



全国高技术重点图书·微电子技术领域

叶良修 编著

微  
电  
子  
学  
丛  
书

# 小尺寸半导体器件的 蒙特卡罗模拟

科学出版社

101012

微电子学丛书

小尺寸半导体器件的  
蒙特卡罗模拟

叶良修 编著

科学出版社

1997

## 内 容 简 介

本书系统介绍了半导体器件和半导体中载流子输运性质的蒙特卡罗模拟。全书共六章,内容包括关于载流子的输运现象及在小尺寸器件中采用蒙特卡罗方法的优点的讨论;各种情形(单粒子模拟和多粒子模拟等)的蒙特卡罗模拟方法;各种能带情形下(非抛物性带、多谷带、价带等)的有关处理;随机事件的各种处理方法;关于器件蒙特卡罗模拟中各个侧面(包括器件模型、边界和界面问题、泊松方程求解等)的较详细的讨论;以及若干有关专门问题的讨论。

本书除对有关物理现象作了深入的讨论外,就实际模拟而言,有关内容又具有较强的可操作性,因而既可供在半导体器件及其模拟以及半导体输运性质研究方面的科技人员参考,也可作为高等院校有关专业本科生及研究生的参考书。

### 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟

叶良修 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:100717

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

\*

1997年2月第一版 开本:850×1168 1/32

1997年2月第一次印刷 印张:15 5/8

印数:1 1000 字数:407 000

ISBN 7-03-004826-1/TN·175

定价:38.00元

## 《微电子学丛书》编委会

顾问：黄 昆 林兰英 谢希德 王守武 王守觉  
童志鹏 李志坚 姜均露 王寿云

主 编：王阳元

编 委（以姓氏笔画为序）：

马俊如	万 群	王芹生	王永文	王阳元
王忠烈	仇玉林	白 丁	李佑斌	许居衍
许振嘉	陈星弼	陈 贤	汤小川	严晓浪
张义门	张利春	张 敏	郑敏政	宗祥福
洪先龙	俞忠钰	钱佩信	唐璞山	徐元森
徐雅文	徐筱棣	黄 敞	梁春广	梁骏吾
韩汝琦	熊和生	魏 玲	魏道政	

秘 书：赵宝瑛

## 《微电子学丛书》序

微电子学是源于并脱胎于固体物理和无线电电子学的一门新兴的边缘性技术学科。历史地说,1948年晶体管的发明、1958年采用硅平面工艺的集成电路的诞生和1971年微处理器的出现是微电子学发展史上的几个重要里程碑。经过46年的发展,微电子产业已成为战略性的基础产业,微电子科学技术已成为现代科学技术的关键技术基础。据统计,现在世界上65%的行业与微电子技术有关。二次大战后,美国正是抓住了以微电子技术为基础的电子信息技术,才使其经济迅速起飞的。日本和亚洲的一些国家和地区也都是抓住了这一点而使其经济振兴。按预测,一直到2020年,世界集成电路产业的产值仍将以年增长率13%的速度增长;技术上也仍保持着集成度年增长率为46%的速度继续发展。到2000年以微电子技术为基础的电子信息产业将成为世界第一大产业。因此,微电子科学技术乃是20世纪下半叶直到21世纪上半叶科学技术竞争的焦点。谁掌握了微电子技术,谁就掌握了主动权。当前,微电子产业规模和技术水平已成为衡量一个国家综合实力的主要标志之一。日本有人提出,把半导体工业总产值占工农业总产值的0.5%作为进入信息社会的标志,看来是不无道理的。

当前,我国微电子产业和科学技术的发展水平远不能适应国民经济和国防建设发展的需要。我国集成电路的市场份额只占世界集成电路市场的0.33%,与我国社会主义大国的地位极不相称。国内市场的占有率,无论是品种还是数量,也只占20%左右。我国微电子产业和科学技术的落后面貌已成为我国四个现代化建设的制约因素。党和国家的领导已把发展微电子作为一项战略措施放到了突出的地位。在这样的形势下,编写出一套高质量的、反

