

Initiation à la simulation bidimensionnelle  
Environnement SILVACO ( ATHENA - ATLAS)  
A. CAZARRE, N. NOLHIER, F.MORANCHO, P. AUSTIN, P.CALMON  
Université Paul SABATIER TOULOUSE III  
**Atelier Inter Universitaire de Microélectronique**

## Introduction

Le cadre général de cet article porte à la fois sur la simulation numérique des procédés technologiques de base utilisés lors de la fabrication des structures actives de la microélectronique et sur la simulation électrique des structures réalisées. Pour ce faire, les dispositifs usuellement exploités sont la diode à jonction PN<sup>+</sup> verticale et le transistor NMOS à enrichissement à grille polysilicium. Cet enseignement est dispensé en second et troisième cycles du cursus universitaire de l'Université Paul Sabatier sous forme de bureau d'étude. En ce qui concerne le second cycle, cette initiation est proposée dans le module « microélectronique » de la maîtrise E.E.A et en deuxième année de l'I.U.P AISEM (Architecture et Ingénierie des Systèmes Electroniques et Microélectroniques). En troisième cycle, elle est dispensée dans le cadre du DEA « Conception de Circuits Microélectroniques et Microsystèmes ».

Les étudiants exploitent les outils ATHENA et ATLAS de l'environnement SILVACO [1] disponible à l'Atelier Inter Universitaire de Microélectronique de TOULOUSE (AIME).

Ces travaux pratiques ont vocation à initier les étudiants à la conception de dispositifs actifs à condition qu'ils aient suivi, d'une part, un enseignement bien adapté de physique et de technologie du composant incluant des travaux dirigés et, d'autre part, un stage de réalisation en salle blanche. Cette application CAO est intéressante dans la mesure où l'environnement SILVACO est largement exploité, tant dans l'industrie que dans les laboratoires de recherche et qu'il est disponible dans les pôles de formations en microélectronique. L'objectif fondamental de ce travail est surtout d'inciter les étudiants à porter un regard critique sur les résultats électriques issus d'une simulation par rapport aux résultats expérimentaux qui restent indispensables.

Il est à noter que les perspectives qu'offre SILVACO, comme, par exemple, une extension vers les microsystèmes, conforte cette stratégie pédagogique. Des versions PC très accessibles sont à ce jour disponibles avec un coût abordable.

## I. Formation second cycle : la Diode N<sup>+</sup>P verticale.

Dans le cadre de cette initiation, la structure n'est pas simulée sous ATHENA, elle est simplement décrite par l'étudiant à partir du procédé réalisé en salle blanche puis simulée sous ATLAS. Cependant l'approche de simulation ATHENA peut être envisagée.

### 1) Description de la structure simulée

La coupe de la structure simulée est représentée dans la figure 1. Cette diode N<sup>+</sup>P verticale est préalablement réalisée et testée par les étudiants dans la salle blanche de l'AIME. Les caractéristiques de cette diode sont résumées ci-dessous :

- Surface du composant : 200  $\mu\text{m}$  x 200  $\mu\text{m}$
- Substrat d'épaisseur 300  $\mu\text{m}$  de type P dopé Bore à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- Région N dopée Phosphore selon un profil Gaussien avec une concentration en surface du silicium égale à  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  et une profondeur de jonction de l'ordre de 1,5  $\mu\text{m}$ .

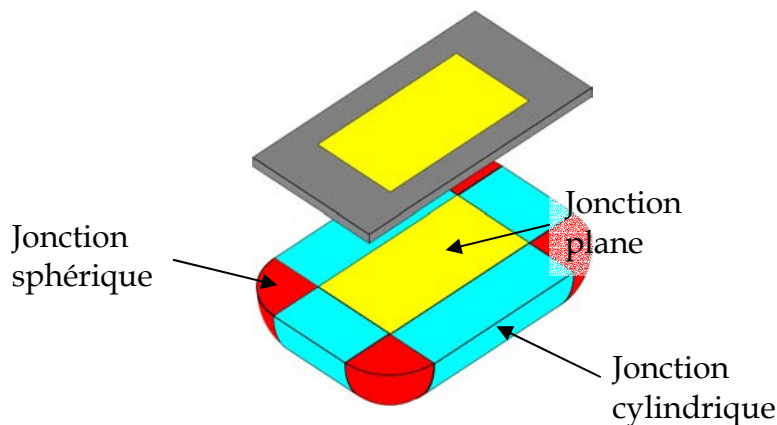


Figure 1 : Diode N<sup>+</sup>P verticale considérée en simulation

### 2) Simulation électrique bidimensionnelle sous ATLAS

La structure considérée est simulée électriquement, sous polarisations directe et inverse, au moyen de l'outil ATLAS. Les principales caractéristiques électriques sont alors comparées aux mesures expérimentales préalablement relevées sur les composants fabriqués et caractérisés en salle blanche. Ainsi, la comparaison entre résultats de mesures et simulations 2D peut être effectuée (Tableau 1).

