

# プロセスシミュレータの概要と特徴

主管研究員 大倉 康幸

Made in Japan のLSIデバイス設計CADシステム  
Advance/TCADのご紹介  
2015年6月30日（火）  
アドバンスソフト株式会社

## 発表内容

Advance/TCADのプロセスシミュレータは、

- ・デバイスの形状を計算する  
堆積／エッチング、酸化
- ・デバイス中の不純物分布を計算する  
イオン注入、不純物拡散
- ・形状が変化したとき及び熱工程に伴う応力を計算するという機能を持つ。

この報告では、

堆積／エッチング(3次元形状モデル)  
不純物拡散(拡散モデル)  
酸化及び応力(3次元酸化モデル)  
について報告する。

イオン注入計算  
入出力GUI(統合プラットフォーム)  
拡散計算の並列化  
は別に報告。

# 3次元形状処理モデル

## 形状処理モデルの対応関係

	物理モデル <sup>[1-2]</sup>	幾何学モデル
デポジション	エピタキシャル成長	平坦化デポジション、(等方性デポジション)
	PVD、CVD	等方性デポジション、平坦化デポジション
エッチング	プラズマエッチング	異方性エッチング、等方性エッチング
	反応性イオンエッチング(RIE)	異方性エッチング、(等方性エッチング)
	溶液エッチング	等方性エッチング
	化学的機械的研磨(CMP)	平坦化エッチング



ポイント

処理後の形状がコントロールしやすい(理想的な形状を再現)

高速に処理が出来る

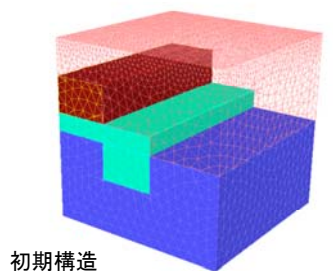
形状表現に適した非構造四面体メッシュに対応

[1] リアライズ社, 最新/半導体プロセス・デバイスシミュレーション技術, 1990

[2] 角南英夫 著, VLSI工学製造プロセス編, 電子情報通信学会編, 2006, コロナ社

## 3次元形状処理モデル

## 3次元形状処理《デポジション》



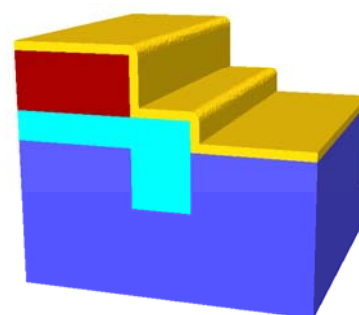
初期構造

等方性 + デポジション



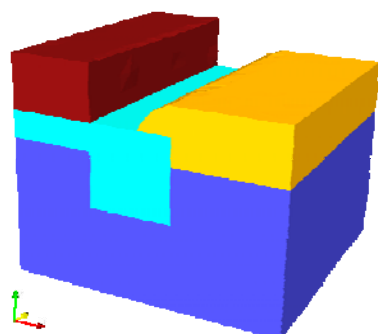
基本機能: 表面に等方的に材質を堆積させる

- どの材質でも同一の処理が行われる
- 縦横比の調節が可能

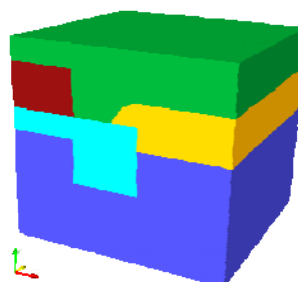


エピタキシャル成長機能:

特定材質の表面に等方的に材料を堆積させる

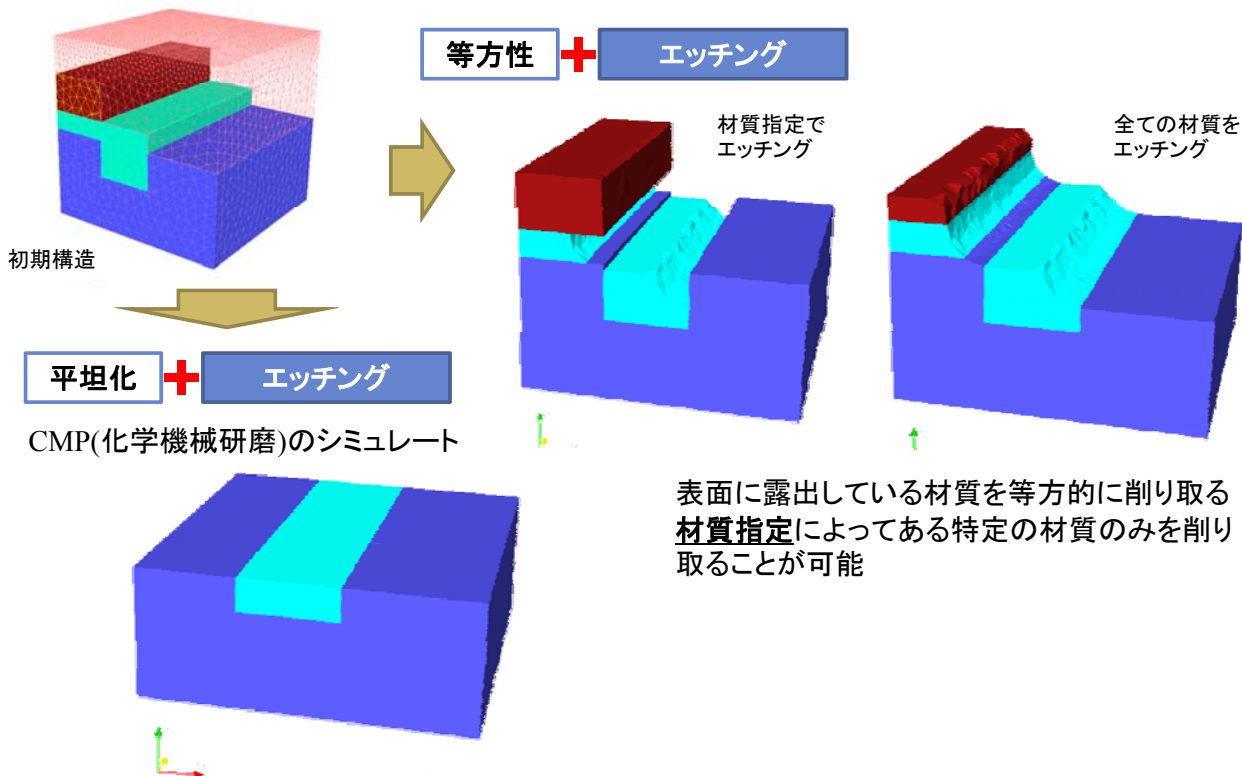


平坦化 + デポジション

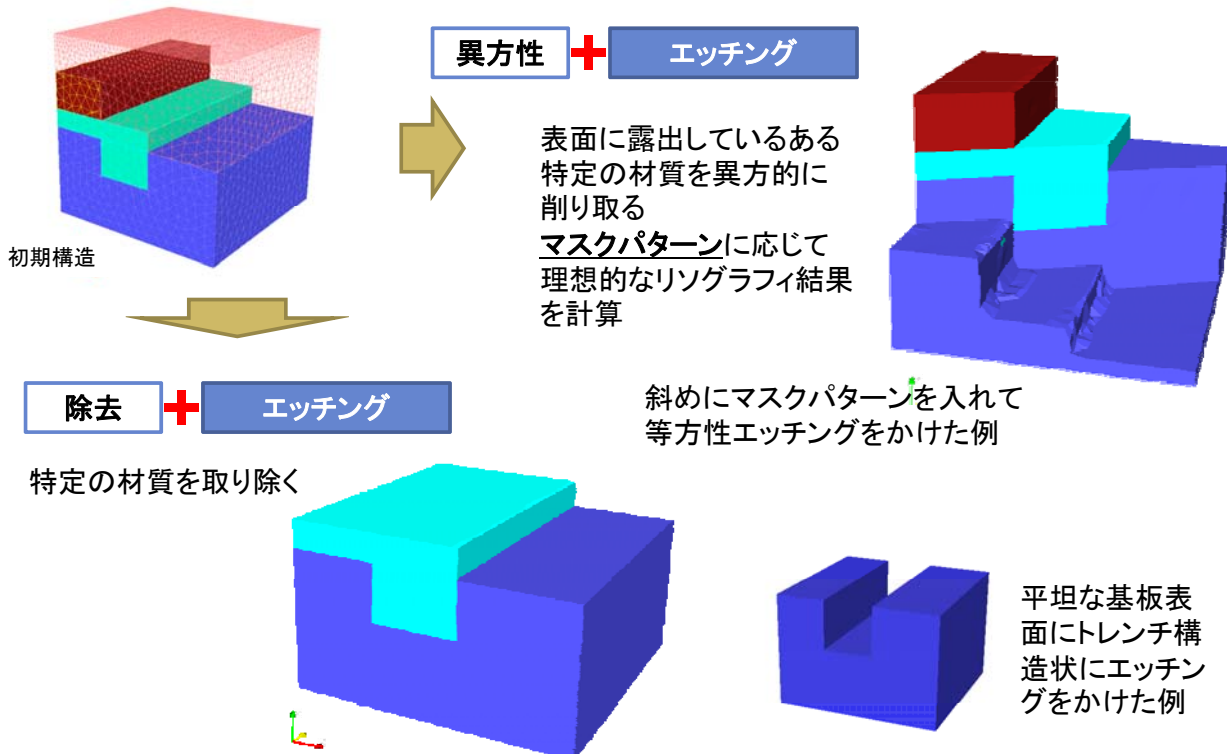


ある高さまで平坦に積み上げる

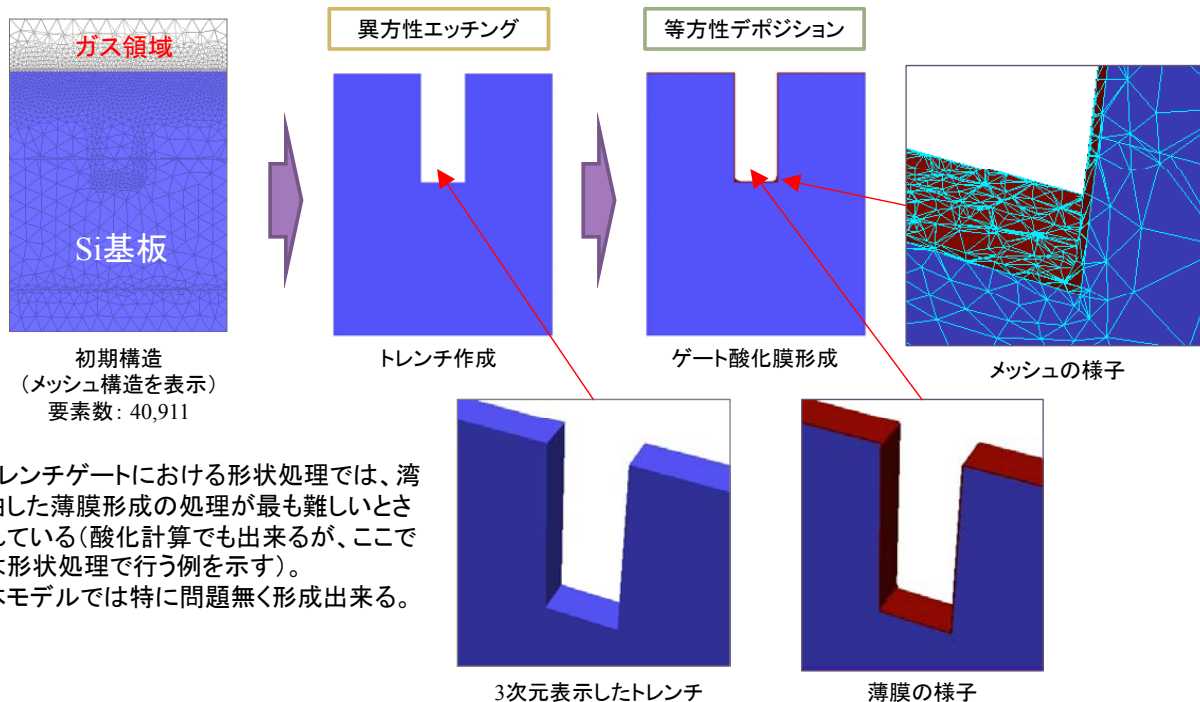
