

イオン注入計算 (Si、SiC)

研究員 岡本 稔

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

- 理論枠組み
- 機能概要
 - ◆ 設定可能関連項目
 - ◆ プロセスシミュレータ共通出力ファイルへの出力内容
 - ◆ 1次元不純物分布データ
- 実験値との比較 (4H-SiC)
- 3次元構造へのイオン注入
 - ◆ 正方孔 (Si)
 - ◆ 六角トレンチ (Si)
 - ◆ MOS Extension (Si, 4H-SiC)
- 並列計算

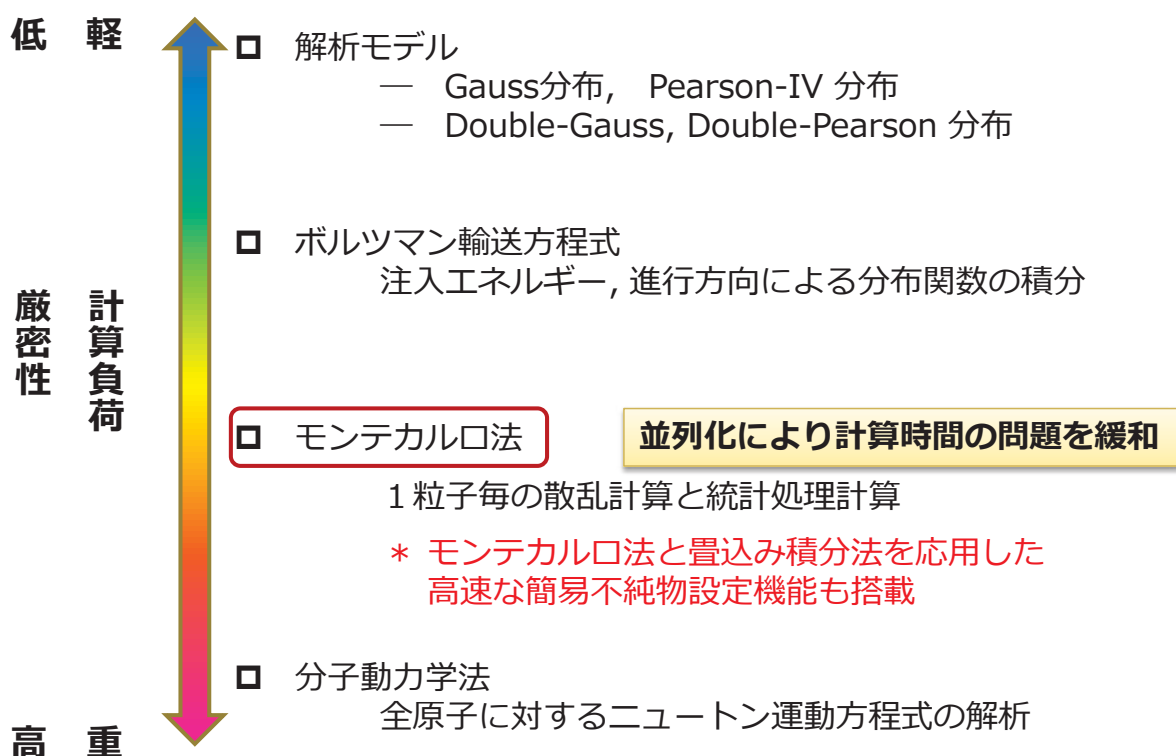
発表内容

- 理論枠組み
- 機能概要
 - ◆ 設定可能関連項目
 - ◆ プロセスシミュレータ共通出力ファイルへの出力内容
 - ◆ 1次元不純物分布データ
- 実験値との比較 (4H-SiC)
- 3次元構造へのイオン注入
 - ◆ 正方孔 (Si)
 - ◆ 六角トレンチ (Si)
 - ◆ MOS Extension (Si, 4H-SiC)
- 並列計算

➤ 理論枠組み

イオン注入モデル

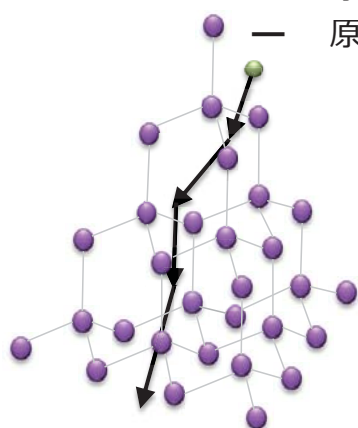
所望のデバイス特性を得る最適なソース・ドレイン/ チャネル不純物分の設計に大きく寄与



➤ 理論枠組み

モンテカルロ法

- 注入イオンと材質構成原子との散乱を直接取り扱う
- 3次元の多様な構造に対しシミュレーション可能
- 対応固体材料
 - ◆ アモルファス材質 : 平均自由行程モデル
 - ◆ 結晶材質 : 周期的に並べた単位胞内で衝突原子を探索
 - 結晶破壊モデル : Kinchin-Peace モデル
 - 熱振動モデル : Debyeモデルによる熱振動振幅
- 2体衝突近似
 - 原子間相互作用 : ZBL ポテンシャル
 - 原子・電子間相互作用 : LSS, Firsov モデル ← アモルファス材質
VIENNA モデル ← 結晶材質



- 結晶構造を正確に反映した2体散乱を取り扱う
- 対応可能結晶系 : 立方晶(Si, 3C-SiC),
六方晶(4H-SiC, 6H-SiC, GaN)

