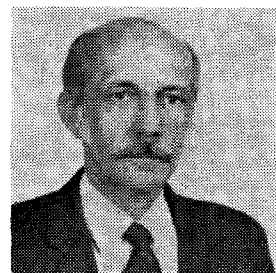


# Többrétegű struktúrák technológiai modellezése

DR. TARNAY KÁLMÁN – DR. MASSZI FERENC –  
DR. DROZDY GYŐZŐ\*

BME Elektronikus Eszközök Tanszéke  
\*MTA Központi Fizikai Kutató Intézet  
Mikroelektronikai Kutató Intézete



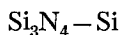
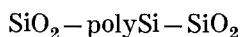
## ÖSSZEFOGLALÁS

A cikk bemutatja a STEP (Silicon Technology Evaluation Program) félvezető technológiai szimulációs programrendszer továbbfejlesztésében legutóbb elért eredményeket. A program jelenleg már modellezi a Si/SiO<sub>2</sub> struktúráknál bonyolultabb, például polyszilíciumot és szilíciumnitridet is tartalmazó többrétegű struktúrákban lejátszódó adaléktranszportot. Ennek megoldása a több határfelülettel rendelkező többrétegű struktúrák, valamint az oxidációs és nitridálási folyamatok irodalomból ismert modellezési módszereinek kiterjesztését igényelte. A cikk bemutatja a probléma megoldására kidolgozott új algoritmust, mely az eddig ismertekkel szemben többrétegű struktúrák esetén az időben eltolódó határfelületekkel is biztosítja a megoldás konvergenciáját. (Λ)

## 1. Bevezetés

Az elmúlt években az egyre bonyolultabb elrendezésű és vertikális struktúrájú LSI és VLSI áramkörök tervezésének minden fázisa egyre több és több számítógépes segítséget igényelt. A különböző áramköri és logikai szimulációs, valamint hibaszimulációs programok mellett megjelentek a technológiai folyamatok szimulációs vizsgálatára alkalmas programok is. E programok közül úttörőnek tekinthető a Stanford Egyetem Integrált Áramköri Laboratóriumában Dutton, Hansen és Antoniadis által kidolgozott SUPREM (Stanford University Process Engineering Models) program, melynek első változata 1977-ben készült el [1]. A technológiai szimulációs programokkal fizikailag megalapozott, vagy formális modellek alapján vizsgálni lehet a különböző rétegválasztási és növesztési, maratási és adalékolási folyamatokat. A programok jelentős segítséget tudnak nyújtani a technológia optimalizálásában és a kialakítandó struktúra elektromos paramétereinek (négyzetes ellenállások, küszöb feszültség stb.) kívánt értékre való beállításában. A technológiai szimulációs programok egy- vagy kétdimenziós vizsgálatok elvégzésére alkalmazhatók.

Az MTA Központi Fizikai Kutató Intézetével együttműködve a BME Elektronikus Eszközök Tanszékén 1978-ban kezdtük el a STEP (Silicon Technology Evaluation Program) technológiai szimulációs programrendszer kidolgozásával kapcsolatos kutatásokat [2]. Munkánk előrehaladtával eredményeinkről több közleményben is beszámoltunk [3], [4], [5], [6]. A STEP programot olyan irányban fejlesztettük tovább, hogy a szilícium/szilícium-dioxid kétrétegű struktúráknál bonyolultabb, pl.



struktúrákban lejátszódó adaléktranszportot is ké-

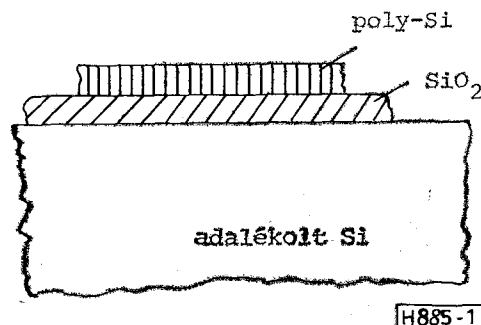
DR. TARNAY  
KÁLMÁN

1952-ben szerzett oklevelet a BME Villamosmérnöki Karán. 1961-ben megvédett műszaki egyetemi doktori értekezésében a tunneldiódák elméletével foglalkozott, 1967-ben kandidátusi fokozatot szerzett a térvezérelt eszközök kapcsolóüzemű működését tárgyaló disszertációjával. 1983-ban az Uppsala-

lai Egyetem Matematikai és Fizikai Szekciója a félvezető eszközök modellezése terén elért eredményeiért díszdoktorává választotta. Jelenleg a BME Elektronikus Eszközök Tanszékének tanszékvezető docense. A HTE Félvezető Eszközök és Integrált Áramkörök Szakosztályának elnöke, a HTE Elnökségének tagja. Tagja több akadémiai és MTESZ bizottságnak.

