

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

**ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ
ПРОЕКТИРОВАНИЕ
КОМПОНЕНТНОЙ БАЗЫ МИКРО-
И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ**

Учебно-методическое пособие

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2016

Утверждено научно-методическим советом физического факультета
17 февраля 2016 г., протокол № 2

Составители: Г. В. Быкадорова, А. Ю. Ткачѳв, Е. Н. Бормонтов, Л. А. Битюцкая

Рецензент – доктор физико-математических наук, профессор С.И. Курганский

Учебно-методическое пособие подготовлено на кафедре физики полупроводников и микроэлектроники физического факультета Воронежского государственного университета.

Рекомендуется для слушателей Президентской программы повышения квалификации инженерных кадров «Приборно-технологическое проектирование компонентной базы микро- и наноэлектроники» по направлению «Электронная техника, радиотехника и связь», а также для студентов 1-го и 2-го курсов очной формы обучения физического факультета, обучающихся по программе магистратуры.

Для направления 11.04.04 – Электроника и наноэлектроника с профилями Интегральная электроника и наноэлектроника, Наноэлектроника

Содержание

1. Физико-математические модели технологических процессов в микро- и наноэлектронике	5
1.1. Модели термического окисления	5
1.1.1. Физико-химические основы модели Дила – Гроува	5
1.1.2. Линейный и параболический законы роста окисла	5
1.1.3. Аномальные эффекты при начальном окислении	6
1.1.4. Вязкоупругая модель локального окисления.....	7
1.2. Модели диффузионных процессов	9
1.2.1. Уравнения диффузии Фика	9
1.2.2. Модели коэффициентов диффузии основных примесей в кремнии	11
1.2.3. Аналитические модели распределения примесей при диффузии в неограниченной, полуограниченных и ограниченных подложках	14
1.2.4. Моделирование процесса диффузии на стадиях загонки и разгонки примесей	16
1.2.5. Многомерные задачи диффузии	18
1.2.6. Сегрегация примесей на границе окисел-полупроводник	19
1.2.7. Диффузионное перераспределение примесей в окислительной среде	20
1.2.8. Численные методы решения уравнений Фика	22
1.3. Физико-математические модели процесса ионной имплантации	25
1.3.1. Основы теории ЛШШ	25
1.3.2. Распределения ионно-имплантированных примесей: гауссовские распределения, сопряженная гауссиана, распределение Пирсон-4	27
1.3.3. Распределения ионно-имплантированных примесей при легировании разориентированных мишеней	31
1.3.4. Методы моделирования распределения ионно-имплантированных примесей в многослойных структурах	33
1.3.5. Локальное легирование методом ионной имплантации	36
1.3.6. Наклонная имплантация	39
1.3.7. Диффузионное перераспределение ионно-имплантированных примесей	42
1.4. Математические модели расчета электрофизических параметров полупроводниковых структур	44
2. Приборно-технологическое проектирование в САПР TCAD	46
2.1. Работа в среде приборно-технологической САПР TCAD	46
2.1.1. Состав приборно-технологической САПР TCAD	46
2.1.2. Визуализация результатов численных экспериментов	52
2.2. Моделирование технологии элементной базы микроэлектроники и твердотельной электроники в специализированном пакете САПР TCAD	56
2.2.1. Программные модули моделирования технологических процессов	56
2.2.2. Моделирование стандартных технологических процессов	63

3. Сквозное приборно-технологическое проектирование приборов микроэлектроники в специализированном пакете САПР TCAD	81
3.1. Программные модули моделирования электрофизических параметров полупроводниковых структур	81
3.1.1. Программные модули оптимизации расчетных сеток виртуальных полупроводниковых структур	81
3.1.2. Программный модуль расчета электрофизических параметров виртуальных приборов	85
3.2. Создание и исследование диодных структур	95
3.3. Создание и исследование МОП-структур	102
3.4. Создание и исследование элементов СБИС и УБИС	112
Библиографический список	118

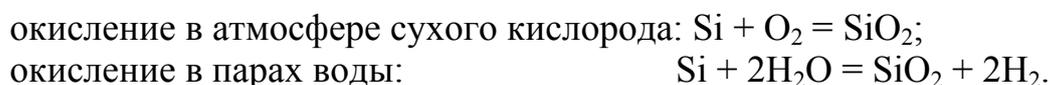
1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

1.1. Модели термического окисления

1.1.1. Физико-химические основы модели Дила – Гроува

Кремниевая технология включает термическое окисление на этапах создания масок, изолирующих областей, подзатворных диэлектрических слоев, пассивации поверхности структур. Методом радиоактивного маркера показано, что рост SiO_2 происходит за счет диффузии кислорода к поверхности кремния. Выход SiO_2 за границы начального объема, занимаемого кремнием, обусловлен их разными плотностями.

Химическая реакция, идущая на поверхности кремниевой пластины, соответствует одному из следующих уравнений:



Согласно модели Дила – Гроува толщина окисла $X(t)$ равна

$$X(t) = \frac{A}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{t}{A^2/4B}} - 1 \right), \quad (1.1)$$

где t – время окисления; B – параболическая константа скорости окисления; B/A – линейная константа скорости окисления.

Если в начальный момент времени $t = 0$ толщина исходного слоя окисла была X_0 , то толщина окисла $X(t)$ равна

$$X(t) = \frac{A}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{t + \tau}{A^2/4B}} - 1 \right), \quad (1.2)$$

где τ – сдвиг по времени или поправка на начальную толщину окисла X_0 :

$$\tau = \frac{X_0^2 + AX_0}{B}.$$

1.1.2. Линейный и параболический законы роста окисла

При малых временах окисления, когда $t + \tau \ll A^2/4B$, рост окисла подчиняется линейному закону $X(t) = \frac{B}{A}(t + \tau)$. При больших временах окисления, когда $t + \tau \gg A^2/4B$, рост окисла подчиняется параболическому закону $X^2(t) = B(t + \tau)$.

Константы скоростей окисления зависят от температуры и от параметров окислительной среды. Для кристаллографической ориентации (111) найдены следующие формулы для расчета констант B и B/A :

– сухой кислород:

$$B = 12,9 \cdot \exp(-1,23/kT), \text{ мкм}^2/\text{мин};$$

$$B/A = 1,04 \cdot 10^5 \cdot \exp(-2,0/kT), \text{ мкм/мин};$$

– пары воды:

$$B = 280 \cdot \exp(-1,17/kT), \text{ мкм}^2/\text{мин}, \quad T \leq 950 \text{ }^\circ\text{C};$$

$$B = 7 \cdot \exp(-0,78/kT), \text{ мкм}^2/\text{мин}, \quad T > 950 \text{ }^\circ\text{C};$$

$$B/A = 3,45 \cdot 10^4 \cdot \exp(-1,6/kT), \text{ мкм/мин}, \quad T \leq 950 \text{ }^\circ\text{C};$$

$$B/A = 2,95 \cdot 10^6 \cdot \exp(-2,05/kT), \text{ мкм/мин}, \quad T > 950 \text{ }^\circ\text{C},$$

где k – постоянная Больцмана, $8,62 \cdot 10^{-5}$ эВ/К; T – температура, К.

Параболическая константа B слабо зависит от ориентации кремниевой подложки, в то время как линейная константа $B/A_{(100)}$ при окислении кремния с ориентацией (100) меньше $B/A_{(111)}$ в 1,68 раз.

Константы B и B/A прямо пропорциональны парциальному давлению окислителя p^n . Показатель степени n зависит от окислительной среды, ориентации подложки, наличия примесей.

1.1.3. Аномальные эффекты при начальном окислении

Модель Дила – Гроува хорошо описывает рост окисла кремния толщиной более 30 нм. Экспериментально было обнаружено, что при малых толщинах окислов скорость окисления превышает в 2–3 раза скорость, предсказываемую линейно-параболической моделью Дила – Гроува.

Одна из феноменологических моделей, объясняющих аномально быстрый рост окисла на начальном этапе, предложена Румаком.

На первом этапе идёт диффузия молекул кислорода O_2 в кремний. При этом образуются две зоны роста SiO_2 : приповерхностный слой кремния и переходной слой окисла (рис. 1.1). На кремнии 1 наряду с растущим окислом 2 при диффузии молекул O_2 кислорода 3 появляются зародыши окисла SiO_2 4 и избыточные атомы кремния 5 (рис. 1.1, стадия I).

Существование потенциального барьера на границе SiO_2 –Si приводит к накоплению избыточных атомов кремния 6 (рис. 1.1, стадия II). Их концентрация может превышать равновесную $\sim 10^{17}$ см⁻³, что приводит к появлению больших напряжений.

При этом идёт преимущественный рост зародышей SiO_2 в кремнии, захват избыточного кремния 6 растущим окислом, генерация дефектов упаковки и дислокаций в кремнии, разрушение плёнки естественного окисла на кремнии между зародышами и возникновение микропор 7 в растущей плёнке окисла (рис. 1.1, стадия III). Образование микропор облегчает перенос кислорода 8 в зону реакции и диффузию избыточного кремния, например, в составе монооксида кремния SiO 9 в атмосферу.

Добавочный перенос кислорода по микропорам ускоряет рост окисла, и микропоры 11 постепенно уменьшаются (рис. 1.1, стадия IV).

Одна из моделей (SUPREM-III) аппроксимирует зависимость скорости роста окислов на начальном этапе с помощью следующей модификации линейно-параболического закона (модель Массуда):

$$\frac{dx}{dt} = \frac{B}{A + 2x} + k_1 e^{-\frac{x}{L_1}} + k_2 e^{-\frac{x}{L_2}},$$

где k_1, k_2 – константы, подчиняющиеся закону Аррениуса; L_1, L_2 – характеристические толщины, $L_1 \approx 20 \text{ \AA}$, $L_2 \approx 70 \text{ \AA}$.

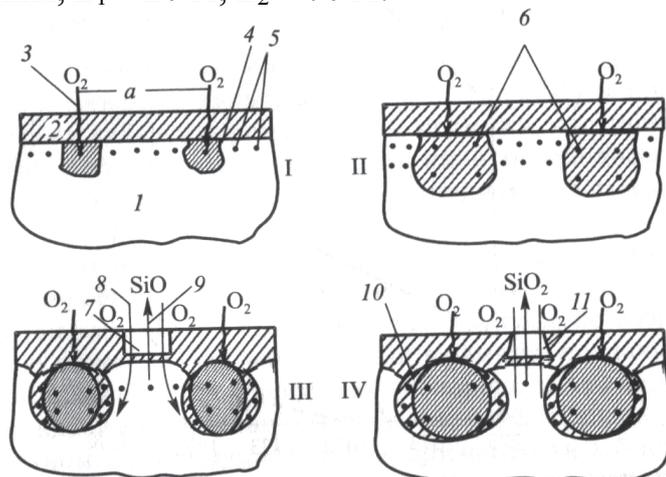


Рис. 1.1. Начальные стадии окисления кремния в сухом кислороде

1.1.4. Вязкоупругая модель локального окисления

При локальном окислении на поверхности кремния формируется защитная маска нитрида кремния, с нанесённым тонким буферным слоем окисла, который предотвращает возникновение на границе $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-Si}$ больших напряжений при окислении.

Диффузия молекул окислителя происходит как в вертикальном направлении, так и латерально под край нитридной маски. Локальная область окисления под краем защитной маски имеет форму «птичий клюв» (рис. 1.2), а при формировании рельефного участка, полученного предварительным травлением кремния на некоторую глубину, за счёт увеличения окисла по периметру вытравленной области образуется окисный профиль «птичья голова».

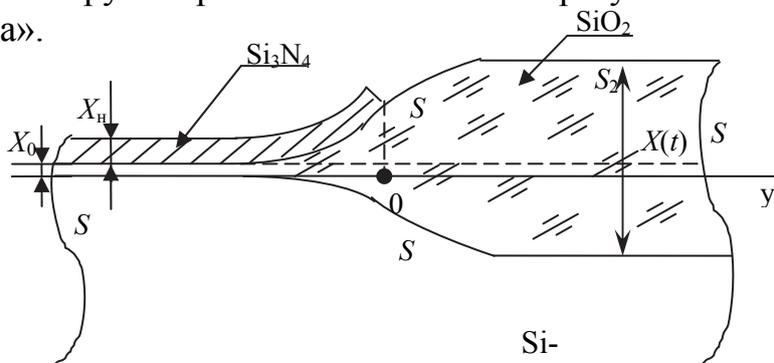


Рис. 1.2. Модель роста окисла с профилем «птичий клюв»

При численном моделировании учитываются вязкоупругие свойства материалов, и при этом решаются одновременно уравнения Лапласа, Навье – Стокса, уравнение непрерывности, диффузии и перемещения границ слоя SiO_2 с соответствующими граничными условиями.

В установившемся стационарном режиме окисел рассматривается как вязкая, несжимаемая жидкость, описываемая уравнением Лапласа

$$D\nabla^2 C(x, y) = 0,$$

где коэффициент диффузии окислителя не зависит от концентрации окислителя и напряжений в окисле.

При большой вязкости и малой скорости роста (менее 1 нм/с), когда упругие напряжения быстро релаксируют, движение описывается уравнением Навье – Стокса

$$-\eta\nabla^2 v = \nabla p,$$

где η – вязкость окисла; v – скорость движения; p – давление.

Окисел считается несжимаемым, поэтому его движение рассматривается как вязкое течение несжимаемой жидкости, которое описывается уравнением непрерывности

$$\Delta v = 0.$$

Решение полученной системы уравнений находится при следующих граничных условиях.

В области S_1 (рис. 1.2) скорость движения границы SiO_2 – Si пропорциональна потоку F окислителя с учётом отношения b объёмов окисла и прошедшего на его формирование объёма кремния ($b \approx 0,44$)

$$v = \frac{(1-b)F}{N},$$

где N – число молекул окислителя в единице объёма окисла.

На границе S_2 учитывается поверхностное натяжение, рассматриваемое как разность давлений внутри p и вне $p_{\text{атм}}$ окисла с учётом коэффициента γ поверхностного натяжения и локального радиуса R кривизны поверхности:

$$p - p_{\text{атм}} = -\frac{\gamma}{R}.$$

В области S_3 под маской жидкость не проскальзывает, а прилипает, поэтому скорость $\vec{v}i = 0$, где $\vec{v} = (v_x/v_y)$, \vec{i} – единичный вектор, касательный к поверхности. В стационарном случае $v = 0$.

В областях S_4 и S_5 также давление равно нулю:

$$p = 0; \vec{v}\vec{n} = 0,$$

где \vec{n} – единичный вектор по нормали к поверхности.

При взаимодействии окислителя с кремнием скорость окисления в области S_1 равна $\vec{v} = \beta C \vec{n}$, и поток окислителя, идущего на образование окисла, есть $D \frac{\partial C}{\partial n} = kC$, где k – коэффициент химической реакции.

На границе S_2 поток окислителя пропорционален коэффициенту массопереноса h и разности концентраций окислителя вне C^* и внутри C_0 границы S_2 :

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = h(C^* - C_0(x, y)).$$

На границах S_3, S_4, S_5 потоки равны нулю: $D \frac{\partial C}{\partial n} = 0$.

Обобщенная упруговязкопластическая модель учитывает влияние упругих напряжений и на механизм диффузии окислителя:

$$\nabla \left(D \nabla C + \frac{D}{RT} C \nabla p_m \right) = 0,$$

где R – универсальная газовая постоянная; p_m – механический потенциал.

Поставленная задача решается численными методами, основанными на использовании теоремы Грина.

Толщину окисла $X(y, t)$ «птичий клюв» при начальной толщине X_0 буферного слоя окисла можно аппроксимировать следующим соотношением:

$$X(y, t) = X_0 + (X(t) - X_0) \cdot \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\gamma} \frac{y}{X(t) - X_0} \right) \right],$$

где $X(t)$ – толщина окисла вне области нитридной маски; γ – параметр бокового распространения окисла под край нитридной маски ($\gamma \approx 0,5$).

Учёт ширины ω окна в нитридной маске и толщины X_n защитного слоя Si_3N_4 осуществляется в следующих аналитических моделях:

$$X(y, t, \omega) = \frac{X(y, t)}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(-\frac{y}{2} \frac{1}{\sqrt{D_y t}} \right) - \operatorname{erfc} \left(-\frac{y - \omega}{2\sqrt{D_y t}} \right) \right\}^{1/2},$$

где D_y – коэффициент диффузии окислителя в латеральном направлении

$$D_y = 6,81 \cdot 10^{-4} \frac{X_0[\text{нм}] + 143}{X_n[\text{нм}] + 584} - 1,14 \cdot 10^{-4}, \text{ мкм/мин.}$$

1.2. Модели диффузионных процессов

1.2.1. Уравнения диффузии Фика

В кремниевой планарной технологии процессы создания диффузионных областей описываются с помощью законов Фика. Согласно первому закону Фика поток J диффундирующей примеси состоит из диффузионной и дрейфовой компонент:

$$J = -D\nabla C - Z\mu NE, \quad (1.3)$$

где D – коэффициент диффузии атомов примеси; ∇ – оператор градиента; $C \equiv C(x, y, z, t)$ – концентрация примеси, зависящая от координат x, y, z и времени диффузии t ; Z – зарядовое состояние ионов примеси (+1 – для акцепторов, –1 – для доноров); μ – подвижность заряженных ионов; $N \equiv N(x, y, z, t)$ – концентрация ионизированных атомов примеси; E – напряженность внутреннего электростатического поля, созданного градиентом концентрации ионизированных атомов примеси.

Из закона сохранения вещества следует второй закон Фика:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D\nabla C + Z\mu NE). \quad (1.4)$$

Решение данного дифференциального уравнения в частных производных второго порядка проводится при различных начальных и граничных условиях, вид которых зависит от выбранных приближений.

Современные модели диффузии рассматривают этот процесс на атомистическом уровне, позволяющем объяснить и смоделировать возникающие основные физические эффекты. Генерация вакансий (например, при ионной обработке мишеней) и неравновесные процессы (например, на границе раздела $\text{SiO}_2\text{--Si}$ при окислении) определяют «дальнодействующие» эффекты. «Локальные» эффекты обусловлены концентрацией примеси: кулоновское взаимодействие атомов примеси с заряженными вакансиями; возникновение внутренних электростатических полей, ускоряющих диффузию; кластеризация и преципитация примесей; генерация заряженных вакансий вследствие деформации решетки.

Указанные эффекты сильно влияют на диффузию примесей в кремнии, причем, при моделировании распределений примесей необходимо для каждой примеси и условий процесса установить влияющие на коэффициент диффузии факторы.

Одним из важнейших факторов является наличие внутренних электростатических полей, влияние которых приводит к увеличению эффективного коэффициента диффузии в h раз:

$$h = 1 + \frac{N}{2n_i} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{N}{2n_i}\right)^2 + 1}}, \quad (1.5)$$

где n_i – собственная концентрация электронов при температуре диффузии, определяемая из трансцендентного уравнения

$$n_i^2 = 1,5 \cdot 10^{33} T^3 \exp\left(-\frac{1,21 + 7,1 \cdot 10^{-10} \sqrt{n_i/T}}{kT}\right), \text{ см}^{-6},$$

Анализ формулы (1.5) показывает, что внутреннее электростатическое поле увеличивает эффективный коэффициент диффузии максимально в два раза при $N \gg n_i$.

1.2.2. Модели коэффициентов диффузии основных примесей в кремнии

В общем случае диффузия примесей в кремнии происходит по нейтральным V^x , акцепторным V^- , V^{2-} и донорным V^+ вакансиям. В численных расчетах используется обобщенная форма записи коэффициента диффузии:

$$D = D_i \frac{1 + \beta^- \eta + \beta^{2-} \eta^2 + \beta^+ \eta^{-1}}{1 + \beta^- + \beta^{2-} + \beta^+},$$

где $D_i = D^x + D^- + D^{2-} + D^+$ – собственный коэффициент диффузии, равный сумме коэффициентов диффузии по различным вакансиям; $\beta^r = D^r / D^x$ ($r = -, 2-, +$) – коэффициенты, описывающие эффективность заряженных вакансий относительно нейтральных; $\eta = n/n_i$; n – концентрация электронов.

Учет специфики механизмов диффузии каждой примеси позволяет построить модели температурно-концентрационных зависимостей коэффициентов диффузии.

Диффузия бора. Диффузия бора происходит по нейтральным и донорным вакансиям. При низких и средних концентрациях коэффициент диффузии бора D_{B0} имеет вид

$$D_{B0} = D_{Bi} \frac{1 + \beta_B(T) \frac{1}{\eta}}{1 + \beta_B(T)}, \quad (1.6)$$

где $D_{Bi} = 0,76 \cdot \exp(-3,46/(kT))$, см²/с; $\beta_B(T) = 0,024 \cdot \exp(0,512/(kT))$.

При низких температурах диффузии (< 900 °С) и высоких концентрациях (> $3 \cdot 10^{19}$ см⁻³) необходимо учитывать образование кластеров $B_{12}Si$, что приводит к аномальному ходу температурно-концентрационной зависимости $D_B(T, C)$.

Обобщенная зависимость коэффициента диффузии бора задается как

$$D_B = \begin{cases} \frac{D_{B0}}{1 + 144 \left(\frac{C_A}{C^*} \right)^{11}}, & C = C_A + 12C_C, \\ D_{B0}, & C = C_A, \end{cases} \quad (1.7)$$

где $C^* = 4,9 \cdot 10^{23} \exp(-0,9/(kT))$ – равновесная концентрация кластерообразования, см⁻³; C_A – концентрация активной примеси бора, определяемая из соотношения $C = C_A \left[1 + 144 \left(C_A / C^* \right)^{11} \right]$; C_C – концентрация кластеров.

Диффузия фосфора. Диффузия фосфора в кремнии происходит по нейтральным и акцепторным вакансиям:

$$D_{P0} = D_{Pi}^x + D_{Pi}^- \eta + D_{Pi}^{2-} \eta^2, \quad (1.8)$$

где $D_{Pi}^x = 3,85 \cdot \exp(-3,66/(kT))$, см²/с;

$D_{Pi}^- = 4,44 \cdot \exp(-4,00/(kT))$, см²/с;

$D_{Pi}^{2-} = 44,2 \cdot \exp(-4,37/(kT))$, см²/с.

При высоких уровнях легирования ($>10^{20}$ см⁻³) наблюдается образование кластеров P₃Si, что приводит к возникновению сильных упругих напряжений в кристаллической решетке и, как следствие, уменьшению ширины запрещенной зоны.

В области I высокой концентрации (рис. 1.3), где образуются E – комплексы P + V²⁻ = (PV)⁻, происходит диффузия фосфора по двухзарядным вакансиям акцепторного типа, и коэффициент диффузии фосфора в этой области есть

$$D_{PI} = D_{Pi}^x + D_{Pi}^{2-} \left(\frac{n}{n_{ie}} \right)^2, \quad (1.9)$$

где n_{ie} – эффективная концентрация собственных носителей в кремнии, учитывающая эффект сужения ширины запрещенной зоны вследствие сильного легирования и равная

$$n_{ie} = n_i \exp\left(\frac{1,5 \cdot 10^{-22} (C_s - 3 \cdot 10^{20})}{kT} \right), \quad \text{при } C_s > 3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3},$$

где C_s – полная поверхностная концентрация фосфора; n – концентрация электрически активного фосфора, определяемого по общей концентрации фосфора в диапазоне температур 900÷1050 °С из уравнения $C = n + 2,4 \cdot 10^{-41} n^3$.

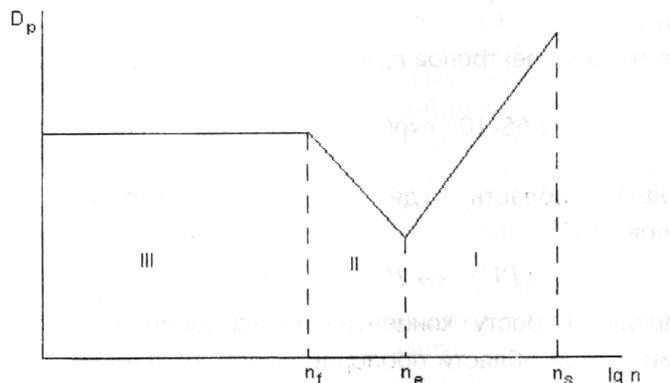


Рис. 1.3. Зависимость коэффициента диффузии фосфора от концентрации электронов.

I – область высокой концентрации; II – переходная область;

III – область низкой концентрации

Вблизи переходной области II когда концентрация электронов n_e составляет величину $n_e = 4,65 \cdot 10^{21} \exp(-0,39/(kT)) \text{ см}^{-3}$, начинается быстрый распад $(PV)^-$ комплексов, и происходит диффузия избыточных вакансий V^- в обе стороны от границы x_e . Коэффициент диффузии фосфора D_{PII} в переходной области рассчитывается по формуле

$$D_{PII} = \left[D_{Pi}^x + D_{Pi}^{2-} \left(\frac{n_e}{n_{ie}} \right)^2 \right] \left(\frac{n_{ie}}{n} \right)^2. \quad (1.10)$$

Область низкой концентрации, где определяющим механизмом диффузии является диффузия по нейтральным и однозарядным акцепторным вакансиям, начинается с концентрации n_f :

$$n_f = 10^{(0,5 \cdot 10^{-3} T + 19,4)}, \text{ см}^{-3}.$$

Коэффициент диффузии D_{PIII} в этой хвостовой области III аппроксимируется выражением

$$D_{PIII} = D_{Pi}^x + D_{Pi}^- \frac{n_s^3}{n_e^2 n_{ie}} \left(1 + e^{\frac{0,3}{kT}} \right) \cdot e^{\frac{3\Delta E_{gm}}{kT}} e^{-\frac{x-x_e}{L_v}}, \quad (1.11)$$

где ΔE_{gm} – сужение ширины запрещенной зоны, вызванное главным образом механическими напряжениями кристаллической решетки; L_v – характеристическая диффузионная длина вакансий V^- , составляющая при температурах $900 \div 1100 \text{ }^\circ\text{C}$ величину $\sim 25 \text{ мкм}$.

График зависимости коэффициента диффузии фосфора в кремнии от концентрации электронов приведен на рис. 1.4.

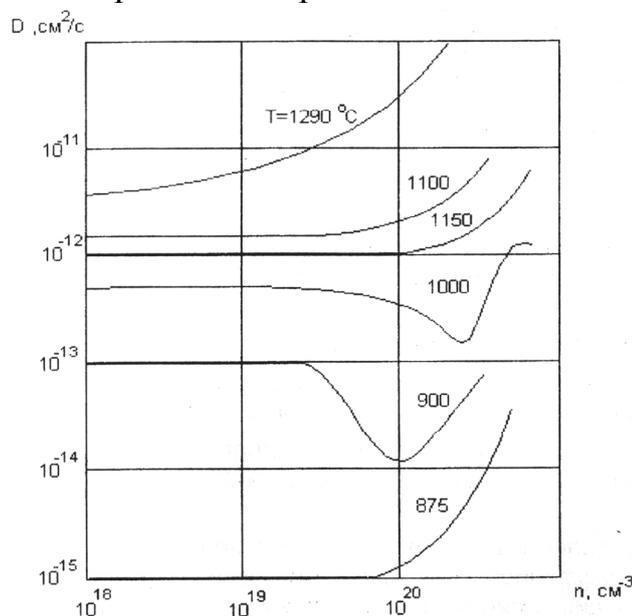


Рис. 1.4. Зависимость коэффициента диффузии фосфора в кремнии от концентрации электронов

1.2.3. Аналитические модели распределения примесей при диффузии в неограниченной, полуограниченных и ограниченных подложках

Большая группа решений может быть получена в приближении постоянного коэффициента диффузии. Тогда второе уравнение Фика в одномерном случае запишется в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (1.12)$$

Для неограниченного тела при произвольном начальном распределении примеси $C(x,0)$ решение уравнения (1.12) имеет вид

$$C(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} C(x,0) e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} d\xi.$$

В большинстве случаев диффузия рассматривается в полубесконечном теле, ограниченном плоскостью $x = 0$, с заданными граничными условиями.

Примером отражающей границы, поток примеси через которую в любой момент времени равен нулю, в первом приближении считается граница раздела $\text{SiO}_2\text{--Si}$, так как для традиционных примесей (бор, фосфор, мышьяк, сурьма) коэффициенты диффузии в окисле на два порядка меньше коэффициентов диффузии в кремнии.

Математическое условие отражающей границы записывается в виде

$$J(0,t) = -D \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = 0,$$

где $J(0,t)$ – поток диффузанта через границу $x = 0$ в любой момент времени t .

Тогда решение уравнения диффузии Фика для полуограниченного тела с отражающей границей имеет вид

$$C(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} C(\xi,0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} + e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] dt.$$

Второе предельное условие реализуется, например, при испарении примеси из предварительно насыщенного ею кристалла. Этот процесс представляет собой обратную диффузию, или диффузию наружу. Математическое условие связывающей границы записывается в виде $C(0,t) = 0$.

Тогда решение уравнения диффузии Фика для полуограниченного тела со связывающей границей имеет вид:

$$C(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} C(\xi,0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} - e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] dt.$$

Задача о диффузии примесей из ограниченного тела актуальна при рассмотрении быстро диффундирующих примесей, характеристическая диффузионная длина которых сравнима с толщиной подложек.

Решение второго уравнения Фика в случае связывающих границ (рис. 1.5) находится при следующих условиях:

– начальное условие (равномерное начальное распределение)

$$C(x,0) = C_0, \quad 0 \leq x \leq l,$$

где $0, l$ – координаты границ твёрдого тела; C_0 – начальная концентрация;

– граничные условия (условия связывающих границ) $C(0,t) = 0; C(l,t) = 0$.

Решение в этом случае получается в виде бесконечного ряда

$$C(x,t) = \frac{4}{\pi} C_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \cdot e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 D t}{l^2}} \cdot \sin \frac{(2k+1)\pi}{l} x.$$

Полученный ряд имеет хорошую сходимость, причём тем лучше, чем больше t . При условии $t > 4,5 \cdot 10^{-2} \frac{l^2}{D}$ можно ограничиться первым членом ряда, делая при этом ошибку не более 1 %:

$$C(x,t) = \frac{4}{\pi} C_0 e^{-\frac{\pi^2 D t}{l^2}} \cdot \sin \frac{\pi}{l} x.$$

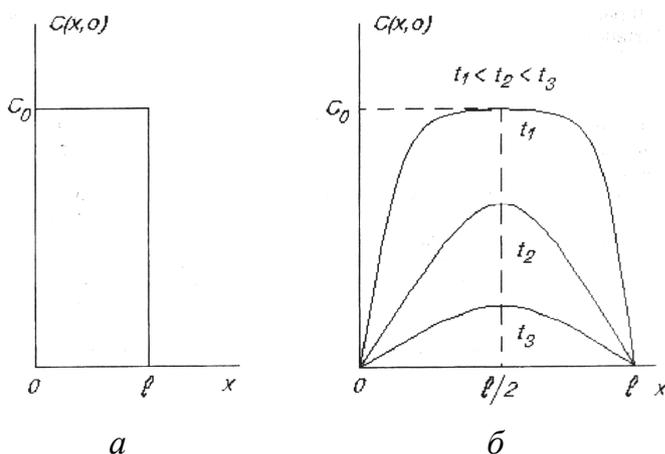


Рис. 1.5. Распределение примеси при диффузии из ограниченного тела со связывающими границами:

a – начальное распределение; *б* – концентрационные профили при различных временах диффузии

В случае, когда диффузانت поступает в ограниченное тело через обе границы (рис. 1.6а), на которых поддерживается постоянная концентрация C_0 , равная в большинстве случаев предельной растворимости диффузанта в материале подложки при температуре диффузии, начальное и граничные условия имеют вид:

– начальное условие

$$C(x,0) = \begin{cases} C_0, & x \leq 0; x \geq l, \\ 0, & 0 < x < l; \end{cases}$$

где $0, l$ – координаты границ твёрдого тела;

– граничные условия (условия связывающих границ)

$$C(0,t) = C_0; \quad C(l,t) = C_0.$$

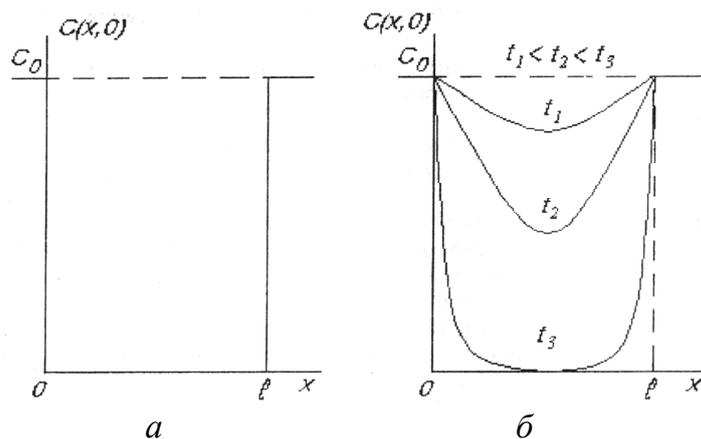


Рис 1.6. Распределение примеси при диффузии из постоянного (бесконечного) источника в ограниченное тело: *а* – начальное распределение; *б* – концентрационные профили при разных временах диффузии

Решение второго уравнения Фика при данных начальных и граничных условиях (рис. 1.6,б) получается в виде бесконечного ряда

$$C(x,t) = C_0 \left[1 - \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \cdot e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 D t}{l^2}} \cdot \sin \frac{(2k+1)\pi}{l} x \right].$$

Полученный ряд имеет хорошую сходимость, причём тем лучше, чем больше t . При условии $t > 4,5 \cdot 10^{-2} \frac{l^2}{D}$ можно ограничиться первым членом ряда, делая при этом ошибку не более 1 %:

$$C(x,t) = C_0 \left[1 - \frac{4}{\pi} e^{-\frac{\pi^2 D t}{l^2}} \cdot \sin \frac{\pi}{l} x \right].$$

1.2.4. Моделирование процесса диффузии на стадиях загонки и разгонки примесей

В планарной технологии диффузия проводится в две стадии, первая из которых – загонка осуществляется из источника с постоянной поверхностной концентрацией C_s . Поверхностная концентрация определяется либо предельной растворимостью примеси, либо концентрацией примеси в источнике диффузанта.

В одномерном случае распределение примеси по глубине x находится из решения второго уравнения Фика в приближении постоянного коэффициента диффузии D

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}$$

при заданных начальном и граничном условиях (рис. 1.7а)

$$C(x > 0, 0) = 0, \quad C(0, t \geq 0) = C_s.$$

Если исходная концентрация в объёме твёрдого тела пренебрежимо мала, то решение есть (рис. 1.7б)

$$C(x,t) = C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}},$$

где $\operatorname{erfc} z = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy$ – функция дополнения интеграла ошибок Гаусса.

Поток $F(0,t)$ примеси через границу $x = 0$, который определяется из первого уравнения Фика

$$F(0,t) = -D \frac{dC}{dx} \Big|_{x=0} = C_s \sqrt{\frac{D}{\pi t}},$$

позволяет рассчитать дозу Q легирования как количество диффузанта, поступившее в твёрдое тело за время диффузии:

$$Q = \int_0^t F(0,t) dt = 2C_s \sqrt{\frac{Dt}{\pi}}.$$

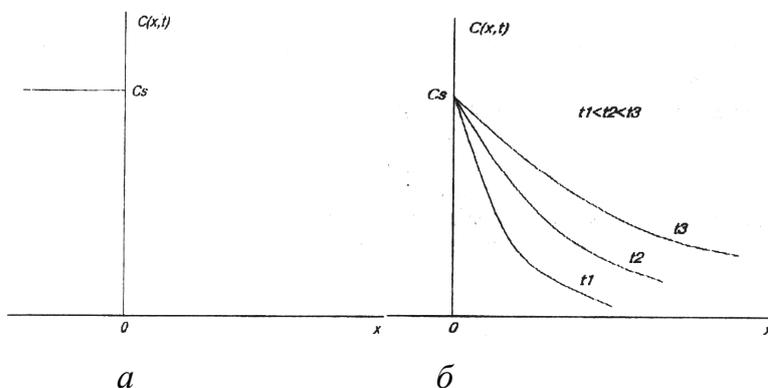


Рис. 1.7. Распределение примеси в случае диффузии из постоянного (бесконечного) источника в полуограниченное тело (стадия загонки): *a* – начальное распределение; *б* – концентрационные профили при различных временах диффузии

При наличии в подложке исходной примеси $C_{исх}$ противоположного типа глубина x_j залегания сформированного р–n-перехода определяется из условия $C(x_j, t) = C_{исх}$: $x_j = 2\sqrt{Dt} \cdot \operatorname{erfc}^{-1} \left(\frac{C_{исх}}{C_s} \right)$.