Cette première phase permet de valider l'outil de simulation, ainsi que les modèles utilisés avant de progresser vers des simulations plus prospectives. Ces modèles sont décrits dans la documentation SILVACO et dans la littérature [2].

Sous polarisation directe, les simulations sont notamment basées sur le modèle classique de CAUGHEY THOMAS dans lequel la mobilité des porteurs est fonction du dopage et de la température.

Sous polarisation inverse, nous avons utilisé le modèle empirique de SELBERHERR, ce dernier est basé sur le calcul des coefficients d'ionisation en fonction du champ électrique.

	Diode mesurée	Diode simulée
Tension de claquage (V)	8,7	10,7
Tension de seuil (V)	0,7	0,8
Résistance série ( $\Omega$ )	4,83	2,27

Tableau 1 : Diode N<sup>+</sup>P avec un dopage Bore de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Comparaison entre les mesures et les simulations sous polarisations directe et inverse.

L'objectif pédagogique de cette approche CAO est d'introduire la notion de simulation bidimensionnelle qui ne peut être abordée analytiquement dans les travaux dirigés. Le composant considéré au niveau du simulateur est une diode de surface  $200 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$  et de profondeur de jonction usuellement fixée à  $1,5 \mu\text{m}$ . Cette surface diffère de la surface réelle ( $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ ) et le courant calculé par la simulation doit donc être corrigé du rapport de surface correspondant. La comparaison entre simulation et expérience peut alors être effectuée et les différences observées peuvent être commentées selon les trois points suivants :

i- la tension de claquage issue de la simulation est supérieure à la valeur mesurée. Cette différence peut être due à des fluctuations latérale et verticale du profil de dopage, de l'ordre de 10 à 20% . Par ailleurs, il est important de souligner que ces simulations sont basées sur un modèle de nature empirique qui n'a pas été affiné sur la technologie des composants réalisés par les étudiants. Une simulation 3D tenant compte de la géométrie exacte de la jonction réelle (voir Fig.1) pourrait être envisagée afin de mieux rendre compte des résultats expérimentaux.

ii- L'écart entre les tensions de seuil mesurées et simulées est également dû aux différences entre un composant "parfait " et un composant réel. Notons que ce paramètre électrique est déterminé expérimentalement à partir de la caractéristique I (V). De plus, l'influence de la finesse du maillage est évidemment capitale dans ce type de simulation, mais l'obtention de résultats dans des délais compatibles avec le temps imparti aux étudiants impose le choix d'un maillage grossier.

Par ailleurs, la caractéristique aux très bas niveaux de courant, conditionnée par les phénomènes de recombinaisons dans la zone dépeuplée et en surface, pourrait être simulée au moyen du modèle de Shockley-Hall-Read (SHR).

iii-la résistance série, très optimiste en simulation, ne tient compte que de la résistance du substrat alors que la mesure inclut quant à elle la résistance de contact face arrière (contact ohmique métal/ semiconducteur) .

### 3) Analyse de sensibilité aux paramètres.

#### 3.1. Influence du dopage du substrat sur la tension de claquage.

Afin de mettre en évidence l'influence du niveau de dopage de la région P sur la tension de claquage, nous effectuons plusieurs simulations en faisant varier sa valeur  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  à  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  (Tableau 2). Les résultats obtenus montrent que la tenue en tension évolue inversement au dopage. Cette étude permet ainsi d'observer le comportement électrique d'une diode Zener (fort dopage) et d'une diode classique. Les étudiants comparent ensuite les résultats simulés avec les résultats théoriques issus des calculs analytiques. La simulation 2D permet en particulier de prendre en compte le profil cylindrique, ce qui n'est pas possible analytiquement dans le cadre des travaux dirigés où seule l'approche théorique de la jonction plane est abordée. Par ailleurs, la configuration du champ électrique au claquage (Figure 2) est analysée. Les points importants sont : le profil de variation du champ, linéaire uniquement côté substrat et la valeur maximale à la jonction ( $E_M$ ) qui croît avec le dopage  $N_A$  du substrat . Notons que sur la figure 2, c'est le « net doping » qui est représenté, soit  $(N_D - N_A)$ . Parallèlement, il est possible d'extraire l'extension de la zone de charge d'espace dont la valeur est d'autant plus importante que la concentration en dopant est faible.

En ce qui concerne les contraintes qu'impose l'utilisation d'un tel simulateur, les étudiants sont sensibilisés à la problématique du temps de calcul. C'est là que la notion très importante du choix du maillage est abordée. En effet, un compromis entre précision et rapidité d'obtention des résultats leur est nécessaire, particulièrement ici quand il s'agit de traiter des tensions supérieures à 300V.

