

Simulation von thermischen Diffusionsprozessen in dreidimensionalen Halbleiterstrukturen

E. Leitner, S. Selberherr
Institut für Mikroelektronik, TU Wien,
1040 Wien

In der vorliegenden Arbeit wird eine Methode zur effizienten Simulation von Diffusionsvorgängen in dreidimensionalen Strukturen vorgestellt. Basierend auf einer Implementierung der Finiten Elemente Methode zur numerischen Lösung der gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen wurde eine durch die Diskretisierungsfehler gesteuerte Methode zur Gitteradaptierung implementiert. Die Methode beruht auf einer lokal rekursiven Zerteilung eines groben Initialgitters, wobei einerseits durch die Art der Verfeinerung die Erhaltung der Gitterqualität sichergestellt ist und andererseits eine effiziente Simulation mit definiertem Diskretisierungsfehler möglich ist.

1. Einleitung

Die Entwicklung moderner hochintegrierter Schaltkreise mit charakteristischen Abmessungen unter $1\mu\text{m}$ erfordert die Berücksichtigung der dreidimensionalen Effekte, welche hauptsächlich an den Ecken der Strukturen auftreten. Die dazu verwendeten Bauteilsimulatoren benötigen allerdings dreidimensionale Dotierungsprofile, um aussagekräftige Ergebnisse liefern zu können. Die zur Erzeugung solcher Profile verwendeten analytische Modelle bzw. die mehr oder weniger naive Erweiterung von ein- bzw. zweidimensionalen Simulationsergebnissen auf drei Dimensionen erfüllt jedoch nicht die Genauigkeitsanforderungen, woraus sich der Bedarf für dreidimensionale Prozeßsimulation ableitet. Ein wesentlicher Prozeßschritt dabei ist das Ausheilen der durch die Implantation der Dopanden entstandenen Gitterdefekte sowie die dabei stattfindende elektrische Aktivierung der Dotierungsatome (Annealing).

2. Thermisch aktivierte Vorgänge in Silizium

Durch die Implantation der Dotierungsatome entstehen erhebliche Störungen der Gitterstruktur des Siliziums. Die Fremdatome sitzen zumeist an Zwischengitterplätzen, wo sie elektrisch inaktiv sind. Weiters sind Siliziumatome von den implantierten Atomen aus dem Gitterverband geschlagen worden, wodurch sie sich einerseits auch auf Zwischengitterplätzen befinden und andererseits leere Gitterplätze hinterlassen (Fehlstellen).

Bei Temperaturen im Bereich von $800 - 1100^\circ\text{C}$ finden durch die thermischen Gitterschwingungen Platzwechselforgänge statt, die zur Ausheilung der Defekte bzw. zur Umverteilung (Diffusion) der dotierten Atome führen. Diese Vorgänge können mit Hilfe folgender Differentialgleichung beschrieben werden:

$$\sum_{l=1}^Q \alpha_{kl} \frac{\partial C_l}{\partial t} = \text{Div}(\vec{J}_k) + \gamma_k = 0, \quad k = 1, \dots, Q$$

$$\vec{J}_k = \sum_{l=1}^Q (a_{kl} \cdot \text{grad} C_l + b_{kl} C_l \text{grad} \Psi)$$

C_l bezeichnet die Konzentrationen der Q verschiedenen Atomarten bzw. Atomzustände. J_k steht für die Teilchenströme, welche über a_{kl} von den Konzentrationsgradienten abhängen und durch b_{kl} mit dem elektrostatischen Feld $\text{grad} \psi$ verkoppelt sind. Die Koeffizienten α_{kl} beschreiben die Übergänge zwischen den einzelnen Zuständen und mit γ_k werden Generations- bzw. Rekombinationsvorgänge beschrieben [1].

3. Numerische Lösung der Diffusionsgleichung

Als Diskretisierungsverfahren verwenden wir die Methode der Finiten Elemente basierend auf Tetraedern mit linearen Ansatzfunktionen [2]. Weiters erlauben wir oktaedrische Elemente, welche zur Diskretisierung in acht Tetraeder zerlegt werden. Die aus der Diskretisierung resultierenden nichtlinearen Gleichungssysteme werden mittels eines gedämpften Newton-Iterationsverfahrens gelöst. Zur Lösung der dabei entstehenden linearen Gleichungssysteme kann wahlweise ein iterativer BiCGStab-Solver oder ein Gauß-Solver verwendet werden.

