

实验十一 工艺模拟、器件模拟与参数提取

实验目的：以普通二极管为例，学习 Athena 工艺仿真方法和 Atlas 器件仿真方法，并学习参数提取

方法：编写 pn 结 Athena 仿真程序，得到器件结构图，提取结深大小，编写 Atlas 仿真程序，得到 I-V 特性结果图。

1. 创建一个初始结构

打开 DeckBuild，在文本窗口中输入语句 `go athena`，如图 1 所示。

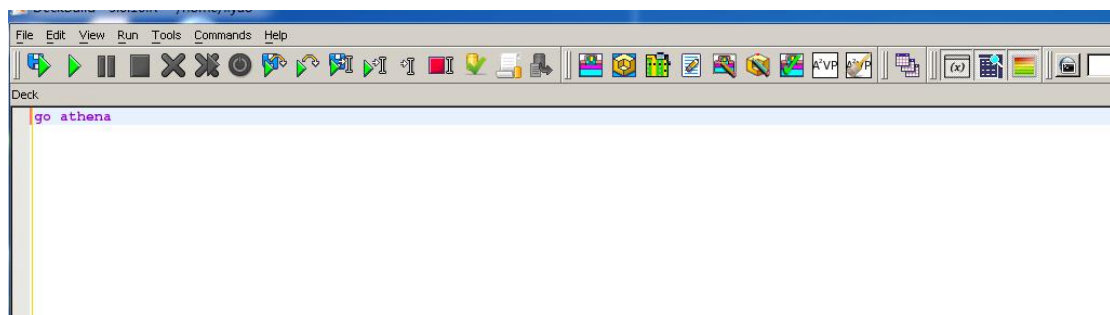


图 1

为了定义网格，在 Commands 中选择 Mesh Define 菜单项，如图 2 所示。下面将在 $1\mu\text{m}\times 2\mu\text{m}$

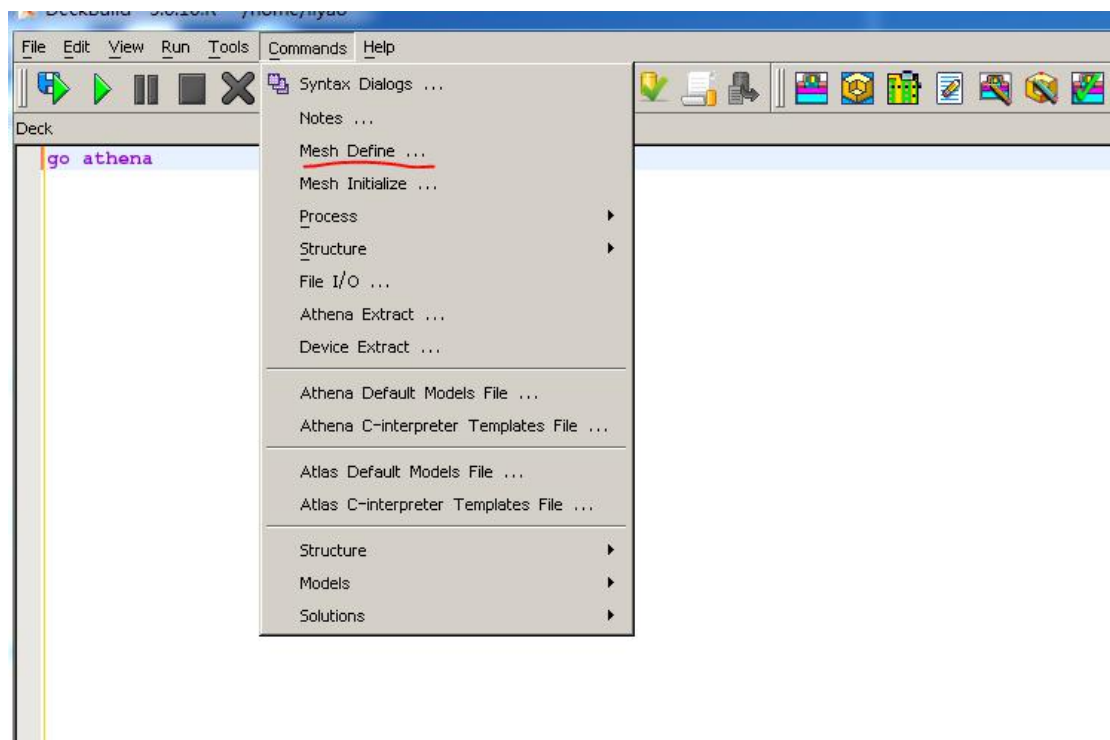


图 2

的区域内创建非均匀网格：在 X 方向，在 Location 栏输入值 0，在 Spacing 栏输入值如 0.1，同时在 Comment 栏输入注释如“Non-Uniform Grid($1\mu\text{m}\times 2\mu\text{m}$)”，也可不输。单击 Insert 按钮，于是网格定义的参数会出现在滚动条菜单中，如图 3。在 $X=0.5$ 和 $X=1$ 处，分别插入第二和第三个网格线定义线，并将网格间距设为 0.01，这样在 X 轴右边区域内就定义了一个

非常精密的网格。在 Y 方向，在 Location 栏输入值 0，然后在 Spacing 栏输入网格间距值为 0.01，单击 Insert 按钮，并继续插入第二，第三个 Y 方向的网格定义点，位置分别设为 1, 2，网格间距设为 0.05，得到如图 4。最后，单击 Write 按钮，即在文本窗口中写入了如图 5 程序（另一种办法是直接文本窗口中编程输入！）。

