



微电子与集成电路设计系列规划教材

半导体器件 TCAD设计与应用

◎ 韩雁 丁扣宝 编著



电子工业出版社

PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY

<http://www.phei.com.cn>

013025241

TN302
02

微电子与集成电路设计系列规划教材

半导体器件 TCAD 设计与应用

韩雁 丁扣宝 编著



电子工业出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京·BEIJING



北航

C1632057

TN302
02

13805284

内 容 简 介

本书从实用性和先进性出发,全面地介绍半导体工艺仿真软件工具、半导体器件仿真软件工具及其使用。全书共 10 章,主要内容包括:半导体工艺及器件仿真工具 Sentaurus TCAD,工艺仿真工具 TSUPREM-4 及器件仿真工具 MEDICI,工艺及器件仿真工具 SILVACO-TCAD,工艺及器件仿真工具 ISE-TCAD,以及工艺仿真工具(DIOS)的优化使用,器件仿真工具(DESIS)的模型分析,片上(芯片级)ESD 防护器件的性能评估,ESD 防护器件关键参数的仿真,VDMOSFET 的设计及仿真验证,IGBT 的设计及仿真验证。本书配套多媒体电子课件。

本书不仅能帮助高等学校微电子学、电子科学与技术或其他相关专业的研究生、高年级本科生和企业设计人员掌握 TCAD 技术,而且也可以作为从事功率器件和集成电路片上 ESD 防护设计领域的科技工作者的重要参考资料。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。
版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

半导体器件 TCAD 设计与应用 / 韩雁, 丁扣宝编著. — 北京: 电子工业出版社, 2013.3

微电子与集成电路设计系列规划教材

ISBN 978-7-121-19342-2

I. ①半… II. ①韩… ②丁… III. ①半导体器件—计算机辅助设计—高等学校—教材 IV. ①TN302-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 309801 号

策划编辑: 王羽佳

责任编辑: 王羽佳

印 刷: 三河市鑫金马印装有限公司

装 订: 三河市鑫金马印装有限公司

出版发行: 电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编: 100036

开 本: 787×1092 1/16 印张: 17.75 字数: 513 千字

印 次: 2013 年 3 月第 1 次印刷

印 数: 3000 册 定价: 45.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系,联系及邮购电话:(010)88254888。

质量投诉请发邮件至 zltz@phei.com.cn, 盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线:(010)88258888。

前 言

随着微电子技术的发展, 半导体工艺水平和器件性能不断提升, 这其中半导体工艺和器件仿真软件 TCAD (Technology Computer Aided Design) 的作用功不可没。TCAD 是建立在半导体物理基础之上的数值仿真工具, 它可以对不同工艺条件进行仿真, 取代或部分取代昂贵、费时的工艺实验; 也可以对不同器件结构进行优化, 获得理想的特性; 还可以对电路性能及电缺陷等进行模拟。

技术进步伴随着设计复杂性的增加, 导致了 TCAD 软件功能及其使用越来越复杂。作者结合多年的微电子器件设计和工艺设计的经验, 尤其是在功率器件和集成电路片上 ESD (静电放电) 防护器件设计方面所做的课题研究, 编写了本书, 以满足研究和设计工作所需。

本书内容主要分两部分: 第一部分是主流 TCAD 软件及其使用介绍, 第二部分是 TCAD 技术的相关模型分析、优化使用方法及在集成电路片上 ESD 防护器件设计和功率半导体器件设计中的应用。

通过学习本书, 你可以:

- 利用数值模拟技术进行半导体工艺及器件性能仿真
- 熟悉工艺仿真工具的优化使用
- 设计集成电路片上 ESD 防护器件
- 设计功率半导体器件
- 在较短时间内以很小的代价设计出合乎要求的各种半导体器件

本书侧重于 TCAD 技术的应用, 选取了主流 TCAD 软件, 每部分的主体设计流程均经过了流片和测试验证, 并已用于实际科研工作中, 具有较强的代表性和实用性。

本书不仅能帮助高等学校微电子学、电子科学与技术或其他相关专业的研究生、高年级本科生和企业设计人员掌握 TCAD 技术, 而且也可以作为从事功率器件和集成电路片上 ESD 防护设计领域的科技工作者的重要参考资料。

教学中, 可以根据教学对象和学时等具体情况对书中的内容进行删减和组合, 也可以进行适当扩展。为适应教学模式、教学方法和手段的改革, 本书配套多媒体电子课件及相应的网络教学资源, 请登录华信教育资源网 (<http://www.hxedu.com.cn>) 注册下载。

本书由浙江大学韩雁教授统筹及定稿, 并负责其中第 1、2、3、4、7、9 和 10 章的编写, 丁扣宝副教授负责第 5、6、8 章的编写。该书在编写过程中还得到了浙江大学微电子与光电子研究所多名师生的帮助, 他们是: 黄大海、张世峰、张斌、崔强、王洁、洪慧、胡佳贤、韩成功、彭洋洋、马飞和郑剑锋等。作者在编写的过程中也参考了其他有关文献资料, 在此一并表示真诚的感谢。