# 3次元形状処理《エッチング》



# 3次元形状処理《エッチング》

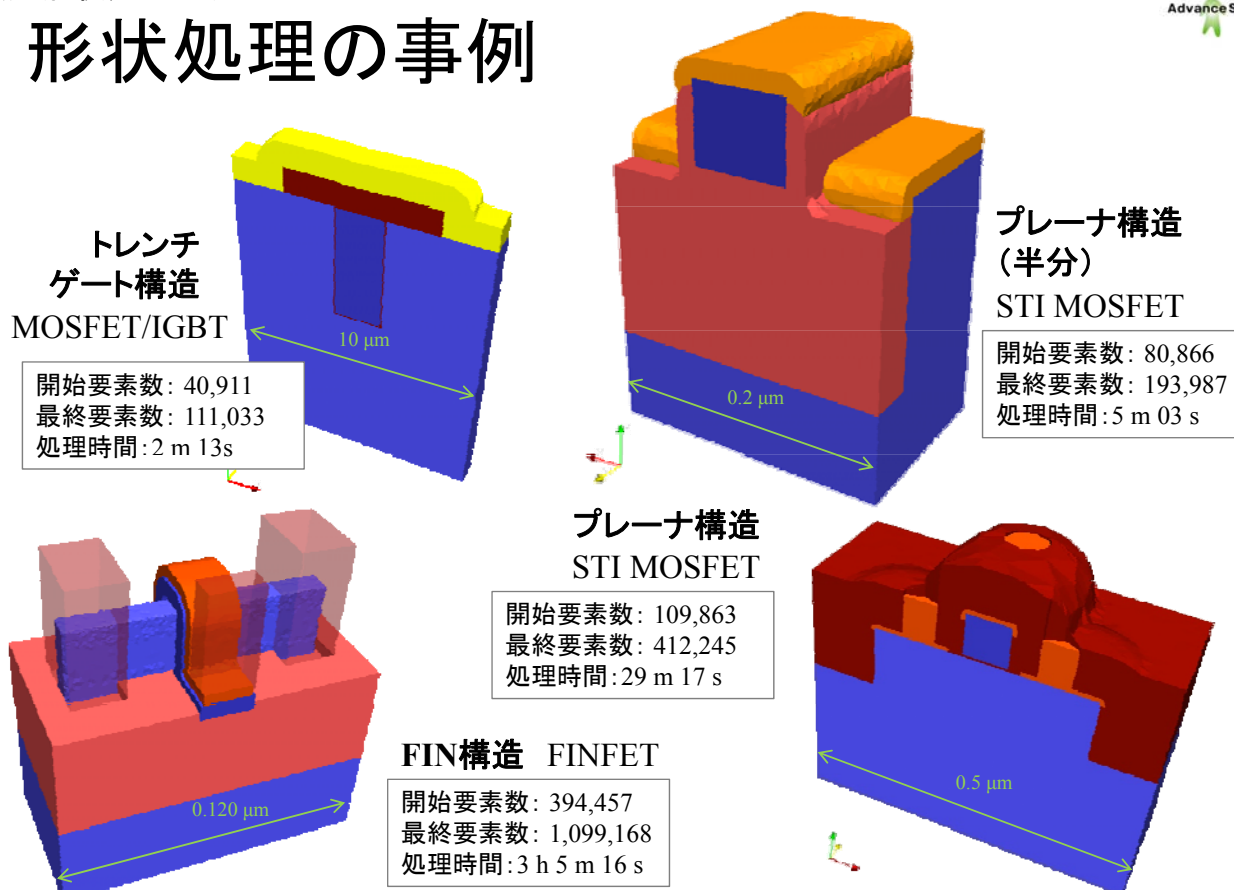


# 形状処理の事例(トレンチゲート)



トレンチゲートにおける形状処理では、湾曲した薄膜形成の処理が最も難しいとされている(酸化計算でも出来るが、ここでは形状処理で行う例を示す)。本モデルでは特に問題無く形成出来る。

