



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



① Número de publicación: **2 357 930**

② Número de solicitud: 200930611

⑤ Int. Cl.:
G06F 17/50 (2006.01)

⑫

SOLICITUD DE PATENTE

A1

② Fecha de presentación: **20.08.2009**

④ Fecha de publicación de la solicitud: **04.05.2011**

④ Fecha de publicación del folleto de la solicitud:
04.05.2011

⑦ Solicitante/s:
**Universidade de Santiago de Compostela
Edificio CACTUS - Campus Sur
15782 Santiago de Compostela, A Coruña, ES**

⑦ Inventor/es: **García Loureiro, Antonio Jesús**

⑦ Agente: **Carpintero López, Mario**

⑤ Título: **Método de fabricación de estructuras semiconductoras considerando efectos cuánticos.**

⑤ Resumen:

Método de fabricación de estructuras semiconductoras considerando efectos cuánticos.

Método de fabricación de una estructura semiconductor que comprende las etapas de obtención de los parámetros materiales, dimensiones y características externas del dispositivo electrónico, obtención del potencial clásico, los potenciales cuánticos y los cuasi-potenciales de los portadores y las concentraciones de portadores, cálculo de las características eléctricas del dispositivo a partir del potencial cuántico y los cuasi potenciales y comparación de las características eléctricas obtenidas con otras de referencia y optimización de los parámetros materiales en función de esa comparación. Gracias a que los potenciales cuánticos se obtienen de ecuaciones de gradiente de densidad es posible usar el método a escalas muy pequeñas de forma más precisa y rápida.

ES 2 357 930 A1

DESCRIPCIÓN

Método de fabricación de estructuras semiconductoras considerando efectos cuánticos.

5 **Campo de la invención**

La presente invención se refiere a un método utilizado en la fabricación de semiconductores. Más en particular, se refiere al cálculo de los parámetros del semiconductor necesarios para su fabricación mediante la aplicación de potenciales cuánticos.

10

Antecedentes de la invención

Los efectos cuánticos tienen actualmente gran importancia en el diseño de los dispositivos electrónicos basados en semiconductores debido a la influencia que tienen sobre las características y el rendimiento de estos elementos. Además está siendo cada vez más importante debido a que con el escalado cada vez más agresivo de estos componentes el efecto de las correcciones cuánticas es cada vez más importante, llegando a invalidar los resultados que se alcanzan si estos no son tenidos en cuenta adecuadamente.

15

20

25

30

35

40

El continuo escalado en los dispositivos semiconductores, sobre todo en el caso de los transistores de efecto campo metal óxido semiconductor (MOSFET), ha alcanzado las dimensiones de decenas de nanómetros. Este escalado se mantiene provocando que las dimensiones críticas de estos elementos sean cada vez más pequeñas. Esto genera importantes problemas tecnológicos que es preciso tener en cuenta para diseñar estos elementos. Frente a los sistemas clásicos para poder caracterizar adecuadamente estos dispositivos es preciso considerar los efectos de las correcciones cuánticas (H.-S. P. Wong. Beyond the conventional transistor. *IBM J. Res. Dev.*, 46(2): 133-168, 2002). Tener en cuenta estos efectos es básico para realizar diseños eficientes, precisar el comportamiento de estos dispositivos, así como probar diferentes estrategias con el fin de aumentar su rendimiento de cara a las distintas aplicaciones desarrolladas a partir de estos dispositivos. Además para poder obtener de forma rápida y precisa el efecto de las correcciones cuánticas es básico, sobre todo cuando se pretende estudiar el efecto de fluctuaciones y variaciones materiales en estos dispositivos debido a los procesos de fabricación, los generados por la naturaleza discreta de la materia. La patente US 200770101301 describe un método para calcular los parámetros de un semiconductor a partir de los potenciales cuánticos. Sin embargo, en este método todos los cálculos se hacen a nivel atómico, usando las funciones de Green y aproximaciones similares, lo que lo hace inviable debido a la ingente cantidad de cálculos que habría que realizar para su aplicación a dispositivos en tres dimensiones de tamaño real, además de los problemas que presenta cuando estos dispositivos están muy dopados, que corresponde a los dispositivos que se fabrican en la actualidad. El uso de dispositivos semiconductores basados en transistores MOSFET en los cuales la región de óxido de la puerta es cada vez más estrecha requiere considerables cambios en los diseños de estos elementos y en la aplicación de los diversos criterios de escalado. A estas dimensiones los efectos cuánticos son muy importantes y deberían de tenerse en cuenta para la correcta fabricación de estos transistores. Modelos previos resultan ser demasiado lentos para el proceso de diseño de las nuevas estructuras debido a la complejidad de su estructura y de los materiales necesarios.

Objeto de la invención

La presente invención tiene por objeto resolver los problemas expuestos anteriormente mediante el siguiente procedimiento:

45

50

55

- a. obtención de los parámetros materiales, dimensiones y características externas del dispositivo electrónico,
- b. obtención del potencial clásico a partir de la etapa anterior,
- c. obtención de los cuasi-potenciales de los portadores y las concentraciones de portadores,
- d. obtención de los potenciales cuánticos a partir del potencial clásico y los cuasi-potenciales,
- e. cálculo de las características eléctricas del dispositivo a partir del potencial cuántico y los cuasi potenciales,
- f. proceso de comparación de las características eléctricas obtenidas con otras de referencia y se optimizan los parámetros materiales en función de esa comparación.

El paso d. se efectúa usando las ecuaciones de gradiente de densidad.

60

En el caso de que la estructura semiconductor tenga fronteras irregulares o que esté dividido internamente en elementos irregulares, el potencial cuántico para los electrones se calcula mediante la siguiente fórmula de gradiente de densidad:

65

$$\int_{\partial\Omega} 2b_n \theta_i \nabla(u) \cdot \vec{n} dS - \int_{\partial\Omega} 2b_n (\nabla(\theta_i) - \theta_i \nabla(u)) \cdot \nabla(u) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0u - \psi + \phi_n) v d\Omega$$

ES 2 357 930 A1

Donde $u = \frac{(\phi_n + \psi - \psi_{qn})}{2}$, $b_n = \frac{\hbar}{4qm_n^*r}$, siendo m_n la masa del electrón, \hbar es la constante de Planck

5 reducida, r un parámetro característico de cada dispositivo, q la carga del electrón, ψ_{qn} es el potencial cuántico efectivo de electrones, φ el potencial, ϕ_n es cuasipotencial de electrones, \vec{n} el vector normal a la superficie de separación S , θ_i es la función de forma sobre el nodo i de la malla correspondiente al elemento Ω .

