

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 621.3.049.77

ФИЗИКО-ТОПОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕМНОЙ КОНДЕНСАТОРНОЙ СТРУКТУРЫ С БАРЬЕРОМ ШОТТКИ

© 2021 г. С. Ш. Рехвиашвили^{а, *}, Д. С. Гаев^б, А. Н. Бойко^с

^аИнститут прикладной математики и автоматизации КБНЦ Российской АН,
Ул. Шортанова, 89А, Нальчик, 360000 КБР, Россия

^бКабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Нальчик, КБР, Россия

^сМосковский институт электронной техники (МИЭТ), Площадь Шокина, 1, Зеленоград, Москва, 124498 Россия

*E-mail: rsergo@mail.ru

Поступила в редакцию 28.01.2021 г.

После доработки 15.02.2021 г.

Принята к публикации 20.02.2021 г.

Предложена и численно реализована физико-топологическая модель интегрального конденсатора на основе барьера Шоттки. Теоретически показано, что путем формирования объемной функциональной структуры конденсатора можно добиться значительного увеличения его емкости. Составлена распределенная эквивалентная схема конденсатора, учитывающая конструктивно-технологические особенности. Построена SPICE-модель интегрального конденсатора и на численном примере проведена идентификация параметров модели. С помощью схемотехнического моделирования изучено влияние паразитных параметров на характеристики интегрального конденсатора.

Ключевые слова: интегральный конденсатор, варикап, объемная структура, физико-топологическое моделирование, эквивалентная электрическая схема

DOI: 10.31857/S0544126921040098

ВВЕДЕНИЕ

Конденсаторы в полупроводниковых интегральных микросхемах могут изготавливаться на основе $p-n$ -переходов транзисторных структур. Как известно, емкость таких конденсаторов определяется преимущественно барьерной емкостью области пространственного заряда (ОПЗ). Вследствие высоких уровней легирования, наибольшую емкость имеет переход “эмиттер–база”. Однако, этот переход имеет небольшое напряжение пробоя, поэтому для изготовления конденсаторов чаще всего используются переходы “база–коллектор” и “коллектор–подложка”. Основными недостатками интегральных конденсаторов на биполярных транзисторных структурах являются низкие значения емкости и добротности. Эти недостатки отсутствуют в МОП-конденсаторах, емкость которых, помимо всего прочего, не зависит от приложенного напряжения. Еще одним перспективным направлением в разработках интегральных конденсаторов представляется применение планарных структур на основе контакта “металл–полупроводник” или барьера Шоттки. Концентрация свободных электронов в металле предельно высока, поэтому ОПЗ формируется в тонком поверхностном слое полупроводника. Кроме того, ток через структуру “металл–полупроводник” почти полностью обусловлен основными носителями заряда. Это приводит к

снижению инерционности приборов на основе данной структуры за счет исключения явлений инжекции, накопления и рассасывания зарядов. Контактная разность потенциалов низкобарьерных диодов Шоттки с тонкими легированными слоями не превышает 0.2–0.3 В, что примерно в два раза меньше, чем в случае контакта двух кремниевых областей разного типа проводимости. Таким образом, конденсаторы на переходах “металл–полупроводник” могут обладать высокой добротностью.

Структуры “металл–полупроводник” широко применяются в СВЧ-детекторах, фотодиодах и транзисторах [1]. Кроме того, ведутся активные исследования оптоэлектронных свойств диодов Шоттки на пористом кремнии [2–4]. Такие диоды в [5–8] предложено использовать для создания варикапов с большой емкостью. Высокоемкостные конденсаторы на диодах Шоттки представляются перспективными компонентами не только для радиоэлектронных схем, но и для создания качественно новых микроэлектромеханических систем [9] и интегральных схем с мемристорами [10].

Настоящая работа посвящена моделированию эксплуатационных характеристик объемного интегрального конденсатора на основе перехода “металл–полупроводник”, который может быть изготовлен с помощью стандартных технологических процессов литографии, травления и напыления. В качестве теоретической основы ис-

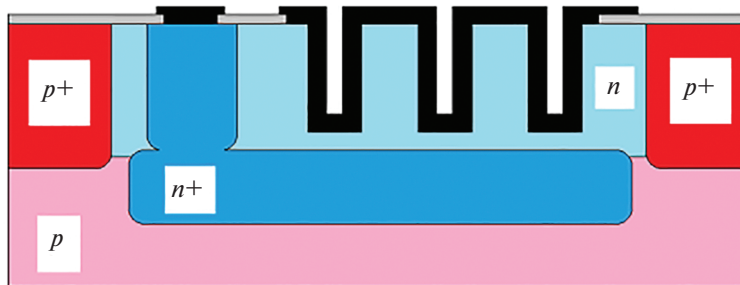


Рис. 1. Технологическая структура интегрального конденсатора.

