Кафедра комп'ютерної інженерії та електроніки

Назва дисципліни – Комп'ютерне моделювання приладних

структур інтегральних схем

Викладач: Котик Михайло Васильович

1. Технологічні операції виготовлення напівпровідникових пристроїв та їх моделювання в Synopsys Sentaurus TCAD.
2. Моделювання електро-фізичних характеристик p-n переходу в Synopsys Sentaurus TCAD.
3. Моделювання нанотранзисторів в TCAD SENTAURUS.
4. SENTAURUS WORKBENCH

Технологічні операції виготовлення напівпровідникових пристроїв та їх моделювання в Synopsys Sentaurus TCAD.

ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

В теоретичній частині лабораторної роботи будуть розглянуті наступні технологічні операції, що використовуються при виготовленні інтегральних мікросхем:

1. Історія розвитку технологічних операцій в мікроелектроніці;
2. Виготовлення кристалічного кремнію;
3. Індукційна плавка напівпровідників та металів;
4. Розрізання злитку монокристалічного кремнію на пластини;
5. Шліфування та полірування напівпровідникових пластин;
6. Очищення напівпровідникових пластин;
7. Вирощування шарів окислу кремнію та полікристалічного кремнію;
8. Епітаксія;
9. Плазмове та хімічне травлення;
10. Фотолітографія;
11. Введення домішок в напівпровідник за допомогою дифузії та іонної імплантації;
12. Нанесення тонких плівок матеріалів на напівпровідникові пластини;
13. Методи ізоляції напівпровідникових приладів (діодів, транзисторів) на підкладці;
14. Основні етапи технології виготовлення діодів.

Розглянемо зазначені етапи більш детально.

1. Історія розвитку технологічних операцій в мікроелектроніці.

В статтях [1,2] розглянуто розвиток мікроелектроніки та сучасні технології виготовлення мікросхем на зразок напруженого кремнію, самосуміщеного затвору, мідних міжз'єднань та 3D транзисторів. Матеріал статті [1] не є обов'язковим для захисту лабораторної роботи, але для загального розвитку його рекомендується прочитати. Ця стаття досить велика і для опрацювання потребує кількох годин, тому можливо варто її відкласти на кінець. Стаття [2] проста і відносно невелика, тому необхідно одразу її прочитати та в першу чергу звернути увагу на 3 проблеми виготовлення мікросхем (інтеграцію, ізоляцію та виготовлення міжз'єднань) і на те, як винахідники запропонували їх вирішувати. Історичну інформацію у другій половині статті [2] можна опустити.

2. Виготовлення кристалічного кремнію

Існує 4 типи кремнію: технічний (дуже велика кількість домішок інших матеріалів), полікристалічний, монокристалічний кремній сонячної якості (для сонячних батарей), монокристалічний кремній електронної якості (найбільш чистий кремній для виготовлення мікросхем. Кількість домішок не більше 0.0000001%). Про відмінності між зазначеними типами кремнію написано в [3].

Спочатку одержують технічний кремній, потім очищуючи його отримують полікристалічний кремній сонячної, або електронної якості. З полікристалічного кремнію вирощують кристали монокристалічного кремнію. Про виготовлення технічного та полікристалічного кремнію можна почитати у книзі [4, розд.1.2., стр.19-23]. За методом Чохральського вирощують злитки монокристалічного кремнію діаметром 300 та 450 мм та довжиною кілька метрів.

Вирощування кристалів монокристалічного кремнію за методом Чохральського описано в [5], [10, розділ 6.2., стр.169] та наочно продемонстровано на 3D моделях у відео [6-7, 14].

3. Індукційна плавка напівпровідників та металів

Створення розплаву кремнію у методі Чохральського відбувається за допомогою індукційної плавки, коли резервуар (тигель) з подрібненим полікристалічним кремнієм поміщають у потужне змінне електромагнітне поле, створене котушкою-індуктором. Змінне електромагнітне поле наводить у кремнії вихрові струми, які розігрівають його, що приводить до розплавлення матеріалу. Подібним чином одержують розплави металів. Приклад індукційної плавки алюмінію наведений у відео [8] та більш детально описаний в [13].

4. Розрізання злитку монокристалічного кремнію на пластини;

Злиток монокристалічного кремнію високої чистоти, одержаний шляхом вирощування за методом Чохральського, механічним способом доводять до однакового діаметру по всій довжині та розрізають на тонкі кремнієві пластини (підкладки), діаметр яких дорівнює діаметру злитку (300, або 450 мм), а товщина складає 0.775 мм для 300 мм пластин та 0.925 мм для 450 мм пластин. Процес розрізання кристалу на пластини відбувається за допомогою надтонких (діаметр 100-200 мкм) металічних тросів з абразивним покриттям (мікроскопічними діамантовими крихтами), що продемонстровано у відео [7].

Процес виготовлення напівпровідникових пластин (підкладок) також гарно описаний у [9].

5. Шліфування та полірування напівпровідникових пластин

Після розрізання поверхня пластини покрита мікронерівностями, які згладжуються шляхом шліфування та полірування. Процес описаний в [10, стр.170] та показаний на відео [6-7, 14]. Більш детальний опис можна знайти в [11, стр.46-50].

6. Очищення напівпровідникових пластин

Під час проведення технологічних операцій по виготовленню мікросхем (нанесення фоторезисту, вирощування шару окислу, нанесення плівок металів, введення домішок і т.д.) поверхня кремнієвої пластини має бути ідеально чистою та вільною від всіх можливих типів забруднень, оскільки попадання забруднень в структуру мікросхеми значно погіршує її конструктивні та електричні характеристики. Перед кожною технологічною операцією поверхню кремнієвої пластини очищають, а самі операції проводять у надчистих приміщеннях вільних від пилу і бруду. Типи забруднень напівпровідникових пластин та способи усунення таких забруднень описані в [11, розд.4.2., стр.55] та у розділі 1 джерела [12].

7. Вирощування шарів окислу кремнію та полікристалічного кремнію

Шар окислу кремнію на поверхні кремнієвої пластини відіграє захисну та ізолюючу функції під час виконання технологічних операцій по виготовленню мікросхем, а також функцію тонкого діелектрику під затвором МДН транзисторів. Шар провідного полікристалічного кремнію виконує функцію затвору в польових МДН транзисторах та роль провідників першого шару міжзєднань. За допомогою провідників з полікремнію можуть сполучатися сусідні транзистори логічних вентилів.

Вирощування шару окислу кремнію описано в [10, розд. 6.4., стр.173-175] та на відео [14]. Більш детальну інформацію по вирощуванню шару окислу кремнію з реальними прикладами можна одержати з [12, розд.1,8,10].

Вирощування шару полікристалічного кремнію описано в [12, розд.12].

8. Епітаксія

За допомогою процесу епітаксії на напівпровідниковій підкладці можна виростити шар монокристалічного кремнію, який повторює орієнтацію кристалічної гратки. При цьому, вирощений епітаксіальний шар може мати інший тип провідності ніж підкладка, що досягається за рахунок введення домішок донорів, чи акцепторів під час епітаксії. Концентрація домішок у створеному епітаксіальному шарі буде однакова в будь якій його області (на відміну від введення домішок шляхом дифузії, чи іонної імплантації).
Процес епітаксії описано в [10, розд.6.3., стр.171-173].

9. Плазмове та хімічне травлення

Технологічний процес травлення використовується для видалення з поверхні підкладки областей раніше нанесеного окислу кремнію, фоторезисту, металу, або іншого матеріалу. Травлення окислу кремнію, металу та інших матеріалів відбувається через маску (трафарет) з фоторезисту, внаслідок чого видаляються лише участки не захищені фоторезистом. Травлення в рідких травниках (кислотах) має той недолік, що кислоти виконують травленння (видаляють матеріал) в усіх напрямках, що приводить до підтравлювання під маску з фоторезисту, внаслідок чого геометрія витравлених в окислі кремнію вікон не співпадає з запланованою. Для видалення матеріалу лише у вертикальному напрямку використовують анізотропне травлення у плазмі.

Процес рідкого та плазмового травлення описаний в [10, розд.6.6., стр.184-186] та на відео [14]. Більш детально рідке травлення розглянуто в [11, розд.4.4., стр.59-60]. Анізотропне травлення у плазмі детально розглянуто в [11, розд.4.8-4.9].

10. Фотолітографія

Фотолітографія є одним з основних етапів виготовлення мікросхем, оскільки з її допомогою створюють вікна в окислі кремнію через які вводять домішки в кремнієву пластину, або зтравлюють залишки раніш нанесеного металу, формуючи зєднувлаьні провідники. Загалом фотолітографія дозволяє створити вікно у фоторезисті, через яке до кремнієвої пластини, не закритої фоторезистом можна застосувати будь-яку технологічну операцію (введення домішок, нанесення тонких плівок, епітаксія, тощо).
Фотолітографія складається з наступних етапів:

- нанесення фоторезисту на кремнієву пластину;
- засвічування фоторезисту (експонування) за допомогою лазеру або джерела ультрафіолетового світла через маску (фотошаблон);
- видалення засвічених (для позитивного фоторезисту), або незасвічених (для негативного фоторезисту) областей фоторезисту шляхом його проявлення та промивки;
- травлення матеріалу через вікна у фоторезисті;
- видалення фоторезисту.

Типи фоторезистів описані в [15]. Процес виготовлення масок (фотошаблонів) описаний в [16]. Ціни виготовлення фотошаблонів та обладнання для проведення фотолітографії наведені в [17]. Загалом процес фотолітографії описаний в [10, розд.6.7., стр.187-192], [18] та наочно продемонстрований на відео [14]. Приклади фотолітографії наведені в [12, розд. 4, 11, 15].

Засвічування фоторезисту за допомогою степерів та сканерів описане в [14, 17, 21].

11. Введення домішок в напівпровідник за допомогою дифузії та іонної імплантації

Введення домішок в області кремнієвої пластини через отвори в окислі кремнію, створені за допомогою фотолітографії виконують за допомогою технологічних операцій дифузії та іонної імплантації. Дифузія домішок розглянута в [10, розд.6.5., стр.176-182], а

іонна імплантація – в [10, розд.6.5., стр.182-183], в [19] та на відео [14]. Більш детально процес дифузії домішок розглянуто в [11, розд.9.2.-9.3.].

Приклад іонної імплантації наведений в [12, розд.5]. Приклад дифузії наводиться в [12, розд.16].

12. Нанесення тонких плівок матеріалів на напівпровідникові пластини

Тонкі плівки металів наносять на поверхню напівпровідника найчастіше для створення металічних міжзєднань. Технологія вакуумного напиленя розглянута в [10, розд.6.8., стр.193-198]. Створення металічних міжзєднань описано в [10, розд.6.9.] та на відео [14].

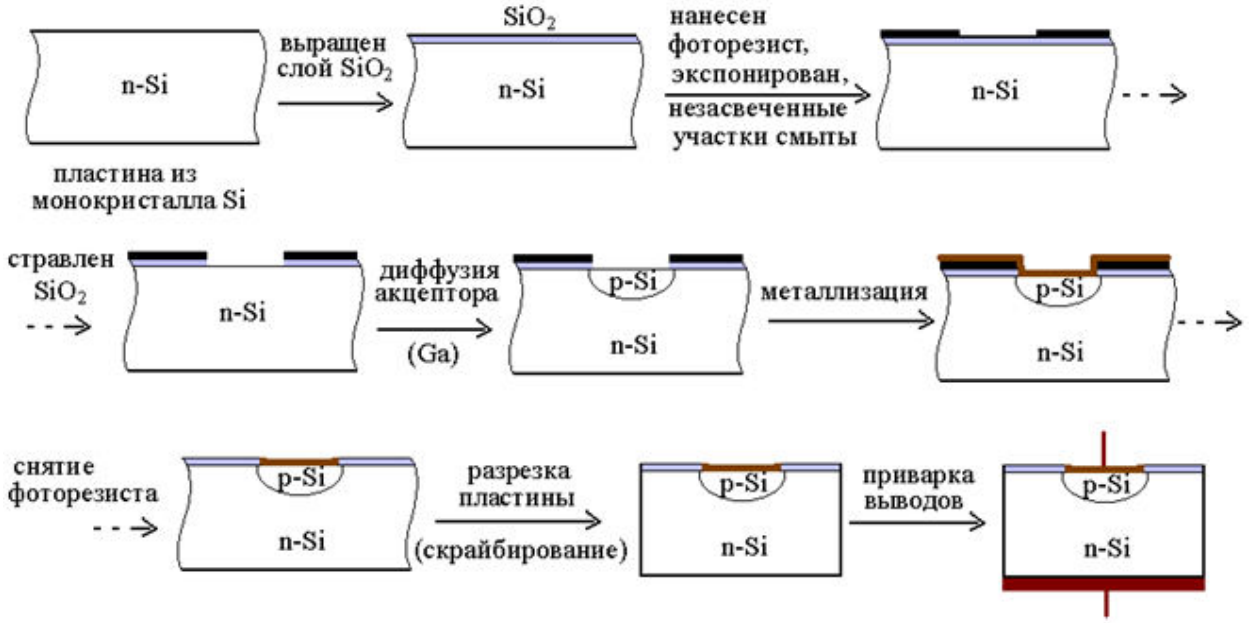
Зверніть увагу на особливості формування алюмінієвих контактів до областей кремнієвої пластини з провідністю n-типу [10, стр.202].

13. Методи ізоляції напівпровідникових приладів (діодів, транзисторів) на підкладці

Виготовлені на кремнієвій підкладці компоненти інтегральних мікросхем (діоди, транзистори) необхідно електрично ізолювати один від одного. Методи ізоляції компонентів на підкладці, зокрема ізоляцію зворотно зміщеним p-n переходом, розглянуто в [10, розд.7.2.].

14. Основні етапи технології виготовлення діодів

Приклад планарної дифузійної технології виготовлення діодів:



ПРАКТИЧНА ЧАСТИНА

Моделювання технологічного процесу виготовлення напівпровідникового діоду в Sentaurus TCAD

Для виконання практичної частини лабораторних робіт будемо використовувати програму Sentaurus TCAD фірми Synopsys. Інструкція по запуску Sentaurus TCAD наведена в [20]. Sentaurus TCAD призначений для моделювання технологічних операцій (технологічного процесу) виготовлення інтегральних мікросхем, мікро- та наноелектронних структур, а також моделювання електрофізичних характеристик створених пристроїв. Перевагою використання Sentaurus TCAD є можливість створення мікро- та наноелектронних структур (діодів, транзисторів. тиристорів, світлодіодів, лазерних діодів, оптичних сенсорів, елементів пам'яті, тощо) шляхом високоточного моделювання технологічних процесів їх виготовлення та електричних характеристик одержаних структур. Початкове налаштування та випробовування пристрою можна проводити на комп'ютері, що значно спрощує та здешевлює процес розробки. Моделі Sentaurus TCAD можна налаштувати під обладнання конкретного заводу, що значно збільшує точність моделювання. Існує можливість створити вихідні файли для виготовлення створених мікро та наноелектронних структур на сучасних заводах. Також можливе створення SPICE моделей одержаних напівпровідникових пристроїв для їх подальшого моделювання в SPICE симуляторах електронних схем (LTSpice, Orcad, Cadence Virtuoso, тощо).

Sentaurus TCAD є пакетом прикладних програм. В першій лабораторній роботі розглянемо такі програми, як *Ligament, Sentaurus Process, Prolyt ma Tecplot.*

Ligament - програма для визначення послідовності та характеристик технологічних операцій виготовлення мікроелектронного пристрою (вирощування оксиду кремнію, фотолітографія, іонна імплантація, тощо). Ligament дозволяє сформувати командний файл для програми моделювання технологічного процесу.

Sentaurus Process - програма моделювання технологічних операцій виготовлення мікроелектронного пристрою (дифузія, іонна імплантація, епітаксія, тощо) з урахуванням усіх відомих фізичних ефектів та найточніших моделей фізичних процесів. Вхідні дані про порядок та характеристики технологічних процесів формуються або в програмі Ligament або у вигляді текстового командного файлу. В результаті роботи Sentaurus Process одержуємо структуру мікроелектронного пристрою, який буде виготовлено після виконання заданих технологічних операцій.

Prolyt - редактор топології інтегральних мікросхем, який можна використовувати для створення фотолітографічних масок.

Tecplot - програма для перегляду результатів моделювання (структури одержаного пристрою, вольт-амперних характеристик, тощо).

Мета та завдання лабораторної роботи

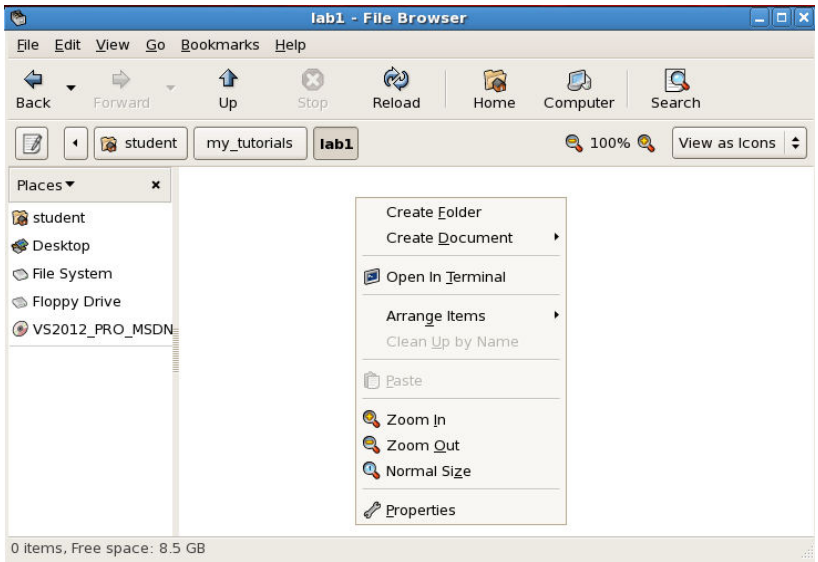
Метою лабораторної роботи є створення послідовності технологічних операцій виготовлення напівпровдникового діоду та одержання його двовимірної і тривимірної структури в результаті моделювання заданих технологічних операцій.

Завданням на лабораторну роботу є виконання студентом описаних далі кроків по створенню технологічних операцій виготовлення напівпровідникового діоду.

Хід роботи

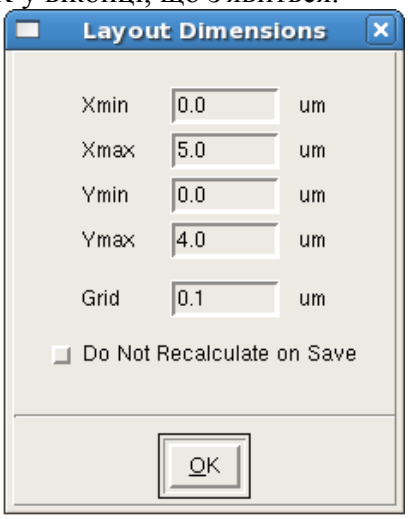
1. Створення директорії та запуск терміналу

Створіть директорію для виконання лабораторної роботи та запустіть в ній програму-термінал для відпрацювання консольних команд, обравши пункт контекстного меню **Open in Terminal**



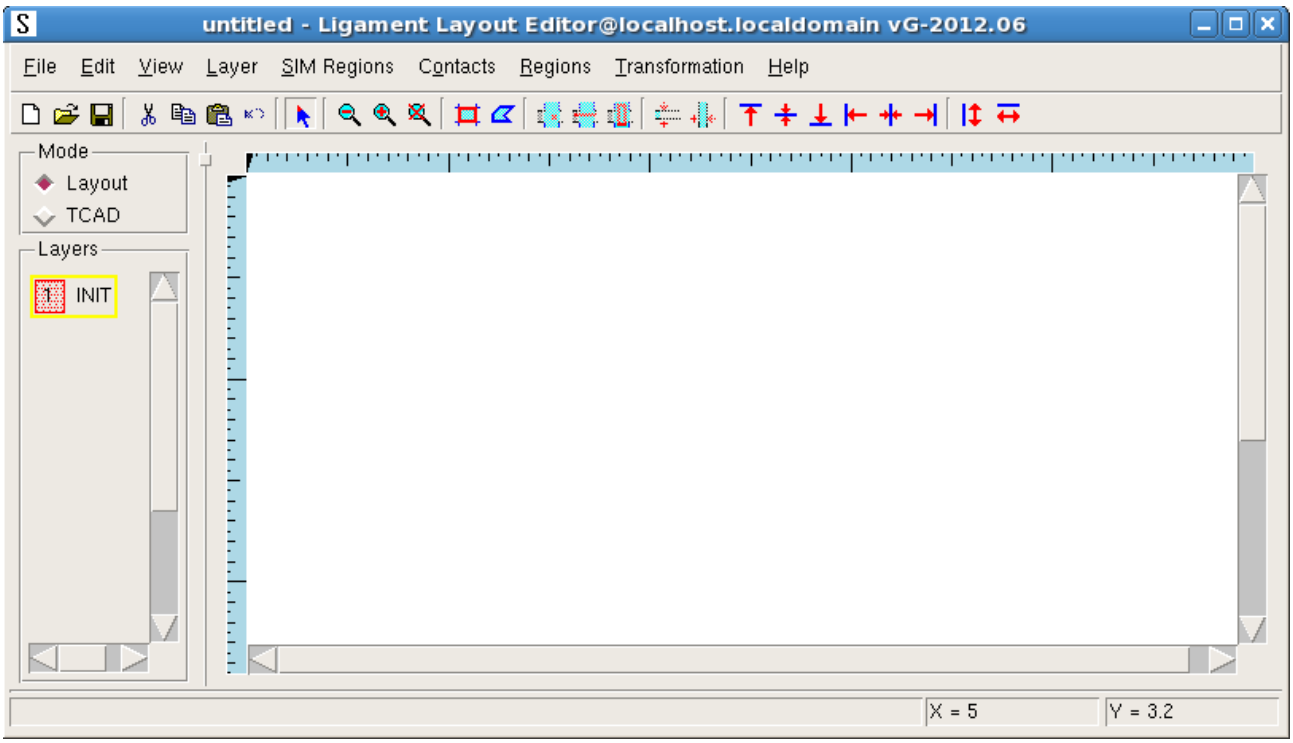
2. Створення фотошаблонів в редакторі топології Prolyt

Запустіть редактор топології Prolyt виконавши з щойно відкритого терміналу (консолі) команду **prolyt &** . Натисніть ОК у віконці, що з'явиться.



Це вікно дозволяє задати геометричні розміри області на якій можна буде створювати топологію. Вистачить розмірів заданих по замовчуванню.

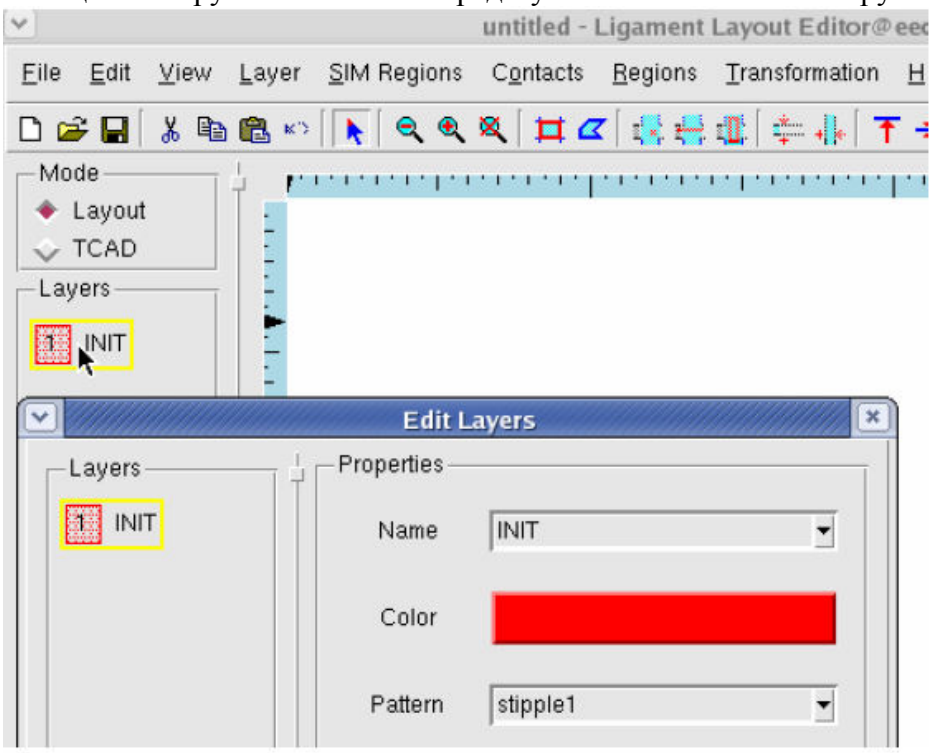
Після запуску, відкриється робоче вікно програми Prolyt.



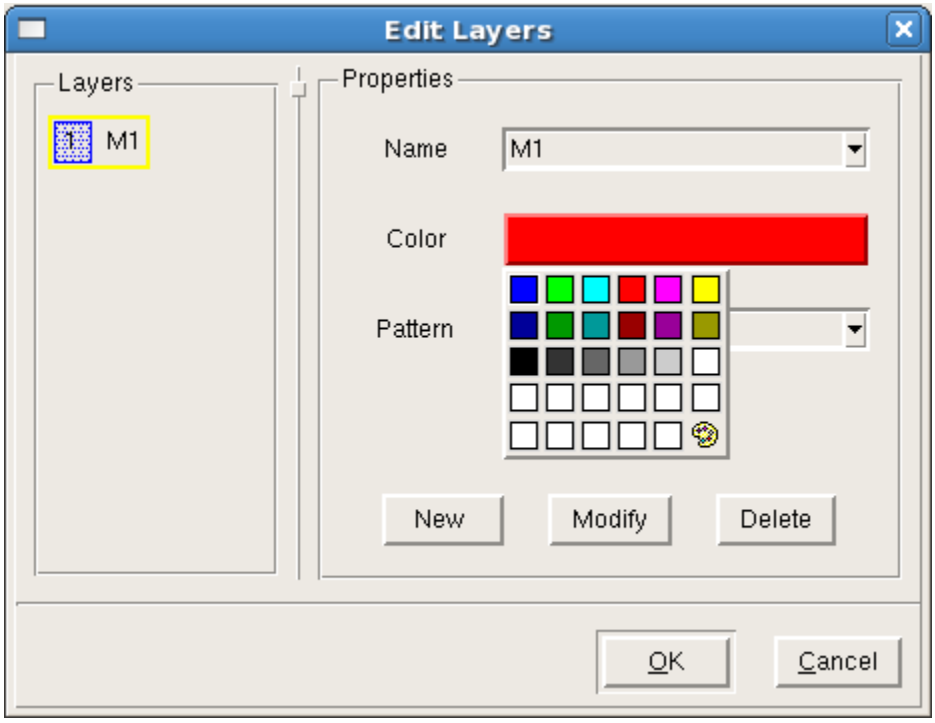
З лівої сторони, на панелі Layers, перераховані шари з кресленнями топології. Поки наявний лише один шар INIT. Можна додавати нові шари, змінювати їх імена та кольори, відображати на екрані, або приховувати креслення на кожному шарі.

Для виконання лабораторної роботи необхідно створити два топологічних креслення. Кожне з них виконаємо в окремому шарі. Перше креслення визначає фотошаблон (маску) для засвічування фоторезисту під час операції створення отворів для алюмінієвого контакту до області n-типу діоду. Назвемо шар з цим кресленням **M1**. Друге креслення визначає фотошаблон (маску) для засвічування фоторезисту під час операції витравлювання залишків алюмінію при створенні алюмінієвого контакту. Назвемо шар з цим кресленням **M2**.

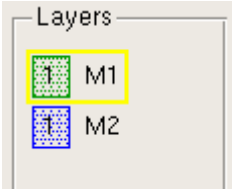
Переіменуємо існуючий шар INIT на M1. Для цього двічі клацнемо лівою кнопкою мишки на імені цього шару. З'явиться вікно редагування властивостей шару.



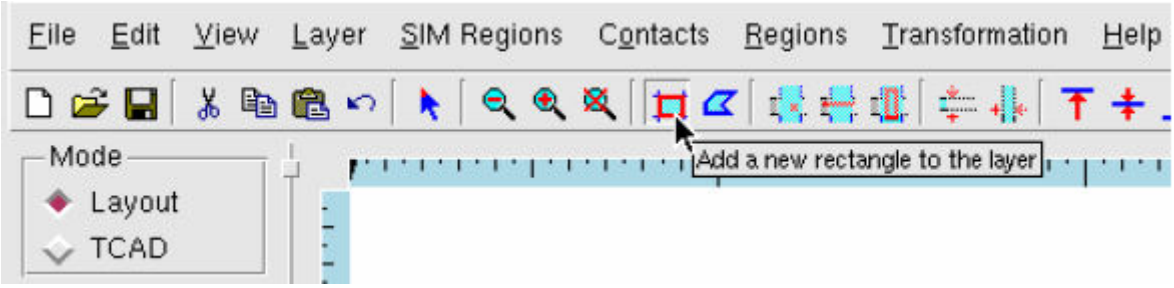
Змінимо текст в полі Name з INIT на M1. Змінимо колір креслень в цьому шарі з червоного на зелений. Для збереження змін натисніть кнопку Modify.



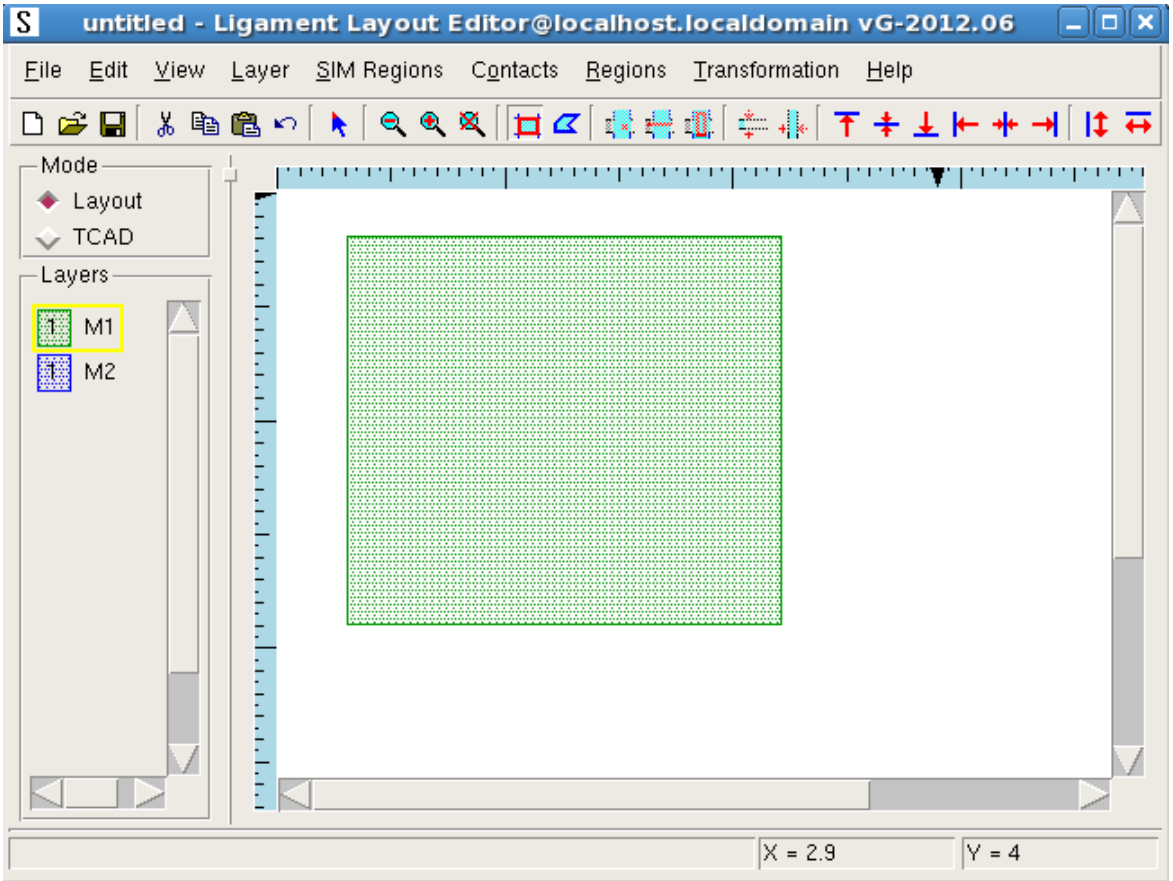
Для створення нового шару, у вікні властивостей **M1** змініть ім'я з **M1** на **M2**. Змініть колір з зеленого на синій та натисніть кнопку **New**. Буде створено новий шар з заданими властивостями.



Креслення маски M1 являє собою квадрат, який захищатиме фоторезист під ним від засвічування. Для створення квадрату в шарі M1, необхідно обрати цей шар, клацнувши на ньому у вікні Layers. Далі необхідно натиснути на кнопку “Add a new rectangle to the layer”



Після цього за допомогою мишки намалюйте на робочій площині квадрат довільного розміру.

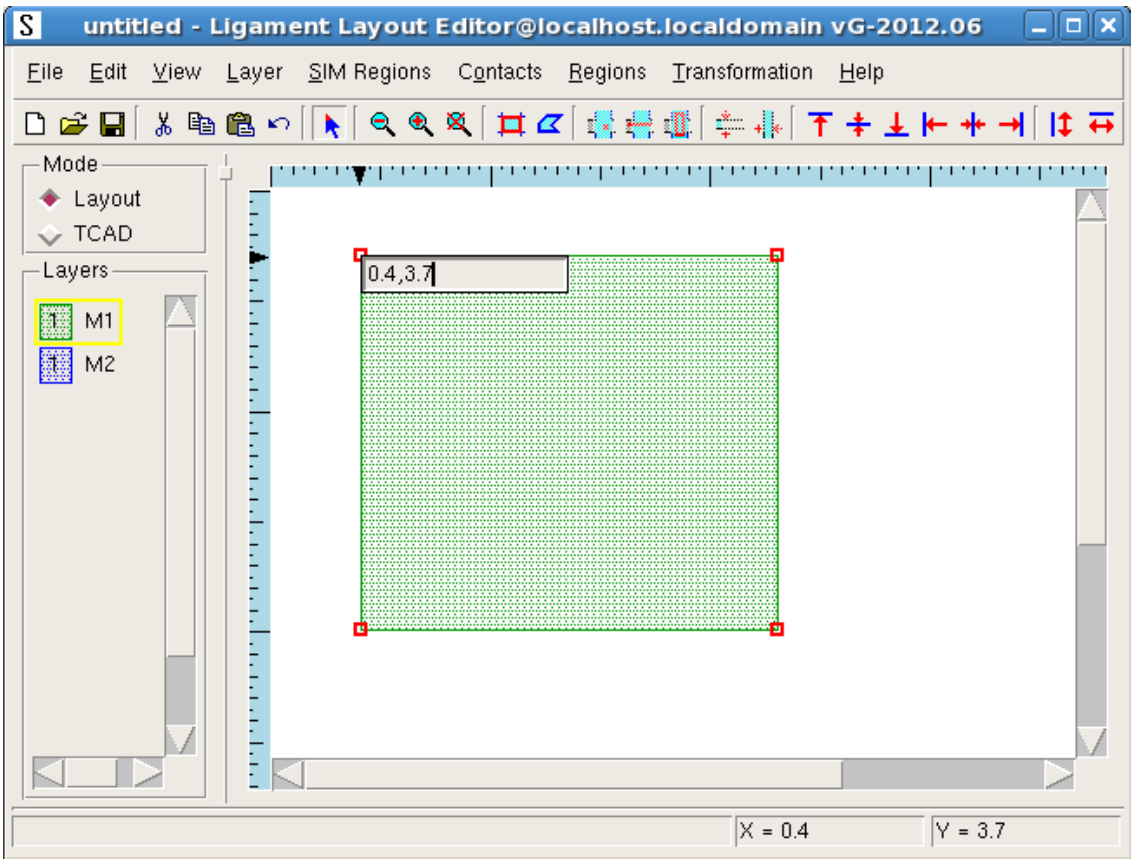


Створений квадрат окреслює область фотошаблону, яка не пропускає світло.

Для переміщення квадрату необхідно повернутися в режим вибору об’єктів натиснувши та один раз клацнути по квадрату лівою кнопкою миші. Навколо квадрату з’явиться червона рамка і його можна буде перетягувати по робочому простору за допомогою миші.

Для редагування розмірів потрібно двічі клацнути лівою кнопкою миші в області створеного квадрату. По краям об’єкту з’являться маленькі червоні маркери. Якщо двічі клацнути на такому маркері, відкриється діалогове вікно для визначення координат вершини.

Необхідно сказати кілька слів про систему координат площини в якій виконуються креслення топології. Координата X розміщена по горизонталі і її значення змінюються з ліва на право (нуль - в лівому верхньому куті). Координата Y розміщена по вертикалі і змінюється з низу до верху (нуль - в лівому нижньому куті). Координати поточного розміщення курсору миші показані в правій нижній частині вікна Prolyt. Всі розміри у мікрометрах.

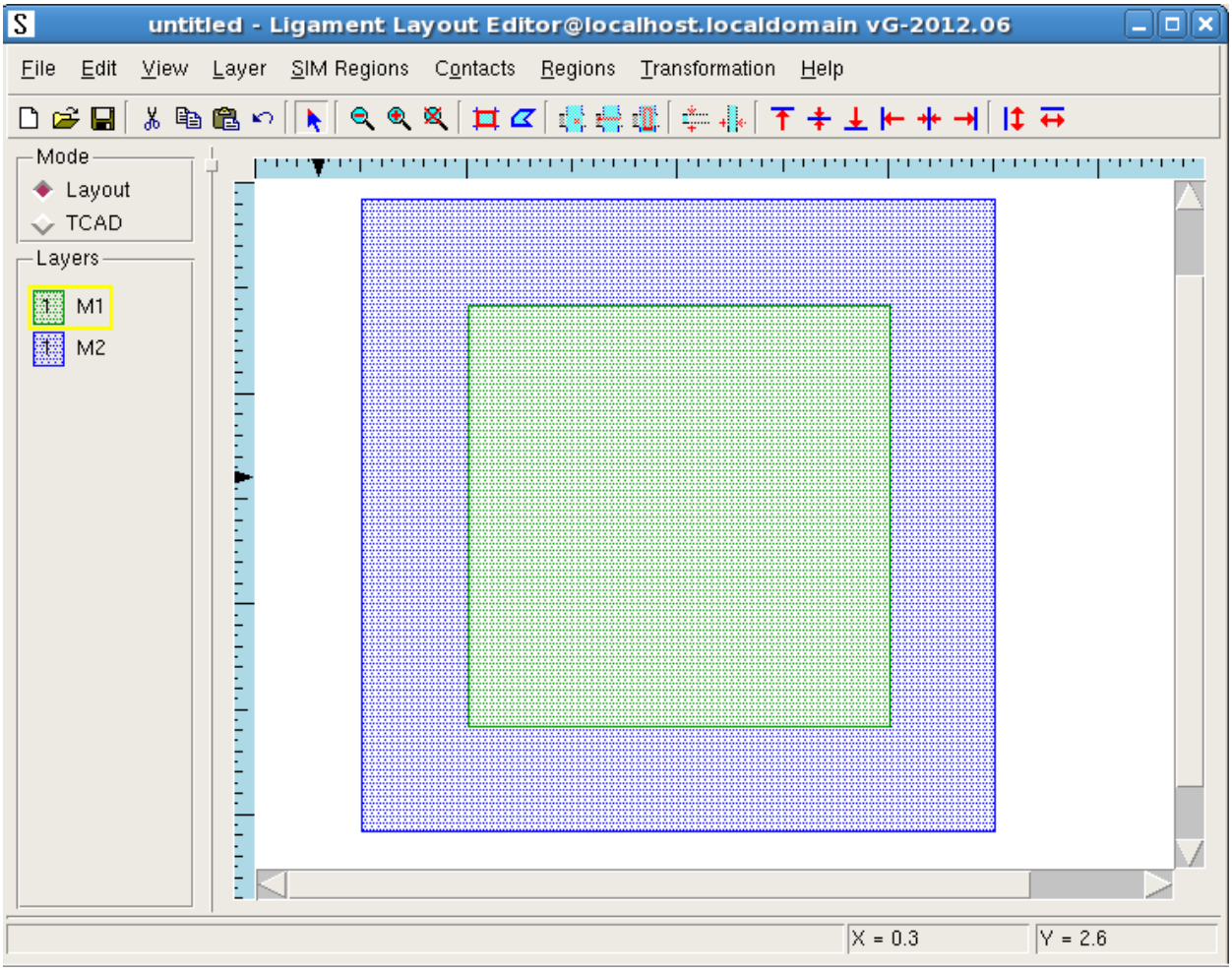


Отже у шарі M1 необхідно створити маску у вигляді квадрату з координатами вершин (1,1) - ліва нижня, (1,3) - ліва верхня, (3,1) - права нижня, (3,3) - права верхня.

Після цього необхідно створити у шарі M2 маску у вигляді квадрату з координатами вершин (0.5,0.5) - ліва нижня, (0.5, 3.5) - ліва верхня, (3.5, 0.5) - права нижня, (3.5, 3.5) - права верхня.

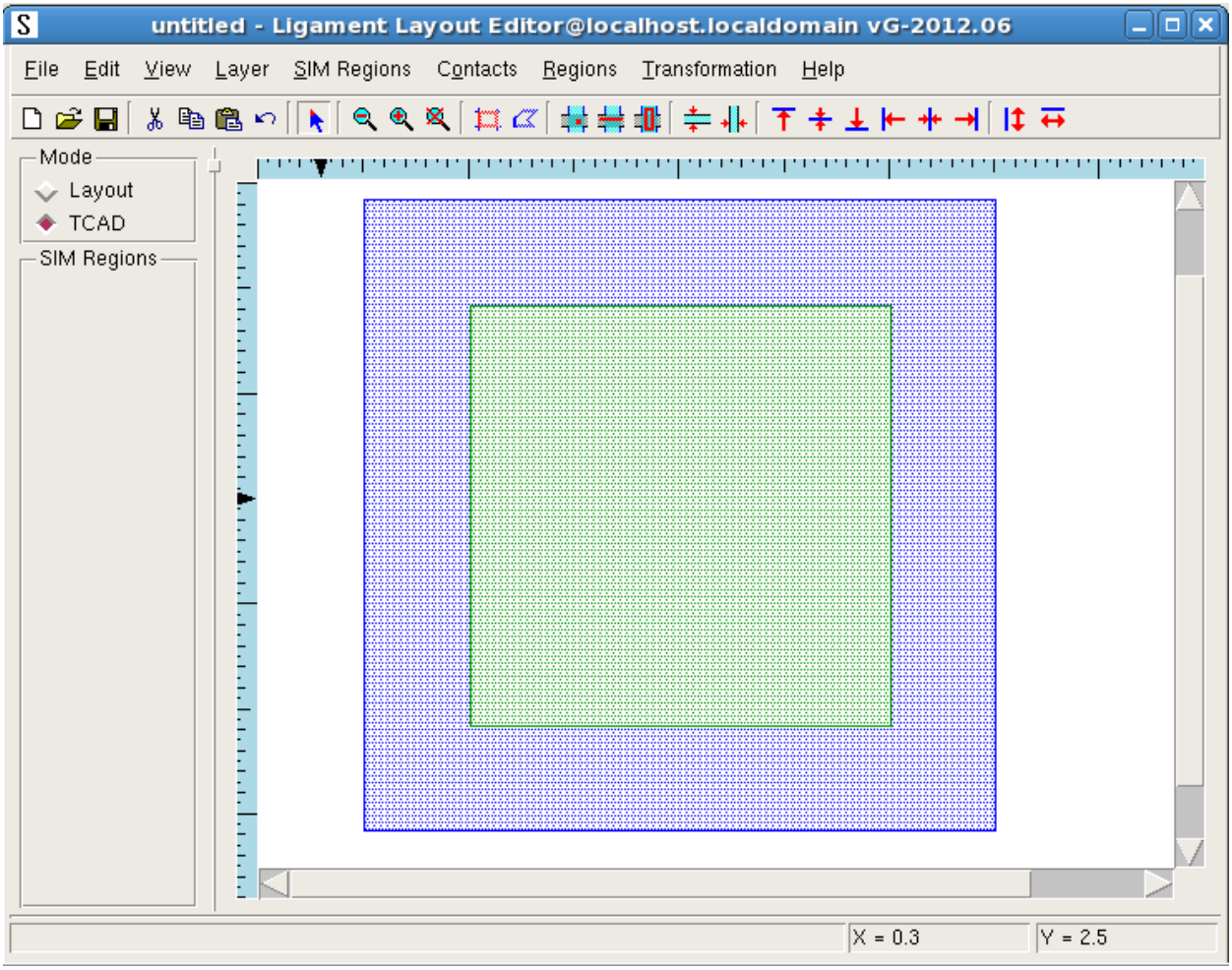
Щоб приховати відображення креслення певного шару, потрібно клацнути правою клавішею миші на імені цього шару у полі layers. Щоб відобразити приховане креслення для певного шару, необхідно клацнути правою кнопкою на імені шару ще раз.

На малюнку нижче відображені креслення фотошаблонів для шарів M1 та M2.



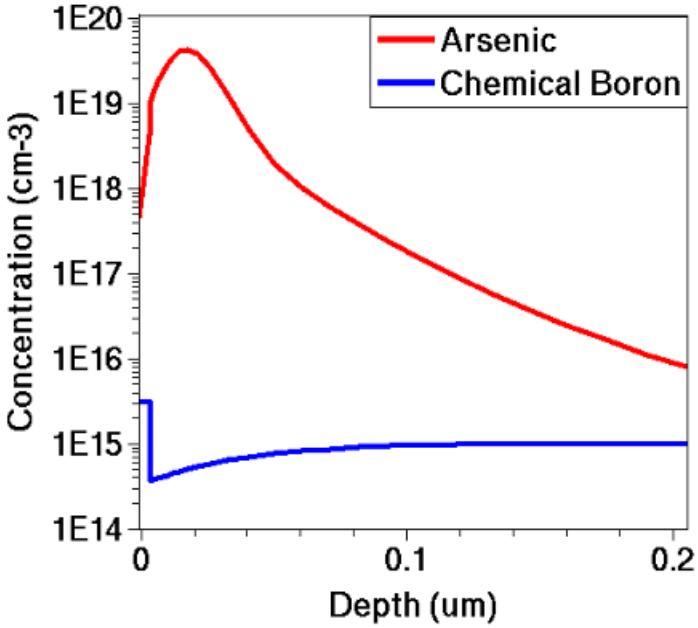
Залишилося обрати область для якої буде виконуватись моделювання структури та електрофізичних характеристик.

Для вибору області моделювання перейдіть у відповідний режим роботи програми Prolyt, змінивши перемикач на панелі **Mode** з положення **Layout** в положення **TCAD**. Як бачите, наповнення вікна програми Prolyt дещо змінилося. Зверніть увагу, що панель **Sim Regions**, в якій відображаються області моделювання, поки що пуста.

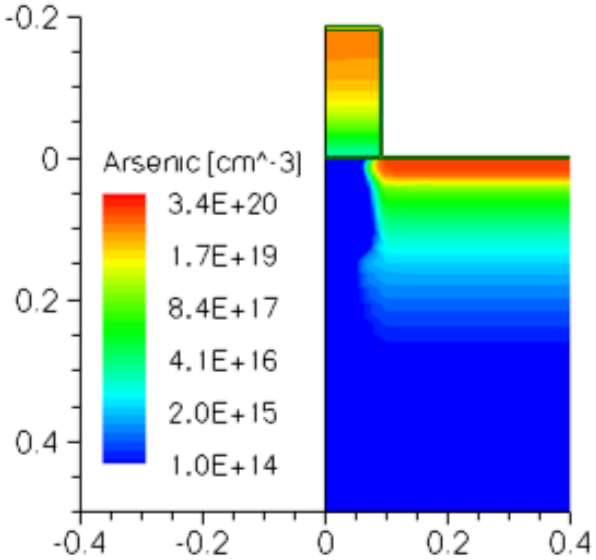


Створені маски характеризують погляд на кремнієву пластину зверху. Нас же цікавлять процеси, що відбуваються всередині пластини. Область всередині пластини, для якої буде відбуватися моделювання, можна визначити за допомогою кнопок .

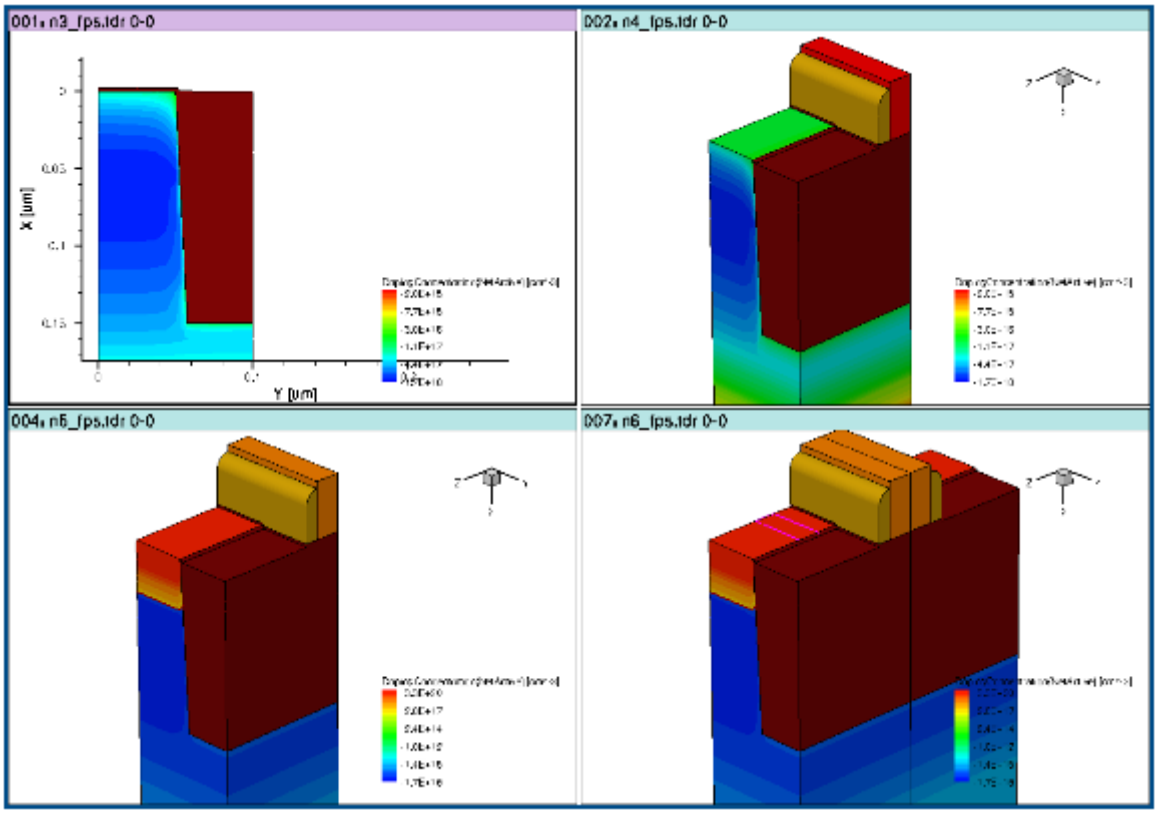
Кнопка задає режим **1D Simulation**. В цьому режимі ви обираєте точку на поверхні кремнієвої пластини і моделювання фізичних процесів відбувається вздовж осі, що перетинає кремнієву пластину в обраній точці перпендикулярно до її поверхні. Це дає можливість одержати залежність певних фізичних величин та характеристик (напруженості електричного поля, густини об’ємного заряду, тощо) від глибини (по осі Z). Прикладом може бути залежність концентрацій атомів миш'яку та бору (введених внаслідок виконання певних технологічних операцій) від глибини кремнієвої пластини в обраній точці на її поверхні.



Кнопка задає режим **2D Simulation**. В цьому режимі ви визначаєте лінію на поверхні кремнієвої пластини і моделювання відбувається в двовимірній області перетину кремнієвої пластини площиною, що проходить через обрану лінію перпендикулярно до поверхні кремнієвої пластини. Такий режим дозволяє одержати залежність певних фізичних величин та характеристик (напруженості електричного поля, густини об'ємного заряду, тощо) від координати по одній із сторін кремнієвої пластини (вісь X, або Y) та від глибини (вісь Z). Прикладом може бути залежність концентрації атомів домішок миш'яку (введених в кремнієву пластину шляхом іонної імплантації) від глибини пластини та координати X (розтин в площині XZ).

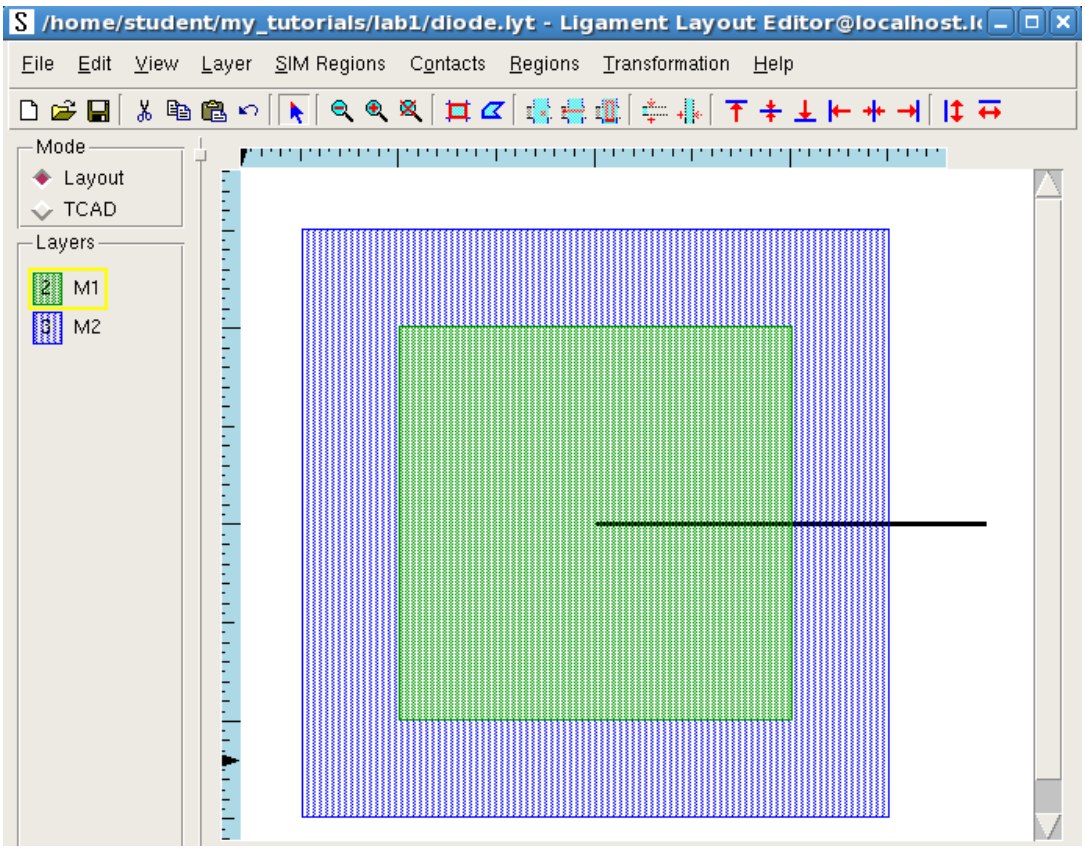


Кнопка дозволяє задати режим **3D Simulation**. В цьому режимі ви визначаєте прямокутник на поверхні кремнієвої пластини і моделювання відбувається в трьох вимірах (по XY всередині обраної зони на поверхні та по глибині). Такий режим дозволяє одержати значення певних фізичних величин та характеристик (напруженості електричного поля, густини об'ємного заряду, тощо) в будь якій точці обраної області всередині кремнієвої пластини. Прикладом може бути залежність концентрації атомів домішок в трьохвимірній структурі польового МДН транзистора.

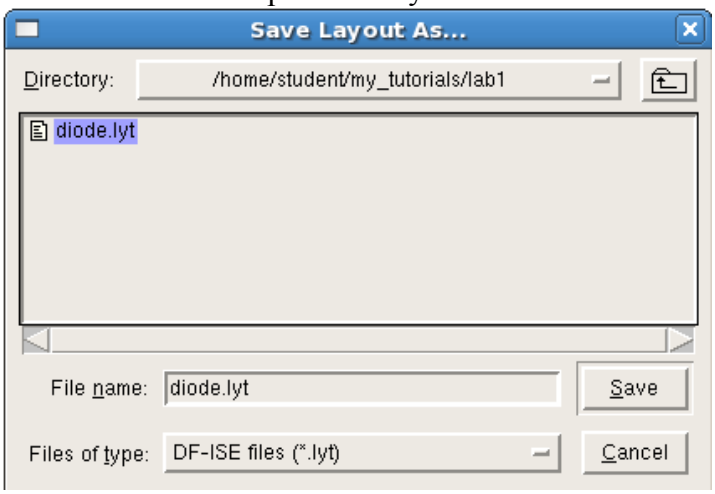


В першій частині лабораторної роботи ми будемо проводити двовимірне моделювання. Тож натискаємо кнопку для визначення режиму **2D Simulation**. Тепер необхідно створити пряму лінію вздовж якої буде проходити розтин кремнієвої пластини. Оскільки проектований діод симетричний, достатньо промоделювати лише половину його структури, оскільки інша половина буде мати такі ж характеристики. Таким чином ми зменшимо тривалість моделювання без зниження точності.

Намалюйте лінію для визначення області моделювання типу **2D Simulation**, як це показано на рисунку нижче. Властивості такої лінії (ім'я, колір) можна задати аналогічно до властивостей об’єктів топології. Координати кінців лінії можна визначити так само, як і координати вершин квадратів створених фотолітографічних масок. По замовчуванню створена область 2D моделювання називається SIM2D та відображається в панелі SIM Regions.



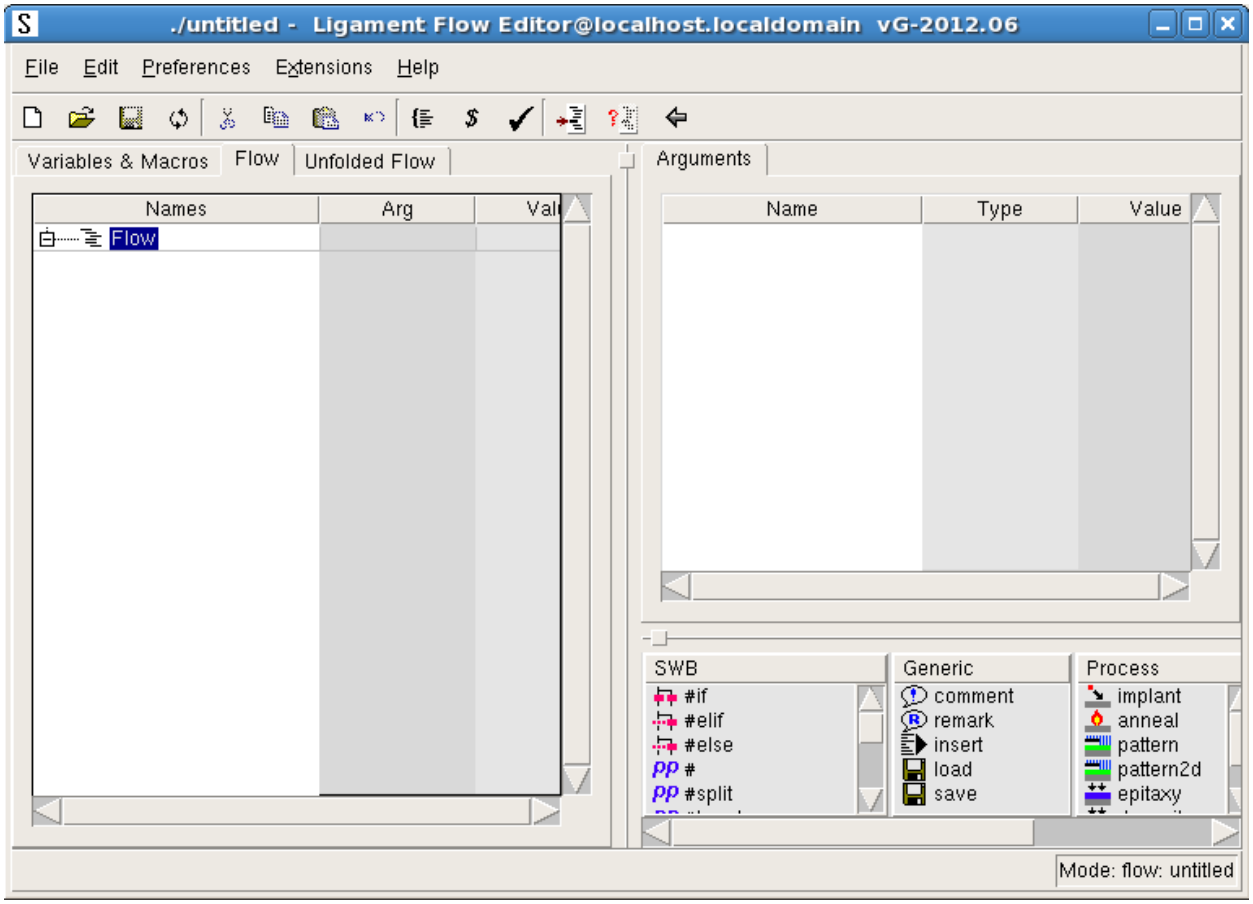
Збережіть створені фотолітографічні маски та область моделювання в файл diode.lyt, обравши File -> Save Layout As -> DF-ISE. Закрийте Prolyt.



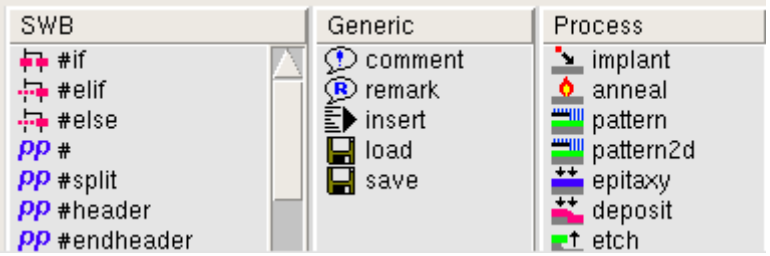
Майте на увазі, що при використанні формату DF-ISE кольори шарів не зберігаються. В нашому випадку це не критично. Для збереження кольорів шарів необхідно використовувати формат GDS або CIF.

3. Початок роботи в Ligament

Запустіть програму Ligament, виконавши в терміналі (консолі) команду **ligedit &** . При цьому консоль повинна бути відкрита з каталогу лабораторної роботи. Відкриється вікно Ligament.

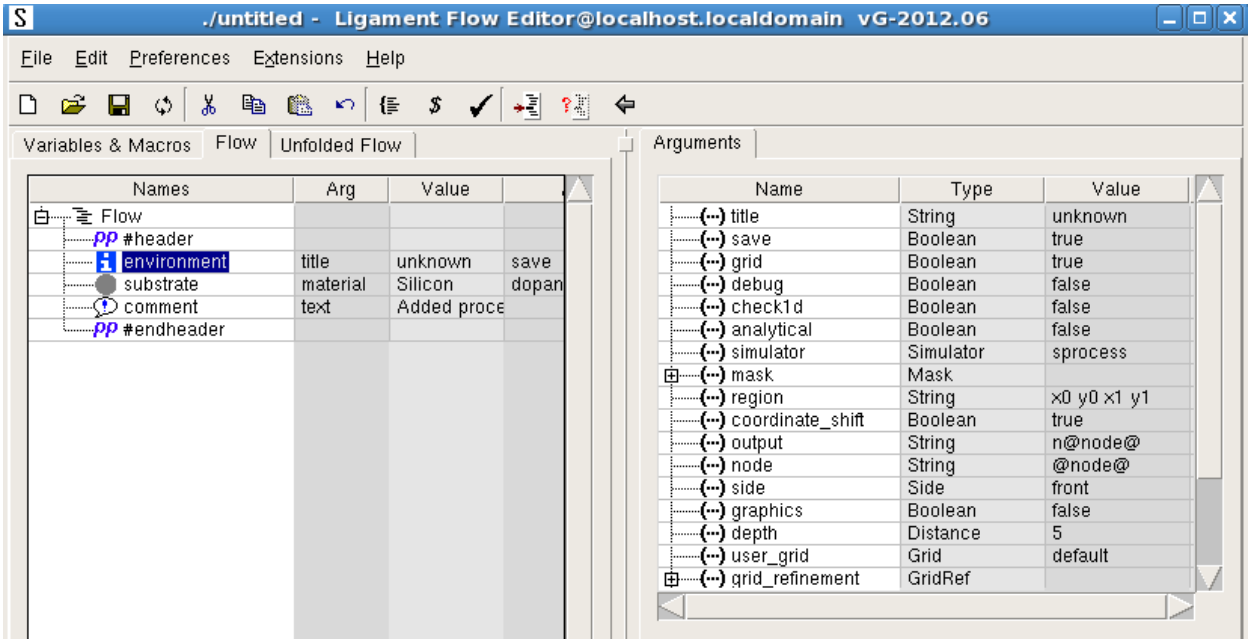


На вкладці **Flow** відображається послідовність етапів технологічного процесу виготовлення мікроелектронного пристрою. Доступні етапи технологічного процесу та команди керування знаходяться на панелі в правому нижньому куті вікна програми. Етапи технологічного процесу можна перетягувати з даної панелі у вікно Flow за допомогою миші.

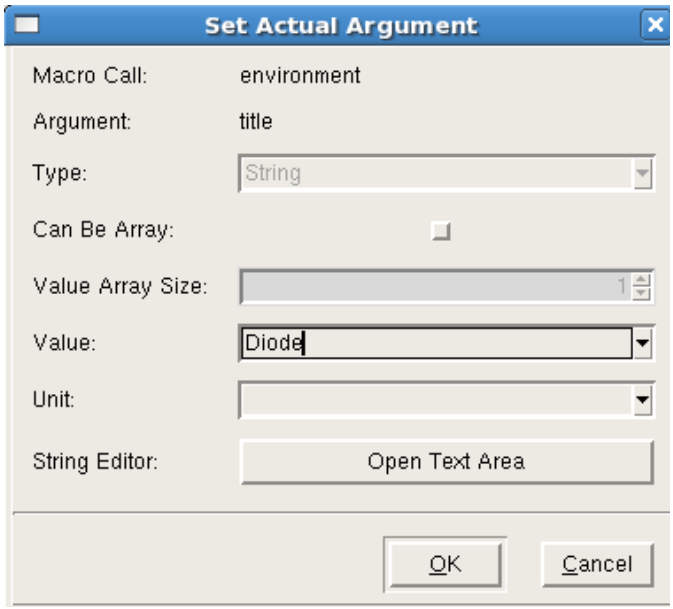


На панелі **Arguments** відображаються параметри (налаштування, аргументи) обраного етапу технологічного процесу.

Спершу необхідно додати заголовок технологічного процесу, в якому описуються основні налаштування моделювання та параметри кремнієвої пластини. Для виконання цього кроку оберіть пункт головного меню Edit -> Add Process Header, або натисніть **Ctrl + H**. В результаті, у вікні Flow з'явиться кілька так званих макросів. Клацніть лівою кнопкою миші на макросі **environment** і на панелі Arguments з'являться налаштування (аргументи) цього макросу.

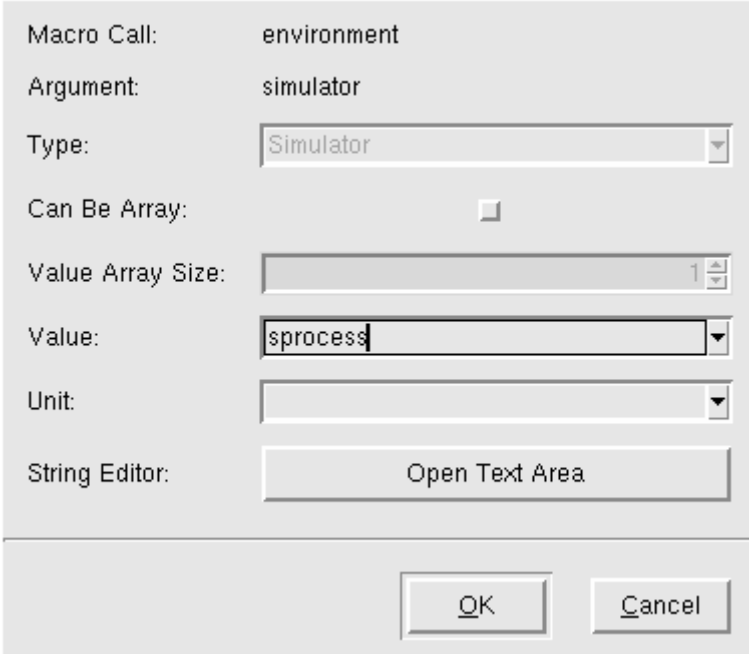


Щоб змінити значення певного параметру (аргументу) макросу треба двічі клацнути лівою кнопкою миші по імені аргументу (**Name**). Відриється вікно для редагування значень аргументу.

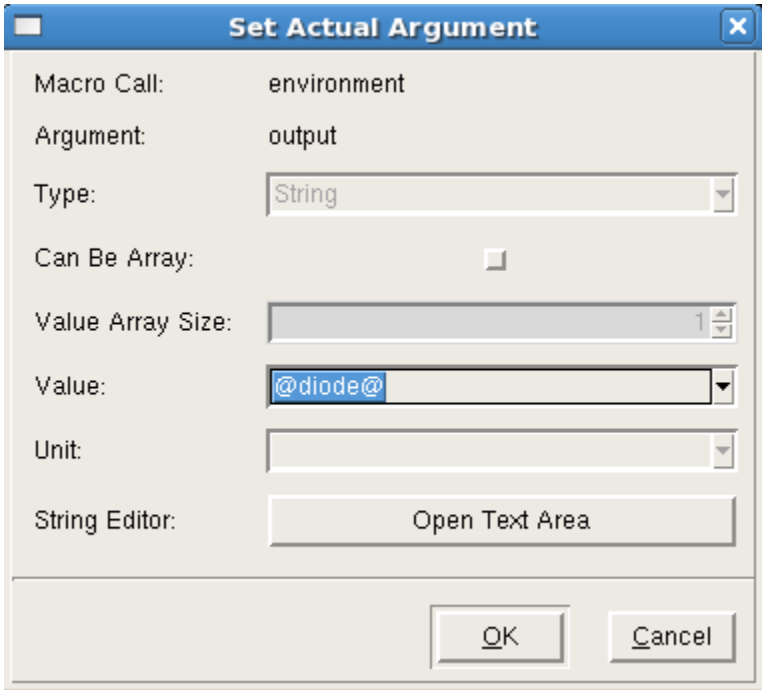


Задайте значення аргументу **Title**. Для цього в полі **Value** редактору значень аргументу вкажіть текст Diode та натисніть кнопку Ок. Натискання кнопки **Open Text Area** приведе до відкривання текстового редактору для введення значного об'єму тексту.

Перевірте, щоб значенням аргументу **simulator** був **sprocess** (програма, що виконуватиме моделювання етапів технологічного процесу).

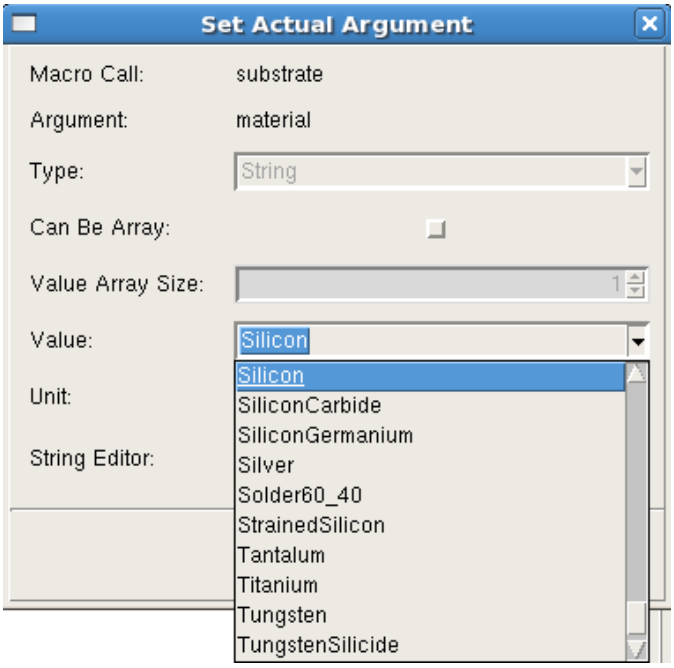


Задайте значенням аргументу **output** текст **@diode@**. Це приведе до маркування всіх вихідних файлів моделювання відповідним текстом.