# 形状処理の事例



開始要素数: 40,911  
最終要素数: 111,033  
処理時間: 2 m 13s

プレーナ構造 (半分)  
STI MOSFET

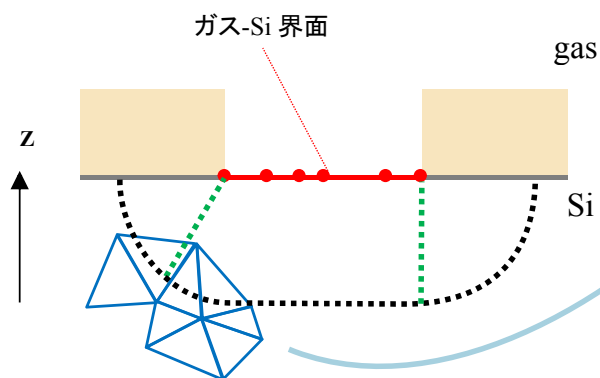
開始要素数: 80,866  
最終要素数: 193,987  
処理時間: 5 m 03 s

開始要素数: 109,863  
最終要素数: 412,245  
処理時間: 29 m 17 s

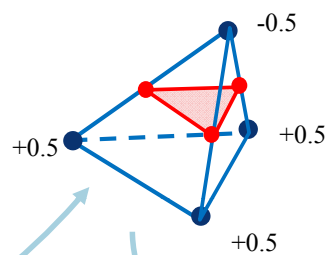
FIN構造 FINFET

開始要素数: 394,457  
最終要素数: 1,099,168  
処理時間: 3 h 5 m 16 s

# 移動境界の方法

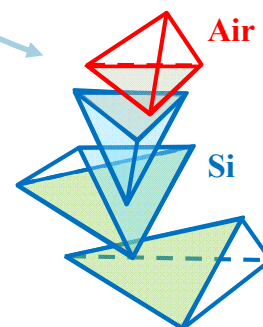


距離関数から要素内界面の頂点座標を求める



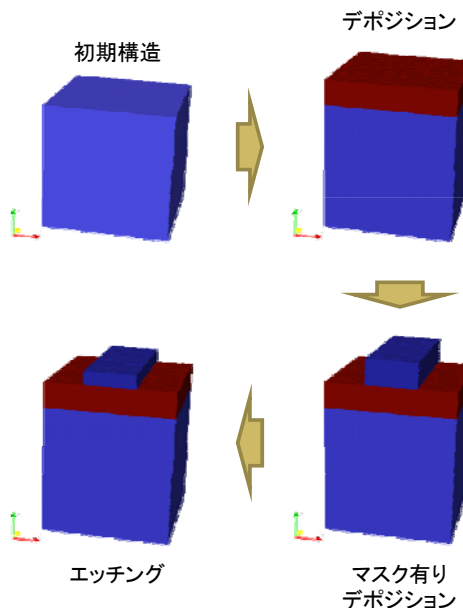
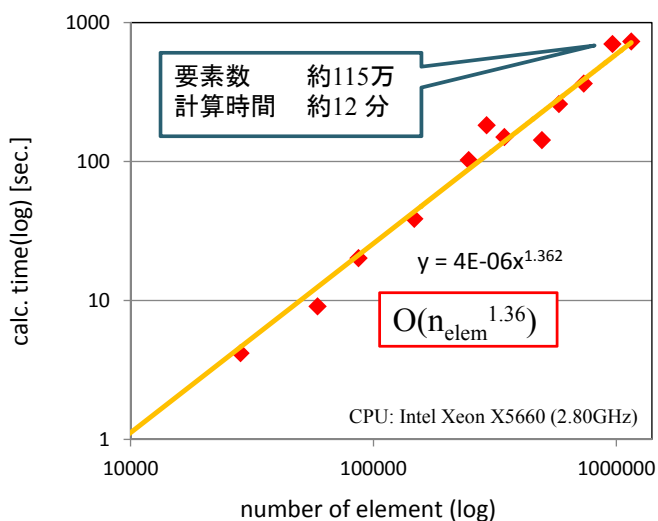
1. あるメッシュ格子点に関して、元界面頂点との最短距離を求める
2. 距離関数から新界面頂点を求める
3. 要素を分割する

