МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный технический университет»

Кафедра твердотельной электроники

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

к выполнению практических работ для студентов направления подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника» всех форм обучения

Воронеж 2023

Составитель

канд. техн. наук Е. Ю. Плотникова

Квантовая механика и статистическая физика в микроэлектронике: методические указания к выполнению практических работ для студентов направления подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника» всех форм обучения / ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»; сост. Е. Ю. Плотникова. Воронеж: Изд-во ВГТУ, 2023. – 30 с.

В методических указаниях рассматриваются основные принципы работы в САПР технологического уровня применительно к дискретным наноразмерным электронным структурам и приборам на квантовых эффектах. Приводятся базовые методы построения моделей микроэлектронных устройств и технология построения их геометрии. Для каждой работы сформированы задание, теоретическое описание отдельных элементов, а также приведены результаты моделирования, которые должны служить базой для построения моделей студентами.

Предназначены для студентов направления 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника» всех профилей и форм обучения.

Методические указания подготовлены в электронном виде и содержатся в файле МУ КМиСФвМ.pdf.

Ил. 21

УДК 530.145(07) ББК 22.314я73

Рецензент – Т. В. Свистова, канд. техн. наук, доцент кафедры твердотельной электроники ВГТУ

Издается по решению редакционно-издательского совета Воронежского государственного технического университета

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОГРАММИРОВАНИЯ В САПР ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УРОВНЯ. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Модуль для работы в САПР TCAD под ОС **Windows** может быть установлена студентами на ПК из дистрибутива от 2019 г., используемого на кафедре ТТЭ (объем загрузочного файла занимает менее 500 Мб).

Установка и присоединение ключ-файла должны выполняться строго по инструкции из прилагаемого pdf-описания пошаговой установки САПР. В версии, используемой в системе Windows (рис. 1), нет блоков victory (process, device, stress), позволяющих проводить более точное моделирование параметров наноразмерных и квантовомеханических структур; предлагаемый набор модулей (athena, atlas) достаточен для первичного изучения подходов к построению базовых приборов микро- и наноэлектроники (диодов и конденсаторов.



Рис. 1. Путь к программе в коневом каталоге OC Windows

Основное рабочее окно, в котором будет создаваться проект, запускается в папке «SedaTools» щелчком на ярлыке «DeckBuild».

По щелчку открывается окно, состоящее из нескольких блоков:

- область для написания кода структуры,

- окно для выведения лог-файла во время расчёта,

– окно, в котором будут выведены данные по рассчитываемым переменным,

– окно, в котором выводится набор файлов рассчитанных структур и графиков,

– область мониторинга ресурсов системы.

Проверка работоспособности установленного ПО проводится следующим образом (рис. 2, 3):



Рис. 2. Основное окно программы

1) путь: File – Examples: – открывается окно с набором встроенных примеров, в котором выбирается проект из блока Product – Athena; описание проекта открывается при щелчке на его названии;

2) нажимаем кнопку «Load»;

D	eckBuild - 5.0.10.R - C:/Users,	/Katy/Documen	ts - anca	aex0)5.in —	- u x	равка 🖓 Что вы хотите сделать?	
File	Edit View Run Tools	Commands H	elp				AREAD AREAD AREAD AREAD AREADON AREADON AREADON	4.05
1 N	lew	Ctrl+N	11	»	😬 » 🖳 😿 » 🝙 🔛	👻 🥔 Connect	Examples ?	×
🧐 C)pen	Ctrl+O			Variables history	×	x	
📚 A	Append	Ctrl+D		^			Search Clear Help no	hits
	lew Deckbuild	Ctrl+M					Name Comment	^ 5
1 N	lew Deckbuild Open File	Ctrl+P	ar				V 🖨 PRODUCT	
	21/2	C+rl+S					✓	
	ave .	CIII+5					ancaex01.in OED Tuning Using TWO.DIM for DRYO2	
e 5	Save As		2.4		Outputs	×	Calibration Using THETA.0	
S S	ave Preferences	Ctrl+Alt+S	uar		Filter: * str * log	V Default Filter	ancietos.m Cambration of Thin Weto2 Oxidation	
E	xamples				iter iter		ancaex05 in Tuning E0C05 Shapes using the COMPRESS Moder	
Examples in Browser					ptcsetup.log	^	ancaex06 in Tuning Pricestolal and Isotropic Etch for Spacer Formation	
					mos1ex01_0.str		ancaex07.in Multiple Implant Profile Optimization	
K	accent Flies				mos1ex01_1.log		ancaex08.in Extraction of Implant Moments from Measured Data	
📢 E	xit				auantumov01 str		> 😂 Athena_DIFFUSI Diffusion Process Simulation	~
athena guantumex01.1					a quantumex01.1.log		Tuning Throshold Voltage using Seg 0 and Theta 0	~
t ■ quantumex01_1.tog			auantumov01 1 etc	~	runing mreshold voltage using Seg.0 and meta.0			
# set					Resource usage	×	x Requires: SSuprem 4	
example=ancaex05				, <u> </u>	Minimum Versions: Athena 5.22.3.R			
							ATHENA/DBinterna	
							Calibration of Vt using Seg.0 and thota.0	
								7
							0.00	
								F
					o bytes	0 bycears	3	~
Outpu	ut 🗹 Scroll to bottom 🛛 C	lear			Memory IO read	10 write	Load Load Deck and Input Files Load Deck Only Close	
Line: 0	Column: 1 Ready No files	generated Free	space :	38.7	GB DeckBuild 5.0.10.R Copyright @	0 1984 - 2021 silva	4 N 100155	