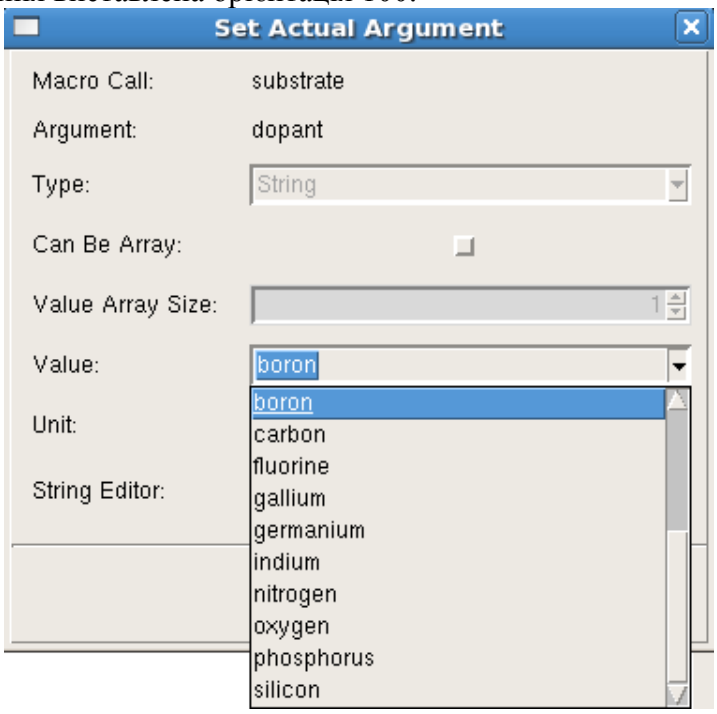


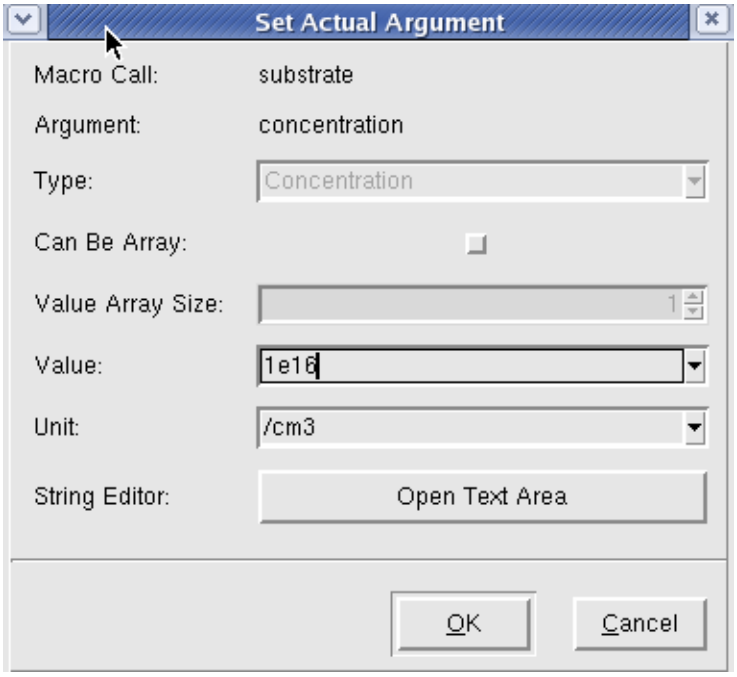
Перевірте, щоб для аргументу **graphics** було виставлено значення **false**. Це необхідно для заборони появи всіх можливих графіків результатів під час симуляції. Набагато зручніше самому побудувати потрібний графік після закінчення симуляції.

Перейдіть до налаштувань макросу **Substrate** клацнувши по ньому в полі Flow. Substrate дозволяє задати параметри напівпровідникової пластини на якій виготовляється мікроелектронний пристрій. Зверніть увагу, що значенням аргументу **Material** по замовчуванню є **Silicon**, тобто кремній. Однак доступно багато інших матеріалів.

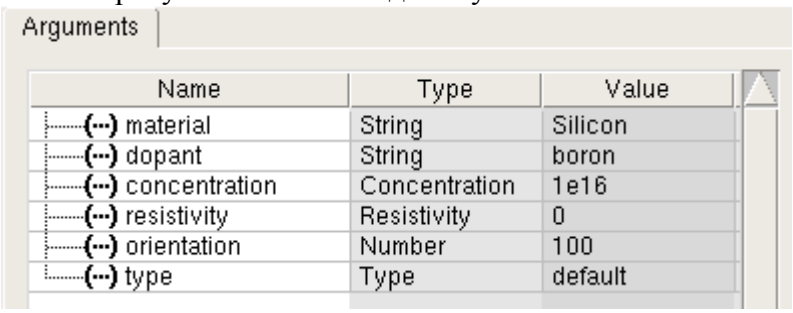


Проставте значенням аргументу **dopant** матеріал Бор (**boron**). Цей аргумент задає хімічний елемент, яким буде легована напівпровідникова пластина. Окрім Бору доступно багато інших хімічних елементів. В даному випадку розподілення хімічних елементів в кремнієвій пластині буде рівномірне. Тобто в кожному кубічному сантиметрі буде знаходитись постійна концентрація атомів обраного хімічного елементу. Концентрація домішок обраного хімічного елементу в кремнієвій пластині задається аргументом **concentration**. Виставимо його значення рівним 1e16 з одиницями вимірювання /cm3. Це означає, що в одному кубічному сантиметрі кремнієвої напівпровідникової пластини буде знаходитись 10^{16} атомів Бору. Оскільки у якості домішок використовуємо Бор, кремнієва пластина буде мати провідність p-типу. Макросом **resistivity** можна задати питомий опір кремнієвої пластини, а макросом **orientation** її кристалографічну орієнтацію в індексах Міллера. По замовчування виставлена орієнтація 100.

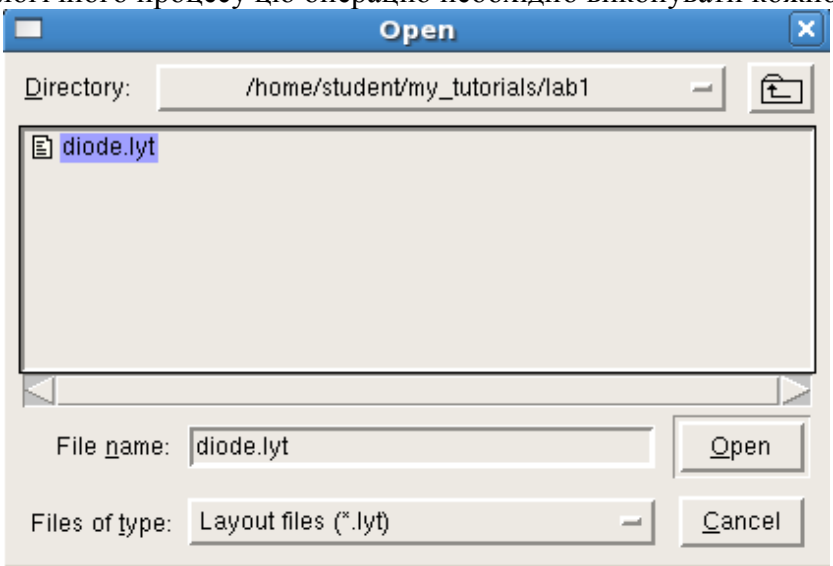




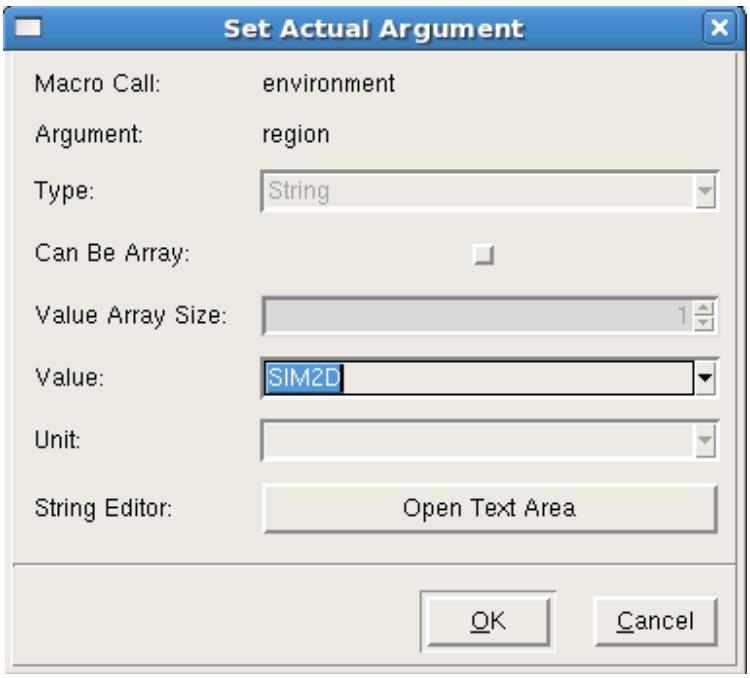
Загалом, аргументи макросу Substrate виглядатимуть таким чином:



Тепер необхідно підключити до створюваного технологічного процесу фотолітографічні маски, раніше розроблені в prolyt. Для цього оберіть пункт головного меню File -> Open Layout та відкрийте раніше збережений файл з топологією. При відкриванні збереженого технологічного процесу цю операцію необхідно виконувати кожного разу.

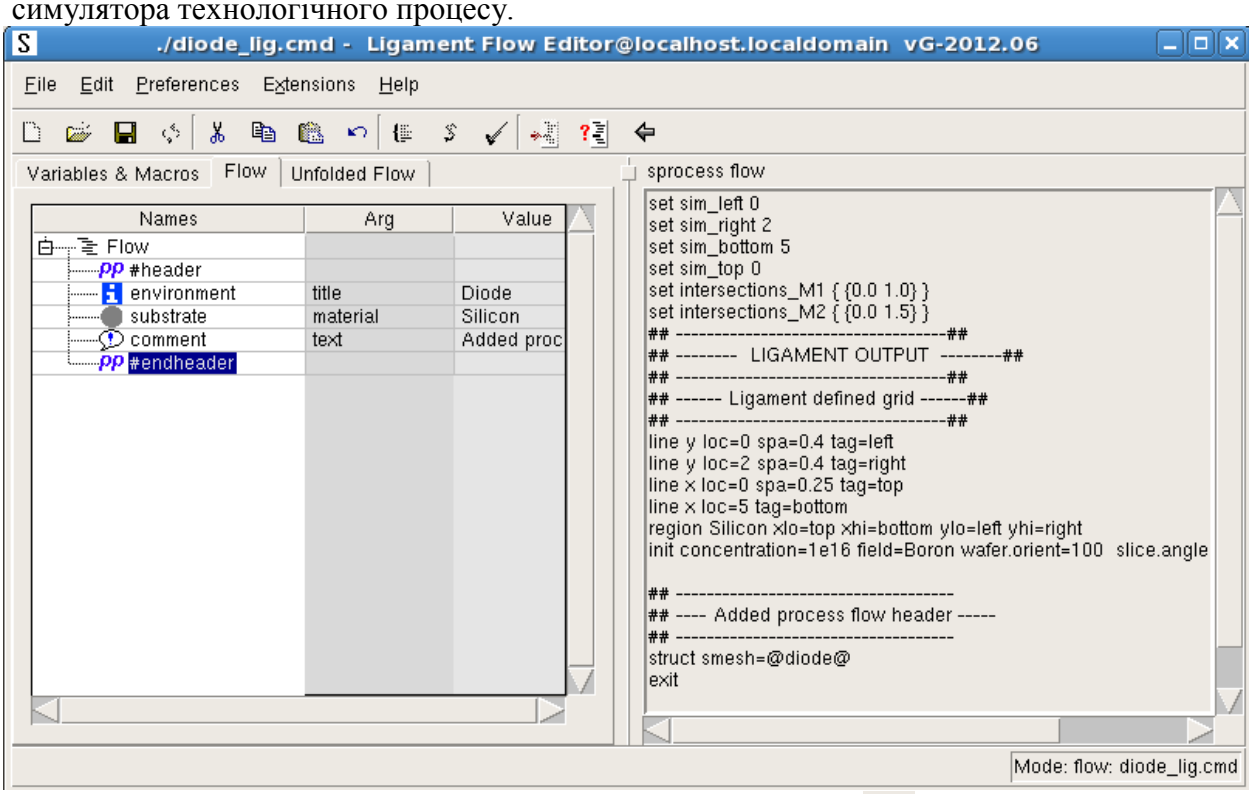


Після підключення файлів з топологією мікроелектронного пристрою необхідно вказати область в якій буде виконуватись симуляція (моделювання). Ми цю область визначили раніше в редакторі Prolyt та зберегли інформацію про неї в файлі diode.lyt, який щойно відкрили в Ligament. Знову переходимо до налаштувань аргументів макросу environment. Обираємо аргумент **region** та виставляємо його значення в **SIM2D**.

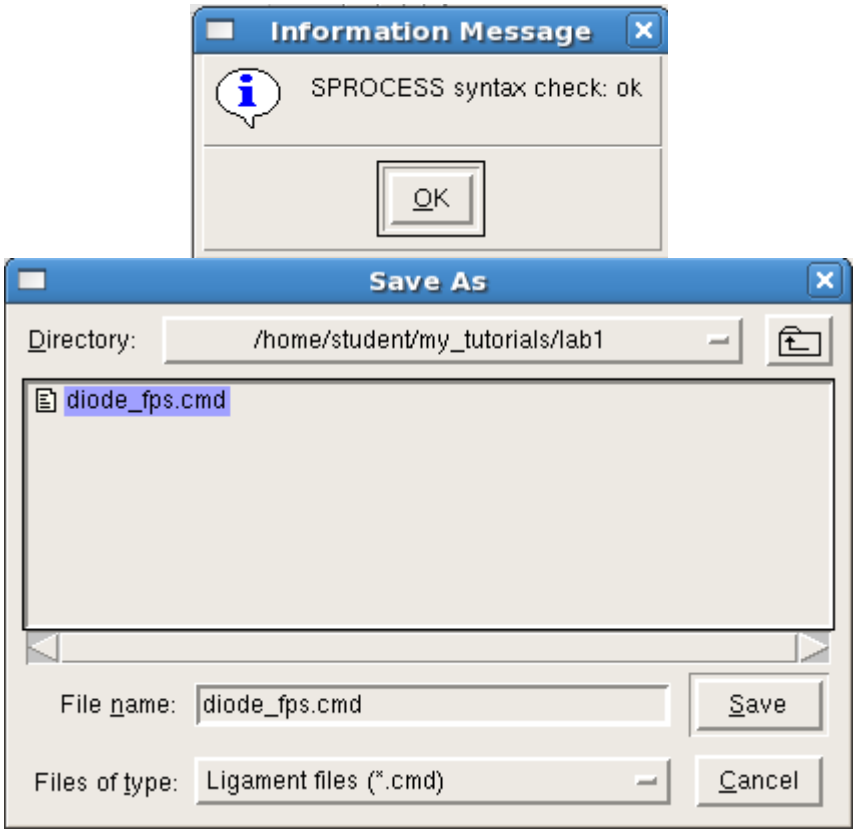


Зверніть увагу, що цю операцію необхідно виконувати після підключення файлу з інформацією про топологію та визначену область симуляції.

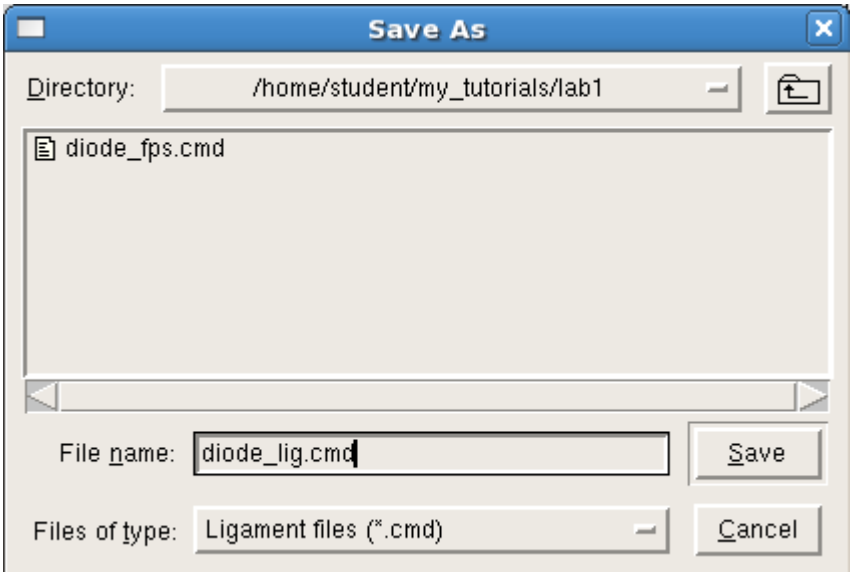
Натисніть на кнопку **Translate the current flow** . В результаті, з послідовності етапів технологічного процесу (макросів) на панелі Flow буде створено командний файл для симулятора технологічного процесу.



Якщо натиснути на кнопку **Check simulator syntax** , буде виконана перевірка правильності створеного командного файлу. Одержавши інформацію про успішне завершення перевірки можна зберегти створений командний файл обравши пункт головного меню File -> Save Translated Flow As. Іменем командного файлу нехай буде **diode_fps.cmd**



Щойно ми створили командний файл для моделювання послідовності технологічних операцій (макросів), наявних на панелі Flow. Поки що послідовність ця невелика і містить лише заголовок технологічного процесу, що складається з макросів environment та substrate, які визначають параметри моделювання і кремнієвої пластини. Для повернення в режим редагування технологічного процесу натисніть копку **Back To Edit Mode** . Збережемо даний технологічний процес в файл **diode_lig.cmd**, обравши пункт головного меню File -> Save As.

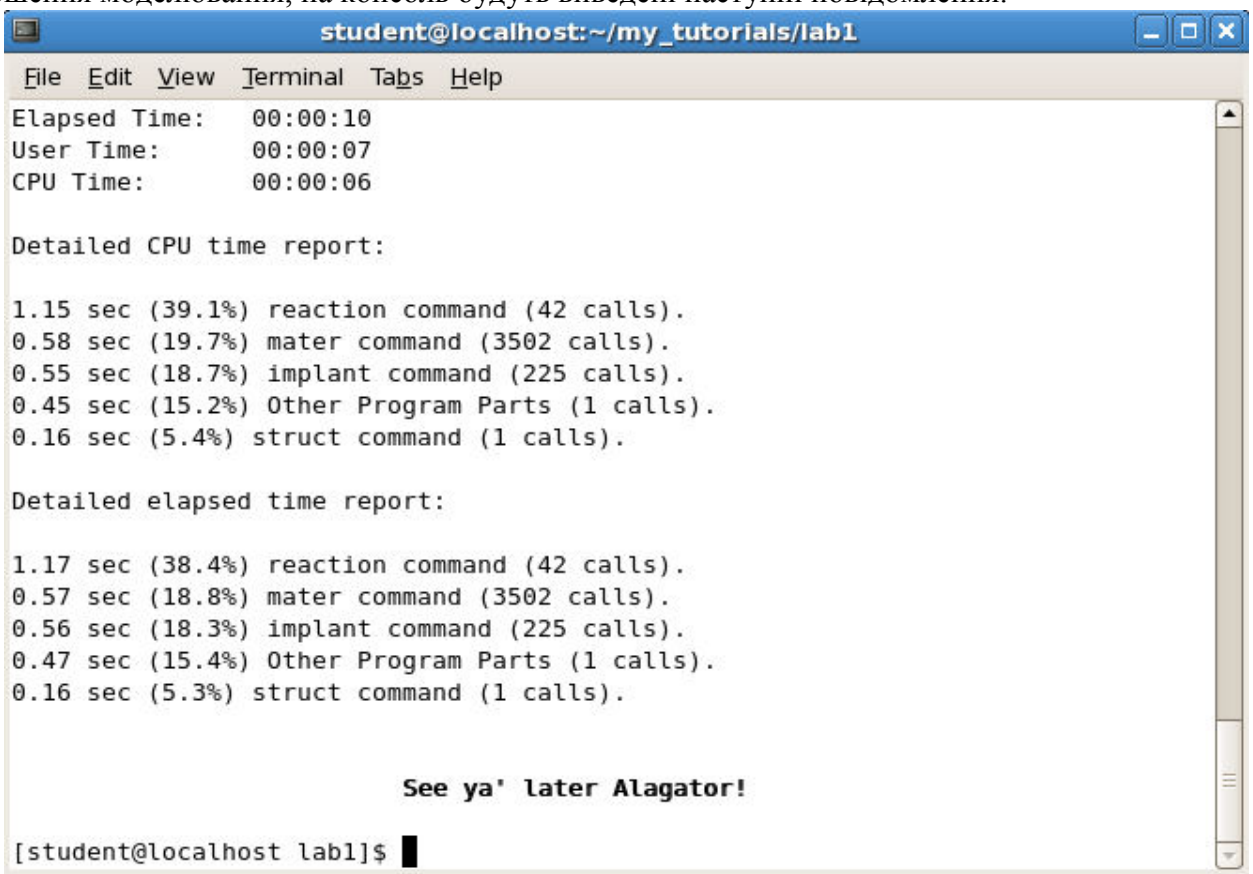


Зверніть увагу, що ми щойно зберегли проект Ligament, а перед цим зберігали командний файл для симулятора технологічного процесу. Командний файл **diode_lig.cmd** можна пізніше відкрити в Ligament і продовжити редагування технологічного процесу, після чого створити новий командний файл для симулятора і знову зберегти його.

Поки що закриємо програму Ligament і виконаємо моделювання найпростішого командного файлу технологічного процесу, який ми щойно створили в Ligament.

Для цього відкрийте консоль (термінал) з каталогу лабораторної роботи та виконайте в терміналі команду **sprocess diode_fps.cmd**. Очевидно, що цією командою ми запускаємо на виконання програму для моделювання технологічного процесу **Sentaurus Process** (sprocess) і

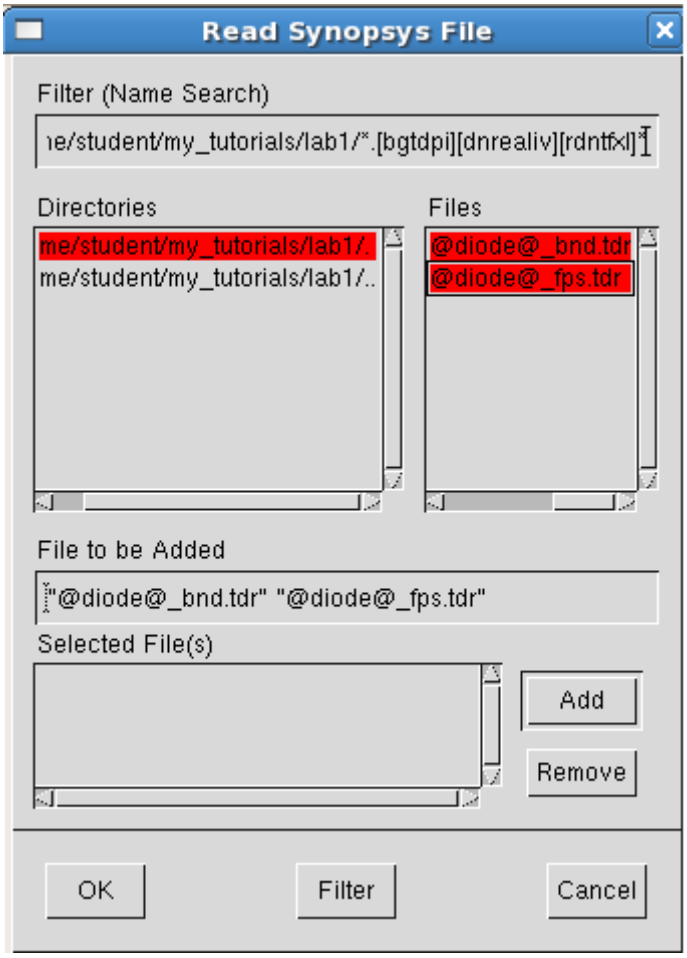
передаємо їй у якості аргументу командний файл **diode_fps.cmd**. У випадку успішного завершення моделювання, на консоль будуть виведені наступні повідомлення.



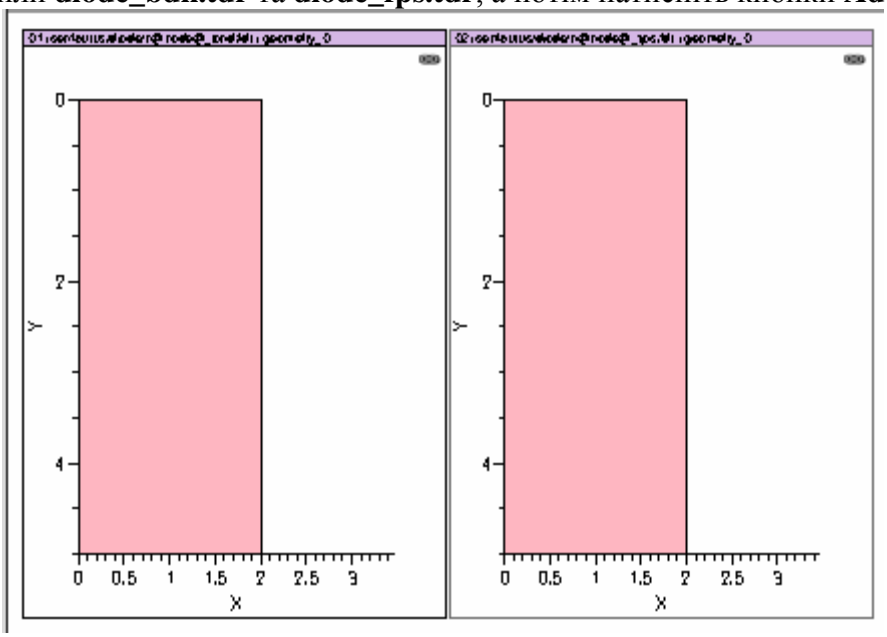
Для перегляду результатів симуляції запустимо програму Tecplot, виконавши з терміналу (консолі) команду **tecplot_sv -mesa &** . З'явиться вікно програми Tecplot.

Після завершення моделювання, програма sprocess створює файли **diode_bdn.tdr** та **diode_fps.tdr**. Файл **diode_bdn.tdr** містить інформацію про структуру і геометричні розміри напівпровідникового приладу, який було створено внаслідок моделювання технологічного процесу. Файл **diode_fps.tdr** на додачу містить інформацію про концентрації атомів матеріалів та механічні напруження в будь-якій точці мікроелектронної структури.

Необхідно відкрити ці файли для перегляду в Tecplot. Для цього оберіть пункт головного меню File -> Load. З'явиться вікно вибору файлів.



Виділіть файли **diode_bdn.tdr** та **diode_fps.tdr**, а потім натисніть кнопки **Add** і **OK**.



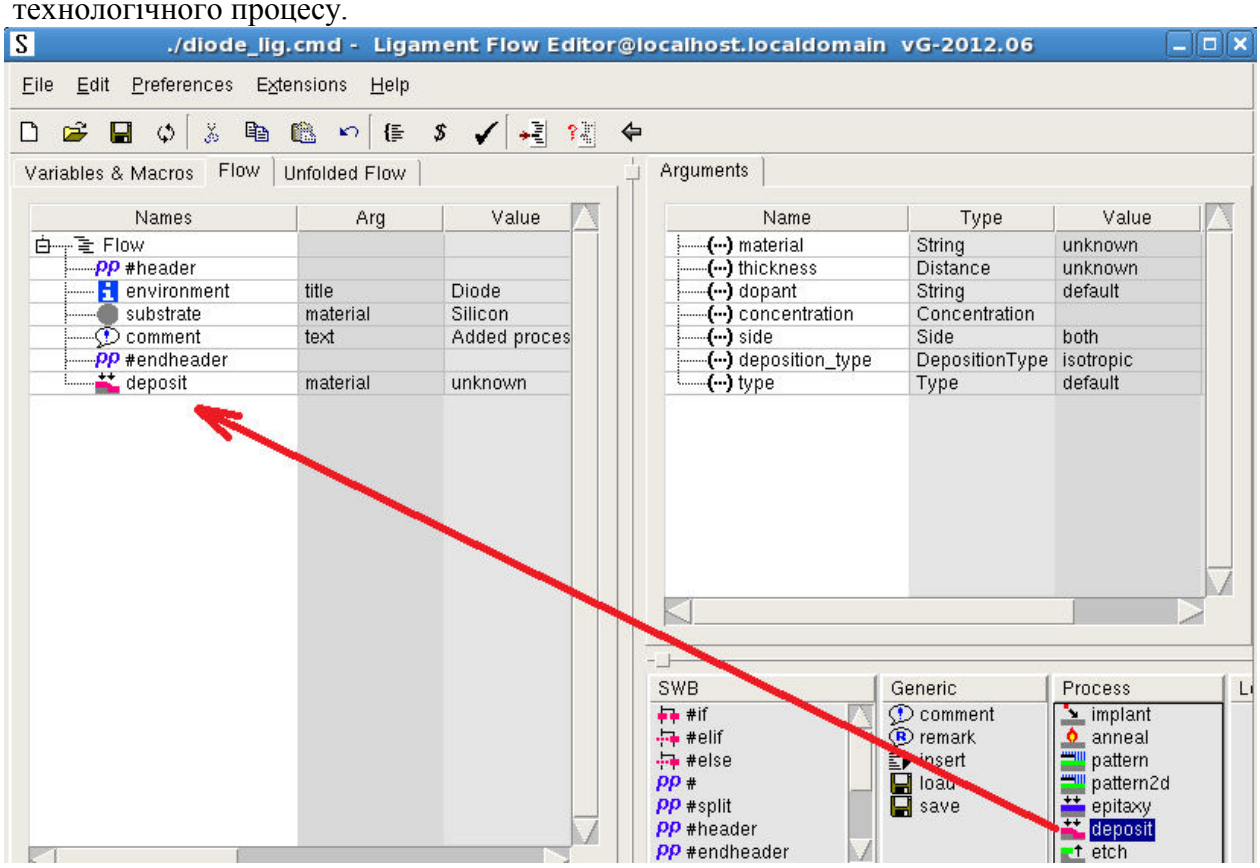
Відкриється вікно з зображенням створеної кремнієвої пластини. Поки що там нічого цікавого немає, оскільки ми не виконували жодних технологічних операцій.

Якщо після масштабування зображення зникне, необхідно натиснути кнопку перемальовування вмісту вікна .

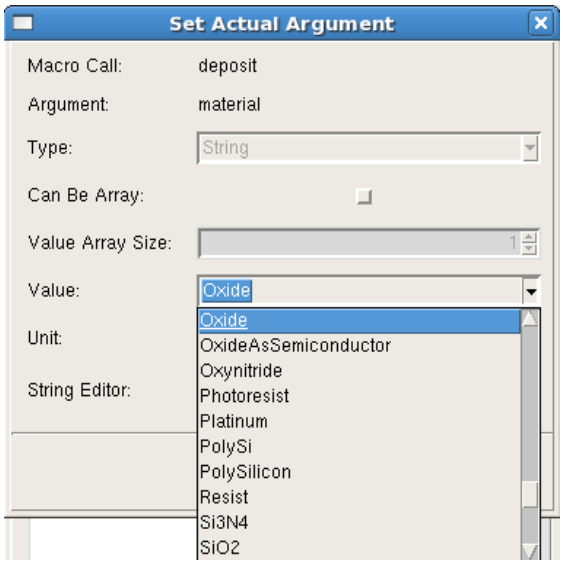
Закриємо Tecplot і повернемося до створення технологічного процесу. Для цього необхідно знову запустити Ligament. Не забудьте після відкриття збереженого проекту в Ligament відкрити файл з топологією, інакше виникатимуть помилки.

4. Створення шару SiO2 з домішками фосфору на поверхні кремнієвої пластини

Першим етапом технологічного процесу стане нанесення на поверхню кремнієвої пластини шару окислу кремнію з домішками фосфору (так зване Spin-on glass). Цей шар буде використовуватись, як джерело донорних атомів під час наступної операції дифузії. Для цього перетягніть макрос deposit з правої нижньої частини вікна в список технологічних операцій в панелі Flow, на позицію, що знаходиться одразу після закінчення заголовку технологічного процесу.



Макрос **deposit** дозволяє наносити на поверхню заготовки шар певного матеріалу заданої товщини. Клацніть лівою кнопкою миші на макросі deposit на панелі Flow і у сусідньому вікні Arguments з'являться параметри (аргументи) цього етапу технологічного процесу. Спершу необхідно обрати матеріал. В нашому випадку це буде окисел кремнію. Отже значенням аргументу **material** необхідно обрати **Oxide**. Ознайомтеся з іншими матеріалами, які можна наносити на поверхню заготовки (в нашому випадку кремнієвої пластини).

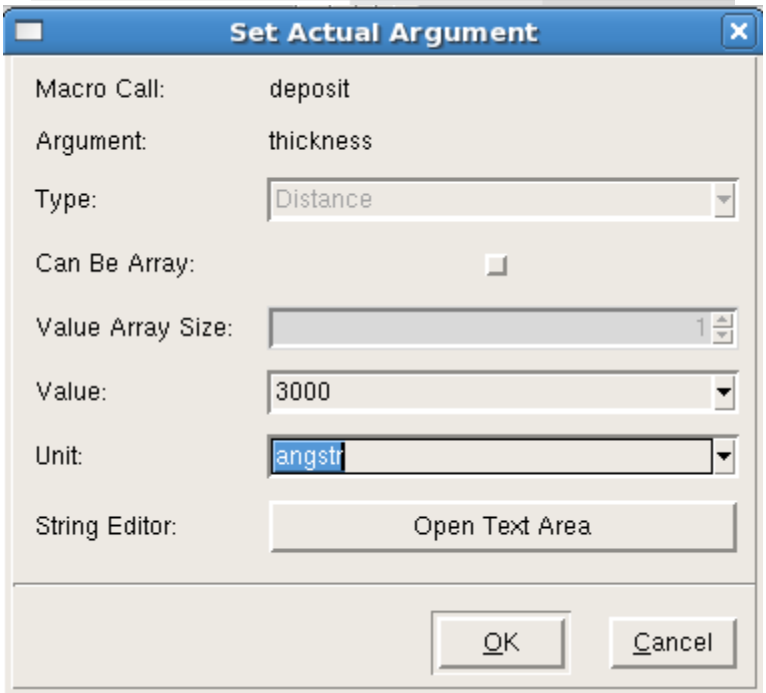


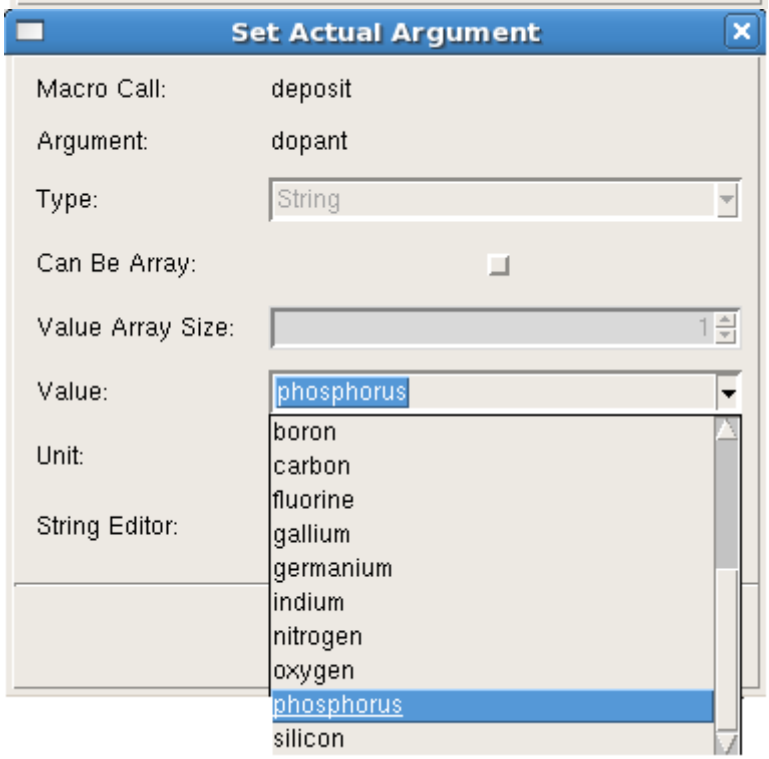
Виставте аргумент **thickness** (товщину шару) в 3000 Ангстрем, матеріал домішок (**dopant**) - фосфор (**Phosphorus**), концентрація домішок (**concentration**) 5e21 ($5*10^{21}$) на $см^3$.

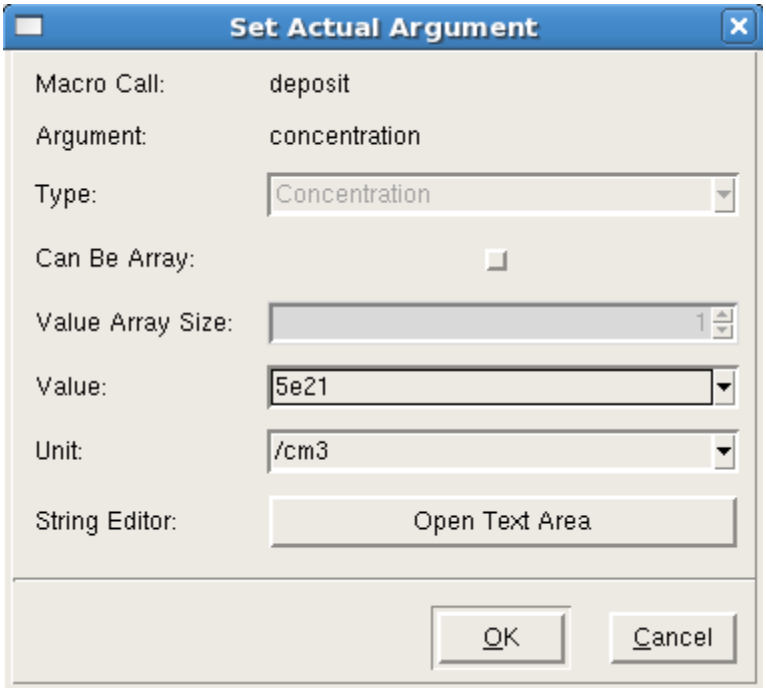
В результаті виконання даного етапу технологічного процесу, на поверхні кремнієвої пластини буде створено шар окислу кремнію SiO2 товщиною 3000 Ангстрем, в якому будуть рівномірно розподілені атоми домішок фосфору з концентрацією $5*10^{21}$ на $см^3$.

Вікно Arguments технологічної операції deposit повинно виглядати таким чином.

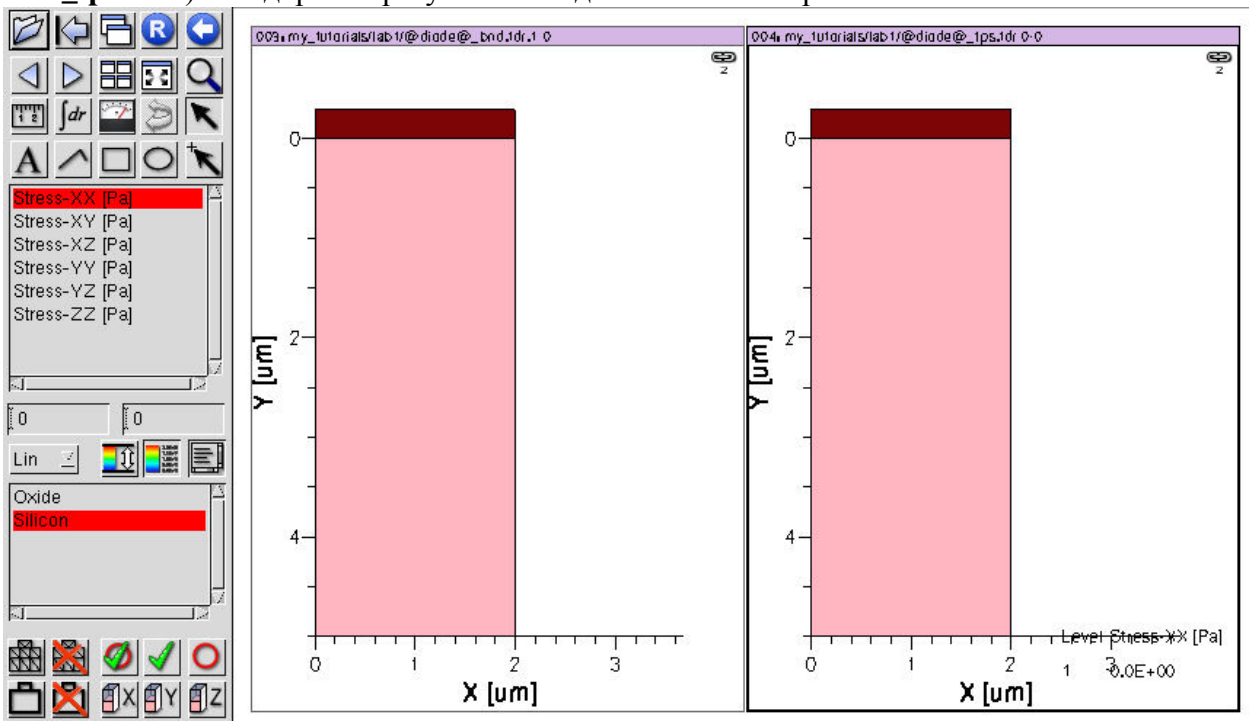
Name	Type	Value
(...) material	String	Oxide
(...) thickness	Distance	3000
(...) dopant	String	phosphorus
(...) concentration	Concentration	5e21
(...) side	Side	both
(...) deposition_type	DepositionType	isotropic
(...) type	Type	default







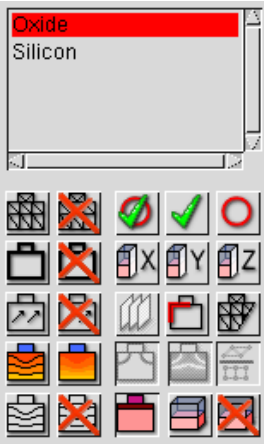
Знову збережіть технологічний процес в Ligament, створіть командний файл для симулятора, збережіть його в **diode_fps.cmd**, виконайте моделювання (**sprocess diode_fps.cmd**) та відкрийте результати моделювання в Tecplot.



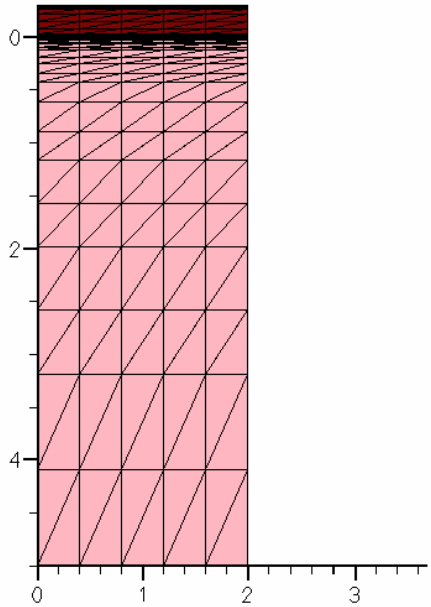
Видно, що зараз над поверхнею кремнієвої платини з'явився шар матеріалу, який був нанесений в заданому технологічному процесі.

Давайте детальніше ознайомимось з інтерфейсом програми Tecplot. По-перше, необхідно розібратися з координатними осями X та Y. Це не ті XY координати, що були в редакторі Prolyt. В Tecplot для випадку двовимірного моделювання (як у нас зараз) координата Y характеризує глибину кремнієвої пластини, а координата X - ту сторону пластини, по якій проходив розріз при визначенні області моделювання.

Зверніть увагу на наступні елементи інтерфейсу:



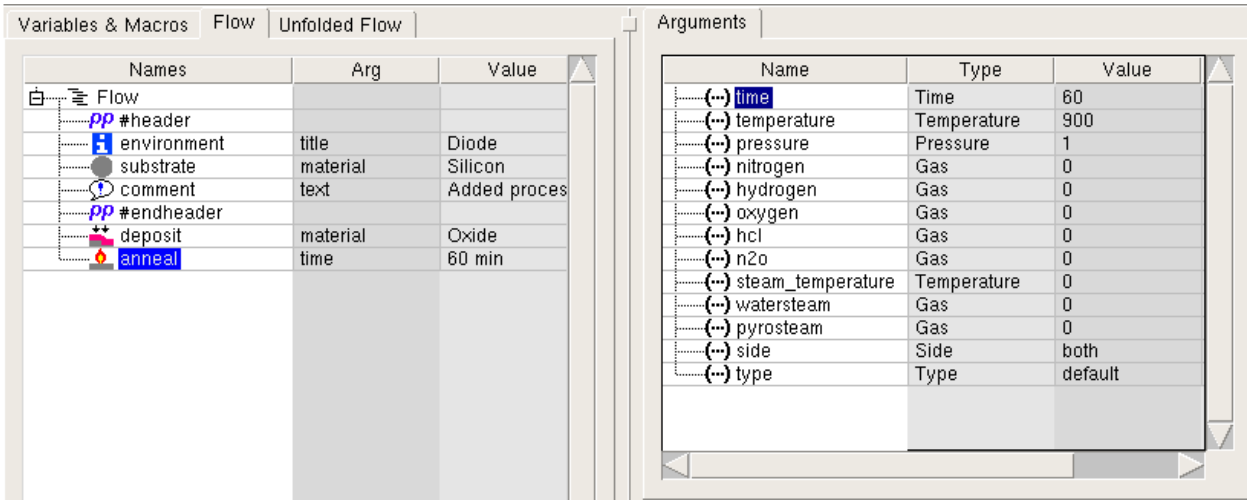
В верхньому списку можна обирати області структури до яких будуть застосовані кнопки з нижньої панелі. Кнопка вмикає відображення сітки для методу скінченних елементів. Кнопка вимикає відображення такої сітки. TCAD вирішує диференційні рівняння фізичних процесів, що відбуваються при проведенні технологічних операцій, за допомогою чисельного методу скінченних елементів. Для реалізації такого методу необхідно створити спеціальну координатну сітку. В даному випадку вона створюється автоматично, але пізніше ми розглянемо як створити її вручну.



5. Виконання операції дифузії

Щоб донорні атоми фосфору дифундували з тонкого шару Spin-On glass в кремнієву пластину p-типу, необхідно її нагріти на певний час до певної температури. Внаслідок такої операції концентрація донорів в приповерхневому шарі кремнієвої пластини значно перевищить концентрацію акцепторів, що приведе до зміни типу провідності з p на n.

Нагрівання можна реалізувати за допомогою макросу **anneal**. Необхідно перетягнути цей макрос з правої нижньої частини вікна Ligament на позицію після макросу deposit.

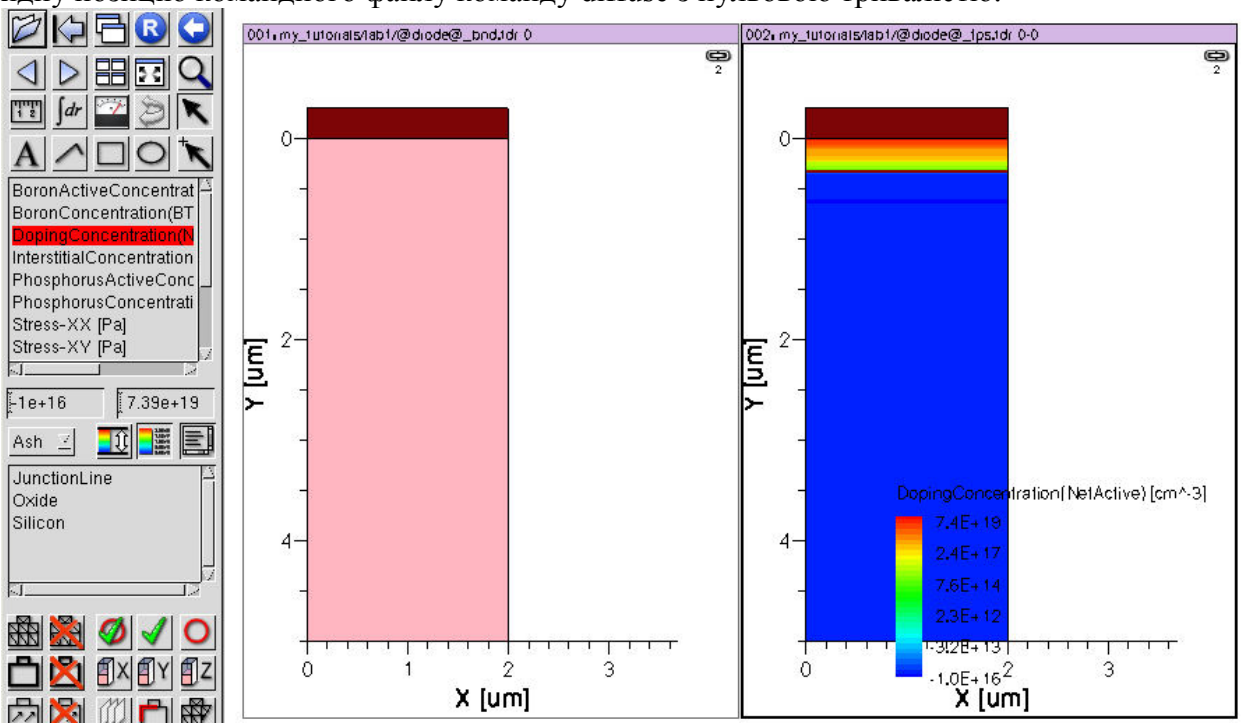


Виставте тривалість нагрівання 60 хвилин і температуру 900 градусів по Цельсію. Можна обрати тип, швидкість протоку та тиск газу (або газів) в камері під час операції нагрівання. В нашому випадку не обрано жодного з газів, тому нагрівання буде відбуватися у вакуумі і аргумент **pressure** ігноруватиметься.

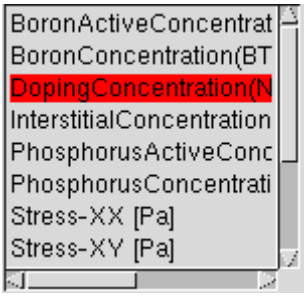
Збережіть оновлену версію технологічного процесу в Ligament, створіть для неї командний файл симулятора та збережіть його в diode_fps.cmd. Виконайте симуляцію технологічного процесу в sprocess та відкрийте результати моделювання в Tecplot. Як бачите, у вікні Tecplot з'явилося багато нової інформації. По-перше, з'явилася можливість переглянути концентрації атомів домішок (фосфору і бору) та дефектів кристалічної гратки (вакансій та міжвузлів) в будь-якій точці напівровідникової пластини. Чому ця інформація з'явилася лише зараз? TCAD оновлює дану інформацію саме після виклику команди **diffuse**, яка входить до складу використаного макросу anneal. Подивіться на уривок щойно створеного командного файлу з командою diffuse:

```
temp_ramp name=tempramp_1_2 time=60 temp=900
diffuse temp_ramp=tempramp_1_2
```

Якщо ви хочете оновити інформацію про зазначені концентрації, потрібно вставити в необхідну позицію командного файлу команду diffuse з нульовою тривалістю.



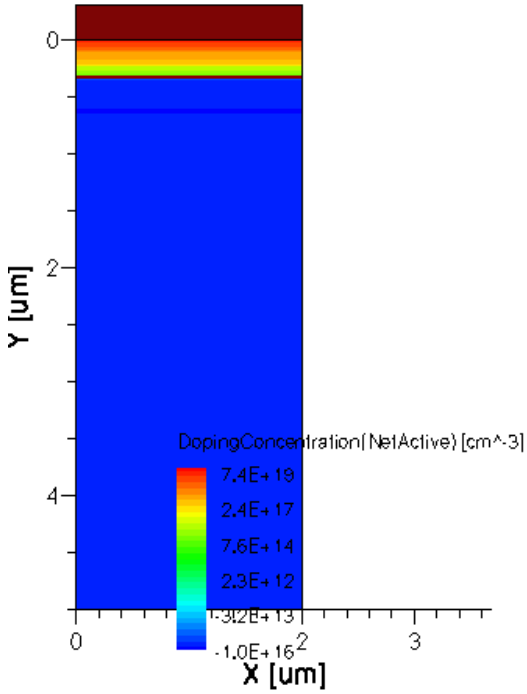
З переліку на панелі в лівій стороні Tecplot можна обрати концентрацію, що нас цікавить і вона відобразиться у вигляді кольорової мапи (кожному кольорі на екрані відповідає певна концентрація).



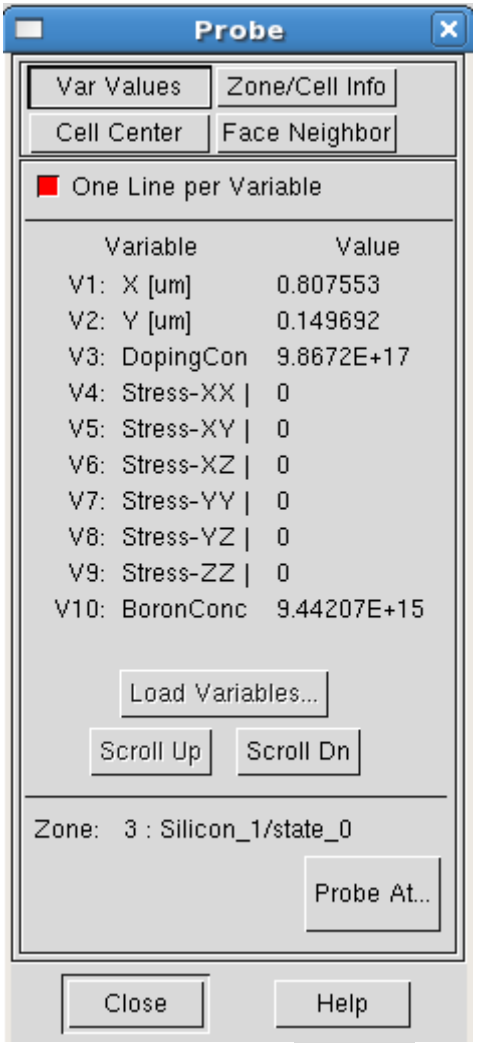
В даному переліку представлені наступні фізичні величини (одиниці вимірювання концентрацій $см^{-3}$):

- **BoronActiveConcentration(BActive)** - концентрація атомів Бору в кремнієвій пластині, які не утворюють дефектів кристалічної гратки (всі ці атоми Бору знаходяться в кристалічній гратці на своїх місцях);
- **BoronConcentration(BTotal)** - концентрація всіх атомів Бору в кремнієвій пластині, враховуючі ті атоми, що утворюють дефекти кристалічної гратки (вакансії, чи міжвузля);
- **DopingConcentration(NetActive)** - різниця концентрацій атомів донорів та акцепторів. В нашому випадку NetActive = PActive - BActive. Якщо NetActive > 0 напівпровідник має провідність n-типу, якщо NetActive < 0 напівпровідник має провідність p-типу. У власного напівпровідника значення NetActive близьке до 0;
- **InterstitialConcentration(ITotal) -** концентрація дефектів кристалічної гратки (міжвузлів);
- **PhosphorusActiveConcentration(PActive) -** концентрація атомів Фосфору в кремнієвій пластині, які не утворюють дефектів кристалічної гратки (всі ці атоми знаходяться в кристалічній гратці на своїх місцях);
- **PhosphorusConcentration(PTotal)** - концентрація всіх атомів Фосфору в кремнієвій пластині, враховуючі ті атоми, що утворюють дефекти кристалічної гратки (вакансії, чи міжвузля);
- **Stress-XX...Stress-ZZ** - механічні напруження, що виникають в кристалі (одиниця вимірювання - Паскаль);
- **VacancyConcentration(VTotal)** - концентрація дефектів кристалічної гратки (вакансій).

Обравши будь-яку з перелічених концентрацій, можна подивитись її просторовий розподіл у вигляді кольорової мапи, де певному кольору відповідає певна концентрація. На малюнку нижче зображений кольоровий розподіл концентрації NetActive:

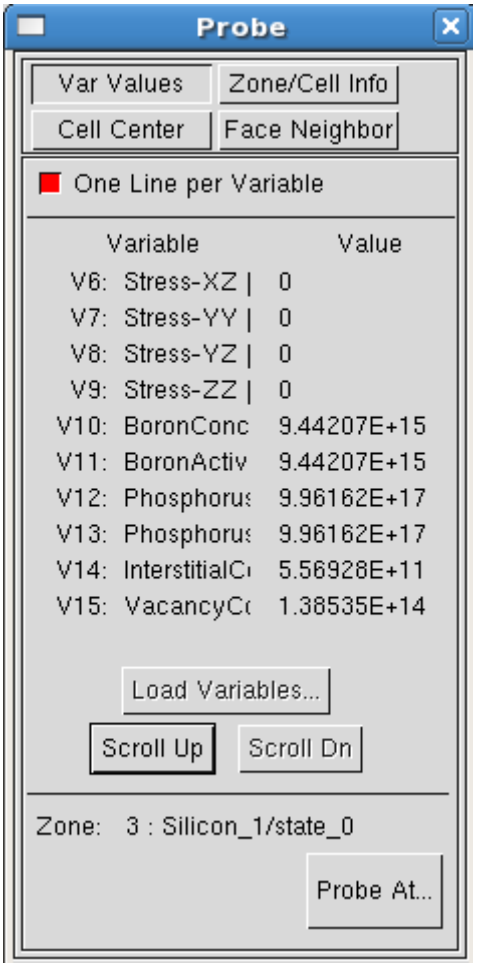


Переглянути значення необхідної концентрації в будь-якому місці кремнієвої пластини можна за допомогою інструменту Probe. Для цього натисніть кнопку та клацніть в будь-якому місці на зображення розрізу кремнієвої пластини. З'явиться вікно з параметрами пластини у вибраній точці.

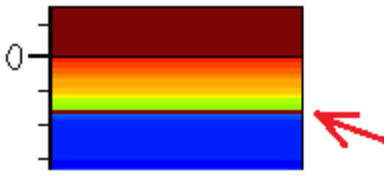


Це не всі результати. Натиснувши на кнопку Scroll Dn можна перейти до невидимої частини списку змінних. Для повернення до індикації змінних V1-V10 натисніть на кнопку Scroll Up. Зверніть увагу, що в одержаному списку присутні всі раніше розглянуті параметри саме для обраної точки в структурі кремнієвої пластини.

Дослідіть значення концентрацій в різних точках кремнієвої пластини. Переконайтесь, що зі збільшенням глибини концентрація донорних атомів фосфору знижується. В той же час концентрація акцепторних атомів бору майже однакова по всьому об'єму кремнієвої пластини (10^{16}) та дещо зменшується біля границі з окислом кремнію з домішками фосфору. Дослідіть концентрації атомів домішок в заданому шарі окислу кремнію. Чим обумовлені такі зміни концентрацій?



Зверніть увагу на коричневу лінію, що розділяє області напівпровідників n-типу та p-типу. **Це p-n перехід**. Переконайтесь, що в області p-n переходу концентрації донорних і акцепторних атомів майже рівні.

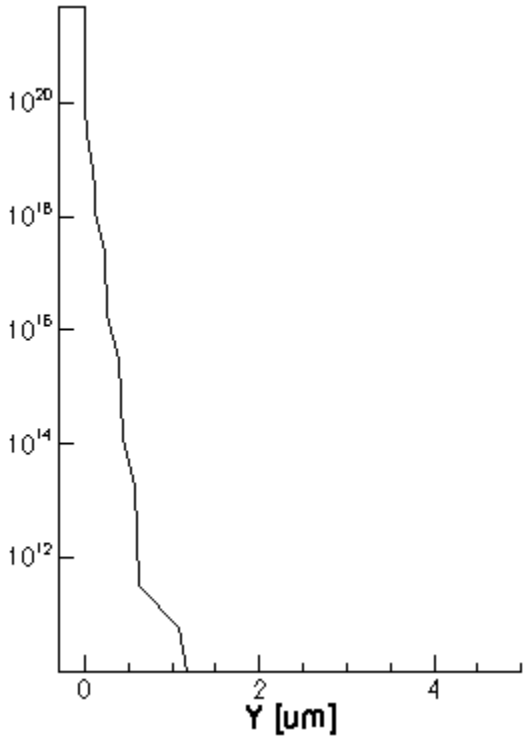


Чудовим інструментом TCAD є можливість будувати графіки залежності фізичної величини від однієї з координат при фіксованих інших координатах. Для цього спершу необхідно обрати фізичну величину. Нехай це буде концентрація атомів фосфору **PhosphorusActiveConcentration**. Далі потрібно натиснути на кнопку

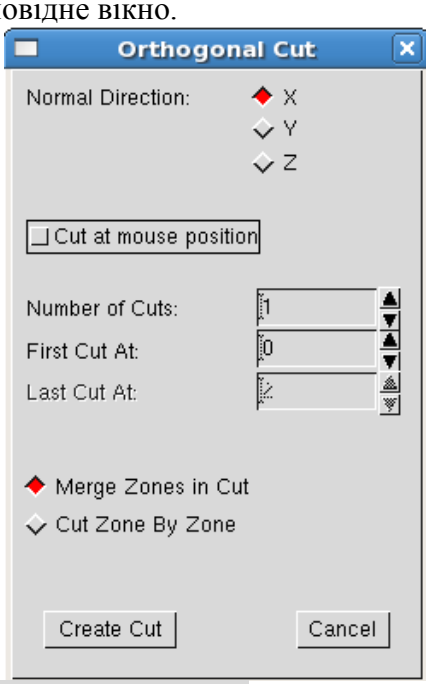
(розріз по X) і клацнути по двовимірному рисунку кремнієвої пластини в тій координаті X, яку необхідно зафіксувати. Tecplot побудує залежність концентрації атомів фосфору від глибини (Y) при заданій координаті X. Можна аналогічно побудувати залежність фізичної величини від X при фіксованому Y, натиснувши кнопку

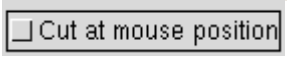
. У випадку тривимірного моделювання можна робити і розріз по Z за допомогою

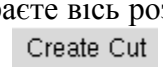
.



Щоб точно задати координати розрізу, оберіть пункт головного меню **Slicer -> Orthogonal Cut**. Відкриється відповідне вікно.



Спершу знімаєте галочку 

.Далі обираєте вісь розрізу (X, Y, або Z) і вводите координату місця розрізу на обраній осі. Натискаєте 

і одержуєте графік необхідного розрізу. Також можна створити кілька розрізів в певному діапазоні значень координати обраної осі.

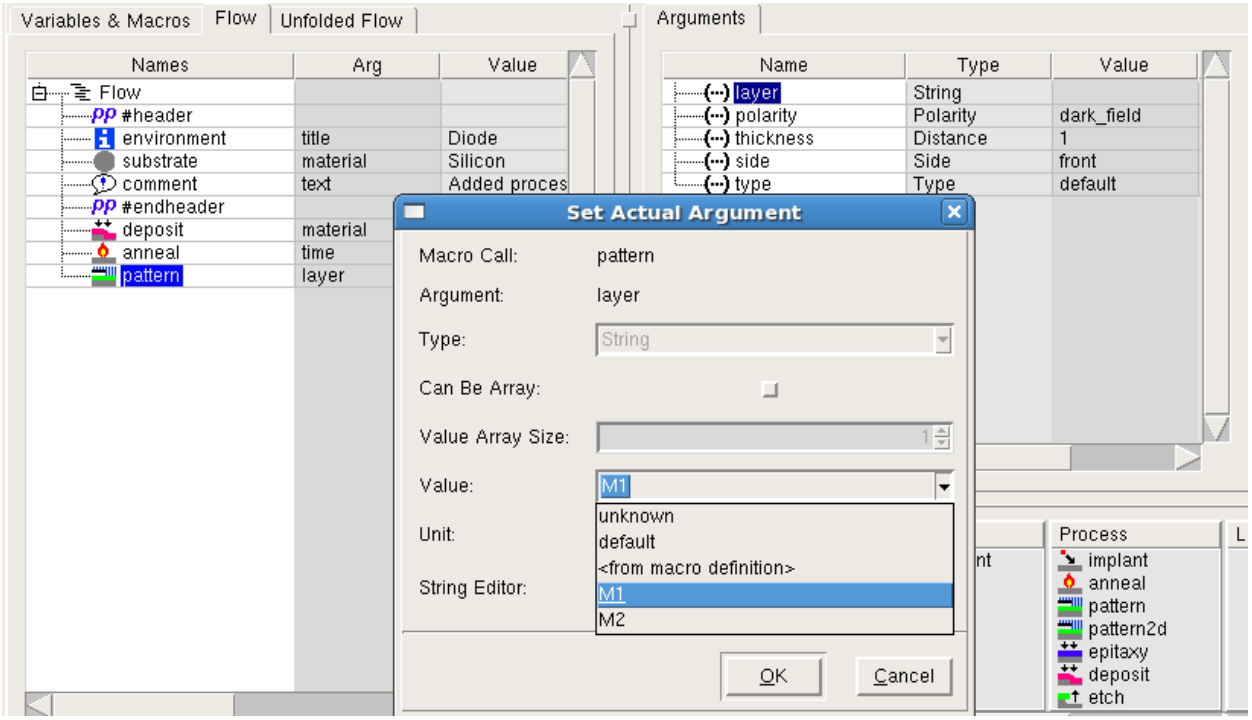
Для масштабування графіку необхідно натиснути кнопку . Після цього клацаєте мишкою в області, яку необхідно наблизити. Для віддалення графіку необхідно клацати на ньому мишкою при натиснутій клавіші Ctrl. Щоб вміст графіку зайняв всю видиму область, необхідно натиснути кнопку .

Комбінації клавіш для керування програмою Tecplot можна переглянути обравши пункт головного меню **Help -> Keyboard Shortcuts**.

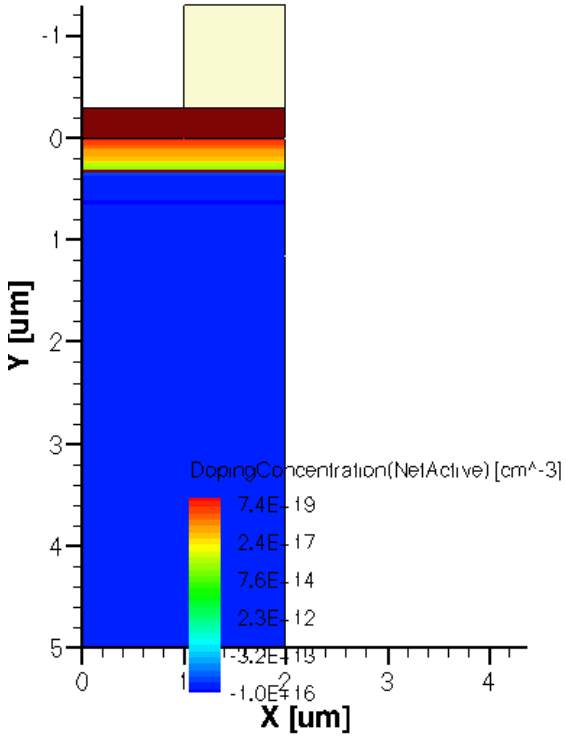
6. Виконання фотолітографії для створення отвору під металічний контакт до верхньої області діоду (n-типу)

Операція фотолітографії (створення отворів у фоторезисті) реалізується в Ligament за допомогою макросу **pattern**. Перетягніть макрос pattern з правої нижньої частини вікна Ligament на панель Flow в позицію після макросу anneal. Для аргументу **layer** оберіть маску **M1**. Тип фоторезисту задається аргументом **polarity**. Необхідний негативний фоторезист, тож ставимо polarity в значення **dark field**. Товщину фоторезисту задає аргумент **thickness**. Виставляємо його в 1 мкм.

Щойно визначений макрос виконує нарощування негативного фоторезисту товщиною 1 мкм на поверхні кремнієвої пластини, його засвічування через фотолітографічну маску M1 і проявку. Оскільки фоторезист негативний, а маска являє собою світлонепроникний квадрат, засвічені області фоторезисту затвердіють, а незавічена область, яку накриває квадрат, змиється під час проявки. Одержимо отвір у фоторезисті на місці квадрату фотолітографічної маски M1.



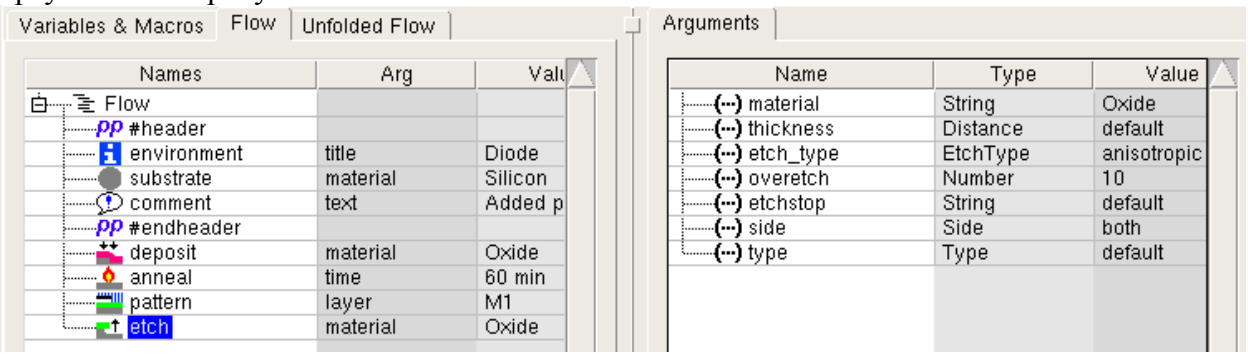
Збережіть щойно удосконалений технологічний процес в Ligament, створіть командний файл та виконайте його моделювання в sprocess. Перегляньте результати моделювання в Tecplot. Тепер фоторезист захищає частину окислу на поверхні кремнієвої пластини.



7. Зтравлювання окислу кремнію через отвори у фоторезисті

В Ligament операція травлення виконується макросом **etch**. Перетягніть цей макрос в останню позицію на панелі Flow. Аргумент **material** визначає матеріал, травлення якого відбуватиметься. Виставте material в значення **Oxide** (оксид кремнію). Тип травлення (аргумент **etch_type**) виставте в **anisotropic** (анізотропне травлення без підтравлювання під маску).

Ось так повинен виглядати технологічний процес на панелі Flow та значення аргументів макросу etch.



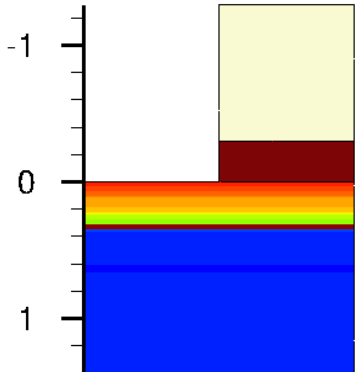
Товщина матеріалу видаленого шляхом зтравлювання (глибина травлення) визначається аргументами **thickness** або **etchstop**. Якщо не використовувати жоден з цих аргументів (залишити значення по замовчуванню), травлення відбуватиметься доки не буде видалено весь матеріал заданий аргументом material. Аргумент **thickness** визначає глибину травлення у вигляді числового значення (в мікрометрах, нанометрах, або ангстремах). Ця величина повинна бути менша товщини матеріалу, заданого аргументом material. В іншому випадку, буде видалено весь шар матеріалу. Аргумент **overetch** вказує додаткову глибину травлення і задається у відсотках значення аргументу thickness. Наприклад, якщо thickness = 1 мкм, а overetch = 20%, буде зтравлено 1.2 мкм. Однак, якщо в такому випадку товщина матеріалу всього 1 мкм, буде зтравлено лише 1мкм, оскільки видаляється лише матеріал заданий аргументом material.

Оскільки в нашому випадку необхідно зняти весь шар окислу кремнію з домішками фосфору, товщину травлення можна не вказувати, а можна вказати реальну товщину шару - 0.3 мкм. В документації на TCAD рекомендують завжди виставляти overetch рівним 1-10%

для гарантованого зняття необхідної товщини матеріалу (щоб не виникало випадків недотравлювання внаслідок незначних похибок обчислень).

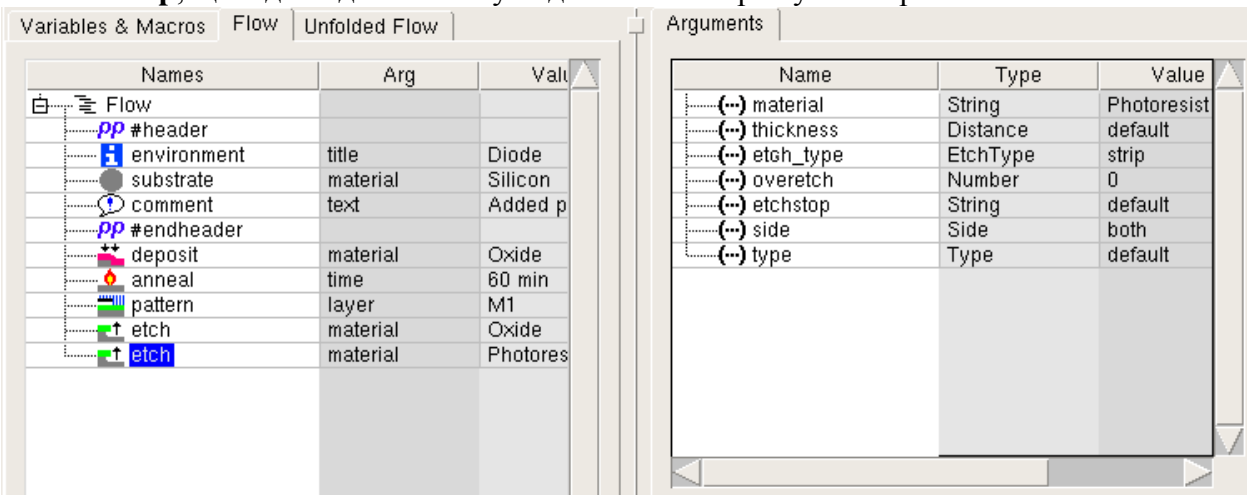
Аргументом **etchstop** можна задати матеріал, при досягненні якого процес травлення буде зупинено.

Збережіть щойно удосконалений технологічний процес в Ligament, створіть командний файл та виконайте його моделювання в sprocess. Перегляньте результати моделювання в Tecplot. Переконайтесь, що шар окислу кремнію, не захищений фоторезистом, було видалено без підтравлювання під фоторезист.