Para los huecos se utiliza la siguiente fórmula:

10

$$\int_{\partial\Omega} 2b_p \theta_i \nabla(w) \vec{n} dS - \int_{\partial\Omega} 2b_p (\nabla(\theta_i) - \theta_i \nabla(w)) \nabla(w) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0w + \psi - \phi_p) v d\Omega$$

15

Si las fronteras son regulares y el semiconductor está internamente dividido en elementos regulares el potencial cuántico para el caso de los electrones se calcula mediante la siguiente fórmula:

20

$$2b_n (\nabla^2 u + (\nabla u)^2) = 2,0u - \psi + \phi_n$$

25

El potencial cuántico para el caso de los huecos se calcula mediante la fórmula:

$$2b_p (\nabla^2 w + (\nabla w)^2) = 2,0w + \psi - \phi_p$$

30

El proceso de obtención de los efectos cuánticos usa el modelo de gradiente de densidad utilizando una formulación específica que presenta una variación mucho más pequeña que los sistemas estándar en los cuales aparecen dependencias tipo exponencial o logarítmica. Este sistema utiliza una dependencia del orden del potencial y no del orden de la concentración que es mucho más grande. La ventaja del método propuesto es que se puede aplicar a dispositivos de tamaño real y realizar el estudio en tres dimensiones incluso en estructuras con formas irregulares. Además de poder aplicarse a casos donde las distintas regiones están dopadas con valores muy elevados.

35

Breve descripción de las figuras

40

Con objeto de ayudar a una mejor comprensión de la presente descripción, acuerdo con un ejemplo preferente de realización práctica de la invención, se adjuntan las siguientes figuras, cuyo carácter es ilustrativo y no limitativo:

45

La figura 1 compara las características I_D - V_G obtenidas con las experimentales a baja tensión de drenador (0,05 V) y a alta tensión de drenador (1,2 V).

La figura 2 es una representación del potencial cuántico efectivo en equilibrio.

La figura 3 es una gráfica del potencial cuántico en el plano $y = 0$.

50

La figura 4 es una representación de la concentración de electrones incluyendo las correcciones cuánticas cuando $V_D = 0.05$ V y $V_G = 0.0$ V.

La figura 5 es una representación del potencial incluyendo correcciones cuánticas cuando $V_D = 0.05$ V y $V_G = 0.0$ V.

55

La figura 6 es una representación de las curvas características I_D - V_D obtenidas considerando y sin considerar correcciones cuánticas.

Descripción detallada de la invención

60

La ventaja del método propuesto es que se puede aplicar a dispositivos de tamaño real y realizar el estudio en tres dimensiones incluso usando dispositivos con formas no rectangulares, irregulares o curvas. Además de poder aplicarse a casos donde las distintas regiones están dopadas con valores muy elevados.

65

La invención posibilita la optimización del diseño de cualquier dispositivo semiconductor sin tener que aproximar las medidas del semiconductor a las de uno ideal. En una primera etapa se parte de una estructura semiconductor inicial con las dimensiones y los parámetros físicos (la permitividad, la movilidad de los portadores, la afinidad, el gap de energía, la masa de cada uno de los portadores, la constante de red y los factores de generación y recombinación) de

ES 2 357 930 A1

5 cada uno de los elementos que componen el dispositivo que se pretende optimizar. Posteriormente, se suele realizar una calibración para poder obtener la precisión de las máquinas de desarrollo y medida utilizadas para crear el dispositivo y medirlo. En una tercera etapa se usan los valores de estos parámetros para calcular las características eléctricas del dispositivo teniendo en cuenta los potenciales cuánticos e incluyéndose los correspondientes márgenes de error debido a las medidas y los correspondientes al propio método. En una cuarta etapa se analizan los valores así obtenidos y se comparan con las características eléctricas deseadas, realizándose los cambios pertinentes para mejorar la estructura del semiconductor hasta que los resultados obtenidos se ajustan a los requeridos.

10 A partir de los parámetros de cada uno de los materiales que componen la estructura semiconductor (la permitividad, la movilidad de los portadores, la afinidad, el gap de energía, la masa de cada uno de los portadores, la constante de red y los factores de generación y recombinación) se realiza un cálculo incluyendo el potencial cuántico de los parámetros eléctricos que se obtendrían con esa estructura entre los que están las corrientes y tensiones y la frecuencia de funcionamiento.

15 Hasta ahora el cálculo de los efectos cuánticos se hacía a nivel atómico, usando las funciones de Green y aproximaciones similares, lo que supone una ingente cantidad de cálculos que habría que realizar e imposibilita su aplicación a dispositivos en tres dimensiones de tamaño real, además de presentar problemas cuando estos dispositivos están muy dopados.

20 En la presente invención, por el contrario, se usa un modelo de partida basado en las ecuaciones de arrastre-difusión básicas en estado estacionario que modelan el comportamiento de los transistores. Estas ecuaciones son la de Poisson y las de continuidad de huecos y de electrones. Éstas ecuaciones de arrastre-difusión son las siguientes:

$$\begin{aligned} \text{div}(\epsilon \nabla \psi) &= q(n - p + N_D^+ - N_A^-) \\ \text{div}(J_n) &= qR \\ \text{div}(J_p) &= -qR \end{aligned} \quad (1)$$

25 donde ψ es el potencial electrostático, q la carga del electrón, ϵ la constante dieléctrica, p y n las densidades de electrones y huecos respectivamente, y N_D^+ y N_A^- son las concentraciones de impurezas donadoras y aceptoras ionizadas, y J_n y J_p las densidades de corriente de electrones y huecos respectivamente. El factor R representa la tasa de recombinación volúmica y superficial. Las densidades de corriente de huecos y de electrones vienen dadas por las expresiones:

$$\begin{aligned} J_n &= -q\mu_n n \nabla \phi_n \\ J_p &= -q\mu_p p \nabla \phi_p \end{aligned} \quad (2)$$

45 donde μ_n y μ_p son las movilidades de electrones y huecos respectivamente y ϕ_n y ϕ_p los cuasipotenciales de Fermi.

50 Las concentraciones de portadores n y p en función de los cuasipotenciales de Fermi y del potencial electrostático vienen dados por:

$$\begin{aligned} n &= n_{ien} \exp\left(\frac{q(\psi - \phi_n)}{kT}\right) \\ p &= n_{iep} \exp\left(\frac{q(\phi_p - \psi)}{kT}\right) \end{aligned} \quad (3)$$

65 donde $V_T = \frac{kT}{q}$ siendo K la constante de Boltzman y T la temperatura. Los valores de las concentraciones intrínsecas efectivas de electrones y huecos n_{ien} y n_{iep} indican los efectos de degeneración del semiconductor, de la variación de los parámetros con la composición, o de la existencia de varias bandas o valles, incluyendo efectos

debidos a que las bandas no sean parabólicas Los valores de n y p, para un semiconductor con varias bandas que intervengan en el transporte, pueden expresarse en función de la concentración intrínseca del material de referencia en las bandas de conducción y de valencia $N_{(c,v)j}$, la densidad efectiva de estados, las integrales de Fermi-Dirac, que operan sobre funciones que relacionan la energía en las distintas bandas, y la afinidad electrónica χ , por lo que resultará:

5

$$n = n_{ic} \sum_j \frac{N_{cj} [F_{1/2}(\eta_{cj}) + \frac{3}{2}KT B_j F_{3/2}(\eta_{cj})]}{N_{co} \exp(\eta_{cj})} \exp\left(\frac{\chi_j - \chi_o}{KT}\right) \exp\left(\frac{q\psi - q\phi_n}{KT}\right)$$