Рис. 3. Путь запуска примеров расчёта моделей TCAD

3) в основном окне кода будет загружен текст проекта: обратите внимание на цветовые обозначения элементов текста:

сиреневый (начинается со слова «go », используется всегда) – указание на решающий модуль (Athena, Atlas, DevEdit, Internal – кстати, на диске С в папке «C:\sedatools\lib» расположены папки с мануалами pdf по этим модулям, названия совпадают),

розовый (начинается со слова «set », используется не во всех кодах) – задание переменной / переменных (в коде будут использованы ссылки со знаками \${ }),

чёрный – основной текст кода,

синий – ссылки на переменные,

зеленый (блок кода начинается с знака «#») – это комментарии, то, что написано в них, никак не будет учитываться программой при расчёте,

зелено-голубой – цифры,

чёрный полужирный (начинается со слова «extract », используется не во всех кодах) – формула для расчёта или экстракции какого-то параметра структуры;

4) запуск кода на выполнение осуществляется щелчком на кнопке «Play» (зеленый треугольник в верхнем левом углу);

5) при выполнении кода просчитываемая строка подсвечена желтым, а сам расчёт выводится в нижней части экрана (рис. 4):

синий – текст кода команды,

черный – сам лог расчёта,

розовый – экстракция какого то значения командой «extract ».

DeckBuild - 5.0.10.R - C:/Users/Katy/Documents - mos1ex01.in			- 🗆 ×
<u>File Edit View Run Tools Commands H</u> elp			
🗣 🕨 📓 📓 📓 📓 📲 💱 📭 🖓 🖓 🖓 🍕 🖉 📲	1	🛛 📑 🚍 🙆	👻 🧽 Connect
Deck		Variables history	>
<pre>########### Vt Test : Returns Vt, Beta and Theta ####################################</pre>	^	gateox nxj kan suf conc chan suf conc chan suf conc chan suf conc chan suf conc	100.163077431803 (^ 0.174288367889877 (29.0935782049464 (2176.83542470721 (3.73448034516482*16 (
contact name=gate n.poly		Filter: * str * log	Pofault Eiltor
<pre>method newton solve init # Bias the drain solve vdrain=0.1 # Ramp the gate log outf=moslex01_1.log master</pre>		ptcsetup.log diodeex01.log diodeex03.log diodeex12_5.log diodeex12_4.log diodeex12_3.log diodeex12_3.log diodeex12_3.log	
solve vgate=0 vstep=0.25 vfinal=3.0 name=gate	\sim		
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	*	93.5 MB	es/s 0 bytes/s
Output 🔽 Scroll to bottom Clear		Memory IO read	IO write
Line: 0 Column: 1 Executing line 135 - atlas Size of generated files : 51.5 KB Free space : 3	8.4 G	B DeckBuild 5.0.10.R Cop	yright © 1984 - 2021 silvaco

Рис. 4. Пример отображения окна при выполнении кода программы

Модули TonyPlot и TonyPlot3D отвечают за вывод рассчитанных характеристик и структур – в версии под Windows могут выдавать ошибку загрузки, которую необходимо закрыть нажатием на кнопку «Ok».

Методы запуска рассчитанных структур и графиков показаны на рис. 5 и 6.



Рис. 5. Модули вывода на экран графических результатом моделирования в папке с программой



Рис. 6. Вывод графических данных непосредственно из кода программы

Когда откроется окно графика (тип файла .log), его необходимо настроить для правильного отображения (рис. 7, 8). ПКМ на графике – в выпадающем меню выбираем «Display» – откроется окно настройки осей графика. По оси X нужно выбрать 1 переменную, по оси Y – можно задать несколько. Масштаб может быть линейным, логарифмическим, можно построить график в полярной системе координат. Масштабирование можно осуществлять мышью, тогда вверху слева появится область управления или через настройки графика.