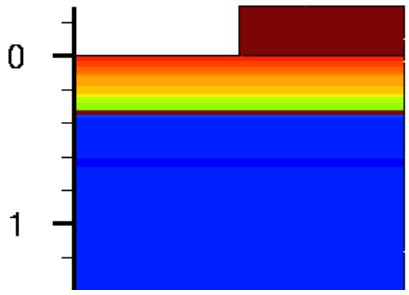


8. Видалення фоторезисту

Видаляти фоторезист з поверхні кремнієвої пластини будемо за допомогою макросу etch. Встановіть аргумент material в значення **photoresist**. Аргумент **etch_type** виставте в значення **strip**, що відповідає повному видаленню матеріалу з поверхні.

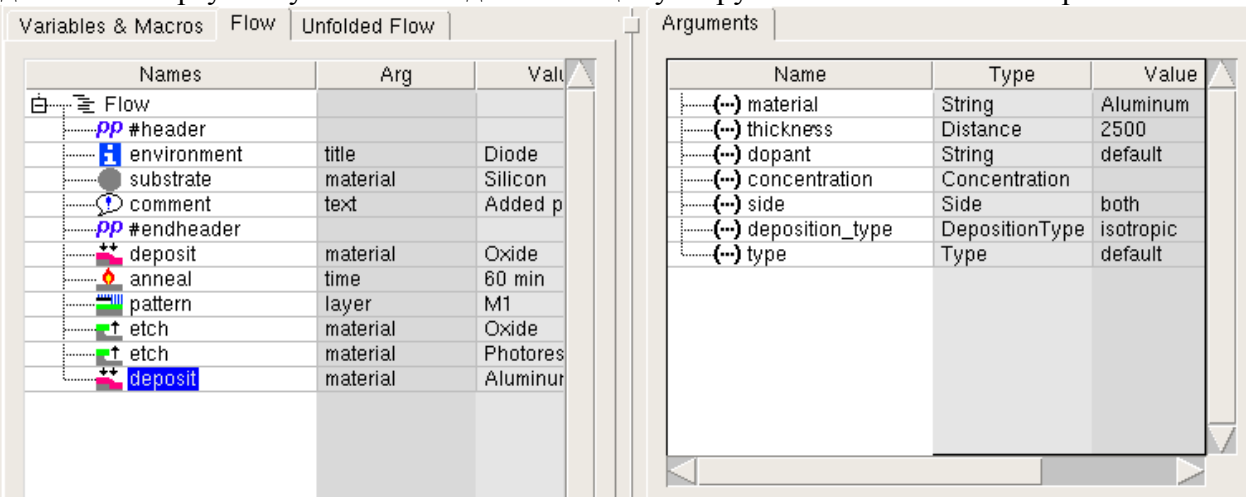


Збережіть щойно удосконалений технологічний процес в Ligament, створіть командний файл та виконайте його моделювання в sprocess. Перегляньте результати моделювання в Tecplot. Переконайтесь, що весь фоторезист з поверхні було видалено.

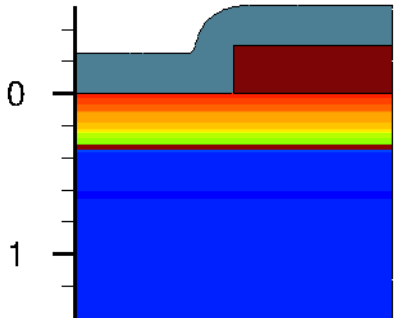


9. Нанесення шару алюмінію

Для нанесення шару алюмінію на поверхню розроблюваної структури скористаємось уже знайомим макросом deposit. Аргументом material даного макросу виставте **aluminum**. За допомогою аргументу thickness задайте товщину шару алюмінію - 2500 ангстрем.

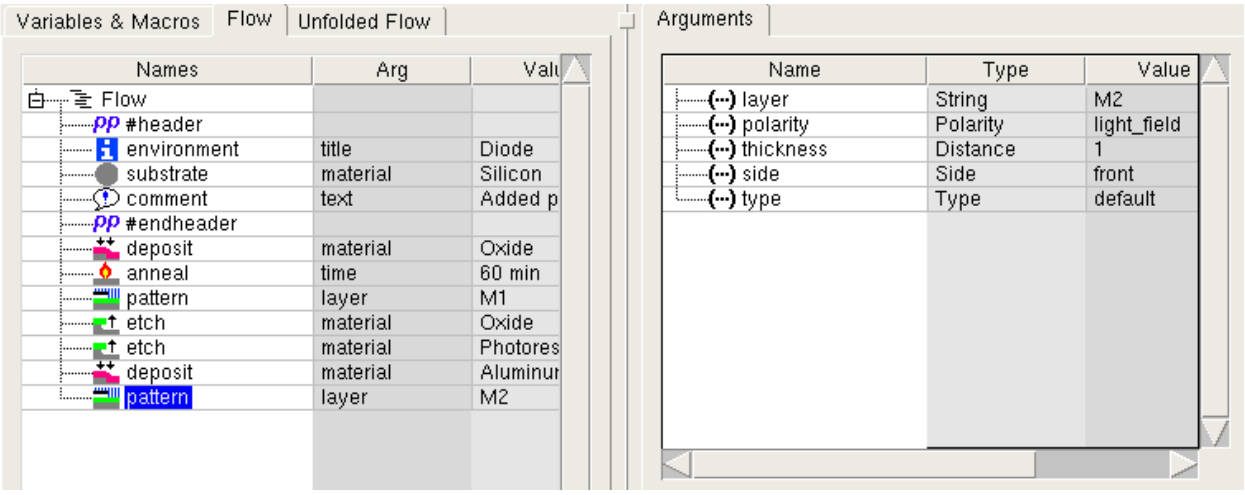


Збережіть щойно удосконалений технологічний процес в Ligament, створіть командний файл та виконайте його моделювання в sprocess. Перегляньте результати моделювання в Tecplot. Переконайтесь, що тепер вся поверхня покрита шаром алюмінію товщиною 2500 ангстрем.



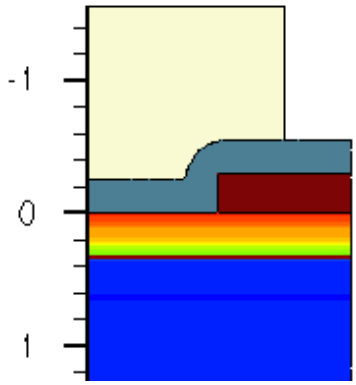
10. Виконання фотолітографії для видалення частини алюмінію

Для виконання цієї фотолітографії знову застосуємо макрос pattern. За допомогою аргументу layer задамо маску M2 для проведення фотолітографії. Цього разу будемо використовувати позитивний фоторезист, тож встановіть значення аргументу polarity в light_field. Товщину шару фоторезисту задамо рівною 1 мкм за допомогою аргументу thickness.



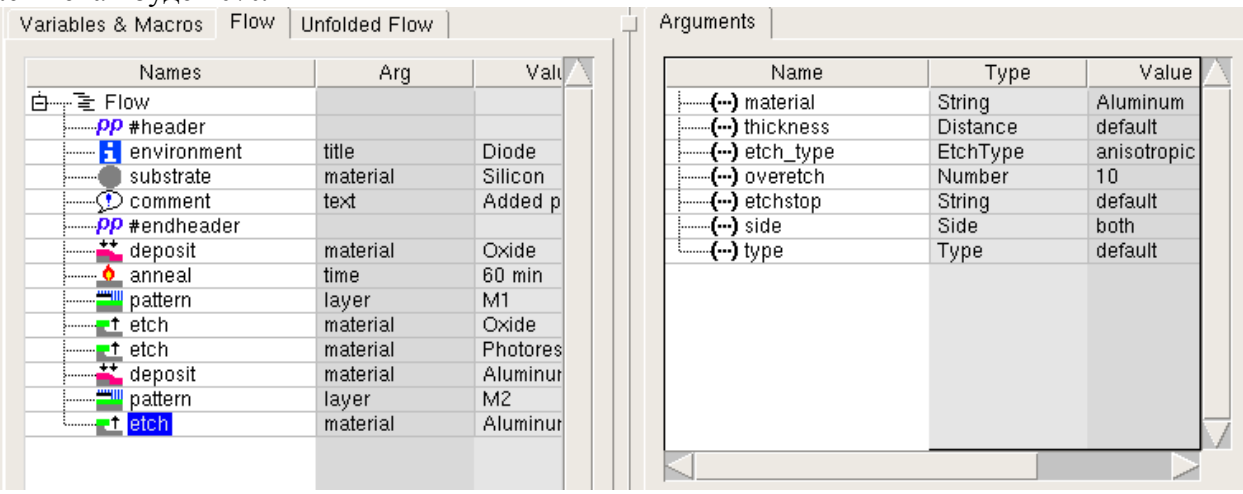
Не закритий маскою фоторезист буде засвічений і видалений під час проявки.

Збережіть щойно удосконалений технологічний процес в Ligament, створіть командний файл та виконайте його моделювання в sprocess. Перегляньте результати моделювання в Tecplot. Переконайтесь, що в засвіченій області фоторезист відсутній.

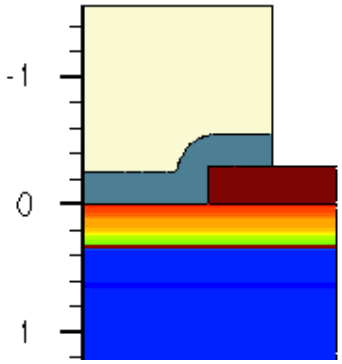


11. Видалення областей алюмінію не закритих фоторезистом

Для видалення областей алюмінію не закритих фоторезистом застосуємо уже відомий макрос etch. Аргумент material виставте в значення aluminum. Для уникнення підтравлювання під маску значення аргументу etch_type встановіть в anisotropic. Аргумент overetch нехай буде 10%.

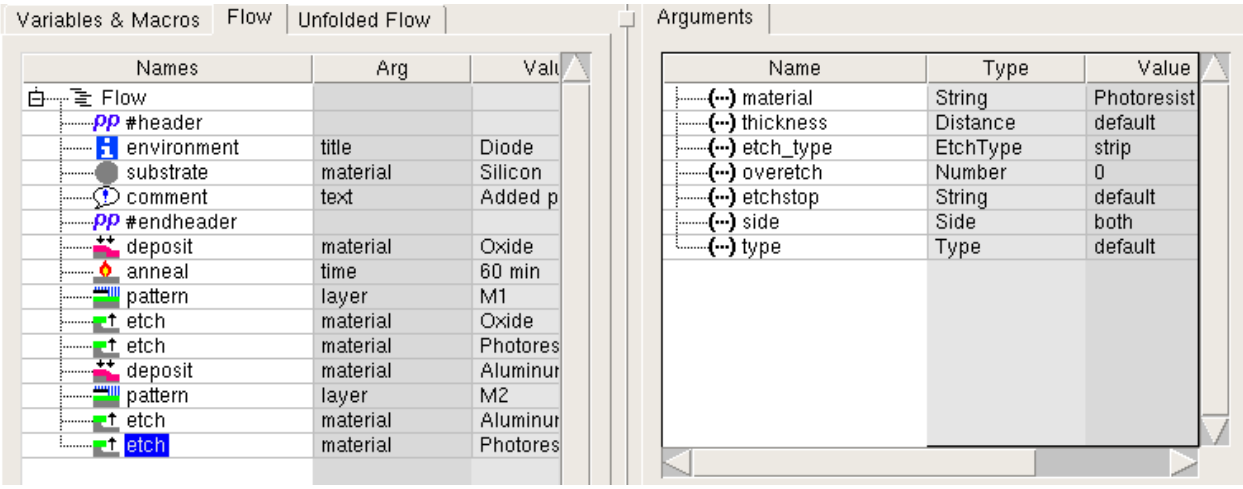


Збережіть щойно удосконалений технологічний процес в Ligament, створіть командний файл та виконайте його моделювання в sprocess. Перегляньте результати моделювання в Tecplot. Переконайтесь, що не закритий фоторезистом алюміній видалено.

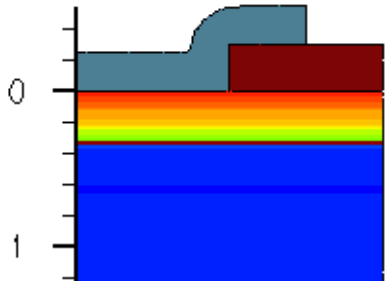


12. Видалення фоторезисту

Видаліть фоторезист з використанням макросу etch, як це ви вже робили в п.8 лабораторної роботи. Технологічний процес виглядатиме так:

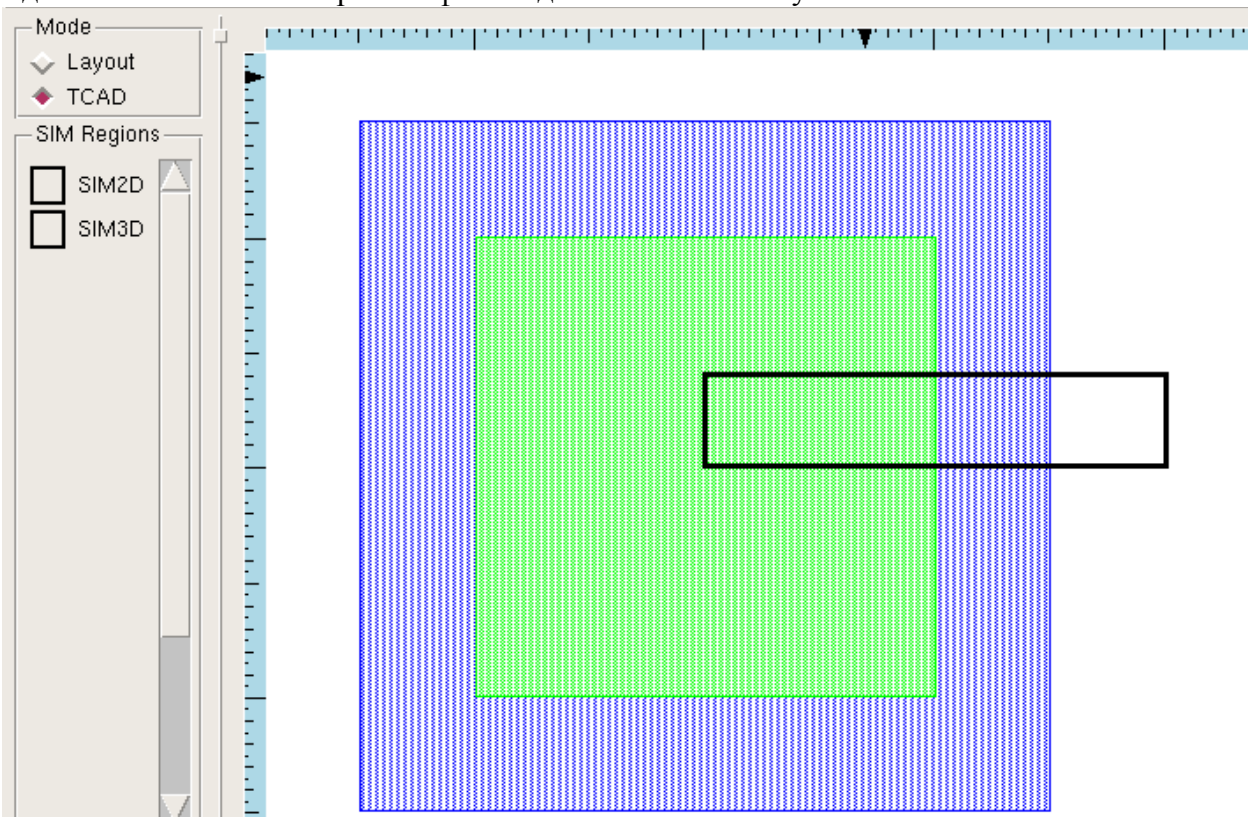


Збережіть щойно удосконалений технологічний процес в Ligament, створіть командний файл та виконайте його моделювання в sprocess. Перегляньте результати моделювання в Tecplot. Переконайтесь, що структура напівпровідникового діоду, виготовлена в результаті моделювання створеного технологічного процесу, виглядає наступним чином:



13. Моделювання технологічного процесу в 3D

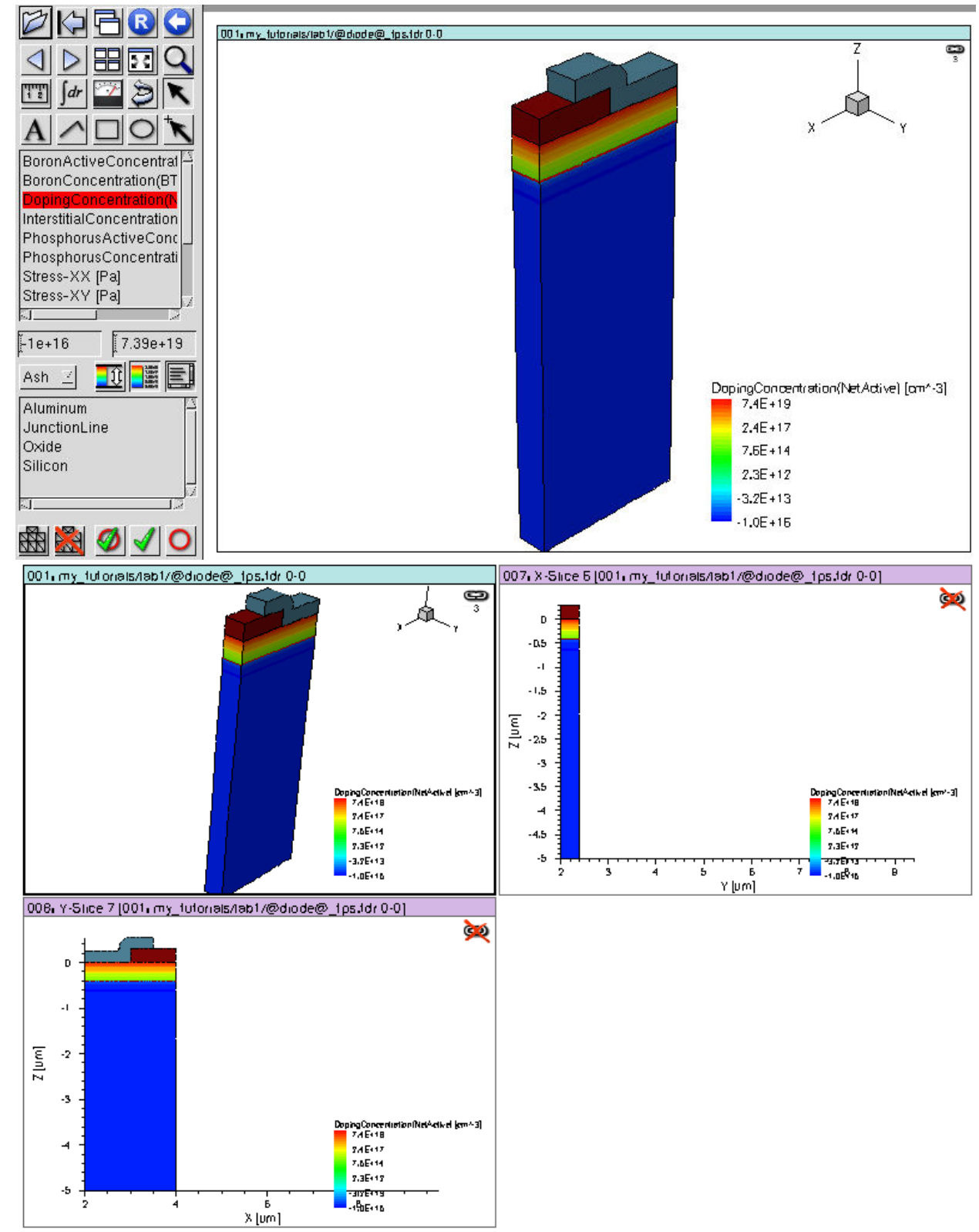
Відкрийте раніше створений і збережений файл diode.lyt. Додайте до нього область 3D моделювання SIM3D. Збережіть файл під іменем diode3D.lyt



Відкрийте в програмі Ligament технологічний процес створений в п.12 лабораторної роботи. За допомогою пункту головного меню File -> Open Layout підключіть файл diode3D.lyt. Аргумент region макросу environment виставте в значення SIM3D. Створіть

командний файл для sprocess та збережіть його під іменем **diode3D_fps.cmd**. Відкрийте цей файл в текстовому редакторі. Видаліть строку “**eval exec prolyt -batch -convertto dfise n1_prl.par**”. В строці “**mask layoutfile=n1_prl.par**” замініть n1_prl.par на diode3D.lyt. Збережіть зміни в файлі. Промоделюйте створений технологічний процес в трьох вимірах, виконавши з консолі команду **sprocess diode3D_fps.cmd.**

Відкрийте результат моделювання в програмі Tecplot. За допомогою кнопки можете обертати структуру в трьох вимірах. За допомогою кнопок спробуйте робити розрізи по X, Y, Z. Для масштабування розрізу клацніть на його графік та натисніть кнопку .



ПІДСУМОК

В даній лабораторній роботі ви навчилися розробляти і моделювати технологічні процеси створення двовимірних та трьохвимірних мікроелектронних структур в Sentaurus TCAD. В наступній лабораторній роботі ви здобудете навички моделювання електричних характеристик одержаних мікроелектронних структур на прикладі одержання прямої та зворотної гілок вольт-амперної характеристики щойно створеного діоду.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ

Запитання по технологічним процесам

1. Чим відрізняється технічний кремній від полікристалічного та монокристалічного?
2. Які відмінності між моно кристалічним кремнієм електронної та сонячної якості?
3. Поясніть метод Чохральського по виговтоленню монокристалічного кремнію;
4. Поясніть метод індукційної плавки металів та напівпровідників;
5. Як відбувається розрізання злитку монокристалічного кремнію на пластини? Який діаметр та товщина таких пластин?
6. Навіщо поверхню пластин очищають перед технологічними операціями? Які бувають типи забруднення поверхні пластин? Як видаляють ці забруднення?
7. Для яких цілей використовують шар окислу кремнію?
8. Як відбувається вирощування шару окислу кремнію? Чим відрізняється сухе та мокре вирощування?
9. Від чого залежить швидкість росту шару окислу кремнію?
10. Яку товщину шару окислу кремнію зазвичай використовують?
11. Для яких цілей використовують полікристалічний кремній легований домішками для збільшення провідності?
12. Поясніть технологічний процес епітаксії. Для яких цілей використовують епітаксію?

13. Що таке ізотропне травлення в рідких кислотах та який недолік воно має?
14. Як швидкість травлення кремнію залежить від його кристалографічної орієнтації?
15. Що таке анізотропне травлення в плазмі та для чого використовується? Який механізм анізотропного травлення в плазмі?
16. Поясніть технологію фотолітографії;
17. Чим позитивний фоторезист відрізняється від негативного?
18. Що таке фотошаблон і як його виготовляють?
19. Що таке сканер (степпер)?
20. Як видаляють фоторезист?
21. Поясніть метод введення домішок в напівпровідник шляхом дифузії;
22. Поясніть перший та другий закони Фіка;
23. Від чого залежить швидкість протікання дифузії домішок?
24. Чим відрізняється дифузія із обмеженого та необмеженого джерела?
25. Намалюйте графіки розподілення домішок в напівпровіднику після дифузії з обмеженого та необмеженого джерела;
26. Поясніть метод введення домішок в напівпровідник шляхом іонної імплантації;
27. Навіщо після іонної імплантації проводять процедуру віджигу?
28. Від чого залежить глибина заглиблення домішок в напівпровідникову пластину під час іонної імплантації?
29. Намалюйте графіки розподілення домішок в напівпровіднику після іонної імплантації;
30. Поясніть метод ізоляції напівпровідникових пристроїв (діодів, транзисторів) за допомогою зворотно зміщеного pn-переходу;
31. Поясніть пленарно-дифузійну технологію виготовлення напівпровідникового діоду;

Запитання по практичній роботі в програмі Sentaurus TCAD

32. Поясніть макроси (та їх аргументи), що були використані при створенні технологічного процесу виготовлення напівпровідникового діоду в Ligament;
33. Поясніть процес створення масок в Prolyt та їх підключення до Ligament;
34. Що таке simulation region та навіщо його визначати в Prolyt?
35. Як в Ligament створити командний файл для симулятора Sprocess?
36. Поясніть структуру напівпровідникового діоду, одержану внаслідок результату симуляції Sprocess та відображену в програмі Tecplot.

ДЖЕРЕЛА ДЛЯ ПІДГОТОВКИ

1. Закон Мура против нанометров. Всё, что вы хотели знать о микроэлектронике, но почему-то не узнали.
   http://www.ixbt.com/cpu/microelectronics.shtml
2. Изобретение интегральной схемы
   https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%98%D0%B7%D0%BE%D0%B1%D1%80%D0%B5%D1%82%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D0%B5_%D0%B8%D0%BD%D1%82%D0%B5%D0%B3%D1%80%D0%B0%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D0%BE%D0%B9_%D1%81%D1%85%D0%B5%D0%BC%D1%8B
3. Кристаллический кремний

https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9A%D1%80%D0%B8%D1%81%D1%82%D0%B0%D0%BB%D0%BB%D0%B8%D1%87%D0%B5%D1%81%D0%BA%D0%B8%D0%B9_%D0%BA%D1%80%D0%B5%D0%BC%D0%BD%D0%B8%D0%B9

4. Технология СБИС: в 2-х кн. Кн. 1 / под ред. С. Зи. – М.: Мир, 1986. – 406 с.
5. Изготовление монокристалла полупроводникового материала
   http://elanina.narod.ru/lanina/ind/student/tehnology/text/page2.htm
6. Технология изготовления кремниевых пластин
   https://www.youtube.com/watch?v=RSVRHvlDpbw
7. Silicon Wafer Production
   https://www.youtube.com/watch?v=AMgQ1-HdElM
8. Индукционная плавка аллюминия
   https://www.youtube.com/watch?v=DkpEz7znpnc
9. Полупроводниковая пластина
   https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9F%D0%BE%D0%BB%D1%83%D0%BF%D1%80%D0%BE%D0%B2%D0%BE%D0%B4%D0%BD%D0%B8%D0%BA%D0%BE%D0%B2%D0%B0%D1%8F_%D0%BF%D0%BB%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%B8%D0%BD%D0%B0
10. Степаненко И.П. Основы микроэлектроники: Учеб. пособие для вузов. – 2-е изд., перераб. и доп.. – М. : Лаборатория Базовых Знаний, 2001. – 488 с.
11. Курносов А.И., Юдин В.В. Технология производства полупроводниковых приборов и интегральных микросхем.
    http://rutracker.org/forum/viewtopic.php?t=2063002
12. Классический маршрут изготовления микропроцессорных N-МОП БИС на примере маршрута Intel 8080
    http://pasiega.narod.ru/
13. Индукционный нагрев
    https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%98%D0%BD%D0%B4%D1%83%D0%BA%D1%86%D0%B8%D0%BE%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B9_%D0%BD%D0%B0%D0%B3%D1%80%D0%B5%D0%B2
14. Технологія виготовлення інтегральних мікросхем. Відео з заводів Intel.
    https://www.youtube.com/watch?v=5di1Ec6n5CQ
15. Фоторезист
    https://ru.wikipedia.org/wiki/Фоторезист
16. Изготовление фотошаблонов
    http://elanina.narod.ru/lanina/ind/student/tehnology/text/page4.htm
17. Как работает микроэлектронное производство и что нам стоит дом построить?
    http://habrahabr.ru/post/155371/
18. Фотолиторафия
    http://elanina.narod.ru/lanina/ind/student/tehnology/text/page11.htm
19. Легирование методом ионной имплантации
    http://elanina.narod.ru/lanina/ind/student/tehnology/text/page7.htm
20. Інформація про Synopsys Sentaurus TCAD та його запуск
    http://vk.com/wall-61050519_286
21. Інформація про сканери та степпери:
    https://en.wikipedia.org/wiki/Stepper

.

Моделювання електро-фізичних характеристик p-n переходу в Synopsys Sentaurus TCAD.

ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

В рамках теоретичної підготовки до виконання та захисту лабораторної роботи вам необхідно вивчити наступні теми:

1. Фізичні процеси, що приводять до утворення p-n переходу;
2. Властивості p-n переходу;
3. Енергетична діаграма p-n переходу у рівноважному стані, при прямому та зворотному зміщенні;
4. Розв'язок рівняння Пуассона для p-n переходу;
5. Розподіл електростатичного потенціалу в p-n переході;
6. Розподіл електричного поля в p-n переході;
7. Формула висота потенціального бар'єру p-n переходу;
8. Формула ширини p-n переходу;
9. Обгрунтування вентильних властивостей p-n переходу з точки зору фізики;
10. Розподіл концентрацій рухомих носіїв заряду (електронів і дірок) в p- та n-областях p-n переходу у рівноважному стані, при прямому та зворотному зміщенні;
11. Розв'язання рівняння неперервності для переходу;
12. Вольт-амперна характеристика p-n переходу.
13. Бар'єра та дифузійна ємність p-n переходу;
14. Опір p-n переходу великому та малому сигналу;

Перевірте свої знання давши відповіді на контрольні запитання.

Інформацію для підготовки ви можете знайти в навчальному посібнику [1].

ПРАКТИЧНА ЧАСТИНА

В даній лабораторній роботі ми ознайомимось з наступними програмами пакету Synopsys Sentaurus TCAD:

1. **Sentaurus Structure Editor (sde)** - програма для створення структури мікро- та наноелектронних приладів в графічному редакторі, створення профілів легування, а також для генерації сітки скінченних елементів для чисельного вирішення диференційних рівнянь [2];
2. **Sentaurus Device (sdevice)** - програма для моделювання електро-фізичних характеристик мікро- та наноелектронних приладів з урахуванням усіх відомих фізичних ефектів (у тому числі квантових) [3]. За допомогою Sentaurus Device, для заданих значень напруг на контактах пристрою, можна одержати зонні діаграми, концентрації електронів та дірок, розподіл електростатичного потенціалу і електричного поля, електромагнітного опромінення, оптичні властивості, вольт-амперні характеристики, загальний струм в структурі, його електронну та діркову складові, просторовий заряд, інтенсивності різних типів генерації та рекомбінації в різних областях структури, температури електронів і дірок та багато інших цікавих характеристик. Також можливо виконувати моделювання зміни сигналів у часі (Transient Analysis) та аналіз пристрою для малого змінного сигналу (AC Analysis). Доступна опція моделювання схем на базі створених напівпровідникових приладів і компонентів описаних за допомогою сторонніх SPICE моделей;

3. **Sentaurus Visual (svisual)** - програма виконує ті ж функції, що і Tecplot (візуалізація результатів технологічного і електрофізичного моделювання), однак реалізована на більш сучасному рівні і зручніша у користуванні [4];
4. **Sentaurus Inspect (inspect)** - використовується для відображення вольт-амперних характеристик [5].

Мета та завдання лабораторної роботи

Метою лабораторної роботи є вивчення електро-фізичних властивостей p-n переходу з кремнію та перевірка набутих знань шляхом моделювання електро-фізичних властивостей p-n переходу в TCAD.

Завданням на лабораторну роботу є самостійне виконання студентом описаних далі кроків.

Хід роботи

1. Документація та довідкова система Sentaurus TCAD

У минулій лабораторній роботі ми створили технологічний процес для виготовлення напівпровідниковго діоду на основі p-n переходу та одержали структуру такого діоду.

Наступним кроком необхідно визначити контакти діоду - вказати програмі симуляції до яких областей створеної структури необхідно прикладати напруги прямого/зворотного зміщення при моделюванні електро-фізичних властивостей.

Однак перед тим, як іти далі, необхідно ознайомитись з документацією і довідковою системою TCAD, оскільки ця інформація знадобиться нам в майбутньому.

Документація на Synopsys Sentaurus TCAD міститься в каталозі **/usr/synopsys/G_2012.06-SP2/tcad/G_2012.06-SP2/manuals/PDFmanuals/data**. Наприклад, інформація про симулятор технологічного процесу sprocess доступна у файлі цього каталогу **sprocess_ug.pdf** [6], а інформацію про програму ligament можна знайти у файлі **ligament_ug.pdf** [7]. Програма Tecplot описана у файлі **tecplotsv_ug.pdf** [8]. В цьому ж каталозі міститься інформація про програми, які ми будемо використовувати поточній і наступних лабораторних роботах: **sdevice**, **inspect**, **swb**, тощо. Отже, якщо вам невідома певна опція командного файлу, чи особливості налаштувань певної програми пакету TCAD, ви стовідсотково знайдете відповідь на запитання у вказаних документах.

В каталозі **/usr/synopsys/G_2012.06-SP2/tcad/G_2012.06-SP2/Sentaurus_Training** знаходяться так звані тьюторіали - приклади застосувань програм пакету TCAD. Ці документи також доступні в мережі інтернет за посиланням [9]. Вигляд подібної документації наведений на рисунку нижче.

TCAD Sentaurus Tutorial

These modules are intended as an introduction to using the TCAD Sentaurus tool suite. They are designed specifically for new users and provide examples with which to begin using the tools.

Module	Description
Tool Overview	An overview of the TCAD Sentaurus tool suite is presented. *Module Time: 30 minutes*
Sentaurus Workbench	Sentaurus Workbench is the primary graphical front end that integrates TCAD Sentaurus simulation tools into one environment. It is used to design, organize, and run simulations. *Module Time: 5 hours and 10 minutes*
Sentaurus Process	Sentaurus Process is a complete and highly flexible multidimensional process modeling environment. It constitutes a solid base for process simulation. *Module Time: 5 hours and 20 minutes*
TCAD Sentaurus–IC WorkBench EV Plus Interface	The TCAD Sentaurus–IC WorkBench EV Plus interface is used to process mask information such that it can be used in Sentaurus Process. *Module Time: 1 hour*
Sentaurus Interconnect	Sentaurus Interconnect is an advanced 1D, 2D, and 3D simulator suitable for IC interconnect reliability analysis.

Sentaurus TCAD включає приклади моделювання реальних мікро- і наноелектронних пристроїв: випрямних діодів, біполярних, польових, IGBT та 3D транзисторів, тиристорів, лазерів, світло-, фото- і лазерних діодів, комірок КМДН логіки, елементів постійної та оперативної пам'яті, тощо. Ці приклади знаходяться у каталозі **/usr/synopsys/G_2012.06-SP2/tcad/G_2012.06-SP2/Applications_Library**.

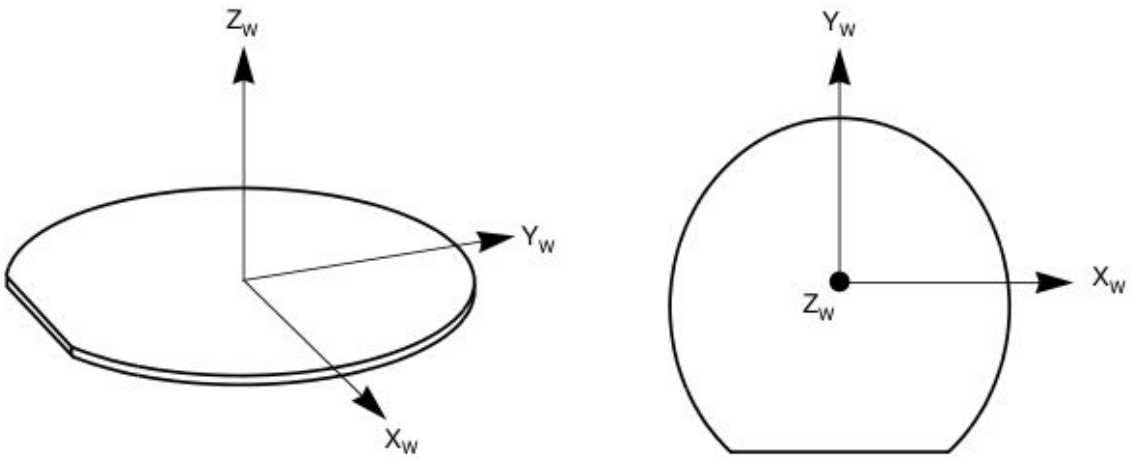
2. Системи координат Sentaurus TCAD

Перед тим, як перейти до операції створення контактів, необхідно розібратися з системами координат Sentaurus TCAD, оскільки різні програми пакету використовують різні системи координат, перетворення між якими відбувається автоматично.

Sentaurus TCAD оперує трьома системами координат:

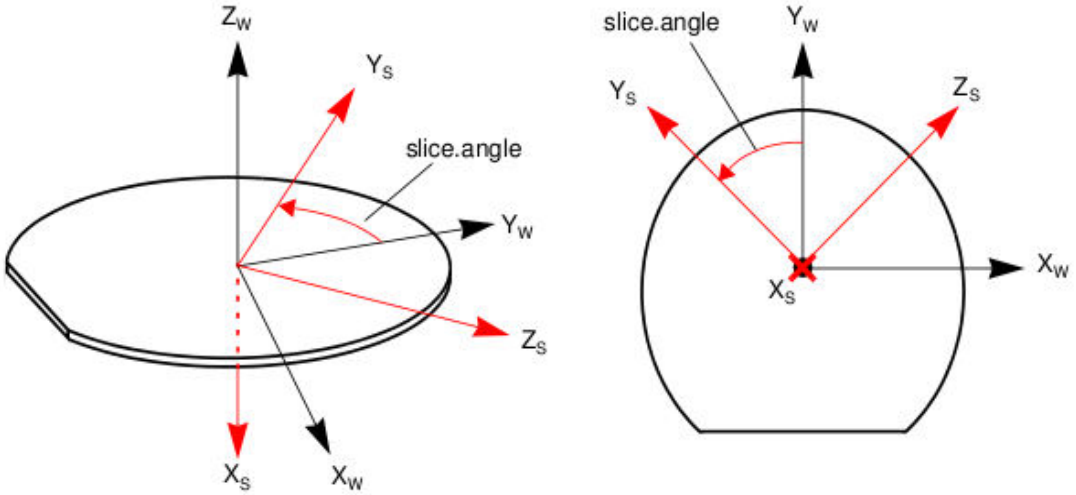
1. Координати кремнієвої пластини;
2. Координати для моделювання;
3. Координати для відображення.

Осі в системі координат кремнієвої пластини позначають Xw, Yw, Zw. Напрямок осей відносно кремнієвої пластини показано на рисунку:

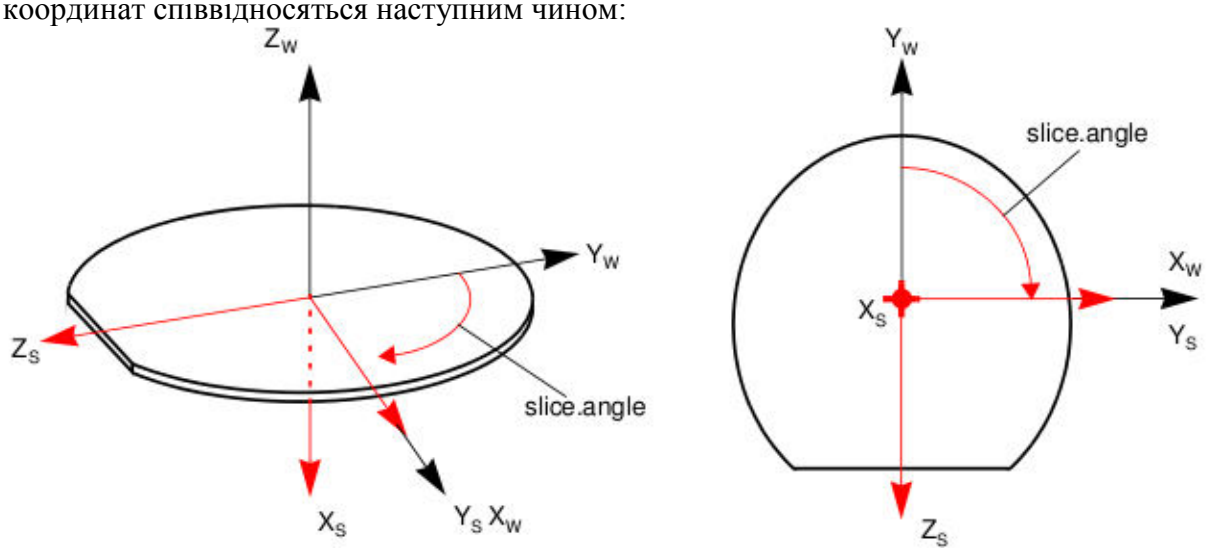


Система координат кремнієвої пластини використовується в програмі Prolyt при створенні топології фотолітографічних масок.

Система координат для моделювання використовується під час моделювання технологічного процесу та для визначення координат в командному файлі програми sprocess. Осі в системі координат моделювання позначаються Xs, Ys, Zs, а їх співвідношення з осями Xw, Yw, Zw зображено на рисунку нижче. При створенні командного файлу в ligament, перехід від координат кремнієвої пластини (одержаних з файлу топології) до координат моделювання здійснюється автоматично.

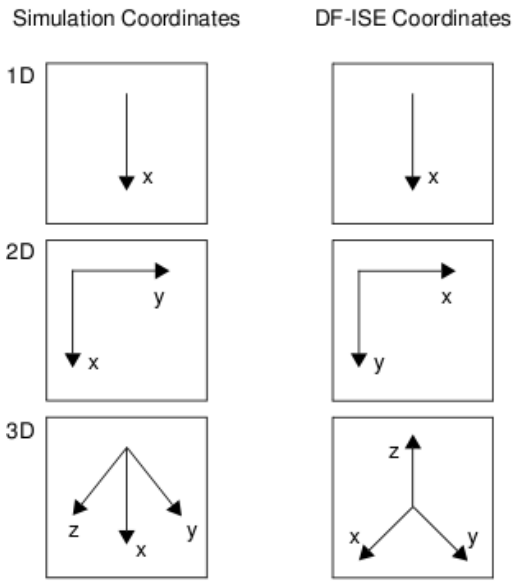


Як бачите, в системі координат моделювання, переміщення по вертикалі (вглиб кремнієвої пластини) задається координатою Xs, а не Zw. При цьому, вісь Ys повернута відносно осі Yw на кут **slice.angle**. По замовчуванню кут **slice.angle** = -90º і системи координат співвідносяться наступним чином:

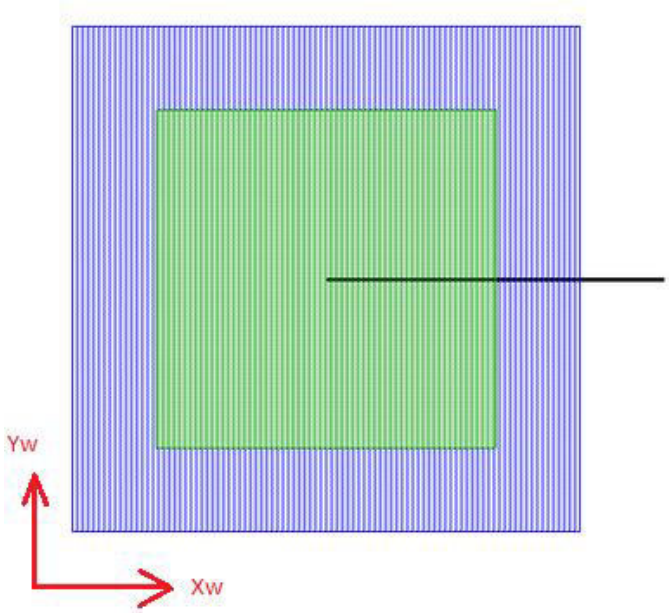


При виконанні 2D моделювання використовуються лише осі Xs та Ys.

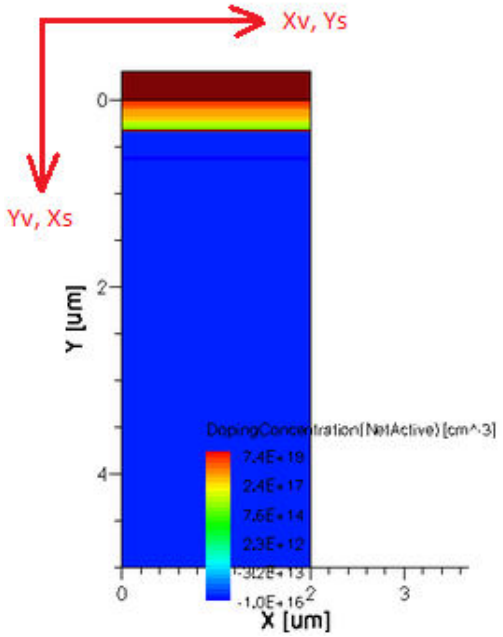
Для відображення результатів моделювання технологічного процесу у вигляді одержаної структури, використовують систему координат відображення, що задається осями Xv, Yv, Zv. Це може бути або система координат моделювання, або система координат DF-ISE. По замовчуванню використовується система координат DF-ISE і всі рисунки створені програмою Tecplot відображаються саме в цій системі координат. Співвідношення між координатами моделювання та DF-ISE координатами відображення для різних випадків симуляції (1D, 2D, 3D) зображені на рисунку:



Розглянемо співвідношення між системами координат на прикладі з попередньої лабораторної роботи. Очевидно, що лінію розтину кремнієвої пластини для визначення площини 2D симуляції ми проводили вздовж осі Xw системи координат кремнієвої пластини.



Однак на рисунку структури p-n переходу, що зображений в програмі Tecplot, горизонтальній осі Xw, вздовж якої розтиналася кремнієва пластина, відповідає уже вісь Xv системи координат відображення, а вертикальна вісь, направлена вглиб кремнієвої пластини, називається тепер Yv. При цьому вісь Xv в системі координат симуляції буде віссю Ys, а вісь Yv - віссю Xs.



3. Створення симетричної структури напівпровідникового діоду

У попередній лабораторній роботі для зменшення тривалості технологічного моделювання ми створили лише половину напівпровідникового діоду. Однак для моделювання електро-фізичних характеристик необхідно одержати повну структуру пристрою.

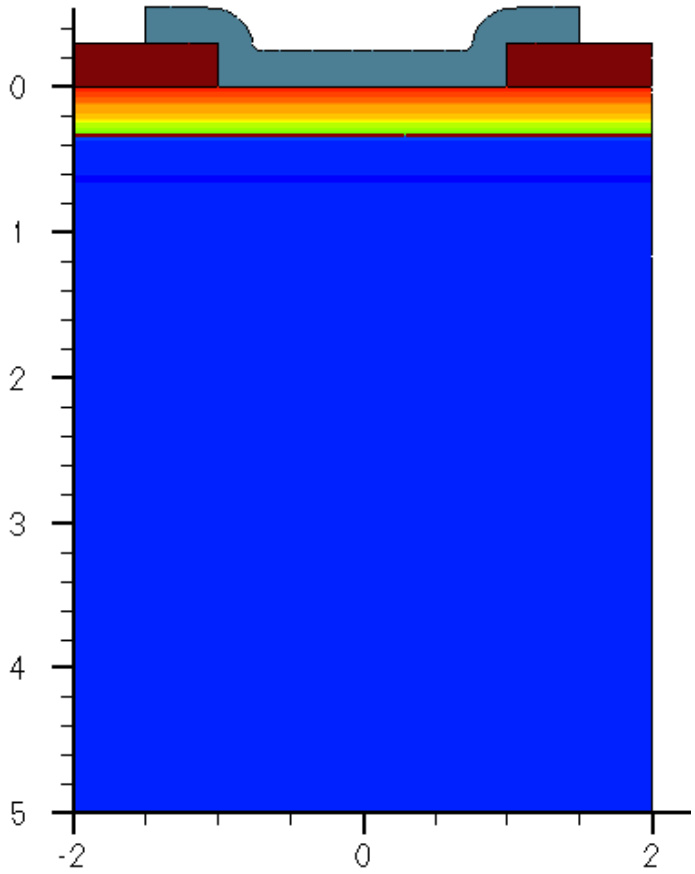
Відкриваємо в програмі Ligament збережений у попередній лабораторній роботі технологічний процес. Не забуваємо підключити файл з топологією та переконатися, що область симуляції - SIM2D.

Нажаль, в програмі Ligament відсутні спеціальні макроси для дзеркального доповнення структури і доведеться це зробити за допомогою інструкції командного файлу. Можна дописати необхідну інструкцію (**transform reflect left**) вручну в самому кінці командного файлу, перед командою **struct**.

```
photo mask=mask_1_3 thickness=1
etch material = {Aluminum} type=anisotropic rate = {10.0} time=1.1
strip Photoresist
transform reflect left
struct smesh=@diode@
exit
```

Однак існує можливість вставити команди для симулятора sprocess в певному місці технологічного процесу за допомогою макросу **insert** в програмі Ligament. Тому перетягнемо макрос insert в останню позицію на панелі flow. Оскільки команда transform призначена для симулятора sprocess, вставляємо її в поле одноіменного аргументу макросу insert. Якщо тепер ви натиснете кнопку Translate для створення командного файлу, зможете переконатись, що інструкція з макросу insert була поміщена у відповідне місце в кінці командного файлу.

Команда **transform reflect left** додає зліва від створеної структури її дзеркальну копію. Запустивши в sprocess щойно створений командний файл, одержимо структуру всього діоду, а не його половини, як це було раніше.

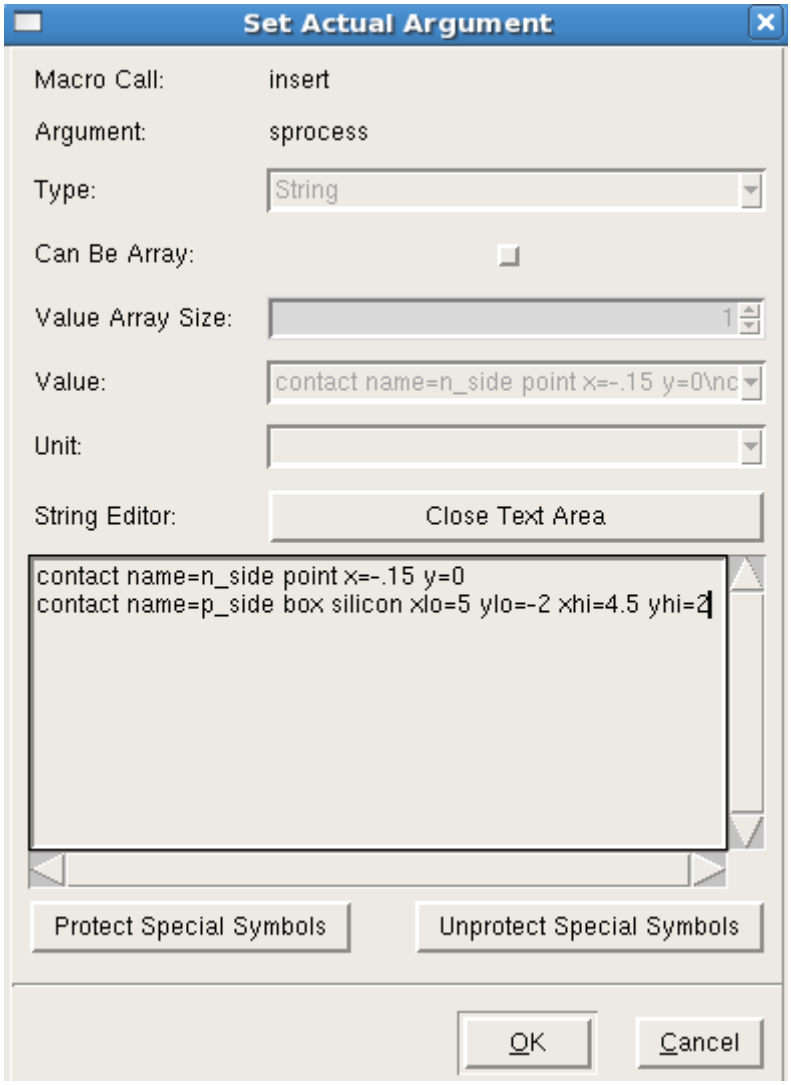


4. Створення контактів до p-n переходу

Для створення контактів в програмі Ligament теж відсутні спеціальні макроси, тож доведеться знову скористатися інструкціями командного файлу. Можна дописати ці інструкції вручну в самому кінці командного файлу, перед командою **struct**.

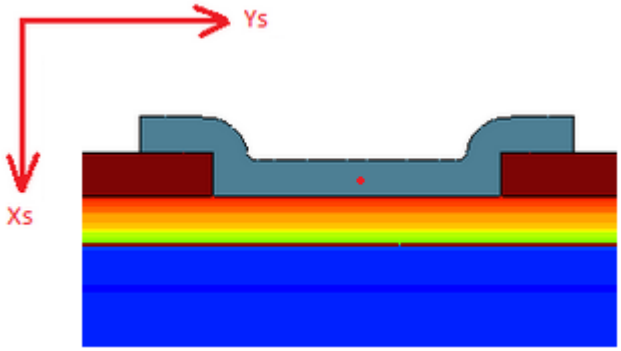
```
photo mask=mask_1_3 thickness=1
etch material = {Aluminum} type=anisotropic rate = {10.0} time=1.1
strip Photoresist
transform reflect left
contact name=n_side point x=-.15 y=0
contact name=p_side box silicon xlo=5 ylo=-2 xhi=4.5 yhi=2
struct smesh=@diode@
exit
```

А можна знову скористатися макросом **insert**, перетягнувши його в останню позицію на панелі flow та вказавши необхідні команди в аргументі sprocess.



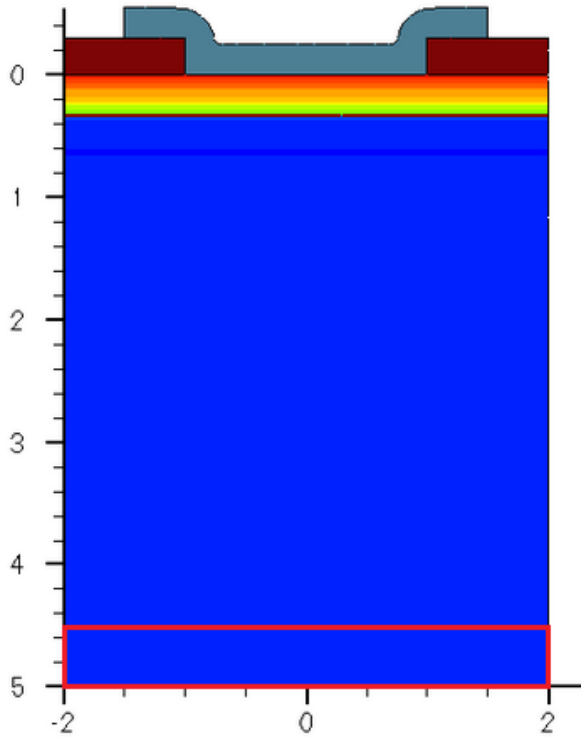
При моделюванні будь-якого технологічного процесу, **контакти повинні визначатися у самому кінці командного файлу**, перед командою struct, після визначення всіх технологічних операцій.

Розглянемо детальніше синтаксис команди **contact**. Ця команда докладно описана в [6] і дозволяє вказати симулятору електро-фізичних характеристик **sdevice,** які області структури напівпровідниковго приладу використовувати у якості контактів (до яких областей прикладати напругу, де вимірювати струм, тощо). Аргумент **name** дозволяє задати ім'я контакту, яке далі буде використовуватись в командних файлах. В даному випадку, контакт до області n-типу має ім'я "**n_side**", а контакт до області p-типу називається "**p_side**". Існує два типи контактів - **point** та **box**. Контакт n_side має тип point, а контакт p_side - тип box. Який тип контакту обрати, залежить від ситуації. Тип point робить контактом всю область з певного матеріалу, до якої належить точка з координатами **x** та **y**. В нашому випадку це координати x= -0.15, y= 0. Одиниці вимірювання координат по замовчуванню мікрометри. Оскільки вказані координати є аргументами команди симулятора sprocess, значить вони визначені в системі координат моделювання Xs, Ys. Тобто x= -0.15 задає координату по глибині, а y= 0 визначає координату по горизонталі в площині розрізу кремнієвої пластини в області 2D симуляції. Оскільки x приймає від'ємне значення, а вісь Xs направлена вглиб кремнієвої пластини, очевидно, що ця координата розміщена над поверхнею кремнію. Нескладно пересвідчитись, що точка x= -0.15, y= 0 в системі координат моделювання розміщена в області алюмінію. Оскільки контакт має тип point, вся область алюмінію стане контактом до кремнію n-типу. Точка з координатами x= -0.15, y= 0 приблизно зображена червоною крапкою на рисунку нижче.

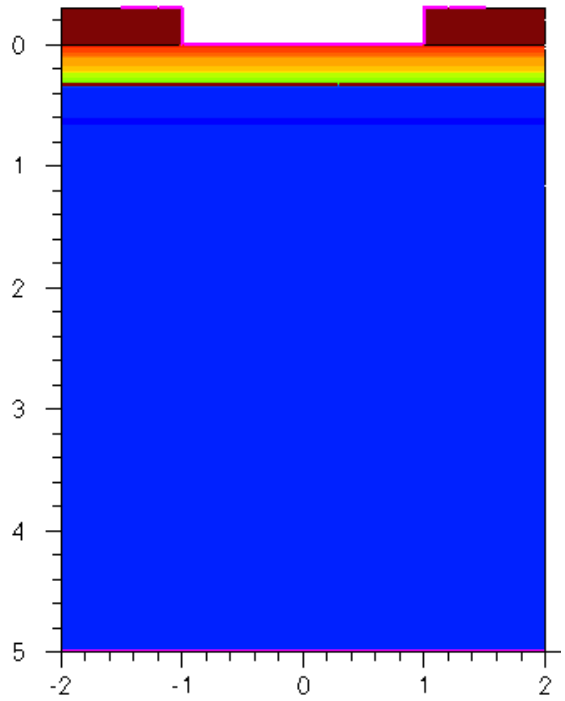


Тип **box** дозволяє зробити контактом прямокутну область структури, визначену координатами **xlo**, **ylo**, **xhi**, **yhi**. Координати xlo, ylo визначають нижню ліву вершину прямокутної області, а xhi, yhi - праву верхню. В такому випадку обов'язково необхідно вказати матеріал контакту. У нашому випадку - це кремній (silicon). Область контакту p_side, задана координатами xlo= 5, ylo= -2, xhi= 4.5, yhi= 2, зображена на рисунку нижче у вигляді червоного прямокутника. В даному випадку також використовується система координат для моделювання Xs, Ys.

Якщо використати аргумент **bottom** команди **contact**, буде створено контакт в площині поверхні нижньої області напівпровідникової структури. Наприклад, **contact bottom name=p_side**.



При створенні контакту типу point, вся область контакту заміняється тонкою лінією. Тож не дивуйтесь, що полоска алюмінію зникне, перетворившись на тонкий контакт.



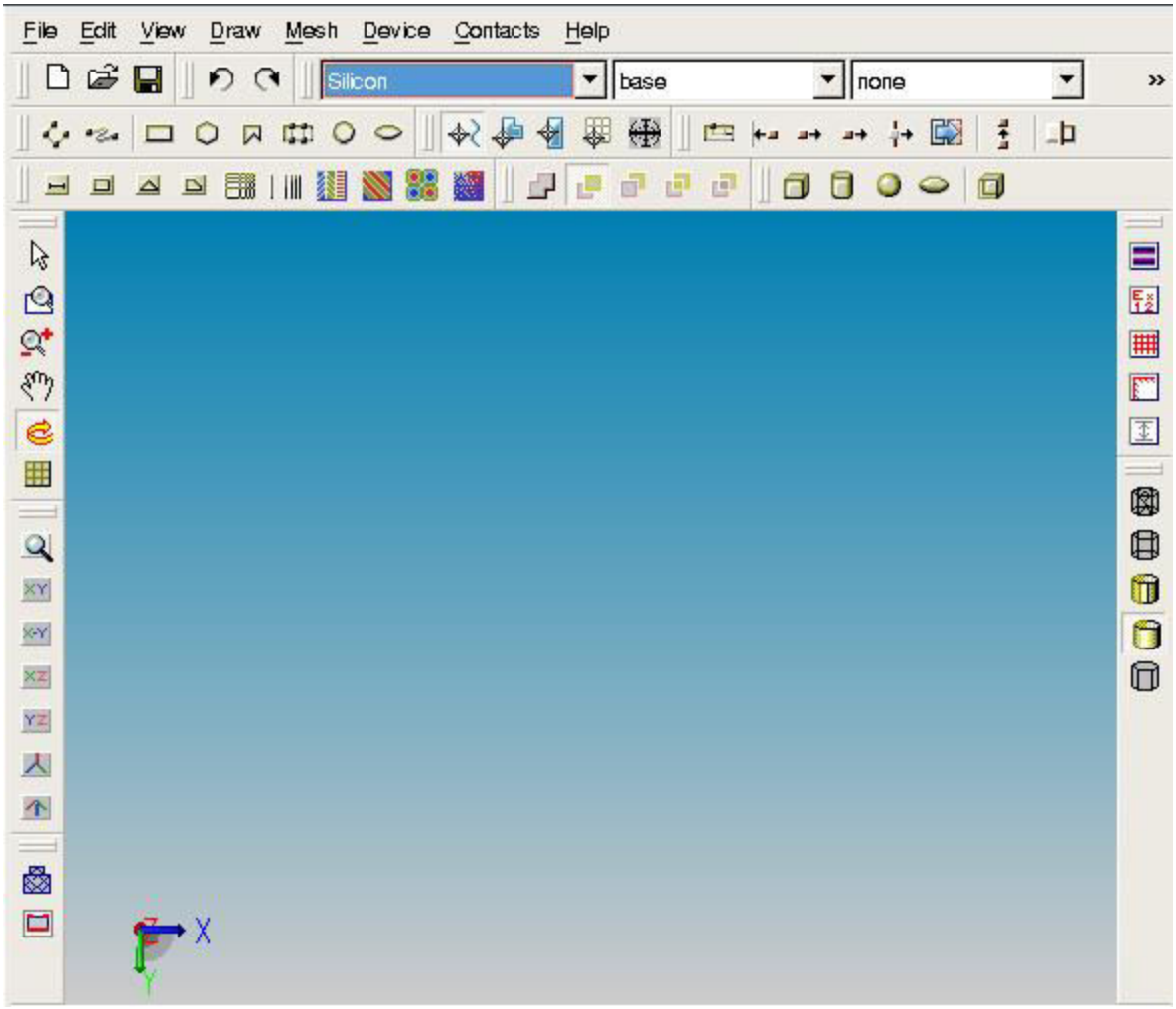
5. Побудова сітки скінченних елементів

Для розв'язку диференційних рівнянь, що описують фізичні процеси в напівпровідниках, Sentaurus TCAD використовує обчислювальні методи на зразок методу скінченних елементів [3, 10]. Для застосування подібних обчислювальних методів необхідно всю поверхню (для 2D моделювання), або об'єм (для 3D моделювання) представити у вигляді сітки скінченних елементів. Розв'язки диференційних рівнянь, що описують значення фізичних величин, знаходяться у вузлах сітки, а значення між вузлами одержують шляхом апроксимації. Для двовимірного моделювання у якості елементів такої сітки часто застосовують трикутники, а у випадку тривимірного моделювання - тетраедри. Чим більше вузлів має сітка, тим вищі точність моделювання і обчислювальні витрати. При неправильно обраній сітці система диференційних рівнянь може взагалі не зійтись до розв'язку. Тож вибір сітки скінченних елементів є відповідальним завданням, що обумовлює точність і швидкість моделювання. Зазвичай обирають мінімально можливу кількість вузлів сітки, потрібну для досягнення необхідної точності розв'язку системи диференційних рівнянь.

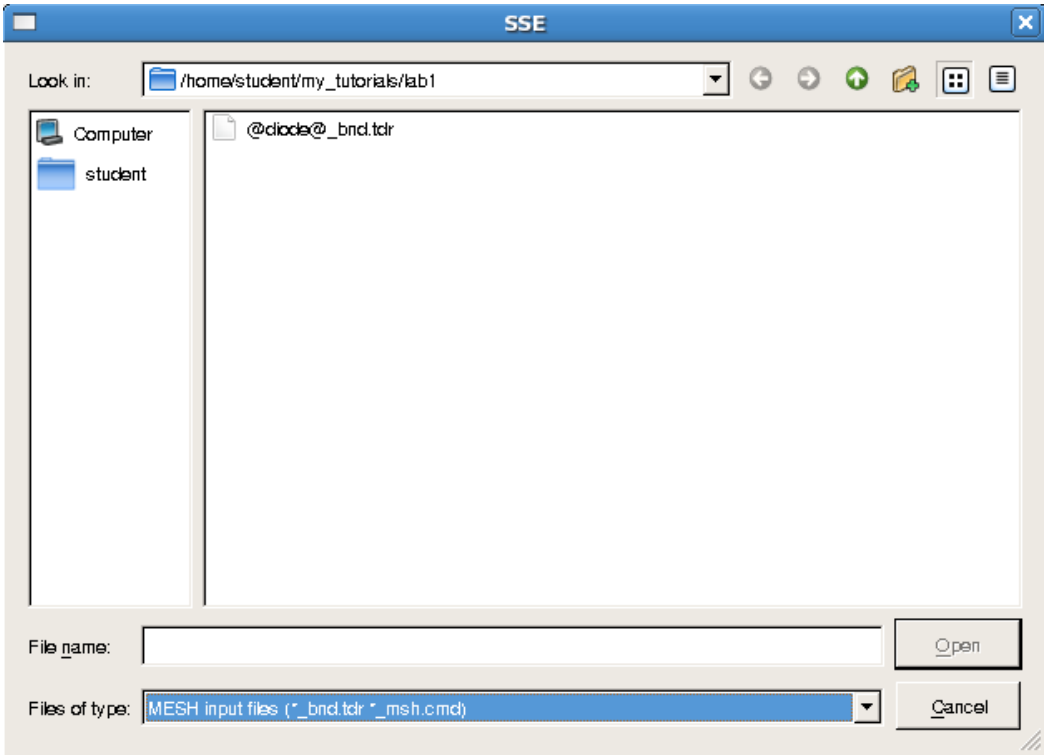
При підготовці командного файлу для Sentaurus Process в програмі Ligament, сітка скінченних елементів будується автоматично і цей етап проходить непомітно для користувача. Однак є можливість власноручно будувати таку сітку, роблячи її щільнішою в необхідних областях структури для підвищення точності технологічного моделювання. В одній з наступних лабораторних робіт ми розглянемо це питання.

Для моделювання електрофізичних характеристик в Sentaurus Device, розробники TCAD рекомендують заново побудувати сітку скінченних елементів в програмі Sentaurus Structure Editor, що використовує з цією метою спеціалізований модуль Sentaurus Mesh Generator. Даний модуль створює оптимальну сітку скінченних елементів Делоне (Delanay Mesh). В документації TCAD [2, 3] рекомендують спочатку створити сітку з відносно великим розміром елементів, а потім зменшити розмір елементів в тих областях структури, де необхідна висока точність моделювання. Зазвичай малий розмір елементів сітки необхідно робити в областях де протікає значна частина струмів структури (наприклад, канал польового транзистора), має місце підвищене електричне поле, або інтенсивна генерація/рекомбінація. Сітка типового двовимірного проекту включає кілька тисяч вузлів (2000-4000). Однак для моделювання силових напівпровідникових приладів і тривимірних структур може знадобитися набагато більша кількість вузлів.

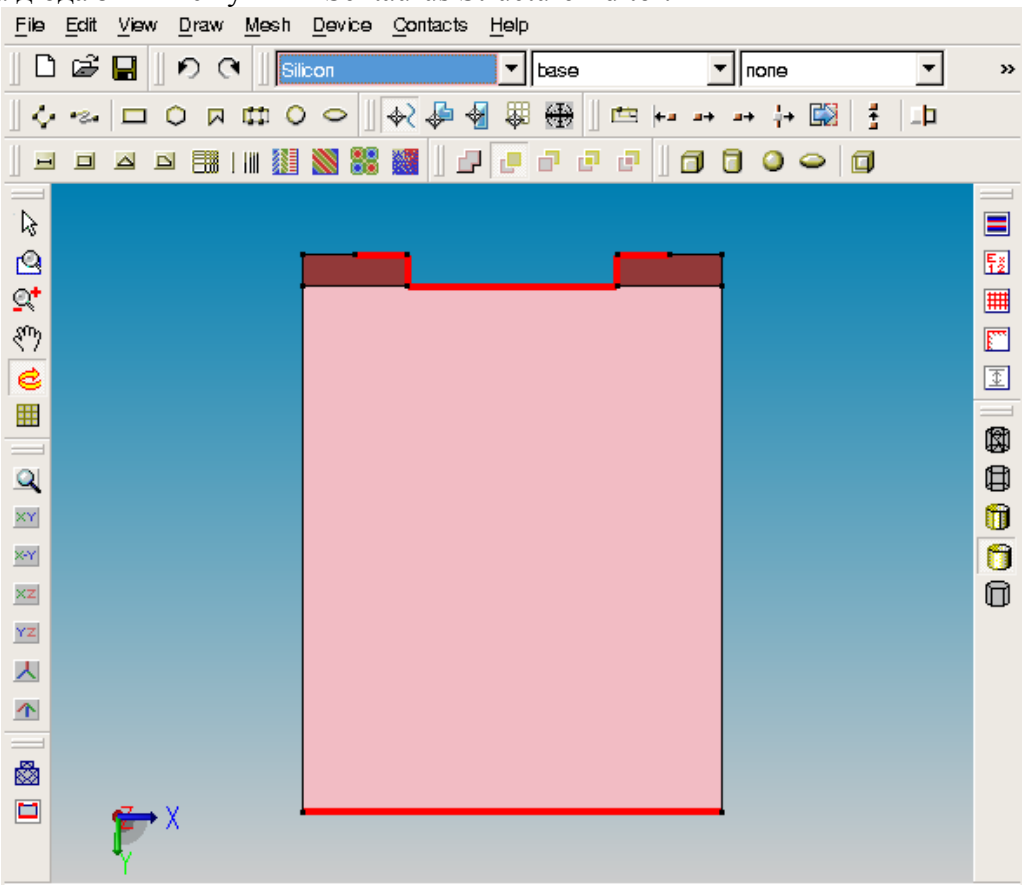
Зкопіюйте файли першої лабораторної роботи в новий каталог і відкрийте з нового каталогу консоль (термінал). Запустіть Sentaurus Structure Editor виконавши в консолі команду **sde &**. Відкриється вікно програми.



Тепер необхідно завантажити в програму інформацію про структуру діоду, для якого будемо генерувати сітку скінченних елементів. Дані про геометричні розміри та структуру напівпровідникового пристрою містяться в файлі *_bnd.tdr, що створюється в результаті роботи програми Sentaurus Process. В нашому випадку це @diode@_bnd.tdr. Щоб відкрити цей файл в Sentaurus Structure Editor, необхідно обрати пункт головного меню File -> Open Model. З'явиться вікно вибору файлу.

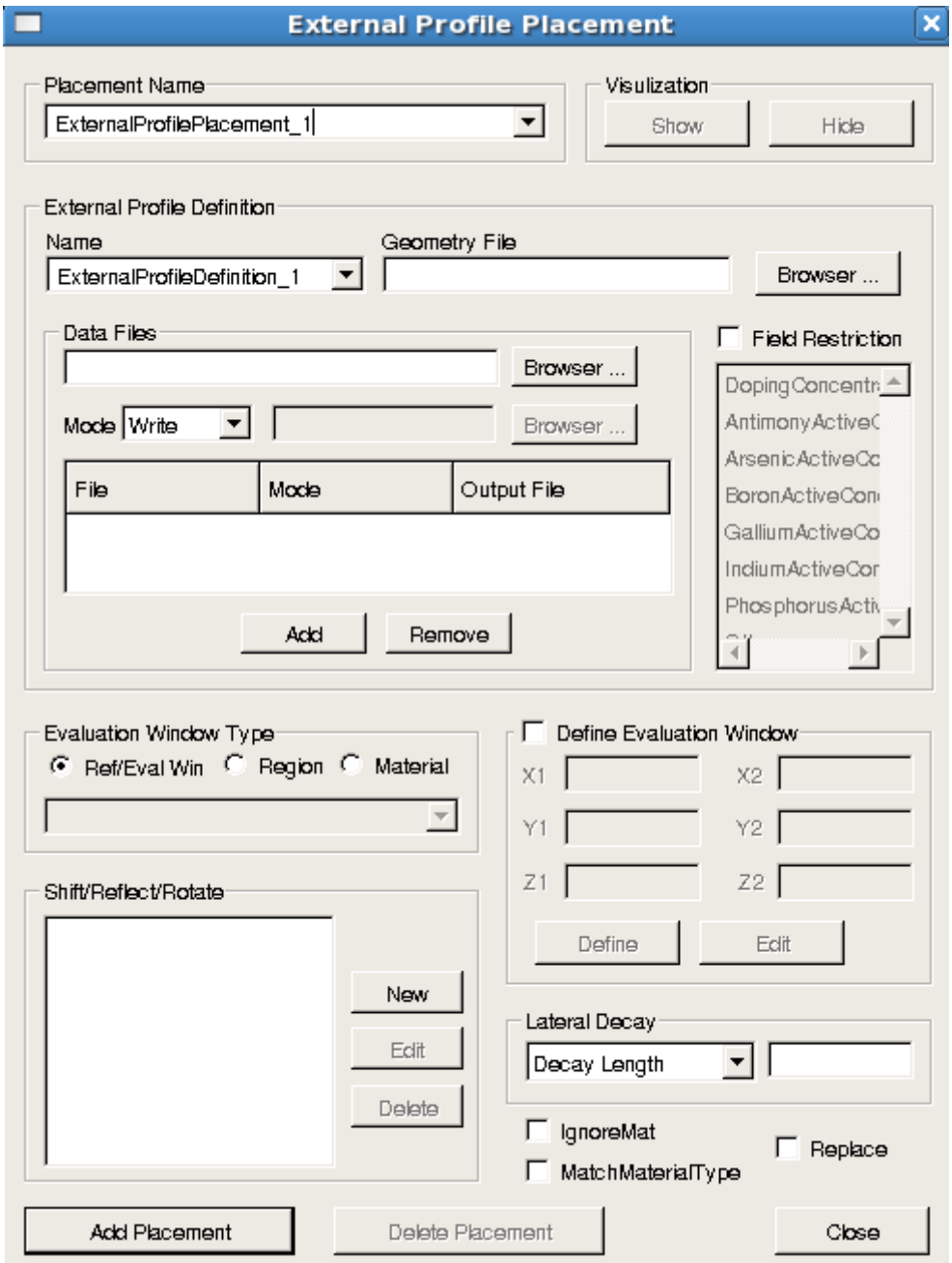


Встановіть фільтр вибору файлів в положення **MESH input files (*_bnd.tdr *_msh.cmd)**, оберіть файл **@diode@_bnd.tdr** та натисніть кнопку Open. В результаті, структура діода з'явиться у вікні Sentaurus Structure Editor.

