

Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов

Численный алгоритм для моделирования профилей травления методом уровней с произвольной функцией скорости

Аляев Р.Л.<sup>1</sup>; Лебедев А.В.<sup>2</sup>;  
<sup>1</sup> МФТИ, <sup>2</sup> ООО «Кинтех Лаб»

Аннотация

В работе выполняется разработка и верификация программного инструмента для моделирования морфологии поверхности в процессах травления и напыления.

Введение

- Цель применения заключается в моделировании процессов на основании функции скорости из первых принципов.
- Это позволит детальным образом учитывать неоднородность и нелинейность физических процессов.
- Трехмерный код основан на методе уровней с использованием «узкой полосы».

Функция скорости

- Эмпирическая функция скорости:

$$R(x,y) = \frac{1}{x} \left( x + y \frac{R_{10}}{R_{11}} \right) R_{11}$$

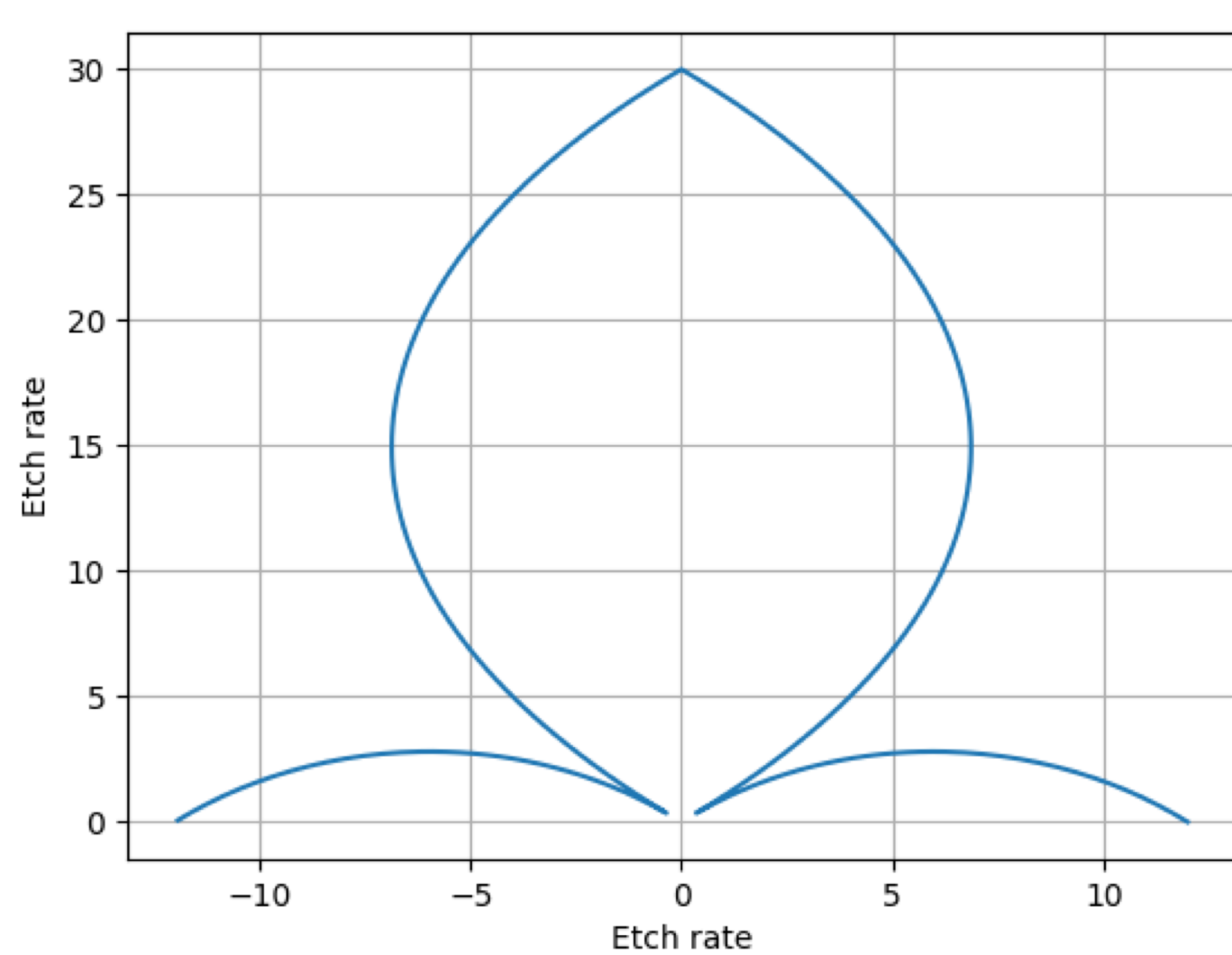


Рисунок 2. Диаграмма направленности

Метод уровней

- Уравнение:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + H(\nabla \phi) = 0$$

