

# **Изучение основных особенностей расчёта диода на основе p-n перехода**

# САПР приборно-технологического моделирования (TCAD)

При разработке и оптимизации технологии и конструкции изготовления элементов интегральных схем, как правило, используются средства приборно-технологического моделирования (**TCAD**).

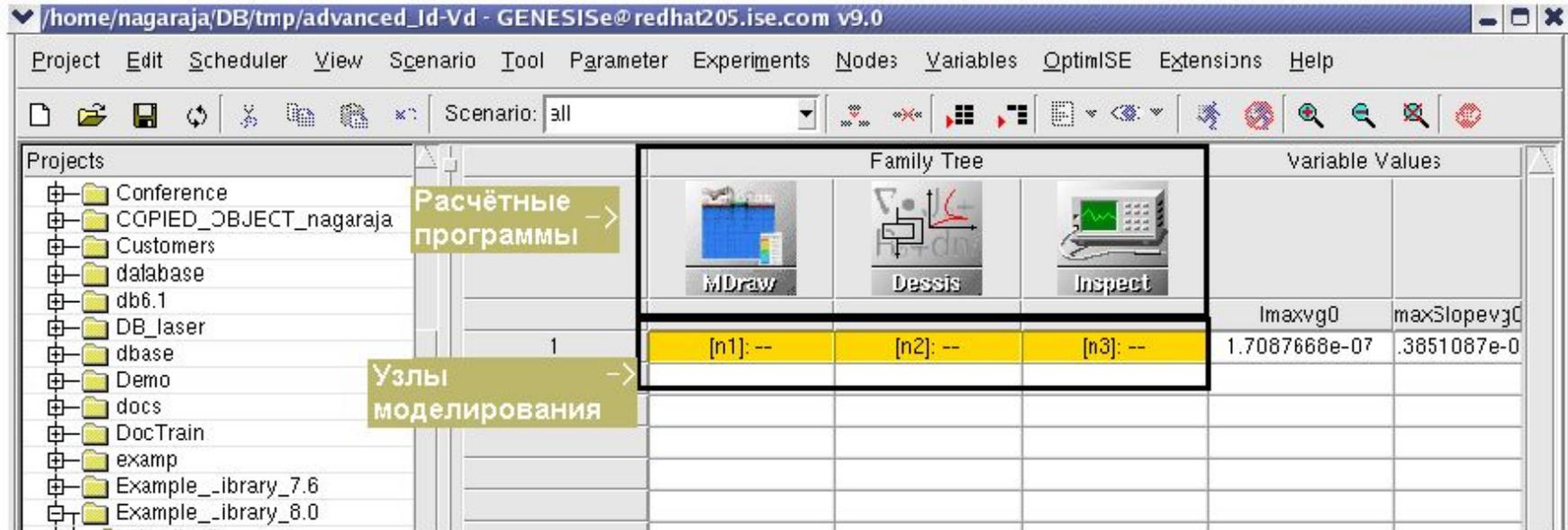
TCAD является универсальной средой с широкими возможностями по моделированию различных полупроводниковых приборов сложных конструкций.

# САПР приборно-технологического моделирования (TCAD)

Фирма, Страница в Интернете	Компоненты пакетов				
	Технологические процессы	Приборные структуры	Графический интерфейс	Визуализаторы данных	Схемотехнический интерфейс
TMAI/Avant!/ Synopsys, www.synopsys.com	Tsuprem, TaurusProcess	Davinci, Medici, TaurusDevice	Taurus Workbench	Taurus Visual	Hspice
ISE/Synopsys, www.synopsys.com	DIOS, Floops (sprocess)	DESSIS (sdevice)	GENESISe /swb	Inspect, Tecplot	DESSIS- SPICE
SilVaCo, www.silvaco.com	Ssuprem, Athena, Victory	ATLAS, S-PISCES	Virtual Wafer Fab	TonyPlot, MaskView	Smart-Spice
Cross Light, www.crosslight.com	Csuprem, ProCom	Lastip, Apsys, PICS3D			
Siborg Systems, www.siborg.ca		MicroTec			
ESEMI Limited, www.esemi.com		TCAD Studio			

# Моделирование процесса в САПР ISE TCAD

Работа с программой начинается с загрузки графической оболочки GENESISe и указания рабочей директории, в которой будет создаваться расчётные проекты.



Для запуска процесса расчёта необходимо выбрать требуемый узел и нажать кнопку Run, остановить работу программы можно используя команду Abort.

# Моделирование Технологического Процесса

## В DIOS

*TITLE('Diode')* – название проекта;

*!Refinements* – комментарии;

*Replace(Control(* – директива перестроения сетки;

*Maxtrl=6,* – максимальный уровень перестроения;

*RefineGradient=-6,* – перестроение по градиенту примеси;

*RefineJunction=-6,* – перестроение на p-n переходах;

*RefineBoundary=-6,* – перестроение на границах;

*Newdiff=1, Sidiff=Off)* – включение расчёта диффузии во всех материалах в структуре;

*!Define Grid*

*Grid(x(-5, 5), y(-5, 15), Nx=5)* – определение области моделирования (вдоль осей x и y, а также начальное разбиение сетки относительно нижней границы области моделирования) ;

*!Define Substrate*

*Substrate(Element=B, Ysubs=0, RHO=10, orientation=111)* – определение подложки, типа примеси, удельного сопротивления, ориентации;

*1d(xsection(0.0),Rs=on)* – процедура экстракции параметров структуры (глубина, поверхностное сопротивление в точке **X=0**);

*!-----Implantation*

*Implantation(Element=P, Dose=3.125E15, Energy=50, tilt=0)* – команда на проведения операции ионной имплантации (фосфор, доза, энергия, угол);

*1d(xsection(0.0), Rs=on)*

*Diffusion(time=60, Temperature=1000, atmo=N2)* – команда на проведения операции температурного отжига (время, температура, атмосфера);

*1d(xsection(0.0), Rs=on)*

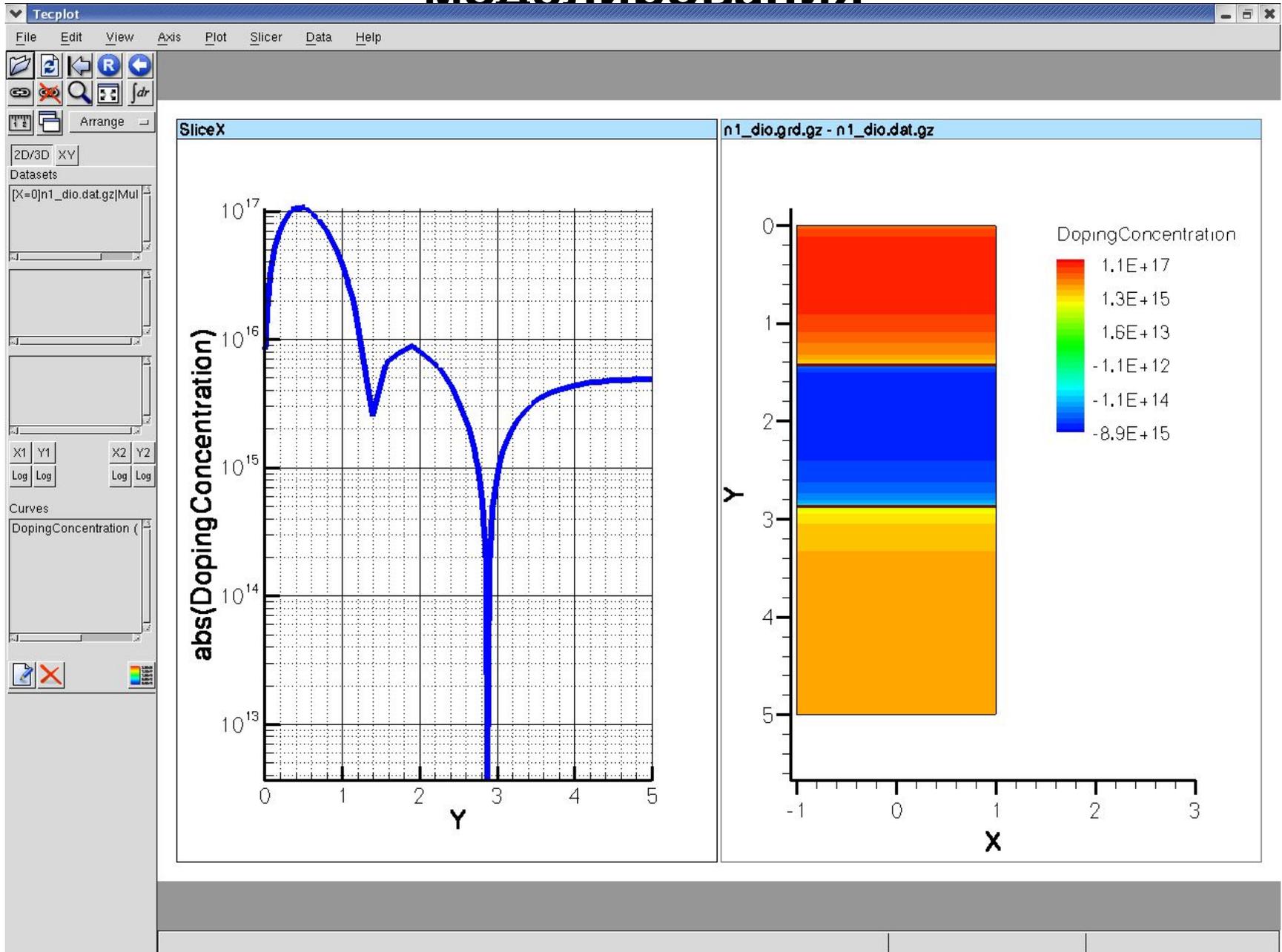
*save(file='n1', type=dmp)* – процедура сохранения в формате DIOS;

*save(file='n1', spe(btot,ptot,netactive), type=picasso)* – процедура сохранения в формате для визуализации в программе Tecplot;

