

作者简介

阮刚,复旦大学教授,微电子及固态电子学专业博士生导师.1956—1958 年在北京大学加入五校半导体联合教研室,参与创办我国第一个半导体专业.1960 年初在复旦大学领导一个青年科研组,研制成功了我国第一批锗集成电路.长期从事半导体器件工艺、物理、模型和模拟的教学和研究工作,已合作编译出版专业书 5 本,单独和合作发表论文 200 余篇.曾是美国 Illinois 大学高级访问学者,新加坡 Nanyang 理工大学访问教授,德国 Chemnitz 技术大学顾问教授及德国 Fraunhofer 微集成研究所高级科技顾问.



前 言

自 1958 年 Jack S. Kilby 发明集成电路(IC)以及 1959 年 Robert N. Noyce 发明实用的硅 IC 以来,历经 50 余年的发展,IC 的功能和应用有了惊人的增强和扩展,2005 年全球基于 IC 的半导体产业产值已超过 2 200 亿美元,IC 已成为人类社会进入信息时代的主要物质基础。

集成电路工艺和器件的计算机模拟又称集成电路工艺和器件技术的计算机辅助设计(英文简称为 IC TCAD),它是 IC 设计和 IC 虚拟制造的重要组成部分,是 IC 工艺和器件特性快速分析的有力工具。应用 IC TCAD 能缩短 IC 工艺和器件的开发周期,节省试制成本,还能获取实验无法得到的信息以及深化 IC 工艺和器件的物理研究。

美国 Stanford 大学 IC 实验室 1978 年 IC 工艺模拟软件 SUPREM-2 的成功试制和释放使用,以及 1979 年半导体器件分析软件 SEDAN-1 的成功试制和释放使用是 IC TCAD 开始进入实用的标志。20 世纪 80 年代至今的 20 多年中,随着 IC 工艺和器件物理研究的进展,计算机硬件性能的增强以及应用软件开发技术的成熟,IC TCAD 的功能和应用也有了同 IC 发展同步而得到显著的增强和扩展。

鉴于 IC TCAD 对 IC 研发和生产的重要作用,复旦大学从 1981 年引入 SUPREM-2 为起点开始了对该项技术的研究,并从 1988 年起为微电子及固态电子学专业的研究生开设了《集成电路工艺和器件的计算机模拟》专业课。本书是作者以该专业课自编讲义为基础,经较多的补充、修改,兼顾基础和近代进展写成的。本书用约 40%的篇幅详细介绍在国际上最早实用的、参考资料齐全的、特别适用于教学和入门学习的几种知名的经典的 IC 工艺和器件模拟程序所用的物理模型和程序使用方法,用约 60%的篇幅阐述 IC TCAD 的多方面发展及近代进展。

作者希望本书适合于大学在校有关专业的高年级本科生或研究生用作教科书或参考书,也希望本书对所有有兴趣于研发、使用 and 了解 IC TCAD 技术的广大

产、学、研界的读者有较大的参考作用。

作者衷心感谢本书相关的 IC TCAD 模型和软件的研制、开发和推广专家以及有关的大学和公司。本书引用了他们撰写的科研论文、研究报告、产品介绍、用户手册的部分内容和有关图表。作者相信部分材料的引用将使本书读者能有机会具体了解本领域一批专家和单位为 IC TCAD 的发明和发展作出的先驱性的贡献，也有利于读者享受由此而带来的本书教学价值和参考价值提升的效果。

最后，作者敬请同行专家和读者对本书存在的差错和不足提出意见，您的意见将是本书有机会再版时修改和补充的主要依据。

阮 刚

2006 年 9 月于复旦大学

* 鉴于本书的主体属集成电路计算机模拟、辅助设计，相关的物理量都采用正体字母，与一般出版惯例不同。

目 录

前言.....	1
第一章 引言.....	1
§ 1.1 模拟和集成电路模拟简释	1
1.1.1 模拟	1
1.1.2 集成电路模拟	1
§ 1.2 IC 工艺和器件模拟简介	2
1.2.1 IC 工艺模拟	2
1.2.2 IC 器件模拟	4
§ 1.3 本书的内容安排及特点	5
第二章 集成电路的工艺模拟.....	7
§ 2.1 SUPREM 概述	7
§ 2.2 SUPREM-2 概述	8
§ 2.3 SUPREM-2 的工艺模型	8
2.3.1 离子注入模型	8
2.3.1.1 简单的对称高斯分布	9
2.3.1.2 两个相联的半高斯分布.....	10
2.3.1.3 修改过的 Pearson IV 分布	10
2.3.1.4 硅表面有二氧化硅层时对射程的修正.....	12
2.3.1.5 热退火对注入杂质分布的影响.....	12
2.3.2 热加工时杂质迁移模型.....	13
2.3.2.1 扩散方程.....	13
2.3.2.2 非本征情况下的扩散系数.....	15
2.3.2.3 硅中存在其他高浓度杂质时对杂质扩散分布的影响 ...	17
2.3.2.4 磷的扩散迁移模型.....	18

2.3.2.5	氧化增强扩散.....	20
2.3.2.6	界面流量.....	21
2.3.2.7	产生和损失机构——砷的扩散迁移模型.....	23
2.3.3	热氧化模型.....	24
2.3.3.1	Deal-Grove 热氧化生长公式	24
2.3.3.2	高硅表面掺杂浓度对硅氧化速率的影响.....	25
2.3.3.3	增量形式的热氧化生长公式.....	26
2.3.4	硅外延模型.....	26
§ 2.4	SUPREM-2 中几个电参数的计算	27
2.4.1	薄层电阻计算.....	27
2.4.2	MOS 阈值电压计算	28
§ 2.5	SUPREM-2 的使用和应用例举	30
2.5.1	SUPREM-2 的使用	30
2.5.2	SUPREM-2 的应用例举	30
2.5.2.1	SUPREM-2 应用例举一 CMOS P 阱模拟	30
2.5.2.2	SUPREM-2 应用例举二 斯坦福配套元件芯片 工艺.....	35
§ 2.6	SUPREM-3	40
2.6.1	SUPREM-3 的离子注入模型	40
2.6.2	SUPREM-3 的热氧化模型	41
2.6.3	SUPREM-3 的杂质扩散模型	46
2.6.3.1	SUPREM-3 执行的非氧化情况下的杂质扩散 模型.....	46
2.6.3.2	SUPREM-3 执行的氧化表面情况下的杂质 扩散模型.....	50
2.6.3.3	SUPREM-3 执行的为其他材料的杂质扩散和 分凝模型.....	52
2.6.4	SUPREM-3 的硅外延模型	52
2.6.5	多晶硅模型.....	55

2.6.6 SUPREM-3 中的电性能计算	56
2.6.7 SUPREM-3 的使用和应用例举	58
2.6.7.1 SUPREM-3 的使用	58
2.6.7.2 SUPREM-3 的应用例举一 硅栅 NMOS 工艺	58
2.6.7.3 SUPREM-3 的应用例举二 掺杂多晶硅发射极 双极型晶体管	73
§ 2.7 SUPREM-4	87
2.7.1 SUPREM-4 的离子注入模型	88
2.7.1.1 解析离子注入模型	88
2.7.1.2 Monte Carlo 离子注入模型	89
2.7.2 SUPREM-4 的杂质扩散模型	89
2.7.3 SUPREM-4 的氧化模型	90
2.7.3.1 一维氧化模型	90
2.7.3.2 二维氧化模型	90
2.7.4 SUPREM-4 的其他工艺模型和电参数计算模型	94
2.7.5 SUPREM-4 的使用和应用例举	95
2.7.5.1 SUPREM-4 的使用	95
2.7.5.2 SUPREM-4 的应用例举一 硅的局部氧化工艺的 二维模拟	95
2.7.5.3 SUPREM-4 的应用例举二 CMOS 中 NMOS 管 的制造工艺模拟	98
第二章参考资料	104
第三章 半导体器件的一维模拟	108
§ 3.1 SEDAN-1 的一般描述	108
§ 3.2 SEDAN-1 执行的半导体基本方程	110
§ 3.3 SEDAN-1 中几个参数的物理模型	112
3.3.1 杂质浓度及电场对迁移率的影响	112
3.3.2 高掺杂浓度引起禁带变窄	113

3.3.3 两种复合机构对复合率的贡献	114
§ 3.4 SEDAN-1 的使用和应用例举	115
3.4.1 SEDAN-1 的使用	115
3.4.2 SEDAN-1 的应用例举	116
3.4.2.1 SEDAN-1 的输入文件例举	116
3.4.2.2 SEDAN-1 的输出信息例举	118
§ 3.5 SEDAN-3	121
3.5.1 SEDAN-3 概述	121
3.5.2 SEDAN-3 执行的基本方程	122
3.5.3 SEDAN-3 中几个参数的物理模型	126
3.5.3.1 硅中几个参数的物理模型	126
3.5.3.2 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中几个参数的物理模型	130
3.5.4 SEDAN-3 的使用和应用例举	135
3.5.4.1 SEDAN-3 的使用	135
3.5.4.2 SEDAN-3 的应用例举一 MOS 电容的模拟	136
3.5.4.3 SEDAN-3 的应用例举二 npn 晶体管的模拟	138
3.5.4.4 SEDAN-3 的应用例举三 具有多晶硅发射区的 nnp 晶体管的模拟	140
3.5.4.5 SEDAN-3 的应用例举四 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ 异质结双极型晶体管的模拟	142
第三章参考资料	145
第四章 半导体器件的二维模拟	147
§ 4.1 MINIMOS-2 概述	147
§ 4.2 MINIMOS-2 执行的半导体方程组	148
§ 4.3 3 种求取二维掺杂分布的方法	150
§ 4.4 MINIMOS-2 中迁移率及产生和复合模型	152
4.4.1 迁移率模型	152
4.4.2 产生和复合模型	154

§ 4.5 MINIMOS-2 的使用和应用例举	155
4.5.1 MINIMOS-2 的使用	155
4.5.2 MINIMOS-2 的应用例举	155
4.5.2.1 MINIMOS-2 的输入文件例举	155
4.5.2.2 几个参数的二维图输出例举	157
§ 4.6 MEDICI	160
4.6.1 MEDICI 概述	160
4.6.2 MEDICI 执行的方程	161
4.6.3 MEDICI 的物理模型	163
4.6.3.1 复合和寿命模型	163
4.6.3.2 禁带宽度模型	168
4.6.3.3 迁移率模型	172
4.6.3.4 其他重要物理模型	185
4.6.4 MEDICI 的使用和应用例举	186
4.6.4.1 MEDICI 的使用	186
4.6.4.2 MEDICI 的应用例举一 沟长为 $1.5\ \mu\text{m}$ 的 N 沟 MOSFET	187
4.6.4.3 MEDICI 的应用例举二 用能量平衡方程 模拟 LDD MOSFET 中衬底电流	212
4.6.4.4 MEDICI 的应用例举三 SiGe 异质结双极型 晶体管(HBT)	219
第四章参考资料.....	224
第五章 集成电路工艺和器件模拟的发展现状和未来需求.....	227
§ 5.1 集成电路工艺和器件模拟器发展现状	227
5.1.1 掺杂分布和氧化模拟器	227
5.1.2 光刻刻蚀和淀积的形貌模拟器	228
5.1.2.1 SAMPLE	228
5.1.2.2 DEPICT 系列	231

5.1.2.3	ELITE	235
5.1.2.4	OPTOLITH	235
5.1.2.5	其他形貌模拟器	236
5.1.3	结合掺杂氧化和形貌模拟的完整工艺模拟器	237
5.1.4	集成电路制造工艺的统计模拟器	237
5.1.4.1	FABRICS II 的一般介绍	237
5.1.4.2	FABRICS II 中的随机数产生器	238
5.1.4.3	FABRICS II 中的工艺和器件模拟器	239
5.1.4.4	集成电路制造工艺统计模拟技术的应用和发展	240
5.1.5	集成电路中有源器件及无源元件模拟器	241
5.1.6	集成电路中的互连寄生模拟器	243
5.1.6.1	模拟的基本内容和建模	243
5.1.6.2	互连寄生模拟器	245
§ 5.2	集成电路工艺和器件模拟近期和远期的需求	251
5.2.1	困难挑战	252
5.2.1.1	10 个论题	252
5.2.1.2	近期困难挑战	253
5.2.1.3	远期困难挑战	256
5.2.1.4	实验验证是关键困难挑战	257
5.2.2	近期和远期的能力需求	257
5.2.2.1	近期的能力需求	257
5.2.2.2	远期的能力需求	261
第五章	参考资料	262
附录		266
附录一	SUPREM-2 的输入文件书写格式	266
附录二	SEDAN-1 的输入文件书写格式	280
附录三	MINIMOS-2 的输入文件书写格式	292



第一章 引言

§ 1.1 模拟和集成电路模拟简释

1.1.1 模拟

当今,模拟(simulation)这一术语已不仅广泛出现在各种科技书刊上,甚至已频繁出现于各种新闻媒体上.不同书刊和辞典对模拟这一术语的定义性简释大同小异,以下3种最有代表性.模拟是:

- (i) 一个系统或过程的功能用另一系统或过程的功能的模仿表示;
- (ii) 用能适用于计算机的数学模型表示实际物理过程或系统;
- (iii) 不用实验对问题的检验.

Simulation又可中译成仿真.模拟(也即仿真)的可信度和精度很大程度上基于建模(modeling)的可信度和精度.建模和模拟(modeling and simulation)是研究自然科学、工程科学、人文科学和社会科学的重要方法,是开发产品、制定决策的重要手段.据不完全统计,目前,有关建模和模拟方面的研究论文已占各类国际、国内专业学术会议论文总数的10%以上,占了很可观的份额.

1.1.2 集成电路模拟

集成电路模拟通过集成电路模拟器(simulator)执行.集成电路模拟器由计算机主机及输入、输出等外围设备(硬件)和有关模拟程序(软件)组成.按模拟内容不同,集成电路模拟一般可分为:系统功能模拟、逻辑模拟、电路模拟、器件模拟及工艺模拟等不同层次(level)的模拟.其中工艺和器件的模拟,国际上也常称作“集成电路工艺和器件的计算机辅助设计”(Technology CAD of IC),简称“IC TCAD”.

§ 1.2 IC 工艺和器件模拟简介

1.2.1 IC 工艺模拟

IC 工艺模拟由运行 IC 工艺模拟器来实现. IC 工艺模拟器由 IC 工艺模拟软件及能运行该软件的具有一定容量和速度的计算机主机及输入输出设备等硬件组成. IC 工艺模拟软件大致可分成 3 类:第一类,用来模拟离子注入、扩散、氧化等以模拟掺杂分布为主的所谓狭义的 IC 工艺模拟软件;第二类,用来模拟刻蚀、淀积等工艺的 IC 形貌模拟软件以及第三类,用来模拟固有的和外来的衬底材料参数及/或制造工艺条件参数的扰动对工艺结果影响的所谓 IC 工艺统计模拟软件. IC 工艺模拟软件可用于模拟制造 IC 的全工序,也可用来模拟单类工艺或单项工艺. IC 工艺模拟有优化设计 IC 制造工艺及快速分析工艺条件对工艺结果影响等功能,也是虚拟制造 IC 的重要组成部分. IC 工艺模拟器及其输入、输出的示意图由图 1.1 给出.

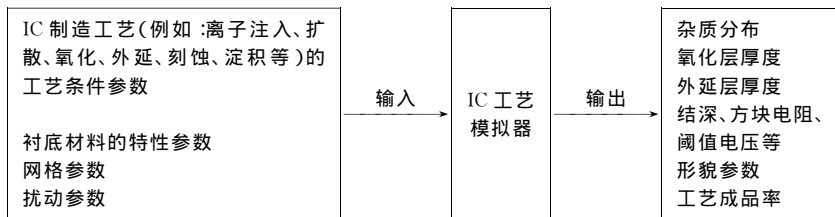


图 1.1 IC 工艺模拟器及其输入、输出的示意图

在工艺条件参数中,以离子注入、扩散和氧化工艺为例,一般包括:离子注入的能量、剂量和杂质种类等;预淀积或再分布扩散的温度、时间、杂质种类及需要给出的浓度、气氛或携带气体的种类和分压等;氧化的温度、时间,携带的氧化剂类别(O_2 , H_2O)和分压等. 衬底材料参数一般包括衬底材料的晶向、掺杂类型和浓度等. 网格参数为上列 3 类工艺模拟都必须给出. 扰动参数仅在运行 IC 工艺统计模拟软件时需给出. 在输出参数中除形貌参数由运行 IC 形貌模拟软件给出,工艺成品率可由运行统计工艺模拟软件给出外,其他输出参数都可由第一类 IC 工艺模拟软件给出;其中方块电阻、阈值电压等电学参数由得出的杂质分布、氧化层厚度及已知的衬底材料参数按有关解析计算公式计算得出.

研制工艺模拟软件首先必须建立能模拟制造 IC 的各种工艺模型,这种模型是物理及/或化学模型。为了用计算机对这种模型进行模拟计算,必须将这些模型用数学公式来表示。数学化的模型一般有解析模型(基于理论推导,有一个精确的或近似的理论表达式)、经验模型(基于大量实验数据,但机理不清楚,用一个经验公式)及半经验模型(不完全基于理论推导,也不完全基于实验数据,理论表达式中某些参数的系数、次方用经验值表示)等 3 种。此外还有表格化模型(实验数据较少,应变量和自变量的关系用列表表示)和内插、外推模型(以较少实验数据为基础,用内插和外推法补充已知实验数据点之间的数据,外推已知实验数据区外的数据)等。为精确求解上列数学化模型,一般用解析技术或数值技术,得到的解相应地称作解析解及数值解。解析解物理含义清晰,模拟耗时短,效率高,但只适用于需用简单物理模型描述的工艺情况。对于拟模拟的工艺,它的因变量随时间和空间两个自变量变化的或其数学表示式是一个偏微分方程(例如:用连续性方程及扩散方程模拟掺杂原子浓度的分布)则需用数值技术而不是解析技术。基于数值技术的数值解,计及时间和空间耦合的变化,可得出更精确的模拟结果,能适用于更多的工艺情况。诚然,数值解较为复杂,精度的提高是以增加模拟的复杂程度为代价的。

用数值技术求解,第一步是空间和时间及偏微分方程的离散化,进行这一步,首先需将拟模拟的定义域分割成小的子区域,每个小的子区域常称作网格,这种分割即所谓网格划分。网格应足够密,即每个网格点的间距应足够小,模拟的时间也分成小的时间增量间隔 Δt , Δt 也必须足够短,以便每个 Δt 内,各种杂质浓度、扩散率以及其他物理参数在每个网格内分别为常数,最终能保证在整个工艺时间步结束时在模拟的定义域内,解得的所要模拟的因变物理参数的分布有足够的精度。但空间和时间间隔的选取也不要过份小和短,否则将会无为地浪费用计算机进行模拟时的消耗(包括存储空间和计算时间)。为了用数字计算机解偏微分方程(例如杂质原子的连续性方程)需要转换偏微分方程成为差分(代数)方程,这个转换过程也称之为离散化。差分有向前、向后及中心差分三种,用中心差分其精确度和数值稳定性较优,空间和时间及偏微分方程离散化处理后,接下来第二步就是选用或开发迭代法解经离散化的非线性代数方程,目前最常用的迭代法是收敛性和计算效率均较好的 Newton-Raphson 法。除建模及数值解方法的研发或选用外,程序实现和验证是工艺模拟软件研制的最重要环节。程序实现包括编程和调试,程序验证包括程序可靠性、精确性和实用性的验证。编程中程序语言的选择,早期大多选 FORTRAN,目前大多选 C 和 C⁺⁺。可靠性的验证包括收敛性的测试及检查程序中是否有弄虚作假之处。精确性的验证,可以同实验数据比,同其他模拟结果比或同外推得出的有关结果比。实用性同可靠性和精确性密切相关,显然不可靠和精度

达不到要求就谈不上实用,实用性也同程序具备的功能密切相关;此外,软件运行时有关信息的输入是否方便于用户,输出信息是否完整和对用户有用也是验证实用性时用户所关注的。

1.2.2 IC 器件模拟

IC 器件模拟由运行 IC 器件模拟器来实现。IC 器件模拟器由 IC 器件模拟软件及能运行该软件的具有一定容量和速度的计算机主机及输入输出设备等硬件组成。随着 IC 的发展需要 PN 结二极管、双极型晶体管等 PN 结型半导体模拟器, MOS 电容、MOSFET 等 MOS 型半导体器件模拟器, MS 二极管、MESFET 等 MS 接触型半导体器件模拟器, Si/SiGe、AlGaAs/GaAs 等异质结半导体器件模拟器, 互连寄生元件模拟器, 薄膜晶体管(TFT)等半导体薄膜器件模拟器等多种器件模拟器。目前在 IC 模拟中最常用和最成熟的器件模拟器是 PN 结型半导体器件模拟器和 MOS 型半导体器件模拟器。IC 器件模拟器及其输入、输出的示意图由图 1.2 给出。

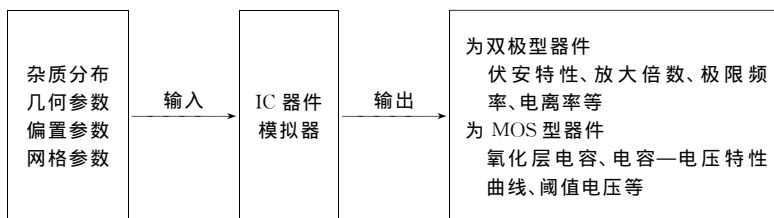


图 1.2 IC 器件模拟器及其输入、输出的示意图

其中杂质分布的输入可用对应的工艺模拟软件的输出或用一个描述掺杂分布的解析表示式,几何参数例如为 MOS 型器件包括沟道长度、沟道宽度、栅氧化层厚度等。

器件模拟软件的研制同工艺模拟类似,需要进行建模,空间、时间及偏微分方程离散化,经离散化得出的非线性代数方程的迭代解,以及程序实现和验证等工作,进行上述工作所采用的方法也基本相同。IC 器件模拟同工艺模拟的差别和关联主要如下述。IC 工艺和器件模拟的核心问题都是找出作为时间函数的可移动的、带电及/或中性的质点的空间分布。可移动的质点的分布由质点连续性方程支配,带电质点由 Poisson 方程支配,可移动的带电质点将由这两个方程耦合支配。器件模拟中的质点主要是载流子——电子和空穴,工艺模拟中主要是原子——中

性的和离化的掺杂原子,求解得出了随时间变化的质点的空间分布,为工艺模拟就直接给出工艺模拟的主要结果——掺杂分布,而器件模拟还需知道静电势分布,以得出端电压和端电流关系及有关器件参数。器件模拟得出的例如双极型器件的端电压和端电流关系及放大倍数、MOS 型器件的电容和电压关系及阈值电压等器件参数的验证,比工艺模拟得出的掺杂分布的验证容易实现。工艺模拟中杂质原子在不同材料的体内和界面输运规律的建模,也即在不同材料的体内的扩散和界面的分凝现象的建模,同器件模拟中对载流子迁移、复合等现象的建模,也即载流子迁移率或扩散率以及载流子的产生率和复合率的建模相比,前者困难大于后者。由于器件特性强烈地依赖于器件中有源区掺杂分布,而精确的掺杂分布目前主要依靠工艺模拟获得。例如发射区磷掺杂的双极型晶体管特性的精确模拟同工艺模拟对发射区磷掺杂的扭曲状分布及高浓度磷发射区引起的基区推出效应的精确模拟紧密相关;MOSFET 阈值电压调整和优化的精确模拟基于用于阈值电压调整的离子注入分布及其再分布对 MOSFET 沟道区掺杂分布的精确模拟。所以,器件模拟和工艺模拟紧密结合,两种模拟器的联用是 IC TCAD 发展的必然要求。

IC 器件模拟器常与 IC 工艺模拟器联用,也可与 IC 电路模拟器联用,若成功联用,则已知制造 IC 工艺条件参数就得出电路特性,实现了基于制造工艺的 IC 计算机辅助设计及快速 IC 特性分析,也即实现了 IC 的虚拟制造。IC 工艺、器件、电路 3 种模拟器联用的示意图由图 1.3 所示。

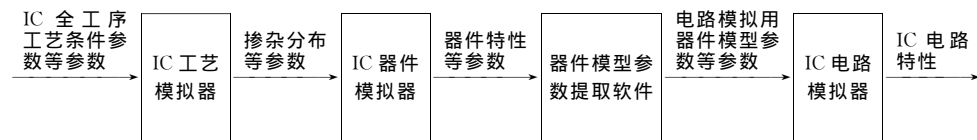


图 1.3 IC 工艺、器件、电路 3 种模拟器联用示意图

在联用时由于 IC 器件模拟器输出的器件参数同 IC 电路模拟器输入要求的器件参数在名称、含义和数据文件格式方面有所不同,一般,在 IC 器件和 IC 电路模拟器间还需要一个器件参数的转换软件将器件模拟器的输出器件参数转换成满足 IC 电路模拟器输入要求的器件参数,这一器件参数转换软件一般称之为参数提取软件。

§ 1.3 本书的内容安排及特点

本书共 5 章。第一章引言中的 § 1.1 节和 § 1.2 节如上述,对模拟、集成电路模

拟、集成电路工艺模拟及集成电路器件模拟作简要介绍。第二章详细描述集成电路的工艺模拟,首先详细介绍美国斯坦福大学(Stanford University)开发的国际上最早实用的、资料较全且适合于教学及入门学习的工艺模拟软件 SUPREM-2 中的工艺建模、使用方法和应用例举;在此基础上再概要介绍体现当今一维工艺模拟软件先进水平的 SUPREM-3 及二维工艺模拟软件 SUPREM-4。第三章详细描述半导体器件的一维模拟,首先详细介绍美国 Stanford 大学开发的、国际上最早实用的、资料较全且适合于教学及入门学习的器件模拟软件 SEDAN-1 中的器件建模、使用方法和应用例举;在此基础上再讨论体现当今一维器件模拟软件先进水平的 SEDAN-3 对 SEDAN-1 的改进;第四章首先详细介绍奥地利维也纳工业大学(Technology University of Vienna)开发的、MOSFET 的二维模拟软件 MINIMOS-2 以及近年来被广泛应用的由美国 Synopsys 公司基于 PISCES 开发的商用半导体二维模拟软件 MEDICI。第五章以模拟器发展为主线,评述掺杂分布和氧化模拟器、光刻、刻蚀和淀积的形貌模拟器,结合掺杂氧化和形貌模拟的完整工艺模拟器、制造工艺的统计模拟器、有源器件及无源元件模拟器、互连寄生模拟器等集成电路工艺和器件模拟器的多方面发展和近代进展;并以国际半导体器件发展路线图 2005 年版本中建模和模拟部分为主要依据评述集成电路工艺和器件的建模和模拟所面临的困难和挑战,以及近期和远期的需求。

综上所述内容安排,本书有下列特点:

(i) 本书挑选国际上最早实用的、资料较全的集成电路工艺和器件模拟程序(软件)(SUPREM-2, SEDAN-1, MINIMOS-2)作为 IC TCAD 的基础和经典,花约 40% 的篇幅向读者作较详尽介绍,这是为了适应由浅入深的入门学习的需求。

(ii) 本书用约 60% 篇幅展示 IC TCAD 的多方面发展及近代进展,这是研究型大学学生学习的需要,也是进一步激励读者对该项技术兴趣的需求。

(iii) 本书以模拟器介绍为主线,以阐述物理模型、使用和应用例举为主,对数值处理及其执行、程序验证等方面极少介绍,这是为了平衡对 IC TCAD 技术有研究开发兴趣、有应用兴趣以及只为了解兴趣的各类读者的需求,也是限于本书篇幅的一种无奈之举。

第二章 集成电路的工艺模拟

§ 2.1 SUPREM 概述

20 世纪 70 年代中期,IC 正从大规模集成电路(LSI)向超大规模集成电路(VLSI)发展,IC 的制作工艺愈益多样化和精细化,用传统的经验方法进行 VLSI 制造工艺的开发和最佳化已非常耗时费钱.为了缩短 IC 工艺开发和最佳化的周期,降低其成本,出现了:“利用对工艺物理原理较深入的理解,进行工艺的精确建模,然后编制一个计算机程序来执行这一建模,通过计算机运行这个程序,最终实现给出制造工艺序列预估器件结构的设想和实践.”这就是研制 IC 工艺模拟器的设想和实践.

美国斯坦福大学(Stanford University)研发的 SUPREM 是国际上最早出现的、也是迄今最享有盛名的 IC 工艺模拟系列软件. SUPREM 是 Stanford University Process Engineering Model 的缩写. SUPREM 的发展体现在它的不同版本(version)上,迄今主要有五种版本.

SUPREM-1(为硅 IC,一维模拟,1977 年 5 月研制成功)[2.1]

SUPREM-2(为硅 IC,一维模拟,1978 年 6 月研制成功)[2.2]

SUPREM-3(为硅 IC,一维模拟,1983 年 7 月研制成功)[2.3]

SUPREM-4(为硅 IC,二维模拟,1986 年 7 月研制成功)[2.4]

SUPREM-3.5(为砷化镓 IC,一维模拟,1987 年 12 月研制成功)[2.5]

SUPREM-1 是 SUPREM 程序系列的第一个文本,也是国际上出现的第一个 IC 工艺模拟软件,由于存在数值不稳定,模型精度不够,未能实用. SUPREM-2 是 SUPREM-1 的改进文本, SUPREM-2 中改进了杂质分凝模型,减小了数值不稳定性;引入了高浓度下磷扩散及相关的基区推进,砷结团对砷迁移及最终的电激活的影响,高浓度硅表面引起的氧化率增强等新模型,提高了模型精度;由于这些改进,使 SUPREM-2 成为国际上第一个能实用的 IC 工艺模拟软件. SUPREM-3 是当今为硅 IC 工艺一维模拟的精度最高、功能最强的软件. SUPREM-4 是当今应用最广泛的硅 IC 二维工艺模拟软件,基于 SUPREM-4 并经商用化改进和包装的,功能更强、精度更高、更方便用户的 IC 二维工艺模拟程序,例如 Synopsys 公司的

TSUPREM-4^[2.6]和 Silvaco 公司的 SSUPREM-4^[2.7]已成为当今主要实用的 IC 工艺模拟软件. SUPREM-3.5 是 Stanford 大学开发的、国际上第一个出现的用于砷化镓工艺模拟的软件.

§ 2.2 SUPREM-2 概述

SUPREM-2 是国际上第一个实用的 IC 工艺模拟软件. 该软件以模拟硅集成电路(包括双极型及 MOS 型)的制造工艺为主,也可以模拟其他硅半导体器件(例如硅太阳能电池、电荷耦合器件 CCD 等)的制造工艺. 它以硅集成电路或其他硅半导体器件的工艺条件参数作输入,输出硅中杂质的一维分布、结深、氧化层厚度、薄层电阻、MOS 管阈值电压等参数. 它可以模拟单步工艺、多步工艺,也可以模拟制造一个完整电路或分立器件的整套工序. 它能模拟硅及二氧化硅中的硼、磷、砷、锑、铝、镓、铟等 7 种杂质的分布,能模拟离子注入、通过表面的气相或固相的化学预淀积、驱入扩散(即再分布)、氧化、外延、腐蚀、低温氧化物淀积等 7 种工艺. 它使用的输入参数文件的格式简易直观,杂质分布的输出可以用作图方式,也可用列表方式,用列表方式打印输出时,深度间隔最小可取 10 nm.

SUPREM-2 中的源程序有 13 000 多条,可在高性能 PC 机或工作站上运行. 在我国,复旦大学大规模集成电路研究室首先在 1981 年春季引进和成功地运行了 SUPREM-2.

工艺模拟软件模拟结果的精度很大程度上取决于所用工艺模型的精度, SUPREM-2 程序中所用的工艺模型考虑了例如离子注入硼的尾部效应、非本征扩散、增强扩散以及高衬底掺杂对氧化生长速率的影响等一些所谓的二级效应,因而精度较高.

本章 § 2.3—§ 2.5 节分别介绍 SUPREM-2 的工艺模型、SUPREM-2 中几个电参数的计算以及 SUPREM-2 的使用和应用例举.

§ 2.3 SUPREM-2 的工艺模型

本节依次介绍离子注入、热加工时杂质迁移、热氧化和硅外延等工艺模型.

2.3.1 离子注入模型

描述用离子注入法在硅或二氧化硅中注入杂质的分布,早期一般是用一个对

称高斯曲线,它采用两个重要参数:平均投影射程 R_p 以及标准偏差 σ_p . 这两个参数可由 J. Lindhard, M. Scharff, M. Schiott 3 人在 1963 年提出的有关理论(后人称之为 LSS 理论)^[2.8]来计算. 而用 LSS 理论计算 R_p 及 σ_p 时,假定了注入杂质的体浓度遵循高斯(Gaussian)分布. 然而许多注入离子的杂质分布,例如在我们制造集成电路中常用的硼、磷、砷,发现都是不对称的,它们不能用经典的、对称的高斯分布,而且需要更多的更高阶的参数来描述它们的分布. 出现了用两个相联的半高斯分布来描述砷和磷的分布^[2.9]以及用修改过的 Pearson IV 分布来描述硼的分布^[2.2]. 此外,在描述离子注入的杂质分布时还需考虑被注入的硅表面有二氧化硅时应作的修正,以及热退火对注入杂质分布的影响.

2.3.1.1 简单的对称高斯分布

对于集成电路制造工艺中所用的注入杂质,如硼、磷、砷、铽用简单的对称高斯分布是很粗糙的. 但在 SUPREM-2 程序中仍保留着对这种简单模型的执行. 当用户提供的注入参数是平均投影射程 R_p 、标准偏差 σ_p 及注入剂量 Q (单位面积注入总量)时,则程序使用简单的对称高斯分布.

我们知道,用 LSS 理论计算 R_p 及 σ_p 时,假设注入杂质体浓度 $N(y)$ 的分布遵循简单的对称高斯分布,则有以下表示式:

$$N(y) = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y-R_p}{\sigma_p}\right)^2\right] \quad (2.1)$$

式中 N_s 称为总杂质量,单位是原子数/厘米². 注入剂量 Q 同 N_s 的关系可用下式表示:

$$Q = \int_0^\infty N(y)dy = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \int_0^\infty \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y-R_p}{\sigma_p}\right)^2\right]dy \quad (2.2)$$

设 P_y 为峰值浓度,即有:

$$P_y = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} = Q \int_0^\infty \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y-R_p}{\sigma_p}\right)^2\right]dy \quad (2.3)$$

则

$$N(y) = P_y \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y-R_p}{\sigma_p}\right)^2\right] \quad (2.4)$$

所以,已知 R_p 、 σ_p 、 Q 的值,通过式(2.3)、式(2.4)就可算得 $N(y)$.

2.3.1.2 两个相联的半高斯分布

当用户给出的是注入能量及注入剂量,且注入的元素是砷、磷或其他杂质(只要不是硼),则程序执行两个相联的半高斯分布。

Gibbons 及 Mylroie^[2.9]指出:当不对称不是很大时(小于标准偏差),注入杂质分布能由两个相联的半高斯分布表示,它们有各自的标准偏差 σ_1 、 σ_2 (相对于 R_m) R_m 称为模态射程(modal range)(有人译为形式上的射程,有人译为接合距)。图 2.1 示出了非对称离子注入杂质分布的两个相联的半高斯分布。若两边注入杂质离子的浓度分布函数分别用 $N_1(y)$ 及 $N_2(y)$ 表示,则

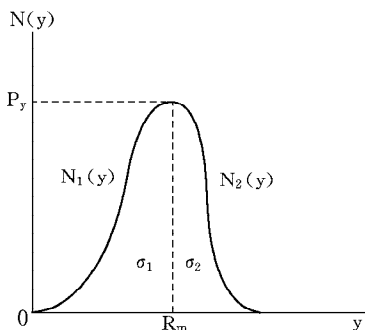


图 2.1 两个相联的半高斯分布(源于[2.2])

$$N_1(y) = P_y \exp[-(y - R_m)^2 / 2\sigma_1^2] \quad (2.5)$$

$$0 \leq y \leq R_m$$

$$N_2(y) = P_y \exp[-(y - R_m)^2 / 2\sigma_2^2] \quad (2.6)$$

$$R_m < y \leq \infty$$

式(2.5)、式(2.6)中峰值浓度 P_y 同注入离子剂量 Q 之间的关系为

$$P_y = Q / [Q(\sigma_1, R_m, 0, R_m) + Q(\sigma_2, R_m, R_m, \infty)] \quad (2.7)$$

$Q(\sigma, R, a, b)$ 为用 P_y 归一化的注入离子剂量。

$$Q(\sigma, R, a, b) = \int_a^b \exp[-(y - R)^2 / 2\sigma^2] dy \quad (2.8)$$

由已知注入能量确定 σ_1 、 σ_2 、 R_m 等参数的方法,在 SUPREM-2 中用查表及内插法^{[2.9][2.10]}。

2.3.1.3 修改过的 Pearson IV 分布

当用户给出注入能量及注入剂量且是注入硼时,程序执行修改过的 Pearson IV 分布。

Hofker 等^[2.11]指出,在无定形硅中,注入的硼分布在退火前可以由标准的 Pearson IV 型分布描述。标准 Pearson IV 型分布的计算公式如下。

$$N(y) = N_0 e^{f(y)} \quad (2.9)$$

$$f(y) = \frac{1}{2b_2} \ln |b_0 + b_1 x_n + b_2 x_n^2| - \frac{(b_1/b_2 + 2a)}{(4b_2 b_0 - b_1^2)^{\frac{1}{2}}} \arctan \left[\frac{2b_2 x_n + b_1}{(4b_2 b_0 - b_1^2)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (2.10)$$

式(2.10)中几个参数表示如下：

$$\begin{aligned} x_n &= (y - R_p)/\sigma_p \\ a &= -\gamma_1(\beta_2 + 3)/A \\ b_0 &= -(4\beta_2 - 3\gamma_1^2)/A \\ b_1 &= a \\ b_2 &= -(2\beta_2 - 3\gamma_1^2 - 6)/A \end{aligned} \quad (2.11)$$

式(2.11)中

$$A = 10\beta_2 - 12\gamma_1^2 - 18 \quad (2.12)$$

式(2.9)中 N_0 可由下式求得

$$N_0 = Q / \int e^{f(y)} dy \quad (2.13)$$

由上列式(2.9)—(2.13)可以看出 σ_p , R_p , γ_1 , β_2 及 Q 决定着标准 Pearson IV 的分布.

图 2.2 示出了注入硼分布的实验值及 Pearson IV 分布的计算曲线. 图 2.2 表明用 Pearson IV 分布描述硼分布的实验值从表面到稍微超过分布峰是好的, 接着的尾部分布用 Pearson IV 分布来描述是失败的, 实验测得尾部的分部呈指数分布, 这个指数尾部分布是由于硼离子沿沟道方向的随机散射所致. 为了同上述实验结果吻合, SUPREM-2 的作者用一个基于经验的修改过的 Pearson IV 分布来描述, 这种分布是在标准的 Pearson IV 分布上附加一个指数尾, 取一个同掺杂剂的能量及晶面取向无关的固定的特征长度为 0.045 微米. 尾部附加到超过标准 Pearson IV 分布的峰值后浓度降到峰值的 50% 的肩部. 当然在加上尾部之后, 要完成注入离子剂量分布的再归一化. 经修改过的 Pearson IV 分布同典型的实验结果有很好的符合, 见图 2.2.

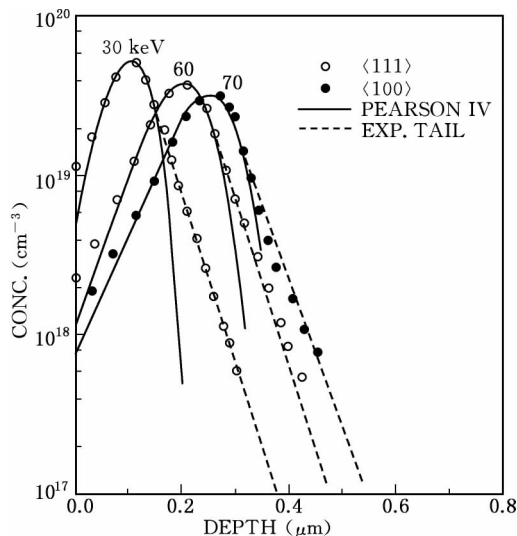


图 2.2 硼在<111>和<100>硅中的离子注入分布(源于[2.2])

Pearson IV 和修改的 Pearson IV 分布,剂量为 10^{13} cm^{-2}

2.3.1.4 硅表面有二氧化硅层时对射程的修正

因为二氧化硅及硅的阻止本领稍有不同,因此硅表面有二氧化硅层时,也即所谓二氧化硅-硅双衬底的情况,两个相联半高斯分布中的模态射程 R_m 以及修改过的 Pearson IV 分布中的平均投影射程 R_p 都要作修正.在 SUPREM-2 程序中用下两式修正

$$R'_{\text{msi}} = R_{\text{msi}} + (1 - R_{\text{msi}}/R_{\text{mox}})Z_{\text{ox}} \quad (2.14)$$

$$R'_{\text{psi}} = R_{\text{psi}} + (1 - R_{\text{psi}}/R_{\text{pox}})Z_{\text{ox}} \quad (2.15)$$

式(2.14)中 R_{msi} 及 R_{mox} 分别表示在单衬底硅中及二氧化硅中注入杂质的模态射程, R'_{msi} 表示在二氧化硅-硅双衬底中注入杂质的模态射程即经修正后的模态射程(也称有效模态射程);同样在式(2.15)中 R_{psi} 及 R_{pox} 分别表示在单衬底硅中和二氧化硅中注入杂质的平均投影射程,而 R'_{psi} 表示在二氧化硅-硅双衬底中注入杂质的平均投影射程,即经修正后的注入杂质的平均投影射程(也称有效平均投影射程); Z_{ox} 是二氧化硅层的厚度.

2.3.1.5 热退火对注入杂质分布的影响

热退火可消除部分损伤(减少缺陷),热退火后的热加工可认为不发生增强扩

散,但热退火时注入杂质发生增强扩散.有关热退火对注入硼分布的影响也已有人作了详细研究,但目前还未用到 SUPREM-2 程序中去.

2.3.2 热加工时杂质迁移模型

2.3.2.1 扩散方程

1. 概述

热加工时硅体内杂质的迁移主要机构是扩散杂质在硅内的扩散运动,一般用所谓扩散方程来描述:它是一个二阶偏微分方程 $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$, 公式中 C 为杂质体浓度,单位为杂质原子数/厘米³, $C = C(y, t)$, y 是杂质扩散的方向,垂直硅表面指向片内的方向为 y 向. D 是扩散系数单位为厘米²/秒.这个方程也称 Fick 第二定律的数学表示式,根据不同的边界条件和初始条件,可从此方程推导出 $C(y, t)$, 我们熟知的两种情况是:

恒定表面浓度扩散

边界条件 $y = 0, t \geq 0$ 情况下有 $C(0, t) = C_s$ 即硅片表面 ($y = 0$) 处的浓度在任何时刻 t 都一样,保持恒定.

初始条件 $y > 0, t = 0$ 情况下有 $C(y, 0) = 0$; 即 $t = 0$, 除硅片表面 ($y = 0$) 处外,硅片内部各点没有扩散的杂质浓度.

解出的分布

$$C(y, t) = C_s \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{y/\sqrt{2\sqrt{Dt}}}^{\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda \right) = C_s \operatorname{erfc} \frac{y}{2\sqrt{Dt}}$$

即所谓余误差函数分布.

限定源扩散

边界条件 $y = 0, t > 0$ 情况下有 $\left. \frac{\partial C}{\partial y} \right|_{y=0} = 0$ 任何时刻在硅表面都没有外来杂质补充.

初始条件 $y \geq 0, t = 0$ 情况下有

$$\int_0^{\infty} C(y, 0) dy = \int_0^{\epsilon} C(y, 0) dy = Q(\epsilon \rightarrow 0),$$

Q 表示扩散前存在于硅片表面无限薄层内,单位表面积的杂质总量,扩散过程中 Q 为常量.

解出的分布

$$C(y, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-y^2/4Dt}$$

即所谓高斯函数分布.

上列常用的 Fick 第二定律表示式是由 Fick 第一定律及杂质的连续性方程出发, 经过一定的近似假设后推得的, 推导过程如式(2.16)—(2.22)所示.

2. 杂质流连续性方程

热加工时, 硅-二氧化硅系统空间中杂质的再分布一般由连续性方程支配, 积分形式的连续性方程可写成

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} C dV = \int_{V(t)} (g - l) dV - \oint_{S(t)} \vec{F} \cdot \vec{n} dS \quad (2.16)$$

式中 C = 杂质浓度

$S(t)$ = 闭合表面(时间 t 的函数)

$V(t)$ = 由 $S(t)$ 包围的体积

$\vec{F}$ = 杂质流矢量

$\vec{n}$ = $S(t)$ 向外的单位法向

g = 单位体积的杂质产生率

l = 单位体积的杂质损失率

方程(2.16)表示在任意体积 $V(t)$ 中, 杂质含量的时间增加率等于在相同体积中净杂质产生率减去通过包围体积 $V(t)$ 的 $S(t)$ 面净杂质外流率.

对于一维流情况

$$\frac{d}{dt} Q(y_1, y_2) = U(y_1, y_2) - [F(y_2) - F(y_1)] \quad (2.17)$$

式(2.17)表示在扩散方向上, 在相距为 $y_2 - y_1$, 截面积为单位面积的薄层空间内, 单位时间内杂质的增加数等于净产生数减去净流出数. 式(2.17)中

$$Q(y_1, y_2) = \int_{y_1}^{y_2} C(y) dy \quad (2.18)$$

$$U(y_1, y_2) = \int_{y_1}^{y_2} (g - l) dy \quad (2.19)$$

这里 y 是同硅表面垂直的方向, 向内是正, 流量 $F(y)$ 沿 y 方向由硅表面向内是正. 从物理上看, 杂质流可以由热扩散及界面现象(如蒸发, 分凝及在硅氧化或外延时界面的运动等)引起.

3. Fick 第一定律

在任意点 y , 杂质的扩散流量或称扩散流密度 $F_D(y)$ 同该点的浓度及扩散率的乘积的梯度之间的关系由 Fick 第一定律描述. 对于一维流, 其关系是

$$F_D(y) = -\frac{d}{dy}[D(y) \cdot C(y)] \quad (2.20)$$

式中 $F_D(y)$ 为一维扩散流密度, 单位为杂质数/厘米²·秒, $C(y)$ 为杂质体密度, 单位为杂质数/厘米³, $D(y)$ 是杂质的扩散系数.

4. Fick 第二定律的推导

在单一状态迁移的假设下, 材料内没有产生和损失, 于是一维连续方程也即守恒方程可写成:

$$\frac{dQ(y_1, y_2)}{dt} = -[F_D(y_2) - F_D(y_1)] \quad (2.21)$$

在均匀扩散率的假设下, 将方程(2.18)及式(2.20)代入式(2.21)并对 y 求微分, 可得出表述 Fick 第二定律的方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (2.22)$$

由上可知式(2.22)的导出假设了:(a)一维,(b)忽略产生和损失——单一状态迁移假设,(c)扩散率 D 是常数.

2.3.2.2 非本征情况下的扩散系数

1. 本征硅和非本征硅

Fick 第二定律一般对低杂质浓度情况下杂质迁移的计算是适当的. 但当杂质浓度增至大于等于加工温度 T 时半导体中本征载流子浓度 $n_i(T)$ 时, 就不适用. 图 2.3 示出了 n_i 同温度 T 的关系图^[2.12], 这个图是 SUPREM-2 中使用的有关补缺值, 此外, 假定在硅中存在高浓度的其他种类杂质, 则所考察的扩散杂质即使在低浓度情况下, 方程[2.22]也不适用. 我们称存在于硅中的任何杂质其浓度低于加工温度时的 $n_i(T)$ 的硅

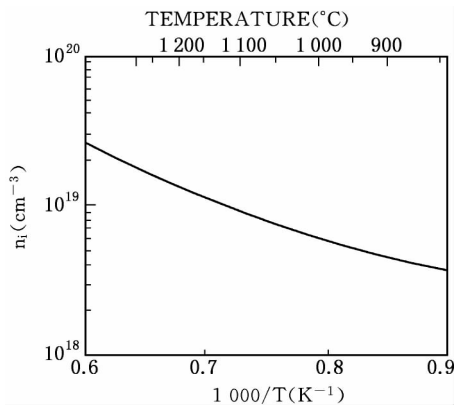


图 2.3 硅中本征载流子浓度 n_i 同温度 T 的关系图(源于[2.2])

为本征硅,其浓度高于加工温度时的 $n_i(T)$ 的硅为非本征硅.

2. 非本征情况下的扩散系数

在硅中,一般情况下杂质的扩散由杂质同点阵点缺陷(例如硅原子空位及或间隙)的相互作用引起,扩散系数正比于这种点缺陷的浓度.这种点缺陷浓度中的中性点缺陷浓度,在任何给出温度时同杂质浓度无关(只要它不趋近于硅原子的浓度),但不同电荷态(在硅禁带内)的带电点缺陷浓度,同禁带中的费米能级位置有关,因而是杂质浓度的函数.

已经观察到大多数普通杂质在非本征情况下的扩散系数比本征情况下的扩散系数约大 10 倍到 20 倍.一般认为非本征情况下的扩散是杂质同硅中带电点缺陷的相互作用结果^[2, 13]. Fair^[2, 14]在 1977 年提出了有效扩散系数的概念,并指出它应是几种扩散率的和.每种不同的扩散率,相应于考虑了杂质同不同点阵空位的电荷态的相互作用.这样,有效扩散系数可表示为:

$$D = f_e \{ D^X + D^- [V^-] + D^= [V^=] + D^+ [V^+] \} \quad (2.23)$$

f_e 是考虑了自由载流子的电场对杂质离子迁移影响后,引入的一个对扩散率的增强系数, $f_e = 1 + \left[1 + 4 \left(\frac{n_i}{C} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}$. 当 $C \gg n_i$ 则 $f_e = 2$. 当 $C < n_i$ 则 $f_e = 1 \rightarrow 2$. D^X 是中性空位引起的扩散率. D^V 是由空位电荷态 v 引起的扩散率, (v 可以是 $=$, $-$, $+$, 即 v 可以是双负,单负和正), $[V^v]$ 是用每种电荷态的本征浓度归一化的空位浓度. 用波尔兹曼近似,这种归一化浓度可容易地得到. 它们是

$$[V^-] = \frac{n}{n_i}, [V^=] = \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \text{ 而 } [V^+] = \frac{n_i}{n} \quad (2.24)$$

这里 n 是自由电子浓度,这样,在本征情况下 ($n = n_i$), 式(2.23)变成

$$D_i = D^X + D^- + D^= + D^+ \quad (2.25)$$

即本征扩散率是不同空位电荷态引起的扩散率之和.

以上模型是一个适宜于扩散工艺模拟用的模型的基础. 在 SUPREM-2 中,除磷之外,杂质原子的扩散率假设只由中性及一个带电的缺陷态决定. 因而有如下的特有形式

$$D = f_e D_i (1 + \beta f_v) / (1 + \beta) \quad (2.26)$$

这里 $\beta = \frac{D^V}{D^X}$ 是带电空位引起的扩散率同中性空位引起的扩散率之比. 此比值是带电空位相对于中性空位在杂质扩散中所起作用大小的标志. 式中 D_i 是测量的本征

扩散率, $f_v = \frac{n}{n_i}$ (为施主), $f_v = \frac{n_i}{n}$ (为受主). 这样, 在本征情况下 $f_v = 1$, $D = D_i$. 在非本征情况, 能由式(2.23)、式(2.24)、式(2.25)及 β 的定义得到下式

$$D^x = D_i \frac{1}{1+\beta}, D^v = D_i \frac{\beta}{1+\beta} \quad (2.27)$$

图 2.4 给出了归一化扩散率 D/D_i 同 f_v 的关系图. 虽然, 任何杂质元素的 β 应是温度的函数, 但目前还没有弄清它们之间的关系. β 的推荐值(也是 SUPREM-2 中用的补缺值)对于硼是 3, 对于砷是 100, 对于磷要用一个完全不同的模型, 将在后面描述, 对其他杂质 β 的值不知道, 都用 1 作补缺值.

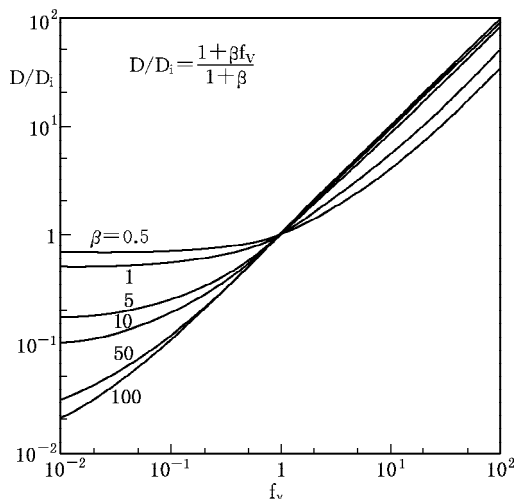


图 2.4 不同 β 值的归一化扩散率 D/D_i 同归一化载流子浓度 f_v 的关系图(源于[2.2])

2.3.2.3 硅中存在其他高浓度杂质时对杂质扩散分布的影响

在硅中存在不同杂质原子时, 它们之间有直接相互作用[2.15], 图 2.5 举出了高浓度砷影响硼的再分布的(模拟的)情况. SUPREM-2 中, 这个互作用直接通过方程(2.12)的计算被模拟. D 不是常数而是浓度 y 的函数, 图 2.5 的例子中, 在重 n 掺杂区硼的扩散流量的减少是由于 $f_v(\text{硼}) = \frac{n_i}{n} \rightarrow 0$, 而在砷剖面分布的边缘, 硼分布的下倾由 f_v , 因而由硼扩散率的快速空间变化产生.

高浓度磷对其他杂质的影响将十分不同. 这在后面作解释, 高表面浓度的磷通

过增加硅中点缺陷的浓度间接影响其他杂质的扩散率。

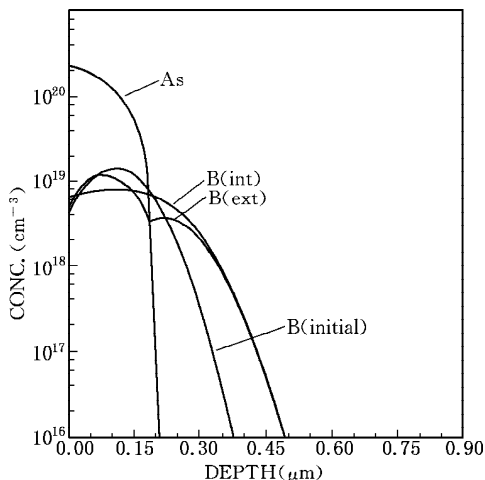


图 2.5 高浓度砷掺杂对硼再分布影响的说明(源于[2.2])

2.3.2.4 磷的扩散迁移模型

在双极型工艺中,在重掺杂磷发射区扩散时,观察到磷分布曲线的扭曲形状及基区推出效应.在 SUPREM-2 中用 1977 年 Fair 和 Tsai 提出的磷扩散迁移模型[2.16],模型预期有相当的精确性.这个模型认为,这些“不规则”效应源于硅中空位浓度的增强,它由从表面流入硅体内形成“ P^+V^- ”的磷-双电荷空位对的分解引起硅中空位浓度的增加.一个典型的磷及扩散率分布由 3 个区域组成如图 2.6 所示.

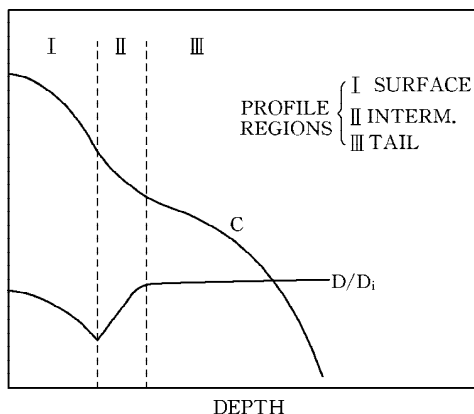


图 2.6 根据 Fair 及 Tsai 模型得出的划分为 3 个区域的典型的磷掺杂分布及扩散率分布(源于[2.2])

模型认为：

1. 表面区扩散率

在表面区域假定磷扩散由磷同中性及成双的电荷空位形成的 P^+V^- 对相互作用而引起, 这样这个区域扩散率由

$$D = f_c \left[D^x + D^- \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \right] \quad (2.28)$$

给出, 式中 n 是自由电子浓度, 它可用整个磷浓度 C 同自由电子 n 之间的关系式^[2.16]

$$C = n + 2.04 \times 10^{-41} n^3 \quad (2.29)$$

计算得到. 由式(2.28)、式(2.29)可知这个区域的扩散率单调地减少, 见图 2.6. 表面区的终端假定处在费米能级降至导带底下 0.11 eV 处, 也就是双离化空位状态的能级处, 这时电子浓度 n_e 由下式给出

$$n_e(T) = 4.65 \times 10^{21} \exp\left(-\frac{0.39 \text{ eV}}{kT}\right) \quad (2.30)$$

2. 尾区扩散率

尾区扩散率相对于本征扩散率是增强的. 这是由于 P^+V^- 分解引起硅点阵中空位的过饱和, 尾区扩散率由

$$D_{\text{tail}} = f_c \left\{ D^x + D^- \frac{n_s^3}{n_e^2 n_i} \left[1 + \exp\left(\frac{0.3 \text{ eV}}{kT}\right) \right] \right\} \quad (2.31)$$

给出. 这里 n_s 是表面电子浓度. 方程(2.31)仅作为一个适用于观测结果的经验方程. 由方程(2.31)可见, 尾部扩散率强烈依赖磷的表面浓度. 自从模型预期在体内存在空位缺陷过饱和以来, 最近 Matsumoto 等人^[2.17]证明: 在重磷表面浓度的区域下, 出现在硅点阵中的任何其他杂质元素, 也呈现出一个扩散率的增强. 它同磷的增强近似地相等. 在 SUPREM-2 中用公式

$$f_{\text{enh}} = \frac{D_{\text{tail}}}{f_c D^x} \quad (2.32)$$

计算增强因子 f_{enh} 而磷存在时任何其他杂质的扩散率也应由相应的 f_{enh} 乘以该杂质的本征扩散率 D^x 得出. 这个扩散率增强模型可解释基区推进效应. 同时也预示其他杂质(例如在双极型工艺中用以构成隐埋集电区的砷或锑)的扩散率也增强, 这一点已有实验证明.

3. 中间区扩散率

尾区的开始由下述方法决定: 在重掺杂情况下^[2.16], ^[2.18], 用 Boltzmann-

Matano 观测到的磷分布的分析,在表面和尾区之间存在着一个中间区,那里扩散率的增加正比于 $\left(\frac{n_i}{n}\right)^2$. 在 SUPREM-2 中这个经验的观测被用来决定尾区的开始,即在表面区的终端 $n = n_e$ 处计算得到的扩散率乘上 $\left(\frac{n_i}{n}\right)^2$. 当深度从表面增加, $\left(\frac{n_i}{n}\right)^2$ 也增加. 直至深度达到扩散率增至 D_{tail} 值的这一点,这点假定是尾区的开始点.

4. 应力效应对扩散率的影响

从方程(2.31)可以看到,刚才描写的模型至少可以预期在尾区磷的扩散率随表面浓度的增加单调地增加. 但事实上,当表面浓度增至大约 $3 \times 10^{20} \sim 4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 以上时,尾扩散率减少. 这个事实可归因于高磷浓度在点阵上引入应力而使硅禁带变窄. 在 SUPREM-2 中,这个应力效应由增加本征载流子浓度 n_i 来描述,用以下公式

$$n_i = n_i(\text{没有应力的}) \exp\left(-\frac{\Delta E_g}{kT}\right) \quad (2.33)$$

这里 ΔE_g 是应力所引入的禁带变窄,由方程

$$\Delta E_g = -1.5 \times 10^{-22} (C_{\text{TS}} - 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}) \text{ eV} \quad (2.34)$$

给出. 式(2.34)中 C_{TS} 是磷的总的表面浓度. $C_{\text{TS}} > 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 才适用. 当然,同时 n_e 也必须增加相同数量. 图 2.7 列出用和不用 ΔE_g 时的扩散磷分布的计算结果,这个结果说明必须考虑应力效应对扩散率的影响.

SUPREM-2 中还考虑了影响离子注入磷分布的扩散率的一种附加的应力效应. 在高剂量情况下,观察到扩散更进一步减少,这可能由在离子注入过程中产生的永久性的点阵无序引起. 在离子注入磷的情况下,一个附加的禁带变窄,可由下式计算

$$\Delta E_g = -2.3 \times 10^{-6} (Q_p)^{0.25} \text{ eV} \quad (2.35)$$

式中 Q_p 是磷原子剂量.

2.3.2.5 氧化增强扩散

已有文献(例如[2.19],[2.20])报道:当硅

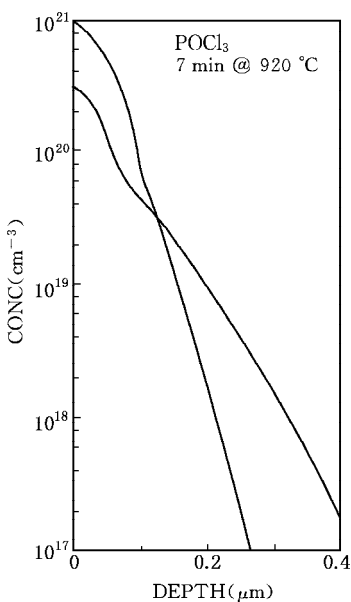


图 2.7 由计算得到的两个不同表面浓度的磷分布(源于[2.2]),这是因硅应力效应模型使较高表面浓度分布的扩散较慢

表面氧化时,硼和磷的扩散率增强.这个氧化增强扩散 OED(Oxidation Enhanced Diffusion 的缩写)现象一般归之于氧化引起了硅点缺陷的增强. Hu^[2.21]已提出了一个模型,其后 Antoniadis 等^[2.20]又作了定量讨论,这个模型认为 OED 同氧化堆垛层错 OSF(Oxidation Stacking Fault 的缩写)生长有关.对于硅中的杂质用了—个空位和间隙两者都引起扩散的双重扩散机构.而且假设了氧化引起硅自间隙的增强.按照这个模型,氧化时杂质扩散率的间隙分量增加导致 OED,而增加间隙的沉积导致 OSF.目前,氧化速率和 OED 之间的关系还知道得不确切.有关模型还在研究中,但在 SUPREM-2 中,对于处于使硅氧化的环境下的硼,假定了一个同温度有关、同时间无关的 OED.对于在干氧化环境下的磷,假定了一个固定增强因子,其值为 1.8;而对于在湿氧化环境下的磷,这个因子假定为 3.3.此外,对硅中其他常见杂质都观察到同温度及时间两者皆有关的 OED^[2.22].

2.3.2.6 界面流量

1. 界面

界面是分隔两个不同区域的表面,在掺杂杂质再分布的热处理过程中,至少存在一界面.界面对掺杂杂质的分布,因而对制得器件的薄层电阻、阈值电压等器件特性起着重要作用.在实际情况下,可能是一个裸露在惰性气体气氛中的硅表面(一种气—固界面),那里发生杂质的蒸发;或者可能是硅表面在一个掺杂原子富有的气氛中,即化学气相淀积的气氛(另一种气—固界面)那里发生掺杂剂的掺入;或者可能是硅—二氧化硅界面,那里在两种材料间发生掺杂原子的交换.

2. 掺杂剂流量

虽然界面实际的化学变化的详情可能不了解,但通常经过界面的掺杂原子流可以用一个一级动力学模型唯象地描述:

$$F_s = h(C_1 - C_2/M_{eq}) \quad (2.36)$$

式中 F_s 是掺杂剂流量,从区域 1 到 2 定义为正, C_1 , C_2 分别为在区域 1 及区域 2 中界面的掺杂浓度.图 2.8 列出了 SiO_2/Si 界面的情况. M_{eq} 是所讨论的某种杂质在区域 1—2 系统中的平衡分凝系数,被定义为

$$M_{eq} = \frac{C_{20}}{C_{10}} \quad (2.37)$$

式(2.37)中 C_{10} 及 C_{20} 分别为在区域 1 及区域 2 中界面的平衡掺杂浓度.式(2.36)中的 h 为表面质量转换系数,有速度的量纲.

在 SUPREM-2 中, 方程(2.36)的这种或另一种形式, 被用作各种界面掺杂流量的模型. 下面简短讨论各种界面掺杂流量的表示形式.

蒸发

质量转换系数变成杂质蒸发系数, 它是温度的函数. SiO_2 及 Si 用相同的蒸发系数, 同时 C_1 假定为 0 而 $M_{\text{eq}} = 1$.

化学淀积

化学淀积用的简单模型为: 假设(任意地) $h \rightarrow \infty$, (实际上 h 取 $1 \mu\text{m}/\text{sec}$), $M_{\text{eq}} = 1$. C_2 或等于掺杂剂的固溶度或等于用户说明的其他浓度, 将十分快速地趋于 C_1 . 必须承认, 上述模型可能过分简单. 我们知道掺杂剂在硅中的淀积工艺太多了, 用一般的方法(例如 SUPREM-2 程序中一段通用程序)来精确地模拟每种特殊的淀积工艺在实际上是做不到的.

SiO_2 -Si 界面流量

在非氧化情况下, SiO_2 -Si 界面是稳定的, 方程(2.36)用来模拟两个区域间杂质流的交换是充分的. 不幸地, 在实际上 SiO_2 -Si 界面一般都是移动的. Ghosh-tagore^[2.23] 仔细探求过用作硅掺杂的掺磷的 SiO_2 -Si 系统, 界面作为固定处理. 在这种情况下, h 被解出作为一个温度的简单的激活函数, 而 M_{eq} 假定为无穷大, 实际上只要 M_{eq} 取一个较大的值(例如 >50)就可以了.

3. 移动界面情况——运动感生界面流量

在移动界面的情况, 如在硅氧化中, 也存在一个由不同掺杂浓度引起的运动感生界面流量经过界面. 这个流量用 F_b 表示, 由下式给出

$$F_b = -V_{\text{ox}}(C_1 - \alpha C_2) \quad (2.38)$$

式中 $V_{\text{ox}} = dZ_{\text{ox}}/dt$ 是氧化生长速率, α 是氧化掉的硅同氧化层厚度之比(等于 0.44). F_b 也标示在图 2.8 中. 一般这个流量同流量 F_s 相竞争. 若 $h \gg V_{\text{ox}}$ 则 $C_2 \rightarrow$

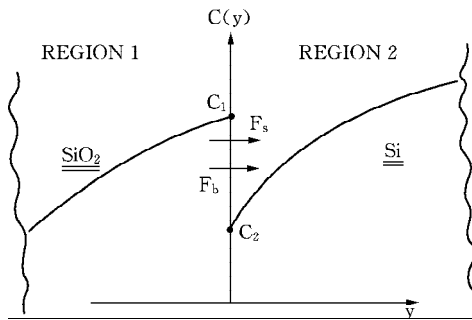


图 2.8 Si-SiO_2 系统中界面流量 F_s 以及当 Si 氧化时运动感生界面流量 F_b (源于[2.2])

$M_{eq}C_1$, 而若 $h \ll V_{ox}$ 则 $C_1 \rightarrow \alpha C_2$. 至今, 在所有移动界面的特性表示中, $h \gg V_{ox}$ 被隐含地假设, 也即平衡分凝条件占优势. 这样, 在任何有意义的确定值还缺乏时, 在 SUPREM-2 中, h 被任意地置为 $0.1 \mu\text{m}/\text{min}$, 满足条件 $h \gg V_{ox}$.

2.3.2.7 产生和损失机构——砷的扩散迁移模型

差不多所有掺杂剂可以以多于一个状态的方式存在于硅中, 特别是高浓度时, 典型的情况是一种状态是替位式的, 因而是可动的, 而另外的状态若存在, 可以是某种沉积或结团形式, 它是不可动的. 这两种状态间的交换引起可动杂质的连续方程(2.16)中产生和损失项. 在 SUPREM-2 中包括了一个描述砷结团现象的模型^[2.24]. 由于缺乏有关模型, 结团及沉积对其他杂质原子迁移的影响被忽略. 对于砷假定的化学反应是:



式中 m 是原子团中的原子数, K_c 和 K_d 是结团及解团速率系数. 结团原子的浓度 C_c 定义为

$$C_c = C_T - C \quad (2.40)$$

这里 C_T 是整个浓度, C 是替位或砷的浓度. C_c 的守恒方程可以写为

$$\frac{\partial C_c}{\partial t} = mK_c C^m - K_d C_c = l - g \quad (2.41)$$

式中 l 和 g 是方程(2.26)中有关的损失和产生项. 平衡结团系数 K_e 定义为

$$K_e = \left(\frac{K_c}{K_d} \right)^{1/m} \quad (2.42)$$

我们能够重写方程(2.41)为

$$\frac{\partial C_c}{\partial t} = K_d \{ m(K_e C)^m - C_c \} = l - g \quad (2.43)$$

上述方程同方程(2.16)一起用来描写硅中砷原子的热迁移. m 取 4 最适合于观察到的结果, 也有证据表明结团的原子数可取更大值. 解团速率系数采用 Schwenker 等人提供的^[2.24].

在平衡条件下(也即 $\partial C_c / \partial t = 0$) 方程(2.43)可化成

$$\frac{C_T}{C} = 1 + 4K_e^4 C^3 \quad (2.44)$$

图 2.9 画出了方程(2.44). 由图可见, 结团现象限制着替位式砷的最大浓度 (因而砷原子的电激活). 这个限制是工艺加工温度的函数.

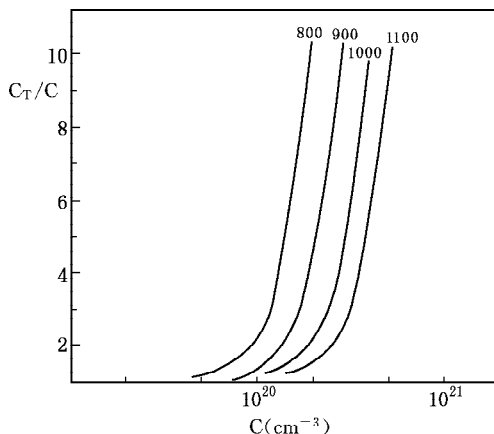


图 2.9 在热平衡时,用结团模型得出的以不同工艺温度为参数的归一化总砷浓度同替位式砷浓度的关系曲线(源于[2.2])

虽然结团模型能预期沉淀和随后的再分布时结团的形成和散离,但当砷用离子注入时,必须假设一个起始结团浓度. 在 SUPREM-2 中这个起始结团浓度是任意假定的,起始结团砷分布简单地由在退火温度时热平衡下给出的整个砷原子浓度的注入分布决定.

2.3.3 热氧化模型

2.3.3.1 Deal-Grove 热氧化生长公式

在 SUPREM-2 中,硅上生长二氧化硅的速率用熟知的 Deal-Grove 公式^[2.25]

$$Z_{\text{ox}}^2 + AZ_{\text{ox}} = B(t + \tau) \quad (2.45)$$

描述. 式(2.45)中 Z_{ox} 是氧化厚度, t 是时间, A 和 B 与线性和抛物线生长系数 K_L 、 K_P 以及归一化 O_2 分压 P_{O_2} 有关.

$$A = P_{O_2} K_P / K_L \quad (2.46)$$

$$B = P_{O_2} K_P \quad (2.47)$$

参数 τ 同起始氧化厚度有关

$$\tau = \frac{Z_{\text{ox}}^2(t=0) + AZ_{\text{ox}}(\tau=0)}{B} \quad (2.48)$$

在相对低的掺杂剂浓度下, K_P 和 K_L 只同硅晶体趋向及氧化气氛有关, 且它们是温度的简单的激活函数.

2.3.3.2 高硅表面掺杂浓度对硅氧化速率的影响

然而, 在高表面浓度情况下, 例如在 MOST 源和漏或双极型发射区, 硅的氧化速率增强. HO 等^[2, 26]在 1978 年发现表面反应速率增强主要是线性速率系数充分地增加, 而同 O_2 通过 SiO_2 的扩散有关的抛物线速率, 只是适度地增强. 这些增强随着温度增加而减弱. 在 SUPREM-2 中用了—个由 HO 及 Plummer 提出的模型, 定量地描述了 K_L 和 K_P 的增强同表面掺杂剂浓度的关系. 其基本概念是硅氧化速率同点阵空位浓度有关, 而点阵空位浓度如已在扩散率流量模型中讨论的那样, 它同掺杂剂原子的浓度密切相关.

按照这个模型线性速率系数能写作:

$$K_L = K_L^i [1 + \gamma(C^T - 1)] \quad (2.49)$$

这里 K_L^i 是本征(即低浓度)线性速率系数, γ 是一个由实验决定的参数. 由

$$\gamma = 2.62 \times 10^3 \exp\left[-\frac{1.10 \text{ eV}}{kT}\right] \quad (2.50)$$

给出, C^T 是归一化的总空位浓度, 由

$$C^T = \frac{1 + C^+ \left(\frac{n}{n_i}\right) + C^- \left(\frac{n}{n_i}\right) + C^= \left(\frac{n}{n_i}\right)^2}{1 + C^+ + C^- + C^=} \quad (2.51)$$

给出, 这里

$$\begin{cases} C^+ = \exp\{(E^+ - E_i)/kT\}; E^+ = 0.35 \text{ eV} \\ C^- = \exp\{(E_i - E^-)/kT\}; E^- = E_g - 0.57 \text{ eV} \\ C^= = \exp\{(2E_i - E^- - E^=)/kT\}; E^= = E_g - 0.11 \text{ eV} \end{cases} \quad (2.52)$$

从上面的表示式可以看出, 3 种电荷状态的空位的归一化本征浓度, 它们各有相应的能态在硅禁带中. 硅禁带宽 E_g , 本征能级 E_i 同温度的关系为

$$E_g(T) = 1.17 - 4.73 \times 10^{-4} [T^2 / (T + 636)] \text{ eV} \quad (2.53)$$

$$E_i(T) = E_g/2 - kT/4 \quad (2.54)$$

对于 n 型掺杂剂, 抛物线氧化率的增强也已由 HO 和 Plummer 描述. K_P 由

$$K_P = K_P^i (1 + \delta C_T^{0.22}) \quad (2.55)$$

给出, 式(2.55)中

$$\delta = 9.63 \times 10^{-18} \exp \frac{2.83}{kT} \text{ eV} \quad (2.56)$$

K_P^i 是本征抛物线速率, C_T 是总的 n 型掺杂剂原子浓度.

2.3.3.3 增量形式的热氧化生长公式

由于扩散和分凝分布, 在氧化时杂质表面浓度变化, 算得的 K_L 和 K_P 的增强值一般同时间有关. 因此, 在 SUPREM-2 中用相同方程的一个增量形式

$$\Delta Z_{ox} = \frac{1}{2} \{ -(2Z_{ox} + A) + \sqrt{(2Z_{ox} + A)^2 + 4B\Delta t} \} \quad (2.57)$$

而不用经典的氧化生长方程(2.45). 这样, 当模拟时间发生在小的时间增量 Δt 内, 以及硅中杂质再分布时, 系数 A 和 B 从每个时间增量内的表面杂质浓度得出, 而氧化厚度的相应增量 ΔZ_{ox} 由这些值计算.

2.3.4 硅外延模型

图 2.10 说明用在 SUPREM-2 中的外延生长模型. 假定容器中的气相有一个均匀的单类掺杂剂的等效浓度 C_{gl}^* , 这是一个虚设的浓度, 等于所需要的均匀外延掺杂浓度. 在 SUPREM-2 中没有真实的气相情况的考虑. 图 2.10 指出, 在固-气界面存在两个流量分量 F_s 和 F_b . F_s 是一个杂质“蒸发”流量

$$F_s = h(KC_{gl}^* - C_i) \quad (2.58)$$

h 是杂质蒸发系数已在界面流量的讨论中提到过. 我们定义除直接移动的边界结合外, 在气体和固体之间交换的任意杂质流量为蒸发流量, C_i 是固体表面的杂质浓度, K 是表面平衡分凝系数, 定义为

$$K = \frac{C_{iO}}{C_{gIO}^*} \quad (2.59)$$

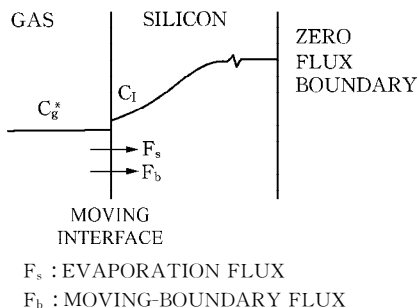


图 2.10 外延硅生长时杂质的再分布模型示意图(源于[2.2])

式中 C_{g10}^* 和 C_{10} 分别表示平衡时气体和固体表面的杂质浓度.

F_b 项是由界面运动引入的流量,像在氧化情况中那样. 它由

$$F_b = V(C_{g1}^* - C_1) \quad (2.60)$$

给出,这里 V 是界面速度(即外延硅生长速率).

在固体内,杂质扩散流的计算,如已在前面讨论过的那样.

另外,关于自动掺杂(autodoping),背面的自动掺杂被忽略,而正面的自动掺杂需考虑.但目前还缺乏合适的模型,尚待进一步研究给出.

§ 2.4 SUPREM-2 中几个电参数的计算

许多器件和电路性能的了解,常可从一些简单电参数计算结果来获得.基于此, SUPREM-2 中利用得到的掺杂分布及有关几何参数提供了薄层电阻以及 MOS 阈值电压等电参数的计算.

2.4.1 薄层电阻计算

众所周知,均匀半导体的电阻公式为

$$R = \rho \cdot \frac{1}{S} \quad (2.61)$$

扩散薄层半导体的电阻公式为

$$R_s = \bar{\rho} \cdot \frac{1}{S} \quad (2.62)$$

若 $S = l \cdot x_j$ (见图 2.11),则得到薄层方块电阻的定义式为

$$R_s = \bar{\rho} / x_j \quad (2.63)$$

单位为 $\Omega/\square$,以表示不同于一般电阻,扩散薄层半导体的平均电阻率计算公式为

$$\bar{\rho} = \frac{1}{\bar{\sigma}} = \frac{1}{q \int_{y_1}^{y_2} \mu(C)N(y)dy / (y_2 - y_1)} = \frac{y_2 - y_1}{q \int_{y_1}^{y_2} \mu(C)N(y)dy} \quad (2.64)$$

$$x_j = y_2 - y_1 \quad (2.65)$$

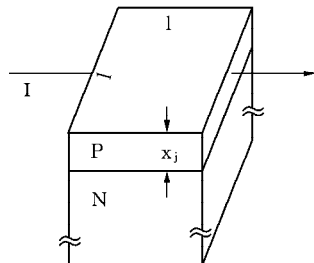


图 2.11 $S=l \cdot x_j$ 的示意图

$$R_s = \frac{1}{q \int_{y_1}^{y_2} \mu(C) N(y) dy} \quad (2.66)$$

y_1 和 y_2 定义为层的边界, q 是电子电荷的绝对值, $\mu(C)$ 是载流子迁移率, 它是杂质浓度 C 的函数, C 是 y 的函数故 μ 也是 y 的函数, $N(y)$ 是净载流子浓度 $N(y) = C_A(y) - C_D(y)$, 足标 A 表示受主杂质, D 表示施主杂质, n 型半导体 q 用 $-q$ 代, $N(y)$ 为负. 在计算 $N(y)$ 时, 假定杂质全部激活(或称电离). 即净杂质浓度就是净载流子浓度. 但有两种情况例外:

- (i) 砷——只有非成团原子假设贡献电子, 即非成团原子浓度就是电子浓度.
- (ii) 磷——电子浓度 n 同原子杂质浓度 C 之间的关系用下式计算

$$C = n + 2.04 \times 10^{-41} n^3 \quad (2.67)$$

这两种情况的特殊考虑, 在重掺杂时很重要.

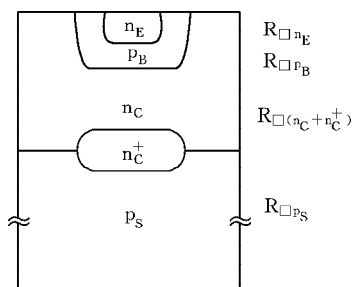


图 2.12 双极型晶体管各区域方块电阻示意图

用 SUPREM-2 可计算双极型晶体管各区域方块电阻(或薄层电阻), 图 2.12 为双极型晶体管各区域方块电阻的示意图.

图 2.12 中符号 $R_{\square n_E}$, $R_{\square p_B}$, $R_{\square (n_C + n_C^+)}$, $R_{\square p_S}$ 分别表示发射区(n_E 区), 基区(p_B 区), 集电区(包括 n_C 和 n_C^+ 区, 其中 n_C^+ 区即隐埋区或称隐埋层)和衬底(p_S 区)的方块电阻.

其中有两个问题需注意:

- (i) 例如算发射区下集电区上的基区时, 是以两个冶金结的边界之间的厚度作为薄层的厚度的, 而不是以扣去耗尽层扩展到基区的深度后的电学上的基区宽度作为薄层的厚度的, 因此算出来的比实际的要偏小.
- (ii) 在有关的层电阻计算时注意所设模拟空间末端的限制.

2.4.2 MOS 阈值电压计算

众所周知, MOS 结构的阈值电压 V_T 的表示式为

$$V_T = V_B + \Psi_S + V_{FB} \quad (2.68)$$

V_{FB} 是平带电压

$$V_{FB} = \phi_{MS} - qN_{SS}/C_{OX} \quad (2.69)$$

ϕ_{MS} 是栅和半导体的接触势,或谓栅材料及半导体的功函数之差,若半导体不是均匀掺杂,则 ϕ_{MS} 同栅材料(铝栅还是硅栅或其他栅)及沟道表面掺杂情况有关。 N_{SS} 为氧化层及硅界面处的界面态面密度,单位为 $\text{states}/\text{cm}^2$, C_{OX} 为单位面积氧化层电容, Ψ_s 是强反型情况下的表面势,由下式给出:

$$\Psi_s = \pm \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{n_b n(y_d)}{n_i^2} \right] \quad (2.70)$$

其中 $n(y_d)$ 是耗尽区边界处的载流子浓度(如图 2.13 所示)。

n_b 是体接触处的载流子浓度,可以是表面浓度(第一个硅点),衬底浓度(最后一个硅点),也可以取由使用者任意确定的浓度。 n_b 同 $n(y_d)$ 一定要是相同类型的载流子,衬底为 P 型杂质取 + 号,衬底为 N 型杂质取 - 号。

V_B 称硅体电压。这个名称不很恰当,因为实际上这部分压降是理想 MOS 结构的栅电压降落在氧化层上的那部分。

$$V_B = \frac{q}{C_{OX}} \int_0^{y_d} n(y) dy \quad (2.71)$$

注意,这里电容用 C_{OX} 是氧化层电容。电荷,因金属栅上的不好算,只能算表面反型层及耗尽层上的,但表面反型层上的电荷可略去,故计算耗尽电荷就等于计算金属栅上的电荷。

以上几个方程中,空间电荷区宽度 y_d 由解泊松方程

$$\frac{d^2 \Psi}{dy^2} = \frac{q}{\epsilon_s} [C_D(y) - C_A(y)] = \frac{q}{\epsilon_s} n(y) \quad (2.72)$$

考虑了相应的边界条件后可得出

$$\Psi_s = \frac{q}{\epsilon_s} \left[y_d \int_0^{y_d} n(y) dy - \int_0^{y_d} \int_0^{y_d} n(y) dy dy \right] \quad (2.73)$$

此式左边的 Ψ_s 再用 $\pm \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{n_b n(y_d)}{n_i^2} \right]$ 代入,再对上述非线性式进行数值解就可解出 y_d 。

用上述公式(2.68—2.73)计算 V_T ,在假设所给出的精确度范围内,可计算任

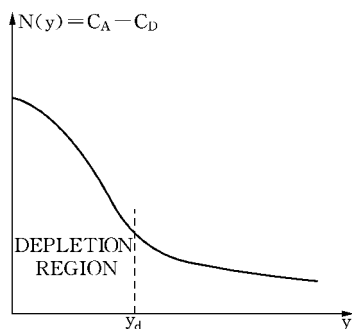


图 2.13 硼离子注入形成的典型的 P 型剖面分布, $N(y)$ 是准电中性条件下的空穴分布(源于[2.2])

意杂质分布的 V_T . 注意, 若在栅下的掺杂分布不是同一掺杂类型, 则接触掺杂类型一定要选取同耗尽区边缘处相同的掺杂类型.

§ 2.5 SUPREM-2 的使用和应用例举

2.5.1 SUPREM-2 的使用

使用 SUPREM-2, 必须做到:

(i) 了解 SUPREM-2 的功能和它所用的各种工艺模型. 这是为了判断使用 SUPREM-2 软件能否满足您(用户)对设计、快速确定、验证有关半导体器件/集成电路工艺及其结果的需求. 例如: 您需模拟二维掺杂分布, 或需模拟包含多晶硅或氮化硅或化合物半导体材料的器件/电路的工艺, SUPREM-2 就不能满足您的需求.

(ii) 要知道拟模拟的硅衬底的材料参数, 有关工艺的条件参数以及工艺序列中各工艺步进行的次序.

(iii) 阅读和正确理解 SUPREM-2 的用户手册, 主要是输入文件的书写格式 [参见附录一] 用户手册中规定了输入文件及其使用的语句的书写格式和语句的含义. 用户根据用户手册中的规定及已知参数和工艺序列编制出一个输入文件, 并将这个输入文件用键盘输入计算机.

2.5.2 SUPREM-2 的应用例举

本书以美国 Stanford 大学电子工程系 IC 实验室 1978 年 6 月技术报告 No. 5019-2^[2.2]中给出的两个例子作为应用例举, 予以介绍.

2.5.2.1 SUPREM-2 应用例举一 CMOS P 阱模拟

1. 已知参数和工艺步骤

(1) 衬底材料及其参数

硅单晶, N 型, 掺杂浓度 $1 \times 10^{15} / \text{cm}^3$, 晶向 100

(2) 工艺步骤及工艺条件参数

步骤一 低温淀积 50 nm 氧化层

步骤二 P 阱注入, 离子注入硼, 注入剂量 $5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, 注入能量 200 keV

- 步骤三 在氮气氛中进行注入硼的驱入扩散 ,温度 1 100 °C ,时间 90 min
- 步骤四 腐蚀掉氧化层
- 步骤五 在 10%干氧气氛中进行硼的驱入扩散 15 小时 ,温度为 1 100 °C
- 步骤六 在湿氧气氛中进行 5 小时场氧化层生长 ,温度为 1 025 °C
- 步骤七 腐蚀掉氧化层
- 步骤八 在干氧气氛中 ,在 1 000 °C 下 ,进行栅氧化 5 min
- 步骤九 在湿氧气氛中 ,在 1 000 °C 下 ,进行栅氧化 5 min
- 步骤十 在干氧气氛中 ,在 1 000 °C 下 ,进行栅氧化 5 min
- 步骤十一 在氮气氛中进行退火 ,退火条件为温度 1 000 °C ,时间为 30 min
- 步骤十二 调节阈值电压 ,离子注入磷 ,剂量为 $5 \times 10^{11} / \text{cm}^2$,能量为 90 keV
- 另外 ,在工艺步骤十一和步骤十二后 ,分别进行阈值电压计算 ,计算时用铝栅极 ,界面态密度取 $4 \times 10^{10} / \text{cm}^2$

2. 输入文件

```

* * * STANFORD UNIVERSITY PROCESS ENGINEERING MODELS PROGRAM * * *

* * * VERSION O-02 * * *

1... TITL   CMOS P-WELL SIMULATION
2... GRID   DYSI = 0.01 , DPTH = 0.6 , YMAX = 2.5
3... SUBS   ORNT = 100 , ELEM = - , CONC = 1E15

4... COMM   STARTING OXIDE THICKNESS OF 500 A.
5... STEP   TYPE = DEPO , TIME = 1 , GRTE = 0.050

6... PLOT   TOTL = Y , CMIN = 14 , NDEC = 4 , WIND = 1.8

7... COMM   P = WELL IMPLANT
8... STEP   TYPE = IMPL , ELEM = 8 , DOSE = 5E12 , AKEV = 200

9... COMM   --- STOP PLOTTING , START PRINTING INFORMATION ---
10... PLOT   TOTL = N
11... PRINT  HEAD = Y

12... COMM   DRIVE - IN IN N2 FOR 1.5 HOURS
13... STEP   TYPE = OXID , TEMP = 1100 , TIME = 90 , MODL = NIT0

14... STEP   TYPE = ETCH , TEMP = 25

```

```
15... COMM    ---EXTEND GRID SPACE ---
16... GRID     DYSI = 0.015 , DPTH = 1.0 , YMAX = 7.0

17... COMM     DRIVE - IN FOR 15 HOURS IN 10 % DRY 02
18... MODEL    NAME = DRY1 , PRES = .1
19... STEP     TYPE = OXID , TEMP = 1100 , TIME = 900 , MODL = DRY1

20... COMM     FIELD OXID GROWTH IN WET 02 FOR 5HOURS
21... STEP     TYPE = OXID , TEMP = 1025 , TIME = 300 , MODL = WETO

22... STEP     TYPE = ETCH , TEMP = 25

23... COMM     GATE OXIDATION AT 1000 C
24... STEP     TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 5 , MODL = DRY0
25... STEP     TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 5 , MODL = WETO
26... PLOT     TOTL = Y , WIND = 6
27... STEP     TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 5 , MODL = DRY0

28... SAVE     FILE = PW1 , TYPE = B

29... COMM     ANNEAL --- CALCULATE THRESHOLD VOLTAGE---
30... MODEL    NAME = SPM1 , GATE = AL , QSSQ = 4E10 , CBLK = 1
31... STEP     TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 30 , MODL = NITO , MODL = SPM1

32... COMM     THRESHOLD TAILORING IMPLANT
33... MODEL    NAME = SPM1 , CBLK = 6E15
34... STEP     TYPE = IMPL , ELEM = P , DOSE = 5E11 , AKEV = 90 , MODL = SPM1

35... END
```

3. 输出信息

按输入文件 除工艺步骤一以外 ,工艺步骤二至步骤十二的每步工艺后都要求有工艺结果的信息输出. 为了节省篇幅 ,这里只给出工艺步骤十二后 ,也即最终的工艺结果的信息输出. 它们分别为 :(i)被称之为标题信息(heading information)的打印输出 ,包括 :本工艺步骤的有关工艺条件参数 ,阈值电压 ,结深 ,薄层电阻 ,净掺杂和各别掺杂浓度等 ;(ii)二氧化硅及硅中净杂质浓度随深度分布的作图输出.

