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

В. В. НЕЛАЕВ, В. Р. СТЕМПИЦКИЙ, В. С. КОТОВ

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ МИКРОСХЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА КОМПАНИИ SYNOPSYS

Рекомендовано УМО по образованию в области информатики и радиоэлектроники в качестве учебно-методического пособия для студентов, получающих высшее образование по специальности 1-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы»

Минск БГУИР 2012

Рецензенты:

профессор кафедры физической электроники Белорусского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор В. М. Борздов;

кафедра «Интеллектуальные системы» Белорусского национального технического университета (протокол №10 от 08.02.2012)

Нелаев, В. В.

Н49 Проектирование интегральных микросхем с использованием программного комплекса компании Synopsys: учеб.-метод. пособие / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий, В. С. Котов. – Минск : БГУИР, 2012. – 76 с. : ил.

ISBN 978-985-488-506-3.

Пособие посвящено описанию физических моделей технологических операций формирования структурных элементов приборов микроэлектроники, используемых в программе TSUPREM-4, входящей в состав комплекса компании SYNOPSYS – одного из мировых лидеров в области разработки средств проектирования в микроэлектронике. Для ознакомления с функциональными возможностями TSUPREM-4 приведены результаты проектирования некоторых стандартных технологических маршрутов изготовления приборов микроэлектроники. Приведены также основные положения работы в среде TSUPREM-4.

УДК 621.3.049.77(075.8) ББК 32.844.1я73

ISBN 978-985-488-506-3

 © Нелаев В. В., Стемпицкий В. Р., Котов В. С., 2012
 © УО «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», 2012

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1 МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ	
В ПРОГРАММЕ TSUPREM-4	5
1.1 Модели окисления кремния	5
1.1.1 Скорость роста окисла	6
1.1.2 Концентрационная зависимость констант в модели Дила-Гроува	7
1.1.3 Численная реализация моделей окисления	9
1.1.4 Окисление поликремния	17
1.1.5 Окисление в среде N ₂ O	17
1.1.6 Скорость химической реакции на поверхности	18
1.1.7 Усиление диффузии примесей в окисле	19
1.1.8 Модели для расчета механических напряжений	22
1.2 Модели ионной имплантации	26
1.2.1 Аналитическая модель ионной имплантации	27
1.2.2 Аналитическая модель образования дефектов кристаллической	
решетки при ионной имплантации	28
1.2.3 Аналитическая модель имплантации в программе Taurus	29
1.2.4 Моделирование ионной имплантации методом Монте-Карло	30
1.2.5 Моделирование ионной имплантации в аморфную	
и кристаллическую структуры	31
1.2.6 Моделирование эффекта туннелирования	31
2 ОПИСАНИЕ МОДЕЛИРУЕМОИ СТРУКТУРЫ И РЕЗУЛЬТАТОВ	
РАСЧЕТОВ В ПРОГРАММЕ TSUPREM-4	33
2.1 Общие сведения	33
2.2 Задание структуры вычислительной сетки	34
2.2.1 Описание структуры сетки	34
2.2.2 Модификация сетки при проведении моделирования отдельных	• •
технологических операций.	38
З ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О РАБОТЕ В СРЕДЕ ПРОГРАММЫ TSUPREM-4	42
3.1 Запуск программы и обработка результатов	42
3.1.1 Результаты работы программы	42
3.2 Типы файлов, используемых в TSUPREM-4	43
3.2.1 Входные файлы	44
3.2.2 Выходные файлы	45
3.2.3 Библиотечные файлы	47
4 ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИИ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ	40
ХАРАКТЕРИСТИК ПРИБОРОВ В СРЕДЕ ПРОГРАММЫ ТSUPREM-4	49
4.1 Моделирование технологического процесса формирования структуры	40
и электрических характеристик оиполярного <i>n-p-n</i> -транзистора	49
4.2. моделирование технологического процесса формирования структуры	(\mathbf{c})
и электрических характеристик МОП-транзистора	05
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	/0 2
	3

введение

Данное пособие является продолжением ранее выпущенной авторами серии учебно-методических изданий, посвященных описанию методов и программных средств, предназначенных для технологического [1–7], приборного [1] и схемотехнического [8] проектирования изделий микроэлектроники. Одна из целей выпуска этой серии пособий состоит в ознакомлении студентов соответствующих специальностей и профессионалов в области проектирования в микроэлектронике с программными комплексами ведущих компанийразработчиков (Silvaco [9], Cadence [10], Synopsys [11] и Mentor Graphics [12]) не только для овладения работой в их средах, получения информации об их функциональных назначениях, достоинствах и недостатках, но также и для осознанного выбора на основе анализа приобретенной информации того или иного программного комплекса, оптимально подходящего для выполнения конкретного проекта.

Каждый программный комплекс указанных компаний имеет свои специфические особенности в используемых физических моделях, численных методах их реализации, языках, используемых при написании программных кодов, и операционных системах, базовых аппаратных средств и пр. В учебнометодических изданиях [1-8] содержится описание лишь основных программных средств, составляющих «лицо» программного комплекса каждой из указанных компаний. Этому принципу авторы придерживались и при составлении предлагаемого издания, посвященного описанию программного комплекса компании Synopsys [11]. Продукты Synopsys обеспечивают разработку сложнейших сверхбольших интегральных схем (СБИС) и систем на кристалле (System on Chip, SoC). Компания также поставляет IP-блоки и предоставляет услуги по разработке СБИС, что позволяет заказчикам упростить процесс проектирования и сократить время выхода своей продукции на рынок. Системы компьютерного проектирования компании Synopsys предназначены для работы с любыми КМОП-технологиями, вплоть до глубоко субмикронных (0,13 мкм и ниже) на всех этапах маршрута проектирования [13].

Из предлагаемых компанией Synopsys программных средств проектирования следует, прежде всего, выделить модуль TSUPREM-4, предназначенный для технологического проектирования (Technology Computer Aided Design, TCAD). Разработчиком модуля TSUPREM-4 является компания Avant!, которую Synopsys приобрела в 2002 году.

Предлагаемое пособие посвящено описанию физических моделей технологических операций формирования структурных элементов приборов микроэлектроники, используемых в программе TSUPREM-4, результатов проектирования некоторых стандартных технологических маршрутов изготовления приборов микроэлектроники с целью ознакомления с основными функциональными возможностями и основных положений работы в среде TSUPREM-4.

1 МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В ПРОГРАММЕ TSUPREM-4

Модели технологических операций, используемые в программе TSUPREM-4, принципиально подобны физическим моделям, заложенным в соответствующей программе SSUPREM4 программного комплекса компании Silvaco, и описаны в [1] и [4]. Далее представлены основные отличительные особенности моделей программы TSUPREM-4 по сравнению с SSUPREM4.

1.1 Модели окисления кремния

В программе TSUPREM-4 реализовано четыре модели окисления: VERTICAL, COMPRESS, VISCOUS и VISCOELA, позволяющие описывать процесс окисления в произвольных структурах. Для определения скорости роста окисла в каждой точке на границе раздела окисел/кремний решается уравнение

$$\vec{F} = h \left(C^* - C_0 \right) \vec{n}_s \,, \tag{1.1}$$

где h – коэффициент массопереноса в газовой фазе; $C^* = HP_{ox}$, где H – коэффициент в законе Генри для окисла и газа-окислителя; P_{ox} – давление газа окислителя, C_0 – концентрация окислителя на поверхности подложки; \vec{n}_s – единичный вектор нормали к поверхности окисла, направленный внутрь окисла.

Скорость роста окисла определяется из выражения

$$\frac{d\vec{Y}}{dt} = \frac{\vec{F}}{N_1} + r_{thin} , \qquad (1.2)$$

где $\frac{d\vec{Y}}{dt}$ характеризует скорость перемещения поверхности раздела относительно окисла; N_1 – количество молекул газа окислителя, необходимое для образования одного кубического сантиметра окисла; r_{thin} – параметр роста окисла в модели на начальной стадии окисления, величина которого зависит от типа используемой модели (аналитической или численной).

Различие между указанными моделями заключается в методе расчета направления распространения роста окисла.

1.1.1 Скорость роста окисла

Уравнение (1.1) описывает поток молекул окислителя, попадающих в окисел из окружающего газа. Коэффициент массопереноса газовой фазы *h* определяется из уравнения

$$h = \text{TRANS.0} \cdot \exp\left(\frac{-\text{TRANS.E}}{kT}\right),$$
 (1.3)

где параметры **TRANS.0** и **TRANS.E** определяются с использованием директивы **AMBIENT** и параметрами **OXIDE** и **AMBIENT**. Коэффициент H в законе Генри задается для каждого типа окислителя (O₂ или H₂O) параметром **HENRY.CO** в директиве **AMBIENT**.

Диффузия окислителя в окисле моделируется с использованием выражения

$$\vec{F} = D\vec{\nabla}C ,$$

где D – коэффициент диффузии окислителя в окисле; ∇ – оператор градиента; C – локальная концентрация окислителя.

Коэффициент диффузии рассчитывается исходя из параболического коэффициента скорости окисла *B*:

$$D = B \frac{N_1}{2C^*},$$

$$A = 2D \left(\frac{1}{k_s} + \frac{1}{h}\right)$$
(1.4)

И

$$B = \frac{2DC^*}{N_1}$$

где параметр N₁ определяется из выражений:

$$N_1 = \begin{cases} \mathbf{THETA} & \text{для } \mathbf{O}_2, \\ \mathbf{2} \cdot \mathbf{THETA} & \text{для } \mathbf{O}_2. \end{cases}$$
(1.5)

В (1.5) **ТНЕТА** – параметр в директиве **AMBIENT**. Коэффициент диффузии рассчитывается из параболической константы роста окисла *B*, определяемой уравнением

6

$$B=p_0p_{\rm P}p_{\rm Cl},$$

где p_0 – параболическая константа в модели скорости окисления; p_P , p_{Cl} – константы, определяющие зависимость скорости окисления от парциального давления и концентрации хлора соответственно.

Коэффициент диффузии для других материалов определяется следующим образом:

$$D = \mathbf{D.0} \cdot \left(\frac{-\mathbf{D.E}}{kT}\right),$$

где **D.0** и **D.Е** – параметры директивы **AMBIENT**.

Скорость, с которой молекулы окислителя взаимодействуют с кремнием на границе раздела окисел/кремний, определяется уравнением

$$\vec{F} = k_s C \vec{n}$$
.

Скорость реакции k_s определяется из уравнения (1.4):

$$k_s = \frac{B}{A} \cdot \frac{N_1}{C^*},$$

где *k* << *h*. Для поликристаллических материалов значение коэффициента *k*_s выше по сравнению с монокристаллическими из-за наличия границ зерен.

Отношение $\frac{B}{A}$, представляющее собой линейный коэффициент в выражении для роста окисла в линейно-параболической модели Дила – Гроува, задается выражением

$$\frac{B}{A} = l_0 \, l_{\rm P} \, l_{\rm C} \, l_{\rm Cl} \,, \tag{1.6}$$

где l_0 – линейная константа в модели скорости окисления, l_P , l_C , l_{Cl} – константы, определяющие зависимости скорости окисления от парциального давления, концентрации электронов и концентрации хлора соответственно.

1.1.2 Концентрационная зависимость констант в модели Дила-Гроува

Зависимость коэффициента $l_{\rm C}$ в выражении (1.6) от концентрации электронов C_V задается следующими выражениями:

 $l_{\rm C} = \begin{cases} 1 & \text{для аналитической модели окисления,} \\ 1 + \gamma_V (C_V - 1) & \text{для численной модели окисления,} \end{cases}$

$$\gamma_V = \mathbf{GAMMA.0} \cdot \exp\left(\frac{-\mathbf{GAMMA.E}}{kT}\right),$$
$$C_V = \frac{1 + C^+ \left(\frac{n_i}{n}\right) + C^- \left(\frac{n}{n_i}\right) + C^= \left(\frac{n}{n_i}\right)^2}{1 + C^+ + C^- + C^=},$$

а GAMMA.0 и GAMMA.E – параметры, задаваемые директивой AMBIENT для каждого типа окислителя; n – концентрация электронов на границе раздела Si/SiO₂, C^+ , C^- , C^- – нормированные собственные концентрации положительных, отрицательных и дважды отрицательных вакансий:

Зависимость $\frac{B}{A}$ от концентрации носителей является функцией положения вдоль границы раздела Si/SiO₂ и используется только в численной модели окисления. Скорость химической реакции окисления на поверхности зависит от кристаллографической ориентации подложки.

Режим формирования тонкого окисла. В режиме окисления с формированием тонкого слоя окисла константа роста в (1.2) задается согласно следующему выражению:

$$r_{thin} = \mathbf{THINOX.0} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{THINOX.E}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{y_{eff}}{\mathbf{THINOX.L}}\right) \times \left(-\frac{\sigma_N}{\mathbf{N.THIN.0} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{N.THIN.E}}{kT}\right)}\right),$$

8

где **THINOX.0**, **THINOX.E**, **THINOX.L** – параметры, которые устанавливаются директивой **AMBIENT** для каждого типа окислителя. Для каждой из трех ориентаций кремниевой подложки и для поликремния возможно задание различных значений **THINOX.0**, **THINOX.E**, **THINOX.L** или **POLYSILI** в директиве **AMBIENT**. Эффективная толщина *y*_{eff} в каждой точке окисляемой поверхности рассчитывается как толщина окисла, необходимая для создания требуемой концентрации окислителя в одномерном решении уравнения Дила-Гроува.

Различные значения N.THIN.0 и N.THIN.Е могут быть заданы для каждой из трех кристаллографических ориентаций кремния или для поликремния посредством задания параметров <111>, <110>, <100> или POLYSIL директивы AMBIENT.

Численные модели окисления не имеют ограничений по начальной толщине окисла. Значение параметра **INITIAL** необязательно должно соответствовать толщине окисла в исходной структуре, поскольку оно используется в качестве толщины «естественного» окисла, который изначально всегда присутствует в моделируемой структуре.

1.1.3 Численная реализация моделей окисления

Модель VERTICAL является простейшей из численных моделей окисления в TSUPREM-4. В этой модели предполагается, что граница раздела окисел/кремний движется в направлении +y, в то время как окисел растет в направлении -y. При этом предполагается, что существует единственная активная граница раздела окисел/кремний с окислом, расположенным сверху. Все слои, находящиеся выше границы раздела, движутся вместе с поверхностью окисла, а слои, расположенные ниже границы раздела, рассматриваются как неподвижные. Поскольку окисел растет вдоль координаты y, скорость его роста зависит только от кристаллографической ориентации подложки (и не зависит от ориентации границы раздела).

Модель VERTICAL является и самой быстрой по скорости расчетов. Ее удобно использовать при моделировании равномерного окисления с произвольной начальной толщиной окисла (при этом директиву INITIAL можно и не задавать) и для локального окисления, когда исходная структура почти планарна. Эту модель нельзя использовать при моделировании окисления неровных поверхностей, канавок и других непланарных структур. Модель VERTICAL может использоваться для моделирования структур кремний-на-изоляторе при условии, что окисление будет проходить только на одной границе раздела окисел/кремний. При этом окислитель не должен попадать на нижележащий слой окисла. Следует отметить, что модель VERTICAL не позволяет моделировать окисление поликремния.

В модели **COMPRESS** рассматривается вязкое движение окисла в процессе окисления. Движение границы раздела окисел/кремний является двухмерным (движение перпендикулярно к границе раздела); скорость роста окисла зависит от изменения кристаллографической ориентации вдоль границы раздела. Вязкое движение окисла рассчитывается в двухмерном пространстве с использованием линейных (3-узловых) конечных элементов.

Название **COMPRESS** происходит от используемого в этой модели условия, состоящего в том, что сжимаемость моделируемой среды должна быть достаточно малой, чтобы результаты расчетов были адекватны эксперименту. Вследствие простоты этой модели и условия малой сжимаемости модель **COMPRESS** нельзя использовать для точного расчета деформаций. В этой модели не учитывается влияния деформации на процесс окисления.

Модель сжимаемого вязкого течения (Compressible Viscous Flow). Распространение окисла в виде процесса «течения» может быть описано уравнением ползучести:

$$\mu \nabla^2 \vec{V} = \vec{\nabla} P, \qquad (1.7)$$

где μ – сдвиговая вязкость окисла; \vec{V} – локальная скорость; P – гидростатическое давление.

Условие несжимаемости можно записать в следующем виде:

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{V}=0.$$

Для решения этого уравнения в элементе, состоящем из трех узлов, условие несжимаемости модифицируется таким образом, чтобы связать дивергенцию скорости с давлением:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = -\left(\frac{1-2\nu}{\mu}\right),\tag{1.8}$$

где v – значение, задаваемое параметром **POISS.R** в директиве **MATERIAL**, является параметром аналогичным коэффициенту Пуассона. Вязкость определяется по аналогии с упругой моделью:

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)},\tag{1.9}$$

где E задается параметром YOUNG.M в директиве MATERIAL. Уравнения (1.7), (1.8) и (1.9) применяются ко всем материалам, кроме монокристаллического кремния, для которого данные параметры постоянны.

Граничные условия. Расчет механических напряжений в направлении, нормальном к границе раздела материалов, производится вдоль всей границы

раздела, тогда как напряжение, нормальное к поверхности, остается равным нулю. Скольжение между материалами на границе раздела отсутствует.

Параметры модели. Значения параметров YOUNG.M и POISS.R для каждого материала заданы по умолчанию, кроме алюминия и фоторезиста, которые не должны присутствовать в структуре в процессе окисления. Для материалов, заданных пользователем, значения данных параметров задаются такими же, как и для модели COMPRESS.

Модель **COMPRESS** рекомендуется использовать для моделирования окисления планарных структур, а также структур, содержащих поликремний, когда нет необходимости рассчитывать механические напряжения. Поскольку эта модель не учитывает эффекты, связанные с влиянием механических напряжений на процесс окисления, ее следует использовать при удовлетворении хотя бы одного из следующих условий:

- структура является планарной;

- величина выращенного окисла мала;

- точная форма получаемого окисла не критична.

Если ни одно из данных условий не удовлетворено, то следует использовать модели VISCOELA или VISCOUS. Модель COMPRESS работает медленнее, чем VISCOUS, и требует большей памяти при расчетах.

Модель VISCOUS описывает вязкое течение окисла в процесс окисления. Движение границы раздела окисел/кремний рассчитывается в двухмерном пространстве (движение перпендикулярно к границе раздела), при расчете скорости окисления учитывается кристаллографическая ориентация вдоль границы раздела. Вязкое течение окисла рассчитывается в двух направлениях с использованием семи узловых конечных элементов, что позволяет достичь требуемой точности при расчете.

Несжимаемое вязкое течение. В представленной ниже модели (1.10) уравнения и граничные условия остаются такими же, как и для модели **COMPRESS** (1.7, 1.9), за исключением того, что учитывается поверхностное натяжение, а также используется иной набор параметров. Для каждого материала вязкость задается следующим образом:

$$\mu_0 = \mathbf{VISC.0} \cdot \exp\left(\frac{-\mathbf{VISC.E}}{kT}\right),\tag{1.10}$$

где VISC.0 и VISC.Е – параметры директивы MATERIAL. Параметр v, который определяет степень сжатия в уравнении (1.9), задается параметром VISC.X. Значение параметра v для всех материалов (за исключением алюминия и фоторезиста) по умолчанию равно 0,499, что приводит к незначительной сжимаемости. Для материалов, задаваемых пользователем, этот параметр должен быть задан таким же, как в модели VISCOUS.

