зависит от направления продвижения фронта локального осаждения/травления и от предыдущего состояния этого фронта.

В некоторых реальных ситуациях эти предположения не выполняются. Так, например, в программе РММА при рассмотрении гель-области на поверхности раздела резист-растворитель скорость травления является функцией состояния ее исходных областей, а также функцией условий травления. Другим исключением является второе предположение, не выполняющееся при так называемом “предпочтительном травлении”, когда травление происходит гораздо быстрее вдоль определенного кристаллографического направления, что приводит к анизотропному травлению.

При использовании алгоритма струны фронт травления моделируется в виде совокупности точек, соединенных прямыми линиями, образующими струну. На каждом приращении по времени каждая точка смещается перпендикулярно локальному фронту осаждения/травления, как показано на рис. 5.1. При этом все сегменты фронта осаждения/травления выравниваются таким образом, чтобы их длины были примерно равными. Основной проблемой при разработке данного алгоритма является выбор подходящего критерия для установки длины сегмента. Сегмент должен быть достаточно коротким, чтобы можно было наиболее точно описать огибающую кривую, т.е., например, максимальный угол между соседними сегментами не должен превышать 0,1 радиана. Однако такой критерий приводит к распространению сегментов в такие области, где фронт может или растягиваться, или сжиматься. В алгоритме струны, используемом в пакете ELITE, ошибка в выборе средней длины сегмента уменьшается пропорционально увеличению времени расчета.

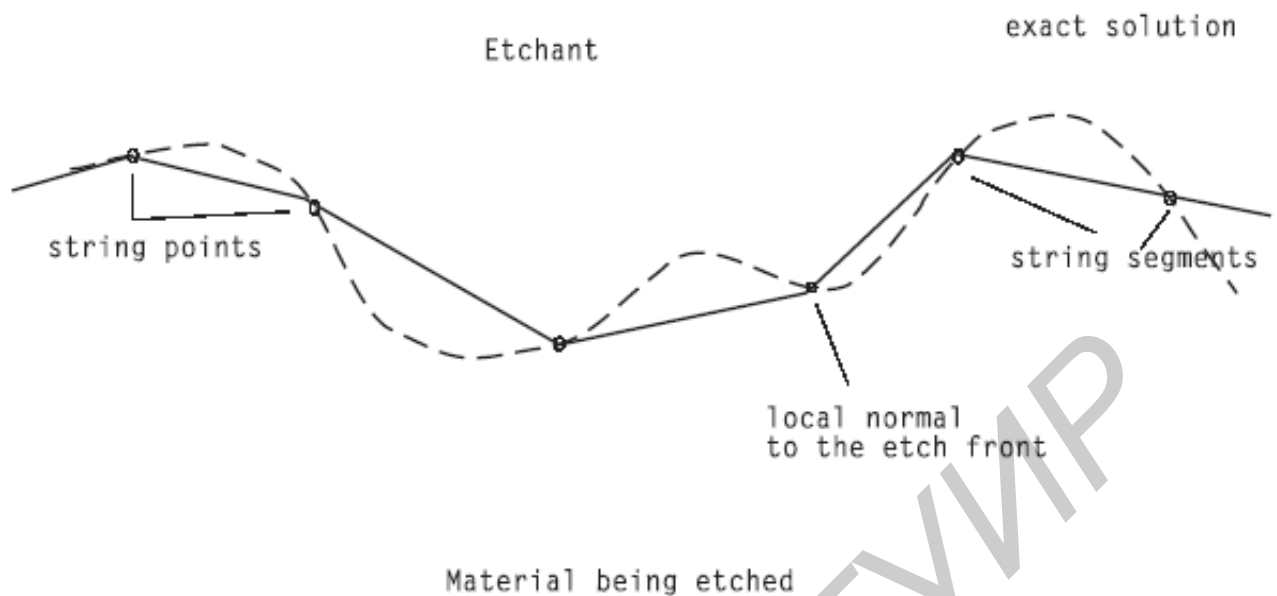


Рис. 5.1. Модель струны при рассмотрении фронта травления

В большинстве рассматриваемых случаев скорость осаждения/травления изменяется с координатой рассматриваемого фронта травления. Это приводит к определенным ошибкам в координате и направлении движения каждой точки струны. Ошибки в координате определяются использованием простого алгоритма интегрирования. Предполагается, что локальная скорость постоянна в течение каждого временного шага. Это может привести к таким же большим ошибкам в определении координат, как и при расчете глубины травления на одном временном шаге. Ошибки в направлении связаны с неравномерными скоростями вдоль струны и с выбором граничных условий. Предполагается, что перпендикулярность к фронту осаждения/травления на каждом временном шаге сохраняется. Однако если две соседние точки имеют большую разницу в скоростях, быстро движущаяся точка не сможет стартовать одновременно с точкой, которая движется с меньшей скоростью.

5.2. Модель конформного осаждения

Конформное осаждение моделируется заданием осаждаемого материала, толщины и количества пространственных точек по вертикали в директиве DEPOSIT. При этом толщина осаждаемого слоя рассчитывается как сумма единичных слоев.

5.3. Модель химического осаждения из газовой фазы

[Эта модель иницируется заданием CVD параметра в директиве RATE.DEPO, а также типа материала, скорости осаждения DEP.RATE и шага приращения осаждаемого слоя STEP.COV].

Локальная скорость осаждения $R(x,y)$ в модели химического осаждения из

газовой фазы (Chemical Vapor Deposition – CVD) рассчитывается следующим образом:

$$R(x, y) = DEP.RATE|(1 - STEP.COV)\cos\theta + STEP.COV|, \quad (5.1)$$

где θ – угол между сегментом поверхности и горизонталью.

5.4. Модель однонаправленного осаждения

[Эта модель иницируется заданием параметра *UNIDIREC* в директиве *RATE.DEPO*].

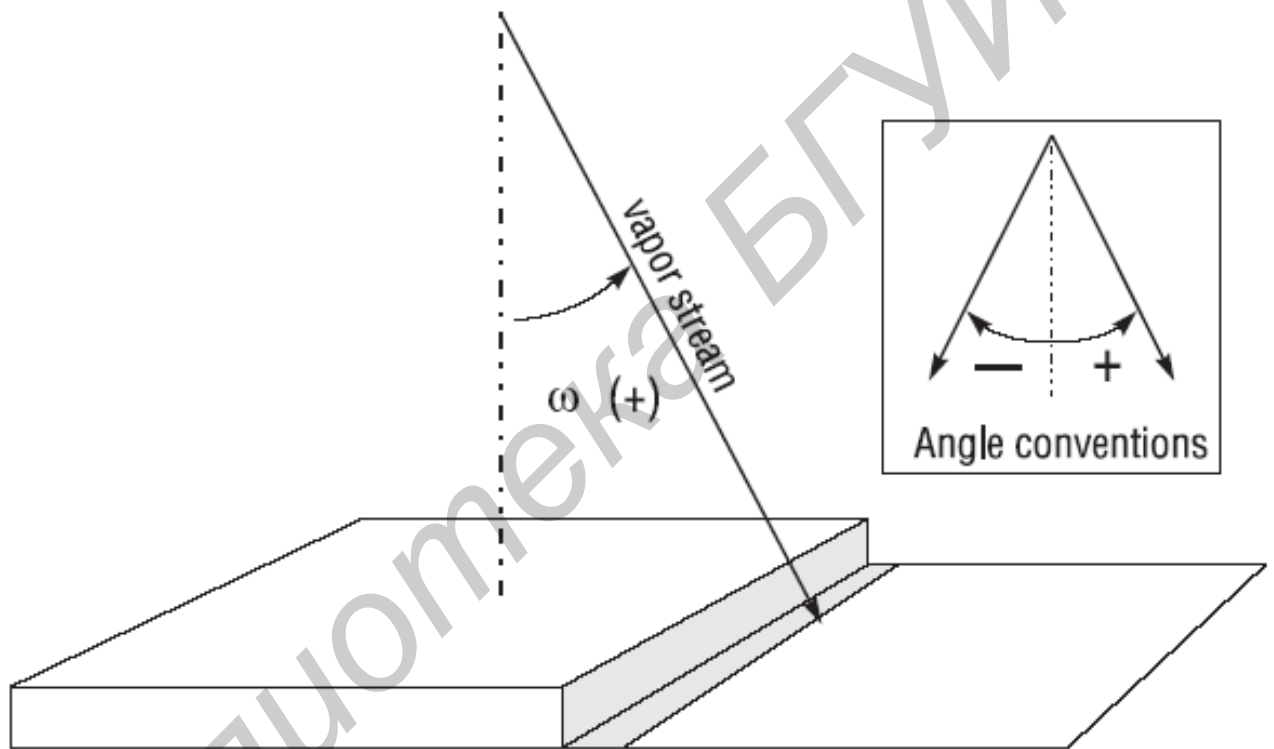


Рис. 5.2. Ступенчатый профиль для однонаправленного источника

Как показано на рис. 5.2, только в одном направлении на незатененную область подложки поступают молекулы осаждаемого газа. Скорость роста осаждаемой пленки в области тени равна нулю.