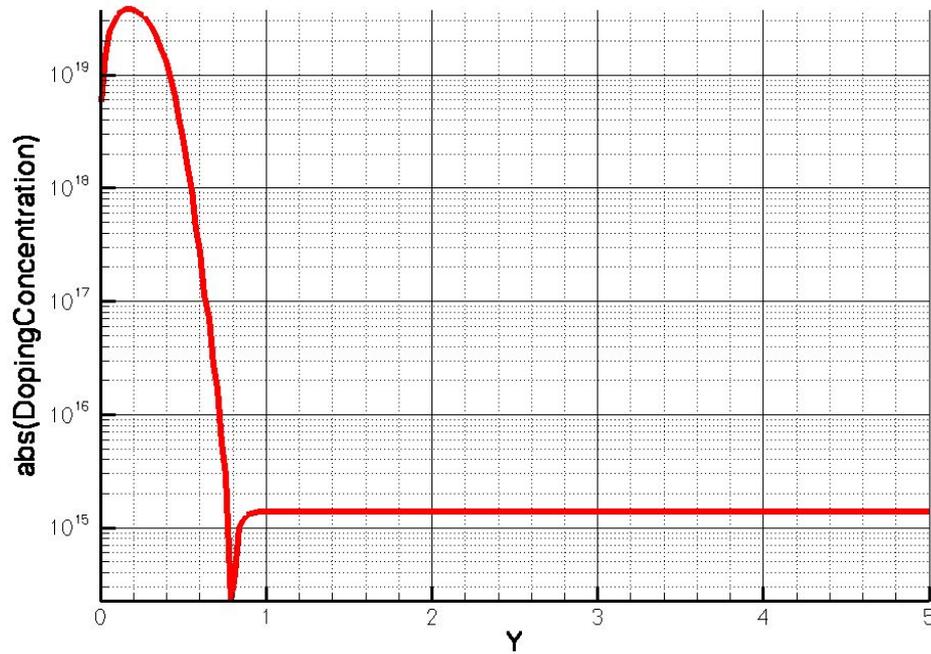
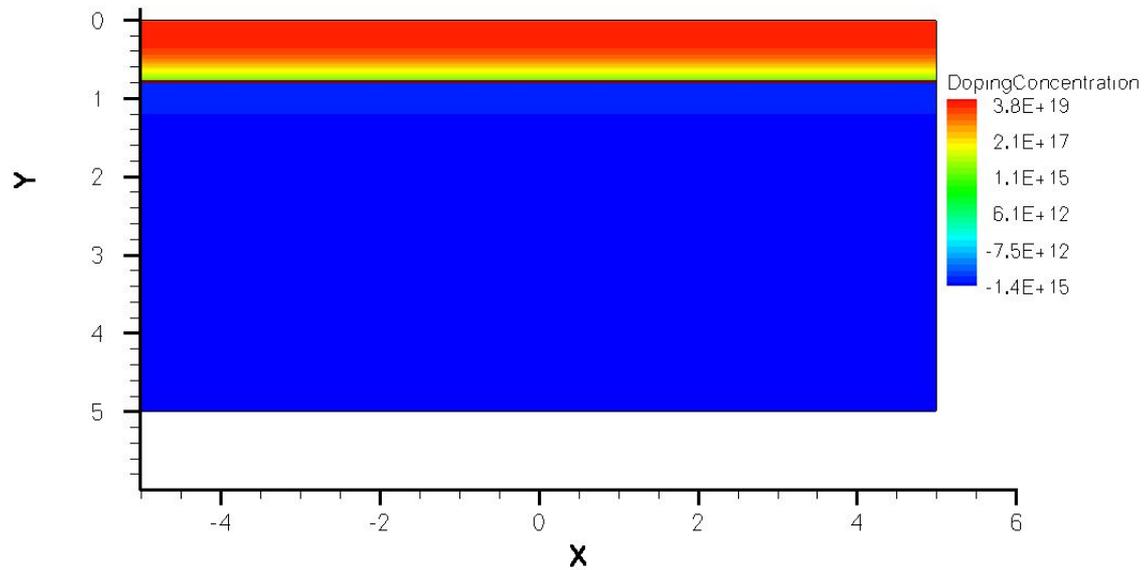
*end*

# Программа визуализатор результатов

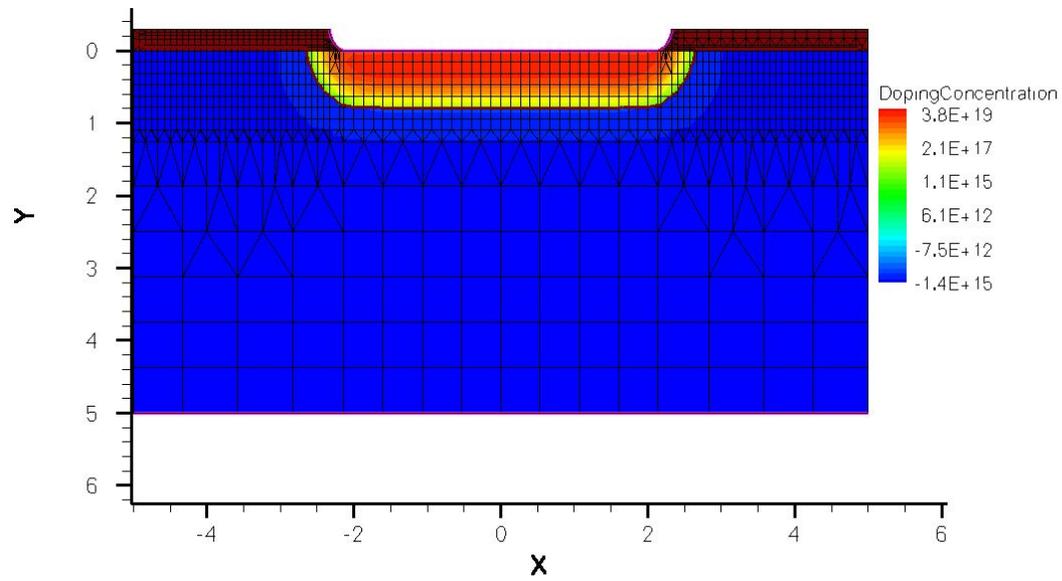
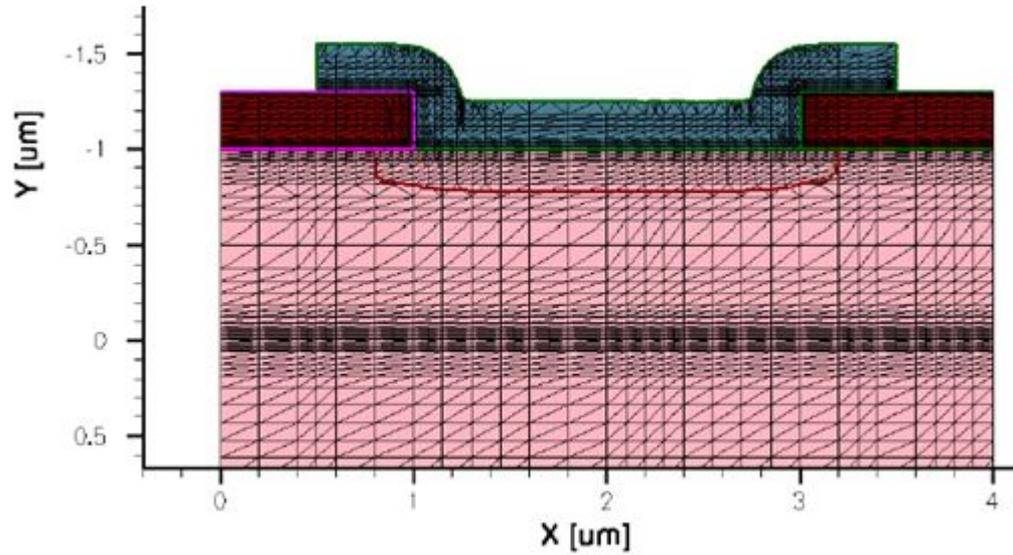
## МОДЕЛИРОВАНИЯ



# Результаты расчётов в DIOS



# Построение сетки



# Построение сетки

*Title "Diode"* – название проекта;

*Definitions* { – процедура определения областей разбиения;

  # *Refinement regions*

*Refinement "sub"* – обозначения процедуры разбиения;

    {  
      *MaxElementSize* = 0.5 – максимальный элемент при разбиении;

*MinElementSize* = 0.5 – минимальный элемент при разбиении;

    }

*Refinement "bas"*

    {

*MaxElementSize* = 0.08

*MinElementSize* = 0.08

    }

*SubMesh "submesh"* – обозначения процедуры загрузки файлов программы DIOS;

  {

*Geofile* = *n@node|-1@\_dio.grd.gz* – обозначения процедуры загрузки сетки;

*Datafile* = *n@node|-1@\_dio.dat.gz* – обозначения процедуры загрузки профиля распределения примеси;

  }}

*Placements* {

  # *Refinement regions*

*Refinement "sub"* – обозначения загрузки процедуры разбиения;

    {

*Reference* = "sub" – обозначения имени процедуры разбиения;

*RefineWindow* = *rectangle* [( -5 1 ) , ( 5 5 )] – обозначения области разбиения;

    }

*Refinement "bas"*

    { *Reference* = "bas"

*RefineWindow* = *rectangle* [( -5 0 ) , ( 5 1) ] }

  # *Profiles*

*SubMesh "submesh"* – обозначения процедуры загрузки сетки и профиля;

  { *Reference* = "submesh" – обозначения имени процедуры;

*SelectWindow*

  { *Element* = *rectangle* [( -5 -10.0 ) , ( 5 10 )] – обозначения области загрузки;

  }}}

# Расчёты электрофизических характеристик В

## DESSIS

\*VAX diode – название проекта;

Electrode { – секция определения контактов;

{ name="contact\_0" voltage=0.0 AreaFactor=15} – указание граничных условий для контакта, размер вдоль оси z;

{ name="contact\_1" voltage=0.0 AreaFactor=15}

}

File { – секция определения входных и выходных файлов;

