

3Ddevice: 半导体器件及其辐照损伤效应 仿真软件系统^{*1)}

黄成梓 白石阳 王芹 马召灿 张倩茹 刘田田 桂升 卢本卓²⁾
(LSEC, 中国科学院数学与系统科学研究院计算数学研究所, 国家数学与交叉科学中心, 北京 100190)

陈旻昕

(苏州大学数学科学学院, 苏州 215006)

李鸿亮²⁾

(四川师范大学数学科学学院, 成都 610066)

摘要

本文介绍我们开发的一款适用于半导体器件及其辐照损伤效应定量模拟的三维并行仿真应用软件平台 3Ddevice. 该软件由中国科学院数学与系统科学研究院和中国工程物理研究院微系统与太赫兹研究中心联合开发, 能直接解算半导体器件的电学响应性质及其氧化物层在电离辐照下带电缺陷与界面态缺陷累积动力学过程, 计算器件损伤后的电学响应偏移. 我们已经实现器件电离辐照总剂量效应以及低剂量率增强效应定量模拟, 模拟结果与实验数据吻合良好. 软件采用 C/S 架构, 分为本地客户端与远程计算端两大子系统. 客户端由总控模块、前处理模块、通信模块以及后处理模块组成. 总控模块主要的功能是求解器挂载、数值模拟流程搭建与管理. 前处理模块主要功能是器件几何建模以及网格生成与优化. 通信模块主要功能是求解器参数初始化与硬件系统状态监控. 后处理模块主要功能是数值模拟结果可视化与数据分析. 计算端基于三维并行自适应有限元平台^[1](PHG)开发, 目前包括半导体器件模拟器 (DevSim), 电离辐照损伤模拟器 (TIDSim). 上述求解器采用 MPI 通讯技术, 支持大规模分布式并行, 已实现十亿量级网格单元数的器件电离损伤及电学响应模拟. 本文介绍的仿真软件系统是一个初级版本, 将会得到持续开发更新, 它的详细使用方法请参照并以软件使用说明书为准.

关键词: 器件模拟; 辐照损伤效应; 网格生成; 可视化系统; 有限元

MR (2010) 主题分类: 62P35

3DDEVICE: A SIMULATION SOFTWARE SYSTEM FOR SEMICONDUCTOR DEVICES AND RADIATION EFFECTS

Huang Chengzi Bai Shiyang Wang Qin Ma Zhaocan Zhang Qianru Liu Tiantian
Gui Sheng Lu Benzhuo

(LSEC, Institute of Computational Mathematics, Academy of Mathematics and Systems Science,
National Center for Mathematics and Interdisciplinary Sciences, Chinese Academy of Sciences,
Beijing 100190, China)

* 2020年3月30日收到.

¹⁾ 基金项目: 科学挑战专题 (TZ201603), 国家重点研发计划 (2016YFB0201304), NSFC(11771435).

²⁾ 通讯作者: 李鸿亮, Email: lihongliang@mtrc.ac.cn; 卢本卓, Email: bzlu@lsec.cc.ac.cn.

Chen Minxin

(Department of Mathematics, Soochow University, Suzhou 215006, China)

Li Hongliang

(Department of Mathematics, Sichuan Normal University, Chengdu 610066, China)

Abstract

This work introduces a parallel software platform we developed, 3Ddevice, which is suitable for quantitative simulation of three-dimensional semiconductor devices and their radiation effects. This software is jointly developed by the Academy of Mathematics and Systems Science of the Chinese Academy of Sciences and the Microsystem and Terahertz Research Center of the China Academy of Engineering Physics. It can directly calculate the device's electrical response property and the accumulation processes of charged oxide traps and interface traps of semiconductor devices, as well as the shift of electrical response after irradiation damage. We have simulated the total dose effect of device ionizing radiation and the enhancement effect of low dose rate, and the simulation results are quantitatively in good agreement with the experimental data. The software adopts C/S architecture and is divided into two major subsystems: local client and remote computing end. The client part is composed of pre-processing, post-processor, control module and communication module. The main functions of the control module are the mounting of the solver and the construction and management of the numerical simulation process. The pre-processing module is primarily used for geometric modelling and mesh generation. The communication module can be used to initialize the parameters of solvers and monitor the hardware system status. The post-processing module is used for analysis and visualization of the simulation results from the solver. The solver module includes two solvers (DevSim for general semiconductor device simulation based on the DD model and TIDSim for simulation of radiation effect). The solvers are developed based on the three-dimensional parallel adaptive finite element platform PHG^[1]. Those solvers use MPI communication to support massive distributed parallelism and now can simulate ionization damage effect and electrical response of a device with a billion-scale mesh. The software system is going to be developed and improved continuously, the detailed and updated usage please refer to its manual.

Keywords: semiconductor device simulation; radiation effects; mesh generation; visualization system; finite element

2010 Mathematics Subject Classification: 62P35

1. 引 言

半导体工艺模拟与器件模拟 (TCAD) 能够大大地缩短器件设计制造周期, 降低生产成本. 因此 TCAD 软件已经成为半导体工业领域不可或缺的工具. TCAD 软件研发有将近 40 年的历史, 早期软件有 Fielday^[2]、Topmost^[3]、Caddeth^[4]、Minimos^[5] 以及 Sierra^[6] 等. 目前商业软件两大巨头分别是 Synopsys 公司的 Sentaurus^[7] 以及 Silvaco 公司的 Atla^[8]. 这些商业软件都是基于共享内存计算机多线程并行计算技术, 而不支持基于分布式内存和消息传递的并行计算, 适用于单晶体管工艺与器件电学响应模拟. 最早的基于集群架构的并行三维器件模拟软件为由斯坦福大学研发的 STRIDE^[9]. 另外, COMSOL Multiphysics^[10] 多物理场仿真

软件系统, 包含计算力学、传热、电磁、输运等计算模块, 在一定程度上可以设计组合模型进行器件仿真。

半导体器件在辐照环境中具有显著的损伤效应, 如阈值电压漂移、增益降低等现象, 甚至器件完全失效。器件辐照损伤模型远比器件电性能连续模型复杂, 如器件电离损伤模型须求解将近 20 个偏微分方程, 而器件模拟仅须求解电势方程和载流子连续性方程。另一方面, 器件辐照损伤并不是孤立的, 有显著的管间关联现象, 即晶体管管间漏电。因此, 实际的器件辐照损伤模拟需要对电路中多个晶体管组成的功能单元进行三维模拟分析。目前主流的商业 TCAD 软件包含的辐照损伤模型比较简单, 不足以刻画器件的损伤退化过程, 不能模拟典型的器件辐照损伤效应。同时, 商业软件并行计算能力不足, 不适用于多晶体管功能单元的三维模拟。学界非常缺乏器件辐照损伤模拟软件。佛罗里达大学研究团队开发了电离损伤效应模拟软件包 Floods^[11], 适用于单晶体管一维以及二维的电离损伤效应模拟, 对器件电离损伤物理机制研究有很大的助益。美国 Sandia 实验室研发了一套半导体器件辐照损伤模拟软件 Charon^[12], 其主要用于高注量脉冲中子瞬态损伤效应模拟, 具有非常强大的并行计算能力。但是该软件为 Sandia 专用软件, 非开源也非商业应用软件, 其他科研机构难以取得使用。

我国在半导体器件辐照损伤领域主要以实验研究为主, 数值模拟算法方面的研究工作相对较少。目前尚无专门用于器件损伤模拟的软件系统。基于科学挑战专题 (TZ2016003) 的大力支持, 我们研发了半导体器件及其辐照损伤效应三维并行有限元模拟软件 3Ddevice。该软件能够定量计算电离辐照条件器件氧化物缺陷浓度与界面缺陷浓度, 并给出损伤后器件的电学响应漂移。据我们所知, 目前该软件是国内仅有的完全自主开发的针对 3D 通用半导体器件及其辐照损伤效应的半导体有限元仿真软件应用平台。该软件包含了完整的数值模拟三大主要流程, 界面友好, 功能完整。同时我们基于国产开源有限元软件包 PHG^[1] 开发了具有自主知识产权的核心解法器。相关解法器有着良好的大规模并行性能, 目前可以实现到近 10 亿个四面体单元, 2000 个核以上的大规模体系的大集群并行。

2. 软件架构与设计

本软件平台, 采用客户端 - 服务端, 即 C/S(Client/Server) 架构。数值模拟三大主要流程, 前处理、求解器、后处理; 其中客户端负责前处理和后处理, 求解器部分运行在服务器端。客户端, 部署于用户个人 PC, 用于网格建模, 网格质量分析与优化、提交作业、分析结果; 服务端, 部署于服务器集群, 主要用于对模型的求解。同时, 为了更好的利用相关计算仿真资源, 在客户端使用总控, 对多个仿真过程和相关参数与配置文件, 进行统一的调度与管理。

