



# Simulación Atomística de Procesos en Microelectrónica

Juan Barbolla

Dept. de Electrónica, Universidad de Valladolid

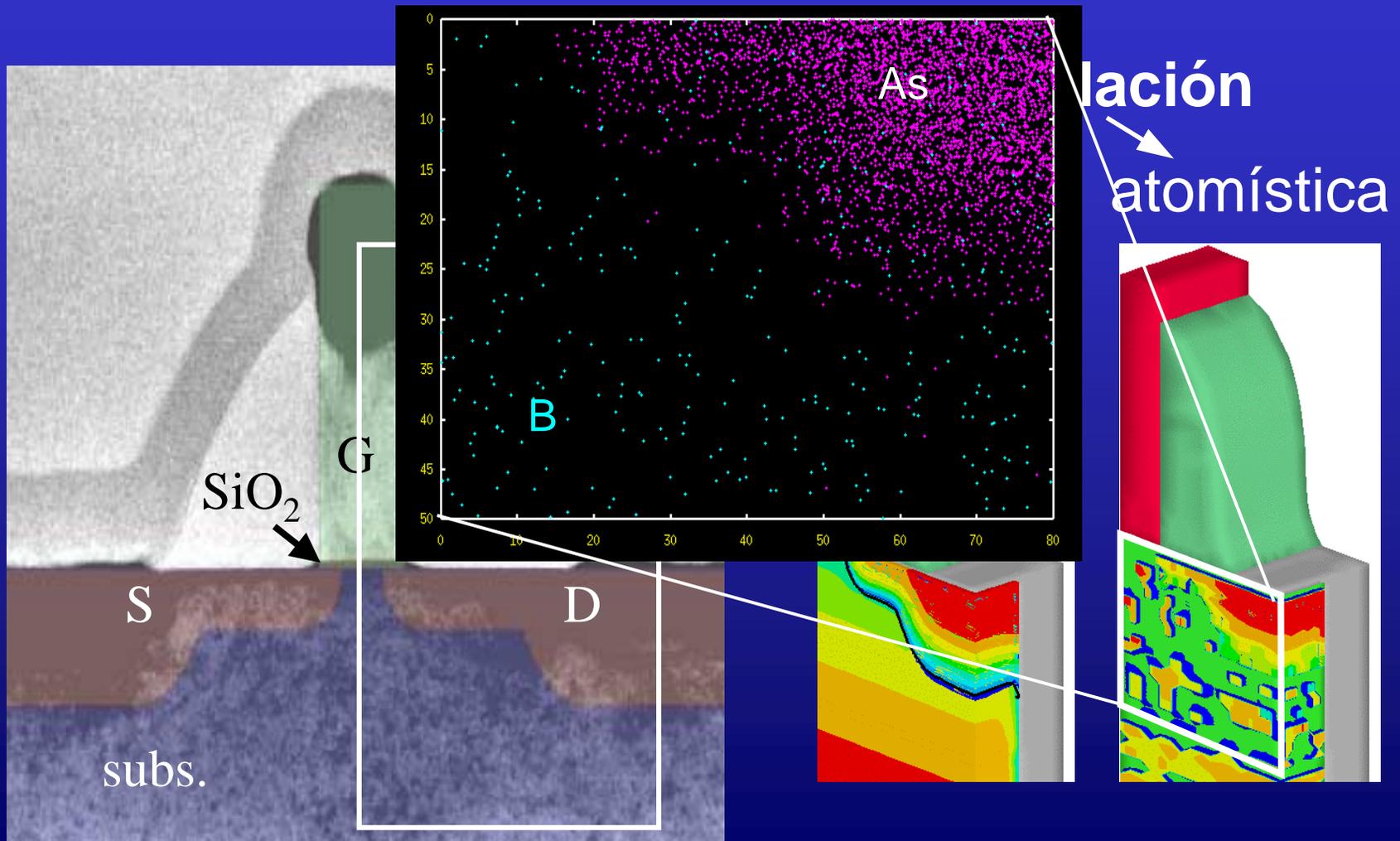
CDE 2003



# Simulación atomística de procesos tecnológicos:

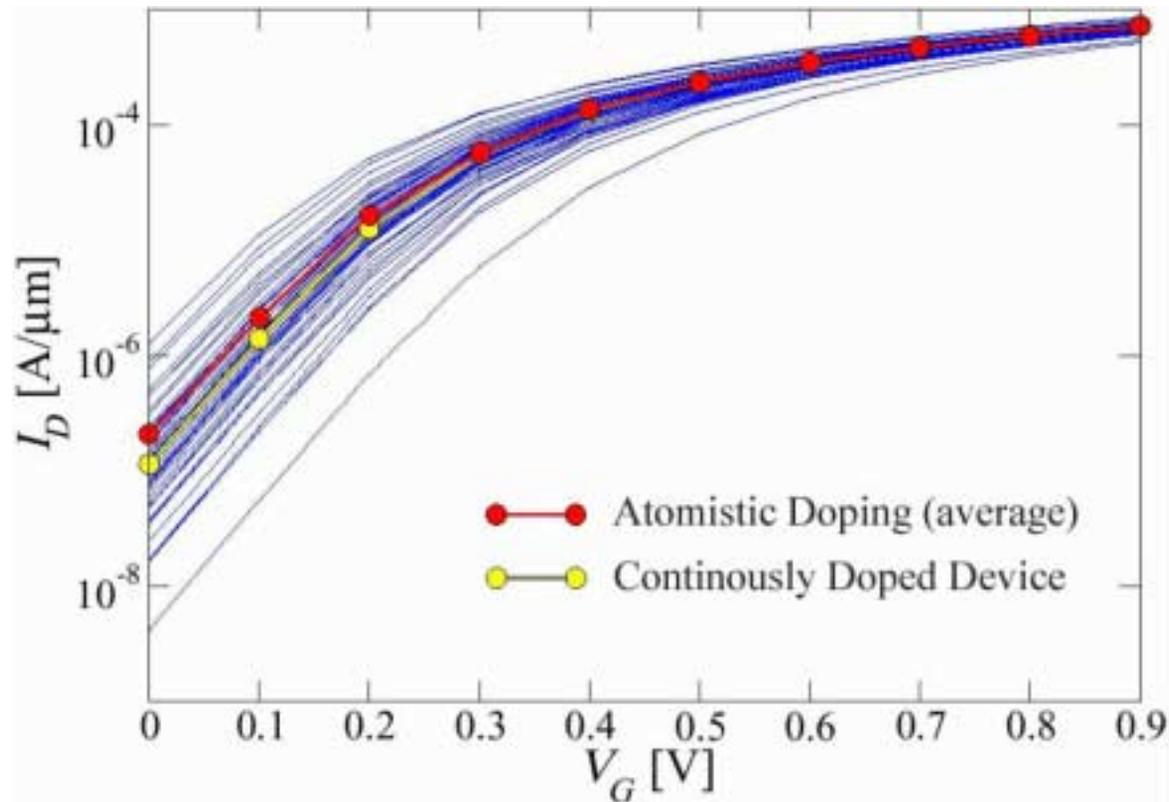
- Realista y detallada
- Más rápida para sub-0.1  $\mu\text{m}$

# 35 nm - MOSFET



Toshiba IEDM, 2001

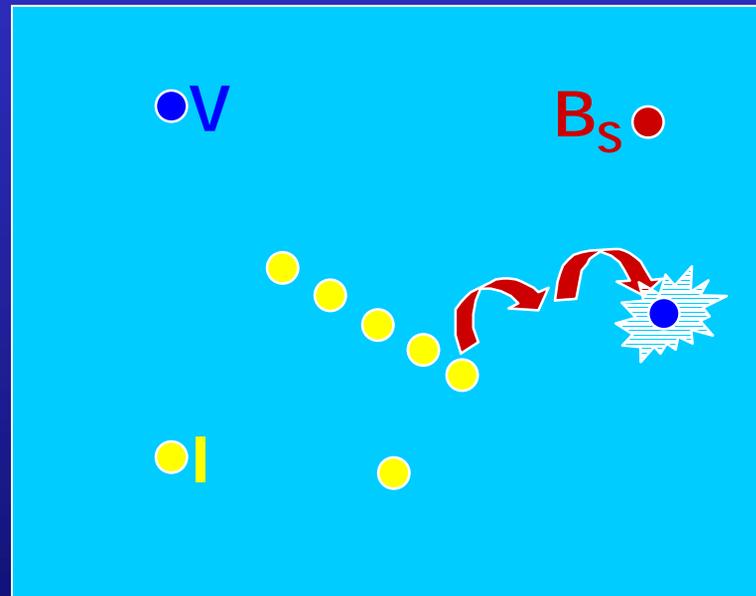
# 35 nm - MOSFET



Asenov et al., SISPAD 2002

Simulación eléctrica a partir de la simulación atomística de procesos

# Estrategia de simulación atomística



- Dinámica del sistema:  
Método de Monte Carlo Cinético (**KMC**)

# Técnicas complementarias para KMC

Frecuencias de salto:  
**Dinámica Molecular  
(MD)**

Dopado + Dañado  
por implantación iónica:  
**Colisiones binarias (BC)**

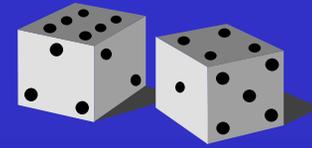


Dinámica del sistema:  
**Monte Carlo Cinético  
(KMC)**

# Índice

- Introducción
- Simulación KMC:
  - Programa DADOS
  - Difusión del Boro
- Dinámica Molecular
- Simulación de la implantación con BC
- Conclusiones

# DADOS



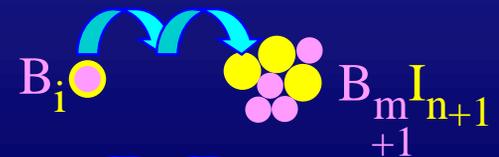
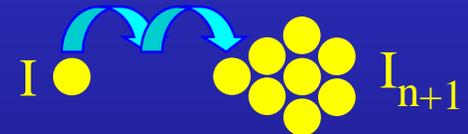
Diffusion of **A**tomistic **D**efects, **O**bject-oriented **S**imulator

- Simulador KMC
- C++, 30.000 líneas de código
- Rendimiento  $>1$  millón de eventos/ seg. (P-4)
- Desarrollado en la Universidad de Valladolid
- Primer simulador atómico incorporado en un simulador de procesos comercial (TAURUS, versión 3D del TSUPREM)

# Interacciones atómicas en DADOS



} igual para V



# Interacciones y eventos

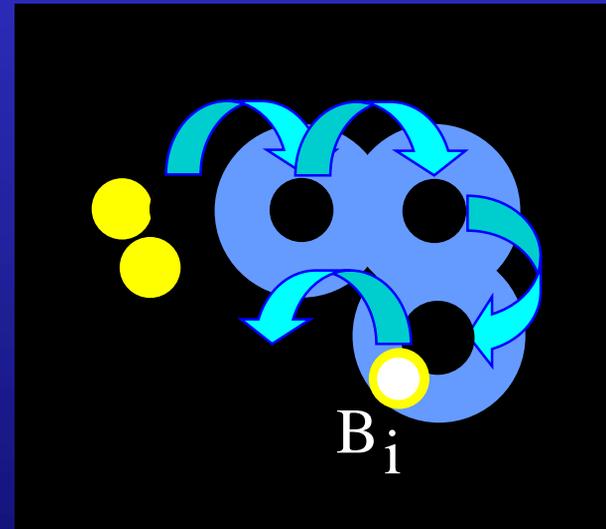
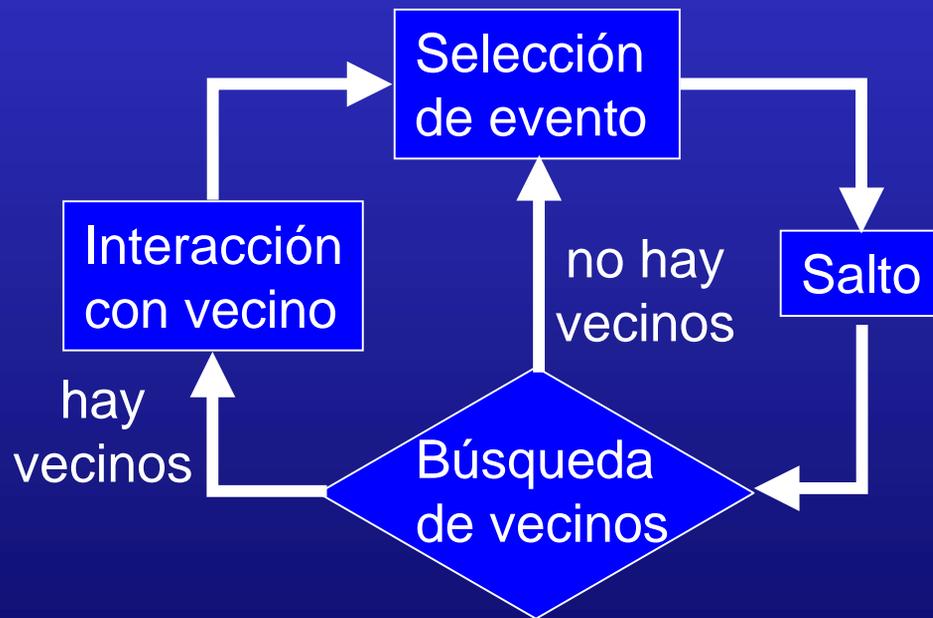
- Interacción: radios de captura



- Evento: frecuencias



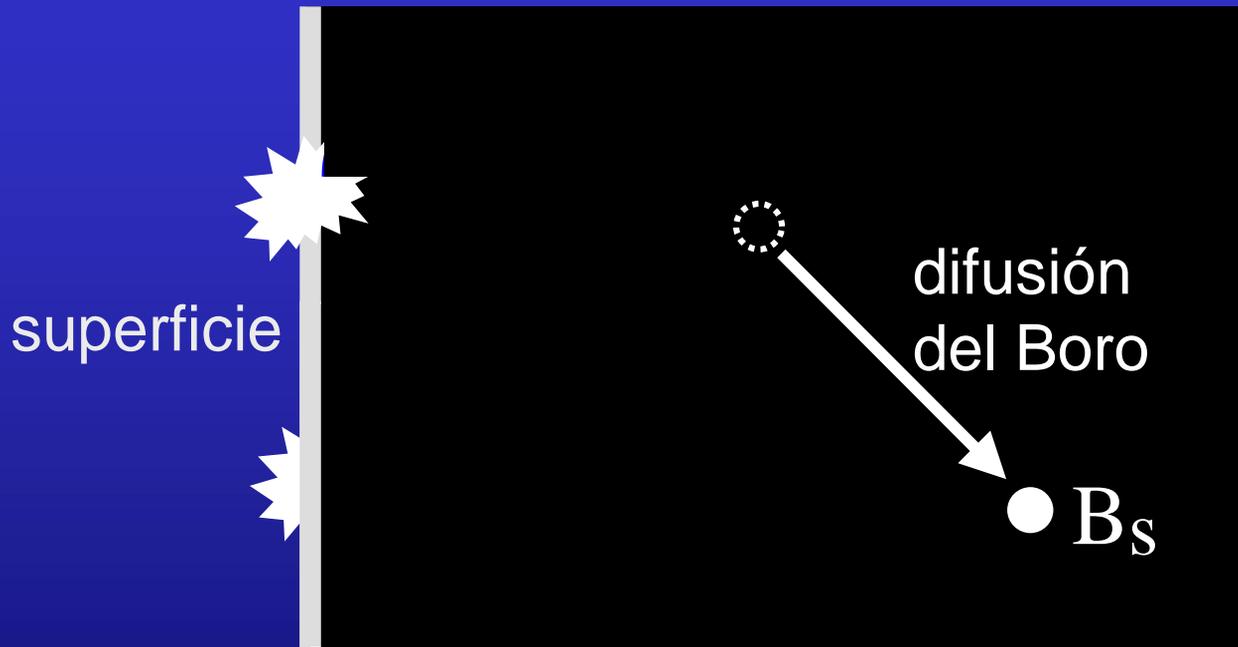
# Esquema de simulación



# Fenómenos que se pueden simular

- Difusión de defectos y dopantes
  - Evolución de clusters de defectos (311's, "voids",...)
  - Gettering de defectos por trampas (I-C, V-O)
  - Formación de precipitados
  - Papel de la superficie (oxidación, nitridación,...)
  - Amorfización / Recristalización
  - Efectos de carga (nivel de Fermi)
  - Efectos 3-D
  - Inhomogeneidades (discretización de la posición)
- ➔ Simulación de fabricación de DISPOSITIVOS

