

УДК 519.2:541.1

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ АЛГОРИТМ ПРОЦЕССА СЕГРЕГАЦИИ ЛЕГИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ НА ГРАНИЦЕ ВОЛНЫ ОКИСЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПОДЛОЖКАХ

Г. А. Тарнавский¹, С. И. Шпак¹, М. С. Обрехт²

В работе рассматривается идеология приближенного моделирования сложного физико-химического процесса сегрегации легирующих примесей, имплантированных в базовый материал, при движении по нему волны окисления, а также реализующий эту идеологию компьютерный алгоритм. Приводятся примеры расчетов сегрегации бора, мышьяка, фосфора и сурьмы в кремнии на границе “кремний/двуокись кремния”.

Ключевые слова: численные методы, краевые задачи, сегрегационные эффекты, легирующие примеси, математическое моделирование, параллельные вычисления.

Введение. Сегрегация — сложный физико-химический процесс взаимодействия волны (границы) окисления базового материала типа кремния Si/SiO₂ с легирующими примесями различных химических элементов типа В, Sb, As, Р и т.п., имплантированными в этот базовый материал (подложку) для получения необходимых полупроводниковых свойств. Физический механизм сегрегации связан с возникновением на границе окисел/материал электромагнитного поля с узлолокализованным и кратковременным потенциалом высокой интенсивности, выталкивающим из окисла (сегрегация типа эжекции) или втягивающим в окисел (сегрегация типа инжекции) в зависимости от конфигурации внешних электронных оболочек легирующих химических элементов. В частности, на волне Si/SiO₂ имеют место сегрегационные эффекты инжекции бора В и эжекции фосфора Р, мышьяка As и сурьмы Sb с образованием областей высоких градиентов их концентраций в направлении по нормали к фронту волны, также узлолокализованных в зоне движения границы окисления подложки.

Квантовомеханический подход к решению этой проблемы наталкивается на значительные трудности построения операторов Гамильтона для уравнения Шредингера (см., например, [1]) и практически нереализуем даже на современной вычислительной технике. Это приводит к необходимости применения более упрощенных подходов и создания приближенных моделей сегрегации [2–7] для разработки реально функционирующих алгоритмов не только для 1D, но и 2D (и даже 3D) задач. В частности, применяющиеся в настоящее время методы моделирования сегрегации можно подразделить на три основные группы (см., например, [6]). В первой из них сегрегация, как отдельный физический процесс, не выделяется, а ее расчет производится в рамках решения уравнений диффузии примеси в базовом материале с использованием специального сегрегационного члена при записи полных диффузионных потоков на границе расчетной ячейки (см. [2–4]). В подходах второго типа (см., например, [7]) сегрегационные соотношения используются как краевые условия на некоторой подвижной криволинейной границе, имитирующей движение волны окисления, положение которой априори неизвестно и должно определяться в процессе решения полной задачи типа Стефана. Третья, наиболее простая и фактически одномерная модель, заключается в “принудительном” и достаточно произвольном выносе некоторой части примеси из области окисла в область материала. Подобные подходы наряду с некоторыми определенными достоинствами имеют и ряд недостатков. Полная задача о разработке полупроводниковых материалов включает в себя ряд достаточно сложных основных подзадач (сегментов): сегмент имплантации легирующих примесей в базовый материал; задачу о диффузии этих примесей; проблему окисления материала и сегрегационную задачу на границе окисел/материал. Корректная декомпозиция полной задачи и последовательный расчет ее отдельных сегментов, на наш взгляд, позволяет наиболее эффективно моделировать сложные физические процессы. Аналогичная методология декомпозиции полной задачи и разработка ее отдельных моделей-сегментов успешно применялась в задачах механики сплошной среды (см., например, [8–9]). Построению такой модели и реализующего ее алгоритма посвящена и настоящая работа.

¹ Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, ул. Институтская, 4/1, 630007 Новосибирск; e-mail: shpak@itam.nsc.ru

² Siborg Systems Inc., University of Waterloo, Department of Electrical and Computer Engineering, Waterloo, Ontario, Canada, N2L3G1; e-mail: obrecht@siborg.ca

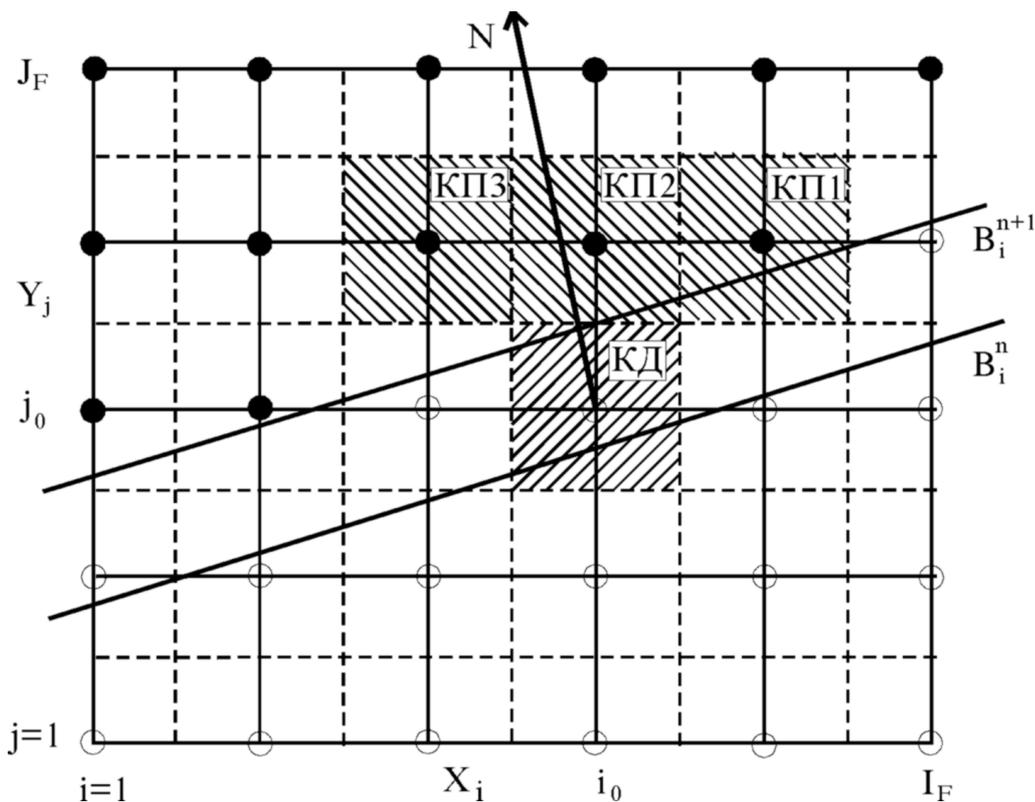


Рис. 1

Постановка задачи. Область \mathcal{R} , занятая базовым материалом (см. рис. 1), покрыта дискретной сеткой

$$\mathcal{R}_{ij} = X_i \times Y_j, \quad i \in [1, I_F], \quad j \in [1, J_F]. \quad (1)$$

В каждом сеточном узле определены значения концентрации легирующих примесей C_{ij} . По области \mathcal{R} идет волна окисления материала, положение которой известно на n и $(n + 1)$ -м слое по времени и задано дискретной функцией B_i^n и B_i^{n+1} . Волна, проходя за время $\tau = t^{n+1} - t^n$, в частности, через узел сетки (i_0, j_0) , сегрегирует (выталкивает или втягивает, в дальнейшем будет использоваться термин “выталкивание”, имея в виду “втягивание” как обратный процесс, возможный для другого типа примеси) из него часть примеси. Вопрос моделирования: какую количественно часть примеси и куда конкретно выталкивает волна из узла (i_0, j_0) ?

Часть I. Физико-математические модели. Законы, гипотезы и приближения.

