

Aspecte generale ale simulării proceselor tehnologice în microelectronică (partea I)

(General Aspects of Simulation Processes in Microelectronics (Part 1))

(Full text in Romanian)

Eugen Ștefan LAKATOȘ¹

¹Universitatea „Valahia” Targoviște, România

Abstract

The paper presents the main aspects of the concept of modeling in microelectronics, as a tool used to describe the electric behavior of devices and integrated circuits, before their manufacture, or technological processes required for manufacturing, by simulation. They highlight the main stages of technological design, in terms of simulation of a flow sheet: technological process simulation, devices simulation that make up the circuit and circuit simulation. From this point of view, there are three types of models: models of the processes that make up a flow sheet, models describing the electric behavior of semiconductor devices and integrated circuits. There are exposed, briefly, methods of solving differential equations, with examples of analytical solution (one-dimensional Poisson equation, in the case of ideal MOS structure) and numerical solution (grid generation, discretization of differential equations), exemplifying numerical solving of Poisson equation for electrostatic potential simulation in two-dimensional structure of the MOS transistor. 1D diffusion model is considered for modeling the diffusion of low and high impurities concentration, with an example of solving one-dimensional diffusion equation by finite difference method. It also gives the Newton-Raphson iteration method for linearization of nonlinear algebraic equations, using as an example the semiconductor diode I-V characteristic.

Keywords: technological process simulation, physical model, empirical model, analytical model, analytical solution, numerical solution

Received: December, 29, 2016

1. Scurt istoric

La 17 iunie 1948, a fost brevetată ideea *tranzistorului cu contact punctiform*, prin realizarea primului dispozitiv *microelectronic*. Astfel a fost „semnat” actul de naștere al unui domeniu tehnic absolut nou, cel al microelectronicii. Dispozitivul, numit inițial *dispozitiv de cristal (semiconductor) cu trei electrozi*, a fost inventat de o echipă formată din trei fizicieni, de la Bell Telephone Laboratories, William Bradford Shockley¹, Walter Houser Brattain și John Bardeen. Se realiza astfel primul amplificator cu corp solid din istoria electronicii. Autorii invenției, Bardeen (care a plecat de la ideea încercată de Shockley în anul 1939, cea a unui amplificator cu siliciu pe baza efectului de câmp, înlocuind siliciul cu germaniul) și Brattain (cel care a realizat baza experimentală), nu l-au inclus în cererea de brevet și pe Shockley. În aceste condiții, Shockley elaborează modelul care stă la baza explicării funcționării tranzistorului *bipolar*, *injecția de*

*purători minoritari*², brevetând, la 26 iunie 1948, *tranzistorul bipolar cu joncțiuni* (tranzistorul difuzat). Toți trei primesc premiul Nobel pentru fizică, în anul 1956, pentru *“cercetările în domeniul semiconductorilor și descoperirea efectului de tranzistor”*³.

Primul material semiconductor folosit, germaniul (Ge), a fost înlocuit cu siliciul (Si), ca material semiconductor de bază folosit încă în industria microelectronică. Motivele înlocuirii au fost: 1) inventarea în anul 1916 a metodei *Czochralski*⁴ (metoda *tragerii din topitură*). Metoda a fost aplicată în industria electronică începând cu anul 1950, mai întâi pentru creșterea monocristalelor de germaniu, apoi pentru cele de siliciu. Reprezintă și în prezent metoda cea mai folosită pentru obținerea *siliciului monocristalin*⁵ folosit ca material de bază în industria microelectronică; 2) inventarea tehnologiei de *purificare zonară* (metoda *zonei flotante* = *Float Zone* (FZ)), folosită pentru obținerea siliciului monocristalin necesar în electronica de putere; 3)

¹William Bradford Shockley (1910-1989), fizician și inventator american, premiul Nobel pentru fizică în 1956. [en.wikipedia.org/wiki/William_Shockley]. În iulie 1949, Shockley a publicat ideea teoriei injecției de purători minoritari într-un articol intitulat *The Theory of P-N Junctions in Semiconductors and P-N Junction Transistors*, dezvoltând această teorie în cartea intitulată *Electrons and Holes in Semiconductors*, publicată în anul 1950. Aceasta a fost prima lucrare de referință pentru noul domeniu al microelectronicii. [50 Years of Electron Devices, 2002, IEEE]

²Purtătorii de sarcină minoritari injectați de joncțiunea emitorului polarizată direct, străbat baza tranzistorului, recombinaându-se într-un procent foarte mic (2%), fiind colectați de joncțiunea colectorului polarizată invers. Curentul de purători minoritari traversează structura tranzistorului, păstrând aproape aceleași valoare, de la un circuit cu rezistență mică (joncțiunea emitor), la un circuit cu rezistență mare (joncțiunea colector), de aici rezultând termenul de TRANSfer-reZISTOR de la care provine cuvântul TRANZISTOR [1].

Cuvântul TRANZISTOR a fost inventat de John Pierce în mai 1948. În anii 50', tranzistorul bipolar cu joncțiuni, produs de firme ca General Electric (GE) sau Texas Instruments, a început să fie folosit ca amplificator în produse comerciale cum ar fi aparatele auditive și receptoarele radio. La începutul anilor 60', tranzistorul a înlocuit tuburile cu vid, în cele mai multe circuite ale calculatorului. [http://en.wikipedia.org/wiki/John_R._Pierce]

³[en.wikipedia.org/wiki/Transistor]

⁴Metoda *Czochralski* sau metoda CZ, după numele chimistului polonez Jan Czochralski, care a inventat această metodă de creștere a *monocristalelor*, în anul 1916.

