

# 应用于半导体器件钝化的类金刚石膜仿真模型的建立

王亚飞, 戴小平, 周 维

(株洲中车时代电气股份有限公司, 湖南 株洲 412001)

**摘 要:** 为建立类金刚石膜材料仿真模型, 采用 PECVD 法在石英及硅衬底沉积出适用于功率半导体器件钝化的类金刚石膜, 借助光谱吸收法测量其禁带宽度, 结合材料电特性、能带结构及其与衬底的相互作用, 将材料在 Silvaco ATLAS 器件仿真系统中重现。结果表明, 材料模型的电特性仿真数据与实验数据相关性达 0.9 以上。该仿真模型可应用于优化类金刚石膜钝化工艺, 研究类金刚石膜材料掺杂特性。

**关键词:** 半导体器件; 类金刚石膜; 钝化; Silvaco ATLAS; 仿真模型

中图分类号: TN305; TG17

文献标识码: A

文章编号: 2095-3631(2016)04-0034-04

doi:10.13889/j.issn.2095-3631.2016.04.007

## Simulation Modelling of Diamond-like Carbon Film for Semiconductor Device Passivation

WANG Yafei, DAI Xiaoping, ZHOU Wei

(Zhuzhou CRRC Times Electric Co., Ltd., Zhuzhou, Hunan 412001, China)

**Abstract:** In order to build the simulative model of diamond-like carbon, it used PECVD to deposit diamond-like carbon from quartz and silicon substrate, which was suitable for power semiconductor device as passivation layer. Band gap was measured through the spectrum absorption method. Combining with its electrical characteristics, band structure and the interaction with substrate, the material was reproduced in Silvaco ATLAS device simulator. Results show that the correlation coefficient between electrical simulation data of the material model and the experimental data is above 0.9. This material modelling can be applied for improving the passivation process of diamond-like carbon film and investigating its doping characteristics.

**Keywords:** semiconductor device; diamond-like carbon; passivation; Silvaco ATLAS; simulation model

### 0 引言

近年来新兴的非晶材料类金刚石膜 (Diamond-like carbon, DLC) 兼具了金刚石和石墨的优良性能, 具有高硬度、高导热性、高电阻率和良好的化学稳定性<sup>[1]</sup>等特点, 非常适合用于功率半导体器件芯片的终端钝化, 以提高芯片阻断电压<sup>[2]</sup>和长期可靠性<sup>[3]</sup>。

对 DLC 薄膜特性的研究, 目前多采用物理实验方法, 而利用 Silvaco 仿真软件进行研究的文献并不多见, 利用该软件建模更是鲜有提及。Silvaco TCAD 仿真软件可以用来仿真半导体工艺和器件特性, 其中 ATLAS

器件仿真系统可以模拟半导体器件的电学、光学和热学行为。ATLAS 系统中的 BLAZE 模块可以仿真硅化物、III-V、II-IV、IV-IV、聚合物及有机物等各种材料<sup>[4]</sup>, 它将所有材料归类于半导体、绝缘体和导体三大类, 而每一类都用特定的参数来描述, 如半导体材料有电子亲和势、能带间隙、状态密度、少子寿命和饱和速度等参数。在 Silvaco 仿真软件自身集成的材料库中, 几乎涵盖了目前半导体物理学中常用材料特性及半导体器件各区域的物理模型。更重要的是, 该软件提供了用户自定义材料功能, 可以定义材料库中没有包含的材料。

本文通过对 DLC 薄膜一些基本参数及电特性的测量, 结合 Silvaco ATLAS 对材料进行仿真, 从而建立

收稿日期: 2016-05-04

作者简介: 王亚飞 (1987-) 男, 主要从事功率半导体器件芯片仿真及芯片钝化工艺研发工作。

DLC 材料仿真模型，以期研究 DLC 的薄膜特性。

1 DLC 薄膜结构

DLC 是一种宽禁带半导体非晶材料，具有诸多与金刚石相似的性能，其中碳原子主要以  $SP^1$ 、 $SP^2$  和  $SP^3$  杂化键结合。通常认为 DLC 的结构是在以 C 的  $SP^2$  形成的网格骨架上镶嵌着无序态的  $SP^3$  颗粒 C<sup>[5]</sup>。膜中原子的键合方式（例如 C-H，C-C， $SP^2$ ， $SP^3$  等）及各种键合方式的比例不同，性能往往也不尽相同。

