# Simulation nichtplanarer Herstellungsprozesse mit PROMIS

K.Wimmer, R.Bauer, S.Halama, G.Hobler, S.Selberherr

27. Februar 1991

**Zusammenfassung**

**Für die Berechnung von Dotierungsprofilen in nichtplanaren Strukturen wird in unserem 2D Prozeß-Simulationsprogramm PROMIS eine Bereichstransformationsmethode verwendet. Bei dieser Transformation wird ein randangepaßtes Koordinatensystem generiert, das die nichtplanare Bauteilgeometrie auf einen rechteckigen Rechenbereich abbildet. Ein rechteckiger Rechenbereich erlaubt die Verwendung etablierter Finite-Differenzen-Codes für die Lösung von parabolischen Systemen gekoppelter, nichtlinearer Differentialgleichungen, wie sie typisch bei Diffusionsproblemen auftreten.**

**Die Methoden zur Generierung von randangepaßten Koordinatensystemen werden vorgestellt. In Anwendungsbeispielen wird demonstriert, daß diese Vorgangsweise für zeitlich veränderliche Geometrien (lokale Oxidation) und stark nichtplanare Strukturen (Trench-Kondensator einer DRAM-Speicherzelle) geeignet ist.**

## 1 Methode der Bereichstransformation

In der Entwicklungsphase von Prozessen für VLSI und ULSI Bauelemente ist die Simulation nichtplanarer Herstellungsschritte unumgänglich. Die Methode der Bereichstransformation bietet die Möglichkeit, nichtplanare Bauelementgeometrien auf einen Rechtecksbereich abzubilden. Dies geschieht durch die Generation eines krummlinigen Koordinatensystems $(u, v)$, in dem die Ränder der Bauteilgeometrie auf Iso-Linien ($u$ = konst bzw. $v$ = konst) zu liegen kommen. In den Koordinaten des krummlinigen Systems erscheint das unter Umständen zeitvariante Simulationsgebiet (Bauteilgeometrie) als Rechteck konstanter Größe.

Die einen physikalischen Vorgang (Diffusion) beschreibenden Differentialgleichungen sind in den nicht-orthogonalen, krummlinigen Koordinaten komplizierter. Die Simulationsgeometrie wird also auf Kosten komplizierterer beschreibender Gleichungen vereinfacht.

### 1.1 Transformation der Diffusionsgleichungen

Die allgemeine Struktur der Differentialgleichungen (1–2) und deren Randbedingungen (3) erlaubt die Behandlung eines breiten Spektrums bekannter Diffusionsmechanismen, wie Punktdefekt-unterstützte Diffusion unter oxidierenden Bedingungen [3], Präzipitationseffekte bei hohen Dopandenkonzentrationen [7], Paardiffusionsmechanismen [1],

oder etwa Korngrenzendiffusion in Polysilizium [4].

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{ij} \cdot \frac{\partial W_j}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J_i} + \gamma_i = 0 \qquad i = 1, \ldots, N \tag{1}$$

$$\vec{J_i} = \sum_{j=1}^{N} (a_{ij} \cdot \operatorname{grad} W_j + b_{ij} \cdot W_j \cdot \operatorname{grad} \Psi + \vec{c}_{ij} \cdot W_j) + \vec{d_i} \tag{2}$$

$$\sum_{j=1}^{N} \beta_{ij} \vec{J_j} \cdot \vec{n} + \phi_i = 0 \tag{3}$$

Eine einfache mathematische Transformation dieser Gleichungen vom Koordinatensystem $(x, y)$ auf das krummlinige Koordinatensystem $(u, v)$ mittels Jacobimatrix führt auf „nicht konservative" Gleichungen. Diese Gleichungen schleppen im diskreten Fall zusätzliche Fehler ein, die zur Verletzung globaler Bilanzgleichungen führen. Mittels Integration konnten „konservative" Gleichungen (20–23) (siehe Anhang) hergeleitet werden, die auch im diskreten Fall die Bilanzgleichungen ohne jeden zusätzlichen Aufwand an Rechenzeit automatisch erfüllen. Die Umrechnung der Gleichungen auf krummlinige Koordinaten erfolgt nach dem Schema (20–23) automatisch im Programm, gleichzeitig mit deren Diskretisierung.