pes legyen modellezni. Ennek megoldása a több határfelülettel rendelkező többrétegű struktúrák, valamint az oxidációs és nitridálási folyamatok irodalomból ismert modellezési módszereinek kiterjesztését igényelte. (A nitridálással kapcsolatos programfejlesztést a BME Elméleti Villamosságtan Tanszékéről dr. Zombory László és dr. Veszely Gyula végezte.) A több határfelülettel rendelkező struktúrák esetén az irodalomból ismert parciális differenciál-egyenletrendszer megoldó módszerekkel nem lehetett a megoldás konvergenciáját megbízhatóan elérni, ezért egy – közbenső határfeltételekkel számoló – új algoritmust dolgoztunk ki, amely a megfelelően megválasztott közbenső határfeltételekkel a többrétegű struktúra esetében időben eltolódó határfelületeknél is biztosítja a megoldás konvergenciáját.

Jelen közleményben az elméleti alapok áttekintése után e munkának egy olyan részletét mutatjuk be, amely az oxidációs folyamat közben egyre hátrább tolódó Si/SiO<sub>2</sub> határfelület elmozdulásával és az azon át történő adalékvándorlással kapcsolatos. Az 1. ábrán látható egy többrétegű struktúra.



1. ábra. Többrétegű struktúra

Beérkezett: 1983. VI. 6.

## 2. A technológiai szimuláció főbb funkciói és alapösszefüggései

Az integrált áramkörti struktúrák előállításakor az alábbi technológiai műveleteket alkalmazzák:

- a) Nem magas hőmérsékleten végzett műveletek
  - Oxid- és nitridrétegek leválasztása
  - Poliszilícium leválasztás
  - Ionimplantáció
  - Maratás
- b) Magas hőmérsékleten végzett műveletek
  - Predepozíció
  - Behajtás
  - Oxidáció
  - Nitridálás
  - Epitaxiális rétegleválasztás
  - Poliszilícium leválasztás
  - Maratás

A magas hőmérsékleten végzett műveletek végzése során a szilíciumban, az oxid- és nitrid-, valamint poliszilíciumrétegekben levő adalékok az adott rétegen belül diffúzió következtében megváltoztatják eloszlásukat, továbbá a határfelületen adaléktranszport lép fel. Az adalékeloszlás időbeli változását a

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = G_i - \text{div } J_i \quad (1)$$

és

$$J_i = -\text{grad } (D_i C_i) \quad (2)$$

Fick-egyenletek írják le. A Fick-egyenletekben:

- $C_i$  az  $i$ -ik adalék koncentrációja,
- $G_i$  az  $i$ -ik adalék forrásúrsága (pl. intersticiális  $\rightarrow$  szubsztitucionális átmenet, clustering stb.),
- $J_i$  az  $i$ -ik adalék fluxusa,
- $D_i$  az  $i$ -ik adalék diffúziós állandója.

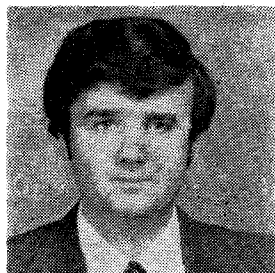
A Fick-egyenletekből származtatható — egyes adalékokra felírt — parciális differenciálegyenleteket a diffúziós állandók közötti kapcsolat csatolja. A diffúziós állandók ugyanis erősebb, vagy gyengébb függést mutatnak az anyagban jelenlevő valamennyi adalék koncentrációjától.