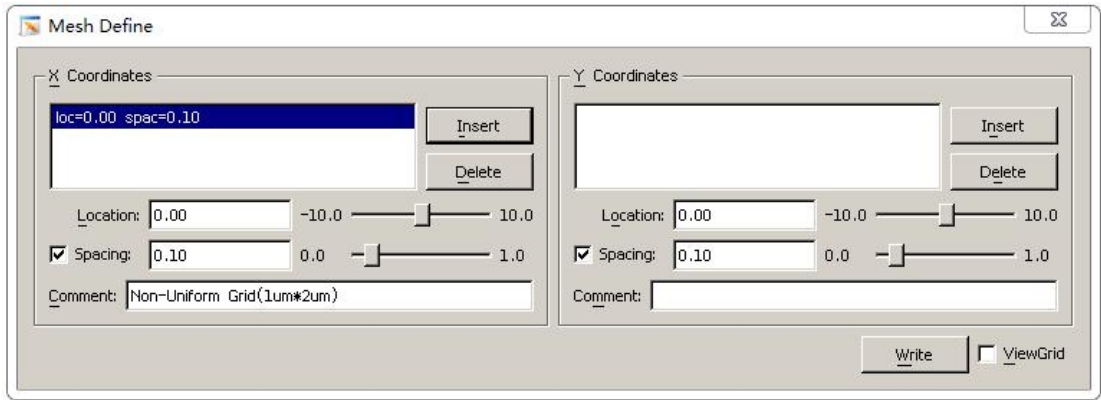


图 3

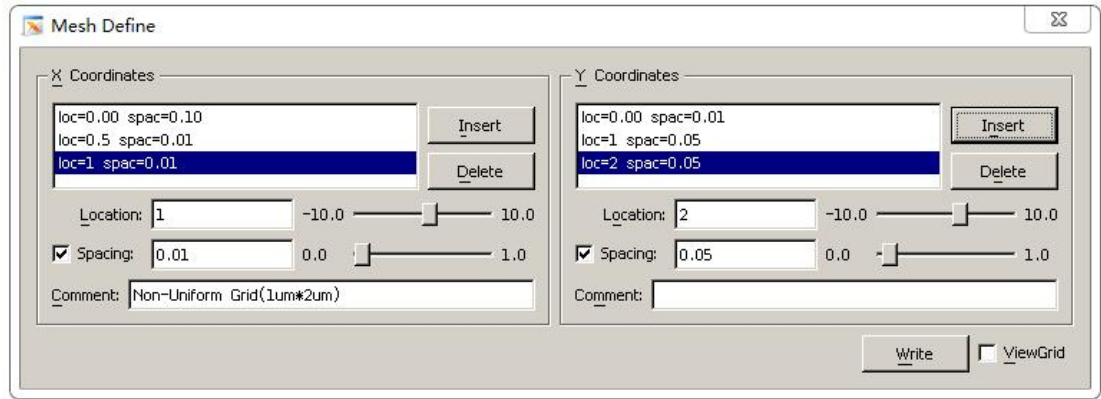


图 4

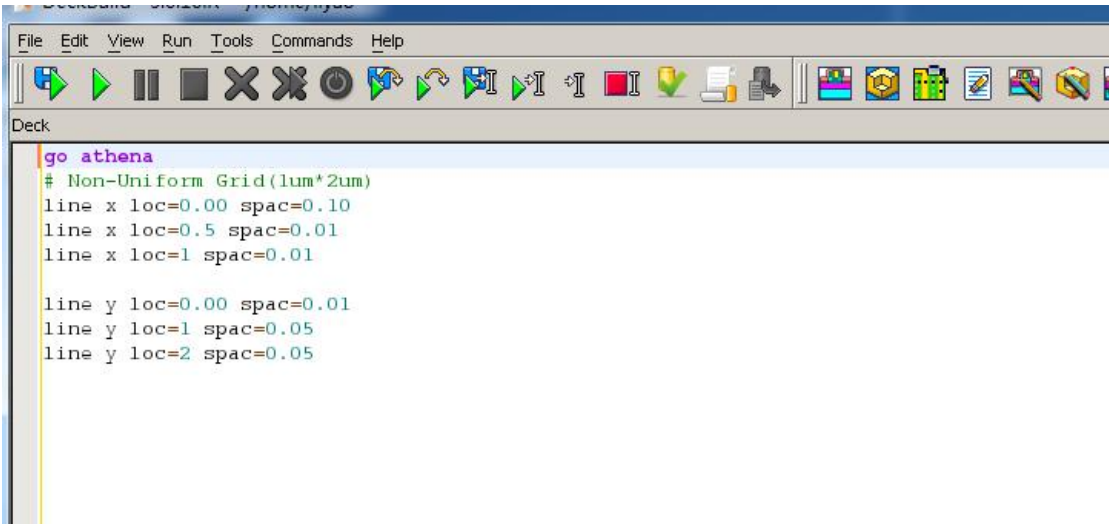


图 5

关闭 Mesh Define。注意：“#”号后面是注释行，不是命令行。

2. 定义初始衬底

在 Commands 菜单中选择 Mesh Initialize...选项，Material 选 Silicon，Orientation 选 100，Impurity 选 Phosphorus，杂质浓度设为 $1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ，Dimensionality 选 2D（二维情况），

Comment 栏可任意填，如图 6 所示，然后单击 Write 按钮，写入网格初始化的有关信息。关闭 Mesh Initialize（窗口写完以后要关闭，以后不再提示）。

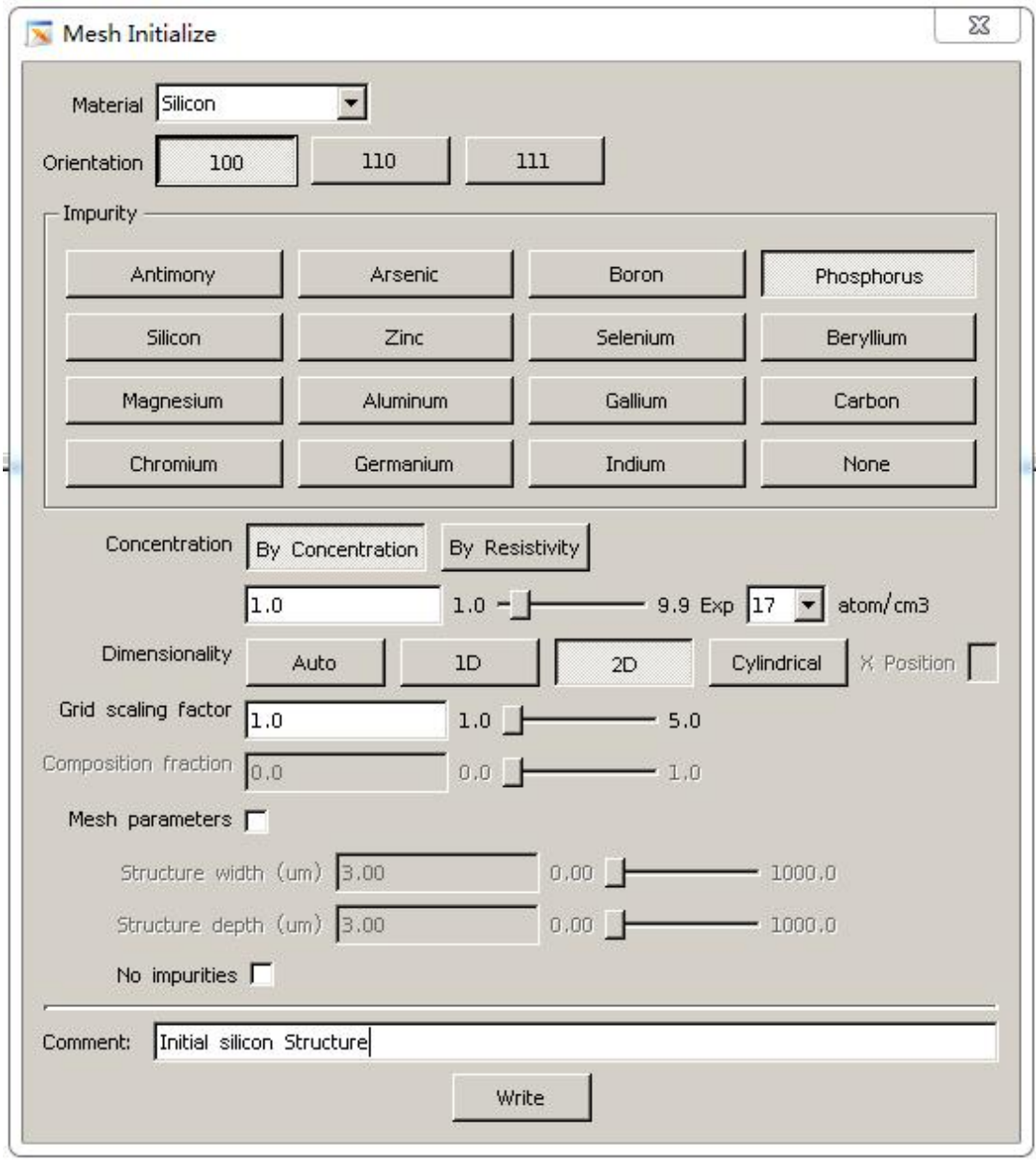


图 6

3. 运行 Athena 并绘图

如果要目前的状态，我们在文本窗口中输入如下语句：`struct outfile=.history01.str`，单击控制栏里的 run 键，输出将会出现在仿真器子窗口中。使初始结构可视化的步骤如下：

- （1）用鼠标左键选中文件.history01.str，单击 Tools 菜单项，选择 Tonyplot，如图 7 所示，将会出现绘图工具软件 Tonyplot。在 Tonyplot 中，依次选择“图”和“显示”，出现“显示（2D 网格）”菜单项，如图 8 所示。
- （2）在默认状态下，“边”和“区域”图像已选。把“网格”图像也选上，并单击“应用”按钮（这样做的目的是可以看到前面定义的三角形网格），最终我们得到结构图形如图 9。

至此，我们创建了一个 $1\mu\text{m}\times 2\mu\text{m}$ 大小的，杂质磷浓度为 $1.0\times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ ，掺杂均匀的《100》晶向的硅片，这个仿真结构已经可以进行任何工艺处理步骤了。

