

Выбор оптимального маршрута моделирования диффузионных процессов с использованием САПР TCAD

Виноградов Р. Н., Дроздов Д. Г., Корнеев С. В., Савченко Е. М.

В статье рассматривается методика расчёта диффузионных процессов с использованием современных средств приборно-технологического моделирования (САПР TCAD компании SYNOPSYS). Показано влияние модели расчёта, атмосферы процесса, а также других факторов на параметры диффузионных слоёв.

Введение

В современных условиях при производстве ИМС для расчёта технологических режимов наиболее целесообразно использовать системы автоматизированного проектирования (САПР), позволяющие проводить приборно-технологическое моделирование. Одним из таких является САПР TCAD компании SYNOPSYS. В составе данного программного средства для моделирования технологических процессов предложен большой набор инструментов: TSuprem4, DIOS, SProcess.

Одним из ключевых моментов при расчёте технологического процесса изготовления полупроводниковых приборов является диффузия примеси. При этом, для того чтобы получить достоверные результаты при расчётах диффузионных профилей, необходимо соблюдать целый ряд условий. Поэтому необходима разработка оптимального маршрута моделирования диффузионных процессов при использовании данного программного продукта.

Расчёт процесса диффузии в любом из указанных выше инструментов начинается с записи в командном файле сценариев команды, отвечающей за процесс диффузии; далее необходимо указать режим диффузии: время отжига, температуру, а также атмосферу процесса.

Кроме задания режима диффузии необходимо указать граничные условия, а также соответствующую модель диффузии.

Необходимость указания соответствующих граничных условий обусловлена возможностью перехода примеси в оксид и её дальнейшего перераспределения вследствие влияния оксида. Для решения большинства задач наиболее подходящими являются смешанные граничные условия, которые заданы по умолчанию.

Наиболее важным вопросом при описании в командном файле сценариев процесса диффузии является выбор модели диффузии. Как уже отмечалось, в САПР TCAD компании SYNOPSYS для моделирования технологических процессов предложены инструменты: TSuprem4, DIOS, SProcess.

Выбор инструмента для моделирования зависит от поставленных задач. Например, использование симулятора SProcess в отличие от DIOS и TSuprem4 предоставляет возможность 3-х мерного моделирования. При этом симулятор SProcess (в отличие от DIOS) не позволяет моделировать заgonку примеси из газовой фазы. Симулятор SProcess ограничивается возможностью отжига ионно-имплантированных слоёв.

Кроме того, модели процесса диффузии для разных симуляторов отличаются друг от друга. Поэтому очень важно правильно определиться с инструментом моделирования.

Более подробно о симуляторе TSuprem4 и моделях, рассматриваемых в нём, можно прочитать в работах [1, 2]. Поскольку симулятор DIOS обладает большими возможностями по сравнению с симулятором TSuprem4 (может использовать большее число моделей, в частности модели SUPREM-2 и SUPREM-3; расчёт кремний-германиевых структур), то на его рассмотрении остановимся более подробно.

Симулятор DIOS

В составе инструмента DIOS представлены 5 основных моделей диффузионных процессов: Conventional (обычная), Equilibrium (равновесная), LooselyCoupled (слабосвязанная), SemiCoupled (полусвязанная) и PairDiffusion (парная).

По умолчанию, в программе задана модель диффузии Conventional. Для данной модели уравнение, описывающее диффузию:

$$\frac{\partial c_{tot}}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad (1)$$

где поток примеси определяется как:

$$\mathbf{j} = -D(\text{grad } c_{act} + qc_{act} \text{grad } \varphi). \quad (2)$$

Здесь c_{tot} и c_{act} – полная и активная концентрации примеси (см^{-3}), D – коэффициент диффузии ($\text{см}^2/\text{с}$), q – заряженное состояние ($q = +1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл для доноров; $q = -1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл для акцепторов), φ – электростатический потенциал (В).

Для данной модели при определении коэффициента диффузии учитываются все взаимодействия примесей с точечными дефектами (вакансиями или междоузлиями).