пользуются методы физико-топологического моделирования [11–13], которые базируются на аналитических и численных решениях краевых задач для уравнения Пуассона и моделях электрофизических параметров. В качестве практического примера проводится схемотехническое моделирование РС-фильтра высоких частот на основе интегрального конденсатора. Полученные результаты представляют определенный интерес с точки зрения развития новых методов проектирования и моделирования трехмерных интегральных схем [13, 14]. Аналогичные подходы для моделирования структур с $p-n$ -переходами применялись, например, в [15–19].

ФИЗИКО-ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОНСТРУКЦИИ

Структура интегрального конденсатора представлена на рис. 1. Оптимальная топология одной ячейки конденсатора выполняется в форме двух квадратов (рис. 2). Прибор изготавливается по

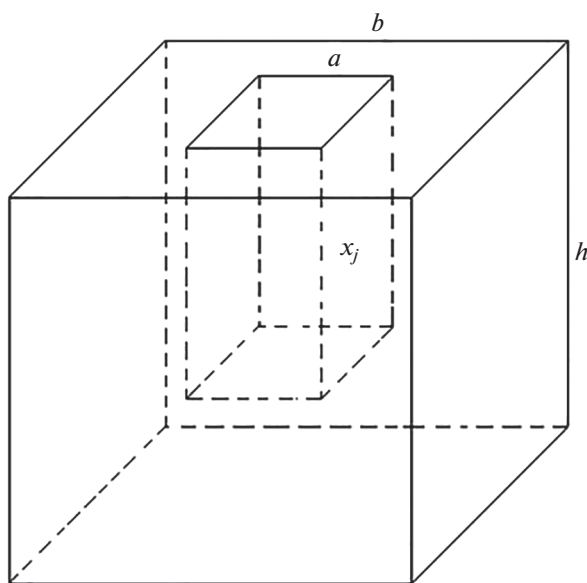


Рис. 2. Геометрия функционального элемента интегрального конденсатора.

стандартной планарно-эпитаксиальной технологии со скрытым слоем и изоляцией $p-n$ -переходами. В эпитаксиальном слое с помощью глубокого реактивного ионного травления (DRIE метод) формируются углубления требуемых размеров. Далее, с помощью химического осаждения из газовой фазы (CVD метод) наносится пленка металла и тем самым получается объемная структура конденсатора с барьером Шоттки.

Рассмотрим контакт полупроводника n -типа с металлом. Предполагается, что электроны из тонкого поверхностного слоя полупроводника переходят в металл. В этом слое возникает потенциальный барьер высотой [20, с. 23]: $\phi_b = \phi_m - \chi_s + \delta\phi$, где ϕ_m – работа выхода электрона из металла, χ_s – энергия электронного сродства полупроводника, $\delta\phi$ – учитывает поверхностные электронные состояния на границе раздела. Функция потенциала в обеденной области полупроводника является решением уравнения Пуассона

$$\Delta\phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0\epsilon}, \tag{1}$$

где Δ – оператор Лапласа, ρ – объемная плотность заряда, $\epsilon = 12$ – диэлектрическая проницаемость кремния, ϵ_0 – электрическая постоянная. В одномерном случае для резкого и плоского перехода при

$$\phi(d) = 0, \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{x=d} = 0, \rho = qN_D$$

решение уравнения (1) имеет вид

$$\phi(x) = \frac{qN_D}{2\epsilon_0\epsilon}(d-x)^2, \tag{2}$$

где q – заряд электрона, N_D – концентрация донорной примеси, d – ширина ОПЗ. При $x = 0$ и $\phi(0) = \phi_b$ из (2) получается известная формула

$$d = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon\phi_b}{qN_D}}. \tag{3}$$

Емкость одного структурного элемента конденсатора в форме правильного параллелепипеда, показанного на рис. 2, равна

$$C = C_1 + C_2 = C_0(b^2 + 4ax_j),$$

$$C_0 = \frac{\epsilon_0 \epsilon}{d} = \sqrt{\frac{q \epsilon_0 \epsilon N_D}{2 \phi_b}}, \quad (4)$$

где C_1 и C_2 – емкость торцевых и боковых частей структуры, C_0 – удельная емкость перехода, a и b – планарные размеры структуры, x_j – глубина лунки. Полная емкость конденсатора получается умножением (4) на количество структурных

элементов (ячеек) в конструкции; зависимость емкости от внешнего напряжения U учитывается делением (4) на безразмерный фактор $\sqrt{1 \pm U/\phi_b}$.