Согласно этим предположениям, скорость роста на подложке $R(x, y)$ можно выразить следующим образом:

$$R(x, y) = 0, \quad (5.2)$$

если точка с координатами (x, y) находится в тени

$$R(x, y) = C \sin \omega i + C \sin \omega j, \quad (5.3)$$

где ω – угол между осью y и направлением потока пара; i и j – единичные вектора соответственно в направлениях x и y ; C – скорость роста незатененной поверхности, нормальной к направлению потока пара.

[Угол ω задается параметром $ANGLE1$ по команде $RATE.DEPO$].

Рассмотрим кратко описание косинусоидального закона осаждения, в котором рассматривается металлизация, обусловленная испарением. Модель, описывающая закон косинусоидального осаждения основана на следующих предположениях:

1. Длина свободного пробега атомов или частиц намного больше, чем среднее расстояние между источником и подложкой.
2. Расстояние между источником и подложкой намного больше по сравнению с топографией подложки.
3. Пленка растет в направлении потока пара.
4. Необходимо включить эффект тени.

Величина скорости роста пленки подчиняется косинусоидальному закону согласно которому толщина осаждаемой пленки растет со скоростью, пропорциональной $\cos(\omega)$, где ω – угол между потоком пара и нормалью к поверхности.

Подгоночный параметр равен 1,0 при осаждении на холодную подложку (при 300 К).

5.5. Модель двунаправленного осаждения

[Эта модель иницируется заданием параметра $DUALDIREC$ в директиве $RATE.DEPO$].

В этом случае в каждую точку незатененной области подложки поток пара поступает в двух различных направлениях и предполагается, что диффузионная длина осаждаемого материала велика по сравнению с характерными геометрическими размерами (рис. 5.3). Скорость роста пленки рассчитывается следующим образом:

$$R(x, y) = 0, \quad (5.4)$$

если точка (x, y) частично находится в тени:

$$R(x, y) = C \sin \omega_1 i + C \sin \omega_1 \text{ или } R(x, y) = C \sin \omega_2 i + C \sin \omega_2 j, \quad (5.5)$$

если точка (x, y) не затенена:

$$R(x, y) = C(\cos \omega_1 + \cos \omega_2) i + C(\sin \omega_1 + \sin \omega_2) j, \quad (5.6)$$

где ω_1 и ω_2 – углы падения.

[Значения ω_1 и ω_2 задаются параметрами $ANGLE1$ и $ANGLE2$ в

директиве *RATE.DEPO*].

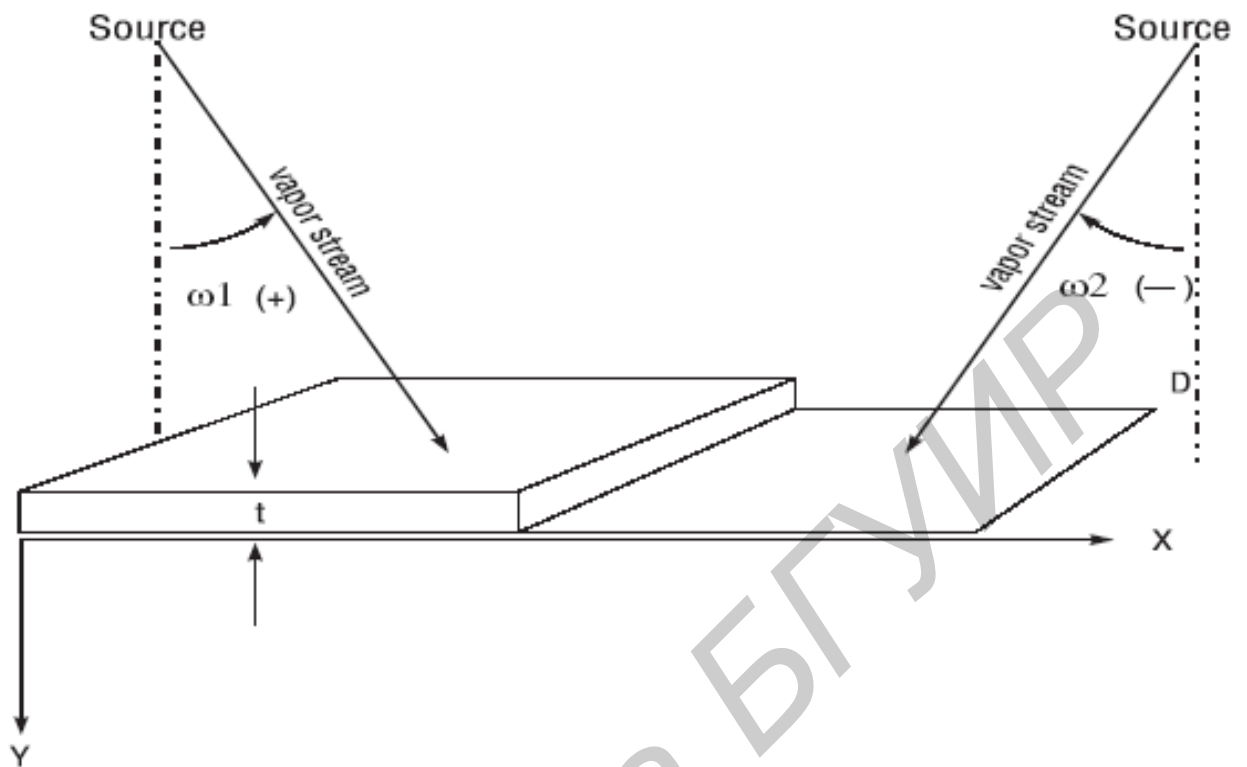


Рис. 5.3. Ступенчатый профиль в случае сдвоенного источника

5.6. Модель полусферического осаждения

[Эта модель иницируется заданием параметра *HEMISPHE* в директиве *RATE.DEPO*].

Поток газа непрерывно и направленно распределен в определенной области (рис. 5.4). Скорость роста пленки рассчитывается согласно выражению

$$R(x, y) = C(\cos \omega_1 - \cos \omega_2) i + C(\sin \omega_1 - \sin \omega_2) j, \quad (5.7)$$

где ω_1 и ω_2 – углы, показанные на рисунке [и задаваемые параметрами *ANGLE1* и *ANGLE2*].

Для решения проблемы, связанной со ступенчатой формой пленки, часто используется модель планарного распыления для получения пленки реальной формы. Идеальный источник распыления моделируется посредством представления источника распыления в виде полусферы.

