

Modélisation des porteurs libres et de la température excédentaire dans le Silicium sous illumination laser intense

Fabian Dortu

Katholieke Universiteit Leuven (KUL)

Interuniversitair MicroElectronica Centrum (IMEC)



SEEDS FOR
TOMORROW'S
WORLD

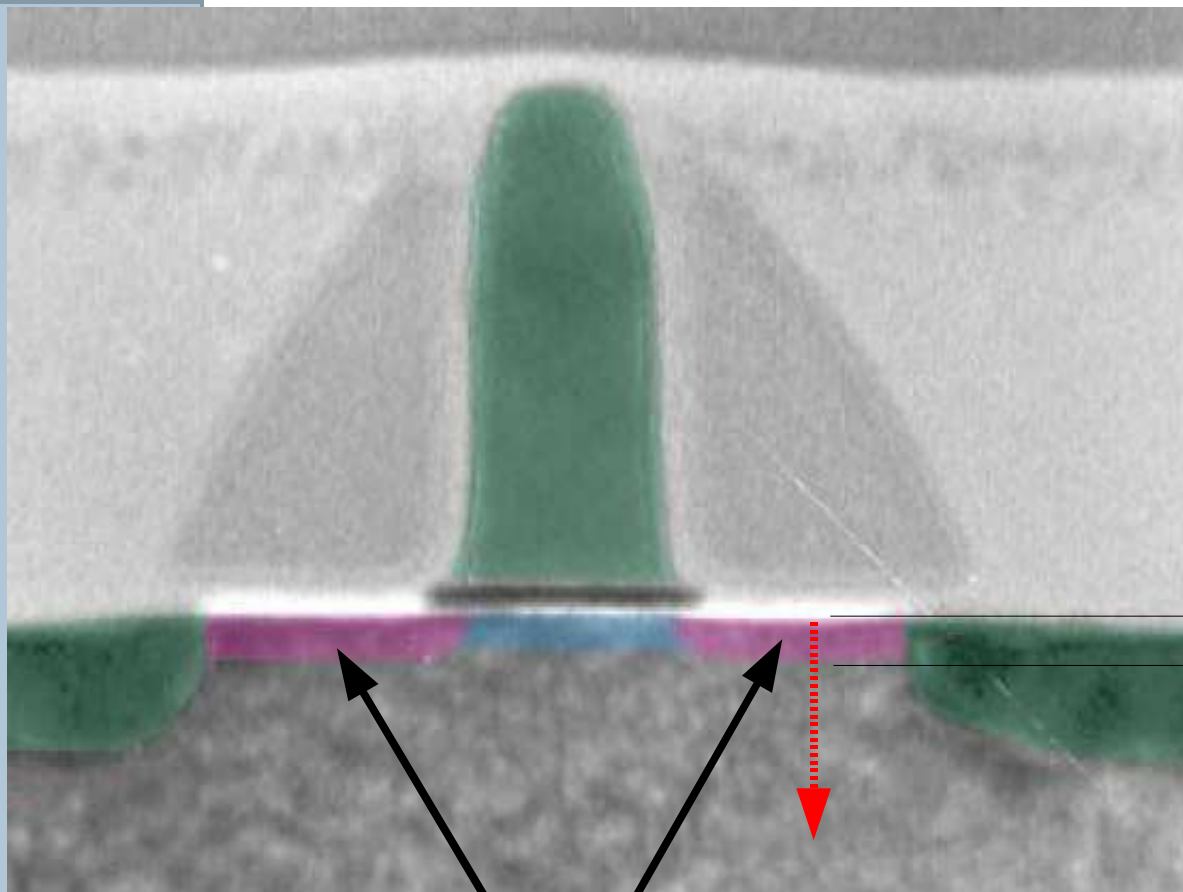
IMECNOLOGY

Résumé

- **“Carrier Illumination”**, une technique de Photo-Reflectance Modulée pour la mesure des porteurs libres dans les Ultra-Shallow-Junctions (USJ) – **Principe général.**
- Modélisation du problème
 - Drift-Diffusion des porteurs libres excédentaires.
 - Diffusion de la chaleur excédentaire.
- Résolution
 - Comparaison logiciels propriétaires et libres
 - Résolution avec FreeFEM++ (porteurs libres + température)
- Développement sous FreeFEM++ d'un environnement intégré: FSEM (Finite Element for SEMiconductor with FreeFEM)

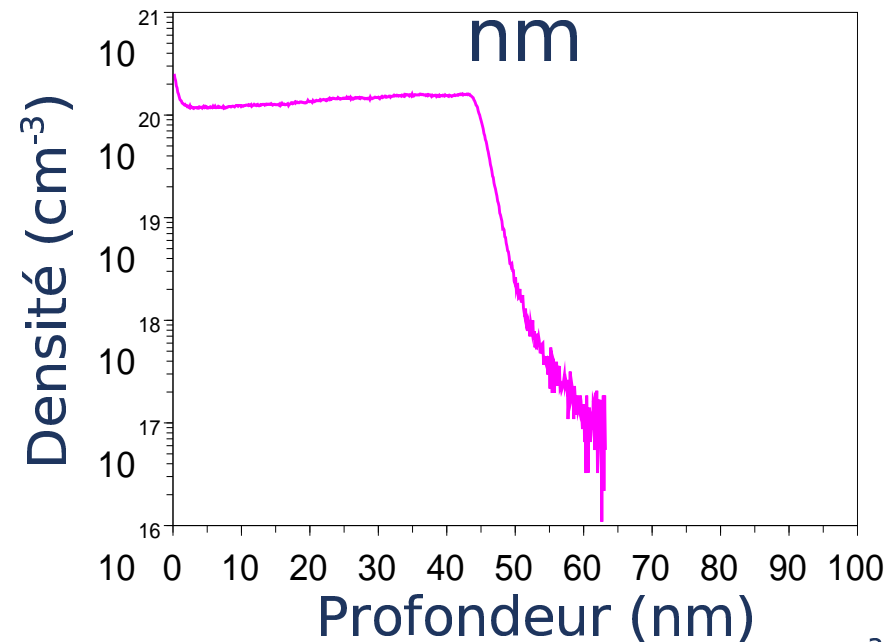
Besoin de caractériser les USJ dans les MOSFET