Основными статическими параметрами интегрального конденсатора являются ток насыщения и встроенное сопротивление. Согласно теории термоэлектронной эмиссии [20, с. 96], для тока насыщения имеем

$$I_S = \frac{q N_C \langle v \rangle (b^2 + 4ax_j)}{4} \exp\left(-\frac{q \phi_b}{kT}\right), \quad \langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}, \quad N_C = 2 \left[\frac{2\pi m k T}{(2\pi \hbar)^2} \right]^{3/2}, \quad (5)$$

где k и \hbar – постоянные Больцмана и Планка, $\langle v \rangle$ – средняя тепловая скорость электронов, N_C – эффективная плотность состояний электронов в зоне проводимости, m – эффективная масса электрона в полупроводнике. Для кремния $m[001] = 2.05m_e$ и $m[111] = 2.15m_e$, где m_e – масса электрона в вакууме. Вследствие кон-

структивных особенностей конденсатора его активное сопротивление будет определяться сопротивлением эпитаксиального слоя. Расчет сопротивления осуществляется посредством декомпозиции функционального слоя на отдельные ортогональные области. Для элемента на рис. 2 получается формула

$$\frac{1}{R} = \sum_r \frac{1}{r_i} = q N_D \mu_n \left(\frac{a^2}{h - x_j} + \frac{b^2 - a^2}{h} + 4 \left[\frac{b - a}{2ax_j} + \frac{2(h - x_j)}{a(b - a)} + \frac{s}{a} \right]^{-1} \right), \quad (6)$$

где r_i – сопротивления областей, μ_n – подвижность электронов, h – толщина эпитаксиального слоя с учетом его диффузионного размытия, s – коэффициент, учитывающий растекание тока от боковых граней лунки. В круглых скобках первое слагаемое относится к области под лункой; второе слагаемое отвечает за область вокруг лунки; слагаемое в квадратных скобках учитывает вклад боковых граней лунки. Если предположить, что растекание тока, который протекает от боковых граней к скрытому слою, аналогично растеканию тока на перегибах меандрового резистора, то можно принять $s = 0.55$ [21, с. 45]. Подвижность электронов (размерность $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$) рассчитывается по следующей эмпирической формуле [13]:

$$\mu_n = \mu_1 + \frac{\mu_2}{1 + \left(\frac{N}{N_0}\right)^\alpha},$$

$$\mu_1 = 88T_n^{0.57}, \quad \mu_2 = 1251.8T_n^{2.33}, \quad (7)$$

$$N_0 = 1.26 \times 10^{17} T_n^{-2.4}, \quad \alpha = 0.88T_n^{0.146},$$

где $N = N_D + N_A$ – полная концентрация легирующей примеси, $T_n = 300/T$. Формула (7) корректно учитывает рассеяние электронов на ионизированных примесях и акустических фононах.

Аналитическая модель (1)–(7) по своей сути одномерная, хотя и применяется здесь к трехмерному объекту. Это является основным недостатком модели. Чтобы установить условия применимости модели, необходимо с помощью (1) численно промоделировать пространственное распределение электрического поля внутри ОПЗ с учетом геометрии контактирующих областей. Это, в частности, позволит визуализировать искажения обедненного слоя в виде отклонений от прямоугольной формы вблизи изгибов структуры. Для этих целей внутри ОПЗ для уравнения (1) в квадрате $\bar{D} = \{(x, y): 0 \leq x \leq d, 0 \leq y \leq d\}$ со стороной d решалась разностная схема (задача Дирихле):

$$(\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j} + \varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1}) - 4\varphi_{i,j} = -\frac{\xi^2}{\epsilon_0 \epsilon} \rho_{i,j},$$

$$\rho_{i,j} = \begin{cases} \rho_0, & (x_i, y_j) \in S, \\ 0, & (x_i, y_j) \in M, \end{cases} \quad \varphi(x_i, y_j)|_{\Gamma_M} = \phi_b, \quad (8)$$

$$\varphi(x_i, y_j)|_{\Gamma_S} = 0, \quad x_i = i\xi, \quad y_j = j\xi, \quad i, j = \overline{0, N},$$