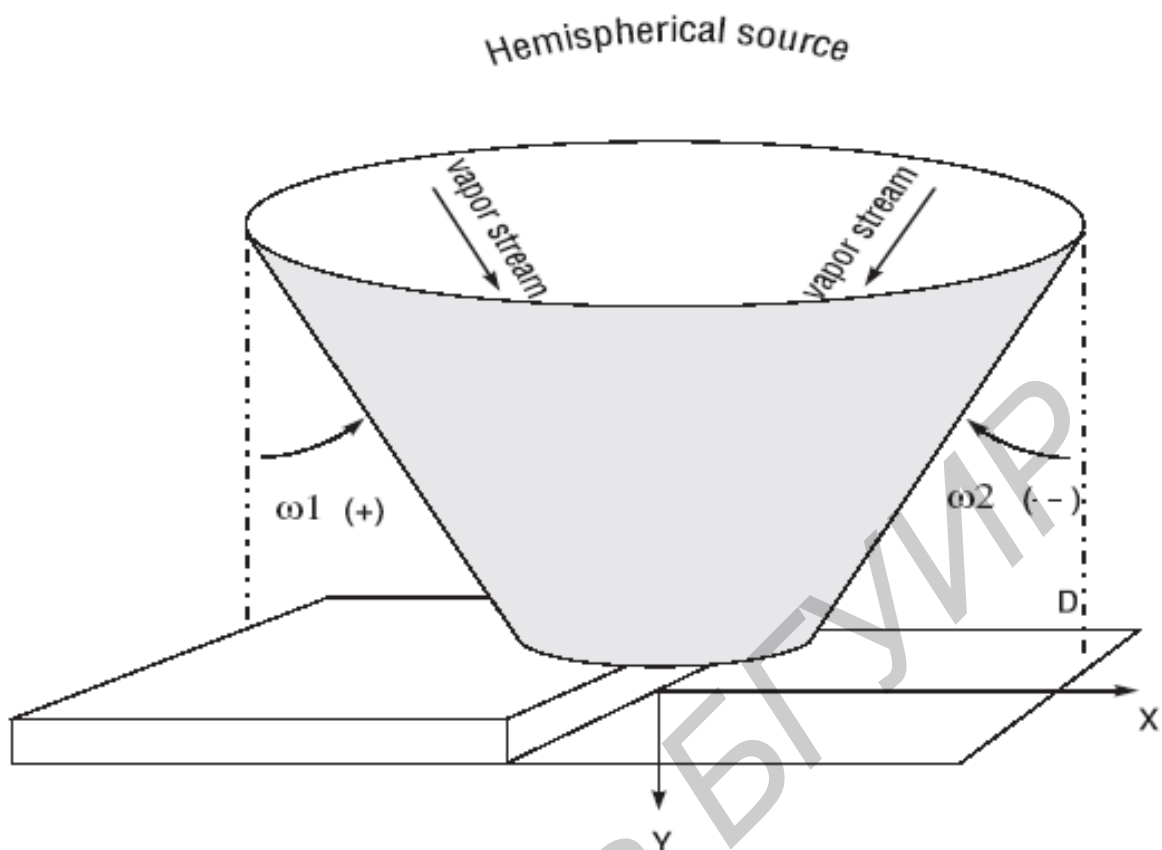


Рис. 5.4. Ступенчатый профиль пленки с полусферическим источником пара

5.7. Модель планетарного осаждения

[Эта модель иницируется заданием параметра *PLANETAR* в директиве *RATE.DEPO*].

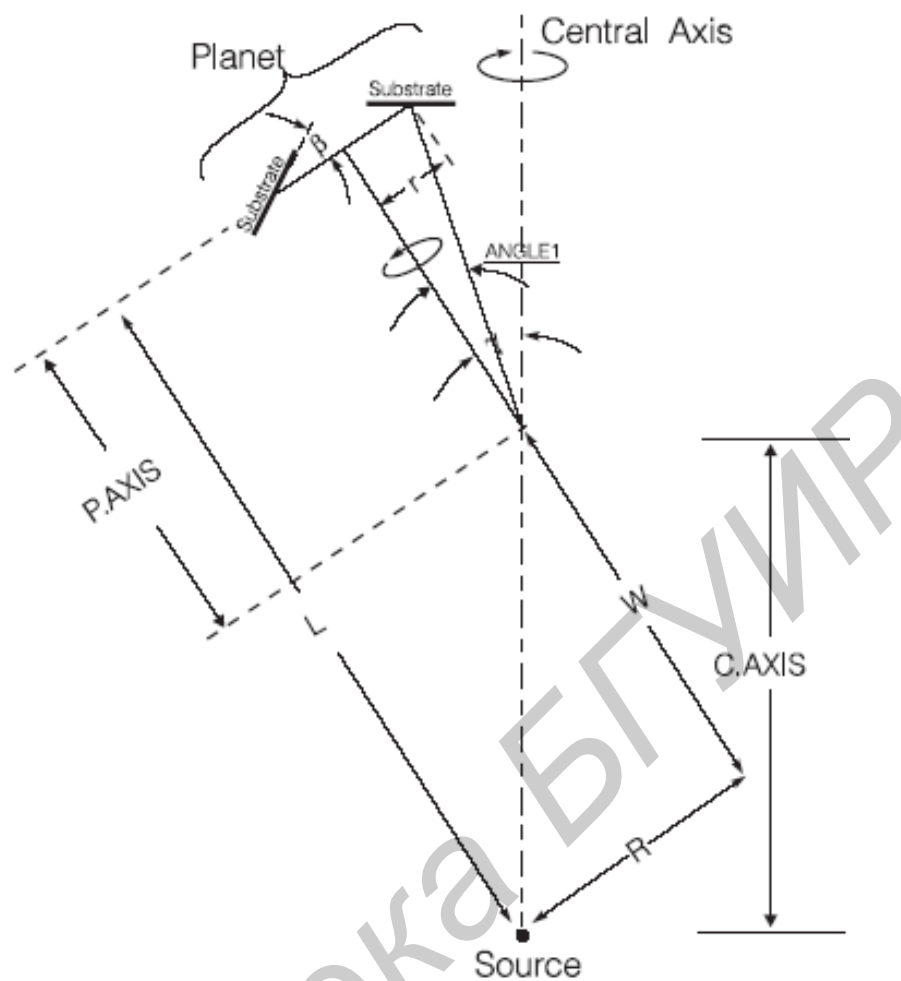


Рис. 5.5. Вид планетарного испарителя

На рис. 5.5 показана планетарная испарительная система. Можно видеть, что поворот системы вдоль центральной оси не влияет на скорость осаждения пленки. Для упрощения решения задачи скорость роста пленки можно рассчитывать при сохранении планетарной системы в стационарном состоянии с вращением только источника вдоль центральной оси системы. В таком случае скорость роста пленки выводится из следующего уравнения:

$$R_x(x, y) = \int \frac{[R^2 - r^2 - rL \tan(\delta - \beta) + LW] [-L \sec(\delta - \beta)^2] [L \tan(\delta - \beta) \sin(\beta) - L \cos \beta] \cdot \tan \delta}{\sqrt{R^2 + W^2} \cdot [R^2 - r^2 + L^2 - 2rL \tan(\delta - \beta)]^2 \sqrt{R^2 - (r + L \tan(\delta - \beta))^2}} d\delta, \quad (5.8)$$

где δ – угол падения парового потока; β – угол наклона планетарной плоскости; r – расстояние между плоскостью подложки и осью планетарной системы; R , L и W – параметры, зависящие от размеров системы.

В данной планетарной модели осаждения имеются асимметрии как по краям выращиваемой пленки, так и по глубине трещин, образующихся вследствие особой ориентации и положения образца, располагающегося в планетарной системе.

Параметры планетарной системы $\gamma = \text{ANGLE2}$, $\beta = \text{ANGLE3}$, $r = \text{DIST.PL}$, $P.AXIS$, $C.AXIS$ и ANGLE1 показаны на рис. 5.5. Параметр ANGLE1 используется при расчете $\text{DIST.PL} = P.AXIS \tan(\text{ANGLE1})$.

5.8. Модель конического осаднения

[Эта модель иницируется заданием параметра *CONICAL* в директиве *RATE.DEPO*].

Коническая модель – это упрощенная версия планетарной модели при β и $r = 0$, причем со стороны подложки источник выглядит как симметричный конус. При такой конфигурации интеграл по приведенным выше уравнениям можно вычислить в аналитическом виде:

$$R_x(x, y) = \frac{-R(R^2 + LW)}{\sqrt{R^2 + W^2}(R^2 + L^2)^2} \left\{ \sqrt{1 - \left(\frac{L}{R} \tan \delta_{\max}\right)^2} - \sqrt{1 - \left(\frac{L}{R} \tan \delta_{\min}\right)^2} \right\}, \quad (5.9)$$

$$R_z(x, y) = \frac{L(R^2 + LW)}{\sqrt{R^2 + W^2}(R^2 + L^2)^2} \left\{ \text{asin}\left(\frac{L}{R} \tan \delta_{\max}\right) - \sqrt{\text{asin}\left(\frac{L^2}{R^2} \tan^2 \delta_{\min}\right)} \right\}. \quad (5.10)$$

В конической модели параметр $\text{ANGLE1} = \gamma$. Другие параметры $C.AXIS$ $P.AXIS$ представлены на рис. 5.6.