标题信息打印输出(第十二步工艺及其结果)

CMOS P = WELL SIMULATION

THRESHOLD TAILORING IMPLANT

STEP # 12

ION IMPLANT (GAUSSIAN APPROXIMATION)

IMPLANTED IMPURITY = PHOSPHORUS

IMPLANTED DOSE = 5.000000E + 11

IMPLANT ENERGY = 90.0000

RANGE = 9.664024E - 02

STANDARD DEVIATION = 4.174892E - 02

PEAK CONCENTRATION = 5.023804E + 16

SURFACE CONCENTRATION = - 4.060335E + 16 ATOMS/CM + 3

GATE MATERIAL = ALUMINUM SILICON UNDER GATE = N - TYPE

OXIDE THICKNESS = 809.5 ANG. CAPACITANCE/AREA = 4.26E - 04 PF/UM2

THRESHOLD VOLTAGE = .15 VOLTS AT SURFACE STATES = 4.00E + 10

JUNCTION DEPTH		SHEET RESISTANCE	
.101351	MICRONS	24786.9	OHMS/SQUARE
3.65608	MICRONS	6092.49	OHMS/SQUARE
		21109.4	OHMS/SQUARE

NET ACTIVE CONCENTRATION

OXIDE CHARGE = 1.181700E + 11 IS 3.79 % OF TOTAL

SILICON CHARGE = 3.002378E + 12 IS 96.2 % OF TOTAL

TOTAL CHARGE = 3.120549E + 12 IS 109.0 % OF INITIAL

INITIAL CHARGE = 2.854394E + 12

CHEMICAL CONCENTRATION OF BORON

OXIDE CHARGE = 4.229726E + 10 IS 1.38 % OF TOTAL

SILICON CHARGE = 3.022125E + 12 IS 98.6 % OF TOTAL

TOTAL CHARGE = 3.064422E + 12 IS 100.0 % OF INITIAL

INITIAL CHARGE = 3.064422E + 12

CHEMICAL CONCENTRATION OF PHOSPHORUS

OXIDE CHARGE = 1.413504E + 11 IS 28.3 % OF TOTAL
SILICON CHARGE = 3.583073E + 11 IS 71.7 % OF TOTAL
TOTAL CHARGE = 4.996577E + 11 IS 0.000E + 00 % OF INITIAL
INITIAL CHARGE = 0.000000E + 00

二氧化硅及硅中净杂质浓度随深度分布的作图(图 2.14)输出(第十二步工艺及其结果)

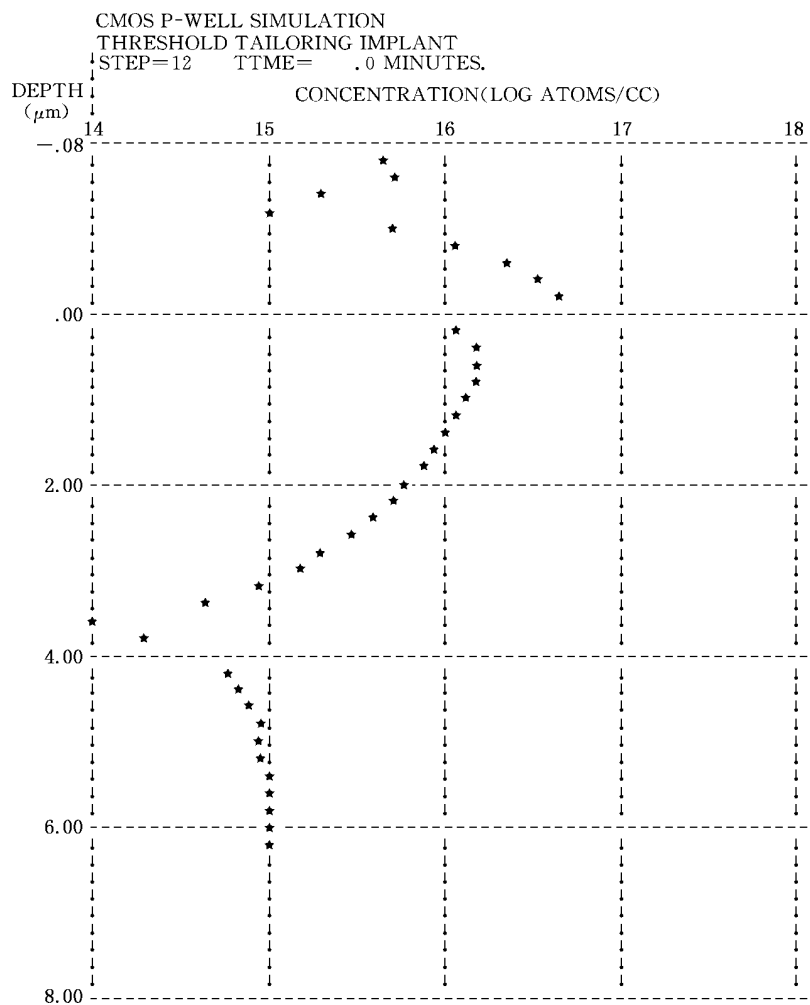


图 2.14 二氧化硅及硅中净杂质浓度随深度的分布(MOS 结构完成后)

2.5.2.2 SUPREM-2 应用例举二 斯坦福配套元件芯片工艺

斯坦福配套元件芯片(Stanford Kitchip)工艺是美国斯坦福大学开发的一种双极型晶体管工艺.

1. 已知参数和工艺步骤

(1) 衬底材料及其参数

硅单晶 ,P 型 ,掺硼 ,浓度 $1 \times 10^{15} / \text{cm}^3$,晶向 100

(2) 工艺步骤及工艺条件参数

步骤一 埋层注入 ,离子注入砷 ,剂量 $1 \times 10^{15} / \text{cm}^2$,能量 30 keV

步骤二 在干氧气氛中氧化、驱入扩散 ,温度 1 250 °C ,时间 180 min

步骤三 腐蚀掉氧化层

步骤四 生长 5.5 μm 掺砷外延层 ,温度 1 000 °C ,砷浓度 $1 \times 10^{15} / \text{cm}^3$

步骤五 隔离工艺 ,在干氧气氛中氧化、驱入扩散 ,温度 1 100 °C ,时间 60 min

步骤六 隔离工艺 ,在干氧气氛中氧化、驱入扩散 ,温度 1 200 °C ,时间 90 min

步骤七 腐蚀掉氧化层

步骤八 基区扩散 ,预淀积硼 ,温度 950 °C ,时间 30 min. 表面硼浓度 $1.2 \times 10^{20} / \text{cm}^3$

步骤九 基区扩散 ,在干氧气氛中氧化、硼驱入扩散 ,温度 1 000 °C ,时间 45 min

步骤十 基区扩散 ,在湿氧气氛中氧化、硼驱入扩散 ,温度 1 000 °C ,时间 60 min

步骤十一 基区扩散 ,在干氧气氛中氧化、硼驱入扩散 ,温度 1 000 °C ,时间 5 min

步骤十二 基区扩散 ,在氮气气氛中硼驱入扩散 ,温度 1 000 °C ,时间 10 min

步骤十三 腐蚀掉氧化层

步骤十四 发射区扩散 ,预淀积磷 ,温度 1 025 °C ,时间 33 min ;表面磷浓度 $1.15 \times 10^{21} / \text{cm}^3$

步骤十五 发射区扩散 ,在氮气气氛中磷驱入扩散 ,温度 900 °C ,时间 10 min

步骤十六 发射区扩散 ,在湿氧气氛中氧化、驱入扩散 ,温度 900 °C ,时间 10 min

步骤十七 发射区扩散 ,在氮气气氛中磷驱入扩散 ,温度 900 °C ,时间 10 min

2. 输入文件

* * * STANFORD UNIVERSITY PROCESS ENGINEERING MODELS PROGRAM * * *

* * * VERSION 0-02 * * *

```
1. . . . TITLE      STANFORD KITCHIP PROCESS          6 / 5 / 78
2. . . . GRID       YMAX = 5 , DPTH = 1 , DYSI = .01
3. . . . SUBS       ELEM = 8 , CONC = 1E15 , ORNT = 100

4. . . . PRINT      HEAD = Y

5. . . . COMM       BURIED LAYER

6. . . . STEP       TYPE = IMPL , DOSE = 1.5E15 , AKEV = 30 , ELEM = AS
7. . . . PLOT       TOTL = Y , WIND = 4
8. . . . STEP       TYPE = OXID , TEMP = 1250 , TIME = 180 , MODL = DRYO
9. . . . PLOT       TOTL = N
10. . . . STEP      TYPE = ETCH , TEMP = 25

11. . . . COMM      EPITAXY

12. . . . PLOT      TOTL = Y , WIND = 8
13. . . . STEP      TYPE = EPIT , TEMP = 1000 , TIME = 11 , GRTE = .5 , ELEM = AS , CONC = 1E15
14. . . . PLOT      TOTL = N

15. . . . COMM      ISOLATION

16. . . . STEP      TYPE = OXID , TEMP = 1100 , TIME = 60 , MODL = DRYO
17. . . . STEP      TYPE = OXID , TEMP = 1200 , TIME = 90 , MODL = DRYO

18. . . . PLOT      TOTL = Y
19. . . . STEP      TYPE = ETCH , TEMP = 25

20. . . . COMM      BASE DIFFUSION

21. . . . PLOT      WIND = 4
22. . . . STEP      TYPE = PDEP , TEMP = 950 , TIME = 30 , ELEM = B , CONC = 1.2E20
23. . . . PLOT      TOTL = N
24. . . . STEP      TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 45 , MODL = DRYO
25. . . . STEP      TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 60 , MODL = WETO
26. . . . STEP      TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 5 , MODL = DRYO
```

```

27... STEP      TYPE = OXID , TEMP = 1000 , TIME = 10 , MODL = NITO
28... PLOT      TOTL = Y

29... STEP      TYPE = ETCH , TEMP = 25

30... SAVE      FILE = EBNCF , TYPE = B

31... COMM      EMITTER DIFFUSION

32... MODEL     NAME = MPH2 , STCO = 0
33... STEP      TYPE = PDEP , TEMP = 1025 , TIME = 33 , ELEM = P , CONC = 1.15E21
34... PLOT      TOTL = N
35... STEP      TYPE = OXID , TEMP = 900 , TIME = 10 , MODL = NITO , MODL = MPH2
36... STEP      TYPE = OXID , TEMP = 900 , TIME = 10 , MODL = WETO

37... SAVE      FILE = EBNCL , TYPE = B
38... PLOT      TOTL = Y
39... STEP      TYPE = OXID , TEMP = 900 , TIME = 10 , MODL = NITO

40... END

```

3. 输出信息

按输入文件 ,工艺步骤一至步骤十七的每步工艺后都要求有工艺结果的打印及/或作图的信息输出. 为了节省篇幅 ,这里只给出工艺步骤十七后 ,也即最终的工艺结果的信息输出. 它们分别为 :(i)标题信息的打印输出 ,包括 :本工艺步骤的有关工艺条件参数 ,硼、砷、磷分别在二氧化硅及硅中的扩散系数 ,在二氧化硅/硅界面的分凝系数以及表面输运系数等缺省参数值 ,表面浓度 ,净掺杂和硼、砷、磷的个别掺杂浓度等 ;(ii)二氧化硅及硅中净杂质浓度随深度分布的作图输出.

标题信息打印输出(第十七步工艺及其结果)

```

STANFORD KITCHIP PROCESS      6 / 5 / 78
EMITTER DIFFUSION
STEP # 17

NEUTRAL AMBIENT DRIVE - IN
TOTAL STEP TIME      =    10.0 MINUTES
INITIAL TEMPERATURE  =    900.000      DEGREES C.
OXIDE THICKNESS      =     .1777      MICRONS

```

	OXIDE DIFFUSION COEFFICIENT	SILICON DIFFUSION COEFFICIENT	SEGREGATION COEFFICIENT	SURFACE TRANSPORT COEFFICIENT
BORON	1.29677E = 09	6.39843E = 06	.16589	3.67548E = 04
ARSENIC	1.03185E = 11	4.27144E = 07	10.0000	2.54185E = 03
PHOSPHORUS	4.19632E = 08	4.36669E = 06	10.0000	0.00000E + 00

SURFACE CONCENTRATION = - 4.416995E + 20 ATOMS/CM + 3

JUNCTION DEPTH		SHEET RESISTANCE	
1.00908	MICRONS	8.20940	OHMS/SQUARE
1.49193	MICRONS	24343.0	OHMS/SQUARE
		24.7713	OHMS/SQUARE

NET ACTIVE CONCENTRATION

OXIDE	CHARGE	=	3.403248E + 15	IS	23.0	%	OF TOTAL
SILICON	CHARGE	=	1.141275E + 16	IS	77.0	%	OF TOTAL
TOTAL	CHARGE	=	1.481600E + 16	IS	100.0	%	OF INITIAL
INITIAL	CHARGE	=	1.481735E + 16				

CHEMICAL CONCENTRATION OF BORON

OXIDE	CHARGE	=	4.670280E + 13	IS	7.66	%	OF TOTAL
SILICON	CHARGE	=	5.629458E + 14	IS	92.3	%	OF TOTAL
TOTAL	CHARGE	=	6.096486E + 14	IS	99.9	%	OF INITIAL
INITIAL	CHARGE	=	6.099692E + 14				

CHEMICAL CONCENTRATION OF ARSENIC

OXIDE	CHARGE	=	3.166797E + 09	IS	2.295E = 04	%	OF TOTAL
SILICON	CHARGE	=	1.379806E + 15	IS	100.0	%	OF TOTAL
TOTAL	CHARGE	=	1.379809E + 15	IS	100.0	%	OF INITIAL
INITIAL	CHARGE	=	1.379809E + 15				

CHEMICAL CONCENTRATION OF PHOSPHORUS

OXIDE	CHARGE	=	6.490390E + 15	IS	21.7	%	OF TOTAL
SILICON	CHARGE	=	2.341254E + 16	IS	78.3	%	OF TOTAL
TOTAL	CHARGE	=	2.990293E + 16	IS	100.0	%	OF INITIAL
INITIAL	CHARGE	=	2.990294E + 16				

二氧化硅及硅中净杂质浓度随深度分布的作图(图 2.15)输出(第十七步工艺及其结果)

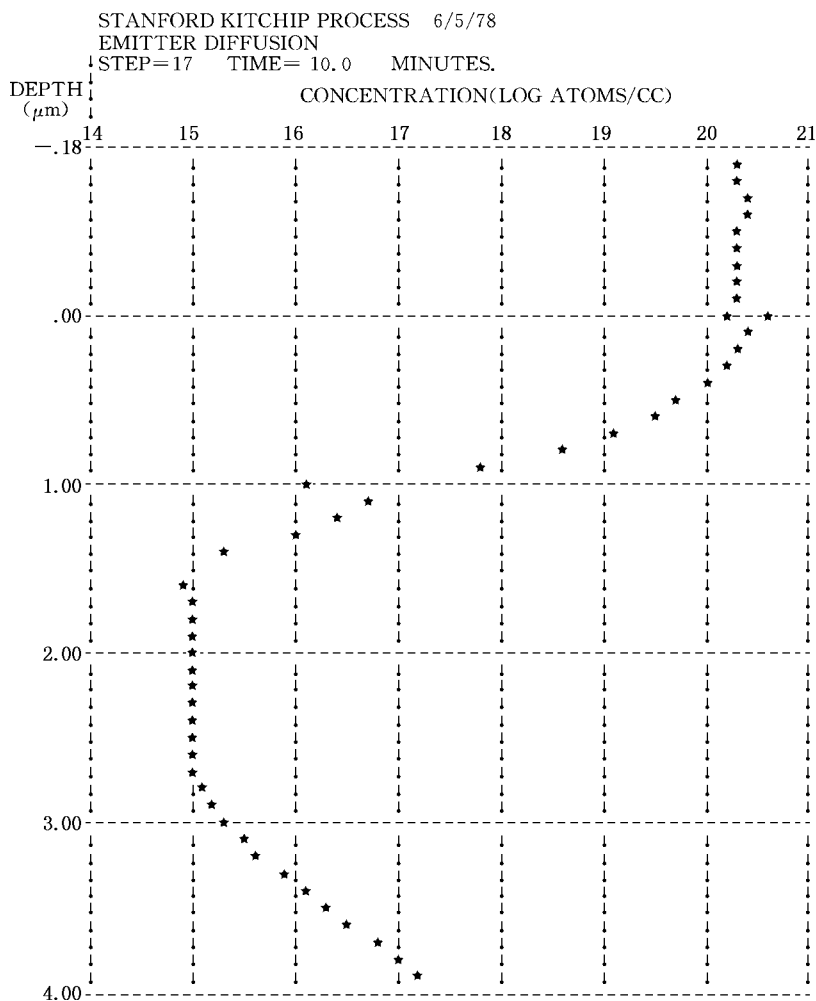


图 2.15 二氧化硅及硅中净杂质浓度随深度的分布(双极型结构完成后)

§ 2.6 SUPREM-3

SUPREM-3 是继 SUPREM-2 研发成功并释放应用 5 年后 Stanford 大学研发成功并释放应用的又一种一维 IC 工艺模拟程序,它在功能和精度方面都优于 SUPREM-2,经商用化,包括根据工业界使用的反馈不断改进的美国 TMA 公司的 TMA SUPREM-3^[2.27],Silvaco 公司的 SSUPREM-3^[2.28]是当今水平最高的通用的一维 IC 工艺模拟软件。

经不断修改补充的 SUPREM-3 软件具有下列功能:

(i) 能进行垂直于半导体圆片表面的一维模拟,能精确模拟制备双极型及 MOS 型半导体器件的大多数制造工艺,包括掺杂或非掺杂硅层的外延生长,淀积和刻蚀,杂质的离子注入,硅、多晶硅和氮化硅的氧化,杂质在构成器件的多种材料层中的扩散。

(ii) 能提供工艺加工期间器件结构变化的信息,例如:层厚度,杂质浓度在材料体内随深度的变化和在界面的变化,电导随偏置变化等,用图形或文本表示输出信息。

(iii) 器件结构可以由硅、多晶硅、二氧化硅、氮化硅、光刻胶或铝等材料组成的多至 10 层材料的结构,离子注入、扩散及包含在淀积层和衬底内的杂质可以是硼、磷、砷、锑 4 种,非上列材料和杂质的模拟,软件也提供若干应用的支持。

(iv) 计算部分器件结构的电特性,包括载流子沿器件纵向剖面的分布、薄层电阻和阈值电压等。

(v) 除可单独运行外,还提供界面使容易和器件模拟器联用,以集成到整个 IC TCAD 系统中运行。

以下概要介绍 SUPREM-3 原始文本及/或经商用化不断改进的文本所用的工艺模型。

2.6.1 SUPREM-3 的离子注入模型

SUPREM-3 中保留着 SUPREM-2 中所用的离子注入模型:包括简单的 Gaussian 分布,相联半 Gaussian 分布(为 P、As、Sb),修改的 Pearson-4 分布(为 B,当靶是单晶硅时)供选用。同时补充了对 Pearson-4 分布的选用。上述离子注入分布模型是基于 LSS 理论和查表法的解析模型,用解析技术进行精确解,模拟耗时短。

但由于 LSS 理论假定各向同性或无定型的半无限靶,因而:

(i) 不适用于模拟单晶硅中的“沟道效应”。上列修改的 Pearson-4 分布是在 Pearson-4 分布加上基于沟道效应的尾部分布经验模型后才能较精确地模拟单晶硅中 B 离子注入的分布。

(ii) 不能模拟多层靶对离子注入射程的影响。

(iii) 不能模拟注入离子碰撞晶格中原子引起的被碰撞原子的“反冲效应”(recoil effect)对离子注入射程的影响。

为了满足精确模拟多层靶(多至 10 层)中杂质离子注入分布及模拟“反冲效应”对离子注入射程的影响, SUPREM-3 中使用了波尔兹曼输运方程(Boltzmann Transport Equation)模型,简称为 BTE 模型,该模型用数值解技术解 BTE,精度较高,但耗时较长。但 BTE 模型仍未能解决对“沟道效应”的模拟,因而并不适用离子注入单晶靶的模拟。

用 Monte Carlo (MC)法作离子注入模拟也已被用于经商用开发的 SUPREM-3 中。MC 法不仅适用于无定形硅靶也适用于结晶硅靶的模拟,但计算耗费大,一般需用超级计算机。这个问题近年来已有所缓解,在使用 MC 法时插入了用查表技术计算碰撞事件,加快了模拟速度减弱了计算强度,使之能在工作站上执行。用 MC 法还可模拟任意晶向的硅靶、注入斜度和转动角度对杂质离子注入分布的影响。

模拟多层材料结构靶中杂质离子注入分布的解析模型也被开发,这种模型通过考虑不同靶材对注入离子阻挡本领的不同来标定某特定材料中的射程分布,也即不同材料层及衬底用不同的射程。

2.6.2 SUPREM-3 的热氧化模型

SUPREM-3 中所用的热氧化模型,同 SUPREM-2 中所用的相比,基本相同:

(i) 硅上热氧化生长二氧化硅厚度的计算都用 Deal-Grove 公式

$$Z_{\text{ox}}^2 + AZ_{\text{ox}} = B(t + \tau)$$

见式(2.45)。

(ii) 硅衬底的表面为低掺杂浓度时,线性生长速率系数 K_L 和抛物线生长速率系数 K_P 都是温度的简单的激活函数,并同硅的晶向及氧化气氛有关。

(iii) 硅衬底的表面为高掺杂浓度时, K_L 和 K_P 都增大, K_L 增大显著,温度增高,增大减小。

(iv) 由于扩散和分凝,热氧化时杂质表面浓度随时间变化,因而在高掺杂浓度下,增大的 K_L 和 K_P 值也随时间变化.为此,在计算二氧化硅厚度时需用公式(2.45)的增量形式:

$$\Delta Z_{\text{ox}} = \frac{1}{2} [- (2Z_{\text{ox}} + A) + \sqrt{(2Z_{\text{ox}} + A)^2 + 4B\Delta t}]$$

见式(2.57).

SUPREM-3 中所用的热氧化模型,同 SUPREM-2 中所用的相比,其改进之处主要是考虑了在氧化气氛中加入 HCl 后对生长速率的影响以及在薄氧化层生长时生长速率的增强,同时修改了表示衬底晶向影响、氧分压影响、衬底表面高掺杂浓度影响等某些参数的缺省值(default value).

SUPREM-3 中所用的热氧化模型中决定氧化速率的 K_P 和 K_L 分别用下列公式表示:

为 H_2O 或干 O_2 氧化, K_P 表示为:

$$K_P = K_P^i [(P_i + P_{i-1})/2] [1 + \delta C_T^q] \epsilon \quad (2.74)$$

为 H_2O 氧化, K_L 表示为:

$$K_L = K_L^i [(P_i + P_{i-1})/2] [1 + \gamma(C_V - 1)] \eta \alpha \quad (2.75)$$

为干 O_2 氧化, K_L 表示为:

$$K_L = K_L^i [(P_i^{0.75} + P_{i-1}^{0.75})/2] [1 + \gamma(C_V - 1)] \eta \alpha (1 + K e^{-x_i/L}) \quad (2.76)$$

式(2.74)—式(2.76)三式中, K_P^i 和 K_L^i 分别是本征抛物线生长速率系数和本征线性生长速率系数,它们都是温度的简单激活函数:

$$K_P^i = C_1 e^{-E_1/kT} \quad (2.77)$$

$$K_L^i = C_2 e^{-E_2/kT} \quad (2.78)$$

式(2.77)及式(2.78)中几个参数的缺省值,为干 O_2 氧化,有:

$$C_1 = 12.9 \mu\text{m}^2/\text{min}$$

$$E_1 = 1.23 \text{ eV}$$

$$C_2 = 1.038 \times 10^5 \mu\text{m}/\text{min}$$

$$E_2 = 2.0 \text{ eV}$$

为 H_2O 氧化, K_p^i 及 K_L^i 表式中几个参数的缺省值分别为

$$T > 950\text{ }^\circ\text{C} : C_1 = 7.0\text{ }\mu\text{m}^2/\text{min}$$

$$E_1 = 0.78\text{ eV}$$

$$T < 950\text{ }^\circ\text{C} : C_1 = 283\text{ }\mu\text{m}^2/\text{min}$$

$$E_1 = 1.17\text{ eV}$$

$$T > 900\text{ }^\circ\text{C} : C_2 = 2.9 \times 10^6\text{ }\mu\text{m}/\text{min}$$

$$E_2 = 2.05\text{ eV}$$

$$T < 900\text{ }^\circ\text{C} : C_2 = 3.4 \times 10^4\text{ }\mu\text{m}/\text{min}$$

$$E_2 = 1.60\text{ eV}$$

以下分别介绍 SUPREM-3 中对影响 SiO_2 生长速率的几个主要因素的建模.

1. 衬底晶向对生长速率的影响

SUPREM-3 中只考虑衬底晶向对 K_L 的影响, 用参数 α 表示.

$$\alpha(111) = 1$$

$$\alpha(100) = 1/1.7 = 0.595$$

α (其他晶向)尚未确定, 但期望在 $\alpha(111)$ 和 $\alpha(100)$ 两者之间.

衬底晶向对 K_p 的影响, 已被发现可以忽略, SUPREM-3 中不予考虑.

2. 氧分压对生长速率的影响

已有工作表明: 在湿 O_2 或 H_2O 或干 O_2 气氛下, K_p 同氧分压成正比, 有:

$$K_p = K_p^i \left(\frac{P_i + P_{i-1}}{2} \right) \quad (2.79)$$

式中 P_i 和 P_{i-1} 分别为时间 t_i 和 t_{i-1} 时的归一化氧分压, 以下同.

在湿 O_2 或 H_2O 气氛下, K_L 也同氧分压成正比, 有:

$$K_L = K_L^i \left(\frac{P_i + P_{i-1}}{2} \right) \quad (2.80)$$

在干 O_2 气氛下, K_L 同氧分压呈超线性关系, 有:

$$K_L = K_L^i \left(\frac{P_i^{0.75} + P_{i-1}^{0.75}}{2} \right) \quad (2.81)$$

此外,湿 O_2 或 H_2O 气氛下, SUPREM-3 中氧分压的缺省值用

$$P_{H_2O_2} = P_{H_2O} = 0.92 \text{ atm.}$$

衬底表面掺杂浓度对生长速率的影响, SUPREM-3 中用:

$$K_L = K_L^i [1 + \gamma(C_V - 1)] \quad (2.49)'$$

$$K_P = K_P^i (1 + \delta C_T^q) \quad (2.55)'$$

表示. 其中 γ 为界面处氧化反应中本征空位作用的量度,

$$\gamma = 2.62 \times 10^3 \exp\left(\frac{-1.10 \text{ eV}}{kT}\right) \quad (2.50)'$$

C_V 为衬底界面处归一化总空位浓度,

C_T 为 Si/SiO₂ 界面的衬底一侧的总的掺杂剂化学浓度,

$$\delta = 9.63 \times 10^{-18} \exp\left(\frac{2.83 \text{ eV}}{kT}\right) \quad (2.56)'$$

$$q = 1.28 \exp\left(\frac{0.176 \text{ eV}}{kT}\right) \quad (2.82)$$

3. 氧化气氛中加入 HCl 对生长速率的影响

已被证明氧化气氛中加入 HCl 有益于热生长 SiO₂ 膜的钝化, MOS 晶体管阈值电压稳定性的改进以及 SiO₂ 膜有更均匀的介质强度. 所以这一工艺措施已被广泛应用于 MOS 型器件和 MOS 型 IC 的工业生产实践中. 在干 O_2 气氛中, HCl 的加入增加氧化速率, 其增加率同 HCl 浓度有关. 在 HCl 浓度达到 1%~2% 后, K_L 的增加趋于饱和; K_P 随 HCl 浓度增加单调增加. 由于定量的物理模型还缺乏, SUPREM-3 中用倍乘因子 η 和 ϵ 分别反映 HCl 的加入对 K_L 和 K_P 的影响.

$$K_L = K_L^i \eta \quad (2.83)$$

$$K_P = K_P^i \epsilon \quad (2.84)$$

η 和 ϵ 同 HCl 浓度和温度 T 的关系存储在包含在 SUPREM-3 中的二张表格内, 可参见[2.3]中的表 2.2、表 2.3. 在 H_2O 气氛中 HCl 的加入, 在氧化时氧化剂被 HCl 稀释, 从而有效地减小 H_2O 分压导致氧化速率的减小, SUPREM-3 用一个经验方法通过 η 和 ϵ 的减小直接反映这一减小,

$$\eta = 1 - \theta/100 \quad (2.85)$$

$$\epsilon = 1 - \theta/100 \quad (2.86)$$

其中 $\theta(= \% \text{HCl})$

4. 薄氧化层生长时氧化速率的增快效应

实验发现,当氧化层厚度 $< 20 \text{ nm}$,氧化层生长速率约增快 10 倍. 这一增快发生在所有感兴趣的加工温度,但不包括在 H_2O 气氛中氧化及最初 2.5 nm SiO_2 层的生长. 由于 MOS 型器件和 IC 中的栅氧化层是薄氧化层,一般都在干 O_2 气氛下制作,所以很需要精确模拟薄栅氧化层生长时氧化速率的增快. SUPREM-3 的开发者在有关物理机理不甚清楚了解的情况下,用了一个经验拟合公式来模拟,该公式为

$$\frac{dx}{dt} = \frac{B}{2x + A} + K e^{-x/L} \quad (2.87)$$

氧化速率的增快项为 $K e^{-x/L}$. 其中 K 是温度的激活函数, $K = K_0 \exp(-E_A/kT)$, L 是衰减长度,几乎和温度无关,约为 7 nm . 迄今 K_0 , E_A 和 L 等参数的物理含义虽不清楚,但 SUPREM-3 中含有它们的缺省值供估算时使用,见表 2.1. 表中数据源于文献[2.29]

表 2.1 用于 SUPREM-3 中的薄 SiO_2 层生长速率参数 K_0 , E_A , L

衬底晶向	$K_0(\text{nm}/\text{min})$	$E_A(\text{eV})$	$L(\text{nm})$
100	6.57×10^9	2.37	6.9
110	5.37×10^9	1.80	6.0
111	5.87×10^9	2.32	7.8

鉴于线性生长速率系数 K_L 表征的氧化层生长速率在生长薄 SiO_2 层时起支配作用,所以氧化速率的增快项 $K e^{-x/L}$ 加入在干 O_2 氧化时 K_L 的表示式(2.76)中.

SUPREM-3 中还包含氮化硅(Si_3N_4)热氧化的模型. 20 世纪 80 年代初氮化硅已广泛用在 CMOS 工艺的局域氧化(LOCOS)中, Si_3N_4 氧化时 Si_3N_4 消耗和 SiO_2 生长厚度的控制和建模显得很重要. SUPREM-3 中执行一个由 Kamins 开发的经验模型[2.30]. 氮化硅氧化时,氮化硅的消耗 Δx_n 满足:

$$\Delta x_n = 1.1 \times 10^7 (e^{-1.9 \text{ eV}/kT}) t^{0.7} P_{\text{H}_2\text{O}} \quad (2.88)$$

式中 Δx_n 的单位为纳米(nm), t 的单位为分(min), H_2O 分压或湿 O_2 分压 $P_{\text{H}_2\text{O}}$ 的单位为大气压(atm). 此式适用温度范围从 900°C 到 1000°C , 压力范围从 1 atm 到 10 atm . 在较低温度(800°C)或压力不在上述范围,式(2.88)的计算结果不精确. 对于 O_2 而不是 H_2O (湿 O_2),一级近似关系式为:

$$\Delta x_n(\text{干 } \text{O}_2) \approx 0.15 \Delta x_n(\text{H}_2\text{O}) \quad (2.89)$$

Si_4N_3 消耗 Δx_n 和 SiO_2 生长 x_o 之间的转换关系用：

$$x_o = Q\Delta x_n \quad (2.90)$$

Δx_n 和 x_o 间的转换比率 Q , SUPREM-3 中取为 1.65.

2.6.3 SUPREM-3 的杂质扩散模型

基于 SUPREM-2 所用扩散模型及文献报道的有关扩散机理的研究成果, SUPREM-3 改进了 SUPREM-2 中扩散模型的某些近似性, 开发了更精确的、由点缺陷相助的 (point defect-assisted) 杂质扩散模型. 该模型考虑了 B、P、As、Sb 等掺杂原子和空位、间隙等点缺陷之间、各种掺杂原子之间以及点缺陷之间的相互作用, 考虑了掺杂剂原子在 SiO_2 , Si, Poly-Si、 Si_3N_4 等多种材料中的扩散及有关界面的分凝, 考虑了掺杂原子在非氧化或氧化情况下的扩散以及考虑了杂质在低浓度及高浓度掺杂硅衬底中的扩散.

2.6.3.1 SUPREM-3 执行的非氧化情况下的杂质扩散模型

1. 掺杂剂为 B

其扩散率为 $D_N(\text{B})$

下标 N 表示非氧化情况, 以下同.

$$\begin{aligned} D_N(\text{B}) &= D_B^x + D_B^+ \left(\frac{P}{n_i} \right) \\ &= 0.037 \exp \left(\frac{-3.46 \text{ eV}}{kT} \right) + 0.72 \exp \left(\frac{-3.46 \text{ eV}}{kT} \right) \left(\frac{P}{n_i} \right) \\ &= \left[0.037 + 0.72 \left(\frac{P}{n_i} \right) \right] \exp \left(\frac{-3.46 \text{ eV}}{kT} \right) \text{ cm}^2 / \text{sec} \end{aligned} \quad (2.91)$$

从式(2.91)可以看出, 由于在硅点阵中, B 是受主杂质, 所以是带负电的, 因而其扩散主要是通过同中性空位 V^x 和带一个正电的空位 V^+ 的互作用. 也可看出掺杂剂 B 通过 V^x 和 V^+ 相助的扩散有相同的激活能, B 和 V^+ 的互作用决定(2.91)式第二项即 $D_B^+ \left(\frac{P}{n_i} \right)$ 对 $D_N(\text{B})$ 的贡献, 一般 $D_B^+ \left(\frac{P}{n_i} \right)$ 大大超过 D_B^x , 起着支配作用, 除非为重掺杂 n 型硅.

2. 掺杂剂为 As

其扩散率为 $D_N(\text{As})$

$$\begin{aligned}
D_N(As) &= D_{As}^X + D_{As}^- \left(\frac{n}{n_i} \right) \\
&= 0.066 \exp\left(\frac{-3.44 \text{ eV}}{kT}\right) + 12.0 \exp\left(\frac{-4.05 \text{ eV}}{kT}\right) \left(\frac{n}{n_i} \right) \\
&= 0.066 \exp\left(\frac{-3.44 \text{ eV}}{kT}\right) + 12.0 \left(\frac{n}{n_i} \right) \exp\left(\frac{-4.05 \text{ eV}}{kT}\right) \quad (2.92)
\end{aligned}$$

从式(2.92)可以看出,由于在硅点阵中 As 是施主杂质,所以是带正电的,因而其扩散主要是通过同中性空位 V^X 和带一个负电的空位 V^- 的相互作用.也可看出, D_{As}^X 和 D_{As}^- 在有兴趣的整个工艺温度范围相差不大. D_{As}^X 和 D_{As}^- 对 $D_N(As)$ 贡献的大小取决于硅的掺杂水平和硅的掺杂类型(P 型或 N 型).在中等掺杂浓度,电子浓度 n 等于 As 掺杂总浓度 $C_T(As)$,但当 $C_T(As)$ 增加到接近 As 的固溶度极限时, n 将不随 $C_T(As)$ 的增加线性地增加, SUPREM-3 中采用 Fair 的工作^[2.31],为离子注入 As,总 As 浓度 $C_{Ti}(As)$ 和 n 近似地遵循公式:

$$C_{Ti}(As) = n + K(T)n^3 \quad (2.93)$$

式中

$$K(T) = 0.41 \times 10^{-44} \exp\left(\frac{0.33 \text{ eV}}{kT}\right) \text{ cm}^6 \quad (2.94)$$

为化学源总 As 浓度 $C_{T_{chem}}(As)$, SUPREM-3 中用以下近似公式描述它同 n 的关系,

$$C_{T_{chem}}(As) = n + K'(T)n^4 \quad (2.95)$$

此 n^4 关系已被 Murota 等人的数据^[2.32]所证实,式中

$$K'(T) = 1.13 \times 10^{-68} \exp\left(\frac{1.6 \text{ eV}}{kT}\right) \text{ cm}^9 \quad (2.96)$$

式(2.96)是参考了 Schwenker 等人的工作^[2.24]而给出的.

3. 掺杂剂为 P

其扩散率为 $D_N(P)$

$$\begin{aligned}
D_N(P) &= D_P^X + D_P^- \left(\frac{n}{n_i} \right) + D_P^{--} \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \\
&= 3.85 \exp\left(\frac{-3.66 \text{ eV}}{kT}\right) + 4.44 \left(\frac{n}{n_i} \right) \exp\left(\frac{-4.00 \text{ eV}}{kT}\right) \\
&\quad + 44.2 \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \exp\left(\frac{-4.37 \text{ eV}}{kT}\right) \text{ cm}^2/\text{sec} \quad (2.97)
\end{aligned}$$

由式(2.97)可见,为轻掺杂 Si, D_p^x 的值决定 $D_N(P)$, 为高掺杂 N 型 Si, 式(2.97)中第三项起主要作用.

当磷的总浓度 $C_T(P)$ 增加到接近溶解度极限时, $C_T(P)$ 和 n 满足下列近似关系 [2.16][2.31]

$$C_T(P) = n + K''(T)n^3 \quad (2.98)$$

式中

$$K''(T) = 5.33 \times 10^{-43} \exp\left(\frac{+0.40 \text{ eV}}{kT}\right) \text{ cm}^6 \quad (2.99)$$

对于具有高浓度磷扩散表面层情况(例如双极型晶体管的磷发射区),为了解释磷扩散分布曲线的扭曲和基区推出效应等不规则现象,目前仍没有一个统一的模型,同 SUPREM-2 类似, SUPREM-3 中采用 Fair 的分三个区域分别建模的方法来处理. [2.16]

(1) 高浓度表面区

扩散率用式(2.97)计算,除考虑式(2.98)和式(2.99)对 n 的影响外,还考虑了由于大量 ($\geq 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) 较小半径磷原子的存在,硅点阵中产生的点阵失配应力引起的禁带变窄 $\Delta E_{g_{ms}}$ 以及高剂量磷离子的注入产生的晶格无序引起的另一种禁带变窄 $\Delta E_{g_{ii}}$. 总的禁带变窄,应为

$$\Delta E_g = \Delta E_{g_{mf}} + \Delta E_{g_{ii}} \quad (2.100)$$

$\Delta E_{g_{mf}}$ 同表面晶向有关,

$$\Delta E_{g_{mf}} \text{ 111} = -1.5 \times 10^{-22} [C_{T_s} - C_D(T)] \text{ eV} \quad (2.101)$$

式中 C_{T_s} 是总的表面磷浓度(忽略 Si/SiO₂ 界面约 10 nm 内的界面堆积)而

$$C_D(T) = \frac{2.43 \times 10^{26}}{[T(^{\circ}\text{C})]^3}.$$

$$\Delta E_{g_{mf}} \text{ 100} = 1.23 \Delta E_{g_{mf}} \text{ 111} \quad (2.102)$$

$\Delta E_{g_{ii}}$ 的表示式为

$$\Delta E_{g_{ii}} = -2.3 \times 10^{-6} (\theta_p)^{0.25} \text{ eV} \quad (2.35)'$$

式中 θ_p 为磷原子剂量(单位为 cm^{-2})

由于 $\Delta E_{g_{mf}}$ 和 $\Delta E_{g_{ii}}$ 都是负值,所以总的 ΔE_g 也为负值. 这样(2.97)式中的 n_i 应由 n_{ie} 代替, n_{ie} 随禁带变窄(即 ΔE_g 为负值)而增大,这里 n_{ie} 为有效本征电子浓度,它同本征电子浓度 n_i 的关系为:

$$n_{ie} = n_i \exp\left(\frac{-\Delta E_g}{2kT}\right) \text{cm}^{-3} \quad (2.33)'$$

n_i 增大到 n_{ie} 以及 n 随磷的化学浓度或离子注入浓度的增加偏离线性地增加,这两种情况都使 $D_N(P)$ 减小. 综合考虑上述两种情况及(2.97)式中 $D_N(P)n_i$ 及 n 的关系, $D_N(P)$ 随着从表面深入到硅体内(也即随 n 的减小)仍单调地减小,直至高浓度表面区的终端. 该终端点的标志设定为 $n = n_e$, 而

$$n_e = 4.65 \times 10^{21} \exp\left(\frac{-0.39 \text{ eV}}{kT}\right) \text{cm}^{-3} \quad (2.30)'$$

(2) 尾区扩散率

尾区扩散率 $D_N^{\text{tail}}(P)$ 由下式表示:

$$D_N^{\text{tail}}(P) = D_P^x + D_P^- (n_s^3 / n_e^2 n_i) \exp(3\Delta E_g / kT) \times \\ [1 + \exp(0.3 \text{ eV} / kT)] \exp[-(x - x_e) / L_V] \quad (2.103)$$

式中 n_s 是表面电子浓度, n_e 是表面区终端的电子浓度也即是 $E_F = E_C - 0.11 \text{ eV}$ 时的电子浓度, x_e 是达到 n_e 时的深度, L_V 是在衬底中空位的扩散长度,它反映了过剩空位的复合过程,因而 L_V 同一系列工艺参数有关,但其定量关系迄今还不清楚. 在 SUPREM-3 中 L_V 取 2.5 nm . 式(2.103)显示的磷高浓度表面尾区扩散率的增加是基于磷扩散过程中过剩空位引起的尾区扩散率的增加,设尾区扩散率增强因子为 G , 则有

$$G = \frac{D_N^{\text{tail}}(P)}{D_P^x} \quad (2.32)'$$

这个增强因子为磷也为高浓度磷表面尾区的任何其他杂质的扩散率,如硼的扩散率,从而可解释硼基区的推出效应.

(3) 中间区扩散率

从表面区的终点 x_e (此点 n 为 n_e , 扩散率为 $D_N^m(P)$, 上标 m 表示中间区) 到 $D_N^m(P)$ 刚增加到扩散率为尾区扩散率 $D_N^{\text{tail}}(P)$ 处的这一区域称为中间区或过渡区. 这个区域的深度在 857°C 时约为 150 nm , 在 1000°C 时约为 50 nm , 温度超过 1050°C 这个区域被取消. 在扩散率达到 $D_N^{\text{tail}}(P)$ 处观察到磷分布的扭折(kink), 这个中间区中磷分布的物理说明目前还不清楚, SUPREM-3 采用基于 Boltzmann-Matano 根据实验观察给出的中间区扩散率模型, 模型指出: 中间区的扩散率可用在 x_e 处由(2.97)式算得的扩散率 $D_N(P)$ 乘以 $(n_e/n)^2$ 来表示, 也即 $D_N^m(P)$ 随着深度的增加而随 $1/n^2$ 增加.

从以上介绍的高浓度磷表面磷扩散的三区域模型中读者可以看到该模型的主要内容在 SUPREM-2 中也已作过介绍. 但 SUPREM-3 文本中对该模型描述得更详细和更量化. 例如在 $D_N^{\text{tail}}(P)$ 表示式中加上了分别考虑 ΔE_g 和空位衰减的 $\exp(3\Delta E_g/kT)$ 和 $\exp[-(X-X_e)/L_V]$ 项. 又如在中间区扩散率描述中给出了该区域深度和温度关系的定量数据.

4. 掺杂剂为 Sb

其扩散率为 $D_N(\text{Sb})$

同 $D_N(\text{As})$ 的表示式相似, $D_N(\text{Sb})$ 有:

$$\begin{aligned} D_N(\text{Sb}) &= D_{\text{Sb}}^x + D_{\text{Sb}}^- \left(\frac{n}{n_i} \right) \\ &= 0.214 \exp\left(-\frac{3.65 \text{ eV}}{kT}\right) + 15.0 \left(\frac{n}{n_i} \right) \exp\left(-\frac{4.08 \text{ eV}}{kT}\right) \text{ cm}^2/\text{sec} \end{aligned} \quad (2.104)$$

2.6.3.2 SUPREM-3 执行的氧化表面情况下的杂质扩散模型

已经发现氧化表面情况下 B、P、As、Sb 等掺杂剂的扩散行为同非氧化表面情况下相比有显著区别,甚至在离开氧化表面或 Si/SiO₂ 界面较远的 Si 体内也被观察到. B、P 和 As 显示出氧化增强扩散(Oxidation-Enhanced Diffusion — OED)而 Sb 显示出氧化减弱扩散(Oxidation-Retarded Diffusion — ORD). B、P、As 在 Si 中的扩散率在 Si 表面氧化情况下增大,这是由于在 Si 表面氧化时有大量的过剩硅原子即间隙硅由表面注入硅体内,产生间隙的过饱和,使扩散率中由间隙相助的扩散分量大大增加;此时空位呈现未饱和(或欠饱和),因而空位相助的扩散分量减小. 由于间隙相助的扩散分量的增加大大超过空位相助的扩散分量的减小,导致总的扩散率在氧化表面情况下得到增强. 这个增强与 B、P、As 等扩散杂质的离子半径小于 Si 的离子半径密切相关. 对于 Sb,由于 Sb 的离子半径大于 Si 的离子半径,间隙相助的扩散分量本身很小,随氧化增加的间隙相助扩散分量更可完全忽略,因而空位相助的扩散分量在氧化表面情况下的减小起支配作用. 所以对于 Sb,呈现氧化减弱扩散 ORD. Sb 的 ORD 现象,已由 Mizuo 和 Higuchi 在 H₂O 和干 O₂ 两种气氛下 Sb 扩散的实验数据所证实^[2,33],Sb 的 ORD 可达 50% 甚至更多.

以下给出有关计算公式.

计及 OED,为 B、P、As 有:

$$D = D_N + \Delta D_{\text{ox}}$$

式中 D_N 为非氧化情况下的扩散率, ΔD_{ox} 为氧化增强的扩散率.

$$D_N = D_{Si} + f_{II} D_{Si}^i \left(\frac{C_V^i}{C_V} \right) \quad (2.105)$$

由式(2.105)可知, D_N 由两项组成, 第一项 D_{Si} , 为非氧化情况下由空位相助的扩散分量对 D_N 的贡献; 第二项为非氧化情况下由间隙相助的扩散分量对 D_N 的贡献; 其中 f_{II} 是热平衡, 非氧化情况以及轻掺杂硅时本征间隙杂质流量相对于本征替换杂质流量的分数, $f_{II} = \frac{D_{II}^i C_{II}^o}{D_{Si}^i C_{Si}^o}$, 式中 D_{Si}^i 和 D_{II}^i 分别为本征情况下空位相助的和间隙相助的扩散率, C_{Si}^o 和 C_{II}^o 分别为热平衡时空位和间隙杂质浓度. f_{II} 随所考虑的杂质变化, 不同杂质的离子半径不同因而经由间隙进行扩散的难易也不同, f_{II} 也不同. 具有最小离子半径的杂质最易通过间隙扩散因而 f_{II} 也最大. Fair 定量地指出: 在接近于 $1000 \sim 1100^\circ\text{C}$, $f_{II}(\text{B}:\text{P}:\text{As}) = 0.17:0.12:0.09$ [2.34]. f_{II} 同温度有关, $f_{II} = K_o \exp\left(\frac{-E_A}{kT}\right)$, 不同杂质 K_o 和 E_A 不同, 详见文献[2.34] [2.35]. C_V^i 和 C_V 分别为本征空位浓度和空位浓度.

$$\Delta D_{ox} = f_{II} D_{Si}^i \left(\frac{C_V^i}{C_V} \right) \frac{K_1(T) \exp(-X/L_1)}{\rho [1 + K_2(T) P_{HCl}^{0.5}]} \left(\frac{dx}{dt} \right)^{0.5} \quad (2.106)$$

式中 ρ 为表面扭折(Kink)密度和表面晶向有关, $\rho_{111} \approx 1.5\rho_{100}$ [2.34], 而 ρ_{100} 的值约等于 10^{12}cm^{-2} . $K_1(T)$ 和 $K_2(T)$ 分别是络合物平衡常数和比例常数.

$$K_1(T)/\rho_{100} = 1.31 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{+2.82 \text{ eV}}{kT}\right) \left(\frac{\text{cm}}{\text{sec}}\right)^{-0.5} \quad (2.107)$$

$$K_2(T) = 2.31 \times 10^{34} \exp\left(\frac{-8.88 \text{ eV}}{kT}\right) (\text{atm})^{-0.5} \quad (2.108)$$

P_{HCl} 是 HCl 加到大气中的分压, 实验发现在氧化进行期间 HCl 的存在将减小 OED, SUPREM-3 中用 $(P_{HCl})^{0.5}$ 参数表示 HCl 对 OED 的减小. L_1 为有效间隙扩散衰减长度, 它强烈地同工艺条件有关. 物理上, 它表示间隙 Si 移离 Si/SiO₂ 界面注入到衬底中的复合及/或沉积. 实验上已测得 L_1 为 10 到 $>100 \mu\text{m}$, 同材料是用浮置区溶法或直拉法(Czochralski 法)制备有关, 也同其他所用的实验条件有关, 在还没有能利用的 L_1 的定量模型的情况下, SUPREM-3 中用 $L_1 = 25 \mu\text{m}$. 已经观察到 OED 同氧化速率 $\frac{dx}{dt}$ 呈超线性关系, 即 $\Delta D_{ox} \sim \left(\frac{dx}{dt}\right)^n$, 次方 n 目前在理论上

和实验上还没有一个完全确定的值, SUPREM-3 采用 $n = 0.5$, 即 $\Delta D_{ox} \sim \left(\frac{dx}{dt}\right)^{0.5}$
考虑 ORD 为 Sb 有:

$$D(Sb) = D_N(Sb) \frac{C_i}{C_1} \quad (2.109)$$

式中 C_i 和 C_1 分别为非氧化和氧化情况下的硅间隙浓度 C_i/C_1 也可用 C_v/C_v 近似替代.

2.6.3.3 SUPREM-3 执行的为其他材料的杂质扩散和分凝模型

为得到最终的工艺结果或器件结构, 掺杂剂在 Si 以外的其他材料中输运也需要模拟. 不幸的是对其他材料掺杂剂的输运规律知之甚少, 只能假设掺杂剂在其他材料中的输运也是扩散, 并用一个经典的扩散常数 D 描述. SUPREM-3 中使用的所有不同掺杂剂在其他材料中的有效扩散率, 限于现有文献中已给出的^[2.3], 如表示 SiO_2 中扩散率的有效激活能和指数前置系数可参见 Wolf^[2.36]以及 Ghezze 和 Brown^[2.37]的书刊.

在具有多层结构的情况, 材料界面杂质的输运或分凝必须考虑, 界面掺杂剂流量必须模拟. SUPREM-3 中采用 SUPREM-2 中所用的一级唯象动力学模型, 考虑固定界面或移动界面. 不同掺杂剂在不同材料界面的分凝系数的确定有大量研究工作需做, 因为目前仅 B、P、As、Sb 在 Si/SiO₂ 界面的分凝系数已有一些研究者提供了有关数据^{[2.38—2.41][2.20][2.36]}, 而为其他材料界面, 例如含有 Si₃N₄ 材料的界面, 还没有可以利用的数据给出.

2.6.4 SUPREM-3 的硅外延模型

SUPREM-2 中所用硅外延层中掺杂剂再分布模型是一个极简化的气—固界面杂质分凝模型, 精确度较差. [见本书 § 2.3.4 节] SUPREM-3 中用了—个物理上令人较满意的、较精确的模型, 此模型用了基于 Reif 和他的同事们的工作结果^[2.42—2.46], 用数值解 Fick 第二定律, 以及用瞬态生长动力学边界条件解掺杂剂扩散的连续性方程, 得出最终的外延层的掺杂分布.

Fick 第二定律的数学表述为:

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.110)$$

掺杂剂流量的瞬态生长动力学的边界条件为：

$$D \frac{\partial N}{\partial x} \Big|_{x=\infty} = 0 \quad (2.111)$$

$$D \frac{\partial N}{\partial x} \Big|_{x=\text{surface}} = f(t) \quad (2.112)$$

其中

$$f(t) = K_A \frac{dN(t)}{dt} + gN(t) - K_{mf} \left[P_D^o(t) - \frac{N(t)}{K_p} \right] \quad (2.113)$$

N 是在生长的外延硅膜表面处的固体中的掺杂剂体浓度, D 是硅点阵中掺杂剂的扩散率, g 是外延生长速率, K_A 和 K_p 分别是在气相中和吸收层中浓度为 N 的掺杂剂的热力学常数, K_{mf} 是掺杂剂结合过程的速率限制阶段的动力学系数, P_D^o 是输入掺杂剂的分压. 式(2.111—2.112)作为边界条件用以解掺杂剂扩散的连续性方程, 从而得出外延层的掺杂剖面分布. 瞬态剖面分布由衰减时间 τ 或衰减常数 L 描述, 它同 K_A , K_p , K_{mf} 和 g 有关,

$$\tau \equiv \frac{K_A}{g + \frac{K_{mf}}{K_p}}, L \equiv g\tau \quad (2.114)$$

K_A , K_p 和 K_{mf} 可完全描述一个已知外延系统, 其值由经验确定.

SUPREM-3 技术报告^[2.3]中根据文献^[2.45]给出的图 2.16—图 2.18 将分别帮助我们了解用 SUPREM-3 中硅外延层掺杂剂分布模型相关的外延水平反应管的结构、外延时发生在硅表面处的掺杂过程以及基于所开发模型的模拟值的可信度.

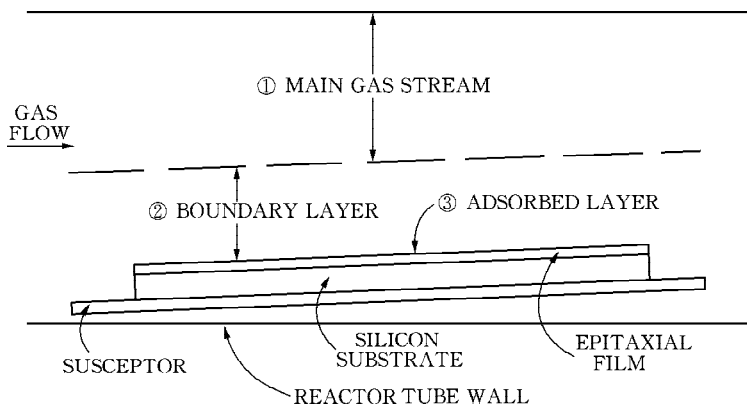


图 2.16 外延掺杂用水平反应管截面简图(源于[2.45])

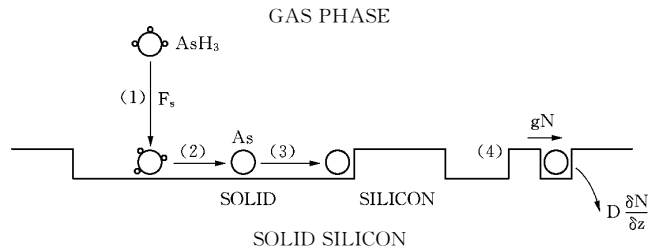


图 2.17 参与掺杂过程的步骤以及发生在硅表面的(1)砷吸收(2)砷化学分解(3)砷表面扩散以及与固态硅结合(4)结合的砷由随后到达的硅原子覆盖(源于[2.45])

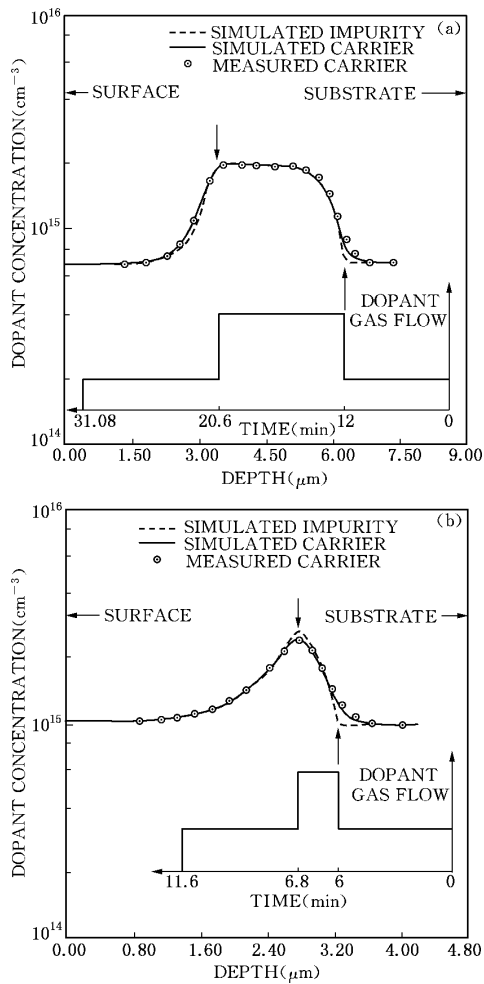


图 2.18 外延掺杂分布的测量值和模拟值,掺杂气体流量(即砷的流量)随时间的变化内插在图中(源于[2.45])

2.6.5 多晶硅模型

多晶硅层在 IC 中已显现出多种重要作用,如:MOS 工艺中用作多晶硅栅电极,双极型结构中用作多晶硅发射极以及用作 IC 的片内互连.多晶硅层和硅衬底的直接接触可用作扩散源及隐埋层接触.轻掺杂多晶硅作为高阻用在 IC 中.含有多晶硅层的器件的最终性能同多晶硅层经历的氧化、扩散和注入等几乎全部 IC 制造工艺步骤有关,和多晶硅结构固有的与多界面有关的多层性有关.

在 SUPREM-3 初始文本开发的年代,多晶硅工艺制备和特性的研究已有了较多的工作,同时 SUPREM-3 的开发者希望在 SUPREM-3 中引入多层结构的模拟能力,基于这些情况,虽然当时已有的或为 SUPREM-3 的执行而开发的多晶硅模型尚较简单和粗糙,但还是采用在 SUPREM-3 中作为多晶硅工艺制造和性能分析的模型供应用.这些模型包括:初始淀积多晶硅工艺对多晶硅晶粒大小及掺杂分布影响的模型(工艺,包括大气压下 CVD、LPCVD 及溅射、掺杂或非掺杂.模型,假定晶粒具有均匀尺寸且呈简单的球状,掺杂分布在整個多晶硅中包括晶粒内和晶粒边界各处是均匀的.)、晶粒生长模型(包括晶粒尺寸及其生长速率模型)、掺杂剂分凝模型(包括在晶粒/晶粒边界、多晶硅/二氧化硅界面及多晶硅/体硅界面等处的分凝)、多晶硅氧化模型(包括考虑不同晶粒的不同晶向以及晶粒边界对氧化的影响)以及多晶硅层电阻率的计算模型等.

基于上列早期的多晶硅模型,SUPREM-3 中用图 2.19 所示的流程进行同多晶硅相关的物理和电参数的计算.这个流程可解读如下:用于初始淀积的技术、温度、厚度以及掺杂确定晶粒尺寸、掺杂分布/分凝以及多晶硅层的其他性质.接着,在每一个工艺步骤中,每个时间增量 Δt 内,其晶粒生长模型用现时的多晶硅参数值和温度、环境气氛以及发生的任何附加掺杂去得出一个新的晶粒尺寸.这一新的晶粒尺寸,用以更新晶粒内的掺杂

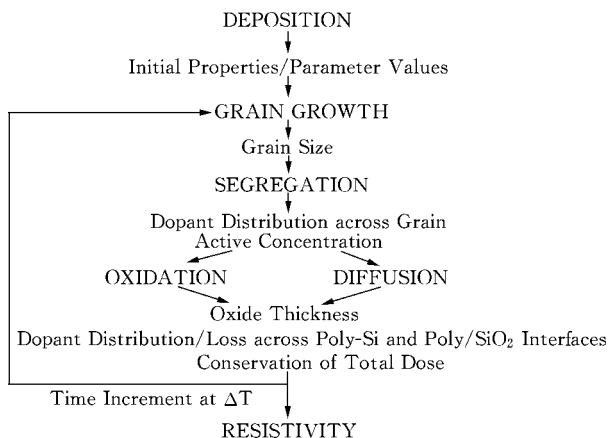


图 2.19 用 SUPREM-3 计算同多晶硅相关的物理和电参数的流程图(源于[2.3])

分布和晶粒边界处的分凝去得出各晶粒内电激活的掺杂剂浓度. 于是在那个时间增量内, 这些更新值影响任何多晶硅氧化的发生, 同时掺杂剂在多晶硅界面处扩散被计算, 它受制于多层结构内掺杂剂总量的守恒. 接着, 下一个时间增量迭代开始, 返回到晶粒生长去得出又一个新的晶粒尺寸. 在全部工艺周期完成时, 最后的多晶硅晶粒尺寸、掺杂剂分布、多晶硅层厚度以及陷在晶粒边界处的载流子用于计算多晶硅电阻率.

SUPREM-3 中执行的多晶硅模型的更详细描述可参见[2.3][2.47].

2.6.6 SUPREM-3 中的电性能计算

在 § 2.4 节中曾指出, 工艺模拟器也可提取若干简单的电参数, 例如: 方块电阻、阈值电压等, 这些参数在工艺加工期间就可评估, 无需制成复杂的检测器件后再进行评估, 这对快速提供工艺最佳化设计的指向很有用.

SUPREM-3 工艺模拟器可计算由材料界面和冶金结为边界的电层的净电荷、电导率和薄层电阻. 它能执行零偏置情况下的计算, 这是缺省情况; 或执行非零偏置情况下的计算, 这时每层的偏置是独立指定的. 一系列连续偏置通过详细指明的偏置步骤加到一层或多层.

SUPREM-3 可以提取作为所加偏置的函数的电参数以及可以处理较复杂的、更通用的器件结构, 是 SUPREM-2 中电性能计算的一个扩展. 为实现这个扩展, 需要 SUPREM-3 用 Poisson 方程的解去计算电器件的特性. 一般情况下, 一维 Poisson 方程可写作:

$$\frac{d}{dy} \left(\epsilon(y) \frac{d\psi(y)}{dy} \right) = -q [p(y, \psi) - n(y, \psi) + N_D^+(y, \psi) - N_A^-(y, \psi) + N_I(y)] \quad (2.115)$$

其中 ϵ 是介质电容率, n 和 p 分别是可动电子和空穴浓度, N_D^+ 和 N_A^- 分别是离化的净电激活施主和受主浓度, 而 N_I 是固定的界面电荷浓度. 电子和空穴浓度分别由下列两式给出,

$$n(y, \psi) = N_C F_{1/2}(\eta) \frac{q}{kT} [\psi(y) - \phi_{F_n}(y)] \quad (2.116)$$

$$p(y, \psi) = N_V F_{1/2}(\eta) \frac{q}{kT} [\phi_{F_p}(y) - \psi(y) - V_G] \quad (2.117)$$

式中 N_C 和 N_V 分别是导带和价带的有效态密度, V_G 是禁带势, ϕ_{F_n} 和 ϕ_{F_p} 分别是电子和空穴准费米势, 而 $F_{1/2}(\eta)$ 是 $1/2$ 级 Fermi-Dirac 积分. 解方程(2.115)时, 边界条

件取 ψ 或 $\frac{d\psi}{dy}$ 在器件表面和有源器件区以外的衬底的电中性部分. 对于多介质层界面以及可动载流子仅部分耗尽的半导体区用数值解技术求解方程(2.115). 上述 SUPREM-3 中所用的方法, 提供了不用耗尽层近似及正确处理半导体耗尽区的优点, 从而避免了发生在用 SUPREM-2 计算时的不精确性.

SUPREM-3 计算的最基本的电参数是每层及整个结构的总的电子、空穴浓度. 层 j 的电子和空穴浓度 n_j 和 p_j 的定义式为:

$$n_j = \int_{y_j}^{y_{j+1}} n(y) dy \quad (2.118)$$

$$p_j = \int_{y_j}^{y_{j+1}} p(y) dy \quad (2.119)$$

式中 n 和 p 由 Poisson 方程的一维解确定. 整个结构的总的电子和空穴浓度 n_T 和 p_T 通过对所有层的 n_j 和 p_j 求和得到,

$$n_T = \sum_{j=1}^J n_j \quad (2.120)$$

$$p_T = \sum_{j=1}^J p_j \quad (2.121)$$

式中 J 是整个结构中层数. n_j 、 p_j 和 n_T 、 p_T 的主要应用是分别确定器件中 j 层或所有层的电荷存储容量.

SUPREM-3 计算每层及整个结构的电子和空穴电导率. 层 j 的电子和空穴的电导率 σ_{nj} 和 σ_{pj} 的定义式为:

$$\sigma_{nj} = q \int_{y_j}^{y_{j+1}} \mu_n(c) n(y) dy \quad (2.122)$$

$$\sigma_{pj} = q \int_{y_j}^{y_{j+1}} \mu_p(c) p(y) dy \quad (2.123)$$

式中 μ_n 和 μ_p 分别是电子和空穴的载流子迁移率, c 是原子杂质浓度. 整个结构的总的电子和空穴电导 σ_{nT} 和 σ_{pT} 通过对所有层的 σ_{nj} 和 σ_{pj} 求和得到,

$$\sigma_{nT} = \sum_{j=1}^J \sigma_{nj} \quad (2.124)$$

$$\sigma_{pT} = \sum_{j=1}^J \sigma_{pj} \quad (2.125)$$

这些电导率参数主要用于确定线性区电流-电压特性以及阈值或夹断电压.

SUPREM-3 计算每层和整个结构的电子和空穴的薄层电阻,它由上面讨论过的电导率直接确定. j 层电子和空穴的薄层电阻 ρ_{nj} 和 ρ_{pj} 分别有

$$\rho_{nj} = \sigma_{nj}^{-1} \quad (2.126)$$

$$\rho_{pj} = \sigma_{pj}^{-1} \quad (2.127)$$

而整个结构的电子和空穴薄层电阻 ρ_{nT} 和 ρ_{pT} 分别有

$$\rho_{nT} = \sigma_{nT}^{-1} \quad (2.128)$$

$$\rho_{pT} = \sigma_{pT}^{-1} \quad (2.129)$$

SUPREM-3 计算得出的薄层电阻更可靠,因为它考虑了耗尽区的存在,消除了 SUPREM-2 低估薄层电阻的问题.

2.6.7 SUPREM-3 的使用和应用例举

2.6.7.1 SUPREM-3 的使用

使用 SUPREM-3 同使用 SUPREM-2 相仿,必须了解 SUPREM-3 的功能和它所用的各种工艺模型,知道拟模拟的硅衬底的材料参数、有关工艺的条件参数和工艺序列中各工艺步进行的次序以及阅读和正确理解 SUPREM-3 的用户手册,主要是输入文件的书写格式.

SUPREM-3 的用户手册因篇幅超过 100 页,不宜在本书附录中给出,读者可参阅文献[2.3]

这里以美国 Stanford 大学电子工程系 IC 实验室 1983 年 7 月技术报告 No. SEL 83-001 中给出的两个例子,“硅栅 NMOS 工艺”以及“采用掺杂多晶硅发射极双极型晶体管工艺”[2.3]作为应用例举,介绍如下.

2.6.7.2 SUPREM-3 的应用例举一 硅栅 NMOS 工艺

1. 器件结构和工艺序列

(1) 器件结构

图 2.20 是拟模拟的局部氧化硅栅 NMOS 器件结构的截面图. 模拟通过栅区中央,通过源或漏区以及通过隔离或场区等 3 个垂直截面

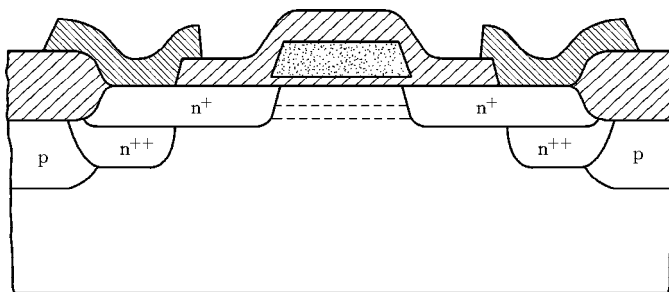


图 2.20 拟模拟的局域氧化硅栅 NMOS 器件的横截面图

(2) 工艺步骤

所用工艺步骤如下：

- 步骤一 衬底,硅单晶,高阻,P型,晶向 100
- 步骤二 生长 40 nm SiO_2 衬垫层(padlayer)
- 步骤三 在 SiO_2 顶部淀积 80 nm Si_3N_4 层
- 步骤四 剥去有源区外的氮化物
- 步骤五 离子注入 B 以增加场区表面的 P 型掺杂
- 步骤六 场区氧化,湿氧气氛,3 小时,1 000 °C
- 步骤七 腐蚀有源区硅表面
- 步骤八 离子注入 B,为置器件的阈值电压
- 步骤九 生长 40 nm 栅氧化层
- 步骤十 淀积 0.5 μm 多晶硅层
- 步骤十一 在预淀积炉中用 POCl_3 作为磷掺杂剂的源
- 步骤十二 腐蚀掉栅区域外的多晶硅
- 步骤十三 离子注入 As 以形成源和漏区
- 步骤十四 源和漏驱入扩散:干氧气氛,30 分钟,1 000 °C
- 步骤十五 开栅、源和漏的接触孔
- 步骤十六 用 CVD 法在圆片表面淀积掺磷 SiO_2 (磷硅玻璃)
- 步骤十七 回溶磷硅玻璃,1 000 °C,30 分钟
- 步骤十八 再打开接触孔并淀积 Al

2. 输入文件

用六个输入文件模拟硅栅 NMOS 器件制造工艺.

文件一 模拟器件有源区的初始加工直至栅和源/漏区加工工艺的分岔点.

(文件名为 S3EX1A)

文件二 以第一个文件结果为起点 ,完成栅区的工艺加工.(文件名为 S3EX1B)

文件三 以第一个文件结果为起点 ,完成源/漏区的工艺加工.(文件名为 S3EX1C)

文件四 基于栅区模拟结果执行电参数计算.(文件名为 S3EX1D)

文件五 与第一个文件相似 ,但是模拟器件的场区工艺加工(文件名为 S3EX1E)

文件六 完成场区的工艺加工.(文件名为 S3EX1F)

六个输入文件如下 :

(1) 输入文件一

Input file name = > S3EX1A

```
1... Title      SUPREM-III Example 1.  NMOS Silicon Gate
2... Comment    Active device region initial processing.
3... $          File S3EX1A

4... Comment    Initialize silicon substrate.
5... Initialize  100  Silicon ,Boron Concentration = 1e15
... +          Thickness = 1.5  dX = .005  XdX = .02  Spaces = 150

6... Comment    Grow pad oxide ,400A.
7... Diffusion  Temperature = 1000  Time = 40  Dry02

8... Comment    Deposit 800A of CVD Nitride.
9... Deposit    Nitride  Thickness = .0800  Spaces = 15

10... Comment   Grow field oxide.
11... Diffusion  Temperature = 1000  Time = 180  Wet02
12... Print     Layer

13... Comment   Etch to silicon surface.
14... Etch      Oxide all
15... Etch      Nitride all
16... Etch      Oxide all

17... Comment   Implant boron to shift the threshold voltage.
18... Implant   Boron  Dose = 4e11  Energy = 50
```

```

19... Comment      Grow gate oxide
20... Diffusion     Temperature = 1050   Time = 30   Dry02   HCL % = 3

21... Comment      Deposit polysilicon
22... Deposit       Polysilicon Thickness = 0.5   Temperature = 600

23... Comment      Heavily dope the polysilicon using POC13
24... Diffusion     Temperature = 1000   Time = 25   dTmin = .3
... +              Phosphorus Solidsolubility
25... Print         Layer
26... Plot          Chemical Boron          Xmax = 1.5          Clear   ^ Axis Linetype = 2
27... Plot          Chemical Phosphorus     Xmax = 1.5          ^ Clear  ^ Axis Linetype = 3
28... Plot          Chemical Net             Xmax = 1.5          ^ Clear   Axis

29... Comment      Save the structure at this point. The simulation runs
30... $            are split for the gate and source/drain regions.
31... Save          Structure   File = S3E1AS

32... Stop          End of SUPREM-III Example 1.

```

(2) 输入文件二

Input file name = > S3EX1B

```

1... Title          SUPREM-III Example 1.   NMOS silicon Gate
2... Comment        Gate region.
3... $              File S3EX1B

4... Comment        Initialize silicon substrate.
5... Initialize      Structure = S3E1AS

6... Comment        Implant Arsenic for source/drain regions.
7... Implant        Arsenic   Dose = 5E15   Energy = 150

8... Comment        Drive-in Arsenic and re-oxidize source/drain regions.
9... Diffusion       Temperature = 1000   Time = 30   Dry02

```

```
10... Comment      Etch contact holes to gate , source , and drain regions.
11... Etch          oxide

12... Comment      Deposit Phosphorus doped SiO2 using CVD.
13... Deposit      Oxide  Thickness = .7500  Phosphorus Concentration = 1. E21

14... Comment      Increase the diffusivity of phosphorus in oxide by
15... $            two orders of magnitude.
16... Phosphorus   Oxide  Diff.C = 4.56E7

17... Comment      Reflow glass to smooth surface and dope contact holes.
18... Diffusion    Temperature = 1000  Time = 30

19... Comment      Reopen contact holes.
20... Etch         Oxide

21... Comment      Deposit Aluminum.
22... Deposit      Aluminum  Thickness = 1.2  Spaces = 10

23... Comment      Plot the chemical impurity distributions at this point.
24... Print        Layer
25... Plot          Chemical Boron          Xmax = 3.5          Clear  ^ Axis Linetype = 2
26... Plot          Chemical Arsenic        Xmax = 3.5          ^ Clear ^ Axis Linetype = 3
27... Plot          Chemical Phosphorus     Xmax = 3.5          ^ Clear ^ Axis Linetype = 6
28... Plot          Chemical Net            Xmax = 3.5          ^ Clear  Axis

29... Comment      Save the structure.
30... Save          Structure  File = S3E1BS

31... Stop          End of SUPREM-III Example 1.
```

(3) 输入文件三

Input file name = > S3EX1C

```
1... Title          SUPREM-III Example 1.  NMOS Silicon Gate
2... Comment        Source/drain regions.
```

```
3... $          File S3EX1C

4... Comment    Initialize silicon substrate.
5... Initialize  Structure = S3E1AS

6... Comment    Etch polysilicon and oxide over source/drain regions.
7... Etch       Polysilicon
8... Etch       Oxide

9... Comment    Implant Arsenic for source/drain regions.
10... Implant   Arsenic Dose = 5E15 Energy = 150

11... Comment   Drive-in Arsenic and re-oxidize source/drain regions.
12... Diffusion Temperature = 1000 Time = 30 DryO2

13... Comment   Etch contact holes to gate , source , and drain regions.
14... Etch      oxide

15... Comment   Deposit Phosphorus doped siO2 using CVD.
16... Deposit   Oxide Thickness = .7500 Phosphorus Concentration = 1e21

17... Comment   Increase the diffusivity of phosphorus in oxide by
18... $         two orders of magnitude.
19... Phosphorus Oxide Dix.C = 4.56E7

20... Comment   Reflow glass to smooth surface and dope contact holes.
21... Diffusion Temperature = 1000 Time = 30
22... Print     Layer

23... Comment   Reopen contact holes.
24... Etch      Oxide

25... Comment   Deposit Aluminum.
26... Deposit   Aluminum Thickness = 1.2 Spacas = 10

27... Comment   Plot the chemical impurity distributions at this point.
```

```
28... Print      Layer
29... Plot       Chemical Boron      Xmax = 2.5      Clear  ^ Axis Linetype = 2
30... Plot       Chemical Arsenic    Xmax = 2.5      ^ Clear ^ Axis Linetype = 3
31... Plot       Chemical Phosphorus Xmax = 2.5      ^ Clear ^ Axis Linetype = 6
32... Plot       Chemical Net        Xmax = 2.5      ^ Clear  Axis

33... Comment    Save the structure.
34... Save       Structure  File = S3E1CS

35... Stop       End of SUPREM-III Example 1.
```

(4) 输入文件四

Input file name = > S3EX1D

```
1... Title      SUPREM-III Example 1.  NMOS Silicon Gate
2... Comment    Gate region electrical simulation.
3... $          File S3EX1D

4... Comment    Initialize using gate region result.
5... Initialize  Structure = S3E1BS

6... Comment    Solve Poisson's equation with the gate biased from
7... $          0. volts to 3. volts in .2 volt steps.
8... Electrical Steps = 16
9... Bias       Layer = 3  Diffusion = 1  V.Majority = 0.  dV. Majority = .2
10... End
11... Stop      End of SUPREM-III Example 1.
```

(5) 输入文件五

Input file name = > S3EX1D

```
1... Title      SUPREM-III Example 1.  NMOS Silicon Gate
2... Comment    Isolation region initial processing.
3... $          File S3EX1E

4... Comment    Initialize silicon substrate.
5... Initialize  100  Silicon ,Boron Concentration = 1e15
```

```

... +      Thickness = 3.0   dX = .01   Spaces = 150

6... Comment      Grow pad oxide , 400A.
7... Diffusion     Temperature = 1000   Time = 40   Dry02

8... Comment      Implant boron to increase field region doping.
9... Implant       Boron   dose = 1e13   energy = 150

10... Comment     Grow field oxide.
11... Diffusion    Temperature = 1000   Time = 180   Wet02
12... Print        Layer

13... Comment     Implant boron to shift the enhancement threshold voltage.

14... Implant      Boron   Dose = 4e11   Energy = 50

15... Comment     Grow gate oxide
16... Diffusion    Temperature = 1050   Time = 30   Dry02   HCL % = 3

17... Comment     Deposit polysilicon
18... Deposit      Polysilicon   Thickness = 0.5   Temperatrue = 600

19... Comment     Heavily dope the polysilicon using POCl3
20... Diffusion    Temperature = 1000   Time = 25   dTmin = .3
... +      Phosphorus Solidsolubility

21... Print        Layer
22... Plot          Chemical Boron          Clear          \ Axis Linetype = 2
23... Plot          Chemical Phosphorus     \ Clear          \ Axis Linetype = 3
24... Plot          Chemical Net             \ Clear          Axis

25... Comment      Save the structure at this point.
26... Save          Structure   File = S3E1ES

27... Stop          End of SUPREM-III Example 1.

```

(6) 输入文件六

Input file name = > S3EX1F

```
1... Title      SUPREM-III Example 1.  NMOS Silicon Gate
2... Comment    Final isolation region processing.
3... $          File S3EX1F

4... Comment    Initialize silicon substrate.
5... Initialize  Structure = S3E1ES

6... Comment    Etch polysilicon and oxide over source/drain regions.
7... Etch       Polysilicon
8... Etch       Oxide Amount = .0700

9... Comment    Implant Arsenic for source/drain regions.
10... Implant   Arsenic  Dose = 5E15  Energy = 150

11... Comment   Drive-in Arsenic and re-oxidize source/drain regions.
12... Diffusion Temperature = 1000  Time = 30  DryO2

13... Comment   Deposit Phosphorus doped SiO2 using CVD.
14... Deposit   Oxide  Thickness = .7500  Phosphorus Concentration = 1e21

15... Comment   Reflow glass to smooth surface and dope contact holes.
16... Diffusion Temperature = 1000  Time = 30

17... Comment   Deposit Aluminum.
18... Deposit   Aluminum  Thickness = 1.2  Spaces = 10

19... Comment   Plot the chemical impurity distributions at this point.
20... Print     Layer
21... Plot      Chemical Boron          Clear          ^ Axis Linetype = 2
22... Plot      Chemical Arsenic        ^ Clear          ^ Axis Linetype = 3
23... Plot      Chemical Phosphorus     ^ Clear          ^ Axis Linetype = 6
24... Plot      Chemical Net             ^ Clear          Axis
```

```

25... Comment      Save the structure.
26... Save          Structure File = S3E1FS

27... Stop          End of SUPREM-III Example 1.

```

3. 输出信息

打印输出,可以包含:结构信息,例如:结深、层厚、各种杂质在结构中的一维空间分布;系数信息,例如:扩散系数、分凝系数、硅的氧化率、杂质或材料的原子数、质量输运系数、各种材料层的体积比.....

可以打印所呈现的各别的、总的或净的杂质浓度,各类杂质浓度的打印可以是电激活的或总的化学浓度.

作图输出,输出结构中杂质浓度的一维空间分布.杂质浓度可以是各别的、总的、或净的.各类杂质浓度可以是电激活的或总的化学的.

这里只给出文件一和文件二的输出信息,供参阅.

(1) 文件一打印输出

```

SUPREM-III Example 1.  NMOS Silicon Gate
Active device region initial processing.
File S3EX1A
Initialize silicon substrate.

```

```

Grow pad oxide , 400A.

```

```

Deposit 800A of CVD Nitride.

```

```

Grow field oxide.

```

layer no.	material type	thickness (microns)	dx (microns)	dxmin (microns)	top node	bottom node	orientation or grain size
4	OXIDE	.0190	.0100	.0010	232	233	
3	NITRIDE	.0685	.0100	.0010	234	248	
2	OXIDE	.0382	.0100	.0010	249	251	
1	SILICON	1.4832	.0050	.0010	252	400	100

Integrated Dopant				
layer	Net		Total	
no.	active	chemical	active	chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
3	-3.1740E+06	-3.1639E+06	3.1740E+06	3.1639E+06
2	-5.8718E+09	-5.8717E+09	5.8718E+09	5.8717E+09
1	-1.4124E+11	-1.4124E+11	1.4124E+11	1.4124E+11
sum	-1.4711E+11	-1.4711E+11	1.4711E+11	1.4711E+11

Integrated Dopant		
layer	BORON	
no.	active	chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00
3	3.1740E+06	3.1639E+06
2	5.8718E+09	5.8717E+09
1	1.4124E+11	1.4124E+11
sum	1.4711E+11	1.4711E+11

Junction Depths and Integrated Dopant Concentrations for Each Diffused Region					
layer	region	type	junction depth	net	total
no.	no.		(microns)	active Qd	chemical Qd
4	1		0.0000	0.0000E+00	0.0000E+00
3	2		0.0000	0.0000E+00	0.0000E+00
3	1	p	.0685	5.4061E+07	5.4061E+07
2	1	p	0.0000	5.8718E+09	5.8718E+09
1	1	p	0.0000	1.4124E+11	1.4124E+11

Etch to silicon surface.

Implant boron to shift the threshold voltage.

Grow gate oxide

Deposit polysilicon

Heavily dope the polysilicon using POCl₃

layer no.	material type	thickness (microns)	dx (microns)	dxmin	top node	bottom node	orientation or grain size
3	POLYSILICON	.5000	.0100	.0010	200	250	.5910
2	OXIDE	.0683	.0100	0.0000	251	256	
1	SILICON	1.4531	.0050	.0010	257	400	100

Integrated Dopant

layer no.	Net		Total	
	active	chemical	active	chemical
3	1.1001E + 16	2.2085E + 16	1.1001E + 16	2.2085E + 16
2	6.6967E + 12	6.6967E + 12	6.9105E + 12	6.9105E + 12
1	-4.2108E + 11	-4.2108E + 11	4.2108E + 11	4.2108E + 11
sum	1.1007E + 16	2.2091E + 16	1.1008E + 16	2.2092E + 16

Integrated Dopant

layer no.	BORON		PHOSPHORUS	
	active	chemical	active	chemical
3	3.3264E + 07	3.3264E + 07	1.1001E + 16	2.2085E + 16
2	1.0688E + 11	1.0688E + 11	6.8036E + 12	6.8036E + 12
1	4.2108E + 11	4.2108E + 11	4.8264E + 04	4.8264E + 04
sum	5.2800E + 11	5.2800E + 11	1.1007E + 16	2.2091E + 16

Junction Depths and Integrated Dopant

Concentrations for Each Diffused Region

layer no.	region no.	type	junction depth (microns)	net active Qd	total chemical Qd
3	1	n	0.0000	1.1001E + 16	2.2085E + 16
2	2	n	0.0000	6.7710E + 12	6.8069E + 12
2	1	p	.0355	6.2314E + 10	6.2867E + 10
1	1	p	0.0000	4.2108E + 11	4.2108E + 11

Save the structure at this point. The simulation runs are split for the gate and source/drain regions.

END SUPREM-III

(2) 文件一作图输出

文件一的作图输出见图 2.21.

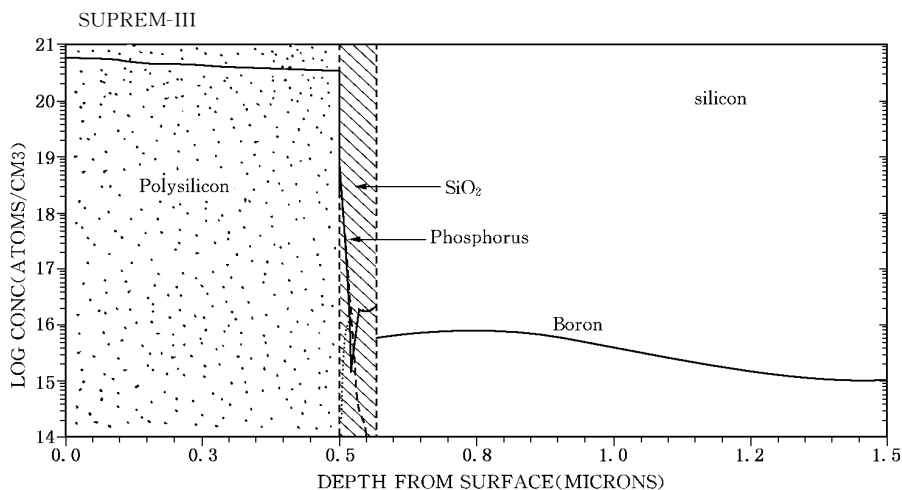


图 2.21 在沟道注入、栅氧化层生长和多晶硅层淀积后,SUPREM-3 的模拟输出。
磷扩散从多晶硅栅进入栅氧化层是明显的

(3) 文件二打印输出

SUPREM-III Example 1. NMOS Silicon Gate

Gate region.

File S3EX1B

Initialize silicon substrate.

Implant Arsenic for source/drain regions.

Drive-in Arsenic and re-oxidize source/drain regions.

Etch contact holes to gate , source , and drain regions.

Deposit Phosphorus doped SiO2 using CVD.

Increase the diffusivity of phosphorus in oxide by
two orders of magnitude.

Reflow glass to smooth surface and dope contact holes.

Reopen contact holes.

Deposit Aluminum.

Plot the chemical impurity distributions at this point.

layer no.	material type	thickness (microns)	dx (microns)	dxmin (microns)	top node	bottom node	orientation or grain size
4	ALUMINUM	1.2000	.0100	.0010	191	201	
3	POLYSILICON	.4845	.0100	.0010	202	250	.8955
2	OXIDE	.0683	.0100	0.0000	251	256	
1	SILICON	1.4531	.0050	.0010	257	400	100

Integrated Dopant

layer no.	Net active	chemical	Total active	chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
3	1.5868E+16	2.7642E+16	1.5868E+16	2.7642E+16
2	1.4632E+13	1.4632E+13	1.4850E+13	1.4850E+13
1	-4.1920E+11	-4.1920E+11	4.1940E+11	4.1940E+11
sum	1.5882E+16	2.7656E+16	1.5883E+16	2.7657E+16

Integrated Dopant

layer no.	PHOSPHORUS active	chemical	ARSENIC active	chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
3	1.1022E+16	2.2670E+16	4.8457E+15	4.9719E+15
2	1.3308E+13	1.3308E+13	1.4334E+12	1.4334E+12
1	1.0429E+08	1.0429E+08	3.9465E-10	3.9465E-10
sum	1.1035E+16	2.2683E+16	4.8471E+15	4.9734E+15

Integrated Dopant

layer no.	BORON active	chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00
3	1.0138E+08	1.0138E+08

2	1.0859E+11	1.0859E+11
1	4.1930E+11	4.1930E+11
sum	5.2799E+11	5.2799E+11

Junction Depths and Integrated Dopant
Concentrations for Each Diffused Region

layer no.	region no.	type	junction depth (microns)	net active Qd	total chemical Qd
4	1		0.0000	0.0000E+00	0.0000E+00
3	1	n	0.0000	1.5868E+16	2.7642E+16
2	2	n	0.0000	1.4661E+13	1.4749E+13
2	1	p	.0510	3.4154E+10	3.7425E+10
1	1	p	0.0000	4.1920E+11	4.1940E+11

Save the structure.

END SUPREM-III

(4) 文件二作图输出

文件二的作图输出见图 2.22.

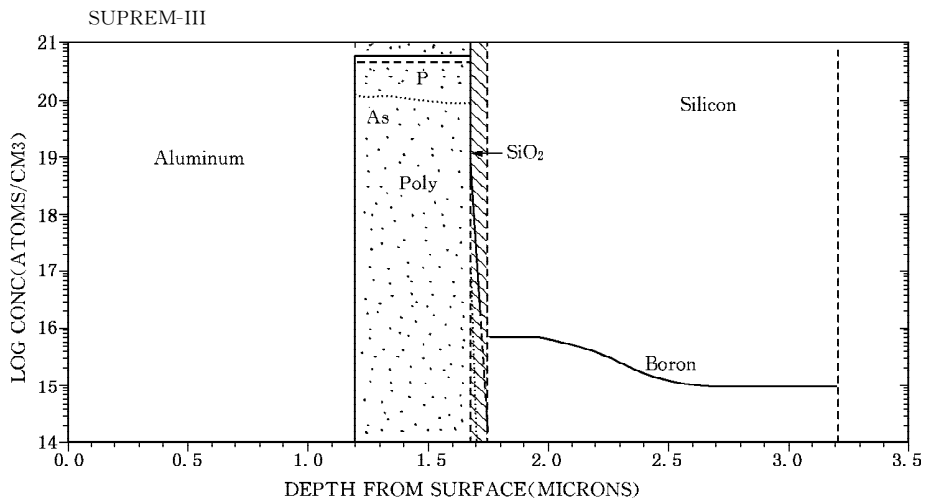


图 2.22 在所有加工工艺步之后,通过栅区的 SUPREM-3 模拟

2.6.7.3 SUPREM-3 的应用例举二 掺杂多晶硅发射极双极型晶体管

1. 器件结构和工艺步骤

(1) 器件结构

图 2.23 是拟模拟的局域氧化掺杂多晶硅发射极双极型晶体管结构的横截面图。

模拟通过有源(射-基)区以及通过场氧化区。此外,通过解有源区的 Poisson 方程计算作为集-基电压函数的基区薄层电阻。

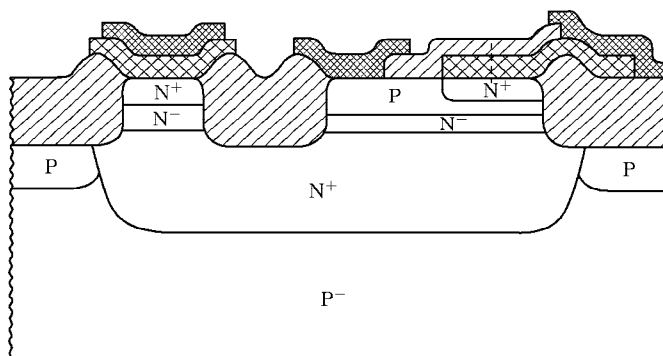


图 2.23 局域氧化掺杂多晶硅发射极双极型晶体管结构的横截面图

(2) 工艺步骤

- 步骤一 工艺开始用的衬底: Si 单晶, P 型, 高阻, 100 晶向
- 步骤二 衬底热氧化, 生长约 $1\ \mu\text{m}$ SiO_2 层
- 步骤三 移去置埋层处的 SiO_2 层
- 步骤四 离子注入 Sb, 剂量 $10^{15}/\text{cm}^2$; 驱入扩散 5 小时, 温度 $1150\ ^\circ\text{C}$
- 步骤五 从表面腐蚀掉 SiO_2 层
- 步骤六 外延生长 $1.6\ \mu\text{m}$ 掺 As 硅
- 步骤七 热生长 $40\ \text{nm}$ SiO_2 衬垫层
- 步骤八 淀积 $80\ \text{nm}$ Si_3N_4 层
- 步骤九 从隔离区腐蚀掉氮化物和氧化物
- 步骤十 腐蚀部分外延层 Si
- 步骤十一 场区离子注入 B, 为增加表面 P 型掺杂

步骤十二 场区热生长氧化层,层厚约为外延层厚的一半

步骤十三 剥去 Si_3N_4 层

步骤十四 用光刻胶作掩模,离子注入 B 形成基区,B 剂量 $10^{14}/\text{cm}^2$,注入能量 50 keV

步骤十五 从发射区腐蚀掉氧化物

步骤十六 淀积掺 As 多晶硅

步骤十七 从非发射区去掉多晶硅

步骤十八 退火:驱入发射区,激活基区扩散

2. 输入文件

本例用五个输入文件.