## 1.2 Methoden der Gittergeneration

Die untersuchten und für die Prozeß-Simulation adaptierten Methoden [8] können in drei Klassen eingeteilt werden: (a) algebraische Verfahren, (b) Verfahren, die auf elliptischen Differentialgleichungen basieren, und (c) Variationsansätze.

### 1.2.1 Algebraische Methoden

Algebraische Methoden beruhen auf einer Interpolation vorgegebener Randpunkte der Geometrie auf die Punktverteilung im Inneren [6].

Beschränkt man sich auf polynomiale Interpolationsfunktionen, so erhält man (4) als allgemeine 2D-Interpolationsformel, mit den Lagrangepolynomen (5). Mit Lagrangepolynomen höherer als zweiter Ordnung ist es möglich, neben dem Verlauf der Ränder ($\vec{r}(u, v_1)$, $\vec{r}(u, v_N)$, ...) auch noch den Verlauf einzelner innerer Koordinatenlinien ($\vec{r}(u, v_i)$, ...) vorzugeben und damit Grenzschichten (z.B.: $Si/SiO_2$) exakt aufzulösen.

$$\vec{r}(u, v) = \sum_{i=1}^{N} \Phi_i(u) \cdot \vec{r}(u_i, v) + \sum_{j=1}^{M} \Phi_j(v) \cdot \vec{r}(u, v_j) - \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \Phi_i(u) \cdot \Phi_j(v) \cdot \vec{r}(u_i, v_j) \tag{4}$$

$$\Phi_i(s) = \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^{N} \frac{s - s_l}{s_i - s_l} \tag{5}$$

### 1.2.2 Elliptische Methoden

Elliptische Gittergenerierungsverfahren sind eine Verallgemeinerung der Methode der konformen Abbildung. Real- und Imaginärteil einer konformen Abbildung $z \rightarrow w$ ($z = x+iy$, $w = u+iv$) erfüllen aufgrund der Analytizität Laplacegleichungen ($u_{xx}+u_{yy} = 0$, $v_{xx} + v_{yy} = 0$). Mittels zusätzlicher Quellterme $P$ und $Q$ in (6) können Schrittweite und Orthogonalität des generierten Gitters gezielt beeinflußt werden.

$$u_{xx} + u_{yy} = P, \quad v_{xx} + v_{yy} = Q \tag{6}$$

Im rechteckigen Rechenbereich sind die korrespondierenden transformierten Gleichungen (7–9) zu lösen. Hier bedeutet $g$ die Jakobideterminante $g = x_u y_v - x_v y_u$.

$$a \cdot x_{uu} - b \cdot x_{uv} + c \cdot x_{vv} = -g \cdot (P \cdot x_u + Q \cdot x_v) \tag{7}$$

$$a \cdot y_{uu} - b \cdot y_{uv} + c \cdot y_{vv} = -g \cdot (P \cdot y_u + Q \cdot y_v) \tag{8}$$

$$a = x_v^2 + y_v^2, \quad b = x_u x_v + y_u y_v, \quad c = x_u^2 + y_u^2 \tag{9}$$

Dieses nichtlineare elliptische Differentialgleichungssystem wird mit einem 9-Punkt Finite-Differenzen-Schema diskretisiert. Das resultierende gekoppelte System nichtlinearer algebraischer Gleichungen wird mittels eines SOR-Algorithmus [5] gelöst.

Eine überlagerte Iteration (10–12) adaptiert die Quellterme $P$ und $Q$ in Hinblick auf Orthogonalität ($\alpha_r = \pi/2$) und gewünschte Schrittweite $\delta_r$.

$$P^0 = Q^0 = 0 \tag{10}$$

$$P^{k+1} = P^k \mp \epsilon_p \cdot \arctan\left(1 - \frac{\alpha}{\alpha_r}\right) \tag{11}$$

$$Q^{k+1} = Q^k \pm \epsilon_q \cdot \arctan\left(1 - \frac{d}{d_r}\right) \tag{12}$$

mit dem Schnittwinkel der Tangentenvektoren der Gitterlinien (13) und der Schrittweite (14).