$$H = V(\nabla \phi) |\nabla \phi|$$

- Метод «узкой полосы» (см. Рисунок 1)
- Численная вязкость (схема Lax-Friedrichs)

$$\hat{H} = H \left( \frac{\phi_i^- + \phi_i^+}{2} \right) - \sum_l \alpha^l \left( \frac{\phi_i^+ - \phi_i^-}{2} \right),$$

$$\alpha^l = \max_{P \in S} \Gamma \left| \frac{\partial V}{\partial n^l} \frac{\phi_p^2 + \phi_q^2}{|\nabla \phi|^2} - \frac{\partial V}{\partial n^p} \frac{\phi_p \phi_l}{|\nabla \phi|^2} - \frac{\partial V}{\partial n^q} \frac{\phi_q \phi_l}{|\nabla \phi|^2} + V n^l \right|$$

$l, p, q \in \{x, y, z\}, l \neq p \neq q$

Разбиение пространства на слои  $L_i$  шириной в 1 нанометр

Решение уравнения на функцию уровней  $\phi$  в активном слое  $L_0$

Получив новый  $L_0$ , отстричь остальные слои на нанометр

Рисунок 1. Алгоритм метода «узкой полосы»

Скорость на основе первичных принципов

Уравнение Больцмана энергии электронов:  
 $\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial E} = \Omega_{coll}$   
(Chemical workbench)

Поток ионов к поверхности материала

Скорость травления и итоговый профиль

Результаты

- Получен корректный двумерный профиль (см. Рисунок 3).
- Погрешность относительно результатов эксперимента Qin et al (2017) составила 9,5%.
- Также сделаны первые шаги к обобщению алгоритма на трехмерное пространство (см. Рисунок 4).

