

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

(General Aspects of Simulation Processes in Microelectronics (Part 2))
(Full text in Romanian)

Eugen Ștefan LAKATOȘ¹

¹Universitatea „Valahia” din Târgoviște, Bd. Regele Carol I, nr. 2, 130024 Târgoviște, România

Abstract

The paper presents the main aspects of the concept of modelling in microelectronics, as a tool used to describe the electric behaviour 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 behaviour 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 modelling 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: August, 28, 2016

To cite this article:

LAKATOȘ E.Ș., „Aspecte generale ale simulării proceselor tehnologice în microelectronică (partea II)” (General Aspects of Simulation Processes in Microelectronics (Part 2)), in *Electrotehnica, Electronica, Automatica (EEA)*, 2016, vol. 64, no. 4, pp. 83-87, ISSN 1582-5175.

3. Modelul unidimensional de difuzie al impurităților în siliciu

Modelul unidimensional de difuzie al impurităților în siliciu, este un model bazat pe date experimentale (model empiric).

Pentru exemplificare se va discuta modelul SUPREM III (Stanford University Process Engineering Model III) [1].

Ecuatia generală de difuzie este de forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \pm \frac{q}{kT} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D \cdot C_i \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) \right], \quad (3.1)$$

unde: D reprezintă coeficientul de difuzie, C , concentrația totală de impurități, C_i , concentrația de impurități încărcate electric (ionizate).

Potențialul Φ este de forma:

$$\Phi = \frac{kT}{q} \ln \frac{n}{n_i}, \quad (3.2)$$

unde n reprezintă concentrația de electroni iar n_i , concentrația intrinsecă, la temperatura la care are loc procesul de difuzie.

În continuare, sunt prezentate modelele fenomenologice folosite în SUPREM III pentru simularea unidimensională a profilurilor de difuzie pentru: bor (B), arsen (As), fosfor (P) și stibiu (Sb), în siliciu (Si).

Aceste modele sunt valabile pentru difuzia prin intermediul vacanțelor din rețeaua cristalină, în atmosferă neoxidantă, propuse de Fair și Tsai [2].

Coeficientul de difuzie al impurităților *ionizate* este egal cu suma dintre coeficientul de difuzie datorat vacanței *neutre* (indice 0) plus coeficientul de difuzie datorat vacanței ionizate cu sarcină opusă (*negativă* (-) sau *pozitivă* (+)):

$$D = D^{(0)} + D^{(-)} \left(\frac{n}{n_i} \right) + D^{(+)} \left(\frac{n_i}{n} \right). \quad (3.3)$$

3.1. Modelarea difuziei de impurități de concentrație mică

În general, într-un semiconductor, concentrația purtătorilor de sarcină depinde de temperatura la care se află semiconductorul.

Într-un semiconductor dopat cu un singur tip de impurități, aflat la temperatură mare ($\gg 300$ K), concentrația purtătorilor de sarcină este egală cu suma dintre concentrația atomilor dopanți (*donori* sau *acceptori*) plus concentrația intrinsecă.

De exemplu, pentru un semiconductor de tip n , concentrația electronilor de conducție (purtători de sarcină majoritari) se exprimă cu relația:

$$n = N_D + n_i. \quad (3.4)$$

În cazul concentrațiilor mici ale impurității dopante ($C = 10^{15} - 10^{18}$ at/cm³), deoarece temperatura la care are loc procesul de difuzie este mare, generarea intrinsecă este mare iar concentrația impurității dopante se poate neglija în raport cu cea intrinsecă, rezultând egalitatea aproximativă a concentrației purtătorilor de sarcină cu cea intrinsecă. (pentru semiconductorul de tip n : $n \cong n_i$).

Prin urmare, conform relației (3.3), coeficientul de difuzie se exprimă sub forma *independentă* de valoarea concentrației purtătorilor de sarcină:

$$D = D^{(0)} + D^{(-)} + D^{(+)} \quad (3.5)$$

Modelul de difuzie al *borului* în siliciu are în vedere faptul că borul este o impuritate *acceptoare* ionizată *negativ*. Prin urmare, borul difuzează prin intermediul vacanțelor *neutre* și încărcate *pozitiv*.

Conform relației (3.5), coeficientul de difuzie pentru bor se modelează cu relația:

$$D_B = D_B^{(0)} + D_B^{(+)} \quad (3.6)$$

Expresia generală a coeficientului de difuzie ține cont de dependența lui de temperatură, fiind dată de relația:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (3.7)$$

unde coeficientul D_0 este dependent de constanta rețelei cristaline în care are loc difuzia, iar E_a este *energia de activare*.