- Densité d'atome dopants (10^{17} - $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$)
- Activation électrique \rightarrow densité de porteurs libres
- épaisseur (5-50 nm)

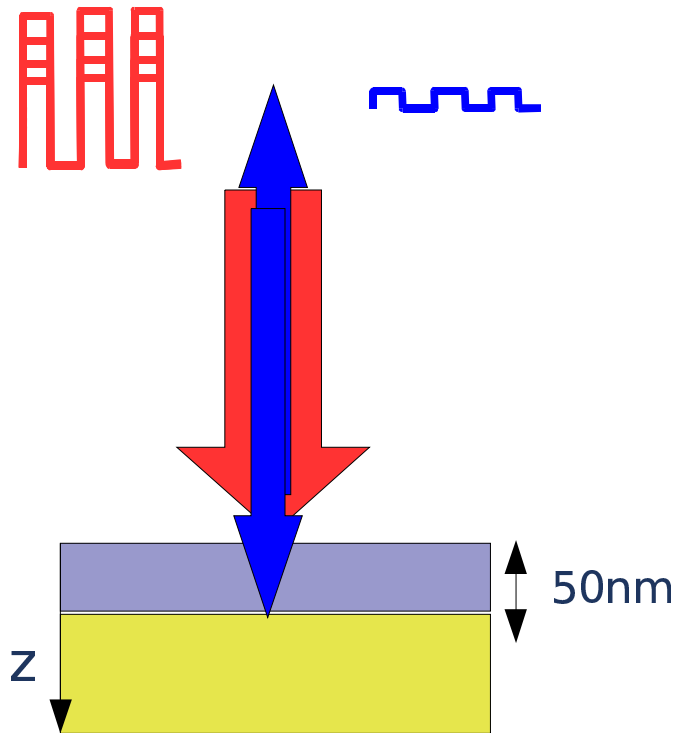


\updownarrow < 50 nm

Ultra Shallow Junction (USJ) =
Région d'extension de la
source et du drain



“Carrier Illumination™”, une technique de Photo Reflectance Modulée pour la caractérisation des USJ



- 2 laser beams:
 - **Sonde** ($8e5 \text{ W/cm}^2$)
 - **Pompe** ($0 \text{ à } 3e5 \text{ W/cm}^2$) (modulée à 2 kHz)

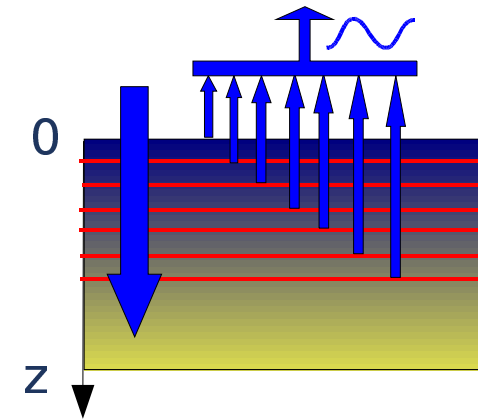
Le signal récupéré est la variation de la réflectance due à la modulation du laser pompe en fonction de sa puissance: $\Delta R(P) / R$

$\Delta R(P)/R$ est fonction des porteurs libres et de la température excédentaire

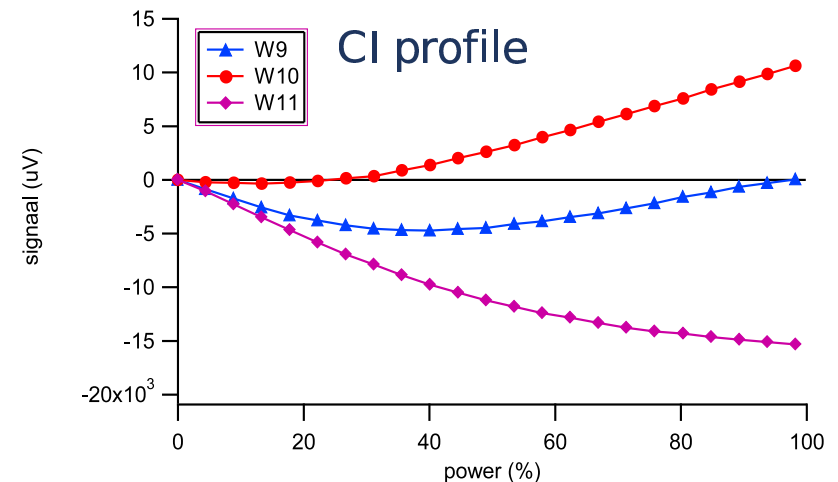
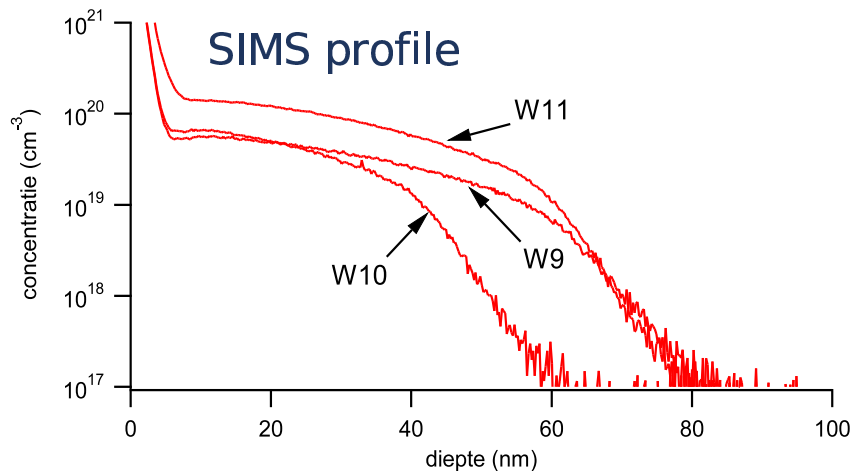
- Le signal réfléchi résulte de l'interférence des ondes réfléchies par le gradient de l'indice de réfraction excédentaire:

$$CI_{sig} \sim \frac{\Delta R(P)}{R} \sim \Delta n(P, z=0^+) + \int_{0^+}^{\infty} \cos\left(\frac{4\pi n z}{\lambda}\right) \frac{d\Delta n(P, z)}{dz} dz$$

