Eine neue Methode zur Simulation der Diffusion in allgemeinen Strukturen

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

25. Februar 1991

Zusammenfassung

Die wachsende Komplexität der Strukturen hochintegrierter elektronischer Bauelemente verlangt adäquate Methoden zur Simulation der Herstellungsprozesse. Es wird ein neues Verfahren zur Berechnung der Diffusionsprozesse in allgemeinen geometrischen Strukturen vorgestellt, mit dem auch sehr komplexe Bauelementgeometrien erfaßt werden können. Diese Methode wird am Beispiel des Trenchkondensators einer DRAM Speicherzelle verifiziert.

1 Motivation

Die rasche Entwicklung neuer Fertigungsverfahren für hochintegrierte elektronische Bauelemente und die damit verbundene Vielfalt der geometrischen Strukturen dieser Bauelemente stellen eine große Herausforderung für die Prozeßsimulation dar. Ein Design-Werkzeug zur Vorhersage der Struktur und Eigenschaften zukünftiger Bauelemente muß in der Lage sein, die potentielle geometrische Struktur solcher Bauelemente mit größtmöglicher Rigorosität zu erfassen. Für die Modellierung der Ionenimplantation in komplexe Bauelementstrukturen bietet sich die Monte Carlo Simulation als sehr mächtiges und verläßliches Verfahren an [1]. Zur numerischen Lösung von Diffusionsproblemen existieren verschiedene Ansätze. Neben Bereichstransformationsmethoden unter Verwendung eines Rechteckgitters [2] ist die Diskretisierung auf einem unregelmäßigen Dreiecksgitter aus zwei Gründen attraktiv: Einerseits unterliegt die geometrische Form des Simulationsgebietes nahezu keiner Beschränkung, und andererseits kann das irreguläre Gitter sehr einfach und effizient lokal verfeinert werden, um die zu berechnenden Größen besser darzustellen.

2 Problemstellung

Zur rigorosen Beschreibung der Diffusion von Dopanden während thermischer Fertigungsschritte wird das Diffusionsproblem möglichst allgemein formuliert:

$$\frac{\partial C^i}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{J}^{\,i} + \gamma^i = 0 \tag{1}$$

$$\vec{J}^{\,i} = \sum_{j=1}^{N} \left(D^{ij} \cdot \mathrm{grad} C^j + \mu^{ij} \cdot C^j \cdot \mathrm{grad} C^k + \vec{v}^{\,ij} \cdot C^j \right) \tag{2}$$

$$\beta^i \cdot \vec{J}^{\,i} \cdot \vec{n} + C^i + \phi^i = 0 \tag{3}$$

In diesem (parabolischen) System gekoppelter, nichtlinearer, partieller Differentialgleichungen steht C^i für die Konzentration der i -ten Spezies (unabhängige Variable) und $\vec{J}^{\,i}$ für den Fluß der i -ten Spezies. Die Generationsraten γ^i können ebenso wie die Diffusionskoeffizienten D^{ij} und die Koeffizienten der Randbedingungen β^i nichtlinear von den gesuchten Größen C^i abhängen.

Der Gesamtstrom setzt sich aus einem Diffusionsstrom $D^{ij} \cdot \text{grad}\, C^j$, einem Konduktionsstrom $\mu^{ij} \cdot C^j \cdot \text{grad}\, C^k$ (für den Fall, daß das elektrische Feld (grad C^k) explizit in die Simulation einbezogen wird) und einem Konvektionsstrom $\vec{v}^{\,ij} \cdot C^j$ zusammen.

Typische, kritische Probleme bei der Simulation der Diffusion resultieren aus der sehr großen Variation der Konzentrationswerte C^i und den ebenfalls stark variierenden Diffusionskoeffizienten D^{ij}. Die stark unterschiedlichen Zeitkonstanten der Diffusion und der Generationsterme γ^i, die beispielsweise bei konsistenter Einbeziehung von Punktdefekten zur Modellierung der transienten Diffusion auftreten [3] [4] führen ebenfalls auf ein numerisch "steifes" Problem.

Um trotzdem stabile und verläßliche Simulationswerkzeuge zu erhalten, müssen räumliche und zeitliche Rechengitter automatisch adaptiert werden, um die Dopandenprofile während des Diffusionsprozesses optimal darzustellen. Geeignete Kriterien hierfür sind die Auflösung von Gradienten und die Konservierung der lokalen Dosis.

