

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

Кафедра микроэлектроники

В.В. НЕЛАЕВ, В.Р. СТЕМПИЦКИЙ

***РАБОТА В СРЕДЕ ПАКЕТА АТЕНА ДЛЯ
ПРОЕКТИРОВАНИЯ
ТЕХНОЛОГИИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ МИКРОСХЕМ***

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

по дисциплине “Основы САПР в микроэлектронике”
для студентов специальностей
I-41 01 02 “Микро- и наноэлектронные технологии и системы”,
I-41 01 03 “Квантовые информационные системы”
всех форм обучения

Минск 2005

УДК 621.382.8.049.77(075.8)

ББК 32.844.1 я 73

Н 49

Рецензент:
д-р техн. наук, проф. В.Е. Борисенко

Нелаев В.В.

Н 49

Работа в среде пакета ATHENA для проектирования технологии интегральных микросхем: Учебное пособие по дисц. “Основы САПР в микроэлектронике” для студ. спец. I-41 01 02 “Микро- и нанoeлектронные технологии и системы”, I-41 01 03 “Квантовые информационные системы” всех форм обуч. / В.В. Нелаев, В.Р. Стемпицкий. – Мн.: БГУИР, 2005. – 138 с.: ил.

ISBN 985-444-788-X

В пособии приведены общие сведения о модуле ATHENA программного комплекса фирмы Silvaso для компьютерного моделирования, проектирования и оптимизации технологических процессов формирования приборов микроэлектроники, а также технологического маршрута изготовления интегральной схемы в целом. Описывается порядок работы в модуле ATHENA под управлением интерактивной оболочки DECKBUILD с многочисленными примерами, содержится подробное описание директив для выполнения задания на моделирование вместе с полным их списком.

УДК 621.382.8.049.77(075.8)

ББК 32.844.1 я 73

ISBN 985-444-788-X

© Нелаев В.В., Стемпицкий В.Р., 2005

© БГУИР, 2005

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

1. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ ATHENA

1.1. Работа с модулем ATHENA в среде DECKBUILD

1.2. Создание структуры прибора

1.2.1. Входные/выходные файлы модуля ATHENA

1.2.2. Создание исходной структуры

1.3. Выбор моделей в программе SSUPREM4

1.4. Некоторые особенности модуля ATHENA

1.4.1. Средства для преобразования моделируемой структуры

1.4.2. Использование физических моделей при моделировании процессов осаждения и травления в модуле ELITE

1.5. Адаптивное построение сетки

1.5.1. Адаптация сетки при моделировании операции термообработки

1.5.2. Интерфейс контроля сетки

1.6. Режимы работы в среде DECKBUILD

2. ДИРЕКТИВЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ В МОДУЛЕ ATHENA

2.1. Правила и примеры работы с директивами

2.2. Список директив модуля ATHENA

3. ОПИСАНИЕ ДИРЕКТИВ МОДУЛЯ ATHENA

ЛИТЕРАТУРА

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование, проектирование и оптимизация технологических процессов формирования приборов микроэлектроники, а также технологического маршрута изготовления интегральной схемы в целом (Technology Computer Aided Design – TCAD) являются важными и актуальными задачами современной микроэлектроники. Ознакомление и приобретение навыков работы в среде TCAD являются необходимыми компонентами подготовки и повышения квалификации инженеров-проектировщиков интегральных микросхем.

Задача проектирования технологии изготовления изделий микроэлектроники состоит в построении адекватных физических моделей базовых операций, в выборе наиболее оптимальных с точки зрения быстродействия и точности расчетов с использованием численных методов интегрирования уравнений, описывающих физические процессы, сопровождающие технологические операции, и в согласовании отдельных моделей базовых операций в процессе построения сквозного технологического маршрута с целью получения на выходе профилей распределения концентраций электрически активных примесей в структурных областях изготавливаемой схемы и ее характерных геометрических размеров.

Настоящее пособие посвящено описанию программного модуля ATHENA, предназначенного для физического моделирования и проектирования как отдельных технологических операций, так и всего маршрута изготовления приборов микроэлектроники. ATHENA как составляющая часть программного комплекса фирмы Silvaco [1] – мирового лидера в области разработки программного обеспечения для проектирования технологии в микроэлектронике активно используется на современных предприятиях электронной промышленности.

Пособие является продолжением выпущенных ранее в БГУИР учебных и методических изданий, включающих описание физических моделей, используемых в программном комплексе SSUPREM4 [2] и в более ранней версии этого комплекса Suprem II [3], а также описание языка составления задания на моделирование технологии в программном комплексе Suprem II [4].

Для эффективного использования как в учебном процессе, так и в научных исследованиях программного модуля ATHENA необходимо, прежде всего, ознакомиться с современными физическими моделями проектирования технологии в микроэлектронике, изложенными в [2]. Изложенный в пособии материал основан на Руководстве для пользователя программного модуля ATHENA [5].

1. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ ATHENA

Модуль ATHENA является составной частью программного комплекса фирмы Silvaco и предназначен для численного физического двухмерного моделирования и проектирования как отдельных операций, так и технологического маршрута изготовления изделий микроэлектроники.

ATHENA осуществляет инициализацию моделируемой структуры и ее модификацию в процессе расчетов, а также обеспечивает управление процессом моделирования операций осаждения и травления и имеет модульную архитектуру, включающую следующие программные инструменты:

- SSUPREM4 – используется для проектирования, анализа и оптимизации кремниевых полупроводниковых структур;
- ELITE – служит для проектирования двухмерной топографии моделируемой структуры, включая моделирование операций осаждения и травления;
- OPTOLITH – проводит моделирование операции оптической литографии;
- FLASH – используется для проектирования, анализа и оптимизации процессов имплантации и диффузии в сложных полупроводниковых структурах.

В среде модуля ATHENA запускаются программы Bake, C-interpret, CMP, Deposition, Development, Diffusion, Epitaxy, Etch, Exposure, Imaging, Implantation, Oxidation, Silicidation (подробная информация об этих программах содержится в данном пособии и в пособии [2]).

Модуль ATHENA также используется во взаимодействии с интерактивными инструментами виртуальной фабрики (VWF Interactive Tools), включая DECKBUILD, TONYPLOT, DEVEDIT, MASKVIEWS и OPTIMIZER.

1.1. Работа с модулем ATHENA в среде DECKBUILD

Основной графической оболочкой для работы в среде модуля ATHENA является диалоговая среда DECKBUILD, которая используется в следующих целях:

- создание входных файлов для моделирования технологических процессов и/или приборов;
- запуск процесса моделирования в диалоговом режиме;
- взаимодействие между различными программами моделирования;
- вызов других интерактивных инструментов модуля VWF (Virtual Wafer Fab – виртуальная фабрика по производству пластин).

Для запуска модуля ATHENA в среде DECKBUILD в диалоговом режиме введите следующую UNIX-команду: `deckbuild -an`.

Главное окно модуля DECKBUILD представлено на рис. 1.1. В нижнем текстовом окне содержатся логотип модуля ATHENA и номер используемой версии, список доступных модулей и командное приглашение.

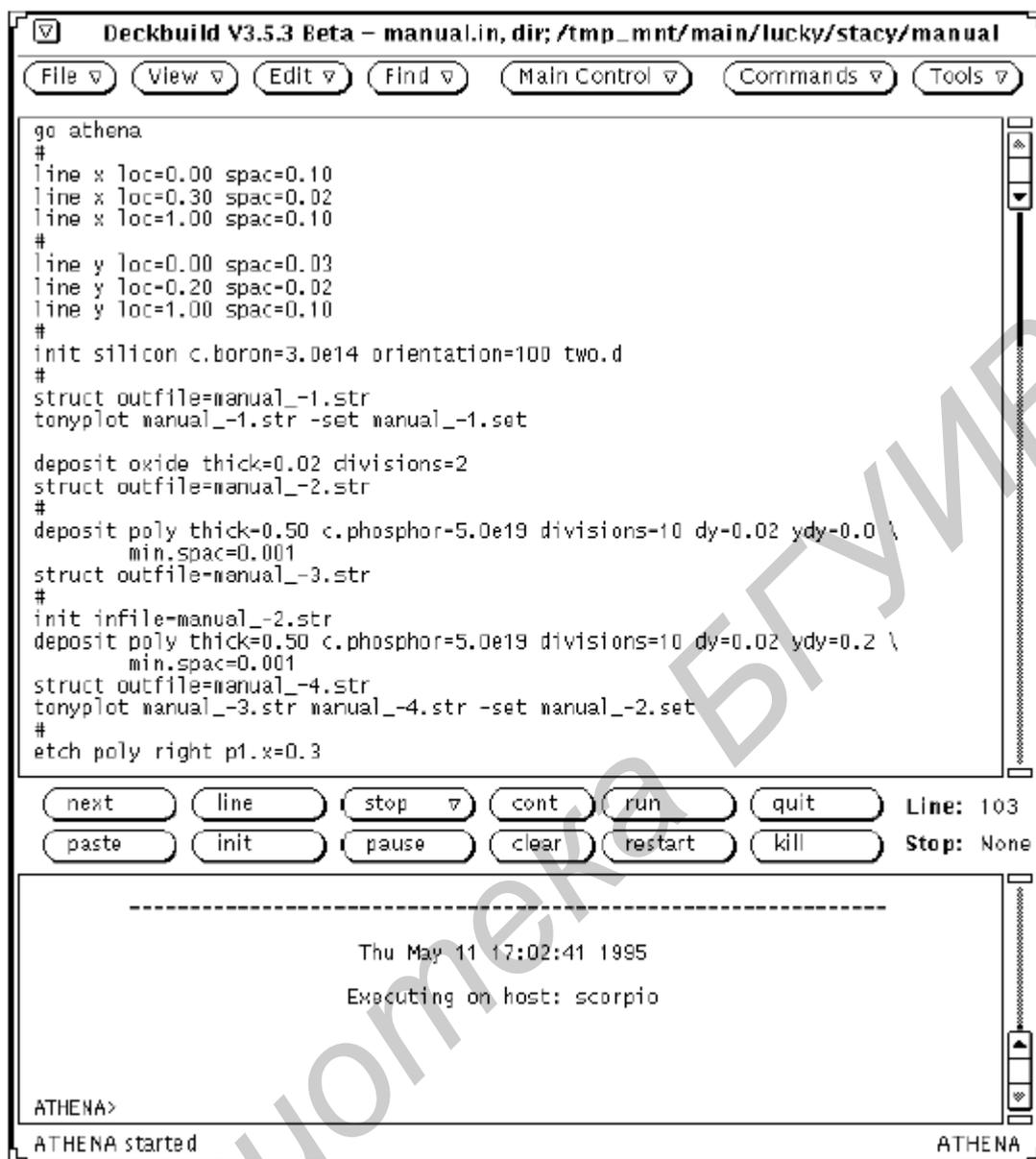


Рис. 1.1. Главное окно модуля DECKBUILD

В среде DECKBUILD можно загружать и запускать входные файлы с примерами моделирования. Для доступа к примерам модуля ATHENA откройте меню Main Control и выберите меню Examples. После этого появится окно примеров программы DECKBUILD (рис. 1.2).

Группы примеров в меню Section сгруппированы по использованным программам моделирования или по объектам моделирования. Отдельные входные файлы для примеров приведены в подменю Sub-section. Запуск примеров осуществляется путем выбора одного из разделов меню Section (например ATHENA_SSUPREM4). После этого появляется список имен входных файлов. Краткие описания примеров представлены в окне Examples.

Выберите один из входных файлов, используя меню Sub-section или двойным щелчком мыши на имени входного файла. После этого появится описание выбранного примера.

Нажмите кнопку Load Example, чтобы загрузить выбранный входной файл в текстовом окне DECKBUILD. Теперь выбранный входной файл вместе с другими, связанными с ним файлами (файлы со структурами, файлы для TONYPLOT и файлы с топологией для MASKVIEWS) будут скопированы в текущую директорию. Выбранный входной файл можно запустить нажатием кнопки Run в главном окне DECKBUILD или посредством выполнения определенных инструкций в окне примеров DECKBUILD. После выполнения большинства примеров модуля ATHENA подключается графический постпроцессор TONYPLOT, с помощью которого на экран дисплея выводятся необходимые графики.

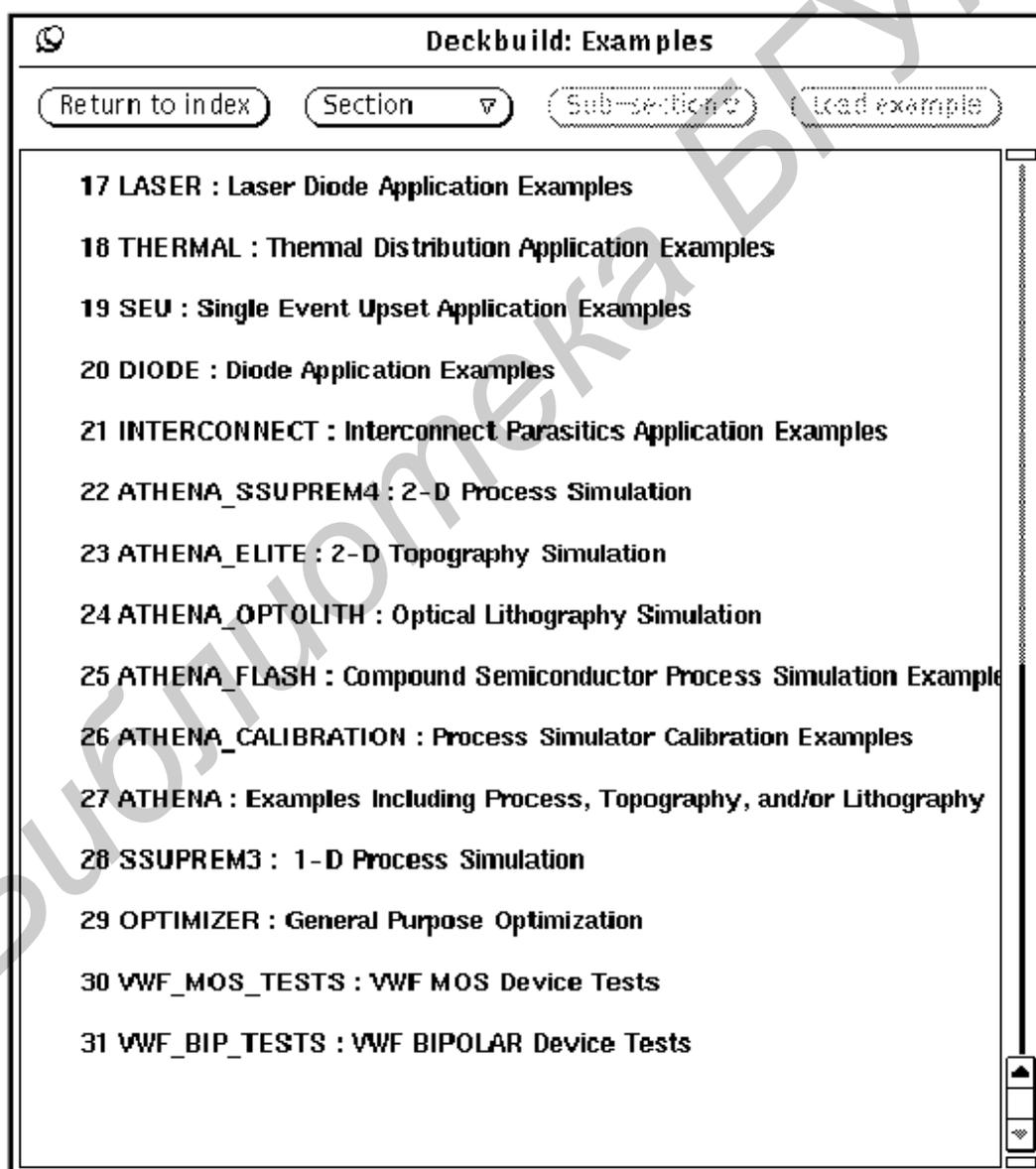


Рис. 1.2. Окно DECKBUILD Examples

Помощь в режиме online. Информацию о командах и синтаксисе модуля ATHENA можно получить посредством помощи в режиме online. Доступ к помощи может быть осуществлен в интерактивном режиме или в среде DECKBUILD. Наберите HELP в подсказке ATHENA> или же в текстовом окне DECKBUILD. После этого в нижнем окне появится список доступных команд модуля ATHENA. Синтаксис команды: HELP <Commands name>.

Эта команда предоставляет дополнительную информацию об именах параметров, начальных значениях и описание параметров для назначаемых команд. Для получения подробной информации о параметрах по умолчанию в модуле ATHENA (записанных в специальном файле под именем athenamod) выберите пункт меню Models... из меню Commands в основном окне DECKBUILD. При этом открывается файл athenamod в окне текстового редактора, в котором можно прочитать файл или скопировать его.

Выберите пункт Notes... из меню Commands, чтобы открыть специальный информационный файл, в котором содержится последний выпуск информации о программном модуле ATHENA. Более полная информация о синтаксисе команд модуля ATHENA, о его параметрах и об их значениях по умолчанию содержится в разд. 2.

1.2. Создание структуры прибора

Модуль ATHENA предназначен, в основном, для моделирования технологии. Он включает программы моделирования отдельных технологических операций и маршрута в целом. В данном разделе описываются входные/выходные файлы модуля ATHENA и следующие базовые процедуры для создания входного файла, используемые во всех программах моделирования технологических операций:

- создание расчетной сетки для моделирования;
- проведение конформального осаждения;
- проведение геометрического травления;
- изменение структуры;
- сохранение и загрузка информации о структуре;
- интерфейс с программами моделирования прибора;
- использование различных интерактивных VWF инструментов (VWF INTERACTIVE TOOLS).

1.2.1. Входные/выходные файлы модуля ATHENA

Общая входная и выходная информация для модуля ATHENA обычно содержится в различных файлах.

Входная информация. Входной файл – это текстовый файл, который создается с помощью модуля DECKBUILD или с помощью ASCII текстового редактора. Отдельные строки текстового файла называются директивами. Каждая

директива состоит из имени и набора параметров, которые устанавливают определенные шаги процесса моделирования, или из коэффициентов, которые используются на каждом этапе моделирования. Детальная информация о синтаксисе директив содержится в разд. 2.

Поскольку в модуле ATHENA используется много информации по умолчанию, часть ее сохраняется в следующих файлах, недоступных для пользователя, которые содержат:

- `athenamod` – параметры физических моделей, коэффициенты диффузии и окисления, параметры численных методов, характеристики моделей осаждения и травления и оптические параметры для моделирования литографии;
- `athenaimp` – таблицы для моделирования ионной имплантации;
- `athenares` – данные о зависимости удельного сопротивления от концентрации примесей.

Любой из параметров в файле `athenamod` можно изменить, назначив другой параметр во входном файле или другую модель, используя специальную опцию `-modfile`.

Выходная информация. Текущая выходная информация, генерируемая модулем ATHENA, будет появляться в текстовом окне DECKBUILD каждый раз, когда он запускается, или же в текущем окне (при задании выходного файла), когда запускается ATHENA. Выходные файлы можно сгруппировать на две категории: стандартный выходной файл (Standard Output) и стандартный выходной файл с ошибками (Standard Error Output).

Стандартный выходной файл содержит информацию, получаемую в результате выполнения директивы PRINT и/или EXTRACT, а также обычные информационные сообщения, генерируемые модулем ATHENA. Количество этих сообщений зависит от числа параметров, содержащихся в директиве OPTION. С помощью опции NORMAL выдается дополнительная информация, например, о расчетной сетке (число узлов и треугольников). Режимы VERBOSE и DEBUG полезны при анализе ошибок.

Стандартный выходной файл с ошибками содержит информацию об ошибках и предупреждения.

Формат файла со стандартной структурой. Этот файл является главным и универсальным средством информационного обмена между модулем ATHENA и другими программами и средствами моделирования. Он создается с помощью директивы STRUCTURE и в нем содержится информация о расчетной сетке, об используемых моделях и их параметрах.

Сохраненный файл со стандартной структурой может использоваться в следующих модулях и программах:

- в ATHENA – для изменений в исходной моделируемой структуре и для продолжения процесса моделирования;
- в ATLAS или в других программах моделирования прибора – для проведения анализа электрических характеристик структуры, сформированной модулем ATHENA;

- в TONYPLOT – для отображения графиков как результатов моделирования;
- в DEVEDIT – для создания новой расчетной сетки и для ее передачи (экспорта) в модуль ATHENA или в другие программы моделирования.

Более подробная информация содержится в разделе “Сохранение файла с описанием моделируемой структурой для формирования графиков или создания входного файла модуля “Входной файл для дальнейшей обработки ATHENA”.

1.2.2. Создание исходной структуры

Задание начальной прямоугольной сетки. После запуска DECKBUILD откройте пункт Commands (рис. 1.3), затем выберите пункт Mesh Define... В результате появится меню для задания расчетной сетки в модуле ATHENA (рис. 1.4).

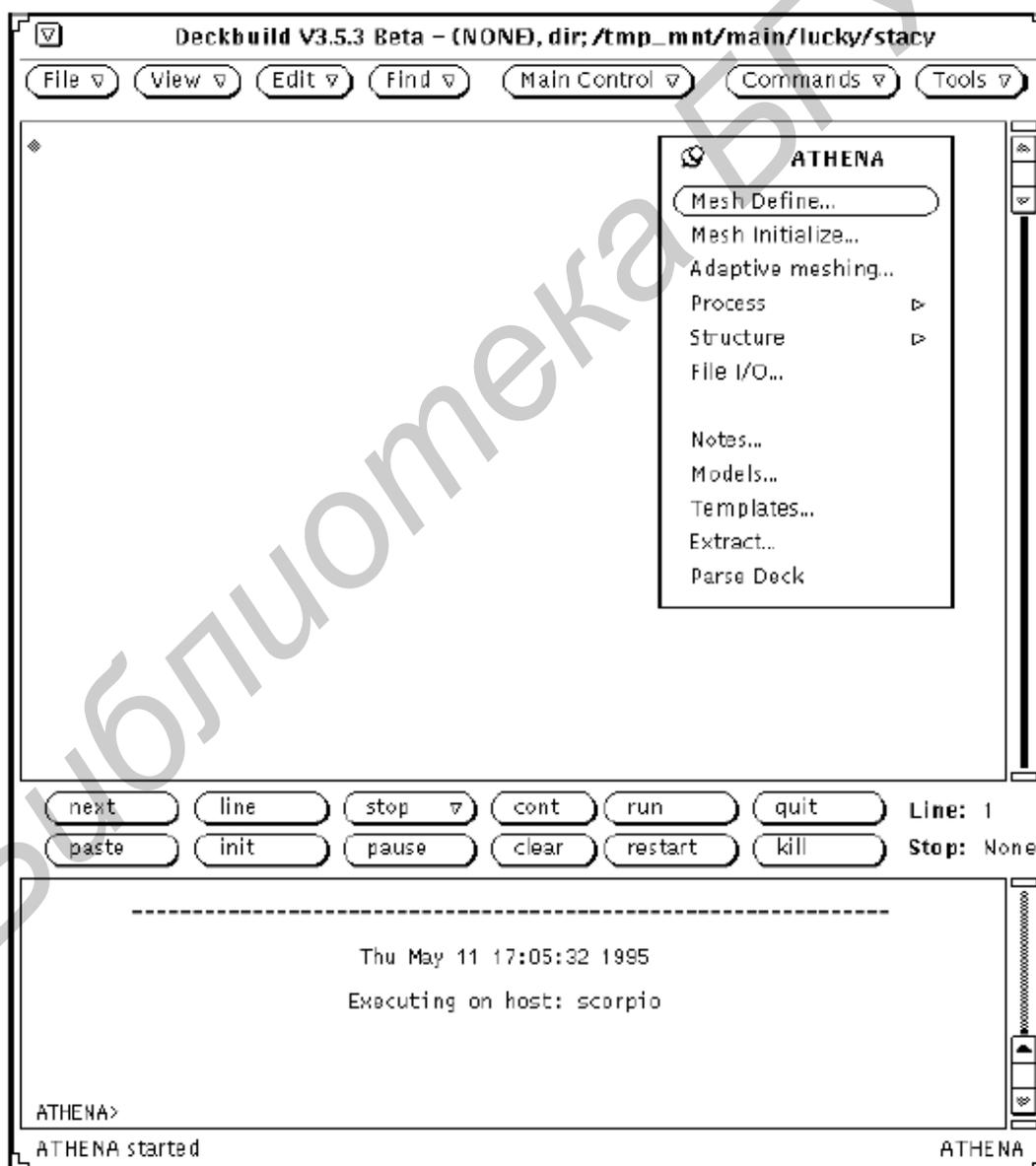


Рис. 1.3. Меню Commands

Теперь можно задать исходную прямоугольную сетку. Число узлов на сетке N_p определяет точность и время моделирования. Максимальное количество узлов составляет 20 000.

Для создания простой равномерной сетки в прямоугольнике размером 1 мкм^2 необходимо следующее: выберите пункт Location и введите значение 0.0, в пункте Spacing – 0.10, затем выберите пункт Insert. В результате появится скроллинговый список параметров. В системе координат, используемой в модуле ATHENA, положительная ось X направлена направо вдоль поверхности моделируемой структуры, а положительная ось Y направлена в глубину моделируемой структуры.

Таким же образом на второй командной строке устанавливается положение другой границы моделируемой структуры вдоль оси X до значения 1.0 мкм с шагом 0.1 мкм.

Далее выбирается направление Y и таким же образом, как и для направления оси Y устанавливаются границы моделируемой структуры вдоль направления Y .

В следующей строке можно написать необходимый комментарий (директива COMMENT). После выполнения этих операций появляется меню для задания расчетной сетки (ATHENA Mesh Define – см. рис. 1.4).

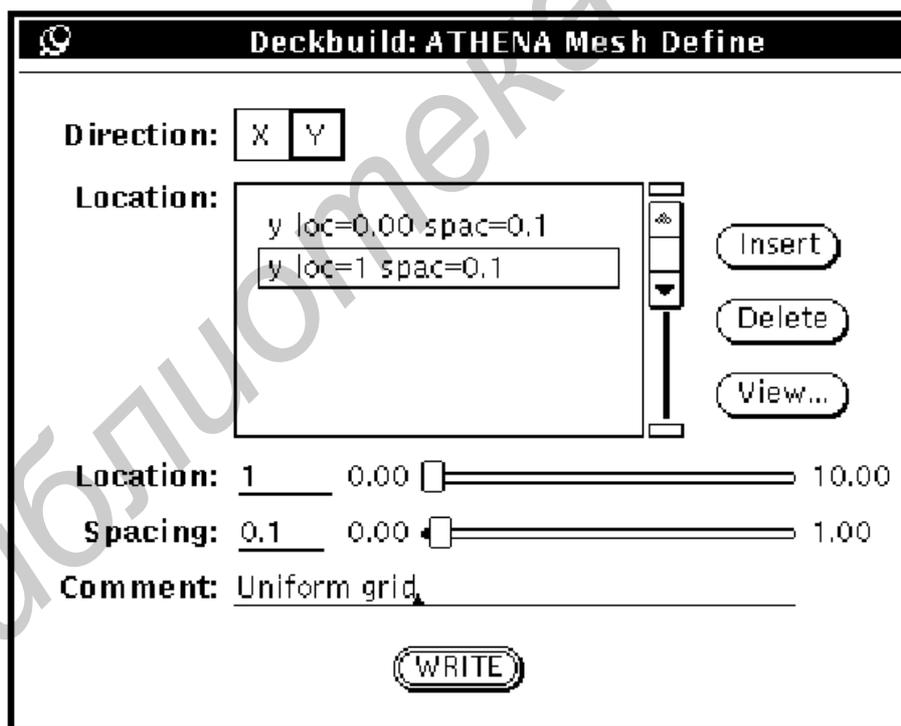


Рис. 1.4. Меню настройки сетки программы ATHENA (Mesh Define...)

Теперь можно записать во входной файл информацию о созданной сетке. Просмотр созданной сетки осуществляется в пункте View... (окно View Grid, рис. 1.5). В данном примере вертикальные и горизонтальные линии сетки рас-

пределены равномерно и сгенерированы 121 точка и 200 элементных треугольников.

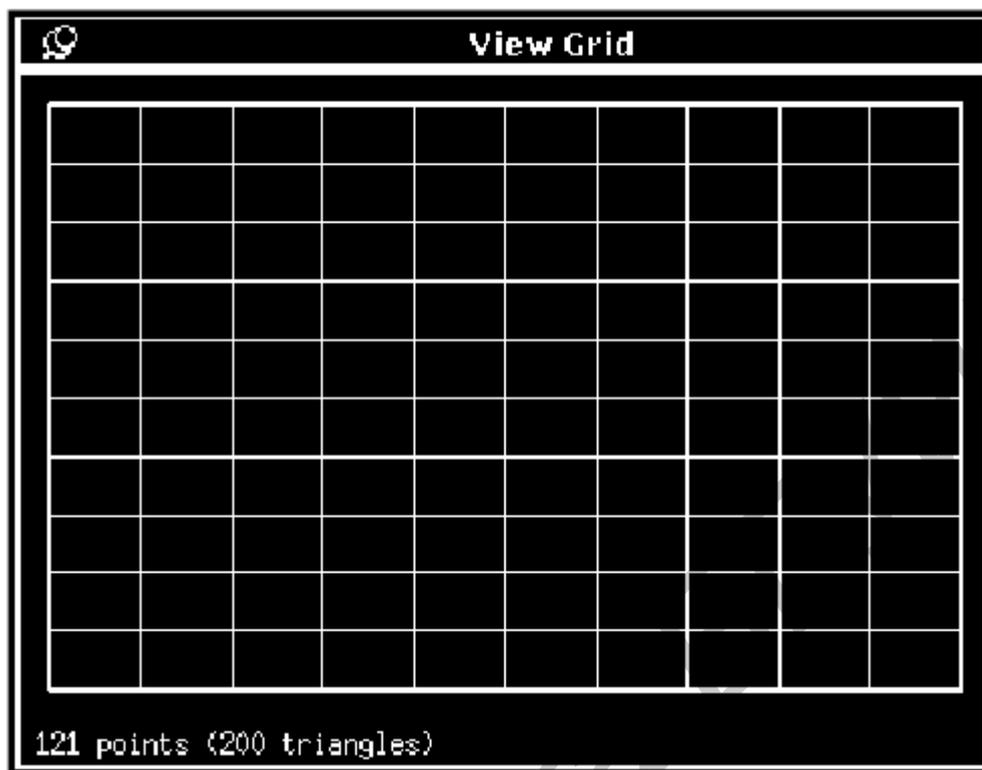


Рис. 1.5. Вид окна View Grid с сеткой

При проведении сложных расчетов равномерной сетки недостаточно. Так, при расчете профилей распределения примесей в результате ионной имплантации необходимо улучшить разрешение вдоль направления y . Например, при исследовании профиля концентрации в результате имплантации бора с энергией 60 кэВ максимум концентрации располагается вблизи 0.2 мкм. Разумно уменьшить сетку в области этой глубины. Для этого следует добавить новую строку, в которой устанавливается `Location`, равное 0.2, и шаг (`Spacing`) 0.02. Новая прямоугольная сетка показана на рис. 1.6. Отметим, что число узлов и треугольников увеличилось соответственно до 231 и 400.

Если необходимо уменьшить сетку верхней части моделируемой структуры, выберите верхнюю строку в `Y-Location` выпадающем списке, измените шаг на 0.03 и нажмите кнопку `Insert`. Выбранная строка изменится на `Y LOC=0.00 SPAC=0.03`. Если теперь нажать на кнопку `View...`, появится 8 линий сетки между $y = 0$ и $y = 0.2$ (рис. 1.7).

Для уменьшения сетки вдоль направления X удостоверьтесь, во-первых, что для построения двумерного профиля установлено необходимое разрешение под краем маски, во-вторых, что вертикальные линии сетки размещены вдоль будущих краев маски.

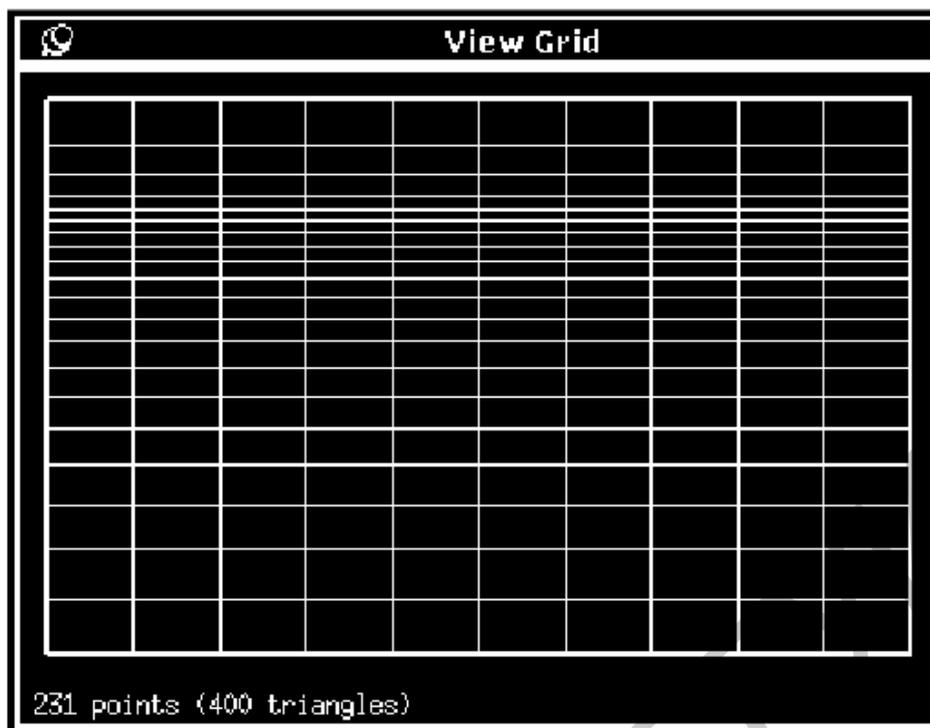


Рис. 1.6. Новая прямоугольная сетка

Для построения, например, половинной структуры МОП-транзистора с характерным размером 0.6 мкм и с центром затвора при $x = 0$ необходима дополнительная x -линия при $x = 0.3$, а шаг сетки в этой линии должен быть достаточно мелким, чтобы получить хорошее боковое разрешение при моделировании имплантации в области истока/стока.

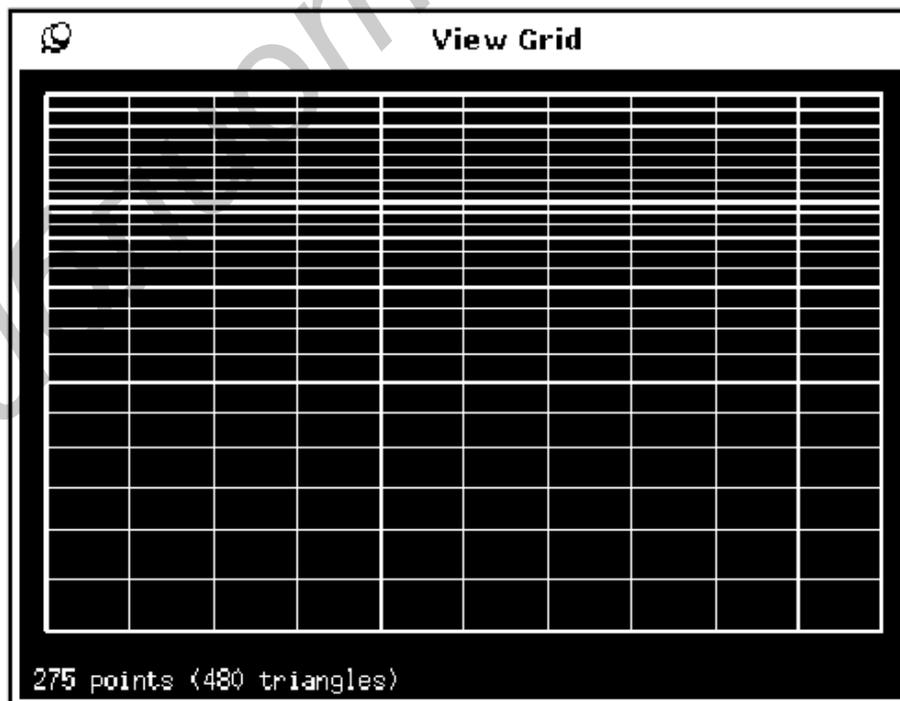


Рис. 1.7. Добавление новых линий сетки

Для этого необходимо вернуться к заданию сетки вдоль направления X в меню Mesh Define... и вставить дополнительную x -строку при $x = 0.3$ с шагом 0.02. Результат отображен на рис. 1.8. Сетка состоит из 525 точек и 960 треугольников (рис. 1.9).

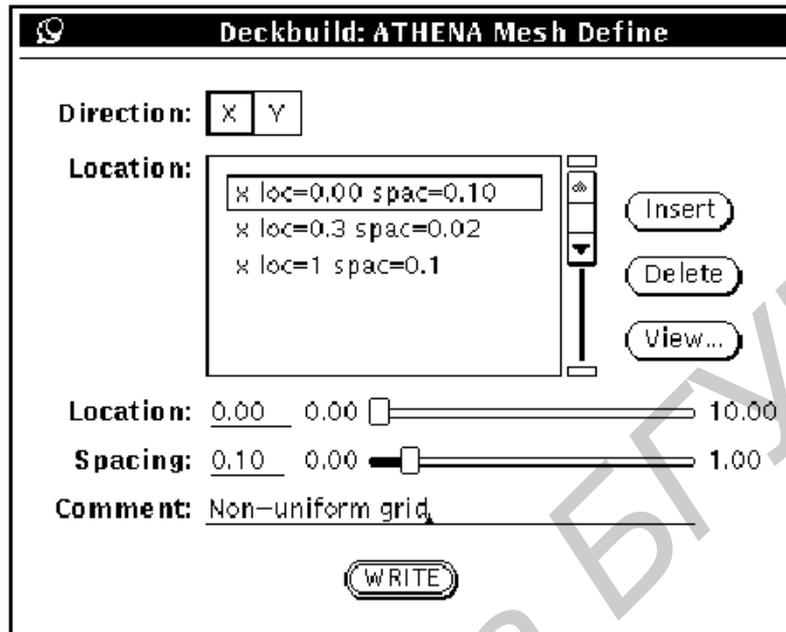


Рис. 1.8. Меню ATHENA Mesh Define

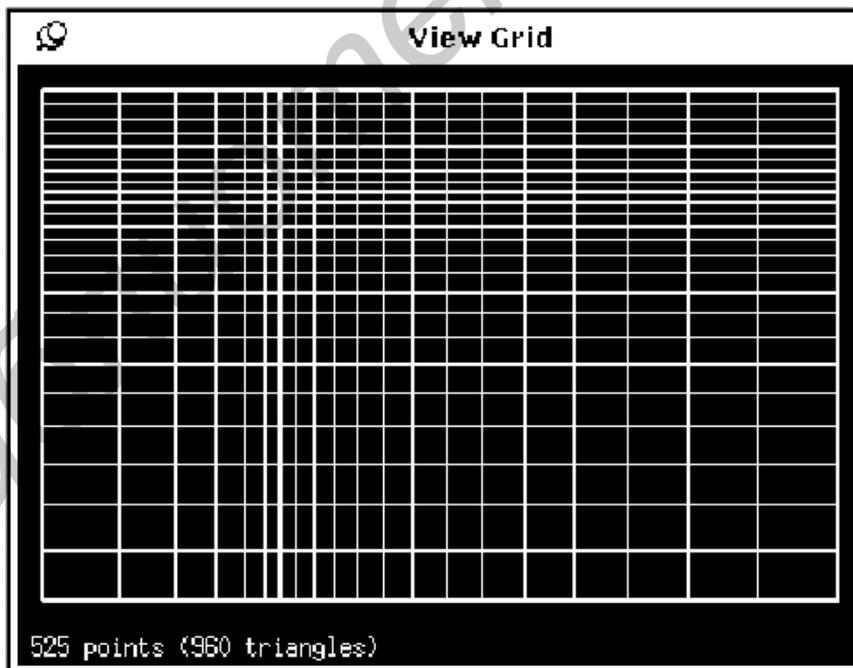


Рис.1.9. Новая сетка

Для сохранения информации Mesh Define... в файл необходимо нажать кнопку Write, в результате во входном файле отображаются типичные строки:

```
GO ATHENA
# NON-UNIFORM GRID
LINE X LOC=0.00 SPAC=0.1
LINE X LOC=0.3 SPAC=0.02
LINE X LOC=1 SPAC=0.1
LINE Y LOC=0.00 SPAC=0.03
LINE Y LOC=0.2 SPAC=0.02
LINE Y LOC=1 SPAC=0.1
```

Первая строка (GO ATHENA) называется директивой autointerface, посредством ее вызывается DECKBUILD, который запускает последующий файл с помощью модуля ATHENA.

Задание исходной подложки. Директивы LINE, задаваемые с помощью меню Mesh Define, устанавливают только прямоугольную сетку для моделируемой структуры. Далее необходимо задать область подложки с ее узлами, треугольниками, исходным легированием, ориентацией и другими дополнительными параметрами.

Deckbuild: ATHENA Mesh Initialize

Material:

Orientation:

Impurity:

Antimony	Arsenic	Boron	Phosphorus
Silicon	Zinc	Selenium	Beryllium
Magnesium	Aluminum	Gallium	Carbon
Chromium	Germanium	None	

Concentration:

3.0 1.0 9.9 Exp: atom/cm³

Dimensionality: X Position:

Grid scaling factor: 1.0 1.0 5.0

Composition fraction: 0.00 0.00 1.00

No impurities:

Comment: Initial silicon structure

Рис. 1.10. Меню для задания сетки

Для задания моделируемой структуры следует выбрать пункт Mesh Initialize... из командного меню (Command menu) модуля ATHENA, по-

сле чего появится меню для задания сетки (Mesh Initialize Menu – рис. 1.10).

Тип фоновой примеси можно задать, выбрав пункт с соответствующей примесью (например Boron). После этого осуществляется переход в режим задания концентрации. Если выбрано None, то информация о концентрации становится неактивной. Выберите нужную концентрацию, используя слайдер (например 3.0) в экспоненциальной форме из меню Exp: menu (например 14). Таким образом вводится фоновая концентрация, равная $3.0 \cdot 10^{14}$ атом/см³. Фоновую концентрацию можно задать в Ом·см, используя пункт By Resistivity.

Выберите пункт 2D box в поле Dimensionality для проведения двухмерных расчетов.

Информация о созданной сетке в файл сохраняется при нажатии на кнопку Write. В текстовом окне DECKBUILD появятся следующие две строки:

```
# INITIAL SILICON STRUCTURE
INIT SILICON C.BORON=3.0E14 ORIENTATION=100 TWO.D
```

Для получения исходной структуры запустите модуль ATHENA, нажав на кнопку Run в DECKBUILD. В подокне программы моделирования появится следующее сообщение:

```
ATHENA> # NON-UNIFORM GRID
ATHENA> LINE X LOC=0.00 SPAC=0.10
ATHENA> LINE X LOC=0.3 SPAC=0.02
ATHENA> LINE X LOC=1 SPAC=0.1
ATHENA> #
ATHENA> LINE Y LOC=0.00 SPAC=0.03
ATHENA> LINE Y LOC=0.2 SPAC=0.02
ATHENA> LINE Y LOC=1 SPAC=0.1
ATHENA> # INITIAL SILICON STRUCTURE
ATHENA> INIT SILICON C.BORON=3.0E14 ORIENTATION=100 TWO.D
ATHENA> STRUCT OUTFILE=.history01.str
```

Строка STRUCT OUTFILE=.history01.str автоматически создается модулем DECKBUILD.

Используйте любой из трех методов для визуализации исходной структуры:

1. Выберите пункт Tools. DECKBUILD автоматически сохранит файл с временной стандартной структурой и вызовет TONYPLOT с этим файлом.