[http://en.wikipedia.org/wiki/Jan_Czochralski]

⁵Lingourile de siliciu au proprietăți mecanice (diametru, suprafață), fizice (perfectiune cristalină, rezistivitate) și chimice (conținut de oxigen, carbon, metale grele) foarte bine controlate. [http://en.wikipedia.org/wiki/Jan_Czochralski]

inventarea în anul 1957 a tehnologiei de creștere din fază de vapori (depunere chimică din fază de vapori = *Chemical Vapour Deposition* (CVD)), reprezentând metoda industrială pentru obținerea straturilor epitaxiale. Cu această tehnică, se pot depune straturi: metalice (de exemplu, aluminiu), izolatoare (de exemplu, bioxid de siliciu) și semiconductoare (de exemplu, siliciu). Cel mai important proces este reprezentat de creșterea unui strat semiconductor monocristalin pe un substrat monocristalin (strat epitaxial), având următoarele proprietăți: același tip de semiconductor (structura cristalină a stratului crescut este identică cu cea a substratului); același tip de conductivitate sau tip diferit; același dopaj sau dopaj diferit; 4) dispozitivele pe bază de siliciu sunt mai puțin afectate de temperatură, datorită diferenței dintre valorile benzilor interzise ($E_{gSi} = 1,1$ eV; $E_{gGe} = 0,67$ eV); 5) dezvoltarea procesului de oxidare termică, cu o dublă însemnătate: posibilitatea dezvoltării tehnologiei planare⁶ și posibilitatea folosirii siliciului ca material semiconductor de bază pentru dispozitivele semiconductoare, datorită usurinței procesului de realizare a bioxidului de siliciu (SiO_2). Principalele scopuri pentru care bioxidul de siliciu este folosit în tehnologia planară sunt: pentru realizarea configurațiilor geometrice dorite ale structurii respective; ca mască pentru corodarea selectivă a unor straturi; ca element constructiv de bază al structurilor MOS [2].

În continuare, sunt amintite câteva date importante din istoria dezvoltării microelectronicii.

Prima firmă de dispozitive semiconductoare este înființată de Shockley în viitoarea celebră Vale a Siliciului din California, în anul 1955 (Shockley Transistor Corporation).

Ideea *circuitului integrat* este brevetată în anul 1959, existând de fapt două brevete depuse la un interval de câteva luni, de către Jack Kilby⁷ (Texas Instruments), pentru realizarea unor circuite electrice având toate elementele: rezistoare, capacitatoare, tranzistoare și diode, înglobate într-o singură plachetă de siliciu, și Robert Norton Noyce⁸, (cofondator al companiei Fairchild Semiconductor Corporation), care combină tehnologia planară cu tehnicile de fotograbare a unor trasee metalice peste stratul de bioxid de siliciu, ceea ce reprezenta de fapt o descriere a conceptului de circuit integrat.

Tehnologia de realizare a primului circuit integrat este dezvoltată ulterior de către Robert Noyce și Gordon Earle Moore⁹, la celebra firmă Intel (*Integrated Electronics*, înființată în anul 1968), unde se produce, în anul 1971, primul microprocesor (4004) și prima memorie integrată. Calea către realizarea calculatorului personal era deschisă, primul calculator personal fiind realizat în anul 1975, folosindu-se microprocesorul Intel 8080.

2. Modelarea în microelectronică

În microelectronică *modelul* este folosit pentru descrierea comportării electrice a dispozitivelor și circuitelor integrate, înainte de fabricarea lor, prin simulare.

2.1. Proiectarea tehnologică

Proiectarea tehnologică a unui circuit integrat implică cunoștințe din următoarele domenii: fizica dispozitivelor, domeniul care influențează proiectarea dispozitivelor semiconductoare active, componente ale circuitului respectiv, proiectarea circuitului și proiectarea tehnologiei de realizare. Toate cele trei domenii contribuie la alcătuirea fluxului tehnologic de realizare a circuitului integrat respectiv.

Datorită interdependenței dintre diversele procese tehnologice care alcătuiesc un flux tehnologic, proiectarea tehnologică trebuie să țină seama de ansamblul tuturor proceselor, astfel încât validarea unui flux tehnologic să se facă numai după stabilirea parametrilor de proces pentru toate procesele tehnologice care alcătuiesc fluxul de fabricație respectiv. Orice modificare a parametrilor unui proces tehnologic individual, trebuie să se facă numai după verificarea întregului flux tehnologic. În acest sens, *simularea* cu ajutorul calculatorului, a fluxurilor tehnologice este foarte importantă, deoarece, pe de o parte este scurtat timpul de obținere a rezultatului final (validarea fluxului tehnologic), iar pe de altă parte, sunt realizate importante economii ale costului final de fabricație.

La proiectarea unui flux tehnologic trebuie să se aibă în vedere: modul de determinare a profilelor de impurități care formează joncțiunile *p-n* ale dispozitivelor și tipurile de măsurători electrice pentru caracterizarea dispozitivelor și a circuitului, finalitatea fiind dată de posibilitățile de apreciere a performanțelor circuitului.

⁶Tehnologia planară a reprezentat o îmbunătățire a gradului de control privind geometria laterală a joncțiunilor difuzate. Ea se poate defini pe scurt ca reprezentând difuzia prin mască de oxid, pe o singură față a plachetei semiconductoare. Această tehnologie combină performanțele joncțiunilor difuzate cu posibilitatea de creștere a bioxidului de siliciu pentru definirea foarte precisă a geometriei dispozitivului. Un strat de bioxid de siliciu este crescut pe fața plachetei de siliciu (grosime $\approx 0,5 \mu m$). Cu ajutorul tehnicii litografice (fotolitografie, litografie cu raze X, fascicul de ioni sau fascicul de electroni) se realizează "ferestre" în stratul de oxid, rezultând configurațiile geometrice dorite ale structurii respective. Prin aceste ferestre are loc difuzia de impurități (din sursă lichidă sau gazoasă), în vederea realizării joncțiunilor *pn* (stratul de oxid constituie un paravan în calea speciei dopante). Această tehnologie a stat la baza dezvoltării tehnologiilor de fabricație a circuitelor integrate. Avantajele implementării acestei tehnologii au fost: creșterea performanțelor electrice ale dispozitivelor (sensibilitatea la acțiunea factorilor externi a scăzut, crescând stabilitatea caracteristicilor electrice), realizarea structurilor MOS (*Metal-Oxid-Semiconductor*) și a tranzistoarelor cu efect de câmp cu structură MOS (*TECMOS*). Există însă și un avantaj economic major, care a

determinat dezvoltarea tehnologiei planare, anume costul de realizare al unui circuit integrat. Dacă se consideră o dimensiune a ferestrei în oxid de $0,2 \times 0,2 \mu m^2$, numărul de joncțiuni cu această dimensiune, având distanța dintre ele de $0,2 \mu m$, pe o plachetă cu diametrul de 30,48 cm (12 inch), este de ordinul a 10^{12} . Capacitatea de fabricare simultană a mii de dispozitive a reprezentat de fapt cheia avantajului economic al tehnologiei planare.