Можно открывать несколько графиков на одном листе (File – Open, внизу в выпадающем списке выбираем OverLay) или в соседних областях окна (File – Open, выбираем Add).



Рис. 7. Отображение графиков в программе



Рис. 8. Настройки отображения графиков

При работе со структурами разрабатываемого прибора (тип файла .str) нажимаем ПКМ и выбираем пункт Display, который позволяет настроить отображение сетки, контуров областей, материалов структуры, концентрации носителей заряда, границ p-n переходов, электродов (остальные настройки в рамках курса не понадобятся) – основные элементы управления приведены на рис. 9, 10.

При активном параметре распределения носителей заряда (по умолчанию – распределение концентрации носителей заряда без деления по типу «электроны-дырки») для настройки различных распределений необходимо выбрать в окне настройки выпадающий список Define – Contours; откроется окно, в котором основным элементом будет выпадающий список Quantity, в котором выбираются требуемые распределения.

ВАЖНО! Каждый проект необходимо сохранять в отдельную папку (если в одном задании делается несколько расчётов, то или каждый расчёт или должен находиться в своей папке, или вариации параметра будут заданы блоком «set» в коде) с англоязычным именем.

Чтобы код программы, написанный в OC Windows, без проблем сохранялся и отображал нечитаемые символы, используйте англоязычные пути к файлу решаемой задачи.

Комментарии в коде рекомендуется писать английскими символами или дублировать в файле типа «.docx», так как из исходного файла типа «.in» они часто «слетают», превращаясь в текст типа «#???????????????.

Файл «.in» можно открывать обычным Блокнотом или WordPad-ом.

Файлы «.str» и «.log» открываются только в модуле TonyPlot (или TonyPlot 3D), поэтому для формирования отчёта по поставленной задаче требуется делать снимки экрана (PrintScreen) с отображенными графиками или структурами.



Рис. 9. Первый шаг настройки отображения структур



Рис. 10. Второй шаг настройки отображения структур

Если программа под ОС Win не устанавливается на конкретный ПК, можно использовать вариант TCAD для **виртуальной** машины, который в исходном исполнении занимает порядка 29 Гб. Папку с программой можно сохранить на флеш-карту (64 Гб) или внешний жесткий диск. Система, под которую программа устанавливается, должна иметь размерность 64 бита. Оперативная память – не меньше 4 Гб, половина из которых отдается под загрузку виртуального образа с системой.

Оболочка VMWare (можно использовать свободное ПО VMWare Player) имеет размер порядка 50 Мб; рекомендуется использовать последнюю версию программы. <u>Пароль на вход в систему</u> на виртуальной машине: 12345. В системе для доступа к набору ярлыков программы открываем папку S.EDA Tools, запускаем ярлык DeckBuild (рис. 11).



Рис. 11. Внешний вид окна программы, запущенного под виртуальной машиной

Зеленый треугольник – запуск кода на выполнение.

Путь «File – Examples» открывает каталог с примерами кода для различных структур.

Путь «Home - \uparrow - \uparrow - opt – silvaco – lib – (папки)» или «C:\\ – sedatools – lib – (папки)» дает доступ к файлам с описанием модулей, содержащихся в TCAD. В данном курсе могут понадобиться модули Athena, Atlas, DeckBuild, TonyPlot. Требуемые файлы лежат в подпапках «docs» и содержат в названии « users1».

Практическая работа № 1–2 ВФХ р-МОП конденсатора с тонким подзатворным окислом

Задание:

1 Перепишите код прибора, приведенный в тексте ниже, в модуль DeckBuild. С помощью соответствующего мануала (для модуля Atlas) изучите структуру кода по словам и строкам. Постройте графики, аналогичные приведенным на рисунках 13 и 14.

2 Корректно переведите описание структуры конденсатора, приведенного в пояснении к коду (текст на английском языке приведен ниже).

3 Определите по коду, какой параметр отвечает за квантовые эффекты при моделировании структуры. Опишите его. Корректно переведите и изучите блок, описывающий модель, использующую этот параметр (путь к файлу: C:\sedatools\lib\atlas\5.28.1.R\docs)

4 Используя разобранный на практике код, опишите порядок построения и моделирования прибора.

5 Добавьте в отчёт графики и структуры, построенные программой по написанному коду. Оформите отчёт согласно правилам оформления, принятым в ВГТУ. Распечатайте отчёт (допускается печать на 2 сторонах листа в черно-белом варианте) и предоставьте на защиту работы.