発表内容

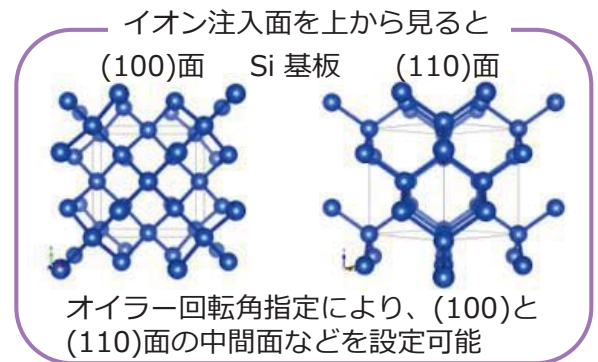
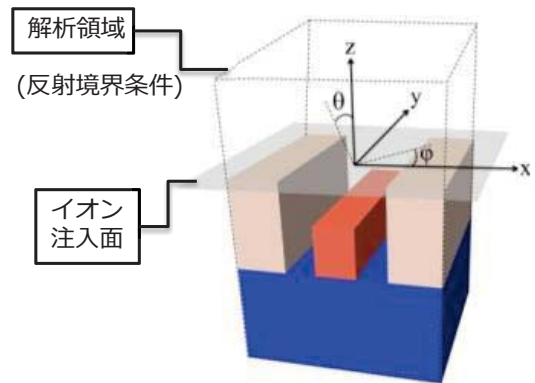
- 理論枠組み
- 機能概要
 - ◆ 設定可能関連項目
 - ◆ プロセスシミュレータ共通出力ファイルへの出力内容
 - ◆ 1次元不純物分布データ
- 実験値との比較 (4H-SiC)
- 3次元構造へのイオン注入
 - ◆ 正方孔 (Si)
 - ◆ 六角トレンチ (Si)
 - ◆ MOS Extension (Si, 4H-SiC)
- 並列計算

機能概要

設定可能関連項目

設定記入項目一覧	
基盤材質	Si, 3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC, GaN
モデルパラメータ	弊社提供ファイル
初期不純物濃度	実数値 [cm ⁻³]
ミラー指数	(100), (110), (111), (0001)
オイラー回転角	実数値 [度数]
注入イオン種	B, P, As, Sb, Al, N, BF ₂ , ユーザー定義イオン
注入エネルギー	実数値 [keV]
ドーズ量	実数値 [cm ⁻²]
代表粒子数	整数値
初期乱数	整数値
Tilt 角	実数値 [度数]
ローテーション角	実数値 [度数]
複数ローテーション角設定	開始ローテーション角, 回転間隔角, 終了時角
拡張領域	実数値 [μm]

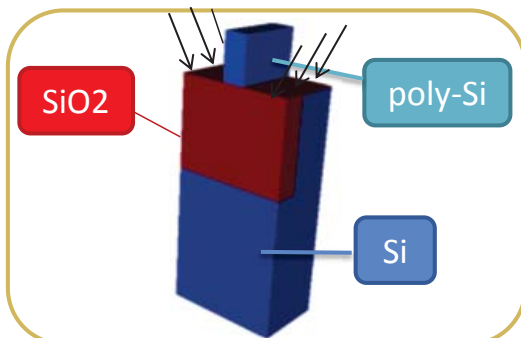
基板の面方位・Tilt角 θ ・Rotation角 ϕ



(* オプション：強制アモルファス計算)

機能概要

プロセスシミュレータ共通出力ファイルへの出力内容



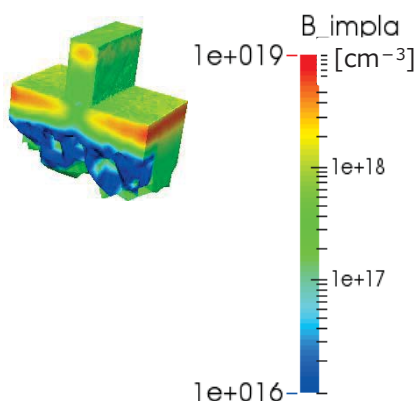
左図構造作成手順：

- ・ Si基板(100面, 初期不純物濃度 $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$)をSTIエッチング
- ・ SiO₂をSi基板の最上面から2nmの高さまでデポジション
- ・ SiO₂膜上にpoly-Siをデポジション

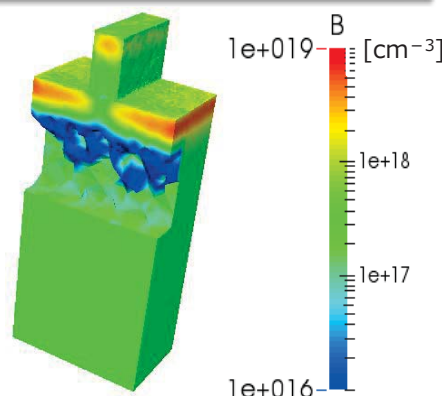
イオン注入条件：

注入種 B, 注入エネルギー 2keV, ドーズ量 $1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$, ティルト角15°, ローテーション角0°, 180°

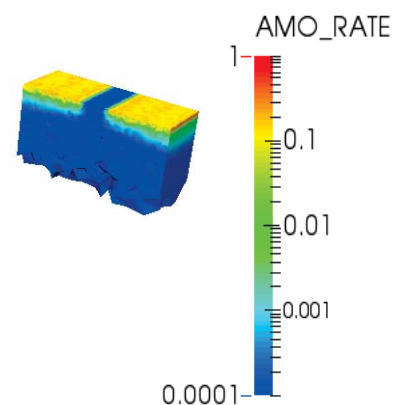
各注入イオン濃度



各不純物全濃度 (初期基板濃度 + 注入イオン濃度)