2. Выберите пункт Main Control. В результате высветится окно DECKBUILD Main Control. Затем выберите пункт Plot Current Structure. DECKBUILD автоматически сохранит временный файл со стандартной структурой и вызовет TONYPLOT с этим файлом.

3. Выберите имя файла со структурой (в данном случае history01.str) и пункты Tools или Plot Current Structure. DECKBUILD запустит TONYPLOT с этим файлом. Появится информация о геометрии структуры и о материалах, из которой она состоит. Выберите пункт Plot. В результате высветятся пункты Display (2D Mesh). Выберите только две левые иконки: Mesh и Edges. В TONYPLOT (рис. 1.11) появится окно Initial Triangular Grid (исходная треугольная сетка).

Простое осаждение пленки. Модель конформного осаждения используется в том случае, когда точная форма осаждаемого слоя не критична (например, в случае планарного или квазипланарного осаждения окисла, когда можно пренебречь перераспределением примесей в процессе окисления).

Для задания моделирования процесса конформного осаждения выберите в DECKBUILD пункты Process->Deposit->Deposit... из меню Commands. В результате появится меню ATHENA Deposit (рис. 1.12).

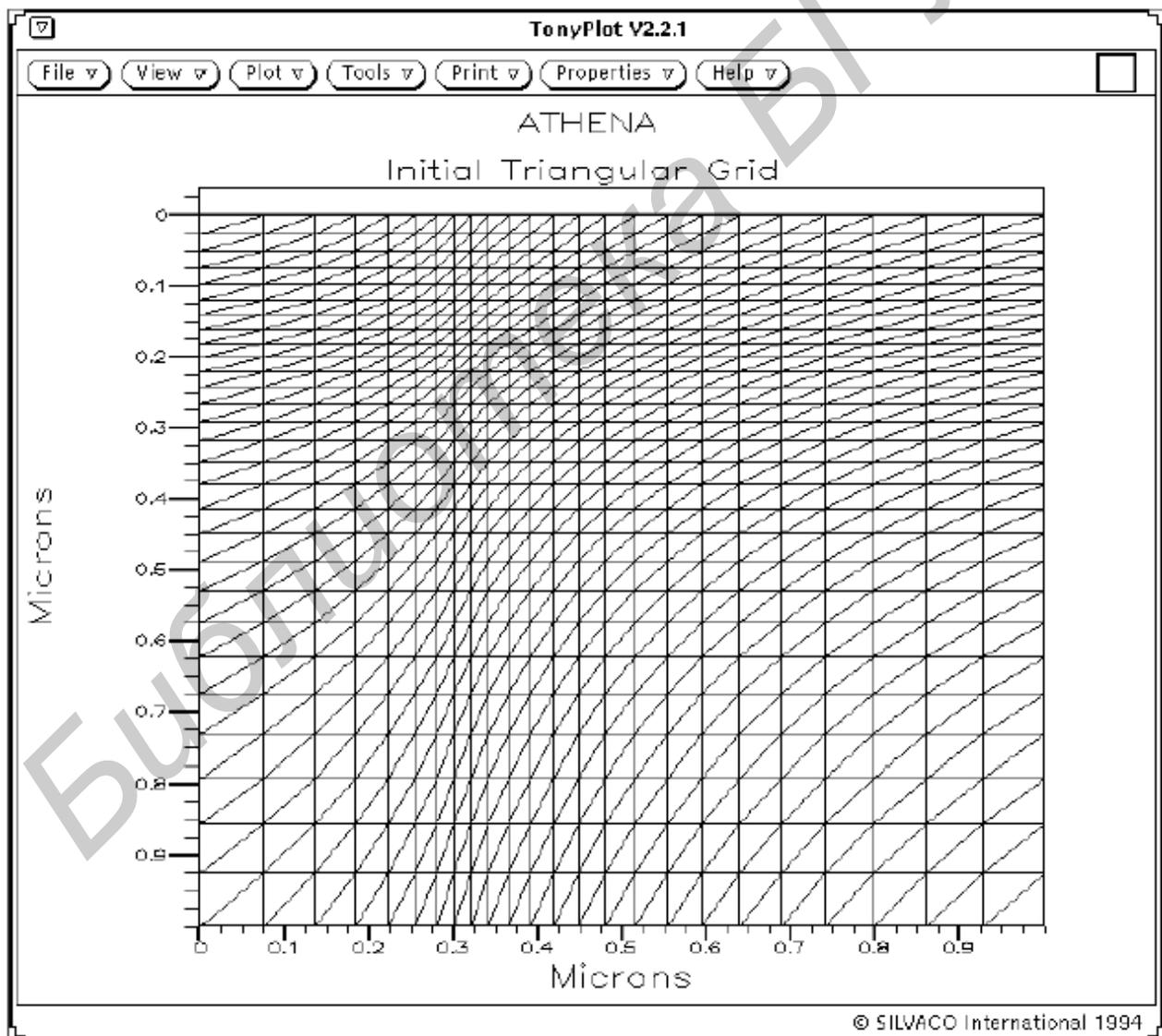


Рис. 1.11. Исходная треугольная сетка

Deckbuild: ATHENA Deposit

Type: Conformal Machine
Display: Basic parameters Grid Impurities

Material: ▼ Oxide
 User defined: _____
Thickness (µm): 0.02 0.00 1.00

Grid specification:
 Total number of grid layers: 2 1 20
 Nominal grid spacing (µm): 0.10 0.00 1.00
 Grid spacing location (µm): 0.00 0.00 1.00
 Minimum grid spacing (µm): 0.01 0.00 1.00
 Minimum edge spacing (µm): 0.01 0.01 1.00

Composition fractions:
 Initial composition fraction: 0.00 0.00 1.00
 Final composition fraction: 0.00 0.00 1.00

Comment: Gate oxide deposition

WRITE

Рис. 1.12. Меню ATHENA Deposit

Конформное осаждение (Conformal Deposition) установлено по умолчанию. Например, если известно, что толщина осажденного окисла кремния равна 200 \AA , ее можно промоделировать посредством конформного осаждения. Выберите пункт Select Oxide из меню Material и установите толщину окисла 0.02 мкм. Всегда полезно задать несколько слоев сетки в осажденном слое. В данном примере необходимо задать по крайней мере два слоя сетки для моделирования транспорта носителей в окисле. В других случаях (например, при осаждении фоторезиста на непланарную структуру) необходима более мелкая сетка для точного моделирования процессов внутри осажденного слоя.

Сетка в осажденном слое контролируется параметрами пункта Grid Specification в меню ATHENA Deposit. Установите в Total number of grid layers число 2, добавьте Comment и выберите пункт Write. Появится следующая строка в текстовом окне DECKBUILD:

```
# GATE OXIDE DEPOSITION
DEPOSIT OXIDE THICK=0.02 DIVISIONS=2
```

Следующий этап состоит в осаждении легированного фосфором слоя поликремния толщиной 0.5 мкм. Выберите материал Polysilicon и установите толщину 0.5. Добавьте легирование, выбрав пункт Impurities. В результате в меню ATHENA Deposit будет добавлен раздел Impurity Concentration Section (рис. 1.13).

Deckbuild: ATHENA Deposit

Type: Display:

Material: Polysilicon
 User defined: _____

Thickness (µm): 0.50 0.00 1.00

Grid specification:

Total number of grid layers: 10 1 20

Nominal grid spacing (µm): 0.02 0.00 1.00

Grid spacing location (µm): 0.2 0.00 1.00

Minimum grid spacing (µm): 0.01 0.00 1.00

Minimum edge spacing (µm): 0.001 0.01 1.00

Impurity concentrations (atom/cm³):

<input type="checkbox"/>	Antimony:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Arsenic:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Boron:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input checked="" type="checkbox"/>	Phosphorus:	5.0	1.0	<input type="range" value="5.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="7"/>	19
<input type="checkbox"/>	Silicon:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="7"/>	11
<input type="checkbox"/>	Zinc:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Selenium:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Beryllium:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="7"/>	11
<input type="checkbox"/>	Magnesium:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Aluminum:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Calcium:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="7"/>	11
<input type="checkbox"/>	Carbon:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Chromium:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11
<input type="checkbox"/>	Germanium:	1.0	1.0	<input type="range" value="1.0"/>	9.9	Exp:	<input type="button" value="2"/>	11

Composition fractions:

Initial composition fraction: 0.00 0.00 1.00

Final composition fraction: 0.00 0.00 1.00

Comment: Poly deposition _____

Рис. 1.13. Раздел Impurity Concentration в меню ATHENA Deposit

Выберите пункт Phosphorus и установите соответствующую концентрацию (например $5.0 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$), используя слайдер и пункт меню Expr. Можно задать неравномерную сетку в осажденном слое, изменив соответствующие параметры в Nominal grid spacing и Grid spacing location. Для создания более мелкой сетки в поликремнии задайте общее число слоев сетки, равное 10, Nominal grid spacing, равное 0.02 мкм и Grid spacing location, равное 0.0 (на поверхности). Затем выберите пункт Write и во входной файл будет записана следующая директива:

```
DEPOSIT POLY THICK=0.5 C.PHOSPHOR=5.0E19  
DIVISIONS=10 DY=0.02 YDY=0.0 MIN.SPACING=0.001
```

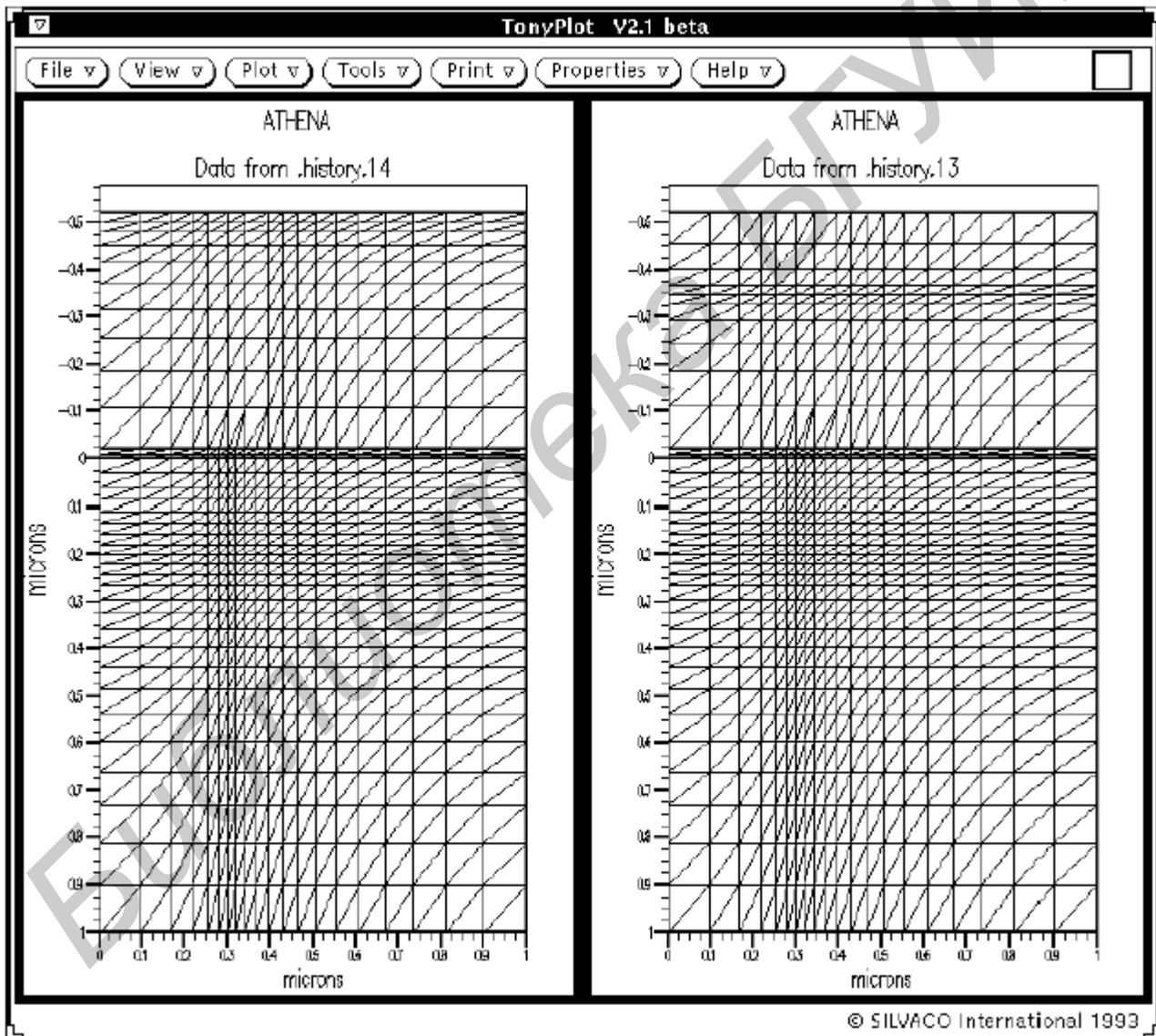


Рис. 1.14. Контроль сетки при моделировании осаждения

Используйте кнопку Cont для продолжения моделирования. При этом будет создана трехслойная структура, изображенная слева на рис. 1.14. Параметр MIN.SPACING сохраняет шаг сетки в горизонтальном направлении с большим разрешением сетки. ATHENA пытается уменьшить шаг сетки, но директива MIN.SPACING останавливает это действие. Чтобы сделать мельче сетку не на поверхности поликремния, а в середине его слоя, измените значение YDY на 0.2. В этом случае установится более мелкая сетка на расстоянии 0.2 мкм от поверхности структуры:

```
DEPOSIT POLY THICK=0.5 C.PHOSPHOR=5.0E19  
DIVISIONS=10 DY=0.02 YDY=0.2
```

При этом параметр YDY. изменится в области поликремния без возврата ко всему входному файлу. Следует просто просмотреть предыдущую директиву (DEPOSIT OXIDE...), нажать на кнопку Init from History в главном меню и затем нажать на кнопку Cont. Новый файл затем можно загрузить в TONYPLOT (см. правую кривую на рис. 1.14).

Простое геометрическое травление. Следующий шаг в этом примере моделирования состоит в задании характеристик поликремниевого затвора. Чтобы задать моделирование операции травления в простом геометрическом приближении, выберите пункты меню Process -> Etch -> Etch... из главного меню модуля DECKBUILD. Появится меню Etch Menu модуля ATHENA (рис. 1.15).

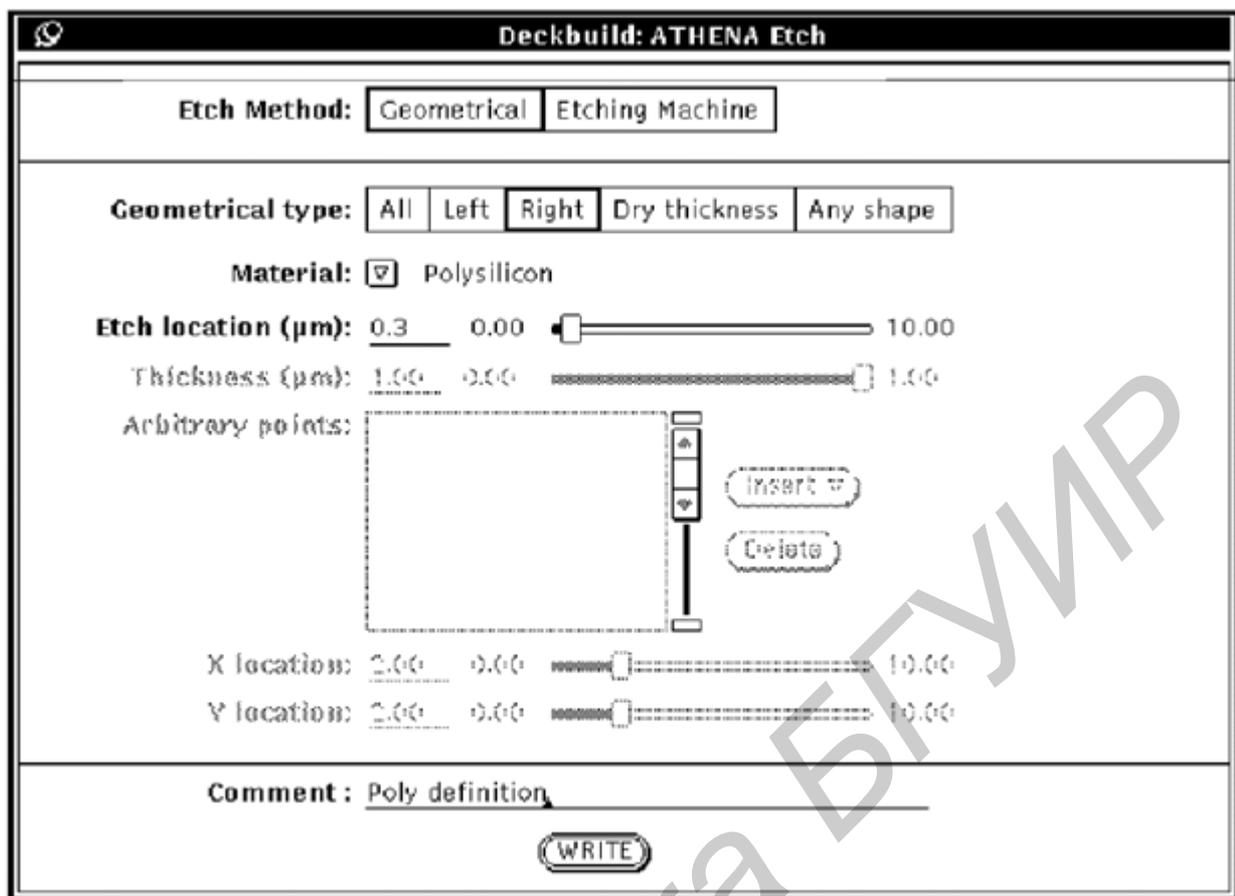


Рис. 1.15. Меню ATHENA Etch

Геометрическое травление в модуле ATHENA устанавливается по умолчанию. Другие методы моделирования травления описаны в подразделе 1.4.2. Выберите Polysilicon из меню Material. В качестве исходной сети будет использоваться край поликремниевого затвора при $x = 0.3$ с центром затвора при $x = 0.0$. Следовательно, поликремний необходимо стравить в правую сторону от $x = 0.3$. Для этого выбираем пункт Right из пункта Geometrical type и устанавливаем Etch location равным 0.3 и получаем следующую директиву:

```
# POLY DEFINITION
ETCH POLY RIGHT P1.X=0.3
```

Структура, созданная по директиве ETCH, показана слева на рис. 1.16. Можно получить произвольную форму геометрического травления, нажав на кнопку Any Shape. Чтобы, например, осуществить наклонное травление, выберем координаты X и Y четырех произвольных точек, как показано на рис. 1.16. Во входной файл необходимо ввести четыре линии травления:

```

# POLY DEFINITION
ETCH POLY START X=0.2 Y=-1
ETCH CONT X=0.4 Y=1
ETCH CONT X=2 Y=1
ETCH DONE X=2 Y=-1

```

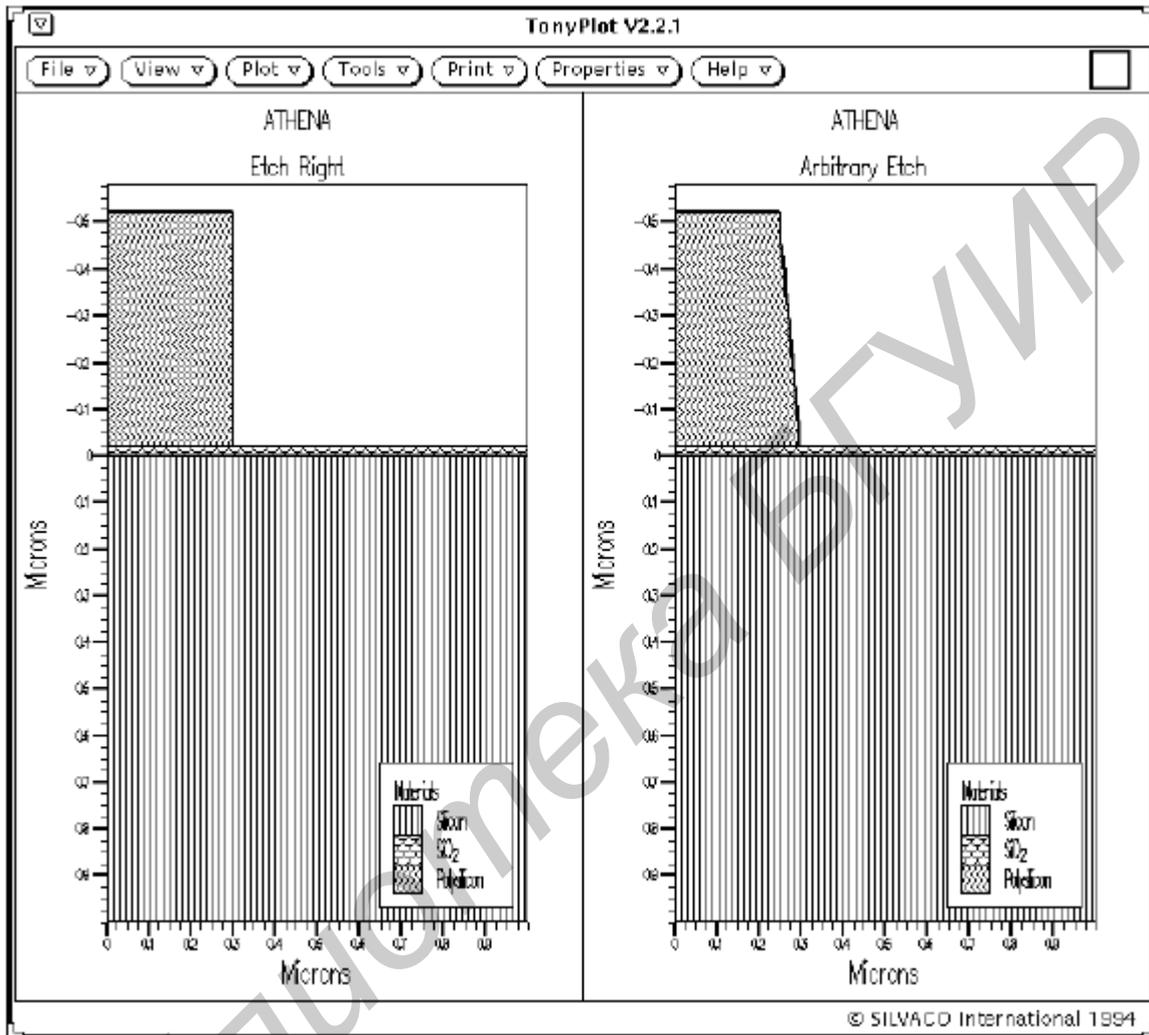


Рис. 1.16. Структура, созданная по директиве Etch

Если запускается фрагмент этого файла вместо предыдущего (используя директиву INIT из History capability), то результат такой последовательности операции травления показан в правой части рис. 1.16. При этом вытравливается весь поликремний из заданного многоугольника. В принципе, такой вытравливаемый многоугольник может состоять из любого количества точек. Используя кнопку Insert, можно ввести дополнительную точку после ввода текущей точки. Существует дополнительная опция геометрического травления – сухое травление по заданной толщине (например, вначале осаждение окисла с заданной толщиной с последующим стравливанием материала такой же толщины):

```

# CLEAN GATE OXIDE
ETCH OXIDE DRY THICK=0.03
# SPACER DEPOSITION
DEPOSIT OXIDE THICK=0.2 DIVISIONS=8
# SPACER ETCHING
ETCH OXIDE DRY THICK=0.23

```

При сухом травлении стравливается заданный материал в области между верхней границей структуры и линией, полученной посредством трансляции граничной линии вниз вдоль направления оси Y . Глубина травления задается параметром THICK. Результирующая структура показана на рис. 1.16.

Уменьшение количества точек сетки с использованием параметра Relax. Прямоугольная сетка, сгенерированная с помощью директив DEPOSIT или INITIALIZE, может оставаться неизменной в тех областях моделируемой структуры, для которых шаг сетки несущественно влияет на результаты моделирования определенных технологических операций (например, операций окисления или травления).

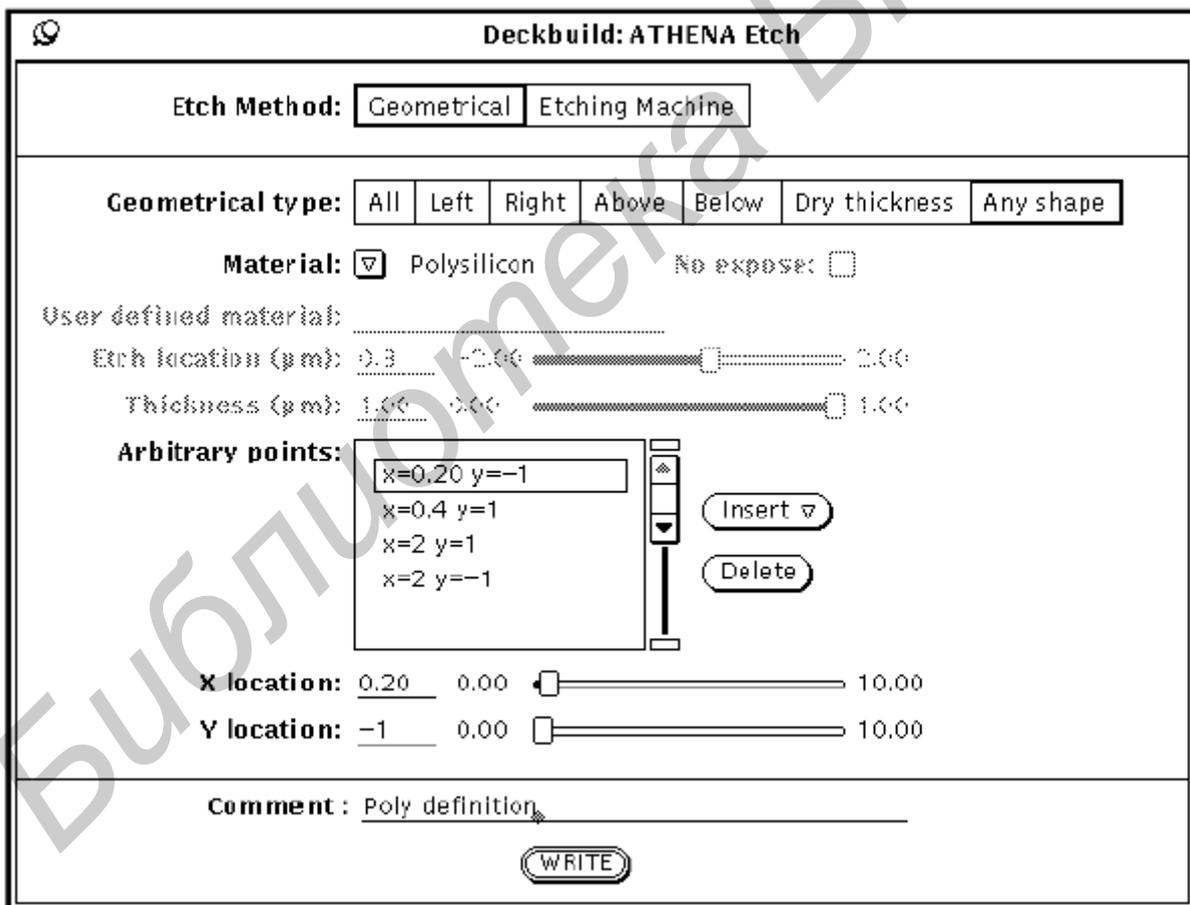


Рис. 1.17. Произвольное травление

С помощью опции Grid Relax можно увеличить шаг сетки для этих областей. Такая возможность полезна по двум причинам. Во-первых, малый

исходный шаг сетки распространяется на всю моделируемую структуру. Например, мелкая сетка вдоль направления оси X , показанная на рис. 1.17, необходима только в верхней части моделируемой структуры, где существенны эффекты имплантации. Пренебрежение же некоторыми точками сетки в нижней части моделируемой структуры не сказывается на точности расчетов имплантации и диффузии. Во-вторых, всегда необходимо задать достаточно мелкую сетку в тех областях, где происходит имплантация, но в то же время нет необходимости использовать мелкую сетку в той области, где уровень концентрации примесей снижается в результате термической обработки. Поэтому релаксация исходной сетки часто необходима при моделировании последующих технологических операций.

Параметры директивы RELAX задаются из меню Relax модуля ATHENA (рис. 1.18).

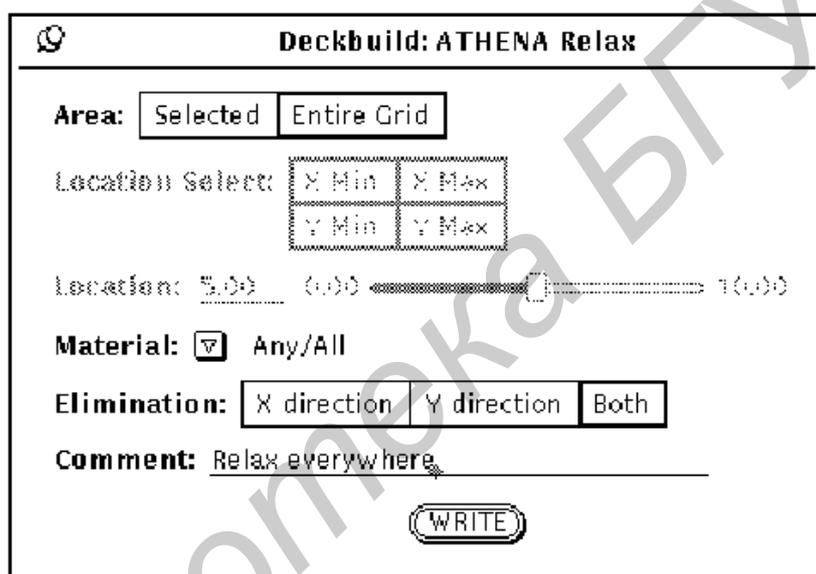


Рис. 1.18. Меню ATHENA Relax

Для открытия этого меню выберем пункт Relax... в подменю Structure главного меню DECKBUILD. Релаксацию сетки можно осуществить по всей структуре, выбрав пункт Entire Grid, или же внутри выбранной прямоугольной области, если выбраны пункты Selected и Locations и заданы величины X_{min} , X_{max} , Y_{min} и Y_{max} . Посредством выбора материала из меню Material можно задать область материала, для которой существенна релаксация сетки. По умолчанию в этой заданной области располагаются все материалы структуры. Удаление любой из линий сетки может быть осуществлено как по одному направлению (пункты X direction, Y direction), так и по обоим направлениям (Both). Процедура Relax вдоль направления X не может быть осуществлена для отдельных материалов, за исключением подложки.

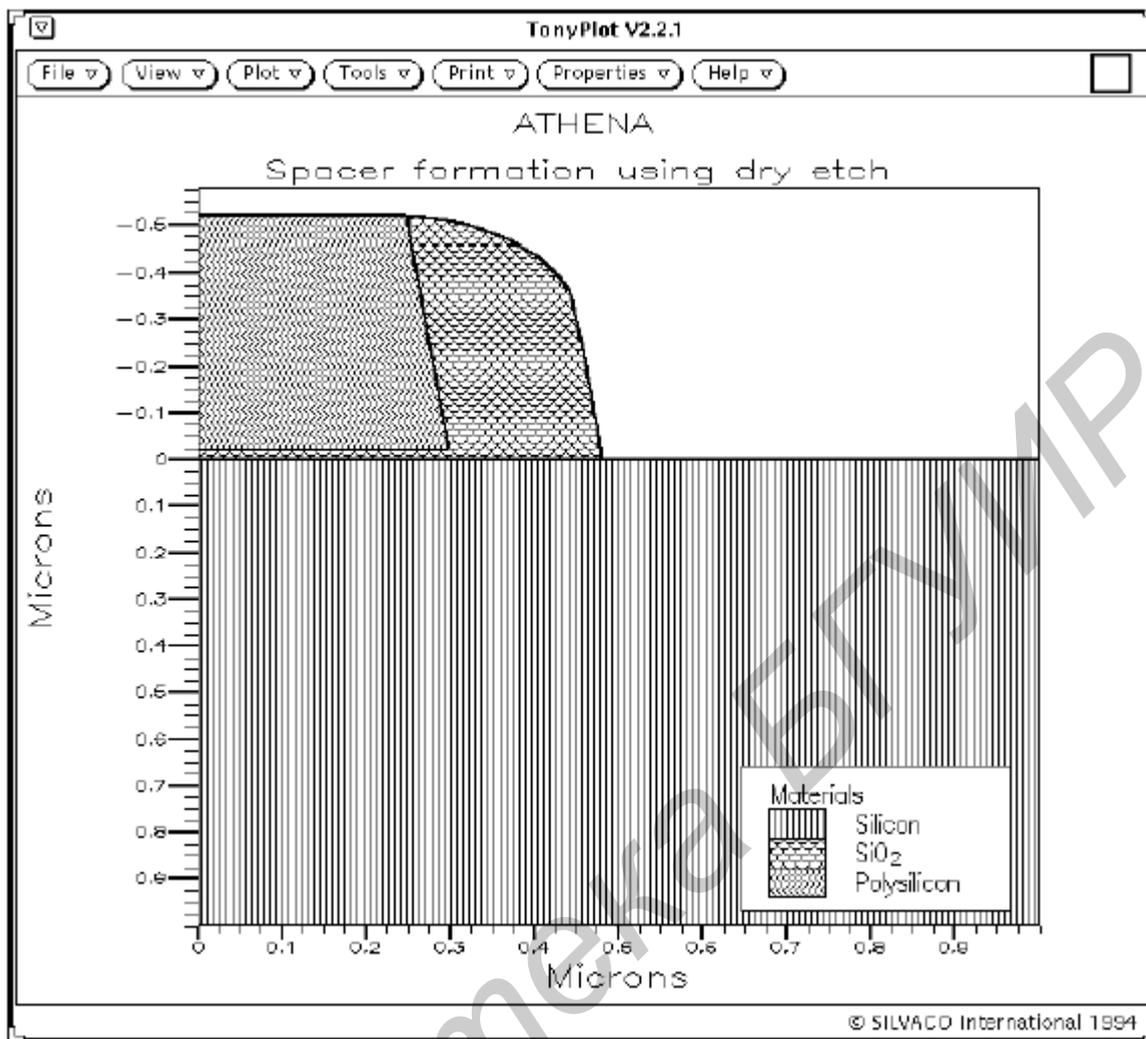


Рис. 1.19. Формирование Spacer с использованием Dry Etch

Чтобы понять, как директива RELAX изменяет сетку, рассмотрим структуру, полученную в результате формирования разделителя (рис. 1.19). Если релаксировать всю сетку в обоих направлениях (рис. 1.20), то следует вставить следующие строки в исходный входной файл:

```
# RELAX EVERYWHERE
RELAX DIR.X=T DIR.Y=T
```

Результирующая сетка показана в верхнем правом углу рис. 1.20. Общее число узлов сетки снижается с 708 до 388. Если сравнить сетку перед релаксацией (верхний левый угол рис. 1.20), то видно, что сетка внутри окисного разделителя и поликремниевого затвора не изменилась. Это обусловлено тремя факторами:

- алгоритм релаксации сетки работает только с прямоугольной сеткой;
- алгоритм не удаляет линии сетки, прилегающие к граничной области;

- размер области релаксации сетки должен составлять по крайней мере 5×5 узлов сетки.

В области кремния удаляется каждая вторая горизонтальная линия сетки. Нижняя часть каждой второй вертикальной линии также удаляется.

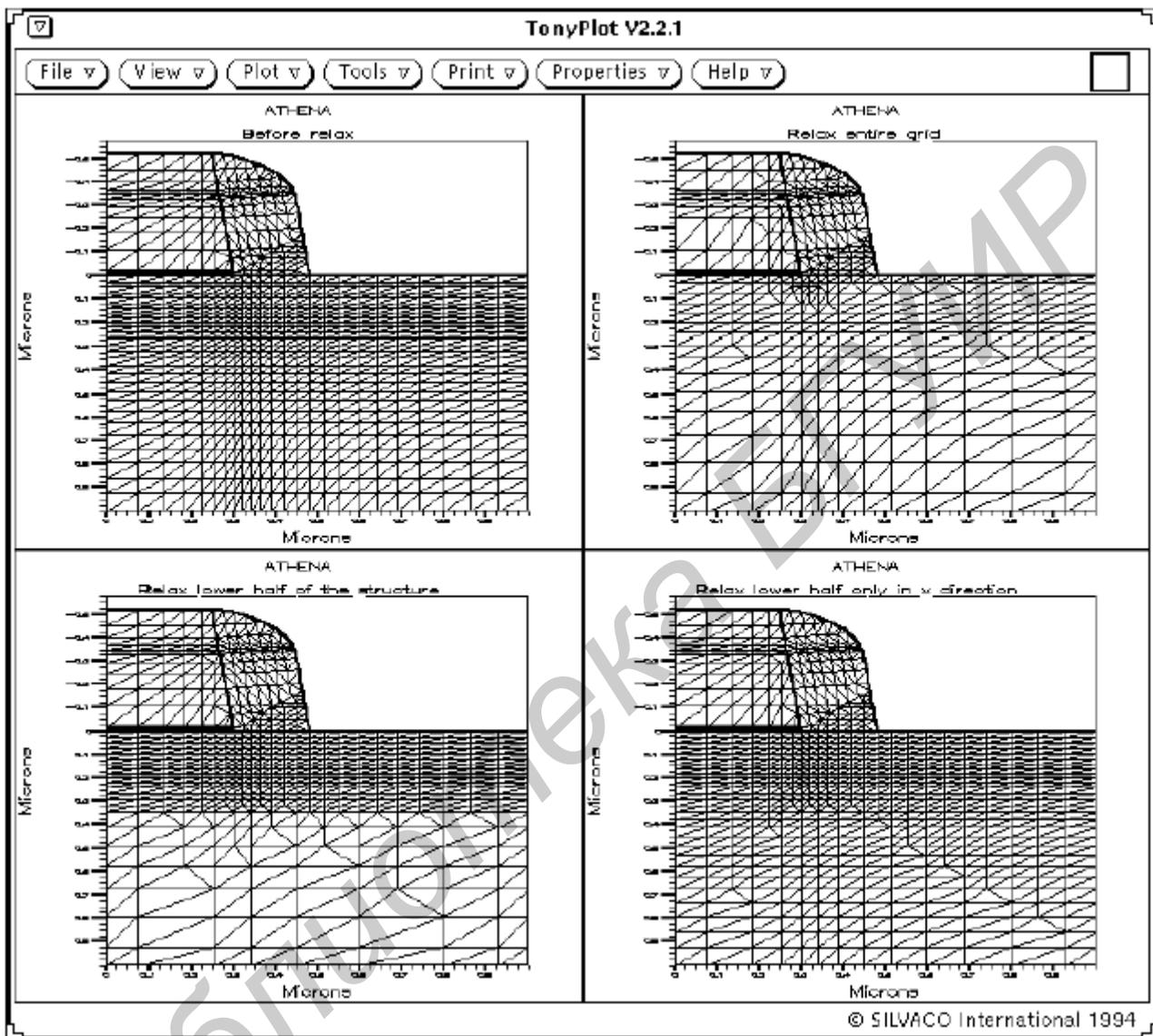


Рис. 1.20. Сетки после различных действий релаксации

Если нет необходимости релаксировать сетку выше $y = 0.3$, выберите пункт Selected и установите все четыре границы в параметрах Relax. Это приводит к следующей директиве RELAX:

```
# RELAX LOWER HALF OF THE STRUCTURE  
RELAX X.MIN=0.00 X.MAX=1.00 Y.MIN=0.3 \  
Y.MAX=1.00 DIR.X=T DIR.Y=T
```

В этом случае число узлов сетки равно 567. Сетка выше $y = 0.3$ остается неизменной (см. нижний левый угол рис. 1.20), а удаление линий в x - и y - направлениях осуществляется только в области ниже $y = 0.3$.

Для увеличения шага только вдоль направления X в области ниже $y = 0.3$ выберите пункт X direction, а параметры в пунктах Area и Location Selections оставьте без изменения. Это приведет к следующей директиве Relax:

```
# RELAX LOWER HALF ONLY IN X-DIRECTION  
RELAX X.MIN=0.00 X.MAX=1.00 \  
Y.MIN=0.3 Y.MAX=1.00 DIR.X=T DIR.Y=F
```

Единственная разница состоит в том, что вместо $DIR.Y=T$ директива содержит $DIR.Y=F$ для предотвращения удаления линий вдоль направления Y .

Можно также применить несколько последовательных директив RELAX для удаления линий сетки в различных областях моделируемой структуры.

Отражение структуры в плоскости Y с использованием параметра Mirror. В рассматриваемом примере обсуждается моделирование половины структуры МОП-транзистора. Необходима полная структура перед ее экспортированием для моделирования прибора, а также при назначении имен электродов. Покажем, как можно зеркально отобразить структуру относительно ее левой границы. Выберите пункт Mirror под пунктом Structure в главном меню (рис. 1.21), затем нажмите кнопку Write, чтобы записать следующую директиву во входной файл: STRUCT MIRROR LEFT.



Рис. 1.21. Меню ATHENA Mirror

Результирующая структура показана на рис. 1.22. Левая часть структуры является полным зеркальным отображением правой части, включая координаты узлов, концентрации примесей и пр.

Назначение электродов. Конечная цель моделирования в модуле ATHENA состоит в создании структуры прибора, которая затем будет использоваться для моделирования характеристик прибора (обычно с помощью модуля ATLAS). Хотя в модуле ATLAS можно задавать электроды, во многих случаях это прodelывается в модуле ATHENA. В этом модуле электроды можно “присоединить” к любому материалу (металлу, силициду или поликремнию).