映世界微电子学发展前沿和我国微电子科学技术成果的丛书,必将促进我国微电子产业建设和科学技术的发展。

这套丛书不同于一般的通俗读物和科普读物,也不同于大学教材,它将是一套反映微电子学主要研究领域里学科发展前沿问题的著作,以满足微电子学领域里的研究部门、教育部门和产业部门的需要,成为工作在第一线科技人员的参考书。当然它也可成为大学生和研究生的教学参考书。我们要求每本著作都要具有科学性、先进性和实践性,而整套丛书又要有系统性。我们计划在“八五”期间开始出版,到2000年前出版10种左右。2000年后还要继续搞下去,使其成为跨世纪的产物。这个工作的意义不亚于建一个工厂,建一个研究所。

倡议编写这套丛书的是国防科工委微电子专业组、全国集成电路计算机辅助设计(ICCAD)专家委员会和ICCAT专家委员会的部分专家们,他们的倡议得到了全国各有关单位微电子专家的支持和赞同,从而形成了一个报告。这个报告得到当时任机械电子工业部电子科学研究所所长童志鹏教授的批准。因此,当我们庆贺微电子丛书开始出版的时候,要特别感谢童志鹏教授的睿智。编写丛书的倡议还得到了国家计委科技司,国防科工委科技委、预研局、四局,国家科委基础研究高技术司,原机械电子工业部微电子与基础产品司和科学出版社等有关领导的支持,使出版这套丛书的愿望得以实现。我们谨向上述领导部门表示由衷的谢意。

我们要感谢老一辈的科学家,我们的老师和有关领导部门的负责人,他们应聘担任丛书编委会的顾问,这对于保证丛书的学术质量将是十分重要的。我们相信,在他们的关心、支持和指导下,本丛书的出版必将能达到预期的目的。

担任本丛书编委的都是一批活跃在微电子领域科研、生产和教育单位的中青年科技专家,我们团结在一起,互相切磋、共同探索,必能攀登一个又一个科学高峰。

“书山有路勤为径,学海无涯苦作舟”。愿为丛书的出版而耕

耘不息。

我们期望得到同行们的更多指正,更多支持。

王阳元

于北京大学

1994年5月

## 前 言

众所周知,半导体器件特性的计算机模拟是研究和设计半导体器件的重要工具.在传统的器件模拟中,载流子的输运过程借助于常量迁移率或作为电场强度的函数的迁移率(或漂移速度)和扩散系数加以描述.但随着器件尺寸的日益减小和其中电场的不断增强,上述传统输运方法不再适用.在小尺寸器件中,各处电子的漂移速度并不简单是各处电场的函数,输运具有非本地的(或非驻定的)性质.而在具有强电场的小尺寸器件中,载流子的平均速度甚至可以发生过冲,即载流子可达到的平均速度可以显著超过对应于电场的稳态漂移速度.前者甚至可为后者的若干倍.

蒙特卡罗方法是模拟存在非本地输运的小尺寸器件特性的有效方法.由于这类器件中输运的非本地性质,对输运性质作认真的半经典描述必须回到关于载流子分布函数的玻耳兹曼方程.可以把基于模拟载流子无规运动的蒙特卡罗方法视为一种求解玻耳兹曼方程的方法.由于这种方法在解决输运问题上的可靠性以及它在概念上的简单和直观,蒙特卡罗方法在小尺寸器件的模拟中日益获得广泛的应用.这就是作者写作本书的动机.在本书第五章中,作者对蒙特卡罗模拟的各个侧面都作了相当详细的讨论.

在典型的蒙特卡罗器件模拟中,被模拟的粒子数常在一万个以上.对它们所经受的频繁的散射的处理是很费时间的.因此,蒙特卡罗方法是一种耗费大量机时的方法.减少蒙特卡罗处理所需要的时间对于这种方法的更为广泛的应用具有重要的意义.本书评述了各种加速蒙特卡罗处理的方法,特别是介绍了由作者及其合作者们所发展的快速确定自由飞行时间的方法——列表法以及快速处理各向异性散射的散射终态的近似方法——动量弛豫率近似和平均散射角近似等.我们的实践表明,采用这些快速处理方



法,可以使蒙特卡罗模拟所耗费的 CPU 时间成十倍地减少,但仍可得到相当满意的结果. 在本书第五章中还给出了采用上述方法时所需的各种散射的有关公式,因而具有较强的可操作性.

