Prozeßsimulation: Stand der Technik

Erasmus Langer und Siegfried Selberherr

Institut für Mikroelektronik, Technische Universität Wien,
Gußhausstraße 27-29, A-1040 Wien, Austria

Zusammenfassung: Die Simulation technologischer Prozesse im Zuge der Fertigung von Halbleiterbauelementen hat sich weltweit als unentbehrliches Hilfsmittel sowohl für die Verbesserung bestehender als auch für die Neuentwicklung von Herstellungsverfahren etabliert. Der Schwerpunkt des Einsatzes liegt vor allem bei hochintegrierten Bauelementen, wo es infolge der stetig fortschreitenden Miniaturisierung unbedingt erforderlich ist, auch bislang als nebensächlich bezeichnete Phänomene möglichst genau zu erfassen. Die in Verwendung befindlichen Programmpakete erlauben im allgemeinen die Simulation sämtlicher wichtiger Prozeßschritte wie Lithographie, Ionenimplantation, Ausheilen (Diffusion), Oxidation, Ätzen und Abscheidung. Derzeit stehen zwar noch Simulatoren im Vordergrund, welche für den überwiegenden Teil der Prozeßschritte nur zwei Ortskoordinaten berücksichtigen – der eindeutige Trend geht allerdings in Richtung dreidimensionaler Behandlung in allen Modulen. Sowohl parallel zu dieser Entwicklung aber auch im Zusammenhang mit der Einbindung der dritten Ortsdimension hat nach wie vor die Entwicklung immer feinerer physikalischer Modelle hohe Priorität, um mit dem rasanten Fortschritt in der Technologie Schritt halten zu können.

1 Einleitung

Die Prozeßsimulation hat zweifellos eine Schlüsselposition innerhalb des gesamten Gebietes der numerischen Simulation von Halbleiterbauelementen inne, da sie im allgemeinen die Ausgangsbasis für eine anschließende Simulation des elektrischen Verhaltens solcher Bauelemente darstellt. Die Aufgabe der Prozeßsimulation ist es, aus der Angabe von Ausgangsmaterial, dessen Geometrie und der einzelnen technologischen Herstellungsschritte das daraus resultierende Bauelement möglichst genau zu beschreiben. Diese Beschreibung umfaßt einerseits die geometrischen Abmessungen („Topographie") und andererseits die Materialeigenschaften („Dotierungsprofil") sowohl an der Oberfläche als auch im Inneren des Bauelementes.

Die Simulation von Halbleiterbauelementen („Bauelementsimulation") benötigt als Eingabe das Dotierungsprofil sowie elektrische Randbedingungen an den Kontakten, um daraus das elektrische Verhalten des betrachteten Bauelementes zu ermitteln. Nur für theoretische Untersuchungen physikalischer Effekte ist es unter Umständen sinnvoll, „künstliche", das heißt nicht realitätsbezogene, Dotierungsprofile zu verwenden – für

die Simulation realer Bauelemente, die in den meisten Fällen im Vordergrund steht, wird jedenfalls eine möglichst wirklichkeitsnahe Beschreibung des Bauelementes benötigt, welche in Ermangelung einfacher Meßmethoden ausschließlich durch die Prozeßsimulation erreichbar ist. Hinzu kommt noch, daß bei der Anwendung der Bauelementsimulation keineswegs die Analyse eines vorhandenen und im Aufbau genau bekannten Halbleiterbauelementes von primärer Bedeutung ist, sondern vor allem für die Optimierung des elektrischen Verhaltens bezüglich eines oder mehrerer Parameter – durch geeignete Variation des Dotierungsprofiles – eingesetzt wird.

Noch vor ein paar Jahren wurden neue Herstellungsprozesse für immer komplexer aufgebaute Bauelementstrukturen vor allem von Prozeßingenieuren aufgrund ihrer Erfahrung entwickelt. Viele Testschaltungen waren notwendig, bis mit einem neuen Prozeß funktionierende Bauelemente mit ausreichender Ausbeute produziert werden konnten. Inzwischen hat sich jedoch die Computer-Simulation der Herstellungsschritte bei der Entwicklung neuer Prozesse als wichtiges Hilfsmittel etabliert und erleichtert die Verifikation dieser neuen Herstellungsmethoden. Die früher benötigten zeitaufwendigen und teuren Experimente können dadurch auf ein Minimum reduziert werden, was eine erhebliche Zeit- und Geldersparnis bedeutet.

Obwohl sich dieser Beitrag ausschließlich mit der Prozeßsimulation beschäftigt sei festgehalten, daß diese im praktischen Einsatz nicht isoliert von der Bauelementsimulation betrachtet werden kann: erst durch die Kopplung beider Simulatoren entsteht ein effizientes Werkzeug zum Entwurf und zur Optimierung von Halbleiterbauelementen, wobei die Schnittstelle durch das Dotierungsprofil gebildet wird.

Im Zuge der rasanten Entwicklung der Prozeßtechnologie in Richtung immer kleiner werdender Einzelbauelemente aber zugleich immer größeren integrierten Schaltungen ergeben sich extrem komplexe Zusammenhänge zwischen den Parametern sowohl innerhalb eines Prozeßschrittes aber auch zwischen aufeinanderfolgenden Prozeßschritten. Während noch vor einigen Jahren mit zweidimensionalen (manchmal auch nur mit eindimensionalen) Modellen durchaus das Auslangen gefunden werden konnte, sind heutzutage aufgrund der hohen Miniaturisierung eine Reihe von Effekten nur mittels dreidimensionaler Prozeßsimulation zu erklären. Daher besteht der eindeutige Trend zu den auch die dritte Ortsdimension erfassenden Programmpaketen, auch wenn diese infolge des enormen Rechenaufwands die zweidimensionalen Module für Standardanwendungen kurzfristig nicht verdrängen werden.

Die wichtigsten Prozeßschritte bei der Herstellung von integrierten Halbleiterbauelementen sind: Maskenherstellung, Lithographie, Ätzen, Deposition, Ionenimplantation, Diffusion und Oxidation. Der wissenschaftliche Zugang, das heißt die Möglichkeit der mathematischen Beschreibung der physikalischen Vorgänge, ist allerdings bei den genannten Prozeßschritten zum Teil recht unterschiedlich: Während es beispielsweise möglich ist, allein durch die Angabe von Substrat, Ionenart, Dosis, Energie und Richtung das Problem der Ionenimplantation ohne genauere Kenntnis der verwendeten Apparatur zufriedenstellend präzise zu beschreiben, ist eine erfolgreiche Simulation der Maskenherstellung oder der Lithographie ohne Berücksichtigung gerätespezifischer Parameter nicht sinnvoll durchführbar. Sowohl aus Gründen des Bedarfes als auch aufgrund

der Portabilität beschäftigt sich die Prozeßsimulation vorwiegend mit den geräteunabhängigen Prozeßschritten. Infolge der im Zuge der Miniaturisierung immer kritischer werdenden Einflüsse steigt jedoch inzwischen der Bedarf, auch die überwiegend geräteabhängigen Prozeßschritte in die Simulation mit einzubeziehen („Gerätesimulation").

In diesem Beitrag wird auf die Simulation der Prozeßschritte Ionenimplantation, Diffusion und Oxidation sowie auf die Topographiesimulation (Ätzen und Deposition) näher eingegangen.

2 Ionenimplantation

Die Ionenimplantation stellt heutzutage das wichtigste Dotierverfahren bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen dar, wobei hierfür vor allem die zwei folgenden Gründe ausschlaggebend sind:

- Die wesentlichen Parameter, die Implantationsenergie und die Dosis – das ist die Anzahl der Dotierungsatome je Einheitsquerschnitt – können sehr genau gemessen werden. Dadurch ist eine hohe Reproduzierbarkeit der Prozeßparameter und damit auch des resultierenden Dotierungsprofils gegeben.

- Die Ionenimplantation zählt zu den Niedertemperaturprozessen, weshalb aus vorhergehenden Prozeßschritten stammende Dotierungsprofile praktisch nicht beeinflußt werden. Dies ist ein großer Vorteil etwa gegenüber der Einbringung von Dotierstoffen mittels der Deposition und anschließender Diffusion.

Die einfachste und am wenigsten Ressourcen beanspruchende Methode zur Simulation der Ionenimplantation ist die analytische, welche auf der Verwendung von Verteilungsfunktionen basiert [49,54]. Aufgrund ihrer raschen Implementierbarkeit ist diese Methode in fast allen Prozeßsimulatoren, in manchen Fällen sogar als Vorlaufprogramm in Bauelementsimulatoren enthalten, um auf benutzerfreundliche Weise realistische Dotierungsprofile – vorwiegend zu Testzwecken – zur Verfügung zu stellen.

Für höchste Ansprüche in Bezug auf Genauigkeit sowie beim Erfordernis einer dreidimensionalen Simulation hat sich die Monte Carlo-Simulation etabliert [2,56,60] und beispielsweise gegenüber der Lösung der Boltzmann-Transportgleichung [15,65] durchgesetzt. Wohl liefert letztere im allgemeinen „glattere" Dotierungsprofile als die Monte Carlo-Methode, doch steigt der Berechnungsaufwand im dreidimensionalen Fall, wo ein fünfdimensionaler Raum diskretisiert werden muß, erheblich an.

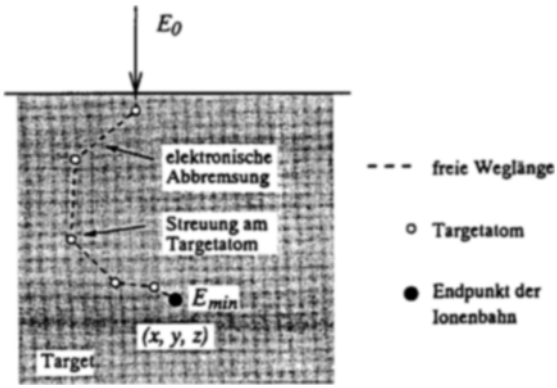

Abbildung 1
Trajektorie eines implantierten Ions

2.1 Physikalische Grundlagen

Bei der Ionenimplantation [76] werden geladene Teilchen mittels großer elektrischer Feldstärke auf eine hohe Geschwindigkeit gebracht und auf das zu dotierende Material (*Target*) geschossen. Die Ionen dringen in das Substrat ein, wobei es zu Kollisionen mit dessen Atomen kommt. Diese Wechselwirkung – Streu- bzw. Abbremsungsprozesse – zwischen eindringenden Ionen und Atomen des Substrates führen letztlich dazu, daß die Ionen in einer Schicht nahe der Oberfläche zum Stillstand kommen.

Abb. 1 zeigt schematisch den Weg eines implantierten Ions im Inneren des Substrates. Die Abbremsung erfolgt dabei einerseits durch inelastischen Energieverlust infolge Wechselwirkung mit Elektronen (*electronic stopping*) und andererseits aufgrund der Streuungen an Kristallatomen (*nuclear stopping*).

Dieser elastische Energieverlust wird im Rahmen der Berechnung des Streuwinkels, das ist jener Winkel, den die Richtung der Ionenbahn vor der Kollision mit der Richtung nach dem Zusammenstoß einschließt, mitberechnet.

Allerdings bleiben die implantierten Ionen im allgemeinen auf Zwischengitterplätzen stehen, das heißt, sie werden nicht in die reguläre Kristallstruktur des Substrates eingebunden. Da solche Teilchen aber nicht zur elektrischen Leitung beitragen würden, ist es erforderlich, die eingebrachten Störstellen elektrisch zu aktivieren, was mit einer thermischen Nachbehandlung erfolgt. Eine derartige Temperaturbehandlung ist aber auch aus einem weiteren Grund erforderlich: Während der Implantation wird der Kristall teilweise zerstört, weil Atome aus dem Kristallverband herausgeschlagen werden. Mittels eines thermischen Prozeßschrittes werden diese Gitterschäden wieder beseitigt, wobei dieses Ausheilen so kurz wie möglich gehalten wird, um die dabei auftretende unerwünschte Diffusion zu minimieren. Ein derzeit erfolgreich eingesetztes Verfahren ist *Rapid Thermal Annealing* (RTA), wo der Halbleiter für kurze Zeit sehr hoch erhitzt wird [18].

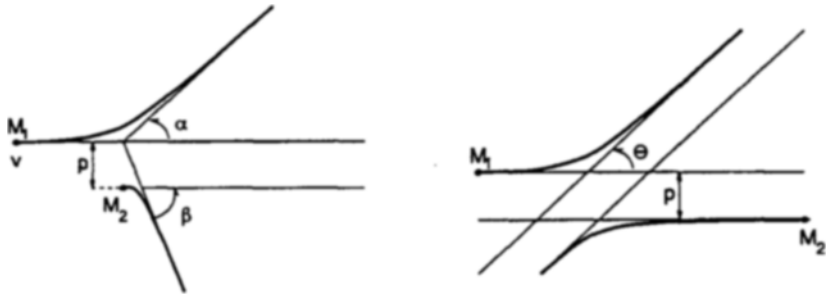

Abbildung 2 Stoßvorgang im Laborsystem (links) und im Massenmittelpunktsystem (rechts)

Streuvorgang

Die Berechnung eines einzelnen Kollisionsvorganges erfolgt durch Anwendung der klassischen Mechanik: Das mit der Energie E einfallende Ion mit der Masse M_1 trifft auf das ruhende Atom mit der Masse M_2, wie der linke Teil der Abb. 2 veranschaulicht. Der Abstand der Massenmittelpunkte beider Teilchen normal zur Einfallsrichtung ist der Stoßparameter p.

Gesucht sind nun der Streuwinkel α, jener Winkel, um den das Ion nach der Kollision von seiner ursprünglichen Einfallsrichtung abweicht, der Winkel β des durch den Stoß beschleunigten Atoms sowie der Energieverlust des Ions. Zur Berechnung dieser Größen wird das Problem auf das Massenmittelpunktsystem, wo sich das Koordinatensystem mit dem Massenmittelpunkt mitbewegt (rechter Teil von Abb. 2), transformiert, wonach sich für den Streuwinkel Θ die Beziehung

$$\Theta = \pi - 2 \cdot \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{p \cdot \mathrm{d}r}{r^2 \cdot \sqrt{1 - V(r)/E_c - p^2/r^2}} \tag{2.1}$$

ergibt. $V(r)$ ist das noch zu definierende interatomare Potential und $r_{\min}$ stellt den minimalen Abstand der beiden Teilchen voneinander dar, welcher aus der Nullstelle des Wurzelausdruckes berechnet werden kann. Nach der Rücktransformation vom Massenmittelpunkt- in das Laborsystem ergeben sich die gesuchten Größen zu:

$$\tan\alpha = \frac{M_2 \cdot \sin\Theta}{M_1 + M_2 \cdot \cos\Theta}, \qquad \cos\beta = \sin\frac{\Theta}{2}$$

$$\Delta E = 4 \cdot E \cdot \frac{M_1 \cdot M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \sin\frac{\Theta}{2} \tag{2.2}$$

Interatomares Potential

Im Prinzip herrscht zwischen den beiden Kernen ein Coulomb-Potential $V_C(r)$, das jedoch infolge der Abschirmwirkung der Elektronen verringert wird. Diese Abschwächung wird mittels einer Abschirmfunktion $\Phi(r) < 1$ berücksichtigt.

$$V(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r}, \qquad V(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \cdot \Phi(r) \tag{2.3}$$

Z_1 und Z_2 sind dabei die Ordnungszahlen des Ions und des betrachteten Atoms.

Für die Abschirmfunktion gibt es eine Reihe von Ansätzen in der Literatur [3,37,59]; im Vergleich mit dem Experiment hat sich am besten das Ziegler-Biersack-Potential [76] bewährt, dessen Grundlage durch das Hartree-Fock-Verfahren zur Berechnung der über alle Richtungen gemittelten Elektronenverteilungen der Atome im Festkörper gebildet wird. Neben dieser Mittelung – ein Erfordernis zum Erhalt eines Zentralpotentials, welches selbst Voraussetzung für die angegebene Beschreibung des Streuvorganges ist – wird angenommen, daß die Elektronenverteilung nicht nur die Kristallatome sondern auch das implantierte Ion selbst beschreibt. Allerdings wird dabei die Ionisierung des Ions vernachlässigt. Eine weitere Annahme besteht darin, daß die Elektronenwolken des Ions und des Atoms einander unverzerrt durchdringen. Berücksichtigt werden durch diese Abschirmfunktion folgende Aspekte:

- elektrostatische Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Kernen
- Anregung der Elektronen sowie die Austauschenergie infolge der erhöhten Dichte im Überlappungsbereich der Elektronenwolken

Die bisherigen Voraussetzungen und Überlegungen liefern allerdings für jede Ion-Target-Kombination eine eigene Kurve $\Phi(r)$, wobei dieses Kurvenfeld einen weiten Bereich überstreicht. Durch die Einführung einer geeigneten Abschirmlänge a_I zur Skalierung von r erhält man eine geeignete Kompression des Kurvenfeldes und damit eine hinreichend gut approximierte Abschirmfunktion für jede Ion-Target-Kombination ($r_a = r/a_I$):

$$a_I = \frac{0.8854 \cdot a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}, \qquad \Phi(r_a) = \sum_{i=1}^{4} a_i \cdot \exp(-b_i \cdot r_a) \tag{2.4}$$

a_0 ist der Bohr'sche Radius ($= 4\pi\varepsilon_0\hbar/m_e e^2 = 0.0529166$ nm), und für die Koeffizienten a_i gilt: $\sum_{i=1}^{4} = 1$. Mit den angepaßten Koeffizienten $a_1 = 0.1818$, $a_2 = 0.5099$, $a_3 = 0.2802$, $a_4 = 0.02817$, $b_1 = 3.2$, $b_2 = 0.9423$, $b_3 = 0.4028$, $b_4 = 0.2016$ ergibt sich zwischen Theorie und Experiment eine Standardabweichung von nur 5%.