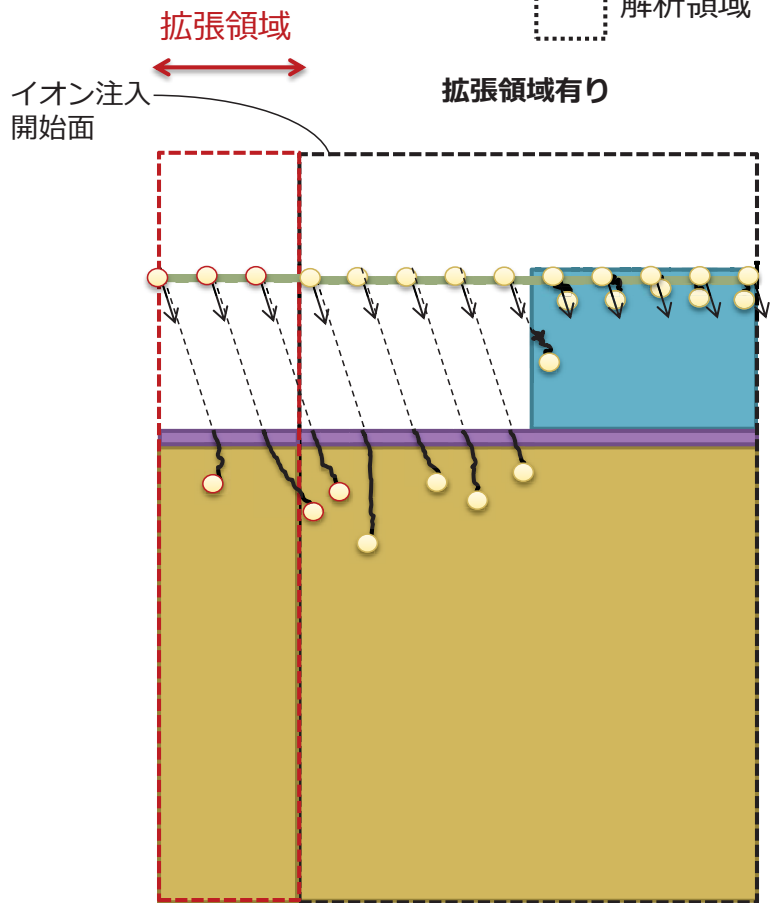
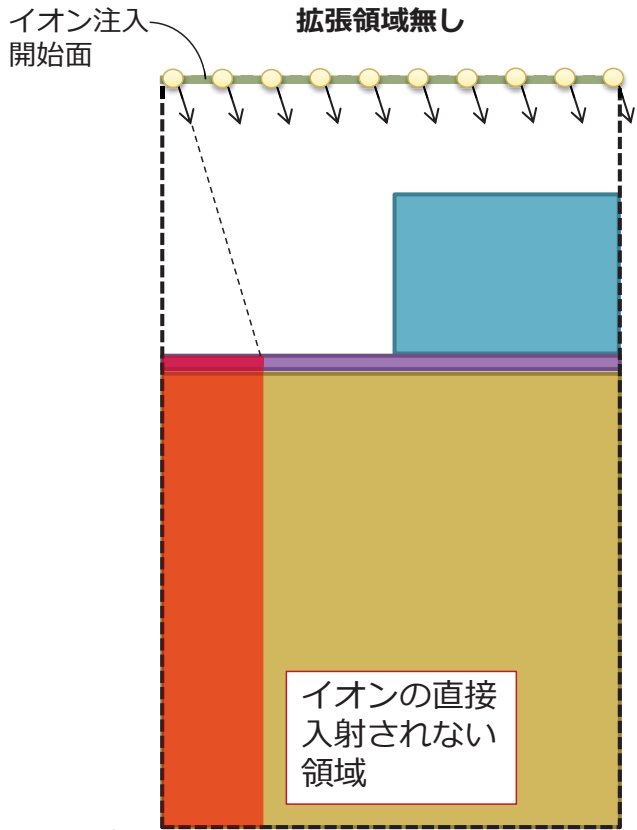


結晶破損率



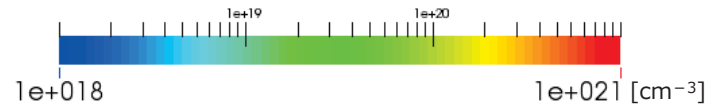
機能概要

拡張領域の適用

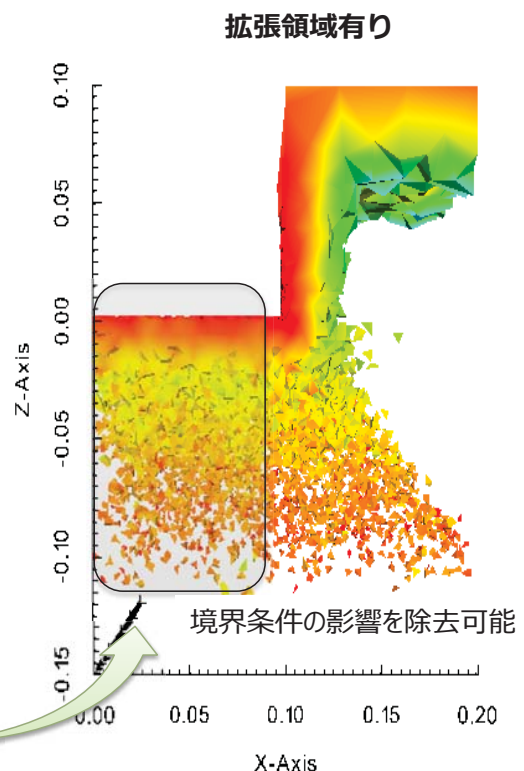
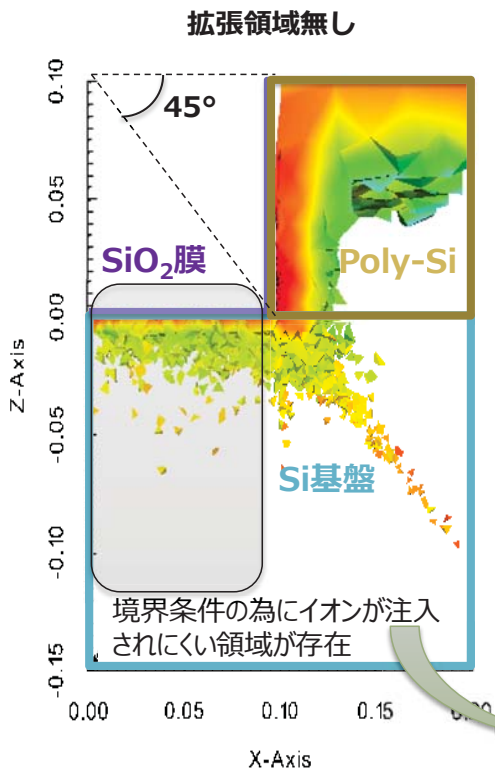


機能概要

拡張領域の適用



Boron , 4keV, $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$, into (100)-Silicon, ティルト角 45°



