

半导体器件计算机模拟

赵鸿麟 编著

天津大学出版社

内 容 简 介

本书全面介绍半导体器件计算机模拟技术。内容包括有限差分法、有限元法、Monte Carlo法及半经典模型等。书中突出各种方法的数学概念及实际应用。以一维模拟为主，用浅显的叙述及简单实例引导学生掌握各种模拟方法的要点。对多维器件模拟技术，也提供必要的基本知识及参考资料，并有作者本人的研究结果。

本书适用于高等学校电子类半导体物理与器件专业高年级本科生及研究生使用。也可供从事器件模拟技术的人员参考。

半导体器件计算机模拟

赵鸿麟 编著

*

天津大学出版社出版

(天津大学内)

河北省永清县印刷厂印刷

新华书店天津发行所发行

*

开本：850×1168毫米^{1/32} 印张：6^{7/8} 字数：179千字

1989年12月第一版 1989年12月第一次印刷

印数：1—1500

ISBN 7-5618-0171-8

TP·24

定价：1.70元

目 录

第一章 导 言	(1)
§1.1 CAD及其在半导体器件研制中的应用	(1)
§1.2 器件模拟技术研究的内容	(3)
§1.3 器件模拟的物理基础	(8)
参考文献	(17)
第二章 有限差分离散模拟法	(18)
§2.1 有限差分法基本概念	(18)
(一) 导数的有限差分近似	(18)
(二) 微分方程的有限差分法求解	(24)
(三) 边界条件为导数时的有限差分法求解	(27)
(四) 非线性微分方程的有限差分法求解	(30)
§2.2 器件模拟技术中常用的迭代法	(31)
(一) Gauss—Seidel法	(32)
(二) 超松弛 (SOR) 法	(35)
(三) 非线性方程组的Newton迭代法	(37)
§2.3 有限差分法模拟pn结中的电势分布	(39)
(一) Poisson方程及其边界条件	(39)
(二) 线性缓变pn结中 $\psi(x)$ 的有限差分解—Newton法I	(42)
(三) 线性缓变pn结中 $\psi(x)$ 的有限差分解—Newton法II	(49)
§2.4 二极管特性模拟	(50)
(一) 基本方程及边界条件	(51)
(二) 基本方程的有限差分离散化	(54)
(三) 差分方程组的线性化	(57)
(四) pin二极管反向特性模拟结果	(62)

§2.5 二维有限差分模拟法	(64)
(一) 二维区间的离散	(65)
(二) 二维基本方程的有限差分离散	(67)
(三) 二维差分方程组的解法	(70)
(四) 二维有限差分模拟示例	(71)
参考文献	(75)
附录2.1 (2.138) 式中的矩阵元	(77)
附录2.2 递归算法解二极管稳态特性	(80)
第三章 有限元离散模拟法	(82)
§3.1 加权余数法	(83)
(一) 函数的加权余数法近似	(83)
(二) Galerkin加权余数法	(86)
(三) 加权余数法求微分方程的近似解	(87)
§3.2 有限元法模拟pn结中电势分布	(90)
(一) 微分方程解的分片近似, 有限元法	(90)
(二) 线性缓变pn结中 $\psi(x)$ 的有限元解	(99)
§3.3 二维有限元法模拟	(104)
(一) 二维区间离散化	(104)
(二) 二维Poisson方程及连续性方程的有限元式	(107)
(三) 二维有限元法模拟示例	(115)
参考文献	(120)
第四章 Monte Carlo微粒模拟法	(123)
§4.1 Monte Carlo法概述	(123)
(一) Monte Carlo法的基本思想举例	(123)
(二) Monte Carlo法的误差估计	(127)
(三) 半导体器件的Monte Carlo微粒模拟法	(130)
(四) Monte Carlo方法的优点及发展	(130)
§4.2 伪随机数的产生及检验	(131)
(一) 随机数的密度分布函数及累积密度分布函数	(131)
(二) 产生伪随机数的同余方法	(133)