где M и S – области, занятые металлом и полупроводником, Γ_M – граница раздела “металл–полупроводник”, Γ_S и ρ_0 – граница ОПЗ и плотность заряда в полупроводниковой области, $\xi = d/N$ – шаг равномерной сетки. Разностная схема (8) имеет

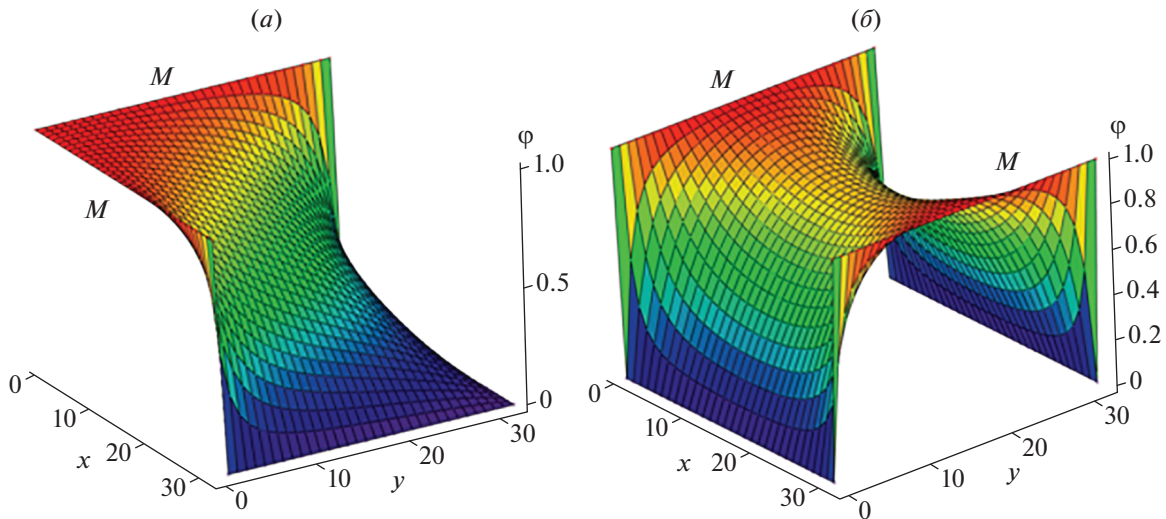


Рис. 3. Конфигурации электрического поля в барьерах Шоттки. Графики построены в относительных единицах.

погрешность аппроксимации $O(\xi^2)$. Схема (8) решалась с помощью метода релаксации [22]. Алгоритм заключается в проверке и численной коррекции уравнений на каждом шаге итерационного процесса. В итоге последовательные итерации приводят (“релаксируют”) к искомому решению краевой задачи.

На рис. 3 приведены результаты численного моделирования: (а) – участок ОПЗ в структуре “металл–полупроводник” с углом изгиба $\pi/2$; (б) – участок ОПЗ в тонком слое полупроводника между двумя металлическими контактами. Значения ρ_0 при моделировании подбирались так, чтобы максимум функции $\phi(x, y)$ достигался строго на границе Γ_M . Вычислительные эксперименты показывают, что в окрестностях изгибов металлизации и при малых расстояниях между металлическими контактами происходят значительные пространственные трансформации ОПЗ. Если при заданном уровне легирования размеры функциональных областей конденсатора будут соизмеримы с шириной ОПЗ, которая определяется формулой (3), то даже малые изменения геометрии ОПЗ могут оказывать критическое влияние на свойства конденсатора. В этом случае аналитическая модель (1)–(7), очевидно, уже неприменима. Воспользоваться этой моделью для расчета интегрального конденсатора на рис. 1 можно, если обеспечивается условие

$$a \gg \max\{d, \lambda + 2\Delta, \sqrt{p/p_0}\}, \quad (9)$$

где λ – разрешающая способность литографического процесса, Δ – горизонтальное растравливание, p – заданная мощность, $p_0 = 1 - 4.5$ Вт/мм² – максимально допустимая удельная мощность рассеивания [21, с. 44]. Как показывает модели-

рование, расстояние от дна лунки до скрытого слоя должно быть намного меньше расстояния между соседними лунками. Это позволит минимизировать токи утечки, протекающие в горизонтальных направлениях. Смыкание ОПЗ соседних лунок при отрицательных напряжениях смещения надежно исключается, если расстояние между ними будет намного больше, чем $2d$.

ЭКВИВАЛЕНТНАЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СХЕМА

Схемотехническое моделирование интегрального конденсатора с учетом его физико-топологических параметров наиболее адекватно может быть проведено с помощью распределенной эквивалентной схемы [12]. В нашем случае требуется обеспечить соответствие этой схемы функциональному элементу на рис. 2; параметры схемы должны учитывать принцип декомпозиции, согласно которому получены формулы (4)–(6).

На рис. 4 приведена предлагаемая эквивалентная схема элемента конденсатора. Источники тока I_1 – I_6 описывают идеальные барьеры Шоттки. Резисторы R_1, R_2 и конденсаторы C_1, C_2 учитывают составляющие от дна лунки и областей вокруг лунки. Резисторы R_3 – R_{10} и конденсаторы C_3 – C_6 отвечают за вклады от боковых частей лунки. Диод D описывает влияние подложки и скрытого слоя.

Для идентификации параметров эквивалентной схемы нами рассматривалась структура при $T = 300$ К со следующими типовыми конструктивно-технологическими параметрами: эпитаксиальный слой с ориентацией (111) и уровнем легирования $N_D = 5 \times 10^{16}$ см⁻³; $a = 5$ мкм; $b = 15$ мкм; $x_j = 2$ мкм; $h = 3$ мкм; $\phi_b = 0.6$ эВ –

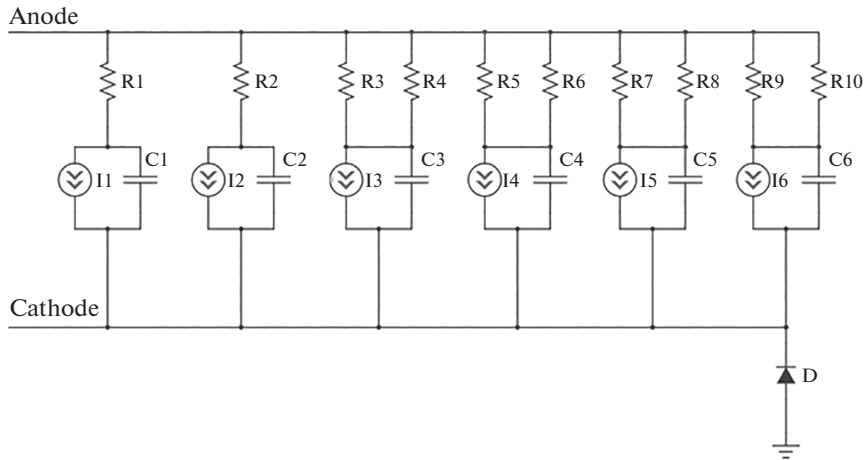


Рис. 4. Распределенная эквивалентная схема функционального элемента интегрального конденсатора.

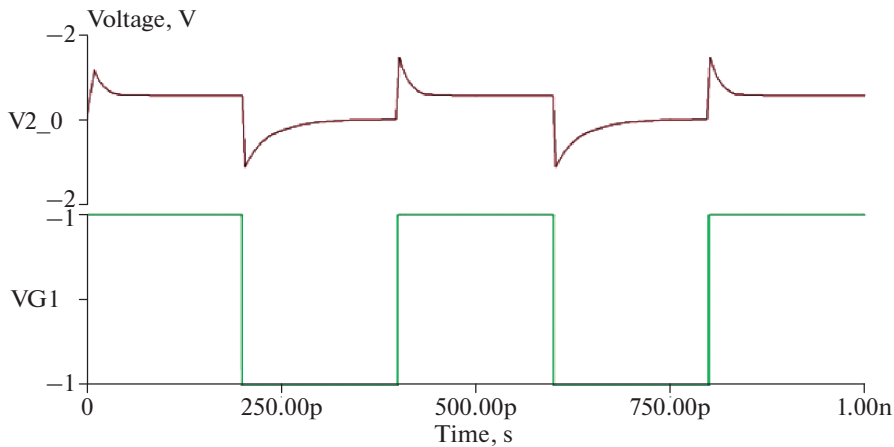


Рис. 5. Осциллограмма сигнала фильтра высоких частот на основе интегрального конденсатора.