機能概要

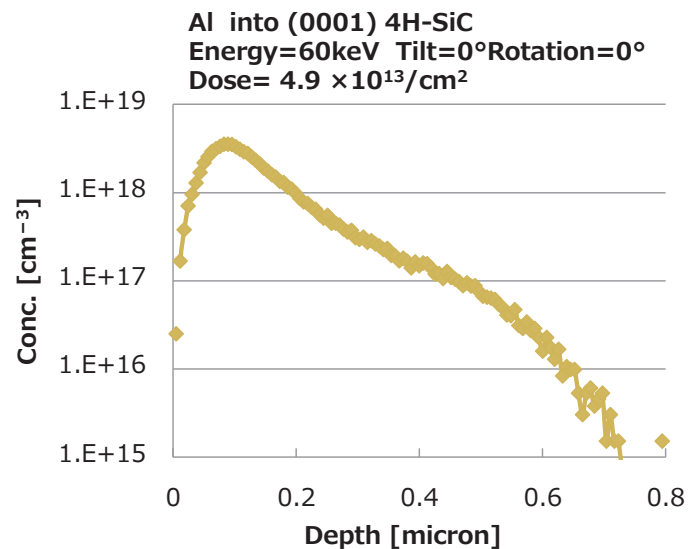
1 元深さ方向不純物密度分布データ

csv ファイル形式 [“出力ファイル名”.csv]

1列目： Z座標 (材質上面 ~ 最深部進入イオン位置)

2列目： 不純物濃度

実験値と比較し、パラメーターファイルを適切に変更することにより、より高精度にパラメーター調整可能



```
[Material]
## 材質名定義中に空行（コメントのみの行）は禁止、
## 順序も以下のとおりとする
## 材質名 属性 電子阻止能モデル名
Material Si CRYSTAL VIENNA
NUM_KIND_OF_ATOMS 1 ## 材質構成原子種の数
ATOM[1] a_Si 4.99678E28 ## 単位体積原子数[/m3]
LATTICE_CONST 5.43E-10 ## 格子定数 [m]
THERMAL_VIBRATION 6.40E-12 ## 熱振動振幅 [m]
NUMBER_OF_ATOM_IN_UNIT 8 ## 単位胞の原子数
LPoint[1] 0.000E0 0.000E0 0.000E0 a_Si
LPoint[2] 0.250E0 0.250E0 0.250E0 a_Si
<<省略>>
```

```
### 以下、電子阻止能、欠陥発生モデルは既定値設定あり
# --- 指定部のみ既定値から変わる
### LSS fitting parameter (Default = 1.0 )
### LSS_CK[ion_name][material_name]
[LSS_MODEL]
LSS_CK[a_B][Si] 1.50
LSS_CK[a_P][Si] 1.30
<<省略>>
```

パラメータファイル内容
(一部抜粋)

発表内容

- 理論枠組み
- 機能概要
 - ◆ 設定可能関連項目
 - ◆ プロセスシミュレータ共通出力ファイルへの出力内容
 - ◆ 1次元不純物分布データ
- 実験値との比較 (4H-SiC)
- 3次元構造へのイオン注入
 - ◆ 正方孔 (Si)
 - ◆ 六角トレンチ (Si)
 - ◆ MOS Extension (Si, 4H-SiC)
- 並列計算

実験値との比較 (4H-SiC基板)

Al into (0001) 4H-SiC

Energy=60keV Tilt=0°Rotation=0°
Dose=0.63, 1.3, 3.4, 4.9 × 10¹³ cm⁻² [1]

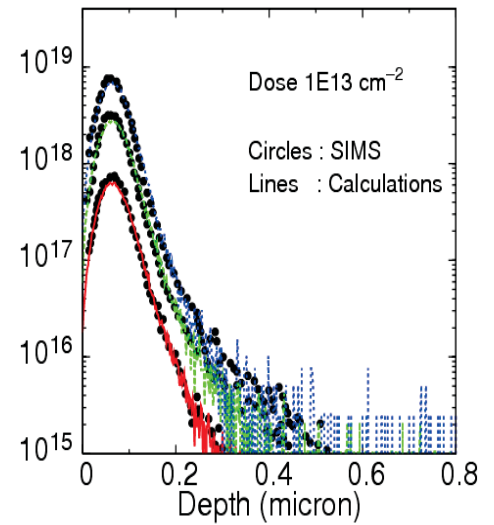
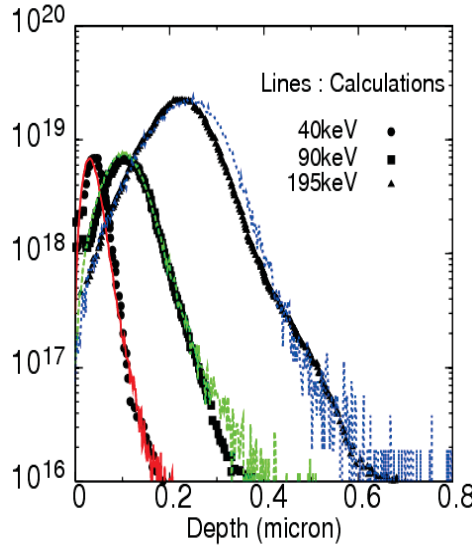
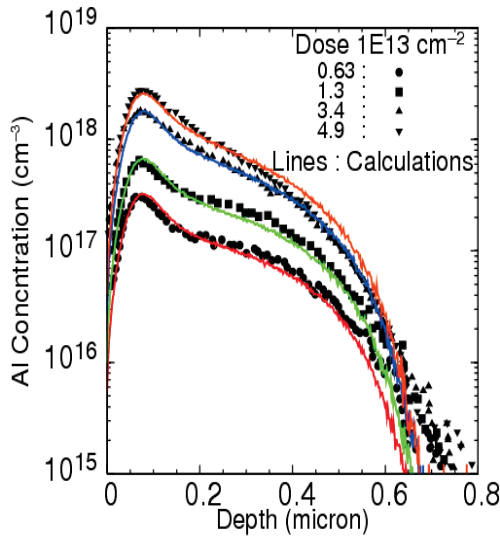
Al into (0001) 4H-SiC

