

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий

ОСНОВЫ САПР В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

*Допущено Министерством образования Республики Беларусь
в качестве учебного пособия для студентов учреждений,
обеспечивающих получение высшего образования по специальностям
«Микро- и нанoeлектронные технологии и системы»,
«Квантовые информационные системы»*

Минск БГУИР 2008

УДК 621.382.8.049.77.001.2(075.8)

ББК 32.844.1 я73

Н 49

ISBN 978-985-488-321-2

Рецензенты:

зав. кафедрой ЭТТ БГУИР, академик НАН Беларуси,
профессор, доктор технических наук А. П. Достанко

кафедра «Интеллектуальные системы» Белорусского
национального технического университета

заместитель директора по научной работе Научно-технического центра
«Белмикросистемы» УП «Завод полупроводниковых приборов»,
доктор технических наук, профессор А. И. Белоус

Нелаев, В. В.

Н 49 Основы САПР в микроэлектронике : учеб. пособие / В. В. Нелаев,
В. Р. Стемпицкий. – Минск : БГУИР, 2008. – 221 с.: ил.

ISBN 978-985-488-321-2

В пособии приведено описание физических моделей технологических процессов и приборов микроэлектроники, используемых в современных программных комплексах компьютерного технологического и приборного проектирования.

На приложенном к пособию компакт-диске содержится разработанный авторами программный модуль GUI-SUPREM, предназначенный как для моделирования отдельных технологических операций микроэлектроники, так и для проведения в сети Интернет/Интранет одномомерного по пространству проектирования технологического маршрута формирования приборной структуры с использованием программного комплекса SUPREM III.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
1. ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ.....	11
1.1. Пример технологического маршрута формирования приборов ИМС. КМОП-технология.....	11
1.2. Модели диффузионного перераспределения примесей в кремнии	36
1.2.1. Диффузия в макроскопическом (континуальном) приближении	36
1.2.2. Моделирование диффузии примесей с учетом дефектов кристаллической решетки в микроскопическом приближении (атомарный уровень).....	46
1.2.3. Обобщенные уравнения для описания диффузии.....	48
1.2.4. Модель диффузии Ферми.....	50
1.2.5. Модель сегрегации примесей.....	51
1.2.6. Двухмерная модель диффузии	52
1.2.7. Модель диффузии связанных пар «примесь–точечный дефект»	57
1.2.8. Другие модели диффузии примесей и их расширения	58
1.2.9. Модель диффузии легирующих примесей в поликремнии	67
1.3. Модели окисления кремния	69
1.3.1. Математическое описание процесса окисления кремния.....	69
1.3.2. Зависимости констант B/A и B от условий окисления	72
1.3.3. Смешанная окислительная среда.....	75
1.3.4. Двухмерные модели окисления кремния	76
1.3.5. Аналитическая двухмерная модель локального окисления кремния ...	79
1.4. Моделирование ионной имплантации.....	85
1.4.1. Аналитические модели имплантации	86
1.4.2. Моделирование имплантации методом Монте-Карло.....	93
1.5. Моделирование поликремниевой технологии	101
1.5.1. Моделирование осаждения поликристаллического кремния на плоскую поверхность в LPCVD-процессе с одновременным легированием	102
1.5.2. Моделирование осаждения поликристаллического кремния на рельефную поверхность в LPCVD-процессе с одновременным легированием	108
1.5.3. Моделирование роста зерна поликристаллического кремния при длительном и импульсном режимах термообработки.....	111
1.5.4. Моделирование электрофизических характеристик поликристаллического кремния.....	121
1.6. Моделирование формирования силицидов	127
1.7. Моделирование процессов осаждения	129
1.8. Моделирование травления	136
1.9. Моделирование химико-механического полирования	140
2. ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ.....	143
2.1. Основные уравнения физики полупроводниковых приборов.....	143

2.2. Основы теории статистики носителей заряда	146
2.3. Пространственный заряд, обусловленный неполной ионизацией, ловушками и дефектами	150
2.4. Транспортное уравнение энергетического баланса	157
2.5. Физические явления на границах	161
2.6. Физические модели переноса носителей заряда	164
2.6.1. Модели подвижности носителей заряда	164
2.6.2. Модели генерации и рекомбинации носителей	181
2.6.3. Модели ударной ионизации	185
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	197
ЛИТЕРАТУРА	199
ПРИЛОЖЕНИЕ	208
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	216
АББРЕВИАТУРЫ АНГЛОЯЗЫЧНЫХ ТЕРМИНОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ	218

ВВЕДЕНИЕ

Бурное развитие микроэлектроники в течение последних десятилетий беспрецедентно в мировой истории технологий, и оно почти без отклонений подчиняется эмпирически выведенному закону Мура, согласно которому степень интеграции изделий микроэлектроники ежегодно удваивается. В табл. В.1 представлены данные об основных характеристиках интегральных микросхем (ИМС) на примере динамической памяти, начиная с 1995 года, и прогноз их развития до 2012 года [1].

Таблица В.1

Основные характеристики интегральных микросхем на примере динамической памяти и тенденция их развития

Год	1995	1997	1999	2003	2006	2009	2012
Минимальная ширина линий, мкм	0,35	0,25	0,18	0,13	0,10	0,07	0,05
Размер чипа, мм ²	200	280	400	560	790	1120	1580
Число транзисторов на чип	10 ⁷	1,5·10 ⁷	2·10 ⁷	8·10 ⁷	2·10 ⁸	5·10 ⁸	1,4·10 ⁹
Частота, МГц	300	450	600	800	1 000	1200	1500
Память	256 Мбит	512 Мбит	1 Гбит	4 Гбит	16 Гбит	64 Гбит	256 Гбит
Максимальное количество слоев металлизации	5	6	6–7	7	7–8	8–9	9
Минимальное количество масок	20	22	22–24	24	24–26	26–28	28
Напряжение питания, В	2,0–3,0	1,8–2,5	1,5–1,8	1,2–1,5	0,9–1,2	0,6–0,9	0,5–0,6

Минимальная ширина линий (наименьший размер структурных элементов схемы, обеспечиваемый технологическим оборудованием и, прежде всего, литографией) является наиболее важным показателем размеров компонентов ИМС.

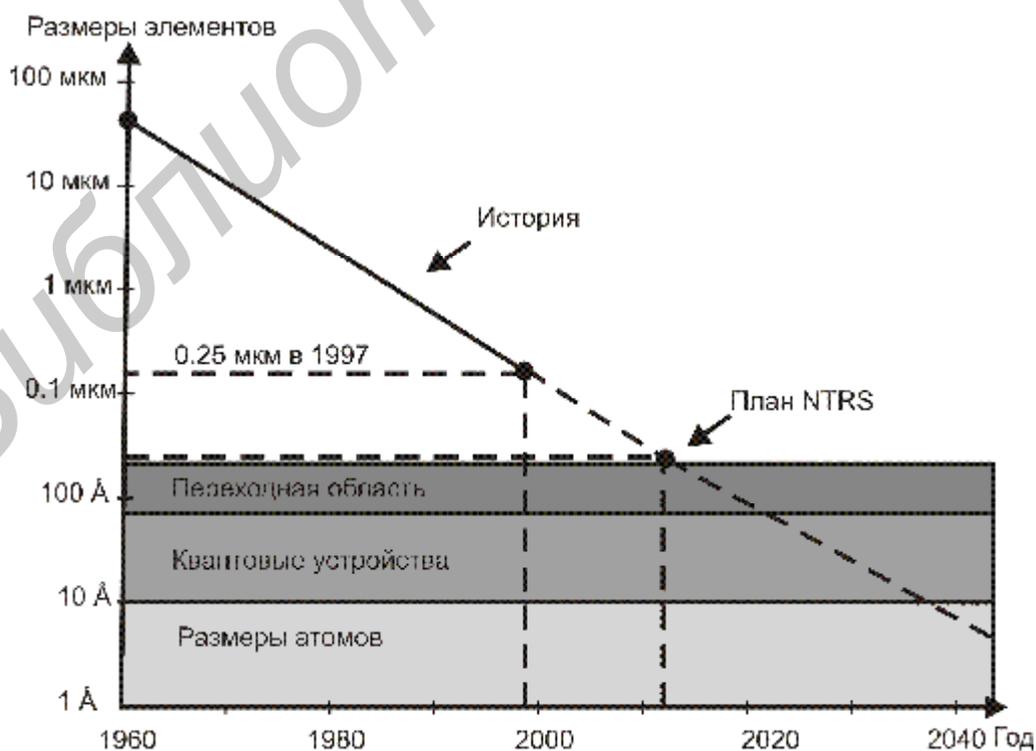


Рис. В.1. Эволюция и экстраполяция на перспективу минимальных характерных размеров интегральных схем

На рис. В.1 приведены данные об эволюции этой характеристики за последние 10 лет и их экстраполяция на будущее [1]. В среднем, как видно из рисунка, минимальная ширина линий уменьшается на 13 % в год. В последние годы эта скорость снизилась до 10 % в год. Размер чипа за последние 45 лет сокращался в среднем на 16 % в год; в последние годы этот темп снизился до 6 % в год для микропроцессоров и до 12 % в год для ИМС динамической памяти.

Однако очевидно, что бесконечное уменьшение характерных размеров приборов микроэлектроники (и соответственно выполнение закона Мура) невозможно. Оно ограничено прежде всего физическими пределами функционирования приборов. Так, при толщине подзатворного диэлектрика МОП-транзистора менее 1–1,5 нм электроны могут легко туннелировать через тонкий слой изолятора: именно такой сверхтонкий слой подзатворного диэлектрика требуется для МОП-транзистора с боковыми размерами, равными 0,05 мкм (50 нм), обеспечивающими приборы поколения 2012 года («Переходная область» на рис. В.1).

Тем не менее теоретические исследования показывают, что стандартные кремниевые КМОП-структуры функциональны с геометрическими нормами вплоть до 20–30 нм. Если изготовление приборов с такими размерами окажется экономически целесообразно, то к 2020 году будет возможно создание систем на кристалле с плотностью 10^{10} – 10^{12} компонентов (приборов и других элементов систем на кристалле).

Выполнение закона Мура в не столь отдаленном будущем может быть ограничено также технологическими возможностями оборудования для изготовления ИМС и, прежде всего, возможностями литографии. Используемое в настоящее время оборудование оптической литографии обеспечивает размер линий порядка 0,1 мкм (хотя продолжающиеся научные исследования могут снизить и эту величину – область «Квантовые устройства» на рис. В.1). Многообещающи в этом отношении исследования в области электронно-лучевой и рентгеновской литографии. Революционные результаты исследований в области литографии могут обеспечить оборудование для сканирующей туннельной микроскопии, с помощью которой можно достичь разрешения на уровне отдельных атомов (область «Размеры атомов» на рис. В.1).

Следует также отметить, что стремительный прогресс развития микроэлектроники сопровождается постоянным усложнением технологии, что влечет за собой неуклонное удорожание оборудования. В связи с этим в начале 90-х годов встал вопрос о справедливости выполнения закона Мура в будущем и с экономической точки зрения. Один из аргументов в пользу такого вывода состоит, в частности, в экспоненциально возрастающей стоимости проектирования и оборудования, затрат на тестирование изделий и т.д.

Несомненные резервы развития нынешней и будущей микроэлектроники открываются в разработке и использовании в системах компьютерного проектирования физических моделей технологии и приборов, обеспечивающих точность и, следовательно, надежность компьютерного проектирования ИМС с характерными размерами вплоть до атомарного уровня.

Физической основой современных технологических операций формирования ИМС являются процессы взаимодействия энергетических ионов и фотонов

с кристаллической решеткой и диффузионные процессы массопереноса. Очевидно, что для микроразмерных структур (и тем более для наноразмерных) традиционные методы моделирования физических явлений, сопровождающих современные технологические процессы обработки полупроводниковых структур, основанные на уравнениях макроскопического теплопереноса, 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, при использовании метода молекулярной динамики [2]. С другой стороны, моделирование таких макроскопических физических явлений, как, например, высокотемпературное окисление 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 [3].

К настоящему времени разработан целый ряд программных комплексов для моделирования технологических операций формирования структурных элементов приборов сверхбольших интегральных схем (СБИС). В табл. В.2 представлены основные характеристики наиболее известных из них.

Таблица В.2

Основные характеристики программных средств
для моделирования технологических операций микроэлектроники

Характеристики	SUPREM II	SUPREM III	SSUPREM4	TEX-I	RITM	SUPRA	IMPACT	ROMAMS	FABRICS-II	OPUS/3D	SYPRUS	TESIC
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<i>Пространственная размерность моделей (1-, 2- или 3-мерная)</i>	1	1	2	2	2	2	2	2	1	3	1	3
<i>Моделирование имплантации:</i>												
<i>Количество слоев в мишени:</i>												
два (Si, SiO ₂)	+				+	+	+		+	+		+
пять (Si, SiO ₂ , Si ₃ N ₄ , p-Si, фоторезист)		+	+	+				+				
Имплантация через маску	+	+	+		+	+	+	+	+	+		+
<i>Импантируемые ионы:</i>												
B, P, As, Sb	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Другие ионы			+							+		+
<i>Функции для описания профилей распределения концентраций имплантированных ионов:</i>												
Гауссиана							+					
Гауссиана с «хвостом»						+		+	+			
Две полугауссианы	+			+								
Пирсон IV		+	+							+	+	+
Питрсон IV и эмпирический экспоненциальный «хвост» для бора	+	+	+		+							

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Расчет методом Монте-Карло										+		
Решение транспортного уравнения Больцмана			+									
<i>Особенности моделирования диффузионного перераспределения примесей:</i>												
Коэффициенты диффузии примесей постоянны							+		+			
<i>P</i> : Три области изменения коэффициента диффузии	+	+	+	+	+	+		+		+	+	+
<i>A_s</i> , <i>S_b</i> , <i>B</i> : вакансионная модель коэффициента диффузии	+	+	+	+	+	+		+		+	+	
Учет эффектов окисления OED и OISF	+	+	+									
Учет высокого уровня легирования	+	+	+			+	+		+		+	+
Учет дрейфового члена, обусловленного наличием других заряженных примесей	+	+	+				+	+		+	+	
Учет кластерообразования	+	+	+	+			+	+		+		+
Численное решение уравнения Фика	+	+								+		+
<i>Моделирование роста пленки окисла:</i>												
Модель Дила–Гроува	+	+		+		+	+	+	+	+		+
Учет зависимости коэффициентов в модели Дила–Гроува от технологических параметров: давления, состава среды, уровня легирования, ориентации подложки	+	+							+	+		+
<i>Моделирование эпитаксии:</i>												
Рост эпитаксии из газовой фазы	+	+		+								
Автолегирование эпитаксии	+			+								
<i>Моделирование травления</i>	+	+	+				+			+		
<i>Моделирование осаждения поликремния</i>	+	+								+		+
<i>Язык программирования</i> (F – Fortran, P – Pascal, C – язык C+, D – Delphi)	P	C	C	F	F	P	P	P	F	C	C	D
<i>Операционная система</i> (M – MS DOS, W – Windows, U – Unix)	W											W
<i>Аппаратная платформа</i> (P – PC, M – Macintosh, S – WorkStation)	P, S	P, S	S	P	P	P	P	P	P	S	W, M	P

Каждая из приведенных в табл. В.2 программ моделирования технологии обладает своими достоинствами и недостатками, связанными с целями, которые преследовались при их создании, и аппаратно-программными возможностями разработчиков.

Программа SUPREM II [4–6] позволяет «конструировать» профиль распределения ионно-имплантированных примесей (четыре типа имплантируемых примесей, двухслойная структура, профиль распределения концентрации ионно-имплантированных примесей – статистические функции Гаусса и Пирсон IV); при моделировании диффузионного перераспределения примесей учитывается повышение коэффициентов диффузии примесей при окислении и эффект кластерообразования.

В программе SUPREM III [7] профиль распределения ионно-имплантированных примесей рассчитывается посредством использования функции Пирсон IV; при расчете коэффициентов диффузии примесей учтен эффект

высокого уровня легирования; в исходное уравнение диффузии введен дрейфовый член, обусловленный наличием заряженных примесей; автолегирование эпилленки при ее росте из легированной подложки рассчитывается путем решения уравнения второго закона Фика с соответствующими граничными условиями.

Программы SUPREM II и III одномерны (как и отечественные программы TEX-I [8] и RITM [9], которые, в основном, подобны комплексу SUPREM-II). Последняя версия программы SUPREM – SSUPREM4, входящая в состав комплекса ATHENA для проектирования технологии/прибора/схемы компании Silvaco [10–13], отличается двухмерностью расчетов и использованием современных физических моделей технологических процессов.

Отличительные особенности программных комплексов SUPRA [14], IMPACT [15], ROMANS II [16], FABRICS [17] и OPUS/3D [18] состоят в том, что они основаны на двухмерном физическом моделировании процессов имплантации примесей через окно в маске, термического отжига в окислительной среде и автолегирования при эпитаксиальном наращивании кремниевой подложки. Эти программы характеризуются использованием физических моделей и вычислительных методов различного уровня – от программы SUPRA, в которой осуществляется двумерное моделирование имплантации через маску, и процесса эпитаксии, до программы OPUS/3D, в которой реализовано квазитрехмерное решение диффузионного уравнения перераспределения примесей.

Программа SYPRUS [19] предназначена для моделирования стандартной КМОП-технологии с использованием аналитических решений физических моделей базовых технологических операций.

Следует отметить, что из перечисленных программных комплексов только программы SSUPREM4 и FABRICS обладают возможностями для решения важнейшей задачи компьютерного проектирования в микроэлектронике – статистического моделирования технологии с целью оптимизации технологического процесса посредством анализа влияния флуктуаций технологических параметров на выходные характеристики моделирования. Однако программа FABRICS одномерна, и статистическое моделирование в ней осуществляется не на физической основе, а посредством использования аналитических полуэмпирических соотношений. В программах SSUPREM4 и SYPRUS статистический анализ осуществляется посредством прямого численного моделирования. Такой подход требует чрезвычайно больших вычислительных затрат.

В программе TESIC (TEchnology Simulation of Integrated Circuits) сочетаются многомерность (вплоть до 3-мерного) моделирования базовых технологических операций формирования структурных элементов приборов микроэлектроники с современным подходом к задаче статистического проектирования и оптимизации технологии, основанным на RSM-методологии [20–22].

Достаточно подробный анализ состояния проблемы моделирования приборов микроэлектроники и соответствующих программных средств на конец 80-х годов прошлого века изложен в работах [14, 23–25]. Наиболее полная реализация разработанных с тех пор физических моделей переноса носителей заряда, являющихся основой приборного моделирования, осуществлена в программе SPISCES2 [26], входящей в состав комплекса SILVACO. Этой программе уделено

особое внимание в данном пособии, учитывая тот факт, что программы SSUPREM4 и SPISCES2 функционируют в одной оболочке. Таким образом результаты моделирования технологии с использованием SSUPREM4 являются входными данными для SPISCES2, что позволяет использовать связи между этими программами для осуществления эффективной процедуры оптимизации как параметров технологии, так и электрических характеристик проектируемого прибора.

В первом разделе пособия описываются физические модели базовых технологических операций микроэлектроники с акцентом на модели, используемые в современных программных комплексах проектирования технологии ИМС. Приведены также способы решения некоторых простых задач, которые можно использовать в инженерно-физическом приближении.

Во втором разделе описываются физические модели, используемые в современных программных средствах проектирования приборов микроэлектроники, в частности, в программе SPISCES2.

Пособие предназначено для углубленного освоения учебных дисциплин, связанных с изучением методов и программных средств проектирования и моделирования в микроэлектронике. Ознакомление и приобретение навыков работы в среде современных средств компьютерного проектирования ИМС являются необходимыми компонентами подготовки и повышения квалификации профессиональных инженеров-проектировщиков интегральных схем, а также магистрантов, аспирантов и научных работников.

Авторы выражают признательность профессору Дж. Д. Пламмеру из Стенфордского университета за любезное разрешение поместить в книге ряд иллюстраций, взятых из его научных работ, а также компании SILVACO за предоставленную возможность использовать в пособии некоторые иллюстративные материалы, содержащиеся в технической документации к программным модулям ATHENA (технологическое проектирование) и ATLAS (проектирование приборов микроэлектроники), академическими лицензиями на использование которых обладает кафедра микро- и нанoeлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Основной труд написания пособия принадлежит В. В. Нелаеву. Доработка всех разделов пособия и его техническое оформление осуществлены В. Р. Стемпицким.

В разработке модуля GUI-SUPREM участвовали магистрант кафедры микро- и нанoeлектроники К. А. Кудин и аспирант кафедры микро- и нанoeлектроники М. Н. Найбук.

1. ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Современные ионно-фотонные технологические методы формирования сверхбольших сверхбыстродействующих интегральных схем (ССБИС) с субмикронными характерными размерами структурных элементов обеспечиваются использованием низкотемпературных, неравновесных, импульсных и радиационно-стимулированных технологических операций. К таким прогрессивным технологическим операциям относятся ионная имплантация, лазерный и электронный отжиг, газофазное, плазмохимическое и молекулярно-лучевое осаждение пленок, плазмохимическое и ионное травление. Только низкотемпературная ионно-фотонная технология может обеспечить получение субмикронных размеров ССБИС путем минимизации боковых и вертикальных размеров легированных областей, лучшую контролируемость планарности слоев и равномерности их легирования, снижение дефектности обрабатываемых структур, повышение специальных характеристик приборов, как, например, радиационная стойкость.

Процесс изготовления ССБИС представляет собой последовательность десятков технологических операций, являющихся комбинацией лишь небольшого числа базовых операций, к которым относятся:

- легирование (имплантационное и диффузионное);
- «разгонка» примесей посредством высокотемпературной обработки;
- модификация поверхности (окисление, эпитаксия, осаждение тонких пленок, металлизация);
- литография (перенос рисунка обрабатываемой структуры на поверхность пластины).

Рассмотрим в качестве примера технологический маршрут формирования типичной приборной структуры микроэлектроники.

1.1. Пример технологического маршрута формирования приборов ИМС. КМОП-технология

В последние 15 лет наиболее популярной среди процессов изготовления ССБИС является КМОП-технология (Complementary Metal-Oxide-Semiconductor, CMOS). Предпочтительность приборов на КМОП-структурах объясняется их высокой и гибкой функциональностью, относительно низким напряжением питания, размерной масштабируемостью.

КМОП-технология, основанная на технологии формирования МОП-транзисторов n- и p-типов на одной подложке, используется для изготовления различных типов логических устройств, а также резисторов, конденсаторов, тонкопленочных транзисторов и других элементов микроэлектроники. Конечная структура типичной КМОП схемы изображена на рис. 1.1.

Кроме активных приборов на этом рисунке можно видеть и другие структурные элементы, включая электрическую изоляцию между n-МОП- и p-МОП-транзисторами, многоуровневую систему электрических соединений между ак-

тивными компонентами схемы, а также области, обеспечивающие снижение эффектов паразитных резисторов.

Исходными данными для формирования любых структур приборов микроэлектроники является информация о кремниевой подложке. В общем случае необходимо задать тип ее проводимости (n- или p-), удельную проводимость (определяемую концентрацией легирующих примесей) и кристаллографическую ориентацию. КМОП-структура обычно формируется на подложке p-типа, характеризующейся достаточно высокой величиной удельной проводимости (25–50 Ом·см, что соответствует уровню легирования $\sim 10^{15}$ см⁻³). Активные компоненты формируются в приповерхностных областях подложки (так называемых «карманах», well) с повышенным уровнем концентрации примесей ($\sim 10^{16}$ – 10^{17} см⁻³). На рис. 1.1 изображена КМОП-структура, сформированная на двух карманах n- и p-типа проводимости.

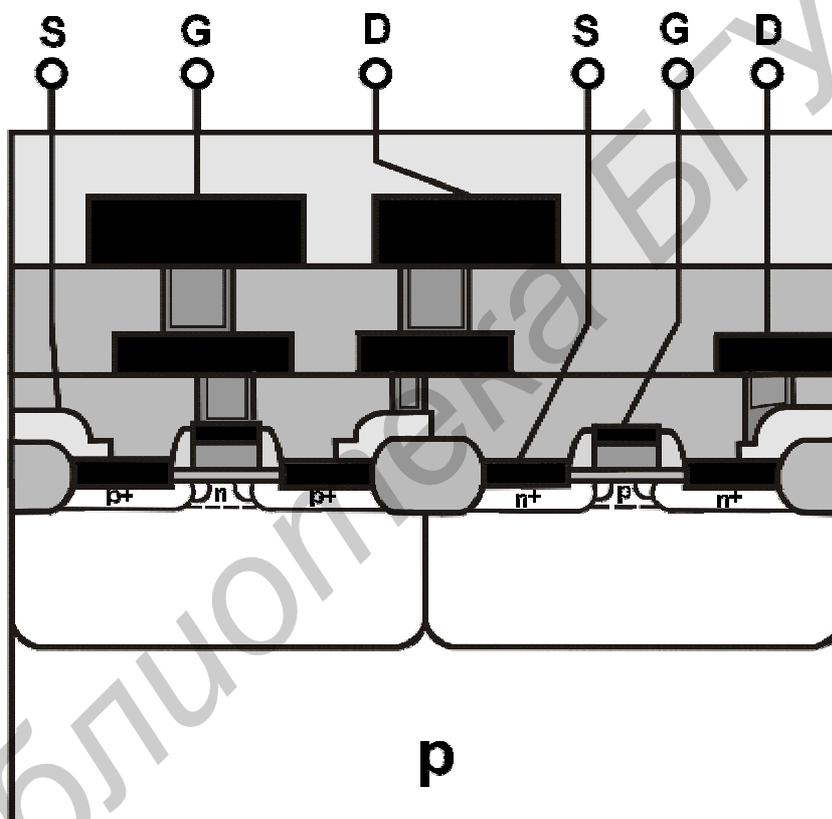


Рис. 1.1. Сечение современной КМОП-структуры с двумя уровнями металлизации. Справа – n-MOSFET, слева – p-MOSFET-транзисторы. Показаны выводы к истоку S (Source), стоку D (Drain) и затвору G (Gate)

Современные кремниевые интегральные схемы формируются на подложках с $\langle 100 \rangle$ кристаллографической ориентацией, поскольку именно с такой ориентацией получают наилучшие свойства поверхности раздела «кремний–двуокись кремния» (Si/SiO₂).

Рассмотрим поэтапно технологический маршрут формирования КМОП-структуры, чтобы показать многообразие технологических операций, входящих в состав всего маршрута [27].

1. Химическая обработка кремниевой пластины с целью очистки ее поверхности.

2. Создание на поверхности подложки тонкого ~ 40 нм ($0,04$ мкм, 400 \AA) слоя окисла посредством окисления в атмосфере сухого кислорода (45 мин, $1000 \text{ }^\circ\text{C}$).

3. Осаждение из газовой фазы при низком давлении (Low Pressure Chemical Vapor Deposition, LPCVD) тонкого ~ 80 нм слоя нитрида кремния (Si_3N_4). Осаждение Si_3N_4 на кремниевую подложку приводит к созданию высоких сжимающих напряжений на поверхности, поэтому основная цель предыдущей операции осаждения тонкого слоя окисла состоит в их устранении посредством частичной компенсации напряжений, возникающих в окисле и в нитриде кремния.

4. Осаждение слоя фоторезиста (~ 1 мкм), используемого в качестве маскирующего слоя. Промежуточное состояние структуры после операций 1–4 изображено на рис. 1.2.



Рис. 1.2. Состояние структуры после операций 1–4

5. Фотолитография (маска №1) для последующего формирования изоляционных областей посредством проведения LOCOS-процесса (LOCAL Oxidation Silicon).

6. Травление определенных областей структуры.

Состояние структуры после операций 5–6 изображено на рис. 1.3.

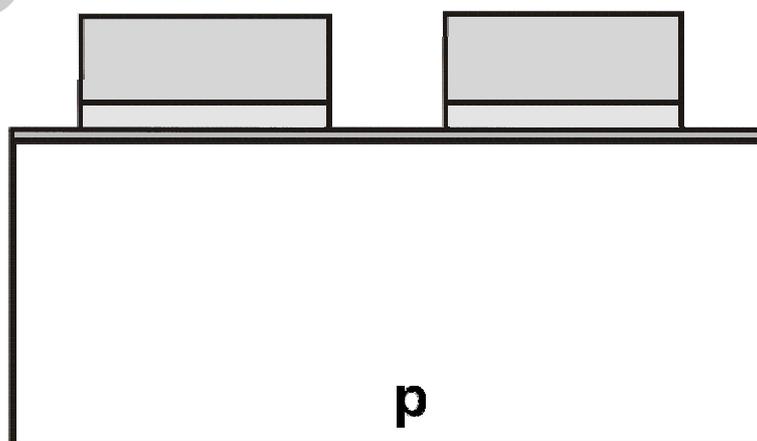


Рис. 1.3. Травление – подготовка к проведению LOCOS-процесса

7. Снятие слоя фоторезиста с использованием фотолитографического процесса. Современные установки для проведения фотолитографии обеспечивают формирование линий толщиной порядка 0,25 мкм с точностью локального расположения менее 100 нм. Типичная стоимость оборудования для проведения такого сложного процесса составляет до миллиона долларов.

8. Проведение LOCOS-процесса (длительность – 90 мин, температура – 1000 °С в среде H₂O) для формирования толстого (~0,5 мкм), так называемого полевого, слоя окисла (field oxide), предназначенного для боковой изоляции активных элементов (МОП-транзисторов) КМОП-структуры (рис. 1.4).

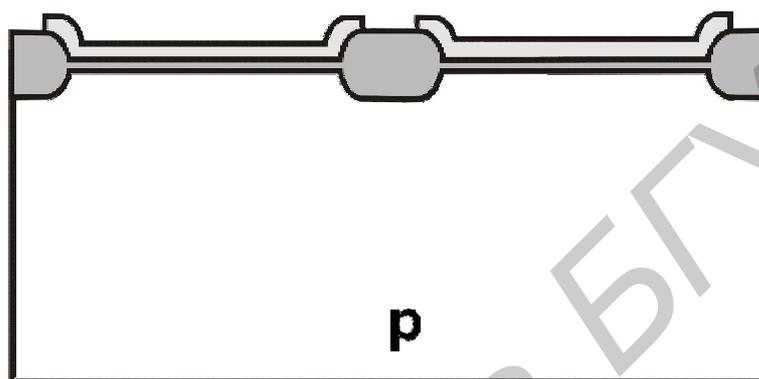


Рис. 1.4. Результат проведения LOCOS-процесса

Далее проводятся операции создания изоляции между активными элементами КМОП-структуры. Эта последовательность операций не входит в основной маршрут формирования активных элементов рассматриваемой структуры, но является важной и необходимой в современной технологии микроэлектроники. Прогрессивным способом создания изоляционных областей является технология с использованием мелких канавок (Shallow Trench Isolation, STI). Приведем последовательность операций, реализующих STI-технология:

- предварительные операции те же, которые используются в LOCOS-процессе. На поверхности подложки термически выращивается слой SiO₂ (10–20 нм) и осаждается слой Si₃N₄ (50–100 нм), как показано на рис. 1.3;
- нанесение фоторезиста (рис. 1.4);
- травление в определенных местах окисла и нитрида кремния (фоторезист используется как маска);
- локальное травление кремниевой подложки с целью формирования мелкозалегающих канавок. Канавки должны иметь слегка наклонные стенки. Кроме того, углы канавок должны быть слегка закруглены. Эти условия необходимы для устранения образования полостей внутри окисла кремния, которым будут в дальнейшем заполняться канавки;
- термическое осаждение тонкого (10–20 нм) слоя SiO₂ на боковые стенки и на дно канавок;
- осаждение толстого слоя SiO₂ в CVD или HDP (осаждение в плазме высокой плотности, High Density Plasma) процессе для заполнения канавки;

- заключительная операция формирования изоляции в STI-процессе – планаризация поверхности методом химико-механического полирования (Chemical-Mechanical Polishing, CMP).

Вернемся теперь к основному маршруту формирования активных элементов КМОП-структуры. Операция 8 была проведена как подготовительная для формирования р-кармана в р-подложке для будущего n-МОП-транзистора и симметрично расположенного р-МОП-транзистора в n-кармане.

9. Осаждение слоя фоторезиста для формирования р-кармана.

10. Фотолитография. Маска №2 используется для формирования р-кармана, а маска №3 для формирования р-МОП-транзистора в n-кармане.

11. Имплантационное легирование бором области р-кармана (доза 10^{13} см⁻², энергия ~150–200 кэВ) через слой SiO₂ для предотвращения эффекта каналирования. Отметим, что выбранная энергия ионов обеспечивает их прохождение через толстый слой полевого окисла. Концентрация бора в р-кармане составляет $\sim 5 \cdot 10^{16} - 10^{17}$ см⁻³ (рис. 1.5).

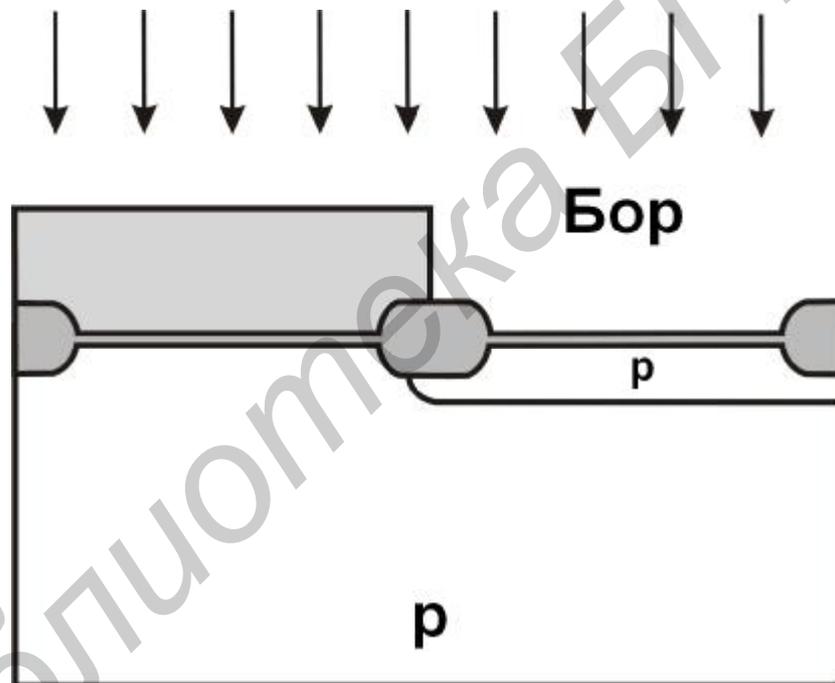


Рис. 1.5. Состояние структуры после операций 9–11

12. Снятие слоя фоторезиста химическим способом или в кислородной плазме.

13. Осаждение слоя фоторезиста.

14. Литография (маска №3 используется для определения областей формирования n-кармана).

15. Ионная имплантация фосфора (энергия ~300–400 кэВ) для легирования области n-кармана (рис. 1.6).

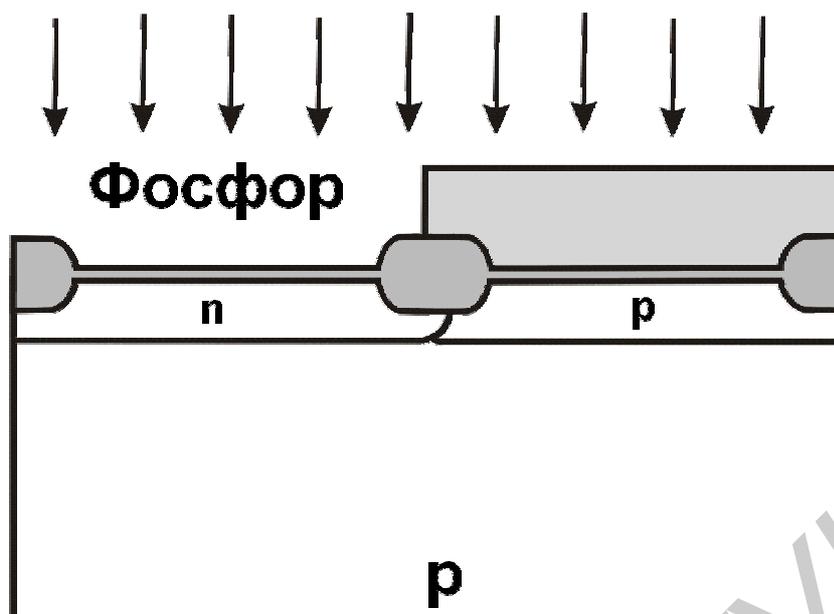


Рис. 1.6. Фоторезист используется в качестве маски для формирования n-МОП-прибора. Имплантация фосфора проводится для легирования n-кармана, в котором будет образован p-МОП-транзистор

Отметим, что энергия ионов фосфора должна быть выше, чем в идентичной операции легирования бором (операция 11), поскольку масса атома фосфора (33) гораздо выше, чем масса атома бора (11), и атому фосфора требуется большая энергия, чтобы проникнуть в процессе ионной имплантации через такой же слой окисла, что и в операции 11. Доза имплантации фосфора примерно такая же, как и доза имплантации бора в операции 11.

16. Высокотемпературная разгонка примесей в p- и n-карманах в инертной среде (длительность 4–6 часов при температуре 1000–1100 °С) для формирования p- и n-переходов на глубине порядка нескольких микрон (рис. 1.7).

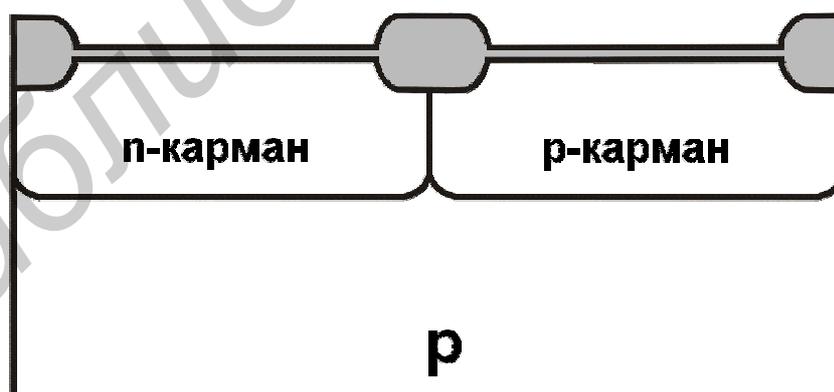


Рис. 1.7. Высокотемпературная разгонка для формирования p- и n-карманов

17. Снятие слоя фоторезиста и химическая очистка поверхности кремниевой подложки.

Следующие операции проводятся для формирования активных областей КМОП-структуры. Существуют различные способы достижения этой цели. Здесь описываются только некоторые из них.

18. Осаждение тонкого слоя окисла.
19. Осаждение слоя нитрида кремния (Si_3N_4).
20. Осаждение слоя фоторезиста.
21. Фотолитография для удаления слоев фоторезист– Si_3N_4 – SiO_2 в определенных областях.
22. Ионная имплантация (доза $\sim 10^{13}$ см^{-2} , энергия ~ 50 кэВ) для подлегирования бором той области подложки, где будет формироваться область боковой изоляции (рис. 1.8). Энергия ионов должна быть такой, чтобы они не проникли через слой полевого окисла.

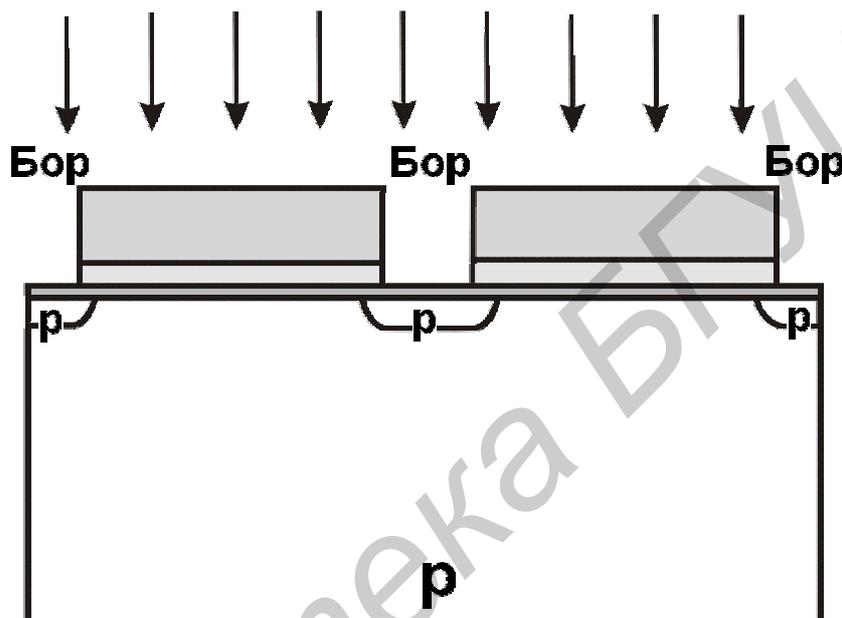


Рис. 1.8. Имплантация бора до проведения LOCOS-процесса (см. рис. 1.4) с целью повышения степени легирования подложки в области под полевым окислом для минимизации проблем, связанных с инверсией поля в МОП-транзисторе

23. Создание p-областей посредством высокотемпературного осаждения полевого слоя окисла в LOCOS-процессе с одновременной диффузией бора для формирования p-областей под ним (рис. 1.9).

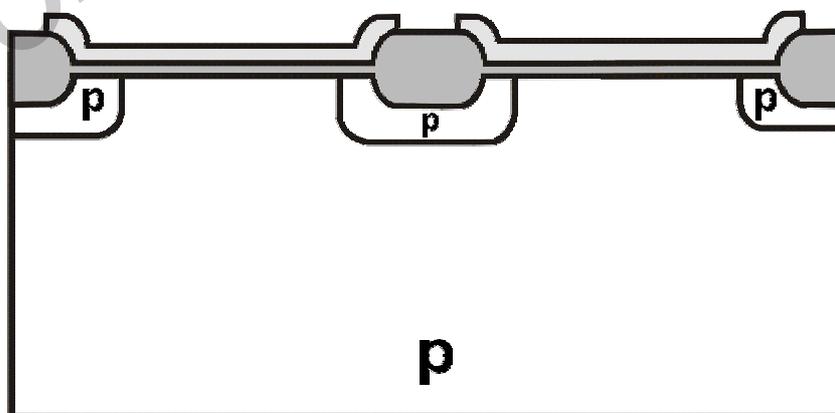


Рис. 1.9. Состояние формируемой структуры после проведения LOCOS-процесса

24. Формирование p- и n-карманов, как и в процессах, иллюстрируемых рис. 1.6 и 1.7, но отличающихся тем, что энергии имплантации бора и фосфора здесь ниже (~50 кэВ), чтобы эти ионы не проникли через полевой окисел (рис. 1.10). Отметим, что при этом отсутствует необходимость использования специальной маски, как при проведении операций 13–15, поскольку используется та же маска, что и при проведении LOCOS-процесса.

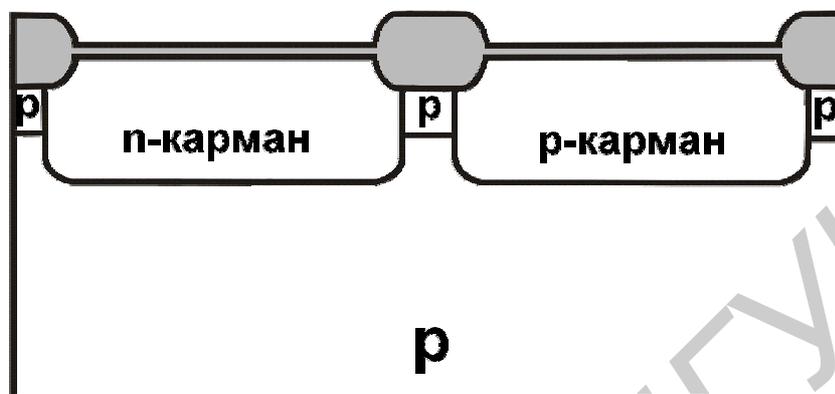


Рис. 1.10. Вариант формирования активных областей КМОП-структуры после создания p- и n-карманов

Современные КМОП-структуры формируются на подложках, которые имеют скрытые высоколегированные слои, расположенные под активными приборами. Возможно также формирование КМОП-структур на высоколегированных подложках. Такие высоколегированные области позволяют минимизировать проблему «защелкивания» МОП-транзистора. Этот эффект связан с наличием паразитных p-n-p-элементов, обладающих такими нежелательными вольт-амперными характеристиками, которые могут привести к выходу из строя прибора. Высоколегированные слои под областями активных приборов шунтируют паразитные элементы, имеющие низкие значения сопротивления, что предотвращает их включение и, следовательно, снимает вероятность «защелкивания».

Рассмотрим этапы формирования таких высоколегированных скрытых слоев. Исходное состояние соответствует рис. 1.2.

Для формирования областей, где будет образован n^+ -скрытый слой, используется маска №1 (рис. 1.11).

25. Ионная имплантация (доза $\sim 10^{15} \text{ см}^{-2}$, энергия ~50 кэВ) для легирования области скрытого слоя. В этой операции могут использоваться ионы как мышьяка, так и сурьмы. Обычно используются ионы мышьяка, поскольку мышьяк имеет более высокий предел растворимости в кремнии.

26. Снятие слоя фоторезиста в кислотной среде или в кислородной плазме.

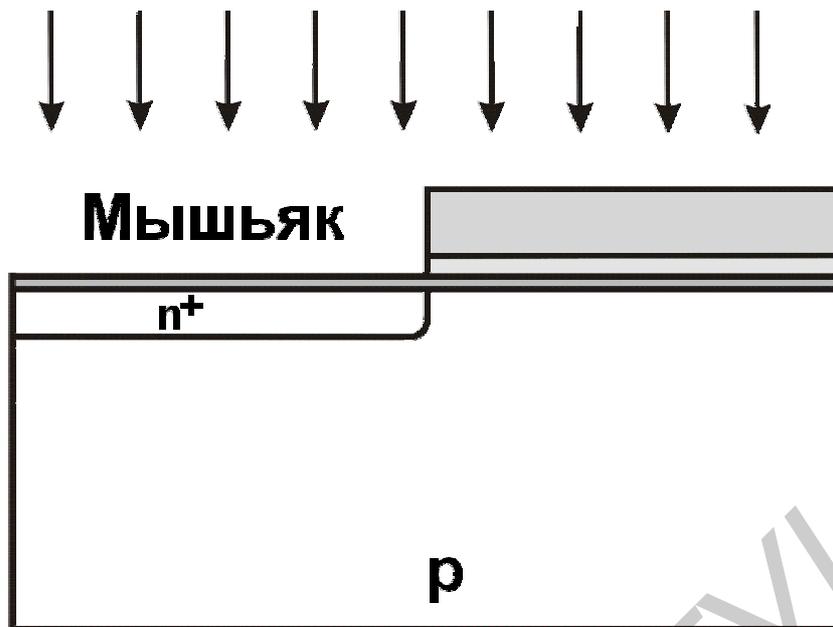


Рис. 1.11. Локальная имплантация ионов мышьяка, используемая при формировании скрытых и эпитаксиальных слоев. Маска №1 используется для задания областей n^+ -скрытых слоев

27. Высокотемпературная обработка, сопровождающаяся несколькими эффектами. Во-первых, при этом разгоняются n^+ -примеси до глубины залегания p - n -перехода $\sim 1-2$ мкм. Во-вторых, часть процесса разгонки проводится в окислительной среде (H_2O). При этом выращивается толстый слой окисла на поверхности подложки только над n^+ -областями вследствие наличия в необходимых областях слоя Si_3N_4 . Возможность использования одной маски для создания как n^+ -, так и p^+ -скрытых слоев обеспечивается проведением LOCOS-процесса (толщина слоя $SiO_2 \sim 0,4$ мкм). В-третьих, в процессах разгонки и окисления создается ступенька на кремниевой подложке вблизи краев n^+ -скрытых слоев. Эта ступенька будет играть важную роль после проведения операции выращивания эпислоя кремния на этих скрытых слоях. Результирующая структура показана на рис. 1.12.

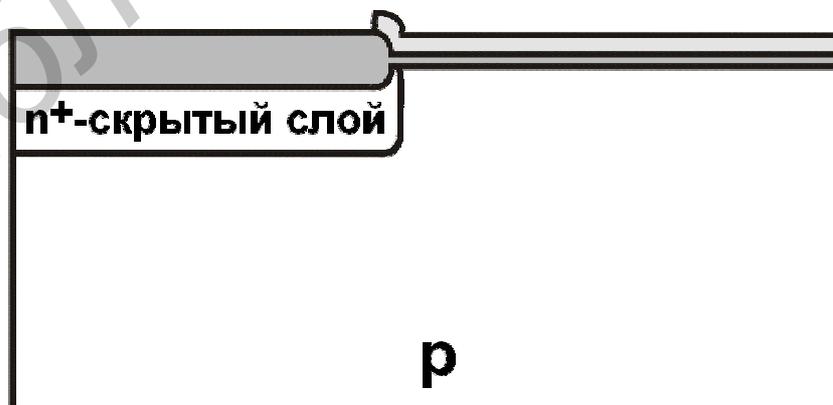


Рис. 1.12. Разгонка n^+ -скрытого слоя после удаления фоторезиста. Формирование толстого слоя окисла над n^+ -областью в LOCOS-процессе.

28. Снятие слоя Si_3N_4 .

29. Ионная имплантация (доза $\sim 10^{14}$ см⁻², энергия $\sim 50\text{--}75$ кэВ) для легирования области p⁺-скрытого слоя (рис. 1.13). Здесь важно свойство самосовмещения обоих (n⁺- и p⁺-) слоев. Толстый слой окисла над n⁺-скрытым слоем препятствует проникновению имплантируемых p⁺-ионов (бор), тогда как исходный тонкий слой окисла прозрачен для проникновения имплантируемых ионов.

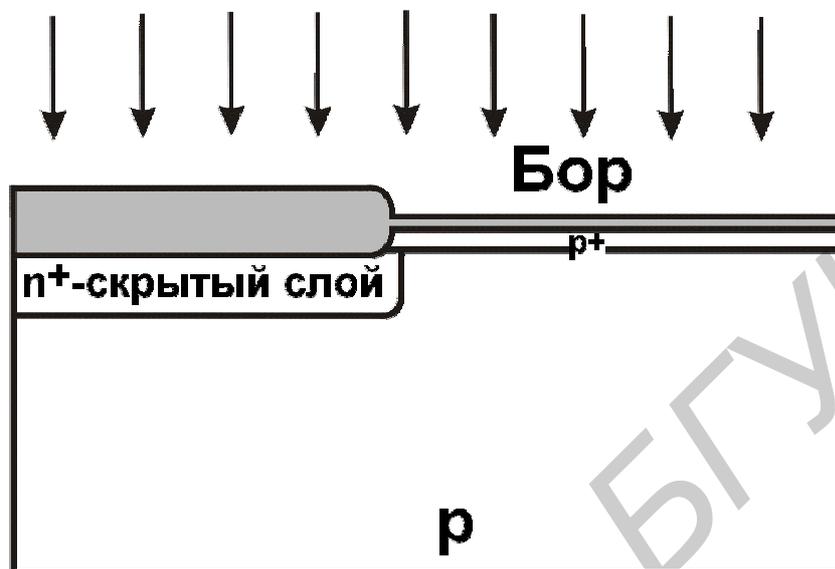


Рис. 1.13. Использование толстого слоя SiO₂ в качестве маски при имплантации фосфора

30. Высокотемпературная разгонка бора и мышьяка вглубь подложки в инертной среде (несколько часов при температуре 1000–1100 °С) (рис. 1.14).

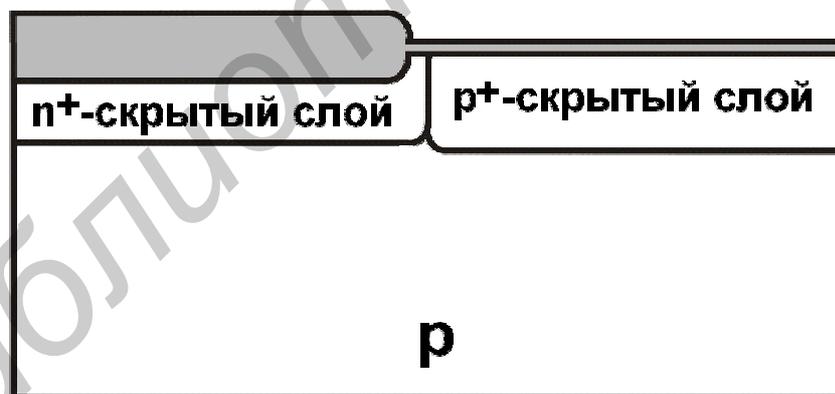


Рис. 1.14. Одновременная разгонка фосфора и бора в результате длительной высокотемпературной обработки

31. Снятие слоя окисла в растворе HF.

32. Химическая очистка.

33. Нарастивание эпитаксиального слоя толщиной несколько микрон с одновременным легированием бором или мышьяком (температура 800–1000 °С, источник кремния – силан SiH₄, источник легирующей примеси – борин B₂H₆ или фосфин AsH₃) – рис. 1.15. Здесь эпислой не легирован, поскольку имплантацион-

ное легирование отдельных его областей будет проводиться в последующих операциях.



Рис. 1.15. Результат наращивания эпитаксиального слоя.

Итак, скрытые высоколегированные слои для предотвращения эффекта «защелкивания» созданы. Далее проводятся уже рассмотренные операции для подготовки и проведения LOCOS-процесса (см. рис. 1.2–1.4) и формирования n- и p-карманов (см. рис. 1.5–1.7).

34. Соединение карманов со скрытыми слоями посредством диффузии соответствующих примесей в процессе высокотемпературной обработки (рис. 1.16). Условия проведения этих операций (несколько часов при температуре 1000–1100 °С) зависят от толщины эпислоя.

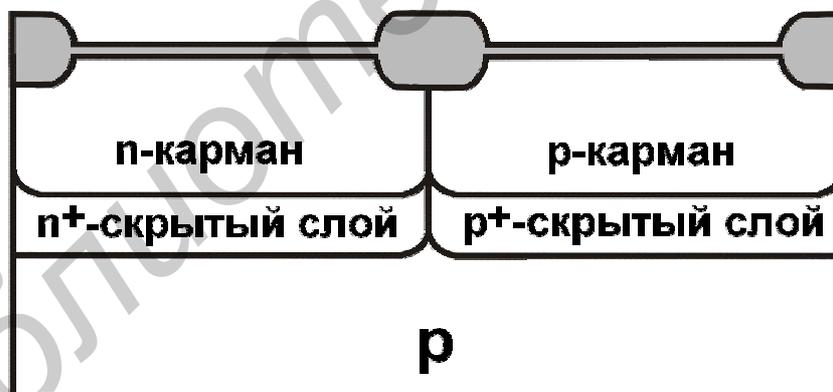


Рис. 1.16. Состояние формируемой структуры после операции 34

Следует отметить, что формирование скрытых эпитаксиальных слоев требует только одной дополнительной маски.

Вернемся теперь к описанию основного маршрута, начиная с рис. 1.7.

Важной целью проектирования технологического маршрута формирования КМОП-структуры является правильный выбор параметров технологических операций для получения необходимых значений пороговых напряжений как для n-, так и p-МОП-транзисторов.

В современных КМОП-приборах пороговое напряжение V_{TH} составляет 0,5–0,8 В (положительное для n-МОП и отрицательное для p-МОП-приборов). Оценочное выражение для порогового напряжения:

$$V_{TH} = V_{FB} + 2f_f + \frac{\sqrt{2e_s q N_A (2f_f)}}{C_{ox}} + \frac{qQ_I}{C_{ox}}, \quad (1.1)$$

здесь V_{FB} – напряжение на затворе, необходимое для компенсации разницы работ выхода для материалов затвора и подложки и электрических зарядов в подзатворном окисле, f_f – энергия Ферми для кремния, e_s – диэлектрическая проницаемость для кремния, N_A – концентрация примесей в подложке, C_{ox} – емкость подзатворного окисла, Q_I – доза легирующих примесей в области канала.

Очевидно, что величины N_A , C_{ox} и Q_I определяются технологическими параметрами.

35. Осаждение слоя фоторезиста.

36. Фотолитография для открытия областей, где будет сформирован n-МОП-транзистор (маска №4).

37. Ионная имплантация бора (доза $\sim 1-5 \cdot 10^{12}$ см⁻², энергия $\sim 50-75$ кэВ) в область канала будущего n-МОП-транзистора для получения заданного значения V_{TH} (рис. 1.17). Энергия имплантации, с одной стороны, должна быть достаточно высокой, чтобы ионы проникли через тонкий слой окисла, и, с другой стороны, не слишком высокой, чтобы имплантированные ионы бора проникли не слишком глубоко от поверхности кремниевой подложки. Значение дозы Q_I вычисляется из выражения (1.1) для V_{TH} .

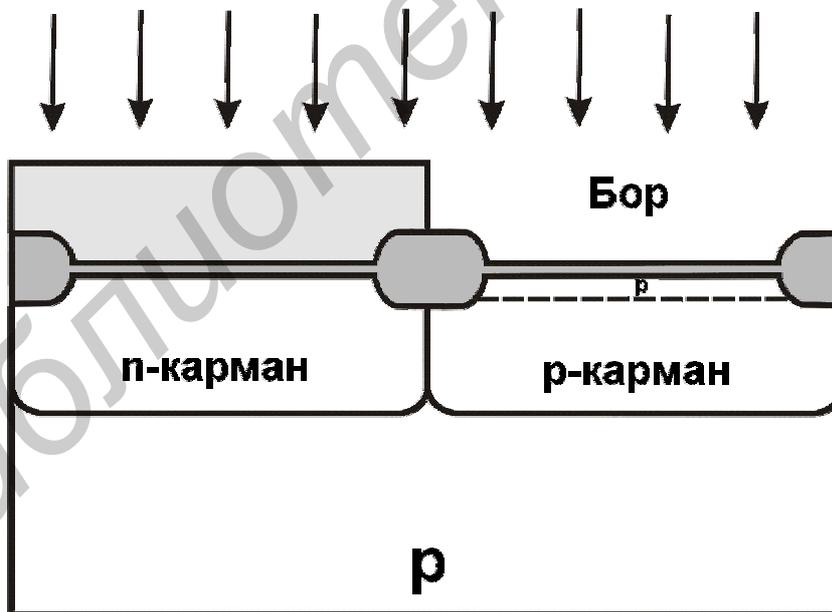


Рис. 1.17. Легирование бором области канала для получения заданного значения порогового напряжения n-МОП-транзистора

На рис. 1.18 иллюстрируется такая же последовательность операций для формирования р-МОП прибора (используется маска №5).

38. Осаждение слоя фоторезиста.

39. Фотолитография для открытия областей, где будет сформирован р-МОП-транзистор (маска №5).

40. Ионная имплантация мышьяка для получения заданного значения V_{TH} p-MOП-транзистора. Доза имплантации в этом случае должна быть такой же, как и в операции 37, а энергия имплантации должна быть выше, поскольку ионы мышьяка имеют большую массу, чем бор.

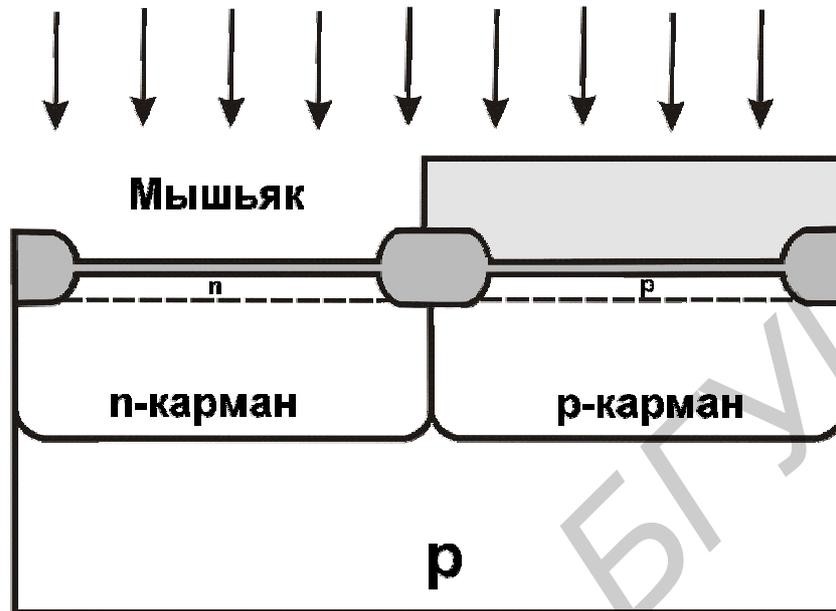


Рис. 1.18. Легирование мышьяком области канала для получения заданного значения порогового напряжения n-MOП-транзистора

41. Травление в растворе HF для снятия тонкого слоя (~10–20 нм) окисла над областью, где формируются активные приборы.

42. Выращивание тонкого (в современных приборах менее 10 нм) слоя окисла кремния для формирования подзатворного диэлектрика MOП-транзистора (120 мин, 800 °C в сухом кислороде или 25 мин, 800 °C во влажной среде).

Необходимость снятия исходного и последующего наращивания нового слоя окисла обусловлена лучшей контролируемостью операции наращивания окисла, чем травления. Кроме того, вновь выращенный слой окисла характеризуется более высоким качеством структуры. Результирующая структура показана на рис. 1.19.

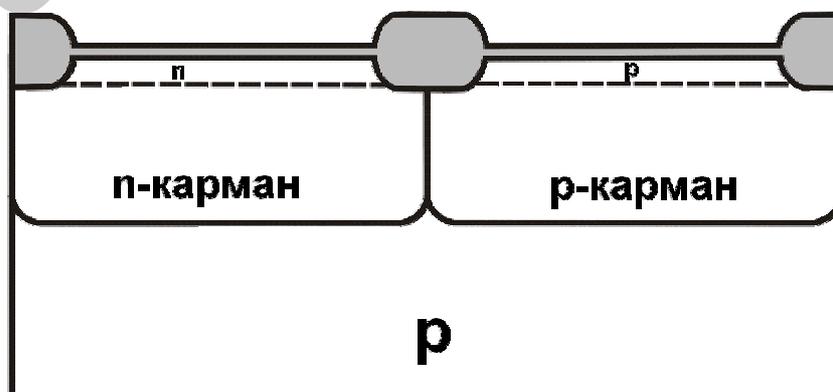


Рис. 1.19. Формирование подзатворного окисла для p- и n-MOП-транзисторов

43. Осаждение поликремниевого электрода толщиной $\sim 0,3-0,5$ мкм в LPCVD-процессе при температуре 600 °C (рис. 1.20).

44. Ионная имплантация n-типа примеси для подлегирования поликремния (доза $\sim 5 \cdot 10^{15}$ см⁻², величина энергии не критична). Легирование поликремния может быть осуществлено и на этапе 43 (осаждение поликремния с одновременным легированием, *in-situ* doping). В таком случае операция 44 отсутствует.

45. Разгонка примеси в поликремнии в процессе высокотемпературной обработки.

46. Осаждение слоя фоторезиста.

47. Фотолитография (маска №6).

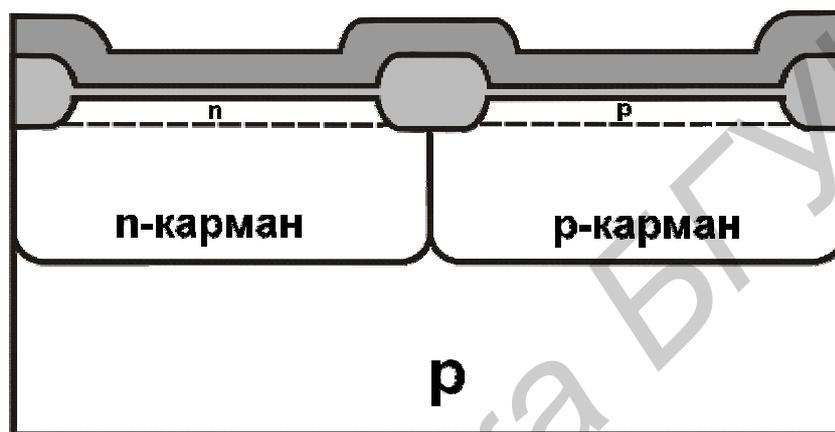


Рис. 1.20. Осаждение пленки поликремния для формирования затворов p- и n-МОП-транзисторов

48. Локальное плазмохимическое травление поликремния (рис. 1.21).

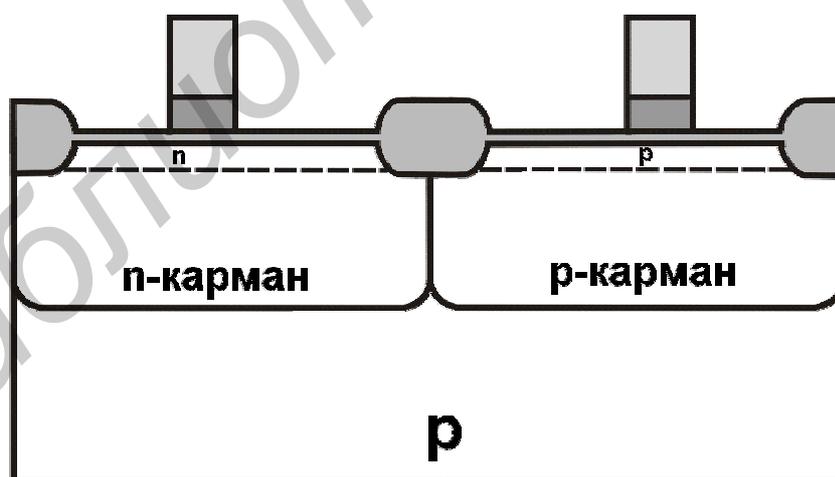


Рис. 1.21. Формирование p- и n-МОП-транзисторов (маска №6)

Слой поликремния может быть использован в качестве соединения между активными приборами (например, для соединения поликремниевых затворов n- и p-МОП-приборов). В этом случае поликремний используется в качестве первого уровня межсоединений. Однако поскольку слоевое сопротивление поликремния (~ 10 Ом/кв) гораздо выше, чем металла ($\leq 0,1$ Ом/кв), поликремний используется только в случае коротких межсоединений.

Таким образом, следующая последовательность операций предназначена для имплантационного введения n- и p-примесей в исток-стоковые области будущих n-МОП и p-МОП транзисторов соответственно (рис. 1.22, 1.23) и для формирования тонкого слоя окисла вдоль краев поликремниевых затворов (рис. 1.24, 1.25). Эти операции необходимы для удовлетворения условий масштабирования МОП-приборов.

За последние 10 лет характерные размеры МОП-приборов снизились с ~ 1 мкм до $< 0,25$ мкм, а напряжение питания – с ~ 5 В всего лишь до $\sim 2,5$ – $3,3$ В. Если с уменьшением размеров транзисторных структур не происходит соответствующего масштабирования напряжения питания, возникает проблема, связанная с резким увеличением электрических полей в структурных элементах. Так, при длине канала МОП-транзистора, равной 2 мкм, и напряжении питания 5 В среднее электрическое поле в канале составляет $\sim 2,5 \cdot 10^4$ В/см. Уменьшение длины канала до 0,5 мкм без снижения напряжения питания приводит к повышению электрического поля в канале до $\sim 10^5$ В/см, что влечет проблемы, связанные с так называемыми «горячими» электронами. Носители заряда (электроны или дырки), разогнанные в таких высоких электрических полях, вызывают эффект ударной ионизации, в результате которого создаются дополнительные электронно-дырочные пары за счет разрыва Si-Si-связей. Кроме того, такие высокоэнергетические электроны могут преодолеть довольно высокий энергетический барьер ($\sim 3,2$ эВ) между зоной проводимости кремния и зоной проводимости SiO₂. Это приводит к инжекции дополнительных носителей в область подзатворного диэлектрика и, следовательно, к нестабильности функционирования прибора.

Для устранения указанных эффектов высоких электрических полей уровень легирования в области стока повышают с целью создания n⁺n⁻p-профиля между стоком и каналом в n-МОП-транзисторе и, соответственно, p⁺p⁻n- в p-МОП-транзисторе. Это позволяет плавно уменьшить уровень напряжения на стоке на гораздо большее расстояние, чем в случае резкого n⁺-p (p⁺-n)-перехода без подлегирования стока, что понижает уровень электрических полей вблизи области стока. Такой прием подлегирования стока используется в так называемой LDD (Lightly Doped Drain) технологии формирования КМОП-структуры.

49. Удаление слоя фоторезиста в нужной области.

50. Фотолитография (маска №7).

51. Ионная имплантация фосфора (n-тип примеси) для подлегирования области стока n-МОП-транзистора (доза $\sim 5 \cdot 10^{13}$ – $5 \cdot 10^{14}$ см⁻², энергия ~ 30 кэВ) (рис. 1.22).

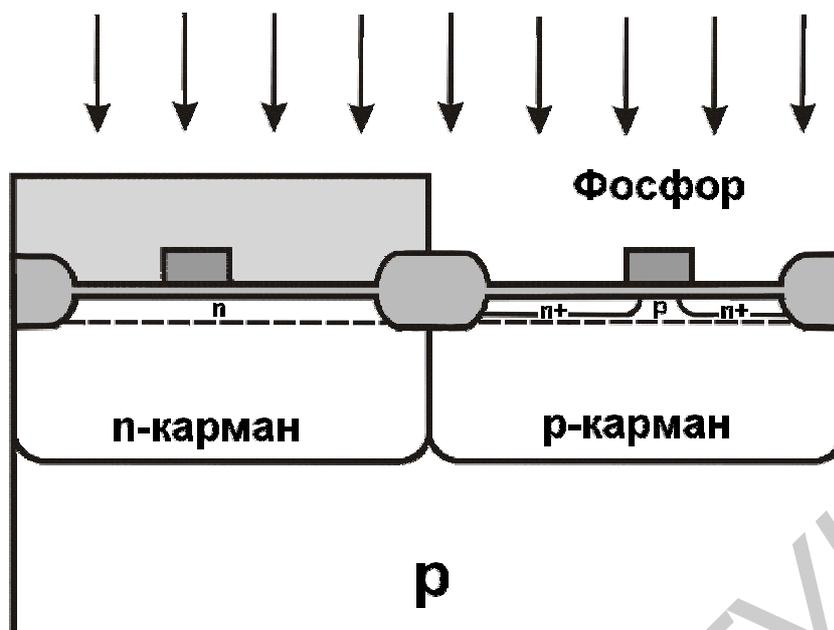


Рис. 1.22. Использование маски №7 и имплантации фосфора для формирования LDD-области в n-MOП-транзисторе

Аналогичные операции 50–52 (имплантируемая примесь – бор, фотолитография с маской №8) проводятся для формирования LDD-области в p-MOП-транзисторе (рис. 1.23).

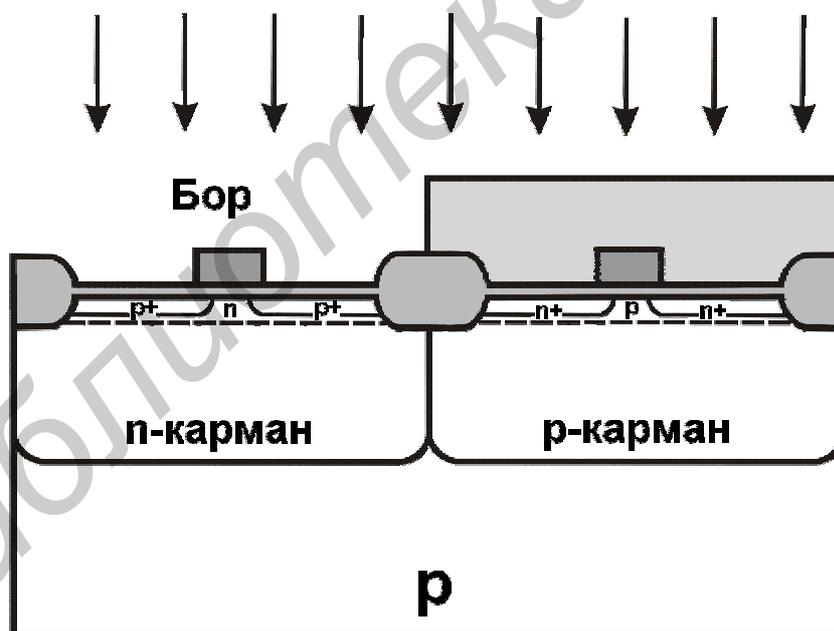


Рис. 1.23. Использование маски №8 для имплантации бора при формировании LDD-области в p-MOП-транзисторе

В современной технологии формирования КМОП-структуры используется несколько низкоэнергетических операций ионного подлегирования областей стока (истока) с различными величинами доз и энергий (и даже с разными наклонами направления ионного пучка относительно поверхности подложки) для создания прецизионного профиля легированных примесей вблизи края области стока (истока), чтобы минимизировать эффекты короткого канала, связанные с распро-

странением электрического поля вглубь канала, что приводит к снижению потенциального барьера для носителей между областями истока и канала и, в конечном счете, к снижению эффективности управления тока в стоке напряжением на затворе.