1. Закон сегрегации. Гипотеза бесконечно тонкого скачка. Приближенная модель основана на замене сложной физико-химической природы процесса ее существенно осредненным аналогом, который заключается в следующем: волна окисел/материал, двигаясь в подложке, устанавливает в каждой точке области соотношение концентраций перед и за фронтом по нормали к нему с учетом направления его движения, определяемое выражением, называемым иногда законом сегрегации:

$$m = \frac{C_+}{C_-}, \quad (2)$$

где C_+ и C_- есть концентрация перед и за фронтом скачка соответственно. Величина m , называемая коэффициентом сегрегации, приближенно зависит от ряда факторов

$$m = m_0 \cdot e^{-W_s/kT}, \quad (3)$$

где m_0 — предэкспоненциальный множитель, W_s — потенциал сегрегации, T — температура подложки, k — постоянная Больцмана. Значения m_0 и W_s существенно различны для разных химических элементов и определяются конкретным типом примеси во взаимодействии с конкретным типом волны (в частности, ниже в тестовых экспериментах рассматриваются В, As, Sb, P, Si/SiO₂). Соотношение (3), вообще говоря, справедливо для равновесных процессов, однако в данную гипотезу бесконечно тонкого скачка (2)

может быть введена поправка на неравновесность, которая может быть учтена введением эффективного коэффициента сегрегации

$$m^* = \frac{1}{\eta(1-B) + B/m},$$

где m — равновесный коэффициент сегрегации, η — коэффициент отношения объема исходного материала к объему его оксида ($\eta = 0,44 = V_{\text{Si}}/V_{\text{SiO}_2}$), $B = \lambda/(\lambda + v_0)$, λ — константа скорости реакции сегрегации (для В в Si, например, $\lambda = 7,5 \cdot 10^5 \cdot \exp(-2\text{eV}/kT)$ мкм/мин), v_0 — скорость окисления.

2. Закон сохранения массы. Гипотеза выталкивания (трехточечная модель). Условно определим области квазинепрерывности распределения примеси в ячейках, окружающих узлы расчетной сетки. Эти ячейки (клетки) разделяются границами с полуцелым значением индекса (штриховые линии на рис. 1). Так, границы клетки, окружающие узел (i, j) с координатами (x_i, y_j) , имеют соответственно координаты $(x_{i-1/2}, y_{j-1/2})$, $(x_{i+1/2}, y_{j+1/2})$, где

$$\begin{aligned} x_{i+1/2} &= 0,5(x_{i+1} + x_i), & x_{i-1/2} &= 0,5(x_i + x_{i-1}), \\ y_{j+1/2} &= 0,5(y_{j+1} + y_j), & y_{j-1/2} &= 0,5(y_j + y_{j-1}). \end{aligned} \quad (4)$$

Масса примеси K_{ij} , находящаяся в клетке с центром (i, j) и площадью S_{ij} , есть

$$K_{ij} = C_{ij}S_{ij} = C_{ij}[(x_{i+1/2} - x_{i-1/2})(y_{j+1/2} - y_{j-1/2})]. \quad (5)$$

Трехточечная гипотеза выталкивания примеси формулируется следующим образом: если волна окисла прошла за время τ через центр (i, j) клетки-донора (в дальнейшем сокращенно КД), т.е. при

$$B_i^n \leq y_j \leq B_i^{n+1}, \quad (6)$$

из нее выталкивается масса примеси ΔK_{ij} , распределяемая между клетками-перципиентами (в дальнейшем КП), прилегающими непосредственно к КД и находящимися перед фронтом волны по направлению ее движения. Центры КП находятся в узлах расчетной сетки

$$\text{КП1} : (i + i_1, j + j_1), \quad \text{КП2} : (i + i_2, j + j_2), \quad \text{КП3} : (i + i_3, j + j_3). \quad (7)$$

Примем для определенности, что КП2 есть клетка, в которую “направлен” вектор нормали к фронту волны, проведенный из центра КД, а КП1 и КП3 прилегают к КП2 соответственно при движении в положительном направлении (против часовой стрелки) по углу, отсчитываемому от положительного направления оси X . Таким образом,

$$\Delta K_{ij} = \sum_{\ell=1}^3 \Delta K_{\ell} = \Delta K_{i+i_1, j+j_1} + \Delta K_{i+i_2, j+j_2} + \Delta K_{i+i_3, j+j_3}. \quad (8)$$

Соотношение (8) есть закон сохранения массы и алгоритм автоматически обеспечивает его выполнение во всех расчетных ситуациях.

3. Триангуляция области. Направление выталкивания. Рассмотрим более подробно фрагмент расчетной сетки, в центре которого находится заштрихованная КД (рис. 2), окруженная возможными КП.

Направление выталкивания примеси и координаты КП определяются направлением угла α нормали к фронту волны окисла, проведенному из центра (i, j) КД:

$$\alpha_{ij} = \frac{\pi}{2} + \gamma_{ij}, \quad \text{если } B_i^{n+1} > B_i^n, \quad (9.1)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{3\pi}{2} + \gamma_{ij}, \quad \text{если } B_i^{n+1} < B_i^n, \quad (9.2)$$

где γ — угол наклона касательной фронта к X -направлению системы координат

$$\gamma_{ij} = \arctg \left(\frac{B_{i+1}^{n+1} - B_{i-1}^{n+1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right). \quad (10)$$

Здесь и в дальнейшем все угловые характеристики отсчитываются от положительного направления оси X против часовой стрелки и их значения лежат в интервале $[0, 2\pi)$, за несколькими исключениями, связанными с удобством программирования.

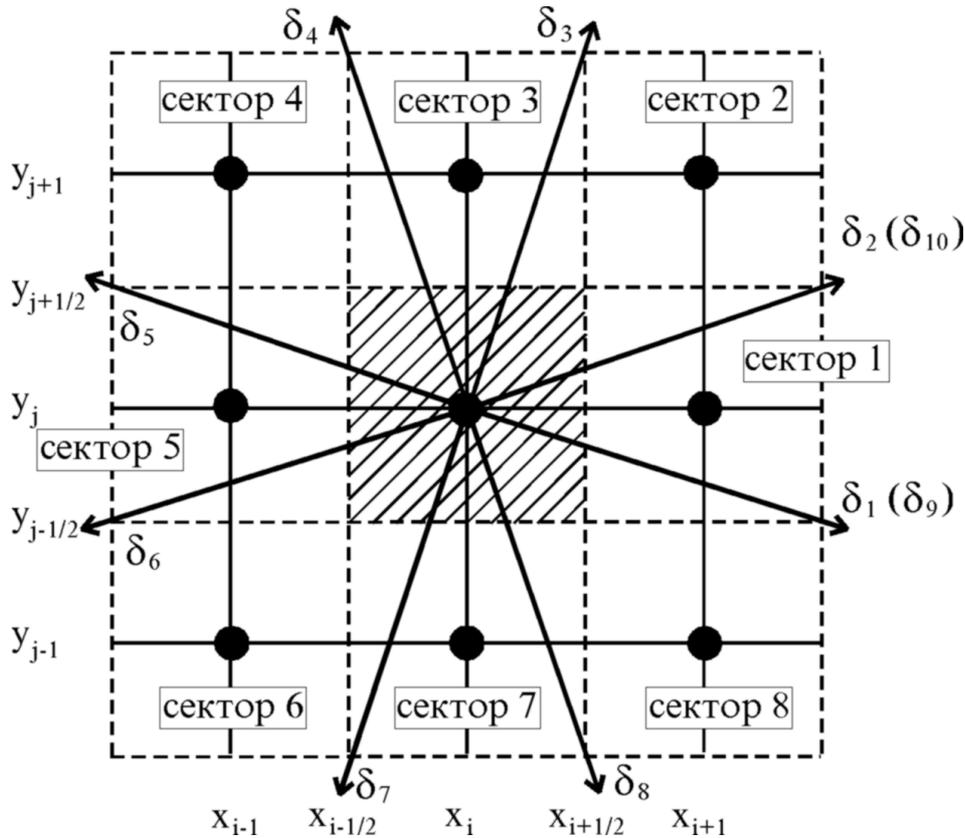


Рис. 2

Из центра КД производится угловая триангуляция ее окрестности — разбивка на сектора обзора, т.е. на углы, под которыми “видны” все соседние клетки, возможные КП. Границы секторов обзора определяются углами δ_k , и полностью сектор имеет величину

$$\Delta_k = \delta_{k+1} - \delta_k, \quad k \in [1, 8]. \tag{11}$$

При попадании вектора нормали в сектор k угловые координаты всех трех КП определяются как

$$\text{для КП1: } \Delta_{k-1} = \delta_k - \delta_{k-1}, \tag{12.1}$$

$$\text{для КП2: } \Delta_k = \delta_{k+1} - \delta_k, \tag{12.2}$$

$$\text{для КП3: } \Delta_{k+1} = \delta_{k+2} - \delta_{k+1}. \tag{12.3}$$

Для унификации использования (11) и (12) в секторах 1, 7 и 8 удобно расширить массивы значений δ_k , $k \in [1, 8]$ до δ_k , $k \in [0, 10]$, введя

$$\delta_0 = \delta_8 - 2\pi, \quad \delta_9 = \delta_1 + 2\pi, \quad \delta_{10} = \delta_2 + 2\pi. \tag{13}$$