Bei Verwendung dieser Abschirmfunktion kann Gleichung (2.1) nicht mehr analytisch gelöst werden. Da eine numerische Integration für jeden Streuvorgang aus Gründen der erforderlichen Rechenkapazität nicht in Frage kommt, bietet sich die Verwendung einer Tabelle an, in welcher der Streuwinkel Θ in Abhängigkeit von einer skalierten Energie und einem skalierten Stoßparameter gespeichert ist [22].

Elektronische Abbremsung

Dieser Abbremsungsprozeß ist ungleich komplizierter als jener durch die Atomkerne, da hierfür eine Reihe von Ursachen zu berücksichtigen sind:

- Kinetische Energieübertragung durch Elektron-Elektron-Kollisionen
- Anregung oder Ionisierung der Kristallatome durch Anregung von Targetelektronen
- Anregung, Ionisierung oder Elektroneneinfang des Ions

Aufgrund der Komplexität dieser Vorgänge gibt es derzeit keine ausschließlich auf physikalischen Grundlagen aufbauende Lösung, die mit dem Experiment zufriedenstellend übereinstimmt. Das Modell von Ziegler und Biersack [76] ist sowohl durch Anpassung an eine große Menge von Experimenten als auch durch grundlegende physikalische Überlegungen entstanden. Die abgeleitete analytische Funktion liefert die in Gleichung (2.5) definierte elektronische Abbremsung (Energieverlust je Wegeinheit, gebrochen durch die Atomdichte N des Targets) für praktisch beliebige Energien und Ion-Target-Kombinationen.

$$S_\mathrm{e} = -\frac{1}{N} \cdot \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} \tag{2.5}$$

Bei der Herleitung wird zunächst vom Energieverlust von leichten Teilchen (Wasserstoff und Helium) ausgegangen, weil dafür die meisten experimentellen Daten vorliegen. Dies führt zunächst zur sogenannten Proton-Stopping-Power S_ep:

$$\frac{1}{S_\mathrm{ep}} = \frac{1}{a \cdot E^b + c \cdot E^d} + \frac{1}{(e/E^f) \cdot \ln(g/E + h \cdot E)} \tag{2.6}$$

Die vom jeweiligen Substrat abhängigen Parameter a bis h sind tabellarisch festgehalten [76]. Für schwere Elemente ergibt sich die elektronische Abbremsung durch Erweiterung der Proton-Stopping-Power:

$$\begin{aligned} S_\mathrm{e} &= S_\mathrm{ep} \cdot (\gamma \cdot Z_1)^2 \\ \gamma &= q + \frac{(1-q) \cdot v_0^2}{2 \cdot v_\mathrm{F}^2} \cdot \ln\left(1 + \left(\frac{2 \cdot \Lambda \cdot v_\mathrm{F}}{a_0 \cdot v_0}\right)^2\right) \\ \Lambda &= \frac{2 \cdot a_0 \cdot \sqrt[3]{(1-q)^2}}{\sqrt[3]{Z_1} \cdot (1 - (1-q)/7)} \end{aligned} \tag{2.7}$$

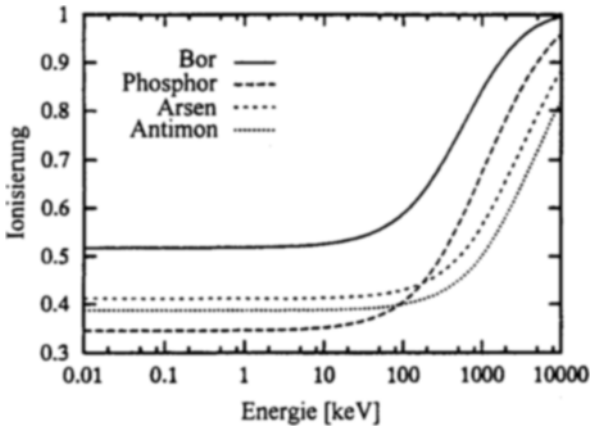

Abbildung 3
Ionisierung in Abhängigkeit von der Energie

γ ist die relative effektive Ladung des Ions, $\gamma \cdot Z_1$ die effektive Ladung des Ions und q die Ionisierung des Ions, wie sie beispielhaft in Abb. 3 für wichtige Dotierelemente angegeben ist. Für ein vollständig ionisiertes Ion gilt $q = 1$, und $q = 0$ bedeutet elektrische Neutralität. Dabei sind v_0 $(=\hbar/(m_e a_0) = 2.18774 \cdot 10^6$ m/s) die Bohr'sche Geschwindigkeit, v_F die Fermigeschwindigkeit [76], und Λ die Abschirmlänge.

Das beschriebene Modell erlaubt unmittelbar nur die Berechnung der elektronischen Abbremsung in einatomigen Substraten. Für zusammengesetzte Materialien – wie beispielsweise SiO_2 – wird zunächst die elektronische Abbremsung für jedes Element berechnet, und anschließend werden gemäß dem Braggschen Gesetz die einzelnen Werte, gewichtet mit ihrem relativen Vorkommen im Target, aufsummiert.

Bei der Simulation kristalliner Targets ist zu berücksichtigen, daß es durch die Kristallausrichtung bestimmte Vorzugsrichtungen („Kanäle") gibt, in denen sich die Ionen leichter fortbewegen [70], das heißt, daß die elektronische Abbremsung solcher Ionen geringer ist als die Abbremsung sich in beliebiger Richtung bewegender Ionen (*Channeling*) [23,24].

Freie Weglänge

Zwischen zwei Kollisionen legt ein implantiertes Ion eine gewisse Strecke, die sogenannte freie Weglänge zurück, während der die elektronische Abbremsung wirksam ist. Die relative Lage des Ions zum nächsten Kollisionsatom wird durch den Stoßparameter p und den azimutalen Winkel ϕ bestimmt. Dabei ist es zweckmäßig, einen maximalen Stoßparameter p_{max} für relevante Stöße zu definieren, sodaß mögliche Stoßparameter nur in einem Zylinder mit dem Radius p_{max} liegen können. p_{max} liegt in der Größenordnung des Abstandes benachbarter Atome im Festkörper, das heißt, $p_{max} \approx N^{-1/3}$, wobei N die atomare Targetdichte ist. Wie schon bei der elektronischen Abbremsung ist auch hier für die weitere Behandlung die Art des Substrates – amorph oder kristallin – zu berücksichtigen.

In einem amorphen Körper ist die freie Weglänge eine statistische Größe, da sich ein Atom an jedem Punkt mit derselben Wahrscheinlichkeit aufhalten kann. Für die *mittlere* freie Weglänge gilt aber jedenfalls:

$$\overline{L} \cdot \pi \cdot p_{\max}^2 = \frac{1}{N} \tag{2.8}$$

Das Modell der gleichverteilten Atome im amorphen Target entspricht allerdings nicht der Realität, derzufolge es weder zu große „Hohlräume" noch beliebig knapp nebeneinanderliegende Atome im Substrat gibt. Daraus folgt, daß dieses Modell die extremen (sehr kleinen bzw. sehr großen) Weglängen überbewertet, weshalb es zielführender ist, mit einer deterministischen freien Weglänge zu rechnen, wodurch sich aber an der Gültigkeit von Gleichung (2.8) nichts ändert. In [76] ist eine in der Praxis bewährte Beziehung für $p_{\max}$ in Abhängigkeit von der Energie des Ions, der Abschirmlänge und dem minimalen, noch zu berücksichtigenden Energieübertrag (ca. 5 eV) angegeben. Diese Formel trägt der Tatsache Rechnung, daß der maximale Stoßparameter am Beginn der Ionenbahn klein ist und mit abnehmender Ionenenerige immer größer wird.

Nach Berechnung von $p_{\max}$ erhält man die freie Weglänge aus Gleichung (2.8) und den Stoßparameter p sowie den im Bereich $[0, 2\pi]$ gleichverteilten azimutalen Winkel ϕ aus

$$p = p_{\max} \cdot \sqrt{R_z}\ , \qquad \phi = 2 \cdot \pi R_z\ , \tag{2.9}$$

wobei R_z eine im Intervall $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl ist.

Bei der Betrachtung eines kristallinen Substrates ist der nächste Stoßpartner dezidiert durch das Kristallgitter vorgegeben. Obwohl auch in diesem Fall ein maximaler Stoßparameter angenommen werden muß ($p_{\max} \approx N^{-1/3}$), um die bisher getroffene Voraussetzung der reinen Zweikörperwechselwirkung aufrechterhalten zu können, ist dieser ausschließlich von der Kristallgeometrie abhängig.

2.2 Monte Carlo-Simulation der Ionenimplantation

Die Simulation der Ionenimplantation mittels der Monte Carlo-Methode basiert ausschließlich auf den im vorigen Kapitel besprochenen Grundlagen. Um statistisch akzeptable Ergebnisse zu erzielen, muß eine hinreichend große Zahl von Ionenbahnen berechnet werden. Für eindimensionale Strukturen reichen etwa 10 000 Teilchen aus, für zweidimensionale Berechnungen sind ca. 100 000 Trajektorien erforderlich, doch für dreidimensionale Anwendungen müssen einige Millionen Teilchen untersucht werden. Dabei ist jedoch hervorzuheben, daß die Berechnung der Ionenbahnen im Substrat jedenfalls im dreidimensionalen Raum erfolgen; nur die Geometrieabfragen zur Bestimmung des endgültigen Aufenthaltsortes eines Ions hängen von der Anzahl der gewünschten Dimensionen ab.

Obwohl für die Berechnung einer einzelnen Ionenbahn mittels der Monte Carlo-Methode kein Diskretisierungsgitter benötigt wird, ist ein solches selbstverständlich einerseits zur örtlichen Auflösung der zu untersuchenden Geometrie und andererseits zur Darstellung des Dotierungsprofiles erforderlich. Wie bei allen Simulatoren ist auch hier eine automatische Gittergenerierung und -adaption wünschenswert, wie sie beispielgebend in [60] vorgeschlagen ist. Hier wird von einem sehr feinen, äquidistanten Gitter ausgegangen, dessen Gitterkonstante durch die minimale zu erwartende laterale Standardabweichung bestimmt wird. Im Zuge des Verfahrens wird das Gitter nach und nach durch gezielte Weglassung von Gitterlinien bzw. -flächen vergröbert. Als Kriterien werden der lokale Dosisfehler und der maximale Gradient der Konzentration verwendet. Eine abermalige Verfeinerung des Gitters ist allerdings nicht sinnvoll durchführbar, da die Aufteilung der in einem Gebiet befindlichen Ionen auf Teilgebiete nur gleichmäßig – aber nichtsdestoweniger willkürlich – erfolgen kann. Ein solches adaptives Gitter bietet zwei Vorteile: einerseits ergibt sich durch die Vergröberung trivialerweise eine Reduktion des Speicherplatzbedarfes sowie der Rechenzeit (infolge der Verringerung der Anzahl der Geometrieabfragen), und andererseits wird das statistische Rauschen verringert, wodurch ein glatteres Dotierungsprofil resultiert.

Vergleich der analytischen Methode mit Monte Carlo-Berechnungen

Die eigentliche Stärke der Monte Carlo-Methode liegt zweifellos in der Simulation dreidimensionaler Strukturen, da hier das analytische Verfahren nicht nur weniger genaue Ergebnisse liefert sondern darüberhinaus auch den Vorteil des geringeren Ressourcenbedarfes verliert. Doch auch im zweidimensionalen Fall, wo die analytische Methode durch vergleichsweise sehr kurze Rechenzeiten besticht, liefert diese unzureichende Ergebnisse, sobald die gegebene Struktur etwas komplexer ist oder steil abfallende Kanten aufweist.

Als Beispiel sei die Simulation der Implantation von Bor unter einem Neigungswinkel von 0° mit einer Energie von 100 keV in einen einfachen, idealisierten Trench in Abb. 4 angegeben. Aus der Isoliniendarstellung (Logarithmus der Borkonzentration/Dosis) ist zu erkennen, daß es an den Seitenwänden unter Zugrundelegung der analytischen Methode (links) praktisch keine Borkonzentration gibt, weil ab einer bestimmten Tiefe die Verteilungsfunktion verschwindend klein wird und das angrenzende Vakuumgebiet keinen Beitrag leisten kann. Bei der Monte Carlo-Methode (rechts) erhält man an den Seitenwänden eine signifikante Konzentration, welche von Ionen stammt, die nach Reflexion an einer Seitenwand in deren gegenüberliegende eintreten. Die Werte der Isolinien in Abb. 4 sind im Bereich 2.5 bis 4.5 im Abstand von 0.5.

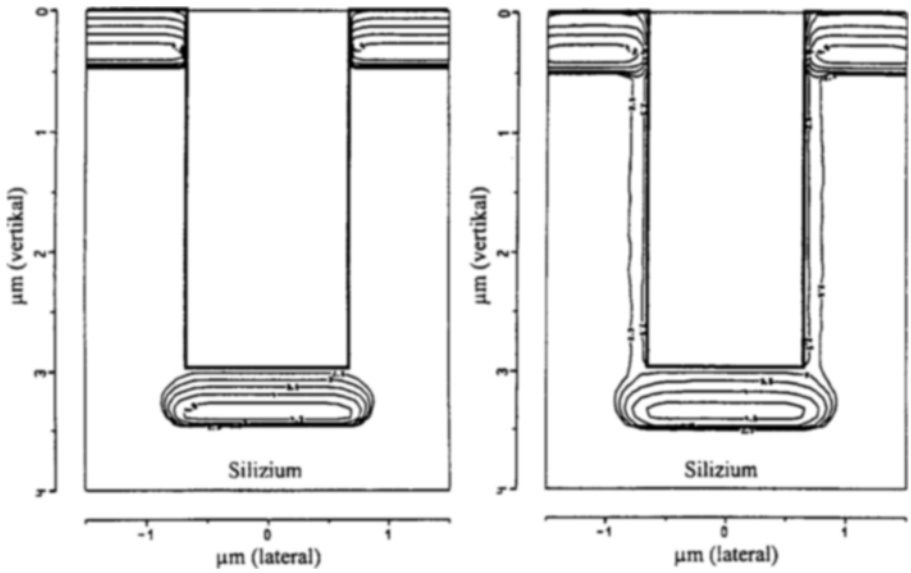

Abbildung 4 Trench Simulation (Logarithmus der Borkonzentration bezogen auf die Dosis) mit analytischer (links) und Monte Carlo-Methode (rechts)

Monte Carlo-Simulation im dreidimensionalen Raum

Die dreidimensionale Simulation der Ionenimplantation ist mit heute zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten ohne beschleunigende Maßnahmen als Entwicklungswerkzeug nicht sinnvoll einsetzbar. Eine sehr zielführende Beschleunigung bietet die Superpositionsmethode [60], bei der das Implantationsfenster zunächst in Teilfenster aufgeteilt wird, deren Größe sich aus dem zuvor beschriebenen Anfangsgitter ergibt. Danach wird eine „Modelltrajektorie" unter der Voraussetzung berechnet, daß das Ion in einen unendlich ausgedehnten, homogen mit einem Material ausgefüllten Raum implantiert wird. Alle wesentlichen Daten, wie die Koordinaten der Kollisionspunkte und die Energie sowie die Richtung nach jedem Zusammenstoß, werden dabei abgespeichert. Anschließend wird je eine Kopie dieser Modelltrajektorie in jedes der anderen Teilfenster gelegt, wodurch aus einer berechneten Ionenbahn einige hundert effektive Trajektorien gewonnen werden können.

Beim Vorhandensein mehrerer Materialien im Simulationsgebiet eröffnen sich zwei Möglichkeiten: Entweder werden für alle Materialien Modelltrajektorien berechnet, sodaß beim Übergang eines Ions von einem Material in das andere auf die entsprechende Modelltrajektorie „umgeschaltet" wird, oder es wird ab dem Punkt, wo die kopierte Trajektorie das erste Material verläßt, die restliche Ionenbahn konventionell fertigberechnet. Ob eine Berechnung von Modelltrajektorien für alle Materialien lohnt, hängt

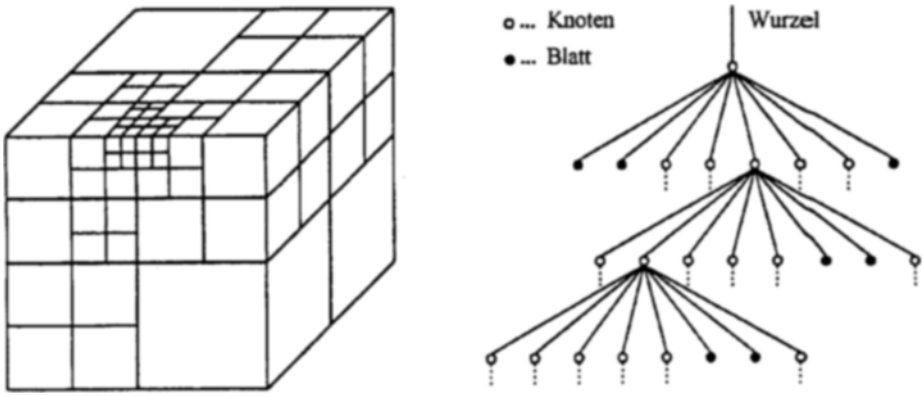

Abbildung 5 Octree-Diskretisierung (links) und Baumstruktur für die Datendarstellung (rechts)

vor allem von der geometrischen Aufteilung der verschiedenen Materialien ab. Weiterentwicklungen dieses Verfahrens der Aufspaltung von Trajektorien (*trajectory splitting*) wurden von Bohmayr et al. vorgestellt [2].