⁷Jack Kilby (1923-2005), inginer electronist american, premiul Nobel pentru fizică 2000. [en.wikipedia.org/wiki/Jack_Kilby]

La data de 24 iulie 1958, Jack Kilby a emis următoarea ipoteză: "miniaturizarea circuitelor electrice ar putea fi realizată prin înglobarea într-o singură plachetă de siliciu a rezistoarelor, capacitatoarelor, tranzistoarelor și diodelor". Ideea a fost demonstrată în septembrie 1958, prin realizarea primului oscilator integrat, pe substrat de germaniu, având frecvența de 1,3 MHz. [50 Years of Electron Devices, 2002, IEEE]

⁸Robert Norton Noyce (1927-1990), inginer American. [en.wikipedia.org/wiki/Robert_Noyce]

⁹Gordon Earle Moore (1929 -), chimist, fizician și om de afaceri American. [en.wikipedia.org/wiki/Gordon_Moore]

Aceste date de proiectare împreună cu *modelele fizice* ale proceselor tehnologice, modelele fizice ale materialelor semiconductoare implicate în proces și *modelele de circuit*, alcătuiesc totalitatea parametrilor necesari pentru simularea dispozitivelor și circuitului integrat respectiv. Compararea parametrilor de proiectare cu cei obținuți în urma simulării, oferă posibilitatea proiectantului de a opera optimizări ale fluxului tehnologic, în ansamblul lui, scopul final fiind cel al obținerii performanțelor dorite pentru circuitul respectiv [3].

2.2. Simularea fluxurilor tehnologice

Simularea unui flux tehnologic are trei aspecte principale: simularea *proceselor tehnologice*, simularea *dispozitivelor* care alcătuiesc circuitul și simularea *circuitului*. Aceste etape pot fi parcurse cu un singur simulator, după un algoritm redat, pe scurt, în continuare.

Simulatorul de procese tehnologice conține modele ale proceselor tehnologice. *Modelul*, în sensul proceselor tehnologice, reprezintă o descriere schematică sau o analogie a fenomenelor, care ține cont de proprietățile cunoscute sau presupuse. Ori de câte ori este posibil, modelele folosite în microelectronică pentru simularea pașilor unui flux tehnologic, sunt bazate pe *fenomene fizice* bine cunoscute și explicate (teoria fizică), din care rezultă modele fizice folosite în simulatoarele avansate pentru simularea bidimensională (2D) a proceselor tehnologice. Dacă fenomenul fizic nu este cunoscut, se apelează la un model bazat pe date *empirice*, rezultate din măsurători experimentale (*model empiric*). Modelele empirice (*fenomenologice*), bazate pe date experimentale, reprezintă relații matematice între variabilele care descriu fenomenul, rezultate din prelucrarea datelor experimentale, fără suport teoretic. Relațiile matematice cantitative sunt *fitate* pe datele experimentale.

2.3. Modele empirice

Metoda *empirică* constă în încercări repetate cu eliminarea sau îndreptarea erorilor. Ca exemplu de model empiric amintim modelul de oxidare a siliciului pentru grosimi mai mici de $350 \text{ \AA}^{10}$, caz în care modelul Deal-Grove¹¹ nu mai este valabil. Chiar dacă modelele empirice sunt folosite în simulări (de procese sau dispozitive) atunci când modelele fizice nu sunt utilizabile sau sunt prea complexe, o temă majoră a cercetării în domeniul semiconductoarelor a fost și este dezvoltarea de noi modele fizice care să înlocuiască modelele empirice [4].

Dezvoltarea inițială a proceselor tehnologice prin metoda empirică a reprezentat o metodă înceată de progres. Rata de progres a tehnologiilor a putut fi radical îmbunătățită prin combinarea investigațiilor empirice cu metodele de modelare, comportarea teoretică fiind dedusă din datele experimentale. Modelele proceselor tehnologice au fost dezvoltate din aceste teorii. Aceste modele oferă, pe lângă o înțelegere a fenomenelor observate, și posibilitatea prezicerii derulării procesului

tehnologic în condiții care nu au fost testate experimental.

2.4. Modele fizice

Dezvoltarea modelelor pentru procesele tehnologice a constituit un real progres în fabricația circuitelor integrate, oferindu-se, în acest mod, soluții de proiectare a proceselor tehnologice, în legătură directă cu parametrii electrici doriți. Dintre procesele tehnologice care alcătuiesc fluxurile de fabricație ale circuitelor integrate, amintim: oxidarea, difuzia, implantarea de ioni, epitaxia. Modelele fizice ale acestor procese stau la baza alcătuirii simulatoarelor de procese tehnologice.

Așa cum s-a arătat, modelele fizice sunt folosite pentru a oferi o perspectivă asupra procesului tehnologic nerealizat experimental. Ecuațiile acestor modele se bazează pe valorile parametrilor determinați experimental, de exemplu: mobilitățile purtătorilor de sarcină, electroni și goluri, μ_n , μ_p , coeficienții de difuzie ai impurităților, D , și pe diverși parametri de proces: *temperatura*, *energia de activare* pentru impuritățile de dopare, *timpul*, *curentul fasciculului de ioni*.

În general, modelele fizice sunt folosite pentru a prevedea un proces fizic sau funcționarea unui nou dispozitiv, nerealizate experimental [4].