Значения δ_k определяются формулами

$$\begin{aligned} \delta_1 &= -\text{arctg}(ay/cx), & \delta_2 &= \text{arctg}(by/cx), \\ \delta_3 &= \text{arctg}(cy/bx), & \delta_4 &= \text{arctg}(cy/ax), \\ \delta_5 &= \text{arctg}(by/dx), & \delta_6 &= \text{arctg}(ay/dx), \\ \delta_7 &= \text{arctg}(dy/ax), & \delta_8 &= \text{arctg}(dy/bx), \end{aligned} \tag{14}$$

где

$$\begin{aligned} ay &= y_j - y_{j-1}, & ax &= x_i - x_{i-1}, \\ by &= y_{j+1} - y_j, & bx &= x_{i+1} - x_i, \\ cy &= y_{j+2} + y_{j+1} - 2y_j, & cx &= x_{i+2} + x_{i+1} - 2x_i, \\ dy &= 2y_j - y_{j-1} - y_{j-2}, & dx &= 2x_i - x_{i-1} - x_{i-2}. \end{aligned} \tag{15}$$

На границах расчетной области формулы (15) корректируются фиктивным расширением (достройкой) сетки с условием ее симметрии относительно границ.

4. Координаты центров клеток-перципиентов. Положение центров КП1, КП2 и КП3, определенные общими формулами (7), конкретизируются после определения сектора, в котором находится вектор нормали, и в (7) должны быть подставлены следующие значения:

$$\begin{aligned}
 \text{сектор 1 : } & i_1 = 1, \quad j_1 = -1, \quad i_2 = 1, \quad j_2 = 0, \quad i_3 = 1, \quad j_3 = 1; \\
 \text{сектор 2 : } & i_1 = 1, \quad j_1 = 0, \quad i_2 = 1, \quad j_2 = 1, \quad i_3 = 0, \quad j_3 = 1; \\
 \text{сектор 3 : } & i_1 = 1, \quad j_1 = 1, \quad i_2 = 0, \quad j_2 = 1, \quad i_3 = -1, \quad j_3 = 1; \\
 \text{сектор 4 : } & i_1 = 0, \quad j_1 = 1, \quad i_2 = -1, \quad j_2 = 1, \quad i_3 = -1, \quad j_3 = 0; \\
 \text{сектор 5 : } & i_1 = -1, \quad j_1 = 1, \quad i_2 = -1, \quad j_2 = 0, \quad i_3 = -1, \quad j_3 = -1; \\
 \text{сектор 6 : } & i_1 = -1, \quad j_1 = 0, \quad i_2 = -1, \quad j_2 = -1, \quad i_3 = 0, \quad j_3 = -1; \\
 \text{сектор 7 : } & i_1 = -1, \quad j_1 = -1, \quad i_2 = 0, \quad j_2 = -1, \quad i_3 = 1, \quad j_3 = -1; \\
 \text{сектор 8 : } & i_1 = 0, \quad j_1 = 1, \quad i_2 = 1, \quad j_2 = -1, \quad i_3 = 1, \quad j_3 = 0.
 \end{aligned} \tag{16}$$

На границах расчетной области все формулы (16) корректируются специальным образом во избежание выхода индексов за пределы определения (1).

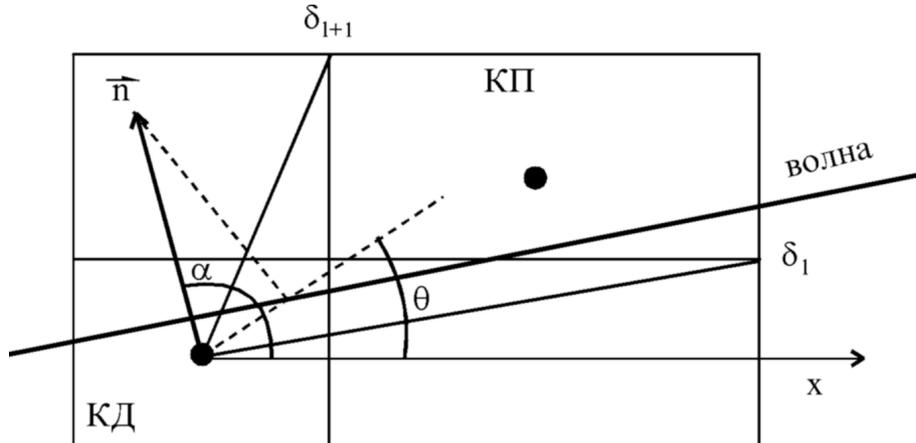


Рис. 3

5. Весовые множители распределения масс. Выносимая из КД масса примеси ΔK_0 распределяется между тремя КП (см. (8)) с безусловным выполнением закона сохранения масс. Каждая из этих КП получает свою долю массы

$$\Delta K = \sum_{\ell=1}^3 \Delta K_{\ell}, \quad \Delta K_{\ell} = f_{\ell} \Delta K, \quad \ell = 1, 2, 3. \tag{17}$$

Для физически обоснованного определения значений весовых множителей f_{ℓ} рассмотрим рис. 3 и определим поток вектора \mathbf{n} , исходящий из КД, в сектор захвата $\Delta_{\ell} = \delta_{\ell} - \delta_{\ell-1}$ одной из КП. Заметим, что сектор захвата клеткой-перципиентом “излучения”, исходящего из КД, естественно, равен углу обзора, под которым эта КП видна из центра КД. Тогда интенсивность излучения в сектор δ_{ℓ} есть

$$I = \int_{\delta_{\ell}}^{\delta_{\ell+1}} n_{\theta}(\theta) d\theta = N \int_{\delta_{\ell}}^{\delta_{\ell+1}} \cos(\alpha - \theta) d\theta = N [\sin(\alpha - \delta_{\ell}) - \sin(\alpha - \delta_{\ell+1})]. \tag{18}$$

После несложных, но громоздких тригонометрических выкладок (18) может быть преобразована к виду

$$I = 2N \sin\left(\frac{\delta_{\ell+1} - \delta_{\ell}}{2}\right) \cos\left(\alpha - \frac{\delta_{\ell+1} + \delta_{\ell}}{2}\right). \tag{19}$$

В этом виде (19) имеет ясный физический смысл. Первый член $\sin((\delta_{\ell+1} - \delta_{\ell})/2)$ представляет влияние размера сектора захвата на поток “излучения” в него: при его уменьшении $\delta_{\ell+1} \rightarrow \delta_{\ell}$ уменьшается и поток

в него, становясь в пределе равным нулю. Второй член $\cos(\alpha - (\delta_{\ell+1} + \delta_\ell)/2)$ сопоставляет направление потока, определяемое его углом нормали α и положением угловой средней линии $(\delta_{\ell+1} + \delta_\ell)/2$ сектора захвата. При совпадении направлений $\alpha = (\delta_{\ell+1} + \delta_\ell)/2$, естественно, максимум потока приходится именно в этот сектор (значение \cos максимально). Таким образом, захват массы примеси, исходящей из КД в рассматриваемую КП, пропорционален

$$Z \sim \int_{\ell} I_{\ell}^2 ds = I^2 S_{\ell}, \quad (20)$$

где S_{ℓ} — площадь КП.