Durch die Anwendung der Superpositionsmethode wird zwar die Anzahl der zu berechnenden Streuvorgänge drastisch reduziert, doch müssen die Geometrieüberprüfungen, das heißt die Feststellungen, ob ein Teilchen eine Materialgrenze überschreitet oder in welchem Gebiet sich das Teilchen befindet (*point location problem*), auch für die kopierten Ionenbahnen durchgeführt werden. Im dreidimensionalen Fall beanspruchen diese Abfragen – unter der Voraussetzung, möglichst allgemeine Strukturen behandeln zu können – bei weitem den Löwenanteil an Rechenzeit, weshalb es von größter Wichtigkeit ist, die Geometrieüberprüfungen möglichst effizient zu gestalten.

Im Vergleich verschiedener Methoden der Strukturrepräsentation bewährt sich bei weitem am besten die Verwendung eines *Octrees*. Diese Methode stammt aus der Bildverarbeitung [11], wo aber zumeist der umgekehrte Vorgang – das Zusammenfassen von Regionen mit denselben Eigenschaften anstelle der Zerlegung eines großen Gebietes – von Bedeutung ist. Bei dieser Methode wird zunächst das gesamte Simulationsgebiet von einem Würfel (dem Ur-Würfel) umschrieben. Soferne dieser Würfel eine Grenzfläche beinhaltet, was im allgemeinen immer der Fall ist, wird dieser in acht Sub-Würfel unterteilt. Dieses Verfahren wird rekursiv für jeden Sub-Würfel fortgesetzt, bis entweder keine mehr in dem jeweiligen, gerade behandelten Würfel liegt oder bis eine vorgegebene minimale Kantenlänge erreicht ist. Jedem End-Würfel wird zuletzt noch das Material, aus dem er zur Gänze bzw. überwiegend besteht, zugeordnet. Der linke Teil von Abb. 5 zeigt eine Octree-Diskretisierung schematisch.

Programmintern wird für die Datendarstellung eine Baumstruktur verwendet (rechter Teil von Abb. 5): Die Wurzel entspricht dabei dem Ur-Würfel, die Knoten stellen allgemeine Sub-Würfel dar, und die Blätter identifizieren die End-Würfel. Nach dem

Aufbau des Octrees kann das Lokalisierungsproblem mittels einfacher Vergleiche anstelle von komplizierten und numerisch viel sensitiveren Berechnungen von Schnitten gelöst werden. Um nun den Aufenthaltsort eines Ions zu bestimmen, muß nur festgestellt werden, ob die Koordinaten des Ions innerhalb der entsprechenden Würfelkanten liegen, was zu einer drastischen Verringerung der Rechenzeit im Vergleich zu anderen Methoden führt.

Bei Verwendung einer Octree-Diskretisierung und der Superpositionsmethode ist die Monte Carlo-Simulation auch unter Berücksichtigung der heutigen Rechnerkapazitäten ein durchaus geeignetes Werkzeug zur qualitativen und quantitativen Berechnung dreidimensionaler Dotierungsprofile, welche durch Ionenimplantation in amorphe Substrate erzeugt werden. Die Simulation der Implantation in kristalline Materialien erfordert aber einen ungleich höheren rechentechnischen Aufwand, da in diesem Fall die Superpositionsmethode nicht anwendbar ist: Ionen, deren Bewegung entlang von Kanälen erfolgt, unterliegen anderen Streumechanismen als jene, die sich in nicht bevorzugte Richtungen bewegen. Darüberhinaus bewirkt der Ionenbeschuß lokale Zerstörungen der Kristallstruktur, indem Targetatome bei der Kollision mit einfallenden Ionen aus dem Kristallverband herausgeschlagen werden und in Form einer Kaskade weitere Gitterschäden („Punktdefekte") verursachen können. Ein Teil dieser erzeugten Defekte ist allerdings nicht stabil sondern verschwindet wieder zufolge spontaner Rekombination. Da der Channeling-Effekt durch vorhandene Punktdefekte reduziert wird – eine starke Zerstörung der Kristallstruktur führt letztlich zu amorphen Eigenschaften –, kommt der Erfassung der erzeugten Gitterschäden eine zentrale Bedeutung zu. In der Prozeßsimulation erfolgreich eingesetzte Verfahren zur Beschreibung dieser sogenannten „Recoil-Kaskaden" basieren auf dem Kinchin-Pease-Modell [32,55].

3 Diffusion

Bei der Simulation der Umverteilung von Dotieratomen aufgrund thermischer Einwirkung handelt es sich um eines der anspruchsvollsten Gebiete innerhalb der Prozeßsimulation, sowohl die physikalische Modellbildung als auch die benötigten Rechenleistungen betreffend. Im Gegensatz zur Beschreibung der Ionenimplantation, wo eine zeitabhängige Betrachtung keineswegs Stand der Technik ist, sind Diffusionsprozesse trivialerweise nur unter Einbeziehung der Zeitkomponente zu simulieren. Darüberhinaus sind bei integrierten Bauelementen zumindest zwei Ortsdimensionen (vertikal und lateral) zu berücksichtigen, wobei infolge der im Zuge der Miniaturisierung stattfindende Reduktion der Bauelementweite eine Erfassung der dritten Ortsdimension mehr und mehr erforderlich ist. Eine Hinzunahme dieser Dimension läßt sich allerdings nicht nur auf das Problem des enorm erhöhten Rechenbedarfes reduzieren, da eine Erweiterung der zweidimensionalen Modelle keineswegs auf einfache Weise erfolgen kann.

Bei der Untersuchung von Diffusionsproblemen gibt es zwei Ansätze, von denen jeder seine Berechtigung und Bedeutung hat: Die makroskopische Betrachtungsweise, welche ein kontinuierliches Material voraussetzt und dessen atomistische Eigenschaften vernachlässigt, ist nicht nur aus historischen Gründen der Ausgangspunkt, sondern stellt auch für die Simulation nach wie vor die Basis dar. Doch die Grenzen der klassischen Behandlungsmethode wurden rasch erreicht; als Beispiel sei nur die Anomalie der Diffusion von Phosphor in Silizium [35] angegeben. Um diese Grenzen zu überwinden, gewann die atomistische, also mikroskopische, Betrachtungsweise mehr und mehr an Bedeutung ohne aber das grundlegende makroskopische Prinzip in der Prozeßsimulation zu verdrängen: die aus atomistischen Überlegungen resultierenden Erkenntnisse werden zumeist zur Modellbildung für die Simulationsprogramme verwendet, um die makroskopischen Modelle zu verbessern. Eine ausschließlich auf der atomistischen Betrachtungsweise basierende Simulation der Diffusion – etwa vergleichbar mit der im Kapitel 2.2 beschriebenen Simulation der Ionenimplantation – scheint aus heutiger Sicht noch in weiter Ferne zu sein.

3.1 Physikalisches Ausgangsmodell

Die Grundlage für die Beschreibung von Diffusionsprozessen stellen die empirischen Fick'schen Gesetze aus dem Jahre 1855 dar [12]. Im Gleichgewichtszustand werden die Dichten aller vorhandenen Atomarten als gleichverteilt angenommen; bei einer inhomogenen Ausgangsverteilung erfolgt eine Umverteilung der Atome, bis die Gleichgewichtsbedingungen hergestellt sind. Der Fluß der Atome $\vec{J}$, das heißt die Atomstromdichte, wird dabei rein phänomenologisch in Relation zum Gradienten der Dichte C gesetzt (erstes Fick'sche Diffusionsgesetz):

$$\vec{J} = -D \cdot \operatorname{grad} C \tag{3.10}$$

Diese Gleichung stellt eine makroskopische Definition für den in dieser Betrachtungsweise konstanten Diffusionskoeffizienten D dar, welcher zwar im allgemeinen ein Tensor zweiter Stufe ist, aber infolge der Symmetrieeigenschaften bei kubischen Kristallen und Diamantstrukturen zu einem Skalar entartet.

Durch Kombination der Kontinuitätsgleichung (3.11) mit dem ersten Fick'schen Gesetz (3.10) ergibt sich unter der Annahme, daß keine Quellen und Senken (G steht für Generation und R für Rekombination) vorhanden sind, das zweite Fick'sche Gesetz (3.12), welches die zeitliche Konzentrationsänderung beschreibt.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{J} + G - R \tag{3.11}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div}(D \cdot \operatorname{grad} C) \tag{3.12}$$

Im einfachsten Fall eines ortsunabhängigen Diffusionskoeffizienten läßt sich dieser vor den Divergenzoperator ziehen. Dieser Fall ist allerdings in der Praxis kaum interessant, da der Diffusionskoeffizient im allgemeinen nicht nur von der Temperatur, sondern auch von ortsabhängigen Größen wie Ladungsträgerdichte, Punktdefekte, mechanische Spannungen und Verzerrungen des Kristalls abhängig ist. Aufgrund experimenteller Untersuchungen kann die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten in vielen Fällen durch eine Beziehung nach Arrhenius

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{k \cdot T}\right) \tag{3.13}$$

beschrieben werden, wobei E_A die Aktivierungsenergie, k die Boltzmannkonstante ($= 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K) und T die absolute Temperatur ist.

3.2 Diffusion von Ionen

Bei der Diffusion geladener Teilchen (Dopanden) spielt der Einfluß des elektrostatischen Feldes eine bedeutende Rolle, da die Diffusionsgeschwindigkeit infolge der gegenseitigen Abstoßung beeinflußt wird. Die durch das erste Fick'sche Gesetz (3.10) beschriebene Teilchenstromdichte wird dabei durch einen Feldterm ergänzt:

$$\vec{J} = -D \cdot \operatorname{grad} C + c \cdot \mu \cdot C \cdot \vec{E} \tag{3.14}$$

Die Gültigkeit dieser Gleichung setzt voraus, daß alle Dotierteilchen ionisiert sind; c hat den Wert -1 für negativ geladene Akzeptoren bzw. $+1$ für positiv geladene Donatoren.

Der Proportionalitätsfaktor μ ist die Beweglichkeit, die sich gemäß Nernst [41], Einstein [7] bzw. Wagner [73] aus dem Diffusionskoeffizienten errechnen läßt:

$$\mu = D \cdot \frac{q}{k \cdot T} = \frac{D}{U_T} \tag{3.15}$$

In dieser als Nernst-Einstein- oder auch als Einstein-Relation bezeichneten Gleichung bedeuten q ($= 1.6021 \cdot 10^{-19}$ C) die Elementarladung und U_T ($= k \cdot T/q$) die sogenannte Thermospannung.

Die durch die geladenen Ionen vorhandene Raumladung wird durch die dritte Maxwellsche Gleichung $\operatorname{div} \vec{D} = \rho$ beschrieben, derzufolge sich die Raumladung ρ aus der Divergenz des elektrischen Verschiebungsvektors $\vec{D}$ ergibt. Nach dem Einsetzen der Beziehungen $\vec{D} = \varepsilon \cdot \vec{E}$ und $\vec{E} = -\operatorname{grad} \psi$ und dem Aufspalten der Raumladung ρ in die Beiträge der einzelnen Teilchenarten – gekennzeichnet durch den Index i – erhält man schließlich die folgende Poissongleichung:

$$\operatorname{div}(\varepsilon \cdot \operatorname{grad} \psi) = q \cdot \left(n - p - \sum_i c_i \cdot C_i\right) \tag{3.16}$$

Die elektrische Permeabilität ε – naturgemäß eigentlich ein Tensor zweiter Stufe – kann für alle im Bereich der Halbleiterfertigung verwendeten Materialien als Skalar angenommen werden. In Gleichung (3.16) bedeuten ψ das elektrostatische Potential, n die Elektronendichte, p die Löcherkonzentration und C_i die Dichten der einzelnen Dotierstoffe, wobei diese als beweglich und vollständig ionisiert angenommen werden.

Infolge der wesentlich größeren Beweglichkeit der Ladungsträger gegenüber jener der Ionen sowie unter der in der Praxis erfüllten Bedingung, daß während des Diffusionsvorganges kein elektrisches Feld von außen wirkt, können Elektronen und Löcher als im thermischen Gleichgewicht befindlich angenommen werden. Weiters kann bei der Prozeßsimulation – im Gegensatz zur Bauelementsimulation – die Gültigkeit der Boltzmannstatistik angenommen werden; zumindest stellt sie auch für hohe Dotierungskonzentrationen noch immer eine sehr zufriedenstellende Annäherung dar. Dadurch lassen sich die Dichten der Elektronen und Löcher durch die intrinsische Konzentration der Ladungsträger n_i und dem elektrostatischen Potential ψ ausdrücken:

$$n = n_i \cdot \exp\left(\frac{\psi}{U_T}\right) , \qquad p = n_i \cdot \exp\left(-\frac{\psi}{U_T}\right) \tag{3.17}$$

Der möglichst genauen Modellierung der intrinsischen Ladungsträgerdichte n_i kommt hohe Bedeutung zu. Dennoch existieren darüber bis heute für Silizium nur die experimentellen Ergebnisse von Morin und Maita [39], die den elektrischen Widerstand von Silizium über einen weiten Temperaturbereich gemessen und folgende Formulierung vorgeschlagen haben:

$$\begin{aligned} n_i &= 3.87 \cdot 10^{16} \cdot \exp\left(\frac{E_g}{2 \cdot k \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{T}{\mathrm{K}}\right)^3 \mathrm{cm}^{-3} \\ E_g &= 1.21\,\mathrm{eV} - 7.1 \cdot 10^{-10} \cdot \sqrt{\frac{n_i/\mathrm{cm}^{-3}}{T/\mathrm{K}}}\,\mathrm{eV} \end{aligned} \tag{3.18}$$

Um die implizite und damit numerisch aufwendige Formulierung zu vermeiden – in der Formel für die Energielücke E_g kommt selbst die intrinsische Dichte n_i vor – haben Fahey et al. [8] folgende „gefittete" Formel angegeben:

$$n_i = 1.01 \cdot 10^{17} \cdot \left(\frac{T}{\mathrm{K}}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{0.68\,\mathrm{eV}}{k \cdot T}\right) \mathrm{cm}^{-3} \tag{3.19}$$

Bei der bereits in der Poissongleichung (3.16) vorhandenen und in der Praxis wichtigen gleichzeitigen Betrachtung mehrerer Spezies von Dopanden ergibt sich für jede Teilchenart je eine Kontinuitätsgleichung (3.11) und eine Stromgleichung; letztere lassen sich unter Einbeziehung der Einstein-Relation (3.15) in folgender Form anschreiben:

$$\vec{J}_i = -D_i \cdot \left(\operatorname{grad} C_i + c_i \cdot \frac{C_i}{U_T} \cdot \operatorname{grad} \psi\right) \tag{3.20}$$

Wie schon in der Poissongleichung (3.16) kennzeichnet der Index $i \in 1 \ldots N$ auch hier den gerade betrachteten Dopandentyp. Diese Nomenklatur wird im weiteren Verlauf beibehalten, um Verwechslungen mit anderen Konzentrationen, wie beispielsweise jener von Vakanzen und Zwischengitterplätzen, zu vermeiden.

Unter der Annahme lokaler Ladungsneutralität (div $\vec{D} = 0$), welche dann gerechtfertigt ist, wenn die Diffusionslänge der Dopanden groß gegenüber der Debye-Länge ist [26], wird die Poissongleichung von den Stromgleichungen entkoppelt:

$$\operatorname{grad} \psi = \frac{U_T}{C_N} \cdot \sum_i c_i \cdot C_i \tag{3.21}$$

$$\vec{J}_i = -D_i \cdot \left(1 + \frac{C_i}{C_N}\right) \cdot \operatorname{grad} C_i - D_i \cdot c_i \cdot \frac{C_i}{C_N} \cdot \sum_{j \neq i} c_j \cdot \operatorname{grad} C_j \tag{3.22}$$

$$C_N = \sqrt{(2 \cdot n_i)^2 + \left(\sum_i c_i \cdot C_i\right)^2} \tag{3.23}$$

3.3 Hochdotierungseffekte

Schon sehr früh wurden die Grenzen der Fick'schen Gesetze zur Beschreibung der Diffusion von Dotierstoffen erkannt, wobei die Anomalie der Phosphordiffusion bei hohen Konzentrationen einen Meilenstein in der Entwicklung adäquater Modelle darstellt [67]. In späterer Folge wurden alle Effekte, die unter Beibehaltung konstanter Diffusionskoeffizienten nicht beschreibbar waren, als Anomalien der Diffusion bezeichnet.