在功能结构上, 客户端以三个功能块为核心, 即 GUI 界面模块, 用于逻辑交互操作等基本界面, 提供显示数据曲线、图表绘图等二维数据可视化界面, 以及 CAD 建模或数据结果等三维数据进行 3D 场景展示的三维可视化界面。文件管理模块, 管理从项目建立到删除过程中所产生的所有中间文件数据。任务管理模块, 用于将建好的模型数据上传至服务端数据库, 并通知服务器启动一个计算作业以及在客户端查看相关计算状态, 如果计算完成, 对计算结果进行取回。

平台框架的开发, 客户端部分选择使用有着较强粘合能力的 Python 语言, 实现平台与多种求解器、计算库、底层库之间有效的粘合对接。在计算密集部分, 选用 C 语言和 Fortran。对于客户端主体 GUI 部分, 选取 Qt^[13] 作为图形用户框架, 网络通信部分采用 paramiko^[14], 使用较为灵活的 SSHv2 协议和 SFTP 协议进行通信和交换文件。可视化部分使用 visualization

toolkit(VTK)^[15] 以及 Matplotlib(MPL)^[16]. 同时上述所使用的类库与实现不依赖特定的操作系统和硬件环境, 使得软件整体有良好的跨平台性, 能够较好的在 Windows, Linux 系统上运行使用. 客户端部分主体分为三大组件, 前处理软件: 包括支持版图建模、导入第三方几何模型文件、网格质量分析、网格优化、模型结构可视化等功能; 通信与参数引导软件: 包括求解器参数控制、计算任务提交、数据通信等功能; 后处理: 包括求解器结果数据中的场数据、和物理数据的展示和分析功能.

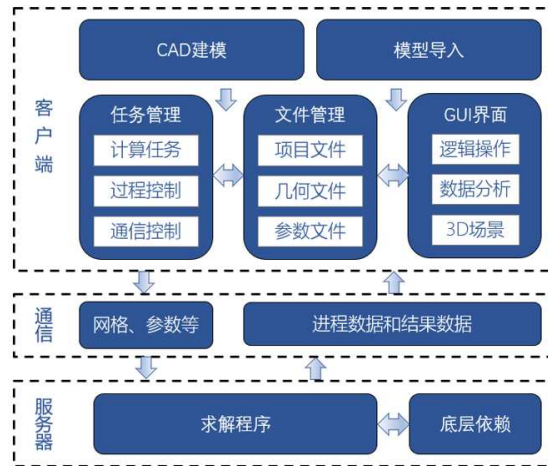


图 1 功能架构示意图

2.1. 总控

总控自动管理从一个工具到另一个工具的信息流, 包括用户输入文件的前处理, 参数化工程, 工具的设置和执行以及结果的查看. 同时以树结构的形式, 展示出整个仿真流程过程. 每个节点代表一个仿真过程的一个环节, 支持多个环节并行进行. 同时可以实现从一个环节上进行分叉、回退、保存等操作, 直观地显示各个节点的状态、参数和变量, 以便对节点的状态进行编辑和更改. 用户可以直接从总控部分调用前处理模块, 求解器模块和后处理模块的相关功能组件, 如图 2(a) 所示. 同时相关参数文件均通过 pro 文件进行配置与管理 pro 文件可以用于保存前处理得到的相关网格信息, 并设置所要使用的求解器及其相关参数以及后处理 VTK 数据的存放位置. 具体求解器参数与求解器类型可以参见第 3.3 节, pro 文件的编写可以参见附录部分.

2.2. 前处理

前处理软件, 内置了三种版图建模功能, 可以生成相关器件的高质量单器件的网格, 并且支持可以由此不断扩充形成器件版图库. 同时软件内置 CAD 建模模块, 支持用户使用标准几何来建模复杂的器件模型. 支持导入 Sentaurus 建模生成的网格. 内置使用与求解器算法相匹配的网格评价方法, 以此为标准开发了网格质量分析模块, 帮助用户了解网格质量情况. 为了应对奇异网格会导致不收敛的问题, 开发了优化模块, 将低质量网格优化为高质量的网格.

图 2(b) 显示了, 软件在 Windows 平台下的接口显示. 窗口中部为可视化区域, 用于显示器件模型; 左侧可以对网格进行区域标记; 右侧用于显示网格的数据信息; 下方为日志窗口, 显示相关操作状态, 网格状态等信息, 用于提示软件当前情况.

2.3. 后处理

图 2(c) 所示为软件的后处理部分. 对于多物理场可视化分析部分, 软件包含 1 个 3D 渲染场景, 并拥有内存数据管理、渲染管理等功能, 可以对求解器数值结果进行 3D 渲染和数据分析. 主体采用 VTK 渲染引擎, 在界面后端窗口使用 QT 窗口调用, 两者可以无缝嵌入使用. 对于 3D 模型的渲染, 软件支持几何模型、三角片面和数据渲染. 渲染支持的数据类型包含分片常数数据场、分片线性数据场和二维曲线数据.

2.4. 通信与参数引导模块

图 2(d) 显示了通信与参数引导模块. 在此模块, 用户选择相应的求解器, 进行参数设置. 本软件可以通过直接编辑参数配置文件的形式进行计算任务提交, 从而方便进行批处理; 也以支持弹窗的方式进行参数设置, 用户根据提示信息输入对应参数, 由系统自动生成对应的参数配置文件. 用户在软件界面的左下方进行计算节点的选择, 在右上方实时查看所选择的服务器当前计算资源的使用情况. 同时客户端和服务端通信采用 SSH 协议, 用户在客户端输入远程主机的 IP 地址、端口号和服务器的 SSH 用户名、密码, 即可登录服务器, 查看状态. 客户端通过远程系统权限, 实现对求解器的调用. 任务提交后, 在右下方显示查看求解器的日志输出.

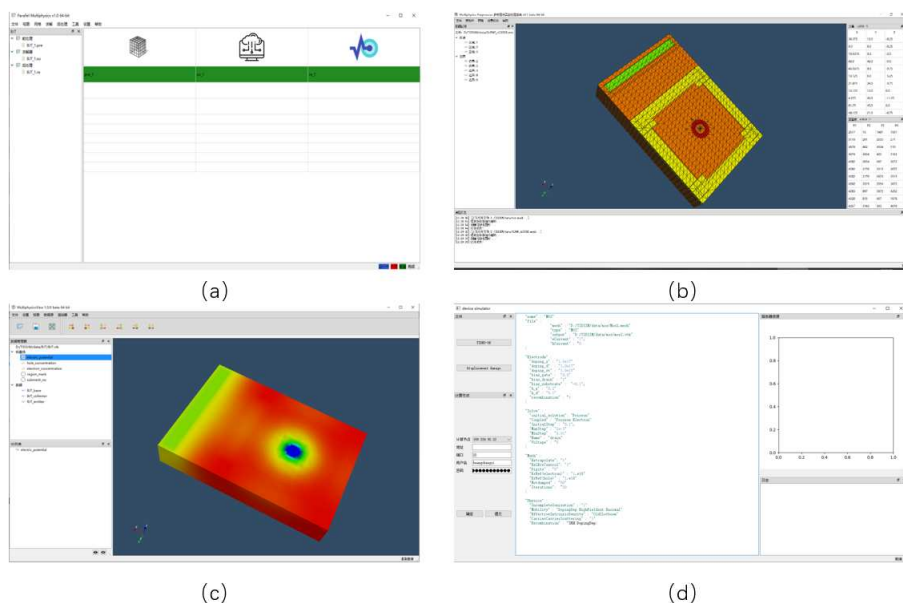


图 2 客户端软件主体用户操作界面设计

3. 功能模块

3.1. 前处理功能模块

整个软件平台的核心是对器件的模拟. 器件几何模型的准确性, 决定最终仿真结果的准确性. 前处理软件部分主要包含: 器件几何建模, 表面网格生成, 表面网格优化, 四面体网格生成, 网格质量分析和边界区域标记等子模块, 最终输出用于计算的网格.

3.1.1. 器件建模与网格生成

器件建模是半导体 TCAD 仿真的重要流程, 也是前处理模块的关键步骤. 对于典型的半导体器件, 我们建立了模板库. 用户可以直接调用模板, 并直接调整相关的几何尺寸参数, 即可生成对应的器件三维网格. 图 3(a)(b)(c) 分别为 MIS、PN 结以及 MOSFET 器件的模板和生成的三维网格.

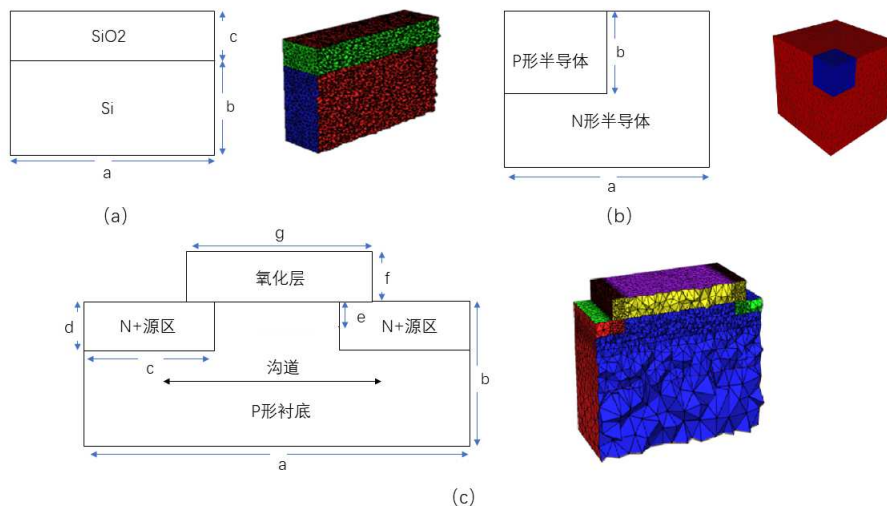


图 3 器件版图与对应网格

同时, 前处理软件也支持调用 TetGen^[17] 生成体网格. TetGen 是一个为三维多面体区域生成四面体网格的软件包, 它生成精确的约束 Delaunay 四面体、边界匹配 Delaunay 网格和 Voronoi 剖分. 软件也支持导入和使用商业软件 Sentaurus 建模生成的器件网格. 如图 4 为建模生成的双 MOSFET 背管网格.