Окончательно весовой множитель f_{ℓ} в (17), исходя из (19)–(20), должен быть определен как

$$f_{\ell} = \mu \sin^2 \left(\frac{\delta_{\ell+1} - \delta_{\ell}}{2} \right) \cos^2 \left(\alpha - \frac{\delta_{\ell+1} + \delta_{\ell}}{2} \right) S_{\ell}, \quad (21)$$

где μ — нормировочный множитель. Распределение массы, исходящей из КД по соответствующим КП, представляется в виде

$$\Delta K_{\ell} = \mu \sin^2(\Delta'_{\ell}) \cos^2(\alpha - \beta_{\ell}) S_{\ell} \Delta K, \quad (22)$$

$$\mu = \frac{1}{\sum_{\ell} [\sin^2(\Delta'_{\ell}) \cos^2(\alpha - \beta_{\ell}) S_{\ell}]}, \quad (23)$$

где

$$\Delta'_{\ell} = (\delta_{\ell+1} - \delta_{\ell})/2, \quad (24)$$

$$\beta_{\ell} = (\delta_{\ell+1} + \delta_{\ell})/2. \quad (25)$$

Заметим, что вместо β_{ℓ} , определяемым (25), можно использовать β'_{ℓ} — угол между центрами КД и КП:

$$\beta'_{\ell} = \arctg \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \right). \quad (26)$$

В случае равномерных сеток $\beta_{\ell} = \beta'_{\ell}$. Подчеркнем, что распределение (22) и нормировка (23) автоматически обеспечивают выполнение закона сохранения массы (17).

6. Закон сегрегации. Гипотезы предельного перехода. В предыдущем пункте было определено, каким образом (количественно) следует распределять массу ΔK , выносимую из КД, по различным КП. Теперь следует определить, сначала качественно, на уровне построения некоторых модельных приближений, а затем на их основе — количественно, какую именно массу ΔK следует выносить из КД. Это достаточно сложная для 2D, и тем более для 3D-задач, проблема.

В п. 1. была сформулирована гипотеза бесконечно тонкого скачка, используемая в данном комплексе моделирования физико-математических аспектов проблемы. В математическом смысле это означает замену реально волны окисления, имеющей хотя и малую, но конечную толщину, разрывным фронтом криволинейной конфигурации. Наличие разрыва делает неопределенным понятие порядка аппроксимации непрерывных функций их дискретными аналогами, и здесь можно говорить лишь о порядке так называемой слабой аппроксимации. “. . . Наличие в расчетной области сильных разрывов сразу понижает любой порядок аппроксимации до первого . . .” [10]. Подобные предельные переходы требуют особого внимания, осторожности и аккуратности в постановке условий на скачке — перед и за его фронтом.

Закон сегрегации (2), записанный в таком виде, требует точного определения понятий C_+ и C_- как предельных значений некоторых непрерывных функций или их дискретных аналогов, определенных в узлах расчетной сетки. Подчеркнем, что граница окисления как математический разрыв не обязательно проходит по этим узлам (необходимо также иметь в виду ее динамику во времени), что делает достаточно затруднительным построение идеологии “сноса” значений концентраций C_{ij} , фактически некоторой интерполяции на границу раздела

$$C_+ = \text{Int} (C_{ij}^1), \quad C_- = \text{Int} (C_{ij}^2), \quad (27)$$

где в символической форме представлены C_{ij}^1 и C_{ij}^2 — значения концентраций перед и за фронтом разрыва в узлах расчетной сетки в непосредственной окрестности точки разрыва, в которую производится предельный переход. В представляемом алгоритме предлагаются следующие модели предельного перехода:

$$C_- = C_{ij}^{n+1}, \quad (28)$$

$$C_+ = \sum_{\ell=1}^3 f_{\ell} C_{\ell}^{n+1}, \quad (29)$$

где C_{ij} — концентрация примеси в центрах КД, C_1, C_2, C_3 — их концентрации в центрах трех КП, а весовые множители f_{ℓ} такие же, как при расчете распределения массы по трем КП (21). Индексы центров КП приведены в (7) и (16). “Неявность” предельного перехода позволяет обеспечить существенно большую устойчивость вычислительного алгоритма. Заметим, что в численных экспериментах использовался и другой предельный переход (29)

$$C_+ = C_{i+i_2, j+j_2}^{n+1}, \quad (30)$$

который в отдельных случаях (при большой кривизне фронта разрыва) работал более устойчиво, чем (29), уступая ему по точности в основных стандартных ситуациях.

Для получения значений ΔK проведем цепочку выкладок (для краткости и унификации обозначений для КД вместо C_{ij}^{n+1} будем использовать C_0^{n+1}). Пусть

$$m \stackrel{df}{=} \frac{C_+}{C_-} = \frac{\sum_{\ell=1}^3 f_{\ell} C_{\ell}^{n+1}}{C_0^{n+1}}. \quad (31)$$

На n -слое по времени в КД и КП содержалась масса примеси (S — площади соответствующих клеток):

$$K_0^n = C_0^n S_0, \quad K_{\ell}^n = C_{\ell}^n S_{\ell}, \quad \ell = 1, 2, 3. \quad (32)$$

После выноса массы из КД и распределения ее по КП имеем с учетом (17)

$$K_0^{n+1} = K_0^n - \Delta K, \quad K_{\ell}^{n+1} = K_{\ell}^n + \Delta K_{\ell} = K_{\ell}^n + f_{\ell} \Delta K. \quad (33)$$

Из (33) определяются новые концентрации:

$$\begin{aligned} C_0^{n+1} &= \frac{K_0^{n+1}}{S_0} = \frac{K_0^n - \Delta K}{S_0} = C_0^n - \frac{\Delta K}{S_0}, \\ C_{\ell}^{n+1} &= \frac{K_{\ell}^{n+1}}{S_{\ell}} = \frac{K_{\ell}^n + f_{\ell} \Delta K}{S_{\ell}} = C_{\ell}^n + \frac{f_{\ell} \Delta K}{S_{\ell}}, \quad \ell = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (34)$$

Подставляя (34) в (35), получим

$$m = \frac{\sum_{\ell=1}^3 f_{\ell} (C_{\ell}^n + f_{\ell} \Delta K / S_{\ell})}{C_0^n - \Delta K / S_0}. \quad (35)$$

Из (35) уже можно определить значение выносимой массы

$$m C_0^n - m \Delta K / S_0 = \sum_{\ell=1}^3 f_{\ell} C_{\ell}^n + \Delta K \sum_{\ell=1}^3 f_{\ell}^2 / S_{\ell},$$

откуда окончательно

$$\Delta K = \frac{m C_0^n - \sum_{\ell=1}^3 f_{\ell} C_{\ell}^n}{m / S_0 + \sum_{\ell=1}^3 f_{\ell}^2 / S_{\ell}}. \quad (36)$$

Выражение (36) справедливо для обоих типов сегрегации:

- а) $m > 1 \Rightarrow \Delta K > 0$ (эжекция примеси),
- б) $m < 1 \Rightarrow \Delta K < 0$ (инжекция примеси).

7. Порядок следования операций в алгоритме. Выполнение описанных выше процедур происходит в следующей последовательности:

- 1) подготовка операций, ввод определяющих параметров и построение сетки;
- 2) начало итерационного цикла;
- 3) координатные циклы — последовательное сканирование по расчетной области;

- 4) поиск по заданному положению границы волны окисла координатной позиции действия алгоритма — центра КД (i, j) ;
- 5) определение угла наклона границы и ее нормали (10), (9);
- 6) триангуляция расчетной области (15), (14), (13), (12);
- 7) определение координат трех КП (7), (16);
- 8) расчет весовых множителей (23), (24), (25), (21);
- 9) расчет значения выносимой из КД массы (36);
- 10) расчет значений вносимых в КП масс (22);
- 11) расчет новых концентраций (34);
- 12) конец координатных циклов;
- 13) проверка решения на сходимость;
- 14) возврат на новый итерационный цикл или выход из решения;
- 15) таблично-графическая обработка информации.

