

Effiziente Methoden für die Monte Carlo Simulation der Ionenimplantation in multidimensionale kristalline Halbleiterstrukturen

W. Bohmayr, S. Selberherr
Institut für Mikroelektronik, TU Wien,
1040 Wien

Wir präsentieren in diesem Beitrag eine neue Methode, mit deren Hilfe Monte Carlo Simulationen der Ionenimplantation in kristalline Halbleiterstrukturen erheblich beschleunigt werden. Dieser „*trajectory split*“ Ansatz kann auf zwei- und dreidimensionale Geometrien angewendet werden und gewährleistet eine weitaus bessere statistische Genauigkeit der Ionenverteilung in niedrig dotierten Gebieten. Um die Vorteile dieser neue Methode auch quantifizieren zu können, wurden sorgfältige statistische Analysen und Zeitmessungen durchgeführt.

1. Einleitung

Moderne Halbleiterstrukturen verlangen immer genauere Modellbeschreibungen und universell einsetzbare Prozeß- und Bauteilsimulatoren. Aufgrund ihrer Fähigkeiten Channeling-Effekte und Strahlenschäden zu berücksichtigen, erfreuen sich Monte Carlo Methoden zunehmender Beliebtheit. Da auch das Simulationsgebiet keinen geometrischen Einschränkungen unterliegt, bleibt als einziger Nachteil nur noch der hohe Rechenzeitaufwand bestehen.

Konventionelle Monte Carlo Ansätze, die auch die kristalline Struktur des Siliziums berücksichtigen, basieren auf der Berechnung einer sehr großen Anzahl unterschiedlicher Ionenbahnen (Trajektorien), d.h. das Ion tritt in das Zielgebiet ein, durchläuft anschließend zahlreiche Stöße mit den Siliziumatomen, wird dadurch von seiner ursprünglichen Bahn abgelenkt und kontinuierlich gebremst, bis es schließlich im Atomgitter zur Ruhe kommt. Da es sich hierbei um Zufallsprozesse handelt, läßt sich auch eine wahrscheinlichste Eindringtiefe vorhersagen, die naturgemäß eine hohe statistische Genauigkeit aufweist. Periphere Bereiche hingegen zeigen ein erheblich höheres statistisches Rauschen, das in den meisten Fällen nicht toleriert werden kann. Man ist daher gezwungen, die Anzahl der berechneten Trajektorien zu erhöhen, was wiederum die Simulationszeit in die Höhe treibt.

Inspiziert durch hervorragende Ergebnisse für eindimensionale Simulationen [1] mit dem UT-MARLOW Programm [2], entwickelten wir die „*trajectory split*“ Methode, die den Berechnungsaufwand drastisch reduziert und auf zwei- und dreidimensionale Strukturen anwendbar ist.

2. Die „trajectory split“ Methode

Der Grundgedanke unseres neuen Simulationsansatzes ist die *lokale* Erhöhung der berechneten Ionenbahnen in Gebieten mit hohen statistischen Dotierungsschwankungen und die Ausnützung jener Informationen, die aus der Flugbahn eines Ions bis zu einer bestimmten Eindringtiefe gewonnen werden können. Dabei ermitteln wir bei jeder Tra-