晶体管的管间漏电是芯片辐照损伤研究中的一个重要领域. 而由于计算规模限制, 通用商业 TCAD 软件难以对多晶体管功能单元进行高精度三维模拟. 多管结构在前处理中, 比单管结构更为复杂, 直接整体生成高质量的三维网格, 是一个困难的技术问题. 我们针对多管结构的大规模网格生成需求, 采用了分治的思想, 实现了基于交界面约束的分块生成整体拼装的功能, 有效的解决了整体生成时的速度和精度问题. 主要流程如下:

- A. 确定多管结构的分段线性复合形 (PLC) 模型, 选出其中的管件间交界面, 并标记为约束

面. 生成约束面上的三角形网格, 并被约束面左右两侧的区域共享顶点和单元, 从而保证多管拼装时网格在交界面上是统一的. 如图 5 所示为多管结构 PLC 器件交界面处约束网格;

- B. 将多管结构整体空间, 拆分成多个单管子结构, 并保持网格表面 PLC 以及约束面三角网格顶点和单元信息. 针对每个子表面网格, 进行单管体网格生成流程, 在单管生成时, 固定约束面上的三角形不变, 从而得到多个单管子网格块;
- C. 将所有子网格按约束面进行对齐合并, 就完成了整个多管结构的网格生成工作.

算法关键点在于需要初试时生成一个粗网格. 在生成网格时添加 Steiner 点, 并通过限制 Steiner 点的数量和位置控制生成时的网格形态, 使得粗网格不破坏约束面上的三角形.

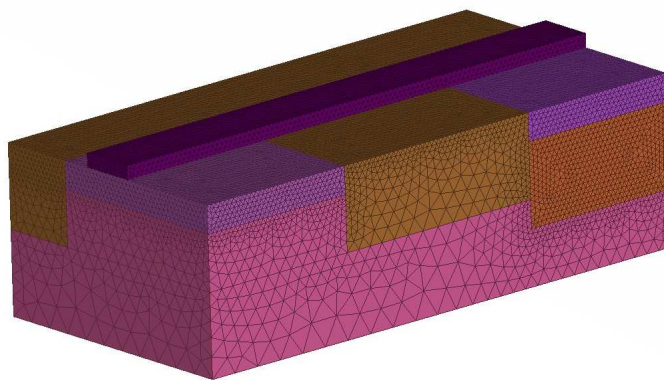


图 4 双 MOSFET 背管网格

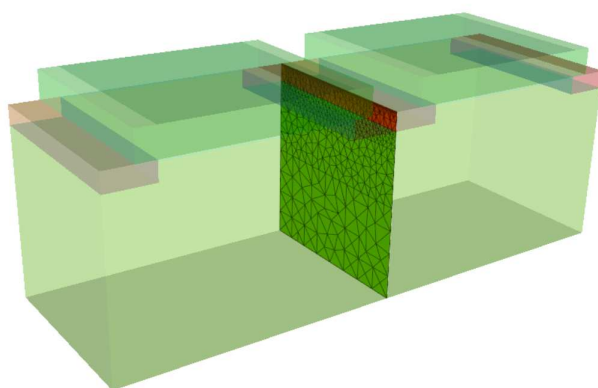


图 5 多管结构 PLC 器件交界面处约束网格

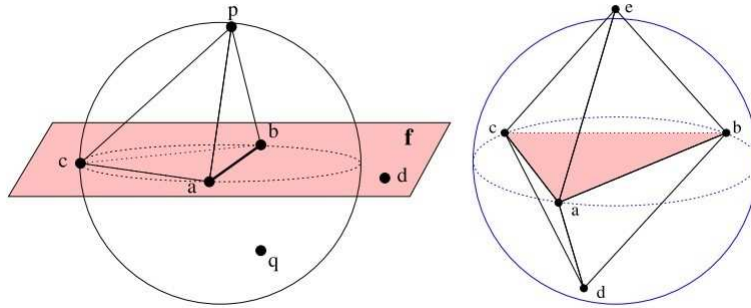


图 6 在约束面 f 上如果产生 Steiner 点 d 则重新优化产生面内部点 d ^[17]

如图 6 所示, 由于子网格同时存在约束面和非约束面, 在粗网格优化时, 需要不断的对需要添加的 Steiner 点集进行过滤, Steiner 点只允许存在于 PLC 内部或非约束面上. 约束面上的 Steiner 点不参与计算, 由此可以保证交界面上的约束三角形不动. 最后组装时通过约束面上的三角形进行匹配和去重, 拼装成完整的多管网格结构. 如图 7 所示为 4 个 MOSFET 管并排放置结构的生成的网格效果图.

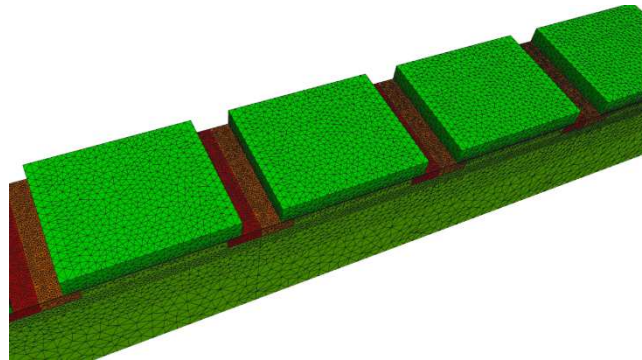


图 7 4 个 MOSFET 管并排放置形成的多管结构网格效果

3.1.2. 网格可视化

网格可视化模块采用的是国际通用的 VTK 格式. VTK 库中可视化的核心是多边形数据的可视化, 即所有的图形都仅由直线条组成的三角形、四边形和多边形组成. 除体绘制和图像绘制之外, 所有的可视化数据都必须转化为多边形数据的可视化. 多边形数据绘制能够被图形硬件绘制接口接受, 并且进行加速; 相比于体绘制速度快很多. 表面网格的可视化正好就是多边形的绘制, 所需要可视化的表面全部为三角形. 对于规模较大的网格, 该软件主要使用 vtkDecimate 所提供的多边形消减技术. 这项技术为 VTK 的专利技术, 它采用更好的三角化技术, 并且允许稍微改动图形的拓扑结构, 可以大规模削减网格数量. 在仅需要局部可视化信息时, 软件主要是使用 vtkQuadricClustering, 可以很好的处理网格碎片, 使得不需要一次将所有网格全部读入内存. 对于网格可视化中的表面平滑化, 软件使用 vtk 中为多边形提供的点

法向计算器, `vtkPolyDataNormal`. 它可以计算网格上每个点的法向, 这样对于法向接近的临近网格可以做表面平滑化处理.

前处理软件可以用不同的样式来渲染给定的网格, 如图 8(a)(b) 所示, 用户可以通过快捷键来在表面渲染和框架渲染之间切换. 同时也可以通过选择区域标记来获取一部分网格, 如图 8(c) 所示.

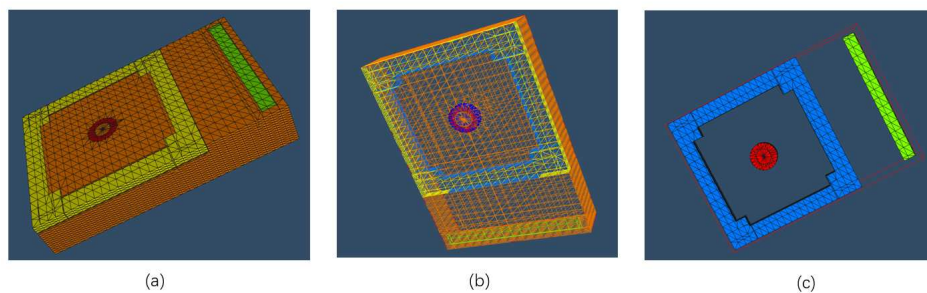


图 8 网格渲染形式

为了满足用户对于多种成分网格的可视化需求, 需要在剖面时, 沿着四面体的表面进行网格剥离, 从而暴露出中心区域的网格. 如图 9 中, 我们发现器件中心区域存在较为平坦致密的网格沟槽, 图 9(b) 显示了存在薄层的情况下, 产生的网格尺度递进时的网格质量的保持情况.