10

$$p = n_{ic} \sum_l \frac{N_{vl} [F_{1/2}(\eta_{vl}) + \frac{3}{2}KT B_l F_{3/2}(\eta_{vl})]}{N_{vo} \exp(\eta_{vl})} \exp\left(\frac{\chi_l - \chi_o + E_{gl} - E_{go}}{KT}\right) \exp\left(\frac{q\phi_p - q\psi}{KT}\right)$$

15

(4)

El efecto de las correcciones cuánticas se puede incluir en esta aproximación en primer orden usando el modelo de gradiente de densidad. Las ecuaciones que es preciso introducir en el modelo para conocer la influencia de los efectos cuánticos sobre la densidad de portadores son las siguientes

20

$$2b_n \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} = \psi_{qn}$$

25

$$2b_p \frac{\nabla^2 \sqrt{p}}{\sqrt{p}} = \psi_{qp}$$

30

(5)

donde n y p son las densidades de electrones y huecos, ψ_{qn} Y ψ_{qp} son los potenciales cuánticos efectivos de electrones y huecos, b_n y b_p son coeficientes constantes del modelo de gradiente de densidad. Esta ecuación esta sujeta a las siguientes condiciones de contorno que definen las fronteras que rodean al dispositivo:

35

$$b\nabla\sqrt{n} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial\Omega_N} = 0$$

40

$$b\nabla\sqrt{n} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial\Omega_{D1}} = b_{ox} \frac{\sqrt{n}}{x_p}$$

45

$$\psi_q \Big|_{\partial\Omega_{D2}} = 0,$$

(6)

50

donde la frontera $\partial\Omega$ corresponde al dominio de la simulación Ω , el cual se divide en la parte correspondiente a las fronteras tipo Neumann $\partial\Omega_N$ y otra parte a las fronteras tipo Dirichlet $\partial\Omega_p$. Este último tipo de fronteras se subdividen en dos partes: DI son los segmentos correspondientes a la zona de contacto entre el óxido y la puerta y D2 son los segmentos correspondientes a los contactos óhmicos de fuente y drenador. Estas ecuaciones son discretizadas usando procedimientos conocidos.

55

El esquema que se propone parte de la ecuación original escalada para el potencial cuántico de electrones es el siguiente:

60

$$2b_n \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} = \psi_{qn}$$

65

(7)

ES 2 357 930 A1

Usando

$$S = \sqrt{\frac{u}{u_i}} = \sqrt{\exp(\psi + \psi_{qn} - \phi_n)} \quad (8)$$

y realizando la transformación a

$$u = \frac{(\phi_n + \psi - \psi_{qn})}{2} \quad (9)$$

se obtiene la siguiente transformación de la ecuación anterior:

$$2b_n \frac{\nabla^2 \exp^u}{\exp^u} = 2,0u - \psi + \phi_n \quad (10)$$

Utilizando el método de elementos finitos (FEM) en su formulación estándar, y considerando como función de prueba v , aplicando el teorema de Gauss y el teorema de Green resultará:

$$\int_{\partial\Omega} 2b_n \frac{v}{\exp^u} \nabla(\exp^u) \vec{n} dS - \int_{\partial\Omega} 2b_n \nabla\left(\frac{v}{\exp^u}\right) \nabla(\exp^u) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0u - \psi + \phi_n) v d\Omega \quad (11)$$

Esta fórmula se transforma usando la formulación del MEF a:

$$\int_{\partial\Omega} 2b_n \theta_i \nabla(u) \vec{n} dS - \int_{\partial\Omega} 2b_n (\nabla(\theta_i) - \theta_i \nabla(u)) \nabla(u) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0u - \psi + \phi_n) v d\Omega \quad (12)$$

Donde la incógnita del problema, u , y el resto de las variables de esa ecuación, tienen el rango de variación que le corresponde al potencial, y no a ninguna concentración de portadores, las cuales son muchísimo más grandes. Además se ha pasado de dependencias exponenciales o logarítmicas a una ecuación cuadrática, la cual por tanto es mucho más fácil de resolver.

Se puede hacer una aproximación similar para resolver la ecuación de gradiente de densidad si utilizásemos un esquema de diferencias finitas o similar. Para ello se puede usar la siguiente formulación transformada de la ecuación general para electrones:

$$2b_n (\nabla^2 u + (\nabla u)^2) = 2,0u - \psi + \phi_n \quad (13)$$

Sobre esta ecuación se puede aplicar directamente el método clásico de diferencias finitas o similar usando la formulación estándar y obteniendo así el valor de u en cada nodo de la malla de diferencias finitas, y por lo tanto se puede deducir el valor de la corrección cuántica, considerando:

$$u = \frac{(\phi_n + \psi - \psi_{qn})}{2} \quad (14)$$

ES 2 357 930 A1

como:

$$\psi_{qn} = \phi_n + \psi - 2u \quad (15)$$

Para el segundo caso, correspondiente a los huecos, usando la relación

$$s = \sqrt{\frac{p}{n_i}}, \quad (16)$$

se obtiene con la formulación estándar:

$$\nabla^2 s = \frac{s}{2b_p} \left(\phi_p - \psi + \frac{K_B T}{q} \ln(s^2) \right) \quad (17)$$

Igual que en el caso anterior esta ecuación es discretizada para poder resolverla usando cualquier esquema de discretización (por ejemplo, diferencias finitas, volúmenes finitos o elementos finitos). Usando la aproximación indicada resultan los parámetros a obtener con menor rango de variación numérica y más fáciles de medir. Además al poder aplicarlo de forma optimizada al caso de usar mallas no estructuradas o al aplicarlo a dispositivos con geometrías complejas, la técnica propuesta es capaz de encontrar un diseño óptimo. Seguidamente se determina la corrección cuántica para los huecos a partir de la ecuación original escalada para huecos, que es la siguiente:

$$2b_p \frac{\nabla^2 \sqrt{p}}{\sqrt{p}} = \psi_{qp} \quad (18)$$

Usando:

$$S = \sqrt{\frac{p}{n_i}} = \sqrt{\exp(\phi_p + \psi_{qp} - \psi)} \quad (19)$$

y realizando cambio de variables a

$$w = \frac{(\phi_p + \psi_{qp} - \psi)}{2} \quad (20)$$

se obtiene la siguiente transformación de la ecuación anterior:

$$2b_p \frac{\nabla^2 \exp^w}{\exp^w} = 2,0w + \psi - \phi_p \quad (21)$$

ES 2 357 930 A1

Utilizando el método de elementos finitos (FEM) en su formulación estándar, y considerando como función de prueba v , aplicando el teorema de Gauss y el de Green resultará:

$$\int_{\partial\Omega} 2b_p \frac{v}{\exp^w} \nabla(\exp^w) \vec{n} dS - \int_{\partial\Omega} 2b_p \nabla\left(\frac{v}{\exp^w}\right) \nabla(\exp^w) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0w + \psi - \phi_p) v d\Omega \quad (22)$$

Esta fórmula se transforma usando la formulación MEF a:

$$\int_{\partial\Omega} 2b_p \theta_i \nabla(w) \vec{n} dS - \int_{\partial\Omega} 2b_p (\nabla(\theta_i) - \theta_i \nabla(w)) \nabla(w) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0w + \psi - \phi_p) v d\Omega \quad (23)$$

Donde la incógnita del problema, w , y el resto de las variables de esa ecuación, tienen el rango de variación que le corresponde al potencial, y no a ninguna concentración de portadores, las cuales son muchísimo más grandes. Además se ha pasado de dependencias exponenciales o logarítmicas a una ecuación cuadrática, la cual es por tanto mucho más fácil de resolver.