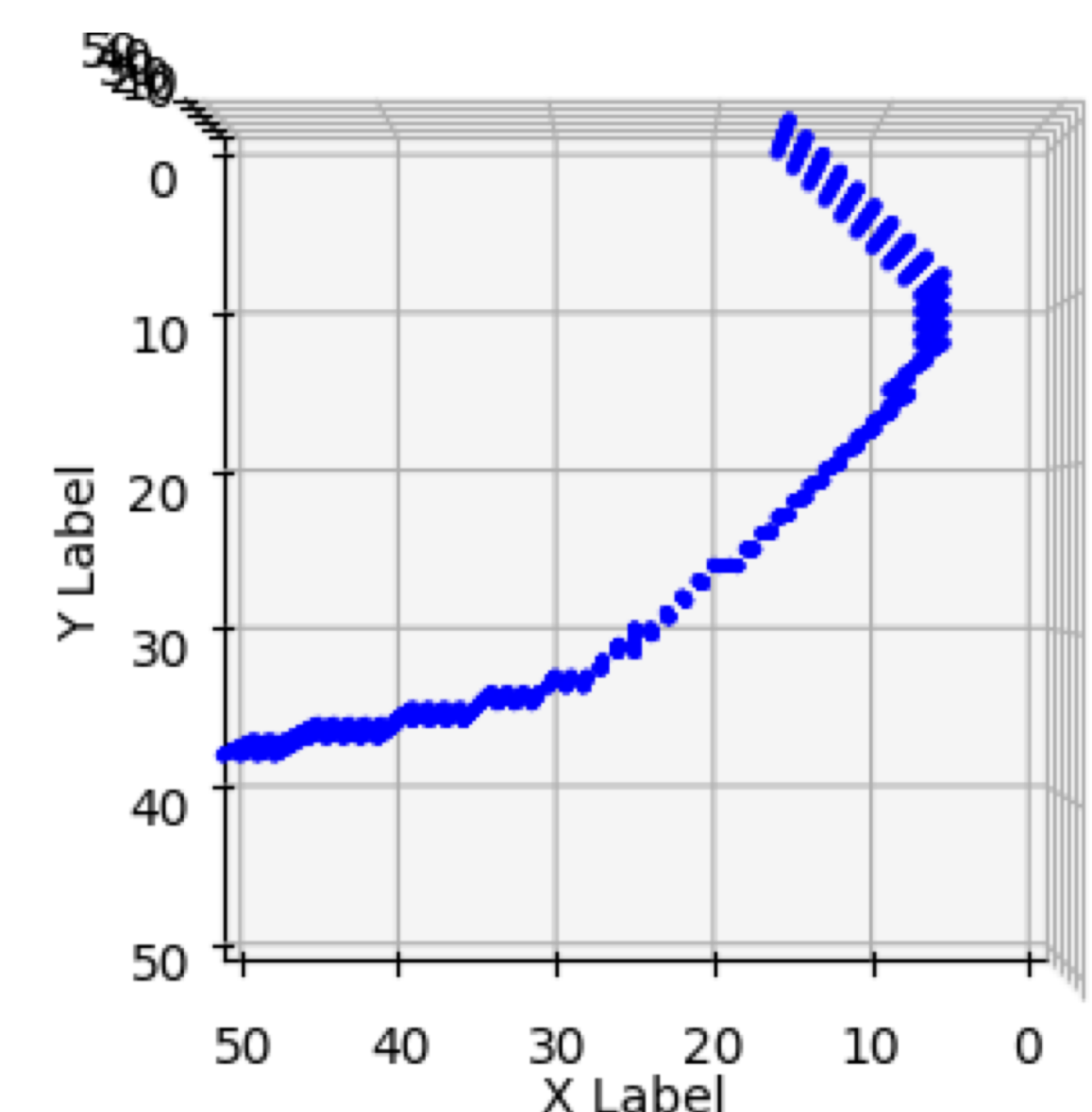


Рисунок 4. Трехмерный профиль травления (30 секунд)