Dopage P ( $\text{cm}^{-3}$ )	$10^{18}$	$10^{17}$	$10^{16}$	$10^{15}$
$V_{\text{claquage}}$ (V)	8,7	19	60	330
$E_M$ ( $\text{kV.cm}^{-1}$ )	580	490	370	275
$R_{\text{série}}$ ( $\Omega$ )	4,83	6,24	38,6	320

Tableau 2 : Influence du dopage du substrat sur la tension de claquage, le champ électrique et la résistance série.

#### 3.2. Influence du dopage du substrat sur la résistance série.

L'influence de la même gamme de dopage sur la résistance série est étudiée sous directe. Les résultats reportés dans le tableau 2 montrent que ce paramètre augmente

lorsque le dopage diminue. Son incidence sur les caractéristiques courant-tension est reportée sur la figure 3.a. Afin de mieux rendre compte de la saturation du courant liée à la résistance série, nous reportons le tracé du courant en échelle logarithmique pour un fort dopage du substrat sur la figure 3.b.

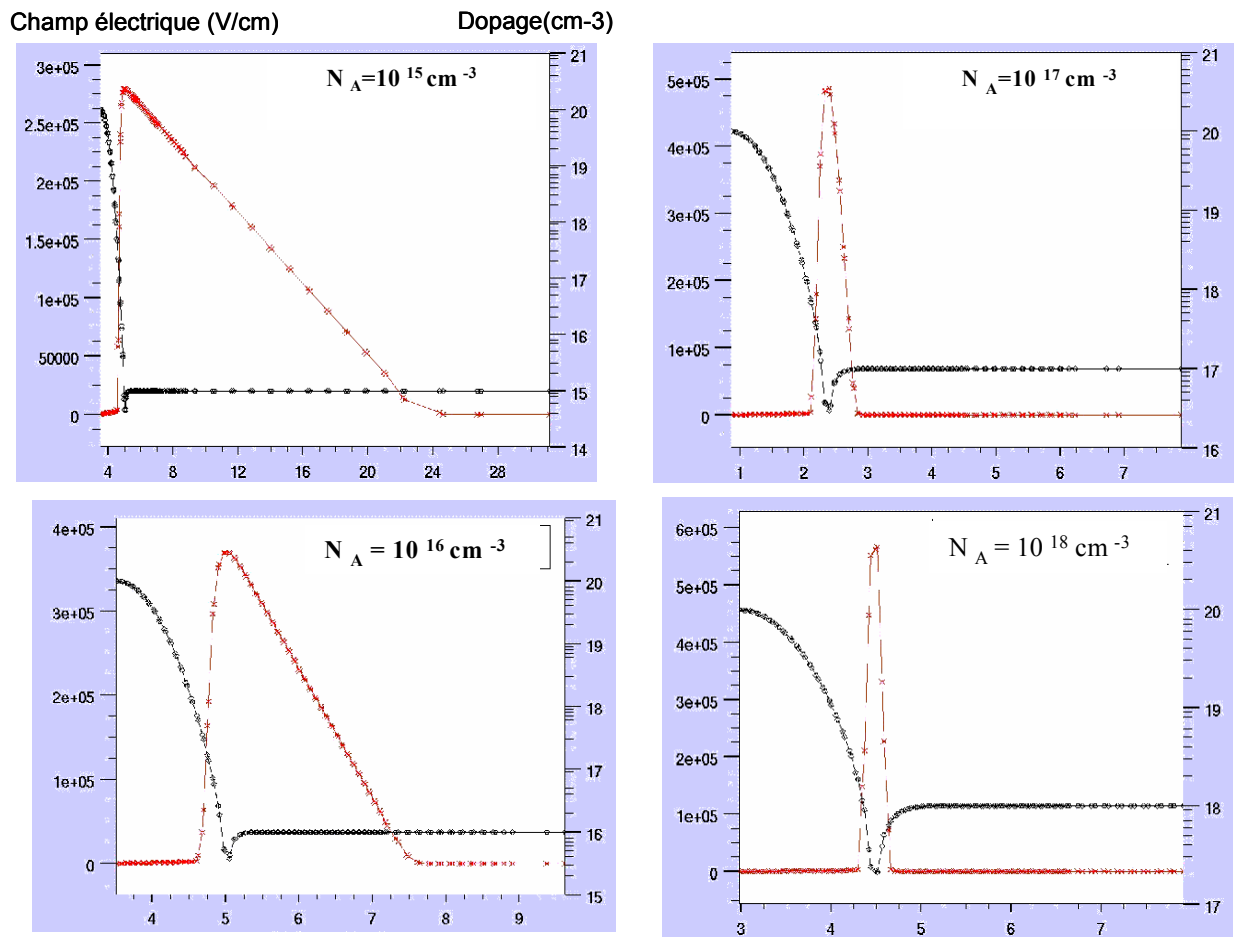


Figure 2 : Champ électrique au claquage pour 4 valeurs croissantes du dopage (simulations ATLAS)

