

半导体器件的 计算机模拟方法

何 野 魏同立 编著

科学出版社

半导体器件的 计算机模拟方法

何 野 魏同立 编著

科 学 出 版 社

1 9 8 9

内 容 简 介

本书系统地阐述了半导体器件的计算机模拟方法和模拟过程。全书共九章,分为三个部分。前三章介绍基本的器件模型方程及在计算机模拟中经常使用的有限差分法、有限元法和蒙特卡罗方法;第四至第七章分析了半导体 PN 结二极管、双极型晶体管、MOS 器件,以及 MESFET 的模拟问题,对稳态模拟、瞬态模拟、一维模拟、二维模拟和三维模拟以及模拟结果均进行了详细讨论。最后两章介绍了计算机模拟技术在半导体器件及集成电路研制中的应用。

本书既可以作为大专院校微电子学、计算机和应用数学专业高年级学生及研究生的选修教材或教学参考书,也可供集成电路研制及计算机应用领域的科技人员参考。

半导体器件的计算机模拟方法

何 野, 魏同立 编著

责任编辑 魏 玲

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100701

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1989 年 12 月 第 一 版 开本: 787×1092 1/32

1989 年 12 月 第一次印刷 印张: 11

印数: 0001—1350 字数: 248 000

ISBN 7-03-001293-3/TN·68

定 价: 10.20 元

前 言

随着微电子技术的迅速发展,大规模集成电路器件的尺寸越来越小,多维效应越来越显著,传统的设计方法已不能满足器件设计的需要,计算机辅助设计(CAD)技术成为分析与设计大规模和超大规模集成电路的重要手段。半导体器件的计算机模拟技术是CAD技术的重要组成部分,它在半导体器件的物理分析、新型结构器件的预研、超大规模集成电路的设计和优化等许多方面均有较高的实用价值,因而受到了科技人员的普遍重视,并得到了日益广泛的应用。

几年来,由于科研和教学工作的需要,在半导体器件的计算机模拟方面,我们做了一些工作,在此基础上,于1986年为我校研究生编写了半导体器件计算机模拟技术的讲义。本书即是在原讲义的基础上,经过几次修改、完善、补充而成。

本书内容力图覆盖所有重要半导体器件的数值模拟技术,其中包括最近几年发展起来的新方法和新观念,并介绍了半导体器件计算机模拟技术在大规模集成电路中的某些应用。考虑到微电子工作者们的自学需要,本书在结构安排上力求由浅入深,略去不必要的数学描述,侧重于模拟技术的讨论。

本书共九章,分为三个部分。第一部分介绍半导体器件计算机模拟的物理和数学基础(第一、二、三章);第二部分介绍常见半导体器件的数值模拟技术(第四、五、六、七章),并结合各种数值技术(有限元法、有限差分法、粒子模拟方法等)对双极型器件、MOS器件、GaAs MESFET作了重点分析,当

然，其方法和思想也可以推广应用于其它各类半导体器件的数值分析；第三部分介绍了半导体器件数值模拟技术在集成电路设计、制备中的某些应用(第八、九章)。

本书的出版得到了国家自然科学基金的资助，同时，也得到了我校微电子中心的大力支持。清华大学微电子所的陈天鑫副教授对本书进行了认真的审阅，并提出了宝贵的修改意见。在此一并表示衷心的感谢。书中谬误之处恳请读者批评指正。