jektorie die momentane, lokale Dotierungskonzentration C_{loc} an bestimmten Punkten („*checkpoints*“) und setzen diese zur momentanen, maximalen Konzentration $C_{max,current}$ durch Berechnung von $C_{loc}/C_{max,current}$ ins Verhältnis. Das Ergebnis wird anschließend vorgegebenen, relativen Konzentrationsbereichen (wir definieren deren zehn zu 0,3, 0,09, 0,027,..., $0,3^{10}$) zugeordnet. Nur wenn das Teilchen von einem größeren zu einem kleineren Bereich wechselt, wird an diesem „*checkpoint*“ ein neues, virtuelles Ion gestartet („*trajectory split point*“). Wir merken uns die Position des Ions, seine Energie sowie seinen Geschwindigkeitsvektor und verwenden diese Daten anschließend zur Berechnung der virtuellen Trajektorie, die erst ab dem „*trajectory split point*“ startet. Dabei werden die selben Modelle und Parameter wie bei den regulären Ionenbahnen verwendet. Da selbstverständlich auf die Erhaltung der Dotierungskonzentration geachtet werden muß, weisen wir jeder Trajektorie, ob nun regulär oder virtuell, ein Gewicht zu (Abb. 1a). Anzumerken wäre noch, daß die unterschiedlichen Realisierungen der verschiedenen Trajektorien nur aus der thermischen Vibration der Siliziumatome [4] resultieren. Durch diese Vorgehensweise entsteht ein selbst-adaptiver Algorithmus mit exakt dem gewünschtem Verhalten: Nur in Gebieten mit momentan ungenügender statistischer Genauigkeit werden zusätzliche Ionenbahnen berechnet und das statistische Rauschen wird reduziert.

In unserem ersten Versuch [3] wählten wir die einfachste Implementierung dieser Methode, bei der rekursives Aufteilen der Trajektorien nicht vorgesehen war, und nur jeweils eine virtuelle Ionenbahn pro „*trajectory split point*“ gestartet wurde (Abb. 1a).

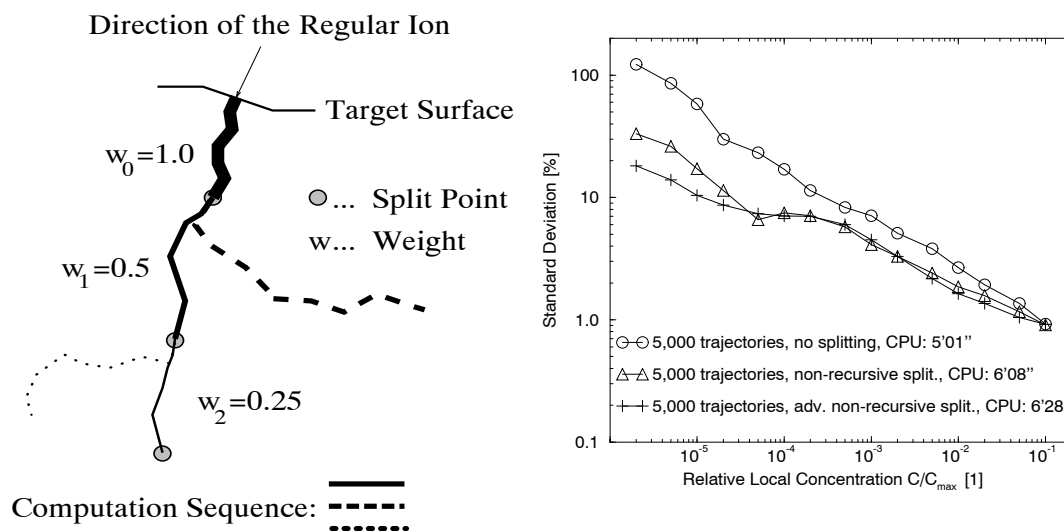


Abb. 1 a) Topologische Struktur der nichtrekursiven Methode, das Gewicht jedes Zweiges und seine Reihenfolge bei der Berechnung b) Zugehörige statistische Genauigkeit einer zweidimensionalen Punktantwort aus einer Phosphor-Implant Simulation

In dieser Arbeit stellen wir zwei weitere „*trajectory split*“ Methoden vor: die „*recursive Trajectory Related Split*“ Methode (TRS, Abb. 2 a) und die „*recursive Split-level Related Split*“ Methode (SRS, Abb. 3 a). Um die Vorzüge der neue Strategien demonstrieren zu können, simulierten wir zweidimensionale Punktantworten von Phosphor Implants in (100) - orientiertem Silizium. Die Energie der Ionen betrug dabei 50 keV und die Strahlendosis setzten wir mit $3 \cdot 10^{13}$ Ionen pro cm^2 fest.

