

Г.А. Тарнавский, доктор физико-математических наук

Дистанционное обучение: тренинг-комплекс третьего уровня раздела «Виртуальное проектирование наносистем» интернет-центра компьютерного моделирования

Приводится описание сегмента «Компьютерные вычисления-3» раздела «Кремниевая электроника. Виртуальное проектирование наносистем» Центра компьютерного моделирования SciShop.ru. Этот сегмент предназначен для третьего уровня обучения и практического тренинга компьютерного конструирования наноматериалов для электроники.

***Ключевые слова:** дистанционное обучение, виртуальный тренинг, удаленный доступ, компьютерное моделирование, нанотехнологии и наноматериалы.*

Настоящая работа продолжает цикл лекций, в которых излагается теоретический материал и проводится практический тренинг по компьютерному моделированию ряда электрофизических, термохимических и механических процессов, применяющихся в современных технологиях производства наноструктурированных полупроводниковых материалов для кремниевой электроники. Курс лекций предназначен для дистанционного обучения молодых специалистов, аспирантов и студентов технических вузов.

В первой лекции цикла [1, с. 47–60] приводится общее описание Центра компьютерного моделирования SciShop.ru, созданного для решения научных и инженерных задач в режиме удаленного доступа по сети интернет.

Во второй лекции [2, с. 108–118] анализируется раздел «Виртуальное проектирование наносистем», входящих в состав Центра.

В третьей лекции [3, с. 92–104] приводится описание тренинг-комплекса первого уровня сложности. На этом уровне проводится изучение компьютерных программ моделирования отдельных технологических процессов производства наноструктурированных материалов. Рассматриваются процессы маскирования, имплантации, эпитаксии, травления и оксидирования кремниевой подложки.

В четвертой лекции [4, с. 21–37] изучается применение программных сегментов, обеспечивающих моделирование уже не одиночных технологических операций, а целых групп. Эти группы операций (подробнее см. [5, с. 11–66]) используются для формирования в кремниевой подложке специальных наноструктур,

составляющих элементы больших, сверхбольших и ультрабольших интегральных схем микропроцессоров, сенсоров и других электронных устройств с функционально ориентированными электрофизическими свойствами.

В представляемой пятой лекции приводится описание программ формирования в наноматериале электротехнических сегментов (наноконденсаторов, нанорезисторов и нанотранзисторов трех различных конструкций).

Подчеркнем, что компьютерное моделирование организовано на базе современного направления в информатике – направления Cloud Computing («Облачные вычисления»). Сущность этого направления заключается в том, что пользователю программных комплексов нет необходимости их покупать, устанавливать на собственном компьютере и самостоятельно поддерживать их функционирование, что всегда сопряжено с большими сложностями и затратами времени. Программные комплексы развернуты на серверах интернета и их администрирование проводится самими разработчиками (подробнее об облачных вычислениях см. [6, с. 11–15]). Таким образом, пользователю необходимо через свой браузер ввести конкретные данные в уже готовые сценарии задачи и отправить задачу на счет нажатием некоторой клавиши – гиперссылке в этом задании. Для решения задачи будут использованы вычислительные мощности разработчиков, и потребитель получит решение «на дом» (на свой браузер). Облачные технологии SaaS (Software as a Service, Программное обеспечение как услуга) и DFC (Data Files Cruise, Круиз файлов данных) резко снижают требование к ресурсам потребителя – вместо мощного персонального компьютера, или даже рабочей станции, клиент может использовать планшетник или другие мобильные гаджеты.

Вследствие сложности представляемого материала в настоящей статье содержатся некоторые повторы материалов прошлых лекций. Это позволяет обеспечить целостность излагаемого материала и повысить эффективность его восприятия, без необходимости чтения других работ.

1. Доступ к тренинг-комплексу и его сегментам. Представляемый тренинг-комплекс «Виртуальное проектирование наносистем» третьего уровня сложности находится в свободном (в настоящее время) доступе на сайте Центра компьютерного моделирования. Этот комплекс размещен в подразделе «Компьютерные вычисления-3» раздела «Нано» Web-портала SciShop.ru. Посетитель, зайдя на этот сайт, с Главной страницы (рис. 1) должен перейти в раздел «Центр-1» по соответствующей гиперссылке. Далее, попав на его корневую страницу, посетитель должен выбрать один из размещенных в «Центре-1» программных комплексов УДАР, ПОТОК, АСТРА и НАНО. В данном случае следует использовать для дальнейшего перехода гиперссылку НАНО. После этого посетитель попадает на базовую страницу «Кремниевая электроника», содержащую различные сегменты информационно-вычислительного комплекса NanoMod (рис. 2).

На базовой странице находятся переходы на четыре раздела: «Научные публикации», «Компьютерные вычисления-1», «Компьютерные вычисления-2» и «Компьютерные вычисления-3».

В раздел «Научные публикации» включены основные статьи авторов комплекса по данной тематике. Также предоставляется возможность доступа к статьям других авторов. Для этого на корневой странице раздела «Центр-1» имеется шлюз для выхода на сайты ведущих российских и зарубежных журналов по тематике «Нанотехнологии в электронике».

2. Функциональное назначение и структура раздела. Раздел «Компьютерные вычисления-3» является тренинг-комплексом третьего уровня обучения. Предполагается, что читатель уже прошел тренинг в разделе «Компьютерные вычисления-1» первого уровня обучения и имеет опыт использования программ-решателей MASK (**m**asking, маскирование), IMPL (**i**mplantation, имплантация), EPIT (**e**pitaxу, эпитаксия), ETCH (**e**tching, травление) и OXID (**o**xidation, оксидирование), моделирующие отдельные электрохимические процессы в наноиндустрии:

- маскирование участков поверхности кремниевой пластины для защиты от электрофизических и термохимических воздействий;
- имплантация в кремний донорных и акцепторных легирующих примесей;
- эпитаксиальное наращивание слоя одного материала на поверхность другого;
- травление материалов различных типов для создания требуемого нанорельефа поверхности;
- оксидирование поверхности кремния для создания оксидных пленок требуемой толщины.

Первый уровень обучения компьютерному моделированию наиболее эффективен именно при «изолированной» форме использования решателей, поскольку дает возможность изучения влияния основных определяющих факторов на финальный результат моделирования.

Кроме этого, желательно, чтобы читатель прошел тренинг также и в разделе «Компьютерные вычисления-2». На этом, втором уровне сложности проводится обучение компьютерному моделированию технологических операций, включающих в себя несколько электрохимических процессов. В данном разделе проводится моделирование пяти сегментов технологических операций, входящих в производственный цикл разработки наноструктур, являющихся ключевыми в процессе сухой или иммерсионной литографии:

- оксидирование части поверхности кремниевой пластины, легированной донорными и акцепторными примесями (сегмент-1);
- травление пластины и организация защиты на участках нанорельефа поверхности масками различных типов и дислокаций (сегмент-2);
- имплантация легирующих примесей в горизонтальные и вертикальные участки нанорельефа поверхности подложки после травления (сегмент-3);
- эпитаксия кремния на непланарную поверхность подложки с маскированными участками (сегмент-4);
- оксидирование непланарной поверхности пластины с наличием траншеи и защитной маски (сегмент-5).

Третий уровень сложности, представляемый в данной статье, предназначен для изучения раздела «Компьютерные вычисления-3», ориентированного на поддержку проектирования ряда конкретных гетероструктур в кремнии, которые являются специализированными электрическими элементами больших, сверхбольших и ультрабольших (БИС, СБИС, УБИС) интегральных схем электронных приборов. Здесь проводится моделирование трех базовых элементов БИС, СБИС и УБИС – наноконденсаторов, нанорезисторов и нанотранзисторов. При этом представлена возможность проектирования трех различных типов нанотранзисторов.

Конденсатор – специализированная система наноструктур, электрическая емкость, накопитель отрицательных и положительных зарядов, основной функциональный элемент наноячеек памяти в интегральных схемах.

Резистор – специализированная система наноструктур, электропроводящий канал с дырочной и/или электронной проводимостью, соединяющий элементы интегральных схем.

Транзистор – основной элемент интегральных схем, применяемый для генерации и преобразования электрических сигналов. Разработаны различные типы нанотранзисторов, три из которых представлены в данном разделе «Компьютерные вычисления-3»:

- элементарный транзистор (классическая схема кремниевого нанотранзистора);
- SOI-транзистор (однозатворный вариант транзистора из спектра полевых транзисторов, выполняемых по технологии «Silicon-On-Isolator»);
- SON-транзистор (однозатворный вариант транзистора из спектра полевых транзисторов, выполняемых по технологии «Silicon-On-Nothing» с элементами архитектуры FinFET).