# Difusión del Boro



- $B_S$  inmóvil
- $C_I^* \leftrightarrow$  superficie
- $I + B_S \rightarrow B_i$  móvil
- $B_i \rightarrow B_S + I$

- $D_B^* \propto C_I^* \cdot v_{m,I} \cdot \frac{v_{m,Bi}}{v_{bk,Bi}}$

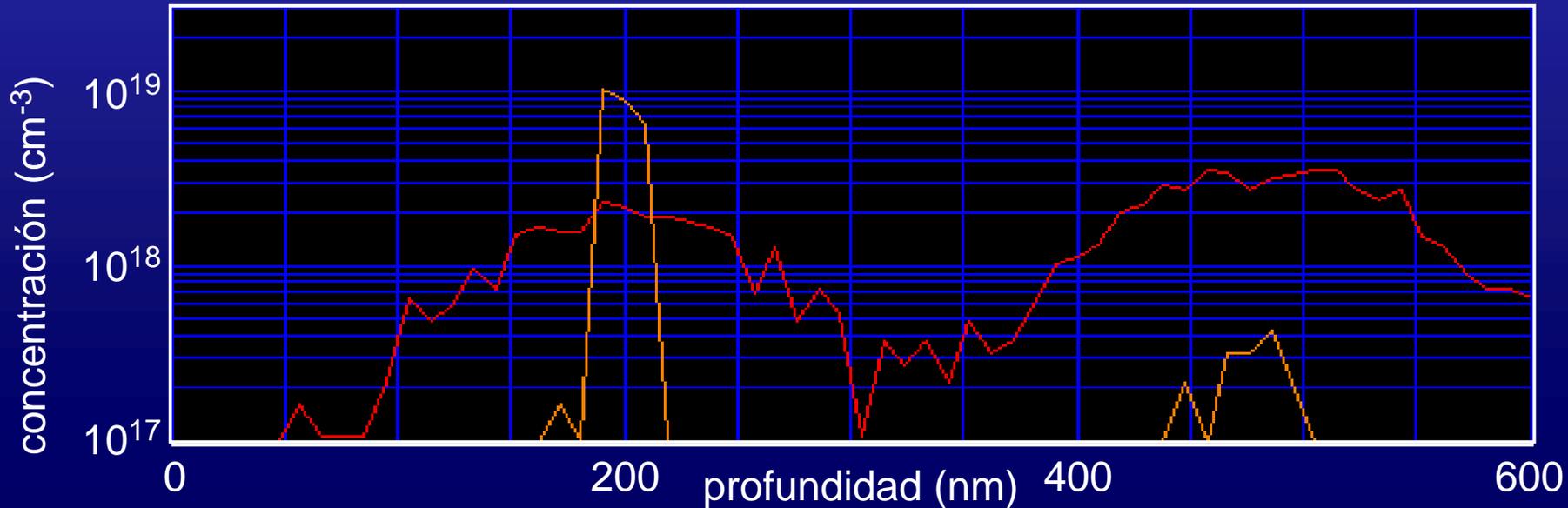
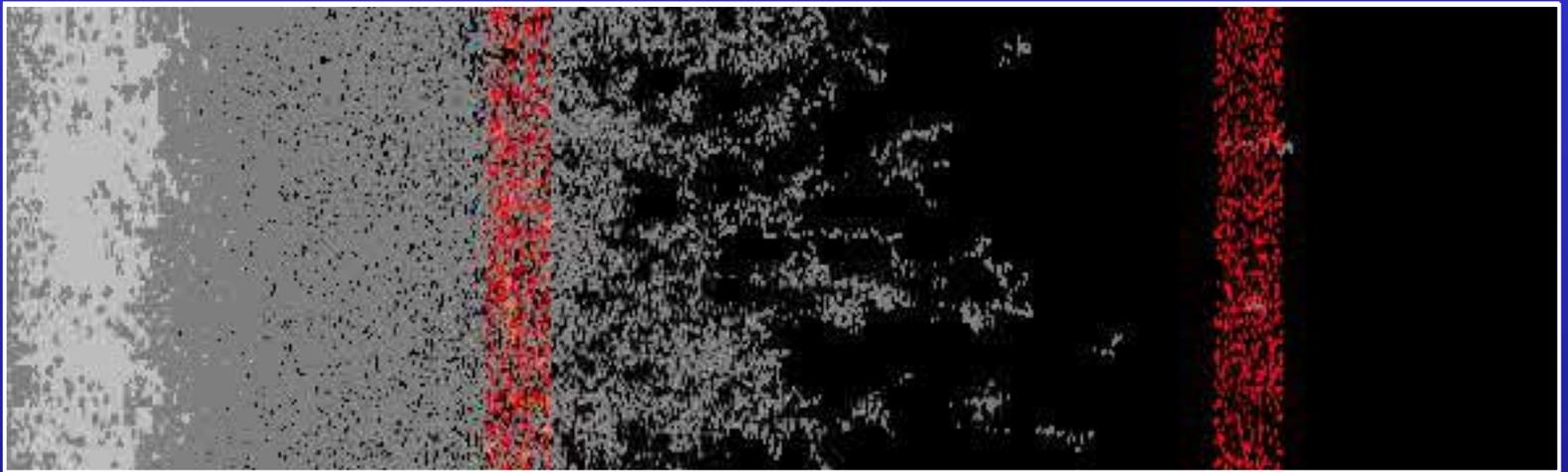
- $\frac{D_B}{D_B^*} = \frac{C_I}{C_I^*}$

supersaturación  
de intersticiales

# Difusión del Boro

## Efectos de la implantación y recocido

Implantación  
Si 40 KeV  
sobre Si  
con  
marcadores  
de B



# Difusión del Boro

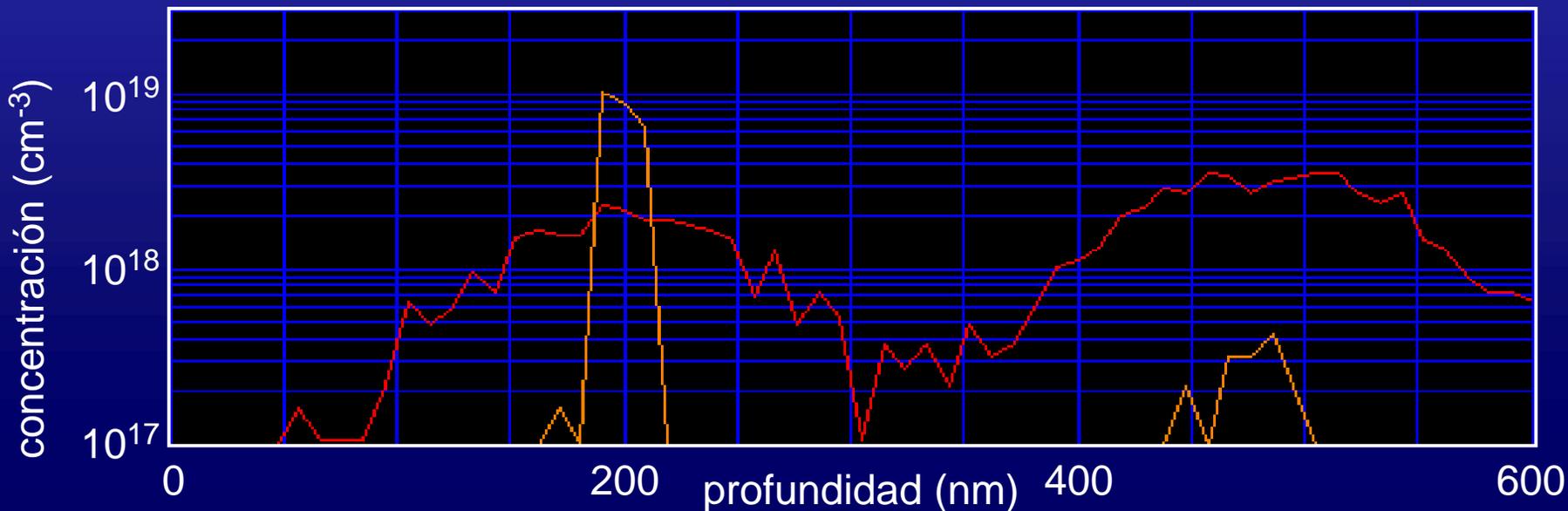
## Efectos de la implantación y recocido

1. Aumento Transitorio de la Difusión (TED) ☹️

$$\frac{D_B}{D_B^*} = \frac{C_I}{C_I^*} \Rightarrow D_B \gg D_B^*$$

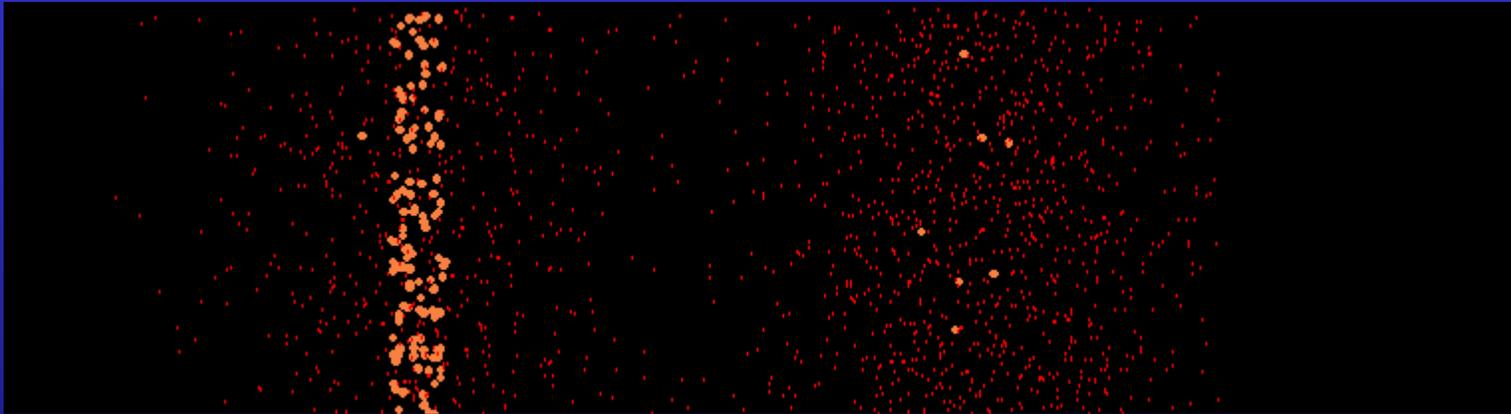
2. Posible formación de clusters de Boro

Inmóviles ☺️ y eléctricamente inactivos ☹️ ☹️



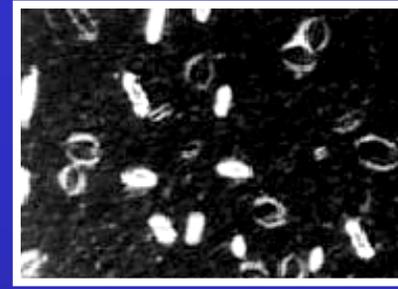
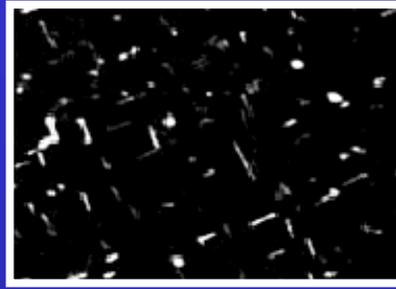
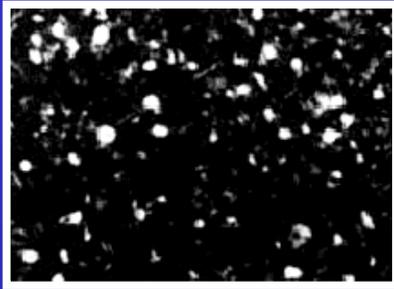
# Aumento Transitorio de la Difusión

## Papel de los clusters de intersticiales



- Breve transitorio inicial  
Clusters de intersticiales y vacantes  $\rightarrow$  recombinación I-V
- Sobreviven algunos clusters de I  
 $\sim 1$  intersticial extra por cada ión implantado (“modelo +1”)
- Los clusters de I aumentan de tamaño: los  $\{311\}$ 's
- Los clusters de intersticiales son fuente de I móviles:  
Emisión de los I por los clusters  $\rightarrow C_I \rightarrow D_B$