Компоненты напряжения определяются из следующих уравнений для каждого материала:

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \frac{\mu}{\frac{1}{2} - \nu} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right),$$

$$\sigma_{xx} - \sigma_{yy} = 2\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial u_y}{\partial y} \right),$$

$$\sigma_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right),$$

где σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{xy} – компоненты тензора напряжений; u_x и u_y – это x и y компоненты скорости. Напряжения в чисто вязкой модели пропорциональны скоростям потока и превращаются в нуль при завершении процесса окисления. Напряжения, рассчитанные с использованием модели VISCOUS, заменяют все другие значения напряжений, которые были рассчитаны ранее с использованием модели ST.HISTO директивы STRESS.

Зависимость параметров окисления от напряжения. Если задан параметр STRESS.D директивы AMBIENT (значение равно *true*), то скорость поверхностной химической реакции k_s , коэффициент диффузии окислителя в окисле D и вязкость окисла µ модифицируются вследствие их зависимости от напряжений в окисле:

$$k'_{s} = k_{s} \exp\left(-\frac{\sigma_{n} \mathbf{V} \mathbf{R}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\sigma_{t} \mathbf{V} \mathbf{T}}{kT}\right),$$

$$D' = D \cdot \exp\left(-\frac{p \mathbf{V} \mathbf{D}}{kT}\right),$$

$$\mu = \mu_{0} \frac{\sigma_{S} \mathbf{V} \mathbf{C}/2kT}{\sinh(\sigma_{S} \mathbf{V} \mathbf{C}/2kT)},$$
(1.11)

где k'_s , D' и μ – модифицированные параметры; VR, VT, VD, и VC – параметры директивы AMBIENT. Экспонента в (1.11) ограничена для положительных аргументов (т.е. для отрицательных значений p) значением VDLIM (параметр директивы AMBIENT) для исключения нереального роста величины коэффициента диффузии. Скорость реакции на поверхности зависит как от напряжения, перпендикулярного к поверхности раздела Si/SiO₂:

$$\sigma_n = - \left(\sigma_{xx} n_x^2 + \sigma_{yy} n_y^2 + 2 \sigma_{xy} n_x n_y \right),$$

так и от напряжения, перпендикулярного к границе раздела:

$$\sigma_t = - \left(\sigma_{xx} n_x^2 + \sigma_{yy} n_y^2 - 2 \sigma_{xy} n_x n_y \right),$$

где *n_x* и *n_y* – компоненты единичного вектора, нормального к границе раздела. Коэффициент диффузии окислителя зависит от гидростатического давления *p*:

$$p = -\frac{1}{2} \left(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} \right),$$

поскольку вязкость окисла зависит от полного модуля сдвига σ_s :

$$\sigma_s = \sqrt{\frac{1}{4} (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + \sigma_{xy}^2}$$

Для численного решения нелинейных уравнений, описывающих зависимость от механических напряжений, используется итерационный метод Ньютона–Рафсона. Несмотря на то, что этот метод требует большого количество итераций, в некоторых случаях сходимость может быть и не достигнута. По этой причине время, затрачиваемое на моделирование процесса окисления с учетом механических напряжений, может в 20–200 раз превышать время расчета без учета напряжений.

Рекомендации по использованию. Модель VISCOUS была создана на основе модели VISCOELA. Модель VISCOUS оказывается более точной в тех случаях, когда вязкость значительно меньше модуля Юнга. Однако расчеты по этой модели производятся гораздо медленнее при учете зависимости от механических напряжений. Эту модель удобнее использовать для проверки точности расчетов, полученных с использованием модели VISCOELA, однако при этом достаточно сложно определить, заключается ли разница между этими двумя моделями в физической постановке задачи или в численной реализации.

Модель **VISCOELA** используется для расчета вязкоупругого течения окисла в процессе окисления. Движение границы раздела Si/SiO₂ является двухмерным (движение осуществляется перпендикулярно границы раздела), а при расчете скорости окисления учитывается изменение кристаллографической ориентации вдоль границы раздела. Вязко-упругое течение окисла рассчитывается в двух измерениях посредством использования 3-узловых конечных элементов, что позволяет рассчитать приближенные значения напряжений.

Вязкоупругое течение. В модель **VISCOELA** добавлен компонент упругости в уравнения, используемые в моделях **COMPRESS** и **VISCOUS**. В одномерном приближении напряжение о связано с деформацией следующим образом:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = 2G \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - \frac{\sigma}{\tau}, \qquad (1.12)$$

где G – модуль упругости сдвиговой деформации, а $\tau = \mu/G$ – время релаксации напряжения (здесь μ – вязкость).

Согласно выражению (1.12) изменение напряжения пропорционально изменению деформации минус время релаксации, которое пропорционально напряжению. В трехмерном случае это уравнения записываются просто в терминах объемного (дилатационного) и сдвигового компонентов:

$$\frac{\partial \sigma_{v}}{\partial t} = 3K \frac{\partial \varepsilon_{v}}{\partial t} - \frac{\sigma_{v}}{\tau_{v}}, \tau_{v} = \frac{\mu_{v}}{K},$$

$$\frac{\partial \vec{\sigma}'}{\partial t} = 2G \frac{\partial \vec{\varepsilon}'}{\partial t} - \frac{\vec{\sigma}'}{\tau'}, \tau' = \frac{\mu}{K},$$

$$\sigma_{v} \equiv \frac{1}{3} \left(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} \right),$$

$$\varepsilon_{v} \equiv \frac{1}{3} \left(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \right)$$
(1.13)

где

являются объемными компонентами напряжения и деформации соответственно, а

$$\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} - \sigma_V \\ \sigma_{yy} - \sigma_V \\ \sigma_{zz} - \sigma_V \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} \vec{\varepsilon}' = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} - \varepsilon_V \\ \varepsilon_{yy} - \varepsilon_V \\ \varepsilon_{zz} - \varepsilon_V \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix}$$

соответственно компоненты сдвиговых напряжений и деформаций. Деформации определяются следующим образом:

$$\begin{split} \varepsilon_{xx} &\equiv \frac{\partial u_x}{\partial x}, \varepsilon_{yy} \equiv \frac{\partial u_y}{\partial y}, \varepsilon_{zz} \equiv \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \varepsilon_{xy'} &\equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right), \end{split}$$

где u_x , u_y и u_z – компоненты перемещения потока. Заметим, что u_z и ε_{zz} равны нулю для двухмерного случая.

Напряжения должны удовлетворять следующим уравнениям баланса:

$$\frac{\partial u_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial u_{xy}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial u_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial u_{xy}}{\partial x} = 0.$$

Эти уравнения могут быть объединены с уравнением (1.13) для определения скоростей потока. Напряжения в направлении, нормальном к поверхности границы раздела, непрерывны вдоль поверхности раздела, тогда как напряжения, нормальные к свободной поверхности, равны нулю (несмотря на учет поверхностного натяжения). Считается, что между материалами на границе раздела отсутствует проскальзывание. Уравнения решаются для кремния только в том случае, если задан параметр **SKIP.STILL** в директиве **METHOD**.

Параметры модели. В модели VISCOELA используются те же параметры упругости, что и в модели COMPRESS, и те же зависимости от вязкости и напряжений, что и в модели VISCOUS. Объемные модули *K* и модули сдвига *G* определяются следующим образом:

$$K = \frac{E}{3(1-2v)}, \quad G = \frac{E}{2(1+v)},$$

где E = YOUNG.M и v = POISS.R задаются в директиве MATERIAL.

Объемная вязкость μ_{v} и сдвиговая вязкость μ определяются следующим образом:

$$\mu_{\nu} = \frac{2\mu(1+\nu_{\nu})}{3(1-2\nu_{\nu})}, \quad \mu = \mathbf{VISC.0} \cdot \exp\left(\frac{-\mathbf{VISC.E}}{kT}\right),$$

где VISC.0, VISC.E и $v_v =$ VISC.X задаются в директиве MATERIAL. Следует отметить, что v_v немного меньше 0,5, так что μ_v значительно больше, чем *K*, а τ_v значительно больше обычного времени окисления. Таким образом, релаксация механических напряжений в объеме игнорируется.

Зависимости коэффициента диффузии окислителя, скорости реакции на границе раздела и вязкости материала от напряжений учитываются таким же образом, как и в модели VISCOUS, за исключением того, что при расчете вязкости материала используется напряжение сдвига фон Мизеса. Учет механических напряжений включен по умолчанию. Отключить данную опцию можно посредством задания параметра STRESS.D в директиве MBIENT.

Линейные элементы, используемые в модели VISCOELA, создают напряжения, постоянные вдоль каждого элемента, и «разрываются» между ними. Для расчета зависимости от напряжений эти «разрывные» напряжения должно быть «сглажены». Количественный показатель разглаживания задается параметром **VE.SMOOTH** директивы **METHOD**. Параметр **VE.SMOOTH** может изменяться от 0,0 (минимальное сглаживание) до 1,0 (максимальное сглаживание). При наименьшем значении параметра сглаживания границы напряжений получаются грубыми, а при наибольших значениях – гладкими, но с потерей точности результатов.

Рекомендации по использованию. Модель VISCOELA рекомендуется использовать совместно с параметром STRESS.D при моделировании двухмерных структур, когда важна подробная информация о форме выращенного оксида и величинах механических напряжений. Эта модель работает медленнее, чем **COMPRESS**, и в случае, когда не учитываются механические напряжения, ее точность сравнительно невысока. С другой сторона, данная модель значительно быстрее модели VISCOUS, особенно в случае учета напряжений в структуре. Модель разработана с целью получения хорошей аппроксимации формы окисла при минимальных временных затратах. В случае, когда известны напряжение и скорость течения, данная модель может использоваться только для грубой оценки.

Модель VISCOELA следует использовать, когда требуется учитывать изменение механических напряжений в процессе моделирования и исследования истории всего маршрута (посредством использования параметра ST.HISTO). Если используется параметр ST.HISTO вместе с моделью VISCOELA, то учитываются внутренние и термические напряжения. Рассчитываются также напряжения, возникающие в процессе отжига в инертной среде, для моделирования релаксации напряжений в структуре.

Анизотропия механических напряжений. Вследствие кристаллографической анизотропии химические реакции вдоль границы раздела кремний/окисел протекают с различной скоростью, поэтому зависимость этих скоростей от локального напряжения является функцией локальной кристаллографической ориентации. Такая анизотропная зависимость химических реакций от внутренних напряжений часто приводит к образованию характерных <111> граней на границе раздела кремний/окисел около верхних углов изоляции, созданной по технологии Shallow Trench Isolation (STI). Если параметр ST.R директивы AMBIENT принимает значение *true*, скорость реакции поверхности в уравнении (1.11) рассчитывается с учетом параметров зависимости от кристаллографической ориентации VR и VT, где VR «экстрагируется» из нормальных активационных объемов вдоль кристаллографических направлений <100>, <110> и <111> (VR100, VR110 и VR111 соответственно), а VT – из тангенциальных активационных объемов в кристаллографических направлениях <100>, <110> и <111> (VT100, VT110 и VT111 соответственно). Отдельные значения активационных объемов в нормальном и тангенциальном направлениях вдоль границы раздела задаются в директиве AMBIENT. Эти условия применимы только для моделей VISCOUS и VISCOELA. 16

Модель напряжения, ограниченного пределом прочности (Strength-Limited Stress Model) может использоваться для предотвращения слишком больших (нефизичных) величин напряжений, получающихся в процессе численного моделирования. При использовании этой модели абсолютные значения напряжения для каждого компонента ограничены пределами прочности. Для включения данной модели используется параметр ST.LIMIT директивы METHOD. По умолчанию данная модель «выключена», а предел прочности берется равным 1/20 от значения модуля Юнга. Параметр STRENGTH может быть переопределен посредством использования команды MATERIAL. Данное приближение применимо только к моделям VISCOUS и VISCOELA.

1.1.4 Окисление поликремния

Для моделирования окисления поликремния используются те же подходы, что и для обычного кремния при использовании моделей COMPRESS, VISCOUS и VISCOELA. Значения параметров THINOX.0, THINOX.E, THINOX.L, L.LIN.0, L.LIN.E, H.LIN.0 и H.LIN.E могут быть переопределены для поликремния при указании параметра POLYSILI в директиве AMBIENT. Отношение затрачиваемой на окисление толщины поликремния к толщине выращенного окисла задается параметром ALPHA директивы AMBIENT.

Эффекты поверхностного натяжения и восстановление течения. Модели VISCOUS и VISCOELA включают эффекты поверхностного натяжения. Поверхностное натяжение моделируется как сила растяжения вдоль поверхности, задаваемая параметром SURF.TEN директивы MATERIAL. На планарной поверхности силы на противоположной стороне любой точки поверхности аннулируются, так что результирующая сила равна нулю. Однако на искривленных поверхностях возникает результирующая сила в направлении кривизны с величиной, обратно пропорциональной радиусу кривизны. Результирующая сила стремится к округлению углов и сглаживанию неравномерностей поверхности. При соответствующих значениях параметра SURF.TEN и величине вязкости материала модель поверхностного натяжения можно использовать для моделирования процесса восстановления течения (*reflow*).

Модель поверхностного натяжения активна при моделировании окисления с использованием моделей VISCOUS, а модель VISCOELA – всякий раз, когда активна история изменения напряжений в структуре (т.е. когда VISCOELA и ST.HISTO используются вместе).

1.1.5 Окисление в среде N₂O

В процессе окисления с использованием молекул N₂O (оксинитридизация) атомы азота захватываются на границе раздела кремний/окисел окислительными узлами, что снижает скорость окисления.

Окисление в среде N_2O задается параметром **N2O** директивы **DIFFUSION**.

Азотные ловушки и генерация. Предполагается, что окислитель N_2O на границе раздела Si/SiO₂ разлагается на атомы азота и кислорода. Некоторое количество азота захватывается на границе раздела. Поток захватываемых атомов азота описывается с помощью модели ловушек на границе раздела

$$\vec{F}_{trap} = hC_i \left(1 - \frac{\sigma_N}{\sigma_{max}}\right) \vec{n}_i$$

где h – скорость захвата; C_i – концентрация азота на границе раздела; σ_N и σ_{max} – плотность захваченных атомов азота и максимальная плотность ловушек соответственно. Коэффициенты h и σ_{max} задаются в директиве **IMPURITY**. Полный поток азота на границе раздела является суммой потока захваченных атомов азота на границе раздела и двухфазного сегрегационного потока в соседний материал. Скорость генерации азота зависит от скорости движения границы и определяется следующим образом:

$$G = \mathbf{N.G.0} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{N.G.E}}{kT}\right) \cdot \nu \left(\frac{\nu}{\mathbf{N.V.0} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{N.G.E}}{kT}\right)}\right)^{gpow}$$
$$gpow = \mathbf{N.GPOW.0} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{N.GPOW}}{kT}\right).$$

Параметры N.G.0, N.G.E, N.V.0, N.V.E, N.GPOW.0 и N.GPOW.E задаются в директиве AMBIENT.

Окисление с использованием N_2O включает модель ловушек на границе раздела Si/SiO₂ для азота независимо от значения параметра **ITRAP** в директиве **METHOD**.

1.1.6 Скорость химической реакции на поверхности

Исходя из того, что скорость реакции на поверхности пропорциональна количеству доступных окислительных центров, скорость потребления кислорода в процессе окисления границы раздела определяется следующим образом:

$$\vec{F} = k_s C_i \left(1 - \frac{\sigma_N}{\mathbf{N.0} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{N.E}}{kT}\right)} \right) \vec{n}_i ,$$

где k_s – скорость реакции на поверхности, C_i – концентрация окислителя на границе раздела, σ_N – концентрация азота, захваченного на границе раздела. Значения **N.0** и **N.E** могут быть заданы для каждой из трех ориентаций кремния и поликремния посредством задания параметров <111>, <110>, <100> или **POLYSILI** в директиве **AMBIENT**.

1.1.7 Усиление диффузии примесей в окисле

Усиление диффузии бора. Использование ультратонких подзатворных окислов позволяет облегчить проникновение примеси в пространство между поликремнием и объемным кремнием. Проникновение бора по сравнению с проникновением других примесей проходит значительно легче ввиду высокого значения коэффициента диффузии. При выращивании окисла на поверхности кремния образуется слой нестехиометрического состава в форме окислительного дефекта (SiO).

Диффузия бора усиливается в тонких окислах из-за более высокого отношения толщины нестехиометрического слоя к общей толщине окисла. Наличие фтора также увеличивает количество окислительных дефектов и, таким образом, усиливает интенсивность диффузии.

Усиление диффузии в тонких окислах. Предполагается, что образование окисла кремния вследствие реакции между атомами кислорода и кремния увеличивает количество окислительных (в первую очередь SiO) дефектов. Сегрегация междоузлий на границе раздела Si/SiO₂ способствует вводу атомов кремния в окисел. Предполагается, что молекулы SiO неподвижны, реагируют с окислителем с образованием SiO₂ и редко диссоциируют на Si и O. Предполагается также, что увеличение объема вследствие формирования окисла кремния незначительно. Коэффициент диффузии примесей зависит от распределения SiO согласно уравнениям

$$\begin{split} \frac{\partial C_{\mathrm{Si}}}{\partial t} &= -\vec{\nabla} \cdot \left(-D_{\mathrm{Si}} \vec{\nabla} C_{\mathrm{Si}} \right) - k_{\mathrm{Si}} C_{\mathrm{Si}} \sqrt{C_{O_2}} ,\\ \frac{\partial C_{\mathrm{SiO}}}{\partial t} &= k_{\mathrm{Si}} C_{\mathrm{Si}} \sqrt{C_{O_2}} - k_{\mathrm{SiO}} C_{\mathrm{SiO}} \sqrt{C_{O_2}} ,\\ F_{\mathrm{Si}} &= h_{\mathrm{Si}} \left(C_{\mathrm{Si}} - mI \right), \end{split}$$

где C_{Si} , C_{SiO} и I – концентрации атомов кремния, SiO в окисле, а также междоузлий в кремнии соответственно. Зависимость коэффициента диффузии атомов кремния D_{Si} определяется следующим выражением: $13 \cdot \exp(-4,5eV/\kappa T)$. Здесь m – коэффициент сегрегации междоузлий на границе раздела Si/SiO₂. Величина m определяется из соотношения: $2,9 \cdot 10^{-5} \cdot \exp(2,19eV/\kappa T)$. Коэффициенты k_{Si} , k_{SiO} – скорости реакции в объеме атомов кремния и SiO с кислородом соответственно; k_i – скорость реакции атомов кремния с кислородом на поверхности окисла.

Повышенный коэффициент диффузии примесей в окисле описывается следующим соотношением:

$$D = D_0 \left(1 + f_{\rm SiO} \frac{C_{\rm SiO}}{C_{\rm SiO_2}} \right), \tag{1.14}$$

где D_0 – коэффициент диффузии в толстых чистых окислах; f_{SiO} – зависящий от температуры коэффициент, вводимый для описания увеличения скорости диффузии, обусловленного SiO; C_{SiO_2} – константа, равная 2,2·10²² см⁻³.