文件一 模拟器件有源区的工艺加工一直到隔离氧化(文件名为 S3EX2A)

文件二 从第一个文件的结果开始完成有源区的工艺加工(文件名为 S3EX2B)

文件三 对最终结果的结构执行电参数计算(文件名为 S3EX2C)

文件四 相似于文件一,但进行隔离区工艺加工的模拟(文件名为 S3EX2D)

文件五 完成隔离区工艺加工(文件名为 S3EX2E)

五个输入文件如下:

(1) 输入文件一

Input file name = > S3EX2A

```
1... Title           Suprem-III Example 2.  Bipolar Poly doped emitter.
2... $              Initial active region formation.
3... $              File S3EX2A

4... Comment         Initialize the silicon substrate.
5... Initialize      100 Silicon,Boron Concentration = 5e14
... +               Thickness = 5.  dX = .01  XdX = .05  Spaces = 100

6... Comment         Grow masking oxide for non-active regions.
7... Diffusion       Temperature = 1150  Time = 100  Wet02

8... Comment         Etch the oxide over the buried layer regions.
9... Etch            Oxide

10... Comment        Implant and drive-in the antimony buried layer.
```

```

11... Implant      Antimony Dose = 5E14 Energy = 120
12... Diffusion    Temperature = 1150 Time = 15 Dry02
13... Diffusion    Temperature = 1150 Time = 300
14... Print        Layer
15... Plot         Net Chemical Xmax = 5

16... Comment      Etch off the oxide.
17... Etch         Oxide

18... Comment      Grow 1.6 micron of arsenic doped epi.
19... Epitaxy      Temperature = 1050 Time = 4 Growth.Rate = .4
... +             Arsenic Gas.Conc = 5E15

20... Comment      Grow a 400A pad oxide.
21... Diffusion    Temperature = 1060 Time = 20 Dry02
22... Comment      Deposit nitride to mask the field oxidation.
23... Deposit      Nitride Thickness = .08

24... Comment      Plot the chemical impurity distributions at this point.
25... Print        Layer
26... Plot         Chemical Boron Xmax = 5 Clear ^ Axis Linetype = 2
27... Polt         Chemical Arsenic Xmax = 5 ^ Clear ^ Axis Linetype = 4
28... Plot         Chemical Antimony Xmax = 5 ^ Clear ^ Axis Linetype = 5
29... Plot         Chemical Net Xmax = 5 ^ Clear Axis Linetype = 1

30... Comment      Save the simulation structure at this point for use in
31... $            subsequent processing.
32... Savefile     Structure File = S3E2AS

33... Stop

```

(2) 输入文件二

Input file name = > S3EX2B

```

1... Title        Suprem-III Example 2. Bipolar Poly doped emitter.
2... $            Final active device region fromation.

```

```
3... $          File S3EX2B

4... Comment    Start from the result of S3EX2A.
5... Initialize  Structure = S3E2AS

6... Comment    Field oxide growth. Oxidation is masked by nitride.
7... Diffusion  Temperature = 800   Time = 30           T.RATE = 10
8... Diffusion  Temperature = 1000  Time = 15   Dry02
9... Diffusion  Temperature = 1100  Time = 210  Wet02
10... Diffusion Temperature = 1100  Time = 15   Dry02
11... Diffusion Temperature = 1100  Time = 10           T.RATE = - 30
12... Print     Layer
13... Plot      Net Chemical   Xmax = 5

14... Comment   Etch the oxide and nitride layers.
15... Etch      Oxide
16... Etch      Nitride
17... Etch      Oxide

18... Comment   Move the fine grid to the surface.
19... Grid      Layer. 1   Xdx = 0.

20... Comment   Implant the boron base.
21... Implant   Boron Dose = 1E14   Energy = 50

22... Comment   Remove oxide from emitter region.
23... Etch      Oxide
24... Comment   Deposit arsenic doped polysilicon for emitter contacts.
25... Deposit   Polysilicon , Thickness = .5   Temperature = 620
... +          Arsenic   Concentration = 1e20

26... Comment   Anneal to activate base and drive-in emitter.
27... Diffusion Temperature = 1000  Time = 20   Wet02
28... Comment   Plot the electrically Active impurity distributions.
29... Print     Layer
30... Plot      Active Boron           Xmax = 6           Clear  \ Axis Linetype = 2
```

```

31... Plot           Active Arsenic           Xmax = 6           ^ Clear   ^ Axis Linetype = 4
32... Plot           Active Antimony          Xmax = 6           ^ Clear   ^ Axis Linetype = 5
33... Plot           Active Net                Xmax = 6           ^ Clear   Axis Linetype = 1

34... Comment        Save the resulting active region.
35... Savefile        Structure File = S3E2BS

36... Stop

```

(3) 输入文件三

Input file name = > S3EX2C

```

1... Title           Suprem-III Example 2.   Bipolar Poly doped emitter.
2... $               Electrical simulation of the active device region.
3... $               File S3EX2C.

4... Comment         Start with the result of the active device region simulation
5... Initialize       Structure = S3E2BS

6... Comment         Solve Poisson's equation with the collector ramped
7... $               from 0 volts to 6 volts in 2 volt steps.
8... Electrical       Extent = 3   Steps = 4
9... Bias             Layer = 1   Diffusion = 3   V.Minority = 0   DV.Minority = 2
10... Bias            Layer = 1   Diffusion = 2   V.Majority = 0   DV.Majority = 2
11... Bias            Layer = 1   Diffusion = 1   V.Minority = 0   DV.Minority = 2
12... End

13... Stop

```

(4) 输入文件四

Input file name = > S3EX2D

```

1... Title           Suprem-III Example 2.   Bipolar Poly Doped Emitter
2... $               Initial isolation region formation.
3... $               File S3EX2D.

4... Comment         Initialize the silicon substrate.

```

```
5... Initialize      100 Silicon ,Boron Concentration = 5E14
... +               Thickness = 3   dX = .03   Spaces = 75

6... Comment        Grow masking oxide for the non-active regions.
7... Diffusion       Temperature = 1150   Time = 100   Wet02

8... Comment        Implant and drive in the antimony buried layer.
9... Implant         Antimony Dose = 1E15   Energy = 80
10... Diffusion      Temperature = 1150   Time = 15   Dry02
11... Diffusion      Temperature = 1150   Time = 300
12... Print          Layer
13... Plot           Net Chemical   Xmax = 4.5

14... Comment        Etch off the oxide.
15... Etch           Oxide

16... Comment        Add 1.6 microns of arsenic doped epi.
17... Epitaxy        Temperature = 1050   Time = 4   Growth.Rate = .4
... +               Arsenic Gas.Conc = 5E15

18... Comment        Grow a 400A pad oxide.
19... Diffusion      Temperature = 1060   Time = 20   Dry02

20... Comment        Deposit a 800A layer of silicon-nitride.
21... Deposit        Nitride Thickness = .08

22... Comment        Plot the chemical impurity distributions at this point.
23... Print          Layer
24... Plot           Chemical Boron      Xmax = 5          Clear   ^ Axis Linetype = 2
25... Plot           Chemical Arsenic    Xmax = 5          ^ Clear  ^ Axis Linetype = 4
26... Plot           Chemical Antimony   Xmax = 5          ^ Clear  ^ Axis Linetype = 5
27... Plot           Chemical Net        Xmax = 5          ^ Clear   Axis Linetype = 1

28... Comment        Save the initial part of the isolation simulation.
29... Savefile       Structure File = S3E2DS

30... Stop
```

(5) 输入文件五

Input file name = > S3EX2E

```

1... Title           Suprem-III Example 2.  Bipolar Poly doped emitter.
2... $              Final isolation region formation.
3... $              File S3EX2E.

4... Comment         Start with the result of S3EX2D.
5... Initialize      Structure = S3E2DS  Thickness = 6

6... Comment         Etch the nitride and oxide layers.
7... Etch            Nitride
8... Etch            Oxide

9... Comment         Etch half the silicon epi layer.
10... Etch           Silicon Amount = .8

11... Comment        Implant boron in the field region.
12... Implant        Boron  Dose = 2E13  Energy = 100

13... Comment        Grow the field oxide.
14... Diffusion       Temperature = 800      Time = 30      T. Rate = 10
15... Diffusion       Temperature = 1100     Time = 15      Dry02
16... Diffusion       Temperature = 1100     Time = 210     Wet02
17... Diffusion       Temperature = 1100     Time = 15      Dry02
18... Diffusion       Temperature = 1100     Time = 10      T. Rate = - 30
19... Print           Layer
20... Plot            Net Chemical  Xmax = 5

21... Comment        Implant the boron base.
22... Implant        Boron  Dose = 1E14  Energy = 80

23... Comment        Deposit arsenic doped polysilicon for the emitter contact.
24... Deposit        Polysilicon , Thickness = .5  Temperature = 620.
... +               Arsenic Concentration = 1E20

```

```
25... Comment      Remove the polysilicon.
26... Etch          Polysilicon

27... Comment      Anneal to activate base and emitter regions.
28... Diffusion     Temperature = 1000   Time = 20   Wet02

29... Comment      Plot the electrically active impurity distributions.
30... Print         Layer
31... Plot          Active Boron          Xmax = 5          Clear  ^ Axis Linetype = 2
32... Plot          Active Arsenic        Xmax = 5          ^ Clear ^ Axis Linetype = 4
33... Plot          Active Antimony       Xmax = 5          ^ Clear ^ Axis Linetype = 5
34... Plot          Active Net            Xmax = 5          ^ Clear   Axis Linetype = 1

35... Comment      Save the final isolation region simulation.
36... Savefile      Structure   File = S3E2ES

37... Stop
```

3. 输出信息

这里只给出文件一和文件二的输出信息供参阅.

(1) 文件一打印输出

Suprem-III Example 2. Bipolar Poly doped emitter.

Initial active region formation.

File S3EX2A

Initialize the silicon substrate.

Grow masking oxide for non-active regions.

Etch the oxide over the buried layer regions.

Implant and drive-in the antimony buried layer.

layer no.	material type	thickness (microns)	dx (microns)	dxmin (microns)	top node	bottom node	orientation or grain size
2	OXIDE	.0637	.0100	0.0000	324	326	
1	SILICON	4.5328	.0100	.0010	327	400	100

Integrated Dopant				
layer	Net		Total	
no.	active	chemical	active	chemical
2	6.4335E + 11	6.4335E + 11	6.4780E + 11	6.4780E + 11
1	4.9257E + 14	4.9257E + 14	4.9299E + 14	4.9299E + 14
sum	4.9321E + 14	4.9321E + 14	4.9363E + 14	4.9363E + 14

Integrated Dopant				
layer	BORON		ANTIMONY	
no.	active	chemical	active	chemical
2	2.2262E + 09	2.2262E + 09	6.4557E + 11	6.4557E + 11
1	2.0843E + 11	2.0843E + 11	4.9278E + 14	4.9278E + 14
sum	2.1065E + 11	2.1065E + 11	4.9342E + 14	4.9342E + 14

Junction Depths and Integrated Dopant Concentrations for Each Diffused Region					
layer	region	type	junction depth	net	total
no.	no.		(microns)	active Qd	chemical Qd
2	1	n	0.0000	6.4335E + 11	6.4780E + 11
1	2	n	0.0000	4.9265E + 14	4.9288E + 14
1	1	p	2.6812	8.5363E + 10	9.7159E + 10

Etch off the oxide.

Grow 1.6 micron of arsenic doped epi.

Grow a 400Å pad oxide.

Deposit nitride to mask the field oxidation.

Plot the chemical impurity distributions at this point.

layer	material type	thickness	dx	dxmin	top	bottom	orientation
no.		(microns)		(microns)	node	node	or grain size
3	NITRIDE	.0800	.0100	.0010	174	182	
2	OXIDE	.0402	.0100	0.0000	183	184	
1	SILICON	6.1151	.0100	.0010	185	400	100

Integrated Dopant				
layer	Net		Total	
no.	active	chemical	active	chemical
3	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
2	5.0632E+08	5.0577E+08	5.0632E+08	5.0577E+08
1	4.9333E+14	4.9333E+14	4.9375E+14	4.9375E+14
sum	4.9333E+14	4.9333E+14	4.9375E+14	4.9375E+14

Integrated Dopant				
layer	ARSENIC		ANTIMONY	
no.	active	chemical	active	chemical
3	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
2	5.0632E+08	5.0577E+08	2.4647E-03	2.4615E-03
1	7.9894E+11	7.9894E+11	4.9274E+14	4.9274E+14
sum	7.9944E+11	7.9944E+11	4.9274E+14	4.9274E+14

Integrated Dopant		
layer	BORON	
no.	active	chemical
3	0.0000E+00	0.0000E+00
2	9.3545E-03	9.3539E-03
1	2.0844E+11	2.0844E+11
sum	2.0844E+11	2.0844E+11

Junction Depths and Integrated Dopant					
Concentrations for Each Diffused Region					
layer	region	type	junction depth	net	total
no.	no.		(microns)	active Qd	chemical Qd
3	1	0.0000	0.0000E+00	0.0000E+00	
2	1	n	0.0000	5.0632E+08	5.0632E+08
1	2	n	0.0000	4.9341E+14	4.9365E+14
1	1	p	4.3815	7.9561E+10	9.1535E+10

Save the simulation structure at this point for use in subsequent processing.

END SUPREM-III

(2) 文件一作图输出

文件一的作图输出见图 2. 24.

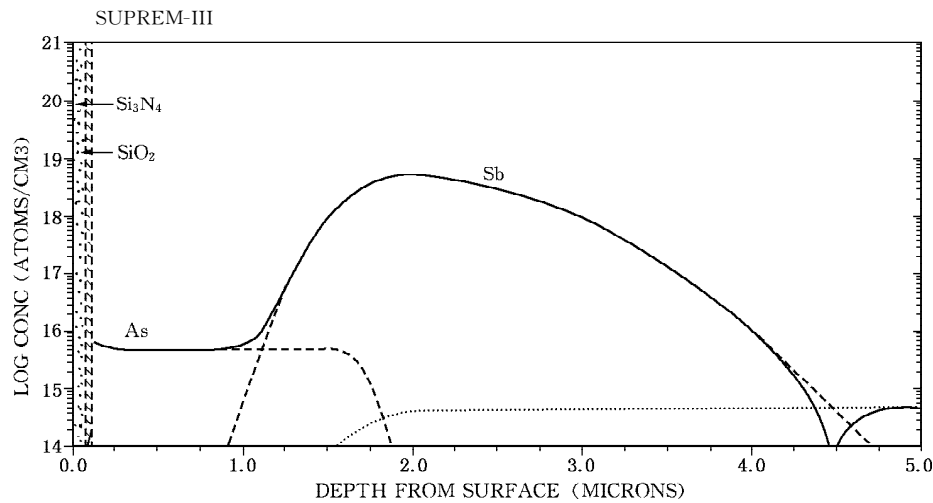


图 2. 24 埋层淀积、外延生长和氧化物/氮化物淀积后有源器件区的 SUPREM-3 模拟

(3) 文件二打印输出

Suprem-III Example 2. Bipolar Poly doped emitter.

Final active device region formation.

File S3EX2B

Start from the result of S3EX2A.

Field oxide growth. Oxidation is masked by nitride.

layer no.	material type	thickness (microns)	dx (microns)	dxmin (microns)	top node	bottom node	orientation or grain size
4	OXIDE	.0750	.0100	.0010	174	178	
3	NITRIDE	.0345	.0100	.0010	179	182	
2	OXIDE	.0402	.0100	0.000	183	184	
1	SILICON	6.1151	.0100	.0010	185	400	100

Integrated Dopant

layer no.	Net active	Net chemical	Total active	Total chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00

3	3.1700E+06	3.1700E+06	3.6534E+06	3.6534E+06
2	3.2643E+08	3.2643E+08	3.9650E+08	3.9650E+08
1	4.9333E+14	4.9333E+14	4.9375E+14	4.9375E+14
sum	4.9333E+14	4.9333E+14	4.9375E+14	4.9375E+14

Integrated Dopant

layer	ARSENIC		ANTIMONY	
no.	active	chemical	active	chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
3	3.4088E+06	3.4088E+06	2.9574E+03	2.9574E+03
2	3.6109E+08	3.6109E+08	3.7520E+05	3.7520E+05
1	7.9907E+11	7.9907E+11	4.9274E+14	4.9274E+14
sum	7.9943E+11	7.9943E+11	4.9274E+14	4.9274E+14

Integrated Dopant

layer	BORON	
no.	active	chemical
4	0.0000E+00	0.0000E+00
3	2.4166E+05	2.4166E+05
2	3.5036E+07	3.5036E+07
1	2.0853E+11	2.0853E+11
sum	2.0857E+11	2.0857E+11

Junction Depths and Integrated Dopant

Concentrations for Each Diffused Region

layer	region	type	junction depth	net	total
no.	no.		(microns)	active Qd	chemical Qd
4	1		0.0000	0.0000E+00	0.0000E+00
3	2		0.0000	6.0542E+02	6.9198E+02
3	1	n	.0100	3.1698E+06	3.6531E+06
2	1	n	0.0000	3.2643E+08	3.9650E+08
1	2	n	0.0000	4.9340E+14	4.9366E+14
1	1	p	4.5878	6.8353E+10	8.2066E+10

Etch the oxide and nitride layers.

Move the fine grid to the surface.

Implant the boron base.

Remove oxide from emitter region.

Deposit arsenic doped polysilicon for emitter contacts.

Anneal to activate base and drive-in emitter.

Plot the electrically Active impurity distributions.

layer no.	material type	thickness (microns)	dx (microns)	dxmin (microns)	top node	bottom node	orientation or grain size
3	OXIDE	.2110	.0100	0.0000	133	142	
2	POLYSILICON	.4072	.0100	.0010	143	184	.5581
1	SILICON	6.1151	.0100	.0010	185	400	100

Integrated Dopant

layer no.	Net		Total	
	active	chemical	active	chemical
3	2.0429E + 14	2.0429E + 14	2.0429E + 14	2.0429E + 14
2	3.9256E + 15	4.0538E + 15	3.9280E + 15	4.0562E + 15
1	1.1099E + 15	1.1246E + 15	1.3079E + 15	1.3225E + 15
sum	5.2397E + 15	5.3826E + 15	5.4402E + 15	5.5831E + 15

Integrated Dopant

layer no.	ARSENIC		ANTIMONY	
	active	chemical	active	chemical
3	2.0429E + 14	2.0429E + 14	- 1.3521E + 02	- 1.3523E + 02
2	3.9268E + 15	4.0550E + 15	1.2032E + 07	1.2032E + 07
1	7.1616E + 14	7.3081E + 14	4.9274E + 14	4.9274E + 14
sum	4.8472E + 15	4.9901E + 15	4.9274E + 14	4.9274E + 14

Integrated Dopant

layer no.	BORON	
	active	chemical
3	8.3229E + 08	8.3229E + 08

2	1.2115E+12	1.2115E+12
1	9.8999E+13	9.8999E+13
sum	1.0021E+14	1.0021E+14

Junction Depths and Integrated Dopant

Concentrations for Each Diffused Region

layer no.	region no.	type	junction depth (microns)	net active Qd	total chemical Qd
3	1	n	0.0000	2.0429E+14	2.0429E+14
2	1	n	0.0000	3.9256E+15	4.0562E+15
1	4	n	0.0000	6.8290E+14	7.5343E+14
1	3	p	.1195	6.6124E+13	6.8378E+13
1	2	n	.4526	4.9315E+14	4.9343E+14
1	1	p	4.6177	6.8012E+10	7.9528E+10

Save the resulting active region.

END SUPREM-III

(4) 文件二作图输出

文件二的作图输出见图 2.25.

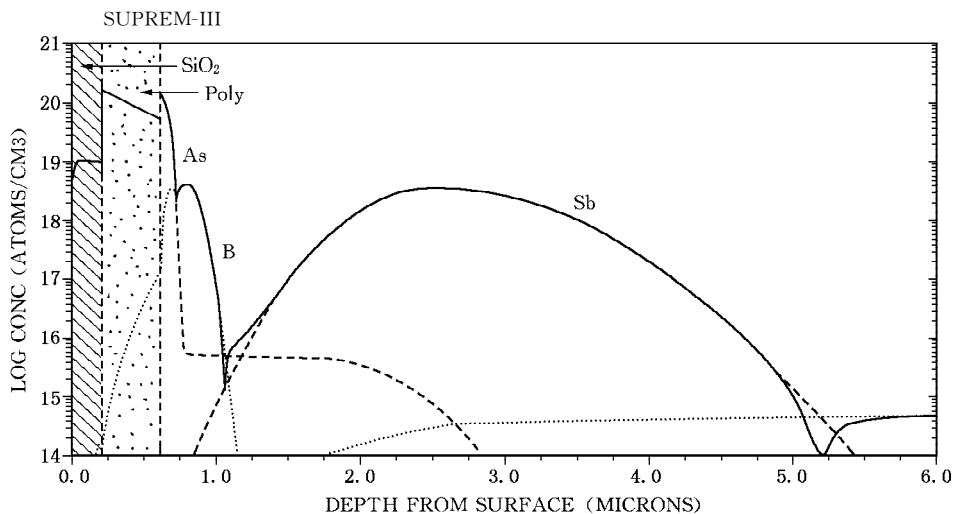


图 2.25 在所有工艺加工步后,有源器件区 SUPREM-3 模拟结果.

由于埋层和基区的扩散,起初的 N 型外延层已几乎消失

§ 2.7 SUPREM-4

如前所述, SUPREM-2、SUPREM-3 都是一维 IC 工艺模拟器, 它们都只能输出垂直于器件表面的器件结构的一维信息, 如: 一维掺杂分布以及 SiO_2 层或其他材料层厚度、结深等一维几何尺寸. 并从这些一维信息中提取若干器件的电参数, 例如: 薄层电阻和阈值电压等. 具有这种模拟能力的一维工艺模拟器的应用表明: 它能较精确地模拟沟长大于 $\sim 2 \mu\text{m}$ 和栅氧化层大于 50 nm 的 MOS 器件以及基区宽度大于 100 nm 的双极型晶体管. 应用也表明: 即使这种“尺寸较大”的器件如果其结构较为复杂, 则要得到对器件性能有影响的完整的器件结构的一维信息, 一般需作 4 个以上的一维模拟. 如为 BiCMOS 器件, 则需作 8 个一维模拟如图 2.26 所示. 应用又表明: 随着器件尺寸减小, 如 MOS 器件沟长小于 $2 \mu\text{m}$, 有许多器件参数例如 MOSFET 的有效栅长、漏—体边墙电容及漏—体击穿电压等同掺杂剂的二维分布有关. 因为随着器件尺寸缩小, 扩散、离子注入和氧化的横向效应使实际的掺杂剂分布较大地偏离由一维理论估算得到的杂质剖面分布, 如果仍用一维模拟得出的掺杂分布去扩展用于减小了尺寸的器件的二维模拟, 则在大多数情况下将使模拟精度有较大的降低. 所以业内人士普遍认为当器件尺寸缩小到亚微米量级后, 为优化设计和快速分析这种“小尺寸器件”, 需要器件结构的二维信息, 也即需要二维 IC 工艺模拟.

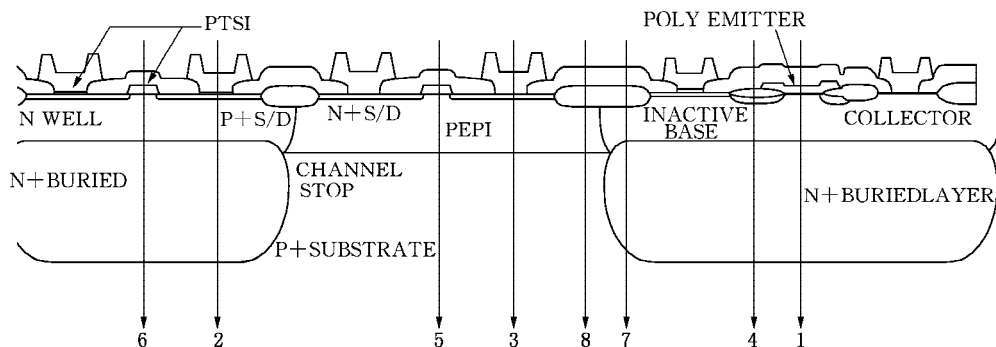


图 2.26 BiCMOS 结构横截面图. 为得到这一器件结构的完整的特性, 需作 8 个一维模拟 (源于 [2.50])

二维 IC 工艺模拟器一般可分成 3 类: 第一类主要模拟二维的扩散、离子注入、氧化等 (例如: SUPRA^[2.48] 和 SUPREM-4^[2.4]), 第二类主要模拟二维的淀积、刻

蚀和光刻等(例如 SAMPLE^[2.49]和 DEPICT^[2.50]),第三类把上两类模拟器的模拟功能集成在一个单一的、综合的模拟器内形成新一类模拟器(例如 BICEPS^[2.51])和 COMPOSITE^[2.52]).由于第三类模拟器目前还不成熟,第二类将在第五章中作简要介绍,而第一类中 SUPRA 所用的模型大部分已被采用在 SUPREM-4 中,且商用的二维 IC 工艺模拟器,例如 TSUPREM-4^[2.6]及 SSUPREM-4^[2.7]都是在 SUPREM-4 的基础上实现商用化修改和扩充的,所以本节主要介绍 SUPREM-4.

2.7.1 SUPREM-4 的离子注入模型

SUPREM-4 中杂质离子注入到硅靶的模型有两种.它们是解析离子注入模型和 Monto Carlo 离子注入模型.解析模型用基于包含在 SUPREM-4 中的离子注入数据文件内的分布矩(distribution moments)的 Gaussian 或 Pearson 函数模拟杂质和点缺陷分布. Monte Carlo 模型基于物理模型,计算注入离子通过二维靶结构的弹道(trjectories).

2.7.1.1 解析离子注入模型

这种模型首先计算沿着通过二维模拟结构的每个垂直条(设为沿 y 向)的注入杂质离子的一维分布 $I(y)$,其表示式为:

$$I(y) = \text{dose} \times f(y) \quad (2.130)$$

式中 dose 是由离子注入器提供的每平方厘米总的杂质离子数, $f(y)$ 是一个归一化的 Gaussian 或 Pearson 分布函数, $y = 0$ 取在垂直条顶部材料的表面.接着,将每个沿垂直条的一维分布乘上一个正交于垂直条方向(取为 x 向)的 Gaussian 分布,使扩展到二维分布 $I(x, y)$,其表示式为:

$$I(x, y) = I(y) \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) \quad (2.131)$$

式中 x 是离沿 y 向的垂直条的垂直距离, σ_x 是横向标准偏差, σ_x 的值可从 SUPREM-4 的离子注入数据文件中找到,最后,再由累加 $I(x, y)$ 得出完全的离子注入二维分布.

为精确模拟离子注入分布, SUPREM-4 解析离子注入模型中还包含以下模型:

(i) 同注入剂量有关的注入分布模型.用双 Pearson 分布描述,其公式为

$$I_{\text{composite}}(y) = \gamma I_{\text{amorphous}}(y) + (1 - \gamma) I_{\text{channeled}}(y) \quad (2.132)$$

式中 γ 是无定型材料情况下杂质离子剖面分布的剂量和总剂量之比, $I_{\text{amorphous}}(y)$ 、 $I_{\text{channeled}}(y)$ 及 $I_{\text{composite}}(y)$ 分别是归一化的无定型部分的、晶体部分的及两者合成的 Pearson 分布。

- (ii) 衬底圆片的倾斜和转动(tilt and rotation)对注入分布影响的模型。
- (iii) 处理多层注入分布的有效射程模型和剂量匹配模型。
- (iv) 与横向注入相关的横向标准偏差模型。
- (v) BF_2 注入模型。
- (vi) 解析注入损伤模型。

2.7.1.2 Monte Carlo 离子注入模型

SUPREM-4 中包含一个基于物理模型的计算杂质离子注入分布的 Monte Carlo 离子注入模型。该模型可计算杂质离子注入在晶体硅、无定型硅及其他材料的分布。该模型还可模拟注入时晶体硅向无定型硅的转变, 反射离子对最终注入分布的影响、注入时产生的空位和间隙类损伤对离子注入分布的影响以及硅衬底损伤的自退火等。

应用 Monte Carlo 离子注入模型的计算可检验一系列参数对最终分布结果的依赖关系, 如倾斜和转动角、高注入剂量、注入温度及低能量离子注入等因素对最终离子注入分布的影响。

目前经商用化修改和补充的 SUPREM-4 中还包含着用 Monte Carlo 方法计算多晶硅及碳化硅中杂质离子注入分布的 Monte Carlo 离子注入模型。

2.7.2 SUPREM-4 的杂质扩散模型

SUPREM-4 执行杂质二维扩散模型, 与较早出现的二维 IC 工艺模拟软件 SUPRA^[2, 48] 中执行的扩散模型相比, 更深入和更全面地考虑和计算了扩散杂质和点缺陷(间隙和空位)、扩散杂质和氧化剂(O_2 或 H_2O)以及扩散杂质间的相互作用。SUPREM-4 不仅能模拟低掺杂浓度、非氧化情况下以及被扩散结构具有平面或非平面边界情况下的扩散, 也即能通过解线性二维扩散方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} \right) \quad (2.133)$$

得出最终扩散分布, 也可以较精确地模拟在氧化气氛下的驱入扩散、高掺杂浓度下

的扩散以及高浓度杂质在同时氧化情况下的扩散 SUPREM-4 执行的杂质扩散模型包括：

- 扩散杂质和点缺陷的互作用模型；
- 扩散杂质和氧化剂的互作用模型,包括氧化增强和减弱扩散模型；
- 杂质间互作用模型,包括高浓度杂质结团、解团和扩散模型；
- 快速热退火(RTA)和瞬时增强扩散(TED)模型；
- 点缺陷扩散、结团模型及点缺陷在界面处的注入和复合模型；
- 瞬时杂质激活模型；
- 施主/受主共扩散模型；
- Si/SiO₂ 界面杂质剂量损失模型；
- 多晶硅中杂质扩散模型；
- 计入 Ge 和 C 含量的 SiGe/SiGeC 中 B 扩散模型；
- 氧化层中 B 扩散增强模型,包括薄氧化层中 B 扩散增强模型及含 F 时 B 扩散增强模型。

2.7.3 SUPREM-4 的氧化模型

SUPREM-4 能模拟一维氧化工艺(例如平面表面上的均匀氧化工艺)以及二维氧化工艺(例如硅的局部氧化工艺(简称 LOCOS 工艺)及深沟氧化工艺)

2.7.3.1 一维氧化模型

SUPREM-4 中执行的一维氧化模型与 SUPREM-3 中执行的基本相同,都基于 Deal 和 Grove 的一维氧化理论,用方程

$$\frac{dy}{dt} = \frac{B}{A + 2y} \quad (2.134)$$

描述,式中 y 是氧化层厚度, B/A 和 B 分别是线性和抛物线氧化速率常数。一维氧化模型中所关注的高掺杂硅上的增强氧化、HCl 对氧化速率的影响、起始薄氧化层氧化速率增强、多晶硅氧化、N₂O 和 N₃Si₄ 的氧化等氧化模型基本上沿用了 SUPREM-3 的原创文本及经修补的商用化文本中有关氧化的模型。

2.7.3.2 二维氧化模型

SUPREM-4 中执行的二维氧化模型可分成经验氧化模型、解析氧化模型和数

值氧化模型 3 类：

1. 经验氧化模型

已在 SUPREM-4 中执行,用以模拟 LOCOS“鸟嘴”结构,这个经验模型用一个余误差函数作为 LOCOS 结构的形状函数,此函数的参数由特定的 LOCOS 结构的工艺参数(包括:氧化物衬垫层厚度、氮化物层厚度、氧化温度和压力等)决定。

SUPREM-4 中还包含了 Guillemot 等^[2, 53]开发的另一种可模拟半隐蔽 LOCOS“鸟嘴”结构形状的经验模型。为氮化物和衬垫氧化物均较薄,掩模层的应力较弱的情况,用两个具有不同参数关系的余误差函数分别模拟氧化层和硅界面及氧化物层和氮化物层界面的轮廓。为氮化物层较厚,掩模层的应力较强的情况,用另外两个具有不同参数关系的函数模拟了“鸟嘴”的轮廓。两种情况的模拟结果曾同实验结果作过比较,两者符合很好。见图 2.27 所示。

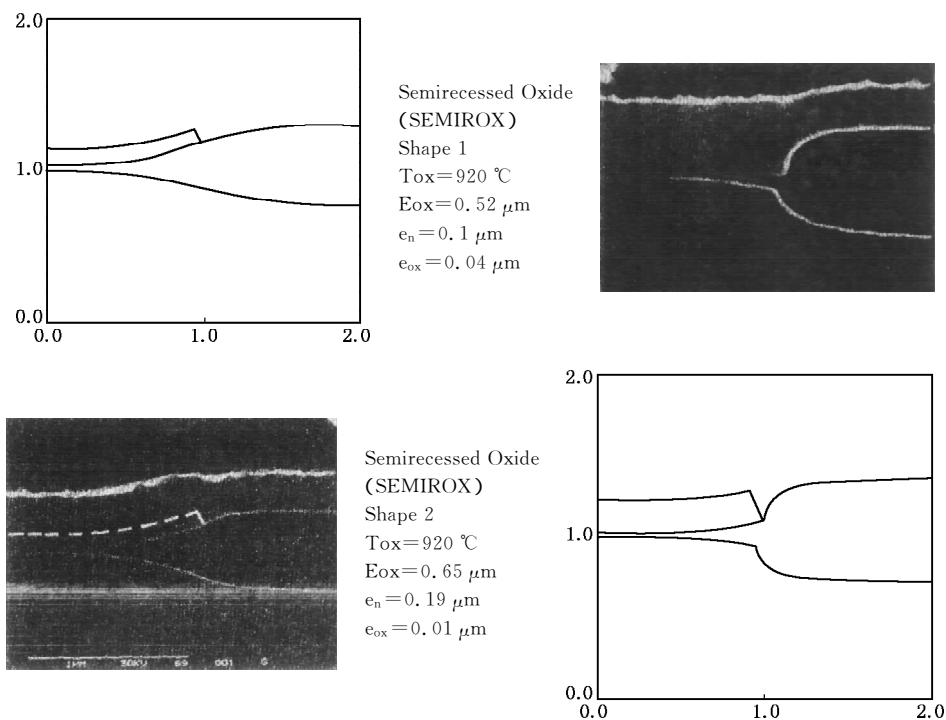


图 2.27 用 Guillemot 等人开发的经验模型的模拟结果同实验结果的比较(源于[2, 53])

2. 解析氧化模型

解析二维氧化模型是一类基于物理的二维模型。解析模型考虑氧化时发生两

种机构:(1)氧化剂通过 SiO_2 扩散到 SiO_2/Si 界面;(2)氧化物的流动由氧化物生成过程的体膨胀和相关联的应力的逐步建立所引起,氧化物流是一种粘滞流。

氧化剂扩散由稳态通用扩散方程描述:

$$D \nabla^2 C = \frac{\partial C}{\partial t} \cong 0 \quad (2.135)$$

式中 D 和 C 分别为氧化剂的扩散常数和浓度。为 LOCOS 结构,解此方程用的边界条件是非均匀的,因而使氧化剂沿着 SiO_2/Si 界面从一处到另一处的分布不同,这样体膨胀率也随位置变化。

氧化物流动由一个简化的 Navier-Stokes 方程描述:

$$\mu \nabla^2 \mathbf{v} = \nabla p \quad (2.136)$$

式中 μ , $\mathbf{v}$, p 分别为氧化物的粘滞度、速度和压力。

原则上在一定边界条件下解上列氧化剂扩散和氧化物流动这两个方程就可得到氧化周期结束时二氧化硅边界的位置,从而满足二维氧化工艺模拟的需求。但由于二氧化硅边界是一个连续移动的边界,解上列两方程还需结合处理边界值的数字技术,用 Green 函数解(2.135)及(2.136)的积分形式来得出所需的解。详见参考文献[2.54]

为了模拟温度低于 960°C , SiO_2 不再呈现出粘滞性能,而遵循弹性规律使硅圆片形变。SUPREM-4 还结合使用 Kao 等开发的另一种解析模型,此模型考虑了生长 SiO_2 膜时逐步建立的应力,以及这些应力如何影响 SiO_2 膜的生长速率,详见

文献[2.55]。此模型能模拟深沟中 SiO_2 的生长以及多种 LOCOS 工艺。模型预言应力会使深沟凹角处氧化速率变慢,实验证实了这一预言。SUPREM-4 模拟结果见图 2.28 所示。

3. 数值氧化模型

多种数值氧化模型包含在经不断修改和补充的商用化 SUPREM-4 中[2.6]。这些数值氧化模型能精确模拟包含掩模层的任意结构。模型通过数值解下列氧化剂流量方程及 SiO_2 生长速率方程直接获得 SiO_2/Si 界面上每点的 SiO_2 生长速率。式(2.137)——(2.141)给

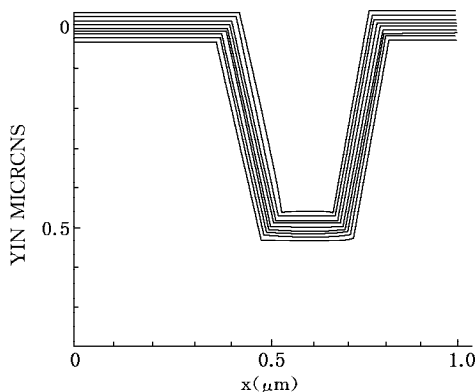


图 2.28 SUPREM-4 模拟深沟中氧化物生长(950°C , 240 min),显示深沟中底角处氧化层较薄(源于[2.50])

出了这些方程的表示式.

由周围气体进入 SiO_2 中的氧化剂(假定为 O_2 或 H_2O)流量由下式给出:

$$\vec{F} = h(C^* - C_0) \vec{n}_s \quad (2.137)$$

式中 h 是气相质量传递系数, C_0 是表面处 SiO_2 中氧化剂的浓度, $C^* = HP_{0x}$, 其中 H 是 SiO_2 中氧化剂的 Henry 定律系数, P_{0x} 是周围气氛中氧化剂的分压, $\vec{n}_s$ 是垂直于 SiO_2 表面指向 SiO_2 的单位矢量.

SiO_2 中氧化剂的流量也可由下式给出:

$$\vec{F} = D \vec{\nabla} C \quad (2.138)$$

式中 D 是 SiO_2 中氧化剂的扩散率, C 是氧化剂的局域浓度, $\vec{\nabla}$ 是梯度算符. $\vec{F}$ 还可利用氧化界面处氧化剂消耗量给出:

$$\vec{F} = K_s C \vec{n}_i \quad (2.139)$$

这里 K_s 是表面反应速率, C 是界面氧化剂的浓度, $\vec{n}_i$ 是垂直于界面背离 SiO_2 的单位矢量.

在稳态, 流量的散度为零,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = 0 \quad (2.140)$$

SiO_2 生长速度由下式给出:

$$\frac{d\vec{Y}}{dt} = \frac{\vec{F}}{N_1} + \gamma_{\text{thin}} \quad (2.141)$$

式中 $\frac{d\vec{Y}}{dt}$ 表示相对于 SiO_2 的界面速度, N_1 是形成每立方厘米 SiO_2 所需的氧化剂分子数, γ_{thin} 是薄区氧化速率常数, 描写氧化初始阶段 SiO_2 的快速生长, γ_{thin} 的计算可用解析模型或数值模型. H. Z. Massoud 曾给出以下 γ_{thin} 表示式 [2.56]

$$\gamma_{\text{thin}} = \text{TOP1} \cdot \exp\left(\frac{-\text{TOP2}}{kT}\right) \exp\left(\frac{-y_\infty}{\text{TOP3}}\right) \quad (2.142)$$

式中 3 个薄区氧化参数 TOP1、TOP2、TOP3 的值同氧化剂的种类以及 Si 的晶向 111, 110, 100 有关, 多晶硅和单晶硅也不同. y_∞ 为没有掩模处氧化层厚度.

数值氧化模型还包含描写体膨胀引起的 SiO_2 流动的方程, 数值氧化模型的不同主要在于计算 SiO_2 流动方程的方法不同.

已执行在 SUPREM-4 商用化版本 TSUPREM-4 中的数值氧化模型有 VERTICAL、COMPRESS、VISCOUS、VISCOELA 等^[2,6],它们各自的特点为:

(1) VERTICAL 模型

最简单但运行速率最快的数值氧化模型.它适用于具有任意初始氧化物厚度的均匀氧化以及初始结构近于平面时的局域氧化;不适用于全隐蔽氧化、深沟或其他非平面结构,不能模拟多晶硅氧化.

(2) COMPRESS 模型

模拟氧化时 SiO_2 的粘滞流,用线性(3节点)有限元计算二维 SiO_2 的粘滞流. SiO_2/Si 界面的运动是二维的,运动垂直于界面.计算氧化速率时计及沿界面晶向的变化.可模拟平面结构、小量 SiO_2 生长及 SiO_2 确切的形状细节并不很关注的情况.当不需要应力计算时可模拟一般的非平面结构和包含多晶硅的结构.由于模型的简单性以及容许小量压缩性,模型不能用于计算应力的精确值,在氧化过程中也不考虑应力效应.同 VERTICAL 模型相比,本模型执行速度较慢且需存储量略大.

(3) VISCOUS 模型

模拟氧化时 SiO_2 的粘滞流,用 7 节点有限元计算二维 SiO_2 的粘滞流,能精确计算应力值. SiO_2/Si 界面的运动是二维的,运动垂直于界面.计算氧化速率时计及沿着界面晶向的变化.同 VISCOELA 模型相比本模型有较多处显现出较陈旧,但当粘滞度比 Young 氏模量小很多时本模型比 VISCOELA 精确,当考虑与应力的相关性时本模型的执行速度较慢.

(4) VISCOELA 模型

模拟氧化时 SiO_2 的粘滞弹性流(Viscoelastic flow),用 3 节点有限元计算 SiO_2 的粘滞弹性流(也即既有粘滞性又有伸缩性的流),能近似计算应力值. SiO_2/Si 界面的运动是二维的,运动垂直于界面.计算氧化速率时计及沿着界面晶向的变化.当最终 SiO_2 的细节重要时或当需要应力值时可用本模型模拟二维结构.本模型能得出 SiO_2 形状的一个很好的近似且需较少的模拟时间.在考虑应力时本模型执行速度比 VISCOUS 模型快,但不考虑应力时比 COMPRESS 模型慢且精度也没有有意义的改进.当综合的应力历史建模时必须用本模型.本模型中的应力模型包含本征的和热失配的应力的考虑也包括惰性环境下退火时结构中的应力弛豫模型.

2.7.4 SUPREM-4 的其他工艺模型和电参数计算模型

2.7.1—2.7.3 节分别简要地介绍了 SUPREM-4 中执行的离子注入、杂质扩

散和氧化的二维模型,限于本书篇幅,也限于作者掌握这方面的材料还不充分,所以本书对 SUPREM-4 中执行的外延生长模型、多晶硅模型、硅化物模型以及电参数计算模型未予介绍;为了确切地了解 SUPREM-4 所用的全部工艺模型和电参数计算模型,读者可参阅文献[2.4] [2.6] [2.7]以及[2.50]

2.7.5 SUPREM-4 的使用和应用例举

2.7.5.1 SUPREM-4 的使用

使用 SUPREM-4 同使用 SUPREM-2, SUPREM-3 相仿,必须要了解 SUPREM-4 的功能和它所用的各种工艺模型,知道拟模拟的硅衬底的材料参数、有关工艺条件参数和工艺序列中各工艺步进行的次序以及阅读和正确理解 SUPREM-4 的用户手册,主要是输入文件书写格式。

SUPREM-4, TSUPREM-4, SSUPREM-4 的用户手册,读者可分别参阅文献[2.4], [2.6], [2.7]

以下给出的硅的局部氧化工艺的二维模拟和 CMOS 中 NMOS 管的制造工艺模拟两个应用例子,源于美国 Synopsys 公司 TSUPREM-4 用户指南^[2.6]。

2.7.5.2 SUPREM-4 的应用例举一 硅的局部氧化工艺的二维模拟

1. 模拟内容

本例模拟一个窄的局部氧化隔离区,包括氧化层厚度和形状以及在基底硅中杂质的分布。模拟的工艺包括:淀积衬垫二氧化硅层,淀积氮化硅层以及腐蚀确定氮化硅掩模层。

2. 输入文件

分两部分列出

(1) 第一部分为确定 LOCOS 形状的输入文件部分

```
$ TSUPREM-4 narrow window example
$ part 1:Oxide shape

$ set up the grid
LINE X LOC = 0.0 SPAC = 0.15
LINE X LOC = 1.25 SPAC = 0.05
```

```
LINE X LOC = 1.5 SPAC = 0.1

LINE Y LOC = 0 SPAC = 0.03
LINE Y LOC = 0.5 SPAC = 0.1

$ No impurities ,for faster oxidation simulation
INITIALIZE

$ Deposit pad oxide and define nitride mask
DEPOSITION OXIDE THICKNES = 0.03 SPACES = 2
DEPOSITION NITRIDE THICKNES = 0.10 SPACES = 2
ETCH NITRIDE RIGHT P1.X = 1.25

$ Plot the grid
SELECT TITLE = "Grid for Oxidation"
PLOT.2D GRID SCALE C.GRID = 2

$ Do the oxidation
METHOD VISCOEL DY.OXIDE = 0.05 INIT = 0.15
AMBIENT MAT = OXIDE VC = 170
AMBIENT MAT = NITRIDE VC = 100
DIFFUSION TEMP = 1000 TIME = 100 WETO2

$ Save the structure
SAVEFILE OUT.FILE = S4EX2AS
```

(2) 第二部分为 LOCOS 工艺模拟结果作图的输入文件部分

```
$ Plot the final structure ,showing flow lines
SELECT TITLE = "Flow at End of Oxidation Step"
PLOT.2D SCALE FLOW VLENG = 0.065 X.MIN = 0.5 C.FLOW = 4

$ Plot the final structure ,showing stress vectors
SELECT TITLE = "Stresses After Oxidation"
PLOT.2D SCALE STRESS VLENG = 0.2 X.MIN = 0.5 +
C.COMPRE = 4 C.TENSIO = 2 L.TENSIO = 2
```

```

$ Plot filled contours of hydrostatic pressure
SELECT      Z = ( - 0.5 * (SXX + SY))  TITLE = "Contours of Hydrostatic Pressure"
PLOT.2D      SCALE  X.MIN = 0.5  X.MAX = 1.8
FOREACH I(1 TO 5)
    COLOR MIN.V = ((I - 0.5) * 2E9)  MAX.V = ((I + 0.5) * 2E9)  COLOR = (13 + I)
    COLOR MIN.V = ((- I - 0.5) * 2E9)  MAX.V = ((- I + 0.5) * 2E9)  COLOR = (25 - I)
END

$ Create a legend
LABEL X = 1.52  Y = - 0.2  LABEL = "Compression"      SIZE = 0.3
LABEL X = 1.60  Y = - 0.15 LABEL = "1 - 3E9"  C.RECT = 14  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35
LABEL X = 1.60  Y = - 0.1  LABEL = "3 - 5E9"  C.RECT = 15  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35
LABEL X = 1.60  Y = - 0.05 LABEL = "5 - 7E9"  C.RECT = 16  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35
LABEL X = 1.60  Y = 0.0    LABEL = "7 - 9E9"  C.RECT = 17  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35
LABEL X = 1.52  Y = 0.05   LABEL = "Tension"      SIZE = 0.3
LABEL X = 1.60  Y = 0.1    LABEL = "1 - 3E9"  C.RECT = 24  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35
LABEL X = 1.60  Y = 0.15   LABEL = "3 - 5E9"  C.RECT = 23  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35
LABEL X = 1.60  Y = 0.20   LABEL = "5 - 7E9"  C.RECT = 22  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35
LABEL X = 1.60  Y = 0.25   LABEL = "7 - 9E9"  C.RECT = 21  SIZE = 0.3  W.RECT = 0.35  H.R = 0.35

$ Redraw boundaries
PLOT.2D      ^AX      ^CL

$ Print location of interface
SELECT      Z = Y
PRINT.1D      SILICON  /OXIDE

```

3. 输出信息

按输入文件 ,应有下列作图输出 :

- (i) 用于氧化模拟的网格 ;
 - (ii) 氧化结束后结构的边界和材料界面以及氧化结束期间氧化物流动的速率和方向 ;
 - (iii) 氧化后的应力(压缩应力和张应力)的二维分布 ;
 - (iv) 流体静压力轮廓图(Contours).
- 这里给出(ii)(图 2.29)和(iv)(彩图 1).

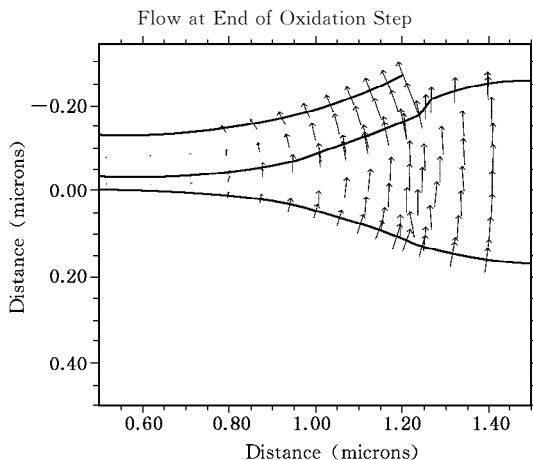


图 2.29 氧化结束期间氧化物流动的速率和方向示意

2.7.5.3 SUPREM-4 的应用例举二 CMOS 中 NMOS 管的制造工艺模拟

1. 模拟内容

本例模拟作为 CMOS 工艺一部分的 NMOS 管的制造工艺. 目的是产生一个输出文件, 它包含完整的结构、网格以及能读入器件模拟器的掺杂信息.

拟模拟的主要工艺步骤包括:

步骤一 基本硅单晶:晶向 100, 掺硼, 浓度 $1 \times 10^{15} / \text{cm}^3$

步骤二 淀积 30 nm 初始衬垫二氧化硅层

步骤三 P 阱 离子注入:硼注入, 剂量 $1 \times 10^{12} / \text{cm}^2$, 能量 35 keV

步骤四 P 阱 驱入扩散:温度 1100 °C, 时间 120 min, 干氧气氛, 氧分压 0.02

步骤五 淀积 100 nm 衬垫氮化硅层

步骤六 场区离子注入:硼注入, 剂量 $5 \times 10^{13} / \text{cm}^2$, 能量 80 keV

步骤七 场区氧化:温度 1000 °C, 时间 360 min, 湿氧氧化

步骤八 调节阈值电压的离子注入:硼注入, 剂量 $1 \times 10^{12} / \text{cm}^2$, 能量 100 keV

步骤九 栅氧化:温度 950 °C, 时间 30 min, 干氧氧化

步骤十 淀积 300 nm 多晶硅层

步骤十一 淀积 20 nm 薄氧化层

步骤十二 轻掺杂漏区(LDD 区)离子注入:磷注入, 剂量 $5 \times 10^{13} / \text{cm}^2$, 能量 100 keV

步骤十三 低温淀积 200 nm 氧化层

步骤十四 源/漏注入 : 砷注入 , 剂量 $2 \times 10^{15} / \text{cm}^2$, 能量 100 keV

步骤十五 源/漏(包括多晶硅栅)再氧化 : 温度 900 °C , 时间 30 min , 干氧氧化

步骤十六 形成源/漏铝电极

2. 输入文件

两个输入文件 , 一个为模拟 CMOS 工艺 , 另一个为输出模拟结果图。

(1) 模拟 CMOS 工艺的输入文件

```
$ TSUPREM-4 N-channel MOS application
$
$ 1. Identify the graphics driver
$ Default from DEFPDEV , TERM , or S4PCAP "default" entry used

$ 2. Beginning of the main loop
FOREACH LD (3 5)

$ 3. Specify the mesh
MESH GRID.FAC = 1.5
MESH DY.SURF = 0.01 LY.SURF = 0.04 LY.ACTIV = 2.0

$ 4. Initialize
INITIALIZE <100> BORON = 1E15 WIDTH = (0.7 + (LD/10.0))DX = 0.1

$ 5. Plot the initial mesh
SELECT TITLE = "Mesh for Delta = 0. @ {LD}"
PLOT.2D SCALE GRID Y.MAX = 3.0 C.GRID = 2

$ 6. Initial oxide pad
DEPOSIT OXIDE THICKNESS = 0.03

$ 7. P-well implant
IMPLANT BORON DOSE = 1E12 ENERGY = 35

$ 8. Use a point defect models that simulates OED
METHOD PD. TRANS
```

\$ 9. P-well drive

```
DIFFUSE      TEMP = 1100  TIME = 120  DRYO2  PRESS = 0.02
```

\$ 10. P-well doping profile

```
SELECT      Z = LOG10(BORON)  TITLE = "Channel Doping (Delta = 0. @{{LD}})"
PLOT.1D     X.VALUE = 0  RIGHT = 3.0  BOTTOM = 15  TOP = 19  LINE.TYP = 2  COLOR = 2
LABEL      X = 1.8  Y = 18.5  LABEL = "After p-well drive"  LINE.TYP = 2  C.LINE = 2
```

\$ 11. Pad nitride

```
DEPOSIT      NITRIDE  THICKNESS = 0.1
```

\$ 12. Field implant and oxidation

```
IMPLANT      BORON  DOSE = 5E13  ENERGY = 80
DIFFUSE      TEMP = 1000  TIME = 360  WETO2
```

\$ 13. Etch to remove the pad

```
ETCH        NITRIDE  ALL
```

\$ 14. Vt adjust implant

```
IMPLANT      BORON  ENERGY = 100  DOSE = 1E12
```

\$ 15. P-well doping profile

```
SELECT      Z = LOG10 (BORON)
PLOT.1D     X.VALUE = 0  ^AXES  ^CLEAR  COLOR = 2
LABEL      X = 1.8  Y = 18.2  LABEL = "After Vt implant"  LINE.TYP = 1  C.LINE = 2
```

\$ 16. Print oxide and silicon thicknesses

```
SELECT      Z = 1
PRINT.1D    X.VALUE = 0.0  LAYERS
```

\$ 17. Etch oxide

```
ETCH        OXIDE  TRAP  THICK = 0.05
```

\$ 18. Gate oxidation

```
DIFFUSE      TEMP = 950  TIME = 30  DRYO2
```

\$ 19. Poly deposition

DEPOSIT POLYSILICON THICKNESS = 0.3 DIVISIONS = 4

\$ 20. Poly and oxide etch between $x = 0.0$ and 0.5 microns

ETCH POLY LEFT P1.X = 0.5

ETCH OXIDE TRAP THICK = 0.04

\$ 21. Deposit a thin layer of oxide

DEPOSIT OXIDE THICKNESS = 0.02

\$ 22. LDD implant

IMPLANT PHOS ENERGY = 50 DOSE = 5E13 IMPL. TAB = PHOSPHORUS

\$ 23. LTO

DEPOSIT OXIDE THICK = 0.2

\$ 24. Establish a sidewall spacer

ETCH OXIDE TRAP THICK = 0.22

\$ 25. Source/drain implant

IMPLANT ARSENIC ENERGY = 100 DOSE = 2E15

\$ 26. Oxide etch

ETCH OXIDE LEFT p1.x = 0.5

\$ 27. Use an oxidation model that understands polysilicon

METHOD COMPRESS

\$ 28. Source/drain reoxidation (including the polysilicon gate)

DIFFUSE TEMP = 900 TIME = 30 DRYO2

\$ 29. BPSG—etch to open windows for aluminum contact

DEPOSIT OXIDE THICK = 0.3

ETCH OXIDE LEFT P1.X = 0.3

\$ 30. Metallization—etch to create a source contact

```
DEPOSIT    ALUMINUM  THICK = 0.5  SPACES = 3
DEPOSIT    PHOTORESIST  THICK = 1.0
ETCH       PHOTORESIST  RIGHT  P1.X = 0.6
ETCH       ALUMINUM  TRAP  ANGLE = 85  THICK = 0.8
ETCH       PHOTORESIST  ALL
```

\$ 31. Reflect to form the complete structure ; then save it

```
SAVEFILE    OUT.FILE = S4EX7AS@LD
STRUCTURE   REFLECT  RIGHT
SAVEFILE    OUT.FILE = S4EX7AP@LD  MEDICI
```

\$ 32. End of loop

END

(2) 输出模拟结果图的输入文件

\$ TSUPREM-4 N-channel MOS application—part B

\$ Plot the results for delta = 0.3

\$ Read the structure

```
INITIALIZE  IN.FILE = S4EX7AS3
STRUCTURE   REFLECT RIGHT
```

\$ Prepare to plot contours of boron , phosphorus , and arsenic

```
SELECT      TITLE = "N-Channel (Delta = 0.3)"
PLOT.2D      SCALE  Y.MAX = 1.5
COLOR        SILICON  COLOR = 7
COLOR        OXIDE    COLOR = 5
COLOR        POLY     COLOR = 3
COLOR        ALUMI    COLOR = 2
```

```
SELECT      Z = LOG10(Boron)
FOREACH      VAL(14 TO 21 STEP 1)
    CONTOUR   VALUE = VAL  LINE = 5  COLOR = 2
END
```

```
SELECT      Z = LOG10 (Phosphorus)
```

```

FOREACH    VAL (16 TO 21 STEP 1)
    CONTOUR    VALUE = VAL  LINE = 4  COLOR = 3
END

SELECT     Z = LOG10 (Arsenic)
FOREACH    VAL (16 TO 21 STEP 1)
    CONTOUR    VALUE = VAL  LINE = 2  COLOR = 4
END

PLOT.2D    ^AX ^CL

$ Add labels
LABEL      X = 0.01  Y = - 0.8  LABEL = "Aluminum"
LABEL      X = 1.99  Y = - 0.8  LABEL = "Aluminum"  RIGHT
LABEL      X = 1.0   Y = - 0.45 LABEL = "BPSG"      CENTER
LABEL      X = 1.0   Y = - 0.2  LABEL = "Poly"      CENTER
LABEL      X = 0.05  Y = 0.35   LABEL = "Source"
LABEL      X = 1.95  Y = 0.35   LABEL = "Drain"      RIGHT

$ Plot the grid
SELECT     TITLE = "Final Mesh (Delta = 0.3)"
PLOT.2D    GRID  SCALE  Y.MAX = 3  C.GRID = 2

$ Plot arsenic profile in poly
SELECT     Z = Log10 (Active (Arsenic))  TITLE = "Arsenic Concentration in Gate"
PLOT.1D    X.V = 1  LEFT = - 0.4  RIGHT = 0  BOT = 16  TOP = 21  COLOR = 4
SELECT     Z = Log10 (Arsenic)
PLOT.1D    X.V = 1  ^AX ^CL  COLOR = 4  LINE = 2
LABEL      X = - 0.16  RIGHT  Y = 19  SIZE = 0.28  COLOR = 4  LABEL = "Active"
LABEL      X = - 0.15  LEFT   Y = 19.7  SIZE = 0.28  COLOR = 4  LABEL = "Total"

```

3. 输出信息

按输入文件 ,输出信息应包括以下作图输出.

- (i) $0.8\ \mu\text{m}$ NMOS 管的初始网格
- (ii) NMOS 管的沟道掺杂分布
- (iii) 最终的 $0.8\ \mu\text{m}$ NMOS 结构及其模拟网格

(iv) 多晶硅中自由运动砷原子浓度和总砷原子浓度的分布
这里给出(ii)(图 2.30)、(iii)(彩图 2)和(iv)(图 2.31).

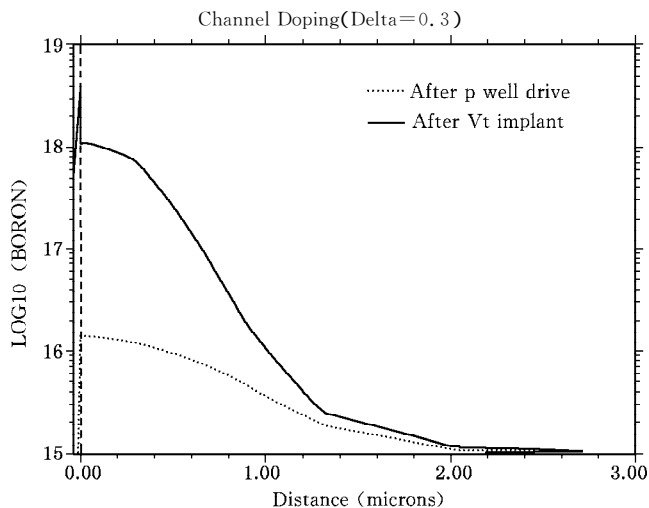


图 2.30 NMOS 管的沟道掺杂分布

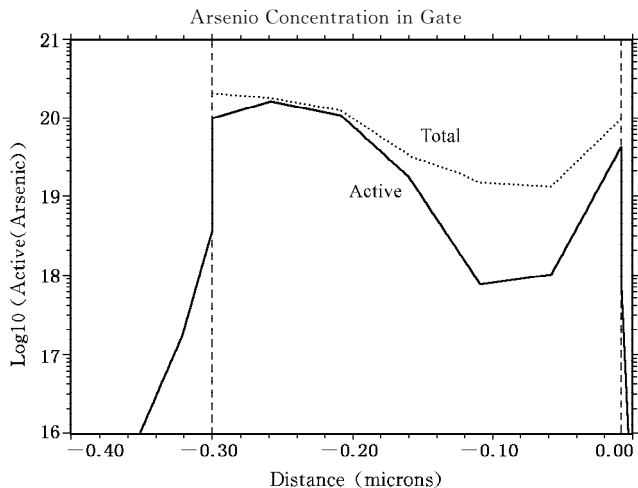


图 2.31 多晶硅中自由运动砷原子浓度和总砷原子浓度的分布

第二章参考资料

[2.1] D. A. Antoniadis , S. E. Hansen , R. W. Dutton , and A. G. Gonzalez , SUPREM I -A

- Program for IC Process Modeling and Simulation*, Stanford Technical Report, No. 5019-1, May 1977
- [2.2] D. A. Antoniadis, S. E. Hansen and R. W. Dutton, *SUPREM II -A Program for IC Process Modeling and Simulation*, Stanford Technical Report, No. 5019-2, June 1978
- [2.3] C. P. Ho and S. E. Hansen, *SUPREM III -A Program for Integrated Circuit Process Modeling and Simulation*, Stanford Technical Report, No. SEL 83-001, July 1983
- [2.4] M. E. Law, C. Rafferty and R. W. Dutton, *SUPREM IV Users Manual*, Technical Report, Integrated Circuits Laboratory, Department of Electrical Engineering, Stanford University, July 1986
- [2.5] M. D. Deal, S. E. Hansen, R. Anholt, S. Chou, J. D. Plummer, R. W. Dutton et al., SUPREM 3.5, Process Modeling of Gallium Arsenide, *IEDM Technical Digest*, 1987, p. 256
- [2.6] *TSUPREM-4 User Guide*, Version 2003.06, June 2003/ *Taurus TSUPREM-4 User Guide*, Version X-2005.10, October 2005, Synopsys, Inc
- [2.7] *ATHENA User's Manual*, Chapter 3—SSUPREM-4 Models, Silvaco International Inc., 1996, p. 3-1—p. 3-60
- [2.8] J. Lindhard, M. Scharff and M. Schiott, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, Vol. 33, 1963, p. 1
- [2.9] J. Gibbons and S. Mylroie, *Appl. Phys. Letts.*, Vol. 22, June 1973, p. 568
- [2.10] Mayer, Erihasen and Davies, *Ion Implantation in Semiconductors*, Academic Press, New York, 1974
- [2.11] W. K. Hofker et al., *Rad. Effects*, Vol. 24, 1975, p. 223
- [2.12] F. J. Morin and J. P. Maita, *Phys. Rev.*, Vol. 96, 1954, p. 28
- [2.13] J. S. Makris and B. J. Masters, *J. Appl. Phys.*, Vol. 42, 1971, p. 3750
- [2.14] R. B. Fair, Proc of Third International Symp. on Silicon Materials Science and Technology (77—2), *J. Electrochem. Soc.*, May 1977, p. 968
- [2.15] A. F. W. Willoughby, *J. Phys. D :Appl. Phys.*, Vol. 10, 1977, p. 455
- [2.16] R. B. Fair and J. C. C. Tsai, *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 124, 1977, p. 1107
- [2.17] S. Matsumoto et al., *Jap. J. of Appl. Phys.*, Vol. 16, 1977, p. 1177
- [2.18] M. Yoshida et al., *J. Appl. Phys.*, Vol. 45, 1975, p. 1948
- [2.19] G. Masetti, S. Solmi and G. Socini, *Solid-State Electron.*, Vol. 16, 1973, p. 1419
- [2.20] D. A. Antoniadis, A. G. Gonzalez and R. W. Dutton, *J. Electrochem Soc.*, Vol. 125, 1978, p. 813
- [2.21] S. M. Hu, *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 45, 1974, p. 1567
- [2.22] D. A. Antoniadis et al., *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 33, Dec. 1978, p. 1030
- [2.23] R. N. Ghoshtagore, *Solid-State Electron.*, Vol. 17, 1974, p. 1065

- [2. 24] R. O. Schwenker , E. S. Pan and R. F. Lever , *J. Appl. Phys.* , Vol. 42 , 1971 , p. 3195
- [2. 25] B. E. Deal and A. S. Grove , *J. Appl. Phys.* , Vol. 36 , 1965 , p. 3770
- [2. 26] C. P. Ho et al. , *J. Electrochem Soc.* , Vol. 125 , 1978 , p. 665
- [2. 27] “TMA SUPREM-3” (Commercial) Technology Modeling Associates , Inc. , 300 Hamilton Ave. , Palo Alto , Ca 94301 , USA
- [2. 28] “SSUPREM-3” , http://www.silvaco.com/products/vwf/athena/ss3/ss3_br.html
- [2. 29] P. M. Fahey , P. B. Griffin and J. D. Plummer , *Reviews of Modern Physics* , Vol. 61 , No. 2 , April 1989 , p. 289
- [2. 30] J. D. Plummer , et al. , Stanford Electronics Laboratories , TR DXG501-82 , July 1982
- [2. 31] R. B. Fair , *Impurity Doping Processes in Silicon* , edited by F. F. Y. Wang , North Holland and Publishing , Amsterdam , 1984
- [2. 32] J. Murota , et al. , *J. Appl. Phys.* , Vol. 50 , February 1979 , p. 804
- [2. 33] S. Mizuo and H. Higuchi , *Jap. J. Appl. Phys.* , Vol. 20 , April 1981 , p. 739
- [2. 34] R. B. Fair , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 128 , June 1981 , p. 1360
- [2. 35] D. A. Antoniadis , A. M. Lin and R. W. Dutton , *Appl. Phys. Lett.* , Vol. 33 , December 1978 , p. 1030
- [2. 36] H. F. Wolf , *Semiconductors* , Wiley-Interscience , New York , 1971
- [2. 37] M. Ghezzo and D. M. Brown , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 120 , January 1973 , p. 110
- [2. 38] J. W. Colby and L. E. Katz , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 123 , March 1976 , p. 409
- [2. 39] S. M. Hu , Materials Research Society Meeting , Boston , November 17—20 , 1980
- [2. 40] A. S. Grove , O. Leistiko , Jr. , and C. T. Sah , *J. Appl. Phys.* , Vol. 35 , September 1964 , p. 2695
- [2. 41] B. E. Deal , et al. , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 112 , March 1965 , p. 308
- [2. 42] R. Reif , T. I. Kamins and K. C. Saraswat , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 125 , 1978 , p. 1860
- [2. 43] R. Reif , T. I. Kamins and K. C. Saraswat , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 126 , 1979 , p. 1979
- [2. 44] R. Reif , T. I. Kamins and K. C. Saraswat , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 126 , 1979 , p. 653
- [2. 45] R. Reif and R. W. Dutton , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 128 , 1981 , p. 909
- [2. 46] R. Reif , *J. Electrochem. Soc.* , Vol. 129 , 1982 , p. 1122
- [2. 47] C. P. Ho , J. D. Plummer , S. E. Hansen and R. W. Dutton , *IEEE Trans. , Electron Devices* , Vol. ED-30 , No. 10 , November 1983 , p. 1438
- [2. 48] D. Chin , M. Kump and R. W. Dutton , *SUPRA* , Stanford Electronics Laboratories , Stanford University , CA. , Oct. 1979
- [2. 49] *SAMPLE Version 1. 6a Users Guide* , Electronics Research Laboratory , Dept. of Electrical Engineering and Computer Science , UC Berkeley , February , 1 , 1985

- [2. 50] Stanley Wolf , *Silicon Processing for the VLSI Era* , Volume2 : *Process Integration* , Lattice Press , California , USA , 1990 , p. 710
- [2. 51] B. R. Penumalli , "BICEPS" , *IEEE Trans. Electron Devices* . , Sept. 1983 , p. 983
- [2. 52] J. Lorenz et al. , "COMPOSITE" , *IEEE Trans. Electron Devices* , October 1985 , p. 216
- [2. 53] N. Guillemot , G. Pananakakis and P. Chenevier , *IEEE Trans. Electron Devices* , May , 1987 , p. 1033
- [2. 54] D. J. Chin et al. , *IEEE Trans. Electron Devices* , ED-30 , July , 1983 , p. 993
- [2. 55] D. Kao et al. , *Tech. Dig. IEDM* , 1985 , p. 388
- [2. 56] H. Z. Massoud , " Thermal Oxidation of Silicon in Dry Oxygen—Growth Kineties and Charge Characterization in the Thin Regime , " *Technical Report* , Stanford Electronics Laboratories , Stanford University , Stanford , California , June , 1983

第三章 半导体器件的一维模拟

本章介绍国际上最早实用的一维半导体器件分析软件 SEDAN-1^[3.1] 以及国际上现有的最高水平的一维半导体器件分析软件 SEDAN-3^[3.2].

§ 3.1 SEDAN-1 的一般描述

SEDAN 是 SEmiconductor Device ANalysis 的简称, 1 是第一个文本, SEDAN-1 是美国斯坦福大学集成电路实验室最早开发的一个实用的半导体器件分析程序, 它作为一个半导体器件特性的模拟器, 执行半导体器件的一维分析, 从杂质分布出发解出器件的电特性.

同其他当时出现的半导体器件分析程序相比, SEDAN-1 有两个重要特点: 一是在程序所采用的物理模型方面比较近代和精确, 考虑了杂质浓度及电场强度对迁移率的影响, 高掺杂浓度引起的禁带变窄对本征载流子浓度 n_{ie} 和电场强度分布的影响以及肖克莱—里特—霍尔 (Shockley-Read-Hall, 简称 SRH) 复合和俄歇 (Auger) 复合两种复合对复合速率的贡献等一些两级效应. 二是输入可直接用集成电路工艺模拟器 SUPREM-2 的输出. 这样, SUPREM-2 同 SEDAN-1 的联用, 可直接由已知工艺条件参数算出器件的电特性. 若再进一步将 SEDAN-1 的有关输出参数通过一个接口程序变换到符合电路分析程序 (例如 SPICE 程序) 输入所要求的参数, 可以组成一个如图 1.3 所示的联用模拟器, 实现由输入工艺条件参数直接输出电路特性的功能.

SEDAN-1 程序由主程序及 50 个子程序及函数组成. 用 FORTRAN 语言书写, 程序总共有语句 8 000 多条. SEDAN-1 程序的简要流程如图 3.1 所示.

SEDAN-1 输入文件的书写格式同 SUPREM-2 一样, 简易直观. SEDAN-1 程序输入文件中包含了所要分析的器件类型, 杂质分布, 偏置情况, 结果输出方式的选择等信息. 可供选择的器件类型有双极型 NPN 管 (包括正常及倒置联结两种情况), PN 结二极管, 其他具有某种杂质分布的二端结构以及 MOS 电容. 杂质分布可以直接取自 SUPREM-2 的输出. 也可以按输入文件规定的格式另行写入. SEDAN-1 允许用户挑选部分计算模型及有关参数, 使程序有更大的灵活性来研究不同模型及不同的有关参数值对计算结果的影响. SEDAN-1 的输出有打印数字

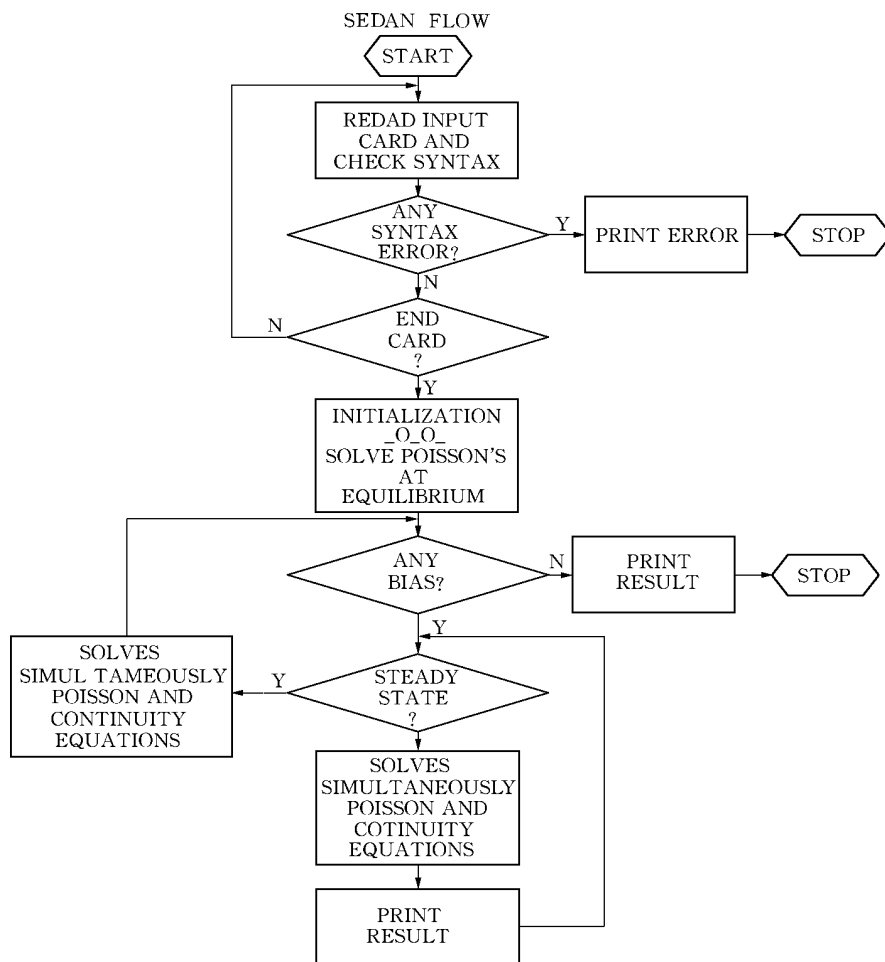


图 3.1 SEDAN-1 简要流程图(源于[3.1])

输出及作图输出. 在打印数字输出方面, 以双极型 NPN 管为例, 有每一偏置点的端电流密度, 每一不同类型层的薄层电阻, DC 电流增益 β 值, 发射极和基极的 Gummel 数以及其他有用信息的输出. 还有电子静电势, 电子和空穴准费米能级, 电场, 电子和空穴浓度, 净杂质浓度等参量随深度变化的打印数字输出. 在作图输出方面, 根据需要有以下几种图可供选择, 它们是电场—深度, 电子准费米能级—深度, 空穴准费米能级—深度, 静电势—深度, 空穴浓度—深度, 电子浓度—深度, 直流电流增益—集电极电流密度, 集电极电流密度— V_{BE} , 基极电流密度— V_{BE} , 二极管电流密度— V_D , 基极发射极间的结电容— V_{BE} , 基极集电极间的结电容— V_{BC} ,

二极管结电容— V_D , MOS 电容净电荷密度—表面势, MOS 电容电子电荷密度—表面势, MOS 电容空穴电荷密度—表面势, MOS 电容和氧化层电容的比— V_{GS} , 发射极到集电极的延迟时间—集电极电流密度等.

§ 3.2 SEDAN-1 执行的半导体基本方程

半导体及半导体器件的电特性可由 5 个物理关系(或称基本方程)描述,它们是 Poisson 方程,电子和空穴的输运方程,电子和空穴的连续性方程.用了适当的边界条件,可以由解下列 5 个基本方程得出载流子浓度,电流密度以及静电势.这 5 个基本方程是:

Poisson 方程

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_{si}}(P - n + N) \quad (3.1)$$

输运方程

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (3.2)$$

$$J_p = q\mu_p pE - qD_p \frac{dp}{dx} \quad (3.3)$$

连续性方程

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} - U \quad (3.4)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} - U \quad (3.5)$$

因为 SEDAN-1 程序只实现一维分析,所以上列方程都用一维形式.一维 Poisson 方程表示静电势 ψ 的两次微商同空穴 P 电子 n 以及净杂质浓度 N (施主减去受主)的关系, q 是电子电荷, ϵ_{si} 是硅的电容率.输运方程中,在总的电子电流密度 J_n 和总的空穴电流密度 J_p 中都包含了漂移和扩散电流两项.电子及空穴迁移率 μ_n 及 μ_p 同电子及空穴扩散常数 D_n 及 D_p 由爱因斯坦关系相联

$$\mu_n = D_n / V_{kT} \quad (3.6)$$

$$\mu_p = D_p / V_{kT} \quad (3.7)$$

$V_{kT} = kT/q$, 为热电压.迁移率同总杂质浓度及电场有关.电场的 x 分量由静电势对 x 微商的负值确定.

$$E_x = -\frac{d\psi}{dx} \quad (3.8)$$

连续性方程同时间有关,复合速率 U 的表示考虑了单能级的 SRH 复合机构以及 Auger 复合机构.

为了方便于微商及数值计算,基本方程中所有的变量和参数都用适当的常数归一化成为无量纲的形式. 归一化因子以及它们的值和单位列于表 3.1.

表 3.1 归一化参数、归一化因子及物理常数(源于[3.1])

归一化参数		归一化因子		
名 称	符 号	符 号	数 值	单 位
位置坐标	x	$L_{DI} = \sqrt{\frac{V_{KT} \epsilon_{Si}}{qn_i}}$	3.405×10^{-3}	厘米
时 间	t	$t_0 = L_{DI}^2 / \mu_0 V_{KT}$	4.483×10^{-4}	秒
静电势/准费米能级	ψ, ϕ_n, ϕ_p	$V_{KT} = kT/q$	0.025 86	伏
电 场	E	V_{KT} / L_{DI}	7.595	伏/厘米
载流子密度和净杂质浓度	n, p, N	n_i	1.45×10^{10}	厘米 ⁻³
载流子迁移率	μ_n, μ_p	μ_0	1.0	厘米 ² /伏—秒
复 合 率	U	$U_0 = \mu_0 V_{KT} n_i / L_{DI}^2$	3.234×10^{13}	1/秒—厘米 ³
电流密度	J_n, J_p	$J_0 = q\mu_0 n_i V_{KT} / L_{DI}$	1.762×10^{-8}	库仑/秒—厘米 ²

物理参数及常数

名 称	符号	数值	单位
玻尔兹曼常数	k	8.62×10^{-5}	电子伏/°K
温 度	T	800	°K
电子电荷	q	1.6×10^{-19}	库仑
Si 电容率	ϵ_{Si}	1.04×10^{-12}	法拉/厘米
SiO ₂ 电容率	ϵ_{ox}	3.45×10^{-13}	法拉/厘米

归一化的器件方程为：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -P + n - N \quad (3.9)$$

$$J_n = \mu_n n E + \mu_n \frac{dn}{dx} \quad (3.10)$$

$$J_p = \mu_p p E - \mu_p \frac{dp}{dx} \quad (3.11)$$

$$\frac{dn}{dt} = \frac{dJ_n}{dx} - U \quad (3.12)$$

$$\frac{dp}{dt} = \frac{dJ_p}{dx} - U \quad (3.13)$$

注意(3.9)——(3.13)式中所有变量和参数都是归一化后的无量纲的量. 且为了简化, 略去了电场 x 分量的足标.

§ 3.3 SEDAN-1 中几个参数的物理模型

3.3.1 杂质浓度及电场对迁移率的影响

我们知道, 散射几率的增加将导致电子和空穴迁移率的减小. 增加散射几率通过两种机构. 一种是通过增加杂质原子(包括施主和受主), 一种是通过增强电场强度因而增强载流子能量. 为了考虑这两种机构对迁移率的影响, 电子和空穴的迁移率应表示为杂质总浓度及电场的函数.

SEDAN-1 程序处理迁移率同杂质总浓度关系时, 或者用一组较近代的杂质总浓度同电子及空穴迁移率的关系数据. 用内插法去找出用户需要知道的某个杂质浓度处迁移率的正确值. 或者选用下列经验函数关系式, 计算迁移率 $\mu(x)$ 随杂质总浓度 $N_T(x)$ 的变化,

$$\mu(x) = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left[\frac{N_T(x)}{N^*} \right]^K} \quad (3.14)$$

上式中所含的几个参数 $\mu_{\max}$, $\mu_{\min}$, N^* , K 用表 3.2 所列数据.

表 3.2 几个计算迁移率的参数值(源于[3.1])

	$\mu_{\max}$ 厘米 ² /伏—秒	$\mu_{\min}$ 厘米 ² /伏—秒	N^* 厘米 ⁻³	K —	E_c 伏/厘米
n	1 407.3	71.12	1.059E17	0.729 1	7 396
p	467.73	49.71	1.606E17	0.700 0	20 000

迁移率 $\mu(x)$ 同电场 $E(x)$ 关系, SEDAN-1 程序通过下列经验关系式计算,

$$\mu(x) = \mu(N_T) [1 + E(x)/E_c]^{-1} \quad (3.15)$$

式中 $\mu(N_T)$ 是考虑了杂质总浓度对迁移率影响后的迁移率, E_c 是速度饱和的临界电场, 这一经验参数值为电子是 7.396×10^3 伏/厘米, 为空穴是 2.0×10^4 伏/厘米 (见表 3.2 所示)。

此外, SEDAN-1 源程序中有一组较近代的 $\mu(x)$ 同 $N_T(x)$ 关系的数据, 它包含在子程序 RMOB 中, 这组关系数据可以很容易地置换, 只要有更近代, 更精确的数据, 再通过修改子程序 RMOB 中有关部分, 而表 3.2 中所列出的包含在 (3.14) 和 (3.15) 经验关系式中所用的迁移率有关参数, 也允许用户在书写输入文件时很方便地修改或另选。

3.3.2 高掺杂浓度引起禁带变窄

当掺杂浓度高于 $10^{17}/\text{厘米}^3$, 同杂质能级相关联的电子波函数开始交叠形成能带, 这个杂质能带同本征导带及价带的边缘交叠, 能级的展宽引起局部处的禁带变窄, 使有效本征电子浓度 n_{ie} 增加, 描述禁带变窄对本征载流子浓度的影响, SEDAN-1 程序采用 Slotboom^[3.3] 指出的表示式:

$$n_{ie} = n_i \exp \left\{ \frac{V_1}{V_{KT}} \left[\ln \frac{N}{N_0} + \sqrt{\ln \left(\frac{N}{N_0} \right)^2 + C} \right] \right\} \quad (3.16)$$

这里 n_i 为无禁带变窄时的本征载流子浓度, $V_1 = 9.0$ 毫伏, $N_0 = 10^{17}/\text{厘米}^3$, $C = 0.5$ 。

局部处的禁带变窄也影响输运, 不均匀的能带边缘产生一个附加在可动载流子上的力, 这个影响必须包括在输运方程中, 有些作者将这一效应作为附加的准电子场强分量加到输运方程^[3.4], 这样, 电子和空穴的输运方程即电子和空穴电流密度的表示式变成:

$$J_n = qn\mu_n \left(-\frac{d\psi}{dx} - \frac{1}{q} \frac{dDEC}{dx} \right) + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (3.17)$$

$$J_p = qp\mu_p \left(-\frac{d\psi}{dx} + \frac{1}{q} \frac{dDEV}{dx} \right) - qD_p \frac{dp}{dx} \quad (3.18)$$

一般来说上两式中的 DEC 和 DEV 是能带结构的一个复杂函数, 但是若应用波尔兹曼统计, DEC 和 DEV 可以看作重掺杂效应引起的导带和价带边缘的变化, 下面我们对 $\frac{dDEC}{dx}$ 的表示式作推导, 在平衡情况下电子浓度由

$$n = n_{ie} \exp(\psi/V_{kT}) \quad (3.19)$$

表示,因为费米能级是常数.若再采用特殊电压参考,将常数值定为零,在平衡时有 J_n 为零.将(3.19)式代入(3.17)式再利用爱因斯坦关系后便可得出

$$\frac{dDEC}{dx} = \frac{1}{n_{ie}} V_{kT} \cdot q \frac{dn_{ie}}{dx} \quad (3.20)$$

因为重掺杂引起的能带变化同偏压无关,所以可以用(3.20)式直接代入(3.17)式得到

$$J_n = q\mu_n n E_{T_n} + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (3.21)$$

式中

$$E_{T_n} = -\frac{d}{dx} \left(\psi + V_{kT} \ln \frac{n_{ie}}{n_i} \right) \quad (3.22)$$

对于空穴,用完全类似的方法可得到

$$J_p = q\mu_p p E_{T_p} - qD_p \frac{dp}{dx} \quad (3.23)$$

$$E_{T_p} = -\frac{d}{dx} \left(\psi - V_{kT} \ln \frac{n_{ie}}{n_i} \right) \quad (3.24)$$

由上述,可以看出重掺杂引起的禁带变窄产生了两个重要物理效应:一是有效本征浓度变成了净杂质浓度的函数.另一是非均匀的能带边缘产生一个作用在可动载流子上的附加力.在玻尔兹曼统计适用的情况下,这个力同 n_{ie} 的梯度间有简单的关系,能够看作加到输运方程中去的一个附加电场分量.

3.3.3 两种复合机构对复合率的贡献

连续性方程中复合率 U 的计算,考虑了两种复合机构,一种是空穴和电子通过复合中心复合的所谓 SRH 复合,另一种是包含三质点过程的所谓 Auger 复合.这样有

$$U = U_{SRH} + U_A \quad (3.25)$$

这里 U_{SRH} 和 U_A 分别为 SRH 及 Auger 复合率.

对于单一复合中心能级,SRH 复合率是:

$$U_{SRH} = \frac{(np - n_{ie}^2)}{\tau_n(n + n_1) + \tau_p(p + p_1)} \quad (3.26)$$

式中 $n_1 = n_{ie} \exp[(E_t/q + \psi)/V_{KT}]$ 而 $p_1 = n_{ie} \exp[-(\psi + E_t/q)/V_{KT}]$, E_t 是本征费米能级为参考的复合中心能级相应的能量值, 而 τ_p 、 τ_n 分别是作为少数载流子的空穴和电子的寿命。

Auger 复合过程是碰撞电离的逆过程, 这个过程既包含了电子—空穴对的复合, 也包含了多余的能量转移到第三个载流子作为动能的过程。这种三质点过程决定的复合率, 可表示为

$$U_A = C_n(n^2p - nn_{ie}^2) + C_p(p^2n - pn_{ie}^2) \quad (3.27)$$

式中 C_n 、 C_p 分别表示同 n 及 p 相应的由实验决定的 Auger 复合数, 其典型值见表 3.3 所示。

表 3.3 复合参数(源于[3.1])

	$C_n, C_p (U_A \text{ 用}) \text{厘米}^6 \text{秒}^{-1}$	$N_{on}, N_{op} (U_{SRH} \text{ 用}) \text{厘米}^{-3}$	$\tau_{no}, \tau_{po} (U_{SRH} \text{ 用}) \text{秒}$
n	2.8×10^{-31}	5×10^{16}	0.5×10^{-6}
p	9.9×10^{-32}	5×10^{16}	0.5×10^{-6}

由于近年来实验结果已经证明, 所有的寿命都同杂质浓度有关。SEDAN-1 所用的物理模型中忽略了杂质浓度对 U_A 的影响, 即没有考虑杂质浓度对 C_n 和 C_p 的影响, 但考虑了对 U_{SRH} 的影响。考虑了杂质浓度对寿命影响后, 电子及空穴寿命分别用如下表示式

$$\tau_n = \frac{\tau_{no}}{1 + \frac{N_T}{N_{on}}} \quad (3.28)$$

$$\tau_p = \frac{\tau_{po}}{1 + \frac{N_T}{N_{op}}} \quad (3.29)$$

式(3.28)及式(3.29)中的经验常数 τ_{no} 、 τ_{po} 、 N_{on} 、 N_{op} 一般同所要计算的过程的特殊情况有关, 其典型值列于表 3.3。

§ 3.4 SEDAN-1 的使用和应用例举

3.4.1 SEDAN-1 的使用

同使用 SUPREM 系列工艺模拟软件相似, 使用 SEDAN-1 软件之前必须了解

SEDAN-1 的功能和它所用的各种模型以及阅读和理解 SEDAN-1 的输入文件书写格式[参见附录二]

SEDAN-1 和 SUPREM-2 联用时,即 SEDAN-1 的一维杂质分布的输入来自 SUPREM-2 的输出时则要注意: SUPREM-2 输入文件 GRID 语句中硅的最大模拟深度 YMAX 参数值的设定要大于或等于 SEDAN-1 输入文件 GRID 语句中总的硅模拟深度的设定值; SUPREM-2 杂质模拟结果的保存语句 SAVE 中的 LUMN= N 的 N 应与 SEDAN-1 PROFILE 语句的 LUMN= N 中的 N 值一致。

3.4.2 SEDAN-1 的应用例举

SEDAN-1 主要应用于模拟双极型 NPN 晶体管 and MOS 电容;杂质分布参数可以取自 SUPREM-2 的输出或由解析式计算。

3.4.2.1 SEDAN-1 的输入文件例举

以下输入文件及输出信息例举均源于[3.1]

例一 双极型 NPN 晶体管,杂质分布取自 SUPREM-2 的输出

```
TITLE      SEDAN  INPUT  TEST  NPNT(1)
GRID       NREG = 1 , STSZ = .05 , NSTP = 20
GRID       NREG = 2 , STSZ = .01325 , NSTP = 150
GRID       NREG = 3 , STSZ = .05 , NSTP = 30
DEVICE     TYPE = NPNT , BACO = 2.17

COMMENT    — BIPOLAR  PROFILE  FROM  SUPREM II —
PROFILE    TYPE = SUPR , LUMN = 22
BIAS       VBEF = 0 , VBEL = .9 , VBES = .1 , VCEF = 1 , VCEL = 5 , VCES = 1
MODEL      SRHR = Y , AUG = N , BGNW = Y
COMPUTE    FT

PRINT      HEAD = Y

END
```

例二 双极型 NPN 晶体管,杂质分布由解析式计算

```
TITLE      SEDAN  INPUT  TEST  NPNT(2)
```

```

GRID      NREG = 1 , STSZ = .025 , NSTP = 200
DEVICE    TYPE = NPNT , BACO = 1.3

COMMENT   —ANALYTICAL BIPOLAR PROFILE WITH BURIED LAYER—
PROFILE   TYPE = ANAL
PROFILE   NLAY = 1 , TLAY = CNST , PAR1 = 0 , PAR2 = 5 , PAR3 = - 1E15
PROFILE   NLAY = 2 , TLAY = GDIF , PAR1 = 0 , PAR2 = .33 , PAR3 = - 1E19
PROFILE   NLAY = 3 , TLAY = GDIF , PAR1 = 0 , PAR2 = .95 , PAR3 = 3.64E16
PROFILE   NLAY = 4 , TLAY = GDIF , PAR1 = 1 , PAR2 = .33 , PAR3 = - 1E19
BIAS      VBEF = .0 , VBEL = .9 , VBES = .1 VCEF = 1 , VCEL = 5 , VCES = 1
MODEL     SRHR = Y , AUG = Y , BGNW = Y

PRINT     HEAD = Y , PRT1 = Y
PLOT      BETA = Y , CCDE = Y , BCDE = Y

END

```

例三 MOS 结构 杂质分布取自 SUPREM-2 的输出

```

TITLE     SEDAN  INPUT  TEST  MOS(1)
GRID      NREG = 1 , STSZ = .01 , NSTP = 200
DEVICE    TYPE = MOSC , OXTH = .09

COMMENT   —MOS  PROFILE  (P-SUBSTRATE)  FROM  SUPREM II—
PROFILE   TYPE = SUPR , LUMN = 22
BIAS      VGSF = 0 , VGSL = 3 , VGSS = .5

PRINT     HEAD = Y
PLOT      NETQ = Y

END

```

例四 MOS 结构 杂质分布由解析式计算

```

TITLE     SEDAN  INPUT  TEST  MOS(2)
GRID      NREG = 1 , STSZ = .02 , NSTP = 3  $ THREE  REGIONS  TO  ASSURE
GRID      NREG = 2 , STSZ = .004 , NSTP = 100  $ SUFFICIENTLY  FINE  GRID
GRID      NREG = 3 , STSZ = .02 , NSTP = 77  $ SPACING  AT  THE  INTERFACE
DEVICE    TYPE = MOSC , OXTH = .1

```

```
COMMENT  —MOS  PROFILE  (P-SUBSTRATE)  FROM  ANALYTICAL—
PROFILE  TYPE = ANAL
PROFILE  NLAY = 1 , TLAY = CNST , PAR1 = 0 , PAR2 = 2 , PAR3 = 1E15
PROFILE  NLAY = 2 , TLAY = GIMP , PAR1 = . 1 , PAR2 = . 2 , PAR3 = 8E15

BIAS      VGSF = 0 , VGSL = 3 , VGSS = 1 , VSBF = 1 , VSBL = 1 , VFBA = 0
COMPUTE  MOS. CAPA

PRINT     HEAD = Y

END
```

3.4.2.2 SEDAN-1 的输出信息例举

例一 外延 NPN 晶体管的若干输出作图信息

此 NPN 晶体管具有 $0.5\ \mu\text{m}$ 基区, 掺杂分布由解析法得出的 3 个 Gaussian 扩散及一个常数外延层给出。

以下几种作图信息, 根据 SEDAN-1 的输出信息给出。

由图 3.2 可见, 在高注入情况下, 注入到基区的电子浓度大大超过基区杂质浓度, 在基区形成一个十分均匀的电势分布, 为维持准电中性条件, 空穴浓度增加到与电子浓度相等的值。

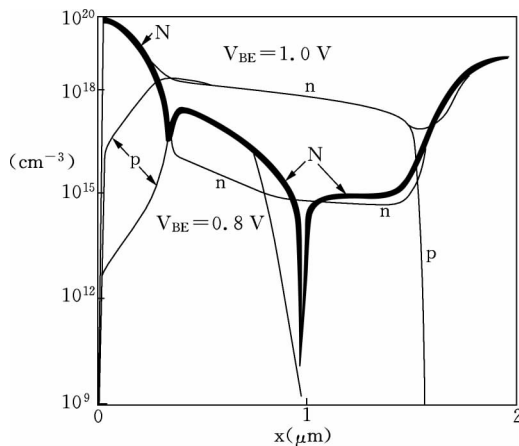


图 3.2 净杂质浓度 N 以及在中等偏置 0.8 V 及高注入情况 1.0 V 时, 电子浓度 n 和空穴浓度 p 的一维分布

图 3.3(a)显示,在高注入时,集电极电流密度减小.这是源于高注入时,注入基区的载流子浓度大大超过基区杂质浓度导致有效基区宽度增加所致.但此时基区电流仍按指数增加,使归一化电流放大系数减小,见图 3.3(b)所示.