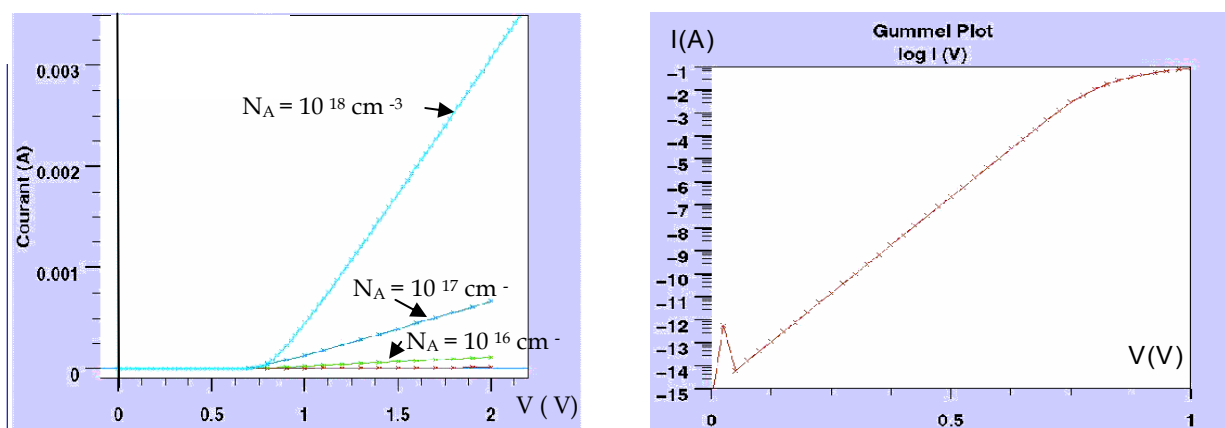


Figure 3 : Caractéristiques directes simulées a) I(V) pour différentes valeurs du dopage et b)  $\log I(V)$  pour  $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

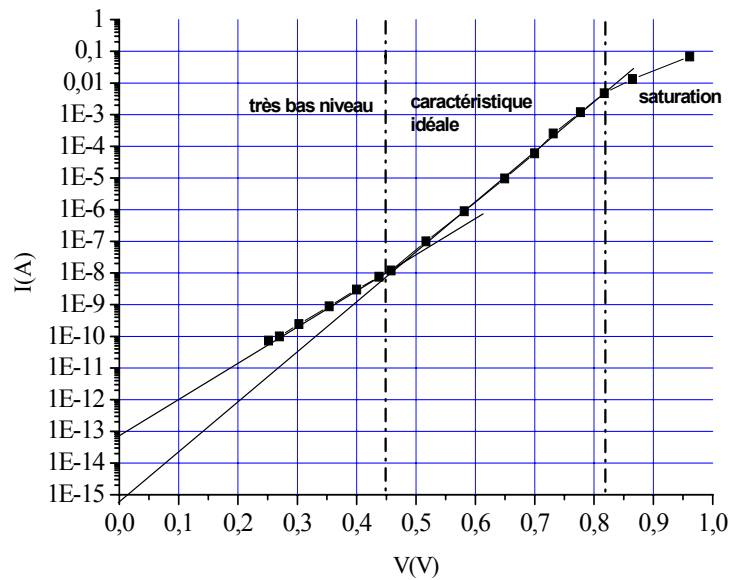


Figure4 : Caractéristique  $\log I(V)$  mesurée pour  $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

### 3.3. Comparaison simulation expérience.

La caractéristique reportée sur la figure 3.b, simulée sous ATLAS, ne fait pas apparaître le comportement de la diode aux très faibles niveaux de courant contrairement au relevé expérimental de la figure 4. En effet, le modèle rendant compte des phénomènes de recombinaisons (SHR) dans la zone dépeuplée et en surface n'est pas considéré dans cette initiation, mais une extension du projet pourrait consister à considérer la caractéristique bas niveaux dans la modélisation. Cependant, on peut noter la relativement bonne concordance de la partie « idéale » en comparant le courant inverse de saturation  $I_s$  extrapolé à partir de la zone idéale ( $I_s = 10^{-15} \text{ A}$ ) dans les deux cas ainsi que l'intensité atteinte sous  $V = 1\text{V}$  ( $0,1\text{A}$ ).