(三) 伪随机数的检验	(135)
§4.3 给定分布的随机抽样	(137)
(一) 离散给定分布的随机抽样	(138)
(二) 直接抽样	(140)
(三) 变换抽样	(142)
(四) 舍选法 I	(143)
(五) 加分布抽样	(145)
(六) 舍选法 II (乘分布抽样)	(147)
§4.4 半导体中载流子的散射	(149)
(一) 半导体的能带结构	(149)
(二) 载流子的散射机构	(152)
§4.5 电场作用下载流子的跟踪	(159)
(一) 随机自由飞行时间的计算	(159)
(二) 随机散射机构的模拟	(161)
(三) k 空间、 r 空间中电子位置的确定	(163)
§4.6 半导体材料特性模拟	(169)
(一) GaAs的NDM特性	(169)
(二) Γ 带中电子的起始分布及抽样	(170)
(三) 散射率计算	(170)
(四) 电子平均漂移速度的计算	(175)
(五) 程序框图及计算结果	(176)
§4.7 FET的DC特性	(179)
(一) Monte Carlo法与小尺寸器件的模拟	(179)
(二) FET中载流子分布	(180)
(三) FET的DC特性曲线	(182)
§4.8 Monte Carlo法工艺模拟	(185)
(一) 工艺参数的随机波动	(185)
(二) 产品电参数分散性模拟	(186)
(三) 产品参数的敏感度	(187)
参考文献	(189)
第五章 亚微米半导体器件的半经典模型	(193)

§5.1	亚微米半导体器件的载流子速度过冲效应 ...	(193)
§5.2	半经典输运方程	(196)
§5.3	亚微米JFET的半经典方法模拟	(199)
	(一) 非稳态模拟方程	(200)
	(二) JFET模型	(202)
	(三) 模拟结果	(203)
	参考文献	(208)

第一章 导 言

§ 1.1 CAD及其在半导体器件研制中的 应 用(1)-(3)

本世纪四十年代电子计算机的发明是科技发展的一个里程碑。电子计算机的出现对工业、农业、国防、科学技术以及人们的生活，均产生了巨大的促进作用。

一项科学技术新发明的重要性，可由其问世后的发展速度看出端倪。1945年出现的初期电子计算机，主要器件是电子管，主存贮器用汞延迟线、静电贮存管或磁鼓，指令简单，只有少量的变址寄存器，使用机器语言，仅用于单作业操作。时隔10多年，到1958年，出现了全晶体管电子计算机，即第二代电子计算机。晶体管电子计算机的主贮存器用磁芯，指令已比较复杂，中央处理机与输入输出同时操作，有分时、中断功能，使用高级语言，是通用数据处理机。继第二代电子计算机出现后，仅过10多年，出现了第三代电子计算机。第三代电子计算机的主存贮器为集成电路存贮器，能对多道程序进行分时处理，具有远程终端，能实现人机对话和实时远程处理，是通用信息处理机。电子计算机约30年内数次换代，性能得到巨大改进，计算速度已从最初单作业操作发展到今日每秒数亿次。

和电子计算机性能速度提高的同时，电子计算机的应用也迅速普及。在50年代，电子计算机主要应用于科学或商业计算，但很快发展到数据处理、信息处理。目前，国外将电子计算机用于信息处理及实时控制的已达5000多种。

CAD (Computer Aided Design) 计算机辅助设计是利用电子计算机帮助设计人员依据产品的要求, 预先制定必须的方法、工艺流程及图案等。例如设计一台计算机, 可以利用计算机进行体系模拟、逻辑模拟、插件划分及自动布线等。由于电子计算机运算具有高速、准确的特点, CAD技术能显著节省人力, 提高设计的自动化程度。CAD技术目前已应用到各个领域。即使在同一领域, 也依据内容的差异分成小类目。例如在电力系统及电子学领域中, 有供电系统CAD、系统控制CAD、电路布局CAD及逻辑CAD等。