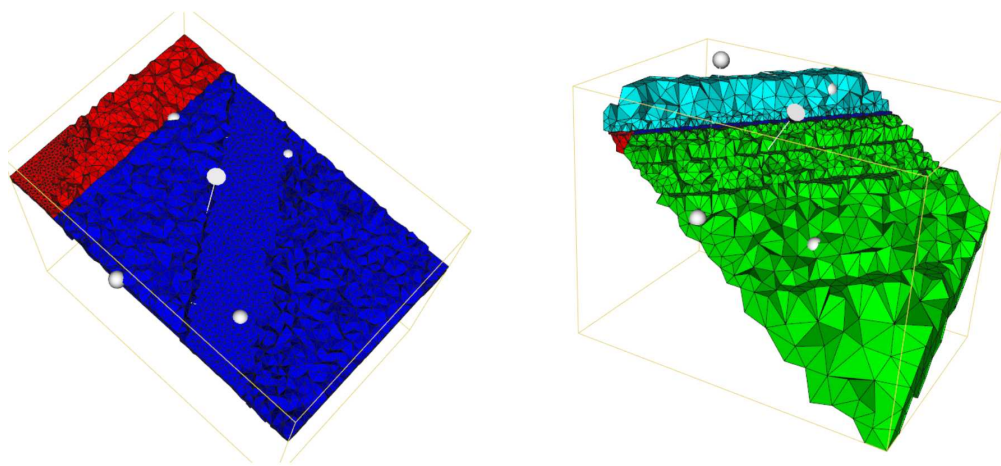


图 9 器件的不同组成部分会有不同的结构特点

3.1.3. 网格优化与质量分析

在前处理软件中有网格质量分析模块, 模块用于对已经建模并生成好的器件网格进行质量分析, 从而在进行求解器计算之前, 预估网格的质量情况. 模块会给出一定的指标和统计情

况图, 这些指标和图可以帮助用户判断网格质量、模型精度和求解时的条件数情况. 由于网格质量并没有唯一标准, 而由数值方法决定. 本软件从相关需求出发, 在充分研究网格细节特征的情况下, 设计了质量分析模块的衡量标准, 该标准主要针对四面体网格单元, 包含体积、边长、面角 (四面体的面三角形内的角度) 和二面角多种指标进行衡量^[18]. 在各种指标中: 体积量级差距用于可以了解网格从粗到细的跨尺度情况; 四面体内长短边比可以描述网格的尖角情况; 最小面角可以反应四面体单元的退化情况, 是否退化成平面. 二面角, 衡量四面体的倾斜度, 是否过于倾斜.

图 10 中列举了一些不希望在网格中出现的低质量四面体. 四面体 10(a) 和 10(b) 中存在一条或两条很短的边, 前面提到的几种质量度量都可以辨别出这种类型的四面体. 图 10(c) 和图 10(d) 中四面体的四个顶点几乎是共面的, 但是它们的最长边与最短边却有较好的比例. 细长的四面体 10(e) 具有大小适中的二面角, 如果只采用最小二面角作为质量度量将不能识别出这类四面体. 因此, 我们采取上述多种指标进行网格质量分析.

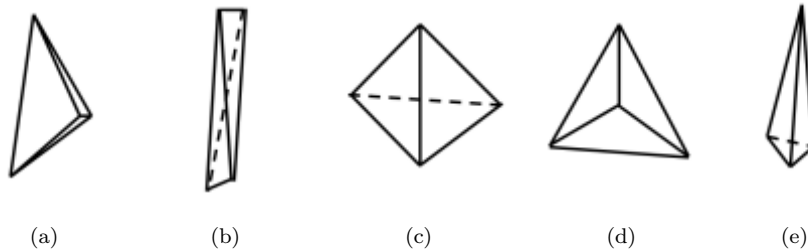


图 10 五种低质量的四面体

网格优化模块是为了构建出一致性更高的网格以供计算使用. 核心是构建出更好的三维约束 Delaunay 四面体. 该模块可以对网格进行光滑以消除网格剖分中局部扰动和噪声同时通过对角线交换、节点删除以及网格细化等操作对网格进行拓扑优化^[17, 19, 20].

3.2. 后处理功能模块

后处理用于将求解器所得的计算结果以图形图像的形式, 在计算机屏幕上展示给用户. 计算结果的正确显示、完整性和显示的效果的优劣直接影响用户的判断和体验. 所使用的可视化算法也就是对数据的结构、属性进行操作, 进而把原始数据信息转化为图形的过程.

3.2.1. 色彩映射

标量场绘制彩图, 需要将标量数据映射为 RGB 类型数据. 颜色映射器将每个数据映射为 RGB 值, 而空间颜色的配置不可能是无限多的. 所以采用等值区间填充法, 将值域映射为 256 色模式, 进行全空间颜色区间填充. 从而得到连续物理场的彩色图. 通过 VTK 渲染引擎, 完成标量场映射设置.

如图 11(a)(b)(c)(d) 分别为对 BJT 半导体器件模拟结果的电势、电子密度、空穴密度、器件材料进行三维绘制显示.

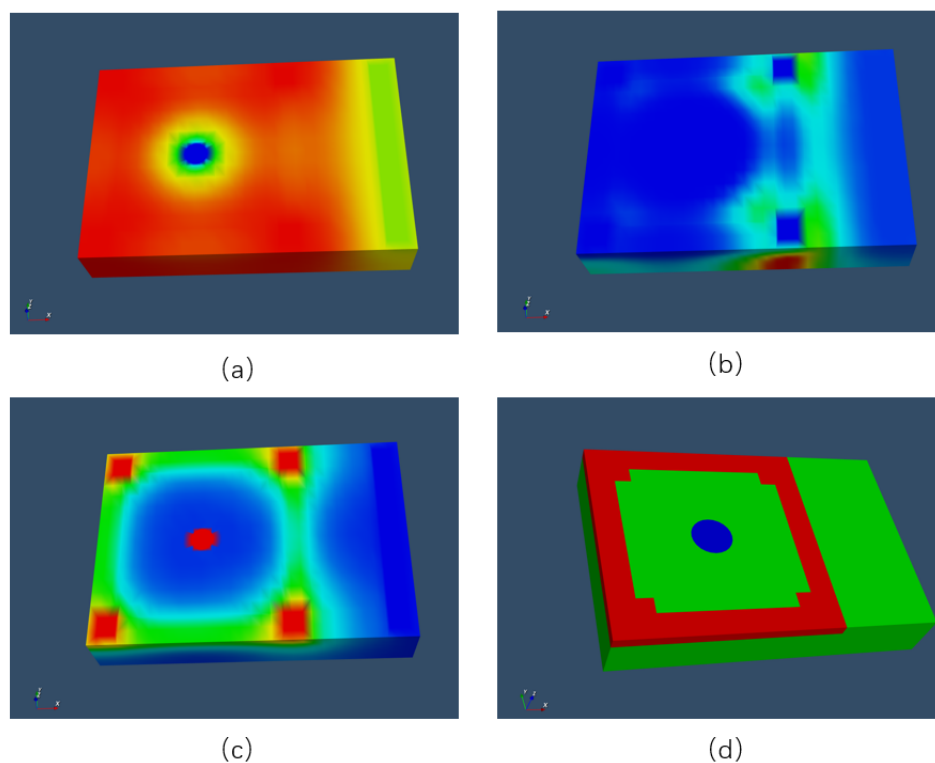


图 11 可视化分析模块对不同物理场的绘制

3.2.2. 数据采样

因为三维数据无法看到内部结构, 那么对三维体数据进行观测时最简单的方法就是采样. 本软件提供了两种采样规则: 面采样, 等值面采样, 可以让用户拖动操作杆, 实现对包括空间中的电势分布、空穴浓度分布、电子密度分布、质子密度分布、氢气密度分布, 以及十几种化学缺陷浓度的切片提取查看. 同时使用数据提取器提取直线空间上的数据.

i. 面采样

本软件所使用的提取数据为四面体网格, 截面和体网格只有两种可能: 当截面为三角形时, 插值获得三角片三个顶点值. 当截面为四边形时, 连接对角线形成两个三角片, 再进行插值. 这样, 截面最终会形成一个非结构化的平面.

ii. 等值面采样

等值面是另一种分析物理场的工具. 在做等值面时, 用户输入等值面数值, 我们对所有的网格扫描所有的边, 在边上进行插值确定等值面上的点. 这样生成的等值面上的所有节点是原网格边上的点, 而等值面上的单元就是这些点组成的三角形单元. 这样生成的等值面往往还需要进一步光滑处理以便显示更加美观. 如果在等值面两侧折棱上存在等值点, 进而利用等值点进行等值面重构. 除了对空间物理场分析之外, 对原始数据的分析也是重要功能, 软件提供了统计性工具, 可以分析原始数据中的空间数值.

iii. 数据提取器

数据提取器可以提取直线空间上的数据并绘图. 对于非物理场数据, 如某个电极的电压 -

电流曲线数据, 软件支持提取并绘制 I-V 曲线.