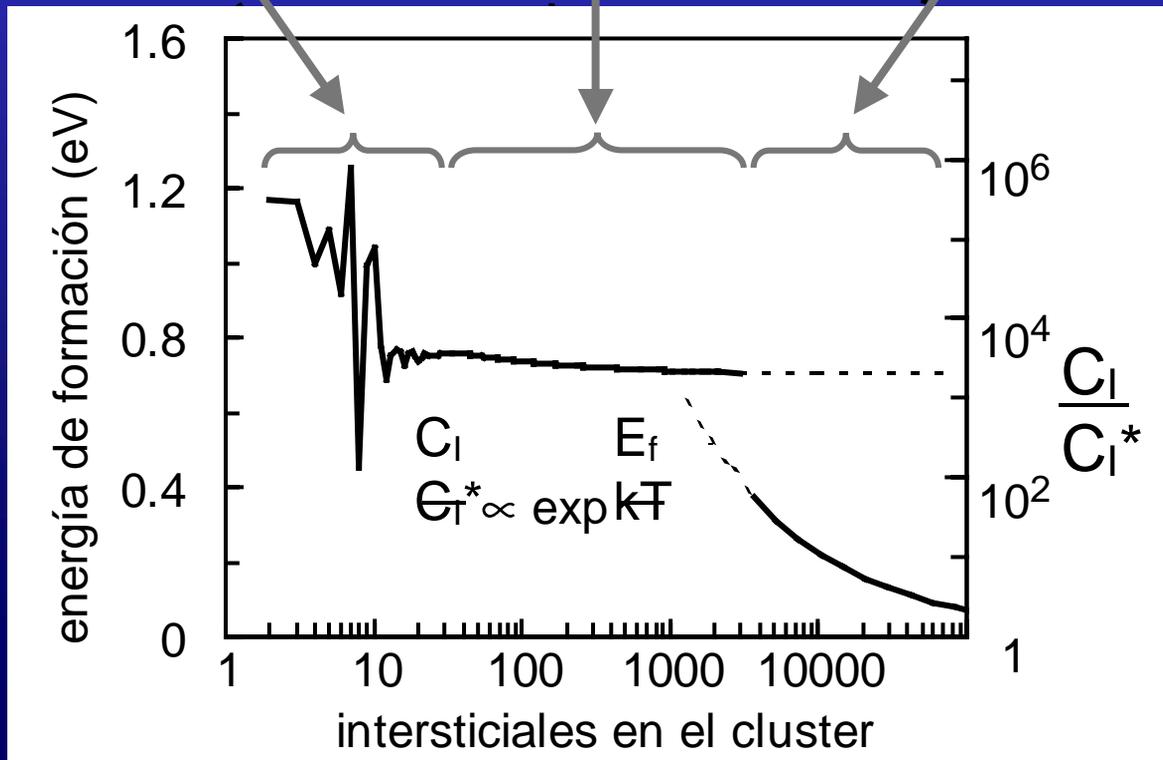
# Clusters de Intersticiales



TEM  
Claverie et al  
APL 2001



más inestables  
↑  
clusters  
↓  
más estables

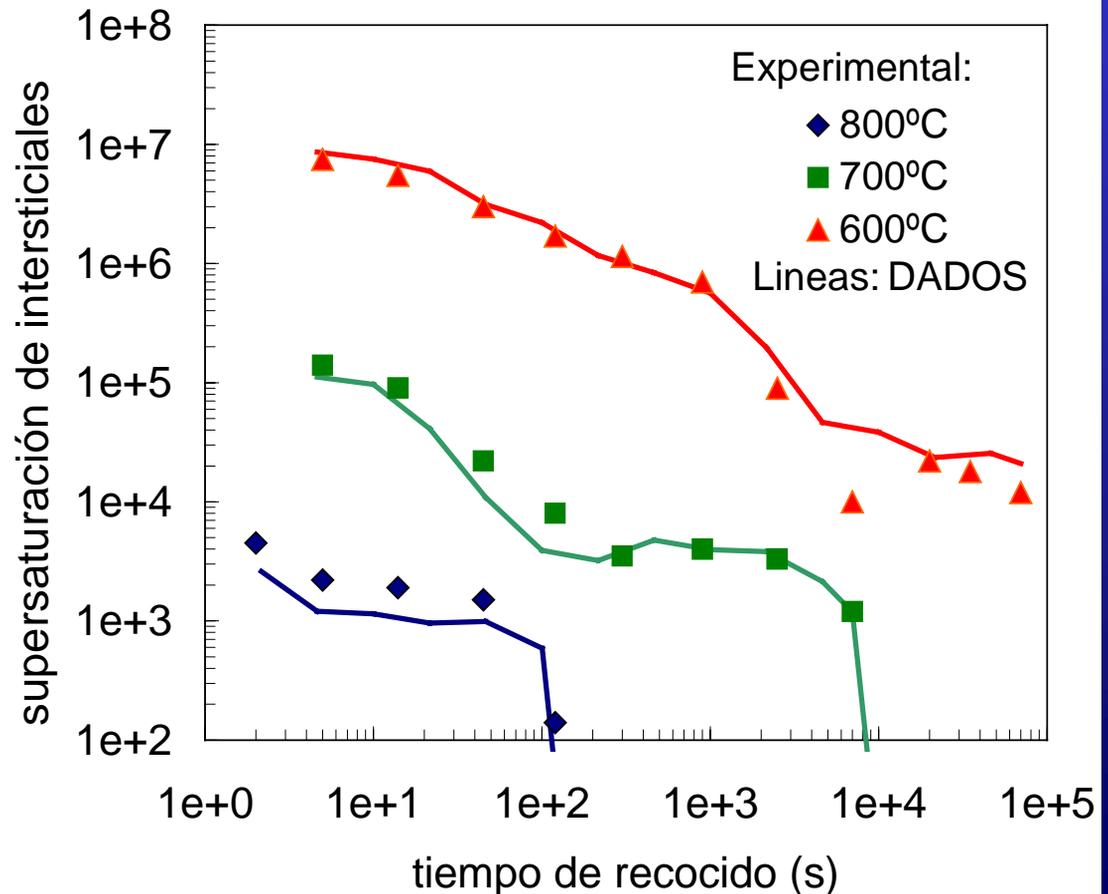
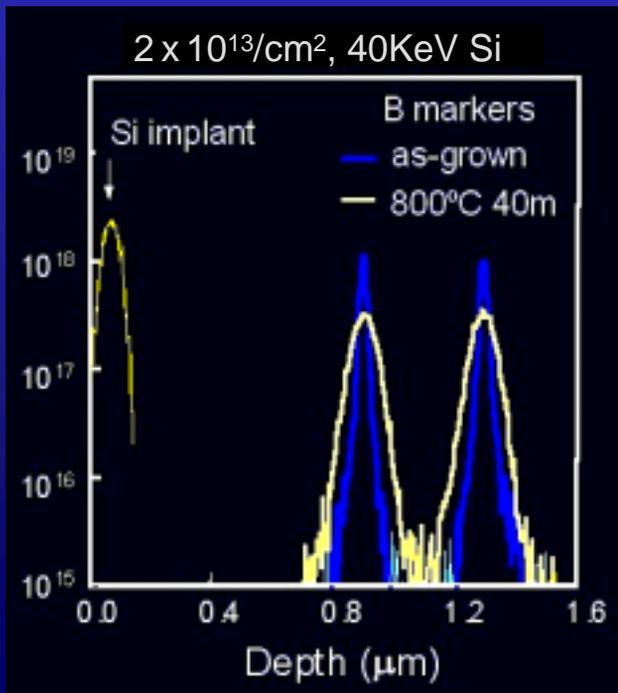


↑ mayor  
frecuencia  
emisión de  
intersticiales  
↓ menor

# Aumento Transitorio de la Difusión

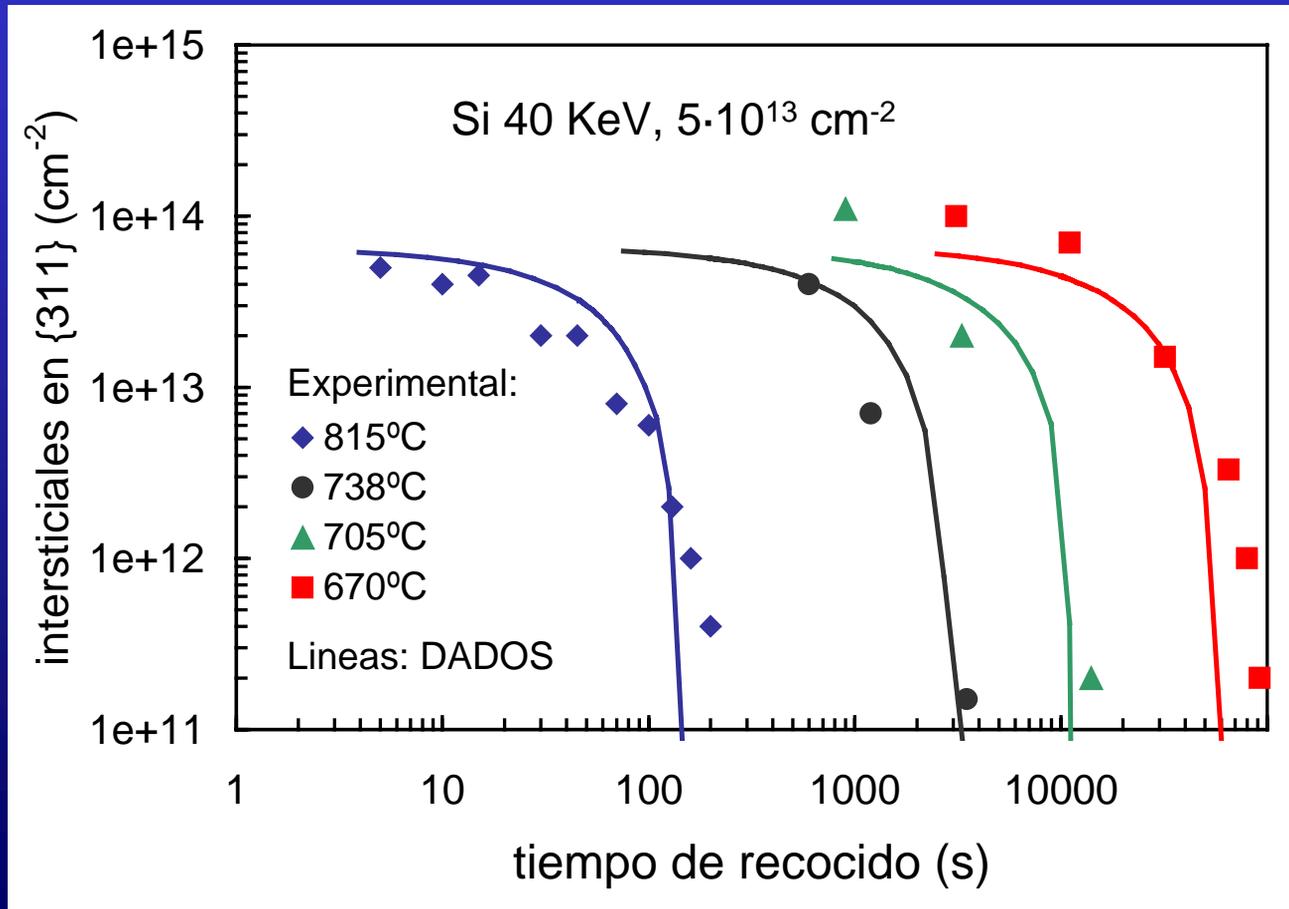
## Supersaturación de intersticiales

$$\frac{D_B}{D_B^*} = \frac{C_I}{C_I^*} \propto \exp \frac{E_f}{kT}$$



# Duración del transitorio

## Disolución de los {311}'s



El tiempo de disolución aumenta si:

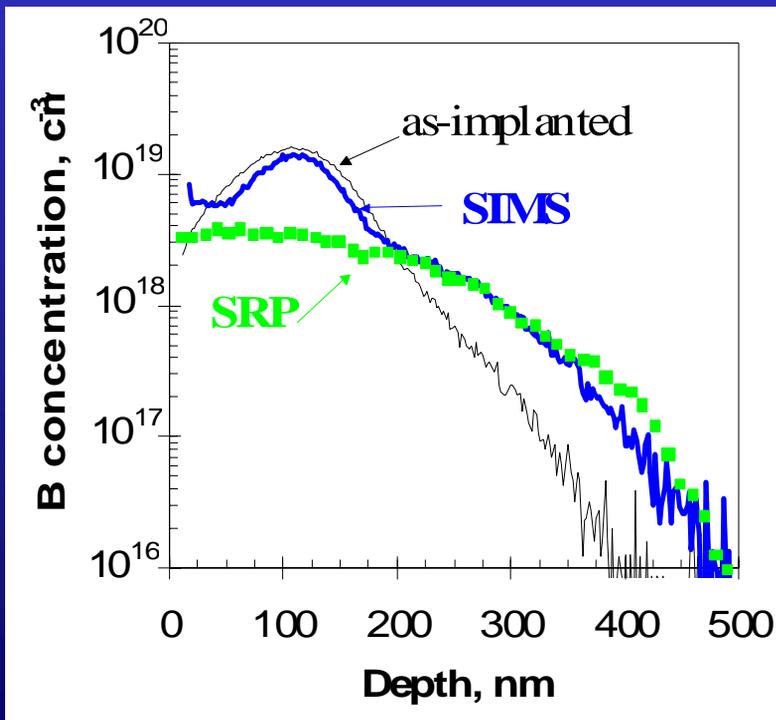
- $T \downarrow$
- dosis  $\uparrow$
- E implant.  $\uparrow$