Энергия активации f_{SiO} равна -0,28 эВ. Новые названия примесей для атомов кремния и SiO принимаются как **IOX** и **SIO** соответственно.

IMPURITY MODEL=DEOX IMP=IOX NEW C.INIT=1E5 IMPURITY MODEL=DEOX IMP=SIO NEW C.INIT=1E5 METHOD IMP=IOX PART REL.ERR=0.01 ABS.ERR=1E9 METHOD IMP=SIO NONE REL.ERR=0.01 ABS.ERR=1E9

Коэффициенты диффузии атомов кремния и бора в окисле:

```
IMPURITY IMP=IOX MAT=OXIDE DIX.0=13.0 DIX.E=4.5 CM.SEC
IMPURITY D.MODEL=DEOX IMP=BORON MAT=OXIDE +
    DI.FAC=1+4.55e-22*exp(0.28/kt)*SIO
```

Реакции в объеме задаются следующим образом:

```
REACTION MODEL=DEOX NAME=KbIOXnO MAT.BULK=OXIDE +
    IMP.L=IOX /IMP.L=O2 IMP.R=SIO EI.L=1.0 /EI.L=0.5
    EI.R=1.0 NI.L=1.0 /NI.L=0.0 NI.R=1.0 +
    RATE.0=7.673E6 RATE.E=4.0 EQUIL.0=0.0
REACTION MODEL=DEOX +
    NAME=KbSiOnO MAT.BULK=OXIDE + IMP.L=SiO /IMP.L=O2 +
    EI.L=1.0 /EI.L=0.5 NI.L=1.0 /NI.L=0.0 +
    RATE.0=7.673E6 RATE.E=4.0 EQUIL.0=0.0
```

Сегрегационный поток междоузлий:

```
REACTION MODEL=DEOX +
NAME=ISEG +
/MAT.L=OXIDE MAT.R=SILICON +
/IMP.L=IOX IMP.R=INTERST +
RATE.0=0.01 RATE.E=0.0 +
EOUIL.0=2.9E-5 EOUIL.E=-2.19
```

Скорость реакции атомов кремния на поверхности:

```
REACTION MODEL=DEOX +
NAME=KiIOX +
/MAT.L=OXIDE MAT.R=AMBIENT +
/IMP.L=IOX IMP.R=O2 +
/EI.L=1.0 EI.R=1.0 +
/NI.L=1.0 NI.R=0.0 +
RATE.0=8.67E7 RATE.E=4.0 EQUIL.0=0.0
```

Поскольку модель **DEOX** изначально отсутствовала в файле *s4init*, она должна быть активирована следующим образом:

```
METHOD MODEL=DEOX ENABLE
```

Считается, что наибольшая концентрация SiO находится вблизи границы раздела Si/SiO₂. Следовательно, вблизи границы раздела необходимо организовать плотную сетку дискретизации. Обычно считается, что исходная толщина окисла должна быть меньше, чем 20 Å (значение, принимаемое по умолчанию).

```
METHOD DY.OXIDE=0.0005
AMBIENT INITIAL=0.0005
```

Данная модель применима только для окисления в сухой среде. Кроме того, точность данной модели не проверена для низкого давления кислорода.

Диффузия, ускоренная фтором. Фтор способствует ускорению диффузии бора в окисле. В модели диффузии фтора атомы рассматривается как электрически нейтральные. В выражение (1.14) добавляется слагаемое, описывающее усиление диффузии, обусловленное наличием атомов фтора:

$$D = D_0 \left(1 + f_{\rm SiO} \frac{C_{\rm SiO}}{C_{\rm SiO_2}} + f_{\rm F} \frac{C_{\rm F}}{C_{\rm SiO_2}} \right),$$

где $f_{\rm SiO}$ – равновесная константа; $C_{\rm F}$ – концентрация фтора; $f_{\rm F}$ – коэффициент диффузии фтора.

IMPURITY D.MODEL=DEOX IMP=BORON MAT=OXIDE + DI.FAC=1+4.55e-22*exp(0.28/kt)*SIO+2.23e-20*Fluorine

Для учета влияния фтора должны быть активированы как модель **FLUORINE**, так и модель **DEOX**. Следующая директива задает модель **FLUORINE**:

```
METHOD MODEL=FLUORINE ENABLE
```

Если модель FLUORINE активирована, а модель DEOX «выключена», то диффузия бора, ускоренная влиянием фтора, игнорируется, несмотря на то, что проводится расчет с учетом фтора.

1.1.8 Модели для расчета механических напряжений

В TSUPREM-4 имеется несколько моделей для расчета механических напряжений, возникающих в процессе проведения технологических операций. Наиболее полной является модель «истории» напряжений (ST.HISTO). Более старые и ограниченные модели «включаются» с помощью директивы STRESS и модели окисления VISCOUS.

Модель «истории» напряжений. Множество различных явлений приводят к возникновению механических напряжений в процессе формирования моделируемой структуры. К таким явлений относятся, например, изменение объема в процессе окисления, несоответствие коэффициентов температурного расширения, внутренние растяжения в осажденных слоях и поверхностное натяжение. Эти явления учитываются в модели истории напряжений (**ST.HISTO**) программы TSUPREM-4.

Модель термических напряжений. Эффект термического расширения при повышении температуры *Т* моделируется посредством добавления дополнительного слагаемого в уравнение (1.13) для объемного напряжения:

$$\frac{\partial \sigma_{v}}{\partial t} = 3K \left(\frac{\partial \varepsilon_{v}}{\partial t} - \frac{\partial T}{\partial t} \right) - \frac{\sigma_{v}}{\tau_{v}}.$$

Граничные условия. Граничные условия предполагают, что термическое расширение является доминирующим в толстой кремниевой подложке с эквивалентными состояниями на обеих сторонах поверхности (т. е. кривизна подложки отсутствует). Термическое расширение подложки создает постоянную деформацию $\varepsilon_{ZZ} = \mathbf{L}\mathbf{C}\mathbf{T}\mathbf{E}\Delta T$ в направлении z. Смещение в направлении x в вертикально отраженных границах и в кремнии, когда установлен параметр SKIP.SIL, пропорционально x: $u_x = x LCTE\Delta T$, а смещение в направлении y в вертикально отраженной границе в кремнии, когда задан параметр SKIP.SIL, пропорционально у: $u_y = y \mathbf{LCTE} \Delta T$. Для задания граничных условий используется значение линейного коэффициента термического расширения LCTE, который задается в директиве MATERIAL. При решении уравнения для термических напряжений с учетом обоих граничных условий в толстой кремниевой подложке термические напряжения не возникают. Расширенная подложка затем используется в качестве исходных данных для расчета относительного термического расширения в слоевых структурах выше подложки. При записи в результирующий файл компонентов напряжения сохраняются только механические деформационные напряжения.

Начальные условия. Напряжения, сформированные в результате одной высокотемпературной операции, используются в качестве начальных напряжений при моделировании последующих операций. Если температура изменяется между завершением первой операции и началам следующей, то программой ав-22

томатически добавляется короткий плавный шаг для расчета изменения напряжений, возникающих вследствие изменения температуры. При задании первой температуры после инициализации структуры напряжения равны нулю. Эта температура может быть задана как часть высокотемпературной технологической операции (например, **DIFFUSION**, **DEPOSITION** или **EPITAXY**) или посредством задания соответствующих параметров в директивах **SELECT** или **SAVEFILE**. Следует отметить, что величины напряжений могут быть изменены в процессах осаждения и травления. По директивам **STRESS**, а также при моделировании окисления с использованием модели **VISCOUS** ранее рассчитанные значения напряжений в структуре игнорируются и перезаписываются результатами, полученными с использованием модели **ST.HISTO**.

Внутренние напряжения в осажденных слоях могут быть заданы для каждого материала с помощью параметра INTRIN.S директивы MATERIAL. Внутренние напряжения учитываются всякий раз, когда включена модель истории напряжений. Каждая операция осаждения сопровождается расчетом релаксаций напряжений для определения конечных напряжений в структуре, обусловленных осаждением. Эта модель учитывает эффекты поверхностного натяжения. Напряжения рассчитываются только тогда, когда инициированы модели ST.HISTO и VISCOELA.

Замечание: Интерпретация параметра INTRIN.S в модели stress history отличается от той, которая применяется в директиве STRESS. В обоих случаях инициализируется начальное напряжение, создаваемое осажденным слоем, затем производится релаксация напряжений для удовлетворения граничных условий (т. е. нулевое напряжение, нормальное к свободной поверхности). В случае использования модели «истории» напряжений в директиве STRESS используется параметр INTRIN.S в качестве начального напряжения, который задается как x (и z) компоненты напряжений в равномерном планарном слое после релаксации. В случае использования модели ST.HISTO для достижения таких же результатов, что и по директиве STRESS, необходимо умножить INTRIN.S на величину (1 - 2v)/(1 - v), где v – значение параметра POISS.R.

Влияние травления на механические напряжения. Когда материал, в котором возникли напряжения, удаляется из структуры, баланс сил, действующих на оставшийся материал, изменяется и приводит к напряжениям, действующим на результирующую структуру. Таким образом, за каждой операцией травления следует расчет релаксации для определения конечных напряжений в структуре. Используемая модель включает учет эффектов поверхностного натяжения. Напряжения рассчитываются только в том случае, если включены модели ST.HISTO и VISCOELA.

Использование модели «истории» напряжений. «История» механических напряжений в структуре моделируется случае, если удовлетворяются следующие условия:

– моделирование осуществляется с применением параметра **ST.HISTO** в директиве **METHOD**;

- для моделирования используется модель окисления VISCOELA.

Напряжения в кремнии будут рассчитываться только в том случае, если задан параметр **SKIP.SIL** в директиве **METHOD**. Напряжения, возникающие вследствие несоответствия коэффициентов температурного расширения материалов, моделируются всякий раз, когда задано изменение температуры в директиве **DIFFUSION**. Внутренние напряжения учитываются всякий раз при осаждении, когда параметр **INTRIN.S** для осаждаемого материала не равен нулю. Влияние растяжения поверхности учитывается в том случае, когда параметр **SURF.TEN** не равен нулю.

Ограничения модели термических напряжений. Модель термических напряжений имеет следующие ограничения:

– предполагается, что термическое расширение является преобладающим в толстом слое кремниевой подложки с эквивалентными условиями на обеих сторонах подложки (т. е. отсутствует искривление пластины). Предполагается также, что термическое расширение является изотропным, что приводит к термическому расширению вдоль координаты *z*;

– модель активируется только в случае, если активна модель VISCOELA. Напряжения в кремнии рассчитываются тогда, когда задан параметр SKIP.SIL. При использовании директивы STRESS или при моделировании окисления с использованием модели VISCOUS история напряжений (результаты, полученные с использованием модели Stress History) уничтожаются и заменяется новыми значениями напряжений;

– модель **Thermal Mismatch** (термическое несоответствие) «работает» вплоть до комнатных температур;

– напряжения, образующиеся вследствие изменения фазовых состояний в процессе циклического изменения температуры, не моделируется.

Моделирование напряжений с использование директивы STRESS. Директива STRESS позволяет рассчитать напряжения, обусловленные различием коэффициентов температурного расширения материалов, несбалансированным напряжением в структуре или внешним давлением при рассмотрении упаковки кристаллов.

Значения модулей Юнга и отношения Пуассона для каждого материала задаются в директиве **MATERIAL** параметрами **YOUNG.M** и **POISS.R** соответственно. Коэффициент линейного расширения для каждого материала **LCTE** может быть задан в виде функции абсолютной температуры в директиве **MATERIAL**.

Моделирование внешнего давления с использованием директивы STRESS. При расчете напряжений, обусловленных внешним давлением на границе, параметр TOP показывает, что к верхней части моделируемой структуры приложено внешнее давление. Параметр SIDE означает, что внешнее давление действует на правую сторону структуры прибора. Параметр P.SIDE задает величину давления, прилагаемого к правой части поверхности. В случае задания такого внешнего давления исходные зеркальные граничные условия снимают-24 ся. Данное приближение используется при рассмотрении эффекта упаковки кристаллов.

Моделирование напряжений, обусловленных примесями. Атомы примеси вносят локальные искажения в кристаллической решетки кремния. Эти локальные микроскопические искажения проявляют себя в виде макроскопических напряжений. Если атом примеси находится в кристаллической решетке кремния в качестве атома замещения, то соответствующие макроскопические напряжения можно оценить из несоответствия размеров атомов примеси и кремния.

Используя линейную экстраполяцию между различными атомными радиусами и соответствующими относительными концентрациями, исходный атомный радиус a_{native} для легированного кремния с радиусами примесей $(a_1, a_2, ..., a_i, ...)$ и соответствующим молярными долями $(x_1, x_2, ..., x_i, ...)$ может быть определен следующим образом:

$$a_{native} = \left(1 - \sum_{i} x_i\right) a_{si} + \sum_{i} x_i a_i.$$
(1.15)

Эффективный атомный радиус a_e слоя легированного кремния также зависит от его напряженного состояния. В случае эпитаксиального роста выращенный слой находится в таком напряженном состоянии, что эффективный радиус атома равен радиусу атома нижнего слоя. Если новый слой не испытывает механических напряжений, то его эффективный атомный радиус равен радиусу атомов подложки. Макроскопические напряжения рассчитываются на основе того, что эффективный и исходный радиусы атомов определены из следующего выражения:

$$\varepsilon = \frac{a_e - a_{native}}{a_{native}}.$$
 (1.16)

Такое напряжение несоответствия входит в уравнение для деформаций в качестве начального условия, а соответствующие локальные напряжений в кристаллической решетке получаются как результат разбаланса суммарного напряжения. Вклад в атомный радиус атома кремния для каждой отдельной примеси может быть задан параметром STN.MIS директивы METHOD следующим образом:

METHOD IMPURITY="GERMANIUM CARBON" STN.MIS

Атомный радиус каждой примеси **AT.RADIU** может быть задан в директиве **IMPURITY**. Расчет напряжений, обусловленный наличием примеси, возможен только в том случае, если активны модели **ST.HISTO** и **VISCOELA**. Напряжения, обусловленные наличием примесей, возникающие в процессе осаждения. Напряжения, наведенные примесями, может быть учтены в процессе осаждения посредством задания параметра STRAINED в директиве DEPOSITION. При этом выполняются следующие действия:

1 Рассчитывается исходный атомный радиус нового и нижележащего слоев. Исходный атомный радиус слоя примесного кремния определяется из уравнения (1.15). Независимо от типа примеси вклады в исходный атомный радиус определяются посредством задания параметра **STN.MIS**.

2 Задается эффективный атомный радиус для данного нижнего слоя и используется уравнение (1.16) для определения напряжения несоответствия.

3 Проводится релаксация напряжений для установления их равновесия.

Напряжения, обусловленные состояния примесей в процессе диффузии. Концентрация примесей в положении замещения изменяется в процессе отжига, поэтому обусловленные примесями напряжения и деформации обновляются на каждом временном шаге моделирования диффузии в соответствии со следующими действиями:

1 Определяется атомный радиус для каждого положения атома кремния из последнего временного шага.

2 Если заданы соответствующие параметры **STN.MIS**, то производится пересчет концентрации примеси в положении замещения на каждом шаге.

3 Рассчитывается новый атомный радиус для каждого положения с использованием новых молярных долей, рассчитываемых из уравнения (1.15).

4 Используя величину относительного изменения атомного радиуса, для каждого локального положения рассчитывается напряжение несоответствия. Соответственно обновляется и изменение напряжения.

1.2 Модели ионной имплантации

Для моделирования имплантации ионизированных примесей в подложку в программе TSUPREM-4 используется директива **IMPLANT**.

При моделировании процесса ионной имплантации используются два основных приближения:

1 Аналитическое приближение, основанное на функциях распределения Гаусса или Пирсона, в которых используются моменты распределений, хранящиеся в соответствующих файлах.

2 Приближение Монте-Карло, в котором на основе физических моделей рассчитываются траектории имплантированных ионов в двухмерной структуре мишени.

В TSUPREM-4, в основном, используются такие же физические модели имплантации, что и в программе SSUPREM-4 разработки компании Silvaco [1, 2, 4, 6, 7]. Здесь описываются только те особенности моделей имплантации в TSUPREM-4, которыми они отличаются от моделей, используемых в SSUPREM-4.

1.2.1 Аналитическая модель ионной имплантации

Параметры DOSE и ENERGY определяют дозу и энергию имплантируемых примесей, а ANTIMONY, ARSENIC, BORON, PHOSPHOR, BF2 – тип примеси. Если задан параметр BACKSCAT, то предполагается, что часть имплантированной примеси отражается от поверхности структуры. Предполагается также, что некоторая часть примеси может пройти через структуру, не оставаясь в ней.

Распределение имплантированной примеси в двухмерной структуре производится из распределений, рассчитанных вдоль вертикальных сечений, проходящих через всю подложку. Действия для одномерного случая, описанные ниже, используются для определения распределения имплантированной примеси вдоль каждого вертикального сечения сетки.

Каждый одномерный профиль может быть преобразован в двухмерный за счет умножения на функцию *x*. Окончательный профиль определяется интегрированием вкладов двухмерных распределений примесей в каждой точке. Если параметр **TILT** не равен нулю, то сечения для одномерного расчета берутся под определенным углом к вертикали.

Переменная *и* представляет собой расстояние вдоль угловых сечений, а переменная *x* соответствует расстоянию, перпендикулярному к поверхности пластины.

Вертикальное распределение вдоль каждого сечения определяется следующим образом:

$$I(u) = \mathbf{DOSE} \cdot f(u),$$

где u = 0 соответствует поверхности верхнего слоя материала, а f(u) – нормированное распределение Гаусса или Пирсона в зависимости от того, какой параметр (GAUSSIAN или PEARSON) выбран в директиве IMPLANT. Параметр DOSE – доза имплантации. Выражения для f(u) описаны ниже.

Функция распределения f(u) рассчитывается, как обычно, с использованием пространственных моментов R_p , σ , γ и β . Первые четыре момента определяются следующим образом:

$$R_p = \int uf(u)du, \ \sigma = \sqrt{\int (u - R_p)^2 f(u)du},$$
$$\gamma = \frac{\int (u - R_p)^3 f(u)du}{\sigma^3}, \ \beta = \frac{\int (u - R_p)^4 f(u)du}{\sigma^4}.$$

Значения R_p , σ , γ и β определяются из файла s4imp0, в котором содержатся данные по имплантации, или из альтернативных файлов имплантации, задаваемых параметром **IN.FILE** директивы **IMPLANT**. В этом файле хранятся значения моментов распределений для каждой комбинации материала и примеси в порядке увеличения энергии имплантации.

Наклон и поворот подложки относительно пучка имплантируемых ионов задаются параметрами **TILT** и **ROTATION**. Различные эффекты, связанные с наклоном подложки, моделируются следующим образом:

1 При наклоне непланарной структуры часть ее может «затениться». При фиксированном угле наклона подложки размер области затенения зависит от угла поворота – от полного затенения при угле поворота, равном 0°, до полного отсутствия затенения при угле 90°.