下面几个缩略语, 是实际中常见的。

CAE (Computer Aided Engineering) 计算机辅助工程。它是电子计算机在各个领域中应用的总称。

CAI (Computer Aided Instruction) 计算机辅助教学。预先安排好学习计划, 学生学习时和计算机处于对话的方式, 计算机能指出学生学习过程中的错误, 并按照学生的回答选择下一个学习课题。

CAC (Computer Aided Counseling) 计算机辅助咨询。在机场或车站等服务处所, 可由计算机回答旅客提出的有关问题。

CAA (Computer Aided Analysis) 计算机辅助分析, 也称为CACA (Computer Aided Circuit Analysis)。在电子学中, 可用计算机对电路进行性能分析。

30多年来, 半导体器件的迅速发展, 晶体管、集成电路、大规模集成电路的相继出现, 使电子计算机得以更新换代。目前, 集成电路的60%用于制造电子计算机。同时, 电子计算机的发展又更新了多项重要的半导体器件制造技术, 促进了半导体器件的发展。

电子计算机辅助技术在半导体器件研制中的应用, 统称为CAD技术, 具体指在分离器件或集成电路的研制中, 利用电子计算机帮助制作光刻掩膜版, 包括自动读图、绘图、刻图, 进行

系统模拟、电路设计、电路布局设计，用作计算机联动的图形发生技术、自动翻版技术及自动布线技术等。此外，电子计算机还经常用于控制单一工艺设备或整条生产线。所有上述应用是在器件制造工艺的流水过程中应用了计算机辅助技术，称之为CAM (Computer Aided Manufacture, 计算机辅助制造)。

CAT (Computer Aided Test) 计算机辅助测试技术，也是半导体器件、集成电路研制过程中经常使用的计算机辅助技术。在半导体器件，尤其是大规模集成电路的生产中，对芯片或成品要测量很多参数，包括交、直流参数、逻辑关系、故障诊断等。利用计算机进行自动测量，能显著提高准确度和效率。

在半导体器件的研制中，计算机的另一重要应用是器件模拟 (Device Modelling)。将一个新器件的设计方案交付车间试制之前，先由计算机运算得到新器件的各项电参数、检查验证设计方案正确与否的技术。器件模拟技术是本书要研究的主要问题。

工艺模拟是计算机在半导体器件制备中的又一重要应用。半导体器件制造加工工艺很复杂。对不同的工艺过程及工艺条件，工艺模拟技术能给出杂质分布等工艺结果。工艺模拟结果常用来代替器件纵向设计输入器件模拟程序。

由于电子计算机在许多领域，其中包括在半导体器件研制中的广泛应用，因此同一个缩略语可能是不同专门术语的缩写。例如 CAE, 可能是前面说的计算机辅助工程 (Computer Aided Engineering), 也可能是计算机辅助教育 (Computer Aided Education) 或计算机辅助实验 (Computer Aided Experiment) 等词的缩写。