图 1 是由  $SP^2$ 、 $SP^3$  和 H 成分组成的 DLC 三元相图<sup>[6]</sup>，其左下角相中  $SP^2$  含量太高，没有 DLC 相形成；右下角相中 H 含量过高，不能成膜；ta-C 和 ta-C:H 的区域是含  $SP^3$  键较多的区域，其膜性能较好。据报道，DLC 薄膜的主要性能由  $SP^3$  键来决定<sup>[7]</sup>。应用于半导体钝化的 DLC 膜中  $SP^3$  键含量可高达 80%。

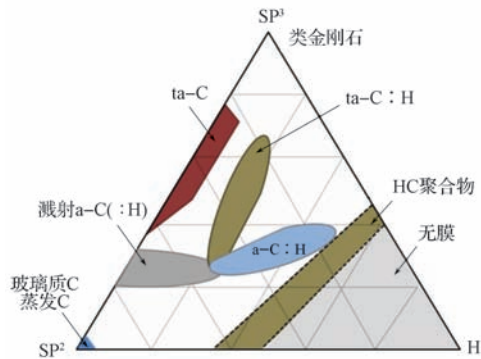


图 1 形成 DLC 的三元相图  
Fig.1 Ternary phase diagram of forming DLC

2 DLC 薄膜制备及材料特性测量

2.1 DLC 薄膜制备

制备 DLC 薄膜样品用于关键参数测量，其主要制备方法有：离子束沉积法 (IBD)、磁控溅射沉积法 (MSD)、真空阴极弧沉积法 (CVAD)、脉冲激光沉积法 (PLD) 和等离子体增强化学气相沉积法 (PECVD) 等<sup>[5]</sup>，其中 PECVD 法既可用于 DLC 薄膜的沉积又可用于薄膜刻蚀，从而得到广泛使用。本文实验采用 PECVD 法制备 DLC 薄膜，以氩气作为反溅射清洗气体，在室温下利用较高频率 (13.56 MHz) 的射频源将甲烷和氢气辉光放电并形成等离子体，同时在反应腔负偏压的作用下，使这些含有碳氢的等离子团沉积在衬底上从而形成 DLC 薄膜。

2.2 DLC 薄膜材料特性

测量 DLC 薄膜材料重要参数，将其作为 Silvaco 仿真的基本输入参数；同时将对于电流密度  $J$  和施加电压  $V$  或电场强度  $E$  的实验测量结果作为校正薄膜仿真结果和调整其他难以通过实验测量参数值的依据，以期建立

更为精确的 DLC 材料仿真模型。

2.2.1 禁带宽度

禁带宽度作为 DLC 薄膜的主要特征量，直接决定其承受电压的能力。

在石英衬底沉积 DLC 薄膜并采用紫外可见光谱吸收法获得其吸收光谱 (图 2)。图 2 中没有清晰可辨的能带边缘，表征 DLC 材料虽有较为复杂的能量带，但仍可沿着吸收光谱做渐进线，得到吸收波长为 580 nm。通过光子能量公式 (式 (1))，可得禁带宽度为 2.14 eV。

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

(1)

式中： $h$ ——普朗克常量； $c$ ——光在空气中的传播速度； $\lambda$ ——吸收的波长。

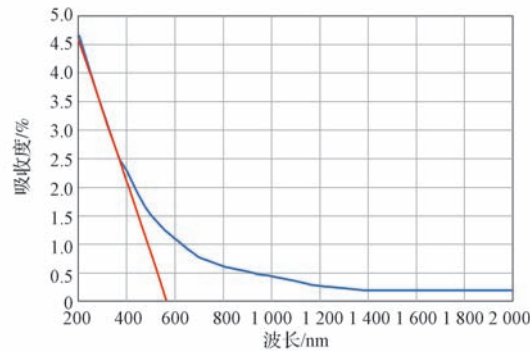


图 2 DLC 紫外线可见光谱吸收图  
Fig.2 UV-VIS absorption spectrum of DLC

2.2.2 材料横向电流密度 - 电场强度 ( $J-E$ ) 特性

在石英衬底沉积出 200 nm DLC 薄膜，利用电子束蒸发在薄膜表面沉积约 10  $\mu\text{m}$  铝层。经湿法刻蚀引出金属电极 (图 3) 并以 50  $\mu\text{m}$  宽 DLC 膜作为电流通道。由于 DLC 膜电阻率较高，室温下电流和电压信号较小，本次实验使用皮可安培计 (Picoammeter) 来进行精确测量。该横向结构主要用来测量流经 DLC 膜体内的电流特性。