### 3.4. Influence du matériau sur la tension de seuil.

En outre, il peut être intéressant d'étudier le rôle de divers autres matériaux (Ge, SiGe, AsGa) sur la tension de seuil à un dopage fixé. C'est principalement l'influence de la largeur de la bande interdite  $E_g$  et par conséquent de la concentration intrinsèque qui est la plus significative, celle-ci variant en  $\exp(-E_g/kT)$ .

## II. Formation 3<sup>ème</sup> cycle : le transistor NMOS à grille en polysilicium.

Pour la formation en troisième cycle, le composant étudié est le transistor NMOS à enrichissement et à grille en polysilicium. La méthodologie appliquée est identique à celle utilisée dans le cadre du second cycle. En effet, une semaine est consacrée à la réalisation technologique et à la caractérisation expérimentale du transistor MOS, suivie de deux journées qui sont dédiées aux simulations technologique de fabrication (ATHENA) et électrique (ATLAS).

## 1) Simulation du procédé technologique sous ATHENA.

Le substrat de départ d'orientation  $\langle 100 \rangle$  est de type P, la concentration en impuretés est de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . La fenêtre de simulation technologique correspond à la moitié du transistor MOS (1/2 grille + source/drain) et les dimensions sont de  $30 \mu\text{m}$  en X et  $30 \mu\text{m}$  en Y. Le premier point essentiel sur lequel les étudiants sont sensibilisés est le maillage de la structure. En effet, le compromis temps de simulation/précision est primordial. La première mesure porte sur la résistance carrée du substrat.

Par la suite, l'ensemble des 11 opérations structure de la figure 4. La première opération correspond à l'oxydation de masquage : l'épaisseur d'oxyde obtenue est comparée à celle mesurée expérimentalement par ellipsométrie. Les étapes d'oxydation sont calquées sur celles réalisées en salle blanche (voir tableau 3). L'étudiant a le choix entre une simulation 1D ou bien une approche 2D. Il est ainsi sensibilisé à l'impact de ce choix sur le temps de simulation. La seconde opération correspond à l'ouverture de la fenêtre de diffusion. La troisième, l'une des plus essentielles, porte sur la réalisation de l'oxyde de grille sous atmosphère sèche pendant 20 min avec un débit d' $\text{O}_2$  de 2 l/min. Les étudiants doivent, par rapport au résultat obtenu, modifier la durée de l'oxydation ou sa température pour s'ajuster à l'épaisseur réellement obtenue en salle blanche (60 à 80 nm). Le dépôt de  $0,3 \mu\text{m}$  de polysilicium constitue la quatrième opération. La gravure du polysilicium fixe la longueur de grille à  $6 \mu\text{m}$ . La sixième opération est le prédépôt de phosphore permettant la réalisation des régions de drain et de source. A titre indicatif, le tableau 4 donne les paramètres de ce prédépôt. A ce stade, les étudiants doivent déterminer la concentration de phosphore introduite dans le silicium. La septième opération correspond à la redistribution qui est effectuée à une température de  $1100^\circ\text{C}$  pendant 30 min sous une atmosphère inerte. La profondeur de la jonction, la longueur effective du canal et la concentration de phosphore sont alors déterminées. Les étudiants observeront aussi la conservation de la dose de phosphore entre l'étape de prédépôt et celle de redistribution. Dans cet article, le transistor est caractérisé par une grille dessinée de  $6 \mu\text{m}$  soit une longueur effective de canal de l'ordre de  $3 \mu\text{m}$  compte tenu des diffusions latérales de drain et de source. La comparaison de ce dernier paramètre avec la valeur obtenue pendant l'opération de prédépôt permet de mettre en évidence le phénomène d'exodiffusion. L'impact de la précision du maillage a aussi un rôle significatif sur cette évaluation. Les opérations 8, 9 et 10 correspondent respectivement au dépôt par LPCVD de l'oxyde de passivation, à l'ouverture des contacts, puis au dépôt et à la gravure de la métallisation. La dernière opération consiste à réaliser un « miroir » de la demi - cellule simulée jusqu'à présent, afin d'obtenir par symétrie le composant transistor MOS complet.

Température	Temps	Débits
800 à 1100°C	25 min	N <sub>2</sub> =1 l/min
1100°C	40 min	H <sub>2</sub> =2,7 l/min et O <sub>2</sub> =1,5 l / min
1100°C	30 min	O <sub>2</sub> = 2,2 l / min
1100°C	10 min	A r =1,5 l / min
1100°C à 800°C	60 min	N <sub>2</sub> = 1 l / min

Tableau 3 : Etapes de l'oxydation de masquage

Température	Temps	Débits
1500°C	5 min	N <sub>2</sub> = 2 l/min et O <sub>2</sub> =0,1 l / min
1500°C	5 min	O <sub>2</sub> = 0,1 l/min et POCL <sub>3</sub> = 5mg/min
1500°C	5 min	N <sub>2</sub> =2 l /min et O <sub>2</sub> =0,1 l/min

