

УДК 548.4; 621.382; 53.072:681.3

## МЕТОДЫ И СРЕДСТВА МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРОЕКТИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

В.В. НЕЛАЕВ

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь*

*Поступила в редакцию 24 декабря 2003*

Приведены результаты исследований методами молекулярной динамики и механики сплошных сред физических закономерностей и механизмов формирования пространственного распределения дефектов и примесных атомов в радиационно-термических технологических процессах микроэлектроники. Описаны разработанные физические модели и алгоритмы для моделирования процессов диффузионного перераспределения примесных атомов при термообработке и окислении монокристаллического кремния, а также газофазного осаждения поликристаллического кремния, определяющие многомерное распределение примесей и модификацию поверхности при изготовлении субмикронных элементов интегральных микросхем. Представлены модели и алгоритмы для осуществления неразрушающего восстановления распределения примесей в полупроводниковых структурах с использованием результатов ИК спектрофотометрических измерений. Описано решение задачи многофакторного статистического анализа в цикле Монте-Карло влияния флуктуаций технологических параметров на выходные характеристики проектируемых приборов/схем и оптимизации этих параметров. Сформулирована реализованная концепция виртуальной лаборатории в сети Интернет для коллективного проектирования технологии интегральных схем удаленными разработчиками и для дистанционного обучения.

*Ключевые слова:* моделирование, технология, молекулярная динамика, упругий континуум, статистический анализ, оптимизация, неразрушающий контроль, интернет.

### Введение

Технология изготовления интегральных схем основана на многообразных физических явлениях, сопровождающих взаимодействие потоков ионов и фотонов с твердым телом. Конструирование и использование оборудования, реализующего такую технологию, требуют больших финансовых затрат. Поэтому, несомненно, важна и актуальна задача разработки физико-математических моделей операций микроэлектроники и соответствующего программного обеспечения, которые позволяют проводить отработку технологии посредством компьютерных расчетов и являются составной частью систем автоматизированного проектирования микроэлектроники.

Использование систем компьютерного проектирования и моделирования технологии в микроэлектронике позволяет разработчику технологии изготовления интегральных схем (ИС) отрабатывать технологические режимы с целью их оптимизации для достижения требуемых физико-топологических параметров приборов. Кроме того, включение этих методов и средств в сферу автоматизированного производства ИС позволяет эффективно и наиболее оптимальным способом "вмешиваться" в технологический процесс с целью исправления "ошибок" на опреде-

ленных этапах технологического маршрута, выявленных на его выходе или на промежуточном этапе.

Кроме того, результаты компьютерного моделирования (другими словами, "компьютерного эксперимента") могут опережать развитие "know-how" технологий, т.е. в принципе можно построить модель технологической операции, не реализованной на практике. С другой стороны, решение задачи моделирования технологических операций формирования структурных элементов ИС позволяет проводить целенаправленный поиск физических методов и технологических параметров для осуществления на практике той или иной технологии.

Физической основой современных технологических операций формирования ИС являются процессы взаимодействия энергетических ионов и фотонов с кристаллической решеткой и диффузионные процессы массопереноса. Очевидно, что для микромасштабных структур (и тем более для наномасштабных!) традиционные методы моделирования физических явлений, сопровождающих современные технологические процессы обработки полупроводниковых структур, основанные на уравнениях макроскопического тепломассопереноса, неприемлемы. При описании таких объектов необходимо проводить анализ динамики перемещений отдельных атомов и эволюции исследуемого ансамбля атомов на уровне дискретной кристаллической решетки (из первых принципов!), что возможно, например, посредством использования метода молекулярной динамики. С другой стороны, моделирование таких макроскопических физических явлений, как, например, высокотемпературное окисление и перераспределение примесей в его процессе или осаждение пленки поликристаллического кремния из газовой фазы дает достаточно адекватные результаты в континуальном (в основном феноменологическом) приближении методами механики сплошных сред. Полученные из первых принципов фундаментальные характеристики могут использоваться как подгоночные константы в феноменологических моделях.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы на основании опыта научной работы автора показать эффективность всесторонних физических и инженерных подходов, а также современных Web-технологий при решении комплексной задачи моделирования и проектирования технологических процессов микроэлектроники.