別のプロセスへ移るときに要素分割を行い、四面体に置き換えるとともに、材質情報を書き換える



# 計算処理速度(メッシュ規模依存性)

単純なベンチマーク(3ステップ)についてCPU1コア(並列なし)で計算メッシュ作成や実作業の時間を含まない計算処理時間のみ

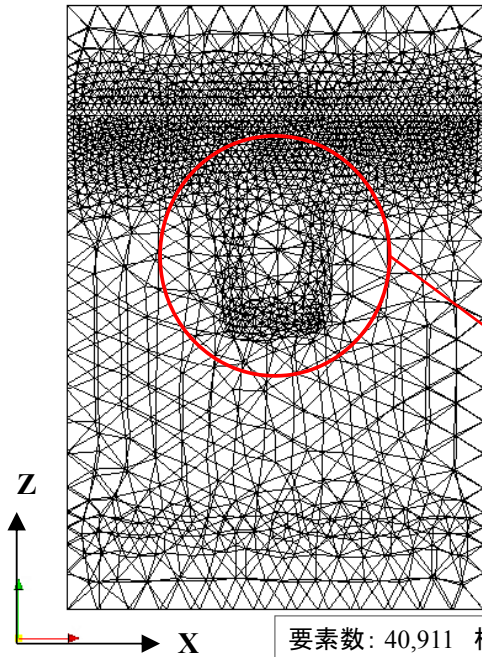


要素数に対して $O(n_{elem}^{1.36})$ の速度性能を実現

# メッシュ作成例

プロセスシミュレータには専用の四面体メッシュャーが付属。

トレンチゲート用擬似2Dメッシュ

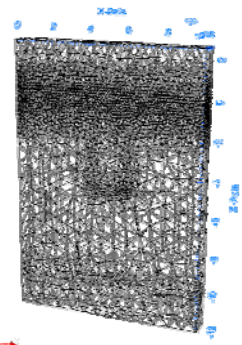


密度制御は、基板表面とマスクパターン近傍で指定可能

界面領域は不純物注入拡散のためにメッシュ密度を高く設定

トレンチ構造を作成するために奥行き方向に均一な密度制御を行う  
特に界面に湾曲が生まれる角の部分を細かく設定

p/n junctionのために少しだけ密度を高く設定



要素数: 40,911 格子点数: 8,185

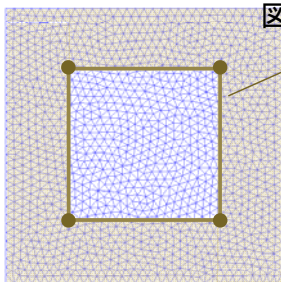
# マスクパターン設定

マスクファイルによる指定

```
!MASK, NAME="MODEL01", FILE="model01.msk"
!MASK, NAME="MODEL02"
0.3, 0.3
0.3, 0.5
0.5, 0.5
0.5, 0.3
```

入力制御ファイルに直接指定する方法

Si-ガス界面を上から(Z軸方向)から見た



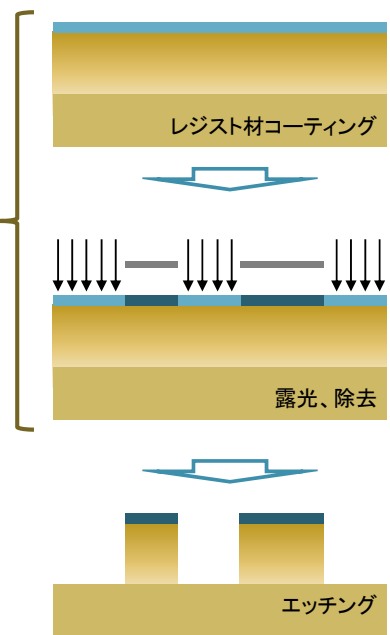
マスクパターン

この領域内部(ポジの場合)にデポジションまたはエッチング処理が施されます。

幾何学モデルでは省略される



幾何学モデルにおけるマスクパターンは、実際のプロセス工程におけるリソグラフィのフォトリソエッチング工程の中間過程を省略し、理想的な処理(高解像度)を再現



エッチング模式図

## 拡散シミュレーションの概要

- ① 要素中心コントロールボリューム法を利用
- ② ニュートン法による非線形解析
- ③ 行列ソルバは汎用ライブラリLIS<sub>[1]</sub> を利用
- ④ 拡散モデル は非平衡反応拡散モデル及び平衡拡散モデル (フェルミモデル)
  - 点欠陥、不純物反応
  - 点欠陥クラスタ反応
  - 不純物不活性化反応
- ⑤ 半導体プロセスで用いられる熱処理条件
  - 高温長時間 1200℃ 数時間
  - 高温短時間 RTA, Spike, Flush (急激な温度変化)
  - 低温長時間 600℃ 数時間