Der numerische Aufwand dieser Methode (unter Verwendung des iterativen Solvers) ist in etwa proportional zu $(Q * N)^{3/2}$, worin N die Zahl der Stützstellen des Finite Elemente Gitters beziffert. Man trachtet daher, N so niedrig als möglich zu halten, was aber im Gegensatz zu den Genauigkeitsanforderungen steht.

4. Adaptierung des Finite Elemente Gitters

Ein Gitter mit diskretisierungsfehlerabhängiger Dichte bietet sich daher als optimale Lösung an, um beide Forderungen zu erfüllen. Zur Abschätzung des Diskretisierungsfehlers vergleichen wir den Gradienten der Näherungslösung mit einer an den Gradienten der Näherungslösung approximierten Näherung höherer Ordnung. Da der Gradient aufgrund der linearen Ansatzfunktionen stückweise stetig ist, werden für die Approximation höherer Ordnung die bereits vorhandenen linearen Ansatzfunktionen verwendet [2].

Zur Realisierung eines Gitters mit steuerbarer Dichte haben wir folgende Methode entwickelt: Wir teilen das Simulationsgebiet in ein grobes Gitter, bestehend aus Tetraedern und Oktaedern, welche das Gebiet vollständig erfüllen. Entsprechend dem Diskretisierungsfehler werden die einzelnen Elemente rekursiv verfeinert, bis die geforderte Genauigkeit erreicht ist. Während der Simulation kommt es aufgrund der Diffusion zur Veränderung der Profile, wodurch Elemente, an denen der Diskretisierungsfehler sehr klein wird, wieder durch ihr übergeordnetes Element ersetzt werden können (Vergrößerung).

Die Form der Gitterelemente hat starken Einfluß auf die Konvergenz des iterativen Lösungsverfahrens. Es ist daher wichtig darauf zu achten, daß die Elementqualität durch die fortschreitende Verfeinerung nicht zusehends geringer wird. Da die Elementqualität hauptsächlich von der Verzerrung des Elementes abhängt, verwenden wir eine Verfeinerungsmethode, die die Form der Elemente erhält:

Wir zerteilen einen Tetraeder in vier kleine Tetraeder und einen Oktaeder. Die vier Tetraeder sitzen jeweils an den Ecken des großen und der verbleibende Rest in der Mitte hat oktaedrische Form (siehe Abb. 1).

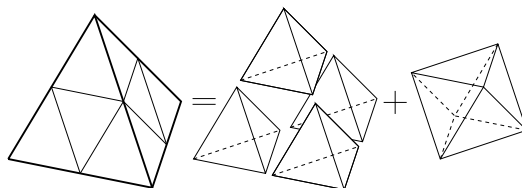


Abb. 1: Verfeinerung eines Tetraeders

Einen Oktaeder hingegen zerlegen wir in sechs kleine Oktaeder und acht Tetraeder. Diesmal befinden sich die kleinen Oktaeder an den Eckpunkten des großen und die verbleibenden Löcher sind tetraedrisch (siehe Abb. 2).

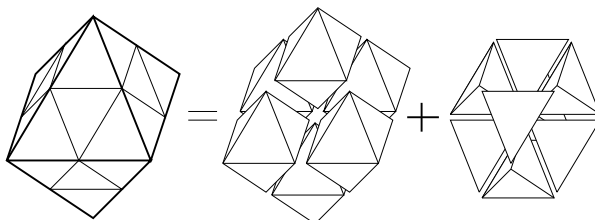


Abb. 2: Verfeinerung eines Oktaeders

Diese Methode hat den Vorteil, daß alle bei rekursiver Verfeinerung entstehenden Elemente die selbe Form haben, wie die nach dem ersten Verfeinerungsschritt vorhandenen Elemente (siehe Abb. 3).

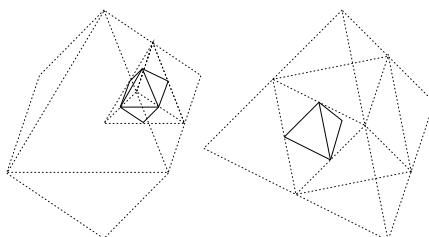


Abb. 3: Formerhaltung bei rekursiver Verfeinerung der Gitterelemente

Es läßt sich zeigen, daß durch die beim ersten Verfeinerungsschritt entstehenden Elemente vom jeweils anderen Typ nur eine geringfügige Qualitätsverschlechterung des Gesamtgitters bewirken können.