52. Осаждение тонкого (порядка нескольких сотен нанометров) конформного слоя диэлектрика (SiO_2 или Si_3N_4) в LPCVD-процессе для создания изоляции (рис. 1.24).

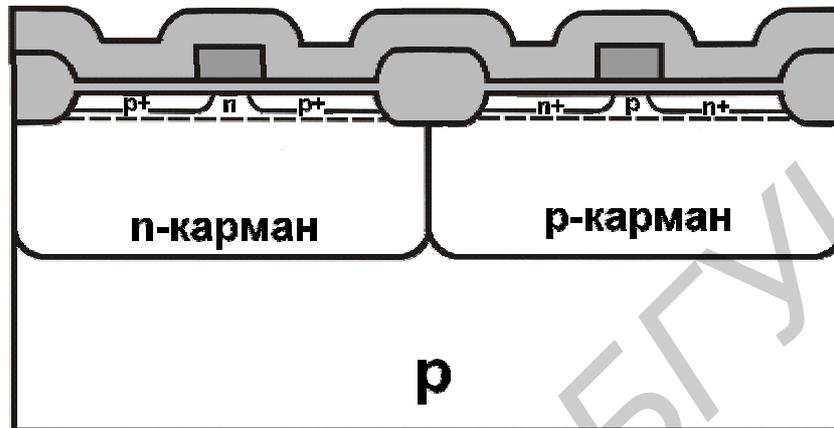


Рис. 1.24. Осаждение конформного слоя SiO_2 для формирования изоляции вдоль краев поликремниевого затвора

53. Анизотропное травление (вертикальное, но не горизонтальное!) осажденного слоя $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ (рис. 1.25) с целью его удаления вдоль краев поликремния.

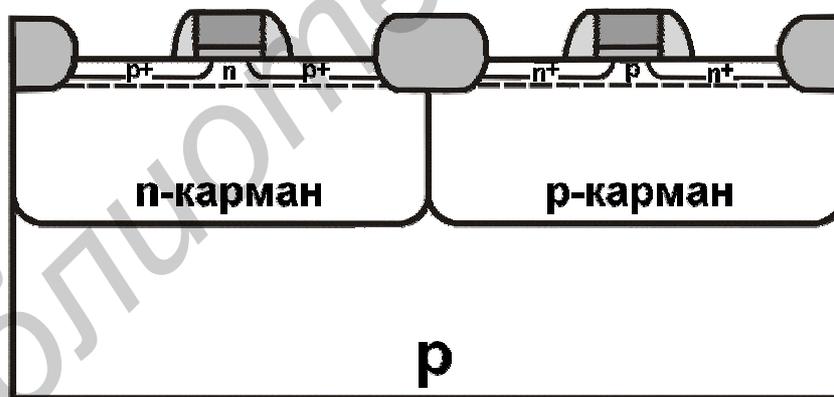


Рис. 1.25. Стравливание лишнего окисла для формирования изоляции вдоль краев поликремния

Далее необходимо ввести легирующие примеси в области истока/затвора как n-МОП-, так и p-МОП-транзисторов посредством ионной имплантации. Вначале эта процедура проводится для формирования областей истока/затвора n-МОП-транзистора.

54. Осаждение тонкого «экранирующего» слоя окисла для подавления эффекта каналирования, сопровождающую операцию ионного легирования.

55. Нанесение слоя фоторезиста.

56. Фотолитография (маска №9).

57. Ионная имплантация мышьяка (n-тип примеси) для легирования областей истока и затвора n-МОП-транзистора (доза $\sim 2-4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, энергия $\sim 75 \text{ КэВ}$) – рис 1.26. При указанных величинах дозы и энергии мышьяк проникает через «экранирующий» слой окисла. При этом обеспечивается достаточно мелкая глубина залегания p-n-перехода.

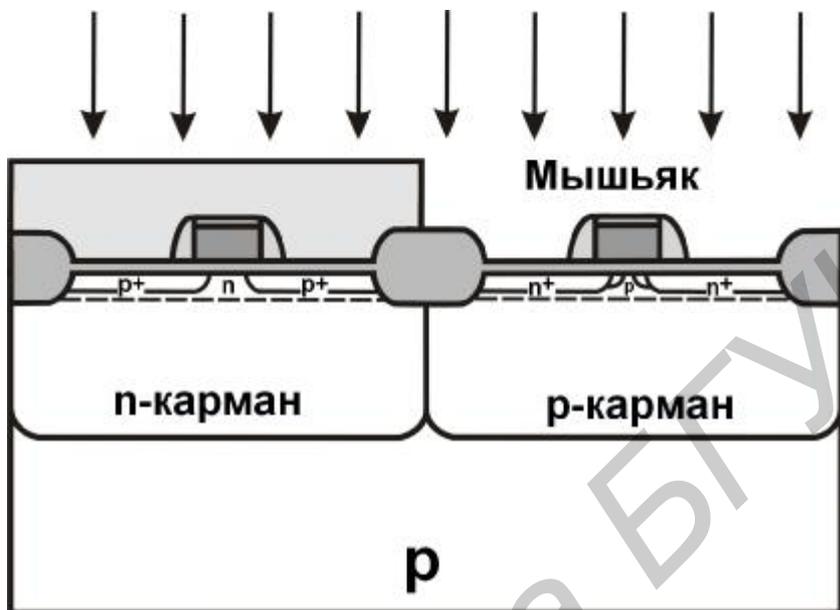


Рис. 1.26. Формирование областей стока и истока n-МОП-транзистора

58, 59, 60. Эти операции, аналогичные операциям 55–57 (имплантируемая примесь – бор, фотолитография с маской №10), проводятся для формирования областей истока/затвора p-МОП-транзистора (рис 1.27).

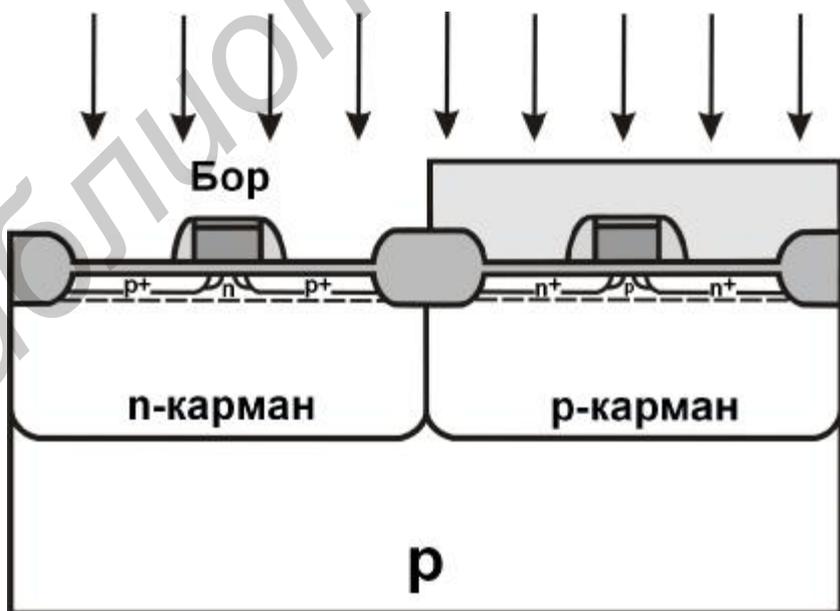


Рис. 1.27. Формирование областей стока и истока p-МОП-транзистора

61. Длительная (30 мин, $\sim 900 \text{ }^\circ\text{C}$) или быстрая ($\sim 1 \text{ мин}$, $1000-1050 \text{ }^\circ\text{C}$) термическая обработка – последняя стадия формирования активных приборов

КМОП-структуры (рис. 1.28). Дефекты кристаллической решетки, образованные при проведении предыдущих операций имплантационного легирования, отжигаются. При этом используется важный эффект повышения коэффициента диффузии примесей в присутствии повышенной концентрации точечных дефектов (вакансий и междоузлий) – так называемый Transient Enhanced Diffusion (TED) эффект. Использование этого эффекта в современной технологии микроэлектроники играет решающую роль при формировании мелких глубин залегания p-n-переходов, что важно для обеспечения масштабируемости характеристик приборов при переходе к субмикронной технологии.

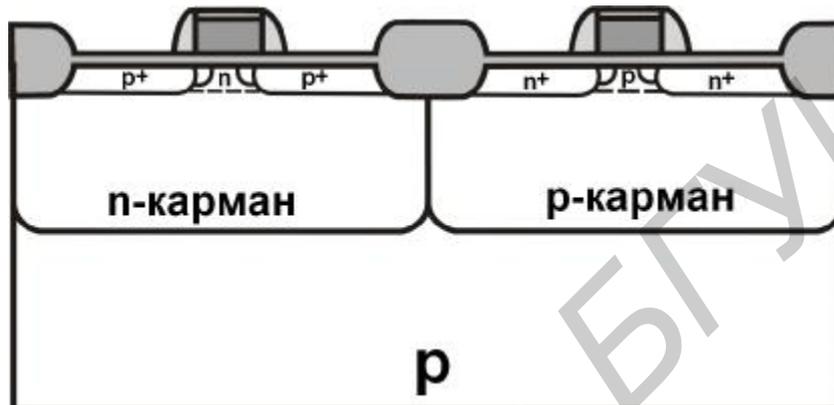


Рис. 1.28. Высокотемпературная разгонка примесей для формирования окончательных p-n-переходов элементов КМОП-структуры

Следующие операции проводятся для формирования межсоединений отдельных элементов КМОП-структуры. В описываемой технологии используется три уровня межсоединений. Этапы формирования первого, нижнего уровня иллюстрируются рис. 1.29–1.32.

62. Снятие окисла из тех областей, где будут формироваться контакты к легированным областям кремниевой подложки и к поликремнию. Эта операция проводится посредством безмасочного травления в среде HF, поскольку вытравливаемый слой окисла (экранирующий, выращенный перед формированием областей истока/стока) достаточно тонкий (~10 нм) (см. рис. 1.29).

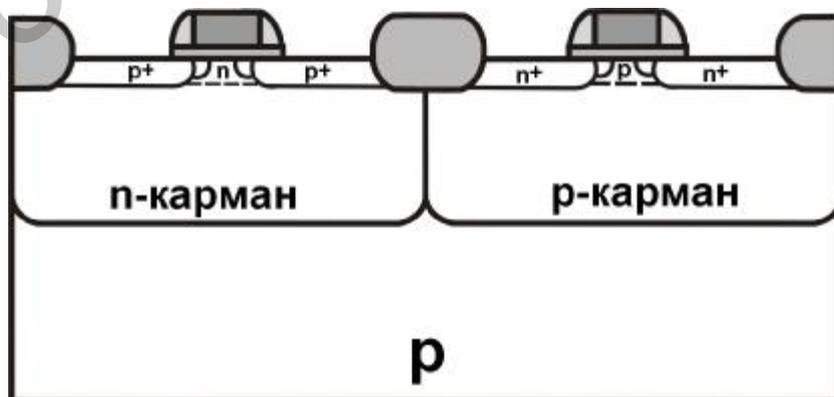


Рис. 1.29. Травление окисла в областях истока/стока и на верхней поверхности поликремния

63. Осаждение тонкого (50–100 нм) слоя титана посредством магнетронного распыления (рис. 1.30).

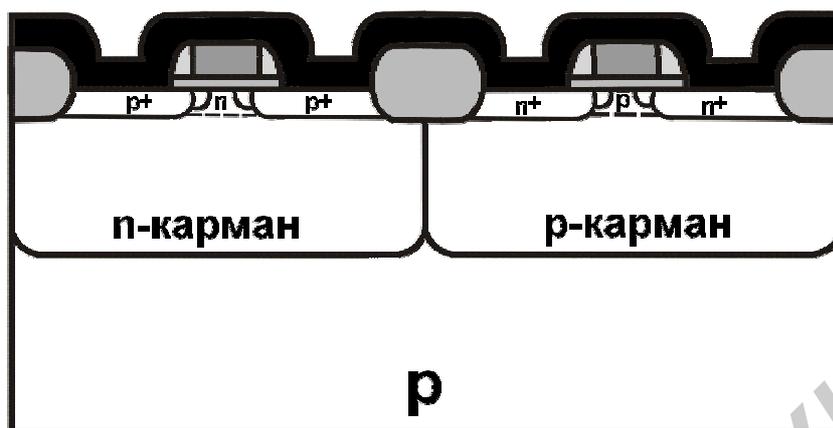


Рис. 1.30. Осаждение титана методом распыления

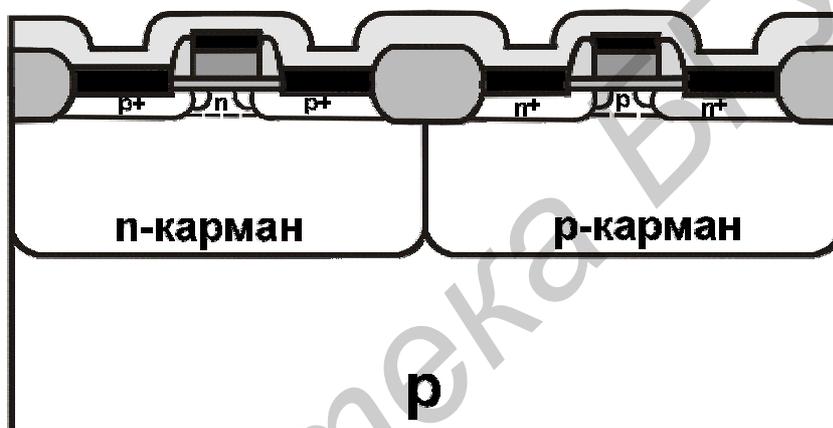


Рис. 1.31. Формирование пленок TiSi_2 (области, выделенные темным цветом) и TiN (области серого цвета)

64. Формирование силицида титана TiSi_2 в процессе высокотемпературной обработки ($\sim 600^\circ\text{C}$, ~ 1 мин) в среде азота посредством химической реакции между Ti и Si (рис 1.31). TiSi_2 – отличный проводник (на рисунке этот слой выделен темным цветом). Он образует низкоомные контакты с n^+ - и p^+ -областями кремния и поликремния. В процессе проведения этой операции Ti реагирует и с N_2 , образуя нитрид титана TiN (области серого цвета на рис 1.31). TiN также хороший проводник, хотя его электропроводность ниже электропроводности большинства металлов. По этой причине нитрид титана используется лишь для локальных или коротких соединений.

65. Нанесение слоя фоторезиста.

66. Фотолитография (маска №11).

67. Высокотемпературная обработка ($\sim 800^\circ\text{C}$, ~ 1 мин) в среде аргона для коррекции сопротивлений слоев TiN и TiSi_2 до 10 и 1 Ом/кв соответственно.

68. Удаление лишних областей TiN посредством химического травления (см. рис. 1.32).

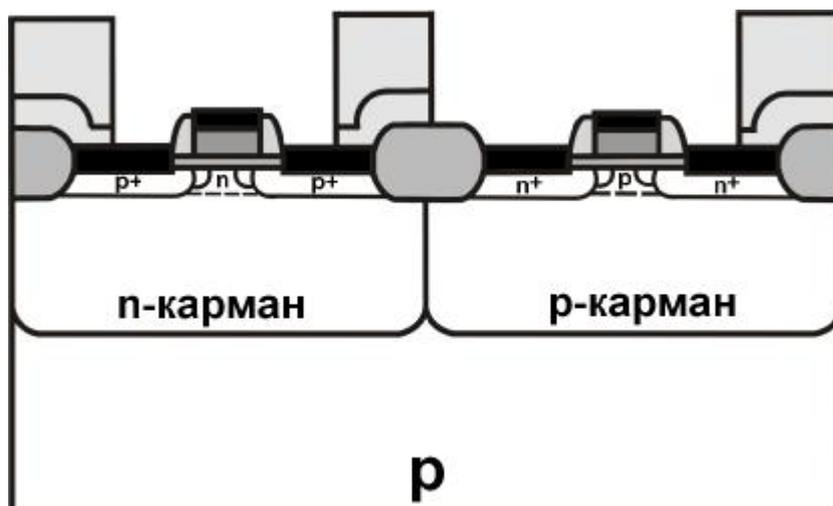


Рис. 1.32. Состояние структуры после операций 65–68

69. Удаление «островков» фоторезиста.

Следующие операции проводятся для формирования остальных двух слоев металлических соединений (рис. 1.33–1.39). Прежде всего, проводится планаризация поверхности (сглаживание ее топографии) с целью удаления выступов и впадин на поверхности, образовавшихся на предыдущих этапах осаждения тонких пленок, для получения качественных слоев металла.

70. Осаждение толстого (~1 мкм) конформного слоя окисла в CVD- или LPCVD-процессе. В современной технологии вместо окисла осаждаются фосфор-силикатные (ФСС) или бор-фосфор-силикатные стекла (БФСС), пленки окисла кремния, легированные фосфором или бором. Иногда на слой ФСС или БФСС дополнительно осаждается пленка нелегированного окисла (см. рис 1.33). Фосфор служит для защиты от проникновения примесей из n^+ -областей в активные области, что приводит к нестабильности функционирования МОП-приборов. Добавка бора снижает температуру, при которой осажденный окисел «растекается» по поверхности.

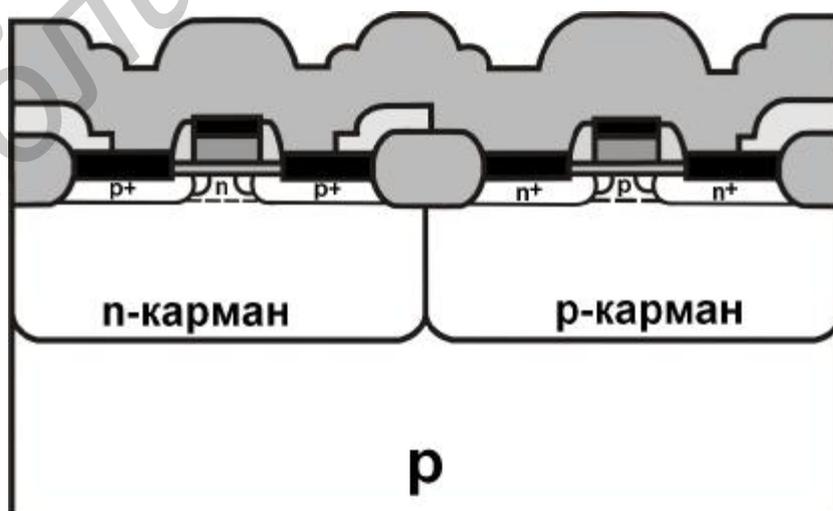


Рис. 1.33. Осаждение конформного слоя окисла в LPCVD-процессе

71. «Растекания» ФСС или БФСС по поверхности еще недостаточно для качественной планаризации топографии поверхности, поэтому необходимы дополнительные меры для достижения этой цели – например, осаждение фоторезиста, который заполняет все неровности поверхности, поскольку он находится в жидкой фазе.

72. Безмасочное плазменное травление. В современной технологии эта операция заменяется химико-механическим полированием (Chemical-Mechanical Polishing, CMP) – совместным использованием установки для полирования и обработки в среде жидкого раствора кремнезема. Результат иллюстрируется рис. 1.34.

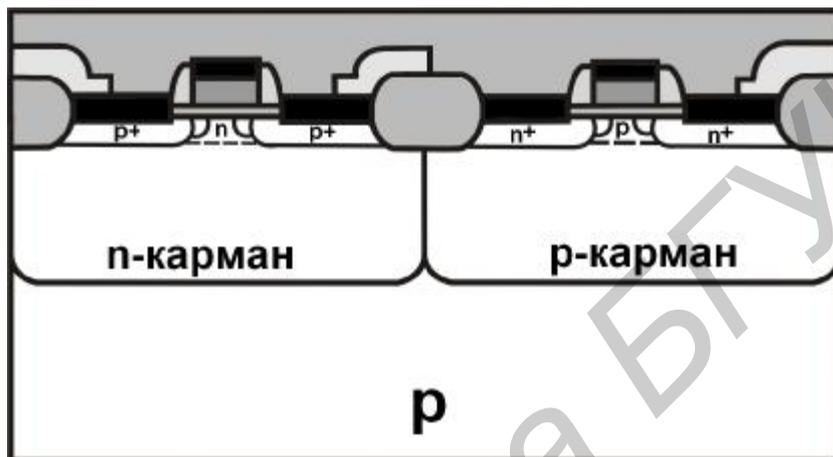


Рис. 1.34. Планаризация поверхности окисла в CMP-процессе

Следующие операции предназначены для открытия областей, в которых будет сформирован контакт между первым уровнем металла и нижележащей структурой.

73. Нанесение слоя фоторезиста.

74. Фотолитография (маска №12).

75. Плазменное травление SiO_2 для получения отверстий, через которые будет осуществлено формирование контактов (рис. 1.35).

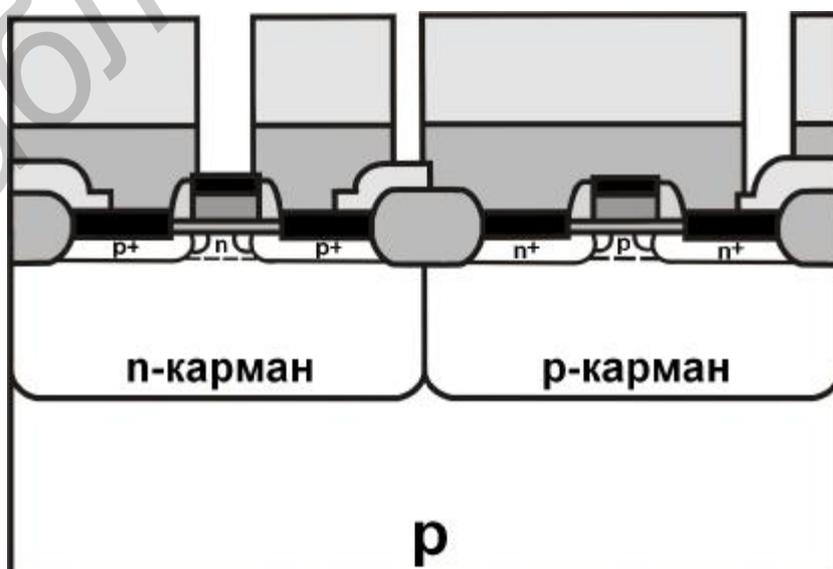


Рис. 1.35. Состояние структуры после операций 53–55

76. Стравливание фоторезиста.

Далее проводятся операции для сохранения планарности поверхности посредством осаждения слоев металлов.

77. Магнетронное или CVD-осаждение тонкого (несколько десятков нанометров) слоя Ti или двойного слоя Ti/TiN для обеспечения хорошей адгезии на пленку SiO₂ и на другие материалы структуры. TiN служит в качестве эффективного барьерного слоя между будущими верхними слоями металла и нижними локальными слоями, предназначенными для соединения с активными приборами.

78. Осаждение слоя вольфрама в CVD-процессе (рис. 1.36).

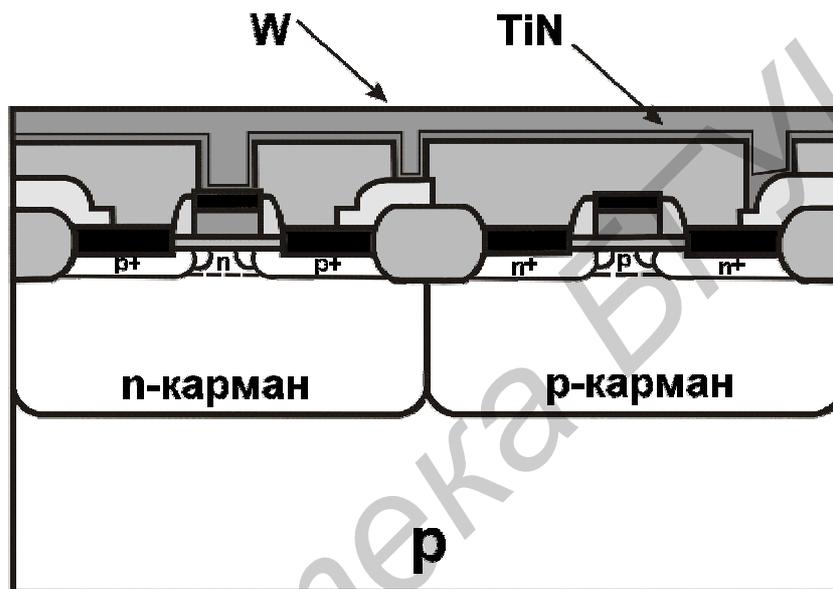


Рис. 1.36. Осаждение тонкого барьерно-адгезионного слоя

79. Повторная планаризация поверхности в процессе химико-механического полирования. В результате проведения этой операции удаляются слои W и TiN во всех областях, кроме тех, где будут образованы контактные отверстия, и, кроме того, планаризируется поверхность, на которую будет осажден первый уровень металла (рис. 1.37).

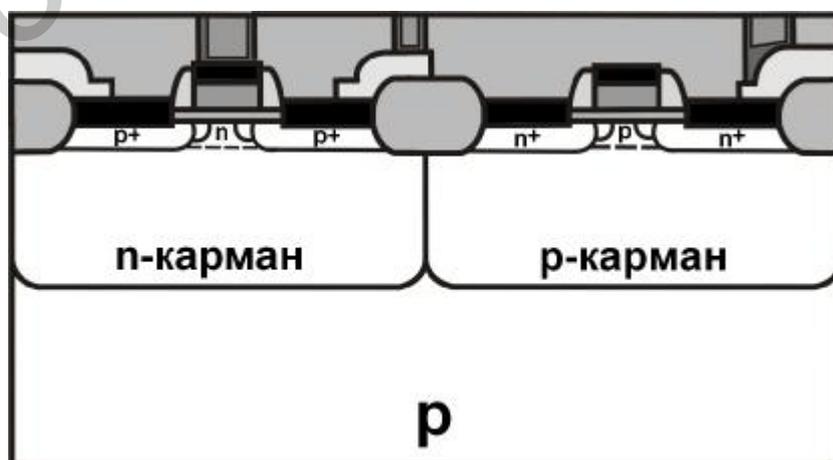


Рис. 1.37. CMP-планаризация поверхности

Итак, отверстия под контакты вытравлены, заполнены металлом и поверхность полностью планаризована.

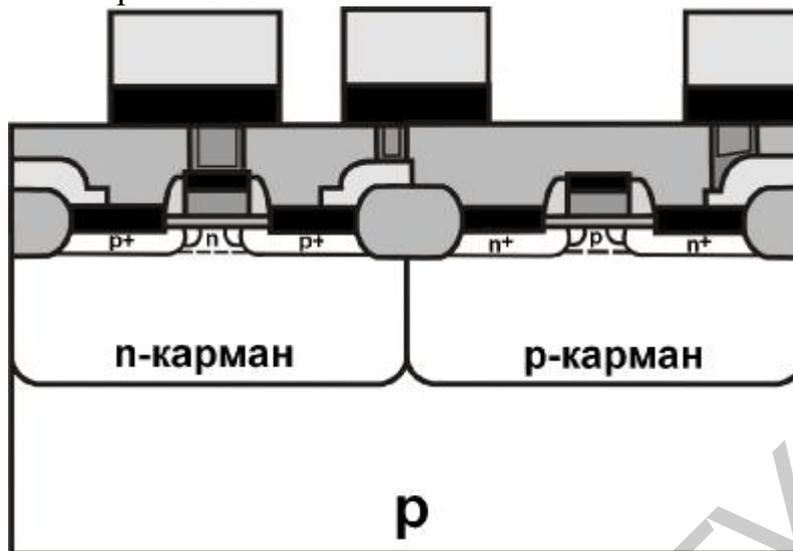


Рис. 1.38. Состояние формируемой структуры после операций 60–62

80. Слой первого уровня металла (Al с небольшим содержанием Si и Cu) осаждается методом магнетронного распыления (рис. 1.38). Добавка кремния (до величины, равной пределу растворимости Si в Al) служит для того, чтобы кремний из подложки не адсорбировался алюминием – в противном случае возникают проблемы, связанные с величиной контактного сопротивления и надежностью контактов. Добавка меди служит для предотвращения явления электромиграции, возникающего в процессе длительной работы приборов при повышенных температурах и высоких плотностях тока, что приводит к образованию полостей в алюминиевых проводниках вследствие повышенной диффузии атомов алюминия.

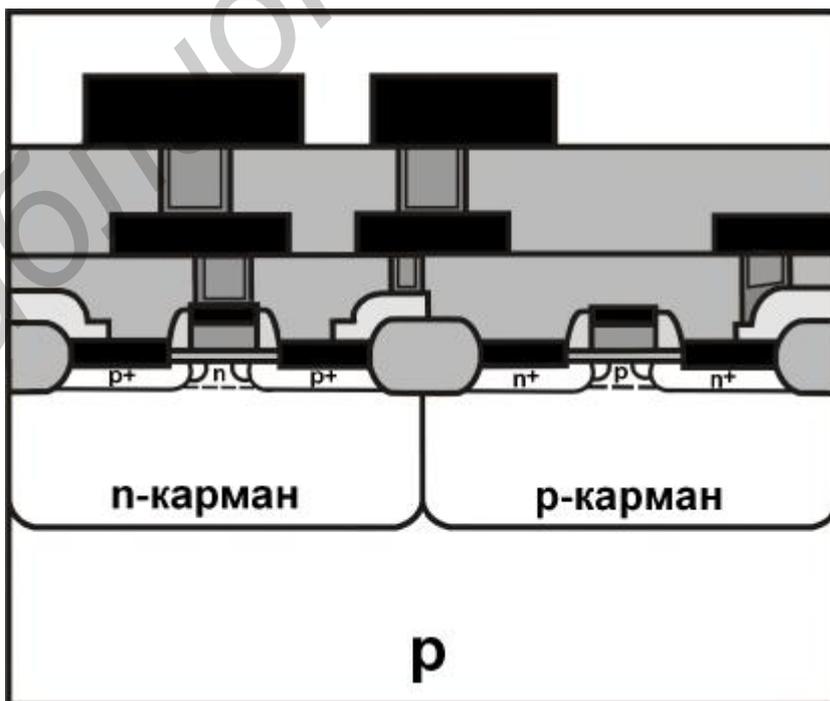


Рис. 1.39. Состояние структуры после формирования второго уровня металлизации

81. Нанесение слоя фоторезиста.

82. Фотолитография (маска №13).

Далее повторяются операции 70–82 (рис. 1.34–1.39) для создания изоляции между первым и вторым уровнями металла и нанесения слоя второго уровня металла.

Маска №14 используется для определения положения отверстий между первым и вторым уровнями металла. Маска №15 используется для задания областей, где формируется второй уровень металла. Последняя операция – осаждение пассивирующего слоя Si_3N_4 в PECVD-процессе. Маска №16 используется для вскрытия отверстий (см. рис. 1.39).

Заключительная операция – термическая обработка при относительно низкой температуре (400–450 °С) в течение ~30 мин в газовой атмосфере (10% H_2 в азоте) для оплавления металлических контактов и снятия электрических зарядов, образовавшихся на границе раздела Si/SiO_2 .

Большинство описанных технологических операций успешно моделируются с использованием современных средств компьютерного проектирования технологии (Technology Computer Aided Design, TCAD), позволяющих разработчику технологии отрабатывать технологические режимы с целью их оптимизации для достижения требуемых физико-топологических параметров и электрических характеристик приборов. Включение методов и средств проектирования и моделирования в сферу автоматизированного производства ИМС позволяет эффективно и наиболее оптимальным способом «вмешиваться» в технологический процесс с целью исправления «ошибки» на определенном этапе технологического маршрута, выявленной на его выходе или на промежуточном этапе. Компьютерное проектирование технологии изготовления приборов и ИМС в целом позволяет на три порядка снизить финансовые затраты, требующиеся при лабораторных отработках технологии.

Результаты компьютерного моделирования (другими словами, компьютерного эксперимента) могут опережать развитие «know-how» технологий, т.е. в принципе можно построить модель технологической операции, еще не реализованной на практике (такую ситуацию можно представить, например, при моделировании технологии изготовления ИМС на сверхрешетках). С другой стороны, решение задачи моделирования технологических операций формирования структурных элементов интегральных микросхем позволяет осуществлять целенаправленный поиск физических методов и технологических параметров для реализации на практике той или иной технологии, т.е. результаты компьютерного моделирования оказываются полезными при разработке новых и улучшении традиционных технологических операций.

Задача моделирования технологии изготовления ИМС состоит в построении адекватных физических моделей базовых операций, в выборе наиболее оптимальных с точки зрения быстродействия и точности расчетов численных методов интегрирования уравнений, описывающих физические процессы, сопровождающие технологические операции, и в согласовании отдельных моделей базовых операций в процессе построения сквозного технологического маршрута с целью полу-

чения на выходе профилей распределения концентраций электрически активных примесей в структурных областях изготавливаемой схемы и ее характерных геометрических размеров.

1.2. Модели диффузионного перераспределения примесей в кремнии

Точный контроль профилей распределения активных легирующих примесей является одной из главных задач проектирования технологического маршрута формирования приборной структуры. Информация о перераспределении примесей при отжиге является определяющей при оценке электрических характеристик прибора.

Модели диффузии описывают перераспределение примесей и дефектов кристаллической решетки при термической обработке, обусловленное градиентом концентрации и внутренними электрическими полями.

Диффузионные процессы могут рассматриваться как в макроскопическом (континуальном), так и в микроскопическом (на уровне дискретной кристаллической решетки) приближениях. В макроскопическом приближении решается уравнение диффузии при определенных граничных условиях. При решении задачи диффузии на атомном уровне учитывается взаимодействие диффундирующих атомов примесей как с атомами, так и с дефектами кристаллической решетки. Очевидно, что второе приближение основано на более глубоких физических представлениях, поэтому оно используется во всех современных программных средствах моделирования технологии и прибора.

1.2.1. Диффузия в макроскопическом (континуальном) приближении

Общая формулировка фундаментального закона сохранения в интегро-дифференциальной форме, лежащая в основе диффузионного перераспределения примесей, имеет следующий вид:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} C dV = \int_{V(t)} (g - l) dV - \oint_{S(t)} \vec{F} \vec{n} dS, \quad (1.2)$$

где C – концентрация примесей; $S(t)$ – замкнутая поверхность, ограничивающая объем $V(t)$, в котором рассматривается диффузионный процесс; \vec{F} – вектор потока примесей; \vec{n} – единичный вектор, нормальный к поверхности $S(t)$; g – скорость генерации примесей; l – скорость потерь примесей; t – время.

Левая часть уравнения (1.2) представляет собой скорость изменения концентрации примеси в некотором объеме $V(t)$ и определяется как скорость генерации примеси в этом объеме минус уход примеси через поверхность $S(t)$, ограничивающую объем $V(t)$. Использование уравнения непрерывности в интегральной форме упрощает описание изменения объема, происходящего при окислении кремния и в процессе эпитаксиального наращивания. Члены в уравнении (1.2), описывающие процессы генерации и потерь, включены для учета эволюции со-

стояний примесных атомов в кристаллической решетке кремния, как, например, в случае мышьяка, когда атомы могут существовать как в междоузельном, так и кластерном состояниях.

Исторически макроскопическое приближение находило достаточно широкое использование при инженерно-физическом рассмотрении задачи диффузионного перераспределения примесей вследствие возможности получения во многих простых случаях аналитического решения.

Описание диффузионных процессов в макроскопическом приближении основано на законах (уравнениях) Фика. Первый закон Фика связывает диффузию примесных атомов с их концентрационным градиентом. В основе этого закона лежит постулат, устанавливающий, что диффузионный поток F пропорционален градиенту концентрации. Для одномерного случая имеем

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (1.3)$$

где D – коэффициент диффузии примеси, $\frac{\partial C}{\partial x}$ – градиент концентрации.

Следует отметить, что первый закон Фика подобен закону Фурье, устанавливающему связь между тепловым потоком и градиентом температуры, а также закону Ома, устанавливающему связь между током и градиентом электрического потенциала.

Более удобная для практического использования форма уравнения (1.3) устанавливается вторым законом Фика, который связывает концентрацию примесей с временным и пространственным аргументами. Этот закон описывает потоки, входящие и выходящие из элемента объема (рис. 1.40), и представляет собой упрощенную модификацию закона сохранения (1.2): изменение со временем концентрации в поперечном сечении единичной площади равно разности между входящими и выходящими потоками:

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{\Delta F}{\Delta x} = \frac{F_{in} - F_{out}}{\Delta x}. \quad (1.4)$$

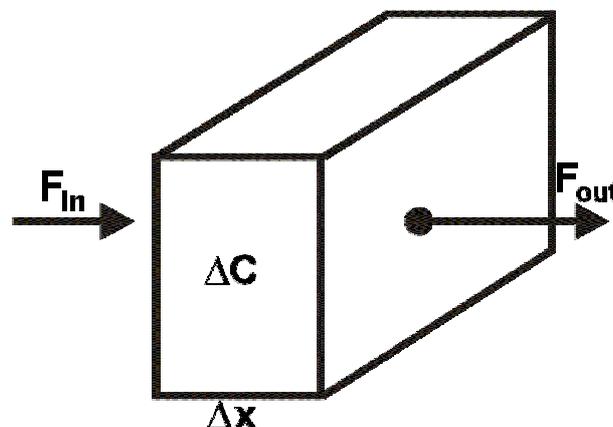


Рис. 1.40. Входящие F_{in} и выходящие F_{out} потоки примеси в элементарном объеме, используемые в выражении (1.4)

Учитывая (1.3), уравнение (1.4) преобразуется в следующее соотношение:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (1.5)$$

Если коэффициент диффузии – постоянная величина (например при данной температуре), то его можно вывести из знака дифференциала, и выражение (1.5) приобретает более привычную форму:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (1.6)$$

Для трехмерного пространства выражение (1.5) имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla F = \nabla(D \nabla C).$$

Аналитические решения диффузионного уравнения. Приведенные ниже аналитические решения уравнения (1.6) используются в основном для оценок в инженерно-физическом приближении в отличие от точного физического моделирования профилей распределения примесей, формирующихся в процессе диффузионного перераспределения.

Простейшее решение уравнения (1.6) для стационарного случая:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0. \quad (1.7)$$

Двойное интегрирование (1.7) дает

$$C = a + bx. \quad (1.8)$$

Это решение описывает линейное изменение концентрации по глубине x . Такое решение диффузионного уравнения используется, например, при анализе диффузии атомов кислорода в окисле при выводе выражения для скорости окисления кремния.

При моделировании кремниевых технологических процессов в инженерно-физическом приближении используются и другие варианты решения линейного диффузионного уравнения, отличающиеся граничными и различными внешними условиями.

Решение в форме распределения Гаусса. Рассмотрим диффузионное перераспределение примеси в слаболегированной (например, в результате ионной им-

плантации) области, начальное распределение которой выражается в виде d -функции (рис. 1.41).

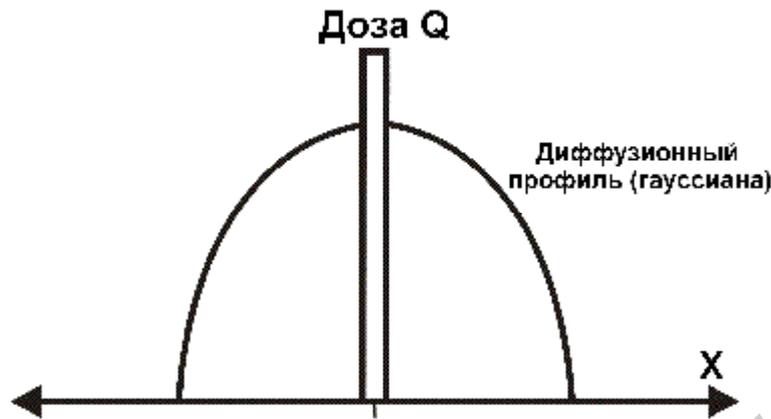


Рис. 1.41. Диффузионное перераспределение (гауссова форма) примеси из исходного распределения в виде d -функции

Такая задача решается, например, при коротком низкотемпературном эпитаксиальном росте монокристаллического кремния на кремниевой подложке с одновременным легированием из газовой фазы. Другая подобная задача решается при моделировании диффузионного перераспределения ионно-имплантированной примеси, исходный профиль которой также можно аппроксимировать d -функцией. В этом случае имеем следующие граничные условия:

$$\begin{aligned} C &\rightarrow 0, \text{ если } t \rightarrow 0, \text{ для } x > 0; \\ C &\rightarrow \infty, \text{ если } t \rightarrow 0, \text{ для } x = 0; \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(x, t) dx = Q, \quad (1.10)$$

где Q – полное количество примесей, определяемое дозой имплантации.

Решение уравнения (1.6), удовлетворяющее указанным граничным условиям, имеет следующий вид:

$$C(x, t) = \frac{Q}{2\sqrt{pDt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) = C(0, t) \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right). \quad (1.11)$$

Уравнение (1.11) описывает эволюцию распределения примеси, профиль которой в исходном состоянии был гауссовым, и эту же форму он сохраняет в процессе диффузии. Очевидно, что такой профиль симметричен относительно начала координат, т.е. он зеркально отображается относительно плоскости $x = 0$.

Отметим несколько следствий полученного решения (1.11). Во-первых, максимальное значение концентрации изменяется по закону $\frac{1}{\sqrt{t}}$. Во-вторых, кон-

центрация примесей уменьшается в e раз на глубине $\frac{2}{\sqrt{Dt}}$, называемой диффузионной длиной. Зависимость относительной концентрации от времени для по-

лученного профиля в линейном и логарифмическом масштабах показана на рис. 1.42.

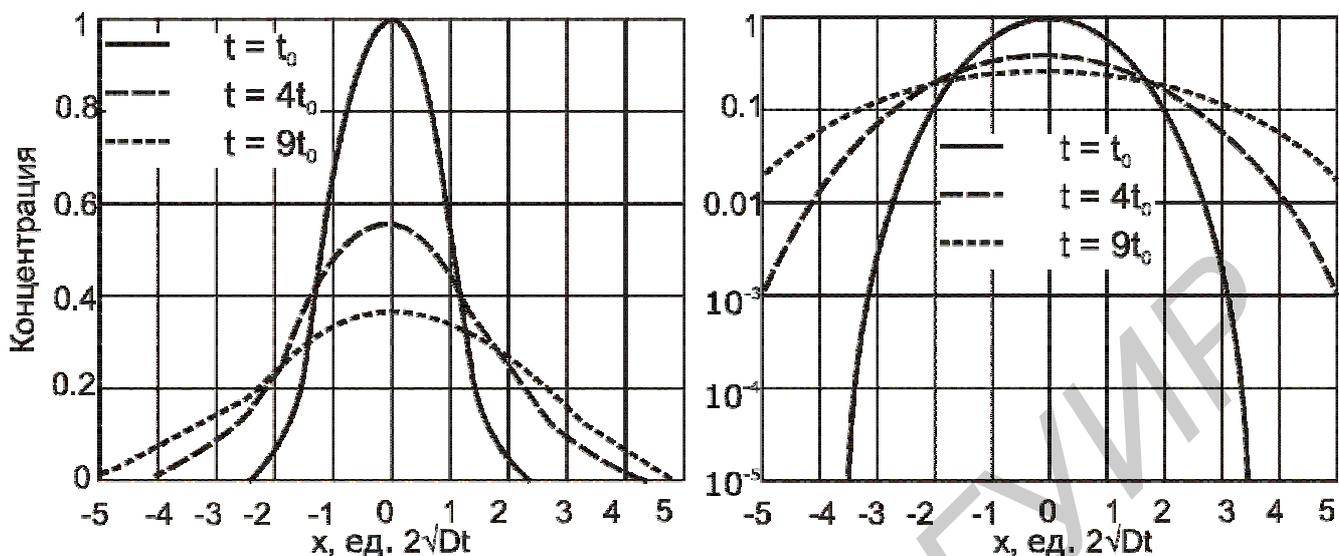


Рис. 1.42. Изменение со временем исходного гауссова распределения примеси

Решение в форме функции ошибок. Такое решение диффузионного уравнения может быть выведено для задачи перераспределения примеси из неограниченного источника в процессе высокотемпературной обработки (например при проведении операции эпитаксиального наращивания с одновременным легированием). В этом случае граничные и начальные условия для уравнения (1.6) имеют вид:

$$\begin{aligned} C &= 0, \text{ если } t = 0, \text{ для } x > 0, \\ C &= C, \text{ если } t = 0, \text{ для } x \leq 0. \end{aligned} \quad (1.12)$$

В таком случае решение уравнения (1.6) можно получить, разбив всю исходную область на n слоев толщиной Δx , каждый из которых содержит $C\Delta x$ примесей. Тогда общее решение будет представлять собой линейную суперпозицию решений (1.11) для каждого тонкого i -го слоя:

$$C(x,t) = \frac{C}{2\sqrt{pDt}} \sum_{i=1}^n \Delta x_i \exp - \frac{(x-x_i)^2}{4Dt}. \quad (1.13)$$

При $Dx \rightarrow 0$ сумма переходит в интеграл:

$$C(x,t) = \frac{C}{2\sqrt{pDt}} \int_0^\infty \exp - \frac{(x-a)^2}{4Dt} da. \quad (1.14)$$

Замена переменной $\frac{x-a}{2\sqrt{Dt}} = h$ дает

$$C(x,t) = \frac{C}{\sqrt{p}} \int_{-\infty}^{x/2\sqrt{Dt}} \exp(-h^2) dh. \quad (1.15)$$

Интеграл в (1.15) представляет собой табулированную функцию ошибок:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{p}} \int_0^z \exp(-h^2) dh. \quad (1.16)$$

Таким образом, решение (1.15) можно представить в виде

$$C(x,t) = \frac{C}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]. \quad (1.17)$$

Выражение в квадратных скобках представляет собой так называемую дополнительную функцию ошибок $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$, так что

$$C(x,t) = \frac{C}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]. \quad (1.18)$$

Временная эволюция профиля, описываемого уравнением (1.18), представлена на рис. 1.43.

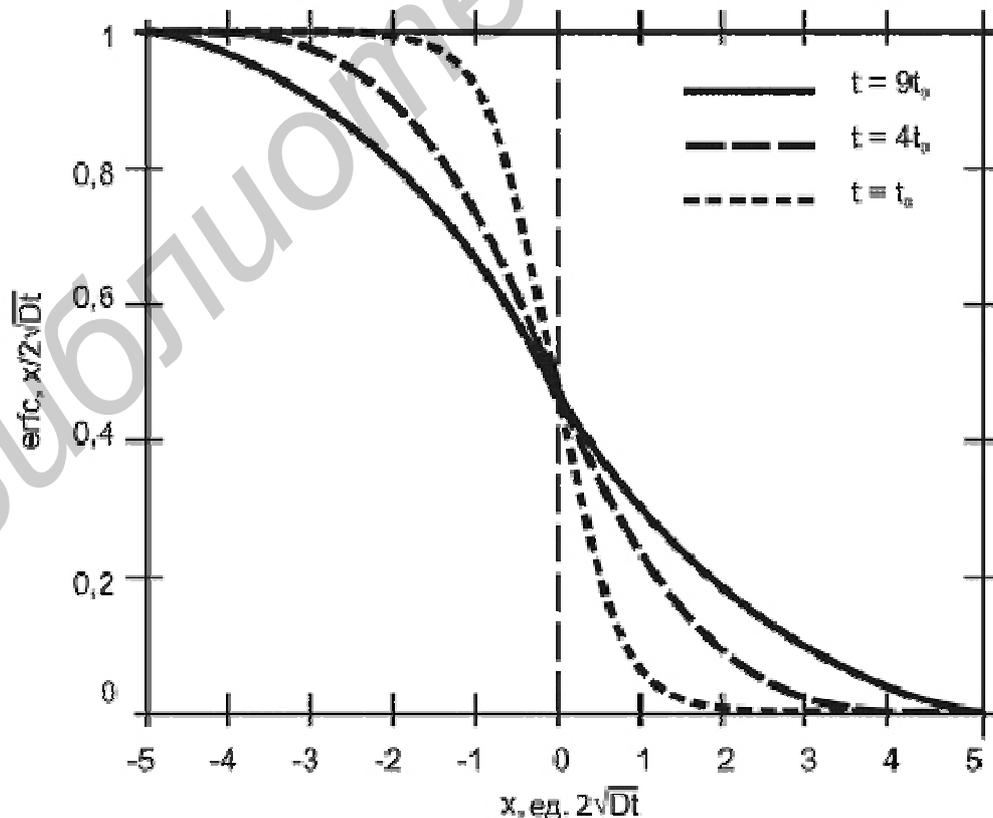


Рис. 1.43. Диффузионное перераспределение примеси из неограниченного источника

Горизонтальная ось на графике выражена в единицах диффузионной длины $2\sqrt{Dt_0}$, характеризующей глубину, на которую диффундирует примесь в условиях термической обработки.

Решение нелинейного закона Фика. При рассмотрении линейного диффузионного уравнения предполагается, что коэффициент диффузии примесей D не зависит ни от каких параметров, кроме температуры T . Температурная зависимость коэффициента диффузии определяется следующим выражением:

$$D = D^0 \exp\left(\frac{-E_A}{kT}\right), \quad (1.19)$$

где k – постоянная Больцмана, E_A – энергия активации, D_0 – так называемый предэкспоненциальный член.

Таблица 1.1

Параметры собственных коэффициентов диффузии примесей в монокристаллическом кремнии

Примесь	Si	B	In	As	Sb	P	Единица измерения
D_0	560	1,0	1,2	9,17	4,58	4,70	$\text{см}^2\text{с}^{-1}$
E_A	4,76	3,5	3,5	3,99	3,88	3,68	эВ

Значения E_A и D_0 для типичных в кремниевой технологии примесей приведены в табл. 1.1 и определяют собственный коэффициент диффузии в условиях, когда концентрация примеси гораздо меньше собственной концентрации соответствующих носителей заряда в кремнии n_i (например при 300 К $n_i = 1,45 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$) [27]. На рис. 1.44 приведены температурные зависимости собственных коэффициентов диффузии примесей в монокристаллическом кремнии.

Если концентрация примесей превышает собственную концентрацию носителей, коэффициенты диффузии примесей отличаются от собственных, что объясняется так называемыми эффектами высокого уровня легирования.

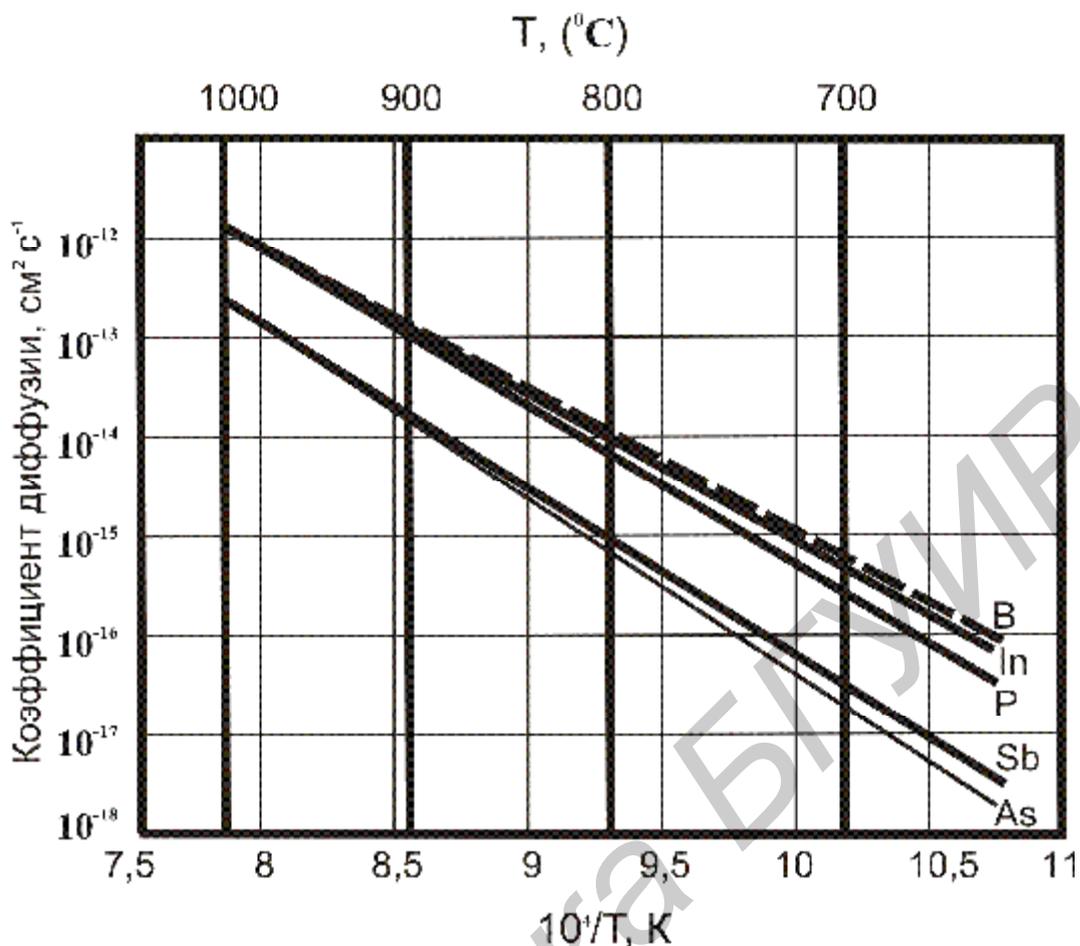


Рис. 1.44. Температурные зависимости коэффициентов диффузии типичных примесей

Модификация закона Фика с учетом электрического поля. В условиях высокого уровня легирования в уравнение Фика (1.3) должно быть введено дополнительное слагаемое для учета изменения потока диффундирующих примесей во внешнем электрическом поле, обусловленном влиянием других ионизированных примесей. В общем случае поток диффундирующих примесей во внешнем поле можно записать в следующем виде:

$$F_{total} = F + F' = -D \frac{\partial C}{\partial x} + Cv. \quad (1.20)$$

Здесь F' – дополнительный поток и v – скорость диффундирующих частиц во внешнем поле.

Если поток F' и, следовательно, скорость v не зависят от пространственной координаты x , то зависимость концентрации диффундирующих примесей от времени будет выражаться в модифицированной форме второго закона Фика:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - n \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (1.21)$$

Учитывая выражение для скорости диффундирующих частиц в электрическом поле e ,

$$v = \mu e,$$

принимая во внимание, что e представляет собой градиент потенциала $\partial\psi/\partial x$, где потенциал

$$y = -\frac{kT}{q} \ln \frac{n}{n_i},$$

и используя соотношение Эйнштейна между подвижностью μ и собственным коэффициентом диффузии примеси D

$$m = \frac{q}{kT} D,$$

получаем выражение для диффузионного потока во внутреннем электрическом поле:

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} - DC \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{n}{n_i}. \quad (1.22)$$

Возможны два способа решения уравнения (1.22). В первом, учитывая очевидное соотношение $\frac{\partial}{\partial x} \ln x = \frac{1}{x}$, получаем

$$F = -D \left(\frac{\partial C}{\partial x} - C \frac{\partial}{\partial x} \ln \left(C \frac{n_i}{n} \right) \right). \quad (1.23)$$

Выражение (1.23) обычно используется при оценке диффузионного перераспределения примесей в условиях высокого уровня легирования, когда в моделируемой области содержатся несколько примесей разного типа проводимости.

Другой способ состоит в использовании обычного условия зарядовой электронейтральности и статистики Больцмана при совместном описании ансамбля носителей заряда и заряженных примесей:

$$\begin{aligned} N_D^+ + p &= N_A^- + n, \\ np &= n_i^2, \end{aligned} \quad (1.24)$$

где N_D^+ и N_A^- – концентрации донорных и акцепторных примесей соответственно, а p и n – концентрации дырок и электронов.

Если все примеси электрически активны, то поток F можно записать в следующем виде:

$$F = -hD \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (1.25)$$

где C – «чистая» концентрация примесей, равная абсолютному значению разности концентраций донорных и акцепторных примесей, а коэффициент h :

$$h = 1 + \frac{C}{\sqrt{C^2 + 4n_i^2}}. \quad (1.26)$$

Из анализа выражения (1.26) следует, что максимальное значение h может быть равным 2. Это означает, что внутреннее электрическое поле, проявляющееся в условиях высокого уровня легирования, может привести максимум к двукратному увеличению значения собственного коэффициента диффузии примесей. Однако этот вывод, как показывают результаты экспериментов, неприменим к диффузии примеси с низкой концентрацией, находящейся в поле примеси противоположного типа проводимости с высокой концентрацией. Например, n -примесь (мышьяк) с высокой концентрацией, являющаяся источником внутреннего электрического поля для примеси p -типа (бор) с низкой концентрацией, повышает коэффициент диффузии бора гораздо значительно, чем в h раз, что проявляется в более существенном увеличении глубины залегания p - n -перехода (рис. 1.45).

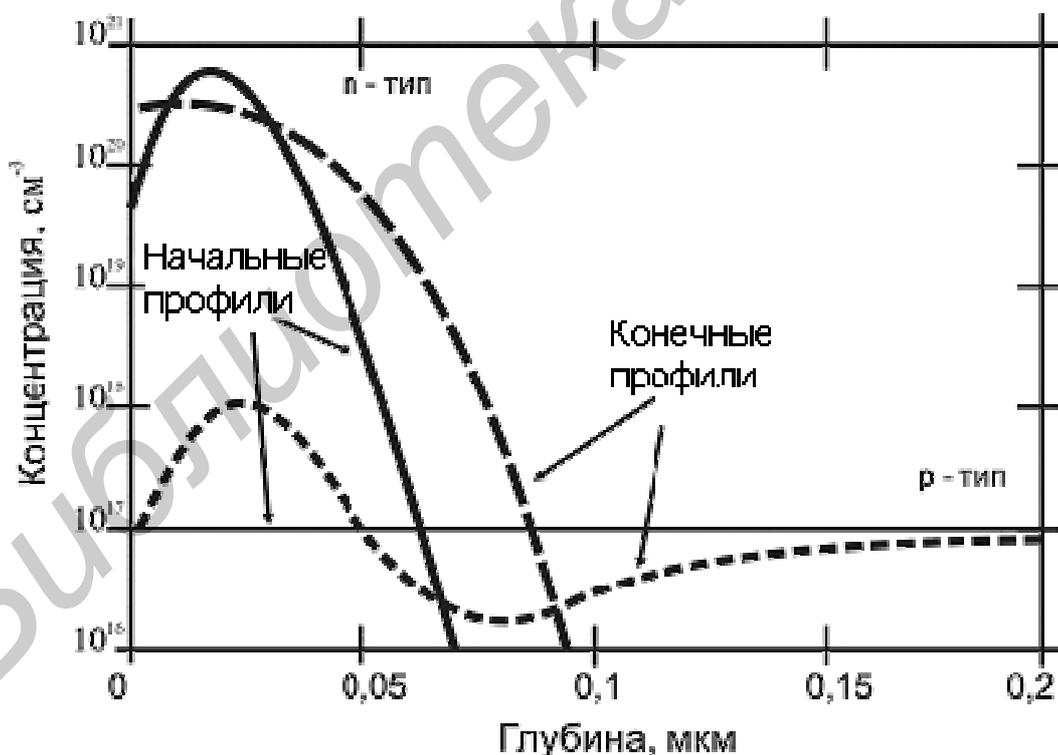


Рис. 1.45. Результат моделирования влияния электрического поля, создаваемого примесью с высокой концентрацией, на коэффициент диффузии низкоконцентрационной примеси противоположного типа проводимости

Модификация закона Фика с учетом концентрационно-зависимой диффузии. Как следует из первого закона Фика, поток диффундирующей примеси про-

порционален градиенту ее концентрации. Экспериментальные данные показывают, что интенсификация диффузии примеси в высококонцентрационных областях обусловлена не только влиянием внутреннего электрического поля, создаваемого в областях с повышенной концентрацией примесей. Эти области характеризуются повышенной плотностью точечных дефектов кристаллической решетки (междоузлий и вакансий), которые принимают активное участие в диффузионной миграции примесей. Данные, представленные на рис. 1.46, иллюстрируют этот эффект диффузии в высококонцентрационных областях.

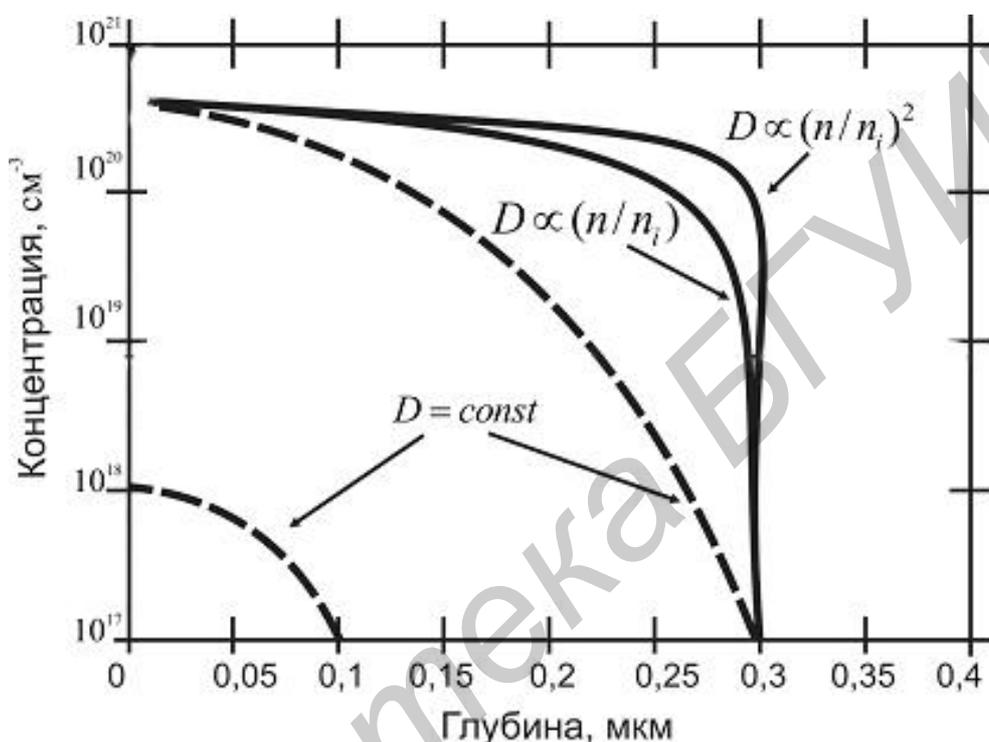


Рис.1.46. Более интенсивный диффузионный процесс перераспределения высококонцентрационной примеси

1.2.2. Моделирование диффузии примесей с учетом дефектов кристаллической решетки в микроскопическом приближении (атомарный уровень)

Современные модели диффузии примесей в кремнии с участием точечных дефектов подробно изложены в обзоре [28]. В программе SSUPREM 4 диффузионные процессы описываются тремя основными моделями:

- стандартной диффузионной моделью;
- двухмерной диффузионной моделью;
- моделью связанных пар «атом примеси–точечный дефект».

Все три модели основаны на концепции парной диффузии, согласно которой атом примеси диффундирует только в совокупности с точечным дефектом кристаллической решетки (междоузельным атомом кремния или вакансией). Если между атомом примеси и дефектом существует постоянная связь, то они могут перемещаться только как единое целое (как пара). Точечный дефект, с другой стороны, может диффундировать как свободно, так и как компонент пары «при-

месный атом–дефект», так что коэффициент диффузии свободного точечного дефекта может значительно отличаться от коэффициента диффузии точечного дефекта, связанного в паре.

Стандартная диффузионная модель. В этой модели не учитывается участие дефектов в диффузии примесей; она представляет собой частный случай диффузионной модели дефектно-примесных пар. При этом полагается, что ансамбль собственных точечных дефектов кристаллической решетки кремния в моделируемой системе находится в термодинамическом равновесии, поэтому при рассмотрении диффузионных процессов они не учитываются в явном виде. В связи с этим преимущество использования стандартной диффузионной модели состоит в быстром выполнении расчетов по сравнению с моделями более высокого уровня. Очевидно, что стандартная модель не выполняется в том случае, когда совокупность точечных дефектов не находится в термодинамическом равновесии. Такая ситуация возникает, например, при рассмотрении диффузии, усиленной окислением (Oxidation Enhanced Diffusion, OED), а также при моделировании диффузии в условиях высокого уровня радиационных повреждений, вызванных имплантацией.

Двухмерная диффузионная модель. В этой модели совокупность точечных дефектов учитывается в явном виде. Важной особенностью двухмерной модели является учет эволюции ансамбля точечных дефектов во времени. В условиях пересыщения точечными дефектами увеличение коэффициента диффузии примесей учитывается посредством введения масштабного множителя, который равен единице в состоянии равновесной концентрации точечных дефектов. Следовательно, при равновесной концентрации точечных дефектов двухмерная модель сводится к стандартной модели. Диффузия примесей при использовании этой модели в существенной степени определяется диффузией точечных дефектов, тогда как диффузия точечных дефектов, с другой стороны, считается не зависящей от диффузии примесей. С физической точки зрения это соответствует состоянию «примесь–точечный дефект» с нулевой энергией связи.

Модель диффузии связанных пар «примесный атом–точечный дефект». Эта модель идентична двухмерной модели диффузии, за исключением того, что в ней диффузия дефектов определяется диффузией примесей посредством добавления к основному потоку дефектов потока связанных пар «примесь–точечный дефект». Таким образом, в этой модели учитываются два потока – поток примесей и поток дефектов. Однако с физической точки зрения эта модель обладает недостатком, заключающимся в том, что при ее использовании затруднительно строго учесть доли дефектов и примесей, связанных и не связанных в пары. Таким образом, эта модель не может воспроизвести эффект насыщения коэффициента диффузии примеси, который наблюдается при очень высокой концентрации примесей, когда все дефекты связаны в пары. Другими словами, эта модель основана на предположении, что концентрация связанных пар гораздо ниже концентраций как примесей, так и вакансий.

Во всех трех моделях используются следующие предположения:

- выполняется статистика Больцмана и отсутствуют внешние источники носителей заряда, поэтому справедливо использование стандартного выражения для

потенциала [29]:

$$\frac{q}{kT} \nabla \psi = \ln \left(\frac{n}{n_i} \right). \quad (1.27)$$

Если это предположение не выполняется, то необходимо решать уравнение Пуассона для расчета потенциала:

$$\nabla(e \nabla \psi) = -r, \quad (1.28)$$

где ϵ – диэлектрическая постоянная; ψ – потенциал; r – плотность заряда;

- электрические процессы происходят гораздо быстрее, чем остальные процессы (адиабатическое приближение);
- взаимодействие примесей и дефектов в парах всегда носит равновесный характер;
- подвижные примеси являются электрически активными.

Наибольшей физической полнотой обладают модели диффузии примесей, используемые в программе SSUPREM4.

Для каждой рассматриваемой диффундирующей частицы (примеси или точечного дефекта) математическое описание диффузионной модели включает:

- уравнение непрерывности;
- один или более членов, описывающих потоки диффундирующих частиц;
- граничные условия (в том числе условия на границах раздела фаз).

Поскольку примеси могут диффундировать только в составе пары «примесь–точечный дефект», уравнение непрерывности для примеси представляет собой уравнение непрерывности для дефектно-примесных пар. В табл. 1.2 приведены стандартные обозначения для диффундирующих частиц. Через x обозначается нейтральное зарядовое состояние частицы.

Таблица 1.2

Стандарты обозначений для диффундирующих частиц

Физическая единица	Общий символ	Конкретные символы
Примесь	A	B, P, As, Sb, \dots
Точечный дефект (междоузлие, вакансия)	X	I, V
Зарядовое состояние	c	$x, -, =, +, ++$

1.2.3. Обобщенные уравнения для описания диффузии

Уравнение непрерывности в дифференциальной форме в отличие от интегральной записи (1.2) для диффузии частиц сорта p (примесей) в объеме представляется в обобщенном виде уравнения Фика второго порядка [30]:

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} = \nabla(-J_p) + S, \quad (1.29)$$

где C_p – полная концентрация частиц (примесей) сорта p , а свободный член S в правой части уравнения учитывает все источники и стоки.

Уравнение непрерывности выражает закон сохранения количества частиц в данном объеме, а именно: скорость изменения количества частиц в единице объема равна скорости ухода частиц из объема вследствие диффузии плюс скорость генерации новых частиц или их аннигиляции. Поток частиц J_p представляется в виде следующего выражения:

$$J_p = -D_p(C_p)\nabla C_{p+} + C_{p+}sE, \quad (1.30)$$

где C_{p+} – доля подвижных (из общего количества C_p), а также электрически активных частиц, s – их подвижность, E – напряженность локального электрического поля. Из уравнения (1.30) следует, что в рассматриваемой диффузионной задаче имеются два основных вклада в поток частиц:

- вклад, пропорциональный градиенту концентрации подвижных частиц (коэффициент пропорциональности D_p , как обычно, – коэффициент диффузии частиц сорта p);
- вклад дрейфового потока, пропорциональный величине локального электрического поля.

Если в рассматриваемой системе имеется несколько типов электрически заряженных частиц, то C_p устанавливает связь между ними, поскольку все заряженные частицы вносят вклад в общий поток частиц и в то же время зависят от локального электрического поля. Следует также отметить, что уравнение (1.30) нелинейно относительно C_p , поскольку как коэффициент диффузии D_p , так и электрическое поле E зависят от концентрации всех частиц.

В условиях термодинамического равновесия подвижность и коэффициент диффузии примеси связаны между собой посредством соотношения Эйнштейна $D = \frac{kT}{q}s$. Подставляя s в (1.30), полагая, что заряд частицы равен целому числу

Z_p , умноженному на элементарный заряд e , и используя соотношение между напряженностью электрического поля E и потенциалом $\Psi E = -\Delta\psi$, получаем выражение для диффузионного потока частиц в другой, более удобной для анализа, форме:

$$J_p = -D_p(C) \left(\nabla C_{p+} + Z_p C_{p+} \frac{e}{kT} \nabla \psi \right). \quad (1.31)$$

Граничные условия можно выразить в следующем виде:

$$\alpha C_p + \beta \partial_n C_p = R, \quad (1.32)$$

где α и β – действительные числа, а $\partial_n C_p$ – поток через границу моделируемой области. Коэффициент R учитывает все источники на границе моделируемой

области.

Физические граничные условия включают:

- область моделирования («поверхность»);
- границы раздела, где рассматриваются частицы, значимые для данной области материалов (например междуузлия на границе раздела кремний/двуокись кремния).

Условия на границах раздела используются для частиц, которые существуют в обеих областях материалов. Для каждой такой поверхности раздела необходимо определить:

- условие «скачка» концентрации;
- условие «скачка» потока.

Условие «скачка» концентрации учитывает нарушение непрерывности распределения концентрации частиц на границе раздела и объясняется как явлением сегрегации примесей, так и разностью в величинах твердой растворимости частиц в разных материалах.

Условие «скачка» потока предполагает наличие на границе раздела источников или стоков частиц, таких как рекомбинация, инжекция частиц или их скопление на движущейся границе раздела.

Для всех частиц используются нулевые граничные условия для боковых сторон и для верхней части моделируемой области.

1.2.4. Модель диффузии Ферми

В модели диффузии Ферми поведение каждой частицы описывается уравнением непрерывности в следующей форме:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \nabla \left[(D_{AV} + D_{AI})C_A + \nabla \ln \left(C_A + \left(\frac{n}{n_i} \right)^Z \right) \right], \quad (1.33)$$

где коэффициент $\frac{n}{n_i}$ под логарифмом учитывает эффект поля. Собственная концентрация n_i рассчитывается следующим образом:

$$n_i = n_{i_0} \exp \left(- \frac{n_{i_E}}{kT} \right) \Gamma^p. \quad (1.34)$$

Показатель степени Z в (1.33) учитывает направление вектора электрического поля, действующего на диффундирующую частицу, и равен +1 для доноров и -1 для акцепторов. T^p – параметр, учитывающий температуру.

