

Экстракция параметров наноразмерных МДП-структур путем расчета вольт-фарадных характеристик

Д.В. Рязанцев, В.П. Грудцов

НПК «Технологический центр» (г. Москва)

Рассмотрено программное обеспечение для моделирования вольт-фарадных характеристик наноразмерных МДП-структур с использованием численных методов. Разработаны методика нахождения и алгоритм автоматической экстракции параметров наноразмерных МДП-структур. Проведено сравнение результатов моделирования вольт-фарадных характеристик МДП-структуры, полученных с помощью разработанных численно-аналитических моделей, с результатами аналогичных зарубежных симуляторов. Методика позволяет производить набор статистики по пластине с выводом результатов в режиме реального времени.

Ключевые слова: вольт-фарадные характеристики; математическое моделирование; наноразмерные МДП-структуры; экстракция параметров.

Прогресс в развитии микроэлектроники связан с миниатюризацией интегральных схем. Уменьшение размеров элементов приводит к усилению влияния наноразмерных эффектов и к необходимости введения корректных физико-математических моделей расчета электрофизических параметров.

Существующие коммерческие средства расчета электрофизических параметров структур с учетом квантовых эффектов имеют закрытые модели, которые практически невозможно подстроить под свои требования. Например, в приборно-технологической среде SYNOPSIS TCAD [1] используется полуклассическая модель (Density Gradient Quantization Model - DGQM), которая вносит квантовую поправку к электростатическому потенциалу и не учитывает кристаллографической ориентации подложки.

В настоящей работе ставится задача разработки программного обеспечения (ПО) для расчета вольт-фарадных характеристик (ВФХ) и экстракции параметров МДП-структуры из экспериментальных данных с учетом мирового опыта в области расчета квантовых эффектов в наноразмерных структурах для получения максимальной корректности и точности результатов с минимальным временем расчета.

В программной среде MATLAB с использованием его базовых функций разработано программное обеспечение, в котором реализованы следующие возможности:

- совместное решение уравнения Пуассона

$$\frac{\partial}{\partial x}(\epsilon(x) \frac{\partial V}{\partial x}) = -q \cdot \frac{p(x) - n(x) + N_D(x) - N_A(x)}{\epsilon_0} \quad (1)$$

и Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{1}{2m_a^*(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi_i(x) \right] + U(x) \psi_i(x) = E_i \psi_i(x) \quad (2)$$

с использованием приближения эффективных масс плотности состояний m^* [2, 3] (огибающая – парабола) для расчета распределения пространственного заряда с учетом квантовых эффектов с кристаллографической ориентацией подложки $\langle 100 \rangle$;

- расчет системы дифференциальных уравнений с использованием метода конечных разностей (переменная квадратная сетка);

- описание носителей заряда в полупроводнике с использованием статистики Ферми–Дирака

$$f(E) = \left[\exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad (3)$$

а также учет ионизации донорной или акцепторной примеси в подложке;

- использование модели, учитывающей зависимость ширины запрещенной зоны от температуры;

- использование метода Ньютона для решения нелинейной системы уравнений.

Проводилось сравнение результатов моделирования разработанного симулятора и приборно-технологической среды SYNOPSIS TCAD с полностью одинаковыми МДП-структурами (рис.1). В классическом приближении без учета квантовых эффектов результаты совпадают (рис.1,а, кривые 1 и 2). При включении моделей учета квантовых эффектов наблюдалось некоторое отличие характеристик вблизи границы с диэлектриком (см. рис.1,а, кривые 3 и 4), которое связано с различием квантовых моделей расчета (рис.1,б, кривые 2 и 3), но в целом результаты подчиняются общему закону.

Для экстракции параметров МДП-структур из ВФХ разработан итеративный алгоритм поиска параметров на основе сравнения экспериментальных данных с результатами расчета математической модели.