Das unterschiedliche Verhalten von Phosphor (*kink and tail*) gegenüber beispielsweise Bor und Arsen läßt sich zwar rudimentär dadurch beschreiben, daß der Diffusionskoeffizient von Phosphor bei Konzentrationen jenseits von 10^{20} cm^{-3} stark ansteigt. Doch für dieses Verhalten gibt es bis heute trotz ausführlicher atomistischer Untersuchungen keine wissenschaftlich eindeutige Erklärung, welche die „Normalität" anderer Dotierstoffe miteinbezieht.

Ein bei heutigen Prozeßsimulatoren weit verbreitetes makroskopisches Modell ist jenes von Fair und Tsai, demzufolge das Profil in eine Hochdotierungsregion, ein Übergangsgebiet und in die Schwanzzone mit niedrigerer Konzentration eingeteilt wird. Der Diffusionskoeffizient wird in den drei Regionen mit unterschiedlichen Modellen in Abhängigkeit von der Phosphor- und der Elektronendichte berechnet [9].

Abb. 6 zeigt Augenblicksdarstellungen während der Diffusion von Phosphor in Silizium, welche nach dem Modell von Fair und Tsai unter Aufrechterhaltung einer konstanten Oberflächenkonzentration berechnet worden sind. Wie ebenfalls aus Abb. 6 ersichtlich ist, wird zwischen der totalen und der aktiven Ionenkonzentration unterschieden, wobei diese Differenz allerdings nur bei sehr hohen Dichten zum Tragen kommt. Dies bedeutet, daß bei Dotierungen über der Löslichkeitsgrenze für jeden Dotierstoff zumindest

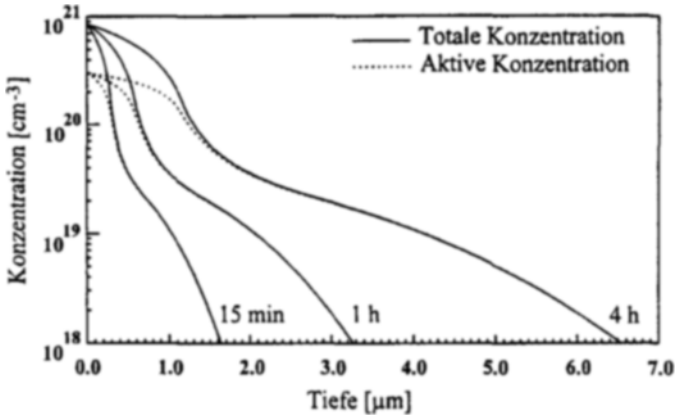

Abbildung 6 Phosphorprofile in Silizium zu bestimmten Zeitpunkten aufgrund der Diffusion bei 1000 °C

zwei Formen berücksichtigt werden müssen: die aktiven, geladenen und mobilen Ionen mit der Konzentration C_i^{a} und die inaktiven, unbeweglichen, in Form eines Clusters oder eines Prezipitates verbundenen Teilchen mit der Dichte C_i^{cl}, welche in Summe die totale Konzentration C_i^{t} ergeben. Die Clusterformation bewirkt eine drastische Reduktion des Diffusionskoeffizienten, da der Gradient der Konzentration der aktiven Teilchen nahezu verschwindet und die gruppierten Dopanden nicht diffundieren. Während sich die inaktiven Teilchen bei Bor und Antimon zu den relativ großen Prezipitaten zusammenschließen, formieren inaktive Phosphor- und Arsenatome Gruppen (Cluster) von typisch zwei bis sechs Atomen. In der Reaktionsgleichung

$$\mathrm{Cl}_i \rightleftharpoons m_i\,\mathrm{A}_i + l_i\,\mathrm{e}^- \tag{3.24}$$

repräsentiert die linke Seite einen Cluster Cl_i, welcher m_i Atomen A_i und l_i Elektronen e^- entspricht. Der Formationsprozeß erfolgt nicht instantan, sondern es sind einige Stunden bei 800 °C und einige Minuten bei 1000 °C erforderlich, bis sich ein Gleichgewichtszustand einstellt [58].

Die derzeit in Simulationsprogrammen verwendeten Modelle für die Clusterbildung stellen sicher nicht der Weisheit letzten Schluß dar. Für Arsen scheint aber jedenfalls neben der Verwendung eines statischen Modells auch die Berücksichtigung der dynamische Clusterbildung essentiell zu sein, wie sie beispielsweise im Simulator PROMIS verwendet wird [74].

$$\frac{\partial C_i^{\mathrm{cl}}}{\partial t} = m_i \cdot k_i^{\mathrm{c}} \cdot n^{l_i} \cdot \left(C_i^{\mathrm{a}}\right)^{m_i} - k_i^{\mathrm{d}} \cdot C_i^{\mathrm{cl}} \tag{3.25}$$

In obiger Gleichung bedeuten k_i^{c} die Cluster-Generationsrate und k_i^{cl} die Rate für die Cluster-Auflösung. Die bei Arsen dominanten Clusterformen bestehen aus drei Arsenatomen und einem Elektron [16] ($l_{\mathrm{As}} = 1$ und $m_{\mathrm{As}} = 3$). Die Arsencluster sind bei üblichen Diffusionstemperaturen aktiv und bei Raumtemperatur elektrisch neutral [71]. Es gibt zwar bereits Modelle für die dynamische Clusterbildung bei Bor, z.B.[57]; da diese aber noch nicht ausreichend verifiziert sind, ist es durchaus sinnvoll, die dynamische Clusterbildung zunächst nur für Arsen zu berücksichtigen:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} - \operatorname{div}\left(D_i \cdot \left(\operatorname{grad} C_i + c_i \cdot \frac{C_i}{U_T} \cdot \operatorname{grad}\psi\right)\right) = 0 \tag{3.26}$$

$$\frac{\partial C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}}}{\partial t} - \operatorname{div}\left(D_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}} \cdot \left(\operatorname{grad} C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}} + c_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}} \cdot \frac{C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}}}{U_T} \cdot \operatorname{grad}\psi\right)\right) + \\ +3 \cdot k_{\mathrm{As}}^{\mathrm{c}} \cdot n \cdot \left(C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}}\right)^3 - k_{\mathrm{As}}^{\mathrm{d}} \cdot C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{cl}} = 0 \tag{3.27}$$

$$\frac{\partial C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{cl}}}{\partial t} - 3 \cdot k_{\mathrm{As}}^{\mathrm{c}} \cdot n \cdot \left(C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}}\right)^3 - k_{\mathrm{As}}^{\mathrm{d}} \cdot C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{cl}} = 0 \tag{3.28}$$

Gleichung (3.26) repräsentiert die Kontinuitätsgleichungen für alle Dopanden mit Ausnahme von Arsen, und die Gleichungen (3.27) und (3.28) sind die Kontinuitätsgleichungen der aktiven Arsenionen bzw. der Arsencluster. Der Ladungszustand eines Arsenatomes innerhalb eines Clusters $c_{\mathrm{As}}^{\mathrm{cl}}$ ergibt sich infolge der anfangs getroffenen Annahme über die dominante Clusterform zu $2/3$.

Zur Erfassung der stationär vorhandenen Cluster, wo deren Bildung bereits einen Gleichgewichtszustand erreicht hat, werden derzeit zumeist nur die Elemente Bor und Arsen in Betracht gezogen [47], wobei Borcluster als aus sechs Atomen ($m_{\mathrm{B}} = 6$) und sechs Elektronen ($l_{\mathrm{B}} = 6$) bestehend angenommen werden. Mit dieser und der zuvor beim dynamischen Modell für Arsen getroffenen Annahme ergeben sich folgende Gesamtkonzentrationen:

$$C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{t}} = C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}} + \frac{3 \cdot k_{\mathrm{As}}^{\mathrm{e}}}{1 - 2 \cdot k_{\mathrm{As}}^{\mathrm{e}} \cdot \left(C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}}\right)^3} \cdot \left(C_{\mathrm{As}}^{\mathrm{a}}\right)^4 \tag{3.29}$$

$$C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{t}} = C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{a}} + 6 \cdot k_{\mathrm{B}}^{\mathrm{e}} \cdot \left(C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{a}}\right)^{12} \tag{3.30}$$

Unter Berücksichtigung der allgemein etablierten Annahme, daß die innerhalb von Clustern gebundenen Dopanden unbeweglich sind ($\vec{J}_i^{\mathrm{cl}} = 0$), erhält man schließlich die Kontinuitätsgleichungen ($i \in 1 \ldots N$, wobei N die Anzahl der beteiligten Dopandenarten ist) sowie die Gleichung für das elektrostatische Feld ($\vec{E} = -\operatorname{grad}\psi$):

$$\frac{\partial C_i^{\mathrm{t}}}{\partial t} - \operatorname{div}\left(D_i \cdot \left(\frac{\partial C_i^{\mathrm{a}}}{\partial C_i^{\mathrm{t}}} \cdot \operatorname{grad} C_i^{\mathrm{t}} + c_i \cdot \frac{C_i^{\mathrm{a}}}{U_T} \cdot \operatorname{grad}\psi\right)\right) = 0 \tag{3.31}$$

$$\operatorname{grad}\psi = \frac{U_T}{\sqrt{(2 \cdot n_i)^2 + C_{\mathrm{net}}^2}} \cdot \sum_j \frac{\partial C_{\mathrm{net}}}{\partial C_j^{\mathrm{t}}} \cdot \operatorname{grad} C_j^{\mathrm{t}} \tag{3.32}$$

$$C_{\mathrm{net}} = \sum_i c_i \cdot \left(C_i^{\mathrm{a}} + \frac{m_i - l_i}{m_i} \cdot \left(C_i^{\mathrm{t}} - C_i^{\mathrm{a}}\right)\right) \tag{3.33}$$

3.4 Diffusion in nicht inerter Umgebung

Im Zuge des in der Siliziumtechnologie stattgefundenen Übergangs von der Verwendung (111)-orientierter Substrate auf den Einsatz jener mit (100)-Orientierung stellte sich heraus, daß der Diffusionskoeffizient von Bor unter inerten Bedingungen unabhängig von der Kristallrichtung ist, nicht jedoch in einer oxidierenden Umgebung. Später wurde dieses Verhalten auch für andere Dotierstoffe nachgewiesen. Die ersten Ansätze zur Berücksichtigung der bei den Elementen Bor und Phosphor beschleunigten Diffusion (OED: *Oxide Enhanced Diffusion*) bzw. der bei Antimon verzögerten Diffusion (ORD: *Oxide Retarded Diffusion*) basierten auf einer ausschließlich phänomenologischen Modellierung des Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Zeit (3.34) oder der Oxidationsrate (3.35).

$$D = D_0 \cdot \left(1 + k_1 \cdot t^{-k_2}\right) \tag{3.34}$$

$$D = D_0 \cdot \left(1 + k_3 \cdot \left(\frac{\mathrm{d}d_{\mathrm{ox}}}{\mathrm{d}t}\right)^{k_4}\right) \tag{3.35}$$

Wohl wurden und werden derartige empirische Modelle in der Prozeßsimulation erfolgreich eingesetzt, um Diffusionsprofile ohne direkte Rückkopplung mit dem Experiment zu berechnen. Doch alleine schon die beachtlichen Schwankungen in der Literatur betreffend die Koeffizienten k_2 und k_4 zeigen, daß diese Modelle eine wenig befriedigende Lösung darstellen. Der eigentliche Zugang zu diesem Problem liegt zweifelsfrei in der atomistischen Betrachtungsweise, derzufolge die sogenannten Punktdefekte (Störungen in der Kristallstruktur), im besonderen die Vakanzen, eine Diffusion von Dopanden erst ursächlich ermöglichen. Solche Punktdefekte können sein: Vakanzen (unbesetzte Gitterplätze), von Dopanden besetzte Zwischengitterplätze (*interstitials*), freie Substrat-Atome (*self-interstitials*), ein im Kristallgefüge eingebauter Dopand (*substitutional impurity*), sowie eine Reihe von Kombinationen, wie beispielsweise Dopand-Vakanz-Paare oder unmittelbar benachbarte Vakanzen.

Der bisherigen makroskopischen Betrachtungsweise der Diffusion liegt die Voraussetzung zugrunde, daß sich die Konzentrationen der Punkdefekte im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Durch eine oxidierende oder nitrierende Umgebung wird jedoch dieses Gleichgewicht gestört: Durch Oxidation werden massiv freie (das heißt interstitielle) Siliziumatome erzeugt, wodurch die Diffusionsgeschwindigkeit jener Atome erhöht wird, welche vorwiegend mittels Zwischengitterplätze diffundieren, wie z.B. Bor, Arsen und Phosphor. Umgekehrt wird die Diffusion von Antimon durch die Oxidation verzögert, weil dieses überwiegend über Vakanzen diffundiert [1,27].

Aufgrund der Erkenntnis, daß die Diffusion der Dopanden vorwiegend über zwei verschiedene Mechanismen erfolgt, liegt es nahe, auch die Konzentrationen der Vakanzen und Zwischengitterplätze in die Prozeßsimulation miteinzubeziehen. Wenn ein Dopand i mit der Wahrscheinlichkeit f_{I_i} interstitiell diffundiert, so diffundiert er mit der komplementären Wahrscheinlichkeit $f_{\mathrm{V}_i} = 1 - f_{\mathrm{I}_i}$ über Vakanzen.

$$D_i = D_i^{\mathrm{Glg}} \cdot \left(f_{\mathrm{I}_i} \cdot \frac{C_{\mathrm{I}}}{C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{Glg}}} + f_{\mathrm{V}_i} \cdot \frac{C_{\mathrm{V}}}{C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{Glg}}} \right) \tag{3.36}$$

In dieser Gleichung bedeutet der hochgestellte Index „Glg" den jeweiligen Gleichgewichtswert bezüglich der Punktdefekte, C_{I} ist die Konzentration der freien Siliziumatome und C_{V} die Dichte der Vakanzen.

Zur Berechnung der Konzentrationen der Punktdefekte stehen zwei Möglichkeiten zur Verfügung: die Verwendung eines statischen Modells, welches auf analytischen Näherungen beruht, und die Lösung zusätzlicher Diffusionsgleichungen. Beide Varianten benötigen jedoch als Voraussetzung die Kenntnis des Oxidwachstums, genauer gesagt, die Geschwindigkeit jedes Punktes an der Si/SiO_2-Grenzschicht sowie deren Form müssen zu jedem Zeitpunkt bekannt sein. Hier soll als Lösungsansatz das rigorosere – wenngleich auch wesentlich ressourcenintensivere – Modell der gekoppelten Diffusion von Punktdefekten und Dopanden besprochen werden, welches die simultane Lösung aller Kontinuitätsgleichungen der Dopanden einerseits und der Diffusionsgleichungen für „Self-interstitials" (3.37) und Vakanzen (3.38) andererseits erfordert.

$$\frac{\partial C_{\mathrm{I}}}{\partial t} = \mathrm{div}\,(D_{\mathrm{I}} \cdot \mathrm{grad}\, C_{\mathrm{I}}) - k_{\mathrm{f}} \cdot \left(C_{\mathrm{I}} \cdot C_{\mathrm{V}} - C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{Glg}} \cdot C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{Glg}} \right) \tag{3.37}$$

$$\frac{\partial C_{\mathrm{V}}}{\partial t} = \mathrm{div}\,(D_{\mathrm{V}} \cdot \mathrm{grad}\, C_{\mathrm{V}}) - k_{\mathrm{f}} \cdot \left(C_{\mathrm{I}} \cdot C_{\mathrm{V}} - C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{Glg}} \cdot C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{Glg}} \right) \tag{3.38}$$

In diesen Gleichungen bedeuten D_{I} und D_{V} die Diffusionskonstanten der Siliziumatome und der Vakanzen, und k_{f} die Rekombinationskonstante im Substratinneren (Frenkel-Paar-Mechanismus).

Als Randbedingungen an der Si/SiO_2-Grenzschicht ist Oberflächenrekombination für beide Punkdefektarten zu berücksichtigen; weiters wird in Gleichung (3.39) angenommen, daß die Generierung von freien Siliziumatomen (auf Zwischengitterplätzen) proportional zur Oxidationsrate ist.

$$\vec{J}_{\mathrm{I}} \cdot \vec{n} = C_{\mathrm{Si}} \cdot \gamma \cdot \left(\vec{v}^{\mathrm{Gr}} \cdot \vec{n} \right) - k_{\mathrm{I}}^{\mathrm{Obf}} \cdot \left(C_{\mathrm{I}} - C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{Glg}} \right) \tag{3.39}$$

$$\vec{J}_{\mathrm{V}} \cdot \vec{n} = -k_{\mathrm{V}}^{\mathrm{Obf}} \cdot \left(C_{\mathrm{V}} - C_{\mathrm{V}]}^{\mathrm{Glg}} \right) \tag{3.40}$$

C_{Si} ($= 5 \cdot 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$) ist die atomare Dichte von Silizium, $k_{\mathrm{I}}^{\mathrm{Obf}}$ und $k_{\mathrm{V}}^{\mathrm{Obf}}$ sind die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten der Punktdefekte, und γ bestimmt den Anteil jener Siliziumatome, welche in das Substrat injiziert werden.