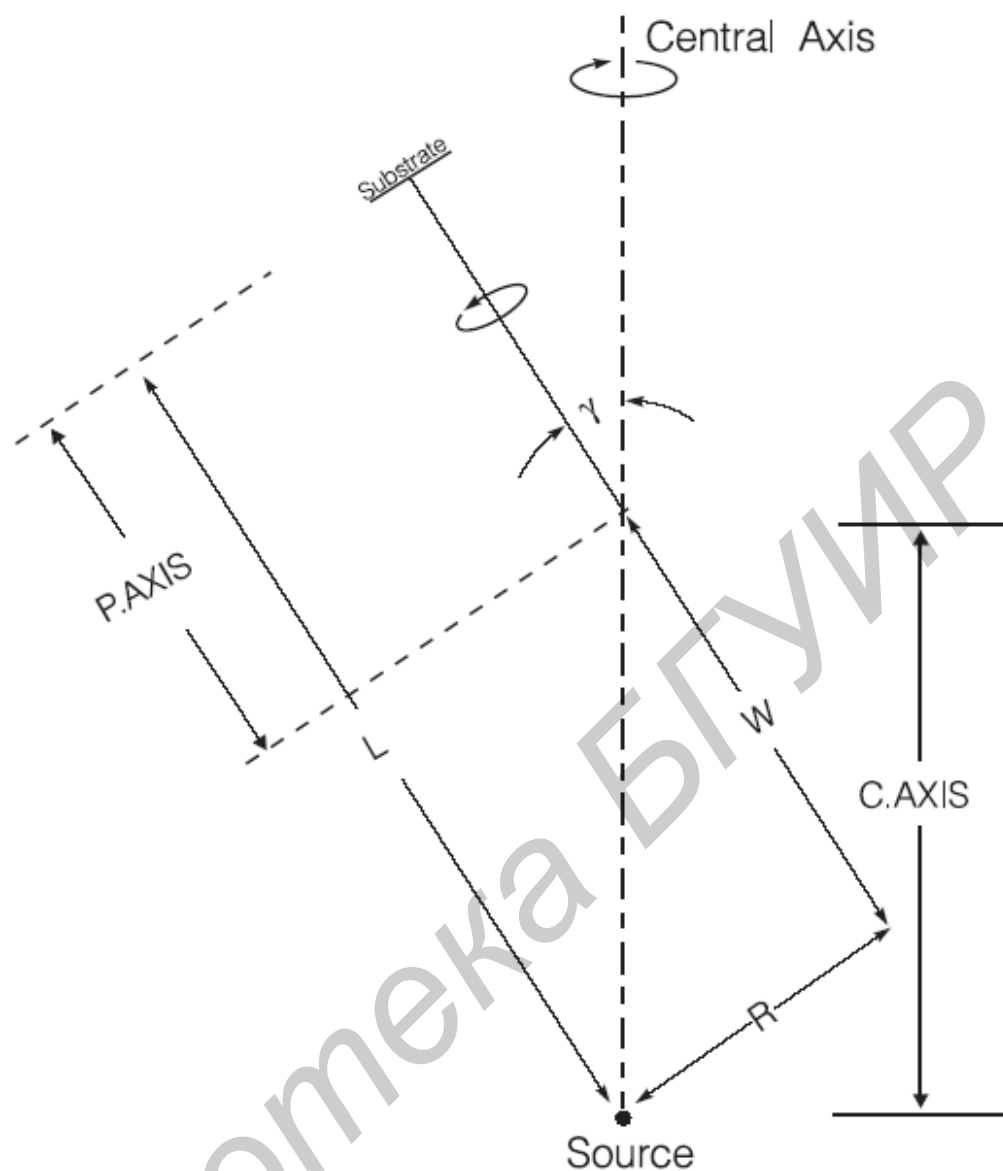


Рис. 5.6. Геометрия и подложка конического испарителя

5.9. Модели осаждения с использованием метода Монте-Карло

[Две модели осаждения методом Монте-Карло иницируются заданием параметров `MONTE1` или `MONTE2` в директиве `RATE.DEPO`, а параметры `SIGMA.DEP`, `DEP.RATE` и `ANGLE1`. `MONTE1` иницируют модель Монте-Карло на основе модели, используемой при моделировании процесса осаждения из химической фазы при низком давлении (*Low-Pressure Chemical Vapor Deposition – LPCVD*) [1, 2].

Поскольку радикалы осаждаются на подложку с ненулевыми термическими скоростями, они могут покинуть поверхность подложки. Поэтому учитывается вероятность их “прилипания” на подложке. [Коэффициент “прилипания” может быть задан с использованием параметра `STICK` в директиве `RATE.DEPO`].

В данной модели используется аналитическое приближение для расчета

поверхностной диффузии посредством нормализованного гауссова распределения nd :

$$nd = \exp\left(-\frac{x^2}{SIGMA.DEP^2}\right), \quad (5.11)$$

где x – точка контакта с поверхностью, как показано на рис. 5.7.

Параметр MONTE2 используется для иницирования баллистической модели осаждения, с помощью которой моделируется рост пленки посредством случайного нереверсивного осаждения жестких двухмерных дисков, движущихся по двухмерным траекториям из случайным образом выбранной точки на вершине моделируемой поверхности в направлении к поверхности. В точке контакта с растущей пленкой падающие диски останавливаются вблизи ближайшей начальной точки с самым высоким координационным числом (контактирующим с самым большим числом соседних дисков) в пределах радиуса, равного величине SIGMA.DEP, которая по умолчанию равна четырем диаметрам диска. Чтобы затормозить нереальный “эпитаксиальный” рост из плотно упакованной поверхности, что рассмотрено в работах [3, 4], начальная совокупность дисков располагается отдельно с центрами, приблизительно равными 1,3 величины диаметра. Такой релаксационный процесс моделирует ограниченную поверхностную диффузию, которая происходит в пленках, для уменьшения поверхностной энергии, связанной с поверхностями высокой кривизны

Геометрия процесса осаждения, используемая в баллистической модели, показана на рис. 5.7. [Число падающих частиц задается параметром $N.PARTICLE$ в директиве DEPOSIT].

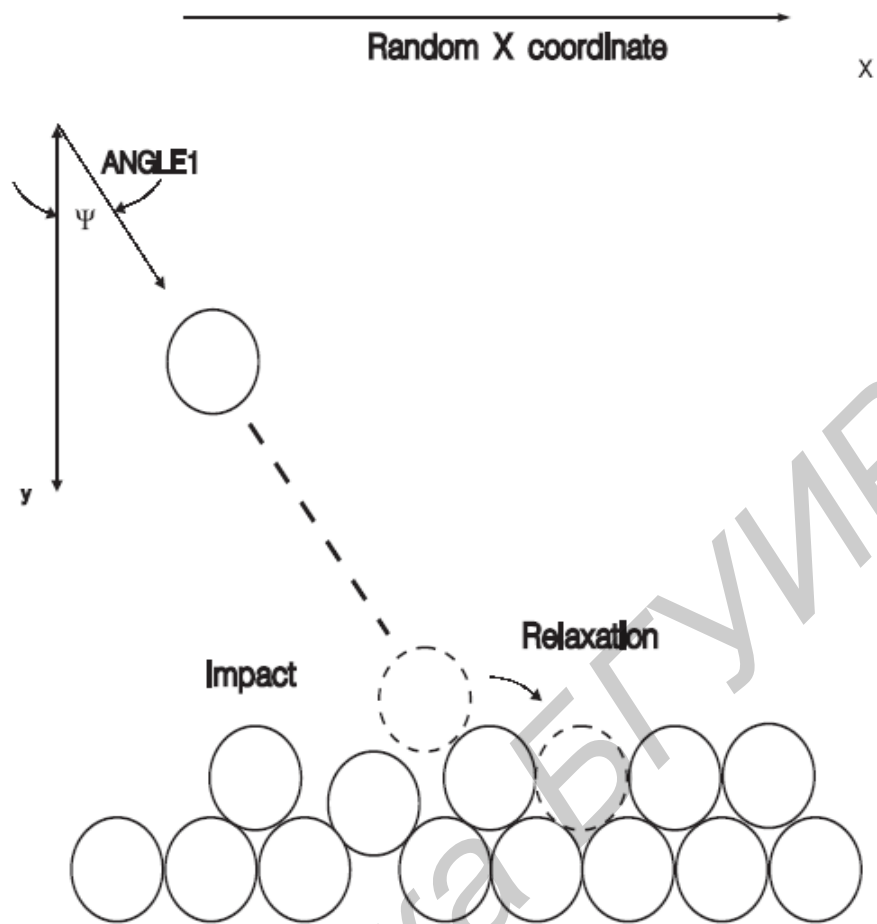


Рис 5.7. Геометрия модели осаждения, используемая в баллистической модели осаждения (MONTE2)