Величины D_{AV} и D_{AI} представляют собой вклады в коэффициент диффузии примесей от пар «примесь–вакансия» и «примесь–междузлия» в различных зарядовых состояниях [28]. Эти члены зависят как от положения уровня Ферми

(именно поэтому описываемая модель диффузии примесей называется моделью Ферми), так и от температуры и выражаются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} D_{AV}\left(T, \frac{n}{n_i}\right) &= D_{AV}^X + D_{AV}^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^1 + D_{AV}^{\bar{}} \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 + D_{AV}^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + D_{AV}^{++} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}, \\ D_{AI}\left(T, \frac{n}{n_i}\right) &= D_{AI}^X + D_{AI}^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^1 + D_{AI}^{\bar{}} \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 + D_{AI}^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + D_{AI}^{++} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}, \end{aligned} \right\} (1.35)$$

где температурная зависимость в неявном виде включена в собственный коэффициент диффузии пары «примесь–точечный дефект» D_{AX} , который определяется законом Аррениуса в виде

$$D_{AX}^C = D_{AX_0}^C \exp\left(-\frac{D_{AXE}^C}{kT}\right) \quad (1.36)$$

1.2.5. Модель сегрегации примесей

Под явлением сегрегации подразумевается перенос частиц через поверхность раздела двух сред с различными значениями предела твердой растворимости.

В многослойной структуре явление сегрегации примесей возникает вдоль поверхности раздела двух материалов: твердое тело/твердое тело или твердое тело/газ. Такая сегрегация описывается эмпирическими соотношениями, основанными на кинетической модели первого порядка для потока через границу раздела:

$$F_S = h_{12} \left(\frac{C_1}{M_{12}} - C_2 \right), \quad (1.37)$$

где C_1 и C_2 – концентрации частиц вблизи поверхности раздела сред 1 и 2 соответственно; h_{12} – скорость переноса частиц через границу раздела из среды 1 в среду 2 и M_{12} – коэффициент сегрегации, равный отношению пределов твердой растворимости примеси в средах 1 и 2, определяемый следующим соотношением:

$$M_{12} = \frac{\text{твердая растворимость примеси в материале}_1}{\text{твердая растворимость примеси в материале}_2}. \quad (1.38)$$

Последние два коэффициента в выражении (1.37) – температурно-независимые параметры, которые учитывают перенос частиц через поверхность раздела и отношение растворимостей примесей в каждой области материала.

Из уравнения (1.38) следует соотношение

$$M_{21} = \frac{1}{M_{12}}. \quad (1.39)$$

Путем несложных алгебраических преобразований из уравнений (1.37) и (1.39) получается универсальное соотношение для скорости переноса частиц из материала 1 в материал 2 через поверхность раздела:

$$h_{21} = M_{12}h_{12}. \quad (1.40)$$

1.2.6. Двухмерная модель диффузии

Двухмерная модель, основанная на стандартной модели диффузии, предназначена для точного расчета эволюции ансамбля неравновесных точечных дефектов. При этом необходимо решать три различных уравнения: одно для примесей и по одному для каждого типа точечных дефектов – вакансий и междоузлий.

Диффузия примесей. Уравнение непрерывности для примесей в двухмерной модели диффузии имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \sum_{X=I,V} \nabla \left[\left(\frac{C_X}{C_X^*} D_{AX} \left(C_A + \nabla \ln \left(C_A + \frac{C_X}{C_X^*} \left(\frac{n}{n_i} \right)^Z \right) \right) \right) \right], \quad (1.41)$$

где C_X – текущие концентрации точечных дефектов, а C_X^* – их равновесные концентрации.

Для учета зависимости коэффициента диффузии примесей от равновесной концентрации точечных дефектов коэффициенты диффузии пар «точечный дефект–примесь», полученные из уравнения (1.35), следует умножить на нормализованную концентрацию точечных дефектов [30]. Несмотря на феноменологический характер этой зависимости, она физически разумна и используется в большинстве моделей, учитывающих усиление диффузии примесей при окислении (Oxidation Enhanced Diffusion, OED), или в условиях переходных процессов (Transient Enhanced Diffusion, TED) [31].

Выражение под оператором градиента представляет собой коэффициент, определяемый внешними дефектами. Он важен при рассмотрении той области моделирования, где резко изменяется профиль концентрации точечных дефектов.

Концентрации равновесных точечных дефектов зависят от температуры и уровня Ферми и могут быть рассчитаны из следующих выражений:

$$\left. \begin{aligned} C_V^* &= C_V^{*i} \frac{k^x + k^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+1} + k^{--} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+2} + k^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + k^{++} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}}{k^x + k^- + k^{--} + k^+ + k^{++}}, \\ C_I^* &= C_I^{*i} \frac{k^x + k^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+1} + k^{--} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{+2} + k^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} + k^{++} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-2}}{k^x + k^- + k^{--} + k^+ + k^{++}}. \end{aligned} \right\} \quad (1.42)$$

Величины C_V^* и C_I^* представляют собой собственные равновесные концентрации точечных дефектов, а весовые факторы k^x , k^- , k^{--} , k^+ и k^{++} – подгоночные параметры модели, которые вводятся для учета распределения дефектов в различных зарядовых состояниях. Полагается, что все эти величины зависят от температуры и эта зависимость подчиняется закону Аррениуса:

$$k^x = k_0^x \exp\left(-\frac{k_E^x}{kT}\right), \quad (1.43)$$

где k^x и k_E^x – предэкспоненциальные коэффициенты и энергии активации.

Граничные условия и условия на границах раздела фаз идентичны тем, которые используются в стандартной модели диффузии.

Диффузия междуузлий. Профиль распределения междуузлий рассчитывается с использованием уравнения непрерывности в следующей форме:

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = \nabla(-J_I) - R + \frac{\partial C_{ET}}{\partial t} + R_{\langle 311 \rangle}, \quad (1.44)$$

где R – скорость рекомбинации в объеме, определяемая интенсивностью реакций между междуузлиями и вакансиями, выражается следующим образом:

$$R = K_r (C_I C_V - C_I^* C_V^*). \quad (1.45)$$

Здесь K_r – подгоночный параметр.

Выражение для потока междуузлий

$$-J_I = D_I C_I^* \nabla \left(\frac{C_I}{C_I^*} \right) \quad (1.46)$$

точно учитывает влияние электрического поля на заряженные междуузлия посредством градиента нормализованной концентрации междуузлий $\frac{C_I}{C_I^*}$. Здесь D_I –

коэффициент диффузии свободных междоузлий.

Член $\frac{\partial C_{ET}}{\partial t}$ в уравнении (1.44) описывает эмиссию и захват междоузлий ловушками. Модель взаимодействия примесей с ловушками была предложена в работе [32] для объяснения широкого диапазона изменений коэффициентов диффузии при различных экспериментальных условиях. Уравнение, описывающее эволюцию ансамбля ловушек в зависимости от времени, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_{ET}}{\partial t} = -K_T \left[C_{ET} C_I - \frac{e^*}{1 - e^*} C_I^* (C_T - C_{ET}) \right], \quad (1.47)$$

где K_T – скорость захвата междоузлий ловушками; C_T – полная концентрация ловушек; C_{ET} – концентрация ловушек в равновесном состоянии; C_I – концентрация междоузлий; C_I^* – равновесная концентрация междоузлий; e^* – отношение концентраций ловушек, находящихся в равновесном состоянии, к полной концентрации ловушек ($e^* \equiv C_{ET}/C_T$).

Уравнение для междоузлий I и ловушек T выводится из простой реакции:



или из уравнения:

$$\frac{\partial C_{ET}}{\partial t} = -K_T C_I C_{ET} + K_r (C_T - C_{ET}), \quad (1.49)$$

где K_r – скорость эмиссии из ловушек. В условиях термодинамического равновесия левая часть уравнения (1.47) равна нулю, что дает

$$K_T C_I C_{ET}^* = K_r (C_T - C_{ET}^*) \Leftrightarrow K_r = K_T \frac{C_I^* (C_{ET}^*/C_T)}{1 - (C_{ET}^*/C_T)} = K_T C_I^* \frac{e^*}{1 - e^*}. \quad (1.50)$$

Подстановка выражения для K_r в уравнение (1.49) приводит к выражению (1.47).

Член $R_{\langle 311 \rangle}$ в уравнении (1.44) обозначает скорость развала междоузельных кластеров $\langle 311 \rangle$, образующихся при высокодозной имплантации примесей в кремний. Такие объемные дефекты могут рассматриваться как стоки для междоузлий [33].

Скорость развала кластеров определяется простой экспоненциальной зависимостью от времени:

$$R_{\langle 311 \rangle} = -\frac{\partial C_{\langle 311 \rangle}}{\partial t} = f(x) \left(\frac{1}{t} \right) \exp \left(-\frac{t}{\tau} \right), \quad (1.51)$$

где $f(x)$ – профиль распределения <311> кластеров (он подобен имплантационному профилю); t – временная константа.

Как показано в работе [34], распределение междуузлий зависит от граничных условий для уравнения баланса потока:

$$\partial_n C_I + K_S (C_I - C_I^*) = g, \quad (1.52)$$

где $\partial_n C_I$ – проекция вектора потока междуузлий на единичный вектор, перпендикулярный границе; K_S – эффективная скорость рекомбинации междуузлий; g – генерационный член для учета инъекции междуузлий при отжиге в окислительной среде.

Таким образом, уравнение (1.52) описывает количество междуузлий, генерируемых на границе, минус количество рекомбинированных междуузлий и должно быть равно количеству междуузлий, которые диффундируют из поверхности раздела в подложку.

Эффективная скорость рекомбинации междуузлий K_S зависит от смещения поверхности раздела при окислении согласно выражению:

$$K_S = K_{surf} \left[K_r \left(\frac{v_i}{v_{i-max}} \right)^{K_p} + 1 \right], \quad (1.53)$$

где K_{surf} – коэффициент поверхностной рекомбинации междуузлий для фиксированных поверхностей раздела; v_i – скорость смещения поверхности раздела SiO_2/Si ; v_{i-max} – максимальная скорость смещения поверхности раздела; K_r и K_p – эмпирические параметры, используемые для калибровки скорости поверхностной рекомбинации междуузлий.

Поверхностная рекомбинация играет важную роль при релаксации профилей распределения дефектов в их равновесное состояние, которая не может происходить только за счет объемной рекомбинации. Следует отметить, что движущая поверхность раздела может инжектировать точечные дефекты в кремний и поликремний.

Возможны две формы представления параметра g в выражении (1.52). В одной он представляется в виде степенной зависимости от длительности отжига t :

$$g = A(t + t_0)^{T_p}, \quad (1.54)$$

а в другой – в виде степенной зависимости от скорости смещения границы раздела SiO_2/Si :

$$g = q v_{mole} v_i \left(\frac{v_i}{v_{i-max}} \right), \quad (1.55)$$

где θ – доля атомов кремния, участвующих в процессе окисления и инжектируемых в объем в качестве собственных междоузлий, ν_{mole} – атомная плотность кремния, а остальные коэффициенты – подгоночные параметры.

Диффузия вакансий. Уравнения для диффузии и потока вакансий в основном подобны соответствующим уравнениям для междоузлий:

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = \nabla(-J_V) - R, \quad (1.56)$$

где R – скорость объемной рекомбинации вакансий и междоузлий. Объемная рекомбинация представляет собой простую реакцию между вакансиями и междоузлиями и выражается следующим соотношением:

$$R = K_r (C_I C_V - C_I^* C_V^*). \quad (1.57)$$

Здесь K_r – коэффициент объемной рекомбинации.

Поток вакансий рассчитывается следующим образом:

$$-J_V = D_V C_V^* \nabla \left(\frac{C_V}{C_V^*} \right) \quad (1.58)$$

с корректным учетом влияния электрического поля на заряженные вакансии посредством использования градиента нормализованной концентрации $\frac{C_V}{C_V^*}$; D_V –

коэффициент диффузии свободных вакансий.

Точечные дефекты имеют более высокие значения коэффициента диффузии, чем примесь, поэтому они могут диффундировать вглубь моделируемой структуры. Если моделируемая структура мелкая, то может быть получена нефизично высокая концентрация дефектов в тех областях, где присутствуют примеси, что, следовательно, приведет к повышенной диффузии примесей. В этом случае необходимо увеличить размер моделируемой области, чтобы обеспечить адекватный сток для точечных дефектов. Для задания глубины области моделирования следует оценить характерные длины диффузии для дефектов, используя выражение

$$l = \sqrt{D_X \Delta t}, \quad (1.59)$$

где D_X – коэффициент диффузии дефекта, а Δt – длительность диффузионного процесса.

1.2.7. Модель диффузии связанных пар «примесь–точечный дефект»

Модель диффузии пар «примесь–точечный дефект» устанавливает взаимозависимость между диффузией примесей, с одной стороны, и диффузией точечных дефектов – с другой посредством добавления к члену, описывающему поток в уравнениях для дефектов, величины потока пар «примесь–точечный дефект», что приводит к следующим выражениям:

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = \nabla \left(-J_V - \sum_{A,c} J_{AV}^C \right) - R, \quad (1.60)$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = \nabla \left(-J_I - \sum_{A,c} J_{AI}^C \right) - R + \frac{\partial C_{ET}}{\partial t} - \frac{\partial C_{<311>}}{\partial t}, \quad (1.61)$$

где суммирование производится по всем зарядовым состояниям примесей и точечных дефектов. Остальные уравнения модели диффузии связанных пар идентичны уравнениям двухмерной модели, описанной в предыдущем разделе. Влияние дополнительного члена проявляется только при очень высоких концентрациях примесей и большой дозе имплантации, когда существенно увеличивается коэффициент диффузии примесей вследствие повышения уровня Ферми и увеличения степени пересыщения точечными дефектами, что следует из уравнений (1.35) и (1.41).

Обобщением уравнений (1.60) и (1.61) являются выражения:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(C_V^{free} - \sum_{A,c} C_{AV}^C \right) = \nabla \left(-J_V^{free} - \sum_{A,c} J_{AV}^C \right) - R, \quad (1.62)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(C_I^{free} - \sum_{A,c} C_{AI}^C \right) = \nabla \left(-J_I^{free} - \sum_{A,c} J_{AI}^C \right) - R + \frac{\partial C_{ET}}{\partial t} - \frac{\partial C_{<311>}}{\partial t}, \quad (1.63)$$

которые показывают, что скорость изменения полной концентрации точечных дефектов X определяется вкладами дефектов, диффундирующих свободно (free), дефектов, диффундирующих в парах (paired), а также вкладов различных истоков и стоков [30]. Истоки и стоки также должны быть разделены на вклады от спаренных (paired) и неспаренных (unpaired) дефектов. В работе [35] показано, что уравнение (1.41) для примесей необходимо изменить посредством подстановки концентрации неспаренных активных примесей в полную концентрацию активных примесей, что приводит к следующему выражению:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \sum_{X=I,V} \nabla \left[\left(\frac{C_X}{C_X^*} D_{AX} \right) C_{A_+}^{unpaired} \nabla \ln \left(C_{A_+}^{unpaired} \frac{C_X}{C_X^*} \left(\frac{n}{n_i} \right)^Z \right) \right]. \quad (1.64)$$

1.2.8. Другие модели диффузии примесей и их расширения

Модель диффузии связанных пар «примесь–точечный дефект» при высокой концентрации. Эта модель является расширением базовой модели диффузии связанных пар «примесь–точечный дефект» с включением рассмотрения пар более высокого порядка и учета механизмов рекомбинации точечных дефектов [36, 39]. В эту модель включено взаимодействие примеси и дефектов более высокого порядка в тех случаях, когда число дефектно-примесных пар существенно велико (при высокой концентрации примесей в кремнии). Модель включает две дополнительные реакции рекомбинации в объеме и две дополнительные реакции рекомбинации на поверхности раздела Si/SiO₂.

В объеме дополнительные члены, описывающие рекомбинацию точечных дефектов, применимы при высоких концентрациях, когда превалирует высокий уровень дефектно-примесных пар:

$$K_r^{PI-V} = F_i \left(\frac{D_{PI} + D_V}{D_I + D_V} \right) K_r, \quad (1.65)$$

$$K_r^{I-PV} = F_i \left(\frac{D_I + D_{PV}}{D_I + D_V} \right) K_r. \quad (1.66)$$

Дополнительные параметры модели учитывают отношение эффективного сечения захвата «примесь–дефект» к сечению рекомбинации «дефект–дефект».

Подобным образом на поверхности раздела скорости поверхностной рекомбинации междоузлий управляются парными и непарными механизмами согласно соотношению

$$K_{surf}^{PI} = F_k \left(\frac{D_{PI}}{D_I} \right) K_{surf}^I. \quad (1.67)$$

Это соотношение связывает поверхностную рекомбинацию дефектов, осуществляемую через пары «примесь–точечный дефект», с рекомбинацией, происходящей непосредственно на поверхности.

Повышенная объемная рекомбинация на дислокационных петлях (loop). Дислокационные петли играют роль стоков для точечных дефектов. В этой модели вводится дополнительный сток для междоузлий, зависящий от распределения дислокационных петель в некоторой пространственной области.

При использовании этой модели учитывается повышение скорости рекомбинации междоузлий в областях дислокационных петель, описываемое выражением

$$R_{loop} = d_a (C_I - C_I^*). \quad (1.68)$$

Модель диффузии при быстром термическом отжиге. При анализе диффузии примесей в процессе быстрого термического отжига (Rapid Thermal Annealing, RTA) используются описанные диффузионные модели, а именно: двухмерная модель и модель связанных пар. Поскольку RTA является быстрым термическим циклом, включающим плавное повышение температуры до высоких температур, в этом процессе будет доминировать так называемая переходная повышенная диффузия (Transient Enhanced Diffusion, TED), сопровождающаяся существенным повреждением кристаллической решетки.

Важными параметрами модели RTA-диффузии являются отношение количества междоузлий в форме <311> кластеров к количеству свободных междоузлий, а также характеристическое время, необходимое для перерастворения междоузельных кластеров.

Модели электрической деактивации и кластерообразования. При высокой степени легирования концентрация электрически активных примесей C_{A+} может быть ниже соответствующей химической концентрации C_A . Чтобы примесь в полупроводниковом материале стала электрически активной, ее следует поместить в узел замещения кристаллической решетки с тем, чтобы носитель заряда находился либо в валентной зоне (акцепторная примесь), либо в зоне проводимости (донорная примесь). Однако выше определенного уровня легирования невозможно поместить большее количество примесей в узлы замещения кристаллической решетки – лишние примеси будут неактивными. Порог, при котором происходит деактивация примесей, часто называется «пределом твердой растворимости», что отчасти терминологически неверно, поскольку примеси могут существовать в различных фазовых состояниях кристалла. Следовательно, трудно определить, к какому фазовому переходу следует отнести «предел твердой растворимости». Например, избыточные примеси могут существовать в виде небольших кластеров или в виде больших преципитатов. «Порог деактивации» является более точным обозначением для такого предела и будет далее по тексту использоваться именно в таком смысле. В дальнейшем через C_{A+}^{th} будет обозначаться порог деактивации.

Таким образом, во всех описываемых здесь моделях для каждого типа примесей принимаются следующие предположения:

- примеси, находящиеся в состоянии, превышающем порог деактивации, считаются электрически неактивными, т.е. они не вносят вклад в совокупность носителей заряда;
- такие примеси считаются неподвижными, т.е. они не могут диффундировать.

Цель использования модели электрической активации состоит в расчете концентрации примесей, при которой происходит их деактивация. Для этого во всех моделях диффузии используются две модели электрической активации:

- модель кластерообразования для мышьяка;
- полуэмпирическая активационная модель (с использованием табличных данных) для всех других примесей.

Модель кластерообразования для мышьяка основана на простой реакции



Полагая, что уравнение (1.69) всегда является равновесным, можно использовать следующее выражение для установления связи между химической и активной концентрациями мышьяка:

$$C_A = C_{A+} + C_{clust} = C_{A+} + C_{tn} C_{A+} \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \frac{C_V}{C_V^*} = C_{A+} \left\{ 1 + C_{tn} \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \frac{C_V}{C_V^*} \right\}. \quad (1.70)$$

Поскольку существует циклическая зависимость между активной концентрацией мышьяка C_{A+} и концентрацией носителей заряда n , можно оценить величину n в начале моделирования. Кроме того (по определению), можно предположить, что отношение $\frac{C_V}{C_V^*}$ равно единице при использовании модели диффузии Ферми.

В полуэмпирической активационной модели (с использованием табличных данных) для всех примесей, за исключением мышьяка, используется двухступенчатая схема при расчете концентрации активных примесей:

1. Проводится интерполяция экспериментальных данных (температура, порог деактивации) и определяется концентрация, не зависящая от порога деактивации, что соответствует текущей температуре, для которой производится моделирование.

2. Вводится логарифмическая зависимость посредством задания величины порога деактивации:

$$C_{A+}^{th'} = \begin{cases} C_{A+}^{th} \left[1 + (1,0 - b) \ln \frac{\left(\frac{C_A}{C_{A+}^{th}} \right) - b}{1,0 - b} \right] & \text{при } C_A \leq C_{A+}^{th}; \\ C_A & \text{при } C_A > C_{A+}^{th}, \end{cases} \quad (1.71)$$

где параметр b имеет значение в интервале (0,8...1,0). Использование уравнения (1.71) способствует сглаживанию профиля распределения активных примесей, который в основном соответствует полному («химическому») профилю.

Модели диффузии, учитывающие высокий уровень концентрации примесей. Поскольку электрические характеристики прибора в существенной степени зависят от распределения электрически активных примесей, формирующегося в результате проведения последовательных термических обработок, важно, чтобы используемые модели диффузии примесей были как можно более точными, что особенно важно при моделировании глубокой субмикронной технологии. При этом

приобретает критическое значение двухмерное и даже трехмерное моделирование. Однако, к сожалению, достаточно точные методики измерения многомерных профилей распределения примесей в настоящее время отсутствуют. Поэтому двухмерные (и, тем более, трехмерные) профили активных примесей могут быть получены только посредством моделирования.

Очевидно, что различные аномальные явления диффузии примесей в кремнии вызываются неравновесными точечными дефектами. Эти дефекты вводятся или непосредственно в процессе диффузии (пример – эффект «продавливания» эмиттерного перехода в процессе диффузии фосфора с высокой концентрацией), или инжектируются в подложку при таких обработках, как окисление или нитризация, или возникают при ионной имплантации примесей в кремниевую подложку. С уменьшением размера формируемого прибора указанные переходные явления являются ключевыми для точного моделирования процесса диффузии примесей.

Модель диффузии CNET. Модель диффузии примесей CNET разработана фирмой CNET-Grenoble (France Telecom). Ниже описывается указанная модель и показаны ее отличия от стандартной модели CPL, описанной в работе [30]. CNET-модель является расширением CPL-модели, в частности, для случая диффузии с высокой концентрацией примесей. Основные физические предпосылки, заложенные в CNET-модель, заключаются в следующем:

- диффузия примесей происходит с участием как вакансий (V), так и междоузлий (I). Эти точечные дефекты существуют в различных зарядовых состояниях, относительные концентрации которых зависят от локального положения уровня Ферми, т.е. от локальной концентрации примесей;

- как междоузлия, так и вакансии имеют относительно высокие значения энергии связи с примесными атомами, вследствие чего диффузия примесей осуществляется посредством пар «примесь–точечный дефект» (примеси, находящиеся в виде атомов внедрения в кристаллической решетке, являются неподвижными). Полагается, что такие примесно-дефектные пары в своих зарядовых состояниях находятся в локальном равновесии с атомами примеси, располагающимися в положении замещения, и со свободными дефектами. Считается, что при высоком уровне легирования концентрации таких пар нельзя считать пренебрежимо малыми по сравнению с концентрациями примесей, находящихся в состоянии замещения. По этой причине концентрации пар «примесь–точечный дефект» необходимо учитывать при расчете полной концентрации примесей и положения уровня Ферми (т.е. концентрации носителей заряда). Прямым следствием этого является частичная самокомпенсация при высоком уровне концентрации примесей, что дает определенный вклад в разницу между полной концентрацией и концентрацией активной примесей в изменение собственного коэффициента диффузии как функции полной концентрации примесей.

- мышьяк и бор при концентрациях, превышающих порог твердой растворимости, образуют нейтральные и неподвижные комплексы (AS_2V или B_2I), которые увеличивают эффективный коэффициент диффузии и вносят вклад в концентрацию неактивных примесей. Полагается, что эти комплексы находятся в состоянии локального равновесия с другими примесями и дефектами. Дальнейшим

развитием этой модели является модель кластерообразования [37];

– при превышении концентрации примесей до величины порядка 10^{20} см^{-3} дефектно-примесные пары уже нельзя рассматривать как изолированные частицы, поскольку вакансии могут взаимодействовать уже с большим числом, чем один примесный атом. В CNET-модели [38–39] этот эффект описывается существованием перколяционного кластера из примесных атомов, расположенных друг от друга на расстояниях вплоть до пятого соседа кристаллической решетки. В таком кластере значительно увеличиваются как коэффициент диффузии, так и концентрация вакансий, что вызывает значительное повышение концентрации примесей, диффундирующих совместно с вакансией. Этот механизм позволяет точно описать известную форму высококонцентрационного профиля распределения фосфора с перегибом (ступенькой) и «хвостом». Поток каждой диффундирующей пары «примесь–дефект», а также свободных дефектов включает дрейфовые члены, вызываемые встроенным электрическим полем и градиентом концентрации;

– полагается, что междоузлия (I) и вакансии (V) не находятся в локальном равновесии, но они могут аннигилировать посредством механизма бимолекулярной рекомбинации. Особенность CNET-модели состоит в том, что в процессе аннигиляции участвуют не только свободные дефекты, но также и дефектно-примесные пары, которые играют роль рекомбинационных центров. В результате скорость I - V -рекомбинации существенно усиливается при высоком уровне концентрации примесей.

Компоненты CNET-модели. CNET-модель включает все приведенные выше пять компонентов. В каждой из них используется свое физическое представление диффузии примесей. Полная CNET-модель использует одновременно все пять компонентов.

1. *Непренебрежимые концентрации дефектно-примесных пар.* В этой модели учитываются эффекты, связанные с высокой концентрацией примесей.

Для фосфора каждый из пяти компонентов модели описывается следующим образом:

$$P_{chem} = PV^- + PV^0 + PI^+ (PI^0 + IP^-) + P^+ = [P^+] \{ 1 + Kp + v = [V^-] + Kp + v - [V^-] + p + 1 i [Ii] \} + [P]_{precipitate}. \quad (1.72)$$

Последний член учитывает атомы фосфора, которые уходят в преципитаты, когда $[P]_{chem}$ больше предела растворимости.

2. *Образование кластеров.* Кроме ухода в преципитаты при моделировании профилей распределения примесей мышьяка и бора учитывается образование неподвижных нейтральных комплексов. В модели CNET такие кластеры обозначаются как As_2V и B_2I (в CPL-модели они неподвижны и превращаются в пары AsV).

При использовании простой статической (равновесной) модели:

$$\left. \begin{aligned} & K A_S^+ AsV^- [As^+] [AsV^-] \\ & K_{B^- BI^+} [B^-] [BI^+] \end{aligned} \right\} \quad (1.73)$$

3. *Уравнение нейтральности.* Этот компонент модели учитывает концентрацию заряженных пар, т.е. решается уравнение

$$n-p = \Sigma(Donor)^e + \varepsilon \Sigma(DonorV)^e + \varepsilon \Sigma(DonorI)^e + \varepsilon \Sigma(AcceptV)^e + \varepsilon \Sigma(AcceptI)^e - \Sigma(Accept)^e. \quad (1.74)$$

В уравнении (1.74) e равно 1, 0 или -1 в зависимости от зарядового состояния пары:

$$\left. \begin{aligned} e = 1 \text{ для } PV^- + (P^+, V^-), \\ e = 0 \text{ для } PV^0 = (P^+, V^-), \\ e = -1 \text{ для } BV^+ = (B^-, V^{++}). \end{aligned} \right\} \quad (1.75)$$

Суммирование в (1.74) проводится по всем донорам (P, As, Sb) и по всем акцепторам (B, In). Следуя этой процедуре, «активная» концентрация в результате решения уравнения диффузии будет равна соответствующей доле примесей, находящейся в состоянии замещения, от ее полной концентрации. Тип примеси задается посредством присвоения соответствующего знака при суммировании.

4. *Зарядовые состояния пар.* Для бора хорошо известно, что существуют только пары BV^0 , BV^+ и BI^- , BI^+ . Их концентрации задаются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} [BV^0] &= K_{B^-V^+} [B^-] [V^+], \\ [BV^+] &= K_{B^-V^{++}} [B^-] [V^{++}], \\ [BI^-] &= K_{B^-I^0} [B^-] [I^0], \\ [BI^+] &= K_{B^-I^{++}} [B^-] [I^{++}]. \end{aligned} \right\} \quad (1.76)$$

Для фосфора (как и для других доноров) существуют пары PV^0 и PV^- . Здесь:

$$\left. \begin{aligned} [PV^0] &= K_{P^+V^-} [P^+] [V^-], \\ [PV^-] &= K_{P^+V^=} [P^+] [V^=], \\ [PI^+] &= K_{P^+I^0} [P^+] [I^0], \\ [PI^0] &= K_{P^+I^-} [P^+] [I^-], \\ [PI^-] &= K_{P^+I^=} [P^+] [I^=]. \end{aligned} \right\} \quad (1.77)$$

Эффективный коэффициент диффузии. Расчет концентрации C из общего уравнения CPL-модели осуществляется посредством решения уравнения

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \nabla \left[D_X^V C_A \frac{C_V C}{C_V^*} \nabla \log \left(C_A \frac{C_V C}{C_V^* n_i} \right) + D_X^I C_A \frac{C_I C}{C_I^*} \nabla \log \left(C_A \frac{C_I C}{C_I^* n_i} \right) \right]. \quad (1.78)$$

При значениях $C = n$ или p легко показать, что в модели диффузии пар, основанной на моделях CPL или CNET, полагается, что величины D_x^V и D_x^I рассчитываются из базисных параметров пар. В уравнениях

$$D_X^V = \sum_i K_{x,v^i} d^v \left(\frac{C}{n_i} \right)^i D_{XV^{i-1}},$$

$$D_X^I = \sum_i K_{x,i^i} d^i \left(\frac{C}{n_i} \right)^i D_{XI^{i-1}}$$
(1.79)

коэффициенты δ^v и δ^i – относительные доли заряженных вакансий и междоузлий соответственно. Это приводит к выражениям, аналогичным для модели диффузии фосфора в связанных парах «примесный атом–дефект», которые отличаются от соответствующих выражений для бора, мышьяка и олова. Фактически в модели диффузии связанных пар отношение D_x^V / D_x^I не зависит от концентрации примесей, тогда как при использовании CNET-модели это отношение зависит от n , что подтверждается экспериментально (OED-эксперименты при высоких концентрациях примеси показывают меньшее усиление диффузии, чем для собственных концентраций P и As.)

Следует подчеркнуть, что имеются определенные соотношения для разных констант, входящих в модели, что сокращает число подгоночных параметров. Во-первых, из физических соображений следует, что отношения D_{xV^-} / D_{xV^0} и D_{xV^0} / D_{xV^+} должны быть равны. В таком случае:

$$\left. \begin{aligned} D_{PV^-} / D_{PV^0} &= D_{PV^0} / D_{PV^+} = D_P^V, \\ D_{PI^-} / D_{PI^0} &= D_{PI^0} / D_{PI^+} = D_P^I, \\ D_{BI^+} / D_{BI^0} &= D_{BI^0} / D_{BI^-} = D_B^I, \\ D_{BV^+} / D_{BV^0} &= D_{BV^0} / D_{BV^-} = D_B^V. \end{aligned} \right\} \quad (1.80)$$

Эти коэффициенты диффузии являются свободными параметрами, если соответствующие параметры для пар (K) в (1.79) известны. Кроме того, они могут быть рассчитаны через известные экспериментальные значения собственных коэффициентов диффузии (D_i) и через междоузельный компонент f_i при собственных условиях. Члены в (1.58), представляющие собой долю концентрации примесей, входящих в соответствующие пары, имеют очевидный физический смысл, и

их, в принципе, можно определить экспериментально (параметры K_{XV}^i невозможно определить экспериментально, поскольку величины C_V^* и C_I^* неизвестны).

5. *Влияние примесей на скорость бимолекулярной рекомбинации.* При использовании CPL-модели рекомбинация точечных дефектов в объеме подчиняется следующей зависимости:

$$G - R = K_R (C_I C_V - C_I^* C_V^*), \quad (1.81)$$

где C_I и C_V представляют собой полные концентрации точечных дефектов, а скорость рекомбинации определяется параметром K_R .

Используя общую запись реакции



где X обозначает примесь, легко показать, что член $(G - R)$ необходимо переписать следующим образом:

$$G - R = K_{BM} (C_I C_V - C_I^* C_V^*). \quad (1.83)$$

Коэффициент K_{BM} существенно зависит от концентрации примесей и включает концентрации нейтральных дефектов. Следовательно, K_R можно вывести из K_{BM} следующим образом:

$$K_R = \frac{K_{BM}}{\left[\sum_i \partial i \left(\frac{C}{n_i} \right)^i + \sum_i \partial i \left(\frac{C}{n_i} \right)^i \right]} \quad (1.84)$$

и

$$K_{BM} = K_{BM}^0 + \sum_X K_{BM}^x, \quad (1.85)$$

где K_{BM}^0 – свободный член, а K_{BM}^x обозначает вклад определенной примеси.

Даже при пренебрежении влиянием пар значение K_{BM}^0 зависит от уровня легирования вследствие различных состояний дефектов:

$$\left. \begin{aligned} I^o + V^o &\rightarrow 4pR(D_I + D_V) \left[I^0 \left[V^0 \right], \right. \\ I^+ V^0 &\rightarrow 4pR(D_I + D_V) + \partial^+ \left(\frac{n^i}{n} \right) \left[I^0 \right] \left[V^0 \right], \\ I^- V^0 &\rightarrow 4pR(D_I + D_V) + \partial^- \left(\frac{n}{n_i} \right) \left[I^0 \right] \left[V^0 \right]. \end{aligned} \right\} \quad (1.86)$$

Это утверждение относится и к I^0 , V^{++} , V , V^- . Следовательно:

$$K_{R^0} = \frac{4pR(D_I + D_V) \sum_i d^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i + \sum_i d^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i}{\left[\sum_i d^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i + \sum_i d^i \left(\frac{n}{n^i} \right)^i \right]}. \quad (1.87)$$

Компонент модели, в которой учитывается зависимость от концентрации пар «примесный атом–дефект», в свою очередь можно разделить на два компонента, соответствующих рекомбинации вакансий с парами «примесь–дефект» и рекомбинации междоузлий с парами «примесь–дефект»:

$$K_{BM}^X = K_{BM}^{XI,V} + K_{BM}^{XV,I}. \quad (1.88)$$

При расчете реакций между отдельно рассматриваемыми частицами, имеющими одинаковый (ненулевой) заряд, можно пренебречь знаком заряда по причине кулоновского отталкивания. Вследствие эффектов, связанных с уровнем Ферми, такие пары не могут иметь высокие концентрации в один и тот же момент времени. Это объясняется выражениями (1.86)–(1.88) при одинаковом радиусе захвата R в этих уравнениях. В первом приближении $R \geq 2,35 \text{ \AA}$ (межатомное расстояние в кремнии).

6. *Модель проницаемости.* Если концентрация примеси превышает некоторую величину $C_{perc} (\approx 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3})$, то основной механизм диффузии изменяется (для той области моделирования, где присутствуют вакансии) вследствие сильного взаимодействия между примесями и дефектами (вплоть до расстояний в пределах пятых соседей кристаллической решетки). В этом случае диффузия описывается таким образом, как если бы «эффективная» концентрация увеличилась с некоторым коэффициентом, а соответствующие потоки будут описываться согласно следующему выражению:

$$J_V^{perc} = F_{perc} J_V^{LOW} \quad (1.89)$$

с обычным потоком вакансий J_V^{low} при $C_{dopant} < C_{perc}$ и

$$J_V^{perc} = F_{perc}^V D_V \frac{C_v^{tot}}{N_S} \left(\frac{\partial X^+}{\partial X} + X^+ \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \right). \quad (1.90)$$

Аналогичное выражение используется для модели диффузии посредством дефектно-примесных пар:

$$J_X^{perc} = F_{perc}^X D_x \frac{C_x}{N_S} [X^+] \nabla \log \left(\frac{[X^+] n}{n_i} \right). \quad (1.91)$$

Таким образом, полный поток является комбинацией потоков с учетом и без учета эффекта проницаемости (перколяции) согласно выражениям

$$J_X = p J_X^{perc} + (1-p) J_X^V + J_X^I, \quad (1.92)$$

$$J_V = p J_V^{perc} + (1-p) J_V^{low} = [p F_{perc} + (1-p)] J_V^{low}, \quad (1.93)$$

где p – вероятность проявления эффекта проницаемости, которая рассчитывается из выражений

$$p = 0 \text{ для } \sum [X_S] < C_{perc}, \quad (1.94)$$

$$p = \min \left\{ 1; 0,85 \left(\frac{\sum [X_S]}{C_{perc}} \right)^{0,4} \right\}. \quad (1.95)$$

Таким образом, примеси при низкой концентрации будут обладать повышенным коэффициентом диффузии вследствие присутствия других примесей с концентрацией, превышающей C_{perc} .

1.2.9. Модель диффузии легирующих примесей в поликремнии

Механизмы диффузии примесей в поликремнии отличаются от соответствующих механизмов в кристаллическом кремнии.

Два потока диффузии примесей в поликремнии. Поликремний имеет микроструктуру в виде малых (по сравнению с областями формируемого прибора) кристаллических областей, называемых зёрнами. Зёрна отделяются друг от друга границами, занимают определенный пространственный объем и образуют сложную сеть. Текстура и морфология границ зёрен зависят от условий осаждения поликремния и от последующей термической обработки, в процессе которой происходит рекристаллизация поликремния (см. подразд. 1.5). Примеси внутри зёрна диффундируют различным образом по сравнению с диффузией по границам зёр-

рен. Примеси диффундируют как через объем зерна, так и через поверхности раздела зерен. Моделирование диффузии во всех областях поликремния с такой геометрически сложной микроструктурой связано с большими вычислительными затратами и поэтому требует использования специальных математических методов. В программе SSUPREM4 используется двухмерная численная модель, изложенная в работах [40–42]. Согласно этой модели, поликремниевая микроструктура математически описывается в гомогенном приближении. Суть его заключается в том, что пространственно разделенные области зерен и их границ представляются в виде пространственно перекрывающихся гомогенной объемной области зерна и гомогенной области сети границ зерна. Каждый локальный элемент поликремниевого материала включает два компонента: собственно зерно и границу зерна. Сеть границ зерна характеризуется скалярной функцией плотности, описывающей размер зерна, и векторной функцией, описывающей кристаллографическое направление границы зерна. Соответственно каждая примесь подразделяется на два диффузионных компонента: внутри объема зерна и в области границы зерна. Эти два компонента связываются с сегрегацией на границах зерен. При рассмотрении термического цикла моделируется также и рекристаллизация поликремния, чтобы включить в модель и эффект роста зерна.

Соотношение между компонентами диффузии примесей для зерен и границ зерен согласно [42] имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = \nabla(D_g \nabla C_g) - G, \quad (1.96)$$

$$D_g = D_{g0} \exp\left(-\frac{D_{gE}}{kT}\right), \quad (1.97)$$

$$\frac{\partial C_{gb}}{\partial t} = \nabla_i(F_{ij} D_{gb} \nabla_j C_{gb}) + G, \quad (1.98)$$

$$G = (t^{-1}) \left(\frac{C_g}{P_{seg}} - C_{gb} \right), \quad (1.99)$$

$$D_{gb} = D_{gb0} \exp\left(-\frac{D_{gbE}}{kT}\right) \frac{1}{t}, \quad (1.100)$$

$$F_{ij} = \frac{1}{L_{g(x,y,z)}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (1.101)$$

где C_g – компонент концентрационного профиля, относящегося к зернам; C_{gb} – компонент концентрационного профиля, относящегося к границам зерен; D_g и D_{gb} – коэффициенты диффузии примесей в объеме зерна и по границам зерен соответственно; G – член, относящийся к сегрегационному потоку примесей на границах зерен; t – константа, введенная для описания скорости сегрегации; P_{seg} – коэффициент сегрегации; F_{ij} – тензор, посредством которого осуществляется учет

эффекта направленности границ зерна; L_g – размер зерна (он предполагается одинаковым в x , y , z направлениях).

Сегрегация на границах зерен рассчитывается согласно выражению [43]:

$$P_{seg} = \frac{1}{L_g} \frac{Q_S}{N_{si}} A \exp\left(-\frac{d_0}{kT}\right), \quad (1.102)$$

где Q_S – плотность сегрегации на границах зерен; N_{si} – плотность атомов в кристаллическом кремнии; A – энтропийный коэффициент; d_0 – энергия активации сегрегации.

1.3. Модели окисления кремния

При изготовлении структур и приборов микроэлектроники важным технологическим процессом является термическое окисление, используемое для формирования диэлектрического затвора в МОП-транзисторах, областей изоляции между отдельными приборами, имплантационных масок и пассивирующего слоя (см. подразд. 1.1).

1.3.1. Математическое описание процесса окисления кремния

Моделирование процесса окисления кремния основано на классической теории Дила–Гроува [44], согласно которой окисление рассматривается как совокупность трех процессов:

1. Перенос окислителя (O_2 или H_2O) из газовой фазы в слой SiO_2 через поверхность раздела газ-окислитель/ SiO_2 .
2. Перенос окислителя через слой SiO_2 до достижения поверхности раздела Si/SiO_2 .
3. Химические реакции



на поверхности раздела SiO_2/Si .

Расчет переноса окислителя через поверхность раздела газ-окислитель/ SiO_2 проводится посредством следующего выражения:

$$F_1 = h(C_G - C_S), \quad (1.103)$$

где h – коэффициент массопереноса; C_G – равновесная концентрация окислителя в SiO_2 ; C_S – концентрация окислителя в SiO_2 на поверхности раздела газ/ SiO_2 .

Равновесная концентрация окислителя в SiO_2 линейна относительно парциального давления окислителя P_S согласно закону Генри:

$$C^* = KP_S, \quad (1.104)$$

где K – константа.

Диффузия молекул окислителя в SiO_2 определяется градиентом его концентрации и описывается законом Фика:

$$F_2 = -D_{eff} \nabla C, \quad (1.105)$$

где D_{eff} – эффективный коэффициент диффузии окислителя (H_2O или O_2) в растущем слое SiO_2 ; C – концентрация окислителя в окисле.

Поток молекул окислителя на поверхности раздела Si (polySi)/ SiO_2 между кремнием и окислителем выражается следующим образом:

$$F_3 = k_s C_s, \quad (1.106)$$

где k_s – константа скорости реакции на поверхности раздела Si/SiO_2 .

В стационарных условиях все три потока равны:

$$F = F_1 = F_2 = F_3.$$

Разделив поток F на N_1 (число молекул окислителя в единице объема SiO_2 , равное $2,2 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ для окисления в кислороде и в два раза большее для окисления во влажной среде) и рассматривая лишь одномерный рост SiO_2 , получаем скорость роста слоя окисла:

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{F}{N_1}, \quad (1.107)$$

где x_0 – толщина окисла. Из уравнений (1.103), (1.105) и (1.106) уравнение (1.107) может быть выражено в следующем виде:

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{B}{A + 2x_0}, \quad (1.108)$$

где

$$A = 2D_{eff} \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h} \right), \quad (1.109)$$

$$B = 2D_{eff} \frac{C^*}{N_1}. \quad (1.110)$$

Здесь B и B/A – так называемые параболическая и линейная константы скорости роста окисла, поскольку они являются коэффициентами при x^2 и x в выражении (1.108). В физическом смысле эти константы служат для описания вкладов в потоки F_2 (поток окислителя) и F_3 (химические реакции на поверхности раздела SiO_2/Si).

Температурные зависимости линейной и параболической констант имеют ярко выраженный экспоненциальный характер и подчиняются закону Аррениуса:

$$B = C_1 \exp(-E_1/kT) \text{ и } \frac{B}{A} = C_2 \exp(-E_2/kT).$$

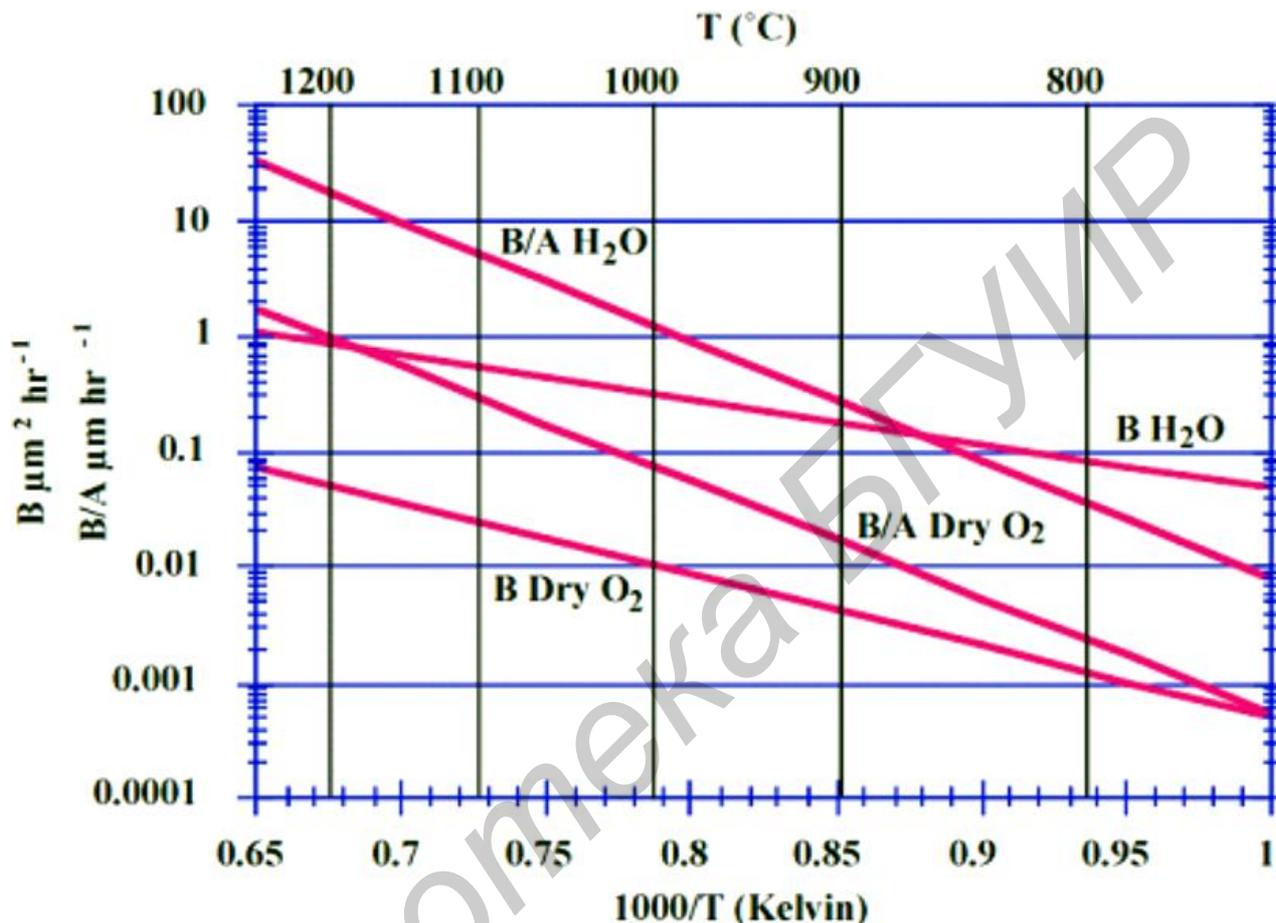


Рис. 1.47. Температурные зависимости констант B и B/A для окисления $\langle 111 \rangle$ кремния в сухой и влажной кислородосодержащих средах

В табл. 1.3 приведены значения соответствующих констант для температурных зависимостей B и B/A , а на рис. 1.47 – графическая иллюстрация этих зависимостей для процессов окисления кремния в сухой (O_2) и влажной ($H_2O + O_2$) средах.

Таблица 1.3

Константы в модели Дила–Гроува для моделирования окисления $\langle 111 \rangle$ кремния при давлении 1 атм

(При моделировании $\langle 100 \rangle$ кремния все значения C_2 следует разделить на 1,68)

Среда	B	B/A
Сухой кислород	$C_1 = 7,72 \cdot 10^2 \text{ мкм}^2/\text{ч}, E_1 = 1,23 \text{ эВ}$	$C_2 = 6,23 \cdot 10^6 \text{ мкм}^2/\text{ч}, E_2 = 2,0 \text{ эВ}$
Влажный кислород	$C_1 = 2,14 \cdot 10^2 \text{ мкм}^2/\text{ч}, E_1 = 0,71 \text{ эВ}$	$C_2 = 8,95 \cdot 10^7 \text{ мкм}^2/\text{ч}, E_2 = 2,05 \text{ эВ}$
H_2O	$C_1 = 3,86 \cdot 10^2 \text{ мкм}^2/\text{ч}, E_1 = 0,78 \text{ эВ}$	$C_2 = 1,63 \cdot 10^8 \text{ мкм}^2/\text{ч}, E_2 = 2,05 \text{ эВ}$

Другая форма записи линейно-параболического закона роста окисла кремния:

$$\frac{x_0^2}{B} + \frac{x_0}{B/A} = t + t, \quad (1.111)$$

где $t = \frac{x_i^2 + Ax_i}{B}$.

Здесь параметры x_i и t введены для учета начальной толщины окисла перед проведением операции окисления, поскольку реально кремниевая подложка всегда имеет тонкий $\sim 20 \text{ \AA}$ слой окисла.

Выражение (1.111) в предельных случаях имеет вид:

$$x_0 \approx \frac{B}{A}(t + t) \quad (1.112)$$

при больших значениях линейной константы B/A (тонкие пленки окисла) и

$$x_0^2 \cong B(t + t) \quad (1.113)$$

при больших значениях параболической константы B (толстые пленки окисла).

1.3.2. Зависимости констант B/A и B от условий окисления

Для короткого времени и низкой температуры окисления рост окисла линейен относительно времени окисления. При этом процессы на границах раздела (перенос окислителя через границу раздела газ-окислитель/ SiO_2 и окислительная реакция на границе раздела Si/SiO_2) являются определяющими факторами при описании кинетики роста окисла.

Разделив уравнение (1.110) на (1.109), получаем следующее выражение для линейной константы скорости окисления:

$$\left(\frac{B}{A}\right) = \frac{C_I}{N_1} \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{k}\right). \quad (1.114)$$

Равновесная концентрация окислителя C^* определяется уравнением (1.104). Коэффициент массопереноса h определяется соотношением Аррениуса:

$$h = h_0 \exp\left(-\frac{h_E}{k_B T}\right).$$

Чтобы разделить влияние различных факторов процесса окисления на линейную константу B/A , ее удобно представить в следующем виде:

$$(B/A)_I = (B/A)_i(B/A)_{or}(B/A)_P(B/A)_{Cl}(B/A)_d, \quad (1.115)$$

где соответствующие множители описывают зависимость B/A от ориентации окисляемой подложки (or), давления (P), содержания хлора (Cl) и степени легирования подложки (d). $(B/A)_i$ – собственная (определяемая экспериментально) линейная константа скорости окисления слаболегированного окисла, получаемого при атмосферном давлении без хлора в газе-окислителе.

Ориентационная зависимость линейной константы скорости окисления. Влияние ориентации кремниевой подложки на кинетику окисления объясняется разной поверхностной плотностью атомов кремния и разным числом химических связей Si–Si на различных гранях кристалла кремния [45, 46]. Отсюда следует, что параболическая константа B не зависит от ориентации подложки, поскольку она определяет интенсивность диффузии окислителя лишь в объеме SiO_2 . Как показывают экспериментальные данные, значения линейной константы B/A для кристаллографических ориентаций $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ с достаточной точностью можно аппроксимировать следующим соотношением

$$(B/A)_{111} = 1,68(B/A)_{100}.$$

Для ориентации $\langle 110 \rangle$ значение B/A принимается в 1,45 больше, чем для ориентации $\langle 100 \rangle$.

Зависимость толщины окисла кремния от давления. Окисление кремния при высоких давлениях позволяет вырастить относительно толстые пленки SiO_2 при пониженных температурах, что уменьшает перераспределение примесей [48, 54]. Зависимость линейной константы скорости окисления от давления, как следует из (1.104), описывается степенным соотношением

$$(B/A)_P = (B/A)_i P^{k_p},$$

где P – парциальное давление окислительного газа, k_p – экспериментально определяемая константа.

Для окисления во влажной среде $k_p \cong 1$, а для окисления в сухой атмосфере $k_p \cong 0,7-0,8$. В качестве примера, на рис. 1.53 показана зависимость толщины окисла кремния от времени окисления при $P = 0,1$ атм в сухом кислороде для разных температур, полученная в модели Дила–Гроува.

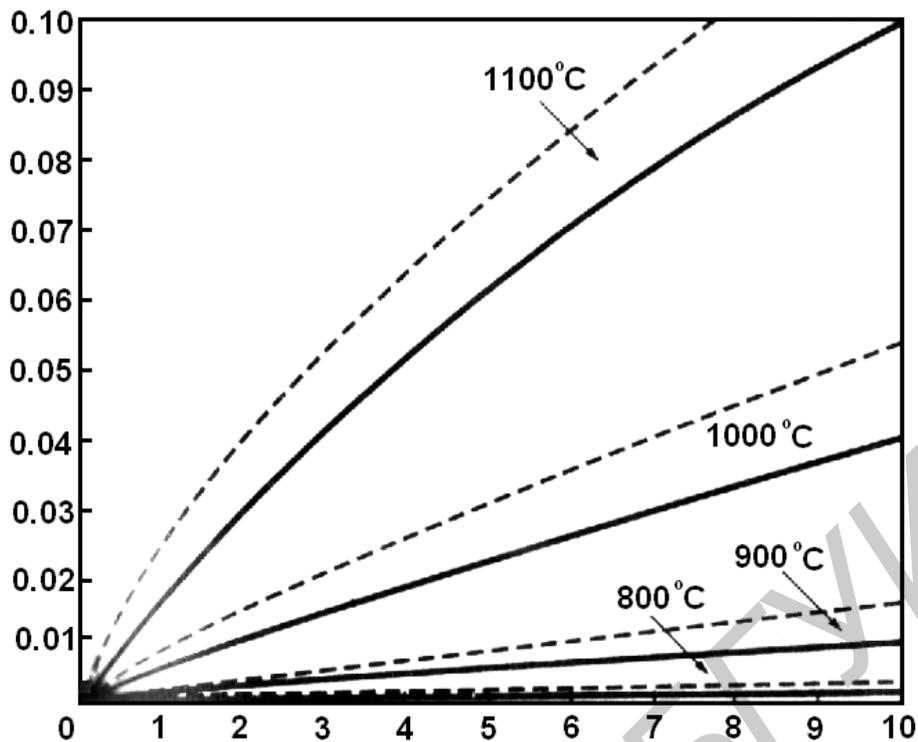


Рис. 1.48. Толщина окисла кремния в зависимости от времени окисления для различных парциальных давлений окислительного газа

Зависимость толщины окисла кремния от содержания хлора. Добавка хлора в окислительную систему приводит к лучшей пассивации и к повышенным диэлектрическим свойствам окисла [44, 46, 47]. В сухой окислительной среде введение хлора приводит к повышению скорости окисления. Одно из возможных объяснений этого влияния состоит в деформации кристаллической решетки SiO₂ при внедрении атомов хлора в окисную пленку, что приводит к повышению коэффициента диффузии окислителя.

Зависимость толщины окисла кремния от степени легирования. Известно, что формирование SiO₂ на высоколегированных подложках n-типа и p-типа может быть улучшено по сравнению с формированием SiO₂ на слаболегированных подложках [48, 49]. Зависимость кинетики роста окисла от концентрации примесей проявляется в изменении линейной константы скорости окисления. Физический смысл влияния высокого уровня концентрации примесей объясняется прежде всего эффектом электрического поля [49, 50, 53]:

$$\left(\frac{B}{A}\right)_d = \left[1 + k_d \exp\left(-\frac{k_{d,0}}{k_B T} \left(\frac{V^*}{V_i^*} - 1\right)\right) \right], \quad (1.116)$$

где V^* – равновесная концентрация вакансий в кремнии вблизи поверхности раздела Si/SiO₂; V_i^* – равновесная концентрация вакансий в кремнии; $k_{d,0}$ и k_d – экспериментально определяемые константы.

Равновесная концентрация вакансий в различных зарядовых состояниях зависит от положения уровня Ферми [51, 52] и определяется следующим выражением:

$$V^* = V_i^* \left\{ \frac{1 + \left(\frac{n_i}{n}\right) f^{+} + \left(\frac{n_i}{n}\right)^2 f^{++} + \left(\frac{n}{n_i}\right) f^{-} + \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 f^{-}}{1 + f^{+} + f^{++} + f^{-} + f^{-}} \right\},$$

где n – концентрация электронов; n_i – собственная концентрация носителей заряда; f^{+} , f^{++} , f^{-} и f^{-} – доли концентраций вакансий соответственно в положительных, двукратно-положительных, отрицательных и двукратно-отрицательных зарядовых состояниях, зависимость которых от температуры задается соотношением Аррениуса.

С увеличением степени легирования примесями n-типа зависимость V^* от V_i^* увеличивается, а для примесей p-типа остается почти неизменной. Увеличение зависимости V^* от V_i^* для примесей n-типа связано с увеличением линейной константы скорости окисления, что приводит к формированию более толстых пленок окисла. Это объясняется более высокой способностью к внедрению в кристаллическую решетку кремниевой подложки вакансий или молекул окислителя при окислении высоколегированной подложки n-типа.

1.3.3. Смешанная окислительная среда

На практике окислительной средой может быть смесь газа, состоящая из более чем одного окислителя и разных примесей. Полная скорость окисления будет зависеть от всех составляющих. При моделировании окисления в многокомпонентной газовой среде следует одновременно учитывать диффузию и окисление всех газовых составляющих [54]. Парциальные давления каждого газа рассчитываются следующим образом:

$$P_j = P_{tot} \frac{F_j}{\sum F_i}, \quad (1.117)$$

где P_j и F_j – парциальное давление и скорость потока газа соответственно для каждой j -й компоненты; P_{tot} – полное давление газовой смеси.

Для сред, содержащих более чем один окислитель (например, O_2 и H_2O), используется парциальное давление каждого окислителя при расчете C^* для каждого компонента. Из полученного значения C^* рассчитываются k и D_{eff} для каждого составляющего окислителя. Уравнение (1.103) решается для каждого окислителя с целью получения распределения концентрации окислителя в растущем SiO_2 . Вклады от каждого составляющего окислителя в скорость смещения поверхности раздела Si/SiO_2 рассчитываются с помощью выражения

$$V_S = \sum_i \frac{k_j C_{ij}}{N_{ij}},$$

если используется уравнение (1.108). Индекс j соответствует j -му окислительному газу.

Уравнения для потока также рассчитываются для смешанной среды, в которой присутствуют как O_2 , так и H_2O . Зависимости величин D_{eff} и k от напряжения являются функциями содержания сухого и влажного кислорода, которые зависят от процессов окисления, проводимых ранее.

1.3.4. Двухмерные модели окисления кремния

Модели, основанные на теории окисления Дила–Гроува, позволяют рассчитывать произвольные двухмерные структуры. При этом уравнение (1.112) адекватно описывает движение поверхности раздела Si/SiO₂, если окисел движется в том же направлении, в каком он растет (для планарных окисляемых структур). Однако в большинстве реальных структур окисел движется в двухмерном пространстве. Двухмерное движение элементов окисла рассчитывается посредством численного решения уравнения гидродинамической ползучести в моделях COMPRESS и VISCOUS, используемых в современных программах технологического моделирования, в том числе в программе SSUPREM4.

Модель COMPRESS. В модели COMPRESS дополнительно к решению уравнений (1.112) и (1.113) решается упрощенное уравнение гидродинамического течения для получения потока окисных элементов [45, 46]. При пренебрежении ускорительными и гравитационными членами в уравнении гидродинамического течения уравнение ползучести имеет вид

$$h\nabla^2 \vec{V} = \nabla P, \quad (1.118)$$

где P – гидродинамическое давление; V – скорость роста элемента окисла; h – вязкость окисла.

Вязкость окисла рассчитывается из выражения

$$h = \frac{E}{(2 + 2m)}, \quad (1.119)$$

где E – модуль Юнга; m – коэффициент Пуассона.

Поток окисла рассматривается как несжимаемая жидкость. Полагается, что плотность окисла постоянна во времени. При таком предположении в уравнении непрерывности массы получаем следующее условие несжимаемости:

$$\vec{\nabla} \vec{V} = 0. \quad (1.120)$$

Условие несжимаемости в уравнении (1.120) при слабой сжимаемости выражается следующим образом:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = -\frac{1-(2m)}{h} P. \quad (1.121)$$

Решение уравнения (1.121) на каждом временном шаге дает поле скоростей элементов окисла.

Модель COMPRESS используется при моделировании планарных и непланарных структур, когда эффекты напряжения играют небольшую роль при определении формы окисла. Если эффекты напряжения существенны, обычно используется модель окисления VISCOUS. На рис. 1.49 показана двухмерная структура, полученная при моделировании LOCOS-окисления посредством использования модели COMPRESS.

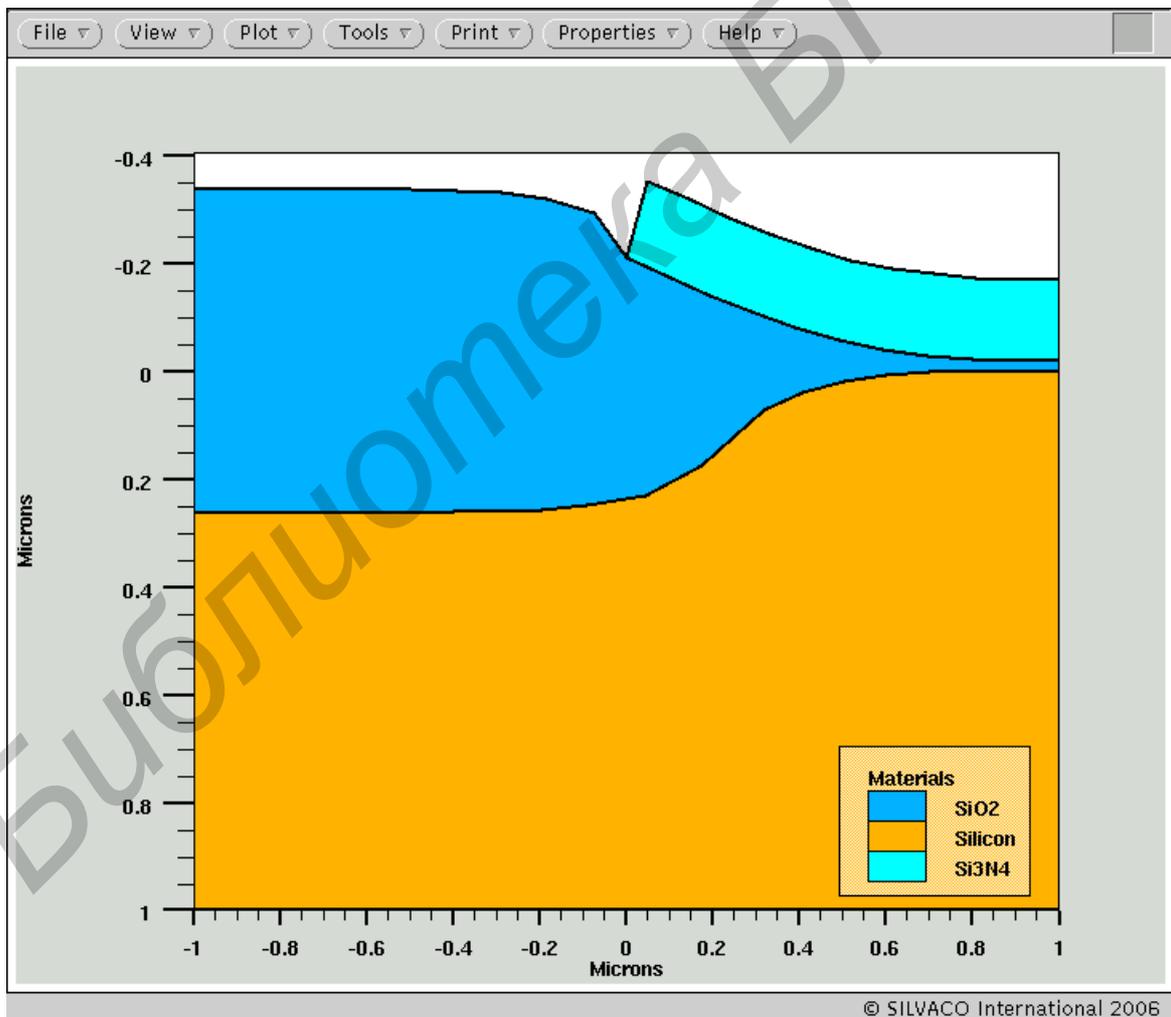


Рис. 1.49. Двухмерная структура, полученная при моделировании LOCOS-окисления посредством использования модели COMPRESS

Модель VISCOUS. В модели VISCOUS решаются те же уравнения, что и в модели COMPRESS. Однако при этом рассчитываются и напряжения в растущем окисле.

Напряжения в окисле рассчитываются следующим образом [55–57]:

$$s_{xx} + s_{yy} = \frac{2h \exp\left(\frac{-h_E}{k_B T}\right)}{1 - (2POISS.R)} \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} \right), \quad (1.122)$$

$$s_{xx} - s_{yy} = 2h \exp\left(\frac{-h_E}{k_B T}\right) \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} - \frac{\partial V_y}{\partial y} \right), \quad (1.123)$$

$$s_{xy} = hVISC.0 \exp\left(\frac{-h_E}{k_b T}\right) \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} - \frac{\partial V_y}{\partial y} \right), \quad (1.124)$$

где V_x и V_y – x и y компоненты скорости потока V ; η и η_E – пред-экспоненциальный коэффициент и энергия активации для вязкости.

Нелинейная модель с зависимостью от напряжения, предложенная в работе [49], позволяет описать реальную форму LOCOS-профиля с перегибами на поверхности раздела. С помощью уравнений (1.118) и (1.121)–(1.124) вначале решается линейная задача нахождения скоростей и напряжений, а затем рассчитываются коэффициенты для определения коэффициента диффузии окислителя D_{eff} , вязкости окисла h и константы скорости реакции на поверхности раздела k :

$$D_{eff}^{(i)} = D_{eff}^{(i-1)} \exp\left(\frac{V_d (s_{xx} + s_{yy})}{k_b T}\right)$$

$$m^{(i)} = m^{(i-1)} \frac{\left(\frac{tV_c}{2k_b T}\right)}{\sinh\left(\frac{tV_c}{2k_b T}\right)},$$

$$k^{(i)} = k^{(i-1)} \exp\left(-\frac{s_r V_r + s_t V_t}{k_b T}\right)$$

где i – номер итерации; V_d , V_c , V_r и V_t – активационные объемы; t – полное напряжение сдвига:

$$t = \frac{1}{2} \sqrt{(s_{xx} - s_{yy})^2 + 4s_{xy}^2},$$

s_r – нормальная компонента полного напряжения:

$$S_r = S_{xx}n_x^2 + S_{yy}n_y^2 + 2S_{xy}n_xn_y,$$

S_t – тангенциальная компонента полного напряжения:

$$S_t = S_{xx}n_y^2 + S_{yy}n_x^2 - 2S_{xy}n_xn_y,$$

где n_x и n_y – x - и y -компоненты единичного нормального вектора.

Найденные параметры подставляются на следующей итерации, и этот процесс продолжается до достижения заданной точности. Следует отметить, что время расчета по модели VISCOUS больше, чем по модели COMPRESS.

На рис. 1.50 приведена результирующая структура LOCOS-окисления, полученная по модели VISCOUS.

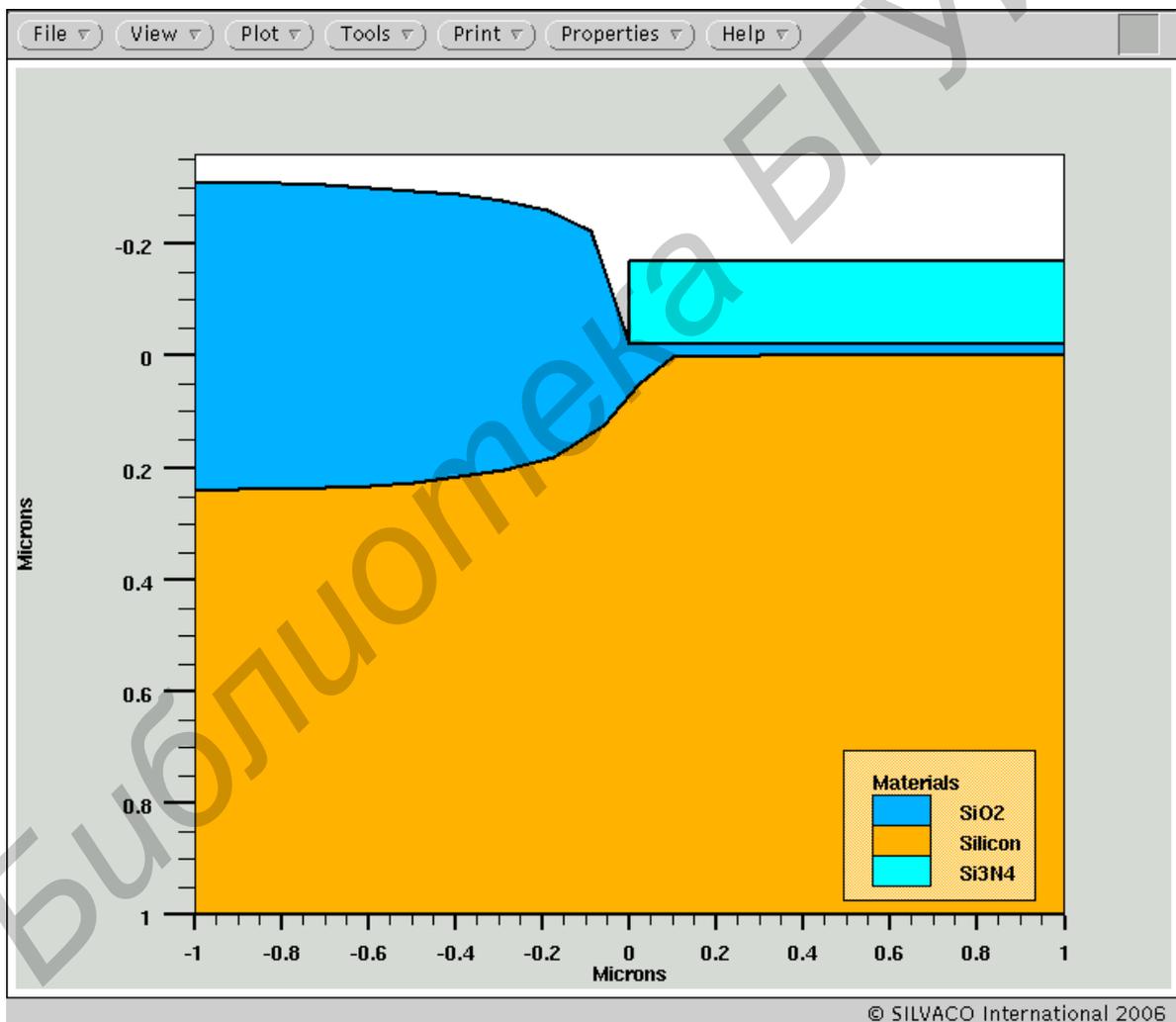


Рис. 1.50. Результирующая структура LOCOS-окисления, полученная по модели VISCOUS

1.3.5. Аналитическая двухмерная модель локального окисления кремния

Моделирование непланарного локального окисления (LOCOS-процесс), характеризующегося образованием подслоя окисла под нитридной маской в виде

так называемой геометрии «птичьего клюва», представляет собой сложную задачу. Процесс локального окисления сопровождается возникновением высоких механических напряжений вблизи края окна в маске и, как следствие, образованием дефектов кристаллической решетки с высоким уровнем их концентрации. Этот эффект не учитывается в физических моделях окисления кремния в приближении вязкого течения [45, 46] и вязко-упругой деформации [47, 48]. Кроме того, использование этих моделей при проектировании технологии формирования структурных элементов интегральных схем требует больших вычислительных затрат, что неприемлемо в статистических расчетах.

Более эффективной с точки зрения требуемых вычислительных ресурсов и физической адекватности результатов расчетов является аналитическая модель «птичьего клюва» [58].

В зависимости от толщины нитридной маски, как показывают результаты экспериментальных исследований, возможны две формы «птичьего клюва» (рис. 1.51).