Datos experimentales (TEM): Eaglesham et al., APL 94

# Desactivación eléctrica del B

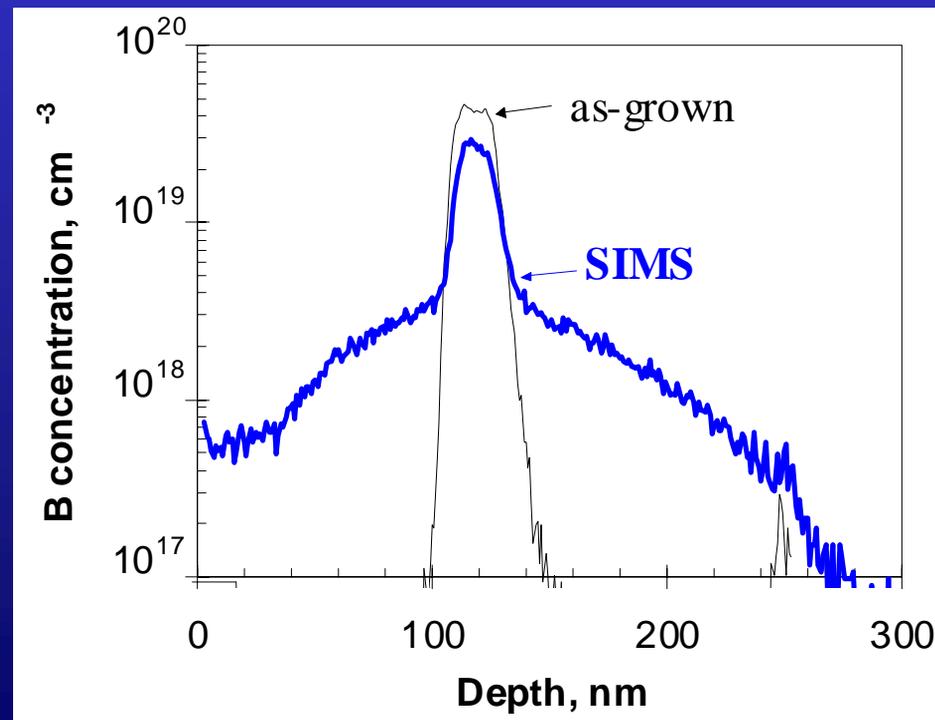
Implantación de B

40 keV  $2 \cdot 10^{14}$  cm<sup>-2</sup>. Recocido: 800°C, 1000 s



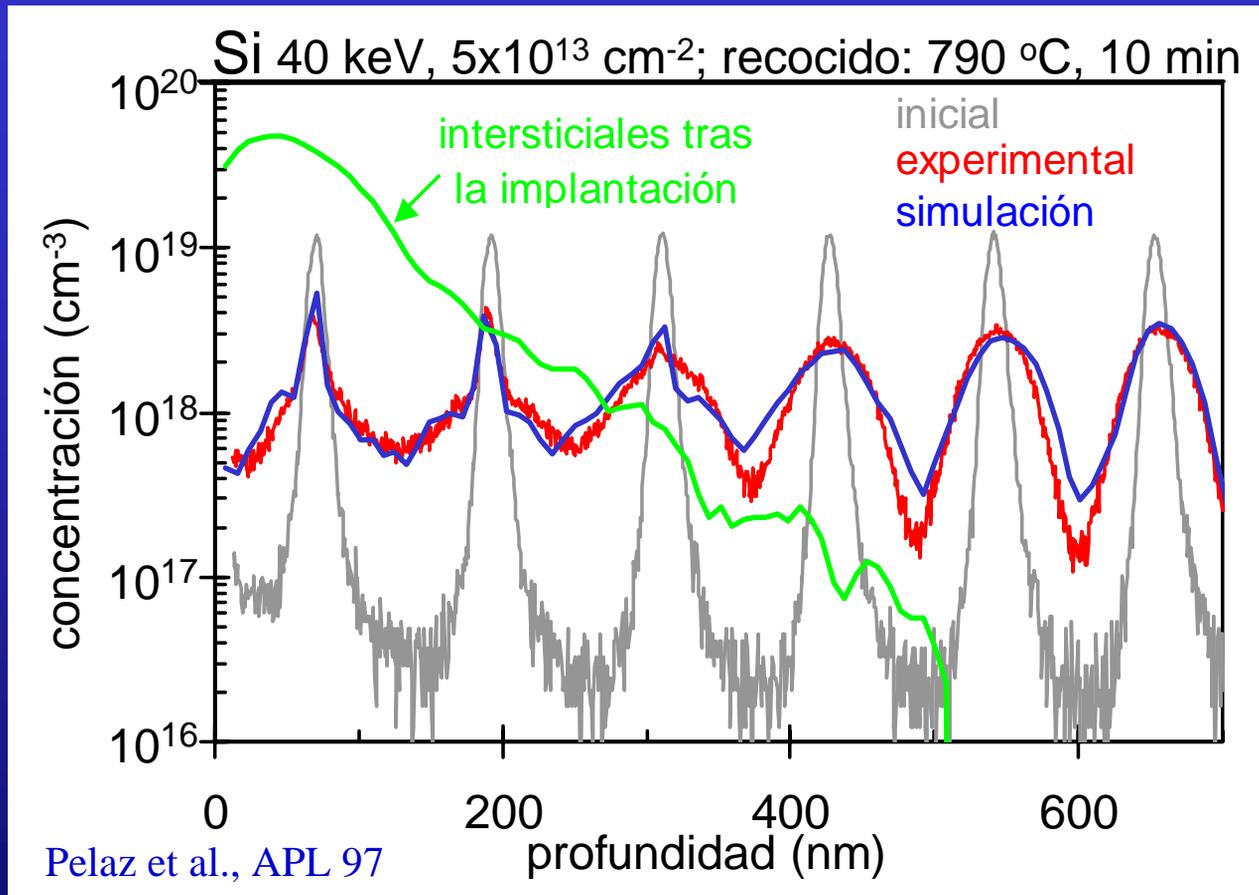
Implantación de Si  
en marcadores de B

40 keV  $9 \cdot 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>. Recocido: 800°C, 500 s



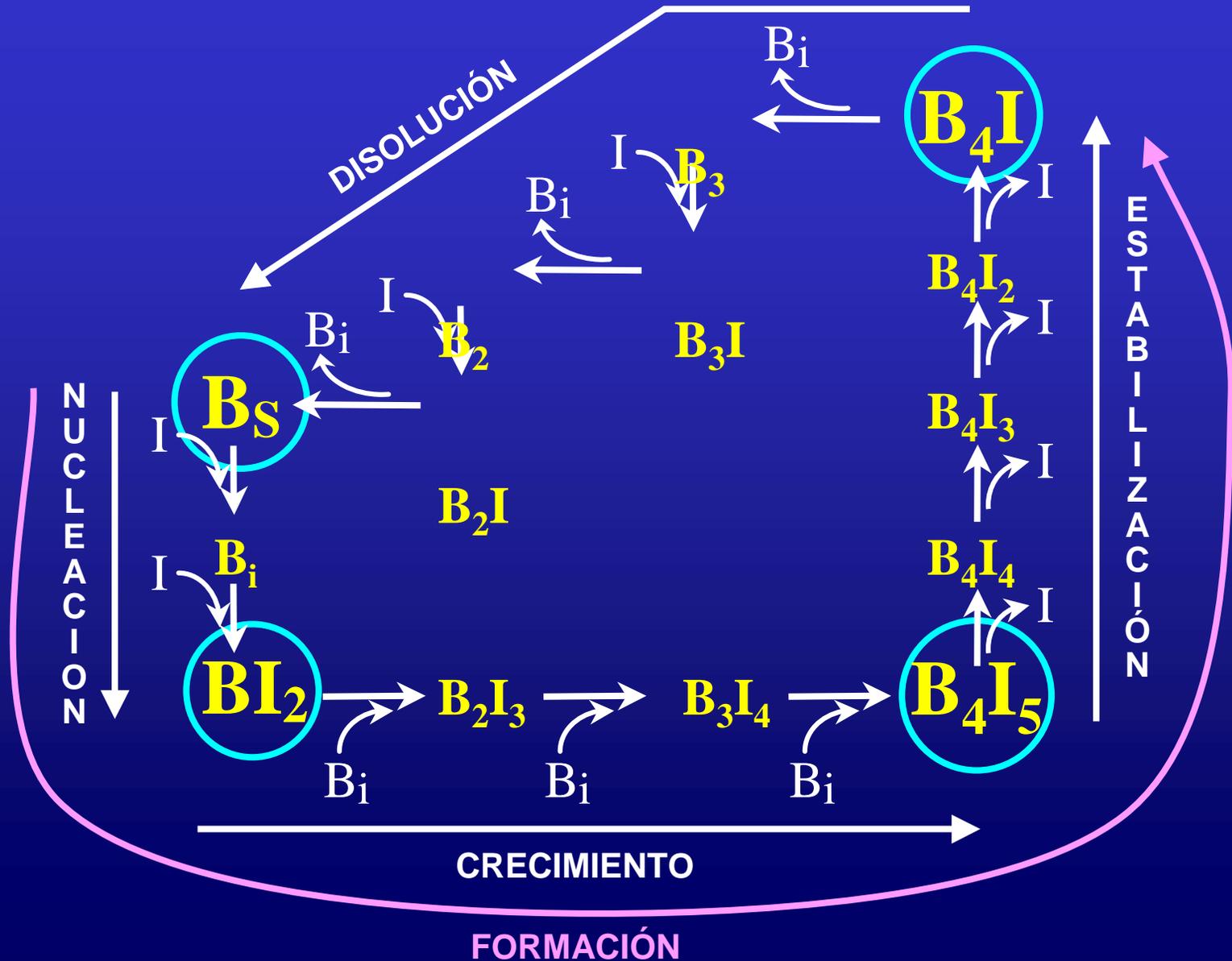
Región inmóvil eléctricamente inactiva } → **CLUSTERS DE BORO**

# Desactivación eléctrica del B



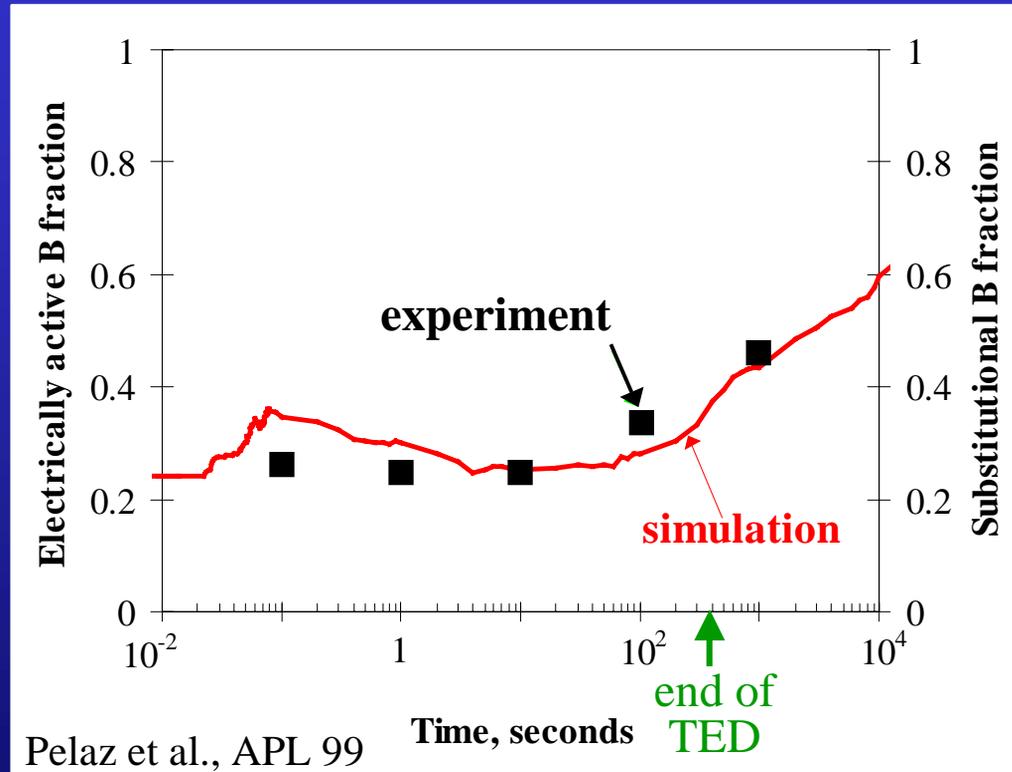
- Todos los marcadores experimentan TED
- Clusters de B en marcadores cerca de la superficie
- Precursores ricos en intersticiales:  $B_i + I \rightarrow BI_2$

# Evolución de los Clusters de B



# Activación eléctrica del B

40 keV  $2 \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> B implant, 800°C anneal



Clusters de B eléctricamente inactivos:

→ se forman al principio del recocido

→ se disuelven lentamente después de la TED

# Índice

- Introducción
- Simulación KMC:
  - Programa DADOS
  - Difusión del Boro
- Dinámica Molecular
- Simulación de la implantación con BC
- Conclusiones

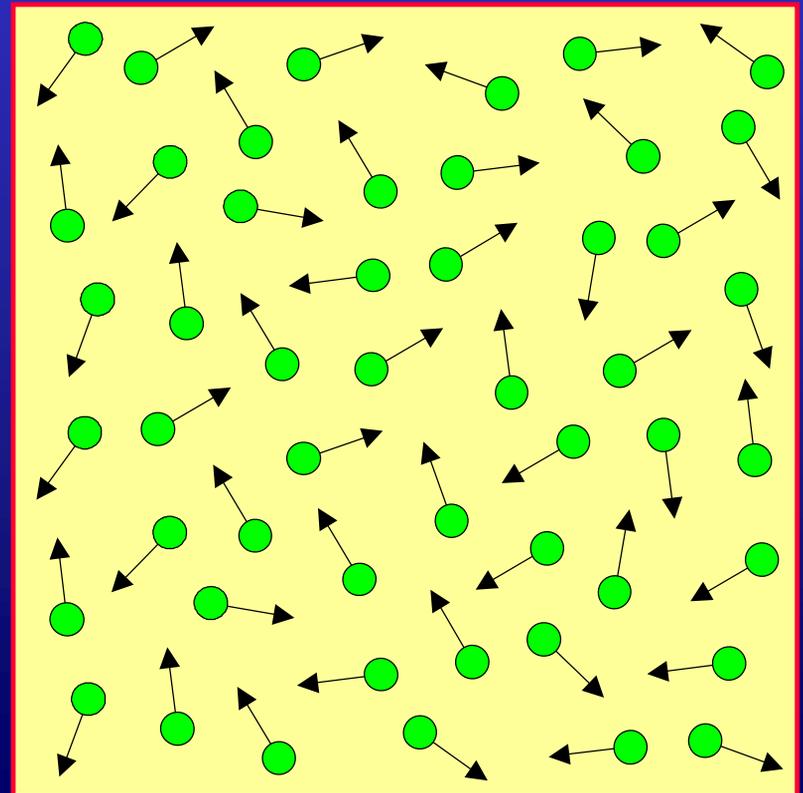
# Dinámica Molecular (MD)

## Definición

Resolución de las ecuaciones de Newton para un conjunto de N partículas:

$$\left. \begin{aligned} m_i \frac{d\vec{r}_i}{dt} &= \vec{p}_i \\ \frac{d\vec{p}_i}{dt} &= \vec{F}_i \end{aligned} \right\} (i = 1, 2, \dots, N)$$

Celda MD



# Dinámica Molecular

## Tipos

### PRIMEROS PRINCIPIOS (*ab initio*)

- Resolución de la ecuación de Schrödinger
- Simulaciones sin parámetros
- Límites:  $N \sim 100$  átomos , tiempo  $\sim 1$  ps

### POTENCIALES INTERATÓMICOS EMPÍRICOS

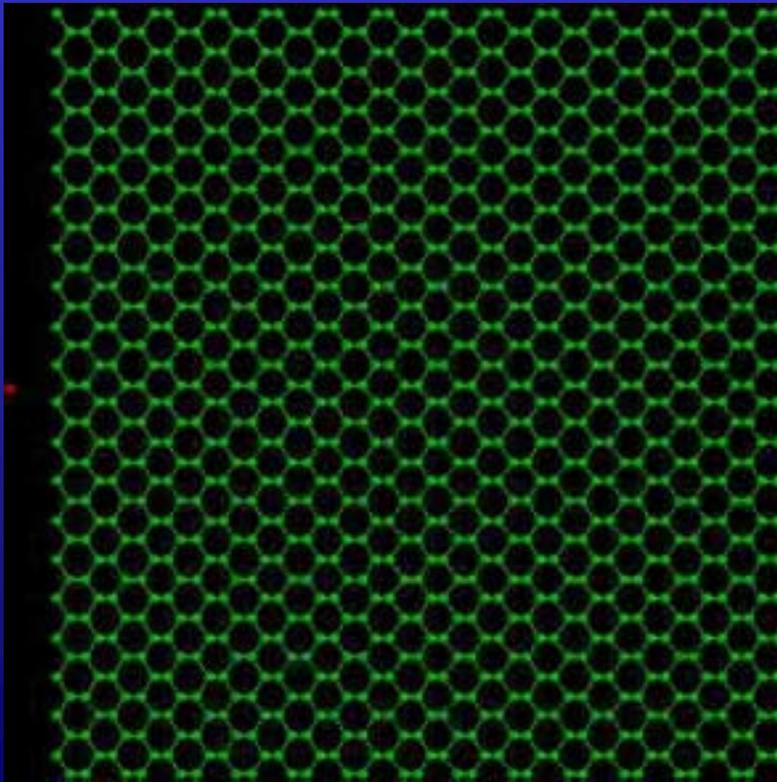
- Energía del sistema como función de las coordenadas:  $E_{\text{Total}} = E_{\text{Total}}\{r_i\}$
- Potenciales empíricos: parámetros ajustables
- Límites:  $N \sim 1.000.000$  átomos, tiempo  $\sim 1$  ns

