

仿真基础

Silvaco 产品涵盖半导体仿真相当广泛的领域,主要的产品有 TCAD、Analog/AMS/RF、Custom IC CAD、Interconnect Modeling 和 Digital CAD。Silvaco TCAD 可以仿真半导体工艺和器件特性,其主要的集成环境为 Deckbuild,工艺仿真器、器件仿真器以及可视化工具等模块均可在 Deckbuild 界面灵活地调用。Silvaco TCAD 有 Linux 版本,也有 Windows 版本。在 Linux 版本下有更多的图形用户界面(GUI),方便用户选择参数,然后自动转化成相应的语句,而 Windows 版本则需要书写语句。对于这两种方式每个人都会有自己的喜好,但一般倾向于图形化界面,作者在开始接触 Silvaco TCAD 的时候也是如此。但图形化界面也有不足的地方,容易使人产生依赖,即用惯了图形化界面来选择参数就不会特别在意语法的学习,而且图形界面并没有包含所有参数。如果使用写语句的方式来组织仿真,则更有利于全面、透彻地理解和掌握,所以作者建议初学者学习 Silvaco TCAD 时应首先从语法学习着手,因此本书以 Windows 版本下的 Silvaco TCAD 为主,但有时为便于说明也会采用一些 Linux 版本中的图形界面。

本章主要介绍 Silvaco TCAD 的基本框架,集成环境 Deckbuild,Deckbuild 的命令“extract”、“go”、“set”和“Tonyplot”以及 Silvaco 文档的分布和学习方法。

1.1 TCAD

TCAD 是 Technology Computer Aided Design 的缩写,指半导体工艺仿真以及器件仿真工具。商用的 TCAD 工具有 Silvaco 公司的 ATHENA 和 ATLAS, Synopsys 公司的 TSuprem 和 Medici 以及 ISE 公司(已经被 Synopsys 公司收购)的 Dios 和 Dessis。Synopsys 公司最新发布的 TCAD 工具命名为 Sentaurus。在光电器件仿真领域不得不提到的另外一个 TCAD 软件是 Crosslight。

1.1.1 数值计算

计算机仿真必须基于数值计算。Silvaco TCAD 中的数值计算是基于一系列的物理模型及其方程的,这些方程以已经成熟的固体物理和半导体物理理论或者是一些经验公式为基础。Silvaco TCAD 提供灵活的方式来设置方程的量,它们可以设置为定值,如 $\mu_n =$

$1200\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{S})$ ；也可以用自定义函数来描述，这需要 C 注释器编写相应的函数表达式文件；如果有相应物理模型来描述参数的话，则参数是由另一些模型方程计算得到的（如模型 conmob 为迁移率随掺杂浓度变化的模型）。3.5 节数值计算方法中将提到解耦合方程以及相应的迭代和初始猜测策略。实际的物理系统非常复杂，连续系统的信息量也巨大到无法估量，必须将其离散化，那么自然的半导体仿真应用上就基于网格计算。

网格计算是将半导体仿真区域划分成网格，在网格点处计算出希望得到的特性（如电学性质、光学性质、工艺步骤的速率等）。网格划分对仿真至关重要，精细的网格能得到较精确的结果，但将增加计算时间。网格点是计算中很重要的资源，要合理地利用。

Silvaco TCAD 有多种方式可以灵活地控制网格：

- (1) 由网格线以及网格线之间的间距来描述仿真区域的网格。
- (2) 通过网格释放来使后续步骤中不是很紧要的区域的网格点变少，网格释放之后也可以再重新建立合适的精细的网格。
- (3) 用三角形参数来控制网格的长宽比。如果将矩形网格的对角线相连，则可以形成两个三角形，控制三角形的角度就可控制网格的长宽比。
- (4) 在适当的区域增删网格线。