何野 魏同立

1988 年 5 月

于南京 东南大学

目 录

第一章 半导体器件数值模拟引论.....	1
1.1 引言	1
1.2 半导体器件模拟的分类	2
1.3 半导体器件模拟的基本方程	4
1.3.1 常规 VLSI 器件的模型方程	4
1.3.2 小尺寸 VLSI 器件的模型方程	8
1.4 半导体器件的分级模拟	10
参考文献.....	13
第二章 有限差分法和有限元法.....	14
2.1 有限差分法	14
2.2 有限元法	19
2.3 高阶稀疏线性方程组的解法	24
2.3.1 迭代方法	24
2.3.2 直接求解方法	34
参考文献.....	40
第三章 蒙特卡罗方法.....	41
3.1 用蒙特卡罗方法解题的一般步骤及收敛特性	41
3.2 随机数与伪随机数	44
3.3 伪随机数的检验	47
3.3.1 参数检验	47
3.3.2 均匀性检验	48
3.4 随机变量抽样	50
3.4.1 直接抽样	50
3.4.2 变换抽样	51
3.4.3 舍选抽样	53

3.4.4 复合抽样与近似抽样	55
3.4.5 若干重要例子	56
3.5 统计试验方法与确定性数值方法的结合	59
参考文献	61
第四章 PN 结二极管的数值分析	62
4.1 基本模型方程及边界条件	62
4.2 PN 结器件的一维稳态数值模拟	66
4.3 PN 结器件的一维瞬态模拟	82
4.4 实际器件的模拟分析	90
4.4.1 电压源激励的瞬态分析	90
4.4.2 满足外部电路条件的瞬态分析	92
4.5 PN 结二极管的两维稳态分析	95
4.5.1 模型方程的有限箱式法离散	95
4.5.2 离散化的偏微分方程系统的求解	104
4.5.3 高压 PN 结二极管的实际模拟结果	108
参考文献	110
第五章 双极型晶体管的数值模拟	111
5.1 双极型晶体管的一维模拟	111
5.1.1 双极型晶体管的一维模型	111
5.1.2 双极型晶体管的一维数值模拟方法	116
5.2 半导体器件多维模拟简介	120
5.3 双极型器件的二维稳态模拟	123
5.3.1 模型方程、边界条件及其离散化	124
5.3.2 非线性模型方程的线性化处理及求解	131
5.3.3 双极型晶体管二维模拟的实例分析	136
5.4 双极型器件的二维瞬态模拟	143
5.4.1 瞬态分析的模型及模拟方法	143
5.4.2 实际器件的数值计算	155
5.5 双极型器件的三维稳态模拟	158
参考文献	166

第六章 MOS 器件的数值分析	167
6.1 MOS 器件的一维模拟	167
6.2 MOS 器件的二维稳态模拟	169
6.2.1 有限元 MOS 器件的二维稳态模拟	169
6.2.2 MOS 器件二维模拟的其它方法	194
6.2.3 MOS 器件的二维稳态模拟结果	212
6.3 MOS 器件的二维瞬态模拟	223
6.3.1 瞬态分析的模型及变量	223
6.3.2 数值模拟的方法	225
6.3.3 模拟结果及讨论	230
6.4 MOS 器件的三维稳态模拟	233
6.4.1 器件模型	233
6.4.2 计算方法	234
6.4.3 MOS 器件的三维模拟结果与讨论	238
参考文献	243
第七章 GaAs MESFET 的计算机分析	245
7.1 蒙特卡罗粒子模拟的引入	245
7.2 GaAs MESFET 的蒙特卡罗粒子模型	247
7.2.1 粒子模型的能带结构和散射机制	248
7.2.2 粒子模型中的力 F	255
7.3 粒子模拟	260
7.3.1 粒子模拟的基本考虑	260
7.3.2 粒子的模拟方法与讨论	262
7.3.3 粒子模拟方案与模型方程的等价性	276
7.4 蒙特卡罗粒子模拟的结果与讨论	281
7.4.1 器件的内部物理参数及端点特性	281
7.4.2 器件的噪声	285
参考文献	286
第八章 计算机模拟在半导体器件研制中的应用	288
8.1 新型结构器件的计算机研究	288