作业 1. 图 9 中的网格何处密？何处疏？两处在器件模拟时不同在哪？

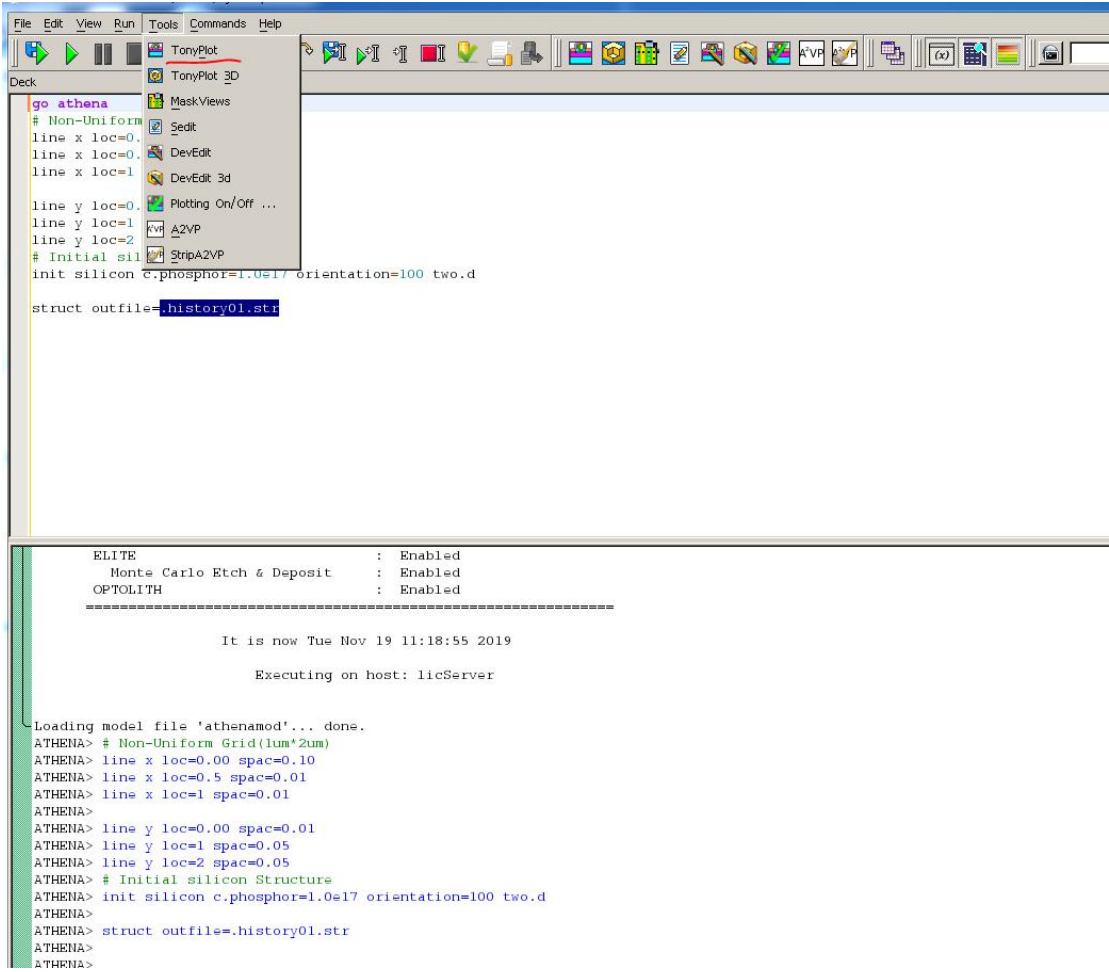


图 7



图 8

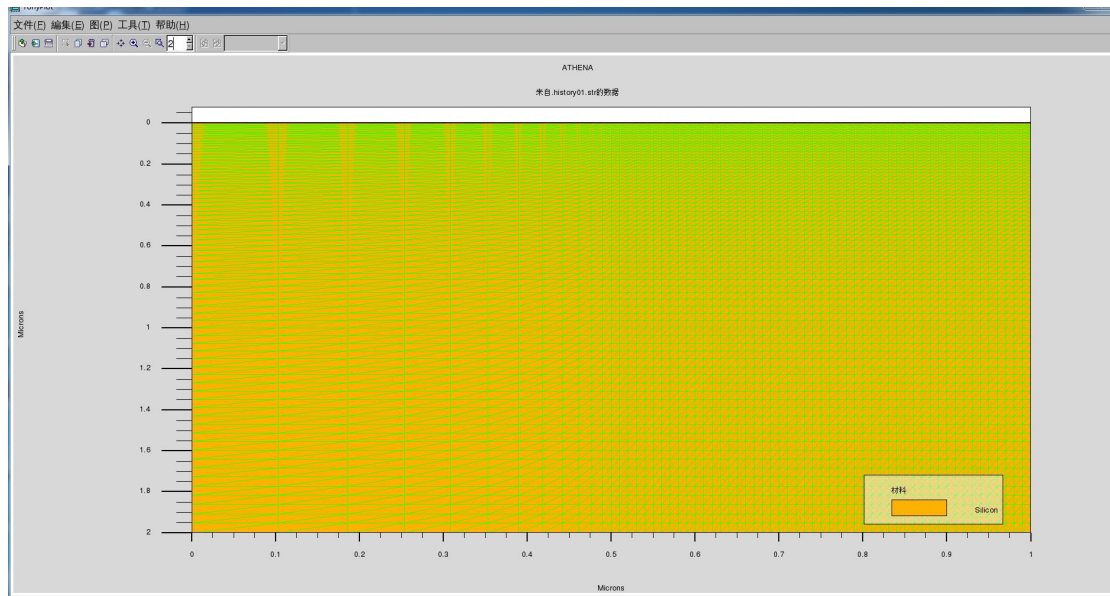


图 9

4. 隔离氧化层淀积

在光刻开注入孔之前，首先需要进行的是隔离氧化层的淀积，厚度是 $1\mu\text{m}$ ，实现方法如下：（1）在 Commands 菜单中依次选择 Process、Deposit 和 Deposit...菜单项，如图 10，Process Deposit 菜单将会出现，在 Material 菜单中选择 Oxide，并将其厚度值设为 1，淀积

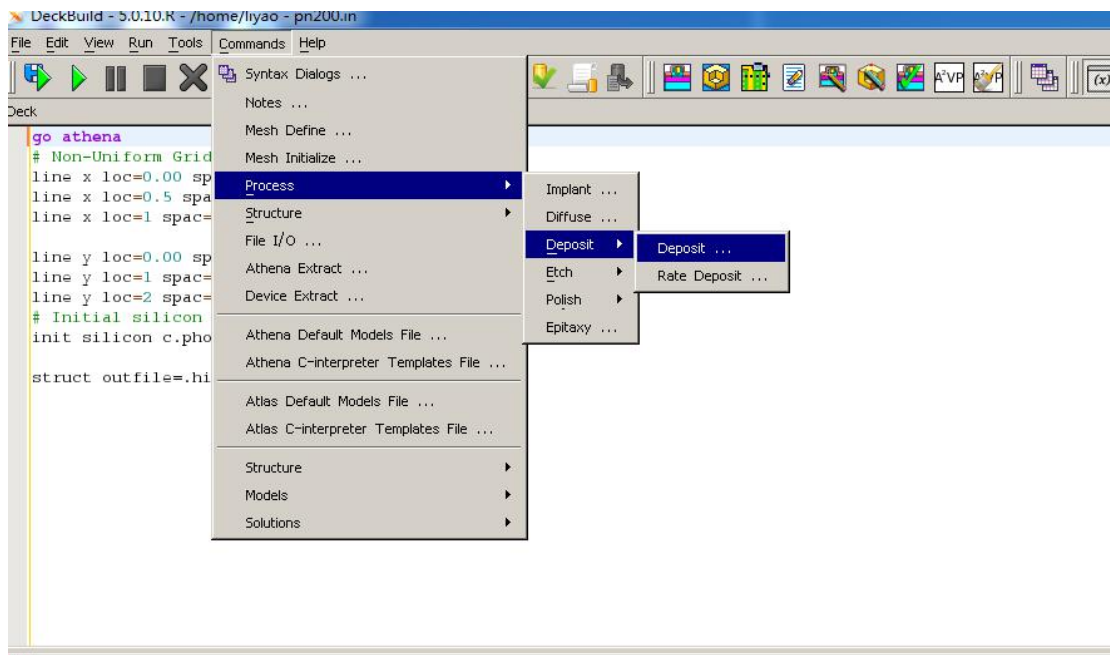


图 10

Type 默认为 Conformal（共形淀积），将 Grid Specification 参数“Total number of Grid layers”设为 10，Comment 栏可任意填如“Conformal Oxide deposition”，如图 11，单击 Write 按钮，淀积语句将会出现在文本窗口中：

```
#Conformal Oxide deposition
deposit oxide thick=1 divisions=10
```