- L'indice de réfraction est fonction
 - Des porteurs libres excédentaires $\Delta N(P, z)$
 - De la température excédentaire $\Delta T(P, z)$



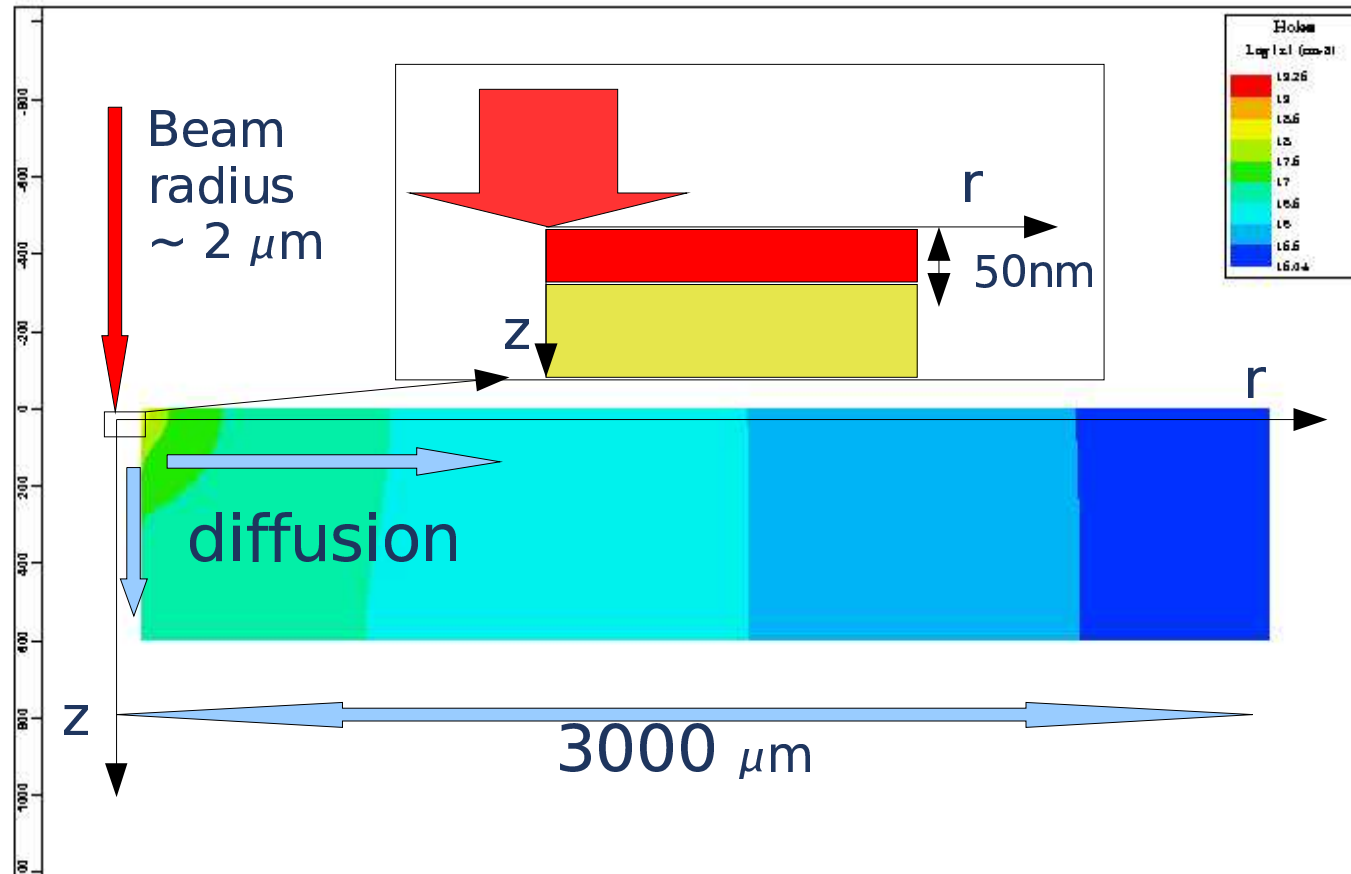
$$CI_{sig} \sim \frac{\Delta R(P)}{R} \sim |B| \left(\Delta N(P, z=0^+) + \int_{0^+}^{\infty} \cos\left(\frac{4\pi n z}{\lambda}\right) \frac{d\Delta N(P, z)}{dz} dz \right) - \delta \Delta T(P, z=0^+)$$



Résumé

- **“Carrier Illumination”**, une technique de Photo-Reflectance Modulée pour la mesure des porteurs libres dans les Ultra-Shallow-Junctions (USJ) – **Principe général.**
- **Modélisation du problème**
 - **Drift-Diffusion des porteurs libres excédentaires**
 - Diffusion de la chaleur excédentaire.
- **Résolution**
 - Comparaison logiciels propriétaires et libres
 - Résolution avec FreeFEM++ (porteurs libres + température)
- Développement sous FreeFEM++ d'un environnement intégré: FSEM (Finite Element for SEMiconductor with FreeFEM)

Modélisation des équations de drift-diffusion dans un domaine 3D axisymétrique



Bien que la topologie du domaine soit simple, les différents ordres de grandeurs rendent le problème complexe (mesh non uniforme):

- $X_j < 50 \text{ nm}$
- Laser radius = $2e3 \text{ nm}$
- Diffusion length = $\text{sqrt}(D \tau) \sim 1e6 \text{ nm}$ ($D \sim 20 \text{ cm}^2/\text{s}$, $\tau \sim 10^{-4} \text{ s}$)

Equations de Poisson et drift-diffusion

Substrat homogène

$$\epsilon \Delta \psi = -q(p - n + N_D - D_A)$$

$$\begin{aligned} 1/q \nabla \cdot (J_n) &= (U_n - G_n) \\ 1/q \nabla \cdot (J_p) &= -(U_p - G_p) \end{aligned} \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} J_n &= -q \mu_n n \nabla \phi_n \\ J_p &= -q \mu_p p \nabla \phi_p \end{aligned}$$

$$-D_a \nabla \cdot \nabla \Delta n = G - U$$

$$\Delta n = 0 \quad \text{in } \delta \Omega_d$$

$$\frac{d \Delta n}{ds_n} = 0 \quad \text{in } \delta \Omega_n$$

$$n = n_0 + \Delta n$$

$$p = p_0 + \Delta p$$

Où μ (mobilité), U (recombinaison/génération nette) et G (génération externe) sont fonctions de Ψ , n et p . n_0 et p_0 sont les concentrations à l'équilibre.