Nuestro código MD: 15  $\mu\text{s}$ /átomo·iteración

# Dinámica Molecular

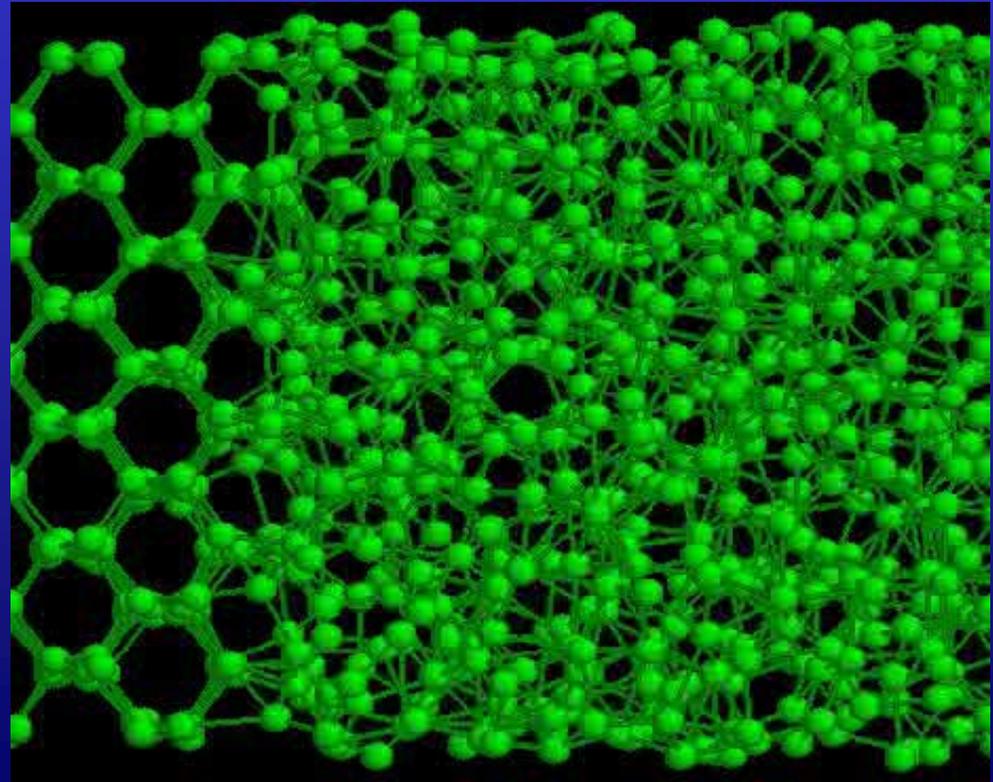
## Ejemplos de simulación en 1 día

$N = 10^6$  átomos,  $t = 5$  ps



5 keV As  $\rightarrow$  Si(100)

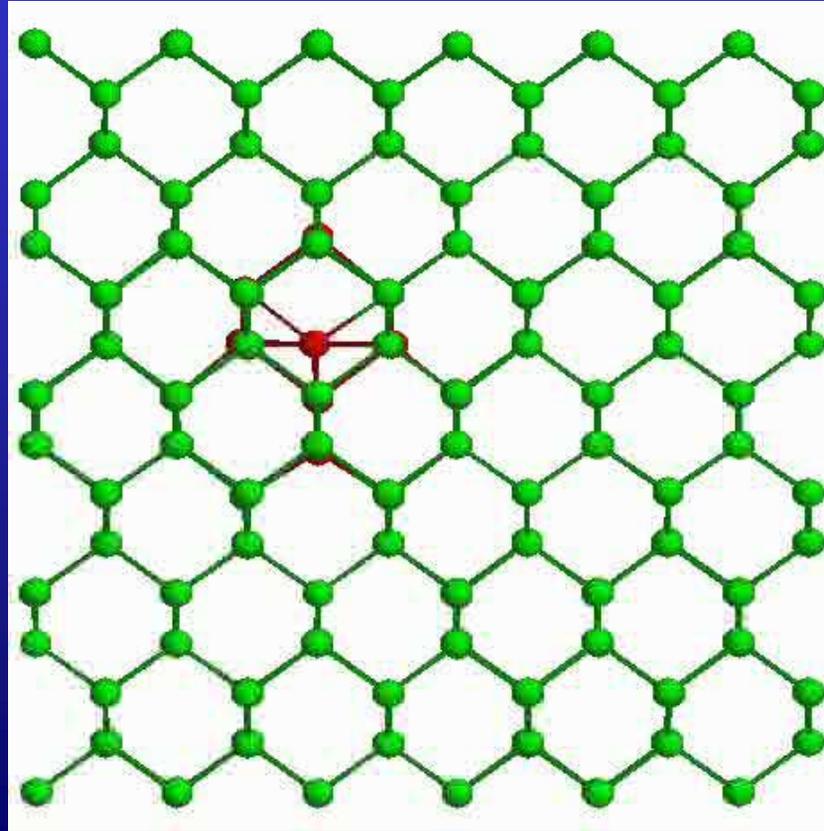
$N = 10^3$  átomos,  $t = 5$  ns



Interfase C/A a 1100 °C

# Dinámica Molecular

## Difusión del intersticial de silicio

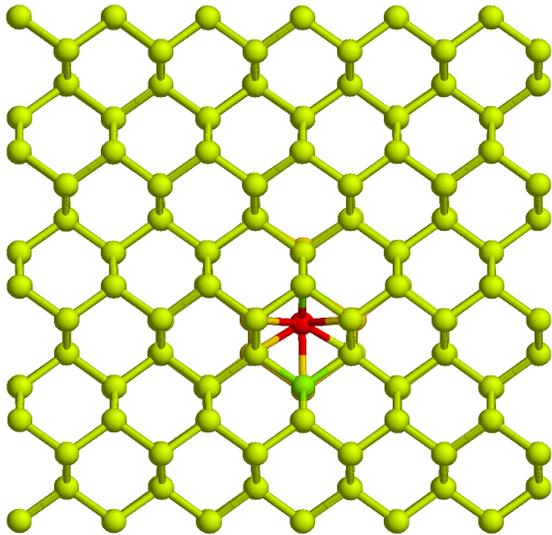


$T = 800 \text{ }^{\circ}\text{C}$

# Dinámica Molecular

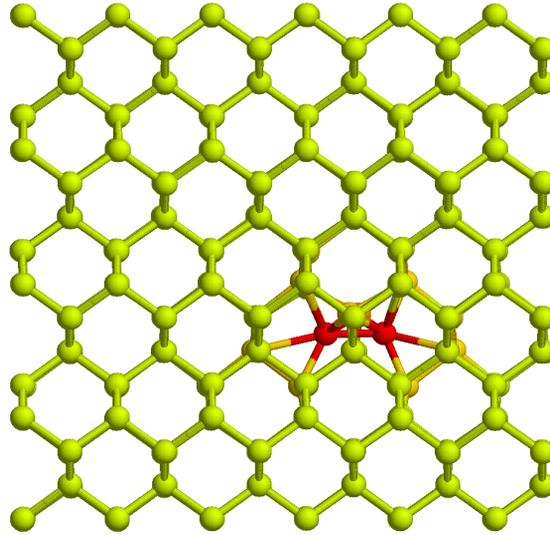
## Configuraciones del intersticial

TETRAÉDRICA (T)



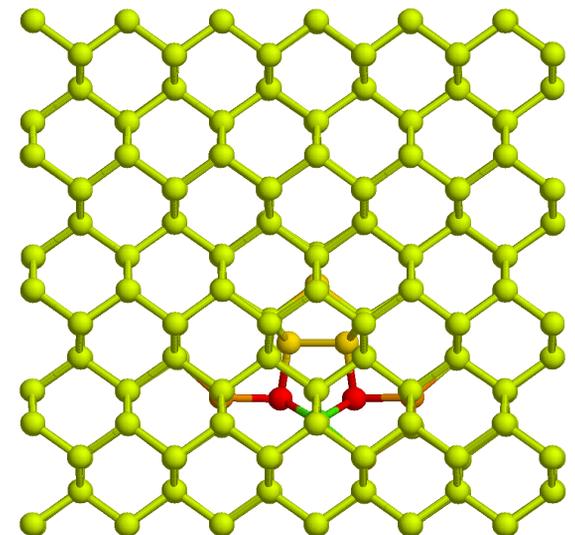
$$E_F = 4.14 \text{ eV}$$

DUMBELL (D)



$$E_F = 5.25 \text{ eV}$$

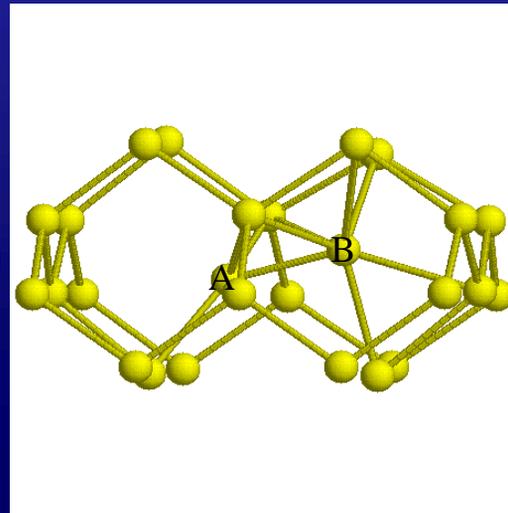
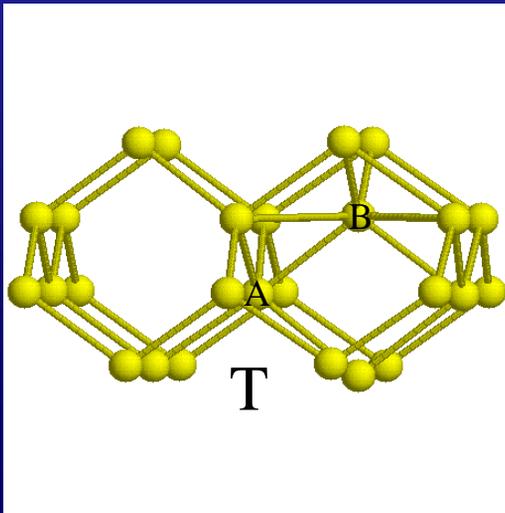
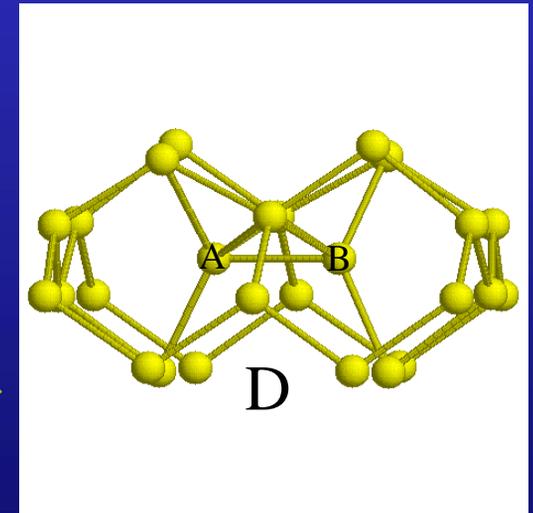
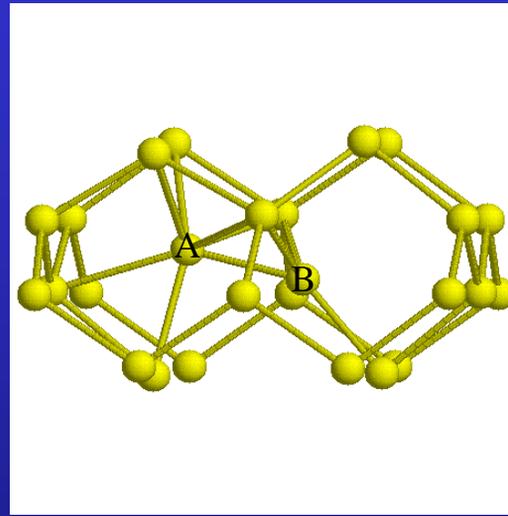
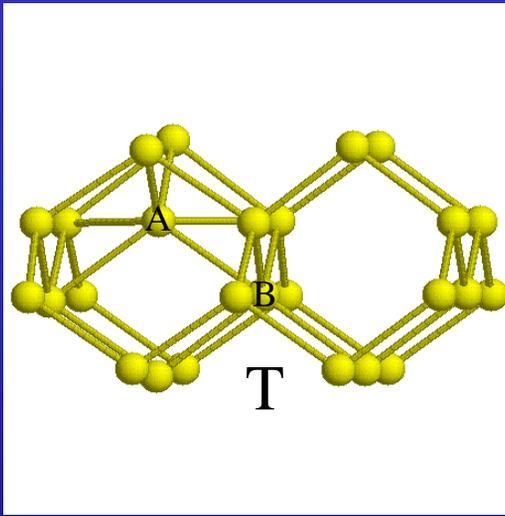
EXTENDIDA (E)