本书采用国际单位制,但保留习惯使用的单位.

作者特别感谢清华大学李瑞伟教授,他认真仔细地审阅了本书,并提出不少有价值的意见. 在本书的编写过程中,也得到了张绮香同志的许多帮助. 书中很多图是由杜海鲲同志计算并给出的,不少公式也请他进行了核算,在此一并表示感谢.

限于作者的水平,本书难免有不少错误和不妥之处,希望得到读者的指正.

叶良修

1994年6月

# 目 录

《微电子学丛书》序

前言

第一章 概论	( 1 )
1.1 蒙特卡罗模拟发展概况	( 1 )
1.2 蒙特卡罗模拟概述	( 5 )
1.3 输运方法概述	( 22 )
1.4 半导体器件发展中的载流子输运现象	( 42 )
参考文献	( 74 )
第二章 各种情形下的蒙特卡罗模拟	( 82 )
2.1 单粒子蒙特卡罗模拟	( 82 )
2.2 多粒子蒙特卡罗模拟	( 100 )
2.3 蒙特卡罗通量方法(散射矩阵法)	( 117 )
2.4 非抛物性能带	( 126 )
2.5 多谷带和卫星谷	( 130 )
2.6 价带空穴	( 135 )
2.7 混合晶体	( 145 )
2.8 二维电子气	( 153 )
参考文献	( 169 )
第三章 随机事件的处理	( 173 )
3.1 确定自由飞行时间的各种自散射方法	( 173 )
3.2 查表法求自由飞行时间	( 184 )
3.3 散射终态波矢的选择	( 188 )
参考文献	( 198 )
第四章 半导体器件的蒙特卡罗模拟	( 199 )
4.1 器件蒙特卡罗模拟概述	( 199 )
4.2 物理模型和物理参数	( 203 )
4.3 器件的几何模型	( 211 )

4.4	边界和界面 .....	(218)
4.5	网格划分、电荷分配、电场计算和时间步长选取 .....	(229)
4.6	自由飞行和散射的处理 .....	(238)
4.7	初始分布和收敛过程 .....	(245)
4.8	泊松方程求解 .....	(251)
4.9	固定电势分布的蒙特卡罗模拟 .....	(277)
4.10	杂化方法和区域蒙特卡罗模拟 .....	(288)
4.11	载流子稀有区的统计增强 .....	(294)
4.12	器件参数 .....	(298)
	参考文献 .....	(311)
<b>第五章 载流子的散射</b> .....		<b>(318)</b>
5.1	散射率 .....	(318)
5.2	电离杂质散射 .....	(325)
5.3	声学波形变势散射 .....	(342)
5.4	声学波压电散射 .....	(354)
5.5	光学波形变势散射和谷间散射 .....	(364)
5.6	极性光学波散射 .....	(370)
5.7	合金无序散射 .....	(383)
5.8	表面粗糙散射 .....	(387)
5.9	空穴的散射 .....	(391)
	参考文献 .....	(400)
<b>第六章 几个专门问题</b> .....		<b>(403)</b>
6.1	扩散、噪声和时间相关函数 .....	(403)
6.2	简并统计 .....	(417)
6.3	载流子间相互作用和等离子激元散射 .....	(422)
6.4	载流子-载流子散射 .....	(431)
6.5	全能带结构蒙特卡罗模拟 .....	(439)
6.6	碰撞电离 .....	(453)
	参考文献 .....	(461)
<b>附录 1 证明自散射的引入不改变真实散射的时间分布</b> .....		<b>(464)</b>

附录 2 证明单粒子模拟所得分布函数满足玻耳兹曼方程 .....	(466)
附录 3 玻耳兹曼方程和漂移扩散模型 .....	(468)
附录 4 异质界面电子的量子力学透射系数 .....	(470)
附录 5 几种半导体材料的物理参数 .....	(472)
参考文献.....	(474)
主题索引.....	(476)