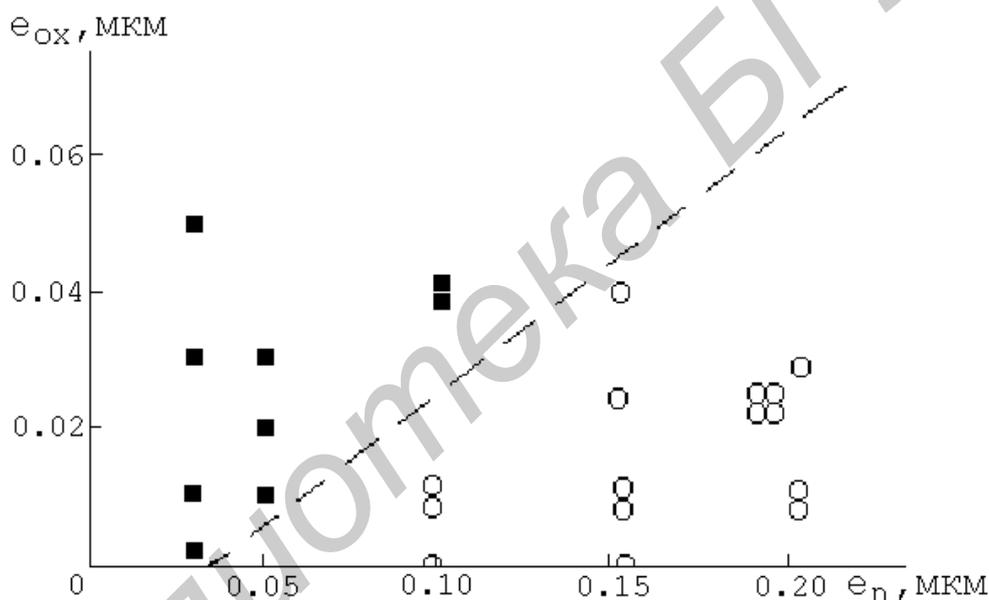


Рис. 1.51. Различные формы структуры «птичьего клюва», наблюдаемые в эксперименте [56]:
 ■ – структура 1; ○ – структура 2

Условно назовем форму «птичьего клюва», образующуюся при малых (< 0,05 мкм) толщинах нитридной маски, структурой 1 (низкий уровень напряжений вблизи края маски), а при больших (> 0,1 мкм) толщинах нитридной маски – структурой 2 (высокий уровень напряжений вблизи края маски).

В аналитической модели локального окисления основными параметрами являются толщина нитридной маски e_n и толщина исходного оксидного слоя e_{ox} под нитридом (рис. 1.52).

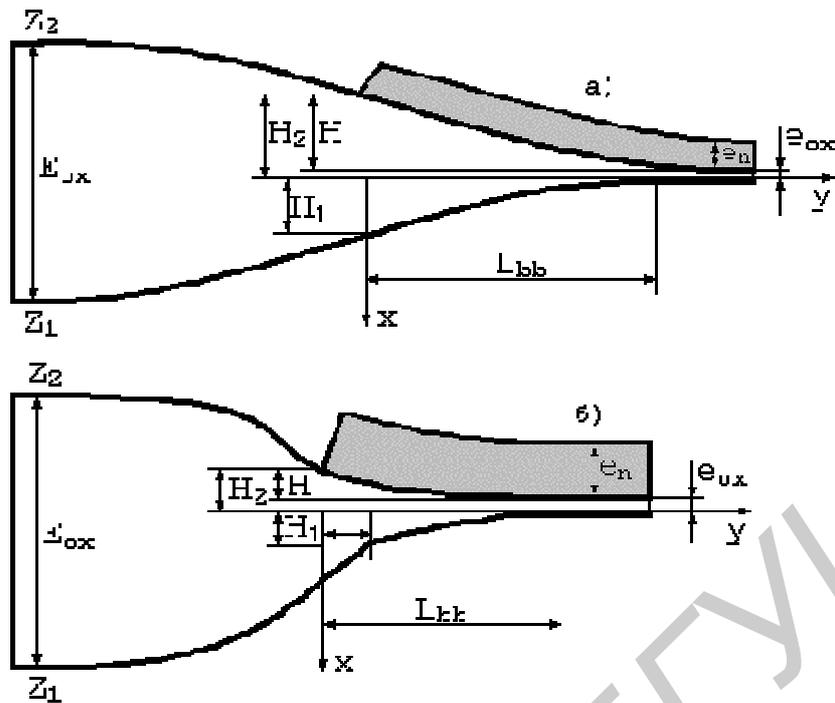


Рис. 1.52. Геометрия и параметры аналитической модели «птичьего клюва»:
а – структура 1, б – структура 2

На рис. 1.52 E_{ox} – толщина окисла, рассчитываемая по классической модели модели Дила–Гроува, а остальные параметры характеризуют геометрию «птичьего клюва» вблизи края маски и зависят от условий операции окисления (в основном, от температуры процесса). Z_1 и Z_2 – аналитические функции, описывающие поверхности раздела «окисел–кремний» и «окисел–окружающая среда» (окисел–нитрид) соответственно. Для каждой структуры геометрии «птичьего клюва» принимаются свои формы аналитических выражений для Z_1 и Z_2 .

Для структуры 1:

$$\begin{aligned} Z_1(y) &= a_1 \operatorname{erfc}(b_1 y + c_1) + d_1, \\ Z_2(y) &= a_2 \operatorname{erfc}(b_2 y + c_2) + d_2. \end{aligned}$$

Для структуры 2 вследствие высокого уровня напряжений вблизи края маски наблюдается ступенька на поверхности раздела «окисел–кремний» вблизи края маски, характеризующаяся сдвигом окисла на величину δ , поэтому принимаются две формы аналитических выражений для Z_1 и Z_2 слева и справа от этой ступеньки:

$$Z_1(y) = \left. \begin{aligned} & a'_1 \operatorname{erfc}(b'_1(y-d)), & y \geq d \\ & e'_1 \frac{d'_1 - y}{d'_1 - y + q}, & y < d \end{aligned} \right\},$$

$$Z_2(y) = \left. \begin{aligned} & a'_2 \operatorname{erfc}(b'_2 y) + c'_2, & y \geq 0 \\ & e'_2 \frac{d'_2 - y}{d'_2 - y + q}, & y < 0 \end{aligned} \right\},$$

где $q = 0,05$ мкм и $\delta = 0,04$ мкм.

Величины $a_1, b_1, a'_1, b'_1, \dots$ являются эмпирическими функциями технологических параметров e_n и e_{ox} ; E_{ox} – толщина окисла, рассчитываемая по модели Дила–Гроува для планарного процесса окисления. Параметры L_{bb} (длина бокового окисления под нитридом) и H (величина подъема маски при окислении) рассчитываются согласно следующим выражениям:

$$L_{bb} = K_L \left[(-T_{ox} + 1580,3) E_{ox}^{0,67} \exp\left(\frac{(e_n - 0,08)^2}{0,06}\right) e_{ox}^{0,3} \right],$$

$$H = K_H \left((-1,75e_n + 0,445) E_{ox} \exp\left(-\frac{T_{ox}}{200}\right) \right)$$

Здесь T_{ox} – температура ($^{\circ}\text{C}$), при которой производится окисление, $K_L = 8,25 \cdot 10^{-3}$, $K_H = 402$ для следующих диапазонов изменения величин E_{ox} , T_{ox} , e_n и e_{ox} :

$$\begin{aligned} & 0 < E_{ox} < 1,5 \text{ мкм}, \\ & 850 \text{ }^{\circ}\text{C} < T_{ox} < 1100 \text{ }^{\circ}\text{C}, \\ & 0,05 \text{ мкм} < e_n < 0,2 \text{ мкм}, \\ & 0 < e_{ox} < 0,05 \text{ мкм}. \end{aligned}$$

Приведенные аналитические выражения и диапазоны изменения параметров справедливы для подложки с кристаллографической ориентацией $\langle 100 \rangle$.

Описанная аналитическая модель достаточно точно воспроизводит геометрию «птичьего клюва», а использование экспериментальных данных позволяет оценить другие критические параметры, связанные с образованием этой структуры, в частности, упругие напряжения под маской и концентрации дефектов кристаллической решетки в условиях возникающих упругих деформаций.

В работе [59] исследована работоспособность описанной аналитической модели формирования структуры «птичьего клюва» вблизи края маски и перераспределения примесей в этом процессе.

Двухмерное моделирование профилей распределения фосфора в результате его имплантации в кремниевую подложку через окно в маске с произвольным на-

клоном ее углов осуществлялось посредством использования суперпозиции статистических функций распределения – PEARSON-IV вдоль направления бомбардирующих ионов и двух гауссиан вдоль поперечных направлений [20, 59]. Расчитанное распределение фосфора в виде изоконцентрационных линий (цифры на изолиниях соответствуют десятичному логарифму значения концентрации фосфора) после его имплантации в кремниевую подложку через окно в маске с прямоугольными краями размером $2 \times 2 \text{ мкм}^2$, с энергией имплантации 100 кэВ и дозой 10^{15} см^{-2} представлено на рис. 1.53.

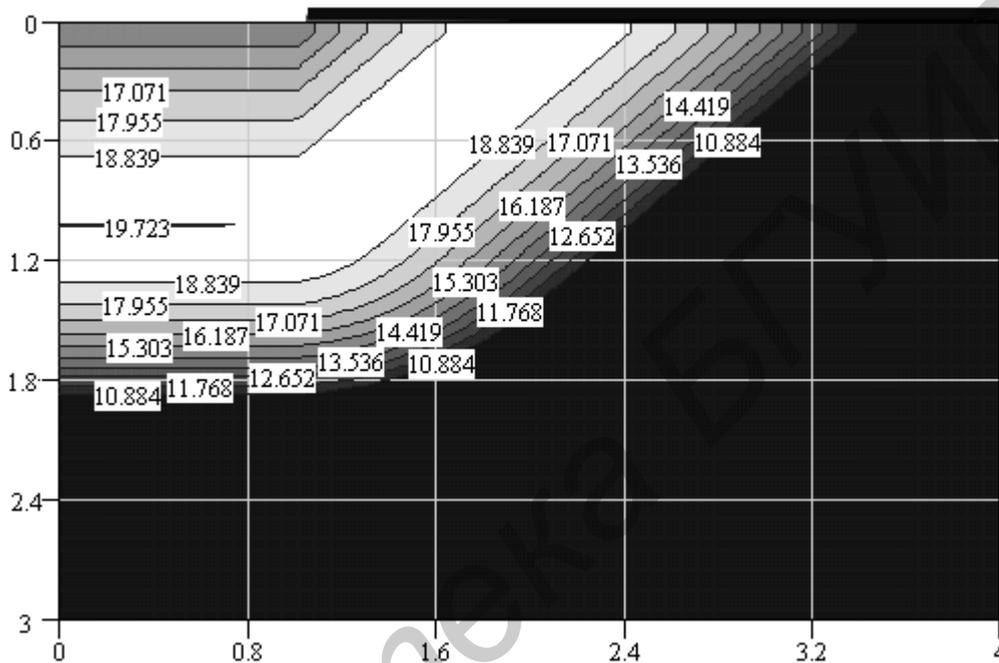
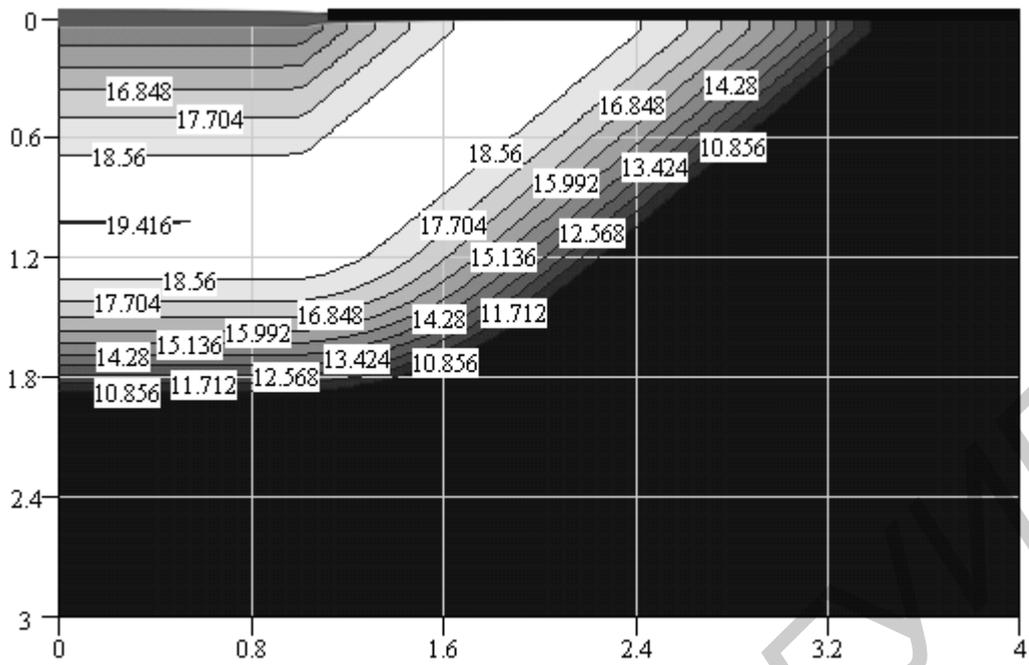


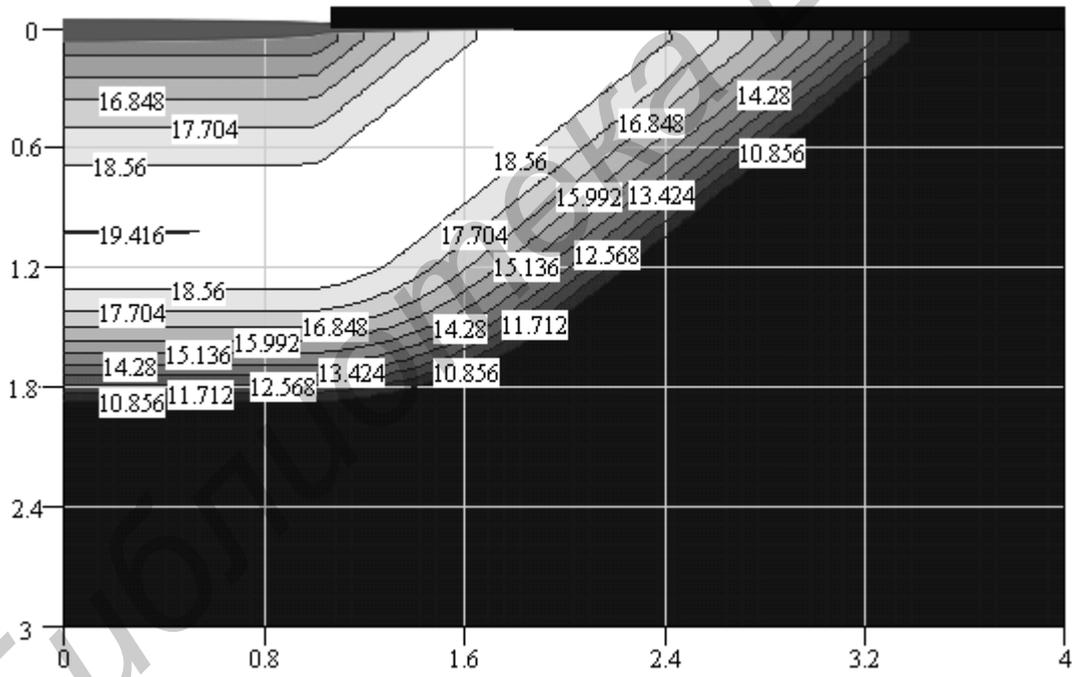
Рис. 1.53. Двухмерный профиль распределения фосфора в кремнии

Результаты моделирования последующего перераспределения фосфора в результате длительного высокотемпературного локального окисления представлены на рис. 1.54 и 1.55. Параметры процесса окисления: длительность 30 мин, температура 950 °С (см. рис. 1.54) и 1100 °С (рис. 1.55), окислительная среда – влажный кислород. В качестве варьируемых параметров кроме температуры процесса были выбраны величины толщины нитридной маски e_n (0,1 и 0,2 мкм) и толщины исходного оксидного слоя e_{ox} (0,001 и 0,04 мкм) под нитридом.

В программе SSUPREM4 форма «птичьего клюва» окисла под нитридными масками различной толщины рассчитывается с использованием двух моделей [58]. Одна из них описывает рост окисла под тонким слоем нитрида, когда напряжения от слоя нитридной маски пренебрежимо малы. Другая описывает рост окисла, когда толщина слоя нитрида достаточно велика и напряжения в окисле могут вызвать «вспучивание» слоя окисла.

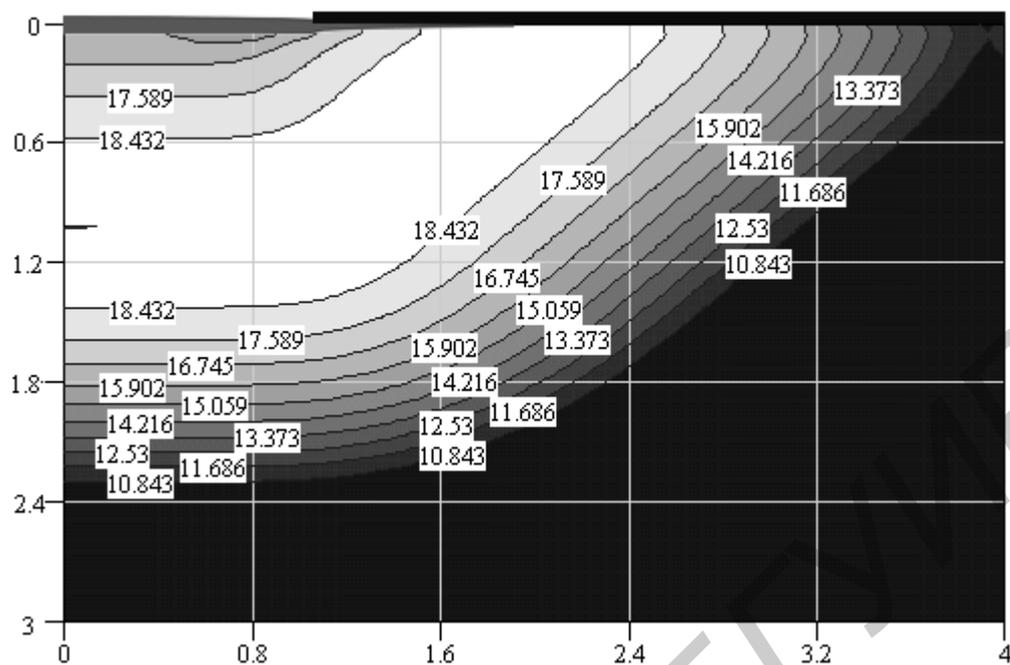


а

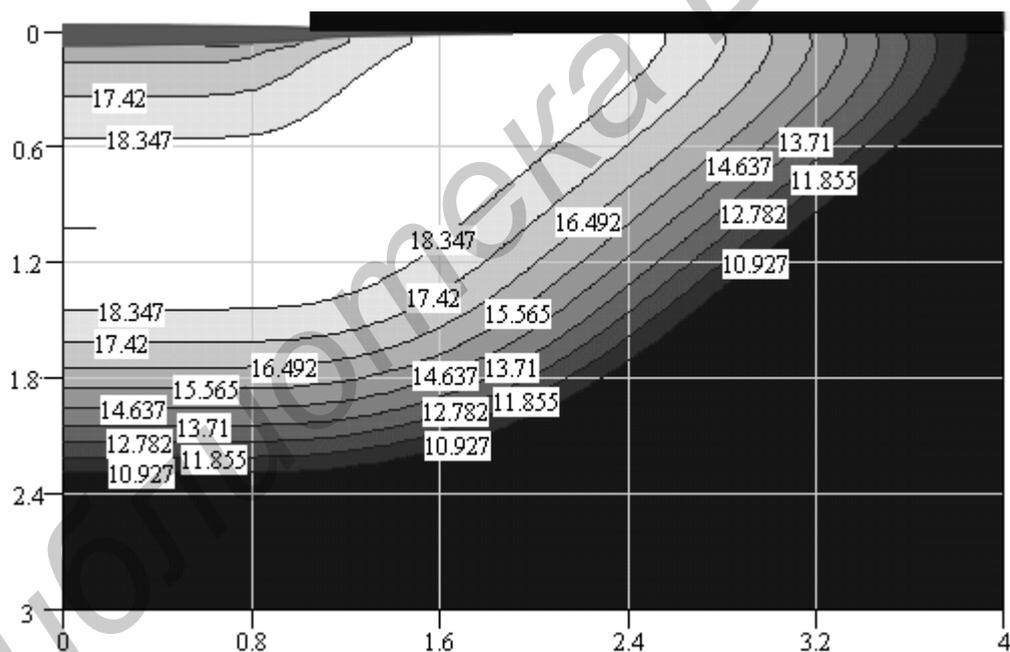


б

Рис. 1.54. Двухмерные пост-имплантационные профили распределения фосфора в кремнии: а – $e_n = 0,1$ мкм, $e_{ox} = 0,04$ мкм;
 б – $e_n = 0,2$ мкм, $e_{ox} = 0,001$ мкм



а



б

Рис. 1.55. Двухмерные пост-имплантационные профили распределения фосфора в кремнии: а – $e_n = 0,1$ мкм, $e_{ox} = 0,04$ мкм; б – $e_n = 0,2$ мкм, $e_{ox} = 0,001$ мкм

1.4. Моделирование ионной имплантации

Ионная имплантация – один из основных способов локального легирования полупроводниковых структур. Эта технологическая операция применяется не только для введения легирующих примесей в полупроводники, но также и для синтеза новых соединений, изменения механических, коррозионных, каталитиче-

ских и оптических свойств приповерхностных слоев материалов. Совершенствование технологий, использующих ионную имплантацию в качестве метода контролируемого введения примесей в твердые тела, требует все более точного описания распределений примесных атомов. Это особенно актуально при использовании высокоэнергетических и высокоинтенсивных имплантаций, коротких и импульсных отжигов, а также в безмасочных технологиях.

Существуют три взаимодополняющих метода расчета распределений имплантированных примесей: метод моментов [60], решение уравнений переноса частиц в пространстве энергий-углов [61] и моделирование траекторий ионов методом Монте-Карло [62].

Метод моментов является наиболее оптимальным при построении профилей распределения ионно-имплантированных примесей с известными моментами статистического распределения для определенных пар «ион–мишень» [63, 64].

В реальной технологии имплантация легирующих примесей производится через окно в маске (SiO_2 или Si_3N_4). Вследствие бокового ухода примесей под маску и проникновения части имплантируемой примеси через слой маски (при достаточно малой ее толщине) необходимо учитывать многомерность постимплантационного профиля.

В программе SSUPREM4 используются аналитические и статистические приближения для моделирования ионной имплантации. Аналитические модели основаны на построении профилей имплантированных ионов из рассчитанных или измеренных моментов распределений. В статистическом подходе используются результаты расчетов траекторий ионов методом Монте-Карло в физическом приближении с целью определения окончательного распределения остановившихся частиц.

1.4.1. Аналитические модели имплантации

Для расчета распределений ионно-имплантированных примесей используются пространственные моменты. Этот метод основан на концепции пробегов Линдхарда [65], в котором профиль ионно-имплантированных примесей строится на основании ранее рассчитанных или измеренных моментов. Двухмерное распределение может рассматриваться как суперпозиция продольного (вдоль направления имплантации) и поперечного (перпендикулярно направлению имплантации) одномерных распределений.

Гауссово распределение ионно-имплантированных примесей. Гауссово одномерное распределение имеет следующий вид:

$$C(x) = \frac{f}{\sqrt{2p\Delta R_r}} \exp \frac{-(x - R_p)^2}{2\Delta R_r^2}, \quad (1.125)$$

где f – доза; R_p – проективный пробег; ΔR_r – страгглинг проективного пробега или стандартное отклонение.

Распределение Пирсона ионно-имплантированных примесей. Для большинства реальных профилей гауссово распределение неадекватно, поскольку реальные профили несимметричны. Простейшим и наиболее широко используемым методом расчета асимметричных продольных профилей распределения ионно-имплантированных примесей является распределение Пирсона и в особенности функция распределения Пирсон IV.

Функция Пирсон IV относится к семейству статистических распределений как результат решения следующего дифференциального уравнения:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{(x-a)f(x)}{b_0 + b_1x + b_2x^2},$$

в котором $f(x)$ – частотная функция. Константы a , b_0 , b_1 и b_2 связаны с моментами функции $f(x)$ следующими соотношениями:

$$a = -\frac{\Delta R_p g(b+3)}{A}, \quad b_0 = -\frac{\Delta R_p^2(4b-3g^2)}{A}, \quad b_1 = a, \quad b_2 = -\frac{2b-g^2-6}{A},$$

где $A = 10b - 12g^2 - 18$, а g и b – параметры, называемые соответственно асимметрией (*skewness*) и скошенностью или эксцессом (*kurtosis*).

Эти параметры распределения Пирсона непосредственно связаны с четырьмя моментами (m_1 , m_2 , m_3 и m_4) функции распределения $f(x)$:

$$R_p = m_1; \quad \Delta R_p = \sqrt{m_2}; \quad g = \frac{m_3}{R_p^3}; \quad b = \frac{m_4}{R_p^4}.$$

Параметры m_i определяются следующими выражениями:

$$m_i = \int_{-\infty}^{\infty} x^i f(x) dx, \quad m_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^i f(x) dx \quad i = 2, 3, 4 \dots$$

Формы решения дифференциального уравнения Пирсона зависят от природы корней уравнения $b_0 + b_1x + b_2x^2 = 0$. Существуют различные формы кривых распределения Пирсона. Их полная классификация содержится в работе [66]. Очевидно, что только колоколообразные кривые подходят для профилей распределения имплантированных ионов. В работе [67] показано, что функция $f(x)$ имеет максимум, когда $b_0 + b_1x + b_2x^2 = 0$. Это выражение можно представить в виде следующего соотношения между b и g :

$$b > \frac{9 \left\{ (6g^2 + 5) + \left[(9g^6)/16 + 8g^4 + 25(g^2 + 1) \right]^{1/2} \right\}}{50 - g^2} \quad (1.126)$$

с дополнительным ограничением $g^2 < 50$.

Только распределение Пирсон IV имеет единственный максимум при $x = a + R_p$, и оно монотонно спадает до нуля по обе стороны распределения. Таким образом, именно распределение Пирсон IV обычно используется для построения профиля распределения ионно-имплантированных примесей. Распределение Пирсон IV является решением уравнения (1.125) при удовлетворении следующих условий:

$$b = \frac{39g^2 + 48 + 6(g^2 + 4)^{3/2}}{32 - g^2}, \quad 0 < g^2 < 32, \quad (1.127)$$

что дает следующую формулу для распределения Пирсон IV:

$$f(x) = K \left[b_0 + b_1(x - R_p) + b_2(x - R_p)^2 \right]^{1/(2b_2)} \times \\ \times \exp \left[- \frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_1b_2 - b_1^2}} \operatorname{atan} \left(\frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_1b_2 - b_1^2}} \right) \right],$$

где K определяется ограничением

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1. \quad (1.128)$$

В узкой области, где критерий распределения Пирсон IV (1.127) не выполняется, но выполняется критерий колоколообразной формы распределения (1.126), используются другие типы функции Пирсона, для которых свойство «колоколообразности» не выполняется по всему интервалу изменения x . Обычно это не влияет на качество рассчитанных профилей, поскольку пределы изменения таких функций располагаются достаточно далеко от положения их максимума. В стандартной модели с использованием распределения Пирсон IV продольное распределение концентрации примеси пропорционально дозе ионов:

$$C(x) = f(x).$$

Приближение с использованием распределения Пирсон IV дает адекватные результаты для многих комбинаций ион/подложка/доза. Однако во многих практически важных случаях, когда необходимо учитывать эффект каналирования, использование приближения Пирсона приводит к неадекватным результатам.

Модель со сдвоенным распределением Пирсона. Для расширения применимости аналитического приближения с целью учета эффекта каналирования в работе [68] предложена модель профиля распределения ионно-имплантированных примесей с использованием сдвоенного распределения Пирсона. В этой модели распределение концентрации примесей представляется в виде линейной комбинации двух функций:

$$C(x) = f_1 f_1(x) + f_2 f_2(x), \quad (1.129)$$

где $f_1 + f_2 = f$ – полная доза, а $f_1(x)$ и $f_2(x)$ – нормализованные функции Пирсон IV, каждая со своими моментами.

Первая функция Пирсона описывает случайные столкновения имплантируемых примесей с атомами подложки (вблизи пика профиля), а вторая – область хвоста, обусловленного эффектом каналирования. Уравнение (1.120) можно переписать в другой форме:

$$C(x) = f[Rf_1(x) + (1 - R)f_2(x)], \quad (1.130)$$

где $R = f_1/f_2$.

Чтобы использовать распределение Пирсона в таком виде, необходимо иметь 9 параметров: по 4 момента для каждой части такого распределения плюс отношение доз.

Моделирование имплантации в многослойную структуру. Чтобы использовать любую из приведенных выше аналитических функций распределения для структур, состоящих из слоев с различными материалами, следует применить специальную методику для изменения параметров пробегов в этих функциях, соответствующих для каждого материала.

Метод подгонки к дозе. Этот метод впервые предложен в работе [69]. Сегмент профиля внутри i -го слоя рассчитывается следующим образом:

$$C_i(x) = ff(x - x_t + x_{eff}), \quad (1.131)$$

где $f(x)$ – функция распределения (Гаусс, Пирсон или сдвоенный Пирсон) с моментами, соответствующими i -му слою; x – расстояние от поверхности подложки до верхней поверхности i -го слоя; x_t – толщина k -го слоя,

$$x_t = \sum_{1 \leq k \leq i-1} t_k; \quad (1.132)$$

x_{eff} – эффективная толщина, рассчитываемая из выражения

$$\int_0^{x_{eff}} C_i(x) dx = \sum_{1 \leq k \leq i-1} f_k, \quad (1.133)$$

где f_k – доля полной дозы имплантации в k -м слое. Очевидно, что для первого слоя $x_{eff} = 0$ и $x_t = 0$.

Методы коррекции проективного пробега и максимальной глубины имплантации. Два других метода в аналитическом приближении для многослойных

структур состоят в изменении величины проективного пробега и максимальной глубины. Эти два метода отличаются от метода подгонки к дозе способом расчета эффективной глубины x_{eff} , а также способом нормализации парциальных профилей в слоях. Как и в методе подгонки к дозе, распределение в первом слое рассчитывается с использованием моментов для первого слоя. Для последующих слоев распределение примесей рассчитывается следующим образом:

$$C_i(x) = Nf(x - x_i + x_{eff}) \text{ и } N = \left(f - \sum_{1 \leq k \leq i-1} f_k \right) / f_i,$$

где N – коэффициент нормализации; f – доза имплантации; x_{eff} – эффективная глубина, рассчитываемая следующим образом. При расчете проективного пробега x_{eff} для i -го слоя:

$$x_{eff} = \sum_{1 \leq k \leq i-1} \frac{t_k}{R_p^k} R_p^{k+1},$$

где R_p^k – проективный пробег иона в материале k -го слоя. При масштабировании максимального пробега x_{eff} рассчитывается по формуле

$$x_{eff} = \sum_{1 \leq k \leq i-1} \frac{t_k}{R_p^k + 3\Delta R_p^k} (R_p^{k+1} + 3\Delta R_p^{k+1}),$$

где ΔR_p^k – страгглинг проективного пробега в k -м слое. В этом приближении рассчитанная величина максимального пробега используется как мера внедрения иона в соответствующий материал.

Метод коррекции моментов. В обоих описанных выше методах моделирования имплантации в многослойную структуру параметры пробегов считаются не зависящими от наличия других слоев. Однако очевидно, что распределение торможения ионов в более глубоких слоях может зависеть от толщины и характеристик торможения более высоких слоев, поскольку каждая траектория ионов проходит через указанные более высокие слои. Метод коррекции моментов (Moment Correction Method, MCM) частично учитывает этот эффект. В MCM-методе проективный пробег и страгглинг в данном слое нормализуются в соответствии с вероятностью проникновения иона в данный слой. Единственной доступной мерой этой вероятности является доля дозы в данном слое. Таким образом, скорректированные проективный пробег R_{pc} и страгглинг в i -м слое рассчитываются следующим образом:

$$R_{pc} = f_i R_p^i + \sum_{1 \leq k \leq i-1} f_k R_p^k, \quad \Delta R_{pc} = f_i R_p^i + \sum_{1 \leq k \leq i-1} f_k R_p^k, \quad \text{где } f_i = f - \sum_{1 \leq k \leq i-1} f_k.$$

Построение двумерных профилей. Метод свертки. Метод свертки заключается в следующем. Прежде всего устанавливается направление имплантации относительно рассматриваемой плоскости, используя угловые параметры θ (угол между направлением пучка ионов и осью y) и φ (угол между направлением пучка ионов и рассматриваемой поверхностью). Например, $\varphi = 0^\circ$ и $\theta > 0^\circ$ соответствуют ионному пучку, параллельному рассматриваемой плоскости и направленному в нижний правый угол рассматриваемой поверхности. $\varphi = 90^\circ$ и $\theta > 0^\circ$ соответствуют ионному пучку в плоскости, перпендикулярному рассматриваемой плоскости и направленному в рассматриваемую плоскость. Эффективный угол имплантации в рассматриваемой плоскости определяется из следующего выражения:

$$\operatorname{tg}(\alpha) = \operatorname{tg}(\theta)\cos(\varphi).$$

Фронт имплантации, перпендикулярный направлению α , разделяется на ряд слоев N_s (обычно > 100) шириной a . Концентрация ионно-имплантированных примесей в каждой точке сетки i с координатами (x_i, y_i) рассчитывается путем суммирования вкладов от каждого k -го слоя:

$$C(x_i, y_i) = \sum_{1 \leq k \leq N_s} C_k(x_i, y_i).$$

Вклад от каждого слоя C_k рассчитывается посредством интегрирования частотной функции $F_{2D}(x, y)$ двумерного источника (от начальной точки в сечении, нормальном к центральному слою поверхности структуры) по ширине слоя:

$$C_k(x_i, y_i) = \int_{-a/2}^{a/2} f_{2D}(d_i, t_i) dt,$$

где d_i – глубина вдоль направления имплантации (т.е. расстояние между начальной точкой и проекцией точки i на вектор \vec{n}), а t_i – поперечное расстояние (т.е. расстояние между точкой i и вектором \vec{n}).

Моделирование бокового распределения примесей в зависимости от глубины. Простейшей формой двумерной частотной функции является произведение продольной функции $f_1(x)$ (которая может быть функцией Гаусса, Пирсона или двойной функцией Пирсона) на не зависящую от глубины поперечную функцию $f_i(y)$:

$$f_{2D}(x, y) = f_1(x)f_i(y). \quad (1.134)$$

Очевидно, что функция $f_i(y)$ должна быть симметричной и иметь колоколообразную форму.

Функция Гаусса для бокового распределения. Такая функция используется в случае, если величина эксцесса отличается от значения 3,0, задаваемого по умолчанию. В этом случае интегрирование уравнения (1.125) дает

$$C(x_i, y_i) = \frac{1}{2} f f_1(d_i) \left[\operatorname{erfc} \frac{t_i - a/2}{\sqrt{2\Delta Y}} - \operatorname{erfc} \frac{t_i + a/2}{\sqrt{2\Delta Y}} \right],$$

где ΔY – продольное стандартное отклонение, определяемое из выражения

$$\Delta Y = f \int_{-\infty}^{\infty} \int f_{2D}(x, y) y^2 dx dy. \quad (1.135)$$

Параболическое приближение для бокового распределения, зависящего от глубины. В работах [70–73] показано, что продольная функция $f_t(y)$ не зависит от глубины, поскольку имеется существенная корреляция между поперечным и продольным движениями имплантируемых ионов. Эту корреляцию можно учесть, используя поперечную функцию с не зависящим от глубины боковым стандартным отклонением. Как показано в работах [71, 73], если используются пространственные моменты вплоть до четвертого порядка, наилучшим приближением является параболическая функция

$$s_y^2(x) = c_0 + c_1(x - R_p) + c_2(x - R_p)^2.$$

Чтобы найти коэффициенты этой функции, следует использовать два дополнительных пространственных момента: так называемую смешанную асимметрию

$$g_{xy} = \int_{-\infty}^{\infty} \int f_{2D}(x, y) (x - R_p) y^2 dx dy \quad (1.136)$$

и смешанный эксцесс

$$b_{xy} = \int_{-\infty}^{\infty} \int f_{2D}(x, y) (x - R_p)^2 y^2 dx dy. \quad (1.137)$$

Параметры c_0 и c_2 можно определить, подставив уравнение (1.134) в уравнения (1.135), (1.136) и (1.137) и принимая во внимание уравнения (1.127) – (1.133) при интегрировании по x . Это приводит к системе уравнений, из которой можно получить следующие соотношения:

$$c_0 = \Delta Y^2(1 - B), \quad c_1 = \frac{\Delta Y^2}{\Delta R_p} (g_{xy} - gB), \quad c_2 = \frac{\Delta Y^2}{\Delta R_p^2} B, \quad \text{где } B = \frac{b_{xy} - 1 - gg_{xy}}{b - 1 - g^2}.$$

Негауссовы функции для бокового распределения. Результаты моделирования методом Монте-Карло [74] показывают, что в большинстве случаев функция поперечного распределения является негауссовой. Другими словами, поперечный эксцесс, рассчитываемый по формуле

$$b_y = \int_{-\infty}^{\infty} \int f_{2D}(x, y) y^4 dx dy,$$

не всегда равен 3,0 и, кроме того, зависит от глубины. Несколько негауссовых поперечных функций распределения исследованы в работе [75], где показано, что применимы симметричные функции Пирсона (типа II для $\beta_y \leq 3,0$ и типа VII для $\beta_y \geq 3,0$), которые обеспечивают хорошее согласие с результатами расчетов методом Монте-Карло для аморфного кремния и обладают высокими вычислительными характеристиками, поскольку их можно интегрировать по x в замкнутой форме через неполные β -функции [76].

Другой альтернативой для функции поперечного распределения является использование модифицированной функции Гаусса (МФГ), предложенной в работе [74]. В [76] показано, что ее также можно интегрировать в замкнутой форме с использованием Γ -функции. Выбор типа функции поперечного распределения в определенной степени субъективен, поскольку он основан на сравнении с боковым сечением двухмерных распределений, полученных методом Монте-Карло, точность которого уменьшается вдали от положения его максимума. Анализ, проведенный в работе [77] на основании ВСА-моделирования (см. подразд. 1.4.2 «Моделирование имплантации методом Монте-Карло»), показал, что функция типа Пирсон II несколько недооценивает концентрации, полученные в ВСА-расчетах, тогда как расчеты в МФГ-приближении переоценивают эти концентрации. Поэтому обычно используется среднее приближение между Пирсон II и МФГ для всех $\beta_y < 3,0$. Если $\beta_y = 3,0$, то обе функции сводятся к функции Гаусса. И, наконец, в работе [77] показано, что в случае более высоких значений β_g МФГ-модель является самым лучшим приближением.

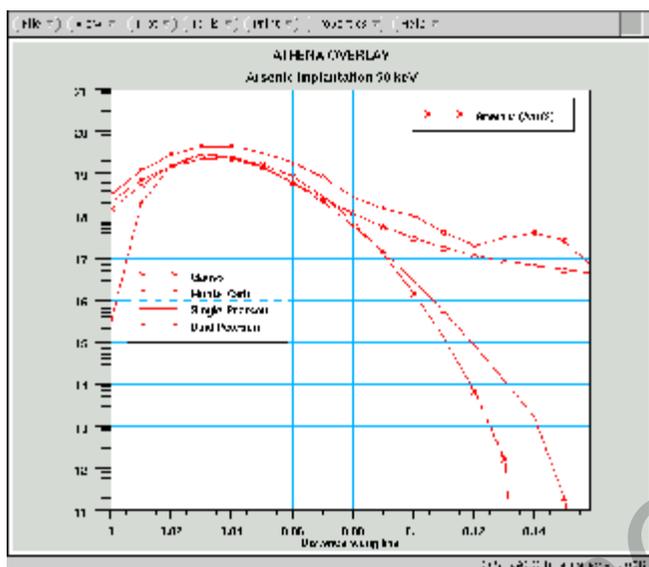
Задача определения функции $b_y(x)$ является более трудной, чем сделанное выше определение функции $S_y(x)$, поскольку в этом случае необходимо использовать пространственные моменты пятого и шестого порядков, чтобы построить аналитическую функцию для зависимости $b_y(x)$. Поэтому обычно используется постоянное значение b_y , не зависящее от x .

1.4.2. Моделирование имплантации методом Монте-Карло

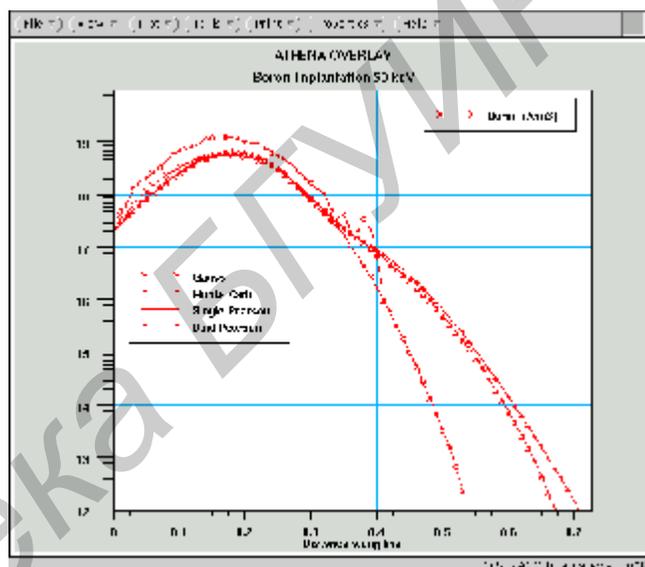
Аналитические модели дают хорошие результаты только при рассмотрении ионной имплантации в простые планарные структуры (в чистый кремний или в кремний, покрытый тонким слоем другого материала). Однако для структур, содержащих много непланарных слоев, необходимы более сложные модели. Наиболее гибким и универсальным приближением для моделирования ионной имплантации в нестандартных условиях является метод Монте-Карло. Это приближение

позволяет рассчитывать имплантационные профили в произвольных структурах с точностью, сравнимой с точностью аналитических моделей для однослойной структуры.

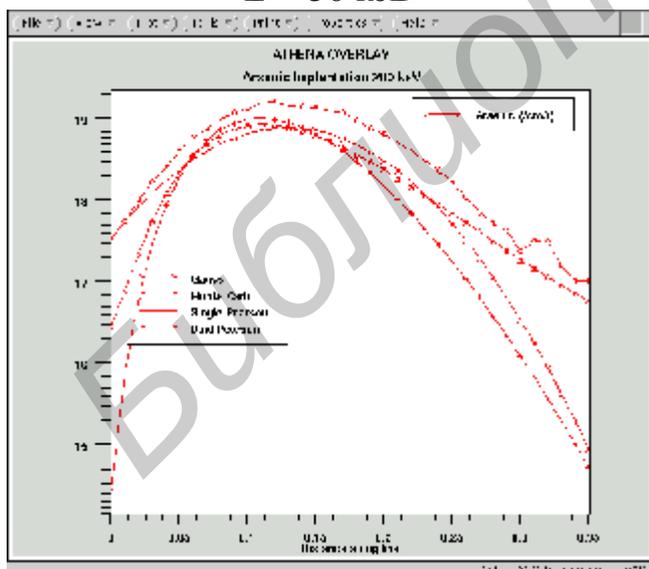
На рис. 1.56 приведены профили распределений бора и мышьяка, имплантированных в однослойную структуру кремния с дозой $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, для двух значений энергий имплантации – 50 и 200 кэВ, полученные с использованием различных способов их построения (гауссова функция распределения, статистическая функция распределения Пирсон IV, сдвоенная функция распределения Пирсон IV и метод Монте-Карло). Расчеты проведены с использованием программы SSUPREM4.



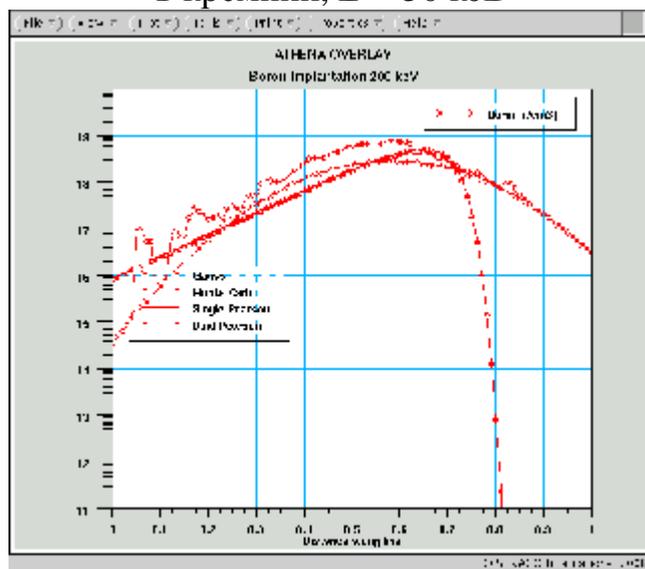
а) бор, имплантированный в кремний,
 $E = 50 \text{ кэВ}$



б) мышьяк, имплантированный
в кремний, $E = 50 \text{ кэВ}$



в) мышьяк, имплантированный
в кремний, $E = 50 \text{ кэВ}$



г) мышьяк, имплантированный
в кремний, $E = 200 \text{ кэВ}$

Рис. 1.56. Профили распределений бора и мышьяка,
имплантированных в однослойную структуру

Анализ профилей, представленных на рисунке 1.56, показывает качественную независимость профилей от массы имплантируемых ионов.

Известны по крайней мере три модели имплантации, реализуемые в цикле Монте-Карло: для аморфного материала, для кристаллического материала и ВСА-модель для кристаллического материала. Все они основаны на приближении бинарных столкновений (Binary-Collision Approximation, ВСА), но используют различные приближения относительно структурного материала и распространения в нем ионов.

Сущность физической проблемы. Пучок быстрых ионов (с энергией от 1 эВ до 25 кэВ) в кристаллическом или аморфном твердом теле замедляется или рассеивается вследствие ядерных столкновений и электронного взаимодействия. На своем пути каждый ион может образовывать атомы отдачи, которые в свою очередь образуют каскады атомных столкновений. Они могут покидать поверхность подложки (эффект распыления) или застревать в узлах кристаллической решетки. Вместе с ионами, осажденными на подложке, это приводит к локальным изменениям в составе, повреждению кристаллической решетки и, наконец, к аморфизации мишени. В зависимости от ориентации кристаллической подложки и/или направления пучка имплантируемые ионы, а также создаваемые ими радиационные повреждения имеют различное пространственное распределение. При больших потоках эти явления будут создавать перемешивание в локальных областях, изменения в составе приповерхностных областей вследствие распыления и установления стационарных профилей имплантированных ионов.

Метод решения задачи. Траектории отдельных движущихся частиц и процессы их столкновений моделируются посредством приближения бинарных столкновений в кристаллических, поликристаллических и аморфных веществах, используя экранированный кулоновский потенциал для ядерных столкновений и комбинацию локального и нелокального приближения электронного газа для электронных энергетических потерь. Для каждого ядерного столкновения рассчитывается параметр столкновения и азимутальный угол отклонения частицы в соответствии с рассматриваемой кристаллической структурой, используя ее трансляционную симметрию. Для аморфных материалов параметр столкновения и азимутальный угол отклонения частицы определяются по закону случайных чисел.

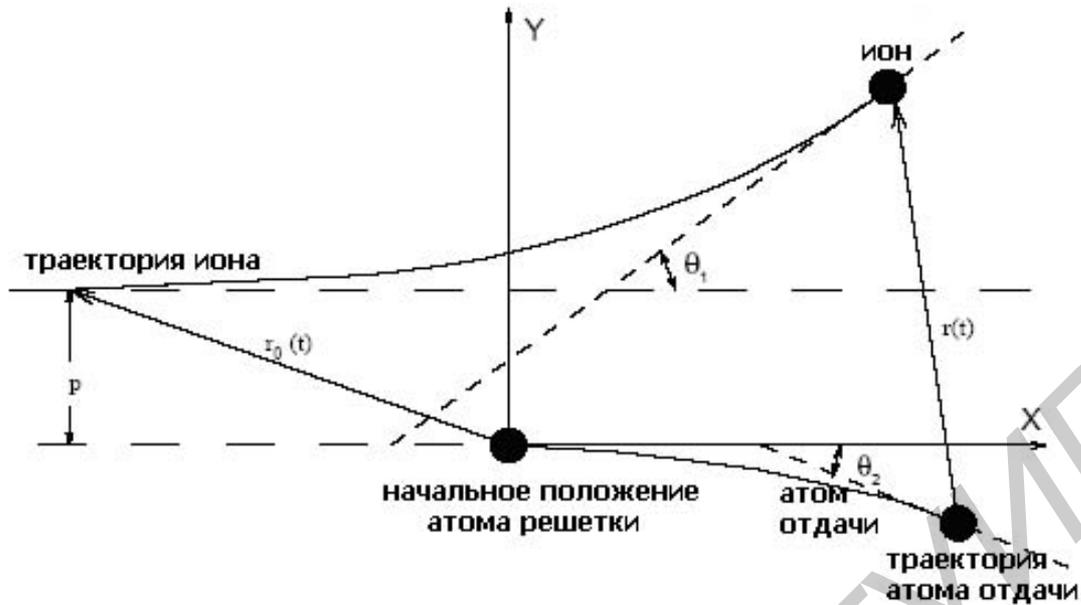


Рис. 1.57. Траектории иона и атома отдачи в приближении упругих столкновений

Ядерное торможение. При прохождении через вещество ионы взаимодействуют не только с атомами кристаллической решетки, но и с электронами. На рис. 1.57 показана геометрия рассеяния двух частиц в лабораторной системе координат. В ВСА-модели предполагается, что ионы движутся из одной точки по отрезкам прямой линии, являющимся асимптотами их траекторий. При каждом столкновении ион теряет свою энергию посредством квазиупругого рассеяния на атомах решетки и посредством электронных потерь.

Углы рассеяния иона и атома отдачи выражаются следующим образом:

$$\operatorname{tg} \vartheta_1 = A f \sin \theta / (1 + A f \cos \theta),$$

$$\operatorname{tg} \vartheta_2 = f \sin \theta / (1 + f \cos \theta),$$

где $f = \sqrt{1 - Q/E_r}$, Q – потеря энергии на электронное возбуждение; $A = M_2/M_1$ – отношение массы атома мишени (рассеянного атома) к массе налетающего (имплантируемого) иона; q – угол рассеяния, определяемый следующим образом:

$$q = p - 2p \int_R^{\infty} \frac{1}{r^2 g(r)} dr,$$

где

$$g(r) = \sqrt{1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_r}},$$

здесь p – параметр столкновения; $E_r = A E_0 / (1 + A)$ – относительная кинетическая энергия иона; E_0 – энергия падающего иона; r – межатомное расстояние; $V(r)$ – межатомный потенциал; R – параметр, определяемый из уравнения $g(R) = 0$.

Сечения падающей и рассеянной частиц определяются посредством использования приближения твердых сфер:

$$x_1 = r \operatorname{tg}(\theta/2), \quad x_2 = 0.$$

Межатомный потенциал. Простейшим потенциалом $V(r)$ межатомного взаимодействия, используемым в ВСА-приближении, является двухчастичный кулоновский потенциал с экранирующей функцией, которая является численной подгонкой к решению, полученному Фирсовым [78]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} c \left(\frac{r}{a_0} \right),$$

где Z_1 и Z_2 – атомные номера атомов 1 и 2; a_0 – радиус экранировки, определяемый согласно выражению:

$$a_0 = 0,8853 a_B \bar{Z}^{-1/3},$$

\bar{Z} – средняя величина атомных номеров обоих атомов:

$$\bar{Z}^{-1/3} = (Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})^{-1} M.$$

Основной недостаток таких двухчастичных потенциалов заключается в их относительно медленном затухании при $r \rightarrow \infty$. Параметр экранировки a_0 рассматривается как подгоночный параметр в самосогласованных расчетах или в процедуре согласования с экспериментальными данными. Экранирующая функция имеет следующую форму:

$$c = \sum_{i=1} a_i \exp(-b_i x),$$

где a_i и b_i – константы [79].

Электронное торможение. Электронное торможение, используемое при моделировании в ВСА-приближении, состоит из двух отдельных механизмов неупругих энергетических потерь – локального и нелокального. Эти два механизма электронного торможения совершенно различны как по физической природе, так и по поведению – они имеют разные энергетические и пространственные зависимости [80]. Локальные неупругие энергетические потери основаны на модели, предложенной Фирсовым [81]. Согласно этой модели, расчет электронных энергетических потерь на столкновение основан на предположении о квазиклассической картине электронов, а именно, на средней энергии возбуждения электронных оболочек и на распределении и движении электронов согласно модели атома То-

маса–Ферми. В этом квазиклассическом представлении перенос энергии ΔE от иона к атому обусловлен переходом электронов от одной частицы к другой, что приводит к изменению момента иона (пропорционально его скорости v) и к увеличению силы, действующей на ион. Когда ионы движутся от атома, то, несмотря на его захват ионом, электроны возвращаются на атом. При этом не происходит изменения момента, поскольку электроны переходят на более высокие энергетические уровни. Локальные энергетические потери, согласно модели Фирсова, рассчитываются следующим образом:

$$-\Delta E = \frac{0,05973(Z_1 + Z_2)^{5/3} \sqrt{E/M_1}}{(1 + 0,31(Z_1 + Z_2)^{1/3} R_0)^5}, eV,$$

где R_0 – расстояние наибольшего сближения ионов в ангстремах, которое приблизительно равно параметру столкновения в случае упругих соударений под малыми углами; E – энергия движущегося атома (иона) в эВ; M_1 – масса имплантируемого иона в атомных единицах массы.

В бинарном столкновении углы рассеяния зависят от неупругих энергетических потерь через параметр f .

Нелокальные электронные энергетические потери обычно рассчитываются по модели, описанной в работе [82]. Замедляющая способность среды $S = dE/dx$ для иона в первом приближении пропорциональна среднеквадратичному эффективному заряду иона. Эффективный заряд иона, ответственный за замедляющую способность, выводится из данного ионизационного состояния q . Дробный эффективный заряд иона в данном ионизационном состоянии q можно записать в следующем виде:

$$z \equiv \frac{Z_1^*}{Z_1} = \left[\frac{S_q}{S_{q=1}} \right]^{1/2},$$

где $S_{q=1}$ – замедляющая способность для чистого ядра. Теория Брандта–Китагавы дает следующее простое выражение для дробного эффективного заряда иона:

$$\zeta \approx q + C(k_F)(1 - q) \ln(1 + (2\Lambda v_F a_0 r_0)^2), \quad (1.138)$$

где $q = (Z_1 - N/Z)_1$ – степень ионизации; N – число электронов, связанных с ядром падающего иона; a_0 и r_0 – скорость падающего иона и радиус боровской орбиты; k_F и v_F – волновой вектор Ферми и скорость Ферми.

Для радиуса экранировки используется экспоненциальная форма распределения, что дает

$$\Lambda = \frac{0,48N^{2/3}}{Z_1(1 - N/(7N_1))}.$$

Единственной неопределенной величиной в выражении (1.138) является константа C , примерно равная 0,5 и слабо зависящая от материала мишени. Степень ионизации q можно выразить так:

$$q = 1 - \exp\left(\frac{-0,92v_r}{v_0 Z_1^{2/3}}\right),$$

где $v_r \equiv \langle v_I - v_e \rangle$ – относительная скорость между падающим ионом и электронами мишени, которая рассчитывается следующим образом:

$$v_r = \frac{3v_F}{4} \left[1 + \left(\frac{2v_1^2}{3v_F^2} \right) - \frac{1}{15} \left(\frac{v_1}{v_F} \right) \right] \text{ для } v_1 < v_F, \quad v_r = v_1 \left(1 + \frac{v_F^2}{5v_1^2} \right) \text{ для } v_1 \geq v_F.$$

Модель радиационных повреждений кристаллической решетки. Описываемая модель включает рассмотрение динамических процессов превращения мишени из кристаллического состояния в аморфное в процессе ионной имплантации. С каждым налетающим ионом связана следующая характеристика реальной дозы:

$$\Delta\Phi = \Phi/N,$$

где N – число падающих ионов. Для каждой точки пространственной сетки рассчитывается запасенная энергия, связанная с общим числом имплантированных ионов. С увеличением дозы имплантации величина запасенной энергии возрастает, и кристаллическая структура постепенно превращается в аморфную. Такой процесс характеризуется вероятностной функцией аморфизации

$$f(r) = 1 - \exp\left[\frac{\Delta E(r)}{E_c}\right],$$

где $\Delta E(r)$ – энергия, запасенная в единице объема, в данной точке пространственной сетки; E_c – критическая плотность энергии, представляющая собой энергию, запасенную в единице объема, необходимую для аморфизации структуры в рассматриваемом объеме, которая выражается в следующем виде:

$$E_c(T) = E_{c0} \left\{ 1 - \exp\left[\frac{E_0(T - T_\infty)}{2k_B T T_\infty}\right] \right\}^{-2},$$

где E_c – энергия активации; k_B – постоянная Больцмана; T_∞ – температура, необходимая для превращения кристалла в аморфное состояние при бесконечной дозе.

В ВСА-модели величина $f(r) = 0,6$ соответствует полностью аморфизированному состоянию, и любая дополнительная энергия, запасенная в точке r , не вносит вклад в процесс аморфизации.

Геометрия имплантации. На рис. 1.58 представлена схема ориентации ионного пучка относительно кристаллографической ориентации подложки. Имеется три основных плоскости относительно направления ионного пучка:

- плоскость имплантации α ;
- плоскость поверхности S ;
- плоскость моделирования b .



Рис. 1.58. Геометрия имплантации

Плоскость имплантации – это плоскость, в которой лежит исходный пучок. Она характеризуется параметрами падающего пучка – углами наклона и поворота. Если ориентация плоскости поверхности равна $\langle 100 \rangle$, соответствующей единственной ориентации подложки в модуле модели ВСА, то сдвиг угла поворота соответствует направлению $\langle 101 \rangle$ на этой плоскости. Это означает, что угол наклона i будет полярным углом в этой плоскости, а угол поворота j представляет собой разницу азимутов линии, вдоль которой рассматриваемая плоскость пересекает поверхность подложки, и направления $\langle 101 \rangle$.

По умолчанию плоскость, в которой проводится моделирование, ориентирована вдоль направления $\langle 101 \rangle$.

Использование метода Монте-Карло при моделировании процесса имплантации в аморфные материалы. В легированном полупроводнике принципиальное

значение имеет остаточное распределение имплантированных примесей. Проникновение ионов в аморфные мишени наиболее простым способом описывается с использованием статистической транспортной модели или посредством моделирования методом Монте-Карло. Среди этих двух подходов метод Монте-Карло является наиболее удобным для многокомпонентных, а также для двух- и трехмерных мишеней. В методе Монте-Карло рассматривается явная цепочка столкновений, так что состав мишени можно менять на произвольных границах пространства и времени. Окончательное распределение ионов определяется из обширного числа N траекторий ионов, статистическая точность которого пропорциональна \sqrt{N} . По мере проникновения иона в твердое тело он участвует в цепочке столкновений с атомами мишени до тех пор, пока не останавливается. Упрощенная модель таких столкновений представляет собой рассмотрение бинарных ядерных столкновений, разделенных отрезками прямых линий (длины свободных пробегов), в процессе которых ион испытывает непрерывные (нелокальные) электронные энергетические потери. Столкновения разделяются, т.е. состояние иона после столкновения зависит единственно от состояния иона перед столкновением. В ВСА-приближении для аморфного материала предполагается, что расположение атомов мишени полностью случайно после каждого столкновения, т.е. материал мишени не имеет структуры и памяти. В результате цепочка столкновений описывается случайным выбором следующего партнера при столкновении относительно положения иона перед столкновением и направлением его скорости. Это означает, что в модели не может описываться аномальный хвост проникновения иона в мишень, который наблюдается для ионов, имплантированных в упорядоченные монокристаллические мишени. Модель адекватно описывает распространение ионов в многослойных непланарных мишенях.

1.5. Моделирование поликремниевой технологии

Поликристаллический кремний (поликремний) приобретает все более важное значение в технологии микроэлектроники [83, 84]. Слаболегированный поликремний используется, например, как высокоомный резистор в интегральных микросхемах статической памяти. Поликремний с высоким уровнем легирования применяется в качестве электрода затвора и межсоединений в МОП-транзисторных интегральных микросхемах. Поликремний используется также как диффузионный источник для формирования неглубоких переходов, а также заглубленных контактов.

Необходимым условием получения качественных слоев поликремния с заданными свойствами является контроль их структурных, электрических и других физических характеристик при проведении технологических операций формирования структурных элементов ИМС.

Осаждение поликремния из газовой фазы при низком давлении (Low Pressure Chemical Vapor Deposition, LPCVD-процесс) в настоящее время является наиболее распространенным методом в современной полупроводниковой промышленности [85, 86]. Этот метод позволяет использовать сразу партию пластин в одном производственном цикле, получать пленки с наилучшей равномерностью

по толщине и составу. При этом очевидны преимущества использования реакторов с пониженным давлением (0,5...1,0 Torr) и высокой температурой (560...680 °С) процессов. При таких условиях коэффициенты диффузии активных газов – реагентов на три порядка выше по сравнению с реакторами при атмосферном давлении, что определяет высокую контролируемость процессов на пластине.

Моделирование кинетики осаждения пленки поликремния в LPCVD-процессе с одновременным легированием, роста зерна поликремния при термообработке и его удельного сопротивления является эффективным способом оптимизации поликремниевой технологии, включая конструкцию реактора и технологические параметры – температуру, парциальные давления компонентов газа, его расход и пр. [2, 87–90].

1.5.1. Моделирование осаждения поликристаллического кремния на плоскую поверхность в LPCVD-процессе с одновременным легированием

Систему диффузионных уравнений, описывающих перенос молекул i -го газа (силана SiH_4 , фосфина PH_3 , арсина AsH_3) в LPCVD-реакторе горизонтального типа, схема которого приведена на рис. 1.59, в общем виде можно записать следующим образом:

$$\dot{U}\nabla C_i = -\nabla \dot{N}_i + Rn_i, \quad i = 1, \dots, n - 1, \quad (1.139)$$

где \dot{U} – средний по массе вектор скорости молекул сорта i в реакторе; C_i – их молярная концентрация; \dot{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.

Уравнение (1.139) справедливо для всех $i = 1 \dots n$ компонент газа в реакторе. При выводе решения этого уравнения должны выполняться следующие условия:

- рассматривается газ только одного химического состава;
- газ содержит только такие компоненты, которые хорошо растворяются в инертном газе-носителе;
- рассматриваются только гетерогенные реакции в объеме реактора и на поверхности пластины.

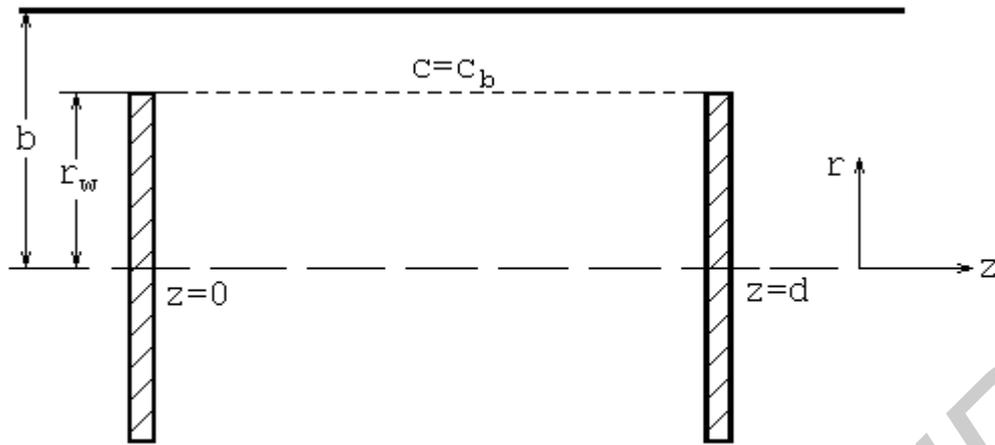
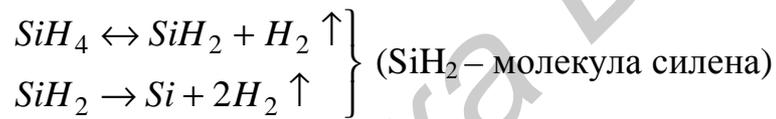


Рис. 1.59. Схема LPCVD-реактора горизонтального типа

Типичным примером такой системы является установка для осаждения поликремния на кремниевую пластину из газовой среды азот/аргон (носитель) + силан SiH_4 (активный компонент) посредством реакций:



Скорость реакции в газовой среде (первая реакция) должна быть первого порядка по силану, т.е.

$$R_S = kC,$$

где R_S – скорость конверсии силана, C – молярная концентрация силана, k – константа пиролизического разложения силана, которую можно аппроксимировать, как показано в работе [91], посредством выражения:

$$k = (a + bP_{tot})AT^{\beta} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right).$$

Здесь эмпирические константы $a = 0,0504$, $b = 0,9496$, $A = 2,54 \cdot 10^{38}$, $\beta = -7,95$, $E_1 = 61,96$, если P_{tot} (полное давление газа в реакторе) задано в атмосферах.

При выводе решения уравнения (1.139) полагается также отсутствие потока ($\dot{U} = 0$) в пространстве между двумя смежными пластинами, т.е. при $0 \leq z \leq d$ и $0 \leq r \leq r_w$. Это условие означает отсутствие конвективного перераспределения газа в малом по сравнению с размерами пластины зазоре между смежными пластинами из-за относительно низкого давления внутри реактора.

Выполнение указанных условий сводит выражение (1.139) к следующему диффузионному уравнению в цилиндрической геометрии для описания распреде-

ления концентрации C активного составляющего компонента (SiH_4) по длине реактора z и его радиусу r :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = 0 \quad (1.140)$$

с граничными условиями:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial r} &= 0 \Big|_{r=b}, \\ C &= C_b \Big|_{r=r_w}, \\ D \frac{\partial C}{\partial z} &= R_S \Big|_{z=0,d} \end{aligned} \right\} \quad (1.141)$$

Здесь D – коэффициент диффузии силана в газе-носителе, зависящий от температуры и состава газовой среды в реакторе; C_b – концентрация силана на краю пластин, не зависящая от координаты z и равная концентрации на входе в реактор.

Решение системы уравнений (1.140–1.141) согласно [92] имеет вид

$$C = C_b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_0(I_n S)}{I_n I_0(I_n)} F_n(A, K_D) [I_n \cos I_n x + K_D \sin I_n x], \quad (1.142)$$

где I_0 – модифицированная функция Бесселя первого рода, а собственные значения λ_n – положительные корни трансцендентного уравнения

$$\operatorname{tg} \frac{I_n}{A} = \frac{2I_n K_D}{I_n^2 - K_D^2}.$$

Пространственные координаты r и l здесь представлены в безразмерных величинах:

$$S = \frac{r}{r_w}, \quad x = \frac{z}{d}.$$

Функция F_n в выражении (1.142) определяется следующим образом:

$$F_n(A, K_D) = f^2 \frac{1 + \frac{I_n^2 + K_D^2}{I_n - K_D^2} \cos \frac{I_n}{A}}{(I_n^2 + K_D^2) + 2AK_D}.$$

Параметры A и K_D связаны с геометрическими характеристиками реактора и диффузионно-кинетическими параметрами физико-химических процессов в газовой среде и на поверхности пластины следующим образом:

$$A = \frac{r_w}{d}, \quad K_D = \frac{kr_w}{D}.$$

Эмпирическая зависимость для коэффициента диффузии D молекул силана в газовой среде, зависящая от температуры T и полного давления газа внутри реактора, получена в работе [93]:

$$D = 0,1 \left(\frac{T}{300} \right)^2 \frac{760}{P_{tot}}.$$

Произведение параметров A и K_D определяет степень неравномерности η толщины осаждаемой пленки поликремния по радиусу пластины:

$$f^2 = 2AK_D = \frac{2r_w k^2}{dD},$$

так что

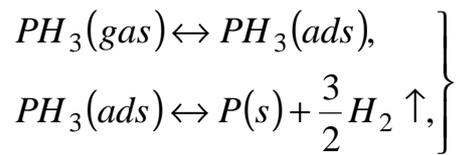
$$h \equiv \frac{2pr_w \int_0^d -D \frac{\partial C(r,0)}{\partial r} \Big|_{r_w} dz}{2pr_w^2 k C_b} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_1(I_n)}{I_n I_0(I_n)} \left[\frac{F_n(A, K_D)}{\Phi} \right]^2 (I^2 + K_D^2 + f^2).$$

Скорость G осаждения пленки поликремния определяется следующим образом:

$$G = R_S k_{ab} V_{Si}, \quad (1.143)$$

где k_{ab} – коэффициент, зависящий от скорости адсорбции–десорбции молекул силана SiH_2 на поверхности кремневой пластины; $V_{Si} = \frac{1}{N_A} \frac{M_{Si}}{d_{Si}}$ – объем, приходящийся на один атом кремния в зерне поликремния, M_{Si} – молекулярный вес кремния, d_{Si} – физическая плотность пленки поликремния, N_A – число Авогадро.

При решении задачи определения скорости осаждения пленки поликремния с одновременным легированием полагается, что реакции с участием фосфина (PH_3) протекают по следующей схеме:



где *gas*, *ads* и *s* обозначают соответственно состояния молекул фосфина в газовой среде, адсорбированном на поверхности пластины и атомов фосфора в твердой фазе поликремния.

Кинетика осаждения поликремния с участием арсина (AsH₃) [93] и фосфина (PH₃) обычно рассматривается, как и в случае силана, согласно теории адсорбции Ленгмюра–Хиншельвуда. Скорость роста пленки поликремния с одновременным легированием при парциальном давлении фосфина PH₃ с достаточной точностью аппроксимируется следующим выражением:

$$GR(PH_3) = \frac{GR}{1 + b\gamma GR}, \quad (1.144)$$

где *GR* – скорость роста пленки при $P_{PH_3} = 0$; γ – относительное содержание фосфина в газовой среде реактора; P_{SiH_4} – парциальное давление силана; *b* – константа, зависящая от температуры.

Таким образом, задавая технологические (температуру, парциальные давления компонентов газа в реакторе) и конструкционные параметры реактора, можно рассчитать скорость роста пленки поликремния в LPCVD-процессе, а путем варьирования этих параметров определить оптимальные характеристики процесса осаждения.

На рис. 1.60–1.63 представлены результаты расчетов скорости роста *G* пленки поликристаллического кремния на плоской (планарной) поверхности кремниевой подложки с одновременным легированием в LPCVD-процессе [94, 95] в зависимости от температуры процесса *T*, полного давления в реакторе P_{tot} , а также парциальных давлений силана P_{SiH_4} и фосфина P_{PH_3} .

Другие технологические параметры LPCVD-процесса в этих расчетах оставались фиксированными: радиус пластины, на которую производится осаждение пленки поликремния, $R_w = 5$ см; внутренний радиус реактора $R_c = 13$ см и расстояние между пластинами $d = 0,5$ см.

Символами на рис. 1.60–1.63 отмечены экспериментальные [96] данные.