VTK 提供直线交互工具, `vtkLinewidget`, 当用户使用鼠标拖动控件时, 会触发回调函数返回两端点坐标, 在回调函数中读取坐标后传给功能模块, 并等待下一次回调函数的触发. 而数据提取器此时生成 `vtkLineSource` 并通过主逻辑模块要求读取内存并启动插值模块, 在这些完成后最终将插值数据结果返回做图.

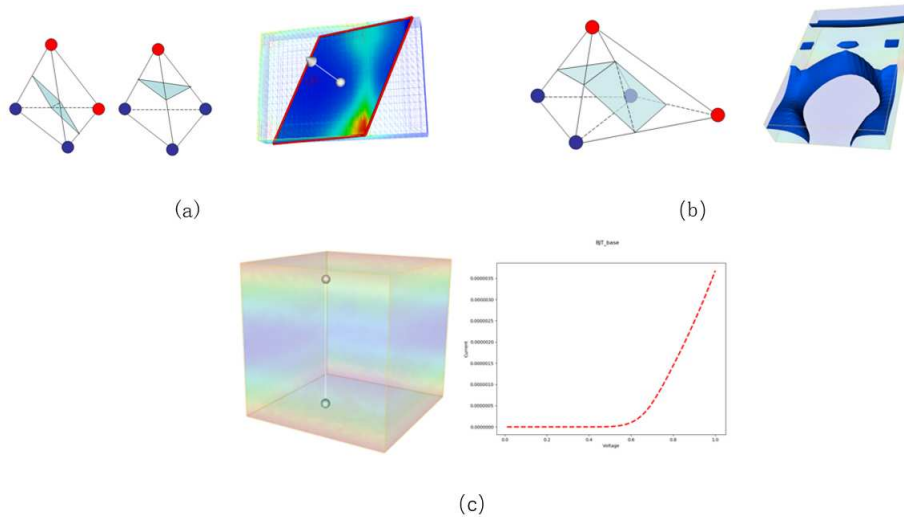


图 12 三种采样模式

如 12 所示为, 三种采样模式, 其中 (a) 图左右分别为截面的两种情况和截面的生成效果, (b) 图左右分别为等值面选点示意图和等值面效果图, (c) 图为对物理场数据进行直线探测并绘制曲线图.

3.2.3. 流场绘制

对于流的数据, 在每个节点上为一个三维向量, 首先需要用户选取一个种子节点, 然后通过这个节点做向前或者向后的积分, 来捕捉到相应的运动节点, 通过管道将这些点包裹, 并且管道的粗细和轨迹点的流场强度有关, 那么就会生成流的运动轨迹. 相邻的流线可以组成流面. 如图 13 所示为对电场线的显示.

3.2.4. 含时数据的显示

在进行物理数据分析时, 对于常规规模网格, 软件可以开启实时计算功能, 进行实时计算并渲染, 从而形成含时动画. 如图 14 所示为等值面变化含时动画截图, 展示了电势等值面变化的动态规律.

3.3. 求解器模块

本软件内置两套求解器和一个功能模块, 分别为求解通用半导体电学特性的 DevSim、求

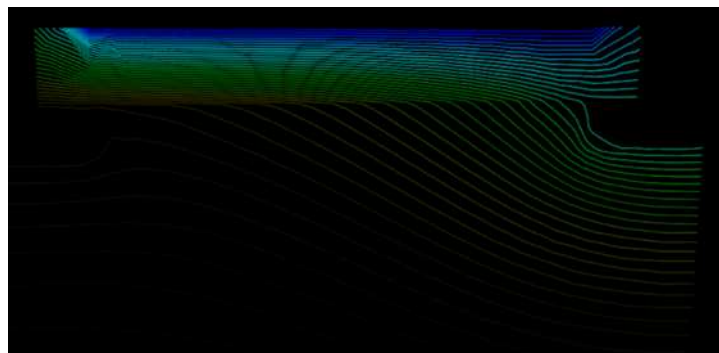


图 13 流场的绘制

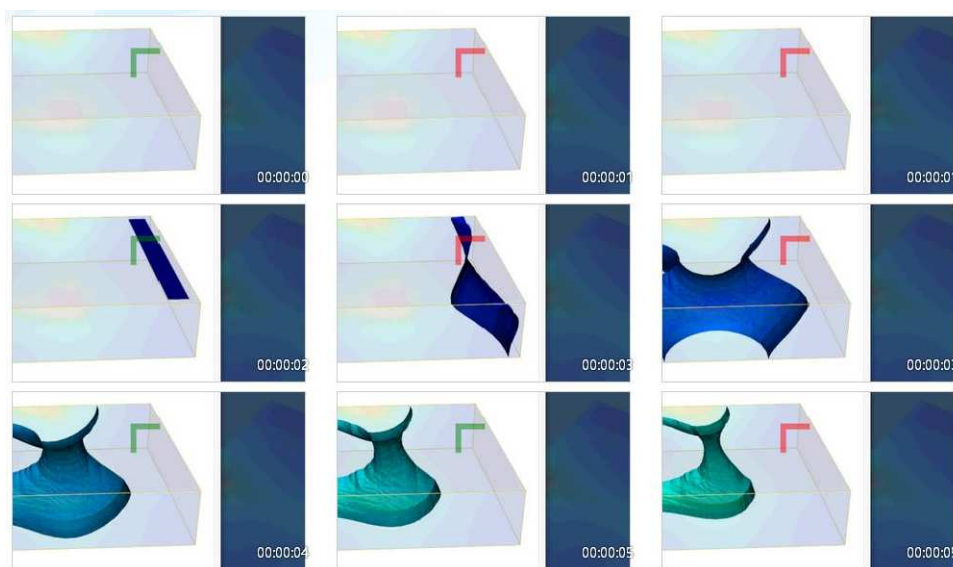


图 14 含时数据的动画显示

解半导体辐射损伤物理参量的 TIDSim 以及通过这两个求解器耦合调用实现典型器件受辐射电离损伤的相关电学响应仿真模拟的功能模块。

每个求解器基于 PHG^[1] 这一并行自适应有限元平台。该平台由科学与工程计算国家重点实验室研发。PHG 的核心是分布式的层次网格结构, 能处理三维四面体协调等网格类型。PHG 采用 C 语言开发, 通过面向对象的数据结构以及用户接口实现了并行网格剖分、动态负载均衡和网格局部自适应加密与放粗, 在隐藏并行细节的同时为并行自适应有限元程序的开发提供了足够的灵活性。

3.3.1. DevSim 的使用

DevSim 采用漂移扩散模型来刻画半导体器件中载流子的输运过程, 通过并行有限元方法来求解相应的方程组, 模拟器件中静电场与载流子的分布情况。对数值结果的进一步处理与分析有助于理解器件的各种电学特性, 同时可以检测数值模型的有效性, 并通过数值模型对可

能产生的现象进行预测.

数值模拟包括描述电场的 Poisson 方程:

$$-\nabla \cdot \epsilon \nabla \phi = e_c(c_{h^+} - c_{e^-} + ND^+ - NA^-), \phi \in \Omega_S,$$

其中 ND^+ 为施主杂质贡献一个电子后留在晶格上的带正电的离子浓度, NA^- 为受主杂质俘获电子后留在晶格上的带负电的离子浓度. 电子和空穴用连续性方程描述如下:

$$-\nabla \cdot J_n = R_n,$$

$$-\nabla \cdot J_p = R_p,$$

$$J_n = -D_n \nabla n - \mu_n n \left(-\nabla \phi - \frac{k_b T}{e_c} \nabla \log(n_{ie}) \right),$$

$$J_p = -D_p \nabla p + \mu_p p \left(-\nabla \phi + \frac{k_b T}{e_c} \nabla \log(n_{ie}) \right),$$

其中 n_{ie} 为本征载流子浓度 D_n 、 D_p 分别表示电子和空穴在 Si 介质中的扩散系数, μ_n 、 μ_p 分别表示电子和空穴在 Si 介质中的迁移率, R_n 和 R_p 分别为电子和空穴的复合产生项. 具体算法和数值结果可参考本刊的另一篇文章 [21].

使用该求解器时, 用户需要从外部给定由前处理建模产生的四面体单元网格文件 (.mesh); 存有半导体器件计算中各种边界条件的边界标记文件 (.bc) 和含有载流子迁移率, 复合寿命等物理信息的粒子信息文件 (.ions). 这里我们给出一组我们所使用的运行脚本文件:

```
mpirun -np 32 ./DevSim \
-solve_option zlamal \
-mesh_file Device_mesh/PN.mesh \
-ions_file Device_mesh/PN.ions
-device 0 \
-doping_pregion 1.0e19 \
-doping_nregion 1.0e15 \
-bias_anode 1 \
-h 0.05
```

其中 `mpirun -np 32 ./DevSim` 表示采用 32 个进程进行并行运行 DevSim;
`-solve_option` 表示采用 zlamal 有限元方法来进行空间离散求解漂移扩散模型;
`-mesh_file`, `ions_file` 分别表示配置文件对应的路径;
`-device` 表示所选取典型器件类型, 其中 0 对应 PN, 1 对应双极器件 NPN, 2 对应双极器件 PNP, 3 对应场效应器件 MOSFET;
`-doping_pregion` 表示 P 型区域的掺杂情况, 这里采用的是 $1.0e19/cm^3$;
`-doping_nregion` 表示 N 型区域的掺杂情况, 这里采用的是 $1.0e15/cm^3$;
`-bias_anode 1` 表示 bias 上的升压截止电压, 其中 anode 指 PN 节的阳极, 如果是 MOS 器件漏区, 对应的电极则为 bias_source, 其中 1 代表升压截止为 1V
`-h 0.05` 表示 bias 上的升压步长, 这里采用的是 0.05V 为一步.