Annak érdekében, hogy az eloszlásokban a fellépő szakadások miatti matematikai problémákat el lehessen kerülni, célszerű olyan megoldó algoritmust alkalmazni, melyben az adott adalékra vonatkozó differenciálegyenletet minden rétegre egymástól függetlenül írjuk fel, és az egyes rétegek közötti

$$J_i = h_i \left( C_1 - \frac{C_2}{s_i} \right) \quad (3)$$

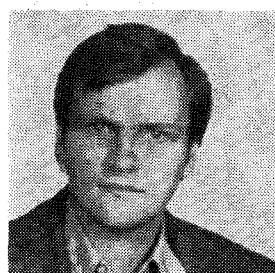
határfelületi fluxus segítségével számolunk (lásd 2. ábra), ahol

- $h_i$  az  $i$ -ik adalékra vonatkozó felületi transzport-tényező,
- $s_i$  az  $i$ -ik adalékra és az adott határfelületre vonatkozó egyensúlyi szegregációs állandó,
- $C_1$  adalékkoncentráció a határfelület bal oldalán,
- $C_2$  adalékkoncentráció a határfelület jobb oldalán.



DR. MASSZI  
FERENC

1976-ban szerzett kiegészítő oklevelet a BME Villamosmérnöki Karán. 1978-ban megvédett műszaki egyetemi doktori disszertációjának témája a félvezető memóriaelemek számítógépes modellezése volt. Oklevelének megszerzése óta a BME Elektronikus Eszközök Tanszékén dolgozik, jelenleg adjunktusként. Kutatási területe: félvezető struktúrák modellezése, számítógépes tervezés. A HTE Félvezető Eszközök és Integrált Áramkörök Szakosztályának titkára.



DR. DROZDY  
GYŐZŐ

1978-ban szerzett oklevelet a BME Villamosmérnöki Kar műszaki fizika ágazatán. Diplomatervezéssel elnyerte a HTE különdíját a diplomatervezési pályázaton. A KFKI dolgozójaként nappali szakmérnöképzésben vett részt és 1980-ban szakmérnöki oklevelet szerzett. 1981-ben megvédett műszaki egyetemi doktori disszertációjának témája az ionimplantáció számítógépi modellezése volt. Jelenleg tudományos munkatárs a KFKI-ban és másodállású tanársegéd a BME Elektronikus Eszközök Tanszékén.

Ebből a határfelületi fluxusból nyerhetjük a parciális differenciálegyenlet határfeltételeit.

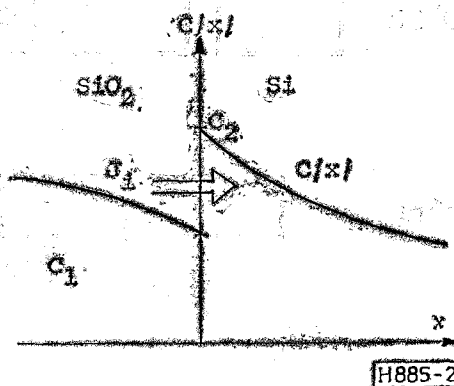
A magas hőmérsékletű folyamatok a  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ , valamint a  $\text{SiO}_2/\text{poliSi}$  határfelületen oxidáló közeg jelenlétében a határfelület eltolódását is előidézik. Ez a határfelület-eltolódás a

$$J_E = -v_{\text{ox}}(C_{\text{ox}} - \alpha C_{\text{Si}}) \quad (4)$$

járolékos adalékfluxussal írható le, ahol

- $v_{\text{ox}}$  az oxidáció sebessége,
- $\alpha$  a Si— $\text{SiO}_2$  térfogatarány (az egységnyi térfogatú szilíciumból keletkező szilíciumdioxid térfogata).

Megjegyezzük, hogy ilyenkor nem az adalékok áram-



2. ábra. Határfelületi transzport

lásáról van szó, hanem tulajdonképpen a határfelület halad át az adalékokon.

Elemi számításokkal kimutatható, hogy az oxidáció sebessége (az oxidrétegben lineárisan csökkenő oxigénkoncentráció feltételezésével)

$$v_{ox}(t) = \frac{v_{ox}(0)}{1 + \frac{z_{ox}(t)}{d}}, \quad (5)$$

ahol

- $v_{ox}(0)$  az oxidáció kezdeti sebessége zérus oxidréteg vastagság esetén,
- $z_{ox}(t)$  az oxidréteg vastagsága az adott időpillanatban,
- $d$  az oxidáció viszonyait leíró, hosszúság dimenziójú mennyiség.