Эффективный коэффициент диффузии примеси по данному механизму:

$$D = D^+ \frac{n_{ie}}{n} + D^x + D^- \frac{n}{n_{ie}} + D^{\bar{}} \left(\frac{n}{n_{ie}} \right)^2, \quad (3)$$

где D – общий коэффициент диффузии в кремнии, D^x – коэффициент диффузии по нейтральным вакансиям, D^+ – коэффициент диффузии по положительно заряженным вакансиям, D^- – коэффициент диффузии по отрицательно заряженным вакансиям, $D^{\bar{}}$ – коэффициент диффузии по дважды отрицательно заряженным вакансиям.

Для акцепторной примеси, например бора, диффузия происходит через нейтральные и положительно заряженные вакансии. Для донорной примеси – через нейтральные и отрицательно заряженные вакансии.

Модель Equilibrium аналогична модели Conventional. Основное их отличие в методе численного расчёта. В модели Equilibrium используется итерационный алгоритм Ньютона, а в модели Conventional – итерационный алгоритм Гуммеля. В общем случае, по умолчанию, для моделей Conventional, Equilibrium, а также LooselyCoupled коэффициенты диффузии берутся на основе модели SUPREM-3 [1].

Коэффициенты диффузии для разных примесей, рассчитанные по данной модели и используемые в программе TCAD, представлены далее:

$$D_N(B) = D_i^0 + D_i^+ \frac{p}{n_i} = \left[0.037 + 0.72 \frac{p}{n_i} \right] \cdot e^{-(3.46eV/kT)} \frac{cM^2}{c}, \quad (4)$$

$$D_N(As) = D_i^0 + D_i^- \left(\frac{n}{n_i} \right) = 0.66 \cdot e^{-(3.46eV/kT)} + 12 \left(\frac{n}{n_i} \right) \cdot e^{-(4.05eV/kT)} \frac{cM^2}{c}, \quad (5)$$

$$D_N(Sb) = 0.214 \cdot e^{-(3.65eV/kT)} + 15 \left(\frac{n}{n_i} \right) \cdot e^{-(4.08eV/kT)} \frac{cM^2}{c}, \quad (6)$$

$$D_N(P) = D_i^0 + D_i^- \left(\frac{n}{n_i} \right) + D_i^- \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 = 3.85 \cdot e^{-(3.66eV/kT)} + 4.44 \left(\frac{n}{n_i} \right) \cdot e^{-(4.0eV/kT)} + 44.2 \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \cdot e^{-(4.37eV/kT)} \frac{cM^2}{c}. \quad (7)$$

В статье [1], описывающей модель SUPREM-3, говорится о том, что преобладающим механизмом диффузии при температурах ниже $T = 1100 \text{ }^\circ\text{C}$ при условии, что в атмосфере отсутствуют окислительные компоненты, является диффузия по вакансионному механизму. Если любое из этих условий нарушено, то существенную роль начинает играть диффузия через междоузлия.

При росте оксида кремния в процессе диффузии поверхность Si/SiO₂ инжектирует избыточные атомы кремния в кремниевую подложку. Это перенасыщение междоузлиями является причиной роста дефектов упаковки и изменения коэффициента диффузии. Для рассматриваемых моделей Conventional и Equilibrium диффузия, ускоренная окислением (OED), интерпретируется как дополнительная концентрация междоузлий:

$$D = D^+ \frac{n_{ie}}{n} + D^x + D^- \frac{n}{n_{ie}} + D^- \left(\frac{n}{n_{ie}} \right)^2 + D_I[I], \quad (8)$$

где $D_I[I]$ – коэффициент диффузии по междоузлиям.

При этом коэффициент диффузии по междоузлиям рассчитывается по формуле:

$$D_I[I](x, y) = D_o |v_r(x_r, y_r)|^{voxn} \exp - \frac{\sqrt{(x-x_r)^2 + (y-y_r)^2}}{leny}, \quad (9)$$

где $voxn$ и $leny$ – экспериментальные параметры, которые зависят от метода выращивания кристалла и ориентации подложки (заданы по умолчанию).

Для ускоренной диффузии можно отметить следующие особенности [3,4]:

- бор и фосфор в окисляющей атмосфере диффундируют по двойному механизму (как через вакансии, так и через междоузлия);

- коэффициент диффузии, ускоренной окислением, при высоких температурах больше, чем при низких;

- при очень высоких температурах коэффициент ускоренной диффузии приближается к величине коэффициента диффузии в инертной атмосфере.