Die Tab. 1 faßt die relevanten Parameter für die gekoppelte Diffusion von Punktdefekten und Dopanden zusammen, wobei sich die modellierten physikalischen Größen mittels des Arrhenius-Gesetzes $a = a_0 \cdot \exp[-E_0/(k \cdot T)]$ ergeben. Die Werte für freie Siliziumatome (*Interstitials*) sind von Bronner und Plummer [4], jene für Vakanzen von Tan und Gösele [66] entnommen.

Tabelle 1 Parameter für die gekoppelte Diffusion von Punktdefekten und Dopanden in Silizium

a	a_0	E_0
C_I^{Glg}	$5.0 \cdot 10^{22}$ cm^{-3}	2.36 eV
C_V^{Glg}	$2.0 \cdot 10^{23}$ cm^{-3}	2.00 eV
D_I	0.1 cm^2/s	2.00 eV
D_V	600.0 cm^2/s	2.44 eV
k_I^{Obf}	$1.76 \cdot 10^{-4}$ cm/s	0.06 eV
k_V^{Obf}	$7.0 \cdot 10^{8}$ cm/s	4.08 eV
k_f	$3.16 \cdot 10^{-6}$ cm/s	2.44 eV
γ	$2.2 \cdot 10^{-7}$	−0.902 eV

3.5 Postimplantative Diffusion

Schon sehr bald nach der Anwendung der Ionenimplantation zur Erzeugung seichter pn-Übergänge wurde die Anomalie einer verstärkten Diffusion von Bor in Silizium im Zuge des Ausheilungsvorganges beobachtet [25]. Doch erst im Zuge der Verwendung der raschen thermischen Ausheilung (RTA: *Rapid Thermal Annealing*) zu Beginn der Achzigerjahre konnten detailliertere Untersuchungen mit entsprechender zeitlicher Auflösung durchgeführt werden, welche allesamt die transient verstärkte Diffusion von Bor und Phosphor nach der Ionenimplantation bestätigten [42]. Zwar wurde auch berichtet, daß dieser Effekt auch bei Arsen vorkomme [40], was aber von anderer Seite nicht dem Phänomen der verstärkten Diffusion nach der Ionenimplantation selbst sondern einer ungenügend genauen Kontrolle der Temperatur während des RTA-Prozeßschrittes zugeschrieben wurde [53]. Unabhängig von dieser kontroversen Interpretation der beobachteten verstärkten Arsendiffusion ist festzuhalten, daß bei der raschen thermischen Ausheilung der Einfluß des Temperaturprofiles auf die Dopandendiffusion essentiell ist [10].

Bei der Simulation der transient verstärkten Diffusion haben die Paar-Diffusions-Modelle weite Verbreitung gefunden [18,44]. Die grundlegende Idee der paarweisen Diffusion liegt darin, daß ein in das Kristallgefüge eingebautes Dotieratom nicht alleine sondern nur durch Paarbildung mit einem Punktdefekt diffundiert. Dabei werden substitutionelle Dopanden D, Punktdefekte P (Interstitials I und Vakanzen V) sowie Paare von Dopanden und Punktdefekten (DI, DV) separat betrachtet, sodaß insgesamt drei Spezies von jedem Dopandentyp und zwei Arten von Punktdefekten zu berücksichtigen sind. Gleichung (3.41) zeigt die dabei möglichen Reaktionen, wobei der hochgestellte Index den Ladungszustand des jeweiligen Teilchens angibt: beispielsweise setzt sich ein

Punktdefekt mit dem Ladungszustand $j+1$ aus einem Punktdefekt mit dem Ladungszustand j und einem Loch l^+ zusammen.

$$\begin{aligned} \mathrm{DP} &\rightleftharpoons \mathrm{D}+\mathrm{P} \\ \mathrm{P}^{j-1} &\rightleftharpoons \mathrm{P}^{j}+\mathrm{e}^- \\ \mathrm{P}^{j+1} &\rightleftharpoons \mathrm{P}^{j}+\mathrm{l}^+ \\ \mathrm{DP}^{j-1} &\rightleftharpoons \mathrm{DP}^{j}+\mathrm{e}^- \\ \mathrm{DP}^{j+1} &\rightleftharpoons \mathrm{DP}^{j}+\mathrm{l}^+ \end{aligned} \tag{3.41}$$

Gleichung (3.42) gibt die Gesamtkonzentrationen für Punktdefekte C_P und Dopand-Punktdefekt-Paare C_DP an; Gleichung (3.43) stellt die Dichten der Teilchen mit unterschiedlichen Ladungszuständen dar, wobei diese auf die Konzentrationen der neutralen Teilchen C_P^0 und C_DP^0 bezogen werden.

$$C_\mathrm{P} = \sum_j C_\mathrm{P}^j\,, \quad C_\mathrm{DP} = \sum_j C_\mathrm{DP}^j \tag{3.42}$$

$$C_\mathrm{P}^j = k_\mathrm{P}^j \cdot C_\mathrm{P}^0 \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-j}\,, \quad C_\mathrm{DP}^j = k_\mathrm{DP}^j \cdot C_\mathrm{DP}^0 \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-j} \tag{3.43}$$

Die Stromgleichungen für die Paar-Diffusion (3.44) und (3.45) beinhalten noch die verschiedenen Ladungszustände der Punktdefekte und Punktdefekt-Dopand-Paare; c_D kennzeichnet den Ladungszustand substitutioneller Dopanden. Die Dopandenstromdichte selbst verschwindet aufgrund des Paar-Diffusions-Modells ($\vec{J}_\mathrm{D} = 0$).

$$\vec{J}_\mathrm{DP}^j = -D_\mathrm{DP}^j \cdot \left(\operatorname{grad} C_\mathrm{DP}^j + (j + c_\mathrm{D}) \cdot \frac{C_\mathrm{DP}^j}{U_T} \cdot \operatorname{grad}\psi\right) \tag{3.44}$$

$$\vec{J}_\mathrm{P}^j = -D_\mathrm{P}^j \cdot \left(\operatorname{grad} C_\mathrm{P}^j + j \cdot \frac{C_\mathrm{P}^j}{U_T} \cdot \operatorname{grad}\psi\right) \tag{3.45}$$

Durch Einsetzen der Beziehungen (3.42) und (3.43) ergibt sich schließlich die Stromgleichung (3.46) für beide betrachteten Größen (x steht für DP bzw. P) unter Verwendung mittlerer Diffusionskoeffizienten (3.47) und mittlerer elektrischen Ladungen (3.48).

$$\vec{J}_x = -D_x \cdot \left(\operatorname{grad} C_x + Q_x \cdot \frac{C_x}{U_T} \cdot \operatorname{grad}\psi\right) \tag{3.46}$$

$$D_x = \frac{1}{K_x} \cdot \sum_j D_x^j \cdot k_x^j \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-j}\,, \quad K_x = \sum_j k_x^j \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-j} \tag{3.47}$$

$$Q_\mathrm{DP} = \frac{\sum_j (c_D + j) \cdot k_\mathrm{DP}^j \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-j}}{K_\mathrm{DP}}\,, \quad Q_\mathrm{P} = \frac{\sum_j j \cdot k_\mathrm{P}^j \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-j}}{K_\mathrm{P}} \tag{3.48}$$

Die Näherung der lokalen Ladungsneutralität (3.49) bestimmt in Verbindung mit den Beziehungen für die Ladungsträgerdichten zufolge der Boltzmannstatistik ($n = n_i \cdot \exp(\psi)$, $p = n_i \cdot \exp(-\psi)$) in der Gleichung für das elektrostatische Feld (3.50) die rechte Seite. Durch diese Annahme werden allerdings jene, durch Punktdefekte und Punktdefekt-Dopanden-Paare verursachten, Ladungen vernachlässigt; dies ist nur dann gerechtfertigt, wenn die Dopanden vorzugsweise substitutionell in das Kristallgefüge eingebaut sind, was allerdings eine Prämisse für das beschriebene Paar-Diffusions-Modell darstellt.

$$\sum_i \left(c_{\mathrm{D}_i} \cdot C_{\mathrm{D}_i} + \sum_j (c_{\mathrm{D}_i} + j) \cdot \left(C_{\mathrm{DI}}^j + C_{\mathrm{DV}}^j \right) \right) + \\ + \sum_j j \cdot \left(C_{\mathrm{I}}^j + C_{\mathrm{V}}^j \right) - n + p = 0 \tag{3.49}$$

$$\operatorname{grad} \psi = \frac{U_T}{\sqrt{(2 \cdot n_i)^2 + C_{\mathrm{net}}^2}} \cdot \sum_i c_{\mathrm{D}_i} \cdot \operatorname{grad} C_{\mathrm{D}_i} \,, \quad C_{\mathrm{net}} = \sum_i c_{\mathrm{D}_i} \cdot C_{\mathrm{D}_i} \tag{3.50}$$

In der Kontinuitätsgleichung für Punktdefekt-Dopanden-Paare (3.51) sowie in jener für die Dopanden selbst (3.52) wird der Reaktion $\mathrm{D} + \mathrm{P} \rightleftharpoons \mathrm{DP}$ durch den Generations-/Rekombinationsterm G_{DP} Rechnung getragen. In der Kontinuitätsgleichung für Punktdefekte (3.53) ist zusätzlich noch der Frenkel-Paar-Mechanismus $\mathrm{I} + \mathrm{V} \rightleftharpoons 0$ zu berücksichtigen.

$$\frac{\partial C_{\mathrm{DP}}}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{J}_{\mathrm{DP}} + G_{\mathrm{DP}} \tag{3.51}$$

$$\frac{\partial C_{\mathrm{D}}}{\partial t} = -\sum_i G_{\mathrm{DP}_i} \tag{3.52}$$

$$\frac{\partial C_{\mathrm{P}}}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{J}_{\mathrm{P}} - \sum_i G_{\mathrm{D}_i\mathrm{P}} + G_{\mathrm{F}} \tag{3.53}$$

Das Modell für den Generationsterm G_{DP} (3.54) ergibt sich aufgrund des Massenwirkungsgesetzes, wobei die Raten k_{gen} und k_{rek} die Bedingung erfüllen müssen, daß die Kinetik zwischen den Gleichgewichtskonzentrationen C_{DP}^0, C_{P}^0 und C_{D}^0 korrekt wiedergegeben wird. K_{P} bzw. K_{DP} wurde bereits in Gleichung (3.47) als K_x definiert. Die Frenkel-Paar-Konstante k_{f} in Gleichung (3.55) ist jene Reaktionsrate, mit der die Interstitial-Konzentration C_{I} und die Vakanzdichte C_{V} ihre Gleichgewichtswerte $C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{Glg}}$ und $C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{Glg}}$ erreichen.

$$G_{\mathrm{DP}} = \frac{k_{\mathrm{gen}}}{K_{\mathrm{P}}} \cdot C_{\mathrm{D}} \cdot C_{\mathrm{P}} - \frac{k_{\mathrm{rek}}}{K_{\mathrm{DP}}} \cdot C_{\mathrm{DP}} \tag{3.54}$$

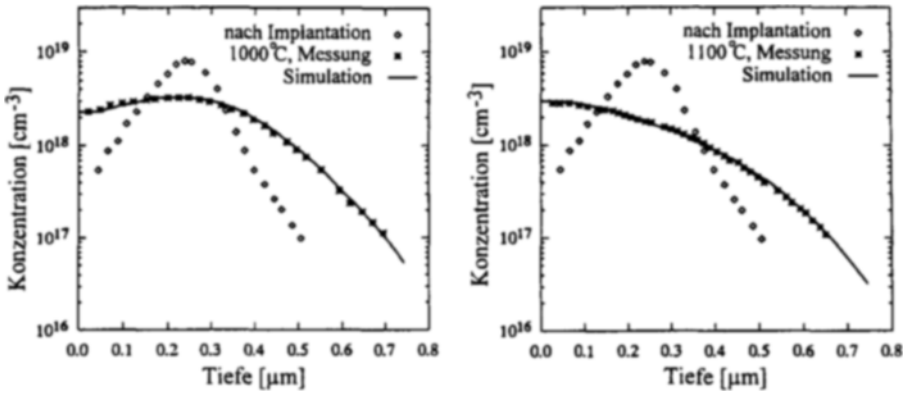

Abbildung 7 Simulierte und gemessene Bor-Profile in Silizium nach einer Ausheilzeit von 35 min bei 1000 °C (links) und bei 1100 °C (rechts)

$$G_F = -k_f \cdot \left(C_I \cdot C_V - C_I^{Glg} \cdot C_V^{Glg}\right) \tag{3.55}$$

Abb. 7 zeigt einen Vergleich zwischen dem Experiment und der Simulation aufgrund des beschriebenen Paar-Diffusions-Modells für zwei RTA-Prozeßschritte. Das in der Abbildung ebenfalls dargestellte Ausgangsprofil wurde durch Ionenimplantation mit einer Dosis von 10^{14} cm^{-2} und einer Energie von 70 keV erzeugt. Die RTA-Prozeßschritte sind durch eine Ausheilzeit von 35 Minuten und einer Temperatur von 1000 °C (linker Teil der Abbildung) bzw. von 1100 °C (rechte Darstellung) gekennzeichnet. Die exzellente Übereinstimmung von Messung – die Daten stammen von [57] – und Simulation soll jedoch nicht vortäuschen, daß alle bei der Diffusion auftretenden Phänomene bereits wissenschaftlich fundiert geklärt sind.

4 Oxidation

Der durchschlagende Erfolg der auf Silizium basierenden Halbleiterbauelemente ist nicht zuletzt auf die hervorragenden Eigenschaften von Siliziumdioxid zurückzuführen, wobei vor allem die Stabilität sowie die isolatorischen und dielektrischen Eigenschaften zu nennen sind. Die schon frühzeitig begonnenen Untersuchungen über die Oxidation planarer Siliziumscheiben (*Wafer*) gipfelten bereits im Jahre 1965 in dem eindimensionalen Modell für das Oxidwachstum von Deal und Grove [5], welches noch heute für fast alle Prozeßsimulatoren die Basis zur Behandlung von Oxidationsvorgängen darstellt.

Dem Modell von Deal und Grove liegt die Hypothese zugrunde, daß die oxidierenden Moleküle – Sauerstoff oder Wasser, je nachdem, ob es sich um trockene oder nasse Oxidation handelt – durch die bereits bestehende Oxidschicht bis zur Si/SiO_2-Grenzschicht transportiert werden, um dort mit Siliziumatomen zu reagieren. Diese Überlegungen führen letztlich zu folgendem linear-parabolischen Wachstumsgesetz:

$$d_{ox} = \frac{A}{2} \cdot \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4 \cdot B}{A^2} \cdot (t + t_0)} \right) \tag{4.56}$$

$$A = 2 \cdot D_{ox} \cdot \left(\frac{1}{k_r} + \frac{1}{h} \right) , \quad B = 2 \cdot D_{ox} \cdot \frac{C_{ox}^{Glg}}{N} , \quad t_0 = \frac{d_{ox0}^2 + A \cdot d_{ox0}}{B}$$

Dabei bedeuten D_{ox} die Diffusionskonstante der oxidierenden Moleküle in SiO_2 und C_{ox}^{Glg} deren Gleichgewichtsdichte an der Oxidoberfläche, k_r ist der Reaktionskoeffizient an der Si/SiO_2-Grenzschicht, h bedeutet den Massentransportfaktor, N ist die Dichte der oxidierenden Moleküle im wachsenden Oxid ($= 2.2 \cdot 10^{22}$ O_2-Moleküle/cm^3 bzw. $4.4 \cdot 10^{22}$ H_2O-Moleküle/cm^3) und d_{ox0} ist die Oxiddicke zum Zeitpunkt $t = 0$.

Für sehr große Oxidationszeiten, das heißt für $t \gg t_0$ und $t \gg A^2/(4 \cdot B)$ entartet Gleichung (4.56) zum parabolischen Oxidwachstum: $d_{ox} \approx \sqrt{B \cdot t}$. Im anderen Extremfall kurzer Oxidationszeiten und damit sehr dünner Oxidschichten ($t + t_0 \ll A^2/(4 \cdot B)$ und $d_{ox} \ll A$) ergibt sich nach Durchführung einer Taylorreihenentwicklung von Gleichung (4.56) unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung die lineare Beziehung $d_{ox} \approx d_{ox0} + (B/A) \cdot t$.

Während das Modell von Deal und Grove für den nassen Oxidationsvorgang erfolgreich anwendbar ist, gibt es das Wachstum sehr dünner Schichten ($\approx$ 20 nm) mittels trockener Oxidation nicht richtig wieder. Schon die Autoren selbst haben seinerzeit erkannt [5], daß zu Beginn der trockenen Oxidation ein verhältnismäßig rasches Wachstum zu beobachten ist. Als einfachste Korrektur kann zur Anwendbarkeit dieses Modells für geringe Schichtdicken angenommen werden, daß sich bereits auf der gereinigten, noch nicht dem Oxidationsprozeß unterworfenen Siliziumscheibe eine Oxidschicht von etwa 10 nm befindet. Im Zuge der rasanten technologischen Entwicklung werden inzwischen sehr dünne Oxidschichten verwendet, welche die Funktionsweise des Bauelementes nachhaltig beeinflussen, wie beispielsweise das Gate-Oxid im MOS-Transistor, weshalb es eine Vielzahl von Untersuchungen und Modellbildungen für das anfänglich rasche Oxidwachstum gibt (z.B. [28,36,50,75]), welches unter anderem nicht nur von der Kristallorientierung sondern auch von der Art der Vorbehandlung der Siliziumscheibe abhängig ist.