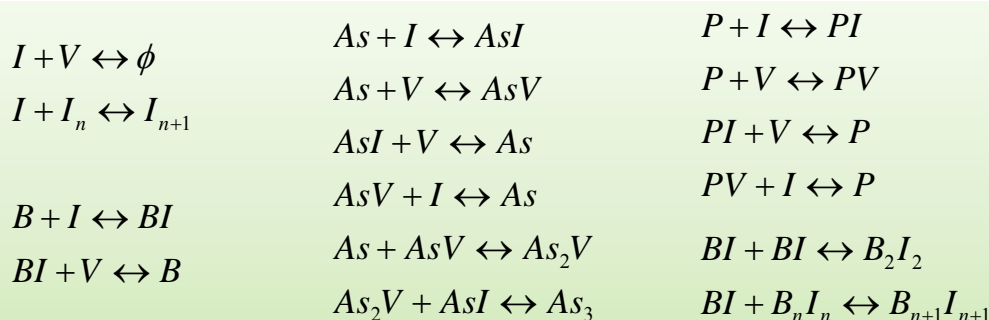


パラメータ記述で  
多様なモデルに対応可能

[1] <http://www.ssisc.org/lis/index.ja.html>

## 非平衡反応拡散モデル

実プロセス対応モデル B,P,As 混在<sub>[2]</sub>



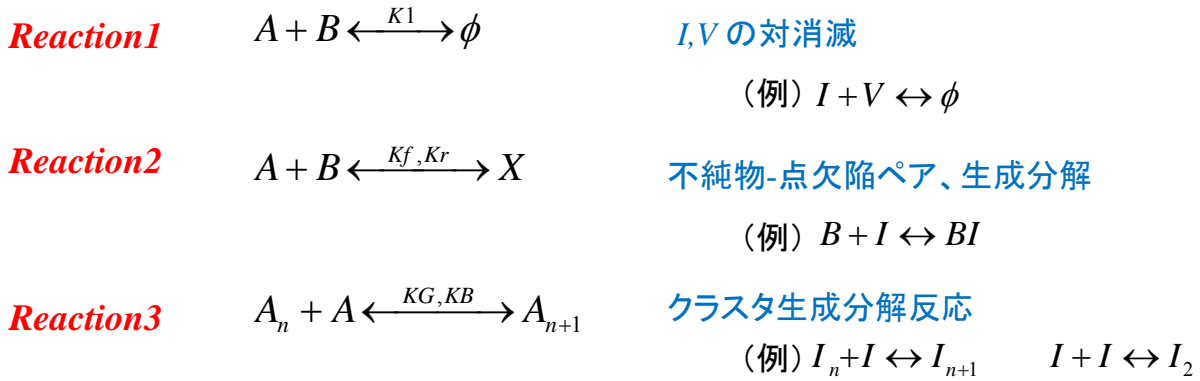
推奨パラメータを構築

I, V, BI, PI, PV, AsI, AsV : 拡散種 7種  
 As, P, B : 活性種 (ドナー・アクセプタ) 3種  
 I<sub>n</sub>, B<sub>n</sub>I<sub>n</sub>, As<sub>2</sub>V, As<sub>3</sub> : 不活性化種 4種      合計 14 種  
 ポアソン方程式を含め 15個の偏微分方程式

[2] H. Sakamoto, et.al., SISPAD,137(1997).

# 反応拡散汎用ソルバ

- 反応拡散モデルをパラメータファイルで記述
- 多様な非平衡拡散モデルに対応可能
- 反応タイプは以下の3種を想定



- 電荷交換反応は平衡を仮定      (例)  $I^0 + e^- \leftrightarrow I^-$        $I^0 + h^+ \leftrightarrow I^+$

# 空孔・格子間Siの熱平衡濃度・拡散係数<sup>[3]</sup>

Si内でのZnの拡散(広がり抵抗)

→空孔・格子間Siの熱平衡濃度・拡散係数

Brachtによる定数

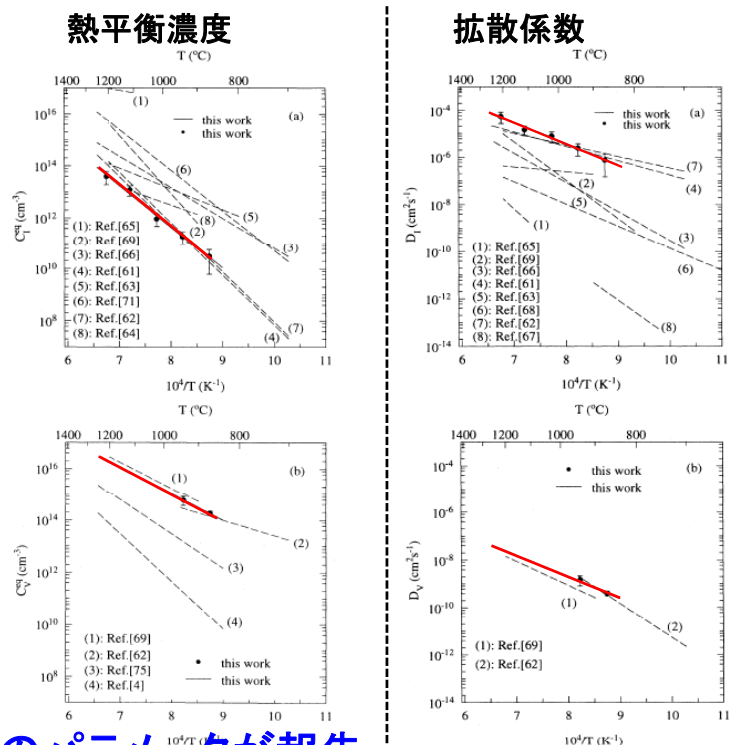
	Interstitial	Vacancy
$C^{eq}$ (1/cm <sup>3</sup> )	$2.9 \times 10^{24}$	$1.4 \times 10^{23}$
$E_{ceq}$ (eV)	3.18	2.0
$D$ (cm <sup>2</sup> /s)	51	$3.0 \times 10^{-2}$
$E_D$ (eV)	1.77	1.8



B, As不純物拡散における推奨パラメータを決定

多くのグループより多数のパラメータが報告

⇒ Brachtらの結果を採用 [3] H. Bracht, et. al., Phys. Rev. B., 52, 16542(1995).