2.5. Modele analitice

Procesele tehnologice pot fi modelate destul de exact cu ecuații diferențiale care au expresii analitice ca soluții (model analitic), de exemplu: modelul liniar-parabolic (Deal-Grove), pentru oxidare; legea a II-a a lui Fick pentru modelul de difuzie (valabil pentru concentrații de dopare relativ mici, în atmosferă inertă, care nu reacționează chimic cu impuritatea dopantă).

Dacă o ecuație diferențială descrie cantitativ modelul fizic corespunzător unui fenomen fizic (de exemplu funcționarea unui dispozitiv sau desfășurarea unui proces fizic), pentru obținerea unui rezultat predictiv cantitativ din acest model, trebuie să fie posibilă rezolvarea ecuației respective.

Există două abordări posibile pentru obținerea soluției: prin tehnici analitice, rezultând o soluție analitică sau prin tehnici de analiză numerică rezultând o soluție numerică.

2.6. Tehnicile analitice

Tehnicile analitice presupun separarea variabilelor și integrarea ecuației diferențiale, rezultând o soluție analitică formată din *funcții elementare* (inclusiv funcții trigonometrice, exponențiale, logaritmice) sau o *serie infinită*. Avantajele folosirii expresiilor analitice sunt: o simulare *rapidă* a procesului și *vizualizarea* modelului de proces.

Soluția analitică reprezintă o funcție continuă pe un interval de valori de interes, fiind folosită pentru obținerea unui set de *valori exacte* ale unei variabile *dependente* funcție de valorile date ale variabilei *independente*.

¹⁰Grosimea stratului de oxid crescut se calculează cu relația generală $X_{ox} = a(t+\tau)^b$, unde a , b , și τ sunt constante, iar t este timpul de oxidare [4].

¹¹Model pentru descrierea procesului de oxidare, valabil pentru temperaturi ale procesului mai mari de 700°C , presiunea agentului oxidant cuprinsă între 0,2 și 1 atm, grosimea oxidului mai mare de

$300 \text{ \AA}$ [2]. Ecuația care descrie dependența grosimii oxidului de timpul de oxidare, are două forme: liniară (pentru timp de oxidare mic) și parabolică (pentru timp de oxidare mare), de aici denumirea de *model liniar-parabolic*.

În continuare, sunt prezentate câteva soluții analitice care descriu procese fizice de bază ale tehnologiei microelectronice.

În cazul modelării procesului de oxidare în varianta unidimensională, grosimea stratului de oxid crescut pe suprafața stratului de siliciu, se obține din ecuația rezultată din modelul Deal-Grove:

$$X_{ox}^2 - X_{in}^2 + A(X_{ox} - X_{in}) = Bt, \quad (2.1)$$

unde X_{in} reprezintă grosimea inițială a stratului de oxid existent pe placheta de siliciu, crescut într-o etapă anterioară de oxidare, iar A și B sunt constante de creștere [2].

Soluția ecuației (2.1) este de forma:

$$X_{ox}(t) = \frac{A}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{t + \tau}{A^2/4B}} - 1 \right], \quad (2.2)$$

unde τ reprezintă timpul necesar creșterii stratului inițial de oxid, X_{in} .

Un alt exemplu de folosire a modelelor analitice se referă la simularea și calculul *profilelor de dopare* pentru procesele de *dopare controlată*. Aceste modele aproximează foarte bine procesele de implantare¹² cu doze mici și de difuzie¹³.

În cazul difuziei, dacă legea a II-a a lui Fick este folosită în varianta unidimensională și coeficientul de difuzie D este considerat constant în tot volumul substratului și pe toată durata procesului de difuzie, rezultă ecuația *liniară parțial diferențială* de forma:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}. \quad (2.3)$$

numită și ecuația de difuzie.

Așa cum este cunoscut, există două soluții analitice ale acestei ecuații, cu anumite condiții la limită și inițiale, asemănătoare condițiilor reale din practica industrială a proceselor de difuzie: funcția *complementară de eroare*, *erfc*, care modelează procesul de *predepunere chimică (predifuzie)* [5]:

$$C(x,t) = C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}, \quad (2.4)$$

și *distribuția Gauss*, care modelează procesul de *difuzie* [5]:

$$C(x,t) = C_s(t) \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right). \quad (2.5)$$

Cele două soluții analitice au fost folosite pentru

modelarea difuziei impurităților în siliciu, începând cu anii '60, în *tehnologia bipolară* folosită la fabricarea circuitelor integrate *pe scară medie*. Tranzistoarele bipolare erau realizate prin procesul dublei difuzii, aceste soluții precizând cu o bună aproximație profilele de difuzie obținute [4].

În cazul în care coeficientul de difuzie D nu este constant (în cazul dopajelor mari depinde de concentrația impurităților dopante), relația (2.3) nu mai este valabilă.

Ecuația care trebuie rezolvată în acest caz, este de forma:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(C) \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right]. \quad (2.6)$$

care este o ecuație *neliniară* parțial diferențială [4].

Legătura între simularea *fluxului tehnologic* și cea a *dispozitivelor*, este realizată în felul următor: rezultatele furnizate de simulatorul de procese (pe baza modelelor pentru fiecare proces tehnologic) se regăsesc sub forma profilelor de dopare, fiind folosite ca date de intrare, pentru *simulatorul de dispozitive*.

Rezultatele secvenței a doua de simulare (simulatorul de dispozitive) se grupează în două categorii: rezultate care privesc fenomenele fizice care caracterizează funcționarea dispozitivelor (distribuția potențialului, distribuția de sarcină, distribuția de curent) și rezultate care privesc caracteristicile electrice ale dispozitivelor (tensiunea de prag, câștigul în curent, caracteristicile curent-tensiune).

2.7. Simulatorul de circuit

Finalitatea simulării dispozitivelor constă în extragerea parametrilor de model care definesc *modelele de dispozitive*, de exemplu: tensiunea de prag, parametrul de transconductanță, parametrul de modulație a lungimii canalului, curentul de saturație, câștigul în curent, tensiunea Early.

