

ZWEIDIMENSIONALE PROZESSIMULATION

P.Pichler, W.Jüngling, S.Selberherr, E.Guerrero, H.Pötzl

Institut für Allgemeine Elektrotechnik und Elektronik
Abteilung für Physikalische Elektronik
Gusshausstraße 27-29, 1040-Wien, AUSTRIA

ZUSAMMENFASSUNG:

Der Übergang zu immer kleineren Strukturen in der Fabrikation von VLSI-Bauteilen erfordert die Kenntnis der zugrundeliegenden physikalischen Vorgänge. Durch die numerische Simulation physikalischer Modelle ist man in der Lage, die Umverteilung der Störatome im Halbleiter zu berechnen und damit Entwicklungszeit und Entwicklungskosten zu senken. Dieser Artikel beschreibt ein Programm, mit dem auch die Simulation komplexer Modelle möglich ist und bringt als Beispiel die Simulation einer stark gekoppelten Bor-Arsen-Diffusion.

1. EINFÜHRUNG

In den letzten Jahren gelangten beim Entwurf neuer Generationen von VLSI-Schaltkreisen in immer stärkerem Maße Programme zum Einsatz, die das elektrische Verhalten der Einzeltransistoren berechneten. Mit steigender Miniaturisierung steigt auch der Einfluß von Nebeneffekten auf die Dotierungsprofile und damit auf das elektrische Verhalten der Bauteile. Zur Beschreibung dieser Einflüsse im Rahmen der Prozeßsimulation werden Modelle verwendet, deren Komplexität laufend zunimmt. Die Implementierung dieser Modelle in bestehende Programme zur Prozeßsimulation sowie deren Adaption und der Austausch von Parametern ist meist sehr arbeitsintensiv und manchmal überhaupt unmöglich /1/, /2/, /3/, /6/. Aus diesem Grund wurde das Programmpaket PROMIS (PROcess Modeling In Silicon semiconductors) entwickelt, das die numerische Simulation parabolischer und elliptischer Systeme gekoppelter, nichtlinearer, partieller Differentialgleichungen (PDEs) fast

beliebiger Struktur gestattet. Kapitel 2 dieses Beitrages beschreibt die mögliche Struktur der PDEs, in Kapitel 3 wird eine Anwendung aus dem Gebiete der extrinsischen, stark gekoppelten Diffusion von Bor und Arsen gezeigt.

2. BESCHREIBUNG VON PROMIS

Die Hauptanwendung von Promis liegt in der zweidimensionalen Berechnung der Umverteilung physikalischer Größen bei Diffusionsschritten. Die Beschreibung dieser Vorgänge erfolgt durch Differentialgleichungen. Die Struktur, in der eine Definition von PDEs möglich ist, wurde daher so allgemein wie möglich gewählt.

$$\sum_{j=1}^N a_{ij} \frac{\partial C_j}{\partial t} + \text{div } J_i + G_i - R_i = 0 \quad (1)$$

$$J_i = \sum_{j=1}^N (d_{ij} \cdot \text{grad } C_j + \mu_{ij} \cdot C_j \cdot \text{grad } \psi) \quad (2)$$

Die Differentialgleichungen haben die Form allgemeiner Kontinuitätsgleichungen (1) mit Generations/Rekombinationstermen und allgemeinen Stromrelationen (2), wobei N sowohl der Anzahl der Differentialgleichungen als auch der Anzahl der abhängigen Variablen C_j entspricht. Die Koeffizienten a_{ij} , d_{ij} , μ_{ij} , G_i und R_i können Funktionen der Simulationszeit bei der transienten Simulation der PDEs, des Ortes, der Temperatur und der lokalen Werte der abhängigen Variablen sein. Die Variable ψ ist eine der abhängigen Variablen C_j und wird für das elektrische Potential verwendet.