由于作者学识和水平有限, 加之 TCAD 的版本在不断更新发展, 错漏之处敬请读者批评指正。

韩雁、丁扣宝

2013 年 1 月 于浙大求是园

目 录

第 1 章 半导体工艺及器件仿真工具 Sentaurus TCAD	1
1.1 集成工艺仿真系统 Sentaurus Process	1
1.1.1 Sentaurus Process 工艺仿真工具简介	1
1.1.2 Sentaurus Process 基本命令介绍	1
1.1.3 Sentaurus Process 中的小尺寸模型	4
1.1.4 Sentaurus Process 仿真实例	5
1.2 器件结构编辑工具 Sentaurus Structure Editor	9
1.2.1 Sentaurus Structure Editor (SDE) 器件结构编辑工具简介	9
1.2.2 完成从 Sentaurus Process 到 SentaurusDevice 的接口转换	10
1.2.3 创建三维结构	13
1.3 器件仿真工具 Sentaurus Device	18
1.3.1 Sentaurus Device 器件仿真工具简介	18
1.3.2 Sentaurus Device 主要物理模型	18
1.3.3 Sentaurus Device 仿真实例	21
1.4 集成电路虚拟制造系统 SentaurusWorkbench 简介	25
1.4.1 Sentaurus Workbench (SWB) 简介	25
1.4.2 创建和运行仿真项目	25
参考文献	28
第 2 章 工艺仿真工具 TSUPREM-4 及器件仿真工具 MEDICI	29
2.1 工艺仿真工具 TSUPREM-4 的模型介绍	29
2.1.1 扩散模型	29
2.1.2 离子注入模型	30
2.1.3 氧化模型	31
2.1.4 刻蚀模型	32
2.2 TSUPREM-4 基本命令介绍	32
2.2.1 符号及变量说明	32
2.2.2 命令类型	33
2.2.3 常用命令的基本格式与用法	33
2.3 双极晶体管结构的一维仿真示例	48
2.3.1 TSUPREM-4 输入文件的顺序	48
2.3.2 初始有源区仿真	49
2.3.3 网格生成	49
2.3.4 模型选择	50
2.3.5 工艺步骤	50
2.3.6 保存结构	51
2.3.7 绘制结果	51
2.3.8 打印层信息	52
2.3.9 完成有源区仿真	53
2.3.10 最终结果	54
2.4 器件仿真工具 MEDICI 简介	55

2.4.1	MEDICI 的特性	55
2.4.2	MEDICI 的使用	56
2.4.3	MEDICI 的语法概览	57
2.5	MEDICI 实例 1——NLDMOS 器件仿真	59
2.6	MEDICI 实例 2——NPN 三极管仿真	64
	参考文献	71
第 3 章	工艺及器件仿真工具 SILVACO-TCAD	72
3.1	使用 ATHENA 的 NMOS 工艺仿真	72
3.1.1	概述	72
3.1.2	创建一个初始结构	72
3.1.3	定义初始衬底	74
3.1.4	运行 ATHENA 并绘图	74
3.1.5	栅极氧化	76
3.1.6	提取栅极氧化层的厚度	77
3.1.7	栅氧厚度的最优化	77
3.1.8	完成离子注入	80
3.1.9	在 TonyPlot 中分析硼掺杂特性	81
3.1.10	多晶硅栅的淀积	82
3.1.11	简单几何刻蚀	84
3.1.12	多晶硅氧化	85
3.1.13	多晶硅掺杂	85
3.1.14	隔离氧化层淀积	87
3.1.15	侧墙氧化隔离的形成	87
3.1.16	源/漏极注入和退火	88
3.1.17	金属的淀积	90
3.1.18	获取器件参数	92
3.1.19	半个 NMOS 结构的镜像	93
3.1.20	电极的确定	93
3.1.21	保存 ATHENA 结构文件	94
3.2	使用 ATLAS 的 NMOS 器件仿真	95
3.2.1	ATLAS 概述	95
3.2.2	NMOS 结构的 ATLAS 仿真	96
3.2.3	创建 ATLAS 输入文档	96
3.2.4	模型命令组	97
3.2.5	数字求解方法命令组	98
3.2.6	解决方案命令组	99
	参考文献	106
第 4 章	工艺及器件仿真工具 ISE-TCAD	107
4.1	工艺仿真工具 DIOS	107
4.1.1	关于 DIOS	107
4.1.2	各种命令说明	108
4.1.3	实例说明	112
4.2	器件描述工具 MDRAW	117
4.2.1	关于 MDRAW	117
4.2.2	MDRAW 的边界编辑	118