§ 1.2 器件模拟技术研究的内容

器件模拟指通过电子计算机的模拟计算，得到半导体器件或

集成电路的性能参数

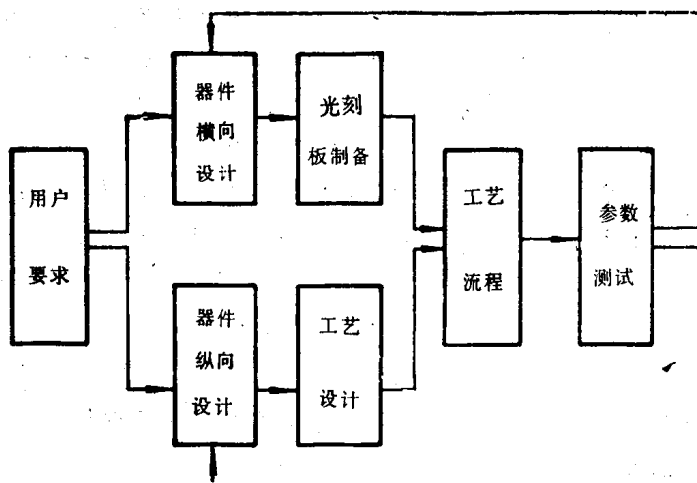


图1.1 传统的器件试制过程

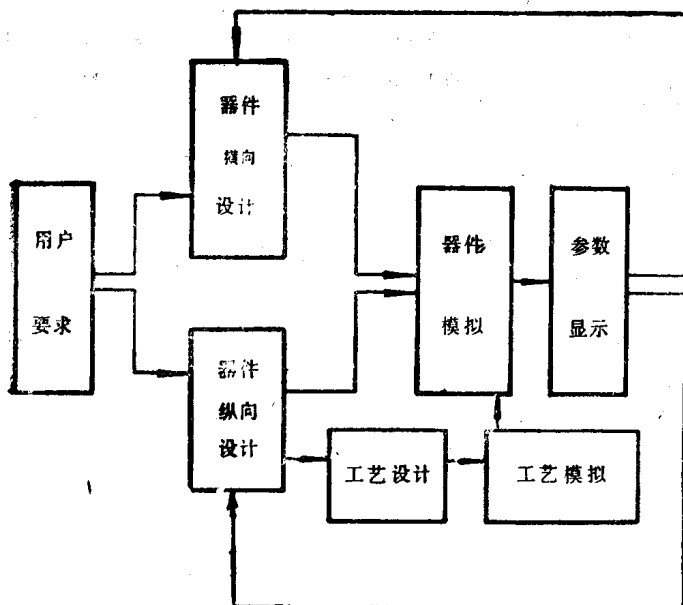


图1.2 器件模拟得到电参数的方法

传统的器件试制过程如图1.1所示，首先根据用户对新器件的要求进行横向几何尺寸及纵向杂质分布等的设计。横向结构设计后要制作光刻掩膜版，纵向结构设计后则需进行工艺设计。有了掩膜版及工艺设计方案后进行工艺试流水，最后得到样品并对它进行性能参数测量。一般，测量参数和用户要求会有差异，这时需要修正器件的设计方案，包括横向设计方案及纵向设计方案。于是又要重复光刻掩膜版制备、工艺设计、工艺流程及参数测量等步骤。通常需经过数次的设计方案调整及数次的工艺流水，最后才能得到符合用户要求的产品。这是得到器件参数的一种方法，得到的参数值是测量值。

器件的性能参数还可用另一种方法得到，即可依据器件的设计参数，从理论上进行计算，得到计算值。如果把理论计算过程称为器件模拟，这种得到器件参数的过程如图1.2所示。开始按照用户的要求，进行新器件的横向结构及纵向结构设计。然后将这些设计参数送入器件模拟进行理论计算（其中纵向设计参数也可通过工艺模拟后输入器件模拟）。器件特性参数的计算值会在器件模拟之后显示出来。如图1.3所示是一个具体例子⁽⁴⁾。要试制的是npn晶体管。上图左所示是器件的横向设计，决定器件的几何尺寸。上右图所示是器件的纵向设计，决定器件的杂质分布。下面的图是依据上面设计参数计算得到的器件特性曲线。

毋庸置疑，如果对一个半导体器件建立了正确的物理模型及数学模型，上述理论计算得到的参数是和测量值一致的。

可见得到半导体器件性能参数的方法有两种：一种是将器件的设计方案经实际试制样品后得到测量值；另一种是将器件的设计方案直接通过理论运算得到计算值。很明显，第一种方法得到器件性能参数所需要的人力、物力、时间多于第二种方法。能否在半导体器件的研制过程中，用计算值的方法代替测量值？如果这种方法可行，则新器件的试制周期将显著缩短，费用将大幅度降低。