En pratique,

$$\begin{aligned} U_n &= U_p = U_{\text{auger}} + U_{\text{SRH}} \\ G_n &= G_p = G_{\text{ind,phonon}} \end{aligned}$$

$$U_{\text{SRH}}(n, p) = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_p(N_a, N_d)(n + n_{ie} \exp(E_{\text{trap}}/kT)) + \tau_n(N_a, N_d)(p + n_{ie} \exp(E_{-trap}/kT))}$$

$$U_{\text{auger}}(n, p) = A_n(pn^2 - nn_{ie}^2) + A_p(np^2 - pn_{ie}^2)$$

$$G(r, z) = I_{\text{las}} / E^{\text{phot}} e^{-\left(\frac{r}{R_{\text{las}}}\right)^2} R \alpha_{\text{bba}} e^{-\alpha_{\text{bba}} z} \quad \text{avec} \quad \alpha_{\text{bba}} = \alpha_{\text{bba}}(E_{\text{gap}}, E^{\text{phot}}, E^{\text{phon}}, T)$$

$$D_a = \frac{(p+n) D_n D_p}{p D_p + n D_n}$$

Résumé

- **“Carrier Illumination”**, une technique de Photo-Reflectance Modulée pour la mesure des porteurs libres dans les Ultra-Shallow-Junctions (USJ) – **Principe général.**
- **Modélisation du problème**
 - Drift-Diffusion des porteurs libres excédentaires.
 - **Diffusion de la chaleur excédentaire.**
- **Résolution**
 - Comparaison logiciels propriétaires et libres
 - Résolution avec FreeFEM++ (porteurs libres + température)
- Développement sous FreeFEM++ d'un environnement intégré: FSEM (Finite Element for SEMiconductor with FreeFEM)

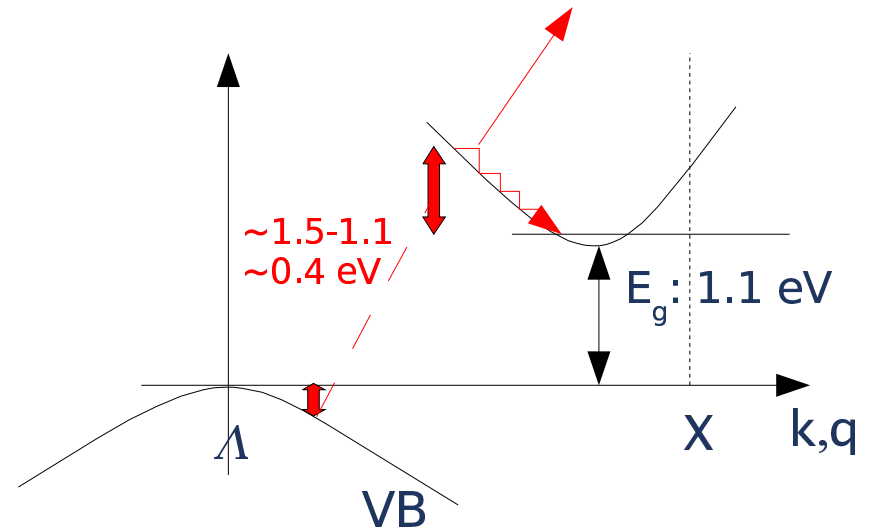
Equation de la chaleur

$$-k\nabla \cdot \nabla T = H_{hc} + H_{rec}, \quad T = T_0 \text{ in } \delta\Omega_d, \quad \frac{dT}{dn} = 0 \text{ in } \delta\Omega_n$$

Eq. linéaire mais couplée à Δn

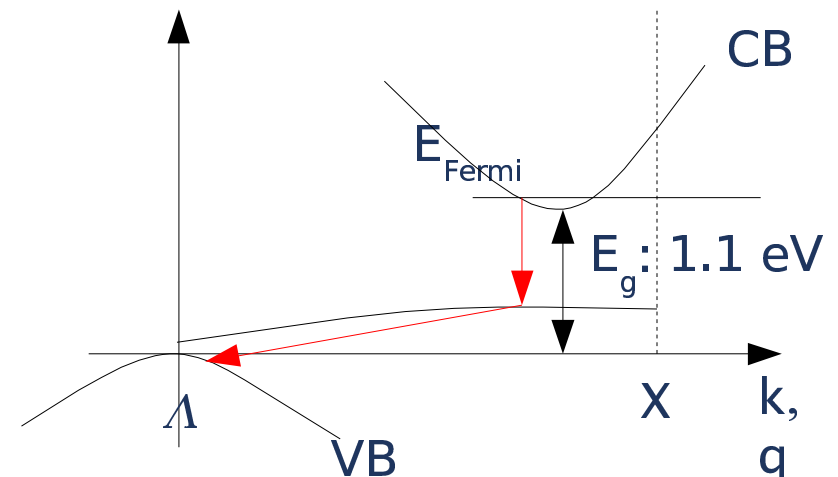
Terme source (hot carriers)
dépendant de la position:

$$H_{hc}(r, z) = I_{las} \frac{E^{phot} - E^{gap}}{E^{phot}} e^{-\left(\frac{r}{R_{las}}\right)^2} R\alpha_{bba} e^{-\alpha_{bba} z}$$