Durch diese allgemeine Formulierung ist es möglich, die physikalischen Vorgänge bei Hochtemperaturschritten, wie z.B. Umverteilung der Dopanden, der Einfluß des elektrischen Feldes, intrinsischer Kristalldefekte, usw. numerisch auszuwerten.

Die Formulierung der Randbedingungen (3) erlaubt die üblichen Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen aber auch gemischte Randbedingungen mit Summen von durch (2) definierten Strömen.

$$\sum_{j=1}^N f_{ij} \cdot (J_j \cdot \bar{n}) + F_i = 0 \quad (3)$$

Die Koeffizienten ξ_{ij} können Funktionen der Simulationszeit, der Ortskoordinate und der Temperatur sein, die F_i können zusätzlich Funktionen der lokalen Randwerte der abhängigen Variablen sein.

Die Berechnung der Differentialgleichungen erfolgt bei der derzeitigen Version von PROMIS in einem rechteckigen Simulationsgebiet auf einem nichtäquidistanten Gitter, dessen Adaption automatisch erfolgt.

Zur Befriedigung der Bedürfnisse in der Prozeßsimulation wurden alle gebräuchlichen Modelle zur Beschreibung von Ionen-Implantationen eingebaut. Zur Weiterverarbeitung von Meßprofilen und von Ergebnissen von Monte-Carlo Programmen können Daten von externen Datenträgern gelesen werden. Eine ausführliche Beschreibung der Programmstruktur findet sich in /5/.

3. GEKOPPELTE DIFFUSION VON BOR UND ARSEN

Der Einfluß der feldunterstützten Diffusion von Bor und Arsen ist ein wichtiges Kapitel der Prozeßsimulation, da diese Elemente häufig bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen verwendet werden. Dieser Effekt führt zu einer gegenseitigen Beeinflussung der Dopanden bei der Umverteilung und kann, wie wir im Beispiel sehen werden, starke Auswirkungen auf die Umverteilung der Ionen haben. Die gleichungsmäßige Formulierung einer gekoppelten Diffusion ist durch die Gleichungen (4)-(6) gegeben.

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi = \frac{q}{\epsilon} \cdot (2 \cdot n_i \cdot \sinh(\frac{\psi}{U_t}) + C_B - C_{As}) \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \operatorname{div} \left(D_B \left(\operatorname{grad} C_B - \frac{C_B}{U_t} \cdot \operatorname{grad} \psi \right) \right) \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = \operatorname{div} \left(D_{As} \left(\operatorname{grad} C_{As} + \frac{C_{As}}{U_t} \cdot \operatorname{grad} \psi \right) \right) \quad (6)$$

Das System besteht aus einer Poisson-Gleichung (4) und den Kontinuitätsgleichungen für Bor (5) und Arsen (6) und wurde unter der Vernachlässigung von Hochdotierungseffekten gewonnen. Wie in /4/ gezeigt wurde, ist eine Vereinfachung der Poisson-

Gleichung unter Vernachlässigung der Raumladung zwar zulässig, führt jedoch bei gleichzeitiger Reduktion des Gleichungssystems auf kompliziertere Ableitungen bei den Diffusionskoeffizienten.

Die Anfangsbedingungen für die Diffusion wurden mit zwei Ionen-Implantationen von Bor (10^{15} cm^{-2} , 75keV durch eine SiO_2 -Maske mit 15nm) und Arsen (10^{15} cm^{-2} , 90 keV durch eine SiO_2 -Maske, die vom Koordinatenursprung von 15nm weg mit 45° ansteigt.) angenommen. Die durch die Ionen-Implantation entstandenen Profile sind in Fig.1 und Fig.2 gegeben.