În final, modelele de dispozitive sunt folosite ca date de intrare pentru *simulatorul de circuit*, de tipul simulatorului SPICE.

Rezultatele simulării circuitului se regăsesc sub forma parametrilor circuitului respectiv, prin: punctele statice de funcționare, timpii de comutare, puterea totală consumată, caracteristica curent-tensiune, caracteristica de transfer, răspunsul în frecvență.

2.8. Modele fizice ale dispozitivelor

Modelul fizic pentru funcționarea dispozitivelor semiconductoare este reprezentat de ecuațiile fundamentale ale fizicii dispozitivelor semiconductoare¹⁴.

Acest model presupune că funcționarea dispozitivelor

¹²Procesul implantării de ioni constă în accelerarea ionilor (de la o sursă de ioni), până la atingerea unei viteze suficient de mare pentru a pătrunde în proba semiconductoare. În condiții care se pot controla, ionii pătrunși în volumul semiconductorului ocupă poziții în rețea astfel încât se comportă ca atomi de impuritate, donori sau acceptori. Sursele de ioni reprezintă *fluoruri* ale elementelor chimice folosite pentru purificarea controlată: BF_3 , pentru dopantul bor (B), PF_5 , pentru dopantul fosfor (P), AsF_3 , pentru dopantul arsen (As).

¹³Termenul *difuzie* se referă la migrarea atomilor unei substanțe (atomii de impuritate), în volumul altei substanțe (corpul solid *gazdă*), datorită gradientului de concentrație existent între două regiuni ale corpului *gazdă* (de la suprafața plăchetei semiconductoare spre volumul ei). Acest fenomen este accelerat

dacă procesul are loc la temperaturi ridicate (în general mai mari de 900°C). Scopul principal al tehnologiilor de difuzie pentru materialele semiconductoare este de a controla tipul și concentrația de impurități în regiuni specifice ale cristalului semiconductor. Calea cea mai practică pentru atingerea acestui scop este *difuzia în solide*. Procesul este modelat de *ecuația de difuzie*, verificată de funcția $C(x, t)$, concentrația atomilor de impuritate (relația 2.3, *supra*).

¹⁴Descriu comportarea statică și dinamică a concentrațiilor purtătorilor de sarcină în dispozitivele semiconductoare aflate sub influența câmpurilor externe, care determină abateri de la condițiile de echilibru termic [6].

poate fi simulată prin rezolvarea setului de cinci ecuații fundamentale, neliniare, parțial diferențiale, care descriu distribuția de câmp, de purtători și de curent, anume: ecuația Poisson¹⁵:

$$\nabla^2 \equiv \Delta \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_s}, \quad (2.7)$$

unde Φ este potențialul electrostatic, ρ , densitatea de sarcină electrică, E , intensitatea câmpului electric; ecuațiile de continuitate¹⁶ [6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= G_n - R_n + \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_n, \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= G_p - R_p - \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_p, \end{aligned} \quad (2.8)$$

unde G_n , G_p reprezintă ratele de generare, R_n , R_p , ratele de recombinare, pentru electroni, respectiv goluri, și ecuațiile densităților de curenți¹⁷ (pentru electroni și goluri, în absența câmpului magnetic și a gradientului de temperatură):

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{cond} &= \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p, \\ \mathbf{J}_n &= \mathbf{J}_{ndrift} + \mathbf{J}_{ndif} = qn\mu_n\mathbf{E} + qD_n\nabla n, \\ \mathbf{J}_p &= \mathbf{J}_{pdrift} + \mathbf{J}_{pdif} = qp\mu_p\mathbf{E} - qD_p\nabla p. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Setul de ecuații (2.7-2.9) definește modelul drift-difuzie folosit pentru simularea dispozitivelor semiconductoare active.

Aceste ecuații se pot rezolva în condiții de curent continuu sau în domeniul timp (regim tranzitoriu).

O parte din parametri existenți în aceste ecuații se obțin prin rezolvarea unor ecuații auxiliare, de exemplu:

ecuațiile concentrațiilor de purtători la echilibru termic¹⁸, în cazul statisticii Boltzmann¹⁹:

$$\begin{aligned} n_0 &= n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right) \equiv n_i \exp\left(q \frac{\Phi_i - \Phi_F}{kT}\right), \\ p_0 &= n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right) \equiv n_i \exp\left(q \frac{\Phi_F - \Phi_i}{kT}\right), \end{aligned} \quad (2.10)$$

unde n_i este concentrația intrinsecă, E_F , nivelul Fermi²⁰, E_{Fi} , nivelul Fermi intrinsec, Φ_F , potențialul Fermi iar Φ_i , potențialul Fermi intrinsec²¹;

ecuațiile concentrațiilor de purtători la neechilibru:

$$\begin{aligned} n &= n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fi}}{kT}\right) \equiv n_i \exp\left(q \frac{\Phi_i - \Phi_{Fn}}{kT}\right), \\ p &= n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_{Fp}}{kT}\right) \equiv n_i \exp\left(q \frac{\Phi_{Fp} - \Phi_i}{kT}\right), \end{aligned} \quad (2.11)$$

unde E_{Fn} și E_{Fp} sunt cuasi-nivelele Fermi pentru electroni și goluri (semiconductor de tip n, respectiv p), iar Φ_{Fn} și Φ_{Fp} , cuasi-potențialele Fermi respective. Distanța dintre cuasi-nivelele Fermi, $E_{Fn} - E_{Fp}$, este o măsură a abaterii de la starea de echilibru.

La echilibru termic, există egalitatea $E_{Fn} = E_{Fp} = E_F$; viteza netă de recombinare Shockley - Read - Hall:

$$R = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)}, \quad (2.12)$$

unde τ_p , τ_n reprezintă timpii de viață ai golurilor și electronilor.