Terme source dépendant du taux de recombinaison des porteurs libres:

$$H_{rec}(\Delta n) = U(\Delta n) E_{gap}$$



Résumé

- **“Carrier Illumination”**, une technique de Photo-Reflectance Modulée pour la mesure des porteurs libres dans les Ultra-Shallow-Junctions (USJ) – **Principe général.**
- Modélisation du problème
 - Drift-Diffusion des porteurs libres excédentaires.
 - Diffusion de la chaleur excédentaires.
- **Résolution**
 - **Comparaison logiciels propriétaires et libres**
 - Résolution avec FreeFEM++ (porteurs libres + température)
- Développement sous FreeFEM++ d'un environnement intégré: FSEM (Finite Element for SEMiconductor with FreeFEM)

Logiciels de résolutions

- Logiciels propriétaires de “Semiconductor Device Simulation” (disponibles à l'IMEC)
 - Avantages:
 - équations déjà implémentées.
 - Sélection de modèles par l'usage de drapeaux.
 - Connaissance des méthodes de résolution non requise.
 - Désavantages:
 - Orienté transistor et pas opto-électronique.
 - Ajouts de nouvelles équations/modèles par l'utilisateur impossible (sauf dans certains cas simples).
 - Prix exorbitant (licence à 11k USD / 3 ans).
 - Limitation du nombre de noeuds (<60k).
 - Bugs nombreux et temps de réponse pour obtenir une correction/hack de l'ordre de l'année.

Logiciels de résolution

- Logiciels libres
 - MOUSE (volumes finis) – hard coded
 - GetDP (éléments finis), développé à l'ULg et similaire à FreeFEM++
 - Désavantage
 - Peu souple. Ex:
 - méthode de Newton est codée en dur.
 - Difficile de chaîner des résolutions.
 - Avantage
 - Forum de discussion (mailing list)
 - FreeFEM++
 - Avantage
 - Très souple (notamment grâce aux macros)
 - Très performant
 - Bonne documentation
 - Désavantage
 - Pas de forum de discussion pour partager l'infos entre les utilisateurs

Résumé

- **“Carrier Illumination”**, une technique de Photo-Reflectance Modulée pour la mesure des porteurs libres dans les Ultra-Shallow-Junctions (USJ) – **Principe général.**
- Modélisation du problème
 - Drift-Diffusion des porteurs libres excédentaires.
 - Diffusion de la chaleur excédentaire.
- **Résolution**
 - Comparaison logiciels propriétaires et libres
 - **Résolution avec FreeFEM++ (porteurs libres + température)**
- Développement sous FreeFEM++ d'un environnement intégré: FSEM (Finite Element for SEMiconductor with FreeFEM)

Formulation variationnelle de l'équation de diffusion

$$\begin{aligned}
 -\nabla \cdot (c(u) \nabla u) + a(u) u &= f(u) \quad \text{sur } \Omega \\
 c \cdot \nabla(u) \cdot n + qu &= g \quad \text{sur } \delta \Omega_n \\
 u &= r \quad \text{sur } \delta \Omega_d
 \end{aligned}$$

Après multiplication par

une fonction test v : $\int_{\Omega} (c \nabla u \cdot \nabla v + a u v - f v) d\Omega - \int_{\delta \Omega} (-qu + g) v d\delta \Omega = 0, \quad \forall v$

Fonctions u et v : $u(r) = \sum_{i=1}^N U_i \phi_i(r)$

L'équation (forme matricielle) devient: $\rho = (K^c + M^a + Q^g) U - F^f - G^g = 0$

$$K_{ij}^c = \int_{\Omega} c \nabla \phi_j \cdot \nabla \tau_i d\Omega$$

$$M_{ij}^a = \int_{\Omega} a \phi_j \tau_i d\Omega$$

$$Q_{ij}^g = \int_{\delta \Omega} q \phi_j \tau_i d\delta \Omega$$

$$F_i^f = \int_{\Omega} f \tau_i d\Omega$$

$$G_i^g = \int_{\delta \Omega} g \tau_i d\delta \Omega$$

En pratique
on utilise
 $\phi_i = \tau_i$

Le jacobien est approximé par:

$$J_{ij} = \frac{\delta \rho_i}{\delta U_j} = K^c + M^{(a-f)} + \text{diag}((K^c + M^a) U)$$

Itération de Newton:

$$U_{n+1} = U_n - J_n^{-1} \rho(U_n)$$

Note sur le calcul du Jacobien

Exemple de calcul du Jacobien pour la partie relative à K:

$$\rho = (K^c + M^a + Q^g) U - F^f - G^g = 0$$

$$K_{ij}^c = \int_{\Omega} c \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \, d\Omega$$

$$J_{ij}^K = \frac{\delta \rho_i}{\delta U_j}$$

$$\rightarrow J_{ij}^K = \frac{\delta \rho_i^K}{\delta U_j} = \frac{\delta (KU)_i}{\delta U_j} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} \sum_I c(U + \epsilon \phi_j) \nabla \phi_I \nabla \phi_i \, dx (U_I + \epsilon_{I,j}) - c(U) \nabla \phi_I \nabla \phi_i \, dx (U_I) \right)$$

avec $c(U + \epsilon \phi_j) = c(U) + \frac{dc}{du} \epsilon \phi_j$

$$\rightarrow J_{ij}^K = \frac{\delta \rho_i^K}{\delta U_j} = \frac{\delta (KU)_i}{\delta U_j} = \underbrace{\int_{\Omega} c(U) \nabla \phi_j \nabla \phi_i \, dx}_{K_{ij}^c} + \underbrace{\sum_I \int_{\Omega} \phi_j \frac{dc}{du} \nabla \phi_I \nabla \phi_i \, dx U_I}_{\text{Remplacé par la matrice formée avec la somme des lignes (lumped approx.)}}$$

K_{ij}^c

Remplacé par la matrice formée avec la somme des lignes (lumped approx.)

$$\text{diag}(K^{(c')} U)$$

Résumé

- **“Carrier Illumination”**, une technique de Photo-Reflectance Modulée pour la mesure des porteurs libres dans les Ultra-Shallow-Junctions (USJ) – **Principe général.**
- Modélisation du problème
 - Drift-Diffusion des porteurs libres en excès.
 - Diffusion de la chaleur en excès.
- Résolution
 - Comparaison logiciels propriétaires et libres
 - Résolution avec FreeFEM++ (porteurs libres + température)
- Développement sous FreeFEM++ d'un environnement intégré: FSEM (Finite Element for SEMiconductor with FreeFEM)

Pourquoi FSEM?