Chapter 14 Quantum: Quantum Effect Simulator
14.1 Quantum Effects Modeling
14.2 Self-Consistent Coupled Schrodinger Poisson Model
14.3 Density Gradient (Quantum Moments Model)
🖅 📋 14.4 Bohm Quantum Potential (BQP)
🛓 🗂 14.5 Quantum Correction Models
🖅 🛅 14.6 Parabolic Quantum Well Model
14.7 Multiband kp Models
14.8 Quantum Transport: Non-Equilibrium Green's Function Approach
14.9 Drift-Diffusion Mode-Space Method (DD_MS)

Рис. 12. Глава в мануале, содержащая модели, с использованием которых строится та или иная задача

Графики и структуры на рисунках ниже приведены в качестве подсказки того, что Вы должны получить при моделировании структур. Сами графики, выгруженные в программе, требуется «донастроить», подбирая оси, масштаб и другие параметры.

Описание прибора на английском языке: CV Analysis Of Thin Gate Oxide PMOS Capacitor

This code demonstrates the CV characteristics of a N-type substrate MOS capacitor with a nominal 30A gate oxide. The example shows:

- 1 Calculation of CV curves using AC Analysis
- 2 Use of the Quantum moments quantum model
- 3 Difference between classical and quantum gate thickness
- 4 Classical and Quantized electron density

A simple 1D MOS capacitor is created in this example with a 30A gate oxide thickness. An AC analysis is performed on the device firstly with the **classical** simulation and the with the **quantum** model swtiched on.

The quantum model is activated by using the **quantum** switch in the models statement for electrons. Note that this activates a quantum moments model which uses a quantum temperature calculation. This quantum temperature can be viewed in the structure files. Also, the cutline created in TonyPlot can be used to examine the classical and quantum electron concentration differences in the structure.

In accumulation, the channel carrier concentration is changed by the addition of quantum mechanics. The peak is not so high and the electrons spread more deeply into the substrate. The difference in gate capacitance is noticable on the CV plot. Since gate oxide thickness is often measured using CV techniques, this leads to erroneous results if QM effects are not accounted for. **extract** statements are used to show the calculated Tox from the classical and QM CV curves.

Код моделируемого прибора:

```
go atlas
mesh
x.m l=0 spac=1
x.m l=1 spac=1
y.m l=-0.0035 spac=0.001
y.m l=0 spac=0.0001
y.m l=0.1 spac=0.02
y.m l=0.5 spac=0.2
region num=1 silicon y.min=0
region num=2 oxide y.max=0
electrode name=gate top
electrode substrate
doping uniform conc=1e17 n.type
save outf=capacitorPMOS.str
```

go atlas

mesh inf=capacitorPMOS.str contact name=gate n.poly models cvt srh print output con.band val.band t.quantum

method carr=2 maxtrap=10 solve outfile=capacitorPMOS_temp.str master log outf=capacitorPMOS_1.log solve vgate=0 vstep=0.1 vfinal=5 name=gate ac freq=1e6 direct save outf=capacitorPMOS_1.str log off

```
load infile=capacitorPMOS_temp.str master
solve
log outf=capacitorPMOS_2.log
solve vgate=0 vstep=-0.2 vfinal=-2 name=gate ac freq=1e6 direct
save outf=capacitorPMOS_2.str
```

go atlas

mesh inf=capacitorPMOS.str contact name=gate n.poly models cvt srh print quantum output con.band val.band t.quantum

```
method carr=2 maxtrap=10
solve outfile=capacitorPMOS_temp.str master
log outf=capacitorPMOS_3.log
solve vgate=0 vstep=0.1 vfinal=5 name=gate ac freq=1e6 direct
save outf=capacitorPMOS_3.str
log off
```

```
load infile=capacitorPMOS_temp.str master
solve
log outf=capacitorPMOS_4.log
solve prev vgate=0 vstep=-0.1 vfinal=-2 name=gate ac freq=1e6 direct
save outf=capacitorPMOS_4.str
```

tonyplot -overlay capacitorPMOS_1.log capacitorPMOS_2.log capacitorPMOS_3.log capacitorPMOS_4.log -set capacitorPMOS_1.set tonyplot -overlay capacitorPMOS_1.str capacitorPMOS_3.str -set capacitorPMOS_2.set extract init inf="capacitorPMOS_1.log" extract name="tox_cl" (3.9*8.85e-10*1.0e-4)/max(c."gate""substrate") extract init inf="capacitorPMOS_3.log" extract name="tox_qm" (3.9*8.85e-10*1.0e-4)/max(c."gate""substrate")

quit

Итоговые структуры и зависимости с установленными настройками:



Рис. 14. Распределение (чего? – требуется самостоятельно сформулировать, какая характеристика построена в коде)

Практическая работа № 3–4 Утечки в диоде на гетеропереходах

Задание:

1 Перепишите код прибора, приведенный в тексте ниже, в модуль DeckBuild. С помощью соответствующего мануала (для модуля Atlas) изучите структуру кода по словам и строкам. Постройте графики, аналогичные приведенным на рисунках 13 и 14.