8. Заключение к части I. Таким образом, представляемый алгоритм сегрегации опирается на два физических закона (закон сохранения массы и закон сегрегации в приближении “тонкого слоя”) и пять гипотез моделирования:

- 1) вынос массы из клетки-донора за фронтом осуществляется в три ближайшие клетки-реципиенты перед фронтом для эжекции (выталкивания), и наоборот — для инжекции (втягивания),
- 2) определение весовых множителей распределения массы по КП,
- 3) модель математического разрыва,
- 4) модель вида предельного перехода концентраций на разрыве,
- 5) гипотеза равенства весовых множителей распределения масс и предельного перехода концентраций на разрыве.

Численные эксперименты показали устойчивость, быструю сходимость, хорошую точность и безотказное функционирование алгоритма в достаточно широком диапазоне параметров.

Часть II. Некоторые результаты моделирования. Представленный выше метод и реализующий его компьютерный алгоритм был применен для моделирования процесса сегрегации легирующих примесей бора В, фосфора Р, сурьмы Sb и мышьяка As, имплантированных в подложку кремния Si (в кристаллизованном или аморфном состоянии) при движении в нем волны окисления кислородом Si/SiO₂.

Размерные параметры задачи: размер подложки Si (расчетной области (X, Y) — ширина и глубина соответственно) — от 0,5 до 1,5 мкм; начальная и конечная толщины окисла — 0,01 мкм и 0,8 мкм соответственно; средняя толщина волны окисла Si/SiO₂ около 0,001 мкм (что делает достаточно разумным применение физической модели тонкого слоя и математического разрыва); начальные концентрации примесей при равномерной имплантации для В, Р, Sb, As находятся в диапазоне $10^{16} - 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (при неравномерной в глубину Si-имплантации характерные распределения примесей приводятся отдельно); равновесные значения коэффициента сегрегации $m - 0,3, 200, 200, 200$; учет неравновесности корректирует их до значений $m^* - 0,91, 30, 30, 30$; скорость окисления составляла 0,005 мкм/мин при давлении свободного O₂ в 10^5 Па и температуре окисления 1100° С. При проведении расчетов применялись нормировки: линейных размеров — к 1 мкм, времени — к 1 мин, концентраций к 10^{20} см^{-3} , что обеспечивает при необходимости пересчет полученной информации из безразмерной в размерную форму.

1. Плоская волна сегрегации. Постановка задачи: в начальный момент времени в узлах (i, j) пространства $\mathfrak{R}_{ij}, i \in [1, N], j \in [1, M]$ заданы массивы концентраций примесей C_{ij}^0 . В пространстве $\mathfrak{R}_{ij}^1, i \in [1, N], j \in [1, j_*^0]$, представляющем плоскую ленту, дислоцирован массив кремния Si_{ij}, а в подпространстве $\mathfrak{R}_{ij}^2, i \in [1, N], j \in [j_*^0 + 1, M]$, — массив двуокиси кремния (SiO₂)_{ij} (естественно, $\mathfrak{R}^1 + \mathfrak{R}^2 = \mathfrak{R}$). Таким образом, в начальный момент времени $n = 0$ граница Si/SiO₂ параллельна оси X и расположена между узлами j_*^0 и $j_*^0 + 1$. Давление O₂ на внешней границе $j = M$ принимается равномерным и постоянным на все время численного эксперимента, что обеспечивает также равномерную и постоянную скорость движения волны окисла $V_{\text{Si/SiO}_2}(x, y, t) = \text{const}$.

Физический процесс: двигаясь плоским фронтом по i в сторону уменьшения j , волна или выталкивает перед своим фронтом часть примесей ($m > 1$), или втягивает за свой фронт часть примесей ($m < 1$). Развиваясь во времени, процесс должен образовать высокий пик концентраций на фронте волны и достаточно гладкое распределение за фронтом. Разумеется, поле концентраций перед фронтом должно быть равнымначальному.

Предварительный анализ: рассматриваемая плоская задача является хорошим тестом для метода, алгоритма и компьютерной программы, поскольку эквивалентна одномерной задаче, для которой могут быть выписаны следующие рекуррентные формулы:

$$\begin{aligned}
&\text{положение волны между:} && (j+1, j), \\
&\text{концентрация за фронтом:} && C_{j+1}^{n+1} = \frac{1}{m+1}(C_{j+1}^n + C_j^n), \\
&\text{концентрация перед фронтом:} && C_j^{n+1} = \frac{m}{m+1}(C_{j+1}^n + C_j^n), \\
&\text{положение волны между:} && (j, j-1), \\
&\text{концентрация за фронтом:} && C_j^{n+2} = \frac{1}{m+1}(C_j^{n+1} + C_{j-1}^n), \\
&\text{концентрация перед фронтом:} && C_{j-1}^{n+2} = \frac{m}{m+1}(C_j^{n+1} + C_{j-1}^n), \\
&\text{положение волны между:} && (j-1, j-2), \\
&\text{концентрация за фронтом:} && C_{j-1}^{n+3} = \frac{1}{m+1}(C_{j-1}^{n+2} + C_{j-2}^n), \\
&\text{концентрация перед фронтом:} && C_{j-2}^{n+3} = \frac{m}{m+1}(C_{j-1}^{n+2} + C_{j-2}^n)
\end{aligned}$$

и т.д., увеличивая индекс $n \rightarrow n+1$ и уменьшая индекс $j \rightarrow j-1$ для всех величин в левой части равенств и первых членов (в скобках) правых частей. Для вторых членов (в скобках) в правой части меняется индекс $j \rightarrow j-1$, а индекс n остается неизменным. Вообще говоря, для этого члена можно написать $n=0$, поскольку в данной постановке поле параметров перед фронтом, т.е. фон, по которому движется волна, не меняется во времени.

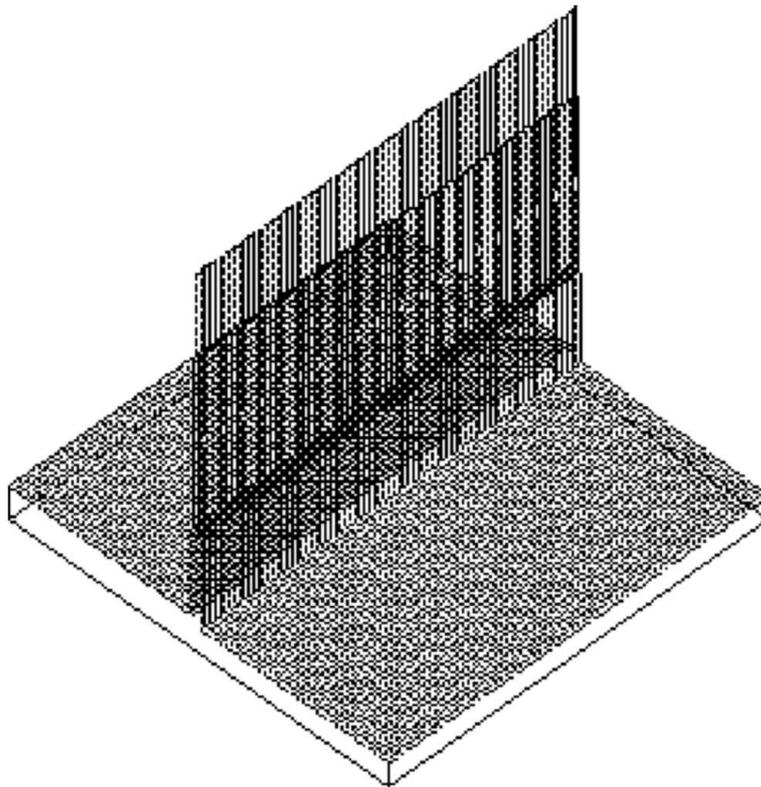


Рис. 4

Результаты расчетов: на рис. 4 показана пространственная картина значений концентраций C_{ij} процесса сегрегации фосфора Р ($m = 200$), соответствующая моменту времени $n = 40$, за которое волна продвинулась к координате $j_*^n = 40$ (начальное положение при $n = 0$, $j_*^n = 1$). Хорошо видна ровная по высоте и прямая вдоль x -координаты “стена” функции C_{ij} . Рис. 5 представляет “вертикальный” одномерный разрез этой картины вдоль оси x , т.е. функцию $C(x, y = \text{const})$, позволяющий провести количественный анализ задачи. Здесь присутствуют все характерные позиции физического процесса сегрегации фосфора: ровная “полка” концентраций перед фронтом, пик на фронте, плавное и равномерное распреде-