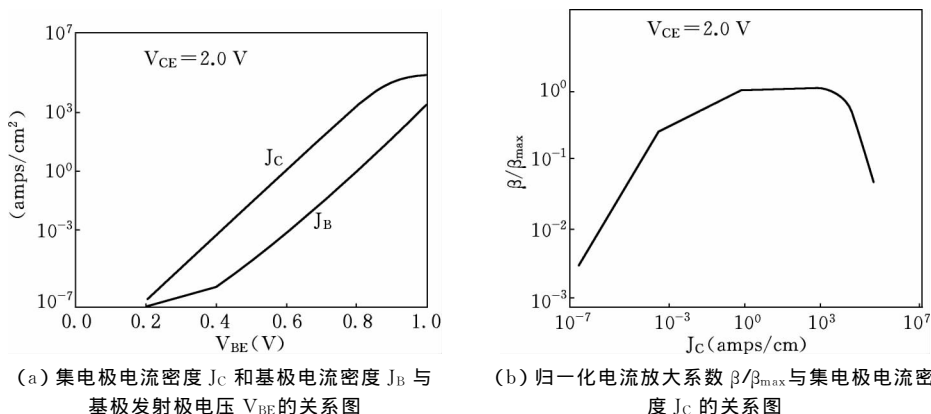


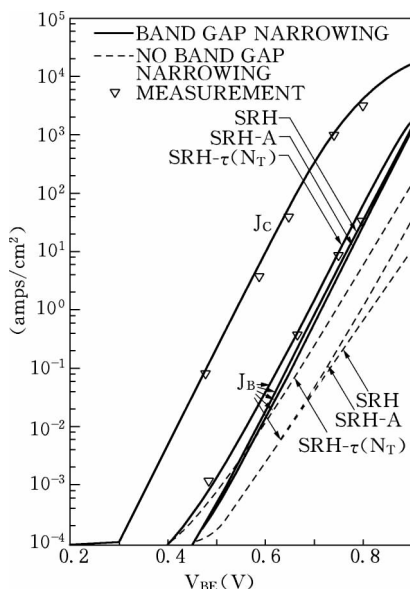
图 3.3 外延 NPN 晶体管的电流放大特性与 V_{BE} 和 J_C 的关系

图 3.4(a)和 3.4(b)中 SRH 表示考虑具有常数寿命的 Shockley-Read-Hall 复合机构, $SRH-\tau(N_T)$ 表示考虑寿命同浓度相关的复合机构, $SRH-A$ 表示考虑 SRH 和 Auger 两种复合机构.

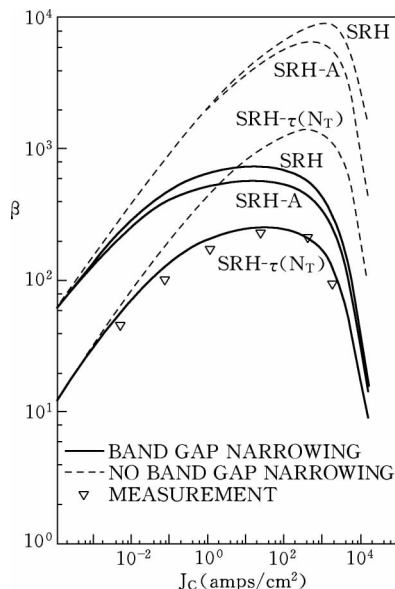
图 3.4(a)显示,对于 $J_C \sim V_{BE}$,是否考虑禁带变窄,考虑哪种复合机构都并不灵敏.这是因为 J_C 主要决定于电子注入到掺杂较轻的基区,那里禁带变窄和与掺杂浓度相关的复合的影响不重要.

图 3.4(a)和图 3.4(b)显示,是否考虑禁带变窄,考虑哪种复合机构对 $J_B \sim V_{BE}$,因而也对电流增益 β ,有不同程度的影响.这种影响可通过对基极电流的二种主要分量作解释.两种主要分量分别是空穴注入到发射区形成的分量以及注入空穴在基—射空间电荷区同电子复合形成的分量;前者在半对数坐标中其斜率正比于 $1/V_{kT}$, V_{kT} 为热电压, $V_{kT} = \frac{kT}{q}$,后者其斜率正比于 $1/2V_{kT}$.

图 3.4(a)和图 3.4(b)中的模拟结果表明,不论是考虑或不考虑禁带变窄情况,对于考虑 SRH 复合,考虑 $SRH-A$ 复合以及考虑 $SRH-\tau(N_T)$ 复合 3 种不同复合情况,其 J_B 值依次减小, β 值依次增加.而当考虑某种复合机构时,需考虑禁带变窄的情况, J_B 值比不需考虑的情况高而 β 值比不需考虑的情况低.这些模拟结果的更详细的解释,可参阅文献[3.1]和[3.5].



(a) 禁带变窄和复合机构对集电极和基极电流密度的影响



(b) 禁带变窄和复合机构对电流增益的影响

图 3.4 禁带变窄和复合机构对集电极和基极电流密度以及电流增益的影响

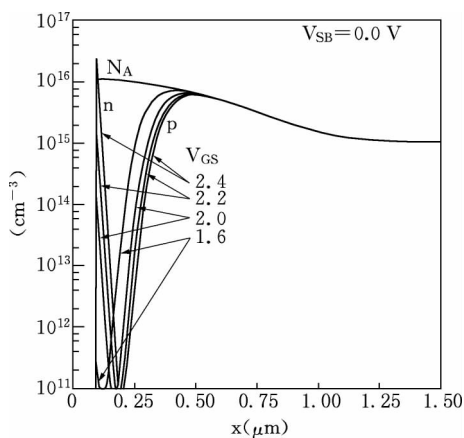
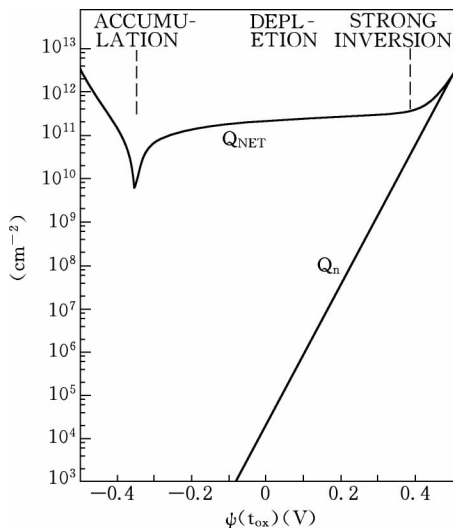
图 3.5 一个典型的非均匀掺杂 p 型衬底 MOS 电容中栅源电压 V_{GS} 同电子浓度 n 和空穴浓度 p 分布的相关性图 3.6 一个典型的 p 型衬底 MOS 电容的总电子表面面密度 Q_n 和净电荷表面面密度 Q_{NET} 同表面势的相关性

图 3.4(a)和图 3.4(b)中给出的实测结果表明,考虑禁带变窄及采用 $\text{SRH-}\tau(N_T)$ 复合模型的模拟结果符合实测结果.

例二 非均匀掺杂衬底 MOS 电容的若干输出作图信息

为阈值电压调节而进行的离子注入,使 MOS 电容的衬底呈非均匀掺杂.

本例给出的模拟结果帮助我们估计阈值调节离子注入对 MOS 晶体管阈值电压的调节作用.

图 3.5 中,表面电子浓度 $n=N_A$ 时, V_{GS} 的值可视为阈值电压的理论定义值.

图 3.6 中集积、耗尽和强反型 3 个区清晰可见,也可从表面刚达到强反型区时 ($Q_{\text{NET}}=2N_A^-$ 或 $2n$) 的 $\phi(t_{ox})$ 估算阈值电压.

§ 3.5 SEDAN-3

3.5.1 SEDAN-3 概述

美国 Stanford 大学 1979 年开发成功和释放应用 SEDAN-1 后,在 1982 年推出了一个改进版本 SEDAN-2^[3.5],接着 1985 年又推出了一个较大地扩展了应用的 SEDAN-3.相对于 SEDAN-1,SEDAN-2 的主要改进是加入了对 pnp 晶体管的模拟,但依旧只能模拟硅双极型二端和三端器件和 MOS 电容;而 SEDAN-3 对器件的模拟扩展到了非硅材料制成的器件,非硅材料可以是二元化合物半导体 GaAs,三元化合物半导体 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 或 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$;可模拟的器件类型不仅包括硅二极管和晶体管、具有三元接触的 MOS 电容,还包括 Schottky 二极管,具有多晶硅发射极的硅晶体管以及任何 SIS(Semiconductor-Insulator-Semiconductor)结构.

SEDAN-3 模拟功能的扩展主要基于:

- (i) 为通用的半导体方程用了一个称之为“盒”法(“box” method)的离散化方法,
- (ii) 用 Fermi-Dirac 统计置换了 Boltzmann 统计,
- (iii) 在载流子输运过程中加入了隧道机构的考虑,
- (iv) 用了易于分析具有 Schottky 接触的器件和串联外电阻的解半导体方程的边界条件.

与 SEDAN-1 相同,SEDAN-3 输入信息主要包括器件结构和掺杂分布,掺杂分布或来自解析说明或来自工艺模拟程序的输出,但如果分析三元化合半导体材料制成的器件,则组分 x 必须包括在 SEDAN-3 的输入信息中.

3.5.2 SEDAN-3 执行的基本方程

同 SEDAN-1 一样, SEDAN-3 中执行的是一维的 Poisson 方程、电子和空穴的连续性方程以及电子和空穴的输运方程(或称电子和空穴的电流密度关系式). 这 5 个方程文献[3.2]中写成:

Poisson 方程

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = q(p - n + N_D^+ - N_A^-), \quad (3.30)$$

电子和空穴的连续性方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial j_n}{\partial x} + G - R \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \frac{\partial j_p}{\partial x} + G - R, \quad (3.32)$$

电子和空穴的电流密度表示式

$$j_n = -q\mu_n n \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \quad (3.33)$$

$$j_p = -q\mu_p p \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \quad (3.34)$$

式(3.31)和(3.32)中的电子—空穴对产生率 G 和电子—空穴对复合率 R 通常是 x 和 t 的已知函数, 在考虑 SRH 复合及 Auger 复合后, 可表示成电子浓度 n 、空穴浓度 p 的函数. 式(3.33)和(3.34)中电子准费米势 ϕ_n 和空穴准费米势 ϕ_p 通过玻尔兹曼或费米—狄拉克分布函数与 n, p 及电子静电势 ψ 有关. 这样, 5 个基本方程(3.30)—(3.34)中, 仅有 3 个基本相关变量 n, p 和 ψ 同空间 x 和时间 t 相关. 解得同 x, t 相关的 n, p 和 ψ 后, 就可求出不同偏置条件下的 I - V 特性曲线以及研究器件结构(包括器件中的掺杂分布, 器件材料的组分)对器件性能的影响, 从而实现器件的最佳化设计.

与 SEDAN-1 不同, 在解半导体方程前, SEDAN-3 的开发者在局部平衡的假设下, 用费米—狄拉克分布替代玻尔兹曼分布来描述电子和空穴浓度按费米能量 E_{F_n} 和 E_{F_p} 的统计分布, 使有:

$$n = N_c F_{1/2} \left(\frac{E_{F_n} - E_c}{kT} \right) \quad (3.35)$$

$$p = N_V F_{1/2} \left(\frac{E_V - E_{F_p}}{kT} \right) \quad (3.36)$$

这里 N_C 和 N_V 分别为导带和价带的有效态密度, $F_{1/2}$ 为 $1/2$ 级别的费米积分(参见文献[3.2]的附录 A), E_C 和 E_V 分别是能带图中导带的底边缘和价带的顶边缘, T 是绝对温度, 而 $E_{F_n} = -q\phi_n$, $E_{F_p} = -q\phi_p$. 分别引入电子和空穴费米积分的自变量 η_n 和 η_p ,

$$\eta_n = \frac{E_{F_n} - E_C}{kT} \quad (3.37)$$

$$\eta_p = \frac{E_V - E_{F_p}}{kT} \quad (3.38)$$

同时分别引入电子和空穴的费米-狄拉克简并因子 γ_n 和 γ_p ,

$$\gamma_n = \frac{F_{1/2}(\eta_n)}{\exp(\eta_n)} \quad (3.39)$$

$$\gamma_p = \frac{F_{1/2}(\eta_p)}{\exp(\eta_p)} \quad (3.40)$$

这样就有:

$$n = N_C \gamma_n e^{\eta_n} \quad (3.41)$$

$$p = N_V \gamma_p e^{\eta_p} \quad (3.42)$$

式(3.41)和(3.42)相似于使用玻尔兹曼统计分布的 Shockley 辅助方程^[3.6]. 其中 γ_n 和 γ_p 通常小于或等于 1. 在热平衡情况下, 整个器件中费米能量是相等的, 即 $E_{F_n} = E_{F_p}$, 则有:

$$np = N_C N_V \gamma_n \gamma_p e^{-E_g/kT} = n_{ie}^2 \gamma_n \gamma_p \quad (3.43)$$

这里禁带宽度 $E_g = E_C - E_V$, 而有效本征载流子浓度 $n_{ie} = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT}$

SEDAN-3 中还定义了一个称作通用势 (generalized potential) 的量 Ψ , 其定义式为:

$$-q\Psi = \frac{1}{2} \left(E_C + E_V - kT \ln \frac{N_C}{N_V} \right) \quad (3.44)$$

在非均匀能带结构, Ψ 不是实际的静电势, 不是 Poisson 方程的解, 但通过能带结构参数, 它接近于同真空能级 E_l 有关, 而 E_l 是 Poisson 方程的解, E_l 同一 $q\phi$ 仅差一常数, 即有:

$$E_i = -q\psi + \text{const.} \quad (3.45)$$

另,按 E_i 和电子亲和势 χ 的定义有:

$$E_i = E_c + \chi \quad (3.46)$$

将式(3.44)代入式(3.46),则有:

$$E_i = -q\Psi + \frac{1}{2} \left(kT \ln \frac{N_c}{N_v} + E_g \right) + \chi \quad (3.47)$$

由式(3.45)和(3.47),则有:

$$-q\psi + \text{const.} = -q\Psi + \frac{1}{2} \left(kT \ln \frac{N_c}{N_v} + E_g \right) + \chi \quad (3.48)$$

式(3.48)对 x 求导后有:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Psi - \frac{1}{q} \left[\frac{1}{2} \left(E_g + kT \ln \frac{N_c}{N_v} \right) + \chi \right] \right\} = \frac{\partial}{\partial x} (\Psi - \theta) \quad (3.49)$$

其中
$$\theta = \frac{1}{q} \left[\frac{1}{2} \left(E_g + kT \ln \frac{N_c}{N_v} \right) + \chi \right] \quad (3.50)$$

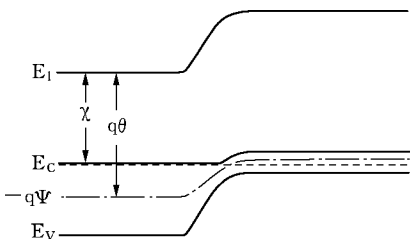


图 3.7 显示 E_i , χ , $-q\Psi$, $q\theta$ 的通用能带图(源于[3.2])

显示 E_i , χ , $-q\Psi$, $q\theta$ 定义和相互关系的通用能带图见图 3.7 所示.

将式(3.49)代入 Poisson 方程(3.30)则有经 SEDAN-3 开发者修改的 Poisson 方程:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[-\epsilon \frac{\partial}{\partial x} (\Psi - \theta) \right] = q(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (3.51)$$

由上式若 θ 在整个空间中是常数,即 E_g , N_c , N_v 和 χ 同位置无关,则方程(3.51)就

退化到原来的 Poisson 方程, Ψ 和 ϕ 完全相同.

若用 Ψ 及 n_{ie} 的表示式代入式(3.41)和(3.42),可得到:

$$n = n_{ie} \gamma_n \left(\frac{\Psi - \phi_n}{V_t} \right) \quad (3.52)$$

$$p = n_{ie} \gamma_p \left(\frac{\phi_p - \Psi}{V_t} \right) \quad (3.53)$$

这里 $V_t = \frac{kT}{q}$ 称作热电压. 用(3.52)和(3.53)式分别代入(3.33)和(3.34)式, 消去 ϕ_n 和 ϕ_p , 引入 $n_{in} = n_{ie} \gamma_n$ 和 $n_{ip} = n_{ie} \gamma_p$, 可得到:

$$j_n = kT\mu_n \frac{\partial n}{\partial x} + qn\mu_n \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi + \frac{kT}{q} \ln n_{in} \right) \right] \quad (3.54)$$

$$j_p = -kT\mu_p \frac{\partial p}{\partial x} + qp\mu_p \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi - \frac{kT}{q} \ln n_{ip} \right) \right] \quad (3.55)$$

式(3.54)和(3.55)分别是修改过的电子和空穴的电流密度关系式. 这样, 式(3.51), (3.31), (3.32), (3.54), (3.55)构成了在 SEDAN-3 中采用的 5 个基本半导体方程.

为克服基本半导体方程中各变量的数值存在巨大差别所形成的计算机模拟的困难, 在解方程前还需将方程归一化. 归一化后的基本方程见式(3.56)—(3.58)

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\Psi - \theta) = n - p + N_A^- - N_D^+ \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_n \left(n\epsilon_n + \frac{\partial n}{\partial x} \right) \right] + G - R \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_p \left(-p\epsilon_p + \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] + G - R \quad (3.58)$$

这里式(3.57)和(3.58)已是把电子和空穴连续性方程归并代入电子电流密度和空穴电流密度关系式后得出的方程, 且假设介电常数 ϵ 同 x 无关. 其中作用在电子和空穴的归一化电场强度分别为 ϵ_n 和 ϵ_p :

$$\epsilon_n = -\frac{\partial}{\partial x} (\Psi + \ln n_{in}) \quad (3.59)$$

$$\epsilon_p = -\frac{\partial}{\partial x} (\Psi - \ln n_{ip}) \quad (3.60)$$

此外, 归一化的 Shockley 辅助方程(3.41)和(3.42)可写成:

$$n = n_{in} e^{\Psi - \phi_n} \quad (3.61)$$

$$p = n_{ip} e^{\phi_p - \Psi} \quad (3.62)$$

用在方程或关系式(3.56)—(3.62)中变量的归一化因子, 见表 3.4 所示.

表 3.4 用在基本方程和辅助方程中变量的归一化因子(源于[3.2])

变 量	归一化因子	T = 300 K 时为硅的值	单 位
电荷 Q	q	1.602×10^{-19}	coulomb
电势 $\psi, \Psi, \phi_n, \phi_p$	$V_t = kT/q$	0.025 86	V
浓度 n, p, N	$n_0 = \sqrt{N_C N_V}$	3.51×10^{19}	cm^{-3}
深度 x	$L_D = \sqrt{\epsilon V_T / q n_0}$	6.9×10^{-8}	cm
电场 ϵ	$\epsilon_0 = V_T / L_D$	3.75×10^5	V/cm
迁移率 μ	μ_0	1	$\text{cm}^2 / \text{V} \cdot \text{sec}$
时间 t	$t_0 = L_D^2 / \mu_0 V_T$	1.84×10^{-13}	sec
复合率 U	$u_0 = n_0 / t_0$	1.91×10^{32}	$\text{cm}^{-3} \cdot \text{sec}^{-1}$
电流密度 j_n, j_p	$j_0 = q \mu_0 n_0 \epsilon_0$	2.1×10^6	A/cm ²

3.5.3 SEDAN-3 中几个参数的物理模型

为了从半导体基本方程精确地求解变量 Ψ, n 和 p 作为 x 和 t 的函数, 必须搞精确有关参数的物理模型. SEDAN-3 中这些模型包括: Si, GaAs, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 和 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 等材料中的电子和空穴的迁移率、禁带宽度、导带和价带的有效态密度、电子亲和势以及电子和空穴的复合率等. 以下仅介绍用于 Si, GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中的有关物理模型.

3.5.3.1 硅中几个参数的物理模型

1. 迁移率模型

SEDAN-3 中采用与温度、掺杂浓度及电场相关的迁移率模型. 这个模型类似于文献[3.7]所给出的, 是一个经验模型. 这个模型不区别相同类型载流子处于多数载流子和少数载流子两种情况. 其模型公式为:

$$\mu(N_T, T, \epsilon) = \frac{\mu_0(N_T, T)}{\{1 + [\mu_0(N_T, T)\epsilon/V_{\text{sat}}]\}^{1/\beta}} \quad (3.63)$$

这里 $\mu_0(N_T, T)$ 是与总的掺杂浓度 N_T ($N_T = N_D + N_A$) 和温度 T 相关的低电场下的迁移率, 其表示式为[3.8]:

$$\mu_0(N_T, T) = \mu_{\min} + \frac{\mu_0}{1 + (N_T/N_{\text{ref}})^\alpha} \quad (3.64)$$

这里 $\mu_{\min}$, μ_0 , N_{ref} 和 α 都是 T 的函数. 电子和空穴的这些参数的表示式列于表 3.5

表 3.5 用在 $\mu_0(N_T, T)$ 表示式中的各参数同温度的关系 (源于[3.2])

参数	$\mu_{\min}$	μ_0	N_{ref}	α
电子	$88T_n^{-0.57}$	$7.4 \times 10^8 T^{-2.33}$	$1.26 \times 10^{17} T_n^{2.4}$	$0.88T_n^{-0.146}$
空穴	$54.3T_n^{-0.57}$	$1.36 \times 10^8 T^{-2.23}$	$2.35 \times 10^{17} T_n^{2.4}$	$0.88T_n^{-0.146}$

上表中 T 为绝对温度单位为 K , $T_n = T/300$, 用室温归一化的温度, (3.63) 式中
为空穴 $\beta = 1$, 为电子 $\beta = 2$ [3.7]. 饱和速度 V_{sat} 由下式给出[3.9]:

$$V_{\text{sat}}(T) = \frac{2.4 \times 10^7}{1 + 0.8(T/600)} \quad (3.65)$$

这里 V_{sat} 的单位用 cm/sec , T 的单位用 K .

2. 温度及重掺杂对禁带宽度的影响

禁带宽度是一个同半导体器件性能密切相关的参数, 本征或轻掺杂 Si 和 GaAs 同温度相关的禁带宽度 $E_{\text{gi}}(T)$ 的半经验公式

$$E_{\text{gi}}(T) = E_{\text{go}} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (3.66)$$

已被实验证明[3.10]. 这里, 参数 E_{go} , α 和 β 列于表 3.6

表 3.6 用在 E_{gi} 半经验公式中的几个参数 (源于[3.2])

材料	E_{go}	$\alpha (\times 10^{-4})$	β
Si	1.17	4.73	636
GaAs	1.519	5.405	204

上表中各参数所用单位为: E_{go} 用 eV , α 用 eV/K , β 用 K .

在重掺杂情况下, 禁带宽度同掺杂浓度相关. 重掺杂效应可用参数 ΔE_g , 即禁带变窄参数来描述. 这样, 为重掺杂情况, 禁带宽度 $E_g(T, N)$ 可表示为:

$$E_g(T, N) = E_{\text{gi}}(T) - \Delta E_g(T, N) \quad (3.67)$$

同净掺杂浓度 N 相关的禁带变窄参数在室温 T_0 情况下的经验公式, SEDAN-3 采用 Slotboom 在文献[3.11]中给出的

$$\Delta E_g(T_0, N) = V_1 \left[\ln \frac{N}{N_0} + \sqrt{\left(\ln \frac{N}{N_0} \right)^2 + 0.5} \right] \quad (3.68)$$

此式适用于所有的实际掺杂情况. 式中参数取: $V_1 = 9 \times 10^{-3} \text{ eV}$, $N_0 = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, 室温 T_0 取 300 K ; 而净掺杂浓度 N 在大多数情况下等于多数载流子浓度. 同时考虑温度和重掺杂影响的 $\Delta E_g(T, N)$ 的表示式, SEDAN-3 中用基于 Lanyon 模型^[3.12]的一个经验公式, 公式表述如下:

$$\Delta E_g(T, N) = \Delta E_g(T_0, N) \left[\frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} \right]_T \left[\frac{F_{1/2}(\eta)}{F_{-1/2}(\eta)} \right]_{T_0} \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \quad (3.69)$$

从上式, 参照文献^[3.2]附录 A, 可估算方括号[]中的各费米积分项, 估算结果表明, 在非简并情况[]的值近似于 1, 这样就有 $\Delta E_g(T, N) \sim 1/\sqrt{T}$, 而在简并情况[]的值近似等于 $\sqrt{T/T_0}$, 这样就有 $\Delta E_g(T, N)$ 和温度 T 无关.

3. 有效态密度和电子亲和势

为抛物线能带结构, 导带和价带的态密度 N_C 和 N_V 分别有:

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (3.70)$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (3.71)$$

为 Si, 电子有效质量 $m_n^* = 1.447m_0$, 空穴有效质量 $m_p^* = 1.08m_0$ ^[3.13], 并假设同温度无关, m_0 为自由电子质量, k 和 h 分别为玻尔兹曼以及 Planck 常数. 将各常数代入, 并进行量化预计算后, 则有:

$$N_C = 2.5 \times 10^{19} (m_n^*/m_0)^{3/2} T_n^{3/2} \quad (3.72)$$

$$N_V = 2.5 \times 10^{19} (m_p^*/m_0)^{3/2} T_n^{3/2} \quad (3.73)$$

这里 T_n 是前面曾提到过的归一化温度.

为本征或轻掺杂 Si, 电子亲和势 $\chi = \chi_0$, $\chi_0 = 4.05 \text{ eV}$ ^[3.9] 在重掺杂情况下, 发生禁带变窄, 即 E_g 有 ΔE_g 的变化, 这样, χ 也应同重掺杂有关, 在 SEDAN-3 中用了 $\Delta E_g = \Delta E_C + \Delta E_V$, 并假设 $\Delta E_C = \Delta E_V$, 则有 $\Delta E_C = \frac{1}{2} \Delta E_g$, 这样就有 χ 的表示式

$$\chi = \chi_0 + \Delta E_C = \frac{1}{2} \Delta E_g \quad (3.74)$$

注意这里 ΔE_C 和 ΔE_V 都应取正值.

4. 复合模型

描述电子—空穴复合机构所用的模型, SEDAN-3 和 SEDAN-1 几乎完全相同. SEDAN-3 所用的模型公式包括:

$$U = U_{\text{SRH}} + U_{\text{A}} \quad (3.75)$$

$$U_{\text{SRH}} = \frac{np - n_{\text{in}} n_{\text{ip}}}{\tau_{\text{p}}(n + n_{\text{i}}) + \tau_{\text{n}}(p + p_{\text{i}})} \quad (3.76)$$

$$\tau = \frac{\tau_0}{1 + (N_{\text{T}}/N_0)} \quad (3.77)$$

$$\begin{aligned} U_{\text{A}} &= C_{\text{n}}(n^2 p - n n_{\text{in}} n_{\text{ip}}) + C_{\text{p}}(p^2 n - p n_{\text{in}} n_{\text{ip}}) \\ &= (C_{\text{n}} n + C_{\text{p}} p)(np - n_{\text{in}} n_{\text{ip}}) \end{aligned} \quad (3.78)$$

若将式(3.76)及式(3.78)中的 $n_{\text{in}} n_{\text{ip}}$ 换成 n_{ic}^2 , 也即 γ_{n} 和 γ_{p} 为 1, 则(3.75)—(3.78)式和 SEDAN-1 中所用的总复合率 U , SRH 复合率 U_{SRH} , 少数载流子寿命 τ_{n} (或 τ_{p}) 以及 Auger 复合率 U_{A} 的表示式(3.25)—(3.29)完全相同. 此外, 上列公式中所用的参数, 为 n (或 p) 的 τ_0 , N_0 以及 C_{n} , C_{p} . SEDAN-3 中用表 3.7 中给出的值, 同 SEDAN-1 给出的相比, 仅参数 C_{n} 在 SEDAN-3 中用 $0.5 \sim 2.8 \times 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{sec}$, 而 SEDAN-1 中用 $2.8 \times 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{sec}$ (见表 3.3)

表 3.7 用在 SRH 和 Auger 复合率表示式中的参数(源于[3.2])

参数	$\tau_0 \text{ sec}$	$N_0 \text{ cm}^{-3}$	$C_{\text{Auger}} \text{ cm}^6/\text{sec}$
n	5×10^{-7}	5×10^{16}	$0.5 \sim 2.8 \times 10^{-31}$
p	5×10^{-7}	5×10^{16}	9.9×10^{-32}

5. 杂质不完全离化效应

杂质不完全离化效应即所谓杂质的凝析效应(freeze-out effect), SEDAN-3 考虑了这一效应, 计入不完全离化效应时, 离化的施主杂质浓度 N_{D}^+ 和离化的受主杂质浓度 N_{A}^- , 同施主杂质浓度 N_{D} 和受主杂质浓度 N_{A} 分别用下列两式描述^[3.9],

$$N_{\text{D}}^+ = \frac{N_{\text{D}}}{1 + g_{\text{D}} \exp\left(\frac{E_{\text{F}} - E_{\text{D}}}{kT}\right)} \quad (3.79)$$

$$N_{\text{A}}^- = \frac{N_{\text{A}}}{1 + g_{\text{A}} \exp\left(\frac{E_{\text{A}} - E_{\text{F}}}{kT}\right)} \quad (3.80)$$

式中 g_{D} , g_{A} 分别是施主和受主杂质能级的基态简并因子, SEDAN-3 中, 对于 Si, g_{D} 取为 2, g_{A} 取为 4. E_{D} 和 E_{A} 分别是施主和受主的杂质能级, 由式(3.37), (3.38)及(3.41), (3.42)上两式可改写成,

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} \frac{n}{\gamma_n N_C}} \quad (3.81)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g_A e^{\frac{\Delta E_A}{kT}} \frac{p}{\gamma_p N_V}} \quad (3.82)$$

式中离化能量 ΔE_D 和 ΔE_A 分别同所掺的施主和受主杂质的水平相关,作为补缺值 (default value),在 SEDAN-3 中,为磷, ΔE_D 用 0.044 eV;为硼, ΔE_A 用 0.045 eV. 归一化后式(3.81)和(3.82)可分别写成

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\Delta E_D} \frac{n}{\gamma_n N_C}} \quad (3.83)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g_A e^{\Delta E_A} \frac{p}{\gamma_p N_V}} \quad (3.84)$$

其中 N_D^+ , N_A^- , N_D , N_A , N_C , N_V , n , p 都用 $n_0 = \sqrt{N_C N_V}$ 作为归一化因子, ΔE_D , ΔE_A 用 kT 作为归一化因子.

3.5.3.2 GaAs 和 $Al_xGa_{1-x}As$ 中几个参数的物理模型

GaAs 具有高电子迁移率和直接能带结构,因而已被用作高速器件及光电子器件. $Al_xGa_{1-x}As$ 和 GaAs 形成的异质结构,由于它的优良电性能,也由于它的制造工艺分子束外延(Molecular Beam Epitaxy)MBE 以及金属有机物化学气相淀积(Metal-Organic Chemical Vapor Deposition)MOCVD 的成功突破和不断改进,已被广泛地应用于微电子和光电子领域.

1. 禁带宽度和电子亲和势

半导体材料的禁带宽度 E_g 定义为导带的最小值和价带的最大值之间的差,同温度、材料组分及掺杂浓度相关,和相应的波矢无关. SEDAN-3 中 GaAs 的 E_g 同温度的关系用方程(3.66)及表 3.6,同掺杂的关系用文献[3.14]中的公式,

$$E_g = 1.424 - 1.6 \times 10^{-8} N^{1/3} \quad (3.85)$$

这里, N 是净掺杂浓度,单位为 cm^{-3} , E_g 单位为 eV. 对 $Al_xGa_{1-x}As$, E_g 同组分 x 的关系用

$$E_g(0 \leq x < 0.45) = 1.424 + 1.247x \quad (3.86)$$

$$E_g(0.45 \leq x < 1.0) = 1.900 + 0.125x + 0.143x^2 \quad (3.87)$$

注意,当 x 满足 $0.45 \leq x < 1.0$ 时,能带结构从 x 满足 $0 \leq x < 0.45$ 时的直接带隙变成间接带隙,参见图 3.8 及图 3.9.

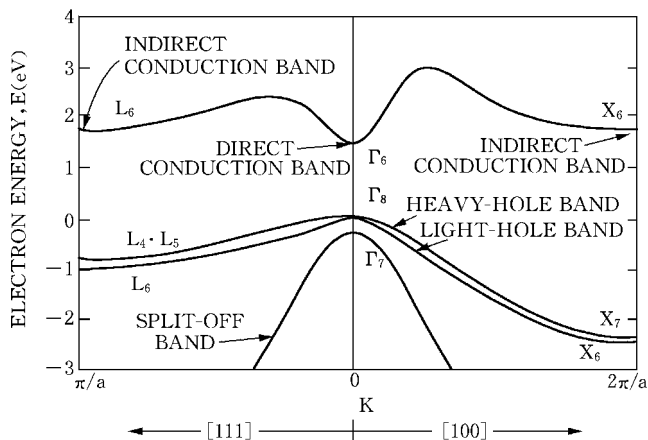


图 3.8 为显示 GaAs 能带结构的电子能量 E 沿 $[100]$ 和 $[111]$ 方向的动量波矢 k 的变化图, Γ , X 和 L 用于标识带间能隙(源于[3.14])

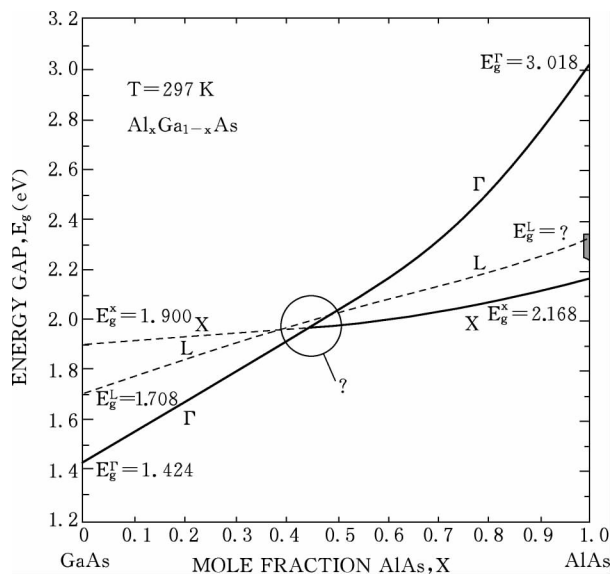


图 3.9 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的直接能隙 ($\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$), 间接能隙 ($\Gamma_8 \rightarrow X_6$ 以及 $\Gamma_8 \rightarrow L_6$) 随组分的变化(源于[3.14])

为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,由于 E_g 同温度和掺杂浓度的关系尚不清楚 ,所以 SEDAN-3 中仅考虑室温情况 ,也未考虑同掺杂浓度的关系.

电子亲和势 χ ,为 GaAs 是 4.07 eV [3.9] ,为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,由下式给出 ,

$$\chi(x) = 4.07 - 0.64[E_g(x) - 1.424] \quad (3.88)$$

上式中各项的单位是 eV , 1.424 为 GaAs E_g 的值 , x 是 AlAs 的克分子数分数 ,(3.88)式的给出用了 $\chi(x)$, $\Delta E_g(x)$ 的定义式 $\chi(x) = 4.07 - \Delta E_c(x)$, $\Delta E_g(x) = E_g(x) - 1.424$ 以及 $\Delta E_c(x) = 0.64\Delta E_g(x)$.

2. 有效质量和有效态密度

GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的导带有多个谷值 ,总的电子有效质量 m_n^* 同每个谷值相关.文献[3.14]给出的公式为 $x < 0.45$ 且 Γ 谷在导带 3 个谷 Γ 、X 和 L 中能量最低时 ,有 :

$$m_n^*/m_0 = [(m_n^\Gamma/m_0)^{3/2} + (m_n^L/m_0)^{3/2} \exp(-\Delta E^{L-\Gamma}/kT) + (m_n^X/m_0)^{3/2} \exp(-\Delta E^{X-\Gamma}/kT)]^{2/3} \quad (3.89)$$

为 $x > 0.45$ 且 X 谷是最低能量时 ,有 :

$$m_n^*/m_0 = [(m_n^\Gamma/m_0)^{3/2} \exp(-\Delta E^{\Gamma-X}/kT) + (m_n^L/m_0)^{3/2} \exp(-\Delta E^{L-X}/kT) + (m_n^X/m_0)^{3/2}]^{2/3} \quad (3.90)$$

上两式中 m_0 是电子质量 , m_n^Γ 、 m_n^L 和 m_n^X 分别是同 Γ 、L 和 X 谷相关的电子有效质量 ,而 $\Delta E^{L-\Gamma}$ 、 $\Delta E^{X-\Gamma}$ 、 $\Delta E^{\Gamma-X}$ 、 ΔE^{L-X} 是有关谷值之间的能量差.各种电子有效质量和谷值能量同组分的关系 ,列于表 3.8.

表 3.8 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中的禁带宽度和有效质量(源于[3.2])

$E_g^\Gamma(0 < x < 0.45) = 1.424 + 1.247x$
$E_g^\Gamma(0.45 < x < 1.0) = 1.424 + 1.247x + 1.147(x - 0.45)^2$
$E_g^L = 1.708 + 0.642x$
$E_g^X = 1.900 + 0.125x + 0.143x^2$
$m_n^\Gamma/m_0 = 0.067 + 0.083x$
$m_n^L/m_0 = 0.55 + 0.12x$
$m_n^X/m_0 = 0.85 - 0.07x$
$m_p^*/m_0 = 0.48 + 0.31x$

为空穴有效质量 m_p^* ,可用公式 :

$$m_p^* = (m_{ph}^{3/2} + m_{pl}^{3/2})^{2/3} \quad (3.91)$$

式中 m_{ph} 和 m_{pl} 分别是重空穴和轻空穴的有效质量 ,文献[3.15]和[3.16]分别给出了 GaAs 和 AlAs 中 m_{ph} , m_{pl} 的值 :对 GaAs , $m_{ph} = 0.50m_0$, $m_{pl} = 0.088m_0$;对 AlAs , $m_{ph} = 0.50m_0$, $m_{pl} = 0.26m_0$. SEDAN-3 不用公式(3.91)而用表 3.8 中的 m_p^*/m_0 公式计算 m_p^* 和 x 的关系.

得出了 m_n^* 和 m_p^* 后就可利用公式(3.70)和(3.71)分别算得导带和价带的有效态密度 N_C 和 N_V .

3. 迁移率

在复合半导体中迁移率除了同掺杂浓度和电场相关外 ,还同组分相关 .对 GaAs 迁移率 $\mu(N_T, \epsilon)$ 同电场 ϵ 的关系 ,用以下公式 [3.17]

$$\mu(N_T, \epsilon) = \frac{\mu(N_T) + \frac{V_{sat}}{\epsilon} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0} \right)^4}{1 + \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0} \right)^4} \quad (3.92)$$

式中临界电场 ϵ_0 是常数 ,在 $N_T = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 时 , $\epsilon_0 = 4 \text{ kV/cm}$ [3.17] ,饱和速度 V_{sat} (单位为 cm/sec)为 [3.18]

$$V_{sat}(T) = 11.3 \times 10^6 - 1.2 \times 10^4 T \quad (3.93)$$

式中 T 是温度 ,单位用绝对温度 K. 低场迁移率 $\mu(N_T)$ 同总掺杂浓度 N_T 的关系与 Si 相似 ,见方程(3.64). 对 GaAs , (3.64)式中有关参数由文献[3.9]给出 ,见表 3.9. 而低场迁移率的温度关系 ,在 SEDAN-3 中没有考虑.

表 3.9 用在(3.64)式中的 GaAs 低场迁移率 $\mu(N_T)$ 的参数(源于[3.2])

参数	μ_{min}	μ_0	N_{ref}	α
电子	0	8 100	1.69×10^{17}	0.436
空穴	0	408.7	2.75×10^{17}	0.359

为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,低场电子迁移率公式用文献[3.19]给出

$$\mu_n(N_T, x) = \gamma_d \mu_d + (1 - \gamma_d) \mu_i \quad (3.94)$$

式中 γ_d 是直接带谷中的电子浓度占总电子浓度的分数 ,

$$\gamma_d = \frac{n_d}{n_d + n_i}$$

$$= \frac{1}{1 + (m_n^L/m_n^T)^{3/2} \exp(-\Delta E^{L-T}/kT) + (m_n^X/m_n^T)^{2/3} \exp(-\Delta E^{X-T}/kT)} \quad (3.95)$$

这里 d 和 i 分别标志直接和间接, 直接带谷电子迁移率 μ_d 和间接带谷电子迁移率 μ_i 分别用文献[3.19]的公式给出:

$$\mu_d = \left[\frac{m_n^T(x=0)}{m_n^T(x)} \right] \frac{\epsilon_{h2}^{-1} - \epsilon_{l2}^{-1}}{\epsilon_h^{-1}(x) - \epsilon_l^{-1}(x)} \mu_n, \text{GaAs}(N_T) \quad (3.96)$$

$$\mu_i = \frac{[m_n^L(x=1)]^{3/2} + [m_n^X(x=1)]^{3/2}}{[m_n^L(x)]^{3/2} + [m_n^X(x)]^{3/2}} \frac{\epsilon_{hl}^{-1} - \epsilon_{ll}^{-1}}{\epsilon_h^{-1}(x) - \epsilon_l^{-1}(x)} \mu_n, \text{AlAs} \quad (3.97)$$

这里 GaAs 中的电子迁移率被认为完全同直接带谷相关, 而 AlAs 则完全同间接带谷相关. AlAs 的电子迁移率同掺杂的关系没有被考虑, 由于没有可靠数据可利用. ϵ 是相对介电常数, ϵ 的下标 h, l 分别表示高频和低频, l, 2 分别表示 AlAs 和 GaAs. $\epsilon(x)$ 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的相对介电常数, 同组分相关, 而 AlAs 和 GaAs 的相对介电常数由下式给出,

$$\epsilon = \frac{1 + 2 \left[x \left(\frac{\epsilon_1 - 1}{\epsilon_1 + 2} \right) + (1-x) \left(\frac{\epsilon_2 - 1}{\epsilon_2 + 2} \right) \right]}{1 - x \left(\frac{\epsilon_1 - 1}{\epsilon_1 + 2} \right) - (1-x) \left(\frac{\epsilon_2 - 1}{\epsilon_2 + 2} \right)} \quad (3.98)$$

上式对高频和低频都适用.

空穴迁移率 $\mu_p(N_T, x)$ 的表示式较电子迁移率的表示式简单, 因为价带最大值在 k 空间的原点. 它的表示式为

$$\mu_p(N_T, x) = \left[\frac{m_p(x=0)}{m_p(x)} \right]^{3/2} \frac{\epsilon_{h2}^{-1} - \epsilon_{l2}^{-1}}{\epsilon_h^{-1}(x) - \epsilon_l^{-1}(x)} \mu_p, \text{GaAs}(N_T) \quad (3.99)$$

这里 $\mu_{p, \text{GaAs}}(N_T)$ 是同掺杂浓度相关的 GaAs 空穴迁移率[参见方程(3.64)] GaAs 和 AlAs 的相对介电常数 ϵ_h , ϵ_l 以及电子迁移率 $\mu_n(N_T)$ 见表 3.10^[3.16],

表 3.10 GaAs 和 AlAs 的相对介电常数 ϵ_h , ϵ_l 以及电子迁移率 $\mu_n(N_T)$ (源于[3.2])

材料	ϵ_h	ϵ_l	$\mu_n(N_T) \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$
GaAs	10.9	13.1	参见方程(3.64)及表 3.9
AlAs	8.12	10.06	75~294*

* SEDAN-3 中所用的补缺值为 $294 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$

4. 复合机构

GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中, 由于它们的直接能带结构, 因而除考虑 SRH 和 Auger 复合等非辐射复合外, 还考虑了辐射复合, 总的净复合率可写成,

$$U = U_{\text{nr}} + U_{\text{r}} \quad (3.100)$$

式中 U_{nr} 为非辐射复合率, 它包括 SRH 复合率 U_{SRH} 和 Auger 复合率 U_{A} , U_{SRH} 和 U_{A} 的表示式用与 Si 相同的公式表示[分别见(3.76)和(3.78)式], U_{r} 为辐射复合率, U_{r} 可用下式表示^[3.14],

$$U_{\text{r}} = B(np - n_0 p_0) \quad (3.101)$$

式中 $n_0 p_0$ 是热平衡时 np 乘积, B 是复合常数

$$B = \frac{1}{\tau_{\text{r}} N} \quad (3.102)$$

式中 N 是净掺杂浓度也即多子浓度, τ_{r} 为与辐射复合相应的少子寿命, τ_{r} 同掺杂浓度相关, SEDAN-3 中用(3.77)式表征, 但式中的 τ_0 和 N_0 用不同于表 3.7 中为 Si 非辐射复合所用的值, 这里它们分别用 $\tau_0 = 6 \times 10^{-6} \text{ sec}$ 和 $N_0 = 2.1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [3.14].

3.5.4 SEDAN-3 的使用和应用例举

以下介绍的四个 SEDAN-3 应用例子均源于[3.2]

3.5.4.1 SEDAN-3 的使用

与使用 SEDAN-1 完全相似, 使用 SEDAN-3 程序之前必须了解 SEDAN-3 的功能和它所用的各种模型以及解读 SEDAN-3 的用户手册, 用户手册参见[3.2].

SEDAN-3 杂质分布的输入有 3 种方法可供用户选择: (1)杂质分布来自 Stanford 大学开发的工艺模拟程序 SUPREM-2 或 SUPREM-3 或 SUPRA 的输出文件, (2)来自具有两列 ASCII 数据的净浓度随深度变化的数据文件, (3)来自用户给出的杂质分布的解析说明.

同使用 SEDAN-1 一样, 当杂质分布的输入采用第一种方法时要注意有关工艺模拟程序和 SEDAN-3 的输入文件的相关语句中的相关参数值的匹配.

3.5.4.2 SEDAN-3 的应用例举一 MOS 电容的模拟

1. 简要描述

本例模拟具有 P 型衬底、注入沟道的 MOS 电容. 包括平带电压、阈值电压和 MOS 电容值的计算以及氧化层/衬底的界面势、载流子、衬底中的净电荷等参数随栅-源电压变化的计算.

固定界面电荷 N_{ss} (输入文件中的 q_i) 从零到 10^{11} cm^{-2} 变化.

2. 输入文件

```
title      MOS capacitor with interface charge

comment    p-substrate with channel implantation

material    si
device      mos oxth = 0.1 qi = 1.0e11 temp = 300

grid        nreg = 1 steps = .1 nstep = 1
grid        nreg = 2 steps = .02 nstep = 120

profile     anal
profile     nlay = 1 cons begin = 0   end = 2.5   conc = 1.e15
profile     nlay = 2 gimp range = 0.5 charlen = 0.5 peakcon = 8.e15

bias        vgsf = 0.0 vgs1 = 4.0 vgss = 0.25 vsbf = 0.0 vsb1 = 0.0

model       srhr = y auge = y bgnw = y wgate = 4.1

compute     cmos

print       head = y site = y sout = y
plot        moss
end
```

3. 输出

(i) 为作图的数据文件 'dmos' 的输出.

Vgs V	Psi_s Volts	E_s V/cm	Qnet C/cm ²	Qn C/cm ²	Qp C/cm ²
0.	1.05966e-01	2.91963e+04	-3.02450e-08	-1.34924e-13	1.07136e-07
0.250	2.27600e-01	3.34727e+04	-3.46750e-08	-1.36745e-11	1.02720e-07
0.500	3.38826e-01	3.79080e+04	-3.92696e-08	-9.55967e-10	9.90673e-08
0.750	3.85038e-01	4.37289e+04	-4.52995e-08	-5.58274e-09	9.76641e-08
1.000	4.04355e-01	5.01099e+04	-5.19098e-08	-1.16435e-08	9.71147e-08
1.250	4.15973e-01	5.66369e+04	-5.86712e-08	-1.80913e-08	9.68010e-08
1.500	4.24201e-01	6.32200e+04	-6.54908e-08	-2.46984e-08	9.65885e-08
1.750	4.30548e-01	6.98295e+04	-7.23377e-08	-3.13876e-08	9.64309e-08
2.000	4.35704e-01	7.64527e+04	-7.91987e-08	-3.81249e-08	9.63072e-08
2.250	4.40043e-01	8.30831e+04	-8.60672e-08	-4.48926e-08	9.62063e-08
2.500	4.43784e-01	8.97173e+04	-9.29398e-08	-5.16806e-08	9.61217e-08
2.750	4.47072e-01	9.63534e+04	-9.98143e-08	-5.84826e-08	9.60493e-08
3.000	4.50003e-01	1.02990e+05	-1.06689e-07	-6.52948e-08	9.59863e-08
3.250	4.52646e-01	1.09627e+05	-1.13565e-07	-7.21143e-08	9.59308e-08
3.500	4.55053e-01	1.16263e+05	-1.20439e-07	-7.89393e-08	9.58812e-08
3.750	4.57263e-01	1.22898e+05	-1.27313e-07	-8.57684e-08	9.58366e-08
4.000	4.59303e-01	1.29533e+05	-1.34185e-07	-9.26006e-08	9.57962e-08

(ii) 作图输出 为 $N_{ss} = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 和 $N_{ss} = 0$ 两种情况的衬底总电子电荷 $\sim$ 栅-源电压 V_{gs} 图,见图 3.10,作图数据来自‘dmos’

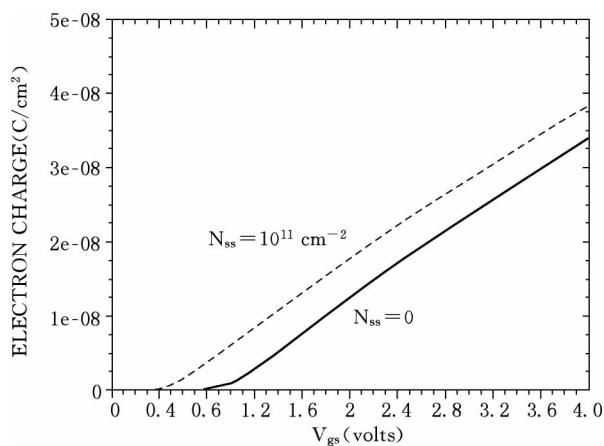


图 3.10 衬底总电子电荷随栅-源电压 V_{gs} 的变化

阈值电压可通过延伸图 3.10 中曲线的线性部分到与 x 轴的截距得出.

界面电势 $\psi_s \sim$ 栅-源电压 V_{gs} 图见图 3.11 ,作图数据也来自 'dmos '

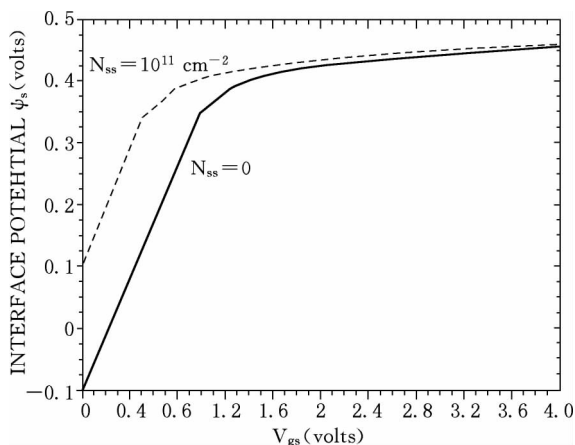


图 3.11 界面电势 ψ_s 随栅-源电压 V_{gs} 的变化

3.5.4.3 SEDAN-3 的应用例举二 npn 晶体管的模拟

1. 简要描述

本例输入的杂质分布取自 SUPREM-3 的输出文件. 模拟的输出包括在输出文件中的截止频率和为作图用的在平衡情况下的载流子浓度和电势分布的数据文件 'dcon' 和 'dpsi' 以及按数据文件 'djcc', 'djbb' 作出的 Gummel 图.

本例仅显示输入文件所需求的 3 种作图输出, 略去了所有数据文件的打印输出.

2. 输入文件

```
title      Analysis of normal npn transistor
comment    profile input from SUPREM III export file

material    si
device      type = trans ferm = y temp = 300

grid        autog depth = 3.5 nemit = 50 sf1 = 1.01 sf2 = 1.02
profile     suprem3 file = mls3
```

```

bias      vbef = 0.0 vbel = 0.8 vbes = 0.1
+         vcef = 0.0 vcel = 3.0 vces = 1.5

comment   smaller bias step for higher bias
bias      vbef = 0.85 vbel = 0.95 vbes = 0.05 vcef = 3.0 vcel = 3.0

model     srhr = y auge = y bgnw = y
compute   ft

print     head = y site = y sout = y screen = n
plot      vbe = 0.0 vce = 0.0 conc poten jc jb beta

end

```

3. 输出

(i) 按数据文件 'dcom' 所作的杂质分布图, 见图 3.12 所示.

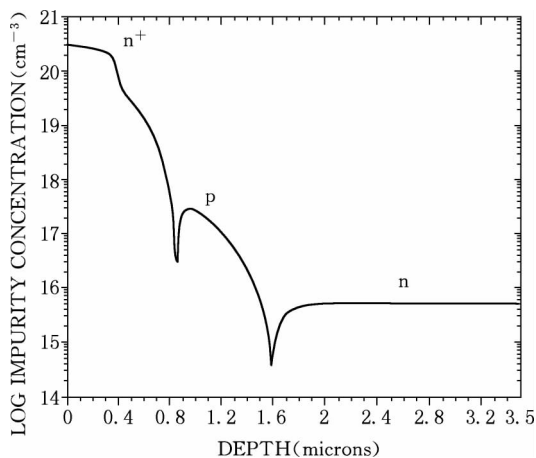


图 3.12 净杂质浓度随深度的变化

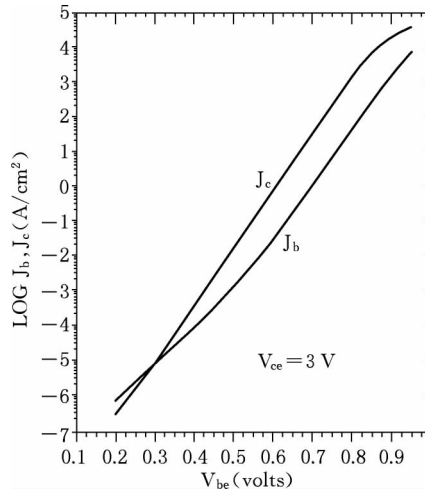


图 3.13 用费米-狄拉克统计的 Gummel 图

(ii) 用费米-狄拉克统计的 Gummel 图, 见图 3.13 所示.

(iii) 用费米-狄拉克和玻尔兹曼统计的电流增益随集电极电流密度 J_c 变化的比较示于图 3.14.

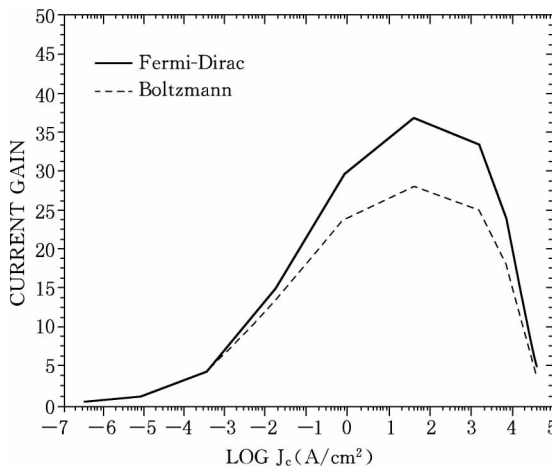


图 3.14 两种不同统计对电流增益随集电极电流密度变化的比较

3.5.4.4 SEDAN-3 的应用例举三 具有多晶硅发射区的 npn 晶体管的模拟

1. 简要描述

本例中杂质分布来自 SUPREM-3. 由于不同的计算机读取二进制数据文件的不兼容性, SUPREM-3 输出的二进制数据文件首先被转换成 ASCII 数据文件, 然后再由 SEDAN-3 读入.

本例中晶体管发射区由两部分组成: $0.175 \mu\text{m}$ 厚的多晶硅层及由来自多晶硅层的掺杂剂 As 扩散形成的单晶发射区, 并假定多晶硅层和单晶硅衬底间有一绝缘界面层.

本例中界面层厚度 $\Delta = 1.75 \text{ nm}$ 以及电子势垒高度 $\chi_n = 0.38 \text{ eV}$ 和空穴势垒高度 $\chi_p = 0.6 \text{ eV}$ 等参数的模拟值和测量值有很好的 consistency.

本例的输出显示中略去了对数据文件的打印输出, 仅显示了 3 种作图输出.

2. 输入文件

```
title    Analysis of Poly-emitter npn Transistor
```

```
material si
```

```
device   poly tran ferm = y temp = 292
```

```
grid     autog depth = 1.5 sf1 = 1.02 sf2 = 1.05
```

```

profile file = dpol

bias      vbef = 0.4  vbel = 1.0  vbes = 0.1
+         vcef = 1.5  vcel = 2.0  vces = 0.5
bias      vbef = 1.05 vbel = 1.2  vbes = 0.05 vcef = 2.0 vcel = 2.0

model     srhr = y nsrh = 1.0e17 ntau = 5.e-5 ptau = 1.e-7
model     auge = y cnau = 0.5e-31
model     bgnw = y bgnt = n nbgo = 2.e17
model     sres = y eare = 1.0e-6 re = 4.3 rb = 1.0e3 rc = 1.4e2
model     ngra = 1 gsz01 = 1750 wint = 17.5 bhp = 0.6 bhn = 0.38
+         nsst = 1.0e12
model     tcon = 5.0e-6

print     head = y site = y sout = y screen = y
plot      vbe = 0.7 vce = 2.0 conc poten curr jb jc beta
end

```

3. 输出

(i) 按数据文件‘dcon’所作的 $V_{be} = 0.7\text{ V}$ 和 $V_{ce} = 2\text{ V}$ 时的杂质浓度和载流子浓度分布示于图 3.15.

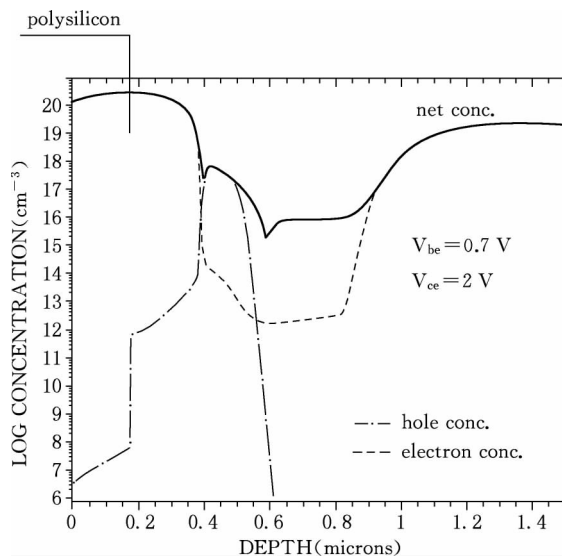


图 3.15 杂质浓度和载流子浓度沿深度的分布

(ii) 由模拟给出的不同界面层厚度的 Gummel 图示于图 3.16.

图 3.16 中的数据点是实测结果. 从模拟结果可以看出势垒厚度对 I-V 特性的影响十分灵敏.

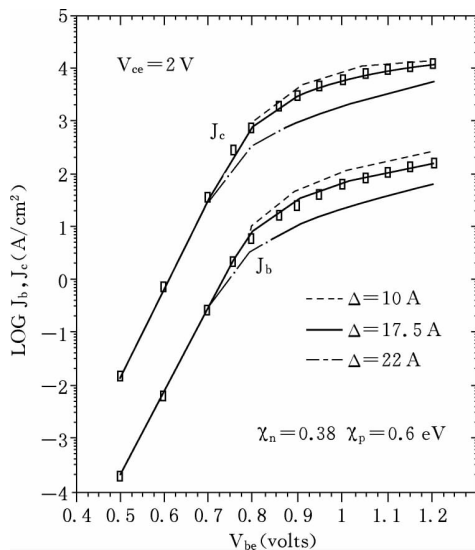


图 3.16 由模拟给出的不同界面层厚度的 Gummel 图

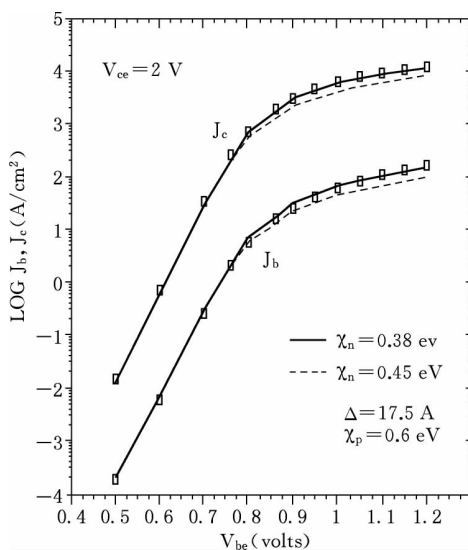


图 3.17 由模拟结果给出的不同电子势垒高度的 Gummel 图

(iii) 由模拟给出的不同电子势垒高度的 Gummel 图示于图 3.17. 其他界面参数也示于图 3.17 中.

3.5.4.5 SEDAN-3 的应用例举四 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ 异质结双极型晶体管的模拟

1. 简要描述

本例模拟 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As-GaAs}$ 异质结晶体管. 异质结由一层厚度为 $0.42 \mu\text{m}$ 的 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 生长在 GaAs 衬底上形成. 该层和 GaAs 之间还有一层 30 nm 的组分为 x 的线性缓变区, 该区中 x 从 0.3 缓变至 0 .

发射区的掺杂水平甚至可以轻于基区, 这样可得到低的基区电阻, 但并不降低晶体管的电流放大系数. 发射区顶部有一个重掺杂层以形成和金属的好的欧姆接触.

本例的输出仅选取热平衡时的能带图和 $1.6 \text{ V} > V_{be} > 0.7 \text{ V}$ 范围内的 Gummel 图.

2. 输入文件

```
title      Graded HBJT simulation

material   AlGaAs
device     trans ferm = y

grid       autog = y depth = 1.2

comment    Structure is from Yoshii's article
comment    (IEEE Transactions on Electron Devices , Sept. 1984)

profile    anal

profile    nlay = 1 const begin = 0      end = 0.2 conc = - 2.e18
profile    nlay = 2 const begin = 0.2    end = .45 conc = - 5.e17
profile    nlay = 3 const begin = 0.45   end = 0.5 conc = 1.e18
profile    nlay = 4 const begin = 0.5     end = 1.   conc = - 5.e16
profile    nlay = 5 const begin = 1.      end = 1.2 conc = - 2.e18

composit   nreg = 1 begin = 0.    end = 0.42 cs = 0.3 ce = 0.3
composit   nreg = 2 begin = 0.42  end = 0.45 cs = 0.3 ce = 0.0
composit   nreg = 3 begin = 0.45  end = 1.2  cs = 0.0 ce = 0.0

bias       vbef = 0.0 vbel = 0.0  vcef = 0.0 vcel = 0.0
bias       vbef = 0.5 vbel = 0.65 vbes = 0.05
+          vcef = 1.0 vcel = 4.0  vces = 1.0

comment    skip bias of vbe = 0.7V to avoid iteration divergence
bias       vbef = 0.71 vbel = 0.71 vbes = 0.0 vcef = 4.0 vcel = 4.0

bias       vbef = 0.8  vbel = 1.0 vbes = 0.1  vcef = 4.0 vcel = 4.0
bias       vbef = 1.05 vbel = 1.6 vbes = 0.05 vcef = 4.0 vcel = 4.0

model      auge = y abox = y

print      head = y site = y sout = y screen = n
plot       vbe = 0.0 vce = 0.0 conc band poten jc jb beta

end
```

3. 输出

(i) 按数据文件 'dban' 画出的热平衡时 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 异质结的能带图示于图 3.18.

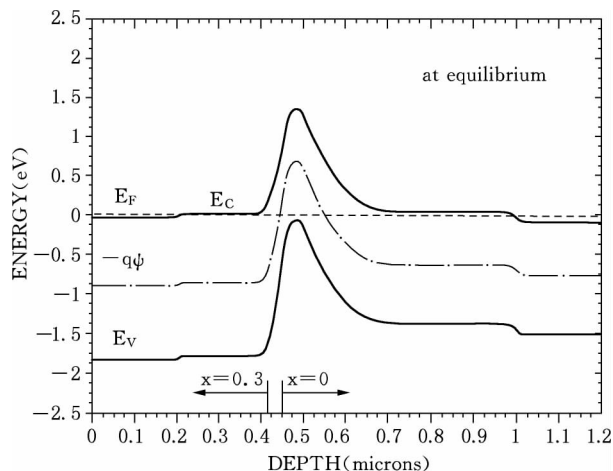


图 3.18 热平衡时 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 异质结的能带图

(ii) $0.7 < V_{be} < 1.6 \text{ V}$ 范围内的 Gummel 图示于图 3.19, 图中 $V_{be} \leq 0.7 \text{ V}$ 时

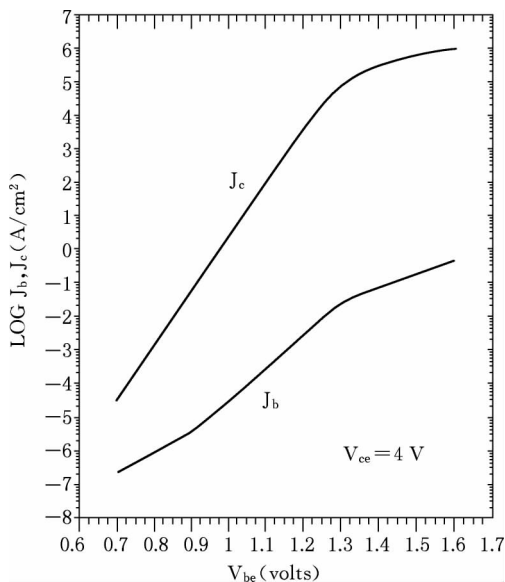


图 3.19 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}-\text{GaAs}$ 异质结晶体管的 Gummel 图

的 I-V 特性由于其不规则性而被删去。

第三章参考资料

- [3.1] D. C. D'Avanzo , M. Vanzi , and R. W. Dutton , *One-Dimensional Semiconductor Device Analysis* (SEDAN) , *Technical Report* No. G-201-5 , Integrated Circuit Laboratory , Stanford University , October 1979
- [3.2] Z. P. Yu and R. W. Dutton , *SEDAN-III-A Generalized Electronic Material Device Analysis Program* , Integrated Circuit Laboratory , Stanford University , July 1985
- [3.3] J. W. Slotboom , *Solid State Electronics* , Vol. 20 , 1977 , p. 279
- [3.4] R. J. Van Overstreaten , H. J. DeMan and R. P. Mertens , *IEEE Transactions on Electron Devices* , Vol. ED-20 , March 1973 , p. 290
- [3.5] Z. P. Yu , G. G. Y Chang and R. W. Dutton , *Supplementary Report on SEDAN-2* , Stanford University Tech. Rep. G-201-12 , June 1982
- [3.6] A. H. Marshak and C. M. Van Vliet , *Proceedings of the IEEE* , Vol. 72 , 1984 , p. 418
- [3.7] D. M. Caughey and R. E. Thomas , *Proc. IEEE* , Vol. 55 , 1967 , p. 2192
- [3.8] N. D. Arora , J. R. Hauser and D. J. Rouston , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-29 , 1982 , p. 292
- [3.9] S. M. Sze , *Physics of Semiconductor Devices* (2nd ed) , John Wiley & Sons , New York , 1982
- [3.10] A. H. Marshak , et al. , *IEEE Transactions on Electron Devices* , Vol. ED-28 , March 1981 , p. 293
- [3.11] J. W. Slotboom and H. C. de Graaff , *Solid-state Electron.* , Vol. 19 , 1976 , p. 857
- [3.12] H. P. D. Lanyon and R. A. Tuft , *IEEE Transactions on Electron Devices* , Vol. ED-26 , July 1979 , p. 1014
- [3.13] A. Neugroschel , S. C. Pao and F. A. Lindholm , *IEEE Transactions on Electron Devices* , Vol. ED-29 , May 1982 , p. 894
- [3.14] H. C. Casey , Jr. and M. B. Panish , *Heterostructure Lasers* , Academic Press , New York , 1978
- [3.15] J. S. Blakemore , *J. Appl. Phys.* , Vol. 53 , No. 10 , Oct. 1982 , p. 123
- [3.16] Landolt-Börnstein , New York : Springer-Verlag , 1982 , Vol. 17a , p. 165
- [3.17] J. J. Barnes , R. J. Lomax and G. I. Haddad , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. ED-23 , Sept. 1976 , p. 1042

- [3. 18] M. A. Littlejohn , J. R. Hauser and T. H. Glisson , *J. Applied Physics* , Vol. 48 , Nov. 1977 , p. 4587
- [3. 19] J. E. Sutherland and J. R. Hauser , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. ED-24 , April 1977 , p. 363

第四章 半导体器件的二维模拟

本章介绍国际上最早出现的在性能和实用两方面都较优的 MOSFET 二维模拟软件 MINIMOS-2^[4.1], 及近年来最广泛应用的半导体器件二维模拟软件 MEDICI^[4.2].

§ 4.1 MINIMOS-2 概述

MINIMOS-2 是一种由奥地利维也纳工业大学 (Technology University of Vienna, Austria) 开发的平面 MOSFET 静态特性二维模拟程序, 它有以下特点: (1) 用了近代较成熟的编程方法, 因而计算机费时较少. 例如在 CDC Cyber 74 计算机上计算一个工作点仅需 CPU 时间 5~60 秒 (同掺杂分布及电压偏置值有关). (2) 具有处理、得出二维掺杂分布的功能. 用户可选用 3 种处理中的任一种. 第一种, 用户提供有关工艺条件参数, 程序执行用写在程序中的解析表示式计算, 得出二维杂质分布; 第二种, 用户提供由一维半导体工艺模拟程序 SUPREM-2 算得的较精确的纵向杂质分布, 程序执行用该纵向数据拟合得出二维杂质分布; 第三种, 接受用户直接提供的逐点杂质分布, 程序处理得出二维杂质分布. (3) 用了一个由 MINIMOS-2 开发者自己提出的迁移率模型, 这个模型考虑了杂质浓度、电场、温度以及距离 (指离 Si—SiO₂ 界面指向硅基片内部的垂直距离) 对迁移率的影响. (4) 输入参数文件容易书写, 同 Newton 等人在 1978 年公开建议的一种统一的输入参数书写法完全兼容. 从上列特点来看, MINIMOS-2 是一种高度面向用户、使用方便、精度尚好、耗费较低的 MOSFET 二维模拟程序.

MINIMOS-2 输入有关杂质分布参数, 器件几何结构参数, 某些材料特性参数以及器件偏置条件参数, 输出杂质二维分布、电势、电场、空间电荷、少子浓度、多子浓度、准费米能级、漏极电流密度、迁移率、雪崩产生率等器件电特性参数. 参数输出可以是列表方式, 若配以有关作图软件, 则有关参数可以以三维图方式输出. MINIMOS-2 采用的计算节点及相邻两点之间间距是非均匀的, 是自动产生的, 节点间距不大于 10 个热电压, 节点规模最小为 25×25 , 最大为 60×60 . MINIMOS-2 中方方程离散化用标准方法; 为解连续性方程用了 Scharfetter 和 Gummel^[4.3] 提出的有效差分近似, 并扩展到二维应用; 同时用 Stone 的 SIP 方法^[4.4] 交替迭代解

Poisson 方程及连续性方程, MINIMOS-2 由 FORTRAN-5(即 ANSI77)书写, 源程序共有近 17 000 条语句(包括说明语句), 包括 1 个主程序, 1 个数据块, 103 个子程序及函数组成, 程序共分 4 个层次, 34 个程序分段。

§ 4.2 MINIMOS-2 执行的半导体方程组

为模拟、分析任意半导体器件中载流子输运现象, 可用一组熟知的基本半导体方程组, 它包含 Poisson 方程(式 4.1)、电子和空穴的连续性方程(式 4.2 及 4.3 式)以及电子和空穴的电流关系式(式 4.4 及 4.5 式)

$$\operatorname{div} \epsilon \operatorname{grad} \phi = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (4.1)$$

$$\operatorname{div} \vec{J}_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = -q(G - R) \quad (4.2)$$

$$\operatorname{div} \vec{J}_p + q \frac{\partial p}{\partial t} = q(G - R) \quad (4.3)$$

$$\vec{J}_n = -q(\mu_n n \operatorname{grad} \phi - D_n \operatorname{grad} n) \quad (4.4)$$

$$\vec{J}_p = -q(\mu_p p \operatorname{grad} \phi + D_p \operatorname{grad} p) \quad (4.5)$$

若我们只考虑稳态情况, 即有 $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$; 且假设电容率 ϵ 为常数, 即半导体电容率 ϵ_{SEM} 和二氧化硅电容率 ϵ_{OXID} 都是常数, 有 $\epsilon_{\text{SEM}} = \text{常数}$ 、 $\epsilon_{\text{OXID}} = \text{常数}$; 又假设杂质全部离化, 即有 $C = N_D - N_A = N_D^+ - N_A^-$ 。

用了上述假设, 同时将该方程组归一化后, 有

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \phi = n - p - C \quad (4.6)$$

$$\operatorname{div} \vec{J}_n = -q(G - R) \quad (4.7)$$

$$\operatorname{div} \vec{J}_p = q(G - R) \quad (4.8)$$

$$\vec{J}_n = -\mu_n (n \operatorname{grad} \phi - \operatorname{grad} n) \quad (4.9)$$

$$\vec{J}_p = -\mu_p (p \operatorname{grad} \phi + \operatorname{grad} p) \quad (4.10)$$

方程组中各参数及所用归一化因子见表 4.1。

表 4.1 归一化参数及归一化因子(源于[4.1])

归一化参数		归一化因子	
名 称	符 号	符 号	单 位
位置坐标	x, y, z	$L_{DI} = \sqrt{\frac{V_{kT} \epsilon}{q n_i}}$	厘米
时 间	t	$t_0 = L_{DI}^2 / \mu_0 V_{kT}$	秒
静电势和准费米势	ψ, ϕ_n, ϕ_p	$V_{kT} = kT/q$	伏
载流子密度和净杂质浓度	p, n, N	n_i	厘米 ⁻³
载流子迁移率	μ_n, μ_p	μ_0	厘米 ² /伏·秒
产生和复合率	G, R	$U_0 = \mu_0 V_{kT} n_i L_{DI}^2$	1/秒—厘米 ³
电流密度	J_n, J_p	$J_0 = q \mu_0 n_i V_{kT} L_{DI}$	库仑/秒—厘米 ²

在 MINIMOS-2 中执行的、为描述 MOSFET 的基本半导体方程组,在(4.6)——(4.10)式基础上,再作了一些附加的合理的简化,包括:(1)不考虑简并半导体,玻尔兹曼统计及爱因斯坦关系适用,没有禁带变窄, $n_i = \text{常数}$;(2)没有净复合和产生,即忽略雪崩, $G - R = 0$;(3)只考虑沟道载流子对电流的贡献,因而为 n 沟 MOSFET, $\vec{J}_p = 0$;为 p 沟 MOSFET, $\vec{J}_n = 0$;(4)整个器件温度分布均匀,保持常数, $T = \text{常数}$,但 T 能够在 250~450 K 范围内变化。

这样,为 n 沟 MOSFET 有

$$\begin{cases} \text{div grad } \psi = \exp(\psi - \phi_n) - \exp(\phi_p - \psi) - C \\ \text{div } \vec{J}_n = 0 \\ \vec{J}_n = -\mu_n n \text{grad } \phi_n \\ \vec{J}_p = 0 \text{ (也即 } \phi_p = \text{常数)} \end{cases} \quad (4.11)$$

为 p 沟 MOSFET 有

$$\begin{cases} \text{div grad } \psi = \exp(\psi - \phi_n) - \exp(\phi_p - \psi) - C \\ \text{div } \vec{J}_p = 0 \\ \vec{J}_p = -\mu_p p \text{grad } \phi_p \\ \vec{J}_n = 0 \text{ (也即 } \phi_n = \text{常数)} \end{cases} \quad (4.12)$$

若被模拟、分析的 MOSFET 的沟道宽度比耗尽层宽度大得多,则偏微商在沟宽方向的值可忽略,式(4.11)或(4.12)将退化到二维.用二维半导体基本方

程组一般能适用于近代的沟道宽度比耗尽层宽度大得多的短沟 MOSFET 的模拟和分析。

§ 4.3 3 种求取二维掺杂分布的方法

二维掺杂分布无疑是二维 MOSFET 模拟程序所需要的最重要的输入参数。在概述中已提到, MINIMOS-2 有 3 种求取二维掺杂分布的方法。在第一种方法中, 所用的模型公式, 为预淀积, 用(4.13)式:

$$\begin{cases} C_p(x, y) = 0.5 N_s e^{-(y/L_d)^2} \cdot \operatorname{erfc}(x/L_d) \\ L_d = 2 \sqrt{Dt} \end{cases} \quad (4.13)$$

其中 D 为扩散系数, t 为扩散时间, L_d 为扩散长度, N_s 为表面浓度。为具有初始离子注入的扩散, 用(4.14)式:

$$\begin{cases} C_i(x, y) = [a/(4 \cdot \Delta R_p \cdot \sqrt{\pi})] \cdot \text{Dose} \cdot [K(y) + K(-y)] \cdot \operatorname{erfc}(X/L_d) \\ K(y) = e^{-[a \cdot (R_p - y)/\Delta R_p]^2} \cdot \operatorname{erfc}\{-a[(R_p/\Delta R_p) + \sqrt{2} \cdot y/L_d]\} \\ a = [2 + (L_d/\Delta R_p)^2]^{1/2} \end{cases} \quad (4.14)$$

其中, R_p 为投影射程, ΔR_p 为投影标准偏差, Dose 为注入剂量。式(4.13)及(4.14)的推导中, 假设了扩散系数是常数, 这仅适用于掺杂浓度较低的情况。对于掺杂浓度高的情况, 可以为得到一个需要的结深来拟合扩散长度 L_d 。在低浓度情况下, D 可用经典的指数公式得出:

$$D = D_0 \cdot e^{T_a/T} \quad (4.15)$$

几种主要扩散杂质元素的 D_0 、 T_a 见表 4.2

表 4.2 参数 D_0 和 T_a (源于[4.1])

元素 \ 参数	$D_0 (\text{cm}^2/\text{sec})$	$T_a (\text{K})$
硼	0.555 4	$-3.975 \cdot 10^4$
磷	3.85	$-4.247 \cdot 10^4$
锑	12.9	$-4.619 \cdot 10^4$
砷	24	$-4.735 \cdot 10^4$

R_p 和 ΔR_p 是注入能量的非线性函数,可用多项式拟合,见(4.16)式:

$$\left. \begin{aligned} R_p &= \sum_{i=1}^n a_i x^i \\ \Delta R_p &= \sum_{i=1}^n b_i x^i \end{aligned} \right\} \quad (4.16)$$

其中 x 表示注入能量 R_p , ΔR_p 的单位为微米.若硅的表面有氧化层,则通过氧化层注入后,在硅中的投影射程将减小,可用式(4.17)来计算:

$$R_p = R_{pSi}(1 - T_{iOX}/R_{pOX}) \quad (4.17)$$

其中 T_{iOX} 为氧化层厚度, R_{pSi} 为硅中投影射程, R_{pOX} 为氧化层中投影射程.为计算硅中 R_p 、硅中 ΔR_p 、二氧化硅中 R_p 所用的多项式系数分别见表 4.3—4.5.

用表 4.3—表 4.5 所列系数求出的 R_p 及 ΔR_p ,在注入能量为 5 keV 到 300 keV 范围内,同其他资料^[4.5]中查到的,其偏离仅为百分之几.

表 4.3 硅中 R_p 的系数(源于[4.1])

元素 系数	硼	磷	锑	砷
a_1	$3.38 \cdot 10^{-3}$	$1.259 \cdot 10^{-3}$	$8.887 \cdot 10^{-4}$	$9.818 \cdot 10^{-4}$
a_2	$-3.308 \cdot 10^{-6}$	$-2.743 \cdot 10^{-7}$	$-1.013 \cdot 10^{-5}$	$-1.022 \cdot 10^{-5}$
a_3		$1.290 \cdot 10^{-9}$	$8.372 \cdot 10^{-8}$	$9.067 \cdot 10^{-6}$
a_4			$-3.056 \cdot 10^{-10}$	$-3.442 \cdot 10^{-10}$
a_5			$4.208 \cdot 10^{-15}$	$4.608 \cdot 10^{-13}$

表 4.4 硅中 ΔR_p 的系数(源于[4.1])

元素 系数	硼	磷	锑	砷
b_1	$1.781 \cdot 10^{-3}$	$6.542 \cdot 10^{-4}$	$2.674 \cdot 10^{-4}$	$3.652 \cdot 10^{-4}$
b_2	$-2.086 \cdot 10^{-5}$	$-3.161 \cdot 10^{-6}$	$-2.885 \cdot 10^{-6}$	$-3.820 \cdot 10^{-6}$
b_3	$1.403 \cdot 10^{-7}$	$1.371 \cdot 10^{-8}$	$2.311 \cdot 10^{-8}$	$3.235 \cdot 10^{-8}$
b_4	$-4.545 \cdot 10^{-10}$	$-2.252 \cdot 10^{-11}$	$-8.310 \cdot 10^{-10}$	$-1.202 \cdot 10^{-10}$
b_5	$5.525 \cdot 10^{-19}$		$1.084 \cdot 10^{-13}$	$1.601 \cdot 10^{-13}$

表 4.5 二氧化硅中 R_p 的系数(源于[4.1])

元素 系数	硼	磷	锑	砷
a_1	$3.258 \cdot 10^{-3}$	$9.842 \cdot 10^{-4}$	$7.200 \cdot 10^{-4}$	$7.806 \cdot 10^{-4}$
a_2	$-2.113 \cdot 10^{-6}$	$-2.240 \cdot 10^{-7}$	$-8.054 \cdot 10^{-6}$	$-7.899 \cdot 10^{-6}$
a_3			$6.641 \cdot 10^{-8}$	$7.029 \cdot 10^{-8}$
a_4			$-2.422 \cdot 10^{-10}$	$-2.653 \cdot 10^{-10}$
a_5			$3.191 \cdot 10^{-13}$	$3.573 \cdot 10^{-13}$

在第二种方法中,用工艺模拟程序(例如 SUPREM-2)较精确地算得的一维纵向掺杂分布,可按(4.18)式转换成二维分布.

$$C(x, y) = c(\sqrt{y^2 + \max(x/f, 0)^2}) \quad (4.18)$$

式中 x 、 y 坐标的取法如图 4.1 所示.

使用公式(4.18)很简单,仅需一个拟合参数 f , f 控制横向扩散的扩散量,对于大多数的应用, f 可取 0.5 到 0.9 范围内的值. 发生在近氧化掩模边缘的外扩散效应没有考虑.

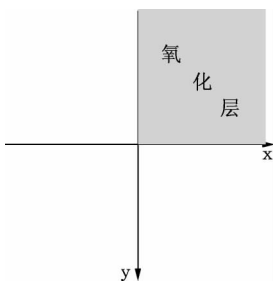


图 4.1 式(4.18)中
 x 、 y 坐标的取法

在第三种方法中,用户需要写一个逐点杂质分布的掺杂文件,该文件中包含衬底掺杂浓度、源/漏区的峰值浓度及结深、亚扩散参数、沟道有效掺杂浓度、掺杂分布计算中的距离增量等数据,以及 100 组逐点数据,每组包括源/漏薄层中受主浓度及其空间导数,源/漏薄层中施主浓度及其空间导数,沟道薄层中受主浓度及其空间导数,沟道薄层中施主浓度及其空间导数. 根据这些输入数据,MINIMOS-2 将其处理成二维掺杂分布.

§ 4.4 MINIMOS-2 中迁移率及产生和复合模型

4.4.1 迁移率模型

由于载流子迁移率(以下简称迁移率)的所有误差,通过相乘的关系产生一个正比的电流误差,所以迁移率是二维 MOSFET 模拟的一个重要参数,同时,迁移率又是一个著名的复杂的量,至今人们对已有的迁移率模型还不是非常满意. 在

MINIMOS-2 中所用的迁移率模型是 MINIMOS-2 作者们提出的一个新的迁移率模型. 作者们假定: 迁移率是温度(T), 平行于电流方向的电场分量(E_p), 垂直于 Si—SiO₂ 界面的距离(y), 杂质浓度(C)及可动载流子密度(n, p)的函数. MINIMOS-2 中执行的迁移率计算公式为:

$$\begin{cases} \mu_{TOT}(y, E_p, E_s, N, T) = \left[\mu_{LIS}^\beta + \left(\frac{V_s}{E_p} \right)^\beta \right]^{1/\beta} \\ \beta_n = -2 & \beta_p = -1 \\ V_{sn} = 1.53 \cdot 10^9 \cdot T^{-0.87} & V_{sp} = 1.62 \cdot 10^8 \cdot T^{-0.52} \end{cases} \quad (4.19)$$

$$\begin{cases} \mu_{LIS}(y, E_p, E_s, N, T) = \mu_{Li}(N, T) \frac{y + y_r}{y + by_r} \\ y_r = y_0 / (1 + E_p / E_{po}) \\ b = 2 + E_s / E_{so} \\ E_p = \text{MAX}[0, (E_x \cdot J_x + E_y \cdot J_y) / (J_x^2 + J_y^2)^{1/2}] \\ E_s = \text{MAX}[0, (E_x \cdot J_y - E_y \cdot J_x) \cdot J_x / (J_x^2 + J_y^2)] \\ y_{on} = 5 \cdot 10^{-7} & y_{op} = 4 \cdot 10^{-7} \\ E_{pon} = 10^3 & E_{pop} = 8 \cdot 10^3 \\ E_{son} = 1.8 \cdot 10^5 & E_{sop} = 3.8 \cdot 10^5 \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\begin{cases} \mu_{Li}(N, T) = \mu_L(T) \cdot a + \mu_{min} \cdot (1 - a) \\ a = 1 / [1 + (T/300)^b \cdot (N/N_{on})^c] \\ N = 0.67 \cdot (N_D^+ + N_A^-) + 0.33 \cdot (n + p) \\ \mu_{min} = 55.24 & \mu_{min} = 49.7 \\ b_n = -3.8 & b_p = -3.7 \\ c_n = 0.73 & c_p = 0.7 \\ N_{on} = 1.072 \cdot 10^{17} & N_{op} = 1.606 \cdot 10^{17} \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\begin{cases} \mu_L(T) = A \cdot T^{-g} \\ A_n = 7.12 \cdot 10^8 & A_p = 1.35 \cdot 10^8 \\ g_n = 2.3 & g_p = 2.2 \end{cases} \quad (4.22)$$

(4.19)—(4.22)式中, 足标 n 和 p 分别为标记电子和空穴. N 为 C 和 n, p 的函数. $\mu_L(T)$ 为只考虑晶格散射时的迁移率, 它由一个简单的温度幂定律描述. $\mu_{Li}(N, T)$ 是考虑了晶格散射和离化杂质及电子、空穴散射后的迁移率, 它是温度、杂质浓度、电子及空穴密度的函数. 在高注入低掺杂区, 电子、空穴散射极为重要.

$\mu_{\text{LIS}}(y, E_p, E_s, N, T)$ 是进一步考虑了表面粗糙和同电场有关的表面散射后的迁移率, 它是 y 、 E_p 、 E_s 、 N 、 T 的函数. μ_{TOT} 是总的迁移率, 它除考虑由晶格、杂质及载流子、表面散射等引起的迁移率 μ_{LIS} 外, 还考虑了平行于电流方向的高电场分量引起漂移速度饱和对迁移率的影响, 即引进了 $\left(\frac{V_s}{E_p}\right)$ 一项, V_s 有弱的温度关系. 用 Mathiessen 法则将该项同 μ_{LSI} 相结合, 最终可求得总的迁移率 μ_{TOT} .