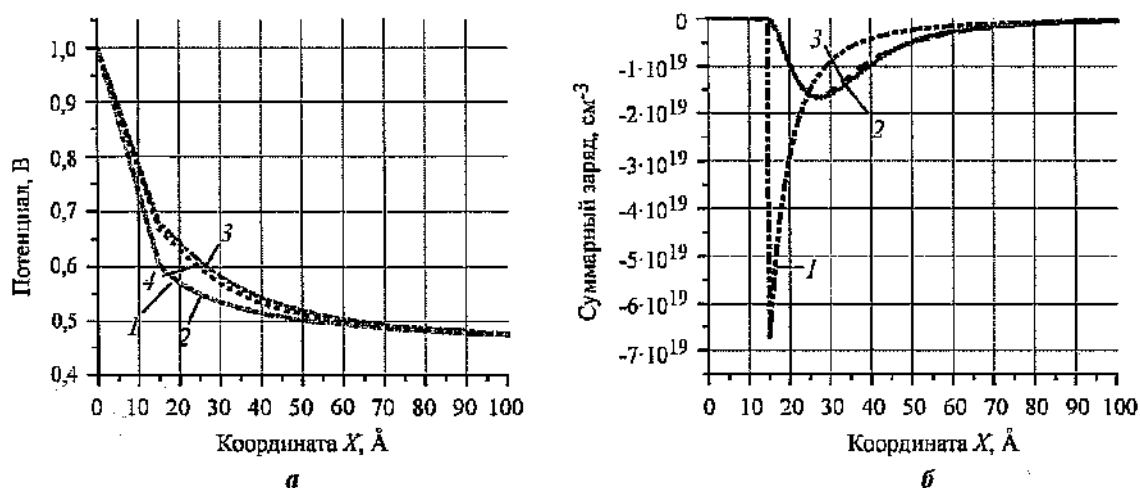


Рис. 1. Распределение потенциалов в МДП-структуре в глубь подложки с толщиной диэлектрика 1,5 нм и концентрацией доноров в подложке $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при смещении на затворе относительно подложки 1 В: 1 – SYNOPSIS TCAD с учетом классического распределения концентраций; 2 – разработанное ПО с учетом классического приближения; 3 – разработанное ПО (совместное решение уравнений Шредингера и Пуассона); 4 – DGQM SYNOPSIS TCAD (а) и распределение суммарной концентрации носителей заряда в МДП-структуре в глубь подложки с толщиной диэлектрика 1,5 нм и подложкой n -типа с концентрацией доноров $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при смещении на затворе относительно подложки 1 В: 1 – классическое; 2 – DGQM SYNOPSIS TCAD; 3 – разработанное ПО (совместное решение уравнений Шредингера и Пуассона) (б). Начало координат – контакт к границе диэлектрика

Алгоритм реализован следующим образом.

1. Получение экспериментальных ВФХ.
 2. Предварительный расчет параметров МДП-структуры по методике, основанной на классических моделях [4, 5]. Эти данные используются в дальнейшем в качестве предварительной оценки значений параметров (т.е. в качестве первого приближения).

3. Корректировка значения толщины подзатворного диэлектрика t_{ox} путем сравнения экспериментальных характеристик структуры в режиме обогащения с результатами расчета математической модели. Корректировка вносится до совпадения экспериментального графика и кривой, рассчитанной по математической модели, вплоть до их совпадения в пределах некоторого заданного диапазона ошибок.

Влияние параметра t_{ox} на ВФХ показано на рис.2.