5. Berechnung eines Diffusionsschrittes für ein implantiertes Borprofil

Abb. 4 zeigt den Silizium Teil eines Ausschnitts aus einer MOS-Transistor Struktur, in welche Bor mit einer Energie von 50keV und einer Dosis von $1 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$ implantiert

wurde, nach einem Diffusionsprozeß bei 1000°C und 30 Minuten. Zur anschaulicheren Darstellung wurde das Feldoxid entfernt. Das Gitter bestand zu Beginn der Simulation aus 10594 Knoten und 21526 Elementen. Im Laufe der Simulation konnte das Gitter auf 18788 Knoten und 9519 Elemente reduziert werden. Die Rechenzeit betrug 52 Minuten auf einer Workstation HP9000/735, und es wurden 23MB Arbeitsspeicher verwendet. Der erlaubte Diskretisierungsfehler betrug dabei 1% bezogen auf die gesamte Bor Dosis in der Struktur.

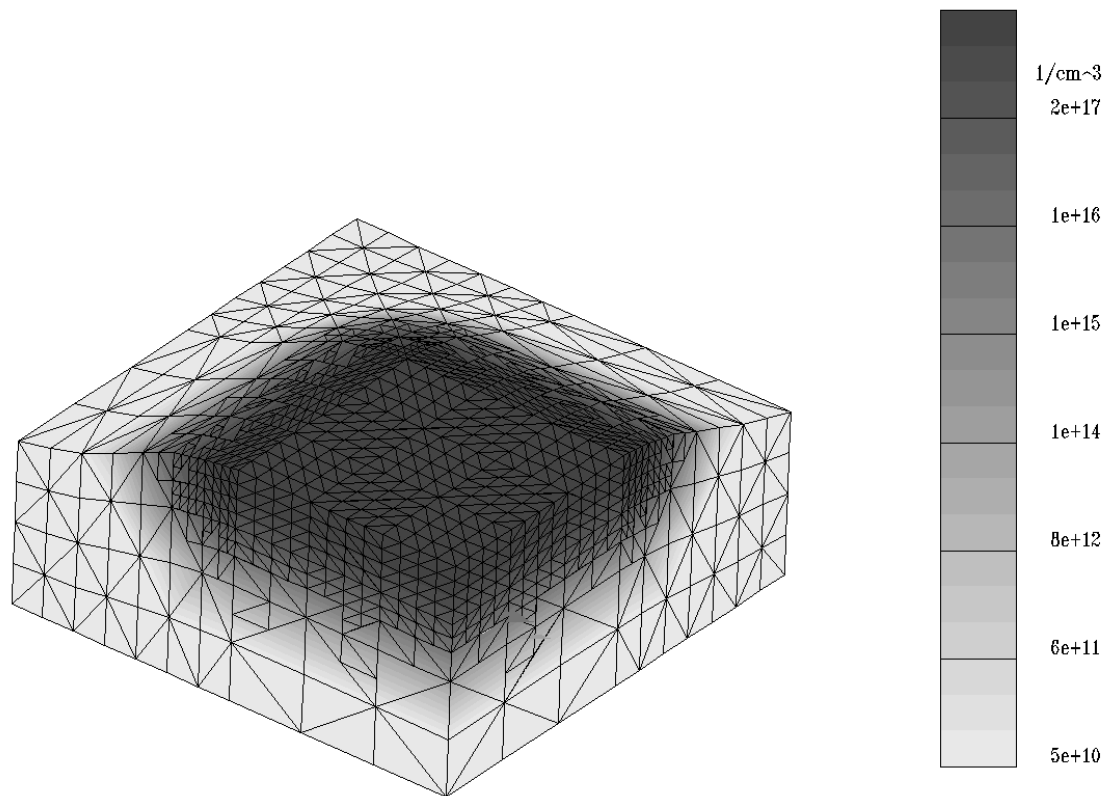


Abb. 4: Ergebnis der Simulation im Siliziumblock

Literaturverzeichnis

- [1] K. Wimmer. Two-Dimensional Nonplanar Process Simulation. Dissertation, Technische Universität Wien, Österreich 1993.
- [2] O. C. Zienkiewicz. The finite Element Method Vol. 1. McGraw-Hill, 1991.