2 Доза имплантируемых ионов при наклоне подложки уменьшается. Такое уменьшение дозы учитывается при моделировании процесса имплантации.

3 Наклон подложки приводит и к изменению рассчитываемых профилей имплантированных примесей, что учитывается посредством введения соответствующих аналитически поправок.

4 Наклон и поворот подложки влияют на эффект каналирования, что учитывается, например, для кремния с кристаллографической ориентацией <100> в соответствующих таблицах параметров имплантации ионов **TR.ARSENIC**, **TR.BF2** и **TR.BORON**.

Имплантация BF_2 . Если в директиве **METHOD** устанавливается модель **FLUORINE**, то при имплантации BF_2 автоматически учитывается и имплантация фтора, например:

METHOD MODEL=FLUORINE ENABLE

При этом энергия фтора берется равной 0,3893 от задаваемой пользователем энергии имплантации. Доза фтора при этом используется в два раза больше дозы BF₂.

1.2.2 Аналитическая модель образования дефектов кристаллической решетки при ионной имплантации

Аналитическая модель образования точечных дефектов при ионной имплантации используется заданием параметра **DAMAGE** в директиве **IMPLANT**. При этом распределения междоузлий и вакансий, образованные при имплантации, добавляются к распределениям дефектов, которые существовали в моделируемой структуре до имплантации. Распределение дефектов влияет на эволюцию всей дефектно-примесной системы.

Расчет распределения дефектов. Распределение дефектов рассчитывается с использованием модели Хоблера–Зельбергера в ее одномерной форме. Согласно этой модели профили распределения дефектов аппроксимируются комбинацией гауссовской и экспоненциальной функций. Параметры этих функций подбираются таким образом, чтобы добиться соответствия профилям распределения дефектов, рассчитанным методом Монте-Карло, при имплантаций ионов с энергиями в диапазоне от 1 до 300 кэВ. Эта модель может быть расширена до двумерной посредством умножения гауссианы на параметр a_3 в модели Хоблера–Зельбергера, равный стандартному отклонению в гауссовской компоненте функции распределения примесей в вертикальном направлении. При имплантации BF₂ используется модель для бора, а функция распределения дефектов умножается на коэффициент 49/11. Этот коэффициент не используется, если в директиве **OPTION** задан параметр **V.COMPAT** = 6,4.

Рекомендации к использованию модели и ее ограничения. Модель расчета распределения дефектов применима только для сурьмы, мышьяка, бора и фосфора. Если при имплантации BF_2 используется параметр **DAMAGE**, то применяется модель для имплантации бора с энергией, уменьшенной посредством умножения на коэффициент 0,2215. Для других примесей используются модели одного из указанных выше ионов (выбирается модель имплантации того иона, атомарный вес которого наиболее близок к имплантируемому иону). В этой модели изменение пользователем каких-либо коэффициентов не предусмотрено. Если после расчета распределения дефектов следует расчет диффузии (**DIFFUSION**), то необходимо убедиться в том, что моделируемая область имеет достаточную глубину для расчета быстрой диффузии точечных дефектов в моделируемую структуру.

1.2.3 Аналитическая модель имплантации в программе Taurus

Аналитическая модель имплантации, используемая в программе Taurus, по сравнению с оригинальными моделями, применяемыми в программе TSUPREM-4, отличается следующими улучшениями:

– расширена возможность калибровки в более широком диапазоне параметров имплантации;

– отсутствует необходимость использования альтернативных таблиц моментов распределений. Все данные собраны в одну таблицу для каждой пары ион/мишень;

– моменты распределений доступны для любых энергий имплантации. Моменты распределений интерполируются автоматически от «нулевой» энергии до энергий порядка 10 МэВ;

- улучшен расчет боковых уходов, основанный на методе Монте-Карло;

 автоматически исключается моделирование эффекта туннелирования и процедура релаксация моментов имплантируемых примесей через аморфные маскирующие слои;

 автоматически осуществляется подавление туннелирования и релаксация моментов имплантируемых примесей в подложке с дефектами;

- учитывается обратное рассеяние ионов для углов рассеяния более 90°;

– таблицы моментов имплантации легко расширяются; при добавлении новых данных в стандартные таблицы моментов они легко интерполируются с использованием уже существующих.

Для использования аналитической модели имплантации в команде **IMPLANT** необходимо задать параметр **IMPL.TAB=taurus**. Для установки необходимых параметров используются команды **IMPLANT**, **METHOD**, **MOMENT** и **MATERIAL**.

1.2.4 Моделирование ионной имплантации методом Монте-Карло

Имеется две модели имплантации с использованием метода Монте-Карло:

- модель, используемая в программе TSUPREM-4;

– модель, используемая по умолчанию в программе Taurus.

Монте-Карло модель ионной имплантации, используемая в программе Taurus. Подключение модели, используемой в Taurus, осуществляется заданием параметра MONTECAR в директиве IMPLANT. Модель Taurus MC предоставляет лучшую точность и сходимость для большинства параметров имплантации. Модель откалибрована для энергий от нескольких кэВ до 10 МэВ для различных параметров имплантации, включая разные направления имплантации, направления туннелирования <100>, <111>, и <110> с соответствующими параметрами для бора, мышьяка и фосфора. Эта модель может использоваться и для других имплантируемых примесей.

Параметры модели Taurus MC в TSUPREM-4 могут быть изменены посредством использования директив MATERIAL и IMPURITY. Дебаевская (DEBYE.T), критическая концентрация аморфизации температура (MAX.DAM) и непланарность поверхности (SURF.DIS) задаются в директиве MATERIAL, а угловая дивергенция (DIV.ANG), подгоночный параметр LSS (LSS.PRE), коэффициент нелокальности (NLOC.PRE), экспоненциальный коэффициент нелокальности (NLOC.EXP), поправочный коэффициент на аморфность мишени (AMOR.PAR, CASC.AMO) и пороговая энергия смещения (DISP.THR, CASC.DIS) задаются посредством использования директивы **IMPURITY**. Параметры, начинающиеся с CASC, относятся к каскадной модели образования дефектов. Модель Taurus MC отличается гибкостью в настройке и использовании, поскольку в ней предусмотрена возможность назначения множества параметров, повышающих точность расчетов.

Моделирование ионной имплантации методом Монте-Карло в **TSUPREM-4**. Использование модели имплантации методом Монте-Карло в TSUPREM-4 задается параметром **OLD.MC** в директиве **IMPLANT**.

Модель используется для кристаллического и аморфного кремния, а также для других материалов. В процессе моделирования исследуются переходы из кристаллической фазы в аморфную, что характерно для процесса имплантации. Модель включает эффекты отраженных ионов и предоставляет информацию о дефектах в виде профилей распределения вакансий и междоузлий. Кроме того, имеется модель для расчета самоотжига дефектов. Механизмы энергетических потерь при движении имплантируемого иона в кремниевой подложке, используемые в модели имплантации методом Монте-Карло, достаточно подробно описаны в работах [1, 4].

1.2.5 Моделирование ионной имплантации в аморфную и кристаллическую структуры

При моделировании процесса ионной имплантации в аморфную структуру используется та же классическая теория бинарных столкновений, что и для кристаллической структуры. Основным положением механизма рассеяния энергии при атомном столкновении в этой теории является допущение, что каждый ион взаимодействует только с одним атомом мишени. Это предположение позволяет использовать в расчетах теорию бинарного рассеяния из классической механики, включая ее ядерную и электронную составляющие.

В программе TSUPREM-4 количество ионных траекторий может быть рассчитано заданием параметра **N.ION** в директиве **IMPLANT**. Имплантируемая примесь может быть любой (включая примеси заданные пользователем) при условии, что для нее указана вся необходимая информация (атомный номер и вес, электронные замедляющие способности и т. д.).

Если установлен параметр **CRYSTAL** при моделировании имплантации методом Монте-Карло, то этот процесс будет рассчитываться по более сложным методикам, которые учитывают свойства кристаллической решетки. В этих расчетах учитывают и эффект туннелирования.

Расчет проводится так же, как и для аморфной мишени, за исключением того, что вместо столкновений имплантируемых ионов с атомами мишени, зависящих от плотности материала мишени и вероятности столкновения, при расчете движения энергетического иона в кристаллической структуре определяется параметр воздействия, который зависит от положении имплантируемого иона в моделируемом участке кристаллита. Это достигается дискретизацией кремниевой решетки и расчетом параметра воздействия для каждых восьми участков решетки в пределах каждой ячейки дискретизации. При этом для расчета столкновения выбирается один участок, а затем производится расчет потери энергии по алгоритму, используемому при расчетах в аморфной мишени.

1.2.6 Моделирование эффекта туннелирования

Эффект туннелирования учитывается посредством задания параметру **TILT** значения, равного 0. Посредством задания параметра **CRIT.F** в директиве **IMPLANT** рассчитывается значение критическое угла, выше которого туннелирования не происходит. При значениях параметра $\mathbf{F} = \mathbf{110}$ или **PRE** рассчитываются критические углы и энергетические потери, обусловленные электронным торможением для кристаллографических осей <100> и <110> соответственно.

Электронное торможение вдоль осей <100> и <110> может быть задано и с помощью параметров ES.100, ES.F.100, ES.110, и ES.F.110. В случае, когда имплантируемый ион движется вдоль кристаллографической оси <100>, значения параметров ES.100 и ES.F.100 заменяются на ES.RAND и ES.F.RAN соответственно, и, таким образом, рассчитывается потеря энергии ионом при электронном торможении.

Для ненулевых значений параметра **TILT** движение имплантируемых ионов в кремнии зависит от кристаллической ориентации оси *х* моделируемой области и значения параметра **ROTATION**. Ориентация может быть задана с помощью параметров **X.ORIENT** и **ROT.SUB** директивы **INITIALIZE**.

2 ОПИСАНИЕ МОДЕЛИРУЕМОЙ СТРУКТУРЫ И РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ В ПРОГРАММЕ TSUPREM-4

2.1 Общие сведения

Моделируемая структура. Результаты моделирования в TSUPREM-4 представляются в двухмерном сечении полупроводниковой подложки.

Координаты моделируемого объекта. Координата *x* – это расстояние вдоль поверхности пластины моделируемой структуры, координата *y* отсчитывается по толщине подложки. Координаты моделируемой системы задаются пользователем и фиксируются относительно начальной структуры, т. е. они привязаны к подложке, а не к поверхности пластины.

Начальная структура. Начальная структура задается в виде прямоугольной области произвольной (задаваемой пользователем) длины и ширины. По умолчанию используется верхняя часть структуры, а граничные условия применяются к боковым и нижней частям. Этот порядок может быть изменен директивой BOUNDARY. Моделирование операций осаждения, травления, подлегирования, окисления, диффузии проводятся на открытых поверхностях, тогда как моделирование операций фотолитографии и ионной имплантации проводится на верхней стороне поверхности.

Моделируемые области и материалы. Моделируемая структура может состоять от одной до сорока областей произвольной формы. Каждая область состоит из одного материала. По определению, смежные области (т. е. области, имеющие общую границу) состоят из различных материалов. Одинаковые материалы могут быть представлены для составных (несмежных) областей.

Структура вычислительной сетки. Непрерывные физические процессы моделируются в TSUPREM-4 посредством численной аппроксимации с использованием метода конечных разностей (для диффузии) и метода конечных элементов (для окисления).

Сетка, треугольные элементы и узлы. Каждая область моделируемой структуры разделяется сеткой, состоящей из неперекрывающихся треугольных элементов, которая может насчитывать до 200 000 треугольников. Расчеты проводятся для узлов сетки, располагающихся в вершинах треугольных элементов. Узлы, где встречаются два и более материала, имеют несколько решений для каждого материала.

Общее количество узлов в моделируемой структуре рассчитывается посредством сложения числа точек сетки каждого материала и количества точек сетки вдоль границы. Возможное количество узлов сетки составляет порядка 100 000. Дополнительные узлы могут понадобиться для временного базиса, когда процесс моделирования останавливается для модификации структуры. Общее количество пользовательских и временных узлов не должно превышать 100 000. Начальная сетка не должна иметь более 1 000 линий вдоль любой из осей *x* и *y*.

2.2 Задание структуры вычислительной сетки

Структура вычислительной сетки должна быть задана до начала процесса моделирования. Пользователь определяет начальную структуру сетки, задавая расположение и шаг сетки. Сетка может генерироваться и автоматически посредством задания длины и (желательно) расположения границ масок. Однажды заданная таким способом сетка в процессе расчетов автоматически модифицируется при моделировании различных технологических операций.

Директива, которая задает и модифицирует сетку, содержит параметры контроля шага сетки. Все шаги сетки увеличиваются на величину параметра GRID.FAC директивы MESH.

2.2.1 Описание структуры сетки

В программе TSUPREM-4 можно задавать неоднородную прямоугольную сетку, которая модифицируется посредством удаления некоторых линий сетки. Измененная прямоугольная сетка затем преобразуется в треугольную при помощи добавления диагоналей. Неоднородная прямоугольная сетка задается посредством директив LINE, BOUNDARY, REGION и модифицируется директивой ELIMINATE. Треугольная сетка задается директивой INITIALIZE.

Директива LINE. Директива LINE используется для задания последовательности линий сетки. Положение каждой линии задается параметром LOCATION, шаг линий задается параметром SPACING. Линии сетки задаются в порядке возрастания параметра LOCATION так что $x_1, x_2,..., x_m$ – это координаты линий вычислительной сетки, а соответствующие пространственные интервалы – $h_1, h_2,..., h_m$.

Если параметр SPACING задан для линии i директивой LINE, то h_i рассчитывается следующим образом:

$$h_i =$$
SPACING · **GRID.FAC**

ИЛИ

$$h_i = \min(x_{i+1} - x_i, x_i - x_{i+1}) \cdot \mathbf{GRID.FAC.}$$

Линии сетки добавляются между значениями, заданными пользователем, и значениями параметра **RATIO** r директивы **INITIALIZE**. При этом соотношение между величиной r и количеством пространственных интервалов n должно удовлетворять выражению:

$$x_{i+1} - x_i = \frac{r^n - 1}{r - 1} h_i , \qquad (2.1)$$

$$h_{i+1} = h_i r^{n-1}, (2.2)$$

34

$$\frac{1}{\mathbf{RATIO}} \le r \le \mathbf{RATIO} \,. \tag{2.3}$$

Полное число (*n* – 1) линий сетки добавляется с шагами

$$h_i, h_i r, h_i r^2, ..., h_i r^{n-2}.$$

Для удовлетворения указанным условиям необходимо изменить значения h_i и h_{i+1} . Выражение (2.3) выполняется при уменьшении h_i и h_{i+1} , если необходимо. Выражение (2.2) рассчитывается посредством уменьшения или увеличения значений h_i и h_{i+1} и умножения на один и тот же коэффициент. Значение этого коэффициента выбирается таким, чтобы конечное значение *n* было близко к целому числу, полученному при решении уравнений (2.1) и (2.2) с условием (2.3) для определенного *r*.

Конечные значения шагов h_i и h_{i+1} должны быть несколько больше по сравнению со значениями, задаваемыми пользователем, а коэффициент r должен быть несколько больше, чем величина **RATIO** или меньше, чем 1/**RATIO** для обеспечения условия сходимости n к целому числу.

Следует отметить специфические ситуации: если h_i и h_{i+1} больше, чем соответствующее расстояние $x_{i+1} - x_i$, то линии сетки не добавляются между x_i и x_{i+1} ; если же h_i и h_{i+1} равны, то добавляются равноотстоящие линии.

Удаление линий/узлов сетки. Для удаления линий/узлов сетки в той части структуры, которая определена пользователем, используется директива ELIMINATE. При этом удаляются заданные пользователем треугольные области структуры, а также вертикальные (COLUMNS) или горизонтальные (ROWS) линии сетки. Затем программа удаляет все линии сетки в заданном направлении внутри заданной области. Каждая дополнительная директива ELIMINATE, которая задает определенную область, удаляет половину оставшихся линий сетки.

В большинстве случаев невозможно удалить линии сетки в областях, перекрывающих заданные ранее области директивой ELIMINATE. В этом случае выводится предупреждающее сообщение и процедура ELIMINATE не проводится. Директива STATEMENT устойчиво работает, когда заданная область в точности совпадает или полностью отличается от области, заданной предыдущей директивой STATEMENT.

Директива **STATEMENT** используется при инициализации моделируемой структуры. Эта директива не может использоваться для удаления сетки после инициализации. Удалить линии сетки после инициализации структуры можно только одним способом – с использованием команды **STRUCTURE UNREFINE**. *Автоматическая генерация сетки*. Если не задана директива LINE X, линии сетки вдоль оси *х* формируются автоматически. Аналогично, если не задана директива LINE Y, вертикальная сетка формируется автоматически. Автоматическая генерация сетки в любом направлении может комбинироваться с ручным заданием сетки в другом направлении.

Автоматическая генерация управляется параметрами директивы MESH и параметрами WIDTH и DX директивы INITIALIZE. Автоматическая генерация сетки вдоль направления *x* также зависит от границ маски, полученных из информации, считанной по директиве MASK.

Автоматическая генерация сетки предназначена для приложений, в которых точная ручная настройка не требуется. Это особенно полезно, когда доступна информация о масках из программ Taurus Layout/IC Layout Interface.

Автоматическая генерация сетки вдоль оси X. Сетка в направлении оси x (вертикальные линии) генерируется автоматически по директиве INITIALIZE, если отсутствует опция IN.FILE и не задана директива LINE X после последней директивы INITIALIZE.

Расположение линий сетки вдоль оси *x* определяется параметрами **DX.MIN**, **DX.MAX**, **DX.RATIO** директивы **MESH** и параметрами **WIDTH** и **DX** директивы **INITIALIZE**. Автоматическое устранение вертикальных линий контролируется параметрами **LY.SURF** и **LY.ACTIV** директивы **MESH**.

Построение сетки с использованием параметра WIDTH. Параметр WIDTH директивы INITIALIZE задает ширину моделируемого прибора. Шаг сетки вдоль *x* направления задается параметром DX директивы INITIALIZE или DX.MAX директивы MASK, если не задан параметр DX.

Построение сетки по директиве MASK. Если не задан параметр WIDTH, но используется директива MASK для чтения информации о масках, то положения границ масок используется для генерации сетки. Линии, размещенные на границе каждой маски, с определенным шагом сетки задаются выражением

$h_{\min} = \mathbf{DX.MIX} \cdot \mathbf{GRID.FAC}.$

Шаг сетки увеличивается до другой стороны маски с использованием коэффициента **DX.RATIO** до величины шага

$h_{\text{max}} = \mathbf{DX.MAX} \cdot \mathbf{GRID.FAC}.$

Если используется параметр **GRID** директивы **MASK**, то для генерации сетки используются только края заданных масок. Если задан параметр **G.EXTENT**, то для задания расстояния от начала линии маски до h_{max} используется шаг h_{min} .
Удаление столбцов. Если не задана директива **ELIMINATE COLUMNS**, то для удаления вертикальных линий сетки необходимые параметры устанавливаются по умолчанию. Одно удаление проводится между линией

 $y = 0.5 \cdot (LY.SURF + LY.ACTIV)$

и нижней частью структуры. Восемь удалений проводится между линией **LY.ACTIV** и нижней частью структуры. Эта процедура предназначены для удаления двух линий ниже **LY.ACTIV**.