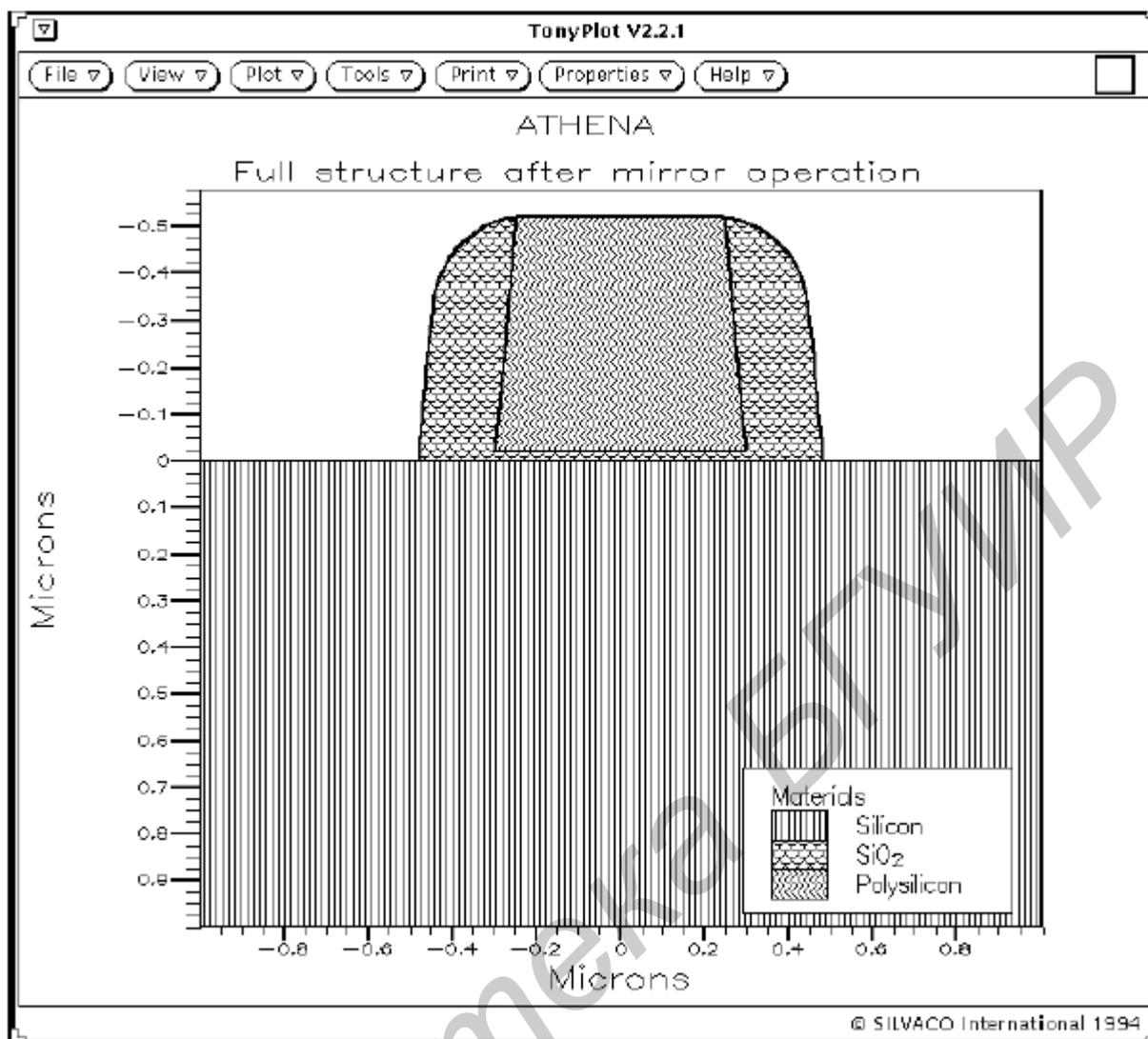


Рис. 1.22. Возможности отображения структуры

Отдельный случай – это задание электрода с обратной стороны, т.е. в нижней части структуры, не имеющей области металла. Пусть слой алюминия толщиной 0.1 мкм осаждается на всю структуру после зеркального отражения (см. рис. 1.22), используя директиву `DEPOSIT ALUMIN THICK=0.1`, и следующая часть слоя между $x = -0.8$ и $x = 0.8$ вытравливается, используя спецификацию `Any Shape` в меню травления программы ATHENA (рис. 1.15):

```

ETCH ALUMINUM START X=-0.8 Y=-20
ETCH CONT X=-0.8 Y=20
ETCH CONT X=0.8 Y=20
ETCH DONE X=0.8 Y=-20

```

В результате получается структура, изображенная на рис. 1.23.


```
ELECTRODE NAME=GATE X=0.0
```

Если поликремниевый слой не является самым верхним слоем при $x = 0$, то может быть задано *Y Position*. В этом случае выберите прямоугольник *Y Position checkbox* и задайте координату *Y* внутри поликремниевого слоя (например -0.2). Если значение *Y* не задано и электрод не располагается на верху структуры, ATHENA будет искать электрод в слое, расположенном ниже. Если это не так, то появится сообщение об ошибке. Чтобы задать электрод на обратной стороне (a backside electrode), выберите пункт *Backside* из поля *Electrode Type* меню *Electrode Menu* (см. рис. 1.24) и наберите соответствующее имя.

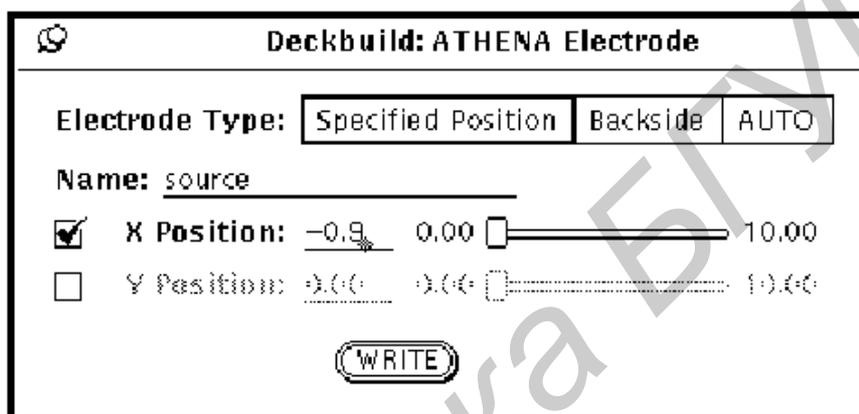


Рис. 1.24. Меню *Electrode* в модуле ATHENA

Во входном файле появится следующая директива:

```
ELECTRODE NAME=BACK BACKSIDE
```

Если имя электрода не задано, то DECKBUILD выдает сообщение об ошибке “NO ELECTRODE NAME SPECIFIED” и команда не записывается во входной файл. Если задано неправильное положение электрода, например:

```
ELECTRODE NAME=JUNK X=0.6
```

то ATHENA выдаст следующее сообщение “Cannot find the electrode for this structure”. При этом директива о задании электрода игнорируется.

Сохранение файла со структурой для получения графика и инициализация входного файла модуля ATHENA для последующей обработки. DECKBUILD *history function* сохраняет файл со структурой после моделирования каждой отдельной операции. Однако иногда необходимо сохранить и инициализировать новую структуру независимо.

Для сохранения и загрузки структуры используется меню ATHENA File I/O (рис. 1.25), которое загружается посредством выбора пункта File I/O... из меню Commands. Задайте имя файла с расширением .str и нажмите кнопку Save, во входном файле появится сообщение:

```
STRUCT OUTFILE=TUTOR.STR
```

Этот файл (TUTOR.STR) можно перезагрузить в модуль ATHENA в любой момент работы DECKBUILD. Для перезагрузки структурного файла нажмите кнопку Load в меню File I/O menu, появится следующее сообщение:

```
INIT INFILE=TUTOR.STR
```

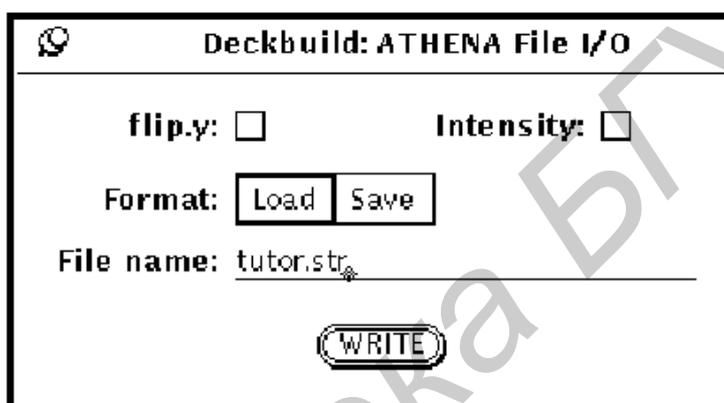


Рис. 1.25. Меню File I/O модуля ATHENA

Структура будет перезагружена только в том случае, если модуль ATHENA будет перезагружен перед директивой INIT. Любые параметры или коэффициенты, заданные при выполнении предыдущих сеансов моделирования, должны быть, если это необходимо, переустановлены. Этот структурный файл может использоваться любой программой моделирования прибора или же модулем DEVEDIT.

1.3. Выбор моделей в программе SSUPREM4

В данном подразделе описывается порядок моделирования операций имплантации, диффузии, окисления и эпитаксии с использованием программы SSUPREM4 в среде модуля ATHENA.

Выбор модели соответствующей технологической операции определяет точность результатов моделирования, особенно при расчете профилей распределения примесей. Например, в кремниевой технологии типичные дозы имплантации могут приводить к серьезным повреждениям кристаллической решетки материала подложки, что усиливает интенсивность диффузии примесей на три-четыре порядка. Очевидно, что чем сложнее используемая модель, тем требуются большие затраты времени на расчеты. Однако всегда можно найти

компромисс между этими двумя факторами, используя иерархию моделей технологических операций.

Выбор подходящей модели с использованием директивы METHOD. Выбор модели или комбинации моделей задается директивой METHOD. Эта директива должна располагаться во входном файле перед директивой, задающей ту или иную моделируемую операцию. Можно использовать несколько директив METHOD для изменения моделей при моделировании всего технологического маршрута с целью оптимизации скорости и точности моделирования.

Рассмотрим способы задания директивы METHOD для типичных моделируемых операций. Эти директивы располагаются в иерархическом порядке: от простых методов до более сложных. Очевидно, что чем сложнее метод, тем большее время требуется для расчетов. Рекомендуемые директивы METHOD для типичных моделируемых операций приведены ниже и используются:

- `method fermi` – только перед директивой `UNDAMAGED` при моделировании диффузии, когда концентрация легирующих примесей менее 10^{20} см^{-3} и присутствует директива `NO OXIDIZING`;
- `method two.dim` – при моделировании имплантации с дозой менее 10^{13} см^{-2} и операции окисления;
- `method full.cpl, cluster.dam high.conc` – при моделировании имплантации с дозой более 10^{13} см^{-2} .

Имеется одно исключение в этой иерархии, относящееся к такому случаю, когда отсутствуют начальные повреждения в исходной подложке. При рассмотрении легированной окиси в качестве диффузионного источника следует использовать директиву `METHOD CNET`.

Изменение директивы METHOD в процессе моделирования технологического маршрута. При моделировании операций, включающих имплантацию или окисление, не рекомендуется использовать модель, более простую, чем `TWO.DIM`. Если используется простейшая (`fermi`) модель перераспределения примесей, то не следует применять директиву `two.dim`, поскольку нет необходимости учитывать движение междоузлий и вакансий.

На практике для большинства операций обработки структур с малой геометрией переключение модели с `METHOD FULL.CPL CLUSTER.DAM HIGH.CONC` на `METHOD TWO.DIM` рекомендуется после имплантации с высокой дозой.

Если температура отжига выше $900 \text{ }^\circ\text{C}$ и время операции отжига составляет по крайней мере 1 мин, то при моделировании последующей операции имплантации с дозой выше 10^{13} см^{-2} следует вернуться к директиве `TWO.DIM`.

Выбор глубины подложки. Поскольку интенсивность диффузионного перераспределения примесей в значительной степени зависит от уровня радиационных повреждений в подложке, для обеспечения достаточной точности результатов моделирования важно правильно выбрать глубину подложки, для которой проводится моделирование.

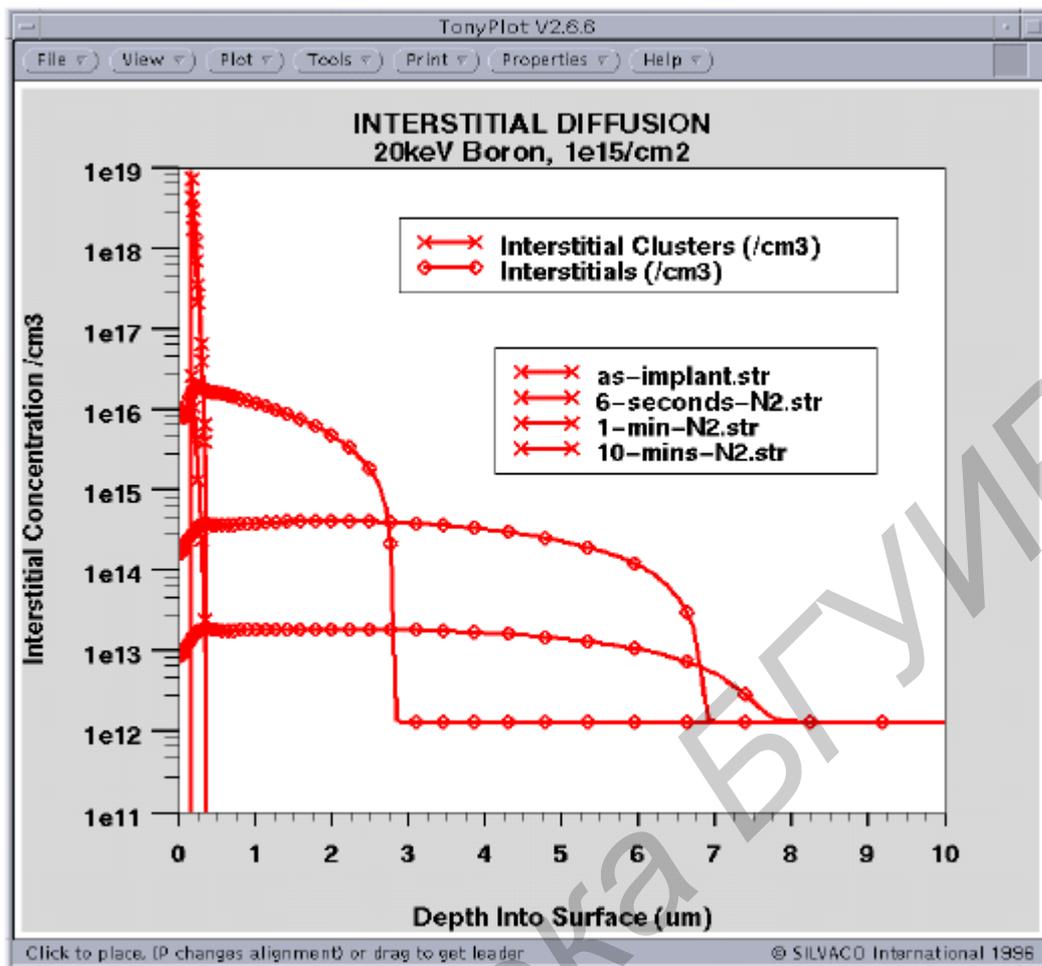


Рис. 1.26. Смещение междоузлий в глубь подложки

На рис. 1.26 показаны типичные диффузионные профили междоузлий после имплантации бора (доза 10^{15} см^{-3} , энергия 20 кэВ) для различных времен отжига. Только после 10-минутного отжига междоузлия продиффундировали на глубину 8 мкм в глубь подложки. Если выбрать слишком мелкую глубину подложки, то градиент междоузлий, как и примесей, не будет учтен достаточно полно. Если же концентрация моделируемых междоузлий достаточно велика, то интенсивность диффузии примесей (даже вблизи поверхности подложки) также будет высока и результаты моделирования могут оказаться неточными.

На рис. 1.27 представлены профили бора для двух операций отжига с одинаковыми параметрами, отличающиеся только выбранными глубинами подложки (0.875 мкм и 1.0 мкм). Видно, что результаты моделирования с более мелкой подложкой приводят к менее корректным результатам.

Для моделирования обычных МОП или биполярных технологий вполне достаточно задать моделируемую область по глубине, равной 20 мкм.

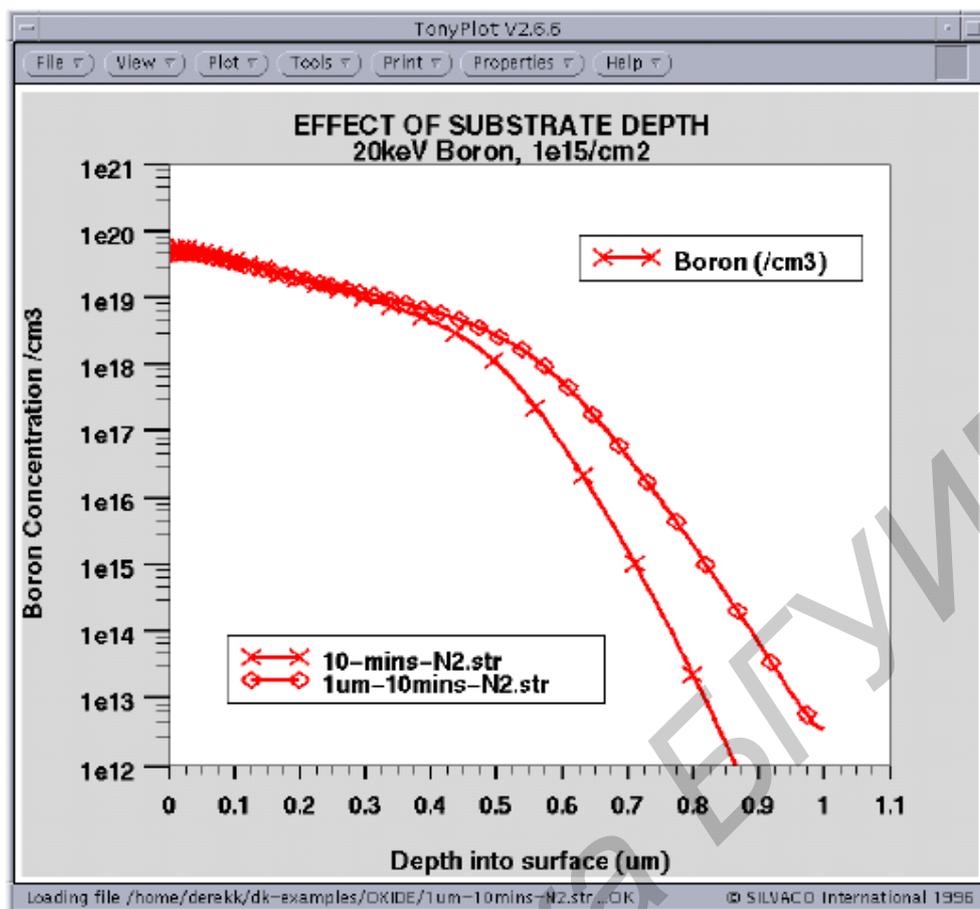


Рис. 1.27. Влияние на диффузионный профиль бора размера области моделирования (глубины подложки)

Моделирование ионной имплантации. Для задания директивы IMPLANT используется ATHENA Implant Menu (рис. 1.28). Для открытия этого меню выберите пункт Implant... в подменю Process меню Commands. Отображается следующий список минимального набора параметров, которые следует задать (значения остальных параметров можно использовать по умолчанию):

- тип имплантируемой примеси (например boron (бор));
- доза имплантации задается с использованием слайдера – вначале выбирается значение предэкспоненциального множителя, например 4.0, а затем в Exp menu показатель экспоненты, например 12;
- энергия имплантации в кэВ (например 60);
- угол наклона в градусах (например 7);
- угол поворота в градусах (например 30).

После нажатия кнопки Write во входном файле появится следующая директива:

```
# CHANNEL IMPLANT
IMPLANT BORON DOSE=4.0E12 ENERGY=60 PEARSON TILT=7 \
ROTATION=30 CRYSTAL
```

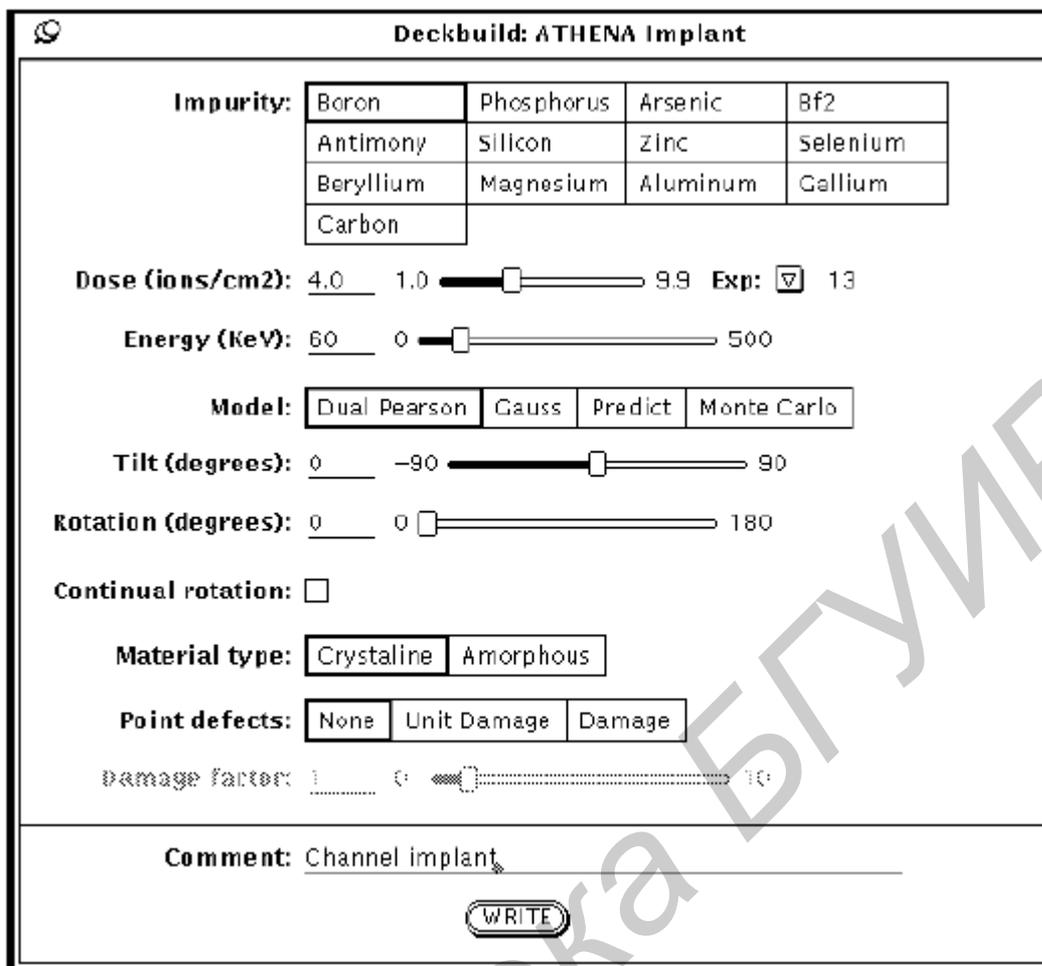


Рис. 1.28. Меню ATHENA Implant

Все параметры в этой директиве не требуют объяснений, за исключением параметра `CRYSTAL`, который показывает, что для всех аналитических моделей статистические пробеги выбираются для монокристалла кремния. При выборе пункта `AMORPHOUS` задаются соответствующие параметры для аморфизированного кремния.

В директиве `IMPLANT` задаются углы наклона и поворота ионного пучка. Положительный угол наклона соответствует ионному пучку, падающему на подложку сверху слева. Задание угла вращения соответствует углу наклона, имеющему ненулевое значение. Нулевой угол поворота означает, что вектор ионного пучка лежит в плоскости, параллельной плоскости двухмерного моделирования; угол поворота 90° означает, что вектор ионного пучка лежит в плоскости, перпендикулярной плоскости моделирования.

Выбор пункта `Continual rotation` позволяет вращать подложку в 24 различных углах поворота от 0 до 345° с шагом 15° .

В модуле `ATHENA` имеются две модели для расчета радиационных повреждений в подложке, но только `Unit Damage model` может использоваться в аналитической модели имплантации для учета влияния точечных дефектов, генерируемых при имплантации, на диффузионные процессы. При использова-

нии UNIT.DAMAGE можно также назначить значение DAM.FACTOR, которое по умолчанию равно 0.01. Для быстрого поиска соответствующей модели смотрите табл. 1.1.

Таблица 1.1

Модели имплантации в модуле ATHENA

Операция	Модель	Приближение	Рекомендации
Имплантация	Сдвоенная функция Пирсон IV	Эмпирическое	Отсутствуют
	Одна функция Пирсон IV	Аналитическое	Используется во всех других случаях
	Монте-Карло или ВСА	Статистическое	Используется для многослойных структур
Имплантация в кремний	Для аморфного кремния	Эффекты каналирования не учитываются	Используется в случаях, когда большая часть имплантационных профилей располагается внутри материала (оксид кремния, поликремний, аморфный кремний, высокая или очень низкая энергии имплантации)
	Для кристаллического кремния по умолчанию	Эффекты каналирования учитываются	Используется в случаях, когда важен учет эффектов каналирования: легкие ионы, нулевой или близкий к нулю угол наклона пучка, имплантация через тонкий аморфный слой в кристаллическую подложку

Моделирование диффузии. Параметры и модели диффузионных операций устанавливаются из ATHENA Diffuse Menu (рис. 1.29). Для открытия этого меню выберите пункт Diffuse... в подменю Process меню DECKBUILD Commands.

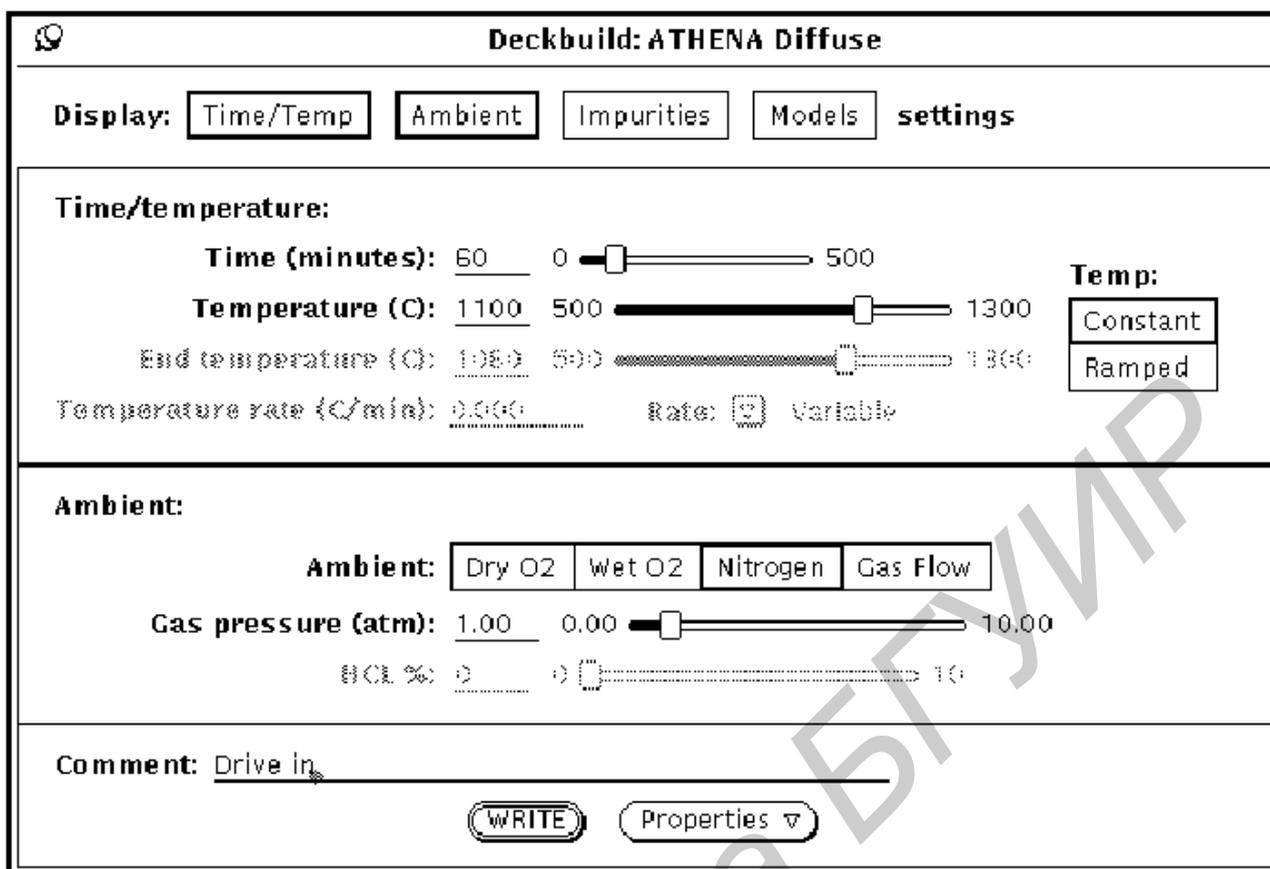


Рис. 1.29. Меню диффузии программы ATHENA

Меню Diffuse имеет четыре раздела. Вначале появляются только поля Time/Temperature и Ambient. Поля Impurities и Models появляются только в том случае, когда выбраны соответствующие прямоугольники. Минимальный набор диффузионных параметров:

- время (например 60 мин);
- температура (например 1100 °C);
- давление газа (по умолчанию 1 атм.).

Во входном файле появляется следующая директива:

```
# DRIVE-IN
DIFFUSE TIME=60 TEMP=1100 NITRO PRESS=1.00
```

Если выбрать прямоугольники Ramped и End Temperature или Temperature rate, то будет моделироваться термическая операция со ступенчатым изменением температуры. Скорость нарастания температуры устанавливается переменной по умолчанию, однако ее можно задать постоянной, если выбрать Constant в прямоугольнике Rate. Если задается конечная температура, равная 1000 °C, то появляется следующая строка:

```
# RAMPING DOWN
DIFFUSE TIME=60 TEMP=1100 T.FINAL=1000 NITRO PRESS=1.00
```

Моделирование окисления. Меню для моделирования окисления похоже на меню для моделирования термического отжига в инертной среде. По умолчанию при моделировании процесса окисления используется модель Compress. Если взять пример из подраздела “Моделирование диффузии”, который отличается тем, что температурная обработка проводится при постоянной температуре 1000 °С в сухом O₂ с добавкой 3% HCl, то следует войти в раздел Ambient из меню Diffuse, во входном файле появится следующая директива:

```
# GATE OXIDE
DIFFUSE TIME=60 TEMP=1000 DRYO2 PRESS=1.00 HCL.PC=3
```

Если среда представляет собой смесь, состоящую из более чем одного окислителя, то скорость окисления будет определяться комбинированным эффектом от всех составляющих среды. Для выбора содержания смешанной окислительной среды выберите кнопку Gas Flow в разделе Ambient и появится дополнительное меню свойств потока газа (рис. 1.30).

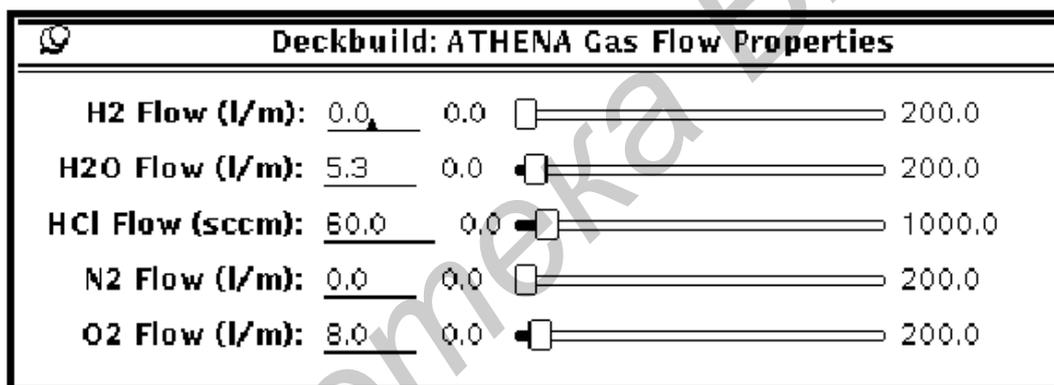


Рис. 1.30. Меню свойств потока газа

Если выбраны компоненты газовой среды, такие, как указано на рис. 1.30, то во входном файле будет сгенерирована следующая директива:

```
# GATE OXIDE
DIFFUSE TIME=60 TEMP=1000 F.H2O=5.3 \
F.HCL=0.06 F.O2=8.0 PRESS=1.00
```

В окислительной среде могут присутствовать одна или несколько примесей. Содержание среды выбирается в пункте Impurity Concentration меню Diffuse (рис. 1.30) посредством выбора соответствующих разделов и ввода необходимых числовых значений с использованием слайдеров и меню Expr. Например, во входной файл может быть введена следующая директива DIFFUSE:

```
# FIELD OXIDE
DIFFUSE TIME=100 TEMP=850 T.FINAL=1060 WETO2 PRESS=1.00 \
HCL.PC=0 C.ARSENIC=9.0E19 C.PHOSPHOR=4.0E20
```

Некоторые другие параметры, недоступные для ввода через директиву DIFFUSE, могут быть назначены через другие директивы. Например, параметры DUMP, DUMP.PREFIX могут создать “кино”, используя TONYPLOT, а при использовании параметра NO.DIFF в расчетах не учитывается перераспределение примесей. Использование этих параметров полезно при моделировании низкотемпературных термических процессов. В табл. 1.2 представлены базовые модели диффузии и окисления.

Таблица 1.2

Базовые модели диффузии и окисления

Операция	Модель	Предположение	Рекомендации
Диффузия	Fermi (по умолчанию)	Равновесное распределение дефектов	Для подложек без повреждений (без дефектов) в инертных средах
	two.dim	Переходный процесс диффузии дефектов	При окислении и после имплантации с умеренными дозами (например, для эффекта усиления диффузии при окислении, OED)
	full.cpl	Модель энергетической связи для примесей и дефектов	После имплантации с высокой дозой и диффузии (высокое время проведения операции диффузии)
Окисление	Vertical	Планарная модель	Только 1D окисление
	Compress (по умолчанию)	Непланарная модель с линейным потоком	2D окисление (например, формирование “птичьего клюва”)
	Viscous Elastic	Непланарная модель с нелинейным потоком	2D окисление (например, формирование “птичьего клюва” с толстой пленкой Si ₃ N ₄ ; высокое время проведения операции)

Ниже приведены дополнительные директивы и параметры:

- IMPURITY, INTERSTITIAL и другие директивы, относящиеся к примесям и точечным дефектам и определяющие параметры моделей (например, коэффициенты диффузии и сегрегации);

- директива OXIDE, определяющая параметры для различных моделей окисления;
- директива MATERIAL, назначающая базовые параметры для всех материалов.

Моделирование процесса эпитаксии. При моделировании высокотемпературной эпитаксии этот процесс рассматривается как комбинация процессов осаждения и диффузии (например, процесс автолегирования из высоколегированного скрытого слоя в слаболегированный эпитаксиальный слой). Диффузионные параметры для эпокремния берутся такими же, как и для монокремния.

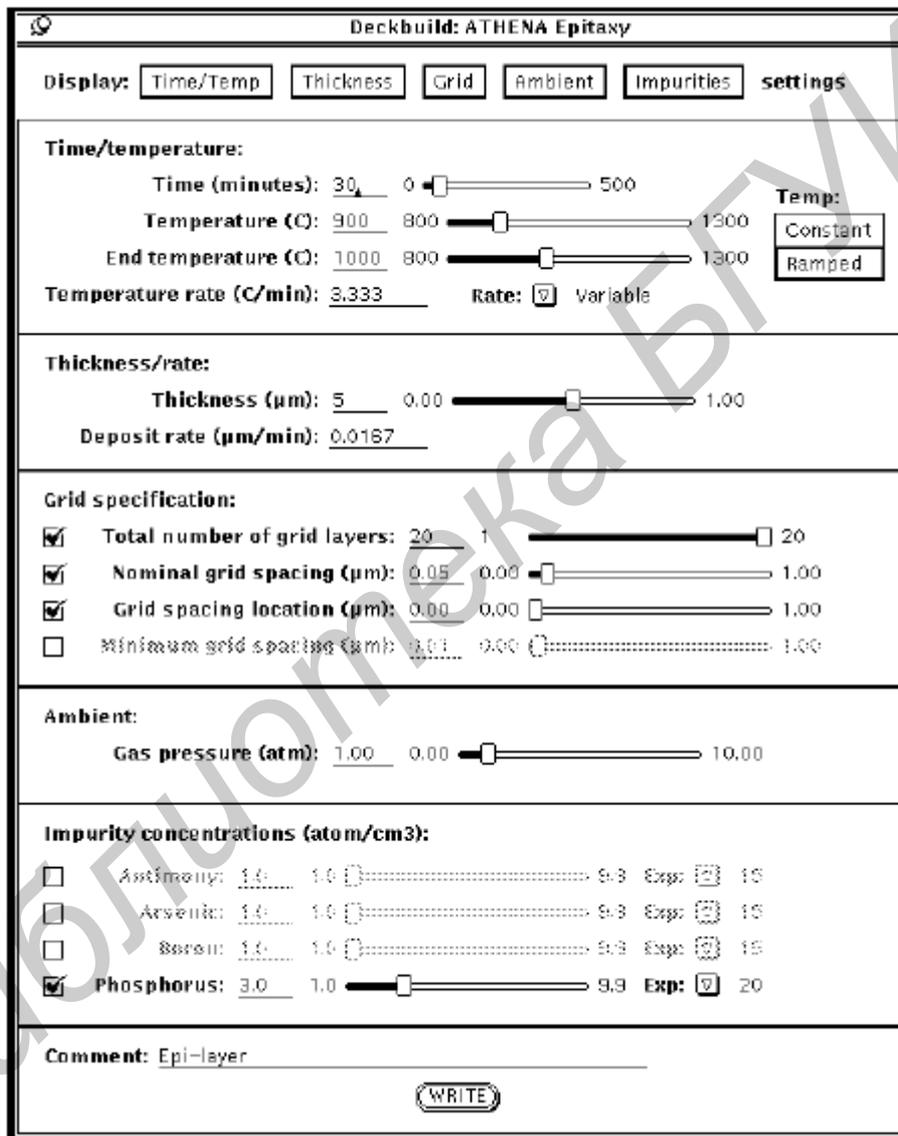


Рис. 1.31. Меню моделирования эпитаксии

Меню для моделирования эпитаксии (рис. 1.31) содержится в пункте Epitaxy подменю Process в Commands menu и имеет следующие разделы:

- Time/temperature – выбор параметров изменения температуры, как и в разделах директивы DIFFUSE;

- Thickness/rate – назначение толщины эпислоя или скорости осаждения эпислоя в (мкм/мин);
- Grid Specification – выбор вертикальной сетки моделируемой структуры внутри выращиваемого эпислоя (все параметры эквивалентны Deposit Menu, рис. 1.12);
- Ambient – задание давления газа в эпитаксиальной камере;
- Concentrations – установка параметров выращиваемого эпислоя (аналогично директиве DIFFUSE).

После выбора параметров, представленных на рис. 1.31, во входном файле появится следующая директива:

```
# EPILAYER
EPITAXY TIME=30 TEMP=900 T.FINAL=1000 THICKNESS=5 \
DIVISIONS=20 DY=0.05 YDY=0.00
```

При моделировании диффузии во время процесса эпитаксии используется параметр Diffusion Model Set в последней директиве METHOD. Если необходима другая директива METHOD, включите ее перед директивой EPITAXY.

1.4. Некоторые особенности модуля ATHENA

В последующих подразделах описаны дополнительные возможности и приведены директивы, использование которых необходимо лишь в частных случаях.

1.4.1. Средства для преобразования моделируемой структуры

Директива STRUCT FLIP.Y. Использование данной директивы позволяет отражать моделируемую структуру относительно оси X. Эта процедура полезна при моделировании операций (например, травления, осаждения или имплантации), проводящихся с обратной стороны подложки. Используя эту директиву, можно отразить структуру, провести моделирование этих операций, а затем отразить эту структуру обратно.

Директива STRETCH. Иногда необходимо провести исследование зависимости характеристик прибора от длины его элементов. Например, ток в затворе МОП-транзистора существенно зависит от длины затвора. Используя директиву STRETCH, можно сгенерировать несколько структур МОП-транзистора с различными величинами длины затвора. Так, в примере моделирования МОП-транзистора (см. рис. 1.22) длина затвора была равна 0.6 мкм. Можно провести моделирование этой структуры с различными длинами затвора, вплоть до 1.5 мкм, используя команду STRETCH. Для этого выберите пункт Stretch в подменю Structure (рис. 1.32).

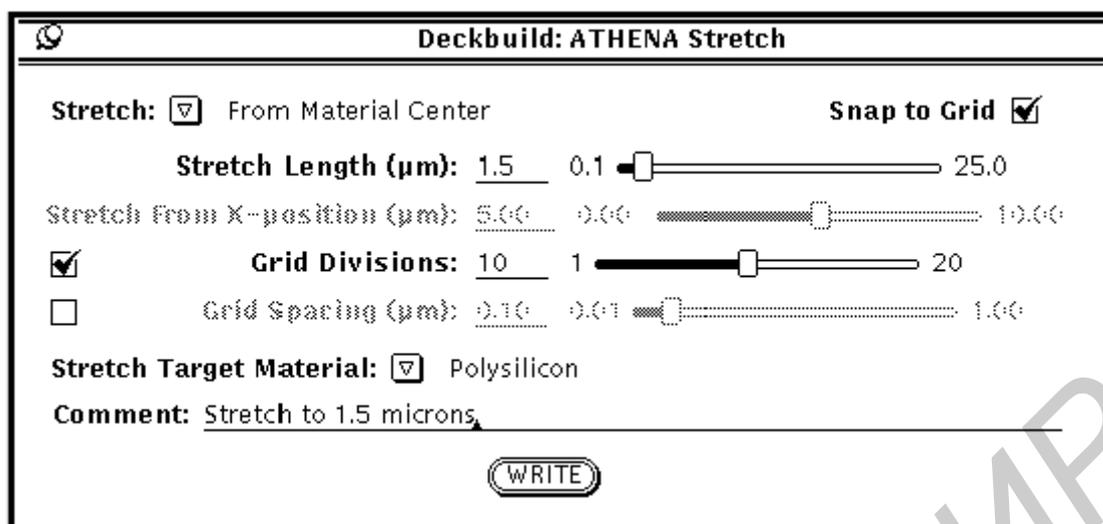


Рис. 1.32. Меню Stretch

Затем выберите пункт Polysilicon, задайте параметр Stretch Length до 1.5 мкм и число 10 в пункте Grid Divisions. Нажмите кнопку Write, и во входном файле появится строка:

```
# STRETCH TO 1.5 MICRONS
STRETCH LENGTH=1.5 POLY SNAP DIVISION=10
```

Результат моделирования представлен на рис. 1.33.

Другой пример использования директивы STRETCH – моделирование мощных приборов, в которых распределение примесей равномерно во всех активных областях, кроме областей вблизи краев маски. Вначале можно провести моделирование сжатой структуры, а затем растянуть активные и/или неактивные области до реальных размеров.

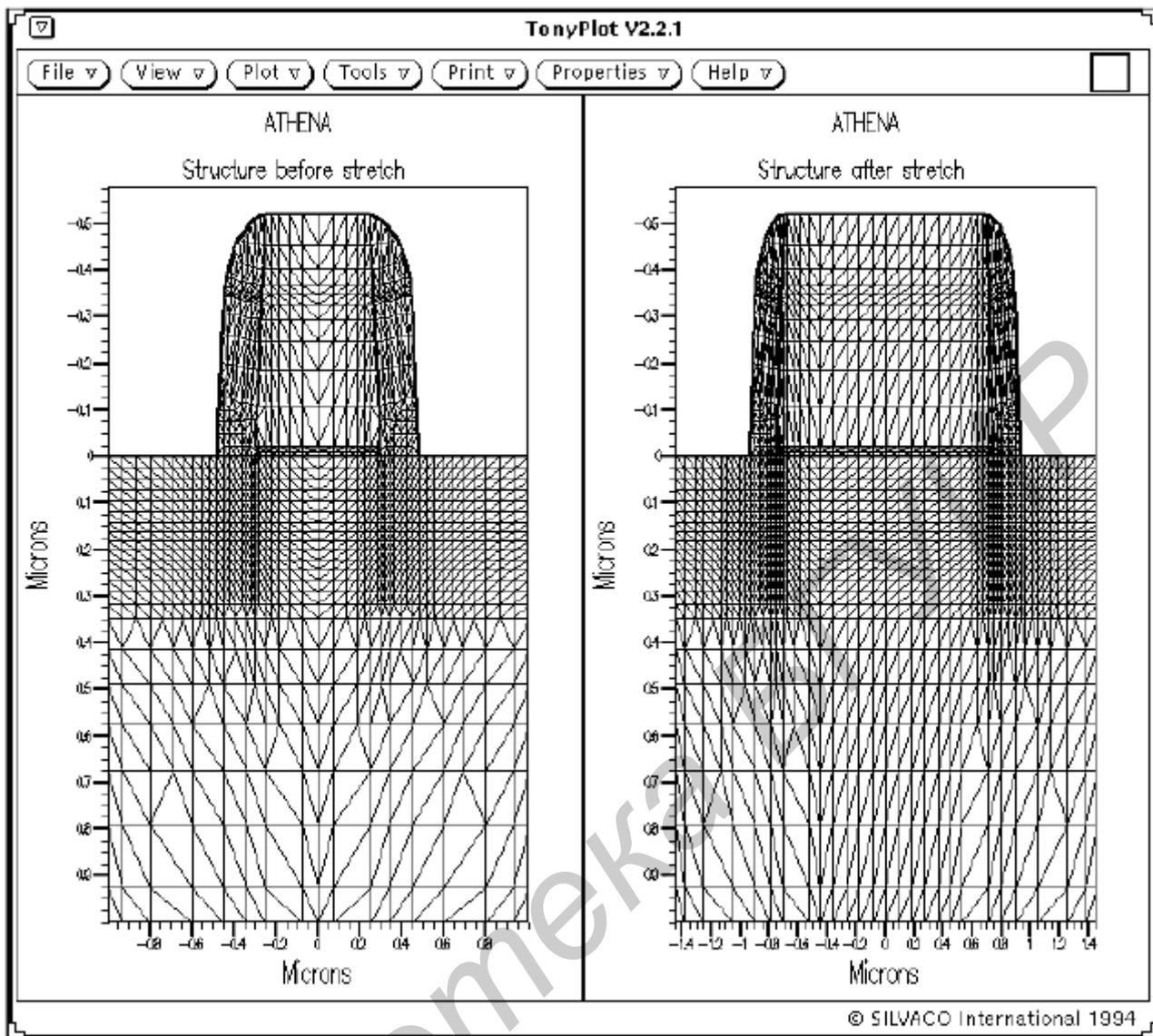


Рис. 1.33. Результат использования директивы STRETCH при моделировании структуры МОП-транзистора

Использование модуля ATHENA в 1D режиме. Скорость моделирования может быть значительно повышена при работе в режиме 1D (одномерное моделирование). По умолчанию моделирование вначале проводится в режиме 1D, затем оно автоматически переходит в режим 2D (двухмерное моделирование) при моделировании таких сугубо двухмерных процессов, как, например, травление. Гораздо быстрее моделирование проводится в режиме 1D таких простых операций, как конформальное осаждение, окисление и диффузия. На рис. 1.34 представлены результаты расчетов последовательности операций осаждения и травления с автоматическим переходом в режим 2D при моделировании первого травления.