Difuzia impurităților *substituționale* (impuritățile care se plasează în nodurile rețelei cristaline a siliciului, folosite pentru doparea controlată a siliciului) are loc prin saltul impurităților în vacanțele din rețeaua siliciului [3]. Prin urmare, energia de activare corespunde energiei necesare pentru formarea unei vacanțe în rețea (formată prin ruperea unei legături dintre doi atomi de siliciu), a cărei valoare este proporțională cu mărimea benzii interzise a semiconductorului. Valorile energiilor de activare pentru difuzia impurităților de tip donator și acceptor în siliciu sunt cuprinse între 3 și 4 eV [4].

Relația (3.6) se rescrie sub forma [1]:

$$\begin{aligned} D_B &= 0,037 \cdot \exp\left(-\frac{3,46}{kT}\right) + 0,72 \cdot \exp\left(-\frac{3,46}{kT}\right) \\ &= 0,76 \cdot \exp\left(-\frac{3,46}{kT}\right), \end{aligned} \quad (3.8)$$

unde, conform comparației termen cu termen cu relația (3.7), $D_0 = 0,76 \text{ cm}^2/\text{s}$ iar $E_a = 3,46 \text{ eV}$.

Modelul de difuzie pentru *arsen* în siliciu are în vedere faptul că arsenul este o impuritate *donoare* ionizată *pozitiv*. Prin urmare, arsenul difuzează prin intermediul vacanțelor *neutre* și încărcate *negativ*. Coeficientul de difuzie pentru arsen se modelează cu relația:

$$\begin{aligned} D_{As} &= D_{As}^{(0)} + D_{As}^{(-)} \\ &= 0,066 \cdot \exp\left(-\frac{3,44}{kT}\right) + 12 \cdot \exp\left(-\frac{4,05}{kT}\right). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Pentru modelul de difuzie al *fosforului* în siliciu, dominantă este interacțiunea impurității cu vacanțe *neutre*.

Coeficientul de difuzie pentru fosfor se modelează cu relația:

$$D_P = 3,85 \cdot \exp\left(-\frac{3,66}{kT}\right). \quad (3.10)$$

3.2. Modelarea difuziei de impurități de concentrație mare

În cazul concentrațiilor mari de impurități, concentrațiile purtătorilor de sarcină electrică depășesc pe cea a concentrației intrinseci. Ca urmare, coeficienții de difuzie sunt dependenți de concentrațiile purtătorilor de sarcină.

Ținând cont de relațiile (3.3) și (3.8), coeficientul de difuzie pentru bor se exprimă sub forma:

$$\begin{aligned} D_B &= D_B^{(0)} + D_B^{(+)} = 0,037 \cdot \exp\left(-\frac{3,46 \text{ eV}}{kT}\right) \\ &+ 0,72 \cdot \left(\frac{p}{n_i}\right) \cdot \exp\left(-\frac{3,46 \text{ eV}}{kT}\right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

unde, pentru a include dependența de concentrația purtătorilor de sarcină majoritari (*golurile*), s-a ținut cont de relația $p \cdot n = n_i^2 \Leftrightarrow n_i/n = p/n_i$.

Similar, ținând cont de relațiile (3.3) și (3.9), rezultă pentru coeficientul de difuzie al *arsenului*:

$$\begin{aligned} D_{As} &= D_{As}^{(0)} + D_{As}^{(-)} = 0,066 \cdot \exp\left(-\frac{3,44 \text{ eV}}{kT}\right) \\ &+ 12 \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right) \cdot \exp\left(-\frac{4,05 \text{ eV}}{kT}\right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

4. Metode numerice pentru rezolvarea ecuațiilor parțial diferențiale neliniare

Algoritmul general pentru rezolvarea ecuațiilor neliniare parțial diferențiale, folosind analiza numerică, este descris de următorii pași:

1) definirea domeniului specific dispozitivului; 2) divizarea domeniului într-un număr suficient de mare de regiuni discrete (generarea *gridului*);

3) pentru ecuațiile diferențiale dependente de timp, se face și o divizare în intervale de timp, suficient de mici;

4) transformarea ecuației diferențiale în *ecuație algebrică* (aproximare a ecuației diferențiale originale), pentru fiecare locație a gridului având o ecuație algebrică discretă;