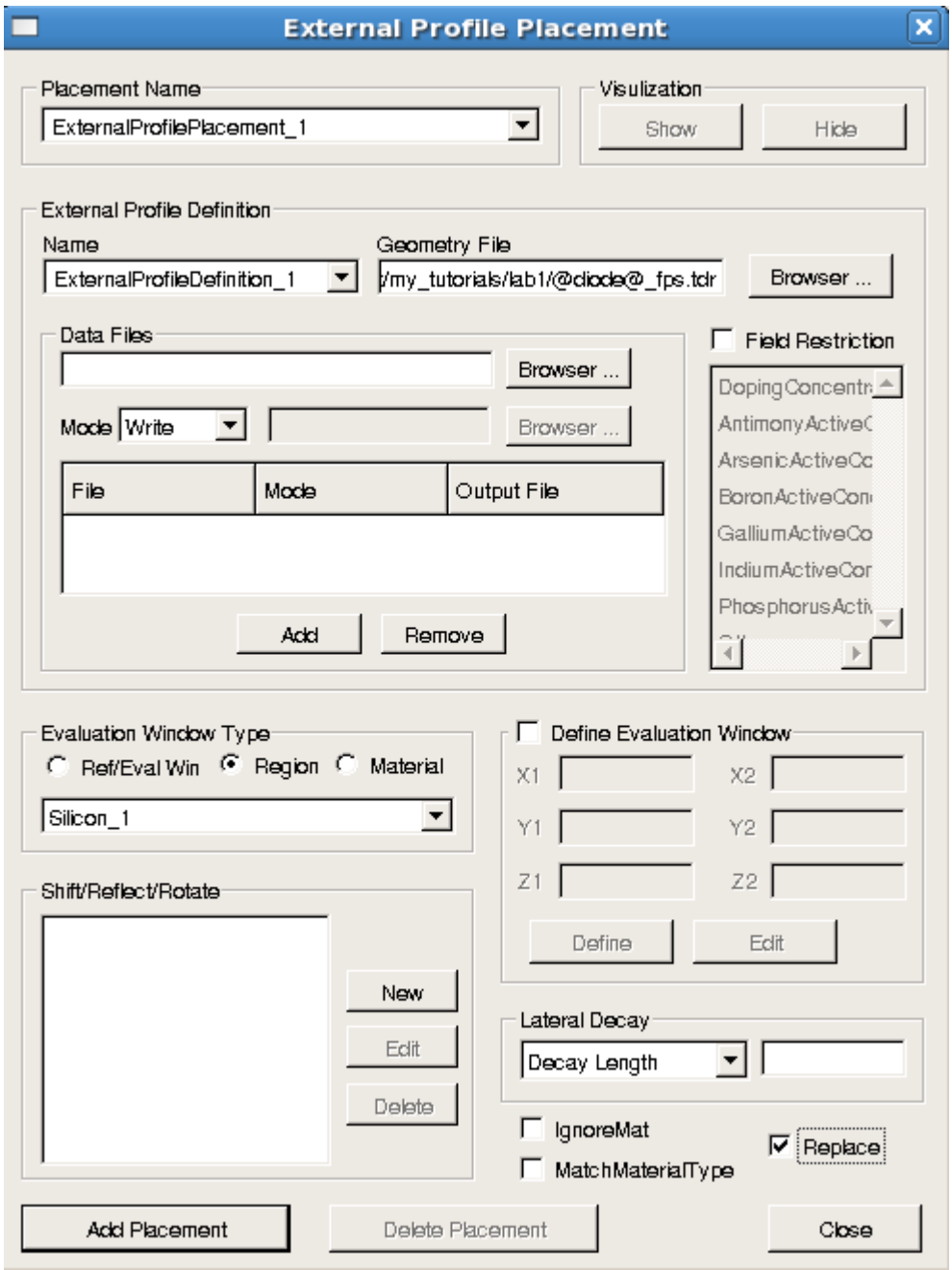


Для розрахунку електрофізичних характеристик необхідна інформація про домішки в структурі напіпровідникового пристрою. Тому наступним кроком стане завантаження профілів легування, які містяться в файлі **@diode@_fps.tdr**, що створюється в результаті роботи програми Sentaurus Process.

Оберіть пункт головного меню Device -> External Profile Placement. Відкриється відповідне вікно.

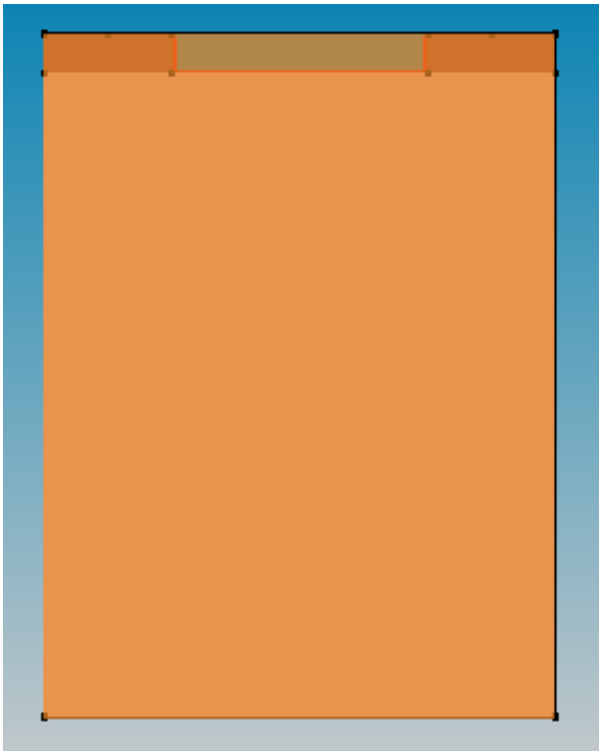


Цей інструмент дозволяє поставити у відповідність певній області структури напівпровідникового пристрою закон розподілення домішок із зовнішнього файлу. В нашому випадку необхідно завантажити профіль легування домішками лише для області кремнію. В полі **Placemet Name** можна вказати ім'я місця розташування профілю легування, що завантажується з файлу. Можна залишити ім'я по замовчуванню. В полі **Name** панелі **External Profile Definition** можна задати ім'я самого профілю, або залишити ім'я задане по замовчуванню. В полі **Geomatry File** необхідно вказати файл, що містить профіль легування, який будемо завантажувати. В нашому випадку це файл **@diode@_fps.tdr**.

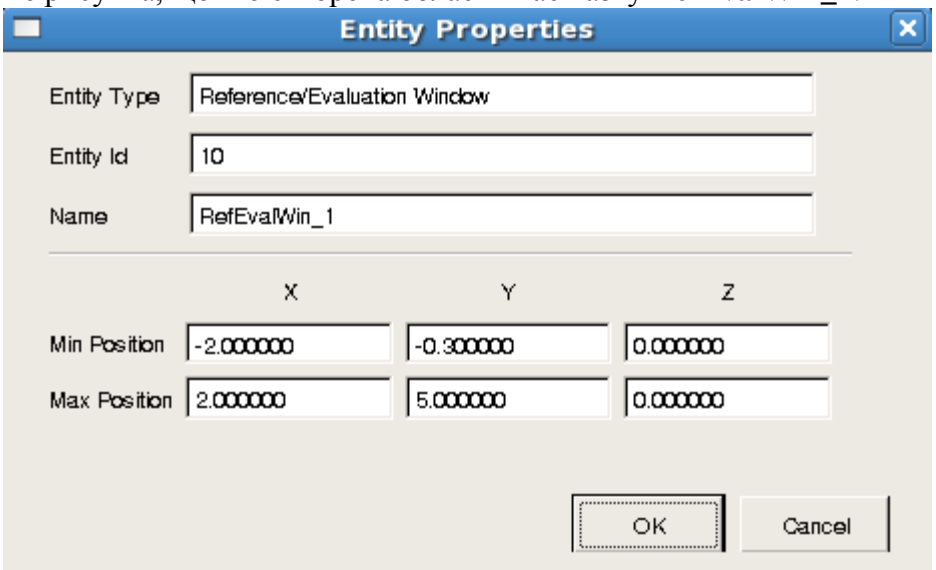


В полі **Evaluation Window Type** оберіть Region (окрема область структури) і в списку знизу оберіть область кремнію (Silicon_1). Поставте галочку Replace, що гарантує заміщення всіх існуючих профілів легування в області Silicon_1 профілями з файлу **@diode@_fps.tdr**. Натисніть кнопку **Add Placemet**, що приведе до завантаження в Structure Editor інформації про легування кремнію домішками Фосфору і Бору.

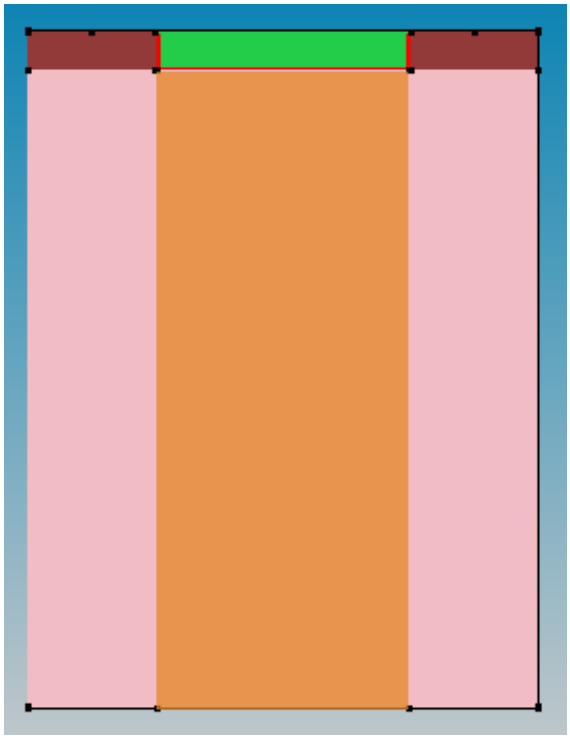
Тепер необхідно обрати області в яких буде створена сітка скінченних елементів. Нехай одна область покриватиме всю структуру і матиме відносно великий розмір комірок, а інша область буде покривати лише ту частину структури, через яку протікає основний струм діоду і розмір комірок в ній буде меншим для підвищення точності моделювання. Для створення зазначених областей оберіть пункт головного меню **Mesh -> Define Ref/Eval Window -> Rectangle** та створіть прямокутник, що покриватиме всю структуру.

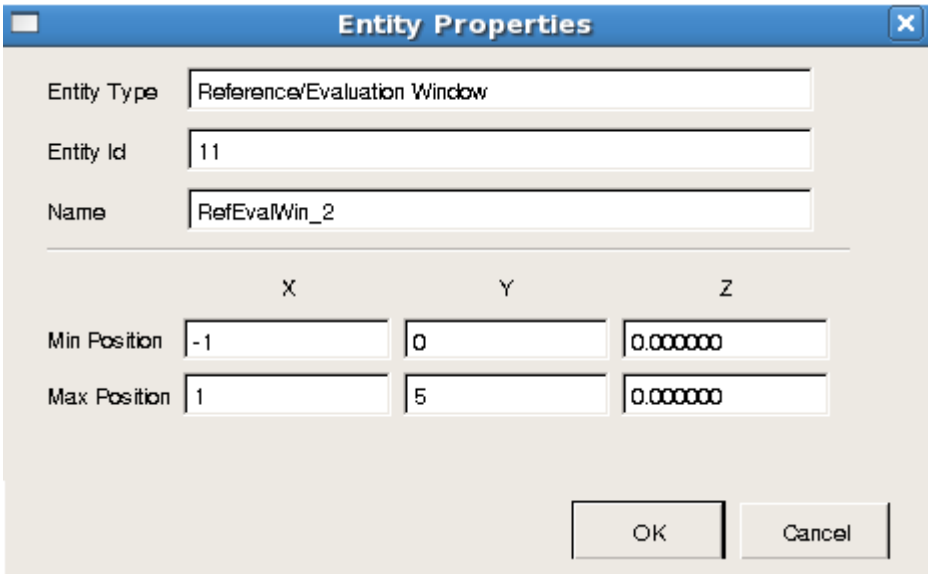


Координати вершин прямокутника можна скорегувати, якщо клацнути правою кнопкою миші на області прямокутника та обрати пункт контекстного меню Properties. Як видно із наведеного нижче рисунка, щойно створена область має назву **RefEvalWin_1**.



Таким же чином створіть ще одну область, що покриває лише частину структури між контактами діоду. Зайдіть у властивості створеної області та перегляньте її ім'я і координати вершин.

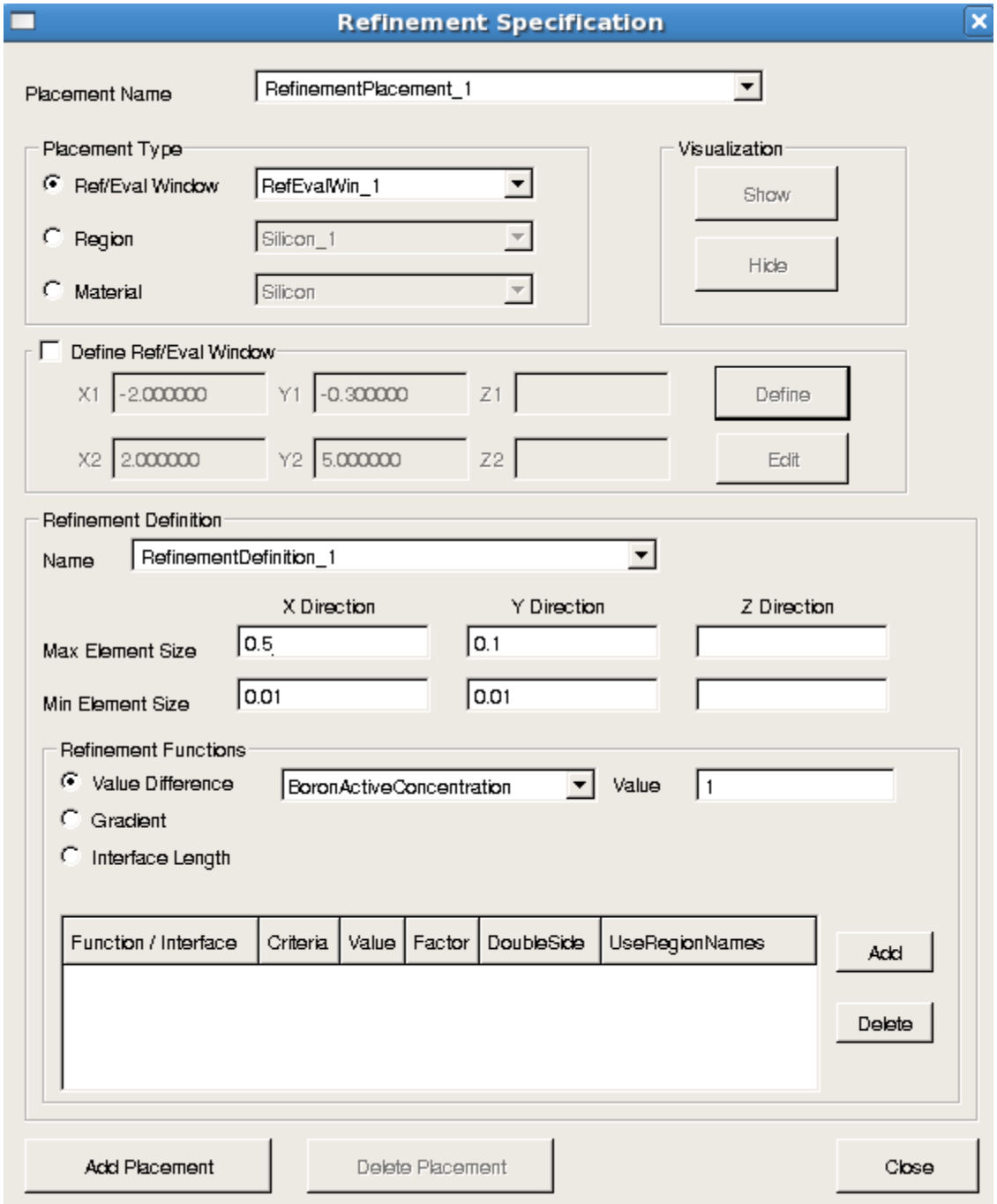




Наступним кроком необхідно задати правила створення сітки скінченних елементів у визначених областях. Для цього оберіть пункт головного меню **Mesh -> Refinement Placement**. Відкриється вікно налаштувань.

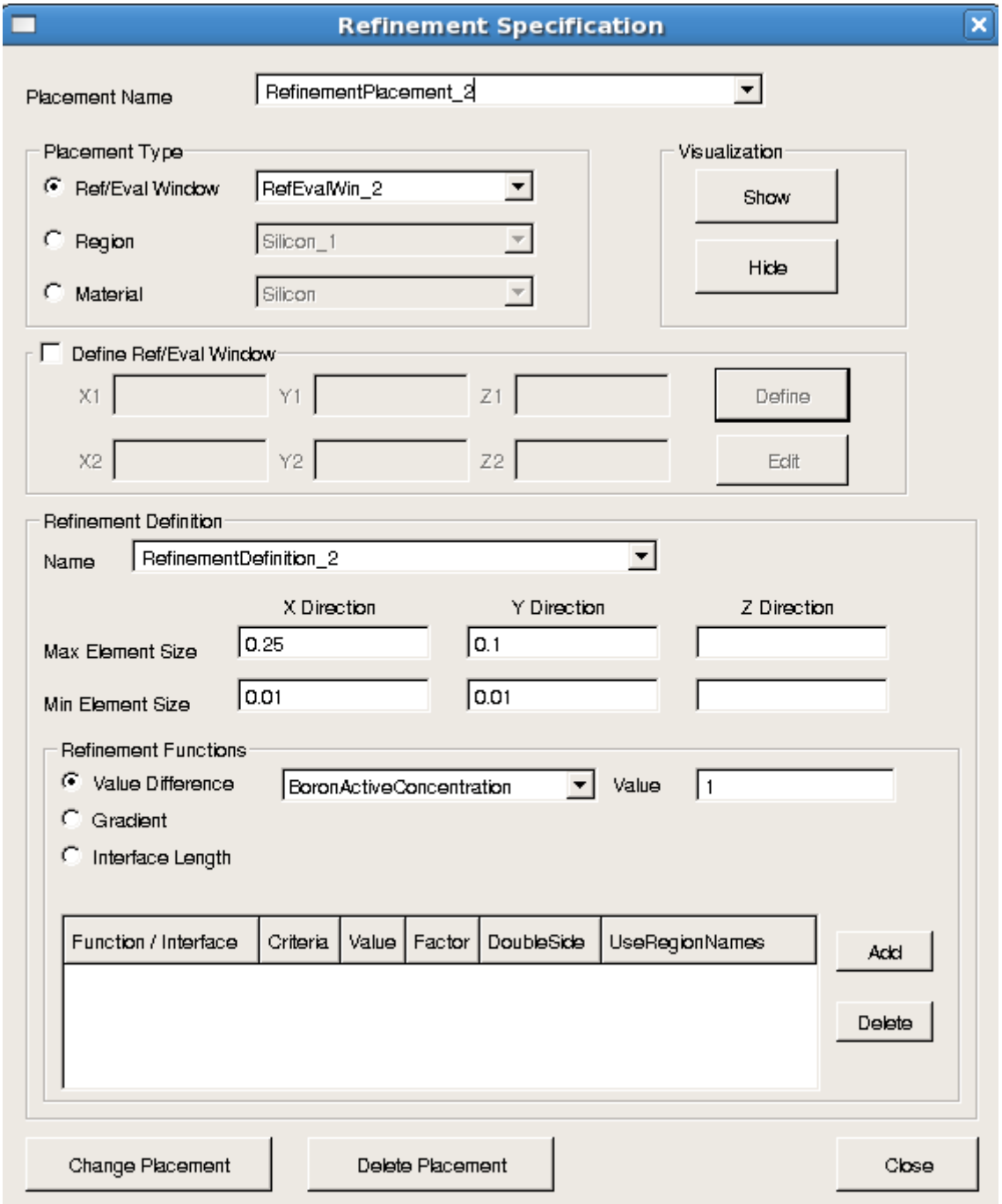
В даному вікні можна прив'язати налаштування генерації сітки до певної області структури. В полі **Placement Name** можна задати ім'я такої прив'язки, або залишити ім'я по замовчуванню. В полі **Palcement Type** обираємо тип прив'язки. Можна пов'язати налаштування генерації сітки, або з певним Ref/Eval вікном (два таких вікна ми щойно створили), а бо з певною областю структури (Region). Оберемо прив'язку до вікна, натиснувши Ref/Eval Window і вибравши зі списку поруч вікно **RefEvalWin_1**, що покриває всю структуру діоду. В полі **Name** панелі **Refinement Definition** можна визначити ім'я налаштувань генерації сітки, або залишити ім'я по замовчуванню. Поля **Min Element Size** та **Max Element Size** дозволяють задати мінімальний та максимальний розміри комірок сітки по осях X, Y та у випадку тривимірного моделювання - по Z. Оскільки сітка генерується автоматично, ці величини задають лише границі значень розмірів елементів сітки. Реальні ж розміри будуть обрані з вказаного діапазону з урахуванням оптимальності побудови сітки. Значення для полів **Min Element Size** та **Max Element Size** вказані на рисунку знизу. На

панелі **Refinement Functions** можна задати критерії відповідно до яких буде генеруватися сітка, однак в даному прикладі ми не будемо цього робити.

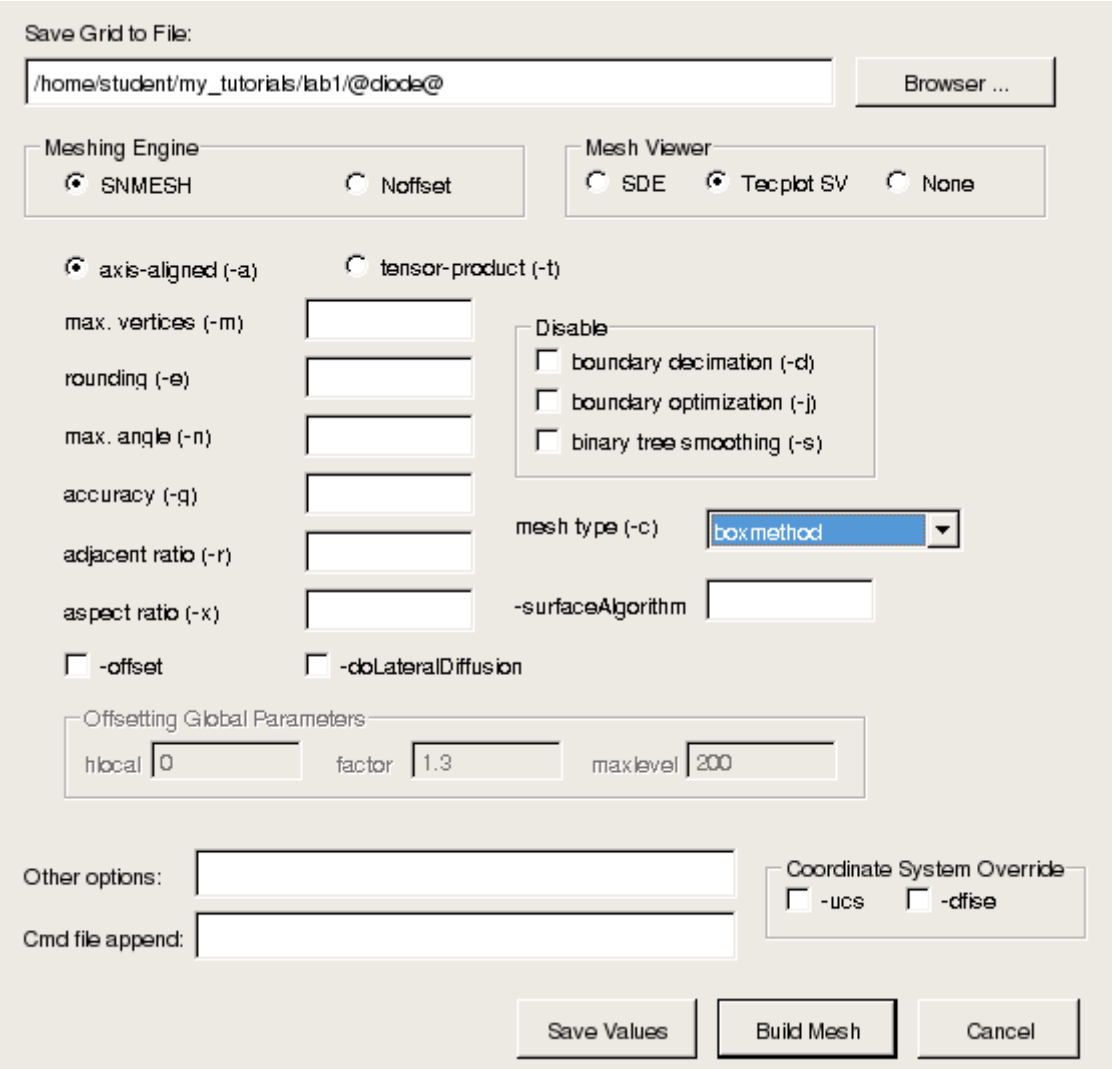


Після виставлення всіх налаштувань відповідно до наведеного рисунку, натисніть кнопку **Add Placement**, що приведе до створення налаштувань генерації сітки для області, що задана вікном **RefEvalWin_1**. Можна змінити налаштування і для підтвердження змін натиснути **Change Placement**.

Наступним кроком задайте налаштування генерації сітки для області, що визначена вікном **RefEvalWin_2**, як це показано на рисунку нижче. Переконайтесь, що Placement Name для цієї нової прив'язки відрізняється від імені попередньо заданої прив'язки. Ім'я в полі Name на панелі Refinement Definition теж повинно відрізнятися від попереднього випадку.

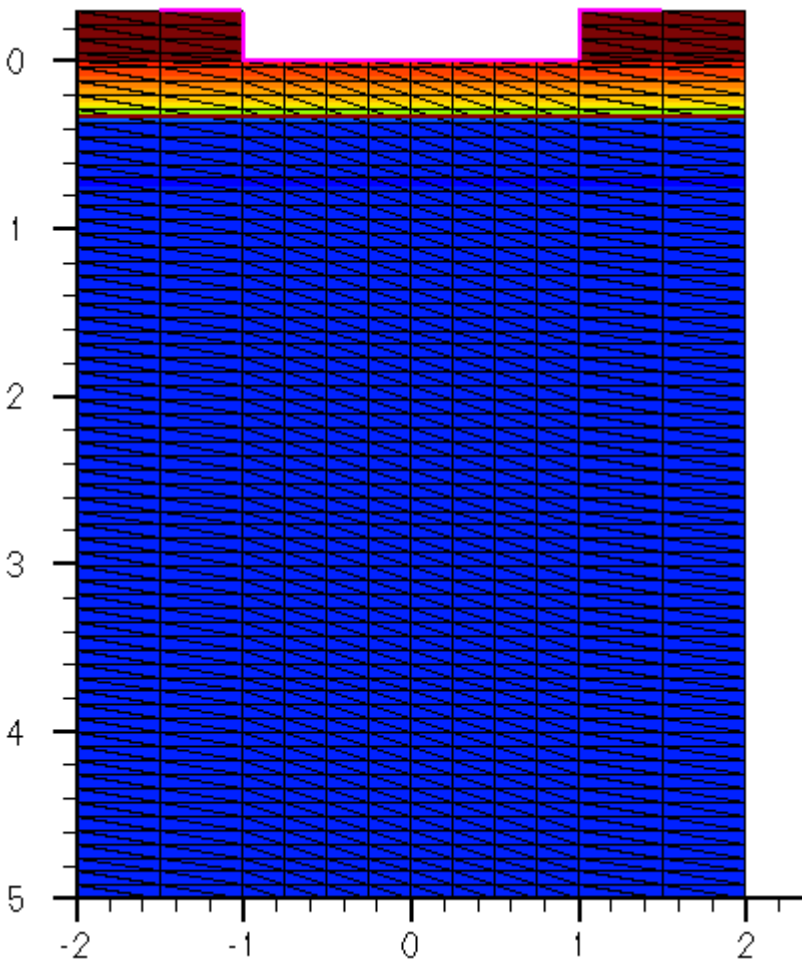


Для генерації сітки відповідно до заданих налаштувань оберіть пункт головного меню **Mesh -> Build Mesh**. Відкриється вікно налаштувань генерації. На панелі Mesh Viewer оберіть Tecplot SV та натисніть кнопку **Build Mesh**.



В результаті, через певний час **Sentaurus Structure Editor** створить файл **@diode@_msh.tdr**, що буде містити інформацію про структуру, геометричні розміри, профілі легування (домішки) та сітку скінченних елементів. Саме цей файл ми будемо використовувати далі для моделювання електрофізичних властивостей в Sentaurus Device. Файл **@diode@_msh.tdr** автоматично відкриється в Tecplot SV. Натиснувши кнопку можна переглянути створену сітку скінченних елементів.

Як бачите, комірки сітки розташовані більш щільно по горизонталі, в області структури між контактами діоду, оскільки для цієї області ми задали вдвічі менший максимальний розмір комірок по осі X.



6. Створення командного файлу для симулятора sdevice

Для моделювання електрофізичних характеристик напівпровідникових приладів в Sentaurus Device, необхідно створити командний файл симулятору, в якому будуть визначені вхідні та вихідні файли і налаштування моделювання.

В каталозі лабораторної роботи створіть файл **diode_des.cmd** і помістіть в нього наступний текст:

```
File {
   * input files:
   Grid= "@diode@_msh.tdr"
   * output files:
   Plot=   "@diode@_des.tdr"
   Current="@diode@_des.plt"
   Output= "@diode@_des.log"
}
Electrode {
   { Name="n_side" Voltage=0.0 Resistor=10}
   { Name="p_side" Voltage=0.0 Resistor=10}
}

Physics{
   Mobility (DopingDependence HighFieldSat Enormal)
   EffectiveIntrinsicDensity (BandGapNarrowing (OldSlotboom) )
   Recombination (
                  SRH
                  eAvalanche(Eparallel)
                  hAvalanche(Eparallel)
                 )
   AreaFactor=2
}
```

```
Math {
   Extrapolate
   * maximum number of iteration at each step
   Iterations=50
   * choosing the solver of the linear system
   Method=ParDiSo
}

CurrentPlot {
   Potential ((0.1 -0.2), (0.1 -1.5))
   ElectricField ((0.1 -0.2), (0.1 -1.5))
}

Plot {
   eDensity hDensity
   Current/Vector eCurrent/Vector hCurrent/Vector
   Potential SpaceCharge ElectricField/Vector
   eMobility hMobility eVelocity hVelocity
   Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
   BandGap EffectiveBandGap BandGapNarrowing ElectronAffinity
   ConductionBandEnergy ValenceBandEnergy
   BoronActiveConcentration
   PhosphorusActiveConcentration
   SRHrecombination
   AvalancheGeneration
}
Solve {
*- Creating initial guess:
   Poisson
   Coupled { Poisson Electron }

*- Ramp to p_side
   Quasistationary(
      InitialStep = 0.010 MaxStep = 0.050 MinStep=0.005
      Goal { Name="p_side" Voltage=1.2 }
   ){ Coupled { Poisson Electron } }
}
```

Розглянемо детальніше вміст файлу. Як бачите, командний файл симулятора Sentaurus Device складається з секцій. Коментарі починаються з зірочки * і не беруться симулятором до уваги.

В секції **File** визначаємо вхідні та вихідні файли моделювання.

Вигляд секції:

```
File {
   * input files:
   Grid= "@diode@_msh.tdr"
   * output files:
   Plot=   "@diode@_des.tdr"
   Current="@diode@_des.plt"
   Output= "@diode@_des.log"
}
```

Параметр `Grid=` дозволяє задати вхідний файл, що містить інформацію про структуру та розміри напівпровідникового пристрою, профілі легування (концентрації домішок) і сітку скінченних елементів. Цей файл ми створили на попередньому кроці, в програмі Sentaurus Structure Editor, на основі даних згенерованих в Sentaurus Process.

Параметр `Plot=` визначає вихідний файл, в який після закінчення моделювання будуть записані значення шуканих електрофізичних величин (електричного поля, потенціалу, тощо) у вузлах сітки скінченних елементів. Вміст цього файлу можна переглянути в програмі Tecplot. Фізичні величини, значення яких зберігаються в цьому файлі, визначаються в секції **Plot**. Файл має суфікс **_des** та розширення **tdr**.

Параметр `Current=` задає вихідний файл, в який після закінчення моделювання будуть записані дані про струми, напруги і заряди на контактах напівпровідникового пристрою. На

основі цих даних можна будувати вольт-амперні характеристики. Файл має суфікс **_des** та розширення **plt**. Вміст файлу можна переглянути в програмі **Inspect** пакету Sentaurus TCAD. Фізичні величини, що будуть записані в файл, можна визначити в секції **CurrentPlot**.

Параметр **`Output=`** задає файл, в який будуть записані дані про хід моделювання (так звані “логи”).

В секції **Electrode** необхідно визначити контакти (електроди) напівпровідникового пристрою, до яких будуть підключатися джерела струмів та напруг при моделюванні електрофізичних характеристик. На цих же електродах будуть вимірюватися струми, заряди та напруги, одержані в результаті моделювання. Електроди не перераховані в секції **Electrode** будуть проігноровані під час моделювання в Sentaurus Device.

Вигляд секції:

```
Electrode {
   { Name="n_side" Voltage=0.0 Resistor=10}
   { Name="p_side" Voltage=0.0 Resistor=10}
}
```

В полі **Name** необхідно вказати ім'я контакту, створеного раніше в Sentaurus Process, або Structure Editor.

Параметр **Voltage** задає напругу на електроді в вольтах на початку симуляції, що є початковим значенням для розрахунку електрофізичних характеристик чисельними методами. Чим більше початкова напруга відрізняється від нуля, тим вища вірогідність того, що розв'язок системи диференційних рівнянь не зійдеться до рішення. Доцільно задавати значення параметра **Voltage** в діапазоні від нуля до кількох сотень мілівольт.

По замовчуванню всі контакти є омічними (не випрямляючими) і їх опір в Омах можна задати за допомогою параметра **Resistor**. Значення опору задане в Resistor є відносним. Реальне значення опору контакту одержуємо по формулі **Resistor * AreaFactor**. Значення параметра **AreaFactor** розглянемо далі.

За допомогою параметрів **Current** та **Charge**, не наведених в прикладі вище, можна задати струм через електрод в Амперах та заряд на електроді в Кулонах на початку симуляції. Бажано задавати значення близьке до нуля.

Якщо необхідно описати металічний контакт до напівпровідника, що має властивості випрямляючого контакту Шоткі, необхідно скористати параметром **Schottky** та задати різницю між рівнями Фермі металу і напівпровідника (потенціальний бар'єр) в електрон-вольтах за допомогою параметра **Barrier**. Наприклад, **`{ Name=«gate» Voltage=0.0 Schottky Barrier=-0.55 }`**

Секція **Physics** дозволяє визначати моделі фізичних процесів, що будуть використані під час моделювання електрофізичних характеристик в Sentaurus Device. Наприклад, можна задати найпростішу дрейфово-дифузійну модель руху вільних носіїв заряду, що знизить тривалість і точність моделювання. Однак, якщо визначити термодинамічну модель руху електронів та дірок, з урахуванням квантових ефектів, точність і тривалість моделювання значно зросте. Якщо певна модель (наприклад, ударної іонізації) відсутня в секції **Physics**, вона не буде враховуватись при моделюванні електрофізичних характеристик. З точки зору точності результатів моделювання ця секція є найбільш важливою. оскільки саме вибір фізичних моделей, використаних при розрахунках, визначає наскільки результати моделювання наближені до реальності. Повний перелік та опис фізичних моделей, доступних для використання в Sentaurus Device, ви можете знайти в розділах 7-32 документу [3].

Вигляд секції:

```
Physics{
   Mobility (DopingDependence HighFieldSat Enormal)
   EffectiveIntrinsicDensity (BandGapNarrowing (OldSlotboom) )
   Recombination (
                  SRH
                  eAvalanche(Eparallel)
                  hAvalanche(Eparallel)
                )
   AreaFactor=2
}
```

В секції **Physics** послідовно перераховують фізичні процеси і явища (рухливість, рекомбінація, тощо), які будуть взяті до уваги під час симуляції. Після кожного фізичного процесу/явища, в круглих скобках визначають моделі, що їх описують. Після кожної моделі в круглих скобках можна вказати деталі її реалізації.

Параметр **Mobility** дозволяє задати моделі рухливості вільних носіїв заряду. В даному випадку враховується вплив концентрацій легуючих домішок (**DopingDependence**), моделюється ефект насичення швидкості руху електронів та дірок в сильному електричному полі (**HighFieldSat**), а також враховується вплив на рухливість перпендикулярного електричного поля (**Enormal**). В круглих скобках після **DopingDependence** можна визначити модель такої залежності. Якщо модель не вказана, для кремнію по замовчуванню використовується модель **Masetti**. Ефект насичення швидкості в сильному електричному полі можна задати окремо для електронів, за допомогою **eHighFieldSat** та для дірок, за допомогою **hHighFieldSat**. Якщо замість **Mobility** вказати **eMobility**, або **hMobility**, вказані в круглих дужках параметри будуть характеризувати виключно рухливість електронів (для **eMobility**), або дірок (для **hMobility**). Детальніше про моделі рухливості вільних носіїв заряду та їх налаштування можна почитати в розділі 15 документу [3].

Параметр **EffectiveIntrinsicDensity** дозволяє визначити моделі, що описують структуру енергетичних зон і використовуються для розрахунку концентрації власних носіїв заряду. В даному випадку моделюється явище зміни ширини забороненої зони (**BandGapNarrowing**) в залежності від концентрацій легуючих домішок з використанням моделі **OldSlotboom**. Детальніше про налаштування і вибір моделей структури енергетичних зон можна почитати в розділі 12 документу [3].

Параметр **Recombination** використовується для визначення моделей генерації та рекомбінації вільних носіїв заряду. **SRH** визначає рекомбінацію Шоклі-Ріда-Хола через домішки. Можна додати моделювання інших видів рекомбінації (Radiative, Auger, тощо). **eAvalanche(Eparallel)** та **hAvalanche(Eparallel)** задають модель ударної генерації електронів та дірок під дією компоненту електричного поля, паралельного потоку вільних електронів та дірок. Можна задати параметри ударної генерації одразу для електронів та дірок, використовуючи **Avalanche** замість **eAvalanche** та **hAvalanche.** Детальніше про моделі генерації/рекомбінації вільних носіїв заряду та їх налаштування можна почитати в розділі 16 документу [3].

У випадку двовимірного моделювання електрофізичних характеристик, при розрахунках струмів та зарядів на електродах, по замовчуванню вважається, що товщина пристрою по осі Z дорівнює 1 мкм. Визначити іншу товщину структури можна за допомогою параметру **AreaFactor**. Якщо цей параметр присутній у секції **Physics**, струми і заряди на електродах множаться на значення **AreaFactor**. Також **AreaFactor** впливає на значення опорів електродів, задані в секції **Electrode**. В нашому прикладі **AreaFactor=2**, що обумовлює товщину структури в 2 мкм і приводить до подвоєння струмів у порівнянні з випадком, коли **AreaFactor** відсутній і товщина структури дорівнює 1 мкм.

В секції **Math** можна задати параметри чисельного вирішення систем диференційних рівнянь. Повний перелік налаштувань секції **Math** доступний в розділах 6 та 40 документу [3].

Вигляд секції:

```
Math {
   Extrapolate
   * maximum number of iteration at each step
   Iterations=50
   * choosing the solver of the linear system
   Method=ParDiSo
}
```

При моделюванні електрофізичних характеристик, спочатку вирішуються рівняння Пуассона і рівняння неперервності для близьких до нуля напруг на електродах пристрою, заданих в секції **Electrode**. Після цього, напруги на електродах збільшуються на невелику величину, відповідно до вмісту секції **Solve** і вищезазначені диференційні рівняння заново вирішуються з урахуванням розв'язку, одержаного на попередньому кроці та нових граничних умов. Таким чином, крок за кроком, можна одержати розв'язок для будь-яких

напруг на електродах. По замовчуванню, у якості початкового вирішення диференційного рівняння для нових граничних умов (наприклад. напруг на електродах), обирається розв'язок, одержаний на попередньому кроці.

Параметр **Extrapolate** секції **Math** дозволяє задати початкове вирішення диференційного рівняння для нових граничних умов, як екстраполяцію розв’язків на двох попередніх кроках. По замовчуванню екстраполяція лінійна, однак можна задати екстраполяцію більш високого порядку (квадратичну, або кубічну).

Параметр **Iterations** задає кількість ітерацій для вирішення диференційних рівнянь на кожному кроці (для певних граничних умов, наприклад, напруг на електродах). Якщо за визначену кількість ітерацій не вдається одержати розв'язок з необхідно малою похибкою, приріст напруг на електродах відносно попереднього кроку зменшується і процес повторюється. По замовчуванню **Iterations=50.**

Параметр **Method** дозволяє визначити метод вирішення систем лінійних рівнянь.

В секції **Plot** необхідно задати фізичні величини, які будуть одержані внаслідок моделювання в Sentaurus Device. Після закінчення моделювання, дані про ці фізичні величини у вузлах сітки скінченних елементів будуть збережені в файл ***_des.tdr**. Повний перелік фізичних величин можна переглянути в таблицях 140 і 141 (додаток F - Data and Plot Names) документу [3].

Вигляд секції:

```
Plot {
   eDensity hDensity
   Current/Vector eCurrent/Vector hCurrent/Vector
   Potential SpaceCharge ElectricField/Vector
   eMobility hMobility eVelocity hVelocity
   Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
   BandGap EffectiveBandGap BandGapNarrowing ElectronAffinity
   ConductionBandEnergy ValenceBandEnergy
   BoronActiveConcentration
   PhosphorusActiveConcentration
   SRHrecombination
   AvalancheGeneration
}
```

eDensity та **hDensity** характеризують концентрації вільних електронів та дірок. Одиниці вимірювання [1/см^3]. В файлі ***_des.tdr** ці фізичні величини мають такі самі назви.

Current, eCurrent, hCurrent характеризують густини повного струму, його електронної та діркової складових. Суфікс **/Vector** означає, що будуть зберігатися не лише скалярні значення густини струму, а і векторні (інформація про напрямок). Одиниці вимірювання [А/см^2]. В файлі ***_des.tdr** ці фізичні величини називаються **CurrentDensity, eCurrentDensity, hCurrentDensity**.

Potential характеризує електростатичний потенціал. Одиниці вимірювання [В]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина називається **ElectrostaticPotential**.

SpaceCharge характеризує просторовий заряд (права частина рівняння Пуассона, поділена на елементарний заряд електрона). Одиниці вимірювання [см^-3]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

ElectricField/Vector характеризує напруженість електричного поля. Зберігаються як скалярні, так і векторні значення. Одиниці вимірювання [В/см]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

eMobility, hMobility характеризують рухливості електронів та дірок. Одиниці вимірювання [см^2/(В*с)]. В файлі ***_des.tdr** ці фізичні величини мають такі самі назви.

eVelocity, hVelocity характеризують швидкості руху вільних електронів та дірок. Одиниці вимірювання [см/с]. В файлі ***_des.tdr** ці фізичні величини мають такі самі назви.

Doping характеризує різницю концентрацій атомів донорів та акцепторів. Якщо Doping > 0, значить атомів донорів більше ніж атомів акцепторів і напівпровідник має провідність n-типу. Якщо ж Doping < 0, напівпровідник має провідність p-типу. У власного напівпровідника значення Doping близьке до 0. Одиниці вимірювання [1/см^3]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина називається **DopingConcentration**.

DonorConcentration, AcceptorConcentration характеризують концентрації донорних та акцепторних атомів домішок. Одиниці вимірювання [1/см^3]. В файлі ***_des.tdr** ці фізичні величини мають такі самі назви.

BoronActiveConcentration характеризує концентрацію атомів домішок Бору, які не утворюють дефектів кристалічної гратки. В нашому прикладі, ця концентрація дорівнює концентрації акцепторних атомів **AcceptorConcentration**. Одиниці вимірювання [1/см^3]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

PhosphorusActiveConcentration характеризує концентрацію атомів домішок Фосфору, які не утворюють дефектів кристалічної гратки. В нашому прикладі, ця концентрація дорівнює концентрації донорних атомів **DonorConcentration**. Одиниці вимірювання [1/см^3]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

BandGap характеризує ширину забороненої зони. Одиниці вимірювання [еВ]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

EffectiveBandGap характеризує ширину забороненої зони з урахуванням впливу легуючих домішок. Одиниці вимірювання [еВ]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

BandGapNarrowing характеризує зміну ширини забороненої зони під дією атомів домішок. **BandGapNarrowing = BandGap - EffectiveBandGap**. Одиниці вимірювання [еВ]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

ElectronAffinity характеризує енергію спорідненості до електрону. Це різниця між енергією вакууму (енергія електрона, що знаходиться на поверхні напівпровідника) та енергією нижньої границі зони провідності. Одиниці вимірювання [еВ]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

ConductionBandEnergy характеризує енергію нижньої границі (дна) зони провідності. Одиниці вимірювання [еВ]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

ValenceBandEnergy характеризує енергію верхньої границі валентної зони. Одиниці вимірювання [еВ]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

SRHrecombination характеризує інтенсивність (швидкість) рекомбінації Шоклі-Ріда-Хола через домішки. Показує скільки пар вільних частинок рекомбінує за секунду в 1 см^3 об'єму напівпровідника. В рівноважному стані швидкість рекомбінації дорівнює швидкості теплової генерації. Одиниці вимірювання [1/(с*см^3)]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

AvalancheGeneration характеризує інтенсивність (швидкість) генерації вільних електронів та дірок під дією ударної іонізації. Показує скільки вільних частинок (електронів та дірок) створюється за секунду в 1 см^3 об'єму напівпровідника. Щоб оцінити швидкості ударної генерації окремо для електронів та дірок, вкажіть **eAvalancheGeneration** та **hAvalancheGeneration**, оскільки **AvalancheGeneration = eAvalancheGeneration + hAvalancheGeneration**. Одиниці вимірювання [1/(с*см^3)]. В файлі ***_des.tdr** ця фізична величина має таку саму назву.

В секції **CurrentPlot** можна задати фізичні величини, які будуть записуватись в файл ***_des.plt** на додачу до інформації про струми, напруги та заряди на електродах пристрою. Фізичні величини і ключові слова, що їх описують, такі ж самі, як і для секції **Plot**. Таким чином, можна переглянути, наприклад, залежність потенціалу та напруженості електричного поля в певній точці структури в залежності від напруги на електродах. Координати точок всередині структури, для яких будуть зберігатися значення обраної фізичної величини, позначають всередині круглих скобок, в системі координат симуляції. Якщо точка з заданими координатами не знаходиться у вузлі сітки скінченних елементів, використовується інтепрполяція значень фізичної величини у сусідніх вузлах сітки.

Вигляд секції:

```
CurrentPlot {
   Potential ((0.1 -0.2), (0.1 -1.5))
   ElectricField ((0.1 -0.2), (0.1 -1.5))
}
```

В секції Solve визначають послідовність задач, які буде виконувати TCAD для моделювання електрофізичних характеристик. В нашому прикладі, на початку моделювання,

напруги на електродах дорівнюють нулю. Припустимо, в ході моделювання необхідно підняти напруги на аноді до 0.8 вольт. TCAD вирішує цю задачу поступовим збільшенням напруг на необхідних електродах від нуля до потрібного значення. Крок збільшення напруг TCAD визначає автоматично з урахуванням забезпечення умов, необхідних для чисельного вирішення диф. рівнянь. Якщо алгоритм вирішення диф. рівняння не сходиться до рішення, крок збільшення напруг змінюється і процес розрахунку починається заново. Одержані на кожному кроці дані записуть в файл ***_des.plt.** Електрофізичні характеристики, задані у секції Plot, у вузлах сітки скінченних елементів, одержані для кінцевої напруги на електродах, зберігаються в файл ***_des.tdr**.

Вигляд секції:

```
Solve {
*- Creating initial guess:
   Poisson
   Coupled { Poisson Electron }
*- Ramp to p_side
   Quasistationary(
      InitialStep = 0.010 MaxStep = 0.050 MinStep=0.005
      Goal { Name="p_side" Voltage=1.2 }
   ){ Coupled { Poisson Electron } }
}
```

Ключове слово **Poisson** використовують для вирішення рівняння Пуассона при початкових напругах на електродах.

Конструкція **Coupled { Poisson Electron }** використовується з метою одержання розв'язку рівняння неперервності для електронів, з урахуванням розв'язку рівняння Пуассона, одержаного раніше.

Конструкція **Quasistationary** використовується для поступового збільшення напруг на електродах пристрою від нуля до заданого значення і запису струмів через електроди для всіх значень проміжних напруг в файл ***_des.plt**. **InitialStep**, **MaxStep** та **MinStep** визначають границі кроку збільшення напруги, як добуток відповідного коефіцієнта на діапазон напруг. Наприклад, якщо MaxStep = 0.050, а діапазон напруг 2 вольта, це означає, що максимальне значення збільшення напруги на електродах буде дорівнювати 0.050*2=0.1 вольт. Реальний крок збільшення напруги TCAD визначає автоматично у встановлених межах.

Конструкція **Goal** дозволяє задати ім'я електроду та значення напруги, якого необхідно досягти на цьому електроді після закінчення симуляції. В нашому прикладі Goal { Name="p_side" Voltage=1.2 }){ Coupled { Poisson Electron } } означає, що напруга на електроді з іменем "p_side" в процесі моделювання буде зростати від нуля до 1.2 вольт з кроком, який TCAD обере автоматично в межах значень MinStep та MaxStep, визначених раніше. Значення всіх проміжних струмів та напруг будуть збережені в файл ***_des.plt**. Для одержання струмів та напруг будуть використані розв'язки рівнянь неперервності та Пуассона.

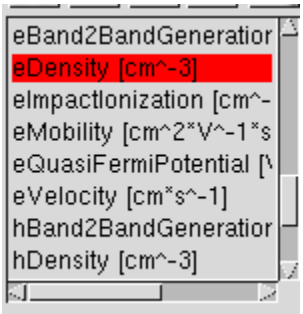
7. Моделювання електро-фізичних характеристик в sdevice та аналіз результатів

Для запуску процесу моделювання електрофізичних характеристик напівпровідникового пристрою, необхідно відкрити консоль з каталогу, в якому містяться файли проекту і виконати команду **sdevice diode_des.cmd**, де **diode_des.cmd** — командний файл симулятора sdevice, створення якого описано у попередньому розділі.

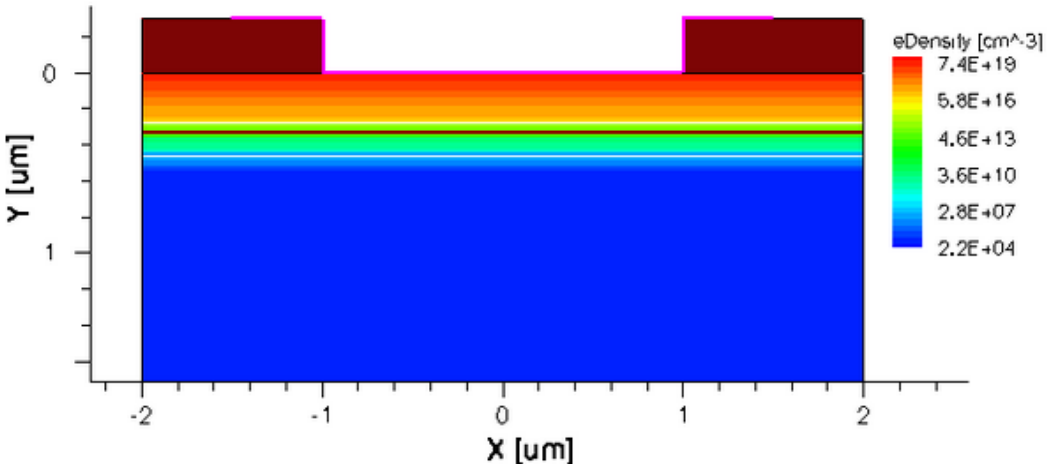
Спершу дослідимо електрофізичні характеристики p-n переходу у рівноважному стані (без прикладання до нього зовнішньої напруги). Для цього необхідно модифікувати файл **diode_des.cmd**, змінивши поле Goal секції Solve наступним чином: `Goal { Name="p_side" Voltage=0 }`. Далі запускаємо симулятор sdevice, як це описано вище. Після завершення симуляції буде створено два файли. Перший файл має розширення .tdr і, в нашому випадку, називається "**@diode@_des.tdr**". Він містить дані про просторовий розподіл скалярних та векторних фізичних величин, визначених в секції Plot файлу diode_des.cmd. Другий файл має розширення *.plt і, в нашому випадку, називається "**@diode@_des.plt**". Цей файл містить струми, напруги і заряди на електродах пристрою та використовується для побудови вольт-

амперних характеристик. Також в цей файл входять значення фізичних величин, визначених в секції Current Plot командного файлу.

Відкриємо файл **@diode@_des.tdr** в Tecplot. На панелі зліва з'явиться список фізичних величин, визначених в секції Plot.

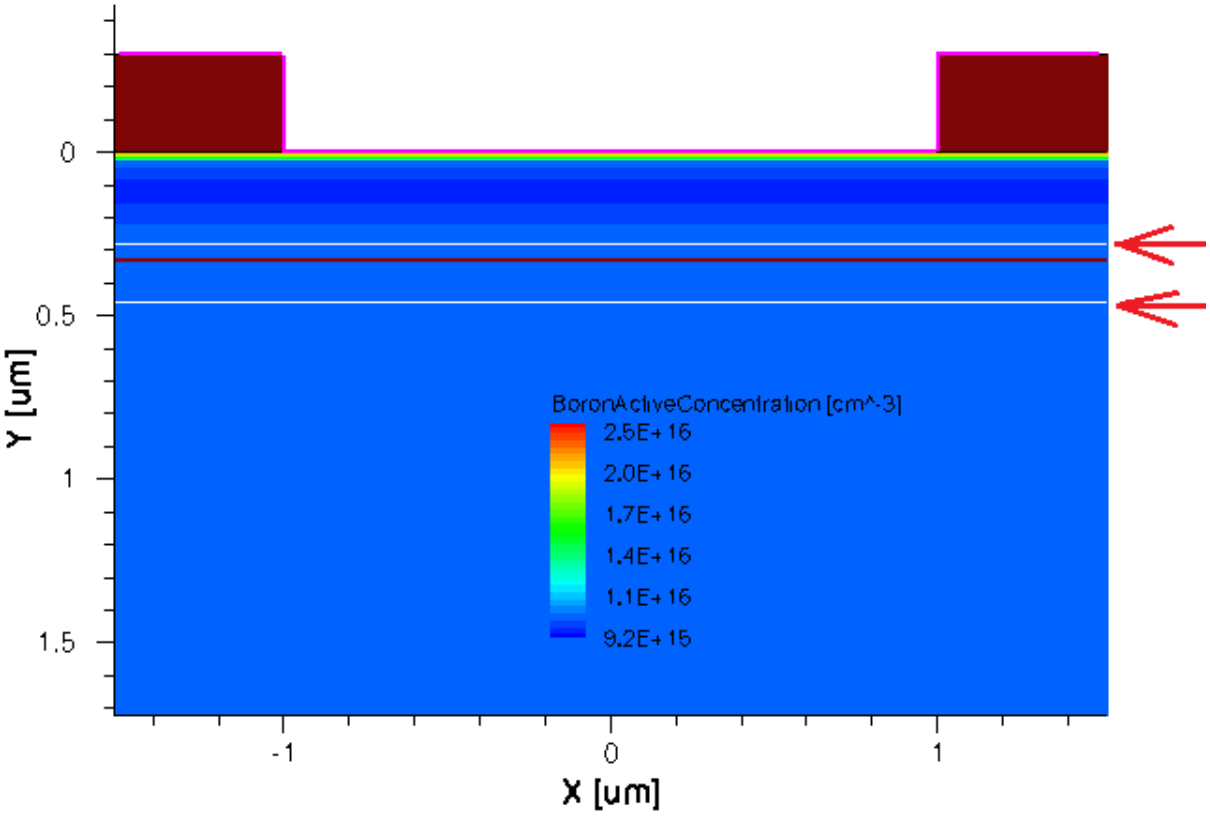


Після вибору фізичної величини, просторовий розподіл її значень буде відображено за допомогою кольорового кодування на рисунку поряд (різним значенням фізичної величини відповідають різні кольори). Оберіть параметр eDensity, що характеризує концентрацію вільних електронів у просторі. Одержите наступний результат:



Границя між напівпровідниками різного типу провідності показана коричневою лінією. Відображення цієї границі можна ввімкнути, або вимкнути за допомогою кнопки . Як бачите, в p-n переході, до якого не прикладена зовнішня напруга, вільні електрони зосереджені виключно в області n-типу, а в області p-типу концентрація вільних електронів різко падає і має порядок 10^{10} (концентрація власних носіїв). Іншими словами - струм відсутній. За допомогою кнопки можете переглянути концентрацію вільних електронів в будь-якій точці діоду.

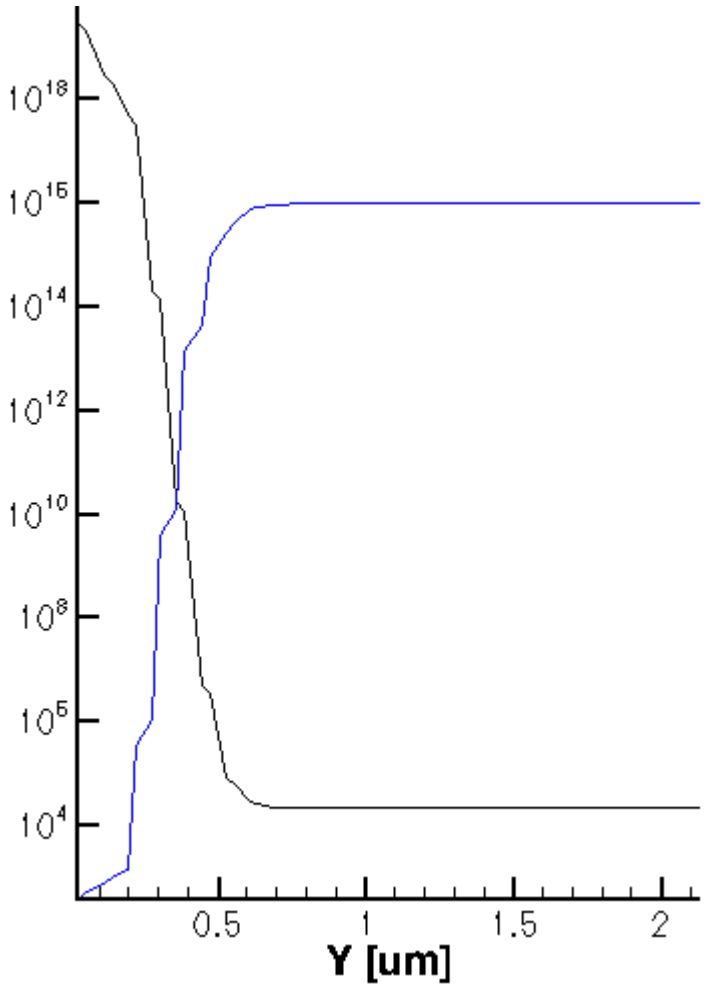
Зверніть увагу на кнопку , яка дозволяє ввімкнути/вимкнути відображення області незрівноваженого об’ємного (просторового) зарядку в областях p-n переходу. На рисунку нижче показаний просторовий розподіл атомів Бору. Лінії границі просторового заряду p-n переходу відмічені червоними стрілками. За допомогою кнопки визначте координати границь областей об’ємного заряду та ширину p-n переходу в n-області та p-області.



Як бачите, ширина переходу в p- області більша, ніж в n- області. Це цілком узгоджується з теорією, оскільки в нашому випадку концентрація донорних домішок більша за концентрацію акцепторних домішок і p-n перехід більше заглиблюється в слабше леговану p-область.

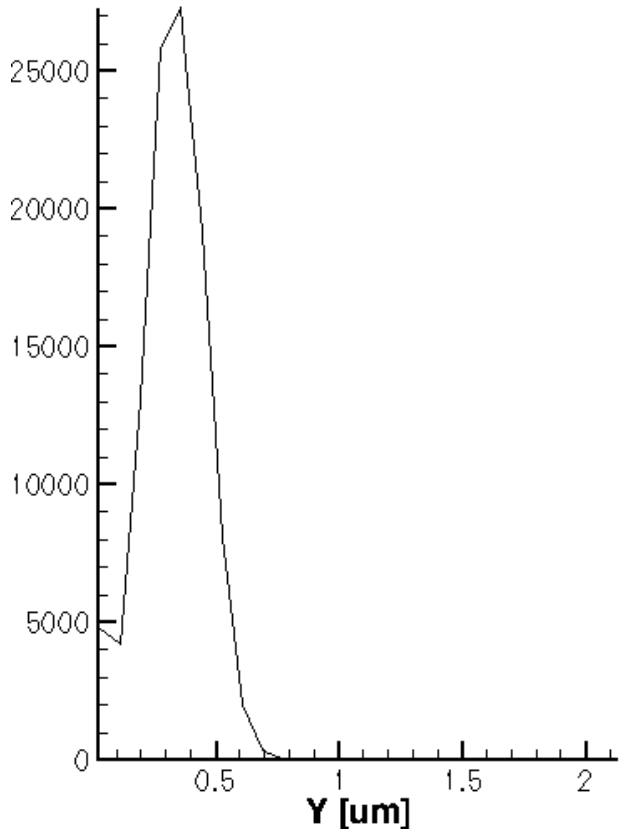
Наступним кроком побудуйте розріз по осі X. На графіку одномірного розрізу (по осі X, або Y, або Z) можна відображати кілька фізичних величин. Для цього їх необхідно обрати зі списку з використанням клавіші Ctrl.

На створеному розрізі побудуйте графік залежності концентрацій вільних електронів (eDensity) та дірок (hDensity) від глибини кристалу (вісь Y).

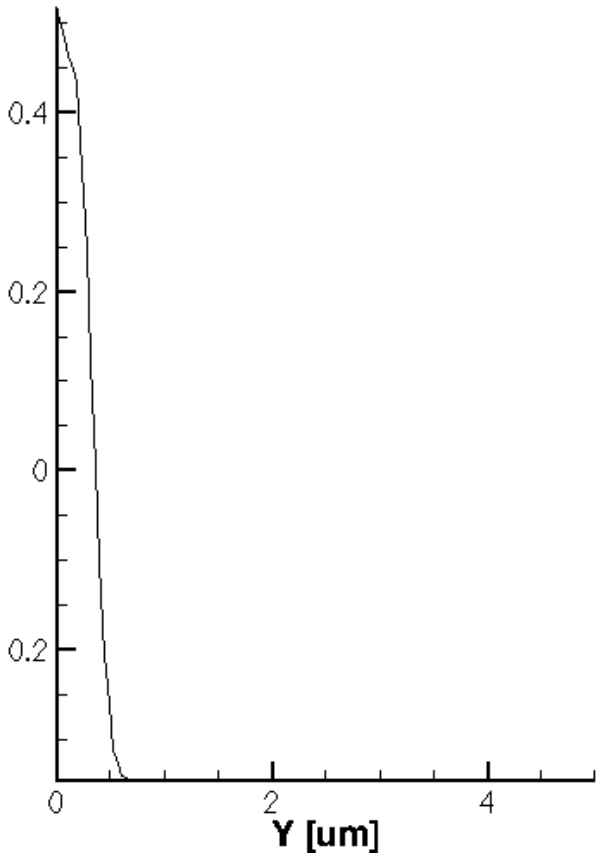


По графіку, з використанням кнопки , визначте координати, в яких концентрації починають різко спадати. Порівняйте ці координати з границями областей нескомпенсованого об’ємного заряду. Переконайтесь, що в областях нескомпенсованого об’ємного заряду концентрації вільних носіїв заряду мінімальні.

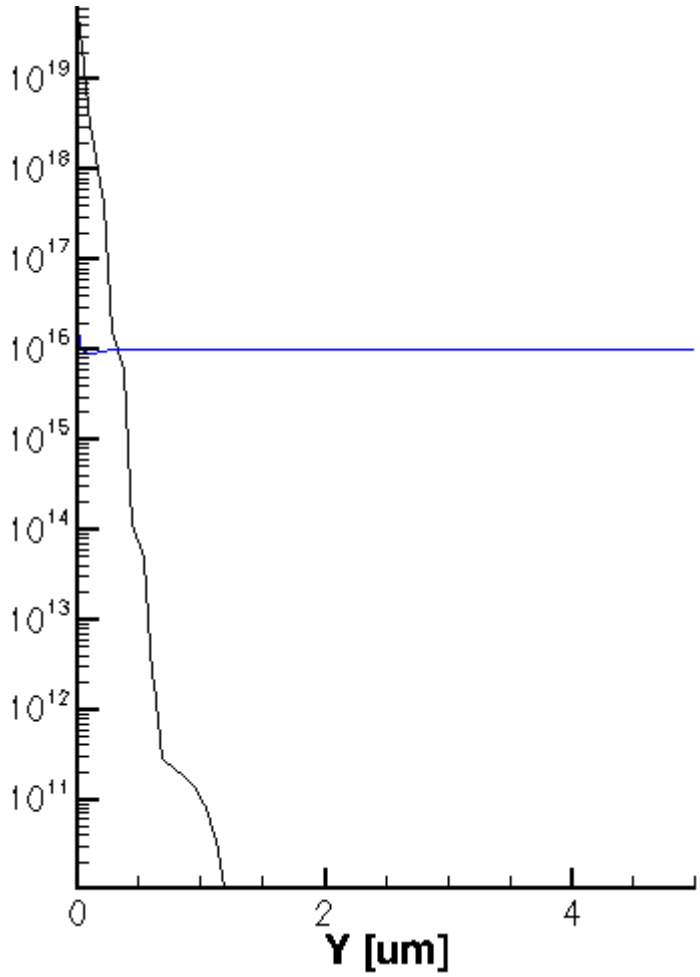
Побудуйте графік розподілу електричного поля в діоді (параметр Abs(ElectricField)). Зверніть увагу, що електричне поле зосереджене в області p-n переходу.



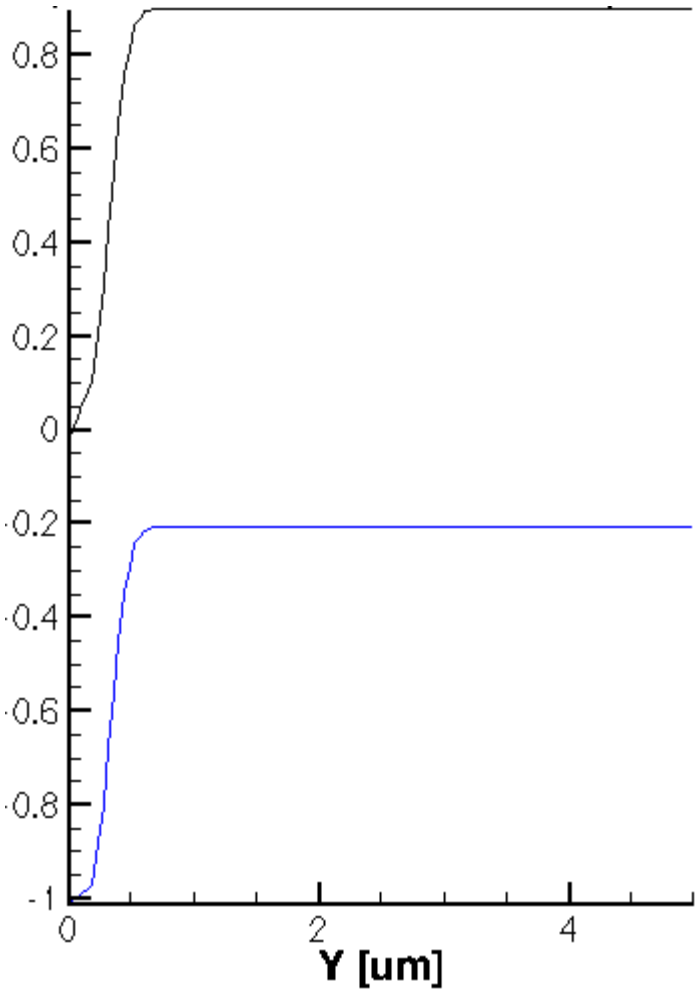
Побудуйте графік електростатичного потенціалу (параметр ElectrostaticPotential).



Побудуйте графік залежності концентрацій донорних та акцепторних домішок від глибини кремнієвої пластини (параметри DonorConcentration, та AcceptorConcentration). Переконайтесь, що лінія розділу областей напівпровідників p- та -n типів провідності проходить в точці рівності концентрацій донорів та акцепторів.

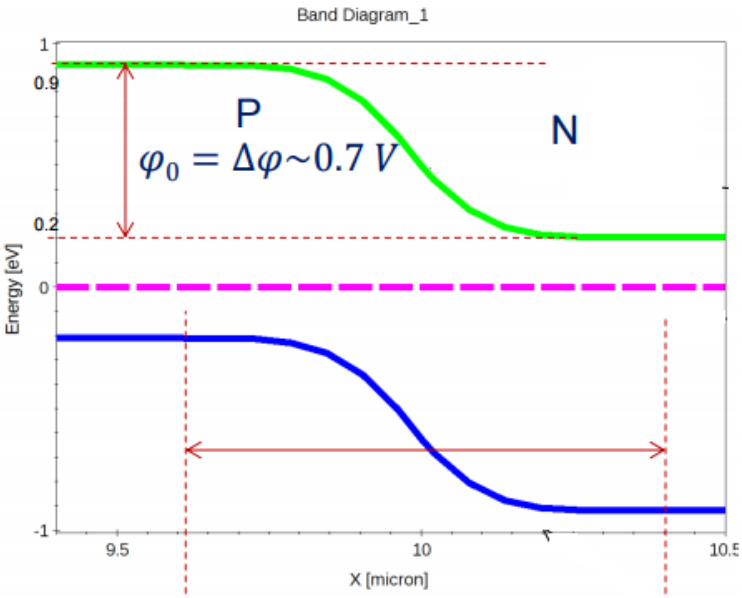


Побудуйте енергетичні діаграми p-n переходу (параметри ConductionBandEnergy та ValenceBandEnergy). Переконайтесь, що ширина забороненої зони складає 1.12 еВ.

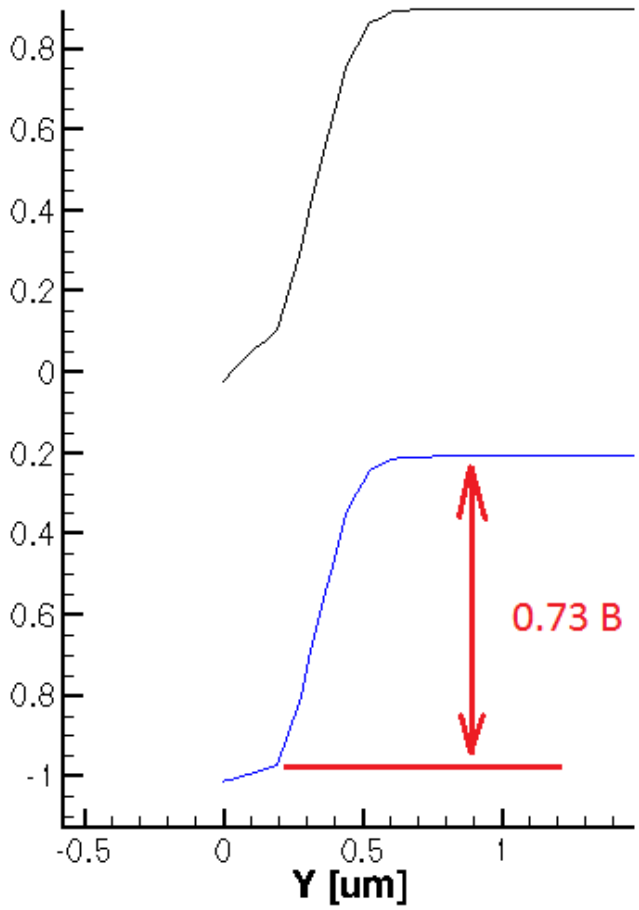


З цього графіку можна визначити висоту потенціального бар'єру p-n переходу у рівноважному стані. Однак ситуацію ускладнюють дві обставини. По-перше, p-n перехід розміщений близько від поверхні кремнієвої пластини, тому енергетичних діаграм в n-області на цьому рисунку майже не видно. По-друге, концентрація домішок в n-області розподілена нерівномірно, що створює додаткове електричне поле і викривляє енергетичні рівні.