3 Lösungsmethode

Die vorgestellte Simulationsmethode verwendet eine zweidimensionale Finite-Differenzen Diskretisierung mit Boxintegration auf einem irregulären, triangularen Ortsgitter [5]. Die Generierung des Anfangsgitters und die Gitteradaption erfolgt nach einem einheitlichen Prinzip in drei unabhängigen Schritten. Zur Zeitdiskretisierung wird ein Backward-Euler Verfahren verwendet. Das aus der Orts- und Zeitdiskretisierung resultierende lineare Gleichungssystem wird iterativ gelöst.

3.1 Gittergenerierung

Das Verfahren der Finite-Differenzen Diskretisierung mit Boxintegration stellt gewisse qualitative Forderungen an das Dreiecksgitter, die eine Delauney-Triangulierung als einzig konsistente Methode zur Vermaschung von Gitterpunkten nahelegen.

Die Delauney-Triangulierung bestimmt aber lediglich, auf welche Art und Weise die Gitterpunkte miteinander zu Dreiecksmaschen verbunden werden. – Die Wahl geeigneter Positionen für Gitterpunkte bleibt von der Triangulierung unbeeinflußt. Die Generierung des Gitters erfolgt daher in 3 voneinander unabhängigen Schritten: Punktgenerierung, Relaxation des Gitterpunkthaufens und Triangulierung.

Der Punktgenerierungsschritt erzeugt eine neue oder adaptierte Punktverteilung aufgrund einer geforderten Gitterpunkt-Dichtefunktion. Die Dichtefunktion wird aus der Geometrie des Simulationsgebietes und aus dem augenblicklichen Verlauf der Dopandenverteilung bestimmt.

Der Relaxationsschritt zwischen Punktgenerierung und Triangulierung führt das anfangs lokal unregelmäßige Gitter in ein regelmäßigeres Gitter über, wodurch eine qua-

litative Verbesserung der Diskretisierung erreicht wird. Die Relaxation erfolgt durch Minimierung einer Art Energiefunktion des N-tupels der Gitterpunktpositionen mit Hilfe eines einfachen Gradientenverfahrens. Die geforderte Gitterdichte geht hierbei als lokaler Parameter in die Energiefunktion ein. Die Randpunkte und die randnahen Gitterpunkte müssen wegen der Verwendung der Delauney-Triangulierung auch während des Relaxationsschrittes gesondert behandelt werden, um eine konsistente Vermaschung zu garantieren.

Das anschließende Delauney-Triangulierungsverfahren erzeugt das Dreiecksnetz und die Integrationsbereiche B_i (Voronoi-Polygone) für die Boxintegration.

3.2 Diskretisierung

Die Diskretisierung der Gleichung (1) und (2) wird hier für den Spezialfall eines einzigen Dopanden ($C^i = C$) demonstriert.

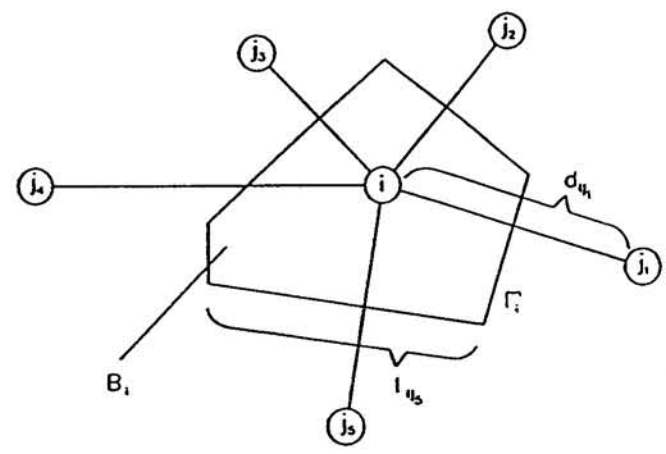

Abbildung 1: Voronoi-Box im Inneren

Durch Einsetzen von (2) in (1) und Integration über die Box B_i erhält man:

$$\int_{B_i} [div(-D\text{grad}C) + \frac{\partial C}{\partial t} - \gamma] dA = 0 \tag{4}$$

Die Anwendung des Gaußschen Integralsatzes und geeignete Approximationen bei der Integration über das Randpolygon Γ_i führen auf die ortsdiskretisierte Form:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \gamma_i + \frac{D_i}{A_{B_i}} \sum_{j\ NB\ i} (C_j - C_i) \frac{l_{ij}}{d_{ij}} + O(h) \tag{5}$$