5) liniarizarea ecuațiilor algebrice discrete neliniare;

6) organizarea setului de ecuații algebrice discrete într-o *matrice standard*, pentru rezolvarea cu ajutorul calculatorului;

7) pentru ecuațiile diferențiale dependente de timp, se procedează la fel, pentru fiecare interval de timp (timpul este avansat cu câte un pas incremental, după fiecare rezolvare, la timpul anterior, a ecuațiilor liniarizate; ecuația neliniară parțial diferențială este rezolvată apoi, din nou, în toate locațiile gridului, pentru noul pas de timp, folosind soluția anterioară, pentru a găsi soluția aferentă următorului interval de timp); la sfârșitul ultimului interval de timp, valorile variabilei pentru fiecare locație a gridului reprezintă soluția ecuației neliniare parțial diferențiale la timpul respectiv.

Soluțiile finale ale ecuațiilor neliniare parțial diferențiale, pentru fiecare locație a gridului, sunt folosite pentru: vizualizarea rezultatelor; ca date de intrare pentru pasul următor al simulării procesului tehnologic sau funcționării dispozitivului.

5. Generarea gridului

Obținerea soluției numerice a unei ecuații parțial diferențiale pentru un domeniu necesită împărțirea domeniului într-un număr de *subdomenii* (elemente) discrete, care, pentru o bună aproximare a soluției exacte, trebuie să fie suficient de mici.

Pentru *metoda diferențelor finite*, domeniul de simulare bidimensional (2D) este divizat în regiuni definite de un *grid*.

Cel mai simplu caz este reprezentat de gridul *rectangular*, pentru care ecuațiile parțial diferențiale sunt rezolvate în *nodurile* gridului. Prima și ultima linie (pe direcțiile orizontală și verticală) reprezintă condițiile de frontieră (la limită).

Algoritmul cel mai simplu de rezolvare se aplică în cazul gridului rectangular uniform.

Pentru exemplificarea folosirii gridului rectangular uniform, se consideră structura clasică a joncțiunii semiconductoră pn realizată în tehnologia planară.

În fig. 5.1 este reprezentat un grid rectangular uniform pentru joncțiunea pn planară.



Figura 5.1. Generarea gridului rectangular uniform în cazul joncțiunii pn planare

Dacă gridarea este fină, timpul de rezolvare (de găsim a soluției) este mare.

Soluția pentru optimizarea timpului de rezolvare este dată de folosirea gridului neuniform, și anume, spațieri mai dese în regiunile de interes reprezentate de marginile joncțiunii și suprafața stratului semiconductor (distanța minimă fiind specificată de utilizator), și spațieri mai rare în restul volumului structurii, distanța crescând, de la suprafața structurii spre substratul semiconductor (volumul structurii), în progresie geometrică (fig. 5.2).

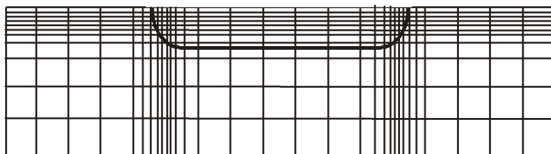


Figura 5.2. Generarea gridului rectangular neuniform în cazul joncțiunii pn planare

Concret, în cazul rezolvării ecuației Poisson, deoarece variația potențialului depinde de densitatea de sarcină locală, zonele cu intensități mari ale câmpului electric vor fi reprezentate prin griduri fine.

Subdomeniile sunt, de regulă, reprezentate prin griduri neregulate (de forma triunghiului). În acest mod, în cazul necesității unei regridări locale (într-un anumit subdomeniu), nu vor fi introduse noduri suplimentare în alte zone ale structurii.

Algoritmul de gridare-regridare (TSUPREM4(1)) este următorul: gridul inițial (de nivel zero) este bazat pe geometria dispozitivului; regridul de nivel 1 este bazat pe

profilul concentrației de dopare, fiind necesar un regrid fin la suprafața semiconductorului; regridul de nivel 2 este bazat pe soluțiile care determină forma potențialului electric (fig. 5.3).

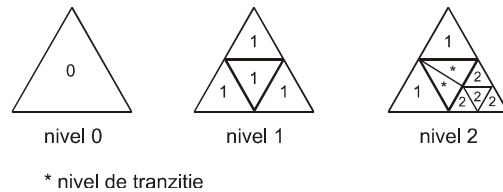


Figura 5.3. Algoritmul de gridare-regridare

Algoritmul de regridare permite redefinirea gridului în timpul procesului de calcul. Aceasta determină o creștere a timpului de calcul, dar și o îmbunătățire a acurateții calculului [5].