### **Исследование механизмов образования и эволюции дефектов кристаллической решетки методом молекулярной динамики**

В методе молекулярной динамики рассматривается совместная система из  $N$  ( $\sim 10^3$ ) атомов модельного кристаллита, взаимодействующих между собой в соответствии с потенциалом центральных сил  $V(r)$ . Уравнение движения  $i$ -го атома модельного кристаллита с массой  $m$  вдоль  $k$ -й оси координат устанавливает, что  $k$ -я компонента скорости  $v_{ik}$  и положение атома  $x_{ik}$  в момент времени  $t$  связаны с компонентой силы  $F_{ik}$ , действующей на этот атом в  $k$ -м направлении, посредством следующих выражений:

$$\begin{aligned} \frac{dx_{ik}(t)}{dt} &= v_{ik}(t), \\ \frac{d^2x_{ik}(t)}{dt^2} &= m^{-1}F_{ik}(t), \quad i = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \tag{1}$$

На  $i$ -й атом, расположенный на поверхности модельного кристаллита, кроме сил, определяемых потенциальным взаимодействием, действуют дополнительные силы, зависящие от величины смещения этого атома относительно узла в идеальной кристаллической решетке и его скорости, так что в общем случае:

$$F_{ik}(t) = F_{ik} \{ x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t), r_{0i}(t), v_{ik}(t) \}, \tag{2}$$

где  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)$  — координаты атомов кристаллита;  $r_{0i}(t)$  — смещение  $i$ -го атома из равновесного положения в идеальной решетке.

Система из  $k \cdot N$  ( $k=1,2,3$ ) дифференциальных уравнений в декартовой системе координат интегрируется методом центральных разностей и решение получаем в виде:

$$v_{ik}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \cong v_{ik}\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \Delta t m^{-1} F_{ik}(t), \quad x_{ik}(t + \Delta t) \cong x_{ik}(t) + \Delta t v_{ik}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right). \quad (3)$$

Начиная с момента времени  $(t - \Delta t/2)$  рассчитываются новые скорости и координаты атомов при  $(t + n\Delta t/2)$ , где  $n=1, 2, 3 \dots$  — номер временного шага. Система уравнений (3) интегрируется по времени  $t$ , в результате решения которой можно проследить траектории движения ансамбля частиц в выделенном объеме фазового пространства.

Основная проблема в расчетах методом молекулярной динамики связана с выбором физически адекватного потенциала, описывающего взаимодействие атомов в кристаллической решетке. Задача состоит в построении такой функции межатомного взаимодействия  $V(r_{ij})$ , которая достаточно корректно воспроизводит бы взаимодействие между ионами и валентными электронами посредством комбинации многочастичных взаимодействий. Автором впервые предложена модель потенциала, учитывающая в явном виде зависимость величины заряда на связях в ковалентных кристаллах от длины связи [1].

Зависимость переменного заряда на связи в единицах заряда электрона от длины связи  $\tau_0$  в деформированном кристалле представляется выражением:

$$Z_b(\tau) = Z_b^0 + \alpha_1(\tau - \tau_0)/\tau_0 + \alpha_2(\tau - \tau_0)^2/\tau_0^2, \quad (4)$$

где  $Z_b^0 = -2/\epsilon_0$  — величина заряда на недеформированной связи, длина которой равна  $\tau_0$ ;  $\tau$  — длина деформированной связи;  $\epsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость кремния. Параметр  $\alpha_1 = -6\epsilon_0'/\epsilon_0^2$ , где  $\epsilon_0' = N \left( \frac{\partial \epsilon_0}{\partial N} \right)_T$  — первая производная статической диэлектрической

проницаемости по плотности валентных электронов  $N$ . Величина  $\epsilon_0'$  вводится для описания эффекта изменения диэлектрической проницаемости кристалла при деформации решетки.

Модель зарядов на ковалентных связях в сочетании с методом псевдопотенциала позволяет в явном виде учесть как сферически симметричную часть  $\Phi(R_{ij})$  потенциала межатомного взаимодействия  $U_{ij}$ , обусловленную взаимодействием ионных остовов (двухчастичное взаимодействие), так и ту его часть  $\Delta\Phi_{cov}$ , которая описывает вклад ковалентных связей — взаимодействие ионных остовов с зарядами на связях (трехчастичное взаимодействие) и зарядов на связях между собой (четырёхчастичное взаимодействие):

$$U_{ij} = \Phi(R_{ij}) + \Delta\Phi_{cov}, \quad (5)$$

$$\Phi(R_{ij}) = \frac{(Z^*)^2 e^2}{R} \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \left[ \frac{\Omega q^2 \omega_0(q)}{4\pi Z^* e^2} \right]^2 \frac{\epsilon(q) - 1}{1 + [\epsilon(q) - 1][1 - f(q)]} \cdot \frac{\sin q R_{ij}}{q} dq \right\},$$

$$\Delta\Phi_{cov} = \frac{Z e^2}{2\epsilon_0} \sum_{k=1}^4 \left[ \frac{Z_b(\tau_{jk})}{\left| \frac{1}{2} \tau_{jk} + R_{ij} \right|} + \frac{Z_b(\tau_{ik})}{\left| \frac{1}{2} \tau_{ik} - R_{ij} \right|} \right] + \frac{e^2}{4\epsilon_0} \sum_{k,k'} \frac{Z_b(\tau_{ik'}) Z_b(\tau_{jk})}{\left| \frac{1}{2} \tau_{ik'} - \frac{1}{2} \tau_{jk} - R_{ij} \right|}.$$