Pentru cazul nivelului mic de injecție (concentrația de purtători minoritari în exces este mult mai mică decât concentrația majoritară de echilibru, $\Delta n_p = n - n_0 \ll p_0$ sau $\Delta p_n = p - p_0 \ll n_0$), relația (2.12) se simplifică, având formele aproximative pentru semiconductorul de tip p, respectiv n:

$$R_p \approx \frac{\Delta n_p}{\tau_n}, R_n \approx \frac{\Delta p_n}{\tau_p}. \quad (2.13)$$

În general, modelele fizice pentru dispozitivele semiconductoare conțin următoarele date: dimensiunile geometrice ale structurii dispozitivului; distribuția spațială a impurităților; principalele constante de material: rezistivitatea, mobilitățile purtătorilor de sarcină electrică, permitivitatea absolută a materialului semiconductor, timpii de viață ai purtătorilor de sarcină minoritari.

Toate aceste mărimi constituie date de intrare ale modelului, numite și parametri constructivi ai structurii dispozitivului, care se regăsesc în componența ecuațiilor fundamentale ale fizicii dispozitivelor semiconductoare.

Ținta simulării dispozitivelor semiconductoare active este precizarea funcționării electrice a dispozitivelor. Pentru aceasta se folosesc modele analitice ale dispozitivelor respective, pentru simularea caracteristicilor curent-tensiune, utilizând simulatoarele pentru analiza circuitelor electronice (de tipul SPICE, nivel 1).

¹⁵Ecuația Poisson este o ecuație generală a electrostaticii, care nu se referă numai la cazul materialelor semiconductoare. Ea este o ecuație fizică fundamentală care modelează relația dintre potențialul electrostatic și intensitatea câmpului electric corespunzător densității de sarcină electrică din dispozitiv. Aplicarea ei în cazul regiunii de sarcină spațială a joncțiunii pn, prin folosirea unor aproximații, conduce la rezultate care se obțin foarte ușor din punct de vedere matematic (dependența spațială a intensității câmpului electric și a potențialului electrostatic).

¹⁶Ecuațiile de continuitate descriu variația în timp a concentrațiilor purtătorilor de sarcină, datorită următoarelor cauze: generare de perechi electron-gol în urma acțiunii factorilor externi, generare - recombinare internă, curenți de conducție.

¹⁷În absența câmpului magnetic și a gradientului de temperatură, cauzele apariției curenților electrici pot fi: aplicarea unui câmp electric și existența gradientilor concentrațiilor purtătorilor de sarcină. Câmpul electric determină curenții de drift (de câmp); gradientii concentrațiilor purtătorilor determină curenții de difuzie. Relațiile care definesc acești curenți se exprimă, de regulă, prin

intermediul densităților de curenți, pentru cele două categorii de purtători de sarcină, electroni și goluri.

¹⁸Condiția de echilibru termic este îndeplinită dacă asupra corpului solid nu acționează nici un *factor extern*: câmp electric, câmp magnetic, radiație luminoasă, radiație nucleară (penetrantă) [e^- , n^0]. De asemenea, corpul solid trebuie să se afle în echilibru cu mediul exterior din punct de vedere al temperaturii. În aceste condiții, datorită compensării reciproce a fenomenelor de *generare* și *recombinare* bandă-bandă, concentrațiile purtătorilor de sarcină mobili rămân constante (*concentrații de echilibru*).

¹⁹Statistica Boltzmann se aplică pentru semiconductorul dopat moderat (semiconductor *nedegenerat*), pentru care este valabilă relația: $E_C - E_{Fn} \geq kT$ (semiconductor de tip n), E_C - marginea de jos a benzii de conducție. [7]

²⁰Nivelul Fermi este energia pentru care probabilitatea de ocupare a unei stări de energie de către un electron este 0,5. [8]

²¹Cele două potențiale se definesc conform relațiilor: $\Phi_i = -E_{Fi}/q$, $\Phi_F = -E_F/q$.

Aceste modele simple sunt rezultate ale rezolvării, cu diverse aproximări, a ecuațiilor fundamentale ale fizicii dispozitivelor semiconductoare. Ca exemple, enumerăm câteva modele analitice simple: modelul Shockley al joncțiunii p-n ideale, modelul fundamental Ebers-Moll pentru caracteristicile statice de ieșire ale tranzistorului bipolar, modelul fundamental Iñantola-Moll cu varianta simplificată a modelului Sah, pentru simularea curentului de drenă al tranzistorului MOS [2].

Efecte de ordin superior se obțin completând aceste modele cu parametri fizici și empirici care se pot extrage folosind caracteristicile curent-tensiune măsurate. Acești parametri extrași se constituie ca noi parametri de model care îmbunătățesc modelele inițiale, rezultând modele analitice semiempirice [4].

2.9. Aproximații în metoda analitică

Metoda analitică necesită folosirea unor aproximări pentru rezolvarea ecuației respective, fără a se afecta foarte mult precizia calculului. În plus, timpul de calcul este mult mai mic decât în cazul metodei numerice [9].

Dintre cele mai uzuale aproximații folosite la utilizarea metodelor analitice, amintim: 1) împărțirea domeniului semiconductor în regiunea de *sarcină spațială* (golită de purtători de sarcină electrică) și regiuni *neutre* (cvasineutre); 2) ipoteza de nivel de injecție: mic ($<10^{-2}$ A/cm²), mediu, mare ($10^{-2} \div 10^3$ A/cm²), pentru regiunile cvasineutre; 3) ipoteza de *cvasiechilibru* pentru regiunea de sarcină spațială; 4) ipoteza de joncțiune *groasă* sau *subțire*; 5) aproximația ionizării complete a impurităților; 6) aproximația joncțiunii *abrupte* sau *liniar gradate*; 7) aproximația (condiția) de semnal mic; 8) regim cvasistaționar.

Condiția de *neutralitate electrică* implică îndeplinirea condiției $\rho = 0$ (ρ - densitatea de sarcină electrică), în orice punct al volumului materialului semiconductor. Condiția este valabilă pentru semiconductoare *omogene, dopate uniform* cu impurități, la echilibru termic²².