# 第一章 概 论

## 1.1 蒙特卡罗模拟发展概况

众所周知,半导体器件特性的计算机模拟是器件研究和设计的重要工具.用适当的计算机程序来计算器件特性随有关结构参数和物理参数的变化常常比相应的实验研究更为经济、快捷和方便.对常规器件的模拟早已获得了广泛的应用<sup>[1-8]</sup>.近年来,由于高速度的小尺寸器件的发展,半导体器件的传统模拟方法,由于其所采用的输运方法的局限性,已不能适应器件发展的需要.在此领域内,蒙特卡罗方法,作为一种可靠的微观方法,日益获得更多的应用.

蒙特卡罗方法是用概率解决物理和数学问题的统计数值方法.这种方法显然很适合用于模拟和随机过程相联系的物理现象.事实上,在用于模拟半导体输运性质及有关器件问题之前,它早已在中子输运及某些统计物理问题中获得过一定的应用<sup>[9-12]</sup>.蒙特卡罗方法对输运性质的模拟是基于对粒子运动的微观描述.粒子模拟方法也较早地被用于真空管和等离子体的模拟<sup>[13]</sup>\*,以及对气体的碰撞电离过程的模拟<sup>[14]</sup>.在等离子体模拟中所取得的进展,对于半导体器件模拟也很有帮助.近年来这种方法也被用于许多其它方面<sup>[15]</sup>.

蒙特卡罗方法开始用于半导体中载流子的输运研究是和强场问题相联系的.人们对强电场输运问题早已给予了相当的关注,主要涉及介电击穿和强场漂移速度<sup>[16-18]</sup>.但是强场输运问题是一

---

\* 但在对等离子体的粒子模拟中有时并不包含随机的散射过程.

个和远离能带边的能带的纵深结构相联系的问题。由于对于高能量范围的  $E-k$  关系缺少具体的认识,早期研究的成就是有限的。随着对各种半导体材料能带结构认识的深化,人们预言,在某些材料中可以存在和谷间电子转移相联系的负微分迁移率<sup>[19,20]</sup>。随后发现了与之相关的微波振荡<sup>[21]</sup>,并在实际中获得了重要应用。这一进展大大刺激了人们对强场输运问题的兴趣。但同时也发现,在深入认识有关现象,特别是在进行定量计算时,在理论方法上表现得软弱无力。因为早期的输运方法大多假设电子在强电场下仍服从麦克斯韦分布或移位的麦克斯韦分布。但在强电场和复杂能带的条件下,导致上述分布的物理条件通常并不能得到满足。于是人们又重新转向各种半经典输运理论的出发点:关于分布函数的玻耳兹曼方程,因为半经典输运问题,归根结底是求解分布函数的问题。于是,作为一种求解玻耳兹曼方程的数值方法——蒙特卡罗方法开始受到人们的重视<sup>[22]</sup>。几乎与此同时,还出现了另一种求解分布函数的数值方法——叠代法<sup>[23]</sup>。这两种方法有一定的互补性,但和叠代法相比,蒙特卡罗方法更为简单、直观和灵活,得到了更为普遍的应用。

在用于解决各种实际问题中,蒙特卡罗方法经历了不断自我完善的过程。蒙特卡罗方法的核心是用随机数处理和散射相联系的随机过程。在半导体中通常存在多种散射机制。它们对电子能量(或波矢)的复杂依赖关系增加了蒙特卡罗处理的复杂性。Rees 在研究叠代法过程中提出的自散射概念<sup>[24,25]</sup>,可使蒙特卡罗处理得到显著的简化并被广泛用于蒙特卡罗模拟。这种方法的意义还在于它使这种模拟方法具有了更大的灵活性。Fawcett 等在蒙特卡罗模拟中,在较为简单的能带模型的基础上认真地处理了散射<sup>[26]</sup>。他们的能带模型可归结为,略去能带的高能量范围内的复杂性,把能带结构描述为若干个处于不同能量的、可由各自非抛物性常数描述的若干能谷。这种能带模型对于电子能量不是非常高的许多输运问题来说是适用的,至今仍被广泛沿用。就平均量的统计平均而言,Price 提出了基于电子散射初态的统计平均方法