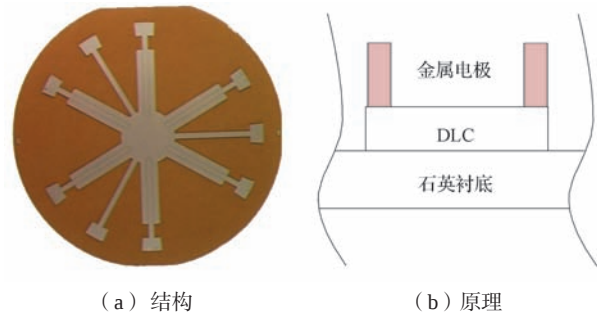


图 3 材料横向  $J-E$  特性测量结构及其原理  
Fig.3 Schematic diagram of test structure and theory for lateral  $J-E$  characteristic

2.2.3 材料纵向电流密度 - 电压 ( $J-V$ ) 特性

在低阻 N 型硅衬底生长约 200 nm DLC 薄膜并双面沉积约 10  $\mu\text{m}$  金属薄膜，再经掩膜刻蚀在 DLC 面做出电极 (图 4)。与横向结构不同，纵向结构体现了 DLC 作

为钝化层时与半导体器件硅衬底的相互作用（异质结）。

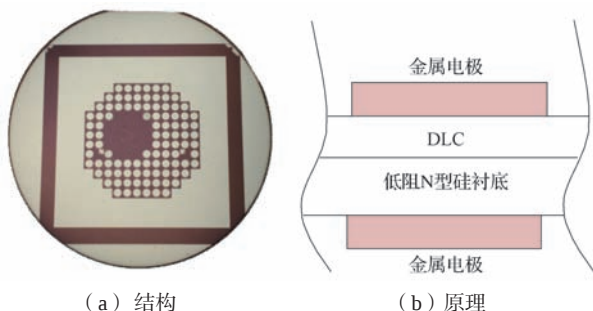


图4 材料纵向  $J-V$  特性测量结构及其原理

Fig.4 Schematic diagram of test structure and theory for vertical  $J-V$  characteristic

### 3 DLC 材料在 Silvaco 中的仿真

用 Silvaco 仿真 DLC 材料主要涉及到两个方面内容：材料特性在仿真软件中的描述，用来表征材料特性；DLC 材料与硅衬底界面的相互作用，用来表征 DLC 作为半导体材料与硅衬底所形成的异质结。

#### 3.1 DLC 能带结构

利用 Silvaco 建模时，需指定材料名称及材料种类。在使用有限元方法进行器件仿真时，模型的方程式将在半导体区域（semiconductor region）进行计算，并且需使用禁带宽度、态密度、电子亲和势等参数来定义半导体材料能带结构。

DLC 作为非晶半导体材料，其禁带中存在大量的缺陷态，并形成具有带尾态（band tail state）的连续态密度分布<sup>[8]</sup>。在进行仿真时，需借助 ATLAS 仿真器中的 Defect 语言来定义 DLC 材料禁带中缺陷态的能量分布并结合指数衰减的带尾态和高斯分布的中间禁带态（mid-gap state）来指明缺陷态密度（DOS）。

一般认为，总缺陷态密度  $g(E)$  由 4 个价带组成：2 个尾带（施主价带和受主导带）和 2 个深能级带（受主型和施主型）。深能级带由高斯分布模拟<sup>[4]</sup>：

$$g(E) = g_{TA}(E) + g_{TD}(E) + g_{GA}(E) + g_{GD}(E) \quad (2)$$

式中： $g_{TA}(E)$  为受主导带分布，且  $g_{TA}(E) =$

$$N_{TA} \exp\left[\frac{E - E_c}{W_{TA}}\right]; g_{TD}(E) \text{ 为施主价带分布，且 } g_{TD}(E) =$$

$$N_{TD} \exp\left[\frac{E_v - E}{W_{TD}}\right]; g_{GA}(E) \text{ 为受主深能级带分布，且}$$

$$g_{GA}(E) = N_{GA} \exp\left[-\left[\frac{E_{GA} - E}{W_{GA}}\right]^2\right]; g_{GD}(E) \text{ 为施主深能级}$$

$$\text{带分布，且 } g_{GD}(E) = N_{GD} \exp\left[-\left[\frac{E - E_{GD}}{W_{GD}}\right]^2\right]. E \text{ 是陷阱}$$

能量； $E_c$  是导带能量； $E_v$  是价带能量；下标的 T、G、A、

D 分别代表带尾态、高斯分布（深能级）态、受主态和施主态。

对于指数尾型分布（exponential tail distribution），态密度由导带和价带边缘截取密度（ $N_{TA}$  和  $N_{TD}$ ）及其特征衰变能（ $W_{TA}$  和  $W_{TD}$ ）来描述；对于高斯分布，态密度则由其总态密度（ $N_{GA}$  和  $N_{GD}$ ）、特征衰变能（ $W_{GA}$  和  $W_{GD}$ ）、峰值能量及峰值分布（ $E_{GA}$  和  $E_{GD}$ ）来描述。