数值计算必须综合考虑精确性、计算速度和收敛性。精确性与网格密度、计算时的步长疏密、算法和物理模型的选择等有关。计算速度由网格密度、计算步长的疏密以及算法等决定。收敛性与计算步长的疏密、初始值以及算法有关。仿真计算时参数设置上需要在精确性、计算速度和收敛性之间取得折中。网格划分与计算的精确性、计算速度和收敛性直接相关，在仿真计算时需要尤其注意，而初学者往往忽略这最重要的一点。Silvaco 中的网格点总数^①是有限制的，在仿真时要合理利用这一资源。

1.1.2 基于物理的计算

仿真的精确性与选择的物理模型相关。基于物理的计算是指在仿真计算时采用的方程是有物理意义的，在不同的应用场合使用不同的物理模型。通常 Silvaco 的仿真思路和采用的模型是基于成熟的成果，这些成果通常发表在 IEEE 上。Silvaco 采用这些成果并打造成 Silvaco library。

器件仿真时主要用到的物理模型和方程如下：

- (1) 基本半导体方程：泊松方程，载流子连续性方程，传输方程（漂移-扩散传输模型和能量平衡传输模型），位移电流方程，……
- (2) 载流子统计的基本理论：费米-狄拉克统计理论，玻耳兹曼统计理论，状态有效密度理论，能带理论，禁带变窄理论，……
- (3) 不完全电离（低温仿真或重掺杂），缺陷或陷阱造成的空间电荷理论，……
- (4) 边界物理：欧姆接触，肖特基接触，浮接触，电流边界，绝缘体接触，上拉元件接触，分布电阻接触，能量平衡边界，……
- (5) 物理模型：迁移率模型，载流子生成-复合模型，碰撞电离模型，带-带隧穿模型，栅电流模型，器件级的可靠性模型，铁电体介电常数模型，外延应力模型，压力影响硅带隙模

^① 二维 ATLAS 仿真中网格点上限是 10 万个，三维仿真的网格点上限是 4000 万个。

型,应力硅电场迁移率模型,纤锌矿材料极化模型,……

- (6) 光电子模型:生成-复合模型,增益模型,光学指数模型,……
- (7) 磁场下载流子传输模型,……
- (8) 各向异性介电常数模型,……
- (9) 单粒子翻转模型,……

器件仿真的通用框架是泊松方程和连续性方程。其中 J_n 、 J_p 、 G_n 、 G_p 、 R_n 、 R_p 、迁移率、载流子浓度、禁带变窄、少子寿命和光生成速率等参数都有专门的模型来定义。不同的模型表达式会有差别。将基本方程中的量去耦^①,然后用相应的模型求出这些量,再代入方程进行计算。

电流密度方程和电荷传输模型通常采用玻耳兹曼近似。这些由不同的传输模型,如漂移-扩散模型、能量平衡传输模型和水力学模型等决定。电荷传输模型主要受所选的生成-复合模型的影响。电荷传输模型和生成-复合模型使用一些和载流子统计相关的概念。

ATLAS 手册中物理部分对物理模型有详细的描述。

1.2 Silvaco TCAD

Silvaco 名称是由三部分组成的,即“Sil”、“va”和“co”,从字面意思上不难理解到是“硅”、“谷”和“公司”英文单词的前几个字母的组合。Silvaco 的中文名称为矽谷科技公司。

来自美国的矽谷科技公司(Silvaco 公司)经过 20 多年的成长与发展,现已成为众多领域卓有建树的 EDA 公司,具有包括 TCAD 工艺和器件模拟、SPICE 参数提取、高速精确电路仿真、全定制 IC 设计与验证等功能。

Silvaco 拥有包括芯片厂、晶圆厂、IC 设计企业、IC 材料业者、ASIC 业者、大学和研究中心等在内的庞大的客户群。如今,Silvaco 已在全球设立多家分公司以提供更好的客户服务和合作机会。