Mit der Einführung nichtplanarer Strukturen hat das eindimensionale Modell von Deal und Grove seine unmittelbare Anwendbarkeit verloren. Das in diesem Zusammenhang wohl bedeutendste Beispiel ist die Ausbildung des sogenannten Vogelschnabels (*bird's beak*) bei der Erzeugung des isolierenden Feldoxids bei MOS-Strukturen mittels des LOCOS-Prozesses (*LOCal Oxidation of Silicon*). Die dabei infolge des großen Unterschiedes in den Dicken von Gate- und Feldoxid entstehende zweidimensionale Struktur wurde in den meisten Prozeßsimulatoren auf analytischem Wege mittels der Fehlerfunktion erfaßt [33,46].

Für neuere Technologien mit nichtplanaren Strukturen oder Polysiliziumschichten sind analytische Modelle nicht mehr zielführend anwendbar. Das Oxidationsmodell von Deal und Grove dient jedoch auch für die zwei- bzw. dreidimensionale Simulation als Grundlage, indem die Diffusionsgleichung der oxidierenden Moleküle (4.57) mit den entsprechenden Randbedingungen (4.58) gelöst wird.

$$\operatorname{div}(D_{\mathrm{ox}} \cdot \operatorname{grad} C_{\mathrm{ox}}) = 0 \tag{4.57}$$

$$\vec{J}_{\mathrm{ox}} \cdot \vec{n} = \begin{cases} k_{\mathrm{r}} \cdot C_{\mathrm{ox}} & \text{an der Si/SiO}_2\text{-Grenzschicht} \\ h \cdot (C_{\mathrm{ox}} - C_{\mathrm{ox}}^{\mathrm{Glg}}) & \text{an der SiO}_2\text{-Oberfläche} \end{cases} \tag{4.58}$$

Während der Oxidation treten mechanische Spannungen und damit auch Verzerrungen im Oxid auf, welche bei einem inhomogenen Wachstum berücksichtigt werden müssen. Die mechanische Beschreibung eines elastischen Körpers basiert einerseits auf den Bewegungsgleichungen (4.59) sowie auf den Beziehungen zwischen mechanischer Verzerrung ε und mechanischer Verschiebung u, welche in Gleichung (4.60) in linearisierter Form angegeben ist. Die Anwendbarkeit der Linearisierung ist durch die in der Praxis durchaus erfüllte Bedingung gegeben, daß nur kleine Verformungen im Vergleich zur Volumseinheit auftreten.

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + K_j = \rho \cdot \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}\,, \quad \text{für } j = 1{,}2{,}3 \tag{4.59}$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)\,, \quad \text{für } i = 1{,}2{,}3;\ j = 1{,}2{,}3 \tag{4.60}$$

Die Schreibweise der beiden Gleichungen beinhaltet die Tensornotation, derzufolge sich die Indizes auf die Ortskoordinaten beziehen ($x_1 \widehat{=} x$, $x_2 \widehat{=} y$, $x_3 \widehat{=} z$, $\sigma_{23} \widehat{=} \sigma_{yz}$). σ bedeutet den mechanischen Spannungstensor zweiter Stufe, ρ die Massendichte und K eine äußere, auf das jeweilige Volumselement angreifende Kraft (beispielsweise die Gravitation), welche für die Simulation ebenso wie die Beschleunigung der Volumselemente vernachlässigbar ist. Bei der Reduktion dieser dreidimensionalen mechanischen Beschreibung auf zwei Ortsdimensionen ist zu beachten, daß dadurch zwar die Verzerrungen in der dritten Dimension verschwinden, nicht jedoch im allgemeinen auch die mechanischen Spannungen.

Bei Prozeßtemperaturen über 950 °C wird das Oxid im allgemeinen als viskos angenommen [31]; der langsame Oxidfluß wird – unter der Voraussetzung, daß das Oxid inkompressibel ist ($\operatorname{div} \vec{v} = 0$) – durch Gleichung (4.61) beschrieben, in der μ die Viskosität und $\vec{v}$ die Geschwindigkeit des Oxids sowie P der hydrostatische Druck sind. In heutigen Prozeßsimulatoren häufig eingesetzte Modelle für die physikalischen Parameter k_{r}, D_{ox} und μ unter Berücksichtigung mechanischer Deformationen sind den Beziehungen (4.62) angegeben [48, 64].

$$\operatorname{div}(\mu \cdot \operatorname{grad} \vec{v}) - \operatorname{grad} P = 0 \tag{4.61}$$

$$k_r = k_r^0 \cdot \exp\left(\frac{-\sigma_n \cdot V_k}{k \cdot T}\right) , \quad D_{ox} = D_{ox}^0 \cdot \exp\left(\frac{-P \cdot V_D}{k \cdot T}\right)$$

$$\mu = \mu^0 \cdot \exp(\alpha_P \cdot P) , \quad \text{für } P \leq 0 \tag{4.62}$$

$$\mu = \mu^0 \cdot \frac{\tau/\sigma_c}{\sinh(\tau/\sigma_c)} \quad \text{mit } \sigma_c = \frac{2 \cdot k \cdot T}{V_c}, \text{ für } P > 0$$

Dabei bedeuten σ_n die mechanische Spannung normal zur Oberfläche, τ die Scherspannung und σ_c eine kritische Spannung: für $\tau > \sigma_c$ verschwindet die Viskosität und das Oxid befindet sich im Bereich der plastischen Verformung, während für Scherspannungen unterhalb der kritischen Spannung viskoelastisches Verhalten festzustellen ist. Die Koeffizienten V_k, V_D, V_c und α_P in den Relationen (4.62) stellen geeignete Anpassungsparameter dar.

5 Topographiesimulation

Obwohl die Simulation der Veränderungen der geometrischen Struktur während bestimmter Prozeßschritte erst relativ spät – im Vergleich beispielsweise zur Ionenimplantation und Diffusion – Einzug in Prozeßsimulatoren gefunden hat, liegen die ersten Ansätze bereits fast zwei Jahrzehnte zurück [43]. Die Ursache für die späte Berücksichtigung liegt vor allem darin, daß erst bei der durch die Hochintegration gegebene Miniaturisierung eine idealisierte Darstellung der Strukturen sich als eine mehr und mehr unzureichende Voraussetzung herausstellte. Nachdem sich in der ersten Phase die meisten Untersuchungen in ihrer Anwendung nur mit der Lithographie beschäftigt haben (z.B. [20,21,29,52]), existieren mittlerweile auch viele Publikationen über Methoden für die Simulation von Ätz- und Depositionsprozessen (z.B. [45,63,68,69]). Heutzutage gibt es bereits eine Reihe etablierter Programme zur Topographiesimulation, wobei in den letzten Jahren der Schwerpunkt auf der Entwicklung von Werkzeugen zur dreidimensionalen Simulation lag [13,34,51]. Im folgenden werden die wichtigsten Methoden zur Topographiesimulation besprochen.

5.1 String-Algorithmus

Der von Jewett et al. [30] bereits im Jahre 1977 vorgeschlagene sogenannte String-Algorithmus hat ohne Zweifel die größte Verbreitung in der Topographiesimulation erfahren. Bei diesem Verfahren wird der Rand des Simulationsgebietes mittels Aneinanderreihung von Punkten (*string*) approximiert, indem sich jeder Punkt entlang einer vorausberechneten Richtung bewegt. Wie in Abb. 8 zu sehen ist, stellt der sich durch Verbindung der neuen Punkte ergebende Polygonzug die Randkurve der Geometrie zum neuen Zeitschritt dar.

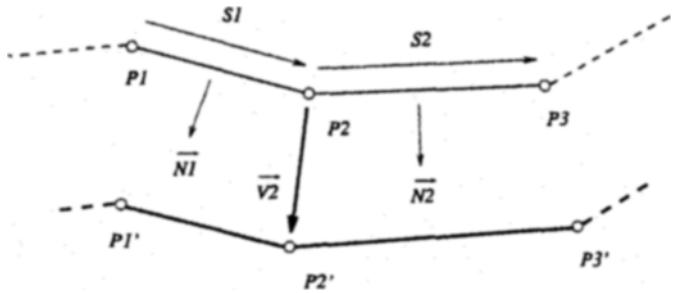

Abbildung 8 Schematische Darstellung des String-Algorithmus

Die Richtung des Bewegungsvektors eines Punktes ($\vec{V}_2$) ergibt sich aus dem arithmetischen Mittel der Normalvektoren der angrenzenden Liniensegmente ($\vec{N}_1$ und $\vec{N}_2$), und der Betrag errechnet sich aus dem Produkt von Zeitschritt und Ätzrate. Das Vorzeichen der Ätzrate bestimmt die Richtung der Punktbewegung und unterscheidet damit zwischen Ätzen und Deposition.

So einfach der String-Algorithmus vom Prinzip her zu sein scheint, ergeben sich bei dessen Anwendung doch eine Reihe von Problemen. Zunächst ist zu bemerken, daß die alleinige Information über die Punktkoordinaten unzureichend ist, da eine geordnete Folge von Punktkoordinaten oder eine Zusatzinformation über die Richtung der Liniensegmente vorhanden sein muß, um die Richtung der Punktbewegung korrekt bestimmen zu können: Infolge der Bewegung der Randkurve rücken Punkte entweder derart eng zusammen, daß Punkte in geeigneter Weise entfernt werden müssen, oder die Randpunkte entfernen sich zu weit voneinander, sodaß ein Einfügealgorithmus angewendet werden muß. Weiters ist besonderes Augenmerk auf Bereiche der Berandung zu legen, wo diese durch eine starke Krümmung gekennzeichnet ist. Ohne zusätzliche Maßnahmen, wie beispielsweise die Entfernung von Punkten bei konkaven Ecken sowie die Punkt-Korrektur (Änderung der lokalen Ätzrate) bei konvexen Ecken, würden bei strikter Anwendung des String-Algorithmus intolerable Fehler entstehen.

Ein schwerwiegendes Problem tritt an konvexen Ecken des Simulationsgebietes dann auf, wenn sich die Punkte des Randes während eines Zeitschrittes zu weit bewegen. Dies hat nämlich das unrealistische Verhalten zur Folge, daß Liniensegmente einander überschneiden und sogenannte Oberflächen-Schleifen (*Loops*) gebildet werden. Die Abb. 9 illustriert im linken Teil das Entstehen einer derartigen Schleife schematisch; im rechten Teil ist das Ergebnis der Simulation einer Photolackentwicklung mit SAMPLE [51] bei einer Entwicklungszeit von 15 Minuten ohne Entfernung der Oberflächen-Schleifen zu sehen. Da eine Vermeidung der Bildung solcher Schleifen aus Gründen der Effizienz nicht möglich ist – dies würde sowohl eine extrem feine örtliche Auflösung als auch kürzeste Zeitschrittweiten bedingen –, werden als Korrekturmaßnahme während der Simulation die entstandenen Schleifen eliminiert. Diese Auflösung von Schleifen muß allerdings möglichst frühzeitig erfolgen, weil sonst im allgemeinen überaus komplizierte Gebilde entstehen, deren Korrektur zunehmend aufwendiger wird.

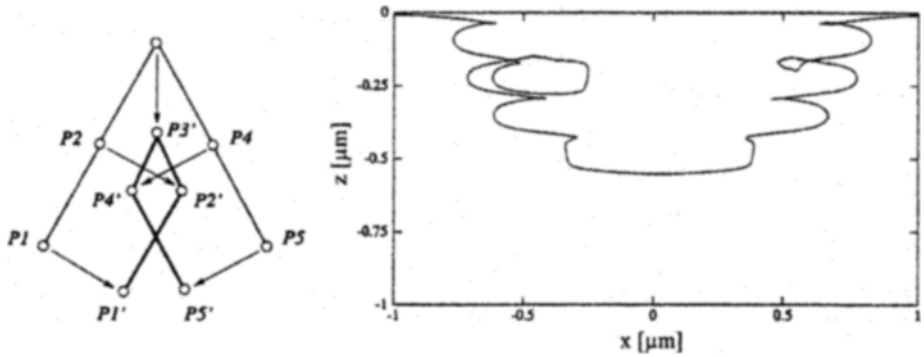

Abbildung 9 Bildung von Oberflächen-Schleifen: schematische Darstellung (links) und Simulationsergebnis (rechts)

Bei der Betrachtung von drei Ortsdimensionen stellt sich der bislang eindimensionale „String" als zweidimensionales Oberflächengitter dar, wobei Dreiecksgitter als Oberflächensegmente verwendet werden. Wie schon beim zweidimensionalen Fall ergibt sich auch hier die Forderung nach einem geordneten Oberflächengitter zwecks eindeutiger Bestimmung der Richtung der Punktbewegung. Allerdings besteht nun ein geordnetes Gitter aus Dreiecken, deren Punkte in aufsteigender Reihenfolge angeordnet sind, sodaß sich die Orientierung der Oberflächensegmente und damit die Richtung des Normalvektors eines Dreiecks bestimmen läßt.

Während die selbstverständlich auch im dreidimensionalen Fall auftretenden Probleme mit zusammenrückenden bzw. auseinanderlaufenden Punkten in ähnlicher Weise lösbar sind wie in zwei Ortsdimensionen, stellt die Auflösung von Oberflächenschleifen unvergleichlich höhere Anforderungen nicht nur an die Methodik sondern vor allem auch an die erforderlichen Rechnerressourcen. In der dreidimensionalen Simulation muß jedes Dreieck des Oberflächengitters dahingehend untersucht werden, ob es eines der übrigen Dreiecke schneidet. Die einander schneidenden Dreiecke müssen entsprechend ihrer Schnittlinie modifiziert werden, und anhand der angrenzenden Dreiecke ist dann der Oberflächen-Schleifen zu lokalisieren, wonach zugehörige Punkte, Linien und Dreiecke aus dem Gitter zu entfernen sind [19].

5.2 Ray-Trace-Algorithmus

Beim Ray-Trace-Algorithmus, welcher von Hagouel [17] im Jahre 1976 vorgestellt worden ist, werden die Punkte der Simulationsgeometrie entlang der Trajektorien von Strahlen bewegt, welche durch ein inhomogenes Geschwindigkeitsfeld wandern. Bei der gegebenen Problemstellung entspricht die Ausbreitungsgeschwindigkeit der zugehörigen Wellen der Ätz- bzw. Depositionsrate. Die Bewegung der Trajektorie ist durch

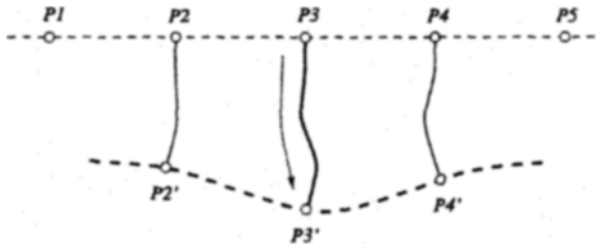

Abbildung 10 Schematische Darstellung des Ray-Trace-Algorithmus

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\frac{1}{v(\vec{r})}\cdot\vec{s}\right) = \mathrm{grad}\left(\frac{1}{v(\vec{r})}\right) \tag{5.63}$$

gegeben, wobei $\vec{r}$ den Ortsvektor ($= x\cdot\vec{e}_x + y\cdot\vec{e}_y + z\cdot\vec{e}_z$), $\vec{s}$ den Einheitsvektor entlang der Trajektorie und $v(\vec{r})$ das skalare Ätzratenfeld bedeuten. Nach Verwendung der Umformung $\mathrm{grad}\left(\frac{1}{v(\vec{r})}\right) = \frac{1}{v(\vec{r})^2}\cdot\mathrm{grad}\,v(\vec{r})$ und Diskretisierung nach dem Wegelement s ergibt sich:

$$\frac{1}{\Delta s}\cdot\left(\frac{\vec{s}_2}{v_2(\vec{r})} - \frac{s_1(\vec{r})}{v_1(\vec{r})}\right) = -\frac{1}{v_\mathrm{m}(\vec{r})^2}\cdot\mathrm{grad}\,v(\vec{r}) \tag{5.64}$$

Δs ist dabei der Weg, den ein Punkt der Trajektorie zwischen den Punkten P_1 und P_2 mit einer mittleren Geschwindigkeit $v_\mathrm{m}(\vec{r})$ zurücklegt. Unter der Annahme, daß die Änderung der Ätzrate zwischen den beiden Punkten klein ist, gilt Gleichung (5.65), welche schließlich zusammen mit der Beziehung $\Delta s = v_\mathrm{m}(\vec{r})\cdot\Delta t$ zur endgültigen Formulierung (5.66) führt, welche die Richtungsänderung der Trajektorie vom Punkt P_1 zum Punkt P_2 in Abhängigkeit vom Gradienten der Ätzrate beschreibt.

$$\frac{1}{v_\mathrm{m}(\vec{r})} = \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{v_1(\vec{r})} + \frac{1}{v_2(\vec{r})}\right) \tag{5.65}$$

$$\vec{s}_2 - \vec{s}_1 = -\frac{v_1(\vec{r}) + v_2(\vec{r})}{2\cdot v_1(\vec{r})}\cdot\mathrm{grad}\,v(\vec{r})\cdot\Delta t + \vec{s}_1\cdot\left(\frac{v_2(\vec{r})}{v_1(\vec{r})} - 1\right) \tag{5.66}$$

Wie Abb. 10 veranschaulichen soll, sind die einzelnen Trajektorien voneinander unabhängig, weshalb dieser Algorithmus keine vollständige Lösung des Topographieproblemes beschreibt: Am Ende der Simulation liegt nur eine Punktverteilung als Resultat vor, aus der erst die tatsächliche Simulationsgeometrie rekonstruiert werden muß, was dann nur unzureichend erfolgen kann, wenn das Auseinanderdriften von Trajektorien zu unverhältnismäßig großen Gebieten ohne Informationen über die Lage von Punkten führt. Durch Überschneidung von Trajektorien kommt es bei der Rekonstruktion der Geometrie auch bei diesem Verfahren zu Oberflächen-Schleifen. Diese verhalten sich jedoch wesentlich harmloser als jene beim String-Algorithmus, da die Punktbewegung ausschließlich von der gegebenen Ätzratenverteilung und nicht von der möglicherweise

schon inkorrekten Geometrie abhängt. Aus diesem Grund wachsen Oberflächenschleifen nicht in alle Richtungen, sodaß deren rechtzeitige Entfernung keine Bedingung für das Erzielen eines zweckdienlichen Simulationsergebnisses ist.