8.2 器件/工艺优化	295
8.2.1 器件/工艺优化的基本思想	295
8.2.2 器件/工艺优化的数学方法	297
8.2.3 器件/工艺优化的结果及讨论	300
8.3 器件最佳设计	303
8.3.1 磁敏 MOS 器件的计算机分析及其数值方案 ...	303
8.3.2 磁敏 MOS 器件的最佳设计及讨论	310
参考文献	313
第九章 计算机模拟在大规模集成电路设计、分析及制 备中的应用.....	314
9.1 VLSI 器件设计规则的检验	314
9.1.1 VLSI 器件常用设计规则简介	314
9.1.2 按比例缩小规则的应用限制	318
9.2 大规模集成电路工艺统计模拟	326
9.2.1 生产工艺流程的统计分析	326
9.2.2 集成电路统计设计	335
参考文献	340

第一章 半导体器件数值模拟引论

1.1 引言

半导体器件的数值模拟是指这样的过程：对所研究的半导体器件建立或选用合适的物理模型，并对其抽象得到相应的数学表述，然后利用适当的数值方法开发计算机软件，并赋以器件的工艺、几何尺寸、电学等方面的模型参数，进行计算机计算，得到器件的特性及其内部的物理图象。

半导体器件模拟的概念起源于肖克莱 (Shockley) 1949 年发表的论文，这篇文章奠定了结型二极管和晶体管的基础。从一组微分方程出发，肖克莱得到了半导体器件的特性。以后，古默尔 (Gummel) 首先用数值方法代替解析方法模拟了一维双极晶体管^[1]，从而使半导体器件模拟向计算机化迈进。随着大规模集成电路 (LSI) 的诞生和发展，器件的尺寸越来越小，多维效应越来越显著，因而相应地，器件模拟工作者们的主要注意力也逐渐放在二维及三维模拟上了。近年来，作为研究器件物理、预研新型结构器件的有效工具，半导体器件计算机模拟技术已成为大规模集成电路进一步发展的前沿学科之一，并得到了日益广泛的应用。

众所周知，半导体器件的新型结构的传统研究方法是以实验为基础的，即首先要建立适当的工艺程序，然后进行试制并完成器件的检测，再与初始设计的指标比较，看是否符合要求，若不符合则须重新修改工艺程序和器件结构的参数，并进行新的试制过程。这种研究方法往往包括许多次从工艺试制

到测试比较的循环。随着集成电路复杂性的不断增加,传统的研究方法已不适应,因而发展了计算机辅助设计技术。实践证明,在工艺和器件的研究与发展中,使用完美的器件模拟方法是有效且经济的。

例如,CMOS 工艺过程可以包括九个光刻步骤、六个离子注入步骤和几个扩散、退火及氧化步骤。在中型计算机上,人们能够模拟所有关键的工艺步骤,相应的器件性能的获得仅是几分钟、几小时的事情,而传统的试制周期则长得多。

由于超大规模集成电路(VLSI)器件及电路的性能与工艺条件密切相关,因而,器件模拟与工艺模拟必须互相结合。为节省篇幅,本书并不打算讨论工艺模拟的细节,而假定器件模拟中所有有关工艺的信息(如掺杂分布等)已由精确的工艺模拟软件获得。事实上,本书介绍的许多数值方法基本上也适用于工艺模拟。

器件模拟尽管属于 CAA (计算机辅助分析)的范畴,但由于与 CAD (计算机辅助设计)技术紧密相关,因而常归类于器件的 CAD 技术。

1.2 半导体器件模拟的分类

半导体器件的计算机模拟可以从不同的角度作如下分类:从器件模拟的空间维数划分,可分为一维、二维及三维;从器件模拟与时间的关系划分,可分为瞬态模拟和稳态模拟;从器件模拟应用的物理模型划分,可分为经典模型、半经典模型和全量子模型(见下节);从模拟的对象划分,可分为 MOS 器件模拟、双极型器件模拟、GaAs MESFET 模拟、传感器件模拟以及其它半导体器件模拟。表 1.1 给出了器件模拟的基本分类,实际上,近年来由于器件模拟技术的发展,这些类别