Если диффузия проходит в условиях окисляющей атмосферы, коэффициент диффузии по вакансиям может уменьшаться через рекомбинацию вакансий в подложке с инжектированными междоузлиями. Этот эффект незначителен для примесей: В, Р

и As. Однако для сурьмы эффект замедления диффузии (ORD) заметно больше, чем эффект ускорения диффузии. Поэтому расчёт коэффициента диффузии должен проводиться уже не по формуле (9), а по следующей формуле:

$$D(x, y) = \frac{D_{inert}(x, y)}{\left(1 + D_o |v_T(x_T, y_T)|^{voxn}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\sqrt{(x-x_T)^2 + (y-y_T)^2}}{leny}\right)}. \quad (10)$$

Кроме рассмотренных моделей в инструменте DIOS присутствуют модели, учитывающие взаимодействия примесей с точечными дефектами. Это модели PairDiffusion, SemiCoupled, LooselyCoupled.

Модель PairDiffusion – это наиболее сложная и полная модель в инструменте DIOS. Все другие модели определяются из этой модели с помощью различных упрощений и предположений относительно коэффициентов диффузии, концентраций примесей и точечных дефектов. Для этой модели подвижными принимаются несвязанные точечные дефекты и пары точечный дефект-примесь. Все электронные и парные реакции предполагаются находящимися в равновесии. Модель учитывает зависимость диффузии от градиента концентрации примеси, находящейся в активном состоянии, от концентрации несвязанных точечных дефектов, а также от электрического поля.

Для модели SemiCoupled предполагается, что примеси, находящиеся в активном состоянии, неподвижны, а пары точечный дефект-примесь продолжают рассматриваться подвижными, так что общий баланс концентрации остаётся подобным модели PairDiffusion. Кроме того, в данной модели, по сравнению с парной диффузионной моделью, уравнения, описывающие потоки пар примесь-точечный дефект, значительно упрощаются.

В модели LooselyCoupled механизм парной диффузии не учитывается, однако примесь в активном состоянии принимается подвижной. Для активированной примеси коэффициенты диффузии зависят от концентрации вакансий и междоузлий. В то же время подобно парной диффузионной модели диффузия примеси зависит от градиента примеси, находящейся в активном состоянии, и от электрического поля.

Уравнения для потоков примесей идентичны уравнениям модели SemiCoupled. Потоки точечных дефектов управляются исключительно через градиент нейтральных несвязанных точечных дефектов. Коэффициенты диффузии точечных дефектов зависят от примеси через концентрацию электронов. Отличительной особенностью данной модели является то, что коэффициенты диффузии и энергии активации в законе Аррениуса для данной модели берутся, как и для более упрощённых моделей, на основании модели SUPREM-3 и умножаются на соответствующие коэффициенты.

Рассмотренные модели PairDiffusion, SemiCoupled и LooselyCoupled наиболее подходят для расчётов субмикронных областей. Данный вывод хорошо проиллюстрирован в статье [5], в которой рассматривается парная модель вакансионно-межузельной диффузии для случая мелких и сверхмелких p-n переходов. Показано, что расчёт согласно такой модели даёт наилучшее совпадение с экспериментальными данными в сравнении с другими моделями. Например, для процесса диффузии из фосфосиликатного стекла при условии быстрого термического отжига совпадения экспериментальных и расчётных данных удаётся добиться при моделировании диффузии

по парной диффузионной модели примесь-вакансия.

Сравним рассмотренные модели. В таблице 1 приведены результаты расчёта для процесса диффузии примеси в течение 30 минут при температуре 1100°C в атмосфере азота [3].

Таблица 1

Сравнение диффузионных моделей программы DIOS

Модель	Атмосфера	Xj (мкм)	R _s (Ом)	Время расчёта, отнесённое к времени модели Conventional
Conventional (SUPREM-3)	N ₂	0.7	183	1
Equilibrium	N ₂	0.7	182	1
LooselyCoupled	N ₂	0.7	181	2.6
SemiCoupled	N ₂	1.4	127	2.9
PairDiffusion	N ₂	1.6	121	3.0
Эксперимент	N ₂	0.75	-	-

Из представленной таблицы следует:

- модели диффузии, для которых коэффициенты диффузии рассчитываются на основе модели SUPREM-3, дают результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными;

- для моделей PairDiffusion и SemiCoupled наблюдается значительное расхождение с результатами эксперимента;

- модели PairDiffusion и SemiCoupled показывают существенное увеличение времени расчёта.