该求解器的流程图, 如图 15(a) 所示.

3.3.2. TIDSim 的使用

TIDSim 的设计初衷是为了对器件的由于 γ 辐照所产生的总剂量效应 (TID) 进行建模与模拟. 它通过含时的漂移扩散反应模型^[22] 来刻画半导体氧化层内部受电离损伤效应的影响, 并通过并行有限元等数值方法来计算相应的方程组预测其电学特性的改变.

数值模拟包括描述电场的 Poisson 方程:

$$-\nabla \cdot \epsilon \nabla \phi = e_c \sum_i z_i c_i + e_c \sum_j z_j V_j$$

我们采用无量纲化的电势 $u = e_c \beta \phi$, 其中 β 表示 $\frac{1}{k_B T}$, $\lambda = e_c^2 \beta$ 表示带电量, z_i 为第 i 种可移动粒子所带的单位电荷数, z_j 为第 j 种固定缺陷所带的单位电荷数, e_c 是单位电荷带电量, c_i 为模型中的可移动粒子, V_j 为该模型中的不可移动的氧化层缺陷.

漂移扩散方程为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i}{\partial t} &= -\nabla \cdot J_i + F_{c_i}(c, V) \\ J_i &= - \left[D_i \nabla c_i + \frac{D_i z_i e_c}{k_B T} c_i (\nabla \phi) \right] \end{aligned}$$

描述氧化层内缺陷 V_j 的常微分方程为:

$$\frac{dV_j}{dt} = F_{V_j}$$

F_{V_j} 为第 j 种缺陷 V_j 的反应速率函数, 与粒子/缺陷的浓度有关. 其具体模型描述和算法可详见本刊的另一篇文章^[23].

使用该求解器时, 用户需要从外部给定由前处理建模产生的四面体单元网格文件 (.mesh); 含有电势欧姆接触、载流子边界条件和扩散系数等有关信息的粒子离子信息文件 (.bc, .ions 和 .cons); 存有在进行半导体损伤模拟时, 模型中所包含的反应类型, 正逆向参数的缺陷动力学反应方程系数文件 (.rhs) 和提高并行效率和计算精度的矩阵解法器选项文件 (.options). 这里我们给出一组我们所使用的运行脚本文件:

```
mpirun -np 32 ./TIDSim \
  -dof_type P2 \
  -fn_bc TIDES_mesh/TIDSim.bc \
  -fn_ions TIDES_mesh/TIDSim.ions \
  -fn_mesh TIDES_mesh/TIDSim.mesh \
  -fn_init TIDES_mesh/TIDSim.cons \
  -options_file advanced.options \
  -Time_type 1 \
  -stop_t 1.0e6 \
  -delta_t 1.0e3 \
  -dose_rate 0.1
```

其中 `mpirun -np 32 ./TIDSim` 表示采用 32 个进程进行并行运行 TIDSim;

`-dof_type P2` 表示采用自由度类型为 Lagrange 二阶元进行空间离散;

`fn_bc`, `fn_ions`, `fn_mesh`, `fn_init`, `fn_rhs` 分别对应配置文件中的边界文件, 粒子电荷和扩散系数信息, 网格文件, 粒子初始量和化学反应系数等读取路径;

-options_file 对应配置文件的矩阵解法器选项, 具体可参考 PHG 平台的使用手册^[24]。
 -Time_type 表示对应的时间方法: 1 表示采用 Backward_Euler 方法, 2 表示采用时间多尺度方法, 3 表示指数时间差分方法, 4 表示采用 Crank_Nicolson 方法;
 -stop_t 用于表示含时系统模拟总时间, 这里给出的是 10^6 s;
 -delta_t 确定离散后时间步长, 这里给出的是 10^3 s;
 -dose_rate 给定辐射剂量率, 这里我们采用的是 0.1(rad/s)
 该求解器的流程图, 如图 15(b) 所示。

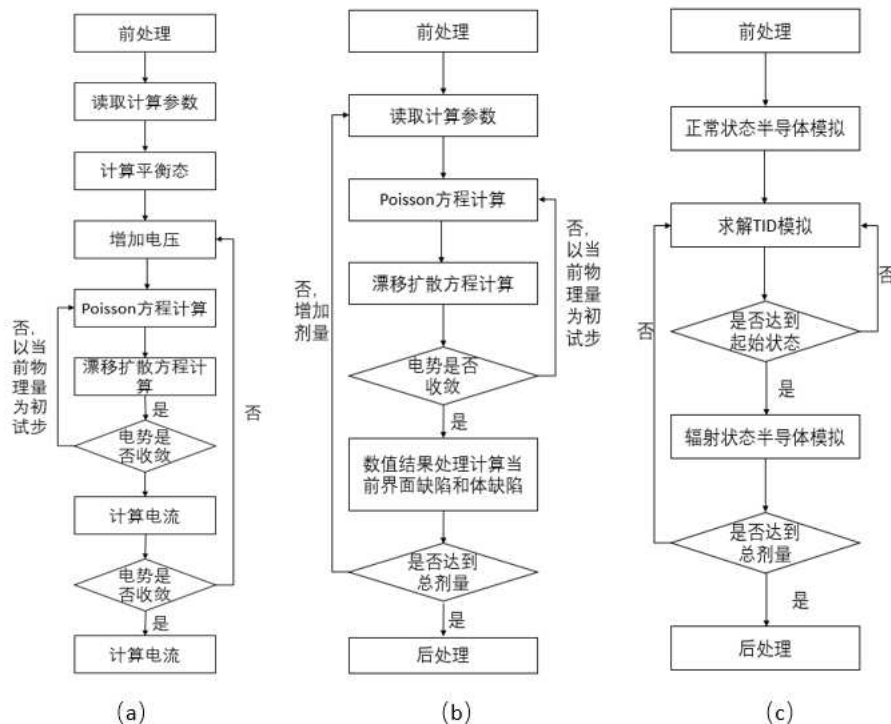


图 15 (a) DevSim 求解流程图, (b) TIDSim 求解流程图, (c) 辐照损伤与器件的耦合求解流程图

3.3.3. 辐照损伤与器件的耦合求解

电离损伤效应对应于半导体器件的最终影响还要反映在其电学响应上. 我们在上述两种求解器模块的基础上进行耦合从而模拟辐照电离损伤引起的器件电学响应。

该求解器为 TIDSim 和 DevSim 的耦合, 在使用 TIDSim 求解器进行辐照电离损伤模拟之后, 将辐射所得的重要物理参量, 如氧化物内带电缺陷密度 (N_{ot}) 和界面缺陷密度 (N_{it}) 等通过参数文件和后处理可视化所需文件传递给 DevSim 求解器, 进行辐照电离损伤引起的器件电学响应的模拟, 具体的模型设置和数值结果可参考 TIDSim 求解器的文章^[23]. 这里我们只给出该解法器的使用说明。

用户只需在 DevSim 的运行参数中加入命令 `-tid-radiation 1` 来开启辐射模块对应的电离损伤模型或使用如下命令来开启辐射模块的位移损伤模型以及加载对应的物理量参数:


```
-dis-radiation 1
-displacement_TAUN 1e-10
-displacement_TAUP 1e-7
```

其中:

-displacement_TAUN 1e-10 表示位移损伤的电子复合寿命为 $10^{-10}s$.

-displacement_TAUP 1e-7 表示位移损伤的空穴复合寿命为 $10^{-7}s$.

这里我们给出这种耦合求解的流程图, 如图 15(c) 所示:

4. 总结与讨论

本文介绍了基于我们在建的 ASIM 仿真软件平台, 开发的一款半导体器件及其辐照损伤效应的应用仿真软件系统 3Ddevice. 采用 C/S 架构, 适用于复杂三维器件结构设计、DD 模型模拟和一般多组分多尺度多物理辐照损伤模型模拟的高效大规模并行模拟仿真.

目前, 3Ddevice 仅支持一些数据格式并仅处理线性元素的可视化. 我们将扩展功能, 以支持更多数据格式, 如 XML 和 DX, 以及其他网格类型, 如常规网格 (有限差分)、六边形网格和高阶元素 (如二次元素). 矢量场可视化、其他算法和模型/功能的求解 (如半导体位移/协同损伤效应的模拟)、数据分析工具以及前处理模块的 CAD 模板库将在未来版本中得到丰富. 另外, 由于本仿真软件系统目前只是一个初级版本, 将会持续更新, 它的详细使用方法请参照并以将公布的软件使用说明书为准, 本文中的例子仅作为当前软件状态的举例说明, 附录中给出更多的参考说明.