6. Discretizarea ecuațiilor diferențiale

În general, seria Taylor se bazează pe presupunerea că orice funcție se poate exprima sub forma unui polinom având un număr infinit de termeni. Pentru exemplificare, se consideră funcția arbitrară reprezentată în fig. 6.1, o funcție continuă, cu derivate de orice ordin și care are o valoare cunoscută $f(x_0)$ pentru $x = x_0$.

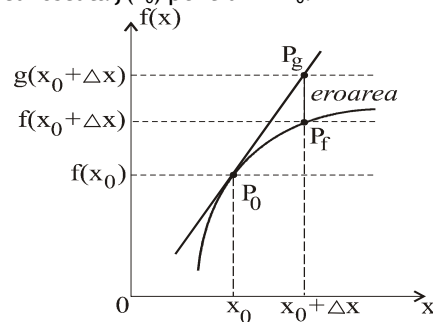


Figura 6.1. Ilustrarea grafică a aproximării unei funcții

Dacă funcția admite o valoare la $x > x_0$, atunci $f(x)$ se aproximează cu tangenta dusă la curbă în punctul P_0 , conform relației (fig. 6.1):

$$\begin{aligned} f(x_0 + \Delta x) &\cong tg \alpha = a \equiv f'(x_0) \\ &= \frac{g(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

de unde:

$$\begin{aligned} g(x_0 + \Delta x) &= \Delta x \cdot a + f(x_0) \\ &\equiv \Delta x \cdot f'(x_0) + f(x_0), \end{aligned} \quad (6.2)$$

unde $f'(x_0)$ este derivata de ordinul 1 a funcției $f(x)$ în punctul $x = x_0$.

Conform figurii 6.1, valoarea $g(x_0 + \Delta x)$ nu este egală cu $f(x_0 + \Delta x)$, dar se poate folosi pentru a aproxima valoarea funcției $f(x_0 + \Delta x)$, cu o eroare:

$$\begin{aligned} f(x_0 + \Delta x) &= g(x_0 + \Delta x) \mp \text{eroarea} \\ &\equiv f(x_0) + \Delta x \cdot f'(x_0) \mp \text{eroarea}, \end{aligned} \quad (6.3)$$

unde semnul $\mp$ este determinat de forma funcției, convexă sau concavă, iar eroare reprezintă seria

¹ TSUPREM4 este un simulator bidimensional de proces pentru tehnologiile de fabricație a dispozitivelor și circuitelor integrate pe

bază de siliciu, dezvoltat de firma americană Technology Modelling Associates, Inc.

termenilor de ordin superior.

Valoarea funcției $f(x)$ la $x = x_0 \pm \Delta x$ se poate obține și din dezvoltarea în serie Taylor a funcției $f(x)$, în jurul punctului x_0 , rezultând:

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + \Delta x \frac{f'(x_0)}{1} + \Delta x^2 \frac{f''(x_0)}{2!} + \Delta x^3 \frac{f'''(x_0)}{3!} + \dots + \Delta x^n \frac{f^n(x_0)}{n!} + \dots, \quad (6.4)$$

sau:

$$f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - \Delta x \frac{f'(x_0)}{1} + \Delta x^2 \frac{f''(x_0)}{2!} - \Delta x^3 \frac{f'''(x_0)}{3!} + \dots - \Delta x^n \frac{f^n(x_0)}{n!} + \dots, \quad (6.5)$$

în funcție de sensul de variație al variabilei x .

6.1. Aproximarea unidimensională a derivatei cu metoda diferențelor finite

Aproximarea de ordinul 1 a derivatei de ordinul 1 pentru funcția $f(x)$, se obține din relația (6.4), neglijând termenii începând cu termenul al treilea, se obține:

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + 0(\Delta x), \quad (6.6)$$

unde prin $0(\Delta x)$ s-a notat termenul de eroare care include termenii de ordin superior.

Pentru derivata de ordinul 1, se obține expresia:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} - 0(\Delta x), \quad (6.7)$$

sau, în general, în funcție de semnul erorii:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \mp 0(\Delta x). \quad (6.8)$$

În practica simulării, pentru scurtarea timpului de calcul, aproximarea unei funcții se face considerând termeni ai seriei Taylor până la, inclusiv, derivata de ordinul doi. Dacă aproximarea unei derivate este obținută prin trunchierea seriei Taylor, termenul $0(\Delta x)$ semnifică eroarea acceptată pentru evaluarea derivatei. Eroarea respectivă se exprimă în funcție de puterile lui Δx . Astfel, în relația (6.8) eroarea este proporțională cu Δx , fiind notată cu $0(\Delta x)$.