Значительное расхождение экспериментальных данных с результатами расчётов на основании моделей PairDiffusion и SemiCoupled можно объяснить как временем проведения диффузии (данные модели хорошо подходят для кратковременных импульсных отжигов примеси), так и глубиной p-n перехода.

Симулятор SPROCESS

Для диффузии в симуляторе SProcess предложены несколько транспортных моделей с различными уровнями сложности вычисления потока примесных атомов. Общее выражение для потока:

$$J_{A^c} = -d_{A^c} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-c} \nabla \left(A^c \left(\frac{n}{n_i} \right)^c \right), \quad (11)$$

где A^c – концентрация, d_{A^c} – коэффициент диффузии, n – концентрация электронов, n_i – собственная электронная концентрация.

По умолчанию для кремния моделью диффузии определена модель Ферми. Данная модель не решает уравнения для точечных дефектов, которые находятся в равновесии. Для данной модели решается следующее уравнение:

$$\frac{\partial A_c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_A. \quad (12)$$

При этом полный поток является суммой потоков примесь-вакансия и примесь-междоузлие.

$$J_A = -\sum_{X,c} D_{AX^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c-z} \nabla \left(C_A^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^z \right). \quad (13)$$

Здесь A – примесь; z – заряженное состояние примеси (± 1); X – точечный дефект (вакансия или междоузлие); c - заряженное состояние точечного дефекта; C_A^+ - активная часть общей концентрации C_A ; D_{AX^c} – эффективный коэффициент диффузии пары примесь-точечный дефект в заряженном состоянии c , он связан с собственным коэффициентом диффузии.

Для усовершенствованной модели Ферми (ChargeFermi) коэффициенты диффузии каждого заряженного состояния могут устанавливаться отдельно. Данные модели наиболее подходят для длительных высокотемпературных отжигов, где влияние процессов, обусловленных ионной имплантацией, минимально.

Кроме модели Ферми представлены другие модели диффузии.

Диффузионные модели React или ChargeReact – это наиболее усовершенствованные модели диффузии примеси. Они решают в заданном порядке три отдельных уравнения для примесей, а также уравнения для пары примесь-дефект и два уравнения для дефектов. Модель ChargeReact должна давать наиболее точные результаты, однако она требует решения большого числа уравнений, поэтому она наиболее затратная в плане компьютерного времени.

Диффузионные модели Pair и ChargePair принимают, что пары примесь-дефект находятся в локальном равновесии, при этом уравнения для точечных дефектов продолжают решать отдельно. Обе эти модели решают одно уравнение для примеси и два уравнения для дефектов. Модель ChargePair позволяет варьировать парными коэффициентами. Эти модели наиболее подходят для современных КМОП процессов, так как они представляют хороший баланс между точностью и затратами компьютерного времени.

Диффузионная модель с постоянным коэффициентом диффузии отличается от всех других транспортных моделей. В ней принимается отсутствие взаимодействия между примесью и точечными дефектами, не учитывается влияние электрического поля. При этом коэффициент диффузии зависит только от температуры. Данная модель используется главным образом для расчёта диффузии примеси в окисле.

В таблице 2 приведено сравнение времени расчёта для моделей в симуляторе SProcess.

Таблица 2

Сравнение диффузионных моделей программы SProcess

Модель диффузии	Время расчёта, отнесённое к времени модели Fermi
Fermi	1
ChargedFermi	1.2
Pair	1.2
ChargedPair	2
React	1.5
ChargedReact	3
Constant	0.5

Выработка маршрута моделирования

Стоит особо подчеркнуть, что кроме выбора симулятора и модели диффузии очень важно правильно указать атмосферу, при которой проводится процесс. Для иллюстрации приведём пример: при расчёте процесса диффузии бора, режим которого представлен на рис. 1, в идеальном случае толщина окисла составила 0,47 мкм. При этом в отличие от эксперимента наблюдается увеличение глубины перехода за счёт ускорения диффузии с помощью окисления. Для соответствия экспериментальным данным необходимо проводить калибровку атмосферы, то есть с помощью изменения состава водяных паров добиться совпадения экспериментальных и расчётных данных. После проведения такого процесса получали толщину 0,27 мкм и глубину перехода $X_j = 1,3$ мкм, что полностью соответствует полученным экспериментальным данным.