$$\alpha = \arccos\left(\frac{\vec{r_u} \cdot \vec{r_v}}{|\vec{r_u}||\vec{r_v}|}\right) \tag{13}$$

$$\delta = |\vec{r}(u, v_{i+1}) - \vec{r}(u, v_i)| \tag{14}$$

### 1.2.3 Variationsmethoden

Variationsmethoden bieten die Möglichkeit, mehrere Gütemerkmale des Gitters gleichzeitig zu optimieren und gezielt zu beeinflussen. Dazu wird ein Gütekriterium $I$ als Linearkombination einzelner Funktionale gebildet und optimiert. Die einzelnen Funktionale sind integrale Größen, welche Glattheit $I_S$, Flächenverzerrung $I_A$ und Orthogonalität $I_O$ des Gitters beurteilen. Die Minimierung des Gütekriteriums $I$ erfolgt über die Lösung der Euler-Lagrange Gleichungen des Variationsproblems.

**Glattheit** (smoothness)

Dieses Kriterium sorgt für möglichst glatte Übergänge zwischen großen und kleinen Schrittweiten des Gitters und wird über Beträge von Gradienten gemessen (15).

$$I_S = \int \frac{1}{g} \left( (\nabla x)^2 + (\nabla y)^2 \right) du\, dv \tag{15}$$

Die Euler-Lagrange Gleichungen für das Optimierungsproblem $I_S \rightarrow min$ sind im Anhang (26–29) angegeben.

**Flächenverzerrung** (area)

Die Fläche einer Gitterzelle wird mit der Jakobideterminante $g$ gemessen. Möglichst flächengleiche Gitterzellen erhält man durch Minimierung von $I_A$ (16). Als entsprechende Euler-Lagrange Gleichungen erhält man (31).

$$I_A = -\frac{1}{2} \int g^2\, du\, dv \tag{16}$$

**Orthogonalität**

Aus dem Skalarprodukt der Tangentenvektoren der Gitterlinien läßt sich ein Maß für die Orthogonalität $I_O$ herleiten (17), und daraus gewinnt man die entsprechenden Euler-Lagrange Gleichungen (32–34).

$$I_O = -\frac{1}{2} \int (x_u x_v + y_u y_v)^2\, du\, dv \tag{17}$$

**Gesamtkriterium**

Als gesamtes Gütekriterium $I$ für das zu generierende Gitter wird eine Linearkombination der Einzelkriterien (18) definiert.

$$I = w_s \cdot I_S + w_o \cdot I_O + w_a \cdot I_A \tag{18}$$

$$w_s \geq 0, \quad w_o \geq 0, \quad w_a \geq 0 \qquad w_s + w_o + w_a = 1 \tag{19}$$

Das resultierende elliptische System der Euler-Lagrange Gleichungen für $I \rightarrow min$ wird mit einem 9-Punkt Finite-Differenzen-Schema diskretisiert, und das daraus endstehende System nichtlinearer algebraischer Gleichungen mit einem SOR-Verfahren gelöst [5].

Die Abbildungen (1–3) zeigen Gitter, die auf einer Testgeometrie mittels algebraischer (Abb. 1), elliptischer (Abb. 2) bzw. Variationsmethode (Abb. 3) generiert wurden.