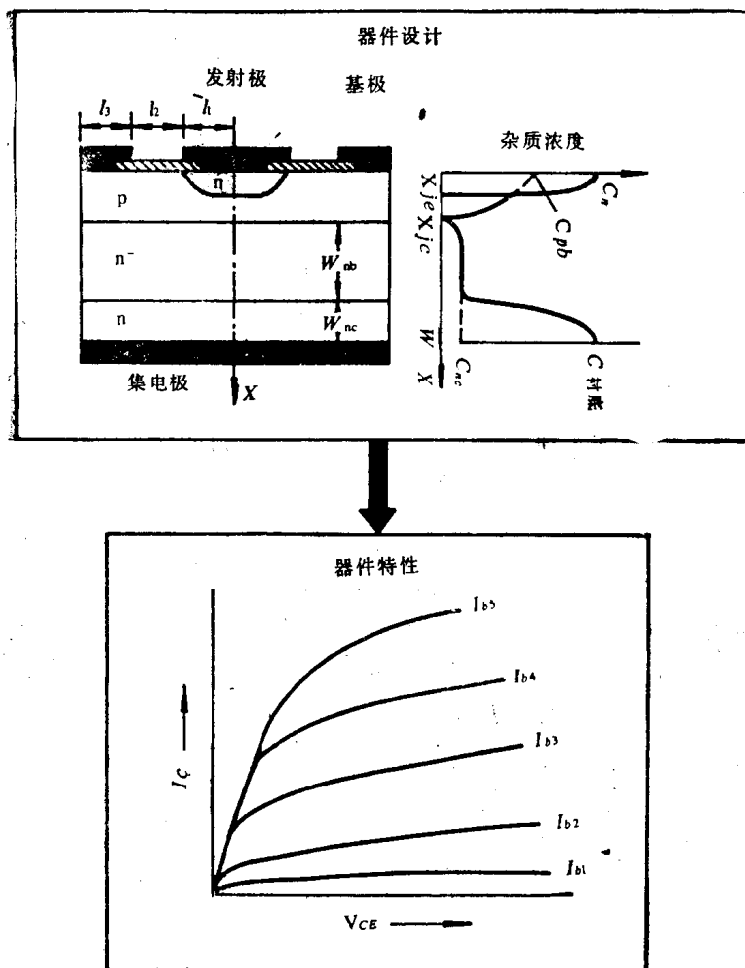


图1.3 npn晶体管的模拟过程

用器件参数的计算值代替测量值，即以器件模拟代替器件工艺试制的关键是要有一个正确的、符合实际的理论模型与有效的计算工具。大量的实践证明，这种方法是成功的，这是器件模拟在过去10多年中蓬勃发展的原因。目前，器件模拟已成为半导体

器件、大规模集成电路工艺中一项重要的新技术。

根据新器件的设计方案，通过数学运算直接得到器件性能参数的工作，可以在器件试制之后进行，也可以在器件试制之前进行。这两种不同情况下进行的计算，虽然不影响计算的方法与结果，但其目的与意义、在试制中所起的作用是不同的。前者是解释器件测量值的一种理论分析；后者则是新器件研制过程中预示器件性能参数的一项重要技术。为了区别二者的不同，对先有参数测量值而进行的理论计算工作，称为器件分析(Device Analysis)；为了得到器件参数而进行的理论计算工作，称为器件模拟(Device Modelling)。

当前，由于器件结构、理论模型的复杂性，计算它们的性能参数非人力所能胜任，通常都要依靠电子计算机来完成。所以这一工作常称为半导体器件的计算机模拟。

器件模拟有两种方法：一种是器件等效电路模拟法；另一种是器件物理模拟法。器件等效电路模拟法不关心器件内部的结构及过程，仅依据器件的输入、输出特性分析它们在电路中的作用。器件等效电路模拟方法比较容易掌握，但其应用范围受器件许多非线性性能的限制，电子电路工程人员常使用这种模拟方法。器件物理模拟法则从器件内部载流子的状态及运动出发，依据器件的几何结构及杂质分布，建立严格的物理模型及数学模型，运算得到器件的性能参数，这种方法能深刻理解器件内部的工作原理，能了解器件性能参数和设计参数之间的关系，是半导体器件工作者必须遵循的方法。是本书研究的方法。

器件物理模拟技术是60年代以后发展起来的⁽⁵⁾。20多年来，相继出现了多种具体方法，主要有三种：(1)有限差分法；(2)有限元法；(3)Monte Carlo法。前二种是离散数值模拟法，是目前模拟常规半导体器件的主要方法。有限差分法是最早发展起来的，方法比较简单，容易掌握，但对几何边界复杂的半导体器件，用多维有限差分法碰到较大的困难。有限元法与有限差分法