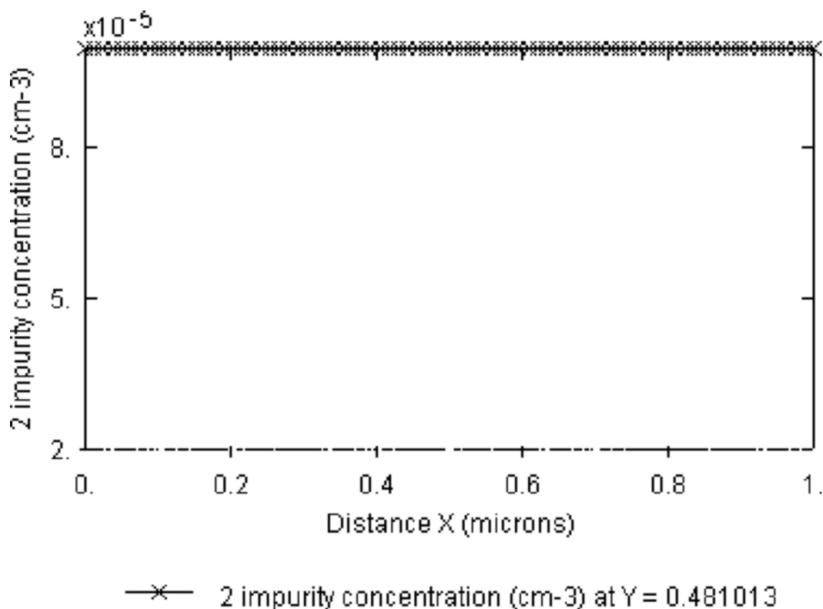


Рис. 5

ление за фронтом. Численно значения компьютерного расчета совпадают со значениями, полученными по рекуррентным формулам с высокой точностью, закон сохранения массы и закон сегрегации выполняются с машинной точностью.

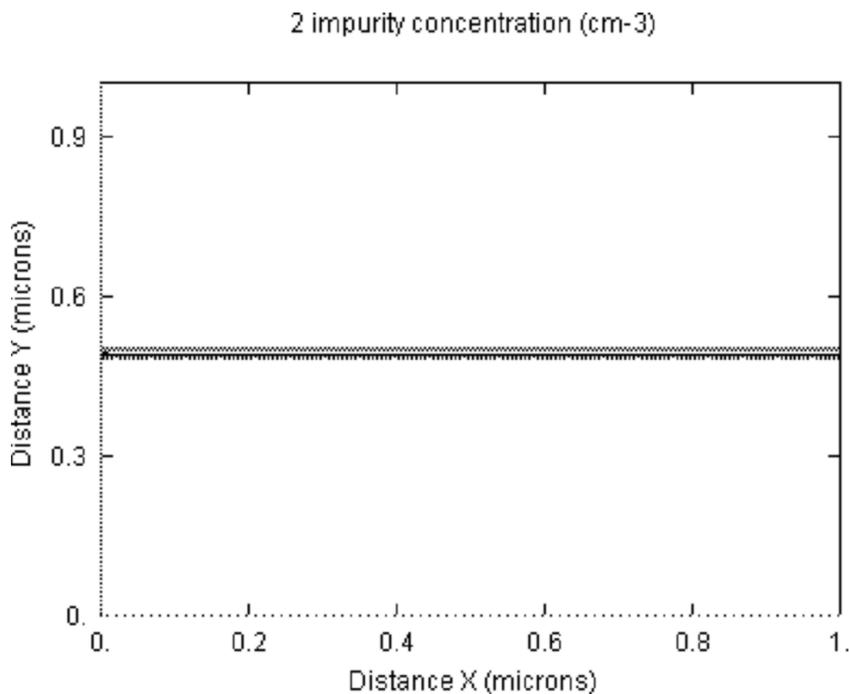


Рис. 6

Рис. 6 представляет проекцию пространственной картины рис. 4 на плоскость, т.е. конфигурацию изолиний функции $C(x, y)$. Симметричность и прямоугольность изолиний (с учетом способов их построения графическим пакетом) делает возможным прогнозировать устойчивость и качественное функционирование алгоритма при решении двумерных задач.

2. Сегрегация в каверне. Постановка задачи: в расчетном (сеточном) полном пространстве \mathfrak{R}_{ij} , $i \in [1, N]$, $j \in [1, M]$ имеется два подпространства, одно из которых \mathfrak{R}_{ij}^1 , представляющее собой прямоугольную каверну (“траншею”), состоящую из двух сегментов $\mathfrak{R}_{ij}^1 = \mathfrak{R}_{ij}^{11} + \mathfrak{R}_{ij}^{12}$, где \mathfrak{R}_{ij}^{11} представляет собой ленту $i^{11} \in [1, N]$, $j^{11} \in [j_2^0, M]$, а \mathfrak{R}_{ij}^{12} — примыкающий к ней прямоугольник $i^{12} \in [i_1^0, i_2^0]$, $j^{12} \in [j_1^0, j_2^0 - 1]$, причем $i_1^0, i_2^0, j_1^0, j_2^0$ — заданные для каждого расчета параметры, варьируемые в серии численных экспериментов (изменяющие ширину и глубину каверны). Второе подпространство $\mathfrak{R}_{ij}^2 = \mathfrak{R}_{ij} - \mathfrak{R}_{ij}^1$. В начальный момент времени $t = 0$ в \mathfrak{R}_{ij}^2 дислоцирован Si, в \mathfrak{R}_{ij}^1 — SiO₂, во всей \mathfrak{R} распределена легирующая примесь с концентрацией C_{ij} и с равновесным $m = 200$ и неравновесным $m^* = 30$ значениями коэффициента сегрегации (в представляемых ниже графиках — сурьма Sb, $m = 200$). На границе Si/SiO₂ образуется волна окисления, распространяющаяся вглубь Si, приводящая к сегрегированию части Sb — выталкиванию ее фронтом волны перед собой.