# パラメータキャリブレーション例①

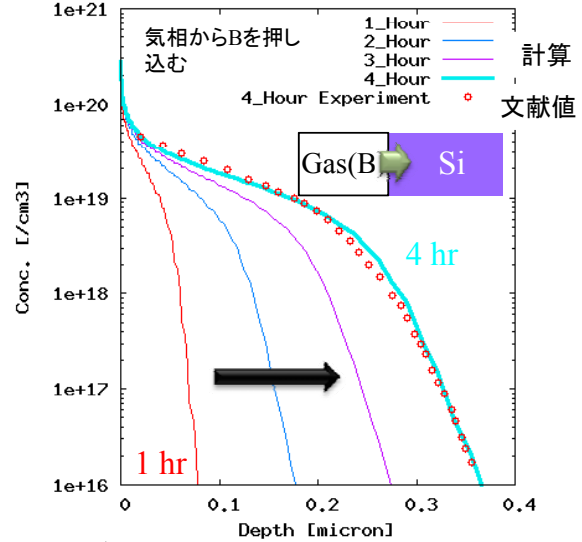
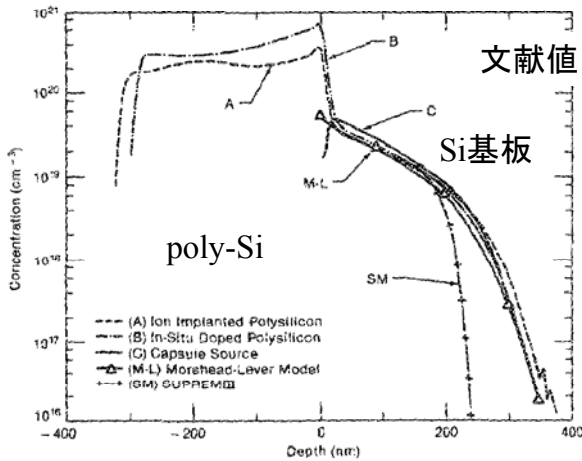
## B拡散

- 格子間シリコン拡散係数、平衡濃度は文献値(Bracht)<sup>[3]</sup>

(poly Si(gas)  $4 \times 10^{20}$  1/cm<sup>3</sup>)

Si-poly Si基板を850°C、4 hr [4]

[4] W. A. Orr Arienzo, et. al., J. Appl. Phys, 63, 116(1988).



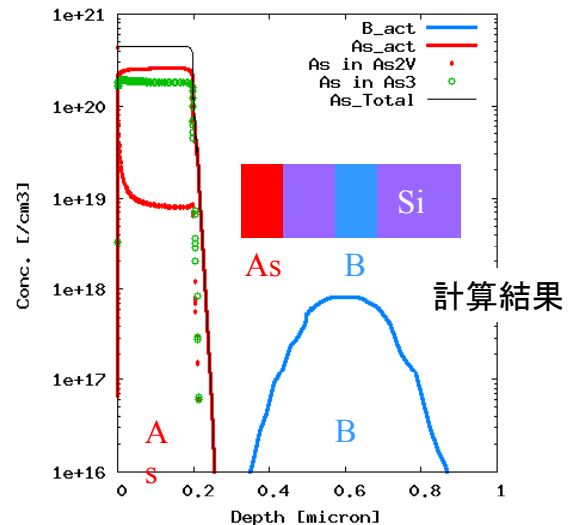
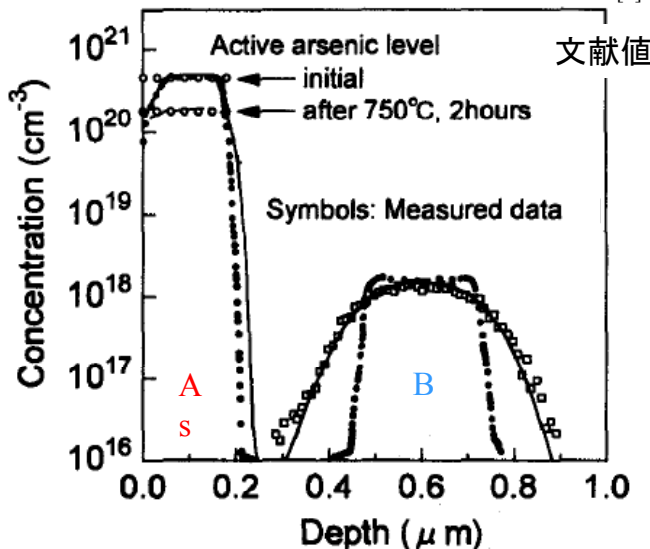
BIペアの拡散係数・反応定数のキャリブレーションで実験を再現