Grid = "@grid@" – определение файлов сетки;

Doping = "@doping@" – определение файлов распределения примеси;

Plot = "@dat@" – определение файла для отображения двумерной информации;

Current = "@plot@" – определение файла для отображения вольт-амперных характеристик;

Output = "@log@" – определение файла для записи информации о расчёте;

}

Physics{ – секция загрузки физических моделей;

Mobility( – модель подвижности;

DopingDep – зависимость подвижности от концентрации примеси;

)

Recombination( – модель рекомбинации;

SRH( DopingDep ) – зависимость времени жизни от концентрации примеси;

Avalanche – модель лавинной генерации носителей заряда;

)

}

## DESSIS

*Plot{* – секция, указывающая на содержания файла двумерной информации;

*\*--Density and Currents, etc*

*eDensity hDensity*

*TotalCurrent/Vector eCurrent/Vector hCurrent/Vector*

*eMobility hMobility*

*eVelocity hVelocity*

*eQuasiFermi hQuasiFermi*

*elOnIntegral hOnIntegral MeanOnIntegral*

*\*--Temperature*

*eTemperature Temperature \* hTemperature*

*\*--Fields and charges*

*ElectricField/Vector Potential SpaceCharge*

*\*--Doping Profiles*

*Doping DonorConcentration AcceptorConcentration*

*\*--Generation/Recombination*

*SRH Band2Band \* Auger*

*AvalancheGeneration eAvalancheGeneration hAvalancheGeneration*

*\*--Driving forces*

*eGradQuasiFermi/Vector hGradQuasiFermi/Vector*

*eEparallel hEparallel eENormal hENormal*

*}*

*Math {* – секция, определяющая особенности расчёта;

*Extrapolate* – метод экстраполяции;

*Iterations=8* – максимальное количество итераций;

*RelErrControl* – метод контроля ошибок;

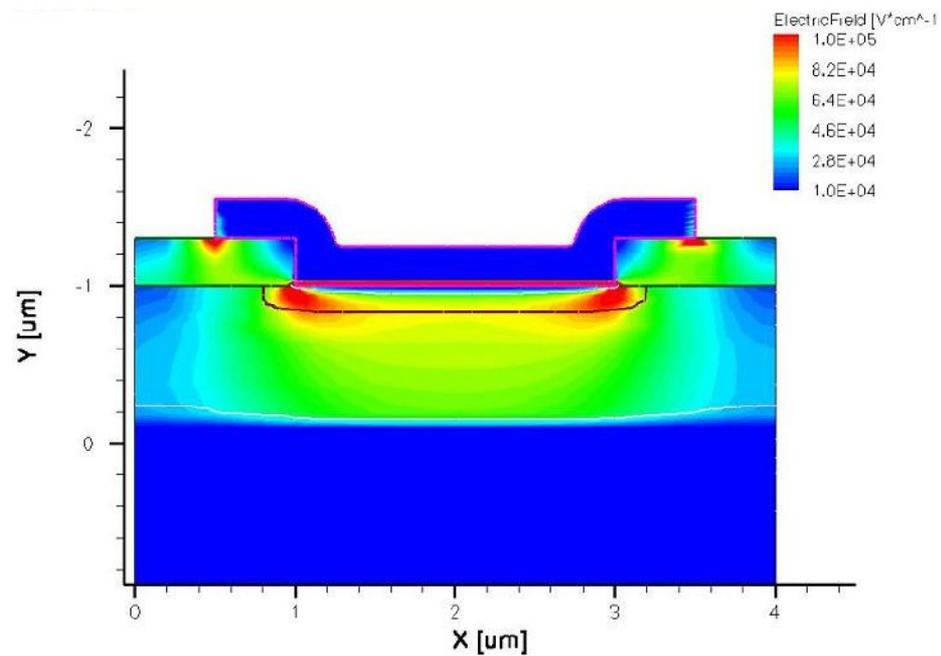
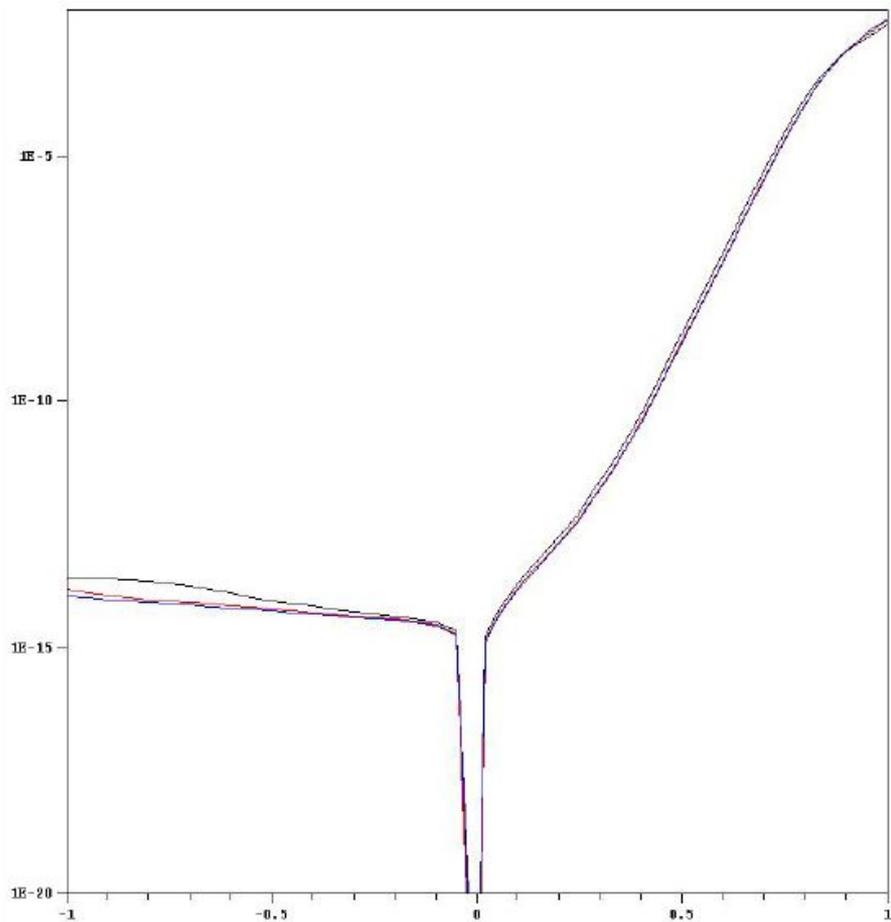
*}*

# Расчеты электрофизических характеристик В

## DESSIS

```
Solve {  
  # initial solution #  
  Plugin – способ решения граничных условий;  
  {  
    Coupled {Poisson} – уравнение Пуассона;  
    Coupled {electron} – уравнение непрерывности для электронов;  
    Coupled {hole} – уравнение непрерывности для дырок;  
  }  
  Quasistationary ( - метод решения;  
    InitialStep=0.1 – начальный шаг;  
    MaxStep=0.1 – максимальный шаг;  
    Minstep=1.0E-5 – минимальный шаг;  
    Goal{ name="contact_0" voltage=10 } – определение необходимой области изменения напряжения;  
  )  
  { coupled {poisson electron hole } } – уравнение для решения ;  
}
```

# Расчёты электрофизических характеристик в DESSIS



# Программы для одномерного

## моделирования

Универсальность системы TCAD существенно затрудняет её изучение, а также неудобна для иллюстрации физики работы простых полупроводниковых приборов, например процессов, происходящих в P-N-переходах с произвольным распределением примеси в подложке.

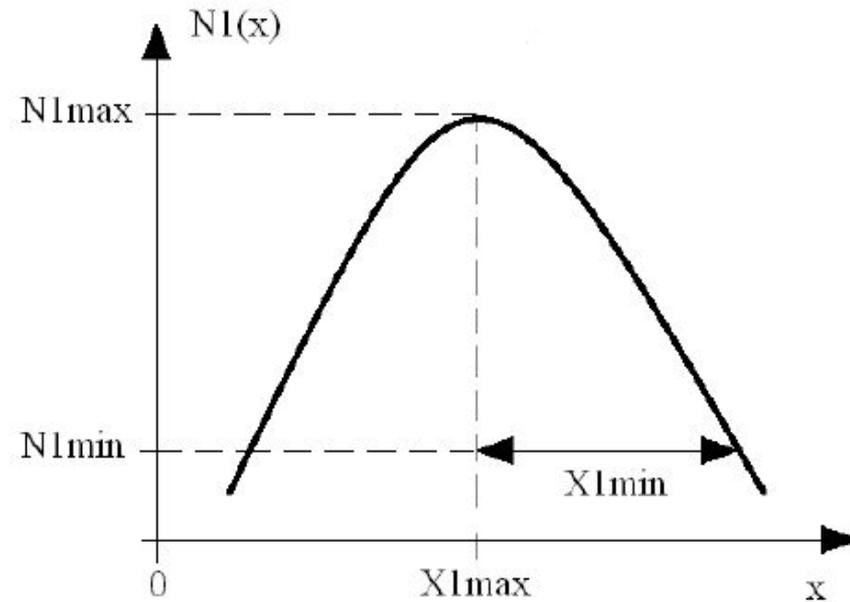
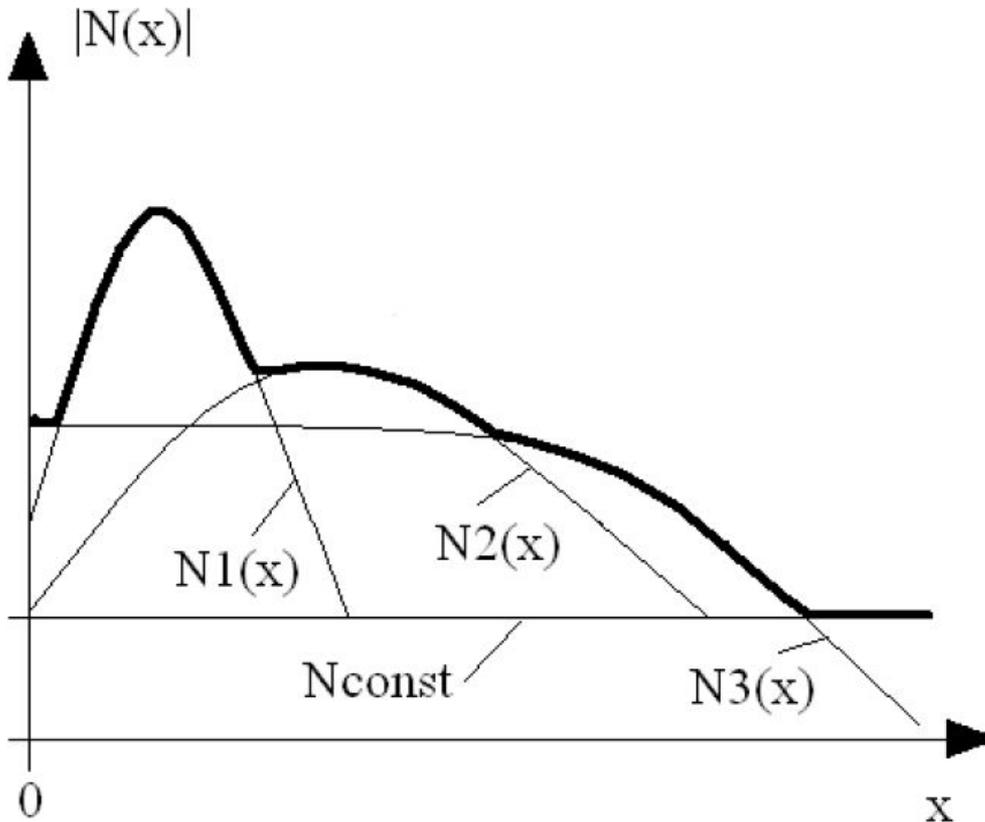
На этапе изучения физики полупроводниковых приборов целесообразно использовать простые программы, позволяющие рассчитывать и сразу отображать основные распределения для P-N-переходов в одномерном приближении.