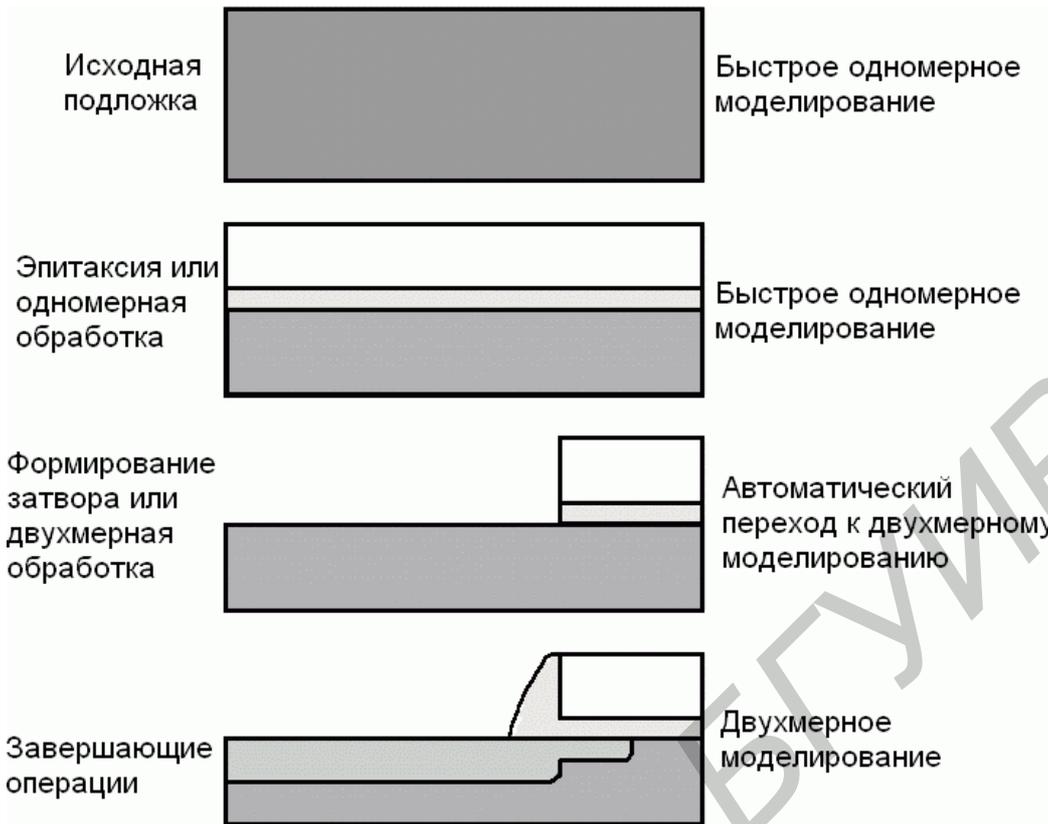


Рис. 1.34. Автоматический переход процесса моделирования из режима 1D в 2D

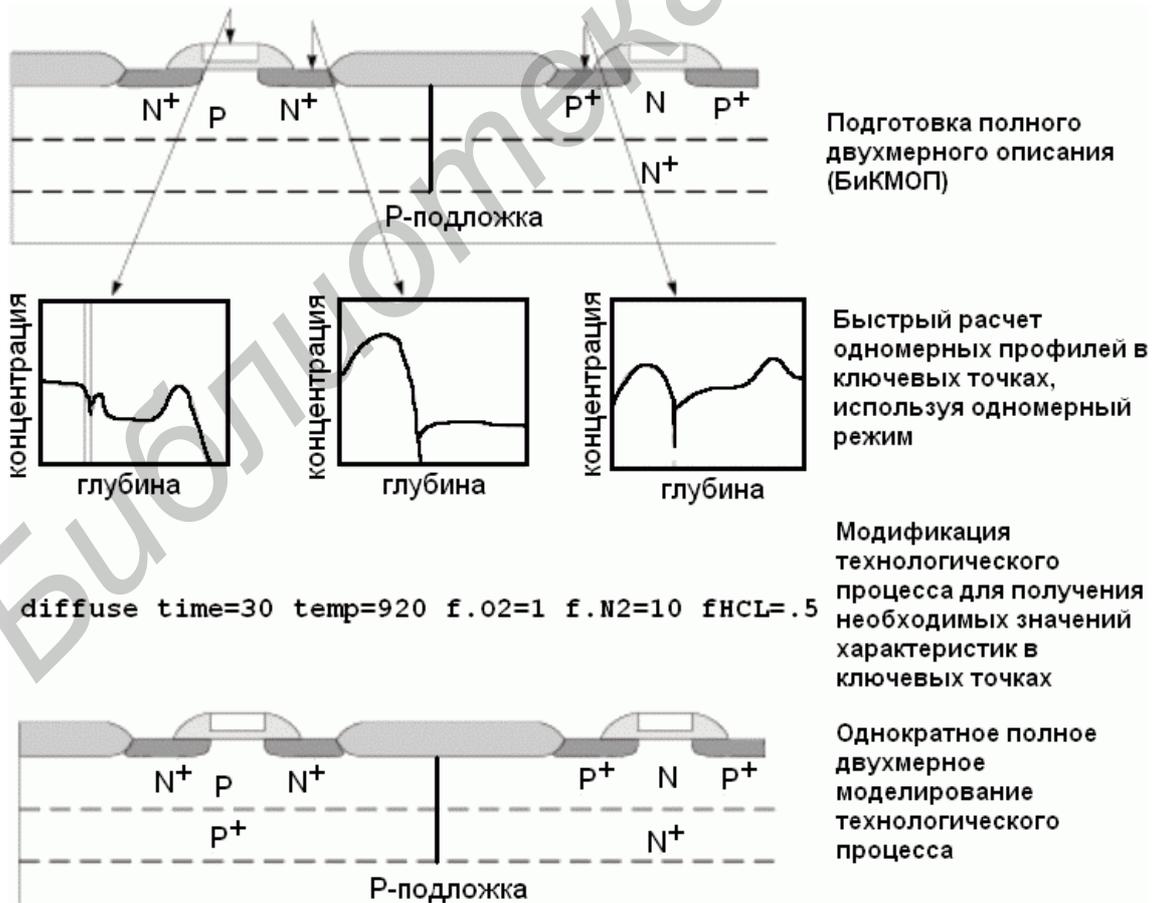


Рис. 1.35. Использование режима одномерного моделирования

Другой аспект режима 1D представлен на рис. 1.35. Здесь команда INITIALIZE назначается с параметрами ONE.D и X.LOC=<n>. ONE.D определяет, что одномерное моделирование проводится в пространственной области X.LOC. В этом случае рассчитываются 1D профили для различных положений вдоль X координаты сложной БИКМОП структуры. Это позволяет провести моделирование всего маршрута, используя 1D режим.

1.4.2. Использование физических моделей при моделировании процессов осаждения и травления в модуле ELITE

Для физического моделирования операций осаждения и травления с использованием модулей ATHENA и ELITE необходимо во входном файле назначить определенную опцию для проведения этих операций. Например, необходимо провести моделирование процесса осаждения алюминия со скоростью 1 мкм/мин длительностью 2 мин из полусферического источника с использованием установки PE4450. Для этого необходимо открыть меню ATHENA Deposit Menu и выбрать пункт Machine. В меню появится подменю PARAMETERS TO RUN THE DEFINED MACHINE (рис. 1.36).

Deckbuild: ATHENA Deposit

Type: Conformal Machine Display: Basic parameters Grid Impurities

PARAMETERS TO RUN THE DEFINED MACHINE

Machine name: PE4450

Time of run: 2.0 minutes

Grid specification:

Total number of grid layers: 10 1 20

Nominal grid spacing (µm): 0.02 0.00 1.00

Grid spacing location (µm): 0.2 0.00 1.00

Maximum grid spacing (µm): 0.01 0.00 1.00

Minimum edge spacing (µm): 0.001 0.01 1.00

Composition fractions:

Initial composition fraction: 0.00 0.00 1.00

Final composition fraction: 0.00 0.00 1.00

Monte Carlo Parameters:

Number of particles: 1000 100 10000

Comment: Using default deposit machine PE4450

WRITE

Рис. 1.36. Меню ATHENA Deposit с разделом Machine

Выберите тип установки PE4450, размерность времени (minutes) и длительность проведения процесса (2.0). Перед этим должен быть задан параметр Total number of grid layers (общее число слоев сетки) в области материала, в которой проводится эта операция. Если это число выбрано равным 10, то во входном файле появится директива:

```
# USING DEFAULT DEPOSIT MACHINE PE4450  
DEPOSIT MACHINE=PE4450 TIME=2.0 MINUTES DIVISIONS=10
```

Концентрация примесей в осаждаемой области назначается в подменю Impurity concentration меню ATHENA Deposit посредством выбора пункта Impurities.

Изменение настройки типа установки. В файле athenamod установка PE4450 задается следующим образом:

```
RATE.DEPO MACHINE=PE4450 ALUMINUM U.M SIGMA.DEP=.35 \  
HEMISPHE DEP.RATE=1.0 ANGLE1=72 ANGLE2=-70
```

Параметры ANGLE1 и ANGLE2 задают углы наклона падающего пучка в полусферическом источнике относительно нормали к обрабатываемой поверхности. Характеристики установки PE4450 можно изменить, используя ASCII редактор. Например, в директиве, приведенной ниже, изменена скорость осаждения 0.5 мкм/мин:

```
RATE.DEPO MACHINE=PE4450 ALUMINUM \  
U.M SIGMA.DEP=.35 HEMISPHE DEP.RATE=.5 \  
ANGLE1=72 ANGLE2=-70
```

Для выбора новых характеристик установки при проведении операции осаждения используется меню ATHENA Rate Deposit (рис. 1.37). Выберите пункт Process -> Deposit -> Rate Deposit в меню Commands. Далее требуется назначить пять основных характеристик установки и один или несколько параметров модели этой операции:

- наименование установки (например TEST01);
- тип материала (например aluminum);
- тип установки (например unidirectional). Возможно назначение одного из шести типов посредством выбора соответствующего пункта;
- единица измерения скорости осаждения (например A/min);
- скорость осаждения (например 1000).

SIGMA.DEP – дополнительный параметр (по умолчанию – 0.2). Параметры SMOOTH.WIN и SMOOTH.STEP служат для проведения многократного геометрического сглаживания обрабатываемой области в окне шириной

SMOOTH.WIN (в мкм). Количество процедур сглаживания задается параметром SMOOTH.STEP (по умолчанию – 1).

The screenshot shows a software window titled "Deckbuild: ATHENA Rate Deposit". It contains several sections for parameter configuration:

- GENERAL PARAMETERS**
 - Machine name: TEST01
 - Material: Aluminum (selected from a dropdown)
 - User defined material: (empty field)
 - Machine type: A table with three columns: Unidirectional, Planetary, Dualdirectional. The first row contains Unidirectional, Planetary, and Dualdirectional. The second row contains Conical, CVD, and Hemispherical. The third row contains Simple MC, Single Particle MC, and User Data.
 - Deposition rate: 1000 Å/sec (selected from a dropdown)
 - Surface Diffusion: 0.20 (checked checkbox, slider from 0.00 to 1.00)
 - Smoothing window: 0.1 (checked checkbox, slider from 0.01 to 5.00)
 - Smoothing step: 1 (slider from 1 to 10)
- PARAMETERS FOR UNIDIREC MACHINE TYPE**
 - Angle 1 (deg): 0.00 (slider from -90.00 to 90.00)
- Comment:** Deposit machine TEST01
- WRITE** button

Рис. 1.37. Меню ATHENA Rate Deposit

Если в меню ATHENA Rate Deposit установлены параметры, показанные на рис. 1.37, то во входном файле будет присутствовать следующая RATE.DEPO директива:

```
RATE.DEPO MACHINE=TEST01 ALUMINUM A.S SIGMA.DEP=0.2 \
SMOOTH.WIN=0.1 SMOOTH.STEP=1 UNIDIREC \
DEP.RATE=1000 ANGLE1=0.00
```

В табл. 1.3 представлены параметры, используемые в модели травления.

Параметры, необходимые для модели осаждения

Параметры	Модели									
	CVD	UNI	DUAL	HEMI	CONIC	PLANET	MONTE1	MONTE2	USERDATA.1	USERDATA.2
DEP.RATE	Y ¹	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	O ³	Y
STEP.COV	Y	N ²	N	N	N	N	N	N	N	N
ANGLE1	N	Y	Y	Y	Y	Y/N ⁴	Y	Y	N	N
ANGLE2	N	N	Y	Y	N	Y	N	N	N	N
C.AXIS	N	N	N	N	Y	Y	N	N	N	N
P.AXIS	N	N	N	N	Y	Y	N	N	N	N
DIST.PL	N	N	N	N	N	Y/N	N	N	N	N
SIGMA.DEP	N	O	O	O	O	O	O	O	N	Y
SMOOTH.WIN	N	O	O	O	O	O	O	O	O	O
SMOOTH.STEP	N	O	O	O	O	O	O	O	O	O

Примечание.

- ¹ – параметры должны быть заданы,
- ² – параметры не задаются,
- ³ – дополнительные параметры,
- ⁴ – при использовании планетарной модели должен быть задан или параметр ANGLE1, или параметр ANGLE2 (эти параметры взаимно исключающие).

Задание типа установки при проведении моделирования операции травления с помощью модуля ELITE. Установка для проведения операции травления может быть задана в меню скорости травления (ATHENA Rate Etch Menu) (рис. 1.38).

Чтобы открыть это меню, выберите Process->Etch->Rate Etch в командном меню (Commands menu). Задание установки требует определения четырех основных параметра и одного или нескольких параметров, специфичных для данной модели.

Общие параметры:

- название установки (например TEST02);
- тип материала (например SILICON);
- тип установки Machine type (например Wet Etch). Может быть задана одна из трех моделей посредством нажатия соответствующей кнопки;
- единица измерения скорости травления (например Å/min). Может быть задана одна из семи таких единиц измерения с помощью соответствующего меню.

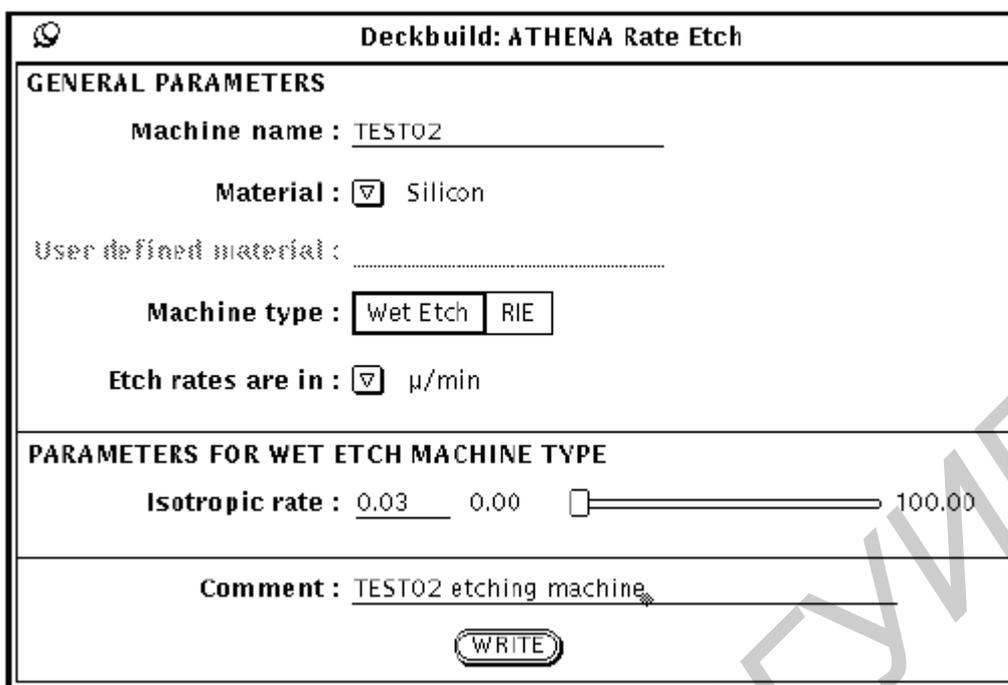


Рис. 1.38. Меню ATHENA Rate Etch

Для каждой модели требуется один или несколько специфичных параметров. Например, только параметр ISOTROPIC rate требуется для модели Wet Etch. В табл. 1.4 представлены параметры, которые требуются для каждой из трех моделей.

Таблица 1.4

Параметры, необходимые для модели травления

Параметры	WET.ETCH	RIE
ISOTROPIC	Y	Y
DIRECTIONAL	N	Y
DIVERGENCE	N	Y
CHEMICAL	N	Y

Если установлено меню ATHENA Rate Etch, как показано на рис. 1.39, то во входном файле появится следующая директива RATE.ETCH:

```
# TEST02 ETCHING MACHINE
RATE.ETCH MACHINE=TEST02 SILICON U.M \
WET.ETCH ISOTROPIC=0.03
```

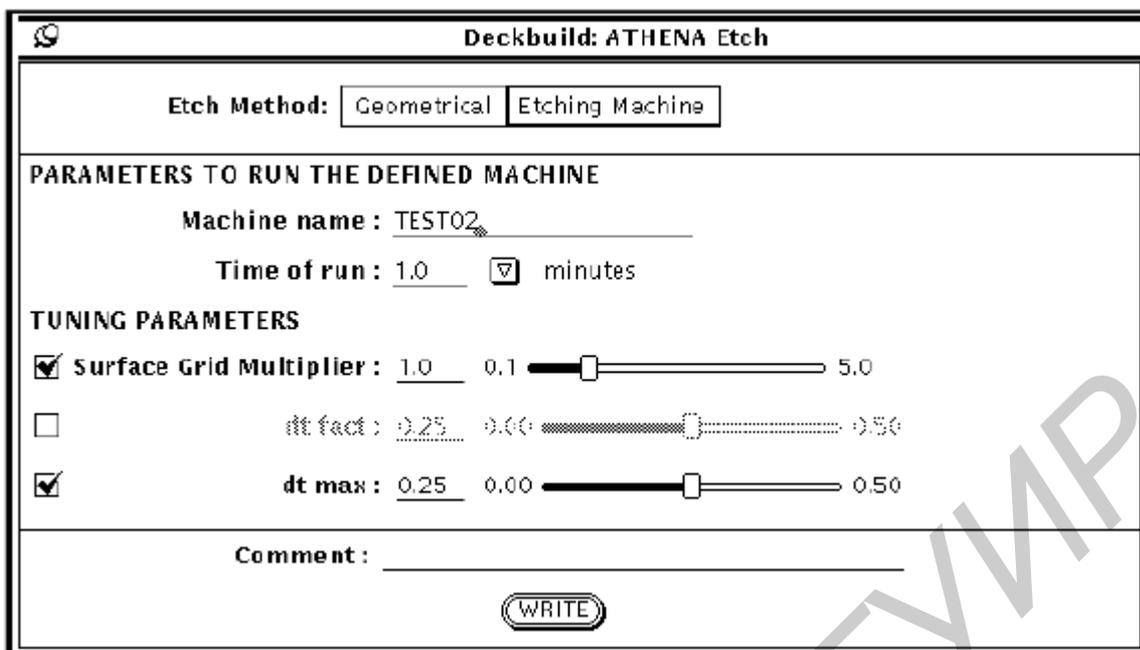


Рис. 1.39. Параметры, необходимые для задания характеристик установки (Machine) травления в разделе меню травления (Etch)

Если в моделируемой структуре имеется несколько материалов, то для каждого материала должны быть заданы свои скорости травления в отдельных директивах RATE.ETCH.

Использование определенной установки при моделировании травления. Если с помощью директивы RATE.ETCH заданы скорости травления для каждой установки, то можно промоделировать эффекты работы этой установки. Для этого необходимо открыть меню ATHENA Etch Menu и выбрать раздел Etching Machine. После этого в меню появится раздел Parameters to Run the Defined Machine (рис. 1.39). Следует задать название установки (TEST02), наименование единицы времени (например минуты) и длительность процесса травления. Имеются также два подгоночных параметра, с помощью которых контролируется временной шаг проведения операции травления. Для получения более плавной поверхности при травлении необходимо уменьшить параметр DT.MAX, устанавливающий максимальное значение временного шага, по умолчанию составляющее 10 % от заданного значения Time of Run.

Если меню установлено, как показано на рис. 1.39, то во входном файле появляется следующая директива при нажатии кнопки WRITE:

```
# 1 MINUTE ETCHING USING TEST02 ETCH MACHINE
ETCH MACHINE=TEST02 TIME=1.0 MINUTES DT.MAX=0.25
```

Для улучшения степени дискретизации расчетной сетки при моделировании операции травления используется параметр DX.MULT, который добавляется в директиву ETCH. Увеличение величины DX.MULT от его значения по

умолчанию, равного 1.0, приводит к увеличению размера приповерхностных сегментов расчетной сетки. Использование DX.MULT более предпочтительно по сравнению с использованием параметра DT.MAX.

1.5. Адаптивное построение сетки

В модуле ATHENA имеется возможность адаптивного построения расчетной сетки при расчете профилей распределения примесей. При моделировании процесса имплантации адаптация сетки производится автоматически. Адаптация сетки при моделировании операции термообработки, контроль построения сетки и формирование исходной сетки проводится при активном участии пользователя.

1.5.1. Адаптация сетки при моделировании операции термообработки

В процессе моделирования операций диффузии/окисления/эпитаксии общее время разбивается на множество малых временных шагов для плавного изменения профилей распределения примесей от шага к шагу.

Пример файла задания на моделирование при создании структуры LDD МОП прибора:

```
GO ATHENA
LINE X LOC=0.00 SPAC=0.1
LINE X LOC=2.00 SPAC=0.1
LINE X LOC=0.00 SPAC=0.1
INIT SILICON C. ARSENIC=10E14
DIFF TIME=50 TEMP=950 DRYO2
DEPOSIT POLY LEFT PL.X=1.2
ETCH POLY LEFT PL.X=1.2
STRUCT OUTF=MOS_0.STR
#PERFORM ADAPTIVE MESHING FOR BOTH IMPLANT AND DIFFUSION
METHOD ADAPT
IMPLANT BORON DOSE=1.0E13 ENGERY=15 PERSON TILT=0
STRUCT OUTF=MOS_1.STR
DEPOSIT OXIDE THICK=.35 DIV=6
ETCH OXIDE THICK=.35
IMPLANT BORON DOSE=1.0E14 ENGERY=15 PERSON TILT=0
STRUCT OUTF=MOS_2.STR
DIFFUSE TEMP=1000 TIME=30
STRUCT OUTF=MOS_3.STR
QUIT
```

Вначале создается простая сетка с помощью четырех команд LINE. После начального одномерного моделирования включается адаптивное изменение сетки для получения плавных постимплантационных профилей распределения бора. В результате проведения последней операции диффузии бор разгоняется

в глубь подложки, при этом процесс адаптации сетки производится на каждом временном шаге.

Модуль ADAPT включается при моделировании различных операций заданием булева флага в команде METHOD, предшествующей директивам IMPLANT, DIFFUSE или EPITAXY. Ниже представлен синтаксис этого простого примера.

Применяются три команды для подключения модуля адаптации сетки. Директива METHOD используется для контроля численного алгоритма. Если задана директива METHOD ADAPT=false, то алгоритм адаптации сетки будет выключен по умолчанию. Параметр IMPLANT.MES определяет, какой алгоритм адаптации будет использоваться для директивы IMPLANT. По умолчанию применяется параметр IMPLANT.MES=0. Ниже представлены четыре параметра в директиве METHOD, которые задают плавность процедуры сглаживания сетки:

- ETCH.SMOOTH – определяет, что процедура сглаживания сетки производится после каждой операции травления;
- DEPO.SMOOTH – то же после каждой операции осаждения;
- DIFF.SMOOTH – то же после каждой операции диффузии;
- STEP.SMOOTH – то же после каждого временного шага при моделировании.

Директива ADAPT.PAR используется для задания параметров, управляющих процессом адаптации расчетной сетки. Для директивы ADAPT.PAR доступны следующие параметры – области определенных материалов (SILICON, OXDIDE, POLYSILICON и т.д.), в которых будет проводиться автоматическая адаптация расчетной сетки. Одновременно можно выбрать один или несколько материалов. По умолчанию включены такие примеси, как I.BORON или I.ARSENIC. Назначьте примеси, для которых будет адаптироваться сетка. Одновременно можно выбрать одну или несколько примесей. Параметр DISABLE определяет, что данные материалы/примеси недоступны для проведения процедуры адаптации сетки или сглаживания, параметр MAX.ERR задает максимальные ошибки, связанные с добавлением дополнительных точек в расчетную сетку, параметр MIN.ERR – минимальные ошибки, связанные с удалением точек из расчетной сетки, параметр CONC.MIN – минимальную концентрацию примесей, ниже которой процесс адаптации сетки прекращается (в единицах $1.0/\text{см}^3$). Параметр ADAPT.MESH используется в том случае, когда автоматическая адаптация сетки проводится одновременно с проведением этой процедуры в ручном режиме.

В директиве ADAPT.MESH присутствуют следующие параметры:

- ADAPT определяет, что следует провести только один шаг адаптации сетки для расширения или сужения текущей сетки, заданной по спецификации материал/примесь, установленной по директиве ADAPT.PAR (значение по умолчанию – false);

- ADAPT.COUNT задает условие, что будет проводиться только отжиг при выполнении директивы ADAPT.MESH (значение по умолчанию –false);
- SMTH.COUNT задает число циклов сглаживания в алгоритме сглаживания.

Управление процедурой адаптации сетки. Процедура адаптации сетки может проводиться в различных режимах. Для управления этой процедуры используются следующие команды:

- METHOD – для включения или выключения различных режимов автоматической адаптации сетки;
- ADAPT.MESH – для проведения процедуры автоматической адаптации сетки в определенной точке;
- ADAPT.PAR – для контроля адаптации сетки как в ручном, так и в автоматическом режимах;
- GRID.MODEL – для описания внешнего шаблонного файла, содержащего команды для установки сетки при моделировании определенной технологии или прибора;
- BASE.MESH – для задания начальной точки сетки при одномерном моделировании;
- BASE.PAR – для задания критериев адаптации сетки (только для базовой сетки!).

Формирование базовой сетки. В модуле ATHENA адаптация сетки проводится как при одномерном, так и при двухмерном моделировании. Вообще говоря, в типичном случае моделирование (например, формирование МОП структуры) начинается в режиме 1D, а затем включается режим 2D при проведении моделирования некоторых промежуточных операций всего технологического маршрута (например, при формировании поликремниевого затвора). В этом случае сетка из 1D моделирования берется в качестве базовой для 2D моделирования. При этом качество базовой 2D сетки очень важно для последующей адаптации сетки, например при моделировании имплантации в области истока/стока и последующего отжига.

1.5.2. Интерфейс контроля сетки

Для контроля процедуры адаптации сетки вблизи границы раздела двух материалов используется соответствующий интерфейс (Interface Mesh Control). С помощью команды ADAPT ADD.I.LINE=n осуществляется контроль добавления новых линий в сетке. Два материала определяются как параметры в команде, задающей интерфейс или набор интерфейсов. Линия сетки добавляется в параметр MATERIAL1 следующим образом:

```
ADAPT.MESH ADD.I.LINE=0.001 MATERIAL1 / MATERIAL2
```

Например, если необходимо добавить дополнительную линию в сетке для кремния (SILICON) в области канала МОП-транзистора, то соответствующая строка будет выглядеть следующим образом:

```
ADAPT.MESH ADD.I.LINE=0.001 SILICON / OXIDE
```

Структурный переход из 1D режима в режим 2D для формирования базовой сетки контролируется параметрами `BASE.PAR`.

Генерация качественной мелкой сетки начинается с команды `BASE.MESH`, определяющей 1D структуру в качестве стековой, вплоть до пяти слоев (например, при формировании биполярного транзистора). Каждый слой имеет свою толщину: `SURF.LY`, `ACTIVE.LY`, `EPI.LY`, `SUB.LY` и `BACK.LY` с соответствующими пространственными шагами `SURF.DY`, `ACTIVE.DY`, `EPI.DY`, `SUB.DY` и `BACK.DY`. Полная структура может быть задана посредством выбора начала координат в левом верхнем угле этой структуры, для этого используются параметры `OFFSET.X` и `OFFSET.Y`.

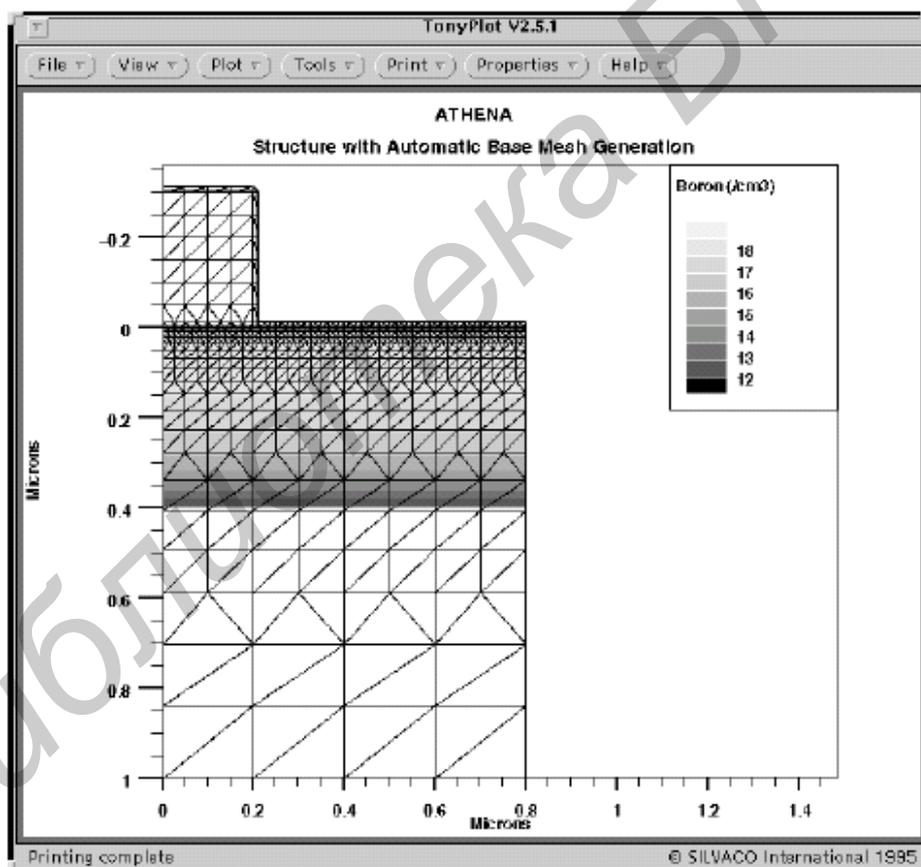


Рис. 1.40. Автоматическая генерация базовой сетки

Контроль качества результата исполнения команды `BASE.MESH`, выполняемой на этапе перехода от 1D к 2D моделированию, осуществляется с помощью параметра команды `BASE.PAR`. Необходимые материалы могут быть на-

значены с помощью различных параметров. Параметр `GRAD.SPACE` контролирует качество получения так называемого коэффициента смежного треугольника в вертикальном направлении, а параметр `RATIO.BOX` – коэффициента смежного треугольника в боковом направлении. С помощью параметра `GRAD.SPACE` осуществляется контроль качества сетки в соседних сегментах пространственной сетки.

Команда `INIT` содержит параметры `WIDTH.STR` и `DEPTH.STR`, определяющие размер начальной структуры, при этом удаляются предыдущие назначения, устанавливаемые по параметру `BASE.MESH`.

Пример такой базовой сетки и результат последующего моделирования 2D диффузии представлены на рис. 1.40 и 1.41.

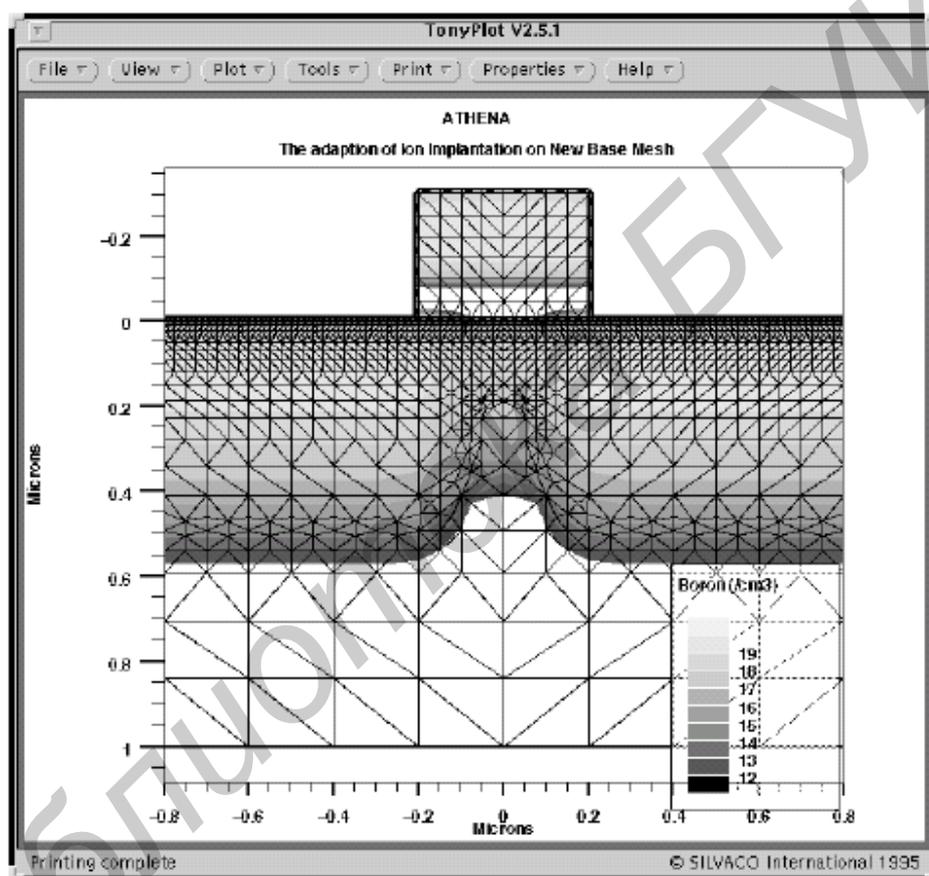


Рис. 1.41. Адаптация профиля ионно-имплантированных примесей на новой базовой сетке

1.6. Режимы работы в среде DECKBUILD

Модуль `ATHENA` работает под управлением оболочки `DECKBUILD`, которая функционирует как в интерактивном режиме, так и в режиме командной строки. В этом разделе представлена информация о запуске модуля `ATHENA` в среде `DECKBUILD`.

Интерактивный режим работы в среде DECKBUILD. Для запуска модуля ATHENA в среде DECKBUILD в интерактивном режиме наберите команду:

```
deckbuild -an
```

по подсказке в UNIX командной строке. Если необходимо запустить модуль ATHENA из существующего входного файла, наберите команду:

```
deckbuild -an <input filename>.
```

В командной строке показывается выполнение каждой команды модуля ATHENA, а также выдаются сообщения об ошибках, о параметрах команд, а также другая информация о выполнении задания в модуле ATHENA.

Если модуль ATHENA запускается в интерактивном режиме, то выходная информация передается в текстовое окно DECKBUILD и при необходимости может быть сохранена. При этом не нужно сохранять эту информацию в явном виде. Для сохранения файла с протоколом выполнения задания наберите в DECKBUILD:

```
deckbuild -an <input filename>  
-outfile <output filename>
```

В этом случае протокол выполнения задания направляется в выходной файл и в выходной раздел окна DECKBUILD.

Режим командной строки. Для использования DECKBUILD не в интерактивном режиме, а в режиме командной строки добавьте параметр `-run parameter` в команду запуска DECKBUILD. Для запуска в режиме командной строки требуется приготовить соответствующий командный файл. Рекомендуется сохранить протокол выполнения задания в отдельном файле, поскольку сообщения об ошибках в этом протоколе будут потеряны при завершении работы в режиме командной строки:

```
deckbuild -run -an <input file> -outfile<output file>
```

Для использования этой команды необходим запуск локальной X-Windows системы. Запуск осуществляется посредством нажатия на иконку DECKBUILD на терминале и автоматически прекращается при завершении моделирования в среде модуля ATHENA. Можно также запустить DECKBUILD, используя удаленный дисплей. Например:

```
deckbuild -run -an <input file>  
-outfile <output file> -display<hostname>:0.0
```

Безоконный режим работы в среде DECKBUILD. Для работы DECKBUILD вне X Windows оболочке требуется параметр `-ascii`. Например:

```
deckbuild -run -ascii -an <input filename>
-outfile <output filename>
```

По этой команде DECKBUILD запускает процесс моделирования в модуле ATHENA без отображения окна или иконки DECKBUILD. Эта процедура полезна при работе в удаленном режиме без X Windows эмулятора или для замены запусков модуля ATHENA в среде UNIX.

При работе в режиме командной строки используйте UNIX командный суффикс `&`, чтобы отделить работу от текущей командной оболочки. Для запуска удаленного моделирования в модуле ATHENA под DECKBUILD без отображения сеанса на дисплее и для последующего выхода из системы используйте команду ОС UNIX `nohup` перед следующей командной строкой в DECKBUILD:

```
nohup deckbuild -run -ascii -an <input filename>
-outfile <output filename> &
```

Запуск модуля ATHENA в среде DECKBUILD. Каждый запуск модуля ATHENA в среде DECKBUILD должен начинаться со следующей командной строки: `go athena`. Отдельный входной файл может содержать несколько запусков модуля ATHENA, каждый из которых отделяется строкой `go athena`. Входные файлы в среде DECKBUILD могут также содержать команды для запусков из других программ (например из ATLAS или DEVEDIT).

Запуск определенной версии модуля ATHENA. Директиву `go` можно заменить с целью обеспечения соответствующих параметров при запуске модуля ATHENA. Синтаксис для запуска версии 4.3.0.R должен быть следующий:

```
go athena simflags = "-V 4.3.0.R"
```

Запуск модуля ATHENA с использованием файла с пользовательскими параметрами. Модуль ATHENA позволяет использовать файлы с параметрами, заданными по умолчанию. Эти файлы имеют по умолчанию имя `athenamod`. Для запуска модуля ATHENA с файлом `athenamod.97` следует использовать следующий синтаксис:

```
go athena simflags="-modfile 97"
```

Запуск модуля ATHENA без использования среды DECKBUILD. Модуль ATHENA можно запускать вне оболочки DECKBUILD. Однако такой способ не рекомендуется. Если пользователь не желает использовать `Deckbuild Window`, он может использовать режим `No Windows Mode`. Вне оболочки DECKBUILD недоступно использование многих функций, например, замена

переменных, автоматический интерфейс с программами моделирования приборов и экстракция параметров. Для запуска модуля ATHENA в среде UNIX следует использовать следующую командную строку:

```
athena <input filename>
```

Для сохранения файла-протокола в другой файл нельзя использовать UNIX команду >. Вместо этого следует задать имя выходного файла:

```
athena <input filename> -logfile <output filename>
```

Стандартные примеры в модуле ATHENA не запускаются корректно вне оболочки DECKBUILD.

2. ДИРЕКТИВЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ В МОДУЛЕ ATHENA

Модуль ATHENA использует файл, в котором содержится описание технологического процесса и моделей, используемых при моделировании. Файл содержит директивы (операторы), каждая из которых является запросом или набором характеристик моделируемого технологического процесса.

2.1. Правила и примеры работы с директивами

Директивы модуля ATHENA задаются в следующем формате:

```
<COMMAND> <PARAMETERS>=<VALUE>
```

где <COMMAND> – имя команды, <PARAMETER> – имя параметра и <VALUE> – численное значение параметра. В ATHENA используются четыре типа чисел – вещественный, целочисленный, логический (булевый) и символьный. Пробел используется для разделения параметров от команд либо других параметров.

Любой параметр, не имеющий логического значения, записывается в виде PARAM=VAL, где PARAM – имя параметра, VAL – его значение. Логические параметры отделяются от остальных параметров пробелом.

Пример записи директивы: DEPOSIT NITRIDE THICK=0.35. Здесь параметр NITRIDE имеет логическое значение (TRUE), а параметр THICK – вещественное значение, в данном случае – 0.35.

Некоторые параметры имеют значения по умолчанию, которые используются в случае, если параметр не указан. В табл. 2.1 приведены различные типы параметров, используемых в ATHENA. Команды модуля ATHENA нечувствительны к регистру и могут вводиться как заглавными, так и прописными буквами.

Типы используемых параметров

Тип	Описание	Пример
Символьный	Строка, состоящая из букв, цифр или цифр и букв	OUTFILE=MOS.STR
Целый	Целое число	COLOR=3
Логический	Условия True или False	OXIDE или OXIDE=f
Вещественный	Любое вещественное число	CONC=1.5e14

Сокращения. Полное название директивы или имя параметра необходимо вводить не во всех случаях. Требуется лишь ввод нескольких букв, отличающих команду от других команд или параметров, например, DEPO можно использовать для определения команды DEPOSIT.

Продолжение строк. В некоторых случаях строка с директивой содержит более 256 символов. ATHENA позволяет пользователю задавать продолжения строк. Если строка с директивой заканчивается символом обратной косой черты (\), то следующая строка интерпретируется как продолжение предыдущей.

Комментарии. Строки с комментариями начинаются с символа (#) и не обрабатываются программой ATHENA.

Описание синтаксиса. Директива модуля ATHENA – это набор слов, который начинается с названия директивы, за которым следует описание параметров. Для каждой директивы синтаксис описывается в следующем виде:

```
ИМЯ ДИРЕКТИВЫ
ОПИСАНИЕ ПАРАМЕТРА 1
ОПИСАНИЕ ПАРАМЕТРА 2 . . .
```

Параметры описываются следующим образом:

```
PARAM=<n> . . . (параметр с вещественным значением)
PARAM=<c> . . . (строковый параметр)
PARAM . . . (логический параметр)
```

Логические параметры имеют значения TRUE (правда) или FALSE (ложь). По умолчанию им присваивается значение TRUE. Значение FALSE присваивается следующим образом: PARAM=FALSE или PARAM=F.