Якби ми моделювали ступінчатий p-n перехід, з однаковим розміром p- та n- областей, його енергетична діаграма виглядала б приблизно так, як це показано на рисунку нижче. В такому випадку висоту потенціального бар'єру визначити набагато простіше.

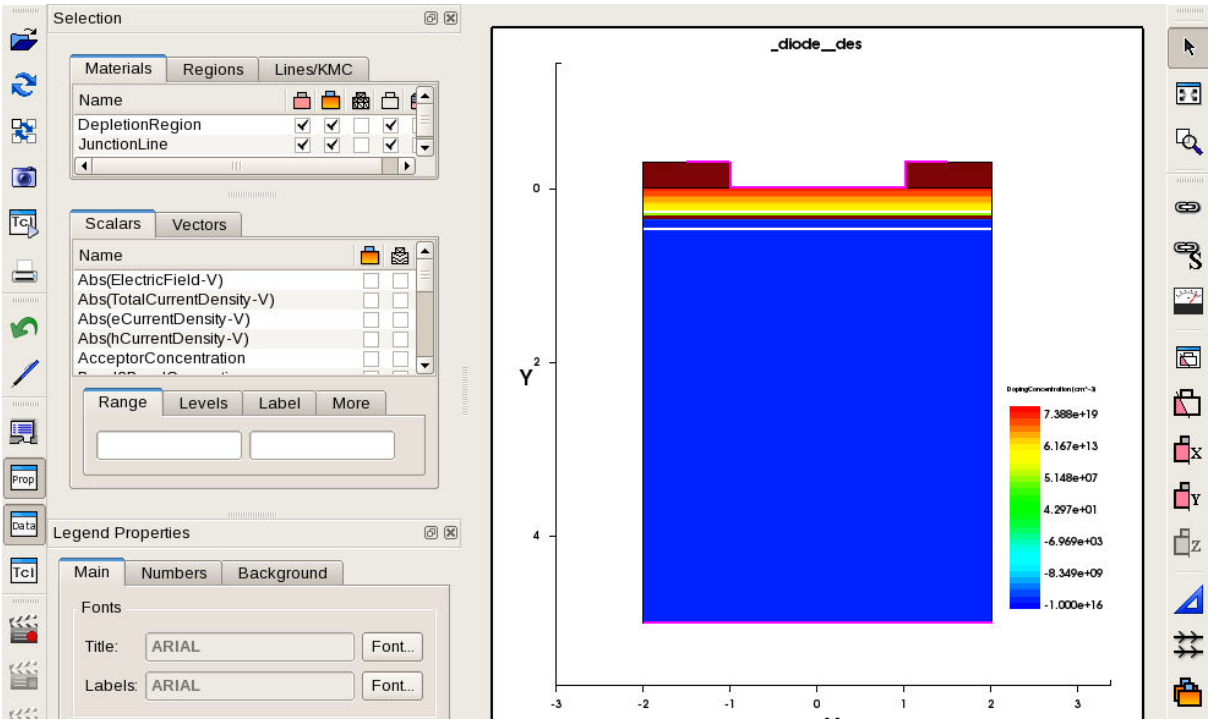


Спробуємо визначити висоту потенціального бар'єру для нашого випадку.Для цього наблизимо область енергетичної діагарами біля p-n переходу. З такого ракурсу видно, що висота потенціального бар'єру складає 0.73 В.

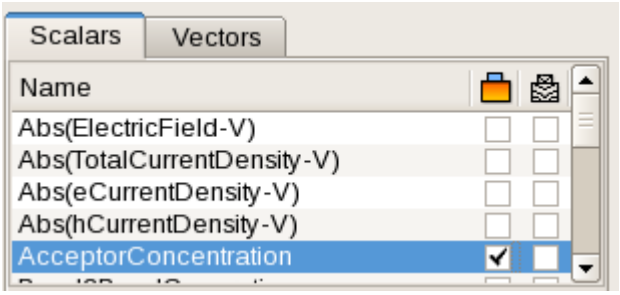


Виконайте моделювання електрофізичних характеристик p-n переходу для прямого та зворотного зміщення. Для моделювання зворотного зміщення модифікуйте поле Goal секції Solve наступним чином: `Goal { Name="p_side" Voltage=-3 }.` Для моделювання прямого зміщення поле Goal повинно виглядати так: `Goal { Name="p_side" Voltage=0.8 }.` Визначте ширину p-n переходу для прямого та зворотного зміщення. Для обох варіантів зміщення побудуйте залежності концентрацій вільних носіїв заряду, донорних і акцепторних домішок, електростатичного потенціалу та електричного поля, енергетичні діаграми p-n переходу. Визначте висоту потенціального бар'єру.

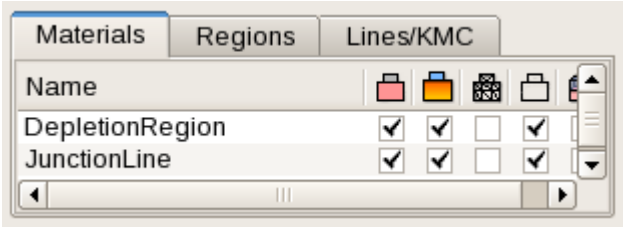
Досі ми переглядали результати моделювання з *.tdr файлів в програмі **Tecplot**. Однак з цією метою можна використовувати більш сучасну програму **Svisual** з пакету TCAD. Для запуску цієї програми напишіть в консолі **svisual** і натисніть Enter. Відкриється головне вікно програми. Щоб відкрити *.tdr файл на перегляд натисніть кнопку Open і оберіть потрібний файл.



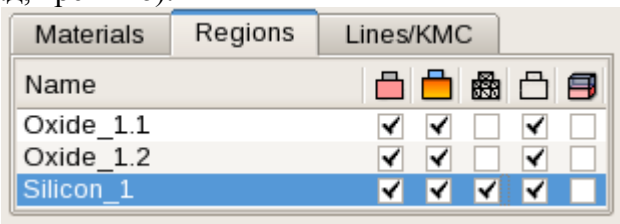
Фізичну величину для візуалізації обирають ставлячи галочку у списку в лівій стороні головного вікна:



Ввімкнути/вимкнути відображення лінії з’єднання напівпровідників різного типу провідності та області нескомпенсованого просторового заряду можна поставивши галочку в наступному списку:



Сітка скінченних елементів вмикається встановленням галочки на вкладці Regions для заданого регіону (наприклад, кремнію):



Вмикати/вимикати відображення певних інформаційних панелей головного вікна програми можна за допомогою кнопок , .

Видалити певний рисунок можна виділивши його та натиснувши Ctrl+D.

Для побудови розрізів по осям X, Y, Z використовуйте відповідні кнопки: , , . Щоб додати функціональну залежність на розріз, оберіть графік цього розрізу, клацнувши на нього. Потім оберіть фізичну величину, яку хочете додати на графік, зі списку зліва (наприклад, eDensity). Потім оберіть вісь, на яку хочете відобразити зміну цієї фізичної величини, натиснувши кнопку **To Left Y-Axis** або **To Right Y-Axis**. Щоб видалити функціональну залежність з графіку, зайдіть на вкладку Curves, оберіть необхідну залежність на натисніть Delete.

Data | Curves

Label	Name	Axis
eDensity(C1(_diode__des))	Curve_1	Y
hDensity(C1(_diode__des))	Curve_3	Y2

Одержаний графік (рисунок) можна зберегти в файл за допомогою кнопки . Для перегляду значень фізичної величини в будь-якій точці напівпровідникової структури можна скористатися кнопкою . Результат буде виведено на панель в лівому нижньому куті головного вікна:

Var Values | Cell Info | Face Neighbor

Zone Silicon_1(Silicon)

Field	Magnitude
Abs(ElectricField-V)	0.0166795
Abs(TotalCurrentDensity-V)	1.33033e-11
Abs(eCurrentDensity-V)	3.41314e-24
Abs(hCurrentDensity-V)	1.33033e-11
AcceptorConcentration	1.00005e+16
Band2BandGeneration	0
BandGap	1.10821
BandgapNarrowing	0.000955172
BoronActiveConcentration	1.00005e+16
ConductionBandEnergy	0.899389
DonorConcentration	1.01256e+10
DopingConcentration	-1.00005e+16
EffectiveBandGap	1.10725
ElectricField-X	-8.64466e-08
ElectricField-Y	-0.0166795
ElectronAffinity	4.07322
ElectrostaticPotential	-0.34683

☐ Show Only Active Field

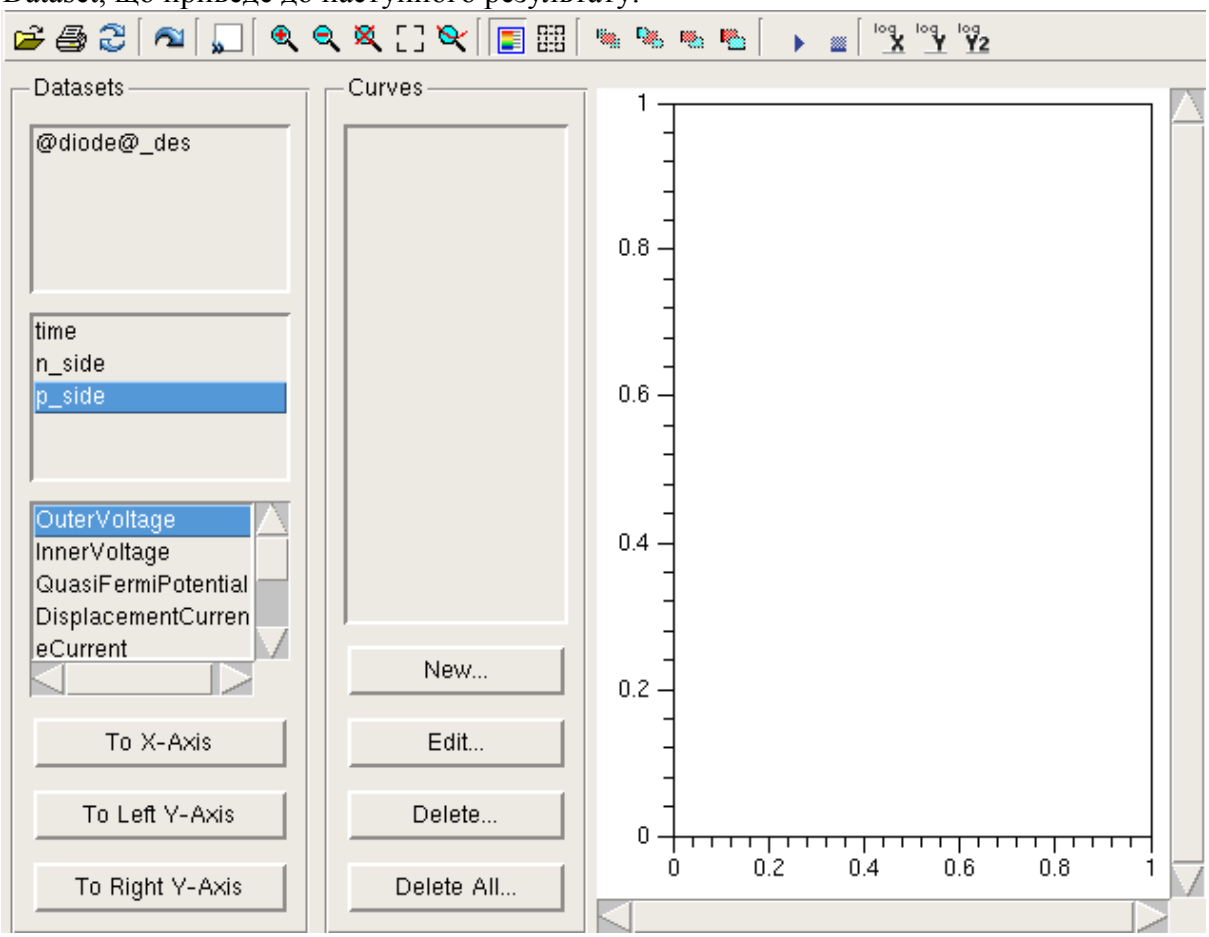
Якщо виділити графік розрізу, стане активною кнопка , після натиснення якої будуть побудовані енергетичні діаграми p-n переходу.

8. Побудова вольт-амперних характеристик в програмі Inspect

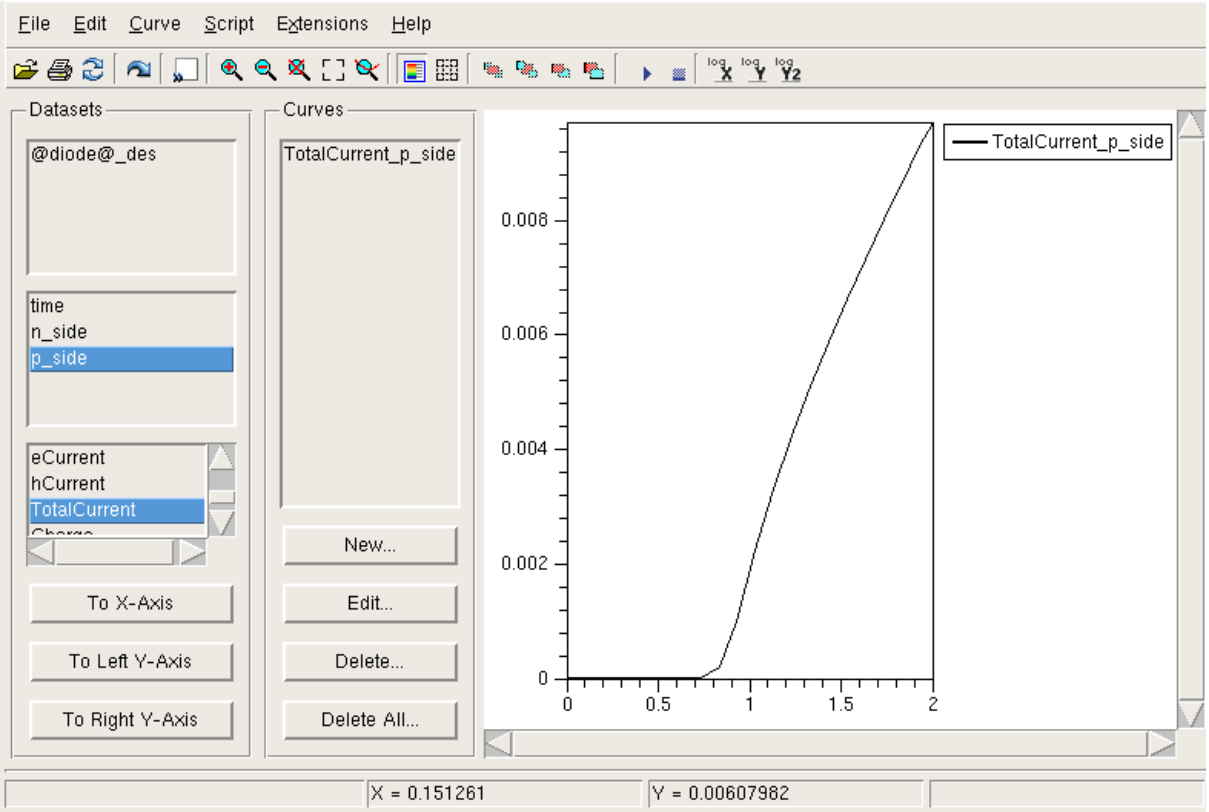
В цьому розділі побудуємо вольт-амперну характеристику діода при прямому зміщенні. Для цього модифікуйте поле Goal секції Solve файлу **diode_des.cmd** наступним чином: `Goal { Name="p_side" Voltage=2 }`. Це приведе до того, що на початку симуляції потенціал на контактах n_side, p_side буде нульовий, а протягом симуляції напруга на контакті p_side відносно контакту n_side зросте до +2 В, що відповідає прямому зміщенню p-n переходу. Після внесення змін до файлу **diode_des.cmd** виконайте симуляцію заново.

Дані для побудови вольт-амперних характеристик містяться в файлі *_des.plt, який є результатом роботи симулятора **sdevice**. Візуалізувати вміст файлу можна за допомогою програми Inspect. Для її запуску, виконайте з консолі команду **inspect**. Оберіть для

відкривання файл *_des.plt натиснувши Ctrl+L, або обравши пункт головного меню File -> Load Dataset, що приведе до наступного результату:

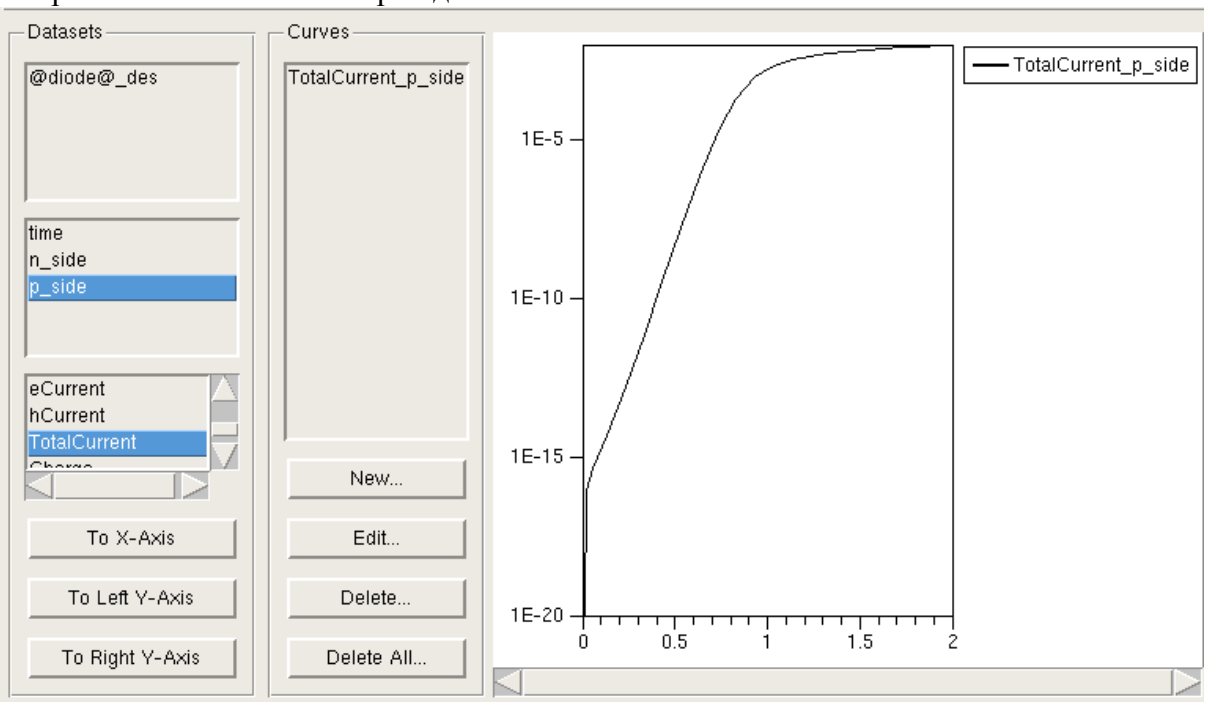


Як бачите, на панелі Datasets з'явилися набори даних, що характеризують фізичні величини на електродах n_side та p_side. Якщо обрати певний набір даних, наприклад p_side, на панелі нижче відобразяться фізичні величини, які пов'язані з ним. Оберіть фізичну величину OuterVoltage набору даних p_side (напруга на цьому електроді відносно нуля) та вкажіть на яку вісь графіку її відобразити натиснувши **To X-Axis** (відображаємо напругу на вісь X). Потім для цього ж набору даних (p_side) оберіть фізичну величину **TotalCurrent**, що характеризує повний струм, який протікає через контакт і натисніть кнопку **To Left Y-Axis**, відобразивши цей струм на вісь Y. Це приведе до побудови вольт-амперної характеристики;



Не дивуйтеся малим значенням струму. Це цілком нормально, враховуючи малу площу поперечного перерізу нашого діоду (4 мкм x 4 мкм = 16 мкм кв).

Переведемо відображення струму в логарифмічний масштаб, натиснувши . Форма вольт-амперної характеристики зміниться. Зверніть увагу, що доки пряма напруга на діоді менша за 0.7 В, логарифм струму через діод зростає лінійно. Це відповідає експоненційному зростанню прямого струму через діод під час його відкривання. Після того, як пряма напруга на діоді перевищує напругу повного відкривання (приблизно 0.7 В у нашому випадку), логарифм струму має характер логарифмічної залежності. Це означає, що струм зростає лінійно зі збільшенням прямої напруги. В цьому немає нічого дивного, оскільки p-n перехід вже повністю відкрився, його опір мінімальний і струм через перехід обумовлений лише опорами p- та n- областей напівпровідника.



Самостійно побудуйте вольт-амперну характеристику p-n переходу при зворотному зміщенні -3 В.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ

1. Поясніть, як відрізняються характеристики p-n переходу при прямому і зворотному зміщенні?
2. Виведіть формулу опору діода постійному струмові;
3. Виведіть формулу диференційного опору діода (опору змінам малого сигналу);
4. Поясніть процеси, що відбуваються при формуванні p-n переходу;
5. Виведіть формулу ширини p-n переходу;
6. Виведіть формулу висоти потенціального бар'єру p-n переходу;
7. Поясніть залежність ширини p-n переходу від напруги зміщення та концентрації домішок;
8. Намалюйте графіки залежності концентрацій основних і неосновних рухливих носіїв заряду в p-n переході;
9. Іони домішок існують у всьому об'ємі напівпровіднику, чи лише в області p-n переходу?
10. Чому іони домішок в глибині напівпровідника не створюють електричне поле?
11. Виведіть формулу бар'єрної ємності;
12. Поясніть від яких чинників залежить бар'єрна ємність і яким чином;
13. Виведіть формулу дифузійної ємності;
14. Поясніть від яких чинників залежить дифузійна ємність і яким чином;
15. Поясніть як впливає внутрішнє електричне поле p-n переходу на основні і неосновні носії заряду?
16. Поясніть, що таке область просторового заряду і чому вона характеризується підвищеним питомим опором?
17. Поясніть, що чим обумовлене внутрішнє поле p-n переходу?
18. Поясніть, як ширина p-n переходу залежить від концентрації домішок і прикладеного зовнішнього напруги?
19. Намалюйте енергетичні діаграми напівпровідників p і n типів провідності.
20. Намалюйте енергетичну діаграму p-n переходу. Поясніть чому викривляються енергетичні лінії. Як це пов'язано зі зміною концентрації рухливих носіїв заряду?
21. Позначте на енергетичній діаграмі потенційний бар'єр і ширину p-n переходу.
22. Розв'яжіть рівняння Пуассона для p- області p-n переходу. Знайдіть розподіл потенціалу в p- області p-n переходу;
23. Розв'яжіть рівняння Пуассона для n- області p-n переходу. Знайдіть розподіл електричного поля в n- області p-n переходу;
24. Для p- області виведіть формулу, що визначає концентрацію неосновних носіїв на границі p-n переходу в залежності від висоти потенційного бар'єру;
25. Для p- області виведіть формулу, що визначає надмірну концентрацію неосновних носіїв на границі p-n переходу в залежності від висоти потенційного бар'єру;
26. Виведіть формулу вольт-амперної характеристики p-n переходу.
27. Поясніть, що таке зворотний струм p-n переходу і від яких параметрів він залежить.
28. Напишіть формулу зворотного струму та поясніть величини, які до неї входять.
29. Яким чином зворотний струм залежить від температури і ступеня освітленості p-n переходу?
30. Намалюйте схему параметричного стабілізатора на стабілітроні та поясніть принцип її роботи;
31. Поясніть механізм виникнення і властивості тунельного пробою;
32. Поясніть механізм виникнення і властивості лавинного пробою;
33. Поясніть механізм виникнення і властивості теплового пробою;
34. На прохання викладача виконайте один, або кілька етапів моделювання електрофізичних характеристик в TCAD. Це необхідно щоб пересвідчитись, що ви самостійно виконали практичну частину роботи.

ДЖЕРЕЛА ДЛЯ ПІДГОТОВКИ

1. *Борисов О.В.* Основи твердотільної електроніки [Текст] : посібник / О. В. Борисов. - К. : Освіта України, 2011. - 462 с. https://goo.gl/Y0phZx
2. Sentaurus Structure Editor User Guide https://drive.google.com/file/d/0B9fI2BqoGDwTUmhfLUcwRjUtanc/view?usp=sharing
3. Sentaurus Device User Guide https://drive.google.com/file/d/0B9fI2BqoGDwTdDlPcS1pdUN6eXc/view?usp=sharing
4. Sentaurus Visual User Guide https://drive.google.com/file/d/0B9fI2BqoGDwTWkdrVDdTaTRKNU0/view?usp=sharing
5. Inspect User Guide https://drive.google.com/file/d/0B9fI2BqoGDwTR1MycDgycm8wSkU/view?usp=sharing
6. Sentaurus Process User Guide https://drive.google.com/file/d/0B9fI2BqoGDwTb2Q4dUs5YWJZWEk/view?usp=sharing
7. Ligament User Guide https://drive.google.com/file/d/0B9fI2BqoGDwTRXRXd050cjJLSWM/view?usp=sharing
8. Tecplot SV User Guide https://drive.google.com/file/d/0B9fI2BqoGDwTdVp3el9fRmtBd0k/view?usp=sharing
9. Synopsys Sentaurus TCAD tutorials http://nadin.miem.edu.ru/Sentaurus_Training_2/Sentaurus_Training/main_menu.html
10. Метод конечных элементов https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D0%BA%D0%BE%D0%BD%D0%B5%D1%87%D0%BD%D1%8B%D1%85_%D1%8D%D0%BB%D0%B5%D0%BC%D0%B5%D0%BD%D1%82%D0%BE%D0%B2

Министерство образования и науки Российской Федерации
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

621.38
М744

№ 3880

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТРАНЗИСТОРОВ В *TCAD SENTAURUS*

Методическое руководство к лабораторному практикуму
для студентов IV курса РЭФ дневного отделения

НОВОСИБИРСК
2010

УДК 621.382.3-022.532(076.5)
М744

Курс «Математическое моделирование и проектирование наносистем» читается в соответствии с учебным планом по направлению 210600 – «Нанотехнология» в 8 семестре. Методическое руководство содержит описания четырех лабораторных работ по курсу. Изложенные в руководстве материалы будут полезны студентам и аспирантам всех форм обучения.

Составители:

С.В. Калинин, А.С. Черкаев, В.Е. Зырянов, Е.А. Макаров

Рецензент канд. физ.-мат. наук, доцент *Б.К. Богомолов*

Работа выполнена на кафедре полупроводниковых приборов и микроэлектроники

© Новосибирский государственный технический университет, 2010

ОГЛАВЛЕНИЕ

Основные сокращения и обозначения.....4

Введение 5

Лабораторная работа 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НАНОПЕРЕХОДОВ НА БАЗЕ ОСНОВНЫХ ОБОЛОЧЕК И ПОДСИСТЕМ *TCAD SENTAURS*.....7

Лабораторная работа 2. ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ МОП-НАНОТРАНЗИСТОРОВ НА НАПРЯЖЕННОМ КРЕМНИИ.....28

Лабораторная работа 3. СКВОЗНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРЕМНИЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР В *TCAD SENTAURUS*.....56

Лабораторная работа 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И ХАРАКТЕРИСТИК *HEMT*-СТРУКТУР В *TCAD SENTAURUS*.....86

Заключение.....100

Литература.....102

Основные сокращения и обозначения

PC – (*англ.*) персональный компьютер
TCAD – (*англ.*) система приборно-технологического моделирования
САПР – система автоматического проектирования
АРМ – автоматизированное рабочее место
ОС – операционная система
ИМС – интегральная микросхема
ITRS – (*англ.*) международная технологическая дорожная карта для полупроводников
ВАХ – вольт-амперная характеристика
ПТ – полевой транзистор
МОПТ – ПТ с МОП структурой затвора или ПТ с изолированным затвором
МЭМС – микроэлектромеханическая система
HEMT – (*англ.*) транзистор с высокой подвижностью электронов (или транзистор с гетероселективным легированием)
КЭФ – маркировка кремния: Кремний Электронный, легированный Фосфором
КДБ – маркировка кремния: Кремний Дырочный, легированный Бором
ИП – имплантационный пучок;
ГПа – гигапаскаль (1 ГПа = $9{,}87 \cdot 10^3$ атм)
ФСУ – фундаментальная система уравнений
DD – (*англ.*) диффузионно-дрейфовая модель
HD – (*англ.*) гидродинамическая модель
ОПЗ – область пространственного заряда
$N_{A(D)}$ – концентрация легирующей акцепторной (A) или донорной (D) примесей
R_S – поверхностное сопротивления слоя
X_j – глубина залегания p–n-перехода
σ_{XX}, σ_{YY} – компоненты тензора напряжений, направленные вдоль осей X и Y
σ_{XY} – сдвиговая (вращательная) компонента тензора напряжений

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерный лабораторный практикум по курсу «Математическое моделирование и проектирование наносистем» предназначен для студентов 4 курса РЭФ, обучающихся по направлению 210600 – Нанотехнология. Структурно семестровый практикум состоит из четырех лабораторных работ, каждая из которых выполняется студентами за 4 академических часа. При этом в качестве инструментального средства используется лицензионная система приборно-технологического моделирования *TCAD Sentaurus* [1, 3, 13–16], которая разработана мировым лидером в данном классе САПР – компанией SYNOPSYS (США).

Современные наносистемы в полупроводниковой электронике представляют собой, прежде всего, ИМС, содержащие в себе примерно до 1 миллиарда кремниевых транзисторов, все из которых находятся в рабочем состоянии [3, 17]. Стремительно возрастающая сложность таких схем принуждает их разработчиков на всех этапах проектирования и изготовления использовать мощные компьютеры. В настоящее время общепризнанной является та точка зрения, согласно которой успешная разработка как цифровой, так и аналоговой ИМС невозможна без точного компьютерного моделирования схемы, которое в свою очередь зависит от точного математического моделирования работы транзисторов и технологии их изготовления. Возможность нахождения реальных параметров и характеристик транзисторов задолго до изготовления кремниевого чипа стала главной причиной широкого использования систем *TCAD*-моделирования в полупроводниковой индустрии. Согласно оценкам экспертов из ITRS [17], регулярно публикуемым в Internet, развитие полупроводниковых нанотехнологий в 21 веке, направленных на создание новой элементной базы электроники, возможно только на основе сочетания сложнейших средств наноизмерений (нанодиагностики) с разработкой и использованием *TCAD*-систем новых поколений.

Суть приборно-технологического моделирования различных полупроводниковых структур микро- и наноэлектроники (в том числе нанотранзисторов, т. е. транзисторов, у которых один из характерных размеров лежит в нанометровом диапазоне) заключается в обеспечении непрерывной взаимосвязи между технологическими параметрами и электрофизическими, тепловыми, оптическими и другими характеристиками прибора. Циклический расчет технологии изготовления и физических процессов переноса электронов и дырок в приборе позволяет осуществить оптимизацию технологического маршрута и конструкции моделируемой структуры. При этом используемые модели представляют собой в основном иерархически выстроенные многомерные краевые задачи, отражающие весь накопленный к моменту разработки модели научно-технический потенциал моделирования. Решение этих задач можно получить только численными методами, для чего в *TCAD Sentaurus* широко используется метод конечных элементов. Здесь уместно отметить, что разработка первых *TCAD*-систем началась в конце 70-х годов прошлого века [7–10, 21–27], а к настоящему моменту уже сменилось несколько их поколений.

Из большого числа различных транзисторных наноструктур [1–6, 15–17] для лабораторных работ были выбраны две базовые, отражающие два магистральных пути развития современной электроники. Первый – это МОПТ на напряженном объемном кремнии [2–5, 17], отражающий направление кремниевой наноэлектроники, которое успешно развивается передовыми полупроводниковыми компаниями, такими как Intel. Второй – это *HEMT* на основе соединений твердых растворов A^3B^5, представляющий направление гетероэлектроники [4–6, 18, 19]. Каждая структура исследуется в двух лабораторных работах, в одной из которых анализируются особенности моделирования технологии изготовления (или конструирования) собственно транзистора, а в другой производятся анализ кинетических процессов переноса носителей в канале и расчет ВАХ прибора.

Данное руководство, несмотря на его вводный характер, может быть использовано при организации курсового и дипломного проектирования по направлениям 210100 – «Электроника и микроэлектроника» и 210108 – «Микросистемная техника», а также при выполнении соответствующих бакалаврских, инженерных и магистерских дипломных работ. Кроме того, авторы надеются, что оно будет интересно всем аспирантам и студентам, работающим в области современной полупроводниковой электроники.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 1

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НАНОПЕРЕХОДОВ НА БАЗЕ ОСНОВНЫХ ОБОЛОЧЕК И ПОДСИСТЕМ TCAD SENTAURUS

1.1. ЦЕЛЬ И СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Цель работы – освоение первичных методик одномерных и двумерных расчетов, анализа и графического представления результатов в *TCAD Sentaurus* на основе оболочек: *Sentaurus Workbench*, *Ligament Flow Editor*, *Inspect*, *Tecplot_SV* и приложения технологического моделирования *Sentaurus Process*.

Содержанием работы является исследование простейшего технологического маршрута изготовления диффузионных нанопереходов и анализ их основных параметров: глубины залегания, бокового ухода, слоевого сопротивления в зависимости от различных режимов технологического маршрута.

1.2. ПЕРВЫЕ ПОНЯТИЯ, НЕОБХОДИМЫЕ ДЛЯ РАБОТЫ В TCAD SENTAURUS

1.2.1. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ TCAD SENTAURUS

Система приборно-технологического моделирования *TCAD Sentaurus* предназначена для компьютерного моделирования технологических маршрутов изготовления различных полупроводниковых многомерных структур и расчета их электрофизических параметров и характеристик. Система обеспечивает проектирование и оптимизацию элементной базы при разработке широкого спектра современных полупроводниковых наносистем различного назначения – от нанотранзисторов для микропро-

цессоров, схем памяти, цифроаналоговых ИМС до МЭМС-сенсоров, приборов оптоэлектронной и высокочастотной техники.

В данном лабораторном практикуме используется версия *TCAD Sentaurus* Z-2007.03, которая работает под управлением операционной системы *Ubuntu* (версии 10.04). *TCAD*-система установлена на сервере, организующем вычислительную работу конечных пользователей с автоматизированных рабочих мест (АРМ). Подготовка всех необходимых для вычислительного процесса данных осуществляется на локальный *PC*.

Структурно *TCAD*-система *Sentaurus* состоит из базовых подсистем (рис. 1.1) для расчета технологии, структур, сеток и приборов, образованных соответствующими приложениями, различных вычислительных оболочек (*framework*) и специализированных утилит. Общее число этих программных продуктов, описанное в соответствующих руководствах пользователя, – более 30, средний объем руководств составляет от 500 до 1000 страниц текста на английском языке.

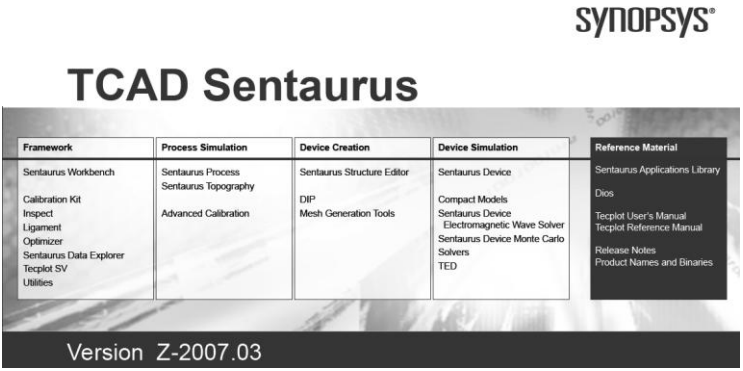


Рис. 1.1. Общая структура *TCAD Sentaurus*

Вычислительные оболочки обеспечивают интеграцию этих *TCAD*-программных средств, внутренний интерфейс между ними, а также интерфейс с конечным пользователем, в результате чего создается единая вычислительная среда, в которой и протекает вычислительный эксперимент по моделированию.

Для первоначальной работы пользователь должен иметь представление о следующих приложениях и программных оболочках.

Sentaurus Workbench (*SWB*) – графическая интерактивная управляющая оболочка, обеспечивающая дружественный интерфейс с пользователем *TCAD*. *SWB* предназначена для организации информацион-

ного процесса внутри рабочих каталогов, проектов и сценариев, взаимодействия всех программных продуктов, объединенных в единый вычислительный поток, а также для параметризации входных файлов, планирования вычислительного эксперимента и статистического анализа полученных результатов в рамках проводимого исследования.

Sentaurus Process (*SProcess*) – основное приложение, предназначенное для одно-, двух- и трехмерного моделирования технологических процессов для структур на основе кремния или различных сложных полупроводников. Прежде всего здесь обеспечивается моделирование маршрутов с циклически повторяющимися процессами имплантации, диффузии, окисления, силицидизации, травления и нанесения.

Наряду с *SProcess* в *Sentaurus* есть еще три дополнительных приложения из подсистемы технологического моделирования: *DIOS*, *SUPREM-IV* и *Taurus Process*.

Ligament Flow Editor – оболочка с высокоуровневым интерфейсом, предназначенным для формирования командного файла технологического маршрута в формате соответствующего приложения. Интерфейс максимально независим от используемых программ технологического моделирования и размерности формируемой структуры.

Sentaurus Structure Editor (*SSE*) – приложение для графического проектирования (конструирования) двумерных и трехмерных полупроводниковых структур, исключающее применение программ технологического моделирования. Формирование структуры включает в себя генерацию геометрической модели (по слоям структуры вместе с контактами), задание аппроксимационных профилей легирования и определение процесса построения вычислительной конечно-элементной сетки.

Sentaurus Device (*SDevice***)** – основное приложение, предназначенное для двумерного и трехмерного моделирования полупроводниковых приборов с учетом различных электрофизических приближений: диффузионно-дрейфового, гидродинамического, с учетом квантовых поправок, механических напряжений и т. д. Обеспечивает расчет, анализ и оптимизацию различного рода параметров и характеристик (электрофизических, тепловых, оптических и т. д.) для широкого ряда полупроводниковых структур: от кремниевых МДП-нанотразисторов и мощных биполярных транзисторов до гомо- и гетероструктур на сложных материалах типа A^3B^5, карбиде кремния и т. д.

Наряду с *SDevice* в подсистему электрофизического моделирования приборов *Sentaurus* входят следующие приложения: *SMOCA* и *SPARTA* – для моделирования приборов методом Монте-Карло; *SDevice Electromagnetic Wave* – для моделирования электромагнитных

процессов электродинамики; *Medici*, *Davinci*, *TaurusDevice* – предыдущие (до объединения с ISE *TCAD* в 2005 г.) версии приложений для моделирования приборов, разработанные компанией SYNOPSYS.

Mesh Generator – приложение, обеспечивающее генерацию высококачественной конечно-элементной сетки для одномерных, двумерных и трехмерных расчетов на основе следующих оболочек: *Mesh* и *Sentaurus Mesh* – упрощенного сеточного генератора для планарных структур и улучшенного для непланарных.

Дополнительно в системе *Sentaurus* имеются:

– *Noffset3D* – трехмерный генератор сеток с повышенной вычислительной устойчивостью, обеспечивающий «подстроение» сетки к поверхностным слоям с целью более точного расчета различных параметров, например, токов, текущих в контактах;

– *MGoals* – библиотека алгоритмов, обеспечивающая оптимальную генерацию сеток с целью уменьшения времени расчета посредством упрощения требований к их качеству. Автоматически встроена в *SProcess*.

Inspect – графическая оболочка, предназначенная для визуализации и анализа одномерных зависимостей (прежде всего одномерных профилей легирования и ВАХ), а также для нахождения различных параметров этих зависимостей путем использования макросов, написанных на внутреннем языке.

Tecplot_SV – графическая оболочка, предназначенная для визуализации двумерных и трехмерных результатов расчетов для всех моделирующих подсистем *Sentaurus*.

Measure – утилита, предназначенная для анализа текстовых файлов (**.log* и **.out*) по контекстному формату.

1.2.2. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ РАБОТЕ В TCAD SENTAURUS

- **Загрузка операционной системы и запуск приложений, оболочек и утилит**

Рабочая операционная система (ОС) *Linux*, используемая в практикуме – это *Ubuntu 10.04*. Она загружается автоматически после включения компьютера. В случае ручной загрузки системы в списке предлагаемых версий необходимо выбрать нужную строку.

При появлении запроса имени пользователя и пароля необходимо ввести следующие параметры – имя пользователя: *user*; пароль: *user*.

Затем для работы с *TCAD Sentaurus* следует активировать консоль и соединиться с сервером. Для этого запускаем *Терминал,* ярлык которого находится на рабочем столе, и с помощью клавиш «↑» и «↓» находим команду *connect_to_tcad2*. Далее следует ввести пароль, выданный преподавателем. **При вводе пароля на экране не отображается никаких символов, в том числе привычных звездочек *****.**

При работе с командной строкой необходимые приложения, оболочки и утилиты можно запускать следующими командами:

mc – *Midnight Commander* (оболочка для работы с файлами в ОС *Ubuntu*, аналог *Far Manager*, *Norton Commander*);

swb – *Sentaurus Workbench* (основная управляющая графическая оболочка, объединяющая программные средства *TCAD Sentaurus* в одну дружественную к пользователю среду);

ligedit – *Ligament Flow Editor* (многофункциональный редактор технологического маршрута);

sprocess – *Sentaurus Process* (приложение для многомерного моделирования технологического процесса);

sde – *Sentaurus Structure Editor* (2*D*- и 3*D*-редактор проектируемого устройства, а также 3*D*-эмулятор технологического процесса);

sdevice – *Sentaurus Device* (приложение позволяет моделировать электрические, тепловые и оптические характеристики полупроводниковых приборов);

tecplot_sv – *Tecplot SV* (универсальный графопостроитель с широкими возможностями визуализации 2*D*- и 3*D*-данных, полученных в результате моделирования или эксперимента);

inspect – *Inspect* (оболочка для отображения и анализа одномерных табличных данных, таких как профили легирования или электрические характеристики, ВАХ полупроводниковых приборов).

Перед выключением компьютера необходимо завершить работу всех приложений *Sentaurus TCAD,* запущенных ранее, и **корректно** закрыть все активные соединения с сервером с помощью команды *EXIT!*

- ***Работа с файлами***

Работа с файлами в ОС *Ubuntu* осуществляется стандартным образом – посредством оконного интерфейса, аналогично ОС *Windows*. Более подробно здесь следует рассмотреть метод копирования файлов на *TCAD*-сервер и обратно, поскольку все созданные в *TCAD Sentaurus* проекты сохраняются именно на сервере. Доступ к этим проектам возможен при реализации соединения с сервером в файловом менеджере.

Для этого необходимо открыть *Терминал* (ярлык на рабочем столе) и запустить *Midnight Commander* (*MC*).

Функциональные клавиши *MC* аналогичны клавишам *Far Manager*:

*F*1 – помощь;	*F*6 – перемещение;
*F*2 – меню пользователя;	*F*7 – создание папки;
*F*3 – просмотр;	*F*8 – удаление;
*F*4 – редактирование;	*F*9 – меню конфигурации *MC*;
*F*5 – копирование;	*F*10 – выход.

Соединение с сервером осуществляется следующим образом:

F9 (*клав.*) → *правая панель* (*или левая панель*) → *Shell-соединение* → *вводим адрес, либо находим его в списке ранее вводимых адресов: tcadX@217.71.134.61* (*где ‘X’ – номер рабочего места)* → *Enter* (*клав.*) → *вводим пароль:* ***** → *Enter* (*клав.*)

Путь к рабочей директории на сервере:

home / tcad_home / tcadX / DB / Lab_Students / (*Группа*) / (*Бригада*)…

На противоположной панели *MC* необходимо открыть директорию для копирования (*Tab* – переключение между панелями), например, указать флешку:

media / disc – адрес *flash*-устройства (доступ из корневого каталога, *“disc”* – метка *flash*-устройства).

Также допускается копирование файлов на рабочий стол:

home / user / Рабочий стол – адрес рабочего стола *Ubuntu*.

После завершения операций с файлами следует закрыть активное соединение с сервером. При этом предлагается использовать следующую терминологию: панель *MC*, в которой осуществлено соединение с сервером, называется *“Сетевой панелью”,* а противоположная панель *MC*, где соединение не реализовано, – *“Локальной”*. При закрытии активного соединения можно перейти на локальную панель и набрать команду *exit*, но при этом закроется сам *MC*. Другой способ заключается в том, чтобы в сетевой панели подняться до корневого каталога сервера и затем перейти еще на одну директорию выше.

Если при работе с сетевой панелью при нажатии клавиши *Enter* появляется красное окно с ошибкой: *“Невозможно выполнять команды на нелокальных файловых системах”*, – **необходимо очистить командную строку**.

Справочные материалы по *TCAD Sentaurus* хранятся на сервере в следующих директориях:

– *home / tcad_home / tcad / tcad / Z-2007.03/ Sentaurus_Training;*

– *home / tcad_home / tcad / tcad / Z-2007.03 / manuals/PDFManual*,
где *Sentaurus_Training* – курс обучения *Sentaurus TCAD* (*html*-формат), а *PDFManual* – документация на *Sentaurus TCAD* (*pdf*-формат).

- ***Работа с изображениями***

Работа с изображениями в *TCAD Sentaurus* сводится к визуализации результатов моделирования и их сохранению в виде законченного графика или рисунка. В качестве результатов моделирования могут выступать одномерные и двумерные распределения примеси в различных областях моделируемой структуры, а также вольт-амперные характеристики проектируемых приборов. Для сохранения какого-либо изображения прежде всего можно воспользоваться стандартной функцией захвата картинки с экрана монитора (клавиша *Print Screen*), при этом так называемый *"Screenshot"* сохраняется в *png*-формате, по умолчанию на рабочем столе.

При работе с программой *Inspect* экспорт изображений возможен только в очень неудобном *eps*-формате, поэтому сохранение графиков лучше осуществлять с помощью клавиши *Print Screen.* Кроме того, если графический файл данных имеет расширение *plx* или *plt,* то его можно построить, например в *ORIGIN-e* или в любом другом построителе графиков посредством прямого переноса данных через флешку.

При работе в программе *Tecplot_SV* для сохранения рисунков в форматах *bmp, eps, jpeg, png, tiff, …*можно воспользоваться встроенной функцией экспорта изображений: *File → Export → Image.*

1.2.3. МОДЕЛИРУЕМЫЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ МАРШРУТ

Лабораторная работа состоит из трех частей: ***A***, ***B*** и ***C***. В части ***A*** необходимо в оболочке *Ligament Flow Editor* подготовить 2*D* командный файл и затем выполнить его в *SWB,* проанализировав графически в *Inspect* и *Tecplot_SV*. В части ***B*** необходимо провести 1*D* расчет прямой задачи для готового проекта *Lab_1b*, состоящего из двух сценариев: *D_E* (доза_энергия) и *T_t* (температура_время), а в части ***C*** – решить обратную задачу о подборе параметров технологических процессов, обеспечивающих заданную глубину *p-n*-перехода по готовому проекту *Lab_1c*.

Технологический маршрут и варианты заданий приведены в табл. 1.1 и 1.2 соответственно.

Таблица 1.1

Моделируемый технологический маршрут

№ п/п	Описание операции	Параметры операции в частях ***A***, ***B***, ***C***			
		A	***B***		***C***
			D_E	*T_t*	
1	Исходная подложка	КДБ-20 (100)	КДБ-20 (100)	КДБ-20 (100)	Подложка *
2	Осаждение маски из SiO_2	D_{ox} = = 0,3 мкм	–	–	–
3	Ионная имплантация	Фосфор $D = 10^{14}$ см$^{-2}$ E = 30 кэВ	Фосфор D = * E = *	Фосфор $D = 10^{14}$ см$^{-2}$ E=30 КэВ	Примесь –* D = ? E = ?
4	Отжиг	T = 1100 °С t = 0,5 мин	T = 500 °С t = 1 мин	T = * t = *	T = ? t = ?

Примечания:

– – операция отсутствует; * – определяется вариантом задания; ? – требуется вычислить.

Таблица 1.2

Варианты заданий по бригадам

Часть	Параметры	Номера бригад				
		1	2	3	4	5
B (*D_E*)	D_1	10^{12} см$^{-2}$	$2\cdot10^{12}$ см$^{-2}$	$3\cdot10^{12}$ см$^{-2}$	$4\cdot10^{12}$ см$^{-2}$	$5\cdot10^{12}$ см$^{-2}$
	D_2	10^{13} см$^{-2}$	$2\cdot10^{13}$ см$^{-2}$	$3\cdot10^{13}$ см$^{-2}$	$4\cdot10^{13}$ см$^{-2}$	$5\cdot10^{13}$ см$^{-2}$
	D_3	10^{14} см$^{-2}$	$2\cdot10^{14}$ см–^{2}	$3\cdot10^{14}$ см$^{-2}$	$4\cdot10^{14}$ см$^{-2}$	$5\cdot10^{14}$ см$^{-2}$
	E_1	15 кэВ	11 кэВ	13 кэВ	10 кэВ	18 кэВ
	E_2	25 кэВ	25 кэВ	33 кэВ	30 кэВ	30 кэВ
	E_3	45 кэВ	50 кэВ	48 кэВ	53 кэВ	45 кэВ
B (*T_t*)	T_1	1010 °С	1020 °С	1030 °С	1040 °С	1050 °С
	T_2	1110 °С	1120 °С	1130 °С	1140 °С	1150 °С
	T_3	1210 °С	1220 °С	1230 °С	1240 °С	1250 °С
	t_1	1 мин	2 мин	3 мин	4 мин	5 мин
	t_2	2 мин	3 мин	4 мин	5 мин	6 мин
	t_3	3 мин	4 мин	5 мин	6 мин	7 мин
C	Подложка	КДБ-20 (100)	КДБ-20 (111)	КДБ-10 (100)	КЭФ-4,5 (111)	КЭФ-7,5 (100)
	Примесь	Phosphorus	Phosphorus	Phosphorus	Boron	Boron
	Глубина *p–n*-перехода X_j (мкм)	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5

1.2.4. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ РАБОТЫ В ОБОЛОЧКЕ SENTAURUS WORKBENCH

Основной информационно-структурной единицей в *Sentaurus* является **проект**, который связан с конкретным вычислительным экспериментом. Проект описывает последовательность используемых для моделирования приложений, оболочек и утилит (**вычислительный поток)**, а также наборы варьируемых в них параметров с исходными величинами для экспериментов (**план вычислительного эксперимента**) (рис. 1.2).

С целью облегчения логической структуры и лучшей визуализации проект может быть разбит на более мелкие части, называемые **сценариями.** При этом каждая клетка таблицы экспериментов называется **узлом.** Каждый узел имеет в проекте свой уникальный номер, посмотреть который можно с помощью кнопки *F9*.

Работа в оболочке *SWB* может проводиться различными способами: через меню, с помощью управляющих иконок, с помощью левой и правой кнопок мыши или с помощью кнопок на клавиатуре. При этом практически все команды эквивалентны командам оболочки *Genesis*, подробно описанной в пособии [12], а принципы работы с проектами аналогичны принципам работы с каталогами в ОС *Windows*.

В поле проектов имеется значительный набор готовых и просчитанных проектов, разработанных в качестве исходных образцов специалистами компании SYNOPSYS. Для того чтобы модифицировать и выполнить какой-либо из них, его следует скопировать в *рабочую директорию*. Вспомогательные проекты для лабораторного практикума находятся внизу (в конце) этого рабочего списка проектов. Каждый такой проект содержит в себе различные группы файлов, как исходные данные, так и результаты вычислений. Посмотреть эти файлы можно, например, с помощью оболочки *MC*, запускаемой в отличном от *SWB* окне терминала.

Для запуска на расчет выбранного проекта из рабочей директории достаточно нажать на иконку с изображением бегущего человека или указать в меню *project > run*, или воспользоваться комбинацией клавиш *ctrl+R*.

В каждом выполненном проекте для каждого приложения имеются колонки столбцов, окрашенные желтым цветом, означающие успешное завершение вычислений для этих узлов. При этом красный цвет узла означает наличие какой-либо ошибки или погрешности. Для того

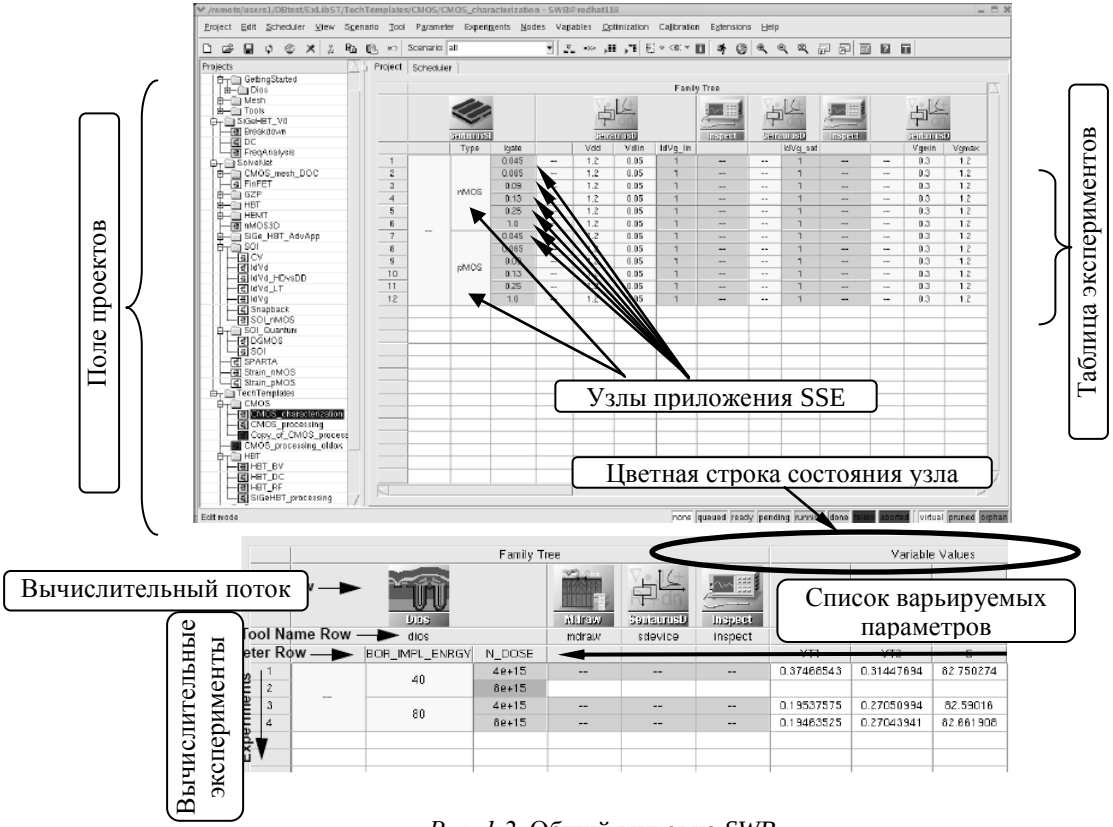


Рис. 1.2. Общий вид окна *SWB*

16

чтобы перезапустить проект из рабочей директории на выполнение, из него следует удалить уже готовые результаты вычислений. Это можно сделать с помощью процедуры *очистки проекта* (*clean up*). Очистка осуществляется либо из меню *project* > *clean up*, либо по комбинации клавиш *ctrl+L*. В результате активируется окно опций очистки, общий вид которого соответствует рис. 1.3.

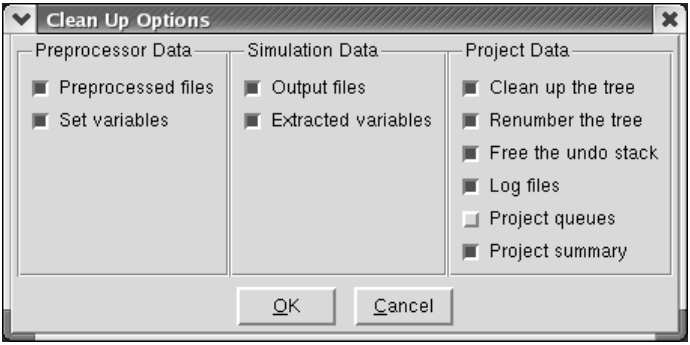


Рис. 1.3. Общий вид окна опций очистки проекта

Если запущенный проект по какой-либо причине нужно остановить до его полного завершения, то это можно сделать с помощью меню: *project* > *abort running* или нажав *Ctrl+T* на клавиатуре.

Если требуется рассчитать только часть входных экспериментальных данных проекта, то достаточно мышью выделить эти данные и далее стандартным образом, как для полного проекта, запустить их на счет.

Для просмотра результатов вычислений удобнее всего пользоваться графическими оболочками *Inspect* или *Tecplot_SV*. Активировать их можно с помощью меню *Extension* > *Inspect* и *Extension* > *Tecplot_SV* соответственно. Причем с каждым узлом, содержащим результаты расчета, связаны собственные графические и выходные текстовые файлы.

Выходные текстовые файлы автоматически создаются в процессе выполнения какого-либо приложения и имеют формат **.log* или **.out*. Посмотреть содержимое этих файлов прямо в момент выполнения проекта можно с помощью опции *View Output*, либо по клавишам *Ctrl+W*, либо по иконке .

При обработке результатов вычислений, содержащихся в выходных текстовых файлах, удобно для быстрой визуализации данных в оболочке *SWB* использовать утилиту *Measure* или собственные процедуры, содержащиеся в командных файлах используемых приложений. Такая ситуация возникает, например, после работы приложения *Sprocess,* когда необходимо определить параметры слоев: толщину выращенного термического окисла или глубину залегания и поверхностное сопротивление *p–n*-перехода.

В том случае, когда нет проекта-прототипа, нужно создать новый проект. Для этого через меню *project* > *new* (или по иконке 🗋) следует определить имя проекта, который должен находиться в рабочей директории. Затем требуется задать вычислительный поток, моделирующий исходную задачу. Это можно сделать либо с помощью правой кнопки мыши, нажатой в поле *No Tools* (рис. 1.4), или через меню *Tools* > *Add Tool*, или по иконке .

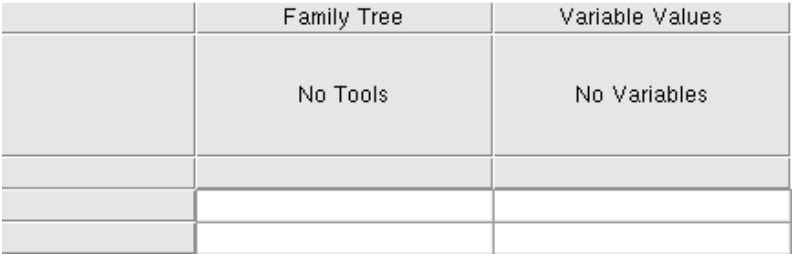


Рис. 1.4. Фрагмент окна *SWB*, в котором задается новый вычислительный поток

В любом случае оболочка предложит выбрать необходимые для вычислительного потока приложения в соответствии с рис. 1.5.

После определения вычислительного потока необходимо сохранить проект через меню *project* > *save as.* Невыполнение операции сохранения проекта может привести к полной потере его данных.

Далее можно приступить к заполнению плана вычислительного эксперимента, который может состоять из нескольких сценариев. Примерный вид окна *SWB* для сценария *D_E* (доза_энергия) из проекта *Lab_1b* приведен на рис. 1.6. В квадратных скобках в узлах приведены их номера. При этом в окне посередине изображения показаны выходные текстовые данные, полученные в ходе выполнения приложения *SProcess* для узла с номером 65.

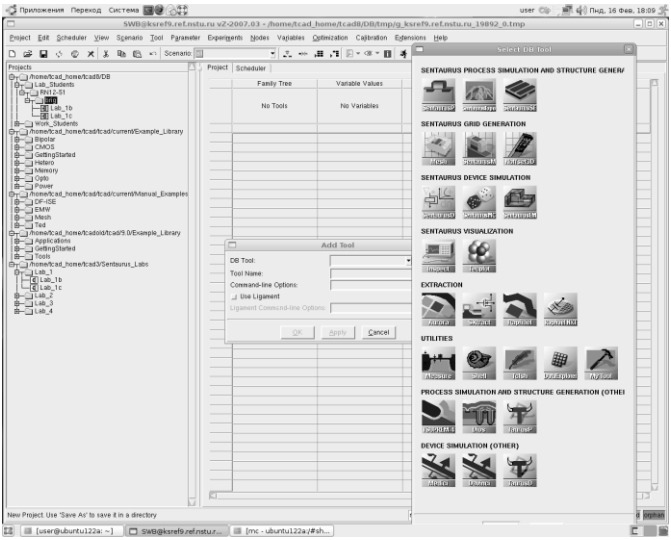


Рис. 1.5. Окно *SWB* при создании рабочего потока для нового проекта

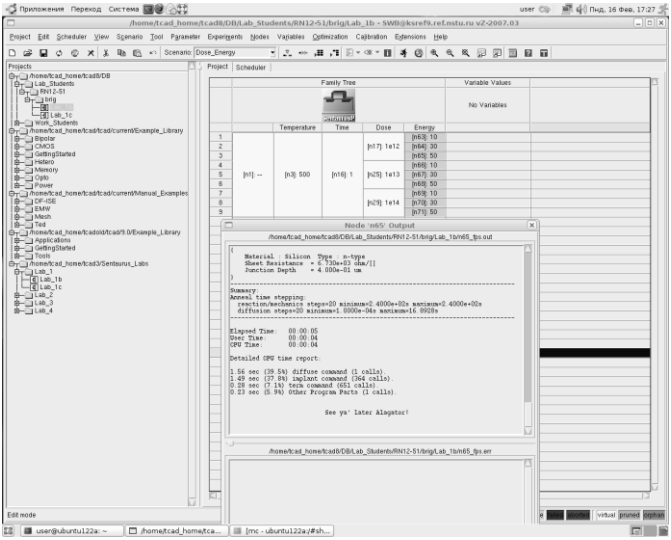


Рис. 1.6. Окно *SWB* при выполнении сценария *Dose_Energy* для проекта *Lab_1b*

1.2.5. ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ КОМАНДНОГО ФАЙЛА ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЯ SPROCESS ИЗ ПОДСИСТЕМЫ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Командный файл части ***A*** для *SProcess*, подготовленный в оболочке *Ligament Flow Editor* приведен ниже. Он соответствует маршруту, заданному в табл. 1.1, и структурно состоит из двух разделов.

Первый, называемый головным, содержит в себе комментарий (заголовок) к командному файлу, секцию *environment* (выделенные строки) и секцию *substrate*. Комментарий образован тремя строками. Секция *environment* содержит в себе описания 2*D* области моделирования (квадрат 1 мкм × 1 мкм), начальной сетки, а также используемых имплантационных таблиц и модели диффузии. В секции *substrate* задаются параметры исходной пластины (КДБ ориентации (100) с $N_A = 6{,}8 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$). Причем при написании входного командного файла нужно обратить внимание на следующие основные моменты:

– каждая новая команда должна размещаться только в одной строке;

– если команда занимает несколько строк, то при переходе на следующую строку необходимо вставить символ ‘\’ (*backslash*);

– символ ‘#’ в начале строки определяет комментарий;

– для указания единиц измерения используются треугольные скобки: *location=100<nm>*.

– ось *X* направлена в глубину структуры (вниз).

```
## ------------------------------------
## ---- Lab_1a -----
## ------------------------------------

## -----Enviroment --------------------
set sim_left 0
set sim_right 1.0
set sim_bottom 1
set sim_top 0
## ----------------------------------##
## --------  LIGAMENT OUTPUT  --------##
## ----------------------------------##
## ------- user defined grid ---------##
## ----------------------------------##
# ----- Control Models. ------------------------------------------
implant tables=Default
```

```
pdbSet Silicon Dopant DiffModel Pair
# ----- Control Grid. ----------------------------------------------
mgoals on min.normal.size=0.01 max.lateral.size=0.025 normal.
growth.ratio=1.1 accuracy=1<nm>
# ----- Forming Grid. ----------------------------------------------
line x location=0 spacing=0.1 tag=Top
line x location=1 spacing=0.1 tag=Bottom
line y location=0 spacing=0.1 tag=Left
line y location=1 spacing=0.1 tag=Right
# ----- Forming Substrate. ----------------------------------------
region Silicon xlo=Top xhi=Bottom ylo=Left yhi=Right

init concentration=6.80e+14 field=Boron wafer.orient=100  slice.
angle=[CutLine2D 0 0 0.0 1.0]

## ------------------------------------
## ---- Forming a Diode Structure. -----
## ------------------------------------

## ----- Oxide-Mask Deposition. ------------------------------------
mask name=window segments= { 0 0.4   0.6 1 } negative
deposit Oxide thickness=0.3 type=anisotropic mask=window

##  ----- Save Struct. ----------------------------------------------
struct smesh=Diode_1

##  ----- Phosphorus Implantation. ---------------------------------
implant Phosphorus dose=1e14 energy=30 tilt=7 rot=-90

##  ----- Annealing. ------------------------------------------------
temp_ramp name=tempramp_1_2 time=0.5 temp=1100
diffuse temp_ramp=tempramp_1_2

##  ----- Save Struct. ----------------------------------------------
struct smesh=Diode_2

##  ----- Save Profiles. --------------------------------------------
SetPlxList { Boron }
WritePlx Boron.plx y=0.5
```

SetPlxList { Phosphorus }
WritePlx Phosphorus.plx y=0.5
SetPlxList { NetActive }
WritePlx NetActive.plx y=0.5

----- Rs Xj Calculation. ----------
SheetResistance y=0.5

----- The End. ----------
exit

Другой раздел, начинающийся с комментария «*Forming a Diode Structure*», состоит из функциональной технологической секции, описывающей последовательность выполняемых технологических операций (нанесение маски из двуокиси кремния, ионной имплантации донорной примеси и ее отжига) и из вспомогательной секции, начинающейся с ремарки «*Save Profiles*» и завершающейся командой *exit*. Команда *struct* обеспечивает сохранение 2*D* изображения моделируемой структуры с целью его дальнейшей визуализации в *Tecplot SV*. Команда *SetPlxList* описывает список выводимых примесей, которые сохраняются в соответствующих файлах с расширением **.plx* в вертикальных сечениях, определяемых координатой *Y* (команда *WritePlx*). Команда *SheetResistance* обеспечивает вычисление поверхностного сопротивления *Rs*.

1.3. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Включить *PC*, загрузить *Ubuntu*, создать соединение с сервером, войти в *Sentaurus*, активировав *SWB*.

2. Открыть второе окно *Терминала*, запустить *MC* и осуществить соединение с сервером в одной из панелей, определить содержание данных в рабочей студенческой директории, найти папку с учебным курсом и папку с руководствами пользователя.

3. Подключить флешку и переписать на нее какой-либо файл из руководств пользователя.

4. Вернуться в оболочку *SWB*. Перехватить текущее изображение и записать его на рабочий стол. Перейти в окно *Ubuntu* и с рабочего стола записать файл на флешку.

5. Вернуться в оболочку *SWB*. В студенческой директории создать рабочий каталог бригады и лабораторной работы.

6. Далее приступить к созданию нового проекта по расчету диффузионного наноперехода (часть ***A***). Для этого в меню выбрать новый проект и задать вычислительный поток для вычислительного эксперимента, состоящий здесь из одного приложения *SProcess*. При этом необходимо указать в качестве источника для формирования входного командного файла приложения *SProcess* оболочку *Ligament Flow Editor* и сохранить проект под именем *Lab_1a* в своей рабочей директории.

7. Через второе окно исследовать содержимое рабочей директории, соответствующей созданному проекту *Lab_1a*. Записать все имена файлов, содержащихся в ней.

8. Вернуться в *SWB* и с помощью оболочки *Ligament Flow Editor* приступить к созданию командного файла *sprocess_lig.cmd*, задающего процесс моделирования технологического маршрута в *SProcess*. Для этого по правой кнопке на иконке *SProcess* в вычислительном потоке выбрать в появившемся меню *Edit input* > *Ligament Flow*. Затем в окне *Ligament* определить технологическую программу, для которой создается командный файл (через меню *Preferences* > *Target*), вставить заготовку головного раздела командного файла (меню *Edit* > *Add Process Header*) и, наконец, поднять в нем наверх комментарий путем перетаскивания мышью.

Потом следует определить содержание секции *environment* из головного раздела. Для этого необходимо установить значения переменных: *title*, *save* (установить *false*), *simulator*, *region* (0 0 0 1), *graphics* (установить *false*), *depth* (1). В окне переменной *user_grid* набрать **все** недостающие строки секции *environment*, начиная с комментария *Control Models* и до команды *region* включительно в соответствии с описанием командного файла, приведенного в разделе 1.2.5.

В завершение работы с головной частью определить параметры для секции *Substrate*. Теперь можно проконтролировать качество набора команд с помощью транслятора и сохранить командный файл.

Далее необходимо приступить к набору функционального раздела проекта посредством перетаскивания необходимых шаблонов команд *comment*, *remark*, *insert*, *implant*, *anneal* из правой нижней панели. Команда *insert* должна использоваться всегда, когда необходим ручной набор технологической операции. Периодически можно контролировать качество набора с помощью трансляции потока команд.

После завершения создания командного файла *sprocess_lig.cmd* можно закрыть окно оболочки *Ligament Flow Editor* правой верхней кнопкой **X**. Теперь через второе открытое окно *Терминала* следует проконтролировать содержимое своей рабочей директории и указать в отчете, какие новые файлы в ней появились.

9. Перейти снова в оболочку *SWB*, сохранить проект и запустить его на расчет (например, по кнопке или клавишами *Ctrl+R*). Наблюдение за ходом расчета какого-либо узла можно вести в окне, нажав комбинацию клавиш *Ctrl+W* или кнопку .

10. После завершения расчета запустить двумерный визуализатор *Tecplot_SV*, (например, через меню *Extensions*). Выбрав в нем файлы с именами *Diode_1_fps.tdr* и *Diode_2_fps.tdr*, получить двумерные изображения моделируемой стуктуры перед ионной имплантацией и в конце технологического маршрута. Посмотреть расчетную сетку в окисле и полупроводнике. Определить с помощью линейки глубину *p–n-пер*ехода и коэффициент бокового ухода примеси под маску. Перехватить на рабочий стол все необходимые для отчета изображения. Переписать на флешку содержание рабочей директории *Lab_1a*. По файлу *n1_fps.out* определить глубину залегания перехода X_j и поверхностное сопротивление *Rs*.

11. Вернуться в оболочку *SWB*. С помощью одномерного визуализатора *Inspect* построить график распределения легирующих примесей в сечении, соответствующем середине структуры (для y = 0,5 мкм). Затем сохранить результаты и закрыть окна *Tecplot_SV* и *Inspect*.

12. Приступить к исследованию готового проекта *Lab_1b*. Для этого перенести его из общей папки к себе в рабочую директорию. В отличие от предыдущего случая данный проект разделен на два сценария: *Dose_Energy* и *Temp_Time*.

13. Загрузить для расчета первый сценарий и установить значения параметров в соответствии со своим вариантом (для правки дважды кликнуть на нужном узле) и запустить его на расчет. После того как расчет завершится (клетки окрасятся в желтый цвет), посмотреть номера узлов (по кнопке *F9*) и, перейдя в окно *MC*, определить, какие файлы в рабочей директории соответствуют каждому узлу и описать принцип кодировки имен файлов.

14. Вернувшись в *SWB*, заполнить числовую табл. 1.3, содержащую итоговые результаты вычислений по сценарию *Dose_Energy*.

Таблица 1.3

Итоговые результаты расчета для сценария *Dose_Energy*

№ п/п	Доза	Энергия	Сопротивление R_s	Глубина X_j

Для нахождения R_s и X_j следует посмотреть содержимое выходных расчетных файлов, соответствующих каждому узлу (например, с помощью двойного нажатия клавиш *Ctrl+W* на выбранном узле). Дома построить графики зависимостей сопротивления и глубины от дозы при разных энергиях как параметра.

15. Для графического просмотра профилей легирования в *p-n*-переходе перейти в одномерный визуализатор *Inspect*. Выбрать графические файлы **.plx* и получить одномерное сечение всех *p-n*-переходов. Затем, выбрав какую-то дозу, построить графики зависимостей для разных энергий и, наоборот, разных энергий при фиксированной дозе. Эти два изображения перехватить на рабочий стол с целью дальнейшего их использования при составлении отчета.

16. Вернуться в оболочку *SWB*. Запустить второй сценарий *Temp_Time* и провести его исследование аналогично пунктам 14 и 15. При этом вместо табл. 1.3 следует заполнить итоговую табл. 1.4 и дома

Таблица 1.4

Итоговые результаты расчета для сценария *Temp_Time*

№ п/п	Время	Температура	Сопротивление R_s	Глубина X_j

построить разгоночные кривые, т. е. зависимости R_s и X_j от времени разгонки, используя температуру как параметр.

17. Для работы дома переписать содержимое рабочего каталога *Lab_1b* к себе на флешку, а также все изображения, хранящиеся на рабочем столе АРМа.

18. Приступить к выполнению завершающего проекта *Lab_1c*. Для этого следует переписать его из общей директории к себе в рабочий каталог, установить значения переменных проекта в соответствии со своим вариантом и, варьируя технологические параметры маршрута, добиться нужной глубины *p–n*-перехода.

19. В конце занятия переписать на флешку все необходимые для работы дома файлы из рабочей директории и рабочего стола, закрыть все активные соединения, затем окна, размонтировать флешку и, корректно завершив работу *Ubuntu*, выключить *PC*.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Опишите методику запуска оболочки *SWB* после загрузки ОС *Ubuntu*.

2. Поясните методику записи файлов из рабочей директории на флешку (с указанием пути к рабочей директории).