Se puede hacer una aproximación similar para resolver la ecuación de gradiente de densidad si utilizásemos un esquema de diferencias finitas o similar. Para ello se puede usar la siguiente formulación transformada de la ecuación general anterior para huecos:

$$2b_p (\nabla^2 w + (\nabla w)^2) = 2,0w + \psi - \phi_p \quad (24)$$

Sobre esta ecuación se puede aplicar directamente el método clásico de diferencias finitas o similar usando la formulación estándar y obteniendo así el valor de w en cada nodo de la malla de diferencias finitas, y por lo tanto se puede deducir el valor de la corrección cuántica, para los huecos como:

$$w = \frac{\{\phi_p + \psi_{qp} - \psi\}}{2} \quad (25)$$

como:

$$\psi_{qp} = 2w - \phi_p + \psi \quad (26)$$

La técnica propuesta se integra con el modelo necesario para resolver las ecuaciones de Poisson y de continuidad de portadores. Para la ecuación de Poisson se puede utilizar la misma técnica de discretización, elementos finitos, volúmenes finitos o diferencias finitas. En el caso de utilizar el FEM usando una malla no estructurada basada en elementos tetraédricos se utilizan funciones de forma lineales. Para este caso la formulación de la ecuación de Poisson da lugar a:

$$\lambda^2 \sum_{j=1}^K \int_{\Omega_e} (\nabla \hat{\varphi}_j)^t \nabla \hat{\varphi}_i |J_e| d\Omega_e \psi_j + \sum_{j=1}^K \int_{\Omega_e} (n_j - C_j) \hat{\varphi}_j \hat{\varphi}_i |J_e| d\Omega_e = 0, \quad \forall i = 1, \dots, K, \quad (27)$$

donde K es el número del vértice en $\bar{\Omega}$, y $\hat{\varphi}_i$ y $\hat{\varphi}_j$ son las funciones de forma sobre el elemento máster Ω_e sobre los vértices P_i y P_j .

En el caso de utilizar el modelo de transporte basado en arrastre-difusión, la discretización de las ecuaciones de corriente requiere el uso de esquemas de discretización específicos como el de Scharfetter-Gummel. Si J_e denota el Jacobiano de la transformación $x = x(\xi)$ del elemento T al elemento de referencia T_m , y $B_T(\Delta\psi_D) = \text{diag}(B(\varphi_D(P_0)) - (\varphi_D(P_1)), \dots)$, donde B es la función de Bernoulli, y $P_i = 0, \dots, n$ son los vértices del elementos de referencia T_m ; y G_m es el centro de gravedad del elemento T_m , y $x_{GT} = x(G_m)$ la imagen de G_m en el elemento T, se obtiene:

$$J_{n,G_T} = \mu_n n_{ien,G_T} e^{\psi_D(P_0)} J_e^{-1} B_T(\Delta\psi_D) J_e^t \nabla e^{-\phi_n} \Big|_D \quad (28)$$

el cual corresponde al valor de la densidad de corriente dentro de un elemento. Las variables que presentan el subíndice D se refieren a las variables discretizadas sobre los nodos de la malla. Aplicando el MEF se obtiene la siguiente ecuación discretizada:

$$\sum_{\Omega_e} \int_{\Omega_e} \mu_n n_{ien,\Delta,G_T} \exp(\psi_\Delta(P_0)) \nabla \varphi_j J_e^{-1} B_T(\psi_\Delta) J_e^t \quad (29)$$

$$\nabla(\exp(-\phi_{n_i})) \nabla \varphi_i d\Omega_e = 0 \quad \forall i = 1, \dots, K$$

Si se utilizase otro modelo de transporte el esquema sería similar y se resolvería acopladamente las ecuaciones de Poisson, gradiente de densidad junto con las del modelo de transporte.

Los sistemas clásicos simplemente no tienen en cuenta estos efectos cuánticos por lo cual los diseños realizados partiendo de esos parámetros no se ajustan a lo que obtiene finalmente. Los sistemas usados para calcular los parámetros característicos en el caso de dispositivos en los que los efectos cuánticos son importantes, como los MOSFET nanométricos, necesitan obtener el valor de los potenciales cuánticos. Los esquemas usados hasta el momento que consideran estos efectos cuánticos presentan grandes inestabilidades numéricas y son difíciles de implementar en muchos casos y además no permiten obtener la solución de forma rápida y precisa. El sistema propuesto es mucho más rápido y eficiente, y además el rango de variación numérica es similar al del potencial, el cual varía solo un orden de magnitud, frente al caso estándar el cual varía casi tanto como la concentración llegando por lo tanto a valores numéricos muy dispares. Además el sistema propuesto permite utilizar cualquier esquema de discretización, como elementos finitos, diferencias finitas, volúmenes finitos, etc., sin tener pérdida de generalidad.

El proceso de obtención de los efectos cuánticos usando el modelo de gradiente de densidad utilizando la formulación específica, la cual presenta una variación mucho más pequeña que los sistemas estándar en los cuales aparecen dependencias tipo exponencial o logarítmica.

Este sistema utiliza una dependencia del orden del potencial y no del orden de la concentración que es mucho más grande. Se ha comprobado la utilidad del modelo incluyéndolo en un simulador tridimensional y paralelo basado en elementos finitos utilizando el modelo de arrastre-difusión, aunque es posible utilizar otros modelos de transporte como el Monte Carlo, y se ha aplicado a diversos dispositivos. En las gráficas se muestra uno de los casos más difíciles de resolver un MOSFET tipo-N con puerta efectiva de 67 nm. Todo el proceso esta basado en una calibración inicial contra los valores experimentales de I-V.

En la figura 1 se compara las características I_D - V_G obtenidas con las experimentales a baja tensión de drenador (0,05 V) y a alta tensión de drenador (1,2 V). La figura 2 representa el potencial cuántico incluyendo el efecto de las correcciones cuánticas en equilibrio y la figura 3 un corte a lo largo del plano $y = 0$. Las figuras 4 y 5 muestran la concentración de electrones y el potencial total usando el modelo propuesto a $V_D=0.05$ V y $V_G=0.0$ V.

Las curvas características I_D - V_D obtenidas a 0,05 V sin tener en cuenta el efecto de las correcciones cuánticas y teniéndolo en cuenta se comparan en la figura 6. El efecto de las correcciones cuánticas es reducir la corriente total de drenador, incrementar el voltaje umbral y reducir la pendiente en la zona sub-umbral, cambiando considerablemente las características del dispositivo, por lo cual tener un sistema que las tenga en cuenta apropiadamente es básico para poder caracterizar adecuadamente el dispositivo.