При диффузии из предварительно нанесённого источника диффузанта с ограниченным содержанием примеси Q второе уравнение Фика решается при следующих начальных и граничных условиях:

$$C(x,0) = 0, \quad x > 0;$$

$$\int_0^{\infty} C(x,t) dx = Q.$$

Распределение примеси в этом случае имеет вид (рис. 1.8)

$$C(x,t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

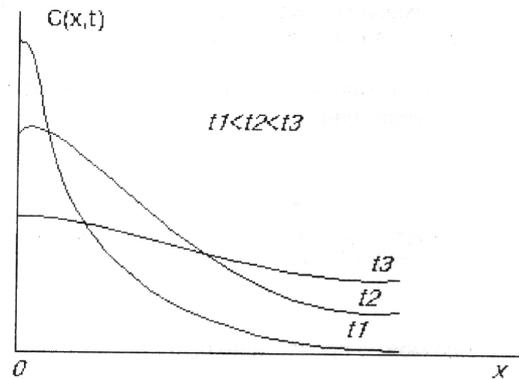


Рис. 1.8. Концентрационные профили при диффузии из бесконечно тонкого слоя с отражающей границей

Если пластина имеет исходную примесь противоположного типа проводимости с концентрацией $C_{исх}$, то возможно формирование р–п-перехода, глубина залегания которого определяется из условия $C(x_j, t) = C_{исх}$:

$$x_j = 2 \sqrt{Dt \cdot \ln \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt} \cdot C_{исх}}}$$

1.2.5. Многомерные задачи диффузии

Уменьшение размеров элементов интегральных схем требует учёта краевых эффектов у границ защитных слоёв окиси кремния.

В общем случае для бесконечного двумерного твёрдого тела с заданным начальным распределением $C(x, 0)$ примеси по глубине боковая изотропная диффузия описывается свёрткой

$$C(x, y, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} C(x, \xi, 0) \cdot e^{-\frac{(\xi-y)^2}{4Dt}} d\xi$$

При этом процессы диффузии вглубь и под край защитной маски считаются независимыми и аддитивными.

Для двухстадийной диффузии нормированное распределение примеси с учетом диффузии под край защитной маски (рис. 1.9) описывается выражениями:

– на стадии загонки примеси

$$C(x, y, t) = \frac{C_s}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \cdot \operatorname{erfc} \frac{y}{2\sqrt{Dt}};$$

– на стадии разгонки примеси

$$C(x, y, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \cdot \operatorname{erfc} \frac{y}{2\sqrt{Dt}}.$$

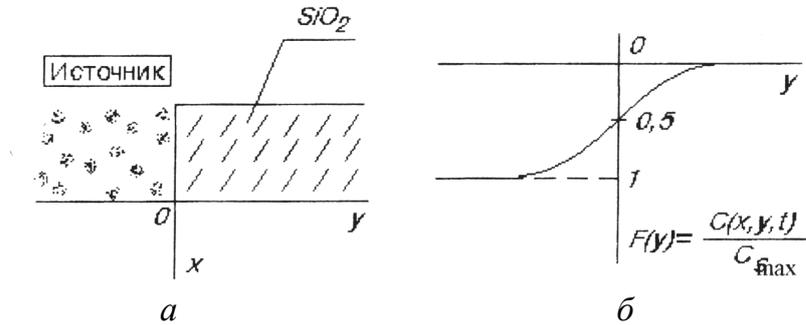


Рис. 1.9. Диффузия под край защитной маски:

a – край окисной маски; *б* – нормированное распределение примеси

Для двухстадийной диффузии нормированное распределение примеси под край щели размером $2a$ в защитной маске описывается выражениями:

– на стадии загонки примеси

$$C(x, y, t) = \frac{C_s}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right];$$

– на стадии разгонки примеси

$$C(x, y, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right].$$

Для двухстадийной диффузии нормированное распределение примеси через прямоугольное окно размером $2a \times 2b$ в защитной маске описывается выражениями:

– на стадии загонки примеси

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_s}{4} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{z-b}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{z+b}{2\sqrt{Dt}} \right];$$

– на стадии разгонки примеси

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{z-b}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{z+b}{2\sqrt{Dt}} \right].$$

1.2.6. Сегрегация примесей на границе окисел-полупроводник

При диффузии в окисляющей среде необходимо учитывать сегрегацию примеси на движущейся границе раздела и поглощение кремния слоем окисла.

В состоянии термодинамического равновесия на границе раздела двух материалов концентрации примесей связаны через равновесный коэффициент сегрегации m_0 :

$$m_0 = \frac{C_s}{C_0}, \text{ т.е. } C_0 = \frac{C_s}{m_0},$$

где C_0 – концентрация примеси на границе раздела SiO_2 – Si в слое окисла; C_s – концентрация примеси на границе раздела SiO_2 – Si в слое кремния.

Если равновесие нарушается, $C_0 \neq \frac{C_s}{m_0}$, то через границу SiO_2 – Si начинает протекать сегрегационный поток примеси J_s (рис. 1.10), стремящийся восстановить равновесие:

$$J_s = -v_s(C_0 - C_s/m_0), \quad (1.13)$$

где v_s – сегрегационный коэффициент массопереноса.

Неравенство концентраций возникает при окислении кремния, когда происходит движение границы раздела SiO_2 – Si . При этом возникает поток примеси, связанный с увеличением объема окисла V_0 и с уменьшением объема кремния V_s , потраченного на образование слоя SiO_2 . При этом $V_s = \beta V_0$, β (или α) $\approx 0,44$. Тогда эффективный коэффициент сегрегации равен

$$m_s = \frac{C_s}{C_0} = m_0 \frac{1 + \frac{v}{v_s}}{1 + m_0 \beta \frac{v}{v_s}}. \quad (1.14)$$

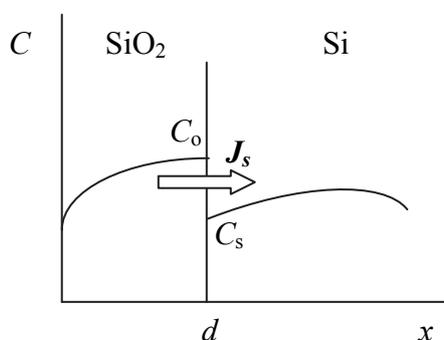


Рис. 1.10. Формирование сегрегационного потока примеси J_s

Анализ выражения (1.14) показывает, что величина m_s изменяется от m_0 до $1/\beta$ (~ 2) в зависимости от скорости окисления. Сегрегационный поток примеси J_s на движущейся границе раздела SiO_2 – Si равен:

$$J_s = C_s \left(\beta - \frac{1}{m_0} \right) \frac{v}{1 + \frac{v}{v_s}}.$$

1.2.7. Диффузионное перераспределение примесей в окислительной среде

В планарной технологии часто проводится диффузионное перераспределение примесей с одновременным окислением. Наличие подвижной границы раздела $\text{SiO}_2\text{-Si}$ даже в одномерном приближении значительно усложняет математическое моделирование процесса диффузии. Такие задачи представляют собой нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных параболического типа и решаются на ЭВМ методом конечных разностей.

В ряде случаев решение о диффузии в окислительной среде имеет аналитическое представление. Решение одномерного уравнения Фика для диффузии в условиях перераспределения примеси между кремнием и растущим окислом может быть рассмотрено в рамках следующих допущений.

Во-первых, для большинства традиционных диффузантов, таких как бор, фосфор, сурьма, мышьяк коэффициент диффузии в окисной пленке D_{SiO_2} в $10 \div 1000$ раз меньше коэффициента диффузии в кремнии D_{Si} . Поэтому диффузией этих примесей в окисной пленке можно пренебречь.

Во-вторых, рассматриваются большие времена окисления, при которых формируется значительный слой окисла $X(t) \approx \sqrt{Bt}$.

В-третьих, на движущейся границе раздела $\text{SiO}_2\text{-Si}$ возникает поток примеси вследствие сегрегации и перераспределения примеси из кремния в растущий окисел. По мере роста окисла, который образуется за счет материала подложки, граница раздела $\text{SiO}_2\text{-Si}$ вдвигается в кремний (рис. 1.11).

Исходя из значений плотностей и молекулярных весов Si и SiO_2 , можно показать, что для формирования слоя окисла толщиной $X(t)$ поглощается слой кремния толщиной $\alpha X(t)$, где коэффициент использования кремния при окислении $\alpha \cong 0,44$.

Сегрегационное перераспределение описывается обратным m_s коэффициентом сегрегации k_s , который равен отношению концентрации C_{SiO_2} примесей, внедрившихся в окисел, к концентрации C_{Si} примесей в кремнии на границе $\text{SiO}_2\text{-Si}$:

$$k_s = C_{\text{SiO}_2}/C_{\text{Si}}.$$

Поток примеси J , действующий в этом случае на движущейся границе раздела, равен:

$$J = C_{\text{Si}}(\alpha - k_s) \frac{v}{1 + v/v_s},$$

где v – скорость окисления; v_s – сегрегационный коэффициент массопереноса. При малых скоростях окисления, когда $v \ll v_s$, поток примеси на границе будет $J = C_{si}(\alpha - k_s)v$.

При параболическом законе скорость роста окисла есть

$$v = \frac{dX(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B}{t}},$$

тогда поток примеси на границе $x = x_0$ ($x_0 = \sqrt{Bt}$) равен

$$J = -D \left. \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right|_{x=x_0} = \frac{-k_s + \alpha}{2} \sqrt{\frac{B}{t}} C(x_0, t).$$

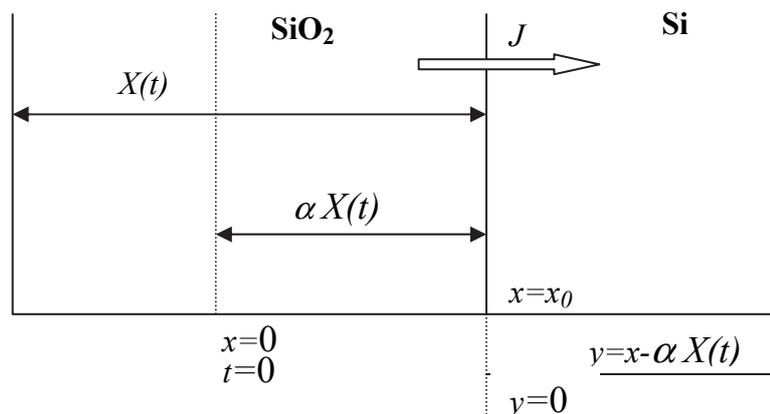


Рис. 1.11. Система координат при росте окисла на поверхности кремния

При исследовании диффузионного перераспределения в окислительной среде начало координат связывается с границей раздела $\text{SiO}_2\text{-Si}$. Переходя к системе координат с переменной $y = x - \alpha\sqrt{Bt}$ и сделав замену переменной интегрирования $\eta = \xi / 2\sqrt{Dt}$, получим

$$C(y,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} C(\eta,0) \left\{ e^{-\left(\eta - M - \frac{y}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} - \frac{\frac{k_s M}{\alpha} - \eta}{\frac{k_s M}{\alpha} + \eta} \cdot e^{4M\eta} \cdot e^{-\left(\eta + M + \frac{y}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} \right\} d\eta$$

где $M = \frac{\alpha\sqrt{Bt}}{2\sqrt{Dt}}$ – коэффициент относительной скорости передвижения поверхности кремния при окислении.

1.2.8. Численные методы решения уравнений Фика

В общем случае решение уравнений диффузии Фика (1.3) и (1.4) проводится методами конечных разностей на неравномерной дискретной сетке

с узловыми точками, расположенными в пределах границ прибора или рассматриваемой области моделирования.

Для аппроксимации по времени левой части уравнения (1.4) могут быть использованы явный или неявный методы Эйлера, метод формул дифференцирования назад (ФДН), другие методы, а также составные алгоритмы на основе указанных выше методов.

Рассматривая второе уравнение Фика (1.4) с учётом нелинейного коэффициента диффузии $D(N)$, запишем его в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D\nabla C) = \Omega(C), \quad (1.15)$$

где $\Omega(C)$ – дифференциальный оператор.

Уравнение (1.15) решается в общем виде методом конечно-разностных аппроксимаций.

Пространственная аппроксимация

Запишем одномерный разностный аналог $L(C_i)$ дифференциального оператора $\Omega(C)$ на трёхточечном шаблоне с пространственной неравномерной сеткой разбиения $\{x_i\}$, где $i = 1, 2, 3, \dots, n - 1$ (рис. 1.12).

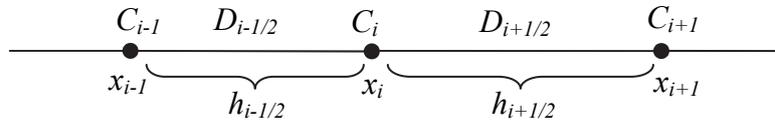


Рис. 1.12. Трёхточечный шаблон с пространственной неравномерной сеткой разбиения

Левая $\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_l$ и правая $\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{np}$ первые разностные производные будут представлены в виде

$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_l \cong \frac{C_i - C_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad \frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{np} \cong \frac{C_{i+1} - C_i}{x_{i+1} - x_i}.$$

Тогда разностный аналог $L(C_i)$ будет в виде

$$L(C_i) \cong \frac{D_{i+1/2} \frac{C_{i+1} - C_i}{x_{i+1} - x_i} - D_{i-1/2} \frac{C_i - C_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}}{(x_{i+1} - x_{i-1})/2}.$$

Обозначив шаг $h_{i-1/2} = x_i - x_{i-1}$ и $h_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i$, получим

$$L(C_i) \cong \frac{2}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}} \left[D_{i+1/2} \frac{C_{i+1} - C_i}{h_{i+1/2}} - D_{i-1/2} \frac{C_i - C_{i-1}}{h_{i-1/2}} \right].$$

Решение полученной системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) даёт распределение примеси на каждом временном шаге. При этом для каждой примеси необходимо использовать свою сетку с числом узлов не менее 100. Показано, что предпочтительнее использовать равномерную или кусочно-равномерную сетку. Динамически перестраиваемые сетки из-за частого их изменения требуют значительных затрат времени. При этом необходимо чётко следить за локальной погрешностью аппроксимации.

Другой источник ошибки пространственной аппроксимации обусловлен приближенным вычислением коэффициента диффузии $D_{i+\frac{1}{2}}$ в интервале $x_{i+1} - x_i$. Для определения $D_{i+\frac{1}{2}}$ рассмотрим первый закон Фика

$$J = -D(C) \frac{dC}{dx}.$$

Проинтегрируем его в интервале $x_i < x < x_{i+1}$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} J dx = - \int_{x_i}^{x_{i+1}} D(C) \frac{dC}{dx} dx = - \int_{C_i}^{C_{i+1}} D(C) dC = -D'_{i+\frac{1}{2}} (C_{i+1} - C_i),$$

откуда

$$D'_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{C_{i+1} - C_i} \int_{C_i}^{C_{i+1}} D(C) dC.$$

Обычно используют более простые соотношения

$$D''_{i+\frac{1}{2}} = \frac{D(C_{i+1}) + D(C_i)}{2} \quad \text{или} \quad D'''_{i+\frac{1}{2}} = D\left(\frac{C_{i+1} + C_i}{2}\right).$$

Очевидно, что все три формулы дают один и тот же результат при постоянном коэффициенте диффузии или при коэффициенте диффузии, прямо пропорциональном концентрации примеси.

Аппроксимация по времени

Для аппроксимации по времени левой части второго уравнения Фика (1.4) используются несколько методов. При этом весь временной интервал разбивается с шагом $\tau^{j+1} = t^{j+1} - t^j$, где j – номер шага по времени (рис. 1.13).

Согласно явному методу Эйлера получается система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$\frac{C^{j+1} - C^j}{\tau^{j+1}} = \Omega(C^j).$$

Показано, что при шаге порядка $\tau^* = \min_i \left(\frac{h_i^2}{D_i} \right)$ схема становится неустойчивой и хорошая аппроксимация по времени достигается лишь при интегрировании с шагом $(0,01 \div 0,001)\tau^*$, поэтому явная схема практически не используется.

Неявный метод Эйлера

$$\frac{C^{j+1} - C^j}{\tau^{j+1}} = \Omega(C^{j+1})$$

устойчив при шаге интегрирования по времени $(0,5 \div 1)\tau^*$.

Как среднее между двумя предыдущими аппроксимациями по времени может рассматриваться метод трапеций

$$\frac{C^{j+1} - C^j}{\tau^{j+1}} = \frac{1}{2} [\Omega(C^{j+1}) + \Omega(C^j)].$$

Этот метод устойчив, более точен, но для реализации требует либо увеличения в 2 раза машинного времени, либо одного дополнительного массива.

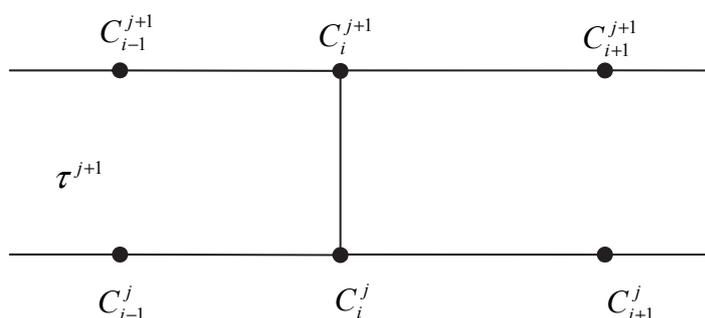


Рис. 1.13. Пространственно-временная неравномерная сетка разбиения по координате x и времени t

Одним из значительных недостатков вышеприведенных методов является большая (до 10 %) ошибка в определении концентрации на поверхности моделируемой структуры. Этому недостатка при большом шаге интегрирования по времени $\sim (10 \div 15)\tau^*$ лишен метод, использующий формулы дифференцирования назад порядка m .

1.3. Физико-математические модели процесса ионной имплантации

1.3.1. Основы теории ЛШШ

Ионная имплантация – это процесс внедрения ионизированных атомов примеси с энергией, достаточной для проникновения ионов в приповерхностные слои мишени.

Молекулярные ионы, внедряясь в кристалл, распадаются на атомные ионы. При этом энергии атомных ионов есть

$$E_i = E_0 \cdot \frac{M_i}{M_0},$$

где E_i , M_i – энергия и масса атомного иона; E_0 , M_0 – энергия и масса молекулярного иона.

Доза облучения Q – количество ионов, падающих на единицу поверхности мишени за время имплантации t : $Q = J \cdot t$, где J – плотность ионного тока.

Поверхностная концентрация N_s падающих ионов определяется дозой облучения $N_s = \frac{Q}{q} = \frac{J \cdot t}{n \cdot e} = 6,25 \cdot 10^{12} Q / n$, ион/см², если доза Q в мкКл/см².

Основной теорией, описывающей процессы при движении ионов в твердых телах, является теория Линдхарда, Шарфа и Шютта – теория ЛШШ. Теория позволяет рассчитать энергетические потери, параметры пробегов, профили распределения радиационных дефектов и внедряемых примесей.

Теория ЛШШ справедлива для аморфных однородных сред, поэтому возникают определенные трудности, например, при теоретическом рассмотрении имплантации многослойных структур типа SiO₂-Si, Si₃N₄-SiO₂-Si и т.д. Реальные подложки являются кристаллическими, поэтому даже при имплантации разориентированных мишеней проявляется эффект каналирования.

При внедрении ускоренных ионов в твердое тело ионы в процессе своего движения теряют энергию и рассеиваются. Согласно теории ЛШШ, основными механизмами энергетических потерь ускоренных ионов в твердом теле являются потери за счет упругих соударений с ядрами атомов мишени и взаимодействия со связанными электронами. Эти два механизма предполагаются независимыми и аддитивными.

При внедрении ускоренных ионов в твердое тело траектории ионов состоят из отдельных ломаных линий (рис. 1.14).

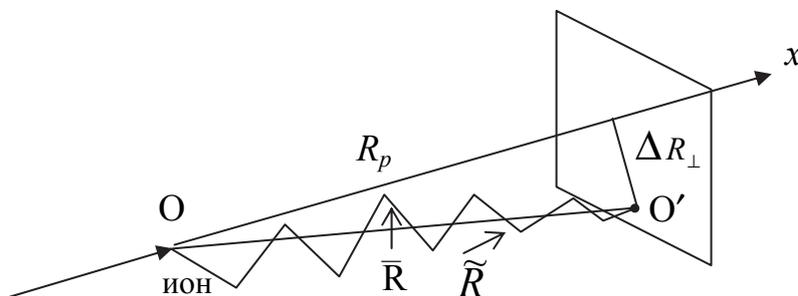


Рис. 1.14. Связь между траекторным \tilde{R} , проецированным R_p , поперечным ΔR_{\perp} и векторным \bar{R} пробегами:

O и O' – точка начала движения иона от поверхности и точка его остановки в твердом теле соответственно

В общем случае профили распределений ионно-имплантированных примесей описываются функцией распределения $p(x, E) \equiv p(x)$ – плотности вероятности того, что ион с энергией E остановится на глубине x .

Симметричные профили достаточно хорошо описываются гауссовским распределением с первым начальным и вторым центральными моментами:

– нормальный пробег, или первый начальный момент,

$$R_p = \mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx ;$$

– среднеквадратичное отклонение (страгглинг) нормального пробега, или второй центральный момент

$$\Delta R_p^2 = \mu_2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^2 p(x) dx .$$

Большинство реальных профилей асимметричны, и для их аппроксимации используются функции распределений, учитывающие более высокие моменты по R_p :

– нормированный коэффициент асимметрии γ , или третий центральный нормированный момент,

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x - R_p)^3}{\Delta R_p^3} p(x) dx ;$$

– нормированный коэффициент затухания (эксцесс) β , или четвертый центральный нормированный момент,

$$\beta = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x - R_p)^4}{\Delta R_p^4} p(x) dx .$$

Для симметричных профилей $\gamma = 0$, а для несимметричных γ может быть как положительным, так и отрицательным.

Эксцесс характеризует распределение вблизи максимума. Распределения с $|\beta| > 3$ имеют высокую и острую вершину по сравнению с гауссовским распределением, а с $|\beta| < 3$ – более низкую и плоскую.

Исходные предпосылки современных теорий не позволяют получить значения β расчетным путем, и он задается аппроксимирующей функцией, сконструированной из коэффициента асимметрии:

$$\beta = 3,28\gamma^2 + 0,39\gamma + 3,08 .$$

Параметры распределений ионно-имплантированных примесей могут быть рассчитаны, исходя из теории ЛШШ, или определены из таблиц.

1.3.2. Распределения ионно-имплантированных примесей: гауссовские распределения, сопряженная гауссиана, распределение Пирсон-4

В первом приближении для аморфных и поликристаллических мишеней распределение плотности вероятности $p(x, E)$ есть функция двух основных параметров: нормального пробега R_p и страгглинга ΔR_p , и представляет собой симметричную функцию Гаусса.

При облучении однородной аморфной или поликристаллической мишени моноэнергетическим пучком с энергией E распределение концентрации $N(x)$ внедренных атомов описывается функцией

$$N(x) = Q p(x, E) = N_m \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right], \quad (1.16)$$

где Q – доза имплантированных ионов, равная числу ионов, прошедших через единицу поверхности мишени за время облучения; N_m – предэкспоненциальный множитель, определяемый из условия нормировки на дозу

$$Q = \int_0^{\infty} N(x) dx. \quad (1.17)$$

Для определения нормирующего множителя N_m на практике рассматриваются два случая.

В первом случае практически вся гауссиана расположена в мишени (рис. 1.15а), что, согласно положениям теории вероятностей и математической статистики (правило «трех сигм»), с вероятностью 0,997 верно при условии $R_p \geq 3\Delta R_p$.

Распределение примеси в случае неусеченной гауссианы есть

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right]. \quad (1.18)$$

В случае усеченной гауссианы (рис. 1.15б), когда $R_p < 3\Delta R_p$, распределение примеси будет в виде

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Delta R_p \left(1 + \operatorname{erf} \frac{R_p}{\sqrt{2}\Delta R_p}\right)} \cdot \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right]. \quad (1.19)$$

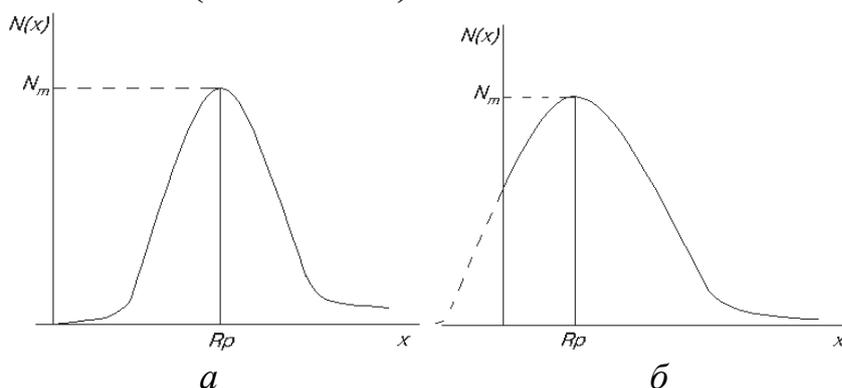


Рис. 1.15. Распределения ионно-имплантированных примесей в приближении двух параметров: а – неусеченная гауссиана; б – усеченная гауссиана

Если подложка легирована исходной примесью противоположного типа с концентрацией N_{ucx} , то возможно возникновение одного или двух р-п-переходов, глубины залегания которых находятся из условия $N(x_{j1,2}) - N_{ucx} = 0$.

В случае неусеченной гауссианы из равенства

$$\frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \cdot e^{-\frac{(x_{j1,2}-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}} = N_{ucx}$$

находим $x_{j1,2} = R_p \pm \Delta R_p \sqrt{2 \ln \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p N_{ucx}}}$.

В большинстве случаев реальные профили ионно-имплантированных примесей имеют значительную асимметрию, и их аппроксимация симметричными распределениями типа гауссовских в значительной степени неудовлетворительна.

Физической причиной асимметрии профилей является характер передачи импульса при движении ускоренных ионов в твердом теле. Так, при столкновении легких ионов с атомами мишени относительно велика величина обратного рассеяния. Это приводит к увеличению концентрации в приповерхностном участке профиля, что характерно, например, для ионов бора (рис. 1.16а).

Для тяжелых ионов, обладающих значительной инерцией, рассеяние в обратном направлении незначительно, и они проникают на большую глубину, приводя к увеличению концентрации в глубине подложки (рис. 1.16б), что характерно, например, для мышьяка.

Для описания несимметричных профилей используется третий центральный нормированный момент γ (коэффициент асимметрии).

В приближении, учитывающем три параметра, используют два гауссовских распределения, которые имеют свои нормальные пробеги R_{p1} и R_{p2} и стратглинги ΔR_{p1} и ΔR_{p2} . Гауссовские распределения объединяются при модальной длине пробега R_m :

$$N(x) = \begin{cases} \frac{2Q}{\sqrt{2\pi}(\Delta R_{p1} + \Delta R_{p2})} \cdot \exp\left[-\frac{(x - R_m)^2}{2\Delta R_{p2}^2}\right], & 0 \leq x \leq R_m; \\ \frac{2Q}{\sqrt{2\pi}(\Delta R_{p1} + \Delta R_{p2})} \cdot \exp\left[-\frac{(x - R_m)^2}{2\Delta R_{p1}^2}\right], & x \geq R_m. \end{cases} \quad (1.20)$$

Приведенная аппроксимация верна только для слабо скошенных профилей с $0,5 \leq |\gamma| \leq 1$.

По начальной энергии E определяются R_p , ΔR_p и γ . Модальный пробег R_m рассчитывается по формуле $R_m = R_p + 0,8(\Delta R_{p2} - \Delta R_{p1})$, а связь между ΔR_{p1} , ΔR_{p2} , γ и ΔR_p приведена в виде таблицы (табл. 1.1).

Параметры распределений в сопряженных полугауссианах

$\gamma > 0$	0,0	0,1	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
$\Delta R_{p1}/\Delta R_p$	1,000	1,062	1,123	1,241	1,360	1,486	1,633
$\Delta R_{p2}/\Delta R_p$	1,000	0,936	0,871	0,729	0,570	0,373	0,081

Если $\gamma < 0$, то $\Delta R_{p1} \Leftarrow \Delta R_{p2}$, $\Delta R_{p2} \Leftarrow \Delta R_{p1}$.

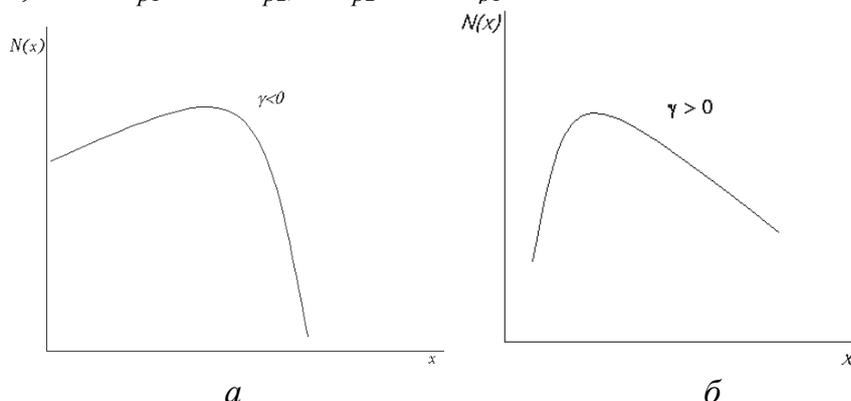


Рис. 1.16. Асимметричные концентрационные профили:
 а – для легких ионов с $\gamma < 0$; б – для тяжелых ионов с $\gamma > 0$

Применение данного приближения трех параметров ограничено условием $|\gamma| < \gamma_0$, что не позволяет описывать профили внедрения легких ионов с достаточно высокой энергией.

При легировании кремния ионами бора диапазон допустимых энергий ограничен сверху величиной 70 кэВ, в то время как для фосфора она составляет 700 кэВ, а для ионов мышьяка и сурьмы – более 1000 кэВ.

Большинство профилей имеют значительную асимметрию, поэтому необходимо выбирать функции, хорошо аппроксимирующие такие распределения и учитывающие более высокие моменты по нормальному пробегу.

Одним из самых удачных вариантов такой аппроксимации является распределение Пирсона в приближении четырех параметров – Пирсон-4. Распределение Пирсон-4 учитывает четыре параметра: нормальный пробег R_p , страгглинг ΔR_p , параметр асимметрии γ и затухание β .

Распределение Пирсон-4 есть решение дифференциального уравнения

$$\frac{dh(x)}{dx} = \frac{(x' - a)h(x)}{b_2 x'^2 + b_1 x' + b_0}, \quad (1.21)$$

где $h(x)$ – функция распределения, удовлетворяющая условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(x) dx = 1; \quad a, b_0, b_1, b_2 – \text{константы}; \quad x' = x - R_p.$$

Константы a, b_0, b_1, b_2 могут быть выражены через интегральные параметры распределения:

$$a = -\gamma \mu_2^{1/2} (\beta + 3) / A; \quad b_0 = -\mu_2 (4\beta - 3\gamma^2) / A;$$

$$b_1 = a; \quad b_2 = -(2\beta - 3\gamma - 6) / A,$$

где $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$.

Нормированное затухание аппроксимируется квадратичным многочленом $\beta = 3,28\gamma^2 + 0,39\gamma + 3,08$.

Распределение Пирсон-4 концентрации ионно-имплантированных примесей будет иметь вид

$$N(x) = N_0 |b_2 x'^2 + b_1 x' + b_0|^{\frac{1}{2b_2}} \exp \left[-\frac{\frac{b_1}{b_2} + 2a}{\sqrt{|4b_0 b_2 - b_1^2|}} \operatorname{arctg} \frac{2b_2 x' + b_1}{\sqrt{|4b_0 b_2 - b_1^2|}} \right]. \quad (1.22)$$

1.3.3. Распределения ионно-имплантированных примесей при легировании разориентированных мишеней

Если кристалл ориентирован точно по направлению с низкими кристаллографическими индексами, то для движущегося иона ряды атомов кристалла образуют канал (рис. 1.17а), а траектория иона совпадает с осью канала (рис. 1.17б).

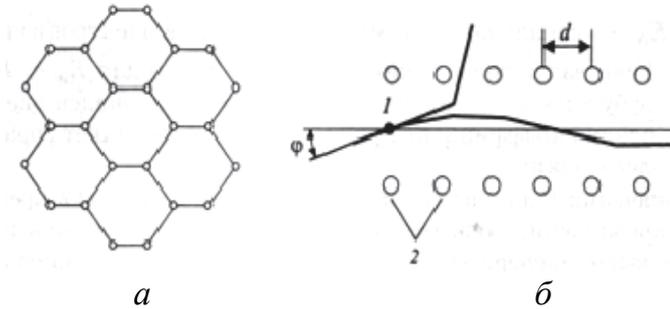


Рис. 1.17. Эффект каналирования:

a – расположение атомов в кремнии в плоскости, перпендикулярной направлению $[110]$; *б* – движение внедрённого иона вдоль канала 1, образованного атомами мишени 2

Распределение ионно-имплантированных примесей в однородных разориентированных монокристаллических мишенях с учетом эффекта каналирования (рис. 1.18) аппроксимируется в следующем виде:

$$N'(x) = \begin{cases} N(x), & 0 \leq x \leq R_0, \\ N(R_0) \cdot e^{-\frac{x-R_0}{\lambda}}, & x > R_0, \end{cases} \quad (1.23)$$

где $N(x)$ – любое из известных распределений; R_0 – координата точки соприкосновения заданного распределения с экспоненциальным «хвостом», при

этом $R_0 > R_m$ (R_m – координата точки максимума концентрации); λ – характеристическая длина экспоненциального «хвоста».

Анализ экспериментальных данных и численные расчеты показывают, что в первом приближении величина λ не зависит от дозы и энергии имплантации. Значение координаты R_m зависит от дозы и энергии ионов и может быть найдено из соотношения

$$F^* = \frac{N'(R_m)}{N'(R_0)},$$

которое существенно зависит только от дозы для заданной комбинации ион-мишень. Значения λ и F^* для ионов бора, фосфора и мышьяка при их внедрении в монокристаллический кремний приведены в табл. 1.2.

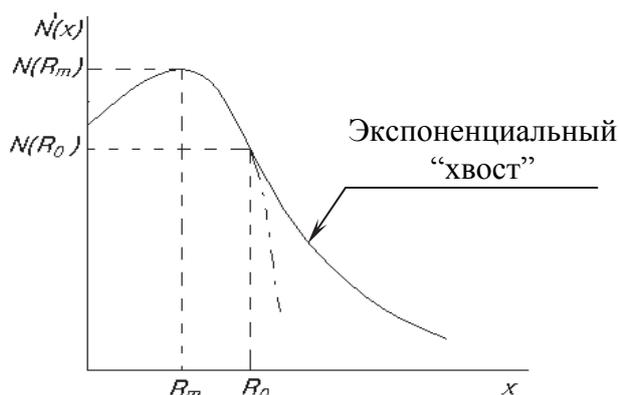


Рис. 1.18. Распределение ионно-имплантированной примеси в разориентированной кристаллической мишени (распределение Пирсон-4) с учетом эффекта каналирования

Т а б л и ц а 1.2

Значения параметров λ и F^*

Доза, см ⁻²	Тип примеси		
	бор $\lambda = 0,045$ мкм	фосфор $\lambda = 0,067$ мкм	мышьяк $\lambda = 0,022$ мкм
$<10^{13}$	2,0	5	2,0
10^{13}	2,3	17	2,3
$5 \cdot 10^{13}$	2,6	40	5,0
10^{14}	6,0	44	5,3
$5 \cdot 10^{14}$	10,2	51	12,4
10^{15}	12,5	55	16,7
$5 \cdot 10^{15}$	13,0	62	20,0
10^{16}	14,3	71	33,0
$5 \cdot 10^{16}$	21,0	150	42,3

1.3.4. Методы моделирования распределения ионно-имплантированных примесей в многослойных структурах

В процессе ионного легирования пассивирующие пленки SiO_2 позволяют предохранить поверхность подложек от загрязнения и повреждений, а также аморфизировать поверхностный слой с целью устранения эффекта каналирования. Кроме того, пассивирующие пленки предотвращают обратную диффузию и испарение имплантированных ионов, обладающих высокой летучестью.

Метод подбора доз обладает высокой эффективностью при моделировании профилей ионно-имплантированных примесей в многослойных структурах. С помощью этого метода можно получить приемлемую адекватность модельного распределения и профиля распределения примеси с минимальными вычислительными затратами. Метод подбора доз основан на статистических распределениях примесей и численном интегрировании доз в каждом слое. Метод подбора доз реализуется по следующему алгоритму.