Здесь  $R_{ij} = |\vec{R}_j - \vec{R}_i|$  — расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ;  $\tau_{ik} = |\vec{R}_k - \vec{R}_i|$  — длина связи атома  $i$  с ближайшим соседним атомом  $k$ ;  $Z^* = Z(1 + \alpha_{eff})$  — эффективная валентность;  $Z$  — валентность;  $\Omega$  — атомарный объем;  $\omega_0(q)$  — форм-фактор псевдопотенциала ионного осто-

ва;  $\epsilon(q)$  — функция диэлектрического экранирования;  $f(q)$  — функция, определяющая обменно-корреляционные поправки.

Использование модели переменных зарядов на ковалентных связях для построения потенциала межатомного взаимодействия на основе метода псевдопотенциала позволило достаточно точно описать характерные особенности фононного спектра кремния.

Ниже приводятся результаты расчетов методом молекулярной динамики микроструктуры, энергетических и миграционных характеристик вакансий и междоузельных атомов в различных зарядовых состояниях, а также их простейших комплексов в кристаллической решетке кремния с использованием предложенного потенциала [2–8].

Энергия образования нейтральной вакансии  $E_F=2,88$  эВ, энергия миграции  $E_M=0,67$  эВ, радиус вакансии  $R_V=0,68/a$  ( $a$  — длина связи в идеальной решетке кремния).

Нейтральная бивакансия: две вакансии в положении ближайших (энергии связи  $E_b=93$  эВ), вторых ( $E_b=0,47$  эВ) и третьих ( $E_b=0,06$  эВ) соседних узлов кристаллической решетки кремния; бивакансии в конфигурации, представляющей собой две вакансии в положении третьих соседних узлов с двойной связью между ними ( $E_b=-0,14$  эВ). Энергия миграции бивакансии  $E_M=1,46$  эВ.

Моделирование конфигураций и расчет энергетических состояний собственного междоузельного атома в кристаллической решетке кремния для пяти зарядовых состояний ( $0, \pm 1, \pm 2$ ) в четырех конфигурациях (изолированной тетраэдрической (Т), изолированной гексагональной (Н), с дополнительным атомом на середине ковалентной связи (М) и в гантельной (D) конфигурации, ориентированной вдоль направления  $\langle 001 \rangle$ ), показали, что междоузелье в зарядовом состоянии  $+1$  характеризуется наименьшей потенциальной энергией в  $H$ -конфигурации, тогда как во всех других зарядовых состояниях наиболее энергетически выгодной является  $\langle 100 \rangle$ -гантельная конфигурация. Эти результаты позволяют, в частности, объяснить высокую подвижность междоузельных атомов в  $p$ -кремнии при низких температурах на основе атермического механизма миграции, осуществляемой за счет перезарядки междоузельного атома и безбарьерного перехода его из связанной гантельной конфигурации в изолированную гексагональную и обратно.

Результаты расчетов структуры протяженной междоузельной конфигурации, позволившие объяснить существование долгоживущих междоузельных атомов в кристаллической решетке кремния при высоких температурах, показали, что такая структура представляет собой кольцо из пяти атомов кремния (один из них дополнительный), последовательно соединенных между собой и окруженных 10 связанными с этой конфигурацией соседними атомами. Установлено, что потенциальная энергия такой конфигурации на 2,98 эВ выше гантельной конфигурации.

Результаты моделирования микроструктуры и расчеты энергии связи компонентов нейтральной дивакансии показали, что устойчивый комплекс из двух вакансий образуется при размещении вакансий в ближайших и соседних второго порядка узлах кристаллической решетки кремния.

Моделирование микроструктуры нейтрального и положительно заряженного комплексов, образованных двумя междоузельными атомами в гантельной конфигурации, показало, что нейтральный комплекс, представляющий собой ряд из трех атомов в окрестности одного узла, ориентированный вдоль направления  $\langle 001 \rangle$ , в кристаллической решетке кремния неустойчив. Захват дырки таким комплексом приводит к образованию устойчивой конфигурации из двух междоузелий. Устойчивый комплекс из двух междоузельных атомов образуется при их размещении только в ближайших и вторых соседних узлах.

Интенсивность процесса накопления точечных дефектов в значительной степени определяется размером и формой области спонтанной рекомбинации пар Френкеля, представляющей собой по определению объем кристалла, в пределах которого вакансия и междоузельный атом рекомбинируют безактивационно. Методом молекулярной динамики рассчитаны размеры и определены пространственные формы областей спонтанной рекомбинации пар Френкеля, состоящих из нейтральной вакансии и междоузельного атома в различных структурных конфигурациях и зарядовых состояниях в недеформированном кристалле кремния.