Литература

1. Sikkens I.J., Hodgkins F., Horowitz H.A. Macleod and J.J. Wharton // Opt. Eng. 25. 1986. P. 142.
2. Tait R.N., Smy T. and Brett M.J. A Ballistic Deposition Model For Films Evaporated Over Topography // Thin Solid films. 1990. 187. P. 375-384.
3. Tait R.N., Dew S.K., Smy T. and Brett M.J. Ballistic Simulation of Optical Coatings Deposited Over Topography // SPIE. 1990. Vol. 1324. Modeling of Optical Thin Films II. P. 112-119.
4. Tait R.N., Smy T. and Brett M.J. Simulation and Measurement of Density Variation in Mo Films Sputter Deposited Over Oxide Steps // J. Vac. Sci. Technol. A 8 (3). May/Jun 1990. P. 1593-1596.

6. МОДЕЛИ ТРАВЛЕНИЯ

По мере усложнения технологии моделирование каждого этапа технологического маршрута становится все более важным. Операция травления является универсальной в технологии микроэлектроники. Она состоит или в растворении фоторезиста органическими растворителями, или в травлении окисла щелочью, или в плазменном травлении резиста электронами. Моделирование травления начинается с рассмотрения исходного профиля как движущейся среды, скорость протравления которой является функцией положения и других переменных, которые определяют результирующий профиль.

В пакете ELITE имеется целый набор моделей травления, соответствующих различным физическим методам травления.

6.1. Изотропная модель травления

[Эта модель иницируется заданием параметра *WET.ETCH* в директиве *RATE.ETCH*].

В процессах мокрого и плазменного травления подложка погружается в жидкую или газовую среду, которая реагирует с обрабатываемой поверхностью. При мокром травлении жидкость взаимодействует с поверхностью, и выборочные продукты удаляются. В результате этой реакции образуются летучие побочные продукты, которые удаляются с помощью вакуумного насоса. Физические реакции в таком процессе отсутствуют.

6.2. Модель реактивного ионного травления

В модели реактивного ионного травления (РИТ) процесс травления разделяется на два компонента: изотропное и анизотропное травление. Каждый из этих компонентов характеризуется эмпирическими скоростями травления (r_{iso} и r_{dir}). Отношение

$$A = \frac{r_{dir}}{r_{iso} + r_{dir}} \quad (6.1)$$

определяет меру анизотропии.

Анизотропная компонента r_{iso} моделирует химическое реактивное травление, в результате которого получают профили с подрезанными и округленными сечениями. При $A=0$ процесс полностью изотропный. В условиях изотропного травления точки на струне продвигаются с постоянной скоростью r_{iso} в направлении, перпендикулярном к сектору смежных сегментов (рис. 6.1).

Компонента скорости анизотропного травления r_{dir} пропорциональна косинусу угла между направлением потока и нормалью к поверхности. При $A=1$

процесс травления – анизотропный, приводящий к вертикальным боковым стенкам профиля травления (рис. 6.2).

На рис. 6.3 показаны наиболее существенные области для каждой компоненты в модели РИТ. Эффект тени учитывается с помощью параметра r_{iso} в затененной области.

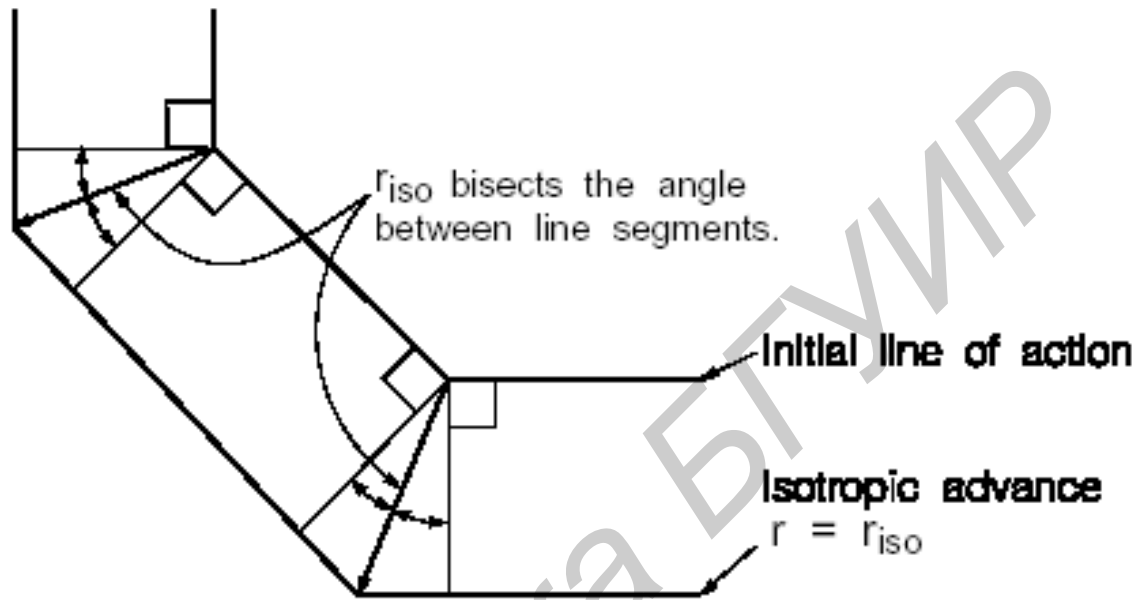


Рис. 6.1. Точки на сегменте в случае изотропного травления

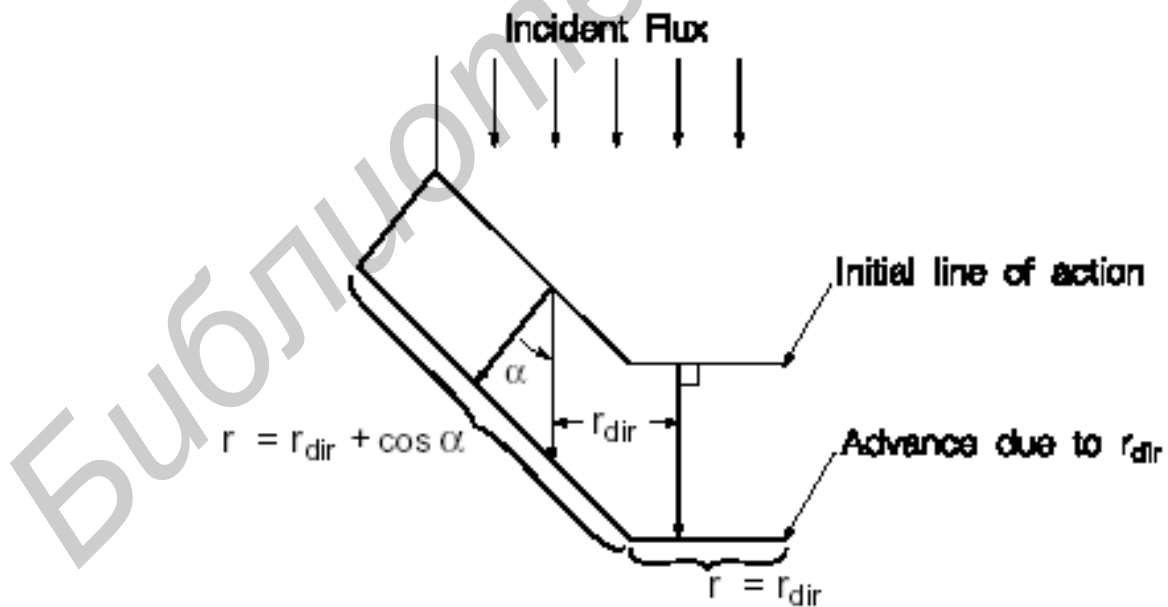


Рис. 6.2. Смещение (advance) точек, обусловленное влиянием направления падающего потока

