

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**).

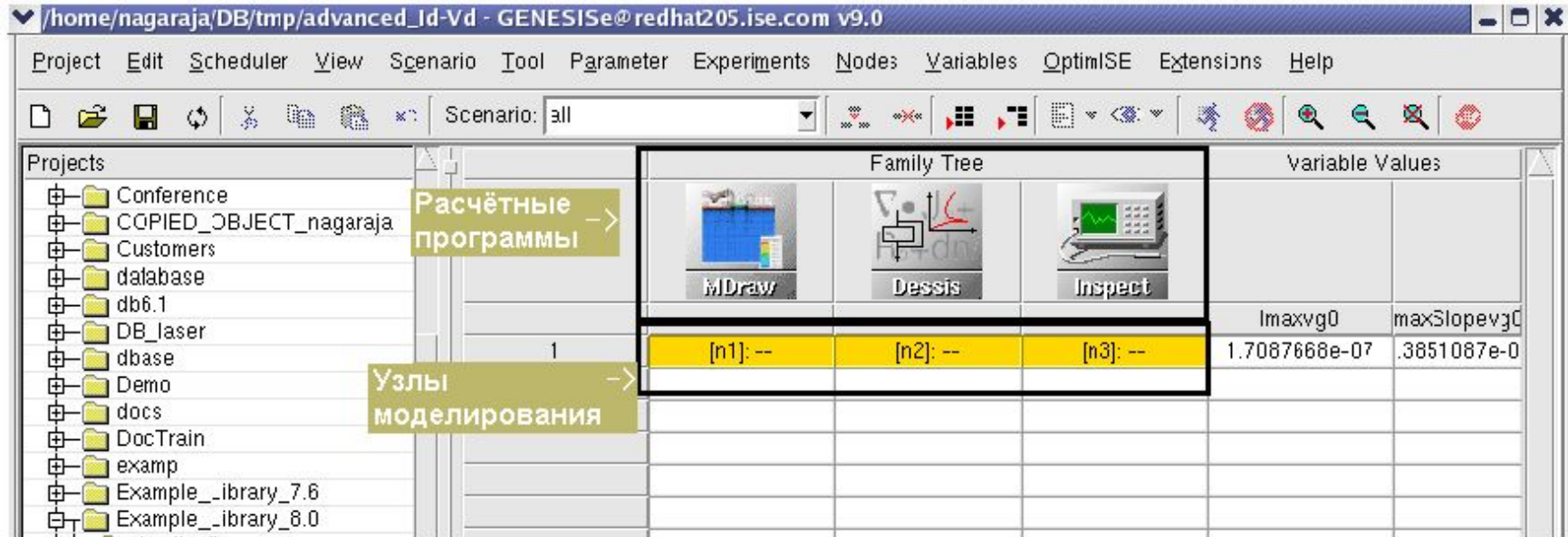
TCAD является универсальной средой с широкими возможностями по моделированию различных полупроводниковых приборов сложных конструкций.

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)

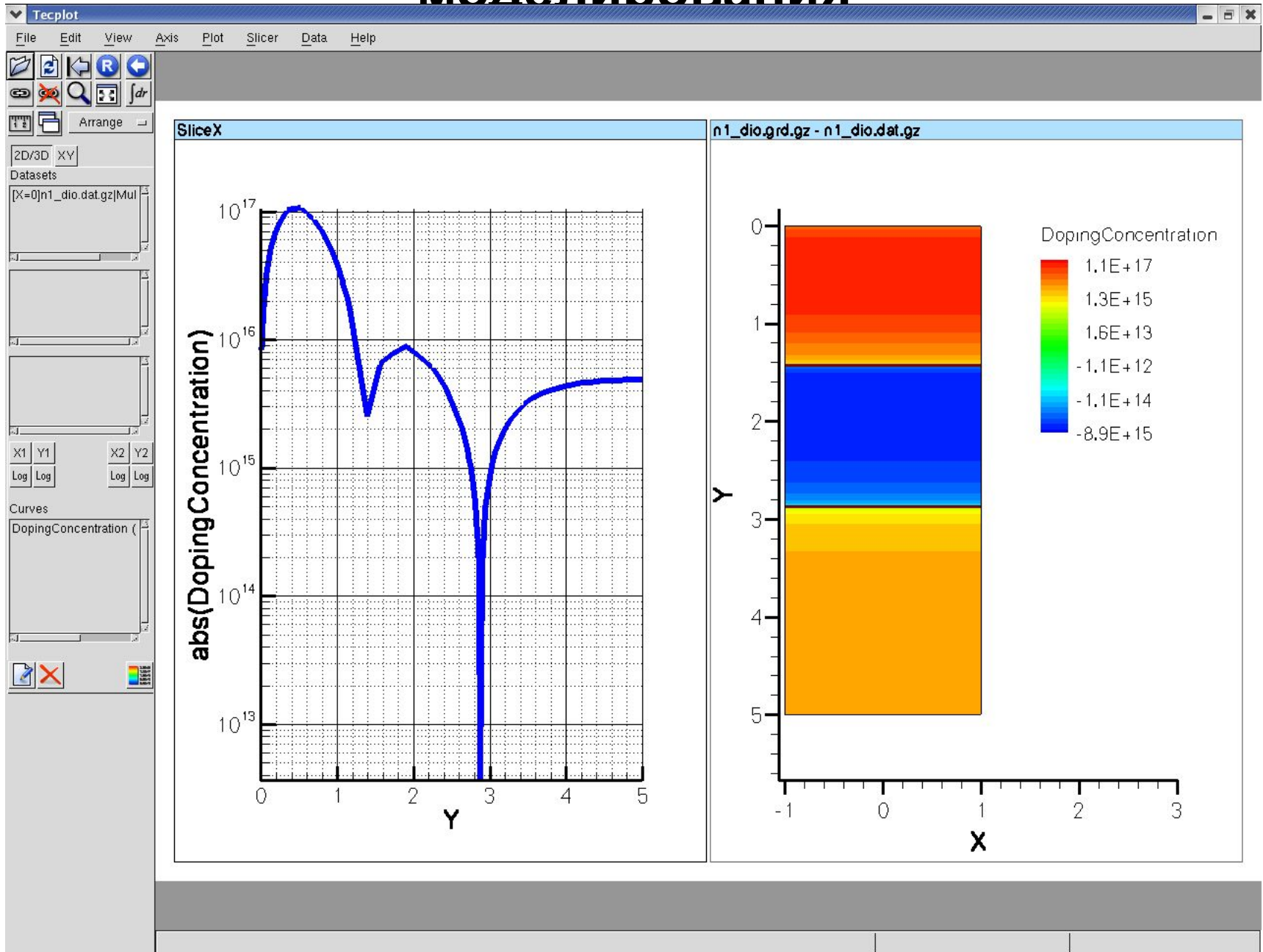
save(file='n1', type=dmp) – процедура сохранения в формате DIOS;