# パラメータキャリブレーション例②

## Asの不活性化によるBの拡散

エピタキシャル成長によるAs・B層の拡散<sup>[5]</sup>

750 °C、2 hrのアニール後の計算結果

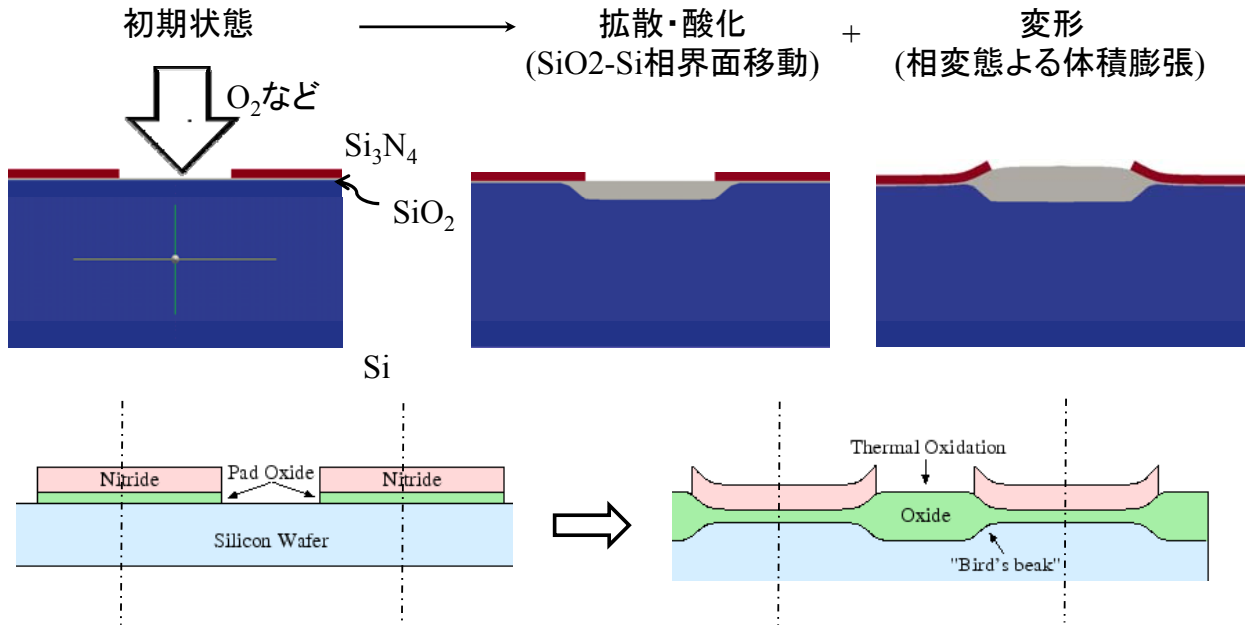


[5] P. M. Rousseau, et. al., IEDM Tech. Digs., 861(1999).

Asの不活性化によるIの発生 ⇒ **Bの拡散が再現**

# 粘弾性モデルによる三次元酸化解析機能概要

酸素拡散--> 相界面移動--> 相変態による体積変化--> 変形  
を  
考慮したシミュレーション機能



## 三次元酸化モデル 実装方法

### 1. 酸素拡散計算

拡散方程式:  $\nabla(D\nabla C) = 0$

SiO2-Si界面:  $[C]v - [D\nabla C \cdot n] = 0$

O2-SiO2界面:  $-D\nabla C \cdot n = k(C - C^*)$ ;  $C^* = K_H p$ ;  $K_H$ : Henry定数,  $p$ : O<sub>2</sub>分圧

### 2. SiO2-Si界面移動

$$dh = \frac{k_s c_{\text{界面}} dt}{N_i}$$

酸化種の流入量  
SiO<sub>2</sub>内単位体積内酸化種の分子数

### 3. 体積膨張: 体積ひずみ $\epsilon_v$ として導入

### 4. 変形解析

つり合い式  $\nabla\sigma + b = 0$

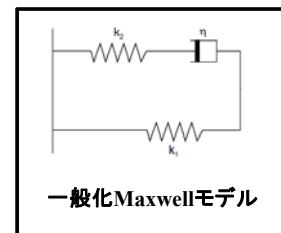
材料構成式:  $d\sigma = Dd\nabla u$

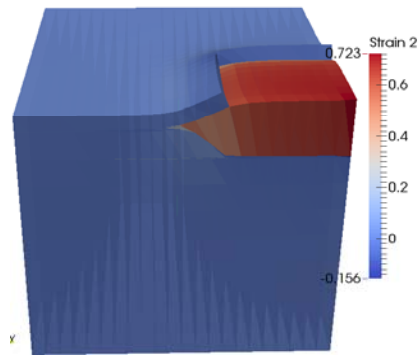
体積力:  $b = K\epsilon_v$

弾性(等方性、直交異方性):

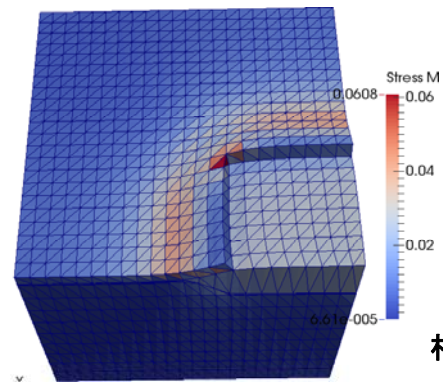
$$D = D(\nabla u, T)$$

粘弾性(一般化Maxwellモデル、等方性のみ):  $D = D(\nabla u, \nabla \dot{u}, T)$

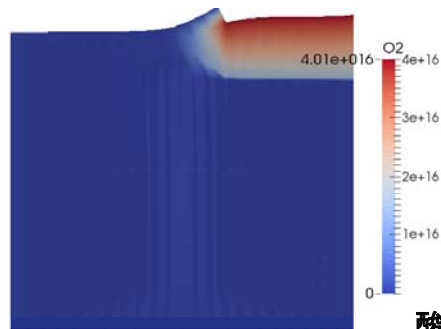




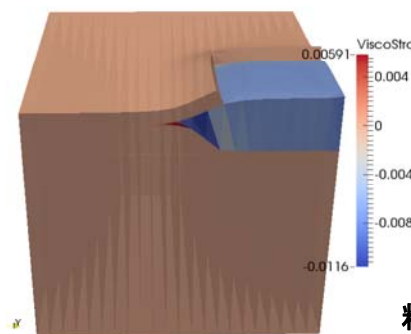
ひずみ



相当応力



酸素濃度



粘性ひずみ

*Thank you for listening!*