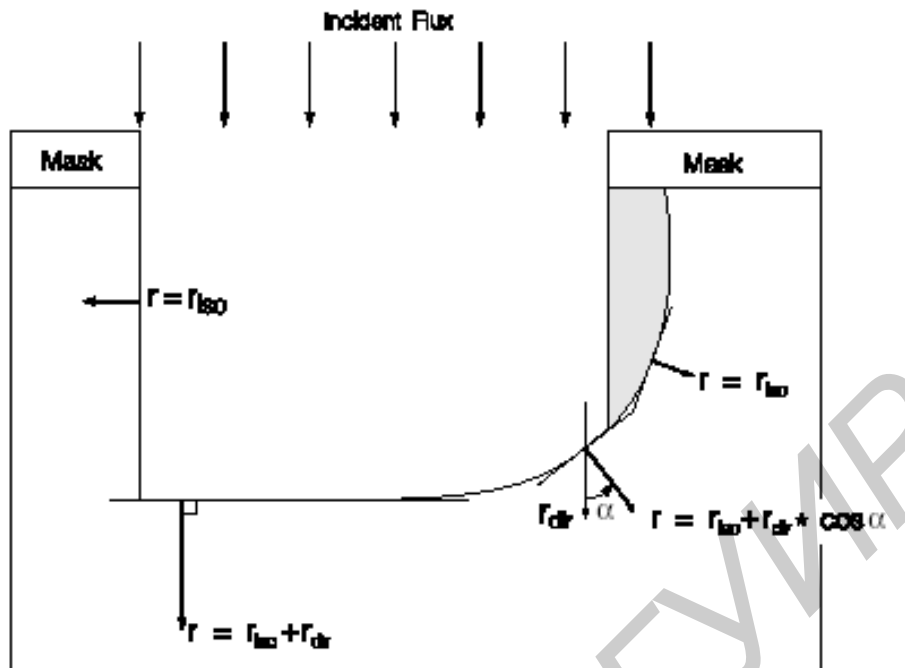


Рис. 6.3. Наиболее существенные области, получаемые с использованием параметров r_{iso} и r_{dir}

6.3. Модель плазменного травления

Модель плазменного травления основана на моделировании методом Монте-Карло переноса ионов из нейтральной плазмы через защитную оболочку, окружающую электроды и стенки. Ионы поступают в эту оболочку из плазмы и затем их движение ускоряется в электрическом потенциале между плазмой и электродами. В методе Монте-Карло рассматривается процесс переноса большого числа ионов через защитную оболочку, включая их столкновения с различными газовыми составляющими, присутствующими в камере. Число столкновений, испытываемых каждым ионом, зависит как от величины среднего пробега иона, так и от толщины защитной оболочки, задаваемой пользователем. Для снижения времени расчетов траектории ионов рассчитываются независимо, а взаимодействие между ионами не рассматривается.

Расчитанные методом Монте-Карло распределения ионов используются для расчета потока ионов, падающих на поверхность подложки. Значение этого потока затем используется для расчета скорости травления посредством интегрирования потока по “окно видимости” в каждой точке на поверхности. “Окно видимости”, например, для плоской поверхности имеет размер от 0 до 2π . Однако для более сложных структур, например канавки, точки на поверхности затеняются и “окно видимости” уменьшается.

6.4. Модель травления, ускоренного легированием

Ускорение травления, обусловленное легированием, моделируется

посредством введения величины скорости травления в каждой точке в следующем виде:

$$ER_{enh} = (1 + enh)ERM, \quad (6.2)$$

где ER_{enh} – ускорение травления, обусловленное присутствием примесей в подложке.

Коэффициент enh рассчитывается с помощью следующего выражения:

$$enh = 0,5ENH.MAX(\tanh(ENH.SCALE(S - ENH.MINC)) + 1)/2, \quad (6.3)$$

где $ENH.MAX$ – коэффициент, связанный с максимальным усилением, а $ENH.SCALE$ показывает, как быстро величина ускорения достигает своего максимального значения; S – коэффициент, связанный с уровнем легирования подложки.

6.5. Модель травления с использованием метода Монте-Карло

Уменьшение критических размеров современных приборов предъявляет высокие требования относительно оптимизации травления тонких масок. Кроме того, повышаются требования к травителям. Моделирование этого процесса требует более совершенных методов, чем аналитические методы. Необходимо более точное рассмотрение таких вопросов, как расчет распределения плазмы и прямое взаимодействие плазмы с материалом подложки.

Модуль, в котором используется метод Монте-Карло, моделирует плазменное или ионное травление. В этой модели учитывается переосаждение полимерного материала, представляющего собой смесь входящих ионов с молекулами (как результат травления или распыления) материала подложки. Кроме того, этот модуль имеет интерфейс с программой C-INTERPRETER, позволяющей проводить моделирование и других процессов, как, например, сухого травления и осаждения, ионного перемешивания и распыления различных материалов. Эту модель можно использовать для расчета переосаждения материала при травлении глубоких и узких канавок, а также других подобных эффектов.

[*Параметры для инициализации модели, использующей метод Монте-Карло, задаются в директиве RATE.ETCH*].

7. МОДЕЛИ ХИМИКО-МЕХАНИЧЕСКОГО ПОЛИРОВАНИЯ

В модели химико-механического полирования (ХМП) предусматривается планаризация пластины посредством механического и химического полирования и решают две основные проблемы: определение глубины фокуса апертуры литографической системы и уточнение материала, которое сопровождается формированием непланарной топографии.

ХМП модуль содержит две модели: первая – моделирует жесткое, а вторая – мягкое полирование [1].

[Обе модели инициализируются по директориям соответственно *RATE.POLISH* и *POLISH*].

7.1. Модель жесткого полирования

В модели жесткого полирования (рис. 7.1) рассматривается процесс растирания поверхности обрабатываемой пластины и рассчитывает скорость полирования как функцию параметра поверхности Pf . Чем выше значение этого параметра, тем ниже скорость полирования. Скорость полирования для самой высокой точки структуры Y_{max} рассчитывается следующим образом:

$$R(x, y) = MAX.HARD(1 - Pf) - MIN.HARD \cdot Pf. \quad (7.1)$$

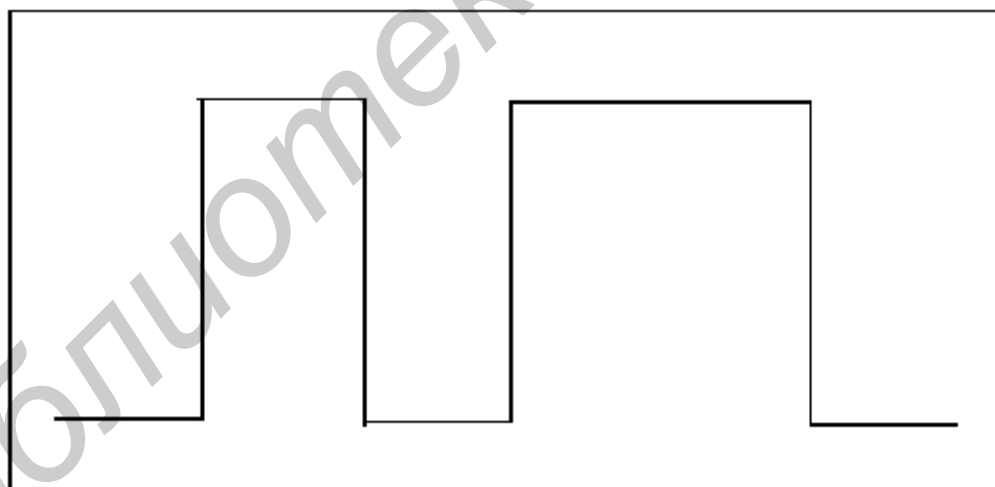


Рис. 7.1. Иллюстрация модели жесткого полирования – структура перед планаризацией