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

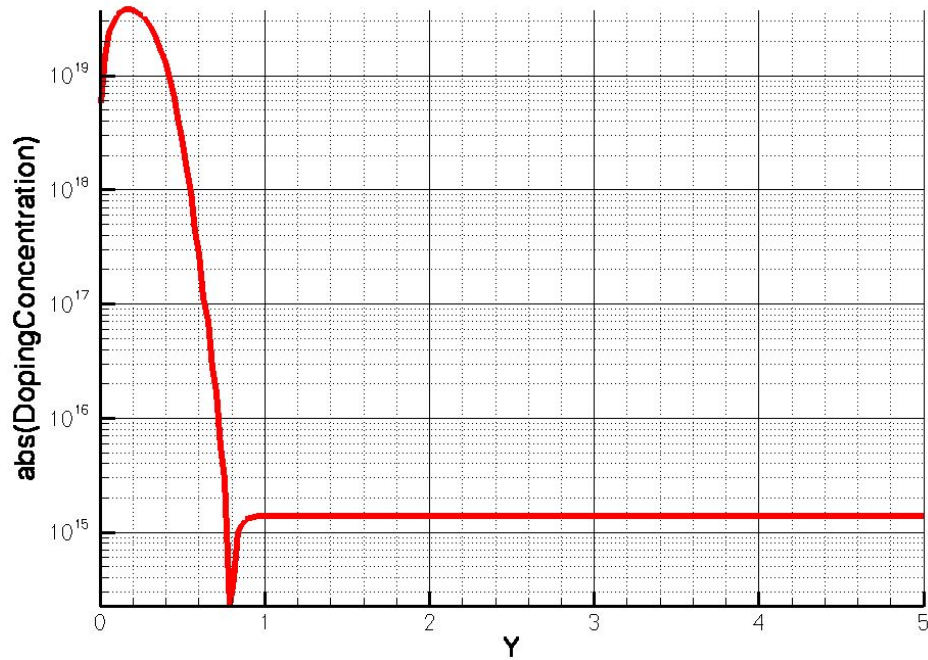
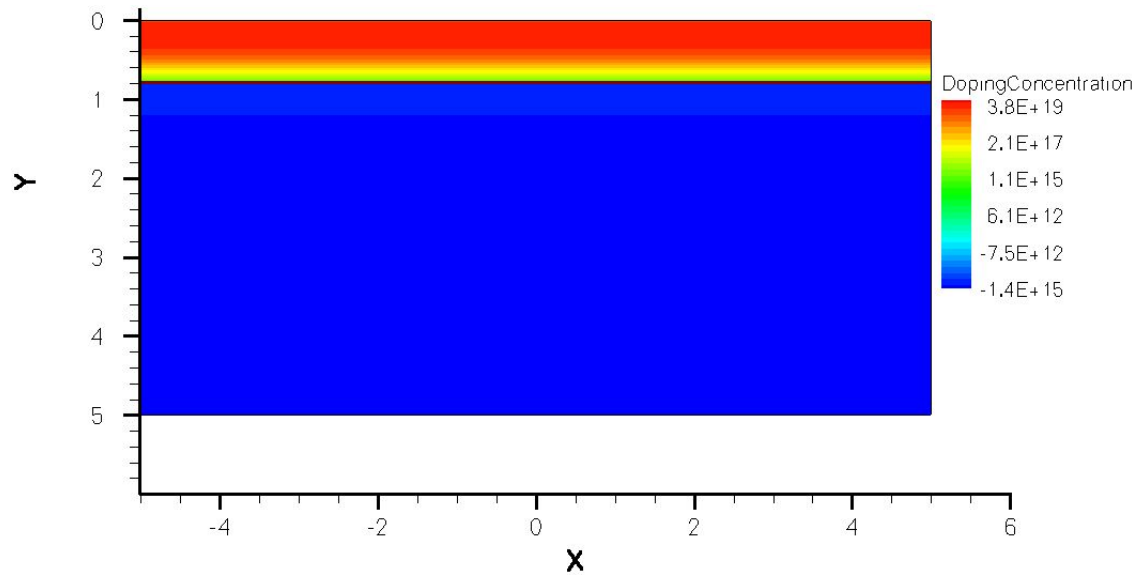
end

Программа визуализатор результатов

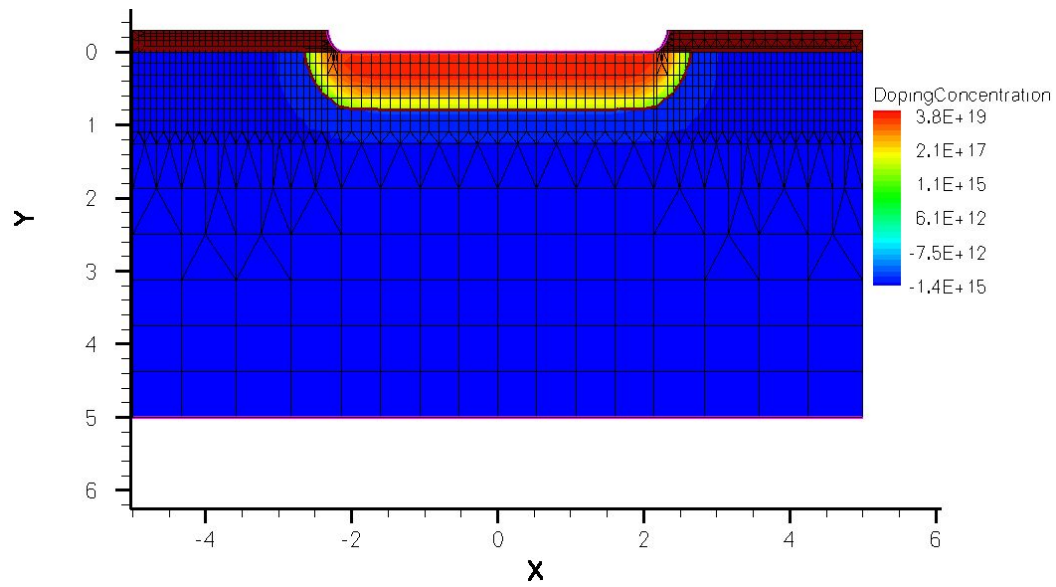
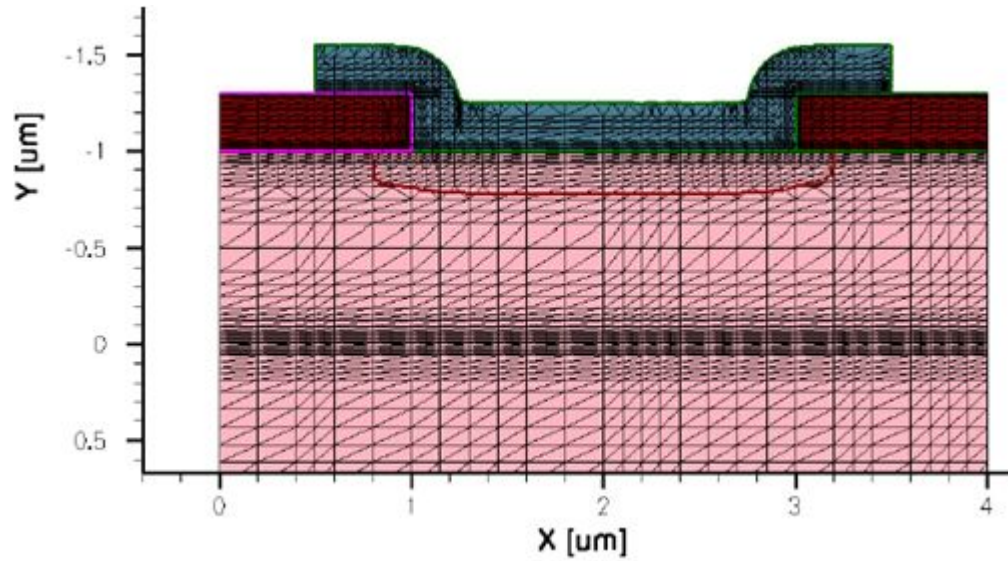
МОДЕЛИРОВАНИЯ



