

Phone: 8(8634)371-649.

The Department of Physics; Head of Department; professor.

Морозов Владимир Николаевич

Главная Геофизическая Обсерватория им. Воейкова, заведующий отделом атмосферного электричества, доктор физико-математических наук, профессор.

E-mail: vn.morozov@inbox.ru

Россия, Ленинградская область, г. Санкт-Петербург, ул. Карбышева д.7 д.т. 3938678.

Тел.: +7(812)3938678.

Morozov Vladimir Nikolaevich

Main Geophysical Observatory of A.I. Voeikov, the Head of Department of Atmospheric Electricity, Doctor of Physico-mathematical Sciences.

E-mail: vn.morozov@inbox.ru.

7, Karbysheva Street, Leningrad region, St.-Petersburg, 3938678, Russia,

Phone: +7(812)3938678.

УДК 621.382.22

А.Г. Захаров, С.А. Богданов, А.А. Лытюк

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА В БАРЬЕРАХ ШОТТКИ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЯ $Si_{1-x}Ge_x$

В работе обсуждаются вопросы моделирования распределения потенциала в области пространственного заряда полупроводника контакта металл- $Si_{1-x}Ge_x$, с учетом особенностей распределения электрически активных примесей в полупроводнике, обусловленных различными технологическими процессами, применяемыми при изготовлении элементов интегральных схем.

Полупроводниковое соединение $Si_{1-x}Ge_x$; уравнение Пуассона; молекулярно-лучевая эпитаксия; метод Монте-Карло; ионное легирование; распределение Гаусса; распределение Пирсона; метод конечных разностей.

A.G. Zakharov, S.A. Bogdanov, A.A. Lytyuk

SIMULATION OF POTENTIAL DISTRIBUTION IN SHOTTKY BARRIERS ON BASIS OF $Si_{1-x}Ge_x$

Simulation of potential distribution in semiconductor space-charge region of metal- $Si_{1-x}Ge_x$ contact is discussed. Characteristics of electrically active impurities distribution in semiconductor, caused by different technological processes for integrated circuits manufacturing, are taken into account during simulation.

Semiconductor compound $Si_{1-x}Ge_x$; Poisson equation; molecular-beam epitaxy; Monte-Carlo method; ion implantation; Gauss distribution; Pirson distribution; finite differences method.

Математическое моделирование находит все более широкое применение в твердотельной электронике. Это связано, прежде всего, с необходимостью описания технологических процессов и приборов, отличающихся чрезвычайно сложностью и часто неравновесным и нестационарным характером. Кроме того, переход к нанометрическим размерам усилил взаимосвязь между электрофизическими характеристиками элементов твердотельной электроники и технологическими режимами их производства.

Моделирование процесса – эффективный инструмент его оптимизации, характеризуемый по сравнению с экспериментальным подходом быстротой и дешевой получением информации. Моделирование технологических операций в сочетании с моделированием интегральных схем (ИС) – перспективный подход к проектированию новых ИС и созданию топологии, а также к прогнозированию функциональных и надежностных параметров схемы [1]. Немаловажным качеством математических моделей является также их универсальный характер, что позволяет применять известные методы для решения новых задач.

Совершенствование технологии формирования тонких пленок, отличающихся высокой повторяемостью электрофизических свойств, позволило уделить повышенное внимание исследованию многослойных структур, способных стать основой для создания новых элементов твердотельной электроники. При этом особый интерес вызывают также контакты металл-полупроводник, в которых в качестве полупроводника используются многокомпонентные материалы, обладающие специфическими электрофизическими характеристиками. Одним из таких материалов является полупроводниковое соединение $Si_{1-x}Ge_x$, основными достоинствами которого являются возможность варьирования ширины запрещенной зоны путем изменения состава соединения, а также более высокая подвижность дырок в $Si_{1-x}Ge_x$ p-типа проводимости по сравнению с подвижностью дырок в кремнии.

Целью настоящей работы является математическое моделирование распределения потенциала в области пространственного заряда (ОПЗ) полупроводника контакта металл- $Si_{1-x}Ge_x$ в стационарном состоянии с учетом особенностей распределения электрически активных примесей в ОПЗ.