Der wohl gravierendste Nachteil des Ray-Trace-Algorithmus ist in der Topographiesimulation wohl dadurch gegeben, daß damit nur isotrope Ätzvorgänge (chemisches Naßätzen) behandelt werden können, da die Ätzrate $v(\vec{r})$ in Gleichung (5.63) durch ein skalares, also richtungsunabhängiges Feld festgelegt ist. Umgekehrt ist eine Erweiterung auf die Erfassung der dritten Ortsdimension im Gegensatz zum String-Algorithmus völlig unproblematisch, da keine aufwendige Überprüfung und Beseitigung von Oberflächenschleifen während der Simulation erforderlich ist.

Eine interessante Erweiterung stellt der sogenannte Ray-String-Algorithmus dar [38], welcher die Vorteile von Ray-Trace- und String-Algorithmus verbindet. Dabei wird die Geometrie durch eine Aneinanderreihung von Punkten, die durch Liniensegmente verbunden werden, wie beim String-Algorithmus approximiert, doch die Bewegungsvektoren werden nicht in Abhängigkeit von der Orientierung angrenzender Liniensegmente, sondern wie beim Ray-Trace-Algorithmus in Abhängigkeit von einer gegebenen Ätzratenverteilung berechnet. Durch diese Kombination ergibt sich einerseits das wesentlich gutmütigere Verhalten des Ray-Trace-Algorithmus bezüglich der Oberflächen-Schleifen, und andererseits liegt zu jedem Zeitschritt eine vollständige Beschreibung der Geometrie vor, wodurch nicht nur dessen Rekonstruktion entfällt sondern wie beim String-Algorithmus Punkte bei Bedarf eingefügt und entfernt werden können.

5.3 Cell-Removal-Algorithmus

Bei dem im Jahre 1975 von Dill et al. [6] präsentierte Cell-Removal-Algorithmus wird das gesamte Simulationsgebiet in rechteckige oder quadratische Zellen unterteilt, wobei jede dieser Zellen entweder als vollständig geätzt, nicht geätzt oder teilweise geätzt charakterisiert ist. Die Oberfläche des Simulationsgebietes besteht aus nicht geätzten oder teilweise geätzten Zellen, deren Nachbarzellen vollständig geätzt sind. Im Zuge der Simulation werden nun einzelne Zellen in Abhängigkeit von der lokalen Ätzrate sowie von der Anzahl der freiliegenden Zellseiten entfernt (*Cell-Removal*), wobei der Zeitschritt jeweils genau so groß zu wählen ist, daß die am schnellsten geätzte Zelle gerade zur Gänze entfernt wird.

Der ursprünglich nur für isotrope Ätzverfahren vorgeschlagene Algorithmus läßt sich prinzipiell auch auf anisotropes Ätzen erweitern, indem man bei der Berechnung der erforderlichen kürzesten Ätzzeit zur Entfernung einer Zelle die Anisotropie durch eine entsprechende Gewichtung der freiliegenden Zellseiten berücksichtigt.

Bei der Anwendung des Cell-Removal-Algorithmus auf ein Gebiet mit konstanter isotroper Ätzrate tritt ein essentielles Problem auf: Wie die in Abb. 11 dargestellten Ätzfronten deutlich zeigen, weist das Verfahren bestimmte Vorzugsrichtungen auf, indem entlang der Koordinatenachsen sowie in Richtung der Zelldiagonalen rascher geätzt wird als in den übrigen Ausbreitungsrichtungen. Die Ursache für dieses Verhalten liegt nicht etwa in einer zu groben zeitlichen oder örtlichen Diskretisierung, sondern darin,

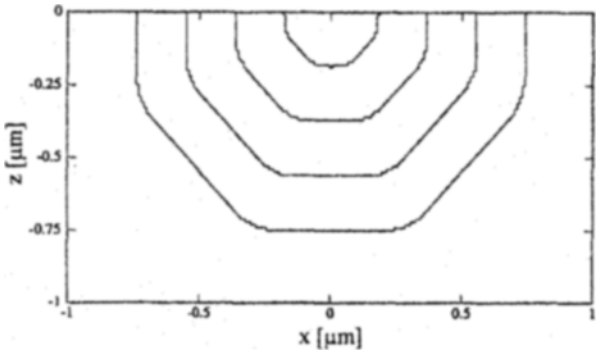

Abbildung 11 Mittels Cell-Removal-Algorithmus simulierte Ätzfronten bei konstanter Ätzrate

daß bei der Untersuchung einer Zelle nur dessen vier unmittelbare Nachbarzellen – das sind jene, die mit der betrachteten Zelle gemeinsame Kanten aufweisen – Berücksichtigung finden, wodurch sich die Ätzfront von Zeitschritt zu Zeitschritt nur in wenige auserlesene Richtungen fortbewegen kann. Eine Verbesserung dieses unerwünschten Verhaltens wäre durch Berücksichtigung von mehr Nachbarzellen zu erreichen, da dies eine Erhöhung der Anzahl der Vorzugsrichtungen mit sich brächte – allerdings um den Preis eines wesentlich erhöhten Rechenaufwands.

Der Cell-Removal-Algorithmus läßt sich ohne Schwierigkeiten auf die Erfassung der dritten Ortsdimension erweitern, indem anstelle von Rechtecken oder Quadraten nunmehr Quader oder Würfel als Zellen benützt werden. Die Berechnung der Zeitschrittweite ist zwar naturgemäß aufwendiger aber nichtsdestoweniger kein grundsätzliches Problem [21]. Gerade in der dreidimensionalen Simulation kommt die Stärke des Cell-Removal-Algorithmus, nämlich dessen Stabilität, voll zum Tragen: im Gegensatz zum String- und zum Ray-Trace-Algorithmus wird das Entstehen von Oberflächen-Schleifen inhärent vermieden.

5.4 Allgemeine Methode der fortschreitenden Oberfläche

Dieses erst in den letzten Jahren von Strasser et al. [62,63] entwickelte Verfahren kann wohl zurecht als Meilenstein in der Topographiesimulation bezeichnet werden, da es die meisten Nachteile der zuvor beschriebenen Algorithmen bereits im Ansatz unterdrückt. Die grundlegende Idee stammt – wie auch die Octree-Diskretisierung in Kapitel 2.2 – aus einem völlig anderen Fachgebiet, nämlich der digitalen Bildverarbeitung, wo grundlegende Bildoperationen verwendet werden, um digitale Bilder zu beschreiben und zu modifizieren. In dieser auch als *Mathematische Morphologie* bezeichneten Disziplin [14,72] werden sogenannte „strukturierende Elemente" verwendet, um ein gegebenes digitales Bild in geeigneter Weise zu manipulieren. Die dortigen Verhältnisse werden nun auf die gegebene Problemstellung übertragen, indem die Simulationsgeometrie als digitales Bild aufgefaßt und die Bewegung der Oberfläche mittels Bildverarbeitungsoperationen beschrieben wird [61].

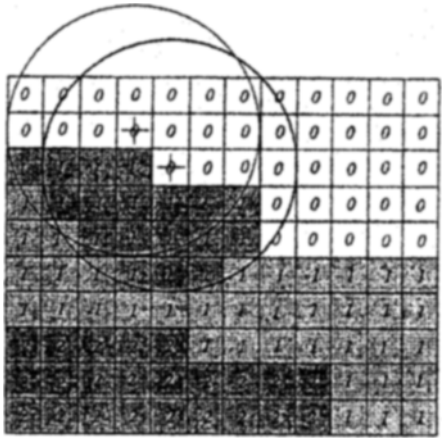

Abbildung 12
Darstellung des Materials und strukturierendes Element

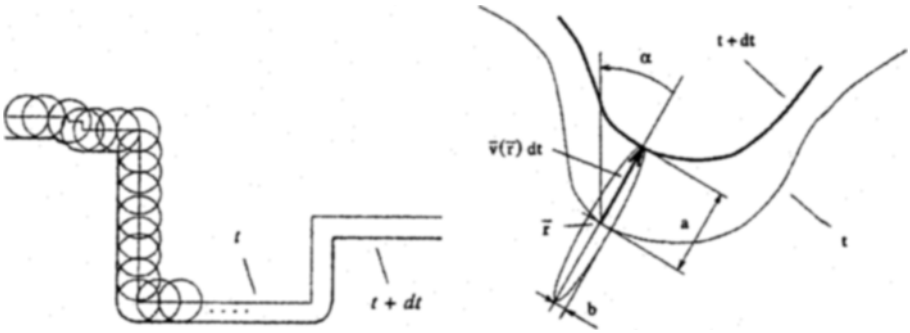

Abbildung 13 Schematische Darstellung des isotropen Ätzvorganges (links); strukturierendes Element für anisotrope Fortschreitung der Oberfläche (rechts)

Die Simulationsgeometrie wird wie bei der Cell-Removal-Methode mittels quadratischer bzw. kubischer Zellen diskretisiert, wobei jede Zelle entweder als geätzt („Vakuumzelle") oder nicht geätzt („Materialzelle") charakterisiert ist. Wie in Abb. 12 zu sehen ist, wird jeder Zelle somit zu jedem Zeitpunkt genau ein Materialindex (0 entspricht dem Vakuum) zugeordnet. Aufgrund dieser zellulären digitalen Beschreibung der Geometrie ist eine höchst effiziente Anwendung der Bildverarbeitungsoperationen möglich, da sich diese auf eine Summe logischer Verknüpfungen zurückführen lassen.

Die Oberfläche der Simulationsgeometrie besteht aus Materialzellen, deren Nachbarn Vakuumzellen sind. Der Ätz- oder Depositionsvorgang greift an diesen Oberflächenzellen an, da dort zumindest eine der vier Zellseiten gegenüber dem Ätzmedium bzw. der Depositionsquelle freiliegt. Der linke Teil von Abb. 13 veranschaulicht die Bewegung der Oberfläche während eines Zeitschrittes aufgrund eines isotropen Ätzvorganges. Bei kontinuierlicher Betrachtungsweise ist die Oberfläche zum Zeitpunkt t der Ort aller

Mittelpunkte für das strukturierende Element – in diesem Fall ein Kreis bzw. eine Kugel –, und die Einhüllende dieser unendlich dicht aneinandergereihten Elemente stellt die Oberfläche zum Zeitpunkt $t + dt$ dar. Im diskretisierten Fall bestimmen die Mittelpunkte der an die Oberfläche angrenzenden Vakuumzellen die Lage des strukturierenden Elementes (Abb. 12).

Obwohl grundsätzlich keinerlei Einschränkungen bezüglich der Wahl der geometrischen Form des strukturierenden Elementes bestehen, hat sich für die Simulation von Ätz- und Depositionsprozessen eine elliptische bzw. ellipsoidale Form als zweckmäßig herausgestellt. Aus dem rechten Teil der Abb. 13 ist für den zweidimensionalen Fall zu entnehmen, daß zum Zeitpunkt t an jedem Punkt der Oberfläche eine Ellipse definiert wird, deren Achsenlängen a und b durch die lokale Ätzrate gegeben sind und deren Richtung, also der Winkel α, durch die Oberflächennormale bestimmt wird. Während der Simulation eines Zeitschrittes werden bei einem Ätzvorgang all jene Materialzellen, deren Mittelpunkte innerhalb des strukturierenden Elementes zu liegen kommen, markiert (siehe die dunklen Zellen mit dem Materialindex 1 in Abb. 12 innerhalb der Kreise). Erst wenn der Markierungsvorgang für den betrachteten Zeitpunkt abgeschlossen ist, wird der Materialindex der markierten Zellen auf 0 gesetzt. Durch dieses Markierungsverfahren – anstelle der naheliegenderen sofortigen Rücksetzung des Materialindex – wird erreicht, daß das Ergebnis von der Reihenfolge der untersuchten Zellen unabhängig ist.

Wenn die Ätzfront während der Simulation eine Materialgrenze erreicht, ändert sich am Prinzip des Verfahrens nichts, doch ist das strukturierende Element in geeigneter Weise zu modifizieren. Dieses setzt sich – um beim zweidimensionalen Fall zu bleiben – nunmehr aus zwei Ellipsenteilen zusammen, welche durch die Materialgrenze voneinander getrennt sind. Infolge dieser Aufteilung ist gewährleistet, daß auch beim Übertritt der Ätzfront von einem Material in ein anderes die unterschiedlichen Ätzraten und deren Anisotropien korrekt erfaßt werden.

Die einzige mögliche Fehlerquelle bei der allgemeinen Methode der fortschreitenden Oberfläche liegt in der Diskretisierung: Wenn ein strukturierendes Element zu wenige Zellen beinhaltet und daher örtlich unzureichend aufgelöst wird, entstehen nicht mehr korrigierbare Positionsfehler der bewegten Oberfläche.

In Abb. 14 ist das Ergebnis einer dreidimensionalen Simulation des Ätzens eines Kontaktloches zu sehen. Im ersten Schritt wurde mit einer isotropen Ätzrate von 0.03 μm/min und einer Ätzdauer von 1000 s eine 0.5 μm dicke Schicht entfernt, und anschließend erfolgte die Durchätzung des Materials mit einer richtungsabhängigen Ätzrate von 0.04 μm/min sowie einer isotropen Ätzrate von 0.008 μm/min und einer Ätzdauer von 800 s. In der Simulation wurden je vier Zeitschritte bei einer örtlichen Diskretisierung von 100 Zellen/μm in allen drei Ortsdimensionen verwendet.

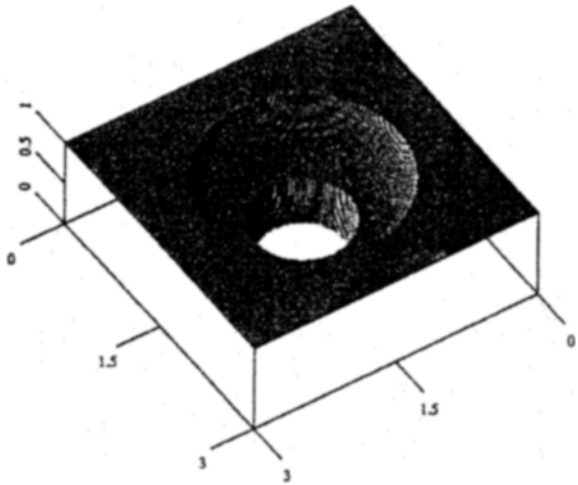

Abbildung 14
Simulation des Ätzens eines Kontaktloches

6 Zusammenfassung

Die Prozeßsimulation umfaßt heutzutage alle wichtigen technologischen Prozeßschritte in der Fertigung von Halbleiterbauelementen, wie Lithographie, Ionenimplantation, Diffusion, Oxidation, Ätzen und Deposition, und stellt ein nicht mehr wegzudenkendes Hilfsmittel für die Verbesserung bestehender sowie die Entwicklung neuer Herstellungsverfahren dar. Stand der Technik ist zwar durchaus die Simulation unter Erfassung aller drei Ortsdimensionen, doch wird diese – ähnlich wie beim seinerzeitigen Übergang von der eindimensionalen auf die zweidimensionale Simulation – im allgemeinen nur dann eingesetzt, wenn Effekte zu analysieren sind, deren Ursprung gerade in der Dreidimensionalität der Problemstellung liegt, oder wenn die zweidimensionale Modellbildung unzureichende Ergebnisse liefert.