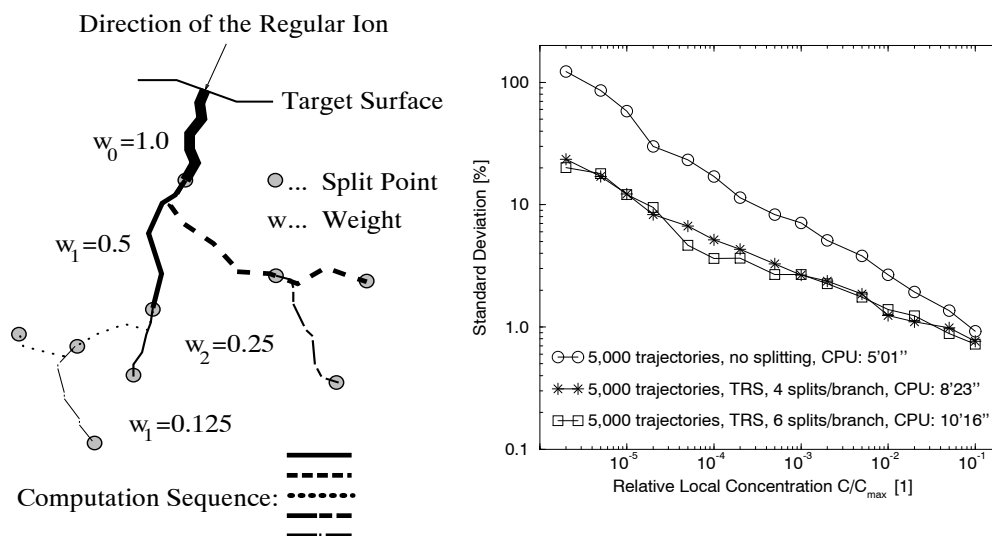


Abb. 2 a) Topologische Struktur der TRS Methode, das Gewicht jedes Zweiges und seine Reihenfolge bei der Berechnung b) Zugehörige statistische Genauigkeit einer zweidimensionalen Punktantwort aus einer Phosphor-Implant Simulation

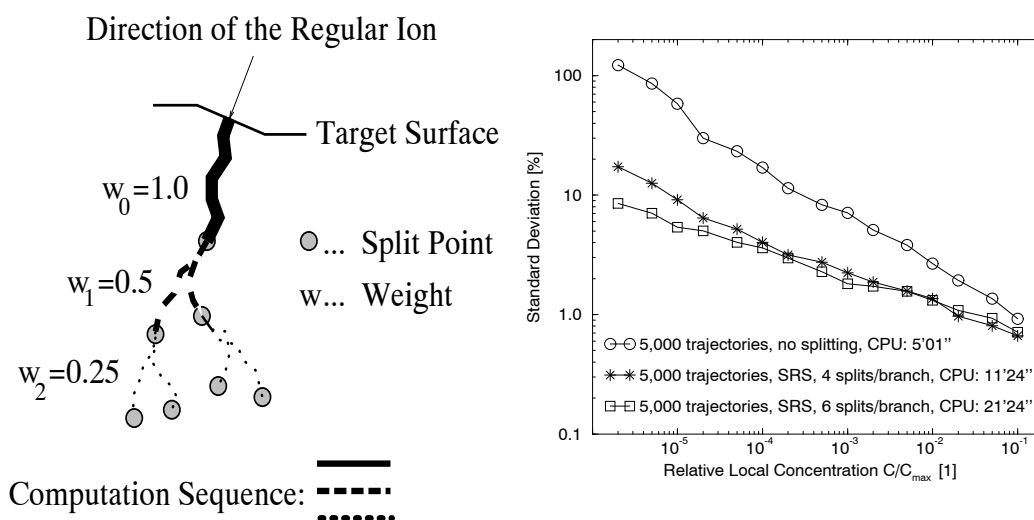


Abb. 3 a) Topologische Struktur der SRS Methode, das Gewicht jedes Zweiges und seine Reihenfolge bei der Berechnung b) Zugehörige statistische Genauigkeit einer zweidimensionalen Punktantwort aus einer Phosphor-Implant Simulation

Der benötigte Rechenzeitaufwand für solche Simulationen beträgt auf einer Workstation HP 735/100 ca. *eine Stunde* bei Verwendung von konventionellen Strategien, hingegen erhält man bereits nach **zehn Minuten** ein Ergebnis mit vergleichbarer Statistik, wenn eine „trajectory split“ Methode zum Einsatz kommt.