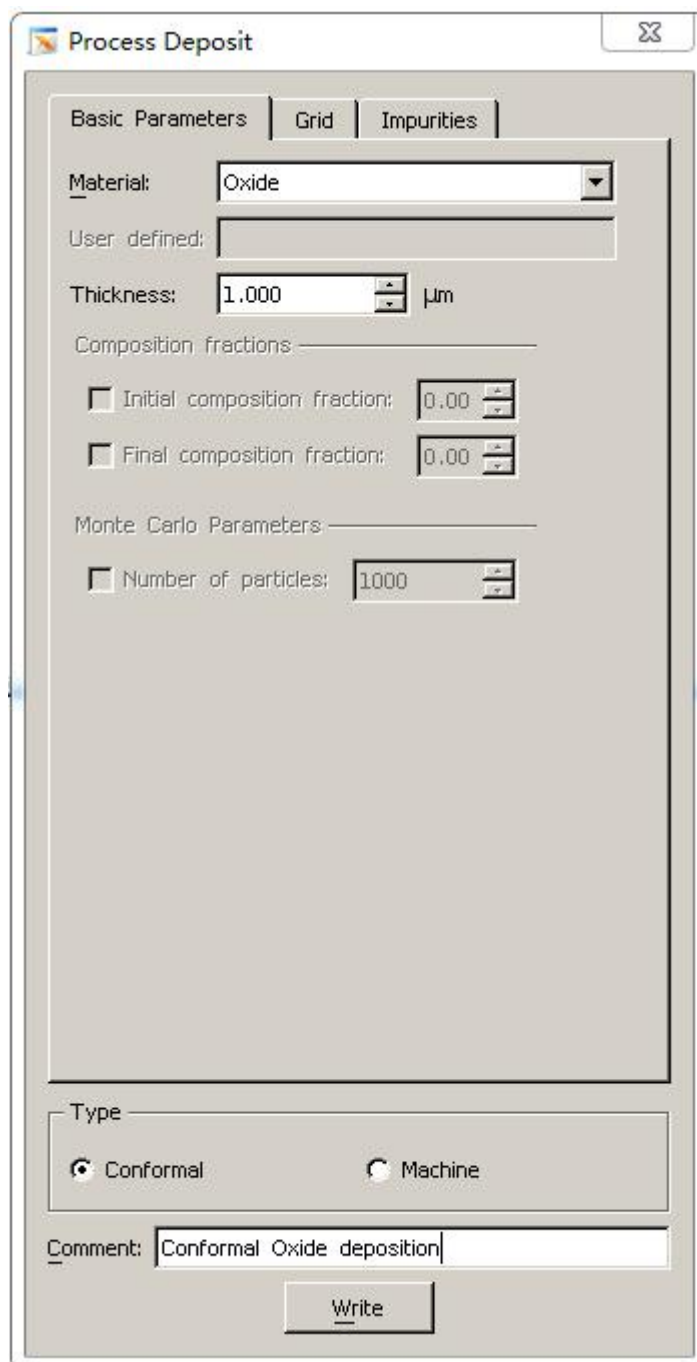



图 11

注意：以上语句应按顺序出现在定义初始衬底语句之后。

(2) 运行 Athena 并绘图，观察氧化层是否已淀积上，步骤基本同步骤 3：我们在文本窗口中输入如下语句：`struct outfile=.history02.str`，单击控制栏里的 run 键，然后使此时结构可视化如图 12 所示。从图可以看出，一个氧化层淀积在了硅表面。

作业 2.请测量一下图 12 中淀积氧化层的厚度是多少？

5. 扩散孔的形成

我们打算在图形右边刻蚀一个扩散孔，以进行下一步的 P 型杂质扩散或离子注入，实际上在此前还有一个光刻过程，我们将它忽略了！具体步骤如下：(1) 在 Commands 菜单中依次选择 Process、Etch 和 Etch...，出现 Process Etch 菜单，在 Etch 菜单的 Geometrical type

一栏中选择 Right；在 Material 一栏中选择 Oxide；将 Etch location 一栏的值设为 0.5；在 Comment 栏中输入注释 Oxide definition，如图 13 所示，单击 Write 按钮产生如下语句：

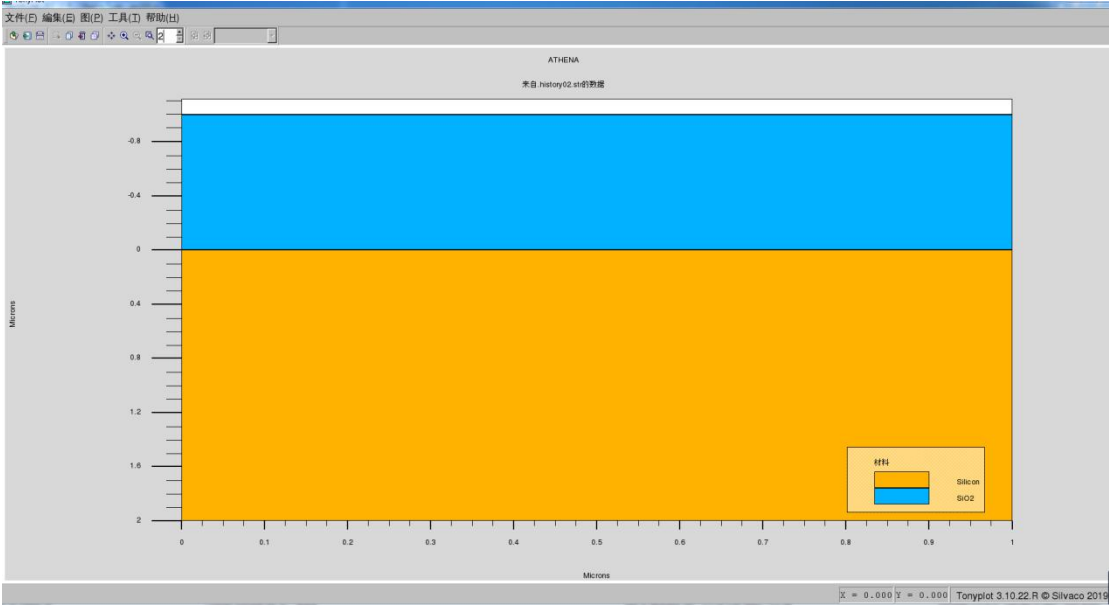


图 12

Process Etch

Etch method: ☒ Geometrical ☐ Etching machine

Geometrical type: **Right** Material: **Oxide**

☐ No expose User defined:

Etch location: **0.50** μm

Thickness: **1.00** μm

Arbitrary points:

☒ After ☐ Before ☐ Top ☐ Bottom

X location: **2.00**

Y location: **0.00**

Comment: **Oxide definition**

图 13

#oxide definition

etch oxide right p1.x=0.5

(2) 运行 Athena 并绘图，以观察现在的结构：我们在文本窗口中输入如下语句：`struct outfile=.history03.str`，单击控制栏里的 run 键，然后使此时结构可视化如图 14 所示。从图可以看出，扩散孔已形成。

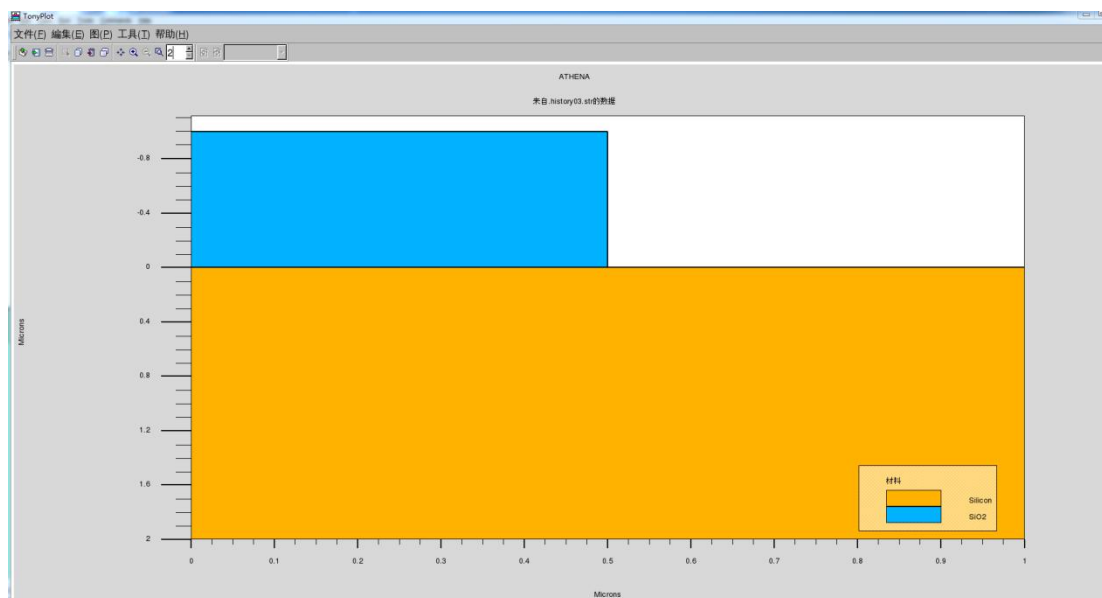


图 14

6. 离子注入掺杂

接下来对现有结构进行离子注入以形成 P 型杂质区，条件为：杂质硼的剂量为 $9.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ ，注入能量为 100keV，tilt 为 7° ，rotation 为 30° ，步骤如下：（1）在 Commands 菜单中，依次选择 Process 和 Implant...，出现 Process Implant 菜单，在 Impurity 一栏中选择 Boron；通过滚动条或直接输入的方法，分别在 Dose 和 exp 这两栏中输入值 9.5 和 14；在 Energy、Tilt 以及 Rotation 这 3 栏中分别输入值 100、7 和 30；默认为 Dual Pearson 模式；将 Material Type 选为 Crystalline；在 Comment 栏中输入注释说明如 Doping，单击 Write 按钮，