A fenti összefüggésekben szereplő mennyiségek hőmérsékletfüggőek, és feltételezzük, hogy hőmérsékletfüggőségük az

$$Y(T) = Y_{\infty} e^{-\frac{W}{kT}} \quad (6)$$

egyetlen aktiválási energiájú Arrhenius összefüggéssel jellemezhető. Ebben az összefüggésben

- $W$  a folyamat aktiválási energiája,
- $T$  a folyamat hőmérséklete,
- $k$  a Boltzmann állandó,
- $Y_{\infty}$  az  $X$  mennyiség aszimptotikus értéke.

Nem térünk ki részletesen a diffúziós állandók hőmérséklet-, orientáció- és adalékfüggéseire, valamint az oxidáló közeg diffúziós állandót befolyásoló hatására. Ezen hatások leírására megfelelő modellek találhatóak a STEP programban.

### 3. Megoldó algoritmus

A Fick-egyenletekből származó parciális differenciálegyenleteket diszkrétizálva oldjuk meg. A diszkrétizálás lépésköze a szilíciumban  $\Delta x$ . Az oxidáció során az egységnyi térfogatú szilíciumból  $\alpha$ -szoros térfogatú szilícium-dioxid keletkezik, illetőleg nitridálás esetén

$\beta$ -szoros mennyiségű szilíciumnitrid jön létre. Ennek megfelelően az oxidban, illetve nitridben  $\alpha \cdot \Delta x$ , illetve  $\beta \cdot \Delta x$  osztásközt alkalmazunk. Az adalékkoncentrációk értékét a  $\Delta x$  osztásközü részek közepére vonatkoztatjuk, illetőleg az oxidrétegben az  $\alpha \cdot \Delta x$ , a nitridrétegben pedig a  $\beta \cdot \Delta x$  részek közepére. A szeregációs összefüggés (3) konzisztens értelmezése érdekében a  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ , illetve bármilyen más határfelület esetén a határfelület mindkét oldalán fél méretű cellákkal számolunk.

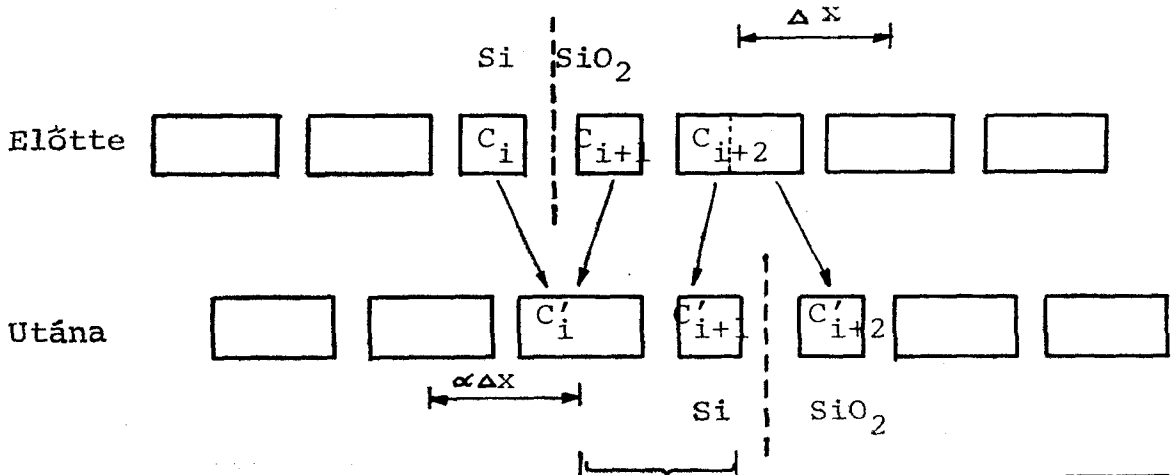
A következőkben a szilícium oxidálásának folyamatát szimuláló algoritmust vizsgáljuk, megjegyezve, hogy megfontolásaink érvényesek nitridálás esetén, továbbá az egykristályos szilícium helyett poliszilícium alkalmazásakor is.