2 Корректно переведите описание структуры конденсатора, приведенного в пояснении к коду (текст на английском языке приведен ниже).

3 Определите по коду, какой параметр отвечает за квантовые эффекты при моделировании структуры. Опишите его. Корректно переведите и изучите блок, описывающий модель, использующую этот параметр (путь к файлу: C:\sedatools\lib\atlas\5.28.1.R\docs)

4 Используя разобранный на практике код, опишите порядок построения и моделирования прибора.

5 Добавьте в отчёт графики и структуры, построенные программой по написанному коду. Оформите отчёт согласно правилам оформления, принятым в ВГТУ. Распечатайте отчёт (допускается печать на 2 сторонах листа в черно-белом варианте) и предоставьте на защиту работы.

Графики и структуры на рисунках ниже приведены в качестве подсказки того, что Вы должны получить при моделировании структур. Сами графики, выгруженные в программе, требуется «донастроить», подбирая оси, масштаб и другие параметры.

Описание прибора на английском языке: Heterojunction Diode Leakage

This code demonstrates the difference between an AlGaAs / GaAs heterojunction diode modeled with and without quantum physics.

In the first half of the file, the example calculates the forward and reverse characteristics of a classically modeled diode. In the second half of the example, the quantum model is switched on. Note that, as in the previous example, the qfactor is used to ramp the level of quantum moments included in the example for zero to unity.

The overlayed results show around an order of magnitude higher reverse leakage in the quantum case. This is due to the smearing of the electron concentration across the heterojunction.

Код моделируемого прибора:

```
go atlas
     mesh
     x.m l=0 spac=1
     x.m l=1 spac=1
     y.m l=0.000 spac=0.1
     y.m l=0.5 spac=0.0001
     y.m l=1.0 spac=0.1
     region num=1 material=GaAs
     region num=2 material=AlGaAs y.min=0.000 y.max=0.4995 x.comp=0.8
grad.34=0.0005
     electrode name=anode top
     electrode name=cathode bottom
     doping uniform conc=1e14 n.type
     models fldmob srh print
     material material=AlGaAs align=0.6
     output band.param val.band con.band
     method carr=1 elec newton
     solve vanode=0.00 outf=geterDiode temp.str master
     log outf=geterDiode 1.log
     solve vanode=0 vstep=0.1 vfinal=2 name=anode
     log outf=geterDiode 2.log
     load inf=geterDiode temp.str master
     solve vanode=0 vstep=-0.1 vfinal=-2 name=anode
     save outf=geterDiode 1.str
     go atlas
     mesh
     x.m l=0 spac=1
     x.m l=1 spac=1
     y.m l=0.000 spac=0.1
```

```
y.m l=0.5 spac=0.0001
y.m l=1.0 spac=0.1
```

```
region num=1 material=GaAs
region num=2 material=AlGaAs y.min=0.000 y.max=0.4995 x.comp=0.8
grad.34=0.0005
```

electrode name=anode top electrode name=cathode bottom

doping uniform conc=1e14 n.type

models fldmob srh print quantum

material material=AlGaAs align=0.6 output t.quantum band.param val.band con.band

method carr=1 elec newton solve qfactor=0 solve qfactor=0.01 solve qfactor=0.05 solve qfactor=0.1 solve qfactor=0.2 solve qfactor=0.3 solve qfactor=0.4 solve qfactor=0.5 solve qfactor=0.6 solve qfactor=0.7 solve qfactor=1.0 outfile=geterDiode_temp.str master

log outf=geterDiode_3.log solve vanode=0 vstep=0.1 vfinal=2 name=anode

log outf=geterDiode_4.log load inf=geterDiode_temp.str master solve vanode=0 vstep=-0.1 vfinal=-2 name=anode save outf=geterDiode_2.str

tonyplot -overlay geterDiode_1.log geterDiode_2.log geterDiode_3.log geterDiode_4.log -set geterDiode_1.set

quit

Итоговые зависимости с установленными настройками:



Рис.15. Сравнение квантовой и классической моделей (укажите, где какая модель рассматривается)

Практическая работа № 5–6 Квантовое туннелирование в кремниевом диоде

Задание:

1 Перепишите код прибора, приведенный в тексте ниже, в модуль DeckBuild. С помощью соответствующего мануала (для модуля Atlas) изучите структуру кода по словам и строкам. Постройте графики, аналогичные приведенным на рисунках 13 и 14.

2 Корректно переведите описание структуры конденсатора, приведенного в пояснении к коду (текст на английском языке приведен ниже).

3 Определите по коду, какой параметр отвечает за квантовые эффекты при моделировании структуры. Опишите его. Корректно переведите и изучите блок, описывающий модель, использующую этот параметр (путь к файлу: C:\sedatools\lib\atlas\5.28.1.R\docs)

4 Используя разобранный на практике код, опишите порядок построения и моделирования прибора.