Tableau 4 : Etapes du prédépôt de phosphore

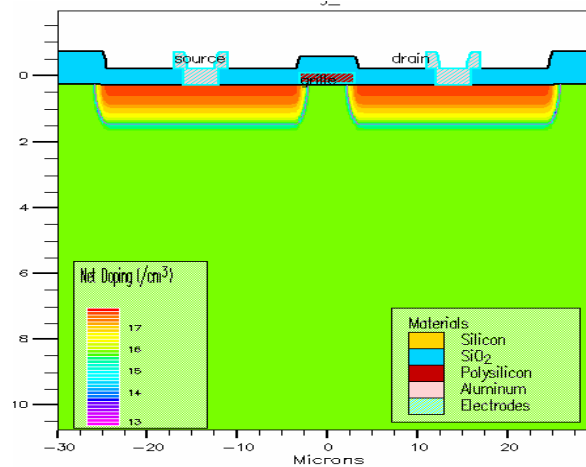


Figure 5 : Vue en coupe de la structure.  $N_{sub} = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $L_{grille} = 6 \mu\text{m}$

## 2) Simulations électriques sous ATLAS

Les résultats les plus significatifs issus de la simulation électrique du transistor NMOS sont reportés sur les figures 7, 8, 9 et 10. La figure 5 est une vue en coupe de la structure non polarisée. La figure 6 illustre la structure polarisée à  $V_{GS} = 3 \text{ V}$  et à faible potentiel de drain  $V_{DS} = 0,4 \text{ V}$  d'une part ( 6.a) et à fort potentiel de drain  $V_{DS} = 10 \text{ V}$  d'autre part ( figure 6.b). Nous pouvons observer la zone de charge d'espace sous le canal et sous la région de drain, son étendue étant bien évidemment fonction des potentiels de



grille et de drain. Par ailleurs, sur la figure 6.c, nous représentons les variations de la concentration en électrons dans le canal à  $V_{GS}$  fixé pour les deux tensions de drain, 400mV et 10V. L'ordonnée représente l'exposant.

En ce qui concerne les caractéristiques courant-tension, il est important d'analyser la caractéristique de transfert  $I_D(V_{GS})$  en régime de saturation à  $V_{DS} = 5$  V en traçant le graphe  $I_D^{1/2}(V_{GS})$  qui en découle et qui est plus facile à exploiter (figure 7). Par la suite, la mise en évidence de l'influence des composantes longitudinales et transversales du champ électrique sur la mobilité des électrons dans le canal, et par conséquent sur la transconductance du dispositif, peut être faite en introduisant dans le simulateur un modèle classique de mobilité.

Ce modèle est ici le modèle CVT de LOMBARDI *et al* [2]. Les caractéristiques simulées montrent des pentes différentes que l'on peut attribuer à la dégradation de la mobilité aux fortes tensions de drain avec le modèle CVT. On peut noter dans notre exemple une dégradation de l'ordre de 40 % de cette mobilité. La figure 8 montre par ailleurs le réseau de caractéristiques de sortie  $I_D(V_{DS}, V_{GS})$  tenant compte soit du modèle à mobilité fixe ou bien du modèle CVT.

### 3) Comparaison avec les résultats expérimentaux.

Ces comparaisons sont effectuées sur les paramètres fondamentaux de ce même composant ( $6 \mu\text{m} \times 180 \mu\text{m}$ ) à savoir, la résistance à l'état passant  $R_{ON}$ , la tension de seuil  $V_T$  et la transconductance  $g_m$  qui sont déduites de la caractéristique de transfert  $I_D(V_{GS})$  ou encore du tracé  $I_D^{1/2}(V_{GS})$  précédemment évoqué (figure 7). Les différences entre valeurs expérimentales et valeurs simulées avec le modèle de mobilité CVT sont relativement faibles (tableau 5). En ce qui concerne la tension de seuil, fortement dépendante de la tension de bande plate à travers la différence entre les travaux de sortie de la grille et du substrat et à travers les états d'interface, la valeur simulée est inférieure à la valeur extraite des mesures.

Ceci doit être attribué d'une part au calcul des travaux de sortie mais aussi à la concentration  $Q_{SS}$  introduite pour traduire l'influence des états d'interface. Dans ces simulations,  $Q_{SS} = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ , valeur légèrement supérieure à celle qui est habituellement extraite des mesures  $C(V)$ . Les figures 9 et 10.a et 10.b illustrent respectivement le réseau de caractéristiques, la caractéristique de transfert  $I_D(V_{GS})$  et sa racine carrée pour  $V_{DS} = 5$  V.