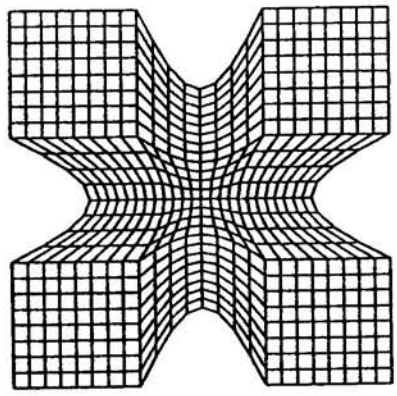

Abb. 1: Testgeometrie, Gittergeneration mit algebraischer Methode

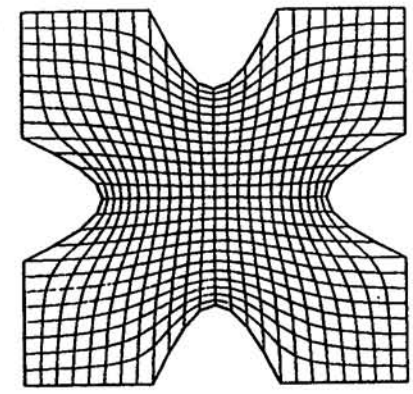

Abb. 2: Testgeometrie, Gittergeneration mit elliptischer Methode

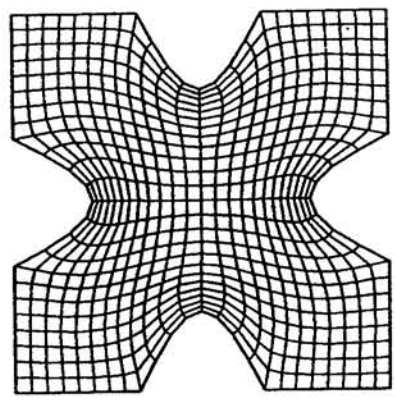

Abb. 3: Testgeometrie, Gittergeneration mit Variationsverfahren, $w_s = 0.3, w_a = 0.7, w_o = 0$.

## 2 Anwendungsbeispiele

Viele der während des Herstellungsprozesses eines ULSI Bauelements auftretenden Geometrien sind nur „schwach nichtplanar", also sehr ähnlich einem Rechteck, und können vollkommen unproblematisch und sehr effektiv mit einer Transformationsmethode behandelt werden. Wir stellen hier zwei anspruchsvollere Probleme vor. Im ersten Beispiel wird ein Diffusionsproblem in einer zeitlich veränderlichen Geometrie berechnet, wie sie während Oxidationsschritten auftritt. Viele Programme, die sonst sehr allgemeine (aber feste) Geometrien verarbeiten können, haben große Schwierigkeiten bei derartigen 'moving boundary' Problemen. Im zweiten Beispiel werden Prozeß-Schritte in einer extrem nichtplanaren Geometrie, einer DRAM-Speicherzelle, simuliert.

## 2.1 Diffusion während lokaler Oxidation

Eine planare Ausgangsgeometrie ist durch ein Oxid von $20nm$ geschützt und zur Hälfte mit einer $1\mu m$ Nitridmaske abgedeckt. In diese Struktur wird zunächst Arsen implantiert ($E = 60\ keV$, $D = 2.10^{15}\ cm^{-2}$). Daran schließt eine nasse Oxidation ($t = 120\ min$, $T = 950°C$) an. Das resultierende Dotierungsprofil ist in Abb. 4 gezeigt.

Durch das Wachstum des Oxids kommt es zu einer zeitlichen Veränderung des Simulationsgebietes. Für die Simulation wurde ein algebraisch generiertes Gitter (Abb. 5) verwendet, das das Simulationsgebiet auf ein Rechteck konstanter Größe abbildet.

Die während der Oxidation an der $SiO_2/Si$ Grenzfläche erzeugten Silizium-Interstitials rekombinieren zum Teil gleich an der Oberfläche, zum Teil diffundieren sie rasch in den Bulk, wo sie mit Vakanzen rekombinieren. Die an der oxidierenden Grenzfläche entstehende starke Übersättigung an Interstitials (Abb. 6) führt zu einer starken Beschleunigung der Dopandendiffusion (oxidation enhanced diffusion). Für die Berechnung des Dotierungsprofiles wurde also ein gekoppeltes System von Diffusionsgleichungen für Arsen, Silizium-Interstitials und Silizium-Vakanzen gelöst [3].