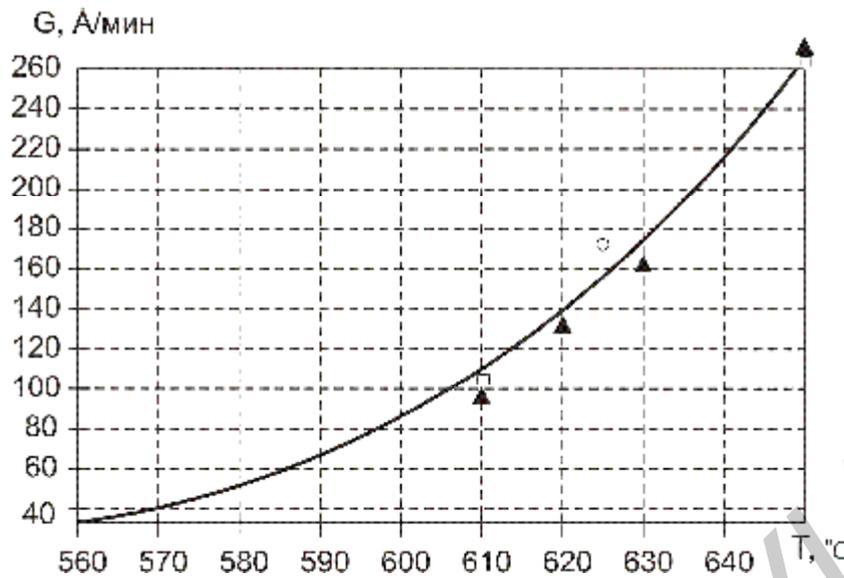


Рис. 1.60. Зависимость скорости G роста пленки поликристаллического кремния в LPCVD-процессе от температуры ($P_{tot} = 33$ Па, $P_{SiH_4} = 33$ Па и $P_{PH_3} = 0$)

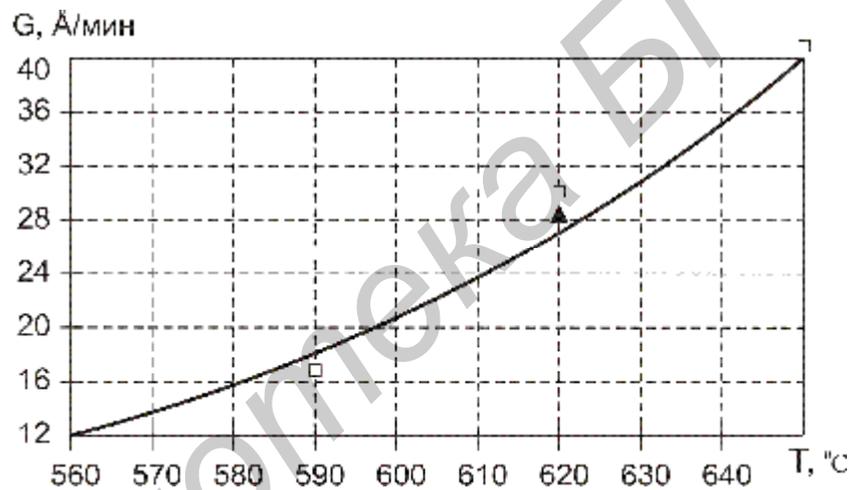


Рис. 1.61. Зависимость скорости G роста пленки поликристаллического кремния в LPCVD-процессе от температуры ($P_{tot} = 33,25$ Па, $P_{SiH_4} = 31$ Па и $P_{PH_3} = 0,055$ Па)

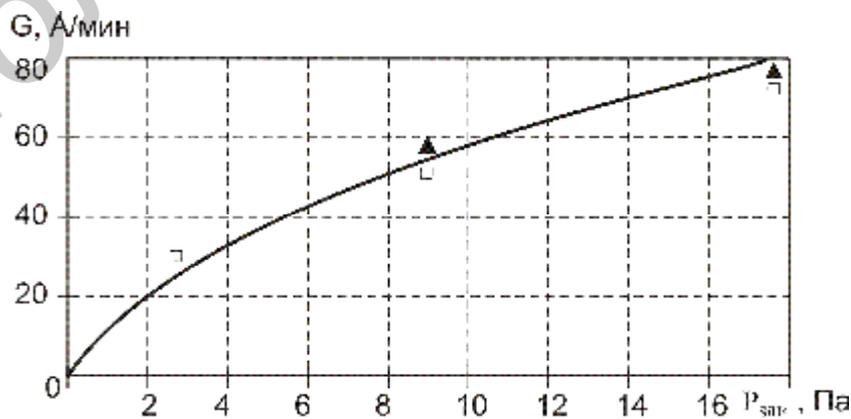


Рис. 1.62. Зависимость скорости G роста пленки поликристаллического кремния в LPCVD-процессе от парциального давления силана P_{SiH_4} ($T = 610$ °C, $P_{tot} = 18$ Па, $P_{PH_3} = 0$)

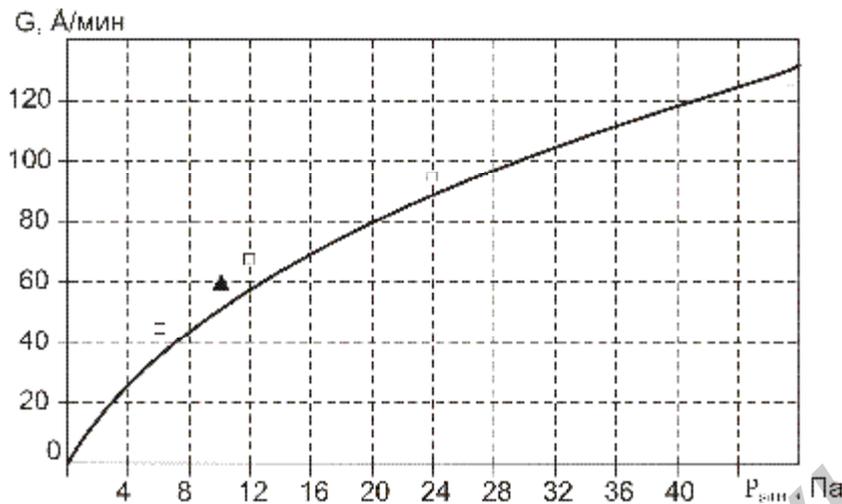


Рис. 1.63. Зависимость скорости G роста пленки поликристаллического кремния в LPCVD-процессе от парциального давления силана P_{SiH_4} ($P_{tot} = 49$ Па, $T = 610$ °С, $P_{PH_3} = 0$)

1.5.2. Моделирование осаждения поликристаллического кремния на рельефную поверхность в LPCVD-процессе с одновременным легированием

При осаждении пленки поликремния на рельефную (непланарную) поверхность, например при заполнении канавки, обычно не наблюдается конформного воспроизведения рельефа ступеньки на подложке, т.е. толщина пленки на стенках и дне канавки отличается от толщины пленки на планарной поверхности подложки. Одна из причин этого явления – отличие скорости падения молекул газа на стенки и дно канавки от скорости их осаждения на планарную поверхность пластины вследствие эффекта «тени» от боковых стенок канавки. По этой причине на боковой стенке канавки создается значительный градиент концентрации адсорбированных молекул газа.

Уравнение, описывающее временную зависимость изменения концентрации C молекул адсорбированного газа на боковой поверхности и дне канавки, можно записать в следующем виде [2]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + P(x), \quad (1.145)$$

где D – коэффициент поверхностной диффузии молекул газа; $P(x)$ – стационарный источник, определяющий скорость «поставки» молекул газа на боковые стенки и на дно канавки; x – пространственная координата.

Схема заполнения канавки при осаждении поликристаллического кремния в LPCVD-процессе представлена на рисунке 1.64.

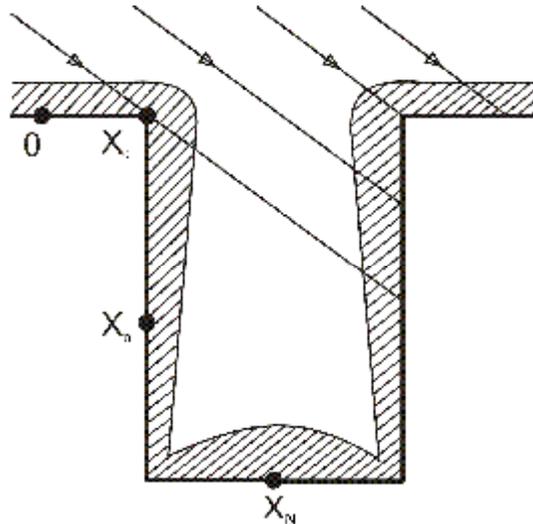


Рис. 1.64. Схема заполнения канавки при осаждении поликристаллического кремния в LPCVD-процессе

Если средняя величина длины свободного пробега молекул в газе намного больше размеров ступеньки, характеризующей геометрию канавки, то выражение для источника можно представить в виде

$$P(x) = P_0 F(x) \operatorname{arctg} \frac{d}{x_n}, \quad (1.146)$$

где P_0 – коэффициент, определяемый из скорости осаждения пленки поликремния (см. (1.143) или (1.144)); $F(x)$ – функция, вводимая для сглаживания зависимости $P(x)$ вблизи точки x_0 ; d – размер дна канавки; x_n – текущая координата.

Начальные и граничные условия для решения уравнения (1.146) устанавливаются в следующем виде:

$$C = 0 \text{ при } t = 0, \quad \partial C / \partial x = 0 \text{ при } x = x_0 \text{ и } x = x_N. \quad (1.147)$$

Программная реализация алгоритма решения транспортного уравнения поверхностной диффузии при решении задачи осаждения пленки поликремния на непланарную поверхность в LPCVD-процессе представлена на Web-сайте [97].

Входные параметры для расчетов: время проведения технологического процесса осаждения t , с; температура процесса T , °С; скорость осаждения пленки поликремния G , Å/с, которая определяется из результатов расчетов скорости осаждения поликристаллического кремния на плоскую поверхность (см. раздел 1.5.1 «Моделирование осаждения поликристаллического кремния на плоскую поверхность в LPCVD-процессе с одновременным легированием»); глубина канавки h , мкм; размер дна канавки d , мкм.

Выходные параметры: рассчитанные значения толщины пленки поликремния в промежуточные моменты времени по всему профилю канавки – на плоской части поверхности h_1 , вблизи ребра канавки h_2 и на средней части дна канавки h_3 . Типичные результаты расчетов представлены на рис. 1.65 и 1.66.

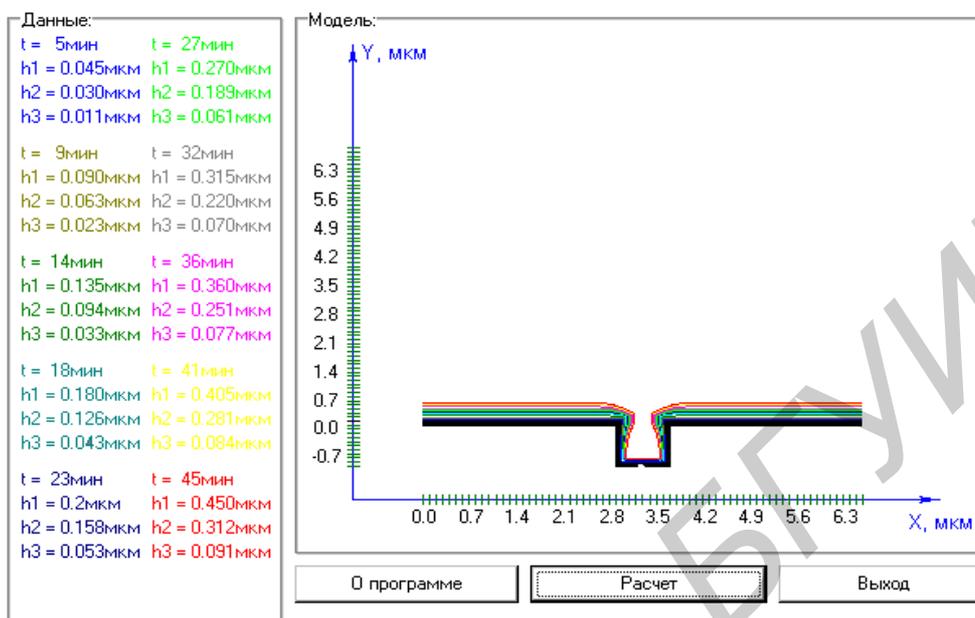


Рис. 1.65. Результат расчета заполнения канавки в LPCVD-процессе ($t = 45$ мин, $T = 600$ °C, $G = 0,01$ мкм/мин, $h = 1$ мкм, $d = 1$ мкм)

Использование программы моделирования заполнения канавки в LPCVD-процессе осаждения поликремния позволяет определить критические условия, при которых происходит смыкание стенок заполняемой поликремнием канавки (рис. 1.66), и тем самым оптимизировать параметры технологического процесса.

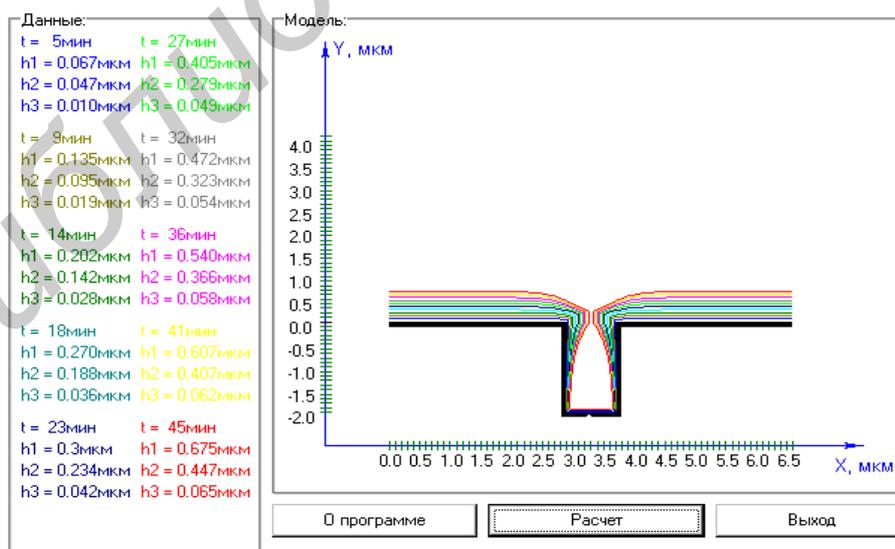


Рис. 1.66. Результат расчета заполнения канавки в LPCVD-процессе ($t = 45$ мин, $T = 600$ °C, $G = 0,015$ мкм/мин, $h = 1,5$ мкм, $d = 1$ мкм)

1.5.3. Моделирование 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 как диффузионных (термических), так и недиффузионных (атермических) механизмов [2]. Рост зерна, обусловленный подвижностью дислокаций, корректно описывается механизмом скольжения и восхождения дислокаций. Вклад второго механизма определяется концентрацией точечных дефектов (вакансий и междоузлий), которая, в свою очередь, зависит от степени легирования поликремния.

Структура зерна поликремния характеризуется его средним размером, кристаллографической ориентацией и распределением по размерам. Размер зерна в существенной степени определяет распределение легирующих элементов по его объему и, в конечном счете, влияет на величину проводимости пленки поликремния [98].

Диффузионная модель роста зерна при термообработке. Согласно общей теории роста зерна поликристаллических материалов [99] скорость этого процесса определяется следующим выражением:

$$\frac{dr}{dt} = M\Delta F, \quad (1.148)$$

где r – средний радиус зерна, M – атомная подвижность границы зерна, а ΔF – так называемая «движущая сила» роста зерна.

В термодинамическом представлении подвижность границы зерна является активационным процессом:

$$M = M_0 \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) \quad (1.149)$$

Здесь Q – энергия активации перехода атома в соседнее положение, которая в конечном счете определяет процесс миграции границы зерна, M_0 – константа, связанная с изменением энтропии, сопровождающим скачкообразное перемещение атома.

В модели роста зерна, обусловленном движением дислокаций, «движущая сила» ΔF определяется уменьшением энергии границы зерна, так что

$$\Delta F = \alpha \frac{g}{r}, \quad (1.150)$$

где γ – средняя энергия границы зерна, r – радиус зерна, α – константа.

Полагая, что M не зависит от времени, и подставляя (1.149) и (1.150) в (1.148), получаем:

$$r^2(t) - r^2(0) = \left[M_0 \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) 2ag \right] t, \quad (1.151)$$

где t – длительность термической обработки, $r(0)$ – начальный размер зерна.

Кинетическая модель подвижности границы зерна. В кинетической модели роста зерна легированной пленки поликремния <100> предполагается, что миграция межзеренных границ осуществляется посредством двух механизмов движения дислокаций – скольжения (атермический механизм) и восхождения (диффузионный механизм). Полагая, что оба механизма осуществляются одновременно, можно оценить вклад одного из них по экспериментальным данным, считая, что вклад другого механизма известен.

Предположим, исходя из высказанных предпосылок, что подвижность границ зерен

$$M = M_1 + M_2,$$

где M_1 – подвижность, обусловленная скольжением, а M_2 – восхождением дислокаций.

Величина M_2 описывает активационный процесс, определяемый концентрацией вакансий C_v :

$$M_2 = KC_v \exp\left(-\frac{\omega}{kT}\right) \quad (1.152)$$

Здесь ω – энергия активации, равная высоте энергетического барьера, разделяющего атом кремния и вакансию, K – температурно-независимая константа.

Величина ω зависит от концентрации примесей в объеме зерна поликремния, которая составляет определенную долю от их полной концентрации в пленке, поскольку часть примесей сегрегирует на межзеренной границе. Для объяснения сегрегации на границе раздела и границе кристаллита используется теория термодинамической сегрегации для металлических систем [101]. Отношение концентрации примеси на границе зерна N_g к общей концентрации примеси N_t задается выражением

$$\frac{N_g}{N_t} = \left[\frac{AQ_S}{LN_{Si}} \exp\left(\frac{E_a}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad (1.153)$$

где N_{Si} – атомная плотность кремния, $Q_S = 2,64 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ – поверхностная плотность узлов на границе кристаллита поликремния, на которых может сегрегировать примесь. Энергия активации E_a , одинаковая для фосфора и мышьяка, составляет 0,456 эВ, $L(t) = 2r(t)$ – размер зерна поликремния. Безразмерный множитель A равен 3,02 для мышьяка и 2,46 – для фосфора при концентрации $2,0 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [102].

Поскольку вклад $(M_e - M_i)$ диффузионного компонента в M_2 , обусловленного легированием и, следовательно, увеличением концентрации вакансий, определяется только добавкой, определяемой механизмом восхождения дислокации $(M_2^e - M_2^i)$, то

$$\frac{M_e}{M_i} = 1 + \frac{M_2^e - M_2^i}{M_i}, \quad (1.154)$$

где индексы e и i относятся соответственно к легированному и нелегированному поликремнию.

Подставляя (1.152) в (1.154) (с учетом индексов e и i) и имея в виду тот факт, что при высоком уровне легирования $C_{ve}/C_{vi} \gg 1$, получаем:

$$\frac{M_e}{M_i} = 1 + \left(\frac{KC_{vi}}{M_i} \right) \left(\frac{C_{ve}}{C_{vi}} \right) \exp\left(-\frac{w_e}{kT} \right).$$

Здесь $C_{vi} = C_{voi} \exp\left(-\frac{q'}{kT} \right)$, где C_{voi} – предэкспоненциальный множитель, q' – энергия образования вакансии на границе зерна в собственном поликремнии.

Таким образом,

$$\frac{M_e}{M_i} = 1 + K' \left(\frac{C_{ve}}{C_{vi}} \right) \exp\left(-\frac{Q'}{kT} \right), \quad (1.155)$$

где $K' = \frac{KC_{voi}}{M_{oi}}$ и $Q' = (q' - Q + w_e)$.

Расчет концентрации вакансий в легированном поликремнии. Общая концентрация вакансий в кремнии C_v складывается из концентраций нейтральных вакансий C_{vx} и заряженных вакансий – в однократно отрицательном C_{v-} , двукратно отрицательном C_{v--} и однократно положительном C_{v+} зарядовых состояниях:

$$C_v = C_{vx} + C_{v-} + C_{v--} + C_{v+}. \quad (1.156)$$

Используя закон действующих масс и экспоненциальную зависимость концентраций вакансий от энергетического уровня заряженных состояний и уровня Ферми E_F , определяемого концентрацией электронов, получаем соотношения для отношений концентраций вакансий в различных зарядовых состояниях [103]:

$$\left. \begin{aligned} F_v &= \frac{C_v}{C_{vx}} = \exp\left[\frac{(E_F - E_{v-})}{kT}\right], \\ F_{v--} &= \frac{C_{v--}}{C_{vx}} = \exp\left[\frac{(2E_F - E_n - E_{n--})}{kT}\right], \\ F_{v+} &= \frac{C_{v+}}{C_{vx}} = \exp\left[\frac{(E_{v+} - E_F)}{kT}\right], \end{aligned} \right\} \quad (1.157)$$

где $E_{v-} = 0,11$ эВ, $E_{v-} = 0,44$ эВ, $E_{v+} = 0,15$ эВ – энергетические уровни, соответствующие вакансиям в кремнии в различных зарядовых состояниях. Энергетические уровни отсчитываются относительно уровней запрещенной зоны: для отрицательно заряженных вакансий они располагаются ниже зоны проводимости, а для положительно заряженных – выше валентной зоны. Этим объясняется различие в знаках перед значениями E_{v-} , E_{v-} и E_{v+} в (1.157).

Таким образом, из (1.155) и (1.157) получаем выражение для отношения $\frac{C_{ve}}{C_{vi}}$, необходимое при расчете изменения подвижности границы зерна поликремния в легированном материале M_e по сравнению с собственным кремнием M_i :

$$\frac{C_{ve}}{C_{vi}} = \frac{(1 + F_{v-} + F_{v-} + F_{v+})_e}{(1 + F_{v-} + F_{v-} + F_{v+})_i}. \quad (1.158)$$

Эффекты высокого уровня легирования и рост зерна. Значение энергии Ферми E_F , входящее в выражение (1.158), зависит от температуры и концентрации легирующих примесей. В собственном полупроводнике зависимость уровня Ферми от температуры определяется следующим выражением:

$$E_F = \left(\frac{E_g}{2}\right) + \frac{3kT}{4} \ln\left(\frac{m_{dn} \frac{2}{C}}{m_{de} M_C^3}\right) \quad (1.159)$$

где $E_g = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + b}$ – ширина запрещенной зоны, T – температура, m_{de} и m_{dn} –

соответственно электронная и дырочная эффективные массы, M_C – число эквивалентных минимумов в зоне проводимости, $E_g(0)$, α , β – эмпирические параметры, равные для кремния соответственно 1,17, $4,73 \cdot 10^{-4}$ и 636, если энергия выражается в эВ, а температура – в кельвинах [104].

В легированном полупроводнике уровень Ферми смещается от середины запрещенной зоны, чтобы обеспечить выполнение условия электронейтральности

полупроводника. Эффективное значение энергии Ферми E_{Fe} в сильнолегированном полупроводнике

$$E_{Fe} = E_F - \frac{dE_g}{2} + \frac{1}{2}kT \ln(b), \quad (1.161)$$

где $b = \frac{(E_F - E_C)}{kT}$ (здесь E_C – уровень, соответствующий дну зоны проводимости); $\frac{dE_g}{2}$ – величина эффективного сужения ширины запрещенной зоны.

$$\delta E_g = 0,057 \ln(N_a) - 2,44. \quad (1.162)$$

Соответствующая эффективная концентрация электронов в собственном полупроводнике с высоким уровнем легирования:

$$n_{ie} = n_i \exp\left(\frac{dE_g}{2kT}\right) b^{\frac{1}{2}}.$$

Здесь $n_i = 3,8 \cdot 10^{16} T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{0,605}{kT}\right)$ – эмпирическое выражение для концентрации носителей зарядов в собственном полупроводнике.

Использование статистики Ферми–Дирака для вырожденного полупроводника, как показано в [105], приводит к следующему выражению для концентрации электронов в условиях высокой концентрации примесей:

$$n = n_{ie} x \left[\frac{(E_F - E_{ie})}{kT} \right], \quad (1.163)$$

где $x = \frac{F_{\frac{1}{2}}(b)}{\exp(b)}$, $F_{\frac{1}{2}}(b) = \left[\exp(-b) + f_{\frac{1}{2}}(b) \right]^{-1}$ – интеграл Ферми–Дирака, а эмпирический параметр $f_{\frac{1}{2}} = 3 \left(\frac{p}{2} \right) \left[(b + 2,13) + (|b - 2,13|)^{2,4} + 9,6^{\frac{5}{12}} \right]^{\frac{3}{2}}$.

Таким образом, используя выражение (1.151) совместно с (1.155), (1.158) и (1.162), получаем выражение для временной зависимости радиуса зерна поликремния от температуры обработки. Поскольку доля активных примесей изменяется со временем за счет сегрегации части примесей на границах зерен поликристаллического кремния и является функцией размера зерна, расчет $r(t)$ производится путем вычисления приращений $[r(t_n = n\Delta t) - r(t_{n-1} = (n-1)\Delta t)]$ на n -м временном шаге ($\Delta t = \tau/N$, где t – полное время термообработки, а N – число временных шагов).

Принципиальные подходы к расчету температуры кремниевой пластины при импульсном режиме термообработки, используемые в описываемой модели, изложены в работе [106]. Алгоритм моделирования роста зерна поликристаллического кремния при длительном и импульсном режимах термообработки реализован в программе, размещенной на Web-сайте [97]. Некоторые зависимости роста зерна поликремния от исходного среднего радиуса зерна поликремния r_0 , полной концентрации легирующих примесей в пленке поликремния N_t , времени t и температуры T длительной термообработки, мощности теплового излучения W и времени экспозиции t при импульсной термообработке представлены на рис. 1.67–1.76.

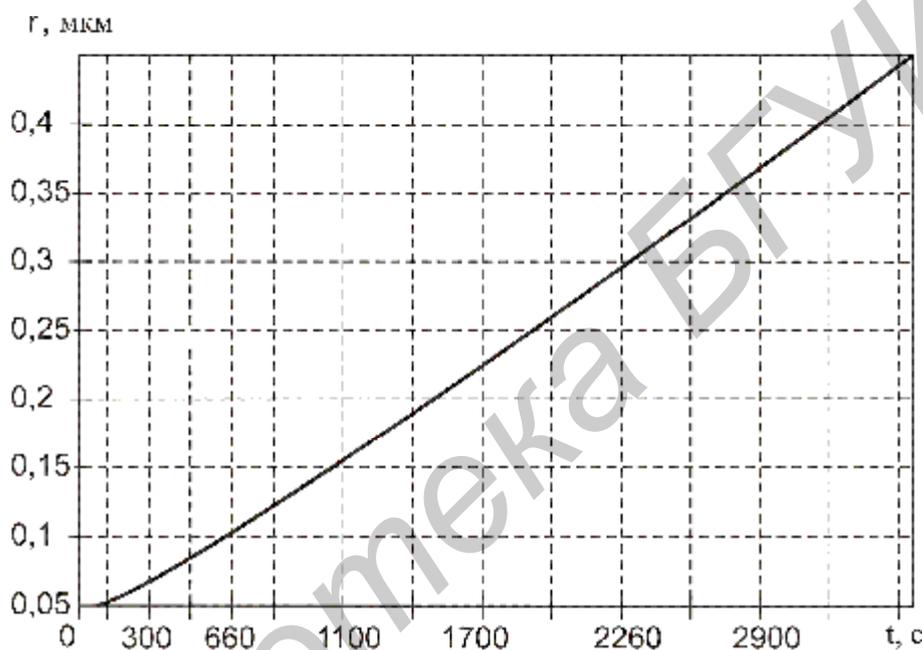


Рис. 1.67. Зависимость размера зерна поликремния от длительности термообработки ($r_0 = 0,05$ мкм, $T = 1100$ °С, $N_t = 5 \cdot 10^{20}$ см⁻³)

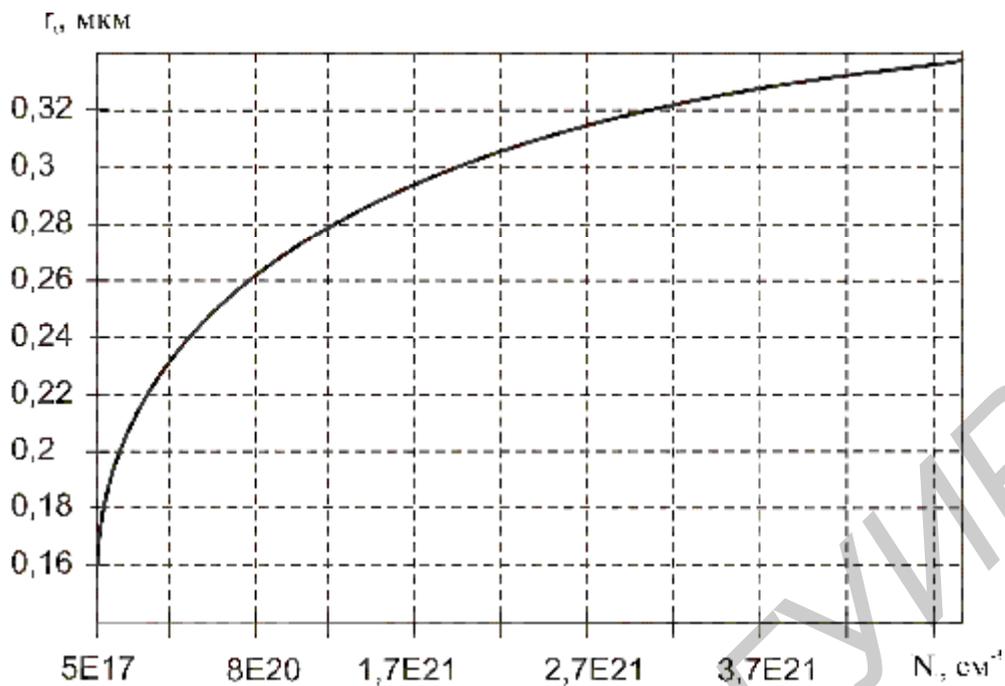


Рис. 1.68. Зависимость размера зерна поликремния от концентрации примесей при длительной термообработке ($t = 1800$ с, $r_0 = 0,05$ мкм, $T = 1100$ °C)



Рис. 1.69. Зависимость размера зерна поликремния от температуры длительной термообработки ($t = 1800$ с, $N_t = 10^{21}$ см⁻³, $r_0 = 0,05$ мкм)

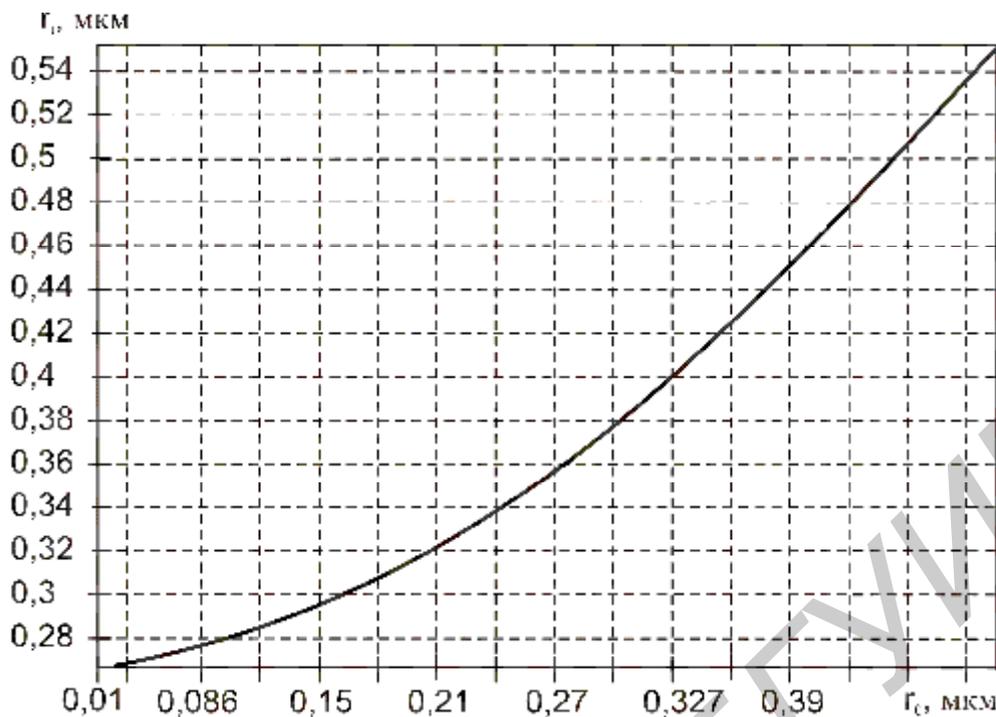


Рис. 1.70. Зависимость радиуса зерна поликремния от начального радиуса при длительной термообработке ($t = 1800$ с, $N_i = 10^{21}$ см⁻³, $T = 1100$ °С)

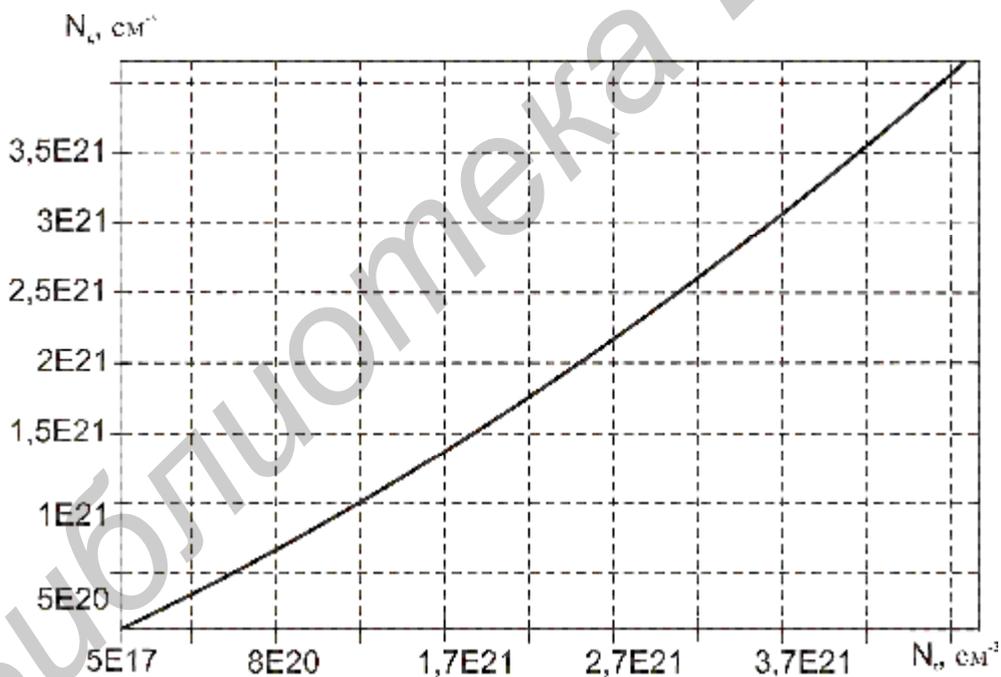


Рис. 1.71. Зависимость концентрации примесей на границе зерна поликремния от полной концентрации примесей при длительной термообработке ($T = 1100$ °С, $t = 1800$ с, $r_0 = 0,05$ мкм)

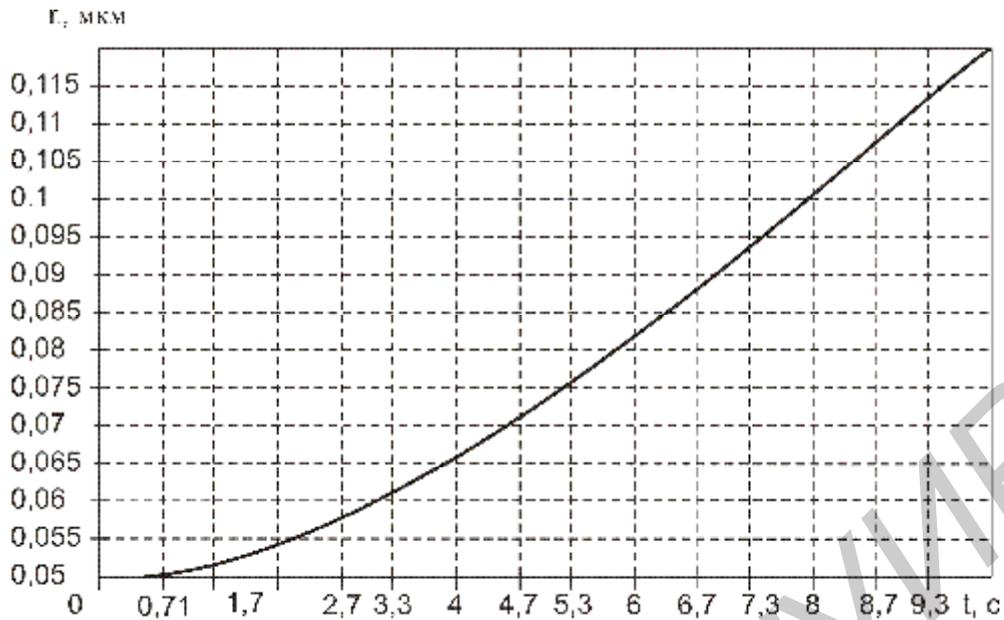


Рис. 1.72. Зависимость радиуса зерна поликремния от длительности импульсной термообработки ($r_0 = 0,05$ мкм, $W = 50$ Вт·см⁻², $N_t = 5 \cdot 10^{20}$ см⁻³)

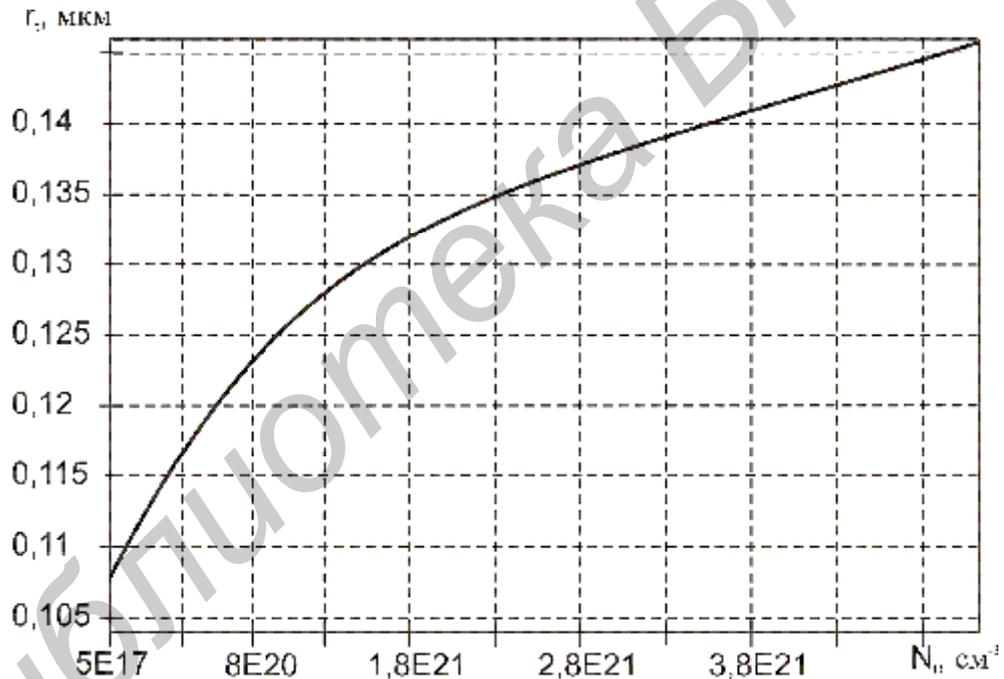


Рис. 1.73. Зависимость радиуса зерна поликремния от концентрации примесей при импульсной термообработке ($t = 10$ с, $r_0 = 0,05$ мкм, $W = 50$ Вт·см⁻²)

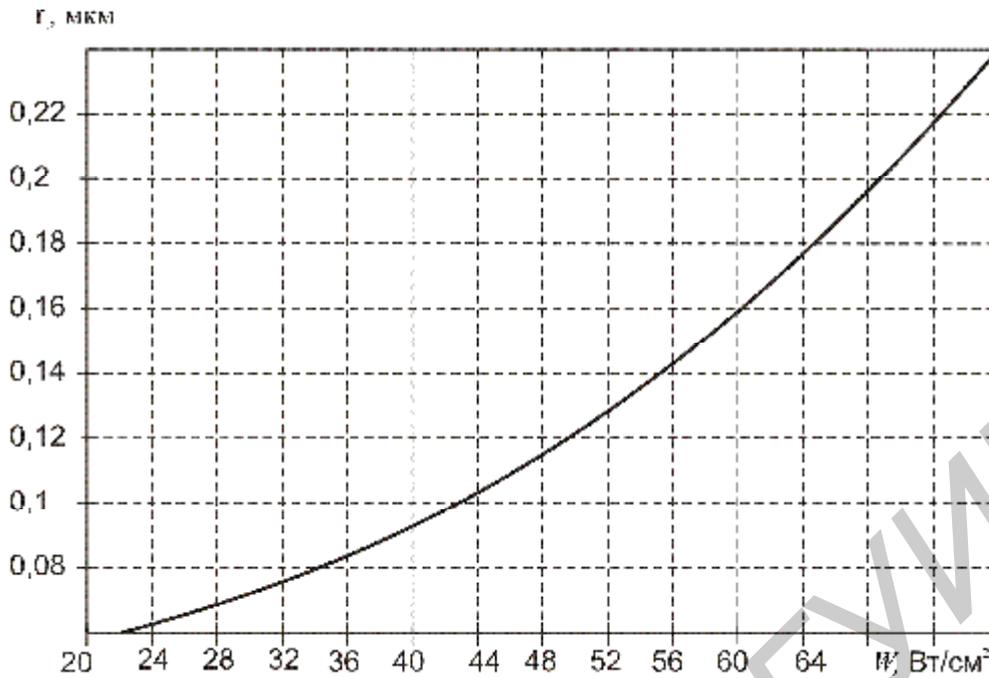


Рис. 1.74. Зависимость радиуса зерна r поликремния от мощности излучения при импульсной термообработке ($t = 10$ с, $N_t = 10^{21}$ см⁻³, $r_0 = 0,05$ мкм)

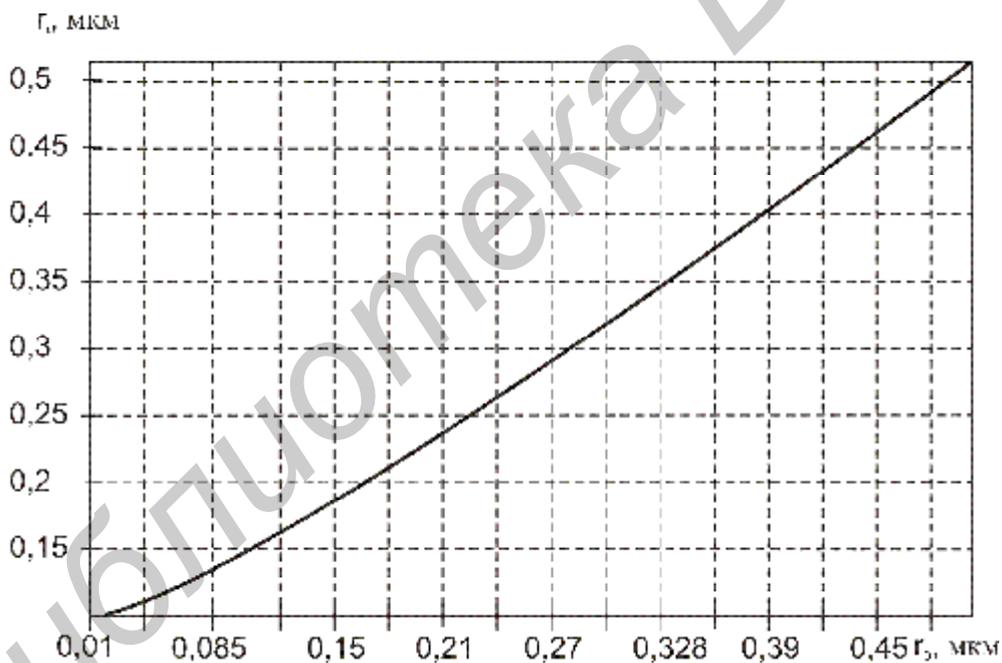


Рис. 1.75. Зависимость радиуса зерна поликремния от начального радиуса при импульсной термообработке ($t = 10$ с, $N_t = 10^{21}$ см⁻³, $W = 50$ Вт·см⁻²)

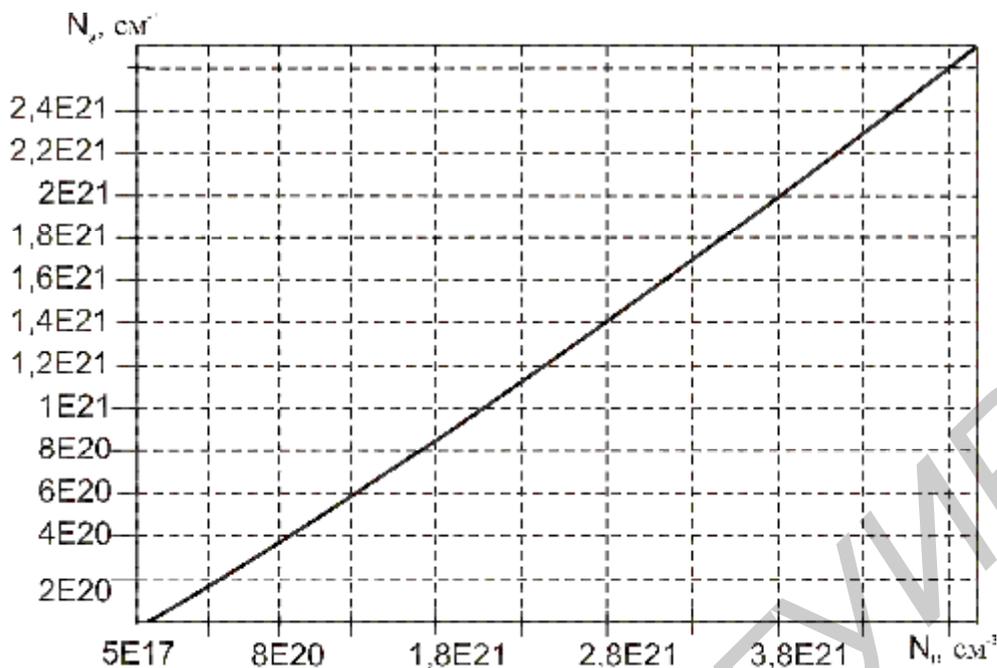


Рис. 1.76. Зависимость концентрации примесей N_g на границе зерна поликремния от полной концентрации примесей при импульсной термообработке ($W = 50 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$, $t = 10 \text{ с}$, $r_0 = 0,05 \text{ мкм}$)

В программе SSUPREM4 изменение радиуса зерна поликремния r от времени длительной термообработки рассчитывается по модели, предложенной в работе [40]:

$$L_g(x, y, z) = \left[\frac{2}{g_0} + \frac{2,6b^2}{kT} ID_{gb/Si}t \right]^{1/2},$$

где g_0 – начальный размер зерна; b – постоянная решетки; $D_{gb/Si}$ – собственный коэффициент диффузии кремния по границам зерна; I – энергия границы зерна; t – время проведения диффузии.

1.5.4. Моделирование электрофизических характеристик поликристаллического кремния

Определяющей характеристикой поликремния являются его электрические свойства. В связи с этим моделирование электропроводности поликремния и исследование ее зависимости от уровня легирования, типа примесных атомов, структуры зерна и технологических параметров формирования пленки поликремния имеет важное значение для качественного проектирования приборов и технологии формирования структурных областей ИМС.

При одном и том же уровне легирования проводимость поликремния всегда ниже проводимости кристаллического кремния вследствие повышенной плотности дефектов кристаллической решетки. В используемой для расчетов физической модели переноса носителей заряда в поликремнии учитываются как физические

характеристики материала (структура зерна, степень легирования), так и эффекты, связанные с взаимодействием носителей заряда и структурными несовершенствами поликремния [107, 2].

Физическая модель проводимости поликристаллического кремния. Основными эффектами, контролирующими подвижность носителей заряда в поликремнии и их концентрацию, являются процессы, протекающие на границах зерен и приводящие к сегрегации примесей, захвату носителей и их рассеянию. Кроме того, снижение подвижности носителей в поликремнии по сравнению с идеальной кристаллической решеткой объясняется их рассеянием на ионизированных примесях и фононах.

В модели, впервые изложенной в работе [107] и развитой далее в [108, 109], для описания переноса носителей заряда в поликремнии используется теория термоионной эмиссии, согласно которой область вблизи границы зерна обогащена ловушками, которые захватывают носители, что приводит к их обеднению вблизи этого слоя. Природа ловушечных состояний объясняется большим количеством дефектов кристаллической решетки и разорванных электронных связей атомов в разупорядоченной области вблизи границы зерна. Таким образом, граница зерна является энергетическим барьером для носителей, высота которого определяется концентрацией примесей, плотностью ловушек и размером кристаллита.

Величина энергетического барьера $E(x)$ в обедненной зоне относительно дна зоны проводимости определяется из решения уравнения Пуассона:

$$E(x) = \frac{qN_g}{2e} \left[\left(W + \frac{W_{gb}}{2} \right) - |x| \right]^2, |x| > \frac{W_{gb}}{2}, \quad (1.164)$$

где x – расстояние от середины границы зерна; W – ширина обедненной зоны вблизи границы зерна; W_{gb} – ширина границы зерна; N_g – концентрация примесей, сегрегированных на границах зерен; e – диэлектрическая проницаемость кремния; q – заряд электрона.

Максимальное значение $E(x)$ достигается при $|x| = W_{gb}/2$ и равно:

$$E_b = \frac{q^2 N_g W^2}{2e}, \quad (1.165)$$

где $W = \frac{Q_t}{2N_g}$ и Q_t – плотность ловушек на границе зерен.

Среднюю концентрацию примесей в объеме зерна $N_a = N_t - N_g$ с учетом примесей, сегрегированных на его границе, можно определить из выражения (1.153):

$$\ln \frac{N_a}{N_g} = \ln \frac{AQ_s}{LN_{Si}} + \frac{E_a}{kT}. \quad (1.166)$$

В работе [102] развита феноменологическая теория проводимости в поликремнии, основанная на физических механизмах, управляющих переносом носителей в зависимости от сегрегации примесей, захвата носителей и их рассеяния на границах зерен. Среднее значение удельного сопротивления в зерне поликремния

$r = \frac{L_g}{L} r_g + \frac{L_{gb}}{L} r_{gb}$, где L – средний размер зерна; L_g – ширина необедненной зоны зерна; L_{gb} – ширина области, не относящейся к границе зерна; ρ_g – удельное сопротивление зерна; ρ_{gb} – удельное сопротивление границы зерна. При этом $L = L_g + L_{gb}$ и $L_{gb} = 2W + W_{gb}$.

В случае малых приложенных напряжений ток, проходящий через зерно поликристаллического кремния, является линейной функцией напряжения, и эффективная подвижность носителей согласно [104] определяется выражением

$$m_b = \frac{qL}{(2pm^*kT)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{E_b}{kT}\right) \quad (1.167)$$

где q – заряд электрона; m^* – эффективная масса носителя заряда; k – постоянная Больцмана; $m = \frac{1}{qn_a}$ и n_a – концентрация носителей в объеме зерна.

Концентрация n_a , определяемая посредством интегрирования по объему зерна, равна:

$$n_a = n_b \left[\left(1 - \frac{Q_t}{L_{ng}}\right) + \frac{1}{qL} \left(\frac{2ekT}{N_g}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{qQ_t}{2} \sqrt{\frac{1}{2ekTN_a}}\right) \right],$$

где Q_t – поверхностная плотность ловушечных состояний; n_b – концентрация носителей заряда в монокристалле кремния с концентрацией легирующих примесей в объеме зерен поликремния N_a , которая определяется из выражения (1.166).

Концентрация n_b зависит от значения уровня Ферми E_F , положение которого определяется температурой T и концентрацией примесей в объеме зерен поликремния $N_a = N_t - N_g$:

$$n_b = n_i \exp\left[\frac{(E_F - E_i)}{kT}\right]. \quad (1.168)$$

Здесь $n_i = 3,87 \cdot 10^{16} T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{0,605}{kT}\right)$ – собственная концентрация носителей. Поправочный множитель для n_b в (1.152), обусловленный сужением ширины запре-

щенной зоны δE_g , равен $\exp\left(\frac{dE_g}{2kT}\right)b^{\frac{1}{2}}$, а параметры E_g , E_F , dE_g и b определяются выражениями (1.159)–(1.161).

Удельное сопротивление границы зерна при высоком уровне легирования

$$r_{gb} = \frac{q^2 N_a L_{gb} C_1 kT \exp(-b_1)}{(2pmkT)^{\frac{1}{2}} (1 - C_1 kT)},$$

$$\text{где } b_1 = \frac{4pW_{gb}}{h} (2m^*)^{\frac{1}{2}} (qf - qV_b)^{\frac{1}{2}}, C_1 = \frac{2pW_{gb}}{h} (2m^*)^{\frac{1}{2}} (qf - qV_b)^{-\frac{1}{2}},$$

$$qV_b = \frac{q^2 N_a W^2}{2e}, qf = qf_{gb} - x, x = E_0 - E_F, qf_{gb} = E_b.$$

При малой концентрации примесей высота энергетического барьера обедненной зоны qV_g имеет максимальную величину, равную примерно $E_g/2$ – полуширине запрещенной зоны невырожденного поликристаллического кремния. Таким образом, при рассмотрении проводимости через границу зерна будет доминировать механизм термоионной эмиссии и удельное сопротивление можно рассчитать с помощью выражения (1.167).

Рассмотрим далее вклад в удельное сопротивление поликремния, обусловленный рассеянием носителей на ионизированных примесях и на фононах.

Феноменологическая теория рассеяния на ионизированных примесях позволяет оценить подвижность носителей в зависимости от концентрации донорных N_d и акцепторных N_a примесей и температуры:

$$\mu_L(N, T) = \mu_L(T)a + \mu_{\min}(1 - a). \quad (1.169)$$

Здесь первое слагаемое учитывает вклад в рассеяние носителей на фононах, а второе – в рассеяние на примесях и в электронно-дырочных столкновениях.

$$\mu_L(T) = AT^{-g} \quad (1.170)$$

где $A_n = 7,12 \cdot 10^8$, $g_n = 2,3$; $A_p = 1,35 \cdot 10^8$, $g_p = 2,2$.

Индексы n и p относятся к электронной и дырочной проводимостям соответственно.

$$a = \left[1 + \left(\frac{T}{300} \right)^b \left(\frac{N}{N_0} \right)^c \right]^{-1},$$

где $N = 0,067 \cdot 10(N_D^+ + N_A^-) + 0,33, (n = p), \mu_{\min}n = 52,24, \mu_{\min}\beta b_n = 49,7, b_n = -3,8, b_p = -3,7, C_n = 0,73, C_p = 0,7, N_{on} = 1,072 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}, N_{op} = 1,606 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}, N_D^+$ и N_A^- – соответственно концентрации дырочных и акцепторных примесей в объеме зерна поликремния, а n и p – концентрации электронов и дырок.

Полная подвижность носителей в зерне поликремния согласно закону Матиссена имеет вид

$$m = \frac{1}{\frac{1}{m_b} + \frac{1}{m_g}}, \quad (1.171)$$

где μ_b – подвижность носителей, определяемая переносом через границу зерна, а μ_g – через объем зерна.

Выводы, полученные на основании изложенного анализа зависимости характеристик переноса носителей заряда от структуры зерна поликремния, степени легирования и температуры, позволяют сформулировать следующий алгоритм расчета удельного сопротивления поликремния.

Вначале рассчитывается концентрация примесей N_g в объеме зерен поликремния с использованием выражения (1.166). Затем проводится расчет энергетического барьера для термоионной эмиссии на границе зерна по формуле (1.165), энергетических характеристик носителей E_g, E_F, dE_g и концентрации носителей n_b согласно выражениям (1.159), (1.160) и (1.168).

Далее по формулам (1.170), (1.171) рассчитывается подвижность носителей, обусловленная рассеянием на ионизированных примесях и на фононах.

Подвижность носителей, обусловленная переносом через границу зерна для слаболегированного ($\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$) поликремния, определяется по формуле (1.167), а для поликремния с промежуточным и высоким уровнем легирования ($> 10^{17} \text{ см}^{-3}$) – согласно выражению (1.169).

Полная подвижность носителей в поликремнии, рассчитываемая по формуле (1.171), связана с удельным сопротивлением согласно выражению $r = \frac{1}{mqn_a}$.

Входными данными для расчета удельного сопротивления легированного поликристаллического поликремния после термообработки являются средний радиус зерна поликремния r , полная концентрация примесей в пленке поликремния N_t и температура T .

Выходная информация, представляемая в графическом или табличном виде: удельное сопротивление поликремния, r , Ом·см; полная подвижность носителей заряда, m , Ом·см/В·с; составляющие полной подвижности носителей заряда, определяемые рассеянием на кристаллической решетке m_g , на ловушках m_L и на ионизированных примесях m_{LT} .

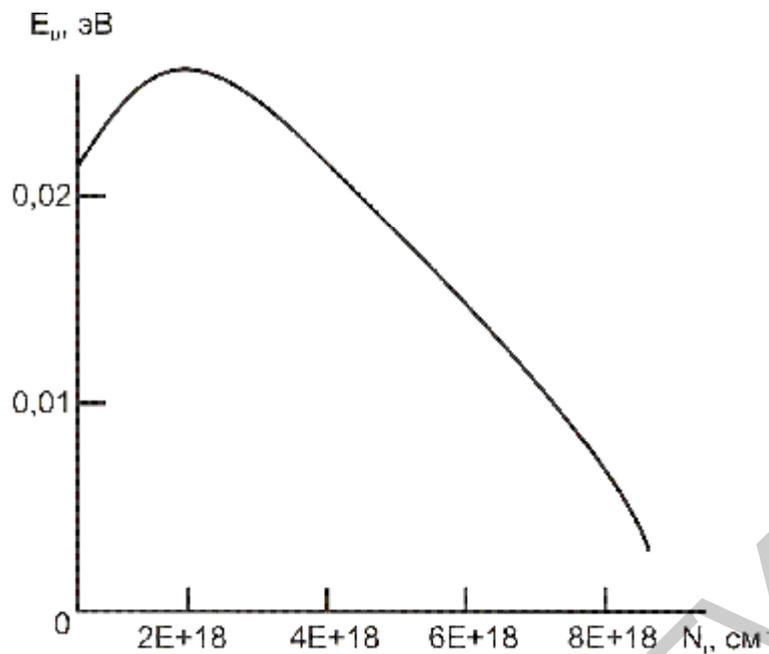


Рис. 1.77. Зависимость величины энергетического барьера от концентрации примесей при термообработке поликремния ($r_0 = 0,005$ мкм, $T = 1000$ °С)

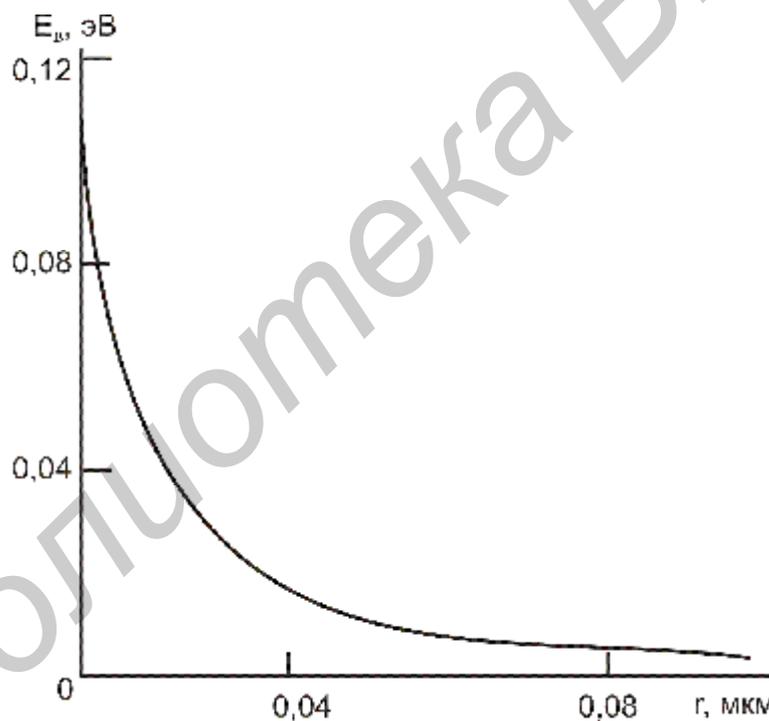


Рис. 1.78. Зависимость величины энергетического барьера от исходного размера зерна поликремния при термообработке ($N_i = 10^{18}$ см⁻³, $T = 1000$ °С)

Алгоритм моделирования удельного сопротивления поликремния, полученного посредством осаждения в LPCVD-процессе и последующей термообработки в условиях длительного и импульсного отжига, реализован в программе, размещенной на Web-сайте [97]. Некоторые типичные результаты расчетов приведены на рис. 1.77–1.80. Символами отмечены экспериментальные [109] данные.

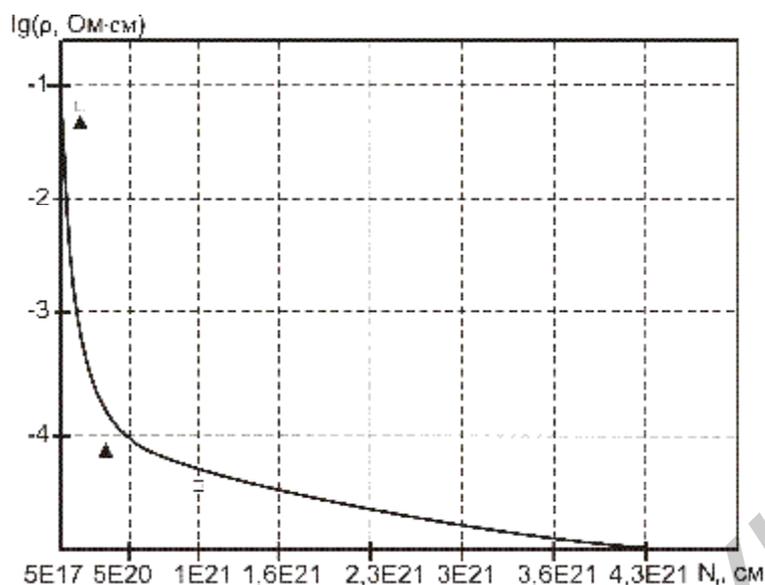


Рис. 1.79. Зависимость удельного сопротивления поликремния от концентрации примесей ($r = 0,05$ мкм)

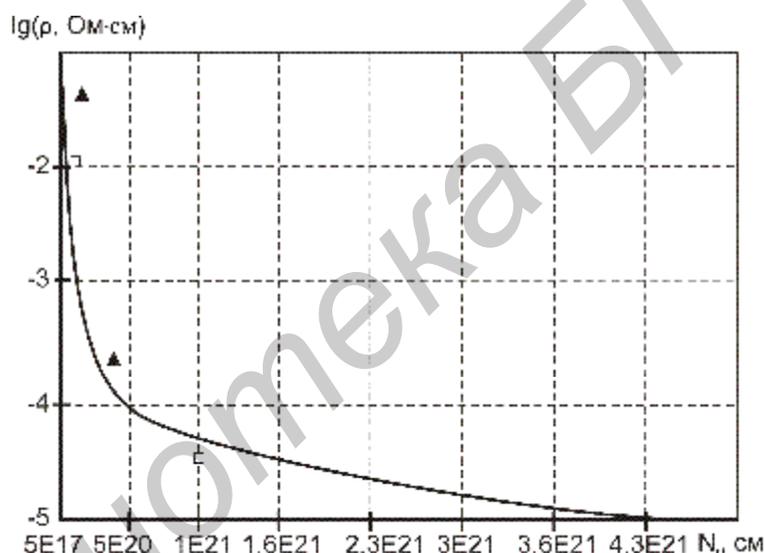


Рис. 1.80. Зависимость удельного сопротивления поликремния от концентрации примесей ($r = 0,5$ мкм)

1.6. Моделирование формирования силицидов

Силициды (соединения металлов с кремнием) образуются при взаимодействии металла с кремнием с образованием промежуточной фазы. Типичная проводимость силицидов на несколько порядков выше по сравнению с проводимостью высоколегированных областей n^+ и p^+ . В современных СБИС-технологиях силициды используются для снижения сопротивления контактов и межсоединений. Кроме того, использование силицидов (самосовмещенных силицидов) приводит к снижению сопротивления поликремниевых затворов и слоевого сопротивления истоков и стоков МОП-транзисторов.

Рост силицидов – это процесс движения границ многослойной структуры вдоль поверхностей раздела «металл–силицид» и «кремний–полукремний» – силицид при взаимодействии атомов кремния и металла с образованием силицида.

Скорости движения границ рассчитываются с использованием коэффициентов, характеризующих скорость взаимодействия атомов кремния и металла, и концентрации кремния и металла в силициде. Диффузия атомов кремния и металла внутри слоев силицида рассматривается посредством использования уравнений, описывающих диффузию точечных дефектов. Моделируются также сегрегация примесей, их диффузия в силициде, а также инжекция точечных дефектов из движущихся границ раздела. Может также рассматриваться комбинация сложных материалов, например, дисилицид платины (PtSi_2), силицид титана (TiSi_2) и силицид вольфрама (WSi_2).

Нанесение силицидов осуществляется посредством осаждения слоев тугоплавких материалов на поверхность кремний/поликремний с последующей термической обработкой.

Моделирование процесса формирования силицидов проводится таким же образом, что и моделирование окисления. На каждом временном шаге в каждой точке поверхности раздела рассчитываются скорости роста силицидов с учетом температуры, коэффициентов скоростей реакции на поверхности и концентраций металла/кремния. Скорости затем используются в качестве граничных условий при решении диффузионных уравнений для кремния, металла и различных примесей. Скорость роста в i -й точке поверхности раздела рассчитывается следующим образом:

$$\frac{dX_i}{dt} = k_i C_i \frac{n_{in}}{N_{1i}},$$

где $k_i = k_s \cdot 0 \exp\left[-\frac{k_s \cdot E}{kT}\right]$ – коэффициент скорости реакции на поверхности раздела; N_{1i} – число молекул кремния или металла на единичную плотность силицида; C_i – концентрация металла или кремния; n_{in} – вектор, нормальный к поверхности раздела, который направлен в сторону кремния/поликремния или металла.

Диффузия молекул металла и кремния в слой силицида моделируется как и процесс диффузии точечных дефектов, при котором молекулы металла и кремния могут реагировать с образованием силицида подобно процессу рекомбинации междоузлий и вакансий:

$$\frac{dC}{dt} = \nabla(D\nabla C) - R,$$

где C – концентрация молекул или металла, или кремния; R – скорость объемной рекомбинации молекул кремния и металла; D – коэффициент диффузии кремния или металла в силициде.

Кроме объемной рекомбинации используются коэффициенты сегрегации и переноса на поверхности раздела с растущим слоем силицида для моделирования химических реакций и переноса диффундирующих молекул через поверхность раздела.

Формирование силицидов обычно приводит к существенному увеличению объема, что объясняет возникновение деформаций, наблюдаемых в силицидах. Такое изменение объема моделируется посредством использования атомных объемов реагирующих молекул и молекулярного объема силицида [110]. Для реакции типа



изменение объема DV рассчитывается следующим образом:

$$\Delta V = \frac{(xV_M + yV_{Si}) - V_{M_xSi_y}}{xV_M + yV_{Si}} 100,$$

где DV , V_M , V_{Si} и $V_{M_xSi_y}$ – соответственно изменение молекулярного объема, молекулярные объемы металла, кремния и силицида; x и y – число атомов металла и кремния в силициде M_xSi_y .

Двухмерное движение границы раздела и изменение объема, связанное с возникающими напряжениями, вызывают вязкий поток движения силицида. Этот поток моделируется аналогично модели окисления COMPRESS посредством решения уравнений [111]:

$$m\nabla^2 V = \nabla P, \nabla \nabla = -\left(\frac{1-2\nu}{m}\right)P, m = \frac{E}{2(1+\nu)},$$

где V – скорость; P – давление; m – вязкость; ν – коэффициент Пуассона; E – модуль Юнга.

1.7. Моделирование процессов осаждения

Для описания топологических изменений, сопровождающих процессы осаждения и травления, используются геометрические представления, коэффициенты для которых рассчитываются по физическим моделям. В данном разделе кратко описываются геометрические подходы, используемые при анализе модификации поверхности в современных средствах проектирования технологии, в частности, в программах SUPREM3 и SSUPREM4.

Модель струны. В этом приближении моделируемое пространство представляет собой совокупность треугольников, каждый из которых содержит информацию о материале, в котором проводится моделирование. Алгоритм струны рассматривает каждую такую поверхность раздела как совокупность движущихся сегментов. Смещение сегментов рассчитывается по соответствующей модели.

Два главных предположения ограничивают общность алгоритма струны. Во-первых, среда, в которой проводится осаждение/травление, полагается равномерной в одном направлении, так что рассматриваемая задача по существу явля-

ется двухмерной. Второе важное предположение состоит в том, что скорость осаждения/травления является скалярной функцией положения и не зависит от направления продвижения фронта локального осаждения/травления и от предыдущего состояния этого фронта.

При использовании алгоритма струны фронт травления моделируется в виде совокупности точек, соединенных прямыми линиями, образующими струну. На каждом приращении по времени каждая точка смещается перпендикулярно локальному фронту осаждения/травления, как показано на рис. 1.81. При этом все сегменты фронта осаждения/травления выравниваются таким образом, чтобы их длины были примерно равными. Основной проблемой при разработке данного алгоритма является выбор подходящего критерия для установки длины сегмента. Сегмент должен быть достаточно коротким, чтобы можно было наиболее точно описать огибающую кривую, т.е., например, максимальный угол между соседними сегментами не должен превышать 0,1 радиана. Однако такой критерий приводит к распространению сегментов в такие области, где фронт может или растягиваться, или сжиматься. В алгоритме струны, используемом в пакете ELITE, ошибка в выборе средней длины сегмента уменьшается пропорционально увеличению времени расчета.



Рис. 1.81. Модель струны при рассмотрении фронта травления

В большинстве рассматриваемых случаев скорость осаждения/травления изменяется с координатой рассматриваемого фронта травления. Это приводит к определенным ошибкам в координате и направлении движения каждой точки струны. Ошибки в координате определяются использованием простого алгоритма интегрирования. Предполагается, что локальная скорость постоянна в течение каждого временного шага. Это может привести к таким же большим ошибкам в определении координат, как и при расчете глубины травления на одном временном шаге. Ошибки в направлении связаны с неравномерными скоростями вдоль струны и с выбором граничных условий. Предполагается, что перпендикулярность к фронту осаждения/травления на каждом временном шаге сохраняется. Однако если две соседние точки имеют большую разницу в скоростях, быстро движущаяся точка не сможет стартовать одновременно с точкой, которая движется с меньшей скоростью.

Модель химического осаждения из газовой фазы. Локальная скорость осаждения $R(x, y)$ в модели химического осаждения из газовой фазы (Chemical Vapor Deposition, CVD) рассчитывается следующим образом:

$$R(x, y) = R|(1 - S)\cos\theta + S|,$$

где q – угол между сегментом поверхности и горизонталью, R – скорость осаждения и S – шаг приращения осаждаемого слоя.

Модель однонаправленного осаждения. В этой модели, как показано на рис. 1.82, молекулы осаждаемого газа поступают на незатененную область подложки только в одном направлении. Скорость роста осаждаемой пленки в области тени равна нулю.

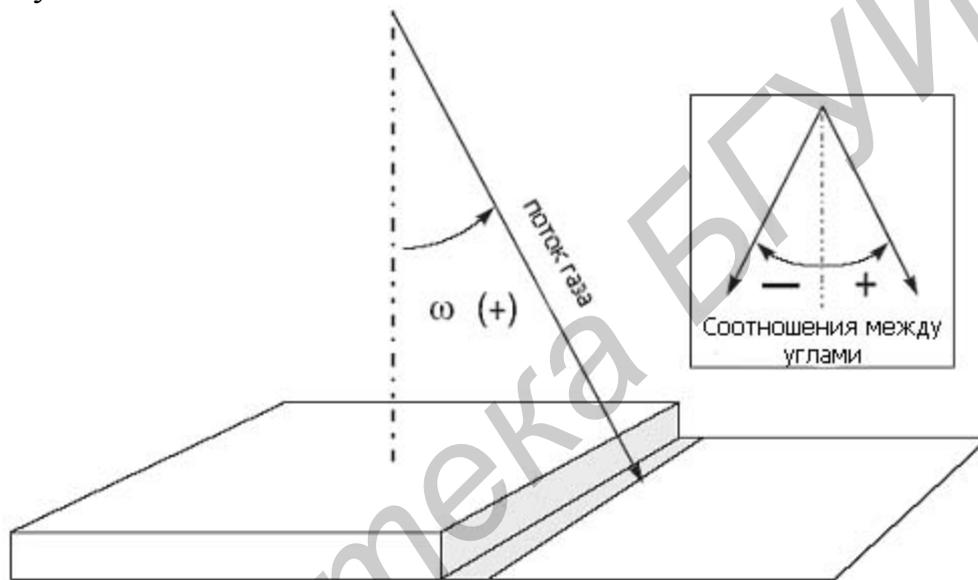


Рис. 1.82. Ступенчатый профиль для однонаправленного источника

Согласно этим предположениям скорость роста на подложке $R(x, y)$ можно выразить следующим образом:

$$R(x, y) = 0,$$

если точка с координатами (x, y) находится в тени

$$R(x, y) = C \sin\omega i + C \sin\omega j,$$

где w – угол между осью y и направлением потока пара; i и j – единичные векторы соответственно в направлениях x и y ; C – скорость роста незатененной поверхности, нормальной к направлению потока пара.