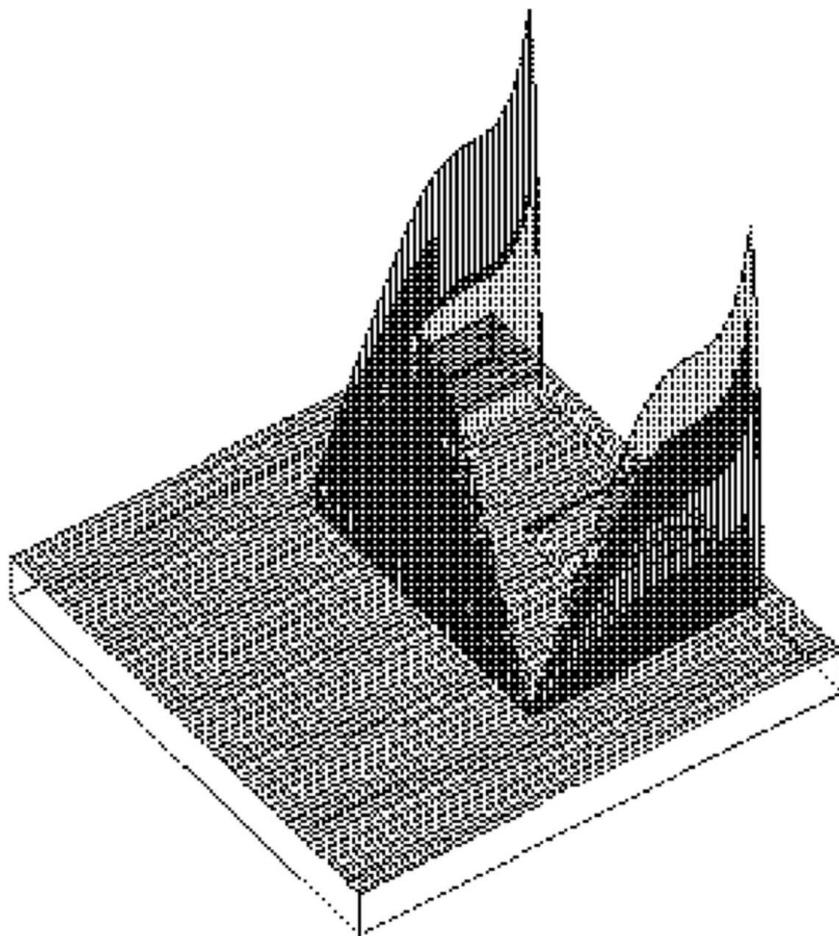


Рис. 7

На рис. 7 приведена пространственная картина $C(x, y)$, возникающая к моменту времени $t = 20$ мин (сетка 80×80 узлов, $x \times y = 1 \times 1$ мкм, $V_{\text{Si/SiO}_2} = 10^{-2}$ мкм/мин, компьютерное время расчета менее 1 сек на P-120). Хорошо просматриваются крутые “стены” фронта сегрегации, прошедшие от начальной конфигурации каверны и образовавшие новую каверну оксида в силиконе. Из этой каверны существенная часть Sb была вытеснена наружу в область перед фронтом волны. На углах каверны величина “стены” $C(x, y)$ существенно меньше, чем в центрах переднего, левого и правого фронтов, иллюстрируя “эффект бульдозера”, когда на ноже этого дорожностроительного механизма срезанный грунт образует характерную конфигурацию с максимумом в центре и минимумами по углам.

Рис. 8 представляет одномерный график распределения $C(x, y = \text{const})$, т.е. “разрез” картины рис. 7 вдоль x -координаты при фиксированном y_j (здесь $j = (j_1^0 + j_2^0)/2$). Симметричность картины относительно x -координаты средней линии каверны иллюстрирует обеспечение алгоритмом симметрии решения

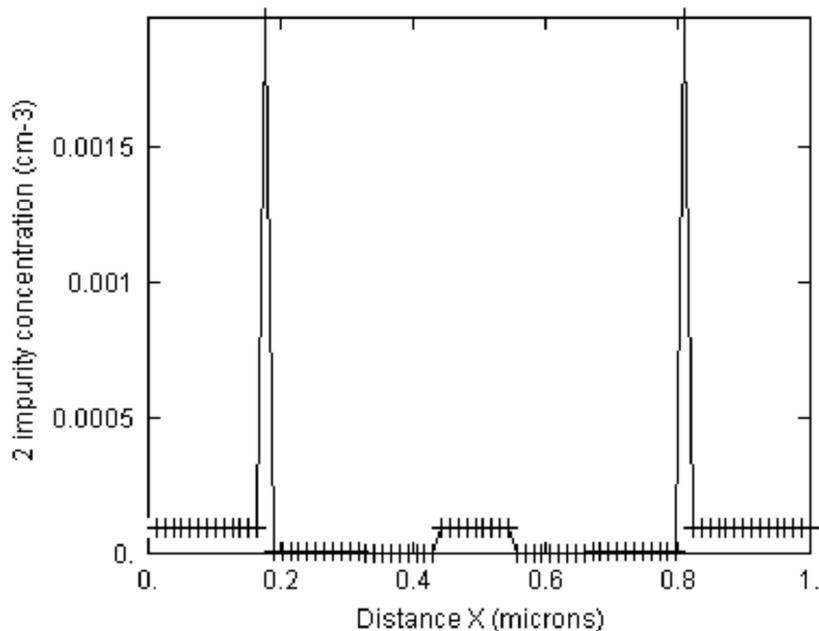


Рис. 8

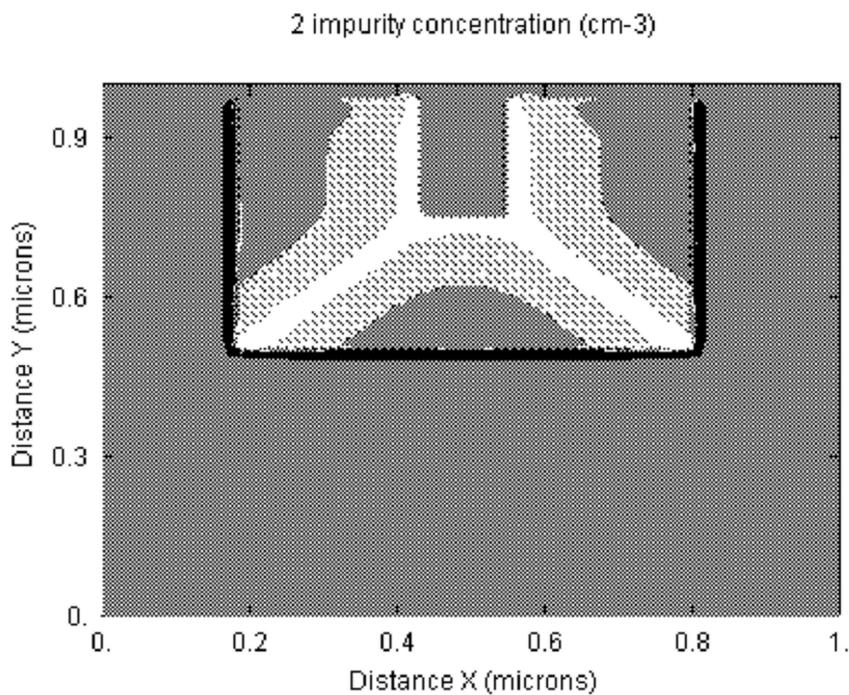


Рис. 9

задачи, несмотря на то, что неявность вычислительной схемы связывает друг с другом значение C_{ij} во всех узлах сетки, а необходимость определенности перебора узлов в однопроцессорной системе детерминирует и направление “движения” алгоритма вдоль фронта с нарушением симметрии данных (шаг за шагом, последовательно, алгоритм проводит обработку части данных, представляющих уже не исходные, с n -временного слоя данные, а со слоя $(n + v)$, где v — номер шага итерационного процесса неявной схемы), а это требует некоторого контроля, который особенно удобно проводить на задачах, где суще-

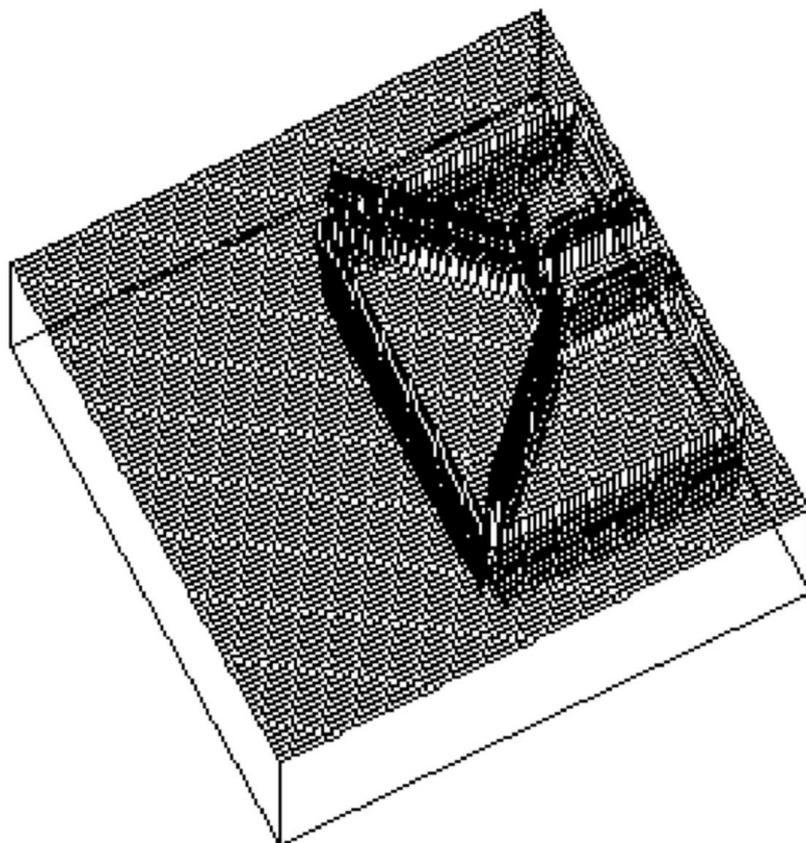


Рис. 10

ствуют области симметрии решения и количественный анализ нарушения этой симметрии может быть принят как критерий точности метода и/или реализующего его алгоритма. На рис. 9 показаны изолинии функции $C(x, y)$ в области расчета на тот же момент времени в двумерном формате, дополняющий пространственное (рис. 7) и одномерное (рис. 8) представление информации.