Параметрами для модели жесткого полирования являются *MAX.HARD* и *MIN.HARD*: *MAX.HARD* – это скорость при $Pf=0$, а *MIN.HARD* – это скорость при $Pf = 1$. $Pf = 1$ соответствует плоской поверхности и рассчитывается по формуле

$$Pf = \frac{X_{total} - \Delta Y}{X_{total}}. \quad (7.2)$$

Поверхностные точки, характеризующиеся параметром ΔY ниже самой высокой точки структуры, определяют коэффициент Pf . Из данных, показанных на рис. 7.2, коэффициент Pf можно определить следующим образом:

$$Pf = \frac{DX_1 + DX_2}{X_{total}}. \quad (7.3)$$

Значение эффективной высоты ΔY рассчитывается как произведение предыдущего значения на величину текущего временного шага. Этот параметр для точек высотой Y_{max} равен R из уравнения (7.1). В точках, уровень которых ниже Y_{max} скорость такова, что при полировке структуры по Y -координате до $(Y_{max} - \Delta Y)$ она становится более планарной (рис. 7.2).

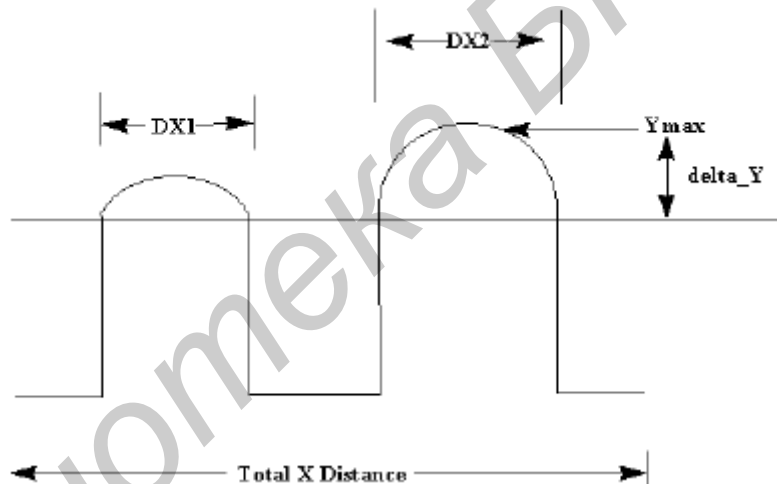


Рис. 7.2. Иллюстрация модели жесткого полирования – структура после планаризации

Модель жесткого полирования может работать вместе с моделью мягкого полирования, а также с моделью изотропного травления. [Для этого задается параметр *ISOTROPIC* в директиве *RATE.POLISH*].

7.2. Модель мягкого полирования

Модель мягкого полирования описана в работе [1]. Для инициализации этой модели используется параметр *SOFT* – скорость полирования ровной поверхности. При этом используются следующие единицы измерения: А.Н (А/ч), А.М (А/мин), А.С (А/с) (по умолчанию), У.Н (микрон/ч), У.М (микрон/мин), У.С (микрон/с) или Н.М (нанометры/мин); *LENGTH.FAC* – масштабный фактор деформации в микронах, описывающий расстояние, до

которого учитывается эффект тени. HEIGHT.FAC – фактор вертикальной деформации, являющийся мерой деформации полируемых выступов относительно самого высокого выступа. Скорость полирования определяется следующим образом:

$$P_i = \frac{K_i A_i}{S_i}, \quad (7.4)$$

где K_i – кинетический фактор или горизонтальная компонента скорости полирования в точке i ; A_i – фактор ускорения точки i , который имеет высокое значение для тех точек, в которых выступы более высокие и которые затеняют другие точки; S_i – фактор затенения, повышающий скорость полирования и являющийся функцией тех точек, которые располагаются выше точки i . Для плоской поверхности $(K_i A_i / S_i) = 1$.

Фактор затенения является характеристикой плоских поверхностей. Однако в общем случае он рассчитывается для одной или большего количества точек, которые затеняют точку i . Фактор затенения рассчитывается посредством использования следующего уравнения:

$$S_i = \exp\left(\frac{\overline{\Delta z}_i}{HEIGHT.FAC}\right), \quad (7.5)$$

где $\Delta z_i \geq 0,0$, так что $S_i > 1$. Величина Δz_i получается посредством интегрирования по окружающей топографии:

$$\overline{\Delta z}_i = \sum_{i_{left}}^{i_{right}} z_i / \cosh\left(\frac{r_i}{LENGTH.FAC}\right). \quad (7.6)$$

В этих уравнениях i_{left} и i_{right} относятся к тем двум точкам, которые могут затенять точку i . Как видно из уравнений, эффект от этих точек зависит от двух параметров LENGTH.FAC и HEIGHT.FAC. Переменная z_i – вертикальное расстояние между точкой i и точкой i_{left}/i_{right} . Фактор ускорения A_i определяется с помощью уравнения, приведенного ниже. A_i рассчитывается для тех двух точек, которые затеняют точку i . Таким же образом многократные эффекты тени учитываются с помощью коэффициента $A_{i_{left}}/A_{i_{right}}$. Если точка i затеняет какую-либо другую точку j , то A_i следует увеличить с помощью подобного уравнения. Это увеличение впоследствии сказывается на значении величины $A_{i_{left}}$:

$$A_{i_{left}} = A_{i_{left}} + A_i B_i (1 - 1/S_i), \quad (7.7)$$

$$A_{i_{right}} = A_{i_{right}} + A_i B_i (1 - 1/S_i). \quad (7.8)$$

Постоянная B_{left}/B_{right} – весовой фактор, который основан на величине затенения в точке i , обусловленного точкой затенения i_{left}/i_{right} . Кинетический фактор основан на следующем уравнении:

$$K_i = 1 + KINETIC.FAC \tan \alpha_i . \quad (7.9)$$

Он показывает эффект влияния параметра $KINETIC.FAC$ на скорость полирования. Угол α_i – локальный угол, характеризующий касательную к полируемой поверхности. Этот угол не должен превышать $89,9544^\circ$ (1,57 радиан), чтобы исключить ошибки в вычислениях.

На рис. 7.3 показаны три области, в которых каждая из компонент скорости полирования должна быть большой.

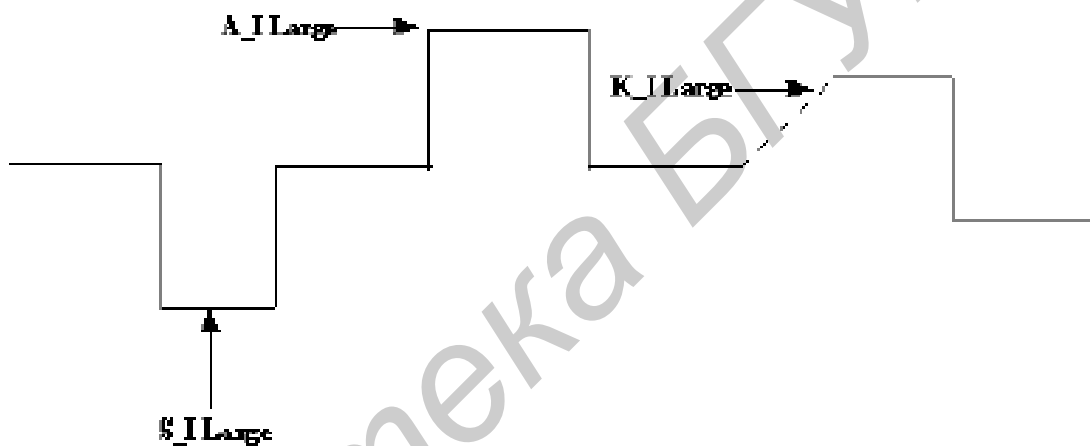


Рис. 7.3. Модель мягкого полирования. Области, в которых доминируют различные компоненты скорости полирования

Литература

1. Matsumoto S. and Niimi T. J. Appl. Phys. Japan 1976. 15. P. 2077.

8. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛЕЙ ДИФФУЗИИ И ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ В СЛОЖНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В данном разделе кратко описываются модели процессов ионной имплантации и диффузии в сложных полупроводниках, которые реализованы в программе FLASH.