Установлено, что размер области спонтанной рекомбинации пар Френкеля в кремнии в большей степени определяется конфигурацией междоузлия, чем кулоновским взаимодействием между заряженными компонентами пар Френкеля. Так, учет кулоновского взаимодействия между заряженными компонентами пар Френкеля приводит к увеличению объема зоны спонтанной рекомбинации не более чем в 2 раза по сравнению с ее объемом для незаряженных компонент пар Френкеля, в то время как объем зоны увеличивается в 4–5 раз для междоузлия как компонента пары Френкеля в гексагональной конфигурации по сравнению с междоузлем в гантельной конфигурации.

Результаты расчетов области спонтанной рекомбинации пар Френкеля в упругодеформированной кристаллической решетке кремния с относительной деформацией  $10^{-3}$  в условиях всестороннего и одноосного сжатия и растяжения вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  показали, что упругая деформация кристаллической решетки кремния не приводит к существенному изменению зоны спонтанной рекомбинации нейтральной вакансии и междоузлия в гантельной  $\langle 001 \rangle$  конфигурации для всех рассмотренных зарядовых состояний точечных дефектов. Однако объем зоны увеличивается по сравнению с недеформированной решеткой для пар Френкеля вакансии — междоузлие в  $H$ -конфигурации. Увеличение объема зоны рекомбинации происходит в основном за счет актов рекомбинации через цепочки замещения с перезарядкой компонент пар Френкеля.

Проведено моделирование процессов дефектообразования в поверхностных слоях кристаллов кремния и  $\alpha$ -железа при низкоэнергетической ( $\leq 500$  эВ) ионной имплантации. Рассчитаны каскадная функция (число пар Френкеля, создаваемых одним внедряемым ионом), доля бивакансий, образующихся в каскадах атом-атомных столкновений, и коэффициент распыления при низкоэнергетической ( $\leq 500$  эВ) имплантации ионов аргона и кислорода (типичных ионов, используемых в плазмохимических технологических операциях микроэлектроники) в кремний с учетом кристаллографической ориентации и релаксации атомов на свободной поверхности кристаллита.

Значение коэффициента распыления для ориентации поверхности (110) ниже на 15–20 %, чем для ориентаций (100) и (111), поскольку в этом направлении в кристаллах с кубической гранцентрированной решеткой наиболее интенсивно проявляются эффекты каналирования. При имплантации ионов кислорода величина коэффициента распыления имеет меньшее значение по сравнению с имплантацией ионов аргона. Кроме того, имплантация ионов кислорода сопровождается такими динамическими актами, в которых атом кислорода, отражаясь от подповерхностных атомов кремния, выбивает поверхностные атомы, чего не наблюдается при имплантации более тяжелого аргона.

Результаты исследований зависимости отношения каскадной функции  $\nu(E)$ , полученной в рамках метода молекулярной динамики, к каскадной функции  $\nu_3(E)$  в модели упругих двухчастичных столкновений Зигмунда от энергии ионов  $\text{Ag}^+$  и  $\text{O}^+$  для трех ориентаций свободной поверхности кремния показали, что с ростом энергии бомбардирующих ионов значение  $\nu(E)$  приближается к значению  $\nu_3(E)$ . Этот факт объясняется тем, что при больших энергиях ионов основная часть каскада смещений развивается вдали от поверхности, где пренебрежимо эффекты релаксации и перестройки поверхностных слоев. Число пар Френкеля, создаваемых ионом  $\text{Ag}^+$  (с большей массой по сравнению с ионом кислорода), выше, чем при имплантации ионов  $\text{O}^+$ . С ростом энергии имплантируемых ионов эта разница практически исчезает вследствие возрастания количества столкновений атомов мишени между собой в каскадах.

При низкоэнергетических имплантационных процессах с целью модификации поверхности, в том числе формирования пленок силицидов на поверхности кремния, важной физической величиной является значение минимальной энергии бомбардирующих ионов  $E_b$ , при которой падающий ион "застревает" на поверхности обрабатываемой подложки. Методом молекулярной динамики проведены расчеты зависимости величины  $E_b$  для различных ионов металлов (Ti, Fe, Co, Pd, Er и Os) от угла  $\theta$  между направлением импульса падающего иона и (100) свободной поверхностью кремния [9]. Обнаружена немонотонная зависимость  $E_b(\theta)$ . Более низкие

значения  $E_b$  для ионов с меньшими массами для углов  $\theta \geq 80^\circ$  объясняются эффектом каналирования.