5.a)

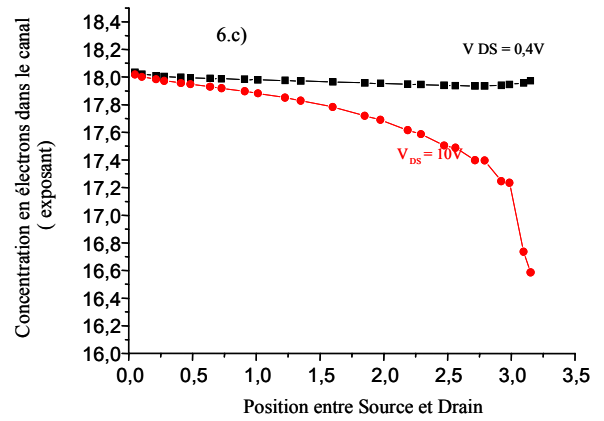
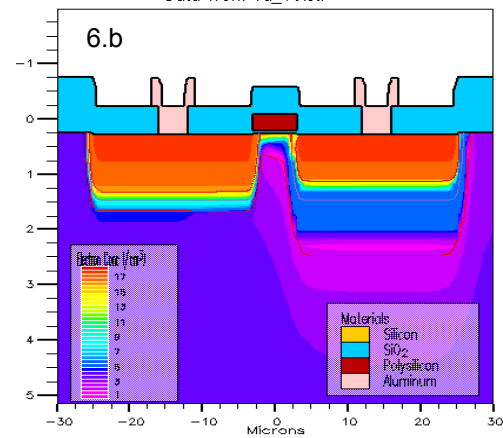
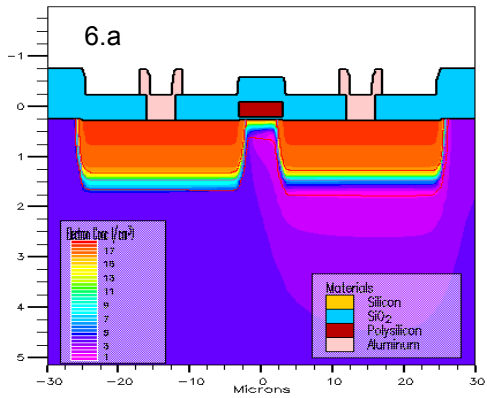


Figure 6 : Structure sous polarisation :  $V_{GS} = 3V$ . a)  $V_{DS} = 0,4V$ , b et c)  $V_{DS} = 10V$ .

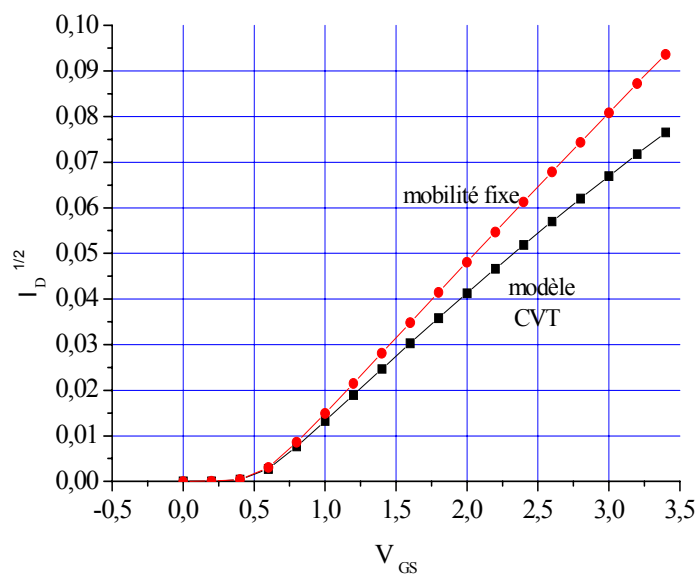


Figure 7 : Caractéristique  $\sqrt{I_D}(V_{GS})$  simulée pour  $V_{DS} = 5V$ .

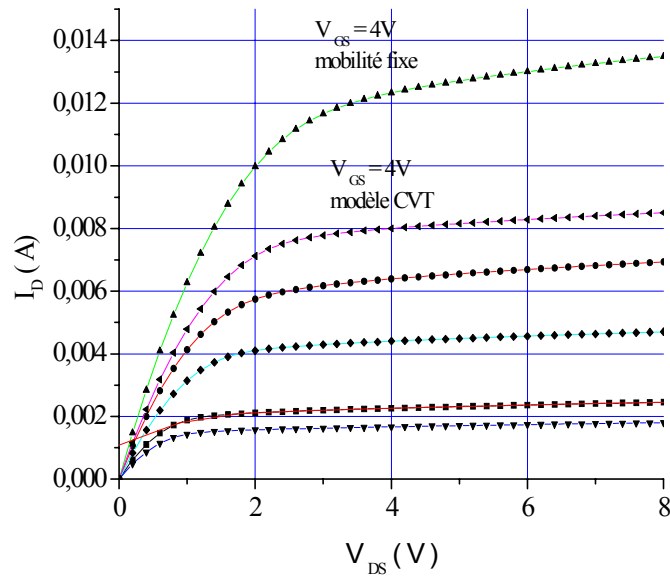


Figure 8 : Réseau de caractéristiques avec mobilité fixe et avec le modèle CVT.