4.2.3	掺杂和优化编辑	129
4.2.4	MDRAW 软件基本使用流程	134
4.3	器件仿真工具 DESSIS	138
4.3.1	关于 DESSIS	138
4.3.2	设计实例	140
4.3.3	主要模型简介	146
4.3.4	小信号 AC (交流) 分析	151
	参考文献	153
第 5 章	工艺仿真工具 (DIOS) 的优化使用	154
5.1	网格定义	154
5.2	工艺流程模拟	156
5.2.1	淀积	157
5.2.2	刻蚀	158
5.2.3	离子注入	159
5.2.4	氧化	162
5.2.5	扩散	165
5.3	结构操作及保存输出	165
	参考文献	166
第 6 章	器件仿真工具 (DESSIS) 的模型分析	167
6.1	传输方程模型	167
6.2	能带模型	168
6.3	迁移率模型	170
6.3.1	晶格散射引起的迁移率退化	170
6.3.2	电离杂质散射引起的迁移率退化	170
6.3.3	载流子间散射引起的迁移率退化	172
6.3.4	高场饱和引起的迁移率退化	173
6.3.5	表面散射引起的迁移率退化	174
6.4	雪崩离化模型	174
6.5	复合模型	176
	参考文献	177
第 7 章	TCAD 工具仿真流程及在 ESD 防护器件性能评估方面的应用	178
7.1	工艺和器件 TCAD 仿真软件的发展历程	178
7.2	工艺和器件仿真的基本流程	179
7.3	TSUPREM-4/MEDICI 的仿真示例	181
7.3.1	半导体工艺级仿真流程	181
7.3.2	从工艺级仿真向器件级仿真的过渡流程	184
7.3.3	半导体器件级仿真的流程	185
7.4	ESD 防护器件设计要求及 TCAD 辅助设计的必要性	187
7.5	利用瞬态仿真对 ESD 防护器件综合性能的定性评估	188
7.5.1	TCAD 评估基本设置	189
7.5.2	有效性评估	189
7.5.3	敏捷性评估	189
7.5.4	鲁棒性评估	190
7.5.5	透明性评估	192

7.5.6 ESD 总体评估	193
参考文献	194
第 8 章 ESD 防护器件关键参数的仿真	196
8.1 ESD 仿真中的物理模型选择	196
8.2 热边界条件的设定	199
8.3 ESD 器件仿真中收敛性问题解决方案	200
8.4 模型参数对关键性能参数仿真结果的影响	204
8.5 二次击穿电流的仿真	207
8.5.1 现有方法的局限性	207
8.5.2 单脉冲 TLP 波形瞬态仿真方法介绍	208
8.5.3 多脉冲 TLP 波形仿真介绍	209
参考文献	211
第 9 章 VDMOSFET 的设计及仿真验证	212
9.1 VDMOSFET 概述	212
9.2 VDMOSFET 元胞设计	213
9.2.1 结构参数及工艺参数	213
9.2.2 工艺流程	213
9.2.3 工艺仿真	214
9.2.4 器件仿真	220
9.2.5 器件优化	229
9.3 VDMOSFET 终端结构的设计	232
9.3.1 结构参数设计	232
9.3.2 工艺仿真	232
9.3.3 器件仿真	237
9.3.4 参数优化	239
9.4 VDMOSFET ESD 防护结构设计	240
9.4.1 ESD 现象概述	240
9.4.2 VDMOSFET 中的 ESD 防护结构设计	241
9.4.3 ESD 防护结构的参数仿真	242
参考文献	248
第 10 章 IGBT 的设计及仿真验证	250
10.1 IGBT 结构简介	250
10.2 IGBT 元胞结构设计	251
10.2.1 IGBT 的正向压降设计	251
10.2.2 IGBT 的正向阻断电压的设计	252
10.2.3 元胞几何图形的考虑	253
10.2.4 IGBT 元胞仿真实例	253
10.3 高压终端结构的设计	258
10.3.1 高压终端结构介绍	258
10.3.2 高压终端结构的仿真	260
10.4 IGBT 工艺流程设计	265
10.4.1 使用材料的选择	265
10.4.2 工艺参数及工艺流程	266
参考文献	276

第 1 章 半导体工艺及器件仿真工具 Sentaurus TCAD

Sentaurus TCAD 是由 Synopsys 公司开发的最新 DFM (面向制造的设计) 软件。Sentaurus TCAD 全面继承了 TSUPREM-4、MEDICI 和 ISE TCAD 的特点和优势, 它可以用来模拟集成器件的工艺制程、器件物理特性和互连线特性等。Sentaurus TCAD 提供了全面的产品套件, 其中包括 Sentaurus Workbench、LIGAMENT、Sentaurus Process、Sentaurus Structure Editor、MESH、NOFFSET3D、Sentaurus Device、Tecplot SV、INSPECT、Advanced Calibration 等。

Sentaurus Process 和 Sentaurus Device 可以支持的仿真器件类型非常广泛, 包括 CMOS、功率器件、存储器、图像传感器、太阳能电池和模拟/射频器件。此外, Sentaurus TCAD 还提供互连建模和参数提取工具, 为优化芯片性能提供了关键的寄生参数信息。

本章介绍 Sentaurus TCAD 的主要分支: Sentaurus Process、Sentaurus Structure Editor、Sentaurus Device 和 Sentaurus Workbench。