5 Добавьте в отчёт графики и структуры, построенные программой по написанному коду. Оформите отчёт согласно правилам оформления, принятым в ВГТУ. Распечатайте отчёт (допускается печать на 2 сторонах листа в черно-белом варианте) и предоставьте на защиту работы.

Графики и структуры на рисунках ниже приведены в качестве подсказки того, что Вы должны получить при моделировании структур. Сами графики, выгруженные в программе, требуется «донастроить», подбирая оси, масштаб и другие параметры.

Описание прибора на английском языке: Quantum Tunnelling in a Silicon Diode

Example of a QTREGION statement.

Example of BBT.NONLOCAL and BBT.NLDERIVS commands.

In this code, the QTREGION statement is used to set up a mesh suitable for tunneling calculations. The device is a degenerately doped silicon p-n diode. Non-local Band-To-Band tunneling is selected on the MODELS statement by using the BBT.NONLOCAL keyword. Because the solution will go to relatively high levels of tunneling current, convergence may become difficult. The optional parameter BBT.NLDERIVS is used to improve this. The diode is biased into both forward and reverse biases. In forward bias a tunneling current occurs up to about 0.3 V, and at higher bias the usual forward bias diffusion current occurs as can be seen in the LOG file. The STRUCTURE files, with the BBT tunneling current displayed, show the actual tunneling current being injected into the device. Under reverse bias it acts like generation, under forward bias like recombination.

Код моделируемого прибора:

go atlas mesh space.mult=1.0 ^diag.flip x.mesh location=0.0 spacing=0.5 x.mesh location=1.0 spacing=0.5 y.mesh loc=0 spacing=0.1 y.mesh loc=0.9 s=0.05 v.mesh loc=0.95 s=0.001 y.mesh loc=1.05 s=0.001 y.mesh loc=1.1 s=0.05 y.mesh loc=2 spacing=0.1 region num=1 material=silicon elec name=anode top elec name=cathode bottom qtregion number=1 pts.normal=3 pts.tunnel=131 x1=0.0 y1=0.95 x2=1.0 y2=0.95 x3=1.0 y3=1.05 x4=0.0 y4=1.05 doping uniform p.type conc=2e20 y.max=1.0 doping uniform n.type conc=2e20 y.min=1.0 models temperature=200 srh fermi ni.fermi print bbt.nonlocal bbt.nlderivs output band.temp traps u.srh method climit=1.0 dvmax=0.005 solve init log outf=tunnelSiDiode reverse.log solve name=anode vanode=-0.0 vstep=-0.01 vfinal=-0.05 solve name=anode vanode=-0.05 vstep=-0.05 vfinal=-0.2 solve name=anode vanode=-0.25 vstep=-0.05 vfinal=-0.5

solve init

log off

log outf=tunnelSiDiode forward.log

solve name=anode vanode=0.0 vstep=0.005 vfinal=0.2

solve name=anode vanode=0.205 vstep=0.005 vfinal=0.35 solve name=anode vanode=0.375 vstep=0.025 vfinal=1.2

 $tonyplot\ \text{-overlay}\ tunnelSiDiode_forward.log\ tunnelSiDiode_reverse.log\ \text{-set}\ tunnelSiDiode_set}$

exit



Итоговые структуры и зависимости с установленными настройками:

Рис. 16. Прямая и обратная ветви ВАХ (какого прибора?)

Практическая работа № 7–8 РТД р-типа на SiGe

Задание:

1 Перепишите код прибора, приведенный в тексте ниже, в модуль DeckBuild. С помощью соответствующего мануала (для модуля Atlas) изучите структуру кода по словам и строкам. Постройте графики, аналогичные приведенным на рисунках 13 и 14.

2 Корректно переведите описание структуры конденсатора, приведенного в пояснении к коду (текст на английском языке приведен ниже).

3 Определите по коду, какой параметр отвечает за квантовые эффекты при моделировании структуры. Опишите его. Корректно переведите и изучите блок, описывающий модель, использующую этот параметр (путь к файлу: C:\sedatools\lib\atlas\5.28.1.R\docs)

4 Используя разобранный на практике код, опишите порядок построения и моделирования прибора.

5 Добавьте в отчёт графики и структуры, построенные программой по написанному коду. Оформите отчёт согласно правилам оформления, принятым в ВГТУ. Распечатайте отчёт (допускается печать на 2 сторонах листа в черно-белом варианте) и предоставьте на защиту работы.

Графики и структуры на рисунках ниже приведены в качестве подсказки того, что Вы должны получить при моделировании структур. Сами графики, выгруженные в программе, требуется «донастроить», подбирая оси, масштаб и другие параметры.