4.4.2 产生和复合模型

若要模拟雪崩效应, 计算雪崩产生率、电子/空穴的离化率或衬底电流, 我们不能直接用式(4.11)或(4.12)式所示的基本半导体方程组. 因为这些方程复合和产生被忽略, 而体多子准费米能级为常数. 所以, 为模拟和计算, 我们必须在连续性方程的右边加上产生及或复合项, 即不能假设 $G - R = 0$. MINIMOS-2 中所用的产生/复合模型公式, 见式(4.23)—(4.27):

$$(G - R)_{\text{tot}} = (G - R)_{\text{th}} + (G - R)_s + (G - R)_{\text{Aug}} + G_a \quad (4.23)$$

式中 $(G - R)_{\text{tot}}$ 为净产生率总量, $(G - R)_{\text{th}}$ 为净俄歇产生率(即净俄歇复合率的负值), G_a 为碰撞电离产生率. 式中各 $(G - R)$ 的单位都是 $1/\text{厘米}^3 \cdot \text{秒}$. (4.23)式也表示不考虑各种不同机理引起的 $(G - R)$ 项之间的相互作用.

$$\begin{cases} (G - R)_{\text{th}} = \frac{n_i^2 - pn}{\tau_n(p + p_1) + \tau_p(n + n_1)} \\ \tau_n = 3.95 \cdot 10^{-5} / \left(1 + \frac{N}{7.1 \cdot 10^5}\right) \\ \tau_p = 3.52 \cdot 10^{-5} / \left(1 + \frac{N}{7.1 \cdot 10^5}\right) \end{cases} \quad (4.24)$$

(4.24)式中, $(G - R)_{\text{th}}$ 表示式即为人们熟知的 Shockley-Read-Hall 公式, 式中载流子寿命 τ_n 和 τ_p 同掺杂浓度有关.

$$\begin{cases} (G - R)_s = \frac{n_i^2 - pn}{(p + p_1)/S_n + (n + n_1)/S_p} \cdot \delta(y) \\ S_n = 100 \\ S_p = 100 \end{cases} \quad (4.25)$$

(4.25)式中 S_n 和 S_p 分别为电子和空穴的表面复合率, $\delta(y)$ 为 Dirac-Delta 函数, $y = 0$ 标记界面.

$$\begin{cases} (G - R)_{Aug} = (n_i^2 - pn)(C_n \cdot n + C_p \cdot p) \\ C_n = 2.8 \cdot 10^{-31} \\ C_p = 9.9 \cdot 10^{-32} \end{cases} \quad (4.26)$$

$$\begin{cases} G_a = \frac{|\vec{J}_n|}{q} A_n \exp \left[-\frac{B_n |\vec{J}_n|}{\vec{E} \cdot \vec{J}} \right] \\ \quad + \frac{|\vec{J}_p|}{q} A_p \exp \left[-\frac{B_p |\vec{J}_p|}{\vec{E} \cdot \vec{J}} \right] \\ A_n = 7.10^5 \quad A_p = 1.588 \cdot 10^6 \\ B_n = 1.23 \cdot 10^6 \quad B_p = 2.036 \cdot 10^6 \end{cases} \quad (4.27)$$

(4.24)~(4.27)式中所用常数 τ_n 、 τ_p 、 S_n 、 S_p 、 C_n 、 C_p 、 A_n 、 B_n 、 A_p 、 B_p 等,用户可通过输入参数文件的书写,选用其他更合适的值,上面所列数值,仅是 MINIMOS-2 程序中所用的补缺值。

§ 4.5 MINIMOS-2 的使用和应用例举

4.5.1 MINIMOS-2 的使用

同使用 Stanford 大学开发的工艺模拟软件 SUPREM 系列和器件模拟软件系列相似,使用 MINIMOS-2 软件前必须了解 MINIMOS-2 的功能和它所用的各种模型以及解读 MINIMOS-2 的用户手册,主要是输入文件书写格式[参见附录三]。

MINIMOS-2 和 SUPREM-2 是不同国家的两个大学独立开发的,程序中所用的相关参数的名称以及数据格式有所不同,因而在联用时中间要插入一个转换程序 SUPMINI。

4.5.2 MINIMOS-2 的应用例举

4.5.2.1 MINIMOS-2 的输入文件例举

以下介绍维也纳工业大学提供的 4 个输入文件的例子^[4.1]。由于 MINIMOS-2 开发成功并释放应用在 1980 年,例子中模拟的 MOSFET 的沟长都为 $3 \mu\text{m}$ 。以下

示出的这 4 个例子依次相应于 MINIMOS-2 可以执行的 4 种计算模型,它们是一维计算模型(MODEL=1-D),阈值电压计算模型(MODEL=THRES),二维计算模型(MODEL=2-D)以及雪崩击穿计算模型(MODEL=AVAL).

例一 铝栅 3 微米沟长 MOSFET 模拟(用一维计算模型)

```
TITLE      TEST # 1
DEVICE     CHANNEL = N   GATE = AL   TOX = 420.E-8   W = 200.E-4   L = 3.E-4
BIAS       UD = 3   UG = 0   UB = -2
PROFILE    NB = 1.2E15   ELEM = AS   DOSE = 5.E15   TOX = 420.E-8   AKEV = 300   TEMP = 1050
+          TIME = 2700
IMPLANT    ELEM = B   DOSE = 5.E11   AKEV = 140   TEMP = 900   TIME = 1000
IMPLANT    ELEM = AS   DOSE = 5.E11   AKEV = 150
OPTION     NSS = 4.E10   MODEL = 1-D
OUTPUT     DC = YES   EL = NO   ET = NO   CC = NO   PSI = NO
END
```

例二 铝栅 3 微米沟长 MOSFET 模拟(用阈值电压计算模型)

```
TITLE      TEST # 2
DEVICE     CHANNEL = N   GATE = AL   TOX = 420.E-8   W = 200.E-4   L = 3.E-4
BIAS       UD = 3   UB = -2
PROFILE    NB = 1.2E15   ELEM = AS   DOSE = 5.E15   TOX = 420.E-8   AKEV = 300   TEMP = 1050
+          TIME = 2700
IMPLANT    ELEM = B   DOSE = 5.E11   AKEV = 140   TEMP = 900   TIME = 1000
IMPLANT    ELEM = AS   DOSE = 5.E11   AKEV = 150
OPTION     NSS = 4.E10   MODEL = THRES
OUTPUT     EL = NO   ET = NO   CC = NO   PSI = NO
END
```

例三 铝栅 3 微米沟长 MOSFET 模拟(用二维计算模型)

```
TITLE      TEST # 3
DEVICE     CHANNEL = N   GATE = AL   TOX = 420.E-8   W = 200.E-4   L = 3.E-4
BIAS       UD = 3   UG = 0   UB = -2
PROFILE    NB = 1.2E15   ELEM = AS   DOSE = 5.E15   TOX = 420.E-8   AKEV = 300   TEMP = 1050
+          TIME = 2700
IMPLANY    ELEM = B   DOSE = 5.E11   AKEV = 140   TEMP = 900   TIME = 1000
IMPLANT    ELEM = AS   DOSE = 5.E11   AKEV = 150
OPTION     NSS = 4.E10
```

```

OUTPUT  EL = NO  ET = NO  CC = NO  PSI = NO
END

```

例四 铝栅 3 微米沟长 MOSFET 模拟(用雪崩击穿计算模型)

```

TITLE      TEST # 4
DEVICE     CHANNEL = N  GATE = AL  TOX = 420.E-8  W = 200.E-4  L = 3.E-4
BIAS       UD = 3  UG = 0  UB = -2
PROFILE    NB = 1.2E15  ELEM = AS  DOSE = 5.E15  TOX = 420.E-8  AKEV = 300  TEMP = 1050
           TIME = 2700
IMPLANT    ELEM = B  DOSE = 5.E11  AKEV = 140  TEMP = 900  TIME = 1000
IMPLANT    ELEM = AS  DOSE = 5.E11  AKEV = 150
OPTION     NSS = 4.E10  MODE = AVAL  AN = 1.7E7  AP = 1.7E7  BN = 2.9E6  BP = 3.2E6
OUTPUT     EL = NO  ET = NO  MAJ = YES  MIN = NO
END

```

4.5.2.2 几个参数的二维图输出例举

以下给出可由 MINIMOS-2 输出的几个参数的二维图^[4.8],由图 4.2—图 4.6 这些图模拟的 MOSFET 其几何沟长(即掩模宽度)是 $1.4\ \mu\text{m}$,结深约 $0.3\ \mu\text{m}$,源/漏的横向扩散约 $0.2\ \mu\text{m}$,因而,其冶金学上的沟道长度约 $1\ \mu\text{m}$.

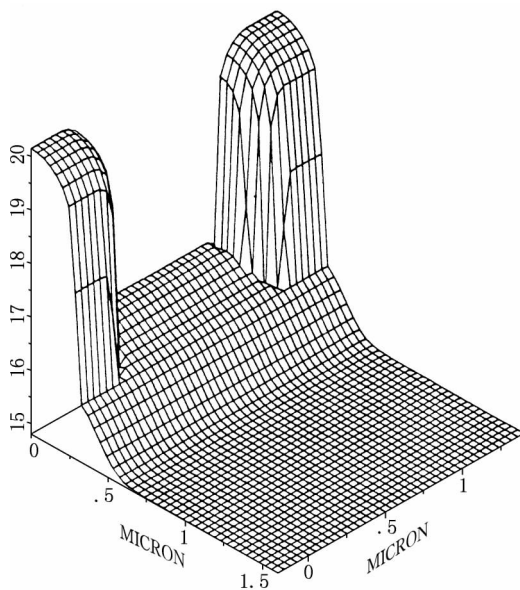


图 4.2 二维掺杂浓度 $[\log, \text{cm}^{-3}]$ 图(源于[4.6])

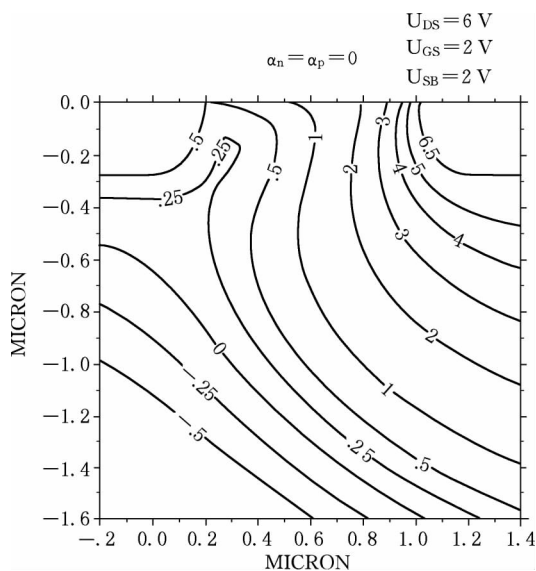


图 4.3 二维静电势[V]分布轮廓图(源于[4.6])
($U_{DS} = 6 \text{ V}$, $U_{GS} = 2 \text{ V}$, $U_{SB} = 2 \text{ V}$, 忽略雪崩产生)

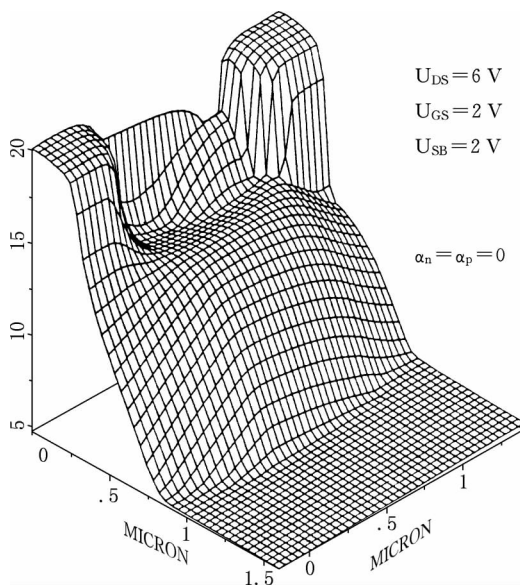


图 4.4 二维电子浓度[log, cm^{-3}]分布图(源于[4.6])
($U_{DS} = 6 \text{ V}$, $U_{GS} = 2 \text{ V}$, $U_{SB} = 2 \text{ V}$, 忽略雪崩产生)

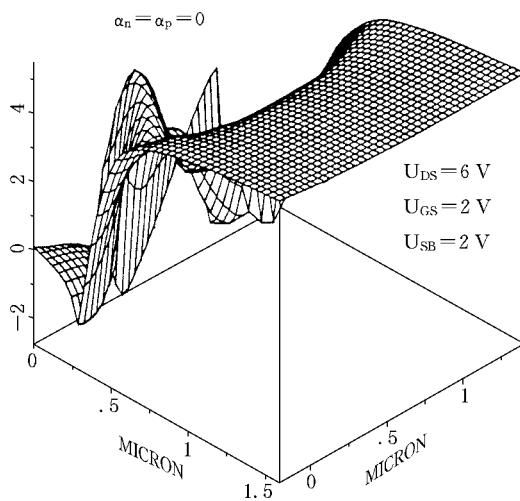


图 4.5 二维空穴浓度 $[\log, \text{cm}^{-3}]$ 分布图(源于[4.6])
($U_{DS} = 6 \text{ V}$, $U_{GS} = 2 \text{ V}$, $U_{SB} = 2 \text{ V}$, 忽略雪崩产生)

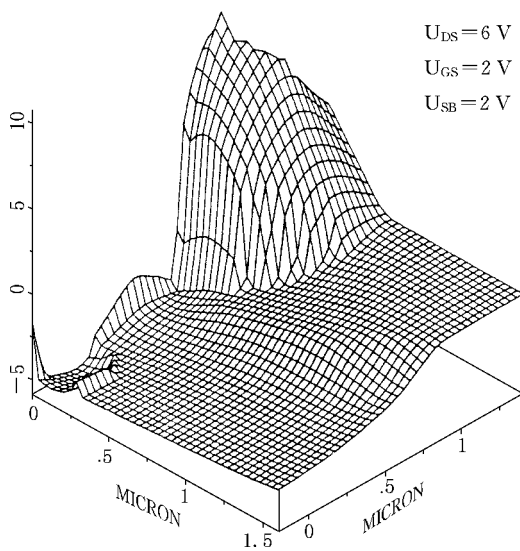


图 4.6 二维净产生/复合率 $[\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$ 分布图(源于[4.6])
($U_{DS} = 6 \text{ V}$, $U_{GS} = 2 \text{ V}$, $U_{SB} = 2 \text{ V}$)

§ 4.6 MEDICI

4.6.1 MEDICI 概述

二维半导体器件模拟软件 MEDICI 商用第一个版本出现于 1992 年^[4.7.],它基于美国 Stanford 大学开发的 PISCES-2B^[4.8],最近美国 Synopsys 公司推出了 MEDICI X-2005.10 版本,这是 MEDICI 的最新版本,是当今实用性最强的二维半导体器件模拟软件,从该版本的用户手册^[4.2]可知:MEDICI 是 Synopsys 公司推出的半导体模拟工具系列 TAURUS MEDICI 中包含的 3 种模拟软件(MEDICI, DAVINIC 和 TAURUS DEVICE)之一。

MEDICI 模拟器件中电势和载流子的二维分布,预测任意偏置条件下的 MOS 型、双极型以及其他类型的半导体器件的二维特性。

MEDICI 解 Poisson 方程和电子及空穴电流连续性方程,分析二极管和双极型晶体管以及涉及二种载流子电流流的效应,例如 CMOS 中的闭锁(Latchup)效应,MEDICI 也分析由一种载流子起支配作用的器件,例如 MOSFETs, JFETs 和 MESFETs. 此外, MEDICI 能用于研究器件的瞬态特性。

MEDICI 能模拟深亚微米器件的特性,自洽解电子和空穴能量平衡方程及其他半导体方程. MEDICI 能模拟载流子加热效应、速度过冲效应,并能分析这些效应对器件特性的影响。

MEDICI 用非均匀三角形模拟网格,能模拟任意器件几何形貌,包括平面和非平面表面形貌. 在模拟过程中网格能被自动精制,能在用户给出的节点数和单元数上附加节点数和单元数,这样,为了模拟例如超过容限的电势或杂质浓度的变化可使用多于已存在的网格单元. 这些灵活性使 MEDICI 中复杂器件和结构模型的使用成为可能。

用 MEDICI 模拟时,电极可置于器件结构的任意处,杂质分布可用 3 种方法获得:来自 MEDICI 的解析函数,来自 Synopsys TCAD 的工艺模拟程序 TMA SUPREM-3 或 TSUPREM-4 的输出以及来自包含杂质分布的用户给出的文本文件。

MEDICI 中用了一系列保证模拟精度的物理模型,包括:复合、光产生、碰撞电离、禁带变窄、带间隧穿、迁移率和寿命等模型,还包括玻尔兹曼和费米-狄拉克两种统计以及杂质不完全离化等模型。

MEDICI 还具有以下一些其他特色,包括:

能在电极接触处附加集总(lumped)电阻、电容和电感元件,有对分布接触电阻的详细说明,在模拟进行期间可随选电压或电流边界条件,能自动显示 IV 曲线,以及能执行任意频率下的 AC 小信号分析以计算电容、电导、导纳和 S 参数同频率的相关性等.

4.6.2 MEDICI 执行的方程

MEDICI 执行的方程包括:Poisson 方程,电子和空穴的连续性方程,电子和空穴的电流密度方程,电子和空穴的能量平衡方程等组成的流体动力学方程组.

Poisson 方程

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon \vec{\nabla} \psi = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-) - \rho_s \quad (4.28)$$

这里 ϵ 为电容率, ψ 在 MEDICI 中常定义为本征费米势 ψ_i , N_D^+ 和 N_A^- 分别为离化的施主和受主浓度, ρ_s 是表面电荷密度,通常包含绝缘材料中的固定电荷或带电的界面态.

电子和空穴的连续性方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = + \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - U_n \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p - U_p \quad (4.30)$$

这里 U_n 和 U_p 分别为电子和空穴的净复合率, $\vec{J}_n$ 和 $\vec{J}_p$ 分别为电子和空穴的电流密度. 若电子和空穴的电流密度用标准的漂移—扩散方程,且用爱因斯坦关系将载流子迁移率替代载流子扩散系数以及考虑了载流子加热引起的温度随空间的变化,则有:

$$\vec{J}_n = q\mu_n(u_n)[n\vec{E}_n + \vec{\nabla}(u_n n)] \quad (4.31)$$

$$\vec{J}_p = q\mu_p(u_p)[p\vec{E}_p + \vec{\nabla}(u_p p)] \quad (4.32)$$

这里 u_n 和 u_p 分别为电子和空穴的热电压 kT_n/q 和 kT_p/q . 用能量输运模型(Energy Transport Model)可得出 $\vec{J}_n$ 和 $\vec{J}_p$ 的另一种表示式^{[4.9], [4.10], [4.11]}:

$$\vec{J}_n = q\mu_n n \vec{E}_n + q\mu_n \vec{\nabla}(u_n n) + qnu_n \frac{\partial \mu_n(u_n)}{\partial u_n} \vec{\nabla} u_n \quad (4.33)$$

$$\vec{J}_p = q\mu_p p \vec{E}_p - q\mu_p \vec{\nabla}(u_p p) - qp u_p \frac{\partial \mu_p(u_p)}{\partial u_p} \vec{\nabla} u_p \quad (4.34)$$

已用以上方程组模拟了小尺寸双极型器件中的寄生速度过冲效应(spurious velocity overshoot effect)^[4.11]。

以下为 MEDICI 中执行的流体动力学方程组中的电子和空穴能量平衡方程^{[4.12], [4.13], [4.14], [4.15]}, 它包含瞬态效应及由碰撞电离引起的载流子变冷效应。

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{S}_n = \frac{1}{q} \vec{J}_n \cdot \vec{E}_n - \frac{3}{2} \left[n \frac{u_n - u_0}{\text{ELE.TAUW}} + \frac{\partial(nu_n)}{\partial t} \right] - \frac{1}{q} E_g G_n^{\text{II}} + H_n^R \quad (4.35)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{S}_p = \frac{1}{q} \vec{J}_p \cdot \vec{E}_p - \frac{3}{2} \left[p \frac{u_p - u_0}{\text{HOL.TAUW}} + \frac{\partial(pu_p)}{\partial t} \right] - \frac{1}{q} E_g G_p^{\text{II}} + H_p^R \quad (4.36)$$

$$\vec{S}_n = -\frac{5}{2} u_n \left[\frac{\vec{J}_n}{q} + \text{ELE.CQ} \mu_n n \vec{\nabla} u_n \right] \quad (4.37)$$

$$\vec{S}_p = +\frac{5}{2} u_p \left[\frac{\vec{J}_p}{q} - \text{HOL.CQ} \mu_p p \vec{\nabla} u_p \right] \quad (4.38)$$

$$H_n^R = U_{\text{Auger}}^n \left[\frac{E_g}{q} + \frac{3}{2} u_p \right] - \frac{3}{2} [\text{SRHG} \cdot U_{\text{SRH}} u_{nL} + U_{\text{Auger}}^p u_n] \quad (4.39)$$

$$H_p^R = U_{\text{Auger}}^p \left[\frac{E_g}{q} + \frac{3}{2} u_n \right] - \frac{3}{2} [\text{SRHG} \cdot U_{\text{SRH}} u_{pL} + U_{\text{Auger}}^n u_p] \quad (4.40)$$

方程(4.35)–(4.40)中:

● $\vec{S}_n$ 、 $\vec{S}_p$ 分别为定标的(scaled)电子、空穴能量流密度, 即单位时间内流过单位面积的电子、空穴单位电荷的能量, 单位用 $\text{W}/\text{cm}^2\text{-Coul}$ 。

● u_0 为点阵的热电压 kT_0/q 。

● G_n^{II} 、 G_p^{II} 分别为由电子、空穴碰撞电离引起的产生率, 单位用 $1/\text{cm}^3\text{-sec}$ 。

● H_n^R 、 H_p^R 分别为由电子、空穴复合引起的单位电荷热产生项, 单位用 $\text{W}/\text{cm}^3\text{-Coul}$ 。

● $u_{nL} = \begin{cases} u_n & (\text{如果 } U_{\text{SRH}} > 0) \\ u_0 & (\text{如果为其他情况}) \end{cases}$, $u_{pL} = \begin{cases} u_p & (\text{如果 } U_{\text{SRH}} > 0) \\ u_0 & (\text{如果为其他情况}) \end{cases}$

● 参数ELE.TAUW、HOL.TAUW分别表示电子、空穴的能量弛豫时间。 τ_{wn} 、

τ_{wp} 单位为 sec, τ_{wn} 的补缺值对硅、多晶硅、二氧化硅取 2×10^{-13} sec, 对砷化镓取 1×10^{-12} sec, τ_{wp} 的补缺值与 τ_{wn} 相同.

● 参数 ELECQ、HOLCQ 分别表示电子、空穴的热导率系数, 是无量纲量, 补缺值都为 1.

● SRHG 可取 1 或 0, 若用全耦合方法解包括能量平衡方程的流体动力学方程组则 SRHG 为 1, 否则为 0.

以上列出的电子和空穴的能量平衡方程大多数适用于硅中载流子的输运, 适用于化合物半导体例如砷化镓的, MEDICI 采用文献[4.16] [4.17] 中给出的, 它们是:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{q} \left[\frac{5}{2} \vec{J}_n \cdot \vec{\nabla} u_n + u_n \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n \right] + \text{ELECQ} \vec{\nabla} \cdot (u_n \mu_n n \vec{\nabla} u_n) + \frac{1}{q} \vec{J}_n \cdot \vec{E} \\ & = \frac{3}{2} \left[n \frac{u_n - u_0}{\tau_{wn}} + \frac{\partial(nu_n)}{\partial t} \right] + \frac{E_g G_n^{\text{II}}}{q} - H_n^R \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{1}{q} \left[\frac{5}{2} \vec{J}_p \cdot \vec{\nabla} u_p + u_p \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \right] + \text{HOLCQ} \vec{\nabla} \cdot (u_p \mu_p p \vec{\nabla} u_p) + \frac{1}{q} \vec{J}_p \cdot \vec{E} \\ & = \frac{3}{2} \left[p \frac{u_p - u_0}{\tau_{wp}} + \frac{\partial(pu_p)}{\partial t} \right] + \frac{E_g G_p^{\text{II}}}{q} - H_p^R \end{aligned} \quad (4.42)$$

4.6.3 MEDICI 的物理模型

为了精确模拟器件特性, MEDICI 中用了较精确的物理模型, 包括复合和寿命模型, 禁带模型, 迁移率模型以及一些其他的物理模型.

4.6.3.1 复合和寿命模型

1. SRH、Auger 和直接复合模型

MEDICI 中使用的基于 SRH、Auger 和直接复合模型的复合率表示式为:

$$U = U_n = U_p = U_{\text{SRH}} + U_{\text{Auger}} + U_{\text{dir}} \quad (4.43)$$

式中 U , U_n , U_p , U_{SRH} , U_{Auger} , U_{dir} 分别为净复合率, 电子净复合率, 空穴净复合率, SRH 复合率, Auger 复合率和直接复合率.

$$U_{\text{SRH}} = \frac{pn - n_{\text{ie}}^2}{\tau_p \left[n + n_{\text{ie}} \exp\left(\frac{E_{\text{TRAP}}}{kT}\right) \right] + \tau_n \left[p + n_{\text{ie}} \exp\left(\frac{-E_{\text{TRAP}}}{kT}\right) \right]} \quad (4.44)$$

$$U_{\text{dir}} = \mathbf{C.DIRECT}(n_p - n_{\text{ie}}^2) \quad (4.45)$$

$$U_{\text{Auger}} = [nC_{\text{Aug},n}(T) + pC_{\text{Aug},p}(T)](pn - n_{\text{ie}}^2) \quad (4.46)$$

上式中：

$$C_{\text{Aug},n}(T) = \mathbf{AUGN} \left(\frac{T}{300} \right)^{\mathbf{DN.AUGER}} \quad (4.47)$$

$$C_{\text{Aug},p}(T) = \mathbf{AUGP} \left(\frac{T}{300} \right)^{\mathbf{DP.AUGER}} \quad (4.48)$$

(4.44)~(4.48)式中, n_{ie} 是有效本征浓度, τ_n 和 τ_p 分别是电子和空穴寿命. 参数 **ETRAP** 表示复合中心能级的能量值 E_t 和本征费米能级的能量值 E_i 之差, 即 **ETRAP** = $E_t - E_i$. 参数 **C.DIRECT**, **AUGN**, **AUGP**, **DN.AUGER**, **DP.AUGER** 分别表示带间复合系数(单位为 cm^3/sec), 电子 Auger 系数(单位为 cm^6/sec), 空穴 Auger 系数(单位为 cm^6/sec), 电子 Auger 系数温度关系的幂(无量纲), 空穴 Auger 系数温度关系的幂(无量纲), 这些参数都可由 MEDICI 的用户自行给定, 其补缺值分别为 **C.DIRECT** = 0, **AUGN** = $2.8 \times 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{sec}$, **AUGP** = $9.9 \times 10^{-32} \text{ cm}^6/\text{sec}$, **DN.AUGER** = 0, **DP.AUGER** = 0.

2. 表面复合模型

MEDICI 的复合模型中也包含表面复合模型, 这是一种在绝缘层和半导体层界面处的复合模型, 用表面复合速率描述^[4, 18]. 载流子在界面每个节点(node)处的寿命同复合速率的关系满足下列关系式:

$$\frac{1}{\tau_n^{\text{eff}}(i)} = \frac{\mathbf{S.N}d_i}{A_i} + \frac{1}{\tau_n(i)} \quad (4.49)$$

$$\frac{1}{\tau_p^{\text{eff}}(i)} = \frac{\mathbf{S.P}d_i}{A_i} + \frac{1}{\tau_p(i)} \quad (4.50)$$

上两式中 $\tau_n^{\text{eff}}(i)$ 、 $\tau_p^{\text{eff}}(i)$ 分别表示在界面 i 节点处的有效寿命, $\tau_n(i)$ 、 $\tau_p(i)$ 分别表示 i 节点处的常规的 SRH 寿命, A_i 和 d_i 分别是同 i 节点相关的半导体面积和界面长度, 而参数 **S.N**、**S.P** 分别为电子、空穴在界面处的复合速率也称电子、空穴和表面复合速率.

3. 寿命同杂质浓度、点阵温度的相关性模型

寿命同杂质浓度相关性的表示式如下:

$$\frac{\mathbf{TAUN0}}{\tau_n(x, y)} = \mathbf{AN} + \mathbf{BN} \left(\frac{N_{\text{total}}(x, y)}{\mathbf{NSRHN}} \right) + \mathbf{CN} \left(\frac{N_{\text{total}}(x, y)}{\mathbf{NSRHN}} \right)^{\mathbf{EN}} \quad (4.51)$$

$$\frac{\text{TAUP0}}{\tau_p(x, y)} = \text{AP} + \text{BP} \left(\frac{N_{\text{total}}(x, y)}{\text{NSRHP}} \right) + \text{CP} \left(\frac{N_{\text{total}}(x, y)}{\text{NSRHP}} \right)^{\text{EP}} \quad (4.52)$$

上两式中, N_{total} 是局域总杂质浓度, 参数 NSRHN、NSRHP、TAUN0、TAUP0、AN、AP、BN、BP、CN、CP、EN 和 EP 用户可自由存取, 也可用补缺值, 这些参数的定义、补缺值及单位见表 4.6 所示。

表 4.6 寿命同杂质浓度相关性表示式中的几个参数(源于[4.2])

参数	定 义	补 缺 值				单位
		Si	Poly-Si	SiO ₂	GaAs	
NSRHN	电子的 SRH 浓度参数	5×10^{16}	5×10^{16}	5×10^{16}	/	cm^{-3}
NSRHP	空穴的 SRH 浓度参数	5×10^{16}	5×10^{16}	5×10^{16}	/	cm^{-3}
TAUN0	SRH 电子寿命	1×10^{-7}	1×10^{-7}	2×10^{-5}	1×10^{-9}	sec
TAUP0	SRH 空穴寿命	1×10^{-7}	1×10^{-7}	2×10^{-5}	1×10^{-9}	sec
AN	电子寿命同浓度相关性表示式中的常数项	/	/	/	/	无
AP	空穴寿命同浓度相关性表示式中的常数项	/	/	/	/	无
BN	电子寿命同浓度相关性表示式中的线性项系数	/	/	/	0	无
BP	空穴寿命同浓度相关性表示式中的线性项系数	/	/	/	0	无
CN	电子寿命同浓度相关性表示式中的幂项系数	0	0	0	0	无
CP	空穴寿命同浓度相关性表示式中的幂项系数	0	0	0	0	无
EN	电子寿命同浓度相关性表示式中的幂项乘方数	2	2	2	0	无
EP	空穴寿命同浓度相关性表示式中的幂项乘方数	2	2	2	0	无

若用补缺值, 则(4.51)和(4.52)式可简化成:

$$\tau_n(x, y) = \frac{\text{TAUN0}}{1 + N_{\text{total}}(x, y)/\text{NSRHN}} \quad (4.53)$$

$$\tau_p(x, y) = \frac{\text{TAUP0}}{1 + N_{\text{total}}(x, y)/\text{NSRHP}} \quad (4.54)$$

寿命同点阵温度相关性的表示式如下：

$$\tau_n(x, y, T) = \tau_n(x, y) \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXN.TAU}} \quad (4.55)$$

$$\tau_p(x, y, T) = \tau_p(x, y) \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXP.TAU}} \quad (4.56)$$

参数 EXN. TAU 和 EXP. TAU 的补缺值都为零, 这时寿命同点阵温度 T 的相关性不被考虑, $\tau_n(x, y, T)$ 和 $\tau_p(x, y, T)$ 分别简化成只考虑浓度相关性的 $\tau_n(x, y)$ 和 $\tau_p(x, y)$.

4. 复合和寿命同电场的相关性模型

更一般化的 SRH 复合模型应考虑寿命同电场的相关性以及强电场存在时带间隧穿引起的复合. 这样, 扩展的、更一般化的 SRH 复合率 U_{RTUN} 的表示式为：

$$U_{\text{RTUN}} = U_{\text{SRH}}^* + U_{\text{btbt}} \quad (4.57)$$

其中 U_{SRH}^* 是考虑了寿命同电场相关性后修改的 SRH 复合率, 而 U_{btbt} 表示在高电场下带间隧穿引起的复合.

电子寿命 τ_n 随电场 E 的变化由下式表示：

$$\tau_n = \frac{\tau_n^0}{1 + \Gamma_n} \quad (4.58)$$

式中 τ_n^0 是 $E = 0$ 时的电子寿命, 而 Γ_n 是电场增强因子, 它由复合中心帮助的隧穿引起. 低场和高场下的 Γ_n , 文献[4.19]给出了近似的解析表示式, 以此为基础, MEDICI 采用低场到高场有平稳过渡的 Γ_n 表示式：

$$\Gamma_n = \sqrt{\pi} \frac{E}{E_{\text{trap}}} \exp \left[\frac{1}{3} \left(\frac{E}{E_{\text{trap}}} \right)^2 \right] \left\{ 2 - \operatorname{erfc} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E_{\text{trap}}}{E} - \frac{E}{E_{\text{trap}}} \cdot \frac{\Delta E_n}{kT} \right) \right] \right\} \quad (4.59)$$

当 $\frac{E}{E_{\text{trap}}} \leq \sqrt{\frac{\Delta E_n}{kT}}$; 而

$$\begin{aligned} \Gamma_n = & \sqrt{\pi} \frac{E}{E_{\text{trap}}} \left(\frac{\Delta E_n}{kT} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{\Delta E_n}{kT} + \frac{E}{E_{\text{trap}}} \left(\frac{\Delta E_n}{kT} \right)^{1/2} + \frac{1}{3} \frac{E_{\text{trap}}}{E} \left(\frac{\Delta E_n}{kT} \right)^{3/2} \right] \\ & \times \operatorname{erfc} \left[\left(\frac{E}{E_{\text{trap}}} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta E_n}{kT} \right)^{1/4} - \left(\frac{E_{\text{trap}}}{E} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta E_n}{kT} \right)^{3/4} \right] \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\text{当 } \frac{E}{E_{\text{trap}}} > \sqrt{\frac{\Delta E_m}{kT}}.$$

复合中心能级或陷阱能级的能量 E_{trap} 以及 $\Delta E_n/kT$ 的表示式如下：

$$E_{\text{trap}} = \frac{\sqrt{8(\mathbf{M} \cdot \mathbf{RTUN} \cdot m_0)(kT)^3}}{q \frac{h}{2\pi}} \quad (4.61)$$

$$\frac{\Delta E_n}{kT} = \begin{cases} 0 & n > n_{\text{ie}} \exp(E_g/2kT) \\ \frac{E_g}{2kT} - \ln \frac{n}{n_{\text{ie}}} & n_t \leq n \leq n_{\text{ie}} \exp(E_g/2kT) \\ \frac{E_g}{2kT} - \ln \frac{n_t}{n_{\text{ie}}} & n < n_t \end{cases} \quad (4.62)$$

这里,参数 $\mathbf{M} \cdot \mathbf{RTUN}$ 是复合中心帮助的隧穿有效质量,单位为 m_0 ,补缺值为 0.25,而 n_t 的表示式为：

$$n_t = n_{\text{ie}} \exp\left(\frac{\mathbf{ETRAP}}{kT}\right) \quad (4.63)$$

为空穴的 $\tau_p, \Gamma_p, \Delta E_p/kT$ 表示式,同电子完全相似,而 p_t 的定义式为：

$$p_t = n_{\text{ie}} \exp\left(-\frac{\mathbf{ETRAP}}{kT}\right) \quad (4.64)$$

由带间隧穿引起的复合,由复合率 U_{btbt} 表示：

$$U_{\text{btbt}} = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{RTUNE}^{\mathbf{S} \cdot \mathbf{RTUN}} D \exp\left(-\frac{E_{\text{btbt}}}{E}\right) \quad (4.65)$$

这里,

$$E_{\text{btbt}} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{RTUN} \left(\frac{E_g(T)}{E_g(T=300)} \right)^{(3/2)} \quad (4.66)$$

而因子 D 的表示式为^[4.19]：

$$D = \begin{cases} 0 & -\vec{\nabla} \phi_{n,p} \cdot \vec{E} < 0 \\ \frac{n_{\text{ie}}^2 - pn}{(n + n_{\text{ie}})(p + n_{\text{ie}})} & -\vec{\nabla} \phi_{n,p} \cdot \vec{E} > 0, J_{n,p} < 10^{-3} q n_{\text{ie}} v_{\text{sat}} \\ 1 & -\vec{\nabla} \phi_{n,p} \cdot \vec{E} > 0, J_{n,p} > 10^{-3} q n_{\text{ie}} v_{\text{sat}} \end{cases} \quad (4.67)$$

这里 v_{sat} 为饱和的漂移速度,参数 $\mathbf{B} \cdot \mathbf{RTUN}$, $\mathbf{S} \cdot \mathbf{RTUN}$ 和 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{RTUN}$ 的定义、补缺值及单位见表 4.7 所示.

表 4.7 带间隧穿复合率表示式中的几个参数(源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值				单 位
		Si	Poly-Si	SiO ₂	GaAs	
B, RTUN	带间隧穿率比例因子	4×10^{14}	4×10^{14}	4×10^{14}	0	(cm/V) S, RTUN /cm ³ /sec
S, RTUN	带间电场乘幂	2.5	2.5	2.5	2	无
E, RTUN	带间参考电场	1.9×10^7	1.9×10^7	1.9×10^7	0	V/cm

4.6.3.2 禁带宽度模型

1. 禁带宽度和有效态密度的温度关系

各向同性的元素半导体其禁带宽度 E_g 和导带、价带的有效态密度 N_C 、 N_V 都随温度变化^[3,9],其相应的表示式为:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{EGALPH T^2}{T + EGBETA}$$

$$= E_g(300) + EGALPH \left[\frac{300^2}{300 + EGBETA} - \frac{T^2}{T + EGBETA} \right] \quad (4.68)$$

$$N_C(T) = 2M_C \left(\frac{2\pi m_{de} kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (4.69)$$

$$N_V(T) = 2M_V \left(\frac{2\pi m_{dh} kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (4.70)$$

这里 M_C 、 M_V 分别为导带、价带的相等极小数, m_{de} 、 m_{dh} 分别为电子、空穴的态有效质量密度. 对于均匀材料, $E_g(300) = EG300$. 在 MEDICI 中, 态有效密度表示如下:

$$N_C(T) = NC300 \left(\frac{T}{300} \right)^{NC.F} \quad (4.71)$$

$$N_V(T) = NV300 \left(\frac{T}{300} \right)^{NV.F} \quad (4.72)$$

按电势 ψ 的定义, 它同禁带宽度及有效态密度的关系式如下:

$$-q\psi = E_C - \frac{E_g}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_C}{N_V} \right) \quad (4.73)$$

参数 **EG300**, **EGALPH**, **EGBETA**, **NC300**, **NC.F**, **NV300** 和 **NV.F** 的定义、补缺值及单位见表 4.8 所示.

表 4.8 禁带宽度和有效态密度温度关系表示式中的几个参数(源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值				单位
		Si	Poly-Si	SiO ₂	GaAs	
EG300	300 K 时材料的禁带宽度	1.08	1.08	9.0	1.424	eV
EGALPH	用在计算禁带宽度随温度变化的 alpha 值	4.73×10^{-4}	4.73×10^{-4}	4.73×10^{-4}	5.405×10^{-4}	eV/K
EGBETA	用在计算禁带宽度随温度变化的 beta 值	636	636	636	204	K
NC300	300 K 时半导体导带中的有效态密度	2.8×10^{19}	2.8×10^{19}	2.8×10^{19}	4.7×10^{17}	cm ⁻³
NC.F	描述导带中有效态密度的温度乘幂	1.5	1.5	1.5	1.5	无
NV300	300 K 时半导体价带中的有效态密度	1.04×10^{19}	1.04×10^{19}	1.04×10^{19}	7×10^{18}	cm ⁻³
NV.F	描述价带中有效态密度的温度乘幂	1.5	1.5	1.5	1.5	无

2. 重掺杂引起禁带变窄

重掺杂引起禁带变窄 ΔE_g 以及 ΔE_g 引起本征载流子浓度 n_i 的变化的表示式分别为^[3.3]：

$$\Delta E_g = \frac{V0.BGN}{2kT} q \left[\ln \frac{N_{total}(x,y)}{N0.BGN} + \sqrt{\left(\ln \frac{N_{total}(x,y)}{N0.BGN} \right)^2 + CON.BGN} \right] \quad (4.74)$$

$$n_{ie}(x,y) = n_i \exp(\Delta E_g) \quad (4.75)$$

式中 n_{ie} 为有效本征载流子浓度. 参数 V0.BGN、N0.BGN 和 CON.BGN 的定义、补缺值和单位见表 4.9 所示. 这些参数用户可以自己调节.

表 4.9 几个禁带变窄模型公式中的参数(1)(源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值				单位
		Si	Poly-Si	SiO ₂	GaAs	
V0.BGN	用在 Slotboom 禁带变窄模型公式中的电压参数	9×10^{-3}	9×10^{-3}	9×10^{-3}	0	V
N0.BGN	用在 Slotboom 禁带变窄模型公式中的浓度参数	1×10^{17}	1×10^{17}	1×10^{17}	1×10^{17}	cm ⁻³
CON.BGN	用在 Slotboom 禁带变窄模型公式中的常数参数	0.5	0.5	0.5	0	无

MEDICI 还根据文献[4.20][4.21]将 ΔE_g 细分为 n 型材料导带和价带的能带移动 ΔE_{cn} 和 ΔE_{vn} 以及为 p 型材料导带和价带的能带移动 ΔE_{cp} 和 ΔE_{vp} , 它们的表示式分别为:

$$\Delta E_{cn} = \text{ANC. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{3}} + \text{BNC. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{4}} + \text{CNC. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.76)$$

$$\Delta E_{vn} = \text{ANV. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{3}} + \text{BNV. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{4}} + \text{CNV. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.77)$$

$$\Delta E_{cp} = \text{APC. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{3}} + \text{BPC. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{4}} + \text{CPC. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.78)$$

$$\Delta E_{vp} = \text{APV. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{3}} + \text{BPV. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{4}} + \text{CPV. BGN} \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.79)$$

式中参数 **ANC. BGN**, **BNC. BGN**, **CNC. BGN**, **ANV. BGN**, **BNV. BGN**, **CNV. BGN**, **APC. BGN**, **BPC. BGN**, **CPC. BGN**, **APV. BGN**, **BPV. BGN** 和 **CPV. BGN** 的定义, 补缺值和单位见表 4.10 所示, 这些参数用户可自由调节.

这样, 电子或空穴的禁带变窄 $\Delta E_{gn,p}$ 以及同空间 x, y 有关的 n_{ie} 可写成:

$$\Delta E_{gn,p} = \Delta E_{vn,p} - \Delta E_{cn,p} \quad (4.80)$$

$$n_{ie}(x, y) = n_i \exp(\Delta E_{gn,p}) \quad (4.81)$$

这样, 根据玻尔兹曼统计得出的 n 和 p 表示式(4.82)和(4.83)中的 n_{ie} 以及电场 $\vec{E}_n$ 和 $\vec{E}_p$ 表示式(4.84)和(4.85)中的 n_{ie} 都要用(4.81)式中的 $n_{ie}(x, y)$ 来表示.

$$n \approx N_c \exp(\eta_n) = n_{ie} \exp \left[\frac{q}{kT} (\psi - \phi_n) \right] \quad (4.82)$$

$$p \approx N_v \exp(\eta_p) = n_{ie} \exp \left[\frac{q}{kT} (\phi_p - \psi) \right] \quad (4.83)$$

$$\vec{E}_n = -\vec{\nabla} \left(\psi + \frac{kT}{q} \ln n_{ie} \right) \quad (4.84)$$

$$\vec{E}_p = -\vec{\nabla} \left(\psi - \frac{kT}{q} \ln n_{ie} \right) \quad (4.85)$$

表 4.10 几个禁带变窄模型公式中的参数(2)(源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值				单位
		Si	Poly-Si	SiO ₂	GaAs	
ANC, BGN	用在 Jian 和 Roulston's 禁带变窄模型中的常数参数(为 n 型半导体)	-14.84×10^{-3}	-14.84×10^{-3}	-14.84×10^{-3}	-16.30×10^{-3}	eV
BNC, BGN	同上	0	0	0	0	eV
CNC, BGN	同上	0.78×10^{-3}	0.78×10^{-3}	0.78×10^{-3}	-18.13×10^{-3}	eV
ANV, BGN	同上	0	0	0	0	eV
BNV, BGN	同上	15.08×10^{-3}	15.08×10^{-3}	15.08×10^{-3}	7.47×10^{-3}	eV
CNV, BGN	同上	0.74×10^{-3}	0.74×10^{-3}	0.74×10^{-3}	72.52×10^{-3}	eV
APC, BGN	用在 Jian 和 Roulston's 禁带变窄模型中的常数参数(为 p 型半导体)	0	0	0	-9.71×10^{-3}	eV
BPC, BGN	同上	-16.27×10^{-3}	-16.27×10^{-3}	-16.27×10^{-3}	0	eV
CPC, BGN	同上	-0.18×10^{-3}	-0.18×10^{-3}	-0.18×10^{-3}	-0.47×10^{-3}	eV
APV, BGN	同上	18.46×10^{-3}	18.46×10^{-3}	18.46×10^{-3}	0	eV
BPV, BGN	同上	0	0	0	12.19×10^{-3}	eV
CPV, BGN	同上	-2.63×10^{-3}	-2.63×10^{-3}	-2.63×10^{-3}	3.41×10^{-3}	eV

3. 禁带和电子亲和势随机应力和应变的变化

除了禁带宽度随温度和掺杂浓度变化外, MEDICI 也考虑禁带宽度 E_g 和电子亲和势 χ 随硅区机械应力和应变的变化 ΔE_g 和 $\Delta \chi$. 有两个模型可供选择, 这里仅介绍一种较新的模型, 该模型用

$$\Delta E_g = \Delta \tilde{E}_c - \Delta \tilde{E}_v \quad (4.86)$$

$$\Delta \chi = -\Delta \tilde{E}_c \quad (4.87)$$

计算由应力引起的禁带和电子亲和势的变化, 这里 $\Delta \tilde{E}_c$ 和 $\Delta \tilde{E}_v$ 分别表示由应力引起的导带和价带边缘的变化,

$$\Delta \tilde{E}_c = \min(\Delta E_{ci}) \quad (4.88)$$

$$\Delta \tilde{E}_v = \max(\Delta E_{vi}, \Delta E_{vh}) \quad (4.89)$$

这里 ΔE_{ci} 是第 i 个椭圆导带极小值处能带边缘的移动, 而 ΔE_{vi} 和 ΔE_{vh} 分别是轻和重空穴价带最大值处能带边缘的移动. 能带边缘的移动采用形变势理论 (deformation potential theory)^[4.22]

$$\Delta E_{ci} = \mathbf{XID}(\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}) + \mathbf{XIU}\epsilon_{ii} \quad (4.90)$$

这里 ϵ 是结晶系坐标系统中的应变张量, 而参数 $\mathbf{XID}$ 和 $\mathbf{XIU}$ 分别是导带的膨胀和切变形变势, 对硅分别为 0.77 eV 和 9.16 eV. 重空穴、轻空穴以及分裂带的价带移动的计算采用文献[4.23]中用的微扰理论和计算方法.

更详细计算 ΔE_{ci} 、 ΔE_{vi} 、 ΔE_{vh} 的描述, 可参见[4.2], [4.22] 和[4.23].

4.6.3.3 迁移率模型

1. MEDICI 提供的多种载流子迁移率模型

载流子迁移率 μ_n 和 μ_p 反映载流子输运过程中的散射机构, MEDICI 提供多种迁移率模型供用户选用, 这些模型的名称、定义及主要内容见表 4.11 所示.

表 4.11 MEDICI 提供的多种载流子迁移率模型 (源于[4.2])

模型名	定义及主要内容
CONMOB	表格化模型, 给出 Si 和 GaAs 中低场、300 K 时载流子迁移率随杂质浓度变化的列表.
ANALYTIC	解析模型, 给出载流子迁移率随杂质浓度和温度变化的表示式, 对 Si 可参见[4.24][4.25], 为 GaAs 可参见[3.9], [3.2]

(续表)

模型名	定义及主要内容
ARORA	ARORA 模型,基于 Arora 等人的工作 ^[4.26] ,计入载流子迁移率随杂质浓度和温度的变化.
CCSMOB	载流子—载流子散射模型 ^[4.27] ,计入载流子迁移率随载流子—载流子散射的变化也计入随杂质浓度和温度的变化.
PHUMOB	Philip 统一迁移率模型 ^{[4.28],[4.29]} ,本模型特别适用于双极型器件的少子迁移率,为正确模拟少子迁移率,需采用合适的禁带变窄参数.
SRFMOB	基于有效电场的表面迁移率模型 ^[4.30] ,本模型在计算半导体—绝缘体表面处的载流子迁移率时用一个有效电场.
SRFMOB2	增强的表面迁移率模型 ^[4.31] ,本模型用在沿半导体—绝缘体界面,计入声子散射、表面粗糙度散射和带电杂质散射.
UNIMOB	通用迁移率模型,适用于 MOSFET 的反型层,同表面迁移率模型相似,但不需要沟道垂直网格大于反型层宽度.
PRPMOB	垂直电场迁移率模型,本模型计入垂直电场对迁移率的减小,本模型可应用在器件的每一个位置不限于界面或反型层.
LSMMOB	Lombardi 表面迁移率模型,基于 Lombardi 等人的工作 ^[4.32] ,是一个结合半导体—绝缘体界面及体硅迁移率表示式的经验模型.
GMCMOB	通用迁移率曲线迁移率模型 ^[4.33] ,本模型跟随通用迁移率曲线,可用于 NMOS 和 PMOS 器件.
SHIRAMOB	Shirahata 迁移率模型,基于 Shirahata 等人的工作 ^[4.34] ,用 Philip 统一迁移率模型(PHOMOB)的所有参数.
TFLDMOB	横向电场迁移率模型,基于 University of Texas, Austin 的工作 ^{[4.35],[4.36]} 是一种为任意几何结构的 MOSFET 反型层迁移率模型.
FLDMOB	计入平行电场分量的迁移率模型,本模型推导时计入了载流子加热和速度饱和效应,模型应用于 Si 和 GaAs.
STRMOB	计入应力影响的迁移率模型 ^[4.37] ,本模型必须同禁带宽度随应力变化的模型结合起来使用.
HPMOB	Hewlett-Packard 公司开发的迁移率模型,本模型计入垂直和平行于电流方向的电场的影响 ^[4.38] .
LUCMOB	清彻的(lucent)迁移率模型 ^[4.39] ,包括低电场、横向电场以及纵向电场对迁移率影响.
IALMOB	反型和集积层迁移率模型,本模型计入体 Coulomb 杂质散射,声学声子和表面粗糙度散射以及高电场效应.
TMPMOB	基于载流子温度的迁移率模型,本模型基于有效电场近似.

上表列出的 19 种载流子迁移率模型分别涵盖了迁移率随温度、杂质浓度、载流子—载流子散射、表面粗糙度散射、横向(也即垂直)电场、平行(也即纵向)电场、强电场、载流子加热、速度饱和、应力等因素或效应的变化。这些模型除适用于 Si 材料和器件外,大部分还适用于 GaAs 材料和器件。

2. 迁移率模型的分类和选用

为便于对模型的选用, MEDICI 将表 4.11 中所列 19 种迁移率模型中的 17 种按对电场的依赖关系分成低电场(low field)、横向电场(transverse field)和平行电场(parallel field)3 类,见表 4.12。

表 4.12 为选用迁移率模型 MEDICI 采用的迁移率分类(源于[4.2])

低电场(Low Field)	横向电场(Transverse Field)	平行电场(Parallel Field)
LUCMOB		
IALMOB		
CCSMOB	HPMOB	
LSMMOB		FLDMOB
GMCMOB		TMPMOB
SHIRAMOB		
ANALYTIC	PRPMOB	
ARORA	SRFMOB	
CONMOB	SRFMOB2	
PHUMOB	TFLDMOB	

注意:表 4.12 中有的迁移率模型分在多于一类中(例如 HPMOB、LSMMOB 等分在两类中,而 LUCMOB、IALMOB 分在 3 类中)。MEDICI 规定:当为模拟某种器件中某区域的载流子迁移率选用迁移率模型时,最多只能在每类多个模型中选一种模型。例如选“CONMOB, PRPMOB, FLDMOB”或“LSMMOB, FLDMOB”这是符合规定的,是合适的选择,而若选“LSMMOB, HPMOB”就不符合规定,因为这时“横向电场”类选了 2 种模型,因而是不合适选择。

此外, UNIMOB 和 STRMOB 没有包含在表 4.12 中,其中 UNIMOB 可归在“横向电场”类供选用, STRMOB 可加入到任一种合适的选择中,增加迁移率随应力变化的模拟。除表 4.12 中所列的迁移率模型外,还有属“低电场”类的常数迁移率模型,属“横向电场”类的界面处载流子迁移率衰减模型以及基于张力的计入应

力影响的迁移率模型 **PIEZORES** 也可供选择.

3. 几种迁移率模型表示式

限于篇幅,这里只介绍 **ARORA**, **PRPMOB**, **FLDMOB**, **LUCMOB** 等 4 种迁移率模型表示式.

(1) **ARORA** 模型表示式

ARORA 模型基于 Arora 等人的工作^[4.26],是一种解析迁移率模型,计入总杂质浓度 $N_{\text{total}}(x, y)$ 和温度 T 对迁移率的影响. **ARORA** 模型为低电场电子迁移率 μ_{0n} 和低电场空穴迁移率 μ_{0p} 的表示式.

$$\mu_{0n} = \text{MUN1.ARO} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXN1.ARO}} + \frac{\text{MUN2.ARO} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXN2.ARO}}}{1 + \left[\frac{N_{\text{total}}(x, y)}{\text{CN.ARORA} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXN3.ARO}}} \right]^{a_n}} \quad (4.91)$$

$$\mu_{0p} = \text{MUP1.ARO} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXP1.ARO}} + \frac{\text{MUP2.ARO} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXP2.ARO}}}{1 + \left[\frac{N_{\text{total}}(x, y)}{\text{CP.ARORA} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXP3.ARO}}} \right]^{a_p}} \quad (4.92)$$

这里

$$\alpha_n = \text{AN.ARORA} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXN4.ARO}} \quad (4.93)$$

$$\alpha_p = \text{AP.ARORA} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{EXP4.ARO}} \quad (4.94)$$

(4.91)—(4.94)式中各参数的定义及为 Si 和 GaAs 的补缺值和单位见表 4.13 所示.

表 4.13 Arora 低场迁移率模型中的参数(源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值		单 位
		Si	GaAs	
MUN1.ARO	Arora 迁移率模型中最小电子迁移率	88.0	8.5×10^3	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$
MUN2.ARO	Arora 迁移率模型中最大电子迁移率	1 252.0	0.0	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$

(续表)

参 数	定 义	补 缺 值		单 位
		Si	GaAs	
CN, ARORA	Arora 电子迁移率模型中的参考杂质浓度	1.26×10^{17}	1.26×10^{17}	cm^{-3}
AN, ARORA	Arora 电子迁移率模型中归一化杂质浓度的幂中的参数	0.88	1.0	无
EXN1, ARO	Arora 电子迁移率模型中归一化温度的幂	-0.57	-0.57	无
EXN2, ARO	Arora 电子迁移率模型中归一化温度的幂	-2.33	0.0	无
EXN3, ARO	Arora 电子迁移率模型中归一化温度的幂	2.4	0.0	无
EXN4, ARO	Arora 电子迁移率模型中归一化温度的幂	-0.146	0.0	无
MUP1, ARO	Arora 迁移率模型中最小空穴迁移率	54.3	4×10^2	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$
MUP2, ARO	Arora 迁移率模型中最大空穴迁移率	407.0	0.0	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$
CP, ARORA	Arora 空穴迁移率模型中的参考杂质浓度	2.35×10^{17}	2.35×10^{17}	cm^{-3}
AP, ARORA	Arora 空穴迁移率模型中归一化杂质浓度的幂中的参数	0.88	1.0	无
EXP1, ARO	Arora 空穴迁移率模型中归一化温度的幂	-0.57	0.0	无
EXP2, ARO	Arora 空穴迁移率模型中归一化温度的幂	-2.23	0.0	无
EXP3, ARO	Arora 空穴迁移率模型中归一化温度的幂	2.4	0.0	无
EXP4, ARO	Arora 空穴迁移率模型中归一化温度的幂	-0.146	0.0	无

(2) PRPMOB 模型表示式

PRPMOB 模型是计入迁移率随垂直(或横向)电场增加而减小的迁移率模型. PRPMOB 模型适用于器件中每一个位置而不是仅适用于界面或反型层. PRPMOB 模型为电子迁移率 $\mu_{S,n}$ 和空穴迁移率 $\mu_{S,p}$ 的表示式分别为:

$$\mu_{S,n} = \text{GSURFN} \cdot \frac{\mu_{0n}}{\sqrt{1 + \frac{E_{\perp,n}}{\text{ECN} \cdot \text{MU}}}} \quad (4.95)$$

$$\mu_{S,p} = \text{GSURFP} \cdot \frac{\mu_{0p}}{\sqrt{1 + \frac{E_{\perp,p}}{\text{ECP} \cdot \text{MU}}}} \quad (4.96)$$

这里低电场迁移率 μ_{0n} 和 μ_{0p} 的值用表格化迁移率模型 CONMOB 给出的值,见表 4.14 所示,而 $E_{\perp,n}$ 和 $E_{\perp,p}$ 是垂直于三角形计算单元边的电场分量(补缺情况)或垂直于电流方向的电场分量(若在 MODELS 语句中置参数 **EJ. MOBIL = True**),在界面处 $E_{\perp,n}$ 和 $E_{\perp,p}$ 应分别置换成有效电场分量 $E_{\text{eff}\perp,n}$ 和 $E_{\text{eff}\perp,p}$,有效电场分量的计算详见文献[4、2]第 2-59 页. 参数 **GSURFN**, **GSURFP**, **ECN. MU**, **ECP. MU** 的定义,补缺值和单位见表 4.15 所示.

表 4.14 硅和砷化镓中迁移率随杂质浓度变化 ($T = 300 \text{ K}$) (源于[4.2])

杂质浓度(cm^{-3})	硅中迁移率($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$)		砷化镓中迁移率($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$)	
	电子	空穴	电子	空穴
1.0×10^{14}	1 350.0	495.0	8 000.0	390.0
2.0×10^{14}	1 345.0	495.0	7 718.0	380.0
4.0×10^{14}	1 335.0	495.0	7 445.0	375.0
6.0×10^{14}	1 320.0	495.0	7 290.0	360.0
8.0×10^{14}	1 310.0	495.0	7 182.0	350.0
1.0×10^{15}	1 300.0	491.1	7 300.0	340.0
2.0×10^{15}	1 248.0	487.3	6 847.0	335.0
4.0×10^{15}	1 200.0	480.1	6 422.0	320.0
6.0×10^{15}	1 156.0	473.3	6 185.0	315.0
8.0×10^{15}	1 115.0	466.9	6 023.0	305.0
1.0×10^{16}	1 076.0	460.9	5 900.0	302.0

(续表)

杂质浓度(cm^{-3})	硅中迁移率($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$)		砷化镓中迁移率($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$)	
	电子	空穴	电子	空穴
2.0×10^{16}	960.0	434.8	5 474.0	300.0
4.0×10^{16}	845.0	396.5	5 079.0	285.0
6.0×10^{16}	760.0	369.2	4 861.0	270.0
8.0×10^{16}	720.0	348.3	4 712.0	245.0
1.0×10^{17}	675.0	331.5	4 600.0	240.0
2.0×10^{17}	524.0	279.0	3 874.0	210.0
4.0×10^{17}	385.0	229.8	3 263.0	205.0
6.0×10^{17}	321.0	203.8	2 950.0	200.0
8.0×10^{17}	279.0	186.9	2 747.0	186.9
1.0×10^{18}	252.0	178.0	2 600.0	170.0
2.0×10^{18}	182.5	130.0	2 060.0	130.0
4.0×10^{18}	140.6	90.0	1 632.0	90.0
6.0×10^{18}	113.6	74.5	1 424.0	74.5
8.0×10^{18}	99.5	66.6	1 293.0	66.6
1.0×10^{19}	90.5	61.0	1 200.0	61.0
2.0×10^{19}	86.9	55.0		
4.0×10^{19}	83.4	53.7		
6.0×10^{19}	78.8	52.9		
8.0×10^{19}	71.6	52.4		
1.0×10^{20}	67.8	52.0		
2.0×10^{20}	52.0	50.8		
4.0×10^{20}	35.5	49.6		
6.0×10^{20}	23.6	48.9		
8.0×10^{20}	19.0	48.4		
1.0×10^{21}	17.8	48.0		

表 4.15 垂直电场迁移率模型 (PRPMOB) 中的参数 (源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值		单 位
		Si	GaAs	
GSURFN	电子迁移率的低电场表面减小因子	1.0	1.0	无
GSURFP	空穴迁移率的低电场表面减小因子	1.0	1.0	无
ECN, MU	用于垂直电场电子迁移率模型的临界电场	6.49×10^4	1×10^8	V/cm
ECP, MU	用于垂直电场空穴迁移率模型的临界电场	1.87×10^4	1×10^8	V/cm

注意 GSURFN, GSURFP 除补缺情况其值为 1.0 外,其他情况应取 0 和 1 之间的值,由用户通过 MOBILITY 语句给定.

(3) FLDMOB 模型表示式

FLDMOB 模型是计入沿电流方向的高电场(也即高平行电场)的载流子迁移率模型.推导 FLDMOB 模型表示式时计入了载流子加热和速度饱和效应.本模型已应用于具有复杂结构的硅和砷化镓器件.为不同材料或区域,用户可通过 MOBILITY 语句中的参数 FLDMOB = n 选用不同的 FLDMOB 模型.

● 当设定 FLDMOB = 0,则在需计算的材料或区域中不计算平行电场对迁移率的影响仅用 SURMOB 模型(参见[4.2]第 2-32 页)计算低电场时考虑表面散射效应的迁移率 $\mu_{S,n}$ 和 $\mu_{S,p}$.

● 当设定 FLDMOB = 1,FLDMOB 模型适用于硅类(silicon-like)材料或区域,采用 Caughey-Thomas 表示式^[4.24],

$$\mu_n = \frac{\mu_{S,n}}{\left[1 + \left(\frac{\mu_{S,n} E_{\parallel,n}}{v_n^{\text{sat}}}\right)^{\text{BETAN}}\right]^{1/\text{BETAN}}} \quad (4.97)$$

$$\mu_p = \frac{\mu_{S,p}}{\left[1 + \left(\frac{\mu_{S,p} E_{\parallel,p}}{v_p^{\text{sat}}}\right)^{\text{BETAP}}\right]^{1/\text{BETAP}}} \quad (4.98)$$

上两式中 $E_{\parallel,n}$ 和 $E_{\parallel,p}$ 分别是电子和空穴的电场平行分量, v_n^{sat} 和 v_p^{sat} 分别是电子和空穴的饱和速度,作为温度 T 函数的电子或空穴的饱和速度 $v_{n,p}^{\text{sat}}(T)$ 的表示

式为^[3.9]：

$$v_{n,p}^{\text{sat}}(T) = \frac{2.4 \times 10^7}{1 + 0.8 \cdot \exp\left(\frac{T}{600}\right)} \quad (4.99)$$

这里,式中的某些常数值用了有关参数的补缺值. v_n^{sat} 和 v_p^{sat} 也可分别用 MOBILITY 语句中参数 VSATN 和 VSATP 的值,其补缺值都是 1.035×10^7 cm/sec. (4.97)式中的参数 BETAN 和(4.98)式中的参数 BETAP 的补缺值分别是 2.0 和 1.0.

● 当设定 $\text{FLDMOB} = 2$,FLDMOB 模型适用于砷化镓类(GaAs-like)材料或区域,迁移率采用以下表示式^[4.40]：

$$\mu_n = \frac{\mu_{S,n} + \frac{v_n^{\text{sat}}}{E_{\parallel,n}} \left(\frac{E_{\parallel,n}}{\text{EON}} \right)^{\text{EXN1.GAA}}}{1 + \left(\frac{E_{\parallel,n}}{\text{EON}} \right)^{\text{EXN2.GAA}}} \quad (4.100)$$

$$\mu_p = \frac{\mu_{S,p} + \frac{v_p^{\text{sat}}}{E_{\parallel,p}} \left(\frac{E_{\parallel,p}}{\text{EOP}} \right)^{\text{EXP1.GAA}}}{1 + \left(\frac{E_{\parallel,p}}{\text{EOP}} \right)^{\text{EXP2.GAA}}} \quad (4.101)$$

这里, v_n^{sat} 和 v_p^{sat} 的表示式为^[4.41]：

$$v_{n,p}^{\text{sat}}(T) = 11.3 \times 10^6 - 1.2 \times 10^4 T \quad (4.102)$$

这里,式中的某些常数值用了有关参数的补缺值, v_n^{sat} 和 v_p^{sat} 也可分别用 MOBILITY 语句中参数 VSATN 和 VSATP 的值,其补缺值分别是 6.5×10^6 cm/sec 和 7.7×10^6 cm/sec.

(4.100)式中的参数 EON, EXN1.GAA, EXN2.GAA 和(4.101)式中的参数 EOP, EXP1.GAA, EXP2.GAA 的定义、补缺值和单位见表 4.16 所示.

表 4.16 FLDMOB=2 时 FLDMOB 模型表示式中的几个参数(源于[4.2])

参 数	定 义	为 GaAs 的补缺值	单 位
EON	用在 FLDMOB 模型表示式中的临界电场(为 GaAs 中的电子)	4×10^3	V/cm
EXN1.GAA	FLDMOB 模型表示式的分子中电场的幂(为 GaAs 中的电子)	4.0	无

(续表)

参 数	定 义	为 GaAs 的补缺值	单 位
EXN2, GAA	FLDMOB 模型表示式的分母中电场的幂(为 GaAs 中的电子)	4.0	无
EOP	用在 FLDMOB 模型表示式中的临界电场(为 GaAs 中的空穴)	4×10^3	V/cm
EXP1, GAA	FLDMOB 模型表示式的分子中电场的幂(为 GaAs 中的空穴)	4.0	无
EXP2, GAA	FLDMOB 模型表示式的分母中电场的幂(为 GaAs 中的空穴)	4.0	无

● 当设定 $\text{FLDMOB} = 3$, FLDMOB 模型的表示式(也称 Hansch 迁移率表示式)为^[4.42]:

$$\mu_n = \frac{2\mu_{S,n}}{1 + \left[1 + \left(\frac{2\mu_{S,n} E_{\parallel,n}}{v_n^{\text{sat}}} \right)^{\text{BETAN, HA}} \right]^{1/\text{BETAN, HA}}} \quad (4.103)$$

$$\mu_p = \frac{2\mu_{S,p}}{1 + \left[1 + \left(\frac{2\mu_{S,p} E_{\parallel,p}}{v_p^{\text{sat}}} \right)^{\text{BETAP, HA}} \right]^{1/\text{BETAP, HA}}} \quad (4.104)$$

(4.103)式中 BETAN, HA 和(4.104)式中 BETAP, HA 的值都可由用户自行给出,其补缺值都为 2.

(4) LUCMOB 模型表示式

清晰完整的迁移率模型(LUCMOB)是一个总括的模型,由 Darwish 等人开发^[4.39],模型包含稍加修改的 Philip 统一迁移率模型(PHUMOB)、Lombardi 表面迁移率模型(LSMMOB)以及计入了高电场效应.

在低纵向电场(即低平行电场)情况,迁移率由下式给出:

$$\mu_S = \left[\frac{1}{\mu_b} + \frac{1}{\mu_{ac}} + \frac{1}{\mu_{sr}} \right]^{-1} \quad (4.105)$$

这里 μ_b 是体硅中的迁移率, μ_{ac} 是计入表面声学声子散射的迁移率, μ_{sr} 是计入表面粗糙散射的迁移率. μ_b 的表示式和 Philip 统一迁移率模型(PHUMOB)中所用的十分相似,对电子有:

$$\frac{1}{\mu_{b,n}} = \frac{1}{\mu_{L,n}} + \frac{1}{\mu_{I,n}} \quad (4.106)$$

这里 ,

$$\mu_{L,n} = \text{MMXN.UM} \left(\frac{T}{300} \right)^{-\text{TETN.UM}} \quad (4.107)$$

$$\mu_{1,n} = \mu_{1,n} \left(\frac{N_{\text{total}}}{N_{\text{Ieff},n}} \right) \left(\frac{\text{NRFN.UM}}{N_{\text{total}}} \right)^{\text{ALPN.UM}} + \mu_{2,n} \left(\frac{n+p}{N_{\text{Ieff},n}} \right) \quad (4.108)$$

其中 $\mu_{1,n}$, $\mu_{2,n}$ 和 $N_{\text{Ieff},n}$ 为 :

$$\mu_{1,n} = \frac{\text{MMXN.UM}^2}{\text{MMXN.UM} - \text{MMNN.UM}} \left(\frac{T}{300} \right)^{3(\text{ALPN.UM})-1.5} \quad (4.109)$$

$$\mu_{2,n} = \frac{\text{MMXN.UM} \cdot \text{MMNN.UM}}{\text{MMXN.UM} - \text{MMNN.UM}} \left(\frac{300}{T} \right)^{0.5} \quad (4.110)$$

$$N_{\text{Ieff},n} = N_D + N_A G(P_n). \quad (4.111)$$

对空穴 $N_{\text{Ieff},p}$ 为 :

$$N_{\text{Ieff},p} = N_A + N_D G(P_p) \quad (4.112)$$

函数 $G(P_n)$ 和 $G(P_p)$ 以及屏蔽参数 P_n 和 P_p 的表示式可参见文献[4.2]第2-31页中为 PHUMOB 模型的相关表示式.

空穴迁移率同列各电子迁移率的表示式相似 ,这里不一一列出.

电子和空穴的 μ_{ac} 和 μ_{sr} 的表示式和 Lombardi 表面迁移率模型(LSMMOB)所用的十分相似 ,它们分别为 :

$$\mu_{\text{ac},n} = \frac{\text{BN.LUC}}{E_{\perp,n}} + \frac{\text{CN.LUC} N_{\text{total}}^{\text{EXN4.LUC}}}{(T/300)^{\text{KN.LUC}} \sqrt[3]{E_{\perp,n}}} \quad (4.113)$$

$$\mu_{\text{ac},p} = \frac{\text{BP.LUC}}{E_{\perp,p}} + \frac{\text{CP.LUC} N_{\text{total}}^{\text{EXP4.LUC}}}{(T/300)^{\text{KP.LUC}} \sqrt[3]{E_{\perp,p}}} \quad (4.114)$$

$$\mu_{\text{sr},n} = \left(\frac{\text{DN.LUC}}{E_{\perp,n}^{\gamma_n}} \right) \quad (4.115)$$

$$\mu_{\text{sr},p} = \left(\frac{\text{DP.LUC}}{E_{\perp,p}^{\gamma_p}} \right) \quad (4.116)$$

这里 ,

$$\gamma_n = \text{AN.LUC} + \frac{\text{FN.LUC}(n+p)}{N_{\text{total}}^{\text{EXN9.LUC}}} \quad (4.117)$$

$$\gamma_p = \text{AP.LUC} + \frac{\text{FP.LUC}(n+p)}{N_{\text{total}}^{\text{EXP9.LUC}}} \quad (4.118)$$

最后,再考虑强电场效应后得出的总的迁移率表示式为:

$$\mu_n = \frac{2\mu_{S,n}}{1 + \left[1 + \left(\frac{2\mu_{S,n}E_{\parallel,n}}{v_n^{\text{sat}}} \right)^{\text{BETAN.HA}} \right]^{1/\text{BETAN.HA}}} \quad (4.119)$$

$$\mu_p = \frac{2\mu_{S,p}}{1 + \left[1 + \left(\frac{2\mu_{S,p}E_{\parallel,p}}{v_p^{\text{sat}}} \right)^{\text{BETAP.HA}} \right]^{1/\text{BETAP.HA}}} \quad (4.120)$$

上两个表示式(4.119)和(4.120)分别同 Hansch 迁移率表示式(4.103)和(4.104)完全相似,仅表示式中的 $\mu_{S,n}$ 和 $\mu_{S,p}$ 的模型公式有区别.

清晰完整的迁移率模型(LUCMOB)参数的定义,补缺值和单位见表 4.17 和表 4.18 所示.

表 4.17 LUCMOB 模型中 μ_b 中的参数(也即 PHUMOB 模型表示式中的参数)(源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值		单 位
		Si	GaAs	
MMNN.UM	PHUMOB 模型中的迁移率参数,为确定高掺杂剂及/或高载流子浓度时的电子迁移率	52.2	0.0	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$
MMXN.UM	PHUMOB 模型中的最大电子迁移率	1.417×10^3	8.5×10^3	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$
NRFN.UM	PHUMOB 模型中为电子迁移率的参考杂质浓度	9.86×10^{16}	1×10^{30}	cm^{-3}
ALPN.UM	PHUMOB 模型中为电子迁移率的幂	0.68	1.0	无
TETN.UM	PHUMOB 模型中用于计算电子迁移率中点阵散杂同温度关系的幂	2.285	0.0	无
NRFD.UM	PHUMOB 模型中为计入超高掺杂效应用的施主参考杂质浓度	4×10^{20}	1×10^{30}	cm^{-3}

(续表)

参 数	定 义	补 缺 值		单 位
		Si	GaAs	
CRFD, UM	PHUMOB 模型中,确定施主的超高掺杂效应的因子	0.21	1×10^{30}	无
MMNP, UM	PHUMOB 模型中的迁移率参数,为确定高掺杂剂及/或高载流子浓度时的空穴迁移率	44.9	0.0	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$
MMXP, UM	PHUMOB 模型中的最大空穴迁移率	4.705×10^2	4×10^2	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$
NRFP, UM	PHUMOB 模型中为空穴迁移率的参考杂质浓度	2.23×10^{17}	1×10^{30}	cm^{-3}
ALPP, UM	PHUMOB 模型中为空穴迁移率的幂	0.719	1.0	无
TETP, UM	PHUMOB 模型中用于计算空穴迁移率中点阵散杂同温度关系的幂	2.247	0.0	无
NRFA, UM	PHUMOB 模型中为计入超高掺杂效应用的受主参考杂质浓度	7.2×10^{20}	1×10^{30}	cm^{-3}
CRFA, UM	PHUMOB 模型中,确定受主的超高掺杂效应的因子	0.5	1×10^{30}	无

表 4.18 LUCMOB 模型中的参数(除去表 4.17 中所列出的)(源于[4.2])

参 数	定 义	补 缺 值		单 位
		Si	GaAs	
AN, LUC	清晰完整电子迁移率模型中表面粗糙项的幂的常数部分	2.58	2.58	无
AP, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中表面粗糙项的幂的常数部分	2.18	2.18	无
BN, LUC	清晰完整电子迁移率模型中声学项的迁移率参数	3.61×10^7	3.61×10^7	cm/sec
BP, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中声学项的迁移率参数	1.51×10^7	1.51×10^7	cm/sec

(续表)

参 数	定 义	补 缺 值		单 位
		Si	GaAs	
CN, LUC	清晰完整电子迁移率模型中声学项的迁移率参数	1.70×10^4	1.70×10^4	[注 1]
CP, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中声学项的迁移率参数	4.18×10^3	4.18×10^3	[注 1]
DN, LUC	清晰完整电子迁移率模型中声学项的迁移率参数	3.58×10^{18}	3.58×10^{18}	[注 2]
DP, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中声学项的迁移率参数	4.10×10^{15}	4.10×10^{15}	[注 3]
FN, LUC	清晰完整电子迁移率模型中表面粗糙项的幂中的总载流子浓度倍增因子	6.85×10^{-21}	6.85×10^{-21}	[注 4]
FP, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中表面粗糙项的幂中的总载流子浓度倍增因子	7.82×10^{-21}	7.82×10^{-21}	[注 4]
KN, LUC	清晰完整电子迁移率模型中用在声学项的温度的幂	1.7	1.7	无
KP, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中用在声学项的温度的幂	0.9	0.9	无
EXN4, LUC	清晰完整电子迁移率模型中用在声子项的总杂质浓度的幂	0.023 3	0.023 3	无
EXP4, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中用在声子项的总杂质浓度的幂	0.011 9	0.011 9	无
EXN9, LUC	清晰完整电子迁移率模型中用在表面粗糙项的总杂质浓度的幂	0.076 7	0.076 7	无
EXP9, LUC	清晰完整空穴迁移率模型中用在表面粗糙项的总杂质浓度的幂	0.123	0.123	无

[注 1]单位为 $(\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}) \times (\text{V}/\text{cm})^{1/3} \text{cm}^3(\text{EXN4, LUC})$

[注 2]单位为 $(\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}) \times (\text{V}/\text{cm})\gamma_n$

[注 3]单位为 $(\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}) \times (\text{V}/\text{cm})\gamma_p$

[注 4]单位为 $\text{cm}^{3(1-\text{EXP9, LUC})}$

4.6.3.4 其他重要物理模型

MEDICI 除执行以上介绍的 3 类主要物理模型外,为了实现它的功能和保证

它的精度,还执行以下重要物理模型,包括:

1. 载流子随能量分布的费米-狄拉克统计模型

该模型和 Yu 等人^[3,2]在 SEDAN-3 中所用的相同,为大多数器件的工作范围,该模型可简化成玻尔兹曼统计模型.

2. 杂质不完全离化模型

该模型的表示式是一种带有同杂质相关的能带简并因子的费米-狄拉克统计表示式.

3. 电子-空穴散射模型

在电子和空穴同时大量呈现的大功率双极型器件中,电子-空穴散射是重要的.该模型考虑了电子-空穴散射对迁移率和电流密度表示式的影响^[4,43].

4. 载流子温度模型

MEDICI 中解能量平衡方程时考虑器件内部载流子的温度分布也执行载流子温度分布对迁移率影响的迁移率模型(TMPMOB)和载流子温度分布对碰撞电离影响的碰撞电离模型(II. TEMP).

5. Schottky 势垒隧穿(SBT)模型

该模型将 Schottky 接触处的热电子边界条件扩充到包含隧穿.

6. 深亚微米 MOSFET 反型层的量子力学模型

深亚微米 MOSFET 中的薄栅氧化层和高掺杂衬底浓度导致反型层中的高电场使层中载流子运动量子化从而影响阈值电压、C-V 特性、载流子分布等器件性能. MEDICI 中不用精确计算量子力学效应的 Schrödinger 方程的解而用一种近似方法——van Dort 禁带扩展近似方法^[4,44]来估算这一量子力学效应对 MOSFET 特性的影响.

7. 修改的局域密度近似量子力学模型

该量子力学模型能计算发生在 Si/SiO₂ 界面处的受限制的载流子分布^[4,45],能应用于反型层和集积层中的电子和空穴.

上列 7 种模型的较详细的描述以及还有一些没有介绍的模型都可参见文献 [4.2] 和注明的有关文献.

4.6.4 MEDICI 的使用和应用例举

本节介绍的三个应用例子都源于 MEDICI 的用户指南.^[4,2]

4.6.4.1 MEDICI 的使用

使用 MEDICI 同使用 SEDAN-1, SEDAN-3 或 MINIMOS-2 等器件模拟软件

相似,必须

(i) 了解 MEDICI 的功能,以判断 MEDICI 的功能是否能满足您(用户)对器件模拟的需求.

(ii) 了解 MEDICI 中所用的器件方程组和有关参数的物理模型,以判断应用 MEDICI 进行模拟的精度.

(iii) 掌握输入文件的书写,只有一丝不苟地根据 MEDICI 用户指南中规定的书写格式包括文件中语句的语法和句法规定,写好一个满足你要求的输入文件,才能顺利地得到你所需要的模拟结果,熟练后,就能把 MEDICI“用出水平”.

4.6.4.2 MEDICI 的应用例举一 沟长为 $1.5\ \mu\text{m}$ 的 N 沟 MOSFET

1. 简要说明

本例介绍用 MEDICI 对沟长为 $1.5\ \mu\text{m}$ 的 N 沟 MOSFET 进行的若干分析、模拟,可分成以下子例:

子例一 产生模拟结构(输入文件为 mdex1)

子例二 模拟栅极特性(输入文件为 mdex1g)

子例三 模拟漏极特性(输入文件为 mdex1d)

子例四 计算栅极电流和由碰撞电离引起的衬底电流(输入文件为 mdex1i)

子例五 研究界面态对器件栅极特性的影响(输入文件为 mdex1f)

子例六 分析带间隧穿引起的漏泄电流(输入文件为 mdex1t)

子例七 用离化积分分析雪崩击穿(输入文件为 mdex1a)

2. 输入文件及结果输出

(1) 产生 $1.5\ \mu\text{m}$ N 沟 MOS 器件模拟结构的输入文件 mdex1 及有关结果输出输入文件 mdex1

```
1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 1-1.5 Micron N-Channel MOSFET

2... COMMENT    Specify a rectangular mesh
3... MESH        SMOOTH = 1
4... X.MESH      WIDTH = 3.0   H1 = 0.125

5... Y.MESH      N = 1   L = - 0.025
6... Y.MESH      N = 3   L = 0.
```

```
7... Y.MESH    DEPTH = 1.0   H1 = 0.125
8... Y.MESH    DEPTH = 1.0   H1 = 0.250

9... COMMENT   Eliminate some unnecessary substrate nodes
10... ELIMIN   COLUMNS   Y.MIN = 1.1

11... COMMENT   Increase source/drain oxide thickness using SPREAD
12... SPREAD   LEFT   WIDTH = .625   UP = 1   LO = 3   THICK = .1   ENC = 2
13... SPREAD   RIGHT  WIDTH = .625   UP = 1   LO = 3   THICK = .1   ENC = 2

14... COMMENT   Use SPREAD again to prevent substrate grid distortion
15... SPREAD   LEFT   WIDTH = 100   UP = 3   LO = 4   Y.LO = 0.125

16... COMMENT   Specify oxide and silicon regions
17... REGION    SILICON
18... REGION    OXIDE   IY.MAX = 3

19... COMMENT   Electrode definition
20... ELECTR    NAME = Gate      X.MIN = 0.625   X.MAX = 2.375   TOP
21... ELECTR    NAME = Substrate  BOTTOM
22... ELECTR    NAME = Source    X.MAX = 0.5   IY.MAX = 3
23... ELECTR    NAME = Drain     X.MIN = 2.5   IY.MAX = 3

24... COMMENT   Specify impurity profiles and fixed charge
25... PROFILE   P-TYPE   N.PEAK = 3E15   UNIFORM   OUT.FILE = MDEX1DS
26... PROFILE   P-TYPE   N.PEAK = 2E16   Y.CHAR = .25
27... PROFILE   N-TYPE   N.PEAK = 2E20   Y.JUNC = .34   X.MIN = 0.0   WIDTH = .5
... +          XY.RAT = .75
28... PROFILE   N-TYPE   N.PEAK = 2E20   Y.JUNC = .34   X.MIN = 2.5   WIDTH = .5
... +          XY.RAT = .75
29... INTERFAC  QF = 1E10

30... PLOT.2D   GRID   TITLE = "Example 1-Initial Grid"   FILL   SCALE

31... COMMENT   Regrid on doping
```

```

32... REGRID   DOPING LOG IGNORE = OXIDE  RATIO = 2  SMOOTH = 1
... +         IN.FILE = MDEX1DS
33... PLOT.2D  GRID  TITLE = "Example 1-Doping Regrid"  FILL  SCALE

34... COMMENT  Specify contact parameters
35... CONTACT  NAME = Gate  N.POLY
36... COMMENT  Specify physical models to use
37... MODELS   CONMOB  FLDMOB  SRFMOB2

38... COMMENT  Symbolic factorization , solve , regrid on potential
39... SYMB     CARRIERS = 0
40... METHOD    ICCG DAMPED
41... SOLVE

42... REGRID   POTEN IGNORE = OXIDE  RATIO = .2  MAX = 1  SMOOTH = 1
... +         IN.FILE = MDEX1DS
... +         OUT.FILE = MDEX1MS
43... PLOT.2D  GRID  TITLE = "Example 1-potential Regrid"  FILL  SCALE

44... COMMENT  Solve using the refined grid , save solution for later use
45... SYMB     CARRIERS = 0
46... SOLVE    OUT.FILE = MDEX1S

47... COMMENT  Impurity profile plots
48... PLOT.1D  DOPING X.START = .25  X.END = 2.5  Y.START = 0  Y.END = 2
... +         Y.LOG  POINTS  BOT = 1E15  TOP = 1E21  COLOR = 2
... +         TITLE = "Example 1-Source Impurity Profile"
49... PLOT.1D  DOPING X.START = 1.5  X.END = 1.5  Y.START = 0  Y.END = 2
... +         Y.LOG  POINTS  BOT = 1E15  TOP = 1E17  COLOR = 2
... +         TITLE = "Example 1-Gate Impurity Profile"
50... PLOT.2D  BOUND  TITLE = "Example 1-Impurity Contours"  FILL  SCALE
51... CONTOUR  DOPING LOG  MIN = 16  MAX = 20  DEL = .5  COLOR = 2
52... CONTOUR  DOPING LOG  MIN = -16  MAX = -15  DEL = .5  COLOR = 1  LINE = 2

```

mdex1 的有关结果输出见图 4.7—图 4.12.

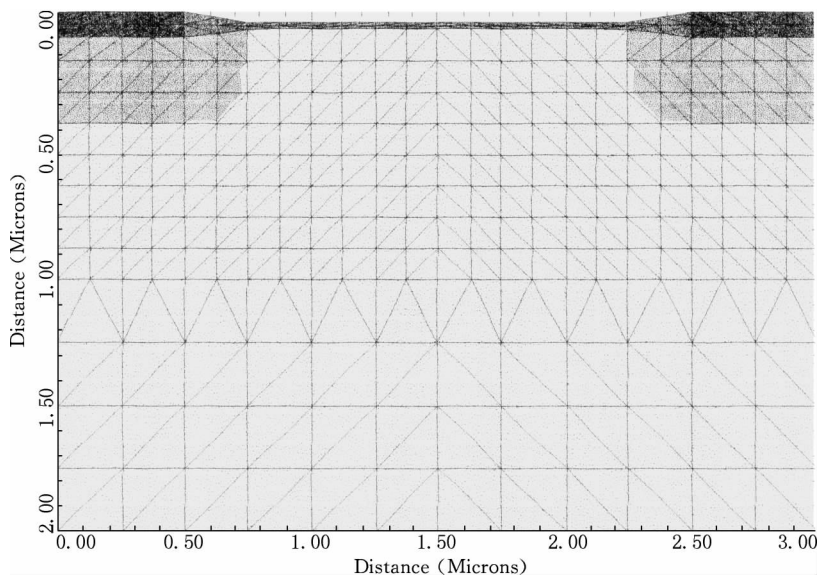


图 4.7 由 mdex1 中第 30 行 PLOT. 2D 语句给出的初始网格

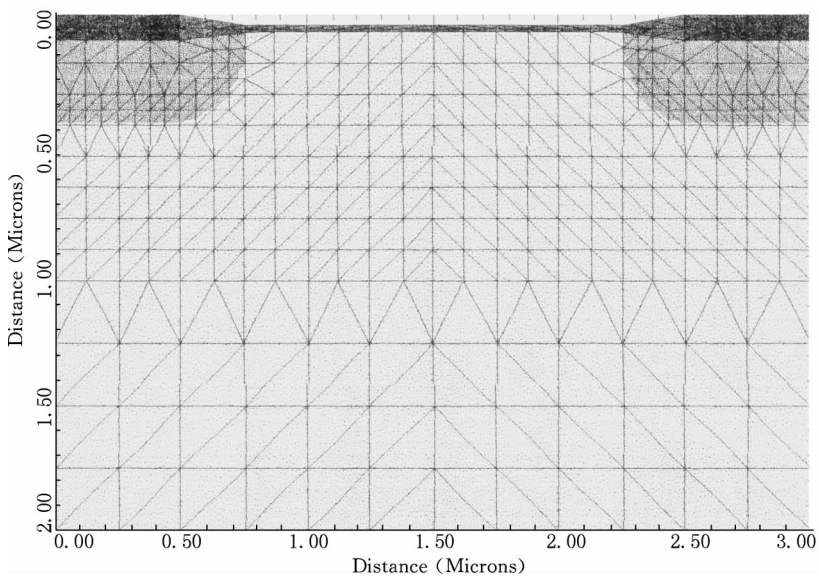


图 4.8 由 mdex1 中第 33 行 PLOT. 2D 语句给出的为模拟掺杂的网格

由图 4.8 清楚可见,同初始网格相比,模拟掺杂的网格在结处网格密度明显

增加.

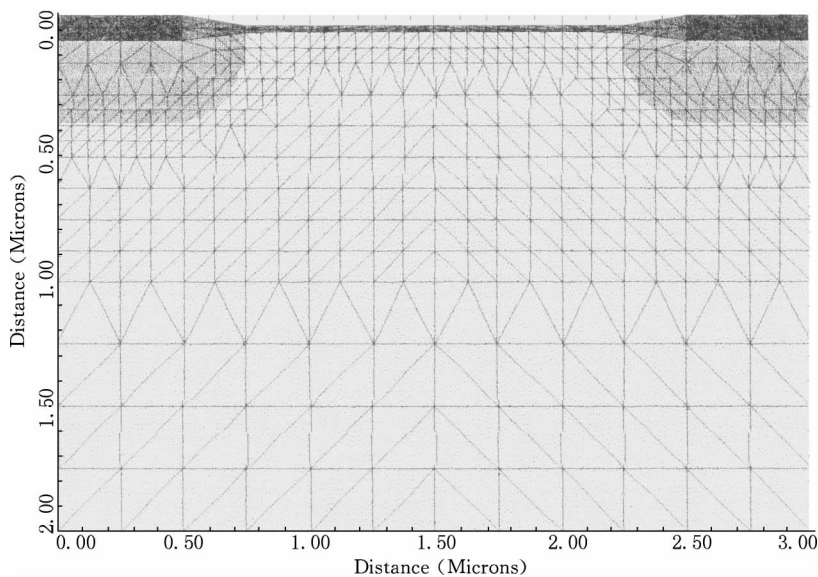


图 4.9 由 mdex1 中第 43 行 PLOT. 2D 语句给出的为模拟电势的网格

图 4.9 中所示的网格是最后的经改进的网格,因而是随后用于模拟的网格.