Az oxidációs folyamat modelljét a 3. ábrán tüntetjük fel. A megoldás során a  $\Delta t_{ox}$  időlépésközt úgy választjuk meg, hogy az éppen  $\Delta x$  vastagságú szilícium oxidálásához szükséges időt jelentse. Így az időlépésköz az oxidáció szimulációja során változik, mivel az oxidáció sebessége az egyre vastagabb oxidréteg következtében csökken, ennek megfelelően egyre nagyobb időlépésköz adódik. Ez az időlépésköz növekedés a diffúziós egyenletek megoldásának pontosságát nem csökkenti, mert a diffúzió során az eloszlásfüggvények egyre simábbakká válnak.

Az ábra szerinti esetben a határfelület az  $i$ -ik és az  $i+1$ -ik elemi cellák között helyezkedik el. Az előzőekben elmondottak szerint tehát a határfelülettől balra helyezkedik el az utolsó, fél méretű szilícium-dioxid cella, melyben az adalékkoncentráció  $C_i$ , a határfelület jobb oldalán van az első – ugyancsak fél méretű – szilícium cella, melyben az adalékkoncentráció  $C_{i+1}$ , és ezt követi a következő, egész méretű szilícium cella, melyben az adalékkoncentráció  $C_{i+2}$ .

$\Delta t$  idő elteltével, amikor egy cellányi ( $\Delta x$  vastagságú) szilíciumréteg oxidálódik, a határfelület  $\Delta x$  értékkel tolódik jobbra modellünk szerint. Így a határfelülettől

- jobbra található fél szilícium cella az előző állapot  $C_{i+2}$  adalékkoncentrációjú cellájának jobb oldali fele, melyben most az adalékkoncent-



H885-3

3. ábra. Az oxidációs folyamat modellje egy cellányi szilícium oxidálása előtt és után

ráció a határfelületi fluxus következtében az eredetitől eltérő,  $C'_{i+2}$  értékű.

- A balra levő fél cella az a szilícium-dioxid fél cella, mely az előző állapot  $C_{i+2}$ -es szilícium cellájának bal oldali feléből keletkezett oxidot tartalmazza, ebben az adalékkoncentráció azonban a szilícium és szilícium-dioxid eltérő térfogata, valamint a határfelületi fluxus következtében  $C_{i+2}$ -től eltér, értékét a következőkben  $C'_{i+1}$ -gyel jelöljük.
- Ennek bal oldali szomszédja egy olyan egész méretű szilícium-dioxid cella, mely részben az előző állapot  $C_{i+1}$  adalékkoncentrációjú szilícium fél cellájának oxidációjából, részben pedig az előző állapot  $C_i$  adalékkoncentrációjú fél oxidcellájából jött létre, ebben most az adalékkoncentráció  $C'_i$ .

Az algoritmus főbb lépései a következők:

1. Kiszámítja a  $\Delta x$  vastagságú szilícium-dioxid réteg létrehozásához szükséges időt,

$$t_{ox} = \frac{\Delta x}{v_{ox}} \quad (7)$$

ahol  $v_{ox}$  értékét a hőmérséklet, az oxidréteg vastagsága, az oxidáló réteg és szilícium anyagi jellemzői határozzák meg.

2. Meghatározza valamennyi adalék koncentrációját az  $i$ -ik,  $i+1$ -ik,  $i+2$ -ik sorszámú cellákra a szegregáció és a  $\Delta t_{ox}$  idő alatti szilícium-dioxid határfelület eltolódását figyelembe véve, elhanyagolva viszont az ezek között a cellák közötti diffúziós adaléktranszportot. A határfelület áthelyeződik az  $i$ -ik és  $i+1$ -ik cellák közötti helyzetéből az  $i+1$ -ik és  $i+2$ -ik cellák közé.
3. Előállítja az egyes határfelületek közötti anyagrésekben a megváltozott határfelületeknek megfelelően az egyes adalékokra vonatkozó parciális differenciálegyenletek megoldását. A határfelületeken át ebben a megoldási fázisban zérus az adaléktranszport. A megoldás olyan  $\Delta t$  időlépésközzel történik, amely a differenciálegyenlet kellő pontosságú megoldását biztosítja, és melynek  $\Delta t_{ox}$  egész számú többszöröse.
4. Ha az oxidáció ideje még nem telt le, vagyis

$$t + \Delta t_{ox} < t_{ox} \quad (8)$$

akkor visszatérünk 1-re.