相比,对区间的离散,方法比较自由,容易适应复杂的器件边界。第三种Monte Carlo法是统计模拟法,它以载流子在器件中运动时的散射过程为基础,逐个跟踪每一载流子的运动。Monte Carlo法的优点是能对器件的物理过程作深入了解,同时不受器件维数的限制,是目前模拟小尺寸半导体器件的最有力工具。它的缺点是计算冗繁,需要很多机时。

除上述三种方法外,半经典方法也是最近发展较快的方法。由于器件尺寸的小型化,出现了一些效应,这些效应用经典的方法处理已不可能,需要对传统的经典理论作一些修正,所以称半经典方法。由于Monte Carlo方法存在机时长的缺点,所以半经典方法当前颇受重视。

当半导体器件的尺寸进一步缩小到小于 $0.1\mu\text{m}$ 时,需要考虑量子效应。相应的模拟方法称量子理论模拟法。

§ 1.3 器件模拟的物理基础(4,6)

下列半导体器件的基本方程,是器件模拟的物理基础。

(1) 载流子浓度⁽⁷⁾

本征半导体材料的载流子浓度 n_i 为

$$n_i = 4.82 \times 10^3 \left(\frac{m_p m_n}{m_e} \right)^{\frac{3}{4}} \cdot T^{3/2} \cdot \exp \left(-\frac{E_g}{2kT} \right) \quad (1.1)$$

式中, m_0 是电子惯性质量; m_p^* 及 m_n^* 分别为电子空穴的有效质量; E_g 是禁带宽度; k 是波尔兹曼常数。对主要半导体材料,室温下的计算值及测量值见表1.1。

表1.1 300°K下锗、硅、砷化镓的本征载流子浓度

各项参数	$E_g(\text{eV})$	$\frac{m_n^*}{(m_e)}$	$\frac{m_p^*}{(m_e)}$	$N_c(\text{cm}^{-3})$	$N_v(\text{cm}^{-3})$	$n_i(\text{cm}^{-3})$ (计算值)	$n_i(\text{cm}^{-3})$ (测量值)
Ge	0.67	$0.56m_0$	$0.37m_0$	1.95×10^{17}	5.7×10^{18}	2.0×10^{18}	2.4×10^{18}
Si	1.12	$1.08m_0$	$0.59m_0$	2.3×10^{19}	1.1×10^{19}	7.8×10^8	1.5×10^{10}
GaAs	1.428	$0.068m_0$	$0.47m_0$	4.5×10^{17}	8.1×10^{18}	2.3×10^8	1.1×10^7

对杂质半导体，一般掺杂浓度下，费米能级 E_F 在禁带中，而且 $E_C - E_F \gg kT$ ，或 $E_F - E_V \gg kT$ 。这时，导带电子和价带电子空穴服从玻尔兹曼分布。它们的浓度为

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right) \quad (1.2)$$

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$

式中， E_C 及 E_V 是导带底及价带顶的能量； N_C 及 N_V 是导带底及价带顶的有效状态浓度。

当 $n = p$ 时， $E_F = E_i$

$$E_i = \frac{1}{2} (E_C + E_V) = +\frac{1}{2} kT \ln \left(\frac{N_V}{N_C} \right) \quad (1.3)$$

则可将 (1.2) 式改写成

$$n = \left[N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_i}{kT}\right) \right] \exp\left[\frac{E_F - E_i}{kT}\right] \quad (1.4)$$