REIVINDICACIONES

1. Método de fabricación de una estructura semiconductor que comprende las etapas siguientes:

- a. obtención de los parámetros materiales, dimensiones y características externas del dispositivo electrónico,
- b. obtención del potencial clásico a partir de la etapa anterior,
- c. obtención de los cuasi-potenciales de los portadores y las concentraciones de portadores,
- d. obtención de los potenciales cuánticos a partir del potencial clásico y los cuasi-potenciales,
- e. cálculo de las características eléctricas del dispositivo a partir del potencial cuántico y los cuasi potenciales,
- f. comparación de las características eléctricas obtenidas con otras de referencia y optimización de los parámetros materiales en función de esa comparación,

caracterizado en que el paso d. se efectúa usando las ecuaciones de gradiente de densidad.

2. Método según la reivindicación 1 **caracterizado** porque, en el caso de que la estructura semiconductor tenga fronteras irregulares o que esté dividido internamente en elementos irregulares, el potencial cuántico para los electrones se calcula mediante la siguiente fórmula de gradiente de densidad:

$$\int_{\partial\Omega} 2b_n\theta_i\nabla(u)\vec{n}dS - \int_{\partial\Omega} 2b_n(\nabla(\theta_i) - \theta_i\nabla(u))\nabla(u)d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0u - \psi + \phi_n)vd\Omega$$

Donde $u = \frac{(\phi_n + \psi - \psi_{qn})}{2}$, $b_n = \frac{\hbar}{4qm_n^*r}$, siendo m_n la masa del electrón, \hbar es la constante de Planck

reducida, r un parámetro característico de cada dispositivo, q la carga del electrón, ψ_{qn} es el potencial cuántico efectivo de electrones, ψ el potencial, ϕ_n es cuasipotencial de electrones, \vec{n} el vector normal a la superficie de separación S , θ_i es la función de forma sobre el nodo i de la malla correspondiente al elemento Ω .

3. Método según la reivindicación 1 **caracterizado** porque en el caso de que la estructura semiconductor tenga fronteras regulares y que internamente este dividido en elementos regulares el potencial cuántico para el caso de los electrones se calcula mediante la siguiente fórmula:

$$2b_n(\nabla^2u + (\nabla u)^2) = 2,0u - \psi + \phi_n$$

donde $u = \frac{(\phi_n + \psi - \psi_{qn})}{2}$, $b_n = \frac{\hbar}{4qm_n^*r}$, siendo m_n la masa del electrón, r un parámetro característico

de cada dispositivo y q la carga del electrón, ψ_{qn} es el potencial cuántico efectivo de electrones, ψ el potencial y ϕ_n es cuasi-potencial de electrones.

4. Método según la reivindicación 1 **caracterizado** porque en el caso de que la estructura semiconductor tenga fronteras irregulares y que este dividido internamente en elementos irregulares el potencial cuántico se calcula para los huecos mediante la siguiente fórmula:

$$\int_{\partial\Omega} 2b_p\theta_i\nabla(w)\vec{n}dS - \int_{\partial\Omega} 2b_p(\nabla(\theta_i) - \theta_i\nabla(w))\nabla(w)d\Omega = \int_{\partial\Omega} (2,0w + \psi - \phi_p)vd\Omega$$

ES 2 357 930 A1

Donde $w = \frac{(\phi_p + \psi_{qp} - \psi)}{2}$, $b_p = \frac{\hbar}{4qm_p^*r}$, siendo m_p la masa del hueco, \hbar es la constante de Planck

5 reducida, r un parámetro característico de cada dispositivo, q la carga del electrón, ψ_{qp} es el potencial cuántico efectivo de huecos, ψ el potencial, ϕ_p es cuasipotencial de huecos, \vec{n} el vector normal a la superficie de separación S , θ_i es la función de forma sobre el nodo i de la malla correspondiente al elemento Ω .

10 5. Método según la reivindicación 1 **caracterizado** porque en el caso de que la estructura semiconductor tenga fronteras regulares y que internamente este dividido en elementos regulares el potencial cuántico para el caso de los huecos se calcula mediante la fórmula:

$$15 \quad 2b_p(\nabla^2 w + (\nabla w)^2) = 2,0w + \psi - \phi_p$$

20 Donde $w = \frac{(\phi_p + \psi_{qp} - \psi)}{2}$, $b_p = \frac{\hbar}{4qm_p^*r}$, siendo m_p la masa del electrón, r un parámetro caracterís-

25 tico de cada dispositivo, q la carga del electrón, ψ_{qp} es el potencial cuántico efectivo de huecos, ψ el potencial, ϕ_p es cuasipotencial de huecos.

30 6. Método de fabricación de un dispositivo electrónico donde los elementos semiconductores que lo componen son fabricados mediante un método según cualquiera de las reivindicaciones anteriores.