Tilt=7.5°Rotation=0°

Energy (keV)/ Dose(10¹³cm⁻²)
= 40/3.0, 90/7.9, 195/38 [1]

Al into (0001) 4H-SiC

Energy=60keV, Tilt=9°, Rotation=0°
Dose=0.48, 2.1, 5.1 × 10¹³cm⁻² [2]



同一パラメータ値において、
結晶方位へのチャネリング・Tilt角・ドーズ量依存性を再現

Experimental data:

[1] J. Wong-Leung et al., Journal of Applied Physics 93, 8914 (2003)

[2] Sang-Sun Lee et al., Journal of the Korean Physical Society, 41, 5, 591 (2002)

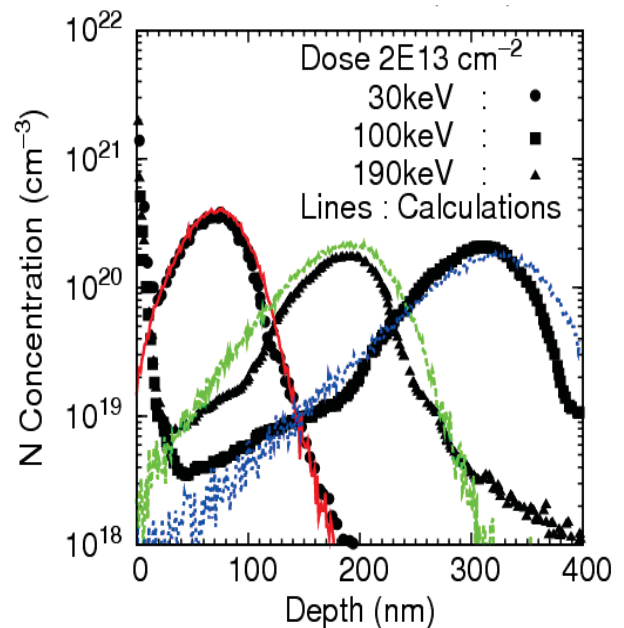
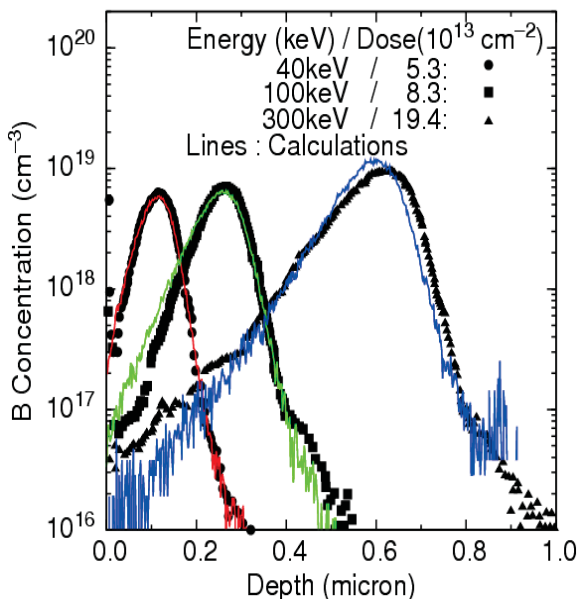
実験値との比較 (4H-SiC基板)

Boron, into (0001) 4H-SiC Tilt=7.5°,

Energy(keV)/Dose(10¹³cm⁻²)=
40/5.3, 100/8.3, 300/19.4 [2]

Nitrogen into (0001) 4H-SiC Tilt=7.5°,

Dose=2×10¹³ cm⁻², Energy= 30, 100, 190 keV [2]



多様なイオンに対してパラメータチューニング済み

Experimental data:

[2] Sang-Sun Lee et al., Journal of the Korean Physical Society, 41, 5, 591 (2002)

発表内容

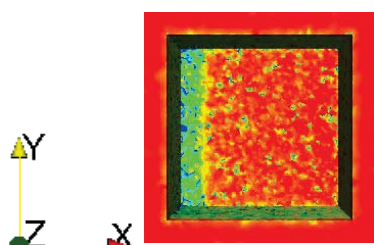
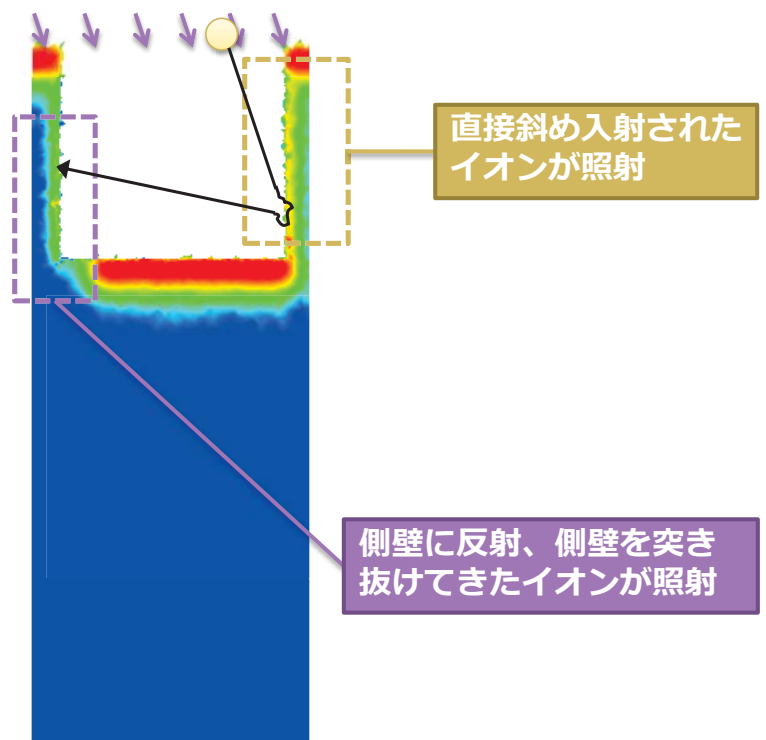
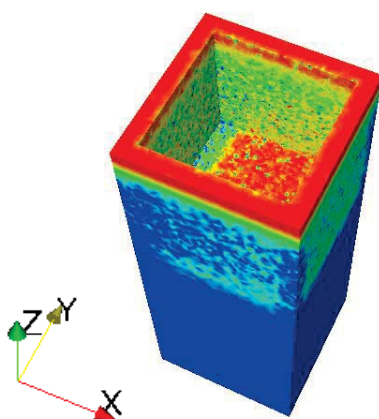
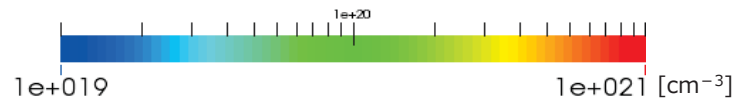
- 理論枠組み
- 機能概要
 - ◆ 設定可能関連項目
 - ◆ プロセスシミュレータ共通出力ファイルへの出力内容
 - ◆ 1次元不純物分布データ
- 実験値との比較 (4H-SiC)
- 3次元構造へのイオン注入
 - ◆ 正方孔 (Si)
 - ◆ 六角トレンチ (Si)
 - ◆ MOS Extension (Si, 4H-SiC)
- 並列計算

