

低温半导体器件模拟的误差限方法*

曹俊诚

(中国科学院上海冶金研究所 上海 200050)

魏同立

(东南大学微电子中心 南京 210018)

摘要 本文从数值方法和求解变量的物理意义两主面出发,提出了适用于低温半导体器件计算机模拟的误差限方法,并且将该方法插入 MINIMOS4.0 进行了数值实验.结果表明,设置误差限方法能保证低温半导体器件模拟的数值敛性,并且有较快的收敛速度.

EEACC: 2560B, 0290

1 引言

低温双极和 MOS 技术在超高速计算机、雷达设备和卫星系统等领域日益显示出其十分重要的应用前景^[1,2],并成为高速 VLSI 的技术基础.计算机模拟则是研究和设计低温器件的有力手段,本文对低温器件计算机模拟方法作了具体的考虑.一般说来,常温半导体器件计算机模拟方法不能直接用于低温器件模拟,其主要原因之一是低温下的物理参数模型有较大变化,包括迁移率模型、载流子冻析模型和禁带宽度模型等^[3],另外由参数模型的变化,不同粒子浓度之间数量级相差急剧增大,低温下数值溢出现象更为严重,收敛性能变得较常温下更坏,从而低温器件模拟需要更有效的数值方法.文献[4,5]采用了一系列加速收敛的数值技术,典型的有阻尼因子法,改进的 Gummel 方法和混合求解法等.它们有较快的收敛速度,但是同时在预处理时会大大增加计算量,如阻尼因子的确定就需要复杂的计算,且常常是针对具体问题经验性的确定.本文从数值方法和求解变量的物理意义出发,提出了适用于低温半导体器件计算机模拟的误差限方法.事实上,从半导体物理意义看,数值计算结果事先有一个定性范围,如果每一次循环的迭代初值都修正到这个数值范围内,那么迭代过程将以更快的速度接近真解.数值例子表明,设置误差限方法能保证低温器件模拟的收敛性,并且有较快的收敛速度.

* 国家自然科学基金资助项目

曹俊诚 男,1967 年生,博士后,当前主要从事半导体输运理论的研究

魏同立 男,1934 年生,教授,博士生导师,主要从事半导体物理与半导体器件物理理论研究

1993 年 10 月 11 日收到初稿,1994 年 5 月 15 日收到修改稿

2 模型分析

稳态半导体器件模型为

$$\begin{aligned}\epsilon \operatorname{div}(\operatorname{grad} \Psi) &= -q(N_D^+ - N_A^- - n + p) \\ J_n &= q\mu_n \operatorname{grad} \Psi + qD_n \operatorname{grad}(n), \operatorname{div} J_n = R \\ J_p &= q\mu_p \operatorname{grad} \Psi - qD_p \operatorname{grad}(p), \operatorname{div} J_p = -R\end{aligned}\quad (1)$$

其中电势 Ψ 、载流子浓度 n 和 p 为求解变量. 数值求解模型(1)的步骤是:

- A 物理参数模型代入方程(1)并将方程归一化
- B 网格部分, 网格点的排序
- C 离散方程的形成及线性化
- D 解线性化方程组
- E 后处理

从数值计算角度看低温下和常温下计算机模拟主要不同之处在步骤 A 和步骤 D, 温度变量陷含在物理参数 N_D^+ 、 N_A^- 、 $\mu_{n/p}$ 、 $D_{n/p}$ 、 n_i 和 E_g 中, 这些物理参数在低温下的表达式参见文献[3]. 由于低温冻析效应的影响, 上述物理参数值较常温下有较大变化, 掺杂浓度部分离化, 迁移率有近十倍的增加, 而 $n_i(300\text{K})/n_i(77\text{K})$ 的量级在 10^{26} 左右, 这些变化导致步骤 D 中线性化方程组系数矩阵的条件数增大, 收敛性能变坏.

这里给出本征载流子浓度 n_i 的计算^[6]. 在一般掺杂下, 我们得到

$$\begin{aligned}n_i^2 &= C_2 T^{n_1} \exp(-E_{g1}(0)/kT) \quad (150\text{K} < T \leq 300\text{K}) \\ n_i^2 &= C_2 T^{n_2} \exp(-E_{g2}(0)/kT) \quad (70\text{K} < T \leq 150\text{K})\end{aligned}$$

其中 $C_1 = 1.42 \times 10^{31} \text{cm}^{-6} \cdot \text{K}^{-3}$, $C_2 = 7.70 \times 10^{31} \text{cm}^{-6} \cdot \text{K}^{-3}$,

$$n_1 = 4.069, \quad n_2 = 3.705,$$

$$E_{g1}(0) = 1.17323\text{eV}, \quad E_{g2}(0) = 1.17102\text{eV}$$

在重掺杂的简并半导体中, 杂质浓度很高, 杂质原子之间互相很靠近, 被杂质原子束缚的载流子的波函数显著重叠, 杂质能级展宽为杂质能带, 并进入导带和价带, 结果使禁带宽度减小了 ΔE_g .

$$\Delta E_g = [\ln(N_A/N_0) + \sqrt{\ln^2(N_A/N_0) + 0.5}] \times 9 \times 10^{-3}, (\text{P 型硅})$$