характерное значение для контакта Al–Si [20]. Рассчитанные по (3)–(6) сосредоточенные параметры конденсатора равны $C = 0.22$ пФ, $I_S = 5.12$ нА, $R = 13.4$ Ом.

Схемотехническое моделирование интегрального конденсатора осуществлялось на примере простейшего RC-фильтра высоких частот. Использовалась программа TINA-TI (Texas Instruments). Параметры эквивалентной схемы рассчитывались в соответствии с рассмотренной выше физико-топологической моделью. Задание на моделирование в SPICE-формате приведено ниже.

```
* Modeling of Integrated Capacitor
VG1 1 0 PULSE(-1 1 0 0 0 0.2N 0.4N)
D1 1 2 D_Schottky_1
D2 1 2 D_Schottky_2
D3 1 2 D_Schottky_3
D4 1 2 D_Schottky_3
D5 1 2 D_Schottky_3
D6 1 2 D_Schottky_3
Ds 0 2 D_Sub
Rn 2 0 130
```

```
.MODEL D_Schottky_1 D(IS=0.483N RS=
52.269 CJO=21.055F VJ=0.6)
.MODEL D_Schottky_2 D(IS=3.867N RS=
19.601 CJO=0.168P VJ=0.6)
.MODEL D_Schottky_3 D(IS=0.193N RS=
849.372 CJO=8.422F VJ=0.6)
.MODEL D_Sub D(IS=1F RS=100MEG CJO=
0.1P VJ=1)
.TRAN 0.1P 1N
.PROBE V([2])
.END
```

На рис. 5 показаны результаты моделирования переходного процесса фильтра. Полученная осциллограмма типична для фильтра высоких частот [23, с. 15]. Процессы переключения обусловлены барьерными и диффузионными емкостями в диоде Шоттки и диоде на основе p – n -перехода “подложка–скрытый слой”. Времена разрядки определяются емкостями, встроенными сопротивлениями интегральных областей и нагрузочным сопротивлением фильтра. Из-за различия электрофизических свойств диода Шоттки и паразитного диода D имеет место асимметрия сиг-

нала. Подробное исследование влияния подложечной структуры на работу интегрального конденсатора на барьере Шоттки представляет большой интерес и является предметом отдельной работы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены результаты теоретического исследования интегрального 3D-конденсатора на основе барьера Шоттки. Выделяются следующие основные результаты: 1) разработана и реализована физико-топологическая модель прибора; 2) с учетом физико-топологической модели разработана и реализована распределенная эквивалентная электрическая схема прибора; 3) проведено схемотехническое моделирование фильтра высоких частот на основе интегрального конденсатора. Полученные результаты важны для проектирования и изготовления интегральных конденсаторных структур с заданными параметрами, а также, по нашему мнению, вносят определенный вклад в общее развитие теоретической базы для 3D-микроэлектроники [14].