Silvaco 是现今市场上唯一能够提供给 Foundry(芯片代工厂)最完整的解决方案和 IC 软件的厂商。提供 TCAD、Modeling 以及 EDA 前端和后端的支持,也能提供完整的 Analog Design Flow 给 IC 设计业者。产品 SmartSpice 是当今公认的模拟软件的黄金标准,因为支持多集成 CPU 的 SmartSpice 的仿真速度比起同类型软件更好,它是国外模拟设计师的最爱;SmartSpice 的收敛性也被公认为仿真器中最好的。Silvaco 还有其他整套流程包括版图工具以及验证工具。许多世界知名 Foundry 包括台积电、联电、Jazz 和 X-FAB 都与 Silvaco 有 PDK 的合作。

Silvaco 公司在 2006 年正式进入中国市场,希望凭借在国外超过 20 年的经验提供给国内 Foundry 最佳的解决方案。Silvaco 公司是现今市场上唯一能够提供整套包括建模、TCAD、模拟软件以及 PDK 方案的 EDA 公司。

从图 1.1 中也可看出 Silvaco 的产品覆盖了半导体产业相当广泛的领域。这也是本书将标题定为半导体仿真软件的原因。

^① 在器件仿真部分介绍计算方法时将提到变量去耦合。

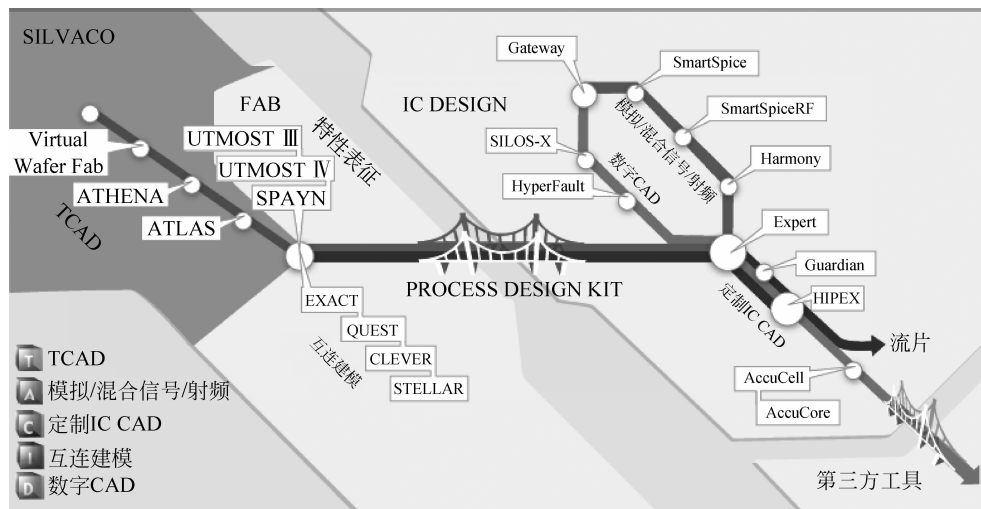


图 1.1 Silvaco 产品分布图

1.2.1 主要组件

Silvaco TCAD 的功能有一维、二维和三维工艺仿真，二维和三维器件仿真。主要的仿真功能及相应模块如下：

- 工艺仿真
 - 3D——Victory Process, Victory Cell
 - 2D——ATHENA, SSuprem4, MC Implant, Elite, MC Deposit/Etch, Optolith
 - 1D——ATHENA 1D, SSuprem3
- 器件仿真
 - 3D——Victory Device, Device 3D, Giga3D, Luminous3D, Quantum3D, TFT3D, Magnetic3D, Thermal3D, MixedMode3D
 - 2D——ATLAS, S-pisces, Blaze, MC Device, Giga, MixedMode, Quantum, Ferro, Magnetic, TFT, LED, Luminous, Laser, VCSEL, Organic Display, Organic Solar, Noise, Mercury
- 交互式工具
 - Deckbuild, Maskviews, DevEdit, Tonyplot, Tonyplot3D
- Virtual Wafer Fab

Silvaco TCAD 的主要组件包括交互式工具 Deckbuild、Tonyplot，二维工艺仿真器 ATHENA、二维器件仿真器 ATLAS、器件编辑器 DevEdit 和三维仿真器 Victory，此外还有一些内部的模块。