——同步系综法<sup>[27]</sup>,这种方法使统计平均变得更方便. Lebowhl 和 Price 首次引入多粒子方法,就 Gunn 二极管作自洽的蒙特卡罗模拟<sup>[28]</sup>. 此外, Fawcett 等还首次将蒙特卡罗方法用于研究载流子的扩散系数,这同时为噪声研究提供了一种方法<sup>[29]</sup>; Ottaviani 等处理了具有扭曲等能面的空穴散射问题<sup>[30]</sup>; Bosi 等<sup>[31]</sup>将简并统计引入蒙特卡罗模拟; Lugli 等处理了电子-电子间散射并引入到多粒子蒙特卡罗模拟中<sup>[32]</sup>. 特别值得提到的是 Philips 和 Price 把加权法用于处理稀有事件<sup>[33]</sup>.

早期,蒙特卡罗方法主要用于研究各种材料的稳态输运特性(包括 GaAs<sup>[26,29,34,35]</sup>, InSb<sup>[36]</sup>, InP<sup>[37]</sup>, Ge<sup>[38]</sup>, Si<sup>[39]</sup>, CdTe<sup>[40]</sup>, InGaAsP 多元系<sup>[41]</sup>等多种材料). 尽管稳态输运特性通常可由实验测量得到,这些研究仍具有重要意义. 通过蒙特卡罗模拟对实验结果的拟合,可以得到某些关于能带结构和能谷间耦合常数等知识. 这些对于此后将蒙特卡罗方法用于器件模拟是必不可少的准备. 值得提到的是对 Ge、Si、金刚石的输运性质的系统的蒙特卡罗研究表明,只要有关参数取得适当,在宽阔的电场范围和温度范围内,对于不同的电场取向和对于电子及空穴等各种不同的情形,对于漂移速度、扩散系数和噪声温度的蒙特卡罗模拟结果和实验结果基本上一致<sup>[42]</sup>. 这些同时也进一步向人们展示,基于半经典输运图像的蒙特卡罗方法是一种可靠的输运方法.

在对各种半导体材料输运性质的蒙特卡罗研究中,人们对强电场条件下的输运现象的认识不断得到深化. 除了 Fawcett 等的经典性的工作<sup>[26]</sup>外,值得提到的是 1972 年 Ruch 在 Si 和 GaAs 上所作的瞬态输运特性的多粒子蒙特卡罗模拟<sup>[43]</sup>. 在 GaAs 上的结果表明,在 10kV/cm 量级的电场下漂移速度可发生十分显著的过冲,可为稳态漂移速度的若干倍,从而向人们清楚地展示,对于小尺寸器件,必须将新的、能够正确描述上述输运现象的输运方法,诸如蒙特卡罗方法,引入到器件模拟中.

就器件模拟而言,继 Lebowhl 等将多粒子自洽方法用于 Gunn 二极管的模拟(1972)之后<sup>[28]</sup>,1974 年 Hockney 等将这种方

法用于 GaAs MESFET 的二维模拟<sup>[44]</sup>, 他们所采用的方法是典型的, 其中包括了对边界条件、电荷分配、调整电场的步长的适当选取等, 为后来的自洽的器件蒙特卡罗模拟所广泛采用. 此外, Baccarani 等在给定电势分布下, 用单粒子方法对肖特基二极管进行了模拟(1976)<sup>[45]</sup>. 鉴于自洽的蒙特卡罗模拟大的计算量, 模拟方法的一个有意义的发展是杂化模拟方法<sup>[46,47]</sup>, 在杂化方法中, 低场区的运输模拟仍采用传统的方法(如漂移扩散模型). 由于弱场区的模拟是蒙特卡罗方法的“弱项”, 在杂化方法中两种方法各自都能扬长避短. 值得提到的是, 不久前 Fischetti 等采用完全的能带结构对 Si 的 MOSFET 进行了自洽蒙特卡罗模拟<sup>[48]</sup>. 由于这种器件的模拟必须包括适当大小的, 载流子浓度很高的源、漏区, 认真的模拟难度是很大的. Fischetti 等在模拟中还计入了载流子之间的散射并对简并统计作了近似处理. 这一工作能够用来说明蒙特卡罗器件模拟方法和现代的计算机已经达到的能力.