Réunir les avantages des logiciels commerciaux et de FreeFEM, à savoir:

- Permettre à l'**utilisateur**, d'utiliser le programme facilement: sélection des équations/formulations/modèles par l'usage de flags
- Permettre à l'**utilisateur moyennement avancé** d'ajouter un nouveau modèle facilement
- Permettre à l'**utilisateur avancé** d'ajouter de nouvelles équations/formulations/méthode de résolution

Exemple de fichier FSEM

```
include "../..//fsemincl.edp" /* Main include. Load all FSEM macros */
include "fsem_SolverPar_template.edp" /* Load default solver parameter */
include "fsem_ModUsrPar_template.edp" /* Load default user parameter */
include "fsem_TEST_2d_geo.edp" /* Load mesh definition */
```

```
/* Contact definition */
```

```
macro AllContactCarr() ContactOhm(outer) //
```

```
macro AllContactTemp() ContactTemp(bottom, 300) ContactTemp(outer, 300) //
```

```
/* Model initialisation */
```

```
int NRegions=1;
```

```
UsrModInit(NRegions);
```

```
/* Define laser parameters (radius, intensity, ...)*/
```

```
ParUsrLaserN = 1; // number of laser
```

```
real[int] ParUsrLaserE(ParUsrLaserN); // Photon energy [eV]
```

```
real[int] ParUsrLaserI(ParUsrLaserN); // intensity [W m-2]
```

```
...
```

Macros et variables (real, table, fespace, ...) en turquoise doivent être définis par l'utilisateur

Macros et variables (real, table, fespace, ...) en bleu sont prédéfinis dans FSEM

Exemple de fichier FSEM (suite 1)

```
Vh VarXCGuess; /* Declaration du vecteur solution */
```

```
ModUsrBGNSlotboom = 1;
```

```
ModUsrBTBIP0 = 1;
```

```
ParUsrTemp = 300;
```

```
VarXCGuess=0;
```

```
{
```

```
SolveCarrLn(VarXCGuess, Vh);
```

```
}
```

Solution système linéaire utilisée comme solution initiale au problème non linéaire

```
ModUsrRecAuger=1;
```

```
ModUsrRecSRH=1;
```

```
Vh VarXC1;
```

```
VarXC1 = VarXCGuess;
```

```
Vh HeatGenAll;
```

```
{
```

```
SolveCarrNln(VarXC1, Vh, VarXC1);
```

```
ModUsrHeatHotCarrier=1;
```

```
ModUsrHeatRec=1;
```

```
ComputeHeatGen(HeatGenAll, ParDepEGap, ParDepAlpha, ParDepRecVol);
```

```
}
```

Résolution du problème non-linéaire

Variables intermédiaires (coef d'absorption, taux de recombinaison Auger, ...) disponibles (block {}) pour sauvegarde figures,

Sera utilisé pour le calcul de la température (slide suivant)

Exemple de fichier FSEM (suite 2)

```
Vh VarTemp1;
VarTemp1=0;
{
  SolveTempLn(VarTemp1, Vh, HeatGenAll);
}
```

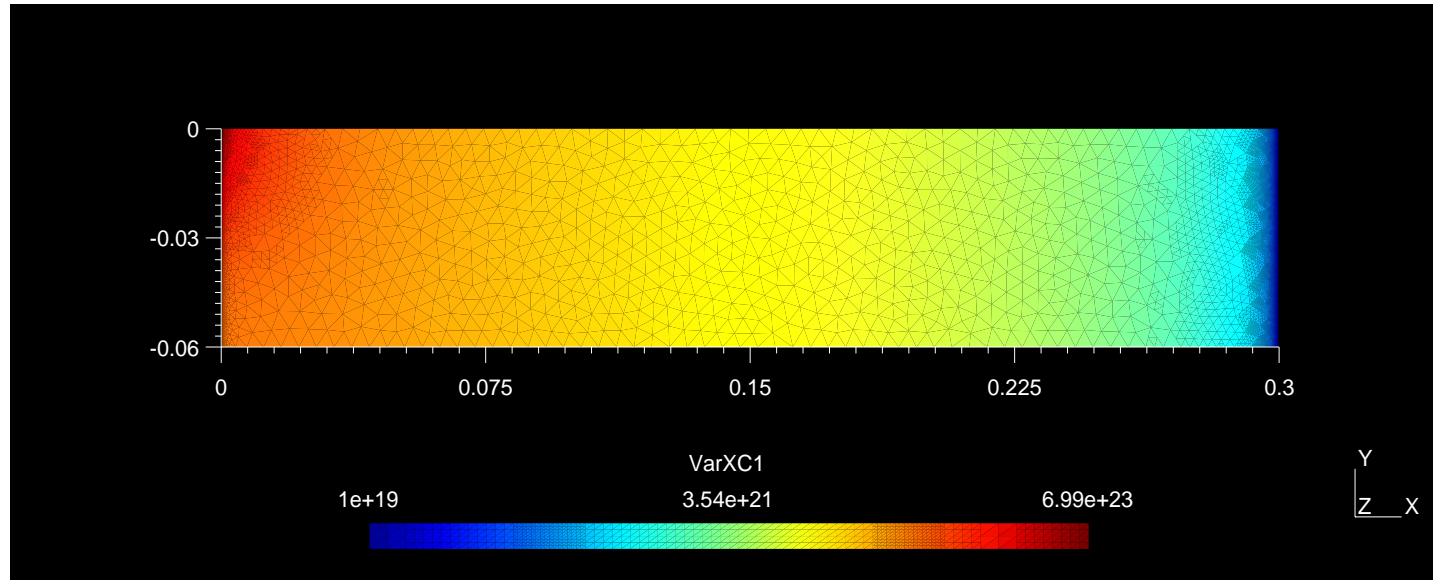
Solution de l'équation pour la température
Le terme source est passé en argument

```
/* Couplage porteurs excédentaires et température
***** /
```