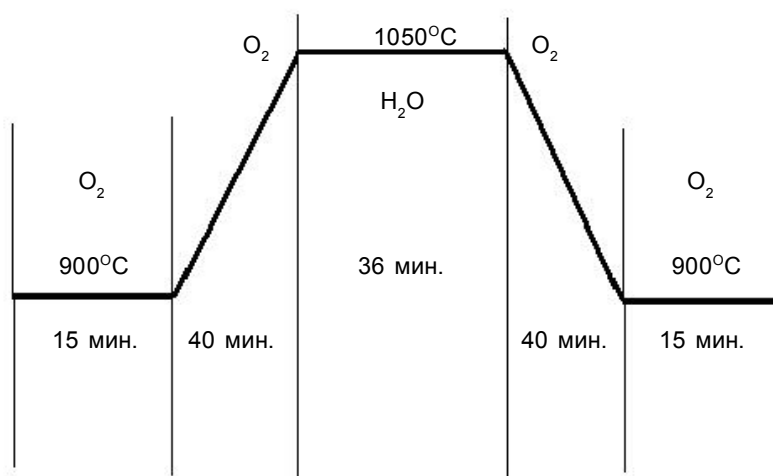


Рис. 1.

Технологический режим создания области базы *p-p-п* биполярного транзистора

Кроме того, для расчёта процесса диффузии очень важно учитывать процессы нагрева и охлаждения диффузионной печи.

Исходя из ранее рассмотренных особенностей моделирования процесса диффузии, можно сформировать оптимальный маршрут для расчёта данных процессов в САПР TCAD:

1. выбор симулятора технологических процессов;
2. выбор модели диффузии с учетом:
 - глубины залегания *p-n* перехода;
 - максимальной температуры процесса;
 - длительности процесса;
 - атмосферы процесса;
 - времени расчёта;
3. выбор граничных условий для всех границ, присутствующих в структуре (кремний/окисел, кремний/газ, окисел/газ и т. д.);
4. указать режимы процессов с учётом:
 - времени процессов нагрев/охлаждение диффузионной печи;
 - атмосферы всех температурных процессов.

Выводы

Для наибольшего совпадения экспериментальных и расчётных данных при использовании САПР TCAD важно не только точно задать все параметры процессов (температура, время, атмосфера), но и правильно выбрать симулятор и модель диффузии. Выбор симулятора полностью зависит от решаемой задачи. Для моделирования процесса диффузии из газовой фазы подходит только симулятор DIOS. Для расчёта диффузии из ионно-имплантированных слоёв целесообразно использовать симулятор SProcess. Выбор модели диффузии внутри симулятора обусловлен глубиной перехода, временем и температурой процесса, а также временем расчёта.

Литература

1. Ho C. P., Plummer J. D., Hansen S. E. and Dutton R. W. VLSI Process Modeling-SUPREM III. - *IEEE Transactions of Electron Devices*, 1983, vol. ED-30, No. 11, pp. 1438-1453.
2. SYNOPSIS SENTAURUS TCAD, Ver. A-2008.09, Manuals "TAURUS TSUPREM-4".
3. Antoniadis D. A., Gonzales A. G. and Dutton R. W. Boron in Near-Intrinsic <100> and <111> Silicon Under Inert and Oxidizing Ambients - Diffusion and Segregation. - *J. Electrochem. Soc.*, 1978, vol. 125, pp. 813-819.
4. Taniguchi K., Kurosawa K., Kanshiwagi M., Oxidation Enhanced Diffusion of Boron and Phosphorus in (100) Silicon. - *J. Electrochem. Soc.* - 1980, vol. 127, pp. 2243- 2248.
5. Шишияну С. Т., Шишияну Т. С., Райлян С. К. Мелкие р-п-переходы в Si, изготовленные методом импульсного фотонного отжига. - *Физика и техника полупроводников*, 2002, т. 36, № 5, с. 611 – 617.