# Программа для одномерного расчёта p-n перехода:

## создание распределения примеси

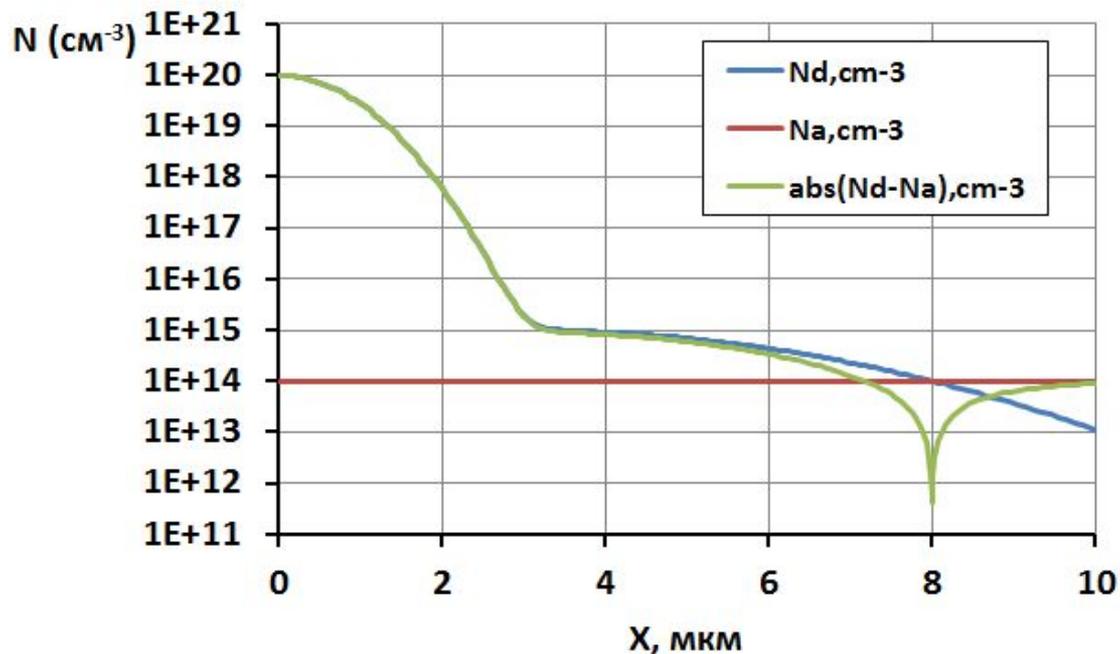
в одномерной модели

$$N(x) = N_1(x) + N_2(x) + N_3(x) + N_{const}$$

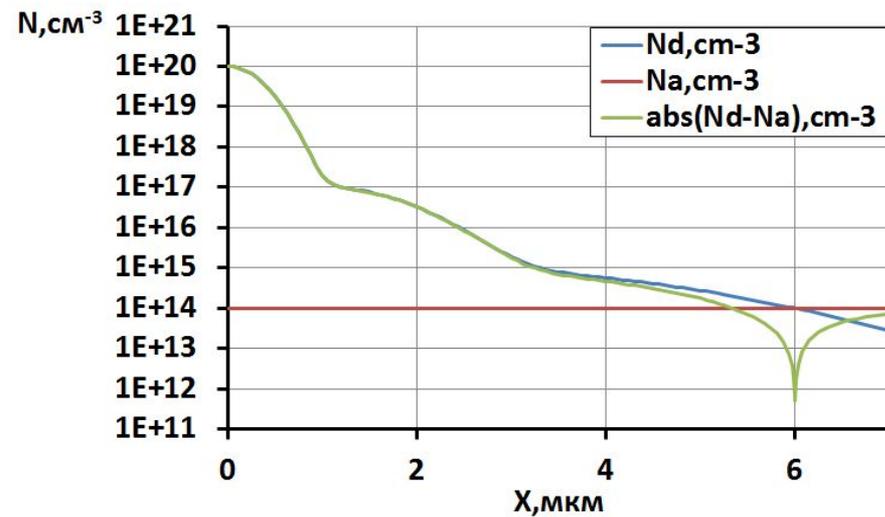
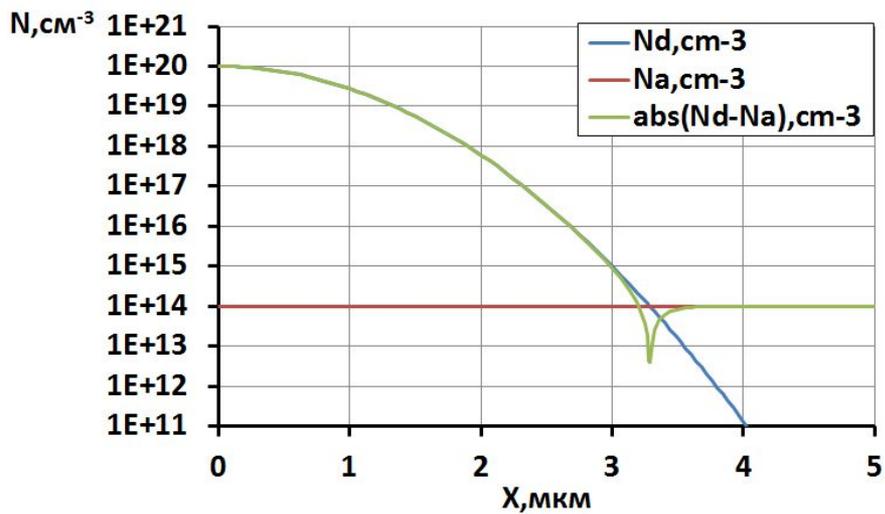


# Создание распределения примеси в одномерной модели

	A	B	C	D	E
1	Параметры P-N-перехода				
2	Подложка	Толщина, мкм	Конц. примеси, см-3	Макс. шаг сетки, мкм	Мин. шаг сетки, мкм
3	p	10,00	1,00E+14	0,100	0,010
4					
5	Параметры распределения примеси				
6		Профиль 1	Профиль 2	Профиль 3	
7		n	n	n	Тип профиля: n p
8	Nmax, см-3	1,00E+20	1,00E+15	1,00E+13	
9	Xmax, мкм	0,00	3,00	0,00	
10	Nmin, см-3	1,00E+15	1,00E+14	1,00E+12	
11	Xmin, мкм	3,00	5,00	0,00	
12					
13	Количество	точек сетки	155		
14	Build 1D model				
15					
16					



# Варианты распределения примеси в одномерной модели



# Расчет электрических характеристик р-п-перехода

напряжение на р-п-переходе

температура структуры

17	Параметры расчетов			
18	U <sub>pn</sub> , В	10	Кол-во итераций	100
19	T, К	300	Ошибка	1,00E-05
20			Начальный шаг	1,00E-03
21	Система	1	Минимальный шаг	1,00E-05
22	координат	0-линейная	Максимальный шаг	1,00E-01
23		1-цилиндрич.		
24		2-сферич.		
25	Run simulation			
26				
27				
28				
29	Сходимость:	Сходимость достигнута		

выбор системы  
координат

параметры численных  
методов

информация о сходимости

кнопка запуска расчета  
параметров р-п-перехода

# Расчет электрических характеристик p-n-перехода

Настройки хода вычислений включают в себя:

- Конечное значение напряжения на переходе  $U_{pn}$  при вариации напряжений на левом контакте (потенциал левого контакта относительно нуля). Потенциал правого контакта равен нулю;
- Значение температуры прибора;
- Параметры управления расчетным шагом (раздел “**Расчетный шаг**”).

При вариации параметров шаг по напряжению  $U_{pn}$  не фиксирован, а меняется в процессе расчета с учетом данных о сходимости метода Ньютона:

$$U_{pn} = U_{\text{начальное}} + \Delta U$$

$$\Delta U = [U_{\text{начальное}} - U_{\text{конечное}}] \cdot \text{Step}$$

Шаг расчета (Step) меняется в диапазоне [0,1].

В начале расчета Step=0.