Пусть задана многослойная структура, содержащая N слоев (рис. 1.19) с глубинами залегания границ раздела d_i ($i = 1, 2, \dots, N$). Распределение ионно-имплантированных примесей в каждом i -ом слое описывается функцией $f_i(x)$ с соответствующим нормирующим множителем N_{mi} , в качестве которой может быть выбрана любая из известных функций распределения (гауссовские, Пирсон-4 и т.д.).

Распределение внедренной примеси $n_1(x)$ в первом слое есть

$$n_1(x) = N_{m1}f_1(x).$$

Доза Q_1 , т. е. количество остановившихся ионов в первом слое, равна

$$Q_1 = \int_0^{d_1} N_{m1}f_1(x)dx.$$

В предположении, что вся структура выполнена из материала слоя 2, определяется глубина d_1' , на которой остановилось число ионов Q_1' , равное дозе Q_1 , из условия

$$Q_1' = Q_1 = \int_0^{d_1'} N_{m2}f_2(x)dx.$$

Таким образом, для определения профиля во втором слое необходимо сдвинуть исходный профиль второй среды на $\Delta d_1 = d_1' - d_1$ к границе раздела на глубине d_1 :

$$n_2(x) = N_{m2}f_2(x + \Delta d_1).$$

Перейдя к третьему слою, определим количество ионов, внедренных в первые два слоя,

$$Q_2' = Q_1 + \int_{d_1}^{d_2} N_{m2} f_2(x + \Delta d_1) dx.$$

В предположении, что вся структура выполнена из вещества слоя 3, определяется глубина d_2' , на которой остановилось то же число ионов Q_2' , что и в предыдущих слоях:

$$Q_2' = \int_0^{d_2'} N_{m3} f_3(x) dx.$$

Из условия $Q_2 = Q_2'$ находится d_2' и, соответственно, величина сдвига $\Delta d_2 = d_2' - d_2$, на которую следует сместить исходный профиль третьей среды $N_{m3} f_3(x)$ к границе d_2 . Тогда распределение примеси в третьем слое будет

$$n_3(x) = N_{m3} f_3(x + \Delta d_2).$$

Аналогично рассчитываются профили во всех последующих слоях на основе рекуррентных соотношений:

$$n_i(x) = N_{mi} f_i(x + \Delta d_{i-1}),$$

где $\Delta d_{i-1} = d_{i-1}' - d_{i-1}$ находится из условия $Q_{i-1} = Q_{i-1}'$:

$$\int_0^{d_{i-1}'} N_{mi} f_i(x) dx = Q_{i-1} + \int_{d_{i-2}}^{d_{i-1}} N_{m(i-1)} f_{i-1}(x + \Delta d_{i-2}) dx.$$

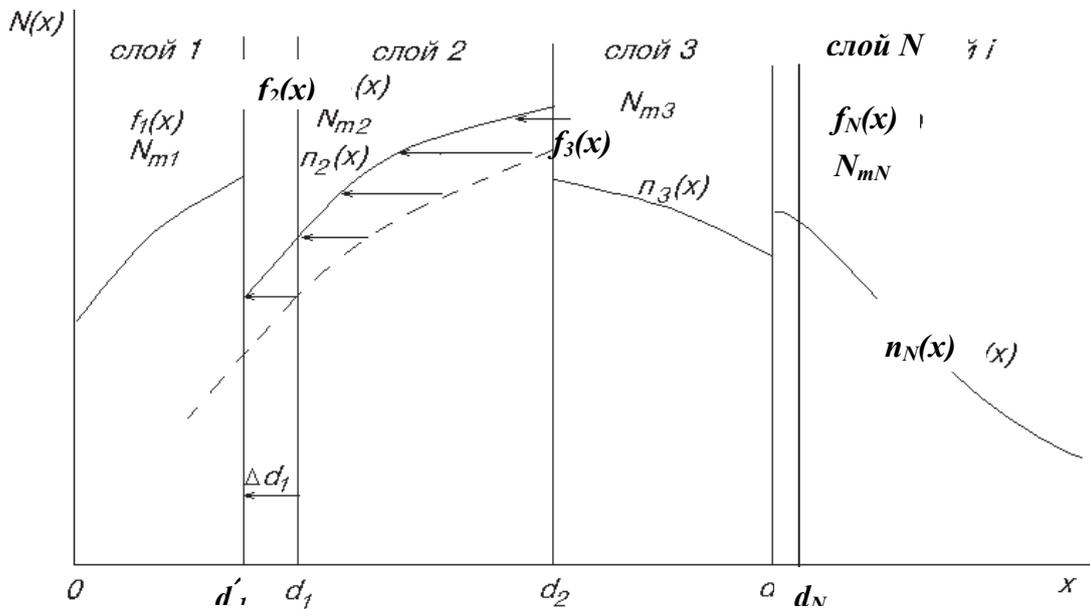


Рис. 1.19. Распределение ионно-имплантированной примеси в многослойной структуре

Приведенные выше рассуждения обобщаются на случай i -го слоя, и полученные рекуррентные соотношения позволяют вычислить концентрационные профили ионно-имплантированных примесей в любой многослойной структуре с любым числом слоев:

$$\begin{aligned}
 Q_{i-1} &= Q_{i-2} + \frac{Q}{2} \left[\operatorname{erf} \frac{d_{i-1} - R'_{p(i-1)}}{\sqrt{2\Delta R_{p(i-1)}}} - \operatorname{erf} \frac{d_{i-2} - R'_{p(i-1)}}{\sqrt{2\Delta R_{p(i-1)}}} \right]; \\
 R'_{p(i-1)} &= R_{p(i-1)} - (d'_{i-2} - d_{i-2}); \\
 \operatorname{erf} \frac{d'_{i-1} - R_{pi}}{\sqrt{2\Delta R_{pi}}} &= \frac{2}{Q} Q_{i-1} - 1; \\
 \Delta d_{i-1} &= d'_{i-1} - d_{i-1}; \\
 n_i(x) &= \frac{Q}{\sqrt{2\pi\Delta R_{pi}}} \exp \left[-\frac{(x + \Delta d_{i-1} - R_{pi})^2}{2\Delta R_{pi}^2} \right], \quad d_{i-1} < x < d_i.
 \end{aligned}
 \tag{1.24}$$

Для теоретического построения профилей в двухслойных структурах может быть использован метод составных профилей.

Пусть отдельно известны профили распределения ионов в слоях диоксида кремния SiO_2 и кремния Si при легировании дозой Q (рис. 1.20а).

На профиле SiO_2 проводится сечение на глубине d_1 , равной толщине слоя SiO_2 . Дозы имплантированных ионов слева и справа от сечения равны соответственно Q_1 и Q_2 . На профиле в кремнии проводится сечение на глубине d_2 так, чтобы количество ионов слева Q_1' было равно Q_1 , а количество ионов справа $Q_2' = Q_2$. После соединения частей профилей Q_1 и Q_2' получается искомый профиль (рис. 1.20б).

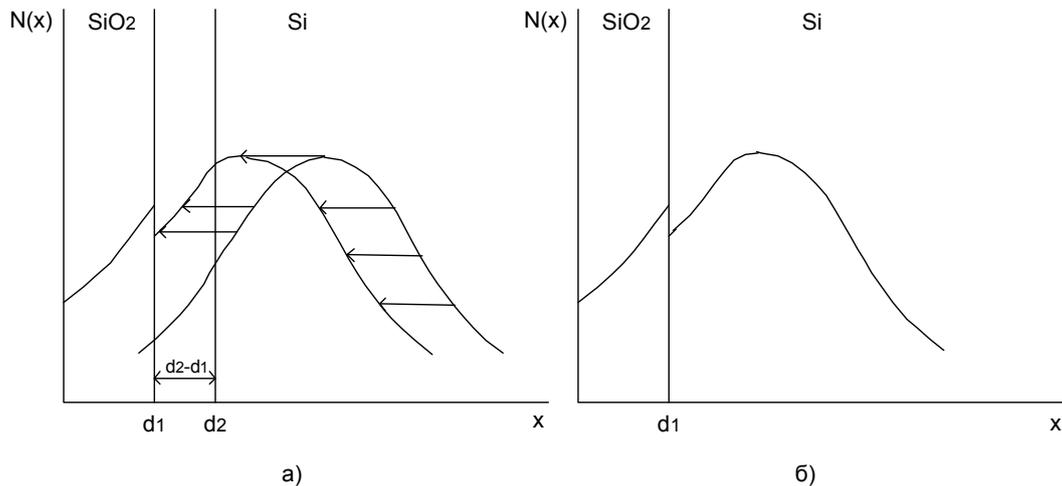


Рис. 1.20. Распределения имплантированных ионов в структуре Si-SiO_2 : а – профили распределения в средах SiO_2 и Si ; б – результирующий профиль

В области SiO_2 профиль описывается гауссианой

$$N_1(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{p1}} \exp\left[-\frac{(x - R_{p1})^2}{2\Delta R_{p1}^2}\right], \quad 0 \leq x \leq d_1.$$

В области кремния вследствие сдвига исходного распределения на отрезок $d_2 - d_1$ распределение имеет вид

$$\begin{aligned} N_2(x) &= \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{p2}} \exp\left[-\frac{(x + (d_2 - d_1) - R_{p2})^2}{2\Delta R_{p2}^2}\right] = \\ &= \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{p2}} \times \exp\left[-\frac{(x - d_1 + (d_1 - R_{p1}) \frac{\Delta R_{p2}}{\Delta R_{p1}})^2}{2\Delta R_{p2}^2}\right], \quad x \geq d_1. \end{aligned} \quad (1.25)$$

1.3.5. Локальное легирование методом ионной имплантации

Боковое рассеяние ионов, характеризуемое боковым среднеквадратичным отклонением ΔR_{\perp} , значительно меньше глубин проникновения ионов в направлении первоначального движения, но в технологии СБИС эффекты бокового рассеяния играют роль основного лимитирующего фактора.

В общем случае проводится имплантация бесконечной подложки с нанесенным защитным слоем толщиной $d(y)$ (рис. 1.21).

Распределение ионно-имплантированной примеси по глубине x есть функция, зависящая от $d(y)$, т.е. $\tilde{N}(x, d(y))$, а концентрационный профиль с учетом бокового рассеяния описывается свёрткой

$$N(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{\perp}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{N}(x, d(\xi)) e^{-\frac{(y-\xi)^2}{2\Delta R_{\perp}^2}} d\xi. \quad (1.26)$$

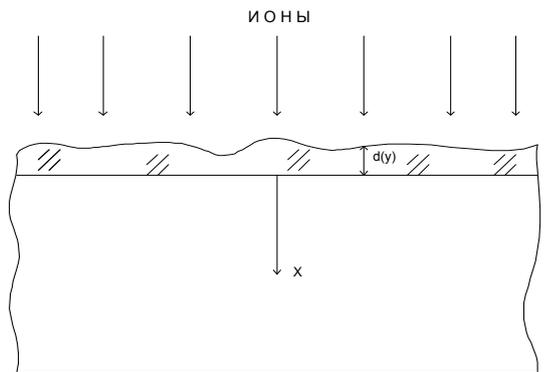


Рис. 1.21. Бесконечная подложка с защитным слоем толщиной $d(y)$

Рассмотрим боковое рассеяние нормально имплантированных ионов под прямоугольный край защитной маски (рис. 1.22). Через защитный слой

толщиной d ионы не проникают ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$), а в незащищенной области распределение по глубине описывается с помощью любого из распределений $N(x)$, рассмотренных в разделах 1.3.2–1.3.3. Боковое рассеяние ионов под край защитной маски описывается сверткой (1.26) с учетом подынтегральной функции $\tilde{N}(x, y)$:

$$\tilde{N}(x, y) = \begin{cases} 0, & 0 \leq y < \infty; \\ N(x), & -\infty < y \leq 0. \end{cases}$$

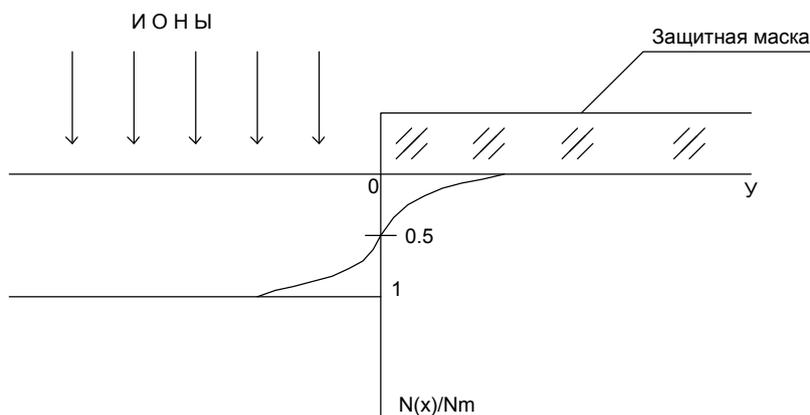


Рис. 1.22. Прямоугольный край защитной маски и нормированное распределение примеси с учетом бокового рассеяния

Подставив $\tilde{N}(x, y)$ в свертку (1.26), получим

$$N(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta R_{\perp}}} \int_{-\infty}^0 N(x) e^{-\frac{(y-\xi)^2}{2\Delta R_{\perp}^2}} d\xi.$$

После замены переменной $z = \frac{y-\xi}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}}$ и соответствующих преобразований распределение с учетом бокового рассеяния будет иметь вид

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{2} \operatorname{erfc} \frac{y}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}}. \quad (1.27)$$

Анализ полученного выражения (1.27) показывает, что рассеяние ионно-имплантированных ионов под прямоугольный край окисной маски может быть описано с использованием модели диффузии в неограниченное тело из полубесконечного пространства.

При нормальной имплантации ионов под края щели в защитной маске (рис. 1.23) через защитный слой толщиной d ионы не проникают ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$), а в незащищенной области распределение ионов по глубине описывается функцией $\tilde{N}(x, y)$:

$$\tilde{N}(x, y) = \begin{cases} 0, & y < -a, y > a; \\ N(x), & -a \leq y \leq a. \end{cases}$$

Распределение в этом случае будет иметь вид

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}} \right].$$

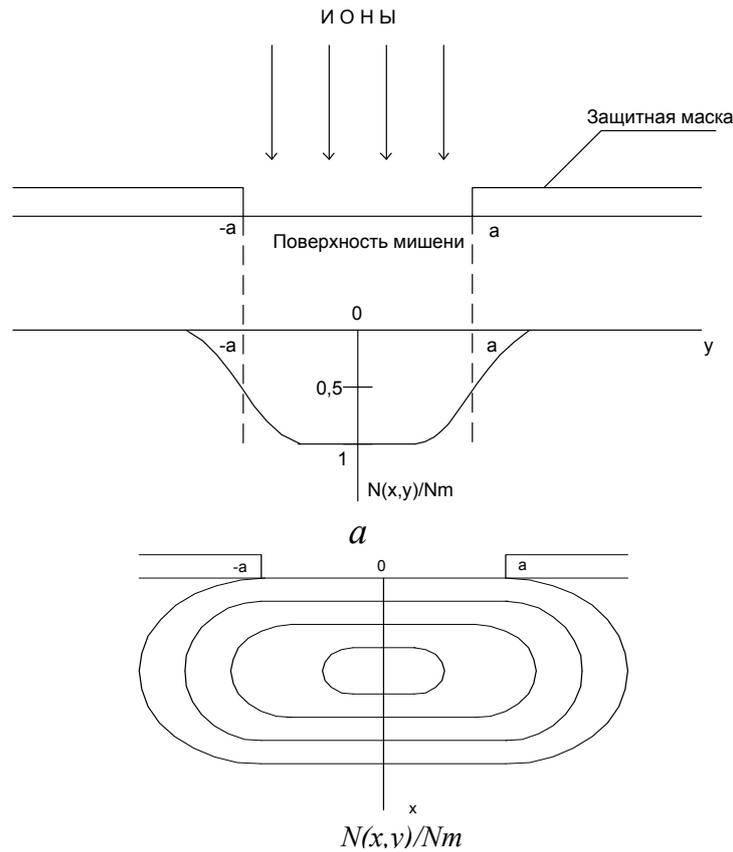
Рассмотрим боковое рассеяние нормально имплантированных ионов под края прямоугольного окна размером $2a \times 2b$ в защитной маске (рис. 1.24).

Если через защитный слой толщиной d ионы не проникают ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$), а в незащищенной области распределение ионов по глубине описывается функцией $N(x, y)$, то начальное распределение имеет вид

$$\tilde{N}(x, y, z) = \begin{cases} 0, & y < -a, y > a, z < -b, z > b; \\ N(x), & -a \leq y \leq a, -b \leq z \leq b. \end{cases}$$

то распределение будет иметь вид

$$N(x, y, z) = \frac{N(x)}{4} \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}} \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{z-b}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}} - \operatorname{erfc} \frac{z+b}{\sqrt{2\Delta R_{\perp}}} \right].$$



б

Рис. 1.23. Образование боковых профилей распределения нормально имплантированной примеси:

a – распределение нормированной концентрации вдоль оси y для щели размером $2a$ в защитной маске; b – линии равной концентрации

1.3.6. Наклонная имплантация

При внедрении ускоренных ионов в полубесконечную подложку под углом θ к нормали максимум распределения смещается к поверхности. При этом в значение среднеквадратичного отклонения ΔR вносит вклад как продольное среднеквадратичное отклонение ΔR_p , так и среднеквадратичное поперечное отклонение ΔR_{\perp} . В результате распределение примеси $N(x)$ по нормали к поверхности при наклонной имплантации имеет вид:

- в случае неусеченной гауссианы, когда $R_p \geq 3\Delta R_p$,

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R} \cdot e^{-\frac{(x-R_p \cos \theta)^2}{2\Delta R^2}} ; \quad (1.28)$$

- в случае усеченной гауссианы, когда $R_p < 3\Delta R_p$,

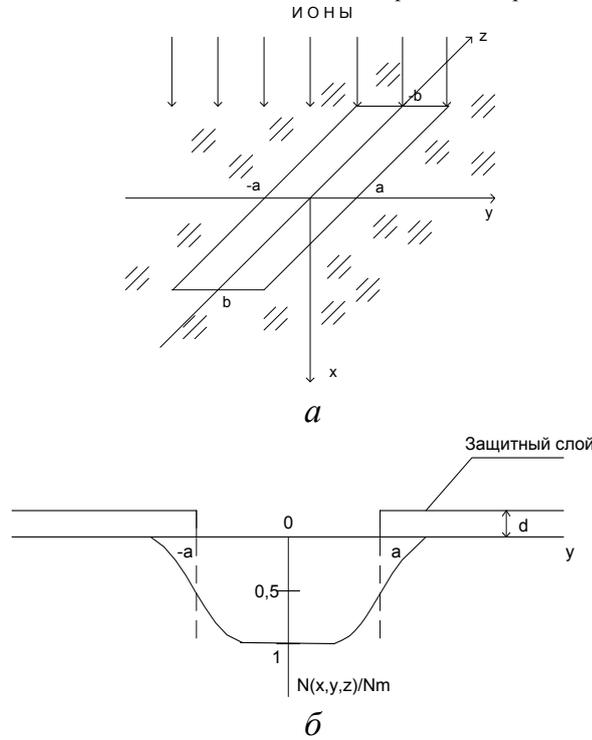


Рис. 1.24. Образование боковых профилей распределения нормально имплантированной примеси:

- a – прямоугольное окно размером $2a \cdot 2b$ в защитной маске;
- b – нормированное распределение имплантированной примеси под края защитной маски в сечении xOy

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Delta R \left(1 + \operatorname{erf} \frac{R_p \cos \theta}{\sqrt{2}\Delta R}\right)} \cdot e^{-\frac{(x-R_p \cos \theta)^2}{2\Delta R^2}} , \quad (1.29)$$

где $\Delta R^2 = \Delta R_p^2 \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \Delta R_{\perp}^2 \sin^2 \theta$.

Если исходная подложка легирована примесью противоположного типа с концентрацией $N_{исх}$, то возможно формирование одного или двух р–n-переходов, глубины залегания которых находятся из условия $N(x_{j1,2}) - N_{исх} = 0$.

Для случая неусеченной гауссианы при наклонной имплантации глубины залегания р–n-переходов рассчитываются по формуле

$$x_{j1,2} = R_p \cos \theta \pm \Delta R \sqrt{2 \ln \frac{Q}{\sqrt{2\pi} \Delta R N_{исх}}} .$$

При наклонной имплантации вблизи края защитной маски толщиной d ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$) в зависимости от ориентации пучка ионов и его угла отклонения от нормали могут быть два случая: имплантация под край защитной маски (рис. 1.25а) и имплантация с образованием теневого участка у края защитной маски (рис. 1.25б).

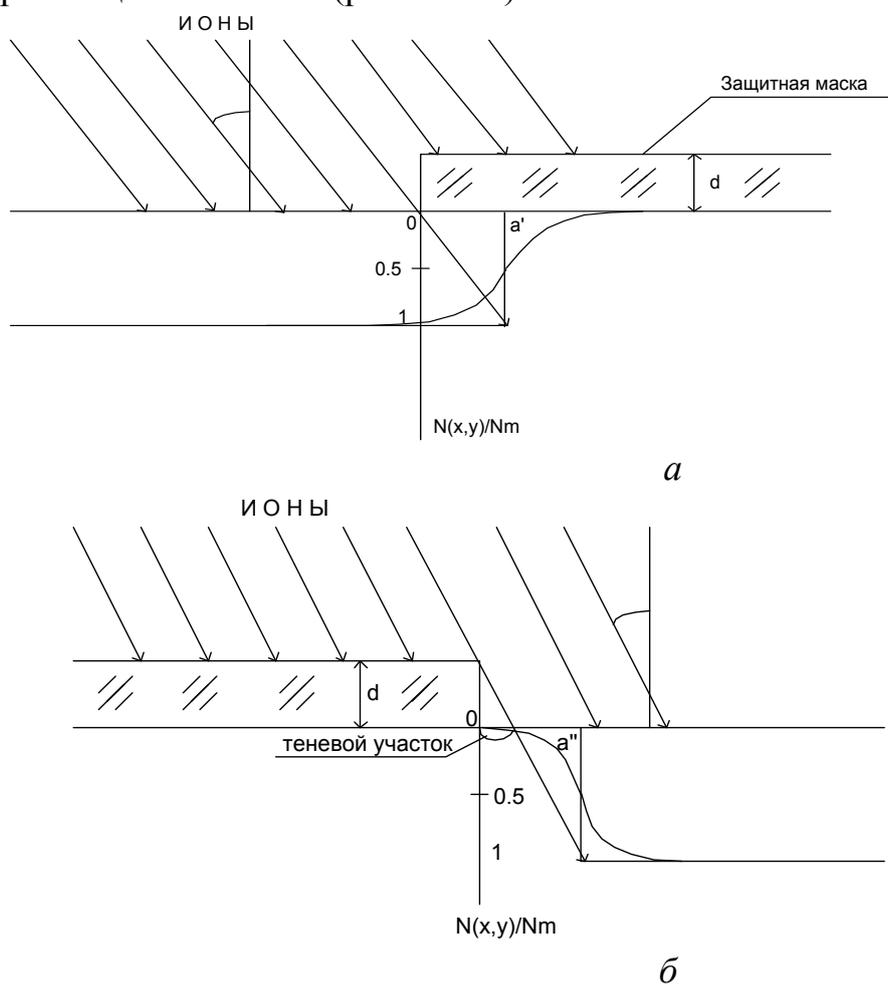


Рис. 1.25. Формирование нормированных боковых профилей распределения наклонно-имплантированных примесей:

а – имплантация под край защитной маски;

б – имплантация с образованием теневого участка у края защитной маски

В обоих случаях при наклонной имплантации под углом θ относительно нормали к поверхности распределение ионно-имплантированных

примесей по глубине $N(x)$ описывается неусеченной или усеченной гауссианами.

На заданной глубине x перераспределение ионно-имплантированных примесей за счет бокового рассеяния будет описываться по модели диффузии в неограниченное тело из полубесконечного пространства:

– при имплантации под край защитной маски

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{2} \operatorname{erfc} \frac{y - a'}{\sqrt{2\Delta R'_\perp}} ; \quad (1.30)$$

– при имплантации с образованием теневого участка у края защитной маски

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{2} \operatorname{erfc} \frac{a'' - y}{\sqrt{2\Delta R'_\perp}} = \frac{N(x)}{2} (2 - \operatorname{erfc} \frac{y - a''}{\sqrt{2\Delta R'_\perp}}). \quad (1.31)$$

В формулах (1.30) и (1.31) из геометрических соображений

$$a' = x \cdot \operatorname{tg} \theta; \quad a'' = (x + d) \operatorname{tg} \theta.$$

В случае легирования подложки с противоположным типом проводимости и исходной концентрацией примеси N_{ucx} из условия $N(x_{j1,2}, y) = N_{ucx}$ можно найти глубины залегания $x_{j1,2}(y)$ сформированных р–п-переходов.

При наклонной имплантации через щель в защитной маске (рис. 1.26) под углом θ относительно нормали к поверхности у правого края щели внедрение ионов происходит под защитный слой, а у левого края щели образуется теньевая область.

Учитывая результаты, полученные при моделировании локальной имплантации, можно построить распределение примесей с учетом бокового рассеяния ионов, наклонно имплантированных через щель в защитной маске размером $2a$:

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{a' - y}{\sqrt{2\Delta R'_\perp}} - \operatorname{erfc} \frac{a'' - y}{\sqrt{2\Delta R'_\perp}} \right], \quad (1.32)$$

где $a' = -a + (d + x) \operatorname{tg} \theta$; $a'' = a + x \operatorname{tg} \theta$.

В случае легирования подложки с противоположным типом проводимости и исходной концентрацией примеси N_{ucx} из условия $N(x_{j1,2}, y) = N_{ucx}$ глубины залегания $x_{j1,2}(y)$ сформированных р–п-переходов можно найти решением трансцендентного уравнения

$$\frac{Q}{2\sqrt{\frac{\pi}{2}\Delta R} \left(1 + \operatorname{erf} \frac{R_p \cos \theta}{\sqrt{2\Delta R}} \right)} \cdot e^{\frac{(x_{j1,2}(y) - R_p \cos \theta)^2}{2\Delta R^2}} \left[\operatorname{erfc} \frac{a'(x_{j1,2}(y)) - y}{\sqrt{2\Delta R'_\perp}} - \operatorname{erfc} \frac{a''(x_{j1,2}(y)) - y}{\sqrt{2\Delta R'_\perp}} \right] = N_{ucx}. \quad (1.33)$$

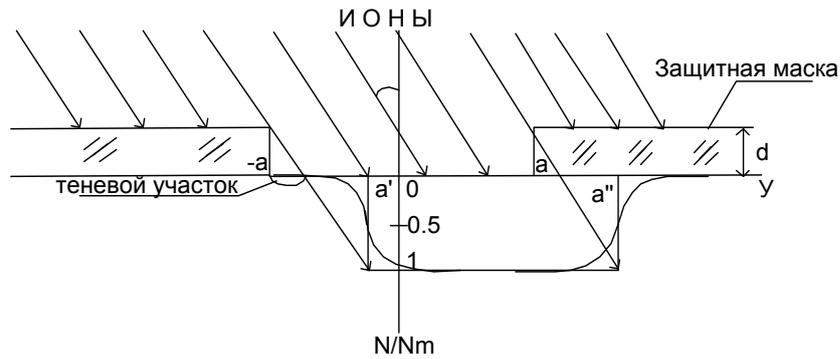


Рис. 1.26. Формирование нормированных профилей распределения примесей при наклонной имплантации через щель шириной $2a$ в защитной маске

1.3.7. Диффузионное перераспределение ионно-имплантированных примесей

Для полуограниченного кристалла особое значение во время диффузионного перераспределения имеют условия на границе, которые определяют вид решения второго уравнения Фика.

На практике в ряде случаев условия на поверхности полупроводниковой подложки могут быть сведены к двум предельным вариантам: отражающей границе или связывающей границе.

При диффузии из ионно-имплантированного слоя с начальным распределением $N(\xi, 0)$ в полуограниченной полупроводниковой подложке с отражающей границей поток J примеси через нее отсутствует в течение всего процесса диффузии. Согласно первому уравнению Фика

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x}, \quad \text{откуда} \quad \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad (1.34)$$

где C – концентрация примеси; D – коэффициент диффузии при данной температуре; t – время диффузии.

Распределение примеси в этом случае может быть представлено в виде

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} N(\xi, 0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} + e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] d\xi, \quad (1.35)$$

где $N(\xi, 0)$ – начальное распределение ионно-имплантированной примеси.

Если же граница является связывающей, концентрация примеси на ней в течение всего процесса диффузии равна нулю, т. е. $C(0, t) = 0$, то распределение примеси имеет вид

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} N(\xi, 0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} - e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] d\xi. \quad (1.36)$$

При малых временах диффузии из ионно-имплантированного слоя, когда диффузионная длина \sqrt{Dt} сравнима со среднеквадратичным отклонением ΔR_p , форма исходного профиля оказывает влияние на конечное распре-

деление, и расчет примесного профиля после диффузии проводится по приведенным выше формулам с использованием методов численного интегрирования.

Если начальное распределение может быть описано неусеченной гауссианой, распределение примеси после диффузионной разгонки описывается выражением

$$C(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p \sqrt{1 + \frac{2Dt}{\Delta R_p^2}}} \left\{ e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \left[1 + \operatorname{erf} \frac{\frac{R_p \sqrt{4Dt}}{\sqrt{2\Delta R_p}} + \frac{x\sqrt{2\Delta R_p}}{\sqrt{4Dt}}}{\sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \right] \pm e^{-\frac{(x+R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \left[1 + \operatorname{erf} \frac{\frac{R_p \sqrt{4Dt}}{\sqrt{2\Delta R_p}} - \frac{x\sqrt{2\Delta R_p}}{\sqrt{4Dt}}}{\sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \right] \right\}, \quad (1.37)$$

где знак «+» соответствует условию отражающей границы, а знак «-» – условию связывающей границы.

Если имплантация проводится в подложку с противоположным типом проводимости по отношению к типу легирующей примеси, то возможно возникновение одного или двух р–n-переходов. В данной модели аналитическое выражение для глубин залегания р–n-переходов отсутствует, поэтому величины x_{j1} и/или x_{j2} определяются как точки, где соответственно $N_i \leq 0$ и $N_{i+1} \geq 0$ и/или $N_i \geq 0$ и $N_{i+1} \leq 0$. Тогда $x_{j1,2} = (x_i + x_{i+1})/2$.

При низких дозах имплантации $Q < 100$ мкКл/см² диффузия примесей из ионно-имплантированного слоя идет как диффузия из ограниченного источника, и распределение концентрации $N(x, t)$ можно оценить с помощью комбинированного распределения

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi} \sqrt{2\Delta R_p^2 + Dt}} \cdot e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2(\Delta R_p^2 + 2Dt)}}. \quad (1.38)$$

Это распределение при больших временах разгонки (т.е. $(R_p, \Delta R_p) \ll \sqrt{Dt}$), когда определяющим является не форма профиля, а доза легирования, переходит в распределение при диффузии из бесконечно тонкого слоя с отражающей границей

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (1.39)$$

При малых временах разгонки, когда $(R_p, \Delta R_p)$ сравнимы с \sqrt{Dt} , комбинированное распределение переходит в неусеченную гауссиану

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \cdot e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}}. \quad (1.40)$$

Если подложка легирована исходной примесью противоположного типа с концентрацией N_{ucx} , то возможно возникновение одного или двух р–п-переходов, глубины залегания которых находятся из условия $N(x_{j1,2}) - N_{ucx} = 0$:

$$\frac{Q}{\sqrt{\pi} \sqrt{2\Delta R_p^2 + Dt}} \cdot e^{-\frac{(x_{j1,2} - R_p)^2}{2(\Delta R_p^2 + 2Dt)}} - N_{ucx} = 0,$$

$$x_{j1,2} = R_p \pm \sqrt{2(\Delta R_p^2 + 2Dt) \ln \frac{Q}{\sqrt{\pi} \sqrt{2\Delta R_p^2 + Dt} N_{ucx}}}.$$

1.4. Математические модели расчета электрофизических параметров полупроводниковых структур

В основе численного моделирования электрофизических параметров полупроводниковых приборов лежит решение системы уравнений в частных производных, описывающей статическое и динамическое поведение носителей в полупроводнике под влиянием внешних полей. Часть уравнений, входящих в эту базовую систему, может быть получена из уравнений Максвелла, а уравнения переноса – путем последовательного вычисления моментов классического кинетического уравнения Больцмана.

Из уравнений Максвелла получаются уравнение Пуассона и уравнения непрерывности:

$$\begin{cases} \nabla(\varepsilon \cdot \nabla \psi) = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-), \\ \nabla \vec{J}_n = q(R - G) + q \frac{\partial n}{\partial t}, \\ -\nabla \vec{J}_p = q(R - G) + q \frac{\partial p}{\partial t}, \end{cases} \quad (1.41)$$

из уравнения Больцмана – диффузионно-дрейфовая модель:

$$\begin{cases} \vec{J}_n = -q\mu_n n \cdot \nabla \varphi_n, \\ \vec{J}_p = -q\mu_p p \cdot \nabla \varphi_p, \end{cases} \quad (1.42)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость; ψ – электростатический потенциал; q – заряд электрона; n, p – концентрация электронов и дырок соответственно; N_D^+ и N_A^- – концентрация ионизированных атомов доноров и акцепторов соответственно; J_n и J_p – плотность электронного и дырочного тока соответственно; $(R - G)$ – суммарный вклад процессов генерации-рекомбинации носителей; μ_n, μ_p – подвижности электронов и дырок соответственно; φ_n и φ_p – квазиуровни Ферми для электронов и дырок соответственно.

В качестве граничных условий для фундаментальной системы уравнений используются напряжения, токи, заряды, температуры и т.д. на электрических и термических контактах моделируемого прибора.

Обычно фундаментальная система уравнений решается методом сеток с использованием алгоритма Ньютона при изменяемых граничных условиях, при этом используются модели физических процессов в структуре, таких, как, например, подвижность носителей, ширина запрещенной зоны, интенсивность рекомбинации носителей. Для большинства известных физических процессов в настоящее время имеются полуэмпирические модели, обладающие различной точностью и областью применения. Конкретные модели физических процессов выбираются, исходя из специфики конструкции и режимов работы прибора.

Подвижность носителей заряда $\mu(C)$ является функцией концентрации и в общем случае не может быть принята постоянной по глубине слоя. Подвижность носителей в кремнии является сложной функцией различных механизмов рассеяния. На практике часто используется феноменологическая модель, учитывающая рассеяние носителей на колебаниях кристаллической решетки:

$$\mu_L(T) = A \cdot T^{-g}, \quad (1.43)$$

– для электронов: $A_n = 7,12 \cdot 10^8 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); g_n = 2,3;$

– для дырок: $A_p = 1,35 \cdot 10^8 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); g_p = 2,2.$

Данная температурная зависимость не учитывает электронно-дырочные столкновения, которые очень важны в слабо легированных областях, где имеется сильная инжекция:

$$\mu_{LT}(C, T) = \mu_L(T) \cdot a + \mu_{\min}(1 - a), \quad (1.44)$$

где C – полная концентрация акцепторов C_A и доноров C_D :

$$C = 0,67(C_D^+ + C_A^-) + 0,33(n + p); \quad a = \frac{1}{1 + (T/300)^b (C/C_0)^c}; \quad (1.45)$$

– для электронов: $\mu_{\min n} = 53,24 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); b_n = -3,8; c_n = 0,73;$
 $C_{0n} = 1,072 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3};$

– для дырок: $\mu_{\min p} = 48,7 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); b_p = -3,7; c_p = 0,7;$
 $C_{0p} = 1,606 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}.$

2. ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ В САПР TCAD

2.1. Работа в среде приборно-технологической САПР TCAD

2.1.1. Состав приборно-технологической САПР TCAD

Приборно-технологическая САПР TCAD ориентирована на проектирование элементной базы СБИС и позволяет осуществить сквозное моделирование как дискретных элементов интегральных полупроводниковых структур, так и рассчитать полный набор статических, динамических и частотных характеристик активных и пассивных элементов СБИС в одно-, двух- и трехмерном приближении.

САПР ISE TCAD (Sentaurus) предназначен для пошагового моделирования процесса разработки и оптимизации полупроводниковой технологии или устройств микро- и нанoeлектроники. Моделирование основано на фундаментальных уравнениях физики, включая дифференциальные, такие как диффузионная и транспортная модели для дискретной геометрии. В программе охватываются два главных направления: моделирование технологии и имитация работы виртуального прибора.