➤ 3次元構造へのイオン注入計算事例

正方孔(Si 基板)

B, 5 keV, $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ into (100)-Silicon, Tilt 10° , Rotation 0°

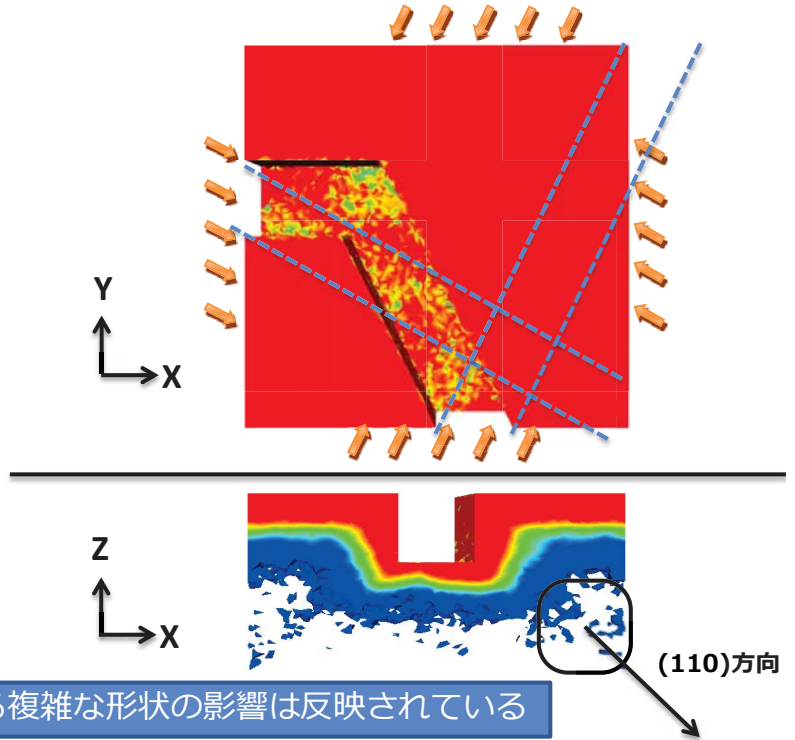
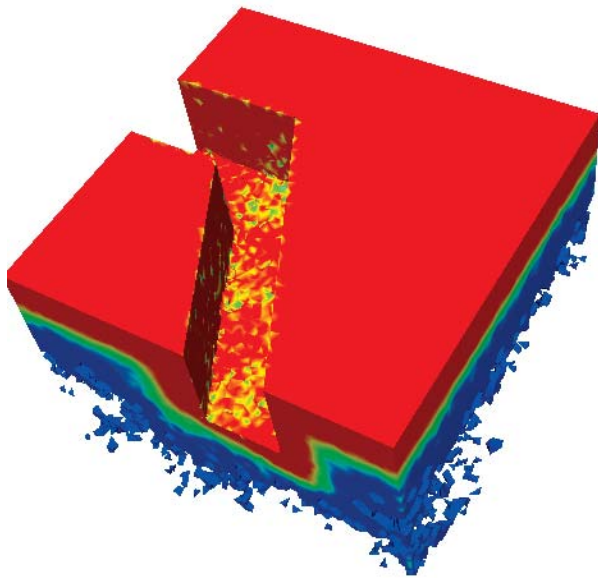
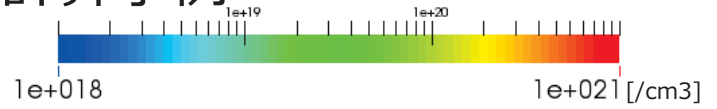
計算粒子数：100万個，計算時間：2635 s by Intel(R) Xenon(R) X5660 2.80GHz 1core



3次元構造へのイオン注入計算事例

六角トレンチ構造(Si基板)

Boron, 5keV, $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ into (100)-Silicon, Tilt 50° ,
Rotation $60^\circ, 150^\circ, 240^\circ, 330^\circ$ (右図矢印方向)
計算粒子数: 400万個, 計算時間: 6205s (Intel(R) Xenon(R) 2.80GHz 1core)