Исследованы закономерности процессов образования комплексов точечных дефектов при низкоэнергетической ионной имплантации в кремний. Установлено, что низкоэнергетическая имплантация примесей в кремний сопровождается интенсивным атермическим образованием вакансионных комплексов, в частности, дивакансий. Характер этого процесса существенно определяется типом и энергией имплантируемых ионов, а также кристаллографической ориентацией поверхности, через которую производится имплантация. Влияние массы внедряемых в кремний ионов низких энергий наиболее существенно для направлений  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ . Вероятность атермического образования дивакансий в меди и кремнии имеет максимальное значение при энергиях внедряемых ионов от 100 до 400 эВ, положение которого определяется типом решетки, массой и направлением начального импульса ионов. В направлениях  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  вероятность атермического образования дивакансии в меди существенно выше, чем в кремнии.

### **Многомерное моделирование распределения легирующих примесей и геометрии структуры, формируемых в процессах имплантации и окисления**

Расчет многомерного пост-имплантационного профиля распределения легирующих примесей основан на суперпозиции статистических функций распределения Пирсон IV и Гаусса при имплантации в свободную поверхность кремния, а также Пирсон IV и функции ошибок  $erf$  — при имплантации через окно в маске с учетом угла наклона ее краев.

Многомерное перераспределение примеси при термической обработке с окислением рассчитывается посредством численного решения нелинейного диффузионного уравнения с движущимися границами:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(C) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D(C) \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D(C) \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (6)$$

с начальным условием  $\tilde{N}(x, y, z) = F(x, y, z)$ , где  $F(x, y, z)$  — пост-имплантационный профиль распределения примеси.

Нелинейность уравнения (6) обусловлена существенной зависимостью коэффициента диффузии легирующих примесей  $D$  от их концентрации  $C$ .

Решение уравнения (6) реализовано методом конечных разностей, который, как показано, отличается более высоким быстродействием расчетов по сравнению со стандартной программой технологического моделирования SUPREM при сохранении достаточной точности получаемых результатов, что важно при статистическом анализе и оптимизации технологии [10].

Для решения диффузионного уравнения (6) в разностной схеме используется метод "предиктор–корректор". На этапе предиктора методом прогонки концентрации примесей  $C(x, y, z)$  в узлах сетки рассчитываются по неявной схеме без учета зависимости потока от пространственных направлений  $(X, Y, Z)$ , на этапе корректора — по явной схеме на основании результатов, полученных на этапе предиктора.

Введение фиктивной области над подложкой позволяет осуществлять моделирование перераспределения примеси для областей подложки и растущего оксида по единой численной схеме. Различия между оксидом и подложкой учитываются при расчете коэффициентов диффузии примесей, для которых, как и в программах SUPREM, используется вакансионная модель. Такой подход требует увеличения количества узлов сетки, однако вычислительный алгоритм при этом существенно упрощается, так как исчезает необходимость перестраивать пространственную сетку на каждом временном шаге. Размер фиктивной области выбирается исходя из предполагаемой толщины оксида, которая рассчитывается по классической модели Дила-Гроува роста оксида.

Описанная численная схема решения многомерного нелинейного диффузионного уравнения с движущимися границами реализована на языке C (стандарт ANS), что решает проблему переноса математической части программы на различные аппаратные платформы. Модели-

рование модификации поверхности в процессе локального окисления кремния осуществлено с использованием феноменологической модели формирования геометрии "птичьего клюва", что значительно сокращает время проведения моделирования без потери точности результатов расчета многомерного профиля распределения примесей и формируемой геометрии по сравнению с результатами, получаемыми с использованием программы SUPREM.

### Многомерное моделирование поликремниевой технологии

Решена задача моделирования осаждения поликристаллического кремния на плоскую поверхность из газовой фазы посредством химических и адсорбционных реакций на поверхности и в объеме кремниевой подложки при низких давлениях (процесс LPCVD — Low Pressure Chemical Vapor Deposition) с одновременным легированием.

*Использовано аналитическое решение системы транспортных диффузионных уравнений массопереноса молекул газа  $i$ -го сорта (силана  $\text{SiH}_4$ , фосфина  $\text{PH}_3$ , арсина  $\text{AsH}_3$ ) в LPCVD-реакторе:*

$$\bar{U}\nabla C_i = -\nabla\bar{N}_i + Rn_i, \quad i = 1, \dots, n-1, \quad (7)$$

где  $\bar{U}$  — средний по массе вектор скорости молекул сорта  $i$  в реакторе;  $C_i$  — их молярная концентрация;  $\bar{N}_i$  — молярный диффузионный поток молекул газа  $i$ -го сорта;  $R$  — полная скорость реакций с поверхностью пластины, на которой осуществляется процесс осаждения всех  $i$ -х компонент газа.