3. Каким образом в оболочке *MC* можно осуществить соединение с сервером и зачем это нужно делать?

4. В чем состоит разница между понятиями сетевой панели *MC* и локальной? Опишите технологию закрытия активного соединения с сервером.

5. Поясните технологию переноса картинки-изображения при работе с *TCAD Sentaurus* к себе на флешку. В каком графическом формате это можно сделать?

6. Дайте понятие проекта в *SWB* и объясните, каким образом его можно создать (скопировать), запустить на расчет, остановить вычисления и удалить результаты расчета.

7. Поясните, каким образом в *SWB* можно задать вычислительный поток из нужных приложений, и приведите примеры структуры этих потоков, использованных в лабораторной работе.

8. Объясните, что такое план вычислительного эксперимента в *SWB*. В чем суть понятия узла и какова технология работы с узлами?

9. Перечислите основные оболочки системы *Sentaurus*, а также главные ее приложения и объясните их назначение.

10. В чем суть понятия «сценарий» и каким образом его можно использовать при работе в *SWB*?

11. Сформулируйте методику (последовательность действий) создания нового рабочего проекта в оболочке *SWB*, состоящего из вычислительного потока, содержащего только одну единицу в виде приложения *SProcess*.

12. Поясните, каким образом можно проконтролировать процесс вычислений при работе приложения *Sprocess*.

13. Опишите структуру командного файла для приложения *SProcess*. Каким образом его можно создать и какое у него будет имя и расширение, если он будет создан в оболочке *Ligament Flow Editor*?

14. Поясните, каким образом в оболочке *Ligament Flow Editor* при создании головного раздела командного файла следует задавать размеры области моделирования.

15. Каким образом в оболочке *Ligament Flow Editor* задается заготовительный шаблон головного раздела командного файла?

16. Какие командные строки головного раздела командного файла соответствуют секции *environment* и для чего они предназначены?

17. Для чего предназначена секция *substrate* в командном файле для *SProcess*, каким образом она задается и какие параметры в ней определяются?

18. Приведите вид командной строки, соответствующей операции *implant*, если она задана в оболочке *Ligament Flow Editor*, и поясните смысл параметров, ее образующих.

19. Приведите вид командной строки, соответствующей операции *anneal*, если она задана в оболочке *Ligament Flow Editor*, и поясните смысл параметров, ее образующих.

20. Нарисуйте системы координат, которые используются в оболочках *SProcess, Ligament Flow Editor* и *Tecplot SV*.

21. Поясните назначение команды *struct smesh=Diode_2* и объясните, с какой оболочкой *Sentaurus* она связана и что в результате эта команда дает пользователю.

22. Какова методика проведения измерения величины бокового ухода с помощью инструмента «Линейка» в визуализаторе *Tecplot SV?*

23. Объясните, для чего предназначены команды: *SetPlxList { Boron }* и *WritePlx Boron.plx y* = 0.5 и с какой оболочкой *Sentaurus* они связаны.

24. Опишите, каким образом после успешного завершения работы *SProcess* в оболочке *Inspect* можно получить на одном полулогарифмическом графике кривые, описывающие донорную и акцепторную примесь в *p–n*-переходе.

25. Поясните, для чего в командном файле *sprocess_lig.cmd* размещается команда *SheetResistance y* = 0.5. Какие параметры она позволяет найти и каким образом их можно посмотреть?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 2

ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ МОП-НАНОТРАНЗИСТОРОВ НА НАПРЯЖЕННОМ КРЕМНИИ

2.1. ЦЕЛЬ И СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Цель работы – освоение методик одномерных и двумерных технологических расчетов, анализа и графического представления результатов в *TCAD Sentaurus* на основе фрагментов реальных технологических маршрутов.

Содержанием работы является подготовка командного файла для *SProcess* в текстовом редакторе ОС *Windows* с последующим его переносом в оболочку *SWB*, исследование зависимости параметров реального *p*-*n*-перехода от режимов технологических операций, моделирование 2*D* структуры и профилей легирования в ней для *n*-МОП и *p*-МОП нанотранзисторов на напряженном кремнии.

2.2. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

2.2.1. НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОПЕРАЦИИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ В SPROCESS

В *SProcess* ионная имплантация моделируется двумя способами: либо на основе аналитических приближений, использующих различные функции распределения, либо расчетным путем на основе метода Монте-Карло.

Чаще всего применяется первый способ, при котором для моделирования имплантационных профилей возможен выбор следующих видов функций распределения:

gaussian – нормальное распределение Гаусса;
pearson – простое распределение Пирсона-IV (по умолчанию);
pearson.s – распределение Пирсона-IV с экспоненциальным хвостом;
dualpearson – двойное распределение Пирсона.

Для конкретного описания этих функций необходимо задать табличный файл, в котором в определенном формате содержатся все параметры соответствующих распределений для различных видов примесей, доз, энергий и т. д. Подключение этого файла осуществляется, например, с помощью команды

implant tables=Default,

которую желательно размещать в головном разделе командного файла.

Формат самой команды имплантации, вставляемой в соответствующем месте командного файла, может иметь следующий базовый вид:

implant Boron energy=40 dose=1.5e12 tilt=7 rotation=–90,

где *Boron* – тип внедряемой примеси; при имплантации в кремний наряду с бором чаще всего используются примеси фосфора и мышьяка (*Phosphorus* и *Arsenic)*;
energy – энергия легирования (по умолчанию в <*keV*>);
dose – доза имплантируемой примеси (по умолчанию в <cm^{-2}>);
tilt – угол наклона имплантационного пучка (ИП), взятый от нормали к поверхности пластины;
rotation – угол поворота пластины.

При этом система координат $OX_WY_WZ_W$ для имплантации примеси, связанная с пластиной, задается в соответствии с рис. 2.1.

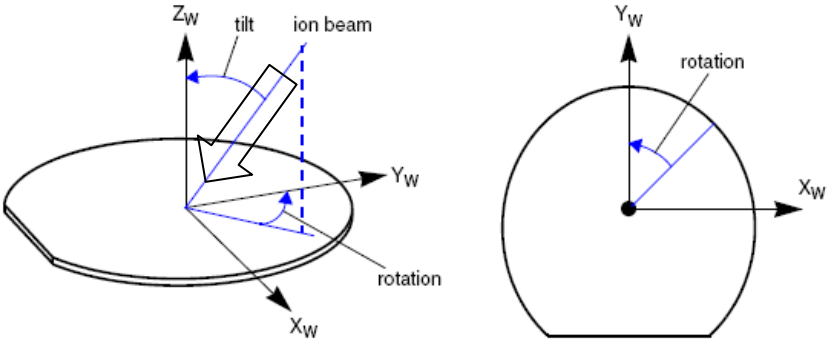


Рис. 2.1. Определение направления ионного пучка в системе координат $OX_WY_WZ_W$

Таким образом, направление ИП определяется двумя параметрами:

tilt – угол наклона ИП в плоскости ($Z_W O\ Y_W$) относительно оси Z_W;

rotation – угол поворота пластины относительно первоначального положения базовой системы координат против часовой стрелки.

Данные параметры имеют по умолчанию следующие значения (в градусах): *tilt=7; rotation=–90*. Частный случай с *rotation=+90* приведен на рис. 2.2.

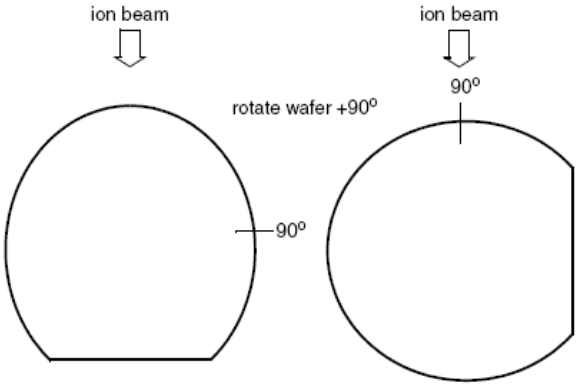


Рис. 2.2. Определение направления вращения пластины относительно ИП

Отметим, что система координат, используемая для моделирования, отличается от рассмотренной выше системы $OX_WY_WZ_W$. В моделирующей системе координат ось X_S направлена в глубину пластины, а оси Y_S и Z_S лежат в плоскости пластины. При этом угол между осями OY_W и OY_S, обозначаемый как *slice.angle*, по умолчанию принимается равным –90.

В том случае, когда вместо модели Пирсон-IV требуется использовать модель Гаусса, то это можно сделать, применив команду:

implant species= Boron Silicon gaussian

Если при двумерном моделировании необходимо выполнить имплантацию не во всю подложку, а лишь в какую-то ее часть, то следует воспользоваться командой *mask*, а в команде *implant* указать имя созданной маски:

mask name=<name> segments= { 0 0.4 0.6 1 }

implant Boron energy=40 dose=1.5e12 tilt=7 rotation=–90 mask=<name>

Другие особенности команды *Implant* приведены в руководстве пользователя.

2.2.2. ОСНОВНЫЕ ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОПЕРАЦИИ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА В SPROCESS

Операция термического отжига (или диффузии легирующих примесей) моделируется с помощью команды *Diffuse*, которая является важнейшей командой в *SProcess*. В общем случае *Diffuse* обеспечивает моделирование следующих процессов и явлений:

– термический отжиг примесей;

– рост различных слоев в процессе отжига (например, термического окисла, силицида, эпитаксиального слоя и т. д.);

– процессы индуцированных термомеханических напряжений.

SProcess поддерживает следующие модели переноса легирующих примесей и точечных дефектов в процессе диффузии:

- *ChargedPair* – 3-потоковая модель многочастичной диффузии [8], в которой рассматриваются парные взаимодействия вида $A^Z+I^C \leftrightarrow AI^{(Z+C)}$ и $A^Z+V^C \leftrightarrow AV^{(Z+C)}$ между атомами легирующей примеси (*A*), междоузлиями (*I*) и вакансиями (*V*) с учетом их зарядовых состояний (*Z* – для примеси, *C* – для точечных дефектов) путем совместного решения системы из трех диффузионных уравнений, определяющих движение каждого типа частиц в отдельности с учетом описанных выше взаимодействий. Обычно она применяется при моделировании отработанного КМОП технологического процесса и представляет собой хороший вариант для соблюдения баланса между вычислительными затратами и точностью расчета;
- *ChargedReact* – наиболее сложная и физически наиболее точная 5-потоковая модель многочастичной диффузии. Здесь рассматриваются взаимодействия между пятью типами частиц: атомами примеси (*A*), междоузлиями (*I*), вакансиями (*V*) и всевозможными их соединениями (*AV*), (*AI*) с учетом зарядовых состояний всех частиц. Для каждой легирующей примеси рассматривается система из пяти дифференциальных уравнений с частными производными. Так как расчеты по данной модели связаны с большими затратами машинного времени, то ее рекомендуется использовать при экстремальных перепадах температуры для быстропротекающих процессов, при специфических начальных условиях и т. д.;

- *ChargedFermi* – аналог модели в приближении эффективного коэффициента диффузии [8] с учетом зарядовых состояний точечных дефектов, находящихся в тепловом равновесии. Данная модель может быть использована при длительных высокотемпературных операциях, где эффекты переходных процессов при отжиге послеимплантационных дефектов минимальны;
- *Pair* – упрощенная модель *ChargedPair* на основе уравнений взаимодействия $A+I \leftrightarrow AI$ и $A+V \leftrightarrow AV$ без учета зарядовых состояний частиц;
- *React* – упрощенная модель *ChargedReact*, не учитывающая в уравнениях взаимодействия частиц их зарядовых состояний;
- *Fermi* – упрощенная модель *ChargedFermi*, тождественная приближению с эффективным коэффициентом диффузии без учета зарядовых состояний;
- *Constant* – наиболее простая модель с постоянным коэффициентом диффузии. Здесь не учитывается взаимодействие между легирующей примесью и точечными дефектами, а также отсутствует эффект влияния электрического поля на движение примеси. Эта модель применяется главным образом для описания диффузии окислителя в окисле.

Выбор определенного типа модели и ее параметров реализуется с помощью команды *pdbSet*. Это можно сделать различными способами, например:

pdbSet Silicon Dopant DiffModel Pair.

Аналогично операции имплантации выбор и установление параметров модели диффузии проще всего задавать в головном разделе командного файла.

Операция термического отжига отличается большой вариативностью командного формата, отражающей реальные технологические особенности процесса диффузии. Прежде всего, это связано с составом атмосферы на планарной поверхности пластины. Так, простейший отжиг в инертной среде, при котором отсутствует рост термического окисла, можно задать командой

diffuse temperature=900 time=20

где *temperature* – температура отжига (по умолчанию в <*C*>); *time* – время отжига в (<*hr*> | <*min*> | <*s*>) (по умолчанию в <*min*>).

Если требуется рассчитать при определенной температуре для выбранной модели только концентрацию электрически активных приме-

сей (т. е. без какого-либо их дополнительного перераспределения), то это можно сделать с помощью команды

diffuse temperature=900 time=0.0

Отжиг во влажной окислительной атмосфере (диффузия, совмещенная с ростом термического окисла) может быть задан как

diffuse temperature=900 time=20 H2O

Простейшее линейное изменение температуры во время отжига с 800 °C до 1000 °C, происходящее в течение 20 минут в атмосфере сухого кислорода, можно определить командой

diffuse temperature=800 time=20 O2 ramprate=10<C/min>

где *ramprate* – скорость изменения температуры (по умолчанию в *<C/s>*).

Если параметр *ramprate > 0*, то температура будет увеличиваться (форсаж). Для уменьшения температуры необходимо устанавливать *ramprate < 0*.

В случае когда технологический режим диффузии состоит из нескольких температурных участков (например, форсаж, полка, снижение), то эти участки удобно объединить в один режим с именем *MyNN* командой *temp_ramp*:

temp_ramp name=MyNN temperature= 800 time=20 O2 trate=10<C/min>

temp_ramp name=MyNN temperature=1000 time=10 O2

temp_ramp name=MyNN temperature=1000 time=40 O2 trate=–50<C/min> last

diffuse temp_ramp=MyNN

При этом ключевое слово *last* указывает на то, что данный участок является конечным в режиме. Теперь скорость изменения температуры задается параметром *trate*.

Перераспределение легирующих примесей при диффузионном отжиге в окислительной атмосфере в значительной степени зависит от химического состава атмосферы. Для простейших случаев сухой и влажной атмосферы достаточно использовать команды в описанных выше форматах. При этом вместо ключевых слов *O2* и *H2O* допускается использование их дополнительных имен *dryO2* и *wet*, соответственно.

В более общих случаях со сложным составом атмосферы для его определения следует использовать команду *gas_flow*, которая является

универсальным средством для смешивания различных газов. При этом количественные параметры компонентов смеси можно задавать двумя способами: либо указывая парциальные давления каждого из газов, либо определяя скорости их потоков в *<l/min>*.

Парциальные давления газов, например, для атмосферы, содержащей 30 % кислорода и 70 % паров воды при давлении в 1 атмосферу, можно определить следующим образом:

gas_flow name=Oper_2 pO2=0.3 pH2O=0.7

или

gas_flow name= Oper_2 partial_pressure = { O2=0.3 H2O=0.7 }

При таком определении газовой смеси *SProcess* не учитывает протекание возможных химических реакций между ее компонентами.

Другой способ состоит в описании окисляющей атмосферы с помощью газовых потоков:

gas_flow name= Oper_2 flowO2=0.5 flowH2O=0.5
flowH2=0.2 flowN2=1.0

или

gas_flow name= Oper_2 flows = { O2=0.5 H2O=0.5 H2=0.2 N2=1.0 }

В этом случае *SProcess* автоматически рассчитает парциальные давления каждого из компонентов с учетом возможного протекания между ними химических реакций типа $O_2 + 2H_2 \rightarrow 2H_2O$.

В общем случае принято, что для смешивания доступны следующие газы: *H2O* (пары воды), *O2*, *H2* (водород), *HCl*, *N2* (азот).

Команда *gas_flow* используется аналогично команде *temp_ramp* в соответствующем месте командного файла в сочетании с командой *diffuse*, например:

gas_flow name= Oper_2 flows = { O2=0.4 H2O=0.5 HCl=0.1 }

diffuse temperature=900 time=20 gas_flow= Oper_2

или

gas_flow name= Oper_2 flows = { O2=0.4 H2O=0.5 HCl=0.1 }

temp_ramp name=MyNN temperature=1000 time=10 gas_flow= Oper_2

diffuse temp_ramp=MyNN

Толщина термического окисла является важнейшим параметром процесса термического окисления. Найти ее значение можно различными способами на основе анализа результатов расчета, содержащихся в выходном файле **.out*. Простейший «ручной» алгоритм состоит в следующем. После выполнения операции термического окисления в выходном файле следует найти соответствующее место, в котором содержатся данные о распределении количества какой-либо примеси по слоям структуры, например, как на рис. 2.3. Геометрические границы слоя SiO_2 здесь составляют *Bottom* = 62,11 нм и *Top* = –80,54 нм. Тогда толщина окисла есть 62,11 + 80,54 = 142,65 нм.

```
------------------------------------------------------------ SetPlxList -----
SetPlxList { NetActive }
-------------------------------------------------------------------------------
------------------------------------------------------------ WritePlx -----
WritePlx fileName
-------------------------------------------------------------------------------
{         Top                Bottom             Integral             Material }
{  -8.054399972812e-02  6.211009948935e-02  0.000000000000e+00 Oxide }
{   6.211009948935e-02  1.500000000000e+01  7.739286898290e-03 Silicon }
{
    Material : Silicon  Type : p-type
    Sheet Resistance  = 1.292e+02 ohm/[]
    Junction Depth    = 2.988e+00 um
}
```

Рис. 2.3. Фрагмент выходного файла *SProcess*, содержащий данные для вычисления толщины окисла

Если подобный фрагмент автоматически отсутствует в выходном файле, то его можно получить принудительно, использовав команды

select z=NetActive

layers

В лабораторной работе вместо ручного счета в командном файле *SProcess* используется специально написанная для этого процедура *OxiTh*, обеспечивающая вывод толщины окисла непосредственно в таблицу параметров *SWB*.

2.3. СТРУКТУРА ЗАДАНИЙ К ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ

Лабораторная работа состоит из двух частей: ***A*** и ***B.*** В части ***A*** необходимо на основе готового командного файла для моделирования 1*D* профилей легирования в сечении эмиттера биполярного транзистора,

приведенного в разделе 2.4, составить командный файл для моделирования фрагмента реального технологического маршрута (табл. 2.1).

Таблица 2.1

Моделируемый технологический маршрут с вариантами задания

<table>
<tr><th rowspan="2">№ п/п</th><th rowspan="2">Описание операции</th><th colspan="3">A</th></tr>
<tr><th colspan="2">Сценарий part1</th><th>Сценарий part2</th></tr>
<tr><td>1</td><td>Исходная подложка</td><td>КЭФ-1 (100)</td><td>КЭФ-1 (111)</td><td>КЭФ-4.5 (100)</td></tr>
<tr><td>2</td><td>Ионная имплантация</td><td>Бор
D = 112
мкКл/см^2
E = 50 кэВ</td><td>Бор
D = 112
мкКул/см^2
E = 50 кэВ</td><td>Бор
D = 80,
800 мкКл/см^2
E = 100 кэВ</td></tr>
<tr><td rowspan="4">3</td><td rowspan="4">Термический отжиг</td><td colspan="2">Атмосфера</td><td rowspan="4">Инертный отжиг
в азоте
T = * °C
t = 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81, 100, 121, 144, 169, 196</td></tr>
<tr><td>O_2 N_2</td><td>O_2 N_2</td></tr>
<tr><td>100 % 0 %
10 % 90 %
1 % 99 %
0 % 100 %</td><td>100 % 0 %
10 % 90 %
1 % 99 %
0 % 100 %</td></tr>
<tr><td>T = 1150 °C
t = 60 мин</td><td>T = 1150 °C
t = 60 мин</td></tr>
</table>

Примечание. * – определяется вариантом задания: **1 – 1050; 2 – 1100; 3 – 1150; 4 – 1200; 5 – 1250**.

Затем следует закодировать соответствующий заданию вариант маршрута в каком-либо текстовом редакторе ОС *Windows* (например, *Блокноте*, *Far Edit*, *Word* с сохранением в формате «Обычный текст» и т. д.). Потом его нужно перенести в соответствующий проект оболочки *SWB* и исследовать влияние варьируемых параметров технологических операций на толщину термического окисла, поверхностное сопротивление и глубину залегания получающегося *p–n*-перехода.

В части ***B*** необходимо провести 2*D* расчет готового проекта *Lab_2b*, обеспечивающего создание структуры *n*-МОП нанотранзистора на напряженном кремнии и исследовать ее особенности.

2.4. ИСХОДНЫЙ КОМАНДНЫЙ ФАЙЛ LAB_2ANPN.TXT ДЛЯ SPROCESS ЧАСТИ А

```
# ******************************************************** #
#                                                          #
#   --- <<< N-P-N BIPOLAR TRANSISTOR
(1D PROCESS SIMULATION) >>> ---                            #
#                                                  #
# ******************************************************** #
# Deactivating The Graphical Mode Using Tecplot SV.
graphics off

# ////////////////////////////// PROCESS HEADER \\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\
# ----- Selecting Models. -------------
                                # Using Pair Diffusion Model
                               # for Dopants Diffusion in Silicon.
pdbSet Silicon Dopant DiffModel Pair

# ----- Meshing Strategy. -------------
mgoals on min.normal.size=10<nm> max.lateral.size=50<nm> \
    normal.growth.ratio=1.2 accuracy=1<nm>

# ----- Initial Grid. -----------------
line x location=0 spacing=0.1 tag=SiTop
line x location=5 spacing=0.1 tag=SiBottom

# ----- Substrate. --------------------
region Silicon xlo=SiTop xhi=SiBottom
init field=Boron resistivity=10.0 wafer.orient=111

# ////////////////////////////////// PROCESS \\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\
#  1) ----- Forming Sacrificial Oxide - 250 A. -------------------------------
                                          # Ambient Definition.
gas_flow name=Oxi_250 flows= { H2O=0.80 N2=0.20 }
                                         # Oxidation.
diffuse temperature=900 time=400<s> gas_flow=Oxi_250

#  2) ----- Arsenic Implantation (N-Buried Layer). --------------------------
implant Arsenic energy=100 dose=1.00e14
```

 # 3) ----- Inert Annealing. ----------
diffuse temperature=1000 time=30

 # ----- RS Measuring. ----------
SheetResistance

 # 4) ----- Sacrificial Oxide Etching. ----------
 # Delete All Oxide Layers from Surface.
strip Oxide

 # 5) ----- N-Epitaxy (Collector). ----------
 # Epitaxy Simulation.
deposit Silicon thickness=4 Phosphorus concentration=1e16
diffuse temperature=1100 time=60

 # 6) ----- Forming Sacrificial Oxide - 400 A. ----------
 # Ambient Definition.
gas_flow name=Oxi_400 flows= { O2=0.90 N2=0.10 }
 # Oxidation.
diffuse temperature=950 time=65 gas_flow=Oxi_400

 # 7) ----- Boron Implantation (Base). ----------
implant Boron energy=50 dose=@B_Dose@

 # 8) ----- Inert Annealing. ----------
diffuse temperature=900 time=@B_Time@

 # ----- RS Measuring. ----------
SheetResistance

 # 9) ----- Sacrificial Oxide Etching. ----------
 # Delete All Oxide Layers from Surface.
strip Oxide

 # 10) ----- Forming Sacrificial Oxide - 500 A. ----------
 # Dry Oxidation.
diffuse temperature=1000 time=42 O2

 # 11) ----- Phosphorus Implantation (Emitter). ----------

implant Phosphorus energy=30 dose=@E_Dose@

 # 12) ----- Inert Annealing. ----------
diffuse temperature=1100 time=@E_Time@

 # 13) ----- Reoxidation. ----------
 # Wet Oxidation.
diffuse temperature=900 time=20 H2O

 # 14) ----- Oxide Etching. ----------
 # Delete All Oxide Layers from Surface.
strip Oxide

 # 15) ----- Final Annealing. ----------
diffuse temperature=950 time=30

 # ----- Saving Profiles. ----------
SetPlxList { Phosphorus }
WritePlx Phosphorus
SetPlxList { Boron }
WritePlx Boron
SetPlxList { Arsenic }
WritePlx Arsenic
SetPlxList { NetActive }
WritePlx NetActive

 # ----- RS Measuring. ----------
SheetResistance

 # \\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\ THE END ////////////////////////////////////
exit

Описание данного файла можно построить по блокам.

1. Головной раздел файла:

– область моделирования – от 0 до 5 мкм;

– параметры сетки для библиотеки *MGoals* – минимальный шаг – 10 нм, максимальный – 50 нм, отношение размеров соседних ячеек – 1,2;

– подложка КДБ-10, ориентация <111>.

2. Формирование скрытого слоя (№ 1–4):

– термическое окисление в парах воды (80 %), толщина окисла 250 Å;

– имплантация As, доза = $1{,}0 \cdot 10^{14}$ см$^{-2}$, энергия 100 кэВ;

– отжиг в нейтральной среде при 1000 ^{o}C, 30 мин;

– определение X_j и *Rs*;

– удаление жертвенного окисла.

3. Создание эпитаксиального слоя (№ 5):

– осаждение слаболегированного *Si* толщиной 4 мкм;

– эмуляция температурной фазы эпитаксии: отжиг в нейтральной среде при 1100 °C, 60 мин.

4. Формирование базового слоя (№ 6–9):

– термическое жертвенное окисление в атмосфере из 90 % кислорода и 10 % азота, D_{ox} = 400 Å;

– имплантация бора, доза =*@B_Dose@* см$^{-2}$, энергия 50 кэВ, угол наклона пучка 7 градусов;

– отжиг в нейтральной среде при 900 °C в течение @B_Time@ мин;

– определение X_j и *Rs*;

– удаление жертвенного окисла.

5. Создание эмиттера (№ 10–12):

– термическое жертвенное окисление в атмосфере сухого кислорода, 500 Å;

– имплантация фосфора, доза =*@E_Dose@* см$^{-2}$, энергия 30 кэВ, угол наклона пучка 7 градусов;

– отжиг в нейтральной среде при 1100 °C в течении *@E_Time@* мин.

6. Завершающие операции маршрута (№ 13–15):

– термическое влажное окисление, D_{ox} = 400 Å;

– удаление жертвенного окисла;

– финальный инертный отжиг.

7. Сохранение результатов моделирования:

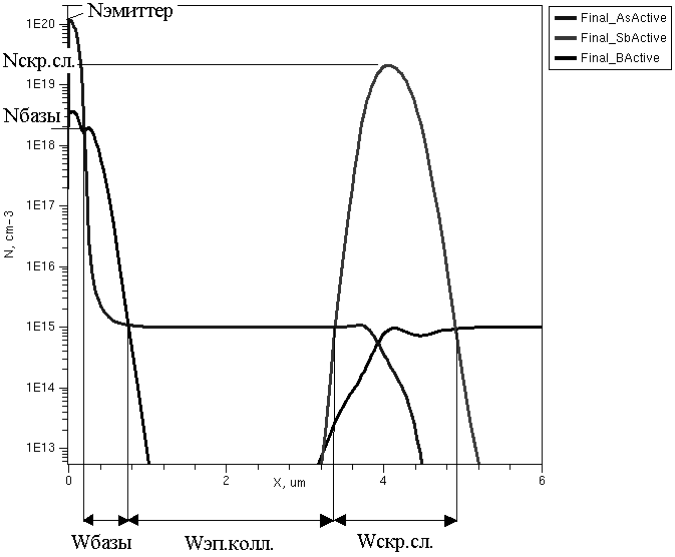
– запись данных о профилях легирования фосфора, бора, мышьяка и активной примеси;

– определение X_j и *Rs* и запись этих данных в выходном файле.

В процессе расчета предусмотрено, что в вычислительном эксперименте варьируемыми параметрами являются дозы легирования базы и эмиттера, а также время их диффузионных разгонок. Их численные значения соответствуют плану эксперимента, приведенному на рис. 2.4, *а*, а графики профилей легирования, полученные с помощью оболочки *Inspect*, – рис. 2.4, *б*.

	Family Tree				
		B_Dose	B_Time	E_Dose	E_Time
1	--	2.00e14	10	1.00e15	90
2					120
3					150
4				1.10e15	90
5					120
6					150
7				1.20e15	90
8					120
9					150

а



б

Рис. 2.2. Входные и выходные данные для командного файла *Lab_2Anpn.txt*:

а – план вычислительного эксперимента для *SWB*;
б – итоговые профили легирования мышьяка, бора и фосфора

2.5. БАЗОВЫЙ КОМАНДНЫЙ ФАЙЛ ДЛЯ SPROCESS ЧАСТИ В

```
# ********************************************************** #
#                                                            #
#                    --- <<< Lab_2b >>> ---                  #
#                                                            #
#**********************************************************#

graphics off

# ////////////////////////// PROCESS HEADER \\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\

# ----- Selecting Models. -------------

implant tables=Default
pdbSet Silicon Dopant DiffModel Pair

# ----- Meshing Strategy. -------------

mgoals on min.normal.size=1<nm> max.lateral.size=50<nm> \
        normal.growth.ratio=1.2 accuracy=0.1<nm>

# ----- Initial Grid. -----------------

line x loc=0                tag=Top    spacing=0.05
line x loc=2                tag=Bottom spacing=0.05
line y loc=0                tag=Mid    spacing=0.025
line y loc=@<Lg*0.001/2+0.3>@ tag=Right  spacing=0.025

# ----- Substrate. --------------------

region Silicon xlo=Top xhi=Bottom ylo=Mid yhi=Right
init field=Phosphorus concentration=5.00e14 wafer.
orient=100 slice.angle=-90

# ----- Saving Struct. ----------------

struct smesh=n@node@_0

# ////////////////////////////////// PROCESS \\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\

#   1) ----- Screen Oxide. ----------------------------------------------------
```

deposit Oxide thickness=20<nm> type=anisotropic

 # ----- Saving Struct. ----------

struct smesh=n@node@_1

 # 2) ---- P-well, Anti-punchthrough & Vt Adjustment Implants. ----------

implant Boron dose=2.00e13 energy=120 tilt=0 rotation=0
implant Boron dose=1.00e13 energy=50 tilt=0 rotation=0
implant Boron dose=1.00e13 energy=25 tilt=0 rotation=0

 # 3) ----- P-well: RTA of Channel Implants. ----------

diffuse time=10<s> temp=1050

 # ----- Saving Struct. ----------

struct smesh=n@node@_3

 # 4) ----- Clean PAD Oxide. ----------

etch Oxide thickness=22<nm> type=anisotropic

 # ----- Saving Struct. ----------

struct smesh=n@node@_4

 # 5) ----- Gate Oxidation. ----------

deposit Oxide thickness=1.2<nm> type=anisotropic

 # ----- Saving Struct. ----------

struct smesh=n@node@_5

 # 6) ----- Poly Gate Deposition. ----------

deposit PolySilicon thickness=0.14 type=anisotropic

mask name=gate_mask left=-1 right=@<Lg*0.001/2>@

etch Poly thickness=0.16 mask=gate_mask type=anisotropic
etch Oxide thickness=0.1 type=anisotropic

 # ----- Saving Struct. ----------

struct smesh=n@node@_6

 # 7) ----- Poly Reoxidation. ----------

gas_flow name=flow_1 flowN2=0.99 flowO2=0.01
diffuse time=10 temp=900 gas_flow=flow_1

 # ----- Saving Struct. ----------

struct smesh=n@node@_7

 # 8) ----- Reflect Before Halo. ----------

transform reflect left

 # ----- Saving Struct. ----------

struct smesh=n@node@_8

 # 9) ----- N-LDD Implantation. ----------

implant Arsenic dose=8.00e14 energy=5 tilt=0 rotation=0 ifactor=0.*1*

 # 10) ----- Halo Implantation: Quad HALO Implants. ----------

implant Boron dose=6.00e13 energy=10 tilt=30 rotation=0 mult.rot=4 ifactor=0.1

 # 11) ----- Structure Cut. ----------

transform cut left loc=0

 # ----- Saving Struct. ----------

```
struct smesh=n@node@_11

#  12) ----- RTA of LDD/HALO Implants. ----------------------------------------

diffuse time=1<s> temp=1000 init=1e-8

# ----- Saving Struct. ----------------

struct smesh=n@node@_12

#  13) ----- Nitride Spacer. ------------------------------------------------

deposit Oxide   thickness=0.01  type=isotropic
deposit Nitride thickness=0.025 type=isotropic
deposit Oxide   thickness=0.01  type=isotropic

etch    Oxide   thickness=0.05  type=anisotropic
etch    Oxide   thickness=0.001 type=isotropic
etch    Nitride thickness=0.06  type=anisotropic
etch    Nitride thickness=0.001 type=isotropic
etch    Oxide   thickness=0.008 type=anisotropic

# ----- Saving Struct. ----------------

struct smesh=n@node@_13

#  14) ----- N+ implantation. ------------------------------------------------

implant spec=Phosphorus damage
implant Phosphorus dose=1.50e15 energy=20 tilt=0 rotation=0 ifactor=0.1

#  15) ----- Final RTA. ----------------------------------------------------

diffuse time=1<s> temp=1025 init=1e-8

# ----- Saving Struct. ----------------

struct smesh=n@node@_15
```

```
# 16a) ----- #split <Strain> ------------------------------------------------

etch    Oxide      thickness=30<nm> type=isotropic
deposit Oxynitride thickness=75<nm> type=isotropic

# ----- Saving Struct. ----------------

struct smesh=n@node@_16a

# 16b) ---------------------------------------------------------------------

#if @<Strain == 1>@

   stress Oxynitride sxxi=@Sxx@e9<Pa> syyi=@Syy@e9<Pa>
szzi=@Szz@e9<Pa>

   # ----- Saving Struct. ----------------

   struct smesh=n@node@_16b

#endif

# 16c) ----- Recompute the Stress Distribution. --------------------------------

pdbSet Silicon Dopant DiffModel Constant

diffuse time=1e-10 temp=1025

#  17) ----- Final Reflect. ---------------------------------------------------

transform reflect left

# ----- Saving Struct. ----------------

struct smesh=n@node@_17

# ----- Saving Profiles. --------------

SetPlxList { Boron Arsenic Phosphorus NetActive }
```

```
WritePlx n@node@_CH y=0
WritePlx n@node@_SD y=@<Lg*0.001+0.25>@

# ----- RS Measuring. -----------------

SheetResistance y=0
SheetResistance y=@<Lg*0.001+0.25>@

# \\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\\ THE END //////////////////////////////////

exit
```

Структура плана вычислительного эксперимента, обеспечивающая вариации длины затвора, толщины *cap*-пленки [2–3] и компонентов тензора механических напряжений в *cap*-пленке, соответствует рис. 2.5.

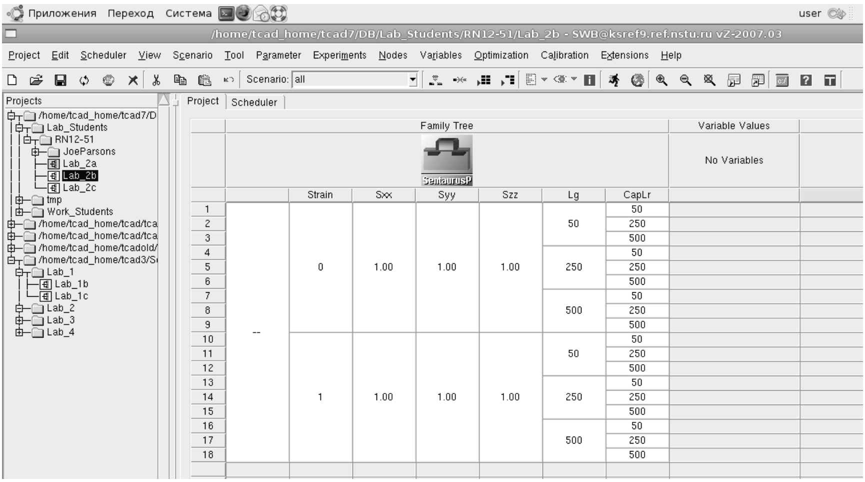


Рис. 2.5. Структура плана вычислительного эксперимента в оболочке *SWB*

Двумерные профили легирования активной примеси на различных стадиях создания моделируемой структуры *n*-МОП нанотранзистора имеют вид, аналогичный приведенному на рис. 2.6.

На рис. 2.7 показаны графические результаты расчетов компонентов тензора механических напряжений.

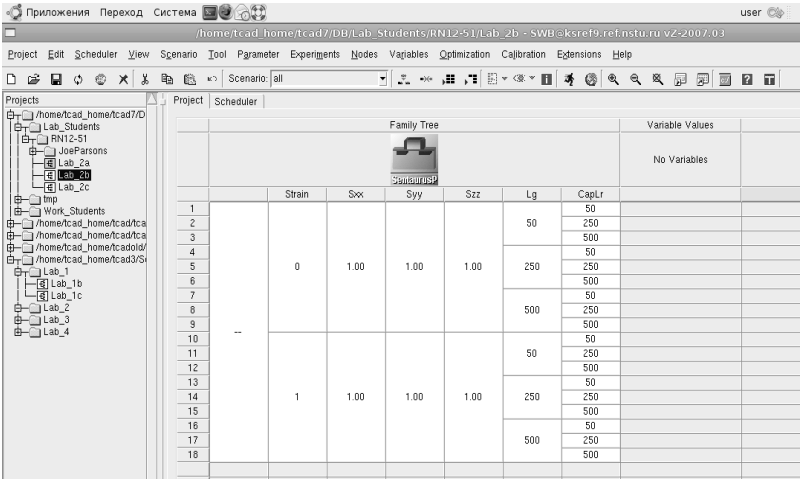


Рис. 2.5. Структура плана вычислительного эксперимента в оболочке *SWB*

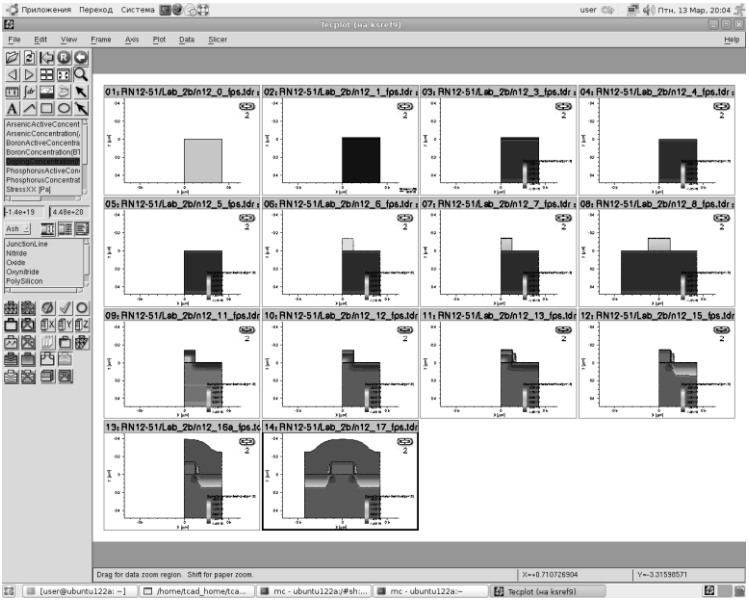
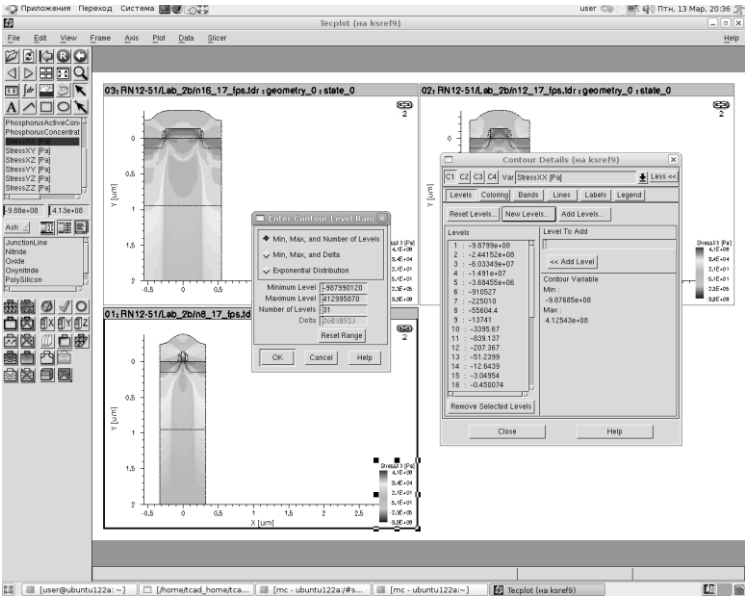


Рис. 2.6. Двумерные структуры, отображающие процесс создания *n*-МОПТ на напряженном кремнии, полученные на основе командного файла для части ***B***



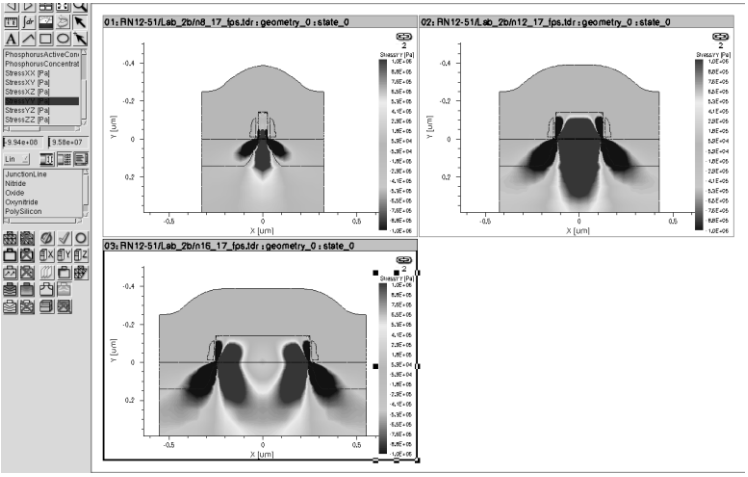


Рис. 2.7. Изображения компонентов тензора механических напряжений σ_{XX} и σ_{YY} в *n*-МОПТ

2.3. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Включить *PC*, запустить ОС *Windows*, найти в директории *D:\user\TCAD* (*Файлы для Lab_2*) текстовый командный файл *Lab_2Anpn.txt* и на его основе, с учетом особенностей операций ионной имплантации и диффузии, описанных в разделе 2.2, составить фрагмент технологического маршрута, определенного в разделе 2.3.

При этом надо учесть следующие особенности. Глубина области моделирования должна составлять 15 мкм. Формируемый командный файл предназначен для моделирования обоих сценариев *part1* и *part2*. Поэтому необходимо составить перечень имен варьируемых параметров (аналогичных *E_Dose*, *B_Dose*, *E_Time*, *B_Time* из *Lab_2Anpn.txt*), которые будут определять вычислительные эксперименты в оболочке *SWB* (их общее число должно быть равно 8) и показать его для проверки преподавателю. В формируемом командном файле имена варьируемых параметров должны быть заключены в скобки вида @ИМЯ@.

В том случае, когда необходим перевод единиц измерения, то математические выражения, его обеспечивающие, дополнительно надо взять в скобки *@<ВЫРАЖЕНИЕ>@*, например для дозы *@<Dose*1e-6/1.6022e-19>@*, а для перевода процентного содержания атмосферы в парциальные давления – *@<O2/100.>@*.

При сохранении профилей легирования нужно использовать следующие команды, учитывающие текущий номер узла:

SetPlxList { NetActive }

WritePlx Node@node@.

Для автоматического вычисления толщины окисла следует вставить в командный файл соответствующую процедуру, которая также содержится в директории *D:\user\TCAD* (*Файлы для Lab_2*). Тело процедуры необходимо разместить перед головным разделом командного файла, а обращение к ней – перед командой *SheetResistance*.

Подготовленный в текстовом редакторе командный файл надо предъявить для проверки преподавателю, а потом переписать на флешку с именем *Lab_2a.txt*.

Необходимо также переписать на флешку два оставшихся в директории файла, обеспечивающих работу утилиты *Measure*.

При составлении отчета дома сравнить данный командный файл *sprocess_fps.cmd* с командным файлом *sprocess_lig.cmd* из первой лабораторной работы и описать основные отличия (прежде всего в командах).

2. Затем следует перезагрузиться, запустить *Ubuntu*, соединиться с сервером и запустить *SWB*. В своей рабочей директории надо создать папку *Lab_2* и в ней проект, вычислительный поток которого состоит из приложения *SProcess* и утилиты *Measure*, задать имя сценария *part1*, потом – сохранить созданный проект с именем *Lab_2a* (выбрав *save as* и нажав *OK* два раза).

3. Запустив второе окно *Терминала*, с помощью *MC* переписать три подготовленных файла (два командных и один – шаблонный) с флешки в свою рабочую директорию.

4. Вернуться в оболочку *SWB*, импортировать переписанный файл правой кнопкой, нажатой по иконке *SProcess*, выбрав затем *import file > commands*. Для контроля просмотреть результат вставки путем перехода в редактор командных файлов (подобно процедуре вставки). Аналогично импортировать файл для *Measure*.

5. Теперь следует задать план вычислительного эксперимента для сценария *part1*. Прежде всего следует ввести список из 8 варьируемых технологических параметров, определенных выше. Для этого в поле под иконкой *SProcess* по правой кнопке последовательно ввести имена параметров. Затем через меню *Experiments > Add new experiment* заполнить числовые данные вашего вычислительного эксперимента, соответствующего сценарию *part1*, и **сохранить проект**.

6. Провести расчет, соответствующий сценарию *part1*. Выписать данные по *Rs* и X_j, соответствующие каждому узлу, а также данные, определяющие толщину выращенного окисла двумя способами (ручным вычислением по выходному файлу и автоматическим вычислением) в зависимости от процентного содержания кислорода и ориентации подложки. В *Inspect* построить график зависимости профилей легирования активной примеси от процента содержания кислорода в атмосфере и привести его в отчете. Дома представить табличные данные в графическом виде и привести их в отчете с соответствующими таблицами и выводами.

В отчете следует также привести следующие данные: подробно откомментированный на русском языке составленный выше командный файл *sprocess_fps.cmd*; подсчитать, сколько всего новых файлов возникнет в рабочей директории после выполнения сценария *part1*; определить, сколько файлов соответствуют одному расчетному узлу и привести список расширений этих файлов с указанием их назначений.

7. Другую часть сценария *part2* задать через меню *Scenario* и затем аналогично пункту 5 заполнить данные по вычислительному эксперименту, соответствующие вашему варианту задания из раздела 2.3.

8. Провести расчет, соответствующий сценарию *part2*. Выписать данные по *Rs* и X_j, соответствующие каждому узлу в зависимости от корня квадратного от времени, и дома построить графики этих зависимостей при различных дозах (графики разгоночных кривых), в отчете сделать соответствующие выводы.

9. Приступить к выполнению части ***B***. Для этого перенести в свою рабочую директорию из общей папки соответствующий проект и переписать к себе на флешку командный файл. Дома проанализировать структуру командного файла и описать маршрут изготовления двумерной полупроводниковой структуры *n*-МОП нанотранзистора аналогично описанию, приведенному в разделе 2.5. При этом перечислить новые команды и описать их назначение.

10. Изменить данные по вычислительному эксперименту, соответствующие вашему варианту, приведенному в табл. 2.2. При этом необходимо выполнить два варианта расчетов (без создания сценариев). Первый – выбрав минимальную толщину *cap*-пленки, рассчитать двумерные распределения мышьяка, бора и фосфора и активной легирующей примеси аналогично рис. 2.6 для трех вариаций длины затвора с учетом наличия механических напряжений в *cap*-пленке и без них. Затем для какой-нибудь определенной длины затвора и типа механических напряжений в *Tecplot_SV* получить двумерные графики распределения легирующих примесей на различных стадиях технологического маршрута, перехватить четыре получающиеся картинки и включить их в отчет.

Таблица 2.2

Варианты задания для части *B*

№ п/п	Длина затвора *Lg*, нм	Толщина пленки d_{cap}, нм	Компоненты тензора напряжений *Sxx*, *Syy*, *Szz*, ГПа
1	50, 250, 500	55, 85, 150	2, 1, 1
2	60, 260, 600	50, 75, 100	1, 2, 1
3	70, 240, 550	60, 80, 110	1, 1, 1
4	80, 200, 500	65, 85, 155	1, 2, 0
5	90, 180, 480	40, 60, 75	1, 1, 2

11. Затем построить двумерные профили распределения компонентов тензора механических напряжений (*StressXX*, *StressYY*, *StressXY*) в зависимости от длины затвора (согласно номеру бригады) для двух

случаев – с учетом и без учета напряжений в *cap*-слое. Перехватить шесть картинок и привести их в отчете.

12. Используя проект *n*-МОПТ части ***B*** в качестве основы, модифицировать его с целью получения двумерной структуры *p*-МОПТ на напряженном кремнии. При этом знак механических напряжений в *cap*-слое следует изменить на противоположный и изменить дозы легирования и времена разгонок исток-стоков таким образом, чтобы избежать эффекта их диффузионного смыкания в канале транзистора. В отчете описать выполненную модификацию командного файла.

13. Для минимальных значений длины канала и *cap*-пленки рассчитать распределение компонентов тензора механических напряжений структуры при двух ее состояниях: при наличии и отсутствии механических напряжений в *cap*-слое. Перехватить полученные при этом картинки и вставить их в отчет.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Быстрый термический отжиг происходит при температуре 900 °С в течение 5 с в атмосфере сухого кислорода. Опишите эту операцию в формате команд *SProcess*.

2. Запишите команду ионной имплантации бора с параметрами: D = 800 мкКул/см^2, E = 100 кэВ и с учетом эффекта каналирования.

3. Запишите команду ионной имплантации фосфора с параметрами: D = 800 мкКул/см^2, E = 100 кэВ без учета эффекта каналирования.

4. Перечислите основные классы моделей имплантационных профилей и поясните назначение команды *implant tables=Default*.

5. Перечислите основные классы моделей диффузии в *SProcess* и поясните назначение команды *pdbSet Silicon Dopant DiffModel Pair*.

6. Приведите один из основных типов формата команды *implant* и поясните физический смысл ее параметров с указанием их единиц измерения по умолчанию.

7. Поясните, каким образом в командном файле для расчета *p–n*-*n*ерехода сохраняются данные о графических результатах моделирования технологических операций. Каким образом можно посмотреть эти данные в оболочке *Tecplot_SV*?

8. Технологическая операция инертного термического отжига состоит из трех рабочих интервалов: подъема температуры (форсаж) с 800 °С до 1000 °С за 10 мин, полки на 1000 °С в течение 30 мин и снижения с 1000 °С до 800 °С за 40 мин. Закодируйте эту операцию с помощью команды *diffuse* для *SProcess*.

9. Перечислите, какие химические газы можно перемешивать при создании окислительной атмосферы в *Sprocess*, и приведите пример команды, это реализующей.

10. Какая модель процесса ионной имплантации используется по умолчанию в команде *implant* и каким образом ее можно заменить на модель гауссианы?

11. В каких единицах измерения задаются величины компонентов смеси атмосферы, используемой при термическом окислении? Приведите пример команды, задающей атмосферу следующего состава: кислород – 10 %; азот – 89,9 %, HCl – 0,1 %.

12. Опишите методику создания проекта, содержащего приложение *SProcess*, командный файл которого создан не в оболочке *Ligament Flow Editor*, а в текстовом редакторе.

13. Опишите методику импорта текстового командного файла для приложения *SProcess* в оболочке *SWB*.

14. Каким образом в оболочке *SWB* задаются имена параметров технологических режимов, содержащиеся в командном файле *sprocess_fps.cmd*?

15. Поясните, каким образом в оболочке *SWB* задаются значения параметров, определяющих вычислительный эксперимент для *Sprocess*.

16. Как можно получить данные по результатам моделирования параметров *p-n-n*ерехода, соответствующие какому-либо конкретному узлу плана вычислительного эксперимента?

17. Опишите методику вычисления толщины термически выращенного окисла, получающегося в конце маршрута моделирования по выходным данным приложения *SProcess*.

18. Объясните понятие «процедура в командном файле» и опишите технологию применения процедуры в лабораторной работе.

19. Поясните, каким образом задаются сжимающие напряжения в *cap*-пленке *p*-МОПТ и как надо модифицировать командный файл для расчета *n*-МОПТ в файл для расчета в *p*-МОПТ.

20. Какова предельная величина допустимых деформаций и механических напряжений в кремнии и каким образом ГПа можно перевести в единицы атмосфер?

21. Как в командном файле для расчета *n*-МОПТ сохраняются данные о графических результатах моделирования технологических операций и каким образом можно визуализировать эти данные в оболочке *Tecplot_SV*?

22. Укажите компоненту тензора механических напряжений, действующую вдоль канала *n*-МОПТ, и поясните, будут ли возникать эти напряжения в том случае, когда *cap*-пленка осаждается без наличия в ней механических напряжений.

23. Каким образом можно получить и улучшить двумерное изображение при прорисовке компонент тензора механических напряжений в оболочке *Tecplot_SV*?

24. Поясните, в каких частях структуры *n*-МОПТ возникают механические напряжения, действующие вдоль канала. Чем картина этих напряжений для структуры *n*-МОП нанотранзистора с ненапряженной *cap*-пленкой отличается от картины с напряженной *cap*-пленкой?

25. Объясните, из каких результатов расчетов, полученных в лабораторной работе, следует, что быстродействие *n*-МОП нанотранзистора на напряженном кремнии увеличивается по сравнению со случаем ненапряженного кремния.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 3

СКВОЗНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРЕМНИЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР В TCAD SENTAURUS

3.1. ЦЕЛЬ И СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Цель работы – освоение методик сквозного моделирования ВАХ и электрофизических параметров кремниевых полупроводниковых структур на основе последовательного использования вычислительных потоков, содержащих приложения *SProcess* и *SDevice* с последующим анализом данных в графических оболочках.

Содержанием работы является изучение различных методик по подготовке данных о контактах в структуре, профилях легирования, полученных в *SProcess* и передаваемых в *SDevice* на основе приложения *SSE*, а также командных файлов для *SDevice*. В ходе выполнения работы в оболочке *SWB* проводятся двумерные расчеты ВАХ различных структур *p–n*-переходов, определяется величина напряжения пробоя в них, а также исследуется влияние механических напряжений на ВАХ *n*-МОПТ на напряженном кремнии.

3.2. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

3.2.1. ОСНОВНЫЕ СПОСОБЫ ПОДГОТОВКИ ДАННЫХ ДЛЯ SDEVICE О ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЕ, ПОЛУЧЕННОЙ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ В SPROCESS

Для проведения расчетов электрофизических характеристик (ВАХ, ВФХ и т. д.), а также различных электрофизических параметров (напряжения пробоя *p–n*-перехода, коэффициентов усиления для БТ,

пороговых напряжений для МОПТ и др.) в полупроводниковой структуре, рассчитанной в технологическом приложении *SProcess*, необходимо определить контакты, на которых задаются управляющие напряжения и через которые протекают токи электродов. Кроме того, технологическая область моделирования зачастую не совпадает с электрофизической областью моделирования, например, в *SProcess* область моделирования может составлять половинку МОПТ от истока до центра канала, в то время как в *SDevice* для расчета нужна полная структура, содержащая как область истока, так и область стока.

Задавать информацию о контактах структуры в *Sentaurus* можно различными способами: с помощью специальных команд, имеющихся в *SProcess*, либо передачей данных из *SProcess* в *SSE* с последующим определением областей контактов.

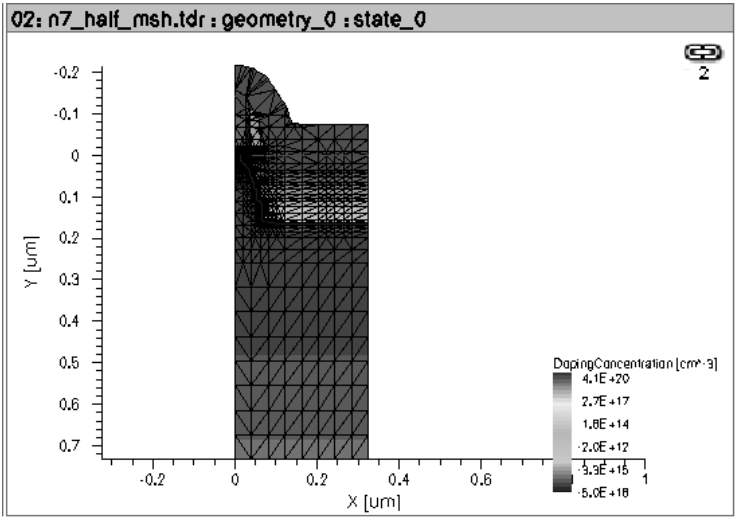
В *SProcess*, например, для определения двух контактов в *p–n*-переходе (анода к *p*-области и катода – к *n*-области), аналогичном структуре из лабораторной работы 1, можно использовать следующие команды:

```
# ----- Осаждение алюминия ----------------------------

mask name=Metal segments= { 0 0.7   1.3 2 }
deposit Aluminum thickness=0.3 mask=Metal isotropic

# ----- Определение контактов --------------------------

contact bottom name=Anode
contact box xlo=-0.7 xhi=0.1 ylo=0.3 yhi=1.7 name=Cathode Aluminum
```

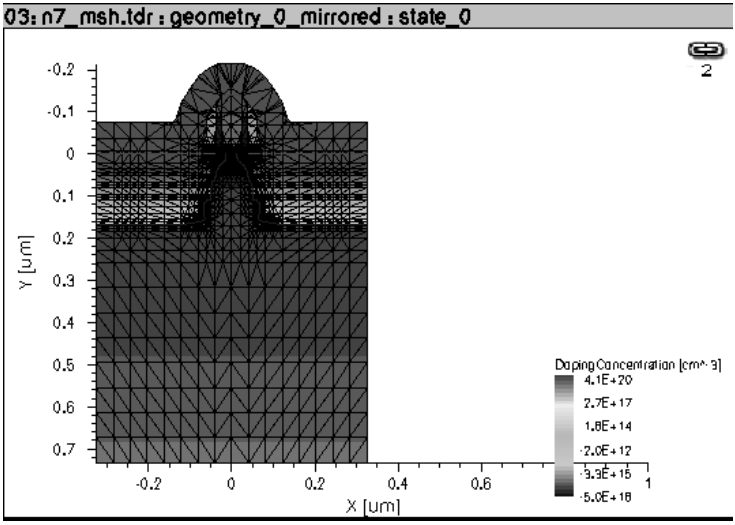
Преобразование области моделирования на примере МОПТ в соответствии с рис. 3.1 можно реализовать с помощью команды *transform reflect left***.**

Способ подготовки файлов данных с помощью приложения *SSE* рассмотрен в разделах 3.2.2–3.2.3.

В версии *Sentaurus* Z-2007.03 для окончательной подготовки входного файла для *SDevice* (**_msh.tdr*), содержащего информацию о геометрии моделируемой структуры, профили легирования в ней и расчетную сетку, следует использовать приложение *SSE*. Пример командного файла, обеспечивающего такую подготовку для 2*D* структуры, состоящей из *p–n*-перехода с уже заданными в нем контактами, дается ниже.



а



б

Рис. 3.1. Технологическая (*а*) и электрофизическая (*б*) области моделирования

```
; Clearing the Database

(sde:clear)

; Defining Parameters

(define BND "Diode_1-@previous@_bnd.tdr")
(define DOP "Diode_1-@previous@_fps.tdr")

; Reading the Boundary

(sdeio:read-tdr-bnd BND)

; Reading the Doping

(sdedr:define-refinement-window "DopWin" "Rectangle"
    (position 0.0 0.0 0.0) (position 2.0 2.0 0.0))
(sdedr:define-submesh-placement "Process"
    "Doping" "DopWin" 0 "NoReplace" 0 0 0 "" "Z" 0)
(sdedr:define-submesh "Doping" DOP)

; Defining Global Grid

(sdedr:define-refinement-size "GloGr" 0.1 0.1 0.1 0.1)
(sdedr:define-refinement-placement
    "Placement_GloGr" "GloGr" "DopWin")

; Refinement Boxes

(sdedr:define-refinement-window "RefBox" "Rectangle"
    (position 0.5 0.0 0.0) (position 1.5 0.5 0.0))
(sdedr:define-refinement-size "RefBoxGr" 0.01 0.01 0.01 0.01)
(sdedr:define-refinement-placement
    "Placement_RefBox" "RefBoxGr" "RefBox")

; Saving the MESH Command File

(sdeio:save-tdr-bnd (get-body-list) "n@node@_bnd.tdr")
(sdedr:write-cmd-file "n@node@_msh.cmd")
```

; Build Mesh

(system:command "snmesh n@node@_msh")

3.2.2. ОСНОВНЫЕ ОСОБЕННОСТИ РАБОТЫ В ПРИЛОЖЕНИИ SENTAURUS STRUCTURE EDITOR

SSE является инструментом для создания/редактирования 2*D*/3*D* структур полупроводниковых приборов в рамках *TCAD Sentaurus*. При трехмерном моделировании он позволяет также проводить эмуляцию некоторых стандартных технологических операций микроэлектроники. Процесс создания/редактирования прибора может выполняться двумя способами: в интерактивном режиме с помощью встроенного *GUI* (*Graphical User Interface*) и редактированием командного файла посредством текстового редактора.

Любой создаваемый в *SSE* прибор может быть представлен совокупностью трех основных блоков: конструктивной геометрии прибора (прямоугольники, полигоны и т.д.); блока, задающего постоянные и аналитические профили легирования и блока, определяющего стратегию построения конечно-элементной сетки. Таким образом, *SSE*, помимо всего прочего, является интерфейсом для конфигурирования и вызова приложений, обеспечивающих процесс построения сетки (например, *Sentaurus Mesh*, *Noffset3D*), для чего им создаются файлы **.bnd* (*boundary* – граница) и **.cmd* (*command* – команда). Необходимо отметить, что это справедливо лишь при работе с *GUI*. После успешного завершения работы *SSE* генерирует файл: **_msh.tdr*, который является входным для приложения *SDevice,* моделирующего электрофизику прибора.

Альтернативой работы с *GUI* является написание командного файла с использованием сценариев, основанных на внутреннем языке *Scheme*. Данный способ является очень полезным при создании параметризованных структур приборов (например, по геометрии). Основные команды, используемые при создании геометрии прибора, задании профилей легирования и построении сетки, будут рассмотрены ниже на конкретном примере.

По умолчанию геометрические размеры в *SSE* измеряются в микрометрах, но при желании может быть введен масштабный коэффициент, позволяющий использовать другие единицы измерения. При 2*D* моделировании принимается следующая система координат: ось *X*

направлена вправо, а ось *Y* – вниз (прямо противоположно системе координат, принятой в *SProcess*). Также по умолчанию *SSE* настроен на работу со входным командным файлом под именем *sde_dvs.cmd*, который должен находиться в папке проекта.

За более подробной информацией о технологии работы в *SSE* надо обратиться к соответствующим разделам руководства пользователя (*User Guide*) или учебного курса – *Sentaurus Traning*.

3.2.3. ОСНОВНЫЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СОЗДАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ *p–n*-ПЕРЕХОДА В ИНТЕРАКТИВНОМ РЕЖИМЕ SSE

Исходная задача: создать в приложении *SSE* в интерактивном режиме без использования технологического моделирования *SProcess* структуру *p–n*-перехода, аналогичную описанной в разделе 3.2.1.

Вначале необходимо запустить *SSE* в новом окне *Терминала* в автономном режиме по команде *SDE*, набранной в командной строке. Затем в раскрывшемся окне (рис. 3.16) следует изменить состояние интерактивного режима, принятого по умолчанию. Для этого нужно:

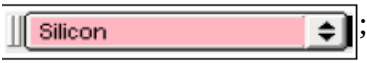
1) переключиться в режим точного ввода координат (*exact coordinates mode*): *Draw > Exact coordinates*;

2) отключить опцию автоматического именования создаваемых областей прибора: *Draw > Auto Region Naming* (галочка должна отсутствовать).

Создание конструктивной геометрии прибора, состоящей из подложки, маскирующего слоя двуокиси кремния и двух контактов, следует начинать с задания подложки. Профили легирования в *p–n-пе*реходе и расчетная сетка определяются после описания геометрии.

- ***Создание подложки***

а) Выбрать материал: на панели инструментов в списке материалов (*Material List*) находим кремний – *Silicon* (обычно стоит по умолчанию)



;

б) Создать регион подложки, для чего в качестве геометрической фигуры выбрать прямоугольник. Это можно сделать, либо посредством соответствующей кнопки на панели инструментов, либо через меню *Draw > 2D Create Tools > Rectangular Region.* При этом для появления диалогового окна, в котором необходимо ввести координаты

двух противоположных углов прямоугольника (*Exact Coordinates*), необходимо два нажатия (клика) мыши. В появившемся окне вводим следующие координаты: (0 ; 0), (2 ; 2). Далее появится диалоговое окно, в котором необходимо ввести идентификационное имя созданного региона/области. В нашем случае это *“R.Substrate”*.

- ***Создание слоя оксида***

Аналогичным образом создаем слой оксида на поверхности подложки. Параметрами этого слоя являются: материал == SiO_2, координаты углов прямоугольника (0 ; 2), (2 ; 2,2), имя региона *“R. Oxide”*. Так как на экране окисел будет находиться внизу, изображение следует перевернуть.

- ***Создание области окна под алюминиевый контакт катода***

Катодный контакт должен располагаться в окне масочного слоя. Поэтому, прежде чем создавать собственно контакт, нужно сформировать область, имитирующую окно в маске. Так как в этом случае слой алюминия имеет Т-образную форму, то в качестве геометрической фигуры нужно выбрать полигон (многоугольник). Доступ к нему аналогичен выбору прямоугольника с тем лишь отличием, что в меню выбирается *Polygonal Region* или на панели кнопка . Прежде чем создавать собственно фигуру, необходимо установить параметр замещения регионов (*Default Boolean Expression*). Это можно сделать через *Draw* > *Overlap Behavior* > *New Replaces Old* или посредством кнопки . При создании полигона после каждого нажатия левой кнопки мыши появляется диалоговое окно, в котором необходимо ввести координату следующей точки. Последовательность точек должна быть следующая: (0,8 ; 2), (1,2 ; 2), (1,2 ; 2,2), (1,6 ; 2,2), (1,6 ; 2,3), (0,4 ; 2,3), (0,4 ; 2,2), (0,8 ; 2,2), (0,8 ; 2,1). При этом в качестве материала нужно выбрать алюминий. Для того чтобы завершить создание полигона, ввод последней точки необходимо инициировать нажатием средней кнопки мыши. Имя региона можно определить как *“R.Contact”*.

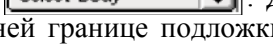
- ***Создание собственно контактов***

Для определения контакта необходимо вызвать соответствующее диалоговое окно посредством меню *Contacts* > *Contact Sets*. В нем необходимо заполнить поле имени контакта (*Contact Name*), выбрать цвет контакта (*Edge Color*) и его толщину (*Edge Thickness*). Чтобы добавить определенный контакт в список контактов, необходимо нажать кнопку *Set*. В конструируемой структуре следует описать два контакта со следующими параметрами: 1) имя – *Anode*, цвет (в формате *RGB*) – 100, толщина контакта – 6; 2) имя – *Cathode*, цвет – 010, толщина – 6.

После определения контактов их необходимо активировать. В конкретный момент времени активированным может быть только один контакт. Активация производится посредством вызова диалогового окна *Contact Sets* через меню *Contacts*. Далее в списке контактов выбирается необходимый контакт и нажимается кнопка *Activate*. Альтернативой данному способу активации служит выбор контакта из списка на панели инструментов. Так выглядит этот список по умолчанию

.

Также следует знать, что существует несколько способов добавления контакта к структуре, но в данной лабораторной работе будут рассмотрены только два.

1. Активируем контакт *Anode*. Далее необходимо выбрать уровень выделения (*Selection Level*). Он необходим для того, чтобы менять формат выбора областей прибора. Для анода необходимо выбрать *Select Edge,* что означает выбор лишь отдельных сторон геометрического объекта (например, стороны прямоугольника подложки). Список *Selection Level* находится на панели инструментов и по умолчанию выглядит следующим образом: 

. Далее поместим курсор как можно ближе к нижней границе подложки (месту расположения анода) и нажмем правую кнопку мыши, после чего соответствующая сторона подложки (на самом деле отрезок между двумя точками) выделится цветом. Для того чтобы контакт к подложке появился на изображении, остается подтвердить свое желание использовать в качестве анода именно выделенный отрезок. Это можно сделать с помощью *Contacts > Set Edge(s)***.**

2. Добавление электрода *Cathode* абсолютно аналогично предыдущему, но здесь *Selection Level* имеет значение *Select Body* и выбирать нужно не отрезок, а целую область/регион (в нашем случае *R.Contact*). А для подтверждения добавления контакта используется последовательность *Contacts > Set Region Boundary Edges*.

После завершения создания контактов нужно **удалить область** *R.Contact* следующим образом: *Edit > 2D Edit Tools > Delete Region*.

- ***Определение профилей легирования***

Постоянный профиль легирования имеет подложка (КДБ-20). В качестве легирующей примеси используется бор с концентрацией $6{,}8 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$. Механизм, позволяющий добавлять профили легирования (как постоянные, так и аналитические) и области перестроения сетки, состоит из следующих основных частей:

– области преобразования (*Refinement/Evaluation Window)*;

– стратегии преобразования (параметры профиля, параметры сетки);

– конструкции, объединяющей оба предыдущих понятия (*Placement*).

В качестве области преобразования может быть не только прямоугольник, но и полигон, кубоид и даже линия (для аналитического профиля легирования). Необходимость конструкции *Placement* заключается в дополнительном наборе опций, который будет раскрыт по мере необходимости (за более подробной информацией следует обратиться к руководству пользователя или тренингу).

Для добавления постоянного профиля легирования нужно выполнить последовательно *Device* > *Constant Profile Placement* или же на панели инструментов нажать кнопку . В поле имени размещения (*Placement Name*) нужно указать *Pl.Constant*, а в поле области типа размещения (*Placement Type*) – *Region == R.Substrate*. В поле параметров профиля легирования (*Constant Profile Definition*) необходимо указать имя профиля (*Name*) *Pr.Boron*, тип примеси (*Species*) *BoronActiveConcentration*, концентрацию примеси (*Concentration*) 6.8E14. Затем следует нажать кнопку *Add Placement*.

Для аналитического профиля легирования доступ к его созданию осуществляется через *Device* > *Analytical Profile Placement* или с помощью соответствующей кнопки на панели инструментов . Но прежде чем задавать параметры профиля или области размещения, необходимо создать область преобразования (*Refinement/Evaluation Window*). Как отмечалось выше, это будет линия (*Base Line*). Назначением этой линии определяется начало распространения функции, задающей аналитический профиль (Гауссиана или функция ошибок). Направление распространения профиля относительно этой базовой линии возможно одновременно в обе стороны. Также варьируя длину данной линии, можно корректировать размеры и форму 2*D* профиля при постоянных прочих его характеристиках. Создание базовой линии осуществляется через меню *Mesh* > *Define Ref/Eval Window* > *Line*. В появившихся диалоговых окнах нужно указать следующие параметры: координаты точек – (0,7 ; 2,0), (1,3 ; 2,0); имя этого “окна” – *RW.BaseLine*. Далее можно задавать параметры аналитического профиля. В поле *Placement Name* задаем *Pl.Analytical*, в поле *Ref/Win* должна появиться созданная нами заранее *RW.BaseLine*. Теперь перейдем к определению параметров профиля (*Profile Definition*). Именем профиля назначим *Pr.Phosphorus*, тип профиля (*Profile Type*) определим как Гауссиану (*Gaussian*), а примесь (*Species*) – фосфор (*PhosphorusActiveConcentration*). Далее требуется задать параметры, необходимые для построения Гауссианы: пиковую концентрацию (*Peak*

Concentration) == 7.5E16 см$^{-3}$, положение максимума относительно базовой линии (*Peak Position*) == 0 мкм, концентрацию, при которой возникает *p–n*-переход (*Junction*) == 6.8E14 см$^{-3}$ и глубину залегания перехода (*Depth*) == 0,3 мкм. Важно также указать параметры латерального (бокового) распространения примеси (*Lateral Diffusion*), а именно функцию распределения в латеральном направлении (*Gaussian vs Error Function*), способ определения спада примеси (*Factor vs Standard Deviation vs Length*) и соответствующее последнему параметру значение. В качестве функции выберем Гауссиану, а спад будет реализован посредством параметра *Factor* со значением 0,8. В качестве направления распространения профиля относительно базовой линии (*Eval Direction*) выберем направление перпендикулярно вниз от маски в подложку.

- ***Создание сетки***

Сначала определим глобальную стратегию построения сетки в подложке. Выполним цепочку: *Mesh* > *Refinement Placement.* и заполним поля диалогового окна *Refinement Specification.* Имя размещения (*Placement Name*) – *Pl.Global, Placement Type – Region == R.Substrate.* В блоке *Refinement Definition* необходимо указать параметры непосредственно стратегии распределения: имя стратегии (*Name*) == *RD.Global,* максимальные и минимальные размеры элемента в трехмерном пространстве. Так как в данной работе рассматривается 2*D* случай, то *Z* координата всегда равна 0, а в направлениях *X* и *Y* для глобальной стратегии выберем постоянное разбиение с размером элемента 0,1 мкм. Параметр *Refinement Function* отвечает за перестроение сетки (как правило, за сгущение) в зависимости от выбранного критерия. Выберем *Gradient – PhosphorusActiveConcentration* со значением *Value* == 1. После этого необходимо нажать кнопку *Add,* чтобы добавить функцию перестроения (*Refinement Function*) в список и затем жмем кнопку *Add Placement.*

Теперь можно перейти к перестроению сетки в области аналитического профиля. Гладкость профиля или границы раздела *p–n*-перехода определяют не только параметры профилей легирования, но и размеры элементов сетки на соответствующих границах раздела. Поэтому перестроим сетку в прямоугольной области, охватывающей аналитический профиль и его окрестности. Для этого сначала создадим область преобразования (*Refinement/Evaluation Window*), которая в отличие от базовой линии будет прямоугольником с именем *RW.Profile*. Координаты двух его противоположных вершин – (0,5 ; 2), (1,5 ; 1,5). Затем вызовем диалоговое окно *Refinement Specification*. Заполняем его поля следующими данными: (*Placement Name*) – *Pl.Profile, Placement Type –*

Ref/Win == RW.Profile. Все размеры будут 0,01 мкм. Параметр *Refinement Function* остается без изменений. В завершении перестроения жмем кнопку *Add Placement*.