Подробно с вопросами конструкций гетероструктур в кремниевой электронике следует ознакомиться в теоретической работе [7, с. 3–18], большом обзоре [8, с. 97–114], монографии [9, с. 1–101] и справочники [10, с.1–77]. Однако необходимо подчеркнуть, что конструкции элементарных электронных наноструктур – наноконденсаторов, нанорезисторов и, в особенности, нанотранзисторов, составляющих базис микропроцессоров, запоминающих устройств и т. п. (см., например, [11, с. 33–35]) весьма быстро совершенствуются и даже принципиально меняются при переходе от устаревших (всего за 1–2 года) к новым технологиям [12, с. 76–83].

Так, в производстве микропроцессоров за несколько лет был совершен грандиозный прорыв от технологий последовательного уменьшения размеров нанотранзисторов от 350 нм к 130 нм, затем к 90 нм и 65 нм, что казалось пределом [13, с. 149–155]. Однако, практически немедленно совершился дальнейший прорыв к принципиально новым технологиям [14, с. 4–18] в 45 нм, а затем к 32 нм. Сейчас активно исследуются и внедряются в массовое промышленное производство сверхсовременные 22 нм технологии, в которых учитываются уже

и квантовые эффекты [15, с. 53–63], связанные с достижением отдельными структурами нанотранзисторов размеров в 1 нм – например, толщина подзатворного диэлектрика подошла к рубежу 1 нм [16, с. 17–22].

Закон Мура, по-видимому, пока продолжает выполняться [17, с. 50–52].

Начальная страница линии «Компьютерные вычисления-3» (рис. 3) содержит 6 гиперссылок перехода на другие страницы. Первая гиперссылка «Общая информация», приводит на страницу, где кратко сформулировано функциональное назначение раздела. Пять других ссылок, клавиши «Конденсатор», «Резистор», «Элементарный транзистор», «SOI-транзистор» и «SON-транзистор», предоставляют посетителю сайта доступ к программным сегментам моделирования групп операций узловых сегментов технологического цикла конструирования соответствующих нанoeлектронных устройств. Страницы организации вычислительного задания, ввода цифровых значений параметров и инициализации компьютерного расчета показаны на рис. 4–8.

На каждой из этих страниц размещен сценарий вычислительного задания: перечень используемых подпрограмм и позиций ввода данных для этих подпрограмм. Для комфортабельности работы пользователя применен специальный дизайн страниц. Каждая подпрограмма выделена в отдельную строку, по цвету отличающуюся от соседних. В левой части строки указано имя подпрограммы. Справа от него расположены окна ввода цифровых значений параметров. Рядом с каждым окном ввода указан идентификатор параметра. Уточнить смысл этих параметров можно по гиперссылке «Информация». Завершает страницу клавиша «Запустить программу», при нажатии которой стартует решение поставленной задачи. Укажем, что в верхней части страницы размещены три рисунка, которые иллюстрируют начальное, промежуточное и финальное решение данного класса подзадач.

Структура и дизайн страниц выполнены в соответствии с облачной технологией WaaS (Workplace as a Service, Рабочее место как услуга). Эта технология ориентирована на создание условий комфорта пребывания посетителя на Web-портале: понятность функционального назначения программного комплекса, простоту организации вычислительного задания и его компьютерной реализации.

3. Система стартовых данных и функциональные возможности подпрограмм, составляющих программные сегменты. Для проведения конкретного расчета необходимо сформулировать соответствующую вычислительную задачу (ввести необходимые стартовые исходные данные) и провести инициализацию процессорных систем комплекса. Стартовые данные подразделяются на глобальные и локальные.

Глобальные данные являются общими для всей задачи и необходимы для функционирования подпрограмм всего комплекса. К ним относятся геометрические параметры: размеры области моделирования в X и Y направлениях, конфигурация исходной границы поверхности кремниевой пластины. Комплекс предоставляет возможность вариации типа кремния: поликристаллический или



Рис. 1. Главная страница Центра компьютерного моделирования SciShop.ru

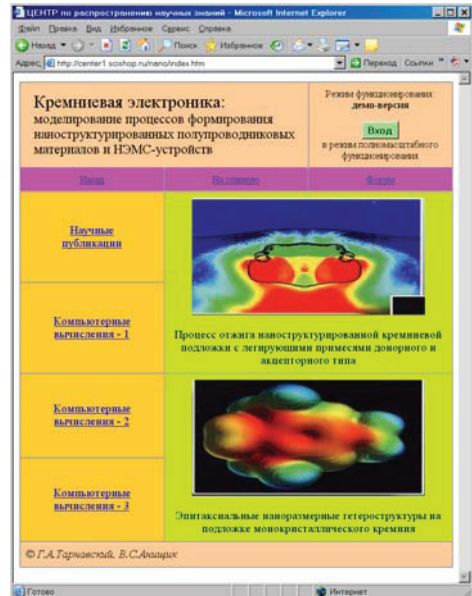


Рис. 2. Базовая страница раздела «Кремниевая электроника» портала SciShop.ru

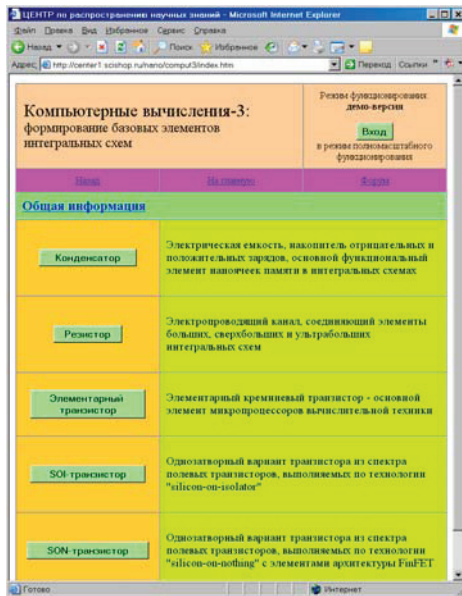


Рис. 3. Начальная страница линии «Компьютерные вычисления-3» тренинг-комплекса третьего уровня обучения



Рис. 4. Страница «Проектирование конденсатора»

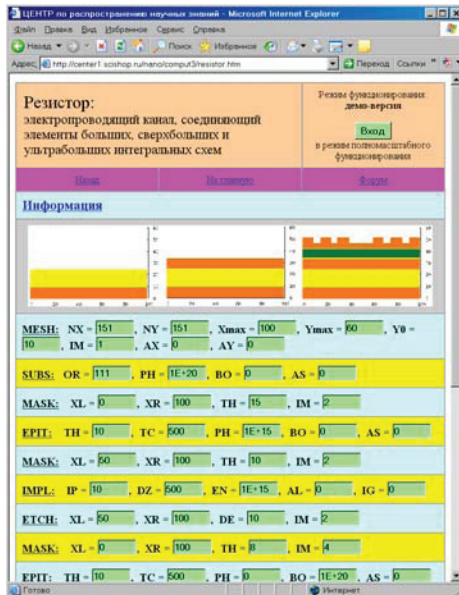


Рис. 5. Страница «Проектирование резистора»



Рис. 6. Страница «Проектирование элементарного транзистора»

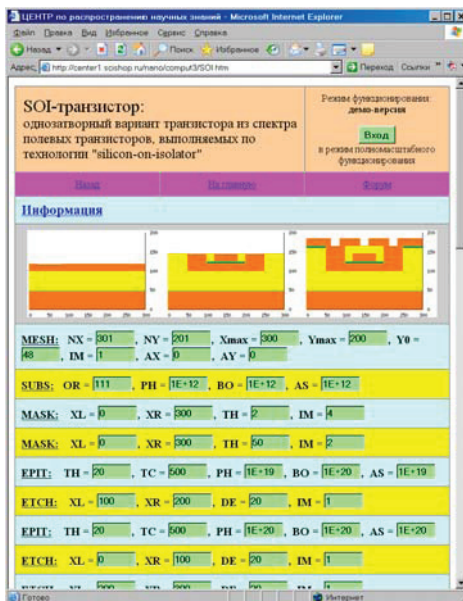


Рис. 7. Страница «Проектирование SOI-транзистора»

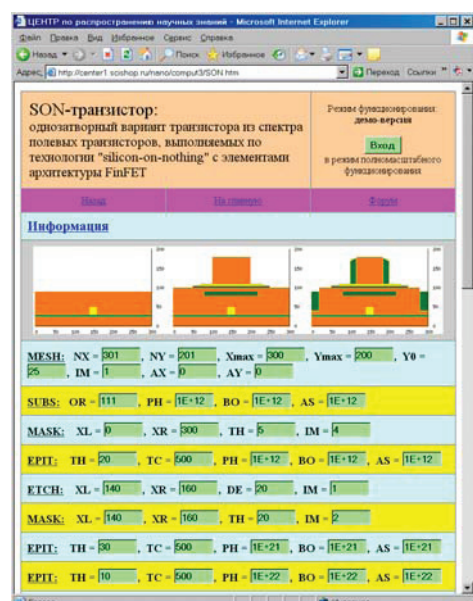


Рис. 8. Страница «Проектирование SON-транзистора»

монокристаллический с различными, по заказу пользователя, значениями индекса Миллера – (100), (110), (111) и т. д. К глобальным относятся также алгоритмические параметры: число узлов расчетной сетки и коэффициента их сгущения по различным координатным направлениям.