8.1. Модели диффузии в сложных полупроводниках

В программе FLASH используется модель диффузии примесных атомов в арсениде галлия. По умолчанию диффузионная модель в FLASH такая же, как в программах SSuprem 3 [1, 2], Bell Integrated Circuit and Engineering Process Simulator (BICEPS) [3] и Finite Element Drift Diffusion Simulator (FEDDS) [4]. Диффузия примесей как функция расстояния (x) и времени (t) описывается следующим образом:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} + Z_i \mu_i N_i \frac{2\psi}{\partial x} \right\} \quad (8.1)$$

при граничном условии:

$$D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} = h(C_i^L - C_i^R/m), \quad (8.2)$$

где C_i – концентрация i -той примеси; N_i – концентрация примесных ионов, которые могут отдавать или принимать электроны; ψ – электростатический потенциал; D_i – коэффициент диффузии i -й примеси; Z_i – зарядовое состояние (+1 для доноров и –1 для акцепторов); μ_i – подвижность i -той примеси; h – транспортный коэффициент; m – коэффициент сегрегации. Значки L и R обозначают левую и правую стороны границы; C_i^L – концентрация i -той примеси в газовой среде на поверхности подложки.

На дне моделируемой области правая часть уравнения (8.2) равна нулю. Подвижность μ_i определяется согласно соотношению Эйнштейна:

$$\mu_i = \frac{q}{kT} D_i, \quad (8.3)$$

где q – заряд электрона, k – постоянная Больцмана и T – температура. Электростатический потенциал ψ определяется исходя из статистики Больцмана и условия нейтральности зарядов:

$$\psi = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{n}{n_i} \right), \quad (8.4)$$

где n – число электронов в единице объема:

$$n = \frac{1}{2} \left[\sum_j Z_j N_j \left(\left(\sum_j Z_j N_j \right)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right], \quad (8.5)$$

где n_i – собственная концентрация электронов.

Уравнения (8.1) – (8.5) описывают стандартную модель для диффузии примесей. В программе FLASH имеется возможность изменять значения некоторых параметров, таких, как диффузионные константы D_x в уравнении (8.1).

8.2. Уравнение Пуассона

Электростатический потенциал (8.4), в общем, удовлетворяет уравнению Пуассона:

$$0 = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{q}{\epsilon} \left(2n_i \sinh \left(\frac{q\psi}{kT} \right) - \sum_j Z_j N_j \right). \quad (8.6)$$

Это уравнение решается совместно с уравнением (8.1). Однако для большинства задач моделирования технологических процессов справедливо приближение Больцмана [5, 6].

8.3. Модели диффузии в GaAs

Механизмы диффузии в GaAs отличаются от соответствующих механизмов для кремния. Диффузионные модели для примесей Si, Be, Se, Mg и Zn в GaAs описаны в работе [7].

8.3.1. Донорные типы примесей

Ионно-имплантированные примеси кремния и селена в GaAs являются наиболее часто используемыми примесями донорного типа. Диффузия n -примесей осуществляется по механизму замещения. Диффузия при отжиге моделируется с использованием уравнения закона Фика, в который включены члены, описывающие эффекты электрического поля. Диффузия n -примесей в GaAs относительно слабая и она моделируется при условии независимости от концентрации примесей. Таким образом, для ионно-имплантированных

примесей в GaAs:

$$D_{Si} = 3,0 \times 10^{-9} \exp(-1,6/kT). \quad (8.7)$$

Для селена, имплантированного в арсенид галлия, выражение для коэффициента диффузии имеет следующий вид:

$$D_{Se} = 3,0 \cdot 10^{-8} \exp(-1,6/kT). \quad (8.8)$$

Это выражение справедливо для доз до $2,0 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

8.3.2. Акцепторные примеси

Диффузия *p*-примесей (Be, Mg and Zn) в GaAs моделируется согласно междоузельному (в состоянии замещения) механизму [7]. В этом случае скорость диффузии в GaAs выше, чем скорость диффузии донорных примесей. При этом учитывается зависимость коэффициента диффузии от концентрации примесей: если в моделируемой области присутствует несколько примесей, то коэффициент диффузии зависит от концентрации дырок, которая используется вместо концентрации примесей. Таким образом, коэффициент диффузии акцепторных примесей в GaAs определяется положением уровня Ферми.

Для диффузии бериллия в GaAs используется следующее выражение:

$$D_{Be} = 2,1 \cdot 10^{-6} (p/n_i) \exp(-0,7/kT), \quad (8.9)$$

где *p* – концентрация дырок и *n_i* – собственная концентрация носителей заряда в GaAs.

Это выражение для коэффициента диффузии предполагает, что диффундирующие междоузельные атомы бериллия находятся в однократно заряженном состоянии.

Аналогичная модель диффузии справедлива и для магния, коэффициент диффузии которого выражается следующим образом:

$$D_{Mg} = 4,8 \cdot 10^{-8} (p/n_i) \exp(-1,6/kT) \text{ для } T < 1100 \text{ К}, \quad (8.10)$$

$$D_{Mg} = 6,1 \cdot 10^{-2} (p/n_i) \exp(-2,8/kT) \text{ для } T > 1100 \text{ К}. \quad (8.11)$$

Коэффициент диффузии атомов цинка в GaAs пропорционален второй степени концентрации дырок:

$$D_{Zn} = 1,2 \cdot 10^2 (p/n_i)^2 \exp(-3,9/kT). \quad (8.12)$$

При моделировании ионной имплантации в сложные полупроводники в программе FLASH, модели ионной имплантации такие же, как и в программе SSuprem 4 с модификациями, учитывающими сложный состав полупроводникового материала.

Литература

1. Fichtner W. (ed. S.M. Sze). Process Simulation // VLSI Technology. McGraw-Hill. 1988. P. 422.
2. Penumalli B.R. A Comprehensive Two-Dimensional VLSI Process Simulation Program, BICEPS // IEEE Trans. on Electron Dev. Sept. 1983. Vol. ED-30(9). P. 986.
3. Fahey P.M. Point Defects and Dopant Diffusion in Silicon // PhD Thesis, Integrated Circuits Laboratory, Department of Electrical Engineering, Stanford University. June 1985.
4. Fair R.B. (ed. F.F.Y. Wang). Concentration Profiles of Diffused Dopants in Silicon // Impurity Doping Process in Silicon. North Holland, New York. 1981.
5. Mathiot D. and Pfister J.C. Dopant Diffusion in Silicon: A Consistent View Involving Nonequilibrium Defects // J. of Appl. Physics. May 1984. Vol. 55. No. 10. P. 3518.
6. Shockley W. and Last J.T. Statistics of the charged Distribution for a Localized Flow in a Semiconductor // Phys. Rev. July 1957. Vol. 107. No. 2, P. 392.
7. Watrasiewicz B.M. Image Formation In Microscopy At High Numerical Aperture // Optica Acta. 1965. Vol. 12. No. 2. P. 167-176.

Учебное издание

Нелаев Владислав Викторович,
Стемпичкий Виктор Романович

**ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ.
ПРОГРАММА SSuprem 4**

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

для курсов лекций и лабораторных работ по дисциплинам

“Расчет и проектирование элементов интегральных схем
и полупроводниковых приборов”

“Основы САПР в микроэлектронике”

“Моделирование технологических процессов
микроэлектроники”

для студентов специальностей

41 01 02 “Микро- и наноэлектронные технологии и системы”

и 41 01 03 “Квантовые информационные системы”

всех форм обучения

Редактор Н.А. Бебель
Корректор Е.Н. Батурчик

Подписано в печать
Бумага
Уч.-изд. л. 2, 3

Гарнитура «Таймс»
Печать офсетная.
Тираж 100 экз.

Формат 60×84 1/16
Усл. печ. л.
Заказ

Издатель и полиграфическое исполнение:

Учреждение образования

«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Лицензия ЛП №156. от 30.12.2002.

Лицензия ЛВ №509 от 03.08.2001.

220027, Минск, П. Бровка, 6