Описание прибора на английском языке: SiGe p-type Resonant Tunneling Diode

This example considers a p-type SiGe RTD with 2nm wide double Si barriers separated by a 2nm SiGe well. A two-band model is used for hole bandstructure. Band offsets and effective masses are set by DEV.HH, DEV.LH and MHH, MLH parametrs on the MATERIAL statment. The convergence criterium for the maximum change in potential is set by the QCRIT.NEGF parameter on the MODELS statement to 0.1 meV.

In order to solve for eigen energies and wavefunctions, we use NEGF.EIG paramater of the SOLVE and SAVE statement. NEGF.EIG can be switchedoff to save computation time if the information on eigen energies is not required. Use EIG.YMIN and EIG.YMAX parametrs on the models statement to choose only states localized in this region.

Код моделируемого прибора:

go atlas

p-type SiGe RTD example 2nm-2nm-2nm double barrier,

mesh diag.flip

x.mesh loc=0.00 spac=0.01 x.mesh loc=0.01 spac=0.01

```
y.mesh loc=-0.072 spac=0.0005
y.mesh loc=-0.01 spac=0.0002
y.mesh loc=0.0 spac=0.0001
y.mesh loc=0.011 spac=0.0001
y.mesh loc=0.013 spac=0.0001
y.mesh loc=0.015 spac=0.0001
y.mesh loc=0.024 spac=0.0001
y.mesh loc=0.026 spac=0.0001
y.mesh loc=0.036 spac=0.0001
y.mesh loc=0.046 spac=0.0002
y.mesh loc=0.1 spac=0.0005
```

Source and drain regions have to be specified as EQUIL.NEGF to impose quasi-equilibrium condition.

region num=1 name=SiGe material=Si y.max=-0.01 equil.negf material=Si x.comp=0.6 y.min= -0.01 region num=2 name=SiGe y.max=0.011 equil.negf region num=3 name=Si material=Si y.min=0.011 y.max=0.013 name=SiGe material=Si region num=4 x.comp=0.6y.min=0.013 y.max=0.015 region num=5 name=Si material=Si y.min=0.015 y.max=0.017 name=SiGe material=Si x.comp=0.6region num=6 y.min=0.017 y.max=0.024 region num=7 name=SiGe material=Si x.comp=0.6y.min=0.024 y.max=0.036 equil.negf region num=8 name=SiGe material=Si y.min=0.036 y.max=0.046 equil.negf region num=9 name=SiGe material=Si y.min=0.046 equil.negf elec num=1 name=emitter top elec num=2 name=collector bottom doping reg=1 uniform p.type conc=1e18

```
doping reg=8 uniform p.type conc=1e16
doping reg=9 uniform p.type conc=1e18
```

Band off-sets: We declare the same material Si in all regions. Here we modify band off-sets and set effective masses. Regions with SiGe are given a name "SiGe", and regions with Si are given a name "Si".

Holes: when NUM.BAND>1 on MODELS statement, use DEV.HH,DEV.LH and DEV.SO to set band off-sets when NUM.BAND=1, use DEV.ISO to set band off-set for isotropic band

Electrons: when NUM.DIRECT=3 on MODELS statement, use DEC.C1,DEC.C2 and DEC.C3 to set band off-sets for each pair of valleys.

when NUM.DIRECT=1, use DEC.ISO to set band off-set for isotropic band (in this example we compute only hole transport, while electrons are treated clasically)

Valence Band off-sets (from the highest Ev of bulk Si)

material name=Si dev.so=-0.044 material name=SiGe dev.hh=0.32 dev.lh=0.26 dev.so=-0.044

Conduction Band off-sets (from the lowest Ec of bulk Si) material name=SiGe dec.iso=-0.01

Holes: when NUM.BAND=1, 1 band is assumed with effective mass MV

when NUM.BAND=2, 2 bans are assumed with effective masses MHH and MLH

when NUM.BAND=3, 3 bans are assumed with effective masses MHH and MLH and MSO

Electrons: when NUM.DIRECT=1, 1 band is assumed with effective mass MC

when NUM.DIRECT=3, 3 bands are assumed with anisotropic effective masses.

(ML,MT1,MT2) for band#1,

(MT1,ML,MT2) for band#2,

(MT1,MT2,ML) for band#3,

(in this example we compute only hole transport, while electrons are treated clasically)

Effective masses (taken from http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe)

material name=Si mc=0.3 mhh=0.49 mlh=0.16 mso=0.24 material name=SiGe mc=1.06 mhh=0.426 mlh=0.1132 mso=0.17

To launch model, use N.NEGF_PL1D and/or P.NEGF_PL1D on the MODELS statement. This will solve 1D model in one slice and copy it to all other slices. If slices are not equivalent, use N.NEGF_PL and/or P.NEGF_PL, to solve 1D model for each slice. Energy grid size in the NEGF solver is regulated by ESIZE.NEGF on the MODELS statement (default is 2001). You may increase it up to 10000 for better convergence. To set broadening in quazi-equilibrium regions

use ETA.NEGF (default is 0.0066 eV). Increase it to 0.01 eV for better convergence. Physically, the broadening corresponds to inelastic electron-phonon scatterin, and is necessary to fill emitter quazi-bound states.