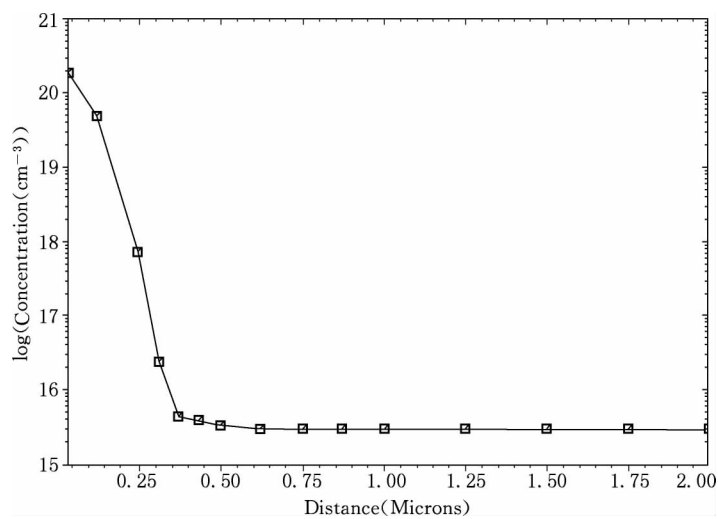


图 4.10 由 mdex1 中第 48 行 PLOT. 1D 语句给出的源区一维杂质剖面图

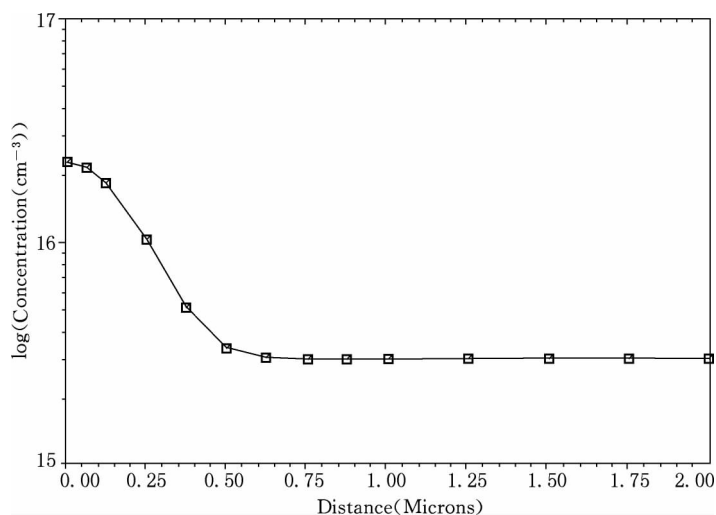


图 4.11 由 mdex1 中第 49 行 PLOT, 1D 语句给出的
栅区一维杂质剖面图

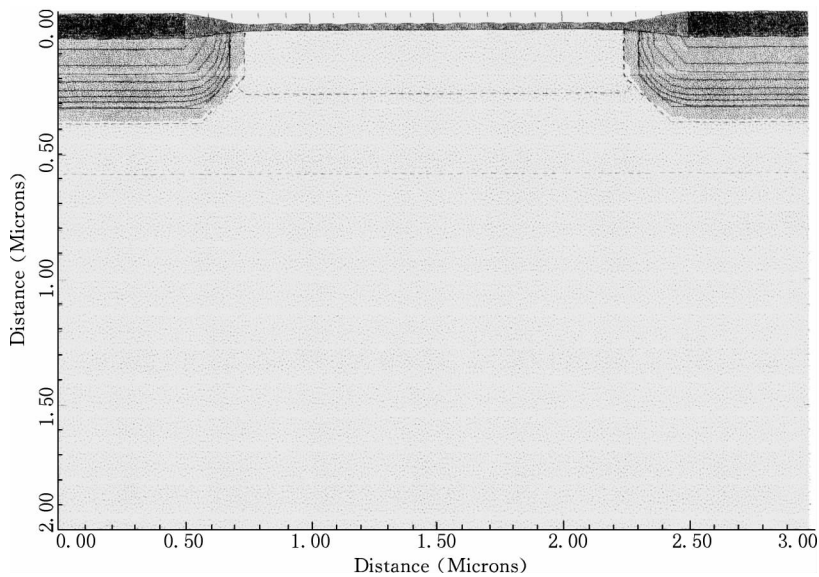


图 4.12 由 mdex1 中第 50 行 PLOT, 2D 以及 51 行和 52 行 CONTOUR
语句给出的二维杂质轮廓图

(2) 栅极特性模拟的输入文件 mdex1g 及有关结果输出

被执行模拟的器件为 $1.5\ \mu\text{m}$ N 沟 MOSFET ,其偏置条件为漏电压 $0.1\ \text{V}$ 栅电压 $0\ \text{V}$ 到 $2\ \text{V}$.

输入文件 mdex1g

```

1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 1G-1.5 Micron N-Channel MOSFET
2... COMMENT    Calculate Gate Characteristics

3... COMMENT    Read in simulation mesh
4... MESH        IN.FILE = MDEX1MS

5... COMMENT    Read in saved solution
6... LOAD        IN.FILE = MDEX1S

7... COMMENT    Use Newton's method for the solution
8... SYMB        NEWTON  CARRIERS = 1  ELECTRONS

9... COMMENT    Setup log file for IV data
10... LOG         OUT.FILE = MDEX1GI

11... COMMENT    Solve for Vds = 0.1 and then ramp gate
12... SOLVE       V(Drain) = .1
13... SOLVE       V(Gate) = .2  ELEC = Gate  VSTEP = .2  NSTEP = 9

14... COMMENT    Plot Ids vs. Vgs
15... PLOT.1D     Y.AXIS = I(Drain)  X.AXIS = V(Gate)  POINTS  COLOR = 2
... +            TITLE = "Example 1G-Gate Characteristics"
16... LABEL       LABEL = "Vds = 0.1v"  X = 1.6  Y = 0.7E-6

```

mdex1g 的结果输出

从图 4.13 可见 ,上列栅极特性曲线在漏源电压 $V_{ds} = 0.1\ \text{V}$,栅源电压 V_{gs} 的增量为每步 $0.2\ \text{V}$ 直至 $V_{gs} = 2\ \text{V}$ 的偏置条件下得出.从图中可确定阈值电压 V_{th} ,当然 V_{th} 还可从 EXTRACT 语句中的 MOS.PARA 参数直接提取.

(3) 漏极特性模拟的输入文件 mdex1d 及有关结果输出

被执行模拟的器件为 $1.5\ \mu\text{m}$ N 沟 MOSFET ,其偏置条件为栅电压 $3\ \text{V}$,漏电压 $0\ \text{V}$ 到 $3\ \text{V}$.

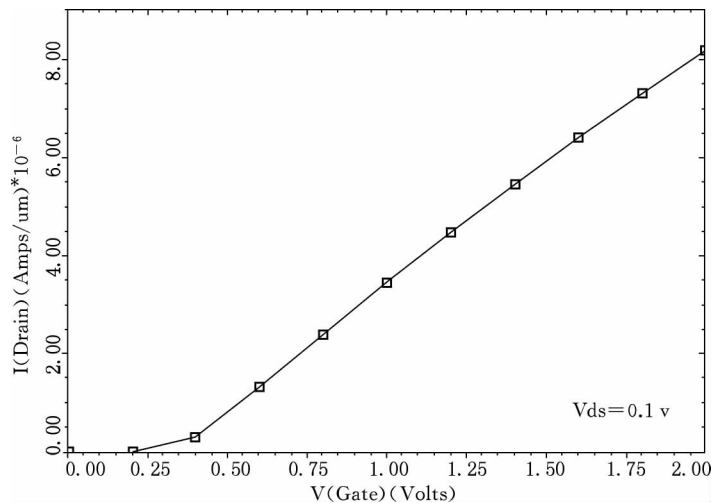


图 4.13 由 mdex1g 中第 15 行 PLOT, 1D 和第 16 行 LABEL 给出的栅极特性曲线

输入文件 mdex1d

```
1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 1D-1.5 Micron N-Channel MOSFET
2... COMMENT    Calculate Drain Characteristics

3... COMMENT    Read in simulation mesh
4... MESH        IN. FILE = MDEX1MS

5... COMMENT    Read in initial solution
6... LOAD        IN. FILE = MDEX1S

7... COMMENT    Do a Poisson solve only to bias the gate
8... SYMB        CARRIERS = 0
9... METHOD        ICCG DAMPED
10... SOLVE       V(Gate) = 3.0

11... COMMENT    Use Newton's method and solve for electrons
12... SYMB        NEWTON  CARRIERS = 1  ELECTRON

13... COMMENT    Setup log file for IV data
14... LOG         OUT. FILE = MDEX1DI
```

```

15... COMMENT  Ramp the drain
16... SOLVE      V(Drain)= 0.0  ELEC = Drain  VSTEP = .2  NSTEP = 15

17... COMMENT  Plot Ids vs. Vds
18... PLOT.1D   Y.AXIS = I(Drain)  X.AXIS = V(Drain)  POINTS  COLOR = 2
... +          TITLE = "Example 1D-Drain Characteristics"
19... LABEL     LABEL = "Vgs = 3.0v"  X = 2.4  Y = 0.1E-4

20... COMMENT  Potential contour plot using most recent solution
21... PLOT.2D   BOUND JUNC DEPL FILL SCALE
... +          TITLE = "Example 1D-Potential Contours"
22... CONTOUR   POTENTIA  MIN = -1  MAX = 4  DEL = .25  COLOR = 6
23... LABEL     LABEL = "Vgs = 3.0v"  X = 0.2  Y = 1.6
24... LABEL     LABEL = "Vds = 3.0v"

```

mdex1d 的结果输出见图 4.14 和图 4.15.

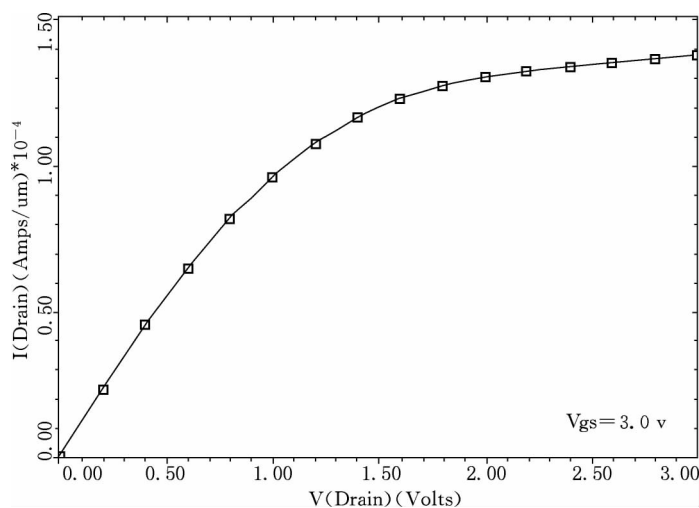


图 4.14 由 mdex1d 中第 18 行 PLOT.1D 和第 19 行 LABEL 给出的漏极特性曲线

从图 4.14 可见,上列漏极特性曲线在栅源电压 $V_{gs} = 3\text{ V}$,漏源电压 V_{ds} 的增量为每步 0.2 V 直至 $V_{ds} = 3\text{ V}$ 的偏置条件下得出。

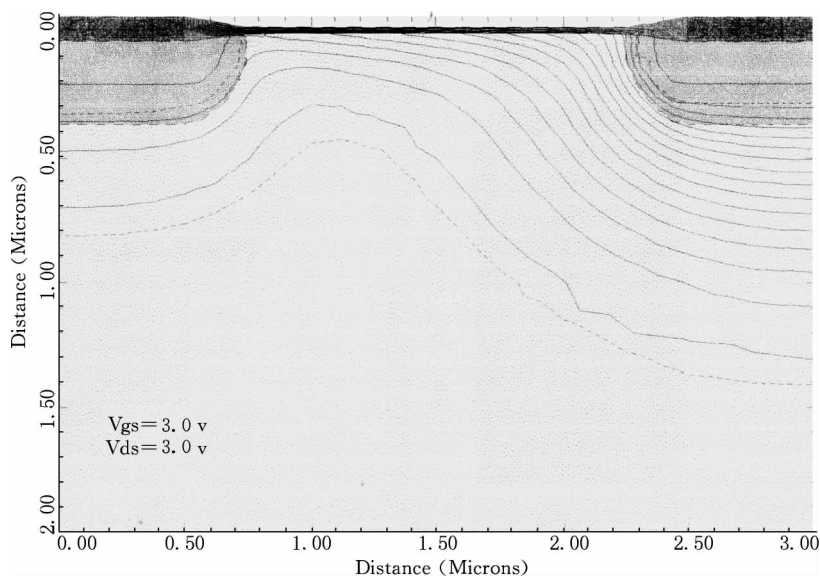


图 4.15 由 mdex1d 中第 21 行 PLOT, 2D, 第 22 行 CONTOUR 以及第 23—24 行 LABEL 给出的 $V_{gs} = 3\text{ V}$, $V_{ds} = 3\text{ V}$ 时的电势轮廓图

(4) 栅极电流和衬底电流计算的输入文件 mdex1i 及有关结果输出

被执行模拟的器件为 $1.5\text{ }\mu\text{m}$ N 沟 MOSFET, 其偏置条件为漏电压 5 V , 栅电压 0 V 到 7.5 V , 在每个解之后, 执行碰撞电离和栅极电流分析。

输入文件 mdex1i

```

1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 1I - 1.5 Micron N-Channel MOSFET
2... COMMENT    Substrate and Gate Current Calculation

3... COMMENT    Read in simulation mesh
4... MESH        IN. FILE = MDEX1MS

5... COMMENT    Read in saved solution
6... LOAD        IN. FILE = MDEX1S

7... COMMENT    Perform a zero carrier solution to bias the drain
8... SYMB        CARR = 0
9... METHOD      DVLIMIT = 1   ICCG

```

```

10... COMMENT Solve for Vds = 5.
11... SOLVE      V(Drain) = 5.  LOCAL

12... COMMENT Switch to 1 - Carrier Newton
13... SYMB       NEWTON  CARRIERS = 1  ELECTRONS

14... COMMENT Setup log file for IV data
15... LOG        OUT.FILE = MDEX1.II

16... COMMENT Ramp the gate ,performing an impact ionization
17... $          and gate current analysis at each bias.
18... SOLVE      V(Gate) = 0.  ELEC = Gate  VSTEP = .5  NSTEP = 15
... +           IMPACT.I  GATE.CUR

19... COMMENT Plot substrate current versus gate bias
20... PLOT.ID     Y.AXIS = II  X.AXIS = V(Gate)  Y.LOG  POINTS  COLOR = 2
... +           TITLE = "Example 1I - Substrate Current vs. Vgs"
21... LABEL      LABEL = "Vds = 5.0v"  X = 6.0  Y = 4E - 12

22... COMMENT Plot gate current versus gate bias
23... PLOT.1D     Y.AXIS = HE(Gate)  X.AXIS = V(Gate)  Y.LOG  POINTS  COLOR = 2
... +           LEFT = 0.  BOT = 1E - 19  TOP = 1E - 13
... +           TITLE = "Example 1I - Gate Current vs. Vgs"
24... LABEL      LABEL = "Vds = 5.0v"  X = .4  Y = 3E - 14

25... COMMENT Plot generation rate contours
26... PLOT.2D     BOUND  JUNC  X.MIN = 2.0  Y.MAX = .7  FILL  SCALE
... +           TITLE = "Example 1I - Generation Rate Contours"
27... CONTOUR     II.GENER  LOG  ABS  MIN = 17  MAX = 27  DEL = 1  COLOR = 2
28... LABEL      LABEL = "Oxide"      X = 2.4  Y = - 0.01
29... LABEL      LABEL = "Drain"      X = 2.6  Y = 0.20
30... LABEL      LABEL = "Substrate"  X = 2.4  Y = 0.55
31... LABEL      LABEL = "Vgs = 7.5v" X = 2.8  Y = 0.55
32... LABEL      LABEL = "Vds = 5.0v"

```

mdexli 的有关结果输出

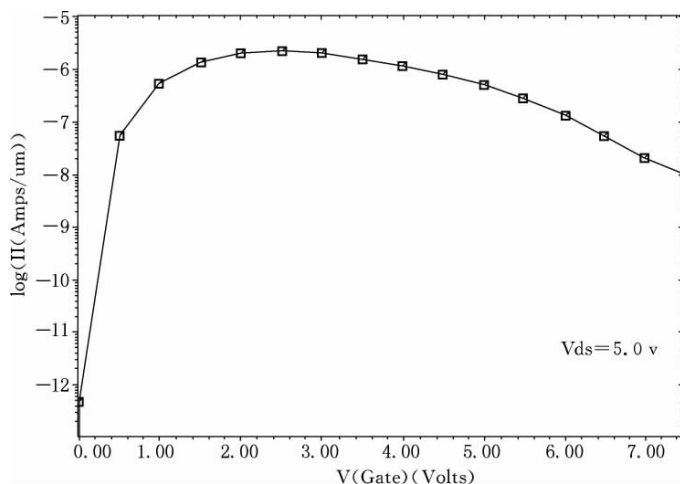


图 4.16 由 mdex1i 中第 20 行 PLOT. 1D 和第 21 行 LABEL 给出的衬底电流随栅极电压的变化

图 4.16 中获得的衬底电流(也即碰撞电离电流)来自对碰撞电离的分析,由图可见,当器件因沟道电流增加而导通,衬底电流十分快速地上升。

当栅极偏置电压增加,器件漏区电场减小,增加电流密度和减小电场之间的折衷;当栅极偏置电压增加时使衬底电流出现峰值,在这种情况下,峰值电流发生在栅极偏置电压约为 2.5 V 处。

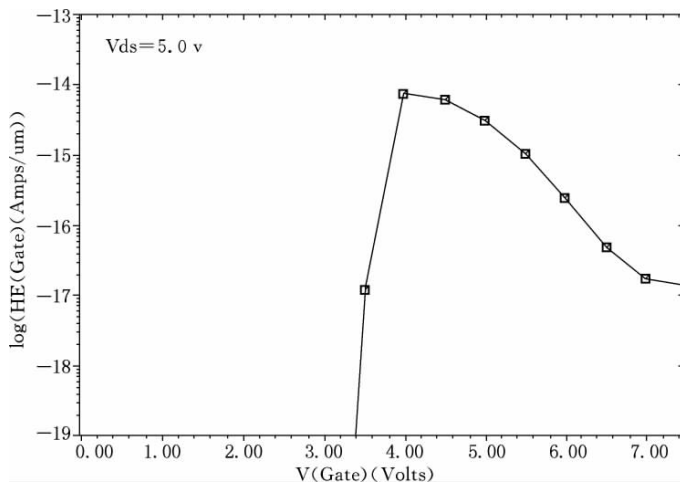


图 4.17 由 mdex1i 中第 23 行 PLOT. 1D 和第 24 行 LABEL 给出的栅极电流随 V_{gs} 的变化

由图 4.17 可见,在低栅极偏置电压时,器件漏区电场高,近漏区处氧化层中的电场禁止电子注入到栅极,因而低 V_{gs} 时栅极电流非常小.当 V_{gs} 向着 V_{ds} 增加,氧化层中电场变得有利于电子的注入,从而使栅极电流快速上升,如在前面对衬底电流所描述的那样,当 V_{gs} 增加时,漏区电场减弱,使栅极电流呈现一个峰值.本例中,峰值发生在栅极偏置电压约为 4.0 V 处.而栅极电流的峰值约比衬底电流的峰值小 8 个数量级.

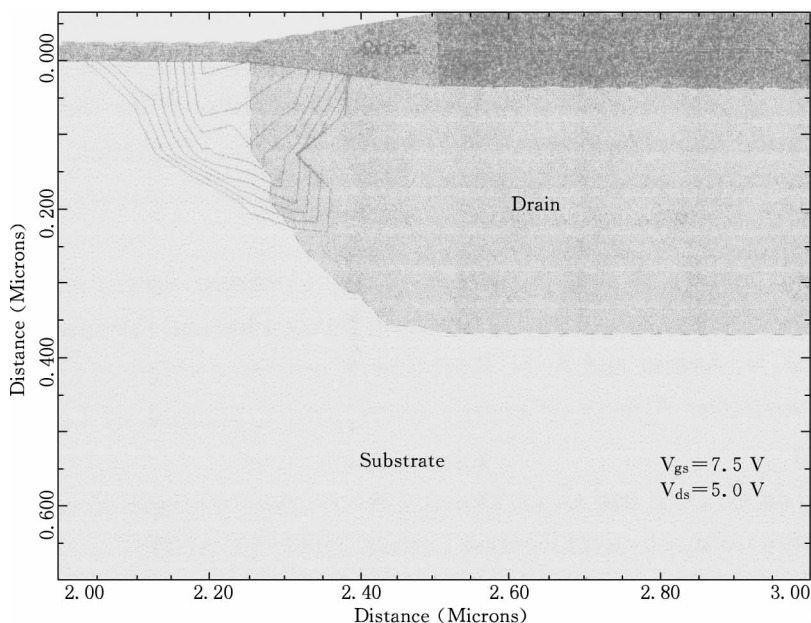


图 4.18 由 mdex1i 中第 26 行 PLOT, 2D, 第 27 行 CONTOUR 以及第 28—32 行 LABEL 给出的产生率轮廓图

图 4.18 是 $V_{gs} = 7.5 \text{ V}$, $V_{ds} = 5.0 \text{ V}$ 时总的碰撞电离产生率的二维轮廓图,轮廓间差一个量级.由图可见,碰撞电离发生在 Si—SiO₂ 界面处沟道和漏区交接处附近.

(5) 界面态对亚阈值特性曲线影响模拟的输入文件 mdex1f 及有关结果输出,被执行模拟的器件为 1.5 μm N 沟 MOSFET,3 种界面态分别为不带电荷的快界面态,带正电荷的快界面态和带负电的快界面态.

输入文件 mdex1f

```
1... TITLE      Synopsis MEDICI Example 1F - 1.5 Micron N-Channel MOSFET
```

```
2... COMMENT      Gate Characteristics Including Fast Interface States

3... COMMENT      Read in saved mesh
4... MESH          IN.FILE = MDEX1MS

5... COMMENT      Read solution to get models
6... LOAD          IN.FILE = MDEX1S
7... INTERFAC     CLEAR

8... COMMENT      0-carrier solution with  $V_g = -0.6\text{v}$ ,  $V_d = 0.1\text{v}$ 
9... SYMB          CARRIERS = 0
10... SOLVE        INIT   $V(\text{Gate}) = -0.6$    $V(\text{Drain}) = 0.1$   OUT.FILE = TEMPSOL

11... COMMENT      Switch to 1 - carrier
12... SYMB          NEWTON  CARRIERS = 1  ELECTRON

13... COMMENT      Gate characteristics with zero , positive , and negative
... +              fast interface states ( $V_d = 0.1\text{v}$ )
14... LOOP          STEPS = 3
15...  ASSIGN       NAME = NDON      N.VALUE = (0.0 , 5E11 , 0.0)
16...  ASSIGN       NAME = NACC      N.VALUE = (0.0 , 0.0 , 5E11)
17...  ASSIGN       NAME = LOGFIL    C1 = "MDE1FIZ"  C2 = "MDE1FIP"  C3 = "MDE1FIN"
18...  ASSIGN       NAME = SOLFIL    C1 = "MDE1SZ"   C2 = "MDE1SP"   C3 = "MDE1SN"

19...  LOAD          IN.FILE = TEMPSOL
20...  INTERFAC     N.DON = @NDON  N.ACC = @NACC
21...  LOG           OUT.FILE = @LOGFIL
22...  SOLVE         $V(\text{Gate}) = -0.6$   OUT.FILE = @SOLFIL"1"
23...  SOLVE         $V(\text{Gate}) = -0.4$   ELEC = Gate  VSTEP = 0.2  NSTEP = 11
24...  SOLVE         $V(\text{Gate}) = 2.0$    OUT.FILE = @SOLFIL"2"
25... L.END

26... COMMENT      Plot log (drain current) versus  $V_{gs}$ 
27... PLOT.ID       IN.FILE = MDE1FIP  Y.AXIS = I(Drain)  X.AXIS = V(Gate)  Y.LOG
... +              BOT = 1E - 14  TOP = 1E - 4  LINE = 1  COLOR = 2  SYMB = 1
... +              TITLE = "Example 1F - Log (Id) vs.  $V_{gs}$ "
```

```

28... PLOT.1D IN.FILE = MDE1FIZ Y.AXIS = I(Drain) X.AXIS = V(Gate) Y.LOG
... + LINE = 1 COLOR = 3 SYMB = 2 UNCHANGE
29... PLOT.1D IN.FILE = MDE1FIN Y.AXIS = I(Drain) X.AXIS = V(Gate) Y.LOG
... + LINE = 1 COLOR = 4 SYMB = 3 UNCHANGE
30... LABEL LAB = "Positive States" COL = 2 SYMB = 1 START.LE LX.FIN = -.5
... + X = -0.3
31... LABEL LAB = "Zero Charge" COL = 3 SYMB = 2 START.LE LX.FIN = -.5
32... LABEL LAB = "Negative states" COL = 4 SYMB = 3 START.LE LX.FIN = -.5

33... COMMENT Plot band diagrams at X = 1.5
34... LOOP STEPS = 3
35... ASSIGN NAME = SOLFIL C1 = "MDE1SZ" C2 = "MDE1SP" C3 = "MDE1SN"
36... ASSIGN NAME = TITLE C1 = "Zero Charge" C2 = "Positive States"
... + C3 = "Negative States"

37... LOOP STEPS = 2
38... ASSIGN NAME = NUM N.VALUE = (1,2)
39... ASSIGN NAME = XOFF N.VALUE = (2.0,11.0)
40... ASSIGN NAME = CLEAR L.VALUE = (T,F)
41... ASSIGN NAME = BIAS C1 = "Vg = -0.6v" C2 = "Vg = 2.0v"

42... LOAD IN.FILE = @SOLFIL@NUM

43... IF COND = @CLEAR
44... PLOT.1D CONDUCT COL = 4 BOT = 2 TOP = -2 X.LEN = 7 X.OFF = @XOFF
... + X.ST = 1.5 X.EN = 1.5 Y.ST = 0 Y.EN = 0.5 TITLE = @TITLE
45... ELSE
46... PLOT.1D CONDUCT COL = 4 BOT = 2 TOP = -2 X.LEN = 7 X.OFF = @XOFF
... + X.ST = 1.5 X.EN = 1.5 Y.ST = 0 Y.EN = 0.5 TITLE = @TITLE
... + ^ CLEAR
47... IF.END

48... PLOT.1D VALENC COL = 4 UNCHANGE X.LEN = 7 X.OFF = @XOFF
... + X.ST = 1.5 X.EN = 1.5 Y.ST = 0 Y.EN = 0.5
49... PLOT.1D POTEN COL = 3 UNCHANGE X.LEN = 7 X.OFF = @XOFF

```

```
...      +      X.ST = 1.5  X.EN = 1.5  Y.ST = 0  Y.EN = 0.5
50 ...    PLOT.1D  QFN      COL = 2  UNCHANGE  X.LEN = 7  X.OFF = @XOFF  LINE = 2
...      +      X.ST = 1.5  X.EN = 1.5  Y.ST = 0  Y.EN = 0.5

51 ...    LABEL      LABEL = @BIAS
52 ...    LABEL      LABEL = Conduction  X = .33  Y = - 0.95  C.SI = .2
53 ...    LABEL      LABEL = Potential   X = .33  Y = - 0.40  C.SI = .2
54 ...    LABEL      LABEL = Qfn        X = .33  Y = - 0.05  C.SI = .2
55 ...    LABEL      LABEL = Valence     X = .33  Y = 0.35   C.SI = .2
56 ...    L.END

57 ...    L.END
```

mdex1f 的有关结果输出

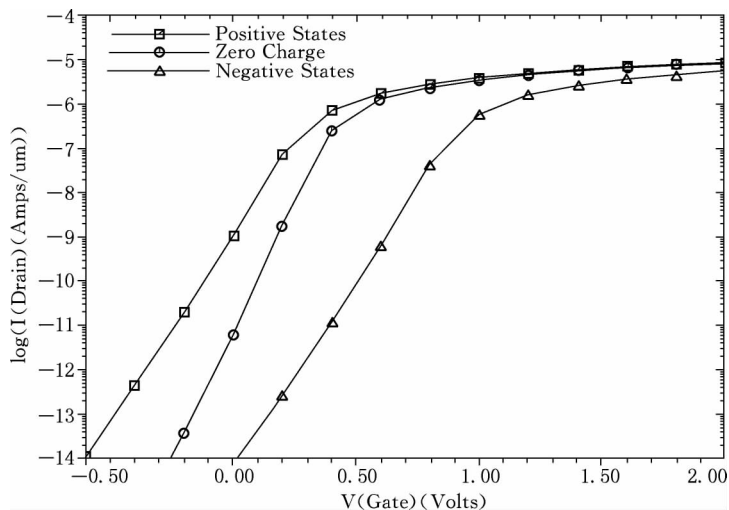


图 4.19 由 mdex1f 中第 27—29 行 PLOT.1D 以及第 30—32 行 LABEL 给出的漏极电流随 V_{gs} 的变化

图 4.19 给出了带正电荷的快界面态、带负电荷的快界面态以及不带电荷的快界面态对亚阈值特性曲线的影响。这一影响需通过研究不同栅极偏置条件下 3 种不同带电情况界面态时的能带图(见图 4.20—图 4.22)来理解。

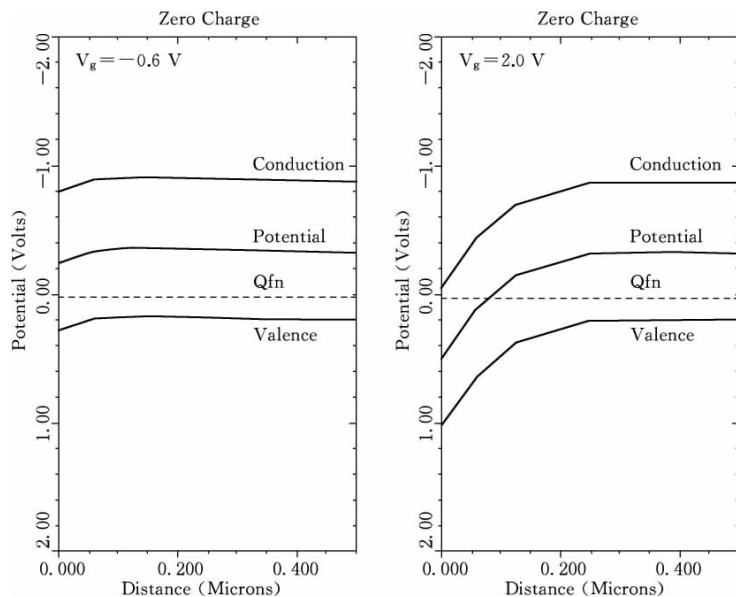


图 4.20 由 mdex1f 中第 34—57 行中的 PLOT, 1D 和 LABEL 语句中的部分相关语句给出的界面态不带电荷时的能带图

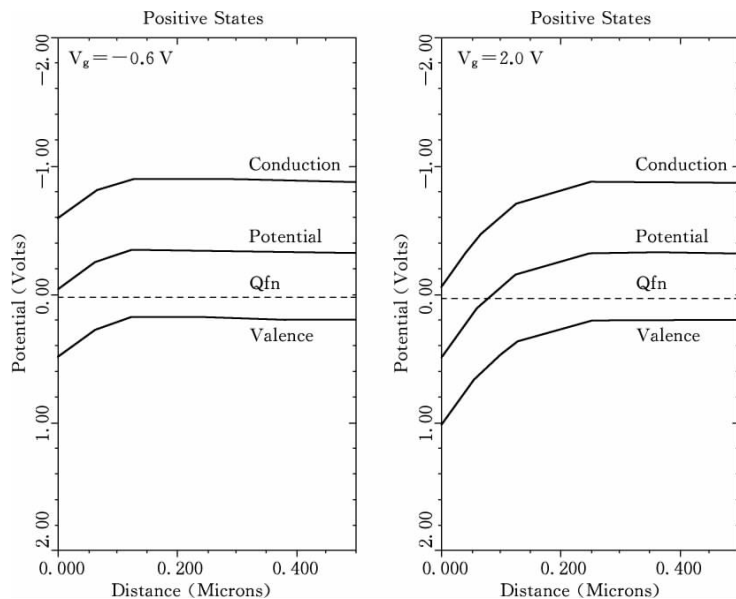


图 4.21 由 mdex1f 中第 34—57 行中的 PLOT, 1D 和 LABEL 语句中的部分相关语句给出的界面态带正电荷时的能带图

由于包含界面处正电荷的总的正电荷同电子准费米势和导带电势之间的差成比例,当栅极偏置电压增加时,界面处能带弯曲,使电势差变小,界面处的正电荷数也相应减小.这样就可解释“带正电荷界面态”的亚阈值曲线在较低栅极偏置电压时比较高栅极偏置电压时向左偏离“不带电荷界面态”的亚阈值曲线更远些(见图 4.19).

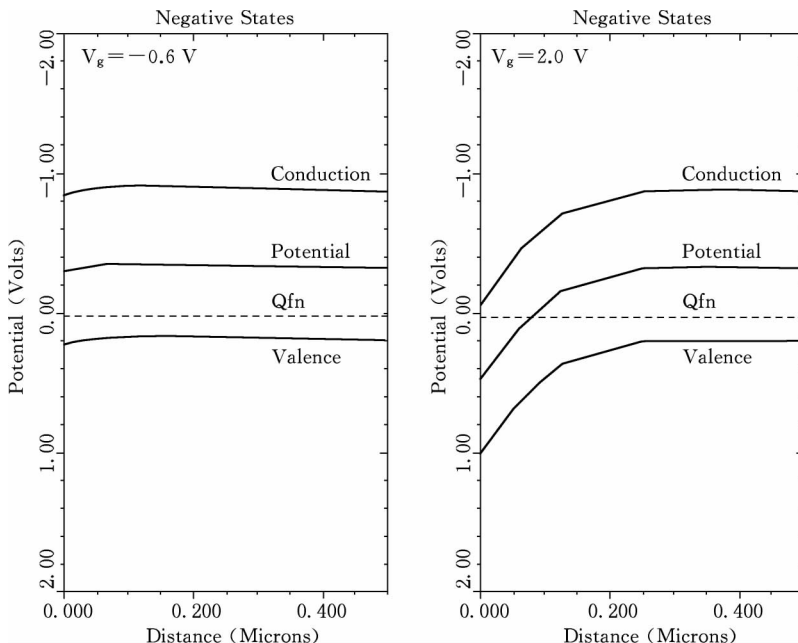


图 4.22 由 mdex1f 中第 34—57 行中的 PLOT, 1D 和 LABEL 语句中的部分相关语句给出的界面态带负电荷时的能带图

由于包含界面处负电荷的总的负电荷同电子准费米势和价带电势之间的差成比例,当栅偏压增加时,界面处能带弯曲使电势差变大,这样,界面处的负电荷数增大,就可解释“带负电荷界面态”的亚阈值曲线在较高栅偏压时比较低栅偏压时向右偏离“不带电荷界面态”的亚阈值曲线更远些(见图 4.19).

(6) 带间隧穿引起漏泄电流模拟的输入文件 mdex1t 及有关结果输出,被执行模拟的器件为 $1.5 \mu\text{m}$ N 沟 MOSFET. 本子例研究栅偏压为负,漏偏压为 10V 时带间隧穿引起的漏泄电流.

输入文件 mdex1t

```
1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 1T - 1.5 Micron N-Channel MOSFET
2... COMMENT    Simulation Including Band-to-Band Tunneling

3... COMMENT    Read in saved mesh
4... MESH        IN.FILE = MDEX1MS

5... COMMENT    Read solution to get models
6... LOAD        IN.FILE = MDEX1S

7... COMMENT    Regrids on band-to-band tunneling rate with Vd = 10v , Vg = - 4v
8... LOOP        STEPS = 3
9...   ASSIGN     NAME = INITIAL  L.VALUE = (T , F , F)
10...  SYMB        CARRIERS = 0
11...  METHOD       ICCG  DAMPED

12...   IF COND = @INITIAL
13...     SOLVE     V(Gate) = - 4  V(Drain) = 10  INITIAL
14...   ELSE
15...     SOLVE     V(Gate) = - 4  V(Drain) = 10
16...   IF.END

17...   ASSIGN     NAME = BBRATE  N.VALUE = (6 , 10 , 14)
18...   REGRID     BB.GENER  IGNORE = OXIDE  LOG  ^ CHANGE  RATIO = @BBRATE
...   +           SMOOTH = 1  IN.FILE = MDEX1DS
19... L.END

20... COMMENT    Plot the simulation grid
21... PLOT.2D     GRID  FILL  SCALE
...   +           TITLE = "Example 1T - BTBT Simulation Grid"

22... COMMENT    Turn on band-to-band tunneling model
23... MODELS      BTBT

24... COMMENT    Initial 0-carrier solution with Vd = 10v , Vg = 0v
25... SYMB        CARRIERS = 0
26... SOLVE        INITIAL  V(Gate) = 0  V(Drain) = 10
```

```
27... COMMENT      Switch to 2-carriers and then ramp the gate
28... SYMB          NEWTON  CARRIERS = 2
29... METHOD         ^ AUTONR
30... LOG           OUT.FILE = MDX1TI
31... SOLVE         V(Gate) = 0  ELEC = Gate  VSTEP = - 0.25  NSTEP = 16

32... COMMENT      Plot drain current versus gate bias
33... PLOT.1D      BOT = 1E-14  TOP = 1E-10  LEFT = - 4  RIGHT = 0  COLOR = 2
... +             X.AXIS = V(Gate)  Y.AXIS = I(Drain)  Y.LOGARITH  POINTS
... +             TITLE = "Example 1T- Drain Current vs. Vgs"
34... LABEL        LABEL = "Vds = 10.0V"  Y = 3E-14

35... COMMENT      Plot band-to-band generation rate contours
36... PLOT.2D      X.MIN = 2.1  X.MAX = 2.7  Y.MAX = 0.3  BOUND  JUNC  FILL  SCALE
... +             TITLE = "Example 1T- Generation Rate Contours"
37... CONTOUR      BB.GENER  LOG  ABS  MIN = 13  MAX = 23  DEL = 1
38... LABEL        LABEL = "Oxide"          X = 2.40  Y = - 0.01
39... LABEL        LABEL = "Drain"          X = 2.50  Y = 0.10
40... LABEL        LABEL = "Vgs = - 4v"     X = 2.55  Y = 0.25
41... LABEL        LABEL = "Vds = 10v"
```

mdex1t 的有关结果输出

在栅极电压负偏置时流过 n 沟 MOSFET 的电流很小,但当加上一个高的漏极偏压后,表面处能带弯曲,有可能使价带电子隧穿禁带到导带而留下一个空穴,带间隧穿产生的电子-空穴对能参加导电从而对器件中的漏极电流作出贡献,为精确研究带间隧穿,模拟的网格必须足够精细以决定发生隧穿区域的高电场。

图 4.23 给出 $V_g = -4\text{ V}$, $V_o = 10\text{ V}$ 时模拟带间隧穿的网格。

图 4.24 清楚地显示,带间隧穿产生的电子,使漏极电流随栅偏压减至更负而增加。

如图 4.25 所示,大多数带间隧穿发生在高电场区栅漏交叠处的表面。

(7) 用离化积分分析雪崩击穿的输入文件 mdex1a 及有关结果输出,被执行模拟的器件为 $1.5\text{ }\mu\text{m}$ N 沟 MOSFET。为雪崩击穿的分析,本子例计算栅偏压为 0 V 、漏偏压为 6 V 到 12 V 时,电子和空穴积分的最大值。由于本子例所用的漏偏压较高,因而输入文件 mdex1 给出的器件模拟结构必须修改。为适应漏偏压高至 $20\sim 30\text{ V}$,模拟器件结构的深度从 $2\text{ }\mu\text{m}$ 增加到 $4\text{ }\mu\text{m}$ 。

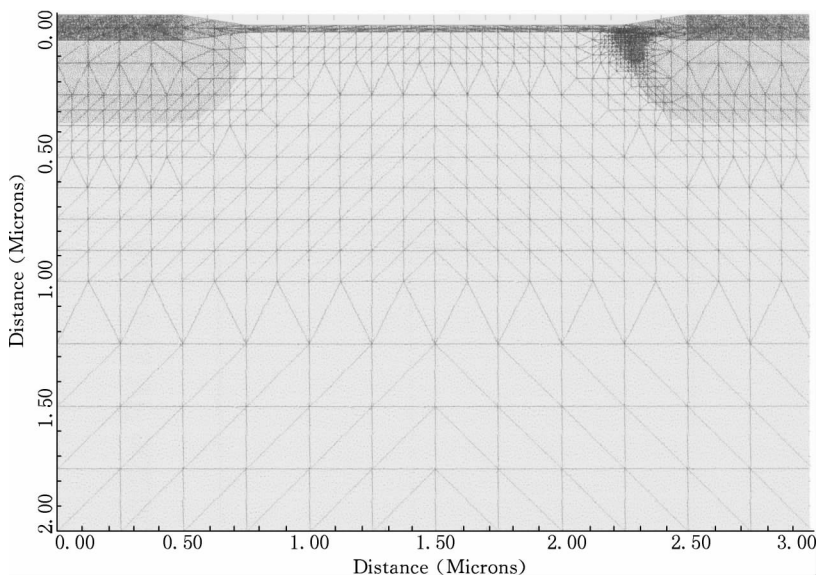


图 4.23 由 mdex1t 中第 21 行 PLOT. 2D 语句给出的带间隧穿 (BTBT) 模拟网格

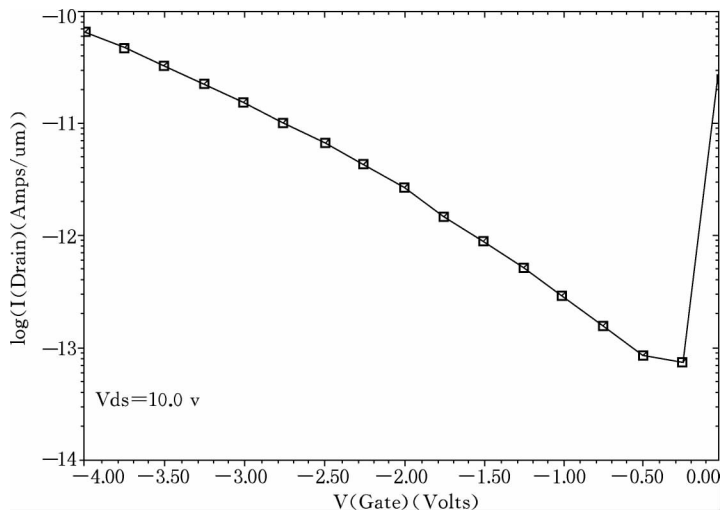


图 4.24 由 mdex1t 中第 33 行 PLOT. 1D 和第 34 行 LABEL 语句给出的漏极电流随 V_g 的变化

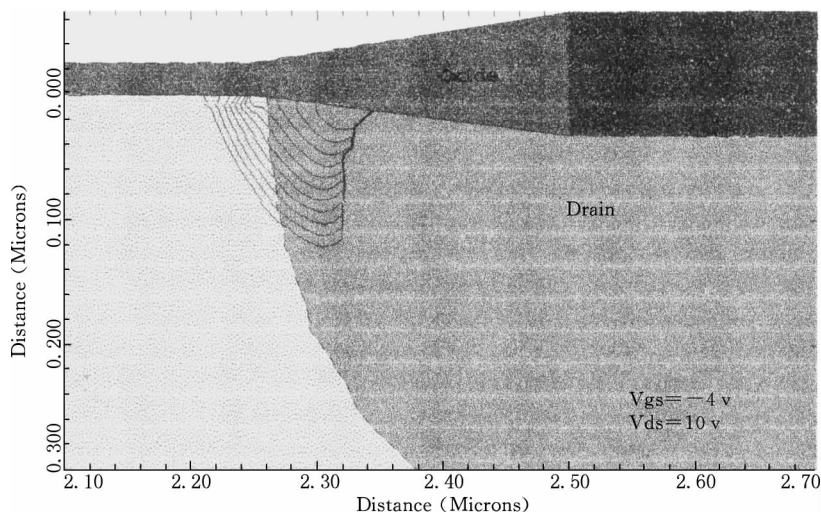


图 4.25 由 mdex1t 中第 36 行 PLOT, 2D, 第 37 行 CONTOUR 以及第 38—41 行 LABEL 语句给出的二维产生率轮廓图

输入文件 mdex1a

```

1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 1A - 1.5 Micron N-Channel MOSFET
2... COMMENT    Avalanche Breakdown Analysis

3... COMMENT    Initial mesh specification
4... MESH       SMOOTH = 1
5... X.MESH     WIDTH = 3.0   H1 = 0.125
6... X.MESH     WIDTH = 1.5   H1 = 0.125   H2 = .3

7... Y.MESH     N = 1   L = -0.025
8... Y.MESH     N = 3   L = 0.
9... Y.MESH     DEPTH = 1.0   H1 = 0.125
10... Y.MESH    DEPTH = 1.0   H1 = 0.250
11... Y.MESH    DEPTH = 2.0   H1 = 0.250   RATIO = 1.4

12... COMMENT   Eliminate nodes , increase source/drain oxide thickness
13... ELIMIN    COLUMNS   Y.MIN = 1.1
14... SPREAD    LEFT      WIDTH = 0.625   UP = 1   LO = 3   THICK = .1   ENC = 2
15... SPREAD    RIGHT     WIDTH = 2.125   UP = 1   LO = 3   THICK = .1   ENC = 2

```

```

16... SPREAD    LEFT    WIDTH = 100    UP = 3    LO = 4    Y, LO = .125

17... COMMENT   Specify oxide and silicon regions
18... REGION    SILICON
19... REGION    OXIDE      IY, MAX = 3

20... COMMENT   Electrode definition
21... ELECTR    NAME = Gate    X, MIN = 0.625    X, MAX = 2.375    TOP
22... ELECTR    NAME = Substrate    BOTTOM
23... ELECTR    NAME = Source    X, MAX = 0.5    IY, MAX = 3
24... ELECTR    NAME = Drain    X, MIN = 2.5    IY, MAX = 3

25... COMMENT   Specify impurity profiles and fixed charge
26... PROFILE   P-TYPE    N, PEAK = 3E15    UNIFORM    OUT, FILE = MDEX1DS
27... PROFILE   P-TYPE    N, PEAK = 2E16    Y, CHAR = .25
28... PROFILE   N-TYPE    N, PEAK = 2E20    Y, JUNC = .34    X, MIN = 0.0    WIDTH = 0.5
... +          XY, RAT = .75
29... PROFILE   N-TYPE    N, PEAK = 2E20    Y, JUNC = .34    X, MIN = 2.5    WIDTH = 2.0
... +          XY, RAT = .75
30... INTERFAC  QF = 1E10

31... COMMENT   Regrid on doping
32... REGRID    DOPING    LOG    IGNORE = OXIDE    RATIO = 2    SMOOTH = 1
... +          IN, FILE = MDEX1DS

33... COMMENT   Specify contact parameters
34... CONTACT   NAME = Gate    N, POLY

35... COMMENT   Specify physical models to use
36... MODELS    CONMOB    FLDMOB    SRFMOB2
37... COMMENT   Initial solution, regrid on potential
38... SYMB      CARRIERS = 0
39... METHOD     ICCG    DAMPED
40... SOLVE

41... REGRID    POTEN    IGNORE = OXIDE    RATIO = .2    MAX = 1    SMOOTH = 1
... +          IN, FILE = MDEX1DS

```

```
42... PLOT.2D GRID TITLE = "Example 1A - Avalanche Simulation Mesh"
... + FILL SCALE
43... COMMENT Solve using the refined grid , Vds = 4
44... SYMB CARRIERS = 0
45... SOLVE V(Drain) = 4 LOCAL

46... COMMENT Calculate ionization integrals for Vds = 6 , 8 , 10 , 12
47... LOOP STEPS = 4
48... ASSIGN NAME = BIAS N. VALUE = 6 DELTA = 2
49... SOLVE V(Drain) = @BIAS
50... EXTRACT IONIZATI X. MIN = 2.0
51... L. END
```

mdex1a 的有关结果输出

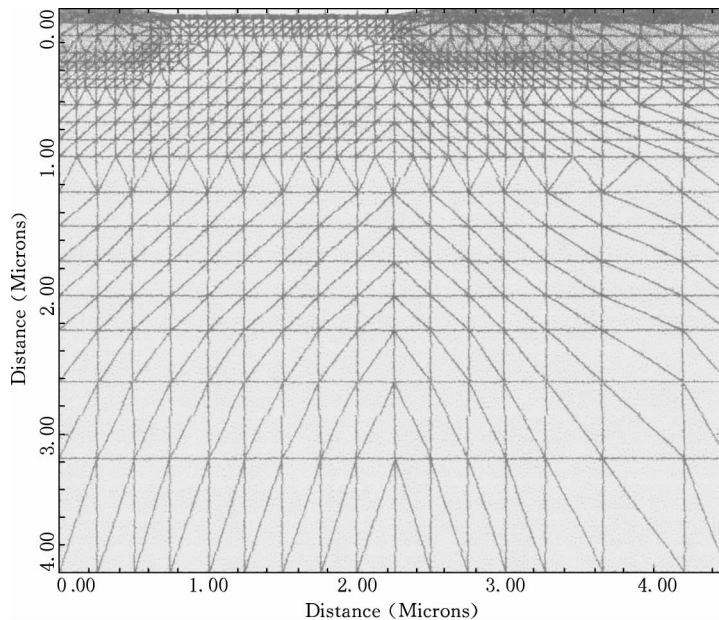


图 4.26 由 mdex1a 中第 42 行 PLOT.2D 语句给出的模拟雪崩击穿的网格

由 mdex1a 中第 47—51 行给出的离化积分计算结果中的一部分 ($V_{GS} = 0\text{ V}$, $V_{DS} = 10\text{ V}$ 以及 $V_{GS} = 0\text{ V}$, $V_{DS} = 12\text{ V}$ 两种偏置情况) 如以下打印输出所示.

Solution for Bias :

V(Gate) = 0.0000000E+00
V(Substrate) = 0.0000000E+00
V(Source) = 0.0000000E+00
V(Drain) = 1.0000000E+01

.

.

.

Electrode Name	Electron Ionization	Peak Field (V/cm)	X Location (microns)	Y Location (microns)
Substrate	0.6847	5.7214E+05	2.272	1.2536E-02
Drain	0.6847	5.7214E+05	2.272	1.2536E-02

Electrode Name	Hole Ionization	Peak Field (V/cm)	X Location (microns)	Y Location (microns)
Substrate	0.5299	5.7214E+05	2.272	1.2536E-02
Drain	0.5299	5.7214E+05	2.272	1.2536E-02

Solution for Bias :

V(Gate) = 0.0000000E+00
V(Substrate) = 0.0000000E+00
V(Source) = 0.0000000E+00
V(Drain) = 1.2000000E+01

.

.

.

Electrode Name	Electron Ionization	Peak Field (V/cm)	X Location (microns)	Y Location (microns)
Substrate	1.002	6.9988E+05	2.326	4.1325E-02
Drain	1.002	6.9988E+05	2.326	4.1325E-02

Electrode Name	Hole Ionization	Peak Field (V/cm)	X Location (microns)	Y Location (microns)
Substrate	1.003	6.9988E+05	2.326	4.1325E-02
Drain	1.003	6.9988E+05	2.326	4.1325E-02

上列计算结果显示雪崩击穿发生在 V_{DS} 近于 12 V 时(此时离化积分 >1)也显

示由电场决定的最大离化积分值位于漏区左边缘的表面处 ($x = 2.326 \mu\text{m}$, $y = 0.041 \mu\text{m}$).

4. 6. 4. 3 MEDICI 的应用例举二 用能量平衡方程模拟 LDD MOSFET 中衬底电流

1. 简要说明

本例是载流子能量平衡方程加到标准的漂移—扩散方程组的自洽解的应用实例之一. 具体说明用能量平衡模型对亚微米 LDD MOSFET 中衬底电流的计算.

本例被模拟的器件为有效沟长 $0.5 \mu\text{m}$ 的 LDD MOSFET, 氧化层厚度为 10 nm , 隔离间距为 150 nm , 源/漏结深为 $0.2 \mu\text{m}$, LDD 结深为 $0.1 \mu\text{m}$.

2. 输入文件及结果输出

(1) 输入文件 mdex8a

mdex8a 由三部分组成. 第一部分称之为结构说明文件, 它生成器件结构和网格用 MOS 样板文件(template file)mosstr0.

mdex8a 的第一部分

```
1... TITLE      MEDICI Example 8A-LDD-MOSFET Simulation
2... COMMENT    Calculation of substrate current using the carrier
... +          temperature-based impact ionization model

3... COMMENT    Create the structure using the MOSFET templates
4... CALL        FILE = mosdef0  ^ PRINT

59... COMMENT    Modify the mosdef0 parameters to define a
... +          0.5 micron n-channel LDD
60... ASSIGN     NAME = TRANTYPE  C. VALUE = NMOS
61... ASSIGN     NAME = FTLE      C. VALUE = E8A
62... ASSIGN     NAME = LGATE     N. VALUE = 0.5
63... ASSIGN     NAME = LSOURCE   N. VALUE = 0.5
64... ASSIGN     NAME = LSCONT    N. VALUE = 0.25
65... ASSIGN     NAME = LDRAIN    N. VALUE = 0.5
66... ASSIGN     NAME = LDCONT    N. VALUE = 0.25
67... ASSIGN     NAME = LSPACER   N. VALUE = 0.15
68... ASSIGN     NAME = TOX       N. VALUE = 0.01
69... ASSIGN     NAME = NSUB      N. VALUE = 5E15
```

```

70... ASSIGN    NAME = VTTYPE      C. VALUE = P
71... ASSIGN    NAME = VTPEAK      N. VALUE = 5E15
72... ASSIGN    NAME = VTCHAR      N. VALUE = 0.10
73... ASSIGN    NAME = SDPEAK      N. VALUE = 1E20
74... ASSIGN    NAME = SDJUNC      N. VALUE = 0.20
75... ASSIGN    NAME = LDDPEAK     N. VALUE = 2E18
76... ASSIGN    NAME = LDDJUNC     N. VALUE = 0.1
77... ASSIGN    NAME = CHANSP      N. VALUE = .005
78... ASSIGN    NAME = JUNCSP      N. VALUE = .03
79... ASSIGN    NAME = RATIO       N. VALUE = 1.4
80... ASSIGN    NAME = VDBMAX      N. VALUE = 3

81... COMMENT   Create the structure using the template "mosstr0"
82... CALL      FILE = mosstr0  ^ PRINT

506... COMMENT  Specify models
507... CONTACT  NAME = Gate  P. POLY
508... MODELS   CONMOB  PRPMOB  FLDMOB  CONSRH  AUGER

```

第二部分称之为模拟文件,它执行 3 种解,传统的漂移—扩散方程解,近似的能量平衡解以及完全的能量平衡解。

(i) 传统的漂移—扩散方程解

这种解,不解能量平衡方程,作为后处理分析计算基于局域电场的碰撞电离,离子化率不反馈到载流子连续性方程中。

(ii) 近似的能量平衡解

这种解,解能量平衡方程以决定平均载流子温度,但载流子温度不反馈到漂移—扩散方程中。这种解法同标准漂移—扩散解法有差不多的速度,因为能量平衡方程每个偏置点只解一次。实现能量平衡方程和漂移—扩散方程的耦合同温度相关的扩散参数以及同温度相关的迁移率参数必须置“true”(同时用标准的同电场相关的迁移率模型 FLDMOB)。后处理的碰撞电离被用来计算衬底电流,但它的计算基于载流子温度而不是电场。

(iii) 完全的能量平衡解

这种解是自洽解。用这种解时,电子温度反馈到连续性方程中通过 TMPMOB 以及 TMPDIF。这种解法速度最慢,因为解漂移—扩散和能量平衡模型需多次通过。作为后处理步骤,基于载流子温度的碰撞电离被再次计算。

mdex8a 的第二部分

```
509... COMMENT   Apply drain bias (2.0v)
510... SYMBOL     CARR = 0
511... METHOD      ICCG   DAMPED
512... SOLVE       V(Drain) = 2.0   OUT.FILE = TEMPSOL

513... COMMENT    Perform three sets of solutions :
... +             1. DDE solution :      mobility(E), impact ioniz(E)
... +             2. Approx EB solution : mobility(E), impact ioniz(T),
... +                                                     no temp. enhanced diffusion
... +             3. Full EB solution :   mobility(T), impact ioniz(T)

514... LOOP       STEPS = 3
515...   ASSIGN    NAME = ELETEMP   L. VALUE = (F , T , T)
516...   ASSIGN    NAME = FULLEB    L. VALUE = (F , F , T)
517...   ASSIGN    NAME = LOGFIL    C1 = "MDE8AID"   C2 = "MDE8AIE"   C3 = "MDE8AIF"
518...   ASSIGN    NAME = SOLFIL    C1 = "MDE8ASD"   C2 = "MDE8ASE"   C3 = "MDE8ASF"

519...   LOAD      IN. FILE = TEMPSOL

520...   IF   COND = @ELETEMP

521...       IF   COND = @FULLEB
522...           MODELS      TMPDIF  TMPMOB  II. TEMP
523...       ELSE
524...           MODELS      ^ TMPDIF ^ TMPMOB  II. TEMP
525...       IF. END

526...       SYMBOL      CARR = 1  NEWTON  ELECTRON  ELE. TEMP
527...       METHOD      ETX. TOL = 0.10
528...       ELSE
529...       SYMBOL      CARR = 1  NEWTON  ELECTRON
530...       IF. END

531...   COMMENT    Sweep gate bias from 0v to 6v.
532...   LOG         OUT. FILE = @LOGFIL
```

```

533... SOLVE      V(Gate) = 0.00  IMPACT. I
534... SOLVE      V(Gate) = 0.25  ELEC = Gate  VSTEP = 0.25  NSTEP = 4  IMPACT. I
535... SOLVE      V(Gate) = 1.50  ELEC = Gate  VSTEP = 0.50  NSTEP = 8  IMPACT. I
536... SOLVE      V(Gate) = 6.00  IMPACT. I  OUT. FILE = @SOLFIL
537... L. END

```

第三部分称之为作图文件. 包括给出 3 种解情况下的衬底电流图 碰撞电离产生率 电子温度图等作图输出(见图 4.27—图 4.32).

mdex8a 第三部分

```

538... COMMENT    Plot substrate current for the three cases
539... PLOT.1D     IN. FILE = MDE8AID  X. AX = V(Gate)  Y. AX = I(Drain)
... +             LOG  LINE = 2  SYMB = 1  BOT = 1E-18  TOP = 1E-2
... +             TITLE = "Example 8A-Substrate Current"
540... PLOT.1D     IN. FILE = MDE8AID  X. AX = V(Gate)  Y. AX = II
... +             LOG  COL = 2  SYMB = 2  UNCH
541... PLOT.1D     IN. FILE = MDE8AIE  X. AX = V(Gate)  Y. AX = II
... +             LOG  COL = 3  SYMB = 3  UNCH
542... PLOT.1D     IN. FILE = MDE8AIF  X. AX = V(Gate)  Y. AX = II
... +             LOG  COL = 4  SYMB = 4  UNCH
543... LABEL       LAB = "V(Drain) = 2v"
544... LABEL       LAB = "I(Drain)"  X = 3.5  Y = 1E-5  LINE = 2
... +             START. L  LX. FIN = 3.2  COL = 1  SYMB = 1
545... LABEL       LAB = "I(Sub. ) (DD)"
... +             START. L  LX. FIN = 3.2  COL = 2  SYMB = 2
546... LABEL       LAB = "I(Sub. ) (EB-full)"
... +             START. L  LX. FIN = 3.2  COL = 4  SYMB = 4
547... LABEL       LAB = "I(Sub. ) (EB-approx)"
... +             START. L  LX. FIN = 3.2  COL = 3  SYMB = 3

548... COMMENT    Impact ionization generation rate
... +             and electron temperature
549... LOAD        IN. FILE = MDE8ASD
550... PLOT.2D     BOUND  FILL  SCALE  Y. MAX = 0.4  L. ELEC = -1
... +             TITLE = "Example 8A-DD: Impact Ionization"
551... CONTOUR     II. GENER  LOG  FILL  MIN = 13  DEL = 1  LINE = 1
552... LABEL       LABEL = "V(Drain) = 2v"  X = 0.1  Y = 0.3

```

```
553... LABEL      LABEL = "V(Gate) = 6v"

554... LOAD      IN.FILE = MDE8ASF
555... PLOT.2D    BOUND  FILL  SCALE  Y.MAX = 0.4  L.ELEC = - 1
... +          TITLE = "Example 8A - EB : Impact Ionization"
556... CONTOUR    II.GENER  LOG  FILL  MIN = 13  DEL = 1  LINE = 1
557... LABEL      LABEL = "V(Drain) = 2v"  X = 0.1  Y = 0.3
558... LABEL      LABEL = "V(Gate) = 6v"

559... PLOT.2D    BOUND  FILL  SCALE  Y.MAX = 0.4  L.ELEC = - 1
... +          TITLE = "Example 8A - EB : Electron Temperature"
560... CONTOUR    ELE.TEMP  FILL  MIN = 500  DEL = 250  LINE = 1
561... LABEL      LABEL = "V(Drain) = 2v"  X = 0.1  Y = 0.3
562... LABEL      LABEL = "V(Gate) = 6v"
```

(2) mdex8a 的结果输出

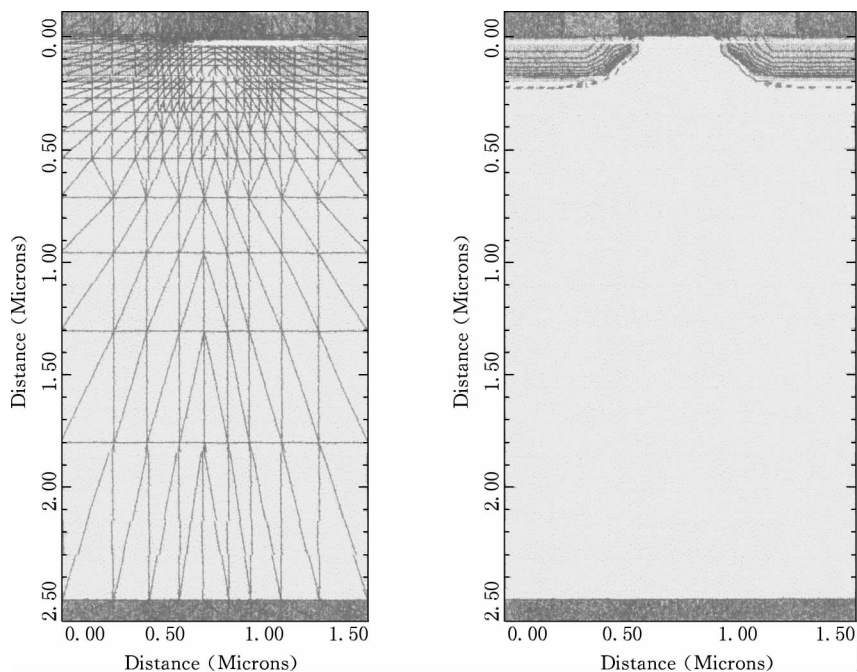


图 4.27 器件结构的网格图(左图)和掺杂浓度轮廓图(右图)

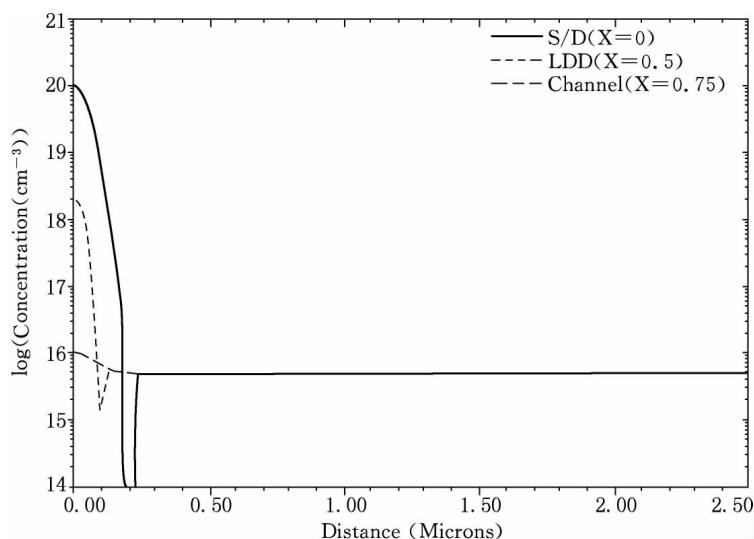


图 4.28 源/漏 S/D($x=0$), LDD($x=0.5$)和沟道($x=0.75$)处垂直于器件结构表面的掺杂分布

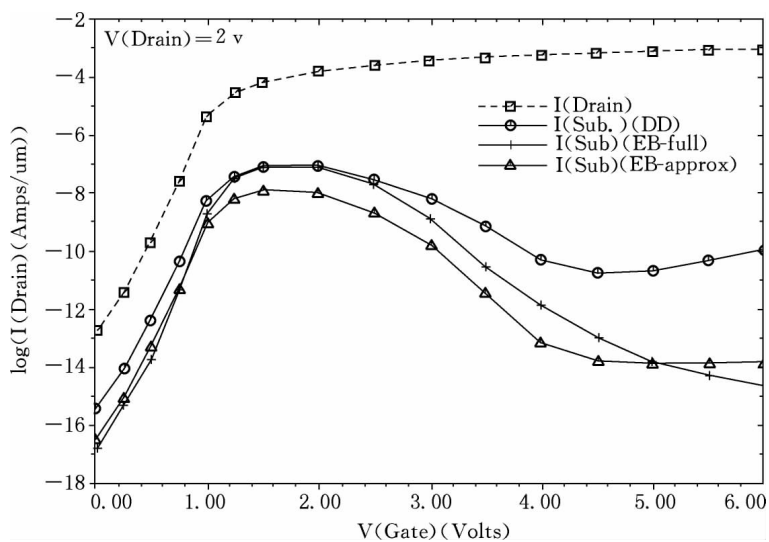


图 4.29 由文件 mdex8a 中第 539—542 行给出的衬底电流

由图 4.29 可见,用传统的漂移—扩散(DD)模型同用近似的能量平衡(EB-Approx.)模型或完全的能量平衡(EB-full)模型计算得到的衬底电流值有

明显的差别,特别是在高栅偏压时,那里被认为是沟道的源区边侧处碰撞电离起支配作用.这一差别的主要原因是传统的局域电场碰撞电离模型没有能力去计入所谓非局域暗空间效应(nonlocal dark space effects),也即没有能力去计入由于载流子在一个强加速电场中行进需要一些时间才能获得为碰撞电离所需的充分能量的效应,因而算得的衬底电流偏高,而能量平衡模型计入了基于载流子温度的碰撞电离模型,因而导致在源区边侧处有较低的碰撞电离,衬底电流较低.

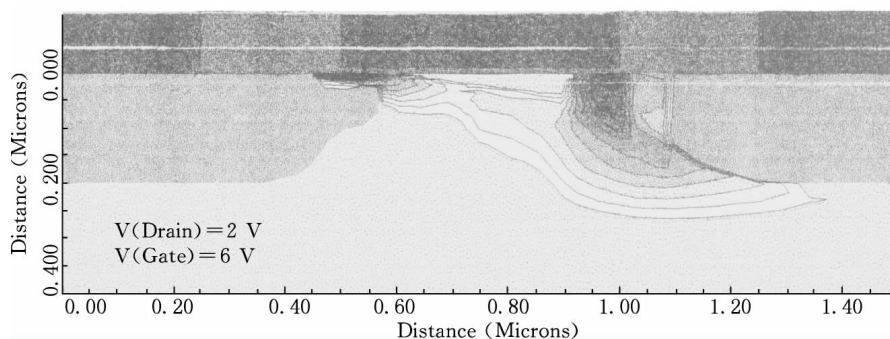


图 4.30 由文件 mdex8a 中第 549—553 行给出的用局域电场碰撞电离模型计算的碰撞电离率

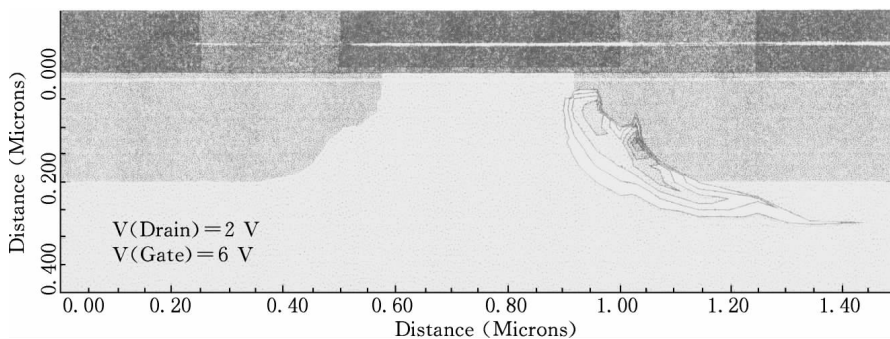


图 4.31 由文件 mdex8a 中第 554—558 行给出的用基于载流子温度的碰撞电离模型计算的碰撞电离率

由文件 mdex8a 中第 559—562 行给出的电子温度见彩图 3.

4. 6. 4. 4 MEDICI 的应用例举三 SiGe 异质结双极型晶体管 (HBT)

1. 简要说明

本例模拟一维 npn $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ HBT, 该 HBT 的发射区和集电区用 Si 而基区用 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 合金. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的禁带宽度比 Si 窄, 禁带宽度变窄量 $\Delta E_g = \Delta E_v + \Delta E_c$, 其中主要由价带的变化 ΔE_v 贡献. 这样, 这类器件从基区注入到发射区的空穴大大减少, 因而具有很高的电流增益, 本例中的 Ge 的克分子分数 x 取 0.2.

2. 输入文件及结果输出

(1) 输入文件 mdex16

mdex16 产生网格和结构, 给定掺杂和 Ge 摩尔分数的分布, 执行初始零偏置解及作出平衡能带图.

```

1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 16 - 1D SiGe HBT Simulation
2... COMMENT    Specify a "1D" Mesh Structure
3... MESH        OUT.FILE = MDEX16M
4... X.MESH      WIDTH = 0.50   N.SPACES = 1
5... Y.MESH      DEPTH = 0.1    H2 = 0.005   RATIO = 1.2
6... Y.MESH      DEPTH = 0.1    H1 = 0.005
7... Y.MESH      DEPTH = 0.6    H1 = 0.005   H2 = 0.050

8... COMMENT    Use a SiGe base (X.MOLE = 0.2) with a graded mole fraction
... +          for the emitter-base and base-collector transitions.
9... REGION      SILICON
10... REGION     SIGE   Y.MIN = 0.100   Y.MAX = 0.125   X.MOLE = 0.0   X.END = 0.2
11... REGION     SIGE   Y.MIN = 0.125   Y.MAX = 0.200   X.MOLE = 0.2
12... REGION     SIGE   Y.MIN = 0.200   Y.MAX = 0.230   X.MOLE = 0.2   X.END = 0.0

13... COMMENT    Electrodes: Use a majority carrier contact for the base.
14... ELECTR      NAME = Emitter   TOP
15... ELECTR      NAME = Base     Y.MIN = 0.125   Y.MAX = 0.125   MAJORITY
16... ELECTR      NAME = Collector BOTTOM
17... PROFILE     N-TYPE   N.PEAK = 2E16   UNIFORM

```

```
18... PROFILE N-TYPE N.PEAK = 5E19 Y.MIN = 0.80 Y.CHAR = 0.125
19... PROFILE P-TYPE N.PEAK = 2E18 Y.MIN = 0.12 Y.JUNC = 0.200
20... PROFILE N-TYPE N.PEAK = 7E19 Y.JUNC = 0.10
21... PLOT.2D GRID FILL SCALE TITLE = "SiGe HBT Mesh"
22... FILL SET.COLOR C.SIGE = 5 C.SILI = 3 ^ NP.COLOR
23... PLOT.2D BOUND FILL SCALE JUNC L.JUNC = 1 ^ CLEAR X.OFF = 11.5
... + TITLE = "SiGe HBT Structure"
24... LABEL LABEL = "n-emitter" X = 0.17 Y = 0.05
25... LABEL LABEL = "SiGe p-base" X = 0.17 Y = 0.18
26... LABEL LABEL = "n-collector" X = 0.17 Y = 0.50
27... PLOT.1D DOPING LOG X.ST = 0 X.EN = 0 Y.ST = 0 Y.EN = 0.8 COLOR = 2
... + TITLE = "Doping Through Emitter"
28... LABEL LABEL = "n" X = 0.05 Y = 1E16
29... LABEL LABEL = "p" X = 0.15 Y = 1E16
30... LABEL LABEL = "n" X = 0.50 Y = 1E16
31... PLOT.1D X.MOLE X.ST = 0 X.EN = 0 Y.ST = 0 Y.EN = 0.8 COLOR = 4 LINE = 2
... + ^ CLEAR ^ AXES ^ MARKS ^ LABELS
32... LABEL LABEL = "mole fraction (max = 0.2)" X = 0.3 Y = 0.18 START.LE
... + LX.FIN = 0.22 ARROW C.SI = 0.2
33... COMMENT Perform a 0-bias solution and plot the equilibrium
... + band diagram.
34... SYMBOL CARR = 2 NEWTON
35... SOLVE
36... PLOT.1D VAL NEG X.ST = 0 X.EN = 0 Y.ST = 0 Y.EN = 0.8 MIN = -1.2 MAX = 1.2
... + TITLE = "HBT Band Diagram , Vce = 0.0 , Vbe = 0.0"
37... PLOT.1D CON NEG X.ST = 0 X.EN = 0 Y.ST = 0 Y.EN = 0.8 UNCH
38... PLOT.1D POT NEG X.ST = 0 X.EN = 0 Y.ST = 0 Y.EN = 0.8 UNCH
39... PLOT.1D QFP NEG X.ST = 0 X.EN = 0 Y.ST = 0 Y.EN = 0.8 UNCH COL = 2 LINE = 2
40... LABEL LABEL = "conduction" X = 0.40 Y = 0.25
41... LABEL LABEL = "potential" X = 0.40 Y = -0.3
42... LABEL LABEL = "valence" X = 0.40 Y = -0.85
43... LABEL LABEL = "Fermi level" X = 0.26 Y = 0.05
```

(2) mdex16 的有关结果输出

有关网格和结构,掺杂和 Ge 摩尔分数的分布以及平衡能带图分别由图 4.32—图 4.34 给出。

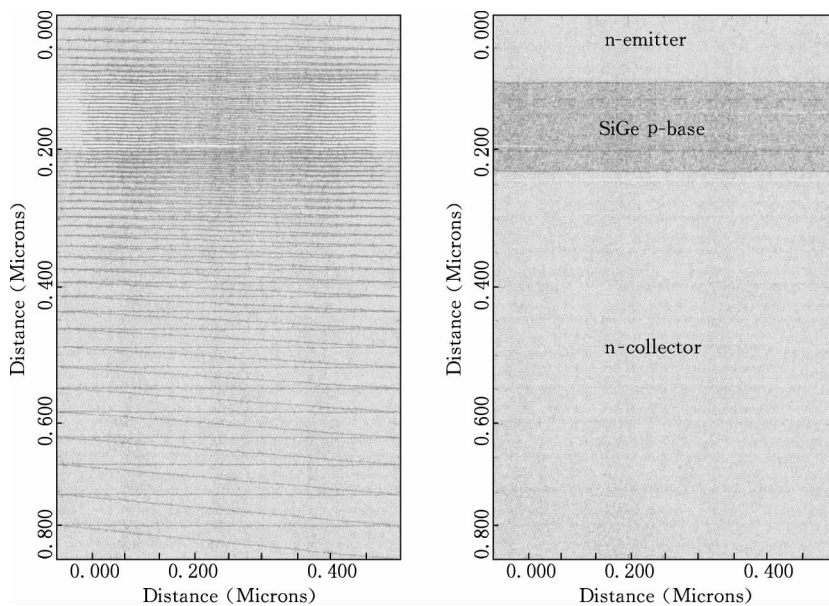


图 4.32 由文件 mdex16 中第 21—26 行生成的 HBT 网格图(左图)和 HBT 结构图(右图)

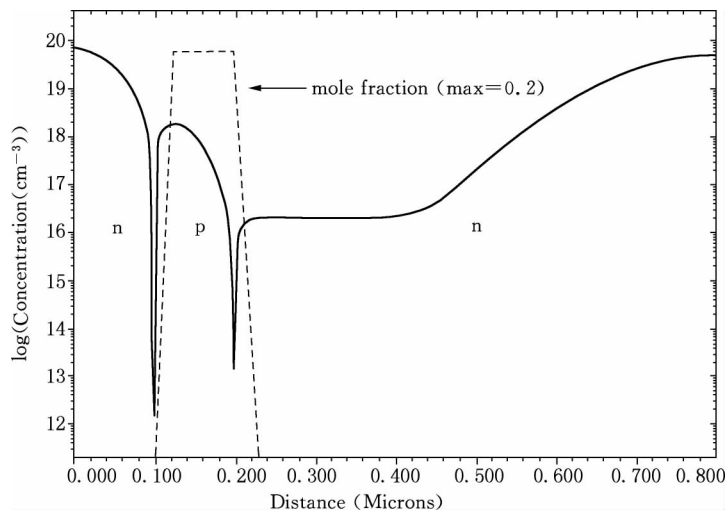


图 4.33 由文件 mdex16 第 27—32 行给出的掺杂和 Ge 摩尔分数 x 的分布图

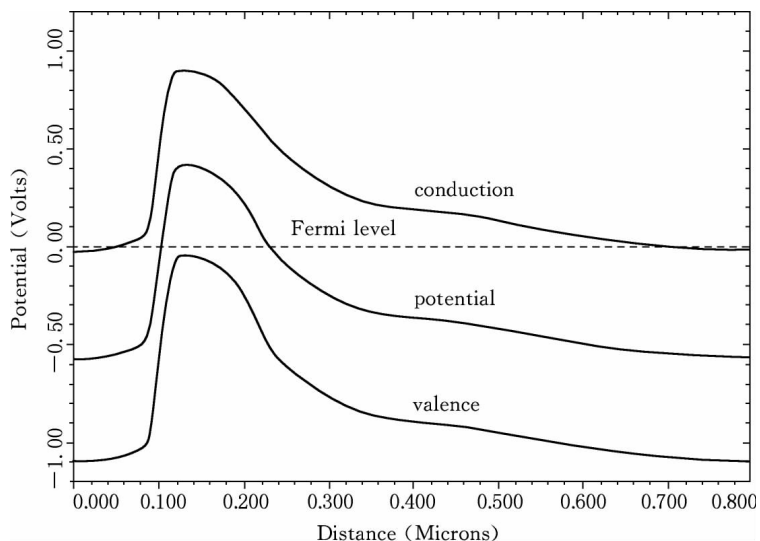


图 4.34 由文件 mdex16 第 36—43 行给出的零偏置平衡能带图

(3) 输入文件 mdex16f

mdex16f 用来读入 mdex16 生成的 HBT 结构以及模拟它的正向特性,模拟时可用补缺的应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 禁带模型也可用说明的非应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 禁带模型.

```

1... TITLE      Synopsys MEDICI Example 16F - 1D SiGe HBT Simulation

2... COMMENT    Read in mesh , specify contact and model parameters

3... MESH       IN. FILE = MDEX16M

4... CONTACT    NAME = Emitter  SURF. REC  VSURFN = 1E5  VSURFP = 1E5

5... MODELS     CONMOB  FLDMOB  CONSRH  AUGER  BGN

6... COMMENT    Use Vc = 2.0 , ramp the base voltage

7... SYMBOLIC   NEWTON  CARRIERS = 2

8... METHOD      CONT. STK

9... LOG        OUT. FILE = MDE16BI

10... SOLVE     V(Collector) = 2.0  V(Base) = 0.0

... +          ELEC = Base  VSTEP = 0.05  NSTEPS = 16

```

```

11... EXTRACT  NAME = Beta  EXPRESS = @I(Collector)/@I(Base)

12... COMMENT  Plot Ic and Ib vs. Vbe

13... PLOT.1D  IN.FILE = MDE16BI  X.AXIS = V(Base)  Y.AXIS = I(Collector)  LOG
... +          LEFT = 0  RIGHT = 0.9  BOTTOM = 1E-15  TOP = 1E-3  POINTS
... +          TITLE = "Example 16F - HBT Gummel Plot"  COLOR = 2

14... PLOT.1D  IN.FILE = MDE16BI  X.AXIS = V(Base)  Y.AXIS = I(Base)  LOG
... +          UNCH  COLOR = 3  LINE = 2  POINTS

15... LABEL    LABEL = "Ic"  X = 0.5  Y = 7E-8

16... LABEL    LABEL = "Ib"  X = 0.5  Y = 2E-11

17... COMMENT  Plot the current gain vs. collector current

18... PLOT.1D  IN.FILE = MDE16BI  X.AXIS = I(Collector)  Y.AXIS = Beta  X.LOG
... +          Y.LOG  LEFT = 1E-10  RIGHT = 1E-3  BOT = 10  TOP = 1E3  COLOR = 2
... +          TITLE = "Example 16F - HBT Gain vs. Collector Current"
... +          POINTS

```

(4) mdex16f 的有关结果输出

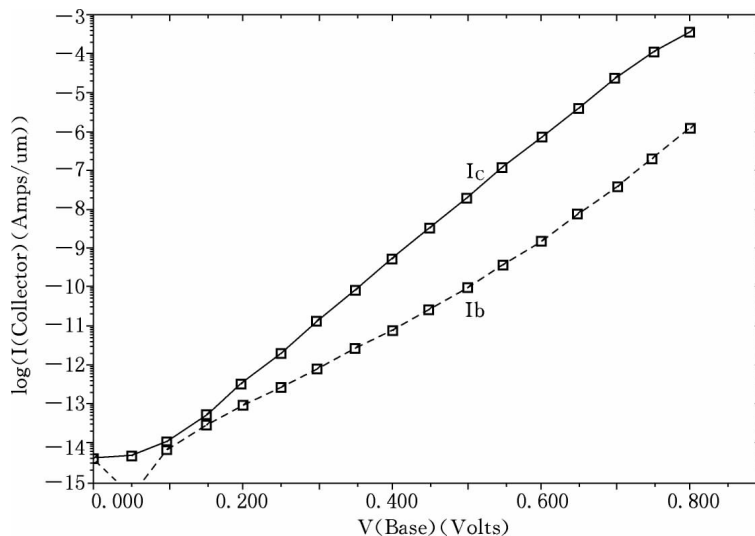


图 4.35 由文件 mdex16f 中第 13—16 行给出的 Gummel 图
(即 I_c 和 I_b 随 V_{be} 的变化图)

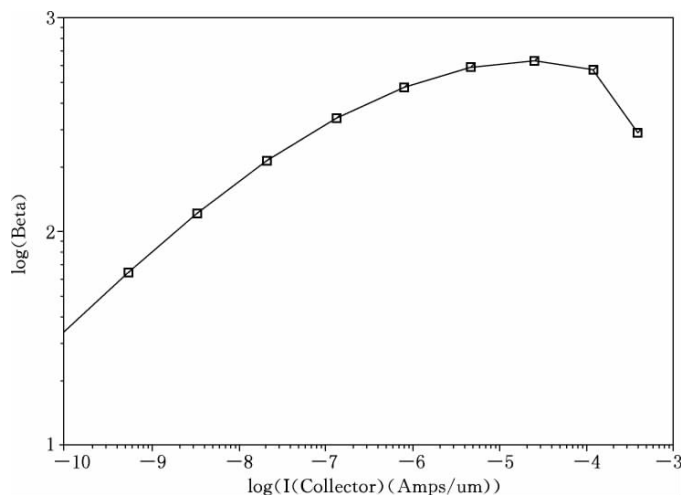


图 4.36 由文件 mdex16f 中第 18 行给出的电流增益 β 随集电极电流 I_c 的变化图

图 4.36 给出的电流增益高于相同尺寸和掺杂水平但基区为 Si 而不是 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的同质结双极型晶体管 1~2 个数量级。

第四章参考资料

- [4.1] S. Selberherr et al. , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-27 , No. 8 , 1980 , p. 1540 , and *MINIMOS-2.0 User's Guide* , May 1982
- [4.2] *MEDICI User Guide (Version X-2005.10)* , Synopsys , Inc. , USA , Oct. 2005
- [4.3] D. L. Scharfetter and H. K. Gummel , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-16 , 1969 , p. 64
- [4.4] H. L. Stone , *SIAM J. Num. Anal.* , Vol. 5 , 1968 , p. 530
- [4.5] J. Gibbons , W. S. Johnson , S. W. Mylroie , *Projected Range Statistics* , Halstead Press , Strandsberg , 1975
- [4.6] S. Selberher , *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices* , Springer-Verlag , 1984
- [4.7] *MEDICI Version 1.0* , Technology Modeling Associates , Inc. , USA , 1992
- [4.8] M. R. Pinto et al. , *PISCES-2B* , Stanford Electronics Lab. Tech. Rep. , Stanford University , 1985
- [4.9] D. Chen et al. , *SISDEP'91* , Zurich , Switzerland , Sept. 1991
- [4.10] D. Chen et al. , *IEEE Electron Device Lett.* , Vol. EDL-13 , Jan , 1992 , p. 26

- [4. 11] D. Chen et al. , *NUPAD-IV* , Seattle , WA , 1992
- [4. 12] A. Forghieri et al. , *IEEE Trans. Computer-Aided Design* , Vol. 7 , No. 2 , Feb. 1988 , p. 231
- [4. 13] B. Meinerzhagen and W. L. Engl , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. 35 , No. 5 , May 1988 , p. 689
- [4. 14] V. Axelrad , *International Workshop on VLSI Process and Device Modeling* , Oiso , Japan , May 1991
- [4. 15] V. Axelrad et al. , *SISDEP'91* , Zurich , Switzerland , Sept. 1991
- [4. 16] C. M. Snowden and D. Loret , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. ED-34 , No. 2 , Feb. 1987 , p. 212
- [4. 17] Y. K. Feng and A. Hintz , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. ED-35 , No. 9 , Sept. 1988 , p. 1419
- [4. 18] A. S. Grove , *Physics and Technology of Semiconductor Devices* , New York : John Wiley & Sons , 1967
- [4. 19] G. A. M. Hurkx , D. B. M. Klaassen and M. P. G. Knuvers , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. ED-39 , Feb. 1992 , p. 331
- [4. 20] S. C. Jain and D. J. Roulston , *Solid-State Electronics* , Vol. 34 , 1991 , p. 453
- [4. 21] C. Persson , U. Lindefelt and B. E. Sernelius , *Journal of Applied Physics* , Vol. 86 , No. 8 , 1999 , p. 4419
- [4. 22] G. L. Bir and G. E. Pikus , *Symmetry and Strain-Induced Effect in Semiconductors* , Wiley , New York , 1974
- [4. 23] T. Manku and A. Nathan , *Journal of Applied Physics* , Vol. 73 , 1993 , p. 1205
- [4. 24] D. M. Caughey and R. E. Thomas , *Proc. IEEE* . Vol. 55 , 1967 , p. 2192
- [4. 25] S. Selberherr , *Microelectron Reliab.* , Vol. 24 , No. 2 , 1984 , p. 225
- [4. 26] N. D. Arora , J. R. Hauser and D. J. Roulston , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. ED-29 , 1982 , p. 292
- [4. 27] J. M. Dorkel and Ph. Leturcq , *Solid-State Electronics* , 24 , 1981 , p. 821
- [4. 28] D. B. M. Klaassen , *Solid-State Electronics* , Vol. 35 , 1992 , p. 953
- [4. 29] D. B. M. Klaassen , *Solid-State Electronics* , Vol. 35 , 1992 , p. 961
- [4. 30] J. T. Watt , *Improved Surface Mobility Models in PISCES* , Presented at *Computer-Aided Design of IC Fabrication Processes* , Stanford University , Aug. 6 , 1987
- [4. 31] J. T. Watt , *Surface Mobility Modeling* , Presented at *Computer-Aided Design of IC Fabrication Processes* , Stanford University , Aug. 3 , 1988
- [4. 32] C. Lombardi et al. , *IEEE Trans. Computer-Aided Design* , Vol. 7 , No. 11 , Nov. 1988 , p. 1164
- [4. 33] S. A. Mujtaba , R. W. Dutton and D. L. Scharfetter , *International Workshop on Numeri-*

- cal Modeling of Processes and Devices for Integrated Circuits* , NUPAD V , Honolulu , Hawaii , USA , June 5-6 , 1994
- [4. 34] M. Shirahata et al. , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , 1992 , p. 1114
- [4. 35] H. Shin et al. , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. 36 June 1989 , p. 1117
- [4. 36] V. M. Agostinelli , H. Shin and A. F. Tasch , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. 38 , Jan. 1991 , p. 151
- [4. 37] J. L. Egley and D. Chidambarras , *Solid-State Electronics* , 36(12) , 1993 , p. 1653
- [4. 38] K. M. Cham et al. , *Computer-Aided Design and VLSI Device Development* , Hingham , Massachusetts , Kluwer Academic Publishers , 1986
- [4. 39] M. N. Darwish et al. , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. 44 , No. 9 , Sept. 1997 , p. 1529
- [4. 40] J. J. Barmes , R. J. Lomax and G. I. Haddad , *IEEE Trans. Electron Devices* , Vol. ED-23 , Sept. 1976 , p. 1042
- [4. 41] M. A. Littlejohn , J. R. Hauser and T. H. Glisson , *J. Appl. Phys.* , Vol. 48 , No. 11 , Nov. 1977 , p. 4587
- [4. 42] S. Selberherr , *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices* , Wien-New York : Springer-Verlag , 1984
- [4. 43] E. Velmre et al. , *Proceedings of Simulation of Semiconductor Devices and Processes* , Vienna , Austria , Sept. 1993 , p. 433
- [4. 44] M. J. van Dort , P. H. Woerlee and A. J. Walker , *Solid-State Electronics* , Vol. 37 , 1994 , p. 411
- [4. 45] G. Paasch and H. Ubensee , *Phys. Stat. Sol. B* , Vol. 113 , 1982 , p. 165

第五章 集成电路工艺和器件模拟的发展现状和未来需求

本章以模拟器的发展为主线评述集成电路工艺和器件模拟的发展现状,并以国际半导体技术发展路线图,International Technology Roadmap for Semiconductors(ITRS) 2005 EDITION,为主要依据,评述集成电路工艺和器件建模和模拟面临的困难和挑战以及近期(2003—2009 年)和远期(2010—2018 年)的需求。

§ 5.1 集成电路工艺和器件模拟器发展现状

自世界范围内第一个实用的集成电路工艺模拟器 SUPREM-2 和第一个实用的集成电路器件模拟器 SEDAN-1 由美国 Stanford 大学研制成功并释放应用以来,集成电路研制和生产的高速发展需求,驱使集成电路工艺和器件模拟器的原创研制,商用开发和推广应用也有了高速和同步的发展。迄今,已出现了掺杂分布和氧化模拟器,光刻、刻蚀和淀积的形貌模拟器,结合掺杂氧化和形貌模拟的完整工艺模拟器,和集成电路制造工艺的统计模拟器等多种工艺模拟器,以及集成电路中有源器件及无源元件模拟器和集成电路中互连寄生模拟器等器件模拟器。

模拟器的原创研制一般都在大学和研究所进行,由政府或研究项目提供研究资金;而进一步附加模型、提高精度、方便用户、给出更丰富的数据和好的图形输出、推广应用等是商用模拟器的卖主们的工作;半导体工业界则尽力地采用和应用已有模拟器的能力去开发和最佳化工艺、器件和集成电路,同时对模拟器的研制、开发和商用化改进不断提出新的需求和改进建议;遵循这样一种分工和合作推进着模拟器的不断发展和模拟器应用的深入和推广。

5.1.1 掺杂分布和氧化模拟器

如第二章所介绍,代表这类模拟器当今水平的是由美国 Stanford 大学原创研制的二维工艺模拟器 SUPREM-4^[2.4]以及美国 Synopsys 和 Silvaco 公司基于 SUPREM-4 的、为商用而改进开发的 TSUPREM-4^[2.6]和 SSUPREM-4^[2.7]。

此外,为满足器件尺寸不断缩小,例如既是短沟又是窄沟的小尺寸 MOSFET

的需求,原创的和商用的三维掺杂分布和氧化模拟器也纷纷相继问世,例如较早期的,1990年已用在日本 OKI Electric Industry Co. Ltd TCAD 系统的为通用目的的多维工艺模拟器 OPUS/3D^{[5.11][5.2]},以及能体现当今三维工艺模拟水平的由 Synopsys 公司开发的商用的多维工艺模拟器 TAURUS PROCESS^[5.3],OPUS 和 TAURUS PROCESS 都具有模拟多维空间的功能,即能模拟一维、二维和三维空间的工艺特性,这种包含三维空间模拟功能的多维模拟器,模拟时可先启动最低维数的模拟,在最晚的可能时间才转到所需的三维模拟,因此可大大节省模拟所需的 CPU 时间。

5.1.2 光刻刻蚀和淀积的形貌模拟器

集成电路制造中光刻、刻蚀和淀积工艺都会影响被加工的半导体圆片中各芯片内器件/电路的形貌,而同掺杂分布一样形貌对集成电路器件/电路的性能,有决定性的影响,器件/电路尺寸愈小,形貌的影响愈显著。当今,作为主流的掺杂分布和氧化模拟器模拟时仅限于用简单几何形状的形貌,该形貌由事先说明的初始几何和随后的有关加工工艺对形貌的理想化影响的描述确定,不具有光刻、刻蚀和淀积工艺的物理/化学的模拟能力。鉴于此,为了精确模拟光刻、刻蚀和淀积工艺对形貌的影响,迄今已原创研制和商用开发了多种形貌模拟软件,以下简要介绍几种。

5.1.2.1 SAMPLE

SAMPLE, Simulation And Modeling of Profiles in Lithography and Etching 的头字母缩写,是美国加州大学贝克莱分校(UC Berkeley)于 1979 年研制成功,1980 年扩展功能并开始释放应用的世界上第一个实用的二维光刻、刻蚀和淀积的形貌模拟软件^{[5.4][5.5][2.49][2.50]}。

SAMPLE 模拟光刻、刻蚀和淀积等工艺,通过模拟输出这些工艺所形成的集成电路所有材料层中各种结构的线边缘轮廓(即形貌)。这里,光刻包括接触式光刻和投影式光刻等,刻蚀包括湿法刻蚀、等离子体刻蚀、反应离子刻蚀和离子磨削等;淀积包括化学气相淀积、溅射和蒸发等。

SAMPLE 用 FORTRAN 77 书写,共约 15 000 条语句。

以下介绍一个应用 SAMPLE 进行光刻模拟的例子^{[2.49][2.50]}。

1. 例子说明

光刻模拟的目标是通过模拟在一种特定的光刻胶膜上得出一个线边缘轮廓(形貌),这个线边缘轮廓是光刻胶通过一个特指的光刻工艺成像、曝光和显影后得

出的。

本例模拟的光刻工艺其光刻系统为用于投影光刻的一种受衍射限制的光学系统,所用光刻胶为具有图形陡直,线条细的光刻效果的正光刻胶。

本例模拟的图案为周期性的,其线条的宽度和线条的间隔都是 $1.25\ \mu\text{m}$,这样,其结果图案只需显示线条和间隔之和的一半(取半宽线条和半宽间隔),而作为掩模的半线条宽度的边缘则位于 $0.625\ \mu\text{m}$ 处。

用电子束或 X 射线代替光学光源的 SAMPLE 模拟实例可参见文献[5.6]或[5.7]

2. 输入文件及语句含义简释

(1) 输入文件的一个实例

```
# Single wavelength projections lithography

lambda 0.4358 ; # lambda parameter
proj 0.28 ; # numerical aperture
linespace 1.25 1.25 ; # linespace parameters
parcohdef 0 0.7 1.5 ; # sigma and defocus
run 1 ; # run image machine
resmodel ((0.4358))
          (0.551,0.058,0.010)
          (1.68,((-0.02)))(0.7133) ; # resist exposure parameters
layers (4.73,-0.136)
        (1.47,0.0,0.0741) ; # layer parameters
dose 150 ; # dose for exposure in  $\text{mJcm}^{-2}$ 
run 3 ; # run exposure machine
devrate 1(5.63,7.43,-12.6) ; # resist development parameters
devtime 15 75,5 ; # development times
run 4 ; # run development machine
descumspec 0.02 0.04,3 ; # run descum
```

上列输入文件是一个使用 SAMPLE 的输入文件示例,由 SAMPLE 用户手册给出。

(2) 文件中语句含义的简释

```
# Single wavelength projections lithography
```

号开始的语句为说明语句,本语句说明文件名称,可译为单波长投影光刻。

```
lambda 0.4358
```

所用单一波长光源的波长为 $0.4358\text{ }\mu\text{m}$.

```
proj 0.28
```

所用成像系统是一种投影式系统,其数值孔径为 $0.28\text{ }\mu\text{m}$.

```
linespace 1.25 1.25
```

所用掩模板包含线条和间隔组成的周期性图案,线条为光不透明区,宽为 $1.25\text{ }\mu\text{m}$,间隔为光完全透明区,宽也为 $1.25\text{ }\mu\text{m}$.

```
parcohdef 0 0.7 1.5
```

用部分相干光成像,部分相干因子为 0.7 ,散焦距离为 $1.5\text{ }\mu\text{m}$.

```
run 1
```

运行图像器械,也即运行光学成像子程序.

```
resmodel ((0.4358))  
          (0.551, 0.058, 0.010)  
          (1.68, ((-0.02)))(0.7133)
```

所用光刻胶的曝光参数,包括:光波长 0.4358 (这里可忽略),曝光常数 A, B, C 是 Dill 等^[5.8]光刻胶曝光模型公式 $\alpha = AM + B$ 以及 $\frac{dM}{dt} = -IMC$ 中的常数 α , M 及 I 分别为光刻胶的光吸收系数,阻化剂相对浓度及光强.这里 A (与光刻胶中阻化剂有关的吸收系数) $= 0.551\text{ }\mu\text{m}^{-1}$, B (与光刻胶中其他成分有关的吸收系数) $= 0.058\text{ }\mu\text{m}^{-1}$, C (与阻化剂分解速率,局域光强,阻化剂浓度相关的常数) $= 0.010\text{ cm}^2/\text{mJ}$;折射率 $(n, k) = (1.68, -0.02)$,这里 k 可以忽略,可按式 $k = -(A + B) \times (\text{光波长}/4\pi)$ 得出;光刻胶层厚度为 $0.7133\text{ }\mu\text{m}$.

```
layers (4.73, -0.136)  
        (1.47, 0.0, 0.0741)
```

假定有一个很厚的衬底层,其折射率 (n, k) 为 $(4.73, -0.136)$;衬底上有一个或多个薄层(可以是氧化层或氮化层)厚度为 $0.0741\text{ }\mu\text{m}$,其折射率 (n, k) 为 $(1.47, 0.0)$.

```
dose 150
```

表示在掩模板上的光照度和曝光时间也即表示入射在掩模板上的光能密度为 150 mJcm^{-2} .

```
run 3
```

运行曝光器械,也即运行光刻胶曝光子程序.

```
devrate 1(5.63,7.43,-12.6)
```

所用显影速率 rate 的表示式为: $\text{rate}(M) = \exp(E_1 + E_2 M + E_3 M^2)$, 式中 3 个光刻胶显影参数 E_1, E_2, E_3 分别取 5.63, 7.43, -12.6.

```
devtime 15 75,5
```

光刻胶显影时间从 15 sec 到 75 sec 均匀地取 5 种,也即产生 15 sec, 30 sec, 45 sec, 60 sec, 75 sec 等 5 种显影时间及相应的 5 种显影后的线边缘轮廓.

```
run 4
```

运行显影器械,也即运行光刻胶显影子程序.

```
descumspec 0.02 0.04,3
```

执行 descumming 以得到最终的 3 种线边缘轮廓,其含义是用各向同性的等离子体刻蚀移去在表面处由无效光强引起的光刻胶“尾部”,3 种腐蚀情况设定为腐蚀掉“尾部”的量分别为 $0.02 \mu\text{m}$, $0.03 \mu\text{m}$ 和 $0.04 \mu\text{m}$.