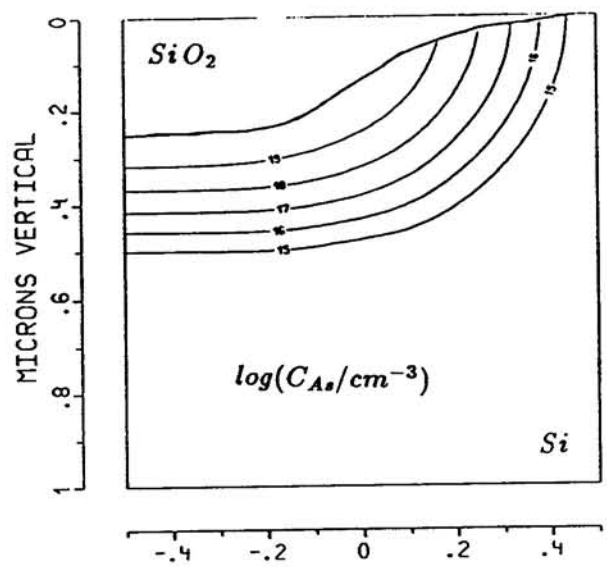


Abb. 4: Ausschnitt aus der Arsenkonzentration in der Umgebung der ursprünglichen Maskenkante

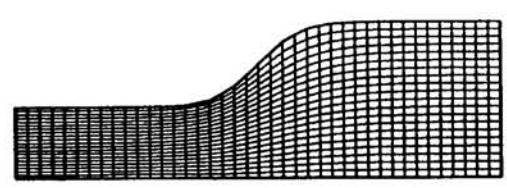

Abb. 5: Algebraisch generiertes Gitter für die Diffusions-Simulation während lokaler Oxidation

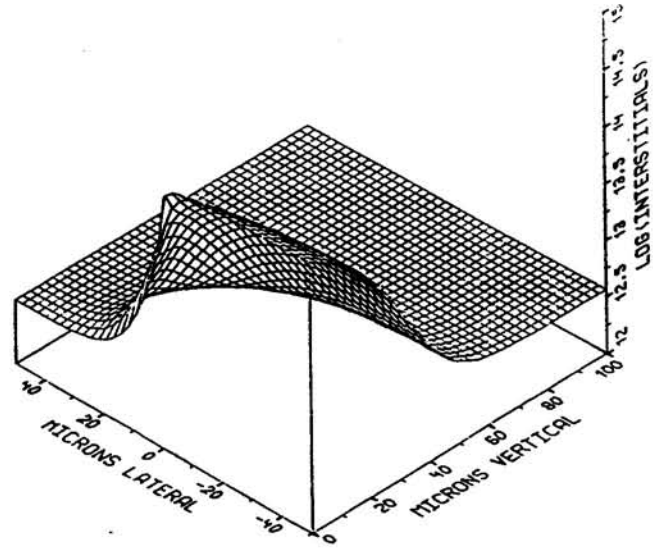


Abb. 6: Die Silizum-Interstitial-Konzentration ist an der oxidierenden Grenzfläche $Si/SiO_2$ stark überhöht

## 2.2 DRAM Speicherzelle

Die Transformationsmethode ist auch für extrem nichtplanare Strukturen geeignet. Das Gitter für die Diffusionssimulation in einer realen Trench-Kapazität einer DRAM-Speicherzelle (Abb. 7) wurde mit einer Variationsmethode generiert. Die Implantation von Arsen ($E = 30\ keV$, $D = 5.10^{13}\ cm^{-2}, \pm 7°$) wurde mittels Monte Carlo Simulation berechnet. Für die Simulation der anschließenden Diffusion ($t = 60\ min$, $T = 1000°C$) wurde aufgrund der hohen Konzentrationen ein dynamisches Clustermodell [7] verwendet. Das resultierende Dotierungsprofil ist in Abb. 8 dargestellt.

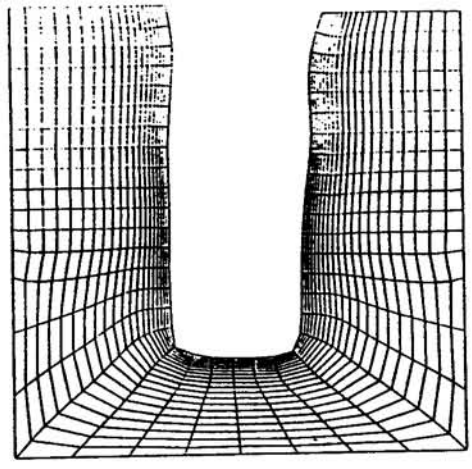

Abb. 7: Dieses Gitter für eine reale DRAM-Speicherzelle wurde mit einer Variationsmethode generiert