Die Ursache für den zum Teil noch recht spärlichen Einsatz dreidimensionaler Simulatoren „im täglichen Gebrauch" liegt in erster Linie im enormen Ressourcenbedarf derartiger Werkzeuge, welcher auch von modernen Rechnersystemen nur schwer zu decken ist. Obgleich der numerische Aspekt auch in der Vergangenheit keineswegs vernachlässigt worden ist, sind in nächster Zukunft besondere Anstrengungen bezüglich der Entwicklung besonders effizienter Lösungsverfahren erforderlich, wobei vor allem auf eine mögliche Parallelisierung der Algorithmen besonderes Augenmerk zu legen ist.

Darüberhinaus stehen nach wie vor die Weiterentwicklung der physikalischen Modelle und deren Implementierung im Vordergrund, da eine Fülle von Phänomenen noch keineswegs wissenschaftlich fundiert geklärt sind. Hier muß allerdings die Prozeßsimulation anläßlich des wachsenden Bedarfes dreidimensionaler Untersuchungen trotz der rasant steigenden Rechnerleistungen mehr denn je die Balance zwischen dem prinzipiell Machbaren und dem in der Praxis effektiv Einsetzbaren wahren.

Literaturverzeichnis

[1] D. ANTONIADIS UND I. MOSKOWITZ. Diffusion of Substitutional Impurities in Silicon at Short Oxidation Times: An Insight into Point Defect Kinetics. *J. Appl. Phys. 53*, 10 (1982), 6788–6796.

[2] W. BOHMAYR, A. BURENKOV, J. LORENZ, H. RYSSEL, UND S. SELBERHERR. Statistical Accuracy and CPU Time Characteristic of Three Trajectory Split Methods for Monte Carlo Simulation of Ion Implantation. In *Simulation of Semiconductor Devices and Processes - SISDEP* (Erlangen, 1995), Bd. 6, S. 492–495.

[3] N. BOHR. On the Theory of Decrease of Velocity of Moving Electrified Particles on Passing through Matter. *The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Journal and Magazine of Science Sixth Series* (1913), 10.

[4] G. BRONNER UND J. PLUMMER. Gettering of Gold in Silicon: A Tool for Understanding the Properties of Silicon. *Appl. Phys. Lett. 61*, 12 (1987), 5286–5288.

[5] B. DEAL UND A. GROVE. General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon. *J. Appl. Phys. 36*, 12 (1965), 3770–3778.

[6] F. DILL, A. NEUREUTHER, J. TUTTLE, UND E. WALKER. Modeling Projection Printing of Positive Photoresists. *IEEE Trans. Electron Devices ED-22* (1975), 456–464.

[7] A. EINSTEIN. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Annalen der Physik, 4. Folge 17* (1905), 549–560.

[8] P. FAHEY, P. GRIFFIN, UND J. PLUMMER. Point defects and dopant diffusion in silicon. *Review of Modern Physics 61*, 2 (1989), 289–384.

[9] R. FAIR UND J. TSAI. A Quantitative Model for the Diffusion of Phosphorus in Silicon and the Emitter Dip Effect. *J. Electrochem. Soc. 124*, 7 (1977), 1107–1117.

[10] J. FEHRIBACH, R. GHEZ, UND G. OEHRLEIN. Asymptotic estimates of diffusion times for rapid thermal annealing. *Appl. Phys. Lett. 46*, 4 (1985), 433–435.

[11] W. FELLNER. *Computergrafik.* Wissenschaftsverlag, 1992.

[12] A. FICK. Über Diffusion. *Annalen der Physik und Chemie von Poggendorf 94*, 170 (1855), 59–86.

[13] M. FUJINAGA, N. KOTANI, T. KUNIKIYO, H. ODA, M. SIRAHATA, UND Y. AKASADA. Three-Dimensional Topography Simulation Model: Etching and Lithograpy. *IEEE Trans. Electron Devices 37*, 10 (Okt. 1990), 2183–2192.

[14] C. GIARDINA UND E. DOUGHERTY. *Morphological Methods in Image and Signal Processing.* Prentice-Hall, New Jersey, 1988.

[15] M. GILES. Ion Implantation Calculations in Two Dimensions Using the Boltzmann Transport Equation. *IEEE Trans. Computer-Aided Design CAD-5*, 4 (1986), 679–684.

[16] E. GUERRERO, H. PÖTZL, R. TIELERT, M. GRASSERBAUER, UND G. STINGEDER. Generalized Model for the Clustering of As Dopants in Si. *J. Electrochem. Soc. 129*, 8 (1982), 1826–1831.

[17] P. HAGOUEL. *X-ray Lithographic Fabrication of Blazed Diffraction Gratings.* PhD theses, University of California, Berkeley, 1976.

[18] M. HEINRICH, M. BUDIL, UND H. PÖTZL. Simulation of Arsenic and Boron Diffusion During Rapid Thermal Annealing in Silicon. In *ESSDERC 90* (1990), S. 205–208.

[19] J. HELMSEN, E. SCHECKLER, A. NEUREUTHER, UND C. SÉQUIN. An Efficient Loop Detection and Removal Algorithm for 3D Surface-Based Lithography Simulation. In *Workshop on Numerical Modeling of Processes and Devices for Integrated Circuits* (1992), S. 3–8.

[20] W. HENKE, D. MEWES, M. WEISS, G. CZECH, UND R. SCHLIESSL-HOYLER. A Study of Reticle Defects Imaged into Three-Dimensional Developed Profiles of Positive Photoresists Using the SOLID Lithography Simulator. *Microelectronic Engineering 14* (1991), 283–297.

[21] Y. HIRAI, S. TOMIDA, K. IKEDA, M. SASAGO, M. ENDO, S. HAYAMA, UND N. NOMURA. Three-Dimensional Resist Process Simulator PEACE (Photo and Electron Beam Litography Analyzing Computer Engineering System). *IEEE Trans. Computer-Aided Design 10*, 6 (Juni 1991), 802–807.

[22] G. HOBLER. *Simulation der Ionenimplantation in ein-, zwei- und dreidimensionalen Strukturen.* Dissertation, Technische Universität Wien, 1988.

[23] G. HOBLER UND H. PÖTZL. Electronic stopping of channeled ions in silicon. In *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* (Pittsburgh, 1993), Bd. 279, S. 165–170.

[24] G. HOBLER, A. SIMIONESCU, L. PALMETSHOFER, C. TIAN, UND G. STINGEDER. Boron channeling implantations in silicon: Modeling of electronic stopping and damage accumulation. *J. Appl. Phys. 77*, 8 (1995), 3697–3703.

[25] W. HOFKER, H. WERNER, D. OOSTHOEK, UND H. D. GREFTE. Influence of Annealing on the Concentration profiles of Boron Implantations in Silicon. *Applied Physics 2* (1973), 265–278.

[26] S. HU. Diffusion in Heavily Doped Semiconductors: Local Charge Neutrality and One-Band Approximations. *J. Appl. Phys. 43*, 4 (1972), 2015–2018.

[27] S. HU. Kinetics of Interstitial Supersaturation During Oxidation of Silicon. *Appl. Phys. Lett. 43*, 5 (1983), 449–451.

[28] E. IRENE, H. MASSOUD, UND E. TIERNEY. Silicon Oxidation Studies: Silicon Orientation Effects on Thermal Oxidation. *J. Electrochem. Soc. 133*, 6 (1986), 1253–1256.

[29] T. ISHIZUKA. Bulk Image Effects of Photoresist in Three-Dimensional Profile Simulation. *Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronics Engineering 10* (1991), 389–399.

[30] R. JEWETT, P. HAGOUEL, A. NEUREUTHER, UND T. V. DUZER. Line-Profile Resist Development Simulation Techniques. *Polymer Engineering and Science 17* (1977), 381–384.

[31] D. KAO, J. MCVITTIE, W. NIX, UND K. SARASWAT. Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon - II. Modeling Stress Effects in Wet Oxides. *IEEE Trans. Electron Devices ED-35*, 1 (1988), 25–37.

[32] G. KINCHIN UND R. PEASE. The Displacement of Atoms in Solids by Radiation. *Rep. Prog. Phys. 18* (1955), 1–51.

[33] H. LEE UND R. DUTTON. Two Dimensional Low Concentration Boron Profiles: Modeling and Measurement. *IEEE Trans. Electron Devices ED-28*, 10 (1981), 1136–1147.

[34] E. LEITNER, W. BOHMAYR, P. FLEISCHMANN, E. STRASSER, UND S. SELBERHERR. 3D TCAD at TU Vienna. In *3-Dimensional Process Simulation*, J. Lorenz, Ed. Springer Wien – New York, 1995, S. 136–161.

[35] I. MACKINTOSH. The Diffusion of Phosphorus in Silicon. *J. Electrochem. Soc. 109*, 5 (1962), 392–401.

[36] H. MASSOUD, D. PLUMMER, UND E. IRENE. Thermal Oxidation of Silicon in Dry Oxygen: Growth-Rate Enhancement in the Thin Regime II. Physical Mechanisms. *J. Electrochem. Soc. 132*, 11 (1985), 2693–2700.

[37] G. MOLIÉRE. Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. *Zeitschrift für Naturforschung 2a* (1947), 133–245.

[38] A. MONIWA, T. MATSUZAWA, T. ITO, UND H. SUNAMI. Three-Dimensional Photoresist Imaging Process Simulator for Strong Standing-Wave Effect Environment. *IEEE Trans. on CAD of Integrated Circuits and Systems CAD-6* (1987), 431–437.

[39] F. MORIN UND J. MAITA. Electrical Properties of Silicon Containing Arsenic and Boron. *Physical Review 96*, 1 (1954), 28–35.

[40] J. NARAYAN, O. HOLLAND, R. EBY, J. WORTMAN, V. OZGUZ, UND G. ROZGONYI. Rapid thermal annealing of arsenic and boron-implanted silicon. *Appl. Phys. Lett. 43*, 10 (1983), 957–959.

[41] W. NERNST. Zur Kinetik der in Lösung befindlicher Körper. *Zeitschrift für Physikalische Chemie, Stöchiometrie und Verwandtschaftslehre 2* (1888), 613–637.

[42] G. OEHRLEIN, R. GETZ, J. FEHRIBACH, E. GOREY, T. SEDGWICK, S. COHEN, UND V. DELINE. Diffusion of Ion-Implanted Boron and Phosphorus During Rapid Thermal Annealing of Silicon. In *13th Int. Conf. on Defects in Semiconductors* (1985), L. Kimerling und J.M. Parsey, Jr., Ed., S. 539–546.

[43] W. OLDHAM, S. NANDGAONKAR, A. NEUREUTHER, UND M. O'TOOLE. A General Simulator for VLSI Lithography and Etching Processes: Part I — Application to Projection Lithography. *IEEE Trans. Electron Devices ED-26*, 4 (1979), 717–722.

[44] M. ORLOWSKI. Impurity and Point Defect Redistribution in the Presence of Crystal Defects. In *Proc. Int. Electron Devices Meeting* (1990), S. 729–732.

[45] J. PELKA. Three-Dimensional Simulation of Ion-Enhanced Dry-Etch Processes. *Microelectronic Engineering 14* (1991), 269–281.

[46] B. PENUMALLI. Lateral Oxidation and Redistribution of Dopants. In *Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits* (Dublin, 1981), B. Browne und J. Miller, Ed., Bd. II, Boole Press, S. 264–269.

[47] P. PICHLER UND R. DÜRR. *User Guide for ICECREAM 4.2 - Simulation Program for Processing Steps in Semiconductor Pruduction.* Fraunhofer Arbeitsgruppe für Integrierte Schaltungen, 1990.

[48] C. RAFFERTY. Simulation of Stress-Dependent Oxidation. In *2nd Int. Symp. on Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology* (The Electrochemical Society, 1991), S. 756–771.

[49] H. RYSSEL, G. PRINKE, UND K. HOFFMANN. Implantation and Diffusion Models for Process Simulation. In *VLSI Process and Device Modeling* (1983), S. 1–41.

[50] S. A. SCHAFER UND S. LYON. New Model of the Rapid Initial Oxidation. *Appl. Phys. Lett. 47*, 2 (1985), 154–156.

[51] E. SCHECKLER UND A. NEUREUTHER. Models and Algorithms for Three-Dimensional Topography Simulation with SAMPLE-3D. *IEEE Trans. Computer-Aided Design 13*, 2 (Feb. 1994), 219.

[52] E. SCHECKLER, N. TAM, A. PFAU, UND A. NEUREUTHER. An Efficient Volume-Removal Algorithm for Practical Three-Dimensional Lithography Simulation with Experimental Verification. *IEEE Trans. on CAD of Integrated Circuits 12* (1993), 1345–1356.

[53] T. SEDGWICK, R. KALISH, S. MADER, UND S. SHATAS. Short Time Annealing of As and B Ion Implanted Si Using Tungsten-Halogen Lamps. In *Mat. Res. Soc. Proc.: Energy Beam-Solid Interactions and Transient Thermal Processing* (1984), J. Fan und N. Johnson, Ed., Bd. 23, S. 293–298.

[54] S. SELBERHERR. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices.* Springer, Wien New-York, 1984.

[55] A. SIMIONESCU. *Monte-Carlo-Simulation der Ionenimplantation in kristallinem Silizium.* Dissertation, Technische Universität Wien, 1995.

[56] A. SIMIONESCU, G. HOBLER, UND F. LAU. Monte Carlo Simulation of Multiple-Species Ion Implantation and its Application to the Modeling of 0.1μ PMOS Devices. In *Simulation of Semiconductor Devices and Processes - SISDEP* (Erlangen, 1995), Bd. 6, S. 484–487.

[57] H. SOLEIMANI. Modelling of High-Dose Ion Implantation-Induced Dopand Transient Diffusion, and Dopant Transient Activation in Silicon (Boron and Arsenic Diffusion. *J. Electrochem. Soc.: Solid-State Science and Technology 139*, 11 (1992), 3275–3284.

[58] S. SOLMI, E. LANDI, UND F. BARUFFALDI. High-Concentration Boron Diffusion in Silicon: Simulation of the Precipitation Phenommena. *J. Appl. Phys. 68*, 7 (1990), 3250–3258.

[59] A. SOMMERFELD. Asymptotische Integration der Differentialgleichung des Thomas-Fermischen Atoms. *Zeitschrift für Physik* (1932), 283–308.

[60] H. STIPPEL. *Simulation der Ionenimplantation.* Dissertation, Technische Universität Wien, 1993.

[61] E. STRASSER. *Simulation von Topographieprozessen in der Halbleiterfertigung.* Dissertation, Technische Universität Wien, 1994.

[62] E. STRASSER, G. SCHROM, K. WIMMER, UND S. SELBERHERR. Accurate Simulation of Pattern Transfer Processes Using Minkowski Operations. *IEEE Trans. Electronics E77-C* (1994), 92–97.

[63] E. STRASSER, K. WIMMER, UND S. SELBERHERR. A New Method for Simulation of Etching and Deposition Processes. In *1993 Int. Workshop on VLSI Process and Device Modeling* (1993), S. 54–55.

[64] P. SUTARDJA UND W. OLDHAM. Modeling of Stress Effects in Silicon Oxidation. *IEEE Trans. Electron Devices 36*, 11 (1989), 2415–2420.

[65] T. TAKEDA, S. TAZAWA, UND A. YOSHII. Precise Ion-Implantation Analysis Including Channeling Effects. *IEEE Trans. Electron Devices 33*, 9 (1986), 1278–1285.

[66] T. TAN UND U. GÖSELE. Point-defects, Diffusion-Processes, and Swirl Defect Formation in Silicon. *Applied Physics A 37*, 1 (1985), 1–17.

[67] E. TANNENBAUM. Detailed Analysis of Thin Phosphorus-Diffused Layers in p-Type Silicon. *Solid-State Electron. 2* (1961), 123–132.

[68] S. TAZAWA, F. LEON, G. ANDERSON, T. ABE, K. SAITO, A. YOSHII, UND D. SCHARFETTER. 3-D Topography Simulation of Via Holes Using Generalized Solid Modeling. In *Int. Electron Devices Meeting* (1992), S. 173–176.

[69] K. THO, A. NEUREUTHER, UND E. SCHECKLER. Algorithms for Simulation of Three-Dimensional Etching. *IEEE Trans. on CAD of Integrated Circuits 13* (1994), 616–624.

[70] M. THOMPSON. An Introduction to Channeling. In *Channeling,* D.V. Morgan, Ed. J. Wiley, 1973, S. 1–36.

[71] M. TSAI, F. MOREHEAD, J. BAGLIN, UND A. MICHEL. Shallow Junctions by High-Dose As Implants in Si: Experiments and Modeling. *J. Appl. Phys. 51*, 6 (1980), 3230–3235.

[72] K. VOSS UND H. SÜSSE. *Praktische Bildverarbeitung*. Karl Hanser Verlag, München Wien, 1991.

[73] C. WAGNER. Über den Zusammenhang zwischen Ionenbeweglichkeit und Diffusionsgeschwindigkeit in festen Salzen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie B 11* (1931), 139–151.

[74] K. WIMMER. *Two-Dimensional Non-Planar Process Simulation*. Dissertation, Technische Universität Wien, 1993.

[75] D. WOLTERS UND A. ZEGERS-VANDUYNHOVEN. Kinetics of Dry Oxidation of Silicon. *Applied Surface Science 39*, 1 (1989), 81–88.

[76] J. ZIEGLER, J. BIERSACK, UND U. LITTMARK. *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Pergamon Press, 1985.