Локальные стартовые данные необходимы для функционирования только отдельных подпрограмм комплекса и индивидуальны для каждого соответствующего алгоритма. Конспективно укажем их основное функциональное назначение.

Подпрограмма «MESH» позволяет использовать различные (в том числе неоднородные) вычислительные сетки в области решения задачи.

Подпрограмма «SUBS» допускает вариацию индексов Миллера (ориентацию кристаллической решетки подложки) и исходных концентраций легирующих примесей.

Подпрограмма «MASK» допускает вариацию положения границ защитных масок и типа их материала.

Подпрограмма «IMPL» допускает вариацию типа вводимой примеси (фосфор, мышьяк, сурьма, бор, галлий) и ее концентрации.

Подпрограмма «EPIT» позволяет пользователю наращивать эпитаксиальные слои кремния заданной толщины. Эти слои могут содержать легирующие примеси с вариацией их концентрации и типа примеси.

Подпрограмма «ETCH» позволяет создавать различные формы нанорельефа поверхности кремния. Это обеспечивается заданием координатного положения и глубины травления, а также типа травителя, ориентированного на травление определенного вида материала.

Подпрограмма «OXID» позволяет пользователю конструировать различные типы (тонкие, толстые) пленок оксида в отдельных подобластях поверхности кремниевой пластины с вариацией параметров технологического процесса (температуры, давления, времени оксидирования и типа оксиданта).

4. Пользовательский интерфейс: ввод основных параметров. Препроцессорная система программного комплекса NanoMod предназначена для поддержки пользователя при выполнении им действий по организации вычислительной задачи: формирования сценария расчета и ввода исходных данных (физико-математических и алгоритмических параметров, необходимых для получения требуемого решения).

В узком смысле препроцессор выполняет функцию подготовки данных для ввода в программу-компилятор. В более широком смысле препроцессорная система ориентирована на создание дружественного пользовательского интерфейса. В системе NanoMod этот интерфейс подразделяется на два типа действия: составление сценария расчета и ввод цифровых данных.

Сценарий расчета есть список подпрограмм, необходимых для проведения вычислительного процесса и перечисленных в нужной последовательности. Ввод параметров есть указание (присвоение) конкретных цифровых значений их условным обозначениям в программе (идентификаторам).

Все пять сегментов (страниц) организации заданий раздела «Компьютерные вычисления-3» имеют типовую структуру: сценарии всех сегментов содержат вызовы нескольких подпрограмм, две из которых, MESH и SUBS, включены во все сценарии расчета, а основная группа, состоящая из подпрограмм MASK, IMPL, EPIT, ETCH и OXID, расположенных в заданной последовательности (с возможным неоднократным вызовом любой из перечисленных подпрограмм), определяет конкретный тип задачи, на которой производится тренинг.

Подчеркнем, что в каждой подпрограмме список формальных параметров (замещаемых в конкретных задачах фактическими значениями) существенно минимизирован для удобства пользователя, избавляя его от необходимости читать «толстые» инструкции или часто обращаться к режиму Help. При этом ввод части данных (особенно алгоритмических, требующих хорошего знания применяемого вычислительного метода) поручен специализированным модулям комплекса.

Функционирование подпрограммы MESH (NX, NY, XMAX, YMAX, Y0, IM, AX, AY) определяется значениями восьми параметров. Параметры NX и NY есть значения числа узлов расчетной сетки по X- и Y-координатному направлению. Параметры XMAX и YMAX являются максимальными значениями соответствующих координат (их минимальные значения для всех задач приняты равными нулю). Параметр Y0 определяет Y-координату границы раздела «кремний-среда» в начальный момент времени в стандартной постановке задачи. В различных задачах среда может быть вакуумом, воздухом, оксидантом и др. Параметр IM является управляющим параметром построения сетки: при IM = 0 строится неравномерная сетка, а при IM = 1 – равномерная сетка. При заказе на построение неравномерной сетки коэффициенты неравномерности по X и Y направлениям определяются соответственно параметрами AX и AY.

Все линейные размеры в этом и других сегментах должны задаваться в нанометрах (нм).

Функционирование подпрограммы SUBS (OR, PH, BO, AS) определяется значением четырех параметров. Параметр OR указывает пространственную ориентацию кристаллической решетки кремниевой подложки. Значение этого параметра равно значению индекса Миллера. Параметры PH, BO и AS являются значениями начальных концентраций фосфора, бора и мышьяка в базовой подложке. Эти значения должны задаваться в единицах см^{-3} (как наиболее употребительных).

5. Моделирование электрофизических, термохимических и механических процессов: основные параметры функционирования программных сегментов. Управление программами моделирования ряда технологических процессов MASK, IMPL, EPIT, ETCH и OXID организовано в достаточно простой форме, когда пользователь должен ввести только минимальный список значений параметров. Смысл этих параметров однозначен и не допускает неверной интерпретации. Ряд параметров, отражающих специфику того или иного технологического процесса, вводится из специализированных баз данных без участия пользователя. Это

повышает эффективность обучения и дает возможность обучаемому сосредоточиться на главных аспектах решаемой проблемы. Перечислим основные входные параметры подпрограмм.

Функционирование подпрограммы MASK (XL, XR, TH, IM) определяется значением четырех параметров:

- XL, XR – X-координаты (нм) соответственно левого и правого края защитной маски, лежащей на поверхности произвольной конфигурации;
- TH – толщина (нм) маски, равномерная по всей ее длине;
- IM – индекс маски (тип ее материала).

Значения XL и XR должны лежать в области моделирования $[0, X_{\max}]$, при этом должно выполняться условие $XL \leq XR$. Верх маски (Y-координата поверхности плюс TH) не должен выходить за область моделирования $Y_{\max}$. В настоящее время индекс IM может принимать значения 2 (маска из диоксида кремния SiO_2) или 4 (маска из нитрида кремния Si_3N_4). Отключение в случае необходимости действия подпрограммы (без ее удаления из вычислительного сценария) производится занулением значений параметров XL, XR и TH.

Функционирование подпрограммы IMPL (IP, DZ, EN, AL, IG) определяется значением пяти параметров:

- IP – индекс имплантанта (тип легирующей примеси);
- DZ – доза имплантанта (концентрация примеси в ионном ускорителе, см^{-3});
- EN – энергия ускорения (эВ) ионов легирующей примеси;
- AL – угол наклона имплантации (град) к горизонту $Y = \text{const}$, отсчитываемый от вертикали;
- IG – индекс режима имплантации.

В настоящее время индекс IP может принимать значения 1, 2 или 3 (имплантация мышьяка, бора или фосфора соответственно), а индекс IG – значения 0 или 1, соответствующие стандартному или усиленному (с дополнительным ускорением) режиму имплантации.

Параметр DZ может принимать любое неотрицательное значение. Укажем для ориентировки некоторые величины: значения концентрации 10^{21} см^{-3} соответствуют значению 1 нм^{-3} ; средний период решетки монокристаллического кремния при нормальных условиях равен 0.543 нм ; длина волны де Бройля для Si – около 12 нм , радиусы атомов (по Мелвину–Хьюзу, в нм): 0.12 (Si) , 0.080 (B) , 0.095 (P) , 0.12 (As) , радиус первой боровской орбиты – 0.053 нм .

Параметр EN может принимать любое неотрицательное значение. Для ориентировки укажем, что, очень осредненно, для внедрения в Si на глубину 1 нм требуется энергия от 0.2 до 1.5 эВ , в зависимости от имплантируемого элемента и его дозы. Параметр AL может принимать любые значения. Отключение в случае необходимости действия подпрограммы (без ее удаления из вычислительного сценария) производится занулением значений параметра DZ.

Функционирование подпрограммы EPIT (TH, TC, PH, BO, AS) определяется значениями пяти параметров:

- ТН – требуемая толщина (нм) наращиваемого слоя, равномерного по всей поверхности (произвольной конфигурации) подложки;
- ТС – температура процесса (град. Цельсия);
- РН, ВО, АS – концентрации (см⁻³) примесей соответственно фосфора, бора и мышьяка, равномерно включаемых в наращиваемый слой.

Верх эпитаксиального слоя (Y-координата поверхности плюс ТН) не должен выходить за область моделирования Y_{max}. Параметр ТС может принимать любые неотрицательные значения. Это значение определяется технологической картой операций. Для ориентировки укажем, что в настоящее время используются температура от 300°C (медленная эпитаксия) до 1300°C (быстрая эпитаксия) с получением слоев различной однородности, которая определяется не только типом наращиваемого материала, но и материала подложки.

Параметры РН, ВО и АS определяются целями операций (создание зон высокой, средней или низкой электропроводности). Отключение в случае необходимости действия подпрограммы (без ее удаления из вычислительного сценария) производится занулением значений параметра ТН.

Функционирование подпрограммы *ETCH (XL, XR, DE, IM)* определяется значением четырех параметров:

- XL, XR – X-координаты (нм) соответственно левого и правого края области травления;
- DE – глубина (нм) травления;
- IM – индекс травителя для травления определенного вида (только одного) материала.