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;

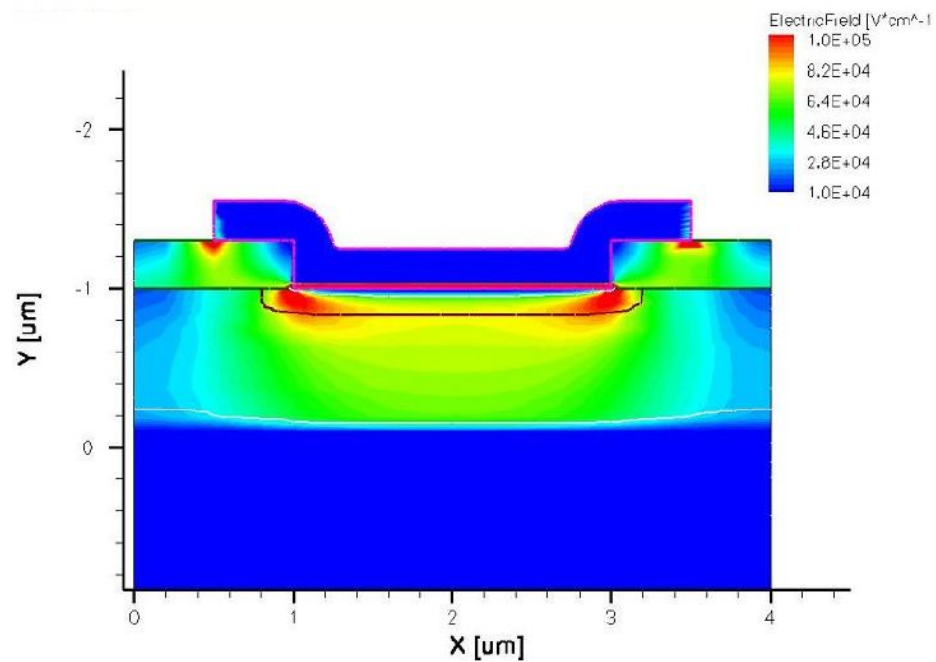
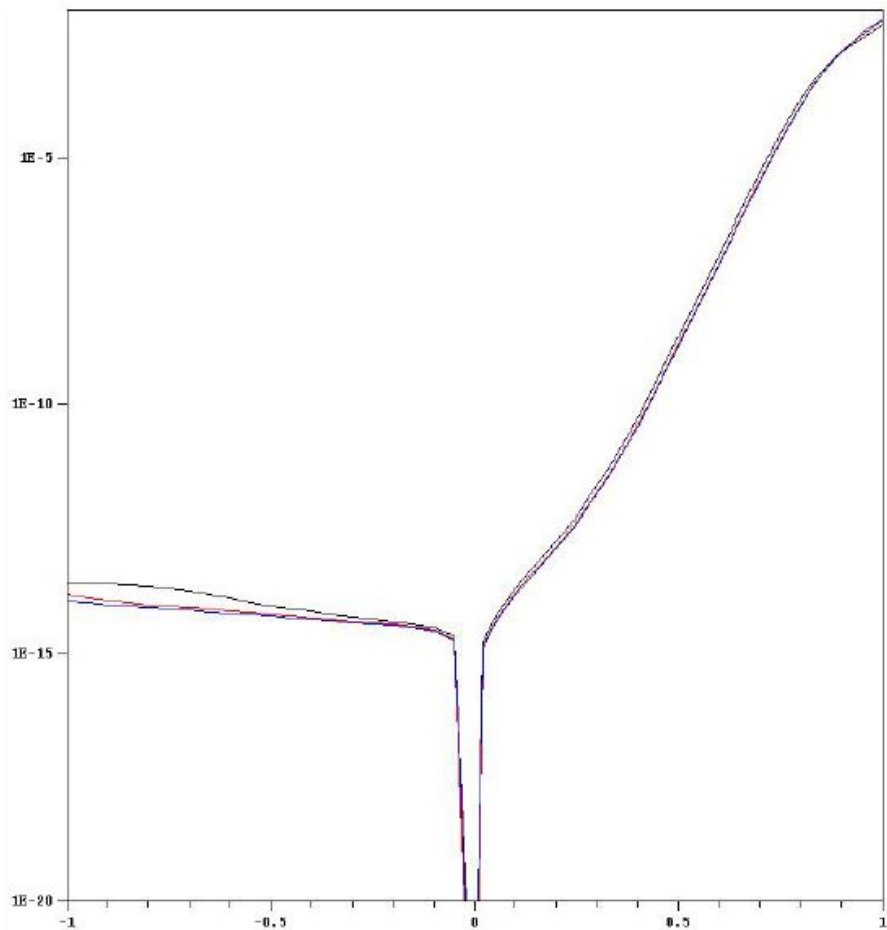
}

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.