#### 3.2 界面特征

与传统的二氧化硅、硅橡胶等钝化层不同的是，DLC 作为半导体材料，用作钝化层时与衬底有着更为复杂的界面作用。以常用的半导体硅为例，当其沉积一层 DLC 薄膜作为钝化层时，在硅与 DLC 薄膜接触界面会形成异质结。DLC 与硅界面的异质结示意如图 5 所示。图中， $E_c(x)$ 、 $E_v(x)$  和  $E_i(x)$  分别是空间依赖的导带、价带和本征能级； $E_f$  和  $E_0$  分别是费米能级和真空能级； $E_{g1}$  和  $E_{g2}$  是两种材料的禁带； $\Delta E_v$  是  $E_{g1}$  和  $E_{g2}$  之差，出现在异质结界面的价带中； $qV_0$  是异质结的内建势； $\chi_1$  和  $\chi_2$  是两种材料的电子亲和势。

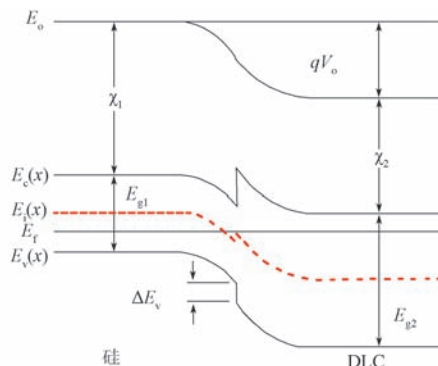


图5 异质结能带示意图

Fig.5 Band diagram of hetero-junction

Defect 语言中不包含材料模型，因此需要结合 BLAZE（化合物材料 2D 仿真器）来仿真材料系统。在 BLAZE 中，定义异质结的基本参数有：带隙参数、EG300、AFFINITY、导带和价带态密度、NC300 和 NV300。其中 EG300 指材料在 300 K 温度下的禁带宽度；NC300 指材料在 300 K 温度下的导带态密度；NV300 指材料在 300 K 温度下的价带态密度。

由图 5 可知，2 种材料之间不同的带隙会导致价带和导带的不连续。价带和导带之间的带隙分布对异质器件中电荷的传输影响很大。一种简便可行的方法是通过 MATERIAL 语句中的 AFFINITY 参数来校正材料的电子亲和势。

### 4 仿真模型建立及结果分析

#### 4.1 仿真模型的建立

综合 DLC 材料参数及其与衬底材料的相互作用，

并结合 Silvaco 语法，建立一个 DLC 材料模型如下：

```
## 自定义一个材料，名为 DLC
•Region Reg=<n> name=DLC
mat=" UD1(DLC)"
## 基于硅四面体 (SP3) 结构，定义
DLC 材料参数及异质结
•Material material=DLC user.group=
semiconductor user.default=silicon EG300=2.14
mun=<n> mup=<n> nc300=<n> nv300=<n>
affinity=<n> resis=<n> permit=<n>
## 定义 DLC 材料禁带中的连续态密度
•Defect region= <n> nta= ntd=<n>
wta=<n> wtd=<n> nga=<n> ngd=<n> ega=<n>
egd=<n> wga=<n> wgd=<n>
```

4.2 仿真结果

在 Silvaco DeckBuild 中建立与第 2.2 节中实验结构相同的仿真结构，使用 DLC 仿真模型定义 DLC 材料。在 300 K 温度下进行仿真计算，调整相关参数值。输出电流密度与电场强度的关系曲线，并与 2.2 节结构实测结果进行对比（图 6 和图 7）。

一组可行的材料仿真模型参数如表 1 所示。可以看出，该模型能较完整地描述 DLC 薄膜电特性（横向结构）及其作为钝化层时与硅衬底的相互作用（纵向结构）。使用 Excel Correlation 函数进行相关性分析，横向  $J-E$

特性仿真结果与实验数据的相关系数为 0.99，纵向  $J-V$  特性仿真结果与实验数据的相关系数为 0.90。

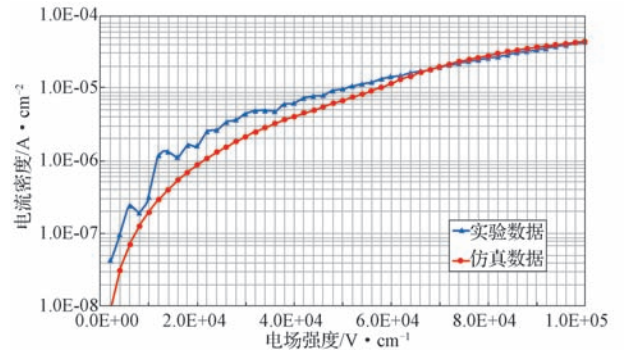


图 6 DLC 薄膜横向  $J-E$  特性仿真结果与实验数据对比  
Fig.6 Comparison between simulation results and experiment results of lateral  $J-E$  characteristics