Für die Integrationsboxen am Rand des Simulationsgebietes ergibt sich

$$\frac{\partial C_r}{\partial t} = \gamma_r + \frac{D_r}{A_{B_r}} \sum_{j\ NB\ r} (C_j - C_r) \frac{l_{rj}}{d_{rj}} + \sum_{\nu=L,R} \frac{d_{r\nu}}{2} J_{r\nu} + O(h) \tag{6}$$

$$J_{r\nu} = \begin{cases} \frac{\kappa}{A_{B_r}} \frac{d_{r\nu}}{2} (w_0 - w_r) & Newton \\ -J_0 \frac{d_{r\nu}}{2} & Neumann \end{cases} \tag{7}$$

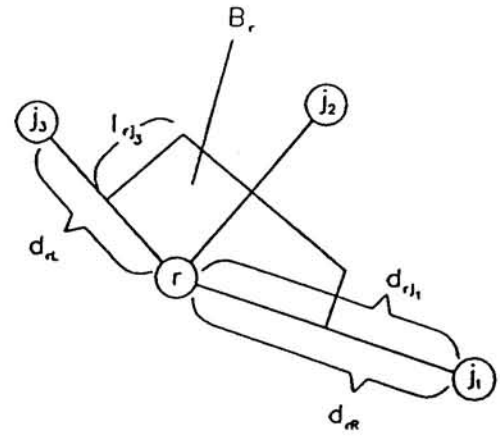

Abbildung 2: Voronoi-Box am Rand

r steht für den Randpunkt und ν für den linksseitigen und rechtsseitigen Nachbar-Randpunkt. Die Dirichlet-Randbedingung geht in trivialer Weise in die diskretisierten Gleichungen ein.

4 Ergebnisse

Zur Verifikation des neuen Verfahrens wurde ein Vergleich mit der bewährten Transformationsmethode durchgeführt [2]. Als Ausgangsdaten dienten die Ergebnisse einer Monte Carlo Simulation eines Ionenimplantationsschrittes in eine reale Trenchstruktur, wie sie beispielsweise in Kondensatoren für DRAM-Speicherzellen Verwendung findet. Arsen wurde in die zweidimensionale Struktur unter +7 °und -7 °mit einer Gesamtdosis von $5 \cdot 10^{13} cm^{-2}$ und einer Energie von 30 keV implantiert (Abbildung 3).

Danach wurde ein ein einstündiger Diffusionsschritt bei 1000 °C (Annealing) mit der beschriebenen Methode der Diskretisierung der Diffusionsgleichung in vereinfachter Form auf einem irregulären triangularen Gitter simuliert.

Das Dreiecksgitter (Abbildung 4) besteht aus etwa 1900 Punkten. Zwecks Vergleich wurde eine Rechnung mit der Bereichstransformationsmethode durchgeführt; das transformierte Rechteckgitter umfasst etwa 6000 Punkte [6].

Wie man sieht, stimmen die Ergebnisse für beide Verfahren gut überein (Abbildungen 5 und 6). Die kleinen Abweichungen zwischen den Ergebnissen sind auf die mangelhafte Interpolation des Anfangsprofils vom orthogonalen Gitter der Monte Carlo Implantation auf das triangulare Gitter und auf den Jitter der Monte Carlo Ergebnisse zurückzuführen.

Für das vorliegende Beispiel, in dem die kritischen Bereiche der Dopandenkonzentrationen mit dem Verlauf der transformierten Gitterlinien übereinstimmen ist die Verfeinerung im transformierten Gitter vergleichbar effizient [6].