Значения XL и XR должны лежать в области моделирования [0, X_{max}], при этом должно выполняться условие $XL \leq XR$. Дно канавки травления (Y-координата первоначальной поверхности минус DE) не должно выходить за область моделирования $Y = 0$. В настоящее время индекс IM может принимать значения 1 (травление кремния Si), 2 (травление диоксида кремния SiO₂) или 4 (травление нитрида кремния Si₃N₄). Отключение в случае необходимости действия подпрограммы (без ее удаления из вычислительного сценария) производится занулением значений параметров XL, XR и DE.

Функционирование подпрограммы *OXID (OX, TC, POX, TM, TAU, U0)* определяется значением шести параметров:

- OX – тип оксидирования;
- ТС – температура процесса (град. Цельсия);
- POX – давление оксиданта (атм);
- ТМ – время процесса (мин);
- TAU – начальный временной шаг (мин);
- U0 – начальная толщина пленки оксида (нм).

В настоящее время подпрограмма обеспечивает возможность моделирования оксидирования кремния различных типов: сухое оксидирование в кислороде

O_2 или влажное окислирование в парах воды H_2O (соответствующие значения управляющего параметра $OX = 1$ или $OX = 2$).

Параметр $ТС$, температура (град. Цельсия) процесса, может принимать любые неотрицательные значения. В настоящее время используется температура от $300^{\circ}C$ (очень медленное, но весьма равномерное окислирование) до $1300^{\circ}C$ (быстрое окислирование).

Параметр $РОХ$, давление (атм) окисланта, может принимать любые неотрицательные значения. В техпроцессах обычно используется давление от 0.5 до 1.5 атм. В некоторых технологиях применяются высокие давления, до 10 атм и иногда выше. При этом возможно существенное уменьшение температуры процесса.

Параметр $ТМ$, время (мин) окислирования, может принимать любые неотрицательные значения. Стандартный интервал изменения этого параметра: от 1 до 30 мин (определяется технологической картой).

Вычислительный алгоритм стартует с начальным значением временного шага TAU и в дальнейшем счете автоматически корректирует его (без участия пользователя) в зависимости от динамики протекающего процесса для обеспечения заданной точности решения. Отключение в случае необходимости действия подпрограммы (без ее удаления из вычислительного сценария) производится за нулением значений параметров $ТМ$ и $U0$.

6. Инициализация процессорных систем. «Круиз файлов данных». После ввода параметров пользователь может дать старт вычислительному процессу, нажав клавишу «Запустить программу». Подчеркнем, что портал SciShop.ru является пионером непосредственного проведения компьютерного моделирования в интернете. К настоящему времени в Сети пока нет другого аналогичного портала, действительно функционирующего в режиме непосредственного расчета научных и прикладных задач.

При создании Web-ресурса SciShop.ru была существенно развита методология Cloud Computing. Эта методология в настоящий момент предполагает, что информационный поток движется только в двух направлениях: «браузер клиента – сервер интернета» и обратно, «сервер интернета – браузер клиента». Разработанную и функционирующую новую организацию информационных потоков в SciShop.ru можно назвать DFC-технологией (Data Files Cruise) «Круиз файлов данных». Эта технология имеет существенно больше направлений движения потоков информации: «браузер клиента – сервер интернета SciShop.ru – переход в суперкомпьютерный центр (IP_1 -адрес) – вычислительный процессор – выход из суперкомпьютерного центра (IP_2 -адрес) – сервер интернета SciShop.ru – браузер клиента».

Полученный файл решения клиент может взять непосредственно на портале SciShop.ru, или по специальному IP_2 -адресу. Адрес этого ресурса, доступный только клиенту, указывается ему на особой странице (рис. 9) сайта, которая генерируется автоматически, без участия пользователя, после нажатия им клавиши «Запустить программу».

DFC-технология является огромным преимуществом Центра компьютерного моделирования, поскольку клиент может вообще не знать системного программирования, являясь научным исследователем или прикладным расчетчиком, и сосредоточиться на физическом или техническом смысле задачи, без неоправданных и излишних затрат времени и интеллектуальных усилий на формирование вычислительного задания.

Заметим во избежание недоразумений, что процедура использования суперкомпьютеров в режиме удаленного доступа достаточно хорошо известна, однако здесь имеется в виду совсем иное – создание файлов доступа к суперкомпьютеру, проведение расчетов и пересылка решения по указанному адресу производится системами Центра SciShop.ru автоматически, без участия клиента.

7. Выходная информация. По окончании решения и завершения системных операций клиент, нажав на указанный адрес, являющийся гиперссылкой, может получить решение в виде цифровых таблиц на странице «Вывод информации» (рис. 10). Гиперссылка «Вывести график», размещенная справа на плашке этой страницы, обеспечивает инициализацию графической системы GnuPlot и визуализацию полученного числового решения.

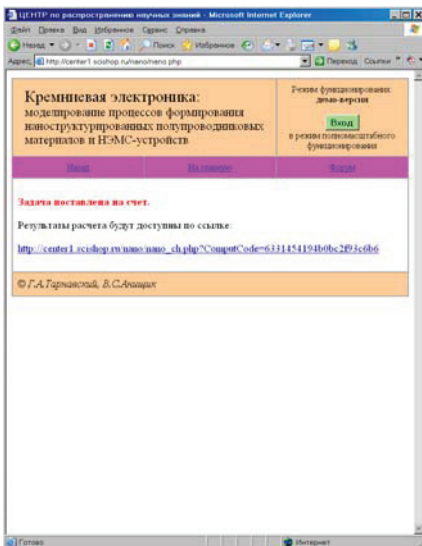


Рис. 9. Страница информации клиента о решении его задачи с указанием URL-адреса, где размещены результаты расчета

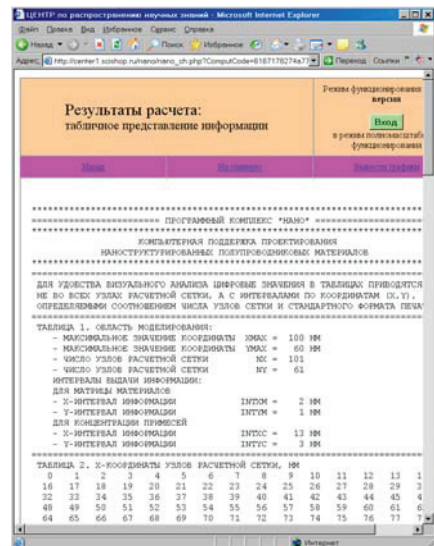


Рис. 10. Страница таблично-цифрового вывода информации

Страница цифровой информации содержит несколько таблиц, в которых размещаются исходные данные задачи (физические и алгоритмические параметры) и данные, полученные в результате решения. Эти данные сведены (в настоящее время) в четыре таблицы: матрицы материалов и значений концент-

раций легирующих примесей (фосфора, бора и мышьяка) в расчетной области (в узлах сетки).

Для комфорта восприятия данных значения в этих таблицах выводятся на экран монитора или на печать с некоторым интервалом выборки значений из узлов расчетной сетки. Шаг выборки (интервал) определяется (в учебных версиях комплекса) автоматически таким образом, чтобы распечатка информации на бумаге по ширине могла быть размещена на листе формата А4. Все цифровые данные снабжены необходимыми текстовыми комментариями.

Графическая информация является визуализацией цифровых данных – у каждой из четырех таблиц имеются графические аналоги, двумерные картины распределения материалов и концентраций примесей в них.

8. Приложение тренинг-комплекса к решению научных и инженерных задач.

Подраздел «Компьютерные вычисления-3» раздела «Кремниевая электроника» Центра компьютерного моделирования SciShop.ru эффективно использовался для конструирования наноструктур в кремниевой подложке и проектирования некоторых элементов в соответствии с технологической картой формирования интегральных схем. Ниже представлены результаты применения программных комплексов «Конденсатор», «Резистор», «SOI-транзистор» и «SON-транзистор» с данными, используемыми в режиме «по умолчанию» на страницах сайта (см. рис. 4, 5, 7 и 8 соответственно).

Проектирование нанорезистора. Резистор – проводник электрического тока, направленного движения носителей электрических зарядов. Физические механизмы электротока в твердых телах, жидкостях и газах существенно различаются.

Среди твердых тел наилучшими проводниками являются металлы. Кремний Si является полупроводником, т.е. способен проводить ток только при определенных условиях, в том числе в зависимости от типа его внутренней структуры (монокристаллический, поликристаллический или аморфный Si). Для создания зон электропроводности в кремнии производится его легирование примесями различных химических элементов. Легирование кремния металлами обеспечивает свойства электронной проводимости (*n*-тип электропроводности) для любого типа кристаллической структуры Si.

Легирование моно- и поликристаллического кремния элементами V группы Периодической системы (фосфор P, мышьяк As, сурьма Sb), называемых примесями донорного типа, приводит к замещению атомами P, As, Sb атомов Si в кристаллической решетке и, вследствие этого, появлению свободных электронов.