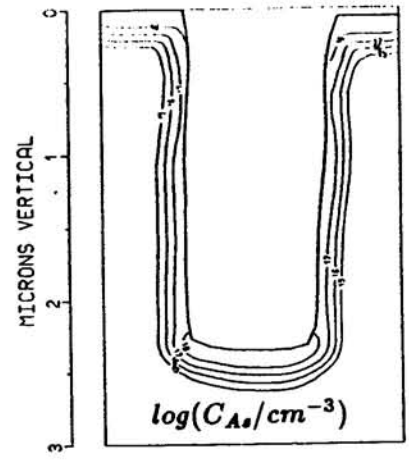


Abb. 8: Logarithmus der Arsenkonzentration nach einem einstündigen Ausheilschritt bei $1000°C$

Obwohl dieses Beispiel atypisch für die Verwendung einer Transformationsmethode ist, ist diese doch vergleichbar effizient zu Methoden mit triangularem Gitter [2]. Das liegt vor allem am nahezu parallelen Verlauf von Diffusionsfront und transformierten Gitterlinien, und der dadurch effizienten Verfeinerungsmöglichkeit.

## 3 Zusammenfassung

Die Methode der Bereichstransformation ist für viele Simulationsaufgaben in der modernen Prozeßtechnik sehr gut geeignet. Der Aufwand für die Generierung eines Gitters „hoher Güte" liegt meist deutlich unterhalb einer CPU-Minute auf gebräuchlichen Workstations. Ein Aufwand dieser Größenordnung für die Gittergeneration macht sich jedenfalls bezahlt, da sich so die Rechenzeit für die Lösung der transformierten physikalischen Gleichungen typisch um den Faktor drei verkürzt.

## Literatur


[1] T.L. Crandle, W.B. Richardson, B.J. Mulvaney: *A Kinetic Model for Anomalous Diffusion during Post-Implant Annealing*, IEDM 1988 Technical Digest, 636–639, 1988

[2] S. Halama, G. Hobler, K. Wimmer, S. Selberherr: *Eine neue Methode zur Simulation der Diffusion in allgemeinen Strukturen*, dieser Tagungsband.

[3] M.D. Giles: *Defect-Coupled Diffusion at High Concentration*, IEEE Trans. Computer-Aided Design, CAD-8, 460–467, 1989

[4] F. Lau: *Modeling of Polysilicon Diffusion Sources*, IEDM 1990 Technical Digest, 737–740, 1990

[5] J.M. Ortega, W.C. Rheinboldt: *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, Academic Press, San Diego, 1970.

[6] J.F. Thomson, A.U.A. Warsi, C.W. Mastin: *Numerical Grid Generation, Foundations and Applications*, North Holland, New York, 1985.

[7] M.Y. Tsai, F.F. Morehead, J.E.E. Balgin, A.E. Michel: *Shallow Junctions by High-Dose As Implants in Si: Experiments and Modeling*, J. Appl. Phys. **51**, 3230–3235, 1980.

[8] K. Wimmer, R. Bauer, S. Selberherr: *Body-Fitting Coordinate Generation for Two-Dimensional Process-Simulation*, Proceedings AMSE 90, Chengdu, China, 1990.

# A Anhang

## A.1 Transformierte Diffusionsgleichungen

Im allgemeinen Fall eines zeitvarianten Simulationsbereichs $(x, y)$ erhält man für die transformierten Gleichungen im zeitinvarianten Rechenbereich $(u, v)$:

$$\left.\frac{\partial W}{\partial t}\right|_{(x,y)} = \left.\frac{\partial W}{\partial \tau}\right|_{(u,v)} - \frac{x_t}{g} \cdot \Big((y_v W)_u - (y_u W)_v\Big) - \frac{y_t}{g} \cdot \Big((x_u W)_v - (x_v W)_u\Big) \tag{20}$$

$$\operatorname{div} \vec{J} = \frac{1}{g} \cdot \Big((y_v J^x - x_v J^y)_u + (-y_u J^x + x_u J^y)_v\Big) \tag{21}$$