Собственно само построение сетки и профилей легирования осуществляется не в *SSE*, а с помощью другого приложения – генератора сеток, к которому происходит обращение из *SSE* в соответствии с определенными выше параметрами. Это обращение осуществляется через меню *Mesh > Build Mesh.* При этом появляется диалоговое окно (рис. 3.25), в котором можно выбрать один из трех различных генераторов для построения сетки (*Mesh, SnMesh, NoffSet3D*). Следует задать *SnMesh*. Более подробную информацию об особенностях каждого сеточного генератора следует искать в руководствах пользователя. После выбора конкретного генератора диалоговое окно модифицируется в зависимости от его параметров. Так как выше уже была задана примитивная стратегия построения сетки, то заполнение полей диалогового окна, относящихся к параметрам разбиения, следует опустить. В качестве средства визуализации полученного результата здесь можно использовать, как приложение *SSE*, так и *Tecplot_SV*. Выбираем *Tecplot_SV* и жмем *BuildMesh.*

3.2.4. ОСНОВНЫЕ ОСОБЕННОСТИ РАБОТЫ С ПРИЛОЖЕНИЕМ SDEVICE

Основные области применения приложения *SDevice* показаны на рис. 3.2, а структура входных и выходных файлов – на рис. 3.3.

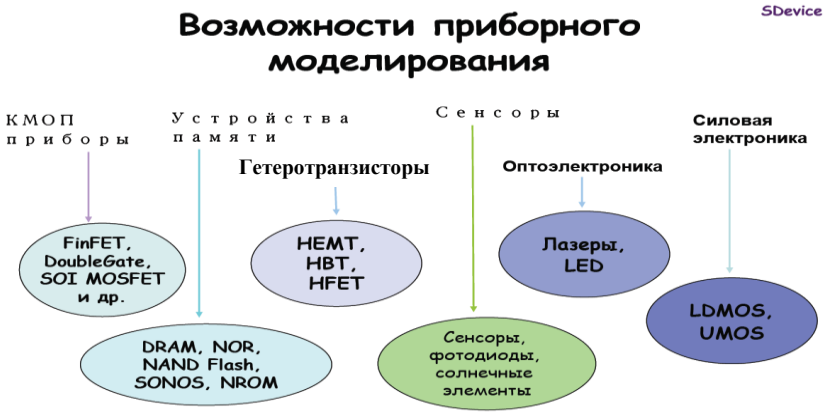


Рис. 3.2. Основные области применения *SDevice*

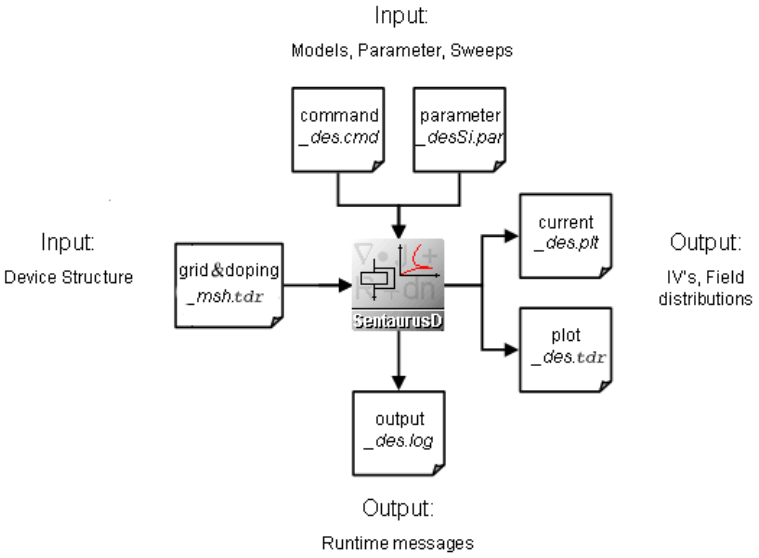


Рис. 3.3. Основные типы входных и выходных файлов для *SDevice*

К главным классам доступных в *SDevice* физических моделей, описывающих перенос носителей заряда в различных полупроводниковых материалах, таких как кремний или германий, арсенид галлия или карбид кремния, тройных соединениях и т.д., относятся (по мере усложнения):

- классическая диффузионно-дрейфовая модель (*DD*) на основе ФСУ (рис. 3.4);
- термодинамическая модель (*DD* плюс уравнение теплопроводности) (рис. 3.5);
- гидродинамическая модель – *HD* (термодинамическая модель плюс уравнения переноса энергии для электронов и дырок) (рис. 3.6).

Во всех этих приближениях учитываются все известные в настоящее время физические механизмы процессов генерации/рекомбинации, эффекты возникающие в сильных полях (горячие электроны, туннелирование в потенциальных барьерах, насыщение дрейфовой скорости и ее всплеск – *over-shoot* (только в *HD*) и т. д.). Многообразные, хорошо откалиброванные модели подвижностей для электронов и дырок используются с учетом влияния температурных, концентрационных, полевых и механических эффектов, связанных с анизотропией кристал-

лов. Возможно моделирование оптических процессов и эффектов, связанных с захватом на ловушки, магнитным полем и т.д. За более подробной информацией следует обратиться к соответствующему руководству пользователя.

Уравнение Пуассона:

$$\nabla\varepsilon \cdot \nabla\psi = -q\left(p - n + N_{D^+} - N_{A^-}\right)$$

Уравнение непрерывности для электронов:

$$\nabla \cdot \vec{J}_n = qR + q\frac{\partial n}{\partial t}$$

Уравнение непрерывности для дырок:

$$-\nabla \cdot \vec{J}_p = qR + q\frac{\partial p}{\partial t}$$

Плотность тока:

$$\vec{J}_p = -pq\mu_p(\nabla\phi_p + P_p\nabla T) \qquad \vec{J}_n = -nq\mu_n(\nabla\phi_n + P_n\nabla T)$$

Рис. 3.4. Система основных уравнений для диффузионо-дрейфовой модели

Плотность тока:

$$\vec{J}_p = -pq\mu_p(\nabla\phi_p + P_p\nabla T) \qquad \vec{J}_n = -nq\mu_n(\nabla\phi_n + P_n\nabla T)$$

Рис. 3.5. Система уравнений для плотности токов в термодинамической модели

Плотность тока электронов:

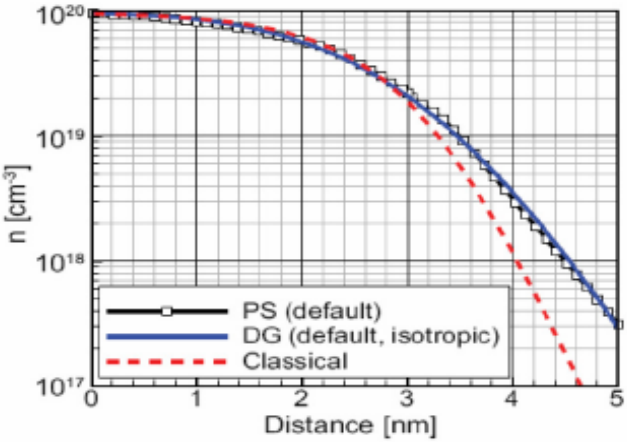
$$\vec{J}_n = q\mu_n\left(n\nabla E_C + k_B T_n \nabla n + f_n^{td} k_B n \nabla T_n - 1.5 n k_B T_n \nabla \ln m_e\right)$$

Плотность тока дырок:

$$\vec{J}_p = q\mu_p\left(p\nabla E_V - k_B T_p \nabla p - f_p^{td} k_B p \nabla T_p - 1.5 p k_B T_p \nabla \ln m_h\right)$$

Рис. 3.6. Система уравнений для плотности токов в гидродинамической модели

Так как точное моделирование процесса переноса электронов и дырок поперек канала в нанотранзисторах, например в МОПТ с относительно тонким диэлектриком и высокой плотностью легирующей примеси в канале, возможно только при учете квантово-механических эффектов [13] (рис. 3.7), то данное явление также доступно для расчета в *SDevice*.



Плотность электронов, проникающих через потенциальный барьер, полученная при помощи уравнений Шредингера-Пуассона, методом градиента плотности и классическим методом

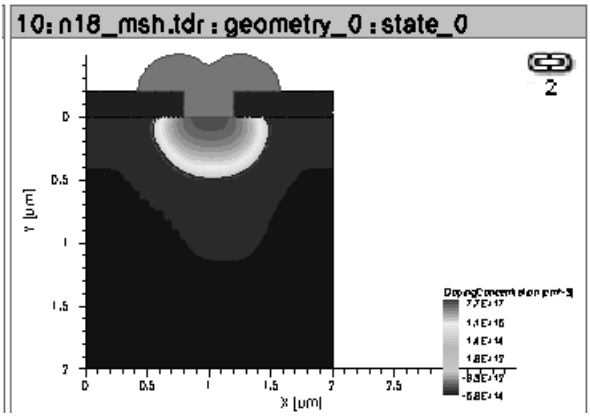
Рис. 3.7. Моделирование квантово-механических эффектов

Решение возникающих при этом многомерных краевых задач в *SDevice* основано на методе конечных элементов. Причем для их эффективного численного решения используются такие способы генерации сетки, которые учитывают высокие градиенты концентрации носителей заряда, возникающие в различных областях исследуемого прибора. В этих условиях основной объем машинных вычислений приходится на решение систем линейных уравнений с разряженными матрицами очень большого размера. Среднее количество узлов на один прибор может составлять величину порядка $5 \cdot 10^4$. Для современных компьютеров решение подобных систем возможно только на основе быстросходящихся итеративных методов.

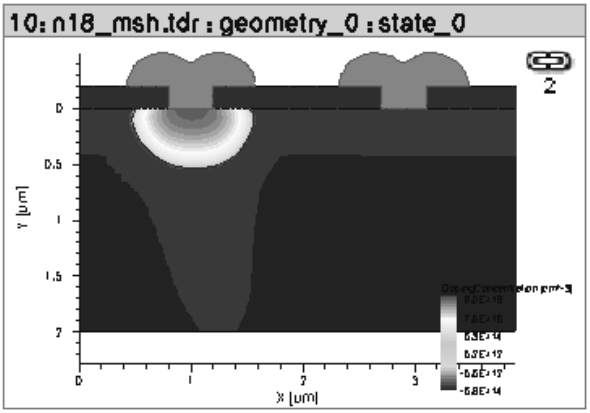
3.2.5. СТРУКТУРА ЗАДАЧ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Лабораторная работа состоит из трех частей: ***A***, ***B*** и ***C***.

В части ***A*** необходимо рассчитать с помощью оболочки *SWB* ВАХ двух диодных структур при прямом и обратном смещениях *p–n*-переходов, с различным расположением электрических контактов (рис. 3.8).



а



б

Рис. 3.8. Расположение контактов в исследуемых диодных структурах:

а – структура *AA*; *б* – структура *AB*

Дополнительно к ВАХ здесь же требуется найти величину напряжения пробоя в соответствии со своим вариантом задания, приведенным в табл. 3.1, а также исследовать зависимость напряжения пробоя от расстояния между контактами для структуры *АВ*.

Таблица 3.1

Варианты заданий по бригадам для структуры *АА*

Технологические параметры	Номер бригады				
	1	2	3	4	5
Доза легирования, см$^{-2}$	$1 \cdot 10^{12}$ $3 \cdot 10^{13}$ $5 \cdot 10^{14}$	$1 \cdot 10^{13}$ $3 \cdot 10^{14}$ $5 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{12}$ $7 \cdot 10^{13}$ $9 \cdot 10^{14}$	$2 \cdot 10^{12}$ $4 \cdot 10^{13}$ $8 \cdot 10^{14}$	$8 \cdot 10^{13}$ $4 \cdot 10^{14}$ $1 \cdot 10^{15}$
Время разгонки, мин	5	5	5	5	5

Для структуры *АВ* расстояние между контактами следует принять равными 1, 1,5 и 2 мкм, время разгонки – 10 мин, а дозу легирования взять как среднюю величину от диапазона доз в варианте задания. Планы вычислительных экспериментов для структур *АА* и *АВ* показаны на рис. 3.9 и 3.10 соответственно.

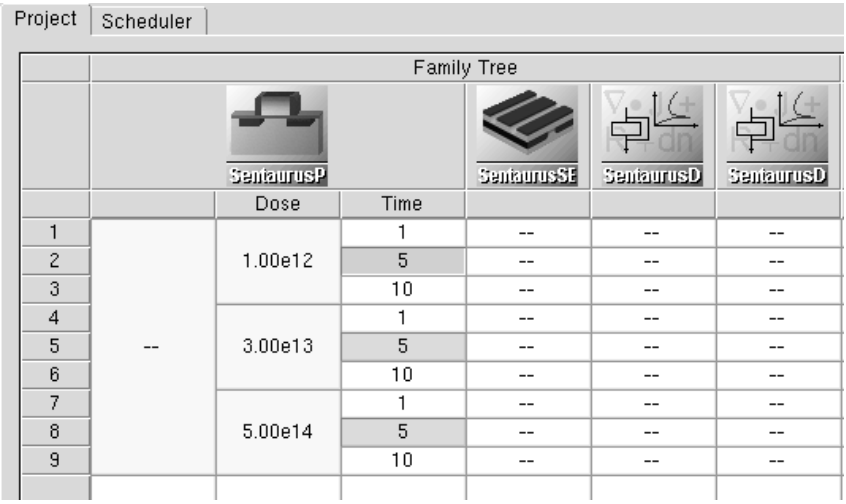


Рис. 3.9. Вычислительный поток и план вычислительного эксперимента для структуры *АА*

Project | Scheduler

	Family Tree					
		SentaurusP		SentaurusSE	SentaurusD	SentaurusD
		Time	LCont			
1	--	1	1	--	--	--
2			1.5	--	--	--
3			2	--	--	--
4		5	1	--	--	--
5			1.5	--	--	--
6			2	--	--	--
7		10	1	--	--	--
8			1.5	--	--	--
9			2	--	--	--

Рис. 3.10. Вычислительный поток и план вычислительного эксперимента для структуры *AB*

В части ***B*** необходимо провести анализ электрофизических характеристик структуры напряженного и ненапряженного *n*-МОПТ на основании уже подготовленного и просчитанного проекта *Strain_NMOSFET* (рис. 3.11). Выходную ВАХ нужно построить с учетом трех различных ситуаций при моделировании: когда в *cap*-пленке нет механических напряжений, когда они есть, но не учитываются в модели подвижности *SDevice*, когда они есть и учитываются в модели подвижности (рис. 3.12).

Project | Scheduler

	Family Tree									
		SentaurusP			SentaurusSE		SentaurusD			Inspect
		Lg	Strain	backend			Strain_device	IV	Vg	Vd	
1	--	50	0	1	--	--	yes	IdVg	1.25	0.05	--
2										1.25	--
3								IdVd	1.25	1.25	--
4			1	1	--	--	yes	IdVg	1.25	0.05	--
5										1.25	--
6								IdVd	1.25	1.25	--
7							no	IdVg	1.25	0.05	--
8										1.25	--
9								IdVd	1.25	1.25	--

Рис. 3.11. Вычислительный поток и план вычислительного эксперимента для структуры *n*-МОПТ

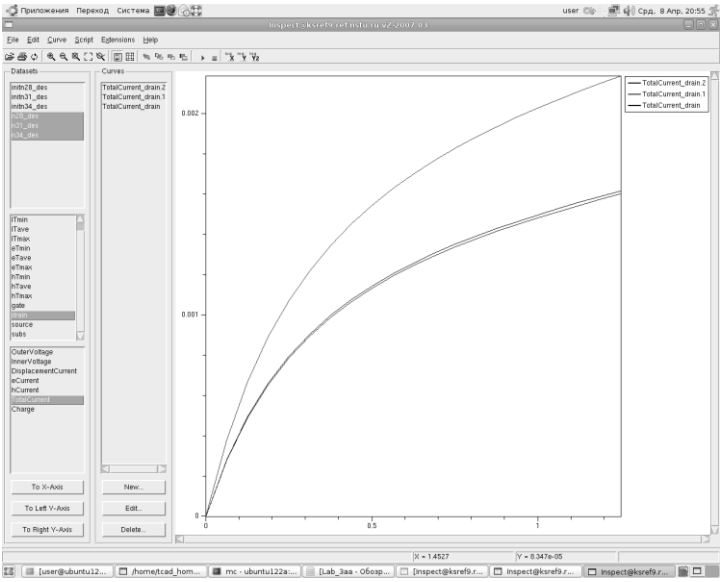


Рис. 3.12. Выходные ВАХ *n*-МОПТ при различных способах моделирования

В части ***C***, являющейся альтернативным вариантом сквозного моделирования структуры из части ***A***, необходимо сконструировать диод *AA* в редакторе структур *SSE* и провести расчет его ВАХ.

3.3. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Приступить к выполнению части ***A***. Для этого перенести готовый проект *Lab_3aa* в свою рабочую директорию. Заполнить данные для вычислительного эксперимента в соответствии с номером бригады. Выделить узлы с t = 5 мин, соответствующие приложениям *SProcess*, *SSE*, *Sdevice*, и запустить их на расчет. При этом интерактивный режим работы *SSE* должен быть отключен (*Batch mode*).

2. В процессе расчета *SProcess* посмотреть структуру командного файла, переписать его на флешку и найти в нем команды, задающие контакты к структуре. Дома этот командный файл **подробно** откомментировать на русском языке и привести его в отчете по лабораторной работе. После выполнения первого узла *SProcess* построить 2*D* изображение *p*–*n*-перехода в визуализаторе. Дома по этому рисунку

описать в соответствующей системе координат геометрию контактов, сопоставив ее с командным файлом.

3. В процессе расчета *SSE* просмотреть его командный файл, переписать на флешку и дома описать структуру с подробными комментариями на русском языке. В визуализаторе *Tecplot_SV* построить 2*D* изображения распределения активной примеси в структурах по файлам **_fps.tdr*. По завершении расчета *SSE* визуально сравнить с помощью оболочки *Tecplot_SV* для какого-нибудь одного варианта дозы, как меняется расчетная сетка при переходе от *SProcess* к *SSE* (смотреть файлы **_fps.tdr* и **_msh.tdr* соответственно рис. 3.13).

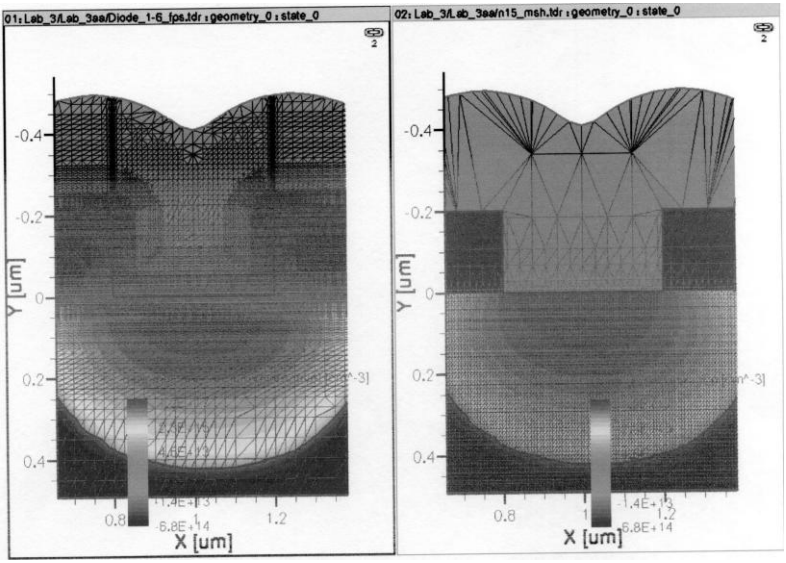


Рис. 3.13. Сравнение расчетных сеток *SProcess* и *SSE*

4. В процессе расчета *SDevice* просмотреть его командные файлы для прямой и обратной ветвей ВАХ и переписать их на флешку. Дома описать структуры этих файлов с подробными комментариями на русском языке. При этом отдельно перечислить все задействованные модели физических процессов. Для просмотра полученных результатов использовать визуализатор *Inspect* (рис. 3.14). В отчете отметить различие смоделированных прямой и обратной ветвей ВАХ.

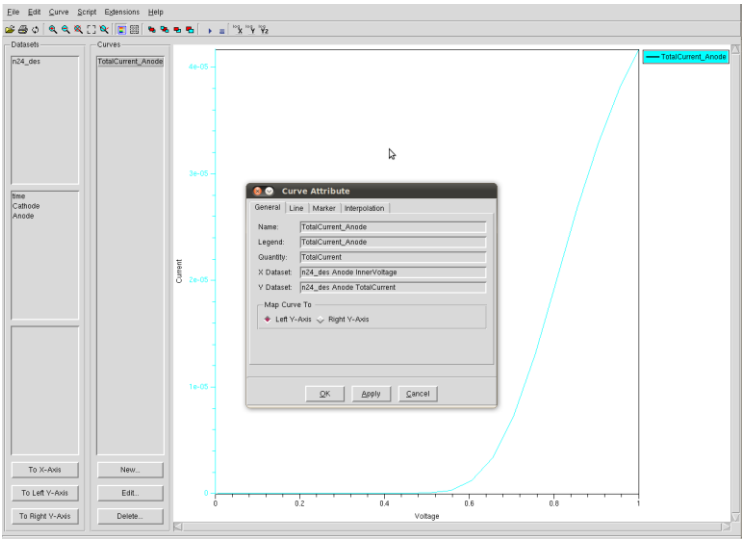


Рис. 3.14. Просмотр смоделированной прямой ВАХ диода в *Inspect*

5. После завершения расчетов в визуализаторе *Inspect* построить график прямой ветви ВАХ в зависимости от дозы легирования *n*-области. Для этого отметить под иконкой *Inspect* нужные узлы и с помощью правой кнопки перейти к *Visualize* > *.plt-files*. В открывшемся окне в левом верхнем углу выделить, если это необходимо, нужные файлы. Затем следует выбрать электрод, на котором меняется напряжение (анод). Далее входное напряжение (*Inner Voltage*) задаем в качестве переменной для оси *X*, а общий ток (*Total Current*) – в качестве переменной для *Y*.

6. В визуализаторе *Tecplot_SV* для прямой ветви построить 2*D* изображения распределений следующих параметров структуры: потенциалов; плотности электронов и дырок; плотности общего тока, текущего в структуре, а также его электронной и дырочной компонент; электростатического поля; различных темпов генерации-рекомбинации; распределения подвижности. Все эти изображения привести в отчете.

7. В визуализаторе *Inspect* построить график обратной ветви ВАХ (с логарифмической шкалой по оси *Y*) в зависимости от дозы легирования *n*-области аналогично пункту 5 и определить по нему зависимость напряжения пробоя от дозы легирования. Дома построить график этой зависимости и привести его в отчете.

8. В визуализаторе *Tecplot_SV* для обратной ветви определить по распределению темпа ударной ионизации (*ImpactIonization*) место пробоя *p-n*-перехода (подобно рис. 3.15) в зависимости от дозы легирования и привести изображения места пробоя в отчете.

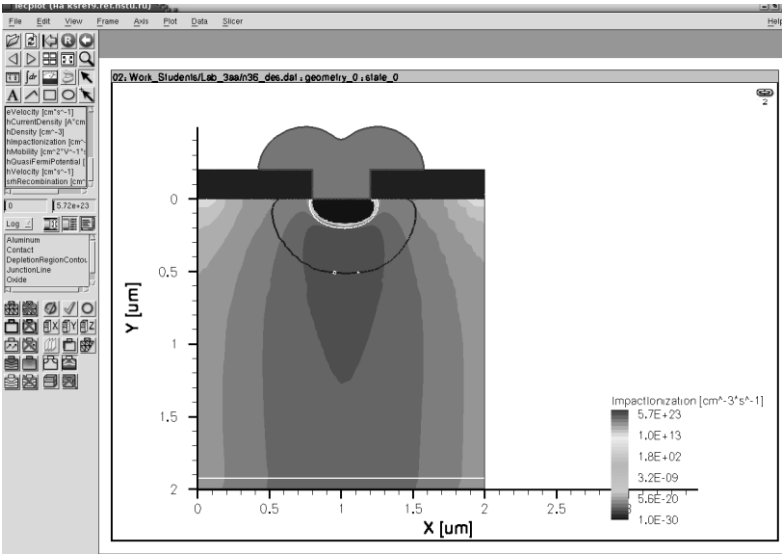


Рис. 3.15. Определение места пробоя по темпу ударной ионизации

9. Приступить к анализу структуры *AB*. Для этого нужно переписать готовый проект в рабочую директорию, запустить его на расчет, построить график обратной ветви ВАХ. Найти напряжение пробоя в зависимости от расстояния между контактами, а также найти место пробоя и привести все эти данные в отчете.

10. Приступить к выполнению части ***B***. Для этого готовый проект *Strain_NMOSFET* переписать к себе в рабочую директорию. Затем следует изучить структуру плана вычислительного эксперимента (см. рис. 3.11) и в отчете по работе привести его словесное описание. В отчете также необходимо подробно описать технологию изготовления напряженного транзистора, соответствующую командному файлу.

Для варианта с напряженной пленкой в соответствии с командным файлом *SProcess* в визуализаторае *Tecplot_SV* построить итоговой вид структуры *n*-МОПТ, а также привести вид структуры на промежуточных этапах моделирования. В отчете указать расположение *LDD, Halo-*

областей и *cap*-пленки [2]. В визуализаторе *Inspect* построить одномерные сечения профилей распределения бора, мышьяка и фосфора в канале транзистора, а также в областях исток-стоков.

По уже имеющимся результатам расчетов построить графики выходных характеристик *n*-МОПТ для напряженного и ненапряженного транзисторов. Характеристики следует строить для одного варианта структуры с учетом трех возможных вариантов моделирования:

– механических напряжений в *cap*-пленке нет;

– механические напряжения в *cap*-пленке есть, но модель, учитывающая их влияние на подвижность электронов в канале МОПТ, выключена;

– механические напряжения в *cap*-пленке есть и модель, учитывающая их влияние на подвижность, включена (рис. 3.12).

11. Приступить к выполнению части ***C***. Для этого в новом окне *Терминала* запустить графический конструктор структур *SSE* по команде *SDE* (см. рис. 3.16) и выполнить в нем необходимые предустановки в соответствии с инструкцией, приведенной в разделе 3.2.3.

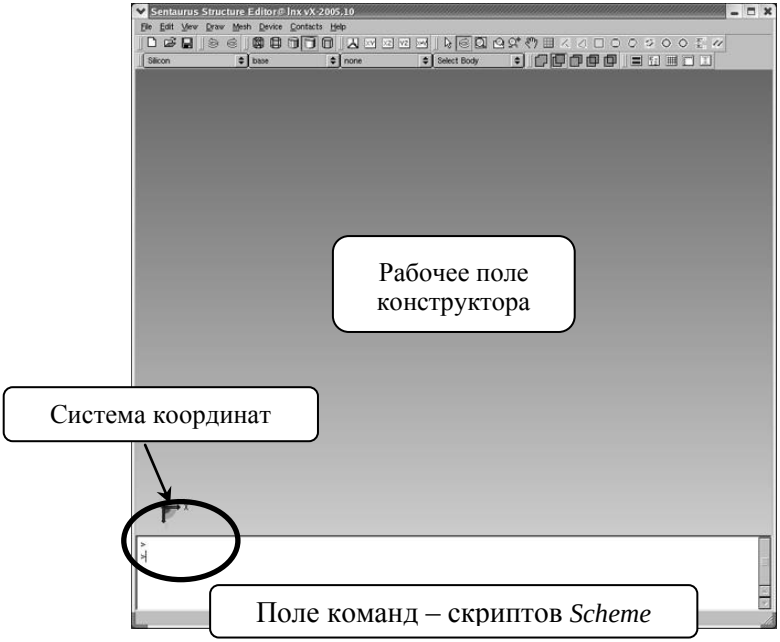


Рис. 3.16. Общий вид окна *SSE* после запуска в графическом режиме

Последовательность действий при конструировании структуры *p–n*-перехода должна быть следующей:

1) создаем подложку в виде прямоугольной области из кремния размером 2 × 2 мкм;

2) создаем защитный слой двуокиси кремния толщиной 200 нм (рис. 3.17);

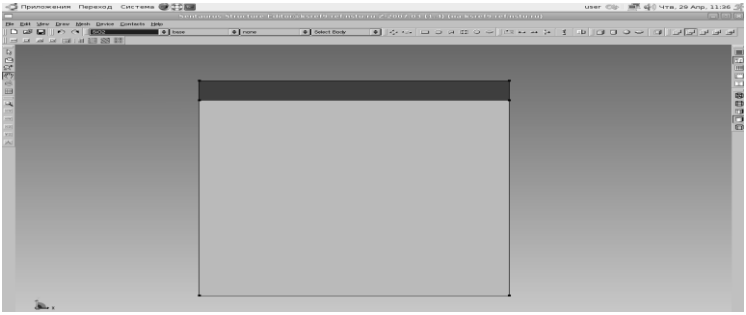


Рис. 3.17. Кремниевая подложка со слоем SiO_2

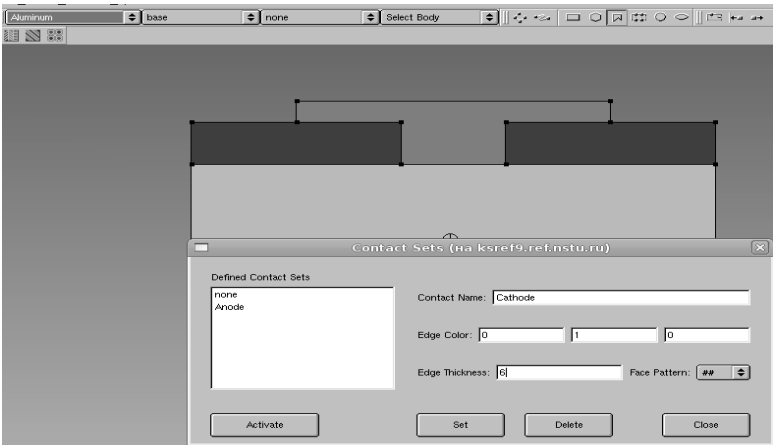
3) формируем Т-образную область с именем *R.Contact* из алюминия под контакт;

4) определяем контакты: *Anode* внизу подложки (красный) и *Cathode* по Т-образной области (зеленый) (рис. 3.18) и активируем их (рис. 3.19);

а

Рис. 3.18. Вид окна при определении списка контактов:

а – анода; *б* – катода с Т-образной областью из алюминия



б

Рис. 3.18. Окончание

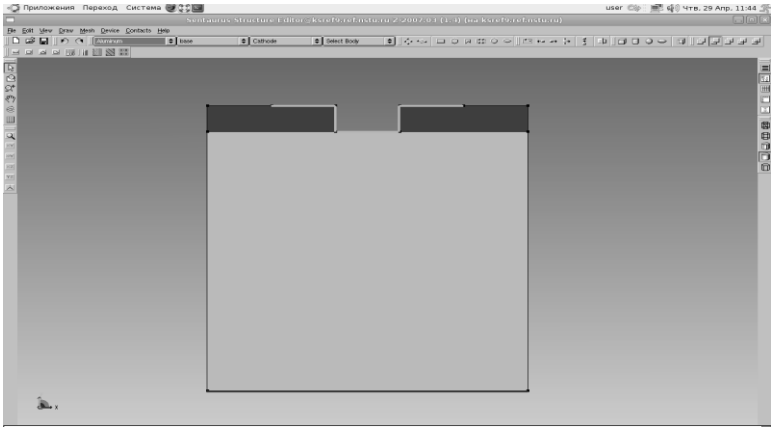


Рис. 3.19. Вид окна *SSE* после активации контактов

5) определяем профили легирования *p-n*-перехода: равномерный профиль в подложке из примеси бора с концентрацией $6{,}74 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$ (КДБ-20) (рис. 3.20) и аналитический 2*D* профиль гауссового типа для фосфора (рис. 3.21);

6) определяем сетку в соответствии с рис. 3.22 – 3.25;

7) просматриваем получившуюся структуру в *Tecplot_SV* (рис. 3.26).

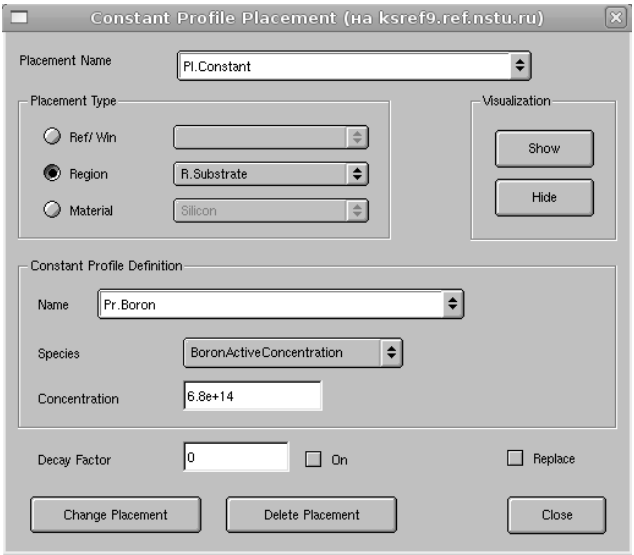


Рис. 3.20. Вид окна *Placement* при определении параметров постоянного профиля легирования подложки примесью бора

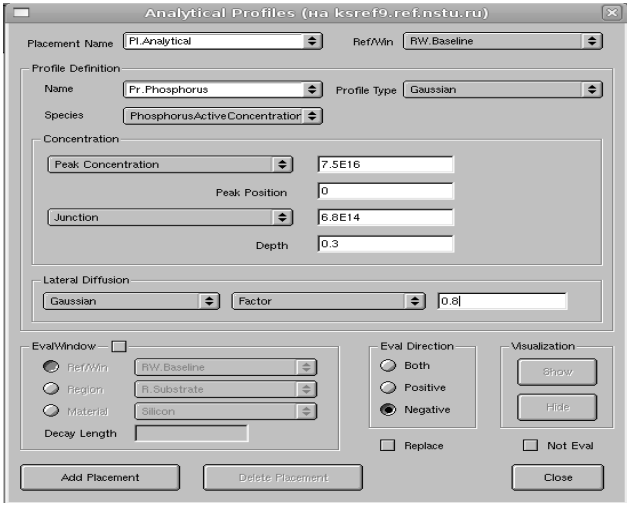


Рис. 3.21. Вид окна *Placement* при определении параметров аналитического профиля легирования подложки примесью фосфора

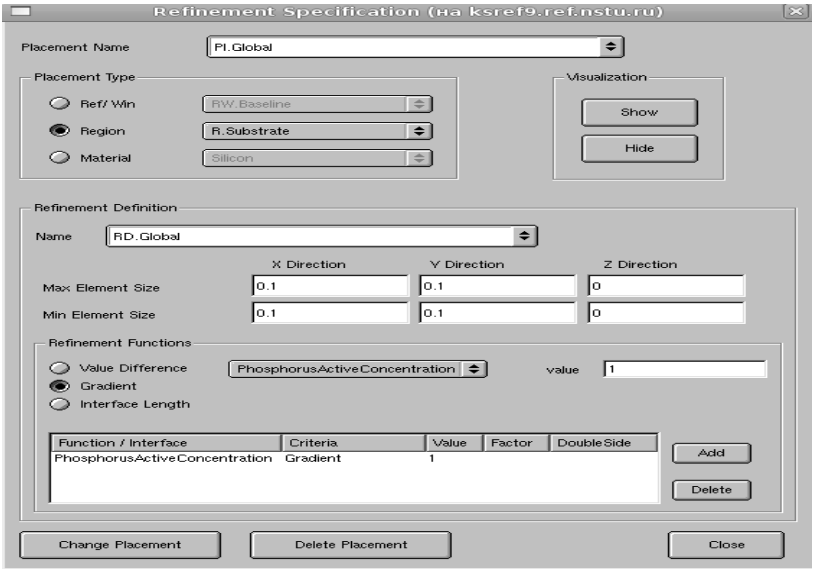


Рис. 3.22. Вид окна *Refinement Specification* при определении стратегии построения сетки

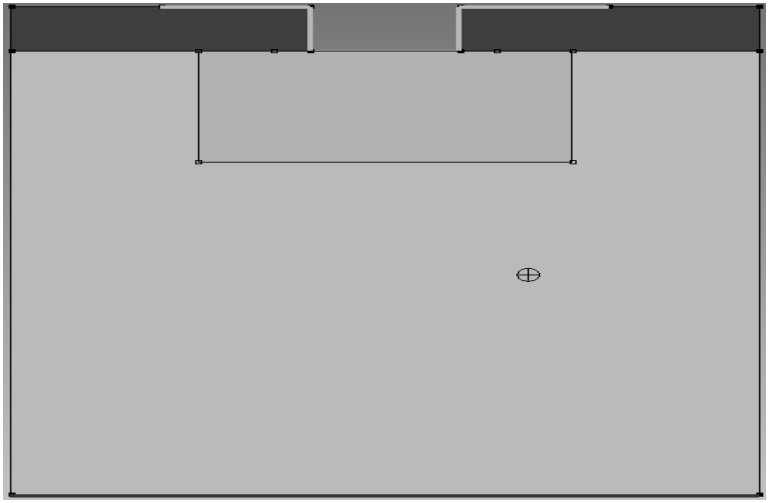


Рис. 3.23. Вид фрагмента окна *SSE* после определения области под аналитический профиль легирования *n*-типа

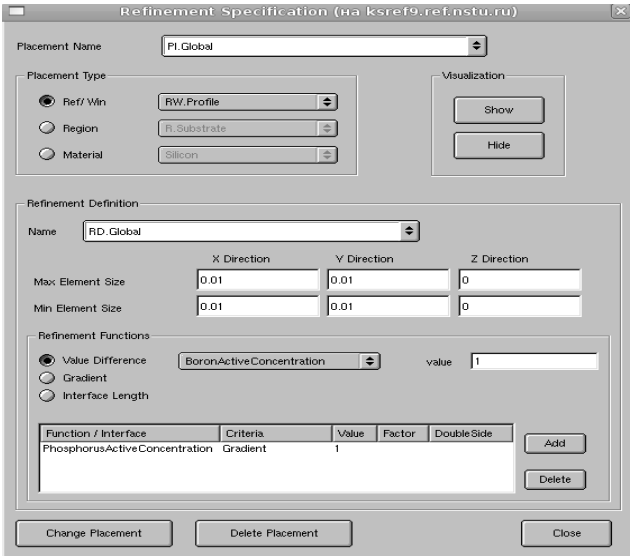


Рис. 3.24. Вид окна *Refinement Specification* при задании параметров перестроения сетки

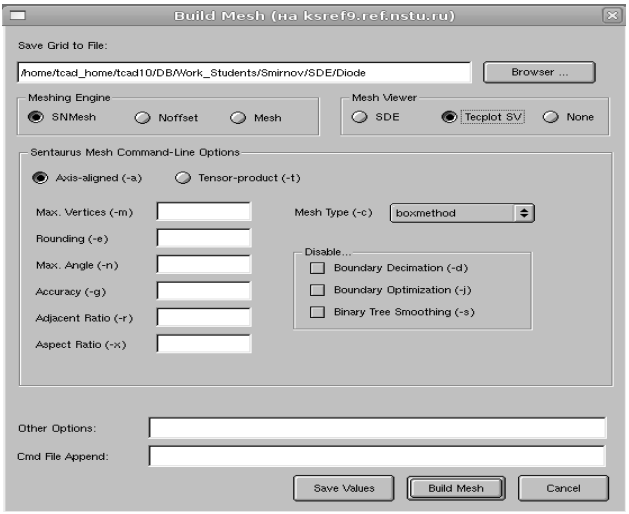


Рис. 3.25. Вид окна *Build Mesh* при выборе генератора сетки и 2*D* визуализатора

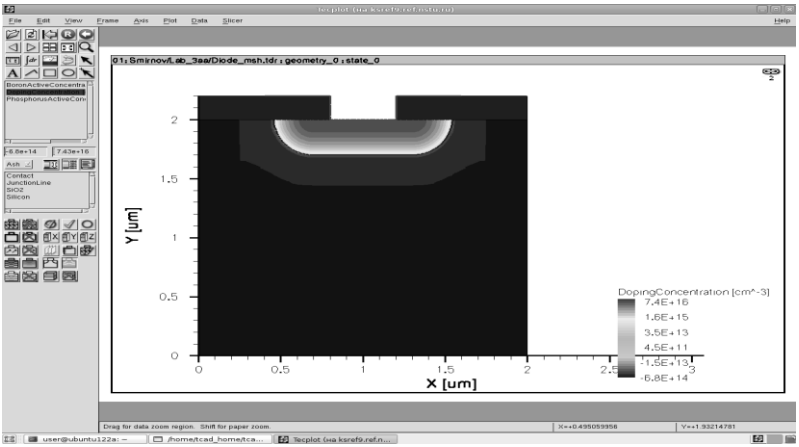


Рис. 3.26. Вид 2*D* концентрационного профиля активной примеси в *p–n*-переходе

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Перечислите и опишите основные типы приборов, которые можно моделировать с помощью *SDevice*.

2. Какие файлы, содержащие в себе полную геометрическую информацию об области моделирования, профилях легирования и сетке, передаются из *SSE* в *SDevice* при сквозном моделировании полупроводниковых структур?

3. В чем состоит разница между технологической и электрофизической областями моделирования и какие команды в приложении *SProcess* используются для согласования этих областей, если это необходимо?

4. Какие файлы следует просматривать в приложении *Tecplot_SV*, для того чтобы сравнить расчетные сетки, получающиеся после *SProcess* и *SSE*?

5. Нарисуйте координатные оси, используемые в приложениях *SProcess*, *SSE* и *SDevice*.

6. Поясните, какие файлы, отражающие работу *SDevice*, можно «посмотреть» в *Inspect*.

7. Каким образом по результатам расчета *SDevice* можно определить место пробоя *p–n*-перехода?

8. Как можно посмотреть результаты расчета *SDevice*, отражающие распределение потенциала и концентрации электронов и дырок в моделируемой структуре?

9. Поясните, в каких выходных файлах *SDevice* содержится информация о распределении темпа ударной ионизации в моделируемой полупроводниковой структуре.

10. Опишите, каким образом в оболочке *SWB* можно посмотреть графики ВАХ, рассчитанные в *Sdevice*. Какие файлы для этого следует использовать?

11. Если в вычислительном эксперименте оболочки *SWB* исследовалось влияние дозы легирования на ВАХ *p-n*-перехода, то каким образом можно построить график, отражающий эту зависимость?

12. Для чего при построении графика ВАХ в оболочке *Inspect* необходимо выбрать определенный контакт? Поясните, каким образом это можно сделать.

13. Опишите, каким образом в *SDevice* моделируется влияние механических напряжений на характеристики прибора.

14. Опишите, в чем состоит разница между диффузионно-дрейфовой и гидродинамической моделями, и что в них общего.

15. Проведите сравнение диффузионно-дрейфовой и термодинамической моделей.

16. Перечислите и опишите модели процессов генерации/рекомбинации носителей заряда, используемые в *SDevice*.

17. При моделировании каких эффектов в *SDevice* используются квантово-механические модели?

18. С помощью каких моделей можно в *SDevice* рассчитывать эффект всплеска дрейфовой скорости электронов и в чем состоит суть этого явления?

19. Поясните общий принцип учета эффекта механических напряжений в *SDevice*. В каком приложении системы *Sentaurus* осуществляется численный расчет компонент тензора механических напряжений?

20. Объясните, из каких результатов расчета, проведенных в лабораторной работе, следует, что быстродействие *n*-МОПТ увеличивается, если эффект влияния механических напряжений имеет место.

21. Каким образом и по какой команде можно запустить редактор структур *SSE* при условии его параллельной работы с оболочкой *SWB*?

22. Опишите методику конструирования кремниевой подложки с масочным слоем двуокиси кремния при работе в интерактивном режиме *SSE*?

23. В каком приложении системы *Sentaurus* осуществляется формирование расчетной конечно-элементной сетки?

24. Перечислите доступные в *SSE* типы 2*D* аналитических аппроксимационных профилей легирующих примесей и поясните, каким образом в лабораторной работе в *SSE* конструировалась область *p-n*-перехода.

25. Какими параметрами в конструкторе *SSE* можно описать исходную кремниевую подложку и каким образом при этом можно учесть ее ориентацию?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И ХАРАКТЕРИСТИК HEMT-СТРУКТУР В TCAD SENTAURUS

4.1. ЦЕЛЬ И СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Цель работы – освоение методик моделирования ВАХ и электрофизических параметров транзисторов с высокой подвижностью электронов – *HEMT* (*High Electron Mobility Transistor*) на основе гетероструктур $GaAs/Al_XGa_{1-X}As$.

Содержанием работы являются изучение методики взаимосвязанной работы приложений *SSE* и *SDevice* с целью установления зависимости между конструктивно-технологическими параметрами *HEMT*-транзистора (длиной канала, толщиной широкозонной области гетероперехода, степенью ее легирования и величиной мольной доли *x*) и его передаточными и выходными ВАХ транзистора, а также исследование принципов работы *HEMT*.

4.2. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

4.2.1. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИРУЕМОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ

Общий вид моделируемой структуры приведен на рис. 4.1.

Принцип действия *HEMT* основывается на управлении напряжением на затворе состоянием квантовой ямы, возникающей в узкозонном материале GaAs в гетеропереходе $Al_XGa_{1-X}As/GaAs$ [4–6, 19], что подробно рассматривалось в курсе «Физика полупроводниковых приборов». При нулевом или небольшом отрицательном напряжении на затворе в квантовой яме имеется несколько энергетических уровней, которые заполняются электронами из сильнолегированного *n*-слоя $Al_XGa_{1-X}As$. В результате этого от истока к стоку формируется канал *n*-типа и при подаче напряжения между этими электродами в транзисторе потечет

ток, образованный двумерным электронным газом в квантовой яме. При увеличении отрицательного напряжения на затворе изгиб зон в квантовой яме начинает «распрямляться» и количество энергетических уровней и электронов в ней – уменьшаться (яма «мелеет»). Ток стока при этом будет уменьшаться. При значительном напряжении на затворе уменьшение изгиба зон в GaAs приводит к полному исчезновению квантовой ямы. Канал обедняется, и ток стока становится равным нулю.

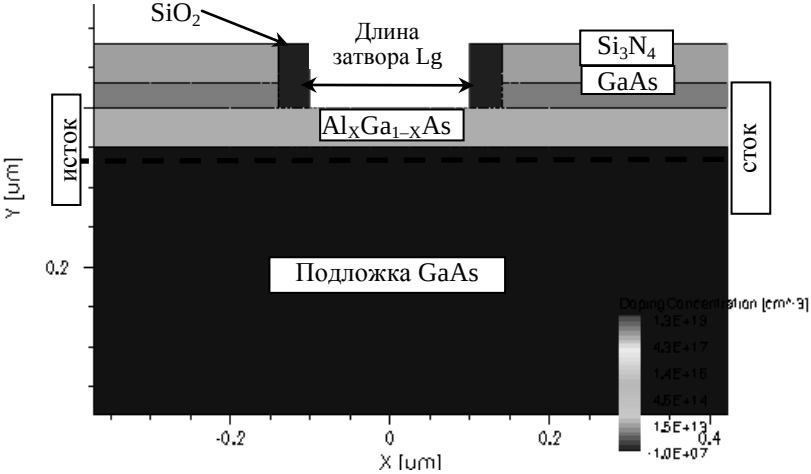


Рис. 4.1. Принципиальная 2*D* структура *HEMT*

Моделирование структуры базируется на использовании приложений *SSE* и *SDevice*. Общий вид проекта для расчета параметров и характеристик структуры на основе командных файлов *sde_dvs.cmd* и *sdevice_des.cmd* в оболочке *SWB* имеет вид в соответствии с рис. 4.2. В данном иллюстративном проекте варьируемым параметром выбрана длина канала *HEMT*.

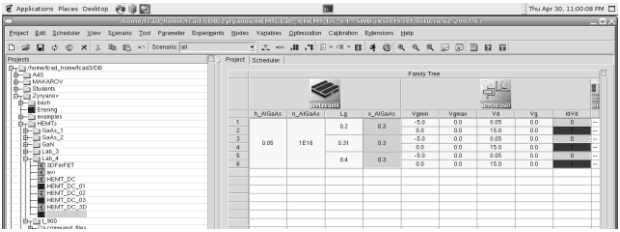


Рис. 4.2. Структура проекта в *SWB* для расчета *HEMT*

Проектирование конструктивной структуры *HEMT* реализуется в редакторе *SSE* на основе командного файла *sde_dvs.cmd*.

Расчет передаточных и выходных ВАХ в приложении *SDevice* производится на базе командного файла *sdevice_des.cmd*, структура которого приводится ниже. При моделировании ВАХ используется гидродинамическое приближение прибора.

4.2.2. КОМАНДНЫЙ ФАЙЛ ПРИЛОЖЕНИЯ SDEVICE

```
Electrode{
  { Name="source" Voltage=0.0 Resistor= 150 }
  { Name="drain"  Voltage=0.0 Resistor= 150 }
  { Name="gate"   Voltage=0.0 Schottky Barrier=0.4
     eRecVelocity=1.e7 hRecVelocity=1.e7 }
  { Name="substrate"    Voltage=0.0 Resistor= 1e3 }
}

File{
  Grid    = "@tdr@"
  Current = "@plot@"
  Output  = "@log@"
  Plot    = "@tdrdat@"
  Param   = "@parameter@"
}

Physics {
  Hydrodynamic( eTemperature )
  Mobility(
    HighFieldSaturation( CarrierTempDrive )
  )
  EffectiveIntrinsicDensity( NoBandGapNarrowing )
  Recombination(
    SRH Auger Radiative
    Avalanche(CarrierTempDrive)
  )
}

Physics( Material="GaAs" ){
  Mobility( Dopingdependence )
}
```

```
#-----------------------------------------------------#
#  Physics( Material="AlGaAs" ){          #
#     MoleFraction( xFraction=0.30 Grading=0)  #
#  }                          #
#-----------------------------------------------------#

Plot{
*--Density and Currents, etc
   eDensity hDensity
   TotalCurrent/Vector eCurrent/Vector hCurrent/Vector
   eMobility hMobility
   eVelocity hVelocity
   eQuasiFermi hQuasiFermi

*--Temperature
   eTemperature
   * hTemperature Temperature

*--Fields and charges
   ElectricField/Vector Potential SpaceCharge

*--Doping Profiles
   Doping DonorConcentration AcceptorConcentration

*--Generation/Recombination
   SRH Auger
   AvalancheGeneration eAvalancheGeneration hAvalancheGeneration

*--Driving forsdeviceces
   eGradQuasiFermi/Vector hGradQuasiFermi/Vector
   eEparallel hEparalllel

*--Band structure/Composition
   BandGap
   * BandGapNarrowing
   Affinity
   ConductionBand ValenceBand
   xMoleFraction
```

```
*--Traps
  eTrappedCharge  hTrappedCharge
  eGapStatesRecombination hGapStatesRecombination

*--Heat generation
  * TotalHeat eJouleHeat hJouleHeat RecombinationHeat
}

Math{
  Extrapolate
  Digits = 5
  Notdamped=50
  Iterations=15
  RelErrControl
  ErrRef(Electron) = 1e7
  ErrRef(Hole)     = 1e7
  RelTermMinDensity = 1e4
  RelTermMinDensityZero = 1e7
}

Solve{
*- Initial Solution:
  Coupled(Iterations=100){ Poisson }
  Coupled{ Poisson Electron Hole }
  Coupled{ Poisson Electron Hole eTemperature }
#-----------------------------------------------------------------------#
#- IdVg
#if @IdVd@ == 0
#-----------------------------------------------------------------------#
*- Gate/Drain ramping to IdVg starting point:
  Quasistationary(
    InitialStep=5e-2 Increment=1.25
    Minstep=1e-5 MaxStep=0.2
    Goal{ Name="drain" Voltage=  @Vd@ }
    Goal{ Name="gate"  Voltage=  @Vgmax@ }
  ){ Coupled{ Poisson Electron Hole eTemperature } }

  NewCurrentFile="IdVg"
```

```
*- IdVg sweep:
  Quasistationary(
    InitialStep=5e-3 Increment=1.25
    Minstep=1e-5 MaxStep=0.025
    Goal{ Name="gate" Voltage= @Vgmin@ }
    DoZero
  ){ Coupled{ Poisson Electron Hole eTemperature }
    CurrentPlot( Time=(Range=(0 1) Intervals=40) )
    Plot(FilePrefix="n@node@" NoOverwrite
      Time=(Range=(0 0.5) Intervals=1) )
  }
#-----------------------------------------------------------------------#
#- IdVd
#else
#-----------------------------------------------------------------------#
  Quasistationary(
    InitialStep=1e-2 Increment=1.25
    Minstep=1e-5 MaxStep=0.2
    Goal{ Name="gate" Voltage= @Vg@ }
  ){ Coupled{ Poisson Electron Hole eTemperature } }

   NewCurrentFile="IdVd_@node@"

   Quasistationary(
    DoZero
    InitialStep=1e-3 Increment=1.5
    MinStep=1e-5 MaxStep=0.05
    Goal { Name="drain" Voltage= @Vd@ }
   ){ Coupled { Poisson Electron Hole eTemperature }
      CurrentPlot( Time=(Range=(0 0.3) Intervals=30
            Range=(0.3 1.0) Intervals=20))
  }

#endif
}
```

4.3. СТРУКТУРА ЗАДАЧ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Лабораторная работа состоит из трех частей: ***A***, ***B*** и ***C***.

В части ***A*** необходимо рассчитать ВАХ диода (прямую и обратную ветви), структура которого была получена в лабораторной работе 3 в интерактивном режиме *SSE*, и сравнить результаты расчета с диффузионным *p–n*-переходом, исследованным в той же работе (вариант *AA*).

В части ***B*** требуется, проанализировав подготовленные командные файлы *sde_dvs.cmd* и *sdevice_des.cmd*, создать проект в *SWB* и сформировать план вычислительного эксперимента, аналогичного приведенному на рис. 4.2. Затем нужно в соответствии со своим вариантом задания, приведенным в табл. 4.1, модифицировать план таким образом, чтобы было возможно установить влияние варьируемого параметра на ВАХ транзистора.

В части ***C*** следует посредством моделирования проиллюстрировать принцип действия *HEMT*, графически показав процессы «обмеления» ямы и отсечки канала транзистора.

Таблица 4.1

Варианты заданий по бригадам для части *B*

Номер бригады	Технологические параметры					
	Варьируемый		Остальные			
	Наименование	диапазон	h_AlGaAs, мкм	n_AlGaAs, см$^{-3}$	x_AlGaAs	Lg, мкм
1	Длина канала, мкм	0,5; 0,31; 0,4	0.05	10^{18}	0,3	–
2	Толщина области $Al_xGa_{1-x}As$	0,04; 0,05; 0,06	–	10^{18}	0,3	0,2
3	Степень легирования $Al_xGa_{1-x}As$, см$^{-3}$	$2*10^{17}$ $5*10^{17}$ $1*10^{18}$	0,05	–	0,3	0,2
4	Степень легирования $Al_xGa_{1-x}As$, см$^{-3}$	$3*10^{17}$ $7*10^{17}$ $2*10^{18}$	0,05	–	0,3	0,2
5	Мольная доля *x* в $Al_xGa_{1-x}As$	0,3: 0,4; 0,5	0,05	10^{18}	–	0,2

Для части ***В*** в процессе расчета необходимо учесть следующие особенности вариантов:

– *при вариации по длине затвора*: предполагаемые значения Lg – 0,2; 0,31 и 0,4 мкм; при этом остаются постоянными значения мольной доли алюминия в $Al_xGa_{1-x}As$ – x_AlGaAs = 0,3, величина уровня легирования донорами широкозонного слоя $Al_xGa_{1-x}As$ – n_AlGaAs = 10^{18} см$^{-3}$ и толщина – h_AlGaAs = 0,05 мкм;

параметры электрофизического моделирования в данном случае выбираются следующим образом: для передаточной характеристики (*IdVd* = 0) – минимальное напряжение на затворе *Vgmin* = –5,0 В, максимальное напряжение на затворе *Vgmax* = 0 В, а напряжение на стоке *Vd* = 0,05 В, причем параметр *Vg* не используется; для выходной ВАХ (*IdVd* = 1) параметры *Vgmax* и *Vgmin* не используются, а *Vd* = 15 В и *Vg* = 0,0 В;

– *при вариации по толщине широкозонного материала*: предполагаемые значения *h_AlGaAs* – 0,04; 0,05 и 0,06 мкм; при этом остаются постоянными значения мольной доли алюминия в $Al_xGa_{1-x}As$ – – x_AlGaAs = 0,3, концентрация доноров – n_AlGaAs = 10^{18} см$^{-3}$ и длина затвора *Lg* = 0,2 мкм;

параметры электрофизического моделирования в данном случае выбираются следующим образом: для передаточной характеристики (*IdVd* = 0) – минимальное напряжение на затворе *Vgmin* равно –6,5 В, максимальное напряжение на затворе *Vgmax* = 0,0 В, а напряжение на стоке *Vd* = 0,05 В, параметр *Vg* не используется; для выходной ВАХ (*IdVd* = 1) параметры *Vgmax* и *Vgmin* не используются, а *Vd* = 15 В, *Vg* = 0,0 В;

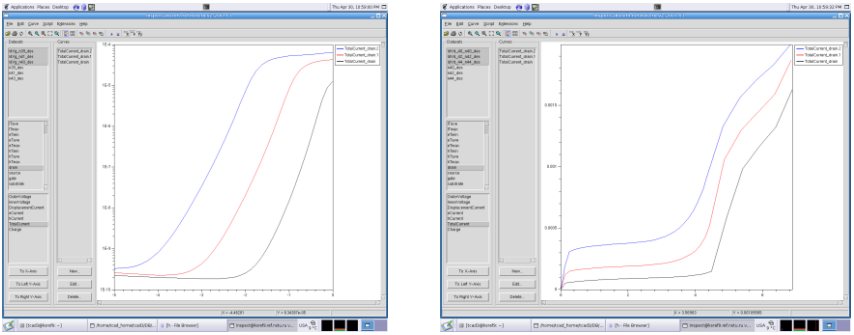
– *при вариации по концентрации мышьяка в широкозонном материале*: предполагаемые значения донорной примеси n_AlGaAs – $-2\cdot10^{17}$; $5\cdot10^{17}$ и $1\cdot10^{18}$ см$^{-3}$, а постоянные значения мольной доли – x_AlGaAs = 0,3, толщина широкозонного слоя – h_AlGaAs = 0,05 мкм и длина затвора – *Lg* = 0,2 мкм;

параметры электрофизического моделирования в данном случае выбираются следующим образом: для передаточной характеристики (*IdVd* = 0) – минимальное напряжение на затворе *Vgmin* равно –5,0 В, максимальное напряжение на затворе *Vgmax* = 0,0 В, а напряжение на стоке *Vd* = 0,05 В, параметр *Vg* не используется; для выходной ВАХ (*IdVd* = 1) параметры *Vgmax* и *Vgmin* не используются, а *Vd* = 15 В, *Vg* = 0,0 В;

– *при вариации по мольной доле алюминия*: предполагаемые значения x_AlGaAs – 0,3; 0,4 и 0,5, а постоянные величины толщины широ-

козонного слоя – h_AlGaAs = 0,05 мкм, длина затвора – *Lg* = 0,2 мкм и концентрация доноров в широкозонном слое n_AlGaAs = $2 \cdot 10^{17}$ см$^{-3}$;

параметры электрофизического моделирования в данном случае выбираются следующим образом: для передаточной характеристики (*IdVd* = 0) минимальное напряжение на затворе *Vgmin* равно –5,0 В, максимальное напряжение на затворе *Vgmax* = 0,0 В, а напряжение на стоке *Vd* = 0,05 В, параметр *Vg* не используется; для выходной ВАХ (*IdVd* = 1) параметры *Vgmax* и *Vgmin* не используются, а *Vd* = 15 В, *Vg* = 0,0 В.



а *б*

Рис. 4.3. Смоделированные ВАХ *HEMT*:

а – передаточные; *б* – выходные

При этом параметры секции *CurrentPlot* командного файла *sdevice_des.cmd* должны быть заданы так:

CurrentPlot(Time=(Range=(0 0.3) Intervals=30
Range=(0.3 1.0) Intervals=20))

Общий характерный вид рассчитываемых ВАХ приведен на рис. 4.3.

4.4. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Перенести в рабочую директорию проект с именем *Lab_4a*, который соответствует рассчитанной в лабораторной работе 3 структуре *p–n*-перехода (вариант *AA*). Добавить в его вычислительный поток два приложения *SDevice* с прикрепленными к ним командными файлами для расчета прямой и обратной ветвей ВАХ *p-n*-перехода. Готовые командные файлы следует взять из каталога *tmp_01*, убедиться при этом, что в рабочей папке проекта находиться файл *Diode_msh.tdr*, в котором

содержатся результаты расчета *SSE*. Затем нужно произвести расчет входных и выходных ВАХ *p–n*-перехода, сформированного в конструкторе *SSE*, и сравнить полученные характеристики с прямой и обратной ветвями диффузионного диода, рассчитанными по технологии сквозного моделирования. Дома в отчете подробно откомментировать соответствующие структуры командных файлов *SDevice*, указав особо секцию, в которой задаются данные о диоде, сформированном в конструкторе *SSE*, а также секцию, в которой задаются напряжения на контактах структуры.

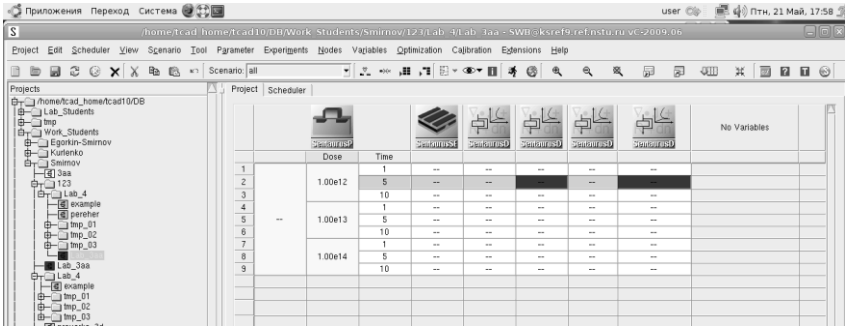
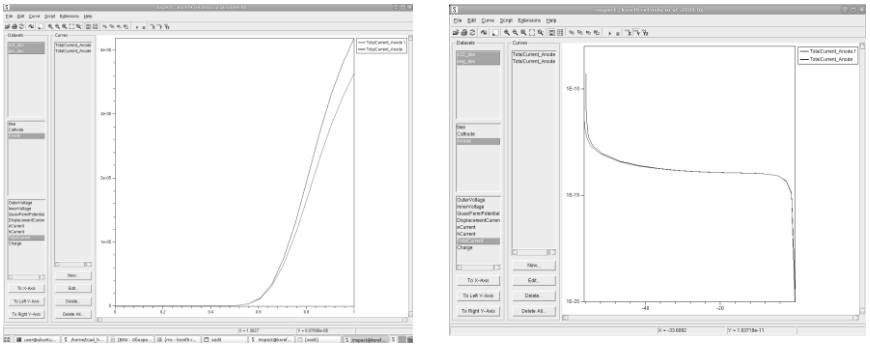


Рис. 4.4. Проект для моделирования диффузионного *p–n*-перехода с добавленными приложениями для расчета ВАХ диода, полученного в *SSE*



а *б*

Рис. 4.5. ВАХ диода, полученного по технологии сквозного моделирования, и аналогичного диода, полученного в конструкторе SSE:

а – прямые ВАХ диодов; *б* – обратные ВАХ диодов

2. Приступить к выполнению части ***B***. Для этого создать новый проект и с помощью *MC* перенести в его рабочую директорию подготовленную основу для моделирования *HEMT* в виде готовых командных файлов для *SSE* и *SDevice* из каталога *tmp_02*. Затем необходимо сформировать в *SWB* план вычислительного эксперимента, определив имена конструктивно-технологических параметров структуры с селективным легированием и электрофизические параметры, аналогично приведенным на рис. 4.2. Потом, внимательно изучив особенности своего варианта расчета, описанные в разделе 4.3, заполнить данные плана вычислительного эксперимента, соответствующего вашему варианту задания, и запустить проект на расчет.

3. В ходе выполнения расчета проанализировать структуру командного файла для *SSE* и получить последовательность фрагментов, иллюстрирующую процесс конструирования *HEMT*, аналогичную приведенной на рис. 4.6.

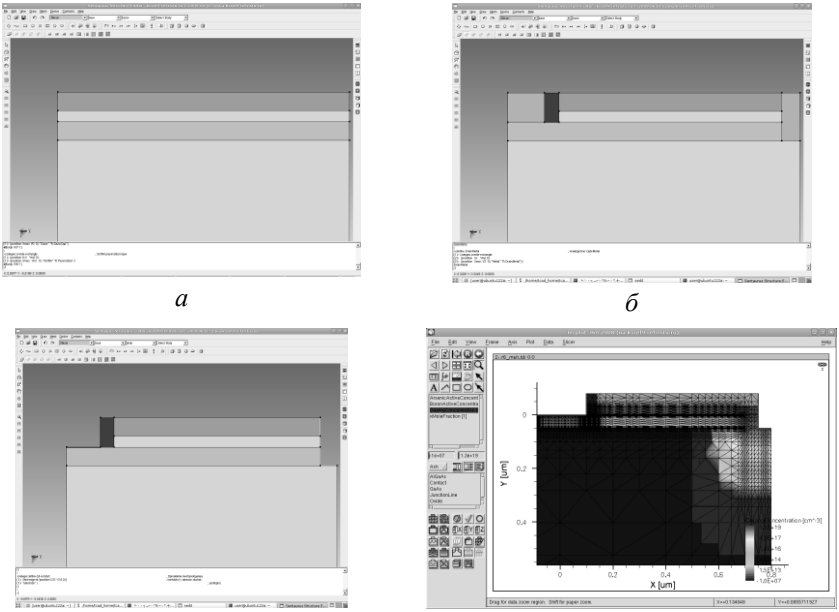


Рис. 4.6. Последовательность фрагментов при конструировании *HEMT*:

а – основные слои заготовки для *HEMT*; *б* – области затвора (половинка) и стока; *в* – конструирование областей контактов; *г* – сетка и профили легирования, сконструированные для половинки *HEMT*

4. После завершения расчетов в оболочке *SSE* для всех трех вариантов структуры вывести в оболочке *Tecplot_SV* их графическое представление, в котором в области канала сделать одномерный разрез структуры, где следует показать изменения областей широкозонного и узкозонного полупроводников, гетероперехода и квантовой ямы в зависимости от варьируемого параметра.

5. Построить графики передаточных и выходных ВАХ транзистора (аналогичные рис. 4.3), оценить их чувствительность к варьируемому параметру, сделать выводы по форме получаемых ВАХ и найти напряжение отсечки. Дома откомментировать командные файлы для *SSE* (особо описав вид всех используемых концентрационных профилей) и *SDevice* с подробным описанием используемых физических моделей и алгоритмов изменения рабочих напряжений на контактах структуры.

6. Приступить к выполнению части ***C***. Для этого в соответствии с указаниями преподавателя нужно перенести в рабочую директорию готовый проект *Lab_4c*, поясняющий принцип работы *HEMT* (рис. 4.7). Затем в оболочке *Inspect* построить графики передаточных ВАХ и найти напряжение отсечки.

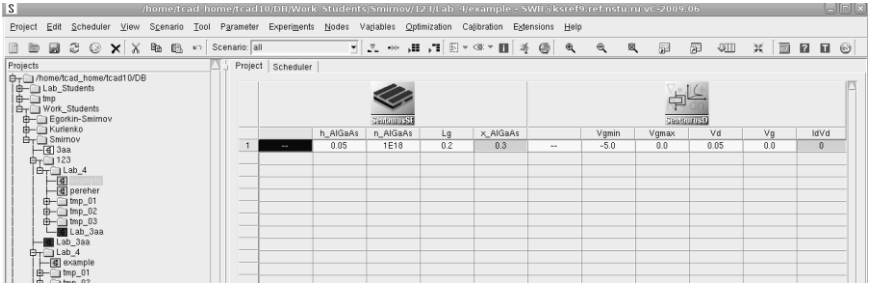


Рис. 4.7. Вычислительный план проекта для иллюстрации принципа действия *HEMT*

7. В зависимости от напряжения на затворе построить графики изменения электрического потенциала в одномерном сечении квантовой ямы, а также графики изменения концентрации электронов в канале *HEMT*.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. С помощью зонной диаграммы поясните принцип действия *HEMT*.

2. Какой конструктивный элемент в структуре *HEMT* называется спейсером, для чего он предназначен и можно ли его показать в исследуемом в лабораторной работе приборе?

3. Покажите на рис. 4.6, *г* области расположения электродов истока, стока, затвора и подложки и поясните, на основе анализа командного файла, какие краевые условия для потенциала на них задаются.

4. Поясните, какие области в исследуемой *HEMT*-структуре однородно легированы, а какие – нет. Каким образом в них задаются концентрационные профили легирующих примесей?

5. Каким образом в плане вычислительного эксперимента задается расчет передаточных и выходных ВАХ? Укажите номера узлов, им соответствующие.

6. Как величина варьируемого параметра в вашем варианте влияет на напряжение отсечки *HEMT*?

7. Поясните, каким образом в визуализаторе *Tecplot_SV* можно построить одномерные графики зонной структуры гетероперехода и показать влияние на нее каких-либо факторов, исследуемых в лабораторной работе.

8. Какой тип модели переноса электронов в канале *HEMT* используется в приложении *SDevice* и соответствует ли он модели на основе ФСУ?

9. Каким образом после завершения расчета приложения *SSE* можно посмотреть получающуюся расчетную сетку?

10. Поясните, каким образом после завершения всех расчетов можно графически оценить геометрическую толщину квантовой ямы при нулевом напряжении на затворе.

11. Перечислите, какие физические модели процессов генерации-рекомбинации носителей заряда используются при расчете ВАХ *HEMT*.

12. Относится ли применяемая в лабораторной работе вычислительная технология к технологии сквозного моделирования? (Ответ обосновать.)

13. Перечислите, какие физические модели подвижности электронов используются при расчете ВАХ *HEMT*.

14. На каких электродах структуры *HEMT* задаются омические граничные условия для потенциала, а на каких – иные (если таковые имеются)?

15. Какие транзисторы были изготовлены раньше – *HEMT* или *n*-МОПТ на напряженном кремнии и почему?

16. Какой физический эффект связан с командой *EffectiveIntrinsicDensity (NoBandGapNarrowing)* для приложения *Sdevice*?

17. Каким образом задаются строки-комментарии в командных файлах *SSE* и *SDevice*?

18. Какой вычислительный процесс в *SDevice* управляется с помощью параметра *Iterations* в секции *Math* командного файла?

19. Какой вычислительный процесс описывается в *SDevice* с помощью команды *Coupled (Iterations = 100) { Poisson }* в секции *Solve*?

20. В чем состоит смысл понятия «Ньютоновская итерация» и в каком месте командного файла для *SDevice* оно используется?

21. Какой физический смысл имеет команда *Hydrodynamic (eTemperature)*, в каком приложении и в какой секции она используется?

22. Сколько расчетных точек ВАХ в передаточной характеристике *HEMT* в среднем использовалось в лабораторной работе и каким образом можно визуализировать 2*D* распределения плотности электронов по структуре, соответствующие каждой такой точке в отдельности?

23. Поясните методику расчета в одном проекте части ***A*** прямых ВАХ диодов, структуры которых были смоделированы в *SProcess* и в *SSE*.

24. Поясните, какие физические эффекты моделируются с помощью команды *Mobility* (*DopingDep HighFieldSat Enormal*).

25. Какой физический смысл имеет параметр *Material* в команде *Physics (Material = “GaAs”) { Mobility (Dopingdependence) }* для приложения *Sdevice*?

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Стремительное развитие нанотехнологий и полупроводниковой наноэлектроники, свидетелями которого мы сейчас все являемся, порождает надежду на быстрое техническое воплощение в жизнь очень многих фантастических проектов, которые пока еще только обсуждаются на научных конференциях. Нечто подобное происходило в 20 веке с проектами, описанными в романах Ж. Верна. Несомненно также то, что все эти новые технические устройства и технологии, существующие в основном на бумаге или даже в головах исследователей, будут использовать ИМС, разработанные на новой элементной базе, параметры и характеристики которой окажутся предельно приближены к свойствам атомов, созданных Природой. Поэтому во всем мире в области электроники инженеры из различных научных университетских лабораторий и исследовательских центров всех известных полупроводниковых компаний ведут интенсивный поиск тех наноэлементов, которые станут основой элементной базы для ИМС 21 века [17, 20].