Моделирование распределения потенциала $\varphi(x, y, z)$ проводилось на основе уравнения Пуассона:

$$\operatorname{div}(\epsilon \epsilon_0 \operatorname{grad}(\varphi)) = -\rho(x, y, z, \varphi), \quad (1)$$

где ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника;

ϵ_0 – электрическая постоянная;

$\rho(x, y, z, \varphi)$ – объемная плотность зарядов в ОПЗ.

При моделировании использовались следующие приближения:

- ◆ отсутствие зарядовых состояний на границе раздела металл-полупроводник, а также изотропность относительной диэлектрической проницаемости полупроводника;
- ◆ отсутствие промежуточного диэлектрического слоя между металлом и полупроводником;

С учетом указанных приближений выражение для объемной плотности заряда может быть записано следующим образом:

$$\rho(x, y, z, \varphi) = q(N_{UC}(x, y, z, \varphi) + N_{SI}(x, y, z, \varphi) + N_T(x, y, z, \varphi)), \quad (2)$$

$$N_{UC}(x, y, z, \varphi) = p(x, y, z, \varphi) - n(x, y, z, \varphi),$$

$$N_{SI}(x, y, z, \varphi) = N_d^+(x, y, z, \varphi) - N_a^-(x, y, z, \varphi),$$

$$N_T(x, y, z, \varphi) = N_{td}^+(x, y, z, \varphi) - N_{td}^-(x, y, z, \varphi),$$

где q – величина заряда электрона;

$p(x, y, z, \varphi)$, $n(x, y, z, \varphi)$ – концентрации свободных носителей в ОПЗ полупроводника;

$N_d^+(x, y, z, \varphi)$, $N_a^-(x, y, z, \varphi)$ – концентрации ионизированных атомов основной легирующей примеси донорного и акцепторного типа соответственно;

$N_{id}^+(x, y, z, \varphi)$, $N_{ia}^-(x, y, z, \varphi)$ – концентрации ионизированных глубоких энергетических уровней (ГУ) донорного и акцепторного типа соответственно.

Концентрации электронов $n(x, y, z, \varphi)$ в зоне проводимости и дырок $p(x, y, z, \varphi)$ в валентной зоне могут быть вычислены на основе выражений [2]:

$$n(x, y, z, \varphi) = N_c F_{1/2}, \quad (3)$$

$$p(x, y, z, \varphi) = N_v F'_{1/2}, \quad (4)$$

где: $N_c = 2 \left[\frac{2\pi m_c kT}{h^2} \right]^{3/2}$ – эффективная плотность состояний в зоне проводимости;

$N_v = 2 \left[\frac{2\pi m_v kT}{h^2} \right]^{3/2}$ – эффективная плотность состояний в валентной зоне;

$F_{1/2} = 2\pi^{-1/2} \int_0^\infty \frac{\zeta_n^{1/2} d\zeta}{1 + \exp(\zeta_n - \xi)}$, $F'_{1/2} = 2\pi^{-1/2} \int_0^\infty \frac{\zeta_p^{1/2} d\zeta}{1 + \exp(\zeta_p - \xi)}$ – интегралы

Ферми половинного индекса;

m_c , m_v – эффективные массы электрона в зоне проводимости и дырки в валентной зоне соответственно;

k – постоянная Больцмана;

T – температура;

h – постоянная Планка;

$\zeta_n = \frac{E - E_c}{kT}$, $\zeta_g = \frac{E_c - E_v}{kT} = \frac{E_g}{kT}$, $\zeta_p = -\zeta_n - \zeta_g$, $\xi = \frac{E_f - E_c \pm \varphi}{kT}$ – приведенные разности энергий;

E – энергия электрона в зоне проводимости;

E_c – величина энергии дна зоны проводимости;

E_g – величина ширины запрещенной зоны;

E_f – величина энергии уровня Ферми.