Взаимно исключаящий выбор между параметрами определяется круглыми скобками и вертикальной чертой между ними (PAR1 | PAR2), при этом может быть использован только один параметр. Выбор нескольких параметров приводит к выдаче предупреждения или сообщения об ошибке.

Параметры, необязательные для использования (опциональные) указываются в квадратных скобках []. Большинство параметров имеют значения по умолчанию и являются необязательными. Однако все параметры и их значения должны быть назначены в контексте моделируемого процесса.

Параметры с символьными (строковыми) значениями можно задавать как одно слово, например `INFILE=FILE1`, или как несколько слов, заключенных в кавычки – `TITLE="3D BORON PLOT"`. Вещественные значения задаются в виде выражений, оперирующих цифрами, числовыми константами, операторами +, -, *, /, а также функциями, описанными ниже:

- `abs5` – абсолютное значение;
- `active` – активная доза выбранной примеси;
- `erf` – функция ошибки;
- `erfc` – дополнительная функция ошибки;
- `exp` – экспонента;
- `gradx` – рассчитать градиент в направлении x ;
- `grady` – рассчитать градиент в направлении y ;
- `log` – логарифм;
- `log10` – десятичный логарифм;
- `mat1@mat2` – возврат значения y на поверхности раздела между `mat1` и `mat2` вдоль вертикального сечения в данной позиции;
- `mat1|mat2` – возврат значения x на поверхности раздела между `mat1` и `mat2` вдоль вертикального сечения в данной позиции;
- `scales` – масштабирование значения, заданного по максимальной величине;
- `sqrt` – корень квадратный;
- `xfn` – по заданным значениям y и z находится соответствующее значение x ;
- `yfn` – по заданным значениям x и z находится соответствующее значение y ;
- `zfn` – по заданным значениям x и y находится соответствующее значение z .

Если выражение содержит пробелы, его необходимо разместить в круглых скобках ().

Примеры:

`PAR1=<n>` – для `PAR1` необходимо использовать численное значение;

`PAR1=(4.0*EXP(-2.0/(8.62E-5*1173.0)))` – для `PAR1` требуется численное значение, полученное в результате вычисления выражения;

`[PAR2=<c>]` – для `PAR2` необходимо использовать строковую переменную.

Директивы DECKBUILD. Применяют следующие директивы (`SET`, `EXTRACT`, `GO`, `SYSTEM`, `SOURCE`, `TONYPLOT`), которые могут использоваться во входном файле программы `ATHENA`.

Синтаксический анализ командной строки. Модуль ATHENA поддерживает использование выражений в командной строке, например:

```
IMPLANT DOSE=4.0e13*1.2 ENERGY=30  
DIFFUSE TIME=10/60 TEMP=1000
```

Следует отметить, что использование круглых скобок для задания порядка операций в арифметических выражениях, как и в языках программирования, не всегда гарантирует правильный результат.

2.2. Список директив модуля ATHENA

В данном подразделе содержится полное описание в алфавитном порядке всех директив, используемых в программе ATHENA. Для каждой директивы описание дается в следующем порядке:

- название директивы;
- список параметров директивы и их типов;
- описание каждого параметра или группы аналогичных параметров;
- пример правильного использования директивы.

Директивы для задания начальных условий (инициализации) моделируемой структуры. Директивы этой группы используются для задания размеров, граничных условий, плотности сетки и типа материала начальной структуры.

- BOUNDARY – границы прямоугольной сетки, которые подвергаются воздействию газа;
- INITIALIZE – начальная сетка, концентрация примесей в подложке и тип материала;
- LINE – расположение осей x и y прямоугольной сетки;
- REGION – соответствующие области прямоугольной сетки и материала.

Директивы для преобразования моделируемой структуры. Эти директивы преобразуют геометрию или атрибуты моделируемой структуры или создают выходной файл:

- ADAPT.MESH – модифицирует сетку на основании профилей распределения примесей;
- ELECTRODE – задает области контактов;
- PROFILE – служит для считывания файл в формате ASCII с информацией о глубине и профилях распределения примесей;
- RELAX – модифицирует сетку в области, заданной пользователем;
- STRETCH – позволяет изменить геометрию структуры посредством ее растяжения вдоль горизонтальной или вертикальной осей;
- STRUCTURE – позволяет записать сетку и ее разрешение. Это основная выходная директива для вывода данных на график.

Директивы моделирования. Эти директивы описывают использование различных физических моделей для обработки структуры и проводят моделирование:

- BAKE – спекания фоторезиста после проведения операции его экспозиции или создания;
- DEPOSIT – осаждения слоя определенного материала;
- DEVELOP – создания слоя фоторезиста;
- DIFFUSE – процесса диффузии примесей в зависимости от времени и температуры подложки и окисления;
- EPITAXY – процесса высокотемпературной эпитаксии кремния;
- ETCH – процесса травления;
- IMAGE – рассчитывает одно- или двухмерное отображение структуры;
- IMPLANT – процесса ионной имплантации;
- POLISH – моделирует химическое и механическое полирование в модуле ELITE;
- STRESS – упругих термических напряжений;
- STRIP – удаляет фоторезист или другой, указанный пользователем материал.

Директивы модели. Эти директивы используются для изменения параметров и коэффициентов модели. Параметры приведены в описании директив. Перед запуском выполняются директивы модели, которые записаны в файле `athenamod` в директории `$SILVACO/lib/ATHENA`. Этот файл содержит параметры по умолчанию для большинства моделей, которые устанавливают:

- ADAPT.PAR – значения коэффициентов для модуля Adaptive Meshing (адаптивная сетка);
- BASE.PAR – граничные характеристики автоматически устанавливаемой сетки;
- GRID.MODEL – файл, содержащий команды адаптивной сетки;
- IMPURITY – коэффициенты кинетики примесей;
- INTERSTITIAL – коэффициенты кинетики междоузлий;
- MATERIAL – необходимые коэффициенты для различных материалов;
- METHOD – численные значения или модели для решения уравнений моделирования;
- MOMENTS – моменты для модели имплантации с использованием функции Пирсон;
- OXIDE – коэффициенты, используемые в модели окисления;
- RATE.DEPO – скорость осаждения для определенной установки осаждения;
- RATE.DEVELOP – скорость роста и другие параметры фоторезиста.
- RATE.ETCH – скорость травления для определенной установки травления;

- RATE.POLISH устанавливает параметры полировки для настройки установок операции полирования;
- TRAP устанавливает коэффициенты кинетики ловушек;
- VACANCY устанавливает коэффициенты кинетики вакансий.

Специальные директивы. Эти директивы осуществляют специальные операции при запуске моделирования в среде DECKBUILD:

- EXTRACT – извлекает (экстрагирует) параметры;
- GO – проводит согласование между программами моделирования;
- TONYPLOT – отображает графики с использованием программы TONYPLOT;
- SET – устанавливает значения переменных, определенных пользователем;
- AUTOELECTRODE – определяет электроды (контакты).

Директивы последующей обработки.

- PRINT.1D – используется для печати (вывода на экран) значений (данных) и информации о профилях легирующих примесей.
- SELECT – позволяет выбирать переменную координаты z для использования в команде PRINT.1D.

3. ОПИСАНИЕ ДИРЕКТИВ МОДУЛЯ ATHENA

ADAPT.MESH – осуществляет запуск алгоритма построения адаптивной сетки.

```
ADAPT.MESH [SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|TUNGSTEN|
TITANIUM|PLATINUM|WSIX|TISIX|PTSIX|POLYSILICON|GAAS|
GAS|ALGAAS|INGAAS|SIGEINP|MATERIAL=<c>] [/SILICON|
/GAAS|/OXIDE/OXYNITRIDE|/NITRIDE|/POLYSILICO|
/TUNGSTEN|/TITANIUM|/PLATINUM|/WSIX|/TISIX|/PTSIX|
/GAS|/ALGAAS|/INGAAS|/SIGE|INP|/MATERIAL=<c>]
[SMOOTH] [SMTH.COUNT=<n>] [ADAPT] / [ADAPT.COUNT=<n>]
[ADD.I.LINE=<n>]
```

SMOOTH – включение процедуры сглаживания сетки;

SMTH.COUNT – количество циклов сглаживания (по умолчанию – 1);

ADAPT – устанавливает необходимость построения адаптивной сетки, которое проводится для очистки или ослабления текущей сетки, используя данные о примесях/материале, заложенных в команде ADAPT.PAR (значение по умолчанию – False);

ADAPT.COUNT – количество циклов при построении отдельной адаптируемой сетки (значение по умолчанию – 1);

ADD.I.LINE – глубина дополнительной линии сетки в микронах, которая добавляется на границе раздела между двумя материалами булевыми зна-

чениями MATERIAL1 и /MATERIAL2. Эта линия добавляется в MATERIAL1 на расстоянии ADD.I.LINE от /MATERIAL2;

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, INGAAS, GAS, PTSIX, PHOTORESIST, BARRIER, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, GAAS, ALGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – используются при определении параметра MATERIAL1 для ADD.I.LINE;

/SILICON, /OXIDE, /OXYNITRIDE, /NITRIDE, /POLYSILICON, /GAS, /BARRIER, /PHOTORESIST, /ALUMINUM, /TUNGSTEN, /SIGE, /TITANIUM, /PLATINUM, /WSIX, /TISIX, /PTSIX, /GAAS, /ALGAAS, /INGAAS, /INP и /MATERIAL – используются при определении /MATERIAL2 для ADD.I.LINE.

ADAPT.PAR – служит для использования и установки параметров алгоритма адаптивного построения сетки.

```
ADAPT.PAR [SILICON] [OXIDE] [OXYNITRIDE] [NITRIDE]
[POLYSILICON] [PHOTORESIST] [BARRIER] [ALUMINUM]
[TUNGSTEN] [TITANIUM] [PLATINUM] [WSIX] [TISIX] [PTSIX]
[GAAS] [ALGAAS] [INGAAS] [SIG/E] [INP] [MATERIAL=<c>]
[I.ARSENIC] [I.PHOSPHOR] [I.BORON] [I.ANTIMONY] [I.BF2]
[I.INTERST] [I.VACANCY] [I.SILICON] [I.GERMANIUM]
[I.ZINC] [I.SELЕНИUM] [I.BERYLLIUM] I.MAGNESIUM]
[I.CHROMIUM] [I.ALUMINUM] [I.GOLD] [I.GALLIUM] [I.CARBON]
[I.DRYO2] [I.WETO2] [MAX.ERR=<n>] [MIN.ERR=<n>]
[CONC.MIN=<n/>] [AREA.MIN=<n>] [AREA.MAX=<n>]
[EDGE.MIN=<n>] /EDGE.MAX=<n/>] [MIN.ADD=<n>]
[DISABLE] [MAX.POINT10=<n>] MAX.LOOP=<n>] [IMPL.SMOOTH]
[DIFF.SMOOTH] [PAR.AUTO] /IMPL.SUB]
ADAPT.PAR [DOSE.ERR=<n>] [DOSE.MIN=<n>]
[DIFF.LENGTH=<n>] [/ANISOTROPIC]
```

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, PHOTORESIST, BARRIER, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, GAAS, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – задают области материалов для построения адаптивной сетки. Это может быть один или несколько материалов одновременно. Параметр MATERIAL=<c> определяется пользователем;

I.ARSENIC, I.PHOSPHOR, I.BORON, I.ANTIMONY, I.BF2, I.ZINC, I.INTERST, I.VACANCY, I.SILICON, I.GERMANIUM, I.SELЕНИUM, I.BERYLLIUM, I.MAGNESIUM, I.CHROMIUM, I.ALUMINUM, I.GOLD, I.GALLIUM, I.CARBON, I.DRYO2, I.WETO2 – типы примесей, используемые

при построении адаптивной сетки. Это может быть одна или несколько примесей одновременно;

DISABLE – определяет, что данная комбинация материал/примесь не будет использоваться для построения адаптивной сетки или сглаживания (значение по умолчанию – false);

MAX.ERR – максимальная допустимая ошибка (в относительных единицах) перед добавлением точки к сетке. Точка со значением, превышающим ошибку, добавляется к сетке;

MIN.ERR – минимальная допустимая ошибка (в относительных единицах), ниже значения которой точка удаляется из сетки. Значения MIN.ERR и MAX.ERR рассчитываются с использованием оценочной функции Банка-Вейзера (Bank-Weiser);

CONC.MIN – минимальное значение концентрации примесей, ниже которого процедура построения адаптивной сетки прекращается (см^{-3});

AREA.MIN – минимальная площадь треугольника, ниже которой добавление точек прекращается (см^2);

AREA.MAX – максимальная площадь треугольника, ниже которой удаление точек прекращается (см^2). Значение по умолчанию – $1.0 \cdot 10^{-11}$;

EDGE.MIN – минимальная длина границы, ниже которой добавление точек к сетке прекращается (см);

EDGE.MAX – максимальная длина границы, ниже которой удаление точек из сетки прекращается (см).

ANTIMONY – устанавливает коэффициенты диффузии и сегрегации сурьмы. Директива устарела – вместо нее используется директива IMPURITY с параметром I.ANTIMONY.

Примеры

Следующая директива описывает изменение коэффициента диффузии нейтрального дефекта для коэффициента диффузии сурьмы:

```
IMPURITY I.ANTIMONY SILICON DIX.0=0.214 DIX.E=3.65
```

Следующая директива служит для изменения параметров сегрегации на поверхности раздела кремний – оксид кремния. Концентрация сурьмы в кремнии в 30 раз превышает равновесную концентрацию сурьмы в оксиде:

```
IMPURITY I.ANTIMONY SILICON /OXIDE \  
SEG.0=30.0 /TRN.0=1.66E-7
```

Следующая директива определяет составную часть нейтральных дефектов при расчете коэффициента диффузии сурьмы в материале, определенном пользователем (DRY_OXIDE):

```
IMPURITY I.ANTIMONY MATERIAL=DRY_OXIDE \  
DIX.0=0.214 /DIX.E=3.65
```

См. также: IMPURITY, INTERSTITIAL, VACANCY.

ARSENIC – задает коэффициенты диффузии и сегрегации мышьяка. Директива устарела. Вместо нее должна использоваться директива IMPURITY с параметром I.ARSENIC.

Примеры

Следующая директива изменяет коэффициент диффузии нейтрального дефекта при расчете коэффициента диффузии мышьяка:

```
IMPURITY I.ARSENIC SILICON DIX.0=8.0 DIX.E=4.05
```

Следующая директива служит для изменения параметров сегрегации на поверхности раздела кремний – оксид кремния. Концентрация сурьмы в кремнии в 30 раз превышает равновесную концентрацию мышьяка в оксиде:

```
IMPURITY I.ARSENIC SILICON/OXIDE SEG.0=30.0 \  
TRN.0=1.66E-7
```

Следующая директива определяет составную часть нейтральных дефектов при расчете коэффициента диффузии мышьяка в материале, определенном пользователем (DRY_OXIDE):

```
IMPURITY I.ARSENIC MATERIAL=DRY_OXIDE \  
DIX.0=0.214 /DIX.E=3.65
```

См. также: IMPURITY, INTERSTITIAL, VACANCY.

BAKE – задает моделирование процесса спекания фоторезиста. Эта директива применяется как для предэкспозиционного, так и постэкспозиционного спекания.

```
BAKE [DIFF.LENGTH=<n>] [TEMPERATURE=<n>] [TIME=<n>]  
[REFLOW] [DUMP=<n>] [DUMP.PREFIX=<c>] [MOVIE=<c>]
```

DIFF.LENGTH – диффузионная длина для постэкспозиционного спекания. Значение по умолчанию – 0.05 мкм;

REFLOW – указывает поток материала, рассчитываемый в процессе спекания;

TEMPERATURE – температура спекания в градусах Цельсия;

TIME – длительность операции спекания в секундах;

DUMP, DUMP.PREFIX – выходной файл, в котором сохраняется структура на каждом DUMP-ном временном шаге. Файлы считываются по директиве STRUCTURE или могут отображаться с использованием программы TONYPLOT. Имена файлов формируются в виде DUMP.PREFIX<time>.str, где <time> – время моделирования.

Примеры

Следующая команда BAKE задает моделирование процесса спекания с длиной диффузии, определенной пользователем для постэкспозиционного спекания:

```
BAKE DIFF.LENGTH=0.05
```

BAKE может также использоваться с параметрами времени и температуры для постэкспозиционного спекания:

```
BAKE TIME=45 TEMP=120
```

Для обратного потока фоторезиста (спекание после выращивания) вышеуказанная команда вводится с параметром REFLOW:

```
BAKE REFLOW TIME=45 TEMP=120
```

См. также: DIFFUSE, RATE.DEVELOP.

BASE.MESH – выполняет построение базовой сетки для генерации начальной сетки.

```
BASE.MESH [SURF.LY=<N>] [SURF.DY=<N>] [ACTIVE.LY=<N>]  
[ACTIVE.DY=<N>] [EPI.LY=<N>] [EPI.DY=<N>]  
[SUB.LY=<N>] [SUB.DY=<N>] [BACK.LY=<N>] BACK.DY=<N>]
```

BASE.MESH применяется для материала, указанного в команде INITIALIZE.

SURF.LY – определяет расположение плоскости. Значение по умолчанию $y = 0.0$ мкм;

`SURF.DY` – локальный интервал сетки в направлении оси Y для области `SURF.LY`;

`ACTIVE.LY`, `EPI.LY`, `SUB.LY` – определяют расположение базовых линий в критических областях структуры прибора;

`ACTIVE.DY`, `EPI.DY`, `SUB.DY` – локальный интервал сетки (в мкм) для областей `ACTIVE.LY`, `EPI.LY`, `SUB.LY`;

`BACK.LY` – нижняя граница моделируемой структуры;

`BACK.DY` – локальный интервал сетки для области `BACK.LY`.

Примеры

В примере задается начальная базовая линия для материала подложки. Базовая линия располагается на уровнях $y = 1.0$, $y = 2.0$, $y = 10.0$ с локальными интервалами сетки соответственно 0.01 мкм, 0.5 мкм, 1.0 мкм и 10 мкм. Размеры прибора в направлении оси y определены как $y_{main} = 0$, $y_{max} = 100$. Тем не менее это только рекомендуемая глубина. Реальная глубина и длина прибора присваиваются по команде `INITIALIZE`. Эти значения могут быть случайными:

```
BASE.MESH SURF.LY=0.0 SURF.DY=0.01\  
ACTIVE.LY=1.0 ACTIVE.DY=0.5 EPI.LY=2.0 EPI.DY=1.0\  
SUB.LY=10.0 SUB.DY=10.0 BACK.LY=500 BACK.DY=100
```

См. также: `BASE.MESH`, `INITIALIZE`.

BASE.PAR – выполняет построение базовой сетки для генерации начальной сетки.

```
BASE.PAR /SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|TUNGSTEN|  
TITANIUM|/PLATINUM|WSIX|TISIX|PTSIX|POLYSILICON|GAAS|  
INGAAS|SIGE|/NP|MATERIAL=<C>] [GRAD.SPACE] [RATIO.BOX]
```

`SILICON`, `OXIDE`, `OXYNITRIDE`, `NITRIDE`, `TUNGSTEN`, `TITANIUM`, `PLATINUM`, `WSIX`, `TISIX`, `PTSIX`, `POLYSILICON`, `GAAS`, `INGAAS`, `SIGE`, `INP` и `MATERIAL` – материалы областей, к которым применяются параметры базовой сетки. Допускается определение одного или нескольких материалов одновременно;

`GRAD.SPACE` – градиент в смежном интервале сетки в направлении y для этого материала (значение по умолчанию – 1.5);

`RATIO.BOX` – приближенное отношение элементного треугольника после генерации базовой сетки для данного материала (по умолчанию – 2).

Пример. В примере генерируется базовая сетка для областей каждого материала:

```
BASE.PAR OXIDE GRAD.SPACE=5 RATIO.BOX=2
BASE.PAR SILICON GRAD.SPACE=1.5 RATIO.BOX=2
BASE.PAR POLYSILICON GRAD.SPACE=5 RATIO.BOX=2
BASE.PAR OXIDE GRAD.SPACE=5 RATIO.BOX=2
BASE.PAR SILICON GRAD.SPACE=1.5 RATIO.BOX=2
BASE.PAR POLYSILICON GRAD.SPACE=5 RATIO.BOX=2
```

См. также: BASE.MESH.

BORON – устанавливает коэффициенты диффузии и сегрегации бора. Директива устарела. Вместо нее должна использоваться директива IMPURITY с параметром I.BORON.

Примеры

Следующая директива изменяет коэффициент диффузии нейтрального дефекта при расчете диффузии бора:

```
IMPURITY I.BORON SILICON DIX.0=0.28 DIX.E=3.46
```

Следующая директива служит для изменения параметров сегрегации на поверхности раздела кремний – оксид кремния. Концентрация сурьмы в кремнии в 30 раз превышает равновесную концентрацию мышьяка в оксиде:

```
IMPURITY I.BORON SILICON /OXIDE SEG.0=1126.0 \
SEG.E=0.91 TRN.0=1.66E-7
```

Следующая директива задает составную часть нейтральных дефектов при расчете коэффициента диффузии мышьяка в материале, определенном пользователем (здесь DRY_OXIDE) :

```
IMPURITY I.BORON MATERIAL=DRY_OXIDE \
DIX.0=0.214 DIX.E=3.65
```

См. также: IMPURITY, INTERSTITIAL, VACANCY.

BOUNDARY – определяет граничные условия для исходного материала. Для основных граничных условий в модуле ATHENA имеются значения по умолчанию, которые исключают необходимость использования директивы BOUNDARY. Данная директива может использоваться для изменения условий на поверхности.

```
BOUNDARY REFLECTING | EXPOSED | BACKSIDE [XLO=<c>]
```

[YLO=<c>] [XHI=<c>] [YHI=<c>]

Допустимы три типа граничных условий:

- EXPOSED – соответствуют поверхности сверху пластины. Только открытые поверхности имеют осажденные слои или слой оксида сверху. Поверхности, созданные при травлении, также являются открытыми, кроме случаев использования директивы ETCH с параметром NO.EXPOSE;

- REFLECTING – параметр для описания поверхности границ прибора.

Все поверхности по умолчанию относятся к типу REFLECTING;

- BACKSIDE (обратная сторона) – поверхности, которые физически идентифицируются как отраженные со специальными значениями только в формате программы PISCES. Эти поверхности генерируются по директиве STRUCTURE;

XLO, YLO, XHI и YHI – задают границы определенного прямоугольника.

Пример. Следующие строки указывают, что верхняя часть сетки будет открытой поверхностью, а нижняя – обратной стороной:

```
BOUNDARY EXPOSED XLO=LEFT XHI=RIGHT YLO=SURF YHI=SURF
BOUNDARY BACKSIDE XLO=LEFT XHI=RIGHT \
YLO=BACK YHI=BACK
```

См. также: REGION, INITIALIZE.

DEPOSIT – осаждение слоя материала. При использовании модуля ELITE полагается, что все операции осаждения в модуле ATHENA на 100% конформны.

```
DEPOSIT [SILICON|GAAS|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|
POLYSILICON|TUNGSTEN|TITANIUM|PLATINUM|WSIX|TISIX|
PTSIX|PHOTORESIST|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|ALUMINUM|
BARRIER] [THICK=<n>] [NAME.RESIST=<c>] [MATERIAL=<c>]
[DIVISIONS=<n>] [SPACES=<n>] [DY=<n>] [YDY=<n>]
[MIN.DY=<n>] [C.ANTIMONY=<n>] [C.ARSENIC=<n>]
[C.BORON=<n>] [C.PHOSPHOR=<n>] [C.SILICON=<n>]
[C.GOLD=<n>] [C.GERMANIUM=<n>] [C.ZINC=<n>]
[C.SELЕНИUM=<n>] [C.CHROMIUM=<n>] [C.BERYLLIUM=<n>]
[C.MAGNESIUM=<n>] [C.ALUMINUM=<n>] [C.GALLIUM=<n>]
[C.CARBON=<n>] [MIN.SPACE=<n>] [MACHINE=<c>] [TIME=<n>]
HOURS|MINUTES|SECONDS [N.PARTICLE=<n>] [OUTFILE=<c>]
[TEMPERATURE] [C.FRAC=<n>] [C.FINAL=<n>] [SUBSTEPS=<n>]
```

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON,
ALUMINUM, BARRIER, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX,

TISIX, PTSIX, PHOTORESIST, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – тип осаждаемого материала. Параметр MATERIAL=<c> используется для материалов, заданных пользователем;

NAME.RESIST – тип фоторезиста;

THICKNESS – толщина осаждаемого слоя (в микронах).

Параметры управления сеткой:

DIVISIONS – количество вертикальных интервалов в слое. В некоторых случаях важно контролировать количество точек сетки в конформально осажденном слое, поскольку это оказывает влияние на точность последующих процессов. Параметр SPACES аналогичен параметру DIVISIONS. Значение по умолчанию для параметра DIVISIONS – 1. Обычно это значение необходимо увеличить для всех операций осаждения. Если значение параметра DIVISIONS слишком мало для поддержания целостности сетки при моделировании непланиарного осаждения, то модуль ATHENA попытается исправить ситуацию, автоматически увеличив значение этого параметра. ATHENA выдаст сообщение об окончательном значении параметра DIVISIONS, используемом в расчетах. Рекомендуется, чтобы пользователь редактировал входной файл для включения значения, рассчитанного программой ATHENA.

MIN.SPACE – устанавливает минимальный интервал между точками на поверхности каждого подслоя. Увеличение этого параметра уменьшает количество точек на изогнутых осажденных поверхностях;

DY – номинальный интервал в слое (в μm);

YDY – глубина, к которой применяется номинальный интервал. YDY рассчитывается относительно верхней точки нового осажденного слоя;

MIN.DY – минимальный интервал в микронах, который допускается между линиями сетки в направлении оси y в новом материале. Значение по умолчанию – 0.001 мкм (10 \AA).

Параметры, относящиеся к легированным осажденным слоям:

C.ANTIMONY, C.ARSENIC, C.BORON, C.PHOSPHOR, C.GOLD, C.SILICON, C.GERMANIUM, C.ZINC, C.SELENIUM, C.BERYLLIUM, C.MAGNESIUM, C.CHROMIUM, C.ALUMINUM, C.GALLIUM и C.CARBON – концентрация примесей в осажденном слое (в cm^{-3}). Возможно использование одного и более параметра этого типа в одной строке с директивой для определения материала с множеством примесей;

C.FRAC – дробные компоненты элементов для составных материалов;

C.FINAL – используется вместе с параметром C.FRAC для определения ступенчатого линейного изменения в дробных компонентах;

C.FRAC – дробный компонент первого элемента (например для AlGaAs, Al – первый компонент) в нижней части осаждения;

C.FINAL – дробный компонент первого элемента сверху осаждения. Дробный компонент второго компонента (т.е. для AlGaAs, Ga – второй компонент). Для этого примера C.FRAC и C.FINAL равны 1.

Параметры, осаждения с использованием программы ELITE:

TIME – время работы установки для проведения осаждения с использованием программы ELITE;

HOURS (часы), MINUTES (минуты) и SECONDS (секунды) устанавливают единицы измерения параметра TIME;

MACHINE – имя установки для выполнения моделирования осаждения с использованием программы ELITE;

TEMPERATURE – температура поверхностного осаждения;

N.PARTICLE – количество траекторий частиц при моделировании осаждения методом Монте-Карло;

OUTFILE – имя файла для записи траекторий частиц в методе Монте-Карло;

SUBSTEPS – количество временных шагов при моделировании осаждения с использованием программы ELITE.

Примеры

Конформное осаждение. Следующий пример описывает осаждение конформного слоя диоксида кремния толщиной 1000 Å на поверхность моделируемой структуры. Он содержит четыре вертикальные точки сетки.

```
DEPOSIT OXIDE THICK=0.1 DIVISIONS=4
```

Осаждение легированного материала, определенного пользователем. Осаждается слой материала, определенного пользователем (BPSG), легированного бором и фосфором:

```
DEPOSIT MATERIAL=BPSG THICKNESS=0.1 DIV=6 \  
C.BORON=1e20 C.PHOS=1e20
```

Управление сеткой. Следующая директива описывает осаждение конформного слоя нитрида кремния толщиной 0.3 мкм. Интервал сетки в нижней части слоя 0.01 мкм включает 10 вертикальных подразделений:

```
DEPOSIT NITRIDE THICK=0.3 DY=0.1 YDY=0.3 DIVIS=10
```

Моделирование осаждения в программе ELITE с использованием определенной установки для осаждения. Следующая директива определяет имя установки (MOCVD) для осаждения вольфрама толщиной 0.1 мкм на плоскую область с шагом покрытия 0.75:

```
RATE.DEPO MACHINE=MOCVD DEP.RATE=.1 u.m \  
STEP.COV=0.75 /TUNGSTEN  
DEPOSIT MACHINE=MOCVD TIME=1 MINUTE
```

См. также: RATE.DEPO.

DIFFUSE – директива моделирования перераспределения примесей при термообработке в течение некоторого времени при определенной температуре, рассчитывает окисление, образование силицидов и диффузию примесей. Любые примеси, которые содержатся в пластине, диффундируют. Если пластина открыта для воздействия газа, то возможно проведение операций загонки (pre-deposition) или окисления. Параметры окисления и диффузии содержатся в совместно используемых директивах METHOD или OXIDE. Значения коэффициентов по умолчанию содержатся в файле athenamod и доступны из подменю Models... меню Command оболочки DECKBUILD. Чтобы изменить коэффициенты модели, необходимо обратиться за информацией в соответствующий раздел описания директивы IMPURITY.

```
DIFFUSE TIME=<n>TEMPERATURE=<n>DRYO2 | WETO2NITROGEN |  
AMMONIA | ARGON | [F.O2=<n> | F.H2=<n> | F.H2O=<n> | F.N2=<n> |  
F.HCL=<n>] [C.ANTIMONY=<n>] [C.ARSENIC=<n>] [C.BORON=<n>  
[C.PHOSPHORUS=<n>] [C.SILICON=<n>] [C.GOLD=<n>]  
[C.GERMANIUM=<n>] [C.ZINC=<n>] [C.SELENIUM=<n>]  
[C.BERYLLIUM=<n>] [C.MAGNESIUM=<n>] [C.CHROMIUM=<n>]  
[C.ALUMINUM=<n>] [C.GALLIUM=<n>] [C.CARBON=<n>]  
[PRESSURE=<n>] [CONTINUE] [MOVIE=<c>] [DUMP.PREFIX=<c>]  
[T.FINAL=<n>] [T.RATE=<n>] [HCL.PC] [NO.DIFF] [DUMP]  
[DUMP.PREFIX] [REFLOW] [P.DIF.COEF=<c>]  
[AS.DIF.COEF=<c>] [SB.DIF.COEF=<c>] [B.DIF.COEF=<c>]  
[I.DIF.COEF=<c>] [V.DIF.COEF=<c>] [P.SEG.CALC=<c>]  
[AS.SEG.CALC=<c>] [SB.SEG.CALC=<c>] [B.SEG.CALC=<c>]  
[P.ACT.CALC=<c>] [AS.ACT.CALC=<c>] [SB.ACT.CALC=<c>]  
[B.ACT.CALC=<c>]
```

Параметры, задаваемые при моделировании термообработки:

TEMPERATURE – температура термообработки в градусах Цельсия (в диапазоне от 800 до 1200°C). За пределами этого диапазона коэффициенты диффузии могут иметь погрешности, что может привести к определенным сложностям в процессе моделирования;

TIME – время процесса диффузионной термообработки (в мин);

T.FINAL – конечная температура процесса ступенчатого изменения температуры;

T.RATE – скорость изменения температуры (в °C/мин) при ступенчатом изменении температуры.

Параметры для задания среды диффузионной термообработки:

DRYO2, WETO2, NITROGEN, AMMONIA и ARGON – логические значения, указывающие на наличие различных типов газа в печи при проведении диффузионной термообработки. Эти газы не зависят от параметра GAS.CONC.

Возможно определение только одного типа газа. В данной версии модуля ATHENA нет разницы между азотом, аргоном и аммиаком;

HCL.PC – процентное содержание HCl в потоке газа-окислителя;

F.O2, F.H2, F.H2O, F.N2 и F.HCL – относительное содержание в потоке компонентов кислорода, водорода, воды, азота и HCl. Если эти параметры используют параметры DRYO2, WETO2, NITROGEN, задание параметра HCL.PC не требуется;

PRESSURE – парциальное давление активных компонентов (в атм). По умолчанию этот параметр равен 1 для сухого и влажного окисления;

C.ANTIMONY, C.ARSENIC, C.BORON, C.PHOSPHOR, C.GOLD, C.SILICON, C.GERMANIUM, C.ZINC, C.SELENIUM, C.BERYLLIUM, C.MAGNESIUM, C.CHROMIUM, C.ALUMINUM, C.GALLIUM – описывают примеси в диффузионном газе (в единицах ат./см³). Возможно задание нескольких параметров для сложной среды с примесями.

Численный параметр:

CONTINUE – задает продолжение этапа диффузии на основании данных, полученных с использованием предыдущей директивы моделирования диффузии. Задание этого параметра предотвращает сброс временного шага. Этот параметр должен использоваться только в крайнем случае при одинаковых окружающих условиях для обеих директив.

Параметр, относящийся к выходным файлам:

DUMP и DUMP.PREFIX – указывают, что файл с моделируемой структурой должен сохраняться на каждом DUMP-ном временном шаге. Файлы могут считываться по директиве STRUCTURE или отображаться с использованием программы TONYPLOT. Имена файлов формируются в виде DUMP.PREFIX<time>.str, где <time> – время моделирования в минутах.

Параметры для определения диффузионной среды:

NO.DIFF – определяет, что диффундирующая примесь не учитывается в расчетах. Это может использоваться для исследования геометрии окисления или силицидообразования без затрат времени на расчеты диффузии примесей;

REFLOW – напряжение поверхности, основывается на обратном потоке материала.

Параметры, задающие имена файлов для C-интерпретатора:

P.DIF.COEF, AS.DIF.COEF, SB.DIF.COEF, B.DIF.COEF, I.DIF.COEF и V.DIF.COEF – используются для изменения коэффициентов диффузии для фосфора, мышьяка, сурьмы, бора, междоузлий и вакансий соответственно. Два последних параметра применяются только в более сложных моделях диффузии. Имя файла для замены модели задается в директиве DIFFUSE со строковым параметром P.DIF.COEF;

P.SEG.CALC, AS.SEG.CALC, SB.SEG.CALC и B.SEG.CALC – внесение изменений в расчет сегрегации для фосфора, сурьмы, мышьяка и бора

соответственно. Для расчета сегрегации имя файла для замены модели задается в директиве DIFFUSE со строковым параметром P.SEG.CALC;

P.ACT.CALC, AS.ACT.CALC, SB.ACT.CALC и B.ACT.CALC – изменения при расчете активации для фосфора, сурьмы, мышьяка и бора соответственно. Для расчета активации имя файла для замены модели задается в директиве DIFFUSE со строковым параметром P.ACT.CALC.

Примеры

Загонка примеси. Следующая строка задает проведение загонки бора при температуре 1000 °С в течение 30 мин:

```
DIFFUSE TIME=30 TEMP=1000 C.BORON=1.0E20
```

Окисление. Следующая строка задает проведение выращивания оксида в течение 30 мин в среде влажного кислорода:

```
DIFFUSE TIME=30 TEMP=1000 DRYO2
```

Задание параметров потока газа. Следующая команда задает проведение диффузии в среде, состоящей из различных газов: кислорода, водорода и HCl в количестве 10, 10 и 0.1 частей соответственно. Водород и кислород объединены в пропорции 2:1 для создания среды WETO2 (влажного кислорода). Любой избыток водорода считается инертным. Любой избыток кислорода определяется как среда DRYO2 (сухой кислород). При фиксированном давлении потока газа (или по умолчанию равном 1 атм), парциальное давление влажного кислорода (WETO2) уменьшается, если присутствует избыток водорода или кислорода:

```
DIFFUSE TIME=10 TEMP=1000 F.O2=10 F.H2=10 F.HCl=.1
```

Использование выходного файла. Следующая команда задает проведение диффузии в сухом кислороде в течение 30 мин при температуре 1000 °С. После каждого второго временного шага файл структуры сохраняется в файл с приставкой в его имени TEST. По директиве TONYPLOT результат отображается на каждом временном шаге в виде ролика, показывающего результат проведение диффузии. Директива SYSTEM используется для выполнения команд ОС UNIX перед проведением этапа диффузии для удаления всех файлов TEST*.str, оставшихся от предыдущих расчетов:

```
SYSTEM rm -rf TEST*.str  
DIFFUSE TIME=30 TEMP=1000 DRYO2 \  
DUMP=2 DUMP.PREFIX=TEST  
TONYPLOT -st TEST*.str
```

См. также: IMPURITY, INTERST, MATERIAL, METHOD, OXIDE, TRAP, VACANCY.

DISLOC.LOOP – устанавливает параметры масштабирования и положение дислокационных петель. Эта директива описывает расположение групп дислокаций по отношению к последующему имплантированному профилю примесей. Она работает только в случае задания директивы METHOD с параметром I.LOOP.SINK. Группы дислокаций используются как междоузлия, и скорость рекомбинации может быть определена с помощью директивы INTERSTITIAL DAMALPHA=<n>.

```
DISLOC.LOOP MIN.LOOP=<n> MAX.LOOP=<n>  
BORON|ARSENIC|ANTIMONY|INDIUM|PHOSPHORUS
```

MIN.LOOP и MAX.LOOP – определяют верхнюю и нижнюю границы концентрации легирующих примесей, в которых располагаются группы дислокаций;

BORON, INDIUM, ARSENIC, ANTIMONY, PHOSPHORUS – задают тип легирующей примеси, к которой относятся группы дислокаций.

Пример генерации группы дислокаций. Следующий пример включает модель группы дислокаций и располагает их в местах, где концентрация индия между $1 \cdot 10^{16}$ и $1 \cdot 10^{15}$ см⁻³:

```
METHOD I.LOOP.SINK  
DISLOC.LOOP MIN.LOOP=1e15 MAX.LOOP=1e16 INDIUM  
IMPLANT INDIUM DOSE=1e15 ENERGY=45
```

См. также: METHOD, CLUSTER, INTERSTITIAL, VACANCY, DIFFUSE, IMPLANT.

ELECTRODE – определяет электроды (контакты) и обозначения для программы ATLAS или других программ моделирования приборов.

```
ELECTRODE NAME=<c> [X=<n> Y=<n>|BACKSIDE|LEFT|RIGHT]
```

NAME – имя электрода, которое будет отображаться в модуле TONYPLOT или использоваться в программе ATLAS. Синтаксис программы ATLAS позволяет использовать общие электрические обозначения для большинства используемых областей прибора. Это такие обозначения, как анод, катод, эмиттер, база, коллектор, сток, исток, затвор, корпус (bulk) и подложка.

RIGHT и LEFT – определяют соответственно верхнюю левую и правую точки области структуры, которая будет обозначена как электрод;

RIGHT – определяет правую верхнюю область структуры, заданной в качестве электрода;

BACKSIDE – указывает, что плоский (с нулевой толщиной) электрод будет расположен в нижней части моделируемой структуры. Это одно исключение для всех областей, которые заданы в качестве электрода. Если металлическая область находится в нижней части структуры, то этот параметр не будет использоваться, а вместо него будут использоваться координаты XY;

X – горизонтальное расположение координаты X области, которая определена в качестве электрода;

Y – горизонтальное расположение координаты Y области, которая определена в качестве электрода. Если значение Y не задано, предполагается верхняя часть структуры.

Примеры

Задание металлической области электрода. Следующее выражение задает имя SOURCE области металла или поликремния, расположенной в X = 1 мкм верхней части структуры:

```
ELECTRODE X=1.0 NAME=SOURCE
```

Задание подложки. Следующий пример задает имя WELL плоскому электроду вдоль нижнего края структуры. Здесь нет необходимости в использовании металла.

```
ELECTRODE BACKSIDE NAME=WELL
```

См. также: STRUCTURE.

EPITAXY – задает технологический процесс эпитаксиального осаждения. Директива предназначена для использования в структурах “кремний на кремний” и не может применяться в случаях, когда присутствуют другие материалы. Модель, по существу, одномерна и не применима в случае селективного (выборочного) эпитаксиального осаждения.

```
EPITAXY TEMP=<n> [PRESS=<n>] [T.FINAL=<n>]  
[PRESSURE=<n>] [C.ANTIMONY] [C.ARSENIC] [C.BORON]  
[C.PHOSPHOR] [C.SILICON=<n>] [C.GOLD=<n>]  
[C.GERMANIUM=<n>] [C.ZINC=<n>] [C.SELЕНИUM=<n>]  
[C.CARBON=<n>] [C.GALLIUM=<n>] [C.BERYLLIUM=<n>]  
[C.MAGNESIUM=<n>] [C.CHROMIUM=<n>] [C.ALUMINUM=<n>]  
[TIME=<n>] [THICKNESS=<n>] [RATE=<n>] [DIVISIONS=<n>]  
[DY=<n>] [MIN.DY=<n>] [YDY=<n>]
```

TEMP – температура эпитаксиального осаждения;

TIME, THICKNESS, и RATE – параметры процесса эпитаксии. TIME задает время в минутах, THICKNESS – толщину в микронах, RATE – скорость роста (мкм/мин). Чтобы взаимно не исключать друг друга, эти две команды используются один раз для определения толщины и цикла “температура – время”;

PRESS – давление в процессе эпитаксиального осаждения, значение по умолчанию – 1 атм;

T.FINAL – окончательная температура для убывающего (ramped) процесса эпитаксии;

Параметры, относящиеся к легированию:

C.ANTIMONY, C.ARSENIC, C.BORON, C.PHOSPHOR, C.GOLD, C.SILICON, C.GERMANIUM, C.ZINC, C.SELENIUM, C.BERYLLIUM, C.MAGNESIUM, C.CHROMIUM, C.ALUMINUM, C.CARBON и C.GALLIUM – концентрация отдельной примеси в кубическом сантиметре эпитаксиального слоя. Возможно использование нескольких директив IMPURITY.

Параметры сетки:

DIVISIONS – количество вертикальных точек сетки в результирующем эпитаксиальном слое. Это опциональный (необязательный) параметр, поскольку он будет сгенерирован автоматически со значением по умолчанию и отнесен к сетке поверхности моделируемой структуры перед эпитаксией.

DY – номинальное значение интервала сетки в микронах для эпитаксиального слоя;

YDY – глубина, на которой номинальное значение интервала будет применяться; рассчитывается относительно верхней точки нового эпитаксиального слоя;

MIN.DY – минимальное допустимое значение интервала между линиями сетки в направлении оси Y в новом материале. Значение по умолчанию – 0.001 мкм (10 Å).