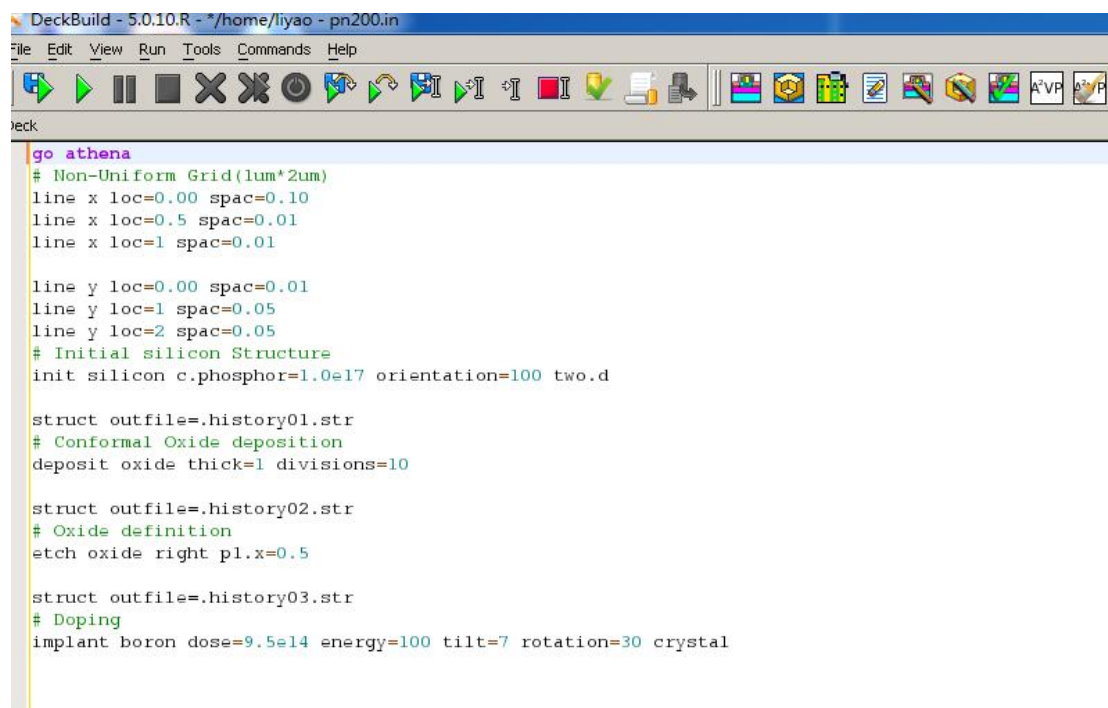


图 15

注入语句将会出现在文本窗口中，如图 15 所示，图中参数 CRYSTAL 说明对于任何解析模型来说，使用的参数均来自单晶硅。（2）运行 Athena 并绘图，我们在文本窗口中输入如下语句：struct outfile=.history04.str，单击控制栏里的 run 键，然后使此时结构可视化：在 Tonyplot 中，依次选择“图”和“显示”，出现“显示”菜单项，把“接合”菜单也选上，并单击“应用”按钮（以观察 pn 结），如图 16，图中的线即是 p 区和 n 区分界的地方。

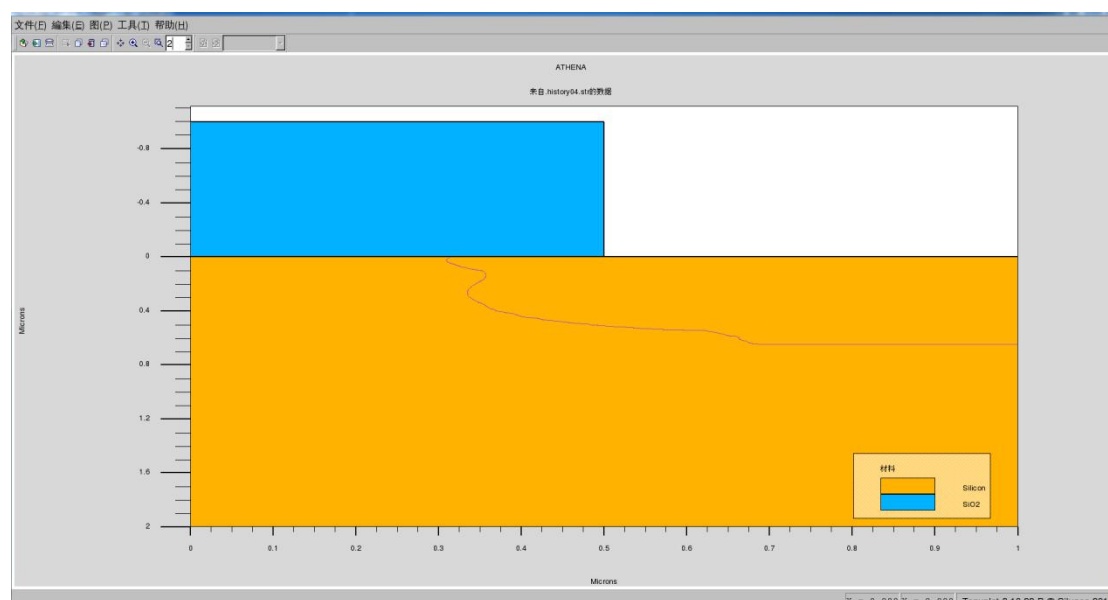


图 16

7. 金属的淀积

利用 Process Deposit 菜单（见步骤 4），一个厚度为 $0.5\mu\text{m}$ 的铝层将被淀积到器件表面，具体步骤：在 Material 菜单中选择 Aluminum，并将其厚度值设为 0.5；对于 Grid specification 参数，将 Total number of grid layers 设为 5；在 Comment 栏中输入 Aluminum Deposition，单

击 Write 按钮，出现如下语句：

```
#Aluminum Deposition
deposit aluminum thick=0.5 divisions=5
```

然后，利用 Etch 菜单，铝层将从 $X=0.3\mu\text{m}$ 向左刻蚀，步骤是：在 Etch 菜单的 Geometrical Type 一栏中，单击 Left；在 Material 栏中，选择 Aluminum；在 Etch location 栏中输入值 0.3；在 Comment 栏中输入 Etch Aluminum，单击 Write：

```
#Etch Aluminum
etch aluminum left p1.x=0.3
```

作业 3. 请给出金属淀积后和刻蚀后的器件结构图。

8. 获取器件参数

我们将从半个 pn 结结构中获取一些器件参数，如 pn 结结深，这可以通过 Commands 中的 Athena Extract...菜单来完成，计算结深的步骤如下：在 Commands 菜单中单击 Athena Extract...，Dialog 菜单将会出现：在 Extract 栏中选择 Junction depth；在 Name 栏中输入 pxj；在 Material 栏中选择 Silicon；在 Extract location 栏中单击 X 方向并输入值 0.8，单击 Write 按钮，Extract 语句将会出现在文本窗口中（如图 17）：

```
extract name="pxj" xj material="Silicon" mat.occno=1 x.val=0.8 junc.occno=1
```

```
# Aluminum Deposition
deposit aluminum thick=0.5 divisions=5
# Etch Aluminum
etch aluminum left p1.x=0.3
#
extract name="pxj" xj material="Silicon" mat.occno=1 x.val=0.8 junc.occno=1
```

图 17

在这个 Extract 语句中，name=“pxj”是 p 型的结深；xj 说明了该结深需要计算；material=“Silicon”是指结的材料，在这里材料是硅；mat.occno=1 是指计算结深要从第一层材料开始；x.val=0.8 是指在 $X=0.8\mu\text{m}$ 的地方得到 pn 结结深；junc.occno=1 是指计算结深要从指定层的第一个结开始。

继续 Athena 仿真，测量值将会出现在 Deckbuild 输出窗口中。

作业 4. $X=0.8\mu\text{m}$ 处的结深是多少？

9. 半个 pn 结结构的镜像

前面构造的是一半的结构，接下来对它进行镜像，步骤如下：（1）在 Commands 菜单中，依次选择 Structure 和 Mirror 项，出现 Structure Mirror 菜单。在 Mirror 栏中选择 Right，如图 18 所示。单击 Write 按钮将下列语句写入输入文件：