Acțiunea unui factor extern determină apariția *concentrațiilor de neechilibru* ale căror valori tind, în timp, datorită *fenomenelor de relaxare*, să atingă valorile de echilibru.

Aproximația de golire este o aproximație foarte importantă. Ea se aplică în regiunile semiconductoare unde există un gradient mare al concentrației de impurități (cazul opus neutralității electrice), cum sunt *regiunile de trecere* de la un tip de conducție majoritar la altul. Exemple: joncțiunea p-n, structuri n-n' sau p-p'. În toate aceste cazuri, apar câmpuri electrice mari datorită *sarcinii spațiale a ionilor de impurități*.

Aproximația de golire constă în neglijarea concentrației purtătorilor de sarcină electrică liberi din regiunile de trecere respective.

Avantajul folosirii acestei aproximații constă în posibilitatea integrării ușoare a ecuației Poisson unidimensionale, rezultând relații analitice simple și o bună precizie pentru distribuțiile câmpului electric, $E(x)$ și potențialului electric, $\Phi(x)$, în cazul aproximațiilor joncțiunii abrupte și liniar gradate.

2.10. Exemple de soluții analitice

Dacă soluția analitică furnizează o bună concordanță cu datele experimentale, care descriu funcționarea dispozitivului sau desfășurarea procesului fizic, rezultă că ea reproduce foarte bine simularea fenomenului respectiv (soluția poate fi folosită pentru o simulare exactă).

Un exemplu în acest sens este dat de structura MOS *ideală* la care potențialul variază numai pe o direcție, de exemplu direcția x, astfel încât $\partial\Phi/\partial y = \partial\Phi/\partial z = 0$.

Ecuația Poisson unidimensională, în regiunea semiconductoare a structurii tranzistorului MOS, în ipotezele simplificatoare ale variației potențialului numai pe direcția x, a aproximației de golire, a ionizării complete a impurității și a dopării uniforme a substratului semiconductor, este de forma [3]:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_s} (p_p - n_p + N_D - N_A) \cong \frac{qN_A}{\epsilon_s}, \quad (2.14)$$

conform modelului joncțiunii *abrupte asimetrice* pe substrat semiconductor de tip p.

Dubla integrare a acestei ecuații diferențiale liniare, impunând condițiile la limită:

$$\begin{aligned} \Phi(x=0) &= \Phi_s \\ \Phi(x=W) &= 0, \quad \left. \frac{d\Phi}{dx} \right|_{x=W} = 0, \end{aligned} \quad (2.15)$$

conduce la o relație foarte simplă a variației potențialului cu distanța, de la suprafața stratului semiconductor spre volumul lui (*modelul simplificat al regiunii de sarcină spațială*, [10]), de forma:

$$\Phi(x) = \Phi_s \left(1 - \frac{x}{W}\right)^2. \quad (2.16)$$

unde Φ_s reprezintă potențialul la suprafața stratului semiconductor (la interfața oxid-semiconductor, $x=0$), iar W, lățimea regiunii golite a joncțiunii induse de câmpul electric aplicat, specifică structurii MOS (Figure 2.1):

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_s\Phi_s}{qN_A}}. \quad (2.17)$$

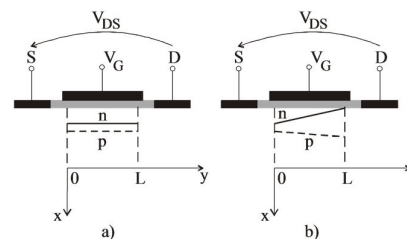


Figura 2.1. Diagrama de benzi energetice pentru structura MOS ideală, cu substrat semiconductor de tip p în regim de inversie puternică

Relația (2.17) este folosită și pentru calculul potențialului electrostatic în structura tranzistorului MOS, *canal lung*, chiar și la tensiuni $V_{DS} \neq 0$, folosind aproximația în care *lățimea regiunii golite este constantă* în lungul canalului indus²³ (Figure 2.2.a).

²²Densitatea de sarcină electrică la echilibru termic se exprimă cu relația: $\rho_0 = q(p_0 - n_0 + N_D - N_A)$.

²³După îndeplinirea condiției de *inversie puternică* (apariția canalului conductor = formarea stratului de inversie = formarea joncțiunii

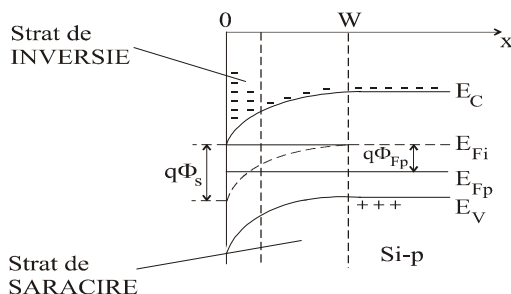


Figura 2.2. Schema regiunii centrale a structurii MOS (canal indus).
a) lățimea regiunii golite *constantă* în lungul canalului indus; b) lățimea regiunii golite *variabilă* în lungul canalului indus (linia *plină* - limita joncțiunii metalurgice a joncțiunii induse; linia *punctată* - limita extinderii regiunii golite)

Pentru structuri cu lungimi de canal *submicronice*, aproximațiile prin care s-a obținut ecuația Poisson (2.14) nu mai sunt valabile²⁴ [4]. În aceste condiții, ecuația Poisson pentru simularea potențialului și câmpului electric este de forma bidimensională (substrat semiconductor de tip p):

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_s} = -\frac{q}{\epsilon_s} (p_p - n_p + N_D - N_A) \quad (2.18)$$

$$\equiv -\frac{q}{\epsilon_s} \left[p_{p0} \exp\left(-\frac{q\Phi}{kT}\right) - n_{p0} \exp\left(\frac{q\Phi}{kT}\right) + N_D \right],$$

unde concentrațiile purtătorilor de sarcină de neechilibru sunt exprimate față de concentrațiile de echilibru.

Soluția acestei ecuații de ordinul doi, parțial diferențială și neliniară, se obține numai cu tehnici de analiză numerică [vezi § 7, partea a III-a].