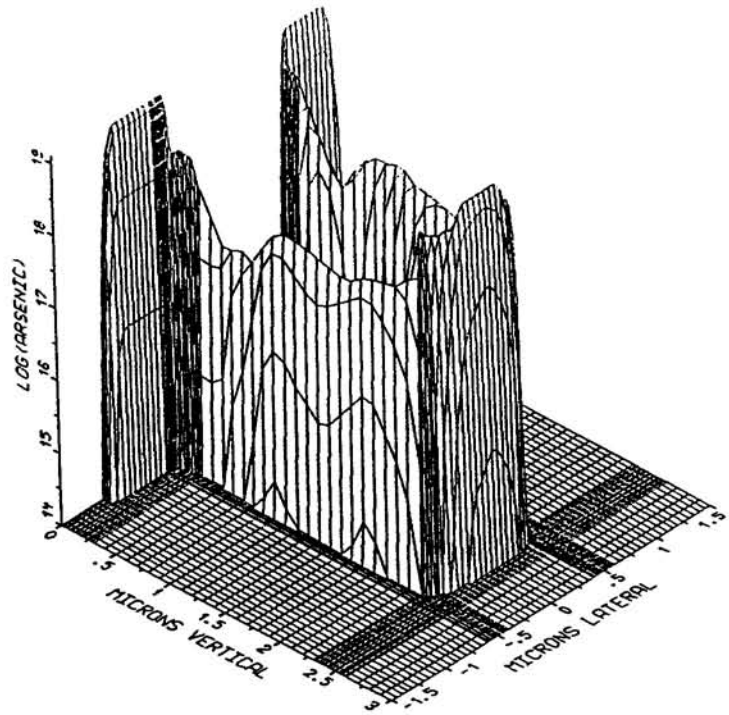

Abbildung 3: Ergebnis der Monte Carlo Implantation

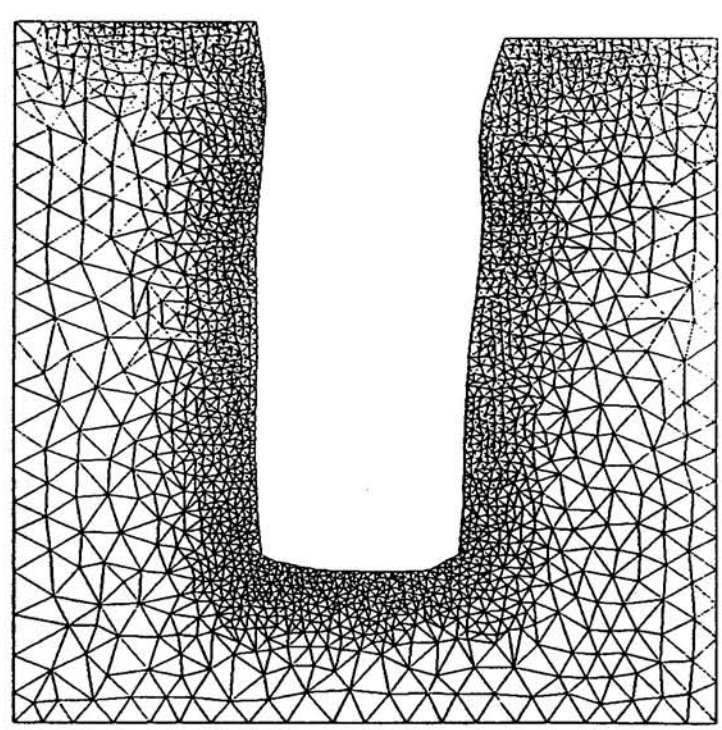

Abbildung 4: Dreiecksgitter für die Simulation der Diffusion

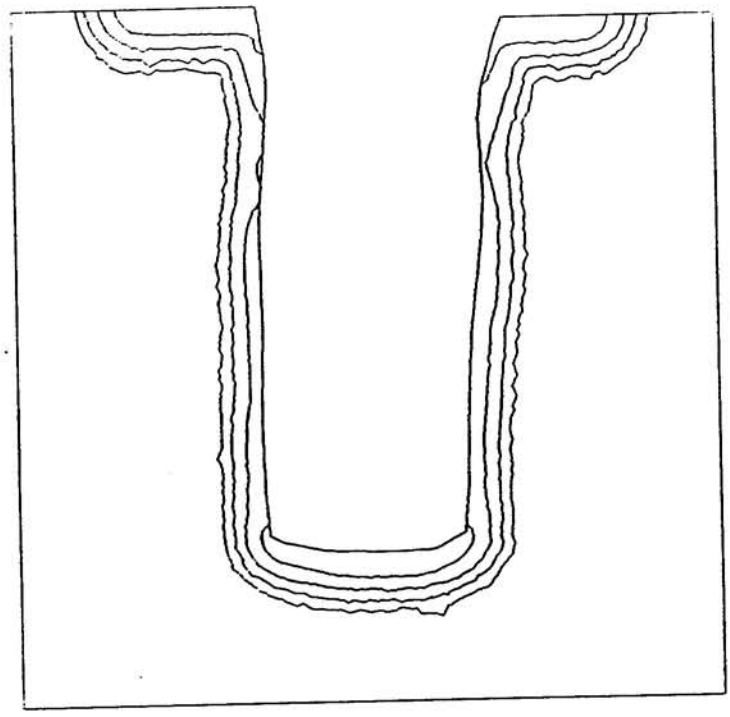

Abbildung 5: Ergebnis der Simulation der Diffusion auf triangularem Gitter (Isolinien bei $C = 10^{15}, 10^{16}, 10^{17}, 10^{18} cm^{-3}$)

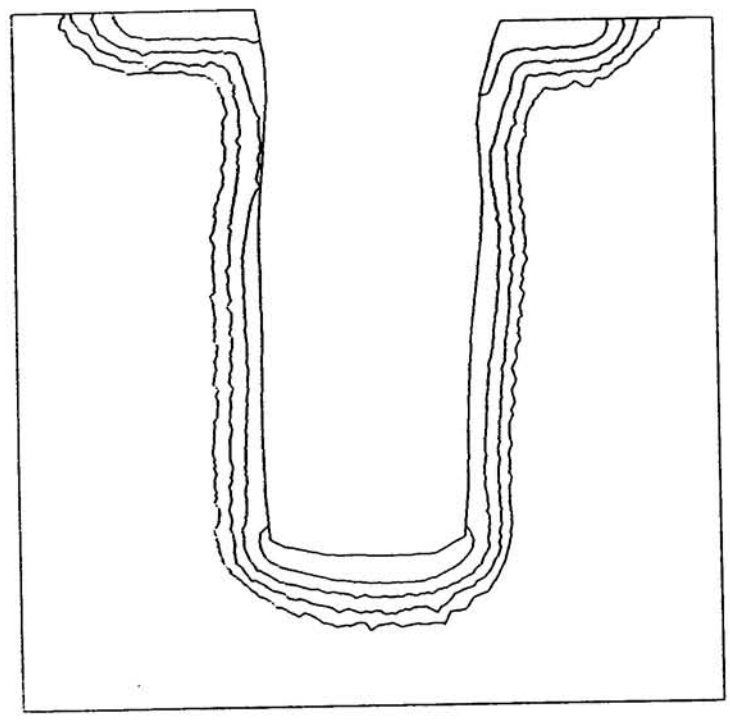

Abbildung 6: Ergebnis der Simulation der Diffusion auf transformiertem Rechteckgitter (Isolinien bei $C = 10^{15}, 10^{16}, 10^{17}, 10^{18} cm^{-3}$)

5 Conclusio

Die Diskretisierung der Diffusionsgleichung auf einem Dreiecksgitter bietet eine große Flexibilität in der Geometrie des Simulationsgebietes und ist sehr effizient lokal verfeinerbar. Diese Vorteile werden durch einen höheren Aufwand in der Gitteradaption und Gittergenerierung erkauft. In Summe erscheint die triangulare Diskretisierung jedoch als geeignetes Verfahren um die Diffusion in sehr komplexen Bauelementstrukturen behandeln zu können.

Literatur

[1] G. Hobler, S. Selberherr: *Monte Carlo Simulation of Ion Implantation into Two- and Three-Dimensional Structures*, IEEE Transactions on CAD, Vol. 8, No. 5, pp. 450 – 459 (1989).

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

[3] M. Heinrich, M. Budil, H. Pötzl: *Simulation of arsenic and boron diffusion during rapid thermal annealing in silicon*, Proceedings ESSDERC 90, pp. 205 – 208 (1990).

[4] G. Hobler, S. Halama, K. Wimmer, S. Selberherr, H. Pötzl: *RTA-SIMULATIONS WITH THE 2-D PROCESS SIMULATOR PROMIS*, NUPAD III technical digest, pp 13 – 14 (1990).

[5] S. Halama, G. Hobler, K. Wimmer, S. Selberherr: *Finite-Differenzen Dreiecksnetzgenerierung für die Prozeßsimulation mit PROMIS*, SIEMENS Tagungsband "NuTech 90" (1990).

[6] K. Wimmer, S. Halama, G. Hobler, S. Selberherr: *Simulation nichtplanarer Herstellungsschritte mit PROMIS*, Dieser Tagungsband.