表 1.1 半导体器件计算机模拟分类

类别	MOS 器件	双极型器件	GaAs MESFET	传感器件及其它
基本模型方程	泊松方程、电流连续性方程或玻耳兹曼方程	泊松方程、电流连续性方程	泊松方程、电流连续性方程或玻耳兹曼方程	麦克斯韦方程组、电流连续性方程以及其它模型方程
维数	1—3 维	1—3 维	1—2 维	1—2 维
数值处理方法	有限元法、有限差分法或蒙特卡罗法	有限元法或有限差分法	有限元法、有限差分法或蒙特卡罗法	有限元法或有限差分法
非线性偏微分方程组求解技术	耦合方法、非耦合方法或粒子模拟方法	耦合方法或非耦合方法	耦合方法、非耦合方法或粒子模拟方法	耦合方法、非耦合方法等
物理模型	经典模型或半经典模型	经典模型	经典模型或半经典模型	经典模型

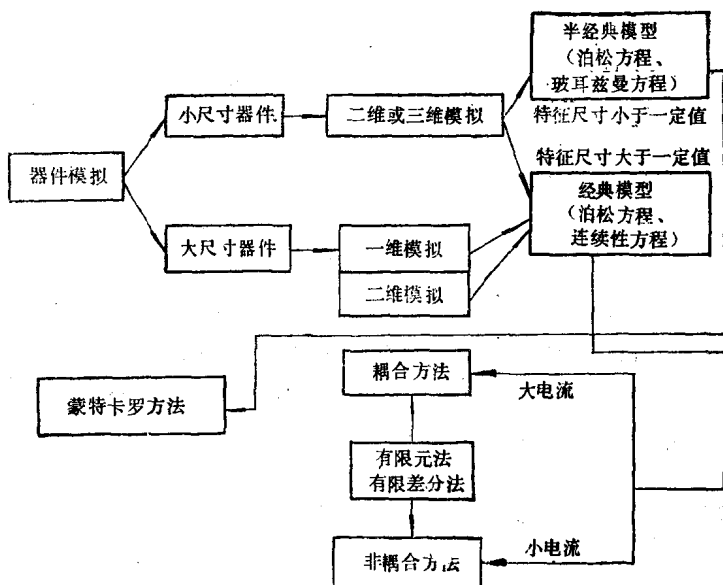


图 1.1 各划分方法之间的内在联系

间的界限也模糊起来，图 1.1 给出了这些划分方法之间的内在联系。

1.3 半导体器件模拟的基本方程

1.3.1 常规 VLSI 器件的模型方程

对于常规 VLSI 器件以及其它各种频率不太高、特征尺寸不太小的半导体器件，在外部电场作用下，描述器件特性的模型方程可以分成三部分：麦克斯韦方程组、电流密度方程和电流连续性方程。

一、麦克斯韦方程组

麦克斯韦方程组是半导体器件中所有电磁现象的基础：

$$\nabla \times \mathbf{E}_t = - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}_{\text{传导}} = \mathbf{J}_{\text{总电流}} \quad (1.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.4)$$

式中电位移矢量 $\mathbf{D}$ 和电场矢量 $\mathbf{E}_t$ 的关系为 $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}_t$ (ϵ 是半导体介电常数)，磁感应强度 $\mathbf{B}$ 和磁场强度 $\mathbf{H}$ 的关系为 $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$ (μ 是半导体磁导率)， ρ 是电荷密度。

一般情况下，我们感兴趣的是泊松方程，它描述了整个空间的电荷与电场梯度的关系：

$$\epsilon \nabla \cdot \mathbf{E}_t = -\epsilon \nabla^2 \varphi = \rho \quad (1.5)$$