Таким образом, в области легирования материал приобретает свойства электронной проводимости. Диффузия электронов в область нелегированного участка Si приводит к образованию *p-n*-перехода, т.е. возникновению энергетического барьера на границе «легированный/нелегированный» Si. Вследствие этого электрический канал приобретает свойство проводимости тока в одном направлении, в зависимости от знака электрического напряжения на концах канала (диода).

Легирование Si элементами III группы Периодической системы (бором В, галлий Ga), называемыми примесями акцепторного типа, обеспечивает образование в материале области дырочной проводимости (*p*-типа), а на границе зоны легирования – формирование области *p-n*-перехода и энергетического барьера и создания диода с другой пропускной направленностью, чем при легировании P, As, Sb.

На рис. 5 приведен сегмент программного кода для организации трех резисторов, разделенных двумя диэлектриками. На рис. 11 проиллюстрированы три стадии процесса, в том числе завершающая стадия технологических операций по формированию данного наноэлектронного узла.

Нижний диэлектрик (2) – диоксид кремния SiO_2 , верхний (4) – нитрид кремния Si_3N_4 . Нижний резистор (1) – стандартный двусторонний канал – проводник, сформированный однородным по всей длине легированием кремния фосфором. Средний канал (3), проводник – диод, сформирован легированием фосфором только левой половины канала. Верхний канал (5), проводник – диод, сформирован легированием бором только левой половины канала. Кроме того, внешняя граница пятислойной пластины профилирована для создания специального нанорельефа поверхности, требуемого, например, для организации электроподводящих контактов.

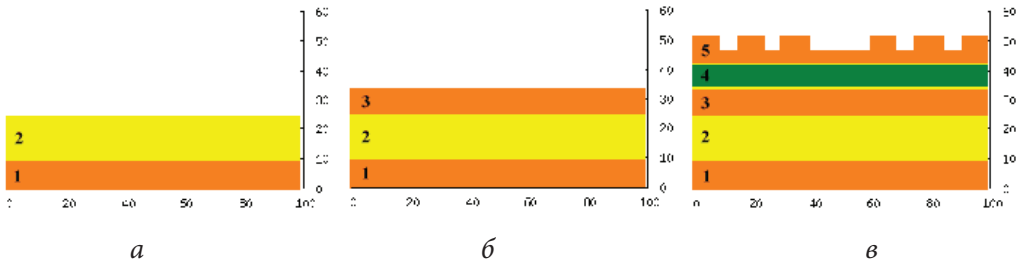


Рис. 11. Три стадии проектирования резистора: а – формирование проводящей (в двух направлениях) базовой подложки кремния (1) и изолирующего слоя оксида (2); б – формирование на оксиде слоя высокопроводящего (в одном направлении) слоя кремния (3); в – окончательное формирование резистора данной конструкции с созданием пассивирующего слоя изолятора (4) и системы электроподводящих контактов со специальным нанорельефом поверхности (5)

Таким образом, нижний канал способен проводить электроток в обоих направлениях слева – направо и справа – налево. Средний и верхний каналы обладают свойствами однонаправленной проводимости в зависимости от знака приложенного к краям канала напряжения и типа электроносителя (электронов или дырок).

Изменение значений определяющих параметров в сценарии (см. рис. 5) позволяет проектировать резисторы (для данного класса) различные модификации с вариацией характеристик (ширина каналов, их электропроводность, нанорельеф подводящей шины и т.п.), в зависимости от требований проекта.

Проектирование наноконденсатора. Конденсатор – система двух разноименно заряженных равными по абсолютной величине зарядами проводников (обкладок конденсатора), имеющих такую форму и расположение друг относительно друга, что поле, создаваемое этой системой, сосредоточено (локализовано) в ограниченной области пространства.

Конденсатор является одним из ключевых узлов в интегральных электрических схемах. Важнейшими характеристиками конденсатора являются его емкость, скорость перезарядки и, в кремниевой микроэлектронике особенно, геометрический размер и конфигурация, а также величина напряжения пробоя.

Емкость конденсатора определяется его топологией (площадью поверхности пластин, расстоянием между ними) и диэлектрической проницаемостью межобкладочного изолятора. Эти параметры, а также механические (прочностные) характеристики определяют пробойную стойкость конденсатора (напряжение пробоя и порог механического разрушения).

В частности, емкость плоского, составленного из нескольких пластин конденсатора, широко используемого в КМОП-технологиях, выражается формулой

$$C = \varepsilon_0 \frac{\varepsilon(n-1)S}{d}, \quad (1)$$

где S – площадь каждой из пластин или меньшая из них; d – расстояние между соседними пластинами; n – число пластин, ε – диэлектрическая проницаемость изолятора, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума (нормировочный коэффициент в системе единиц СИ).

В соответствии с (1), увеличение емкости конденсатора может быть достигнуто тремя путями: увеличением S , увеличением ε и уменьшением d .

Первый способ, увеличение S (т. е. увеличение длины и/или ширины пластины), не коррелирует с современными тенденциями к уменьшению размеров наноустройств.

Второй путь, увеличение ε , т. е. замена материала диэлектрика, в настоящее время является эффективным способом разработки наноконденсаторов с повышенными значениями C . В частности, может быть проведена замена широко используемого в качестве межобкладочного изолятора диоксида кремния SiO_2 ($\varepsilon = 3.9$) на диоксид циркония ZrO_2 или диоксид гафния HfO_2 ($\varepsilon = 25$). Однако при этом существенно усложняются технологии промышленного производства наноустройств.

Третий путь, уменьшение d , также является эффективным способом увеличения C , но требует совершенствования технологических операций. При этом следует учитывать усиление квантовых эффектов туннелирования электронов через слой диэлектрика и снижение уровня напряжения пробоя.

Сегмент программного кода (см. рис. 4), обеспечивает проектирование наноконденсатора, состоящего из пяти пластин высоколегированного кремния,

шириной 10 нм и длиной 40 нм каждая, с диэлектриком (SiO_2) шириной 5 нм. Контуры узла закрыты сверху и снизу пассивирующим слоем изолятора (Si_3N_4). Толщина подводящих каналов – 5 нм. Размер системы пластин 40×70 нм. Размер конденсатора в общем пространстве полупроводникового материала составляет 60×100 нм.

На рис. 12 проиллюстрированы три стадии процесса, в том числе финальная стадия – наноконденсатор. Изменение значений определяющих параметров в сценарии (см. рис. 4) позволяет проектировать конденсаторы (для данного класса) различные модификации с вариацией характеристик (количество пластин, их площади, расстояния между ними, типа изолирующего диэлектрика и т. п.), в зависимости от требований проекта.

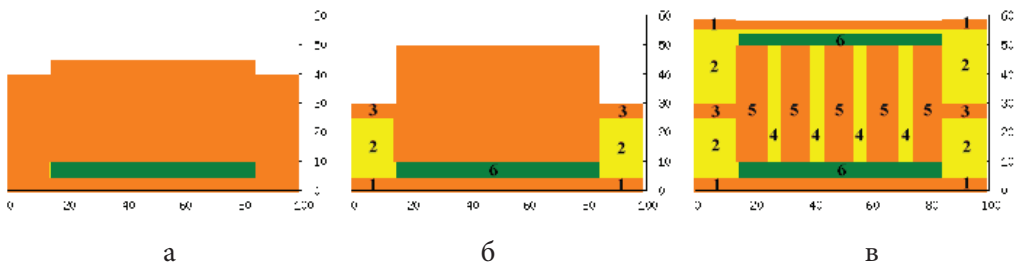


Рис. 12. Три стадии проектирования конденсатора: а – формирование кремниевого корпуса со слоем (2), изолирующим корпус от базовой подложки (1); б – формирование подводящих каналов (3); в – окончательное формирование конденсатора из пяти пластин (5) с четырьмя изолирующими слоями SiO_2 (4), закрытых сверху и снизу пассивирующим слоем изолятора Si_3N_4 (6)

Проектирование нанотранзисторов

Некоторые возможности программного комплекса NanoMod иллюстрируются на решении задачи проектирования нанотранзисторов. В настоящее время разработаны и непрерывно продолжается разработка значительного числа разнообразных типов нанотранзисторов, с их постоянным совершенствованием, миниатюризацией размеров, улучшением характеристик и повышением надежности в эксплуатации.

Проанализируем процессы формирования двух современных архитипов: SOI- и SON-транзисторов. Заметим, что анализ электрофизических свойств этих транзисторов лежит вне рамок настоящей статьи.

Формирование SOI-транзистора. Процесс компьютерного конструирования транзистора на основе имитации технологии «кремний-на-изоляторе» представлен на рис. 13 (размеры даны в нм). Рассмотрим шесть этапов формирования SOI-транзистора. Каждый из этих этапов интегрированно содержит несколько электрофизических, термохимических и механических процессов.