30

35

40

45

50

55

60

65

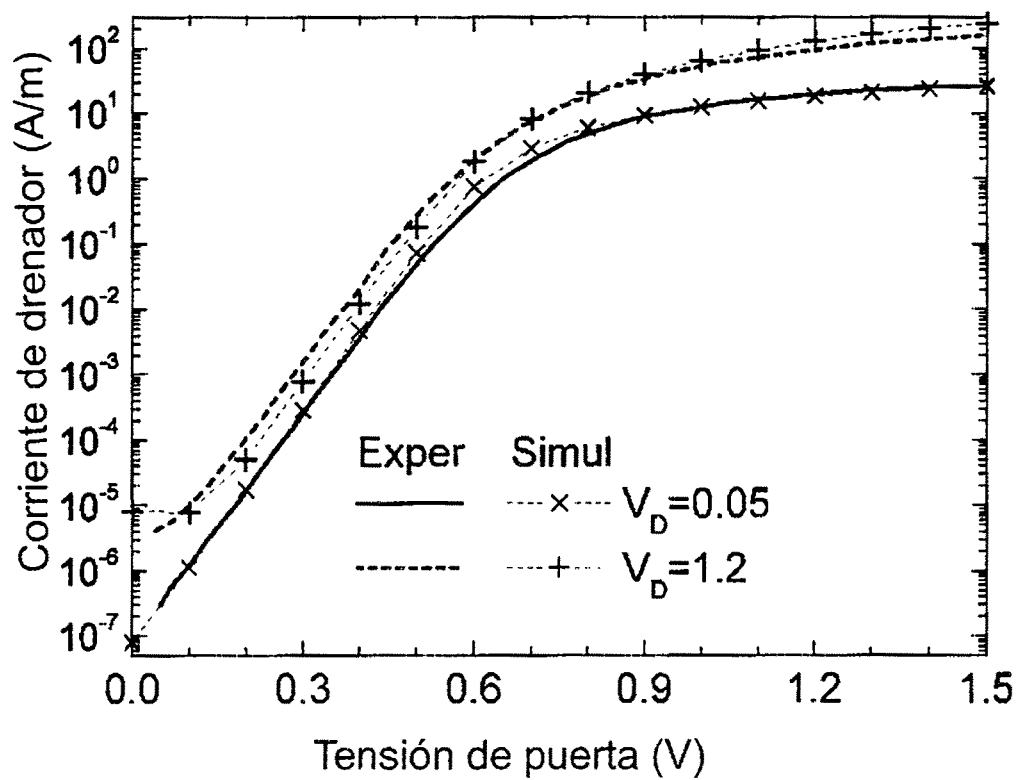


FIG. 1

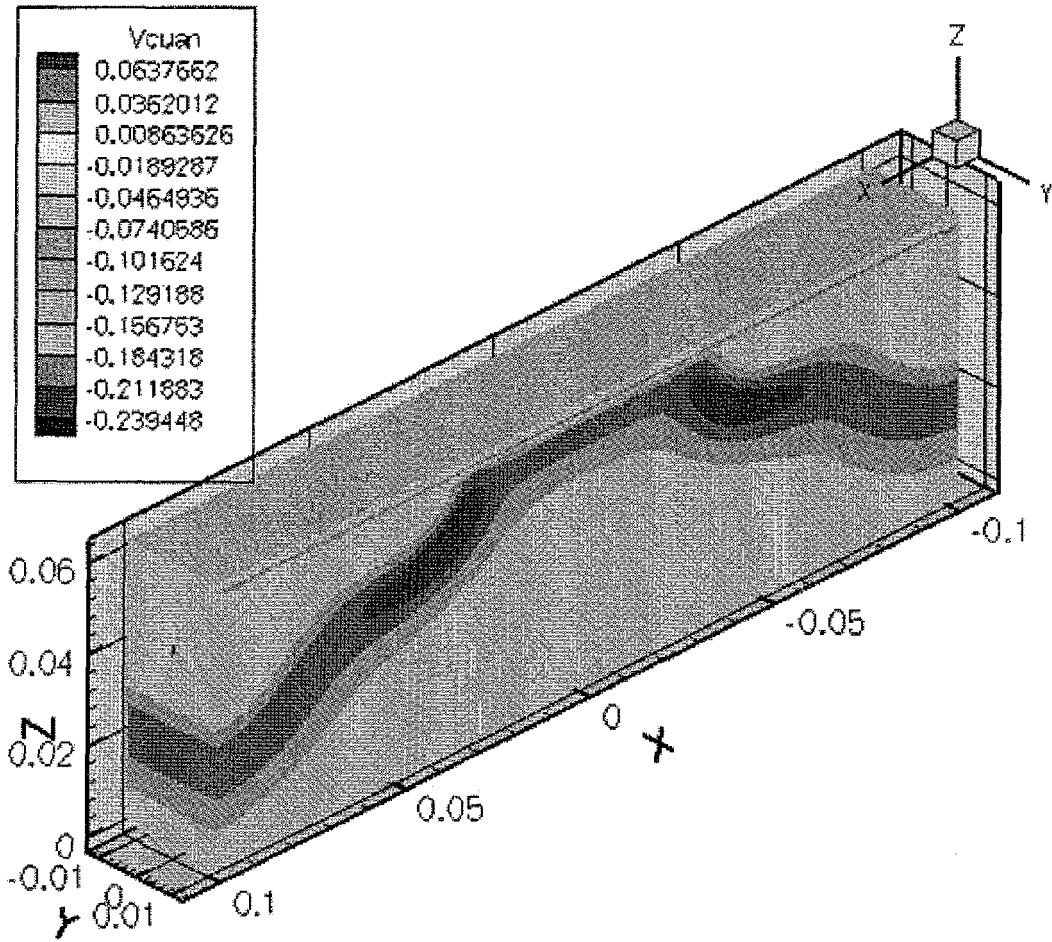


FIG. 2

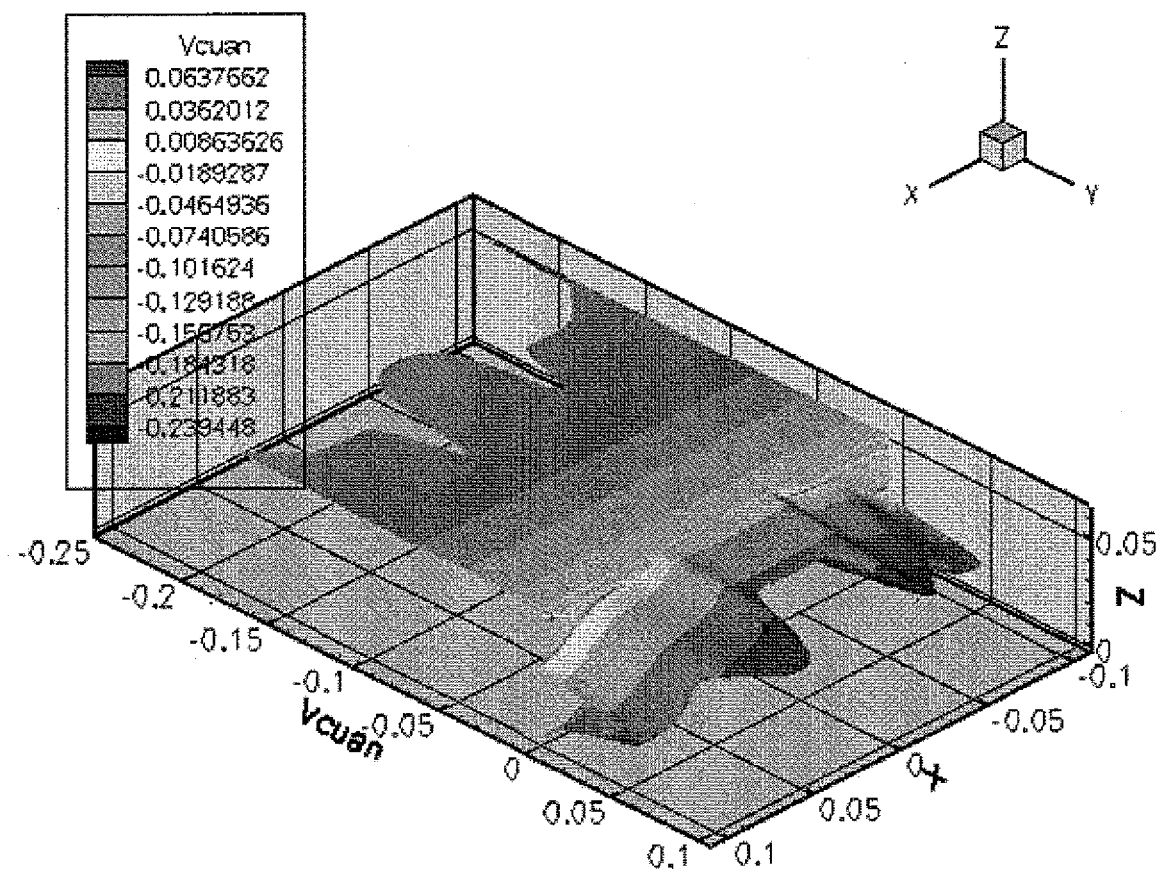


FIG. 3

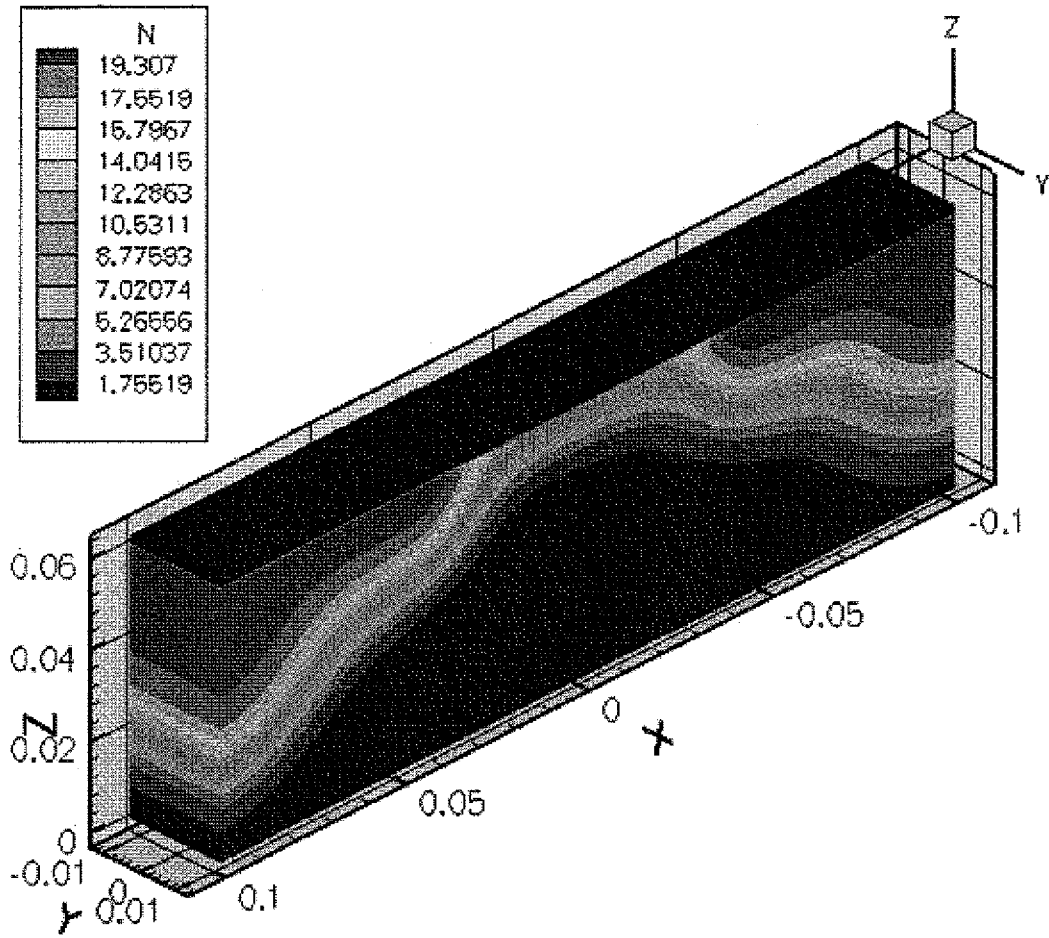


FIG: 4

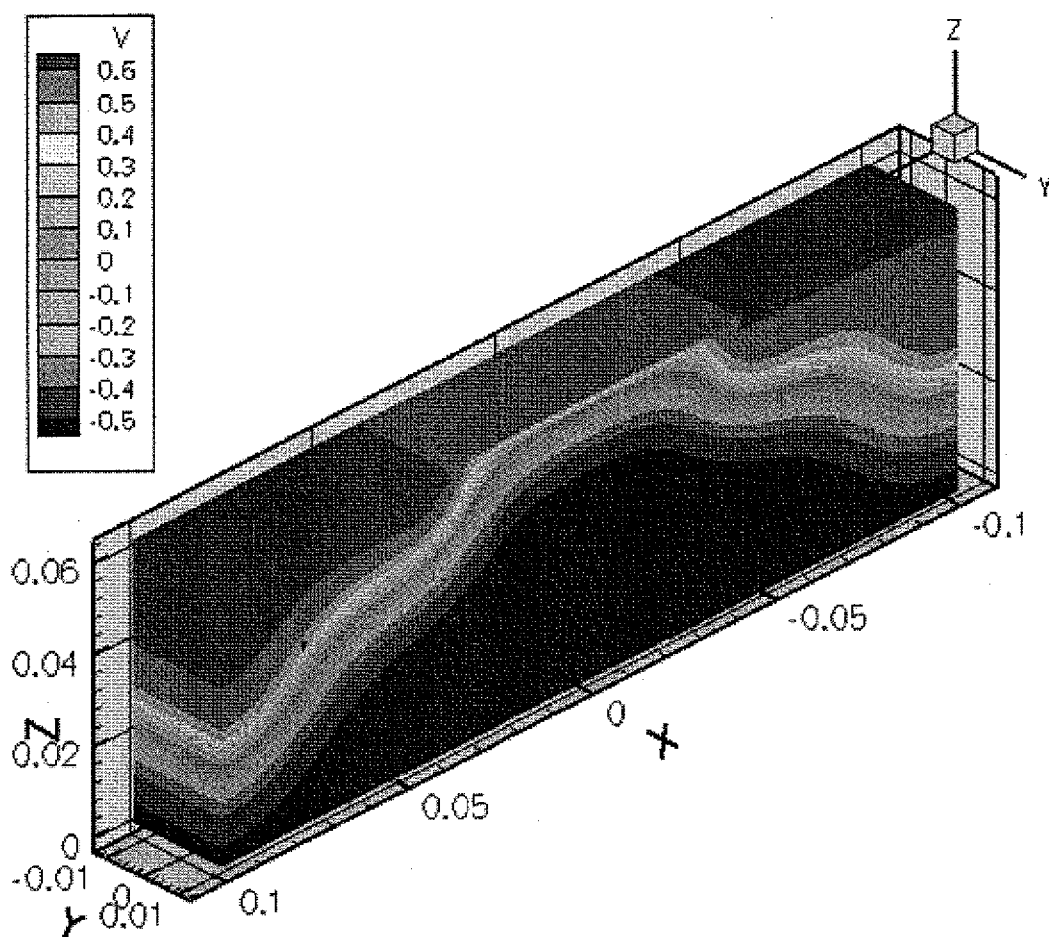


FIG. 5

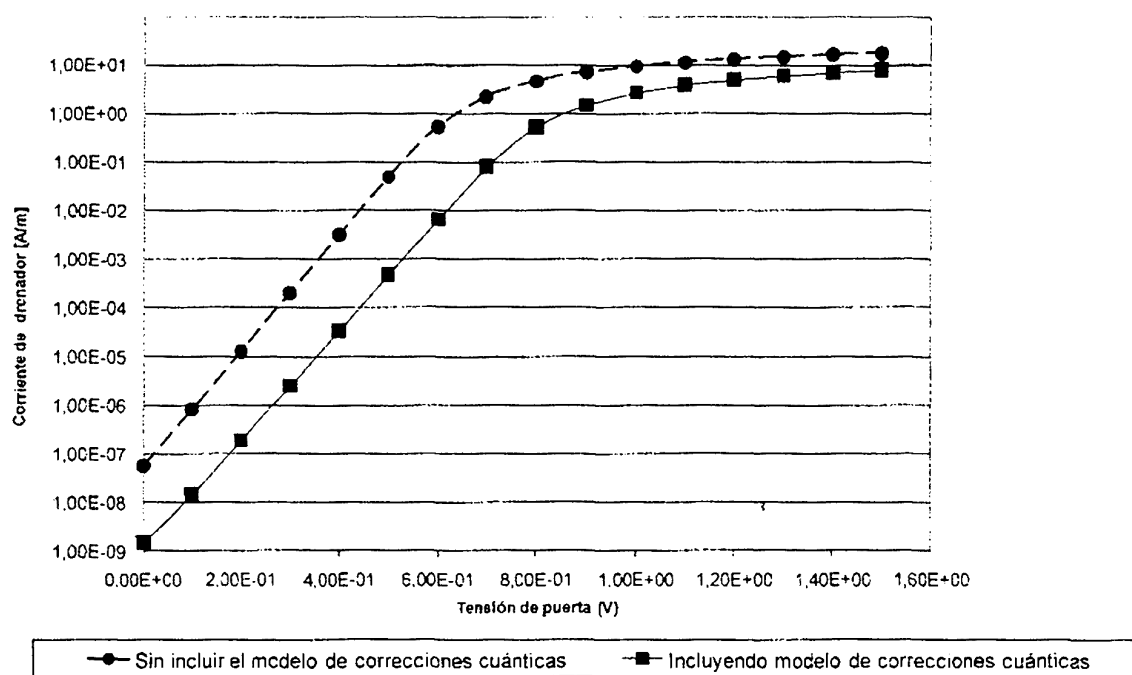


FIG. 6



OFICINA ESPAÑOLA
DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

②¹ N.º solicitud: 200930611

②² Fecha de presentación de la solicitud: 20.08.2009

③² Fecha de prioridad:

INFORME SOBRE EL ESTADO DE LA TÉCNICA

⑤¹ Int. Cl.: **G06F17/50** (2006.01)

DOCUMENTOS RELEVANTES

Categoría	Documentos citados	Reivindicaciones afectadas
X	US 6304834 B1 (TOSHIBA KK) 16.10.2001, figura 11; columna 1, línea 64 – columna 2, línea 52; columna 5, línea 6 – columna 9, línea 45; columna 12, línea 9 – columna 15, línea 39; reivindicación 9.	1-4
A	EP 1111521 A2 (NEC CORP) 27.06.2001, resumen.	1
A	US 2004079943 A1 (SEIKO EPSON CORP) 29.04.2004, descripción.	1
A	US 2009132974 A1 (HITACHI LTD) 21.05.2009, descripción.	1

Categoría de los documentos citados

X: de particular relevancia

Y: de particular relevancia combinado con otro/s de la misma categoría

A: refleja el estado de la técnica

O: referido a divulgación no escrita

P: publicado entre la fecha de prioridad y la de presentación de la solicitud

E: documento anterior, pero publicado después de la fecha de presentación de la solicitud

El presente informe ha sido realizado

para todas las reivindicaciones

para las reivindicaciones nº:

Fecha de realización del informe
04.04.2011

Examinador
E. Pina Martínez

Página
1/4

Documentación mínima buscada (sistema de clasificación seguido de los símbolos de clasificación)

G06F

Bases de datos electrónicas consultadas durante la búsqueda (nombre de la base de datos y, si es posible, términos de búsqueda utilizados)

INVENES, EPODOC, WPI, XPESP, NPL