Основные пакеты:

GENESISe – графический пользовательский интерфейс для дизайна, организации и запуска процессов имитации. Это интегральная среда разработки.

LIGAMENT – среда для разработки настроек и исполнения имитации высокого уровня абстракции. Включает редактор слоев.

DIOS, FLOOPS, DEVISE, PROSIT – программы-модули для физико-технологического моделирования полупроводниковых приборов.

FLOOPS – наиболее мощный пакет, позволяет производить калибровку параметров модели под используемую технологию. Обладает большей экспериментальной базой по сравнению с **DIOS**.

MDRAW, MESH, NOFFSET3D – программы оптимизации расчетной сетки, служат для перехода к приборному моделированию. Задача пакетов – сократить время моделирования.

ISEXTRACT – модуль для извлечения из виртуальных моделей приборов Space-параметров.

EMLAB – модуль для моделирования электромагнитных явлений, проведения микроволнового анализа.

DESSIS – программный модуль, который позволяет моделировать электрические, тепловые, оптические параметры приборов, позволяет моделировать полупроводниковые лазеры на основе соединений $A^{III}B^V$, хорошо описывает физику субмикронных приборов и гетероструктуры, а также мощных приборов. Позволяет учитывать квантовые эффекты, радиационное и механическое воздействие, проводить шумовой и флуктуационный анализ.

TECPLOT, INSPECT, MEASURE – программы для визуального отображения результатов моделирования и расчета параметров.

Весь процесс моделирования проводится в среде-оболочке **GENESISe**. Чтобы запустить **GENESISe**, необходимо сделать двойной клик мышкой по соответствующему ярлыку на рабочем столе, либо выполнить скрипт:

\$ISEROOT/bin/GENESISe. Откроется главное окно **GENESISe** (рис. 2.1).

Менеджер проектов содержит список разрабатываемых проектов. С помощью двойного клика мышки можно открыть ранее созданный проект. Для создания нового проекта нужно на панели меню выбрать:

file->new->new project или на панели инструментов кликнуть мышкой по значку . После этого появится пустое окно **GENESISe** (рис. 2.2).

В рабочее пространство нового проекта необходимо добавить программы моделирования, командные файлы, значения переменных.

Для добавления программных модулей в проект нужно правой кнопкой мыши щелкнуть на области пиктограмм программных модулей рабочей области, т.е. надпись **No Tools** на рис. 2.2.

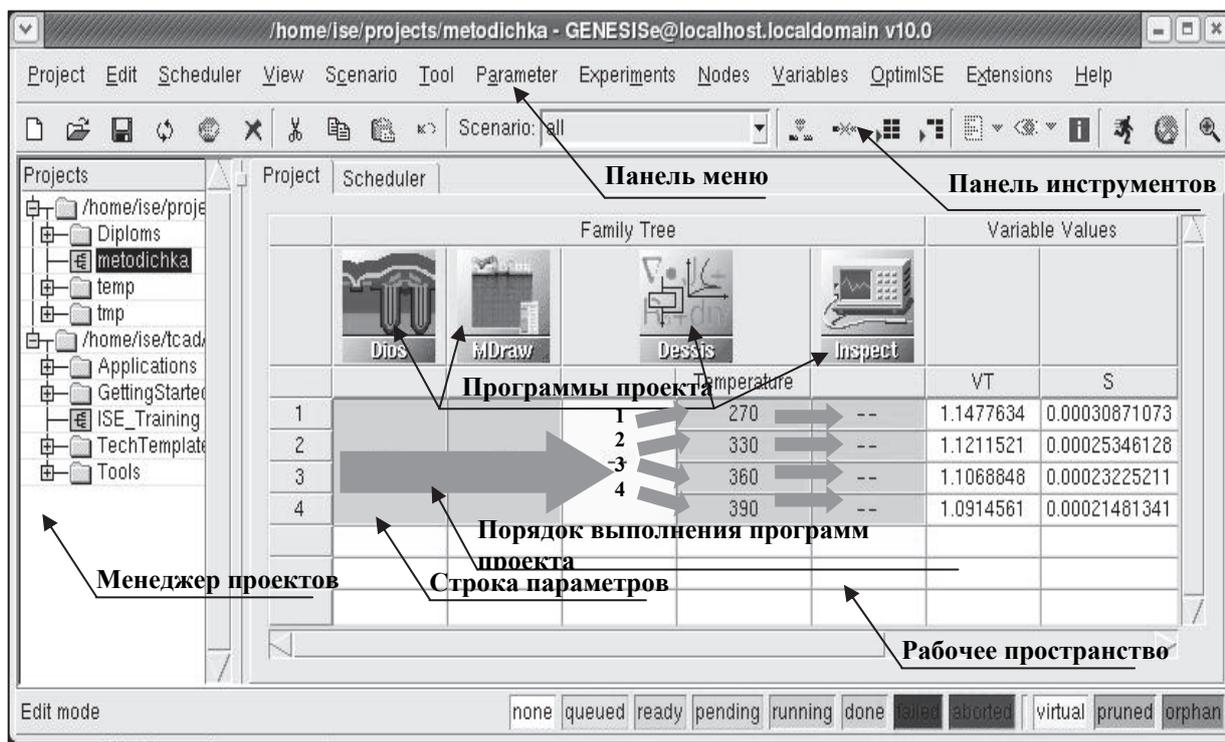


Рис. 2.1. Главное окно программы **GENESISe**

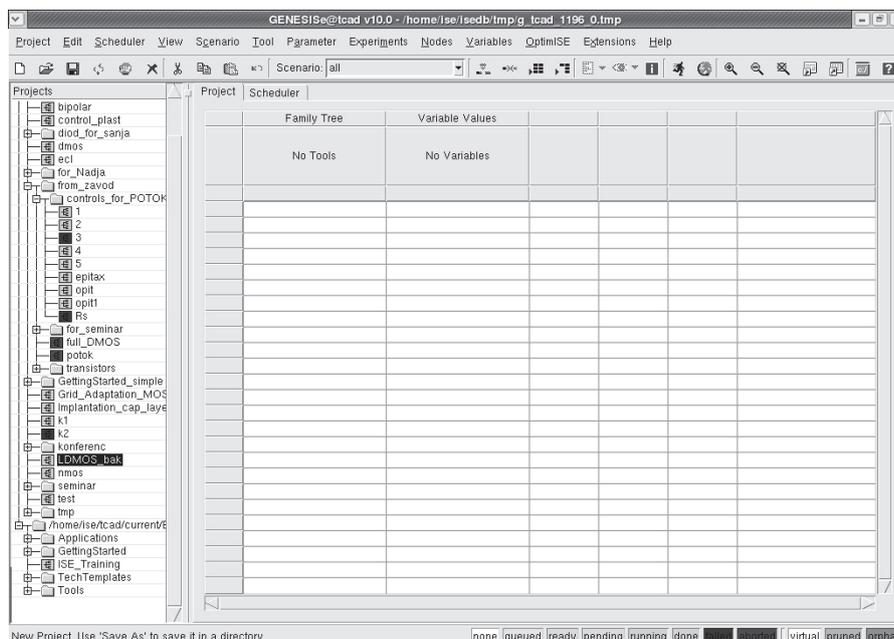


Рис. 2.2. Окно нового проекта

В появившемся меню нужно выбрать пункт **Add** и в запустившемся диалоговом блоке вписать название программы (рис. 2.3) либо нажать на кнопку **Tools** и выбрать из пиктограмм (рис. 2.4).

В запросе об используемом сценарии нужно выбрать параметр **default**. Далее для дальнейшего добавления модулей к проекту нужно кликнуть правой кнопкой мыши на пиктограмме уже имеющегося модуля и повторить вышеописанные действия. При этом в зависимости от положения переключателя **After Selected Tool** или **Before Selected Tool** в диалоге выбора программы (рис. 2.3), новый модуль будет добавлен соответственно после или до выбранного программного модуля. Для редактирования командного файла какого-либо программного модуля (изначально он пуст) нужно щелкнуть правой кнопкой мыши на соответствующей иконке нужного модуля, например, **DESSIS** и в появившемся меню выбрать **Edit Input** → **Command**.

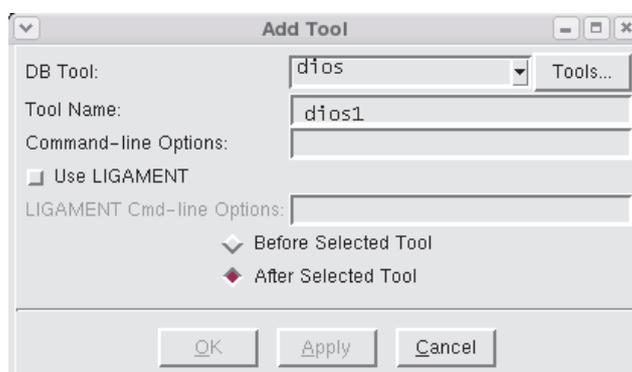


Рис. 2.3. Добавление программного модуля

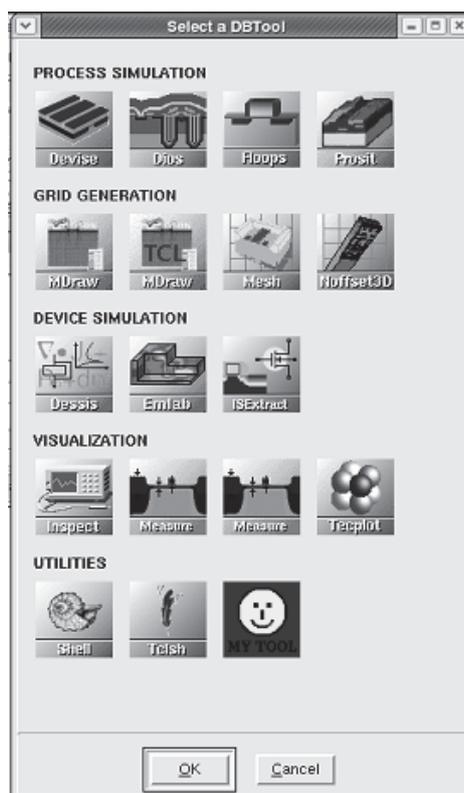


Рис. 2.4. Окно выбора программных модулей среды CAPE ISE TCAD

В результате запустится текстовый редактор **ISEDIT**, с помощью которого можно редактировать командный файл.

Такие программы как **DIOS**, **MDRAW**, **INSPECT** могут выполняться в двух режимах: интерактивно с графическим окном или в фоновом режиме. Для наблюдения процесса моделирования рекомендуется установить флажок на значении *start in interactive mode*. Вызов окна выбора режима (рис. 2.5) выполняется следующим способом: щелкнуть правой кнопкой мыши на соответствующей иконке нужного модуля, например, **DIOS**, и в появившемся меню после выбора *Edit Input* → *Preferences* появляется диалоговое окно (рис. 2.5).

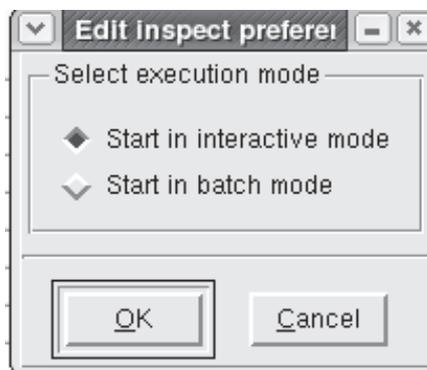


Рис. 2.5. Выбор режима запуска программы

Часто бывает необходимо провести расчеты при условии изменения каких-либо параметров. Например, работа транзистора в разных температурных условиях, с разной шириной подзатворного окисла, или даже можно варьировать технологические параметры для отработки технологии (изменяем длину канала с целью получить необходимое значение напряжения пробоя).

Для добавления параметров к какому-либо программному модулю необходимо щелкнуть правой кнопкой мыши на ячейке строки параметров под соответствующим программным модулем. В вызванном меню нужно выбрать *Add*, затем в диалоговом окне указать имя параметра и значение по умолчанию (рис. 2.6). Для добавления значений параметра выполнить аналогичные действия, но выбрать пункт *Add Value*. Далее указать, начиная с какого значения, с каким шагом и сколько добавлять значений с учетом начального (рис. 2.7).

Параметры используются для передачи данных в соответствующий программный модуль. При использовании параметров, задание которых в командных файлах выглядит как *@имя_параметра@*, в процессе выполнения проекта создается необходимое количество командных файлов, в которых вместо параметра подставлено соответствующее значение, и программный модуль будет запускаться столько раз, сколько значений у параметра. Это и есть ветвление проекта (рис. 2.1). Внешне запуск расчета каждого командного файла выглядит как запуск узла проекта с нужным значением параметра.

Изменить значение параметра какого-либо конкретного узла можно, сделав двойной клик левой кнопкой мыши на данном узле. В результате появится окно (рис. 2.8), в котором можно изменить значение параметра.

Чтобы запустить проект на выполнение необходимо выделить нужные узлы клавишами *Shift* или *Control*, кликнуть мышкой на значок  (*run*), который находится на панели инструментов. Такой же значок можно найти и в меню. Запускается проект и комбинацией клавиш Ctrl+R. Появится диалоговое окно запуска проекта (рис. 2.9).

По умолчанию расчет будет вестись на данном локальном компьютере (*Queue: local default*), хотя при наличии кластера расчет можно провести на нем, сократив тем самым время расчета. Если узлы не выделены, то будет запущен расчет всего проекта. По умолчанию будут рассчитываться узлы, которые не были рассчитаны (*remaining*). Можно пересчитать весь проект целиком (*all*). Для прерывания расчета используется кнопка  (*Abort*).

Статус узла (рассчитан, прерван, ошибка, не рассчитан, виртуальный и т.д.) обозначается цветом:

none queued ready pending running done failed aborted virtual pruned orphan

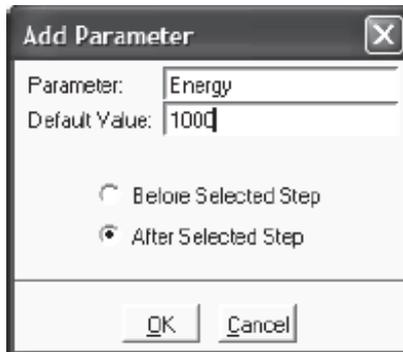


Рис. 2.6. Добавление параметров

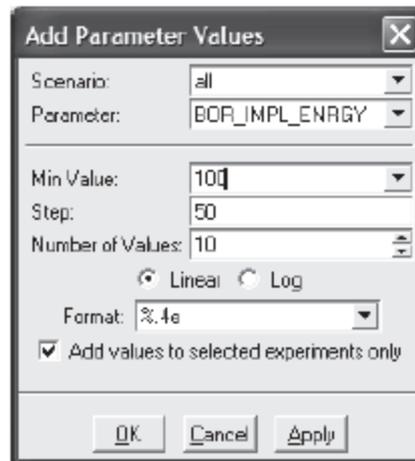


Рис. 2.7. Добавление значений параметров



Рис. 2.8. Окно статуса узла



Рис. 2.9. Окно запуска расчета узлов

Результаты вычисления можно вывести в окно **GENESISe** для дальнейшего анализа. Для этого необходимо задать переменные: правой кнопкой мыши щелкнуть на области переменных, т. е. надпись *No Variables* (рис. 2.2). В появившемся меню выбрать пункт *Add* и в запущившемся диалоговом блоке вписать название переменной, здесь же можно и указать значение переменной по умолчанию (рис. 2.10).

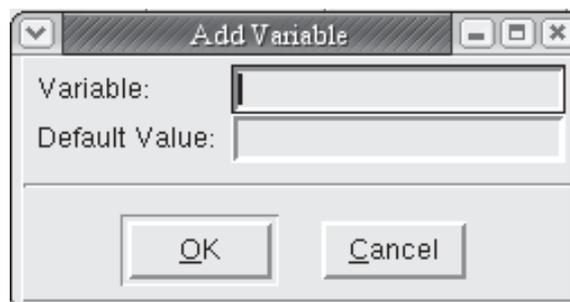


Рис. 2.10. Окно ввода переменных

2.1.2. Визуализация результатов численных экспериментов

Если щелкнуть правой кнопкой мыши по какому-либо узлу, появится контекстное меню, наиболее часто используемые пункты которого: **run** (запустить расчет), **abort** (прервать выполнение), **view output** (просмотреть сообщения программы о ходе расчета), **visualize** – в подменю можно выбрать: ***.dat files (TECPLOT)** – визуальное представление результатов расчетов в программе **TECPLOT**; ***.plt files (INSPECT)** – просмотр данных в виде графиков в программе **INSPECT** (рис. 2.11).

Программа **INSPECT** служит для построения и анализа графиков. Имеется возможность управления процессом построения и анализа графиков с помощью командного файла. Графическое окно программы **INSPECT** показано на рис. 2.12.

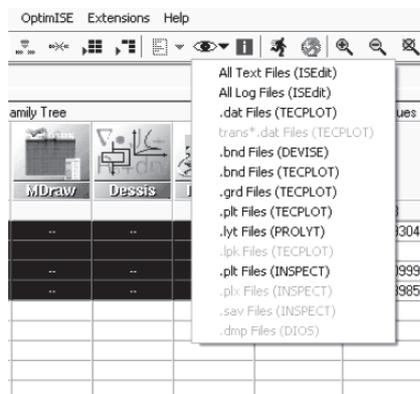


Рис. 2.11. Меню **visualize** для выделенного узла

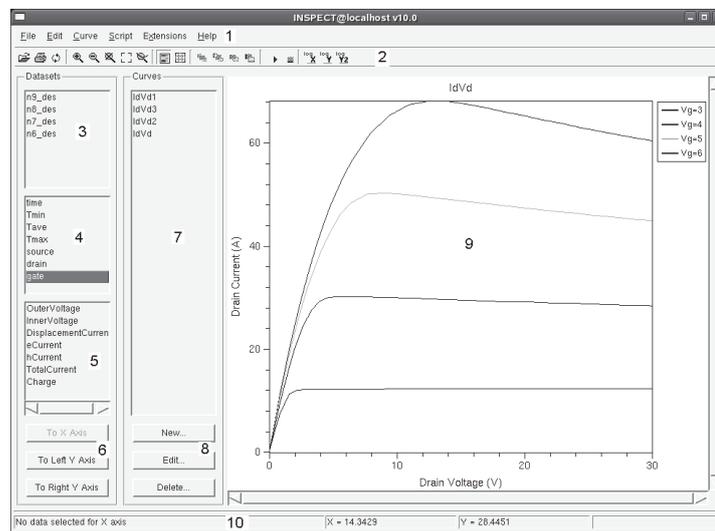


Рис. 2.12. Графическое окно программы **INSPECT**:

- 1 – строка меню; 2 – строка кнопок управления; 3 – список загруженных файлов;
- 4 – область электродов, термодов, времени и т.п.; 5 – область параметров;
- 6 – кнопки выбора оси; 7 – список построенных графиков;
- 8 – кнопки создания и редактирования графиков; 9 – область графиков;
- 10 – строка состояния

Программа **TECPLOT** предназначена для визуального представления результатов расчетов, например, распределений концентрации примесей, плотностей токов, подвижностей носителей и т.д. **TECPLOT** может работать с одно-, двух- и трехмерными виртуальными структурами. Окно программы **TECPLOT** изображено на рисунке 2.13.

При загрузке файлов структуры необходимо учитывать, что **TECPLOT** использует пару файлов с расширениями *.dat и *.grd.

Наиболее часто используемые пункты строки меню:

File → **Load** – загрузка данных (рис. 2.14);

View → **Maximize Workspace** – увеличение области просмотра на все окно;

Axis – настройка внешнего вида координатных осей (один из пунктов – на рисунке 2.15);

Plot → **Contour** – изменение количества изолиний, режима цветового градиента, меток изолиний и т.д. для выбранного параметра (рис. 2.16);

Slicer – построение сечений;

Data → **Probe At** – отображение значений всех параметров в заданной точке (рис. 2.17).

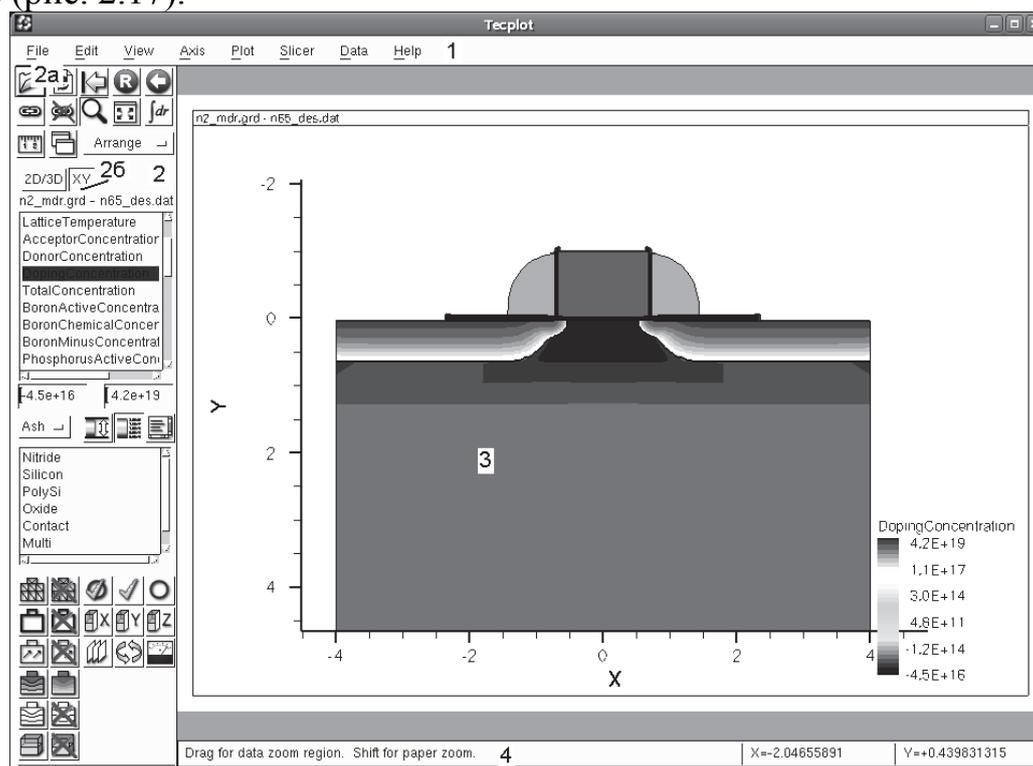


Рис. 2.13. Окно программы **TECPLOT**:

- 1 – строка меню; 2 – панель управления; 3 – область просмотра;
- 4 – строка состояния

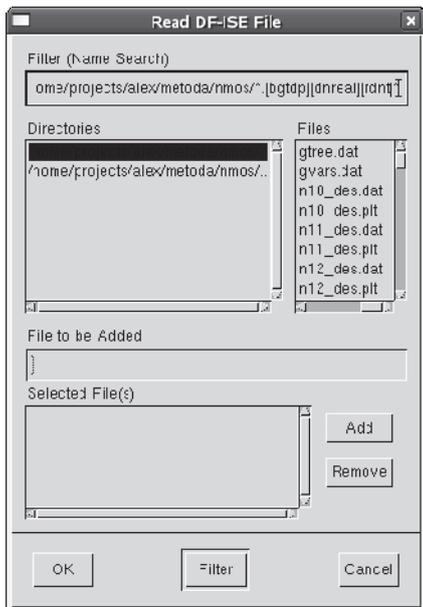


Рис. 2.14. Окно загрузки файлов в TЕСPLOT

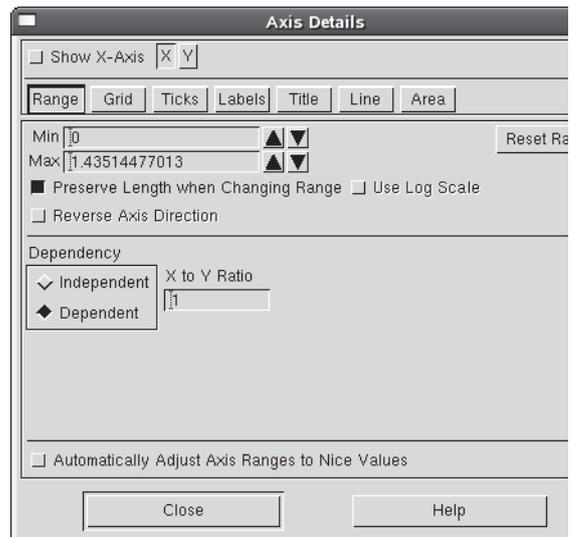


Рис. 2.15. Окно настройки атрибутов координатных осей

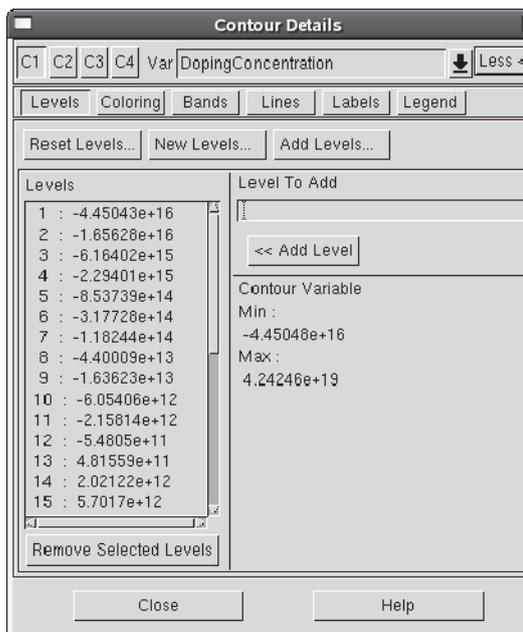


Рис. 2.16. Окно настройки изолиний, меток на них, цветового градиента и других установок

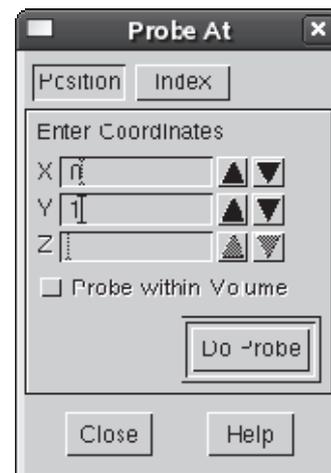


Рис. 2.17. Окно задания координат точки для получения значений всех параметров в ней

Панель управления можно разделить на две части: кнопки управления, используемые в любом режиме просмотра, и область, вид которой зависит от режима просмотра – одномерный или многомерный.

Основные кнопки управления (рис. 2.13, 2а):



– **Load** – загрузка данных;



– **Reset** – приведение к начальному виду;

-  – **Redraw** – перерисовка изображения;
-  – **Last View** – предыдущий вид;
-  – **Zoom** – увеличение изображения;
-  – **Measure** – измерение расстояния между двумя и более точками.

Ниже кнопок управления находится переключатель режима просмотра (рис. 2.13, 2б): одномерный или многомерный (двух- или трехмерный). Одномерный режим используется для просмотра графиков. Далее рассматривается только двумерный режим просмотра (рис. 2.18).

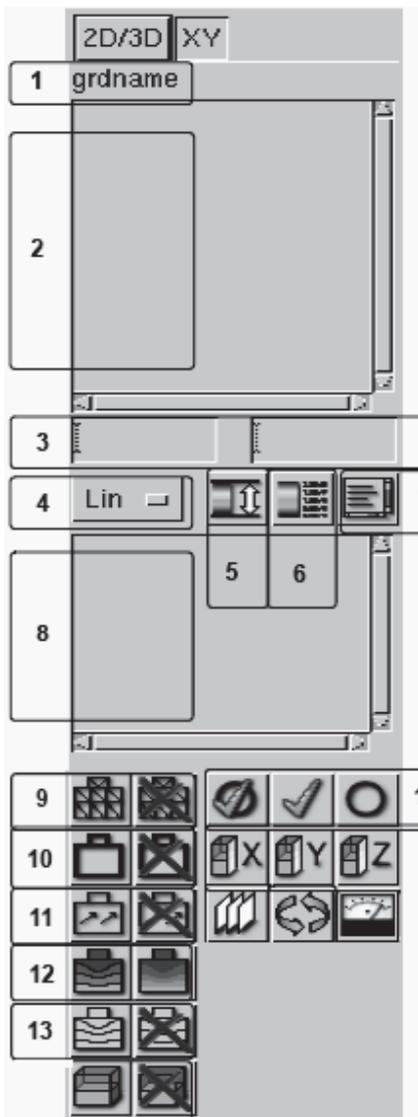


Рис. 2.18. Панель управления программы **TECPLOT** в многомерном режиме

- 1 – имена используемых файлов структуры;
- 2 – список параметров просмотра, в нем отображаются те величины, распределения которых можно просмотреть для данной структуры (например, распределение примесей);
- 3 – поля минимального и максимального значений выбранного параметра;
- 4 – кнопка переключения режима интерполяции при отображении (линейная, логарифмическая, с использованием гиперболического арксинуса);
- 5 – кнопка выбора различных режимов вычисления минимального и максимального значения параметров;
- 6 – включение/выключение отображения цветовой шкалы значений параметра;
- 7 – переключение режимов отображения списка материалов/областей;
- 8 – список материалов либо областей;
- 9 – включение/выключение отображения сетки выбранного материала/области;
- 10 – включение/выключение отображения границ выбранного материала/области;
- 11 – то же для поля векторов;
- 12 – включение/выключение отображения изолиний при включенном цветовом градиенте;
- 13 – включение/выключение отображения изолиний при выключенном цветовом градиенте;
- 14 – кнопки режима отображения выбранного материала/области (слева направо): отображение только выбранного материала, отображение выбранного материала, выключение отображения выбранного материала

После загрузки данных в области просмотра отображается исследуемая структура. Для увеличения какой-либо ее области нужно нажать кнопку **Zoom** и выделить левой кнопкой мыши рассматриваемую прямоугольную область. Для перемещения структуры нужно, нажав и удерживая правую кнопку мыши, перемещать курсор в нужную сторону. Для измерения расстояния между двумя точками, а также измерения периметра и т.п. нужно нажать кнопку **Measure**, щелчком левой кнопки мыши задать начальную точку, далее, указывая щелчком левой кнопки мыши узловые точки, провести всю линию. Конечная точка обозначается двойным щелчком мыши (рис. 2.19). Для включения/выключения отображения сетки на каком-либо материале или области нужно сначала выбрать материал/область, затем нажать кнопку включения/выключения сетки. Аналогично производится включение/выключение отображения границ, изолиний и т.п.

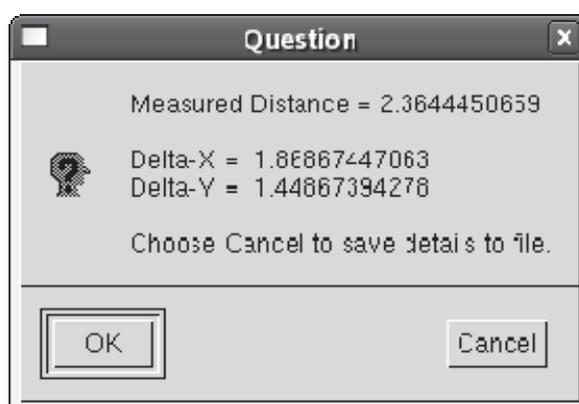


Рис. 2.19. Результат измерения расстояния в программе TESPLOT

2.2. Моделирование технологии элементной базы микроэлектроники и твердотельной электроники в специализированном пакете TCAD

2.2.1. Программные модули моделирования технологических процессов

Программа **DIOS** предназначена для двумерного моделирования технологических процессов микро- и нанoeлектроники. **DIOS** позволяет описать такие процессы как травление, осаждение, эпитаксия, ионная имплантация, диффузия, окисление, маскирование.

Управление ходом моделирования осуществляется с помощью командного файла, в котором описывается весь технологический маршрут.

Командный файл имеет следующую структуру:

Title(...) – заголовок

substrate(...) / load(...) – создание новой структуры или загрузка уже имеющейся

`replace(control(...))` – описание команд управления графическим выводом, сеткой описание основных технологических процессов

`Implant(...)` – имплантация

`Diffuse(...)` – диффузия

`Mask(...)` – маскирование

`Etch(...)` – травление

`Deposit(...)` – осаждение

`save(...)` – сохранение результатов моделирования

`end` – конец командного файла

Комментарий выделяется подстановкой `#` или `!` перед новой строкой.

Основные параметры используемых команд:

`TITLE(«simple nmos example»)` – команда всегда расположена первой в командном файле и используется для инициализации проекта.

`GRID(X(x1, x2), Y(y1, y2), nx=number)` – команда определяет прямоугольную область моделирования. Ось X направлена слева направо, ось Y направлена снизу вверх. Параметр `nx` задает количество ячеек начальной расчетной сетки. Можно использовать параметр `dx`, определяющий максимальный размер ячейки вдоль оси x. Так же используются аналогичные параметры `ny` и `dy`.

`LOAD(file='имя_файла')` – команда применяется для загрузки ранее смоделированной структуры.

`Replace(Control(MaxTri=level, RefineBoundary=level))` – критерий адаптации расчетной сетки, т. е. условий, под которые сетка будет адаптирована (например, под граничный материал, шаг градиента концентрации примеси, максимальную концентрацию примеси, p–n-переход и т. д.); *level* – номер, характеризующий размер элемента сетки.

`Substrate(...)` – команда используется для задания параметров подложки.

Например, `Substrate(Element=B, Concentration=5.0e15, Orientation = 100)` – кремневая подложка, легированная бором с концентрацией $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, с ориентацией (100).

`Mask(...)` – команда для моделирования технологического процесса нанесения материала. Наиболее часто использует в связке с травлением для процесса фотолитографии.

Примеры использования:

`Mask(Material=Re, Thickness=800.0nm, X(0.1, 0.3))` – нанесение фоторезиста толщиной 800 нм на интервале между координатами $x_1 = 0.1 \text{ мкм}$ и $x_2 = 0.3 \text{ мкм}$.

Mask(Material=Po, Element=P, Concentration=3e19, Thickness=180nm, XLeft=0.2, XRight=0.4) – осаждение поликремния, легированного фосфором.

IMPLant(...) – команда для моделирования процесса ионной имплантации. Может включать параметры:

Element – определение типа примеси, используемой для легирования;

ENergy – задание энергии имплантируемых ионов (по умолчанию в кэВ);

Dose – задание дозы имплантации (по умолчанию см^{-2} , для использования дозы в $\text{мкКл}/\text{см}^2$ используется выражение *number/1.6e-13*).

Tilt – установка угла наклона пучка ионов относительно перпендикуляра к поверхности подложки (по умолчанию 7 градусов);

ROTation – установка угла поворота подложки, например, для проведения HALO-имплантации;

FUNCTion – задание функции распределения имплантированных ионов:

Gauss – гауссиана (по умолчанию);

GK – гауссиана с нелинейным экспоненциальным хвостом;

PEarson – распределение Пирсон-4;

P4S – распределение Пирсон-4 с линейным экспоненциальным хвостом;

P4K – распределение Пирсон IV с нелинейным экспоненциальным хвостом;

LateralFunction – функция распределения концентрации имплантированных ионов в латеральном направлении;

CrystalTrim – распределение, рассчитанное по методу Монте-Карло.

Примеры использования:

Implant(Element=BF2, Dose=5.0e12, Energy=25.0kev, Tilt=7.0) – легирование ионами BF_2 с энергией 25 кэВ под углом 7 градусов и с дозой $5.0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, по умолчанию задано гауссовское распределение внедрённых ионов.

Implantation(Element=As, Dose=1.0e14, Energy=300, Tilt=0degree, Rotation=-90degree, Function=CrystalTrim, Particles=2000) – легирование ионами мышьяка с энергией 300 кэВ под углом 0 градусов и с дозой $1.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, задано распределение внедрённых ионов, рассчитываемое по методу Монте-Карло.

DIFFusion(...) – команда для моделирования всех высокотемпературных процессов, а именно, термического отжига, окисления, эпитаксиального наращивания, диффузии и др. Может включать следующие параметры:

TEmperature – задание температуры (по умолчанию в градусах Цельсия); возможно задание списка температур через заданные интервалы времени (t_1, t_2, \dots, t_n);

TempRate – задание скорости изменения температуры (в К/мин);

Time – задание времени проведения процесса (по умолчанию в минутах); возможно задание списка интервалов времени ($t_1, t_2, \dots, t(n-1)$);

ATMOsphere – описание среды, в которой проводится операция;

N2 – инертная (по умолчанию);

H2O – окисление во влажном кислороде;

O2 – окисление в сухом кислороде;

HCL – окисление с добавкой хлористого водорода;

EPI – эпитаксиальное наращивание.