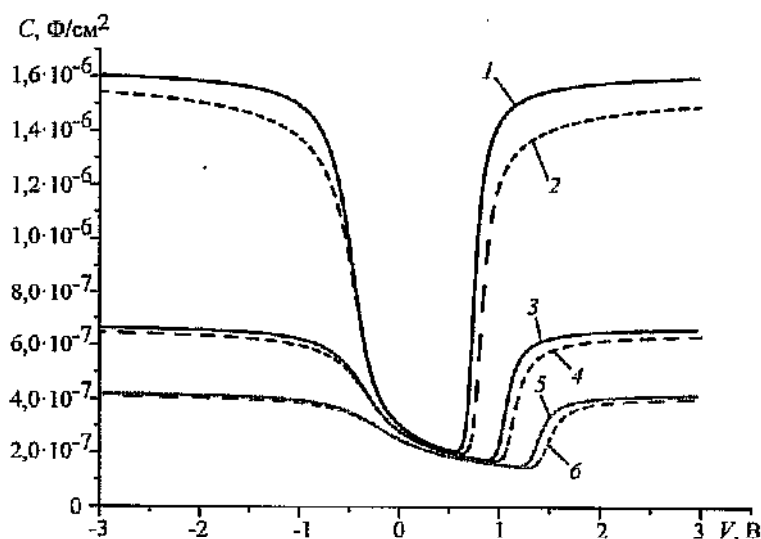


Рис.2. Результаты моделирования МДП-структуры при расчете в классическом приближении (сплошные линии) и в квантовом приближении (пунктирные линии) с разной толщиной диэлектрика: 2 нм (1, 2), 5 нм (3, 4), 8 нм (5, 6)

4. Итеративный поиск значений концентрации примеси в подложке N_{sub} и концентрации поверхностных состояний на границе Si-SiO₂ N_{ss} . В зависимости от типа применяемых характеристик поиск может быть выполнен двумя способами:

- используются только низкочастотные характеристики. На первом этапе выполняется поиск значения N_{sub} в предположении, что $N_{ss} = 0$. Это реализуется путем нахождения такого значения N_{sub} , что минимумы экспериментальной и рассчитанной кривых совпадут. Далее выполняется итеративное изменение N_{ss} и N_{sub} до достижения заданной точности. Критерием точности найденных значений является совпадение в некотором заданном диапазоне ошибок экспериментальной и рассчитанной кривых в режимах обеднения и слабой инверсии;

- используются высокочастотные и низкочастотные характеристики. В таком случае значение N_{sub} рассчитывается из высокочастотных характеристик, а поиск значения N_{ss} выполняется на основе низкочастотных кривых. Условием использования высокочастотной характеристики в данном случае является достаточно высокая частота, при которой влиянием поверхностных состояний можно пренебречь. Влияние параметров N_{sub} и N_{ss} на ВФХ представлено на рис.3.

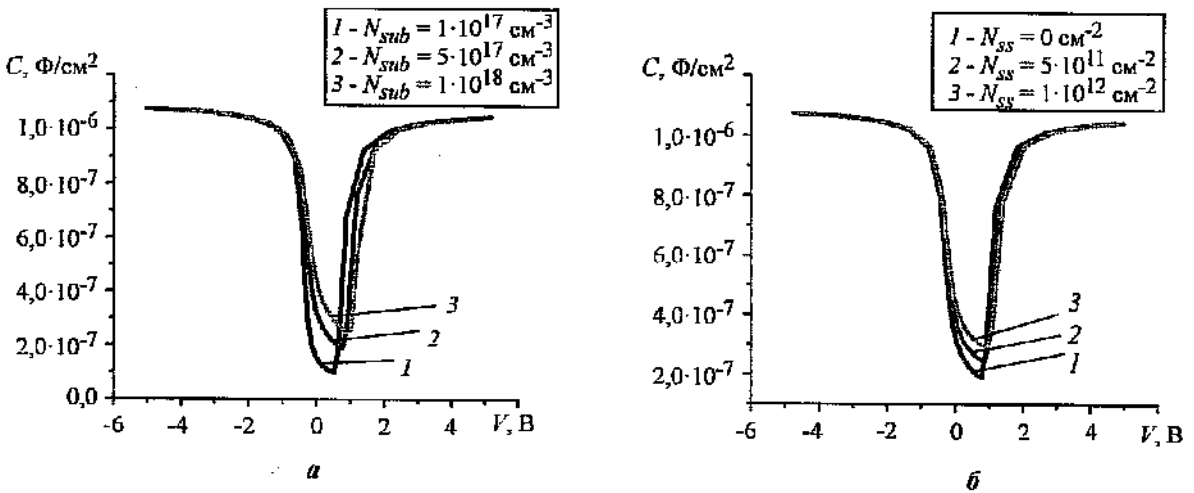


Рис. 3. Результаты моделирования МДП-структуры в квантовом приближении с разными значениями параметра N_{sub} (а) и N_{ss} (б)

5. Расчет дополнительных параметров структуры (напряжения плоских зон V_{fb} , порогового напряжения V_{th} , фиксированного заряда в окисле Q_{ox}) на основе аналитических выражений и скорректированных параметров.

Блок-схема работы алгоритма представлена на рис.4.