Pentru aproximarea prin metoda diferențelor finite se consideră că Δx este distanța dintre nodurile gridului. Pentru un grid uniform, această distanță este constantă, dar pentru un grid neuniform, distanța Δx variază pe direcția de gridare respectivă [1].

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + \Delta x \frac{f'(x_0)}{1} + \Delta x^2 \frac{f''(x_0)}{2!} + 0(\Delta x^2), \quad (6.9)$$

Aproximarea de ordinul 2 a derivatei de ordinul 1 pentru funcția $f(x)$, se obține din relațiile (6.4) și (6.5), neglijând termenii începând cu termenul al patrulea. Se obține, respectiv:

$$f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - \Delta x \frac{f'(x_0)}{1} + \Delta x^2 \frac{f''(x_0)}{2!} - 0(\Delta x^2), \quad (6.10)$$

încât pentru aproximarea de ordinul 2 a derivatei de ordinul 1 se obține:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x} \pm 0(\Delta x^2). \quad (6.11)$$

Similar, pentru aproximarea de ordinul 2 a derivatei de ordinul 2, se obține expresia [5]:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} \pm 0(\Delta x^2). \quad (6.12)$$

Această metodă de exprimare a erorilor permite compararea diferitelor relații în funcție de ordinul erorii, în sensul următor: chiar dacă, de regulă, $\Delta x \ll 1$, relațiile cu aproximare de ordinul 2 vor fi mai exacte decât cele cu aproximare de ordinul 1.

6.2. Discretizarea spațială în două dimensiuni

Distanța dintre două noduri adiacente ale gridului se exprimă cu notația:

$$\begin{aligned} a_i &= \Delta x = x_{i+1} - x_i, i = 0, 1, 2, 3, \dots, n \\ b_j &= \Delta y = y_{j+1} - y_j, j = 0, 1, 2, 3, \dots, m. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Folosind notația (6.13), expresiile diferențelor finite în cazul bidimensional sunt de forma:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f_{i, j}; i = 0, 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, 2, \dots, m \\ f(x \pm \Delta x, y) &= f_{i \pm 1, j} \\ f(x, y \pm \Delta y) &= f_{i, j \pm 1}, \end{aligned} \quad (6.14)$$

unde pozițiile punctelor de coordonate (i, j) sunt exprimate în coordonate carteziane.

În fig. 6.2., sunt ilustrate pozițiile a patru noduri adiacente, pe cele două axe perpendiculare, față de nodul central (i, j) (aproximația în 5 puncte a metodei diferențelor finite).

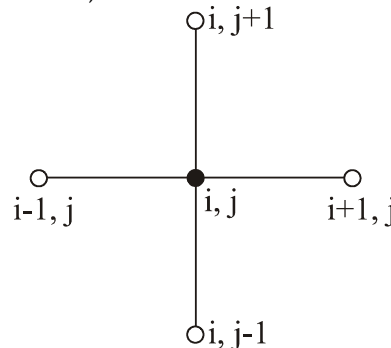


Figura 6.2. Notația pentru nodurile gridului rectangular folosit la metoda diferențelor finite

7. References (part 2)

- [1] Wolf, S., *Silicon Processing for the VLSI Era*, vol. 2, *Process Integration*, Lattice Press, Sunset Beach, California, 1990.
- [2] Fair, R.B., *Impurity Doping Processes in Silicon*, North-Holland, New York, 1981.

- [3] Boltaks, B.I., *Diffusion in Semiconductors*, Academic Press, 1963.
[4] Grove, A.S., *Fizica și tehnologia dispozitivelor semiconductoare*, Editura tehnică, București, 1973.

Biography



Eugen Șt. LAKATOS was born in Arad in 1954, August, 31.
He graduated the University of Bucharest, Faculty of Physics in 1979.
He is Doctor in Physics in 1996.

He is professor at the “Valahia” University of Târgoviște.
His research interests concern: modelling and simulation of microelectronic process and active semiconductor devices, modelling and SPICE simulation of active microelectronic semiconductor devices and analogue integrated circuits.
e-mail: e_lakatos@yahoo.com