Примеры

Скорость осаждения. Следующая директива моделирует рост кремния, легированного бором на поверхность кремниевой пластины со скоростью 1 мкм/мин. Толщина слоя – время осаждения, умноженное на скорость – 10 мкм:

```
EPITAXY TIME=10 TEMP=1150 C.BORON=5E14 RATE=1
```

Время и температура эпитаксии. В следующей директиве проводится эпитаксиальное осаждение 6 мкм кремния в течение 10 мин. Фосфор диффундирует в течение процедуры осаждения. Количество вертикальных точек сетки в готовом эпитаксиальном слое задается параметром DIVISIONS. Синтаксис аналогичен директиве DEPOSIT:

```
EPITAXY THICK=6 TIME=10 TEMP=1180 \
```

C.PHOS=1.5E14 DIVISIONS=20

Использование неравномерной сетки. Следующая директива осуществляет эпитаксию с неравномерным интервалом вертикальной сетки. Интервал вертикальной сетки равен 0.5 мкм на глубину 5 мкм ниже осажденной поверхности. Эпитаксиальный слой разделен на 40 интервалов:

```
EPITAXY THICK=10 TIME=30 TEMP=1100 \  
DY=.5 YDY=5.0 DIVISIONS=40
```

ETCH – моделирует процесс травления. ATHENA позволяет использовать два различных метода травления: геометрическое травление доступно в программе ATHENA и физическое травление, которое реализовано только в модуле ELITE.

```
ETCH SILICON|GAAS|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|  
POLYSILICON|TUNGSTEN|TITANIUM|PLATINUM|WSIX|TISIX|  
PTSIX|PHOTORESIST|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|ALUMIN|  
BARRIER|INDIUM|MATERIAL=<c> [LEFT|RIGHT|ABOVE|BELOW|  
START|CONTINUE|DONE|DRY|ALL] [X=<n>] [Y=<n>] [THICK=<n>]  
[P1.X=<n>] [P1.Y=<n>] [P2.X=<n>] [P2.Y=<n>] [INFILE=<c>]  
[TOP.LAYER] [NOEXPOSE] [MACHINE=<c>] [TIME=<n>]  
[HOURS|MINUTES|SECONDS] [DT.FACT=<n>] [DT.MAX=<n>]  
[DX.MULT=<n>] [MC.REDEPO] [MC.SMOOTH = <n>]  
[MC.DT.FACT = <n>] {MC.MODFNAME = <c>}
```

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, BARRIER, GAAS, PHOTORESIST, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – служат для задания стравливаемого материала. Если материал задан, то стравливается только слой этого материала. Если материал не задан, то стравливаются все материалы в области травления. Параметр MATERIAL=<c> позволяет пользователю определить материал.

Параметры, используемые для геометрического травления:

ALL – определяет, что все из указанных материалов будут стравлены;

DRY – указывает, что результирующая поверхность копирует открытую поверхность и опускается на глубину, заданную параметром THICKNESS (в мкм), ниже открытой поверхности;

THICKNESS – глубина, на которую осуществляется травление для сухого типа травления;

INFILE – профиль травления, который будет взят из файла, заданного параметром INFILE. Указанный файл должен иметь следующий формат:

X1, Y1
X2, Y2
X3, Y3
...
Xn, Yn

Таким образом, стравливается область, ограниченная координатами, полученными из файла. Любое количество координат может быть задано в файле. Эта команда часто используется для введения данных экспериментальных профилей или полученных в других программах. Заключительная линия автоматически отображается (проводится) из последней точки в начальную;

LEFT, RIGHT, ABOVE и BELOW – используются для установки режима быстрого травления с трапециевидными секциями. Область травления определяется сторонами (левой, правой, верхней и нижней линиями), определяемыми следующими координатами P1.X, P1.Y и P2.X, P2.Y;

P1.X, P1.Y, P2.X и P2.Y – координаты линии левой, правой, верхней и нижней области травления соответственно. Параметры P1 необходимы всегда, если используются параметры LEFT, RIGHT, ABOVE и BELOW. Параметры P2 необходимы в случае, если углы трапеции неперпендикулярные;

START, CONTINUE и DONE – определяют произвольную сложную область травления. Несколько линий могут быть заданы для описания области;

X и Y – точка в режиме START/CONTINUE/DONE для задания области травления;

TOP.LAYER – указывает, что только верхний слой стравливаемого материала должен быть удален;

NOEXPOSE – указывает, что новая поверхность не открыта для последующего окисления или осаждения после операции геометрического травления. Этот параметр используется для удаления части структуры с нижней области моделирования.

Параметры, используемые только при физическом травлении в модуле ELITE:

MACHINE – название установки для травления.

TIME – время травления.

HOURS, MINUTES и SECONDS – единицы измерения в параметре TIME.

Параметры, используемые только с моделями RIE, WET.ETCH и PLASMA:

DT.FACT – используется в модуле ELITE при расчете травления. По умолчанию движение узла ограничено меньшим или равным четверти длины среднего сегмента – это компромиссное решение между скоростью моделирования и опасностью формирования петли. Оптимизированное значение фактора DT.FACT не должно превышать 0.5, но может быть уменьшено для повышения точности;

DT.MAX – используется для ограничения временного шага. По умолчанию верхняя граница для максимального временного шага составляет одну десятую от общего времени травления – компромиссное решение между точностью расчетов и его продолжительностью. Однако иногда требуется адаптировать это значение для решения проблем моделирования. Увеличение временного шага приводит к снижению времени моделирования, при уменьшении шага – повышается точность, но время расчетов увеличивается;

DX.MULT – коэффициент точности для травления в модуле ELITE. Размер дискретизации, используемый для расчета травления, определяется коэффициентом DX.MULT. Для повышения точности, жертвуя при этом временем травления, важно уменьшить значение DX.MULT;

Параметры, используемые только с моделью MC.PLASMA:

MC.REDEPO – определяет перераспределение (redeposition) полимеров, должно быть промоделировано. Значение по умолчанию – TRUE;

MC.SMOOTH – уровень сглаживания поверхности;

MC.DT.FACT – служит для контроля временного шага в Монте-Карло травлении и перераспределении (redeposition) примесей;

MC.MODFILE – имя файла для C-интерпретатора, используемого для моделей травления и перераспределения (redeposition) в цикле Монте-Карло.

Примеры

Простое геометрическое травление. Следующая директива стравливает весь нитрид, находящийся слева от вертикальной линии на расстоянии $x = 0.5$ мкм:

```
ETCH NITRIDE LEFT P1.X=0.5
```

Геометрическое травление произвольной формы. Следующий набор команд предназначен для травления оксида в квадрате, определенном координатами (0,0), (1,0), (1,1) и (0,1):

```
ETCH OXIDE START X=0.0 Y=0.0
ETCH CONTINUE X=1.0 Y=0.0
ETCH CONTINUE X=1.0 Y=1.0
ETCH DONE X=0.0 Y=1.0
```

Следует быть осторожным при таком способе задания формы многоугольника. Завершающая линия из двух последних добавленных точек проводится автоматически.

Анизотропное геометрическое травление. Следующая директива вскрывает поверхность и стравливает ее до глубины 0.1 мкм; эта линия становится новой поверхностью:

```
ETCH DRY THICK=0.1
```

Физическое травление. Следующая директива определяет установку для травления PLASMA1, которая осуществляет реактивное ионное травление кремния. Длительность травления – 10 мин:

```
RATE.ETCH MACHINE=PLASMA1 SILICON \  
U.M RIE ISOTROPIC=0.1 DIRECT=0.9 \  
ETCH MACHINE=PLASMA1 TIME=10 MINUTES
```

Программа может быть чувствительна к расположению сетки.
См. также: RATE.ETCH.

GO – запускает процесс моделирования. Каждый входной файл программы ATHENA должен содержать директиву GO. Директива GO исполняется программой DECKBUILD и подробно описана в (VWF Interactive Tools Manual Volume I).

Примеры

Приведем две возможности использования директивы GO. Данная команда запускает программу ATHENA определенной версии.

```
go ATHENA simflags=--V 4.3.0.R-
```

Следующая директива запускает программу ATHENA с файлом модели <install>/lib/ATHENA/<version>/common/Athenamod.97a:

```
go ATHENA simflags=--modfile 97a-
```

Если DECKBUILD встречается директива GO, где отсутствует версия или файл модели изменен, программа ATHENA не будет завершена или перезапущена.

HELP – предназначена для запуска утилиты с текущей (online) информацией о синтаксисе.

```
HELP <command>
```

HELP приводит список параметров для запрашиваемой директивы и представляет их краткое описание. Если директива не указана, выводится список всех директив и дается информация об их использовании.

Ниже выводится список всех возможных директив (команд) программы ATHENA: HELP.

Следующий пример выводит описание директивы DIFFUSE и ее параметров: HELP DIFFUSE.

IMPLANT – моделирование ионной имплантации с использованием различных аналитических моделей и моделей Монте-Карло.

```
IMPLANT ANTIMONY | ARSENIC | BORON | BF2 | PHOSPHORUS |  
SILICON | ZINC | SELENIUM | MAGNESIUM | BERYLLIUM | CHROMIUM |  
ALUMINUM | GALLIUM | CARBON | GERMANIUM | INDIUM [GAUSS |  
PEARSON | MONTE | FULL.LAT | BCA] [ANY.PEARSON] [CRYSTAL |  
AMORPHOUS] DOSE=<n>ENERGY=<n> [TILT=<n>] [ROTATION=<n>]  
[FULLROTATIO] [X.DISCR=<n>] [PRINT.MOM] [DAMAGE]  
[PLUS.ONE | FREE.DAM] [DAM.FACTOR=<h> | FREE.FACTOR=<n>]  
[MAX.DAMAGE=<n>] [LAT.RATIO1] [LAT.RATIO2] [S.OXIDE=<n>]  
[MATCH.DOSE | RP.SCALE | MAX.SCALE] [SCALE.MOM] [N.ION=<n>]  
[MCSEED=<n>] [TEMPERAT=<n>] [THRESHOLD=<n>] [SMOOTH=<n>]  
[PERIODIC | REFLECT | VACUUM] [REC.FRAC=<n>]  
[BEAMWIDTH=<n>] [HOBLER] [PMAX.HOBLER=<n>]  
[XNL.HOBLER=<n>] [F.HOBLER=<n>] [FLUORINE]  
[TRAJECTOR=<n>] [TRAJ.FILE=<c>] [IMPCT.POINT=<n>]
```

Параметры для выбора модели:

GAUSS, PEARSON, FULL.LAT, MONTE и BCA – определяют используемую модель имплантации. GAUSS служит для выбора распределения Гаусса, PEARSON служит для выбора распределения Пирсон-4 или, где это возможно, двойное распределение Пирсона. FULL.LAT – расширенное распределение Пирсона, учитывающее полные боковые моменты. MONTE служит для выбора модуля имплантации Монте-Карло. BCA активирует модель Монте-Карло в приближении бинарных столкновений (Binary Collision Approximation). Значение по умолчанию – PEARSON;

CRYSTAL и AMORPHOUS – параметры, определяющие учет пространственной решетки кремния при моделировании имплантации. Эти параметры взаимно исключают; параметр CRYSTAL имеет значение по умолчанию – true. Для имплантации через толстые экранирующие материалы необходимо указывать параметр AMORPHOUS для исключения получения некорректного профиля. Для аналитических моделей имплантации эти параметры выбираются из таблиц для различных диапазонов энергии имплантации в кремний. Параметр CRYSTAL использует таблицу SVDP, которая выбирается по умолчанию. Для моделей MONTE или BCA эти параметры контролируют учет структуры кристаллической решетки.

Параметры, используемые во всех моделях имплантации:

ALUMINUM, ANTIMONY, ARSENIC, BERYLLIUM, BF2, BORON, CHROMIUM, GALLIUM, CARBON, GERMANIUM, INDIUM, MAGNESIUM,

PHOSPHORUS, SELENIUM, SILICON и ZINC – задают тип имплантируемой примеси;

DOSE – доза имплантируемой примеси. Доза рассчитывается в плоскости, нормальной к направлению имплантации, единицы измерения – см^{-2} ;

FULL.DOSE – определяет, что доза имплантации корректируется с учетом угла наклона имплантационного пучка. Этот способ задания дозы часто используется при имплантации с большим углом наклона. Скорректированная доза (Adjusted Dose) = $\text{DOSE} / \cos(\text{TILT})$;

ENERGY – энергия имплантации в (кэВ);

TILT – угол наклона (в градусах) пучка имплантируемых ионов относительно вертикали к поверхности подложки. Значение по умолчанию – 7° ;

ROTATION – угол поворота (в градусах) пучка имплантируемых ионов относительно плоскости моделирования. Значение по умолчанию – 30° ;

FULLROTATIO – указывает, что имплантация будет проводиться при всех углах поворота;

PLUS.ONE (аналоги UNIT.DAMAGE или FREE.DAM) и DAM.FACTOR, (аналог FREE.FACTOR) – устанавливают необходимость расчета повреждений, введенных имплантируемой примесью. UNIT.DAMAGE определяет, что профиль междоузлий должен быть масштабированной версией профиля имплантированной примеси. DAM.FACTOR определяет коэффициент масштабирования для использования в модели UNIT.DAMAGE. Профили имплантационных повреждений пользователь может также задать с использованием функции С-интерпретатора (см. директиву MOMENTS);

PRINT.MOM – выводит выходные моменты для всех комбинаций ион/материал, используемых в аналитической модели. В случае моделирования методом Монте-Карло этот параметр выводит выходные моменты, рассчитанные из координат ионов в стандартном файле структуры, и может быть извлечен директивой EXTRACT;

X.DISCR – толщина слоя в направлении пучка ионов, которая используется для моделирования профиля распределения имплантированных ионов. Используемое значение масштабируется относительно бокового страгглинга имплантируемой примеси. По умолчанию толщина слоя находится в диапазоне 0.1-0.2 от среднего бокового страгглинга. Этот параметр позволяет пользователю не учитывать внутренний выбор дискретизации в направлении фронта имплантации. Если значение X.DISCR уменьшается, точность моделирования увеличивается, однако увеличивается длительность моделирования;

LAT.RATIO1 – коэффициент, на который умножаются все стандартные боковые страгглинги для первого распределения Пирсона. Значение по умолчанию – 1.0;

LAT.RATIO2 – коэффициент, на который умножаются все стандартные боковые страгглинги для второго распределения Пирсона. Значение по умолчанию – 0.2.

Параметры LAT.RATIO* позволяют осуществлять простое масштабирование стандартного бокового отклонения. Директива MOMENTS может использоваться для более полного задания и описания стандартного бокового отклонения.

S.OXIDE – толщина оксидной маски в модели имплантации SVDP. Значение по умолчанию – 0.001 мкм. Значение толщины оксидной маски не рассчитывается из структуры, а задается пользователем;

MATCH.DOSE, RP.SCALE (аналог RP.EFF) и MAX.SCALE – метод расчета имплантации в структуры, состоящие из нескольких материалов. Параметр по умолчанию – MATCH.DOSE;

SCALE.MOM – алгоритм масштабирования моментов, который будет использоваться в модели имплантации в многокомпонентную структуру;

ANY.PEARSON – снимает ограничения на комбинацию допустимых асимметрий и эксцессов. По умолчанию – true, т.к. необходим для модели SVDP. В модуле ATHENA версии ниже 4.0 значение данного параметра по умолчанию – false.

Параметры моделей имплантации Монте-Карло и ВСА:

MCSEED – задает начальные условия для генератора случайных чисел при расчете с использованием модели Монте-Карло;

N.ION – количество траекторий ионов для моделирования по методу Монте-Карло;

TEMPERAT – температура подложки в процессе имплантации;

BEAMWIDTH – ширина пучка в градусах. Если задано значение угла BEAMWIDTH, то величина параметра TILT изменяется в пределах $TILT \pm BEAMWIDTH/2.0$. Каждый ион должен иметь определенный угол направления движения в этом диапазоне, полученный с помощью генератора случайных чисел. Распределение ионов равномерно в области, заданной угловым распределением. Корректное описание параметра BEAMWIDTH необходимо для точного задания имплантации с нулевым углом;

IMPCT.POINT – определяет (только в модели Монте-Карло), что пучок ионов входит в поверхность в точке с боковой координатой $x = (left + IMPCT.POINT * L)$, где left – x-координата левой границы структуры и L – длина структуры. Этот параметр может использоваться для расчета двумерного распределения точечного источника и пространственных моментов с использованием метода Монте-Карло.

Параметры, используемые только с моделью имплантации методом Монте-Карло:

DAMAGE – определяет, что будут рассчитываться радиационные повреждения (или точечные дефекты) при моделировании имплантации методом Монте-Карло;

MAX.DAMAGE – максимальный уровень повреждений, ниже которого происходит аморфизация. Рекомендуется задавать данный параметр с исполь-

зованием параметра `MAX.DAMAGE` директивы `MATERIAL`. Это позволяет задать различный уровень повреждений для каждого материала;

`THRESHOLD` – критический порог повреждений при моделировании имплантации Монте-Карло. Рекомендуется, чтобы этот параметр задавался с использованием параметра `DAM.THRESH` директивы `MATERIAL`. Это позволяет задать различные значения порога повреждений для каждого материала;

`REC.FRAC` – рассчитывает вторичное рассеяние в модели имплантации методом Монте-Карло. Модель вызывается заданием `REC.FRAC=<number>` совместно с параметром `DAMAGE`. Модель рассчитывает траектории вторичных ионов, генерируемых столкновением между первичными ионами и атомами кристаллической решетки. `REC.FRAC` контролирует долю вторичных ионов, генерируемых первичными ионами и используемых при моделировании. Эта доля задается случайным образом. Для каждого вторичного иона, генерируемого первичным ионом, моделируется каскадный процесс генерации вторичных ионов. Если количество каскадов превышает 100, будет выводиться предупреждение до тех пор, пока осуществляется моделирование. В текущей реализации вторичные ионы могут генерироваться в таких материалах, как кремний, GaAs и InP. Моделирование этих процессов в SiGe аналогично для кремния. Моделирование этих процессов AlGaAs и InGaAs аналогично для GaAs. В процессе взаимодействий имплантируемых ионов с атомами кристаллической решетки мишени генерируются вакансии. При остановке вторичных ионов генерируются междоузлия;

`NOBLER`, `PMAX.NOBLER`, `XNL.NOBLER` и `F.NOBLER` – параметры модели электронного торможения. Эта модель инициализируется определением параметра `NOBLER` в директиве `IMPLANT`. Он может также использоваться для кремния с другими примесями определением параметра `NOBLER` в директиве `IMPLANT`. `PMAX.NOBLER` имеет значение по умолчанию, равное 2.35, `XNL.NOBLER` – 0.4, `F.NOBLER` – 0.8;

`PERIODIC`, `REFLECT` и `VACUUM` – граничные условия для имплантации методом Монте-Карло. `PERIODIC` указывает, что ион, который выходит через боковую границу области моделирования, возвращается в соответствующую точку противоположной боковой границы. Это условие используется по умолчанию в одномерных и цилиндрических режимах. `REFLECT` указывает, что ион вместо того, чтобы покинуть моделируемую область через боковую границу, просто возвращается обратно в моделируемую область с противоположной стороны. Параметр `VACUUM` указывает, что ион пересекает боковую границу и не возвращается назад;

`SMOOTH` – тип специального гауссовского сглаживания, который используется при обработке результатов расчетов методом Монте-Карло;

`FLUORINE` – определяет, какая концентрация фтора будет рассчитана методом Монте-Карло при имплантации VF_2 ;

TRAJECTOR=<n> – траектория движения каждого n -ого иона через моделируемую структуру для сохранения в файл TRAJ.FILE. Если задан параметр DAMAGE, траектории всех выбитых из подложки атомов также сохраняются;

TRAJ.FILE – специальный файл, в который сохраняются траектории атомов для последующего отображения в модуле TONYPLOT с использованием функции LINE. Значение по умолчанию – traj.str.

Примеры

Аналитическая модель имплантации. Следующий пример демонстрирует моделирование имплантации фосфора с энергией 100 кэВ и дозой $1.0 \cdot 10^{14}$ см⁻² и с углом наклона 15° к нормали поверхности. Для расчета профиля примеси используется модель распределения Пирсона:

```
IMPLANT PHOSPH DOSE=1E14 ENERGY=100 TILT=15
```

Имплантация бора по модели SVDP. Этот пример демонстрирует синтаксис для нулевого угла наклона имплантации бора с энергией 50 кэВ через маску оксида толщиной 5 нм. Оксид задан параметром S.OXIDE:

```
IMPLANT BORON DOSE=1E13 ENERGY=50 TILT=0 S.OXIDE=0.005
```

Имплантация по модели Монте-Карло. Следующий пример описывает имплантацию фосфора с энергией 100 кэВ и дозой $1.0 \cdot 10^{14}$ см⁻². В методе Монте-Карло игнорируется структура кристаллической решетки. Каждая 10-я траектория сохраняется в файл PHTRAJ и может затем быть использована для визуализации в модуле TONYPLOT:

```
IMPLANT PHOSPH DOSE=1E14 ENERGY=100 \  
MONTE AMORPH TRAJECT=10 TRAJ.FILE=PHTRAJ
```

Моделирование имплантации методом Монте-Карло.

Этот пример демонстрирует имплантацию бора с энергией 300 кэВ с нулевым углом наклона и поворотом. Точное моделирование для этой примеси возможно только с использованием модели BCA. Поскольку каналирование иона существенно зависит от угла наклона пучка, важно задать ширину пучка во избежание избыточной оценки области имплантации:

```
IMPLANT BORON DOSE=1E13 ENERGY=300 \  
BCA TILT=0 ROTATION=0 BEAMWIDTH=1
```

Моделирование радиационных повреждений при имплантации. По следующей директиве проводится моделирование имплантации фосфора и вызывается модель радиационных повреждений. Модель UNIT.DAMAGE рассчиты-

вает профиль междоузлий, масштабированный относительно профиля распределения имплантируемых примесей. Параметр DAM.FACTOR используется для указания того, что концентрация междоузлий будет в десять раз меньше, чем концентрация примесей по всей глубине профиля имплантации:

```
IMPLANT PHOSPHORUS DOSE=1E14 ENERGY=50 \  
UNIT.DAMAGE DAM.FACTOR=0.1
```

IMPURITY – устанавливает коэффициенты кинетики примесей (диффузии, транспорта, сегрегации и других свойств). Данная директива заменяет устаревшие директивы, используемые для описания примеси отдельных типов.

```
IMPURITY I.ALUMINUM|I.ANTIMONY|I.ARSENIC|I.BERYLLIUM|  
I.BORON|I.CARBON|I.CHROMIUM|I.GALLIUM|I.GERMANIUM|  
I.INDIUM|I.PHOSPHOR|I.MAGNESIUM|I.SILICON|I.SELЕНИUM|  
I.ZINC [DONOR|ACCEPTOR] SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|  
NITRIDE|POLYSILICON|TUNGSTEN|TITANIUM|PLATINUM|WSIX|  
TISIX|PTSIX|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|GAAS|GAS|  
MATERIAL=<c> [DIX.0=<n>] [DIX.E=<n>] [DIP.0=<n>]  
[DIP.E=<n>] [DIM.0=<n>] [DIM.E=<n>] [DIMM.0=<n>]  
[DIMM.E=<n>] [DVX.0=<n>] [DVX.E=<n>] [DVM.0=<n>]  
[DVM.E=<n>] [DVMM.0=<n>] [DVMM.E=<n>] [CTN.0=<n>]  
[CTN.E=<n>] [SS.CLEAR] [SS.TEMP=<n>] [SS.CONC=<n>]  
[/SILICON|/GAAS|/OXIDE|/OXYNITR|/NITRIDE|/GAS|  
/POLYSILICO|/TUNGSTEN|/TITANIUM|/PLATINUM|/WSIX|  
/TISIX|/PTSIX|/ALGAAS|/INGAAS|/SIGE|/INP|  
/MATERIAL=<c>] [SEG.0=<n>] [SEG.E=<n>] [TRN.0=<n>]  
[TRN.E=<n>] [GB.DIX.0=<<n>>] [GB.DIX.E=<n>]  
[GB.SEG.0=<n>] [GB.SEG.E=<n>] [GB.TAU=<n>]  
[AT.NUMBER=<n>] [AT.MASS=<n>] [DIF.CALC=<c>]  
[ACT.CALC=<c>] [SEG.CALC=<c>] [CPERC] [FPERC.0] [FPERC.E]  
[ROUI.0] [ROUI.E] [ROUV.0] [ROUV.E] [DII.0] [DII.E]  
[FI.0=<n>] [FI.E=<n>] [act.factor]
```

I.ALUMINUM, I.ANTIMONY, I.ARSENIC, I.BORON, I.CARBON, I.BERYLLIUM, I.CHROMIUM, I.GALLIUM, I.GERMANIUM, I.ZINC I.PHOSPHOR, I.MAGNESIUM, I.SILICON и I.SELЕНИUM определяют тип примеси;

DONOR или ACCEPTOR – природа примеси (донор или акцептор) в выбранном материале;

SILICON, GAAS, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, WSIX, GAS, POLYSILICON, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, TISIX, PTSIX, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – тип материала, для которого задаются коэффициенты примесей. Параметр MATERIAL=<string> позволяет

пользователю определять собственный материал. Только один параметр материала может быть определен в директиве, и эта директива относится к заданному материалу. Параметр материала используется для определения первого материала при задании параметров границы раздела, таких как коэффициенты транспорта и сегрегации;

AT.NUMBER и AT.MASS – число атомов и атомная масса примеси соответственно. Эти параметры используются при расчетах с использованием моделей имплантации Монте-Карло и VCA;

Параметры диффузии:

DIX.0 и DIX.E – коэффициент диффузии для диффузии примесей с нейтральными дефектами. DIX.0 – предэкспоненциальная константа и DIX.E – энергия активации;

DIP.0 и DIP.E – коэффициент диффузии для примеси, диффундирующей с однократно положительно заряженным междоузлием. DIP.0 – предэкспоненциальная константа и DIP.E – энергия активации;

DIM.0 и BDIM.E – коэффициент диффузии для примеси, диффундирующей с однократно отрицательно заряженным междоузлием. DIM.0 – предэкспоненциальная константа и DIM.E – энергия активации;

DIMM.0 и DIMM.E – примесь, диффундирующая с двукратно отрицательно заряженным междоузлием. DIMM.0 – предэкспоненциальная константа и DIMM.E – энергия активации;

DVX.0 и DVX.E позволяют определить примесь, диффундирующую с нейтральной вакансией. DVX.0 – предэкспоненциальная константа и DVX.E – энергия активации;

DVM.0 и DVM.E позволяют определить примесь, диффундирующую с однократно отрицательно заряженной вакансией. DVM.0 – предэкспоненциальная константа и DVM.E – энергия активации;

DVMM.0 и DVMM.E позволяют определить примесь, диффундирующую с двукратно отрицательно заряженной вакансией. DVMM.0 – предэкспоненциальная константа и DVMM.E – энергия активации;

FI.0 и FI.E – параметры, связанные с относительным содержанием междоузлий. Эти параметры определяют механизм диффузии примеси посредством взаимодействия с междоузлиями или вакансиями. Значение FI может изменяться от 0 до 1. Значение, равное 1, означает диффузию только посредством междоузельного механизма, а значение, равное 0, – диффузию только посредством вакансионного механизма.

Параметры модели активации:

SS.CLEAR, SS.TEMP и SS.CONC – параметры для данных о твердотельной растворимости. SS.CLEAR удаляет текущие данные о твердотельной растворимости для выбранной примеси. SS.TEMP и SS.CONC добавляют температуру и соответствующую ей твердотельную концентрацию растворимости к сохраненным данным для данной примеси;

CTN.0 и CTN.E – коэффициенты кластеризации примеси. CTN.0 – предэкспоненциальная константа и CTN.E – энергия активации. По умолчанию эти параметры используются только для мышьяка. Если используется директива METHOD CLUSTER.S4, то параметры могут применяться для любой примеси.

ACT.FACTOR – параметр зависимости концентрации от твердотельной растворимости для модели активации.

Параметры транспорта поверхности раздела:

/SILICON, /GAAS, /OXIDE, /OXYNITRIDE, /NITRIDE, /GAS, /POLYSILICO, /TUNGSTEN, /TITANIUM, /PLATINUM, /WSIX, /TISIX, /PTSIX, /ALGAAS, /INGAAS, /SIGE, /INP и /MATERIAL – определяют материал 2. Строковый параметр /MATERIAL позволяет пользователю задать произвольный материал для материала 2. Материал 2 выбирается для указания второго материала при определении таких параметров границы раздела, как коэффициенты сегрегации и транспорта;

SEG.0 и SEG.E – равновесные сегрегационные концентрации. SEG.0 – предэкспоненциальная константа и SEG.E – энергия активации;

TRN.0 и TRN.E – скорость переноса примесей через данную поверхность раздела. Единица измерения – сантиметр в секунду (см/с). TRN.0 – предэкспоненциальная константа и TRN.E – энергия активации.

Параметры диффузии в поликремнии:

GB.DIX.0 и GB.DIX.E – параметры границы зерна для расширенной модели диффузии в поликремнии. GB.DIX.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для коэффициента диффузии по границе зерна и GB.DIX.E – энергия активации (эВ);

GB.SEG.0 – энтропийный фактор в коэффициенте сегрегации на границе зерна, используется в расширенной модели диффузии в поликремнии;

GB.SEG.E – энергия активации коэффициента сегрегации на границе зерна, используется в расширенной модели диффузии в поликремнии;

GB.TAU – временная константа коэффициента сегрегации по границе зерна, которая используется в расширенной модели диффузии в поликремнии.

Параметры диффузионной модели CNET:

Следующие параметры применяются совместно с моделью CNET. Об использовании этой модели см. в описании директивы METHOD.

SPERC – перколяционная концентрация. Единица измерения – см^{-3} , значение по умолчанию – $2.5 \cdot 10^{20}$;

FPERC.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для коэффициента усиления перколяции (просачивания). Значение по умолчанию – $2.0 \cdot 10^4$;

FPERC.E – энергия активации в выражении для коэффициента усиления перколяции. Единица измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.0;

ROUI.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для коэффициента парной диффузии, связанной с междуузлиями, по умолчанию – 1.0;

ROUI.E – энергия активации в выражении для коэффициента парной диффузии, связанной с междоузлиями. Единица измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.0;

ROUV.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для коэффициента парной диффузии, связанной с вакансиями. Значение по умолчанию – 1.0.

ROUV.E – энергия активации в выражении для коэффициента парной диффузии, связанной с вакансиями. Единица измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.3;

DII.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для коэффициента собственной диффузии. Единица измерения – см²/с, значение по умолчанию – 3.19;

DII.E – энергия активации в выражении для коэффициента собственной диффузии. Единица измерения – эВ, значение по умолчанию – 3.66.

Примеры

Следующая директива служит для изменения коэффициента диффузии фосфора в кремнии по механизму диффузии с нейтральными междоузлиями.

```
IMPURITY I.PHOSPHORUS SILICON DIX.0=3.85 DIX.E=3.85
```

Следующая директива изменяет параметры сегрегации на поверхности раздела кремний – оксид кремния. Равновесная концентрация фосфора в кремнии в 30 раз превышает концентрацию фосфора в оксиде.

```
IMPURITY I.PHOSPHORUS SILICON /OXIDE SEG.0=30.0 \  
TRN.0=1.66E-7
```

Следующий набор директив задает температурную зависимость активации примесного индия в кремнии:

```
IMPURITY I.INDIUM SILICON SS.TEMP=800 \  
SS.CONC=<VAL1> SS.CLEAR  
IMPURITY I.INDIUM SILICON SS.TEMP=900 SS.CONC=<VAL2>  
IMPURITY I.INDIUM SILICON SS.TEMP=950 SS.CONC=<VAL3>  
etc...
```

Коэффициенты сегрегации и транспорта TRN.0, TRN.E, SEG.0 и SEG.E могут иметь неверные величины для некоторых значений концентрации, комбинаций материалов и диапазонов температур. В случае неточных результатов моделирования эти коэффициенты требуют калибровки.

См. также: INTERSTITIAL, VACANCY.

INITIALIZE – задает начальный материал и уровни фоновой концентрации примесей, т.е. устанавливает сетку из любой прямоугольной спецификации или из файла со структурой. Директива также инициализирует фоновую концентрацию примесей для всех областей.

```
INITIALIZE [SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|
POLYSILICON|ALUMINUM|TUNGSTEN|TITANIUM|PLATINUM|WSIX|
TSIX|PTSIX|GAAS|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|PHOTORESIST|
[MATERIAL=<c>] [BORON|PHOSPHORUS|ANTIMONY|ARSENIC]
[INFILE=<c>] [STRUCTURE|INTENSITY] [ONE.D|TWO.D]
[LAYOUT.FILE=<c>] [X.LOCAT=<n>] [X=<n>] [CONCENTRAT=<n>]
[RESISTIVITY=<n>] [ORIENTATION=<n>] [LINE.DATA]
[INTERVAL.R=<n>] [SCALE=<n>] [FLIP.Y] [NO.IMPURITY]
[SPACE.MULT=<n>] [CYLINDRICAL] [ROT.SUB=<n>]
[C.ANTIMONY=<n>] [C.ARSENIC=<n>] [C.BORON=<n>]
[C.PHOSPHOR=<n>] [C.SILICON=<n>] [C.GOLD=<n>]
[C.GERMANIUM=<n>] [C.ZINC=<n>] [C.SELЕНИUM=<n>]
[C.BERYLLIUM=<n>] [C.MAGNESIUM=<n>] [C.CHROMIUM=<n>]
[C.ALUMINUM=<n>] [C.CARBON=<n>] [C.GALLIUM=<n>]
[C.FRAC=<n>] [DEPTH.STR=<n>] [WIDTH.STR=<n>]
```

Параметры, относящиеся к материалу:

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TSIX, PTSIX, PHOTORESIST, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – материал, который будет инициализирован. Параметр MATERIAL=<c> используется для определения материала пользователем;

ORIENTATION – ориентация подложки. Возможные значения – 100, 110 и 111; значение по умолчанию – 100;

ROT.SUB – угол поворота подложки относительно плоскости 100. По умолчанию вертикальные боковые стенки в подложке 100 также имеют ориентацию 100. Значение по умолчанию – 45°;

C.FRAC – определяет дробную часть в составных материалах, таких как SiGe или AlGaAs.

Параметры, относящиеся к примесям:

ANTIMONY, ARSENIC, BORON и PHOSPHORUS – тип примеси, которая формирует фоновую концентрацию. Возможно использование только одного из этих параметров. Если эти параметры объявлены, то необходимо также включить один из параметров – CONC или RESISTIVITY;

CONCENTRAT – значение фоновой концентрации (в см⁻³);

RESISTIVITY – удельное сопротивление исходного материала подложки (Ом·см). Может использоваться в качестве альтернативы параметру CONC.

C.ANTIMONY, C.ARSENIC, C.BORON, C.PHOSPHOR, C.GOLD, C.SILICON, C.GERMANIUM, C.ZINC, C.SELENIUM, C.BERYLLIUM, C.MAGNESIUM, C.CHROMIUM, C.ALUMINUM, C.CARBON и C.GALLIUM – определяют альтернативный способ задания концентрации примеси. Возможно использование нескольких параметров для задания компенсирующих примесей в исходном материале;

NO.IMPURITY – условие, при котором моделирование проводится без учета примесей. Ни одна примесь не будет учитываться в расчетах. Эти экономные по времени расчеты позволяют проводить быстрый анализ операций окисления (осаждения оксида) и травления.

Установка размерности моделирования:

ONE.D, TWO.D, AUTO – размерность проводимых расчетов – 1D, 2D или с автоматическим выбором размерности соответственно. Значение по умолчанию – AUTO. При одномерном моделировании область расчетов задается параметром X.LOCAT. При выборе параметра AUTO модуль ATHENA проводит одномерные расчеты до тех пор, пока нет необходимости в использовании двухмерных. Типичный случай – при первом использовании директивы ETCN, когда материал стравливается по всей длине структуры;

X.LOCAT – положение, в котором задается двухмерная сетка для осуществления одномерных расчетов.

Инициализация из файла:

INFIL – имя файла, содержащего предварительно сохраненную структуру (см. директиву STRUCTURE);

STRUCTURE и INTENSITY – тип файла инициализации, по умолчанию – STRUCTURE.

Параметры структуры и сетки:

SPACE.MULT – общий множитель масштабирования, который задан в предварительно определенной директиве LINE;

INTERVAL.R – максимальное отношение между расстояниями добавляемых линий сетки. Значение по умолчанию – 1.5;

LINE.DATA – определяет, какое расположение линий сетки должно быть выведено в течение расчета;

SCALE – задает масштабирование входной сетки, по умолчанию – 1.0;

FLIP.Y – логический параметр, который предписывает, что сетка должна быть отражена относительно оси X;

CYLINDRICAL – определяет граничные условия, используемые для цилиндрически симметричной структуры. В этом случае ось поворота $X = 0.0$; при этом не допускается использование отрицательных координат X;

DEPTH.STR и WIDTH.STR – глубина и ширина начальной подложки для использования модуля построения адаптивной сетки;

Примеры

Инициализация из файла. Следующая директива считывает предварительно сохраненную структуру из файла TEST . STR:

```
INITIALIZE INFILE=TEST . STR
```

Использование подложки из оксида. Следующая директива заканчивает построение прямоугольной сетки и задает сетку в структуре с концентрацией бора $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$:

```
INITIALIZE OXIDE C . BORON=1E15
```

Инициализация с адаптивным построением сетки. Следующий пример демонстрирует исходную структуру шириной 0.8 мкм и глубиной 1 мкм. Базовая сетка генерируется автоматически, согласно параметрам BASE . PAR и BASE . MESH, заданным в моделях или в начале расчета:

```
INIT C . ARSENIC=2E16 WIDTH . STR=.8 DEPTH . STR=1
```

См. также: BOUNDARY, LINE, REGION, STRUCTURE, BASE . MESH .

INTERSTITIAL – устанавливает коэффициенты диффузии, рекомбинации и генерации для междоузлий.

VACANCY – устанавливает коэффициенты диффузии, рекомбинации и генерации для вакансий.

Эти две эквивалентные директивы определяют значения коэффициентов уравнения непрерывности для междоузлий и позволяют задавать коэффициенты для каждого выбранного материала. ATHENA настраивает параметры по умолчанию для кремния и поверхностей раздела кремния с другими материалами. Поскольку поликремний описан подробно, как и кремний, его параметры по умолчанию соответствуют кремнию.

```
INTERSTITIAL|VACANCY SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|  
NITRIDE|POLYSILICON|ALUMINUM|TUNGSTEN|TITANIUM|  
PLATINUM|GAAS|WSIX|TISIX|PTSIX|GAS|PHOTORES|ALGAAS|  
INGAAS|SIGE|INP|MATERIAL=<c>[/SILICON|/OXIDE|  
/OXYNITRIDE|/NITRIDE|/POLYSILICO|/ALGAAS|/INGAAS|  
/SIGE|/INP|/ALUMINUM|/TUNGSTEN|/TITANIUM|/PLATINUM|  
/WSIX|/TISIX|PTSIX|/GAAS|/GAS|/MATERIAL=<c>)]  
[D.0=<n>][D.E=<n>][KR.0=<n>][KR.E=<n>][CSTAR.0=<n>]  
[CSTAR.E=<n>][KTRAP.0=<n>][KTRAP.E=<n>][NEU.0=<n>]  
[NEU.E=<n>][NEG.0=<n>][NEG.E=<n>][DNEG.0=<n>]  
[DNEG.E=<n>][POS.0=<n>][POS.E=<n>][DPOS.0=<n>]  
[DPOS.E=<n>][ANTIMONY|ARSENICBORON|PHOSPHORUS]
```

[TIME.INJ] [GROWTH.INJ] [RECOMB] [KSURF.0=<n>]
[KSURF.E=<n>] [KRAT.0=<n>] [KRAT.E=<n>] [KPOW.0=<n>]
[KPOW.E=<n>] [VMOLE=<n>] [[GPOW.0=<n>] [GPOW.E=<n>]
[A.0=<n>] [A.E=<n>] [T0.0=<n>] [T0.E=<n>] [TPOW.0=<n>]
[TPOW.E=<n>] [REC.STR=<n>] [INJ.STR=<n>] [THETA.0=<n>]
[THETA.E=<n>] [/THETA.0=<n>] [/THETA.E=<n>] [WET02 |
DRY02] [DAMALPHA=<h>] [IVFACTOR=<n>] [ISURFACT=<n>]
[IIFACTOR=<n>]

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX GAAS, GAS, PHOTORESIST, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – параметры материалов, которые могут использоваться для взаимодействия с точечными дефектами. В директиве может быть задан только один материал, и параметры директивы применяются только к этому материалу. Параметр MATERIAL=<string> позволяет пользователю задать материал. Этот параметр используется при указании первого материала для задания параметров границы раздела, например сегрегации или транспорта.

Диффузия дефектов:

D.0 и D.E – коэффициенты диффузии междоузлий. Единицы измерения – см²/с;

CSTAR.0 и CSTAR.E – позволяют определить полную равновесную концентрацию междоузлий;

ANTIMONY, ARSENIC, BORON и PHOSPHORUS – примесь, для которой задаются параметры, связанные с междоузлиями;

NEU.0, NEU.E, NEG.0, NEG.E, DNEG.0, DNEG.E, POS.0, POS.E, DPOS.0 и DPOS.E – определяют относительную концентрацию междоузлий в различных зарядовых состояниях (нейтральное, отрицательное, двукратно отрицательное, положительное, двукратно положительное). Значение по умолчанию – $5 \cdot 10^{22}$ и 2.36 эВ.

Параметры границы раздела:

/SILICON, /OXIDE, /OXYNITRIDE, /NITRIDE, /POLYSILICO, /ALUMINUM, /TUNGSTEN, / TITANIUM, /PLATINUM, /WSIX, /TISIX, /PTSIX, /GAAS, /GAS, /ALGAAS, /INGAAS, /SIGE, /INP и /MATERIAL – определяют материал 2. В директиве может быть задан только один материал. Строковый параметр /MATERIAL позволяет пользователю задать материал. Материал 2 используется при указании второго материала для задания параметров границы раздела, например сегрегации или транспорта;

TIME.INJ, GROWTH.IN и RECOMB – тип реакции, происходящей на выбранной границе раздела. Параметр TIME.INJ показывает, что выбрана модель инъекции, которая зависит от времени. Параметр GROWTH.INJ связывает

инжекцию со скоростью роста поверхности раздела. Параметр RECOMB задает конечную скорость поверхностной рекомбинации.

Рекомбинация дефектов:

KR.0 и KR.E – величина скорости рекомбинации, единицы измерения – $\text{см}^3/\text{с}$;

KSURF.0, KSURF.E, KRAT.0, KRAT.E, KPOW.0 и KPOW.E – скорость поверхностной рекомбинации.

VFACTOR, IIFACTOR, ISURFACT – биомолекулярное отношение междуузлий к вакансиям для модели HIGH.CONC;

KTRAP.0 и KTRAP.E – скорость реакции ловушек. В настоящее время очень трудно экстрагировать значения этих параметров. Значения по умолчанию предполагают, что реакция ловушек ограничена концентрацией междуузлий. Коэффициент ловушек по существу равен бесконечности;

DAMALPHA – скорость рекомбинации дефектов в области дислокационной петли.

Генерация дефектов:

VMOLE, THETA.0, THETA.E, GPOW.0 и GPOW.E – зависимость генерации от скорости роста поверхности раздела;

REC.STR и INJ.STR – используются для экспериментов с новыми моделями при рекомбинации или инъекции на поверхности раздела. Три макроса допустимы для использования: T – время в секундах, а также X и Y – координаты. Если заданы эти параметры, они используются вместо любой другой модели. Например, директива:

```
INTERST SILICON /OXIDE INJ.STR=(10.0E4*EXP(T/10.0))
```

описывает инъекцию в поверхности раздела оксида кремния, которая экспоненциально ослабляется во времени.

WETO2, DRYO2 определяют, для какого типа окисления (влажного или сухого) используются параметры THETA.0, THETA.E, по умолчанию используется DRYO2.

THETA.0 определяет значение THETA.0 для первого материала.

THETA.E определяет значение THETA.E для первого материала.

/THETA.0 определяет значение THETA.0 для второго материала.

/THETA.E определяет значение THETA.E для второго материала.

A.0, A.E, T0.0, T0.E, TPOW.0 и TPOW.E определяют параметры модели инъекции с гибкой зависимостью от времени.