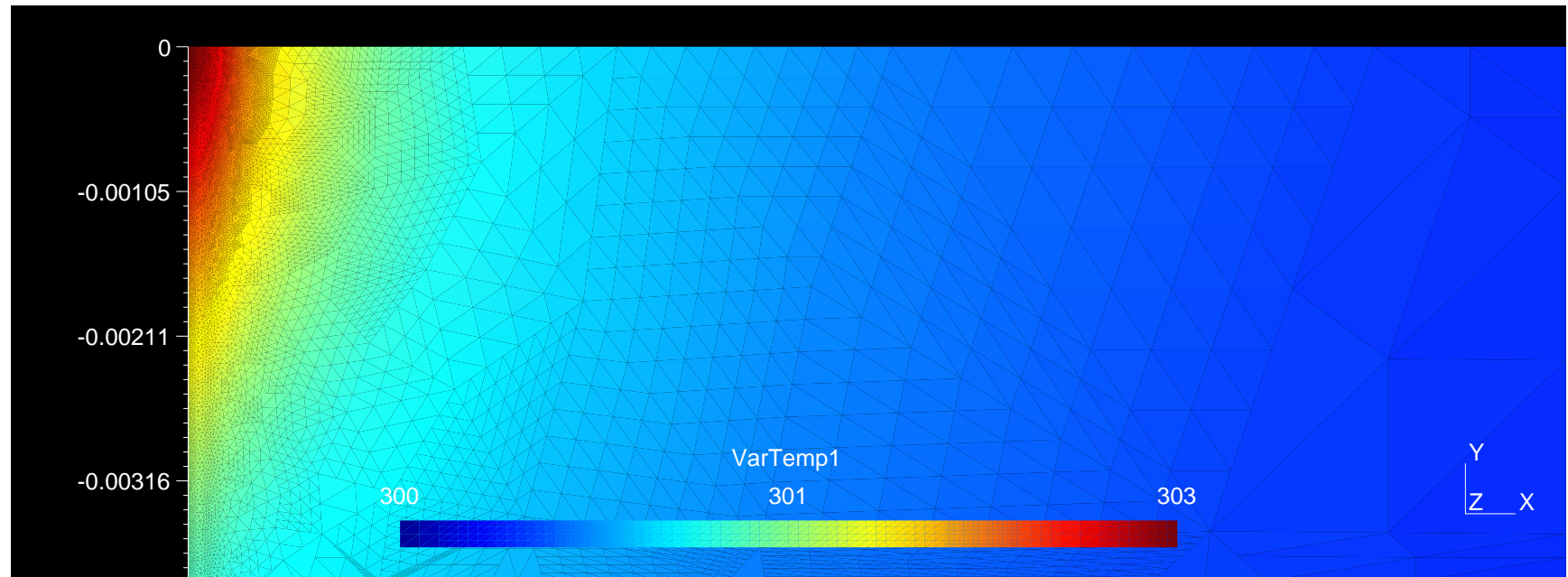
```
for(int i=1; i<5; i++) {
  ParUsrTemp = VarTemp1;
  {
    SolveCarrNln(VarXC1, Vh, VarXC1);
    ComputeHeatGen(HeatGenAll, ParDepEGap, ParDepAlpha, ParDepRecVol);
  }
  {
    SolveTempLn(VarTemp1, Vh, HeatGenAll);
  }
}
```