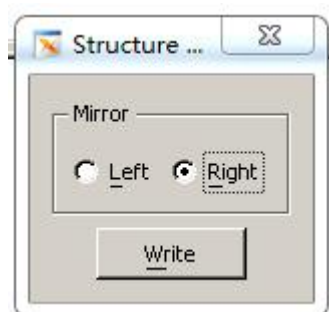


图 18

Struct mirror right

(3) 继续 Athena 仿真，并将完整的 pn 结结构绘制出来如图 19。

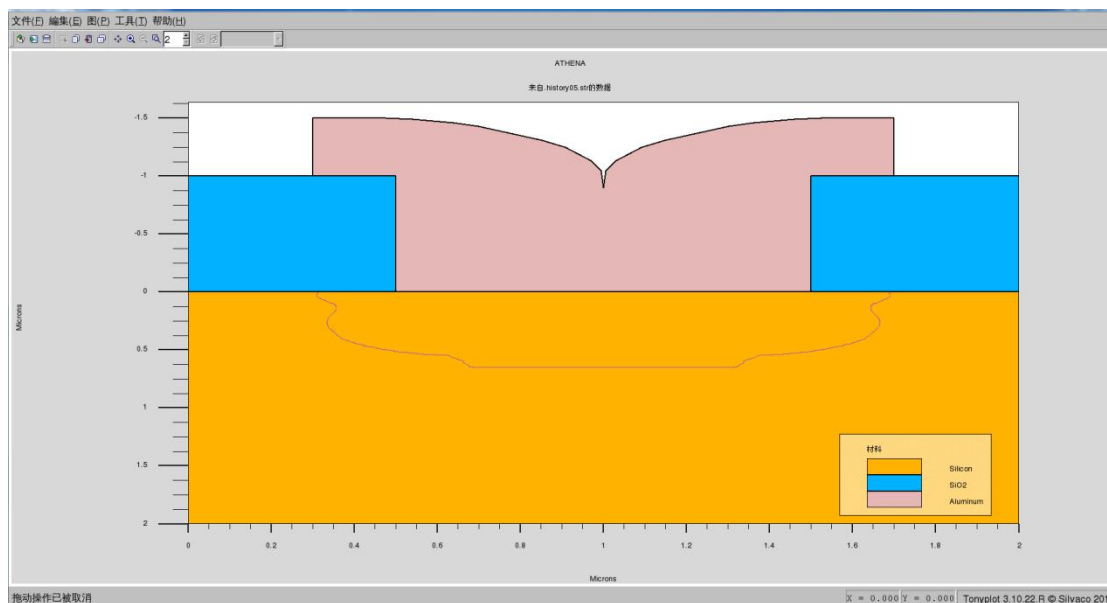


图 19

10. 电极的确定

为了使接下来的器件仿真器 Atlas 实现偏置，有必要对 pn 结二极管的电极进行标注，步骤如下：(1) 在 Commands 菜单中，依次选择 Structure 和 Electrode 项，Structure Electrode 菜单将会出现，在 Type 栏中，选择 Specified Position；在 Name 栏中，输入 anode；单击 X Position 并将其值设为 0.8（当 Y 没有指定时，默认是器件的表面），如图 20 所示。单击 Write 按钮，下面的语句将会出现在输入文件中：

```
electrode name=anode x=0.80
```

(2) 在 Athena 中，backside 电极可以放在结构的底部：在 Structure Electrode 菜单的 Type 栏选择 backside，在 Name 栏输入 Cathode，得到如下语句：

```
electrode name=cathode backside
```

(3) 继续运行输入文件，从 Deckbuild 输出窗口中可以看到相关说明。

随着电极的确定，pn 结结构也已经完成了。

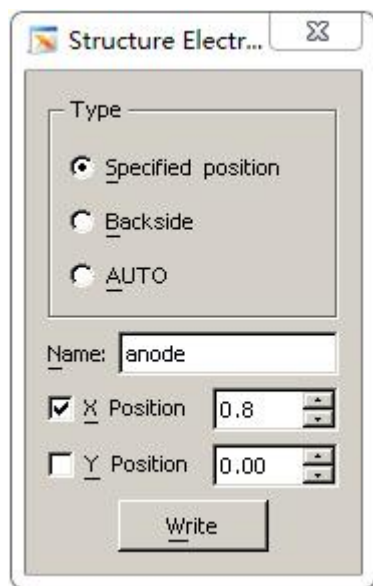


图 20

11. 保存 Athena 结构文件

(1) 在 Commands 菜单中选择 File I/O, 单击 Save 按钮并建立一个新的文件名 pn.str, 如图 21, 单击 Write 按钮。(2) 继续运行输入文件并将 pn.str 结构文件绘制出来。选择“电极”图像以查看阴极阳极两个电极, 如图 22, 看两个电极分别在什么地方。

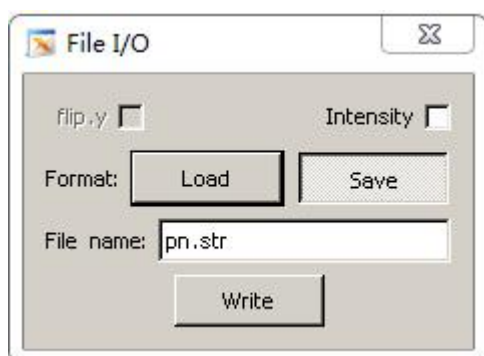


图 21

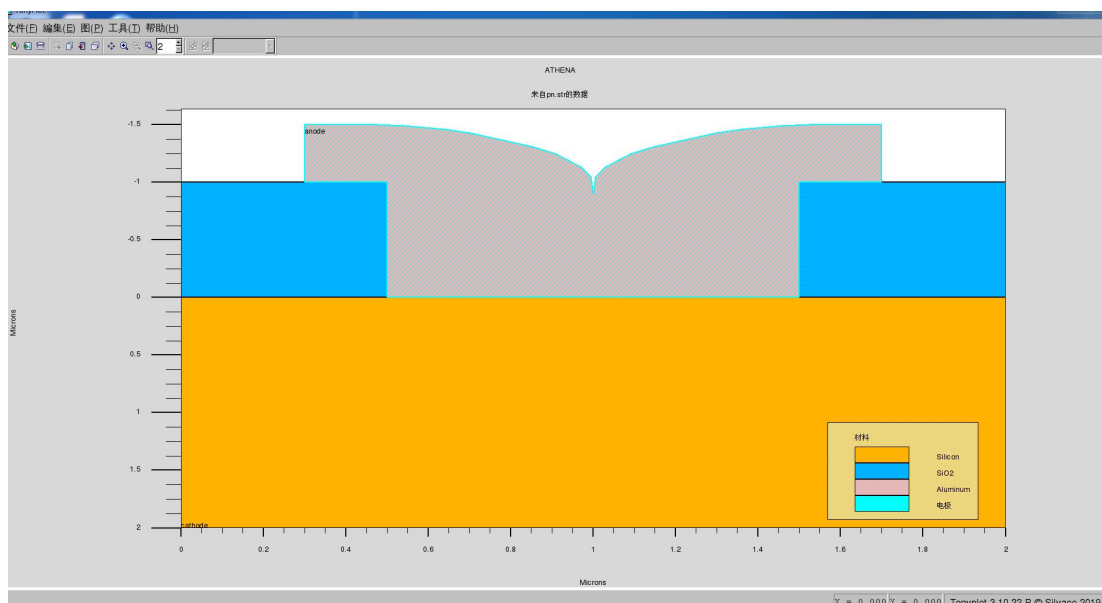


图 22

至此，Athena 工艺仿真已全部完成，接下来进行 Atlas 器件仿真，分为结构命令组、模型命令组、数值求解方法命令组和解决方案命令组（此命令组又可分为解决方案命令和结果分析两部分）：

12. 创建 Atlas 输入文档

为了启动 Atlas，输入下列语句：

go atlas

载入有 Athena 创建的“pn.str”结构文件，步骤如下：（1）在 Commands 菜单中，依次选择 Structure 和 Mesh...，会弹出 Mesh 菜单；（2）在 Type 栏中，单击 Read from file，在 File name 栏中输入结构文件名“pn.str”，如图 23；（3）单击 Write 按钮，将 Mesh 语句写入 Deckbuild 文本窗口中，如图 24 所示。