$$J^x = \sum_{j=1}^{N} \Big[\frac{a_{ij}}{g}\Big((y_v W_j)_u - (y_u W_j)_v\Big) + \frac{b_{ij}}{g} W_j \Big((y_v \Psi)_u - (y_u \Psi)_v\Big) + c_{ij}^x W_j\Big] + d_i^x \tag{22}$$

$$J^y = \sum_{j=1}^{N} \Big[\frac{a_{ij}}{g}\Big((x_u W_j)_v - (x_v W_j)_u\Big) + \frac{b_{ij}}{g} W_j \Big((x_u \Psi)_v - (x_v \Psi)_u\Big) + c_{ij}^y W_j\Big] + d_i^y \tag{23}$$

Bei den Randbedingungen muß man die Ränder $u =$ konst (24) natürlich getrennt von den Rändern $v =$ konst (25) behandeln.

$$\vec{J} \cdot \vec{n} = \frac{1}{\sqrt{x_v^2 + y_v^2}} \cdot (y_v J^x - x_v J^y) \tag{24}$$

$$\vec{J} \cdot \vec{n} = \frac{1}{\sqrt{x_u^2 + y_u^2}} \cdot (x_v J^y - y_u J^x) \tag{25}$$

In diesen Gleichungen bedeuten tiefgestellte Indizes $u$ und $v$ Ableitungen nach den entsprechenden Koordinaten, $(x_u, x_v, \ldots)$ sind die Elemente der Jakobimatrix der Abbildung $(x, y) \to (u, v)$, und $g$ ist die Jakobideterminante $g = x_u y_v - x_v y_u$.

## A.2 Euler-Lagrange Gleichungen

Die Euler-Lagrange Gleichungen für das Glattheits-Funktional $I_S$ (15) sind in (26–29) zusammengefaßt. Unter der Bedingung $A^2 - BC \neq 0$ vereinfachen sie sich zu (30) und sind identisch zu einem Laplaceschen Gittergenerationssystem.

$$B(dx_{uu} - 2ex_{uv} + fx_{vv}) - A(dy_{uu} - 2ey_{uv} + fy_{vv}) = 0 \tag{26}$$

$$A(dx_{uu} - 2ex_{uv} + fx_{vv}) - C(dy_{uu} - 2ey_{uv} + fy_{vv}) = 0 \tag{27}$$

$$A = x_u y_u + x_v y_v \qquad B = y_u^2 + y_v^2 \qquad C = x_u^2 + x_v^2 \tag{28}$$

$$d = (x_v^2 + y_v^2)/g^3 \qquad e = (x_u x_v + y_u y_v)/g^3 \qquad f = (x_u^2 + y_u^2)/g^3 \tag{29}$$

$$dx_{uu} - 2ex_{uv} + fx_{vv} = 0, \quad dy_{uu} - 2ey_{uv} + fy_{vv} = 0 \tag{30}$$

Als Euler-Lagrange Gleichungen des Flächen-Funktionals $I_A$ (16) erhält man (31).

$$(y_v - y_u)g + g_u y_v - g_v y_u = 0, \quad (x_u - x_v)g + g_v x_u - g_u x_v = 0 \tag{31}$$

Die Euler-Lagrange Gleichungen für das Orthogonalitäts-Funktional $I_O$ (17) sind in (32–34) zusammengestellt.

$$b_1 x_{uu} + b_2 x_{uv} + b_3 x_{vv} + a_1 y_{uu} + a_2 y_{uv} + a_3 y_{vv} = 0 \tag{32}$$

$$a_1 x_{uu} + a_2 x_{uv} + a_3 x_{vv} + b_1 y_{uu} + b_2 y_{uv} + b_3 y_{vv} = 0 \tag{33}$$

$$\begin{array}{lll} a_1 = x_v y_v & b_1 = x_v^2 & c_1 = y_v^2 \\ a_2 = x_u y_v + x_v y_u & b_2 = 2(2x_u x_v + y_u y_v) & c_2 = 2(x_u x_v + 2y_u y_v) \\ a_3 = x_u y_u & b_3 = x_u^2 & c_3 = y_u^2 \end{array} \tag{34}$$