Выражения для концентраций ионизированных атомов основной легирующей примеси донорного и акцепторного типа, соответственно, имеют следующий вид [2]:

$$N_d^+ = N_d \left[1 - \frac{1}{1 + \beta_d \exp(-\xi - \zeta_d)} \right], \quad (5)$$

$$N_a^- = \frac{N_a}{1 + \beta_a \exp(-\zeta_a + \zeta_g + \xi)}, \quad (6)$$

где N_d , N_a – концентрации атомов основной легирующей примеси донорного и акцепторного типа, соответственно;

β_d , β_a – факторы вырождения примесных уровней;

$$\zeta_d = \frac{E_d - E_c}{kT}, \quad \zeta_a = \frac{E_a - E_c}{kT} \text{ – приведенные разности энергий.}$$

Концентрации ионизированных ГУ, обусловленных атомами примесей и дефектами кристаллической решетки полупроводника, могут быть определены следующим образом [3, 4]:

$$N_{id}^+ = N_{id} \frac{C_p p + B_n}{C_n n + C_p p + B_p + B_n}, \quad (7)$$

$$N_{ia}^- = N_{ia} \frac{C_n n + B_p}{C_n n + C_p p + B_p + B_n}, \quad (8)$$

где N_{id} , N_{ia} – концентрации ГУ;

$$C_n = \sigma_n v_n, \quad C_p = \sigma_p v_p \text{ – вероятности захвата электрона, дырки ГУ;}$$

$$B_n = C_n n(x, y, z, \varphi) \frac{1 - f_0}{f_0}, \quad B_p = C_p p(x, y, z, \varphi) \frac{f_0}{1 - f_0};$$

σ_n , σ_p – сечения захвата для электронов и дырок соответственно;

v_n , v_p – тепловые скорости электронов и дырок соответственно;

$$f_0 = \frac{1}{1 + \beta_i \exp\left(\frac{-(E_i + E_f)}{kT}\right)} \text{ – функция распределения Ферми, отражаю-}$$

щая степень заполнения ГУ;

β_i – фактор вырождения ГУ;

E_i – величина энергии ионизации ГУ.

Для получения различных профилей распределения легирующей примеси в $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, как правило, применяются следующие методы легирования: легирование в процессе роста полупроводникового слоя, например, во время молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), а также ионная имплантация.

МЛЭ широко применяется для изготовления структур на основе $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, так как позволяет получать слои различной толщины как однородно легированные, так и со сложным профилем распределения легирующей примеси. При этом точность уровня легирования и толщины слоя соблюдаются очень высокой. В математических моделях МЛЭ моделируется эволюция системы, состоящей из подложки атомов или молекул, посредством моделирования кинетики либо методом Монте–Карло, либо методом молекулярной динамики, либо с помощью некоторой комбинации этих методов. В большинстве моделей используется метод Монте–Карло [5].

Основные элементы модели МЛЭ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, легируемого примесью, по аналогии с моделью МЛЭ GaAs, приведенной в [5], могут быть следующими. В начальный момент подложка представляет собой идеальный монокристалл кремния. Потoki элементов состоят из атомов кремния, германия и примеси. Падающие атомы участвуют в процессах адсорбции, а также миграции и встраивания в кристалл. Эти процессы моделируются в виде случайных последовательностей элементарных актов.

Для получения тонких легированных слоев широко используется метод ионного легирования, позволяющий вводить в полупроводник ионы различных элементов и получать требуемые величины и заданные распределения концентрации [6]. Распределение примеси, внедренной путем ионной имплантации, может быть описано либо методом Монте-Карло, либо аналитическим приближением [7].

С помощью метода Монте-Карло моделируются физические процессы, происходящие при торможении отдельных частиц. Ядерные столкновения можно описать формулой торможения [7]:

$$S_n(E) = -\frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dx} \right)_n \int_0^{T_{\max}} T_n d\sigma, \quad (9)$$

где $S_n(E)$ – тормозная способность (удельная потеря энергии ионом с энергией E);

N – атомная плотность мишени;

$T_{\max} = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E$ – максимальная энергия, которая может быть передана

при лобовом столкновении двух атомов;

$T_n = T_{\max} \sin^2 \alpha / 2$ – передаваемая энергия;

$d\sigma$ – дифференциальное сечение столкновения;

M_1, M_2 – массы атомов мишени и имплантируемой примеси;

α – угол рассеяния.