3. 模拟结果输出

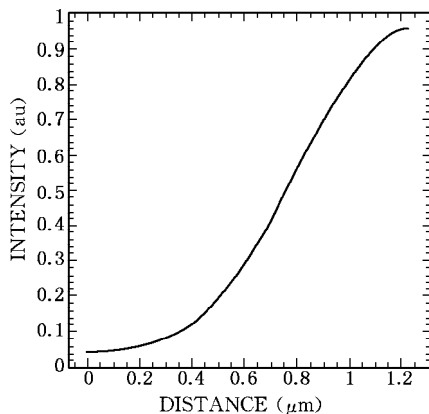
由上列输入文件给出的单波长投影光刻的 SAMPLE 模拟输出见图 5.1 所示.

5.1.2.2 DEPICT 系列

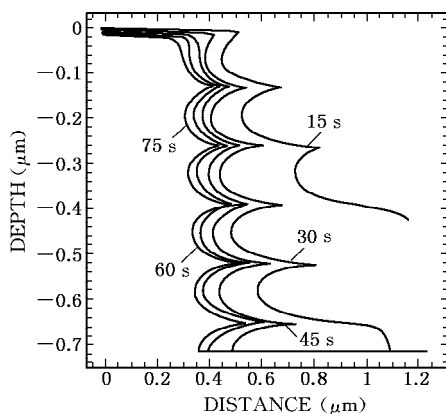
本小节对 DEPICT 的 3 个版本 DEPICT-2, DEPICT-3, DEPICT-4 作简介.

DEPICT-2 是美国 TMA 公司 (Technology Modeling Associates, Inc., USA) 1990 年推出的商用半导体二维形貌模拟器^[5.9], 该模拟器除了具有与 SAMPLE 同样的模拟光刻、刻蚀及淀积等制造工艺对器件/电路形貌影响的能力外, 其模拟能力还有以下增强, 包括:

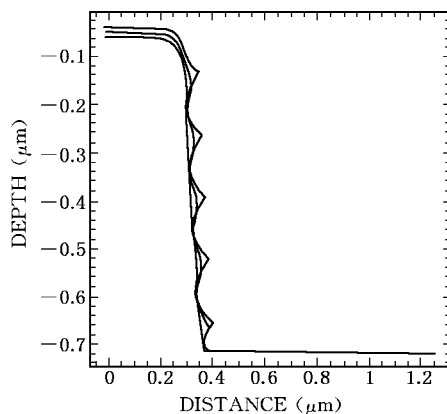
- 能模拟复杂的非平面结构.
- 改进了光刻胶表面的成像模型(aerial imaging model), 使能模拟接近效应, 缺陷互作用, 先进的掩模技术(例如: 相移掩模技术或带有衬线的掩模技术以及物镜残余像差效应)等.
- 开发了计入斜波传播的高数值孔径模型, 使能精确模拟使用高数值孔径物镜或厚光刻胶膜时光刻胶膜的曝光.



(a) 由运行光学成像子程序后给出的沿掩模版的一维光强分布



(b) 由运行光刻胶显影子程序后给出的光刻胶上显影轮廓图(为 5 种不同显影时间)



(c) 经执行最终刻蚀修正模拟后给出的光刻胶上显影轮廓图(为 3 种刻蚀修正情况)

图 5.1 单波长投影光刻的 SAMPLE 模拟结果输出(源自[2.49])

- 能为产生需要的最佳化的结构特性自动地确定最佳工艺条件.
- 提取、打印和作图任意量包括清晰的线宽的输出能力.
- 不仅可作为一个单独使用的形貌模拟工具,也可作为 TMA TCAD 系统的一部分和 TSUPREM-4 实现双向传输模拟完整的工艺;另外,DEPICT-2 给出的器件结构也能直接读入 TMA PISCES-2B 器件模拟器^[4.8]以得出二维器件电特性分析.

随着集成电路光刻、刻蚀、淀积等工艺技术的进展,TMA 公司又先后在 1993

年和 1996 年分别推出了 DEPICT-3^[5, 10]和 DEPICT-4^[5, 11], DEPICT-3 中增加或改进了掩模布局可视性和设计, 二维掩模布局、通用光强度分布建模、空间频率滤波建模、先进的透镜建模等提高了模拟器的模拟效率和模拟精度, 增加了模拟功能, 具体表现在:

- 水平网格节点的最大数已增加到能使由光刻工艺步骤产生的结构有较高的清晰度.
- 最大允许的边界成串节点计数已增加到能使淀积和光刻胶显影期间层表面和界面有较高的清晰度.
- 结构中层的最大数已增至 51.
- 通过使用双精密算法增加了二维光刻胶表面成像模型的精度.
- 为适应更综合的显影速率模型, 用户使用的显影速率模型中的参数已从 6 个增至 12 个.
- 增强了包含非光敏材料层结构的和包含单一材料界面结构的光学系数的快速分析能力.
- 输出能力有较大增强, 可以作图的输出包括: 与二维光刻胶表面成像计算相关的各种参量图、二维掩模场分区图、基底掩模场图、光刻胶层中吸收能量分布图、任意轮廓线数的轮廓图等.
- 不仅能通过双向界面与 TMA 公司的 TSUPREM-4 程序实现双向传输, 还可通过单向界面将器件结构单向输入到 TMA 公司的 MEDICI 器件模拟程序^[4, 7]及 RAPHAEL 模拟程序^[5, 12].

DEPICT-4 是 DEPICT-2 和 DEPICT-3 的改进版本, 能适用于深亚微米工艺, 最大特点是能执行大面积的清晰的光刻胶表面成像. 其他有特色的应用有:

- 通过模拟和分析由已知掩模/高性能步进器给出的二维光刻胶表面图像, 从而准确描述失效面积以控制掩模中的信息正确转移到显影的光刻胶膜中. (例如通过使用一个 $300\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m}$ 的掩模板、一台 I-line 步进器, 在 SPARC 20 机器上花 30 分钟实现上列模拟和控制).
- 执行互动的光接近校正(OPC—Optical Proximity Correction).
- 模拟不同掩模(包括: 二元掩模, 无铬掩模, 薄掩模及各种相移掩模).
- 分析潜在的光刻失效.
- 有方便用户的图形界面可用作三维光/像强度的作图和打印输出以及光/像强度的渐变度分析.
- 流畅地同最广泛使用的布局表示数据格式 GDS II 文件相连以及图像强度的互动提取.

以下给出几幅分别说明 DEPICT 各版本特色功能的作图输出。

彩图 4 中轮廓图表示常数光刻胶表面成像强度(constant aerial intensity),而线图表示沿着横截面切线 AA' 各处的强度。如彩图 4 所示,用相移掩模同用传统透射掩模相比显现出具有较大的清晰度,这是基于前者改进了图像的对比度。本模拟的线宽为 $0.6\text{ }\mu\text{m}$,所用光源的部分相干因子 $\sigma = 0.7$,投影式成像系统的数值孔径 $\text{NA} = 0.28$ 。

得出彩图 5 所用的 DEPICT-2 模拟的参数同得出彩图 4 所用的完全相同。彩图 5 中的高强度区(或“热点”)由于局域相干互相作用的结果。

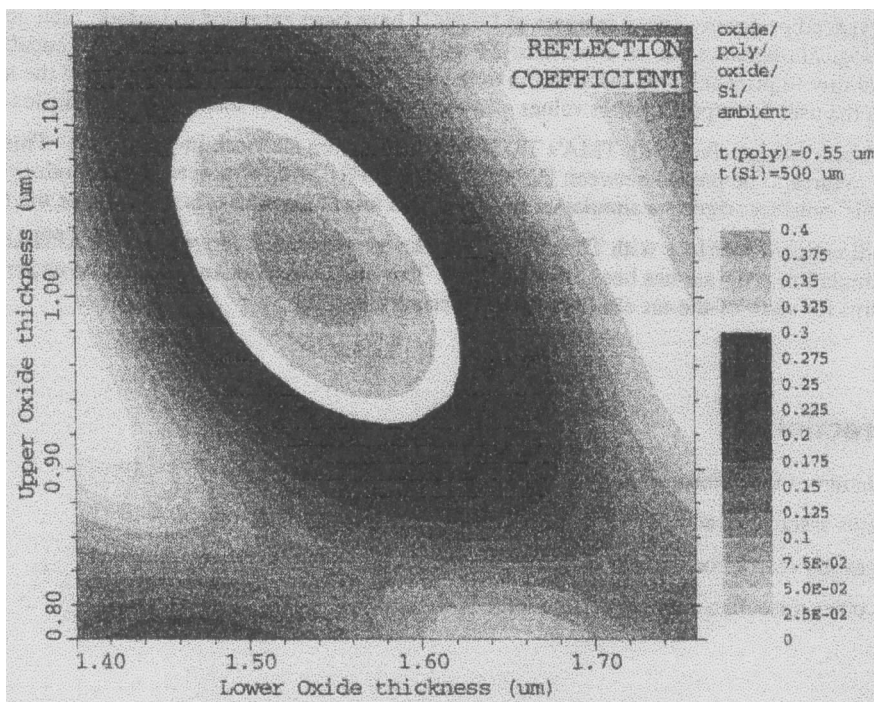


图 5.2 显示 $\text{SiO}_2/\text{Poly-Si}/\text{SiO}_2/\text{Si}$ 膜堆积的反射系数随红外激光照度变化的 DEPICT-3 模拟(源于[5.10])

在 DEPICT-3 的介绍中曾提及 DEPICT-3 增强了包含非光敏材料层结构的和包含单一材料界面结构的光学系数的快速分析能力,图 5.2 显示的结果证实了这种能力。

以下给出的彩图 6 和彩图 7 显示用 DEPICT-4 执行的为大面积光刻胶表面

成像的两幅模拟结果图。模拟用 SPARC 20 型计算机,模拟的工艺条件/参数为 $0.4\ \mu\text{m}$ 工艺技术, $300\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m}$ 掩模板, I-line 步进器, 输入文件用一个大的 GDS II 文件(一种最广泛使用的表示布局的数据格式文件)。两幅图显示的都是整个掩模的一小部分。

彩图 6 显示的结果可用作大面积光刻胶表面图像质量的快速定性度量。

彩图 7 显示的结果可用作精确估价大面积光刻胶表面图像的可印刷性。

5.1.2.3 ELITE

ELITE 是一种由 Silvaco 公司开发的商用的二维淀积和刻蚀模拟器^[5.13], 它模拟近代 IC 工艺技术中的物理刻蚀、淀积以及回熔(reflow)等工艺步骤, 预测复杂工艺加工(例如: 多层金属化, 沟渠刻蚀, APCVD, LPCVD 及离子磨削)生成和改变的形貌。在 ATHENA 框架内, ELITE 提供和 SSUPREM-4 以及 OPTOLISH^[5.14]无缝的双向整合, 以及包含 CMP(化学机械抛光), MC(蒙特卡洛)淀积和 MC 刻蚀工艺等子模块。

ELITE 的综合能力使能够精确模拟例如: 平面化, 阶跃覆盖, 空隙, 微结构裂缝以及多层互连结构等。ELITE 采用串算法(string algorithm), 采用时间或费用上是经济的, 技术上是先进的形貌设计规则, 用以解决过程分析中遇到的问题。

彩图 8 和彩图 9 给出两幅 ELITE 模拟结果的例图。

彩图 8 说明 ELITE 模拟再熔化后接触通道中金属阶跃覆盖的能力, 通过这种形貌模拟结果可分析多层淀积和形成图案的工艺步骤进行期间的失效机构。模拟得出的最后结构可作为运行器件模拟软件时的结构输入信息。

彩图 9 给出的模拟结果基于 ELITE 中包含的一个蒙特卡洛淀积工艺模块。图 5.8 显示的表面粗糙结构说明由于金属淀积的角度相关性可能形成空隙(void)。

5.1.2.4 OPTOLITH

OPTOLITH 是由 Silvaco 公司开发的商用的非平面二维光刻模拟器^[5.14]。它模拟亚微米光刻工艺的所有方面, 包括: 光刻胶表面成像、曝光、后曝光焙烘以及光刻胶显影等, 能为确定光刻胶中轮廓图的实验研究和确定最佳化光刻工艺步骤提供快速和精确的预估。OPTOLITH 能同所有符合 GDS-II 格式的商用 IC 布局工具相连接。OPTOLITH 能通过与掺杂分布和氧化模拟器以及淀积和刻蚀模拟器的无缝整合, 使之具备模拟在片扩散、离子注入、氧化、光刻、刻蚀、淀积等完整的工艺模拟能力, 用于工艺开发和工艺最佳化。

彩图 10 给出一幅用 OPTOLITH 模拟得出的非平面结构上显影后的光刻胶纵剖面轮廓图。

从彩图 10 可以看到光散射和干涉等非平面效应对非平面结构上光刻胶的线宽和形貌的影响。

5.1.2.5 其他形貌模拟器

除以上介绍的 SAMPLE ,DEPICT 系列 ,ELITE 和 OPTOLITH 外 ,较知名的形貌模拟器还有 PROLITH ,PROFILE ,SIMPL 系列(包括 SIMPL-1 ,SIMPL-2 和 SIMPL-DIX)以及 3D-MULSS 等.表 5.1 列出 PROLITH 等上列 6 种其他较知名形貌模拟器的基本信息。

表 5.1 其他形貌模拟器的基本信息

名 称	原创研制或商用开发机构	释放年份	主要功能或特点	参考资料
PROLITH	美国 Dept of Defense	1986	二维光刻模拟 ,能模拟投影、接触和接近等多种光刻	[5.15] , [2.50]
PROFILE	美国 Stanford U	1988	干法刻蚀模拟 ,能计算包括各向同性 ,离子流 ,能量流 ,淀积流和阻化层等不同刻蚀机构的刻蚀速率	[5.16] , [5.17] , [2.50]
SIMPL-1	美国 UC Berkeley	1983	通过结合工艺和掩模信息 ,从已知布局模拟得出器件结构横截面形貌	[5.18] , [2.50]
SIMPL-2	美国 UC Berkeley	1985	主要功能与 SIMPL-1 相同 ,但对鸟嘴 ,横向扩散 ,底切部刻蚀 ,边墙覆盖淀积等二维效应的模拟更精确的模拟器(例如 SAMPLE)交换形貌的数据	[5.18] , [2.50]
SIMPL-DIX	美国 UC Berkeley	1988	交互式计算机辅助设计工具 ,能通过 SIMPL-2 提供设计界面为运行其他工艺和器件模拟器. SIMPL-DIX 中 DIX 的由来取自 Design Interface in Xwindow 的首字母缩写	[5.19] , [2.50]
3D-MULSS	日本 Mitsubishi Electric Corporation	1990	三维多层形状模拟器 ,包括三维光刻 ,刻蚀和 Al 溅射淀积等淀积工艺	[5.20]

5.1.3 结合掺杂氧化和形貌模拟的完整工艺模拟器

为了将掺杂氧化模拟器和形貌模拟器有机结合成一个完整工艺模拟器,德国 J. Lorenz 等开发了一个完整工艺模拟器 COMPOSITE^[5.21]。为了使该模拟程序不过分庞大,COMPOSITE 中简化了掺杂氧化和形貌模型,这样 COMPOSITE 虽实现了两类模拟的有机结合,但牺牲了必要的精度,导致 COMPOSITE 未被工业界实用。

目前实现完整工艺模拟的方法已在前面提及,采用:例如 DEPICT 系列中任一版本模拟器同 TSUPREM-4 通过双向界面进行双向传输实现完整的工艺模拟,或采用例如光刻模拟器 OPTOLITH 通过与 SSUPREM-4 以及刻蚀和淀积模拟器 ELITE 的无缝整合实现完整的工艺模拟。

5.1.4 集成电路制造工艺的统计模拟器

随着器件尺寸不断减小,制造工艺的改变对电路性能变化的灵敏性不断增加,这就要求集成电路设计者必须具备能估算制造工艺固有的统计涨落对集成电路工艺、器件以及电路成品率影响的能力。为满足这一需求,美国 Carnegie-Mellon University(CMU)1982 年原创研制成功了国际上第一个集成电路制造工艺的统计模拟器 FABRICS^[5.22]以及 1984 年开始释放应用经改进性能和扩大功能的 FABRICS II^[5.23]。当时 FABRICS II 已由 CMU 的集成电路设计中心及在线制造控制中应用。以下再对 FABRICS II 作一简要介绍。

5.1.4.1 FABRICS II 的一般介绍

集成电路制造工艺的统计模拟器 FABRICS II 是一种考虑了制造工艺固有统计涨落的 IC 制造工艺模拟器,它能模拟包括 NMOS,CMOS 和双极制造工艺,是双极工艺统计模拟器 FABRICS 性能改进和功能扩大的版本。FABRICS II 能用作工艺和电路设计的证实及最佳化,IC 制造前成品率的预估和最大化以及失效分析。

FABRICS II 由 FAB1 和 FAB2 两部分组成,FAB1 是制造工艺模拟器,FAB2 是半导体器件模拟器,经 FAB1 和 FAB2 的模拟产生由不同制造工艺制得的典型半导体器件的电参数(例如阈值电压、本征跨导……等)。FABRICS II 同传统的,以使用数值模型为主的工艺模拟器(例如 SUPREM 系列模拟器)和器件模拟器(例如 SEDAN 系列或 MINIMOS 系列模拟器)不同,使用以解析模型为主的工艺/器件混合的解析方法去应对模拟工艺的统计涨落时增加的复杂性,以达到模拟的

精度和效率间有一个合理的折中。

在集成电路制造工艺的统计模拟器中求解有关解析模型时,需给出必要的工艺条件参数(例如扩散的时间和温度,离子注入的剂量和能量……)和工艺控制参数(包括制造工艺步的工序安排……)及上一工艺步的输出结果外,还需给出工艺扰动参数。工艺扰动参数用物理参数(例如杂质原子的扩散率,光刻掩模板之间的对准偏差……)建模,它是一个随机变量,具有由特指工艺序列决定的概率分布。使用了精度和效率折中的解析模型,计入了工艺扰动的集成电路制造工艺的统计模拟器 FABRICS II 通过统计模拟产生电路设计需要的具有统计涨落的电阻、电容、跨导等元件参数,以及工艺诊断需要的具有统计涨落的结深、薄层电阻、氧化层厚度等参数。具有统计涨落的上列参数,在现实上也是一组随机变量,统计模拟器产生能用来确定描写这些随机变量的联合概率密度函数 JPDF(Joint Probability Density Function)。因为模拟得出的随机变量无法同实测的相应参数值比较,而模拟得出的 JPDF 可以同实测的相应的 JPDF 作比较,所以统计模拟结果的精度可用模拟结果的 JPDF 同在实际工艺中测得的相应的 JPDF 的匹配程度来表征。为了获得所期望的精度可通过改变工艺扰动集合的 JPDF 来调节,这种调节被称作模拟器的调谐。

5.1.4.2 FABRICS II 中的随机数产生器

FABRICS II 用适当定义的随机数产生器 RNG's(Random Number Generators)来模拟工艺扰动。进一步,如果不只考虑芯片,而是考虑批、圆片、芯片、器件等不同层次的工艺扰动引起的器件参数的统计涨落,则使用所谓工艺扰动的多层结构,即扰动分层次地由多个随机数产生器(RNG's)产生。图 5.3 给出了模拟局部(芯片内)和总体(圆片内)工艺情况涨落的两个层次 RNG's 的示意。

图 5.3 显示 3 个 RNG's 组成的两个层次结构,该结构产生一个圆片的扰动数据。

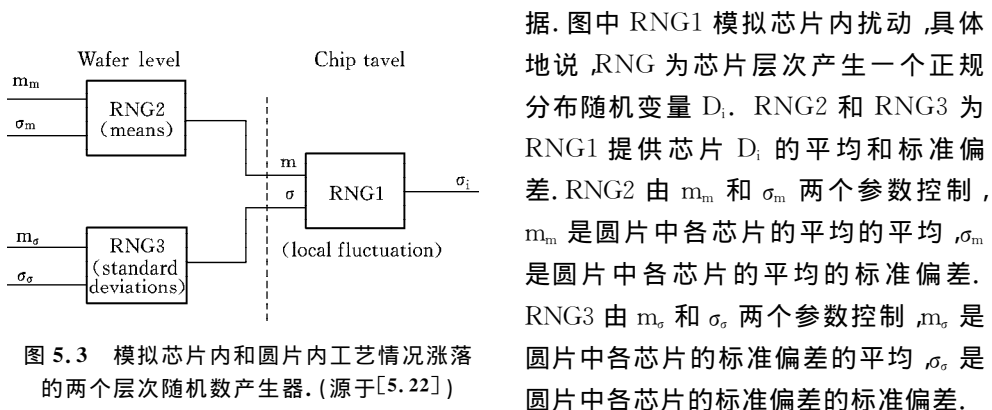


图 5.3 模拟芯片内和圆片内工艺情况涨落的两个层次随机数产生器。(源于[5.22])

图中 RNG1 模拟芯片内扰动,具体地说,RNG 为芯片层次产生一个正规分布随机变量 D_i 。RNG2 和 RNG3 为 RNG1 提供芯片 D_i 的平均和标准偏差。RNG2 由 m_m 和 σ_m 两个参数控制, m_m 是圆片中各芯片的的平均的平均, σ_m 是圆片中各芯片的的平均的标准偏差。RNG3 由 m_σ 和 σ_σ 两个参数控制, m_σ 是圆片中各芯片的标准偏差的平均, σ_σ 是圆片中各芯片的标准偏差的标准偏差。

FABRICS II 用 C 语言书写,模拟器的结构是模块式的,这样加入新模型或修改已有模型无需变化已经存在的其他部分,方便了继续开发者或用户。

5.1.4.3 FABRICS II 中的工艺和器件模拟器

FABRICS II 如前面已提及主要由工艺模拟器 FAB1 和器件模拟器 FAB2 组成。FAB1 和 FAB2 的结构图分别由图 5.4 和图 5.5 所示。

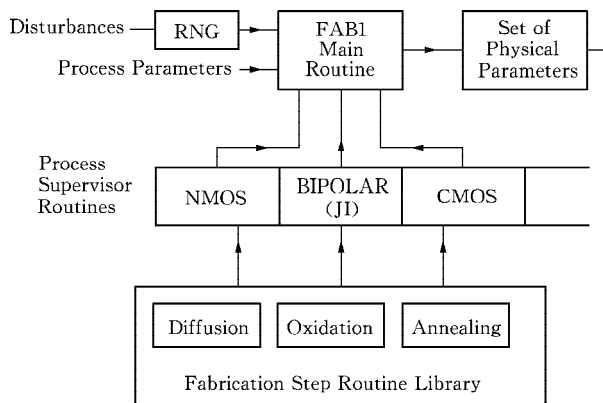


图 5.4 FAB1 的结构图(源于[5.23])

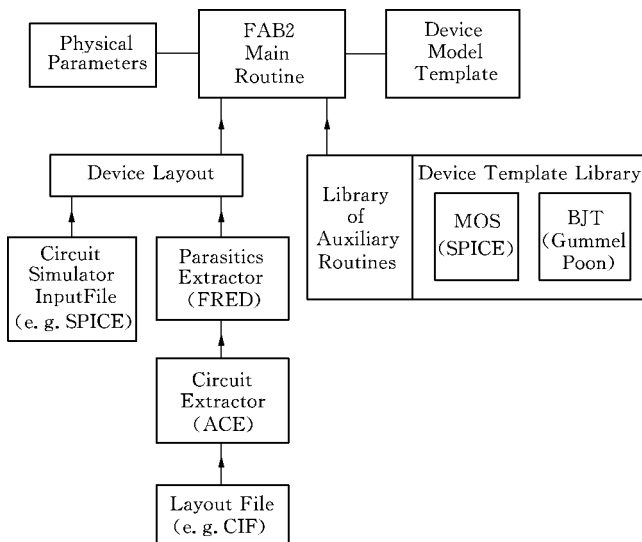


图 5.5 FAB2 的结构图(源于[5.23])

由图 5.4 可见, FAB1 主程序的输入包含工艺参数、工艺扰动和运行控制参数. 控制参数的给出由制造步骤程序库和工艺管理程序支配. 程序库包含制造步骤运行的模型库以及模拟杂质分布和从模拟结构提取在线参数的功能库, 其中模型库中包含的模型有硅中扩散杂质、离子注入、热氧化、光刻、表面处理工艺和接触淀积等; 光刻模型用了统计模型, 考虑了由掩模板对准偏差以及光和刻蚀操作中因有的涨落引起线宽的不精确性; 表面处理工艺和接触淀积也用统计模型, 由随机变量表示表面势、表面复合速度、表面态密度和比接触电阻等参数因工艺涨落引起的涨落. 工艺管理程序相似于制造工艺流程可由客户确定, 这样对专指制造工艺的客户版本模拟器也不难创建. FAB1 主程序的输出是一组物理参数, 用作器件模拟器 FAB2 的输入.

由图 5.5 可见, FAB2 主程序的输入来自 FAB1 输出的物理参数, 器件的布局信息以及器件模型库(或称器件样板库). 器件的布局信息包含两部分器件尺寸和互连. 器件尺寸信息和 FAB1 输出的物理参数相结合用于 FAB2 计算电路模拟所需的器件模型参数; 互连信息, FAB2 用以产生相当的寄生电阻和电容. 器件模型库中包含 MOS 晶体管、双极型晶体管 npn 和 pnp(横向和衬底)、MOS 电容器、扩散电阻器、互连(寄生电阻和电容)等器件模型. FAB2 主程序输出的器件模型参数包含: MOS 晶体管的 Shichman-Hodges 模型参数及/或双极型晶体管的 Gummel-Poon 模型参数. 另, 图 5.5 中 CIF 是 Caltech Intermediate Form 的缩写, 是芯片布局文件的一种书写格式, ACE 是 A Circuit Extractor 的缩写, 是 CMU 开发的从 CIF 文件中提取器件尺寸信息的一种参数提取软件, FRED 是一种互连寄生元件参数提取器.

5.1.4.4 集成电路制造工艺统计模拟技术的应用和发展

CMU 的研究人员在上世纪 80 年代已给出了多个 FABRICS II 的应用实例, 例如:

- (i) VLSI 微单元性能的最佳化设计^{[5.23][5.24]};
- (ii) 基于考虑最坏情况的 IC 设计方法的开发^{[5.23][5.25]};
- (iii) 用基于统计图像识别方法的 IC 失效分析系统的器件参数故障模拟^{[5.23][5.26]};
- (iv) 用 NMOS 工艺的 64 bit × 64 bit DRAM 的工艺最佳化^[5.23]以及改变工艺参数对 5 级环形振荡器性能统计矩(statistical moments)的影响^[5.23]等.

在 CMU 积极开发 FABRICS II 应用以来, 一方面如前所述, 由于 FABRICS II 使用精简的解析及/或经验模型来替代传统的工艺, 器件模拟器中使用的基于精确物

理模型的数值计算模型后,在实现集成电路工艺、器件、电路性能的统计模拟以及集成电路工艺、器件、电路成品率的统计模拟方面有了一个可接受的时间耗费;但另一方面,FABRICS II在工艺、器件模拟精度方面远不如传统的IC TCAD系统中的工艺模拟器(例如TSUPREM-4)和器件模拟器(例如MEDICI)能达到的,因而在对精度有较高要求的例如IC新工艺的统计设计或纳米IC制造的统计设计等方面,也即在例如IC新工艺或纳米IC制造的“为制造而设计”(Design For Manufacturing,英文简称DFM)方面,完全不能满足实际的需求.所以,上世纪90年代以来基于使用精度较高的TCAD系统,但不断改进统计方法的DFM研究和基于统计方法改进的用于DFM的统计TCAD系统的开发正同IC特征尺寸已减小到 $<100\text{ nm}$ 的发展现状同步地进展着^{[5.27]—[5.33]}.

5.1.5 集成电路中有源器件及无源元件模拟器

集成电路中有源器件及无源元件模拟器,一般简称为器件模拟器.前面第三、第四章中我们曾较详细地介绍过SEDAN-1, SEDAN-3, MINIMOS-2, MEDICI等几种器件模拟器的物理模型以及它的使用和应用例举,其中美国Synopsys公司开发的商用MEDICI(Version X-2005.10)是当今功能最强的二维器件模拟器之一.它模拟器件中二维电势和载流子浓度分布以及一种或两种载流子对器件特性的影响;它不仅能模拟集成电路中pn结二极管、双极型晶体管等pn结型器件, MOS结构、MOS型晶体管等MOS型器件、MS型二极管、MS型晶体管等MS型器件,各种结构的电容和电阻还能模拟Si/SiGe、AlGaAs/GaAs等异质结晶体管以及多晶或无定型Si TFT晶体管等元器件.

此外,随着集成电路特征尺寸的不断缩小,特别当集成电路中有源器件从微米进展到亚微米小尺寸器件后,很多方面器件的二维模拟已不能满足对器件特性模拟的需求,需要进行器件内部电势、电场、载流子、离子化率及电流密度等参数的三维空间分布模拟,才能给出需要的、有参考价值的器件性能的模拟结果.例如在小尺寸MOSFET中由于短沟道和窄沟道效应同时发生,而这些效应间又有相关性,所以分析小尺寸效应对MOSFET阈值电压的影响,就需要快速和方便的MOSFET性能的三维模拟^{[5.34]—[5.35]}.又如:在小尺寸双极型晶体管中为了得到最大发射效率和电流增益就要研究基于电流拥挤效应和夹断效应的基区电流非均匀性的三维空间分布,也即需要双极型晶体管性能的三维模拟.^[5.36]再如:研究漏电路径同器件失效机构的关联,研究例如单事件瞬态辐射对器件性能的扰乱,CMOS结构闭锁灵敏度分析以及提取交叉互连结构的寄生电容等也都需要器件的三维模拟

器[5.35],[5.36].

迄今,据不完全统计,较知名的原创研制和商用开发的三维器件模拟器见表 5.2 所列.

表 5.2 若干较知名的三维器件模拟器

名 称	原创研制或 商用开发机构	开始使用 或释放年月	主要功能或特点	参考资料
FIELDAY	美国 IBM 公司	1980,2/ 1981,7	最早的半导体器件三维有 限源模拟器	[5.37]/ [5.38]
WATMOS	加拿大 Waterloo 大学	1981,12/ 1982,4	研究特征尺寸为 $1\mu\text{m}$, $2\mu\text{m}$ MOSFET 三维效应的三维 器件模拟器	[5.39]/ [5.40]
CADDETH	日本 Hitachi 公司	1984,5/ 1985,10	用高收敛矩阵解算法的高 速三维器件模拟器	[5.41]/ [5.42]
SIERRA	美国 TI 公司	1989,5	用作研究集成电路器件和 可靠性问题的三维通用半 导体器件模拟器	[5.43]
STRIDE	美国 Stanford 大学	1990,6/ 1991,9	能解超过 250 000 网格节点 的,用多处理器平行计算 的,考虑了可视化的三维器 件模拟器	[5.44]/ [5.45]
MINIMOS 5/ MINIMOS 6.1	奥地利 Viena 大学	1990,8/ 1992	MINIMOS 5 是 MINIMOS 系列第一个三维模拟版本, 此后又发展了新版本 MIN- IMOS 6.1,该新版本集成二 维和三维器件模拟,可模拟 硅体和 SOI MOSFET's 及 砷化镓 MESFET's	[5.46]/ [5.47]
SITAR	德国 Munich 大学 和 Siemens 公司	1990,11	特别适用于分析非平面沟渠 结构器件的三维模拟	[5.48]
SMART II	日本 Matsushita 公司	1991,5	为亚微米 MOSFET 的三维 工艺/器件集成模拟器	[5.49]
PMC-3D	美国 Hughes 公司	1994,6	用平行算法的三维 Monte Carlo 半导体器件模拟器	[5.50]
DAVINCI Version 2.1	美国 TMA 公司	1990,11	最早出现的商用三维器件 模拟器	[5.35]

(续表)

名 称	原创研制或 商用开发机构	开始使用 或释放年月	主要功能或特点	参考资料
3D ATLAS	美国 Silvaco 公司	1996 , 10	包含 DEVICE 3D , BLA2E 3D , GIGA 3D , TFT 3D , MIXEDMODE 3D ,QUANTUM 3D , LUMINOUS 3D 等三维器件模拟产品的商用三维器件模拟软件包	[5. 51]
DAVINCI Version X-2005 , 6	美国 Synopsys 公司	2005 , 6	商用三维器件模拟器	[5. 52]
Taurus Device Version X-2005 , 6	美国 Synopsys 公司	2005 , 6	商用多维(一、二、三维)器件模拟器	[5. 36]

作为三维模拟结果的可视化例子 ,下面介绍一个通过三维器件模拟得出的典型的 NPN 双极型晶体管中电流密度和空穴电流密度的三维轮廓图(见彩图 11)[5. 35]。

彩图 11 中(a)图显示正常的集电极电流向下流动经过重掺杂埋层(橙色)以及在发射区接触(深蓝色)的拐角处电流的拥挤。(b)图中三维空穴电流密度的浅和深蓝色轮廓图显示在近发射区侧面拐角处电流的拥挤。通过彩图 11 允许工程师为了 NPN 管最大电流增益和效率去进行最佳化器件几何布局设计和工艺制造。

如何减小三维模拟所需的长时间和大容量存贮以及模拟结果的精确可视化是三维器件模拟需持续努力解决的问题。

5.1.6 集成电路中的互连寄生模拟器

近代深亚微米 VLSI/ULSI 电路中 ,互连线线宽窄至<0. 5 μm ,用作总线 ,时钟和功率分配等长互连线长度长至几厘米 ,器件速率和时钟频率开始增至 GHz 范围 ,互连寄生对集成电路性能的影响变得日益重要 ,甚至起支配作用。为设计、分析、最佳化深亚微米集成电路性能 ,集成电路器件模拟的重要组成部分——集成电路中互连寄生模拟 ,已必不可少 ,以下首先简要介绍集成电路中互连寄生模拟的基本内容和建模。

5.1.6.1 模拟的基本内容和建模

集成电路中互连寄生模拟的基本内容和建模概述如下[5. 53]：

集成电路片内互连系统中存在电阻性电压降,信号传输的时间延迟,线间和线衬底间的串扰(通过电容的或电感的耦合或衬底引起),界面等不连续性引起的反射,高频趋肤效应,涡电流(存在于例如螺旋形电感中)以及电磁辐射等引起的互连寄生效应可以通过对互连系统的电场、磁场的计算进行表征,也即可通过在时域或频域内对电磁场基本方程组——Maxwell 方程组或经某些简化的 Maxwell 方程组进行求解。

互连参数建模的传统方法是提取总的或称全域的电参数(电阻、电容、电感)以及建立一个能近似描述确定范围内互连特性的集总模型。这个模型可用类似 SPICE 那样的电路模拟器进行评估。但在较高工作频率时,要用一维(传输线)或三维分布模型去获得更精确的结果。

成功模拟的关键是精确的参数提取,已有大量文献报道了互连线电阻,衬底电阻,电容,电感的建模和参数提取(参见文献[5, 53]中所列参考文献[1—31])为某些应用,基于提取参数的集总模型的建模方法并不适用于对互连系统及电路性能的模拟,需用基于互连线分布电阻、电容、电感和所用材料的电导率的传输线模型。为高频情况,趋肤效应发生,有关参数同频率相关。传输线建模可扩展到描述多路线间或线同有损耗衬底间信号的串扰。

为得出更精确的结果,必须解三维 Maxwell 方程组,但可根据需模拟问题的不同作某些简化,例如:磁场效应可忽略时,也即电阻的作用大大超过电感时,可简化采用准静电模拟;电容性位移电流可忽略时,也即电感的作用大大超过电容时,可简化采用准静磁模拟;若结合上两种简化,可采用准静态模拟,此时 Maxwell 方程组简化成 Poisson 方程,可用有限源或有限差分离散方法解。但当信号的波长达到互连的几何特征尺寸,准静态模拟变得不太精确,需要解不作简化的三维 Maxwell 方程组,即所谓全波模拟。此时,方程通常在频域解,虽时域解也可能,但会出现数值不稳定和边界条件建模困难,同时 CPU 的耗费也较大,只能模拟整个芯片布局中的一小部分。此外,由于三维 Maxwell 方程组是一组三维偏微分方程,它的离散化导致一个大的代数系统,通常不能有效地结合进电路模拟。为解决这一困难,有效地将互连模拟结果输入到电路模拟器中,需要一个较低复杂性,但保持必要的精确性的宏模型。

互连线横截面的减小使互连线具有较高的电流密度,导致增加功率耗散密度以及相应地提高温度,特别当由金属互连线和介质组成的互连系统中采用了低介电常数(low-k)介质,一般也是低热导率介质时。因而,为估算互连线流过最大电流极限的热模拟变得很需要。为了计算温度分布需数值解热导方程。

互连线长时间暴露在高电流密度下(例如电源线或信号总线)会发生电迁徙。

电迁徙是互连系统也是电路可靠性的关键因素. 电迁徙除同电流密度密切相关外, 还同温度、机械应力、线长和横截面等其他因素相关. 目前所用的基于 Black 方程的简单模型^[5.54]以及计算耗费很大的原子模型^[5.53], 前者只适用于同实验验证所用的结构相似的互连几何结构, 后者同难以知道的因素例如晶粒边界的位置有关, 不能用于实际芯片布局验证的目的, 所以能用于模拟的实用且精确的电迁徙模型还在努力解决中.

布局后验证, 互连寄生提取是最重要的. 大多数情况, 简单的几何模型是足够的, 仅“关键网”需高度精确的三维模拟. 然而, 随着提高时钟频率和增加总的互连长度, 此时关键网数也增加, 同时高精度模型的需要也变得更明显. 为提高设计过程的效率和节省设计的费用, 在设计阶段, 互连寄生的考虑应尽可能早, 例如在元件布局和布线阶段就考虑.

对任何实用模拟软件的基本要求是稳定和精确, 对互连模拟也不例外. 软件的精确性必须知道并需对运行时间和精确性折中地进行控制. 互连模拟器应能自动地认定“关键网”, 并选择适当模型. 为减少运行所需的 CPU 时间, 模拟范围可按精度需要划分成应用不同复杂性模型的若干区域. 为使这一分割过程自动化, 需要开发一个通用的算法, 同时, 由于在高频情况, 传统上可以分别分析的结构之间会产生复杂的互作用, 因而需为界面找到合适的模型.

5.1.6.2 互连寄生模拟器

本小节首先简要介绍 3 种较知名的互连寄生模拟器, 它们是: 奥地利 Vienna 工业大学开发的 SAP^[5.55], 美国 Synopsys 公司开发的 RAPHAEL Version X-2005.06^[5.56]以及美国 Silvaco 公司开发的 PARASITIC EXTRACTION^[5.57].

1. SAP

SAP 是 Smart Analysis Program 的简称, 是奥地利 Vienna 工业大学微电子学研究所 1998 年 6 月在美国 San Francisco 举行的 International Interconnect Technology Conference 上宣布原创研制成功的一种为二维、三维互连模拟的模拟程序包. 它基于有限元方法, 可用于高精度的电容提取, 电阻计算, 瞬态电性能和电—热耦合性能模拟.

SAP 包含两个主要程序(SCAP: 高精度的电容和电阻提取程序以及 STAP: 瞬态电性能和电—热耦合性能分析程序). 用有限元方法解 Laplace 和 Poisson 方程. 为求解与时间相关的问题, 用 Backward-Euler 和 Crank-Nicholson 方法. 三角形和四面体网格单元用于二维和三维模拟, 用线性和二次形状函数执行计算. 为有效利用计算机存储器, 稀疏地占有的刚度矩阵用一个压缩格式(MCSR)存储. 解大

的线性系统用一个预处理共轭梯度解算器,为得到高度精确的结果,执行一个全局网格精炼算法。

SAP 中含有两个预处理器(LAYGRID 以及 CUTGRID),作为模拟几何和接触(电和热两者)的说明,也负责模拟网格的产生。输入布局文件的工具用 GDSII 或 CIF 格式。算得的电势、电流密度及温度分布能用一个可视化程序来检阅。

SAP 已经过大量应用的检验,并可免费使用(www.iue.tuwien.ac.at)。

2. RAPHAEL

RAPHAEL 是一种最早商用开发的也是当今最先进的商用互连模拟器之一。RAPHEAL 由美国 TMA 公司和 HP 公司联合开发成功,并在 1991 第 28 届 ACM/IEEE Design Automation Conference 上宣告释放应用^[5,58]。此后,经历了 10 余年发展的 RAPHAEL 最新版本——RAPHAEL Version X-2005.06 是美国 Synopsys 公司修改、补充、包装后出售的。

Synopsys 公司的 RAPHAEL 最新版本是为互连分析和建模的二维和三维场解算器及界面,它模拟当今复杂的在片互连的电和热效应。通过 RAPHAEL 能容易地使用图形用户界面(GUI),输入工艺技术数据,自动产生关键互连结构及描述电容特性。当今深亚微米硅集成电路的性能由在片互连结构的寄生电容、电阻和电感起支配作用,因而关键的设计包括:定时、功率、噪声和可靠性设计需精确和耐用的互连模型。通过使用 RAPHAEL 的工业标准场解算器及界面能精确地模拟互连寄生电阻、电容及电感,以满足这些集成电路发展的关键需要。

RAPHAEL 包含为不同模拟域设计的 5 个互连解算器或分析器,它们是: RC2 和 RC2-BEM(最佳的二维电参数分析器),RC3 和 RC3-BEM(三维热和电问题的解算器),RI3(条线和平面形成的三维结构中的电感计算的分析器)等。RC2 解算器可用于二维问题的全部范围。RC2 用有限差分法解 Laplace 和 Poisson 方程,同时自动网格化和再网格化。RC2-BEM 是 RC2 的一个替换物,它基于边界元法解有关方程,它可用的范围比 RC2 窄,但解算速率较快。RC3 解算三维电阻、电容、电流密度分布以及热和电势分布。与 RC2 一样,为方程离散化 RC3 用有限差分法,同时自动网格化和再网格化。RC3-BEM 是 RC3 的一个替换物,它基于边界元法。与二维解算器不同,RC3-BEM 的解算速率超过 RC3 很有限,对复杂几何结构甚至反而比 RC3 差。RI3 可用于三维电感和电阻模拟,包含这些参数由于趋肤效应而随频率的变化。所有其他电和热特性应当用 RC3 计算。RI3 能解算的几何结构比 RC3 有较多限制,RI3 用于正方形截面的互连线而 RC3 可用于多种形状截面的互连线。RAPHAEL 中 5 个互连解算器的详细描述以及 RC2 和 RC2-BEM 以

及 RC3 和 RC3-BEM 区别的详细描述可参阅[5.56]有关章节.

RAPHAEL 提供一个图形的用户界面(Graphical User Interface,简称 GUI), GUI 提供 4 种运行模式分别关联于.

(1) 寄生数据库(Parasitics Database)

寄生数据库在描述不同工艺的互连特性方面,对众多不同的硅芯片代工生产厂(foundries)特别有兴趣.运行这种模式用户首先需获得使用 RAPHAEL 解算器的许可,然后才可为互连寄生提取使用寄生数据库.

(2) 布线图参数提取(Layout Parameter Extraction,简称 LPE)工具界面使用 LPE 工具界面,用户能为各种 LPE 工具,例如:Cadence's Dracula, Diva, Vampire, Mentor Graphics' xCalibre 和 ICextract 等创建规则文件(rule files)

(3) 场解算器(Field Solvers)

RAPHAEL 中 5 种场解算器可通过 GUI 存取

(4) RAPHAEL 互连库(RAPHAEL Interconnect Library,简称 RIL)

RIL 包含一套参数确定的结构,易于 RAPHAEL 模拟.

RAPHAEL 模拟的一个关键步骤是输入需模拟的初始结构.如图 5.14 所示初始结构可通过 RIL, GDSII 或人工输入.其中 GDSII 表示通过 GDSII 流格式界面(GDSII Stream Format Interface)输入,这是 RAPHAEL 输入初始结构方法中最有特色的一种. GDSII 流格式界面由 Synopsys 公司开发的 TCAD 的 IC 布线图界面程序 Taurus Layout 执行. GDSII 文件存贮 IC 布线图信息, GDSII 流格式是目前 IC 设计和模拟时表示布线图最广泛使用的格式.

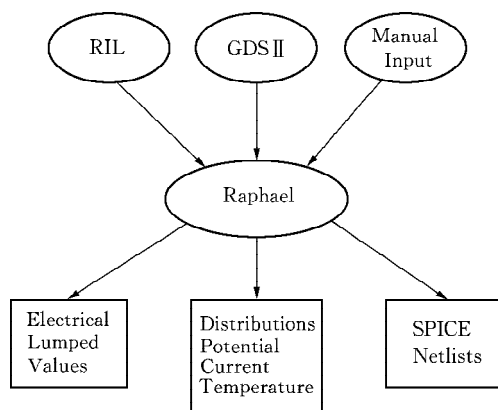


图 5.6 RAPHAEL 数据流简图(源于[5.56])

由图 5.6 也可看到 ,RAPHAEL 的输出结果可以是互连寄生电阻、电容、电感的集总值 ,互连系统中电势、电流、温度的分布以及为 IC 电路模拟用的包含互连寄生的 SPICE 网表(Netlists).

3. PARASITIC EXTRACTION

PARASITIC EXTRACTION 是 Silvaco 公司开发的互连寄生提取器. 它根据用户选取的精度和容量 ,用基于物理的二维和三维场解算器直接把掩模数据及有关工艺信息转换成 SPICE 网表信息 ,同时返回给出互连电容和电阻寄生的注解.

Silvaco 公司的 PARASITIC EXTRACTION 产品包括 5 种基于物理的寄生提取软件 CLEVER ,STELLAR ,QUEST ,EXACT 及 HIPEX.

(1) CLEVER

CLEVER 是一个基于物理的寄生提取软件 ,使用三维场解算器直接把一个单元的掩模数据及有关工艺信息转换成 SPICE 网表信息 ,同时返回给出精确的互连电容和电阻寄生的注解. 这种直接的一步处理 ,可完全去除来自传统的、基于规则的寄生提取所形成的不精确. (例如由曲线拟合寄生数据到经验公式所形成的不精确.)本寄生提取软件特别适用于客户单元寄生提取及最佳化. CLEVER 的输入/输出见图 5.7 所示.

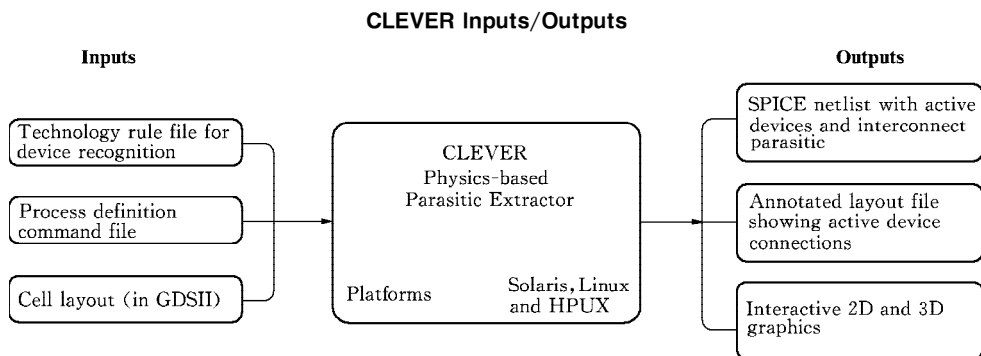


图 5.7 CLEVER 的输入/输出(源于[5.57])

(2) STELLAR

STELLAR 能够描述标准单元寄生的特性. 它填补了典型小单元解算器和全芯片提取器间电路规模的差距 ,用一个新的高效场解算器算法 ,描述多到 50 000 个有源元件的单元 ,使基于物理的传统场解算器在描述有较大电路规模的单元时 ,也较精确 ,而在以前较大容量单元都用基于规则的全芯片提取器处理的. STEL-

LAR 直接把掩模和工序数据转换成 SPICE 网格信息,同时返回给出互连电容和电阻寄生的注解. 本寄生提取软件特别适用于标准单元寄生电容提取. STELLAR 的输入/输出见图 5.8 所示.

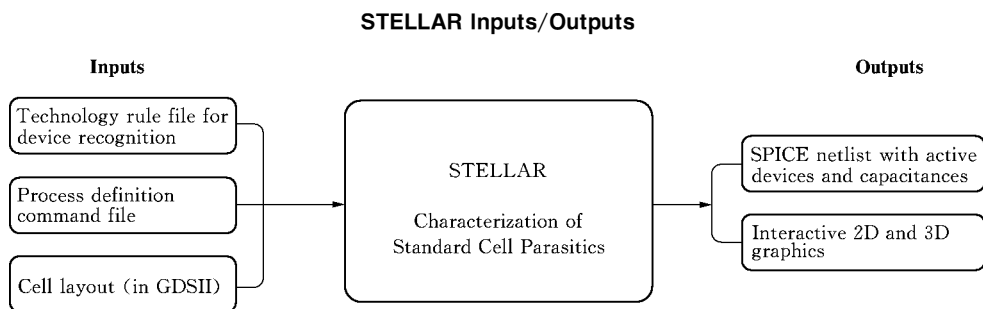


图 5.8 STELLAR 的输入/输出(源于[5.57])

(3) QUEST

QUEST 是高频寄生提取器,它计算三维与频率相关的电感、电阻、电容以及为 RF SPICE 分析的任何多通道网络的电容性损失. 它创建与频率相关的 W-元件传输线及螺旋形电感的标准 SPICE 模型,直接从 GDSII 布线图,使用一种互动的 GUI 界面. 在此工具内,工艺技术文件能被输入或产生. 本寄生提取软件特别适用于高频建模. QUEST 的输入/输出见图 5.9 所示.

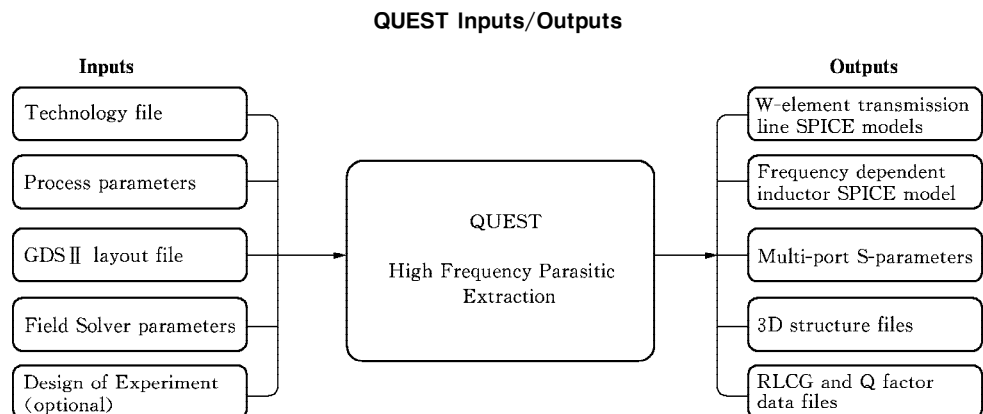


图 5.9 QUEST 的输入/输出(源于[5.57])

(4) EXACT

EXACT 能够描述互连寄生特性,为纳米半导体器件工艺提供精确的互连模型及为引导全芯片提取工具产生布线图参数提取(LPE)规则文件. EXACT 是一个有力的三维场解算器,它支持 Mentor 的 xCalibre 和 Calibre xRC, Candence 的 Diva 和 Dracula LPE 以及 Silvaco 的 HIPEX 全芯片寄生提取产品,它支持非平面半导体外形,为了精确地对不规则腐蚀轮廓,双重镶嵌(dual damascene)以及低介电常数(low-k)介质. EXACT 计算互连电容模型时能在不损害提取性能的情况下,给出最精确的 LPE 规则文件,因而特别适用于作为电容规则文件产生器. EXACT 的输入/输出见图 5.10 所示.

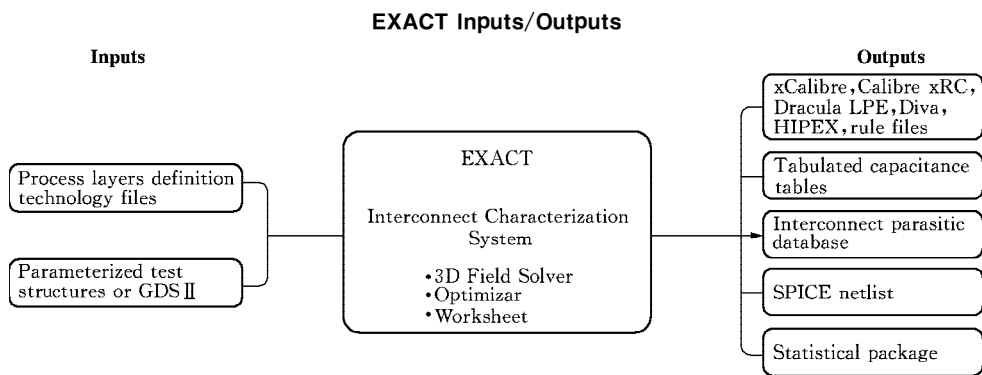


图 5.10 EXACT 的输入/输出(源于[5.57])

(5) HIPEX

HIPEX 是全芯片寄生提取器,它执行三维精确的和二维快速的使用纳米工艺技术的寄生电容和电阻提取,从分层布线图成为分层晶体管级网表. 它紧密地和专家布线图编辑器在一个平台上集成,为 DRC/LXS/LPE 的完整设计流和 RC 寄生提取. 图 5.11 给出 HIPEX 的设计流程图,图中 HIPEX-NET 的主要功能为器件提取,可提取 MOSFET, MESFET, BJT, JFET 二极管,电容,电阻以及由用户定义的参数化的器件. HIPEX-C 的主要功能为寄生电容提取. HIPEX-RC 主要功能为寄生电阻提取和寄生 RC 网络分配. HIPEX-CRC 为网络简约工具,为较大地减少布局后和布线后模拟的时间. HIPEX 的输入/输出见图 5.12 所示.

互连寄生模拟除可应用上列 3 种模拟器进行模拟外,研究者自行研制、开发的专用的、简法的有场解算功能的或仅有解 Poisson 方程功能的模拟软件在模拟互连寄生方面也起了不小作用,但模拟的功能一般都不如上列 3 种强,同外界例如电

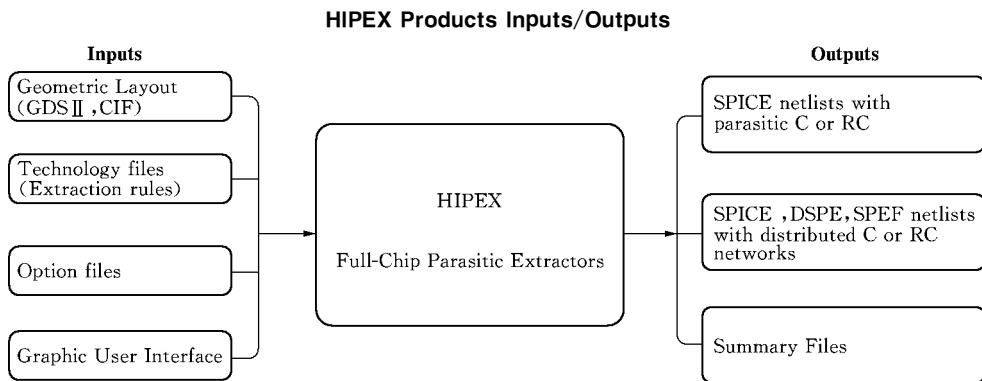


图 5.11 HIPEX 全芯片寄生提取器设计流图(源于[5.57])

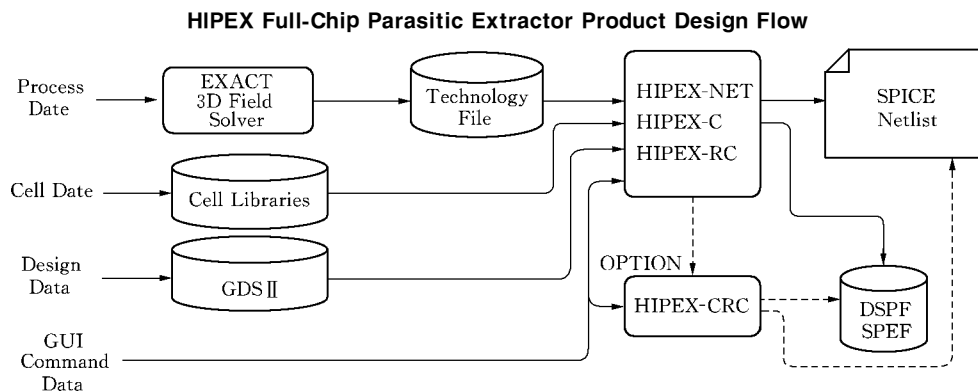


图 5.12 HIPEX 的输入/输出(源于[5.57])

路模拟器 SPICE 的连接界面也不如上列 3 种匹配。

此外,美国 Stanford 大学、德国 Chemnitz 技术大学和我国复旦大学等大学曾用基于有限元法的计算机辅助工程软件 ANSYS^[5.59]模拟互连寄生的电和热性能以及提取互连系统的电阻、电容和电感,也能获得具有相当精度的结果^{[5.60]—[5.64]},虽然 ANSYS 不是为互连寄生开发的专用软件。

§ 5.2 集成电路工艺和器件模拟近期和远期的需求

本节参照 ITRS 2005 年版本的 Modeling and Simulation 部分^[5.65]阐述集成电路工艺和器件模拟近期(2005—2013 年)及远期(2014—2020 年)面临的困难挑

战以及集成电路发展对工艺和器件模拟近期及远期的需求.

5.2.1 困难挑战

5.2.1.1 10 个论题

根据文献[5.65],集成电路工艺和器件的建模和模拟可包括以下 10 个论题:

论题一 前端工艺的建模和模拟——这里前端工艺包括从准备半导体圆片开始直至金属化互连系统完成的所有集成电路制造工艺,但不包括刻蚀工艺

论题二 刻蚀工艺的建模和模拟——包括刻蚀装备形成掩模的成像,光刻胶特性和加工等的建模和模拟

论题三 器件的建模和模拟——为描述有源器件工作特性的,基于物理的,分级的建模和模拟

论题四 互连和集成无源元件的建模和模拟——涉及后端结构(包括机械的,电磁的和热的特性)的建模和模拟

论题五 为设计、制造和成品率的 TCAD——开发附加的模型和软件使通过 TCAD 能模拟不可抗拒的工艺变化和掺杂剂涨落对集成电路性能,同时设计参数,可制造性以及在规格范围内集成电路的百分率(即成品率)的影响

论题六 包装的建模和模拟——芯片包装的机械的,电的和热的建模和模拟

论题七 设备的建模和模拟——从设备的几何和环境出发,为设备(除刻蚀设备)对圆片每点局域影响的建模和模拟

论题八 电路元件的建模——有源,无源和寄生电路元件以及基于新器件结构的新电路元件的紧缩型模型(compact model),主要为电路模拟所用

论题九 材料建模——用作模拟工具,预测材料物理性质以及在有些情况下其后的电性质

论题十 数字方法的研究和开发——为执行所有模型(包括执行网格产生器,为(偏)微分方程系统的(平行)解算器等模型)需要的全部算法的研究和开发

上列论题一至五已分别在本书前面各章节作了介绍和述评,限于篇幅论题六至十本书未作阐述,但其重要性是毋庸置疑的.例如:包装在提高集成电路产品最终成品率和降低集成电路产品成本方面有显著作用;设备和材料对集成电路所有制造工序以及有源器件和互连寄生的作用正变得愈益重要;电路元件的紧缩型模型及其参数提取的精度决定着电路模拟的精度;数字方法或称数字算法与所有模拟紧密相关,它的研究进展和成功开发被需要应用的模拟器分享.

以下介绍[5.65]所概括和分析的同以上 10 个论题相关的近期和远期的困难挑战。这里,近期是指[5.65]的编制者们所预估的,既是需要又是有可能实现的集成电路的有关工艺特征尺寸 ≥ 32 nm 的时间为(2005—2013 年);远期则是 < 32 nm 的时间为(2014—2020 年),此时间内有关工艺特征尺寸为 28~14 nm。近期和远期有关工艺特征尺寸的预估分别由表 5.3 和表 5.4 所示。

表 5.3 近期几种工艺特征尺寸的预估值(源自[5.65])

Year of Production	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
DRAM 1/2 Pitch(nm)(contacted)	80	70	65	57	50	45	40	36	32
MPU/ASIC Metal 1(M1) 1/2 Pitch(nm)(contacted)	90	78	68	59	52	45	40	36	32
MPU Physical Gate Length(nm)	32	28	25	22	20	18	16	14	13

表 5.4 远期几种工艺特征尺寸的预估值(源自[5.65])

Year of Production	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020
DRAM 1/2 Pitch(nm)(contacted)	28	25	22	20	18	16	14
MPU/ASIC Metal 1(M1) 1/2 Pitch(nm)(contacted)	28	25	22	20	18	16	14
MPU Physical Gate Length(nm)	11	10	9	8	7	6	6

5.2.1.2 近期困难挑战

工艺特征尺寸 ≥ 32 nm 相应时间跨度 9 年(2005—2013 年)已面临和将面临的困难挑战,[5.65]中概括、归纳为以下 6 个方面,称为近期困难挑战,现摘要整理如下:

1. 5~100 GHz 应用的高频器件和电路的建模和模拟

已面临的和将面临的困难挑战,包括:

- 互连寄生延迟及功耗的精确和有效的建模和模拟。

必须考虑和解决:全芯片互连延迟和功耗的有效提取;二维、三维效应对互连的影响,包括它们的统计变化;更精确和更有效的三维互连模型,特别为传输线和 S-参数的模型;分布 R-C-L 的分区提取;处理多层介质的有效模拟技术;互连和包装的协同设计等。

- 电路模拟用的紧缩型器件模型。

其中有源器件应包含 :HBTs , CMOS 和 LDMOSTs ;无源器件应包含 :变容二极管、电感器、高密度电容器、变压器和传输线 ;模型应能描述非准静态效应、衬底噪声、 $1/f$ 噪声和寄生耦合 ,并能尺度可变 ;此外 ,还包括 :RF 测量最少化的 RF 紧缩型模型参数的提取 ;可辅以模拟的基于标准 I-V 和 C-V 测量的参数提取.

- 全局性效应提取技术.

包括串扰 ,衬底返回路径 ,衬底耦合 ,EM 辐射和加热等全局性效应的精确和有效提取技术.

- 器件物理模型扩展到 III-V 族化合物半导体材料.

2. 纳米结构的前端工艺建模和模拟

这是估算器件制造工艺的关键的困难挑战 ,包括 :

- 超浅结形成的建模和模拟.

超浅几何 /结及低掺杂水平的描述工具 /方法学. 十分低能量注入的建模和模拟 ,包括掺杂剂扩散 ,注入损伤 ,非晶化 ,再结晶 ,热退火以及硅化物生成的精确建模和模拟.

- 掺杂处延层形成的建模和模拟.

包括掺杂外延层的形状、结构、缺陷和应力的建模和模拟.

- 增加沟道载流子迁移率相关工艺的建模和模拟.

应力和应变以及它们对扩散和激活的影响 ,特别对应变 Si , SiGe 以及 SOI 结构.

- 模型开发、校正和估算及工艺特性描述.

包括掺杂剂 ,缺陷和应力的计量学的进展以及它们的二维、三维实验测量.

- 前端加工对可靠性的影响.

3. 设备、材料、特征尺度加工的综合建模及对器件的影响

● 所用制造设备和设备不同维护(例如反应室不同涂层)引起工艺结果不均匀或漂移等效应的建模和模拟.

应特别注意模拟等离子体淀积和腐蚀 ,化学气相淀积 ,电镀以及化学机械抛光 (CMP)等加工中出现的由设备引起的工艺结果不均匀或漂移. 结果可用工艺 /器件参数 ,可制造性参数或成品率参数表征. 结果不均匀或漂移指在一个圆片内和不同圆片间.

- 材料物理性质和化学加工对器件影响的预估性模拟.

最大困难挑战包括 :反应路径精确模型的开发 ,需要参数可靠值的提取以及实际应用所需的仅考虑主要机构的简化化学模型的开发.

- 较好地连接设备和特征尺度的建模和模拟.

包括 :等离子体—表面相互作用 ,表面化学 ,高介电常数 (high-k)金属栅集成 ,损

伤预估的建模和模拟。

- CMP ,刻蚀 ,电化学抛光(ECP)的建模和模拟(整个圆片及芯片级 ,包含与图形相关的效应)。

- MOCVD , PECVD , ALD ,电镀和无电淀积的建模和模拟。

4. 包括下一代刻蚀的刻蚀建模和模拟

- 分辨率增强技术的光学模拟 ,包括为光接近校正(OPC)和相移掩模(PSM)改进的建模方法的创建。

- 预估的抗蚀剂模型(例如中等规模的模型) ,包括线边缘粗糙度 ,抗腐蚀性 ,粘附性及机械稳定性。

- 易于校正抗蚀剂模型动力学和输运参数的方法。

- 超高数值孔径(NA)矢量模型的实验证实和模拟 ,包括来自掩模和成像系统的极化效应。

- 非光学的浸泡刻蚀(immersion lithography)引入的各种效应(例如形貌及折射率分布的改变)的模型和实验证实。

- 缺陷影响/缺陷印晒模制(defect printing)的模拟。

- 设备和掩模寿命对刻蚀影响的建模。

- 下一代刻蚀的建模和评价。

5. 纳米尺度 CMOS 工艺技术和器件的最终极限的模拟

- 估计 CMOS 极限的方法、模型和算法。

- 材料模型特别需要 :包含 high-k 材料的迭层栅 ,与尺寸相关的铜电阻率和 low-k 介质的互连 ,非线性光刻胶等。

- 通用的、精确的 ,计算上最有效和最经济的基于量子及非平衡(弹道)的器件模拟。

- 非标准平面 CMOS 的模拟。

- 结构和掺杂分布统计涨落对器件影响的模型。

- 应力工程的材料模型和由应力感生的器件性能的物理模型。

6. 互连和包装的热——机械——电特性建模

- 互连和包装中电、热和机械作用相互影响的综合模拟。

- 互连和包装中可靠性问题的建模和模拟

包括 :电迁徙 ,应力空隙 ,薄膜的完整性和黏附性 ,表面粗糙度 ,压电效应 ,图像结构 ,包装裂缝以及侵蚀等。

- 有关问题的热模拟

包括 :集成电路耐热能力 ,芯片内的热传输和芯片散热 ,芯片内的功率管理以

及栅迭层中 high-k 材料等问题的热模拟.

- 工艺加工对 low-k , high-k ,导体等材料的性质以及三维互连形状的影响.
- 超精细图形导体中的电输运模型.

5.2.1.3 远期困难挑战

工艺特征尺寸 $< 32\text{ nm}$, (28~14 nm) ,相应时间跨度 7 年(2014—2020 年)期间 ,将面临的困难挑战预估 [5.65] 中概括和归纳为以下 4 方面 ,称为远期困难挑战 ,现摘要整理如下 :

1. 新材料的化学、热工学和电学性质的建模和模拟

● 将设备、工艺、器件和电路模拟扩展到新材料 ,特别为栅迭层、互连结构和光刻胶涉及的新材料.

● 开发和应用材料科学工具去描述器件和互连中新材料材料性质. 工艺选择及工作特性 ,包括 :栅迭层、介电常数的预估性建模、体极化电荷、表面态、相变、热工学(含应力对迁移率影响)、光学性质、可靠性、击穿以及含带结构的漏电流 ,与工艺/材料、结构相关的隧穿等 ,为减少实验的努力.

- 空气隙和三维互连的新集成模型(含为超薄材料的数据).

- 为半经验计算的数据库聚积数据.

2. 电路参数分散的预估

● 紧缩型器件建模扩展到包含 FD-SOI , Fin FET 或双栅 FET ,具有比目前更多更好的物理模型.

- 为传统的 CMOS、紧缩型器件建模包含量子限制和弹道效应.

- 在工艺冻结、量子输运等以前 ,统计的影响加入紧缩型建模.

- 依据工艺和器件模拟的电路级变化的有效提取.

- 为纳米尺度器件的电路性能的建模.

3. 纳米尺度工艺及器件的建模和模拟

● 为制造新纳米器件的工艺建模和模拟 ,包括纳米线 ,碳纳米管(含掺杂) ,量子点 ,分子电子学等制作工艺.

● 为分析纳米器件工作的器件建模和模拟 ,包括量子输运、共振隧穿自旋管、接触效应等工作模式.

4. 光电子学建模和模拟

- 光电子元件(传送器和接收器)的材料和工艺模型.

- 集成电/光系统的物理设计和性能模拟.

- 光互连材料、制造、特性分析的建模和模拟.

(续表)

年 份	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
刻蚀									
曝光	(a) 浸没刻蚀 (包括物理掩模参数,掩模双折射及掩模极化效应)的模拟		(b) EUV , EPL , ML2 的模拟 ,图案刻蚀选择 ,桥接的 OPC 模型以及预言性的特征尺度模拟					(d) NGL 模型以及材料和元件的建模 (浸没 EUV , EPL , ML2 刻蚀加工 ,压印)	
抗蚀剂模型	(a) 明显的化学增强抗蚀剂和包括 LER 及浸没 (液固界面) 的 EUR 抗蚀剂模型 ,以及易于校正参数的方法 ;与腐蚀耦合的模型				(b) 有限的聚合物尺寸效应		(b) 具有有限分子效应的中间尺度抗蚀剂模型		(d) 非传统的光致抗蚀剂模型 以及与腐蚀耦合的模型
全芯片刻蚀模拟	(a) 检测刻蚀不充分点的遍及整个芯片的刻蚀模拟		(b) 检测曝光不充分点的遍及整个曝光场的刻蚀和腐蚀模拟						
形貌和材料建模									
淀积	(a) 特征尺度模拟和设备模拟的整合		(b) 电性能和应力包括 :微结构 ;版图相关性 ;分配在平面上及栅极图案上液体 (抗蚀剂 ,旋涂 ULK) 的预估 ;与腐蚀 ,刻蚀及 CMP 耦合的模型		(d) 黏附和可靠性 ,包括微结构 ;全分子动力学 (或原子) 特征尺度模型 ,表面性质的预估				
平面化	(c) 综合的三维物理 CMP 模型			(b) 芯片级包括伪布局 (dummy layout) 最佳化 ,插入损耗 (padwear) 和调节盘建模 ,基于物理的比率 ,均匀性和缺陷减少的最佳化		(d) 为电路设计的 CMP 工序包括工序的变化			

(续表)

年 份	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
腐蚀	(a) 基于表面物理的特征尺度模型 (包括再淀积)	(b) 特征尺度模拟和设备(等离子体)模型的整合 ;工序整合(耦合腐蚀—淀积—电镀—CMP—刻蚀—包括形貌以外的数据也包括亚表面材料性质预估),全分子动力学(或原子)特征尺度模型							
替换材料建模				(b) 热(热力学),机械和电子学特征的计算 ;工艺对本征材料性能的完整性和在应变条件下的电性能的影响					
设备对包含材料性能的工艺结果的影响						(d) 计算工程师的材料和工序秘方 ;预估可制造性和成品率 ;全工序集成模型 ,扩展到包括来自原子尺度的材料信息的设备 /特征尺度建模			
数值器件建模									
输运建模	(a) 迁移率模型 包括应力 ,氮氧化物的表面粗糙效应以及沟道的取向		(b) high-k 材料的迁移率模型		(b) 准弹道输运的有效包含体.				
非经典 CMOS 的额外需求	(a) 包含附加界面(特别关于薄膜中的迁移率)的器件模型		(b) 三维器件结构的有效量子力学模拟 ,包括薄膜 ,与迁移率模型一致				(b) 纳米尺度模拟能力 ,包括精确的原子和量子效应		
新型存储器件	(b) MRAMs , PCMs , FeRAMs 和 SO-NOS/NROMs 的材料性质和器件建模								
新型存储器件	(c) MRAMs , PCMs , FeRAMs 和 SONOS/ NROMs 的单元性能建模			(b) 新存储器件的材料性质和可靠性建模					
RF 建模	(c) III/V 族化合物中高频噪声和迁移率的物理器件模型								

(续表)

年 份	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
电路元件建模									
有源器件	(c) 非经典 CMOS 紧缩型模型/非准静态模型和串联电阻		(b) 包括可靠性和统计影响的非经典 CMOS 器件的电路模型		(b) 包括弹道效应			(d) 纳米尺度器件和互连的电路模型	
互连和集成的无源器件	(a) 分级的全芯片 RLC		(b) 分级的知道加工过程的全芯片 RLC		(d) 包括自加热和可靠性			(b) 混合的电/光模拟	
工艺和材料对互连电性能的影响	(c) 电子输运(例如在导线中)与材料性质(相关工艺或基本原理)相关的模型. 包括电子散射模型. 材料性质修补 (例如 low-k 修补 ,电容修补)的路线预测模型								
包装建模									
电的建模	(c) 为包装/芯片的统一 RLC 提取	(b) 简化的指令模型	(b) 全波分析		(b) 混合的电/光分析				
热和机械建模	(c) 热和机械集成模型	(b) 包括非体和多孔材料性质	(d) 包括可靠性 (特别是寿命预估)						
材料性质	(c) 改进的材料模型(黏滞弹性,蠕变,塑性),界面	(b) 完全的管芯模拟							
数值分析									
网格	(c) 包括运动边界的耐用的,可靠的网格产生								
算法	(a) 更耐用的和更平行化的算法		(b) 替换的,离散化方案(例如用箱法)		(b) 有效的原子/量子方法 ;从头开始或基于形貌模拟的分子动力学				

5.2.2.2 远期的能力需求

表 5.6 建模和模拟的能力需求(远期)

年 份	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020
前端工艺建模							
栅迭层	(d) 新工艺步 /变更材料的加工和性质的建模						
扩散和活化模型	(d) 需要的新技术						
刻蚀							
曝光	(d) 下一代刻蚀模型和材料及元件的建模(浸没 ,EUV , EPL , ML2 刻蚀加工 ,压印)						
抗蚀剂模型	(d) 非传统光刻胶模型以及与腐蚀模型的耦合						
形貌和材料建模							
替换材料建模	(b) 热 (热 力学) ,机械和电子学特性的计算 ; 工艺对本征材料性能的完整性和在应变条件下的电性能的影响	(d) 原子材料模型					
设备对包含材料性能的工艺结果的影响	(d) 计算工程师的材料和工序秘方 ,预估可制造性和成品率 ;全工序集成模型. 扩展到包括来自原子尺度的材料信息的设备 / 特征尺度建模						
数值器件建模							
非经典 CMOS 的额外需求	(b) 纳米尺度模拟能力 ,包括精确的原子和量子效应						
电路元件建模							
有源器件	(d) 纳米尺度器件和互连的电路模型						

(续表)

年 份	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020
互连和集成的无源器件	(b) 混合的电/光模拟		(d) 耦合建模中的可靠性预估				
包装建模							
电的建模	(d) 耦合建模中的可靠性预估						
数值分析							
算法	(b) 多尺度模拟(原子—连续);设备—形貌—电特性—可靠性的快速耦合模型;分级的全芯片模拟						

 第五章参考资料

[5.1] S. Ushio et al. , “ A Fast Three-dimensional Process Simulator OPUS/3D with Access to Two-dimensional Simulation Results ,” *IEEE Trans. Computer-Aided Design* , CAD-9 , 1990 , p. 745

[5.2] J. Ueda et al. , “ Technology CAD at OKI ” , *Microelectronics Journal* . 26 , 1995 , p. 159

[5.3] “ Taurus Process Reference Manual ,” *Version X-2005* . 10 , October 2005 , Synopsys , Inc.

[5.4] W. G. Oldham et al. , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-26 , No. 4 , April 1979 , p. 717

[5.5] W. G. Oldham et al. , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-27 , No. 8 , August , p. 1455

[5.6] M. G. Rosenfield and A. R. Neureuther , *IEEE Trans. Electron Dev.* , Nov. 1981 , p. 1289

[5.7] G. M. Atkinson and A. R. Neureuther , *J. Vac. Sci. Technol.* , B , Vol. 3(1) , Jan. /Feb. 1985 , p. 421

[5.8] F. H. Dill et al. , *IEEE Trans. Electron Dev.* , July , 1975 , p. 456

[5.9] “ DEPICT-2 ” , Technology Modeling Associates , Inc. , USA / “ phase-Shift Masking with DEPICT-2 ,” *TMA’s Newsletter* , Vol. 3 , No. 1 , Jan. —Feb. 1991 , p. 1

[5.10] “ DEPICT Release Bulletin-Version 3.0 ” , Technology Modeling Associates , Inc. , Feb. 1993

[5.11] Juan Rey , “ DEPICT-4.0 Performs Large Area Aerial Imaging ” , *TMA Times* , Vol. 8 , No. 1 , Winter 1996 , p. 3

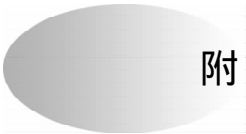
[5.12] “ RAPHAEL ” , *TMA’S Newsletter* , Vol. 3 , No. 4 , July-August 1991

- [5.13] *ATHENA User's Manual*, Chapter 4 : ELITE Models. Silvaco International Inc. , 1996 , p. 4-1—p. 4-17
- [5.14] *ATHENA User's Manual* , Chapter 5 : OPTOLISH Models. Silvaco International Inc. , 1996 , p. 5-1—p. 5-12
- [5.15] C. A. Mack , *Optical Microlith* , IV , Proc. , SPIE , Vol. 538 , 1985 , p. 207
- [5.16] J. I. Ulacia and J. P. McVittie , *Ext Abs. Electrochem. Soc. Meeting* , Spring , 1988 , Abs. No. 100 , p. 144
- [5.17] J. I. Ulacia and J. P. McVittie , *Ext Abs. Electrochem. Soc. Meeting* , Spring , 1988 , Abs. No. 101 , p. 146
- [5.18] A. R. Neureuther , *Solid State Technology* , March 1986 , p. 71
- [5.19] H. C. Wu et al. , *Tech. Dig. IEDM* , 1988 , p. 328
- [5.20] M. Fujinaga et al. , *Tech. Dig. IEDM* , 1990 , p. 905
- [5.21] J. Lorenz et al. , COMPOSITE , *IEEE Trans. Electron Dev.* , October 1985 , p. 1977
- [5.22] W. Maly and A. J. Strojwas , "Statistical Simulation of the IC Manufacturing Process" , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* , Vol. CAD-1 , No. 3 , July 1982 , p. 120
- [5.23] S. R. Nassif , A. J. Strojwas and S. W. Director , "FABRICS II : A Statistically Based IC Fabrication Process Simulator" , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design*. Vol. CAD-3 , No. 1 , January 1984 , p. 40
- [5.24] A. J. Strojwas S. R. Nassif and S. W. Director , "Optimal Design of VLSI Minicells Using a Statistical Process Simulator" , in Proc. 1983 ISCAS , 1983
- [5.25] S. R. Nassif , A. J. Strojwas and S. W. Director , "A Methodology for Worst Case Analysis of Integrated Circuits" , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , Vol. CAD-5 , No. 1 , January 1986 , p. 104
- [5.26] A. J. Strojwas , "A Pattern Recognition Based System for IC Failure Analysis" , Ph. D Dissertation , Carnegie-Mellon University , Sept. 1982
- [5.27] T. J. Sanders et al. , *IEEE Trans. on Semiconductor Manufacturing* , Vol. 5 , No. 4 , November 1992 , p. 368
- [5.28] P. K. Mozumder and A. Chatterjee , *IEEE Trans. on Semiconductor Manufacturing* , Vol. 9 , No. 3 , August 1996 , p. 437
- [5.29] K. P. White , W. J. Trybula and R. N. Athay , *IEEE Trans. on Components , Packaging and Manufacturing Technology-Partc* , Vol. 20 , No. 1 , Januarg 1997 , p. 58
- [5.30] T. Smedes and P. G. A. Emonts , *Tech. Dig. . IEDM* , 1998 , p. 763
- [5.31] N. Shigyo et al. , *Solid-State Electronics* , 44 , 2000 , p. 1001
- [5.32] C. Bittlestone , *Proceedings of ESSCIRC* , Grenoble , France , 2005 , p. 197
- [5.33] "SPAYN — Statistical Parameter and Yield Analysis" , Silvaco International , USA(产品

说明书)

- [5.34] R. Kasai et al. , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-29 , No. 5 , May 1982 , p. 870
- [5.35] “DAVINCI” , Technology Modeling Associates , Inc. , USA , 1990
- [5.36] *Taurus Device Version X-2005. 06 User Guide* , Synopsys Inc. , October , 2005
- [5.37] E. M. Buturla et al. , *Proc. of Int. Solid State Circuits Conf.* , Feb. 1980 , p. 76
- [5.38] E. M. Buturla et al. , *IBM J. Res. Develop* , Vol. 25 , No. 4 , Jul , 1981 , p. 218
- [5.39] S. G. Chamberlain and A. Husain , *IEEE IEDM Tech. Dig.* , Dec. 1981 , p. 592
- [5.40] A. Husain and S. G. Chamberlain , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-29 , No. 4 , April 1982 , p. 631
- [5.41] H. Masuda , T. Toyabe et al. , *Proc. of IEEE Int. Symp. on Circuits and Systems* , 1984 , p. 1163
- [5.42] T. Toyabe , H. Masuda et al. , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. ED-32 , No. 10 , Oct. 1985 , p. 2038
- [5.43] J. H. Chern et al. , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , Vol. 8 , No. 5 , May 1989 , p. 516
- [5.44] G. Chin , K. C. Wu and R. W. Dutton , 1990 Workshop on Numerical Modeling of Processes and Devices for Integrated Circuits(1990 NUPAD III) , 3—4 Jun. 1990 , p. 21
- [5.45] K. C. Wu , G. R. Chin and R. W. Dutton , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , Vol. 10 , No. 9 , Sept. 1991 , p. 1132
- [5.46] M. Thurner and S. Selberherr , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , Vol. 9 , No. 8 , August 1990 , p. 856
- [5.47] <http://www.iue.tuwein.ac.at/software.o.html>.
- [5.48] W. Bergner and R. Kircher , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , Vol. 9 , No. 11 , November 1990 , p. 1184
- [5.49] S. OdanaKa et al. , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , Vol. 10 , No. 5 , May 1991 , p. 619
- [5.50] U. A. Ranawake et al. , *IEEE Trans. on Computer-Aided Design* , Vol. 13 , No. 6 , Jun 1994 , p. 712
- [5.51] *ATLAS User's Manual* , Silvaco International , Oct. 1996 , Chapter 6 , p. 6-1
- [5.52] *DAVINCI Version X-2005. 06 User Guide* , Synopsys Inc. , October 2005
- [5.53] R. SabelKa , C. Harlander and S. Selberherr , “The State of the Art Interconnect Simulation” Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD) , 2000 , p. 6
- [5.54] J. R. Black , *IEEE Trans. on Electron Devices* , Vol. 16 , 1969 , p. 338
- [5.55] R. SabelKa , S. Selberherr , “SAP — a Program Package for Three-dimensional Intercon-

- nect Simulation", Proceedings of the IEEE 1998 International Interconnect Technology Conference, 1—3 Jun 1998, p. 250
- [5.56] "RAPHAEL Version X-2005.06 Interconnect Analysis Program Reference Manual," Synopsys Inc., June 2005
- [5.57] "Silvaco-Products-Parasitic Extraction", http://www.silvaco.com/products/parasitic_extraction.html.
- [5.58] "RAPHAEL", Technology Modeling Associates, Inc., Technology CAD, Vol. 3, No. 4, July-August 1991
- [5.59] "ANSYS User's Manual for Revision 5.4", Swanson Analysis System, Inc., USA, 1994 or www.ansys.com.
- [5.60] B. P. Shieh et al., Solid State Technology, Feb., 1999, p. 51
- [5.61] R. Streiter et al., Proceedings of Advanced Metallization Conference 1999, MRS, 2000, p. 335
- [5.62] X. Xiao et al., *Microelectronic Engineering*, Vol. 54, No. (3—4), 2000, p. 21
- [5.63] Ruan Gang et al., *Semiconductor Technology* (in Chinese), Vol. 25, No. 1, 2000, p. 53
- [5.64] Ruan Gang and Xiao Xia, *Chinese Journal of Semiconductors*, Vol. 22, No. 8, Aug. 2001, p. 1081
- [5.65] International Technology Roadmap for Semiconductors, 2005 Edition, Modeling and Simulation, [http://www.itrs.net/Links/2005 ITRS/Modeling 2005.pdf](http://www.itrs.net/Links/2005%20ITRS/Modeling%202005.pdf)



附录

附录一 SUPREM-2 的输入文件书写格式^[2.2]

本附录为集成电路工艺和器件模拟技术的初学者提供练习工艺模拟输入文件书写用. 作者多年教学经验证明: “有了这一练习, 再通过阅读更先进和实用的工艺模拟器的用户手册, 就不难掌握更复杂的, 例如 SUPREM-4 等工艺模拟器的输入文件书写, 从而顺利地使用它们”。

SUPREM-2 输入格式

SUPREM-2 输入参数用一系列卡片或数据文件中的一系列行说明, 卡片或行的类型有下列 3 类 11 种:

INITIALIZATION(预置)	INPUT/OUTPUT(输入/输出)	PROCESS/MODEL(加工/模型)
TITLE(题名)	PRINT(打印)	STEP(工艺步)
COMMENT(注解)	PLOT(绘图)	MODEL(模型)
END(结束)	SAVE(保存)	
GRID(网格)	LOAD(装载)	
SUBSTRATE(基片)		

每张卡的开始用上列卡型之一标志(其中只有前面 4 个字符是重要的), 接着是一个或多个空格, 这同卡型有关, 再接着或是一个参数表或是一个字符串. SUPREM-2 输入处理机只读一行中前面的 72 列. 假如参数表填一行还不够, 可在下一行继续, 续行的第一列用一个加号(+). 用字符串而不用参数表的卡型(TITLE, END, COMMENT)没有续行. 空行被略去, 不作处理. 任何 TITLE 或 COMMENT 卡中的字符串仅用在输出子程序中, 而 END 卡中的字符串被略去. 所有其他卡, 参数用参数名同一个值的等式说明(即 NAME = VALUE). 每对 PARAMETER/VALUE 可按任何次序出现在参数表中. 用逗号或逗号及空格相互分隔.