1. Deckbuild

各 TCAD 仿真组件均可在集成环境 Deckbuild 的界面灵活调用，例如先由 ATHENA 或 DevEdit 生成器件结构，再由 ATLAS 对器件特性或器件-电路混合特性进行仿真，最后

由 Tonyplot 或 Tonyplot3D 显示输出。

Deckbuild 的特性功能如下：

- 输入和编辑仿真文件；
- 查看仿真输出并对其进行控制；
- 提供仿真器间的自动转换；
- 提供工艺优化以快速而准确地获得仿真参数；
- 内建的提取功能对仿真得到的特性进行提取；
- 内建的显示提供对结构的图像输出；
- 可从器件仿真的结果中提取对应 SPICE 模型的参数。

Silvaco 仿真流程如图 1.2 所示,由工艺仿真器或器件编辑器得到器件结构,然后通过器件仿真器求解相应的特性,结果由可视化工具 Tonyplot 显示出来或显示在实时输出窗口。命令文件的输入和各仿真器的调用都是在集成环境 Deckbuild 中完成的。

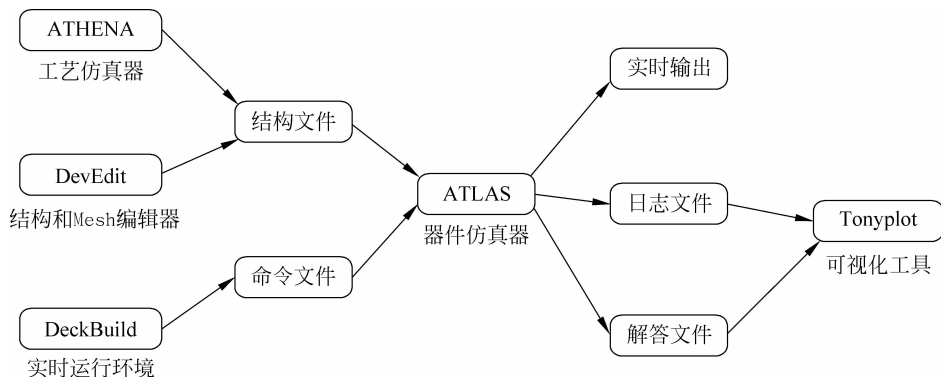


图 1.2 Silvaco 仿真流程图

2. Tonyplot 可视化工具

Tonyplot 用于对结构的显示,结构包括一维、二维结构,三维结构的显示需要使用 Tonyplot3D。Tonyplot 可显示的类型非常丰富,包括几何结构和物理量的分布等,也可以显示器件仿真所得到的曲线。

Tonyplot 可以将显示结果导出图片,也可将结构中的物理量的分布导出成数据文件,这样就能清楚地获取仿真的结果数据,以便采用其他绘图软件进行处理。Tonyplot 还提供动画制作等功能,支持将各步工艺的图像结果制作成动画以观察工艺的动态效果。

1.3.5 节将详细介绍 Tonyplot,Tonyplot3D 将在 5.6.2 节进行介绍。

3. ATHENA

工艺仿真器 ATHENA 能帮助工艺开发和优化半导体制造工艺。ATHENA 提供一个易于使用、模块化的、可扩展的平台。ATHENA 能对所有关键制造步骤(离子注入、扩散、刻蚀、淀积、光刻以及氧化等)进行快速精确的模拟。仿真能得到包括 CMOS、Bipolar、SiGe、SOI、III-V、光电子以及功率器件等器件的结构,并精确预测器件结构中的几何参数、掺杂分布和应力等。优化设计参数使速度、产量、击穿、泄漏电流和可靠性达到最佳结合。

它通过模拟取代了耗费成本的硅片实验,可缩短开发周期和提高成品率。

ATHENA 工艺仿真软件的主要模块有:SSuprem、二维硅工艺仿真器、蒙特卡洛注入仿真器、硅化物仿真模块、精英淀积和刻蚀仿真器、蒙特卡洛淀积和刻蚀仿真器、先进的闪存材料工艺仿真器和光电印刷仿真器。相应的工艺步骤仿真将在第 2 章详细介绍。