5. 附录使用示例

5.1. 支持的数据格式类型

i. 前处理软件

前处理软件主要支持两类格式的网格文件的导入, .mesh 文件和 Sentaurus 建模生成的 .tdr 文件. PHG 接受的 .mesh 文件的格式如图 16 所示, 其中主要是存有三类数据: 点数据、四面体和三角形. 点是直接存储着点的坐标值, 四面体和三角形为对应的顶点的索引号.

ii. 后处理软件

后处理支持打开和查看以 .vtk 格式保存的可视化信息. .vtk 文件主要存有两类几何拓扑结构和物理量. 几何拓扑结构和 .mesh 的存储类似, 存储着点的坐标, 单元以索引的形式存储. 物理量部分为节点和单元上的值, 物理量可以是标量、向量或张量. 具体详情可以查看 VTK 手册^[15].

iii. 总控

总控软件使用 pro 文件控制整个仿真项目, pro 文件主要是由 6 部分组成.

- name 部分代表着项目名字.
- File 部分用于编写输入输出相关信息, 其中 mesh 部分用于表示前处理部件读入的网格所在本机保存的位置; type 代表着这个网格所代表的器件类型; output 部分用于在求解器提交过任务计算完成后, 用于保存 VTK 文件的本地路径. 这部分也用于作为后处理部件所打开的文件路径. 跟器件相关的 2D 画图命令也在 File 文件部分指定.

```

MeshVersionFormatted 1
Dimension 3
Vertices      number_vertices
x y z 0
.....

Tetrahedra   number_tetrahedra
Point1 Point2 Point3 Point4 label
.....

Triangles     number_triangles
Point1 Point2 Point3 label
.....

```

图 16 前处理所支持的 mesh 数据格式

- Electrode 用于编辑定义电 (或热) 接触, 初始偏压条件, 特殊边界条件等相关信息.
- Physics 主要是用于指定仿真所使用的物理模型. 用于指定某些器件的迁移率模型, 载流子复合模型等. 物理部分可设置为材料、区域、材料界面和区域界面.
- Math 进行有限元方法求解时, 求解方法的选择与设定.
- Model 用于建立仿真求解时的输运模型.

5.2. 前处理软件使用样例

在点击打开或导入外部文件后, 或者从模板库生成对应的网格后, 如图 17, 网格会在软件的中心区域进行显示.

之后可以通过质量分析模块查看网格质量. 如从 Sentaurus 创建一个 MOSFET 器件网格, 由于 Sentaurus 与本软件所使用的求解器原理不同, 其所生成的网格对于本软件来说可能是一个低质量网格. 利用质量分析模块, 如图 18, 其在长短边比中, 超过 20 倍差距的四面体单元占了超过 50%, 面角小于 15 度的网格也超过 15%, 二面角小于 5 度的网格也大量存在, 最大长短边比为 497 倍, 最小面角 0.1 度, 最小二面角 0.1 度. 由此可知, 奇异性网格占比很高, 无法进行有限元计算, 需要进行优化.

如图 19 经过优化模块确定优化区域后, 进行网格优化重划分后得到新的四面体网格模型. 在优化完的四面体网格中, 保持了原网格的形状不变, 并消除了原网格中的狭长、扁平单元, 从而得到了一致性更高的网格.

通过质量分析可以看到, 如图 20, 统计图中长短边比例控制在了 10 倍以内, 大比例奇异性部分被消除, 20 度以内的面内角和 10 度以内的二面角基本被消除, 奇异性网格占比低于 3%, 并且极端网格单元情况被改善, 最大长短边比例为 15 倍, 最小面内角为 22 度, 最小二面角为 7 度. 优化后的网格, 可由求解器最终完成计算.

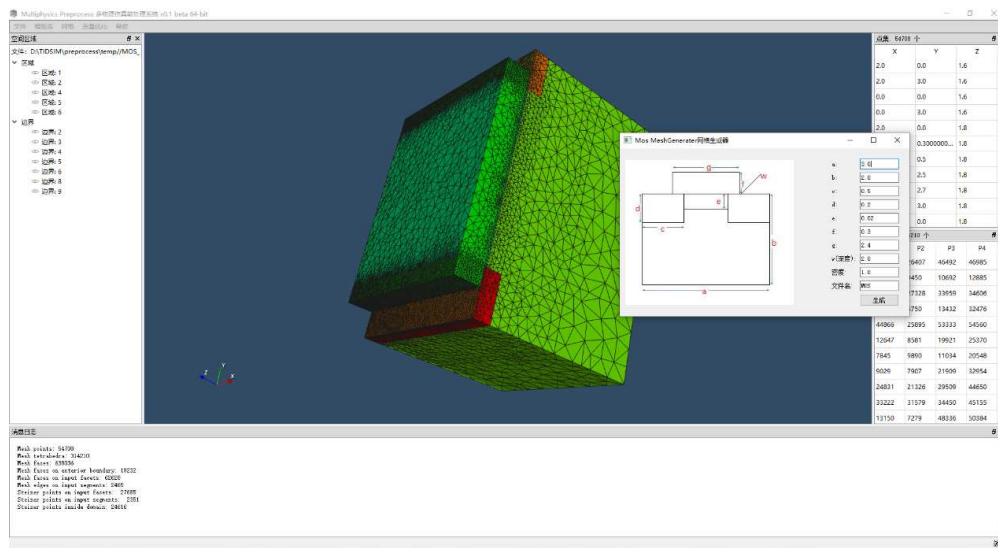


图 17 从模板库生成网格



图 18 优化前的网格质量分析

5.3. 后处理

如图 21 所示, 在后处理软件中, 导入 vtk 文件之后, 在软件左上区域用右键可以选择“创建 3D 模型”, 软件后台根据物理场数据生成三维几何结构, 同时通过计算颜色映射函数, 绘制物体彩色形式, 渲染完毕后, 模型数据存放于 3D 列表中, 用户可对 3D 列表中的对象施加相关操作. 相关操作的交互页面均以弹窗的形式弹出.

5.4. 总控, 通信与参数引导模块

在总控中导入 pro 文件后, 文件树和中部节点区域会进行相关更新. 对于总控的中部工

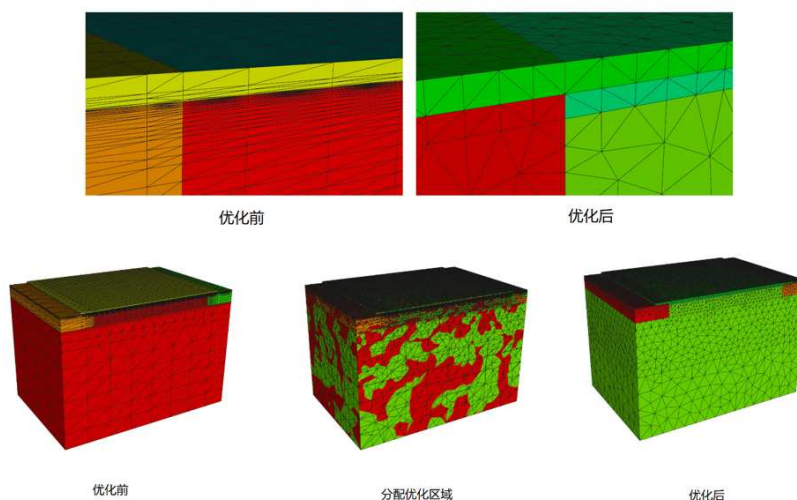


图 19 优化前后网格对比

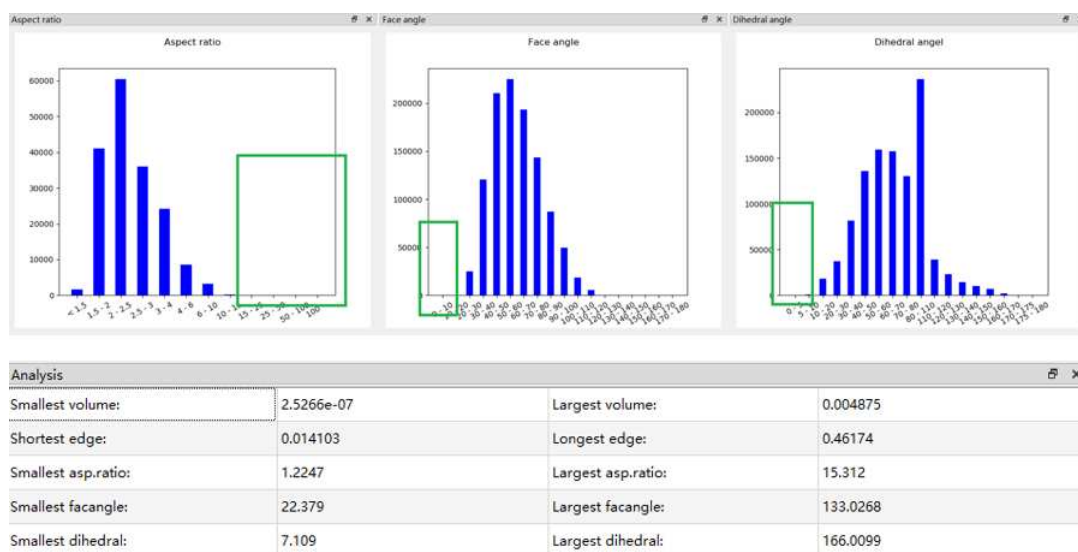


图 20 优化后的网格质量分析

具区, 可以点击图标直接调用其他仿真模块, 以这种方式调用的仿真为一个空白状态的仿真状态, 需要单独加载所需要的配置文件. 从下方状态节点区域调用, 可以查看相关当前状态下的前处理、后处理部件软件运行结果. 也可以从该节点对相关状态有关参数进行配置.