Couplage porteurs excédentaires - température

Quelques résultats

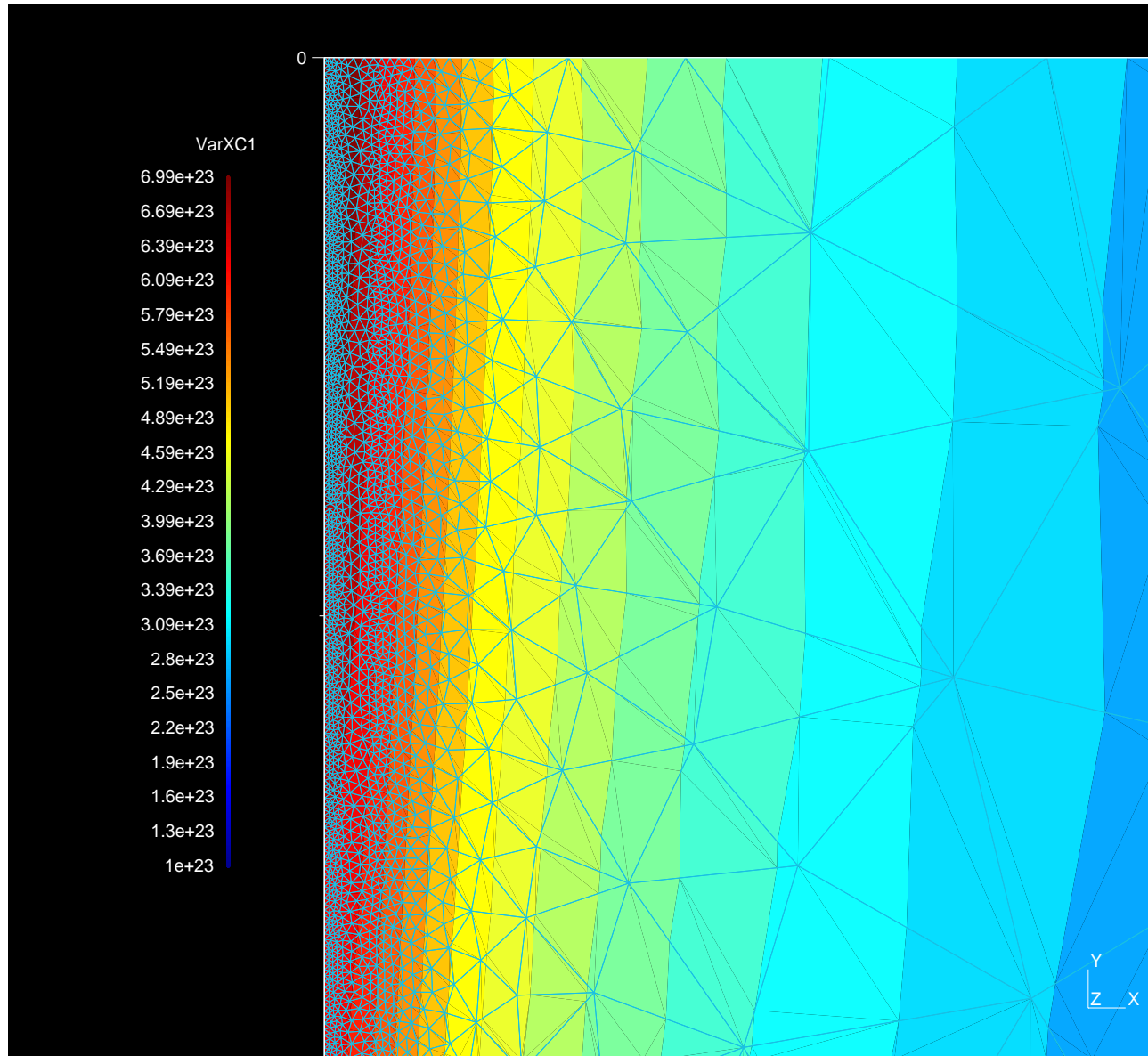


Densité de charges excédentaires (m^{-3}) sous illumination (8.06 Wcm^{-2} , 980nm , $R=1.5 \mu\text{m}$).
FreeFEM 1.47-4.
Rendu avec gmsht 1.60.



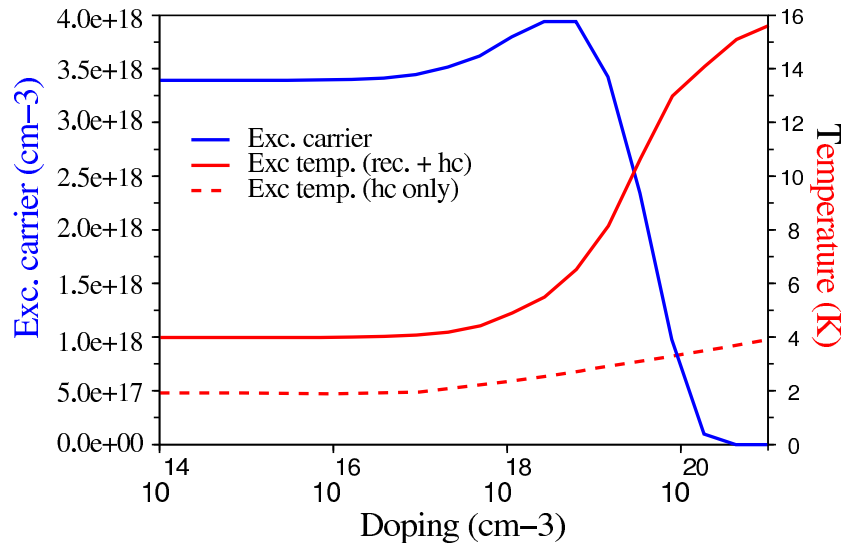
Température (K)

Quelques résultats

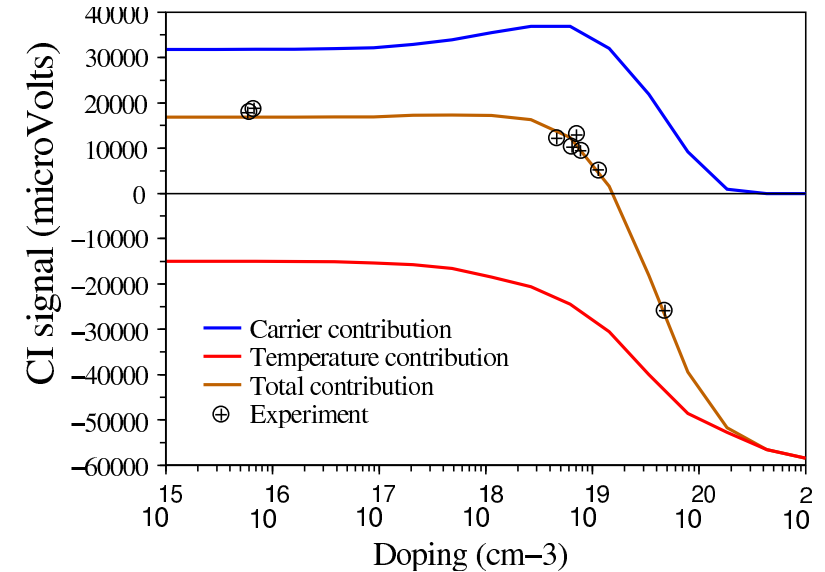


Densité de charges excédentaires (m^{-3}) sous illumination
 (8.06 Wcm^{-2} , 980nm , $R=1.5 \mu\text{m}$).
 FreeFEM 1.47-4. Rendu avec gmsht 1.60.

Quelques résultats



Charge et température excédentaire de surface en fonction du dopage (homogène)



CI signal en fonction du dopage du dopage.

“Progress in the physical modeling of Carrier Illumination (CI)”
F. Dortu, T. Clarysse, W. Vandervort.
 To be published in JVST february 2006 issue.

Conclusions

Travail réalisé :

- Implémentation d'un environnement pour la simulation de l'équation de diffusion des porteurs excédentaires et de la température (FSEM)
- Une documentation sommaire sous la forme d'un diagramme expliquant la structure du programme et les variables/macros prédéfinies

Travail à réaliser:

- Amélioration de la structure de FSEM (les macros manquent parfois de cohérence par rapport à leurs arguments)
- Implémentation d'une formulation mixte avec des éléments de Raviart-Thomas dans le but d'implémenter les équations complètes de drift-diffusion

Souhaits

- Création d'une mailing list



SEEDS FOR TOMORROW'S WORLD **IMEC**NOLOGY