Если параметр **WIDTH** не задан и если отсутствует информация о масках по директиве **MASK**, то вертикальные линии располагаются в положениях с координатами x = 0 и x = 1 мкм, что сводит решение задачи к одномерному моделированию.

Автоматическая генерация сетки вдоль оси *Y*. Сетка в направлении оси *y* (т. е. задание горизонтальных линий) генерируется автоматически по директиве INITIALIZE без опции IN.FILE и если ни одна из директив LINE Y не была задана после последней директивы INITIALIZE.

Расположение линий сетки вдоль оси *у* определяется параметрами LY.SURF, DY.SURF, LY.ACTIVE, LY.BOT, DY.BOT и DY.RATIO директивы MESH.

Для генерации сетки моделируемая структура разделяется на три области:

1. Поверхностная область от y = 0 до LY.SURF с шагом DY.SURF · GRID.FAC. Эта область имеет самый мелкий шаг. Обычно она содержит мелкие области легирования и каналы МОП-транзисторов.

2. Активная область от LG.SURF до LG.ACTIV с плавно изменяющимся шагом от DY.URF · GRID.FAC до DY.ACTIV · GRID.FAC. Активная область располагается ниже самого глубокого p-n-перехода в моделируемой структуре.

3. Область подложки от LG.ACTIV до LY.BOT с шагом, изменяющимся от DY.ACTIV · GRID.FAC с постепенным увеличением посредством умножения на коэффициент DY.RATIO до достижения величины DY.BOT · GRID.FAC. Область подложки достаточно глубокая, но она имеет небольшое количество вертикальных сечений. Это обеспечивает достаточно точное моделирование эффекта рекомбинации точечных дефектов.

Изменение расчетной сетки в процессе моделирования. В процессе моделирования технологических операций осаждения, эпитаксии, травления, окисления, изменяющих структуру прибора, следует обязательно изменять и расчетную сетку моделируемой структуры. В определенных случаях, если возможно адаптивное построение сетки, она может быть изменена и в процессе моделирования операций ионной имплантации и диффузии. Моделируемая структура может быть сжата, отражена или расширена с использованием директивы STRUCTURE.

2.2.2 Модификация сетки при проведении моделирования отдельных технологических операций

Операции осаждения и эпитаксии. Моделирование осаждения конформного слоя на поверхность структуры проводится по директивам **DEPOSITION** и **EPITAXY**. Расчетная сетка в направлении, перпендикулярном к поверхности, на которую проводится осаждение, контролируется четырьмя параметрами:

- толщиной слоя (THICKNES);

- номинальным шагом сетки (**DY**);

- положением области с номинальным шагом сетки относительно верхней части поверхности слоя (YDY);

- общим числом узлов в моделируемой области (SPACES).

Толщина моделируемой области должна быть всегда задана. Если ни один из указанных параметров не задан, то распределение сетки в моделируемой области устанавливается равномерным. Если заданы параметры SPACES или **DY** (но не оба одновременно), то устанавливается сетка с постоянным шагом, определяемым соотношениями THICKNES / SPACES или DY (умноженные на значение параметра GRID.FAC). Если заданы оба параметра SPACES и **DY**, то используется неравномерная по глубине сетка с шагом, равным **DY** · **GRID.FAC**, на глубине **YDY** ниже поверхности. Далее шаг сетки постоянно увеличивается или уменьшается с постоянным коэффициентом для всех отдельных областей сетки, так чтобы общее количество узлов было равно SPACES/GRID.FAC. Шаг сетки линейно изменяется от значения YDY до верхней и нижней границ слоя, увеличиваясь или уменьшаясь с той же скоростью на любой стороне YDY, чтобы создать требуемое количество узлов сетки. Не все комбинации параметров **SPACES**, **DY** и **YDY** могут создать корректную сетку; в частности, средний шаг расчетной сетки не может быть меньше половины значения параметра DY.

Обычно шаг сетки вдоль направления, параллельного поверхности, на которую проводится осаждение, устанавливается таким же, как и вдоль исходной поверхности. Однако, если шаг сетки вдоль направления, перпендикулярного поверхности, больше шага вдоль направления, параллельного поверхности, то последний увеличивается для исключения появления элементов сетки с малым отношением ширины ячейки сетки к ее высоте. По умолчанию отношение ширины ячейки к ее высоте должно быть не менее 0,5, но эта величина может быть изменена посредством назначения параметра AR.MIN в директивах DEPOSITION или EPITAXY. Некоторые углы на исходной поверхности создают неровности на поверхности осаждаемого слоя. Эти неровности аппроксимируются прямыми сегментами длиной ARC.SPAC · GRID.FAC или меньше.

Увеличение размеров структуры. Использование директивы STRUCTURE с параметром EXTEND приводит к тому же результату, что и назначение директивы на моделирование операции осаждения, с отличием, за-38

ключающемся в том, что расчетная сетка в последнем случае строится в горизонтальном направлении по отношению к каждой границе моделируемой структуры. В таком случае вместо параметров **THICKNES**, **DY** и **YDY** используются параметры **WIDTH**, **DX** и **XDX** соответственно. При этом параметр **XDX** является абсолютной координатой по оси X, вдоль которой строится новая сетка с использованием параметра **DX**.

По директивам **ETCH** и **DEVELOP** удаляется определенная часть структуры. При этом расчетная сетка изменяется в два этапа:

1. Добавляются узлы вдоль всей границы области травления, располагаемые в точках, где граница травления пересекает границу удаляемого материала. В той области, где материал удаляется, интервалы между добавляемыми узлами устанавливаются равными наименьшим интервалам на границе травления.

2. Удаляются элементы сетки внутри границы травления.

Операции окисления и формирования силицидов. Движущаяся граница раздела кремний/окисел и расширение материала в процессе окисления требуют постоянных изменений расчетной сетки, что реализуется посредством выполнения следующих процедур, заключающихся в выполнении трех основных требований для необходимого изменения сетки:

- удаление узлов в расходуемых слоях кремния;

- добавление узлов в растущем слое (например, в процессе окисления);

– удаление или перестройка узлов в областях, где происходит деформирование окисла.

Единственное отличие процедуры изменения сетки в процессе моделирования окисления и в процессе формирования силицидов состоит в том, что вместо параметров **DY.OXIDE** и **GRID.OXI** используется параметр **DY.DEFAU**. Это отличие не влияет на другие процессы, кроме операции окисления.

Удаление узлов в расходуемом слое кремния. В процессе моделирования окисления происходит смещение границы раздела кремний/окисел вглубь кремния, когда растущий окисел смещается от кремния. Узлы (и для кремния, и для окисла) на границе раздела смещаются вместе с границей раздела. Узлы в кремнии зафиксированы и не смещаются, тогда как узлы в окисле смещаются с ростом окисла. Как следствие, узлы, находящиеся на границе раздела кремний/окисел, непрерывно смещаются по направлению к узлам, находящимся в кремнии, которые должны быть удалены для обеспечения адекватного моделирования смещения границы раздела.

Добавление узлов в растущем слое. Элементы треугольной сетки со стороны окисла на границе раздела кремний/окисел растягиваются. Для обеспечения точности решения в окисле (например при моделировании диффузии окислителя в окисел) необходимо добавлять расчетные узлы в области окисла. Добавление узлов в окисел контролируется параметрами **DY.OXIDE**, **DY.EXACT**, **DY.LOCAL** и **GRID.OXI** в директиве **METHOD**.

Точный шаг сетки определяется посредством добавления новых узлов в растущем слое на расстоянии, определяемом как DY.OXIDE · GRID.FAC из

существующего узла в слое. Поскольку только один узел может быть добавлен в каждой точке на границе раздела во время одного временного шага моделирования, величина временного шага моделирования должна быть уменьшена для достижения необходимого шага расчетной сетки. Это уменьшение временного шага моделирования может быть осуществлено посредством использования параметра **DY.EXACT** в директиве **METHOD**. По умолчанию параметр **DY.EXACT** устанавливается таким, чтобы обеспечить уменьшение величины временного шага для контроля величины шага расчетной сетки. Указанный алгоритм не позволяет задавать узлы расчетной сетки с шагом, меньшим, чем 1 Å, а контроль шага сетки не может быть достаточно точным для шага, меньшего, чем 2 Å.

Параметры и алгоритмы контроля расчетной сетки применяются ко всей структуре. Во избежание создания слишком плотной сетки в областях структуры, где растет подзатворный окисел, добавляют соответствующую опцию, чтобы размер ячеек расчетной сетки изменялся одновременно с ростом окисла. Если задан параметр **DY.LOCAL** в директиве **METHOD**, то шаг расчетной сетки в каждой точке растущего окисла вычисляется следующим образом:

$$h = \frac{v_{\text{max}}}{v}$$
DY.OXIDE · **GRID.FAC**,

где v – скорость роста окисла в данной точке структуры; v_{max} – максимальная скорость роста на всех границах раздела в моделируемой структуре (параметр **DY.DEFAU** используется вместо параметра **DY.OXIDE** для всех процессов, кроме окислительных); параметр **DY.LOCAL** по умолчанию устанавливается как *true*.

Если параметр **DY.OXIDE** равен нулю, то добавляется лишний узел, когда размер ячейки в окисле приблизительно равен размеру ячейки в кремнии, умноженному на значение параметра **GRID.OXI**. Для **GRID.OXI** = 2,2 (коэффициент объемного несоответствия кремний/окисел кремний) можно ожидать, что количество узлов, добавленных в объем окисла, будет равняться количеству узлов удаленных из объема кремния. Фактически, больше узлов добавляется в окисел, поскольку шаг сетки в кремнии уменьшается вследствие смещения границы раздела. Параметр **DY.OXIDE** является главным элементом управления шагом сетки в окисле. Параметр **GRID.OXI** сохранен для обеспечения совместимости со старыми версиями программы.

Узлы в областях, в которых происходит деформирование окисла. Если в моделируемой структуре имеется маскирующий слой, то рост окисла не может быть равномерным. Например, на краю слоя нитрида кремния два угла элемента треугольной сетки могут быть натянуты из-за присутствия окисла, тогда как третий угол перемещается из-за смещения окисла под маской. В таких ситуациях треугольники сетки могут быть сильно деформированы, что в свою очередь делает невозможным дальнейший рост окисла до тех пор, пока эта ситуация не будет исправлена посредством «переворачивания» треугольников и удаления узлов или треугольников в переполненных ими областях моделируемой структуры. В «перевернутых» треугольниках линия, общая для смежных треугольников, удаляется для последующего формирования четырехугольника, затем между противоположными углами добавляется линия для разделения четырехугольника на два треугольника.

В некоторых случаях необходимо исключить очень тонкий треугольник одного материала, который проникает в другой материал. Для исключения образования полости в моделируемой структуре материал, заполняющий этот треугольник, заменяется на материал, который окружает структуру.

Численное интегрирование. После любого изменения сетки проводится проверка тех треугольников, которые могут привести к затруднениям при реализации численной процедуры моделирования (например к потере точности или к плохой сходимости). Там, где это возможно, такие треугольники удаляются посредством так называемой процедуры триангуляризации или посредством добавления новых узлов. Если же такая процедура невозможна или приводит к большим численным ошибкам, дискретизация треугольника модифицируется так, чтобы исключить нестабильность численной процедуры вычисле-ния.

3 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О РАБОТЕ В СРЕДЕ ПРОГРАММЫ TSUPREM-4

3.1 Запуск программы и обработка результатов

Запуск программы TSUPREM-4 осуществляется с использованием команды *Tsuprem4* <*входной файл*>, где необязательный аргумент <*входной файл*> задает имя входного файла с заданием на моделирование в TSUPREM-4. Если указан <*входной файл*>, то программа TSUPREM-4 будет запускаться с опциями, указанными во входном файле. Если имя входного файла не указано, то программа будет запускаться в том виде, который отображается на экране терминала. Далее будет показано приглашение для задания входного файла.

Если входной файл на запрос командной строки не указан, то программа переходит в интерактивный режим. В этом случае необходимо будет вводить в командной строке команды и выражения вручную.

Команды, запущенные с терминала или из входного файла, обрабатываются одинаково.

3.1.1 Результаты работы программы

Результаты моделирования, полученные с использованием программы TSUPREM-4, могут представляться как в графическом, так и в текстовом виде.

Результаты моделирования в текстовом формате. Возможно получение следующей выходной информации как результат моделирования в TSUPREM-4:

– информация о распределении примесей вдоль вертикальной или горизонтальной осей структуры или вдоль поверхности материала (команда **PRINT.1D**);

- результаты, полученные по команде **EXTRACT**;

– экстракция электрических параметров (например слоевого сопротивления) с помощью директивы **ELECTRICAL**;

- суммарная информация о слоях и их уровнях (директива MASK);

– суммарная информация о параметрах ионной имплантации (директива **IMPLANT**);

сообщения об ошибках и информация о процессе моделирования.

В графическом формате представляются:

– результаты моделирования вдоль поперечных сечений структуры или вдоль поверхности материала (директива **PLOT.1D**);

– двухмерный вид структуры с отображением границ материалов, сетки моделирования, профиля примесей или концентрации точечных дефектов, скорости роста и векторов напряжения (директива **PLOT.2D**);

– трехмерное представление результатов моделирования (директива **PLOT.3D**);

– некоторые электрические параметры, например, емкость или проводимость канала в зависимости от напряжения смещения (директива **PLOT.1D**);

– представление данных, заданных пользователем (например сравнение результатов измерений и моделирования).

Результаты моделирования могут также сохраняться с целью дальнейшего анализа с использованием графических программ.

Ошибки, предупреждения и синтаксис. Если при обработке команды обнаружена ошибка, то выводится соответствующее сообщение. Если команды считываются из файла, то команда запуска программы не выполняется, остальные директивы входного файла проверяются на синтаксис и не выполняются.

Возможен также вывод предупреждающих сообщений. Предупреждения служат для указания потенциальной проблемы. Сообщения обычно отображают, а корректирующее действие выполняется программой автоматически.

3.2 Типы файлов, используемых в TSUPREM-4

В данном руководстве имена файлов выделяются курсивом. Для имен входных, библиотечных и графических файлов используется строчный индекс; прописной индекс используется для сохраняемых файлов.

Файлы, используемые в TSUPREM-4, можно условно разделить на два типа:

– программные файлы (библиотеки);

- файлы, задаваемые пользователем.

Программные файлы (такие, как s4init и s4pcap) имеют названия, определенные компанией-разработчиком Synopsys TCAD. Пользователь может изменять названия этих файлов при запуске программы или с использование прав администратора, который установил программу.

Пользователь может задавать следующие файлы:

- командный входной файл;

- файл с выходными результатами;
- файл для хранения результатов.

Имена файлов можно использовать любые при условии согласования имен с особенностями используемой операционной системы.

Имена файлов по умолчанию. Значения имен по умолчанию для выходных файлов задаются из имен входного командного файла, если он указан в командной строке TSUPREM-4 или из запроса командной строки. Это позволяет запускать несколько копий TSUPREM-4 одновременно (используя различные входные файлы) в одной директории без конфликта с именами выходных файлов. Имя выходного файла получается добавлением расширения (последний символ «.» и любой другой символ в имени файла) .out, .inf, .dia к входному файлу. Если имена выходных файлов не определены (TSUPREM-4 запущен в интерактивном режиме), можно использовать имена по умолчанию: s4out, s4inf, s4dia.

3.2.1 Входные файлы

В TSUPREM-4 используется несколько типов входных файлов. Пользователь может задать один или несколько входных командных файлов. Кроме того, имеется возможность считать файлы, сформированные предыдущими запусками программ TSUPREM-4 или Taurus-Lithography (программа моделирования литографии программного комплекса Synopsys). В среде программы TSUPREM-4 можно также считывать файлы формата TIF для использования вместе с приложениями программ Taurus-WorkBench (физическое моделирование технологии с элементами оптимизации выхода годных и анализа ошибок), Taurus-Topography (программа расчета топологии) и другими.

Командные входные файлы содержат директивы, которые управляют процессом моделирования. Они представляют собой текстовые файлы, создаваемые или модифицируемые с использованием любого текстового редактора. В интерактивных приложениях терминал служит первичным источником входного файла. Вторичный источник определяется директивой **SOURSE**.

Дескрипторные имена могут использоваться для специфических входных файлов: файлов описания отдельных операций, файлов с коэффициентами моделей, файлов управления процессом моделирования.

Для работы с использованием программы визуализации STUDIO следует записать в конце названия командного файла расширение .*inp*.

Файл описания слоев формируется программой Taurus-Layout, предназначенной для моделирования топологии. Этот файл содержит информацию о слоях моделируемой структуры из продольного сечения топологии. При использовании этого файла рекомендуется применять расширение *.tl*1.

Файл с описанием профилей распределения примесей содержит информацию о профилях распределения примесей, считываемую посредством использования директивы **PROFILE**. Эти профили могут быть распечатаны директивой **PLOT.1D** или использованы как объект оптимизации.

Другие входные файлы:

– структурный файл, содержащий информацию о проблемах и их решениях при выполнении моделирования;

– библиотечный файл *s4init*, содержащий информацию о коэффициентах, используемых в моделях;

– файл s4compat64, содержащий команды модификации коэффициентов моделей для соответствия результатов TSUPREM-4 версий 6.5 и 6.4;

– библиотечный файл *s4imp*0, содержащий статистику диапазонов ионной имплантации при использовании директивы **IMPLANT**;

– библиотечный файл *s4pcap*, определяющий характеристики различных графических выходных устройств, доступных в среде TSUPREM-4;

– библиотечный файл *s4auth*, содержащий информацию о компьютере, имеющем лицензию на использования программы TSUPREM-4.

3.2.2 Выходные файлы

Сообщения об ошибках и стандартные выходные результаты обычно отображаются на дисплее. Некоторые результаты могут перенаправляться в соответствующий выходной файл или одновременно направляться на дисплей и в выходной файл. Стандартный вывод включает результаты выполнения команды **PRINT.D**, а также предупреждения, информационные сообщения и сообщения об ошибках, формируемые другими командами. Если установлена опция **ECHO** с командой **OPTION** (она установлена по умолчанию), то входные директивы также отображаются в стандартном выводе.

Стандартный выходной файл s4out. Запись результатов каждого запуска TSUPREM-4 направляется в выходной файл. По умолчанию имя этому файлу присваивается по имени входного файла. Использование переменной s4out заменяет имя этого файла в процессе работы программы. Этот текстовый файл включает список всех входных директив, сообщений об ошибках и выходные данные, формируемые программой.

Информационный выходной файл s4inf. Дополнительная информация, формируемая в TSUPREM-4, может направляться в информационный выходной файл. По умолчанию имя этого файла определяется по имени входного файла. Использование переменной s4inf заменяет это имя в процессе работы TSUPREM-4. Файл s4inf может использоваться для анализа действий программы. Опция формирования информационного файла может быть активирована или отключена с помощью параметра INFORMAT директивы OPTION; по умолчанию она отключена.

Выходной файл диагностики s4dia. Данный файл содержит диагностическую информацию о работе программы TSUPREM-4. По умолчанию имя этого файла определяется именем входного файла. Опция формирования диагностического файла может быть активирована или отключена ключом **DIAGNOST** директивы **OPTION**, которая умолчанию отключена.