右边第一项是 $E_F = E_i$ 时的电子浓度 n_i ，所以有

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right) \quad (1.5)$$

同理，对空穴浓度有

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right) \quad (1.6)$$

(1.5)、(1.6) 二式仅适用于平衡态。当半导体器件中通过电流时，平衡态破坏，电子和空穴不再存在统一的费米能级。当电流不大时，采用准费米能级近似，则有

$$n = n_i \exp\left[\frac{E_{Fn} - E_i}{kT}\right] \quad (1.7)$$

$$p = n_i \exp\left[\frac{E_i - E_{FP}}{kT}\right]$$

式中, E_{Fn} 及 E_{Fp} 分别为电子及空穴的准费米能级。

如果用准费米电势 ϕ_n 及 ϕ_p , 则

$$\phi_n = -\frac{E_{Fn}}{q}, \quad \phi_p = -\frac{E_{Fp}}{q} \quad (1.8)$$

$\psi = -E_i/q$, 于是

$$\begin{aligned} n &= n_i \exp \left[\frac{q}{kT} (\psi - \phi_n) \right] \\ p &= n_i \exp \left[\frac{q}{kT} (\phi_p - \psi) \right] \end{aligned} \quad (1.9)$$

在重掺杂情况下

$$n = n_i \frac{\exp \left[\frac{E_{Fn} - E_i}{kT} \right]}{\xi \left[\frac{E_F - E_C}{kT} \right]} \quad (1.10)$$

$$p = n_i \frac{\exp \left[\frac{E_i - E_{Fp}}{kT} \right]}{\xi \left[\frac{E_V - E_{Fp}}{kT} \right]}$$

式中, $\xi(X)$ 为简并校正因子

$$\xi(X) = \frac{\pi \cdot \exp(X)}{2 \cdot F_{\frac{1}{2}}(X)} \quad (1.11)$$

$F_{\frac{1}{2}}(X)$ 是费米积分, 其值可以通过计算或查表得到。

(2) 载流子迁移率⁽⁶⁾

研究半导体器件中载流子输运的基本物理量之一是迁移率。在一块均匀掺杂的半导体材料上加一电压, 微观地看, 由于载流子在晶体中运动时, 受到晶格振动、电离杂质等多种因素的散射, 载流子在电场作用下作杂乱无规则的定向运动; 宏观地看, 载流子只能沿着或逆着电场方向漂移。按欧姆定律, 载流子的漂移速度正比于电场强度 E 。

$$v_n = \mu_n E$$

$$v_p = \mu_p E \quad (1.12)$$

v_n 及 v_p 分别是电子及空穴的漂移速度。比例系数 μ_n 及 μ_p 称为电子及空穴的迁移率。

一般说来,载流子的迁移率和材料的类型、杂质浓度、电场强度等因素有关,不是常数。当掺杂量增加或电场强度增大时,一般加剧载流子的散射,从而使迁移率变小。迁移率和杂质浓度间保持下面经验公式

$$\mu(N) = \mu_{min} + \frac{\mu_{max} - \mu_{min}}{1 + \left(\frac{N_T}{N_{ref}} \right)^\alpha} \quad (1.13)$$

式中, $N_T = N_D + N_A$ 是总掺杂浓度,其它各参数值如表1.2所示。

表1.2 迁移率参数

	μ_{max} ($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{S}^{-1}$)	μ_{min} ($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{S}^{-1}$)	N_{ref} (cm^{-3})	α
电 子	1360	92	1.3×10^{17}	0.91
空 穴	520	65	2.4×10^{17}	0.61

实际测量证明:载流子浓度非常高时,迁移率因电子—空穴散射而进一步变小,这时(1.13)式中的 N_T 可用下式代替

$$N_T = 0.34 (N_A + N_D) + 0.66 (\bar{n}) \quad (1.14)$$

上式中, $\bar{n} = n + p$ 。该式说明,电离杂质与载流子都有库仑散射作用,导致迁移率下降。

在低掺杂半导体材料中,电场强度 E 对迁移率的影响可用下式表示

$$\mu(N, \bar{n}, E) = \mu(N, \bar{n}) \left[1 + \left(\frac{\mu(N, \bar{n}) |E|}{v_{max}} \right)^\beta \right]^{-1/\beta} \quad (1.15)$$

其中, β 值对电子 $\beta_n = 2$ 、对空穴 $\beta_p = 1$; v_{max} 是和掺杂无关的极限漂移速度。