这里 $\rho = -q(n - p - N^-)$ ， $N = N_a^+ - N_d^-$ 是离化的净掺杂浓度， N_a^+ 和 N_d^- 分别是离化的施主和受主杂质浓度， q 是单位电荷电量， n 和 p 分别是电子浓度和空穴浓度， φ 是电位。

二、电流密度方程

电子和空穴的电流密度包括漂移分量和扩散分量，可分别表示为

$$J_n = q\mu_n n E_i + qD_n \nabla n \quad (1.6)$$

$$J_p = q\mu_p p E_i - qD_p \nabla p \quad (1.7)$$

式中 μ_n 和 μ_p 分别是电子和空穴的迁移率， D_n 和 D_p 是相应的扩散系数，扩散系数与迁移率由爱因斯坦关系所联系：

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n, \quad D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (1.8)$$

对于非简并材料，平衡条件下的电流密度为零，载流子浓度由玻耳兹曼近似给出：

$$n = n_i \exp \left[\frac{q(\varphi - \phi_F)}{kT} \right] \quad (1.9)$$

$$p = n_i \exp \left[\frac{q(\phi_F - \varphi)}{kT} \right] \quad (1.10)$$

其中 n_i 是本征载流子浓度， ϕ_F 是平衡条件下的费米势。从式(1.9)和(1.10)可得出平衡条件下的关系式：

$$np = n_i^2 \quad (1.11)$$

在非平衡条件下，电子和空穴浓度偏离平衡值，它们的费米势不再能由单一的 ϕ_F 表示。然而，我们可以引入电子准费米势 ϕ_n 和空穴准费米势 ϕ_p ，得到

$$n = n_i \exp \left[\frac{q(\varphi - \phi_n)}{kT} \right] \quad (1.12)$$

$$p = n_i \exp \left[\frac{q(\phi_p - \varphi)}{kT} \right] \quad (1.13)$$

相应地，式(1.11)所示的关系由下式代替：

$$np = n_i^2 \exp \left[\frac{q(\phi_p - \phi_n)}{kT} \right] \quad (1.14)$$

准费米势的差表征了 np 乘积与它的平衡值的偏离。用式 (1.8)、(1.12)、(1.13) 改写式 (1.6)、(1.7)，可得出用准费米势表示的电流密度：

$$J_n = -q\mu_n n \nabla \phi_n \quad (1.15)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla \phi_p \quad (1.16)$$

实际上，某些半导体器件中需要重掺杂，如双极型晶体管的发射区，掺杂浓度需要高于 10^{19} cm^{-3} 。重掺杂对半导体器件的特性影响很大，并可引起禁带变窄、俄歇复合等效应，这些效应的物理机理很复杂，目前尚不能进行深入的定量分析。为了在半导体器件模拟中能有效地考虑重掺杂效应，可以用有效本征载流子浓度 n_{ie} 代替本征载流子浓度 n_i ，并继续使用原来的物理模型方程。 n_{ie} 与 n_i 的关系为

$$n_{ie} = n_i \exp\left(-\frac{\Delta E_f}{kT}\right) \quad (1.17)$$

式中 ΔE_f 描绘了禁带变窄。相应地，载流子浓度可表示为

$$n = n_{ie} \exp\left[\frac{q(\phi_n - \phi_s)}{kT}\right] \quad (1.18)$$

$$p = n_{ie} \exp\left[\frac{q(\phi_p - \phi)}{kT}\right] \quad (1.19)$$

三、电流连续性方程

电子和空穴的电流连续性方程为

$$-\frac{1}{q} \nabla \cdot J_n - G_n + R_n + \frac{\partial n}{\partial t} = 0 \quad (1.20)$$

$$\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p - G_p + R_p + \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (1.21)$$

这里 G_n 、 G_p 分别是由碰撞离化以及外部辐射等引起的电子和空穴的产生率， R_n 、 R_p 分别是电子和空穴的复合率。一般

$$G - R = (G - R)_{\text{热学}} + (G)_{\text{雪崩}} + (G - R)_{\text{俄歇}} \quad (1.22)$$