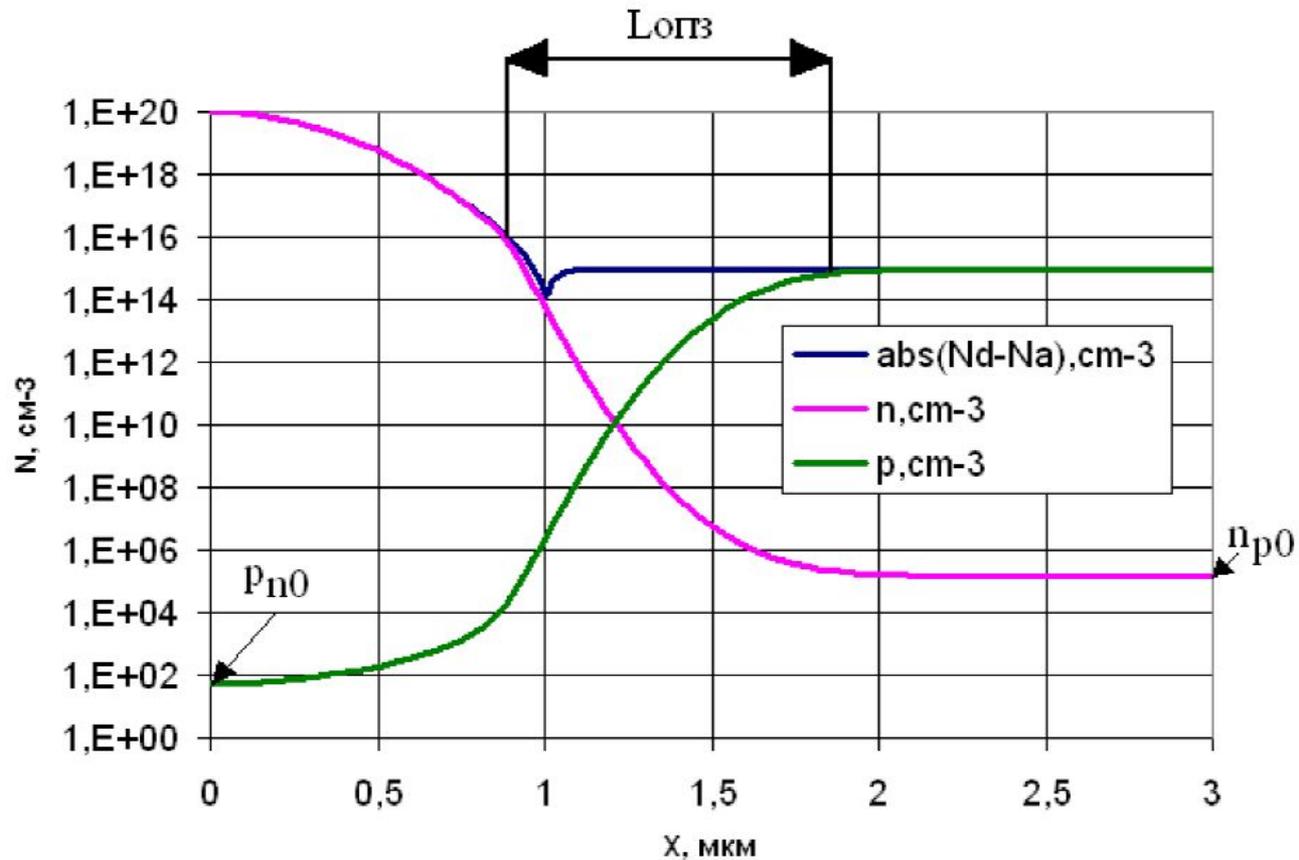
В случае сходимости метода Ньютона при решении уравнений с таким начальным приближением шаг удваивается.

Если Step > MaxStep, то Step = MaxStep

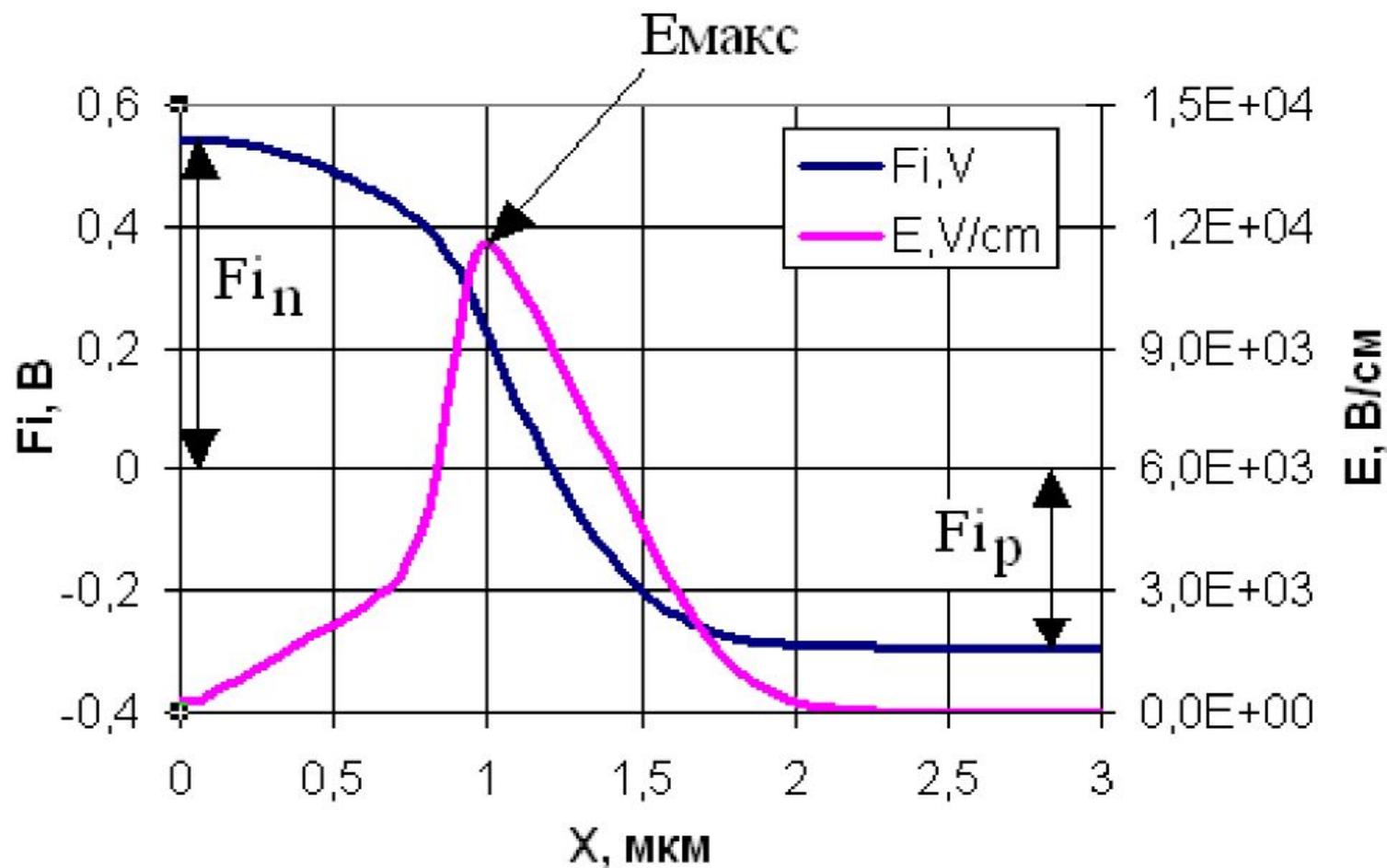
Если метод Ньютона при решении уравнений с заданным шагом по напряжению расходится, то шаг уменьшается вдвое.

Если Step < MinStep, то Step = MinStep, и расчет прекращается.

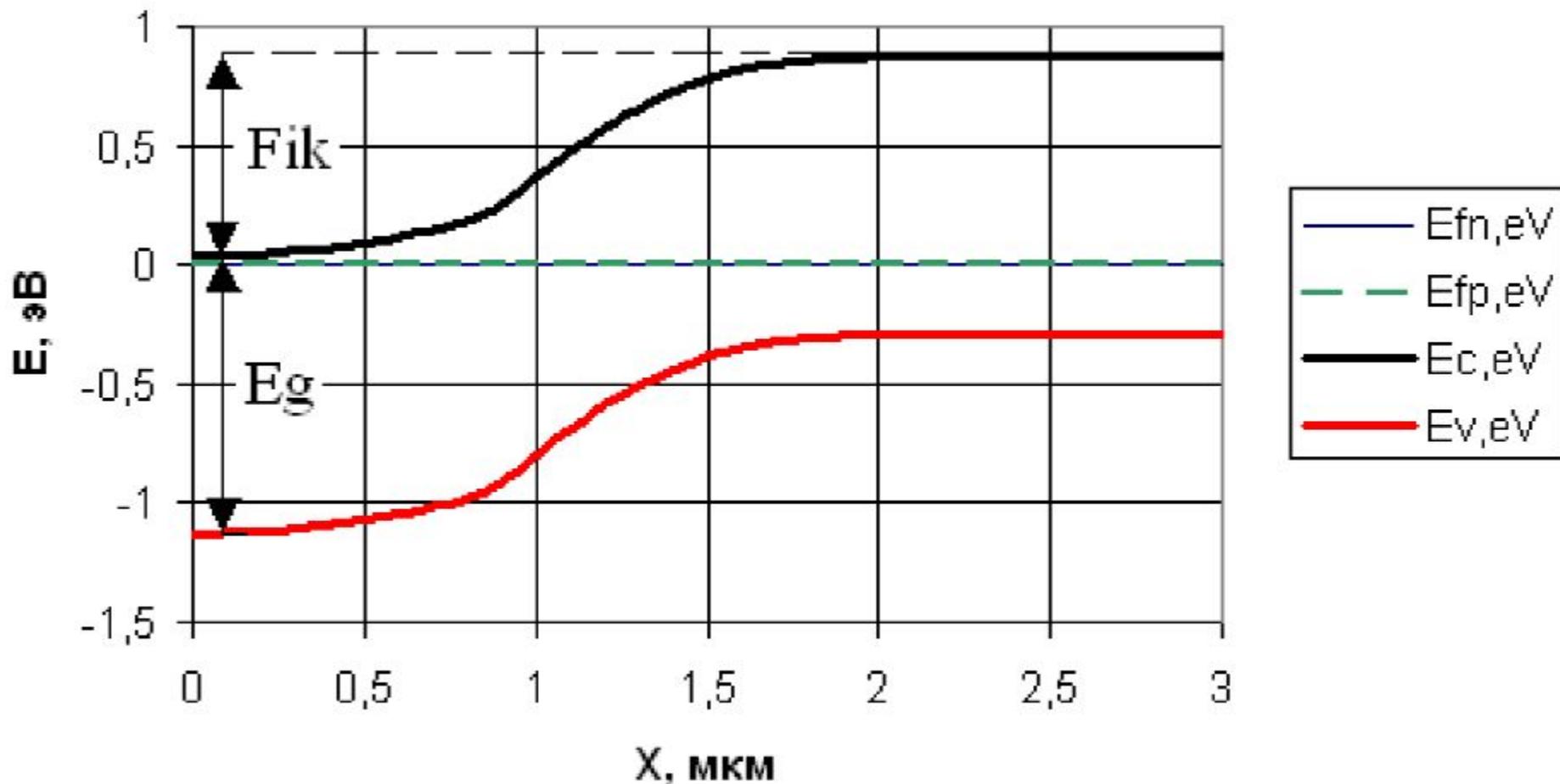
# Распределение концентрации носителей заряда при $U = 0$