1.1 集成工艺仿真系统 Sentaurus Process

1.1.1 Sentaurus Process 工艺仿真工具简介

Sentaurus Process 是当前最为先进的工艺仿真工具, 它将一维、二维和三维仿真集成在同一平台中, 并面向当代纳米级集成电路工艺制程, 全面支持小尺寸效应的仿真与模拟。Sentaurus Process 在保留传统工艺仿真软件运行模式的基础上, 还做了一些重要的改进:

- (1) 增加了模型参数数据库浏览器 (PDB), 为用户提供了修改模型参数和增加模型的方便途径;
- (2) 增加了一维模拟结果输出工具 Inspect 和二维、三维模拟结果输出工具 (Tecplot SV);
- (3) 增加了小尺寸模型, 提高了工艺软件的仿真精度, 适应了半导体工艺发展的需求。这些小尺寸模型主要有高精度刻蚀模型、基于蒙特卡罗的离子扩散模型、注入损伤模型和离子注入校准模型等。

1.1.2 Sentaurus Process 基本命令介绍

用户可以通过输入命令来指导 Sentaurus Process 的执行。这些命令可以通过命令文件或用户终端直接输入。*或#表示该行其后内容为注释, 程序不执行该注释内容。命令语句对大小写不敏感。

1. 文件说明及控制语句

下面的语句用于控制 Sentaurus Process 的执行。

exit: 用于终止 Sentaurus Process 的运行。

fbreak: 使仿真进入交互模式。

fcontinue: 重新执行输入文件。

fexec: 执行系统命令文件。

interface: 返回材料的边界位置。

load: 从文件中导入数据信息并插入到当前网格。

logfile: 将注释信息输出到屏幕及日志文件中。
mater: 返回当前结构中的所有材料列表, 或在原列表中增加新的材料。
mgoals: 使用 MGOALS 引擎设置网格参数。
tclsel: 选择预处理中的绘图变量。

2. 器件结构说明语句

下面的语句用于描述器件结构。
init: 设置初始网格和掺杂信息。
region: 指定结构中特定区域的材料。
line: 指定网格线的位置和间距。
grid: 执行网格设置的命令。
substrate_profile: 定义器件衬底的杂质分布。
polygon: 描述多边形结构。
point: 描述器件结构中的一个点。
doping: 定义线性掺杂分布曲线。
profile: 读取数据文件并重建数据区域。
refinebox: 设置局部网格参数, 并用 MGOALS 库进行细化。
bound: 提取材料边界并返回坐标列表。
contact: 设置电极信息。
transform: 执行转换步骤。

3. 工艺步骤说明语句

下面的语句用于模拟工艺步骤。
deposit: 用于淀积一个新的层次。
diffuse: 用于高温扩散和高温氧化。
etch: 用于刻蚀。
implant: 实现离子注入。
mask: 用于定义掩膜版。
photo: 淀积光刻胶。
strip: 去除表面的介质层。
stress: 用于计算应力。

4. 模型和参数说明语句

下面的语句用于指定仿真模型和相关参数。
arrhenius: 用于描述常规的指数分布模型。
beam: 给出用于离子束刻蚀的模型参数。
equation: 完成一个模型的测试和一个方程的求解。
gas_flow: 设置扩散步骤中的气体氛围。
kmc: 设定蒙特卡罗模型。
math: 设置数字和矩阵参数。
mechdata: 定义应力计算中的本征应力材料。

pdbDelayDouble: 用于检索扩散过程中的双参数表达式。

pdbDopantLike: 用于创建新的掺杂杂质。

pdbGet: 用于提取数据库参数。

pdbNewMaterial: 用于引入新的材料。

pdbSet: 用于完成数据库参数的修改。

pdbUnSetString 和 **pdbUnSetDouble:** 用于删除由 **pdbSetDouble** 和 **pdbSetString** 创建的参数。

SetDFISEList: 设置以 DF-ISE 格式保存的文件中的求解列表。

SetDiosEquilibriumModelMode 和 **SetDiosPairModelMode:** 将默认扩散模型设置为 Dios 平衡模型和 Dios 电子空穴对模型。