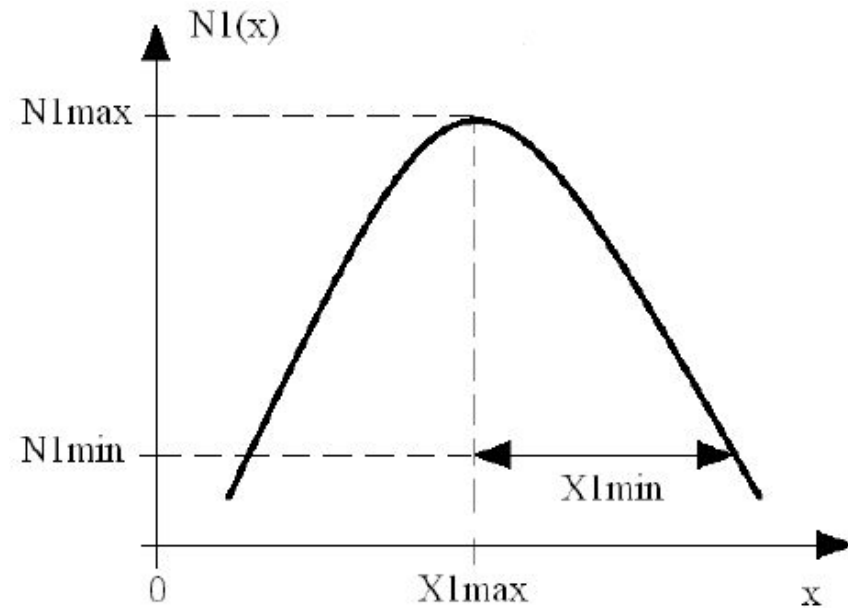
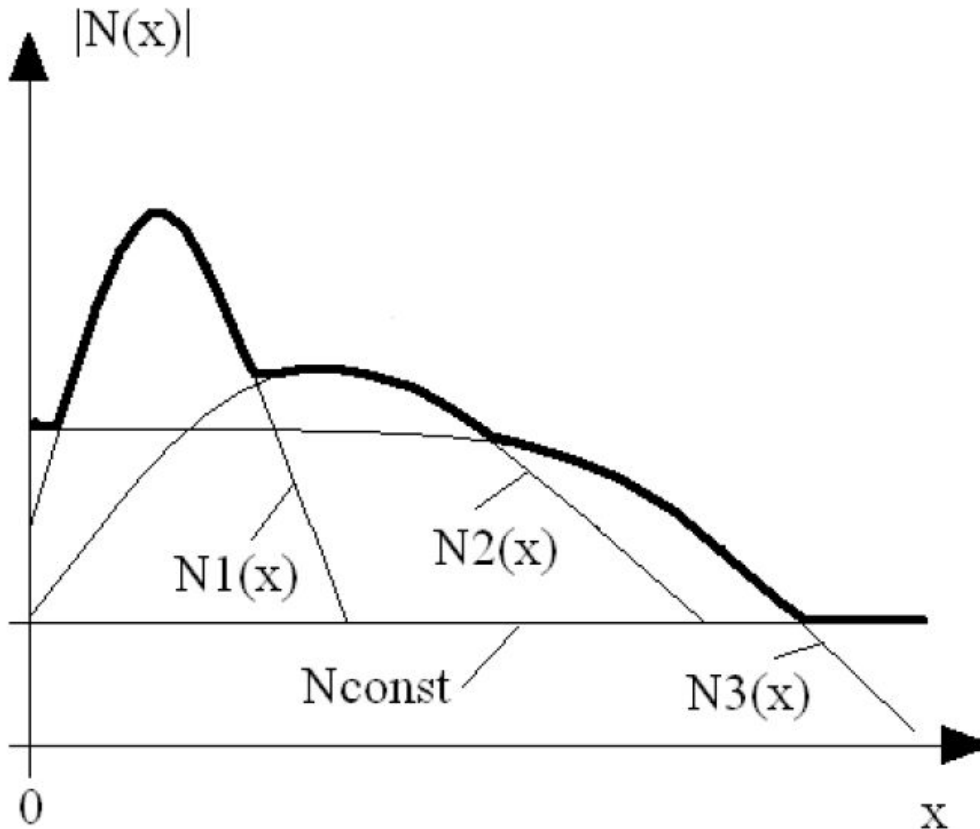
На этапе изучения физики полупроводниковых приборов целесообразно использовать простые программы, позволяющие рассчитывать и сразу отображать основные распределения для P-N-переходов в одномерном приближении.

Программа для одномерного расчёта p-n перехода:

создание распределения примеси

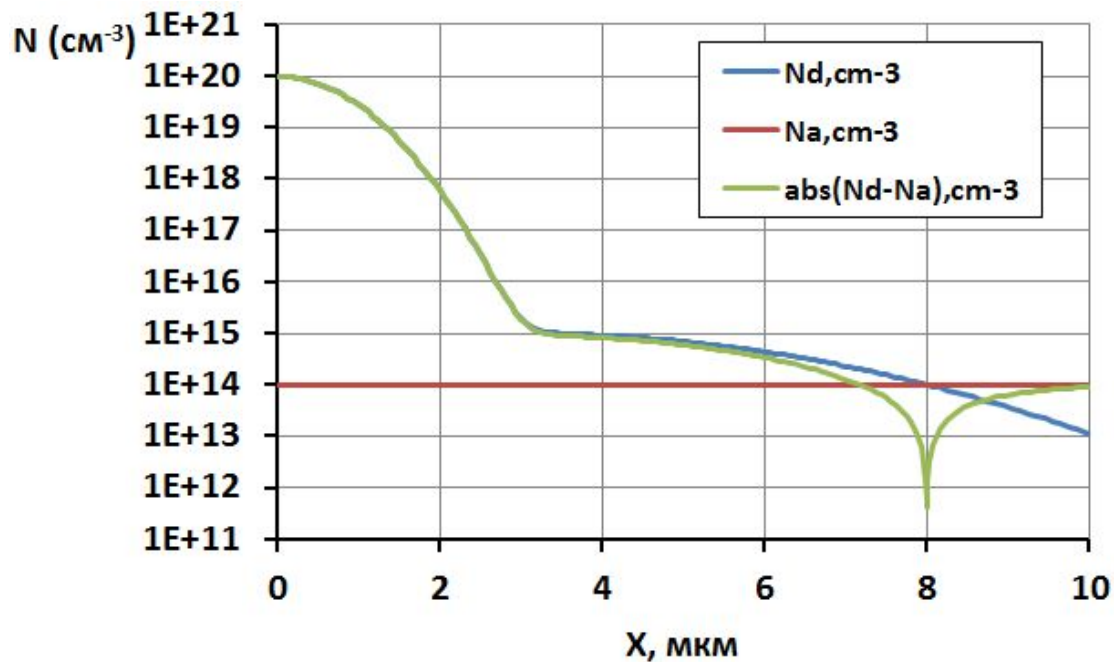
в одномерной модели

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

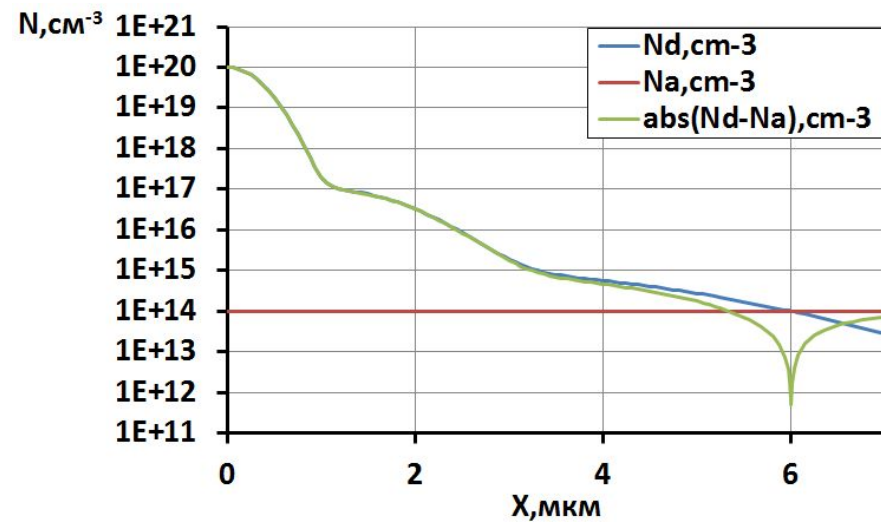
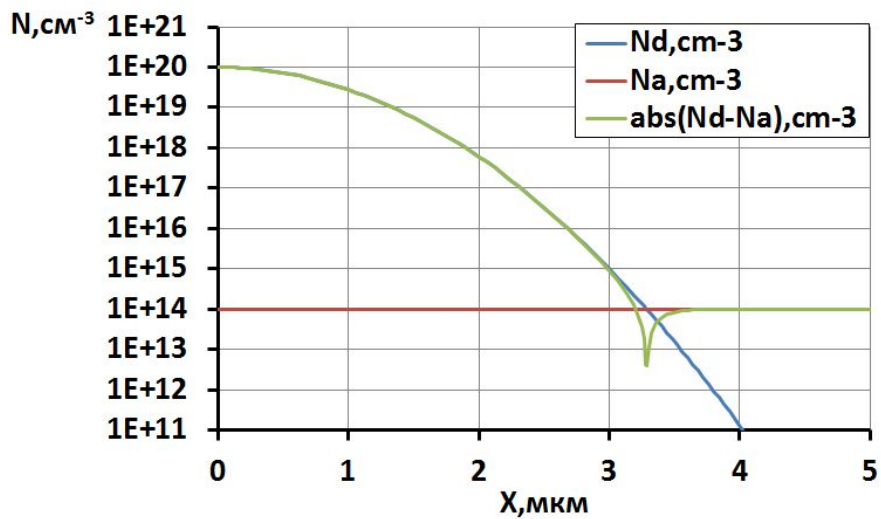


Создание распределения примеси в одномерной модели

	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 _{pn} , В	10	<table border="1"><tr><td>Кол-во итераций</td><td>100</td></tr><tr><td>Ошибка</td><td>1,00E-05</td></tr><tr><td>Начальный шаг</td><td>1,00E-03</td></tr><tr><td>Минимальный шаг</td><td>1,00E-05</td></tr><tr><td>Максимальный шаг</td><td>1,00E-01</td></tr></table>	Кол-во итераций	100	Ошибка	1,00E-05	Начальный шаг	1,00E-03	Минимальный шаг	1,00E-05	Максимальный шаг	1,00E-01
Кол-во итераций	100												
Ошибка	1,00E-05												
Начальный шаг	1,00E-03												
Минимальный шаг	1,00E-05												
Максимальный шаг	1,00E-01												
19	T, К	300											
20													
21	Система	1											
22	координат	0-линейная											
23		1-цилиндрич.											
24		2-сферич.											
25													
26	Run simulation												
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.

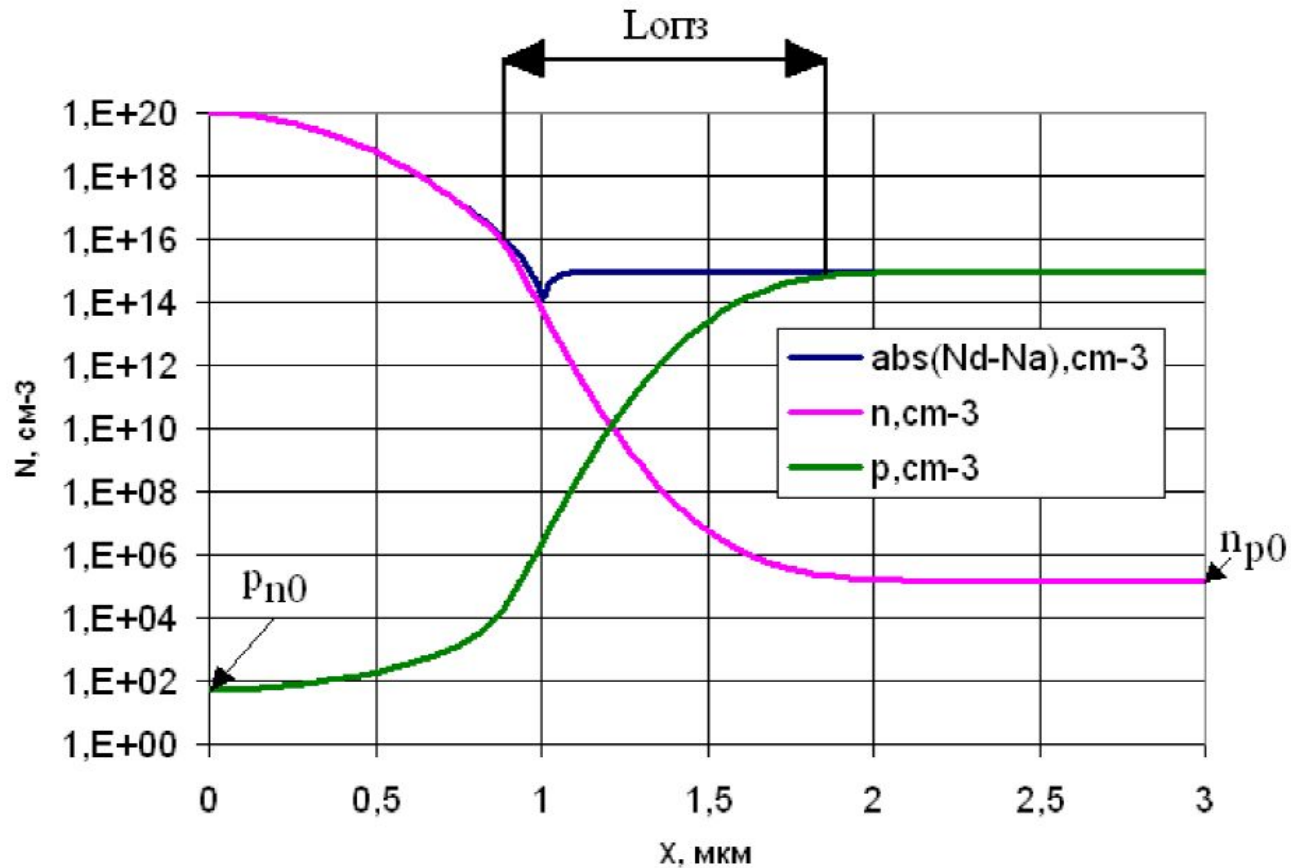
В случае сходимости метода Ньютона при решении уравнений с таким начальным приближением шаг удваивается.