Первый этап (рис. 13,а) заключается в создании подложки транзистора. Кремниевая монопластина толщиной 100 нм (корпус транзистора) оксидирует-

ся, в результате чего создается двухслойная пластина Si – SiO₂. В SOI-технологии формируют толстый 50-нм слой оксида. Для усиления изолирующих свойств с целью устранить или минимизировать токи утечки в корпус может быть дополнительно к слою оксида SiO₂ сформирован тонкий (5 нм) защитный слой нитрида кремния Si₃N₄.

Второй этап – формирование канала транзистора (рис. 13,б). На слой оксида по эпитаксиальной технологии наращивается слой кремния. Этот слой кремния, высоколегированный примесями донорного (фосфор Р, мышьяк As) и/или акцепторного (бор В) типа, обеспечивает проводимость *n*- или *p*-типа (электронной или дырочной). Создается канал толщиной 20 нм и длиной 200 нм. В представляемой конструкции центр канала имеет преимущественно *n*-тип проводимости, а края канала (непосредственно соединенные с истоком и стоком транзистора) – проводимость преимущественно *p*-типа.

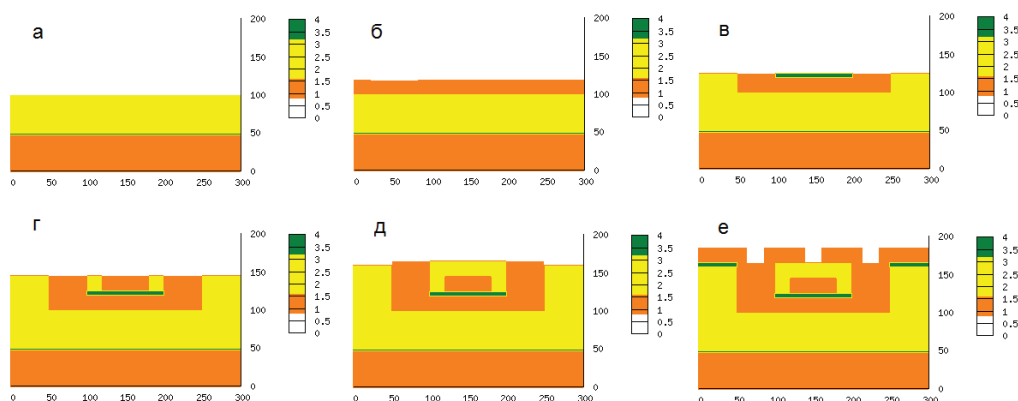


Рис. 13. Компьютерное проектирование SOI-транзистора. Последовательные стадии формирования наноструктур транзистора: а – двухслойная подложка; б – канал; в – боковые изоляторы и подзатворный диэлектрик; г – затвор и подводящие контакты; д – крышка затвора, исток и сток; е – электроподводящий слой

Вообще говоря, стадия формирования канала транзистора с несколькими (по длине) зонами проводимости различных типов не может быть обеспечена единственным технологическим процессом – эпитаксией кремния. Для этого используются несколько техпроцессов. Сначала выращивается 20-нм слой Si, высоколегированный фосфором (зона *n*-проводимости в центре канала). Далее маскируется центральная часть и проводится травление краев слоя Si на его полную глубину (20 нм). После этого защитные маски смываются (стравливаются), и проводится эпитаксия нового 20-нм слоя Si, высоколегированного бором. Этим обеспечивается *p*-проводимость на краях канала, прилегающих к истоку и стоку. Создается П-образный слой Si (толщина которого на данный момент составляет 20 нм по краям и 40 нм в центре). Его края закрываются масками, и производит-

ся травление в центре на глубину 20 нм. После удаления защитных масок канал транзистора, с одинаковой по всей длине 20-нм толщиной, зоной проводимости *n*-типа в центре и *p*-типа по краям, сформирован (см. рис. 13,б). Подчеркнем, что все процессы должны проводиться при температуре не выше 500°C во избежание сильной диффузии легирующих примесей.

Соответственно проводится компьютерное моделирование всех этих стадий (они не показаны на рис. 13 для избежания громоздкости представления результатов).

Может быть применена и другая технология. Однородный по толщине слой Si закрывается последовательно масками в нужных позициях. Затем производится последовательная (бор – левый край, фосфор – центр, бор – правый край) ионная имплантация легирующих примесей в канал. Однако заметим, что при этом не может быть достигнуто равномерное распределение примесей по глубине. В такой технологии зависимость концентрации примесей поперек канала соответствует распределению Гаусса, положение максимума которого определяется энергией имплантации (глубина внедрения, например, фосфора требует около 1–2 эв/нм в зависимости от других характеристик процесса и ориентации кристаллической решетки кремния).

Третью стадию производства (рис. 13,в) составляет группа операций по формированию подзатворного диэлектрика и боковых изоляторов.

Подзатворный диэлектрик является очень важной структурой, изолирующей затвор транзистора от его канала. Функциональное назначение подзатворного диэлектрика носит альтернативный характер. С одной стороны, его толщина должна быть минимально возможной – это определяет скорость переключения нанoeлектронных систем. С другой стороны, при уменьшении толщины усиливается эффект туннелирования электронов, т. е. возрастает ток утечки из затвора в канал через подзатворный диэлектрик.

Для создания этого слоя в SOI-технологии проводится травление центральной части слоя Si длиной 100 нм на глубину 5 нм с последующим заполнением этой выемки слоем изолятора. Для повышения эффективности функционирования изолирующий диэлектрик составляется из двух слоев (например, SiO₂ и Si₃N₄). Естественно, перед травлением накладываются защитные маски слева и справа от зоны травления, с последующим их удалением.

Ниже упоминание о маскировании поверхности будет опускаться, однако следует иметь в виду, что операции травления, оксидирования, имплантации (и некоторых других) сопровождаются предшествующим маскированием части поверхности и последующим удалением (при необходимости) защитных масок.

Левый и правый боковые изоляторы создаются операцией оксидирования. Они отделяют края проводящего канала транзистора от других нанoeлектронных систем в пластине полупроводникового материала.

Следующая, четвертая, стадия (рис. 13,г) – группа операций по формированию затвора транзистора и областей контакта канала с истоком и стоком.

На горизонт поверхности, сформированный в предыдущей стадии, проводится эпитаксия толстого (20 нм) высоколегированного слоя кремния. Далее этот слой оксидируется в четырех зонах. При этом вместо единого слоя образуются три области Si с хорошей электропроводностью, изолированные друг от друга и внешних границ оксидом.

Центральная из этих областей предназначена для функционирования в качестве затвора транзистора (в некоторых технологиях здесь используется материал «кремний-германий» SiGe). Левая и правая области соединяют канал транзистора с его истоком и стоком.

В пятой стадии операций (рис. 13,д) формируются исток и сток транзистора и изолирующая крышка затвора. Аналогично предыдущей стадии, на горизонт сформированной поверхности проводится эпитаксия 20-нм слоя кремния. Длинная центральная две более коротких области оксидируются: образуется изолирующая крышка затвора транзистора и продолжают наращиваться боковые изоляторы. Между неэлектропроводными областями оксида создаются высокопроводящие области истока и стока транзистора, не только легированные фосфором, мышьяком и/или бором, но и с возможной дополнительной металлизацией алюминием.

Заключительная, шестая стадия операций (рис. 13,е) ориентирована на формирование электроподводящего (к истоку и стоку) слоя. Проводится эпитаксиальное наращивание слоя кремния, металлизированного добавлением алюминия. В некоторых технологиях этот слой конструируется из алюминия в целом. Однако в таком случае требуется применение специальных операций по устранению нежелательных эффектов на границе раздела сред «высоколегированный кремний/алюминий» истока (и стока) транзистора и подводящего слоя. Заметим, что эти операции определяют важные характеристики работы нанотранзистора, и технологические карты этих операций являются конфиденциальной информацией.

В дальнейших процессах производится герметизация, шлифовка и ряд других операций, включая тестирование, после которых слой материала признается готовым. Заметим, что кристалл чипа процессора содержит до 25 слоев с разным функциональным назначением и склеенных в единый пакет.

Формирование SON-транзистора. Принципиально этот тип нанотранзистора эквивалентен в электрической СБИС SOI-транзистору, но существенно отличается общей конструкцией и последовательностью.

Кратко рассмотрим стадии технологического процесса (рис.14), в каждой из которых сгруппированы несколько операций. В этом разделе основное внимание при анализе будет уделяться не техническим деталям операций, а функциональному назначению наноэлектронных систем.

Формирование SON-транзистора производится на базовой пластине кремния (корпусе), общей для нескольких десятков структур. Эта пластина формируется из четырех слоев (рис. 14,а): внешнего изолятора (например, Si_3N_4), который предназначен для электроизоляции разных пластин, монокристаллического нелегированного кремния и двух изолирующих слоев (SiO_2 и Si_3N_4).