SetFastMode: 忽略扩散和蒙特卡罗注入模型, 加快仿真速度。

SetTDRList: 设置文件中以 TDR 格式保存的求解列表。

SetTemp: 设置温度。

SetTS4MechanicsMode: 设置与 TSUPREM-4 相匹配的机械应力参数和氧化参数。

solution: 求解或设置求解参数。

strain_profile: 定义由掺杂引入的张力变化。

temp_ramp: 定义扩散过程中的温度变化。

term: 定义方程中使用的新表达式。

update_substrate: 设置衬底中的杂质属性、张力和晶格常量等信息。

reaction: 定义反应材料。

5. 输出说明语句

下面的语句用于打印和绘制仿真结果。

alias: 用于设置和打印用户指定的命令缩写。

color: 用于设定、填充被仿真的器件结构中某特定区域杂质浓度等值曲线的颜色。

contour: 用于设置二维浓度剖面等值分布曲线的图形输出。

graphics: 启动或更新 Sentaurus Process 已经设置的图形输出。

layers: 用于打印器件结构材料的边界数据和相关数据。

print.1d: 沿器件结构的某一维方向打印相关数据。

plot.1d: 沿器件结构的某一维方向输出某些物理量之间的变化曲线。

plot.2d: 输出器件结构中二维浓度剖面分布曲线。

plot.tec: 启动或更新 Sentaurus Process-Tecplot SV 所输出的一维、二维和三维图形。

plot.xy: 配置二维剖面绘图。

point.xy: 在现有曲线中再添加一段曲线。

print.data: 以 x 、 y 、 z 坐标的格式打印数据。

setPlxList: 设置 WritePlx 中要保存的求解列表。

writePlx: 设置输出一维掺杂数据文件。

select: 确定后续工艺流程中需要输出的变量。

slice: 基于二维、三维结构提取一维杂质分布数据。

struct: 设置网格结构及求解信息。

sheetResistance: 用于计算表面薄层电阻和 PN 结结深。

1.1.3 Sentaurus Process 中的小尺寸模型

1. 离子注入模型

在 Sentaurus Process 中, 解析注入模型或蒙特卡罗 (MC) 注入模型可以用来计算离子注入的分布情况及仿真所造成的注入损伤程度。解析注入模型使用经典的高斯分布、泊松分布及近代的双泊松分布建模, 来模拟离子注入掺杂的行为和过程。使用解析模型模拟注入后形成的损伤是根据 Hobler 模型进行估算的。蒙特卡罗注入模型使用统计方法来计算体内的注入离子的分布, 注入损伤通过计算点缺陷浓度进行分析。

为满足现代集成电路技术发展的需求, Sentaurus Process 添加了很多小尺寸模型, 如掺杂剂量控制模型 (Beam Dose Control)、杂质剖面改造模型 (Profile Reshaping)、有效沟道抑制模型 (Effective Channelling Suppression) 和无定型靶预注入模型 (Preamorphization Implants, PAI) 等。

在掺杂剂量控制模型中, 最后的注入剂量会随注入倾角和旋转角的改变而改变。有效沟道抑制模型和杂质剖面改造模型描述了短沟道效应和在器件特征尺寸缩小过程中所产生的次级效应。无定型靶预注入模型可以用来修正注入损伤所造成的沟道尾部效应。

2. 扩散模型

在集成电路制造工艺过程中, 将杂质掺入到半导体材料中的方法有很多, 如离子注入和高温扩散等方式。Sentaurus Process 仿真高温扩散的主要模型和依据有杂质激活模型、缺陷对杂质迁移的影响, 表面介质的移动、掺杂对内部电场的影响等。

Sentaurus Process 给出的杂质选择性扩散模型和杂质激活模型, 可以用来模拟杂质的扩散和迁移行为。杂质选择性扩散模型基于蒙特卡罗数值分析, 适于模拟特征尺寸小于 100 nm 的扩散工艺。杂质选择性扩散模型引入了杂质活化效应对杂质迁移的影响, 也间接地覆盖了热扩散工艺中产生的缺陷对杂质的影响。杂质激活模型主要是考虑了在掺杂过程中的缺陷、氧化空位及硅化物界面态所引发的杂质激活效应。杂质激活模型可以对由杂质激活效应引起的理论分布的偏差进行补偿或修改。此外, Sentaurus Process 通过点缺陷平衡浓度修正模型, 可对应力引发的点缺陷浓度变化规律进行分析, 从而更加精确地计算杂质迁移过程中点缺陷的影响, 满足纳米器件对点缺陷激活杂质迁移的仿真要求。

3. 基于原子动力学的蒙特卡罗扩散模型

对于大尺寸器件而言, 用连续性的扩散方程来描述杂质的传输及体内杂质剂量的守恒是有意义的。然而, 对于特征尺寸小于 100 nm 的器件而言, 则很难保持高的仿真精度。

基于扩散仿真的蒙特卡罗 (MC) 的数值算法提供了一个有价值的连续方法。蒙特卡罗仿真所需要的计算机资源随器件尺寸的减小而减少, 因为它们与器件中的杂质和缺陷是成比例的。另一方面, 连续仿真所需要的资源在增加, 因为需要更多的、更复杂的、不平衡的现象来建模。因此, 就所需要的计算机资源而言, 这种趋势使基于原子动力学理论的蒙特卡罗扩散方法 (KMC) 在与现在最详细的连续扩散方法竞争时占有优势。

4. 对局部微机械应力变化计算的建模

器件结构内部机械应力的变化在器件制造工艺制程中起着非常重要的作用, 它决定着器件结构在加工过程中是否能保持完整性、热加工工艺过程的效益、热加工过程引发的载流子迁移率及扩散率的变化等。随着器件尺寸的进一步缩小, 器件内部机械应力的变化还会使材料的禁带宽度发生变化, 使得杂质扩散速率和氧化速率等也发生相应变化, 从而使得局部热生长氧化层产生形状变异。