式中 $(G - R)_{\text{热学}}$ 描述了在体内和表面的肖克莱-里德-霍尔 (Shockley-Read-Hall:SRH) 复合, $(G)_{\text{雪崩}}$ 代表由雪崩离化而引起的载流子产生项, $(G - R)_{\text{俄歇}}$ 表示俄歇现象的贡献。对于硅材料, $(G - R)_{\text{热学}}$ 可以表示为

$$(G - R)_{\text{热学}} = \frac{n_i^2 - pn}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + p_i)} \quad (1.23)$$

式中 τ_n 、 τ_p 分别表示电子、空穴寿命, n_i 和 p_i 与禁带中的复合中心能级有关, 最有效的复合中心能级位于禁带中央, 这时 $n_i = p_i = n_i$ 。 $(G)_{\text{雪崩}}$ 可表示为

$$(G)_{\text{雪崩}} = \frac{1}{q} (\alpha_n |J_n| + \alpha_p |J_p|) \quad (1.24)$$

式中 α_n 和 α_p 分别是电子和空穴的离化系数, 它们与电场有关:

$$\alpha_n(\alpha_p) = A \exp \left[- \left(\frac{b}{|E_t|} \right)^m \right] \quad (1.25)$$

表 1.2 给出了硅器件的离化常数 A 、 b 和 m 的值。

表 1.2 离化常数表

载流子 \ 常数	$A(\text{cm}^{-1})$	$b(\text{V/cm})$	m
电 子	3.8×10^7	1.75×10^6	1
空 穴	2.25×10^7	3.26×10^6	1

俄歇复合是离化的反过程, 它与三个粒子有关。在俄歇复合中, 电子-空穴对复合并释放能量给第三个粒子。由于俄歇复合的几率正比于所涉及的粒子密度, 所以 $(G - R)_{\text{俄歇}}$ 可写为

$$(G - R)_{\text{散}} = (n_i^2 - pn)(c_n n + c_p p) \quad (1.26)$$

式中 c_n 和 c_p 是俄歇系数。

上面给出的器件模型方程是建立在经典理论基础上的，所以被称为经典模型方程，相应的模型被称为经典模型。由于电流密度方程计入了漂移和扩散分量，因而该模型也被称为漂移-扩散模型。

1.3.2 小尺寸 VLSI 器件的模型方程

当半导体器件的特征尺寸小到一定值时，再用经典模型描述器件特性就会产生很大的误差，并且，对于许多物理现象，如 MOS 器件中的热载流子发射和电子速度过冲等非线性输运现象，也无法解释。因此必须建立更完善的物理模型。当器件的特征长度（如场效应器件的栅长度）达到一定值（Si 器件为 $0.1\mu\text{m}$ ，GaAs 器件为 $0.5\mu\text{m}$ ）时，在经典模型方程中需用玻耳兹曼方程代替电流连续性方程。玻耳兹曼方程的形式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f - \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \sum_{\mathbf{k}'} \{f(\mathbf{k}')P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(\mathbf{k})P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\} \quad (1.27)$$

式中 f 是载流子分布函数， $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ， h 是普朗克常数， $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 是单位时间载流子波矢从 $\mathbf{k}$ 变到 $\mathbf{k}'$ 的几率， $\mathbf{v}$ 是载流子速度（不是漂移速度）矢量， $\mathbf{F}$ 是作用在载流子上的力

$$\mathbf{F} = \pm q \left(\mathbf{E}_l + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) - \nabla_{\mathbf{r}} E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \quad (1.28)$$

$\mathbf{E}_l$ 是电场， c 是光速， $\mathbf{r}$ 是位置矢量， $\mathbf{p}$ 是动量矢量， $E(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ 是载流子能量。式 (1.28) 右边第一项是外部电场和磁场引起的作用力，第二项是由于固体内部（如声学波引起的）能