Для полноты анализа этого типа эксперимента на рис. 10–12 приведены аналогичные данные для расчета сегрегации бора В, у которого $m < 1$, и вместо выталкивания части примеси фронтом имеет место обратный процесс — втягивание части примеси за фронт. Рис. 10 представляет в пространственной картине наличие “провала”, в который инжектируется В; рис. 11 дает возможность количественно проанализировать полученную информацию (распределение примеси $C(x, y = \text{const})$, величину пиков сегрегации, постепенное выглаживание за фронтами) и сравнить эти данные с данными расчета по рекуррентным формулам на “одномерных” участках (совпадение с высокой точностью). Последний в этой серии рис. 13 (аналог рис. 9) позволяет сделать окончательный вывод о применимости метода и реализующего его алгоритма для расчета двух типов сегрегации: эжекции (выталкивания) и инжекции (втягивания) примеси фронтом волны окисления.

Краткое изложение полученных вычислительных результатов, фактически их демонстрационное представление, связано с тем, что основной целью настоящей работы является подробное описание методологии и алгоритма решения физико-химической проблемы сегрегации. В последующем цикле статей будут представлены и обсуждены результаты расчетов ряда задач.

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность А. Л. Александрову за участие в проведении тестовых экспериментов, полезные обсуждения, постоянное внимание и интерес к данной работе.

Заключение. Приведенный выше теоретический метод и вычислительный алгоритм расчета сегрегационных задач показал высокую точность и безотказность функционирования в широком диапазоне

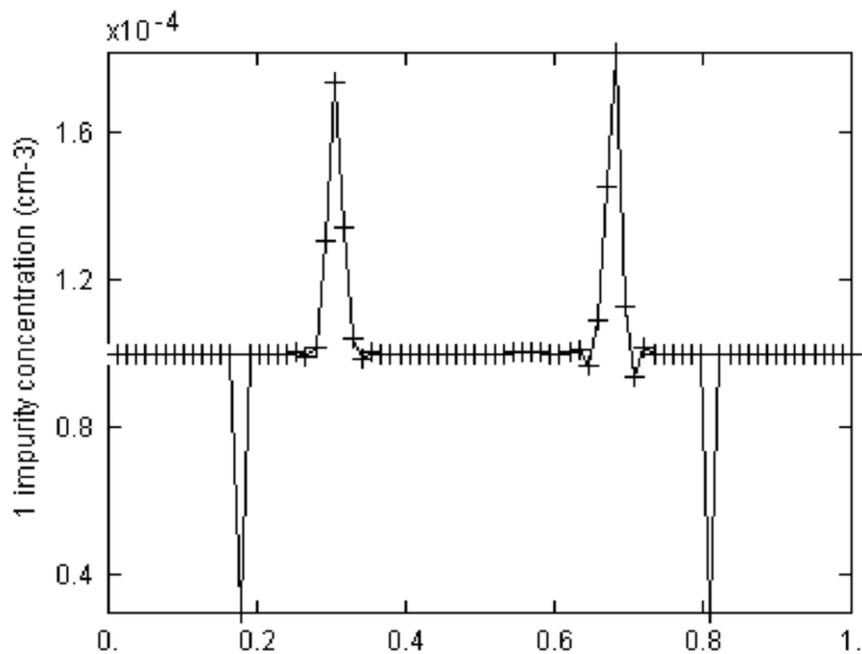


Рис. 11

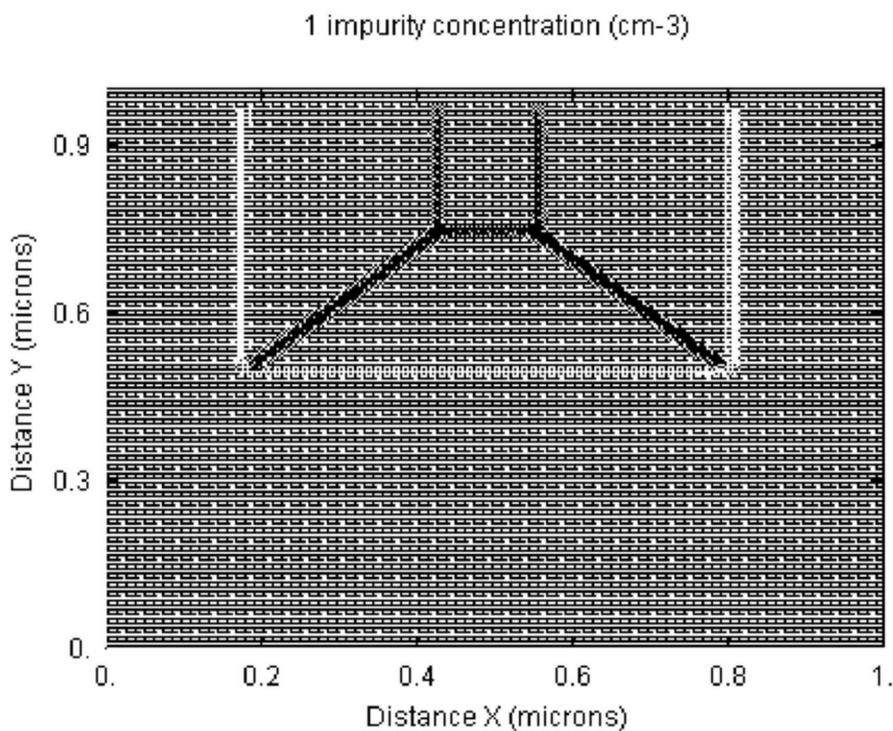


Рис. 12

определяющих параметров и является одним из аспектов компьютерного конструирования материалов с определенными полупроводниковыми свойствами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М: Физматгиз, 1963.
2. Ho C. P., Plumber J. D. Si/SiO₂ interface oxidation kinetics: a physical model for the influence of high substrate doping levels. I. Theory // J. Electrochem. Soc. 1979. **126**, N 9. 1516–1522.

3. *Ho C. P., Plumber J. D.* Si/SiO₂ interface oxidation kinetics: a physical model for the influence of high substrate doping levels. II. Comparison with experiment and discussion // *J. Electrochem. Soc.* 1979. **126**, N 9. 1523–1530.
4. *Ho C. P., Plumber J. D., Meindl J. D.* Thermal oxidation of heavily phosphorus-doped silicon // *J. Electrochem. Soc.* 1978. **125**, N 4. 665–671.
5. *Chin D., Oh S. Y., Hu S. M., Dutton R. W., Moll J. L.* Two-dimensional oxidation // *IEEE Trans. Elec. Dev.* 1983. ED-30, N 7, 744–749.
6. *Rafferty C. S.* Stress Effects in Silicon Oxidation. Simulation and Experiments. 1989. Ph.D Theses. Stanford University, Stanford, California.
7. *Кольдяев В. И., Мороз В. А., Назаров С. А.* Двумерное моделирование легирования и окисления кремния // *Автометрия.* 1988. № 3. 46–54.
8. *Тарнавский Г. А., Шпак С. И.* Проблемы численного моделирования сверхзвукового ламинарно-турбулентного обтекания тел конечного размера // *Матем. моделирование.* 1998. **10**, № 6. 53–74.
9. *Тарнавский Г. А., Шпак С. И.* Декомпозиция методов и распараллеливание алгоритмов решения задач аэродинамики: вычислительная система “Поток-3” // *Программирование.* 2000. № 6. 45–57.
10. *Годунов С. К.* Воспоминания о разностных схемах. Новосибирск: Научная книга, 1997.

Поступила в редакцию
21.02.2001