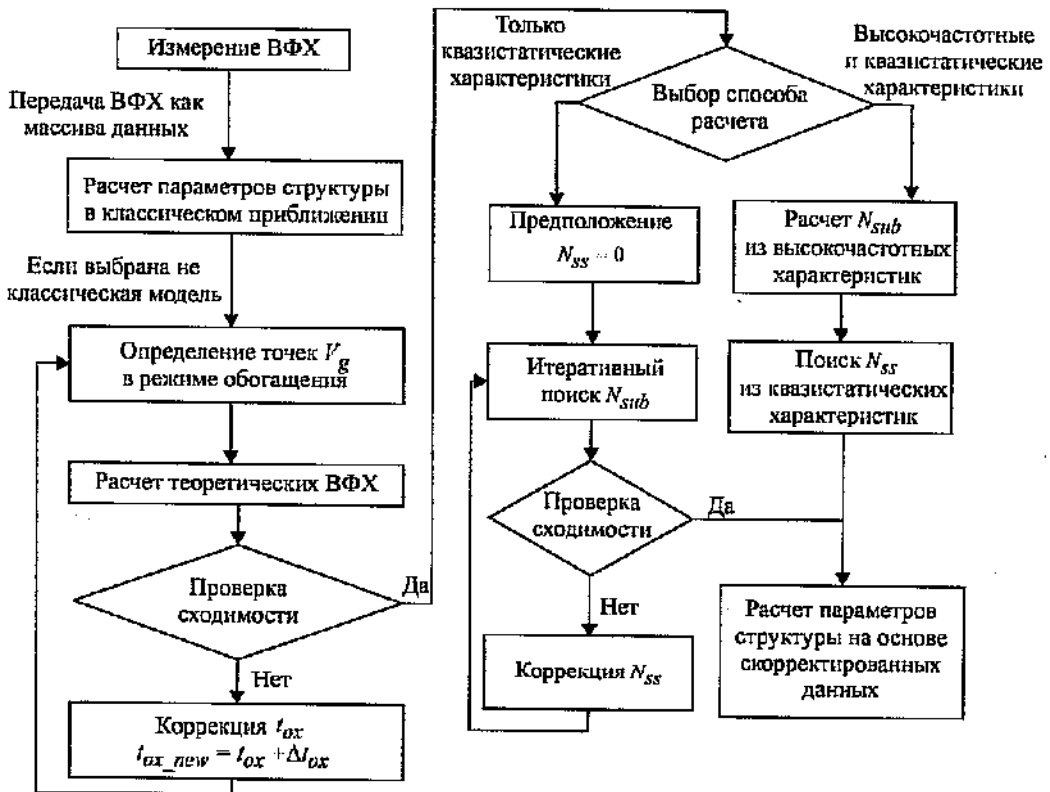


Рис. 4. Блок-схема алгоритма автоматической экстракции параметров МДП-структур

Расчет ВФХ для сверхтонкого подзатворного диэлектрика основан на самосогласованном решении уравнения Шредингера–Пуассона по конечно-разностной сетке в одномерном приближении. Для получения оптимального соотношения точности результата и скорости расчета, обеспечивающего возможность измерения в реальном времени, используются следующие численно-аналитические модели.

Аппроксимация интеграла Ферми–Дирака. Для расчета концентрации носителей в глубине полупроводника применимо выражение

$$n = N_{3D} F_{1/2}(\eta_F), \quad (4)$$

где N_{3D} – эффективная плотность состояний:

$$N_{3D} = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{\hbar^2} \right)^{3/2};$$

$F_{1/2}(\eta_F)$ – интеграл Ферми–Дирака порядка 1/2:

$$F_{1/2}(\eta_F) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{1 + \exp(\varepsilon - \eta_F)}.$$

Для поиска сходимости при использовании метода Ньютона необходимо рассчитывать производные на каждом шаге. Производная от интеграла Ферми–Дирака подчиняется следующему закону:

$$\frac{dF_j}{d\eta_F} = F_{j-1}.$$

Данные интегралы возможно рассчитать только численно. Прямой численный расчет интеграла приводит к точному результату, однако требует значительных затрат времени.