Рассмотрим кратко описание косинусоидального закона осаждения. В этой простой модели рассматривается металлизация, обусловленная испарением. Модель косинусоидального закона осаждения основана на следующих предположениях:

1. Длина свободного пробега атомов или частиц намного больше, чем среднее расстояние между источником и подложкой.
2. Расстояние между источником и подложкой намного больше по сравнению с топографией подложки.
3. Пленка растет в направлении потока пара.
4. Необходимо включить эффект тени.

Величина скорости роста пленки подчиняется косинусоидальному закону, согласно которому толщина осаждаемой пленки растет со скоростью, пропорциональной $\cos(w)$, где w – угол между потоком пара и нормалью к поверхности.

Подгоночный параметр равен 1,0 при осаждении на холодную подложку (при 300 К).

Модель двунаправленного осаждения. В этом случае в каждую точку незатененной области подложки поток пара поступает в двух различных направлениях, и предполагается, что диффузионная длина осаждаемого материала велика по сравнению с характерными геометрическими размерами (рис. 1.83). Скорость роста пленки рассчитывается следующим образом:

$$R(x, y) = 0,$$

если точка (x, y) частично находится в тени:

$$R(x, y) = C \sin\omega_1 i + C \sin\omega_1 \text{ или } R(x, y) = C \sin\omega_2 i + C \sin\omega_2 j,$$

если точка (x, y) не затенена:

$$R(x, y) = C (\cos\omega_1 + \cos\omega_2) i + C (\sin\omega_1 + \sin\omega_2) j,$$

где w_1 и w_2 – углы падения.

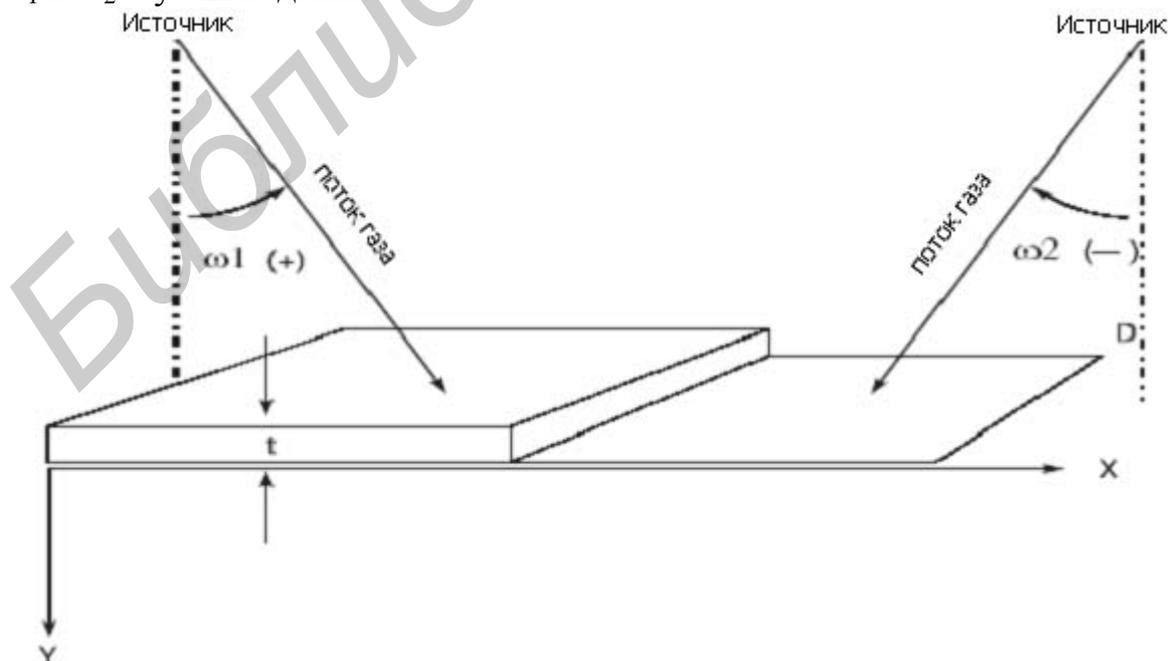


Рис. 1.83. Ступенчатый профиль в случае двоиного источника

Модель полусферического осаждения. Поток газа непрерывно и направленно распределен в определенной области (рис. 1.84). Скорость роста пленки рассчитывается согласно выражению

$$R(x, y) = C (\cos\omega_1 - \cos\omega_2)i + C(\sin\omega_1 - \sin\omega_2)j,$$

где ω_1 и ω_2 – углы, показанные на рисунке.

Для решения проблемы, связанной со ступенчатой формой пленки, часто используется модель планарного распыления для получения пленки реальной формы. Идеальный источник распыления моделируется посредством представления источника распыления в виде полусферы.

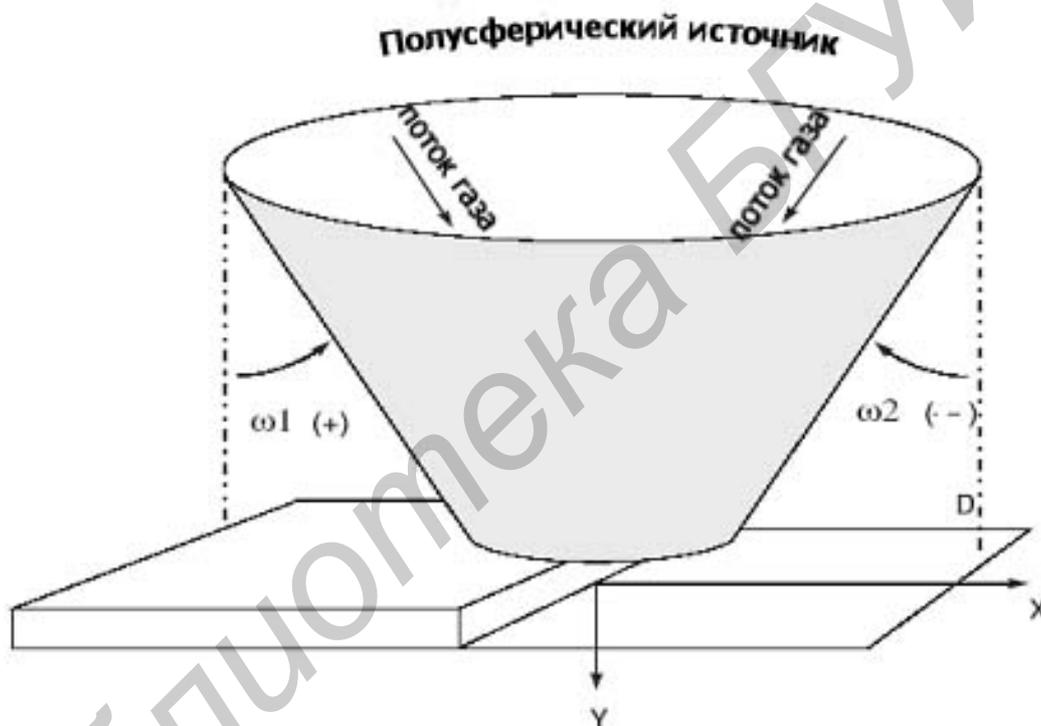


Рис. 1.84. Ступенчатый профиль пленки с полусферическим источником пара

Модель планетарного осаждения. На рис. 1.85 показана планетарная испарительная система. Можно видеть, что поворот системы вдоль центральной оси не влияет на скорость осаждения пленки. Для упрощения решения задачи скорость роста пленки можно рассчитывать при сохранении планетарной системы в стационарном состоянии с вращением только источника вдоль центральной оси системы. В таком случае скорость роста пленки выводится из следующего уравнения:

$$R_x(x, y) = \int \frac{[R^2 - r^2 - rL \operatorname{tg}(d - b) + LW] - L \sec^2(d - b)^2 [L \operatorname{tg}(d - b) \sin(b) - L \cos b] \operatorname{tg} d}{\sqrt{R^2 + W^2} [R^2 - r^2 + L^2 - 2rL \operatorname{tg}(d - b)]^2 \sqrt{R^2 - (r + L \operatorname{tg}(d - b))^2}} dd,$$

где d – угол падения парового потока; b – угол наклона планетарной плоскости; r – расстояние между плоскостью подложки и осью планетарной системы; R , L и W – параметры, зависящие от размеров системы.

В данной планетарной модели осаждения имеются асимметрии как по краям выращиваемой пленки, так и по глубине трещин, образующихся вследствие особой ориентации и положения образца, располагающегося в планетарной системе. Параметры планетарной системы показаны на рис. 1.90.

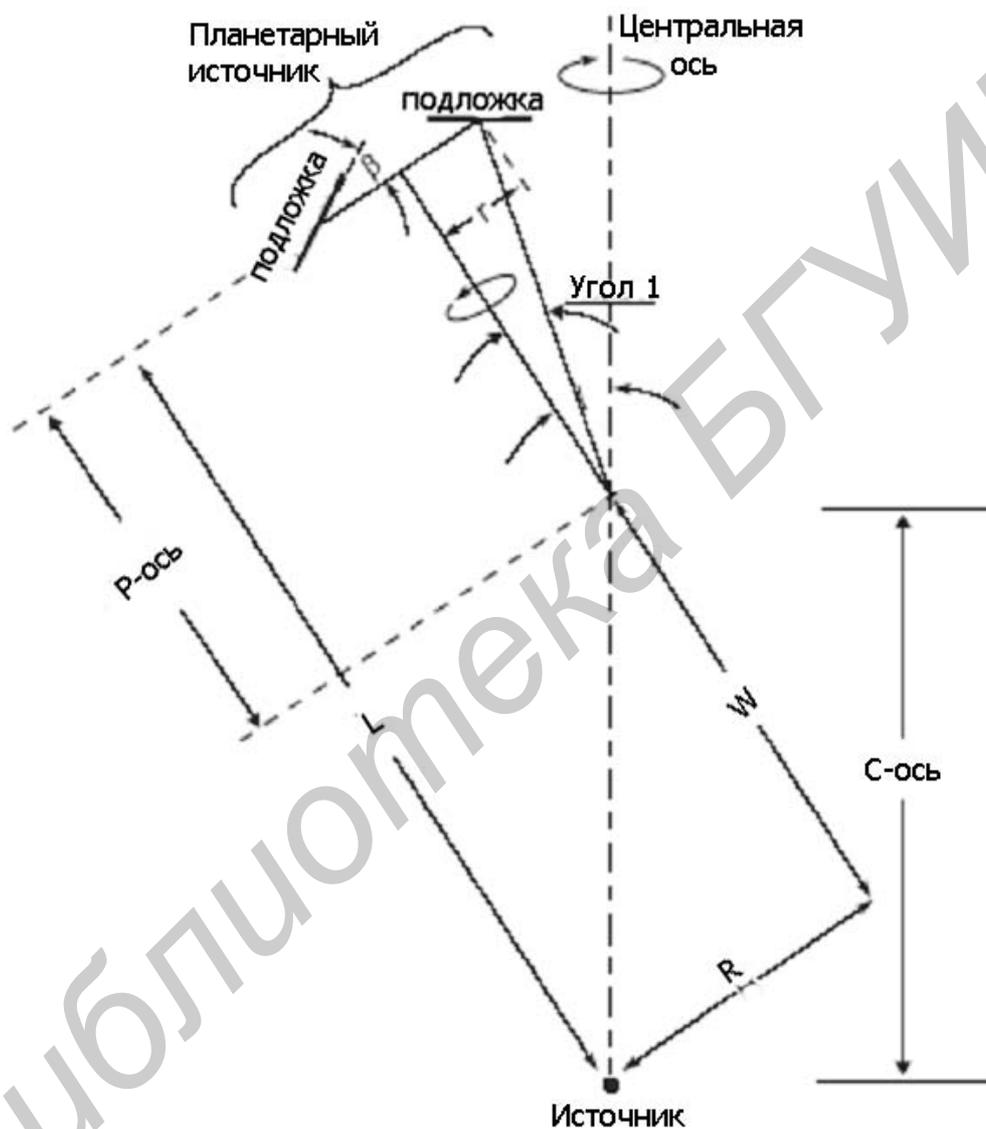


Рис. 1.85. Вид планетарного испарителя

Модель конического осаждения. Коническая модель – это упрощенная версия планетарной модели при b и $r = 0$, причем со стороны подложки источник выглядит как симметричный конус. При такой конфигурации интеграл по приведенным выше уравнениям можно вычислить в аналитическом виде:

$$R_x(x, y) = \frac{-R(R^2 + LW)}{\sqrt{R^2 + W^2}(R^2 + L^2)^2} \left\{ \sqrt{1 - \left(\frac{L}{R} \operatorname{tg} d_{\max}\right)^2} - \sqrt{1 - \left(\frac{L}{R} \operatorname{tg} d_{\min}\right)^2} \right\},$$

$$R_z(x, y) = \frac{L(R^2 + LW)}{\sqrt{R^2 + W^2}(R^2 + L^2)^2} \left\{ \operatorname{asin}\left(\frac{L}{R} \operatorname{tg} d_{\max}\right) - \sqrt{\operatorname{asin}\left(\frac{L^2}{R^2} \operatorname{tg} d_{\min}^2\right)} \right\}.$$

Параметры конической модели представлены на рис. 1.86.

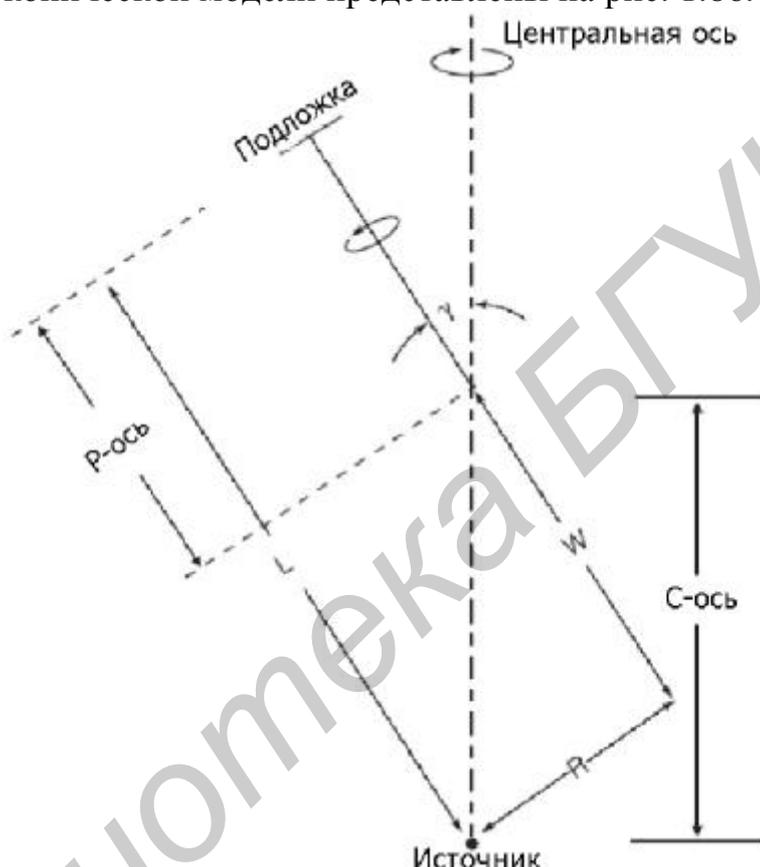


Рис. 1.86. Геометрия и подложка конического испарителя

Модели осаждения с использованием метода Монте-Карло. Данное приближение основано на модели процесса осаждения из химической фазы при низком давлении (Low-Pressure Chemical Vapor Deposition, LPCVD) [85, 86].

Поскольку радикалы осаждаются на подложку с ненулевыми термическими скоростями, они могут покинуть поверхность подложки. Поэтому учитывается вероятность их «прилипания» на подложке.

При расчете поверхностной диффузии используется аналитическое приближение в виде нормализованного гауссова распределения G_D :

$$G_D = \exp\left(-\frac{x^2}{s_D^2}\right),$$

где x – точка контакта с поверхностью, как показано на рис. 1.87.

В баллистической модели рост осаждаемой пленки рассматривается как случайное нереверсивное осаждение жестких двумерных дисков, движущихся по двумерным траекториям из случайным образом выбранной точки на вершине моделируемой поверхности в направлении к поверхности. В точке контакта с растущей пленкой падающие диски останавливаются возле ближайшей начальной точки с самым высоким координационным числом (контактирующим с самым большим числом соседних дисков) в пределах радиуса, равного величине S , которая по умолчанию равна четырем диаметрам диска. Чтобы затормозить нереальный «эпитаксиальный» рост из плотно упакованной поверхности, что рассмотрено в работах [87, 88], начальная совокупность дисков располагается отдельно с центрами, приблизительно равными 1,3 величины диаметра. Такой релаксационный процесс моделирует ограниченную поверхностную диффузию, которая происходит в пленках, для уменьшения поверхностной энергии, связанной с поверхностями высокой кривизны.

Геометрия процесса осаждения, используемая в баллистической модели, показана на рис. 1.87.



Рис 1.87. Геометрическое представление баллистической модели осаждения

1.8. Моделирование травления

Операция травления в технологии микроэлектроники является универсальной. Она заключается или в растворении фоторезиста органическими растворителями, или в травлении окисла щелочью, или в плазменном травлении резиста электронами. Моделирование травления начинается с рассмотрения исходного профиля структуры как движущейся среды, скорость травления которой является функцией положения и других переменных.

Рассмотрим кратко некоторые модели травления, используемые в современных программных комплексах технологического моделирования, в частности, в программе SSUPREM4.

Изотропная модель травления. В процессах мокрого и плазменного травления подложка погружается в жидкую или газовую среду, которая реагирует с обрабатываемой поверхностью. При мокром травлении жидкость взаимодействует с поверхностью, и выборочные продукты удаляются. В результате этой реакции образуются летучие побочные продукты, которые удаляются с помощью вакуумного насоса. Физические реакции в таком процессе отсутствуют.

Модель реактивного ионного травления. В модели реактивного ионного травления (РИТ) процесс травления разделяется на два компонента: изотропное и анизотропное травление. Каждый из этих компонентов характеризуется эмпирическими скоростями травления (r_{iso} и r_{dir}). Отношение

$$A = \frac{r_{dir}}{r_{iso} + r_{dir}}$$

определяет меру анизотропии.

Посредством анизотропной компоненты r_{iso} моделируется химическое реактивное травление, в результате которого получают профили с подрезанными и округленными сечениями. При $A = 0$ процесс полностью изотропный. В условиях изотропного травления точки на струне продвигаются с постоянной скоростью r_{iso} в направлении, перпендикулярном к сектору смежных сегментов (рис. 1.88).



Рис. 1.88. Точки на сегменте в случае изотропного травления

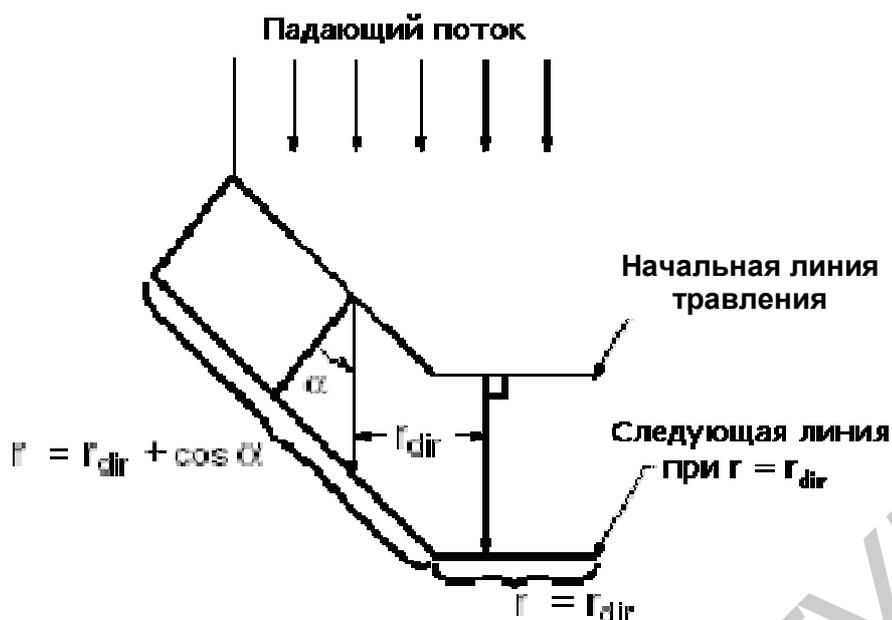


Рис. 1.89. Смещение точек, обусловленное влиянием направления падающего потока

Компонента скорости анизотропного травления r_{dir} пропорциональна косинусу угла между направлением потока и нормалью к поверхности. При $A = 1$ процесс травления – анизотропный, приводящий к вертикальным боковым стенкам профиля травления (рис. 1.89).

На рис. 1.90 показаны наиболее существенные области для каждой компоненты в модели РИТ. Эффект тени учитывается с помощью параметра r_{iso} в затененной области.

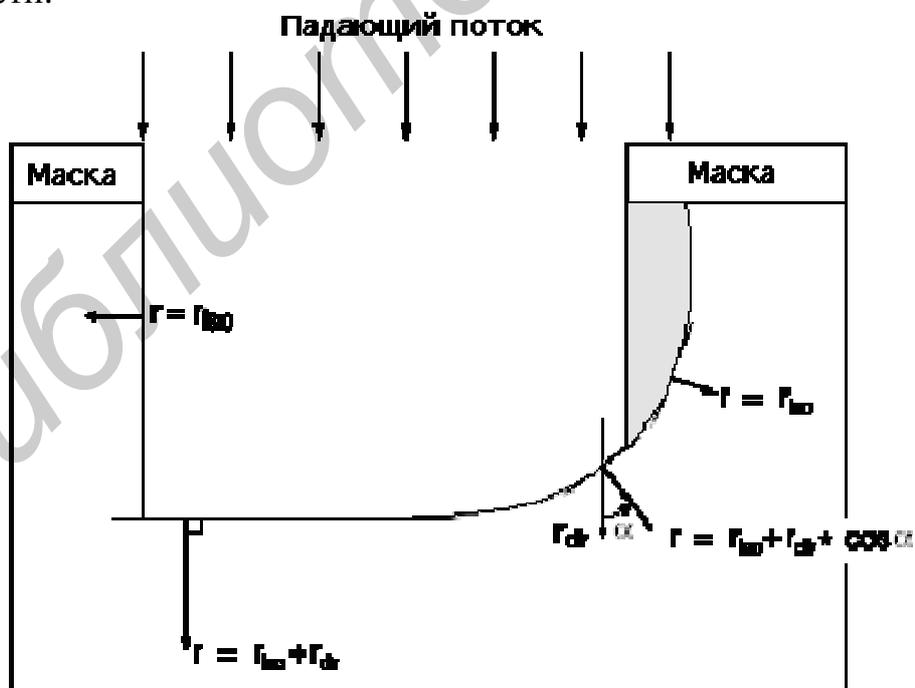


Рис. 1.90. Наиболее существенные области, получаемые с использованием параметров r_{iso} и r_{dir}

Модель плазменного травления. Эта модель основана на моделировании методом Монте-Карло переноса ионов из нейтральной плазмы через защитную оболочку (кожух), окружающую электроды и стенки. Ионы поступают в эту оболочку из плазмы, и затем их движение ускоряется в электрическом потенциале между плазмой и электродами. В методе Монте-Карло рассматривается процесс переноса большого числа ионов через защитную оболочку, включая их столкновения с различными газовыми составляющими, присутствующими в камере. Число столкновений, испытываемых каждым ионом, зависит как от величины среднего пробега иона, так и от толщины защитной оболочки. Для снижения времени расчетов траектории ионов рассчитываются независимо, а взаимодействие между ионами не рассматривается.

Расчитанные методом Монте-Карло распределения ионов используются для расчета потока ионов, падающих на поверхность подложки. Значение этого потока затем используется для расчета скорости травления посредством интегрирования потока по «окну видимости» в каждой точке на поверхности. «Окно видимости», например, для плоской поверхности имеет размер от 0 до 2π . Однако для более сложных структур, например канавки, точки на поверхности затеняются и «окно видимости» уменьшается.

Модель травления, ускоренного легированием. Ускорение травления, обусловленное легированием, моделируется посредством введения величины скорости травления в каждой точке в следующем виде:

$$R_{enh} = (1+h)R.$$

Коэффициент h рассчитывается с помощью следующего выражения:

$$h = 0,5H_{max}(\tanh(H_S(S - H_{min})) + 1)/2,$$

где H_{max} – коэффициент, связанный с максимальным усилением, а параметр H_S показывает, как быстро величина ускорения достигает своего максимального значения; S – коэффициент, связанный с уровнем легирования подложки.

Модель травления с использованием метода Монте-Карло

Уменьшение критических размеров современных приборов предъявляет высокие требования относительно оптимизации травления тонких масок. Кроме того, повышаются требования к травителям. Моделирование этого процесса требует более совершенных методов, чем методы аналитические. Необходимо более точное рассмотрение таких вопросов, как расчет распределения плазмы и прямое взаимодействие плазмы с материалом подложки.

Более физичные результаты моделирования плазменного и ионного травления достигаются с использованием метода Монте-Карло. В таких моделях учитывается переосаждение полимерного материала, представляющего собой смесь входящих ионов с молекулами материала подложки (как результат травления или распыления).

1.9. Моделирование химико-механического полирования

Модели химико-механического полирования (ХМП) рассматривают планирование пластины посредством механического и химического полирования и решают две основные проблемы: определение глубины фокуса апертуры литографической системы и утончение материала, которое сопровождается формированием непланарной топографии [112].

Модель жесткого полирования. Модель жесткого полирования рассматривает процесс сглаживания поверхности обрабатываемой пластины и рассчитывает скорость полирования как функцию параметра поверхности Pf . Чем выше значение этого параметра, тем ниже скорость полирования. Скорость полирования для самой высокой точки структуры Y_{max} рассчитывается следующим образом:

$$R(x, y) = M_1(1 - Pf) - M_2Pf. \quad (1.172)$$

Параметрами для модели жесткого полирования являются M_1 и M_2 : M_1 – это скорость при $Pf = 0$, а M_2 – это скорость при $Pf = 1$. $Pf = 1$ соответствует плоской поверхности и рассчитывается по формуле

$$Pf = \frac{X_{total} - \Delta Y}{X_{total}}.$$

Поверхностные точки, характеризующиеся параметром ΔY ниже самой высокой точки структуры, определяют коэффициент Pf . Из данных, показанных на рис. 1.96, коэффициент Pf можно определить следующим образом:

$$Pf = \frac{DX_1 + DX_2}{X_{total}}.$$

Значение эффективной высоты ΔY рассчитывается как произведение предыдущего значения и величины текущего временного шага. Этот параметр для точек высотой Y_{max} равен R из уравнения (1.172). В точках ниже Y_{max} скорость такова, чтобы отполировать структуру по u -координате до $(Y_{max} - \Delta Y)$, так что структура становится более планарной, как показано на рис. 1.91.

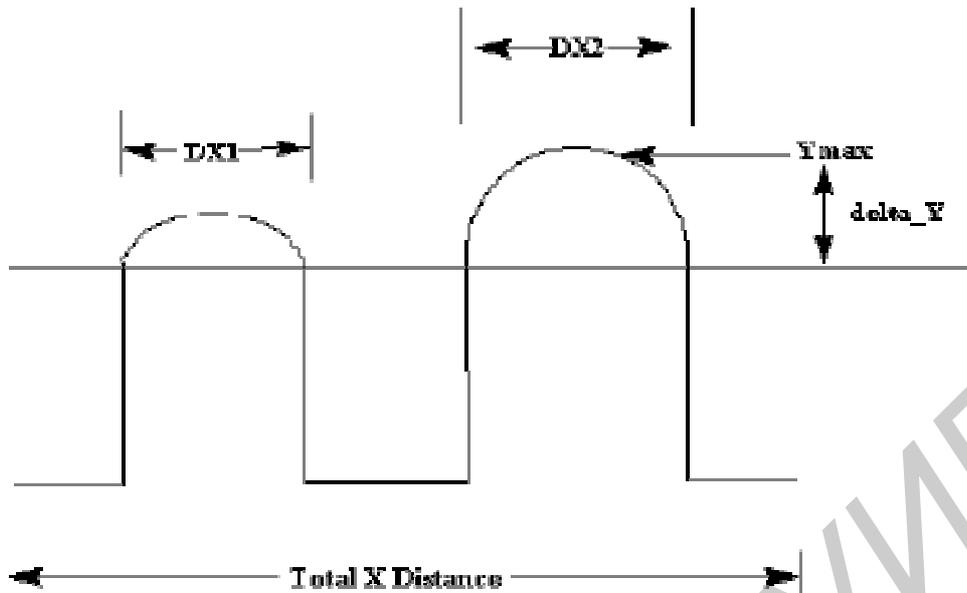


Рис. 1.91. Иллюстрация модели жесткого полирования – структура после планаризации

Модель мягкого полирования. Скорость полирования в модели мягкого полирования, описанной в работе [112], определяется следующим образом:

$$P_i = \frac{K_i A_i}{S_i},$$

где K_i – кинетический фактор или горизонтальная компонента скорости полирования в точке i ; A_i – фактор ускорения точки i , который имеет высокое значение для тех точек, в которых выступы более высокие и которые затеняют другие точки; S_i – фактор затенения, повышающий скорость полирования и являющийся функцией тех точек, которые располагаются выше точки i . Для плоской поверхности $\frac{K_i A_i}{S_i} = 1$.

Фактор затенения является характеристикой плоских поверхностей. Однако в общем случае он рассчитывается для одной или большего количества точек, которые затеняют точку i . Фактор затенения рассчитывается посредством использования следующего уравнения:

$$S_i = \exp\left(\frac{\overline{\Delta z}_i}{h}\right),$$

где $\Delta z_i \geq 0,0$ так что $S_i > 1$. Величина Δz_i получается посредством интегрирования по окружающей топографии:

$$\overline{\Delta z}_i = \sum_{i_{left}}^{i_{right}} z_i / \cosh\left(\frac{r_i}{L}\right).$$

В этих уравнениях i_{left} и i_{right} относятся к тем двум точкам, которые могут затенять точку i . Как видно из уравнений, эффект от этих точек зависит от двух параметров h и L . Переменная z_i – вертикальное расстояние между точкой i и точкой i_{left}/i_{right} . Фактор ускорения A_i определяется с помощью уравнения, приведенного ниже. A_i рассчитывается для тех двух точек, которые затеняют точку i . Таким же образом многократные эффекты тени учитываются с помощью коэффициента $A_{i_{left}}/A_{i_{right}}$. Если точка i затеняет какую-либо другую точку j , то A_i следует увеличить с помощью подобного уравнения. Это увеличение впоследствии сказывается на значении величины $A_{i_{left}}$.

$$\begin{aligned} A_{i_{left}} &= A_{i_{left}} + A_i B_i (1 - 1/S_i), \\ A_{i_{right}} &= A_{i_{right}} + A_i B_i (1 - 1/S_i). \end{aligned}$$

Постоянная $B_{i_{left}}/B_{i_{right}}$ – весовой фактор, который основан на величине затенения в точке i , обусловленного точкой затенения i_{left}/i_{right} . Кинетический фактор K_i , основанный на выражении $K_i = 1 + K \tan \alpha_i$, вводится для учета эффекта влияния параметра K на скорость полирования. Угол α_i – локальный угол, характеризующий касательную к полируемой поверхности. Этот угол не должен превышать $89,9544^\circ$ (1,57 радиан), чтобы исключить ошибки в вычислениях.

2. ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ

В данном разделе приводятся основные физические модели, используемые в программном комплексе компании SILVACO (модуль ATLAS) [113] при проектировании полупроводниковых приборов.

2.1. Основные уравнения физики полупроводниковых приборов

Физические модели полупроводниковых приборов описываются системой фундаментальных уравнений [14, 23, 114], которые связывают электростатический потенциал и плотность носителей заряда в пределах области моделирования. Эта система уравнений выводится из законов Максвелла и состоит из уравнения Пуассона, уравнений непрерывности и транспортных уравнений. Уравнение Пуассона описывает связь между изменениями электростатического потенциала и локальной плотности носителей. Уравнения непрерывности и транспорта описывают эволюцию плотности носителей в результате процессов транспорта, генерации и рекомбинации.

Уравнение Пуассона. Это уравнение связывает электростатический потенциал с пространственной плотностью носителей заряда:

$$\operatorname{div}(e\nabla\psi) = -r, \quad (2.1)$$

где ψ – электростатический потенциал (или собственный потенциал Ферми), ε – локальная диэлектрическая проницаемость и ρ – локальная пространственная плотность зарядов. Локальная пространственная плотность зарядов представляет собой сумму подвижных и неподвижных зарядов, включая электроны, дырки и ионизированные примеси.

Электрическое поле можно найти через градиент потенциала:

$$\vec{E} = -\nabla\psi. \quad (2.2)$$

Уравнения непрерывности. Уравнения непрерывности для электронов и дырок представляются в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{q} \operatorname{div}(\vec{J}_n) + G_n - R_n, \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= \frac{1}{q} \operatorname{div}(\vec{J}_p) + G_p - R_p. \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

где n и p – концентрации электронов и дырок; \vec{J}_n и \vec{J}_p – плотности электронного и дырочного токов; G_n и G_p – скорости генерации электронов и дырок; R_n и R_p – скорости рекомбинации электронов и дырок; q – заряд электрона.

Транспортные уравнения. Уравнения (2.1) и (2.3) составляют основу для моделирования приборов. Однако кроме них для описания физических моделей поведения $\dot{J}_n, \dot{J}_p, G_n, G_p, R_n$ и R_p требуются дополнительные уравнения.

Уравнения для плотности тока или модели транспорта зарядов обычно выводятся посредством аппроксимации и некоторых упрощений общего транспортного уравнения Больцмана, что приводит к целому ряду различных моделей транспорта зарядов, как, например, диффузионно-дрейфовая модель, модель энергетического баланса или гидродинамическая модель. Выбор той или иной модели транспорта зарядов оказывает существенное влияние на выбор моделей генерации и рекомбинации носителей.

Наиболее простой моделью транспорта зарядов является диффузионно-дрейфовая модель. Эта модель отличается тем, что в ее рамках не требуется вводить дополнительные независимые переменные в величины ψ, n и p . До недавнего времени диффузионно-дрейфовая модель давала физически адекватные результаты почти для всех приборов. Однако диффузионно-дрейфовое приближение оказывается менее точным для приборов со все более уменьшающимися характерными размерами. Более точными для приборов с субмикронными размерами являются модель энергетического баланса и гидродинамическая модель.

Диффузионно-дрейфовое транспортное уравнение. Как следует из транспортной теории Больцмана, плотности токов в уравнениях непрерывности могут быть аппроксимированы диффузионно-дрейфовой моделью. В этом случае плотности токов выражаются через квазиуровни Ферми φ_n и φ_p следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{J}_n &= -q\mathbf{m}_n n \nabla \varphi_n, \\ \mathbf{J}_p &= -q\mathbf{m}_p p \nabla \varphi_p. \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

где μ_n и μ_p – подвижности электронов и дырок. Квазиуровни Ферми могут быть выражены через концентрации носителей и потенциал посредством аппроксимации Больцмана:

$$\left. \begin{aligned} n &= n_{ie} \exp\left[\frac{-q(\psi - \varphi_n)}{kT_L}\right], \\ p &= n_{ie} \exp\left[\frac{-q(\psi - \varphi_p)}{kT_L}\right], \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

где n_{ie} – эффективная собственная концентрация электронов и T_L – температура кристаллической решетки. Эти два уравнения могут быть переписаны для определения квазиуровней Ферми:

$$\left. \begin{aligned} f_n &= \psi - \frac{kT_L}{q} \ln \frac{n}{n_{ie}}, \\ f_p &= \psi + \frac{kT_L}{q} \ln \frac{p}{n_{ie}}. \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

Подставляя эти уравнения в выражения для плотностей тока (2.4), получаем следующие соотношения для токов:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{J}_n &= qD_n \nabla n - qn \mathbf{m}_n \nabla \psi - m_n n (kT_L \nabla (\ln n_{ie})), \\ \mathbf{J}_p &= -qD_p \nabla p - qp \mathbf{m}_p \nabla \psi + m_p p (kT_L \nabla (\ln n_{ie})). \end{aligned} \right\} \quad (2.7)$$

Последний член правых частей уравнений (2.7) учитывает градиент эффективной собственной концентрации носителей, обусловленный эффектами сужения ширины запрещенной зоны. Эффективные электрические поля обычно определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}_n &= -\nabla \left(\psi + \frac{kT_L}{q} \ln n_{ie} \right), \\ \mathbf{E}_p &= -\nabla \left(\psi - \frac{kT_L}{q} \ln n_{ie} \right). \end{aligned} \right\} \quad (2.8)$$

что позволяет записать диффузионно-дрейфовые уравнения в более удобной форме:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{J}_n &= qn \mathbf{m}_n \mathbf{E}_n + qD_n \nabla n, \\ \mathbf{J}_p &= qp \mathbf{m}_p \mathbf{E}_p - qD_p \nabla p. \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

Следует отметить, что такой подход при построении диффузионно-дрейфовой модели неявно допускает, что выполняются соотношения Эйнштейна. В случае статистики Больцмана это соответствует:

$$\left. \begin{aligned} D_n &= \frac{kT_L}{q} m_n, \\ D_p &= \frac{kT_L}{q} m_p. \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

Если используется статистика Ферми–Дирака для электронов, то выражение для D_n в системе уравнений (2.10) принимает следующий вид:

$$D_n = \frac{\left(\frac{kT_L}{q} m_n\right) F_{1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} |e_{Fn} - e_C| \right\}}{F_{-1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} |e_{Fn} - e_C| \right\}}, \quad (2.11)$$

где F – интеграл Ферми–Дирака. Аналогичные выражения используются для дырок со статистикой Ферми–Дирака.

Транспортное уравнение энергетического баланса. Более высокий порядок решения общих транспортных уравнений Больцмана достигается введением дополнительной связи между плотностью тока и температурой носителей (или энергией). Выражения для плотности тока по диффузионно-дрейфовой модели модифицируются, чтобы включить это дополнительное физическое соотношение. В этом случае выражения для электронного (дырочного) тока и плотностей энергетических потоков приобретают следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r} J_n &= qD_n \nabla n - m_n n \nabla \psi + qnD_n^T \nabla T_n, \\ \mathbf{r} S_n &= -K_n \nabla T_n - \left(\frac{kd_n}{q}\right) \mathbf{r} J_n T_n, \\ \mathbf{r} J_p &= qD_p \nabla p - m_p p \nabla \psi + qpD_p^T \nabla T_p, \\ \mathbf{r} S_p &= -K_p \nabla T_p - \left(\frac{kd_p}{q}\right) \mathbf{r} J_p T_p, \end{aligned} \right\} \quad (2.12)$$

где T_n и T_p – температуры носителей заряда (электронов и дырок), S_n и S_p – соответствующие энергетические (или тепловые) потоки. Транспортная модель энергетического баланса включает множество достаточно сложных соотношений, поэтому она будет изложена отдельно.

Выражение для смещения тока, используемое при моделировании временных процессов в приборах, имеет следующий вид:

$$\mathbf{r} J_{dis} = e \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right). \quad (2.13)$$

2.2. Основы теории статистики носителей заряда

Статистики Ферми–Дирака и Больцмана. Электроны в состоянии теплового равновесия при температуре T_L в кристаллической решетке полупроводника подчиняются статистике Ферми–Дирака, согласно которой вероятность $f(\varepsilon)$ того, что электронное состояние с энергией ε будет занято электроном, записывается в следующем виде:

$$f(e) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{e - E_F}{kT_L}\right)}, \quad (2.14)$$

где E_F – пространственно независимая энергия, известная как уровень Ферми, и k – постоянная Больцмана.

В пределе ($\varepsilon - E_F \gg kT_L$) уравнение (2.14) можно аппроксимировать следующим образом:

$$f(e) = \exp\left(\frac{E_F - e}{kT_L}\right). \quad (2.15)$$

Статистика, основанная на использовании уравнения (2.15), называется статистикой Больцмана. Использование статистики Больцмана вместо статистики Ферми–Дирака значительно упрощает последующие вычисления. Вообще говоря, статистика Больцмана применима в теории полупроводниковых приборов. Однако в статистике Ферми–Дирака необходимо учитывать определенные свойства высоколегированных (вырожденных) материалов.

Эффективная плотность состояний. Интегрирование статистики Ферми–Дирака по параболической зависимости плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне, энергетический минимум в которых расположен при энергиях E_C и E_V , приводит к следующим выражениям для концентраций электронов и дырок:

$$\left. \begin{aligned} n &= N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT_L}\right) \\ p &= N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT_L}\right) \end{aligned} \right\} \quad (2.16)$$

где N_C и N_V – эффективные плотности состояний для электронов и дырок:

$$\left. \begin{aligned} N_C(T_L) &= 2 \left(\frac{2pm_e^* kT_L}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{T_L}{300} \right)^{\frac{3}{2}} NC300, \\ N_V(T_L) &= 2 \left(\frac{2pm_h^* kT_L}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{T_L}{300} \right)^{\frac{3}{2}} NV300. \end{aligned} \right\}$$

Здесь $NC300$ и $NV300$ – подгоночные параметры.

Собственная концентрация носителей. Из уравнения (2.16) получим:

$$np = n_{ie}^2, \quad (2.17)$$

где n_{ie} – собственная концентрация носителей, определяемая следующим образом:

$$n_{ie} = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(\frac{-E_g}{2kT_L}\right), \quad (2.18)$$

где $E_g = E_C - E_V$ – ширина запрещенной зоны.

Для собственного (нелегированного) материала $n = p$. В этом случае решение системы (2.16) относительно E_F дает:

$$E_F = E_i = -q\psi_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \left(-\frac{kT_L}{2}\right) \ln\left(\frac{N_C}{N_V}\right), \quad (2.19)$$

где E_i – уровень Ферми для собственного кремния, а ψ_i – собственный потенциал.

Уравнение (2.19) определяет также собственный потенциал при неравновесных условиях.

Концентрации электронов и дырок можно выразить через собственную концентрацию носителей:

$$\left. \begin{aligned} n &= n_{ie} \exp\left[\frac{-q(\psi - f_n)}{kT_L}\right], \\ p &= n_{ie} \exp\left[\frac{-q(\psi - f_p)}{kT_L}\right], \end{aligned} \right\} \quad (2.20)$$

где ψ – собственный потенциал и φ – потенциал, соответствующий уровню Ферми, т.е. $E_F = q\varphi$.

Ширина запрещенной зоны. Температурная зависимость ширины запрещенной зоны представляется следующим образом:

$$E_g(T_L) = E_g(0) - \frac{\alpha T_L^2}{T_L + b} = E_g(0) + a \left[\frac{300^2}{300 + b} - \frac{T_L^2}{T_L + b} \right],$$

где $E_g(0)$ – ширина запрещенной зоны при 0 К, α и b – постоянные коэффициенты, 300 – комнатная температура в шкале Кельвина. Для кремния $E_g(0) = 1,08$ эВ, $\alpha = 4,73 \cdot 10^{-4}$ эВ/К, $b = 636$ К.

Сужение ширины запрещенной зоны. Экспериментальные данные показывают, что произведение pn в кремнии зависит от концентрации примесей в условиях высокого уровня легирования (более 10^{18} см^{-3}). Увеличение уровня легирования приводит к сужению ширины запрещенной зоны: уровень зоны проводимости уменьшается примерно на такую же величину, на какую поднимается уровень валентной зоны. Этот эффект моделируется с помощью изменяющейся по пространству собственной концентрации n_{ie} , определяемой из уравнения:

$$n_{ie}^2 = n_i^2 \exp\left(\frac{\Delta E_g}{kT}\right). \quad (2.21)$$

Эти эффекты могут быть описаны в аналитическом виде, связывающем изменение ширины запрещенной зоны ΔE_g с концентрацией примеси N :

$$\Delta E_g = a \left\{ \ln \frac{N}{b} + \left[\left(\ln \frac{N}{b} \right)^2 + c \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, \quad (2.22)$$

где a , b и c – константы.

Изменение ширины запрещенной зоны вводится в другие физические модели посредством вычитания результатов, получаемых с использованием уравнения (2.22), из значения ширины запрещенной зоны E_g . Кроме того, в транспортные модели введены члены, описывающие эффекты электрического поля, в той форме, которая была описана выше, так что

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r} \\ E_n &= -\nabla \left(y + \frac{kT_L}{q} \ln n_{ie} \right) \\ \mathbf{r} \\ E_p &= -\nabla \left(y - \frac{kT_L}{q} \ln n_{ie} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

При моделировании ширины запрещенной зоны введен также член, частично учитывающий «средство» к электрону χ , эффективная величина которого χ_{eff} описывается следующим образом:

$$\chi_{eff} = \chi + \Delta E_g A,$$

где A – так называемый коэффициент асимметрии.

2.3. Пространственный заряд, обусловленный неполной ионизацией, ловушками и дефектами

Уравнение Пуассона (2.1), включающее концентрации носителей, концентрации ионизированных донорных и акцепторных примесей N_D^+ и N_A^- , заряд, обусловленный ловушками и дефектами Q_T , имеет вид:

$$\operatorname{div}(e\nabla\psi) = q(n - p - N_D^+ + N_A^-) + Q_T. \quad (2.24)$$

Обычно принимается полная ионизация примесей (т.е. $N_D^+ = N_{D,total}$ и $N_A^- = N_{A,total}$) и устанавливается величина Q_T , равная нулю. Для учета неполной ионизации примеси и дополнительного заряда, связанного с ловушками и дефектами, используются специальные модели.

Неполная ионизация примесей. Эффект «вымораживания» примесей при использовании статистики Ферми–Дирака описывается посредством введения коэффициентов с целью учета вырождения для зоны проводимости и валентной зоны. Величины концентраций ионизированных донорных и акцепторных примесей описываются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} N_D^+ &= \frac{N_D}{1 + G_C \exp\left(\frac{e_{Fn} - (E_c + E_{DB})}{kT_L}\right)}, \\ N_A^- &= \frac{N_A}{1 + G_V \exp\left(\frac{E_V + E_{AB} - e_{Fp}}{kT_L}\right)}, \end{aligned} \right\} \quad (2.25)$$

где E_{DB} – энергетический уровень доноров, E_{AB} – энергетический уровень акцепторов, N_D и N_A – полные скомпенсированные концентрации примесей n - и p -типа, G_C и G_V – константы.

Полные скомпенсированные концентрации примесей определяются следующим образом:

если $N_{total} = (N_{A,total} - N_{D,total}) > 0$, то $N_D = |N_{total}|$ и $N_A = 0$;

в противоположном случае $N_D = 0$ и $N_A = |N_{total}|$.

Для физически адекватного моделирования эффекта неполной ионизации в кремнии при высоких уровнях легирования используется новая модель.

Модели неполной ионизации, описываемые системой уравнений (2.25), дают приемлемые физические результаты для низких и средних уровней легирования. Для более высоких (больше, чем $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) уровней легирования эти модели плохо описывают экспериментальные результаты полной ионизации.

В этой модели энергии активации примесей в системе уравнений (2.25) изменены для описания зависимости от уровня легирования согласно следующим выражениям:

$$\left. \begin{aligned} E_{DB}(MэВ) &= 44,0 - 3,6 \cdot 10^{-8} N_D^{1/3} \quad (N_D < 10^{18} \text{ см}^{-3}), \\ E_{AB}(MэВ) &= 43,8 - 3,037 \cdot 10^{-5} N_A^{1/3} \quad (N_D < 10^{18} \text{ см}^{-3}). \end{aligned} \right\} \quad (2.26)$$

При концентрациях примесей выше $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ эта модель удовлетворительно предсказывает эффекты, связанные с полной ионизацией. При концентрациях примеси между 10^{18} и $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ эта модель предсказывает величины, линейно интерполированные между значениями, полученными согласно выражениям (2.25), (2.26), и моделью полной ионизации.

Ловушки и дефекты. В полупроводниковых материалах могут образовываться дефекты кристаллической решетки, обусловленные разрывом связей на поверхностях раздела или наличием примесей в подложке. Присутствие таких дефектных центров или ловушек в полупроводниковых подложках может оказать значительное влияние на электрические характеристики приборов. Ловушечные центры, энергия связи которых находится в пределах запрещенной зоны, обмениваются зарядами между зоной проводимости и валентной зоной посредством эмиссии и рекомбинации электронов. Ловушечные центры изменяют плотность пространственного заряда в объеме полупроводника и влияют на статистику рекомбинации.

Существует три механизма, которые вносят вклад в член, описывающий пространственный заряд в уравнении Пуассона, в дополнение к эффектам ионизированных донорных и акцепторных примесей: заряды, захваченные на границе раздела, ловушечные состояния на границе раздела и ловушечные состояния в объеме. Заряд, захваченный на границе раздела, рассматривается как слоевой заряд на границе раздела и, следовательно, контролируется условиями на границе раздела. Ловушки на границе раздела и ловушки в объеме вносят вклад в пространственный заряд, описываемый правой частью уравнения Пуассона.

Дефекты полупроводниковых структур имеют два возможных состояния, называемых пустым и полным. В пустом состоянии дефект характеризуется определенным поперечным сечением захвата электрона. Дефект может только или испустить, или захватить электрон. Если заряд на центре изменился на величину $-q$ посредством захвата электрона, то такой дефект называется полным и характеризуется другим поперечным сечением захвата дырки. Существует два основных типа ловушек: ловушки, подобные донорам (электронные ловушки), и ловушки, подобные акцепторам (дырочные ловушки). Заряд, содержащийся в каждом типе ловушек, будет зависеть от того, какой носитель (электрон или дырка) заполняет ловушку.

Ловушка, подобная донору, заряжена положительно и, следовательно, может захватить только электрон. Это означает, что ловушки, подобные донору, заряжены положительно, если в них нет электрона, и они нейтральны, если заполнены. Ловушка, подобная акцептору, заряжена отрицательно и, следовательно, она может только испустить электрон. Следовательно, ловушки, подобные акцепторам, отрицательны, если они заполнены, и нейтральны, если они пусты. В полупроводнике имеется положение уровня Ферми, соответствующее состоянию

нейтральности. При таком условии ловушки, располагающиеся выше уровня Ферми, определяются как ловушки, подобные акцепторам, а ловушки, располагающиеся ниже уровня Ферми, – как ловушки, подобные донорам.

Расчет ловушечного заряда в уравнении Пуассона. Полный заряд, обусловленный наличием ловушек, добавляется в правую часть уравнения Пуассона. Таким образом, величина полного заряда определяется следующим соотношением:

$$Q_T = q(p_t - n_t),$$

где n_t и p_t – плотности ловушечного заряда для донорных и акцепторных ловушек соответственно.

Величина заряда, захваченного ловушками, зависит от плотности ловушек D_t и вероятностей F_n и F_p образования ловушки донорного и акцепторного типов. Для ловушек донорного и акцепторного типов захваченный заряд вычисляется согласно уравнениям:

$$\left. \begin{aligned} n_t &= D_t F_n, \\ p_t &= D_t F_p. \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

В случае расчета многократно заряженных ловушек с многократными энергетическими уровнями полный заряд определяется следующим образом:

$$n_t = \sum_{a=1}^k n_t^a, \quad p_t = \sum_{b=1}^m p_t^b, \quad (2.28)$$

где k – число акцепторных и m – число донорных ловушек.

При расчете вероятности образования ловушек предполагается, что сечение захвата является константой для всех энергий в данной зоне:

$$\left. \begin{aligned} F_n &= \frac{v_n S_n + e_p}{v_n (S_n + S_p) + (e_n + e_p)}, \\ F_p &= \frac{v_p S_p + e_n}{v_p (S_n + S_p) + (e_n + e_p)}, \end{aligned} \right\} \quad (2.29)$$

где S_n и S_p – поперечные сечения захвата носителей для электронов и дырок соответственно, v_n и v_p – термические скорости для электронов и дырок.

Скорости эмиссии электронов и дырок определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} e_n &= E_{\text{deg}} v_p S_n n_i \exp \frac{E_t - E_i}{kT_L}, \\ e_p &= \frac{1}{E_{\text{deg}}} v_p S_p n_i \exp \frac{E_i - E_t}{kT_L}, \end{aligned} \right\} \quad (2.30)$$

где E_i – положение собственного уровня Ферми, E_t – энергетический уровень в запрещенной зоне каждого дискретного центра ловушки и E_{deg} – коэффициент вырождения ловушечного центра.

Последний член в правых частях уравнений (2.30) учитывает наличие спинового вырождения, заключающегося в том, что пустой и полный дефекты обычно имеют различное значение спина и характеризуются вырождением орбиталей.

Учет ловушек в моделях рекомбинации. Для удовлетворения условия самосогласованности следует учитывать, что электроны испускаются или захватываются ловушками донорного и акцепторного типов, что влияет на величину концентрации носителей. Для учета этого эффекта внесены изменения в слагаемое, описывающее скорость рекомбинации в уравнениях непрерывности.

Стандартная запись рекомбинации Шоттки–Рида–Холла (SRH):

$$R = \sum_{a=1}^k R_n^a + \sum_{b=1}^m R_p^b,$$

где k – число ловушек-доноров, m – число ловушек-акцепторов.

Функция R записывается в следующем виде:

$$R_{n,p} = \frac{pn - n_i^2}{t_n \left[p + \frac{n_i}{E_{\text{deg}}} \exp \frac{E_i - E_L}{kT_L} \right] + t_p \left[n + E_{\text{deg}i} \exp \frac{E_L - E_i}{kT_L} \right]}. \quad (2.31)$$

Времена жизни электронов и дырок t_n и t_p связаны с сечением захвата носителей S_n и S_p посредством уравнений:

$$t_n = \frac{1}{S_n v_n D_t}, \quad (2.32)$$

$$t_p = \frac{1}{S_p v_p D_t}. \quad (2.33)$$

Туннелирование с участием ловушек. Эта модель рассматривает эффекты туннелирования для дираковских ям. При высоких электрических полях туннелирование электронов из валентной зоны в зону проводимости через ловушечные или дефектные состояния может оказывать важное влияние на величину тока. Туннелирование с участием ловушек моделируется посредством включения в вы-

ражение (2.31) для времен жизни ловушек слагаемых, описывающих увеличение параметров Γ_n и Γ_p в сечениях захвата, обусловленных эффектом поля. Эти слагаемые, описывающие эффект поля, приводят к изменению сечений захвата, что позволяет учесть влияние туннелирования с участием фононов на эмиссию электронов и дырок из ловушек.

Слагаемое для описания рекомбинации имеет следующий вид:

$$R_{n,p} = \frac{p_n - n_{ie}^2}{\frac{t_n}{1 + \Gamma_n} \left[p + \frac{1}{E_{\text{deg}}} n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right] + \frac{t_p}{1 + \Gamma_p} \left[n + E_{\text{deg}} n_{ie} \exp\left(\frac{E_t}{kT_L}\right) \right]}.$$

Слагаемые для описания эффекта поля для электронов и дырок:

$$\Gamma_n = \frac{\Delta E_n}{kT_L} \int_0^1 \exp\left(\frac{\Delta E_n}{kT_L} u - k_n u^{3/2}\right) du,$$

$$\Gamma_p = \frac{\Delta E_p}{kT_L} \int_0^1 \exp\left(\frac{\Delta E_n}{kT_L} u - k_p u^{3/2}\right) du,$$

где u – переменная интегрирования, ΔE_n – энергетическая область, в которой возможно туннелирование электронов, ΔE_p – энергетическая область, в которой возможно туннелирование дырок, а величины k_n и k_p определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} k_n &= \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_0 m^* \Delta E_n^3}}{3q\hbar|E|}, \\ k_p &= \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_0 m^* \Delta E_p^3}}{3q\hbar|E|}, \end{aligned} \right\} \quad (2.34)$$

где \hbar – постоянная Планка, m_0 – масса покоя электрона и m^* – эффективная масса.

Сечения захвата электронов и дырок S_n и S_p в предыдущих уравнениях модифицируются в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} S_n &= \frac{S_n}{1 + \Gamma_n}, \\ S_p &= \frac{S_p}{1 + \Gamma_p}. \end{aligned} \right\}$$

В соответствующих уравнениях σ_n и σ_p заменяют значения S_n и S_p .

Параметры $\Delta E_{n,p}$ определяются следующим образом:

$$\Delta E_n = \begin{cases} E_C - E_{fn}, & \text{при } E_T \leq E_{fn} \\ E_C - E_T, & \text{при } E_T > E_{fn} \end{cases} \quad \text{и} \quad \Delta E_p = \begin{cases} E_{fp} - E_V, & \text{при } E_T > E_{fp} \\ E_C - E_T, & \text{при } E_T \leq E_{fp} \end{cases},$$

где E_C – край зоны проводимости, E_V – край валентной зоны, E_{fn} – квазиуровень Ферми для электронов, E_{fp} – квазиуровень Ферми для дырок и E_T – энергия уровня ловушек.

Для низких уровней электрического поля ($k_{n,p} > 2\Delta E_{n,p}/(3kT)$):

$$\Gamma_{n,p} = 2\sqrt{3p} \frac{|E|}{E_\Gamma} \exp\left[\left(\frac{E}{E_\Gamma}\right)^2\right], \quad \text{где } E_\Gamma = \frac{2p\sqrt{24m^*m_0}(kT_L)^3}{qh},$$

k – константа Больцмана, T_L – температура решетки, E – электрическое поле.

Для высоких уровней электрического поля при ($k_{n,p} \leq 2\Delta E_{n,p}/(3kT)$):

$$\Gamma_{n,p} = \frac{\Delta E_{n,p}}{2kT_L} \sqrt{\frac{p}{a}} \exp\left[\frac{b^2 - ac}{a}\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{b}{\sqrt{a}}\right),$$

где $a = \frac{3}{8}K_{n,p}$, $b = \frac{\Delta E_{n,p}}{2kT_L} - \frac{3}{4}K_{n,p}$ и $c = K_{n,p} - \frac{\Delta E_{n,p}}{kT_L}$.

Снижение барьера Пула–Френкеля для кулоновской ямы. Эффект Пула–Френкеля повышает интенсивность эмиссии носителей при туннелировании с участием ловушек и фононов, а также термическую эмиссию при низких электрических полях. Эффект Пула–Френкеля проявляется, когда происходит снижение кулоновского потенциального барьера, обусловленное влиянием электрического поля и характерное только для ловушек с кулоновским потенциалом (такие ловушки, которые нейтральны, когда они заполнены).

Эффект Пула–Френкеля моделируется посредством включения слагаемого, описывающего эффект усиления электрическим полем, для кулоновских ям (Γ_n и Γ_p) и термической эмиссии (χ_F) в уравнении (2.31) для времен жизни ловушек. Эта модель включает также и эффекты туннелирования с участием ловушек в дираковских ямах.

Для этой модели слагаемые, описывающие рекомбинацию для ловушек, имеют следующий вид:

$$R_n = \frac{p_n - n_{ie}^2}{\frac{t_n}{c_F + \Gamma_n} \left[p + \frac{1}{E_{deg}} n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right] + \frac{t_p}{1 + \Gamma_p} \left[n + E_{deg} n_{ie} \exp\left(\frac{E_t}{kT_L}\right) \right]},$$

$$R_p = \frac{p_n - n_{ie}^2}{\frac{t_p}{1 + \Gamma_n} \left[p + \frac{1}{E_{deg}} n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right] + \frac{t_p}{c_F + \Gamma_p} \left[n + E_{deg} n_{ie} \exp\left(\frac{E_t}{kT_L}\right) \right]},$$

где фактор ускорения термической эмиссии c_F :

$$c_F = \exp\left(\frac{\Delta E_{fp}}{kT_L}\right).$$

Здесь ΔE_{fp} – параметр, описывающий понижение барьера для кулоновской ямы:

$$\Delta E_{fp} = \sqrt{\frac{q|E|}{pe}}.$$

Кулоновские члены Γ_n и Γ_p , описывающие фактор ускорения полем, определяются следующим образом:

$$\Gamma_n = \frac{\Delta E_n}{kT_L} \int_{\frac{\Delta E_{fp}}{\Delta E_n}}^1 \exp\left(\frac{\Delta E_n}{kT_L} u - k_p u^{3/2} \left[1 - \left(\frac{\Delta E_{fp}}{u \Delta E_n}\right)^{5/3} \right]\right) du,$$

$$\Gamma_p = \frac{\Delta E_p}{kT_L} \int_{\frac{\Delta E_{fp}}{\Delta E_n}}^1 \exp\left(\frac{\Delta E_p}{kT_L} u - k_p u^{3/2} \left[1 - \left(\frac{\Delta E_{fp}}{u \Delta E_p}\right)^{5/3} \right]\right) du.$$

Ловушки в неравновесном состоянии. Акцепторные и донорные ловушки не приходят в состояние равновесия мгновенно. Необходимо некоторое время для эмиссии или захвата электронов. Это учитывается посредством решения дополнительного дифференциального уравнения всякий раз, когда проводится нестационарное моделирование. Вероятность образования в этом случае становится зависимой от эмиссии электронов, развивающейся во времени, посредством следующего уравнения:

$$\frac{d}{dt}(D_t F_{n,p}) = R_n(t) - R_p(t),$$

где $R_n(t)$ и $R_p(t)$ – скорости рекомбинации электронов и дырок соответственно. Слагаемые, описывающие процессы эмиссии и захвата R_n и R_p , представляются в следующем виде:

$$R_n = D_t v_n S_n \left[n(1 - F_n) - F_n E_{\text{deg}} n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right],$$

$$R_p = D_t v_p S_p \left[pF_p - (1 - F_p) \frac{1}{E_{\text{deg}}} n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right].$$

Моделирование ловушек в нестационарном состоянии с использованием описываемой модели требует больших временных затрат, чем использование статической модели, но дает более точное описание физики прибора. Иногда может быть приемлемым выполнение нестационарного моделирования с использованием статического распределения ловушек и допущения, что ловушки достигают равновесия мгновенно.

2.4. Транспортное уравнение энергетического баланса

В стандартной диффузионно-дрейфовой модели переноса носителей заряда пренебрегается такими нелокальными эффектами переноса, как отклонение скорости, диффузия с учетом температуры носителей и зависимость интенсивности ударной ионизации от энергетического распределения носителей. Эти явления могут оказать значительное влияние на характеристики приборов с субмикронными размерами. Для описания нелокального переноса носителей заряда предложены две модели: модель энергетического баланса и гидродинамическая модель.

Транспортная модель энергетического баланса основана на положениях, которые следуют из обобщенного транспортного уравнения Больцмана. При определенных предположениях эта модель сводится к гидродинамической модели.

Транспортная модель энергетического баланса использует уравнения непрерывности с учетом температур носителей и рассматривает подвижности и коэффициенты ударной ионизации как функции температур носителей, а не функции локального электрического поля.

Уравнения энергетического баланса. В транспортной модели энергетического баланса вводятся две новые независимые переменные T_n и T_p – температуры электронов и дырок. Уравнения энергетического баланса состоят из уравнения энергетического баланса и уравнений для плотности тока и потока энергии $S_{n,p}$.

Для электронов и дырок модель энергетического баланса представляется соответственно следующими системами уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{S}_n^{\mathbf{r}} &= -\mathbf{J}_n \nabla \psi - W_n - \frac{3k}{2} \frac{\partial}{\partial t} (I_n^* n T_n^*), \\ \mathbf{J}_n^{\mathbf{r}} &= q D_n \nabla n - m_n n \nabla \psi + q n D_n^T \nabla T_n, \\ \mathbf{S}_n^{\mathbf{r}} &= -K_n \nabla T_n - \left(\frac{k d_n}{q} \right) \mathbf{J}_n^{\mathbf{r}} T_n, \end{aligned} \right\} \quad (2.35)$$

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{S}_p^{\mathbf{r}} &= -\mathbf{J}_p \nabla \psi - W_{pn} - \frac{3k}{2} \frac{\partial}{\partial t} (I_p^* n T_p^*), \\ \mathbf{J}_p^{\mathbf{r}} &= q D_p \nabla p - m_p p \nabla \psi + q p D_p^T \nabla T_p, \\ \mathbf{S}_p^{\mathbf{r}} &= -K_p \nabla T_p - \left(\frac{k d_p}{q} \right) \mathbf{J}_p^{\mathbf{r}} T_p, \end{aligned} \right\} \quad (2.36)$$

где \dot{S}_n и \dot{S}_p – плотности энергетического потока электронов и дырок; W_n и W_p – энергетические потери для электронов и дырок (см. (2.52)); K_n и K_p – термическая проводимость для электронов и дырок (см. (2.41) и (2.48)); D_n и D_p – граничные коэффициенты диффузии электронов и дырок (см. (2.37) и (2.44)); μ_n и μ_p – подвижности электронов и дырок;

$$D_n = \frac{m_n k T_n}{q} I_n; \quad (2.37)$$

$$I_n = \frac{F_{1/2}(h_n)}{F_{-1/2}(h_n)}, \quad h_n = \frac{e_{Fn} - e_C}{k T_n} = F_{1/2}^{-1} \left(\frac{n}{N_C} \right); \quad (2.38)$$

$$D_n^T = \left(m_{2n} - \frac{3}{2} I_n m_n \right) \frac{k}{q}; \quad (2.39)$$

$$m_{2n} = m_n \left(\frac{5}{2} + x_n \right) \frac{F_{x_n} + 3/2(h_n)}{F_{x_n} + 1/2(h_n)}; \quad (2.40)$$

$$K_n = q n m_n \left(\frac{k}{q} \right)^2 \Delta n T_n; \quad (2.41)$$

$$\Delta n = d_n \left[\left(x_n + \frac{7}{2} \right) \frac{F_{x_n} + 5/2(h_n)}{F_{x_n} + 3/2(h_n)} - \left(x_n + \frac{5}{2} \right) \frac{F_{x_n} + 3/2(h_n)}{F_{x_n} + 1/2(h_n)} \right]; \quad (2.42)$$

$$d_n = \frac{m_{2n}}{m_n}. \quad (2.43)$$

Подобные выражения для дырок:

$$D_p = \frac{m_p k T_p}{q} I_p; \quad (2.44)$$

$$I_p = \frac{F_{1/2}(h_p)}{F_{-1/2}(h_p)}, \quad h_p = \frac{e_V - e_{fp}}{k T_p} = F_{1/2}^{-1}\left(\frac{p}{N_V}\right); \quad (2.45)$$

$$D_p^T = \left(m_{2p} - \frac{3}{2} I_p m_p \right) \frac{k}{q}; \quad (2.46)$$

$$m_{2p} = m_p \left(\frac{5}{2} + x_p \right) \frac{F_{xp} + 3/2(h_p)}{F_{xp} + 1/2(h_p)}; \quad (2.47)$$

$$K_p = q n m_p \left(\frac{k}{q} \right)^2 \Delta p T_p; \quad (2.48)$$

$$\Delta p = d_p \left[\left(x_p + \frac{7}{2} \right) \frac{F_{xp} + 5/2(h_p)}{F_{xp} + 3/2(h_p)} - \left(x_p + \frac{5}{2} \right) \frac{F_{xp} + 3/2(h_p)}{F_{xp} + 1/2(h_p)} \right]; \quad (2.49)$$

$$d_p = \frac{m_{2p}}{m_p}. \quad (2.50)$$

Если используется статистика Больцмана вместо статистики Ферми, то приведенные уравнения упрощаются:

$$I_n = I_p = 1;$$

$$\Delta n = d_n = \left(\frac{5}{2} + x_n \right);$$

$$\Delta n = d_p = \left(\frac{5}{2} + x_p \right);$$

$$x_n = \frac{d(\ln m_n)}{d(\ln T_n)} = \frac{T_n}{m_n} \frac{\partial m_n}{\partial T_n};$$

$$x_p = \frac{d(\ln m_p)}{d(\ln T_p)} = \frac{T_p}{m_p} \frac{\partial m_p}{\partial T_p}.$$

Параметры ξ_n и ξ_p зависят от температур носителей. Другие предположения относительно ξ_n и ξ_p соответствуют различным нелокальным моделям. В пределе высоких полей и состояния насыщения скоростей подвижности носителей обратно пропорциональны температурам носителей $\xi_n = \xi_p = -1$, что соответствует модели энергетического баланса.

При $\xi_n = \xi_p = 0$ получаем упрощенную гидродинамическую модель.

Граничные условия для n , p и ψ такие же, как и для диффузионно-дрейфовой модели. Уравнения энергетического баланса решаются только в облас-

ти полупроводника. Температуры электронов и дырок задаются равными температуре решетки на контактах. На другой части границы нормальные компоненты энергетических потоков исчезают.

Плотность состояний. Вычисление эффективной плотности состояний меняется для модели энергетического баланса. Температуры электронов и дырок заменяются на температуру решетки в системе уравнений (2.17). Например,

$$N_C(T_n) = \left(\frac{2pm_e^*kT_n}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{T_n}{300} \right)^{\frac{3}{2}} N_C(300),$$

$$N_V(T_p) = \left(\frac{2pm_n^*kT_p}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{T_p}{300} \right)^{\frac{3}{2}} N_V(300).$$

Интенсивность энергетических потерь. Скорости потери плотности энергии определяют физические механизмы, по которым носители обмениваются энергией с окружающей кристаллической решеткой. Эти механизмы включают нагрев носителей с возрастанием температуры решетки, а также энергетический обмен посредством процессов рекомбинации (SRH и Оже) и процессы генерации (ударная ионизации). Если полную интенсивность генерации-рекомбинации записать в форме

$$U = R_{srh} - R_n^A + R_p^A + G_n - G_p, \quad (2.51)$$

где R_{srh} – интенсивность рекомбинации носителей в модели Шокли–Рида–Холла, R_n^A и R_p^A – интенсивности Оже-рекомбинации для электронов и дырок, G_n и G_p – интенсивности ударной ионизации, то интенсивности потери плотности энергии в уравнениях (2.35) и (2.36) можно записать следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} W_n &= \frac{3}{2} n \frac{k(T_n - T_L)}{t_{r,e}} I_n^* + \frac{3}{2} kT_n I_n^* R_{SRH} + E_g (G_n - R_n^A), \\ W_p &= \frac{3}{2} p \frac{k(T_p - T_L)}{t_{r,p}} I_p^* + \frac{3}{2} kT_p I_p^* R_{SRH} + E_g (G_p - R_p^A), \end{aligned} \right\} \quad (2.52)$$

где $I_{n,p}^*$ определяется выражениями (2.38) и (2.45) (и равняется «1» для статистики Больцмана), $\tau_{r,e}$ и $\tau_{r,p}$ – времена релаксации электронов и дырок, E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника.

Времена релаксации чрезвычайно важны, так как они определяют временную константу в выражении для интенсивности обмена энергией и, следовательно, требуются их точные значения, если используется точная модель. Однако этот

параметр измерить невозможно. Для экстракции времени релаксации необходимо проводить статистический анализ в цикле Монте-Карло.

При проведении строгих расчетов транспорта носителей заряда необходимо иметь в виду, что разные материалы имеют различные величины времени релаксации энергии и следует учитывать температурную зависимость времени релаксации.

Зависимость подвижности носителей от энергии. Согласно транспортной модели энергетического баланса подвижность носителей зависит от энергии носителей. Это условие учитывается посредством использования соотношения для гомогенного стационарного энергетического баланса, которое относится к предельной скорости насыщения. При этом предполагается, что должно быть рассчитано эффективное электрическое поле, которое задает температуру носителей в гомогенном образце, равную температуре в узловых точках моделируемого прибора. Эффективные электрические поля $E_{eff,n}$ и $E_{eff,p}$ рассчитываются посредством решения уравнений:

$$qm_n(E_{eff,n})E_{eff,n}^2 = \frac{3k(T_n - T_L)}{2t_e},$$

$$qm_p(E_{eff,p})E_{eff,p}^2 = \frac{3k(T_p - T_L)}{2t_p},$$

для $E_{eff,n}$ и $E_{eff,p}$. Эти уравнения выводятся из уравнений энергетического баланса посредством исключения всех слагаемых, переменных по пространству. Далее вводятся значения эффективных электрических полей с целью их учета в модели подвижности носителей. Полное описание этих моделей приведено в разделе «Моделирование подвижности носителей».

2.5. Физические явления на границах

При описании явлений на границах раздела используются различные модели: омические контакты, контакты Шоттки, изолирующие контакты и границы Ньюмана (эффекты отражения). Условия для напряжений на границах обычно задаются на контактах. Могут быть заданы также граничные условия для токов. В некоторых специфических случаях задаются дополнительные условия.