Возможно использование потока газа-носителя и некоторых комбинаций компонент в различных процентных соотношениях;

Concentration – определение концентрации примеси в потоке газаносителя при моделировании диффузии из газовой фазы или в эпитаксиальном слое при моделировании эпитаксиального наращивания;

ELEMeNt – определение типа примеси при эпитаксиальном наращивании или диффузии;

GrowthRate – задание скорости наращивания эпитаксиального слоя (в нм/мин);

ModDiff – задание модели диффузии: **Equilibrium**, **PairDiffusion**, **LooselyCoupled**, **SemiCoupled**, **Conventional**. Возможно также задание моделей кластеризации бора и фосфора: **Si:(B:(ModClust=*name*))**, **Si:(P:(ModClust=*name*))**.

Примеры использования:

Diffusion(Temperature=1050, Time=10sec) – десятисекундный отжиг в инертной атмосфере при температуре 1050 °С.

Diffusion(Temperature=1000, Time=20.0min, Atmosphere=O2) – сухое термическое окисление при температуре 1000 °С в течение 20 минут.

Diffusion(Atmosphere=Epitaxy, Time=1.0, Temperature=1050, GrowthRate=1000.0, Element=Ge, Concentration=1.0e20) – эпитаксиальное наращивание SiGe-слоя с концентрацией $1,0 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ в течение 1 минуты при температуре 1050 °С со скоростью наращивания 1000 нм/мин.

DEPOsit(...) – моделирование процесса осаждения слоев, а именно, изотропного и анизотропного осаждения, планаризации, селективного осаждения и химико-механической полировки.

Примеры использования:

Deposit(Material=Po, Thickness=0.2um, Element=P, Conc=3.0e19) – осаждение слоя легированного фосфором поликремния толщиной 0,2 мкм с концентрацией $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

Deposit(Material=OX, DType=Fill, YFill=2.0um) – моделирование процесса полировки поверхности окисла.

Deposit(Material=Si, Selection=AllSiPo, THick=50nm, ELe=P, CONC=1E14) – моделирование селективного осаждения кремния толщиной 50 нм, легированного фосфором с концентрацией $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$; когда кристаллический кремний осаждается на кристаллический кремний и поликремний, то он автоматически осаждается и на все другие материалы.

Etching(...) – моделирование процесса травления, в частности, при фотолитографии. Может включать следующие параметры:

MATerial – материал, который будет травиться;

REmove – толщина стравливаемого слоя (по умолчанию в мкм);

STOP – указание границы раздела, при достижении которой на каком-либо участке поверхности травление останавливается;

Rate – задание типа (**ISOtropic** или **ANISOtropic**) и скорости травления (по умолчанию в нм/мин).

Пример использования:

Etch(Material=Ox, Time=5.0min, Rate(Iso=100.0nm/min)) – моделирование пятиминутного изотропного травления оксида со скоростью 100 нм/мин.

1D(...) – команда сохранения для использования в других программных пакетах в плоскостных срезах любых переменных **DIOS**, таких как профиль легирования, дислокации, области кластеризации, механические напряжения.

Пример использования:

1D(File=Channel, XSection(0.0), Spe(BTota, PTot), Fac=-1.0, Append=Off) – сохранение общей концентрации бора и фосфора как функции глубины в одномерном сечении, проходящем через координату $x=0$.

Save(...) – команда сохранения в файле конечной структуры, которая может быть загружена обратно в **DIOS** для продолжения моделирования, в **MDRAW** для создания входного файла, который используется в разработке устройства в **DESSIS** или для визуального просмотра в **TECPLOT**. В данной команде описывается расположение контактов.

Содержит чаще всего следующие параметры:

type – определение формата сохранения;

species – указание примесей распределения концентраций, которые будут включены в сохраняемую структуру;

contacts – задание контактных областей путем их перечисления с указанием названий контактов и координат любой точки в пределах материала

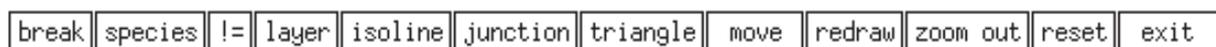
контакта. Для использования нижней границы подложки в качестве контакта вместо задания координат используется команда `location=bottom`.

Пример использования:

```
save(file='n@node@',          type=Mdraw,          compress=off
,synonyms(po=metal, al=metal)
  contacts( contact1(name='source', -0.3, 0.005)
            contact2(name='gate', 0.0, 0.05)
            contact3(name='drain', 0.3, 0.005)
            contact4(name='substrate', location=bottom) ) ) –
```

сохраняет файл в формате **MDRAW**. Название формируется в виде: `n@node@`, где `node` – номер узла. Не создается архив `*.gz` (по умолчанию все файлы упаковываются). Присваиваются имена контактам, и описывается их расположение.

Если программа **DIOS** была запущена в интерактивном (графическом) режиме, то откроется окно визуализации технологического процесса (рис. 2.20). Результат каждой технологической операции представляется в виде двухмерной цветной слоистой структуры (моделируемая структура с осями координат). Цвет определяет материал слоя, уровень примеси в слое, расположение p – n -перехода. Назначение каждого цвета отображается в таблице цветового обозначения. Внизу окна располагается панель кнопок управления:



Кнопки графического окна имеют следующее назначение (наиболее часто используемые):

break (go) – приостановить (продолжить) моделирование;

species – переключение типа примеси и режима отображения ее в окне;

layer – переключение между различными вариантами отображения слоев и границ раздела;

isoline – переключение между следующими режимами просмотра: типы материалов, распределение примесей, тип материалов с изоконцентрационными линиями;

junction – выбор одного из вариантов обозначения p – n -перехода: без обозначения, вдоль линий расчетной сетки или сглаженный;

triangle – вкл/выкл. отображения расчетной сетки;

redraw – перерисовка окна;

zoom out – возврат к прежнему масштабу структуры;

reset – сброс параметров отображения (установки по умолчанию);

exit – прерывание моделирования.

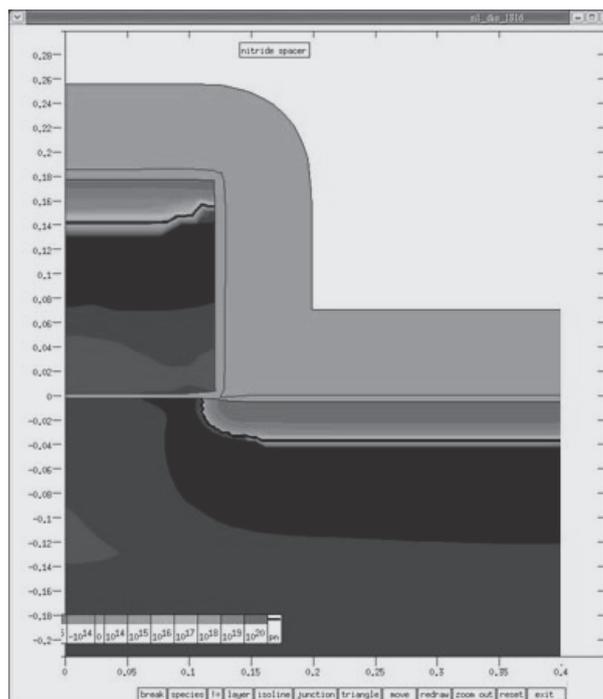


Рис. 2.20. Окно визуализации технологического процесса в модуле **DIOS**

При нажатии на кнопку *species* появляются дополнительные кнопки для выбора типа примеси и режима ее отображения:



Наиболее часто используемые из них:

Total, BTotal, PTotal и т. д. – отображение полной концентрации всех примесей, полной концентрации бора, фосфора и т. д.;

BActive, PActive и т. д. – распределение концентрации электрически активного бора, фосфора и т. д.;

NetActive – отображение модуля разности концентраций электрически активных примесей;

Amorphization – отображение степени аморфизации материала;

Pressure – распределение давлений в структуре;

BCluster, PCluster и т. д. – распределение кластеров бора, фосфора и т. д.;

BSurf, PSurf и т. д. – отображение поверхностной концентрация бора, фосфора и т. д.;

V--, V-, V+ – распределение разных типов вакансий;

I-, I+ – распределение концентрации разных типов междоузлий;

ITotal, VTotat – отображение полной концентрации междоузлий, вакансий.

Для увеличения какой-либо области в графическом окне нужно, нажав и удерживая левую кнопку мыши, провести по диагонали воображаемого прямоугольника, включающего интересующую область.

2.2.2. Моделирование стандартных технологических процессов

Проект для моделирования одномерного термического окисления кремния

Для исследования одномерного термического окисления кремния разработан командный файл 2.1 в модуле **DIOS**, в котором задается каждая технологическая операция.

Листинг командного файла 2.1

Заголовок командного файла:

```
Title('OXID-1')
```

Для того, чтобы процесс моделирования отображался в режиме реального времени, задаются команды:

```
replace(Control(ngra=1))  
graph(triangle=off, plot)
```

Определяется прямоугольная область моделирования с количеством ячеек начальной расчетной сетки: `grid(x=(x_{min} , x_{max}), y=(y_{min} , y_{max}), nx=number)`, где x_{min} , x_{max} , y_{min} , y_{max} – координаты левой, правой, нижней и верхней границ области моделирования (по умолчанию в микронах). **DIOS** использует следующую систему координат: ось X направлена слева направо, ось Y направлена снизу вверх. Параметр nx задает количество ячеек начальной расчетной сетки:

```
grid(x=(0.0, 20.0), y=(-6.0, 0.0), nx=40)
```

Выбирается исходная подложка с ориентацией (100), легированная бором с удельным сопротивлением 0.005 Ом·см:

```
substrate (orientation=111, element=B, rho=0.005, ysubs=0.0)
```

Наращивается эпитаксиальный слой. Выбраны следующие параметры процесса эпитаксии: температура наращивания – 800 °С, скорость наращивания концентрация примеси бора $1.116 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, толщина эпитаксиального слоя – 12 мкм:

```
comment('epitaxy')
```

```
diff(temp=800, atmo=epitaxy, elem=B, conc=1.116e14, thickness=12um)
```

Наносится слой SiO₂ при температуре 800 °С в течение 100 мин в атмосфере азота с добавлением сухого и влажного кислорода:

```
comment('ox')
```

```
diff(temp=800, time=100, atmo=mixture, flow(O2=1L/min, h2O=0L/min,  
N2=0L/min))
```

Расчет слоевого сопротивления R_s и концентрационного профиля бора после температурных обработок структуры в сечении с координатой $x = 20$ мкм:

```
1D(Rs=on, xsect(20.0))
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(20.0), fac=-1)
```

```
Сохранение полученной структуры:
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off)
```

end

С помощью разработанного проекта для исследования зависимости толщины термически наращиваемого окисла на монокристаллических подложках кремния с ориентациями (111), (110), (100), легированных бором и фосфором, проведены расчеты при различных режимах окисления, результаты которых представлены на графиках (рис. 2.21–2.24).

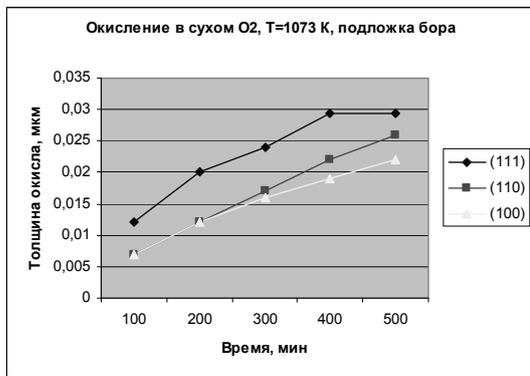


Рис. 2.21. Зависимость толщины окисла от времени при окислении кремния с различной ориентацией пластины марки КДБ0,005 в атмосфере сухого кислорода

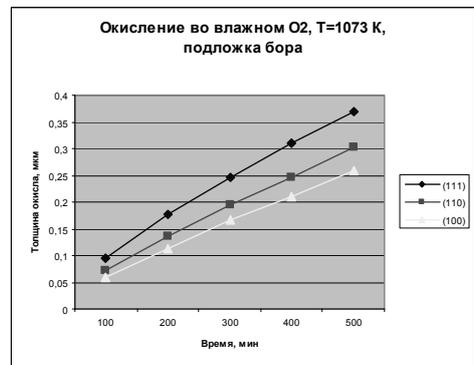


Рис. 2.22. Зависимость толщины окисла от времени при окислении кремния с различной ориентацией пластины марки КДБ0,005 в атмосфере влажного кислорода

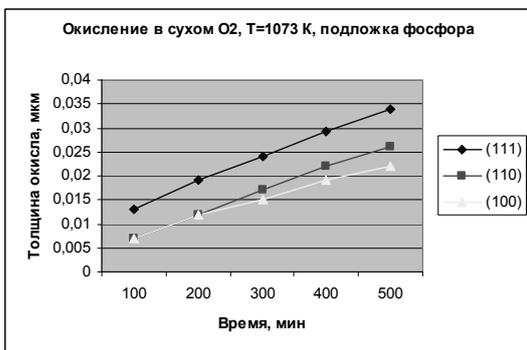


Рис. 2.23. Зависимость толщины окисла от времени при окислении кремния с различной ориентацией пластины марки КЭФ0,005 в атмосфере сухого кислорода

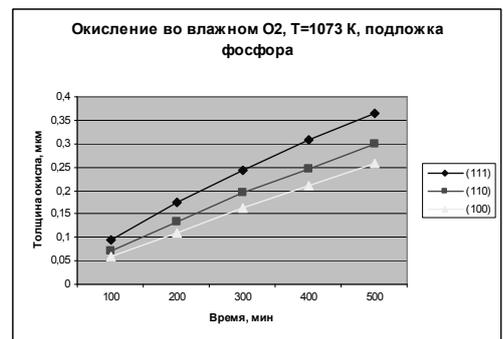


Рис. 2.24. Зависимость толщины окисла от времени при окислении кремния с различной ориентацией пластины марки КЭФ0,005 в атмосфере влажного кислорода

Проект позволяет рассчитать концентрационные профили при перераспределении примеси бора (рис. 2.25) и фосфора (рис. 2.26) в слое кремния у границы раздела SiO₂-Si, которое происходит в процессе окисления равномерно легированной подложке кремния и учитывает сегрегацию примеси.

Проекты для моделирования локального окисления

Для исследования профиля типа «птичий клюв», получающегося при локальном окислении кремния, разработан командный файл 2.2 в модуле DIOS.

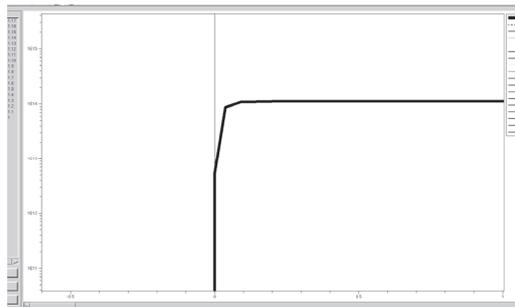


Рис. 2.25. Концентрационный профиль бора

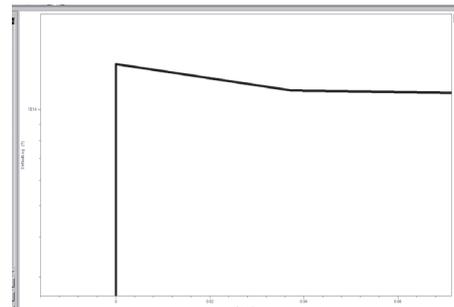


Рис. 2.26. Концентрационный профиль фосфора

Листинг командного файла 2.2

```
Title('OXID-2')
Replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)
grid (x=(0.0, 20.0), y=(-6.0, 0.0), nx=20)
```

Выбирается исходная подложка с ориентацией (100), легированная бором с удельным сопротивлением 0.005 Ом·см :

```
substrate (orientation=100, element=B, rho=0.005, ysubs=0.0)
```

Нарращивается эпитаксиальный слой. Выбраны следующие параметры: температура наращивания – 1190 °С, скорость наращивания – 300 нм/мин, концентрация бора $1.116 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, толщина эпитаксиального слоя – 12 мкм:

```
comment('epitaxy')
diff(GrowthRate=300, temp=1190, atmo=epitaxy, elem=B, conc=1.116e14, thickness=5)
```

Нанесение слоя SiO₂ толщиной в 400 Å:

```
comment('ox')
deposit(material=ox, thickness=0.04)
```

Нанесение нитрида кремния толщиной 1200 Å:

```
comment('dep si3n4')
deposit(material=SI3N4, thickness=0.12)
```

Фотолитография (шаблон «Область негативная»):

```
comment('Negativ')
```

```
mask(material=resist, thickness=1, xleft=0.0, xright=5.0)
```

```
mask(material=resist, thickness=1, xleft=15.0, xright=20.0)
```

Удаление незащищенного нитрида кремния:

```
comment('del si3n4')
```

```
etching(material=si3n4, remove=0.12, rate(anisotropic=100))
```

Удаление фоторезиста:

```
comment('del res')
```

```
etching(material=resist)
```

Проводится диффузия с последующим формированием профиля «птичий клюв»:

```
comment('diff')
```

```
diff(temp=1100, time=400, atmo=mixture, flow(O2=1l/min, H2O=1l/min, N2=4l/min))
```

Расчет слоевого сопротивления R_s и концентрационного профиля бора после температурных обработок структуры в сечении с координатой $x = 15$ мкм:

```
1D(Rs=on, xsect(15.0))
```

```
1D(file=n@node@, species(B), xsect(15.0), fac=-1)
```

Сохранение полученной структуры:

```
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off) end
```

С помощью командного файла 2.2 для проектирования операции локального окисления с созданием окисного профиля типа «птичий клюв» проведено моделирование и получена структура, приведенная на рис. 2.27, а также построен график концентрационного профиля бора после температурных обработок структуры в сечении с координатой $x = 15$ мкм (рис. 2.28).

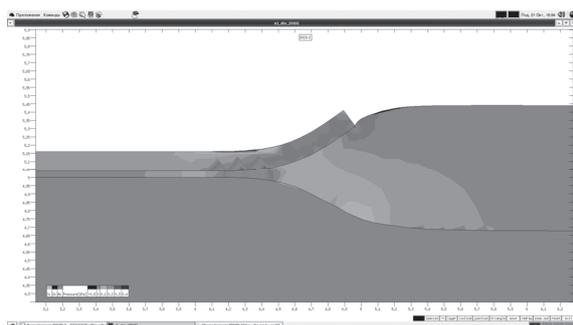


Рис. 2.27. Распределение концентрации бора в структуре «птичий клюв»

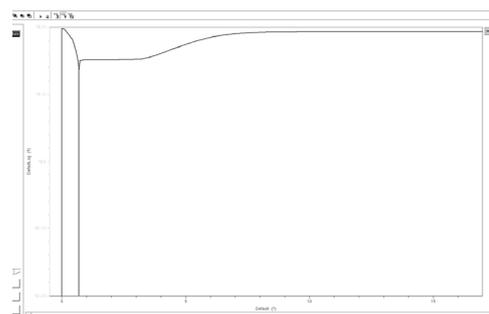


Рис. 2.28. Концентрационный профиль бора в сечении с координатой $x=15$ мкм

Для исследования профиля типа «птичья голова», получающегося при локальном окислении кремния, разработан командный файл 2.3 в модуле DIOS, в котором задается каждая технологическая операция и ее параметры.

```
Title('OXID-3')
Replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)
grid(x=(0.0, 20.0), y=(-6.0, 0.0), nx=40)
```

Выбирается исходная подложка с ориентацией (100), легированная бором с удельным сопротивлением 0.005 Ом·см :

```
substrate(orientation=100, element=B, rho=0.005, ysubs=0.0)
```

```
comment('epitaxy')
diff(temp=1190, GrowthRate=300, atmo=Epitaxy, ELEM=B,
Conc=1.116e14, thickness=5)
```

Наносится слой SiO₂ толщиной в 10 Å:

```
comment('ox')
deposit(material=ox, thickness=0.001)
```

Нанесение нитрида кремния толщиной 70 Å:

```
comment('dep si3n4')
deposit(material=SI3N4, thickness=0.07)
```

Фотолитография (шаблон «Область негативная»):

```
comment('Negativ')
mask(material=resist, thickness=1, xleft=0.0, xright=5.0)
mask(material=resist, thickness=1, xleft=15.0, xright=20.0)
```

```
etching(material=si3n4, remove=0.07, rate(anisotropic=100))
etching(material=ox, remove=0.001, rate(anisotropic=100))
etching(material=si, remove=0.001, rate(anisotropic=100))
```

```
comment('del res')
etching(material=resist)
```

Проводится диффузия с формированием профиля "птичья голова":

```
comment('diff')
diff(temp=1100, time=40, atmo=mixture, flow(O2=1l/min, H2O=1l/min,
N2=4l/min))
```

Сохранение одномерного сечения концентрационного профиля полученной структуры в сечении $x = 20$ мкм и распределений примесей:

```
1D(Rs=on, xsect(20.0))
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(20.0), fac=-1)
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off) end
```

С помощью разработанного командного файла 2.3 получена структура «птичья голова» (рис. 2.29), построен график концентрационного профиля

бора в сечении с координатой $x = 15$ мкм (рис. 2.30), а также графики распределений вакансий (рис. 2.31) и напряжений (рис. 2.32).

*Проекты для моделирования
диффузионного перераспределения примесей в структурах $\text{SiO}_2\text{-Si}$*

Рассматривается задача диффузионного перераспределения примеси в процессе окисления равномерно легированной кремниевой подложки р-типа с исходной концентрацией 10^{16} см^{-3} в атмосфере влажного кислорода при температуре 1000°C в течение 1 часа. Для моделирования процесса перераспределения бора разработан командный файл 2.4 для модуля **DIOS**.

Листинг командного файла 2.4

```
Title('diff pereraspr c okisl-1')
replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)
grid(x=(0.0, 4.0), y=(-3.0, 0.0), nx=40)
substrate (orientation=100, element=B, conc=1e16, ysubs=0.0)
comment('diff c okisl')
diff(elem=B, te=1000, time=60, atmo=H2O)
1D(Rs=on, xsect(2.0))
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(2.0), fac=-1)
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off) end
```

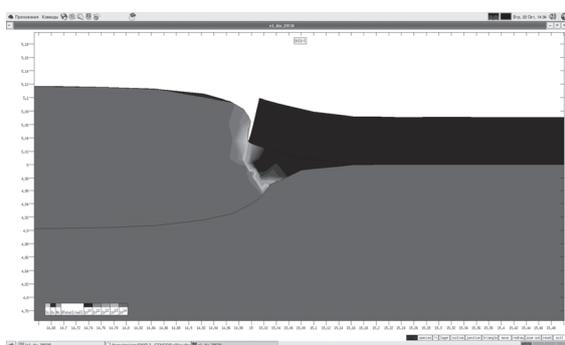


Рис. 2.29. Структура «птичий клюв» с отображением концентрационного профиля

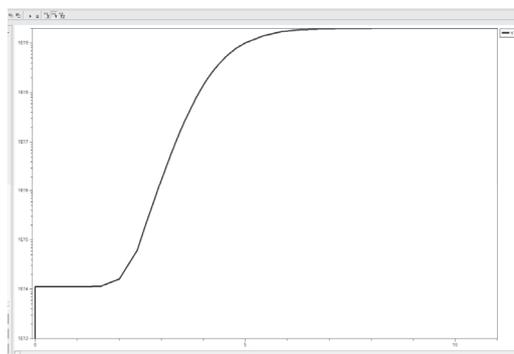


Рис. 2.30. График концентрационного профиля бора в сечении с координатой $x = 15$ мкм

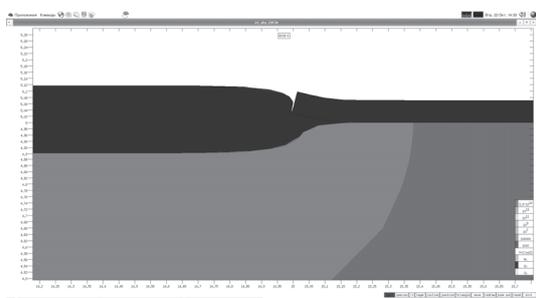


Рис. 2.31. Распределение вакансий в структуре «птичья голова»

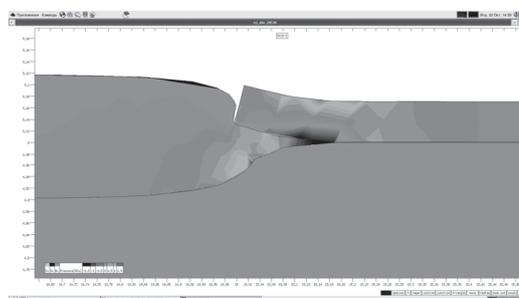


Рис. 2.32. Распределение напряжений в структуре «птичья голова»

В качестве второго примера рассматривается процесс диффузионного перераспределения примеси фосфора, внедренного с энергией 80 кэВ и дозой имплантации $6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ в монокристаллическую кремниевую подложку марки КДБ7. Диффузионный отжиг проводится при температуре 1100 °С в течение 0,5 часа во влажном кислороде. Для моделирования процесса перераспределения фосфора разработан командный файл 2.5 для модуля **DIOS**.

Листинг командного файла 2.5

```

title('diff pereraspr c okisl-2')
grid(x=(0.0, 4.0), y=(-3.0, 0.0), nx=40)
replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)

substrate(orientation=100, element=B, rho=7, ysubs=0.0)

implant(elem=P, energy=80keV, dose=6e13, tilt=0, func=gauss)

1D(Rs=on, xsect(2.0))
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(2.0), fac=-1)

comment('diff c okisl')
diff(elem=P, te=1100, time=30, atmo=H2O)

1D(Rs=on, xsect(2.0))
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(2.0), fac=-1)
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off) end

```

С помощью командного файла 2.4 получена структура (рис. 2.33) и диффузионное перераспределение (рис. 2.34) примеси бора в процессе окисления исходной кремниевой подложки р-типа с исходной концентрацией 10^{16} см^{-3} при нормальном давлении в атмосфере влажного кислорода при температуре 1000 °С в течение 1 часа.

С помощью командного файла 2.5 получена структура (рис. 2.35) и диффузионное перераспределение (рис. 2.36) примеси фосфора, внедренного при энергии 80 кэВ и дозой $6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ монокристаллическую кремниевую подложку марки КДБ7 с последующим и диффузионным отжигом при температуре 1100 °С в течение 0,5 часа во влажном кислороде.

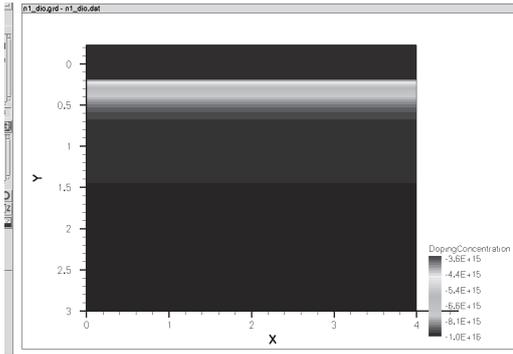


Рис. 2.33. Структура после диффузионного отжига

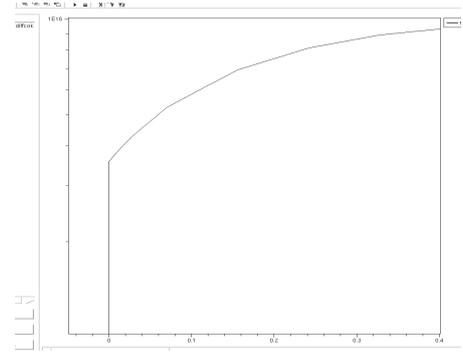
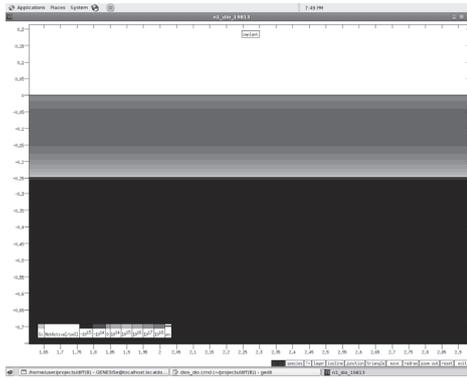
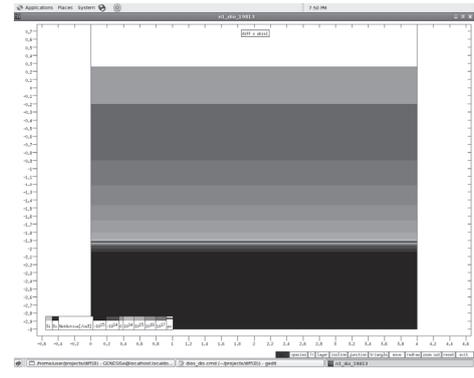


Рис. 2.34. Диффузионное перераспределение примеси бора



а



б

Рис. 2.35. Структура: а – после внедрения фосфора; б – после диффузионного отжига

Проект для моделирования распределений ионно-имплантированных примесей в кремнии

Для изучения распределений ионно-имплантированных примесей, аппроксимируемых различными функциями, разработан командный файл 2.6 для модуля **DIOS**.

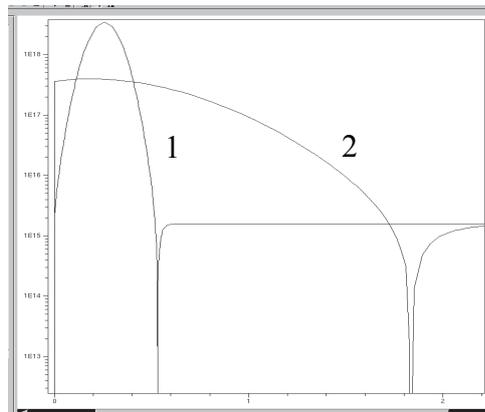


Рис. 2.36. Диффузионное перераспределение примеси фосфора после ионной имплантации (1) и после диффузионного отжига (2)

```

title('implant_bora')
grid(x=(0.0, 1.5), y=(-1.0, 0.0), nx=40)
replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)

substrate(orientation=110, element=P, conc=1e13, ysubs=0.0)

```

Проводится ионная имплантация примесью бора с дозой $6.25 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, энергией 60 кэВ с заданной функцией распределения Пирсон-4:

```
implant(element=B, dose=6.25e15, energy=60kev, func=p4)
```

Сохранение одномерного сечения концентрационного профиля полученной структуры в сечении $x=1,5$ мкм и распределений примесей:

```

1D(Rs=on, xsect(1.5))
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(1.5), fac=-1)

save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off) end

```

С помощью разработанного командного файла 2.6 проведено исследование зависимости от ориентации монокристаллического кремния концентрационного профиля при имплантации ионами бора структуры, которая после ионной имплантации приведена на рис. 2.37.

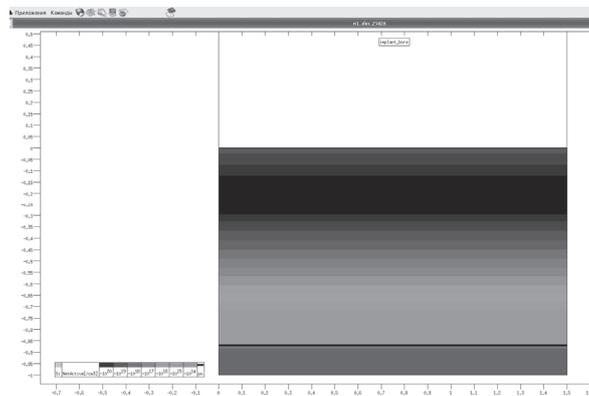


Рис. 2.37. Структура после ионной имплантации

Распределения ионно-имплантированного бора для подложек монокристаллического кремния с ориентациями (100), (111) и (110) рассчитаны по следующим моделям: гауссовское, Пирсон-4 и Монте-Карло. Сравнительные графики приведены на рисунках 2.38–2.40.

На рисунке 2.41 приведены распределения бора в кремнии с ориентациями (100) (1), (111) (2) и (110) (3), рассчитанные по методу Монте-Карло.

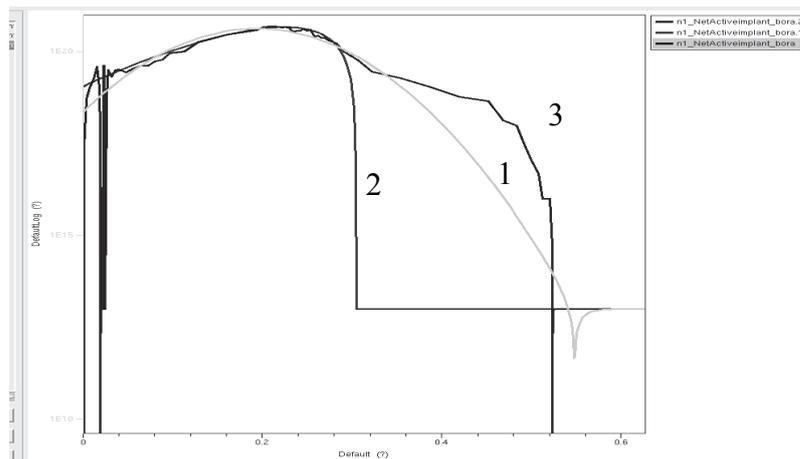


Рис. 2.38. Распределения бора в кремнии с ориентацией (100), рассчитанные с помощью: 1 – гауссовского распределения; 2 – распределения Пирсон-4; 3 – по методу Монте-Карло

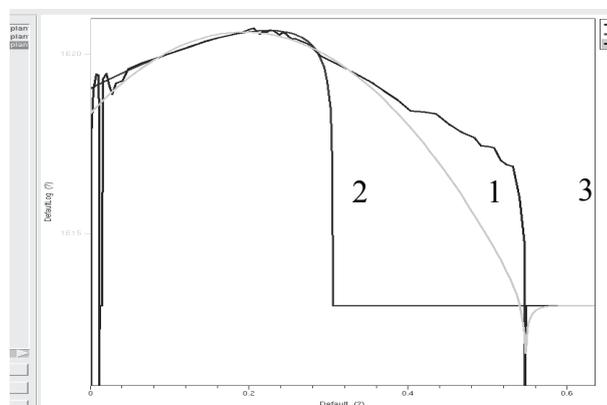


Рис. 2.39. Распределения бора в кремнии с ориентацией (111), рассчитанные с помощью: 1 – гауссовского распределения, 2 – распределения Пирсон-4, 3 – по методу Монте-Карло

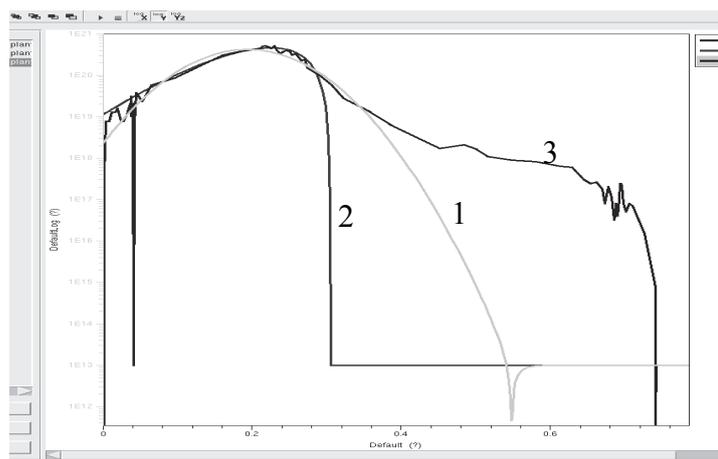


Рис. 2.40. Распределения бора в кремнии с ориентацией (110), рассчитанные с помощью: 1 – гауссовского распределения; 2 – распределения Пирсон-4; 3 – по методу Монте-Карло

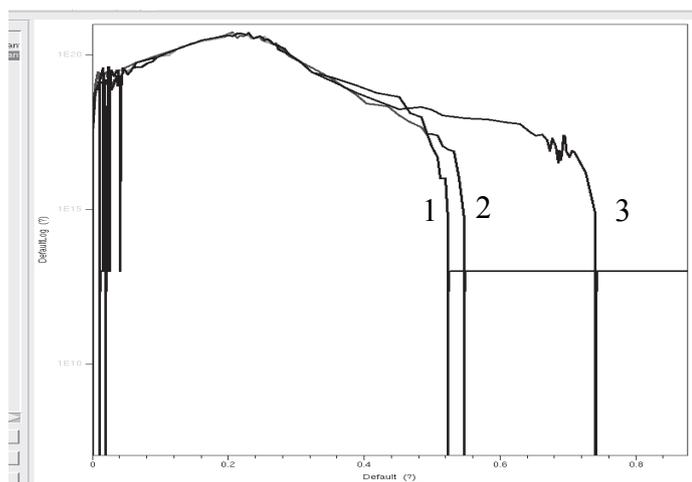


Рис. 2.41. Распределения бора в кремнии с ориентациями (110) (1), (111) (2) и (110) (3), рассчитанные по методу Монте-Карло

Проект для моделирования распределений ионно-имплантированных примесей в кремнии с учетом эффекта каналирования

Для исследования влияния эффекта каналирования при имплантации разориентированных монокристаллических кремниевых мишеней разработан командный файл 2.7 для модуля **DIOS**.