A 2. pontban szereplő koncentrációértékek a részletes számítás mellőzésével:

$$C'_i = \frac{1}{2} \cdot \left( C_i + \frac{C_{i+1}}{2} \right) - \frac{u}{2\alpha} \frac{s \cdot \left( C_i - \frac{C_{i+1}}{s} + \frac{C_{i+2}}{\alpha} \right)}{s+u} \quad (9)$$

$$C'_{i+1} = \frac{C_{i+2}}{\alpha} \quad (10)$$

$$C'_{i+2} = s \cdot \frac{C_{i+2} + u \cdot \left( C_i - \frac{C_{i+1}}{s} + \frac{C_{i+2}}{\alpha} \right)}{s+u} \quad (11)$$

Ezekben az összefüggésekben az  $u$  mennyiség a határfelületi fluxustól függ:

$$u = \frac{h}{3v_{ox}} \quad (12)$$

A leírt algoritmus arra is alkalmas, hogy a szimuláció során figyelembe vegye az oxidnövekedés sebességének adalékkoncentrációtól való függését is. Az algoritmus alkalmazásánál a felhasználó részére a kvantált oxidnövekedés okozhat problémákat. Az ebből származó nehézségek azonban az egyébként alapértelmezésben automatikusan számítható időlépésköz, vagy pedig a  $\Delta x$  érték megfelelő megválasztásával kiküszöbölhetők.

### 1. táblázat

A kísérleti szelet technológiai leírása

1.  $T = 980$  °C elődiffúzió,  $t = 40$  perc  
Bőr felületi koncentráció:  $10^{20}$  [1/cm<sup>3</sup>]
2.  $T = 1150$  °C behajtás, száraz oxidáló közegben,  $t = 2$  óra

83/05/17

STEP / SEMCCN

```

1..TITLE STEP PROBAFELADAT
2..GRID DYSI=0.02,DPTH=7.6,YMAX=7.6
3..SUBST DRNT=111,ELEM=P,CONC=3.5E15
A..PLOT TCTL=Y,CMIN=14,NOEC=7,WIND=8
5..PRINT TOTL=Y,HEAE=Y
6..COMMENT ELODIFFUZIO
7..STEP TYPE=PDEP,TIME=40,ELEM=E,CONC=1E20,TEMP=985
8..COMMENT BEHAJTAS
9..STEP TYPE=OXID,TEMP=1150,TIME=120,MODL=DRYD
10..END
    
```

H885-4

4. ábra. Az 1. táblázatban megadott technológia STEP bemeneti nyelven történő leírása

83/05/17

STEP / SEMCCN

```

STEP PROBAFELADAT
BEHAJTAS
STEP 2 START AT 10:28:28 STOP AT 10:54:48
ELAPSED CPU TIME: 2 MIN 7.240 SEC
OXIDATION IN DRY OXIGEN
=====
TOTAL STEP TIME = 529.00 MINUTES
INITIAL TEMPERATURE = 1150.00 DEGREES C.
OXIDE THICKNESS = 0.2278 MICRONS

LINEAR OXIDE GROWTH RATE = 0.0025 MICRONS/MINUTE
PARABOLIC OXIDE GROWTH RATE = 0.0000 MICRONS**2/MINUTE
OXIDE GROWTH PRESSURE = 1.000000 ATMOSPHERES

OXIDE SILICON SEGREGATION TRANSPORT I
I DIFFUSION I COEFFICIENT I COEFFICIENT I
=====
BORON I 5.9943850-C7 I 2.5821460-03 I 6.7473720-01 I 2.743360-02 I
PHOSPHOR I 1.6412150-C6 I 2.5305180-03 I 1.0000000-01 I 8.6806740-02 I
    
```

```

JUNCTION DEPTH I SHEET RESISTANCE
=====
3.600000 MICRONS I 59.5 OHMS/SQUARE
I C.402E+04 OHMS/SQUARE
    
```

H885-5

5. ábra. A szimulációs program által nyomtatott eredmény egy része, a 4. ábrán megadott technológiára vonatkozóan

Az 1. táblázatban leírt technológiához tartozó STEP bemeneti nyelven megadott technológiai leírás a 4. ábrán, az eredmények pedig az 5. és 6. ábrán