На второй стадии (рис. 14,б) формируется подложка монокристаллического кремния, слаболегированного примесями типа фосфора или мышьяка. На своей нижней границе этот слой «разрезан» областью изолятора (оксида). По терминологии, принятой в корпорации Intel, эта область оксида носит название «плавник» (fin), а технология изготовления наноструктур с «плавниками» – технологией FinFET.

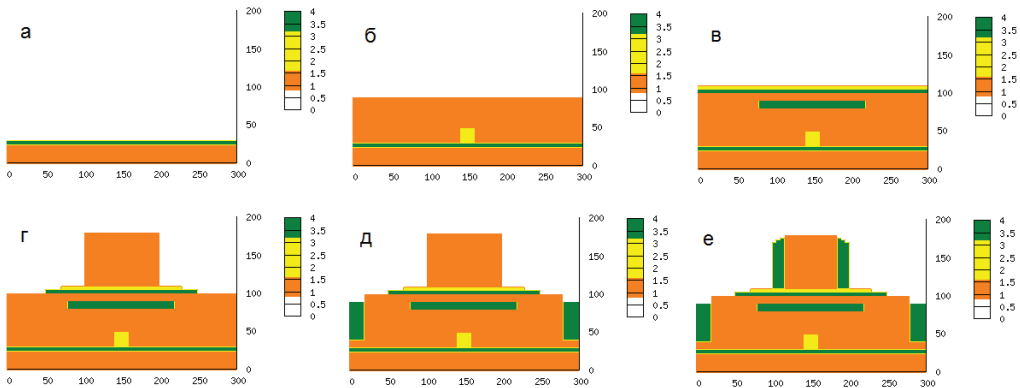


Рис. 14. Компьютерное проектирование SON-транзистора. Последовательные стадии формирования наноструктур транзистора: а – корпус в двойном изолирующем слое; б – подложка кремния с «плавником» оксида; в – внутренний изолятор, канал, исток, сток и подзатворный диэлектрик; г – затвор; д – боковые изоляторы подложки; е – боковые изоляторы затвора

«Плавник» выполняет весьма важную функцию, которая заключается в следующем. Даже при закрытом транзисторе имеют место токи утечки из истока в сток, существенно снижающие эффективность работы, что приводит к необходимости контроля за несанкционированностью переключений. А это, в свою очередь, требует резервирования ответственных участков в СБИС. При миниатюризации размеров проблема токов утечки становится все более и более актуальной.

Если ток утечки из подложки в корпус достаточно просто пресекается двухслойным изолятором, то ток утечки из истока в сток представляет более сложную проблему. В технологии FinFET устранение тока утечки из истока в сток опирается на следующую физическую природу. Этот ток проходит вдоль внешней, наиболее удаленной от затвора, поверхности подложки. В эту область смещаются электроносители из канала при соответствующем «запирающем» электрическом поле затвора. Концентрация этих носителей увеличивается и за счет невозможности их перетекания из подложки в корпус вследствие наличия двойного изолирующего слоя. Таким образом, ток утечки из истока в сток при запертом транзисторе протекает вдоль слоя изолятора по внешней поверхности подложки. «Плавник» разрывает траекторию этого тока, что в существенной мере минимизирует его, вплоть до полного прекращения, поскольку электроносители не могут обогнуть

«плавник» вверх (в системе координат рис. 14), поскольку этому препятствует электрическое поле затвора.

На следующей стадии (рис. 14,в) формируется канал транзистора, ограниченный с одной стороны внутренним изолятором и с другой – подзатворным диэлектриком.

В центре поверхности подложки Si вытравливается канавка длиной 140 нм и глубиной 10 нм, которая заполняется диэлектриком (например, Si_3N_4). На горизонт поверхности проводится эпитаксия 10-нм слоя кремния, высоколегированного примесями донорного или акцепторного типа. Создается канал транзистора с электронной или дырочной проводимостью, в зависимости от карты СБИС. После эпитаксии Si слой диэлектрика оказывается внутри области кремния, разделяя высокопроводящий канал и подложку. Этот изолятор является барьером и ориентирован на минимизацию тока утечки из канала в подложку. Левый и правый края канала дополнительно легируются (операцией ионной имплантации) примесями донорного или акцепторного типа, с дополнительной металлизацией. Образуются исток и сток транзистора.

Сверху канал ограничен тонким слоем подзатворного диэлектрика. Его двойная структура существенно уменьшает эффект туннелирования электронов (ток утечки из затвора в канал или сток). Вообще говоря, миниатюризация размеров транзистора для повышения его быстродействия, с уменьшением толщины подзатворного диэлектрика до 1–2 нм, приводит к усилению квантовых эффектов туннелирования электроносителей, в том числе их «просачивания» через энергетические барьеры *p-n*-переходов «исток-канал» и «сток-канал». Эти эффекты существенно усиливаются при уменьшении длины канала, т. е. при сближении истока и стока с перекрытием их областей объемных зарядов.

Следующие стадии достаточно стандартны. Проводится формирование затвора транзистора (рис. 14,г), изоляция боковых границ канала и подложки (рис. 14,д), изоляция боковых границ затвора (рис. 14,е).

В заключение следует указать, что все геометрические размеры, приведенные в этом разделе (см. рис. 13 и 14), относятся к 90-нм технологии производства. Для технологий «65 нм» и «45 нм» может быть произведен пересчет (линейное масштабирование). Технологии «32 нм» и, особенно «22 нм», в связи с усилением квантовых эффектов, используют существенно иные архитектуры (в частности, транзисторы с двумя и четырьмя затворами) и иные физико-химические процессы их производства.

Время компьютерного моделирования данного варианта SON-транзистора на вычислительной сетке 10^5 узлов требует около 10 с (персональный компьютер Intel D2, 2.8 ГГц, 1 Гб). Однако следует указать, что численная имитация процессов легирования с применением моделей ионной имплантации может повысить требуемое время расчета до 10–20 мин.

Это делает затруднительным проведение многовариантных расчетов для определения оптимальных конструкций транзистора и других элементарных нанoeлектронных устройств.

Тренинг после чтения

I. Общая подготовка к работе с сегментами. 1. Зайдите на сайт <http://www.SciShop.ru> и просмотрите научную информацию по компьютерному моделированию нанотехнологий и наноматериалов.

2. Пройдите на сайте SciShop.ru по цепочке гиперссылок «Центр-1» – «НАНО» – «Компьютерные вычисления-3» – «Конденсатор» – «Запустить программу» – «Получить результат» – «Вывести график». Таким образом, Вы ознакомитесь со структурой линии вычислений на сайте (в данном случае с использованием опции «Конденсатор», включающей в себя подпрограммы MESH, SUBS, MASK, IMPL и ETCH программного комплекса NanoMod).

II. Тренинг применения отдельных подпрограмм. Каждый из сегментов линии «Компьютерные вычисления-2» содержит обращения к различным подпрограммам комплекса, однократные или многократные, в зависимости от вычислительной задачи. Эти подпрограммы управляются параметрами, описание которых содержится в настоящей статье. Читателю рекомендуется, выбрав какой-либо из пяти сегментов линии, провести вариацию параметров подпрограмм, включенных в данный сегмент. При этом оптимальным является вариация параметров: вначале первой, затем второй, потом третьей (и так далее) подпрограмм. Таким образом можно реально изучить влияние параметров на получаемое решение.

1. *Подпрограмма MESH.* Последовательно варьируйте число узлов расчетной сетки и коэффициенты ее сгущения по различным координатным направлениям.

2. *Подпрограмма MASK.* Варьируя нужные параметры, поместите маску в различные позиции (слева, справа, в центре). Проварьируйте толщину и тип материала защитной маски.

Внимание: при вариации толщины маски следите за уровнем ее верхнего края, который не должен выходить за пределы расчетной области (в учебных версиях система контроля за входными параметрами отключена).

3. *Подпрограмма IMPL.* Варьируйте значения параметров – энергию и угол имплантации, тип имплантанта и его дозу. Увеличивайте энергию имплантации и определите ее значение, когда ионы имплантанта будут «простреливать насквозь» пластину заданной толщины с вылетом за пределы расчетной области. Определите, какому типу примесей (мышьяк, бор или фосфор) требуется для этого меньшая энергия. Увеличивайте угол имплантации и определяйте изменения максимума концентрации и его ординаты. Внимание: не рекомендуется задавать значение угла, равное или очень близкое к 90 град, поскольку при этом точность вычисления тангенса падает, и возможны отказы программы. Оставайтесь в пределах вариации от –89 до +89 градусов.

4. *Подпрограмма EPIT.* Проварьируйте входные параметры и определите их влияние на решение. Замечание: визуально вариация температуры процесса не влияет на решение. Этот параметр определяет скорость роста эпитаксиальной

пленки и скорость диффузии в ней легирующих примесей, что заметно в других сценариях расчета (тренинги более высокого уровня).

Внимание: заказ толщины пленки должен контролироваться вычислителем во избежание выхода эпитаксиального слоя за пределы расчетной области.