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kwok K.Ng.* Complete Guide to Semiconductor Devices. Wiley-IEEE Press, 2002.
2. *Puisford N.J., Rikken G.L.J.A., Kessener Y.A.R.R., Lous E.J., Venhuizen A.H.J.* Carrier injection and transport in porous silicon Schottky diodes // *J. Luminescence*. 1993. V. 57. P. 181–184. [https://doi.org/10.1016/0022-2313\(93\)90129-B](https://doi.org/10.1016/0022-2313(93)90129-B)
3. *Lazarouk S., Katsouba S., Tomlinson A., Benedetti S., Mazzoleni S., Mulloni S., Mariotto G., Pavesi L.* Optical characterization of reverse biased porous silicon light emitting diode // *Materials Science and Engineering B*. 2000. V. 69–70. P. 114–117. [https://doi.org/10.1016/S0921-5107\(99\)00280-9](https://doi.org/10.1016/S0921-5107(99)00280-9)
4. *Selvam K., Rajashankar S., Haji-Sheikh M.J.* Measurement of light sensitivity of chromium/porous silicon Schottky diodes made by silicon nitride masking // *Twelfth International Conference on Sensing Technology (ICST), IEEE*, 2019. P. 330–335. <https://doi.org/10.1109/ICSensT.2018.8603629>
5. *Vega D., Reina J., Pavon R., Rodriguez A.* High-density capacitor devices based on macroporous silicon and metal electroplating // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2014. V. 61. № 1. C. 116–122. <https://doi.org/10.1109/TED.2013.2290065>
6. *Vega D., Reina J., Marti F., Pavon R., Rodriguez A.* Macroporous silicon for high-capacitance devices using metal electrodes // *Nanoscale Research Letters*. 2014. V. 9. P. 473. <https://doi.org/10.1186/1556-276X-9-473>
7. *Тимошенко С.П., Гаев Д.С., Бойко А.Н.* Варикап и способ его изготовления // Патент на изобретение RU 2614663, заявка № 2015156481 от 29.12.2015.
8. *Тимошенко С.П., Бойко А.Н., Гаев Д.С., Калмыков Р.М.* Интегральный варикап повышенной емкости на основе пористого кремния // *Известия вузов. Электроника*. 2017. Т. 22. № 1. С. 15–19. [Timoshenkov S.P., Boyko A.N., Gaev D.S. et al. An Integrated High-Capacitance Varicap Based on Porous Silicon // *Russian Microelectronics*. 2018. V. 47. P. 465–467. DOI 10.1134/S1063739718070156]
9. *Драгунов В.П., Остертак Д.И.* Микроэлектромеханические преобразователи // *Микроэлектроника*. 2012. Т. 41. № 2. С. 120–135. [Dragunov V.P., Oster-tak D.I. Microelectromechanical converters // *Russian Microelectronics*. 2012. V. 41. № 2. P. 107–121. DOI 10.1134/S1063739712010027]
10. *Ракитин В.В., Русаков С.Г.* Мемристорный генератор последовательности импульсов // *Микроэлектроника*. 2019. Т. 48. № 4. С. 300–307. [Rakitin V.V., Rusakov S.G. Memristor Based Pulse Train Generator // *Russian Microelectronics*. 2019. V. 48. № 4. P. 255–261. DOI 10.1134/S1063739719040073]
11. *Бубенников А.Н.* Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. М.: Высш. шк., 1989.
12. Автоматизация проектирования БИС. В 6 кн. Практ. пособие. Кн. 5. Кремлев В.Я. Физико-топологическое моделирование структур элементов БИС. М.: Высш. шк., 1990.
13. *Kircher R., Bergner W.* Three-dimensional simulation of semiconductor devices. Birkhauser Verlag, 1991.
14. *Pavlidis V.F., Savidis I., Friedman E.G.* Three-dimensional integrated circuit design. Morgan Kaufmann Publishers, 2017.
15. *Baccarani G., Ciampolini P., Pierantoni A.* Three-dimensional simulation of semiconductor devices: state of the art and prospects // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1993. A326. P. 253–259. [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(93\)90360-T](https://doi.org/10.1016/0168-9002(93)90360-T)
16. *Ubaldi F., Pozzi G., Fazzini P.F., Beleggia M., Beleggia M.* Three-dimensional field models for reverse biased p-n junctions. In book: *Microscopy of Semiconducting Materials*. Cambridge, 2007.
17. *Kosec G., Trobec R.* Simulation of semiconductor devices with a local numerical approach // *Engineering Analysis with Boundary Elements*. 2015. V. 50. P. 69–75. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2014.07.013>
18. *Nouar F.S., Mansouri S., Amrani M., Marie P., Massoum M.* Three-dimensional devices transport simulation lifetime and relaxation semiconductor // *International J. Electrical and Computer Engineering*. 2015. V. 5. № 2. P. 243–250. <https://doi.org/10.11591/ijece.v5i2.pp243-250>
19. *Benaichi M., Chetouani A., Karkri A., Moussaid D., Elqabbaj S.E.* Three-dimensional drift-diffusion model for simulation and investigation of bordering effects in silicon solar cells // *Materials Today: Proceedings*. 2019. V. 13. P. 630–636. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.04.022>
20. *Rhoderick E.H., Williams R.H.* Metal-semiconductor contacts. Oxford University Press, 1988.
21. *Пономарев М.Ф., Коноплев Б.Г.* Конструирование и расчет микросхем и микропроцессоров. М.: Высш. шк., 1986.
22. *Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P.* Numerical recipes: the art of scientific computing. Cambridge University Press, 2007.
23. *Tietze U., Schenk Ch., Schmid E.* Electronic Circuits: Design and Applications. Springer-Verlag, 1991.