Местоположения рассеивающих атомов выбираются случайными. Результатом моделирования торможения достаточно большого числа частиц является случайное распределение их траекторий.

Преимущество метода Монте – Карло заключается в присутствии ему прямом соответствии реальным физическим событиям, а основной недостаток – большие затраты машинного времени для получения статистически надежных результатов. В связи с этим действительные распределения примесей аппроксимируются аналитическими приближениями, известными из теории математической статистики. Наиболее распространенными среди них являются функция Гаусса и функция Пирсона [7]. Далее аналитические приближения с целью упрощения будут записаны для одномерного случая.

Гауссовские распределения чрезвычайно полезны для быстрой оценки распределения пробегов имплантированных ионов или вычисления толщин маскирующих слоев. При этом профиль концентрации имплантированных ионов определяется выражением [6]:

$$N(x) = \frac{Q}{\Delta R_p \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right), \quad (10)$$

где x – глубина от поверхности мишени;

Q – количество легирующих ионов на единицу площади;

R_p – средняя величина проекции пробега ионов;

ΔR_p – среднее нормальное отклонение проекции пробега.

Многие экспериментальные данные показывают, что простое описание профилей имплантации неадекватно для большинства примесных атомов в полупро-

водниках, и для построения распределений пробегов необходимо использовать моменты более высоких порядков. Особенно полезной в этом случае является функция Пирсона с 4 моментами [7]. Распределение Пирсона имеет вид:

$$F(x) = K \left[b_2(x - R_p)^2 + b_1(x - R_p) + b_0 \right] \times \exp \left[\frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \times \operatorname{arctg} \left(\frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right) \right], \quad (11)$$

$$a = b_1 = \frac{\Delta R_p \gamma (\beta + 3)}{A},$$

$$b_0 = -\frac{\Delta R_p^2 (4\beta - 3\gamma^2)}{A},$$

$$b_2 = -\frac{(2\beta - 3\gamma - 6)}{A},$$

$$A = 5\beta - 6\gamma^2 - 9,$$

где K – коэффициент, определяемый из условия нормировки $\int_{-\infty}^{+\infty} F(x) dx = 1$;

γ – асимметрия;

β – изгиб профиля.

Параметры R_p , ΔR_p , γ , β в выражении (10) связаны с моментами μ_1 , μ_2 , μ_3 , μ_4 распределения $F(x)$ следующими соотношениями:

$$\mu_1 = R_p = \int_{-\infty}^{+\infty} x F(x) dx,$$

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - R_p)^i F(x) dx, \quad i = 2, 3, 4,$$

$$\Delta R_p = \sqrt{\mu_2}, \quad \gamma = \mu_3 / \Delta R_p^3, \quad \beta = \mu_4 / \Delta R_p^4.$$

Асимметрия характеризует изгиб профиля, а эксцесс – степень плавности вблизи вершины профиля.

Соотношение между моментами третьего и четвертого порядков должны выбираться таким образом, чтобы удовлетворять неравенству:

$$\beta > \beta_{\min} = \frac{48 + 39\gamma^2 + 6(\gamma^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma^2}.$$

Чтобы получить профиль распределения, необходимо дозу легирования Q умножить на функцию распределения Пирсона $F(x)$:

$$N(x) = QF(x). \quad (12)$$

Очевидно, что совместное решение системы уравнений (1–8) и уравнений (9–12), не может быть получено в аналитическом виде, что обуславливает необходимость использования численных методов. Наиболее распространенными методами решения уравнения Пуассона в численном виде являются метод конечных разностей (МКР) и вариационные методы. В виду универсальности МКР и большей простоты его программной реализации по сравнению вариационными методами, он был выбран для решения системы (1–8).