Если Step > MaxStep, то Step = MaxStep

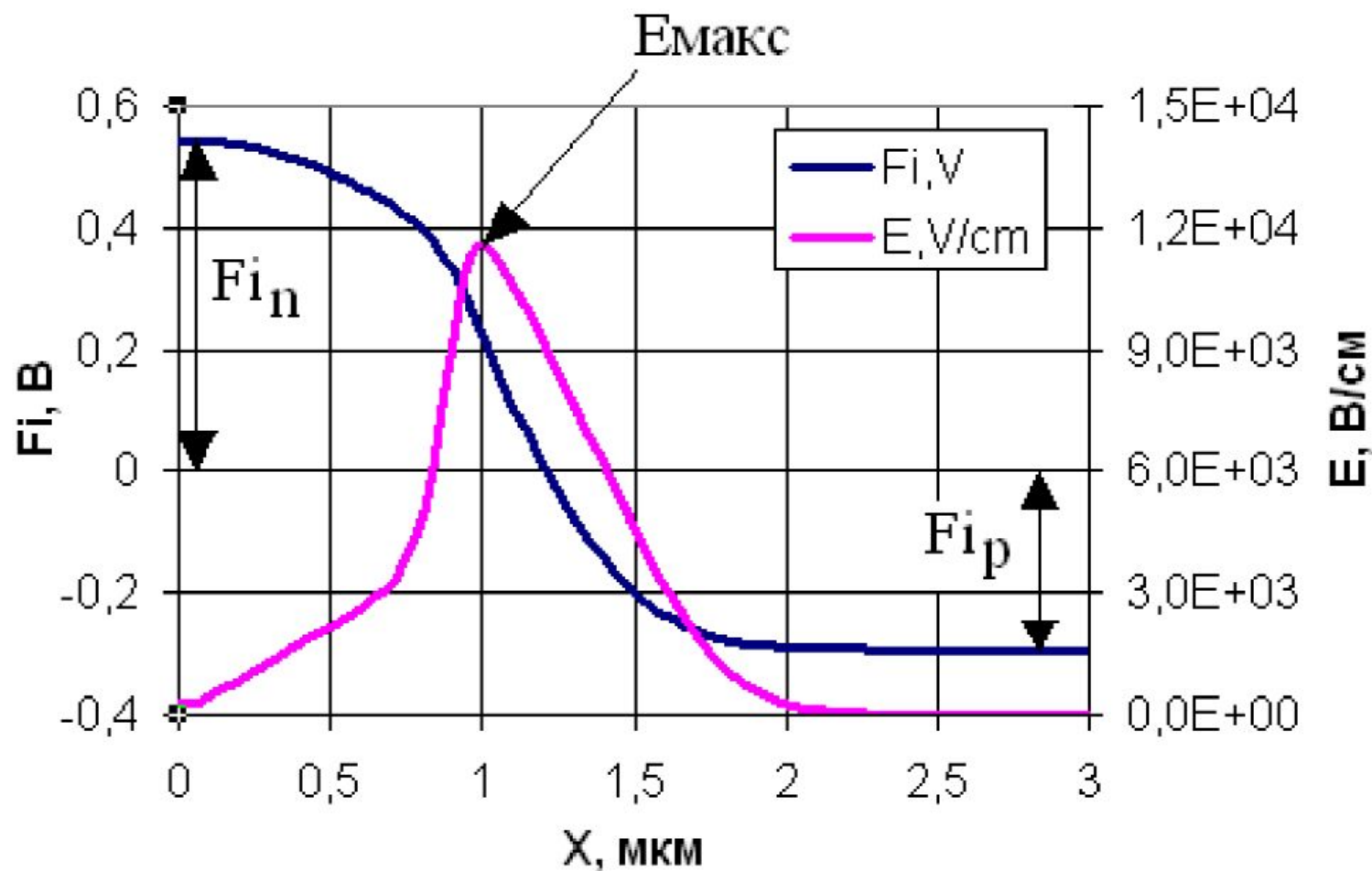
Если метод Ньютона при решении уравнений с заданным шагом по напряжению расходится, то шаг уменьшается вдвое.