在现代工艺制程中，精确计算器件内部机械应力的变化是十分重要的。现在的一个趋势是在器件设计过程当中都会对器件结构施加一定的机械应力，这是因为合适的微机械应力可以有效地改善器件的性能。

Sentaurus Process 对机械应力计算的仿真基于以下 4 个步骤：①定义微机械力学平衡方程；②定义微机械力学平衡方程的边界条件；③定义微结构的材料特性；④定义驱动微机械应力变化的机制。

Sentaurus Process 包含了很多引起微机械应力变化的机制，包括热失配、晶格失配以及由材料淀积、刻蚀所引起的应力变化等。

1.1.4 Sentaurus Process 仿真实例

本节将结合功率器件 VDMOS 的工艺制程仿真来介绍 Sentaurus Process 的基本应用，主要包括命令文件的编写规则和常用工艺仿真语句。

1. 定义二维初始网格

二维初始网格定义语句如下：

```
line x location = 0.00 spacing = 0.01 tag = SiTop
line x location = 0.50 spacing = 0.01
line x location = 0.90 spacing = 0.10
line x location = 1.30 spacing = 0.25
line x location = 4.00 spacing = 0.25
line x location = 6.00 spacing = 0.50
line x location = 10.0 spacing = 2.50
line x location = 15.0 spacing = 5.00
line x location = 44.0 spacing = 10.0 tag = SiBottom
line y location = 0.00 spacing = 0.50 tag = Mid
line y location = 7.75 spacing = 0.50 tag = Right
```

line 命令定义了网格线的位置和间距。对于二维仿真，网格线的方向一般是沿 x 轴和 y 轴的。网格间距由关键字 location 和 spacing 来定义。location 确定了某一网格点的起始位置，而 spacing 则定义了两条网格线之间的距离。其中位置和间距的默认单位为 μm 。

通常，在仿真的初始阶段，不需要将网格定义太多的网格节点，否则会影响整体的仿真速度。

2. 开启二维输出结果调阅工具 Tecplot SV 界面

开启 Tecplot SV 界面语句如下：

```
graphics on
```

Sentaurus Process 工艺仿真生成的结构信息及二维或三维数据信息都可以通过 Tecplot SV 来调阅。

3. 激活校准模型

激活校准模型的语句如下：

```
Advanced Calibration
```

这个命令包括了点缺陷的扩散、硼扩散、硼质聚类过程（激活和失活的硼）和表面捕获等模型的校准。

4. 开启自适应网格

开启自适应网格的语句如下:

```
pdbSet Grid Adaptive 1
```

在仿真过程中, 自适应网格会自动添加网格点到器件结构中。

5. 定义仿真区域并对仿真区域进行初始化

```
region silicon xlo = SiTop xhi = SiBottom ylo = Mid yhi = Right
init field = As resistivity = 14 wafer.orient = 100
```

对于二维仿真而言, 初始仿真区域是通过指向 x 和 y 方向的标记符来定义的。这些标记符由前面的 `line` 命令语句定义。在本例中, 定义衬底为砷掺杂, 电阻率为 $14 \Omega \cdot \text{cm}$ 。硅片的晶向为 $\langle 100 \rangle$ 。

6. 定义网格细化规则

网格细化规则的定义语句如下:

```
mgoals on min.normal.size = 10<nm> max.lateral.size = 2<um> \
normal.growth.ratio = 1.2 accuracy = 2e-5
```

第一行结尾处的“\”表示续行符。工艺制程中的氧化、淀积或刻蚀等步骤会改变原有的结构网格。在设置了网格辅助调整功能的前提下, 系统将依据需要对网格进行重新设置。在 `Sentaurus Process` 中用 `mgoals` 命令在初始网格的基础上来重新定义网格。网格的调整只针对新的层或新生成的表面区域。`mgoals` 命令中的 `min.normal.size` 用来定义边界处的网格最小间距, 离开表面后将按照 `normal.growth.ratio` 确定的速率变化。`max.lateral.size` 定义了边界处网格的最大横向间距, `accuracy` 为误差精度。

7. 在重要区域进一步优化网格

完成局部区域网格优化的语句如下:

```
refinebox min = {2.5 0} max = {3 1}      xrefine = {0.1}   yrefine = {0.1} all add
refinebox min = {2.5 1} max = {2 3}      xrefine = {0.1}   yrefine = {0.1} all add
refinebox min = {0 1.7} max = {0.2 2.9}  xrefine = {0.1}   yrefine = {0.1} all add
refinebox min = {0 3}   max = {2.5 5}    xrefine = {0.1}   yrefine = {0.1} all add
```

`min` 参数和 `max` 参数用来定义网格优化的窗口。`xrefine` 参数和 `yrefine` 参数用来定义网格的间距。

8. 生长薄氧层

在离子注入之前, 需要先生长一层薄氧, 用来缓冲随后进行的离子注入, 可有效避免注入损伤。

```
gas_flowname=O2_HCLpressure=1<atm>flows={O2=4.0<l/min>HCL=0.03<l/min>}
diffuse temperature = 950<C> time = 25<min> gas_flow = O2_HCL
```