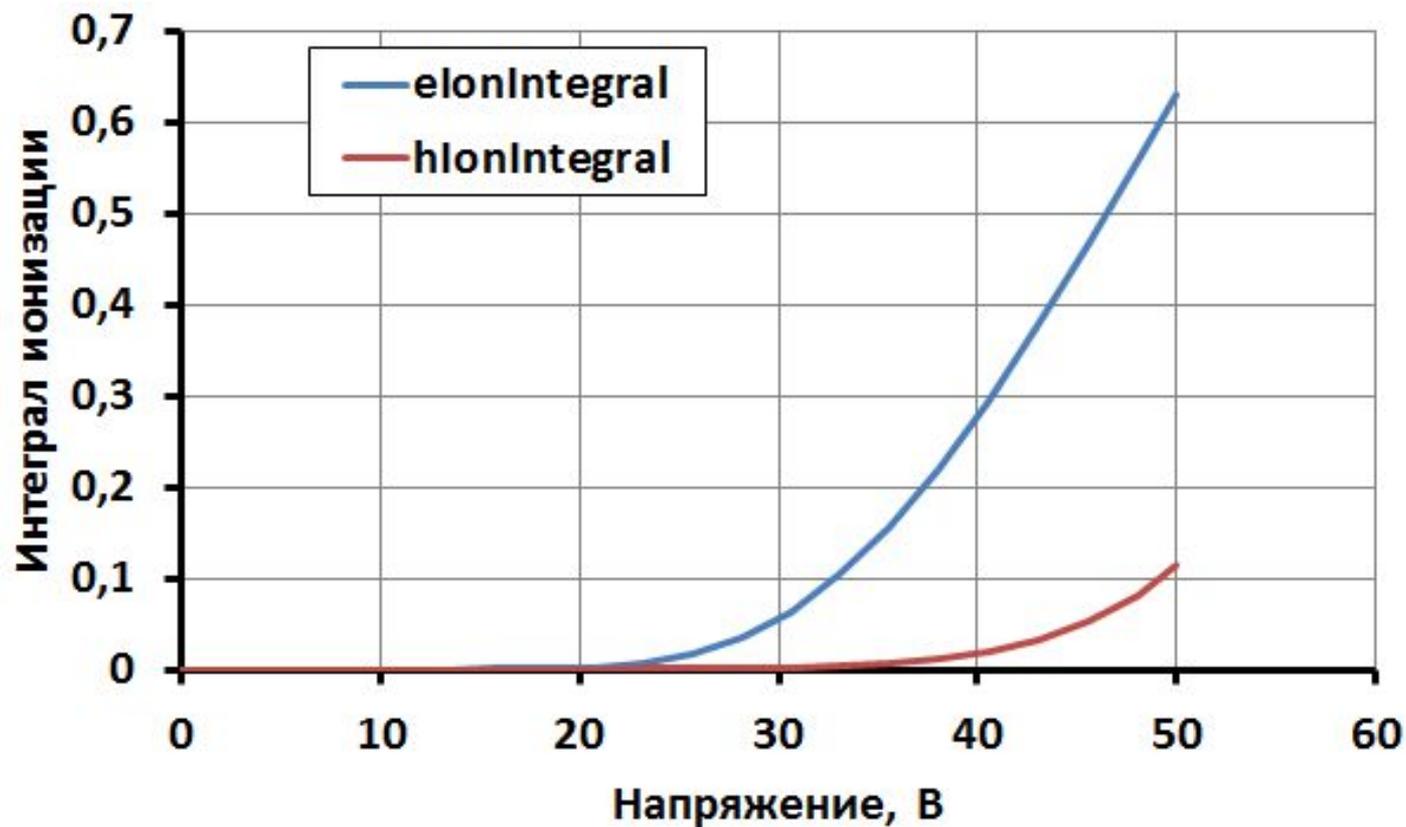
# Распределение поля и потенциала при $U = 0$



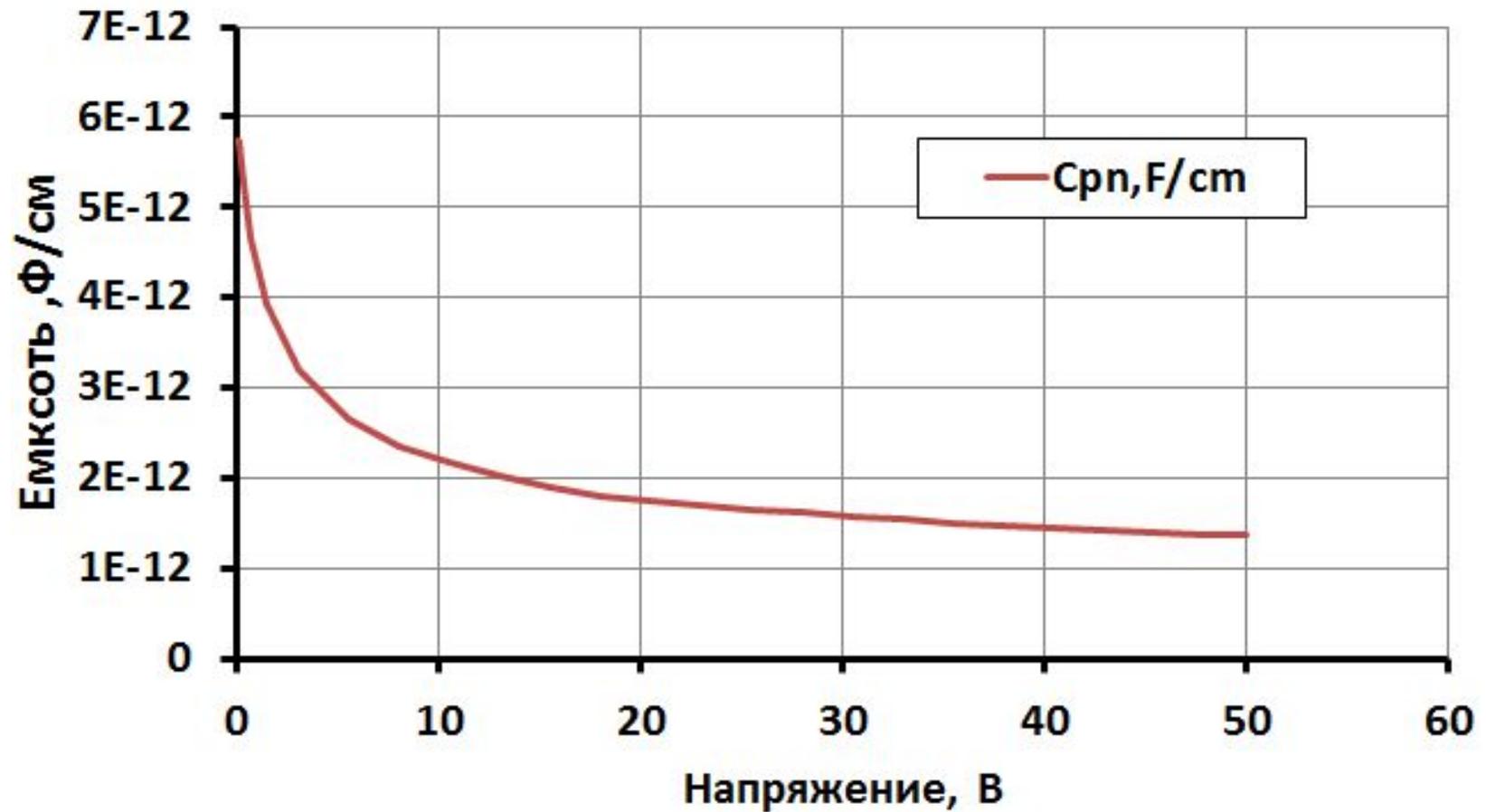
# Зонная диаграмма p-n перехода при $U = 0$