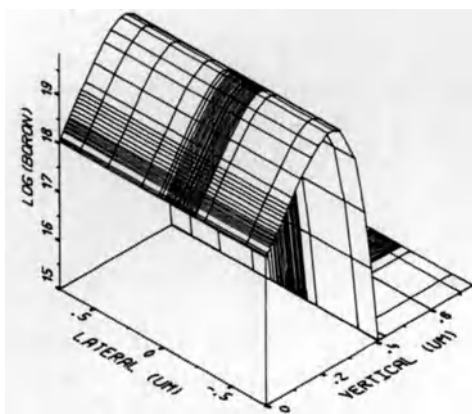


Fig.1: Bor Konzentration nach der Ionen-Implantation

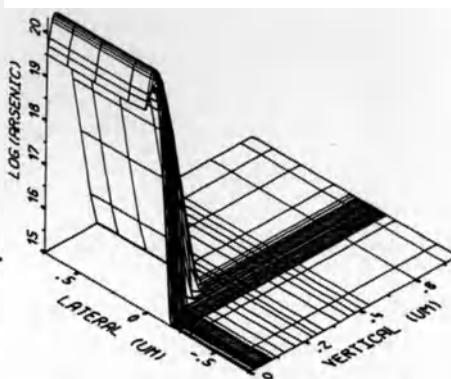


Fig.2: Arsen Konzentration nach der Ionen-Implantation

Nach 600 Sekunden inerte Diffusion bei 1000°C ergeben sich die in Fig.3 bis Fig.5 dargestellten Kurvenformen für das elektrische Potential und die Dopanden.

Durch den Einfluß des Arsens bildete das Bor-Profil in der Umgebung des p-n-Überganges eine Spitze. Um das Ausmaß der gegenseitigen Beeinflussung besser abschätzen zu können, wurden in den Bildern 6 und 7 die Dotierungsprofile in linearem Maßstab gezeichnet.