不同参数的 VALUE 可用几种不同的类型赋值,例如用 NUMERICAL(数值的), LOGICAL(逻辑的)等. 在以下各页卡型的说明中,赋予某一参数的 VALUE 的类型由下列符号之一说明.

符号	类型	例子/说明
N	NUMERICAL	10. , 2 , 1. 28E-14 , 350. 236
L	LOGICAL	T , TRUE , Y , YES , F , FLASE , N , NO
E	ELEMET	B(BORON) , P(PHOSPHORORUS) , SB(ANTIMONY) , AS(ARSENIC)
S	STEP TYPE	见 STEP 卡说明
M	MODEL TYPE	见 MODEL 卡说明
P	PARAMETER NAME	一个最佳化的或结果的参数名
FT	FILETYPE	A , ASCII , B , BINARY

所有长度,面积和体积用 MICRON 作基本单位,除了杂质浓度用 ATOMS/CUBIC CENTIMETER,注入剂量用 ATOMS/SQUARE CENTIMTER. 时间总是用 MINUTES,所以速度用 MICRONS/MINUTE,扩散率用 MICRONS SQUARED/MINUTE.

下面是每种卡型及与之相关的参数的说明. 在这个说明中,任意选用的参数或参数组包括在方括号[]内. 必须选择参数表或参数组表中的一种,包括在圆括号()内用 OR 分隔.

1. INITIALIZATION CARDS(预置卡类)

(1) TITLE CARD

TITLE CARD 说明在打印和绘图子程序中用作标识输出的字符串,同时也使许多程序数据缓冲器产生预置初始数据. 在任何工艺序列中,第一张卡必须是 TITLE CARD,没有续行. 若要运行几种工艺程序,可以放在由 TITLE CARDS 区分的同一输入文件中.

TITLE[字符串]

(2) COMMENT CARD

COMMENT CARD 除了不能紧接着放在最初出现的 TITLE CARD 后以外,能放在输入卡片组的任何地方. 在一个 STEP CARD 前的最后的 COMMENT CARD 中说明的字符串,在打印和绘图子程序中用于标识输出. COMMENT

CARD 不能有续卡.

COMMENT[字符串]

(3) END CARD

END CARD 终止程序,必须是最后的输入卡,不允许有续行.

END[字符串]

END CARD 中的字符串不在打印和绘图子程序中用于标识输出,仅在输入文件中用作 END 的说明.

(4) GRID CARD

GRID CARD 可以出现在一个工艺序列中的任何地方.但是为了预置网格的初始值.在初始的 TITLE CARD 后,紧接着要用一张 GRID CARD,允许用户在需要时,为了在减少计算时间的同时保持足够的精确性,可以去修改网格的间距以及边界.

沿着垂直于硅片表面轴.硅片用 100 到 400 个间隔的网格点表示.这些网格点在 3 个区域中分配.网格间距(相邻网格点之间的距离)在每个区域内是一致的,通常不同于其他区域.

第一个区域表示氧化层.若有氧化层则配于 10 个到 25 个点,若没有氧化层则为零个点.这个区域中使用的网格点间距及实际点数由程序决定.

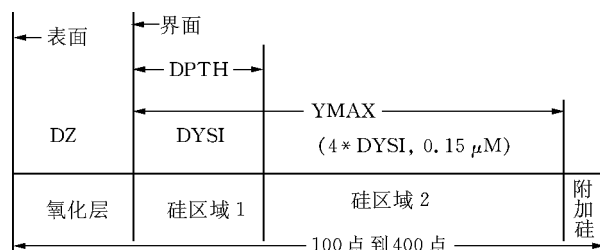
其次两个区域表示硅中的分布.这两个区域的差别仅仅在于它们的网格间距(第二个区域至少比第一个区域大 4 倍).第一个区域中的网格间距由 GRID CARD 中的 DYSI 参数确定.它的边界由硅表面扩展到由 GRID CARD 中的 DPTH 参数说明的深度处.(硅表面是指氧化层/硅界面,在没有氧化层存在时指片子的表面).GRID CARD 中的 YMAX 参数说明描述的最大硅深度.所以第二个区域的边界在 DPTH(第一个硅区域的终止端)及 YMAX(硅片的终止端)处.

在硅中用两个区域的理由是这样的:例如一个包含深的结构的埋层集电极所需要的网格间距对于精确地表示接近表面的一个陡的或窄的分布(例如离子注入)是太粗糙了.在这种情况下,可以把其网格间距能由用户选用 DYSI 参数说明的第一个硅区域扩展到整个陡的或窄的分布的部分.除了极少数情况,该区域的网格间距不需要用于小于 0.01 微米.事实上,0.02 微米以及 0.03 微米常是很适用的.

程序启动时,每个工艺步骤的网格点数置在低限 100.接着核查用 100 个网格点是否能实现用户说明的网格(DYSI, DPTH, YMAX).若不能,则逐渐增加网格点的总数.去调节第一个高分辨能力区,然后再调节第二个低分辨能力区.程序中

自选了 400 个网格点的上限. 第二个网格间距初始时为 DYSI 的 4 倍. 为了保持足够的精确度, 通过网格点总数的一个附加的增加, 第二个网格间距保持小于 0.15 微米. 对于每一工艺步用程序调节第二个网格间距, 在合理的计算总量时, 允许得出一个精确的数值结果.

模拟的总深度由第一张 GRID CARD 上的 YMAX 说明. 在加工中不可以减少, 但可由较后的 GRID CARD 增加. 用此法增加的深度, 附加硅的浓度等于原始硅的最后点的浓度.



GRID [DYSI = N], DPTH = N], YMAX = N]

DYSI 从硅表面到由 DPTH 说明的深度处的区域中网格点之间的间距. 单位用 MICRONS. 缺省值 = 0.01

DPTH 硅区域的深度, 起点在硅表面处. 单位用 MICRONS, 该区域网格间距由 DYSI 给出. 缺省值 = 0.01

YMAX 硅的最大计算厚度, 单位用 MICRONS. 没有缺省值.

(5) SUBSTRATE CARD

SUBSTRATE CARD 向程序提供有关基片的信息. 例如晶向、任何初始的均匀的杂质浓度. SUBSTRATE CARD 应紧跟在 TITLE 和初始 GRID CARD 后面. SUPREM-2 现在只处理 111 或 100 趋向的硅基片.

在许多模拟中, 仅仅为了提供结深的信息使用了一个初始的、均匀的基片浓度, 否则是不重要的. 在这种情况下, 许多计算时间以及打印输出能够节省下来, 用初始基片杂质的类型 P 或 N 型 (+ 或 -) 而不用实际的元素类型 B, P, SB 或 AS 来说明. 若使用这种方法, 则说明的杂质浓度仅用来计算输出信息. 例如结深, 薄层电阻率, 阈值电压等, 而不用在高温工艺步骤时的实际加工过程. 注意这个浓度在现存的硅中自始至终保持着相同的均匀性, 甚至本征外延层.

SUBSTRATE ORNT = N [, ELEM = E [, CONC = N]]

ORNT 片子的晶向,只允许 111 或 100 晶向.

ELEM 基片中初始时杂质的类型,它的均匀的浓度由 CONC 说明.可以是实际杂质名,例如 B, P, SB 或 AS,或只用+(对于 P 型)或-(对于 N 型).

CONC 用 ELEM 参数说明的元素的均匀杂质浓度.

2. INPUT/OUTPUT CARDS(输入/输出卡类)

(1) PRINT CARD

PRINT CARD 控制 SUPREM-2 打印的数值输出,它可以出现在初始 GRID CARD 后的工艺序列中的任何地方,在任何最优化循环之外.第一个输出类型(标题信息)由 PRINT CARD 的 HEAD 参数控制.标题信息包含 STEP CARD 的参数,同步步骤相关的其他变量,例如生长后或腐蚀后氧化层或硅的总量,总的表面浓度,结深,薄层电阻以及总的和各别的集积的杂质浓度.打印数值输出的第二个类型是对于总的及/或各别的杂质分布在每个网格点处的深度和浓度表.由 PRINT CARD 的 TOTL 以及 IDIV 参数控制.

PRINT CARD 参数全由逻辑标志,所以必须在能够产生输出之前置 TRUE 或 FALSE.因为输出子程序在一个工艺步完成后立即被调用,如果那个步的输出打印中任选项中的任何项要改变,必须使形成那些改变的 PRINT CARD 出现在那个 STEP CARD 之前.PRINT CARD 的选择项一旦置定,适用于全部序列的工艺步,直至以后的 PRINT CARD 来改变.

PRINT [HEAD = L I, TOTL = L I, IDIV = L I]

HEAD 控制标题信息的打印.自动补缺值=FALSE(或 N)

TOTL 控制每个网格点净杂质浓度值同深度关系的打印.

自动补缺值 = FALSE(或 N)

IDIV 控制每个网格点处每种存在元素的各别的杂质浓度值同深度关系的打印.自动补缺值=FALSE(或 N)

(2) PLOT CARD

PLOT CARD 控制杂质浓度同深度关系的作图.它们可以出现在 TITLE CARD 以及初始的 GRID CARD 以后的一个工艺序列中的任何处. SUPREM-2 的标准图输出在行式打印机(LINE PRINTER)或标准列表设备(STANDARD LIST DEVICE)上.在行式打印机上作图只用下面列出的参数中的 5 个,其他两个参数 AXIS 及 DATA,当系统用一个为 SUPREM-2 用的非行式打印机时,可用作附加的控制,用行式打印机时可不用.

所有行式打印机作的图在一页上占用相同的空间,以使不同的图可容易地覆在上面.这意味着氧化层所作的图有一个固定的空间的大小,它同氧化层的厚薄无关(甚至假如没有氧化层).硅的图也被作在每页的相同大小的空间.然而所用的面积比氧化层大4倍.所作图的硅的总量,即图的窗(THE PLOT WINDOW),由PLOT CARD的WIND参数说明.然而最大的Y轴值可以稍微大一点,因为程序选择0.05的最小倍数作为较小段的宽度,这样就可完全地适应用户需要的作图深度.水平轴表示浓度的 10^g 值,它的最小log值由CMIN参数说明.作图用几个十进位数,由NDEC参数说明.对于超过浓度范围的杂质分布,相应的打印字行(UNDERFLOW /OVERFLOW)印在标准图的右边/左边.

其他4个PLOT CARD参数是确定图上作什么信息的逻辑说明. TOTL 参数控制总的或净浓度的图而 IDIV 参数控制各别的杂质浓度图. 以下两个参数仅在用打印机时考虑. AXIS 参数控制轴的作图. 允许用户在同一张纸上作几根曲线. 不用每一步重画轴. DATA 参数控制在图的底部处若干个步骤数据的打印. 例如氧化厚度,步骤的时间和温度.

```
PLOT [WIND = N ][CMIN = N ][NDEC = N ][TOTL = L ][IDIV = L ]
+ [AXIS = L ][DATA = L ]
```

WIND 图表示的硅总量,单位用 MICRONS,补缺值=4.

CMIN 最小作图浓度的 LOG,自动补缺值=14.

NDEC 作图浓度的十进位个数,自动补缺值=7.

TOTL 控制净杂质浓度同浓度的关系图.自动补缺值=FALSE.

IDIV 控制每种存在的元素其各别的杂质浓度同深度的关系,自动补缺值=FALSE.

AXIS 控制轴的作图,自动补缺值=FALSE.

DATA 控制在所作曲线图下面,步骤数据的打印,自动补缺值=FALSE.

(3) SAVE/LOAD CARD

SAVE 及 LOAD CARD 用来存贮和读入需要再启动一个工艺序列的信息. 它们的主要用处是为了模拟运行的分叉,例如模拟几个发射区扩散时间,不用对每个扩散时间重复运行整个工艺步. LOAD CARD 可以出现在工艺序列中 TITLE 和 END CARD 之间的任何地方. SAVE CARD 应立即出现在工艺序列中要保存的最后步骤之后.

SAVE 和 LOAD CARD 只有两个参数. 一个参数说明被分配在作业控制语言卡片组中数据文件的 FORTRAN 逻辑单元数,而另一个参数说明数据传输的

类型.

SAVE LUNM = N , TYPE = FT /LOAD LUNM = N , TYPE = FT

LUNM 分配在作业控制语言卡片组中数据文件的 FORTRAN 逻辑单元数 (用从 20 号到 29 号几个数), 也即输入、输出的逻辑单元号

TYPE 数据传输类型——ASCII(FT=A)或 BINARY(FT=B). 信息传输用 BINARY 形式约比 ASCII 快 20 倍, 且磁盘存贮量较少.

3. STEP CARDS(工艺步卡类)

STEP CARD 用来说明工艺步类型及参数. 目前有 6 种不同工艺类型 SUPREM-2 中有模型来描述: 离子注入、预淀积、氧化、外延生长、低温氧化淀积以及腐蚀. 驱入用氮或中性气氛中氧化来描述. 工艺序列中的每一工艺步用上一步的结果作为它计算的出发点.

工艺步的每种类型有它自己的参数表. 尽管它们可以用许多相同的参数. 下面是某种工艺步类型和它的有关参数表的说明.

(1) 离子注入步骤

离子注入步骤可用两种方法说明:

方法一 若注入能量被说明, 则程序用在内部已存贮的信息去计算分布. 在这种情况下, 杂质分布对于砷、磷和锑用两个相联半高斯分布, 对于硼用修改的 PEARSON-IV 型分布.

方法二 若射程以及标准偏离被说明, 则 SUPREM-2 用这些值去计算这元素的简单的高斯分布.

STEP TYPE = IMPL , ELEM = E , DOSE = N ,
+ (AKEV = N)OR(RANG = N , STDV = N) [, MODL = M]

ELEM 注入的杂质元素(B, P, SB, AS)

DOSE 离子注入剂量, 单位用 ATOMS/CM²

AKEV 离子注入能量, 单位用 KEV

RANG 简单高斯分布的射程. 单位用 MICRONS

STDV 简单高斯分布的标准偏离, 单位用 MICRONS

MODL 元素、特殊用途或最佳化模型的名字.

(2) 腐蚀步骤

在 SUPREM-2 中腐蚀可以发生在高温或低温. 低温腐蚀其温度低于 200 °C, 腐蚀掉的氧化层等于腐蚀速率乘上步骤的时间. 任何低温腐蚀在所有的氧化层移去后停止. 若时间或腐蚀速率两者之一为零或不被说明, 则所有氧化层被腐蚀掉.

高温腐蚀时,腐蚀掉氧化层的时间假定可以忽略,移去硅的量等于步骤的时间乘上腐蚀速率.在目前的 SUPREM-2 文本中,余下的材料中的杂质不进行再分布,即再分布被忽略.

STEP TYPE = ETCH, TEMP = N [, TIME = N , ERTE = N], MODL = M]

TEMP 在这个步骤期间硅的温度,单位为 $^{\circ}\text{C}$.

TIME 总的步骤时间,单位为 MINUTES.

ERTE 腐蚀速率,单位为 MICRONS/MINUTE.

MODL 元素,特殊用途或最佳化模型的名字.

(3) 低温氧化淀积步骤

在这一步骤中,掺杂或不掺杂的氧化层被淀积在硅表面上或任何已存在的氧化层顶部.被淀积的氧化层的总量等于步骤的时间乘上生长速率.若淀积的氧化层是掺杂的,则杂质通过 ELEM 参数说明,而用 CONC 说明它的均匀杂质浓度.

STEP TYPE = DEPO, TIME = N , GRTE = N [, ELEM = E , CONC = N]

TIME 总的步骤时间,单位为 MINUTES

GRTE 氧化层生长速率,单位为 MICRONS/MINUTE

ELEM 氧化层掺的杂质(B, P, SB, AS)

CONC 淀积氧化层中杂质的浓度,单位为 ATOMS/CM^3

MODL 元素,特殊用途或最佳化模型的名字.

(4) 氧化/驱入步骤

氧化步骤是一个高温步骤,它包括由于扩散和蒸发而出现的杂质的再分布.若由 MODL 参数说明的氧化模型指出的气氛不是中性的,则杂质再分布同氧化物生长同时发生. TEMP 参数说明在步骤开始时片子的温度,最终的温度等于所说明的起始温度加上由 TRTE 说明的温度改变率乘上总的步骤时间.氧化气氛由氧化模型卡参数说明(见氧化模型),在同样的卡中也可参照其他 MODEL CARDS,但是只允许参照一种氧化模型.若没有氧化模型被参照,则假定是 NIT0 模型.

STEP TYPE = OXID, TIME = N [, TEMP = N], TRTE = N], MODL = M]

TIME 总的步骤时间,单位为 MINUTES

TEMP 步骤启动时的片子温度,单位为 $^{\circ}\text{C}$,自动补缺值=最紧接的已在前面说明的步骤温度.

TRTE 温度变化率,单位用 $^{\circ}\text{C}/\text{MINUTE}$.自动补缺值=0

MODL 氧化,元素,特殊用途或最佳化模型的名字.

(5) 预淀积步骤

预淀积步骤描述在硅表面处杂质元素从一个常数源的引入. SUPREM-2 不关心杂质源的详细情况. CONC 参数说明表面处的源浓度, 而 ELEM 参数指出源的元素类型. 步骤启动时硅的温度由 TEMP 参数说明, 而最终的温度等于初始温度加上由 TRTE 参数说明的温度改变率乘上总的步骤时间.

```
STEP TYPE = PDEP, ELEM = E, CONC = N, TIME = N [, TEMP = N ], TRTE = N ]  
+  
[ , MODL = M ]
```

ELEM 正在引入的杂质元素(B, P, SB, AS)

CONC 由 ELEM 说明的杂质的表面气相浓度, 单位用 ATOMS/CM³

TIME 总的步骤时间, 单位用 MINUTES

TEMP 步骤开始时片子的温度, 单位用℃. 补缺值 = 最紧接的已在前面说明的步骤温度.

TRTE 温度变化率, 单位用℃/MINUTE. 缺省值 = 0

MODL 元素, 特殊用途或最佳模型的名字.

(6) 外延生长步骤

这步骤描述在高温时在硅的初始层顶部一个硅层的外延生长. 若它是掺杂的, 由 ELEM 参数说明杂质元素. 用 CONC 参数说明体气相浓度(不是表面). 硅生长的总量等于由 GRTE 说明的生长速率乘上总的步骤时间. 步骤开始时片子的温度由 TEMP 参数说明. 最终的温度是初始温度加上由 TRTE 说明的温度变化率乘上总的步骤时间, MODL 参数可以用来说明任何需要的元素, 外延, 特殊用途或最佳化模型.

```
STEP TYPE = EPIT, TIME = N, GRTE = N [, TEMP = N ], TRTE = N ]  
+  
[ , MODL = M ], ELEM = E, CONC = N ]
```

TIME 总的步骤时间, 单位为 MINUTES.

GRTE 外延层的生长率, 单位为 MICRONS/MINUTE

TEMP 步骤开始时片子温度, 单位为℃, 自动补缺值 = 最紧接的已在前面说明的温度.

TRTE 温度变化率, 单位为℃/MINUTE, 自动补缺值 = 0

ELEM 生长硅中的杂质元素(B, P, SB, AS).

CONC 由 ELEM 说明的杂质的体气相浓度. 单位为 ATOMS/CM³

MODL 元素, 外延, 特殊目的或最佳化模型的名字.

4. MODEL CARDS(模型卡类)

MODEL CARDS 允许用户修改内部的程序系数. MODEL CARDS 是全局性的,可以出现在工艺序列中的任何地方. MODEL CARDS 有 4 种主要类型,其中有两种:元素和氧化,各分成 4 种支类型. 这些主类型或支类型中的每一种由单一的 3 个字符的名字来识别. 此外,每个主模型或支模型的 3 个字符组成的名字后边跟着一个数字,这个数可取 1—5, SUPREM-2 允许共有 50 种不同的 MODEL CARDS. 模型主类型,支类型和它们的名字列表在下面.

模型主类型	模型支类型	主/支类型模型名
ELEMENT MODELS	(BORON)	MBONO NO = 1—5
	(PHOSPHORUS)	MPHNO NO = 1—5
	(ANTIMONY)	MSBNO NO = 1—5
	(ARSENIC)	MASNO NO = 1—5
OXIDATION MODELS	(STEAM)	STMNO NO = 1—5
	(WET)	WETNO NO = 1—5
	(DRY)	DRYNO NO = 1—5
	(NITROGEN)	NITNO NO = 1—5
EPITAXY MODELS		EPINO NO = 1—5
SPECIAL PURPOSE MODELS		SPMNO NO = 1—5

在 STEP CARD 中被参照的特殊模型,由赋值模型名字到模型参数(例如: MODL=MAS2). 这导致在 MODEL CARD 上说明参数值的那个名字被赋值到相应的程序变量. 这些新的参数值将用在所有分序列步骤中,除非由另外的参数赋值到相同类型或支类型的 MODEL CARD. 若一个步骤参照一个模型它用数值另作为标识数字,则同那种类型或支类型的模型相关的所有程序变量复位到它们的补缺值.

下面描述模型的类型和它们的参数表.

(1) 元素模型

元素模型允许用户改变那些元素所特有的参数. 有 4 种元素模型支类型,对应于能允许的硼、磷、锑和砷 4 种杂质元素.

MODEL CARD 的参数应用的元素由名字参数赋值说明,元素和对应的名字是:

BORON MBO1, MBO2, MBO3, MBO4, MBO5,
 PHOSPHORUS MPH1, MPH2, MPH3, MPH4, MPH5,
 ANTIMONY MSB1, MSB2, MSB3, MSB4, MSB5,
 ARSENIC MAS1, MAS2, MAS3, MAS4, MAS5,

能够通过元素模型卡存取的系数被列表在下面. 模型卡的参数用这种方法来

计算.

氧化物扩散系数 = $DOX0 * \exp(-EOX0 / KT)$

分凝系数 = $SEGO * \exp(-SEGE / KT)$

表面迁移系数 = $STCO * \exp(-STCE / KT)$

移动的边界流量项 = $HSFO * \exp(-HSFE / KT)$

硅扩散系数 =

(非氧化) = $DSXN * \exp(-ESXN / KT)$

(硼在干氧中) = $DSXN * \exp(-ESXN / KT) + DSXD * \exp(-ESXD / KT)$

(硼在湿氧中) = $DSXN * \exp(-ESXN / KT) + DSXW * \exp(-ESXW / KT)$

(所有其他元素在干氧中) = $DSXD * \exp(-ESXD / KT)$

(所有其他元素在湿氧中) = $DSXW * \exp(-ESXW / KT)$

这里 $KT = \text{玻尔兹曼常数} * \text{温度}(K)$

参数 BETA 用来修改杂质的硅扩散系数通过一个由计算得出的倍增因子:

$$\text{FACTOR} = (1 + \text{BETA} * (N \text{ 或 } P) / \text{NIEF}) / (1 + \text{BETA})$$

这里(N 或 P)是在工艺温度时在一个网格点处的自由载流子浓度,而 NIEF 是在工艺温度时的本征载流子浓度.

若杂质浓度小于 NIEF 的 10%,则载流子数等于 NIEF,这样 FACTOR=1

高浓度掺杂水平时砷的成团由以下 3 个参数控制:

(平衡结团系数) = $KEQ0 * \exp(-KEQE / KT)$

(消团系数) = $KDC0 * \exp(-KDCE / KT)$

(每个团的原子数) = CLST

MODEL NAME = M [, DOX0 = N [, EOX0 = N [, DSXN = N [, ESXN = N [

+ [, DSXD = N [, ESXD = N [, DSXW = N [, ESXW = N [

+ [, SEGO = N [, SEGE = N [, HSFO = N [, HSFE = N [

+ [, STCO = N [, STCE = N [, BETA = N [, CLST = N [

+ [, KEQ0 = N [, KEQE = N [, KDC0 = N [, KDCE = N []

DOX0 二氧化硅扩散系数的指数前置项, MICRONS SQUARED/MINUTE

EOX0 二氧化硅扩散系数的激活能. ELECTRON VOLTS

DSXN 本征硅扩散系数的指数前置项. MICRONS SQUARED/MINUTE

ESXN 本征硅扩散系数的激活能. ELECTRON VOLTS

DSXD 硅扩散干氧增强系数的指数前置项. MICRONS SQUARED/MINUTE

ESXD 硅扩散干氧增强系数的激活能. ELECTRON VOLTS

- DSXW 硅扩散湿氧增强系数的指数前置项. MICRONS SQUARED/
MINUTE
- ESXW 硅扩散湿氧增强系数的激活能. ELECTRON VOLTS
- SEG0 分凝系数的指数前置项,分凝系数定义为硅中浓度/氧化物中浓度.
- SEGE 分凝系数的激活能, ELECTRON VOLTS
- STC0 表面迁移系数的指数前置常数 MICRONS/MINUTE.
- STCE 表面迁移系数的激活能. ELECTRON VOLTS
- HSF0 移动边界流量的指数前置常数. MICRONS/MIMUTE.
- HSFE 移动边界流量的激活能. ELECTRON VOLTS
- BETA 有关带电空位对扩散系数影响的系数.
- CLST 每个结团的杂质原子数.
- KEQ0 平衡结团系数的指数前置常数.
- KEQE 平衡结团系数的激活能.
- KDC0 消团系数的指数前置常数.
- KDCE 消团系数的激活能.

(2) 氧化模型

氧化模型有两种功能：

功能一 说明正在进行的步骤的周围气氛的类型.

功能二 修饰那种周围气氛下的氧化物生长率.

氧化模型的名字允许区分 4 种周围气氛. 周围气氛的类型以及相应的模型名字列表于下：

STEAM STM1, STM2, STM3, STM4, STM5

WETO2 WET1, WET2, WET3, WET4, WET5

DRYO2 DRY1, DRY2, DRY3, DRY4, DRY5

NITROGEN NIT1, NIT2, NIT3, NIT4, NIT5

能够由氧化模型参数变更的系数是线性的以及抛物线的氧化生长率. 使用氧化模型参数的这些系数的表示式为：

线性生长率 = $LRTE * EXP(-LREA/KT) * PRES$

抛物线生长率 = $PRTE * EXP(-PREA/KT) * PRES$

这里 $KT = \text{玻尔兹曼常数} * \text{温度}(K)$

MODEL NAME = N [, LRTE = N] , LREA = N] , PRTE = N] , PREA = N]
+ [, PRES = N]

LRTE 计算线性生长率的指数前置项. MICRONS/MINUTE
LREA 计算线性生长率的激活能. ELECTRON VOLTS
PRTE 计算抛物线生长率的指数前置项. MICRONS SQUARED/MINUTE
PREA 计算抛物线生长率的激活能. ELECTRON VOLTS
PRTE 计算抛物线生长率的指数前置项. MICRONS SQUARED/MINUTE
PRES 周围气氛的压力单位为 ATMOSPHERES

(3) 外延模型

外延模型用来修饰用于外延生长子程序中用的杂质流量参数. 有 5 个外延模型从 1—5 :EPI1 , EPI2 , EPI3 , EPI4 , EPI5. 外延模型的参数表描述在下面.

MODEL NAME = M [, FAUT = N] , FRAC = N]

FAUT 为自动掺杂的蒸发系数的乘数.

FRAC 从再吸收界面解释放的掺杂剂的分.

(4) 特殊用途模型

所以称特殊用途模型, 因为它们的参数不适合任何其他模型而且必须不是同其他模型有相同意义的广格的模型参数. 5 种特殊模型以及它们的参数列表描述如下:

特殊目的模型 :SPM1 , SPM2 , SPM3 , SPM4 , SPM5.

MODEL NAME = M [, NIEF = N] , NIEA = N] , GATE = G] , QSSQ = N]
+ [, CBLK = N]

NIEF 用于计算作为温度函数的有效本征载流子浓度 NI 的指数前置常数
(即 $NI = NIEF * \exp(-NIEA/KT) * (T * 1.5)$), 这里 K 是玻尔兹曼常数, T 是 K)

补缺值 = $2.09717E16$ ATOMS/CM³

NIEA 用于计算有效本征载流子浓度的上述表示式中的激活能. 缺省值 =
 0.561839 EV

GATE 用于计算电压的栅极材料, 有 3 种类型可以说明.

铝, P+ 和 N+. 它们的符号(G)分别是 AL, + 和 -, 补缺值 = AL.

QSSQ 用于计算 阈电压的硅/氧化物界面处表面态的数目, 单位用
STATES/CM², 自动补缺值 = 0.

CBLK 指示体接触类型

CBLK = 0 在衬底处接触(最后的硅点)

CBLK = 1 在表面处接触(第一个硅点)

CBLK = N 体接触在任意浓度正为 P 型 ,负为 N 型

5. 各种模型参数的补缺值

表 A1、表 A2 列出 SUPREM-2 中各种模型参数的补缺值. 这些参数大多同晶向有关 ,若参数在晶向 100 时的补缺值不知道 ,则使用 111 时的补缺值.

表 A1

NAME ORNT	BORON	PHOSPHORUS	ANTIMONY	ARSENIC
SEGREGATION COEFFICIENT				
SEG0(111)	1 126.0	10.0	10.0	10.0
SEG0(100)	2 208.0	10.0	10.0	10.0
SEGE(111)	0.91	0.0	0.0	0.0
SEGE(100)	0.96	0.0	0.0	0.0
SURFACE TRANSPORT COEFFICIENT				
STC0	1.674E7	9.0E5	1.5E3	9.0E5
STCE	2.481	1.99	1.04	1.99
MOVING BOUNDARY FLUX TERM				
HSF0	0.1	0.1	0.1	0.1
HSFE	0.0	0.0	0.0	0.0
SILICON DIOXIDE DIFFUSION COEFFICIENT				
DOX0	1.896E6	4.56E7	7.86E25	1.05E10
EOX0	3.53	3.5	8.75	4.89
SILICON DIFFUSION COEFFICIENT(NEUTRAL OR NON-OXIDIZING AMBIENT)				
DSXN(111)	3.332 4E9	2.31E10	7.74E10	1.440E11
DSXN(100)	3.332 4E9	2.31E10	7.74E10	1.440E11
ESXN(111)	3.425 65	3.66	3.98	4.08
ESXN(100)	3.425 65	3.66	3.98	4.08
SILICON DIFFUSION COEFFICIENT(DRY O2 OXIDIZING AMBIENT)				
DSXD(111)	1.608E1	2.31E10	7.74E10	1.440E11
DSXD(100)	5.502E2	4.158E10	7.74E10	1.440E11
DSXD(111)	1.453 0	3.66	3.98	4.08
DSXD(100)	1.690 65	3.66	3.98	4.08

(续表)

NAME ORNT	BORON	PHOSPHORUS	ANTIMONY	ARSENIC
SILICON DIFFUSION COEFFICIENT(WET 02 OXIDIZING AMBIENT)				
DSXW(111)	1.608E1	2.31E10	7.74E10	1.440E11
DSXW(100)	5.502E2	8.880E10	7.74E10	1.440E11
ESXW(111)	1.430	3.66	3.98	4.08
ESXW(100)	1.690	3.66	3.98	4.08
BETA				
BETA	3.0	1.0	0.0	100.0
CLUSTERING SIZE				
CLST	0.0	0.0	0.0	4.0
EQUILIBRIUM CLUSTERING COEFFICIENT				
KEQ0	0.0	0.0	0.0	2.72E-17
KEQE	0.0	0.0	0.0	-0.305
DECLUSTERING RATE				
KDC0	0.0	0.0	0.0	4.8E8
KDCE	0.0	0.0	0.0	2.6

表 A2

NAME ORNT	STEAM	WET	DRY	NEUTRAL
LINEAR OXIDE GROWTH RATE				
LRTE(111)	2.717E6	2.717E6	1.038E5	0.0
LRTE(100)	1.617E6	1.617E6	6.181E4	0.0
LREA(111)	2.05	2.05	2.00	0.0
LREA(100)	2.05	2.05	2.00	0.0
PARABOLIC OXIDE GROWTH RATE				
PRTE(111)	6.43	6.43	12.87	0.0
PRTE(100)	6.43	6.43	12.87	0.0
PREA(111)	0.78	0.78	1.23	0.0
PREA(100)	0.78	0.78	1.23	0.0

附录二 SEDAN-1 的输入文件书写格式^[3.1]

本附录为集成电路工艺和器件模拟技术的初学者提供练习器件模拟输入文件

书写用. 作者多年教学经验证明, “有了这一练习, 再通过阅读更先进和实用的工艺模拟器的用户手册, 就不难掌握更复杂的, 例如 MEDICI 等器件模拟器的输入文件书写, 从而顺利地使用它们.”

SEDAN-1 输入格式

1. 引言

SEDAN-1 的输入信息由输入数据文件中一系列语句说明, 语句共有 3 类; 第一类为预置初始状态/分析类, 共包括 TITLE(题名)、COMMENT(注解)、GRID(网格)、DEVICE(器件)、PROFILE(剖面分布)、BIAS(偏置)、COMPUTE(计算)、END(结束)等语句; 第二类为输出类, 包括 PRINT(打印)及 PLOT(绘图)语句; 第三类为模型类, 只有一种 MODEL(模型)语句. 每一语句由上列语句类型标识符之一以及随后的参数表或字符串组成. 参数表或字符串同语句标识符的分隔用一个逗号或用一个或多个空格. SEDAN-1 的输入处理器只读一行中的头 72 列. 若一个语句中的参数一行写不完, 可写在下一行, 即所谓续行, 续行用一个加号(+)作为第一个非空格字符. 用字符串代替参数表语句类型不许有续行. 所有空行都不作处理. TITLE、COMMENT 和 END 语句中用字符串不用参数表. TITLE 语句中的字符串被用于输出子程序, 而 COMMENT 或 END 语句中的字符串对程序的执行及结果的输出均无作用. 用参数表的那些语句中的参数, 用一个参数名以及同它相等的值来说明(即 NAME = VALUE), 下面我们将会看到对于逻辑参数 NAME 右边的部分(= VALUE)不是必须的. NAME = VALUE 的对, 可以任何次序出现在参数表中. 相互之间用逗号或用一个或多个空格隔开. 允许在语句中有注解. 但必须用一个键盘字符“\$”(美元单位符号)来分隔.(详见后面有关 COMMENT 语句的描述)赋给不同参数的值的基本类型有 3 种: 数值的、逻辑的或字符. 后面将描述的各类型语句中, 赋给一个参数的值的类型由下列符号之一表示.

表 B1

符 号	赋值类型	例子及说明
N	NUMERICAL	10. , 2 , 1. 28 E-14 , 350. 236
L	LOGICAL	T , TRUE , Y , YES , F , FALSE , N , NO ;若参数置 TRUE , 只要写上参数名, “= Y”等都不必写. 例如 :PLOT EFIE=Y 等效于 PLOT EFIE
D	DEVICE TYPE	NPNT , MOSC , PNDI , NPNR
P	PROFILE TYPE	SUPR , ANAL
F	LAYER TYPE	CNST , EXPO , GDIF , ERFC , GIMP

2. 语句及语句格式

(1) TITLE 语句

TITLE 语句说明用在打印及绘图子程序作为标识输出的字符串,同时使许多程序数据缓冲器预置初始状态. 所以它必须是任何输入数据文件序列的第一个语句. TITLE 语句说明的字符串打印在每个输出的标题页的开始处. TITLE 语句的格式是:

TITLE 字符串

(2) COMMENT 语句

COMMENT 语句可放在输入文件中的任何处. 键盘字 COMMENT 后的任何字符串,在 SEDAN-1 程序的执行和结果的输出中不起任何作用,仅能用作用户对输入数据文件的注解. 星号(*)能用来代替键盘字 COMMENT. 允许在行中注解. 在注解字符串前必须用一个美元单位符号(\$). 字符串同样对程序的执行和结果的输出不起任何作用. COMMENT 语句的格式是:

COMMENT 字符串

* 字符串 或
—— — — — — \$ 字符串

(3) END 语句

END 语句用作终结程序,所以必须是输入文件中的最后一个语句. 若有任何字符串,则该字符串同样对程序的执行和结果的输出不起任何作用. END 语句的格式是:

END 字符串

(4) GRID 语句

SEDAN-1 程序模拟的一维空间最多可由 400 个格点表示,可以将总模拟空间分成几个区域,每个区域有均匀的网格间距(两个相邻网格点之间的距离). 大多数情况不需要用 400 个网格点. 对于十分陡的杂质分布或十分浅的基区就需要足够多的格点. 解的精确度同网格的选择密切相关. 为满足不同区域对精度的不同需求,将网格分成几个区域是必要的. 每个区域用户需要一个 GRID 语句说明网格. GRID 语句必须紧跟 TITLE 语句. 每条 GRID 语句的格式是:

GRID NREG = N NSTP = N STSZ = N

这里

NREG 区域的序号数,从模拟空间的开始处起算. NPN 晶体管及 PN 结二

极管起算点取在氧化物——硅界面处 ;MOS 电容 ,起算点取在栅极和氧化物的接触处.

NSTP 区域中的步数.

STSZ 区域的网格间距(用微米表示).

每个区域都必须说明这些参数 ,所以在总模拟空间内分成多少个区域就必须用多少条 GRID 语句. 所有区域的 NSTP 的和不能大于 400. 在 SEDAN-1 的输入杂质分布直接取自工艺模拟程序 SUPREM-2 的情况下, 用户已经通过 SUPREM-2 中的 YMAX 知道了模拟空间的深度 ,若 SEDAN-1 模拟空间的深度用大于 SUPREM-2 中所用深度 ,则 SUPREM-2 中最后格点的杂质浓度值将延伸到实际的新的总深度. 网格间距对于杂质是常数或慢变化分布, 可取 0.1 微米 ,对于十分陡的分布 ,可取 0.01 微米或 0.005 微米.

下面列出一个书写实例 :

```
GRID NREG = 1   STSZ = .02   NSTP = 50
GRID NREG = 2   STSZ = .01   NSTP = 100
GRID NREG = 3   STSZ = .05   NSTP = 80
```

(5) DEVICE 语句

DEVICE 语句用来说明所分析的器件类型. DEVICE 语句必须紧跟在 GRID 及 TITLE 语句后面. 其格式为 :

```
DEVICE TYPE = D (BACO = N )(OXTH = N )
```

这里以及以后遇到的用圆括号括起来的是可供选取的参数. D

可以是下列几种之一 :

NPNT 双极型 NPN 晶体管正向分析 ;

MOSC MOS 电容 ;

PNDI PN 结二极管或一般的二端剖面分布 ;

NPNR 双极型 NPN 晶体管反向分析或倒置分析.

若 TYPE=NPNR SEDAN-1 程序将输入分布(解析或来自 SUPREM-2 的)倒置后执行分析. 这样可以得到器件的倒置特性. 这对于 I^2L 的杂质分布特别有用 ,那里表面扩散层实际上是集电区而埋层是发射区. 于是 β 、电流等的打印值将对应于倒置 β 、倒置电流等. DEVICE 语句中的基极接触以及 BIAS 语句中的电压 ,必须保持与正向分析时相同. 所以简单地用 TYPE=NPNR 替换 TYPE=NPNT 就可以实现晶体管倒置工作方式下的分析.

可以只用写器件的名字代替 TYPE= D

TYPE = NPNT 可用 NPN , FORWARD 代替
TYPE = MOSC 可用 MOS , CAPACITOR 代替
TYPE = PN DI 可用 PN , DIODE 代替
TYPE = NPNR 可用 NPN , REVERSE 代替

于是就有例如下列两个语句完全等效

```
DEVICE TYPE = NPNT. . .  
DEVICE NPN , FORWARD. . .  
BACO(也可写成 BASE , CONTACT)TYPE = NPNT 时的基区接触程序必须考虑的深度(单位用微米).  
OXTH(也可写成 OXIDE , THICKNESS)TYPE = MOSC 时氧化层的厚度(单位用微米).
```

下面列出几个 DEVICE 语句书写实例：

```
DEVICE TYPE = NPNT      BACO = 1.1  
DEVICE NPN. FORWARD    BASE CONTACT = 1.1  
DEVICE TYPE = MOSC      OXTH = .1  
DEVICE MOS. CAPACITOR OXIDE. THICKNESS = .1
```

最后一条语句也可写成一种简化的形式

```
DEVICE M OXI = .1
```

(6) PROFILE 语句

PROFILE 语句包含杂质分布信息. 在 MOS 电容的分析中, 若分布由 SUPREM-2 说明, 在 SUPREM-2 中的氧化厚度值不被采用. 而采用 DEVICE 语句中给定的氧化层厚度的数据. SEDAN-1 中的网格说明必须照顾氧化层以及从 SUPREM-2 输出要求的深度, 而对于 MOS 电容, 若杂质分布用解析说明, 深度参数必须栅极和氧化层的接触处而不是 Si—SiO₂ 界面为参考. 若输入文件中杂质分布用解析说明则 PROFILE 语句的格式用：

```
PROFILE TYPE = ANAL NLAY = N   TLAY = F   PAR1 = N   PAR2 = N   PAR3 = N
```

若输入文件中杂质分布取自 SUPREM-2 则用：

```
PROFILE TYPE = SUPR LUNM = N
```

若输入文件用解析说明, 将由若干层构成(大至 10)每一层需要一个 PROFILE 语句. 若输入分布读自 SUPREM-2, LUNM 参数表示文件号码, 程序将按这个号码读一个事先建立的 SUPREM-2 SAVE 文件. SAVE 文件在 SUPREM-2 中已经以 TYPE=A 或 TYPE=B 格式建立起来.

NLAY 层的序号数

TLAY = F (也可写成 TYPEOFLAYER), TYPEOFLAYER 可以是下列几种情形之一: CNST 为常数杂质分布, EXPO 为指数分布, GDIF 为高斯扩散分布, ERFC 为余误差函数分布, GIMP 为高斯注入分布.

PAR1, PAR2, PAR3 是有不同意义的 3 个参数, 同它们所描写的类型有关:

(i) 若是常数类型. 则 PAR1 是常数层的始点, 单位用微米; PAR2 是常数层的末端, 单位用微米; PAR3 是浓度值, 负为 N 型, 正为 P 型(厘米⁻³).

(ii) 若是 GDIF 或 EXPO 或 ERFC 类型. 则 PAR1 是扩散表面(0 定在 X=0 处, 1 定在 X=LASTX 处); PAR2 是扩散长度, 单位用微米; PAR3 是表面浓度(厘米⁻³), 负为 N 型, 正为 P 型. 所用杂质分布方程是: 对于高斯扩散

$$C(X) = PAR3 * EXP[-(|L * PAR1 - X|/PAR2) * * 2]$$

对于误差函数或指数分布

$$C(X) = PAR3 * ERFC(|L * PAR1 - X|/PAR2)$$

$$C(X) = PAR3 * EXP(-|L * PAR1 - X|/PAR2)$$

(iii) 若是 GIMP 类型, 则 PAR1 是高斯分布的射程(微米); PAR2 是标准偏差(微米); PAR3 是浓度的峰值(厘米⁻³). 所用杂质分布方程是:

$$C(X) = PAR3 * EXP - ((X - PAR1)/PAR2) * * 2$$

PROFILE 语句的实例(有隐埋层的双极型分布)

```
PROFILE TYPE = ANAL
```

```
PROFILE NLAY = 1 TLAY = CNST PAR1 = 0 PAR2 = 5 PAR3 = - 1E15
```

```
PROFILE NLAY = 2 TLAY = GDIF PAR1 = 0 PAR2 = . 33 PAR3 = - 1E19
```

```
PROFILE NLAY = 3 TLAY = GDIF PAR1 = 0 PAR2 = . 95 PAR3 = 3. 64E16
```

```
PROFILE NLAY = 4 TLAY = GDIF PAR1 = 1 PAR2 = . 33 PAR3 = - 1E19
```

或

```
PROFILE TYPE = SUPR LUNM = 22
```

(7) BIAS 语句

BIAS 语句说明执行分析时所需要的电压值. 为定义一组偏置点, 只需要说明第一个电压, 最后一个电压以及电压步长. 存在两种电压一起递增的情况时, 若两个电压中的第一个达到最大值电压后, 这个电压随后的偏置点将取这个最大值

电压.

BIAS 语句的格式是：

BIAS XXXF = N XXXL = N XXXS = N XXXF = N XXXL = N XXXS = N

电压的名字是不同的,它同所分析的器件有关.

对于 NPN 的正向或 NPN 的反向

VBEF = 第一个基极—发射极电压

VBEL = 最后一个基极—发射极电压

VBES = 基极—发射极电压的步长, VBE 以 VBES 为步长从 VBEF 增至 VBEL

VCEF = 第一个集电极—发射极电压

VCEL = 最后一个集电极—发射极电压

VCES = 集电极—发射极电压的步长

对于 MOS 电容

VGSF = 第一个栅—源电压

VGSL = 最后一个栅—源电压

VGSS = 栅—源电压的步长

VSBF = 第一个源—衬底电压

VSBL = 最后一个源—衬底电压

VSBS = 源—衬底电压的步长

VFBA = 平带电压

对于 PN 结二极管

VDDF = 第一个二极管电压

VDDL = 最后一个二极管电压

VDDS = 二极管电压的步长

若 XXXF=XXXL,则仅有一点被描述,就无需说明 XXXS PN 结二极管电压加在第一个网格点到最后一个网格点之间.

(8) COMPUTE 语句

COMPUTE 语句通常在有要求算非常规计算的电参数时用. 这些参数不是 SEDAN-1 常规计算的参数. 因为它们需要大量附加计算. 例如,在计算电容时,由 SEDAN-1 分析的偏置点数实际上是用户说明的两倍. 实际上 SEDAN-1 用电压的小增量(MODEL 语句中的 DELTV)重复计算,而计算结电容用两个增量偏置点之间集积电荷的差值同 DELTV 的比值. 对于 MOS 电容的计算,SEDAN-1 不执

行电荷的数值积分,用在氧化层中电场的变化来替代两个增量偏置点之间电荷变化的计算.这样可消除由数值积分引入的不可避免的误差.必须注意若需要计算电容,偏置电压必须用合适的方法说明,以保证对正向或反向结电容以及 MOS 电容有好的计算结果.

对 f_T (截止频率)的计算,在用户说明了一组偏置点以后,实际上 SEDAN-1 分析一组新的固定偏置点($V_{CB}=0$, $V_{BE}=0.45$ 到 $V_{BE}=0.9$),然后计算 TEC(整个发射极到集电极的延迟时间).它是 DQ (NPN 器件中所有空穴的增量变化)同 DJC (集电极电流密度的增量变化)之比.而 f_T 由 $1/(2 * \pi * TEC)$ 计算. SEDAN-1 也计算基区渡越时间 TB ,用 Q_B/J_C ,这里 Q_B 是基区准中性区中的过剩少数电荷.这样就可以比较 TB 和 TEC 以及分析基区渡越时间在总的延迟时间中的重要性.若 TEC 用在类似于 SLIC 的电路模拟程序中,所用的 f_T 参数值是一个对应于 f_T 峰值(也即 TEC 的最小值)的值.

在 V_A (Early 电压)计算中,在用户说明了偏置点组后,SEDAN-1 分析一组固定的新的偏置点($V_{BE}=0.6$, $V_{CE}=0.4$ 到 $V_{CE}=0.8$)且从 $J_C \sim V_{CE}$ 特性曲线外推得出 Early 电压,用这种方法可以算得一组 Early 电压.用在 SLIC 或 SPICE 中的 Early 电压值能够取平均值.但是也能分析 Early 电压值偏差的情况.

在 COMPUTE 语句中所用的参数都是逻辑参数.说明或不说明对应于请求或不请求作特有的计算. COMPUTE 语句的格式是:

```
COMPUTE(CJE)(CJC)(FT)(VA)(CJD)(MOS. CAPA)
```

CJE 为基极——发射极结电容(仅为 NPN)的计算请求

CJC 为基极——集电极结电容(仅为 NPN)的计算请求

FT 为截止频率,总的发射极到集电极延迟时间(TEC)以及基区渡越时间(TB)(仅为 NPN)的计算请求.

V_A 为 Early 电压的计算(仅为 NPN)

CJD 为二极管结电容的计算(仅为二极管)

MOS. CAPA 为 MOS 电容的计算(仅为 MOS)

3. 输出语句

OUTPUT 语句是 PRINT 和 PIOT 语句.它们用来控制打印输出.

(1) PRINT 语句

PRINT 语句控制 SEDAN-1 的打印数字输出.有两个基本类型,第一个称作标题信息类型,由 PRINT 语句的 HEAD 参数控制.例如,对于双极型晶体管,标题页包括每一偏置点端电流密度的值,每一不同类型层的薄层电阻,DC 电流增益

β , 发射极和基极的 GUMMEL 数以及其他有用信息. 打印数字输出的第二个类型分成 3 组数据. 3 个逻辑参数控制 3 组打印输出. 当 3 个参数中的每一个置 TRUE 时所给出的信息. 在下面语句格式的描述中描写.

PRINT 语句的格式是:

```
PRINT(HEAD = L )(PRT1 = L )(PRT2 = L )(PRT3 = L )
```

HEAD 控制一般信息和有用数据的标题页. 在第一个(或只有)偏置点是 $V_{BE}=0$ 及 $V_{CE}=0$ 时执行 JSS(饱和电流密度)的计算. 在强反型工作区的一组偏置点(至少 2 点)被说明时执行 MOS 阈电压计算.

PRT1 控制网格数, 相应于每个网格数的深度(用微米表示), 电子静电势, 电子和空穴浓度, 净复合率, 电子和空穴电流密度等的打印输出.

PRT2 控制网格数, 相应于每个网格数的深度(用微米表示), 电子静电势场, 电子和空穴准费米势的打印输出.

PRT3 控制一个包含每次迭代时所有矩阵元的调试输出.

PRINT 语句的格式也可表示为

```
PRINT(HEAD)(1)(2)(3)
```

(2) PLOT 语句

PLOT 语句控制 SEDAN 的绘图输出(执行 IBM 文本时用宽行打印机输出). 所有参数(除 CMIN 和 CMAX)用逻辑值表示, 补缺值用 FALSE. 每个参数置 TRUE 产生一张两页的图. 有两组不同的图: 一组是深度关系, 将在每个偏置点后给出, 一组是偏置关系, 将在一系列偏置点的最后, 至少 4 个偏置点之后绘出.

PLOT 语句的格式是:

```
PLOT (EFIE = L )(PHIN = L )(PHIP = L )(PSIP = L )(NCON = L )  
+ (HCON = L )(ECON = L )(BETA = L )(CCDE = L )(BCDE = L )  
+ (BEJC = L )(BCJC = L )(DDJC = L )(NETQ = L )(ELEQ = L )  
+ (HOLQ = L )(CMIN = N )(CMAX = N )
```

或可写成:

```
PLOT (E.FIELD)(PHIN)(PHIP)(POTENTIAL)(NET.CONC)(HOLE.CON)  
+ (ELEC.CON)(BETA)(JC)(JB)(CJE)(CJC)(CJD)(QNET)(QN)  
+ (QP)(CMIN = N )(CMAX = N )(JD)(MOS.CAPA)(TEC)
```

为首的 7 个是深度关系参数, 深度用 X 轴表示. 所有的其他参数是偏置关系, X 轴表示适当的电压或电流密度. 偏置点愈多, 图的精确度愈高(偏置点最大值为

60) 小于 4 个偏置点时, 不作图. 图的界限是自动置的. 但杂质浓度可以(但不是一定)去置图的界限(应用参数 CMIN 及 CMAX). 所有的浓度图有相同的标度, 这一点可能是有用的, 若 CMAX—CMIN 是 5 的倍数, 则这个图正巧适合纸上的最大空间.

EFIE	(也可用 E. FIELD 表示)控制电场~深度图(线性)
PHIN	控制电子准费米能级~深度图(线性)
PHIP	控制空穴准费米能级~深度图(线性)
PSIP	(也可用 POTENTIAL 表示)控制静电势~深度图(线性)
NCON	(也可用 NET. CONC 表示)控制净杂质浓度~深度图(常用对数)
HCON	(也可用 HOLE. CON 表示)控制空穴浓度~深度图(常用对数)
ECON	(也可用 ELEC. CON 表示)控制电子浓度~深度图(常用对数)
BETA	控制 DC 电流增益 BETA~JC(集电极电流密度)图, 仅在最后偏置点之后(常用对数)
CCDE	(也可用 JC 表示)控制集电极电流密度~VBE 图, 仅在最后偏置点之后(常用对数)
BCDE	(也可用 JB 表示)控制基极电流密度~VBE 图, 仅在最后偏置点之后(常用对数)
BEJC	(也可用 CJE 表示)控制基极发射极结电容~VBE 图, 仅在最后偏置点之后(线性)
BCJC	(也可用 CJC 表示)控制基极集电极结电容~VBC 图, 仅在最后偏置点之后(线性)
DDJC	(也可用 CJD 表示)控制二极管结电容~VD 的图, 仅在最后偏置点之后(线性)
NETQ	(也可用 QNET 表示)控制一个 MOS 二极管净电荷密度~表面势的图, 仅在最后偏置点之后(常用对数)
ELEQ	(也可用 QN 表示)控制一个 MOS 二极管电子电荷密度~表面势的图, 仅在最后偏置点之后(常用对数)
HOLQ	(也可用 QP 表示)控制一个 MOS 二极管空穴电荷密度~表面势的图, 仅在最后偏置之后(常用对数)
CMIN	置浓度~深度图的较低的界限(用 10 的次方数). 若要几张图, 这个界限将适合于所有要作的图
CMAX	置浓度~深度图的较高的界限(用 10 的次方数)
JD	控制二极管电流密度~VD 的图, 仅在最后偏置点之后(常用对数)

MOS. CAPA 控制 MOS 电容和氧化层电容的比~栅源电压的图,仅在最后偏置点之后(线性)

TEC 控制整个发射极到集电极的延迟时间~集电极电流密度的图(在 FT 回路的末端处)(常用对数)

4. 模型语句

MODEL 语句包含物理模型说明,物理常数值,当请求瞬态分析时时间增量的说明(仅为双极晶体管及二极管)以及其他通用的实用参数. MODEL 语句的格式用:

```
MODEL (SRHR = L )(AUGE = L )(BGNW = L )(TINC = N )(CNAU = N )  
+ (CPAU = N )(ELFT = N )(HLFT = N )(MOBF = N )(MOB0 = N )  
+ (MOB1 = N )(MOB2 = N )(MOB3 = N )(MOB4 = N )(MOB5 = N )  
+ (MOB6 = N )(MOB7 = N )(MOFE = N )(MOFH = N )(NSRH = L )(DELV = N )
```

或可写成

```
MODEL (SRH)(AUGER)(BGN)(Timestep = N )(CN. AUGER = N )  
+ (CP. AUGER = N )(E. LIFETIME = N )(H. LIFETIME = N )  
+ (MOB. DATA)(MOB0 = N )(MOB1 = N )(MOB2 = N )  
+ (MOB3 = N )(MOB4 = N )(MOB5 = N )(MOB6 = N )  
+ (MOB7 = N )(MOBN = N )(MOBP = N )(DELTV = N )(NSRH = N )
```

SRHR (也可用 SRH 表示)是一个逻辑标记,它控制 Shockley-Read-Hall 复合机构. 若不说明则 Shockley-Read-Hall 复合插在模型中,但使用常数电子和空穴寿命(等于补缺值或 ELFT 及 HLFT 中说明的值);若 SRHR 被说明,寿命同浓度的关系插在模型中.

AUGE (也可用 AUGER 表示)是一个逻辑标记. 它控制 AUGER 复合机构. 若被说明,则 AUGER 复合被插在模型中.

BGNW (也可用 BGN 表示)是一个逻辑标记. 它控制“带隙变窄”的物理机构. 若被说明,则计入带隙变窄.

TINC (也可用 Timestep 表示)用于瞬态分析,它指出在此时间(用秒表示)后需要一个瞬态解. 由于在连续性方程的时间方面存在离散性,对于 MOS 结构不能执行瞬态分析(仅仅能解泊松(poisson)方程). 若 TINC 被说明,在 BIAS 语句中,只要求有一个偏置点.

CNAU (也可用 CN. AUGER 表示)AUGER 复合机构公式中的一个常数.

CPAU (也可用 CP. AUGER 表示)AUGER 复合机构公式中的一个常数.

描述 AUGER 复合机构的公式

$$U(\text{AUGER}) = \text{CNAU} * (P * N * * 2 - N * \text{NIE} * * 2) + \text{CPAU} * (N * P * * 2 - P * \text{NIE} * * 2)$$

ELFT (也可用 E. LIFETIME 表示) Shockley-Read-Hall 复合机构中的电子寿命.

HLFT (也可用 H. LIFETIME 表示) Shockley-Read-Hall 复合机构中的空穴寿命.

描述 Shockley-Read-Hall 复合机构的公式为:

$$U(\text{SRH}) = (N * P - \text{NIE} * * 2) / (\text{TCN} * (N + N_1) + \text{TCP} * (P + P_1))$$

这里 $\text{TCN} = \text{ELFT} / (1 + (\text{NT}(\text{X}) / \text{NSRH}))$

而 $\text{TCP} = \text{HLFT} / (1 + (\text{NT}(\text{X}) / \text{NSRH}))$

MOBF(也可用 MOB. DATA 表示)是一个逻辑标记,它允许用户在两种计算以总杂质浓度为函数的迁移率数组之间选择.若 MOBF 被说明,两个迁移率数组(电子和空穴)用内插一组近期的研究数据计算.这就允许新的数据一旦可利用就可用来执行.若 MOBF 不被说明(FALSE),SEDAN-1 使用美国国家标准局(NBS)关系.在这种情况下,下面的 NBS 关系中的参数 MOB0 到 MOB7 可以应用(见本节末尾列出的补缺值).

对于电子有

$$\text{MOB}(\text{N}) = (\text{MOB0} + (\text{MOB1} - \text{MOB0}) / (1 + (\text{N}(\text{X}) / \text{MOB2}) * * \text{MOB3}))$$

对于空穴有

$$\text{MOB}(\text{N}) = (\text{MOB4} + (\text{MOB5} - \text{MOB4}) / (1 + (\text{N}(\text{X}) / \text{MOB6}) * * \text{MOB7}))$$

MOB0 到 MOB7 是上述关系式中的常数,MOB0 到 MOB3 是有关电子的,而 MOB4 到 MOB7 是有关空穴的.补缺值见本节末尾.

MOFE 及 MOFH(也可用 MOBN 及 MOBP 表示)是电子(MOFE)和空穴(MOFH)迁移率同电场关系式中的两个常数.关系式为:

$$\text{MOB}(\text{E}) = \text{MOB}(\text{N}) * (1 + \text{E}(\text{X}) / \text{MOFE}) * * - 1 \quad \text{对于电子}$$

$$\text{MOB}(\text{E}) = \text{MOB}(\text{N}) * (1 + \text{E}(\text{X}) / \text{MOFH}) * * - 1 \quad \text{对于空穴}$$

补缺值见本节末尾

NSRH 上述 Shockley-Read-Hall 复合机构的寿命同浓度关系式中所用的一个常数值.

DELV (也可用 DELTV 表示)计算电容时用的电压步长.每个偏置点由用

户说明, SEDAN-1 实际上执行由 DELTV 伏(补缺值是.05)分开的两次计算,用总电荷之差同 DELTV 之比计算电容. DELTV 用于结电容及 MOS 电容.

补 缺 值

SRHR = FALSE	AUGE = FALSE	BGNW = FALSE
TINC = 1(秒—稳态)	CNAU = $2.8E-31$	CPAU = $9.9E-32$
ELFT = $1E-6$	HLFT = $1E-6$	MOBF = FALSE
MOB0 = 1407.3	MOB1 = 71.1	MOB2 = $1.1E17$
MOB3 = .729	MOB4 = 467.7	MOB5 = 49.7
MOB6 = $1.6E17$	MOB7 = 0.700	MOFE = $7.396E3$
MOFH = $2.0E4$	NSRH = $5.1E16$	DELV = .02

附录三 MINIMOS-2 的输入文件书写格式^[4.1]

给出本附录的目的同给出附录一、附录二相同. 由于 MINIMOS-2 是奥地利 Vienna 工业大学开发的,而 SEDAN-1 是美国 Stanford 大学开发的,因而通过阅读本附录及和附录二比较可了解不同开发单位所用的器件模拟器输入文件书写格式的异同.

事实上,所有集成电路工艺和器件模拟器(包括近代发展的 SUPREM-4 和 MEDICI)随着模拟功能的不断增强其输入文件及有关规定的复杂程度也不断增加,但输入文件中语句的格式基本上还是

语句名 字符串及/或 参数名 = 参数的赋值

MINIMOS-2 输入格式

1. 概述

MINIMOS 的输入参数由输入数据文件中一系列行(指令)描述. 每行只有前面 80 个字符能读入,并写到输出文件中,供用户查看他的输入卡的序列. 在 80 个字符中,只有前面 72 个字符提供语法分析的有用信息. 数据文件中的第一行称为 title 卡,这一行的内容仅用作打印输出页的标记. title 卡不可省略.

所有其他卡遵从一种简单的语法规则,其格式为:

"IDENT", "KEY 1" = "VALUE 1", ..., "KEYi" = "VALUEi", ...

"IDENT"可以是以下字符串的任一种：

DEVICE, BIAS, STEP, PROFILE, IMPLANT, OPTION, OUTPUT, END. 任何"IDENT"仅前面两个字符是重要的, 允许缩写. "IDENT"用一个空格, 一个逗号, 或用一个星号(*)来定界. 任何指令能在下一行继续, 续行要在第一列用一个加号(+). 注解信息可放在输入信息流中的任何地方, 用一个星号(*)标记注解的开始, 一行的开始用星号, 则该行为注解行, 而星号出现在一个行的任一列, 则这一行的星号以后的部分为注解部分. 在续行内允许有注解. 忽略所有空白行, 但在继续的"IDENT"内不允许有空白行. 忽略在"IDENT"前面的空格.

在任何 MINTMOS 输入文件中, 具有适当 Keys 的 DEVICE, BIAS, PROFILE 以及 END "IDENT"是必须的. STEP, IMPLANT, OPTION 及 OUTPUT "IDENT"是任选的. 各种"IDENT"可以以任何次序出现在输入文件中, 但 END 除外, 它要放在最后, 以标记输入信息流的结束.

各种"IDENT"以及有关参数, 在下面描述.

2. DEVICE "IDENT"

DEVICE "IDENT"说明器件的主要物理参数, 可能有以下"KEYi"s.

DEVICE CHANNEL = 'type' GATE = 'Mat' TOX = 'num' L = 'num' W = 'num'

任何一个"KEYi"仅第一个字符是重要的.

☞ CHANNEL

这个"KEYi"说明器件的类型, 'type'可以是 N 或 P, 分别对应于 n 沟或 p 沟器件. 仅第一个字符是重要的. CHANNEL "KEYi"不能省略.

☞ GATE

这个"KEYi"说明栅材料. 'mat'可以是 AL, NPOLY 或 PPOLY 分别标志铝, n 型掺杂多晶硅及 p 型掺杂多晶硅. 仅第一个字符是重要的. GATE "KEYi"不能省略, 除非在 OPTION "IDENT"中给出 UFB "KEYi", 在这种情况下, 才能省略 GATE "KEYi".

☞ TOX

这个"KEYi"说明栅氧化层的厚度, 单位为厘米. 'num'可以是 10^{-6} 到 10^{-3} 范围内的任意值. TOX "KEYi"不能省略.

☞ W

这个"KEYi"说明沟道宽度, 单位为厘米. 'num'可以是 2×10^{-4} 到 0.1 范围内的任意值. W "KEYi"不能省略.

L

这个“KEYi”说明沟道长度,单位为厘米. 'num'可以 2×10^{-5} 到 2×10^{-3} 范围内的任意值. L “KEYi”不能省略.

3. BIAS “IDENT”

BIAS “IDENT”用来说明模拟被执行的工作点,可能有以下“KEYi”s.

BIAS US = 'num' UB = 'num' UG = 'num' UD = 'num'

对于任一“KEYi”前面两个字符是重要的.

US

这个“KEYi”说明使用的源电压,单位为伏特. 'num'可以是一20 到 20 范围内的任意值. 若省略这一“KEYi”则假设源电压为零.

UB

这个“KEYi”说明使用的体电压,单位为伏特. 'num'可以是一20 到 20 范围内的任意值. 若省略这一“KEYi”,则假设 $UB = US$.

UG

这个“KEYi”说明使用的栅电压,单位为伏特. 'num'可以是一20 到 20 范围内的任意值. 这个“KEYi”不能省略,除非选择行中用了 $MODEL = THRES$. (见 $OPTION$ “IDENT”)

UD

这个“KEYi”说明使用的漏电压,单位为伏特. 'num'可以是一20 到 20 范围内的任意值. UD “KEYi”不能省略.

为了物理上的合理性,应注意输入数据的校验. 例如 $UD - US$ 和 $US - UB$ 为 n 沟器件必须为正,为 p 沟器件必须为负. 这种合理性的校验由 $PHYSCK$ “KEYi”控制(见 $OPTION$ “IDENT”).

4. STEP “IDENT”

STEP “IDENT”说明任一使用电压步进的序列. 可能有以下“KEYi”s.

STEP DB = 'num' NB = 'num' DG = 'num' NG = 'num' DD = 'num' ND = 'num'

对于任一“KEYi”前面两个字符都是重要的.

DB

这个“KEYi”说明体电压的增量,单位为伏特. 'num'可以是一5 到 5 范围内的任意值. 绝对值必须大于或等于 0.1. DB “KEYi”可以省略,但是若被说明,则 NB “KEYi”也必须给出.

NB

这个“KEYi”说明执行体电压步进的次数。‘num’可以是 1 到 10 之间的任意值。分数部分被截去。NB “KEYi”可以省略,但是若被说明,则 DB “KEYi”也必须给出。

Ⓔ DG

这个“KEYi”说明栅电压的增量,单位为伏特。‘num’可以是一 5 到 5 范围内的任意值。绝对值必须大于或等于 0.1。DG “KEYi”可以省略,但是若被说明,则 NG “KEYi”也必须给出。然而,若选择行中用了 MODEL = THRES(见 OPTION “IDENT”)则 DG “KEYi”和 NG “KEYi”都不能出现。

Ⓕ NG

这个“KEYi”说明执行栅电压步进的次数。‘num’可以是 1 到 10 之间的任意值。分数部分被截去。NG “KEYi”可以省略,但是若被说明,则 ND “KEYi”也必须给出。

Ⓖ DD

这个“KEYi”说明漏电压的增量,单位用伏特。‘num’可以是一 5 到 5 范围内的任意值。绝对值必须大于或等于 0.1。DD “KEYi”可以省略,但如果被说明,则 ND “KEYi”也必须给出。

Ⓖ ND

这个“KEYi”说明执行漏电压步进的次数。‘num’可以是 1 到 10 之间的任意值。分数部分被截去。ND “KEYi”可以省略,但若被说明,则 DD “KEYi”也必须给出。

为了物理上的合理性应注意输入数据的校验,除非 PHYSCK “KEYi”置 NO。因为 $UD+i \times DD-US$, ($i=1, ND$), 以及 $US-UB-i \times DB$, ($i=1, NB$), 必须在 0 到 20 和 0 到 -20 范围内,分别为 n 沟和 p 沟器件。

5. PROFILE “IDENT”

PROFILE “IDENT”说明源/漏掺杂分布及体掺杂分布或一个可以被读入源/漏及沟道掺杂分布的外部文件。可能有以下“KEYi”s。

```
PROFILE FILE = 'log' LFIT = 'num' NB = 'num' NS = 'num' TEMP = 'num' TIME = 'num'
+ ELEM = 'dop' DOSE = 'num' AKEV = 'num' TOX = 'num'
```

对于任一“KEYi”,前面两个字符是重要的。

确定源/漏分布存在 3 种可能性。一旦用户已选用了其中的一种,则有关语句必须确切地出现(在括号内的“KEYi”s 可略去)。

```
1. FILE = YES(LFIT = 'num')
```

2. NB = 'num' NS = 'num' TEMP = 'num' TIME = 'num' (FILE = NO)
3. NB = 'num' ELEM = 'dop' TEMP = 'num' TIME = 'num' DOSE = 'num'
AKEV = 'num' (TOX = 'num') (FILE = NO)

FILE

这个“KEYi”说明是否掺杂数据读自外部文件. 外部文件的格式见后面的附录 A. 'log' 可以是 YES 或 NO. 只有第一个字符是重要的. 若 FILE = YES 被说明, 则 NB, NS, TEMP, TIME, ELEM, DOSE, AKEV 和 TOX “KEYi”s 不需要给出.

LFIT

这个“KEYi”说明在用外部文件掺杂数据情况下的亚扩散(subdiffusion)拟合参数. 'num' 可以取 0.1 和 2 之间的任何值. LFIT “KEYi”可以略去, 但若被说明, FILE “KEYi”必须给出, 且用 log = YES, 而 NB, NS, TEMP, TIME, ELEM, DOSE, AKEV 和 TOX “KEYi”不需要给出. 若只有 FILE “KEYi”被说明, 则 LFIT 用补缺值 0.7.

NB

这个“KEYi”说明体掺杂浓度, 单位为厘米⁻³. 'num' 可以是 5×10^{13} 和 5×10^{17} 之间的任何值. NB “KEYi”必须说明, 除非 FILE = YES 已给出. 在这种情况下 NB “KEYi”必须省略.

NS

这个“KEYi”说明源/漏杂质预淀积的表面浓度, 单位为厘米⁻³. 'num' 可以是 10^{17} 到 10^{21} 范围内的任意值. 若 NS “KEYi”被说明, 则 ELEM, DOSE, AKEV 和 TOX “KEYi”s 不要说明. 磷和硼分别为 n 沟和 p 沟的掺杂剂. 说明值必须至少比体掺杂浓度高 100 倍. 若 FILE = YES 被说明或已给出了 ELEM, DOSE 和 AKEV “KEYi”则 NS “KEYi”必须省略.

TEMP

这个“KEYi”说明源/漏掺杂的扩散温度, 单位为℃. 'num' 可以是 800 到 1300 范围内的任意值. TEMP “KEYi”必须说明, 除非 FILE = YES 已给出. 在这种情况下, TEMP “KEYi”必须省略.

TIME

这个“KEYi”说明源/漏掺杂的扩散时间, 单位为秒. 'num' 可以是 60 到 48×3600 范围内的任意值. TIME “KEYi”必须说明, 除非 FILE = YES 已给出. 在这种情况下, TIME “KEYi”必须省略.

ELEM

这个“KEYi”说明源/漏的离子注入元素. 'dop' 可以是 B, P, SB 和 AS(标志

硼、磷、锑和砷)中的任一种. 只有第一个字符是重要的. 若 ELEM “KEYi”被说明, DOSE 和 AKEV “KEYi”s 也必须说明, 而 NS “KEYi”必须略去. 对于 n 沟器件只允许用 P, SB, AS; 对于 p 沟器件只能用 B 作为掺杂剂. 若 FILE= YES 或 NS “KEYi”被说明则 ELEM “KEYi”必须略去.

DOSE

这个“KEYi”说明源/漏注入剂量, 单位为厘米⁻². 'num'可以是 10¹³ 到 10¹⁷ 范围内的任意值. 若 DOSE “KEYi”被说明, ELEM 和 AKEV “KEYi”也得说明, 而 NS “KEYi”必须略去. 若 FILE= YES 或 NS “KEYi”被说明, 则 DOSE “KEYi”必须略去.

AKEV

这个“KEYi”说明源/漏离子注入能量, 单位为千电子伏. 'num'可以是 10 到 300 范围内的任意值. 若 AKEV “KEYi”被说明, ELEM 和 DOSE “KEYi”s 也得被说明而 NS “KEYi”必须略去. 若 FILE= YES 或 NS “KEYi”被说明, 则 AKEV “KEYi”必须略去.

TOX

这个“KEYi”说明源/漏注入绝缘氧化层, 单位为厘米. 'num'可以是 0 到 10⁻³ 范围内的任意值. TOX “KEYi”可以略去. 若被说明, 则 ELEM, DOSE 和 AKEV “KEYi”也得说明而 NS “KEYi”必须略去. 若不被说明, 但 ELEM, DOSE 和 AKEV “KEYi”已知, 则一个零的补缺值被假设, 这意味着在一个没有氧化层的裸露表面注入. 若 FILE= YES 或 NS “KEYi”被说明, 则 TOX “KEYi”必须略去.

6. IMPLANT “IDENT”

IMPLANT “IDENT”说明沟道的离子注入. 若描述均匀掺杂沟道, 这个“IDENT”可省略. 对于单一注入沟道器件, 用一个 IMPLANT 指令, 对于双注入沟道器件, 用两个 IMPLANT 指令. 但退火参数只有一组, 因为两种注入经常是共同氧化的. 沟道和源/漏的温度处理完全是独立的, 没有相互影响. 沟道退火参数可以在第一个或第二个 IMPLANT 指令中说明. 若 FILE= YES 在 PROFILE 卡上被说明, 则允许不用 IMPLANT 指令. 可能有以下“KEYi”s.

IMPLANT ELEM = 'dop' DOSE = 'num' AKEV = 'num' TEMP = 'num' TIME = 'num'

对于这些“KEYi”s, 前面两个字符是重要的.

ELEM

这个“KEYi”说明沟道注入元素, 'dop'可以是 B, P, SB 和 AS(标记硼、磷、锑和砷)中的任一种. 仅第一个字符是重要的. 若任何 IMPLANT “KEYi”被说明, 则

ELEM “KEYi”不能略去.

☞ DOSE

这个“KEYi”说明沟道离子注入剂量,单位为厘米⁻². 'num'可以是 10^{10} 到 10^{17} 间的任意值. 若任何 IMPLANT “KEYi”被说明,则 DOSE “KEYi”不能略去.

☞ AKEV

这个“KEYi”说明沟道注入能量,单位为千电子伏, 'num'可以是 10 到 300 间的任意值. 若 IMPLANT “KEYi”s 中的任一个被说明,则 AKEV “KEYi”不能省略.

☞ TEMP

这个“KEYi”说明沟道离子注入退火温度,单位为℃. 'num'可以是 800 和 1 300 之间的任何值. TEMP “KEYi”不能省略,如果 IMPLANT “KEYi”s 中的任一个被说明. 在双注入沟道情况下,只能被说明一次.

☞ TIME

这个“KEYi”说明沟道注入的退火时间,单位为秒. 'num'可以是 60 和 $48 \times 3\,600$ 间的任何值. TIME “KEYi”不能省略,若任何“KEYi”被说明. 在双注入沟道情况下,只能被说明一次.

7. OPTION “IDENT”

OPTION “IDENT”说明各种器件物理参数. 本“IDENT”可以省略,当没有一个本“IDENT”中的“KEYi”有需要时,存在补缺值,它在每个“KEYi”的描写中给出. 可能有以下“KEYi”s

```
OPTION MODEL = 'mod' PHYSCK = 'log' UFB = 'num' NSS = 'num' TEMP = 'num'
+   TN = 'num' TP = 'num' MI = 'num' MV = 'num' MB = 'num' MS = 'num'
+   GRIDFREEZE = 'log' CURRENT = 'num' RBULK = 'num' AN = 'num' AP = 'num'
+   BN = 'num' BP = 'num' SN = 'num' SP = 'num' CN = 'num' CP = 'num'
```

这些“KEYi”s 中的任一个,前面两个字符是重要的.

☞ MODEL

这个“KEYi”说明 MINIMOS-2 应当执行的计算模型. 用户可在 4 个模型中选择. 'mod'可以是下列之一(补缺值是 2-D). 仅第一个字符是重要的.

MODEL=1-D 这是可选择的最简单模型,它提供十分快的执行速度. 解二维泊松方程及一维连续性方程. 考虑了几种散射机构引起的迁移率减小.

MODEL=THRES :与 MODEL=1-D 相同,但用一个初始迭代过程计算阈值电压替代了对电流的计算. 若选择本模型,则 NG “KEYi”和 DG “KEYi”都不可出现在 STEP “IDENT”之内. 若 UG “KEYi”出现,(参考 BIAS “IDENT”)则说

明的栅压被用作阈值电压的初始值,否则,长沟阈值电压将被使用. 阈值电压的定义可由 CURRENT “KEYi”给出.

MODEL=2-D:泊松方程和少子连续性方程都用两维解. 应用本模型,MINIMOS 2.0 文本将像 MINIMOS 1.1(或 1.0)文本一样工作.

MODEL=AVAL:这是为精确计算雪崩击穿区的唯一的模型. 全部方程组(泊松方程和两个连续性方程)用两维解. 通过载流子连续性方程的不均匀项计入了碰撞电离,因而也能计算衬底电流.

PHYSCK

本“KEYi”说明是否要处理“物理的”错误.“物理的”错误是任何‘num’值的超界(“out-of-range”)错误以及 BIAS “IDENT”中的符号错误. 本“KEYi”的另一作用是决定执行是否应终结,若任何迭代看来好像不收敛(例如 UD 在击穿电压以上,由穿通引起阈电压为无穷大).“log”可以是 YES 或 NO,仅第一个字符是重要的. 在用 PHYSCK=NO 情况下,若“物理的”错误被 MINIMOS-2 检出,则一个警告信息将被发出. 若省去这个“KEYi”,“物理的”错误将被处理. 例如,对于 n 沟器件如果必须用一个正的体电压描述,则 PHYSCK=NO 必须给出. 由于用了 PHYSCK=NO 必会丧失任何常规执行的保证,故不推荐用这句话句.

UFB

本“KEYi”说明平带电压,单位为伏特. ‘num’可以是一 3 到 3 范围内的任意值. 若略去本“KEYi”,则平带电压将从栅材料的功函数差(器件指令中的 GATE “KEYi”)及慢表面态密度(如在下面描述的 NSS “KEYi”)计算. 若 UFB 被说明,则 DEVICE 指令中的 GATE “KEYi”及 NSS “KEYi”必须略去.

NSS

本“KEYi”说明慢表面态密度,单位为厘米⁻². ‘num’可以是 0 到 10¹³ 范围内的任意值. 若本“KEYi”省略,则表面态密度假设为零. 若 UFB “KEYi”给出,则本“KEYi”不需要说明.

TEMP

本“KEYi”说明模拟温度,单位为 K. ‘num’可以是 250 到 450 范围内的任意值. 若本“KEYi”省略,模拟执行 300 K.

TN

本“KEYi”说明电子寿命,单位为秒. ‘num’可以是 10⁻⁹ 到 10⁶ 范围内的任意值. 若本“KEYi”略去,电子寿命置 10⁻⁶ 秒.

TP

本“KEYi”说明空穴寿命,单位为秒. ‘num’可以是 10⁻⁹ 到 10⁶ 范围内的任意

值. 若本“KEYi”略去, 空穴寿命置 10^{-6} 秒.

MI

本“KEYi”说明杂质散射临界浓度的权重. 'num'可以是 10^{-4} 到 10^6 范围内的任意值. 若本“KEYi”略去, 权重置 1. MI 大于 1, 导致减少杂质散射, 反之亦然.

MV

本“KEYi”说明由载流子加热引起的饱和速度的权重. 'num'可以是 10^{-2} 到 10^6 范围内的任意值. 若本“KEYi”略去, 则这个权重置 1. MV 大于 1 导致增高饱和速度, 因而减少热电子散射, 反之亦然.

MB

本“KEYi”说明 Mathiessens 系数的权重. 'num'可以是 0.1 到 10 内的任意值. 若本“KEYi”略去, 则权重置 1. MB 大于 1 导致在较高电场时速度饱和, 反之亦然.

MS

本“KEYi”说明表面散射临界场的权重. 'num'可以是 10^{-2} 到 10^6 范围内的任意值. 本“KEYi”略去, 则权重置 1. MS 大于 1 导致减小表面散射, 反之亦然.

GRIDFREEZE

本“KEYi”仅用在步进参数(参考 STEP “IDENT”)中的任一个已被选用的情况. 本“KEYi”用来决定在任一电压步进之间是否要执行网络的修改. 'log'可以用 YES 或 NO. 本“KEYi”的补缺值置 YES.

CURRENT

本“KEYi”仅用在 MODEL “KEYi”用 $\text{mod} = \text{THRES}$ 给出的情况. 在那种情况下, CURRENT “KEYi”决定阈值条件下的漏电流, 单位为安培. 'num'可以是 1×10^{-10} 和 2×10^{-3} 之间的任何值. 补缺值置 $1 \times 10^{-7} \times W/L$.

以下“KEYi”s 仅用在给出 MODEL “KEYi”且 $\text{mod} = \text{AVAL}$ 时.

RBULK

本“KEYi”说明有效体电阻, 单位为欧姆. 'num'可以是 0 和 1×10^6 之间的任何值. 本“KEYi”的补缺值是 0. 当本“KEYi”给出时, 有效衬底偏置用 $UB - RBULK \times ISUB$ 计算(UB 见 BIAS “IDENT”).

AN, AP, BN, BP

这几个“KEYi”s 用于计算离化率. 计算时, 用式 $\alpha_n(E) = AN \times \exp(-BN/E)$ 及 $\alpha_p(E) = AP \times \exp(-BP/E)$, E 为电场. AN 和 AP 给出, 单位为 厘米^{-1} . BN 和 BP 给出, 单位为伏特/厘米. 补缺值为 $AN = 7 \times 10^3$, $AP = 1.58 \times 10^6$, $BN = 1.23 \times 10^6$, $BP = 2.036 \times 10^6$ (Van Overstreaten, *Solid State Electron*, 13,

pp. 583—608). 由于碰撞电离的暗空间效应,上面给出的参数可能高估了离化率,特别在小漏电压及/或陡的漏结,因此算出的 I_{SUB} 将太大. 在此情况,上面的参数应增加——例如 $AN = 1.7 \times 10^7$, $AP = 1.7 \times 10^7$, $BN = 2.9 \times 10^6$, $BP = 3.2 \times 10^6$.

☞ SN

本“KEYi”说明电子的表面复合速率(在 Si—SiO₂ 界面),单位为厘米/秒. 'num'可以是 1 和 1×10^7 之间的任何值. 补缺值是 100.

☞ SP

本“KEYi”说明空穴的表面复合速率,单位为厘米/秒. 'num'可以是 1 和 1×10^7 之间的任何值. 补缺值是 100.

☞ CN

本“KEYi”说明电子的 Auger 复合参数. 单位为厘米⁶. 'num'可以是 0 和 1×10^{-30} 之间的任何值. 补缺值是 2.8×10^{-31} .

☞ CP

本“KEYi”说明空穴的 Auger 复合参数,单位为厘米⁶. 'num'可以是 0 和 1×10^{-30} 之间的任何值. 补缺值是 0.99×10^{-31} .

8. OUTPUT “IDENT”

OUTPUT “IDENT”用来说明物理量,这些物理量在已经成功地模拟后被打印. 可能在本“IDENT”上的所有“KEYi”s 是逻辑项. 仅决定是否要打印某些物理量. 可能有以下“KEYi”s

```
OUTPUT DC = 'log' PST = 'log' ELAT = 'log' ETRAN = 'log'
+ OXID = 'log' MIN = 'log' MAJ = 'log' PHI = 'log' CC = 'log'
+ RHO = 'log' JLAT = 'log' JTRAN = 'log' MOB = 'log' AVAL = 'log'
```

这些“KEYi”s 的任一种,前面两个字符是重要的. 'log'可以是 YES 或 NO,仅第一个字符是重要的. 所有“KEYi”有一个补缺值.

☞ DC

本“KEYi”说明掺杂分布的打印. 本“KEYi”的补缺值是 NO.

☞ PSI

本“KEYi”说明电势的打印. 本“KEYi”的补缺值是 YES.

☞ ELAT

本“KEYi”说明横向电场分量的打印. 本“KEYi”的补缺值是 YES.

☞ ETRAN

本“KEYi”说明纵向电场分量的打印. 本“KEYi”的补缺值是 YES.

OXIDE

本“KEYi”说明在氧化层内上面 3 个量的打印, 本“KEYi”的补缺值是 NO.

RHO

本“KEYi”说明空间电荷的打印. 本“KEYi”的补缺值是 NO.

MIN

本“KEYi”说明是否接着应考虑少子量的打印. 本“KEYi”的补缺值是 YES.

MAJ

本“KEYi”说明是否接着应考虑多子量的打印. 本“KEYi”的补缺值是 NO, 多子量仅当给出 MODEL=AVAL 时(见 OPTION “IDENT”)能够利用.

PHI

本“KEYi”说明准费米能级的打印. 本“KEYi”的补缺值是 0.

CC

本“KEYi”说明准费米能级的打印. 本“KEYi”的补缺值是 YES.

给出 MODEL=1-D 或 MODEL=THRES(见 OPTION “IDENT”)以下量不能利用.

JLAT

本“KEYi”说明横向电流密度分量的打印. 本“KEYi”的补缺值是 NO.

JTRAN

本“KEYi”说明纵向电流密度分量的打印. 本“KEYi”的补缺值是 NO.

MOB

本“KEYi”说明迁移分布的打印. 本“KEYi”的补缺值是 NO.

AVAL

本“KEYi”说明雪崩产生率的打印, “KEYi”的补缺值是 NO.

这个量能利用仅仅在 MODEL=AVAL 给出时(见 OPTION “IDENT”).

9. END “IDENT”

END “IDENT”用作输入文件结束的信号, 本“IDENT”可以省略, 然而若存在, 它必须是最后的“IDENT”. 以下的“KEYi”是可能的:

END ERROR = 'num' BIN = 'log'

对于这些“KEYi”s, 第一个字符是重要的.

ERROR

本“KEYi”说明有关电流变化模拟所需要的最后误差, 若给出 MODEL =

THRES, ERROR='num'说明阈值电压的最后误差,单位为伏特.'num'可以是 10^{-4} 到 0.5 范围内的任意值.

本“KEYi”能略去,本“KEYi”的补缺值是 2×10^{-2} . 这个精确性对于很宽的应用范围是充分的. 然而,在某些特殊情况(相对高的偏置情况),有时需要一个较小的误差限制.

BIN

本“KEYi”说明是否要将模拟结果存贮到一个外部文件上.'log'可以是 YES 或 NO. 仅第一个字符有意义,本“KEYi”可以略去. 本“KEYi”的补缺值是 NO. 外部文件的格式由以下的附录 B 给出.

10. 附录 A 掺杂文件的格式

掺杂文件以二进制方式读,第一个记录用以下方式:

```
READ(DOPFIL) SUBS, SURF, SUBCH, RJT, RJL, YINC
```

SUBS 是体掺杂,单位为 cm^{-3}

SURF 是源/漏区的峰值浓度,单位为 cm^{-3}

SUBCH 是有效沟道掺杂的一个估计值,单位为 cm^{-3}

RJT 是源/漏结深,单位为 cm

RJL 是亚扩散(subdiffusion),单位为 cm

YINC 为掺杂表格中的距离增量

掺杂文件接下去的 100 个记录说明源/漏薄层和沟道薄层的受主和施主浓度以及它们的空间导数.

```
READ(DOPFIL) AS(I), DAS(I), DS(I), DDS(I), AC(I), DAC(I), DC(I), DDC(I)
```

AS 是源/漏薄层中的受主浓度,单位为 cm^{-3}

DAS 是源/漏薄层中受主浓度的空间导数,单位为 cm^{-4}

DS 是源/漏薄层中的施主浓度,单位为 cm^{-3}

DDS 是源/漏薄层中施主浓度的空间导数,单位为 cm^{-3}

AC 是沟道薄层中的受主浓度,单位为 cm^{-3}

DAC 是沟道薄层中受主浓度的空间导数,单位为 cm^{-4}

DC 是沟道薄层中的施主浓度,单位为 cm^{-3}

DDC 是沟道薄层中施主浓度的空间导数,单位为 cm^{-4}

$I = 1$ 标记表面, $I = 100$ 标记深度为 $99 * YINC$. 若 MINIMOS-2 需要一个在较深距离处的掺杂浓度值,则体掺杂浓度值被假设. 读自文件的掺杂数据,不是在物理上被证实的.

11. 附录 B 二进制文件的格式

二进制文件通过子程序 BINAER 用 Fortran 二进制模式写. 这个文件的主要目的是存贮输出数据, 为随后的后处理(例如作图). 这个文件的长度取决于 MODEL “KEY_i”的说明(见 OPTION “IDENT”). 被写的各量用修改的 S. I. 单位(厘米, 秒, 伏特, 安培). 数据按下列次序写:

1. TITLE 输入文件的第一行(80 个字符)
2. CHANNEL, UFB, TOX, L, W. (1 个字符 + 4 个字)
为 CHANNEL, TOX, L, W 见 DEVICE “IDENT”
为 UFB 见 OPTION “IDENT”
3. US, UG, UD, UB, ID, IS, IB(7 个实字)
为 US, UG, UD, UB 见 BIAS “IDENT”
ID, IS, IB 分别是漏、源和体电流
4. LI, UT, NI(3 个字)
LI——本征 Debeye 长度
UT——热电压
NI——本征数
5. NX, NY, NYOXM, NYTOT, NXSP, NXSOXM(6 个字)
NX——X 方向网格行数
NY——Y 方向网格行数(体)
NYOXM——Y 方向网格行数(氧化层)
NYTOT——NY + NYOXM
NXSP——第一个栅点的 X 标记(源边)
NXSOXM——最后栅点的 X 标记(漏边)
6. X(I), I = (1, NX) X—坐标
7. Y(J), J = (1, NYTOT) Y—坐标
NYOXM + 1 表示氧化物—半导体界面
8. C(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT 掺杂浓度
9. PSI(I, J), I = (1, NX), J = (1, NYTOT), 电势分布(为氧化物和半导体)
10. CMIN(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT, 少子分布
文件结束为 MODEL = 1 - D 或 MODEL = THRES
11. MOBMIN(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT, 少子迁移率
12. JLMIN(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT, 少子电流密度(X 分量)
13. JTMIN(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT, 少子电流密度(Y 分量)
文件结束为 MODEL = 2 - D
14. CMAJ(I, J), (I = 1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT 多子密度

15. MOBMAJ(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT 多子迁移率
16. JLMAJ(I, J), I = (1, NX), J = (MYOXM + 1), NYTOT 多子电流密度(X 分量)
17. JTMAJ(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT 多子电流密度(Y 分量)
18. AVAL(I, J), I = (1, NX), J = (NYOXM + 1), NYTOT 雪崩(碰撞电离)产生率