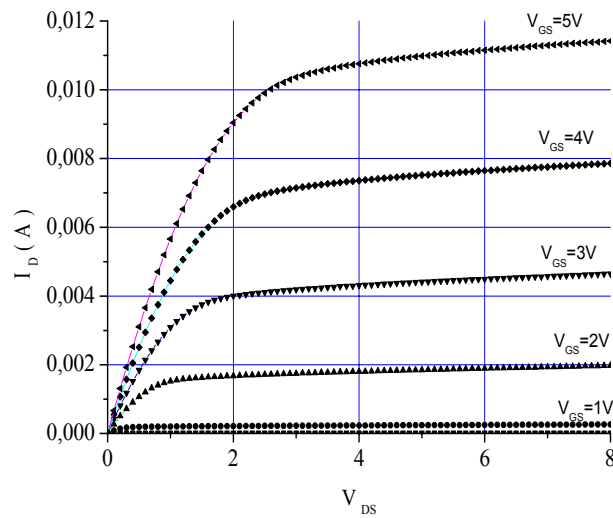


Figure 9 : Réseau de caractéristiques mesurées.

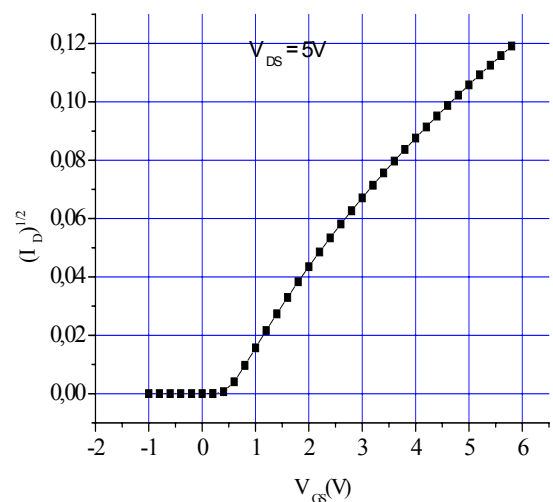
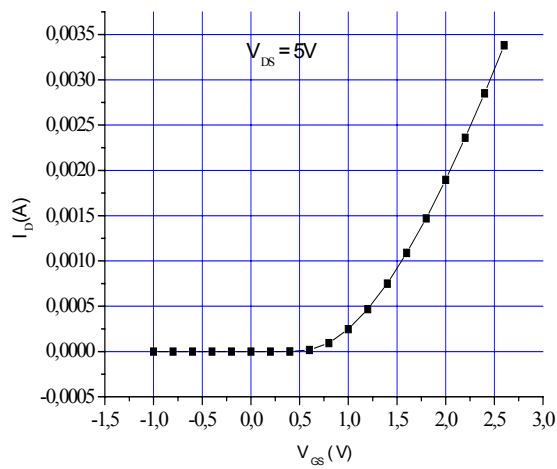


Figure 10 : a) Caractéristique de transfert mesurée  $I_D(V_{GS})$  pour  $V_{DS} = 5\text{ V}$  et b) variations de  $\sqrt{I_D}(V_{GS})$  pour  $V_{DS} = 5\text{ V}$ .

#### 4) Conclusion

En conclusion, nous pouvons considérer que l'initiation aux outils de simulation 2D est un bon complément de formation à l'approche unidimensionnelle simplifiée introduite en cours et travaux dirigés, tant en physique du composant qu'en technologie. L'approche expérimentale est bien sûr indispensable, voire obligatoire dans un contexte de simulation utilisant ATLAS. Une formation pratique préalable à la technologie est la bienvenue dans le cadre de l'approche ATHENA. Dans tous les cas, la comparaison mesures simulations 2D doit être présente afin de développer l'esprit critique de l'étudiant.

Cette approche prend tout son intérêt dans le cadre de formations aux métiers de la conception au sens large du terme, tant sur le plan de la microélectronique que des microsystèmes.

#### Références bibliographiques.

[1] SILVACO International Users manual ([www.silvaco.com](http://www.silvaco.com))

[2] ATLAS users manual vol.1. A physically based mobility model for numerical simulation of non - planar devices, IEEE tans. On CAD, Nov 1988, p 1664.

#### Remerciements

Nous remercions l'ensemble du personnel de l'Atelier Inter Universitaire de Microélectronique tant de la salle blanche que de la CAO.