В работах [6, 7] предложено несколько аналитических выражений, основанных на разложении интеграла Ферми–Дирака в ряд. Для $-1/2 \leq j \leq 7/2$ ошибка оценки интеграла составляет не больше 10^{-5} . Данная аппроксимация позволяет значительно сократить время расчета интеграла с пренебрежимо малой ошибкой.

Параболическая аппроксимация потенциала. При решении уравнения Пуассона (1) в первом приближении используется параболическая аппроксимация потенциала:

$$\varphi_i(x) = -\frac{eN_{sub}}{2\varepsilon_i\varepsilon_0} \cdot (2xW_{dep} - x^2),$$

где W_{dep} – глубина слоя обеднения:

$$W_{dep} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_i\varepsilon_0\varphi_{si}}{eN_{sub}}}.$$

Данная аппроксимация позволяет более точно в первом приближении оценить распределение потенциала в полупроводнике, что сокращает количество итераций и в итоге – общее время моделирования.

Возможности среды MATLAB. Для решения уравнения Шредингера (2) используются возможности среды MATLAB. В частности, для нахождения собственных значений и собственных функций применяется функция `eig`. Найденные значения используются для расчета концентрации носителей в квантовой системе:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E)f(E)dE, \tag{5}$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} g(E)(1 - f(E))dE,$$

где E_c – дно зоны проводимости; E_v – потолок валентной зоны; $f(E)$ – функция распределения Ферми–Дирака (3); $g(E)$ – функция плотности состояний.

Для электронов в глубине подложки

$$g_{3D}(E) = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m^*(E - E_c)}, \tag{6}$$

где m^* – эффективная масса плотности состояний.

Учитывая (6), выражение (5) преобразовывается в формулу (4). При расчете одномерной потенциальной ямы необходимо использовать выражение для двумерной плотности состояний:

$$g_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2},$$

и (2) преобразовывается к виду

$$n(x) = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \sum_i \ln \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right) \right] |\psi_i(x)|^2,$$

где $|\psi_i(x)|^2$ – вероятность нахождения носителей в точке x , соответствующая энергетическому уровню E_i .

Выражения для дырок выводятся аналогично.

Общая блок-схема расчета теоретических ВФХ с учетом данных моделей показана на рис.5.

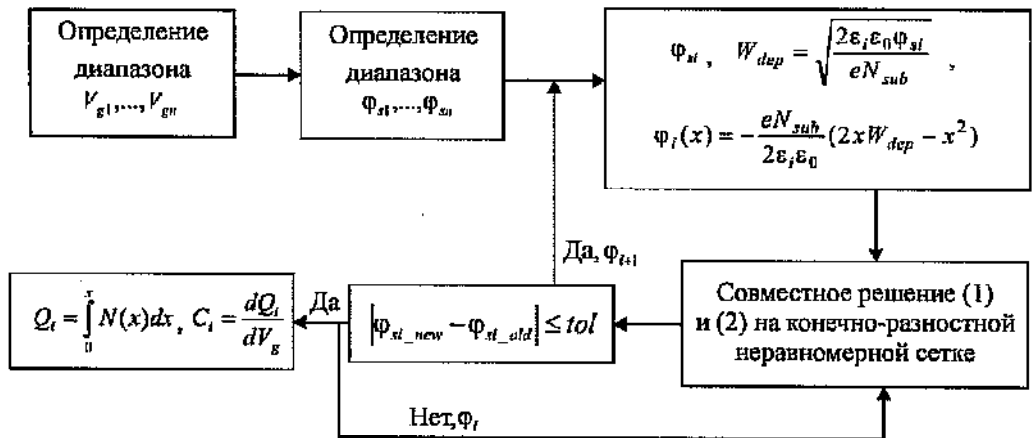


Рис.5. Блок-схема расчета ВФХ с учетом численно-аналитических моделей

Проведено сравнение теоретических ВФХ, рассчитанных с помощью разработанных численно-аналитических моделей и с использованием существующих симуляторов. Результаты сравнения представлены на рис.6. Видно, что теоретические ВФХ достаточно хорошо согласуются между собой во всех режимах.