众所周知, 蒙特卡罗模拟是一种计算量大的模拟方法, 处理随机事件, 特别是选择自由飞行时间, 占据了 CPU 时间的很大的一部分. 减少用于这一部分的 CPU 时间是人们所关注的一个课题. 原型的自散射方法通常并不一定能导致计算时间的节省. Borsari 等采用的阶梯  $\Gamma$  值的自散射方法在这方面前进了一步<sup>[49]</sup>. Kato 提出的优化  $\Gamma$  值的自散射方法\* 使 CPU 时间得到进一步显著的降低<sup>[50]</sup>. 李狄纳等提出的列表法则可通过查表直接确定自由飞行时间<sup>[51]</sup>, 排除了自散射和相应的计算量, 是一种目前最快的计算方法.

现在, 蒙特卡罗器件模拟方法渐趋成熟, 日益获得更为广泛的应用, 成为先进的小尺寸半导体电子器件的研究和设计的一个重要的工具.

有关半导体的蒙特卡罗模拟已存在一些有价值的评述和专著<sup>[13,52-55]</sup>.

---

\* 实际上这种方法也需要列表.



## 1.2 蒙特卡罗模拟概述

在用于研究半导体中载流子的输运性质和模拟器件特性时,蒙特卡罗方法按照输运过程的半经典图像,追踪模拟单个或多个粒子的无规则运动.在此基础上通过适当的统计平均来得到所需要的性质.在半经典图像中,荷电粒子的微观运动可归结为一系列的交替的在外场下的自由飞行和随机性的散射,如图 1.1 所示.蒙特卡罗方法通过产生均匀分布在 0 和 1 之间的随机数系列来处理散射相联系的随机性事件.和散射相比,对于给定的电场、电子初态和自由飞行时间,自由飞行过程是完全确定的.

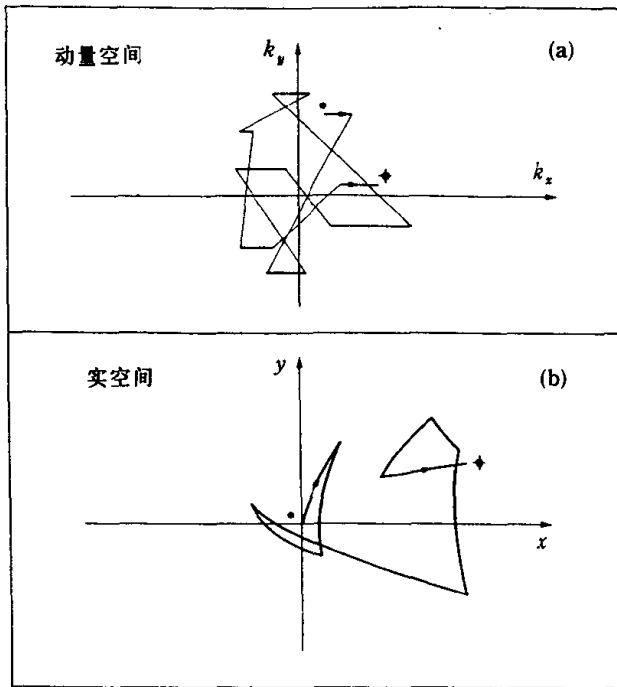


图 1.1 一个载流子在外场作用下交替发生的自由飞行和散射过程示意图<sup>[54]</sup>

与碰撞相联系,存在三种随机事件:在一次碰撞以后,下次碰撞何时发生(自由飞行时间的长短);散射属于何种类型;散射后载