Сохраняемые файлы с формируемыми структурами. Структура и распределение примесей могут сохраняться в нескольких форматах. Название файла определяется параметром **OUT.FILE** директивы **SAVEFILE**. Все файлы формируются в текстовом формате, что позволяет их обрабатывать различными программными платформами. Некоторые типы файлов могут как считываться, так и перезаписываться программой TSUPREM-4.

TSUPREM-4 – основной формат файла для сохранения структуры и результатов моделирования для дальнейшего использования в TSUPREM-4. Этот формат по умолчанию задается директивой **SAVEFILE**. Структурный файл TSUPREM-4 содержит конечную структуру как результат моделирования, информацию о решениях и описание некоторых моделей. Эта информация может считываться директивами **INITIALIZE** и **LOADFILE** и использоваться в основных файлах при проведении дальнейшего моделирования. *ТІҒ-файлы* используются для обмена информацией между пакетами Taurus-WorkBench, Taurus-Topography и Taurus Visual. ТІҒ-файлы формируются при задании параметра **ТІ**Ғ в директиве **SAVEFILE**. ТІҒ-файлы содержат конечную структуру как результат моделирования, информацию о решениях и описание некоторых моделей. Они могут считываться директивами **INITIALZE** и **LOADFILE** и использоваться как основные для дальнейшего моделирования. ТІҒ-файлы также могут использоваться для передачи данных в программу Medici.

Medici. Структурный файл *medici* используется для взаимодействия с программой моделирования прибора Medici. Он содержит информацию о физической структуре, вычислительной сетке и профилях распределения примесей. Структурный файл *medici* поддерживается большинством версий программы PISCES, предназначенной для моделирования переноса носителей заряда в приборной структуре. TIF файлы могут использоваться и для передачи рассчитанной структуры в программу Medici.

MINIMOS5. Структурные файлы могут формироваться в формате, который поддерживается программой моделирования прибора MINIMOS5. Файл содержит информацию о структуре и концентрациях примесей, необходимую для расчетов в среде MINIMOS5.

Wave. Результаты моделирования могут сохраняться в *wave*-формате для дальнейшего вывода на экран монитора с помощью программы визуализации результатов моделирования Wavefront Technologies Data Visualizer.

Графические результаты. Графические результаты передаются в выходное устройство, установленное параметром **DEVICE** директивы **OPTION** или в выходное устройство, заданное по умолчанию – терминал пользователя. Некоторые устройства могут задаваться в выходном файле *s4pcap*.

TSUPREM-4 выбирает выходное устройство в следующем порядке:

1 Если задан правильный параметр **DEVICE** директивы **OPTION**, он используется для имени устройства.

2 Если определена переменная окружения имени устройства *DEFPDEV*, то используется данное устройство.

3 Если определена переменная окружения имени устройства *TERM*, то используется данное устройство.

4 Если ни на одном из этих этапов не задано адекватное имя выходного устройства, то используется *default* устройство из *s4pcap* файла. *Default* устройство эквивалентно параметру *ps*, который определяет файл формата PostScript.

Данная процедура выполняется только один раз, когда приходит запрос на отображение результатов.

Выходные файлы с экстрагированными параметрами. Директива EXTRACT позволяет получить информацию о структуре прибора, в том числе о толщинах слоев и концентрациях примесей. Экстрагированная информация передается в файл, задаваемый параметром OUT.FILE директивы EXTRACT.

Выходной файл с электрическими характеристиками. По директиве **ELECTRICAL** сохраняются экстрагированные электрические характеристики в файле, заданном параметром **OUT.FILE**.

3.2.3 Библиотечные файлы

Эти файлы используются только в программе TSUPREM-4 и в большинстве случаев нет необходимости вносить изменения в эти файлы. Имена этих файлов заданы заранее, но они могут переименовываться с использованием соответствующих параметров. Обычно эти файлы установлены в библиотеку, общую для всех пользователей программы.

Входной файл инициализации s4init содержит входные выражения для моделирования, которые определяют значения коэффициентов по умолчанию для материалов, примесей, численных моделей TSUPREM-4. Этот файл считывается автоматически каждый раз при запуске программы TSUPREM-4. По умолчанию имя этого файла s4init. Переменная S4INIT может использоваться для изменения имени этого файла в процессе запуска программы. Значения коэффициентов и параметров моделей могут быть изменены с помощью этого файла. Файл s4init – текстовый, он может быть изменен при помощи любого текстового редактора или с помощью командного редактора TSUPREM-4.

Файл данных для ионной имплантации s4imp0 задает значения пробегов легирующих примесей при имплантации в различные материалы. По умолчанию имя этого файла s4imp0. Для изменения имени этого файла может использоваться переменная **S4IMP0** в процессе запуска программы. Файл s4imp0 – текстовый, он может быть изменен при помощи любого текстового редактора. Информация, представленная в этом файле, форматируется по правилам, приведенным в этом файле.

Файл, определяющий устройство печати, содержит информацию, необходимую для установки и использования различных графических выходных устройств. По умолчанию имя этого файла *s4pcap*. Его можно изменить с использованием параметра **S4PCAP** в процессе запуска программы. Файл *s4pcap* – текстовый, поэтому он может быть изменен при помощи любого текстового редактора.

Файлы s4fky0 и s4uky0 определяют имена выражений, имена параметров и значения по умолчанию, используемые TSUPREM-4. Они используются для проверки синтаксиса команд входного файла. Эти файлы содержат одинаковую информацию в различных форматах: файл s4fky0 имеет текстовый формат и может модифицироваться любым текстовым редактором. Файл s4uky0 имеет двоичный формат и может использоваться более эффективно, чем s4fky0, при проверке синтаксиса. Файл s4uky0 формируется из файла s4fky0 при начальной инсталляции TSUPREM-4. Форматирование файла с ключами s4fky0 не допускается, и его наличие при запуске программы обязательно. Переменные

S4FKY0 и S4UKY0 могут использоваться для изменения имен этих файлов в процессе запуска программы.

Файл авторизации s4auth содержит параметры, доступные для запуска TSUPREM-4. Если этот файл содержит неправильные значения авторизации, отобразится ошибка на *lbcgktt*, указывающая, что программа не авторизована для запуска на данной машине. Данные в файле *s4auth* записаны в текстовом формате. Переменная **S4AUTH** может использоваться для изменения имени этого файла в процессе запуска программы. Файл *s4auth* не требуется для версии TSUPREM-4, которая использует программу-менеджер лицензий.

4 ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИИ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИБОРОВ В СРЕДЕ ПРОГРАММЫ TSUPREM-4

Для иллюстрации функциональных возможностей программы TSUPREM-4 ниже приведены примеры моделирования в ее среде типичных технологических маршрутов формирования структур биполярного и МОП-транзистора и их основных электрических характеристик. Для каждого примера приведены:

- содержание входного файла задания на моделирование в виде таблицы;

- комментарии к директивам входного файла;

- характерные результаты расчетов.

Имена файлов, используемых в примерах, имеют расширение *.inp*. При форматировании входных файлов должны выполняться следующие правила:

– если текст директивы слишком длинный, его можно разбить на несколько частей и при переносе части текста на следующую строку используется символ переноса строки «+», располагающийся в конце предыдущей строки;

- имена директив и параметров можно указывать в сокращенной форме;

– в большинстве директив параметры можно записать в любом порядке;

– пустые линии между директивами и длинные пробелы перед параметрами игнорируются;

– комментарии начинаются с символа «\$» и используются для документирования входного файла;

– регистр написания текста игнорируется, кроме некоторых специфических строк.

4.1 Моделирование технологического процесса формирования структуры и электрических характеристик биполярного *n-p-n*-транзистора

Выбранный в качестве примера технологический маршрут формирования структуры биполярного *n-p-n*-транзистора представляет собой последовательность операций создания скрытого слоя посредством имплантации в кремниевую подложку мышьяка с последующим эпитаксиальным наращиванием пленки кремния для формирования области коллектора, имплантации и разгонки примесей в областях базы и эмиттера.

Таблица 4.1 – Входной файл с заданием на моделирование технологического процесса формирования структуры и электрических характеристик биполярного *n-p-n*-транзистора

№, п/п	Содержимое файла задания на моделирование
1	Задание параметров исходной подложки и сетки пространственной дискретизации
1.1	\$driver ts4_init

1.2	\$module substrate:0
1.3	\$step load
1.4	mask in.file=NPN:0 0.tl1
1.5	mesh grid.fac=1 dy.surf=0.25 ly.surf=3 dy.active=0.5
	+ ly.active=4 dy.bot=2 ly.bot=16 dx.max=0.2
1.6	initialize <111> boron=10 resistiv
1.7	\$step save
1.8	savefile out.file=substrate:0 0 tif
2	Формирование скрытого слоя
2.1	\$driver ts4
2.2	\$module burried:0
2.3	\$step load
2.4	initialize in.file=substrate:0_0 tif
2.5	mask in.file=NPN:0_0.tl1
2.6	diffusion time=45 temperat=1200 weto2
2.7	\$step photolit
2.8	deposition photores positive thicknes=1 spaces=5
2.9	expose mask=bn
2.10	develop
2.11	etch oxide
2.12	etch photores
2.13	diffusion time=20 temperat=900 weto2
2.14	\$step ion implant
2.15	implant antimony dose=2e+15 energy=700
2.16	diffusion time=30 temperat=1150 dryo2
2.17	etch oxide
2.18	\$step save
2.19	<pre>savefile out.file=burried:0_0 tif</pre>
3	Выращивание эпитаксиального слоя
3.1	\$driver ts4
3.2	\$module EPI:0
3.3	\$step load
3.4	initialize in.file=burried:0_0 tif
3.5	mask in.file=NPN:0_0.tl1
36	epitaxy thicknes=15 antimony=2 resistiv time=15
	+ temperat=900 spaces=15
3.7	Şstep save
3.8	savefile out.file=EPI:0_0 tif
4	Формирование глубокого коллектора
4.1	driver ts4
4.2	\$module collector:U
4.3	Step load
4.4	Initialize in.file=EPI:U_U tit
4.5	mask in.IIIe=NPN:U_U.TII
4.6	alliusion time=45 temperat=1200 weto2
4.7	aeposit oxide thicknes=1

4.8	\$step photolit
4.9	deposition photores positive thicknes=1 spaces=5
4.10	expose mask=dn
4.11	develop
4.12	etch oxide
4.13	etch photores
4.14	method compress dif.adapt
4.15	diffusion phosphor=9e20 time=30 temperat=1200
4.16	diffusion time=120 temperat=1250 dryo2
4.17	etch oxide
4.18	\$step save
4.19	<pre>savefile out.file=collector:0_0 tif</pre>
5	Формирование области базы
5.1	\$driver ts4
5.2	\$module base_6:0
5.3	\$step load
5.4	initialize in.file=collector:0_0 tif
5.5	<pre>mask in.file=NPN:0_0.tl1</pre>
5.6	deposition oxide thicknes=2
5.7	\$step photolit
5.8	deposition photores positive thicknes=1 spaces=5
5.9	expose mask=pb
5.10	develop
5.11	etch oxide
5.12	etch photores
5.13	method pd.full
5.14	diffusion time=15 temperat=1000 weto2
5.15	implant boron dose=1.9e+14 energy=105
5.16	diffusion time=40 temperat=1190 dryo2
5.17	etch oxide
5.18	electrical resistance x=7
5.19	Sstep save
5.20	savefile out.file=base_6:0_0 tif
6	Формирование области эмиттера
6.1	Sdriver ts4
6.2	\$module emitter:0
6.3	Sstep load
6.4	initialize in.file=base 6:0 U tif
6.5	mask in.file=NPN:0_0.tll
0.0	deposit oxide unicknes=1
0./	Ascep procorrect provide this this this this the second process.
0.8	deposition photores positive thicknes=1 spaces=5
0.9	expose mask=sn
0.10	
0.11	etch oxide
6.12	etcn pnotores

6.13	Implant phosphor dose=8e15 energy=50
6.14	diffusion time=10 temperat=1050 dryo2
6.15	etch oxide
6.16	\$step save
6.17	savefile out.file=emitter:0 6 tif
7	Формирование контактов
7.1	\$driver ts4
7.2	\$module kontakty:0
7.3	\$step load
7.4	initialize in.file=emitter:0_0 tif
7.5	mask in.file=NPN:0_0.tl1
7.6	deposit oxide thicknes=1
7.7	\$step base kont
7.8	deposition photores positive thicknes=1 spaces=5
7.9	expose mask=sp
7.10	develop
7.11	etch oxide
7.12	etch photores
7.13	implant boron energy=30 dose=1e15
7.14	diffusion temperat=1050 time=7 dryo2
7.15	etch oxide
7.16	\$step photolit
7.17	deposit oxide thicknes=1
7.18	deposit photores positive thicknes=1
7.19	expose mask=w1
7.20	develop
7.21	etch oxide
7.22	etch photores
7.23	\$step metallization
7.24	deposition aluminum thicknes=1 spaces=5
7.25	deposit photores positive thicknes=1
7.26	expose mask=a1
7.27	develop
7.28	etch aluminum
7.29	etch photores
7.30	electrode name=base x=4 y=-15
7.31	electrode name=emitter x=8.8 y=-15
7.32	electrode name=collector x=33.6 y=-15
7.33	Sstep save
/.34	saverile out.file=kontakty:0_0 tit
8	Изменение сетки дискретизации для расчета ВАХ
8.1	pariver mesn
8.2	pmodule mesn :U
8.5	mesh tii in.iiie=kontakty:U_U abc junc.abc critical=U.UUUUUUU
8.4	save til out.file=kontakty:U_U
8.5	step save

8.6	<pre>savefile out.file=mesh_:0_0 tif</pre>
9	Расчет коэффициента усиления ВЕТА
9.1	\$driver medici
9.2	\$module Beta_vs_Ib_:0
9.3	\$step load
9.4	<pre>mesh tif in.file=mesh_:0_0</pre>
9.5	\$step init
9.6	interface s.n=450 s.p=450 qf=5e10
	<pre>material silicon con.bgn=0.5 n0.bgn=1.3e17 v0.bgn=6.92e-3</pre>
9.7	+ taun0=2.5e-3 taup0=2.5e-3 augp=1e-28
	+ e2=-0.2 taun=1e-7 taup=1e-7 n.total=-1e15
9.8	\$step models
9.9	models consrh energy.l high.dop phumob auger bgn incomple
9.10	\$step bjt_icvc
9.11	symbolic carriers=0 gummel
9.12	method cont.rhs stack=8 damped damp.one
9.13	<pre>solve initial v(collector)=0 v(emitter)=0 v(base)=0</pre>
9.14	<pre>solve initial v(collector)=1 v(emitter)=0 v(base)=0</pre>
9.15	<pre>solve initial v(collector)=2 v(emitter)=0 v(base)=0</pre>
9.16	<pre>solve initial v(collector)=3 v(emitter)=0 v(base)=0</pre>
9.17	symbolic carriers=2 newton
9.18	<pre>solve v(base)=1 v(emitter)=0</pre>
9.19	extract name=Bf expression=@i(collector)/@I(base) print
9.20	extract name=Ic expression=@I(collector) print
9.21	extract name=Ib expression=@I(base) print
9.22	extract name=Ube expression=@v(base)-@v(emitter) print
9.23	log ivfile=Beta_vs_Ib_:0_0.ivl
9.24	solve v(base)=0.2 elec=base vstep=0.1 nstep=8
9.25	log close
9.26	\$step save
9.27	<pre>save tif all out.file=Beta_vs_Ib_:0_0</pre>
10	Расчет напряжения пробоя эмиттер-база V _{breb}
10.1	\$driver medici
10.2	\$module BVeb:0
10.3	\$step load
10.4	<pre>mesh tif in.file=mesh:0_0</pre>
10.5	\$step mos_models
10.6	models srfmob fldmob consrh arora ^auger ^bgn ^impact.i
10.7	\$step mos_init
10.8	symbolic carriers=0 gummel
10.9	method damped itlimit=20
10.10	<pre>solve v(Base)=0 v(Emitter)=0 initial</pre>
10.11	\$step mos_models
10.12	models srfmob fldmob consrh arora ^auger ^bgn impact.i
10.13	Şstep mos_breakdown
10.14	symbolic carriers=2 newton

10.15	method damped itlimit=20 stack=8
10.16	solve v(Emitter)=0 electrode=Emitter + c.vstep=0.025 c.imax=0.0001 c.vmax=15 continue
10.17	\$step save
10.18	save tif all out.file=BVeb:0_0

Номера строк в нижеследующих комментариях соответствуют позициям таблицы 4.1.

1.1 Имя драйвера для описания исходного состояния подложки.

1.2 Присвоение имени модулю с описанием подложки.

1.3 Присвоение имени этапа загрузки.

1.4 Присвоение имени файла с топологией формируемого прибора в формате tl1.

1.5 Формирование сетки дискретизации по директиве MESH, устанавливающей размеры областей моделирования вдоль направления *Y*. Здесь **GRID.FAC** – коэффициент масштабирования сетки, **DY.SURF** и **LY.SURF** – соответственно шаг сетки вдоль направления *Y* в приповерхностной области подложки и размер этой области; **DY.ACTIVE** и **LY.ACTIVE** – соответственно шаг сетки вдоль направления *Y* в промежуточной (между приповерхностной (**SURF**) и нижней (**BOT**)) областью подложки и размер этой области; **DY.BOT** и **LY.BOT** – соответственно шаг сетки вдоль направления *Y* в нижней области подложки и размер этой области; **DX.MAX** – величина равномерного шага сетки вдоль направления *X*.

1.6 Задание исходного состояния подложки по директиве **INITIALIZE**, устанавливающей, что подложка имеет кристаллографическую ориентацию <111> и легирована бором с концентрацией, соответствующей удельному со-противлению (*resistivity*) 10 Ом·см.

1.7 Комментарий о присвоение имени этапа сохранения сформированного файла с информацией об исходном состоянии подложки.

1.8 Сохранение файла с исходным состоянием подложки в формате tif.

2.1, 2.2 и 2.3 Эквивалентно строкам 1.1, 1.2 и 1.3 (но для скрытого слоя).

2.4. Загрузка файла с информацией об исходном состоянии подложки в формате tif.

2.5 Загрузка файла с топологией формируемого прибора в формате tl1.

2.6 Окисление в атмосфере влажного кислорода при температуре 1200 °С длительностью 45 минут (формирование окисной маски).

2.7 Комментарий о проведении процесса фотолитографии.

2.8 Осаждение положительного фоторезиста толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 5 слоев.

2.9 Экспозиция фоторезиста с использованием маски.

2.10 Удаление фоторезиста в местах его экспонирования.

2.11 Травление всего слоя окисла.

2.12 Травление всего слоя фоторезиста.

2.13 Окисление в атмосфере влажного кислорода при температуре 900 °С длительностью 20 минут (формирование окисной маски).

2.14 Комментарий к моделированию процесса ионной имплантации.

2.15 Ионная имплантация мышьяка с дозой 2·10¹⁴ см⁻² и энергией 700 кэВ.

2.16 Отжиг в процессе высокотемпературного окисления в атмосфере сухого кислорода при температуре 1150 °С длительностью 30 минут.

2.17 Травление всего слоя окисла.