În general, simularea structurilor submicronice necesită rezolvarea ecuațiilor neliniare parțial diferențiale, bidimensionale sau tridimensionale.

Dacă, dimpotrivă, soluția analitică nu verifică datele experimentale, atunci soluția obținută cu ajutorul analizei numerice oferă o mai bună descriere a fenomenului simulat.

În comparație cu soluțiile analitice, soluțiile numerice nu sunt limitate de complexitatea ecuațiilor diferențiale.

2.11. Tehnicile de analiză numerică

Rezolvarea exactă a sistemului de ecuații fundamentale ale fizicii dispozitivelor semiconductoare se poate face numai prin metode numerice.

Pentru simulările care necesită o mare acuratețe (ca în cazul structurilor submicronice), modelele analitice sunt înlocuite cu simulări numerice care pot să reprezinte mai real fenomenele complexe neliniare sau dependente de timp. Cerințele programelor de analiză numerică sunt: să reprezinte structura dispozitivului, prin definirea domeniului specific dispozitivului și divizarea domeniului

într-un număr suficient de mare de regiuni discrete (generarea gridului); să discretizeze ecuațiile diferențiale care descriu procesul fizic sau funcționarea dispozitivului; să rezolve setul de ecuații algebrice discretizate; să reprezinte grafic soluțiile rezolvării (structura dispozitivului, distribuția concentrației dopantului, distribuția potențialului, suprapunerea etapelor procesului tehnologic din care a rezultat structura, caracteristici I-V).

Cunoștințele necesare pentru folosirea unui astfel de simulator sunt: cunoștințe de fizica dispozitivului și tehnologia de realizare a structurilor respective, plus cele privind metodele numerice folosite în softul simulatorului (opțional).

Soluțiile numerice nu elimină folosirea soluțiilor analitice, acestea din urmă fiind preferate atunci când este posibil, deoarece soluțiile numerice necesită, în general, calculatoare foarte performante.

Ca urmare, ori de câte ori este posibilă obținerea unei soluții analitice care descrie un fenomen fizic, așa cum a fost el estimat, soluțiile analitice respective sunt folosite.

Folosirea simulatorilor complexe (flux tehnologic, dispozitiv, circuit) pentru proiectarea circuitelor integrate a condus la scăderea costurilor proiectării. Factorii care au condus la această scădere sunt: specificarea corectă a regiunilor relevante pentru funcționarea dispozitivelor (exemplu: zona de curbură a joncțiunii planare); selectarea parametrilor de material și a modelelor potrivite; varierea condițiilor de proces și a condițiilor de funcționare pentru dispozitiv, în vederea obținerii performanțelor electrice optime; asigurarea unui rezultat numeric exact (precis).

Modelarea a reprezentat și reprezintă o modalitate rapidă de progres în tehnologia microelectronică. Chiar dacă, în mod evident, simularea proceselor tehnologice nu poate să înlocuiască fabricația, simularea reduce numărul de încercări (și erori) necesare obținerii unui proces performant și stabil.

În general, funcționarea dispozitivelor semiconductoare poate fi mai bine simulată decât procesele necesare fabricării circuitelor integrate, deoarece fizica dispozitivelor semiconductoare este bine cunoscută, permițând folosirea unor modele fizice foarte bune.

3. References (part 1)

- [1] Brown, Cl., *Tranzistoare. Întrebări și răspunsuri*, Editura tehnică, București, 1976.
- [2] Bârsan, R. M., *Fizica și tehnologia circuitelor MOS integrate pe scară mare*, Editura Academiei Române, București, 1989.
- [3] Lakatos, E. Șt., *Rolul fizicii în dezvoltarea microelectronicii*, Editura ELECTRA, București, 2014.
- [4] Wolf, S., *Silicon Processing for the VLSI Era*, vol. 3 - *Process Integration*, Lattice Press, Sunset Beach, California, 1990.
- [5] Carslaw, H. S., Jaeger, J. C., *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, ediția a II-a, 1959.
- [6] Sze, S. M., *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, Inc. 1981.

induse de câmpul electric aplicat pe contactul metalic al grilei), aplicarea tensiunii V_{DS} determină trecerea curentului I_D . Tensiunea V_{DS} determină o polarizare inversă a joncțiunii drenă-substrat mai puternică decât polarizarea inversă a joncțiunii sursă-substrat și, ca urmare, lățimea regiunii golite corespunzătoare joncțiunii induse grilă-substrat este mai mare lângă joncțiunea drenei. În primă

aproximație, pentru simplitatea calculelor, se consideră că lățimea regiunii golite este constantă în lungul canalului.

²⁴Dacă în cazul canalului lung variația componentei E_y a câmpului electric în lungul canalului se poate neglija (panta gradientului este mică), în cazul canalului scurt această variație nu se mai poate neglija. De asemenea, în regiunea canalului doparea este neuniformă pe direcția x (vezi Figura 2.2.b, *supra*).

- [7] Kireev, P. S., *Fizica semiconductorilor*, Editura științifică și enciclopedică, București, 1977.
- [8] Grove, A. S., *Fizica și tehnologia dispozitivelor semiconductoare*, Editura tehnică, București, 1973.
- [9] Rusu, A., *Modelarea componentelor microelectronice active*, Editura Academiei Române, București, 1990.
- [10] Drăgănescu, M., *Electronica corpului solid*, Editura tehnică, București, 1972.

He is Doctor in Physics in 1996. He is professor at the "Valahia" University of Targoviște.

His research interests concern: modelling and simulation of microelectronic process and active semiconductor devices, modelling and SPICE simulation of active microelectronic semiconductor devices and analog integrated circuits.

Correspondence address: Universitatea „Valahia” din Targoviște, Facultatea de Inginerie Electrică, Electronică și Tehnologia Informației, Aleea Sinaia nr. 13, 130004, Târgoviște, e-mail: e_lakatos@yahoo.com

4. Biography



Eugen Șt. LAKATOS was born in Arad in 1954, August, 31.

He graduated the University of Bucharest, Faculty of Physics in 1979.