Осуществлено физическое моделирование скорости роста пленки  $G$  поликремния в зависимости от технологических параметров LPCVD-процесса (температуры, парциальных давлений газовых составляющих), конструкции реактора (его длины и диаметра, расстояния между пластинами) и интенсивности физико-химических процессов, протекающих с участием молекул газов вблизи и на поверхности кремниевой подложки.

*Разработана модель осаждения поликристаллического кремния в LPCVD-процессе на рельефную поверхность (канавка микронных размеров на кремниевой подложке) с одновременным легированием. Временная зависимость изменения концентрации  $C$  молекул адсорбированного газа на боковой поверхности и дне канавки описывается уравнением поверхностной диффузии:*

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + P(x), \quad (8)$$

где  $D$  — коэффициент поверхностной диффузии молекул газа;  $P(x)$  — стационарный источник, определяющий скорость "поставки" молекул газа на боковые стенки и на дно канавки и зависящий от ее геометрических размеров;  $x$  — пространственная координата. Численное решение уравнения (8) осуществляется методом конечных разностей.

Описанная модель и разработанное программное обеспечение позволяют оптимизировать технологические параметры (длительность  $t$ , температуру  $T$ , скорость роста пленки поликремния на планарной поверхности  $G$ ) процесса осаждения поликристаллического кремния на рельефную кремниевую подложку в зависимости от размеров канавки — ее глубины и ширины.

Разработаны алгоритм и программное обеспечение для моделирования роста зерна поликристаллического кремния при длительном и импульсном режимах термообработки. Физические модели, положенные в основу расчета роста зерна легированной пленки поликремния при термообработке, описывают этот процесс посредством диффузионных (термических), и недиффузионных (атермических) механизмов.

Используемые физические модели позволяют проанализировать зависимость среднего радиуса  $r$  зерна, концентраций легирующих примесей в объеме  $N_b$  и сегрегированных на границе зерна  $N_g$ , концентрации  $C_{ve}$  вакансий в объеме зерна поликристаллического кремния в зависимости от исходной концентрации  $N_t$  легирующих примесей, времени  $t$ , температуры  $T$  при

длительном режиме термообработки и мощности  $W$  источника излучения при импульсном режиме.

В физической модели переноса носителей заряда в поликристаллическом кремнии при расчете его удельного сопротивления учитываются как физические характеристики материала (структура зерна, степень легирования), так и эффекты, связанные с процессами, протекающими в объеме и на границах зерен и приводящие к сегрегации примесей, захвату носителей ловушками, а также их рассеянию на ионизированных примесях и фонах.

Разработанный программный комплекс размещен на Web-сайте с возможностью расчетов в режиме on-line в процессе виртуального проектирования в сети Интернет и дистанционного обучения [11].

### **Статистический многофакторный анализ и оптимизация параметров технологии формирования интегральных схем**

Актуальность этой задачи связана с проблемой повышения выхода годных изделий и технологичности маршрута изготовления ИС.

Прямое статистическое в цикле Монте-Карло проектирование технологии требует значительных вычислительных ресурсов (объема памяти и времени расчетов). В связи с этим особую актуальность приобретает применение методов аппроксимации результатов численного моделирования технологии в виде полиномиальных зависимостей и последующего их использования при статистическом анализе.

Впервые разработан подход к решению этой задачи, основанный на эвристическом приближении метода распознавания образов теории нейронных сетей. Показано, что, несмотря на удовлетворительное согласие между результатами прямого статистического численного моделирования технологии ИС и полученных посредством аппроксимации численных расчетов на основе эвристического алгоритма двухуровневой коррекции, этот метод, как и сплайновые приближения, неэффективен с точки зрения требуемых вычислительных ресурсов.

Решить принципиальную проблему, связанную с большими вычислительными затратами, необходимыми для осуществления процедуры оптимизации параметров посредством статистического в цикле Монте-Карло анализа результатов численного моделирования, позволяет развитая автором методология поверхности откликов, в которой полагается, что выходная характеристика  $Y$  результатов численного моделирования технологии/прибора/схемы является функцией  $N$  независимых входных технологических параметров и может быть аппроксимирована полиномом в виде ряда Тейлора второго порядка или ортогональным полиномом Чебышева для осуществления более точного нелинейного регрессионного анализа [12–14].

Задача нахождения функции  $Y$  сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Число уравнений, входящих в эту систему, определяется количеством компьютерных (или натуральных) экспериментов согласно специальной методике их планирования.

Решена задача оптимизации технологических параметров изготовления ИМС, заключающаяся в определении пределов их изменения, обеспечивающих получение заданного интервала разбросов выходных характеристик проектируемых приборов/схем [15].