Листинг командного файла 2.7

```
Title('implant_bora')
grid(x=(0.0, 1.5), y=(-1.0, 0.0), nx=40)
replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)
```

Выбирается исходная подложка с ориентацией (110), легированная фосфором с исходной концентрацией $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$:

```
substrate(orientation=110, element=P, conc=1e13, ysubs=0.0)
```

Проводится ионная имплантация примесью бора с дозой $6.25 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, энергией 60 кэВ с заданной функцией распределения Пирсон-4 с учетом эффекта каналирования:

```
implant(element=B, dose=6.25e15, energy=60kev, func=p4s)
```

```
1D(Rs=on, xsect(1.5))
```

```
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(1.5), fac=-1)
```

```
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off)
```

```
end
```

С помощью разработанного командного файла 2.7 для проектирования технологической операции ионного легирования с учетом эффекта каналирования проведено моделирование ионно-имплантированной структуры, приведенной на рис. 4.42.

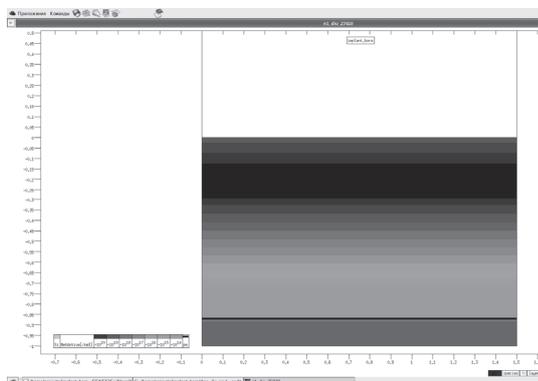


Рис. 2.42. Структура после ионной имплантации с учетом эффекта каналирования

Сравнительный анализ распределений ионно-имплантированного бора в подложке марки КЭФ приведен на рис. 2.43, который при наличии экспериментальных данных позволяет выбрать для проектирования соответствующую модель распределения.

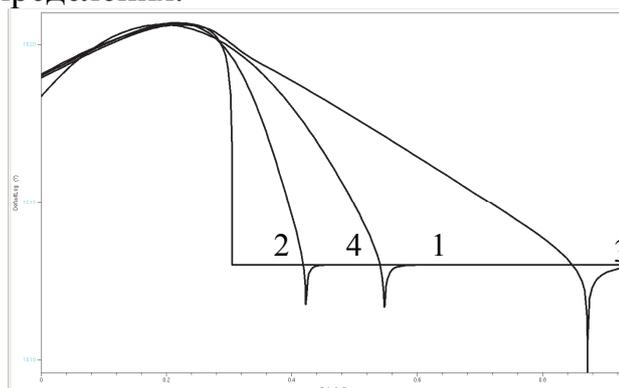


Рис. 2.43. Концентрационные профили ионно-имплантированного бора, рассчитанные по модели:

- 1 – симметричного гауссовского распределения; 2 – Пирсон-4;
- 3 – Пирсон-4 с учетом линейного экспоненциального «хвоста»;
- 4 – Пирсон-4 с учетом нелинейного экспоненциального «хвоста»

Сравнительный анализ распределений ионно-имплантированного фосфора в подложке марки КДБ приведен на рис. 2.44, который при наличии экспериментальных данных позволяет выбрать для проектирования соответствующую модель распределения. Как показывают результаты (рис. 2.44), для фосфора результаты расчетов по моделям, учитывающим эффект каналирования, совпадают.

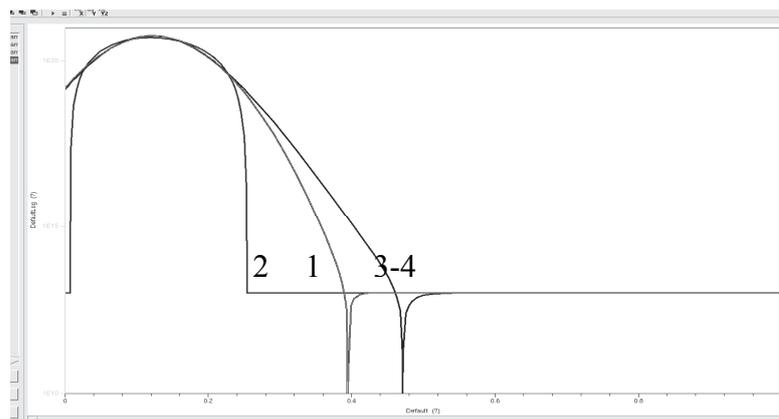


Рис. 2.44. Концентрационные профили ионно-имплантированного фосфора, рассчитанные по модели: 1 – симметричного гауссовского распределения; 2 – Пирсон-4; 3–4 – Пирсон-4 с учетом линейного и нелинейного экспоненциального «хвоста»

Сравнительный анализ распределений ионно-имплантированного мышьяка в подложке марки КДБ приведен на рис. 2.45, который при наличии экспериментальных данных позволяет выбрать для проектирования соответствующую модель распределения. Как показывают результаты (рис. 2.45), для мышьяка результаты расчетов по моделям, учитывающим эффект каналирования, совпадают.

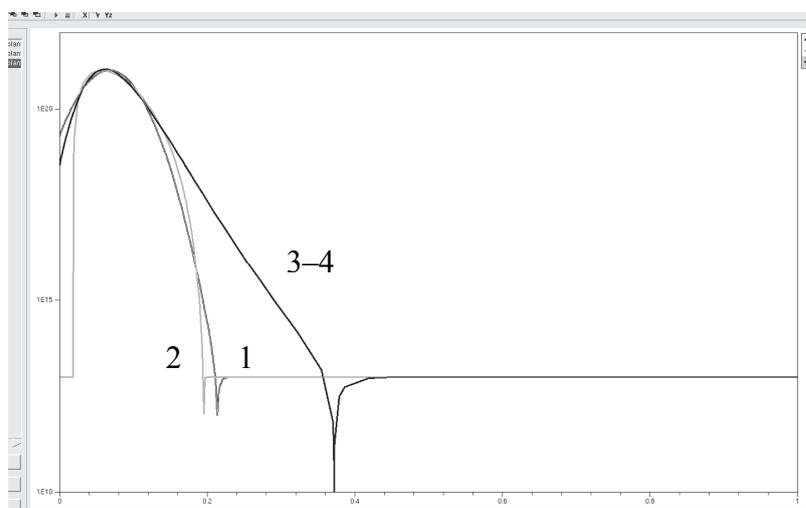


Рис. 2.45. Концентрационные профили ионно-имплантированного мышьяка, рассчитанные по модели: 1 – симметричного гауссовского распределения; 2 – Пирсон-4; 3–4 – Пирсон-4 с учетом линейного и нелинейного экспоненциального «хвоста»

Проект для моделирования распределений ионно-имплантированных примесей в многослойных структурах

Для исследования распределений ионно-имплантированных примесей в многослойных структурах созданы два командных файла для имплантации двухслойных структур SiO₂-Si (командный файл 2.8) и трехслойных структур Si₃N₄-SiO₂-Si (командный файл 2.9).

Листинг командного файла 2.8

```
Title('implant_bora')
grid(x=(0.0, 1.5), y=(-1.0, 0.0), nx=40)
replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)
substrate(orientation=100, element=P, rho=7.5, ysubs=0.0)

comment('okislenie')
deposit(material=ox, thickness=0.02)

comment('implantation')
implant(element=B, dose=5/1.6e-19, energy=100kev, func=gauss)
1D(Rs=on, xsect(1.5))
1D(file=n@node@, species(total), xsect(1.5), fac=-1)
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off)
end
```

Листинг командного файла 2.9

```
Title('implant_bora')
grid(x=(0.0, 1.5), y=(-1.0, 0.0), nx=40)
replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)
substrate(orientation=100, element=P, rho=7.5, ysubs=0.0)

comment('okislenie')
deposit(material=ox, thickness=0.02)

comment('Si3N4')
deposit(material=Si3N4, thickness=0.07)

comment('implantation')
implant(element=B, dose=5/1.6e-13, energy=100kev, func=gauss)
1D(Rs=on, xsect(1.5))
1D(file=n@node@, species(total), xsect(1.5), fac=-1)
save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off)
end
```

При имплантации бора с энергией 100 кэВ и дозой 5 мкКл/см² в структуру SiO₂-Si с исходной подложкой КЭФ7,5 при толщине окисного слоя

0,02 мкм получена виртуальная структура (рис. 2.46) с распределением примеси, приведенным на рисунке 2.27. При имплантации фосфора с энергией 100 кэВ и дозой 5 мкКл/см² в структуру SiO₂-Si с исходной подложкой КЭФ7,5 при толщине окисного слоя 0,02 мкм получено распределение примеси, приведенное на рисунке 2.48.

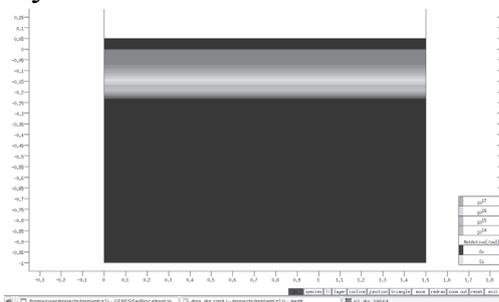


Рис. 2.46. Виртуальная структура SiO₂-Si , легированная бором

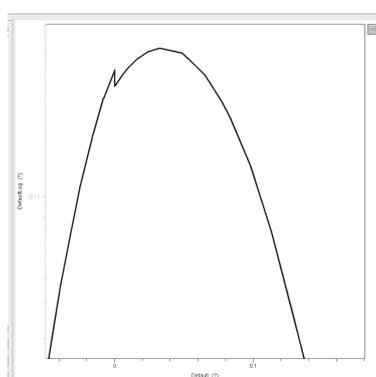


Рис. 2.47. Распределение концентрации ионно-имплантированного бора в виртуальной структуре SiO₂-Si

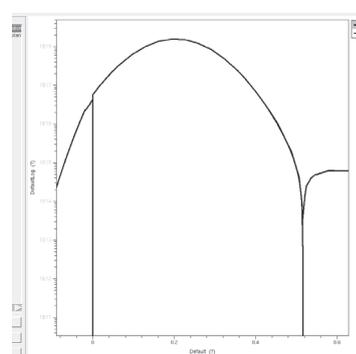


Рис. 2.48. Распределение концентрации ионно-имплантированного фосфора в виртуальной структуре SiO₂-Si

При имплантации бора с энергией 100 кэВ и дозой 5 мкКл/см² в структуру Si₃N₄-SiO₂-Si с исходной подложкой КЭФ7,5 при толщине окисного слоя 0,02 мкм, толщине слоя нитрида кремния 0,07 мкм получена виртуальная структура (рис. 2.49) с распределением примеси, приведенным на рис. 2.50.

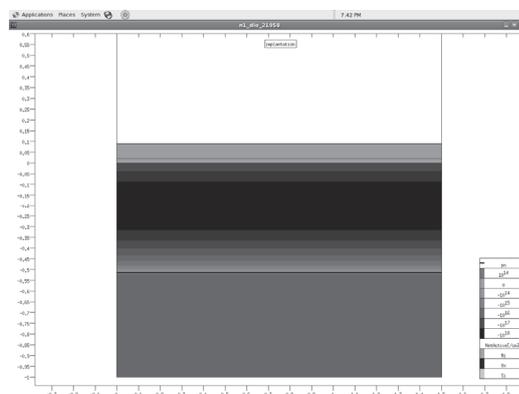


Рис. 2.49. Виртуальная структура Si₃N₄-SiO₂-Si , легированная бором

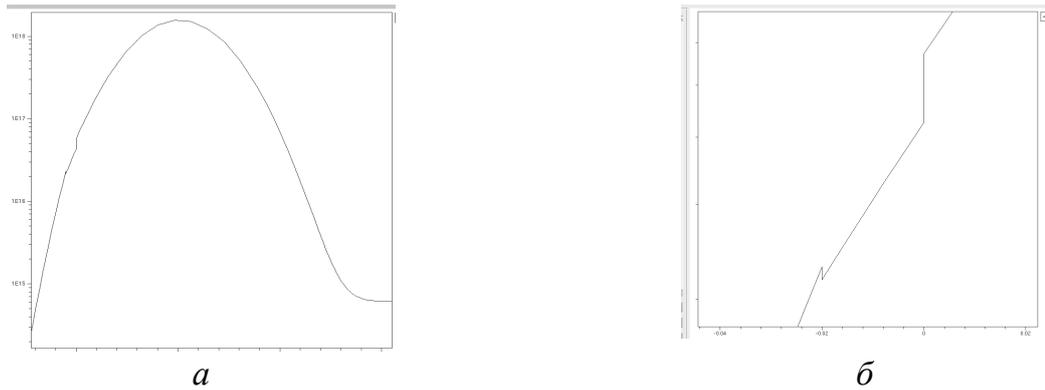


Рис. 2.50. Распределение концентрации ионно-имплантированного бора: а – в виртуальной структуре SiO₂-Si; б – увеличенный фрагмент распределения

*Проект для моделирования распределений примесей
при наклонной имплантации*

Для исследования распределений внедренных примесей при наклонной имплантации разориентированных кремниевых мишеней разработан командный файл 2.10 для модуля **DIOS**.

Листинг командного файла 2.10

```
Title('implant_bora')
grid(x=(0.0, 3.0), y=(-2.0, 0.0), nx=40)
replace(Control(ngra=1))
graph(triangle=off, plot)
```

Выбирается исходная подложка с ориентацией 100, легированная бором, марки КДБ5:

```
substrate(orientation=100, element=B, rho=5, ysubs=0.0)
```

Наносится слой SiO₂ толщиной в 4000 Å:

```
deposit(material=ox, thickness=0.4)
```

Наносится резистивная маска шириной 2 мкм:

```
mask(material=resist, thickness=2, xleft=0.0, xright=1.0)
mask(material=resist, thickness=2, xleft=2.0, xright=3.0)
```

```
etching(material=ox,remove=0.4, rate(anisotropic=100))
etching(material=resist)
```

Проводится наклонная имплантация под углом 40° примесью сурьмы с дозой 10¹⁴ см⁻², энергией 180 кэВ с гауссовской функцией распределения:

```
implant(element=Sb, dose=1e14, energy=180kev, func=gauss, tilt=40)
```

Сохранение одномерных сечений концентрационного профиля полученной структуры в сечениях $x = 2.0$ мкм, $x = 1.5$ мкм и $x = 1.25$ мкм:

```

1D(Rs=on, xsect(1.5))
1D(Rs=on, xsect(2.0))
1D(Rs=on, xsect(1.25))
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(2.0), fac=-1)
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(1.5), fac=-1)
1D(file=n@node@, species(netactive), xsect(1.25), fac=-1)

save(file='n@node@', type=mdraw, compress=off)

end

```

С помощью разработанного командного файла 2.10 проведено исследование распределений внедренных примесей при наклонной имплантации монокристаллических кремниевых мишеней.

Распределение внедренных примесей сурьмы при наклонной имплантации кремниевой мишени марки КДБ5 в локальную щель размером $2 \times 0,5$ мкм с энергией ионов 180 кэВ и дозой $1 \cdot 10^{14}$ см⁻² под углом 40° приведено на рис. 2.51а, а распределение изоконцентрационных линий – на рис. 2.51б.

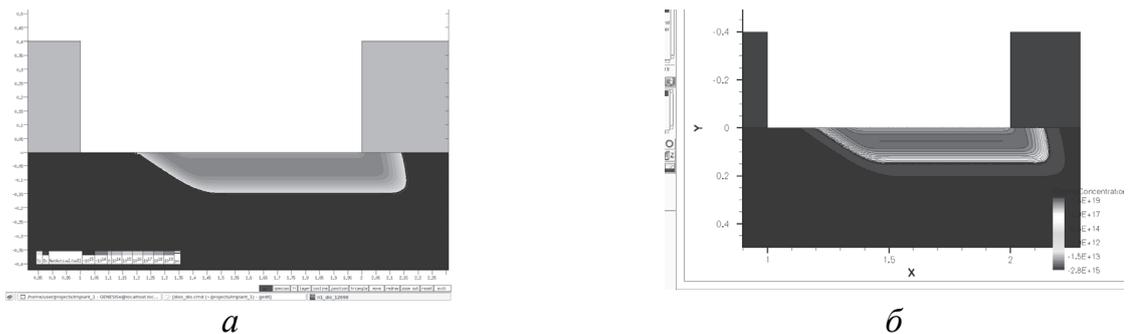


Рис. 2.51. Распределение наклонно внедренных примесей сурьмы в локальную щель: а – распределение концентрации; б – изоконцентрационные линии

На рис. 2.52 приведены результаты расчетов концентрационных профилей наклонно имплантированного мышьяка при данных условиях в сечениях $x = 2.0$ мкм, $x = 1.5$ мкм и $x = 1.25$ мкм.

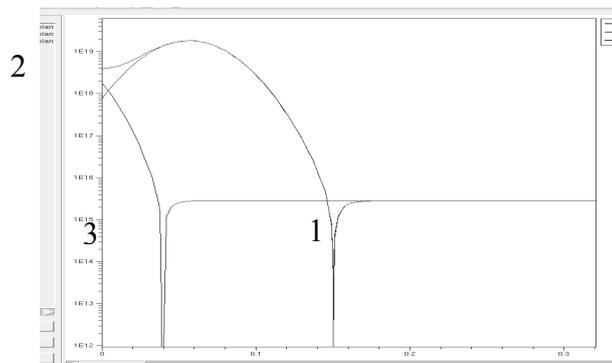


Рис. 2.52. Концентрационные профили наклонно-имплантированной примеси сурьмы в сечениях: 1 – $x = 2.0$ мкм; 2 – $x = 1.5$ мкм; 3 – $x = 1.25$ мкм

Если травление окисла происходит при условии изотропности процесса (команда травления окисла `etching(material=ox,remove=0.4)`), результаты расчетов концентрационных профилей наклонно имплантированного мышьяка при данных условиях в сечениях $x = 2.4$ мкм, $x = 1.5$ мкм и $x = 0.85$ мкм имеют вид, приведенный на рис. 2.53 и 2.54.

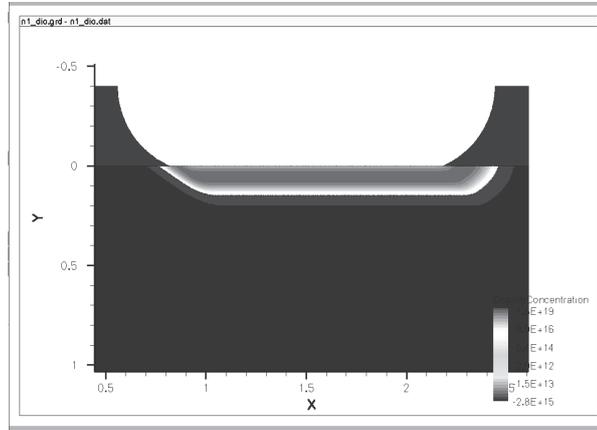


Рис. 2.53. Распределение наклонно внедренной примеси мышьяка

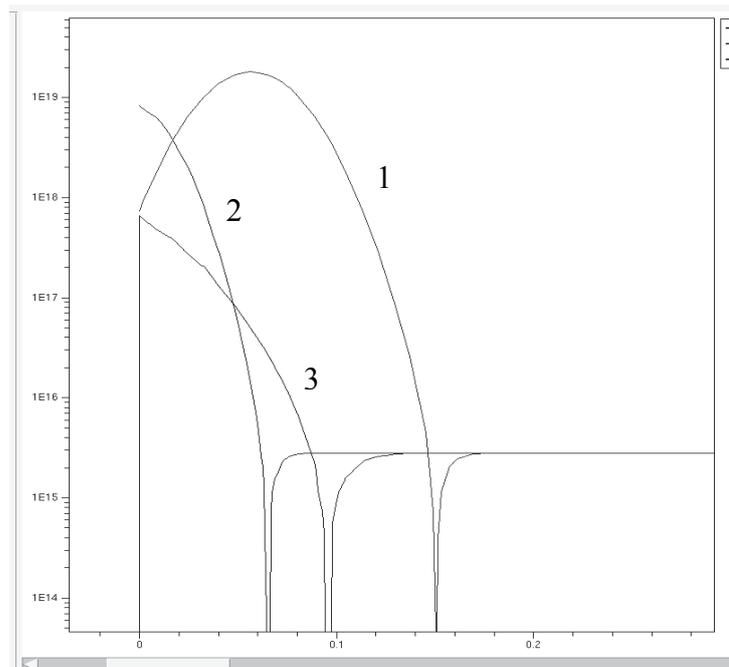


Рис. 2.54. Концентрационные профили наклонно-имплантированного мышьяка в сечениях: 1 – $x = 2.4$ мкм; 2 – $x = 1.5$ мкм; 3 – $x = 0.85$ мкм

3. СКВОЗНОЕ ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПРИБОРОВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ В СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОМ ПАКЕТЕ САПР TCAD

3.1. Программные модули моделирования электрофизических параметров полупроводниковых структур

3.1.1. Программные модули оптимизации расчетных сеток виртуальных полупроводниковых структур

Оптимизация сетки нужна при передаче модели прибора после технологического проектирования в программы моделирования параметров прибора. Подобная адаптация сводится к формированию такого вида расчетной сетки, что в квазинейтральных областях и областях, не влияющих на исследуемый параметр прибора, шаг увеличивается максимально; а в областях, в которых моделируется параметр, выбирается малый шаг с целью наиболее полно получить представление о проектируемой модели.

Для этих целей в TCAD включены следующие модули:

- **MESH, NOFFSET3D** – двух- и трехмерный генераторы сеток (рис. 3.1);
- **MDRAW** – интерактивный редактор приборов и компоновщик двумерных структур.

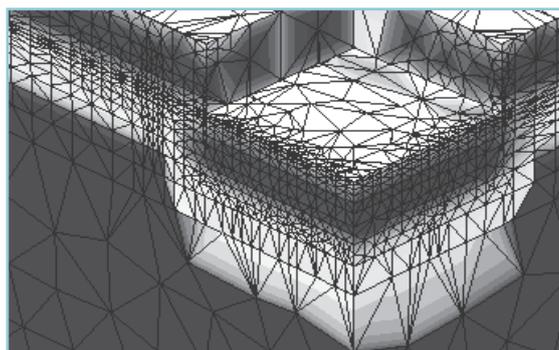


Рис. 3.1. Модель имплантации в **NOFFSET3D**

Для того, чтобы моделировать электро-, теплофизические и другие параметры и характеристики рассчитанной в **DIOS** структуры, сначала необходимо изменить расчетную сетку **DIOS**. **DIOS** создает сетку, оптимизированную для расчета технологии изготовления прибора. Для уменьшения времени последующих расчетов в **DESSIS** нужно значительно увеличить размеры ячеек сетки в неактивных областях, например, в области равномерно легированной подложки. В активных областях и особенно вблизи р-п-переходов необходима значительно более мелкая сетка для более точного расчета параметров, но не чрезмерно мелкая, иначе системы уравнений перестают сходиться. Другими словами, сетка должна быть оптимизирована под профиль распределения примеси. Этой цели служат несколько программ пакета ISE TCAD.

Программа **MDRAW** включает в себя несколько частей: редактор границ, или редактор структур, редактор распределения примесей, а также оптимизатор сетки, который является одной из функций редактора распределения примесей. **MDRAW** позволяет создать, т.е. фактически нарисовать структуру «с нуля», не пользуясь моделированием технологии изготовления. Так как созданная таким образом структура имеет простейшие профили распределения примесей, например, гауссианы, а также другие упрощенные технологические характеристики, ее применение оправдано, в основном, только в учебных целях. Также ее можно применять для исследования каких-либо общих закономерностей как идеализированную модель. При расчете технологии в **DIOS** редактор структуры **MDRAW** используется практически только для того, чтобы проверить правильность расположения контактов.

Программа **MESH** – это практически тот же оптимизатор сетки **MDRAW**. Главные отличия в том, что **MESH** не имеет графического интерфейса, хотя структуры в нем все же можно создавать, используя командные файлы. Важное преимущество **MESH** заключается в возможности работать с одно-, двух- и трехмерными структурами, в то время как **MDRAW** работает только с одно- и двумерными. Синтаксис командного файла **MESH** и **MDRAW** одинаковый за исключением трехмерного случая. Алгоритмы оптимизации сетки этих программ несколько отличаются, в результате чего сетка, полученная с помощью **MDRAW**, имеет более «квадратные» ячейки, а с помощью **MESH** – более «треугольные», но на результатах приборного моделирования это различие практически не сказывается.

Запуск как **MDRAW**, так и **MESH**, удобнее производить в составе проекта в **GENESISe**. При этом необходимо обратить внимание на вкладку **Preferences** контекстного меню (рис. 3.2). Помимо выбора режима запуска – графический или фоновый (для **MDRAW**) – необходимо установить использование файла границ от **DIOS: take «boundary» file from the preceding tool**, а также использование командного файла, созданного пользователем: **take «commands» file from the user**. Графическое окно программы **MDRAW** показано на рис. 3.3.

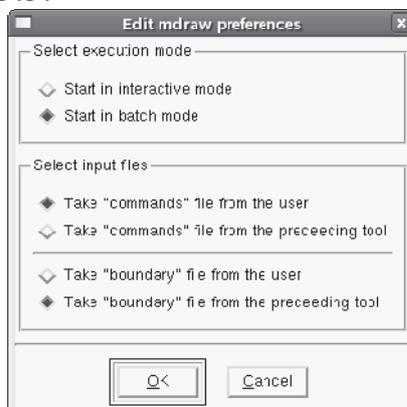


Рис. 3.2. Окно настройки параметров запуска программы **MDRAW**

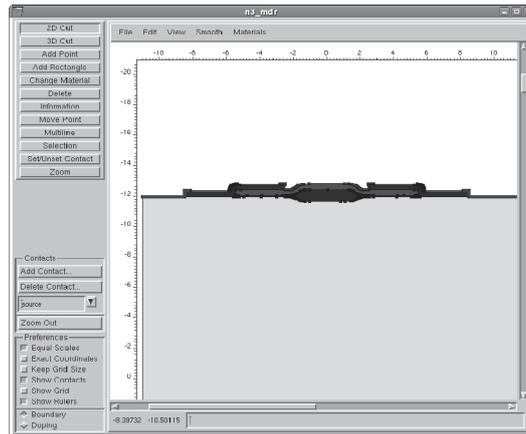


Рис. 3.3. Графическое окно программы MDRAW. Режим редактора структур

В левом нижнем углу окна находится переключатель режимов работы «редактор структур – редактор распределения примесей» (**Boundary – Doping**). В режиме редактора структур активизируются кнопки добавления и удаления контактов: **Add Contact** и **Delete Contact**. Расположение контактов на структуре обозначается красными линиями. Выбранный контакт, название которого находится в списке контактов, находится в поле под кнопкой **Delete Contact**, помечается жирной красной чертой. Для добавления контакта нужно нажать на кнопку **Add Contact**, задать название контакта, нажать кнопку **Set/Unset Contact** и, подведя курсор к нужной границе, щелкнуть левой кнопкой мыши. Если в списке контактов имеются странные области с неизвестными названиями, то необходимо проверить правильность командного файла **DIOS**. Возможно, например, при травлении поликремния или алюминия остались малые неотравленные области, либо координаты контакта заданы неверно. При правильной технологии и верном задании координат в командном файле **DIOS** все контакты в MDRAW отображаются правильно.

В режиме редактора распределения примесей вместо кнопок **Add Contact** и **Delete Contact** появляется кнопка **Build Mesh** (рис. 3.4).

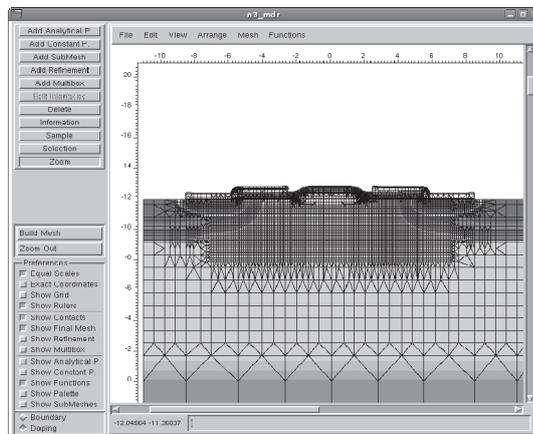


Рис. 3.4. Режим редактора распределения примесей программы MDRAW

Для оптимизации расчетной сетки нужно нажать на кнопку **Build Mesh**. Размеры ячеек сетки, расположение активных областей и функция оптимизации задаются в командном файле, указанном в окне **Preferences**. После оптимизации сетки необходимо сохранить результаты, выбрав в меню **File** пункт **Save All**.

Командный файл программ **MDRAW** и **MESH**, используемый для оптимизации расчетной сетки двумерной структуры, имеет следующую структуру:

```
Title "Заголовок"

#Описание областей, в которых будет оптимизироваться сетка
#с заданием основных характеристик сетки:
Definitions{
    #сетка для всей структуры (по умолчанию)
    Refinement"Default Region"
    {MaxElementSize=(Xmax1 Ymax1) #максимальный размер ячейки
    MinElementSize=(Xmin1 Ymin1) #минимальный размер ячейки
    RefineFunction=MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration", Value =
1.0) #функция оптимизации (в данном случае под профиль распределения
концентрации примесей)}
    Refinement "Region 1" #область с другим размером ячейки сетки
    {MaxElementSize = (Xmax2 Ymax2)
    MinElementSize = (Xmin2 Ymin2)
    RefineFunction=MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration", Value =
1.0) }
    # .
    # .   аналогичное описание остальных областей
    # .

#Определение файлов структуры, для которой будет оптимизироваться
сетка:
SubMesh "Structure"{Geofile = "@grid@" #файл сетки DIOS
    Datafile = "@doping@" #файл распределения примесей
DIOS } }

#Задание геометрического расположения объявленных ранее областей:
Placements{
    Refinement "Default Region" #вся структура
    {Reference = "Default Region" }
    Refinement "Region 1" #область с другим размером ячеек
    {Reference = "Region 1"
```

```
RefineWindow = rectangle [(Xleft Ytop) , (Xright Ybottom)] #опре-
деление прямоугольной области путем задания координат верхнего левого
и нижнего правого углов }
```

```
# .
# .   описание расположения остальных областей
# .
```

```
#Структура, относительно которой задано расположение областей:
Submesh "Structure"{Reference = "Structure" } }
```

Такой командный файл подходит для оптимизации расчетной сетки большинства двумерных структур. Необходимо только устанавливать минимальные и максимальные размеры ячеек, добавлять необходимое количество областей с шагом, отличным от заданного по умолчанию для всей структуры, а также задавать геометрическое положение этих областей. У каждой области должно быть свое уникальное имя. При определении координат прямоугольной области необходимо учитывать, что в **MDRAW** и **MESH** используется система координат с осью Y, направленной вниз, а не вверх, как в **DIOS**. Такая же система координат принята в программе **TECPLOT**, поэтому координаты удобно задавать, используя изображение структуры в **TECPLOT**.

Результат выполнения командного файла можно просмотреть как описано выше: контекстное меню *Visualize* → **.dat files* (**TECPLOT**).

Структура с уже оптимизированной сеткой помещается в 2 файла: *_mdr.grd и *_mdr.dat – для **MDRAW**, *_msh.grd и *_msh.dat – для **MESH**.

3.1.2. Программный модуль расчета электрофизических параметров виртуальных приборов

В основе численного моделирования электрофизических параметров полупроводниковых приборов лежит решение системы уравнений в частных производных, описывающей статическое и динамическое поведение носителей в полупроводнике под влиянием внешних полей. Часть уравнений, входящих в эту базовую систему, может быть получена из уравнений Максвелла, а уравнения переноса – путем последовательного вычисления моментов классического кинетического уравнения Больцмана.

Решение интегро-дифференциального уравнения Больцмана представляет сложную проблему, особенно в случае пространственно неоднородных явлений. Обычно используется квазистатическое приближение, которое справедливо, если произведение максимальных скоростей носителей и времен релаксации пренебрежимо мало по сравнению с активными размерами

прибора. Используя вычисление двух моментов кинетического уравнения Больцмана, получим хорошо известную диффузионно-дрейфовую модель. В результате вычисления третьего момента получается уравнение баланса энергии, с учетом которого строится гидродинамическая модель. В этом случае в уравнения непрерывности необходимо ввести температурную зависимость коэффициентов.

В качестве граничных условий для фундаментальной системы уравнений используются напряжения, токи, заряды, температуры и т.д. на электрических и термических контактах моделируемого виртуального прибора.

Обычно фундаментальная система уравнений решается методом сеток с использованием алгоритма Ньютона при изменяемых граничных условиях. При этом используются модели физических процессов, таких, как, например, подвижность носителей, ширина запрещенной зоны, интенсивность рекомбинации носителей. Для большинства известных физических процессов в настоящее время имеются полуэмпирические модели, обладающие различной точностью и областью применения. Конкретные модели физических процессов выбираются, исходя из специфики конструкции и режимов работы прибора.

Альтернативный подход к решению кинетического уравнения Больцмана для полупроводниковых структур состоит в вычислении движения одного или более носителей на микроскопическом уровне с помощью метода Монте-Карло. Достоверные решения при расчетах методом Монте-Карло получаются при числе частиц 3000 и более. Метод Монте-Карло находит все более широкое применение, несмотря на его вычислительную трудоемкость.

DESSIS – программа для приборного и схемного моделирования одно-, двух- и трехмерных полупроводниковых структур. Она объединяет в себе современные физические модели и численные методы для моделирования большинства существующих на сегодняшний день полупроводниковых структур, начиная с субмикронных МОП-транзисторов и заканчивая гетероструктурами и лазерами. Для этой цели программа содержит множество моделей процессов, существующих в полупроводниковых приборах: дрейфовая диффузия, термодинамические эффекты, гидродинамические модели и многие другие. **DESSIS** также включает в себя большой набор средств для решения нелинейных уравнений, поддерживает Spice-модели.

DESSIS моделирует поведение полупроводниковых приборов, основываясь на уравнениях физики полупроводников, описывающих механизмы проводимости и распределения носителей. Реальный полупроводниковый прибор представляется в **DESSIS** как «виртуальный прибор», свойства которого дискретизированы по узлам неоднородной сетки. Следовательно, непрерывные функции, такие как профили легирования, разбиты на конеч-

ное число дискретных точек и значения этих функций между узлами сетки может быть получено путем интерполяции. Граничные и начальные условия задаются путем указания напряжений, токов, зарядов, температур и других параметров на электрических и тепловых контактах.

Для моделирования в **DESSIS** используются структуры, созданные с помощью модулей **DIOS**, **MDRAW**, **MESH**. Структура должна быть с оптимизированной расчетной сеткой. **DESSIS** не имеет графического интерфейса и управляется только командным файлом.

Командный файл состоит из набора секций, порядок расположения которых обычно не имеет значения. Строки, начинающиеся со знаков # и *, считаются комментариями.

Простейший командный файл имеет следующую структуру:

*Определение файлов моделируемой структуры и выходных файлов:

```
File{ grid = "@grid@" doping = "@doping@" plot = "@dat@"  
      current = "@plot@" output = "@log@" }
```

*Задание электрических контактов и начальных условий для них:

```
Electrode{ {name = "electrode1" voltage = V1} {name = "electrode2" cur-  
rent = I1}
```

```
.  
. }
```

*Задание термических контактов и начальных условий для них:

```
Termode{ {name = "termode1" temperature = T1}
```

```
.  
. }
```

*Задание моделей физических процессов, используемых в расчете:

```
Physics{
```

```
.  
. }
```

*Определение математических методов решения уравнений:

```
Math{
```

```
.  
. }
```

*Описание параметров и характеристик, которые будут рассчитываться:

```
Plot{
```

```
.  
. }
```

*Составление и решение необходимых систем уравнений:

```
Solve{
```

*Получение начального решения из начальных условий:
`Coupled{ Poisson Electron Hole }`

*Решение системы уравнений при переменных параметрах
*на электродах или термодах (или при других условиях):
`QuasiStationary(InitialStep = Step0 MaxStep = MaxStep MinStep =
MinStep
Goal{ name = "Наименование_контакта" parameter = Результирующе_значение })
{ Coupled{Hole Electron Poisson} } }`

Основные параметры секций командного файла **DESSIS** имеют следующие назначение и структуру:

`File{...}` – в данной секции определяются входные и выходные файлы **DESSIS**. Входные файлы – это файл сетки `*.grd` и файл распределения примесей `*.dat` моделируемой полупроводниковой структуры. Выходные файлы: файл, содержащий распределения различных параметров на входной сетке – `*_des.dat`; файл, содержащий различные зависимости, представляемые в виде графиков – `*_des.plt`; файл протокола `*_des.log`. При использовании **DESSIS** в составе проекта **GENESISe** со стандартными именами файлов (например, `n3_mdr.grd`, `n4_des.dat` и т.д.) удобно эти файлы обозначать таким образом:

```
grid = "@grid@" doping = "@doping@" plot = "@dat@"  
current = "@plot@" output = "@log@"
```

При таком определении будут автоматически подставлены файлы моделируемой структуры и созданы выходные файлы со стандартными именами. При использовании нестандартных имен необходимо явно указать имена файлов, например:

```
grid = "nmos_mdr.grd" doping = "nmos_mdr.dat" plot = "output_des.dat"  
current = "output_des.plt" output = "output_des.log"
```

Файлы с расширением `*_des.plt` можно просматривать в программе **INSPECT**, а файл `*_des.dat` вместе с соответствующим ему файлом `*_mdr.grd` в программе **TECPLOT**.