$$E_F = 4.61 \text{ eV}$$

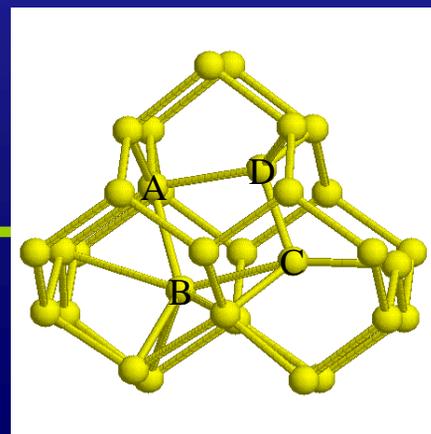
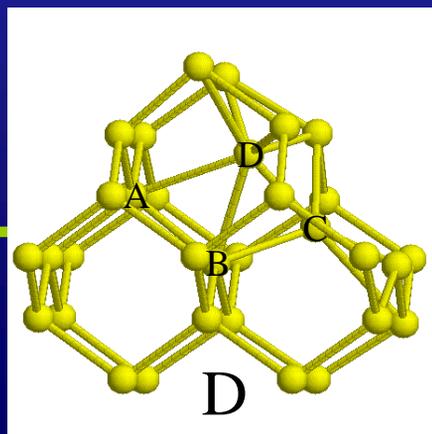
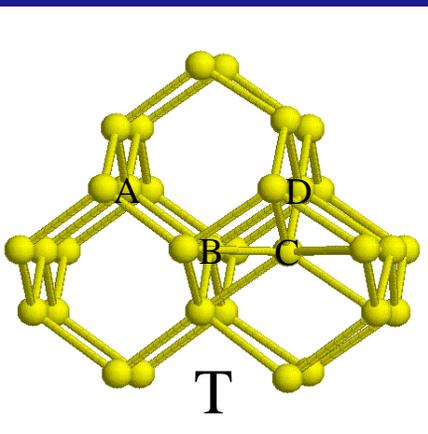
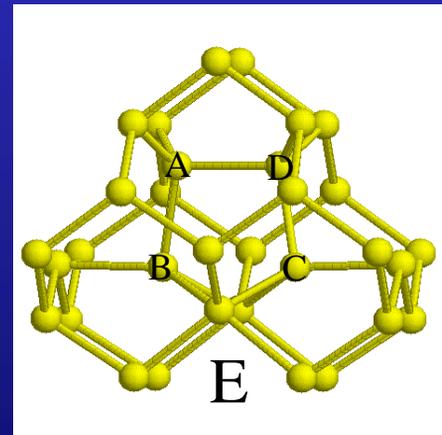
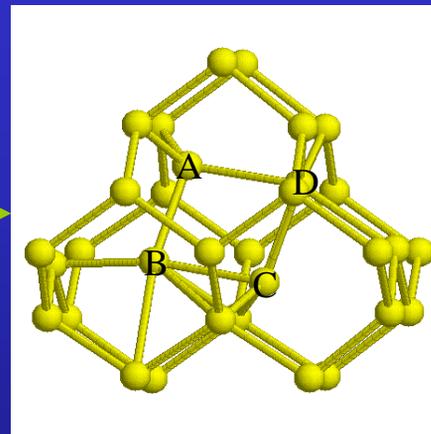
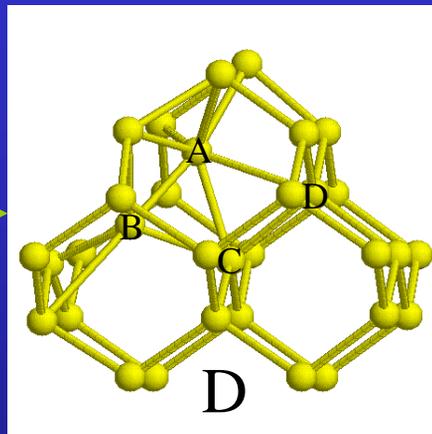
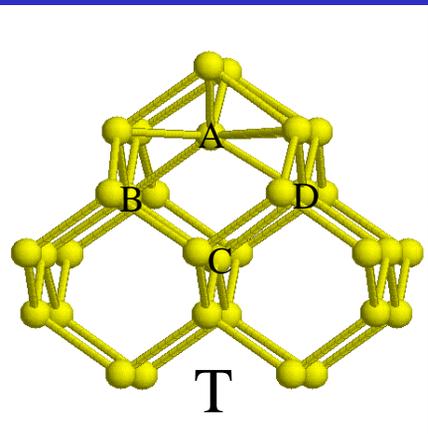
# Dinámica Molecular

## Camino de difusión 1



# Dinámica Molecular

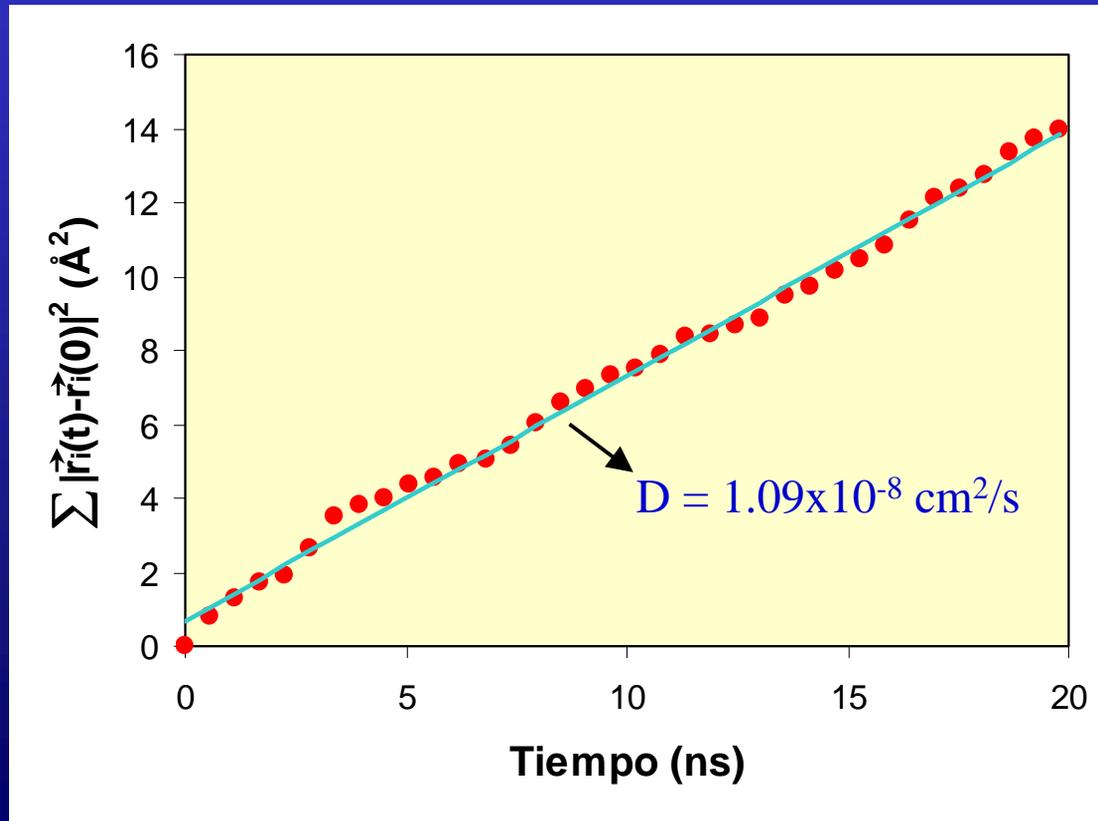
## Camino de difusión 2



# Dinámica Molecular

## Constante de difusión (D)

Relación de Einstein:  $D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)|^2}{6t}$

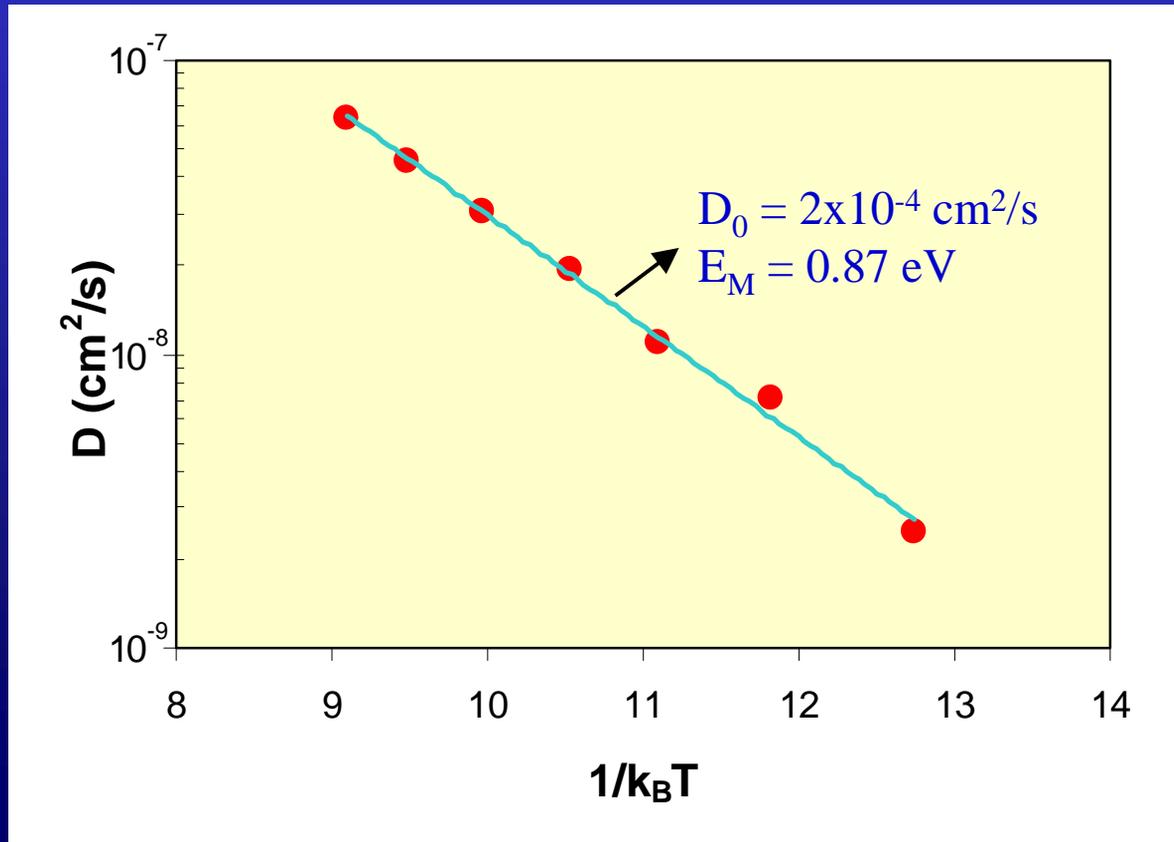


Difusión de un intersticial a  $T = 800 \text{ °C}$

# Dinámica Molecular

## Energía de migración y prefactor

Comportamiento tipo Arrhenius:  $D = D_0 \exp(-E_M/k_B T)$



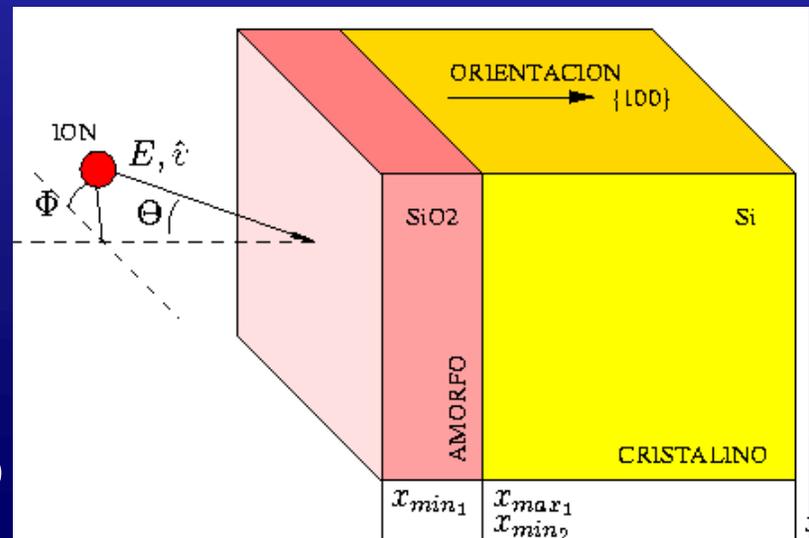
# Índice

- Introducción
- Simulación KMC:
  - Programa DADOS
  - Difusión del Boro
- Dinámica Molecular
- Simulación de la implantación con BC
- Conclusiones

# Implantación iónica

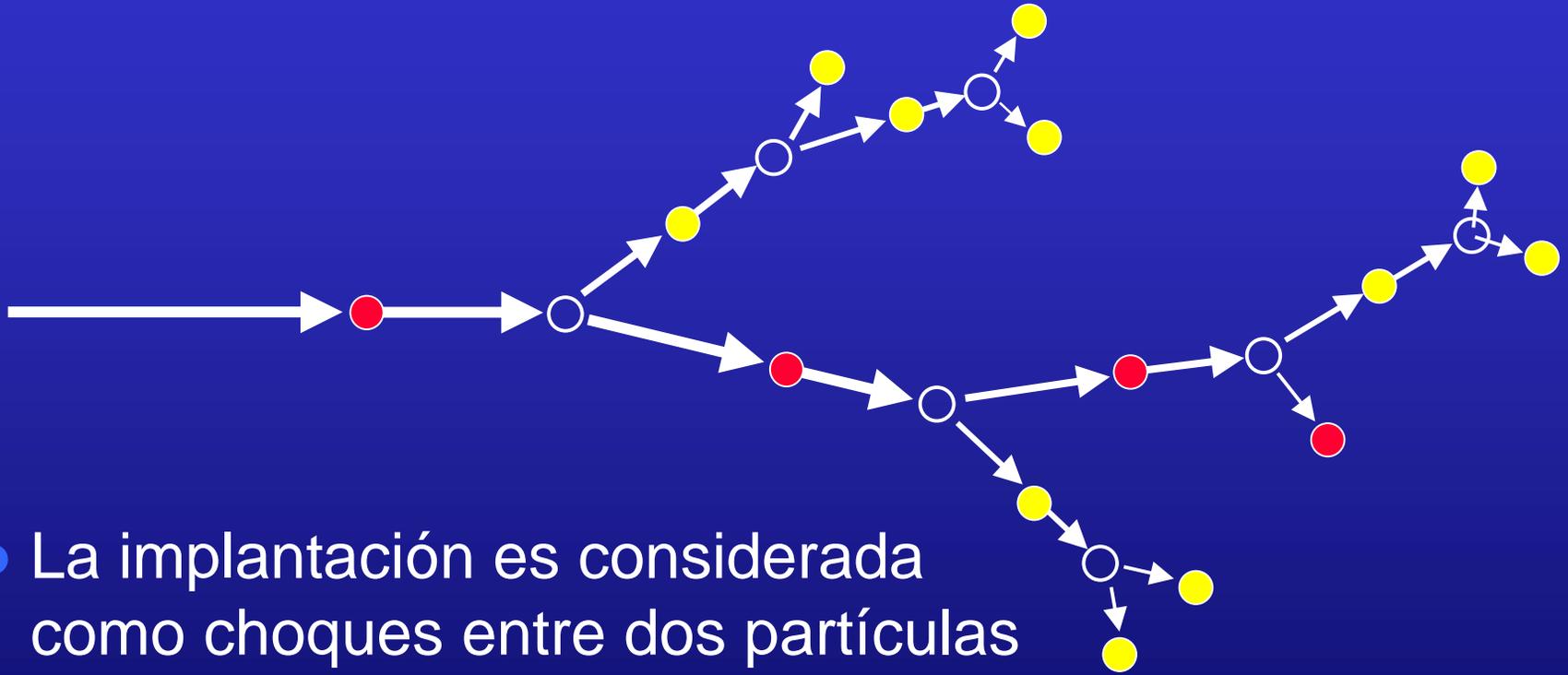
## Fundamentos

- Introducción de iones energéticos  
⇒ dopado + dañado ( I's y V's)
- Rangos típicos: Energía: 1 keV .. 1 MeV  
Dosis:  $10^{12}$  ..  $10^{15}$  cm<sup>-2</sup>
- Otros parámetros:
  - Ángulos de incidencia (inclinación, rotación)
  - Estructura cristalina (orientación) y/o amorfa
  - Geometría del dispositivo
  - ...