Омические контакты. Омические контакты обычно вводятся как простые граничные условия раздела Дирихле, согласно которым задаются поверхностный потенциал, концентрации электронов и дырок (ψ_s, n_s, p_s), квазипотенциалы Ферми для неосновных и основных носителей полагаются равными напряжению, приложенному к электроду (т.е. $\varphi_n = \varphi_p = V_{applied}$). При этом значение потенциала ψ_s согласуется с условием нейтральности свободного заряда:

$$n_s + N_A^- = p_s + N_D^+. \quad (2.53)$$

Уравнение (2.53) можно решить для ψ_s , n_s и p_s , поскольку значения ϕ_n и ϕ_p известны. Если используется статистика Больцмана, подстановка уравнений (2.20) в (2.53) дает:

$$n_s = \frac{1}{2} \left[(N_D^+ - N_A^-) + \sqrt{(N_D^+ - N_A^-)^2 + 4n_{ie}^2} \right],$$

$$p_s = \frac{n_{ie}^2}{n_s},$$

$$y_s = f_n + \frac{kT_L}{q} \ln \frac{n_s}{n_{ie}} = f_p - \frac{kT_L}{q} \ln \frac{p_s}{n_{ie}}.$$

Контакты Шоттки. Моделирование контактов Шоттки может быть осуществлено двумя различными способами: посредством задания значения работы выхода j_M из металла электрода или задания скорости поверхностной рекомбинации на электроде.

В случае задания работы выхода поверхностный потенциал на контакте Шоттки определяется уравнением:

$$y_s = c + \frac{E_g}{2q} + \frac{kT_L}{2q} \ln \frac{N_C}{N_V} - f_M + V_{applied}, \quad (2.54)$$

где c – величина электронного сродства для полупроводникового материала, E_g – ширина запрещенной зоны, N_C – плотность состояний в зоне проводимости, N_V – плотность состояний в валентной зоне и T_L – температура окружающей среды.

На практике работа выхода с достаточной точностью рассчитывается по следующей формуле:

$$j_M = c + f_B,$$

где f_B – высота барьера на разделе «металл–полупроводник».

При определении контакта Шоттки можно использовать метод конечной скорости поверхностной рекомбинации. В этом случае квазиуровни Ферми f_n и f_p не равны величине $V_{applied}$ и электронные и дырочные токи на контакте определяются следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned} J_{sn} &= qn_{sn}(n_s - n_{eq}), \\ J_{sp} &= qp_{sp}(p_s - p_{eq}), \end{aligned} \right\} \quad (2.55)$$

где J_{sn} и J_{sp} – электронные и дырочные токи на контакте, n_s и p_s – поверхностные концентрации электронов и дырок, v_{sn} и v_{sp} – скорости поверхностной рекомбинации электронов и дырок. Параметры n_{eq} и p_{eq} – равновесные концентрации элек-

тронов и дырок в предположении бесконечного значения скорости поверхностной рекомбинации ($f_n = f_p = V_{applied}$).

Значения v_{sn} и v_{sp} вычисляются посредством использования выражения:

$$\left. \begin{aligned} n_{sn} &= \frac{a_{rn} T_L^2}{q N_C}, \\ n_{sp} &= \frac{a_{rp} T_L^2}{q N_V}, \end{aligned} \right\} \quad (2.56)$$

где a_{rn} и a_{rp} – эффективные постоянные Ричардсона для электронов и дырок, учитывающие квантово-механическое отражение и туннелирование, N_C и N_V – плотность состояний в зоне проводимости и в валентной зоне.

Модель поверхностной рекомбинации Шоттки также учитывает механизмы понижения энергетических барьеров, обусловленные наличием электрического поля. Наличие этих полей приводит к созданию статических дипольных слоев на границе раздела «металл–полупроводник». Если высоты барьеров:

$$f_{bn} = f_M - c, \quad f_{bp} = c + \frac{E_g}{2} - f_M,$$

то условие их понижения следующее:

$$\Delta f_b = \left[\frac{q}{4pe_s} \right]^{1/2} E^{1/2} + aE, \quad (2.57)$$

где E – величина электрического поля на границе раздела, a – линейный коэффициент, характеризующий понижение дипольного барьера.

Ток, обусловленный туннелированием электронов J_{tn} , определяется по модели Цу–Езаки и применяется к контакту в качестве граничного условия для тока:

$$J_{tn} = \frac{4pqm_{et}m_0kT_L}{h^3} \int_0^{f_{bn}} P(E_Z)N(E_Z)dE_Z, \quad (2.58)$$

где f_{bn} – высота барьера, m_{et} – относительная эффективная масса электрона, m_0 – масса покоя электрона, h – постоянная Планка, k – постоянная Больцмана, q – заряд электрона и

$$N(E_Z) = \ln \left(\frac{1 + e^{\left(\frac{E_F - E_Z}{kT_L} \right)}}{1 + e^{\left(\frac{E_F - E_Z - qV}{kT_L} \right)}} \right).$$

Вероятность прохождения $P(E_Z)$ определяется согласно модели Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна с аппроксимацией для барьера треугольной формы:

$$P(E_Z) = \exp \left(\frac{-8p \left(2m_{et} m^* \right)^{\frac{1}{2}} (f_{bn} - E_Z)^{\frac{3}{2}}}{3qhE} \right).$$

2.6. Физические модели переноса носителей заряда

Носители заряда (электроны и дырки) ускоряются в электрических полях и при своем движении теряют энергию в результате различных процессов рассеяния. Каждый тип носителя испытывает рассеяния на фононах, примесных ионах, на других носителях, а также на поверхности и других несовершенствах материала. Поскольку все эти микроскопические явления объясняют макроскопическую подвижность, рассчитываемую с использованием транспортных уравнений, то, следовательно, подвижность носителей является функцией локального электрического поля, температуры решетки, концентрации примеси и т.д.

2.6.1. Модели подвижности носителей заряда

Моделирование подвижности носителей обычно подразделяется на описание их поведения в условиях низких и высоких электрических полей в объеме полупроводника и в области инверсионных слоев.

При низком уровне электрического поля носители находятся в квазиравновесии с решеткой, и их подвижности (соответственно для электронов и дырок) обозначаются как μ_{n0} и μ_{p0} . Величины подвижностей при этих условиях зависят в основном от рассеяния на фононах и на примесях. Оба этих фактора уменьшают подвижность в условиях низкого поля.

Поведение носителей при высоких электрических полях показывает, что подвижность носителей спадает с электрическим полем, поскольку носители, приобретающие дополнительную энергию, могут участвовать в более широком диапазоне процессов рассеяния. Средняя дрейфовая скорость уже не возрастает линейно с увеличением электрического поля, а повышается более медленно. В конечном счете, скорость носителей достигает насыщения v_{sat} с увеличением поля. Рассеяние носителей на примесях сравнительно невелико, поэтому v_{sat} является в основном функцией температуры решетки.

Моделирование подвижности в объеме материала включает: расчет величин μ_{n0} и μ_{p0} как функции концентрации примесей и температуры решетки, расчет v_{sat}

как функции температуры решетки и промежуточного значения подвижности в условиях низкого поля и области насыщения.

Моделирование подвижности носителей в инверсионных слоях связано с определенными сложностями. Поведение носителей в инверсионных слоях характеризуется рассеянием на поверхности, существенным рассеянием носителей на носителях и квантово-механическими эффектами. Эти эффекты следует специально учитывать, чтобы получить достаточно точный результат моделирования (особенно при расчете МОП-приборов). В качестве параметра часто используется поперечное электрическое поле, которое характеризует интенсивность рассеяния в инверсионных слоях.

Модели подвижности при низком уровне поля. Подвижность носителей в условиях низкого электрического поля может быть рассчитана несколькими способами в зависимости от заданной точности.

Первое приближение заключается в использовании параметров m_n и m_p – подвижностей электронов и дырок при нормальных условиях. Второй способ заключается в использовании табулированного соотношения между подвижностью при низком поле и температуре 300 К с концентрацией примеси. Третий способ состоит в использовании аналитических моделей подвижности в условиях низкого поля, которые связывают подвижности носителей при низком поле с температурой и концентрацией примеси. В четвертом способе используется модель рассеяния носителей на носителях, которая связывает подвижность при низком поле с концентрацией носителей и температурой. Пятый способ заключается в использовании обобщенной модели Клаасена для подвижности при низком поле, которая связывает подвижность с рассеянием на донорах, акцепторах, решетке, носителях, а также с температурой.

Модель подвижности при постоянном низком уровне поля. В этой модели отсутствует зависимость подвижности от концентрации легирующей примеси, плотности носителей и электрических полей. Она учитывает рассеяние на решетке в зависимости от температуры согласно следующим выражениям:

$$\left. \begin{aligned} m_{n0} &= m_n \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-T_{mn}}, \\ m_{p0} &= m_p \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-T_{mp}}, \end{aligned} \right\} \quad (2.59)$$

где T_L – температура решетки.

Аналитическая модель подвижности при низком уровне поля. Для моделирования зависимости подвижности при низком поле от концентрации легирующей примеси и температуры используются следующие аналитические функции:

$$\left. \begin{aligned}
 m_{n0} &= m_{1n} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{a_n} + \frac{m_{2n} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{b_n} - m_{1n} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{a_n}}{1 + \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{c_n} \left(\frac{N}{NCRITN.CAUG} \right)^{d_n}}, \\
 m_{p0} &= m_{1p} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{a_p} + \frac{m_{2p} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{b_p} - m_{1p} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{a_p}}{1 + \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{c_p} \left(\frac{N}{NCRITP.CAUG} \right)^{d_p}},
 \end{aligned} \right\} (2.60)$$

где N – локальная (полная) концентрация примесей в см^{-3} и T_L – температура в градусах Кельвина, а $a_n, b_n \dots e_n$ и $a_p, b_p \dots e_p$ – эмпирические константы для электронов и дырок.

Модель Ароры для подвижности при низком поле. Другая аналитическая модель для зависимости подвижности при низком поле от концентрации легирующей примеси и температуры предложена в работе [115]:

$$\left. \begin{aligned}
 m_{n0} &= m_{1n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{a_n} + \frac{m_{2n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{b_n}}{1 + \frac{N}{c_n \left(\frac{T_L}{300} \right)^{d_n}}}, \\
 m_{p0} &= m_{1p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{a_p} + \frac{m_{2p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{b_p}}{1 + \frac{N}{c_p \left(\frac{T_L}{300} \right)^{d_p}}}.
 \end{aligned} \right\} (2.61)$$

Модель рассеяния носителей на носителях при низком уровне поля. Модель Доркеля и Летурка [116] для подвижности при низком поле включает зависимости от температуры, концентрации легирующих примесей и рассеяния носителей на носителях. Согласно этой модели:

$$m_{n0,p0} = m_{n,p}^L \left(\frac{1,025}{1 + \left[1,126 \left(\frac{m_{n,p}^L}{m^{IC}} \right) \right]^{0,715}} \right)^{-0,025},$$

где индексы означают: L – рассеяние на решетке, I – рассеяние на ионизированных примесях и C – рассеяние носителей на носителях.

Значения $m_{n,p}^{IC}$ определяются следующим образом:

$$m_{n,p}^{IC} = \left[\frac{1}{m^C} + \frac{1}{m_{n,p}^I} \right]^{-1}, \text{ где } m^C = \frac{1,04 \cdot 10^{21} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{3/2}}{\sqrt{np} \ln \left[1 + 7,45 \cdot 10^{13} \left(\frac{T_L}{300} \right)^2 (np)^{1/3} \right]},$$

$$\left. \begin{aligned} m_n^I &= \frac{AN.CCS \left(\frac{T_L}{300} \right)^{3/2}}{N_T} f \left[\frac{BN.CCS \left(\frac{T_L}{300} \right)^2}{n+p} \right], \\ m_p^I &= \frac{AP.CCS \left(\frac{T_L}{300} \right)^{3/2}}{N_T} f \left[\frac{BP.CCS \left(\frac{T_L}{300} \right)^2}{n+p} \right]. \end{aligned} \right\} \quad (2.62)$$

Здесь N_T – полная концентрация примесей, T_L – температура решетки, n, p – концентрации электронов и дырок, $f(x) = \left[\ln(1+x) - \frac{x}{1+x} \right]^{-1}$.

Значения слагаемых $m_{n,p}^L$, описывающих рассеяние на решетке, определяются из уравнений (2.59).

Обобщенная модель Клаассена для подвижности при низком уровне поля. Модель Клаассена [117, 118] в обобщенном виде описывает подвижности основных и неосновных носителей заряда. Она включает эффекты рассеяния на решетке, рассеяния на примесях (с экранировкой от заряженных носителей), рассеяния носителей на носителях и кластеризации атомов примесей при высоких концен-

трациях. Эта модель показывает отличное согласие с эмпирическими данными для:

- подвижности электронов как основных носителей в функции концентрации доноров в интервале от 10^{14} до 10^{22} см⁻³;
- подвижности электронов как неосновных носителей в функции от концентрации акцепторов в интервале от 10^{17} до 10^{20} см⁻³;
- подвижности дырок как неосновных носителей в функции от концентрации доноров в интервале от 10^{17} до 10^{20} см⁻³;
- температурной зависимости в интервале от 70 до 500 К.

Модель Клаасена учитывает более широкий ряд эффектов и откалибрована для более широкого диапазона условий по сравнению с другими моделями подвижности при низком поле.

Полная подвижность носителей может быть описана через ее компоненты, используя правило Маттисена:

$$\left. \begin{aligned} m_{n0}^{-1} &= m_{nL}^{-1} + m_{nDAP}^{-1} \\ m_{p0}^{-1} &= m_{pL}^{-1} + m_{pDAP}^{-1} \end{aligned} \right\},$$

где μ_n и μ_p – полные подвижности электронов и дырок при низком поле, μ_{nL} и μ_{pL} – подвижности электронов и дырок, обусловленные рассеянием на решетке, μ_{nDAP} и μ_{pDAP} – подвижности электронов и дырок, обусловленные рассеянием на донорах (D), акцепторах (A), экранировке (P) и носителей на носителях.

Компоненты рассеяния на решетке, μ_{nL} и μ_{pL} определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} m_{nL} &= m_{n,Kla} \left(\frac{300}{T_L} \right)^{\theta_{n,Kla}} \\ m_{pL} &= m_{p,Kla} \left(\frac{300}{T_L} \right)^{\theta_{p,Kla}} \end{aligned} \right\},$$

где $\theta_{n,Kla}$ и $\theta_{p,Kla}$ – эмпирические константы в модели Клаасена.

Компоненты рассеяния носителей на примесях определяются следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned} m_{nDAP} &= m_{N,n} \frac{N_{ncs}}{N_{nsc,eff}} \left(\frac{N_{n,Kla}}{N_{nsc}} \right)^{a_{n,Kla}} + m_{nc} \left(\frac{n+p}{N_{nsc,eff}} \right) \\ m_{pDAP} &= m_{N,p} \frac{N_{pcs}}{N_{psc,eff}} \left(\frac{N_{p,Kla}}{N_{psc}} \right)^{a_{p,Kla}} + m_{pc} \left(\frac{n+p}{N_{psc,eff}} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.63)$$

где $N_{n,Kla}$, $N_{p,Kla}$, $\alpha_{n,Kla}$ и $\alpha_{p,Kla}$ – эмпирические константы в модели Клаасена.

Компоненты рассеяния на примесях, $\mu_{N,n}$ и $\mu_{N,p}$ определяются следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned} m_{N,n} &= \frac{m_{\max,n}^2}{m_{\max,n} - m_{\min,n}} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{3\alpha_{n,Kla} - 1,5}, \\ m_{N,p} &= \frac{m_{\max,p}^2}{m_{\max,p} - m_{\min,p}} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{3\alpha_{p,Kla} - 1,5}, \end{aligned} \right\}$$

где $m_{\min,n}$, $m_{\min,p}$, $m_{\max,n}$ и $m_{\max,p}$ – эмпирические константы в модели Клаасена.

Компоненты рассеяния носителей на носителях μ_{nc} и μ_{pc} определяются следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned} m_{nc} &= \frac{m_{\min,n} m_{\max,n}}{m_{\max,n} - m_{\min,n}} \left(\frac{300}{T_L} \right)^{0,5}, \\ m_{pc} &= \frac{m_{\min,p} m_p m_{\max,p}}{m_{\max,p} - m_{\min,p}} \left(\frac{300}{T_L} \right)^{0,5}. \end{aligned} \right\}$$

Параметры N_{nsc} и N_{psc} в уравнении (2.63) определяются следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned} N_{nsc} &= N_D + N_A + p, \\ N_{psc} &= N_D + N_A + n, \end{aligned} \right\}$$

где N_D и N_A – концентрации доноров и акцепторов, n и p – концентрации электронов и дырок.

Параметры $N_{nsc,eff}$ и $N_{psc,eff}$ определяются следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned} N_{nsc,eff} &= N_D + G(P_n)N_A + \left(\frac{p}{F(P_n)} \right), \\ N_{psc,eff} &= N_A + G(P_p)N_D + \left(\frac{n}{F(P_p)} \right) \end{aligned} \right\}$$

Функции $G(P)$ и $F(P)$ представляют собой факторы экранирования рассеяния носителей на носителях. Функция $G(P)$ определяется следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned}
 G(P_n) &= 1 - \frac{S_1}{\left[S_2 + P_{BH,n} \left(\frac{m_0 T_L}{m_e 300} \right)^{S_4} \right]^{S_3}} + \frac{S_5}{\left[P_{BH,n} \left(\frac{m_0 T_L}{m_e 300} \right)^{S_7} \right]^{S_6}}, \\
 G(P_p) &= 1 - \frac{S_1}{\left[S_2 + P_{BH,p} \left(\frac{m_0 T_L}{m_h 300} \right)^{S_4} \right]^{S_3}} + \frac{S_5}{\left[P_{BH,p} \left(\frac{m_0 T_L}{m_h 300} \right)^{S_7} \right]^{S_6}},
 \end{aligned} \right\} \quad (2.64)$$

где $S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6$ и S_7 – параметры в модели Клаасена.

Функции $F(P_n)$ и $F(P_p)$ рассчитываются с использованием следующих выражений:

$$\left. \begin{aligned}
 F(P_n) &= \frac{R_1 P_n^{R_6} + R_2 + R_3 \frac{m_e}{m_h}}{P_n^{R_6} + R_4 + R_5 \frac{m_e}{m_h}}, \\
 F(P_p) &= \frac{R_1 P_p^{R_6} + R_2 + R_3 \frac{m_h}{m_e}}{P_p^{R_6} + R_4 + R_5 \frac{m_h}{m_e}},
 \end{aligned} \right\} \quad (2.65)$$

где R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 и R_6 – параметры в модели Клаасена.

Параметры экранирования P_n и P_p , используемые в уравнениях (2.65), находятся с использованием следующих выражений:

$$\left. \begin{aligned}
 P_n &= \left[\frac{f_{CW,n}}{P_{CW,n}} + \frac{f_{BH,n}}{P_{BH,n}} \right]^{-1}, \\
 P_p &= \left[\frac{f_{CW,p}}{P_{CW,p}} + \frac{f_{BH,p}}{P_{BH,p}} \right]^{-1},
 \end{aligned} \right\} \quad (2.66)$$

где f_{CW} и f_{BH} – параметры в модели Клаасена.

Функции $P_{BH,n}$ и $P_{BH,p}$ вычисляются с использованием следующих уравнений:

$$\left. \begin{aligned} P_{BH,n} &= \frac{1,36 \cdot 10^{20}}{n} \left(\frac{m_e}{m_0} \right) \left(\frac{T_L}{300} \right)^2, \\ P_{BH,p} &= \frac{1,36 \cdot 10^{20}}{p} \left(\frac{m_h}{m_0} \right) \left(\frac{T_L}{300} \right)^2, \end{aligned} \right\}$$

где $\frac{m_e}{m_0}$ и $\frac{m_h}{m_0}$ – нормированные эффективные массы носителей.

Функции $P_{CW,n}$ и $P_{CW,p}$ определяются из следующих соотношений:

$$\left. \begin{aligned} P_{CW,n} &= 3,97 \cdot 10^{13} \left\{ \frac{1}{Z_n^3 N_D} \left(\frac{T_L}{300} \right)^3 \right\}^{\frac{2}{3}}, \\ P_{CW,p} &= 3,97 \cdot 10^{13} \left\{ \frac{1}{Z_p^3 N_A} \left(\frac{T_L}{300} \right)^3 \right\}^{\frac{2}{3}}, \end{aligned} \right\}$$

где Z_n и Z_p – функции кластеризации, определяемые выражениями:

$$\left. \begin{aligned} Z_n &= 1 + \frac{1}{C_D + \left(\frac{Nr_D}{N_D} \right)^2}, \\ Z_p &= 1 + \frac{1}{C_A + \left(\frac{Nr_A}{N_A} \right)^2}, \end{aligned} \right\} \quad (2.67)$$

где N_D и N_A – концентрации доноров и акцепторов, C_D , C_A , Nr_D и Nr_A – параметры в модели Клаасена.

Модель подвижности в инверсионных слоях. Для получения точных результатов при моделировании МОП-приборов необходимо учитывать снижение подвижности, наблюдающееся в инверсионных слоях. Этот эффект связан с высокой степенью рассеяния подвижности на поверхности вблизи границы раздела «полупроводник–диэлектрик» и описывается:

- моделью Ломбарди деградации носителей вблизи поверхности,
- моделью подвижности Ширата в поперечном электрическом поле,
- моделями Ломбарди, Ямагучи и Таша поведения носителей в инверсионных слоях.

Модель Ломбарди. В модели Ломбарди для описания поведения носителей в инверсионных слоях [119] компоненты полной подвижности μ_T , описывающие зависимость от поперечного поля μ_{AC} , от концентрации легирующей примеси μ_{sr} и от температуры μ_b , связаны по правилу Матиссена:

$$m_T^{-1} = m_{AC}^{-1} + m_b^{-1} + m_{sr}^{-1}.$$

Первый компонент μ_{AC} описывает вклад в поверхностную подвижность, обусловленную рассеянием на акустических фононах:

$$\left. \begin{aligned} m_{AC,n} &= \frac{B_n}{E_{\perp}} + \frac{C_n N^{t_n}}{T_L E_{\perp}^{1/3}}, \\ m_{AC,p} &= \frac{B_p}{E_{\perp}} + \frac{C_p N^{t_p T}}{T_L E_{\perp}^{1/3}}, \end{aligned} \right\} \quad (2.68)$$

где E_{\perp} – перпендикулярная составляющая электрического поля, N – полная концентрация легирующей примеси. Константы B_n , B_p , C_n и C_p – параметры в модели Ломбарди.

Второй компонент μ_{sr} – показатель шероховатости поверхности:

$$\left. \begin{aligned} m_{sr,n} &= \frac{D_n}{E_{\perp}^2}, \\ m_{sr,p} &= \frac{D_p}{E_{\perp}^2}. \end{aligned} \right\} \quad (2.69)$$

Параметры D_n и D_p – эмпирические константы в модели Ломбарди.

Третий компонент подвижности μ_b – вклад, обусловленный рассеянием на оптических междолинных фононах:

$$\left. \begin{aligned} m_{b,n} &= m_{0,n} \exp\left(\frac{-P_n}{N}\right) + \frac{m_{\max,n} \left(\frac{T_L}{300}\right)^{-g_n} - m_{0,n}}{1 + \left(\frac{N}{Cr_n}\right)^{a_n}} - \frac{m_{1,n}}{1 + \left(\frac{Cs_n}{N}\right)^{b_n}}, \\ m_{b,p} &= m_{0,p} \exp\left(\frac{-P_p}{N}\right) + \frac{m_{\max,p} \left(\frac{T_L}{300}\right)^{-g_p} - m_{0,p}}{1 + \left(\frac{N}{Cr_p}\right)^{a_p}} - \frac{m_{1,p}}{1 + \left(\frac{Cs_p}{N}\right)^{b_p}}. \end{aligned} \right\} \quad (2.70)$$

Здесь N – полная концентрация примесей, а коэффициенты $P_n, P_p, Cr_n, Cr_p, Cs_n, Cs_p, \alpha_n, \alpha_p, \gamma_n$ и γ_p – эмпирические параметры в модели Ломбарди.

Расширенная модель Ломбарди. Модель Ломбарди [119] успешно используется при моделировании многих приборов. Улучшенная версия этой модели предложена в работе [120], в которой введены две модификации. В первой описывается подвижность в объеме с использованием модели Клаасена, в которой учитываются эффекты кулоновского экранирования. Во второй модификации используется новое выражение для описания эффекта шероховатости поверхности, в которой выражения (2.69) заменяются на следующие:

$$\left. \begin{aligned} m_{sr,n} &= \frac{D_n}{E^{g_{n\perp}}}, \\ m_{sr,p} &= \frac{D_p}{E^{g_{p\perp}}}, \end{aligned} \right\} \quad (2.71)$$

$$\left. \begin{aligned} g_n &= A_n + \frac{Al_n N}{N_{tot}^{E_{t,n}}}, \\ g_p &= A_p + \frac{Al_p N}{N_{tot}^{E_{t,p}}}. \end{aligned} \right\} \quad (2.72)$$

Здесь N_{tot} – полная концентрация примесей ($N_D + N_A$), а N – полная концентрация носителей n- и p-типа.

Модель Ямагучи. В модели Ямагучи [121], подобной модели Ломбарди, учитывается концентрация легирующей примеси при расчете подвижности носителей в условиях низкого поля. Из данных, полученных при расчете по этой модели, рассчитывается подвижность в условиях поперечного и параллельного электрических полей.

Вклад в подвижность, обусловленный низким полем, в модели Ямагучи определяется следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned}
 m_{n0} &= m_{L,n} \left[1 + \frac{N_i}{\frac{N_i}{S_n} + Nr_n} \right]^{-\frac{1}{2}}, \\
 m_{p0} &= m_{L,p} \left[1 + \frac{N_i}{\frac{N_i}{S_p} + Nr_p} \right]^{-\frac{1}{2}},
 \end{aligned} \right\} \quad (2.73)$$

где N_i – «чистая» концентрация примеси, равная абсолютному значению разности концентраций донорных и акцепторных примесей, параметры $m_{L,n}$, $m_{L,p}$, S_n , S_p , Nr_n и Nr_p – эмпирические константы.

Зависимость подвижности от поперечного электрического поля рассчитывается следующим образом:

$$\left. \begin{aligned}
 m_{s,n} &= m_{n0} (1 + As_n E_{\perp})^{-\frac{1}{2}} \\
 m_{s,p} &= m_{p0} (1 + As_p AE_{\perp})^{-\frac{1}{2}}
 \end{aligned} \right\} \quad (2.74)$$

где E_{\perp} – перпендикулярное электрическое поле, а параметры As_n и As_p – эмпирические константы.

Окончательное выражение для подвижности, в котором учитывается зависимость от параллельного электрического поля, приобретает вид

$$\left. \begin{aligned}
 m_n &= m_{s,n} \left[1 + \left(\frac{m_{s,n} E}{U_n} \right)^2 \left(\frac{G_n + m_{s,n} E}{U_n} \right)^{-1} + \left(\frac{m_{s,n} E}{V_n} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}, \\
 m_p &= m_{s,p} \left[1 + \left(\frac{m_{s,p} E}{U_p} \right)^2 \left(\frac{G_p + m_{s,p} E}{U_p} \right)^{-1} + \left(\frac{m_{s,p} E}{V_p} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}},
 \end{aligned} \right\} \quad (2.75)$$

где E – параллельное электрическое поле, а параметры U_n , U_p , V_n , V_p , G_n и G_p – эмпирические константы.

Модель Таша. В модели Таша, предложенной вначале для МОП-прибора [122, 123], подвижность рассматривается в функции от перпендикулярного и параллельного электрических полей, заряда на границе раздела, температуры ре-

шетки и концентрации легирующей примеси. Эта модель определяется следующими выражениями:

$$\left. \begin{aligned} m_n &= \Gamma_n + (E_{\perp} - E_0) \frac{d\Gamma_n}{dE_{\perp}}, \\ m_p &= \Gamma_p + (E_{\perp} - E_0) \frac{d\Gamma_p}{dE_{\perp}}, \end{aligned} \right\}$$

где E_{\perp} – поперечное электрическое поле во всей моделируемой структуре, а E_0 – поперечное электрическое поле на краю инверсионного слоя. Функции $\Gamma_{n,p}$ определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_n &= \frac{m_{eff,n}}{\left(1 + \left(\frac{m_{eff,n} E_{\parallel}}{Vs_n}\right)^{b_n}\right)^{1/b_n}}, \\ \Gamma_p &= \frac{m_{eff,p}}{\left(1 + \left(\frac{m_{eff,p} E_{\parallel}}{Vs_p}\right)^{b_p}\right)^{1/b_p}}. \end{aligned} \right\}$$

Подвижности носителей $\mu_{eff,n}$ и $\mu_{eff,p}$ определяются тремя компонентами μ_{ph} , μ_{sr} и μ_C , которые определяются по правилу Матиссена:

$$m_{eff} = \left[\frac{1}{m_{ph}} + \frac{1}{m_{sr}} + \frac{1}{m_C} \right]^{-1}.$$

Член μ_{ph} учитывает снижение подвижности из-за рассеяния на акустических фоновых посредством выражений:

$$m_{ph,n}^{-1} = \left(m_{b,n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-T_n} \right)^{-1} + \left(\frac{Z_n}{D_n Y_n \left(\frac{T_L}{300} \right)^{1/2}} \right)^{-1},$$

$$m_{ph,p}^{-1} = \left(m_{b,p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-T_n} \right)^{-1} + \left(\frac{Z_p}{D_p Y_p \left(\frac{T_L}{300} \right)^{1/2}} \right)^{-1},$$

где функции $Z_{n,p}$ и $Y_{n,p}$ определяются следующим образом:

$$Z_n = Z_{T_1,n} \left(\frac{T_L}{300} \right) E_{eff,n}^{-1} + Z_{T_2,n} E_{eff,n}^{1/3},$$

$$Z_p = Z_{T_1,p} \left(\frac{T_L}{300} \right) E_{eff,p}^{-1} + Z_{T_2,p} E_{eff,p}^{1/3},$$

$$E_{eff,n} = \frac{(E_{\perp} + (R_{T,n} - 1)E_0)}{R_{T,n}},$$

$$E_{eff,p} = \frac{(E_{\perp} + (R_{T,p} - 1)E_0)}{R_{T,p}},$$

$$Y_n = P_{T_1,n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{B_{T_1,n}} + P_{T_2,n} n^{-B_{T_2,n}} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-1} N_f,$$

$$Y_p = P_{T_1,p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{B_{T_1,p}} + P_{T_2,p} p^{-B_{T_2,p}} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-1} N_f.$$

Вклад в снижение подвижности из-за шероховатости поверхности описывается следующим соотношением:

$$m_{sr,n} = (E_{sr,n} E_{eff,n})^{-b_n}$$

$$m_{sr,p} = (E_{sr,p} E_{eff,p})^{-b_p}$$

Последний член, μ_C , моделирует вклад в кулоновское рассеяние согласно выражениям:

$$\left. \begin{aligned} m_{C,n} &= \frac{N_{2,n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{1,5}}{N_A \ln(1 + g_{BH,n}) \frac{g_{BH,n}}{1 + g_{BH,n}}}, \\ m_{C,p} &= \frac{N_{2,p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{1,5}}{N_D \ln(1 + g_{BH,p}) \frac{g_{BH,p}}{1 + g_{BH,p}}} \end{aligned} \right\}$$

где

$$\left. \begin{aligned} g_{BH,n} &= \frac{N_{1,n}}{n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{a_n}, \\ g_{BH,p} &= \frac{N_{1,p}}{p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{a_p} \end{aligned} \right\}$$

В приведенных выражениях T_L – температура решетки в Кельвинах, N_f – фиксированный заряд на границе раздела «диэлектрический затвор–кремний», N_A – концентрация акцепторной примеси в канале, N_D – концентрация донорной примеси в канале, n и p – концентрации электронов и дырок в инверсионном слое.

Модель Уатта для подвижности в перпендикулярном поле. Модель поверхностной подвижности, предложенная Уаттом [124], учитывает следующие основные механизмы рассеяния в инверсионном слое:

1. Рассеяние на фононах, которое является результатом взаимодействия носителей в двумерном инверсионном слое с фононами в объеме.
2. Рассеяние, обусловленное шероховатостью поверхности, являющееся результатом взаимодействия между носителями в инверсионном слое и отклонениями от идеальной планарности границы раздела.
3. Рассеяние на ионизированных примесях, обусловленное взаимодействием между носителями в инверсионном слое и ионами, локализованными в окисле, на границе раздела или в объеме.

Компоненты рассеяния на фононах и компоненты рассеяния, обусловленные шероховатостью поверхности, являются функциями эффективного электрического поля. Компонент рассеяния на ионизированных примесях зависит от плотности легирования в области канала.

Эффективные подвижности для электронов и дырок определяются следующими уравнениями:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{m_{eff,n}} &= \frac{1}{M_{1,n}} \left(\frac{1}{E_{eff,n}} \right)^{A_{1,n}} + \frac{1}{M_{2,n}} \left(\frac{1}{E_{eff,n}} \right)^{A_{2,n}} + \frac{1}{M_{3,n}} \left(\frac{1}{N_B} \right)^{-1} \left(\frac{1}{N_i} \right)^{A_{3,n}}, \\ \frac{1}{m_{eff,p}} &= \frac{1}{M_{1,p}} \left(\frac{1}{E_{eff,p}} \right)^{A_{1,p}} + \frac{1}{M_{2,n}} \left(\frac{1}{E_{eff,p}} \right)^{A_{2,p}} + \frac{1}{M_{3,n}} \left(\frac{1}{N_B} \right)^{-1} \left(\frac{1}{N_i} \right)^{A_{3,p}}. \end{aligned} \right\}$$

Здесь N_B – плотность заряда на поверхности, N_i – плотность заряда в инверсионном слое и E_{eff} – эффективное электрическое поле, определяемое следующими уравнениями:

$$\left. \begin{aligned} E_{eff,n} &= E_{\perp} + E_{T,n}(E_0 - E_{\perp}) \\ E_{eff,p} &= E_{\perp} + E_{T,p}(E_0 - E_{\perp}) \end{aligned} \right\},$$

где E_{\perp} – электрическое поле, перпендикулярное направлению тока, и E_0 – перпендикулярное электрическое поле на границе раздела диэлектрик–полупроводник.

Слагаемые в правой части уравнений для $\mu_{eff,n}$ и $\mu_{eff,p}$ в модели Уатта описывают три ранее обсужденных механизма рассеяния. Каждый компонент содержит две константы: предэкспоненциальный множитель и коэффициент основного независимого параметра. Предполагается, что компонент, описывающий рассеяние на ионизированных примесях, обратно пропорционален плотности легирующих примесей.

Выражение для эффективной подвижности содержит целый ряд нормирующих констант. Первые два члена в описываемой модели подвижности зависят от E_{eff} и представляют собой универсальное соотношение между подвижностью и полем. Третий член учитывает отклонение от этого универсального соотношения, обусловленное рассеянием на ионизированных примесях.

Модель Ширахаты. Модель подвижности Ширахаты [125] – универсальная модель подвижности для МОП-транзистора, в которой учитываются эффекты экранировки в инверсионном слое, а также используется улучшенная зависимость от перпендикулярного поля для тонкого окисного слоя (подзатворного диэлектрика). Если используется модель Клаасена для низкого уровня поля совместно с моделью Ширахаты, то член, описывающий рассеяние на решетки, в модели Клаасена опускается.

Модель Ширахаты для электронов и дырок представляется в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} m_n &= \frac{m_{0,n} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-q_{s,n}}}{\left[1 + \frac{|E_{\perp}|}{E_{1,n}} \right]^{P_{1,n}} + \left[1 + \frac{|E_{\perp}|}{E_{2,n}} \right]^{P_{2,n}}} \\ m_p &= \frac{m_{0,p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{-q_{s,p}}}{\left[1 + \frac{|E_{\perp}|}{E_{1,p}} \right]^{P_{1,p}} + \left[1 + \frac{|E_{\perp}|}{E_{2,p}} \right]^{P_{2,p}}} \end{aligned} \right\},$$

где E_{\perp} – напряженность перпендикулярного электрического поля, остальные параметры $\mu_{0,n}$, $\mu_{0,p}$, $E_{1,n}$, $E_{1,p}$, $E_{2,n}$, $E_{2,p}$, $P_{1,n}$, $P_{1,p}$, $P_{2,n}$, $P_{2,p}$, $\theta_{1,n}$ и $\theta_{1,p}$ – эмпирические константы в модели Ширахаты.

Модель подвижности в параллельном поле. По мере ускорения носителей в электрическом поле их скорость достигает насыщения при высоких значениях электрического поля. Этот эффект приводит к снижению эффективной подвижности, поскольку величина дрейфовой скорости равна произведению подвижности и компонента электрического поля в направлении тока. Для осуществления плавного перехода между поведением носителей в условиях низкого и высокого уровней электрического поля используются следующие выражения:

$$\left. \begin{aligned} m_n(E) &= m_{n0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{m_{n0} E}{V_{sat,n}} \right)^{b_n}} \right]^{\frac{1}{b_n}}, \\ m_p(E) &= m_{p0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{m_{p0} E}{V_{sat,p}} \right)^{b_p}} \right]^{\frac{1}{b_p}}, \end{aligned} \right\}$$

где E – параллельная составляющая напряженности электрического поля, μ_{n0} и μ_{p0} – подвижности электронов и дырок в условиях низкого поля. Параметры модели β_n и β_p – эмпирические константы.

Температурная зависимость скоростей насыщения электронов и дырок описывается следующим выражением:

$$\left. \begin{aligned} V_{sat,n} &= \frac{a_n}{1 + q_n \exp\left(\frac{T_L}{T_{nom,n}}\right)}, \\ V_{sat,p} &= \frac{a_p}{1 + q_p \exp\left(\frac{T_L}{T_{nom,p}}\right)}. \end{aligned} \right\}$$

Модель подвижности, учитывающая температуру носителей. В модели энергетического баланса можно установить связь между подвижностью носителей и их энергией. Это достигается посредством выражения для гомогенного стационарного энергетического баланса, которое описывает предел скорости насыщения, что позволяет рассчитать эффективное электрическое поле. Эта величина представляет собой значение постоянного электрического поля, при котором носители в гомогенном образце имеют такую же температуру, что и в узловой точке прибора. Эффективные электрические поля $E_{eff,n}$ и $E_{eff,p}$ вычисляются посредством решения уравнений:

$$\left. \begin{aligned} qm_n(E_{eff,n})E_{eff,n}^2 &= \frac{3k(T_n - T_L)}{2t_{mob,e}}, \\ qm_p(E_{eff,p})E_{eff,p}^2 &= \frac{3k(T_p - T_L)}{2t_{mob,h}}. \end{aligned} \right\}$$

Эти соотношения выведены из уравнений энергетического баланса посредством исключения всех переменных, зависящих от пространственных координат.

В модели энергетического баланса при анализе транспорта носителей используются четыре различных приближения.

Модель Кафи–Томаса [126] описывает зависимость подвижности от поля. Результирующее соотношение между подвижностью носителей и температурой носителей имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} m_n &= \frac{m_{n0}}{\left(1 + X_n^{b_n}\right)^{\frac{1}{b_n}}}, \\ m_p &= \frac{m_{p0}}{\left(1 + X_p^{b_p}\right)^{\frac{1}{b_p}}}. \end{aligned} \right\} \quad (2.76)$$

$$\left. \begin{aligned} X_n^{b_n} &= \frac{1}{2} \left(a_n^{b_n} + \sqrt{a_n^{2b_n} (T_n - T_L)^{2b_n} - 4a_n^{b_n} (T_n - T_L)^{b_n}} \right) \\ X_p^{b_p} &= \frac{1}{2} \left(a_p^{b_p} + \sqrt{a_p^{2b_p} (T_p - T_L)^{2b_p} - 4a_p^{b_p} (T_p - T_L)^{b_p}} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.77)$$

$$\left. \begin{aligned} a_n &= \frac{3}{2} \frac{k_B m_{n0}}{q V_{sat,n}^2 t_e} \\ a_p &= \frac{3}{2} \frac{k_B m_{p0}}{q V_{sat,p}^2 t_h} \end{aligned} \right\} \quad (2.78)$$

где μ_{n0} и μ_{p0} – подвижности носителей при низком поле, $V_{sat,n}$ и $V_{sat,p}$ – скорости насыщения для электронов и дырок. Параметры $V_{sat,n}$, $V_{sat,p}$, β_n и β_p – эмпирические константы.

2.6.2. Модели генерации и рекомбинации носителей

В конечном счете, генерация и рекомбинация носителей – это физические процессы восстановления состояния равновесия в полупроводниковом материале. Если рассматривается гомогенно легированный полупроводник с равновесной концентрацией электронов и дырок n_0 и p_0 , то равновесное состояние характеризуется соотношением:

$$n_0 = p_0 = n_i^2.$$

Поскольку в реальных условиях полупроводник находится в состоянии постоянного возбуждения, величины n_0 и p_0 отклоняются от состояния равновесия. Например, свет, падающий на поверхность полупроводника p -типа, вызывает генерацию электронно-дырочных пар, существенно изменяющую концентрацию неосновных носителей. В результате процессов рекомбинации система возвращается в состояние равновесия. Процессы, ответственные за генерацию–рекомбинацию, можно разделить на шесть основных типов: фононные переходы, фотонные переходы, Оже-переходы, поверхностная рекомбинация, ударная ионизация и туннелирование.

Модель рекомбинации Шокли–Рида–Холла. Фононные переходы происходят с участием ловушки (или дефекта) внутри запрещенной зоны полупроводника. По существу, это двухстадийный процесс, теория которого была предложена Шокли и Ридом [127] и затем развита Холлом [128]. Интенсивность рекомбинации в модели Шокли–Рида–Холла (SRH) характеризуется следующим соотношением:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{t_p \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + t_n \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]}, \quad (2.79)$$

где E_{trap} – разница между энергетическим уровнем ловушки и собственным уровнем Ферми, T_L – температура решетки в Кельвинах, τ_n и τ_p – времена жизни электронов и дырок.

Примечание. В модели Шокли–Рида–Холла предполагается существование только одного уровня ловушек, по умолчанию равного $E_{trap} = 0$. Этот уровень соответствует наиболее эффективному центру рекомбинации.

Зависимость времени жизни носителей от концентрации примеси можно представить следующим выражением [129]:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{t_p \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + t_n \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]}, \quad (2.80)$$

где

$$\left. \begin{aligned} t_n &= \frac{t_{n,0}}{1 + N/N_{SRH,n}}, \\ t_p &= \frac{t_{p,0}}{1 + N/N_{SRH,p}} \end{aligned} \right\} \quad (2.81)$$

Здесь N – локальная концентрация примеси.

Модель Клаасена. В модели Клаасена [117] в приближении модели SRH учитывается зависимость времени жизни носителей от концентрации примесей и температуры. Времена жизни для электронов и дырок в этой модели определяются уравнениями:

$$\left. \begin{aligned} t_{n,0}^{-1} &= \left(K_{T,n}^{-1} + K_{C,n} N \left(\frac{300}{T_L} \right)^{K_{G,n}} \right), \\ t_{p,0}^{-1} &= \left(K_{T,p}^{-1} + K_{C,p} N \left(\frac{300}{T_L} \right)^{K_{G,p}} \right), \end{aligned} \right\} \quad (2.82)$$

где N – локальная (полная) концентрация примеси. Параметры $K_{T,n}$, $K_{T,p}$, $K_{G,n}$ и $K_{G,p}$ – эмпирические константы в модели Клаасена.

Туннелирование с участием ловушек. При высоких электрических полях электроны могут туннелировать через запрещенную зону посредством ловушечных состояний. Интенсивность рекомбинации носителей в модифицированной модели Шокли–Рида–Холла, учитывающей эффект туннелирования с участием ловушек, имеет следующий вид:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\frac{t_{p,0}}{1 + \Gamma_p^{DIRAC}} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + \frac{t_{n,0}}{1 + \Gamma_n^{DIRAC}} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]},$$

где Γ_n^{DIRAC} – член, описывающий усиление интенсивности рекомбинации электронов, обусловленное эффектом поля, для дираковской ямы, и Γ_p^{DIRAC} – соответственно для дырок. Величины Γ_n^{DIRAC} и Γ_p^{DIRAC} определяются уравнениями, описывающими модель туннелирования с участием ловушек.

Снижение барьера Пула–Френкеля для кулоновской ямы. Эффект Пула–Френкеля может приводить к увеличению скорости эмиссии для кулоновских ям. В результате учета этого эффекта выражения для $R_{n,SRH}$ и $R_{p,SRH}$ в модели Шокли–Рида–Холла электронно-дырочной рекомбинации приобретают вид:

$$R_{n,SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\frac{t_{p,0}}{1 + \Gamma_p^{DIRAC}} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + \frac{t_{n,0}}{c_F + \Gamma_n^{COUL}} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]},$$

$$R_{p,SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\frac{t_{p,0}}{c_F + \Gamma_n^{COUL}} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + \frac{t_{n,0}}{1 + \Gamma_p^{DIRAC}} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]}.$$

Коэффициент термической эмиссии c_F в модели Пула–Френкеля и кулоновские факторы Γ_n^{COUL} и Γ_p^{COUL} определяются выражениями, приведенными в описании модели снижения барьера Пула–Френкеля для кулоновской ямы в подразд. 2.3.2 «Ловушки и дефекты».

Радиационная рекомбинация (генерация фотонов). Генерация фотонов происходит в том случае, если возможен прямой переход из валентной зоны в зону проводимости. Этот процесс характерен только для материалов с узкой шириной запрещенной зоны как, например, в GaAs. Модель радиационной рекомбинации представляется следующим соотношением:

$$R_{direct} = C_{Opt} (pn - n_{ie}^2),$$

где параметр C_{Opt} – константа.

Оже-рекомбинация. Оже-рекомбинация осуществляется посредством трехчастичного последовательного взаимодействия, в результате которого подвижный носитель либо захватывается, либо эмитирует. К сожалению, физика этих процес-

сов до сих пор неясна, поэтому при анализе этого явления достаточно качественного описания, изложенного в работе [130].

Стандартная модель Оже-рекомбинации. Процесс Оже-рекомбинации обычно моделируется посредством использования следующего выражения:

$$R_{Auger} = A_n (pn^2 - nn_{ie}^2) + A_p (np^2 - pn_{ie}^2), \quad (2.83)$$

где параметры A_n и A_p – подгоночные константы.

Модель Клаасена для температурной зависимости Оже-эффекта. Оже-рекомбинация в модели Клаасена [131] описывается следующим выражением:

$$R_{Auger} = C_n (pn^2 - nn_{ie}^2) + C_p (np^2 - pn_{ie}^2),$$

где коэффициенты Оже зависят от температуры согласно выражениям:

$$\left. \begin{aligned} C_n &= p^2 K_{C,n} AUGCN \left(\frac{T_L}{300} \right)^{K_{D,n}}, \\ C_p &= n^2 K_{C,p} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{K_{D,p}}. \end{aligned} \right\} \quad (2.84)$$

Здесь $K_{C,n}$, $K_{C,p}$, $K_{D,n}$ и $K_{D,p}$ – подгоночные параметры.

Эффект сужения ширины запрещенной зоны в модели Оже. Альтернативная модель для коэффициентов Оже-рекомбинации, которая более пригодна для моделирования процессов Оже в полупроводниках с узкой шириной запрещенной зоны, представленная в упрощенном виде в работе [132], описывается выражением

$$R_{Auger} = C_n (pn^2 - nn_{ie}^2) + C_p (np^2 - pn_{ie}^2),$$

где коэффициенты Оже C_n и C_p зависят от концентрации следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} C_n &= \frac{A_n}{1 + A_{K,n}n}, \\ C_p &= \frac{A_p}{1 + A_{K,p}p}. \end{aligned} \right\}$$

Здесь n и p – концентрации электронов и дырок, а параметры $A_{K,n}$, $A_{K,p}$, A_n и A_p – подгоночные константы.

Поверхностная рекомбинация. Электроны и дырки кроме процессов генерации–рекомбинации в объеме полупроводника, могут рекомбинировать–генерироваться на границах раздела. Скорость поверхностной рекомбинации может быть выше, чем в объеме. Стандартный подход для моделирования процессов рекомбинации на границе раздела осуществляется простым способом, как и при моделировании скорости генерации–рекомбинации в объеме:

$$R_{surf} = \frac{pn - n_{ie}^2}{t_p^{eff} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + t_n^{eff} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]}.$$

Здесь:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{t_n^{eff}} &= \frac{1}{t_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S.N, \\ \frac{1}{t_p^{eff}} &= \frac{1}{t_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S.P, \end{aligned} \right\} \quad (2.85)$$

где $\tau_{n,p}^i$ – времена жизни носителя (электрона или дырки) в объеме, рассчитанные в узле i вдоль границы раздела, которые могут быть также функцией от концентрации примеси. Параметры d_i и A_i – длина и площадь границы раздела в узле i . Параметры S_n и S_p – скорости рекомбинации для электронов и дырок соответственно.

2.6.3. Модели ударной ионизации

В любой области пространственного заряда в условиях приложенного напряжения электрическое поле может быть достаточно высоким, чтобы свободные носители приобрели энергию, необходимую для генерации новых свободных носителей в результате столкновений с атомами кристалла. Другими словами, носитель должен приобрести энергию E_i , необходимую для ионизации атома примеси. Если интенсивность генерации свободных носителей достаточно высока, то этот процесс может, в конечном счете, привести к лавинному пробую.

Общий процесс ударной ионизации может быть описан уравнением

$$G = \alpha_n J_n + \alpha_p J_p, \quad (2.86)$$

где G – полная скорость генерации электронно-дырочных пар, $\alpha_{n,p}$ – коэффициенты ионизации для электронов и дырок и $J_{n,p}$ – соответствующие плотности токов. Коэффициент ионизации представляет собой число электронно-дырочных пар, генерированных носителем на единицу длины его пробега. Точное вычисление этого параметра важно при моделировании различных эффектов, связанных с ударной ионизацией, как, например, ток подложки и пробивное напряжение при-

бора. Модели ударной ионизации можно разделить на два основных типа: локальные и нелокальные.

В локальной модели предполагается, что ионизация в любой области прибора является функцией только электрического поля. В нелокальных моделях расчеты выполняются в более грубом приближении, учитывая лишь энергию, приобретенную носителем.

Модели ударной ионизации в условиях локального электрического поля. Модель Зельбергера: Модель для расчета скорости ионизации, предложенная Зельбергером [114], представляет собой модификацию классической модели Чиновета [133]. В этой модели

$$\left. \begin{aligned} a_n &= A_n \exp \left[- \left(\frac{B_n}{E} \right)^{b_n} \right], \\ a_p &= A_p \exp \left[- \left(\frac{B_p}{E} \right)^{b_p} \right], \end{aligned} \right\}$$

где E – электрическое поле в направлении тока в данной области структуры, а параметры A_n , A_p , B_n , B_p , b_n и b_p – эмпирические константы.

В этой модели параметры $A_{n,p}$ и $B_{n,p}$ являются также функцией от температуры решетки [134] и представляются в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} A_n &= A_{n,1,2} \left(1 + A_{T,n} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M_{A,n}} - 1 \right] \right), \\ A_p &= A_{p,1,2} \left(1 + A_{T,p} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M_{A,p}} - 1 \right] \right), \\ B_n &= B_{n,1,2} \left(1 + B_{T,n} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M_{B,n}} - 1 \right] \right), \\ B_p &= B_{p,1,2} \left(1 + B_{T,p} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M_{B,p}} - 1 \right] \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.87)$$

Модель Вальдиночи. Вальдиночи с соавторами [135] предложили методику измерений для калибровки моделей ударной ионизации, в которой учитывается температурная зависимость, и основанную на ней новую модель. В рамках этой модели проведена калибровка коэффициентов ионизации как для дырок, так и для электронов в диапазоне температур от 25 до 400 °С. Эта модель основана на следующем соотношении:

$$a_{n,p} = \frac{E}{a_{n,p}(T_L) + b_{n,p}(T_L) \exp[d_{n,p}(T_L)/(E + c_{n,p}(T_L))]},$$

где E – электрическое поле вдоль линий тока, а параметры этого выражения следующие:

$$\begin{aligned} a_n(T_L) &= A_{n,0} + (A_{n,1} T_L^{A_{n,2}}), \\ b_n(T_L) &= B_{n,0} \exp(B_{n,1} T_L), \\ c_n(T_L) &= C_{n,0} + (C_{n,1} T_L^{C_{n,2}}) + C_{n,3} T_L^2, \\ d_n(T_L) &= D_{n,0} + D_{n,1} T_L + D_{n,2} T_L^2, \\ a_p(T_L) &= A_{p,0} + (A_{p,1} T_L^{A_{p,2}}), \\ b_p(T_L) &= B_{p,0} \exp(B_{p,1} T_L), \\ c_p(T_L) &= C_{p,0} + (C_{p,1} T_L^{C_{p,2}}) + C_{p,3} T_L^2, \\ d_p(T_L) &= D_{p,0} + D_{p,1} T_L + D_{p,2} T_L^2. \end{aligned}$$

Здесь A , B , C , и D – эмпирические константы.

Модель Гранта. Более простая модель ударной ионизации Гранта имеет ту же форму, что и модель Зельбергера. В этой модели:

$$\left. \begin{aligned} a_n &= AN \exp \left[- \left(\frac{B_n}{E} \right) \right], \\ a_p &= AP \exp \left[- \left(\frac{B_p}{E} \right) \right]. \end{aligned} \right\}$$

Модель Гранта имеет следующие особенности:

- она может быть использована при низких, промежуточных и высоких уровнях поля;
- в ней используются соответствующие коэффициенты для кремния и других материалов;
- в этой модели отсутствует температурная зависимость.

Модель Гранта [136] была разработана на основании исследований Бараффа [137], предложившего способ учета областей низкого, промежуточного и высокого поля с соответствующими скоростями ионизации для электронов и дырок. Коэффициенты, используемые в этой модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными Гранта [136].

Параметры модели Гранта имеют следующие значения для трех областей электрических полей:

- 1) $A_n = 2,6 \cdot 10^6$, $A_p = 2,0 \cdot 10^6$, $B_n = 1,08 \cdot 10^6$, $B_p = 1,97 \cdot 10^6$ при $E < 2,4 \cdot 10^5$ В/см
- 2) $A_n = 6,2 \cdot 10^5$, $A_p = 2,0 \cdot 10^6$, $B_n = 1,08 \cdot 10^6$, $B_p = 1,97 \cdot 10^6$ при $2,4 \cdot 10^5 < E < 5,3 \cdot 10^5$ В/см
- 3) $A_n = 5,0 \cdot 10^5$, $A_p = 5,6 \cdot 10^5$, $B_n = 9,9 \cdot 10^6$, $B_p = 1,32 \cdot 10^6$ при $E > 5,3 \cdot 10^5$ В/см.

Модель Кроуэлла–Зи. Кроуэлл и Зи [138] предложили более физичную (но достаточно сложную) зависимость между электрическим полем и скоростями ионизации. В этой модели ионизационные коэффициенты представляются в следующем виде:

$$a_{n,p} = \frac{1}{I_{n,p}} \exp[C_0(r) + C_1(r)x + C_2(r)x^2], \quad C_0(r) = -1,92 + 75,5r - 75,5r^2,$$

$$C_1(r) = -1,75 \cdot 10^{-2} - 11,9r + 46r^2, \quad C_2(r) = 3,9 \cdot 10^{-4} - 1,17r + 11,5r^2,$$

где $r = \frac{E_r}{E_i}$; $x = \frac{E_i}{qI_{n,p}E}$; $E_r = 0,063eV$; $E_i = \begin{cases} 1,1eV & \text{для электронов;} \\ 1,8eV & \text{для дырок.} \end{cases}$

$$I_n^0 = I_e \frac{\tanh\left[\frac{qE_r}{2kT_L}\right]}{\tanh\left[\frac{qE_r}{2k300}\right]}; \quad I_p^0 = I_p \frac{\tanh\left[\frac{qE_r}{2kT_L}\right]}{\tanh\left[\frac{qE_r}{2k300}\right]},$$

где λ_e и λ_p – эмпирические параметры.

Модели ударной ионизации в условиях нелокального электрического поля. Все модели поведения носителей в представлении локального электрического поля обычно переоценивают скорость ударной ионизации. Согласно теории переноса носителей в условиях постоянного электрического поля E после прохождения носителем расстояния $\Delta x = E_i/(qE)$ он приобретает энергию, равную энергии ионизации E_i . Однако в реальных приборах электрическое поле непостоянно и обычно имеет острые пики напряженности в областях металлургического р-п-перехода. Электронная модель показывает, что при прохождении носителей через области с пиковыми значениями электрического поля расстояние ионизации Δx будет достаточно коротким. В результате скорость ударной ионизации получится слишком высокой (переоценена), и, как следствие этого, напряжение пробоя будет недооценено, а ток подложки – переоценен.

Для повышения точности моделирования процесса ударной ионизации следует использовать модель энергетического баланса с привлечением моделей ионизации, основанных на учете температуры носителей. Такой подход позволяет использовать нелокальную зависимость от электрического поля в рамках модели ударной ионизации. Использование модели энергетического баланса может улучшить точность моделирования напряжения пробоя и тока подложки. Известны две модели ударной ионизации. Одна основана на классическом соотношении Чиновета с некоторыми изменениями для учета температуры носителей. Другая модель представляет собой развитие не-максвелловского приближения, основанного на учете температуры носителей.

В транспортно-энергетическом подходе возможно использование двух моделей ударной ионизации: модели Тоябе и модели Конканнона.

Модель Тоябе. Температурная зависимость в модели ударной ионизации является основой модели Зельбергера и подобна той, которая предложена Тоябе [139]. В этой модели используется температура носителей для расчета эффективного электрического поля на основе однородного соотношения между температурой и полем. С целью самосогласованного решения задачи в рамках транспортной модели энергетического баланса подобное соотношение используется для эффективного электрического поля при анализе подвижности с учетом температуры носителей. В этом случае скорости ионизации имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} a_n &= A_n \exp\left(\frac{-B_n}{E_{eff,n}}\right) \\ a_p &= A_p \exp\left(\frac{-B_p}{E_{eff,p}}\right) \end{aligned} \right\}$$

где параметры модели $A_{n,p}$ и $B_{n,p}$ – эмпирические константы.

Эффективное электрическое поле вычисляется следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} E_{eff,n} &= \frac{3 kT_n}{2 qL_e} \\ E_{eff,p} &= \frac{3 kT_p}{2 qL_p} \end{aligned} \right\} \quad (2.88)$$

где параметры $L_{e,p}$ могут быть рассчитаны по следующим соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} L_e &= V_{sat,n} t_{s,n} \\ L_p &= V_{sat,p} t_{s,p} \end{aligned} \right\}, \quad (2.89)$$

где параметры $V_{sat,n}$ и $V_{sat,p}$ – скорости насыщения для электронов и дырок, а параметры $t_{s,n}$ и $t_{s,p}$ времена релаксации электронной энергии (t_e и t_p) в уравнениях (2.78).

Модель Конканнона. В нелокальной модели ударной ионизации Тоябе принимается максвелловская форма распределения горячих носителей. В работе Фигна [140] результаты моделирования методом Монте-Карло подтвердили немасвелловский высокий энергетический «хвост» в функции распределения энергии. Для более точного моделирования этих эффектов Конканноном [141] предложена модель, основанная на немасвелловском распределении. На базе этой мо-

дели вычисляется вероятность достижения носителем энергии, достаточной, чтобы вызвать ударную ионизацию.

Скорость генерации является функцией температуры носителей, а их концентрации определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} G_n(x, y) &= C_n n \int_{E_{T,n}}^{\infty} F(e, T_n(x, y)) de, \\ G_p(x, y) &= C_p p \int_{E_{T,p}}^{\infty} F(e, T_p(x, y)) de, \end{aligned} \right\} \quad (2.90)$$

где $n(x, y)$ и $p(x, y)$ – концентрации электронов и дырок; ε – энергия; $T_n(x, y)$ и $T_p(x, y)$ – температуры электронов и дырок; значение F определяется в уравнении (2.75); $C_{n,p}$ и $E_{n,p}$ – подгоночные параметры.

Функция $F(\varepsilon, T)$ в уравнениях (2.90) определяется через произведение функции плотности состояний $g(\varepsilon)$ и функции энергетического распределения $f(\varepsilon)$:

$$F = \frac{g(e)f(e)}{\int_0^{\infty} g(e)f(e)de}.$$

Функцию плотности можно аппроксимировать следующим образом:

$$g(\varepsilon) = \varepsilon^{1,25}.$$

Функции распределения энергий электронов и дырок имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} f_n(e) &= \left[\exp\left(\frac{-C_e e^3}{T_n^{1.5}}\right) + C_0 \exp\left(\frac{-C_B e^3}{T_n^{1.5}}\right) \right], \\ f_p(e) &= \exp\left(\frac{-C_h e^3}{T_p^{1.5}}\right) \end{aligned} \right\}.$$

Константы $C_{e,h}$, C_B и C_0 – подгоночные параметры в модели Конканнона.

Межзонное туннелирование. В случае достаточно высокого электрического поля возможен существенный локальный изгиб энергетической зоны, что позволяет электронам туннелировать из валентной зоны в зону проводимости посредством внутренней эмиссии. Следовательно, в зоне проводимости генерируется дополнительный электрон и образуется дырка в валентной зоне. Этот механизм генерации описывается правой частью уравнения непрерывности. Согласно рабо-

там [142, 143] скорость генерации носителей посредством такого механизма туннелирования описывается следующим соотношением:

$$G_{BB} = BB_a E^{BB_g} \exp\left(-\frac{BB_b}{E}\right),$$

где E – величина электрического поля; $BB_{\alpha, b, \gamma}$ – параметры, которые можно рассчитать из первых принципов согласно выражениям:

$$\left. \begin{aligned} BB_a &= \frac{q^2 \sqrt{2m_t m_0}}{h^2 \sqrt{E_g}}, \\ BB_b &= \frac{p^2 E_g^{3/2} \sqrt{\frac{m_t m_0}{2}}}{qh}, \\ BB_g &= 2, \end{aligned} \right\}$$

где q – заряд электрона, h – постоянная Планка, E_g – энергия запрещенной зоны, m_0 – масса покоя электрона и m_t – эффективная масса.

Модель туннелирования Фаулера–Нордгейма. Если электрическое поле в диэлектрике достаточно высоко, то оно может вызвать туннелирование электронов из уровня Ферми полупроводника (или металла) в зону проводимости диэлектрика. Этот процесс зависит от величины приложенного электрического поля, но не зависит от температуры окружающей среды.

Уравнение Фаулера–Нордгейма выражает плотность туннельного тока через окисел следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} J_{FN} &= F_{a,e} E^2 \exp\left(-\frac{F_{b,e}}{E}\right) \\ J_{FP} &= F_{a,h} E^2 \exp\left(-\frac{F_{b,h}}{E}\right) \end{aligned} \right\} \quad (2.91)$$

где E – электрическое поле в окисле. Коэффициенты $F_{a,e}$, $F_{a,h}$, $F_{b,e}$ и $F_{b,h}$ – параметры в модели Фаулера–Нордгейма.

Модель инжекции горячих носителей для свободного электрона. В этой модели предполагается, что электрон эмитирует в окисел посредством приобретения достаточной энергии в электрическом поле канала для преодоления барьера на границе «диэлектрик–полупроводник». При получении такой энергии электроны

меняют свое движение в направлении границы раздела «диэлектрик–полупроводник» посредством рассеяния на фононах. Если эти условия выполнены, носитель, движущийся в направлении к границе раздела, будет иметь меньшую вероятность дополнительных столкновений, сопровождающихся потерей энергии.

Описываемая модель является модифицированной версией модели, предложенной Тамом [144]. Граница раздела «электрод к затвору–диэлектрик» разбивается на ряд дискретных сегментов. Для каждого сегмента используется описываемая в данном разделе модель для вычисления инжекционного тока в этом сегменте. Общий ток затвора будет равен сумме всех его дискретных значений для каждого сегмента.

Для каждой дискретной точки на границе раздела «электрод к затвору–диэлектрик» можно записать выражение для тока, инжектированного из полупроводника. Согласно этому выражению рассчитывается вклад в инжекционный ток затвора от каждого узла в полупроводнике:

$$I_{inj} = \iint P_n(x, y) |J_n(x, y)| dx dy + \iint P_p(x, y) |J_p(x, y)| dx dy,$$

где $J_{n,p}(x, y)$ – плотности электронного и дырочного токов в точке с координатами (x, y) в полупроводнике; $P_{n,p}(x, y)$ – вероятность того, что некоторая часть этого тока достигнет подзатворного диэлектрика и инжектируется через него в электрод затвора:

$$\left. \begin{aligned} P_n(x, y) &= \frac{P_{\text{цБ},n} P_{1,n} P_{2,n}}{G_e}, \\ P_p(x, y) &= \frac{P_{\text{цБ},p} P_{1,p} P_{2,p}}{G_h}, \end{aligned} \right\}$$

где E – электрическое поле, параллельное направлению тока, а параметры G_e и G_h – средние пути свободного пробега электронов и дырок, P_{fB} – вероятность получить носителю энергию f_B при движении в электрическом поле E и параллельно ему без потери энергии посредством рассеяния на оптических фононах:

$$\left. \begin{aligned} P_{fB,n} &= 0,25 \left(\frac{EG_{e,f}}{f_{B,n}} \right) \exp \left(- \frac{f_{B,n}}{EG_{e,f}} \right) \\ P_{fB,p} &= 0,25 \left(\frac{EG_{h,f}}{f_{B,p}} \right) \exp \left(- \frac{f_{B,p}}{EG_{h,f}} \right) \end{aligned} \right\}$$

где $G_{e,f}$ и $G_{h,f}$ – средние длины свободного пробега электронов и дырок при рассеянии на оптических фононах. Высоты барьеров $f_{Bn,p}$ определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} f_{B,n} &= E_{e,0} - E_{e,b} \sqrt{E_{\perp}} - G_{e,q} E_{\perp}^{2/3} - \Delta y(x, y), \\ f_{B,p} &= E_{h,0} - E_{h,b} \sqrt{E_{\perp}} - E_{h,q} E_{\perp}^{2/3} - \Delta y(x, y), \end{aligned} \right\}$$

где E_{\perp} – электрическое поле, перпендикулярное границе раздела «полупроводник–диэлектрик». Обычные высоты барьеров $E_{e,0}$ и $E_{h,0}$ уменьшены для учета следующих эффектов. Первый обусловлен уменьшением барьера Шоттки, высота которого зависит от перпендикулярного электрического поля на границе раздела «полупроводник–диэлектрик». Второй эффект учитывает туннелирование через подзатворный диэлектрик посредством уменьшения высоты барьера. Третий эффект учитывает тот факт, что имеется разница в потенциалах между границей раздела «полупроводник–диэлектрик» и начальным положением горячего носителя.

P_1 – вероятность того, что горячий носитель не теряет энергию при рассеянии на оптических фононах, когда он движется к границе раздела «полупроводник–диэлектрик» после переориентации:

$$\left. \begin{aligned} P_{1,n} &\approx \exp\left(-\frac{r}{G_{e,f}}\right) \\ P_{1,p} &\approx \exp\left(-\frac{r}{G_{h,f}}\right) \end{aligned} \right\}$$

где r – расстояние от положения в полупроводнике, где горячий носитель изменил направление движения, до границы раздела «полупроводник–диэлектрик».

P_2 – вероятность рассеяния в потенциальной яме в области подзатворного диэлектрика:

$$\left. \begin{aligned} P_{2,n} &= \exp\left(-\frac{\sqrt{\frac{q}{16pe_{ox}E_{ox}}}}{P_n}\right) \quad \text{для } q > q_n, \\ P_{2,n} &= 0 \quad \text{для } q < q_n, \\ P_{2,p} &= \exp\left(-\frac{\sqrt{\frac{q}{16pe_{ox}E_{ox}}}}{P_p}\right) \quad \text{для } q > q_p, \\ P_{2,p} &= 0 \quad \text{для } q < q_p, \end{aligned} \right\}$$

где $P_{n,p}$ – средние длины свободного пробега для электронов и дырок в окисле, ϵ_{ox} – диэлектрическая проницаемость окисла и E_{ox} – электрическое поле в окисле. Параметр q вводит угловую зависимость вероятности рассеяния P_2 . Экспериментальные результаты, представленные в этой работе, показывают, что имеются критические углы θ_n и θ_p между углом q , образованным границей раздела «полупроводник–диэлектрик» и направлением электрического поля в окисле. Если угол q меньше этого критического угла, то электроны отталкиваются в подложку.

Модель инжекции Конканнона. В приближении статистически распределенных электронов предполагается, что энергетическое распределение горячих носителей имеет максвелловскую форму. Однако в работе [140] при моделировании методом Монте-Карло показано, что имеется не-максвелловский «хвост» в высокоэнергетической области распределения. Более точное моделирование этого эффекта обеспечивается моделью Конканнона [141]. Эта модель использует уравнение энергетического баланса для температур носителей и реализуется подобным же образом, что и модель статистически распределенных электронов.

Модель инжекции Конканнона имеет ту же форму, что и модель случайных электронов. Инжекционный ток вычисляется согласно следующему выражению:

$$I_{inj} = \iint P_n(x, y)n(x, y)dxdy + \iint P_p(x, y)p(x, y)dxdy, \quad (2.92)$$

где $n(x, y)$ и $p(x, y)$ – концентрации носителей в полупроводнике. Функции вероятностей $P_n(x, y)$ и $P_p(x, y)$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} P_n(x, y) &= -qC_{g,n}P_{fB,n}P_{1,n}P_{2,n}, \\ P_p(x, y) &= -qC_{g,p}P_{fB,p}P_{1,p}P_{2,p}, \end{aligned} \quad (2.93)$$

где q – заряд электрона, а коэффициенты $C_{g,n}$ и $C_{g,p}$ – подгоночные параметры модели.

Далее будут описаны три вероятностные функции, присутствующие в уравнениях (2.92) и (2.93).

Вероятность того, что носитель имеет достаточную энергию для преодоления барьера, разделяющего диэлектрик и полупроводник f_B , задается как функция энергии, так что

$$\left. \begin{aligned} P_{fB,n} &= \int_{fB,n}^{\infty} v_{\perp}(e)F(e, T_n(x, y))de, \\ P_{fB,p} &= \int_{fB,p}^{\infty} v_{\perp}(e)F(e, T_p(x, y))de, \end{aligned} \right\}$$

где $v_{\perp}(\epsilon)$ – перпендикулярная составляющая скорости горячих носителей, определяющая вероятность возникновения горячих носителей с энергией ϵ , движущихся в направлении границы раздела «диэлектрик–полупроводник». Высоты барьеров $f_{B,n,p}$ определяются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} f_{B,n} &= P_{eff,n} - E_{e,b} \sqrt{E_{\perp}} - E_{e,h} E_{\perp}^{2/3} - \Delta\mathcal{U}(x, y), \\ f_{B,p} &= P_{eff,p} - E_{h,b} \sqrt{E_{\perp}} - E_{h,h} E_{\perp}^{2/3} - \Delta\mathcal{U}(x, y), \end{aligned} \right\}$$

где E_{\perp} – электрическое поле, перпендикулярное границе раздела «полупроводник–диэлектрик». Обычные высоты барьера $E_{e,0}$ и $E_{h,0}$ снижаются за счет трех эффектов. Первый эффект обусловлен понижением барьера Шоттки, которое зависит от перпендикулярного электрического поля на границе раздела «полупроводник–диэлектрик». Второй учитывает туннелирование через подзатворный диэлектрик. Третий эффект учитывает тот факт, что имеется разница в потенциалах между границей раздела «полупроводник–диэлектрик» и исходным положением горячего носителя.

В модели Фиегна [140] скорость горячих носителей пропорциональна энергии согласно выражению $v_{\perp} \sim \epsilon^{0,25}$.

Функция $F(\epsilon, T_{n,p}(x, y))$ задается плотностью состояний и функцией энергетического распределения следующим образом:

$$F(\epsilon, T_n(x, y)) \sim \frac{g(\epsilon)f(\epsilon)}{\int_0^{\infty} g(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon}.$$

Плотность состояний $g(\epsilon)$ согласно анализу Касси [145]:

$$g(\epsilon) \sim \epsilon^{0,25}.$$

Окончательно функция распределения энергии для электронов и дырок определяется следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} f_e(\epsilon) &\sim \left[\exp\left(-\frac{E_{T,n}\epsilon^3}{T_n^{1.5}}\right) + C_0 \exp\left(-\frac{E_{T,p}\epsilon^3}{T_n^{1.5}}\right) \right], \\ f_e(\epsilon) &\sim \exp\left(-\frac{C_A\epsilon^3}{T_p^{1.5}}\right), \end{aligned} \right\}$$

где коэффициенты $E_{T,n}$, $E_{T,p}$ и C_0 – подгоночные параметры модели, T_n и T_p – средние температуры носителей (для электронов и дырок), вычисляемые из транспортной модели энергетического баланса; P_1 – вероятность того, что энергетические потери при рассеянии горячих носителей на оптических фоновых при движении к границе раздела «полупроводник–диэлектрик» после изменения их направления движения отсутствуют:

$$\left. \begin{aligned} P_{1,n} &\sim \exp\left(-\frac{r}{G_e}\right) \\ P_{1,p} &\sim \exp\left(-\frac{r}{G_h}\right) \end{aligned} \right\}$$

где r – расстояние от точки, где изменилось направление движения носителей, до границы раздела «полупроводник–диэлектрик».