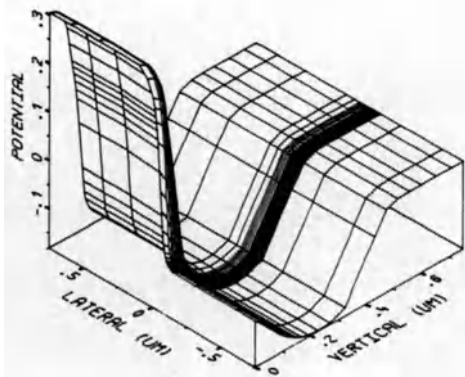


Fig.3: Potential nach 600s Diffusion

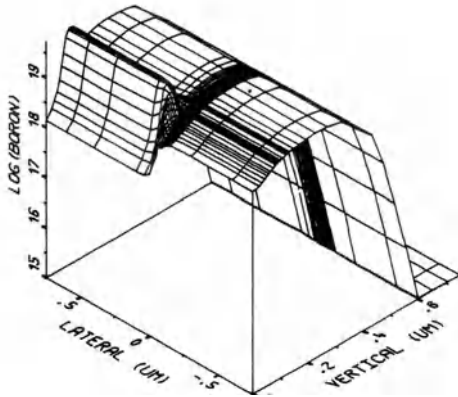


Fig.4: Bor Konzentration
nach 600s Diffusion

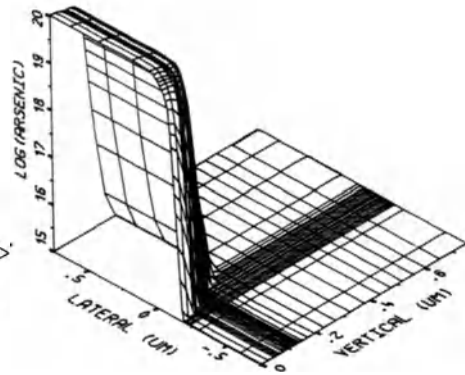


Fig.5: Arsen Konzentration
nach 600s Diffusion

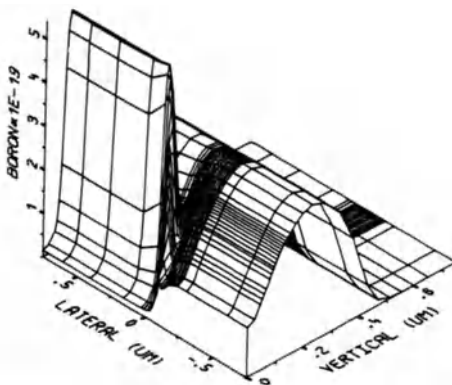


Fig.6: Bor Konzentration
nach 600s Diffusion

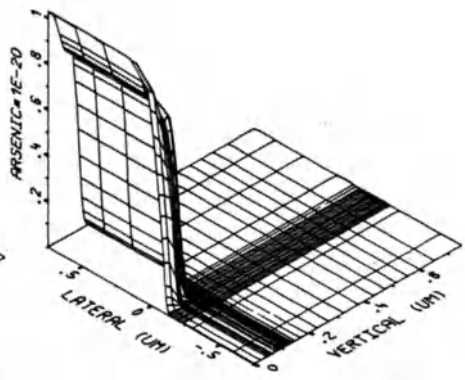


Fig.7: Arsen Konzentration
nach 600s Diffusion

Eindimensionale Untersuchungen /4/ zeigten, daß am Anfang einer extrinsischen Diffusion der Einfluß des elektrischen Feldes, das durch die anfängliche Verteilung der Dopanden entsteht, die Diffusion maßgeblich beeinflusst. In dieser Phase bilden sich die beobachteten Akkumulationen der Dopanden, die in einer zweiten Phase der Diffusion ambipolar diffundieren. Dieser Effekt tritt, qualitativ gesehen, bei allen MOS-Transistor Prozessen auf, da meist Arsen für die Drain- und Sourcegebiete und Bor für die Kanalimplantation verwendet wird. Die Auswirkungen sind jedoch wegen der meist geringen Bor-Dosis und der geringeren Temperatur weniger ausgeprägt.

ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Beitrag wurde ein Universalprogramm zur Simulation nahezu aller in der Prozeßsimulation üblichen Differentialgleichungssysteme vorgestellt. PROMIS unterstützt die einfache Implementierung physikalischer Modelle und erleichtert die Benutzung durch sophistizierte Algorithmen. Ein Beispiel einer gekoppelten Bor-Arsen-Diffusion zeigt ein typisches Anwendungsbeispiel.

DANKSAGUNG

Diese Arbeit wurde durch die SIEMENS Forschungslaboratorien in München und den Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung, Projekt S 43/10 unterstützt.

LITERATUR

- /1/ Antoniadis D.A., Dutton R.W., Models for Computer Simulation of Complete IC Fabrication Process, IEEE J.Solid State Circuits, Vol.SC-14, No.2, pp.412-422, 1979.
- /2/ Ho C.P., Plummer J.D., Hansen S.E., Dutton R.W., VLSI Process Modeling - SUPREM III, IEEE Trans. Electron Devices, Vol.ED-30, No.11, pp.1438-1453, 1983.
- /3/ Penumalli B.R., A Comprehensive Two-dimensional VLSI Process Simulation Program, BICEPS, IEEE Trans.Electron Devices, Vol.ED-27, No.9, pp.986-992, 1983.
- /4/ Pichler P., Jüngling W., Selberherr S., Pötzl H., Two-Dimensional Coupled Diffusion Modeling, Physica B, Vol.129B, pp.187-191, 1985.
- /5/ Pichler P., Jüngling W., Selberherr S., Guerrero E., Pötzl H., Simulation of Critical IC-Fabrication Steps, Accepted for publication in IEEE Trans.Electron Devices, October 1985.
- /6/ Ryssel H., Habberger K. Hoffmann K., Prinke G., Dümcke R., Sachs A., Simulation of Doping Processes, IEEE Trans.Electron Devices, Vol.ED-27, pp.1484-1492, 1980.