# Implantación iónica

## Simulación: Colisiones Binarias



- La implantación es considerada como choques entre dos partículas
- Cascada: proyectil ●, intersticiales ● y vacantes ○
- Válido hasta energías de MeV
- Colisiones binarias: mucho más rápido que MD

# Implantación iónica

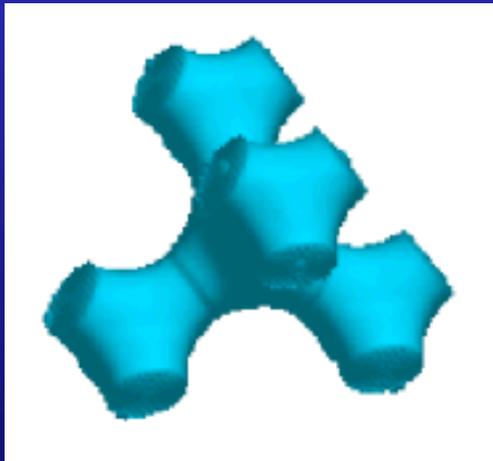
## Modelos físicos

- **Frenado** { Elástico: núcleo-núcleo  
Inelástico: núcleo-electrón

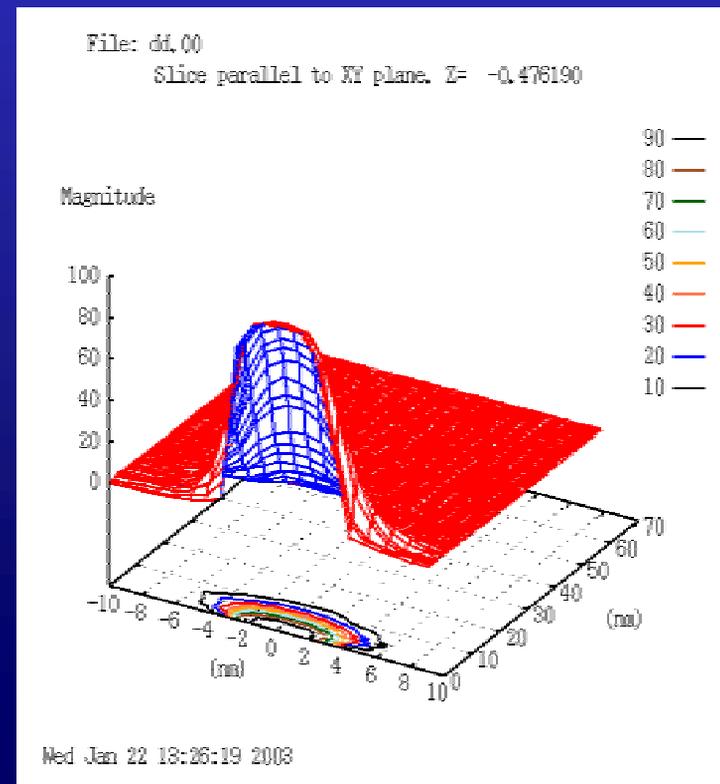
- **Dañado**
  - Implementación → Modelo estadístico
    - perfiles de impurezas
    - poco preciso para el daño
    - rápido
  - Implementación → Modelo atomístico
    - perfiles de impureza
    - preciso para el daño → KMC
    - más lento

# Implantación iónica Simulador IIS

- Modelado físico para el frenado electrónico:
  - Densidad electrónica ab-initio 3D:  
un único parámetro ajustable proyectil-blanco



- 3D: dopado, dañado
- Ejecución paralela, mecanismos de reducción del ruido estadístico, etc



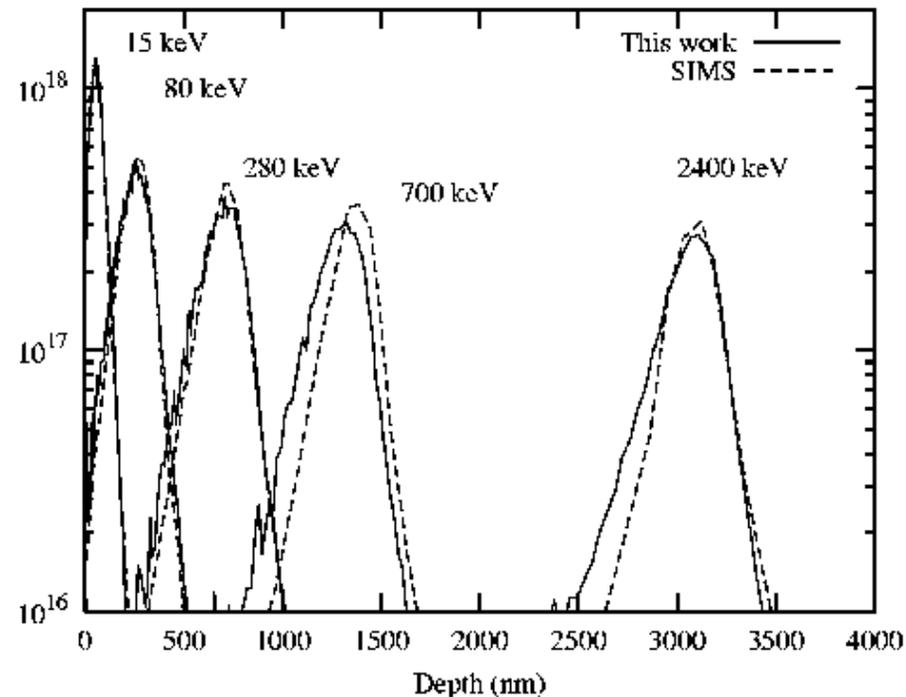
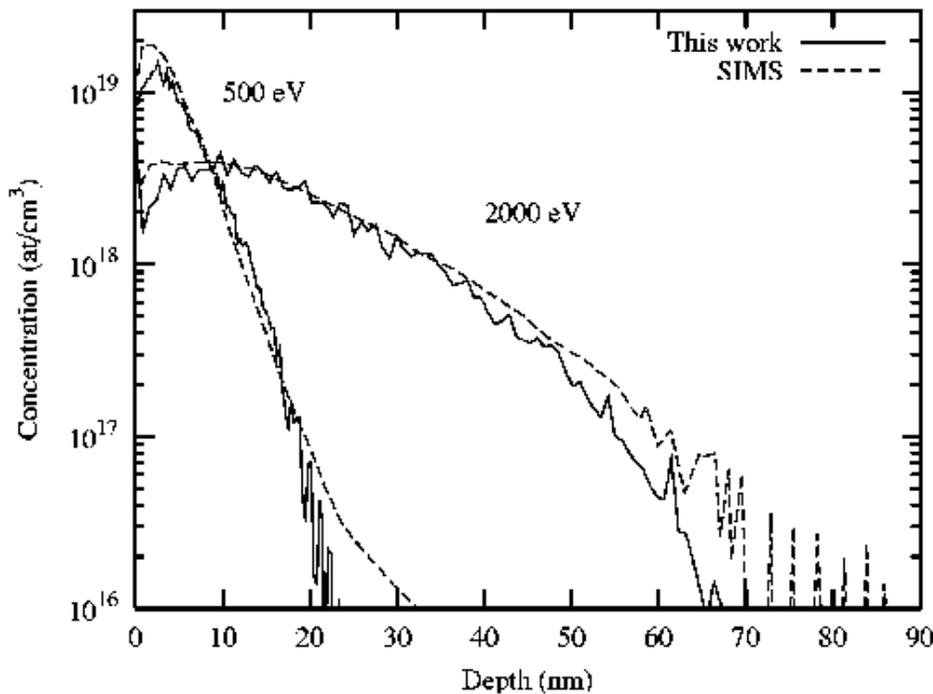
# Implantación iónica

## Boro en Silicio

con diferentes energías y orientaciones

B ( $0^\circ, 0^\circ$ )  $\rightarrow$  Si {100}

B ( $7^\circ, 30^\circ$ )  $\rightarrow$  Si {100}



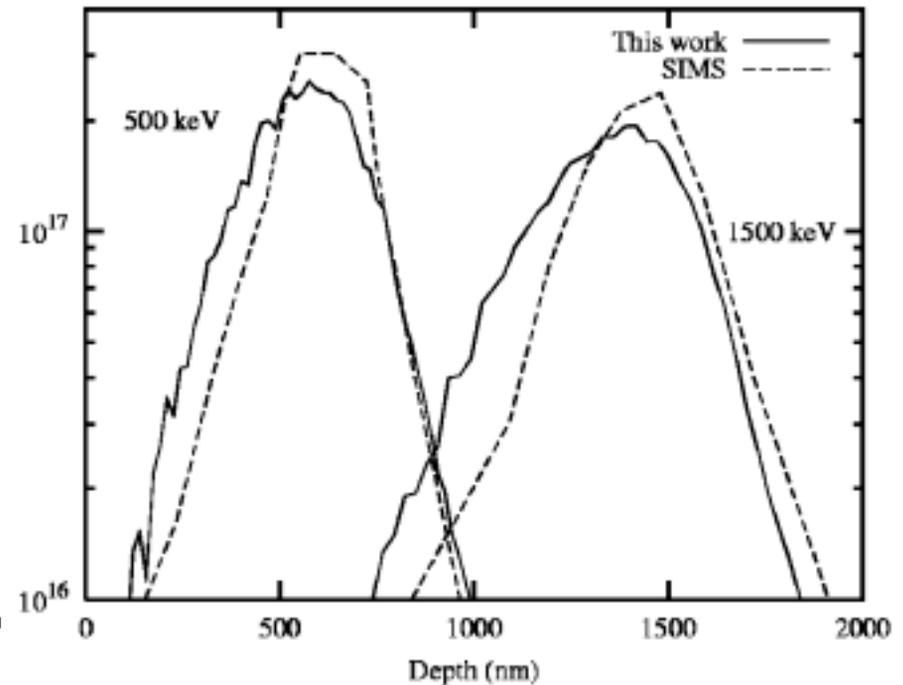
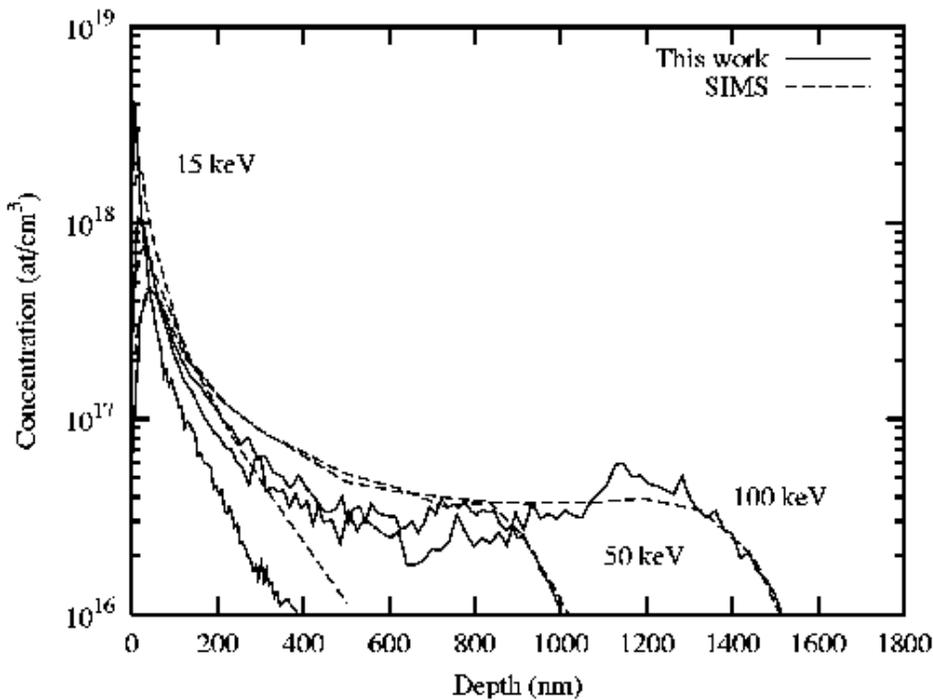
# Implantación iónica

## Arsénico y Fósforo en Silicio

en condiciones de acanalamiento

As  $\rightarrow$  Si {110}

P  $\rightarrow$  Si {100}

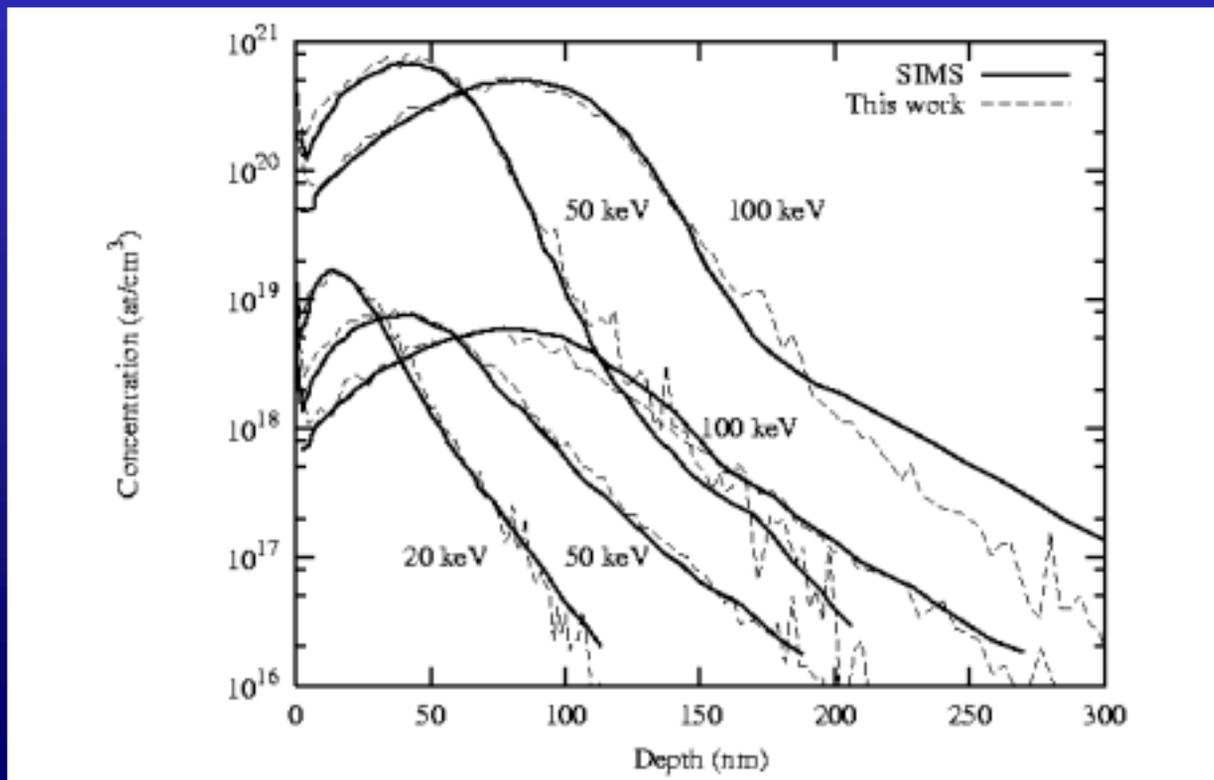


# Implantación iónica

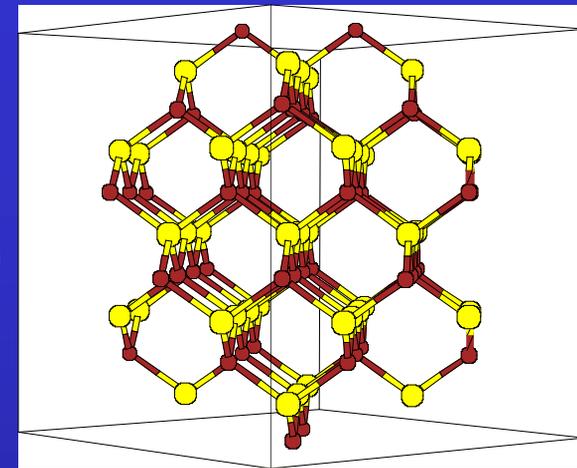
## Moléculas $\text{BF}_2$ en Silicio

con diferentes energías y dosis

$\text{BF}_2 \rightarrow \text{Si } \{100\}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$  y  $4 \cdot 10^{15} \text{ at/cm}^2$