# Зависимость интегралов ионизации от U



# Зависимость емкости р-п перехода от U



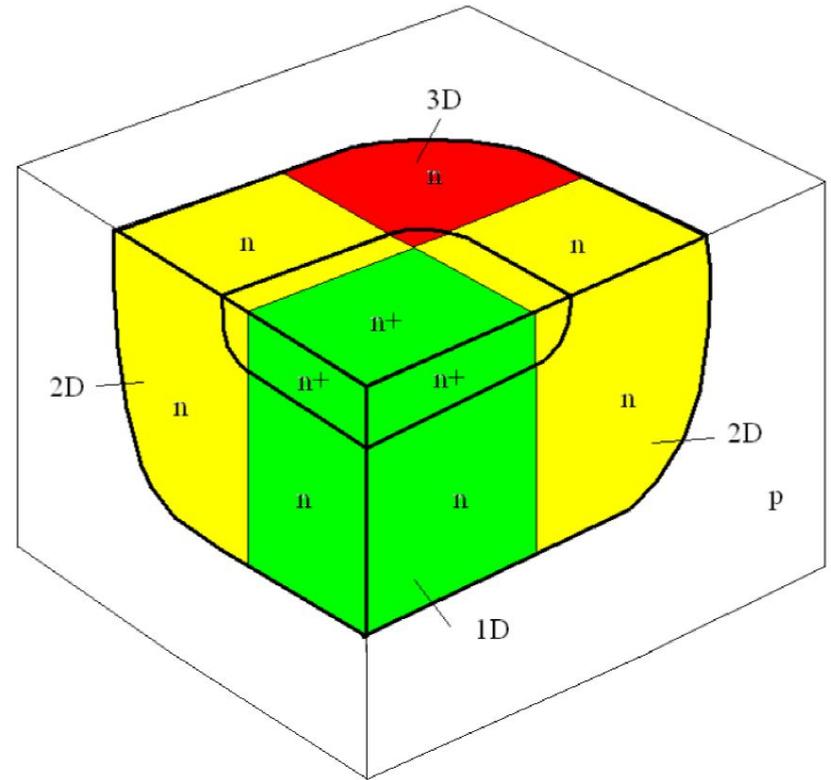
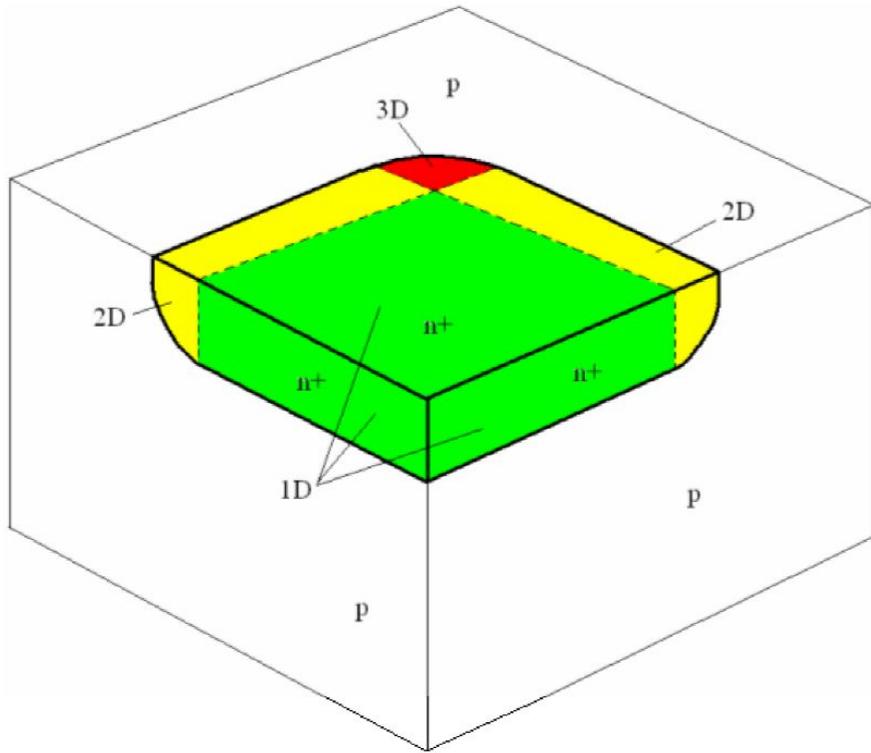
# Основные уравнения и модели, используемые в программе

P-n-переход представляется в виде одномерного распределения примеси на конечно-разностной сетке, на которой численно решается уравнение Пуассона, рассчитываются распределения потенциала, напряженности электрического поля, концентраций электронов и дырок.

На основе полученных результатов может быть рассчитан ионизационный интеграл, позволяющий оценить напряжение лавинного пробоя p-n-перехода, емкость p-n перехода.

Для оценки влияния двух- и трехмерных краевых эффектов на величину напряжения лавинного пробоя в программе предусмотрено представление p-n-перехода в виде цилиндрически и сферически симметричной структуры.

# Структуры p-n – переходов с учетом краев структуры



# Уравнение Пуассона

В такой структуре для одномерного распределения примеси решается уравнение Пуассона в линейных (1D), цилиндрических (2D) и сферических (3D) координатах:

## - Уравнение Пуассона в линейных координатах (1D)

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} = \frac{e}{\varepsilon * \varepsilon_0} * \left( n_i * \exp\left(\frac{\varphi_p - \varphi}{\varphi_T}\right) - n_i * \exp\left(\frac{\varphi - \varphi_n}{\varphi_T}\right) + (N_d - N_a) \right)$$

## - Уравнение Пуассона в цилиндрических координатах (2D)

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{d\varphi}{dr} = \frac{e}{\varepsilon * \varepsilon_0} * \left( n_i * \exp\left(\frac{\varphi_p - \varphi}{\varphi_T}\right) - n_i * \exp\left(\frac{\varphi - \varphi_n}{\varphi_T}\right) + (N_d - N_a) \right)$$

## - Уравнение Пуассона в сферических координатах (3D)

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d\varphi}{dr} = \frac{e}{\varepsilon * \varepsilon_0} * \left( n_i * \exp\left(\frac{\varphi_p - \varphi}{\varphi_T}\right) - n_i * \exp\left(\frac{\varphi - \varphi_n}{\varphi_T}\right) + (N_d - N_a) \right)$$

# Дискретизация уравнения Пуассона

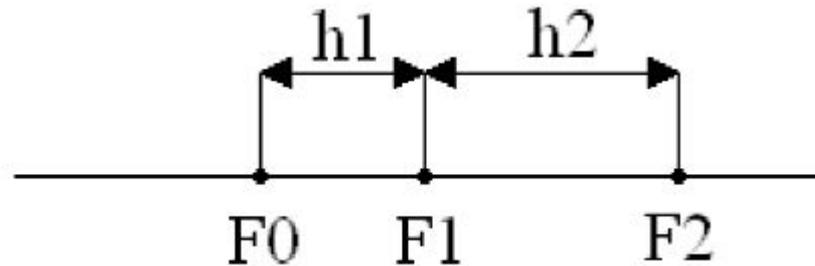
линейные координаты  $\frac{d^2 F}{dr^2}$

цилиндрические координаты  $\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{dF}{dr}$

сферические координаты  $\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{dF}{dr}$

# Дискретизация уравнения Пуассона

Для конечно-разностной сетки с переменным шагом сетки левые части уравнения Пуассона имеют вид:



$$\frac{d^2F}{dr^2} = \frac{2 \cdot F_0}{h_1 \cdot (h_1 + h_2)} - \frac{2 \cdot F_1}{h_1 \cdot h_2} + \frac{2 \cdot F_2}{h_2 \cdot (h_1 + h_2)}$$

$$\frac{dF}{dr} = - \frac{h_2 \cdot F_0}{h_1 \cdot (h_1 + h_2)} - \frac{F_1 \cdot (h_1 - h_2)}{h_1 \cdot h_2} + \frac{h_1 \cdot F_2}{h_2 \cdot (h_1 + h_2)}$$

Уравнение записано для одного узла сетки с индексом  $i$  ( $F_1$ )

# Дискретизация уравнения Пуассона

Для всей сетки уравнение записывается в матричном виде:

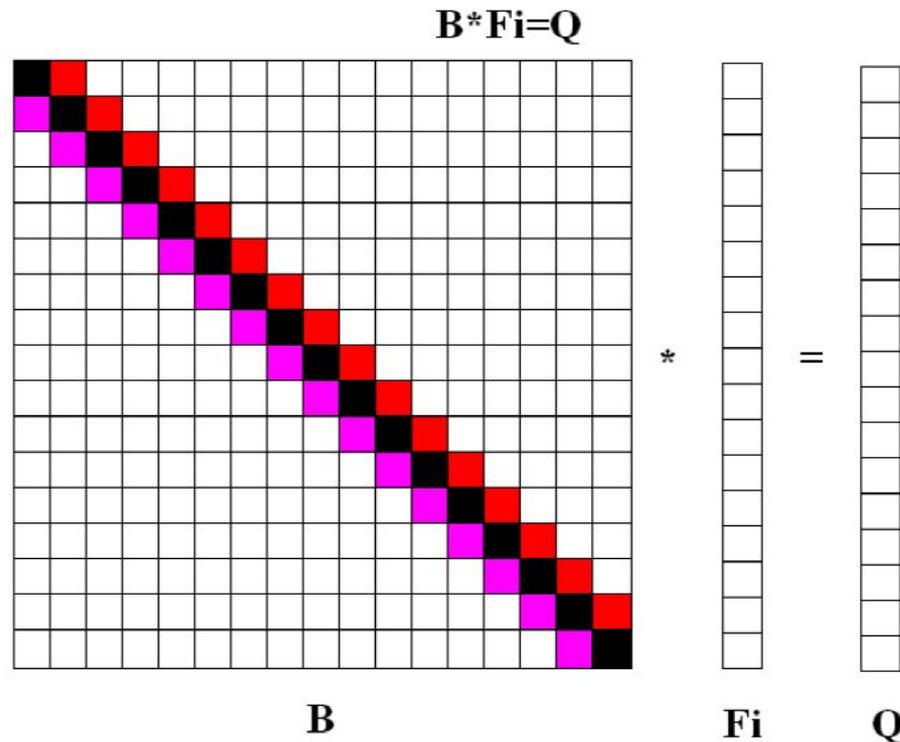
$$B \cdot \varphi = Q$$

, где  $B$  – квадратная матрица коэффициентов левой части уравнения

$\varphi$  – столбец значений потенциала

$Q$  – правая часть уравнения дискретного уравнения Пуассона

Вид матричного уравнения Пуассона показан на рисунке. Пустые поля матрицы  $B$  соответствуют нулевым значениям коэффициентов.