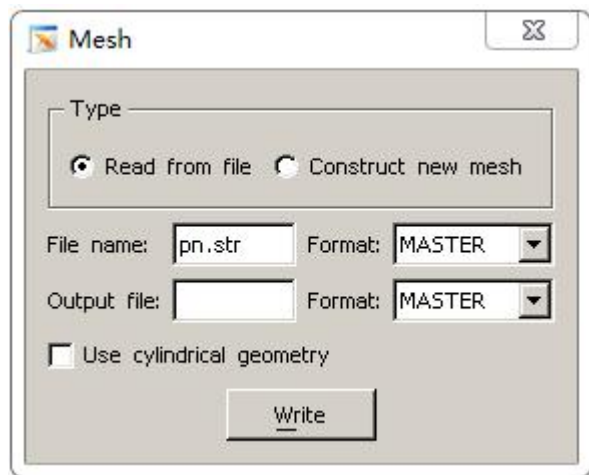


图 23

```
extract name="pxj" xj material="Silicon" mat.occno=1 x.val=0.8 junc.occno=1
struct mirror right

struct outfile=.history05.str
electrode name=anode x=0.80
electrode name=cathode backside
#
structure outfile=pn.str

go atlas
mesh infile=pn.str
```

图 24

13. 模型命令组

在 Athena 中已经创建了 pn 结构，跳过结构命令组而直接进入模型命令组。

Material 语句可直接在文本文件中键入：

material material=Si taun0=1e-7 taup0=1e-7

该语句给定了 Si 材料中的电子和空穴寿命。接下来我们用 Model 语句来定义物理模型，实际上可直接键入：

models srh conmob fldmob

srh 是复合（Recombination）模型，srh 是 Shockley-Read-Hall 的缩写；conmob 和 fldmob 是两种迁移率（Mobility）模型，分别是浓度相关模型和场相关模型，可一起使用。

14. 数值求解方法命令组

接下来选择数值方法进行仿真，Method 语句可通过如下方法设定：

(1) 在 Commands 菜单中，依次选择 Solutions 和 Method...项，Method 菜单将会出现。在 Method 栏中选择 Newton 和 Gummel 选项，如图 25 所示；默认设定的最大重复数为 25，这个值可以根据需要修改。

(2) 单击 Write 按钮，写入 Method 语句，至此写入的模型命令组语句和数值求解方法命令组语句如图 26。

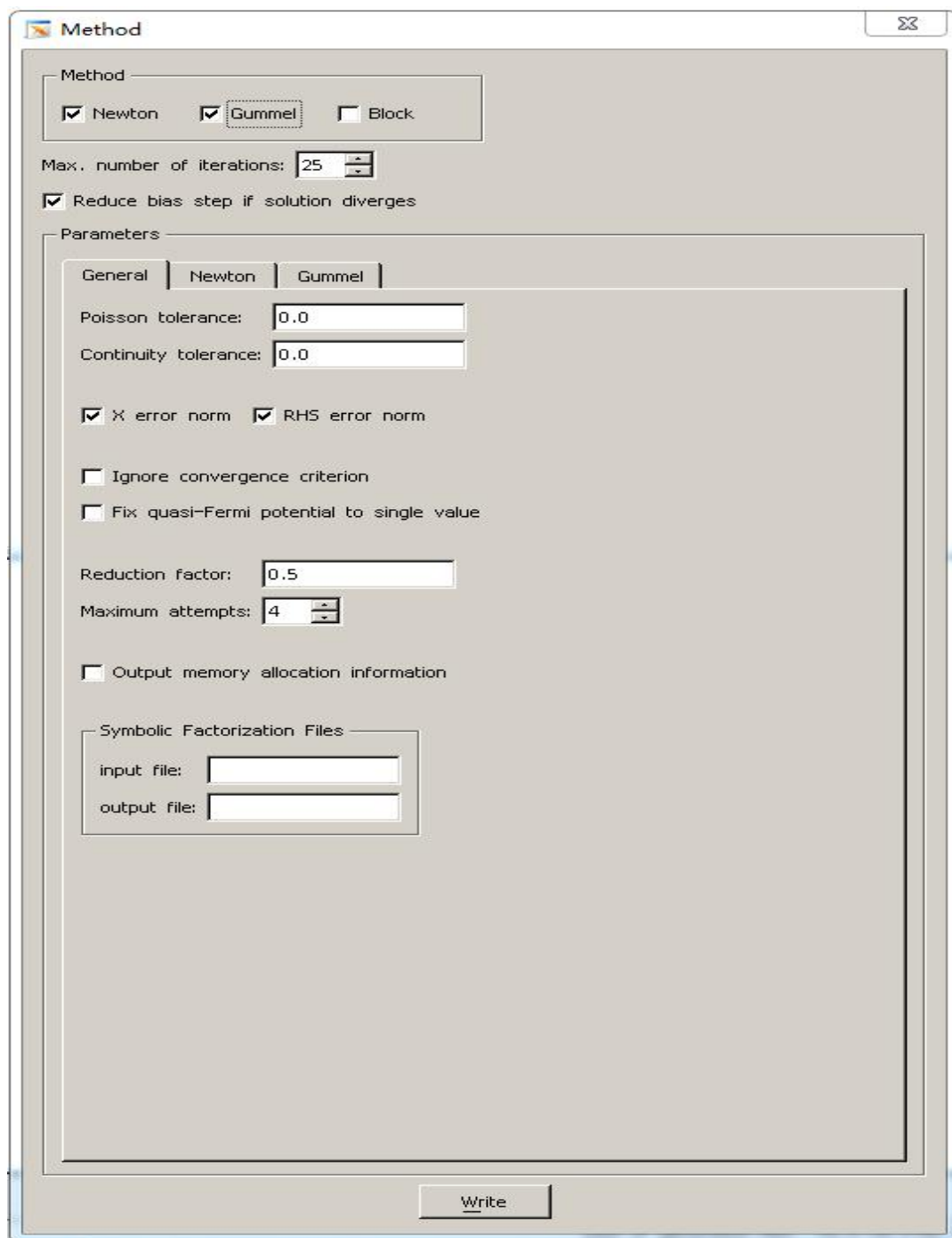


图 25


```

go atlas
mesh infile=pn.str
material material=Si taun0=1e-7 taup0=1e-7
models srh conmob fldmob
#
method newton gummel itlimit=25 trap atrap=0.5 maxtrap=4 autonr nrccriterion=0.1 tol.tim
|

```

图 26

15. 解决方案命令组

在解决方案命令组中，需要使用 `log` 语句来输出并保存包含端口特性计算结果在内的记录文件，用 `solve` 语句来对不同偏置条件进行求解。过程如下：

（1）在 **Commands** 菜单中，依次选择 **Solutions** 和 **Solve...** 项，**Deckbuild: Atlas Test** 菜单将会出现，如图 27 所示；单击 **Properties:** 在 **Log file** 栏中将文件名改为 “pn01_”，如图 28 所示。

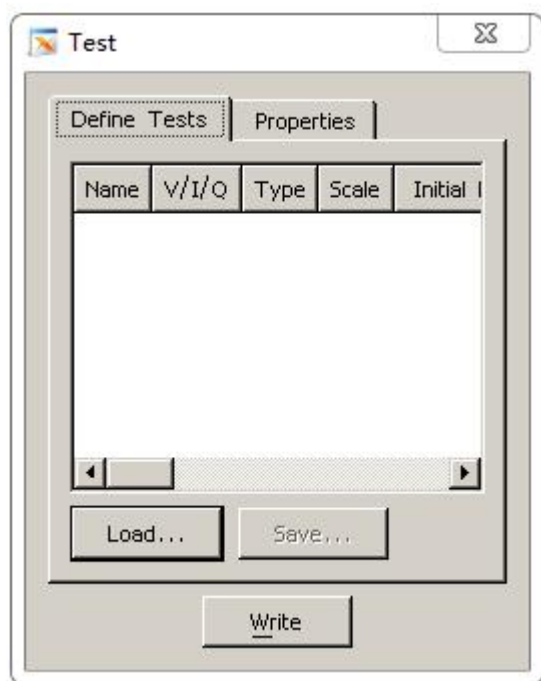


图 27

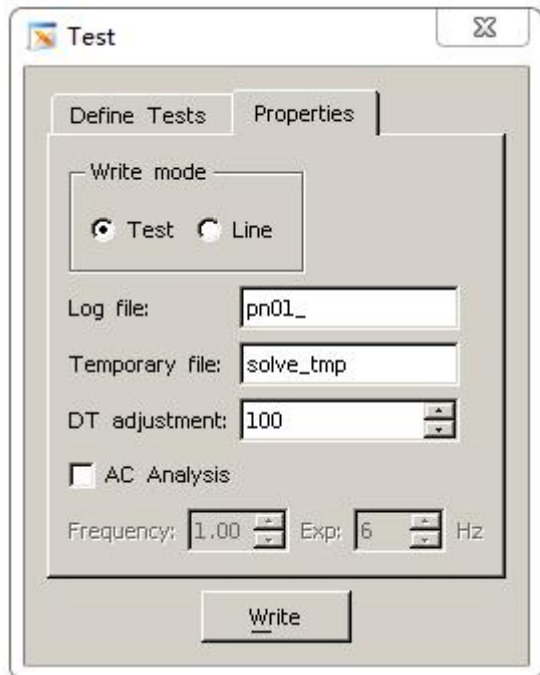


图 28

(2) 单击 **Define Tests**, 然后将鼠标移至 **Worksheet** 区域, 单击鼠标右键并选择 **Add new row**, 如图 29 所示。一个新行被添加到了 **Worksheet** 中, 如图 30 所示。