其中 $N_0 = 1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

当 $N_A > 1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 时

$$\Delta E_g = 1.80 \times 10^{-2} \ln(N_A/N_0)$$

$$n_i^2 = n_{i0}^2 (N_A/N_0)^{1.80 \times 10^{-2}/kT}$$

经过计算得到 77K 和 300K 本征载流子浓度的值(表 1)

从表 1 看出, 由于低温载流子冻析效应的作用, 本征载流子浓度急剧下降, 而禁带宽度

变窄效应使其下降速度稍微减小. 量级变化最大的如 $n_i(300\text{K})/n_i(77\text{K})=10^{37}$, 这将导致线性代后的方程组矩阵条件数急增. 本文采用

$$N_s = \sqrt{4.8 \times 10^{22} n_i(T)}$$

作为 n, p 和 N_A, N_B 的归一化因子, 较好地克服了数值溢出现象, 其中 $4.8 \times 10^{22}(\text{cm}^{-3})$ 为硅原子密度.

表 1 考虑禁带变窄效应的本征载流子浓度的计算值

$N_A(\text{cm}^{-3})$	1×10^{18}	5×10^{18}	1×10^{19}	5×10^{19}	1×10^{20}	5×10^{20}
$n_i(300\text{K})$	3.02×10^{10}	5.28×10^{10}	6.17×10^{10}	1.17×10^{10}	1.49×10^{11}	2.60×10^{11}
$n_i(77\text{K})$	5.19×10^{-18}	4.06×10^{-17}	1.03×10^{-16}	9.09×10^{-16}	2.32×10^{-15}	2.04×10^{-14}

3 误差限方法

离散方程线性化后, 每一次迭代增量定义为

$$\begin{aligned} \Delta\Psi(i, j) &= \Psi^m(i, j) - \Psi^{m-1}(i, j) \\ \Delta n(i, j) &= n^m(i, j) - n^{m-1}(i, j) \\ \Delta p(i, j) &= p^m(i, j) - p^{m-1}(i, j) \end{aligned}$$

这里 (i, j) 是网格点, m 是 Gummel 或 Newton 循环迭代数, 增量 $\Delta\Psi, \Delta n$ 和 Δp 也叫误差.

从半导体物理意义看, 真值 $\Psi(i, j)$ 和迭代初值 $\Psi_0(i, j)$ 之差有一个定性的值, 设为 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$, 如果两次迭代增量超出 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$, 这时适当修正下一次迭代的初值. 修正值取为:

$$\Delta\Psi' = \begin{cases} -\Delta\Psi_{\text{lim}} & \Delta\Psi \leqslant -\Delta\Psi_{\text{lim}} \\ \Delta\Psi & -\Delta\Psi_{\text{lim}} < \Delta\Psi < \Delta\Psi_{\text{lim}} \\ \Delta\Psi_{\text{lim}} & \Delta\Psi \geqslant \Delta\Psi_{\text{lim}} \end{cases} \tag{2}$$

这里 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$ 称为误差限. 选择合适的 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$ 对于收敛性能影响是本质的, 若 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$ 选得过小, 每次迭代后的值变化小, 接近真解的速度就慢, 若 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$ 过大, 显然限制就变得无效.

对于非简并材料, 平衡条件下的电流密度为零, 载流子浓度由 Boltzmann 近似给出

$$n = n_i \exp[q(\Psi - \Phi_F)/kT] \tag{3}$$

其中 Φ_F 是平衡条件下的 Fermi 势. 由(3)式得

$$n^m(i, j)/n^{m-1}(i, j) = \exp[q\Delta\Psi(i, j)/kT] \tag{4}$$

对迭代增量 $\Delta\Psi(i, j)$ 采用修正值 $\Delta\Psi'$ 取代, 则得到 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$ 与电子浓度有下列近似关系:

$$n^m(i, j)/n^{m-1}(i, j) = \exp(\pm q\Delta\Psi_{\text{lim}}/kT) \tag{5}$$

从半导体物理意义知电子浓度的量级在 10—20 之间, 所以 $n^m(i, j)/n^{m-1}(i, j)$ 的范围是

$$10^{-r} < n^m(i, j)/n^{m-1}(i, j) < 10^r \tag{6}$$

这里 $r=1-10$.

由(5)和(6)得

$$\Delta\Psi_{\text{lim}} = (\ln 10)rkT/q$$

以 $r=5$ 为例, $\Delta\Psi_{\text{lim}}(300\text{K})=0.30\text{V}$, $\Delta\Psi_{\text{lim}}(77\text{K})=0.076\text{V}$. 从 $\Delta\Psi_{\text{lim}}$ 的值可以看出, 低温下的收敛速度较常温下变得更慢.

以上为电位误差限制方法, 同样可以采用载流子浓度误差限制方法.

4 数值例子

把误差限方法 LPI(电位误差限制)和 LCI(载流子浓度误差限制)插入 MINIMOS4.0, 计算流程如图 1. 得到一个 NMOS 电位分布和电子浓度分布(见图 2,3). 该器件沟道长度为 $1\mu\text{m}$, $U_D=5\text{V}$, $U_G=2\text{V}$, 模拟温度为 77K. 计算表明, 采用 PLI 和 LCI 方法迭代次数明显减小, 收敛速度加快.