通信与参数引导模块中参数配置区域所填写的内容与总控所用的 pro 文件相同, 对于求解器参数部分, 可以直接在该区域编辑修改, 也可以通过选项卡的形式直接填入. 从左下角选定计算服务器后, 在右上角查看相关服务器状态. 任务提交后, 在右下方显示求解器的日志输出.

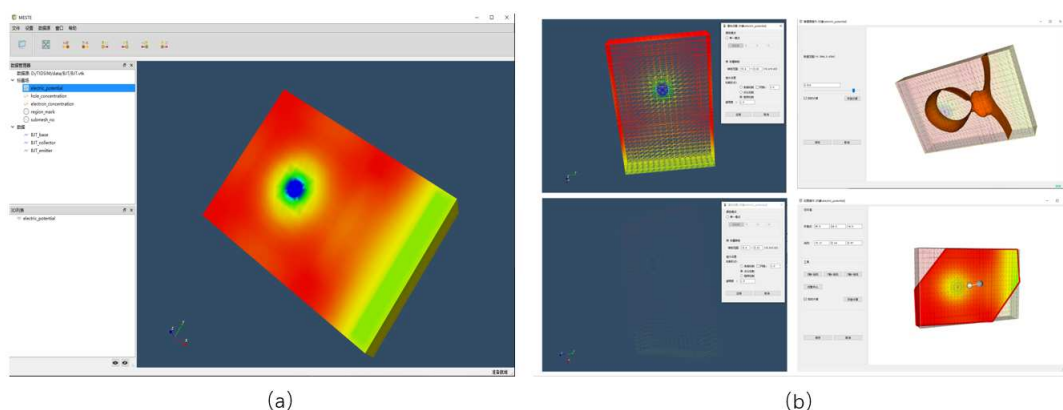


图 21 (a) 整体后处理页面, (b) 操作页面

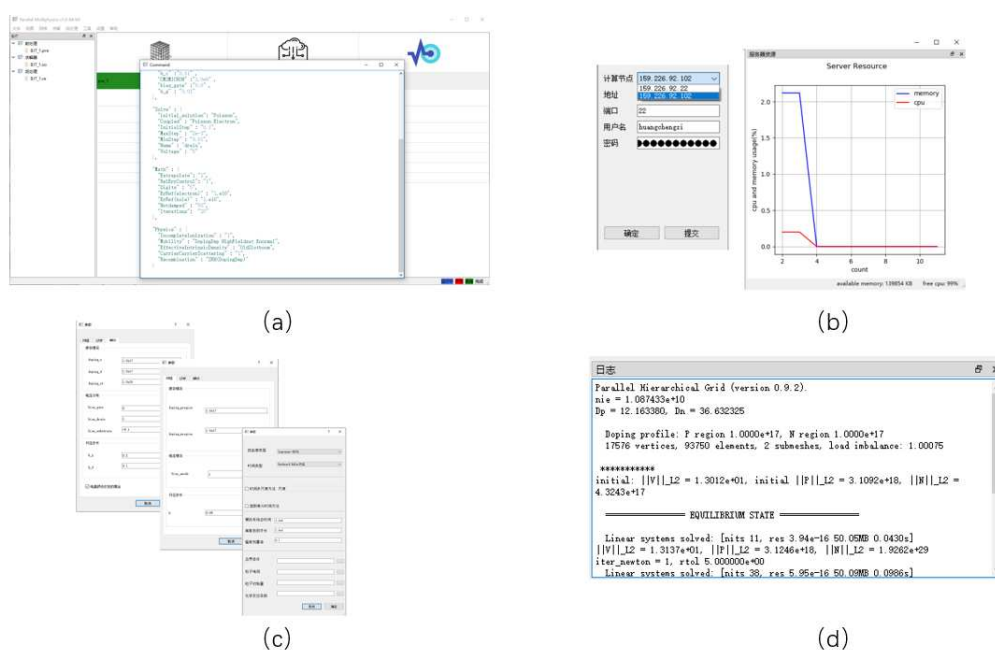


图 22 (a) 修改相关节点状态, (b) 计算资源查看, (c) 选项卡输入参数, (d) 日志输出

参 考 文 献

- [1] Zhang L. A Parallel Algorithm for Adaptive Local Refinement of Tetrahedral Meshes Using Bisection[J]. Numerical Mathematics-Theory Methods and Applications, Feb 2009, 2(1): 65-89.
- [2] Buturla E, Cottrell P, Grossman B, Salsburg K, Lawlor M, McMullen C. Three-dimensional finite element simulation of semiconductor devices[C]. In 1980 IEEE International Solid-State Circuits Conference. Digest of Technical Papers, volume 23, pages 76-77. IEEE, 1980.
- [3] Shigyo N, Dang R. Analysis of an anomalous subthreshold current in a fully recessed oxide MOS-FET using a three-dimensional device simulator[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1985,

- 32(2): 441–445.
- [4] Toyabe T, Masuda H, Aoki Y, Shukuri H, Hagiwara T. Three-dimensional device simulator Cad-deth with highly convergent matrix solution algorithms[J]. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1985, 32(10): 2038–2044.
- [5] Thurner M, Selberherr S. The extension of MINIMOS to a three dimensional simulation program[C]. In [1987] NASECODE V: Proceedings of the Fifth International Conference on the Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits, pages 327–332. IEEE, 1987.
- [6] Chern J, Maeda J T, Arledge L A, Yang P. SIERRA: a 3-D device simulator for reliability modeling[J]. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 1989, 8(5): 516–527.
- [7] <http://www.synopsys.com/Tools/TCAD/DeviceSimulation/Pages/SentaurusDevice.aspx>. Accessed March 10, 2020.
- [8] <http://www.silvaco.com/products/DeviceSimulation/atlas.html>. Accessed March 10, 2020.
- [9] Wu K C, Chin G R, Dutton R W. A STRIDE towards practical 3-D device simulation-numerical and visualization considerations[J]. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 1991, 10(9): 1132–1140.
- [10] <http://cn.comsol.com/products>. Accessed March 10, 2020.
- [11] Rowsey N L. Quantitative modeling of total ionizing dose reliability effects in device silicon dioxide layers[M]. University of Florida, 2012.
- [12] Rowsey N L, Law M E, Schrimpf R D, Fleetwood D M, Tuttle B R, Pantelides S T. A Quantitative Model for ELDRS and H₂ Degradation Effects in Irradiated Oxides Based on First Principles Calculations[J]. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2011, 58(6): 2937–2944.
- [13] <https://www.qt.io/>. Accessed March 10, 2020.
- [14] <http://www.lag.net/paramiko/>. Accessed March 10, 2020.
- [15] Schroeder W J, Lorensen B, Martin K. The visualization toolkit: an object-oriented approach to 3D graphics[M]. Kitware, 2004.
- [16] Hunter J D. Matplotlib: A 2D Graphics Environment[J]. *Computing in Science and Engineering*, 2007, 9(3): 90–95.
- [17] Si H. TetGen, a Delaunay-Based Quality Tetrahedral Mesh Generator[J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 2015, 41(2): 11.1–11.36.
- [18] Chew L P. Guaranteed-quality triangular meshes[R]. Technical report, Cornell University, 1989.
- [19] Liu T, Chen M, Lu B. Efficient and Qualified Mesh Generation for Gaussian Molecular Surface Using Adaptive Partition and Piecewise Polynomial Approximation[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2018, 40(2): B507–B527.
- [20] Liu T, Chen M, Song Y, Li H, Lu B. Quality improvement of surface triangular mesh using a modified Laplacian smoothing approach avoiding intersection[J]. *PLOS ONE*, 2017, 12(9): e0184206.
- [21] 王芹, 马召灿, 白石阳, 张林波, 李鸿亮, 卢本卓. 三维半导体器件漂移扩散模型的并行有限元方法研究 [J]. *数值计算与计算机应用*, 2020, 41 (2): 85–104.
- [22] 许竞劫, 谢妍, 卢本卓. 一个基于 PHG 平台的并行有限元生物分子模拟解法器 [J]. *数值计算与计算机应用*, 2016, 37(1): 67–82.
- [23] 马召灿, 许竞劫, 李鸿亮, 卢本卓. 半导体器件辐照损伤效应模拟的数值算法及应用 [J]. *数值计算与计算机应用*, 2020, 41(2): 105–120.
- [24] <http://lsec.cc.ac.cn/phg/download/manual.pdf>. Accessed March 10, 2020.