`gas_flow` 命令用来定义气体的混合成分。其中, 周围气压定义为一个大气压, 而 O_2 和 HCl 的流量分别定义为 4.0 l/minute 和 0.03 l/minute 。`diffuse` 命令用来定义热氧化步骤的时间、温度等参数。

9. JFET 注入

该工艺步骤可以有效减小器件的导通电阻, 增加器件的驱动能力。该工艺步骤定义语句如下:

```
mask name = JFET_mask left = 0<um> right = 6.75<um>
implant Phosphorus mask = JFET_mask dose = 1.5e12 energy = 100<keV>
```

```
diffuse temp = 1150<C> time = 180<min>
mask clear
```

`mask` 命令用来定义掩膜版信息，在本例中，选用正性光刻胶（若用负性光刻胶，则用 `negative` 参数表示）， $0\sim 6.75\ \mu\text{m}$ 之间的光刻胶在曝光后会被留下作为掩膜版。`implant` 命令用来完成磷的注入，其中注入剂量为 $1.5\times 10^{12}\ \text{cm}^{-2}$ ，注入能量为 $100\ \text{keV}$ 。`diffuse` 命令用来执行热退火过程，`clear` 将掩膜版去除。

10. 保存一维掺杂文件

保存一维掺杂文件的语句如下：

```
SetPlxList {AsTotal PTotal} WritePlx epi.plx y = 7 silicon
```

在 `SetPlxList` 命令中，将砷和磷的掺杂分布做了保存。在 `WritePlx` 命令中，指定保存 $y=7\ \mu\text{m}$ 处的掺杂分布曲线。最终保存的一维掺杂分布曲线如图 1.1 所示。

11. 生长栅氧化层

在生长栅氧化层之前，需要将之前使用的薄氧层去除，`etch` 命令用来完成这一工艺步骤。其中关键字 `thickness` 定义的厚度需要大于之前薄氧层生长的厚度，这样才能完全去除。而 `gas_flow` 和 `diffuse` 命令则定义了生长栅氧化层的工艺条件。生长栅氧化层的语句如下：

```
etch oxide type = anisotropic thickness = 0.5<um>
gas_flow name = O2_1_HCL_1_H2 pressure = 1<atm> flows =
    {O2 = 10.0<l/min>H2 = 5.0<l/min>HCl = 0.03<l/min>}
diffuse temperature = 1000<C> time = 17<min> gas_flow = O2_1_HCL_1_H2
```

12. 制备多晶硅栅极

制备多晶硅栅极的语句如下：

```
deposit poly type = anisotropic thickness = 0.6<um>
mask name = gate_mask left = 2.75<um> right = 8<um>
etch poly type = anisotropic thickness = 0.7<um> mask = gate_mask
mask clear
```

首先，使用 `deposit` 命令淀积一层多晶硅，厚度为 $0.6\ \mu\text{m}$ 。然后，使用 `mask` 命令定义刻蚀多晶硅栅的光刻版，即 $0\sim 2.75\ \mu\text{m}$ 之间的多晶硅会被刻蚀掉。接着，使用 `etch` 命令完成刻蚀步骤，其中刻蚀类型定义为各向异性，即只在垂直方向进行刻蚀，最终将光刻版去除。

13. 形成 P-Body 区域

形成 P-Body 区域的语句如下：

```
implant Boron dose = 2.8e13 energy = 80<keV>
diffuse temp = 1150<C> time = 120<min>
```

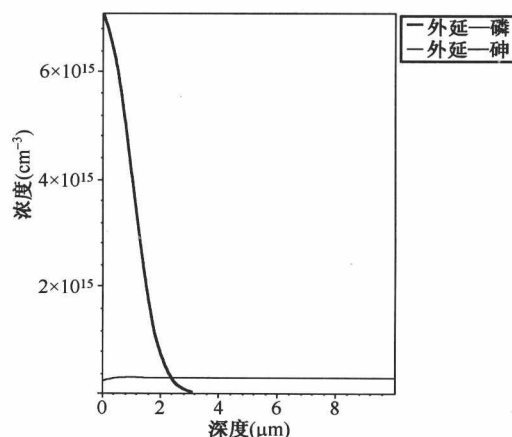


图 1.1 砷和磷的一维掺杂分布曲线

P-Body 区的注入是通过穿透栅氧层实现的。先注入剂量为 $2.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 的硼，然后在 1150°C 的高温条件下，进行 120 分钟的退火实现。

14. 形成 P+接触区域

形成 P+接触区域的语句如下：

```
mask name = P+_mask left = 0.85<um> right = 8<um>
implant Boron mask = P+_mask dose = 1e15 energy = 60<keV>
diffuse temp = 1100<C> time = 100<min>
mask clear
```

为了在 P-Body 区域形成良好的欧姆接触，P+注入剂量需要很高，一般为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 。

15. 形成源区域

形成源区域的语句如下：

```
mask name = N+_mask left = 0<um> right = 1.75<um>
mask name = N+_mask left = 2.75<um> right = 8<um>
implant As mask = N+_mask dose = 5e15 energy = 60<keV>
mask clear
```