В настоящее время многочисленные научные журналы по электронике, труды конференций, Internet заполнены различными информационными сообщениями о тех или иных достижениях. В этом океане фактов и информационном лабиринте молодому исследователю важно иметь какой-то инструмент для быстрого анализа таких данных (или, иными словами, твердую почву под ногами). Современные *TCAD* системы моделирования, позволяющие точно рассчитывать конкретные численные параметры и характеристики новых наноэлементов, и являются, по сути, таким средством.

В процессе своего исторического развития *TCAD*-системы прошли значительный путь [8, 9, 13–15, 21–27, 31]. И многие из них, такие как легендарные *SUPREM-IV* и *PISCES-II* [26], несмотря на высочайший научно-технический уровень, в них заключенный, остались уже далеко позади. Новые поколения *TCAD*-систем, и прежде всего системы, разрабатываемые компанией SYNOPSYS [1,10, 13], значительно превосходят все предыдущие разработки по сложности используемых физических моделей, конструктивной геометрии прибора, численным методам, применяемым для построения расчетных сеток и решения возникающих при этом систем линейных уравнений [15, 16].

В информационном смысле *TCAD*-системы, особенно для российских пользователей, являются довольно сложным объектом, видимо превосходящем все известные прикладные системы такого рода. Квалификационные требования к практическим пользователям этих

систем очень велики. Причем решающим обстоятельством успешного применения *TCAD* является не «искусство нажимания на кнопки компьютера», а системный анализ полученных численных результатов на основе заложенных в систему моделей и численных алгоритмов. Нужно постоянно иметь в виду, что ответственность за полученные результаты моделирования несет не компьютер, а человек. И здесь уместно напомнить, что во все времена главным качеством Инженера является его **умение думать**.

Описанные выше обстоятельства и являются настоятельной причиной того, чтобы российские студенты и аспиранты, связанные с полупроводниковой электроникой, имели возможность получить доступ к русскоязычным учебным материалам, вводящих их в круг вопросов, связанных с использованием *TCAD*-системы *Sentaurus*. За последнее пятилетие такие материалы стали появляться в ведущих российских технических университетах [12, 28–31] и прежде всего в МИЭТе [10]. Авторы данного руководства надеются, что их труд будет также полезен в этом смысле.

В завершение авторы считают своим долгом выразить благодарность бывшим выпускникам РЭФ НГТУ, ныне работающим в компании SYNOPSYS, В.А. Морозу и О.Ю. Пензину за постоянное внимание к данному практикуму. Также мы благодарны студентам 3 курса РЭФ А.В. Егоркину и И.А. Смирнову за их молодой энтузиазм, проявившийся в отладке некоторых командных файлов.

ЛИТЕРАТУРА

Основная

1. www.synopsys.com

2. *Драгунов В.П., Неизвестный И.Г.* Наноструктуры. Физика, технология, применение.– Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2009. – 356 с

3. *Wong B.P., Zach F., Moroz V., Mittal A., Starr G.W.* Nano-CMOS design for manufacturability. – Wiley, 2009. – 383 pp.

4. *Мартинес-Дуарт Д.М., Мартин-Палма Р.Д., Агулло-Руеда Ф.* Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. – М.: Техносфера, 2009. – 367с.

5. *Игнатов А.Н., Калинин С.В.* и др. Микросхемотехника и наноэлектроника, ч. 2.– Новосибирск, СибГУТИ, 2007. – 243 с.

6. *Шур М.* Современные приборы на основе арсенида галлия: пер. с англ. – М.: Мир, 1991. – 632 с.

7. *Бубенников А.Н.* Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. – М.: Высшая школа, 1989. – 320 с.

8. МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов / Под ред. П. Антонетти, Д. Антониадиса, Р. Даттона, У. Оулдхема. – М.: Радио и связь, 1988. – 496 с.

9. *Selberherr S.* Analysis and simulation of semiconductor devices. – Wien., Springer, 1984. – 294 pp.

10. *Королев М.А., Крупкина Т.Ю., Ревелева М.А.* Технология, конструкции и методы моделирования кремниевых интегральных микросхем. В 2 ч. – М.: Бином, 2007. – 397 с.

11. *Абрамов И.И.* Лекции по моделированию элементов интегральных схем.– РХД, М. – Ижевск, 2005.

12. *Макаров Е.А., Мясников А.М.* Приборно-технологическое моделирование с помощью пакета Sentaurus TCAD: Методическое пособие. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2008. – 150 с.

Дополнительная

13. *Тихомиров П., Пфеффли П., Зорзи М.* Система Sentaurus TCAD компании Synopsys // Электроника: НТБ. – 2006. – № 7. – С. 89–95.

14. *Bork I., Moroz V., Bomholt L., Pramanik D.* Trends, demands and challenges in TCAD. – Materials science and engineering B 124–125, 2005, pp. 81–85.

15. www.essderc.org (Труды ежегодной конференции по TCAD-моделированию).

16. TCAD news. – *http://www.synopsys.com/products/tcad/ tcad_ pubs.html*
17. *http://www.itrs.net/reports.html.*
18. Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов / Под ред. Г.В. Гадияка. – М.: Радио и связь, 1989.
19. *Кальфа А.А.* Полевые транзисторы на гетероструктурах с селективным легированием. Современное состояние и перспективы развития. – Электронная техника, сер. Электроника СВЧ, вып. 9(403), 1987, стр. 35–49.
20. *Service R. F.* Is silicon's reign nearing its end? – Science, v=323, 20 Feb. 2009, pp. 1000–1002.
21. *Plummer J.D., Deal M.D., Griffin P.B.* Silicon VLSI Technology: fundamentals, practice and modeling. – Prentice Hall, 2001.
22. *Engl W.L.* (Ed.) Process and device modeling. – North-Holland, Elsevier, 1986.
23. *Cham K.M., Oh S.Y., Chin D., Moll J.L.* Computer-Aided Design and VLSI device development. – Boston: Kluwer, 1986. – 317 pp.
24. *Dutton R.W.* Modeling of the silicon integrated circuit design and manufacturing process. – IEEE Trans., v=ED-30, № 9, pp. 968–986.
25. *Энгль В.Л., Диркс Х.К., Майнерцхаген Б.* Моделирование полупроводниковых приборов // ТИИЭР, 1983, т. 71. – № 1. – С. 14–42.
26. *Даттон Р.У., Пинто М.Р.* Средства автоматизации и прогресс интегральных технологии // ТИИЭР, 1986, т.74. – № 12. – С. 150–161.
27. *Бубенников А.Н., Садовников А.Д.* Физико-технологическое моделирование субмикронных элементов кремниевых ССБИС // Зарубежная электронная техника, 1987. – № 3. – С. 3–21; № 4. – С. 3–28.
28. *Лукичев В.Ф., Хренов Г.Ю.* Математические модели технологических процессов электронной техники. – М.: МИРЭА, 2006.
29. *Горячкин Ю. В*. Физико-топологическое моделирование в САПР TCAD. – Саранск: Изд-во Мордов. ун-та, 2006.– 124 с.
30. *Шишлянников Б.М*. ISE TCAD: Программа моделирования технологических процессов микроэлектроники: методические указания. – Новгород: НовГУ им. Ярослава Мудрого, 2004. – 630 с.
31. *Асессоров В.В., Быкадорова Г.В., Ткачев А.Ю.* Моделирование полевых полупроводниковых приборов в САПР ISE TCAD. – Воронеж: ВГУ, 2007.
32. *Armstrong G.A., Maiti C.K.* Technology computer aided besign for Si, SiGe, GaAs integrated circuits. – The institution of Engineering and Technology, UK, 2007.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТРАНЗИСТОРОВ
В TCAD SENTAURUS

Методическое руководство

Редактор *И.Л. Кескевич*
Выпускающий редактор *И.П. Бровановa*
Корректор *И.Е. Семенова*
Компьютерная верстка *Л.А. Веселовская*

Подписано в печать 05.10.2010. Формат 60 × 84 1/16. Бумага офсетная. Тираж 150 экз.
Уч.-изд. л. 6,04. Печ. л. 6,5. Изд. № 187. Заказ № Цена договорная

Отпечатано в типографии
Новосибирского государственного технического университета
630092, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20

Sentaurus Workbench
6. Advanced Features

6.1 Preferences and Settings
6.2 Tree Navigation
6.3 Parameter and Variable References
6.4 Input Customization
6.5 Script Wrapper for Inspect
6.6 Research Mode
6.7 Third-Party Software Integration

Objectives

- To provide deeper insight into the advanced features of Sentaurus Workbench.

6.1 Preferences and Settings

The graphical user interface (GUI) of Sentaurus Workbench can be customized using the Preferences dialog box.

To open the Preferences dialog box: **Edit > User Preferences** (or press the F12 key).

Here, two useful customization features are shown. For other customization options, refer to the *Sentaurus Workbench User Guide*.

The first option allows you to change the frame or title colors of an open project so that it looks intuitively better.

Project | Scheduler

	SPROCESS		TCLSH		INSPECT	
	tool1		tool2		tool3	
		param1		param2		param3
1	[n1]: --	[n2]: 1	[n7]: --	[n12]: ABC	[n22]: --	[n32]: lin
2						[n33]: log
3				[n13]: DEF	[n23]: --	[n34]: lin
4						[n35]: log
5		[n3]: 2	[n8]: --	[n14]: ABC	[n24]: --	[n36]: lin
6						[n37]: log
7				[n15]: DEF	[n25]: --	[n38]: lin
8						[n39]: log
9		[n4]: 3	[n9]: --	[n16]: ABC	[n26]: --	[n40]: lin
10						[n41]: log
11				[n17]: DEF	[n27]: --	[n42]: lin
12						[n43]: log
13		[n5]: 4	[n10]: --	[n18]: ABC	[n28]: --	[n44]: lin
14						[n45]: log
15				[n19]: DEF	[n29]: --	[n46]: lin
16						[n47]: log
17		[n6]: 5	[n11]: --	[n20]: ABC	[n30]: --	[n48]: lin
18						[n49]: log
19				[n21]: DEF	[n31]: --	[n50]: lin
20						[n51]: log

Figure 1. Project with changed title color in horizontal orientation.

To change the title color:

1. **Edit > User Preferences**.
2. In the Preferences dialog box, expand **Table** and then expand **Title**.
3. Change the **Background/Foreground** color by editing the text in the Entry Value field (see Figure 2).
4. Click **Apply**.

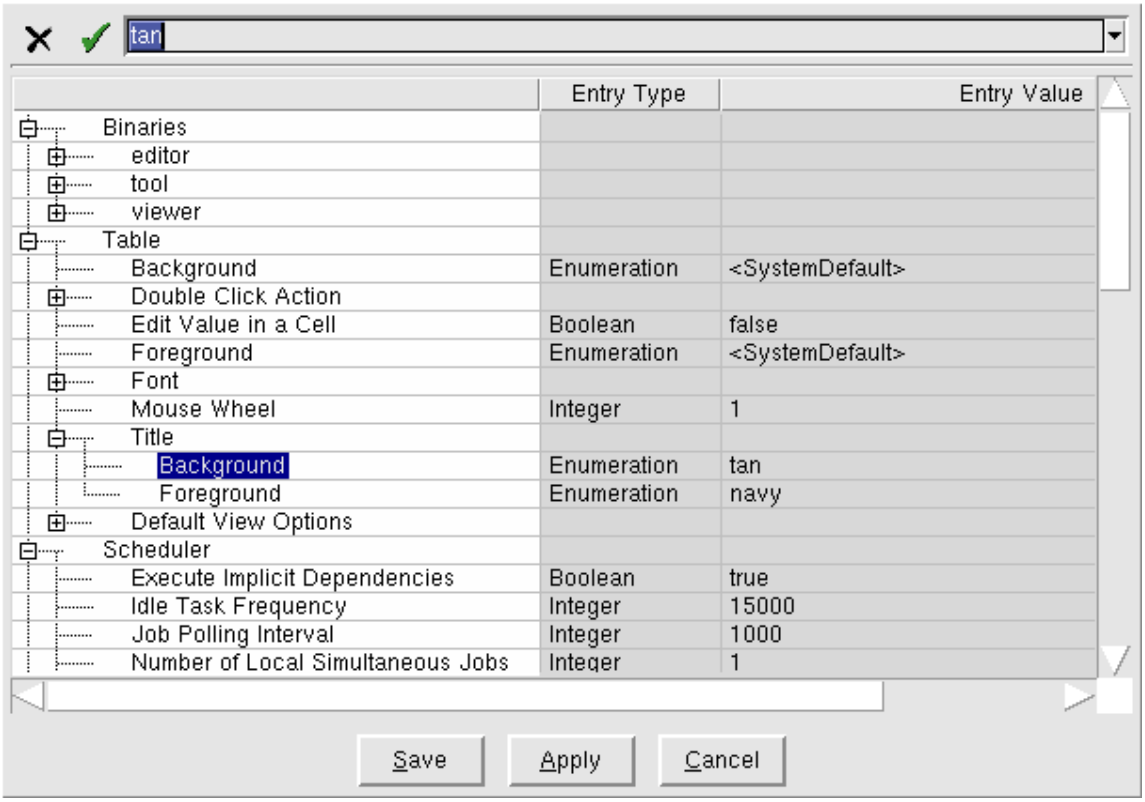


Figure 2. Changing color of background title. (Click image for full-size view.)

The second option allows you to change the project orientation: horizontal or vertical. For large projects with many splits, it is more convenient to view them in a horizontal orientation (such as Figure 1).

Small projects with fewer splits look better in a vertical representation (see Figure 3).

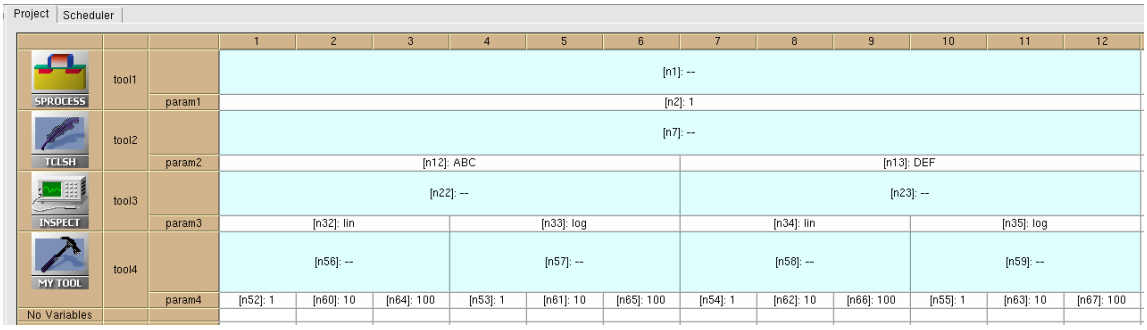


Figure 3. Vertical project orientation. (Click image for full-size view.)

To switch between the horizontal and vertical orientation for an open project: **View** > **Display Simulation Flow** > **Flow Orientation**.

To choose the project orientation globally:

1. **Edit** > **User Preferences**.
2. In the Preferences dialog box, expand **Table** and then expand **Default View Options**.
3. Change the **Default Project Orientation** (see Figure 4).
4. Click **Apply**.

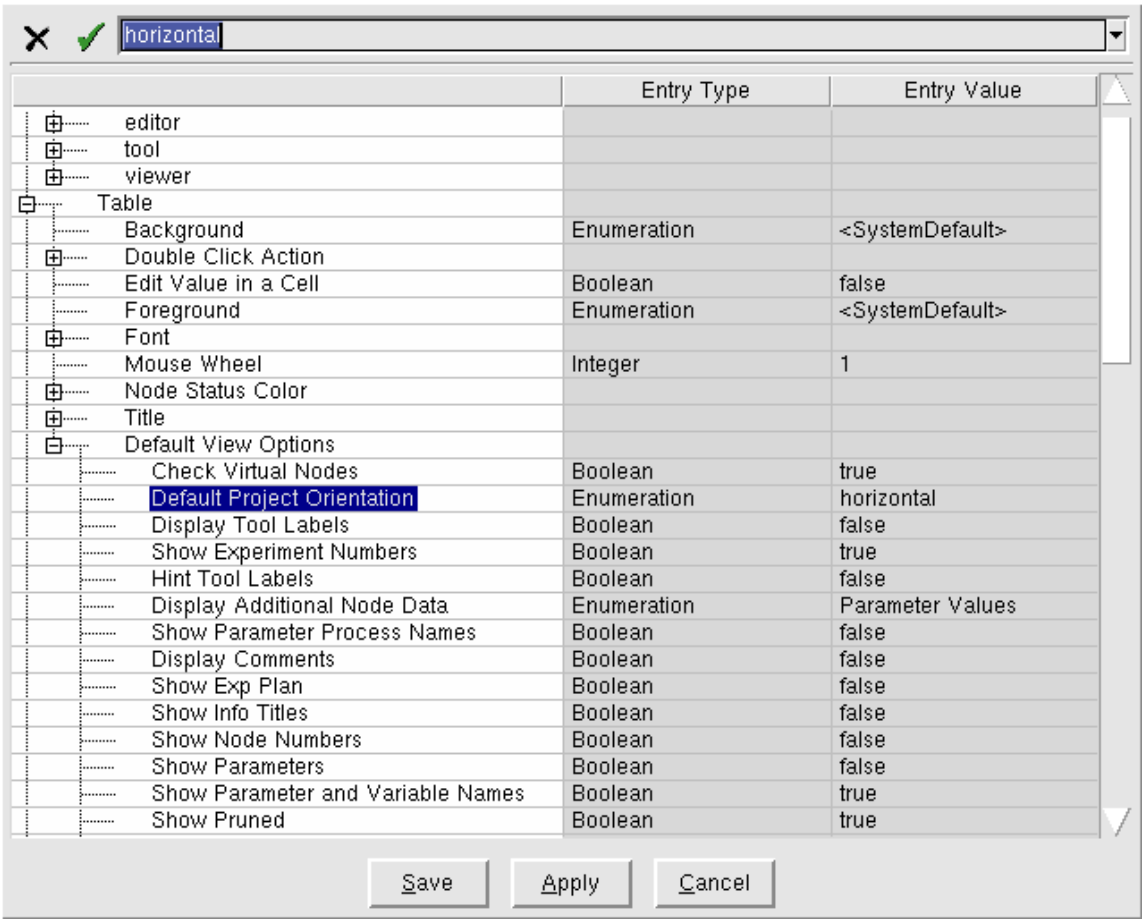


Figure 4. Changing project orientation globally. (Click image for full-size view.)

6.2 Tree Navigation

The common strategy for data exchange between different tools in a Sentaurus Workbench project uses the concept of tree navigation, which is based on the fact that each node in a simulation tree receives its unique number. When manipulating tool inputs, you can enter preprocessing commands (for example, `#if`, `#include`) and special `@...@` constructions, which are evaluated and substituted during a project preprocess.

To view project node numbers: **View** > **Tree Options** > **Node Numbers** (or Ctrl+2).

By pressing the F9 key, you can see both node numbers and parameter values within the same cell (as shown in Figure 1).

6.2.1 Node Navigation

The complete Sentaurus Workbench project, showing the standard node navigation and parameter operations, can be studied under `Applications_Library/GettingStarted/swb/node_preprocess`. Load the project into Sentaurus Workbench and preprocess it (Ctrl+P). Then, look at each particular node input (`pp*.cmd`) to see how the preprocessor interprets the commands.

The node number for each particular tool in a project can be accessed using the `@node@` specification in a tool command file. For example, for the project shown in Figure 1, the following entries have been put into the first tool input (tool1):

Node specification

```
@node@
@node:2@
@node:+2@
@node:all@
@node:first@
@node:last@
@node|1@
@node|+1@
@node|+1:all@
#if @node@ != @node:first@
  @node:-1@
#else
  none
#endif
@node:index@
@node:max@
@node|tool1@
@node|tool2@
@node|tool1:all@
```

Tool instance

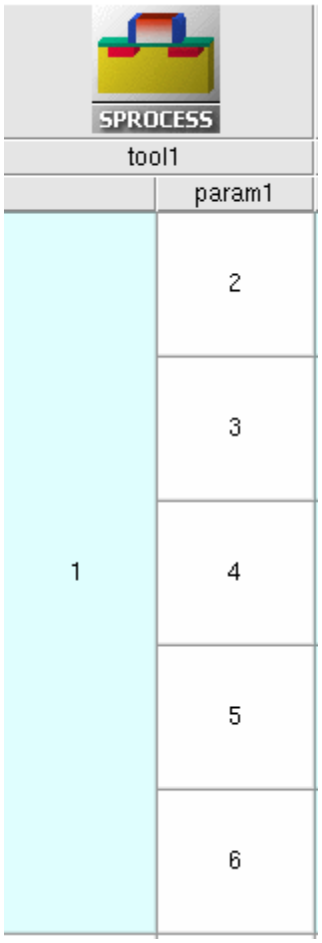
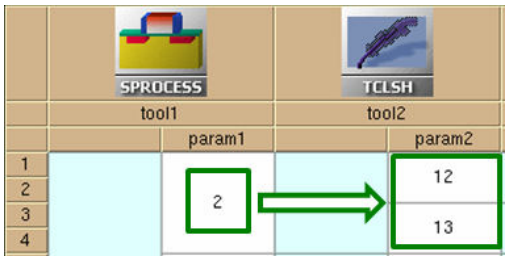


Table 1 illustrates how Sentaurus Workbench interprets these entries during the project preprocess. The Description column assumes horizontal project orientation. For vertical project orientation, the definitions of the words *right* and *below* in the description should be exchanged.

Table 1. Node navigation semantics.

Command entry	Result after preprocessing	Description
`@node@`	2	Returns the current node number.
`@node:2@`	3	Returns the number of the second node in the column. Here, a colon (:) is the operator used to navigate between different nodes within the same tool of the project.
`@node:+2@`	4	Returns the node number that is two positions below the current node. If a project is vertically oriented, it is two positions to the right of the current node (on the same tool level).
`@node:all@`	2 3 4 5 6	Returns the list of node numbers in the current

		project level.
`@node:first@`	2	Returns the number of the first node in the column.
`@node:last@`	6	Returns the number of the last node in the column.
`@node|1@`	12 13	Returns node numbers for the next subsequent tool in the project that are in the same branch of the simulation tree. Here, a vertical bar (|) is the operator to navigate between different tool nodes in the project.  Note that, when navigating, only real nodes are counted; virtual nodes (light-blue colored) are ignored.
`@node|+1@`	12 13	The command is equivalent to `@node|1@`.

`@node|+1:all@`	12 13 14 15 16
	17 18 19 20 21
	12 13 14 15 16
	17 18 19 20 21
		The list of all node numbers for the next subsequent tool in the project. Numbers in the list are repeated according to a number of splits on the next tool level (in this case, two repetitions of the number set are produced). To produce the unique node number list without repetitions, use the following commands:
		`!(`
		`set nl [list @node|+1:all@]`
		`puts [lsort -unique $nl]`
		`)!`
		
		which produces the desired node list:
		12 13 14 15 16 17 18 19 20 21
		
		The !(...)! construction instructs Sentaurus Workbench that there are Tcl commands inside, which must be evaluated during node preprocessing.

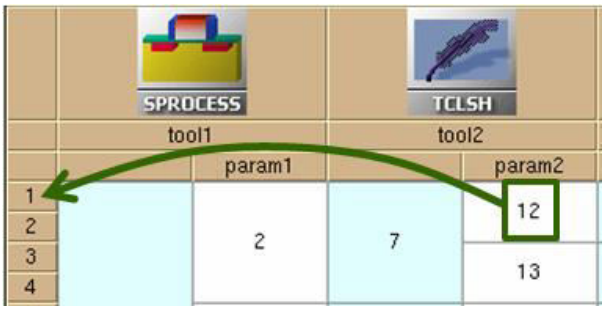
`#if @node@ != @node:first@`
`  @node:-1@`
`#else`
`  none`
`#endif`
	none	Constructions such as `@node:-1@`, `@node:+1@`, `@node|-1@`, and `@node|+1@` must be used with care, since they may refer to nonexistent node numbers. To avoid such problems, it is recommended that you check using the `#if`command.
		
		In the example, for the first node in the column, the

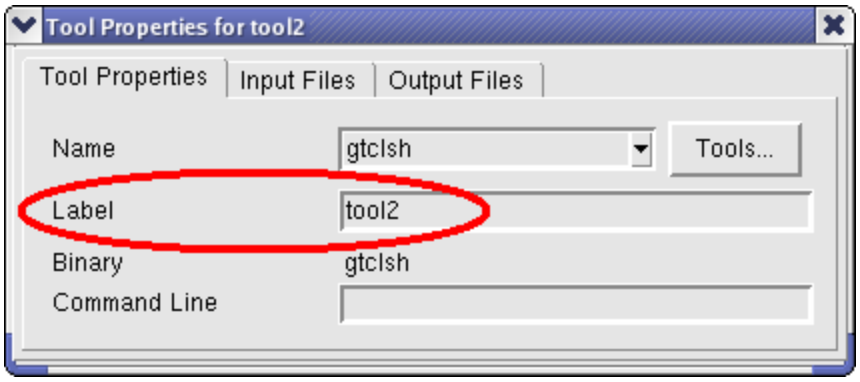
		reference to the previous node does not exist. Therefore, the `#if` check returns the "none" value.
`@node:index@`	1	Returns the index of the current node.
`@node:max@`	5	Returns the index of the last node in the column, which is equivalent to the number of splits on the current tool level in the project tree.
`@node|tool1@`	2	Returns the node number for the "tool1" tool name in the current branch of the simulation tree. Using the tool name for node navigation sometimes is more convenient, because you do not need to think about at which project tree level a node is located, but can directly access its number using a tool name.
`@node|tool2@`	12 13	Returns the node numbers for the "tool2" tool name in the current branch of the simulation tree. This command is equivalent to `@node|+1@`.
`@node|tool1:all@`	2 3 4 5 6	Returns the list of node numbers for the "tool1" tool name in the simulation tree. This command is equivalent to `@node:all@`.

6.2.2 Reserved Keywords

There are other `@...@` reserved keywords in Sentaurus Workbench, which can be useful for tree navigation and data analysis. The most frequently used keywords are collected in the second TCLSH tool input (tool2) of the project shown in Figure 1.

Table 2. Reserved Sentaurus Workbench keywords.

Keyword	Description
`@previous@`	Returns the node number of the previous node in the tree branch. Used to create node execution dependency (see Section 6.2.3 Execution Dependencies). Note that it cannot be used in the first tool input in the flow, for which a previous node does not exist.
`@experiment@`	Returns the experiment number to which a node belongs. 
`@experiments@`	Returns all the experiments to which a node belongs as a list.
`@tool_label@`	The label of a tool instance in the simulation flow.



`@pwd@`	Returns an absolute path to the project depository.
`@boundary@`	Returns the full name of the device structure boundary file, which is supposed to be loaded or saved in the current node. This command assumes that a boundary is created by either of the available boundary generators – Sentaurus Process or Sentaurus Structure Editor – and automatically substitutes the keyword with a proper file name. If specified in other tool inputs, this specification will produce a preprocessor error.
`@tdr@`	Returns the grid file name, given in TDR data format, which appears to be a result of the preceding process simulation or meshing step. Sentaurus Workbench assigns automatically a name according to the provided tool sequence in the project.

Table 3 summarizes the specially reserved keywords for Sentaurus Device.

Table 3. Reserved Sentaurus Device keywords.

Keyword	Description
`@grid@`	Returns a grid file name in DF–ISE format (obsolete). A file name is decided automatically according to the provided tool sequence in the project.
`@doping@`	Returns a doping file name in DF–ISE format (obsolete). A file name is decided automatically according to the provided tool sequence in the project.
`@tdrdat@`	Returns a file name using the following template `n<current_node_number>_des.tdr`, which is suitable for the `Plot` file specification in the `File` section of the Sentaurus Device command file. Therefore, it is usually used as a parameter of the `Plot` statement: `Plot="@tdrdat@"`.
`@plot@`	Returns a file name using the following template `n<current_node_number>_des.plt`, which is suitable for the `Current` specification in the `File` section of the Sentaurus Device command file. It is used as a parameter of the `Current` statement, `Current="@plot@"`, which refers to results of the electrothermal device simulation (currents, voltages, time, temperature, charges, and so on).
`@log@`	Returns a file name using the following template `n<current_node_number>_des.log`, which is suitable for

	the `Output` specification in the `File` section of the Sentaurus Device command file. Therefore, it is usually used as a parameter of the `Output` statement: `Output="@log@"`.
`@acplot@`	Returns a file name using the following template `n<current_node_number>_ac_des.plt`. It is used as a parameter of the `ACExtract` statement in the `File` section of the Sentaurus Device command file, `ACExtract="@acplot@"`, which refers to the results of small-signal AC analysis.
`@parameter@`	Returns a file name using the following template `n<current_node_number>_des.par`. It is used as a parameter of the `Parameter` statement in the `File` section of the Sentaurus Device command file, `Parameter="@parameter@"`, which refers to the input parameter file, containing material properties and the kinetic model coefficients.

6.2.3 Execution Dependencies

When running a project, the node execution dependency is set according to the value of the Nodes Running Order parameter (**Edit > User Preferences > Miscellaneous > Nodes Running Order**).

By default, the value is `Breadth_First`. This instructs Sentaurus Workbench to execute the nodes by row (for projects with horizontal orientation). To execute nodes by column, change it to `Depth_First`. These settings are only taken into account when no node dependencies are specified in the command file.

To have a node execution dependent on the successful completion of the previous node or nodes in the project tree, the special preprocess command `#setdep` can be used in the following form:

```
#setdep <list of nodes>
```

Having found such a command, the preprocessor ensures that a current node is not executed before all nodes in the list have the status "done".

Table 4 shows how to activate node execution dependencies.

Table 4. Execution dependency controls.

Command	Result
`#setdep @node|-1@`	Sets the dependency on a previous node in the project tree branch.
`#setdep @node|-1:all@`	Requests the node execution only when all nodes in the previous node column are finished.
`@previous@`	Specifying the keyword `@previous@` in the input automatically triggers a corresponding node dependency.

To unset node dependency, use the `#remdep` command.

Selecting **Preprocess** for nodes in the Run Project dialog box, in the Research project configuration, does not generate a node dependency. To activate node dependency, a project or node must be explicitly preprocessed by selecting **Nodes > Preprocess Nodes**.

6.2.4 The "/i" and "/o" Reference Options

Each `@...@` reference in Sentaurus Workbench may have an option, specifying whether the reference addresses the input or output interface of a tool.

There are two possible flags (options):

- `@<ABC>/i@` refers to the input file of type `<ABC>` for the current tool.
- `@<ABC>/o@` refers to the output file of type `<ABC>` for the current tool.

If no option is specified, the Sentaurus Workbench preprocessor assumes the input file (`"/i"` option), which works seamlessly for most tools. The only exception is Sentaurus Structure Editor, for which you may want to produce either input with the file name extension `_dvs` (the default setting in Sentaurus Structure Editor) (for debugging purposes) or input for the consequent tool (for example, Sentaurus Mesh). This is where the `"/i"` and `"/o"` options are helpful.

For example, the following commands:

```
@boundary/i@
@boundary/o@
```

will be interpreted by the Sentaurus Workbench preprocessor as:

```
pp3_dvs.bnd
n3_msh.bnd
```

6.3 Parameter and Variable References

This section discusses how to refer to project parameters and variables in Sentaurus Workbench.

6.3.1 Project Parameters

As mentioned in Section 4.1 Adding Parameters, a parameter splits the flow at the insertion point to produce variations in the current tool inputs. To access a parameter value, the syntax `@<parameter_name>@` is used.

To demonstrate the possible ways to access parameter values, the following entries have been put into the Inspect tool input file (tool3) for the project shown in Figure 1:

```
@param1@
@param2@
@param3:+2@
@param2|-1:+2@
@param1:all@
@param1|-2:all@
```

Below are how the corresponding preprocessed entries for the first (upper) node in the column look after preprocessing.

Command entry Result after preprocessing

`@param1@` 1

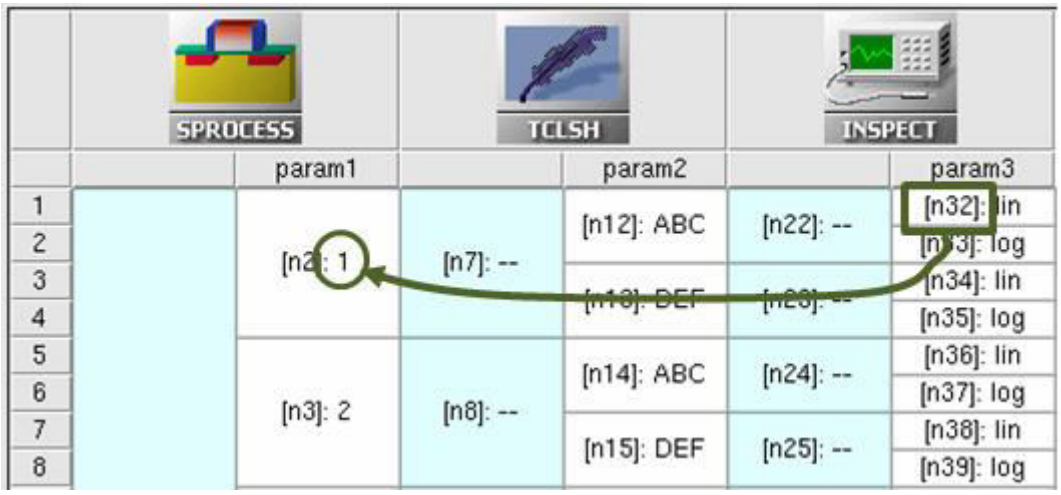


Figure 5. Reference by parameter name.

Command entry Result after preprocessing

`@param2@` ABC

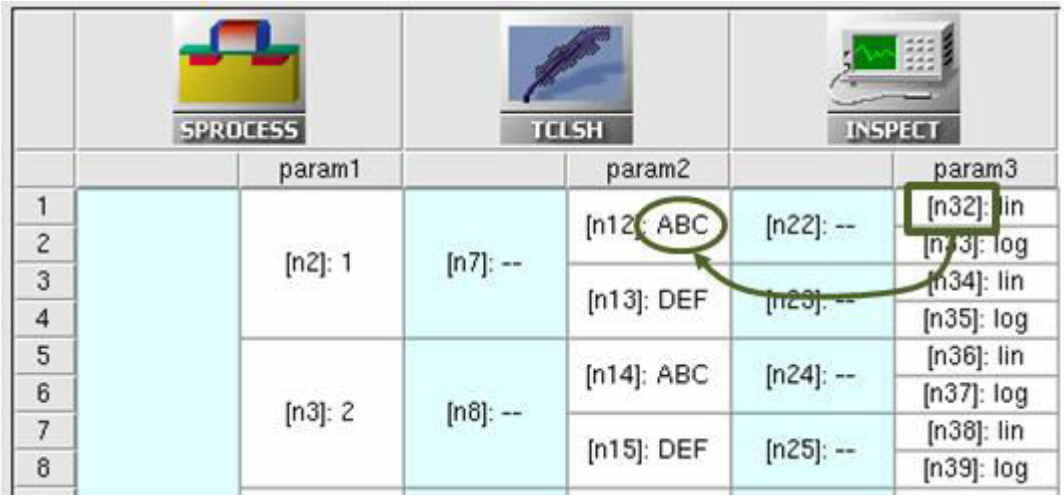


Figure 6. Reference by parameter name.

Command entry Result after preprocessing

`@param3:+2@` lin

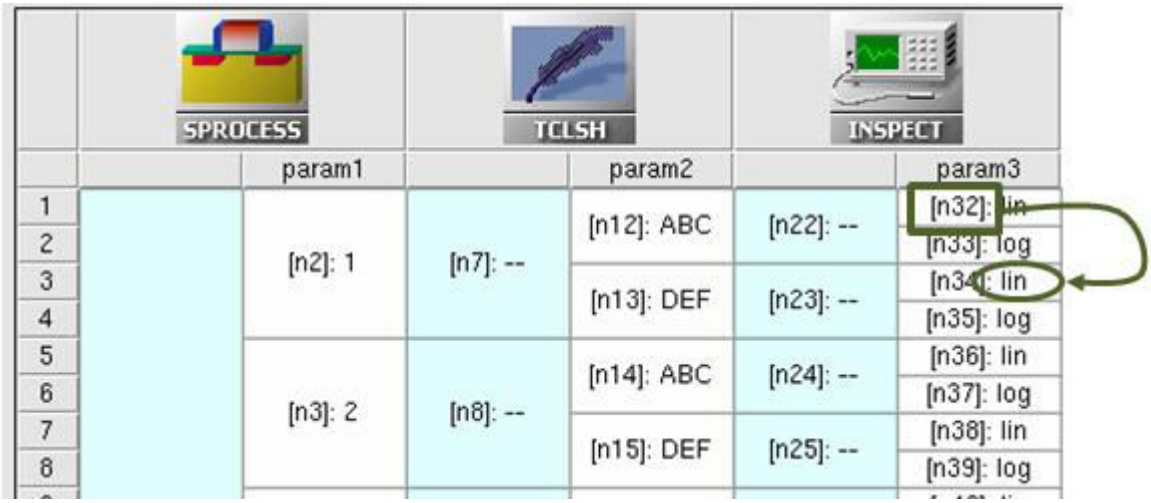


Figure 7. Combination of reference by parameter name and vertical node shift.

Command entry Result after preprocessing

`@param2|-1:+2@`
`or`
`@param2|:+2@` ABC

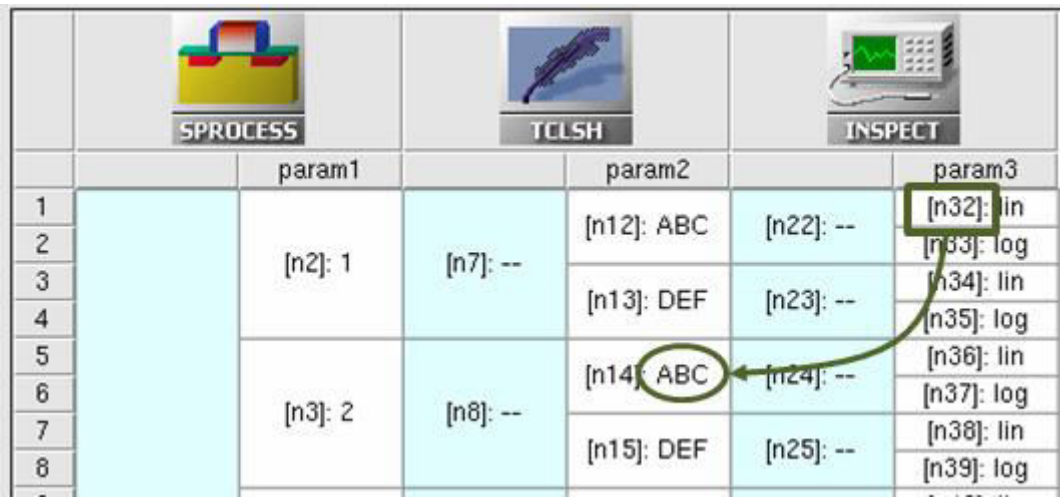


Figure 8. Combination of reference by parameter name, and vertical and horizontal node shifts.

Command entry Result after preprocessing

`@param1:all@` 1 1 1 1 2 2 2 2 3 3 3 3 4 4 4 4 5 5 5 5

`@param1|-2:all@` 1 2 3 4 5

The `@param1:all@` entry in the Inspect tool instance produces the multiple value `param1` list according to the number of subsequent splits in the Family Tree. To produce the original list of values, the command should refer to the project tool location where the parameter has been introduced (Sentaurus Process tool instance). Alternatively, the list of values produced by the `@param1:all@` command can be sorted using the Tcl `lsort` command:

```
!(
```

```
puts [lsort -unique [list @param1:all@]]
)!
```

6.3.2 Project Variables

Variables are special objects, introduced in Sentaurus Workbench, which are used to exchange extracted data values between project tools. Like a parameter, a variable holds a value and can be referenced in any form of the `@...@` references. The main difference is that a variable does not create a split in the simulation flow and, therefore, does not change the simulation tree representation.

The `#set` command is used to define a preprocessed variable and to initialize it:

```
#set <variable_name> <value>
```

A variable reference creates an execution dependency from the node where the reference is performed to the first ancestor where the variable has been set.

In the above project, the variable `"VAR1"` is defined in the first Sentaurus Process tool instance as `#set VAR1 @node@`.

After project preprocessing, it appears as a single project column following the last tool in the project tool flow.

	SPROCESS		TCLSH		INSPECT			
		param1		param2		param3	VAR1	square
1	[n1]: --	[n2]: 1	[n7]: --	[n12]: ABC	[n22]: --	[n32]: lin	2	1
2						[n33]: log	2	1
3				[n13]: DEF	[n23]: --	[n34]: lin	2	1
4						[n35]: log	2	1
5		[n3]: 2	[n8]: --	[n14]: ABC	[n24]: --	[n36]: lin	3	4
6						[n37]: log	3	4
7				[n15]: DEF	[n25]: --	[n38]: lin	3	4
8						[n39]: log	3	4
9		[n4]: 3	[n9]: --	[n16]: ABC	[n26]: --	[n40]: lin	4	9
10						[n41]: log	4	9
11				[n17]: DEF	[n27]: --	[n42]: lin	4	9
12						[n43]: log	4	9
13		[n5]: 4	[n10]: --	[n18]: ABC	[n28]: --	[n44]: lin	5	16
14						[n45]: log	5	16
15				[n19]: DEF	[n29]: --	[n46]: lin	5	16
16						[n47]: log	5	16
17		[n6]: 5	[n11]: --	[n20]: ABC	[n30]: --	[n48]: lin	6	25
18						[n49]: log	6	25
19				[n21]: DEF	[n31]: --	[n50]: lin	6	25
20						[n51]: log	6	25

Figure 9. Variable initialization in Sentaurus Workbench.

The last statement in the Inspect tool command file:

```
#set square @<@param1@*@param1@>@
```

illustrates how you can use a parameter in the equation expression and assign a resulting value to the variable, which then appears in the project tree. The `#set` command here is used to create the variable and assign its value.

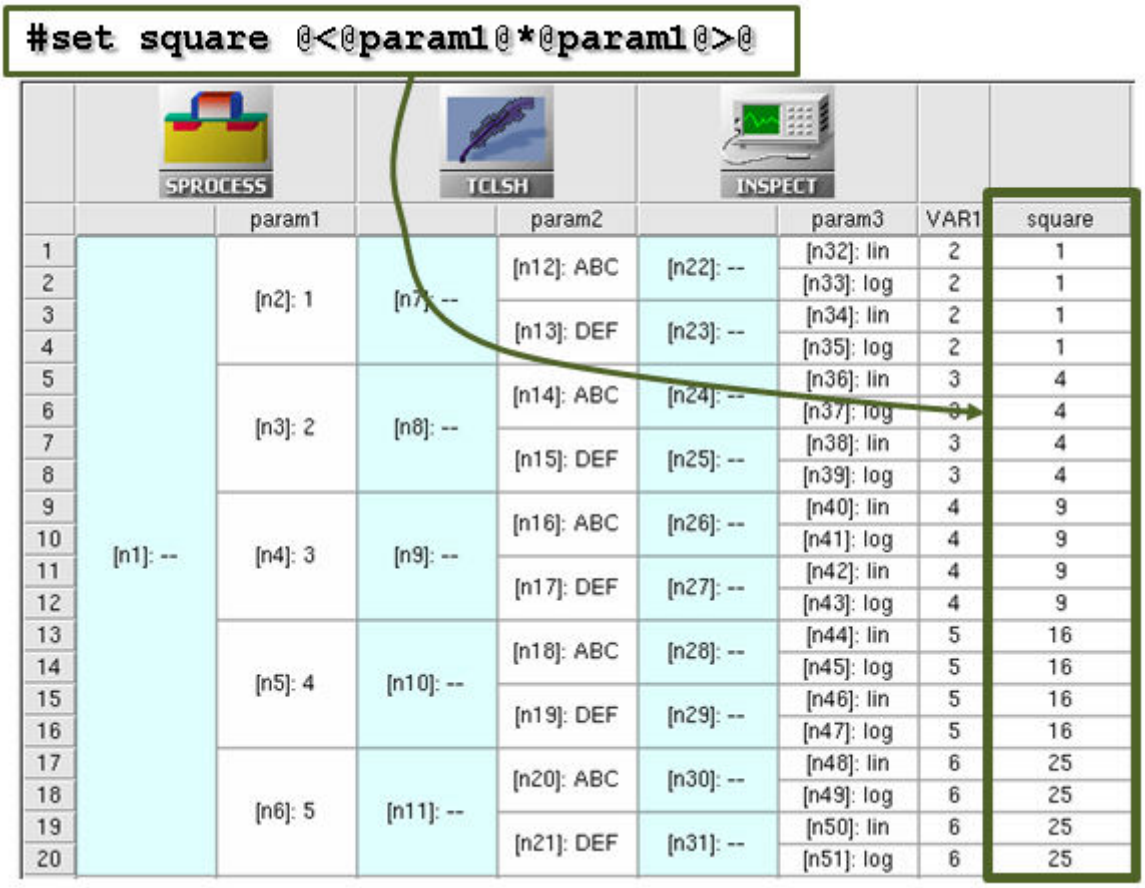


Figure 10. Variable declaration and its value assignment using parameter reference and equation expression. The resulting variable value appears on the rightmost side of the project tree.

Another way to have a variable appear in the project is to print its name and value while a node is executed. This is the typical way in which extracted parameter values are sent to the project for further analysis. After a node has been executed successfully, its output file is parsed by Sentaurus Workbench for strings that match the following template:

```
DOE: <varname> <value>
```

Then, found values are written to the `gvars.dat` file and the project view is modified. If a specified variable already exists, the last printed value will overwrite an existing one.

Here are a few examples of how you can write a variable to have it appear in a project tree:

- In Sentaurus Structure Editor:
  ```
  (define pi 3.141593)
  (display "DOE: PI") (display pi) (newline)
  ```

- In Tclsh:
  ```
  set pi 3.141593
  puts "DOE: PI $pi"
  ```

- In Inspect:
  ```
  set pi 3.141593
  ft_scalar PI $pi
  ```

6.4 Input Customization

All tool inputs can be accessed from the GUI of Sentaurus Workbench by either selecting **Tool > Edit Input**, or right-clicking a tool icon and selecting **Edit Input**.

The corresponding tool inputs in the menu are tool oriented, and their definitions are specified in the global `tooldb.tcl` file, which is accessible by selecting **Edit > Tool DB > Global**.

For example, for the Sentaurus Device tool instance, the following specifications are entered in the `tooldb.tcl` file:

```
set WB_tool(sdevice,input,commands,file)  @tool_label@_des.cmd
set WB_tool(sdevice,input,commands,newfile)  @tool_label@_des.cmd
set WB_tool(sdevice,input,commands,label)  Commands...
set WB_tool(sdevice,input,commands,editor)  text
set WB_tool(sdevice,input,parameter,files)  sdevice_*.par
set WB_tool(sdevice,input,parameter,file)  .par
set WB_tool(sdevice,input,parameter,newfile)  sdevice.par
set WB_tool(sdevice,input,parameter,label)  "Parameter..."
set WB_tool(sdevice,input,parameter,parametrized)  1
set WB_tool(sdevice,input,parameter,preamble)  sdevice_par_Si
set WB_tool(sdevice,input,parameter,editor)  text
set WB_tool(sdevice,input,edit,label)  "Include Parameter File..."
set WB_tool(sdevice,input,edit,cmd)  G_ToolInput::GetDatex
set WB_tool(sdevice,input,config,label)  "Linear Solvers..."
set WB_tool(sdevice,input,config,file)  [list .sliprc .superrc]
set WB_tool(sdevice,input,config,editor)  text
```

These commands instruct Sentaurus Workbench as to which entries should be listed in the **Edit Input** submenu and how they will be handled when selected. When the **Edit Input** command is selected, a submenu is displayed, allowing you to select the necessary input and then to edit it.

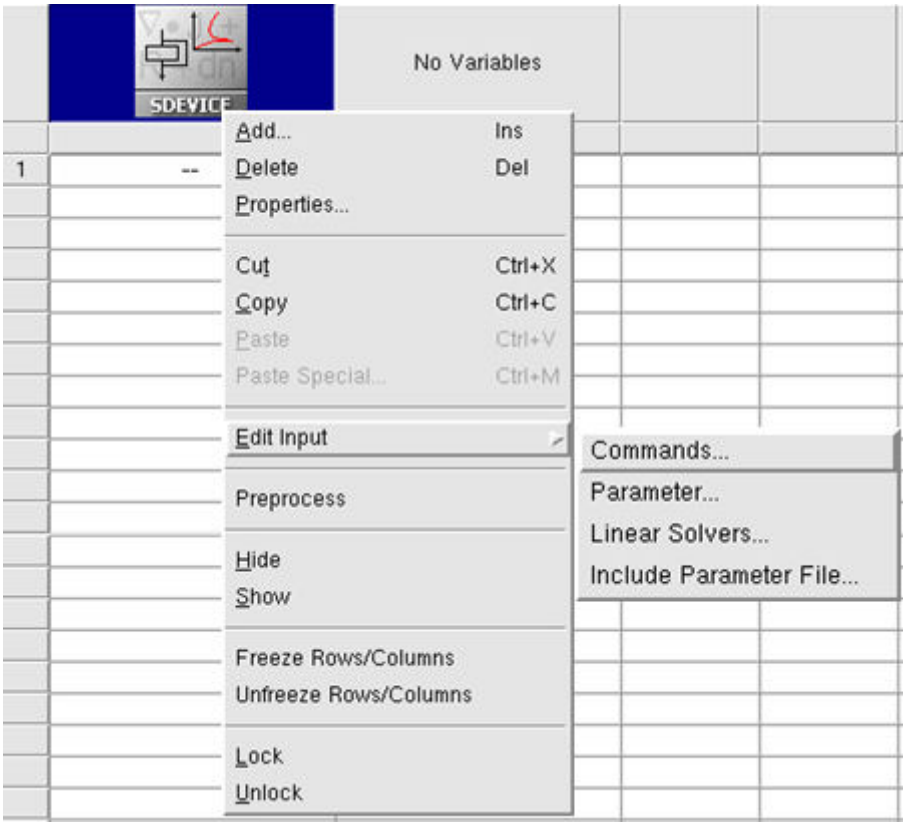


Figure 11. Standard input file list for Sentaurus Device tool entry.

By default, in the **Edit Input** submenu, access to the Sentaurus Device command file, parameter file, linear solver settings, and material parameters is provided. If you need to modify the submenu (input list), you can customize it by introducing the necessary corrections in a local project `gtooldb.tcl` file. The following example shows how you can do this.

Now look at the project, which consists of one Sentaurus Device tool instance and one parameter (see Figure 12).

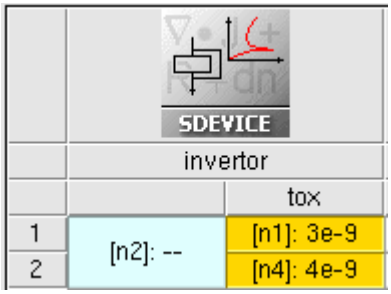


Figure 12. Example showing how to customize the input file list for the Sentaurus Device tool instance.

The corresponding Sentaurus Workbench project can be found in the directory `Applications_Library/GettingStarted/swb/HSpice_bsim4`.

In this project, the CMOS inverter behavior is simulated on a circuit level using the HSPICE BSIM4 circuit model. The BSIM4 model parameters for the NMOS and PMOS

transistors are loaded from the external file circuit.scf, where the parameter tox is referred.

To ensure that this file can be parameterized, the local project gtooldb.tcl file has been modified.

The first three commands add the new object (circuit) to the file type list, define its standard extension (scf), and add the new object to the Sentaurus Device input file list:

```
set WB_tool(file_types) [list circuit]
set WB_tool(circuit,ext) scf
set WB_tool(sdevice,input) [list commands parameter config grid doping \
                                 edit tdr circuit]
```

The next four commands specify the full circuit file name, which must be opened when selecting the corresponding item from the **Edit Input** submenu, select the label in the tool **Edit Input** submenu, activate the parameterization possibility for this file, and indicate that a default text editor must be used for this input editing:

```
set WB_tool(sdevice,input,circuit,file) circuit.scf
set WB_tool(sdevice,input,circuit,label) "Circuit..."
set WB_tool(sdevice,input,circuit,parametrized) 1
set WB_tool(sdevice,input,circuit,editor) text
```

This makes it possible for:

- The circuit file to appear in the list of Sentaurus Device inputs.
- The circuit.scf file to be parameterized.

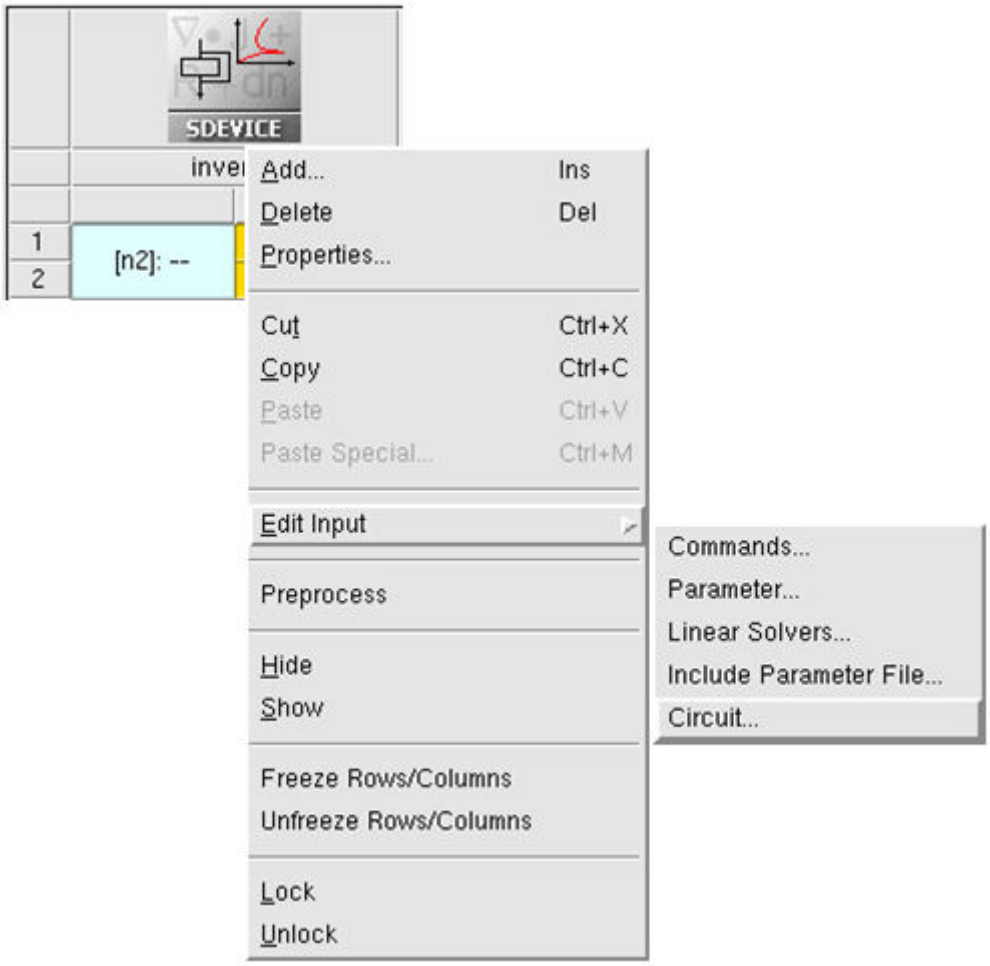


Figure 13. Modified input file list for Sentaurus Device, introducing the possibility to edit the circuit file description.

Preprocess the project to see how the `@tox@` statement is replaced by its actual values.

At the end of the `gtooldb.tcl` file of the project, you can see the additional command, which instructs Sentaurus Workbench that the prologue commands must be executed before a Sentaurus Device node execution:

```
set WB_tool(sdevice,prologue) { catch {os_mkdir_rel n@node@ $wdir}; \
     os_cp $wdir/pp@node@_des.scf $wdir/n@node@/pp@node@_des.scf }
```

The purpose of these commands is to create a subdirectory in the project folder and copy a preprocessed circuit file there. This is performed to overcome a Sentaurus Device limitation, which is always to read the first-found circuit file in the directory specified in the `SPICEPath` command statement.

Correspondingly, Senaturus Device is instructed to read the circuit file from a specific `"./n@node@"` path to avoid a circuit file misuse:

```
File {
  ...
  SPICEPath= "./n@node@"
}
```

6.5 Script Wrapper for Inspect

You can visualize single-node curves as well as multiple-node curves using the visualization wrapper script integrated in Sentaurus Workbench. To do this, at least one Inspect tool instance must be present in the project.

Now, you will look at the `GettingStarted/SWB_nmos` project supplied with the release.

Start Sentaurus Workbench, copy the project to your workspace, and open it. Then, select several Inspect nodes, which correspond to the same V_{ds} bias condition, such as shown in Figure 14.

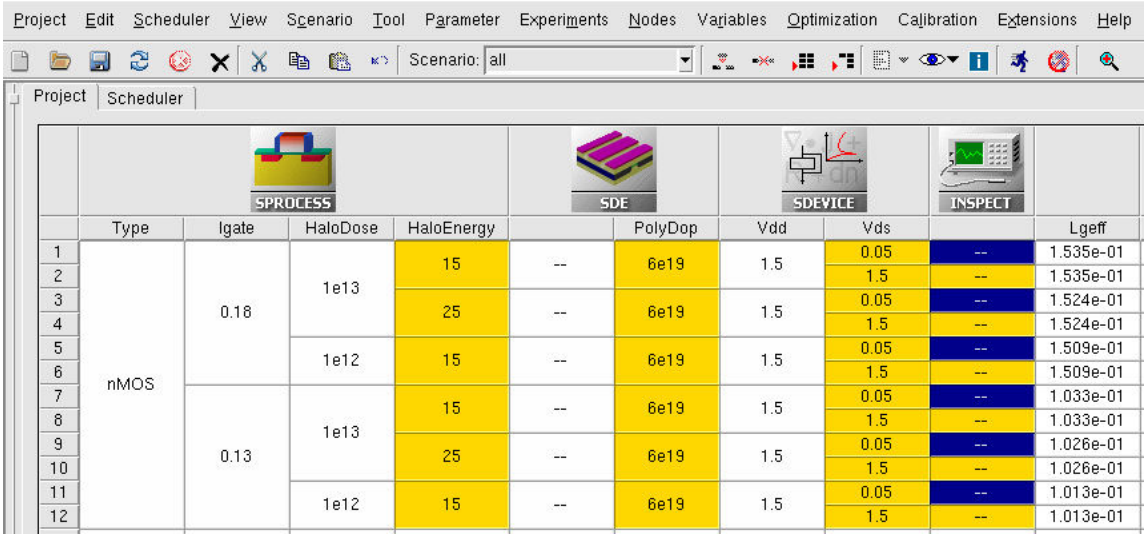


Figure 14. The SWB_nmos project. (Click image for full-size view.)

After nodes are selected, select **Extensions** > **Run Selected Inspect Nodes Together** to launch the visualization wrapper script (see Figure 15).

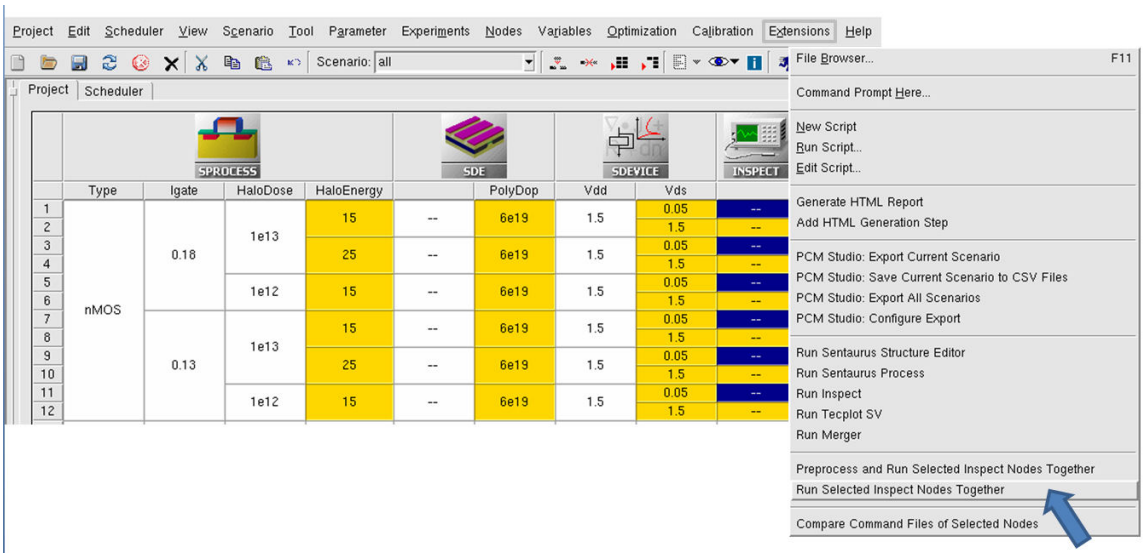


Figure 15. Extensions menu for launching visualization wrapper script. (Click image for full-size view.)

The wrapper will assemble all the corresponding Id–Vgs curves within one Inspect window (see Figure 16).

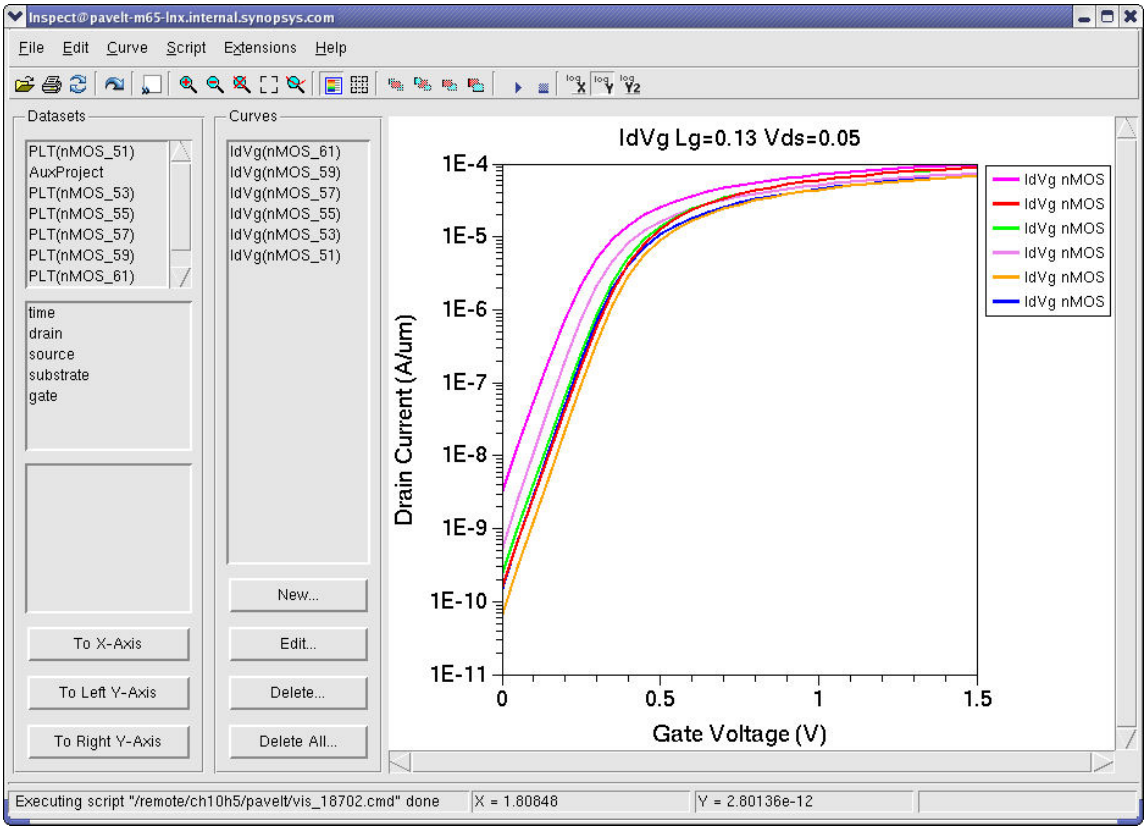


Figure 16. Inspect curve assembly by visualization script wrapper. (Click image for full-size view.)

Technically, the wrapper merges the selected Inspect inputs into one command file and then evaluates the file. Therefore, to avoid any unexpected behavior, the following requirements must be met when using the wrapper:

- Inspect nodes must be either executed or preprocessed before the wrapper is launched since Sentaurus Workbench looks for the file `pp@node@_ins.cmd` to be available.
- In the Inspect master input file, you must ensure that a curve name template includes a unique node number `@node@`, for example, `cv_createDS IdVg(@node@) ...`
  This helps the wrapper to distinguish between curves to be visualized. The name of a curve being built automatically contains a corresponding node number. Otherwise, Inspect will generate an error message.

6.6 Research Mode

A project can be configured in two different modes:

- Standard mode:
  - Sentaurus Workbench handles projects as in previous releases.
  - Sentaurus Workbench activates safeguards to keep overall project consistency.

- Research mode:
    - Sentaurus Workbench disables all safeguards.
    - Users have maximum flexibility when running projects.
    - Users are wholly responsible for maintaining project consistency.

For an already loaded project, to switch between modes, use **Project > Configuration**. Every time a project is loaded, its mode is taken according to the configuration setup from the previous session.

For new projects and projects created with previous Sentaurus Workbench releases, the mode is taken according to **Edit > User Preferences > Preferences > Project > Configuration > Default Project Configuration**.

The project mode status is indicated in the main title bar of the GUI of Sentaurus Workbench, where the full project name is shown.

Table 5 summarizes the differences between the two modes in terms of user ability to control the execution of project nodes.

Table 5. Comparison of Sentaurus Workbench configuration modes.

Running project criteria	Standard mode	Research mode
Running project is locked for changes.	Yes	No
Automatic checks of project consistency, file timestamps, and execution dependencies.	Yes	No
Modifications to tool input files on a node level are allowed.	No	Yes
Nodes are forced to be preprocessed when they are run.	Yes	No
Modifications to tool input files and tool database files are allowed.	No	Yes
Parameterization table accepts changes: 1. Add or remove tools, parameters, and variables. 2. Add or remove experiments or parameter values. 3. Change a parameter value on a node.	No	Yes
Modifications can remove or affect already running nodes.	No	No
Preprocessing the whole project or selected nodes is allowed.	No	Yes
Adding additional nodes to run, or aborting a project or nodes, is allowed.	Yes	Yes

When you run a project in Research mode, the Run Project dialog box is displayed (see Figure 17).

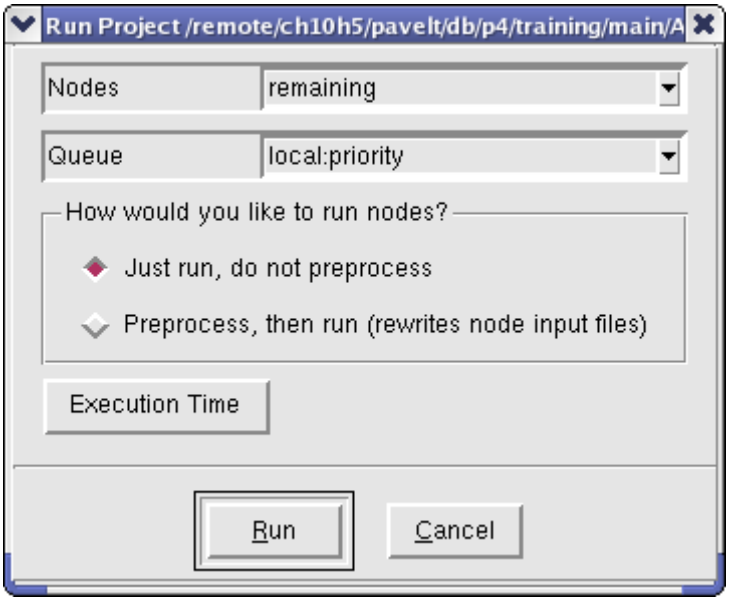


Figure 17. Run Project dialog box when project is in Research mode.

By default, the **Just run, do not preprocess** option is selected, which instructs Sentaurus Workbench not to preprocess the project before it is run. This is helpful if you have already preprocessed the project. If not, the node run will fail. In this case, you need to select the **Preprocess, then run**option to have nodes preprocessed first.

To make the latter option the default: **Project > Configuration > Settings for Research Configuration > How to run nodes by default**.

6.7 Third-Party Software Integration

Sentaurus Workbench provides several capabilities to use third-party software with TCAD Sentaurus tools. It is possible to introduce a new tool using the MY TOOL tool instance and to customize its input in the user or project `tooldb` file.

For more details, refer to the *Sentaurus Workbench User Guide*, Chapter 10, Integrating Sentaurus Workbench with Other Tools.

This section demonstrates how third-party software can be used in Sentaurus Workbench by integrating the Sentaurus Device Wizard application into Sentaurus Workbench through modifications applied to the input file list of Sentaurus Device. This allows you to use the Sentaurus Device Wizard, which generates an application-based input file for Sentaurus Device.

To launch the Sentaurus Device Wizard inside Sentaurus Workbench:

1. Save the archived Sentaurus Device Wizard input file `sdw.tgz` to your `$STDB` destination by right-clicking and selecting **Save Link As**, and decompress it:

   ```
   gunzip -c sdw.tgz | tar xvf -
   ```

2. Copy the following lines in the `$STDB/tooldb_<username>` file:

```
global env
source [file join $env(STDB) sdw.tcl]
source [file join $env(STDB) sdevice_wizard.tcl]

set WB_tool(sdevice,input) [list commands parameter config \
      grid doping edit tdr wizard]
set WB_tool(sdevice,input,wizard,label) "SDevice Wizard..."
set WB_tool(sdevice,input,wizard,cmd) "sdevice_wizard::Start"
```

   Here, the first three commands source the Sentaurus Device Wizard Tcl code. The last three commands introduce the new entry in the Sentaurus Device input file list and indicate what Sentaurus Workbench needs to do when the entry is chosen.

3. Launch Sentaurus Workbench and create new project.
4. Verify that the above lines are recognized by Sentaurus Workbench by looking at the user `tooldb` file (**Edit > Tool DB > User**).
5. Add Sentaurus Device as a new tool instance and save the project.
6. Right-click the Sentaurus Device tool icon and select **Edit Input**. In the shortcut menu, you will see **SDevice Wizard** as a command option (see Figure 19).
7. Select **SDevice Wizard** to open the Sentaurus Device Wizard GUI.

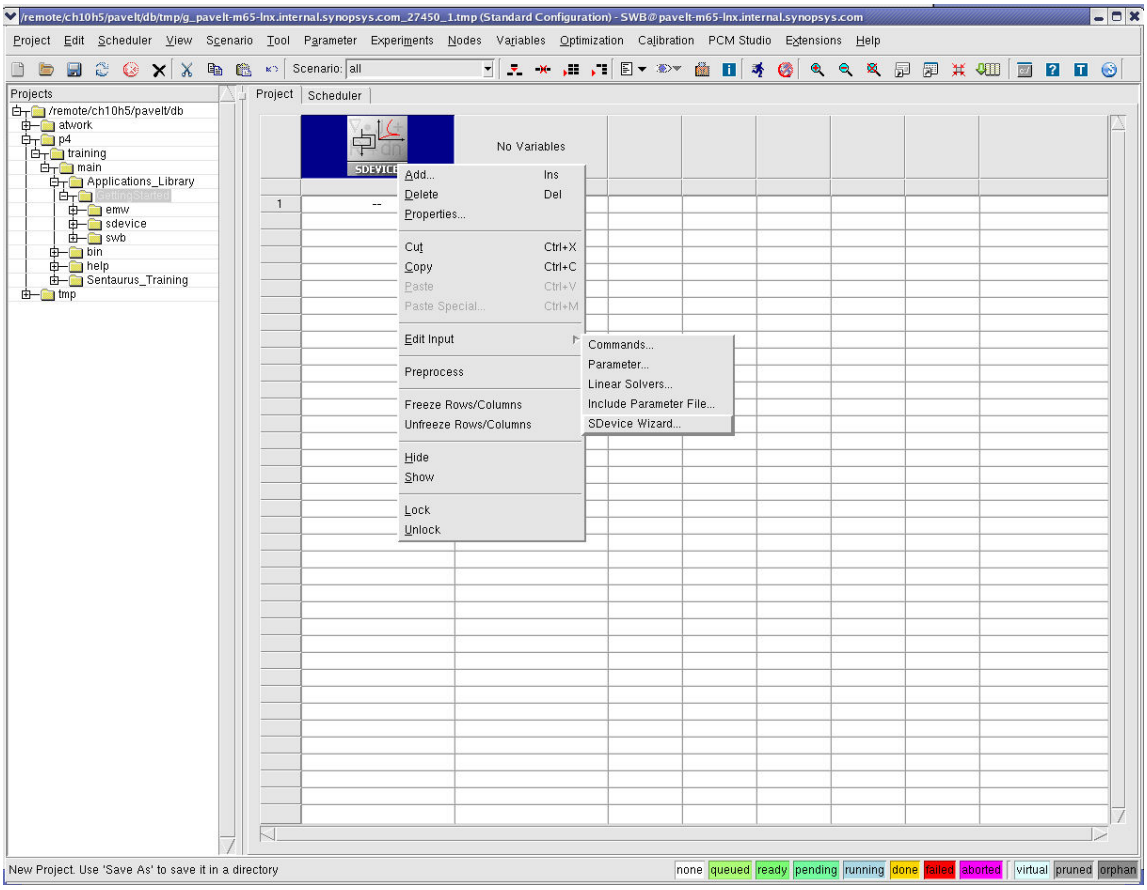


Figure 18. Sentaurus Device Wizard command entry becomes visible in the Sentaurus Device input file list after applying above modifications to a user tool database file. (Click image for full-size view.)