4. ATLAS

ATLAS 器件仿真器可以模拟半导体器件的电学、光学和热学行为。ATLAS 提供一个基于物理的、使用简便的、模块化的、可扩展的平台,用以分析所有二维和三维模式下半导体器件的直流、交流和时域响应。

ATLAS 可以仿真硅化物、III-V、II-VI、IV-IV 或聚合/有机物等各种材料。可以仿真的器件类型很多,如 CMOS、双极、高压功率、VCSEL、TFT、光电子、激光、LED、CCD、传感器、熔丝、铁电材料、NVM、SOI、HEMT、Fin 和 HBT 等器件。

ATLAS 器件仿真器的主要模块有 S-Pisces(二维硅器件模拟器)、Device3D(三维硅器件模拟器)、Blaze2D/3D(高级材料的二维/三维器件模拟器)、TFT2D/3D(无定型和多晶体二维/三维模拟器)、VCSELS 模拟器、Laser(半导体激光二极管模拟器)、Luminous2D/3D(光电子器件模块)、Ferro(铁电场相关的介电常数模拟器)、Quantum(二维/三维量子效应模拟模块)、Giga2D/3D(二维/三维非等温器件模拟模块)、NOISE(半导体噪声模拟模块)、ATLAS C 注释器模块和 MixedMode(二维/三维组合器件和电路仿真模块)等。

5. 器件编辑器 DevEdit2D/3D

器件编辑器 DevEdit2D/3D 可以编辑器件结构。器件编辑器有很多优点,如器件编辑器中的“区域”是由一系列特定位置的“点”构成的,因此器件结构的轮廓可以很灵活地控制。器件编辑器还可以在工艺仿真得到的结构基础上进行编辑,如重新划分网格;将 ATHENA 生成的二维剖面往 Z 方向扩展,得到三维结构。另外,器件编辑器在定义复杂电极(如通孔)时较 ATHENA 和 ATLAS 方便。器件编辑器的使用将在器件特性仿真的结构定义部分讲解。

6. 掩膜输出编辑器

Maskviews Layout Editor 可以编辑掩膜结构,以便光刻等后续工艺中采用。Maskviews 有图形化界面。掩膜结构也可以用 layout 命令生成。三维工艺仿真是由掩膜驱动的,即工艺之前先定义采用的掩膜中的某一层,然后再开始工艺步骤。

掩膜编辑器将在 2.3.7 节进行介绍,在 5.6.3 节部分也有说明。

1.2.2 目录结构

在仿真之前需要先熟悉 Silvaco 的架构。此前介绍的只是 TCAD 的一些概念以及 Silvaco 各仿真模块的特性,接下来介绍软件使用的信息,如文件分布、文件类型等。

以 Windows 下的版本为例,目录结构的样式如下:

```
X:\ sedatools
| - Doc(程序安装以及 sflm① 说明文档)
| - exe(可执行程序的快捷方式)
| - Shortcuts(程序控制及主要仿真环境的快捷方式)
| - lib(组件库)
    | - athena(二维工艺仿真器)
        | - 5.20.0.R(版本号)
            | - common(包含模型文件、模板、材料参数等)
            | - docs(用户手册及组件更新的说明文档)
            | - notes(各版本的新特性说明文档)
            - x86-nt(应用程序和环境)
    | - atlas(二维器件仿真器)
    | - Deckbuild
    | - Tonyplot
    | - tonyplot3d
    | - ssuprem3
    | - devedit
    | - Maskviews
    | - rpc.sflmserverd
    ...
| - examples(示例库)
    | - athenald(工艺仿真的子示例库)
    | - athena_adaptmesh
    | - athena_diffusion
    | - athena_implant
    | - bjt
    | - diode
    | - mos1
    | - optoelectronics
    | - power
    ...
```

1.2.3 文件类型

仿真时需要熟悉 Silvaco 的文件系统, Silvaco TCAD 的主要文件类型有:

- (1) 输入文件(*.in): Deckbuild 集成环境的仿真输入文件;
- (2) 结构文件(*.str): 工艺仿真或器件编辑器得到的器件结构;
- (3) 器件仿真结果文件(*.log): 器件仿真时存储仿真曲线数据;
- (4) 设置文件(*.set): Tonyplot 的显示设置;

^① standard floating license manager, license 管理器。

- (5) 掩膜结构文件(*.lay): 光刻的掩膜信息;
- (6) 提取的结果文件(*.dat): 提取得到的数据;
- (7) 函数文件(*.lib): C 注释器编写的函数文件;
- (8) 其他文件类型: *.sepc, *.opt, ...调用的其他数据文件。

1.3 Deckbuild

Deckbuild 是一个交互式、图形化的实时运行环境,在工艺和器件仿真中作为仿真平台。Deckbuild 有仿真输入和编辑的窗口,也有仿真输出和控制的窗口。Deckbuild 有很强的灵活的工具,也提供很多自动的特性,如仿真器的切换、内建的提取(extract)等。



图 1.3 快捷方式文件夹

启动 Deckbuild 可以在桌面上单击 S. EDA Tools 图标来打开程序的快捷方式文件夹(路径 C:\sedatools\Shortcuts, 见图 1.3), 然后直接双击 Deckbuild 图标, 也可以执行“开始”→“所有程序”→S. EDA Tools→Deckbuild 命令来打开。

Linux 版本下 Silvaco TCAD 的可执行程序在 bin 目录下, 形如 /opt/silvaco/bin。程序启动的方式需视操作系统而定, 与环境变量(如路径)的定义也有关。

启动之后即出现如图 1.4 所示的 Deckbuild 的界面, Deckbuild 上部窗口为命令编辑区, 下部窗口为仿真状态的实时输出区域。

Deckbuild 界面中顶部是主菜单、编辑控制和进度控制。主要有 File、Commands、Execution 等菜单。Commands 子菜单提供简单的提取语句、显示当前结构和工艺优化的功能。编辑控制包含新建、打开、保存、剪切、复制、粘贴和撤销等常用编辑操作。

进度控制的快捷键及其意义如下:

- ▶ Run(Ctrl+R): 从上至下执行到“断点”(即“Stop at line”的“line”)时结束;
- Stop(Shift+F5): 运行完当前行暂停;
- ▶ Next(F10): 运行完下一行暂停;
- ▶▶ Continue(F5): 在之前暂停运行的行开始往下运行;

- ⏪ Initialize: 从历史文件初始化仿真;
- ✕ Kill(Ctrl+K): 强制结束;
- Line(Ctrl+L): 重置当前行为选择的行;
- 👤 Stop at line(Ctrl+B): 设置当前行为断点。