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

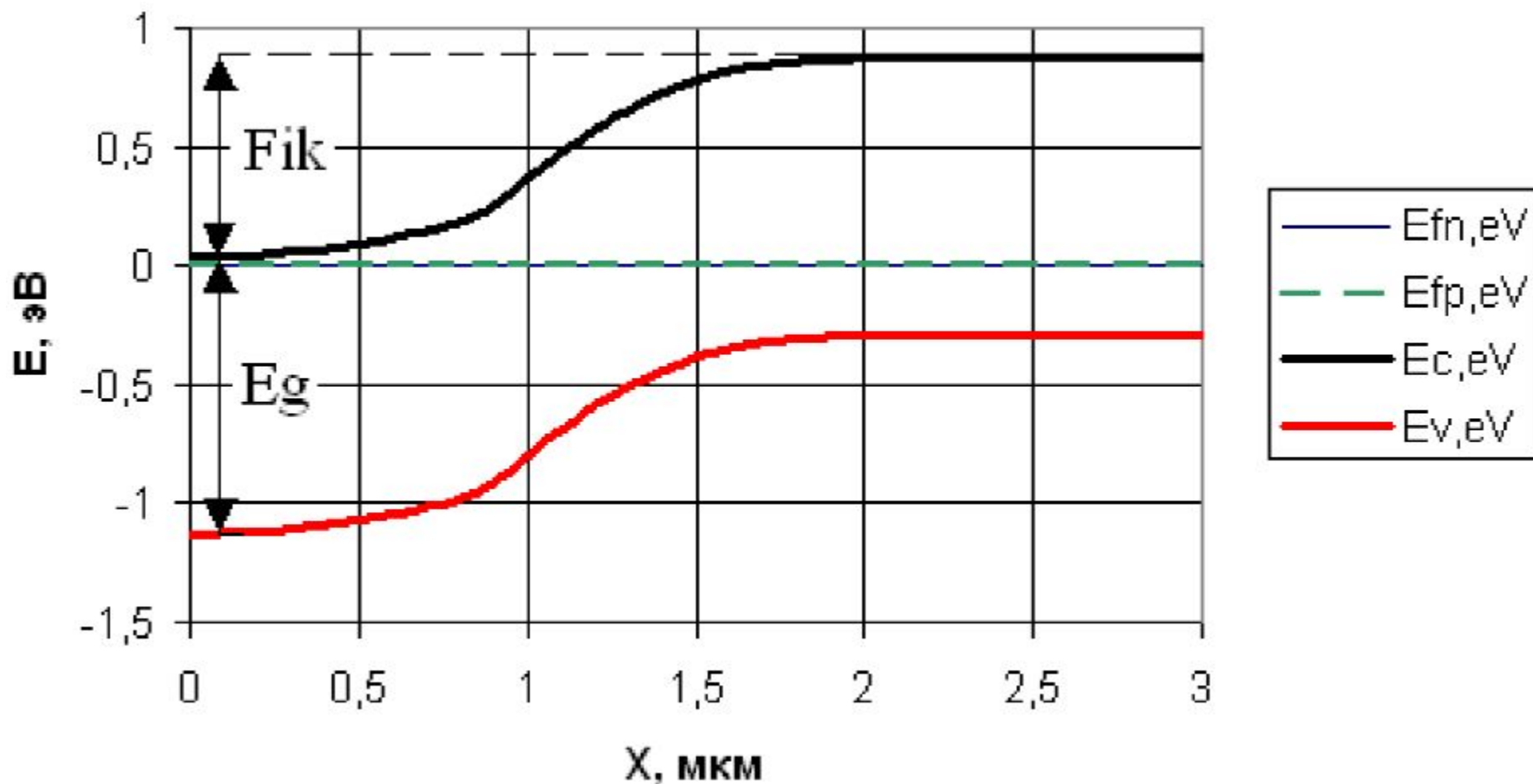
Распределение концентрации носителей заряда при $U = 0$



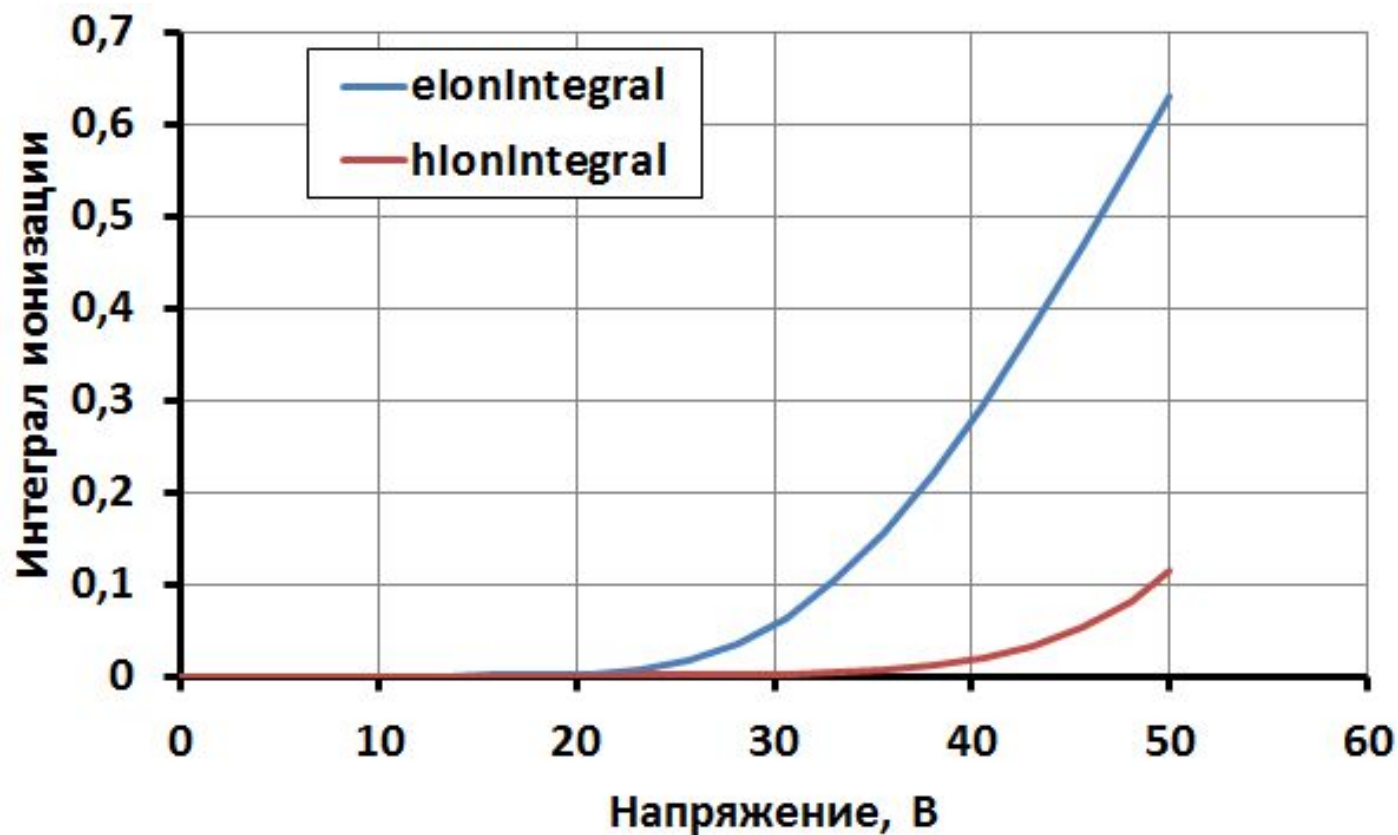
Распределение поля и потенциала при $U = 0$