Fecha de Realización de la Opinión Escrita: 04.04.2011

Declaración

Novedad (Art. 6.1 LP 11/1986)	Reivindicaciones 2-4	SI
	Reivindicaciones 1	NO
Actividad inventiva (Art. 8.1 LP11/1986)	Reivindicaciones	SI
	Reivindicaciones 1-4	NO

Se considera que la solicitud cumple con el requisito de aplicación industrial. Este requisito fue evaluado durante la fase de examen formal y técnico de la solicitud (Artículo 31.2 Ley 11/1986).

Base de la Opinión.-

La presente opinión se ha realizado sobre la base de la solicitud de patente tal y como se publica.

1. Documentos considerados.-

A continuación se relacionan los documentos pertenecientes al estado de la técnica tomados en consideración para la realización de esta opinión.

Documento	Número Publicación o Identificación	Fecha Publicación
D01	US 6304834 B1 (TOSHIBA KK)	16.10.2001

2. Declaración motivada según los artículos 29.6 y 29.7 del Reglamento de ejecución de la Ley 11/1986, de 20 de marzo, de Patentes sobre la novedad y la actividad inventiva; citas y explicaciones en apoyo de esta declaración

Se considera D01 el documento del estado de la técnica anterior más próximo al objeto reivindicado en la solicitud. Este documento afecta a la novedad y/o actividad inventiva de todas las reivindicaciones, tal y como se explica a continuación (las referencias entre paréntesis se refieren a D01).

Reivindicación1

Siguiendo la terminología empleada en la solicitud, el documento D01 describe el siguiente método (las referencias entre paréntesis se refieren a D01):

Método de fabricación de una estructura semiconductor que comprende las etapas siguientes (ver fig.11):

- obtención de los parámetros materiales, dimensiones y características externas del dispositivo electrónico (col. 1, lín. 65-67).
- obtención del potencial clásico a partir de la etapa anterior (col. 1, lín. 65-67)
- obtención de los cuasi-potenciales de los portadores y las concentraciones de portadores, (col. 5, lín. 40-55).
