

## PREDICT-B

Predictive multiscale modeling of boron diffusion and activation kinetics in SiGe

<b>Programm / Ausschreibung</b>	KS 24/26, KS 24/26, BRIDGE 2025/01	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.02.2026	<b>Projektende</b>	31.01.2029
<b>Zeitraum</b>	2026 - 2029	<b>Projektlaufzeit</b>	36 Monate
<b>Projektförderung</b>	€ 358.263		
<b>Keywords</b>	first-principles modeling, machine learning, reaction-diffusion, SiGe, Boron, dopant activation		

### Projektbeschreibung

Technology-Computer-Aided-Design (TCAD)-Werkzeuge spielen eine zentrale Rolle in der Halbleiterentwicklung, da sie vorhersagbare Modelle für Prozess- und Baueigenschaften über alle Technologieknoten hinweg bereitstellen. Für fortgeschrittene CMOS-Bauelemente wie FinFETs, Nanosheets und zukünftige Gate-all-around-Strukturen ist die Kontrolle der Bor-Diffusion und Aktivierung in SiGe nach Implantation oder In-situ-Dotierung entscheidend, um extrem flache pn-Übergänge unter zunehmend eingeschränkten thermischen Budgets zu realisieren. Das Aktivierungsverhalten von Dopanden während des Annealings wird jedoch von komplexen Phänomenen wie transienter Diffusion, Clusterbildung und Grenzflächeneffekten bestimmt, die experimentell nicht direkt zugänglich sind und von empirischen Diffusionsmodellen oder klassischen interatomaren Potentialen nicht zuverlässig erfasst werden können.

Dieses Projekt zielt darauf ab, ein übertragbares Framework zur Modellierung dieses Aktivierungsvorgangs in SiGe zu entwickeln, beginnend mit einem maschinell gelernten interatomaren Potential, das auf Dichtefunktionaltheorie basiert. Durch die systematische Abdeckung verschiedener SiGe Zusammensetzungen, einschließlich des Einflusses von Verspannungen, der Bildung von Defektkomplexen und relevanter Grenzflächen, wird dieses Potential die Simulation der Bor-Diffusion und Aktivierung über realistische Zeitskalen mittels Molekulardynamik und kinetischen Monte-Carlo-Methoden ermöglichen und so die Lücke zwischen quantenmechanischer Genauigkeit und der für realistische Bauelementgeometrien erforderlichen Recheneffizienz schließen.

Aus diesen Simulationen werden wir Defektenergien, Migrationspfade und Reaktionsraten ableiten, um kontinuierliche Reaktions-Diffusions-Modelle ohne empirische Anpassungen zu parametrieren. Diese Modelle werden in das Global TCAD Solutions (GTS)-Framework implementiert, um Design-Technology Co-Optimization (DTCO) zu unterstützen und akkurate Vorhersagen für zukünftige 3D-Bauelementarchitekturen zu ermöglichen, bei denen die resultierenden Dotierungsprofile experimentell nicht direkt zugänglich sind. Die Validierung erfolgt anhand gut charakterisierter Si-Referenzen und repräsentativer SiGe-Teststrukturen.

Das Projekt wird die Grundlage für ein nicht-empirisches, physikalisches Modellierungs-Framework legen, das für die Integration in industrielle TCAD-Workflows geeignet ist. Dadurch werden genaue Vorhersagen bei moderatem Rechenaufwand ermöglicht und die Abhängigkeit von kostspieligen experimentellen Versuchsreihen verringert. Durch die Kombination von quantenmechanischen Simulationsdaten, maschinellem Lernen und Prozess-TCAD-Integration schafft dieses Projekt die Basis für die genaue Modellierung der Dotierstoff-Aktivierung und Diffusion während moderner Prozessbedingungen und in Geometrien. Es unterstützt damit Entwicklung zukünftiger skalierten Technologieknoten. Über Si und SiGe hinaus ist dieses übertragbare Framework auch auf reines Ge für Anwendungen wie Doping-basierte Qubits erweiterbar und kann zudem weiterentwickelt werden, um Co-Dotierungen zu behandeln, die für fortschrittliche CMOS-Technologien relevant sind.

## **Abstract**

Technology computer-aided design (TCAD) tools play a central role in semiconductor development, providing predictive models for process and device behavior across all technology nodes. For advanced CMOS devices such as FinFETs, nano-sheets, and future gate-all-around structures, controlling boron diffusion and activation in SiGe after implantation or in-situ doping is critical for achieving ultra-shallow junctions under increasingly constrained thermal budgets. However, dopant activation behavior during annealing is governed by complex phenomena such as transient diffusion, clustering, and interface-driven effects that are not directly accessible to experiments and cannot be reliably captured by empirical diffusion models or classical force fields.

This project aims at developing a transferable framework to model boron annealing in SiGe, starting from a machine-learned interatomic potential trained on density functional theory. By systematically covering the full SiGe composition range including the influence of strain, the formation of defect complexes, and relevant interfaces, this potential will enable large-scale atomistic simulations of boron diffusion and activation using molecular dynamics and kinetic Monte Carlo methods, thereby bridging the gap between first-principles accuracy and computational efficiency required at realistic device geometries.

From these simulations, we will extract defect energetics, migration pathways, and reaction rates to parameterize continuum reaction-diffusion models free from empirical fitting. These models will be implemented in the Global TCAD Solutions (GTS) framework to support design-technology co-optimization (DTCO), enabling predictive capabilities for next-generation 3D device architectures where doping profiles are not directly accessible experimentally. Validation will be performed using well-characterized Si benchmarks and representative SiGe test structures.

The project will lay the groundwork for a non-empirical, physics-based modeling framework suitable for integration into industrial TCAD workflows, providing predictive insights at modest computational cost and thereby reducing reliance on costly trial-and-error experiments. By combining first-principles data, machine learning, and process TCAD integration, the work provides a foundation for accurate modeling of boron activation and diffusion across advanced process conditions and geometries, supporting future technology scaling. Beyond Si and SiGe, this transferable framework is extendable to pure Ge for applications such as dopant-based quantum devices, and can be further developed to address co-doping scenarios relevant for advanced CMOS technology.

## **Projektkoordinator**

- Technische Universität Wien

## **Projektpartner**

- Global TCAD Solutions GmbH