Разработанные методические принципы и вычислительные алгоритмы статистического анализа и оптимизации предназначены для исследования на технологичность маршрута изготовления ИМС в условиях опытно-промышленного производства и „виртуального“ в сети Интернет проектирования и не зависят как от пространственной размерности задачи, так и используемых аппаратных платформ и операционных систем.

### **Использование Web-технологий в сферах проектирования ИС и обучения в сети Интернет/Инtranет**

Описанные физические модели и вычислительные алгоритмы реализованы в форме JAVA-апплетов для проектирования и обучения в сети Интернет/Инtranет по различным аспектам технологии микроэлектроники.

Разработана концепция и создана виртуальная Интернет-лаборатория, предназначенная для разработки в режиме клиент-сервер научно-технических проектов удаленными санкционированными членами лаборатории и программных средств дистанционного обучения в любых сферах знаний [16–17]. Реализован программно-аппаратный комплекс для осуществления проектирования в сети Интернет с использованием современных Web-технологий (сервер Apache, СУБД MySQL, языки программирования JAVA/PERL/PHP) [18–19].

На собственном Web-сайте [11] созданной активной виртуальной Интернет лаборатории размещены обучающие программы для изучения биполярной, МОП и КМОП технологий изготовления ИМС, моделирования многомерного пост-имплантационного профиля распределения легирующих примесей, исследования влияния технологических параметров на SPICE характеристики МОП транзисторов и моделирования поликремниевой технологии. Предусмотрена возможность проведения исследовательских расчетов в режиме on-line.

### Заключение

Комплексное использование метода молекулярной динамики, развитого из первых принципов, и инженерно-физических подходов в континуальном приближении позволяет проводить всесторонние теоретические исследования многомерных имплантационных и диффузионных процессов, используемых в технологии микроэлектроники, с целью выявления их физических механизмов, построения моделей и создания программного обеспечения для физического моделирования и оптимизации технологии изготовления ИС.

Новый подход к построению потенциала межатомного взаимодействия в ковалентных кристаллах на основе приближения псевдопотенциала и разработанной модели переменных зарядов на связях, учитывающей многочастичные эффекты взаимодействия и неоднородное пространственное распределение валентных электронов, позволяет физически адекватно моделировать низкоэнергетические имплантационные процессы и рассчитывать структурные и энергетические характеристики дефектов кристаллической решетки кремния в рамках метода молекулярной динамики.

Оригинальный алгоритм численного решения в конечных разностях методом "предиктор-корректор" многомерного нелинейного диффузионного уравнения с движущимися границами совместно с аналитической моделью формирования структуры "птичьего клюва" для физического моделирования перераспределения примесей и геометрии прибора в процессах имплантации и высокотемпературного локального окисления кремния позволяет существенно снизить требования к вычислительным ресурсам стандартной аппаратной платформы РС, что важно при проведении статистического анализа и оптимизации технологии изготовления ИС.

Разработанные физические модели, математические методы и алгоритмы расчета осаждения поликристаллического кремния из газовой фазы с одновременным легированием на плоскую и профилированную поверхности кремниевой подложки, роста зерна и удельного сопротивления поликристаллического кремния при длительном и импульсном режимах термообработки обеспечивают возможность комплексного проведения многомерного моделирования и оптимизации поликремниевой технологии в условиях опытно-промышленного производства и виртуального проектирования ИС в сети Интернет.

Решена задача многофакторного статистического анализа влияния флуктуаций технологических параметров на характеристики проектируемых приборов/схем и оптимизации технологии ИС в цикле Монте-Карло на основе методологии поверхности откликов и эффективного способа планирования эксперимента.

Сформулирована и реализована концепция активной виртуальной лаборатории в сети Интернет для коллективного проектирования технологии ИМС удаленными разработчиками и дистанционного образования. Разработан и размещен на Web-сайте в сети Интернет комплекс прикладных и обучающих программ на основе Java-технологии. Реализован программно-аппаратный комплекс для осуществления процесса проектирования в сети Интернет удаленными разработчиками.

Приведенные результаты иллюстрируют эффективность использования всесторонних физических и инженерных подходов, а также современных Web-технологий при решении ком-

плексной задачи моделирования и проектирования технологических процессов микроэлектроники.

## METHODS AND TOOLS FOR SIMULATION AND DESIGN OF TECHNOLOGY PROCESSES IN MICROELECTRONICS

V.V. NELAYEV

### Abstract

Results of investigations of physical rules and mechanisms of crystal defects formation and their spatial distribution in radiation and thermal technological processes of microelectronics by means of the molecular dynamics method and in the continua approach are reviewed. Developed physical models and algorithms for simulation of the diffusion redistribution of impurities under thermal treatment and oxidation of monocrystalline silicon as well vapour deposition of polycrystalline silicon are described. These processes specify many-dimensional distribution of impurities and surface modification during submicron integrated circuits manufacturing. Models and algorithms for the realization of the non-destructive impurity distribution control on the base of IR-spectrophotometrical data are presented. The solution of the problem of the many-factorial statistical analysis in the Monte-Carlo loop including the investigation of random fluctuations of process parameters affecting on the responses of designed device/circuit and integrated circuit technology optimization are described. The concept of the realized virtual Internet laboratory for the collective integrated circuit technology design by remote developers and for the distance learning is formulated.