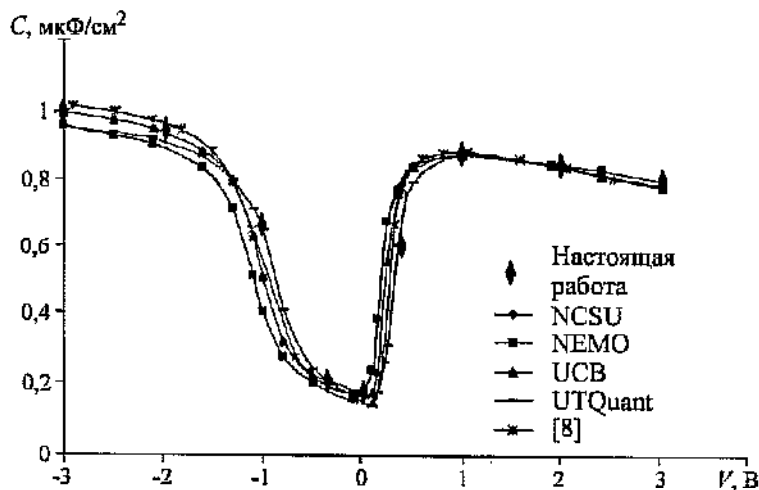


Рис.6. Сравнение результатов расчета ВФХ МДП-структуры (толщина диэлектрика 3 нм, подложка *p*-типа с концентрацией акцепторов $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, поликремниевый затвор *n*-типа с концентрацией доноров $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) по разработанным моделям с результатами расчета других квантово-механических симуляторов

В результате проделанной работы создано ПО для расчета ВФХ. ПО использовано для автоматизированной экстракции параметров МДП-структур при помощи измерительного комплекса, в состав которого входят анализатор полупроводниковых приборов Agilent B1500A и полуавтоматическая зондовая станция SUSS PA 300. С помощью данного комплекса проводится экспресс-контроль параметров МДП-структур и набор статистики по пластине с выводом результатов в реальном времени. В дальнейшем планируется введение новых моделей, в том числе модель электролита, и усовершенствование существующих.

Литература

1. <http://www.synopsys.com/tools/tcad/Pages/default.aspx> (дата обращения: 16.05.2014).
2. Пимер Ю., Кардона М. Основы физики полупроводников. – М.: Физматлит, 2002. – 560 с.
3. Validity of the parabolic effective mass approximation in silicon and germanium *n*-MOSFETs with different crystal orientations / Van J.L.P.J. der Steen, D. Esseni, P. Palestri et al. // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2007. – 54(8). – P. 1843–1851.
4. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Т.1. – М.: Мир, 1984. – 456 с.
5. Nicollian E.H., Brews J.R. MOS (Metal Oxide Semiconductor) physics and technology. – N. Y.: Wiley-Interscience, 1982. – 920 p.
6. Halen P.V., Pulfrey D.L. Accurate, short series approximations to Fermi–Dirac integrals of order $-1/2$, $1/2$, 1 , $3/2$, 2 , $5/2$, 3 and $7/2$ // J. Appl. Phys. – 1985. – Vol. 57. – № 12. – P. 5271–5274.
7. Van Halen P., Pulfrey D.L. Erratum: «Accurate, short series approximation to Fermi–Dirac integrals of order $-1/2$, $1/2$, 1 , $3/2$, 2 , $5/2$, 3 , and $7/2$ » [J. Appl. Phys. – 1985. – Vol. 57. – P. 5271] // J. Appl. Phys. – 1986. – Vol. 59. – №. 6. – P. 2264.
8. Jianxin Z. Quantum mechanical simulation of a metal-oxide-semiconductor system, 2003. – URL: <http://scholarbank.nus.sg/handle/10635/13550> (дата обращения: 16.05.2014).

Статья поступила 10 апреля 2014 г.

Рязанцев Дмитрий Владимирович – инженер НИК «Технологический центр» (г. Москва). Область научных интересов: технология микро- и нанoeлектроники, математическое моделирование полупроводниковых устройств. E-mail: D.Ryazancev@tcen.ru

Грудцов Виталий Павлович – инженер НИК «Технологический центр» (г. Москва). Область научных интересов: технология микро- и нанoeлектроники, математическое моделирование полупроводниковых устройств.