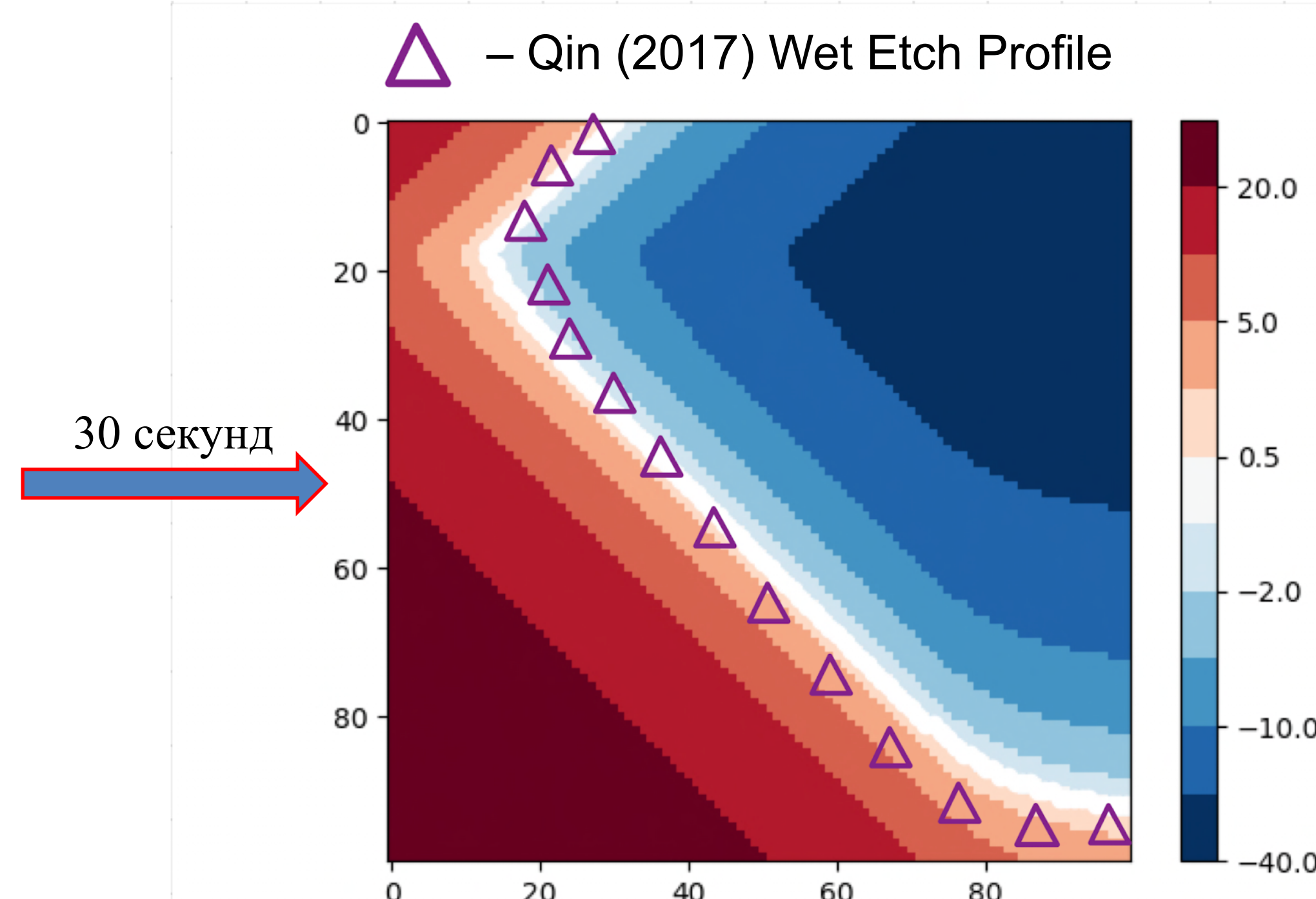
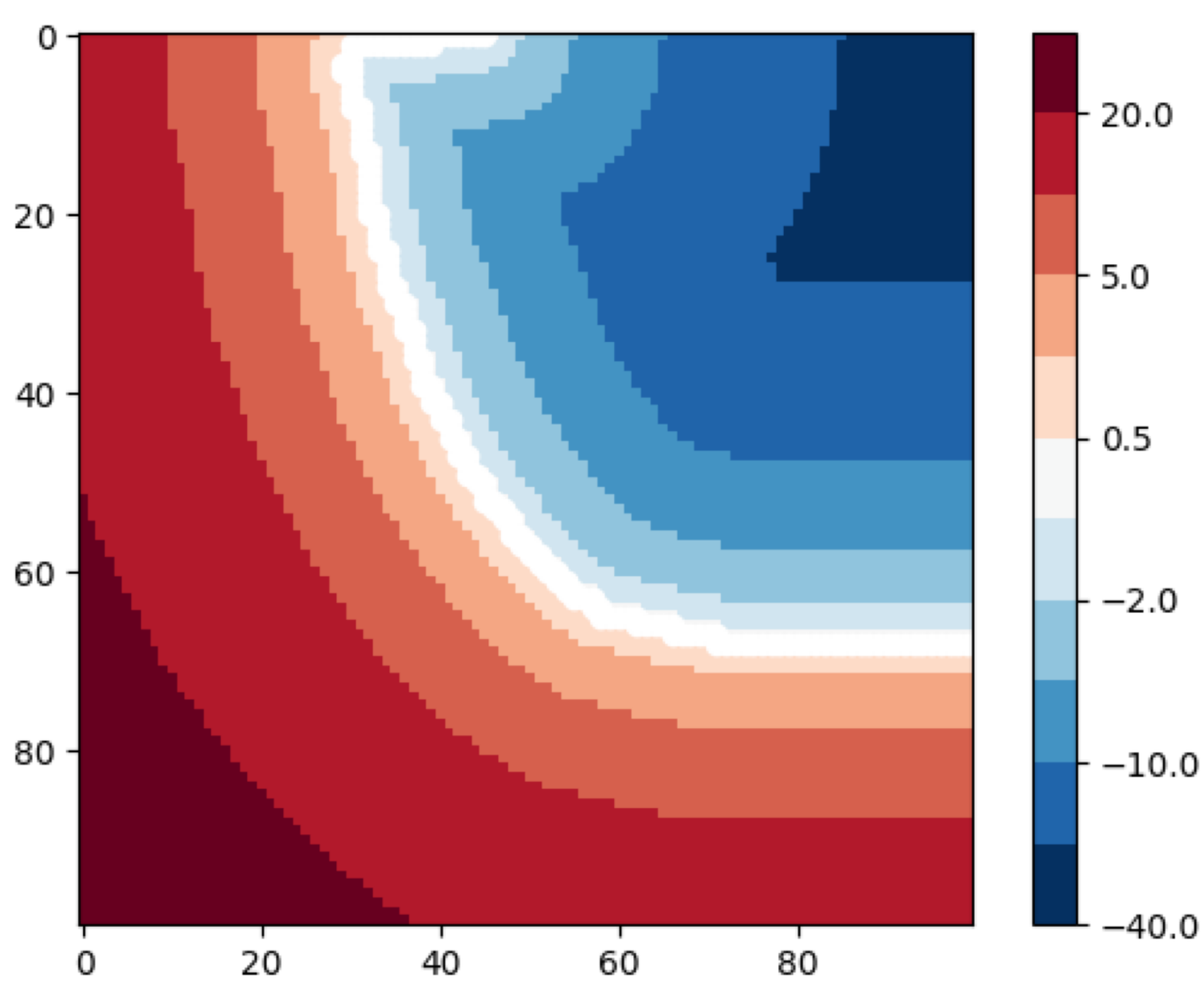


Рисунок 3. Результаты двумерного моделирования морфологии поверхности

Литература

- Qin C. et al. Study of sigma-shaped source/drain recesses for embedded-SiGe pMOSFETs, 2017. Vol. 181, pp. 22–28. DOI: 10.1016/j.mee.2017.07.001
- Toifl A. Novel Numerical Dissipation Scheme for Level-Set Based Anisotropic Etching Simulations, 2019, 2019 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD). DOI: 10.1109/SISPAD.2019.8870443