Tilt角・Rotation角, あらゆる複雑な形状の影響は反映されている

3次元構造へのイオン注入計算事例

MOSFET プロセス工程

STIエッチング



絶縁膜形成



ゲートポリシリコン形成

Halo & Extension へのイオン注入

側壁デポジション



拡散層へのイオン注入 + 活性化

薄膜除去



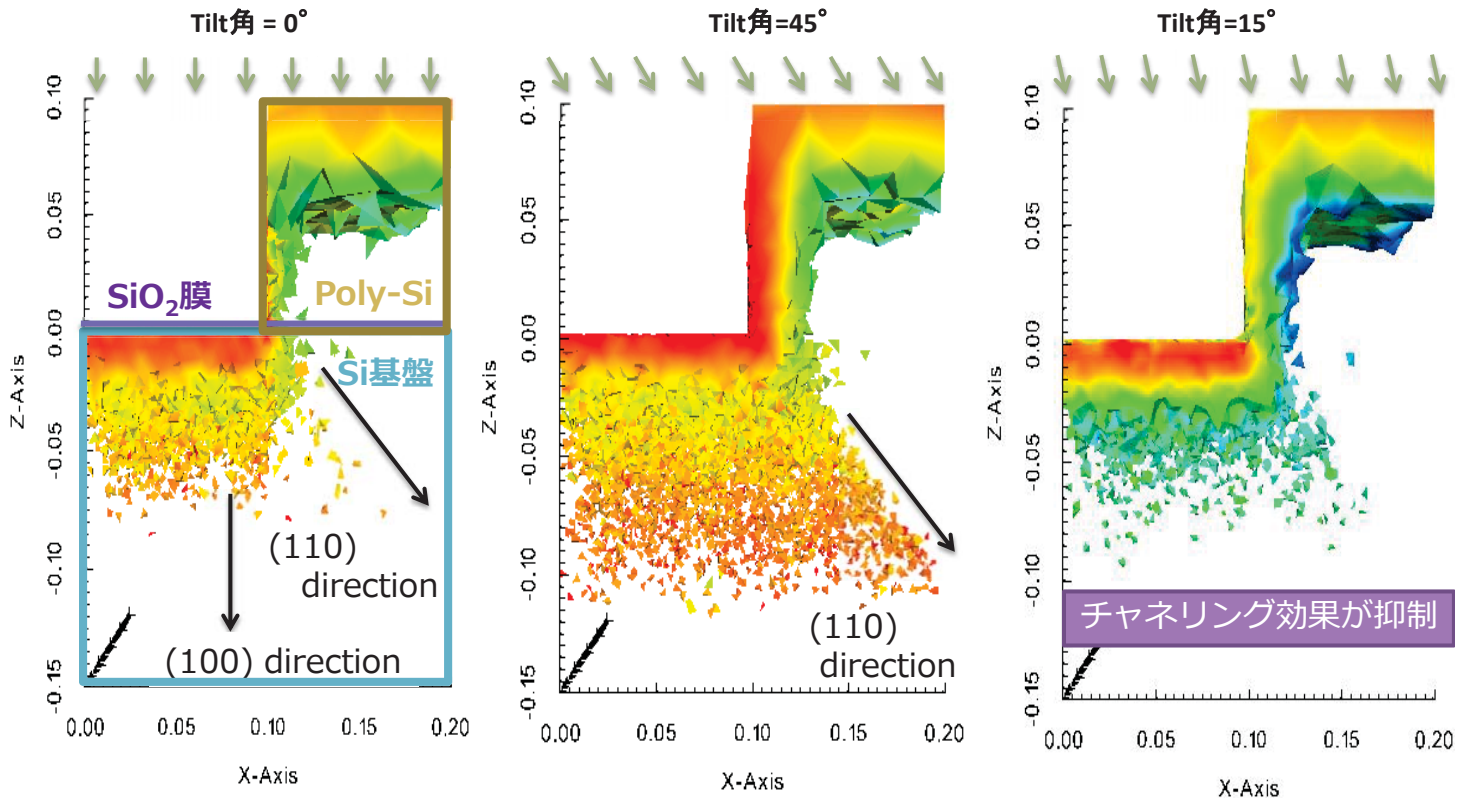
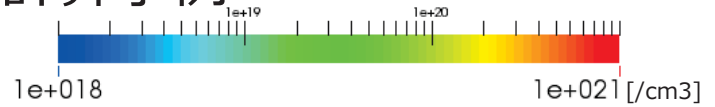
電極形成



3次元構造へのイオン注入計算事例

Si MOSFET extension注入

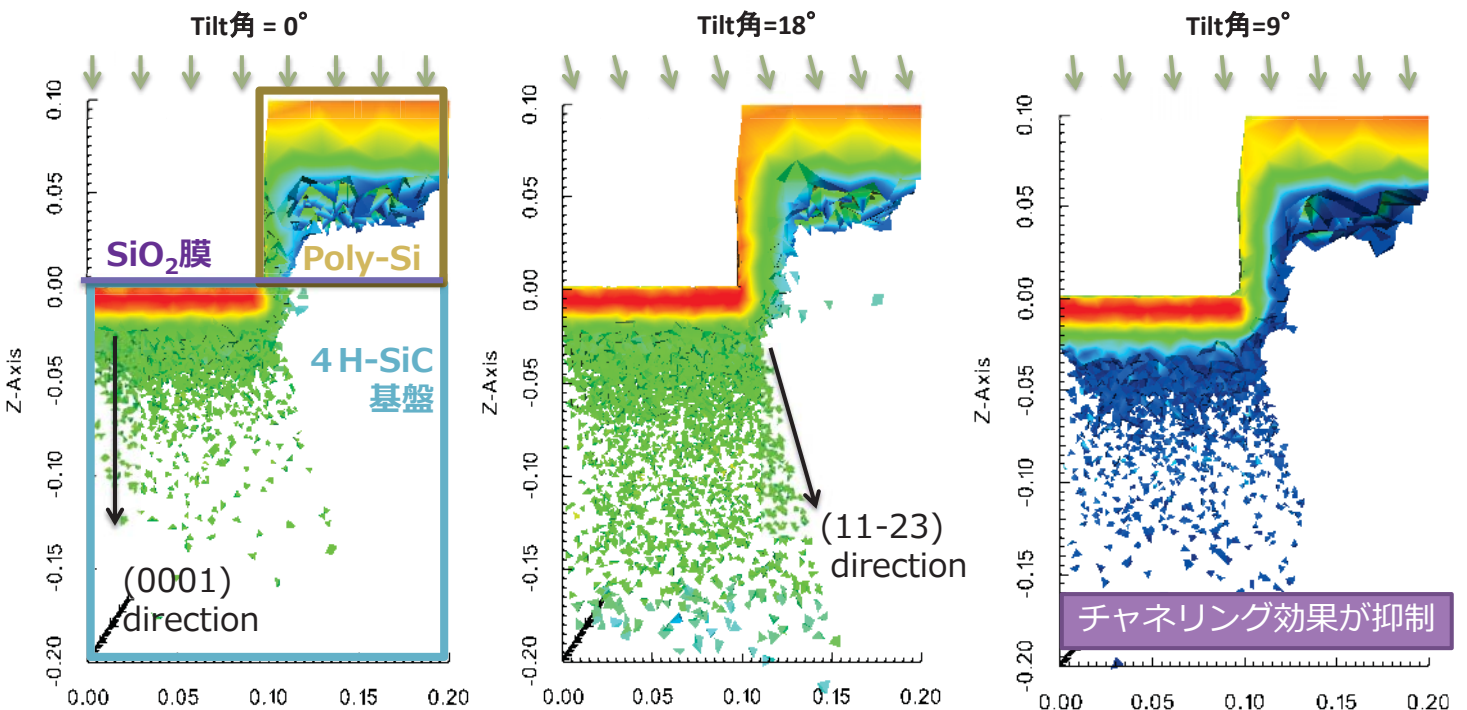
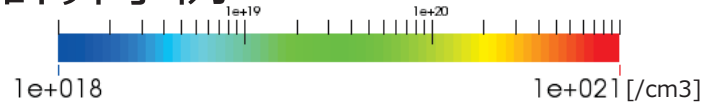
Boron, 2keV, $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, into (100)-Silicon