16. 制备侧墙区

制备侧墙区的语句如下：

```
deposit nitride type = isotropic thickness = 0.2<um>
etch nitride type = anisotropic thickness = 0.25<um>
etch oxide type = anisotropic thickness = 100<nm>
diffuse temperature = 950<C> time = 25<min>
```

17. 制备铝电极

制备铝电极的语句如下：

```
deposit Aluminum type = isotropic thickness = 0.7<um>
mask name = contacts_mask left = 0<um> right = 2.5<um>
etch Aluminum type = anisotropic thickness = 2.5<um> mask = contacts_mask
mask clear
```

18. 定义电极

定义电极的语句如下：

```
contact name = Gate x = -0.5 y = 5 replace point
contact name = Source x = -0.5 y = 1 replace point
contact name = Drain bottom
```

在上述语句中分别定义了栅电极、源电极和漏电极。其中，漏电极在器件结构的背面形成。

19. 保存完整的器件结构

保存完整器件结构的语句如下：

```
struct tdr = vdmofinal
struct smesh = 500vdmofinal
```


使用 `struct` 命令来保存完整的器件结构信息。使用 `smesh` 命令后, 则已经完成了器件结构保存格式转换, 在已经定义电极的情况下, 可以将 `smesh` 保存的文件直接导入 Sentaurus Device, 进行器件物理特性的仿真。最终的器件结构图如图 1.2 所示。

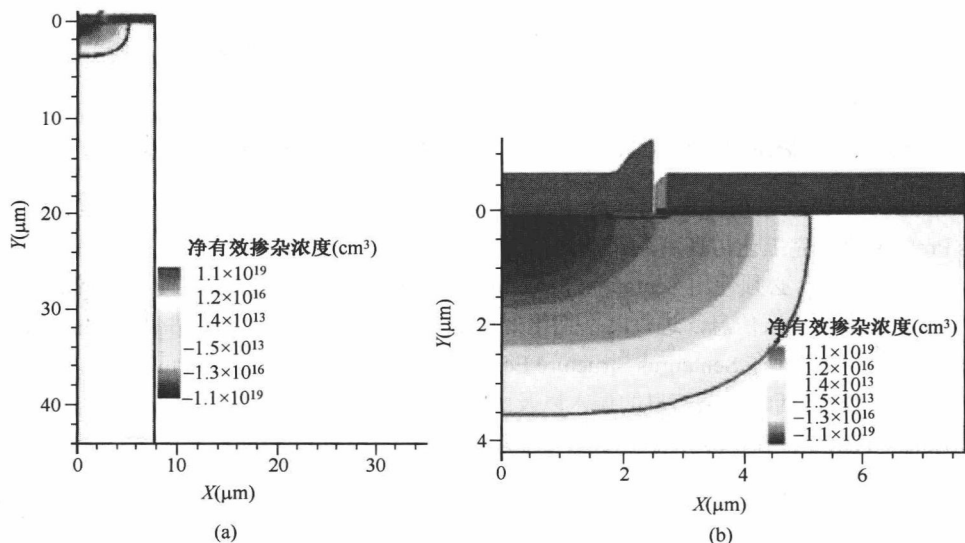


图 1.2 最终形成的 VDMOS 器件结构图

1.2 器件结构编辑工具 Sentaurus Structure Editor

1.2.1 Sentaurus Structure Editor (SDE) 器件结构编辑工具简介

Sentaurus Structure Editor (也称 Sentaurus Device Editor, 简称 SDE) 是基于二维和三维器件结构编辑的集成环境, 可生成或编辑二维和三维器件结构, 用于与 Process 工艺仿真系统的结合。如果单独使用 Sentaurus Structure Editor, 仅可实现三维器件的工艺级仿真。在 Sentaurus Structure Editor 中, 用户可以通过图形用户界面 (Graphical User Interface, GUI) 来生成或编辑器件结构。同时, 用户还可以根据需要定义器件的掺杂分布和网格优化策略。Sentaurus Structure Editor 可以产生网格引擎所需要的输入文件 (DF-ISE 格式的边界文件或 TDR 格式的边界文件), 并使用网格引擎产生 TDR 格式的器件网格及掺杂数据文件或 DF-ISE 格式的器件网格及掺杂数据文件.gdr 和.dat 文件。

(1) Sentaurus Structure Editor 提供以下工具模块。

- ① 二维器件编辑模块;
- ② 三维器件编辑模块;
- ③ Procem 三维工艺仿真制程模块。

(2) Sentaurus Structure Editor 具有以下特点。

- ① 具有优秀的几何建模内核, 为创建可视化模型提供了保障;
- ② 拥有高质量的绘图引擎和图形用户界面;
- ③ 具有基于 Scheme 脚本语言的工具接口;
- ④ 共享 DF-ISE 和 TDR 输入及输出文件格式。

(3) 二维和三维器件编辑模块提供了图形用户界面 GUI 和脚本语言的交互, 支持以下功能。