2.18 Комментарий к выполнению процедуры сохранения сформированного файла с информацией о результатах формирования скрытого слоя.

2.19 Сохранение файла в формате tif с результатами формирования скрытого слоя.

3.1, 3.2 и 3.3 Эквивалентно строкам 1.1, 1.2 и 1.3 (но для эпитаксиального слоя).

3.4 Загрузка файла в формате tif с информацией о результатах моделирования формирования скрытого слоя.

3.5 Загрузка файла в формате tllc топологией формируемого прибора.

3.6 Выращивание эпитаксиального слоя толщиной 15 мкм с одновременным легированием мышьяком до концентрации, эквивалентной удельному сопротивлению, равному 2 Ом см, при температуре 900 °C длительностью 15 минут и с разбиением по пространству выращенного эпислоя на 15 слоев.

3.7 Комментарий о выполнении процедуры сохранения сформированного файла с информацией о результатах моделирования выращивания эпитаксиального слоя.

3.8 Сохранение файла в формате tif с результатами моделирования выращивания эпитаксиального слоя.

4.1, 4.2 и 4.3 Эквивалентно строкам 1.1, 1.2 и 1.3 (но для процедуры формирования глубокого коллектора).

4.4 Загрузка файла в формате tif с информацией о результатах моделирования выращивания эпитаксиального слоя.

4.5 Загрузка файла в формате tllc топологией формируемого прибора.

4.6 Окисление в атмосфере влажного кислорода при температуре 1200 °С длительностью 45 минут (формирование окисной маски).

4.7 Осаждение окисла толщиной 1 мкм.

4.8 Комментарий к моделированию процесса фотолитографии.

4.9 Осаждение положительного фоторезиста толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 5 слоев.

4.10 Экспозиция фоторезиста с использованием маски.

4.11 Растворение фоторезиста в местах его экспонирования.

4.12 Травление всего слоя окисла.

4.13 Травление всего слоя фоторезиста.

4.14 Назначение модели **COMPRESS** для моделирования процесса локального окисления.

4.15 Диффузионное легирование фосфором из неограниченного источника с концентрацией 9·10²⁰ см⁻³ при температуре 1200 °C в течение 30 мин.

4.16 Окисление в атмосфере сухого кислорода при температуре 1250 °С длительностью 120 минут.

4.17 Травление всего слоя окисла.

4.18 Комментарий к выполнению процедуры сохранения сформированного файла с информацией о результатах моделирования формирования глубокого коллектора.

4.19 Сохранение файла в формате tif с результатами моделирования формирования глубокого коллектора.

5.1, 5.2 и 5.3 Эквивалентно строкам 1.1, 1.2 и 1.3 (но для процедуры формирования области базы).

5.4 Загрузка файла в формате tif с информацией о результатах моделирования формирования глубокого коллектора.

5.5 Загрузка файла в формате tllc топологией формируемого прибора.

5.6 Осаждение окисла толщиной 2 мкм.

5.7 Комментарий к проведению процесса фотолитографии.

5.8 Осаждение позитивного фоторезиста толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 5 слоев.

5.9-5.12 Эквивалентно строкам 4.10-4.13.

5.13 Назначения модели **PD.FULL** для моделирования перераспределения примесей в процессе высокотемпературного отжига.

5.14 Высокотемпературный отжиг с одновременным окислением в атмосфере влажного кислорода при температуре 1000 °С длительностью 15 минут.

5.15 Директива на моделирование процесса ионной имплантации бора с дозой 1.9·10¹⁴ см⁻² и энергией 105 кэВ.

5.16 Отжиг в процессе высокотемпературного окисления в атмосфере сухого кислорода при температуре 1190 °С длительностью 40 минут.

5.17 Травление всего слоя окисла.

5.18 Расчет слоевого сопротивления по поперечному сечению моделируемой структуры при X = 7 мкм.

5.19-5.20 Эквивалентно строкам 4.18-4.19.

6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5 Эквивалентно строкам 5.1, 5.2, 5.3, 5.4 и 5.5.

Профили распределения примесей, сформировавшиеся в структуре на данный этап моделирования, представлены на рисунке 4.1.

6.6 Осаждение окисла толщиной 1 мкм.

6.7 Эквивалентно строке 5.7.

6.8 Осаждение позитивного фоторезиста толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 5 слоев.



Рисунок 4.1 – Профили распределения примесей в моделируемой структуре, сформировавшиеся после проведения операции 5.17

6.9-6.12 Эквивалентно строкам 5.9-5.12.

6.13 Ионная имплантация в область эмиттера фосфора с дозой 8·10¹⁴ см⁻² и энергией 50 кэВ.

6.14 Отжиг в процессе высокотемпературного окисления в атмосфере сухого кислорода при температуре 1050 °С длительностью 10 минут.

6.15-6.17 Эквивалентно строкам 5.17, 5.19-5.20.

7.1-7.5 Эквивалентно строкам 6.1-6.5.

7.6 Осаждение окисла толщиной 1 мкм.

7.7–7.12 Эквивалентно строкам 6.7–6.12.

7.13 Ионная имплантация бора с дозой 10^{15} см⁻² и энергией 3 кэВ (подлегирование области базы под контакт).

7.14 Отжиг в процессе высокотемпературного окисления в атмосфере сухого кислорода при температуре 1050 °С длительностью 7 минут.

Структура, сформированная на после этапа 7.14 представлена на рисунке 4.2.



Рисунок 4.2 – Структура сформированного биполярного *п-р-п-*транзистора

7.15 Стравливание всего окисла.

7.16 Эквивалентно строке 6.7.

7.17 Осаждение окисла толщиной 1 мкм.

7.18–7.22 Эквивалентно строкам 6.8–6.12.

7.23 Комментарий к началу процедуры металлизации.

7.24 Осаждение слоя алюминия толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 5 слоев.

7.25-7.27 Эквивалентно строкам 6.8-6.10.

7.28 Стравливание алюминия в незащищенных фоторезистом локальных областях.

7.29 Стравливание фоторезиста.

7.30 Назначение имени и координат электрода к базе.

7.31 Назначение имени и координат электрода к эмиттеру.

7.32 Присвоение имени электрода к коллектору с назначением его координат.

7.33-7.34 Эквивалентно строкам 6.16-6.17.

8.1-8.2 Эквивалентно строкам 1.1 и 1.2 (но для формирования расчетной сетки).

8.3 Создание сетки с использованием генератора АВС.

8.4 Сохранение выходного tif файла с информацией о созданной сетке.

8.5-8.6 Эквивалентно строкам 1.7-1.8 (но для сетки, созданной для расчета электрических характеристик сформированного транзистора).

Сформированная сетка, полученная на этапах 8.3 – 8.6, представлена на рисунке 4.3.



Рисунок 4.3 – Сетка дискретизации для численных вычислений при расчете ВАХ моделируемого биполярного *n-p-n*-транзистора

9.1, 9.2 и 9.3 Эквивалентно 7.1-7.3.

9.4 Загрузка tif файла с информацией о сетке.

9.5 Комментарий к началу процедуры расчета коэффициента усиления *B_f*.

9.6 Задание физических констант для расчета электрических характеристик на границе раздела кремний/окисел кремния (плотность поверхностных состояний и др.).

9.7 Задание электрических постоянных по директиве **MATERIAL**: материал (кремний), времена жизни электронов и дырок.

9.8 Задание параметров, относящихся к захвату ловушками носителей заряда.

9.9 Задание моделей, описывающих перенос носителей заряда в кремнии.

9.10 Комментарий к началу процедуры расчета зависимости тока в коллекторе от напряжения на коллекторе.

9.11 Задание выражений, по которым рассчитывается перенос носителей в модели Гуммеля – Пуна.

9.12 Задание методов (в частности, Рида – Шоттки – Холла) расчета переноса носителей заряда в исследуемой структуре.

9.13–9.16 Установка начальных напряжений на коллекторе – 0, 1, 2, 3 В, которые необходимы для проведения параметрических расчетов ВАХ транзистора, при напряжении на эмиттере и базе, равном нулю.

9.17 Задание выражений, по которым рассчитывается поведение носителей в модели Ньютона.

9.18 Задание напряжений на базе и эмиттере, соответственно равных 1 и 0 В.

9.19 Задание имени выражения $B_f = I_c/I_b$ и его печать.

9.20 Задание имени выражения для тока в коллекторе и его печать.

9.21 Задание имени выражения для тока в базе и его печать.

9.22 Задание имени выражения для напряжения база-эмиттер $V_{be} = V_b - V_e$ и напечатать его.

9.23 Создание log-файла для расчета зависимости B_f от I_b .

9.24 Задание изменения напряжения на базе от 0,2 В с шагом 0,1 В и с количеством шагов, равным 8.

9.25 Закрыть log-файл.

9.26–9.27 Эквивалентно строкам 1.7-1.8 (но для зависимости B_f om I_b).

Рассчитанная зависимость коэффициента усиления Bf моделируемого биполярного транзистора от логарифма значения тока в базе $log(I_b)$ приведена на рисунке 4.4.

10.1–10.4 Эквивалентно 9.1-9.4 (кроме: дальнейший расчет напряжения пробоя эмиттер-база *V*_{*Beb*} будет проводиться в среде программы medici.

Зависимость тока в эмиттере от напряжения, приложенного к эмиттеру, приведена на рисунке 4.5.





10.5 Комментарий к началу процедуры подключения моделей биполярно-го транзистора.

10.6 Подключение разных моделей описания биполярного транзистора.

10.7 Комментарий к началу процедуры моделирования биполярного транзистора.

10.8 Эквивалентно строке 9.11.

10.9 Подключение метода расчета поведения носителей с установлением предельного количества итераций, равного 20.

10.10 Установка в качестве начальных условий величин напряжений на базе и на эмиттере, равных 0 В для проведения параметрического моделирования.

10.11 Комментарий к назначению моделей, используемых при анализе моделируемого биполярного транзистора.

10.12 Назначение моделей, используемых при анализе моделируемого биполярного транзистора.

10.13 Комментарий к началу процедуры расчета напряжения пробоя моделируемого биполярного транзистора.

10.14 Эквивалентно строке 9.17.

10.15 Назначение необходимых параметров при использовании метода расчета, назначенного в строке 10.9.

10.16 Задание процедуры расчета напряжения на эмиттере с шагом 0,025 В до достижения предельного тока на эмиттере, равного с.imax.

10.17-10.18 Эквивалентно строкам 9.26-9.27.

4.2. Моделирование технологического процесса формирования структуры и электрических характеристик МОП-транзистора

Таблица 4.2 – Входной файл задания на моделирование технологического процесса формирования структуры и электрических характеристик МОП-транзистора

№, п/п	Содержимое файла задания на моделирование
1	Задание параметров исходной подложки и сетки пространственной дискретизации
1.1	driver ts4_init
1.2	\$module Psub_B:0
1.3	\$step mesh
1.4	mask in.file=nmos_as:0_0.tl1
1.5	<pre>mesh grid.fac=1 dx.max=0.2 ly.surf=0.5 dy.surf=0.02</pre>
	+ ly.activ=2 dy.activ=0.1 ly.bot=5 dy.bot=0.2
1.6	initialize <100> boron=1e14
1.7	\$step save
1.8	savefile out.file=Psub_B:0_0 tif

2	Создание «жертвенного» слоя окисла, подлегирование области
_	канала и формирование подзатворного диэлектрика
2.1	Şdriver ts4
2.2	<pre>\$module Implant_B:0</pre>
2.3	Sstep load
2.4	initialize in.file=Psub_B:0_0 tif
2.5	<pre>mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1</pre>
2.6	Şstep clear
2.7	diffusion time=10 temperat=/00 weto2
2.8	step extract_tox
2.9	+ out.file=Implant_B:0_0.ext
2.10	etch oxide
2.11	\$step oxide
2.12	diffusion time=25 temperat=900 dryo2
2.13	\$step implantation
2.14	implant boron dose=5e+11 energy=10
2.15	etch oxide
2.16	diffusion time=25 temperat=900 dryo2
2.17	\$step extract_tox
2.18	extract oxide area.ext x=3 prefix="%tox" suffix="um" + out.file=Gate oxide:0 0.ext
2 1 9	Sstep save
4.17	
2.19	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif
2.1) 2.20 3	savefile out.file=Gate_oxide:0 0 tif Осаждение поликремния и задание области затвора
2.1) 2.20 3 3.1	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Осаждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4
$ \frac{2.19}{2.20} \\ \frac{3}{3.1} \\ \overline{3.2} $	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0
2.10 2.20 3 3.1 3.2 3.3	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load
$ \begin{array}{r} 2.10 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \overline{3.3} \\ \overline{3.4} \\ \end{array} $	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif
$ \begin{array}{r} 2.10 \\ 2.20 \\ 3 \\ 3.1 \\ 3.2 \\ 3.3 \\ 3.4 \\ 3.5 \\ \end{array} $	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1
$ \begin{array}{r} 2.10 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \overline{3.3} \\ \overline{3.4} \\ \overline{3.5} \\ \overline{3.6} \\ \end{array} $	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocаждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21
$\begin{array}{r} 2.10 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 2.6 \\ \hline \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography
$\begin{array}{r} 2.10 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 3.8 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3.8 \\ \hline \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1
$\begin{array}{r} 2.19 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 3.8 \\ \hline 3.9 \\ \hline 2.16 \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10
$\begin{array}{r} 2.19\\ \hline 2.20\\ \hline 3\\ \hline 3.1\\ \hline 3.2\\ \hline 3.3\\ \hline 3.4\\ \hline 3.5\\ \hline 3.6\\ \hline 3.7\\ \hline 3.8\\ \hline 3.9\\ \hline 3.10\\ \hline 2.11\\ \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop
$\begin{array}{r} 2.19\\ \hline 2.20\\ \hline 3\\ \hline 3.1\\ \hline 3.2\\ \hline 3.3\\ \hline 3.4\\ \hline 3.5\\ \hline 3.6\\ \hline 3.7\\ \hline 3.8\\ \hline 3.9\\ \hline 3.10\\ \hline 3.11\\ \hline 2.12 \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0 0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili
$\begin{array}{r} 2.19\\ 2.20\\ \hline 3\\ \hline 3.1\\ \hline 3.2\\ \hline 3.3\\ \hline 3.4\\ \hline 3.5\\ \hline 3.6\\ \hline 3.7\\ \hline 3.8\\ \hline 3.9\\ \hline 3.10\\ \hline 3.11\\ \hline 3.12\\ \hline 2.12\\ \hline 2.12\\ \hline \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores
$\begin{array}{r} 2.19\\ \hline 2.20\\ \hline 3\\ \hline 3.1\\ \hline 3.2\\ \hline 3.3\\ \hline 3.4\\ \hline 3.5\\ \hline 3.6\\ \hline 3.7\\ \hline 3.8\\ \hline 3.9\\ \hline 3.10\\ \hline 3.11\\ \hline 3.12\\ \hline 3.13\\ \hline 2.14\end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0 0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save
$\begin{array}{c} 2.19 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 3.8 \\ \hline 3.9 \\ \hline 3.10 \\ \hline 3.11 \\ \hline 3.12 \\ \hline 3.13 \\ \hline 3.14 \\ \hline \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save savefile out.file=Definition_Gate:0_0 tif
$\begin{array}{c} 2.19 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 3.8 \\ \hline 3.9 \\ \hline 3.10 \\ \hline 3.11 \\ \hline 3.12 \\ \hline 3.13 \\ \hline 3.14 \\ \hline 4 \\ \hline 4 \\ \hline 4 \\ \hline 1 \\ \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save savefile out.file=Definition_Gate:0_0 tif Формирование областей истока и стока
$\begin{array}{c} 2.19 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 3.8 \\ \hline 3.9 \\ \hline 3.10 \\ \hline 3.11 \\ \hline 3.12 \\ \hline 3.13 \\ \hline 3.14 \\ \hline 4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save savefile out.file=Definition_Gate:0_0 tif Формирование областей истока и стока \$driver ts4 \$module_SD_Ac:0
$\begin{array}{c} 2.19 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 3.8 \\ \hline 3.9 \\ \hline 3.10 \\ \hline 3.11 \\ \hline 3.12 \\ \hline 3.13 \\ \hline 3.13 \\ \hline 3.14 \\ \hline 4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.2$	savefile out.file=Gate_oxide:0_0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save savefile out.file=Definition_Gate:0_0 tif
$\begin{array}{c} 2.19 \\ \hline 2.20 \\ \hline 3 \\ \hline 3.1 \\ \hline 3.2 \\ \hline 3.3 \\ \hline 3.4 \\ \hline 3.5 \\ \hline 3.6 \\ \hline 3.7 \\ \hline 3.8 \\ \hline 3.9 \\ \hline 3.10 \\ \hline 3.11 \\ \hline 3.12 \\ \hline 3.13 \\ \hline 3.14 \\ \hline 4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4 \\ 4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.1 \\ \hline 4.2 \\ \hline 4.3 \\ \hline 4.4 \\ \hline 4.$	savefile out.file=Gate_oxide:0 0 tif Ocamagenue поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save savefile out.file=Definition_Gate:0_0 tif
$\begin{array}{c} 2.19\\ \hline 2.20\\ \hline 3\\ \hline 3.1\\ \hline 3.2\\ \hline 3.3\\ \hline 3.4\\ \hline 3.5\\ \hline 3.6\\ \hline 3.7\\ \hline 3.8\\ \hline 3.9\\ \hline 3.10\\ \hline 3.11\\ \hline 3.12\\ \hline 3.13\\ \hline 3.14\\ \hline 4\\ \hline 4.1\\ \hline 4.2\\ \hline 4.3\\ \hline 4.4\\ \hline 4.5\\ \hline \end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0 0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition_Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save savefile out.file=Definition_Gate:0_0 tif
$\begin{array}{c} 2.19\\ \hline 2.20\\ \hline 3\\ \hline 3.1\\ \hline 3.2\\ \hline 3.3\\ \hline 3.4\\ \hline 3.5\\ \hline 3.6\\ \hline 3.7\\ \hline 3.8\\ \hline 3.9\\ \hline 3.10\\ \hline 3.11\\ \hline 3.12\\ \hline 3.13\\ \hline 3.13\\ \hline 3.14\\ \hline 4\\ \hline 4.1\\ \hline 4.2\\ \hline 4.3\\ \hline 4.4\\ \hline 4.5\\ \hline 4.6\\ \hline 4.5\\ \hline 4.6\\ \hline 6\end{array}$	savefile out.file=Gate_oxide:0 0 tif Ocaждение поликремния и задание области затвора \$driver ts4 \$module Definition Gate:0 \$step load initialize in.file=Gate_oxide:0_0 tif mask in.file=NMOS As:0 0.tl1 deposition polysili thicknes=0.04 spaces=5 phosphor=1e21 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_10 develop etch polysili etch photores \$step save savefile out.file=Definition Gate:0_0 tif