Параметры модели CNET:

NEU.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междуузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной нейтральной паре примесь/дефект. Единицы измерения – 1, значение по умолчанию – 1.0;

NEU.E – энергия активации в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной нейтральной паре примесь/дефект. Единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 1.0;

NEG.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной отрицательной паре примесь/дефект. Единицы измерения – 1, значение по умолчанию – 1.0;

NEG.E – энергия активации в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной отрицательной паре примесь/дефект. Единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.0;

DNEG.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной двукратно отрицательно заряженной паре примесь/дефект, единицы измерения – 1, значение по умолчанию – 1.0;

DNEG.E – энергия активации в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной двукратно отрицательно заряженной паре примесь/дефект, единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.0;

POS.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной положительно заряженной паре примесь/дефект, единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 1.0;

POS.E – энергия активации в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной положительной паре примесь/дефект, единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.0;

DPOS.0 – предэкспоненциальная константа в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной двукратно положительно заряженной паре примесь/дефект, единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 1.0;

DPOS.E – энергия активации в выражении для произведения равновесной концентрации нейтральных междоузлий (вакансий) и коэффициента реакции в выбранной двукратно положительно заряженной паре примесь/дефект, единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.0;

Примеры

Следующая директива определяет значения равновесных параметров и параметров диффузии для междоузлий в кремнии.

```
INTERST SILICON DI.0=5.0E-7 D.E=0.0 \  
CSTAR.0=1.0E13 CSTAR.E=0.0
```

Инжекция дефектов при окислении. Следующая директива определяет инъекцию на поверхности раздела кремний – оксид кремния для среды сухого кислорода (DRYO2) с использованием скорости роста оксида и с затратой 1 % кремния, инжектируемого как междуузлие:

```
INTERST SILICON /OXIDE GROWTH VMOLE=5.0E22 \  
THETA.0=0.01 THETA.E=0.0
```

Поверхностная рекомбинация. Следующая директива определяет скорость поверхностной рекомбинации в нитриде кремния, равную $3.5 \cdot 10^3$ см/с:

```
INTERST SILICON /NITRIDE KSURF.0=3.5E-3 \  
KSURF.E=0.0 KRAT.0=0.0
```

Модель CNET. Следующая директива определяет эквивалентное количество положительно и отрицательно заряженных междуузлий при собственном легировании:

```
INTERST SILICON NEU.0=1.0 NEG.0=1.0 \  
POS.0=0.0 DNEG.0=0.0 DPOS.0=0.0  
INTERST SILICON NEU.E=0.0 NEG.E=0.0 \  
POS.E=0.0 DNEG.E=0.0 DPOS.0=0.0
```

Абсолютная равноценность директив INTERSTITIAL и VACANCY верна, если не учитывать физическую сущность. Например, инъекция вакансий при окислении не может быть задана и ее коэффициенты равны нулю.

Модели, используемые здесь, сложны для исследования. Множество параметров имеют неизвестные зависимости от температуры, начального материала и пр.

См. также: IMPURITY, TRAP, VACANCY.

LINE – используется для задания линии при построении сетки. Эта директива задает позицию и интервал линий сетки. Все директивы LINE должны быть заданы перед директивами REGION и BOUNDARY, которые, в свою очередь, должны следовать за директивой INITIALIZE.

```
LINE X|Y LOCATION=<n> [SPACING=<n>] [TAG=<c>]
```

X и Y – тип линии сетки – горизонтальный или вертикальный;

LOCATION – положение вдоль выбранной оси (в мкм), в котором должна размещаться линия. Координата X увеличивается слева направо; координата Y увеличивается по направлению сверху вниз в подложку;

SPACING – локальный интервал сетки (в мкм). Модуль ATHENA добавляет линии сетки следующим образом. Каждая линия имеет интервал, который задается пользователем или выводится из ближайшего окружения. Этот интервал затем сглаживается в случае, если отношение оказывается больше значения, которое задается параметром INTERVAL .R директивы INITIALIZE (значение по умолчанию – 1.5). Новые линии сетки вводятся таким образом, чтобы интервал геометрически изменялся от одного к другому;

TAG – линии, предназначенные для последующего описания директивами BOUNDARY и REGION, значением может быть любое слово.

Пример

Ниже приведен пример задания трех линий по оси X и двух линий по оси Y. Интервал для линий X более мелкий в центре, чем по краям. После обработки модуль ATHENA определяет линии сетки по оси X в точках 0.0, 0.42, 0.69, 0.88, 1.0, 1.12, 1.31, 1.58, 2.0. В центре интервал равен 0.12, а по краям – 0.42, поскольку его значение не может быть выбрано для отношения интервалов, большего, чем 1.5. Если отношение интервалов задано равным 9, то возможно задание интервала 0.9 и 0.1. В данном примере интервал, равный 1, дает линии по оси X при 0.0 и 1.0.

```
LINE X LOC=0 SPA=1 TAG=LEFT
LINE X LOC=1 SPA=0.1
LINE X LOC=2 SPA=1 TAG=RIGHT
LINE Y LOC=0 SPA=0.02 TAG=SURF
LINE Y LOC=3 SPA=0.5 TAG=BACK
```

Имеются сложности предсказания количества генерируемых линий сетки в интервале. Задание начальной сетки весьма важно для успешного моделирования. Используйте геометрический режим, применяемый при задании параметра NO . IMP в директиве INITIALIZE для проведения упрощенного расчета без учета примесей, с целью определения правильности выбора интервала сетки.

См. также: INITIALIZE, REGION, BASE . MESH, BASE . PAR .

MATERIAL – устанавливает коэффициенты материалов. Эта директива определяет значения для коэффициентов при собственной концентрации и относительной диэлектрической проницаемости для всех материалов.

```
MATERIAL [IMPL . SCALE=<n>] (SILICON | OXIDE | OXYNITRIDE |
NITRIDE | POLYSILICONTUNGSTEN | TITANIUM | PLATINUM | WSIX |
TISIX | PTSIX | PHOTORESIST | ALGAAS | INGAAS | SIGE | INP |
ALUMINUMMATERIAL=<c>) [WETO2 | DRY02] [NI . 0=<n>]
[NI . E=<n>] [NI . POW=<n>] [EPS=<n>] [VISC . 0=<n>]
```

[VISC.E=<n>] [VISC.X=<n>] [YOUNG.M=<n>] [POISS.R=<n>]
[LCTE=<c>] [INTRIN.SIG=<n>] [DENSITY=<n>] [AT.NUM.1=<n>]
[AT.NUM.2=<n>] [AT.NUM.3=<n>] [AT.NUM.4=<n>]
[AT.MASS.1=<n>] [AT.MASS.2=<n>] [AT.MASS.3=<n>]
[AT.MASS.4=<n>] [ABUND.1=<n>] [ABUND.2=<n>]
[ABUND.3=<n>] [ABUND.4=<n>] [MAX.DAMAGE=<n>]
[DAM.THRESH=<n>] [IMPL.SCALE] [GB.VOL.RATI=<n>]
[GB.SEG=<n>] [GRAIN.SIZE=<n>] [GB.ENERGY=<n>]
[GB.DIX.0=<n>] [G.DIX.E=<n>] [REFLOW] [GAMMA.REFLO=<n>]
[CR.0] [CR.E] [NO.FLIP]

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, PHOTORESIST, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – тип материала, для которого задаются параметры, параметр MATERIAL=<c> используется для выбора материала пользователем;

WETO2 и DRYO2 – параметры для влажного или сухого окисления. Если задан оксид, необходимо привести метод его получения в директиве MATERIAL;

NI.0, NI.E и NI.POW – зависимость собственной концентрации электронов от температуры.

Параметры, относящиеся к напряженности и вязкости материалов:

VISC.0, VISC.E и VISC.X – параметры, определяющие вязкость. VISC.0 – предэкспоненциальная константа (г/(см·с)); VISC.E – энергия активации (эВ); VISC.X – коэффициент сжимаемости;

YOUNG.M – модуль Юнга материала (дин·см⁻²). Этот параметр используется при расчете напряженности, а также с моделью COMPRESS для моделирования окисления (см. также METHOD LIFT.POLY);

POISS.R – отношение Пуассона для материала. Этот параметр используется при расчете напряжений;

LCTE – зависимость линейного коэффициента термического растяжения от температуры, задается в относительных единицах, что удобнее, чем в процентах;

INTRIN.SIG – начальное состояние равномерной напряженности в материале, например, в осажденной на подложку нитридной пленки. Он также может определять зависимость от температуры, используя выражение и переменную T (в градусах Кельвина – °К).

Параметры структуры материала в процессе имплантации:

DENSITY – плотность (удельная масса) материала (г/см³);

AT.NUM.1, AT.NUM.2, AT.NUM.3 и AT.NUM.4 – число атомов элементов, составляющих материал;

AT.MASS.1, AT.MASS.2, AT.MASS.3 и AT.MASS.4 – атомная масса элементов, составляющих материал (в единицах массы);

ABUND.1, ABUND.2, ABUND.3 и ABUND.4 – относительная доля атомов элементов, составляющих материал. Хотя бы один из этих параметров необходим для задания материала при моделировании имплантации методом Монте-Карло;

MAX.DAMAGE – максимальные радиационные повреждения, вызванные имплантацией, при моделировании методом Монте-Карло (см^{-3}). Значение по умолчанию – $1.0 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$;

DAM.THRES – критический уровень энергии имплантируемых ионов, при которой образуются радиационные повреждения, вызванные имплантацией, при моделировании методом Монте-Карло, единица измерения – эВ, значение по умолчанию – 25 эВ;

IMPL.SCALE – коэффициент масштабирования в аналитической модели имплантации. Этот параметр используется вместе с названием материала при масштабировании параметров имплантации для данного материала;

RANGE, STD.DEV, SRANGE и SSTD.DEV – параметры, которые умножаются на IMPL.SCALE для каждой последующей имплантации.

Параметры, относящиеся к модели диффузии в поликремнии:

Допускается только одно значение для размера зерна поликремния. Существует типа параметров, которые необходимы для правильного описания диффузии:

1. Параметры, относящиеся к материалу поликремния, задаются в директиве MATERIAL.

2. Параметры, относящиеся к примесям в поликремнии, задаются в директиве IMPURITY.

GB.VOL.RATIO – объемная доля границ зерна в общем объеме материала, которая определяет относительную величину концентраций примесей в обоих компонентах. Единицы измерения – V_{gb} / V_{tot} , значение по умолчанию – 0.1;

GRAIN.SIZE – начальный размер зерна. Единицы измерения – мкм, значение по умолчанию – 0.2;

GB.SEG – плотность расположения сегрегаций на границах зерна;

GB.ENERGY – энергия границы зерна, которая учитывается при рекристаллизации. Единицы измерения – $\text{эВ}/\text{см}^2$, значение по умолчанию – 1.0;

GB.DIX.0 – используется для описания диффузии границ зерна поликремния. Единицы измерения – $\text{см}^2/\text{с}$, значение по умолчанию – $1.0 \cdot 10^{-12}$);

GB.DIX.E – энергия активации самодиффузии границ зерна поликремния. Единицы измерения – эВ, значение по умолчанию – 0.0.

Параметры моделирования обратного течения (REFLOW):

REFLOW – указывает, что материал может быть текучим, если в директиве DIFFUSE задан параметр REFLOW;

GAMMA.REFLO – параметр напряженности на поверхности, который используется при моделировании обратного течения. Единицы измерения – дин/см. Заметим, что текучесть материала (параметры VISC.*) также влияет на скорость обратного течения.

Параметры, относящиеся к модели CNET:

CR.0, CR.E – область захвата при рекомбинации точечных дефектов в модели диффузии CNET, которые являются соответственно предэкспоненциальной константой и энергией активации. Единицы измерения – Å и эВ, значения по умолчанию – 2.35 и 0.0.

Параметр, относящийся к управлению сеткой:

NO.FLIP – определяет, что процедура поворота треугольной сетки не применяется к данному материалу.

Примеры

Следующая директива определяет относительную удельную проводимость кремния:

```
MATERIAL SILICON EPS=11.9
```

Следующая директива определяет зависимость коэффициента термического расширения для нитрида кремния от температуры T. Так, при 0 °K коэффициент равен 0.0003 %/°K, начальное напряжение в пленке нитрида кремния равно $1.4 \cdot 10^{10}$ дин·см⁻² и модуль Юнга равен $3.0 \cdot 10^{12}$ дин·см⁻²:

```
MATERIAL NITRIDE LCTE=(3E-6+2*1E-10*T) \  
INTRIN.SIG=1.4E10 YOUNG.M=3E12
```

Следующая директива устанавливает некоторые свойства материала, называемого BPSG. Материал состоит из кремния, кислорода, бора и фосфора с относительным содержанием их в составе 0.3, 0.6, 0.05 и 0.05 соответственно. Этот параметр используется при моделировании имплантации методом Монте-Карло:

```
MATERIAL MATERIAL=BPSG AT.NUM.1=14 AT.NUM.2=8 \  
AT.NUM.3=5 AT.NUM.4=15 AT.MASS.1=28.086 \  
AT.MASS.2=16 AT.MASS.3=10.8 AT.MASS.4=31 \  
ABUND.1=.3 ABUND.2=.6 ABUND.3=.05 ABUND.4=.05
```

См. также: OXIDE, STRESS, DIFFUSE.

METHOD – служит для выбора численных методов и модели для диффузии и окисления. Эта директива используется для выбора различных математических алгоритмов, которые будут использоваться в процессе моделирования и уровня сложности моделей диффузии и окисления. Значения по умолчанию для численных параметров содержатся в файле athenamod, и поэтому необходимо только задать требуемую модель диффузии и окисления.

METHOD VACANCIES | INTERSTIT | ARSENIC | PHOSPHORUS | INDIUM |
 ANTIMONY | BORON | OXIDANT | VELOCITY | TRAPS | GOLD | PSI | PAC |
 BERYLLIUM | SELENIUM | SILICON | MAGNESIUM | ZINC
 [REL.ERROR=<n>] [ABS.ERROR=<n>] [INIT.TIME=<n>]
 PDINIT.TIMETRBDP | FORMULA] [LOWTHER] [FILL]
 [PERIMETER=<n>] [MIN.FILL] [MIN.FREQ=<n>] [GAUSS | CG]
 [BACK=<n>] [BLK.ITLIM=<n>] [TIME | ERR | NEWTON] [DIAG | KNOT |
 FULL.FAC] [FERMI | TWO.DIM | STEADY | FULL.CPL | POWER]
 [I.LOOP.SINK] [CLUSTER.DAM] [HIGH.CONC] [ERFC | ERF1 | ERF2 |
 VERTICAL | COMPRESS | VISCOUS] [GRID.OXIDE=<n>]
 [GRIDINIT.OX=<n>] [SKIP.SIL] [OXIDE.GDT=<n>]
 [REDO.OXIDE=<n>] [OXIDE.EARLY=<n>] [OXIDE.LATE=<n>]
 [OXIDE.REL=<n>] [T.DEFECT=<n>] [TRUNC.DEF=<n>]
 [GLOOP.IMAX=<n>] [GLOOP.EMIN=<n>] [GLOOP.EMAX=<n>]
 [FE.RELERR=<n>] [FE.ABSERR=<n>] [TD.RELERR=<n>]
 [TD.ABSERR=<n>] [ST.RELERR=<n>] [ST.ABSERR=<n>]
 [FU.RELERR=<n>] [FU.ABSERR=<n>] [VERBOSE]
 [GRIDINIT.OXIDE=<n>] [GRID.SILICI=<n>]
 [GRIDINIT.SI=<n>] [LIFT.POLY] [LIFT.OXIDE] [LIFT.NITRID]
 [OX.OBFIX=<n>] [SILICIDE] [SLCD.RELERR] [SLCD.ABSERR]
 [LOWTHER] [POLY.DIFF] [FLIP.FACTOR=<n>] [ADAPT]
 [DEPO.SMOOTH] [ETCH.SMOOTH] [DIFF.SMOOTH] [STEP.SMOOTH]
 [IMPLANT.MES=<n>] [PAIR.DEFEC] [CLUSTER.DEFEC]
 [CHARGE.DEFEC] [DIFFSVTY.DEFEC] [RECOM.DEFEC]
 [PERCO.DEFEC] [CNET.MODEL] [CLUSTER.S4] [OX.THRESH=<n>]
 [MIN.TEMP=<n>] [ILFEM] [ILF.INITT=<n>] [ILF.TOLERAN=, n.]
 [ILF.STPTOL=<n>]

Параметры, относящиеся к модели диффузии:

FERMI, TWO.DIM, STEADY и FULL.CPL – тип уравнения диффузии с особым вниманием на учет модели точечных дефектов. FERMI – определяет, что дефекты зависят только от уровня Ферми; TWO.DIM – необходимость проведения полного моделирования зависимости от времени; STEADY – положение дефектов в устойчивом состоянии; FULL.CPL – необходимость учета полного взаимодействия между дефектами и легирующими примесями. По умолчанию используется параметр FERMI;

CLUSTER.DAM – включение кластерной (311) модели при последующем моделировании имплантации. Эта модель должна использоваться только в случае, если включен параметр FULL.CPL. Кроме того, временное разложение кластеров (311) превалирует над инжекцией междоузлий. Директива CLUSTER используется для выбора параметров этой модели. Для корректного проведения моделирования по директиве METHOD CLUSTER.DAM FULL.CPL необходимо

предварительно определить директиву IMPLANT, генерирующую кластеры типа (311);

HIGH.CONC – определяет, что в модели рекомбинации будет использоваться зависимость от избыточной концентрации легирующих примесей. При этом в директиве INTERSTITIAL должны быть использованы параметры ISUFACT, IVFACT, ITFACT;

I.LOOP.SINK, V.LOOP.SINK – определяют, что может быть задана область дислокационных петель в последующем моделировании имплантации, и что дислокационные петли могут рассматриваться как стоки междоузлий или вакансий в процессе моделирования диффузии. Директива DISLOC.LOOP используется для задания параметров этой модели;

POLY.DIFF – использование модели двухпоточной диффузии примесей в поликремнии. Для управления точностью эта модель должна быть определена перед моделированием осаждения поликремния;

POWER – простейшая модель диффузии при формировании приборов с большими размерами. Эта модель основана на температурной зависимости коэффициентов диффузии без учета точечных дефектов. В этой модели не учитывается сегрегация примесей;

CLUSTER.S4 – необходимость использования модели кластеризации легирующей примеси для активации всех примесей. По умолчанию она не используется, поскольку подразумевается, что модель кластеризации применяется только для мышьяка. Для других примесей используется простая модель твердотельной растворимости;

LOWTHER – использование процедуры дискретизации. При ее применении снижается чувствительность расчетов к сетке. При этом возможно использование более крупной сетки. Этот параметр включен по умолчанию. Он позволяет повысить в 2-3 раза скорость моделирования для одной и той же сетки по сравнению со значением этого параметра false. Однако результат на крупной сетке с LOWTHER=f будет неточным;

MIN.TEMP – минимальная температура, при которой происходит диффузия примесей. При температурах ниже MIN.TEMP примеси остаются неподвижными. Значение по умолчанию – 700 °C.

Параметры, относящиеся к моделям окисления:

ERFC, ERF1, ERF2, VERTICAL, COMPRESS и VISCOUS – модели окисления. ERFC – использование простой функции аппроксимации ошибок при моделировании “птичьего клюва”; ERF1 и ERF2 – аналитические аппроксимационные модели для моделирования ”птичьего клюва” (см. директиву OXIDE). Модель ERF1 более предпочтительна, чем модели ERF2. Все ERF* модели применяются только для простых случаев окисления. Все параметры, относящиеся к директиве OXIDE, должны быть точно определены, если используется одна из моделей ERF*. Модель VERTICAL указывает, что рост оксида производится в вертикальном направлении; COMPRESS рас-

смачивает оксид как сжимаемую жидкость; VISCIOUS – как несжимаемую текучую жидкость. В общем случае оксид несжимаем, однако модели, использующие сжатие, моделируют быстрее. По умолчанию используется модель COMPRESS;

OX.THRESH – наличие критического уровня окисления, который не допускает проведение моделирования окисления в случае, если концентрация окислителя ниже критического уровня, заданного параметром MIN.OXIDANT в директиве OXIDE;

SKIP.SIL – параметр, который используется для расчета напряжений в кремнии. Значение по умолчанию – true. Напряжение может быть рассчитано только при использовании модели VISCIOUS;

LIFT.POLY, LIFT.OXIDE и LIFT.NITRID – определяют, что поликремний, оксид и нитрид могут быть подняты в процессе окисления. Значения по умолчанию – true, но могут быть заданы и как false во избежание подъема при моделировании геометрии, в которой этот эффект не предусмотрен;

REDO.OXIDE – используется для уменьшения времени расчета. В этом случае не проводится решение уравнения диффузии для примесей. Параметр REDO.OXIDE определяет долю времени, необходимого для окисления одного слоя сетки. Обычно значение REDO.OXIDE намного меньше, чем OXIDE.GDT, являющегося верхней границей времени решения уравнения.

Параметры, относящиеся к контролю временного шага:

INIT.TIME – начальное значение временного шага. Значение по умолчанию – 0.1 с;

PDINIT.TIME – начальное значение временного шага при моделировании диффузии точечных дефектов. Точечные дефекты остаются неподвижными на первом временном шаге. Значение по умолчанию – 10^{-5} с;

T.DEFECT – время в секундах, для которого инжекция точечных дефектов не учитывается в процессе моделирования окисления. Значение по умолчанию – 5 с;

OXIDE.GDT – служит для ограничения значения временного шага при моделировании окисления до времени, необходимого для окисления одного слоя сетки (GRID.OXIDE). Временной шаг может быть ограничен как окислением, так и диффузией, и значение OXIDE.GDT может накладывать ограничение на временной шаг, если он более значим, чем ограничения, налагаемые диффузией. Значение параметра OXIDE.GDT рекомендуется задавать $\ll 1$ для повышения разрешения при моделировании диффузии при окислении. Значение по умолчанию – 0.25;

TRBDF и FORMULA – метод интегрирования по времени. TRBDF – использование метода трапеций; FORMULA – задает временной шаг в функции времени (t), предыдущий временной шаг (dt) и временной сетки (gdt). Эта возможность в первую очередь предназначена для тестирования. По умолчанию используется параметр TRBDF.

Параметры, относящиеся к методике численного решения:

VACANCIES, INTERSTIT, ARSENIC, PHOSPHORUS, ANTIMONY, PAC, BERYLLIUM, SELENIUM, SILICON, MAGNESIUM, ZINC, BORON, OXIDANT, VELOCITY, TRAPS, GOLD и PSI – параметры для задания единичной примеси или потенциала. Допустимое отклонение задается для каждой примеси;

REL.ERR – точность, с которой должны решаться уравнения для примеси. В общем случае реальная ошибка не должна превышать половины указанного значения. По умолчанию значение этого параметра для всех примесей принимается равным 0.01, а для потенциалов – 0.001. Если этот параметр используется, то должны быть заданы примеси;

ABS.ERR – абсолютное значение разброса. Для легирующих примесей абсолютное значение по умолчанию равно $1.0 \times 10^9 \text{ см}^{-3}$, для дефектов – 10^5 см^{-3} , для потенциалов – 10^{-6} . Если этот параметр используется, то должны быть заданы примеси;

FE.RELERR и FE.ABSERR – относительная и абсолютная погрешности для модели FERMI;

TD.RELERR и TD.ABSERR – относительная и абсолютная погрешности для модели TWO.DIM;

ST.RELERR и ST.ABSERR – относительная и абсолютная погрешности для модели STEADY;

FU.RELERR и FU.ABSERR – относительная и абсолютная погрешности для модели FULL.CPL;

MIN.FILL – минимальный размер матрицы. Значение по умолчанию – true. Эта опция является необходимой, поскольку она позволяет уменьшить размеры матрицы более чем в два раза, т.к. скорость расчетов зависит от размера матрицы;

GAUSS и CG – тип итерационной процедуры для линейной системы. CG – использование метода сопряженных остатков;

BACK – количество обратных векторов при использовании параметра CG. Значение по умолчанию – 3, максимально возможное – 6. Большее значение параметра BACK дает скорейшую сходимость за счет больших затрат памяти;

BLK.ITLIM – максимально возможное количество блоковых итераций. Процедура блокового итерационного процесса заканчивается в этой точке независимо от завершения процесса сходимости;

TIME, ERROR и NEWTON – частота, с которой должна перемножаться матрица. Значение по умолчанию – TIME. TIME определяет, что за один временной шаг матрица должна перемножаться дважды. Эта опция дает преимущество во времени расчетов. ERROR указывает, что матрица должна перемножаться до тех пор, пока не уменьшится ошибка. NEWTON проводит перемножение на каждом шаге NEWTON;

DIAG, KNOT и FULL.FAC – величина заполненности при перемножении

матриц. Параметр `DIAG` указывает, что должны перемножаться только диагональные блоки матрицы. Параметр `KNOT` – неактивен. Параметр `DIAG` задается по умолчанию, хотя в некоторых случаях лучшие результаты дает параметр `FULL.FAC`. `FULL.FAC` указывает, что должна рассчитываться общая величина заполненности;

`TRUNC.DEF` – доля концентрации отрицательных дефектов, изменивших свой знак при моделировании на положительный.

Параметры, относящиеся к управлению сеткой при окислении:

`GRID.OXIDE=<n>` – толщина слоев сетки, которая добавляется к выращенному окислу (в мкм). Она может оказать влияние на величину временного шага (см. `OXIDE.GDT`). По умолчанию – 0.1 мкм;

`GRIDINIT.OX` – начальная величина пространственного шага в окисле (в мкм). По умолчанию – 0.1 мкм;

`GRID.SILICI` – максимальный пространственный шаг в силициде (в мкм). По умолчанию – 0.1 мкм;

`GRIDINIT.SI` – начальный пространственный шаг в силициде (в мкм). По умолчанию – 0.1 мкм;

`GLOOP.EMIN`, `GLOOP.EMAX` и `GLOOP.IMAX` – учет дислокационных петель при изменении сетки. По умолчанию величина `GLOOP.IMAX` равна 170°. При учете дислокационных петель контролируются процессы интрузии и экструзии на границе. Алгоритм интрузии запускается при углах, больших чем `GLOOP.IMAX`. Алгоритм экструзии запускается при углах, больших чем `GLOOP.EMAX`. По умолчанию величина `GLOOP.EMIN` = 130°. Ни один из этих параметров не может быть меньше 90°;

`OX.OBFIX` – значение косинуса наихудшего угла, используемого при моделировании окисления;

`FLIP.FACTOR` – параметр, позволяющий пользователю контролировать критерий изменения диагонали между парой треугольников при моделировании окисления. По умолчанию эта величина равна 10^{-6} ;

`FILL` – устанавливает, что полости, которые образуются при окислении, должны быть заполнены.

Параметр, относящийся к контролю сетки при моделировании операции травления:

`ETCH.EPS` задает условие на движение сетки при выполнении директивы `ETCH`. По умолчанию эта величина равна 10^{-6} , что соответствует примерно 10 Å.

Параметры, используемые в модуле для адаптации сетки, которые устанавливаются:

`ADAPT` – что адаптация сетки должна проводиться, если присутствуют директивы `IMPLANT`, `DIFFUSE` или `EPITAXY` (по умолчанию – `false`);

`DEPO.SMOOTH` – что сглаживание сетки должно проводиться после каждой директивы `DEPOSIT`;

ETCH.SMOOTH – что сглаживание сетки должно проводиться после каждой директивы ETCH;

DIFF.SMOOTH – что сглаживание сетки должно проводиться после каждой директивы DIFFUSE;

STEP.SMOOTH – что сглаживание сетки должно проводиться после каждого временного шага при каждой директиве DIFFUSE;

IMPLANT.MES – алгоритм адаптации, который будет использоваться в директиве IMPLANT. IMPLANT.MES=0 (по умолчанию) соответствует алгоритму, разработанному в университете штата Флорида.

Параметры, относящиеся к моделям CNET:

Эти модели учитывают эффекты высококонцентрационной диффузии. CNET.MODEL включает одновременно все модели CNET (по умолчанию – false). При этом должна быть задана директива FULL.CPL. Использование моделей CNET требует инициализации некоторых параметров, значения которых задаются по умолчанию. Для реализации этого используется файл cnetmod (см. директиву MATERIAL для контроля сечения рекомбинации дефектов MATERIAL CR.0=2.35 and CR.E=0). Не рекомендуется включение отдельных CNET моделей, поскольку они все включаются посредством директивы METHOD FULL.CPL CNET.MOD;

PAIR.DEFEC – модель связанных дефектно-примесных пар, учитывающая непренебрежимые эффекты концентрации этих пар при высокой концентрации примесей (по умолчанию – false). Для контроля этой модели следует выбрать следующие параметры в строке IMPURITY: ROUI.0=1 ROUI.E=0 ROUV.0=1 ROUV.E=1;

CLUSTER.DEFEC – модель кластеризации (по умолчанию - false), которая учитывает зарядовые состояния дефектно-примесных пар (по умолчанию: false). Здесь различные зарядовые состояния дефектно-примесных пар задаются посредством установления соотношения между концентрациями связанных дефектно-примесных пар и нейтральных дефектов, находящихся в состоянии равновесия. В директивах INTERSTITIAL и VACANCY следует использовать параметры: NEU.0, NEU.E, NEG.0, NEG.E, DNEG.0, DNEG.E, POS.0, POS.E, DPOS.0, DPOS.E. Далее относительные доли междоузлий, которые определяют диффузию, зависящую от локальной концентрации междоузлий задаются параметрами FI.0=<n> FI.E=<n> (зависящими от температуры) в директиве IMPURITY;

DIFFSVTY.DEFEC – модель, учитывающая собственный коэффициент диффузии без учета диффузии посредством дефектно-примесных пар (по умолчанию – false). Для контроля этой модели следует задать параметры DII.0 и DII.E собственного коэффициента диффузии в директиве IMPURITY (по умолчанию – false);

RECOM.DEFEC – модель, учитывающая рекомбинацию междоузлий и ва-

кансий (по умолчанию – false);

PERCO.DEFEC – модель, учитывающая перколяционные эффекты высокой концентрации при диффузии фосфора и бора (по умолчанию – false). Для контроля этой модели следует задать параметры $CPERC=2.5e20$ $FPERC.O=2e4$ $FPERC.E=0$ в директиве IMPURITY. Некоторые параметры CNET модели устанавливаются по директивам INTERSTITIAL и VACANCY.

Параметры, связанные с численным методом ILFEM:

Данные параметры относятся к линейному методу конечных элементов для решения диффузионных уравнений (Implicit Linear Finite Element Method, ILFEM). Этот метод в модуле ATHENA используется в качестве альтернативы методу, используемому в программе SSUPREM-4. Основные достоинства метода ILFEM состоят в более высокой скорости и лучшей сходимости. Параметр ILFEM определяет, что модуль ILFEM будет использоваться во всех последующих расчетах, связанных с моделированием диффузионных процессов. ILFEM можно использовать для моделирования диффузии в инертной атмосфере вместе с параметрами FERMI, TWO.DIM, FULL.CPL и CLUSTER.DAM. Если модуль ILFEM невозможно использовать для данной моделируемой структуры или для данных параметров технологического процесса, то появится соответствующее объяснение причины этого. При этом расчет возвратится к традиционному методу, заданному в директиве DIFFUSE.

ILF.INITT – начальный временной шаг для расчета по методу ILFEM (по умолчанию – 10^{-5} с).

ILF.TOLERAN – остаток (линейное допустимое отклонение при решении методом ILFEM, по умолчанию – 10^{-4} с).

ILF.STPTOL – выбор временного шага. Чем меньше величина ILF.STPTOL, тем меньшие временные шаги будут использоваться при решении диффузионного уравнения.

Примеры

Задание допусков при решении диффузионного уравнения. Следующая директива задает условие, что уравнение диффузии мышьяка будет решаться с допустимой относительной ошибкой, равной 1%, и концентрации меньше 10^9 см⁻³ не будут учитываться:

```
METHOD ARSEN REL.ERR=0.01 ABS.ERR=1.0E9
```

Задание используемого численного метода. Следующая директива задает условие, что уравнение диффузии будет решаться с использованием метода объединенных остатков с тремя обратными векторами. Начальный временной шаг будет 0.1 с, и интегрирование по времени будет проводиться с использованием параметра TRBDF. При моделировании диффузии будет использоваться FERMI-модель, а при моделировании роста окисла – модель COMPRESS:

```
METHOD MIN.FILL CG BACK=3 INIT.TI=0.1 \  
TRBDF FERMI COMPRESS
```

Задание модели диффузии при моделировании мощных приборов. Следующая директива задает условие, что простая модель диффузии будет использоваться при моделировании мощных электронных приборов:

```
METHOD POWER DIFFUSION TEMP=1000 TIME=300 NITROGEN
```

Задание модели CNET. Следующая директива задает условие, что для модели FULL.CPL будет использоваться полный набор расширения модели CNET. В этом случае специальный файл с коэффициентами, принятыми по умолчанию в модели CNET, будет сразу же вызван после назначения модели:

```
METHOD FULL.CPL CNET.MOD SOURCE CNET.MOD
```

Задание моделей диффузии для быстрого термического отжига (RTA). Следующая директива задает условие, что будут использоваться все <311> кластерные модели при моделировании RTA. Эта директива должна быть задана перед директивой IMPLANT:

```
METHOD NEWTON FULL.CPL CLUSTER.DAM \  
I.LOOP.SINK HIGH.CONC BACK=6  
IMPLANT ....  
DIFFUSE ....
```

Задание ILFEM-метода. Следующая последовательность директив демонстрирует синтаксис для задания использования численного метода ILFEM, а также синтаксис вызова этого метода и возврата к традиционному численному методу при решении диффузионного уравнения:

```
# set the ILFEM method  
METHOD ILFEM  
DIFFUSE ...  
# disable the ILFEM method  
METHOD ILFEM=f  
DIFFUSE ...
```

MOMENTS – контролирует задание моментов для аналитической модели имплантации.

```
MOMENTS [SVDP_TABLES|STD_TABLES|USR_SVDP_TAB|  
USR_STD_TAB] [USER_TABLE=<c>] [IGNORE_MOM] [SILICON|  
OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|POLYSILICON|PHOTORESIST|
```

BARRIER | ALUMINUM | TUNGSTEN | TITANIUM | PLATINUM | WSIX |
TISIX | PTSIX | GAAS | ALGAAS | INGAAS | SIGE | INP | MATERIAL=<c>]
I.ARSENIC | I.PHOSPHOR | I.BORON | I.ANTIMONY | I.BF2 |
I.SILICON | I.GERMANIUM | I.ZINC | I.SELENIUM | I.BERYLLIUM |
I.MAGNESIUM | I.CHROMIUM | I.ALUMINUM | I.GOLD | I.GALLIUM |
I.CARBON | I.INDIUM [DOSE=<n>] [ENERGY=<n>] [RANGE=<n>]
[STD.DEV=<n>] [GAMMA=<n>] [KURTOSIS=<n>] [LSTD.DEV]
[LGAMMA] [LKURTOSIS] [SKEWXY] [SRANGE=<n>] [SSTD.DEV=<n>]
[SGAMMA=<n>] [SKURTOSIS=<n>] [LSSTD.DEV] [LSGAMMA]
[LSKURTOSIS] [DRATIO=<n>] [DAMAGEMOD.FN]

Параметры, используемые при выборе моментов из таблиц:

USER_TABLE=<c> – файл, который содержит таблицы параметров имплантации (созданные пользователем);

SVDP_TABLE – определяет, что будут использоваться таблицы моментов SIMS Verified Dual Pearson (SVDP) в модели сдвоенной функции распределения Пирсона;

STD_TABLE – задает, что вместо таблиц UT_TABLE будут использоваться стандартные таблицы с последующими директивами имплантации;

USR_SVDP_TAB – определяет, что будет использоваться файл с таблицами, заданными пользователем (см. параметр USER_TABLE), и что формат этого файла будет таким же, как и формат SVDP_TABLE;

USR_STD_TAB – использование файла с моментами, заданными пользователем (см. параметр USER_TABLE) в стандартном формате.

Шаблон см. в <install.area>/lib/athena/<version>/common/userimp.

Параметры для моделирования имплантации:

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, PHOTORESIST, BARRIER, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, GAAS, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – задают используемый материал. Может быть задан только один материал. Параметр MATERIAL=<c> должен использоваться только для материала, заданного пользователем;

I.ARSENIC, I.PHOSPHOR, I.BORON, I.ANTIMONY, I.BF2, I.SILICON, I.GERMANIUM, I.ZINC, I.SELENIUM, I.BERYLLIUM, I.MAGNESIUM, I.CHROMIUM, I.ALUMINUM, I.GOLD, I.GALLIUM, I.CARBON и I.INDIUM – задают используемую примесь. Может быть задана только одна примесь;

DOSE – доза имплантируемых ионов (см^{-2});

ENERGY – энергия имплантируемых ионов (кэВ);

Параметры для задания пространственных моментов:

RANGE (RP) – проективный пробег (мкм);

STD.DEV (DRP) – стандартное отклонение (мкм);

GAMMA (SKEWNESS) – третий момент. По умолчанию – 0.0;
KURTOSIS – четвертый момент. По умолчанию – 3.0;
LSTD.DEV (LDRP) – стандартное боковое отклонение (мкм);
SKEWXY – смешанный третий момент;
KURTXY – боковой смешанный четвертый момент;
KURTT – боковой четвертый момент. По умолчанию – 3.0;
SRANGE (SRP) – проективный пробег для второй функции Пирсона (мкм);
SSTD.DEV (SDRP) – стандартное отклонение для второй функции Пирсона (мкм);
SGAMMA (SSKEW) – третий момент для второй функции Пирсона. По умолчанию – 0.0;
SKURTOSIS – четвертый момент для второй функции Пирсона. По умолчанию – 3.0;
LSSTD.DEV (LSDRP) – боковое стандартное отклонение для второй функции Пирсона (мкм);
SSKEWXY – смешанный третий момент для второй функции Пирсона. По умолчанию равен 0.0;
SKURTXY – смешанный четвертый момент для второй функции Пирсона. По умолчанию – 0.0;
SKUPTT – боковой четвертый момент для второй функции Пирсона. По умолчанию – 3.0;
DRATIO задает отношение доз R в двоянной функции Пирсона.

Параметр для сброса значений:

IGNORE_MOM – все предыдущие директивы MOMENTS будут игнорироваться.

Параметр для моделирования повреждений, наведенных имплантацией:

DAMAGEMOD.FN – имя файла на языке C, контролирующего модели расчета повреждений в зависимости от уровня концентрации примесей. Этот файл используется в последующих директивах IMPLANT C-интерпретатором.

Пример

Следующая директива MOMENTS используется для установления моментов, заданных пользователем, на подходящем командном языке. В примере задаются моменты для моделирования имплантации бора в материал SAPPHIRE, заданный пользователем.

```
MOMENTS MATERIAL=SAPPHIRE I.BORON \  
DOSE=1.6e12 ENERGY=25 RANGE=0.098 \  
STD.DEV=0.045 GAMMA=-0.04 KURTOSIS=3.5
```

См. также: IMPLANT.

OXIDE – задает коэффициенты, используемые при моделировании окисления. Модели окисления устанавливаются в директиве METHOD. Для задания значений большинства коэффициентов необходимо знать среду, в которой проводится эта операция, и ориентацию подложки.

```
OXIDE ORIENT=<n>DRY02|WET02 [LIN.L.0=<n>] [LIN.L.E=<n>]
[LIN.H.0=<n>] [LIN.H.E=<n>] [L.BREAK=<n>] [L.PDEP=<n>]
[PAR.L.0=<n>] [PAR.L.E=<n>] [PAR.H.0=<n>] [PAR.H.E=<n>]
[P.BREAK=<n>] [P.PDEP=<n>] [THINOX.0=<n>] [THINOX.E=<n>]
[THINOX.L=<n>] [HCL.PC=<n>] [HCLT=<n>] [HCLP=<n>]
[HCL.PAR=<n>] [HCL.LIN=<n>] [BAF.DEP] [BAF.EBK=<n>]
[BAF.PE=<n>] [BAF.PPE=<n>] [BAF.NE=<n>] [BAF.NNE=<n>]
[BAF.K0=<n>] [BAF.KE=<n>] [STRESS.DEP|ORI.DEP]
[ORI.FAC=<n>] [VC=<n>] [VR=<n>] [VD=<n>] [VT=<n>]
[DLIM=<n>] [GAMMA] [SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|
POLYSILICON|TUNGSTEN|TITANIUM|PLATINUM|WSIX|GAAS|
ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|TISIX|PTSIX|MATERIAL=<c>]
[/SILICON|/OXIDE|/OXYNITRIDE|/NITRIDE|/POLYSILICO|
/TUNGSTEN|/TITANIUM|/PLATINUM|/WSIX|/TISIX|GAAS|
/ALGAAS|/INGAAS|/SIGE|/INP|/PTSIX|/GAS|/MATERIAL=<c>]
[ALPHA=<n>] [HENRY.COEFF=<n>] [THETA=<n>] [DIFF.0=<n>]
[DIFF.E=<n>] [SEG.0=<n>] [SEG.E=<n>] [TRN.0=<n>]
[TRN.E=<n>] [INITIAL=<n>] [SPREAD=<n>] [MASK.EDGE=<n>]
[NIT.THICK=<n>] [ERF.Q=<n>] [ERF.DELTA=<n>]
[ERF.LBB=<n>] [ERF.H=<n>] [SPLIT.ANGLE=<n>]
[MIN.OXIDANT=<n>]
```

DRY02, WET02 – окислительная среда. Эти параметры всегда необходимы, за исключением одномерного окисления;

LIN.L.0, LIN.L.E, LIN.H.0, LIN.H.E, L.BREAK и L.PDEP – линейные коэффициенты скорости окисления (В/А); L.BREAK – температурный диапазон окисления (в °С); LIN.L.0 – предэкспоненциальный коэффициент (в мкм/мин); LIN.L.E – энергия активации (в эВ) для нижнего температурного диапазона; LIN.H.0 и LIN.H.E – соответствуют параметрам для верхнего температурного диапазона; L.PDEP – экспонента в зависимости скорости окисления от давления;

PAR.L.0, PAR.L.E, PAR.H.0, PAR.H.E, P.BREAK и P.PDEP – коэффициенты параболической зависимости скорости окисления (В);

ORIENT – ориентация подложки (возможны 100, 110 и 111 ориентации).

По умолчанию этот параметр – 100;

ORI.FAC – отношение В/А, зависящее от ориентации подложки;

ORI.DEP – параметр, определяющий необходимость учета ориентации в каждой точке при расчете коэффициента В/А. По умолчанию – true. Если false, то ориентация подложки используется для всех точек;

THINOX.P – параметр, задающий зависимость модели тонкой окисной пленки от давления;

THINOX.0, THINOX.E и THINOX.L – коэффициенты для модели тонкой окисной пленки. THINOX.0 предэкспоненциальный коэффициент (в мкм/мин), THINOX.E – энергия активации (в эВ) и THINOX.L – характеристическая длина (в мкм);

HCL.PC, HCLT, HCLP, HCL.PAR и HCL.LIN – некоторые численные параметры: HCL.PC – процентное содержание HCl в газе-окислителе (по умолчанию – 0). Зависимость линейных и параболических коэффициентов от содержания HCl представлена в таблице, в которой приведены соответствующие коэффициенты, зависящие от процентного содержания HCl. Эти коэффициенты могут вводиться с использованием параметра HCLP. В столбцах – коэффициенты, зависящие от температуры; могут вводиться с использованием параметра HCLT. Зависимость отношения В/А от процентного содержания HCl задается с помощью параметра HCL.LIN. Значение HCL.LIN представляет собой произведение чисел, определяющих HCLP и HCLT. Зависимость коэффициента В задается с помощью параметра HCL.PAR. Число HCL.PAR представляет собой произведение чисел, определяющих HCLP и HCLT;

BAF.DEP, BAF.EVK, BAF.PE, BAF.PPE, BAF.NE, BAF.NNE, BAF.KO и BAF.KE – параметры, относящиеся к зависимости скорости окисления от степени легирования. По умолчанию эта зависимость учитывается, когда параметр BAF.DEP – true;

STRESS.DEP, VC, VR, VD, VT и DLIM – контролируют зависимость скорости окисления от напряжения при использовании модели VISCOUS. Параметр STRESS.DEP – инициализирует эту зависимость; VC – активационный объем вязкости; VR – активационный объем скорости реакции при нормальном напряжении; VT – активационный объем скорости реакции при тангенциальном напряжении; VD – активационный объем диффузии окислителя в зависимости от давления; DLIM – максимальное усиление диффузии, обусловленное напряжением растяжения;

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, GAAS, GAS, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – характеристики материала material 1. Параметр MATERIAL=<c> используется только для материала, заданного пользователем;

/SILICON, /OXIDE<, /OXYNITRIDE, /NITRIDE, /GAAS, /POLYSILICO, /TUNGSTEN, /TITANIUM, /PLATINUM, /WSIX, /GAS, /TISIX, /PTSIX, /ALGAAS, /INGAAS, /SIGE, /INP и

/MATERIAL – характеристики материала material 2. Параметр MATERIAL=<с> используется только для материала, заданного пользователем;

DIFF.0, DIFF.E, SEG.0, SEG.E, TRN.0 и TRN.E – коэффициенты диффузии оксиданта в материале material 1 и граничные коэффициенты (“transport” и “segregation”) из материала material 1 в материал material 2. DIFF.0 предэкспоненциальный коэффициент (в см²/с), DIFF.E – энергия активации (в эВ). Транспортные коэффициенты представляют собой коэффициент переноса массы в газовой фазе в твердом теле на поверхности раздела оксид – газ, константа скорости химической реакции на поверхности и обычный коэффициент диффузионного транспорта на других поверхностях раздела. Коэффициент сегрегации равен 1 на поверхности раздела оксид – газ, бесконечности – на поверхности раздела окисел-кремний и обычному коэффициенту сегрегации – на других поверхностях раздела;

HENRY.COEFF (коэффициент Генри) – растворимость оксиданта в материале material 1 (в см³) при давлении в 1 атм;

THETA – число атомов кислорода, введенных в 1 см³ окисла. В случае сухого окисления эта величина равна THETA, а в случае влажного окисления она равна 2·THETA;

ALPHA – коэффициент объемного расширения между материалами 1 и 2;

MIN.OXIDANT – минимальная концентрация оксиданта, при которой происходит окисление. Этот параметр используется только в том случае, если задан параметр METHOD OX.THRESH.