Для реализации МКР по методике, изложенной в [8], в рассматриваемой области составлялась разностная схема. Решением полученной таким образом системы алгебраических уравнений являлись значения сеточных функций в узлах сетки, которые приближенно считались равными значениям искомым функций. С целью упрощения рассматриваемой задачи, моделирование осуществлялось для одномерного случая, что не оказывало существенного влияния на качественную сторону решения. С учетом этого, дискретизированное уравнение (1) может быть записано следующим образом:

$$\frac{\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1}}{h^2} = \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0} (N_{UC}(\varphi_i, x_i) + N_{SI}(\varphi_i, x_i) + N_T(\varphi_i, x_i)), \quad (13)$$

где i – номер узла сетки $i = \overline{1, n}$;

h – шаг сетки.

Граничные условия имеют следующий вид:

$$\varphi_1 = \varphi_d, \quad \varphi_n = 0, \quad (14)$$

где φ_1, φ_n – граничные значения потенциала;

φ_d – величина диффузионного потенциала.

Решение (13) с учетом (14) осуществлялось итерационно, методом Зейделя. В качестве начального приближения величина потенциала в узлах сетки выбиралась равной 0. Расчет проводился до тех пор, пока величина максимальной разности значений потенциала на двух последовательных слоях не становилась меньше заданного значения τ . Для оценки используемого численного метода проверка разностной схемы осуществлялась на известном аналитическом решении уравнения (1) [9].

В работе показано, что синтез адекватной математической модели распределения потенциала в ОПЗ полупроводника контакта металл – $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ является сложной задачей, численное решение которой в общем виде связано с большими затратами аппаратных ресурсов. Использование разумных допущений позволяет упростить задачу и получать адекватные решения. Результаты моделирования могут быть полезны при проектировании быстродействующей элементной базы на основе гетероструктур.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Пирс К. и др. Технология СБИС: В 2-х кн. Кн.1; Пер. с англ. / Под ред. С. Зи. – М.: Мир, 1986. – 404 с.
2. Блекмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках; Пер. с англ. / Под ред. Л.Л. Коренблита. – М.: Мир, 1964. – 392 с.
3. Lhermite H. et al. Analysis of the field effect in metal-oxide-small grain polysilicon structure – experimentation and modeling // IEEE transactions on electron devices. – May 1988. – vol.15. – №5.

4. *Фистуль В.И.* Введение в физику полупроводников. – 2 изд., перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1984. – 352 с.
5. *Песков Н.В.* Численное моделирование миграции атомов Ga в молекулярно-лучевой эпитаксии GaAs // Математическое моделирование. – 1995. – Т. 7. №3.
6. *Мейер Дж., Эрикссон Л., Дэвис Дж.* Ионное легирование полупроводников (кремний и германий); Пер. с англ./Под ред. Гусева В.М. – М.: Мир, 1973. – 296 с.
7. *Антонетти П. и др.* МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов; Пер. с англ. В.Л. Кустова и др. Под ред. Сурица Р.А. – М.: Радио и связь, 1988. – 496 с.
8. *Турчак Л.И., Плотников П.В.* Основы численных методов: учебное пособие. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. – 304 с.
9. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов. Кн.1; Пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – 456 с.

Захаров Анатолий Григорьевич

Технологический институт федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: Zakharov@egf.tsure.ru.

347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44.

Тел.: 8(8634)371-663.

Zakharov Anatoliy Grigorievich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: Zakharov@egf.tsure.ru.

44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: 8(8634)371-663.

Богданов Сергей Александрович

Технологический институт федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: bogdanov_sa@mail.ru

347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44.

Тел.: 8(8634)371-663.

Bogdanov Sergey Aleksandrovich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: bogdanov_sa@mail.ru

44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: 8(8634)371-663.

Лытчук Александр Анатольевич

Технологический институт федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: bogdanov_sa@mail.ru

347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44.

Тел.: 8(8634)371-663.

Lytyuk Aleksandr Anatolievich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: realspolock@gmail.com.

44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: 8(8634)371-663.