Um nun die statistische Genauigkeit der Simulationsergebnisse beurteilen zu können, definierten wir eine mittlere quadratisch Abweichung von einer Referenzkonzentration (Ergebnis aus einer konventionellen Simulation mit einer extrem großen Trajektorienzahl (1.000.000), sodaß statistische Fluktuationen in den betrachteten Gebieten vernachlässigt werden können). Wir präsentieren die Abweichungen für die nichtreursive

(Abb. 1 b), die TRS (Abb. 2 b) und die SRS (Abb. 3 b) Methode, jeweils mit 5.000 regulären Ionenbahnen berechnet. Die relative Konzentration in diesen Abbildungen ist als Verhältnis C/C_{\max} definiert, wobei C_{\max} die maximale Dotierungskonzentration der Referenzverteilung darstellt. Es ist evident, daß der relative Fehler in Richtung zunehmender lokaler Konzentration abnimmt. Daraus folgt unmittelbar, daß Bereiche mit niedriger lokaler Dotierung am besten dazu geeignet sind, die Vorzüge der neuen Simulationsmethoden zu demonstrieren (mittlere quadratische Abweichung von der Referenzverteilung bis zu 15 mal kleiner). Weitere nicht zu unterschätzende Vorteile der „*trajectory split*“ Methode sind ihre geringere Sensitivität bezüglich der relativen lokalen Konzentration und die Option, den Fehlerverlauf individuell zu gestalten (Abb. 3 b). Erhöht man z.B. die Anzahl der virtuellen Trajektorien pro „*trajectory split point*“ und/oder die Anzahl der erlaubten Aufteilungspunkte pro Zweig, so erreicht man eine Verringerung des Fehlers in Gebieten mit niedriger Dotierung, läßt aber die Statistik in hochdotierten Bereichen nahezu unverändert. Es besteht damit die Möglichkeit, das Verhältnis von Simulationsdauer zur Standardabweichung für die jeweilige Problemstellung zu optimieren.

Danksagung:

Die Autoren danken den Herren A. Burenkov, J. Lorenz und H. Ryssel (alle am Fraunhofer-Institut für Integrierte Schaltungen Bauelementetechnologie, Erlangen, Deutschland) für ihre wesentlichen Beiträge zum Gelingen dieser Arbeit, sowie der EU für die finanzielle und wissenschaftliche Unterstützung im Rahmen des ESPRIT Projektes Nr. 8150 (PROMPT).

Literaturverzeichnis

- [1] S.-H. Yang, D. Lim, S. Morris, and A.F. Tasch, „A More Efficient Approach for Monte Carlo Simulation of Deeply-Channeled Implanted Profiles in Single-Crystal Silicon“, NUPAD 94, pp. 97-100.
- [2] K.M. Klein, C. Park, and A.F. Tasch, „Monte Carlo Simulation of Boron Implantation into Single-Crystal Silicon“, IEEE Trans. Electron Devices, ED-39, pp. 1614-1621, 1992.
- [3] W. Bohmayr and S. Selberherr, „Trajectory Split Method for Monte Carlo Simulation of Ion Implantation Demonstrated by Three-Dimensional Poly-Buffered LOCOS Field Oxide Corners“, VLSI-TSA 95, Taipei.
- [4] M. Jaraiz, J. Arias, E. Rubio, L.A. Marques, L. Pelaz, L. Bailon, and J. Barbolla, „Dechanneling by Thermal Vibrations in Silicon Ion Implantation“, Catania-Conference for ion implantation, P. 2.19, 1994.