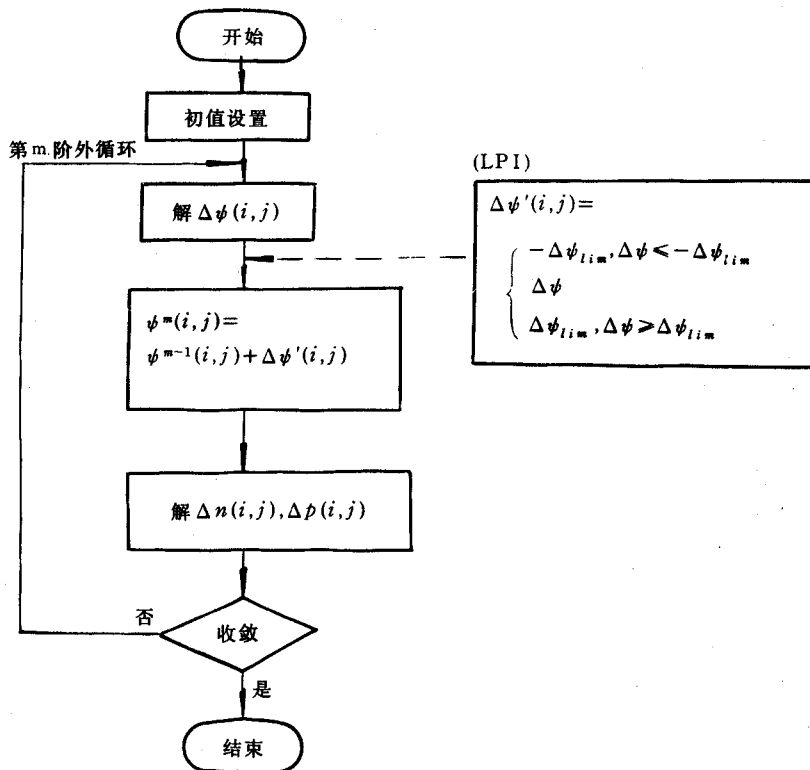


图 1 插入误差限制的 Gummel 算法框图

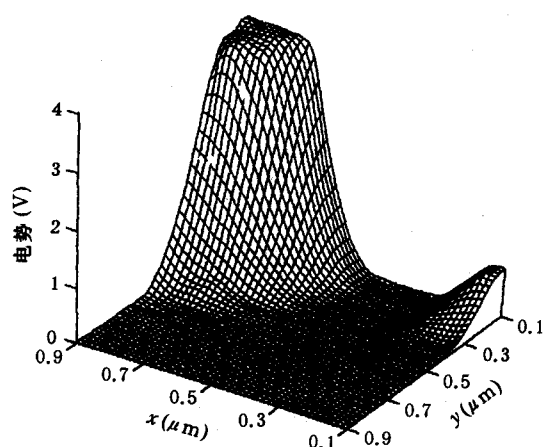


图 2 77K NMOS 电位分布

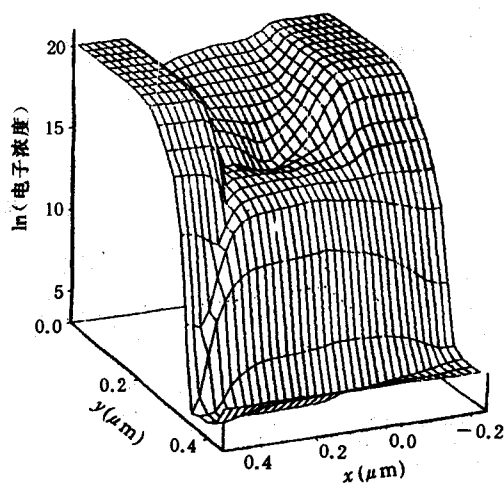


图 3 77K NMOS 电子浓度分布

参 考 文 献

- [1] D. M. Carlson, IEEE Trans. on Electron Devices, 1989, ED-36(8):1404.
- [2] 郑荭, 魏同立, 大自然探索, 1991, 10(4):33.
- [3] S. Selberherr, IEEE Trans. on Electron Devices, 1989, ED-36(8):1464.
- [4] S. Selberherr, Analysis and Simulation of Semiconductor Devices, Springer-Verlag Wien, New York, 1984.
- [5] C. A. Ringhofer, IEEE Trans CAD, 1988, 7(2):251.

Increment Limit Method for Semiconductor Device Simulation at Low Temperature

Cao Juncheng and Wei Tongli

(Microelectronics Center, Southeast University, Nanjing 210018)

Received 11 October 1993, revised manuscript received 15 May 1994

Abstract The increment limit method suitable for semiconductor device simulation at low temperature is presented from both numerical and physical view. Computer test for this method is carried out by MINIMOS4.0 Numerical results show that the increment limit method is convergent fast for 77K device simulation.

EEACC: 2560B, 0190