Параметры, относящиеся к контролю сетки:

INITIAL – толщина исходного окисла в начале операции окисления (по умолчанию равен 2 нм (20 Å). Если поверхность исходной структуры чистая (неокисленная), то осаждается окисный слой такой толщины перед окислением;

SPLIT.ANGLE – минимальный угол, под которым будет создана еще одна линия сетки при окислении по трем точкам (т.е. в том месте, где встречаются в одной точке окисел, кремний и нитрид). По умолчанию этот угол равен 22.5°. Этот параметр зависит от материала. Следует задавать окисляющийся материал без “/”, а другой материал со значком “/”, используя следующий формат:

OXIDE SPLIT.ANGLE=35 SILICON /NITRIDE.

Имеются только три возможные комбинации: SILICON /NITRIDE, SILICON /POLY и POLY /NITRIDE.

Параметры, относящиеся к аналитическим моделям окисления (Analytical Oxidation Models) (ERF):*

SPREAD и MASK.EDGE – используются только в приближении функции ошибок при расчете “птичьего клюва”;

SPREAD – отношение бокового окисления к вертикальному (по умолчанию – 1).

`MASK.EDGE` – положение края маски (в мкм). По умолчанию – $-\infty$. Окисел растет к правому краю маски.

`ERF.Q`, `ERF.DELTA`, `ERF.LBB`, `ERF.H` и `NIT.THICK` относятся к `ERFG` модели. `ERF.Q` и `ERF.DELTA` – параметры `DELTA` и `Q` в `ERFG` модели. Обычно нет необходимости их изменять; `ERF.LBB` – длина “птичьего клюва”, она используется только в `ERFG`-модели. Ее можно задать для расчета E_{ox} (толщина окисла в мкм), e_{ox} (толщина защитного окисла в мм), T_{ox} (температура окисления в градусах Кельвина) и e_n (толщина нитрида в мм); `ERF.H` – относительная величина поднятия нитрида по отношению к толщине окисла. Задается для расчета E_{ox} , e_{ox} , T_{ox} и e_n ; `NIT.THICK` – толщина нитрида для расчета параметра `EN`.

Примеры

Следующая строка модифицирует коэффициенты в параболической модели окисления для {100} кремния в среде сухого кислорода:

```
OXIDE DRY ORI=100 PAR.L.0=283.333 PAR.L.E=1.17
```

В следующей директиве задается толщина исходного окисла, равная 10 Å:

```
OXIDE INITIAL=0.001
```

Следующая директива определяет, что будут использоваться коэффициенты, зависящие от напряжения в модели окисления `VISCOUS`:

```
METHOD VISCOUS  
OXIDE STRESS.DEP=t
```

См. также: `DIFFUSE`, `METHOD`.

PAUSE – пауза в выполнении директивы.

PHOSPHORUS – задает коэффициенты при моделировании диффузии и сегрегации фосфора. Вместо этой директивы следует использовать директиву `IMPURITY` с параметром `I.PHOS`.

POLISH – запускает модуль моделирования химико-механического полирования (`CMP`). Директива `POLISH` должна предшествовать директиве `RATE.POLISH` для задания установки полирования (`polishing machine`).

```
POLISH MACHINE=<c> [TIME=<n>] [HOURS | MINUTES | SECONDS]  
[DX.MULT=<n>] [DT.FACT=<n>] [DT.MAX=<n>]
```

MACHINE – имя установки;
TIME – время работы заданной установки;
HOURS, MINUTES и SECONDS задают единицы измерения параметра TIME.

DX.MULT – точность полировки. Размер дискретизации, используемый при моделировании полирования, умножается на величину DX.MULT. Для улучшения точности следует уменьшить параметр DX.MULT. Для повышения скорости расчетов следует увеличить DX.MULT;

DT.FACT – величина временного шага. Оптимизационный параметр DT.FACT не должен превышать 0.5, но может быть уменьшен для повышения точности;

DT.MAX – верхний предел временного шага равен одной десятой полного заданного времени травления.

Пример:

```
RATE.POLISH OXIDE MACHINE=cmp u.s MAX.HARD=0.15 \  
MIN.HARD=0.03 ISOTROPIC=0.001 POLISH MACHINE=cmp \  
TIME=5 MIN
```

См. также: RATE.POLISH, ETCH.

PRINT. 1D – выдача на печать результатов моделирования в одномерном сечении. Использование этой директивы не рекомендуется. Все ее функции выполняет команда EXTRACT в среде DECKBUILD.

PROFILE – считывание одномерного профиля распределения примесей в модуль ATHENA. Эта директива служит для записи данных о профилях распределения примесей в модуль ATHENA. Данная информация может быть загружена из данных по масс-спектропии вторичных ионов (Secondary Ion Mass Spectroscopy, SIMS) или результатов расчетов профилей с использованием программы SSUPREM3. Данные получены для одномерного сечения и далее будут использоваться для двумерного моделирования.

```
PROFILE [INFILE=<c>] [ANTIMONY] [ARSENIC] [ALUMINUM]  
[BORON] [BERYLLIUM] [CHROMIUM] [CARBON] [GALLIUM]  
[GERMANIUM] [MAGNESIUM] [PHOSPHORUS] [SELENIUM]  
[SILICON] [ZINC] [MASTER] [INTERSTITIALS] [CLUSTER.DAM]  
[LAYER1.DIV=<n>] [LAYER2.DIV=<n>] [LAYER3.DIV]  
[LAYER4.DIV] [LAYER5.DIV=<n>] [LAYER6.DIV=<n>]  
[LAYER7.DIV=<n>] [LAYER8.DIV=<n>] [LAYER9.DIV=<n>]  
[LAYER10.DIV=<n>] [LAYER11.DIV=<n>] [LAYER12.DIV=<n>  
[LAYER13.DIV=<n>] [LAYER14.DIV=<n>] [LAYER15.DIV=<n>]  
[LAYER16.DIV=<n>] [LAYER17.DIV=<n>] [LAYER18.DIV=<n>]
```

```
[LAYER19.DIV=<n>] [LAYER20.DIV=<n>]
```

INFILE – имя файла с профилями или загружаемый файл со стандартной структурой;

ANTIMONY, ARSENIC, BORON, GALLIUM, BERYLLIUM, CARBON, ALUMINUM, CHROMIUM, SELENIUM, INTERSTITIALS, CLUSTER.DAM, GERMANIUM, MAGNESIUM, PHOSPHORUS, SILICON и ZINC – тип примеси для файлов с примесями;

MASTER – указывает, что загружаемый файл является файлом в стандартном формате фирмы Silvaco;

LAYER1.DIV, LAYER2.DIV, ..., LAYER20.DIV – количество разбиений в каждом слое при загрузке файла со структурой, полученной в SSUPREM3.

Примеры

```
PROFILE INF=BORON.SIMS BORON
```

В этом примере по директиве PROFILE устанавливается, что информация будет добавлена только в текущую кремниевую структуру. Файл с данными BORON.SIMS должен иметь следующий формат:

```
#THIS IS SIMS DATA
0.01 1E15
0.02 1.1E15
0.04 1.3E15
0.06 1.5E15
0.1 1.7E15
0.2 1.9E15
0.4 2.6E15
...
```

В следующем примере по директиве PROFILE будет считываться файл в стандартном одномерном формате фирмы (Silvaco Standard Format – SSF). Вся информация о примесях и структуре сохраняется. Это позволяет пользователю начинать моделирование, например, в SSUPREM3, а заканчивать в модуле ATHENA. Прежде всего, необходимо задать сетку для моделирования в модуле ATHENA. По директиве PROFILE будут включены все перекрывающиеся слои, которые могут быть осаждены или выращены при создании структуры в SSUPREM3. Параметр LAYER<n>.DIV будет контролировать количество точек сетки в перекрывающихся слоях. По умолчанию шаг сетки, генерируемый для перекрывающихся слоев, равен 0.05 мкм:

```
PROFILE MASTER INF=SSUPREM3.STR LAYER1.DIV=3 LAYER2.DIV=6
```

Первый слой рассматриваемой структуры имеет 3 вертикальных шага расчетной сетки, а второй слой рассматриваемой структуры имеет 6 вертикальных шагов расчетной сетки. Файл SSUPREM3 . STR должен быть SSF файлом.

Ниже приводится список специальных случаев и их решения:

- если структура в SSUPREM3 глубже, чем структура в модуле ATHENA, то директива PROFILE расширит расчетную сетку в нижней части структуры;

- если структура в SSUPREM3 мельче, чем структура в модуле ATHENA, то по директиве PROFILE вырежется профиль из модуля ATHENA;

- загрузка SSF-файла осуществляется только при чистой (неокисленной) поверхности подложки в качестве исходного состояния. Если будет использоваться другой материал в качестве подложки, то результаты будут нереальными и непредсказуемыми;

- любые концентрации примесей, инициализированные в модуле ATHENA, будут перезаписаны, если используется директива PROFILE для загрузки SSF файла.

RATE . DEPO – назначает скорости осаждения в моделируемой установке. Эти скорости впоследствии используются в директиве DEPOSIT. Эта директива используется для задания параметров осаждения и типа установки для одной из девяти моделей осаждения, имеющих в модуле ELITE.

```
RATE.DEPO SILICON|GAAS|OXIDE|NITRIDE|POLYSILICON|
PHOTORESIST|ALUMINUM|TUNGSTEN|TITANIUM|ALGAAS|INGAAS|
SIGE|INP|PLATINUM|WSIX|TISIX|PTSIX|MATERIAL=<c>
[NAME.RESIST=<c>] [CONICAL|CVD|PLANETAR|UNIDIREC|
DUALDIREC|HEMISPHE|MONTE1|MONTE2|CUSTOM] [MACHINE=<c>]
[A.H|A.M|A.S|U.S|U.M|U.H|N.M] {INFILE=<c> [ANGLE1=<n>]
[ANGLE2=<n>] [ANGLE3=<n>] [C.AXIS=<n> [DEP.RATE=<n>]
[DIR=<n>] [DIST.PL=<n>] [ISOTROPIC=<n>] [P.AXIS=<n>]
[SIGMA.DEP=<n>] [STEP.COV=<n>] [SMOOTH.WIN=<n>]
[SMOOTH.STEP=<n>] [MCSEED=<n>] [STICK.COEF=<n>]
[SIGMA.0] [SIGMA.E]
```

CONICAL, CVD, PLANETAR, UNIDIREC, DUALDIREC, MONTE1, MONTE2, HEMISPHE и CUSTOM – наименование моделей, используемых в установках для проведения операции осаждения;

MACHINE – тип установки в директиве RATE . DEPO;

A.H, A.M, A.S, U.H, U.M, U.S и N.M – единицы измерения скорости осаждения (А/ч, А/мин, А/с, мкм/ч, мкм/мин, мкм/с и нм/мин соответственно);

ANGLE1 – угловой параметр, используемый в моделях HEMISPHE, CONICAL, UNIDIREC, DUALDIREC и PLANETAR;

ANGLE2 – угловой параметр, используемый в моделях DUALDIREC, PLANETAR и HEMISPHE;

ANGLE3 – угловой параметр, используемый в модели PLANETAR;

C.AXIS – длина центральной оси, используемой в моделях CONICAL и PLANETAR;

DEP.RATE – скорость осаждения, используемая в моделях CONICAL, CVD, UNIDIREC, DUALDIREC, HEMISPHE, PLANETAR, MONTE1 и MONTE2;

DEP.RATE – множитель, используемый в модели CUSTOM;

DIST.PL – расстояние от подложки до планетарной оси, используемое в модели PLANETAR;

SILICON, SIGE, GASS, OXIDE, NITRIDE, POLYSILICON, PHOTORESIST, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, ALGAAS, INGAAS, INP и MATERIAL – задают один из предыдущих материалов или определяемый пользователем осаждаемый материал. Параметр MATERIAL=<c> должен использоваться только для материалов, заданных пользователем;

NAME.RESIST – тип осаждаемого фоторезиста;

P.AXIS – длина планетарной оси, используемая в моделях PLANETAR и CONICAL;

SIGMA.DEP – параметр поверхностной диффузии, используемых в моделях UNIDIREC, DUALDIREC, HEMISPHE, PLANETAR, CONICAL, MONTE1, MONTE2;

SIGMA.0, SIGMA.E – добавляются в директиву RATE.DEPO для моделирования температурной зависимости поверхностной диффузии в модели осаждения. Эта зависимость имеет вид: $SIGMA.DEP = SIGMA.0 * EXP(-SIGMA.E/KT)$. Температура вводится по команде DEPOSIT;

SMOOTH.WIN и SMOOTH.STEP – размер окна в микронах и число вариантов в алгоритме сглаживания для простого геометрического алгоритма сглаживания при осаждении;

STEP.COV – шаг по пространству, используемый в модели CVD;

MCSEED – используется при генерации случайных в процессе моделирования осаждения методом Монте-Карло в программах MONTE1 и MONTE2;

STICK.COEF – коэффициент, используемый в модели MONTE1;

INFILE – имя файла, в котором содержатся информация об угле и скорости осаждения для модели CUSTOM.

Пример

По следующей директиве задается имя установки TEST для моделирования осаждения нитрида кремния со скоростью 1500 А/мин с использованием CVD модели при значении параметра STEP.COV, равном 75 %:

```
RATE.DEPO MACHINE=TEST NITRIDE DEP.RATE=1500 \
A.M CVD STEP.COV=.75
```

См. также: DEPOSIT.

RATE.DOPE – задает параметры для описания усиления процесса травления, вызванного легированием, в модуле ELITE. Модель усиления травления, вызванного легированием, неприменима для модели травления MC.PLASMA.

```
RATE.DOPE MACHINE=<c>MATERIAL=<c>IMPURITY=<c>
[ENH.MAX=<n>] [ENH.SCALE=<n>] [ENH.MINC=<n>]
```

Явление ускорения травления, вызванного легированием, описывается следующей формулой:

$$Enh = 0.5 * ENH.MAX * (\tanh(ENH.SCALE * (C - ENH.MINC)) + 1),$$

где C – концентрация примесей.

ENH.MAX – максимальное усиление травления;

ENH.MINC – предел, ниже которого это явление не учитывается. Для экспоненциально изменяющихся параметров, например, напряжения при окислении и концентрации примесей величины C и ENH.MINC берутся в виде десятичного логарифма от их действительного значения;

ENH.SCALE – диапазон, в пределах которого это явление учитывается, т.е. рассчитывается, как быстро коэффициент усиления достигает максимальной величины;

IMPURITY – любой тип примеси, используемый в модуле ATHENA, например, PHOSPHORUS и т.д. В случае усиления напряжения, вызванного окислением, параметр IMPURITY должен задаваться в виде компонента тензора напряжения, т.е. S.XX, S.YY или S.XY.

RATE.ETCH – задает скорость травления для установки, которая используется в директиве ETCH.

```
RATE.ETCH |RIE|PLASMA|MC.PLASMA) MACHINE=<c>
SILICON|GAAS|OXIDE|NITRIDE|POLYSILICON|PHOTORESIST|
ALUMINUM|TUNGSTEN|TITANIUM|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|
```

PLATINUM|WSIX|TISIX|PTSIX|MATERIAL=<c>A.H|A.M|A.S|
U.H|U.M|U.S|N.M[DIRECTIONAL=<n>] [ISOTROPIC=<n>]
[CHEMICAL=<n>] [DIVERGENCE=<n>] [PRESSURE=<n>]
[TGAS=<n>] [TION=<n>] [VPDC=<n>] [VPAC=<n>] [LSHDC=<n>]
[LSHAC=<n>] [FREQ=<n>] [NPARTICLES=<n>] [MGAS=<n>]
[MION=<n>] [CHILD.LANGM|COLLISION|LINEAR|CONSTANT]
[ENERGY.DIV=<n>] [ANGLE.DIV=<n>] [QIO=<n>] [QCHT=<n>]
[MAX.IONFLUX=<n>] [IONFLUX.THR=<n>] [K.I=<n>]
[OUTFILE=<c>] [ION.TYPES=<n>] [MC.POLYMPT=<n>]
[MC.POLYMPT=<n>] [MC.ETCH1=<n>] [MC.ETCH2=<n>]
[MC.ALB1=<n>] [MC.ALB2=<n>] [MC.PLM.ALB=<n>]
[MC.NORM.T1=<n>] [MC.NORM.T2=<n>] [MC.LAT.T1=<n>]
[MC.LAT.T2=<n>] [MC.ION.CU1=<n>] [MC.ION.CU2=<n>]
[MC.PARTS1=<n>] [MC.PARTS1=<n>]

CONICAL, CVD, PLANETAR, UNIDIREC, DUALDIREC, MONTE1, MONTE2, HEMISPHE и CUSTOM – задают определенную модель установки для осаждения;

MACHINE – имя установки в директиве RATE.DEPO;

WET.ETCH, RIE, PLASMA и MC.PLASMA задают модель используемой установки.

Параметры, используемые во всех моделях:

MACHINE – имя установки.

SILICON, OXIDE, GAAS, NITRIDE, PHOTORESIST, ALUMINUM, POLYSILICON, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – материалы, для которых устанавливаются параметры для получения скорости травления в определенной установке. Параметр MATERIAL=<c> может использоваться только пользователем при задании определенного материала.

Параметры, используемые в моделях RIE и WET.ETCH:

A.H, A.M, A.S, U.H, U.M, U.S и N.M – задают единицы измерения скорости травления (А/ч, А/мин, А/с, мкм/ч, мкм/мин, мкм/с и нм/мин соответственно);

DIRECTIONAL – компонента направления скорости травления, которая используется в модели RIE;

ISOTROPIC – скорость травления в изотропном процессе, которая используется в моделях WET.ETCH и RIE;

CHEMICAL, DIVERGENCE CHEMICAL – скорость травления в модели травления RIE, нормальная к направлению ионного пучка при ненулевом значении параметра DIVERGENCE, который задает дивергенцию пучка в модели RIE. Предполагается, что угловое распределение ионов, падающих на подложку, является гауссовым.

Параметры, используемые при моделировании плазменного травления:

PRESSURE – давление в реакторе плазменного травления;
TGAS – температура в реакторе плазменного травления;
TION – температура ионов в реакторе плазменного травления;
VPDC – величина постоянного напряжения в реакторе плазменного травления;
VPAC – величина переменного напряжения в реакторе плазменного травления;
FREQ – частота переменного тока в реакторе плазменного травления;
LSHDC – средняя толщина кожуха реактора плазменного травления;
LSHAC – AC-компонента толщины кожуха;
MGAS – атомная масса атомов газа;
MION – атомная масса ионов газа;
CHILD.LANG, COLLISION, LINEAR и CONSTANT – модель, используемая в расчете падения напряжения в плазменном кожухе. По умолчанию эта величина равна CONSTANT.
QIO – сечение момента передачи;
QCHT – сечение обмена зарядом;
MAX.IONFLUX – поток, генерируемый в установке для плазменного травления;
IONFLUX.THR – пороговая величина потока, ниже которого поток при расчете травления не учитывается;
NPARTICLES – число частиц, используемых в методе Монте-Карло для расчета ионного потока, входящего из плазмы;
ENERGY.DIV – количество энергетических интервалов, используемых при расчете плазменного ионного потока;
ANGLE.DIV – количество угловых интервалов, используемых при расчете плазменного ионного потока;
K.I – линейный коэффициент плазменной скорости;
OUTFILE – имя выходного файла, в котором сохраняется информация об энергетически-угловом распределении ионного потока. Это распределение можно отобразить в виде графика с помощью TONYPLOT.

Параметры, используемые в модели плазменного травления методом Монте-Карло:

ION.TYPES – количество различных ионов в плазме;
MS.POLYMP – количество полимерных частиц, нормализованных по отношению к объему эжектируемого материала;
MS.RFLCTDIF – коэффициент диффузионного отражения. 1 соответствует полному диффузионному отражению, 0 – идеальному зеркальному отражению;
MS.ETCH1 – параметр скорости травления для первого типа ионов (безразмерная величина);

MC.ETCH2 – параметр скорости травления для второго типа ионов (безразмерная величина);

MC.ALB1 – параметр отражения для первого типа ионов (безразмерная величина). Этот коэффициент может изменяться от 0 (нет отражения) до 1 (100% отражения);

MC.ALB2 – параметр отражения для второго типа ионов (безразмерная величина). Этот коэффициент может изменяться от 0 (нет отражения) до 1 (100% отражения);

MC.PLM.ALB – параметр отражения для полимерных частиц (безразмерная величина). Этот коэффициент может изменяться от 0 (нет отражения) до 1 (100 % отражения);

MC.NORM.T1 – нормальная температура плазмы для первого типа ионов (безразмерная величина);

MC.NORM.T2 – нормальная температура плазмы для второго типа ионов (безразмерная величина).

MC.LAT.T1 – боковая температура плазмы для первого типа ионов (безразмерная величина).

MC.LAT.T2 задает боковую температуру плазмы для второго типа ионов (безразмерная величина).

MC.ION.CU1 – плотность ионного тока плазмы для первого типа ионов (в ион/см²·с);

MC.ION.CU2 – плотность ионного тока плазмы для второго типа ионов (в ион/см²·с);

MC.PARTS1 – количество частиц, моделируемых в цикле Монте-Карло, для первого типа ионов;

MC.PARTS2 – количество частиц, моделируемых в цикле Монте-Карло, для второго типа ионов;

Примеры

Задание на моделирование травления во влажной атмосфере с использованием установки для травления кремния с соответствующими характеристиками влажного травления со скоростью 0.1 мкм/мин:

```
RATE.ETCH MACHINE=TEST SILICON WET.ETCH \  
ISOTROPIC=.1 U.M
```

Задание на моделирование плазменного травления методом Монте-Карло с заданием необходимых характеристик соответствующей установки:

```
RATE.ETCH MACHINE=MCETCH SILICON \  
MC.PLASMA ION.TYPES=1 MC.PARTS1=20000 \  
MC.NORM.T1=14.0 MC.LAT.T1=2.0 \  
MC.ION.CU1=15 MC.ETCH1=1e-05 MC.ALB1=0.2 \  

```

MC.PLM.ALB=0.5 MC.POLYMPT=5000 MC.RFLCTDIF=0.5

См. также: ETCH.

REGION – задает материал, в области которого проводится переопределение расчетной сетки. Обычно директива REGION не требуется, поскольку начальный материал подложки задается в директиве INIT. Директивы REGION должны следовать за директивами LINE. Материал должен быть задан для каждого треугольника в сетке, поэтому для каждого прямоугольника сетки следует назначить по крайней мере одну директиву REGION, по которой задается материал, включаемый в задаваемую сетку. Если директива REGION отсутствует между директивами LINE и INITIALIZE, то материал может по умолчанию быть задан по директиве INITIALIZE.

```
REGION SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|POLYSILICON|
GAAS|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|TUNGSTEN|TITANIUM|
PLATINUM|WSIX|TISIX|PTSIX|PHOTORESIST|ALUMINUM|
MATERIAL=<c> [XLO=<c>] [YLO=<c>] [XHI=<c>] [YHI=<c>]
```

SILICON, GAAS, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, WSIX, POLYSILICON, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATINUM, TISIX, PTSIX, GAS, PHOTORESIST, ALUMINUM, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – материал в рассматриваемой области. MATERIAL=<c> – параметр, который может быть задан только пользователем;

XLO, YLO, XHI и YHI – границы прямоугольной области. Значение типа <string> должно быть задано в предыдущей директиве LINE.

Пример.

В следующей директиве REGION задается кремний в качестве материала, в котором формируется сетка:

```
LINE X LOC=0 SPA=1 TAG=LEFT
LINE X LOC=1 SPA=0.1
LINE X LOC=2 SPA=1 TAG=RIGHT
LINE Y LOC=0 SPA=0.02 TAG=SURF
LINE Y LOC=1 SPA=0.1 TAG=BACK
REGION SILICON XLO=LEFT XHI=RIGHT YLO=SURF YHI=BACK
INIT
```

Если ни одна директива REGION не используется и никакой материал не задан в директиве INIT, то предполагается, что кремний является стартовым материалом.

См. также: INITIALIZE.

RELAX – команда, служит для ослабления сетки. Эта директива позволяет увеличить шаг сетки. Строка с директивой RELAX может быть помещена в любом месте входного файла. Однако команда RELAX игнорируется в режиме 1D моделирования. Директива RELAX содержит также алгоритм для релаксации сетки на поверхности моделируемой структуры.

```
RELAX [X.MIN=<n>] [X.MAX=<n>] [Y.MIN=<n>] [Y.MAX=<n>]  
[DX.SURF=<n> [SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|  
POLYSILICON|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|PHOTORESIST|  
ALUMINUM|TUNGSTEN|TITANIUM|PLATINUM|WSIX|GAAS|  
TISIX|PTSIX|MATERIAL=<c>] [DIR.X|DIR.Y|SURFACE]
```

X.MIN, X.MAX, Y.MIN и Y.MAX – угловые координаты (в мкм);
SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON,
TUNGSTEN GAAS, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX,
ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP, PHOTORESIST или ALUMINUM и
MATERIAL – материал в директиве RELAX. Если материал не задан, то релаксация сетки проводится во всех областях (материалах) моделируемой структуры, причем только для того материала, который задан в директиве RELAX. Параметр MATERIAL=<c> может использоваться только для тех материалов, которые определены пользователем;

DIR.X или DIR.Y, заданные как false, запрещает перестройку сетки в выбранном направлении. DIR. Параметр X может быть задан только для подложки или для всей структуры;

SURFACE – релаксация сетки на поверхности моделируемой структуры;
DX.SURF – минимальный размер поверхностных сегментов.

Примеры

Данная директива изменяет сетку в прямоугольной области кремния с левой стороны структуры до 1 и от $y = 0$ до нижней части кремния:

```
RELAX SILI X.MAX=1 Y.MIN=0
```

Директива RELAX не будет проводить никаких изменений в сетке, если треугольники будут результатом релаксации сетки. Вследствие этого директива RELAX будет работать только с такой сеткой, которая была вначале задана по директиве LINE в модуле ATHENA. Для других структур может использоваться директива DEVEDIT.

SELECT – выбирает переменную для печати и выдачи графика и может быть заменена обращением к TONYPLOT.

SELECT [Z=<c>] [LABEL=<c>] [TITLE=<c>] [TEMPERATURE=<n>]

SELECT – переменная, которая будет выведена на печать по директиве PRINT.1D. Каждая директива SELECT аннулирует любую другую директиву;

Z – выбирается равным заданной переменной. Операторы *, /, +, -, ^ действуют как стандартные алгебраические операторы. Значение Z может быть присвоено любой векторной переменной из представленных ниже:

- ANTIMONY – концентрация сурьмы;
- ARSENIC – концентрация мышьяка;
- BORON – концентрация бора;
- SI.STAR – равновесная концентрация междоузлий;
- SV.STAR – равновесная концентрация вакансий;
- DOPING – чистая концентрация активных примесей;
- ELECTRONS – концентрация электронов;
- INTERSTITIAL – концентрация междоузлий;
- NI – собственная концентрация электронов;
- OXIGEN – концентрация кислорода;
- PHOSPHORUS – концентрация фосфора;
- Sxx, Sxy, Syu – компоненты напряжения в декартовой системе координат;
- TRAP – концентрация незаполненных ловушек для междоузлий;
- VACANCY – концентрация вакансий;
- X – x-координаты;
- Y – y-координаты;
- X.V – x-координата скорости;
- Y.V – y-координата скорости.

Потенциал рассчитывается с использованием условия нейтральности зарядов. Концентрация электронов рассчитывается из значения потенциала с использованием статистики Больцмана. Ниже представлен список функций в директивы SELECT:

- abs – абсолютное значение;
- active – доля активной заданной примеси;
- erf – функция ошибок;
- erfc – комплементарная функция ошибок;
- exp – экспонента;
- gradx – производная по x-координате;
- grady – производная по y-координате;
- log – логарифм;
- log10 – логарифм по основанию 10;

- $\langle \text{mat1} \rangle @ \langle \text{mat2} \rangle$ – возврат величины y на поверхности раздела $\langle \text{mat1} \rangle$ и $\langle \text{mat2} \rangle$ вдоль вертикального сечения в заданном положении;
- `scale` – масштабирование величины по ее заданному максимальному значению;
- `sqrt` – корень квадратный.

`TITLE` – строка, которая печатается большими буквами поперек верхней части графика. По умолчанию в этой строке пишется слово `ATHENA`;

`TEMPERATURE` – температура, при которой рассчитывается данное выражение. По умолчанию это температура последнего диффузионного процесса. Данный параметр должен быть задан (по умолчанию или явным образом) при печати полной активной концентрации или при подготовке файла со структурой.

Примеры

В следующей директиве выбран десятичный логарифм концентрации мышьяка в качестве переменной при задании директивы `PRINT.1D`:

```
SELECT Z=LOG10 (ARSEN)
```

В следующей директиве выбрана концентрация фосфора минус постоянная концентрация $5.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ в качестве переменной при задании директивы `PRINT.1D`:

```
PRINT.1D variable.  
SELECT Z=(PHOS - 5.0E14)
```

В следующей директиве выбрана разность между профилем фосфора и аналитическим профилем в качестве переменной при задании директивы `PRINT.1D`:

```
SELECT Z=(PHOS - 1.0E18 * EXP (Y * Y / 1.0E-8))
```

В следующей директиве выбрано произведение концентраций междоузлий и вакансий в качестве переменной при задании директивы `PRINT.1D`:

```
SELECT Z=(INTER * VACAN - CI.STAR * CV.STAR)
```

При использовании функций `log` или `log10` необходимо убедиться, что аргумент положителен и не равен нулю. Для примера всегда используйте `log10(abs(doping)+1)`.

SET – имеет два назначения:

- задает выбор в процессе выполнения программы;

- задает строки или числа для изменения переменной.

Эта команда служит для включения некоторых полезных параметров. Директива UNSET – наоборот, для выключения.

```
SET [NOEXECUTE|PROMPT=<c>|ECHO] или SET variable = <value>
```

NOEXECUTE – служит для проверки всех введенных директив. Если этот “флаг” включен, то ATHENA проверяет правильность введенных директив на синтаксис, но директивы при этом не выполняются.

PROMPT – инициализирует подсказку в буквенной строке <c>. По умолчанию используется подсказка <ATHENA>. Если программа запущена в среде DECKBUILD, то не рекомендуется делать какие-то изменения в этой строке.

Пример численной переменной. В следующей директиве устанавливается переменная и выражение для оперирования с ней для использования в последующей обработке синтаксиса:

```
SET MYDOSE=1e13
SET HALFMYDOSE=$"MYDOSE"/2
IMPLANT BORON DOSE=$"HALFMYDOSE"
```

Пример строковой переменной. В этом примере используется директива SET для задания строковой переменной. Сохраненный файл будет иметь имя mosfet_fred.str.

```
SET MYNAME=fred
STRUCTURE OUTFILE=mosfet_"myname".str
```

См. также: UNSET, EXTRACT.

SOURCE – инициализирует директивы из заданного файла. Директивы считываются до маркера “конец файла”. Директива SOURCE особенно полезна при выполнении большой группы директив.

```
SOURCE <filename>
```

Пример

По следующей директиве содержимое файла под именем test.in включается во входной файл.

```
SOURCE TEST.IN
```

STRESS – рассчитывает упругие напряжения, обусловленные внутренними деформациями в тонкой пленке или термическими деформациями.

```
STRESS [TEMP1=<n>] [TEMP2=<n>] [NEL=<n>]
```

TEMP1 и TEMP2 – начальная и конечная температуры в градусах Цельсия для расчета термических деформаций;

NEL – число узлов в элементном треугольнике (по умолчанию – 6).

Примеры

По следующей директиве рассчитываются напряжения в подложке и пленке, обусловленные слоем нитрида кремния, в котором внутреннее напряжение составляет $1.4 \cdot 10^{14}$ дин/см² при равномерном осаждении:

```
MATERIAL NITRIDE INTRIN.SIG=1.4E10  
STRESS
```

По следующей директиве рассчитываются термические напряжения во всей структуре в результате изменения температуры от 1000 до 100 °C:

```
STRESS TEMP1=1000 TEMP2=100
```

См. также: MATERIAL.

STRETCH – растягивает структуру около выделенной области.

```
STRETCH SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|POLYSILICON|  
TUNGSTEN|TITANIUM|PLATINUM|WSIX|TISIX|PTSIX|GAAS|  
ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|PHOTORESIST|ALUMINUM|  
MATERIAL=<c> [LENGTH=<n>] [X.VAL=<n>] [Y.VAL=<n>]  
[STRETCH.VAL=<n>] [SPACING=<n>] [DIVISION=<n>] [SNAP]
```

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, TUNGSTEN, GAAS, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, PHOTORESIST, ALUMINUM, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – материал, в котором будет проведено растягивание структуры. Параметр MATERIAL=<c> может использоваться только для материалов, заданных пользователем;

LENGTH – длина, до которой будет растягиваться заданная область материала. Альтернативно может быть задано X.VAL, используя STRETCH.VAL для задания соответственно положения вертикальной линии сечения и расстояния, до которого будет растягиваться заданная область;

SPACING – шаг сетки внутри растягиваемой области;

DIVISION – количество делений сетки внутри растягиваемой области;

SNAP – положение, в котором нужно отметить X.VAL (изменить величину или положение) до ближайшей точки сетки перед растягиванием. Эту процедуру рекомендуется проводить при генерации элементного треугольника с тупым углом. По умолчанию это значение true;

X.VAL и Y.VAL – вертикальная и горизонтальная координаты, в которых должно проводиться растягивание;

LENGTH – аннулирует параметры STRETCH.VAL, X.VAL и Y.VAL. Если задана величина LENGTH, то линия сечения будет проходить через центр заданного материала. По умолчанию материалом, в котором проводится растягивание, является поликремний.

Примеры

По следующей директиве будет растягиваться структура около центра области поликремния. Эта структура может быть МОП-транзистором с поликремниевым затвором длиной 1 мкм. Команда STRETCH создаст МОП-транзистор длиной 1.8 мкм:

```
STRETCH LENGTH=1.8
```

В следующем примере будет растянута структура с изоляцией окислом от точки с координатой X 2.3 мкм на величину 1.3 мкм. Растянутая область будет содержать 14 узлов сетки.

```
STRETCH OXIDE X.VAL=2.3 DIVISIONS=14 STRETCH.VAL=1.3
```

STRIP – удаляет все фоторезистивные и барьерные материалы. Эта команда эквивалентна команде ETCH.

```
STRIP [PHOTORESIST|SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|  
POLYSILICON|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|BARRIER|ALUMINUM|  
TUNGSTEN|TITANIUM|PLATNIUM|WSIX|TISIX|PTSIX|GAAS|  
MATERIAL=<c>]
```

PHOTORESIST, SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, BARRIER, ALUMINUM, TUNGSTEN, TITANIUM, PLATNIUM, WSIX, TISIX, PTSIX, GAAS, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP и MATERIAL – стравливаемые материалы. Если материалы не заданы, то удаляется фоторезист и барьерные материалы. По команде MATERIAL=<c> удаляется только материал, заданный пользователем.

Пример.

По следующим директивам осаждается фоторезист для создания маски под именем CONT, вытравливается окисел через маску и по директиве STRIP фоторезист удаляется. В данном примере требуется использование модуля MASKVIEWS:

```
MASK NAME="CONT"  
ETCH OXIDE DRY THICK=.2  
STRIP
```

См. также: MASK, ETCH.

STRUCTURE – по этой директиве записывается информация о сетке и результате моделирования или о перевернутой или зеркальной структуре.

```
STRUCTURE [OUTFILE=<c>] [INFILE=<c>] [OPC=<n>] [FLIP.Y]  
[MIRROR] [LEFT|RIGHT|TOP|BOTTOM] [INTENSITY|MASK]  
[REMOVE.GAS]
```

OUTFILE – имя записываемого файла. Существующие файлы с тем же именем будут перезаписаны под новым именем.

INFILE – имя части файла, полученного с использованием модуля MASKVIEWS;

FLIP.Y – указывает, что данная структура должна быть отображена относительно оси *x*;

MIRROR, LEFT, RIGHT, TOP и BOTTOM – зеркально отображают сетку относительно ее левой, правой, верхней или нижней границы соответственно. По умолчанию отображение осуществляется относительно правой оси.

SYSTEM – позволяет осуществлять любую команду в UNIX C-оболочке в рамках входного файла.

Примеры:

Следующая команда удаляет все файлы test*.str перед директивой DIFFUSE, в которой используется параметр DUMP:

```
SYSTEM \rm -rf test*.str  
DIFFUSE .... DUMP=1 DUMP.PREF=test
```

Системная команда и UNIX-команды взаимно чувствительны. UNIX-команды могут быть размещены на одной строке с системной командой с помощью оператора (;). В следующем примере запускается третья часть программы, которая считывает и записывает файлы в формате Silvaco с именами input.str и output.str:

```
STRUCTURE OUTF=mysave.str
SYSTEM mv mysave.str input.str; source myprog.exe; \
mv output.str myrestart.str
INIT INF=myrestart.str
```

Символ > в UNIX-системе не поддерживается системной командой.

TONYPLOT – запуск графического постпроцессора TONYPLOT. По директиве TONYPLOT файл с данными для графика автоматически сохраняется и загружается TONYPLOT. Во всплывающем окне TONYPLOT отображаются границы материалов. Используйте меню Plot -> Display для вызова более подробных опций меню.

Примеры

По следующей команде отображается файл myfile.str:

```
tonyplot -st myfile.str
```

По следующей директиве накладываются отображения файлов myfile1.str и myfile2.str:

```
tonyplot -overlay myfile1.str myfile2.str
```

TRAP – задает коэффициенты в модели захвата междоузлий. Указанные коэффициенты могут быть заданы для всех материалов моделируемой структуры. По умолчанию задаются только коэффициенты для кремния. Для поликремния по умолчанию задаются такие же коэффициенты, как и для кремния.

```
TRAP SILICON|OXIDE|OXYNITRIDE|NITRIDE|POLYSILICON|
GAAS|ALGAAS|INGAAS|SIGE|INP|TUNGSTEN|TITANIUM|
PLATINUM|WSIX|TISIX|PTSIX|GAS|ALUMINUM|PHOTORESIST|
MATERIAL=<<c>>| [ENABLE] [TOTAL=<n>] [FRAC.0=<n>]
[FRAC.E=<n>]
```

SILICON, OXIDE, OXYNITRIDE, NITRIDE, POLYSILICON, TUNGSTEN, GAAS, TITANIUM, PLATINUM, WSIX, TISIX, PTSIX, GAS, ALGAAS, INGAAS, SIGE, INP, ALUMINUM, PHOTORESIST и MATERIAL – материал, для которого устанавливаются необходимые параметры. Параметр MATERIAL=<c> – используется только для материала, назначенного пользователем;

ENABLE – показывает, что ловушки назначаются только для данного материала;

TOTAL – полное количество ловушек (в см⁻³). По умолчанию для кремния эта величина равна $5.0 \cdot 10^{17}$ см⁻³;

FRAC.0 и FRAC.E – доли пустых ловушек в состоянии равновесия.

Пример

По следующей директиве включается модель ловушек, задаются их полное число, равное $5.0 \cdot 10^{17}$, и их относительная доля, равная 0.5:

```
TRAP SILICON TOTAL=5.0E17 FRAC.0=0.5 FRAC.E=0.0 ENABLE
```

%UNDEF – обнуляет заданный ранее макрос.

```
%UNDEF <macro_name>
```

Аналогична UNIX команде UNALIAS.

Пример

Следующая последовательность команд:

```
%DEFINE MACRO THIS IS A MACRO  
ECHO MACRO  
%UNDEF MACRO  
ECHO MACRO
```

создает следующий выходной файл:

```
ATHENA > %DEFINE MACRO THIS IS A MACRO  
ATHENA > ECHO MACRO  
THIS IS A MACRO  
ATHENA > %UNDEF MACRO  
ATHENA > ECHO MACRO  
MACRO
```

Макрокоманду MACRO можно не задавать.

NOEXECUTE – по этой команде все введенные директивы будут выполняться только в режиме проверки, т.е. будет проверяться их синтаксис без выполнения.

PROMPT – превращает буквенную строку <c> в подсказку. По умолчанию эта строка – <ATHENA>.

ECHO – выводит на экран все строки входного файла.

VACANCY – задает все коэффициенты, относящиеся к кинетике вакансий. Данная директива задается вместе с директивой INTERSTITIAL.

ЛИТЕРАТУРА

1. <http://www.silvaco.com>.
2. Нелаев В.В., Стемпицкий В.Р. Технологическое проектирование интегральных схем. Программа SSUPREM4: Учеб. пособие.- Мн.: БГУИР, 2004.- 102 с.
3. Нелаев В.В. Физическое моделирование технологических процессов в программе SUPREM II: Учеб. пособие.- Мн.: БГУИР, 1998.- 37 с.
4. Нелаев В.В. Программа SUPREM II моделирования технологии изготовления интегральных схем: Метод. пособие.- Мн.: БГУИР, 1998.- 26 с.
5. ATHENA User's Manual. 2D Process simulation software. SILVACO International. November, 2003.

Библиотека БГУИР

Учебное издание

**Нелаев Владислав Викторович,
Стемпицкий Виктор Романович**

**РАБОТА В СРЕДЕ ПАКЕТА ATHENA ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ
ТЕХНОЛОГИИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ МИКРОСХЕМ**

Учебное пособие по дисциплине
«Основы САПР в микроэлектронике»

для студентов специальностей

I-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы»,

I-41 01 03 «Квантовые информационные системы»

всех форм обучения

Редактор Н.А. Бебель
Корректор Е.Н. Батурчик

Подписано в печать 19.04.2005.
Гарнитура «Таймс».
Уч.-изд. л. 7,5.

Формат 60x84 1/16.
Печать ризографическая.
Тираж 150 экз.

Бумага офсетная.
Усл. печ. л. 8,25.
Заказ 538.

Издатель и полиграфическое исполнение: Учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»
Лицензия на осуществление издательской деятельности №02330/0056964 от 01.04.2004.
Лицензия на осуществление полиграфической деятельности №02330/0133108 от 30.04.2004.
220013, Минск, П. Бровки, 6