### Литература

1. *Климович Б.В., Нелаев В.В.* Переменные заряды на связях в ковалентных кристаллах и дисперсия фононов в кремнии // Изв. вузов СССР. Физика. 1988. № 7. С. 95-98.
2. *Михлин Э.Я., Нелаев В.В.* Зона аннигиляции дефектов Френкеля в  $\alpha$ -железе // Физика металлов и металловедение. 1976. Т. 41, № 5. С.1090-1092.
3. *Mikhlin E.Ya., Nelayev V.V.* On the increase of the Frenkel defect recombination zone in  $\alpha$ -iron caused by hydrostatic compression // Physica Status Solidi. 1976. Vol. 35 (a), No.1. P. K81-K84.
4. *Mikhlin E.Ya., Nelayev V.V.* The effect of uniaxial compression upon dimensions and shape of Frenkel defect recombination zone in  $\alpha$ -iron // Physica Status Solidi. 1977. Vol. 43 (a), No.1. P. K23-K28.
5. *Климович Б.В., Нелаев В.В.* Машинное моделирование процессов дефектообразования в поверхностных слоях кремния при низкоэнергетической имплантации примесей // Поверхность. Физика, химия, механика. 1988. № 11. С. 82-86.
6. *Климович Б.В., Нелаев В.В.* Моделирование радиационных дефектов методом молекулярной динамики // Физика и химия обработки материалов. 1991. № 1. С. 5-12.
7. *Климович Б.В., Нелаев В.В.* Образование бивакансий в каскадах атомных столкновений при низкоэнергетической имплантации ионов в кристаллы // Вопросы атомной науки и техники: Науч.-техн. сб.. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1988. Вып. 2(44). С. 10-14.
8. *Климович Б.В., Нелаев В.В.* Зона спонтанной рекомбинации пар Френкеля в упругодеформированном кристалле кремния // Вопросы атомной науки и техники: Науч.-техн. сб. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1989. Вып. 3(50). С. 3-8.
9. *Nelayev V.V.* Molecular-dynamics investigation of the silicides formation technology // 3<sup>rd</sup> Int. Workshop on New Approaches to High-Tech: Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering. Proc. SPIE - The Int. Society for Optical Engineering. 1999. Vol. 4064. P. 224-226.
10. *Нелаев В.В., Казитов М.В., Ноготов Е.Ф.* 3D – моделирование термического отжига ионно- имплантированных примесей // Инж.-физ. журн. 1998. Т.71, № 6. С. 1075-1080.
11. <http://icts.hypermart.net>
12. *Kazitov M.V., Kuzmich W.B., Nelayev V.V., Stempitsky V.R.* Statistical many-dimensional simulation of VLSI technology based on response surface methodology // Proc. SPIE - The Int. Society for Optical Engineering. 1999. Vol. 4064. P. 179-183.

13. *Kuzmicz W.B., Malyshev V.S., Nelayev V.V., Stempitsky V.R.* Optimization of the integrated circuit technology // Proc. of SPIE. 2001. Vol. 4348. P. 431-434.
14. *Kouleshoff A.A., Nelayev V.V.* New approach for the response surface methodology. // Proc. of SPIE. 2001. Vol. 4348. P. 435-439.
15. *Кулешов А.А., Малышев В.С., Нелаяев В.В., Стемпитский В.Р.* Статистическое проектирование и оптимизация технологии производства интегральных микросхем // Микроэлектроника. 2003. Т. 32, № 1. С. 47-61.
16. *Nelayev V.V., Kazitov M.V.* Active virtual laboratory at Internet as an effective tool for learning // Proc. 1<sup>st</sup> Global Congress on Engineering Education. Cracow. Poland. 1998. P. 269-272.
17. *Kudrjartsev P. A., Maximenya A. I., Nelayev V. V.* Virtual laboratory at the Internet for a distance learning in integrated circuit technology // Proc. 2<sup>nd</sup> Global Congress on Engineering Education. Wismar. Germany. 2000. P. 144-147.
18. *Nelayev V.V.* The experience of distance design and learning via Internet // Proc. 7<sup>th</sup> world Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics. Orlando, USA, 2003. Vol. 14. P.97-101.
19. <http://www.bsuir.edu.by/icts>