`Electrode{...}` – эта секция служит для определения электрических контактов моделируемой структуры и задания начальных параметров на них. Данные параметры служат электрическими граничными условиями при решении систем уравнений, описывающих электрофизические свойства моделируемого прибора. Названия электродов соответствуют названиям, данным в программе **DIOS** или **MDRAW**. Контакты, которые не описаны в данной секции, игнорируются **DESSIS**. В качестве начальных параметров

на электродах могут быть заданы: напряжение (**Voltage**, В), ток (**Current**, А), заряд (**Charge**, Кл) и другие параметры. Можно также указать, что к электроду подключен резистор (**Resistor**, Ом). При задании затвора МОП-транзистора необходимо указывать разность работ выхода между металлом затвора и кремнием (**barrier**, эВ). При использовании затвора из сильнолегированного поликремния нужно указать тип проводимости поликремния (**material = "PolySi"(N)**). Например:

```
Electrode { {name = "source" voltage = 0.0}
            {name = "gate" voltage = -2.0 material = "PolySi"(N)}
            {name = "substrate" current = 1e-3}
            {name = "drain" voltage = 2.0 resistor = 100}
            {name = "gate1" voltage = 5.0 Barrier=-0.55} }
```

Termode{...} – секция для определения термических контактов. Если при расчете не учитываются термодинамические характеристики модели, то данная секция не используется. Секция по назначению и структуре аналогична секции **electrode{ }**. В качестве начальных параметров чаще всего используются температура (**temperature**, К), тепловое сопротивление (**SurfaceResistance**, см²·К/Вт), коэффициент теплопроводности – величина, обратная тепловому сопротивлению (**SurfaceConductance**) и др. Например:

```
Thermode {
{ Name = "substrate" Temperature = 300 }
{name = "surface" Temperature = 310 SurfaceResistance = 0.1}}
```

Physics{...} – секция для описания используемых в расчете физических моделей. Основные параметры:

AreaFactor = number – задает толщину [мкм] двумерной структуры, преобразуя ее в трехмерную, по умолчанию 1 мкм;

Temperature = number – температура [К], при которой находится виртуальная структура, по умолчанию 300 К;

EffectiveIntrinsicDensity(BandGapNarrowing(Slotboom)) – модель сужения запрещенной зоны кремния, по умолчанию учет этого эффекта включен. Наиболее часто используется модель **Slotboom**, которую можно задавать в виде **EffectiveIntrinsicDensity(Slotboom)**;

Hydrodynamic – включение гидродинамической транспортной модели;

Mobility(...) – задание различных моделей, учитывающих изменение подвижности носителей под действием различных факторов. Из них наиболее часто используются следующие:

DopingDependence(Masetti) – модели, учитывающие зависимость подвижности носителей от концентрации примесей, для кремния по умолчанию используется модель **Masetti**;

HighFieldSaturation(GradQuasiFermi) – модели насыщения дрейфовой скорости носителей в сильном электрическом поле, по умолчанию используется GradQuasiFermi; также часто используется модель Eparallel, учитывающая параллельное поверхности подложки электрическое поле;

NormalElectricField или Enormal – модели, учитывающие влияние нормального к поверхности подложки электрического поля;

CarrierCarrierScattering(ConwellWeisskopf) – учет рассеивания носителей на других носителях, по умолчанию используется модель Conwell-Weisskopf;

Recombination(...) – используемые модели генерации-рекомбинации носителей, по умолчанию все модели отключены. Наиболее часто используются следующие модели:

SRH(models) – рекомбинация Шокли–Рида–Холла, models – учет зависимости от концентрации примесей (DopingDependence), от температуры (TempDependence), учет туннельного эффекта (Tunneling) и др.;

CDL(models) – рекомбинация на парных дефектных энергетических уровнях, models – те же, что и в рекомбинации ШРХ;

Auger – рекомбинация Оже;

Band2Band – генерация носителей путем туннельного перехода зона–зона;

Avalanche(VanOverstraeten GradQuasiFermi) – лавинная генерация электронно-дырочных пар (или ударная ионизация); модель по умолчанию VanOverstraeten; модель напряженности внутреннего электрического поля GradQuasiFermi (по умолчанию) либо Eparallel;

SurfaceSRH – поверхностная рекомбинация ШРХ;

Thermodynamic – включение учета термодинамических характеристик моделируемой структуры, например, для учета саморазогрева;

Charge(Concentration = number) – концентрация зарядов в оксиде кремния, см^{-3} , по умолчанию 0 см^{-3} .

Physics(MaterialInterface="Oxide/Silicon") {charge(surfconc=Nss)} – таким образом можно задать концентрацию зарядов на границе раздела оксид–кремний, см^{-3} . Подобным образом задаются и другие параметры и модели на границах раздела, для отдельных материалов, областей и т.д. Следует обратить внимание на то, что данные команды не включаются в основную секцию Physics{ }.

Для многих задач достаточно следующих моделей физических процессов:

```
Physics{ AreaFactor = number Temperature = number  
EffectiveIntrinsicDensity(Slotboom)
```

```
Mobility( DopingDependence HighFieldSaturation Enormal )
```

```
Recombination( SRH(DopingDependence) CDL(DopingDependence)
```

```
Band2Band Avalanche ) Charge(Concentration = number) }
```

Physics(MaterialInterface="Oxide/Silicon"){charge(surfconc=Nss) }

Math{...} – секция, в которой описываются используемые для решения уравнений математические методы. Наиболее часто используемые параметры:

Cylindrical – указывает, что для моделируемой структуры необходимо использовать цилиндрическую систему координат, это полезно при моделировании диодных и других простых структур;

Derivatives – использование аналитических производных подвижности носителей в решаемых уравнениях. По умолчанию этот параметр включен, для его выключения нужно указать **Derivatives**;

AvalDerivatives – использование аналитических производных в уравнениях ударной ионизации. По умолчанию этот параметр включен, для его выключения нужно указать **AvalDerivatives**;

NewDiscretization – использование улучшенной схемы дискретизации уравнений. По умолчанию этот параметр включен, для его выключения нужно указать **NewDiscretization**;

RelErrControl – включение относительного критерия остановки итерационного процесса при достижении необходимой точности (по умолчанию включен); задание **RelErrControl** включает абсолютный критерий, при этом необходимо задать параметр **Digits=number** (по умолчанию **Digits = 5**), означающий число знаков после запятой в критерии точности;

Iterations – задание максимального количества итераций на каждом шаге, по умолчанию **Iterations=50**. Если уравнения не сходятся после заданного количества итераций, то шаг уменьшается и процедура повторяется;

Extrapolate – использование экстраполяции при итерационном решении уравнений. По умолчанию параметр выключен. Рекомендуется его включать для улучшения сходимости уравнений;

Smooth – сглаживание результатов, полученных на соседних шагах; используется при плохой сходимости.

Для большинства случаев достаточно явно заданных параметров:

Math{ RelErrControl Iterations = 20 Extrapolate }

Plot{...} – определение физических величин, распределения которых будут рассчитаны и занесены в файл *_des.dat. Вычислены будут только те величины, расчет которых возможен на основе выбранных моделей физических процессов. Наиболее часто используемые величины:

AcceptorConcentration – концентрация акцепторных примесей;

AntimonyActiveConcentration – концентрация электрически активной сурьмы;

AntimonyConcentration – концентрация сурьмы;

AntimonyPlusConcentration – концентрация положительных ионов сурьмы;
ArsenicActiveConcentration – концентрация электрически активного мышьяка;
ArsenicConcentration – концентрация мышьяка;
ArsenicPlusConcentration – концентрация положительных ионов мышьяка;
AugerRecombination – скорость рекомбинации Оже;
AvalancheGeneration – скорость лавинной генерации носителей;
Band2BandGeneration – скорость генерации носителей путем туннельного перехода зона–зона;
BandGap – ширина запрещенной зоны;
BandgapNarrowing – сужение запрещенной зоны;
BoronActiveConcentration – концентрация электрически активного бора;
BoronConcentration – концентрация бора;
BoronMinusConcentration – концентрация отрицательных ионов бора;
BuiltinPotential – встроенный электрический потенциал;
CDLRecombination – скорость рекомбинации на парных уровнях дефектов;
ConductionBandEnergy – энергия на дне зоны проводимости;
DielectricConstant – диэлектрическая проницаемость;
DonorConcentration – концентрация доноров;
DopingConcentration – разность концентрации донорных и акцепторных примесей;
eCurrentDensity – плотность электронного тока;
eDensity – концентрация электронов;
eDirectTunnelCurrent – плотность туннельного электронного тока;
eDriftVelocity – дрейфовая скорость электронов;
EffectiveBandGap – эффективная ширина запрещенной зоны;
EffectiveIntrinsicDensity – эффективная собственная концентрация носителей;
eGradQuasiFermi – градиент электронного квазиуровня Ферми;
eQuasiFermiPotential – электронный квазипотенциал Ферми;
ElectricField – напряженность электрического поля;
ElectronAffinity – электронное сродство;
ElectrostaticPotential – электростатический потенциал;
eLifetime – время жизни электронов;
eMobility – подвижность электронов;
eSaturationVelocity – скорость электронов в области насыщения;
eTemperature – температура электронов;
eVelocity – скорость электронов;

hCurrentDensity – плотность дырочного тока;
hDensity – концентрация дырок;
hDirectTunnelCurrent – плотность туннельного дырочного тока;
hDriftVelocity – дрейфовая скорость дырок;
hGradQuasiFermi – градиент дырочного квазиуровня Ферми;
hLifetime – время жизни дырок;
hMobility – подвижность дырок;
HotElectronInj – инжекция горячих электронов;
HotHoleInj – инжекция горячих дырок;
hQuasiFermiPotential – дырочный квазипотенциал Ферми;
hSaturationVelocity – скорость дырок в области насыщения;
hTemperature – температура дырок;
hVelocity – скорость дырок;
LatticeTemperature – температура;
PhosphorusActiveConcentration – концентрация электрически актив-
ного фосфора;
PhosphorusConcentration – концентрация фосфора;
PhosphorusPlusConcentration – концентрация положительных ионов
фосфора;
QuasiFermiPotential – квазипотенциал Ферми;
SpaceCharge – пространственный заряд;
SRHRecombination – скорость рекомбинации Шокли – Рида – Холла;
ThermalConductivity – теплопроводность;
ThomsonHeat – скорость выделения теплоты в результате эффекта
Томсона;
TotalConcentration – полная концентрация примесей;
TotalCurrentDensity – полная плотность тока;
TotalHeat – полная скорость выделения теплоты;
TotalRecombination – полная скорость рекомбинации.

Пример:

```

Plot{ AcceptorConcentration DonorConcentration BoronConcentration
      PhosphorusConcentration TotalConcentration DopingConcentration
BandGap
      BandgapNarrowing BuiltInPotential ElectrostaticPotential SpaceCharge
ElectricField
      SRHRecombination CDLRecombination AvalancheGeneration
      Band2BandGeneration TotalRecombination eDensity eMobility eCurrent-
Density
      hDensity hMobility hCurrentDensity TotalCurrentDensity LatticeTempera-
ture }

```

`Solve{...}` – секция для задания используемых уравнений и условий их решения. В данной секции важен порядок следования команд. Обычно используется следующая схема решения: получение начального решения, затем циклическое изменение с определенным шагом какого-либо начального параметра и расчет уравнений в режиме установившегося равновесия (квазистационарный режим). Для решения уравнений обычно используется алгоритм Ньютона. Начальное решение чаще всего формируется за один или два шага. Например, можно на первом шаге решить уравнение Пуассона с использованием начальных условий, заданных в секции `Electrode{ }`. На втором шаге решается система уравнений, состоящая из уравнения Пуассона и уравнений непрерывностей для электронов и дырок, используя в качестве начальных условий результаты, полученные на первом шаге:

```
Poisson
Coupled{ Poisson Electron Hole }
```

Такой подход обычно обеспечивает хорошую сходимость. Можно на первом же шаге решать систему уравнений, тогда отдельное решение уравнения Пуассона и второй шаг не нужны. При учете термодинамических свойств моделируемого прибора рекомендуется в начальное решение не включать уравнения термодинамики для обеспечения лучшей сходимости.

После расчета начального решения обычно используется следующая процедура: с определенным шагом на заданном электроде (термоде) изменяется начальный параметр, для каждого шага рассчитывается система уравнений `coupled{Poisson Electron Hole}` или `coupled{Poisson Electron Hole Temperature}` (при учете термодинамических свойств) в квазистационарных условиях, используя новое значение параметра вместо исходного. В качестве начального используется решение, полученное на предыдущем шаге. Если система уравнений не сходится, то шаг изменения параметра уменьшается, и система рассчитывается заново. После успешного решения шаг увеличивается. Процедура повторяется, пока параметр на электроде (термоде) не достигнет заданного значения. В случае систематической расходимости уравнений расчет прерывается. Параметры изменения шага: начальный (`InitialStep`), минимальный (`MinStep`) и максимальный (`MaxStep`) шаги, а также коэффициенты увеличения (`Increment`) и уменьшения (`Decrement`) шага.

Например:

```
QuasiStationary( InitialStep = 1e-3 MaxStep = 1e-2 MinStep = 1e-7
Goal{ name = "gate" voltage = 5 }) { Coupled{Hole Electron Poisson} }
```

В данном примере напряжение на электроде `gate` изменяется от начального до 5 В, шаг изменения и пределы его вариаций заданы параметра-

ми `InitialStep`, `MaxStep` и `MinStep`. `Increment` и `Decrement` установлены по умолчанию (оба равны 2). Параметры на остальных электродах остаются неизменными. На каждом шаге решается система, состоящая из уравнений Пуассона, непрерывности для электронов и дырок.

Примеры команды `Solve{ }`:

1. Без учета термодинамических характеристик:

```
Solve{ Poisson Coupled{Poisson Electron Hole}
      QuasiStationary( InitialStep = 0.001 MaxStep = 0.01 MinStep = 1e-7
                      Goal{ name = "gate" voltage = 5 })
      { Coupled{Hole Electron Poisson} } }
```

2. С учетом термодинамических характеристик (например, при учете само-разогрева):

```
Solve{ Coupled{Poisson Electron Hole}
      QuasiStationary( InitialStep = 0.01 MaxStep = 0.1 MinStep = 1e-5
                      Goal{ name = "drain" voltage = 30 })
      { Coupled{Hole Electron Poisson Temperature} } }
```

В команде `Solve{ }` может быть несколько команд `Goal{ }`. После выполнения команды `Solve{ }` на использованном в команде `Goal{ }` электроде (термоде) остается то значение параметра, которое было последним в итерационной процедуре. В выходной файл `*_des.dat` записываются указанные в секции `Plot{ }` величины, рассчитанные при последнем значении параметра на электроде. В файл `*_des.plt` записываются данные по мере изменения значения рассматриваемого параметра. Поэтому различные распределения из файла `*_des.dat` в **TECPLOT** можно просмотреть только при фиксированном режиме моделируемого прибора. Характеристики из файла `*_des.plt` можно просмотреть в **INSPECT** во всем диапазоне изменения рассматриваемого параметра – это различные вольтамперные и другие характеристики.

3.2. Создание и исследование диодных структур

Для исследования диодных структур разработаны командные файлы моделирования технологии в модуле **DIOS** (командный файл 3.1), оптимизации расчетной сетки в модуле **MESH** (командный файл 3.2), расчета прямой и обратной ветви вольтамперной характеристики в модуле **DESSIS** (командные файлы 3.3 и 3.4 соответственно).

Маршрут изготовления диодной структуры.

1. Исходная подложка марки КДБ0,005 с ориентацией (100).
2. Эпитаксиальное наращивание слоя кремния р-типа при температуре 1190 °С со скоростью 300 нм/мин с заданным удельным сопротивлением.

3. Окисление при температуре 1100 °С в течение 10 минут в атмосфере сухого кислорода.
4. Осаждение слоя нитрида кремния толщиной 1000 Å.
5. Создание фоторезистивной маски толщиной 1000 нм и шириной окна 10 мкм.
6. Вытравливание окна в нитриде кремния со скоростью 100 нм/мин.
7. Удаление фоторезиста.
8. Нарращивание толстого окисла при температуре 1100 °С в течение 100 минут в инертной атмосфере газа-носителя с расходом азот – 1 л/мин, H₂O – 2 л/мин.
9. Удаление нитрида.
10. Нормальная имплантация фосфора при энергии 80 кэВ и дозой 100 мКл/см².
11. Диффузионная разгонка фосфора в инертной атмосфере при температуре 1000 °С в течение 30 минут.
12. Стравливание тонкого слоя окисла – вскрытие контактного окна.
13. Осаждение слоя алюминия толщиной 0,5 мкм.
14. Создание под контакт фоторезистивной маски толщиной 1000 нм и шириной 11 мкм.
15. Анизотропное травление алюминия со скоростью 100 нм/мин.
16. Удаление фоторезистивной маски.

Листинг командного файла 3.1

```

Title('Simple diode')
grid(x=(0.0, 30.0) y=(-10.0, 0.0), nx=10)
Replace(Control(ngra=1))

# Задание параметров исходной подложки:
substrate(orientation=100, element=B, rho=0.005, ysubs=0.0)

# Эпитаксиальное наращивание:
diff(GrowthRate=300, temp=1190, atmo=Epitaxy, ELEM=B,
Conc=1/(1.6e-19*450*@Rho_Epi@), thickness=@D_Epi@um)

comment('Oxidation')
diffusion(time=10, temperature=1100, atmosphere=O2)

comment('Silicon nitride deposition')
deposit(material=si3n4, thickness=0.1)

comment('Photo mask')
mask(material=resist, thickness=1000nm, xleft=10.0, xright=20.0)

```

```
comment('Etching window in nitride')
etching(material=si3n4, stop=oxgas, rate(anisotropic=100))
```

```
comment('Photoresist removing')
etching(material=resist)
```

```
comment('High-temperature annealing in H2O atmosphere')
diff(time=100, temperature=1100, Flow(h2O=2.0l/min, n2=1.0l/min), at-
mosphere=mixture)
```

```
comment('Nitride removing')
etching(material=si3n4)
graphic(plot)
comment('Phosphorus implantation')
implant(element=P, dose=100/1.6e-13, energy=80keV, tilt=0)
```

```
comment('High-temperature annealing in neutral atmosphere')
diff(time=30, temperature=1000, atmosphere=n2)
```

```
comment('Etching window in oxide')
etching(material=ox, stop=sigas)
```

```
comment('Aluminum deposition')
deposit(material=Al, thickness=0.5)
```

```
comment('Photo mask')
mask(material=resist, thickness=1000nm, xleft=9.5, xright=20.5)
```

```
comment('Etching aluminum')
etching(material=Al, stop=oxgas, rate(anisotropic=100))
```

```
comment('Photoresist removing')
etching(material=resist)
```

```
comment('Final structure')
Определение толщины слоев в заданном сечении:
1d(Rs=on, xsect(15.0))
```

```
# Сохранение одномерного концентрационного профиля в заданном сече-
нии:
```

```
1d(file=n@node@, species(netactive), xsect(15.0), fac=-1)
```

```
# Сохранение результатов моделирования в формате, пригодном для даль-
нейшего приборного моделирования:
```

```
Save(File='n@node@', Type=mdraw, compress=off,
Contacts(
```

```

contact1(name='cathode', 15.0, @D_Epi@+0.3)
contact2(name='anode', location=bottom) ) )
end

```

В результате выполнения командного файла 3.1 получена диодная структура, приведенная на рис. 3.5, с концентрационным профилем суммарной примеси в сечении с координатой $x = 15$ мкм (рис. 3.6).

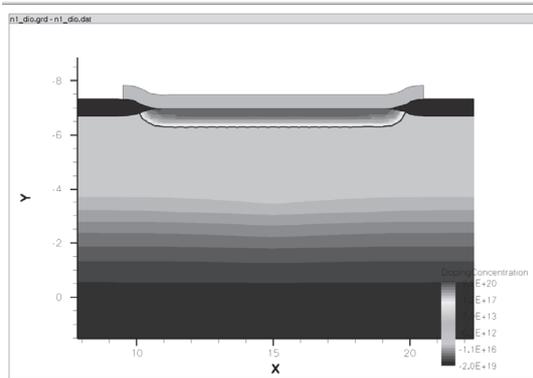


Рис. 3.5. Виртуальная модель диодной структуры

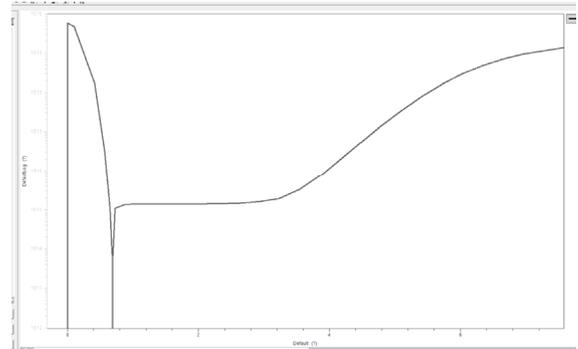


Рис. 3.6. Концентрационный профиль суммарной примеси в сечении с координатой $x = 15$ мкм

После оптимизации расчетной сетки, выполненной с помощью командного файла 3.2 в модуле **MESH**, получена структура, приведенная на рис. 3.7.

Листинг командного файла 3.2

```

Title "Diode"

Definitions{
# Объявление областей определения сетки и задание их параметров:
  Refinement "Default Region"
  { MaxElementSize = (2.0 2.0)
    MinElementSize = (0.6 0.6)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0) }

  Refinement "Epitaxial layer"
  { MaxElementSize = (0.6 0.6)
    MinElementSize = (0.2 0.2)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0) }

  Refinement "Cathode"
  { MaxElementSize = (0.2 0.2)

```

```

MinElementSize = (0.03 0.03)
RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0) }

```

Исходная модель полупроводниковой структуры:

```

SubMesh "SubMesh_0"
{ Geofile = "n@previous@_dio.grd"
  Datafile = n@previous@_dio.dat } }

```

Placements{

Геометрическое размещение заданных областей адаптации сетки:

```

Refinement "Default Region"
{ Reference = "Default Region" }

```

```

Refinement "Epitaxial layer"
{ Reference = "Epitaxial layer"
  RefineWindow = rectangle [( 0.0 - @<D_Epi>@ ) , ( 30.0-2.0 ) }

```

```

Refinement "Cathode"
{ Reference = "Cathode"
  RefineWindow = rectangle [( 8 - @<D_Epi>@ ) , ( 22 -
@<D_Epi/1.5>@ ) ] }

```

```

Submesh "SubMesh_0"
{ Reference = "SubMesh_0" } }

```

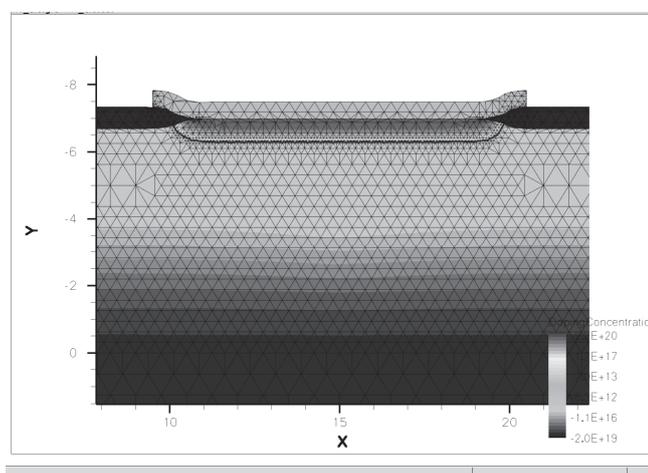


Рис. 3.7. Виртуальная диодная структура с оптимизированной расчетной сеткой

В модуле **DESSIS** прямая ветвь вольтамперной характеристики (рис. 3.8) в диапазоне прямого смещения (0÷—2) В рассчитана с помощью командного файла 3.3, а обратная ветвь вольт-амперной характеристики

(рис. 3.9) в диапазоне обратного смещения (0÷10000) В рассчитана с помощью командного файла 3.4.

Листинг командного файла 3.3

```
# Задание входных и выходных файлов:
File{ grid = "@grid@" doping = "@doping@" plot = "@dat@"
      current = "@plot@" output = "@log@" }

# Объявление электродов и задание начальных (граничных) условий на
них:
Electrode{ {name = "anode" voltage = 0.0}
            {name = "cathode" voltage = 0.0} }

# Включение необходимых моделей физических эффектов:
Physics{
# третье измерение (толщина) модели
AreaFactor = 1000
# модель зависимости ширины запрещенной зоны от уровня легирования
EffectiveIntrinsicDensity(Slotboom)
# Модели подвижности носителей:
Mobility(
# учет зависимости подвижности от концентрации примеси
DopingDependence
# включение модели насыщения дрейфовой скорости носителей
# в сильном электрическом поле
HighFieldSaturation(GradQuasiFermi)
# влияние нормального электрического поля
NormalElectricField )
# Модели генерационно-рекомбинационных процессов:
Recombination(
# модель рекомбинации Шокли – Рида – Холла
SRH(DopingDependence ) )

Temperature = 300 # температура модели }

# Настройка математических методов:
Math{ Extrapolate Iterations = 15 RelerrControl Derivatives
      NewDiscretization }

# Перечень рассчитываемых физических характеристик:
Plot{ DopingConcentration BoronConcentration PhosphorusConcentration
eDensity hDensity eQuasiFermi hQuasiFermi
ElectricField ElectrostaticPotential SpaceCharge
```

```

SRHRecombination TotalRecombination
eCurrentDensity hCurrentDensity TotalCurrentDensity      }

# Составление и решение системы уравнений:
Solve{
    # Начальное решение: уравнение Пуассона
    Poisson
# система уравнений, состоящая из уравнения Пуассона
# и уравнений непрерывностей для электронов и дырок
Coupled{ Poisson Electron Hole }

# Моделирование поведения прибора в квазистационарных условиях
# при изменении напряжения на заданном электроде:
    QuasiStationary( InitialStep = 0.02 MaxStep = 0.05 MinStep = 1e-7
# итоговое напряжение на электроде
    Goal{ name = "cathode" voltage = -2 }      )
    {
        # система уравнений, решаемая на каждой итерации
        Coupled{Hole Electron Poisson}      }      }

```

Листинг командного файла 3.4

```

File{ grid = "@grid@" doping = "@doping@" plot = "@dat@"
      current = "@plot@" output = "@log@" }

Electrode{ {name = "anode" voltage = 0.0}
           {name = "cathode" voltage = 0.0 resistor=1e10}      }

Physics{ AreaFactor = 1000 EffectiveIntrinsicDensity(Slotboom)

        Mobility( DopingDependence HighFieldSaturation(GradQuasiFermi)
                  NormalElectricField )
        Recombination( SRH(DopingDependence) Avalanche )
        Temperature = 300      }

Math{ Extrapolate Iterations = 10 RelerrControl Derivatives
      NewDiscretization AvalDerivatives }

Plot{ DopingConcentration BoronConcentration PhosphorusConcentration
      eDensity hDensity eQuasiFermi hQuasiFermi
      ElectricField ElectrostaticPotential SpaceCharge
      SRHRecombination AvalancheGeneration TotalRecombination
      eCurrentDensity hCurrentDensity TotalCurrentDensity      }

```

```

Solve{
  ##Initial Solution
  Poisson Coupled{ Poisson Electron Hole }

  QuasiStationary( InitialStep = 1e-7 MaxStep = 0.1 MinStep = 1e-8
  Increment = 2 Decrement = 3 Goal { name = "cathode" voltage =
10000 })
  { Coupled{Hole Electron Poisson} } }

```

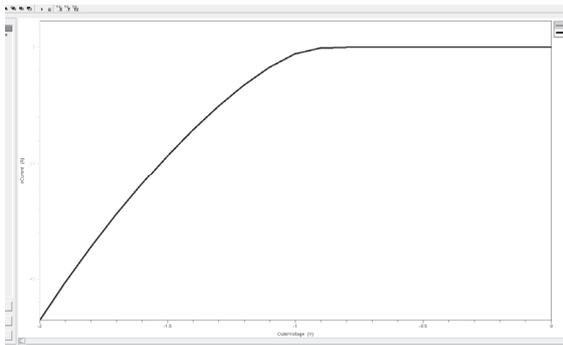


Рис. 3.8. Прямая ветвь
вольт-амперной характеристики
диода

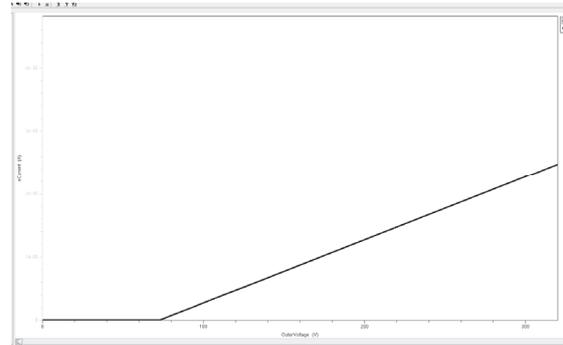


Рис. 3.9. Обратная ветвь
вольт-амперной характеристики диода

3.3. Создание и исследование МОП-структур

Для исследования МОП-структур разработаны командные файлы моделирования технологии в модуле **DIOS** (командный файл 3.5), оптимизации расчетной сетки в модуле **MESH** (командный файл 3.6), расчета передаточной характеристики, семейства выходных вольт-амперных характеристик и стоковой характеристики в модуле **DESSIS** (командные файлы 3.7, 3.8 и 3.9 соответственно).

Маршрут изготовления n-МОП-структуры.

1. Исходная подложка p-типа с ориентацией (100) и исходной концентрацией 10^{15} см^{-3} .
2. Нормальная имплантация бора с энергией 20 кэВ и дозой $3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.
3. Нарастивание тонкого подзатворного окисла в атмосфере сухого кислорода при температуре 1100 °С в течение 10 минут.
4. Осаждение поликремния толщиной 400 нм.
5. Формирование затворной маски с помощью нанесения поликремния толщиной 400 нм, нанесения резистивной маски толщиной 1000 нм.
6. Анизотропное травление поликремния со скоростью 100 нм/мин с последующим удалением фоторезиста.
7. Окисление поликремния при температуре 1100 °С в течение 15 минут в атмосфере сухого кислорода.

8. Ионное легирование примесью n-типа для создания истоковой, стоковой области и легирования поликремния ионами фосфора с энергией 100 кэВ и дозой 100 мКл/см².

9. Создание спейсеров: нанесение нитрида кремния толщиной 300 нм и анизотропное травление нитрида кремния со скоростью 100 нм/мин.

10. Нормальная имплантация фосфора с энергией 140 кэВ и дозой 1000 мКл/см².

11. Диффузионная разгонка имплантированной примеси в атмосфере сухого кислорода при температуре 1000 °С в течение 2 минут.

12. Нанесение защитного слоя SiO₂ толщиной 400 нм.

13. Формирование с помощью фотолитографии маски для контактных окон: нанесение резистивной маски толщиной 1000 нм, вскрытие контактных окон анизотропным травлением окисла толщиной 500 нм со скоростью 100 нм/мин с последующим удалением фоторезиста.

14. Осаждение слоя алюминия толщиной 1 мкм.

15. Создание под контакты фоторезистивной маски толщиной 1000 нм.

16. Травление алюминия со скоростью: анизотропная составляющая 100 нм/мин, изотропная – 10 нм/мин.

17. Удаление фоторезистивной маски.

Листинг командного файла 3.5

```
Title('n-MOS')

# Геометрические границы модели (половина симметричной структуры):
grid(x=(0.0, 3.3+@L_gate@/2) y=(-100.0, 0.0), nx=10)

# Silicon substrate definition
substrate(orientation=100, element=B, conc=1e15, ysubs=0.0)

# Start the graphical output, set to update each step and each time step

# define the refinement of the grid:
# maxtrl - defines the max. number of subdivisions of an initial triangle
# RefineGradient - max. level of subdivisions due to steep gradients
# RefineMaximum - max. level of subdivisions around the dopant maxima
# RefineJunction - max. level of subdivisions at junctions
# RefineBoundary - max. level of subdivisions at material interfaces

Repl( Cont(MaxTrl=10, RefineBoundary=-3, RefineGradient=-4, Refine-
Maximum=-3,
      RefineJunction=-6, Resist(MaxTrl=1), Ngra=1) )
graph(triangle=off, plot)
# Definition global models:
```

```
implantation:(function=p4, lateralfunction=pe)
diffusion:( moddiff=paiddiffusion, Si:(B:(ModClust=Equilibrium)),
           Si:(P:(ModClust=Equilibrium)) )
```

```
#***** Start simulation*****
```

```
implant(element=B, dose=3e12, energy=20keV, tilt=0)
```

```
comment('Gate oxidation')
```

```
diffusion(time=10, temperature=1100, atmosphere=O2)
```

```
comment('Polysilicon gate deposition')
```

```
deposit(material=po, thickness=400nm)
```

```
comment('Poly gate pattern')
```

```
mask(material=resist, thickness=1000nm, xleft=0, xright=@L_gate@/2)
```

```
comment('Poly gate etch')
```

```
etching(material=po, stop=oxgas, rate(anisotropic=100))
```

```
etching(material=resist)
```

```
comment('Poly oxidation')
```

```
diffusion(time=15, temperature=1100, atmosphere=O2)
```

```
comment('Phosphorus implantation for source and drain regions')
```

```
implant(element=P, dose=100/1.6e-13, energy=100keV, tilt=0)
```

```
comment('Nitride spacer')
```

```
deposit(material=si3n4, thickness=300nm)
```

```
etching(material=si3n4, stop=oxgas, rate(anisotropic=100))
```

```
implant(element=P, dose=1000/1.6e-13, energy=140keV, tilt=0)
```

```
diffusion(time=2, temperature=1000, atmosphere=O2)
```

```
deposit(material=ox, thickness=400nm)
```

```
comment('Contact windows')
```

```
mask(material=resist, thickness=1000nm, xleft=-0.1+@L_gate@/2,
      xright=1.65+@L_gate@/2)
```

```
etching(material=ox, remove=500nm, rate(anisotropic=100))
```

```
etching(material=resist)
```

```
comment('Deposit Al')
```

```
deposit(material=al, thickness=1000nm)
```

```

comment('Contacts')
mask(material=resist, thickness=1000nm, xleft=0.0,
xright=0.15+@L_gate@/2)

mask(material=resist, thickness=1000nm, xleft=1.5+@L_gate@/2,
xright=3.3+@L_gate@/2)
etch(material=al, remove=1600nm, rate(anisotropic=100, isotropic=10))
etch(material=resist)

comment('Full device structure')
Reflect(Reflect=0.0)

#***** End simulation *****

Comment('Saving final structure')

1d(file=n@node@_x_channel, spe(netactive), ysect(-0.05), fac=-1)
1d(file=n@node@_y_channel, spe(netactive), xsect(0.0), fac=-1)

Save(File='n@node@', Type=mdraw, compress=off,
Contacts( contact1(name='gate', 0.0, 1.5)
contact2(name='source', -(2.5+@L_gate@/2), 0.5)
contact3(name='drain', 2.5+@L_gate@/2, 0.5)
contact4(name='substrate', location=bottom) ) )

end

```

В результате выполнения командного файла 3.5 получена n-МОП-структура, приведенная на рис. 3.10, с концентрационным профилем суммарной примеси в сечениях с координатами $y = -0,05$ мкм (рис. 3.11) и $x = 0$ мкм (рис. 3.12).