P.NEGF_PL1D - only holes are taken into account in transport calculation

Take only light and heavy holes into account by setting NUM.BAND=2

ESIZE.NEGF=20001 incerases the number of energy grid for better resolution

QCRIT.NEGF=1e-4 - convergence criterium is 0.1 meV or less in update of potential

Broadening in quasi-equilibrium regions is set by ETA.NEGF=0.0066

When storing for eigen energies and wave functions , take only ehose localized between EIG.YMIN=0.008 and EIG.YMAX=0.017

models p.negf_pl1d esize.negf=20001 eta.negf=0.0066 num.band=2 eig.ymin=0.008 eig.ymax=0.017 qcrit.negf=1e-4

method carr=0

Probes contain important information about Transmission and density of states versus energy. Also, you can output DENSVSE (carrier density spectrum) and CURDVSE (current density spectrum). Files will have names RTDSiGe_TranvsE_0.log, RTDSiGe_TranvsE_1.log etc. for each time you set NEGF.LOG on the SAVE statement. Setting X-location is not needed if you solve only one slice (N.NEGF_PL1D).

probe transmission filename="RTDSiGe_TranvsE_" probe transmission band=1 probe transmission band=2 probe dosvse x=0 y=0.015 probe dosvse x=0 y=0.015 band=1 probe dosvse x=0 y=0.015 band=2 probe curdvse x=0 y=0.015 band=1 probe curdvse x=0 y=0.015 band=1

ESIZEOUT.NEGF on the OUTPUT statement is the size of energy grid in the output file TranvsE_DB2_0.log. If you don't set it, it will be the same as ESIZE.NEGF on the MODELS statement.

output con.band val.band eigen=7

solve init save outf=RTDSiGe init.str negf.log negf.eig

log outf=RTDSiGe_IV.log

solve v2=0 name=collector vstep=-0.02 vfinal=-0.1 save outf=RTDSiGe_vm01.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.02 vfinal=-0.2 save outf=RTDSiGe_vm02.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.02 vfinal=-0.3 save outf=RTDSiGe_vm03.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.02 vfinal=-0.4 save outf=RTDSiGe_vm04.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.005 vfinal=-0.5 save outf=RTDSiGe_vm05.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.005 vfinal=-0.58

solve name=collector vstep=-0.005 vfinal=-0.6 save outf=RTDSiGe_vm06.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.005 vfinal=-0.7 save outf=RTDSiGe_vm07.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.005 vfinal=-0.8 save outf=RTDSiGe_vm08.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.005 vfinal=-0.9 save outf=RTDSiGe_vm09.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.005 vfinal=-1 save outf=RTDSiGe_vm1.str negf.log negf.eig

solve name=collector vstep=-0.01 vfinal=-2 save outf=RTDSiGe_vm2.str negf.log negf.eig

log off

tonyplot RTDSiGe_vm07.str -set RTDSiGe_fig1.set tonyplot RTDSiGe_vm07.str -set RTDSiGe_fig2.set tonyplot RTDSiGe_IV.log -set RTDSiGe_fig3.set tonyplot RTDSiGe_TranvsE_7.log -set RTDSiGe_fig4.set tonyplot RTDSiGe_TranvsE_7.log -set RTDSiGe_fig5.set

quit

Итоговые структуры и зависимости с установленными настройками:



Рис. 17. Определите название моделируемой характеристики



Рис. 18. Определите название моделируемой характеристики



Рис. 19. Требуется подобрать описание графика самостоятельно



Рис. 20. Определите название моделируемой характеристики



Рис. 21. Определите название моделируемой характеристики

ОГЛАВЛЕНИЕ

Теоретические основы программирования в САПР технологического							
уровня. Основные положения							
Практическая работа № 1-2. ВФХ р-МОП конденсатора с тонким							
подзатворным окислом	11						
Практическая работа № 3–4. Утечки в диоде на гетеропереходах							
Практическая работа № 5-6. Квантовое туннелирование в кремниевом							
диоде	19						
Практическая работа № 7–8. РТД р-типа на SiGe							

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

к выполнению практических работ для студентов направления подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника» всех форм обучения

> Составитель Плотникова Екатерина Юрьевна

> > В авторской редакции

Подписано к изданию 28.11.2023. Уч.-изд. л. 1,5.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет» 394006 Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84