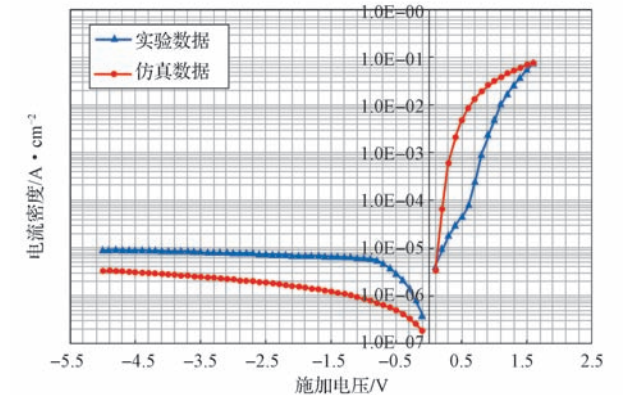


图 7 DLC 薄膜纵向  $J-V$  特性仿真结果与实验数据对比  
Fig.7 Comparison between simulation results and experiment results of vertical  $J-V$  characteristics

表 1 DLC 材料模型仿真参数  
Tab.1 Simulation parameters of DLC model

| 仿真语句 | Material                              |     |                      |       |          | Defect                     |     |                       |     |      |      |       |      |
|------|---------------------------------------|-----|----------------------|-------|----------|----------------------------|-----|-----------------------|-----|------|------|-------|------|
|      | MUN                                   | MUP | NC300                | NV300 | AFFINITY | NTA                        | NTD | NGA                   | NGD | EGA  | EGD  | WTA   | WTD  |
| 仿真参数 |                                       |     |                      |       |          |                            |     |                       |     |      |      |       |      |
| 仿真值  | 20                                    | 1.5 | $2.5 \times 10^{21}$ |       | 3.49     | $1.00 \times 10^{21}$      |     | $1.50 \times 10^{15}$ |     | 0.62 | 0.78 | 0.033 | 0.05 |
| 单位   | $\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ |     | $\text{cm}^{-3}$     |       | eV       | $\text{cm}^{-3}/\text{eV}$ |     | eV                    |     |      |      |       |      |

5 结语

本文介绍了类金刚石薄膜的基本物理性质，通过对其重要物理参数及基本电特性的测量，结合 Silvaco 有限元仿真软件初步建立了 DLC 材料仿真模型。该模型较为全面地涵盖了其重要的结构特征及物理特性，不但描述了其禁带态密度分布而且分析了其作为半导体钝化膜时与衬底的相互作用。基于该模型对两种测试结构进行仿真建模，其仿真数据与实验数据一致性较好。该新型 DLC 材料模型的建立，可进一步用于 ATLAS 器件仿真，探索最佳材料参数、研究不同掺杂对薄膜性质的影响，从而优化功率半导体器件终端钝化工艺，提高器件可靠性。

参考文献：

[1] 邓洁, 覃礼钊, 吴正龙. 类金刚石膜的性质及应用 [J]. 现代科

学仪器, 2007(3): 101-103.  
[2] SZMIDT J, LISIK Z, MITURA S, et al. DLC passivation layers for high voltage silicon devices [J]. Electrotechnical Conference, 1998, 1 (1): 345-348.  
[3] HONDA S, HARADA T, NISHII A, et al. High Voltage Device Edge Termination for Wide Temperature Range plus Humidity with Surface Charge Control (SCC) Technology [C] //28<sup>th</sup> ISPSD, 2016: 291-294.  
[4] Silvaco Inc. Atlas User's Manual Devices Simulation Software [S]. Santa Clara Silvaco Inc., 2013.  
[5] 彭鸿雁, 赵立新. 类金刚石膜结构的制备性能与应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2004.  
[6] SANTRA T S, BHATTACHARYYA T K, PATEL P, et al. Microelectromechanical Systems and Devices [M]. Croatia: InTech, 2012: 459-480.  
[7] GRILLV A. Electrical and optical properties of diamond-like carbon [J]. Thin Solid Films, 1999: 189-193.  
[8] ROBERTSON J. Defects in Diamond-Like Carbon [J]. Physical status solidi (a), 2001, 186(2): 177-185.