4.7	<pre>implant arsenic dose=7.3e+14 energy=10</pre>
4.8	\$step up-diffusion
4.9	diffusion time=13 temperat=900 inert
4.10	\$step save
4.11	savefile out.file=SD As:0 0 tif
5	Расчет базовых характеристик структуры моделируемого МОП-транзистора
5.1	\$driver ts4
5.2	\$module Extract:0
5.3	\$step load
5.4	initialize in.file=SD_As:0_0 tif
5.5	mask in.file=NMOS_As:0_0.tl1
5.6	\$step extract Xj
5.7	select z=doping
5.8	extract d.extract value=0 silicon x=1 prefix="Xj"
5.0	+ suffix="um" out.file=Extract:0_0.ext
5.9	\$step extract Rs
5.10	electrical X=1 RESISTAN
5.11	\$step extract Npeak(SD)
5.12	<pre>select z=abs(doping)</pre>
5 13	extract silicon val.extract maximum x=1 prefix="%Nmax(SD)"
5.15	+ suffix="cm**-3" out.file=Extract:0_0.ext
5.14	\$step extract Npeak(channel)
5.15	<pre>select z=abs(doping)</pre>
	extract silicon val.extract maximum x=3
5.16	+ prefix="%Nmax(channel)" suffix="cm**-3"
C 17	+ out.file=Extract:0_0.ext
$\frac{3.1}{5.10}$	Sstep save
5.18	Saveille Out.ille=Extract:0_0 til
6	Формирование контактов к структурным элементам МОП-транзистора
0.1	Sariver ts4
6.2	Smodule Contacts:U
0.3	initializa in filo-Eutroatio 0 tif
0.4	millalize in.life-Extract:0_0 til
0.3	Mask IN.IIIe-NMOS_AS:0_0.01
0.0	dependentian evide thickness 0.05 enages 20
0.7	cater lithegraphy
0.8	sstep iithography
0.9	dependention photomer positive thickness-1 approach
0.10	deposition photores positive thicknes=1 spaces=1
6 1 1	<pre>deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_16 develop</pre>
6.11	<pre>deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_16 develop otch_ovido</pre>
6.11 6.12	<pre>deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_16 develop etch oxide otch photores</pre>
6.11 6.12 6.13	<pre>deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_16 develop etch oxide etch photores Sstep metallization</pre>
6.11 6.12 6.13 6.14	<pre>deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_16 develop etch oxide etch photores \$step metallization deposition aluminum thicknes=0, 1 spaces=30</pre>
6.11 6.12 6.13 6.14 6.15	<pre>deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_16 develop etch oxide etch photores \$step metallization deposition aluminum thicknes=0.1 spaces=30 \$step_lithography</pre>
6.11 6.12 6.13 6.14 6.15 6.16 6.16	<pre>deposition photores positive thicknes=1 spaces=1 expose mask=layer_16 develop etch oxide etch photores \$step metallization deposition aluminum thicknes=0.1 spaces=30 \$step lithography deposition photores positive thicknes=1 spaces=1</pre>

6.18	expose mask=layer_17
6.19	develop
6.20	etch aluminum
6.21	etch photores
6.22	\$step anneal
6.23	diffusion time=25 temperat=400
6.24	\$step electrodes
6.25	electrode name=Source X=1.5 Y=-0.06
6.26	electrode name=Gate X=3 Y=-0.03
6.27	electrode name=Drain X=4.5 Y=-0.06
6.28	\$step save
6.29	<pre>savefile out.file=Contacts:0_0 tif</pre>
7	Формирование вычислительной сетки для расчета электрических характеристик моде-
/	лируемого МОП-транзистора: порогового напряжения V_{th} и напряжения пробоя V_{br}
7.1	driver Mesh
7.2	\$module Mesh:0
7.3	<pre>mesh tif in.file=Contacts:0_0 ABC JUNC.ABC critical=0.0000001</pre>
7.4	<pre>save tif out.file=Contacts:0_0</pre>
7.5	\$step save
7.6	savefile out.file=Mesh:0_0 tif
8	Расчет порогового напряжения V _{th}
8.1	\$driver medici
8.2	\$module IdVg:0
8.3	\$step load
8.4	<pre>mesh tif in.file=Mesh:0_0</pre>
8.5	\$step bottom_electrode
8.6	electrode Y.MIN=4.9 name=Substrate
8.7	\$step models
8.8	models srfmob fldmob consrh arora ^auger ^bgn ^impact.i
8.9	\$step IdVg
8.10	symbolic carriers=2 gummel
8.11	method damped itlimit=20
8 1 2	<pre>solve v(Drain)=0.1 v(Source)=0 v(Gate)=0</pre>
0.12	+ v(Substrate)=0 initial
8.13	symbolic carriers=2 newton
8.14	log ivfile=IdVg:0_0.ivl
8.15	solve v(Gate)=0 elec=Gate vstep=0.25 nsteps=20
8.16	log close
8.17	\$step extract
8.18	<pre>extract mos.param in.file=IdVg:0_0.ivl out.file=IdVg:0_0.ext</pre>
8.19	\$step save
8.20	<pre>save tif all out.file=IdVg:0_0</pre>
9	Расчет напряжения пробоя V _{br}
9.1	\$driver medici
9.2	\$module breakdown:0
9.3	\$step load

9.4	<pre>mesh tif in.file=IdVg:0_0</pre>
9.5	\$step models
9.6	models srfmob fldmob consrh arora ^auger ^bgn ^impact.i
9.7	\$step init
9.8	symbolic carriers=0 gummel
9.9	method damped itlimit=20
9.10	<pre>solve v(Gate)=1 v(Source)=0 v(Drain)=0 v(Substrate)=0 initial</pre>
9.11	\$step models
9.12	models SRFMOB FLDMOB CONSRH ARORA ^auger ^bgn impact.i
9.13	\$step breakdown
9.14	symbolic carriers=2 newton
9.15	method damped itlimit=20 stack=8
9.16	extract expression=max(@VBmax;@v(Drain))
7.10	+ init=0 print
917	solve v(Drain)=0 elec=Drain c.vstep=0.01 c.imax=0.001
7.17	+ c.vmax=40 continue
9 1 8	extract expression=@VBmax out.file=breakdown:0_0.ext
7.10	+ caesar name=VBrk units=V now
9.19	\$step save
9.20	save tif all out.file=breakdown:0_0

Номера строк (этапов технологического процесса) в нижеследующих комментариях соответствуют позициям таблицы 4.2.

1.1 Имя драйвера для описания исходного состояния подложки.

1.2 Присвоение имени модулю с описанием подложки.

1.3 Комментарий к имени этапа формирования сетки дискретизации.

1.4 Присвоение имени файла с топологией формируемого прибора в формате tl1.

1.5 Формирование сетки дискретизации по директиве MESH, устанавливающей размеры областей моделирования вдоль направления Y. Здесь: GRID.FAC – коэффициент масштабирования сетки, DY.SURF и LY.SURF – соответственно шаг сетки вдоль направления Y в приповерхностной области подложки и размер этой области; DY.ACTIVE и LY.ACTIVE – соответственно шаг сетки вдоль направления Y в промежуточной (между приповерхностной (SURF) и нижней (BOT)) областью подложки и размер этой области; DY.BOT и LY.BOT – соответственно шаг сетки вдоль направления Y в нижней области подложки и размер этой области; DX.MAX – величина равномерного шага сетки вдоль направления X.

1.6 Задание исходного состояния подложки по директиве INITIALIZE, устанавливающей, что подложка имеет кристаллографическую ориентацию <111> и легирована бором с концентрацией 10^{14} см⁻³.

1.7 Комментарий к присвоению имени этапа сохранения сформированного файла с информацией об исходном состоянии подложки. 1.8 Сохранение файла с исходным состоянием подложки в формате tif.

2.1, 2.2 и 2.3 Эквивалентно строкам 1.1, 1.2 и 1.3 (но для данного этапа моделирования технологического маршрута).

2.4 Сохранение информации об исходном состоянии подложки в формате tif.

2.5 Сохранение топологии формируемого прибора в формате tl1.

2.6 Комментарий к процедуре очистки кремниевой поверхности.

2.7 Окисление в атмосфере влажного кислорода при температуре 700 °С длительностью 10 минут (формирование окисного слоя).

2.8 Комментарий к процедуре экстракции (расчета) толщины подзатворного диэлектрика *t*_{ox}.

2.9 Задание области формирования подзатворного диэлектрика tox.

2.10 Стравливание всего слоя окисла.

2.11 Комментарий к процедуре формирования окисного слоя.

2.12 Окисление в атмосфере сухого кислорода при температуре 900 °C длительностью 25 минут.

2.13 Комментарий к проведению процесса ионной имплантации.

2.14 Ионная имплантация бора с дозой $5 \cdot 10^{11}$ см⁻² и энергией 10 кэВ.

2.15 Стравливание всего слоя окисла.

2.16 Отжиг в процессе высокотемпературного окисления в атмосфере сухого кислорода при температуре 900 °С длительностью 25 минут.

2.17 Комментарий к процедуре экстракции (расчета) толщины подзатворного диэлектрика *t*_{ox}.

2.18 Задание области формирования подзатворного диэлектрика t_{ox} и затвора (gate).

2.19 Комментарий к процедуре сохранения данных о t_{ox} и gate.

2.20 Сохранение файла в формате tif с результатами формирования подзатворного диэлектрика.

3.1-3.5 Эквивалентно строкам 2.1-2.5 (но для операций всего этапа 3).

3.6 Осаждение поликремния толщиной 0,04 мкм с одновременным легированием фосфором с концентрацией 10^{21} см⁻³ и с разбиением по пространству выращенного слоя на 5 подслоев.

3.7 Комментарий к проведению операции фотолитографии.

3.8 Осаждение позитивного фоторезиста толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 5 слоев.

3.9 Экспозиция фоторезиста с использованием маски.

3.10 Удаление фоторезиста в местах его экспонирования.

3.11 Травление поликремния.

3.12 Травление фоторезиста.

3.13–3.14 Эквивалентно строкам 1.7–1.8 (но для операций всего этапа 3).

4.1-4.3 Эквивалентно строкам 1.1-1.3.

4.4 Эквивалентно строке 2.4 (но для затвора).

4.5 Эквивалентно строке 2.5.

4.6 Комментарий к проведению моделирования процесса имплантации.

4.7 Ионная имплантация мышьяка с дозой 7,3·10¹⁴ см⁻² и энергией 10 кэВ.

4.8 Комментарий к проведению моделирования процесса отжига.

4.9 Отжиг в процессе высокотемпературного окисления в инертной среде при температуре 900 °C длительностью 13 минут.

4.10–4.11. Эквивалентно строкам 1.7–1.8 (но для формирования областей истока-стока).

5.1-5.5 Эквивалентно строкам 2.1-2.5.

5.6 Комментарий к проведению «экстракции» глубины залегания p-n-перехода X_{j} .

5.7 Вывод профиля распределения примесей в виде графика.

Распределение «чистой» net-концентрации примесей в структуре моделируемого МОП-транзистора приведено на рисунке 4.6.

5.8 Задание геометрических областей, в которых будут экстрагироваться характеристики, выводимые в виде графика.

5.9 Эквивалентно строке 5.6 (но для слоевого сопротивления R_s).

5.10 Директива на расчет слоевого сопротивления в сечении X = 1 мкм.

5.11 Комментарий к проведению расчета максимальной концентрации примесей в областях истока-стока.

5.12 Эквивалентно строке 5.7 (но для «net» профиля).

5.13 Эквивалентно строке 5.8.

5.14 Эквивалентно строке 5.11 (но для области канала).

5.15 Эквивалентно строке 5.12.

5.16 Эквивалентно строке 5.13.

5.17-5.18 Эквивалентно строкам 1.7-1.8.

6.1-6.5 Эквивалентно строкам 2.1-2.5.

6.6 Комментарий к проведению моделирования осаждения окисла.

6.7 Осаждение оксида кремния толщиной 0,05 мкм и с разбиением по пространству на 20 слоев.

6.8 Комментарий к проведению моделирования процесса литографии.

6.9 Осаждение позитивного фоторезиста толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 1 слой.

6.10-6.11 Эквивалентно строкам 3.9-3.10.

6.12 Стравливание всего слоя окисла.

6.13 Комментарий к проведению моделирования процесса литографии.

6.14 Комментарий к проведению моделирования процесса металлизации.

6.15 Осаждение алюминия толщиной 0,1 мкм и с разбиением по пространству на 30 слоев.

6.16 Комментарий к проведению моделирования процесса литографии.

6.17 Осаждение позитивного фоторезиста толщиной 1 мкм и с разбиением по пространству на 1 слой.



Рисунок 4.6 – Распределение «чистой» (net) концентрации примесей (абсолютное значение суммы примесей разного типа, взятых со своим знаком) в структуре моделируемого МОП-транзистора

70

6.18-6.19 Эквивалентно строкам 6.12-6.13.

6.20 Стравливание незащищенного слоя алюминия.

6.21 Стравливание всего слоя фоторезиста.

6.22 Комментарий к проведению моделирования процесса отжига.

6.23 Отжиг в процессе высокотемпературного окисления (по умолчанию в нейтральной среде) при температуре 400 °C длительностью 25 минут.

6.24 Комментарий к проведению моделирования формирования электродов.

6.25–6.27 Назначение имен электродов к истоку, стоку и затвору с назначением соответствующих координат по *X* и *Y* направлениям.

6.28-6.29. Эквивалентно строкам 1.7-1.8.

7.1–7.2 Эквивалентно строкам 1.1 и 1.2 (но для формирования расчетной сетки).

7.3 Задание сетки с использованием генератора АВС.

7.4 Сохранение выходного tif файла с информацией о созданной сетке с контактами.

7.5–7.6 Эквивалентно строкам 1.7–1.8 (но для сетки, созданной для формирования контактов моделируемого МОП-транзистора).

Сформированная сетка для дальнейших численных расчетов ВАХ моделируемого МОП-транзистора представлена на рисунке 4.7.

8.1–8.3 Эквивалентно строкам 1.1-1.3 (но для расчета зависимости тока стока от напряжения на затворе с использованием модуля medici).

8.4 Комментарий к назначению нижнего (bottom) электрода.

8.5 Назначение имени электрода и его У-координаты.

8.6 Комментарий к назначению моделей для расчета электрических характеристик моделируемого МОП-транзистора.

8.7 Задание моделей для расчета электрических характеристик моделируемого МОП-транзистора.

8.8 Комментарий к организации расчета зависимости тока стока I_d от напряжения на затворе V_g .

8.9 Задание выражений, по которым рассчитывается поведение носителей в модели Гуммеля–Пуна.

8.10 Выбор метода расчета ВАХ с заданием предельного количества итераций itlimit.

8.11 Задание начальных значений напряжений на стоке, истоке и затворе для расчета семейства ВАХ.

8.12 Формирование log-файла для расчета зависимости I_d/V_g .

8.13 Задание выражений для расчетов поведения носителей в методе Ньютона.

8.14 Задание начального значения напряжения на затворе, шага изменения этого напряжения и количества шагов для расчета зависимости I_d/V_g .

8.15 Закрыть log-файл.



при расчете ВАХ моделируемого МОП-транзистора

8.16 Комментарий к организации процедуры расчета параметров моделируемого МОП-транзистора.

8.17 Расчет электрических параметров моделируемого МОП-транзистора и сохранение результатов в соответствующем файле.

8.18–8.19 Эквивалентно строкам 1.7–1.8 (но для расчета зависимости I_d/V_g).

Рассчитанная зависимость тока стока от напряжения на затворе моделируемого МОП-транзистора приведена на рисунке 4.8.

9.1–9.4 Эквивалентно строкам 8.1-8.4 (но для расчета напряжения пробоя V_{br} с использованием модуля medici).

9.5 Комментарий к началу процедуры моделирования поведения носителей заряда в структурных элементах моделируемого МОП-транзистора.


Рисунок 4.8 – Зависимость тока стока от напряжения на затворе, используемая для определения порогового напряжения МОП-транзистора ($V_{th} = 0.5$ B)



9.6 Задание моделей, описывающих поведение носителей заряда в структурных элементах моделируемого МОП-транзистора, методов их решения и соответствующих параметров моделей.

9.7 Комментарий к организации начала расчета ВАХ, необходимых для определения напряжения пробоя.

9.8-9.10 Эквивалентно строкам 8.9-8.11.

9.11-9.15 Эквивалентно строкам 8.6-8.10.

9.16 Расчет выражений для максимальной величины напряжения на затворе VBmax.

9.17 Эквивалентно строке 8.14 (но с заданием максимальных значений тока с.imax и напряжения с.vmax).

9.18 Эквивалентно строке 9.16 (но для расчета напряжения пробоя V_{br}).

9.19–9.20 Эквивалентно строкам 1.7–1.8 (но для расчета зависимости V_{br}).

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1 Нелаев, В. В. Основы САПР в микроэлектронике. Моделирование технологии и прибора : учеб. пособие / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий. – Минск : БГУИР, 2008. – 220 с.

2 Нелаев, В. В. Программный модуль для проектирования технологии интегральных схем : метод. пособие / В. В. Нелаев, М. Н. Найбук. – Минск : БГУИР, 2007. – 43 с.

3 Нелаев, В. В. Работа в среде пакета АТНЕNA проектирования интегральных микросхем : учеб. пособие / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий. – Минск : БГУИР, 2004. – 148 с.

4 Нелаев, В. В. Технологическое проектирование интегральных схем. Программа SSUPREM4 : учеб. пособие / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий.-Минск : БГУИР, 2003.- 101 с.

5 Нелаев, В. В. Статистический анализ и оптимизация технологических параметров изготовления интегральных микросхем : учеб.-метод. пособие / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий.– Минск : БГУИР, 2002.– 39 с.

6 Нелаев, В. В. Программа Suprem II моделирования технологии изготовления интегральных схем : метод. пособие / В. В. Нелаев. – Минск : БГУИР, 1998. – 26 с.

7 Нелаев, В. В. Физическое моделирование технологических процессов в программе SUPREM II : учеб. пособие / В. В. Нелаев. – Минск : БГУИР, 1998. – 37 с.

8 Нелаев, В. В. Проектирование ИС в среде системы Design Center : учеб. пособие / В. В. Нелаев, В. Р. Стемпицкий. – Минск : БГУИР, 2005. – 55 с.

9 Silvaco Corporate Site [Электронный ресурс].– 2011.– Режим доступа: http://www.silvaco.com

10 Cadence Corporate Site [Электронный ресурс].– 2011.– Режим доступа: http://www.cadence.com

11 Synopsys Corporate Site [Электронный ресурс].– 2011.– Режим доступа: http://www.synopsys.com

12 Mentor Graphics Corporate Site [Электронный ресурс].– 2011.– Режим доступа: http://www.mentor.com

13 Кравченко, В. САПР компании Synopsys. Основные средства и возможности / В. Кравченко, Д. Радченко // Электроника: Наука. Технология. Бизнес. – 2003. – Вып. 5. – С. 31–33. Учебное издание

Нелаев Владислав Викторович Стемпицкий Виктор Романович Котов Владимир Семенович

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ МИКРОСХЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА КОМПАНИИ SYNOPSYS

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ

Редактор Л. А. Шичко Корректор Е. Н. Батурчик

Подписано в печать 14.04.2012. Формат 60х84 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс». Отпечатано на ризографе. Усл. печ. л. 4,65. Уч.-изд. л. 4,0. Тираж 100 экз. Заказ 623.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» ЛИ №02330/0494371 от 16.03.2009. ЛП №02330/0494175 от 03.04.2009. 220013, Минск, П. Бровки, 6