- obtención de los potenciales cuánticos a partir del potencial clásico y los cuasi-potenciales, (col. 5, lín. 40-55)
- cálculo de las características eléctricas del dispositivo a partir del potencial cuántico y los cuasi potenciales, (col. 2, lín. 1-7)
- comparación de las características eléctricas obtenidas con otras de referencia y optimización de los parámetros materiales en función de esa comparación (col. 9, lín. 10-15),

en el que en la etapa d se utilizan las ecuaciones de gradiente de densidad (ec. 1-3).

A la vista de lo anterior se deduce que el documento D01 describe idénticamente todas las etapas de la reivindicación 1 por lo que ésta no satisface el requisito de novedad establecido en el Art. 6.1 de la Ley de Patentes 11/86.

Reivindicaciones 2-4

En cuanto a las ecuaciones empleadas para el cálculo del potencial cuántico (para electrones o huecos) que se definen en las reivindicaciones dependientes, correspondientes a una elección de fronteras irregulares o regulares en la discretización empleada, se considera que dichas ecuaciones son consecuencia de la aplicación de un determinado método de cálculo para la resolución de un problema matemático. Es decir, no se considera que haya un problema técnico subyacente a la hora de simplificar un determinado cálculo matemático.

En cualquier caso, en el documento D01 el problema de simplificación del cálculo se resuelve mediante la transformación de las ecuaciones integrales (1-3) en ecuaciones algebraicas (col. 6, lín. 25-40) que siguen la variación del potencial y no la de las concentraciones de los portadores, lo que se considera una solución equivalente a la que se aporta en el método de la solicitud.

En consecuencia se considera que las reivindicaciones 2-4 carecen del requisito de actividad inventiva (Art. 8.1 LP).

En conclusión, la solicitud no satisface los requisitos de patentabilidad establecidos en el Art. 4.1 LP.