# Линеаризация системы уравнений

Уравнение Пуассона в дискретном матричном виде является нелинейным. Его необходимо привести к линейному виду. Если записать уравнение в виде:

$$F = B \cdot \varphi - Q$$

то можно составить новую систему уравнений, линейную относительно

$$\Delta\varphi = \varphi^{m+1} - \varphi^m$$

(разница между новым и старым приближениями для  $\varphi$ ):

$$J^m(F) \cdot \Delta\varphi = -F^m \quad \text{или} \quad J \cdot \Delta\varphi = C$$

Где  $J$  – матрица производных  $F$  по всем переменным (якобиан)

$$J^m = \begin{bmatrix} \frac{dF}{d\varphi_{i-1}} & \frac{dF}{d\varphi_i} & \frac{dF}{d\varphi_{i+1}} \end{bmatrix}$$

# Решение системы линейных уравнений

Матрица  $J$  также как матрица  $B$  является разреженной 3-диагональной матрицей, которую необходимо привести к диагональному виду.

В данном случае возможно использование прямого метода исключения Гаусса, который для 3-диагональной матрицы называется методом прогонки, в ходе которой сначала исключается нижняя диагональ, а затем верхняя.

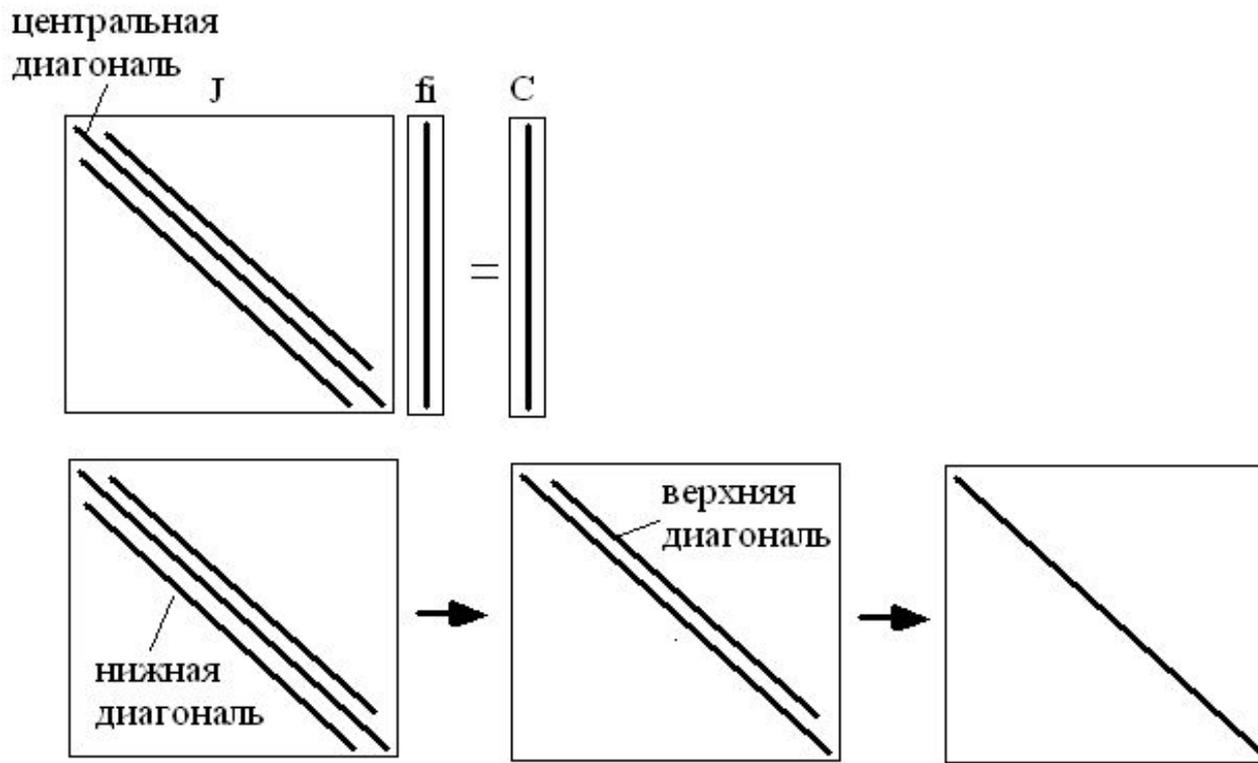


Иллюстрация метода прогонки для решения системы линейных уравнений

# Вычисление ошибки

Общая формула для вычисления относительной ошибки для всех узлов сетки следующая:

$$error = \sum_{i=1}^{N_{\text{узел}}} \left( \frac{\phi_i^{m+1} - \phi_i^m}{\phi_i^{m+1}} \right) * \frac{1}{N_{\text{узел}} * Error}$$

где:  $N_{\text{узел}}$  – количество точек-узлов сетки

Если  $error < 1$ , то сходимость достигнута; если  $error \geq 1$  – не достигнута и требуется дополнительная итерация.

Если  $error \geq 1$ , то  $\phi_{im} + 1 = \Delta\phi_i + \phi_{im}$ ;  $\phi_{im} = \phi_{im} + 1$  – новое приближение.

Также увеличивается на единицу количество итераций; если оно превышает максимальное заданное значение, то расчет прерывается.

# Модели, используемые для расчёта р-n перехода

Дифференциальные уравнения дополняются граничными условиями

Распределение потенциала в подложке (в начальной стадии расчета) и на правой границе структуры задается следующим образом:

- для области n-типа:

$$\phi = \phi_t \cdot \ln\left(\frac{N(x)}{n_i}\right) \quad \phi_t = \frac{k_b \cdot T}{e} = 25.8 \text{ мВ (при } T=300\text{К)}$$

- для области р-типа:

$$\phi = -\phi_t \cdot \ln\left(\frac{\text{abs}(N(x))}{n_i}\right)$$

# Модели, используемые для расчёта p-n перехода

Модель эффективной собственной концентрации носителей

$$n_i(T) = \sqrt{N_c(T) \cdot N_v(T)} \cdot \exp\left(-\frac{E_g(T)}{2 \cdot k_B \cdot T}\right)$$

Эффективная плотность состояний в зоне проводимости

$$N_c(T) = N_{c300} \cdot \left(\frac{T}{300K}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Эффективная плотность состояний в валентной зоне

$$N_v(T) = N_{v300} \cdot \left(\frac{T}{300K}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Зависимость ширины запрещенной зоны от температуры и концентрации

$$E_g(T, N) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} - \Delta E_g(N)$$

Модель модуляции ширины запрещенной зоны

$$\Delta E_g(N) = E_{bgn} \left[ \ln\left(\frac{N}{N_{ref}}\right) + \sqrt{\left(\ln\left(\frac{N}{N_{ref}}\right)\right)^2 + 0.5} \right]$$

# Модели, используемые для расчёта p-n перехода

Материал	Диэлектрическая проницаемость	Ширина запрещенной зоны, эВ	Сродство к электронам, эВ
Si	11,9		
SiO2	3,9	9	0,9
Si3N4	7,5	5	1,9
Диэлектрик1	3,9	9	0,9
Диэлектрик2	3,9	9	0,9
Диэлектрик3	3,9	9	0,9

	Параметры запрещенной зоны Si	Eg(T,N); Nc; Nv
Eg(0), эВ	1,1648	
alfa, эВ/К	4,73E-04	
beta, К	636	
Xi0, эВ	4,05	
XiBGN	0,5	
Ebgn, эВ	6,92E-03	
Nref, см-3	1,30E+17	
Nc300, см-3	2,89E+19	
Nv300, см-3	3,14E+19	

# Модели, используемые для расчёта p-n перехода

Модель подвижности носителей заряда Масетти

$$\mu_{\text{dop}} = \mu_{\text{min1}} \exp\left(-\frac{P_c}{N_i}\right) + \frac{\mu_{\text{const}} - \mu_{\text{min2}}}{1 + \left(\frac{N_i}{C_r}\right)^\alpha} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{C_s}{N_i}\right)^\beta}$$

Модель коэффициента лавинного умножения Окуто-Кроувелла

$$\alpha(F) = a \cdot \left(1 + c(T - T_0)\right) \cdot F^\gamma \cdot e^{-\left(\frac{b[1 + d(T - T_0)]}{F}\right)^\delta}$$

$$I_n = \int_0^W \alpha_n(x) e^{-\int_x^W (\alpha_n(x') - \alpha_p(x')) dx'} dx$$

$$I_p = \int_0^W \alpha_p(x) e^{\int_0^x (\alpha_p(x') - \alpha_n(x')) dx'} dx$$

# Модели, используемые для расчёта p-n перехода

Параметры	Лавинная генерация	Модель Okuto
	Электроны	Дырки
A, 1/V	4,26E-01	0,243
B, В/см	4,81E+05	6,53E+05
C, 1/K	3,05E-04	5,35E-04
D, 1/K	6,86E-04	5,67E-04
Gamma	1	1
Delta	2	2
Параметры подвижности	Masetti model	
	Электроны	Дырки
MuL, см2/(В*с)	1417	470,5
AlfaL	2,5	2,2
MuMin1, см2/(В*с)	52,2	44,9
MuMin2, см2/(В*с)	52,2	0
Mu1, см2/(В*с)	43,4	29
Pc, см-3	0	9,23E+16
Cr, см-3	9,68E+16	2,23E+17
Cs, см-3	3,43E+20	6,10E+20
Alfa	0,68	0,719
Beta	2	2

# Задания для расчёта

а) Построить профиль распределения примеси в соответствии с представленным вариантом;

б) Построить зависимость потенциала и электрического поля от расстояния при нулевом значении прикладываемого напряжения;

Определить:

- ширину области пространственного заряда (ОПЗ);
- значение максимального электрического поля;
- значение контактной разности потенциалов.

в) Построить зависимость интеграла ионизации в диапазоне прикладываемых напряжений;

г) Построить зависимость емкости р-п перехода в диапазоне прикладываемых напряжений.