5. *Подпрограмма ETCH*. Вариацией параметров проведите травление канавки различной ширины и глубины в различных местах кремниевой подложки. Измените тип травителя и проанализируйте результат травления кремния субстанции, предназначенной для травления диоксида или нитрида кремния.

Внимание: при вводе геометрических параметров, особенно глубины травления, следите за возможностью выхода дна канавки за пределы расчетной области.

6. *Подпрограмма OXID*. Проведите циклы экспериментов следующего типа. Для нескольких расчетов варьируйте какой-либо один параметр при фиксированных остальных:

- изменяйте температуру процесса (500, 700, 900, 1100 и 1300°C, температура плавления кремния 1410°C при нормальных условиях);
- изменяйте давление оксиданта (0.8, 1, 1.2, ... атм);
- изменяйте время оксидирования (1, 5, 10, ... мин), проследите, при каком времени весь кремний перейдет в диоксид кремния и как влияет на это температура и давление;
- измените тип процесса (сухое или влажное оксидирование).

III. Тренинг проектирования наносистем. 1. *Проектирование нанорезистора*. Внимательно прочтите подраздел «Резистор» и проанализируйте расположенный на соответствующей странице сайта сценарий вычислительного задания (его фрагмент показан на рис. 5). Определите, какую функцию выполняет каждая из подпрограмм, т. е. какой сегмент наноматериала, показанный на рис. 11, проектируется этой подпрограммой. Проведите серию компьютерных экспериментов, спроектировав (при помощи данного сценария путем вариации значений параметров) трехканальный нанорезистор с другими характеристиками:

- с вариацией ширины каждого канала;
 - с вариацией электропроводности каждого канала (изменяя концентрацию легирующей примеси и ее тип);
 - с вариацией толщины диэлектриков, разделяющих проводящие каналы;
 - с вариацией нанорельефа электроконтактной шины.
- Отключая некоторые подпрограммы, спроектируйте:
- двухканальный нанорезистор с вариацией его параметров;
 - одноканальный нанорезистор с вариацией его параметров;
 - однородную кремниевую пластину (*p*- и/или *n*-проводимости) с гладкой внешней поверхностью.

2. *Проектирование наноконденсатора*. Внимательно прочтите подраздел «Конденсатор» и проанализируйте расположенный на соответствующей странице сайта сценарий вычислительного задания (его фрагмент показан на рис. 4). Определите, какую функцию выполняет каждая из подпрограмм, т. е. какой сегмент

наноматериала, показанный на рис. 12, проектируется этой подпрограммой. Проведите серию компьютерных экспериментов, спроектировав (при помощи данного сценария путем вариации значений параметров) пятипластинчатый наноконденсатор с другими характеристиками:

- с вариацией размеров (длины и ширины) пластин и изолирующих диэлектрических слоев;
- с вариацией типа изолирующего диэлектрика (SiO_2 или Si_3N_4);
- с вариацией электрических свойств пластин, обусловленных концентрацией легирующих донорных и/или акцепторных примесей в кремнии.

Отключив некоторые подпрограммы вычислительного сценария, спроектируйте традиционный двухпластинчатый наноконденсатор и проварьируйте его параметры.

3. *Проектирование элементарного нанотранзистора.* Зайдите на соответствующую страницу сайта (см. рис. 6) и, активировав гиперссылку «Информация», изучите представленные сведения по данной проблематике. Проведите расчет и проанализируйте процесс последовательного формирования структур нанотранзистора в кремниевой подложке (проводящий канал, исток и сток, подзатворный диэлектрик, затвор). Проварьируйте их параметры.

4. *Проектирование SOI-транзистора.* Внимательно прочтите подраздел «SOI-транзистор» и проанализируйте расположенный на соответствующей странице сайта сценарий вычислительного задания (его фрагмент показан на рис. 7). Определите, какую функцию выполняет каждая из подпрограмм, т.е. какой сегмент наноматериала, показанный на рис. 13, проектируется этой подпрограммой. Проведите серию компьютерных экспериментов, спроектировав (при помощи данного сценария путем вариации значений параметров) нанотранзистор конструкции «silicon-on-isolator» с другими характеристиками:

- с вариацией толщин первого и второго слоя подложки, включая вариант с отсутствием какого-либо из них;
- с вариацией параметров канала нанотранзистора (толщины, типа проводимости);
- с вариацией толщины подзатворного диэлектрика и типа его материала;
- с вариацией размеров и электрофизических параметров затвора;
- с вариацией нанорельефа внешней поверхности и характеристик главных элементов транзистора (истока, стока, крышки затвора, боковых изоляторов и электроподводящего слоя).

5. *Проектирование SON-транзистора.* Внимательно прочтите подраздел «SON-транзистор» и проанализируйте расположенный на соответствующей странице сайта сценарий вычислительного задания (его фрагмент показан на рис. 8). Определите, какую функцию выполняет каждая из подпрограмм, т.е. какой сегмент наноматериала, показанный на рис. 14, проектируется этой подпрограммой. Проведите серию компьютерных экспериментов, спроектировав (при помощи данного сценария путем вариации значений параметров) нанотранзистор конструкции «silicon-on-nothing» с другими характеристиками:

- с вариацией параметров корпуса в двойном изолирующем слое (толщины корпуса, уровня его легирования, толщины изолирующих слоев, вплоть до нулевой какой-либо из них);
- с вариацией параметров подложки (толщины и уровня легирования) и «плавника» внутри подложки (ширины, высоты, места дислокации и типа материала);
- с вариацией характеристик внутреннего изолятора (длины, толщины, типа материала);
- с вариацией геометрических параметров планарного рабочего слоя транзистора (исток, канал, сток), типа допинг-примеси для создания различно ориентированных *p-n*-переходов и уровня легирования, определяющего высоту энергетического барьера;
- с вариацией параметров двухслойного подзатворного диэлектрика (толщины и типа материала, включая инверсию слоев SiO_2 и Si_3N_4);
- с вариацией геометрических и электрофизических свойств затвора (высоты, ширины, уровня легирования и типа легирующей примеси);
- с вариацией геометрических параметров боковых изоляторов и типа их материала (оксида или нитрида кремния).

Литература

1. Тарнавский Г.А. Дистанционное компьютерное моделирование в Интернете – новая форма распространения знаний // Дистанционное и виртуальное обучение. 2010. № 4.
2. Тарнавский Г.А. Дистанционное обучение: раздел «Виртуальное проектирование наносистем» Интернет-центра компьютерного моделирования // Дистанционное и виртуальное обучение. 2010. № 8.
3. Тарнавский Г.А. Дистанционное обучение: тренинг-комплекс первого уровня раздела «Виртуальное проектирование наносистем» Интернет-центра компьютерного моделирования // Дистанционное и виртуальное обучение. 2010. № 11.
4. Тарнавский Г.А. Дистанционное обучение: тренинг-комплекс второго уровня раздела «Виртуальное проектирование наносистем» Интернет-центра компьютерного моделирования // Дистанционное и виртуальное обучение. 2011. № 5.
5. Тарнавский Г.А. Нанотехнологии в электронике: краткий обзор основных процессов производства современных микроэлектромеханических систем // Справочник. Инженерный журнал. 2008. №11.
6. Тарнавский Г.А. Облачные вычисления в Интернете // Информатика и образование. 2010. № 10.
7. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 1998. Т.32. № 1.

8. Асеев А.Л. Наноматериалы и нанотехнологии для современной полупроводниковой электроники // Российские нанотехнологии. 2006. № 1.
9. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов. М.: ЗАО РИЦ «Техносфера», 2002. Ч. 1.
10. Cressler J.D. Silicon Heterostructure Handbook. CRC Press Taylor & Francis Group, 2006.
11. Пахомов С.А. Производство микропроцессоров Intel // Компьютер Пресс. 2002. № 4.
12. Пахомов С.А. Революция в производстве транзисторов // Компьютер Пресс. 2004. №1.
13. Пахомов С.А. Новый прорыв в 65-нанометровом технологическом процессе // Компьютер Пресс. 2004. № 11.
14. Пахомов С.А. Процессорная микроархитектура Intel следующего поколения // Компьютер Пресс. 2008. № 8.
15. Адамов Д.Ю., Матвеев О.С. Усовершенствование структур МОП-транзисторов в нанометровых технологиях // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 2.
16. Мустафаев Ар.Г., Мустафаев Аб.Г. Проблемы масштабирования затворного диэлектрика для МОП-технологий // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 4.
17. Майская В. Транзисторы компании Intel с тройным затвором. Закон Мура по-прежнему справедлив // Электроника: наука, технология, бизнес. 2006. № 7.

Tarnavskiy G.A.

The Institute for Calculating Mathematics and Mathematical geophysical of SO of the Russian Academy of Sciences

A description of a segment 'Computer Calculations-3' of the section 'Silicon Electronics: Virtual Nanosystems Design' by the Center for Computer Simulation SciShop.ru is given. This segment is developed for the third level of training and a practical training of computer constructing of nanomaterials for electronics.

Key words: distance education, a virtual training, a remote access, computer simulation, nanotechnologies and nanomaterials.