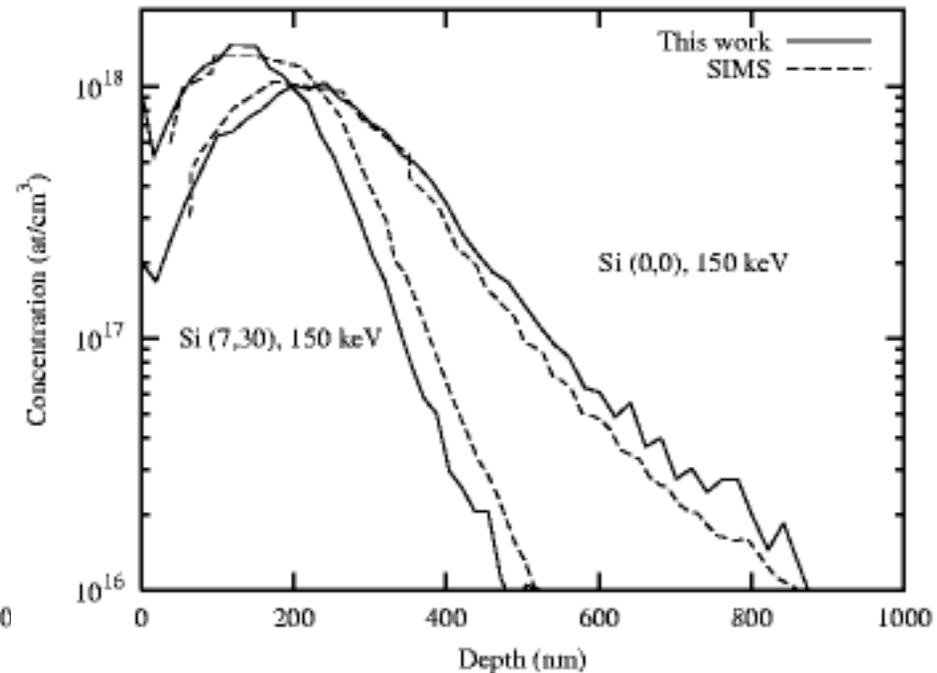
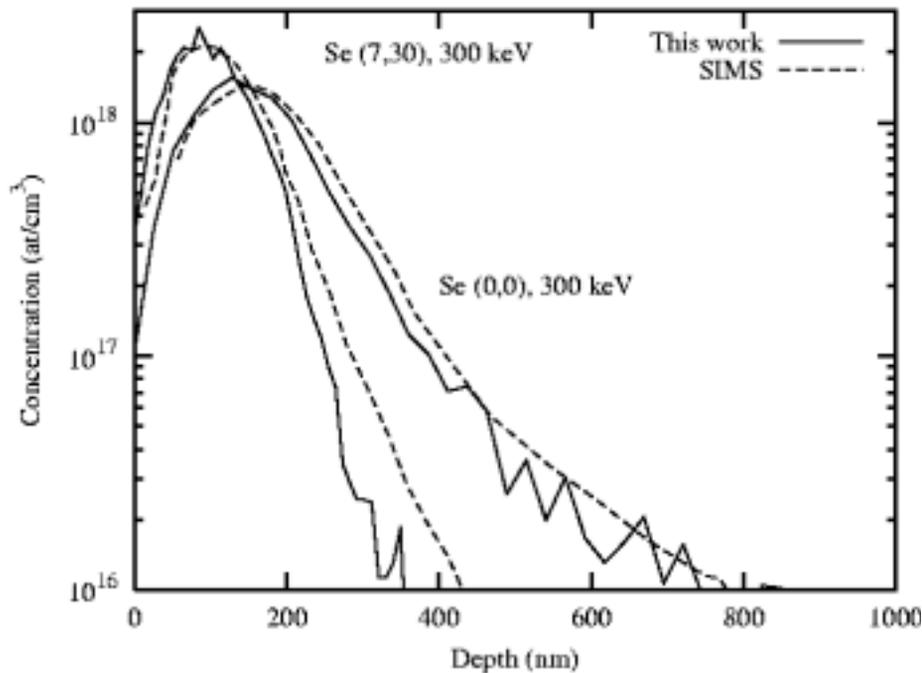


# Implantación iónica en Arseniuro de Galio (III-V)

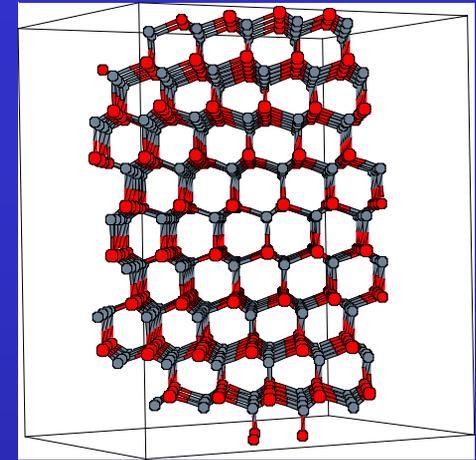


Se ( $7^\circ, 30^\circ$ ) y ( $0^\circ, 0^\circ$ ) 300 keV  $\rightarrow$  GaAs{100}

Si ( $7^\circ, 30^\circ$ ) y ( $0^\circ, 0^\circ$ ) 150 keV  $\rightarrow$  GaAs{100}

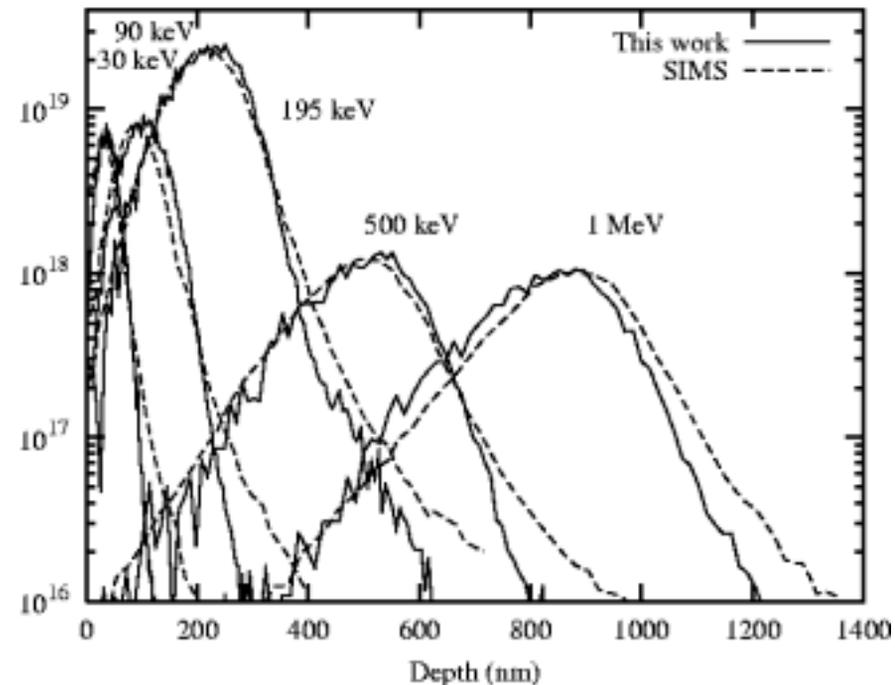
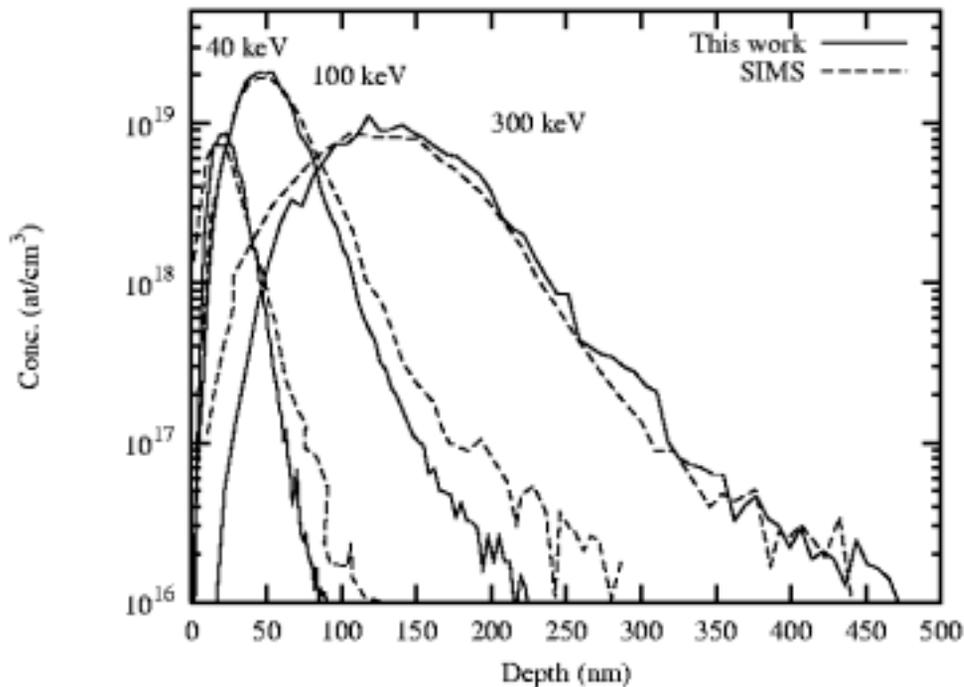


# Implantación iónica en Carburo de Silicio (IV-IV)



As (12.5°, 3.5°) → 6H-SiC{0001}

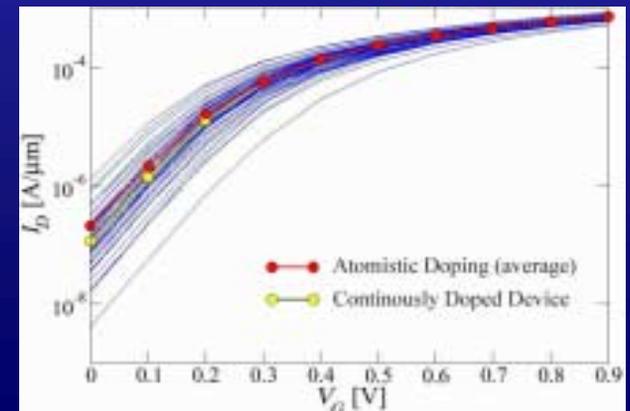
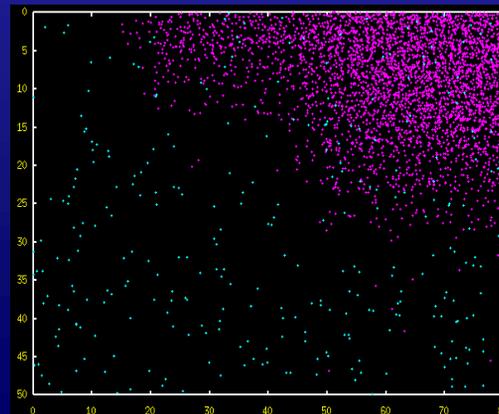
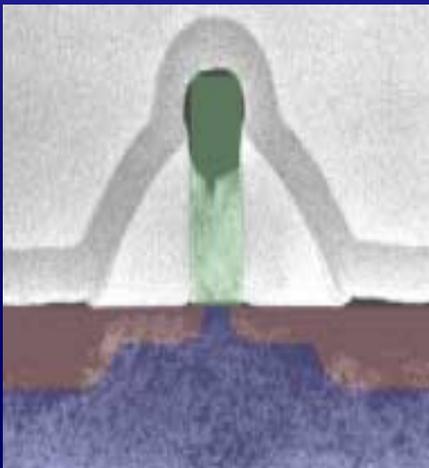
Al (12.5°, 3.5°) → 6H-SiC{0001}



# Conclusiones

La Simulación Atomística de Procesos Tecnológicos:

- Proporciona un elevado nivel de detalle y precisión
- Buena herramienta para el estudio de mecanismos complejos
- Mas rápida y precisa que los simuladores continuos 3D para dispositivos  $< 0.1 \mu\text{m}$





# Caracterización Eléctrica de Materiales y Dispositivos Microelectrónicos

---

## LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Caracterización de:

- Centros profundos en uniones bipolares (p-n y Schottky)
- Defectos en estructuras MIS
- Propiedades dieléctricas en estructuras metal-aislante-metal
- Dispositivos electrónicos avanzados
  - HEMT de GaN
  - Estructuras silicio-sobre-zafiro
  - Dispositivos fotónicos de semic. III-V (InGaAs, InGaP, InAlAs):  
Diodos láser, células solares integradas, detectores y emisores optoelectrónicos



# Caracterización Eléctrica de Materiales y Dispositivos Microelectrónicos

---

## TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN

### Técnicas convencionales

- Caracterización de dispositivos en condiciones estacionarias
- *Deep level transient spectroscopy* (DLTS)
- Medidas de efecto Hall
- Medidas C-V en estructuras MIS (cuasiestática y alta frecuencia)

### Técnicas desarrolladas en nuestro laboratorio

- DLTS de un sólo barrido (SS-DLTS)
- Espectroscopía óptica de admitancia (OAS)
- Técnica de transitorios capacidad-voltaje (CVTT)
- Técnica de transitorios de conductancia (g-t)
- Análisis de impedancia en radio-frecuencia (RFIA)

# Diseño de Circuitos Integrados Analógicos

## Diseño de sistemas de altas prestaciones

---

- FILTROS que operan a muy baja tensión (1V)

- Solución basada en el AO conmutado.

Aplicación: *Radio Data System*

- CONVERTORES

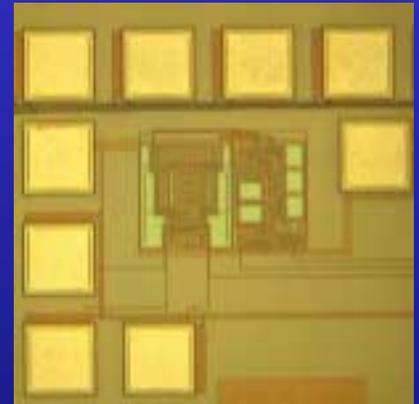
- De tipo Nyquist:

circuitos de muestreo y retención y convertor *pipeline*

- De sobremuestreo:

convertor sigma-delta de tiempo continuo

Aplicación: comunicación inalámbrica de alta velocidad  
(*wireless-LAN*)





# Simulación Atomística de Procesos en Microelectrónica

Juan Barbolla

Dept. de Electrónica, Universidad de Valladolid

CDE 2003