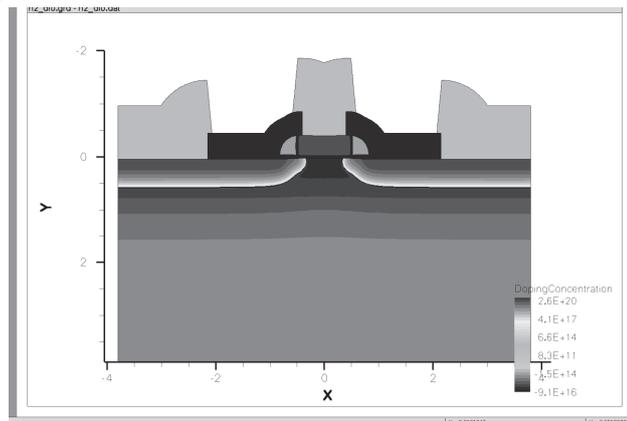


Рис. 3.10. Виртуальная модель n-МОП-структуры

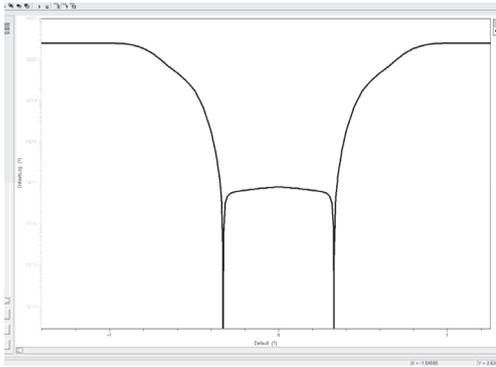


Рис. 3.11. Концентрационный профиль суммарной примеси в сечении с координатой $y = 0,05$ мкм

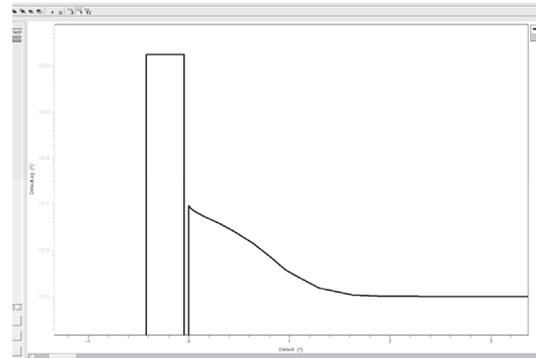


Рис. 3.12. Концентрационный профиль суммарной примеси в сечении с координатой $x = 0$ мкм

После оптимизации расчетной сетки, выполненной с помощью командного файла 3.6 в модуле **MESH**, получена структура, приведенная на рисунке 3.13.

Листинг командного файла 3.6

```
Title "n-MOS"
Definitions{
  # Refinement regions  Refinement "Default Region"
  { MaxElementSize = (1.0 1.0)  MinElementSize = (0.2 0.2)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0)  }
  Refinement "Active region"
  { MaxElementSize = (0.2 0.2)  MinElementSize = (0.05 0.03)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0)  }
  Refinement "Under gate"
  { MaxElementSize = (0.1 0.1)  MinElementSize = (0.02 0.02)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0)  }
  Refinement "Recomb"
  { MaxElementSize = (0.03 0.03)  MinElementSize = (0.008 0.008)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0)  }
  Refinement "Recomb1"
  { MaxElementSize = (0.01 0.01)  MinElementSize = (0.002 0.002)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0)  }
  Refinement "Channel"
  { MaxElementSize = (0.01 0.01)  MinElementSize = (0.008 0.008)
    RefineFunction = MaxTransDiff(Variable = "DopingConcentration",
Value = 1.0)  }
  # Profiles
```

```

SubMesh "SubMesh_0"
{ Geofile = "n@previous@_dio.grd"  Datafile = "n@previous@_dio.dat"
} }

```

```

Placements{
# Refinement regions
  Refinement "Default Region"
  { # Default region  Reference = "Default Region" }
  Refinement "Active region"
  { Reference = "Active region"
    RefineWindow = rectangle[( -@<3.5+L_gate/2.0>@ 0.0 ) ,
  ( @<3.5+L_gate/2.0>@ 3.0 )] }
  Refinement "Under gate"
  { Reference = "Under gate"
    RefineWindow=  rectangle[( -@<0.5+L_gate/2.0>@ 0.0) ,
  (@<0.5+L_gate/2.0>@ 1.0)]}
  Refinement "Recomb"
  { Reference = "Recomb"
    RefineWindow =  rectangle[( -@<L_gate/2.0>@ 0.0 ) ,
  ( @<L_gate/2.0>@ 0.4 )] }
  Refinement "Recomb1"
  { Reference = "Recomb1"
    RefineWindow =  rectangle[( @<L_gate/2.0-0.4>@ 0.0 ) ,
  ( @<L_gate/2.0>@ 0.3 )] }
  Refinement "Channel"
  { Reference = "Channel"
    RefineWindow =  rectangle[( -@<L_gate/2.0>@ -0.04 ) ,
  ( @<L_gate/2.0>@ 0.04 )] }

  Submesh "SubMesh_0"
  { Reference = "SubMesh_0" } }

```

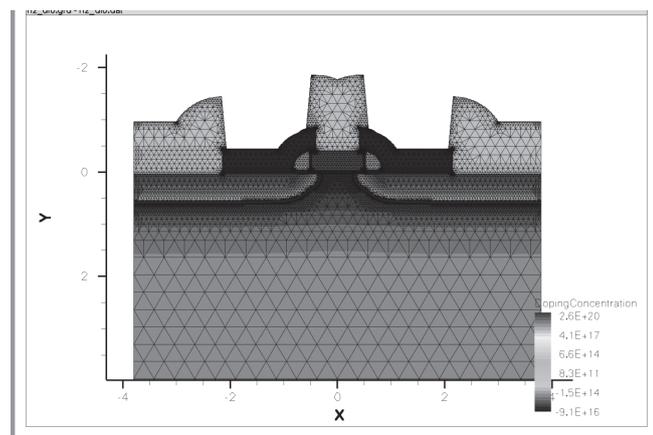


Рис. 3.13. Виртуальная n-МОП-структура с оптимизированной расчетной сеткой

В модуле **DESSIS** рассчитываются передаточная характеристика (рис. 3.14) с помощью командного файла 3.7, семейство выходных вольтамперных характеристик (рис. 3.15) с помощью командного файла 3.8, и стоковая характеристика (рис. 3.16) с помощью командного файла 3.9.

Листинг командного файла 3.7

```
File{ grid = "@grid@" doping = "@doping@" plot = "@dat@"
      current = "@plot@" output = "@log@" }

Electrode{ {name = "source" voltage = 0.0} {name = "gate" voltage = 0.0 }
           {name = "substrate" voltage = 0.0} {name = "drain" voltage = 0.0} }

Physics{ AreaFactor = 1e3 EffectiveIntrinsicDensity(Slotboom)
         Mobility( DopingDependence HighFieldSaturation(GradQuasiFermi)
                 NormalElectricField )
         Recombination( SRH(DopingDependence) )
         Temperature = 300 }

Physics(MaterialInterface="Oxide/Silicon") {charge(surfconc=1e11)}

Math{ Extrapolate Iterations = 15 RelerrControl Derivatives
      NewDiscretization method = Pardiso }

Plot{ AcceptorConcentration DonorConcentration DopingConcentration
      TotalConcentration eDensity hDensity eMobility hMobility
      BuiltinPotential ElectricField ElectrostaticPotential SpaceCharge
      SRHRecombination TotalRecombination eCurrentDensity hCurrentDensity
      TotalCurrentDensity eDriftVelocity hDriftVelocity eGradQuasiFermi
      hGradQuasiFermi eQuasiFermiPotential hQuasiFermiPotential }

Solve{ Poisson Coupled {Poisson Electron Hole}
       QuasiStationary ( InitialStep = 0.5 MaxStep = 0.5 MinStep = 1e-3
                        Goal { name = "drain" voltage = 10 } )
       { Coupled {Hole Electron Poisson} }
       QuasiStationary (InitialStep = 0.001 MaxStep = 0.05 MinStep = 1e-7
                        Goal { name = "gate" voltage = 5 } )
       { Coupled{Hole Electron Poisson} } }
```

Листинг командного файла 3.8

```
File{ grid = "@grid@" doping = "@doping@" plot = "@dat@"
      current = "@plot@" output = "@log@" }

Electrode{ {name = "substrate" voltage = 0.0} {name = "source" voltage = 0.0 }
```

```

{name = "gate" voltage = 0.0 } {name = "drain" voltage = 0.0} }

Thermode{ {name = "substrate" temperature = 300} }

Physics{ AreaFactor = 1e3 EffectiveIntrinsicDensity(Slotboom)
  Mobility( DopingDependence HighFieldSaturation(GradQuasiFermi)
  NormalElectricField )
  Recombination( SRH(DopingDependence TempDependence) )
  Temperature = 300
  Thermodynamic }

Physics(MaterialInterface="Oxide/Silicon") {charge(surfconc=1e11)}

Math{ Extrapolate Iterations = 15 RelerrControl Derivatives
  NewDiscretization method = Pardiso }

Plot{ temperature
  AcceptorConcentration DonorConcentration DopingConcentration Total-
Concentration
  eDensity hDensity eMobility hMobility
  BuiltinPotential ElectricField ElectrostaticPotential SpaceCharge
  SRHRecombination TotalRecombination
  eCurrentDensity hCurrentDensity TotalCurrentDensity eGradQuasiFermi
  hGradQuasiFermi eQuasiFermiPotential hQuasiFermiPotential eDriftVe-
locity }

Solve{ Poisson Coupled { Poisson Electron Hole}
  QuasiStationary ( InitialStep=0.5 Maxstep=0.8 MinStep=0.001
    Goal { name="gate" voltage=2 } )
  { coupled{ Poisson Electron Hole}}
  save(FilePrefix="vg1")

  QuasiStationary( InitialStep=0.5 Maxstep=0.8 MinStep=0.001
    Goal { name="gate" voltage=3 } )
  { coupled{ Poisson Electron Hole}}
  save(FilePrefix="vg2")

  QuasiStationary( InitialStep=0.5 Maxstep=0.8 MinStep=0.001
    Goal { name="gate" voltage=4 } )
  { coupled{ Poisson Electron Hole}}
  save(FilePrefix="vg3")

  QuasiStationary( InitialStep=0.5 Maxstep=0.8 MinStep=0.001
    Goal { name="gate" voltage=5 } )
  { coupled{ Poisson Electron Hole}}

```

```

save(FilePrefix="vg4")

QuasiStationary( InitialStep=0.5 Maxstep=0.8 MinStep=0.001
                  Goal { name="gate" voltage=6 } )
{ coupled{ Poisson Electron Hole}}
save(FilePrefix="vg5")

load(FilePrefix="vg1")
NewCurrent="Curve1"
QuasiStationary( InitialStep=0.001 Maxstep=0.05 MinStep=0.00001
                  Goal { name="drain" voltage=10.0 } )
{ coupled{ Poisson Electron Hole temperature}}

load(FilePrefix="vg2")
NewCurrent="Curve2"
QuasiStationary( InitialStep=0.001 Maxstep=0.05 MinStep=0.00001
                  Goal { name="drain" voltage=10.0 } )
{ coupled{ Poisson Electron Hole temperature}}

load(FilePrefix="vg3")
NewCurrent="Curve3"
QuasiStationary( InitialStep=0.001 Maxstep=0.05 MinStep=0.00001
                  Goal { name="drain" voltage=10.0 } )
{ coupled{ Poisson Electron Hole temperature}}

load(FilePrefix="vg4")
NewCurrent="Curve4"
QuasiStationary( InitialStep=0.001 Maxstep=0.05 MinStep=0.00001
                  Goal { name="drain" voltage=10.0 } )
{ coupled{ Poisson Electron Hole temperature}}

load(FilePrefix="vg5")
NewCurrent="Curve5"
QuasiStationary( InitialStep=0.001 Maxstep=0.05 MinStep=0.00001
                  Goal{ name="drain" voltage=10.0 } )
{coupled{ Poisson Electron Hole temperature}} }

```

Листинг командного файла 3.9

```

File{ grid = "@grid@" doping = "@doping@" plot = "@dat@"
      current = "@plot@" output = "@log@" }

Electrode{{name = "source" voltage = 0.0} {name = "gate" voltage = 0.0 }
           {name = "substrate" voltage = 0.0} {name = "drain" voltage = 0.0 resis-
tor=1e12} }

```

Physics{ AreaFactor = 1e3 EffectiveIntrinsicDensity(Slotboom)

Mobility(DopingDependence HighFieldSaturation(GradQuasiFermi) NormalElectricField)

Recombination(SRH(DopingDependence) Avalanche)

Temperature = 300 }

Physics(MaterialInterface="Oxide/Silicon") {charge(surfconc=1e11)}

Math{Extrapolate Iterations = 15 RelerrControl Derivatives
NewDiscretization Avalderivatives method = Pardiso }

Plot{AcceptorConcentration DonorConcentration DopingConcentration TotalConcentration

eDensity hDensity eMobility hMobility BuiltinPotential ElectricField ElectrostaticPotential SpaceCharge SRHRecombination AvalancheGeneration TotalRecombination

eCurrentDensity hCurrentDensity TotalCurrentDensity eDriftVelocity hDriftVelocity

eGradQuasiFermi hGradQuasiFermi eQuasiFermiPotential hQuasiFermiPotential }

Solve{Poisson Coupled { Poisson Electron Hole }

QuasiStationary(InitialStep = 1e-5 MaxStep = 0.05 MinStep = 1e-12
increment=2 decrement=3

Goal { name = "drain" voltage = 1e3 })

{ Coupled {Hole Electron Poisson} }

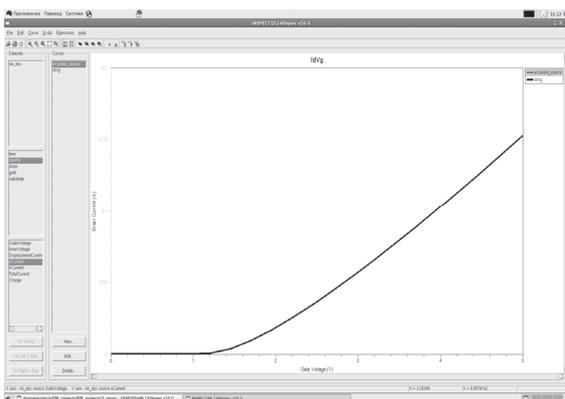


Рис. 3.14. Передаточная характеристика виртуальной n-МОП-структуры

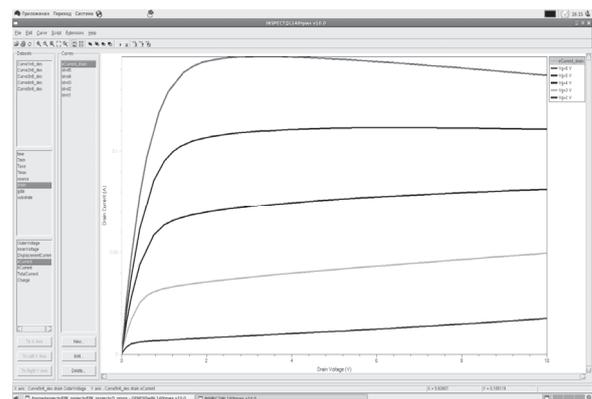


Рис. 3.15. Семейство выходных характеристик виртуальной n-МОП-структуры

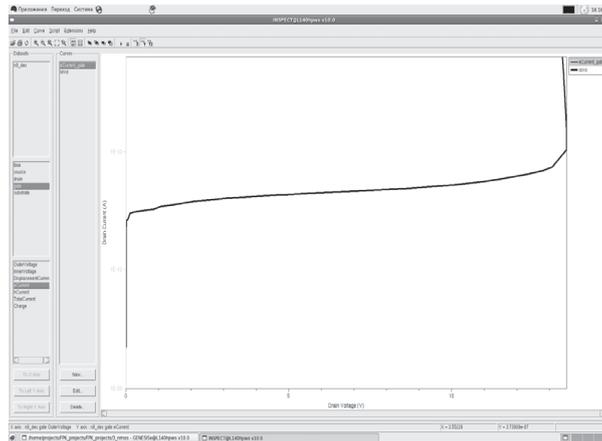


Рис. 3.16. Стоковая характеристика виртуальной n-МОП-структуры

3.4. Создание и исследование элементов СБИС и УБИС

Для исследования FinFet-структур разработаны командные файлы создания структуры в модуле **DEVICE** (командный файл 3.10), расчета вольт-амперной характеристики в модуле **DESSIS** (командный файл 3.11), построения и анализа графика в модуле **INSPECT** (командный файл 3.12).

Листинг командного файла 3.10

```

; Объявление переменных:
(define Xbox 90) (define Ybox 90) (define Zbox -40)
(define Xcha 35) (define Ycha 10) (define Zcha 20)
(define Xmas Xcha) (define Ymas Ycha) (define Zmas (+ Zcha 15))
(define Xsd 70) (define Ysd 70) (define Zsd 40)
(define Xsdm Xsd) (define Ysdm Ysd) (define Zsdm (+ Zsd 30))
(define Xgox Xcha) (define Ygox (+ Ycha 2)) (define Zgox (+ Zmas 2))
(define Xspa 15) (define Yspa Ysd) (define Zspa (- Zsdm 5))
(define Xpol 45) (define Ypol 60) (define Zpol 80)
;Units conversion from nm to the default unit on um (define nm 1e-3)

; Создание модели в виде набора геометрических примитивов:
;--- Исходная подложка
(isegeo:create-cuboid (position 0 0 Zbox) (position Xbox Ybox 0) "SiO2"
"BOX")

;--- Канальная область
(isegeo:create-cuboid (position 0 0 0) (position Xcha Ycha Zcha) "Silicon"
"Channel")

;--- Нитридная маска затвора
(isegeo:create-cuboid (position 0 0 Zcha) (position Xmas Ymas Zmas)
"Si3N4" "ChMask")

```

```

;--- Области стока и истока
(isegeo:create-cuboid (position Xcha 0 0) (position Xsd Ysd Zsd) "Silicon"
"SourceDrain")

;--- Нитридные маски стока и истока
(isegeo:create-cuboid (position Xcha 0 Zsd) (position Xsdm Ysdm Zsdm)
"Si3N4" "SDMask")

;--- Подзатворный окисел
(isegeo:set-default-boolean "BAB")
(isegeo:create-cuboid (position 0 0 0) (position Xgox Ygox Zgox) "Oxide"
"Gox")

;--- Нитридные спейсеры и их скругление
(isegeo:create-cuboid (position Xspa 0 0) (position Xcha Yspa Zspa)
"Si3N4" "Spacer")
(define fillet-radius (* 0.75 (- Xcha Xspa)) )
(isegeo:fillet-edges (find-edge-id (position Xspa (* 0.5 Yspa) Zspa))
fillet-radius)

;--- Поликремниевый затвор
(isegeo:create-cuboid (position 0 0 0) (position Xpol Ypol Zpol) "PolySi"
"Gate")

;--- Определение контакта затвора
(define GateID (find-body-id (position (* 0.5 Xspa)
(* 0.5 Ypol)
(* 0.5 (+ Zgox Zpol)) ) ) )
(isegeo:define-contact-set "gate" 4.0 (color:rgb 1.0 0.0 0.0 ) "==" )
(isegeo:set-current-contact-set "gate")
(isegeo:set-contact-faces (find-face-id (position (/ Xpol 2) (/ Ypol 2) Zpol )))

;--- Контакт к подложке:
(isegeo:define-contact-set "sub" 4.0 (color:rgb 1.0 0.0 0.0 ) "||" )
(isegeo:set-current-contact-set "sub")
(isegeo:set-contact-faces
(find-face-id(position (* 0.5 Xbox) (* 0.5 Ybox) Zbox)))

;--- Delete Source/Drain Mask
(define SDMaskID(find-body-id (position (* 0.5 (+ Xcha Xsdm))
(* 0.5 Ysdm) (* 0.5 (+ Zsd Zsdm)) ) ) )
(isegeo:delete-region SDMaskID)
(isegeo:reflect(part:entities (filter:type "solid?")) (position 0 0 0) (gvector -1
0 0) #t)

```

```

;--- Указание контакта стока
(isegeo:define-contact-set "drain" 4.0 (color:rgb 1.0 0.0 0.0) "###" )
(isegeo:set-current-contact-set "drain")
(isegeo:set-contact-faces
 (find-face-id(position (* 0.5 (+ Xcha Xsd)) (* 0.5 Ysd) Zsd )))
;--- Указание контакта истока
(isegeo:define-contact-set "source" 4.0 (color:rgb 1.0 0.0 0.0) "||" )
(isegeo:set-current-contact-set "source")
(isegeo:set-contact-faces
 (find-face-id(position (* -0.5 (+ Xcha Xsd)) (* 0.5 Ysd) Zsd )))
(isegeo:reflect(part:entities (filter:type "solid?")) (position 0 0 0) (gvector 0 -
1 0) #t)

;--- Равномерный концентрационный профиль бора в кремнии
(isedr:define-constant-profile "Boron_BG" "BoronActiveConcentration"
1e16)
(isedr:define-constant-profile-material "Boron_BG_PL" "Boron_BG" "Sili-
con")

;--- Концентрационный профиль фосфора в поликремнии
(isedr:define-constant-profile "Poly_conc" "PhosphorusActiveConcentra-
tion" 1e20)
(isedr:define-constant-profile-material "Poly_gate" "Poly_conc" "PolySi")

;--- Равномерные концентрационные профили мышьяка в областях сто-
ка и истока
(isedr:define-constant-profile "SD" "ArsenicActiveConcentration" 5e19)
(isedr:define-refinement-window "Drain_PIBox" "Cuboid" (position Xcha -
70 -30)
 (position(+ Xsd 30) (+ Ysd 30) (+ Zsd 30)))
(isedr:define-constant-profile-placement "Drain_PL" "SD" "Drain_PIBox" 8)
(isedr:define-refinement-window "Source_PIBox" "Cuboid"
 (position(* -1 Xcha) -70 -30)
 (position(* -1 (+ Xsd 30)) (+ Ysd 30) (+ Zsd 30)))
(isedr:define-constant-profile-placement "Source_PL" "SD"
"Source_PIBox" 8)

;--- Определение правил построения расчетной сетки
(isedr:define-refinement-size "Si_Mesh" 10 10 10 5 5 5)
(isedr:define-refinement-material "Si_Mesh_PL" "Si_Mesh" "Silicon" )
(isedr:define-refinement-size "Cha_Mesh" 2.5 2.5 2.5 0.5 2.0 2.0 )
(isedr:define-refinement-function "Cha_Mesh" "DopingConcentration"
"MaxTransDiff" 1)
(isegeo:bool-unite
 (list (car (find-body-id (position (* 0.5 Xcha) (* 0.5 Ycha) (* 0.5 Zcha) )))
 (car (find-body-id (position (* -0.5 Xcha) (* 0.5 Ycha) (* 0.5 Zcha) )))

```

```

(car (find-body-id (position (* 0.5 Xcha) (* -0.5 Ycha) (* 0.5 Zcha) )))
(car (find-body-id (position (* -0.5 Xcha) (* -0.5 Ycha) (* 0.5 Zcha) ))) ) )
(ise:addmaterial(find-body-id (position 0.0 (* 0.5 Ycha) (* 0.5 Zcha) ))
"Silicon" "Channel")
(isedr:define-refinement-region "Cha_Mesh_PL" "Cha_Mesh" "Chan-
nel" )
(isedr:define-refinement-window "ChannelMB" "Cuboid"
(position(* -1.0 Xcha) 0 0) (position Xcha Ycha Zcha) )
(isedr:define-refinement-window "ChannelMB1" "Cuboid"
(position(* -1.0 Xcha) (* -1 Ycha) 0) (position Xcha 0 Zcha) )
(isedr:define-multibox-size "ChannelMB_Def" 99 99 99 66 0.1 66 1 -
1.35 1)
(isedr:define-multibox-placement "ChannelMB_PL" "Chan-
nelMB_Def" "ChannelMB" )
(isedr:define-multibox-size "ChannelMB_Def1" 99 99 99 66 0.1 66 1
1.35 1)
(isedr:define-multibox-placement "ChannelMB_PL1" "Chan-
nelMB_Def1" "ChannelMB1" )

```

```

;--- Сохранение командных и граничных файлов, а также масштабиро-
вание структуры (уменьшение в 1000 раз) для перевода в наноразмеры
(ise:assign-material-and-region-names (part:entities (filter:type "solid?")))
(isegeo:scale(part:entities (filter:type "solid?")) nm nm nm )
(iseio:save-dfise-bnd (part:entities (filter:type "solid?")) "@boundary/o@")
(isedr:write-scaled-cmd-file "@commands/o@" nm)

```

Листинг командного файла 3.11

```

Electrode{ { name="source" voltage=0.0 } { name="drain" voltage=0.0 }
{ name="gate" voltage=0.0 workfunction=4.5 } { name="sub" vol-
tage=0.0 } }

File{ Grid = "@grid@" Doping = "@doping@" Plot = "@dat@"
Current = "@plot@" Output = "@log@" }

Physics{Mobility( DopingDep HighFieldsaturation(CarrierTempDrive) )
EffectiveIntrinsicDensity(OldSlotboom) Recombination(SRH(Doping Dep)) }

Plot{ eDensity hDensity eCurrent/Vector ElectricField/Vector eTempe-
rature Doping
eVelocity eEparal hEparal eQuantumPotential ConductionBand Valen-
ceBand }

```

```

Math{ Extrapolate Derivatives RelErrControl Digits=5 ErRef(elect-
ron)=1.e10
      ErRef(hole)=1.e10 Notdamped=50 Iterations=20 Newdiscretization
      Directcurrent Method=ParDiSo -VoronoiFaceBoxMethod Natural-
BoxMethod }

Solve{Coupled(iterations=150) { Poisson } Coupled{ Poisson Electron
Hole }
      NewCurrentFile="n@node@_init"
      Quasistationary( InitialStep=0.3 Minstep=1e-5 MaxStep=0.5
        Goal{ name="drain" voltage=0.05 } )
      { Coupled{ Poisson Electron Hole } }
      NewCurrentFile=""
      Quasistationary(InitialStep=1e-1 Minstep=1e-5 MaxStep=0.1
        Goal{ name="gate" voltage=0.8 } DoZero )
      { Coupled{ Poisson Electron Hole } } }

```

Листинг командного файла 3.12

```

set N @node@
proj_load @plot@ I($N)

cv_create Id_half($N) \
  "I($N) gate OuterVoltage" "I($N) drain TotalCurrent" y

cv_createWithFormula Id($N) \ "2.0*<Id_half($N)>" A A A A
cv_display Id($N)
cv_setCurveAttr Id($N) "" red solid 3 circle 6 defcolor 1 defcolor

gr_setAxisAttr X "Gate Voltage (V)" {18} {} {} black 1 {16} 0 5 0
gr_setAxisAttr Y "Drain Current (A)" {18} {} {} black 1 {16} 0 5 0

```

В результате выполнения командного файла 3.10 в модуле **DEVICE** получена виртуальная FinFet-структура, распределение концентрации активного мышьяка в которой приведено на рис. 3.17, а распределение концентрации активного фосфора – на рис. 3.18.

Для моделирования передаточной характеристики виртуальной FinFet-структуры сформирована расчетная сетка (рис. 3.19), а с помощью командного файла 3.12 для модуля **INSPECT** построена передаточная характеристика (рис. 3.20), рассчитанная в модуле **DESSIS** с помощью командного файла 3.11.

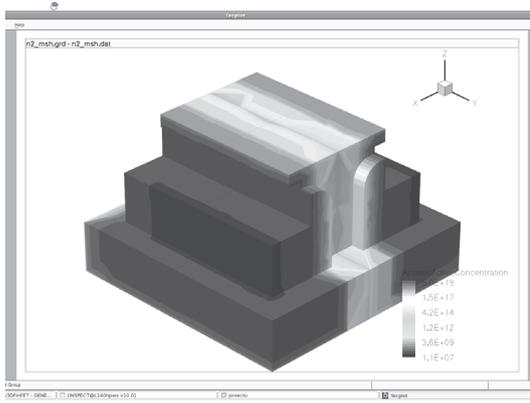


Рис. 3.17. Распределение концентрации активного мышьяка в виртуальной FinFet-структуре

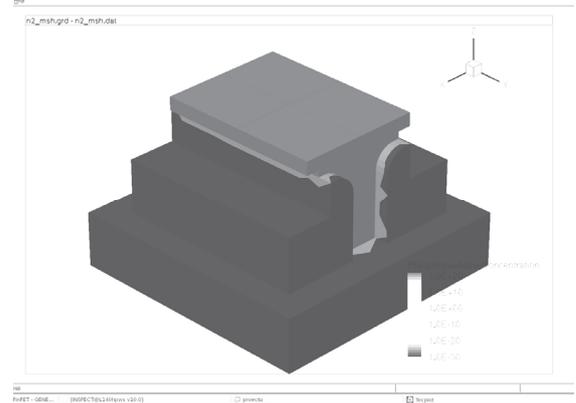


Рис. 3.18. Распределение концентрации активного фосфора в виртуальной FinFet-структуре

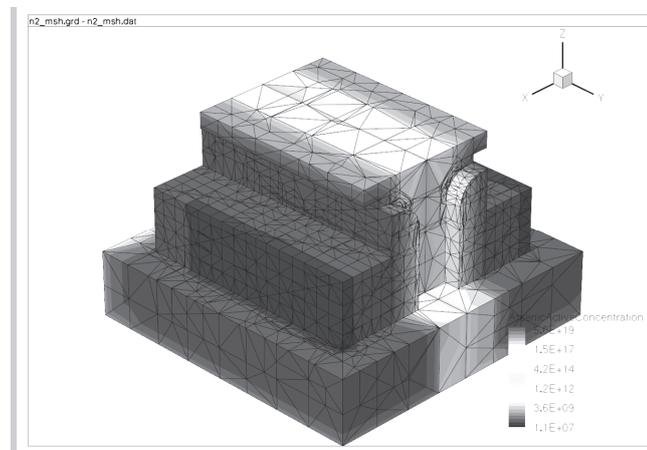


Рис. 3.19. Виртуальная FinFet-структура с расчетной сеткой

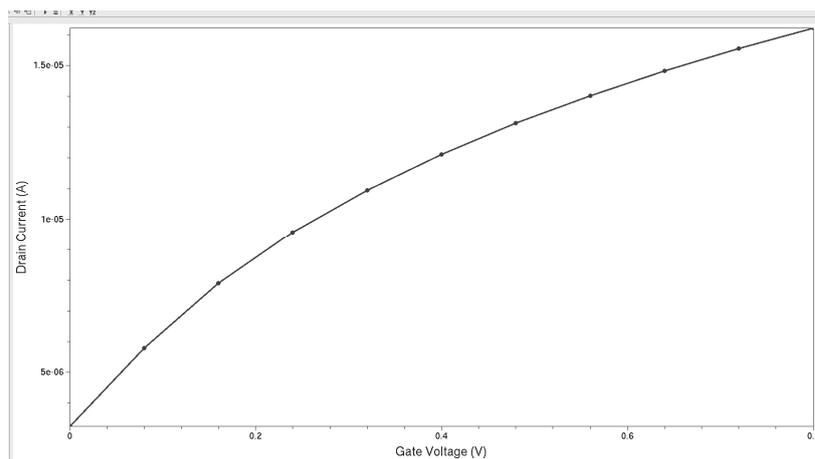


Рис.3.20. Передаточная характеристика виртуальной FinFet-структуры

Библиографический список

1. Бубенников А. Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и интегральных схем / А. Н. Бубенников. – М. : Высш. шк., 1989. – 320 с.
2. Бубенников А. Н. Физико-технологическое проектирование биполярных элементов кремниевых БИС / А. Н. Бубенников, А. Д. Садовников. – М. : Радио и связь, 1991. – 288 с.
3. Денисенко В. Особенности субмикронных МОП-транзисторов / В. Денисенко. – Режим доступа: http://www.chipnews.ru/html.cgi/archiv/02_07/4.htm
4. Казеннов Г. Г. Основы проектирования интегральных схем и систем / Г. Г. Казеннов. – М. : Бином, 2005. – 295 с.
5. Королев М. А. Элитное техническое образование / М. А. Королев // Электроника : Наука, Технология, Бизнес. – 2004. – № 4. – С. 79–81.
6. Королев М. А. Приборно-технологическое моделирование при разработке изделий микроэлектроники и микросистемной техники / М. А. Королев, Т. Ю. Крупкина, Ю. А. Чаплыгин // Известия вузов. Электроника. – 2005. – № 4–5. – С. 64–71.
7. Королев М. А. Технология, конструкции и методы моделирования кремниевых интегральных микросхем / М. А. Королев, Т. Ю. Крупкина, М. А. Ревелева. – М. : Бином, 2007. – Ч. 1 : Технологические процессы изготовления кремниевых интегральных схем и их моделирование. – 397 с.
8. Технология, конструкции и методы моделирования кремниевых интегральных микросхем : в 2 ч. / М. А. Королев [и др.]. – М. : Бином, 2009. – Ч. 2 : Элементы и маршруты изготовления кремниевых ИС и методы их математического моделирования. – 422 с.
9. Красников Г. Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов : в 2 ч. / Г. Я. Красников. – М. : Техносфера, 2002. – Ч. 1. – 416 с.
10. Курносов А. И. Технология производства полупроводниковых приборов и интегральных схем / А. И. Курносов, Б. Б. Юдин. – М. : Высш. шк., 1986. – 388 с.
11. Марголин В. И. Физические основы микроэлектроники / В. И. Марголин, В. А. Жабрев, В. А. Тупик. – М. : Академия, 2008. – 39 с.
12. Математическое моделирование технологических процессов в микроэлектронике / Г. В. Быкадорова, Л. А. Битюцкая, В. А. Гольдфарб. – Воронеж : Воронежский государственный университет, 1997. – Ч. 1 : Диффузия. – 116 с.
13. Моделирование полевых полупроводниковых приборов в САПР ISE TCAD : учеб. пос. для вузов / сост. : В. В. Ассессоров, Г. В. Быкадорова,

А. Ю. Ткачев. – Воронеж : Лаборатория оперативной печати Воронежского государственного университета, 2007. – 27 с.

14. Моделирование процессов внедрения и перераспределения примесей при ионной имплантации / В. В. Асессоров [и др.]. – Воронеж : Изд-во Воронежского государственного университета, 2004. – 203 с.

15. МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов / под ред. П. Антонетти [и др.]. – М. : Радио и связь, 1988. – 496 с.

16. Основы работы в среде приборно-технологической САПР ISE TCAD : учебно-методическое пособие / сост. : В. В. Асессоров [и др.]. – Воронеж : Лаборатория оперативной печати Воронежского государственного университета, 2006. – 61 с.

17. Пичугин И. Г. Технология полупроводниковых приборов / И. Г. Пичугин, Ю. Н. Таиров. – М. : Высш. шк., 1984. – 288 с.

18. Ревелева М. А. Моделирование процессов распределения примеси в полупроводниковых структурах / М. А. Ревелева. – М. : МГИЭТ (ТУ), 1996. – 196 с.

19. Сайт фирмы Siborg System Inc. – Режим доступа: <http://www.siborg.com>).

20. Сайт фирмы Silvaco. – Режим доступа: <http://www.silvaco.com>.

21. Сайт фирмы Synopsys. – Режим доступа: <http://www.synopsys.com>.

22. Технология СБИС : в 2 кн. / под ред. С. Зи. – М. : Мир, 1986. – Кн. 1. – 404 с. ; Кн. 2. – 416 с.

23. Тихомиров П. Система Sentaurus TCAD компании Synopsys. Новое поколение приборно-технологических САПР / П. Тихомиров, П. Пфеффли, М. Зорзи // Электроника : Наука, Технология, Бизнес. – 2006. – № 7. – С. 89–95.

Учебное издание

**ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ
ПРОЕКТИРОВАНИЕ
КОМПОНЕНТНОЙ БАЗЫ МИКРО-
И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ**

Учебно-методическое пособие

Составители:

**Быкадорова Галина Владимировна,
Ткачёв Александр Юрьевич,
Бормонтов Евгений Николаевич,
Битюцкая Лариса Александровна**

Редактор *И. Г. Вальнкина*

Компьютерная верстка *О. В. Шкуратько*

Подписано в печать 4.04.2016. Формат 60×84/16.
Уч.-изд. л. 7,5. Усл. печ. л. 7. Тираж 25 экз. Заказ 123.

Издательский дом ВГУ.
394000, г. Воронеж, пл. Ленина, 10

Отпечатано в типографии Издательского дома ВГУ.
394000, г. Воронеж, ул. Пушкинская, 3