(3) 将鼠标移至 **gate** 参数上, 单击鼠标左键, 会出现一个电极名的列表, 选择 **anode**。

(4) 在 **anode** 行中, 将鼠标移至 **CONST** 类型上, 单击鼠标左键并选择 **VAR1**。分别将 **Initial Bias**, **Final Bias** 和 **Delta** 的值设为 0.05, 1.0 和 0.05, 如图 31 所示。

(5) 单击 **Write** 按钮, 如下语句将会出现在 **Deckbuild** 文本窗口中:

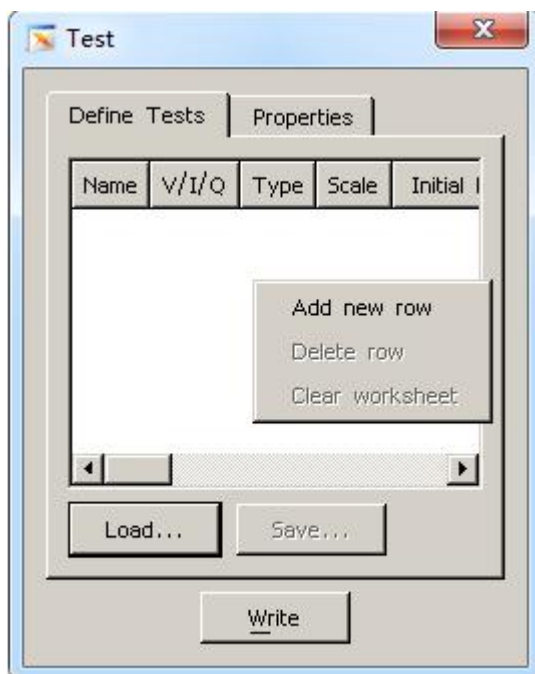


图 29

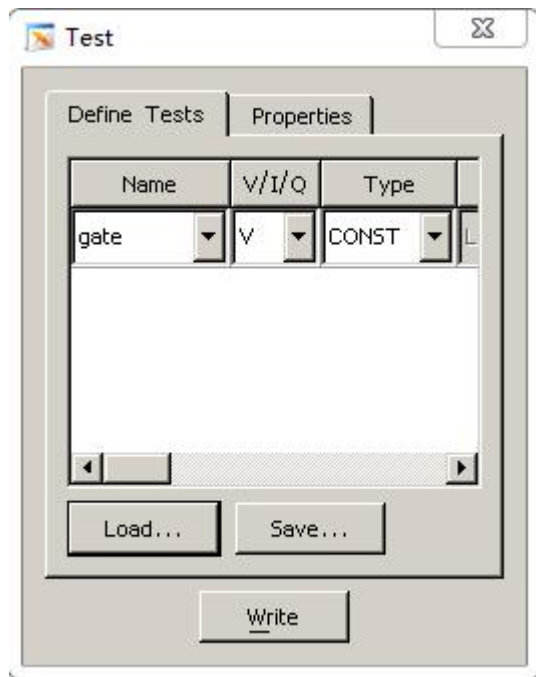


图 30

```
solve init
```

```
log outf=pn01_0.log
```

```
solve name=anode vanode=0.05 vfinal=1.0 vstep=0.05
```

上述语句以 `solve init` 开始，这条语句提供了一个初始猜想，即零偏置（或热平衡）情况的解。

第二条语句是 `log` 语句，这条语句用来将由 Atlas 计算得出的所有仿真结果保存在 `pn01_0.log` 文件中。

最后一条 `solve` 语句使阳极电压从 0.05V 变化到 1.0V，间隔为 0.05V。

16. 使用 Tonyplot 绘出结果

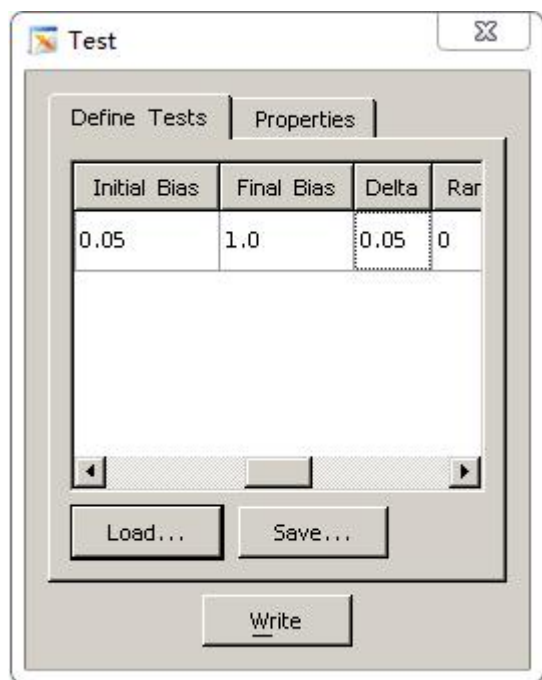


图 31

可键入如下语句：

tonyplot pn.str

tonyplot pn01_0.log

17. 结束

输入如下语句结束编程：

quit

现在，你已结束了编程，接下来：（1）可以单击 Run 键运行 Athena 和 Atlas，观察 Deckbuild 输出窗口看运行是否顺利，如果出现问题，根据输出窗口提示进行程序修改，没有问题则程序通过；（2）同时，会自动弹出 Tonyplot 图形（pn.str 和 pn01_0.log），注意 pn01_0.log 图形中横坐标是 Anode Voltage，纵坐标是 Cathode Current，如图 32 所示。

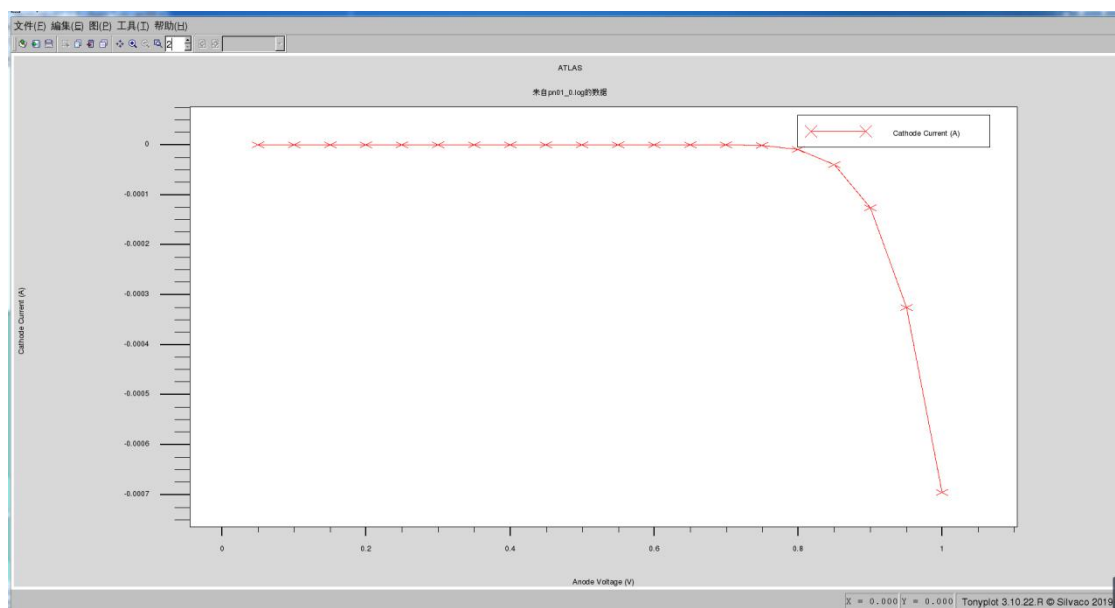


图 32

作业 5.给出你自己编程绘出的 pn 结 I-V 特性图。

在 File 菜单下单击 Save 可随时保存此 Deckbuild 文件，文件名自定,后缀名为.in（以后要用该文件,可通过在 File 菜单下单击 Open...打开）。

最后退出 Deckbuild，关闭各个窗口。