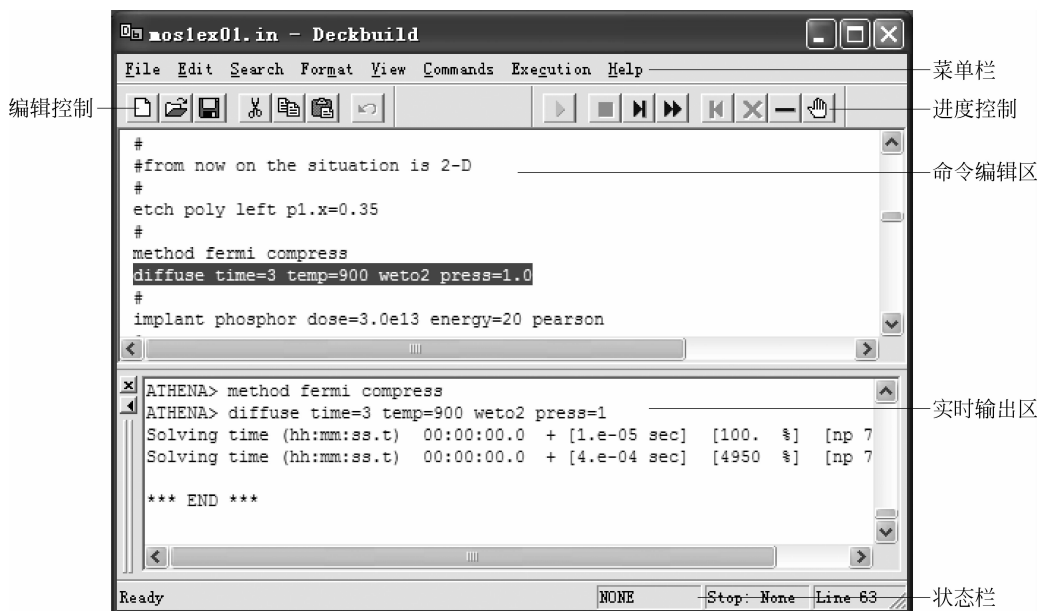


图 1.4 Deckbuild 界面

仿真的进度控制也可以由顶部的 Execution 菜单来实现,例如可以用 Execution→Clear 来撤销“断点”。

Edit 菜单中的 Set Simulator Version 选项可选择仿真器的默认版本,在 Deckbuild 中调用仿真器时可以指定版本,对于器件仿真还可以设定使用的 CPU 核的数目。

Deckbuild 窗口的底部是状态栏,样式及意义如下:



其中,Ready 为仿真的状态;ATHENA 为当前使用的仿真器;“Stop: None”表示当前未设置断点;Line 21 表示光标所在的行号。

1.3.1 Deckbuild Preferences

选择 Edit→Preferences 命令将打开 Deckbuild 配置框。Deckbuild Preferences 设置 Deckbuild 的特性,了解这些设置可以更好地对仿真进行控制。

1. Deckbuild 的工作路径

Silvaco TCAD 在运行中生成的临时文件和仿真结果都保存在工作路径中。仿真语句中若调用了外部文件,如 C 注释器编辑的函数文件 (*.lib) 和显示设置文件 (*.set) 等,也将在工作路径下寻找相应文件,如果没有就会提示出错。

Deckbuild 默认的工作路径为 C:\sedatools\Work, 如果安装完成后并没有这样一个文件夹, 则需要手动指定一个路径。工作路径可在 Deckbuild Preferences 配置框中的 Working Directory 选项卡中进行查看或更改。如图 1.5 所示为工作路径的设置框。



图 1.5 Deckbuild Preferences—Working Directory

2. History Settings

History Settings 功能允许回退到输入文件的某一行, 直接从这一行开始往下执行仿真, 这为调试仿真语句带来了便利。在 History Settings 选项卡中选中 Make History 复选框, 如图 1.6 所示, 则在仿真时会按工艺仿真步骤在工作路径下保存一系列历史文件(器件仿真不会保存历史文件)。典型的工艺步骤包括: implant、diffuse、etch、deposit, 而其他的状态如注释、显示(Tonyplot)、空行等将会忽略掉而没有历史文件保存。工艺仿真的历史文件的命名样式为“hist_*.str”, 其中“*”号为仿真步骤所在的行数(Deckbuild 状态栏底部显示的 Line)。例如第 10 行有一个工艺步骤, 则执行这一行的工艺之后就会保存历史文件“hist_10.str”。



图 1.6 Deckbuild Preferences—Make History

使用历史文件应遵循以下步骤:

- (1) 将光标停在某一行, 单击 Execution 菜单中的 Line 按钮选中此行。
- (2) 单击 Execution 菜单中的 Next 按钮, 导入工艺仿真模型文件, 提示仿真即将开始。
- (3) 单击 Execution 菜单中的 Init 按钮, 导入之前在运行此行时保存的历史文件。
- (4) 单击 Execution 菜单中的 Continue 按钮, 依次往下执行仿真。重新运行后各后续工艺生成的历史文件也将被更新。

历史文件会占用工作区的存储空间, 有时需要将其清理掉。Deckbuild 有很灵活的方