P_2 – вероятность рассеяния в потенциальной яме:

$$\left. \begin{aligned} P_{2,n} &= \exp\left(-\frac{\sqrt{\frac{q}{16pe_{ox}E_{ox}}}}{P_n}\right) \text{ для } q > q_n, \\ P_{2,n} &= 0 \text{ для } q < q_n, \\ P_{2,p} &= \exp\left(-\frac{\sqrt{\frac{q}{16pe_{ox}E_{ox}}}}{P_p}\right) \text{ для } q > q_p, \\ P_{2,p} &= 0 \text{ для } q < q_p, \end{aligned} \right\}$$

где P_n и P_p – средние пути свободного пробега электронов и дырок в окисле, ϵ_{ox} – диэлектрическая проницаемость окисла и E_{ox} – электрическое поле в окисле. Угловая зависимость, которая основана на работе [146], вводится параметром q . Экспериментальные результаты показывают, что имеются критические углы q_n и q_p , представляющие собой углы между границей раздела «полупроводник–диэлектрик» и электрическим полем в окисле. Если угол q меньше этих критических углов, то электроны отталкиваются в подложку.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Достигнутый к настоящему времени уровень изложенных физических моделей технологических процессов изготовления и моделей функционирования кремниевых приборов микроэлектроники при использовании соответствующим образом откалиброванных физических параметров и констант, используемых в этих моделях, позволяет получать результаты, достаточно адекватно описывающие экспериментальные данные. Эти модели лежат в основе таких современных, являющихся международными стандартами, программных комплексов проектирования в микроэлектронике, как программные средства компаний CADENCE, SYNOPSIS и MentorGraphics (разработка схем широкого диапазона применений на всех уровнях иерархического проектирования – от схемотехнического до систем на кристалле) и компании SILVACO (технологическое и приборное проектирование).

Однако по мере повышения сложности приборов микроэлектроники и уменьшения характерных размеров их элементов критические проблемы в моделировании проявляются в неодинаковой степени: возрастает роль и сложность моделирования технологических процессов по сравнению с моделированием приборов [147]. Если точность результатов моделирования прибора в настоящее время достаточно удовлетворительна для современных систем со сверхбольшой степенью интеграции, то адекватность результатов моделирования технологии экспериментальным данным является слабым местом современных средств проектирования. Это связано прежде всего со стремительным развитием новых методов и оборудования для обработки полупроводниковых структур, в связи с чем проявляется отставание во времени моделирования технологических процессов от их использования непосредственно на предприятиях электронной промышленности («вчера технология моделируется завтра!»).

Не касаясь нынешних и грядущих сверхзадач нанотехнологии и наноэлектроники [148], физические процессы в которых описываются на принципиально других, атомистическом и квантово-механическом, уровнях, следует отметить следующие основные проблемы в сфере моделирования современной субмикронной технологии микроэлектроники в «традиционном», континуальном, приближении:

- расчет профилей активных примесей, основанный на физическом описании их диффузии и активации с участием дефектов кристаллической решетки кремния (как точечных, так и протяженных) при фазовых превращениях, сопровождающих современные короткие процессы отжига;

- распределение дефектов, образующихся при имплантации, и его эволюция во времени (возможное решение проблемы состоит в использовании первопринципных (*ab initio*) методов и в первую очередь – метода молекулярной динамики);

- учет фазовых превращений при легировании посредством высокодозной имплантации [149];

– анализ эффектов сегрегации и захвата примесей ловушками в процессе окисления кремния на границе раздела «двуокись кремния–кремниевая подложка»;

– физически корректное моделирование технологии создания сверхмелких р-п-переходов в условиях лазерного отжига с целью минимизации короткоканальных эффектов в структурах МОП-транзистора с одновременным получением низких значений слоевых сопротивлений для максимизации управляющих токов;

– моделирование технологии получения новых материалов с более высокой, чем для двуокиси кремния, диэлектрической проницаемостью, предназначенных для использования в качестве диэлектрических слоев в элементах МОП-транзисторов, например, оксинитридов, диэлектрическая проницаемость которых равна 7,5 по сравнению с 3,9 для SiO₂;

Основные проблемы в сфере моделирования кремниевых приборов микроэлектроники:

– корректный физический анализ паразитных эффектов, в частности, токов утечки в МОП-транзисторе с узким и коротким каналом;

– необходимость многомерного моделирования транспорта носителей заряда в современных приборных структурах (задача, требующая более емких компьютерных ресурсов и, соответственно, более «изошренных» численных методов по сравнению с многомерным моделированием технологии);

– учет механических напряжений в элементах МОП-транзистора, важность которого возрастает при масштабировании прибора;

– учет зависимости подвижности носителей от уровня легирования и направления электрического поля, уточнение вклада рассеяния носителей на примесях и эффектов рекомбинации–генерации вблизи поверхности [150].

Важнейшая задача при решении как указанных, так и «традиционных» проблем в моделировании технологии и приборов микроэлектроники состоит в калибровке физических параметров и констант, используемых в стандартных программных комплексах, для обеспечения адекватного описания технологических процессов и приборов микроэлектроники (в математической постановке эта задача подобна проблеме экстракции SPICE-параметров новых приборов).

Только совместное решение указанных проблем позволит решить «параллельный» переход из микроэлектроники в эру нанoeлектроники.

ЛИТЕРАТУРА

1. National Technology Roadmap for Semiconductors // SIA, 1997.
2. Нелаев, В. В. Многомерное моделирование имплантационных и твердофазных диффузионных процессов в технологии микроэлектроники методом молекулярной динамики и в континуальном приближении : дис. д-ра физ.-мат. наук: 05.27.01 / В. В. Нелаев; / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники.– Минск, 2001.– 300 с.
3. Нелаев, В. В. Методы и средства моделирования и проектирования технологических процессов в микроэлектронике / В. В. Нелаев // Доклады БГУИР.– 2004.– Т. 2, № 3.– С. 62–72.
4. Antoniadis D.A., Hansen S.E., Dutton R.W. SUPREM II – A program for IC process modeling and simulation / Stanford Electronics Lab.– Tech. Report.– 5019-2.– 1978.
5. Нелаев, В. В. Программа SUPREM II моделирования технологии изготовления интегральных схем : Метод. пособие / В. В. Нелаев.– Минск : БГУИР, 1998. – 26 с.
6. Нелаев, В. В. Физическое моделирование технологических процессов в программе SUPREM II : Учеб. пособие / В. В. Нелаев.– Минск : БГУИР, 1998. – 37 с.
7. Ho C.P., Plummer J.D., Hansen S.E., Dutton R.W. VLSI process modeling. – SUPREM III // IEEE Trans. on Electron Devices.– 1983.– Vol. ED-30, № 11.– P. 1438–1452.
8. Бубенников, А. Н. Физико-технологическое проектирование биполярных элементов кремниевых БИС / А. Н. Бубенников, А. Д. Садовников. - М. : Радио и связь, 1991. – 288 с.
9. Миловидов, В. С. Одномерное моделирование технологических процессов производства интегральных микросхем. В. С. Миловидов, В. А. Мосолов, В.В. Нелаев // Алгоритмы и программы. Информационный бюллетень / Всес. науч.-технич. информац. Центр; Всес. фонд алгоритмов и программ, Центральный информац. фонд.– М., 1988.– № 1.– С. 14.
10. <http://www.silvaco.com>
11. ATHENA: The complete process simulation environment // Simulation Standard. A Journal for Process and Device Engineers.– 1984.– Vol. 5, № 3.– P. 1–10.
12. Нелаев, В. В. Технологическое проектирование интегральных схем. Программа SSUPREM 4 : учеб.-метод. пособие для курсов лекций и лаб. работ по дисц. «Основы САПР в микроэлектронике» / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий.– Минск : БГУИР, 2004.– 102 с.
13. Нелаев, В. В. Работа в среде пакета ATHENA для проектирования технологии интегральных микросхем : учеб. пособие по дисц. «Основы САПР в микроэлектронике» / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий.– Минск. : БГУИР, 2005.– 137 с.
14. МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов / под ред. П. Антонетти и др.; пер. с англ.– М. : Радио и связь, 1988.– 490 с.

15. Collard D., Naniguchi K. IMPACT A point-defect-based two-dimensional process simulator: modeling the lateral oxidation-enhanced diffusion of dopants in silicon // IEEE Trans. on Electron Devices.– 1986.– Vol. ED-33, N. 10.– P. 1454–1462.

16. Maldoradu C.D. ROMANS II – A two-dimensional process simulator for modeling and simulation in the design of VLSI devices // Appl. Phys.– 1983.– Vol. A 31, №. 1.– P. 119–124.

17. Nassif S.R., Strojvas A.I., Director S.W. FABRICS II – A statistically based IC fabrication process simulator // IEEE Trans. on Computer Aided Design. 1984.– Vol. CAD-4, №. 1.– P. 40–47.

18. Ushio S., Nishi K., Kuroda S., Kai K., Ueda J. A fast three-dimensional process simulator OPUS/3D with access to two-dimensional simulation results // IEEE Trans. on Computer Aided Design.– 1990. Vol. CAD-9, №. 7.– P. 745–751.

19. <http://www.imio.pw.edu.pl/vlsi/imiocad/syprus>

20. Нелаев, В. В. 3D – моделирование термического отжига ионно – имплантированных примесей / В. В. Нелаев, М. В. Казитов, Е. Ф. Ноготов // Инженерно – физический журнал.– 1998.– Т. 71, № 6.– С. 1075–1080.

21. Kazitov M.V., Kuzmicz W.B., Nelayev V.V., and Stempitsky V.R. Statistical many-dimensional simulation of VLSI technology based on response surface methodology // Proc. SPIE.– 1999.– Vol. 4064.– P. 179–183.

22. Статистическое проектирование и оптимизация технологии производства интегральных микросхем / А. А. Кулешов [и др.] // Микроэлектроника.– 2003.– Т. 32, № 31.– С. 47–61.

23. Степаненко, И. П. Основы микроэлектроники / И. П. Степаненко. М. : Советское радио. 1980.

24. Абрамов, И. И. Численное моделирование элементов интегральных схем. И. И. Абрамов, В. В. Харитонов. Минск. : Выш. школа. 1990.– 224 с.

25. Абрамов, И. И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем / И. И. Абрамов. Минск. : БГУ, 1999.– 189 с.

26. Pinto M.R., Conor S., Rafferty N., Dutton R. W. PISCES2 – Poisson and Continuity Equation Solver / Stanford Electronics Laboratory Technical Report, Stanford University.– 1984, September.

27. Plummer J.D., Deal M.D., Griffin P.B. Silicon VLSI Technology. Fundamentals, Practice and Modeling.– Beijing, 2003.– 817 p.

28. Fahey P.M., Griffin P.B., Plummer J.D. Point defects and dopant diffusion in silicon // Rev. Mod. Phys.– 1989.– Vol. 61, №. 2.– P. 289–384.

29. Shockley W., Last J.T. Statistics of the charged distribution for a localized flow in a semiconductor // Phys. Rev.– 1957.– Vol. 107, №. 2.– P. 392–399.

30. Mathiot D., Pfister J.C. Dopant diffusion in silicon: A consistent view involving nonequilibrium defects // J. of Appl. Physics.– 1984.– Vol. 55, №. 10.– P. 3518–3525.

31. Rorris E., O'Brien R.R., Morehead F.F. et al. A new approach to the simulation of the coupled point defects and impurity diffusion // IEEE Trans. on CAD.– 1990.– Vol. 9, №. 10. P. 1113–1120.

32. Griffin P.B., Plummer J.D. Process physics determining 2-D impurity profiles in VLSI devices / International Electron Devices Meeting.– 1986, Dec.– P. 522–525.

33. Hu S.M. On interstitial and vacancy concentration in presence of injection // J. Appl. Phys.– 1985.– Vol. 57.– P. 1069–1075.
34. Hobler G., Selberherr S. Two-dimensional modeling of ion implantation induced point defects // IEEE Trans. on Computer Aided Design.– 1988.– Vol. 7, №. 7.– P. 174–179.
35. Park H, Law M.E. Point defect based modeling of low dose silicon implant damage // J. of Appl. Physics.– 1992.– Vol. 72, №. 11.– P. 3431–3439.
36. Mathiot D., Scheiblin P. ULSI Science and Technology.– 1995.
37. Middlesworth E.M., Massoud H. Dynamic clustering // Electrochemical Soc. Proc.– 1995.– Vol. 95-5.– P. 13.
38. Mathiot D., Pfister J.C. CNET Physical Diffusion Model // J. Phys. Letters.– 1982.– №. 43. L-453.
39. Yoshida M. Simulations of phosphorus predeposition profiles at high and intermediate surface concentrations // J. Appl. Phys.– 1979.– Vol. 59. №. 18.– P. 479–481.
40. Thompson C.V. Grain growth in thin films // Ann. Rev. of Mat. Sci.– 1990.– Vol. 20.– P. 245–256.
41. Mulvaney B.J., Richardson W.B., Crandle T.L. PEPPER – A process simulator for VLSI // IEEE Trans. on Computer-Aided Design. – 1989. – Vol. 8, № 4.– P.41-45.
42. Jones S.K., Gerodolle A. 2D process simulation of dopant diffusion in polysilicon / NASECODE-VII Conference Copper Mountain (Colorado), Copper Mountain.– 1991, May. Ed. by J.Miller, P. 31–32.
43. Mei L., Dutton R.W. A process simulation model for multilayer structures involving polycrystalline silicon // IEEE Trans. Electron Devices.– 1982.– Vol. ED-29.– P. 1726–1734.
44. Deal B.E., Grove A.S. General relationship for the thermal oxidation of silicon // J. Appl. Phys.– 1965.– Vol. 25.– P. 3770–3775.
45. Deal B.E. Thermal oxidation kinetics of silicon in pyrogenic H₂O and 5 % HCl/H₂O Mixtures // J. Electrochem. Soc.– 1978.– Vol. 125, № 4.– P. 576–579.
46. Chin D., Oh S.-Y., Hu S.M., Dutton R.W., Moll J.L. Process design using two-dimensional process and device simulator // IEEE Trans. Electron. Devices.– 1983.– Vol. ED-32, № 6.– P. 744–7493.
47. Hess D.W., Deal B.E. Kinetics of the thermal oxidation of silicon in O₂/HCl mixtures // J. Electrochem. Soc.– 1977.– Vol. 124, № 5.– P. 735–739.
48. Razouk R.R., Lie L.N., Deal B.E. Kinetics of high pressure oxidation of silicon in pyrogenic steam // J. Electrochem. Soc.– 1981.– Vol. 128, № 10.– P. 2214–2220.
49. Athanassouli A., Ganetsos Th., Klose F., Messoloras S. Morphology and oxidation kinetics of SiO₂ layers on silicon // Semicond. Sci. Technol.– 2002.– № 17. P. 65-76.
50. Law M.E. Theory of dopant diffusion assuming nondilute concentrations of dopant-defect pairs // Appl. Phys. Lett.–1991.– Vol.57, № 2.– P. 233–248.
51. Watkins G.D. EPR studies of the lattice vacancy and low temperature damage processes in silicon. Lattice defects in semiconductors, Ed. Huntley F.A.– 1974 / Inst. Phys. Conf. Ser. 23.– London, 1975.

52. Giles M.D. Defect-coupled diffusion at high concentrations // IEEE Trans. on Computer-Aided Design.– 1988.– Vol. 7. №. 4.– P. 411–415.

53. Park H., Law M.E. Point defect based modeling of low dose silicon implant damage and oxidation effects on phosphorous and boron diffusion in silicon // J. Appl. Phys.– 1992.– Vol. 72, № 8.– P. 3431–3435.

54. Hirabayashi K., Iwamura J. Kinetics of thermal growth of HCl-O₂ oxides on silicon // J. Electrochem. Soc.– 1973.– Vol. 120.– P. 1595–1601.

55. Chin D. A General solution method for two-dimensional nonplanar oxidation // IEEE Trans. Electron Devices.– 1983.– Vol. ED-30.– P. 993–995.

56. Matsumoto Y., Fukuma M. Numerical modeling of nonuniform thermal oxidation // IEEE Trans. Electron. Devices.– 1983.– Vol. ED-32, № 2.– P. 132–140.

57. Eyring H. Viscosity, plasticity and diffusion as examples of absolute reaction rate // J. Chem. Phys.– 1936.– Vol. 4.– P. 283–287.

58. Guillemot N. A new analytical model of the bird's beak // IEEE Trans. on ED.– 1987.– Vol. ED-34, №. 5.– P. 1271–1280.

59. Казитов, М. В. Влияние параметров аналитической модели «птичьего клюва» на 3-мерный профиль распределения примесей / М. В. Казитов, В. В. Неллаев // Радиационная физика твердого тела : материалы 8-го Международного совещания / Московский ин-т электронного машиностроения.– Севастополь.– 1998.– С. 37–41.

60. Кендалл, М. Дж. Теория распределений / М. Дж. Кендалл, А. Стюарт.– М. : Мир, 1966.– 257 с.

61. Christel L.A., Gibbons J.F., Mylroe S. An application of the Boltzman transport equation to ion range and damage distributions in multilayered targets // J. Appl. Phys.– 1980.– Vol.51, № 2.– P. 6176–6182.

62. Biersack J.P., Haggmark L.G. A Monte-Carlo computer program TRIM // Nucl. Instr. and Meth.– 1980.– Vol. 174, № 1.– P. 257–269.

63. Комаров, Ф. Ф. Ионная имплантация / Ф. Ф. Комаров, А. Н. Новиков, А. Ф. Буренков.– Минск : Універсітэцкае, 1994.– 285 с.

64. Таблицы пространственных распределений примеси при ионной имплантации. А. Ф. Буренков [и др.]– Нью-Йорк; Лондон и др. : Гордон и Брич, 1986.– 465 с.

65. Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E. Range concepts and heavy ion ranges // Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-fys. Medd.– 1963.– Vol. 33, №. 14.– P. 53–64.

66. Кендалл, М. Дж. Теория распределений. М. Дж. Кендалл, А. Стюарт.– М. : Мир, 1966.– 257 с.

67. Atomic and ion collisions in solids and at surfaces / Ed. by R. Smith // Cambridge university press.– 1997.

68. Tasch A.F. An improved approach to accurately model shallow B and BF₂ implants in silicon // J. Electrochem. Soc.– 1989.– Vol. 136, № 3.– P. 1717–1723.

69. Amaratunga G.A.J., Sabine K., Evans A.G.R. The modeling of ion implantation in a three-layer structure using the method of dose matching // IEEE Trans. Electron. Dev.– 1985.– Vol. ED-32, № 9.– P. 1899–1907.

70. Буренков, А. Ф. Аналитический расчет ионной имплантации через окно в маске / А. Ф. Буренков, Ф. Ф. Комаров, М. М. Темкин // Микроэлектроника.– 1987.– Т. 16, №. 1.– С. 15-21.
71. Parab K.B., Yang D.H., Morris S.J., Tian S., Tasch A.F., Kamenitsa D., Simonton R., Magee C. Analysis of ultra-shallow doping profiles obtained by low energy ion implantation // J. Vac. Sci. Technol.– 1996.– Vol. B14, №. 1.– P. 293–299.
72. Буренков, А. Ф. 2-мерное локальное распределение ионно-имплантированных примесей / А. Ф. Буренков, А. Г. Курганов, Г. Г. Конопляник // Поверхность.– 1989. Т. 8.– С. 52-58.
73. Lorenz J., Kruger W., Barthel A. Simulation of the lateral spread of implanted ions: Theory / NASECODE-VI, Ed. Miller J.J.H., Boole Press.– 1989.– P. 513–520.
74. Ashworth D.G., Bowyer M.D.J., Owen R. Generating ion implantation profiles in one and two dimensions. 1: Density functions // J. Phys. D: Appl. Phys.– 1996. Vol. 29.– P. 1274–1285.
75. Bowyer M.D.J., Ashworth D.G., Owen R. Representation of ion implantation distributions in two and three dimensions // J. Phys. D: Appl. Phys.– 1991.– Vol. 24.– P. 1120–1125.
76. Griffin P.B., Plummer J.D. Process physics determining 2-D impurity profiles in VLSI devices / International Electron Devices Meeting.– 1986. Dec.– P. 522–525.
77. Hobler G., Langer E., Selberherr S. Two-dimensional modeling of ion implantation with spatial moments // Solid-State Electronics.– Vol. 30.– P. 445–447.
78. Фирсов, О. Б. Потенциал межатомного взаимодействия при малых и средних энергиях столкновений / О. Б. Фирсов // Журнал экспериментальной и теоретической физики.– 1957.– Т. 34.– С. 947–951.
79. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids.– 1985.– Vol. 1 / Pergamon Press.
80. Fichtner W. Process simulation. / VLSI technology. Ed. by Sze S.M. McGraw-Hill.– 1988.– 422 p.
81. Фирсов, О. Б. Качественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях / О. Б. Фирсов // Журнал экспериментальной и теоретической физики.– 1959.– Т. 36.– С. 1517–1521.
82. Brandt W., Kitagawa M. Effective stopping-power charges of swift ions in condensed matter // Phys. Rev.– 1982.– Vol. B 25, № 9.– P. 5631–5637.
83. Kamins T. Polycrystalline silicon for integrated circuit applications. 2d ed., Kluwer Academic Publishers.– 1998.
84. Технология СБИС. / под ред. С. Зи; Пер. с англ.– М. : Мир, 1986.– 453 с.
85. Weerts W.L., de Groon M.H.J., Marin G.B. The kinetics of the low-pressure chemical vapor deposition of polycrystalline silicon from silane // J. Electrochem. Soc.– 1998.– Vol. 145, № 4.– P. 1318–1330.
86. Hasimoto K., Miura K., Masuda T., Toma M., Sawai H., and Kawase M. Growth kinetics of polycrystalline silicon from silane by thermal chemical vapor deposition method // J. Electrochem. Soc.– 1990.– Vol. 137, № 3.– P. 1000–1007.
87. Jensen K.F., and Graves D.B. Modeling and analysis of low pressure CVD reactors // J. Electrochem. Soc.– 1983.– Vol. 130, № 9.– P. 1950–1957.

88. Griffith S.K., Nilson R.H. Deposition uniformity, particle nucleation, and the optimum conditions for chemical vapor deposition in multiwafer furnances // J. Electrochem. Soc.– 1997.– Vol. 144, № 4.– P. 1399–1410.

89. Yeckel A., Middleman S. Strategies for the control of deposition uniformity in CVD // J. Electrochem. Soc.– 1990.– Vol. 137, № 1.– P. 207–212.

90. Learn A.J., Foster D.W. Deposition and electrical properties of in situ phosphorus-doped silicon films formed by low-pressure chemical vapor deposition // J. Appl. Phys.– 1986.– Vol. 61, № 5.– P. 1898–1904.

91. Coltrin M.E., Kee R.J., Miller J.M. A mathematical model of silicon vapor deposition. Further refinements and the effects of thermal diffusion // J. Electrochem. Soc.– 1986.– Vol. 133, № 6.– P. 1206–1213.

92. Yeckel A., Middleman S. A model of the effect of diffusion and convection on the rate and uniformity of deposition in a CVD reactor // J. Electrochem. Soc.– 1986.– Vol. 133, № 9.– P. 1951–1956.

93. Kuiper A.E., van den Brekel C.J., de Groot J., Veltcamp G.W. Modeling of low pressure CVD process // J. Electrochem. Soc.– 1982.– Vol. 129, № 10.– P. 2288–2291.

94. Нелаев, В. В. Моделирование процесса осаждения поликремния из газовой фазы / В. В. Нелаев, А. С. Турцевич // Термодинамика и материаловедение полупроводников : материалы IV Всес. конф. / Акад. наук СССР. Гос. комитет по нар. обр. СССР.– М.,– 1989.– Ч.2.– С. 403.

95. Нелаев, В. В. Физическое моделирование процессов осаждения, термообработки и свойств пленки поликремния / В. В. Нелаев // Физика и технология тонких полупроводниковых пленок : тез. докл. III Всес. научн. конф. / Акад. наук СССР, Научный совет по проблеме «Физико-химические основы полупроводникового материаловедения», Ивано-Франковский гос. пед. ин-т, ПО «Родон».– Ивано-Франковск.– 1990.– С. 43.

96. Jensen K.F., Graves D.B. Modeling and analysis of low pressure CVD reactors // J. Electrochem. Soc.– 1983.– Vol. 130, № 9.– P. 1950–1957.

97. <http://www.icts-bsuir.by.ru>.

98. Sagara K., Vurakami E. Effect of grain size on conduction mechanism in polycrystalline silicon // Appl. Phys. Lett.– 1987.– Vol. 51, № 25.– P. 2139–2141.

99. Hillert M. Comments on grain growth // Scripta Met.– 1988.– Vol. 22, № 7.– P. 1035–1036.

100. Kim H.-J., Tompson C.V. Kinetic modeling of grain growth in polycrystalline silicon films doped with phosphorus or boron // J. Electrochem. Soc.– 1988.– Vol. 135, № 9.– P. 2312–2319.

101. Mandurah M., Saraswat K.C., Helms C.R., Kamins T.I. Dopant segregation in polysilicon // J. Appl. Phys.– 1981.– Vol. 51, № 11.– P. 5755–5759.

102. Mandurah M., Saraswat K.C., Kamins T.I. Arsenic segregation in polycrystalline silicon // J. Appl. Phys.– 1980.– Vol. 36, № 8.– P. 683–689.

103. Van Vechten J.A., Thurmond C.D. Entropy of ionization and temperature variation of ionization levels of defects in semiconductors // Phys. Rev.– 1976.– Vol. B 14, № 8.– P. 3539–3550.

104. Зи, С. / Физика полупроводниковых приборов : В 2-х книгах. Кн.1. / С. Зи; Пер. с англ. – 2-е изд. перераб. и доп. – М. : Мир, 1984.– 456 с.
105. Kim H.-J., Tompson C.V. Kinetic modeling of grain growth in polycrystalline silicon films doped with phosphorus or boron // J. Electrochem. Soc.– 1988.– Vol. 135, № 9.– P. 2312–2319.
106. Борисенко, В. Е. Твердофазные процессы в полупроводниках при импульсном нагреве / В. Е. Борисенко; под ред. В. А. Лабунова.– Минск. : Навука і тэхніка, 1992.– 248 с.
107. Seto J. Y. N. The electrical properties of polycrystalline silicon // J. Appl. Phys.– 1975.– Vol. 46, № 12.– P. 5247–5254.
108. Vaccarani G., Ricco B., and Spadini G. Transport properties of polycrystalline silicon films // J. Appl. Phys.– 1978.– Vol. 49, № 11.– P. 5565–5570.
109. Mandurah M. M., Saraswat K. S., Kamins T. I. A model for conduction in polycrystalline silicon. Part 1: Theory // Proc. IEEE Trans. on Electron Devices.– 1981.– Vol. ED-28, № 10.– P. 1163–1171.
110. Murarka S.P. Silicides for VLSI applications / Academic Press, Orlando, Florida 32887.– 1983.– P. 60.
111. Conor S. Rafferty stress effects in silicon oxidation – Simulation and experiments / Integrated Circuits Laboratory, Department of Electrical Engineering, Stanford University, Stanford, CA 94305.– 1989.– P. 123–125.
112. Fu G., Chandra A. An analytical dishing and step height reduction model for chemical mechanical planarization (CMP) // Proc. IEEE Trans. on Semiconductor Manufacturing.– 2003.– Vol. 16, № 3.– P. 477–485.
113. ATLAS user's manual. Device simulation and software. Vol. 1 and 2. / SILVACO International.– December 2002.
114. Selberherr S. Analysis and simulation of semiconductor devices / Springer-Verlag, Wien-New York, 1984.
115. Arora N.D., Hauser, J.R., Roulston, D.J. Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature // IEEE Trans Electron Devices.– 1982.– Vol. ED-29, № 1. P. 292–295.
116. Dorkel J., Leturcq Ph. Carrier mobilities in silicon semi-empirically related to temperature doping and injection level // Solid-State Electronics.– 1981.– Vol. 24.– P. 821–825.
117. Klaassen D.B.M. A unified mobility model for device simulation – I. Model equations and concentration dependence // Solid State Electronics.– 1992.– Vol. 35, № 7. P. 953-959.
118. Klaassen D.B.M. A unified mobility model for device simulation – II. Temperature dependence of carrier mobility and lifetime // Solid State Electronics.– 1992.– Vol. 35, № 7.– P. 961–967.
119. Lombardi C. A physically based mobility model for numerical simulation of non-planar devices // IEEE Trans. on CAD.– 1988.– Vol. 7, № 4.– P. 1164–1169.
120. Darwish M. An improved electron and hole mobility model for general purpose device simulation // IEEE Trans. Elect. Dev.– 1997.– Vol. 44, № 9.– 1997.– P. 1529–1537.

121. Yamaguchi K. // A mobility model for carriers in the MOS inversion layer // IEEE Trans. Elect. Devices.– 1983.– Vol. ED-30.– P. 658–663.
122. Shin H., Tasch A.F., Maziar C.M., Banerjee S.K. // A new approach to verify and derive a transverse-field-dependent mobility model for electrons in MOS inversion layers // IEEE Trans. Electron Devices.– 1989.– Vol. ED-36, № 6.– P. 1117–1123.
123. Shin H., Yeric G.M., Tasch A.F., Maziar C.M. Physically-based models for effective mobility and local-field mobility of electrons in MOS inversion layers // IEEE Trans. on Electron Devices.–1999.– Vol. 46, № 88.– P.1749–1759.
124. Watt J.T. Improved surface mobility models in PISCES // Proc. Int. Conf on Computer-Aided Design of IC Fabrication Processes.– 1987.– Stanford University.
125. Shirahata M., Kusano H., Kotani N., Kusanoki S., Akasaka Y. A mobility model including the screening effect in MOS inversion layer // IEEE Trans. on Computer-Aided Design.– 1992.– Vol. CAD-11, № 9.– P. 1114–1119.
126. Caughey D.M., Thomas R. E. // Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field // Proc. IEEE.– 1967.– Vol. 55.– P. 2192–2193.
127. Shockley W., Read W.T. Statistics of the recombination of holes and electrons // Phys. Rev.– 1952.– Vol. 87.– P. 835–842.
128. Hall R.N. Electron and hole recombination in germanium // Phys. Rev.– 1952.– Vol. 87.– P. 387–342.
129. Roulston D.J., Arora N.D., Chamberlain S.G. Modeling and measurement of minority-carrier lifetime versus doping in diffused layers of n-p silicon diodes // IEEE Trans. on Electron Devices.– 1982.– Vol. ED-29, № 2.– P. 284–291.
130. Fossum J.G., Lee D.S. A physical model for the dependence of carrier lifetime on doping density in nondegenerate silicon // Solid State Electronics.– 1982.– Vol. 25, № 2.– P. 741–747.
131. Klaassen D. B. M., Slotboom J. W., De Graaff H. C. Unified apparent band-gap narrowing in n- and p-type silicon // Sol. St. Electronics.– 1992.–Vol. 35, № 2.– P. 125–129.
132. Beattie A.R., White A.M. An analytical approximation with a wide range of applicability for electron initiated Auger transitions in narrow-gap semiconductors // J. Appl. Phys.– 1996.– Vol. 79, № 12. P. 802–813.
133. Chynoweth A.G. Ionization rates for electrons and holes in silicon // Phys. Rev.– 1958.– Vol. 109, № 2.– P. 1537–1540.
134. Mars P. Temperature dependence of avalanche breakdown voltage in p-n junctions // International Journal of Electronics.– 1993. Vol. 32, № 1.– P. 23–27.
135. Valdinoci M., Ventura D., Vecchi M.C., Rudan M., Baccaran G.i, Illien F., Stricker A. A., Zullino L. The impact-ionization in silicon at large operating temperature / 1999. Proc. SISPAD '99. Kyoto, Japan.
136. Grant W.N. Electron and hole ionization rates in epitaxial silicon at high electric fields // Solid-State Electronics.– 1973.– Vol. 16.– P. 1189–1203.
137. Baraff G.A. Distribution functions and ionization rates for hot electrons in semiconductors // Appl. Phys. Rev.– 1973.– Vol. 128, № 5.– P. 2507–2517.
138. Crowell C.R., Sze S.M. // Temperature dependence of avalanche multiplication in semiconductors // Appl. Phys. Letters.– 1966.– Vol. 9.– P. 242–244.

139. Katayama K., Toyabe T. // A new hot carrier simulation method based on full 3D hydrodynamic equations.– 1989.– Proc. IEDM-89, Technical Digest.– P. 135–137.
140. Fiegna C., Venturi F. Simple and efficient modelling of EPROM writing // IEEE Trans. on Elect. Dev.– 1991.– Vol. ED-38.– P. 603–610.
141. Concannon A., Piccinini F., Mathewson A., Lombardi C. The numerical simulation of substrate and gate currents in MOS and EPROMs // IEEE Proc. IEDM. 1995. P. 289–292.
142. Hurkx G.A.M, Klaassen D.B.M., Knuvers M.P.G. New recombination model for device simulation including tunneling // IEEE Trans. on Electron Devices.– 1992.– Vol. ED-39, № 2.– P. 331–338.
143. Klaassen D.B.M. Physical modeling for bipolar device simulation / Simulation of Semiconductor Devices and Processes. Ed. by Fichtner W., Aemmer D. Harting-Gorre.– 1991.– Vol.– 4. P. 23–43.
144. Tam S., Ko P.-K., Hu C. // Lucky-electron model of channel hot-electron injection in MOSFET's // IEEE Trans. on Electron Devices.– 1984.– Vol. ED-31, № 9.– P. 2775–2781.
145. Cassi C., Ricco B. An analytical model of the energy distribution of hot electrons // IEEE Trans. on Electron Devices.– 1990.– Vol. 37, № 5.– P. 1514–1521.
146. Wada M. A two-dimensional computer simulation of hot carrier effects in MOSFETs // Proc. IEDM Tech. Dig.– 1981.– P. 223–225.
147. Law M.E. Process modeling for future technologies // IBM J. Research and Developments. 2002. Vol. 46, No. 2/3. – P. 330–346.
148. International Technology Roadmap for Semiconductors, 2006 Update. Modeling and Simulation. www.itrs.net/Links/2006Update/FinalToPost/Update.pdf.
149. Комаров, Ф. Ф. Формирование скрытых изолирующих слоев нитрида кремния в кремнии при высокоэнергетической интенсивной имплантации азота / Ф. Ф. Комаров, А. Ф. Комаров, С. А. Петров // Микроэлектроника. – 2002.– Т. 31, №5. – С. 361–366.
150. Pop E., Goodson K.E., Dutton R.W. Analytic band Monte Carlo model for electron transport in Si including acoustic and optical phonon dispersion // J. Appl. Phys.– 2004. – Vol. 96, № 10. – P. 4998–5005.

В приложении приводится пример файла задания на моделирование типичного технологического маршрута формирования структуры nМОП-транзистора и некоторые результаты, характеризующие модели технологических операций и модели для расчета электрических характеристик прибора, используемые в программном комплексе компании Silvaco. Правила создания файла задания на моделирование технологии в модуле ATHENA приведены в работе [13].

Рассматриваемый технологический маршрут формирования LDD структуры nМОП-транзистора (таблица П.1) является частью маршрута формирования КМОП-структуры, подробно рассмотренного в подразд. 1.1. В связи с этим при описании рассматриваемого примера будут приводиться ссылки на соответствующие этапы формирования nМОП-транзистора в общем маршруте создания КМОП-структуры.

В приведенном файле отсутствуют директивы на проведение моделирования операций осаждения/травления фоторезиста и литографии, поскольку эти операции не влияют на формирование геометрии моделируемой структуры и на профили распределения легирующих примесей в ней.

Таблица П.1

Файла задания на моделирование типичного технологического маршрута формирования LDD структуры nМОП-транзистора

Номер строки	Содержание строки в файле задания на моделирование
1	2
1	go athena
2	set cd=0.8
3	line x loc=-0.5 spac=0.1
4	line x loc=-0.4 spac=0.05
5	line x loc=-0.2 spac=0.01
6	line x loc=0.0 spac=0.1
7	line x loc=0.2 spac=0.01
8	line x loc=0.4 spac=0.05
9	line x loc=0.5 spac=0.1
10	line y loc=0.0 spac=0.001
11	line y loc=0.2 spac=0.005
12	line y loc=0.5 spac=0.05
13	line y loc=0.8 spac=0.15
14	line y loc=5 spac=1
15	line y loc=10 spac=5
16	init orientation=100 c.boron=1e14
17	diffus time=30 temp=1000 dryo2 press=1.00 hcl=3
18	etch oxide thick=0.02
19	implant boron dose=8e12 energy=100 pearson
20	diffus temp=950 time=100 weto2 hcl=3
21	diffus time=50 temp=1000 t.rate=4.000 dryo2 press=0.10 hcl=3
22	diffus time=220 temp=1200 nitro press=1
23	diffus time=90 temp=1200 t.rate=-4.444 nitro press=1
24	etch oxide all

1	2
25	diffus time=20 temp=1000 dryo2 press=1 hcl=3
26	etch oxide all
27	diffus time=11 temp=925 dryo2 press=1.00 hcl=3
28	implant boron dose=9.5e11 energy=10 pearson
29	depo poly thick=0.25 div=10
30	etch poly left pl.x=-0.25
31	etch poly right pl.x=0.25
32	stretch poly length="\$cd" div=6
33	method fermi compress
34	diffuse time=3 temp=900 weto2 press=1.0
35	implant phosphor dose=3.0e13 energy=20 pearson
36	depo oxide thick=0.120 div=8
37	etch oxide dry thick=0.120
38	implant arsenic dose=5.0e15 energy=50 pearson
39	method fermi compress
40	diffuse time=1 temp=900 nitro press=1.0
41	etch oxide right pl.x=("\$cd"/2+0.1)
42	etch oxide left pl.x=- (\$"cd"/2+0.1)
43	deposit alumin thick=0.03 div=2
44	etch aluminum start x=- (\$"cd"/2+0.15) y=-10.00
45	etch cont x=("\$cd"/2+0.15) y=-10.00
46	etch cont x=("\$cd"/2+0.15) y=10.00
47	etch done x=-(\$"cd"/2+0.15) y=10.00
49	structure outfile=moslex15_0.str
50	tonyplot moslex15_0.str -set moslex15_0.set
51	quit

Ниже построчно описываются назначение и содержание предложений и директив в обсуждаемом файле.

1 – вызов модуля ATHENA, предназначенного для моделирования технологического маршрута.

2 – объявление внутренней переменной *cd* в качестве параметра, с помощью которого в дальнейшем будет задана длина канала (равного 0,8 мкм) моделируемого МОП-транзистора.

3–9 – задание неравномерной расчетной сетки по оси *x* (вдоль поверхности подложки). Моделируемая область имеет *x*-координаты от –0,5 мкм до +0,5 мкм (размерность координат и шага сетки – микроны). Начало координат совпадает с серединой моделируемого транзистора (рис П.1). Шаг расчетной сетки (*space*) задается равным 0,1 мкм в области ($-0,5 \leq x \leq -0,4$); в области ($-0,4 < x \leq -0,2$) *space* = 0,05 мкм; в области ($-0,2 < x \leq 0$) *space* = 0,01 мкм. Такие же значения шага сетки заданы в области, симметричной относительно $x = 0$.

10–15 – задание неравномерной расчетной сетки по оси *y* (вдоль нормали к поверхности подложки): *space* = 0,001 мкм в области ($0 \leq x \leq 0,2$); *space* = 0,005 мкм в области ($0,2 < x \leq 0,5$); *space* = 0,05 мкм в области ($0,5 < x \leq 0,8$); *space* = 0,15 мкм в области ($0,8 < x \leq 5$); *space* = 1,0 мкм в области ($5 < x \leq 10$).

16 – задание параметров исходной подложки (кристаллографическая ориентация $\langle 100 \rangle$, равномерное легирование бором с концентрацией 10^{14} см^{-3}).

17 – директива на моделирование окисления подложки для создания маски (температура – $1000 \text{ }^\circ\text{C}$, длительность – 30 мин, среда – сухой кислород с 3%-ным содержанием молекул соляной кислоты, давление – 1 атм). Расчетная толщина окисла составляет 0,0397 мкм. (Эта операция соответствует операции 2, описанной в подразд. 1.1, стр. 13).

18 – директива на моделирование травления окисла до толщины, равной 0,02 мкм (операция 6, стр. 13).

19 – директива на моделирование ионной имплантации бора через оставшийся после травления слой окисла (операция 11, стр. 15).

20–23 – директивы на моделирование высокотемпературной разгонки бора в 4 этапа: вначале окисление в атмосфере влажного кислорода (толщина окисла 0,4039 мкм), затем – в атмосфере влажного кислорода (толщина окисла 0,4141 мкм) и последующие 2 этапа – в нейтральной атмосфере (операция 16, стр. 16).

24 – директива на моделирование стравливания всего слоя окисла (операция 17, стр. 16).

25 – директива на моделирование окисления в атмосфере сухого кислорода с добавкой соляной кислоты при давлении 1 атм.). Расчетная толщина окисла 0,316 мкм.

26 – директива на моделирование стравливания всего слоя окисла.

27 – директива на моделирование окисления в атмосфере сухого кислорода с добавкой соляной кислоты при давлении 1 атм. (формирование подзатворного окисла). Расчетная толщина окисла 0,001 мкм (операция 42, стр. 23).

28 – директива на моделирование ионной имплантации бора (операция 37, стр. 22).

29 – директива на моделирование осаждения слоя поликремния толщиной 0,25 мкм. Здесь и далее параметр div задает количество слоев осажденного материала (эквивалентно заданию пространственной сетки вдоль оси y) (операция 43, стр. 23).

30–31 – директивы на моделирование травления всего слоя поликремния влево, начиная с координаты $x = -0,25$, и вправо, начиная с координаты $x = 0,25$ (операция 48, стр. 24).

32 – «растягивание» слоя поликремния до длины, равной значению ранее объявленного параметра cd .

33–34 – директива на моделирование окисления в атмосфере влажного кислорода при давлении 1 атм. Расчетная толщина окисла 0,0155 мкм. Используется модель FERMI при расчете диффузионного перераспределения примесей и модель COMPRESS при расчете толщины и формы окисла.

35 – директива на моделирования ионной имплантации бора. Используется модель PEARSON при расчете постимплантационного распределения примесей (операция 51, стр. 25).

36 – директива на моделирование осаждения толстого (0,12 мкм) слоя окисла кремния (операция 52, стр. 26).

37 – директива на моделирование травления окисла (операция 53, стр. 27).

38 – директива на моделирование ионной имплантации мышьяка (операция 57, стр. 27).

39–40 – директива на моделирование диффузионного перераспределения примесей (модель FERMI) в нейтральной (азот) среде. При расчете толщины и формы окисла используется модель COMPRESS (операция 61, стр. 28).

41–42 – директивы на моделирование травления всего слоя окисла вправо, начиная с координаты $x = -0,5$, и влево, начиная с координаты $x = 0,5$. (Операция 62, стр. 29).

43 – директива на моделирование осаждения алюминия. (Операция 63, стр. 29).

44–47 – директивы на моделирование травления алюминия.

48 – сохранение выходного файла, содержащего результирующую структуру, под именем `moslex15_0.str`.

49 – вызов графического постпроцессора TONYPLOT для вывода на экран результирующей структуры моделируемого прибора.

50 – конец задания на моделирование.

Некоторые результаты моделирования технологии и электрических характеристик МОП-транзистора приведены на рис. П.1–П.8.

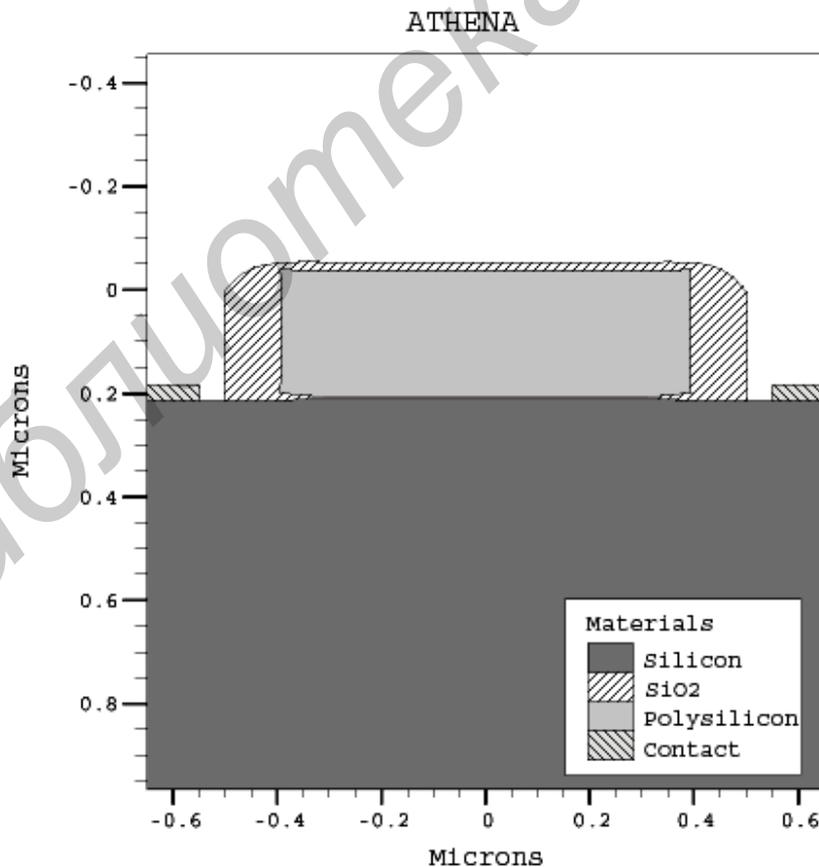


Рис. П.1. Результирующая двумерная структура МОП-транзистора

ATHENA

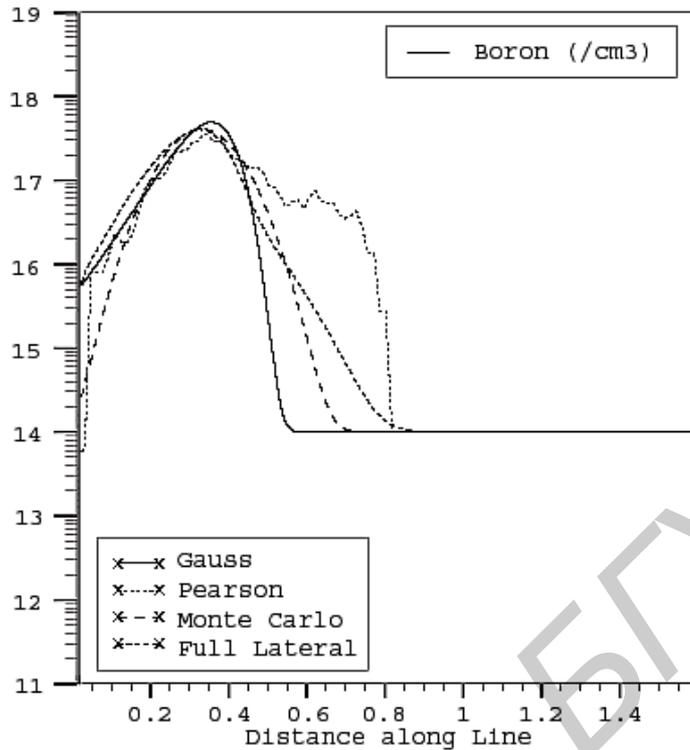


Рис. П.2. Профили распределения бора на этапе формирования р-кармана (строка 19, табл. П.1), рассчитанные с использованием различных моделей имплантации

ATHENA

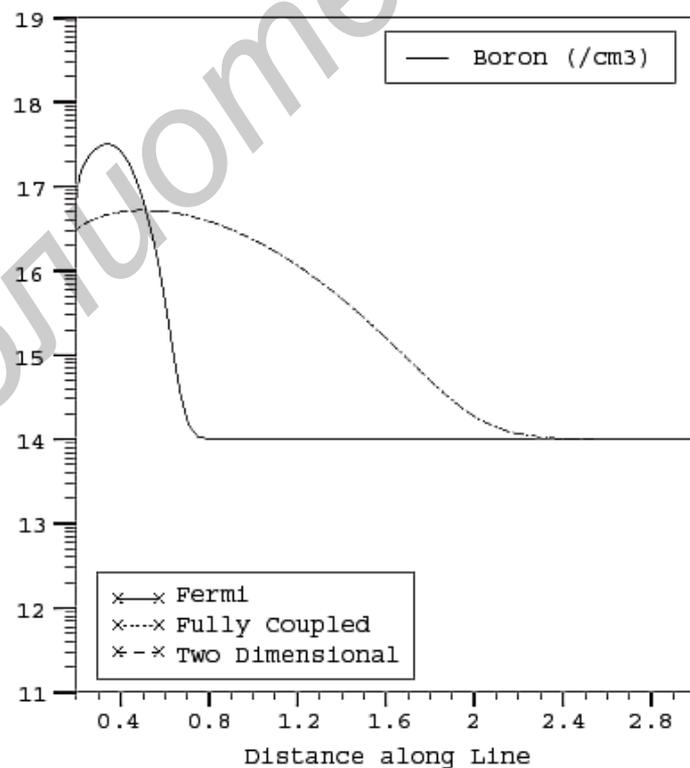


Рис. П.3. Профили распределения бора на этапе формирования р-кармана после 1-го отжига (строка 20, табл. П.1), рассчитанные с использованием различных моделей диффузионного перераспределения примесей (стр. 49–55)

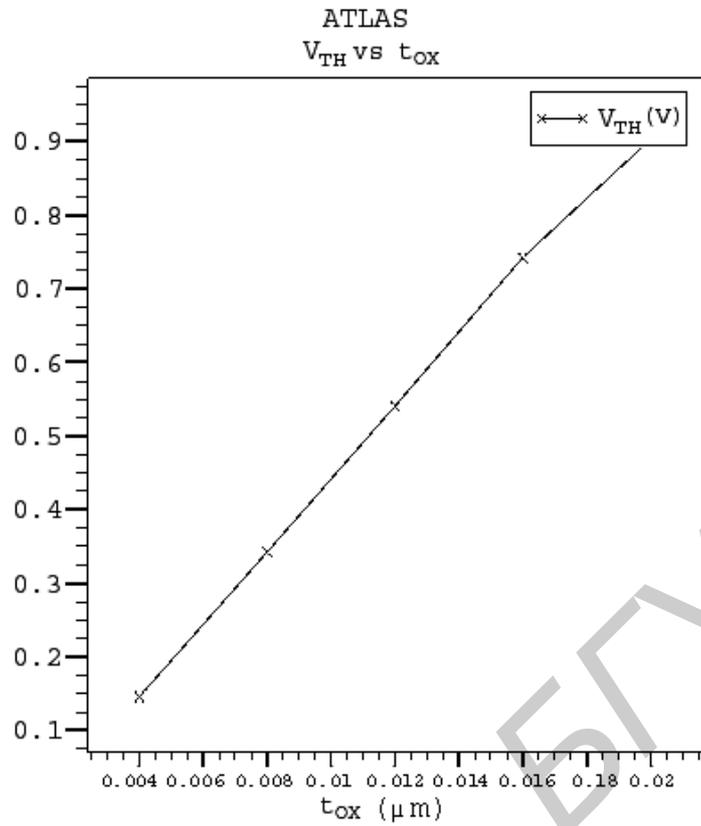


Рис. П.4. Зависимость порогового напряжения V_{TH} моделируемого nМОП-транзистора от толщины t_{ox} подзатворного окисла

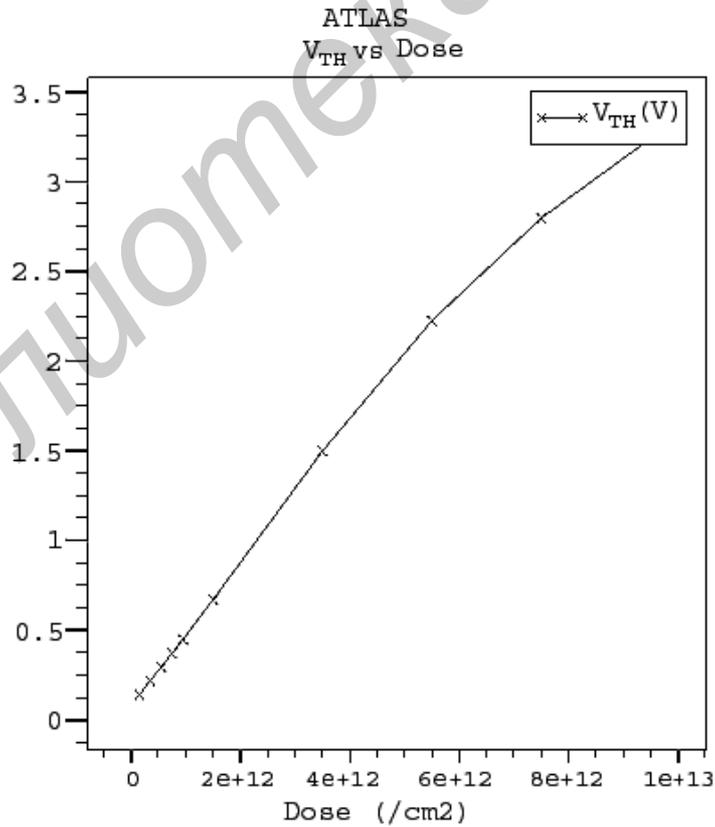


Рис. П.5. Зависимость порогового напряжения V_{TH} моделируемого nМОП-транзистора от дозы (Dose) имплантации бора в область канала (строка 28, табл. П.1)

ATLAS

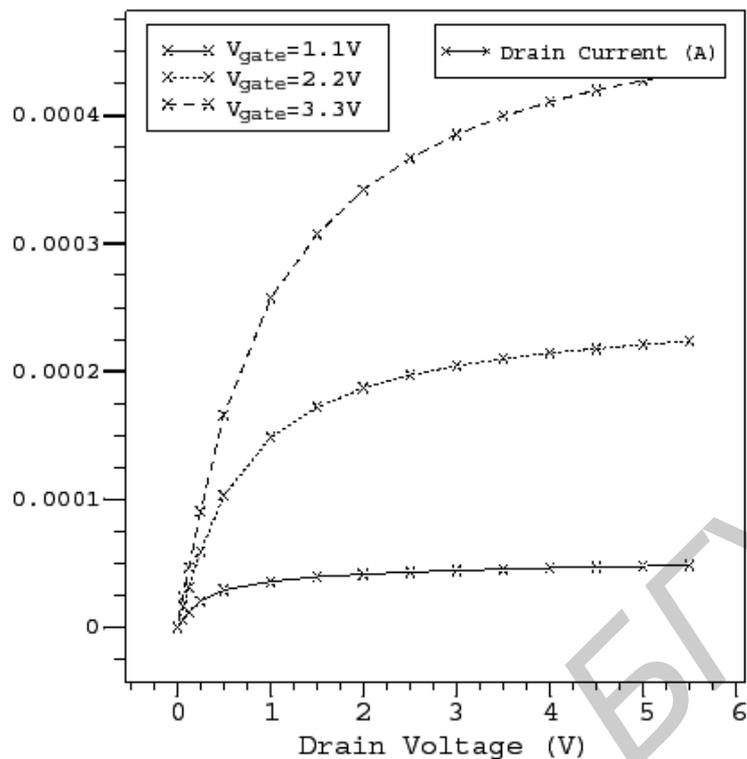


Рис. П.6. Зависимость тока стока (Drain Current) от напряжения на стоке (Drain Voltage) для различных значений напряжения на затворе (V_{gate}) моделируемого nМОП-транзистора

ATLAS

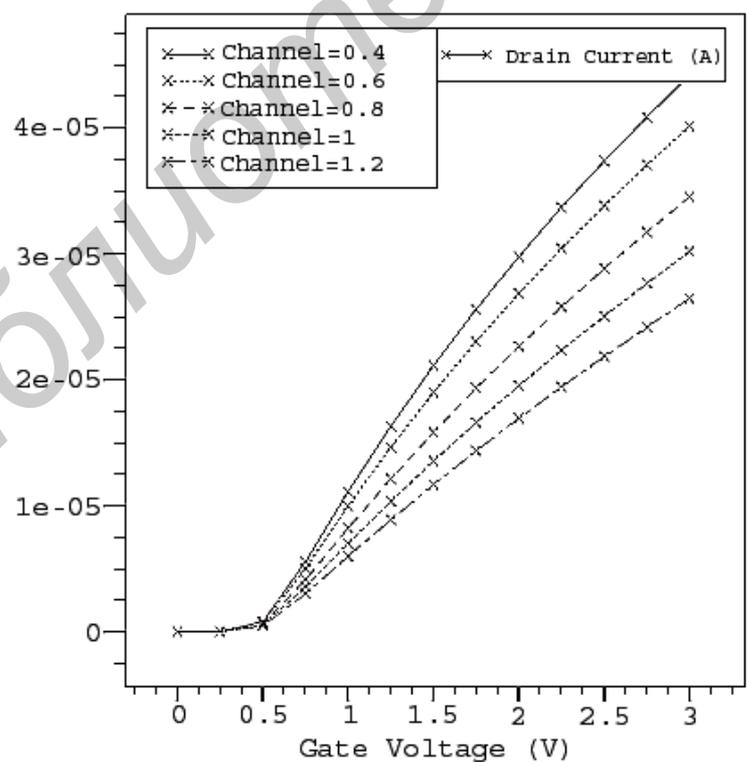


Рис. П.7. Зависимость тока стока (Drain Current) от напряжения на затворе (Drain Voltage) для различных значений длины канала (от 0,4 до 1,2 мкм) моделируемого nМОП-транзистора

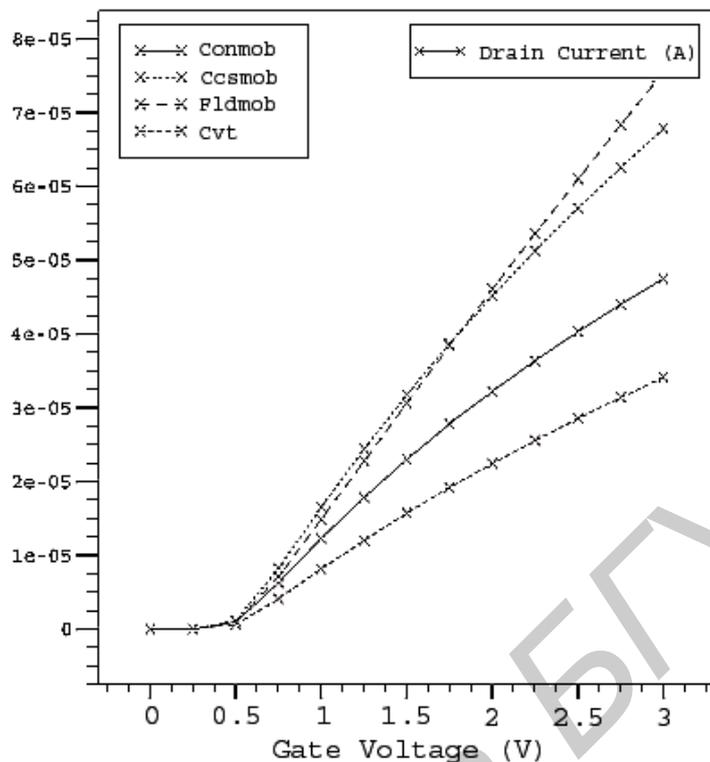


Рис. П.8. Зависимости тока стока (Drain Current) от напряжения на затворе (Drain Voltage) моделируемого nMOS-транзистора, рассчитанные с использованием различных моделей подвижности носителей заряда:

CONMOB – модель, учитывающая только концентрационную зависимость подвижности (стр. 161–162);

CCSMOB – модель Доркеля-Летурка, учитывающая зависимость подвижности от концентрации примесей и температуры (стр. 162–163);
 CVT – модель Ломбарди, учитывающая зависимость подвижности носителей от концентрации примесей, температуры, а также от эффектов параллельного и продольного электрических полей (стр.167–169);

FLDMOB – модель, учитывающая зависимость подвижности носителей от параллельного электрического поля (стр. 174–175)

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

High Density Plasma, HDP.....	14	построение двухмерных профилей	91
LDD-технология.....	25	приближении бинарных столкновений ..	95
LOCOS-окисление	77	электронное торможение	97
LOCOS-процесс	13	ядерное торможение	96
LPCVD-процесс	27	КМОП-технология.....	11
Shallow Trench Isolation, STI.....	14	ловушки.....	151, 156
SPISCES2.....	9	масштабируемость.....	29
SUPREM.....	8	модель проводимости	
Technology Computer Aided Design, TCAD	35	поликристаллического кремния	122
влияние электрического поля на		модель проницаемости	66
заряженные вакансии	56	окисление	
диффузия		аналитическая модель птичьего клюва ..	80
Oxidation Enhanced Diffusion.....	47, 52	модель COMPRESS.....	76
Rapid Thermal Annealing.....	59	параболическая и линейная константы	
Transient Enhanced Diffusion	52, 59	скорости роста окисла	70
вакансий.....	56	теория Дила–Гроува.....	69
междоузлий.....	53	осаждение	
механизмы в поликремнии.....	67	Low Pressure Chemical Vapor Deposition,	
модели, учитывающие высокий уровень		LPCVD-процесс	101
концентрации примесей	60	из газовой фазы при низком давлении ..	13
модель CNET	61	моделирование с использованием метода	
модель двухмерная.....	47	Монте-Карло	135
модель диффузии при быстром		модель двунаправленного осаждения ..	132
термическом отжиге	59	модель конического осаждения.....	134
модель диффузии связанных пар		модель однонаправленного осаждения	131
‘примесный атом–точечный дефект’	47	модель планетарного осаждения	133
модель диффузии связанных пар		модель полусферического осаждения ..	133
‘примесь–точечный дефект’	57	модель струны	129
примесей	52	модель химического осаждения из	
стандартная диффузионная модель ..	47	газовой фазы	131
закон		поликремния из газовой фазы при низком	
Мура.....	5	давлении.....	101
Фика	70	плотность	
инжекция		сегрегации	69
модель инъекции горячих носителей..	191	состояний.....	147, 160
модель инъекции Конканнона.....	194	подвижность	
модель Фиегна.....	195	в инверсионных слоях.....	171
ионизация		модель Кафи–Томаса	180
примесей	150	модель Ломбарди	172
ударная.....	185	модель подвижности при низком уровне	
ионная имплантация		поля	165
Binary-Collision Approximation, BCA.....	95	модель Таша	174
в аморфные материалы	100	модель Уатта	177
в многослойную структуру	89	модель Ширата.....	171
межатомный потенциал	97	модель Ширахаты	178
метод Монте-Карло	93	модель Ямагучи.....	173
метод коррекции моментов.....	90	носителей.....	161
метод моментов	86	подзатворный диэлектрик	6, 23
метод Монте-Карло	86, 101	поликремний.....	24
метод подгонки к дозе.....	89	полирование	

Chemical-Mechanical Polishing, CMP.....	15	изотропная модель травления.....	137
модель жесткого полирования.....	140	модель плазменного травления.....	139
модель мягкого полирования.....	141	модель реактивного ионного травления	
химико-механическое полирование.....	15, 140	137
пространственный заряд.....	150	модель травления с использованием	
разгонка.....	16, 19	метода Монте-Карло.....	139
распределение		модель травления, ускоренного	
Гаусса.....	38	легированием.....	139
Гаусса, для ионно-имплантированных		туннелирование	
примесей.....	86	модель Фаулера–Нордгейма.....	191
Пирсона.....	87	с участием ловушек.....	153
рекомбинация		ударная ионизация	
барьер Пула–Френкеля.....	183	модель Вальдиночи.....	186
модель Клаасена.....	182	модель Гранта.....	187
модель рекомбинации Шокли–Рида–		модель Зельбергера.....	186
Холла.....	181	модель Конканнона.....	189
объемная на дислокационных петлях...	58	модель Кроуэлла–Зи.....	188
оже–рекомбинация.....	183	модель Тоябе.....	189
поверхностная.....	185	модель Чиновета.....	186
учет ловушек в моделях рекомбинации		уравнение	
.....	153	диффузионно–дрейфовое транспортное	
рост зерна поликремния		уравнение.....	144
диффузионная модель роста зерна.....	111	непрерывности.....	49, 143
кинетическая модель подвижности		Пуассона.....	48, 143
границы зерна.....	112	энергетического баланса.....	157
сдвоенное распределение Пирсона.....	88	уровень Ферми.....	50, 114
скрытый слой.....	18	функция Гаусса для бокового	
собственная концентрация носителей.....	148	распределения.....	92
статистика		функция ошибок.....	40
Больцмана.....	44, 145, 159	ширина запрещенной зоны.....	148
Ферми–Дирака.....	115, 145	Шоттки	
сужение ширины запрещенной зоны.....	149	контакты.....	162
травление		эффект Пула–Френкеля.....	155

АББРЕВИАТУРЫ АНГЛОЯЗЫЧНЫХ ТЕРМИНОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

- AC (Alternating Current) – переменный ток
A/C (Amorphous/Crystalline interface in Si) – граница раздела «аморфный–кристаллический кремний»
AES (Auger Electron Spectroscopy) – Оже электронная спектроскопия
AFM (Atomic Force Microscopy) – атомная силовая микроскопия
APCVD (Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition) – химическое осаждение из газовой фазы при атмосферном давлении
AR (Aspect Ratio) – аспектное соотношение
ARDE (Aspect Ratio Dependent Etching) – травление с учетом величины аспектного соотношения
BICMOS (Bipolar CMOS devices on the same chip) – биполярные и КМОП-приборы на одном кристалле
BJT (Bipolar Junction Transistor) – биполярный транзистор на p-n-переходе
BOE (Buffered Oxide Etch) – травление буферного окисла
BPSG (BoroPhosphoSilicate Glass) – бор-фосфор-силикатное стекло
CVD (Chemical Vapor Deposition) – химическое осаждение из газовой фазы
CZ (Czochralski Crystal Growth Method) – выращивание кристаллов по методу Чохральского
CMP (Chemical-Mechanical Polishing) – химико-механическое полирование
DC (Direct Current) – постоянный ток
DOP (Degree Of Planarization) – степень планаризации
DRAM (Dynamic Random-Access Memory) – динамическая память со случайной выборкой
DUV (Deep UltraViolet) – глубокий ультрафиолет
E-BEAM (Electron BEAM) – электронный пучок
EBSD (Electron Back-Scattering Diffraction) – дифракция электронов с обратным рассеянием
ECR (Electron Cyclotron Resonance) – электронный циклотронный резонанс
EM (ElectroMigration) – электромиграция
ERF (ERror Function) – функция ошибок
ERFC (Error Function Complementary) – комплементарная функция ошибок
FET (Field Effect Transistor) – полевой транзистор
FIB (Focused Ion Beam) – фокусированный ионный пучок
FTIR (Fourier Transform InfraRed spectroscopy) – инфракрасная спектроскопия, основанная на преобразовании Фурье
FZ (Float-Zone crystal growth method) – выращивание кристаллов методом зонной плавки
HDP (High-Density Plasma) – плазма с высокой плотностью
HF (High Frequency) – высокая частота
IC (Integrated Circuit) – интегральная схема
IMD (InterMetal Dielectric) – интерметаллический диэлектрик

IMP (Ionized Metal Deposition, то же, что и IPVD) – метод осаждения ионизированного металла

IPVD (Ionized PVD, то же, что и IMP) – метод осаждения ионизированного металла

LDD (Lightly Doped Drain) – технологический метод формирования низколегированного стока

LF (Low Frequency) – низкая частота

LOCOS (LOCAl Oxidation of Silicon) – локальное окисление кремния

LPCVD (Low-Pressure Chemical Vapor Deposition) – химическое осаждение из газовой фазы при низком давлении

LSS (Lindhard, Scharff, Schiott) – теория имплантации, разработанная Линхардом, Шарфом и Шюоттом

MBE (Molecular Beam Epitaxy) – молекулярно-лучевая эпитаксия

MOS (Metal Oxide Semiconductor) – структура металл-окисел-полупроводник (МОП)

MTTF (Median Time To Failure) – среднее время на отказ

NMOS (N channel MOS transistor) – n-канальный МОП-транзистор

NPN – npn-переход

NTD (Neutron Transmutation Doping) – метод легирования посредством нейтронной трансмутации

NTRS (National Technology Roadmap for Semiconductors) – Американское агентство по прогнозированию развития полупроводниковой промышленности

OED (Oxidation Enhanced Diffusion) – диффузия примесей, усиленная в процессе окисления кремния

OISF (Oxidation-Induced Stacking Fault) – образование дефектов упаковки при окислении

PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition) – химическое осаждение из газовой фазы в плазме

PMOS (P-channel MOS transistor) – p-канальный МОП-транзистор

PSG (PhosphoSilicate Glass) – фосфор-силикатное стекло

PVD (Physical Vapor Deposition) – физическое осаждение из газовой фазы

QBD (Charge to BreakDown) – заряд, необходимый для пробоя

RBS (Rutherford BackScattering) – Резерфордское обратное рассеяние

RCA (a wafer Cleaning process) – технологический процесс очистки подложки

RF (Radio Frequency) – радиочастота (обычно 13,56 Гц)

RIE (Reactive Ion Etching) – реактивное ионное травление

RTA (Rapid Thermal Annealing) – быстрый термический отжиг

RTO (Rapid Thermal Oxidation) – быстрое термическое окисление

SACVD (SubAtmospheric Chemical Vapor Deposition) – химическое осаждение из газовой фазы при субатмосферном давлении

SCM (Scanning Capacitance Microscope) – сканирующий емкостный микроскоп

SEM (Scanning Electron Microscopy) – сканирующий электронный микроскоп

SIA (Semiconductor Industry Association) – американская ассоциация полупроводниковой промышленности

SIMOX (Silicon process for separation by IMplanted OXygen) – технологический процесс формирования КНИ-структуры посредством имплантации кислорода

SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry) – вторичная ионная масс-спектрометрия

SOI (Silicon On Insulator) – КНИ-структура («Кремний На Изоляторе»)

SPEEDIE (Stanford Profile Emulator for Etching and Deposition in Ic Engineering) – программа для эмуляции профилей распределения примесей в процессах травления и осаждения при проектировании интегральных микросхем, разработанная в Стенфордском университете

SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis) – программа для моделирования аналоговых схем

SRH (Shockley, Read, Hall Recombination) – модель рекомбинации носителей заряда Шокли–Рида–Холла

STM (Scanning Tunneling Microscope) – сканирующий туннельный микроскоп

SUPREM (Stanford University PRogram Emphased to technology modeling in Microelectronics) – программный комплекс для моделирования технологических процессов микроэлектроники, разработанный в Стэнфордском университете

TCAD (Technology Computer-Aided Design) – системы автоматизированного проектирования технологии в микроэлектронике

TED (Transient-Enhanced Diffusion) – диффузия легирующих примесей, усиленная в переходных процессах

TEM (Transmission Electron Microscopy) – трансмиссионная электронная микроскопия

TXRF (Total X-Ray Fluorescence) – полная рентгеновская флуоресценция

ULSI (UltraLarge-Scale Integration) – интегральные микросхемы со сверхвысокой (более 10^6 элементов на кристалл) степенью интеграции

UV (UltraViolet light) – ультрафиолетовое излучение (длина волны $< 0,2-0,4$ мкм)

VLSI (Very Large Scale Integration circuit) – сверхбольшие (СБИС) интегральные микросхемы (до 10^5 элементов на кристалл)

XES (X-ray Electron Spectroscopy) – рентгеновская электронная спектроскопия

XPS (X-ray Photo-electron Spectroscopy) – рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

XRF (X-Ray Fluorescence) – рентгеновская флуоресценция

XRD (X-Ray Diffraction) – рентгеновская дифракция

Учебное издание

Нелаев Владислав Викторович
Стемпницкий Виктор Романович

ОСНОВЫ САПР В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

Учебное пособие

Редактор *Т. Н. Крюкова*
Корректор *М. В. Тезина*

Подписано в печать 15.08.2008. Формат 60x84 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс».
Печать ризографическая. Усл. печ. л. 12,79. Уч.-изд. л. 12,0. Тираж 100 экз. Заказ 489.

Издатель и полиграфическое исполнение: Учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»
ЛИ №02330/0056964 от 01.04.2004. ЛП №02330/0131666 от 30.04.2004.
220013, Минск, П. Бровки, 6