3次元構造へのイオン注入計算事例

4H-SiC MOSFET extension注入

Aluminum, 5.0keV, $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, into (0001) 4H-SiC



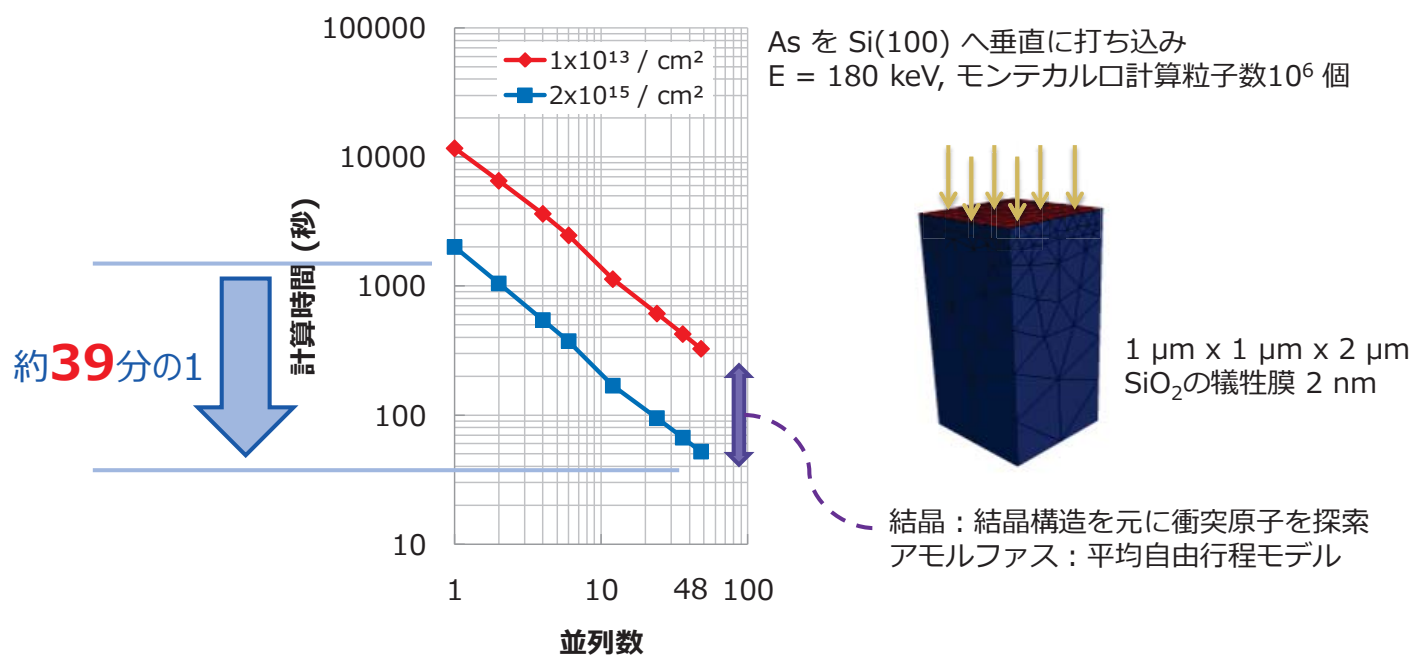
(100)・(0001)軸以外に, (110)・(11-23)軸にも捕捉され、横方向(x軸)に広がる

発表内容

- 理論枠組み
- 機能概要
 - ◆ 設定可能関連項目
 - ◆ プロセスシミュレータ共通出力ファイルへの出力内容
 - ◆ 1次元不純物分布データ
- 実験値との比較 (4H-SiC)
- 3次元構造へのイオン注入
 - ◆ 正方孔 (Si)
 - ◆ 六角トレンチ (Si)
 - ◆ MOS Extension (Si, 4H-SiC)
- 並列計算

➤ 並列計算

逐次計算では … 最後まで計算粒子を1つずつ注入
 並列計算では … **プロセッサで等分配**して注入(結晶破損情報の同期を定期的に行う)
 プロセッサ間のデータ授受はMPI(Message Passing Interface)を利用



並列数にほぼ反比例して計算時間が減少

Intel Xeon
 X5660 2.80GHz (#1~6)
 E5-2640 2.50GHz (#12~48)

まとめ

- 理論枠組み
 - モンテカルロ法
 - 扱える結晶系：立方晶、六方晶
- 機能概要
 - 基板材質、注入条件の設定
 - 3次元不純物密度、結晶破損率分布、1次元不純物密度分布の出力
- 実験値との比較（4H-SiC）
 - パラメータチューニングの結果、各イオンにおいて同一パラメータ値で様々な注入条件に対する実験値を再現。
- 3次元構造へのイオン注入
 - 複雑な注入条件, 形状の影響の反映。
 - 拡張領域の適用により、境界条件からの影響の除去。
- 並列計算
 - 48並列で約39分の1の計算時間短縮を実現。

ご清聴ありがとうございました