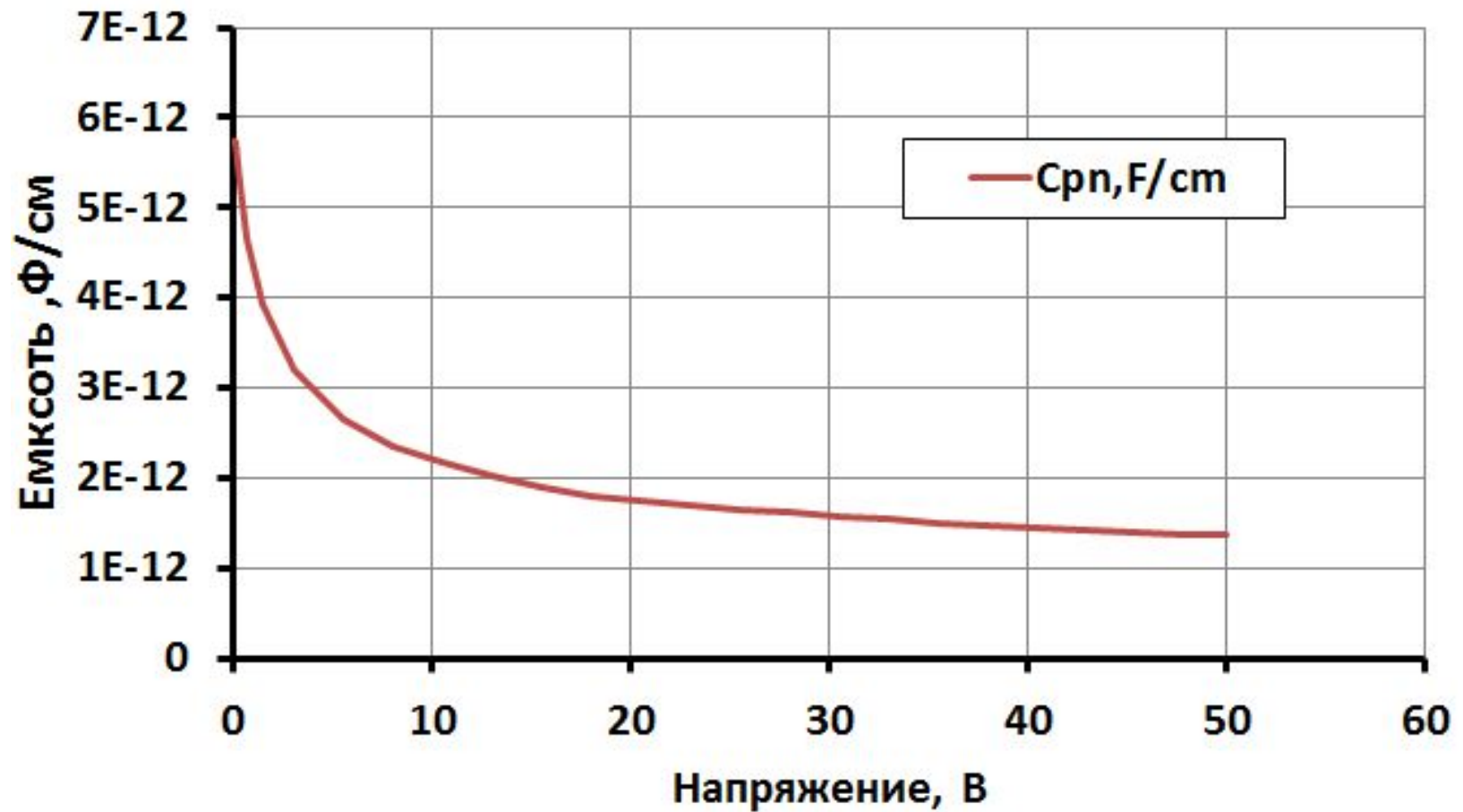
Зонная диаграмма p-n перехода при $U = 0$



Зависимость интегралов ионизации от U



Зависимость емкости р-п перехода от U



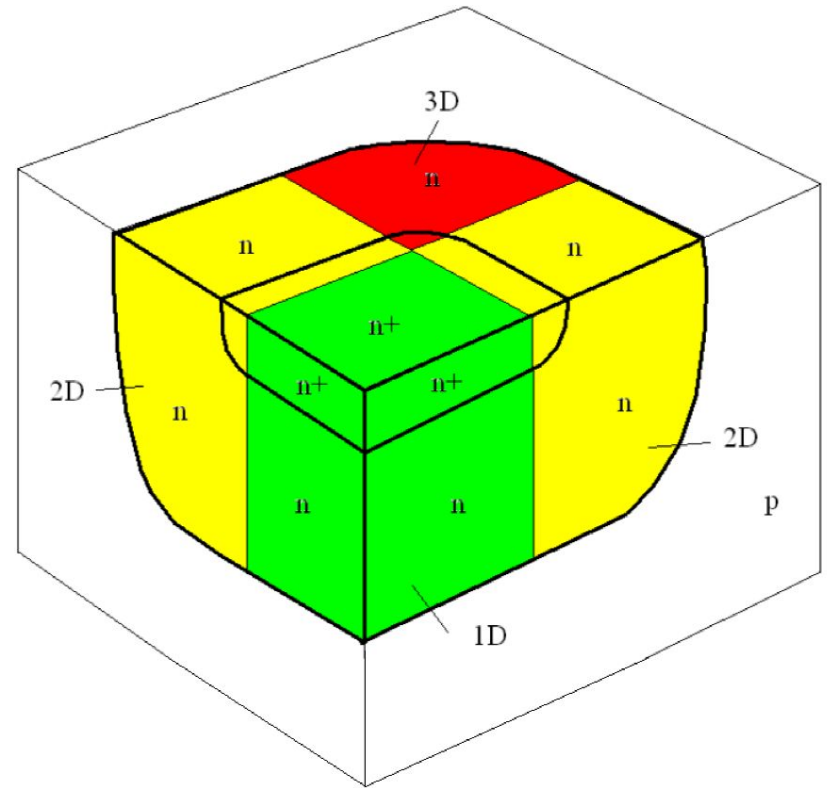
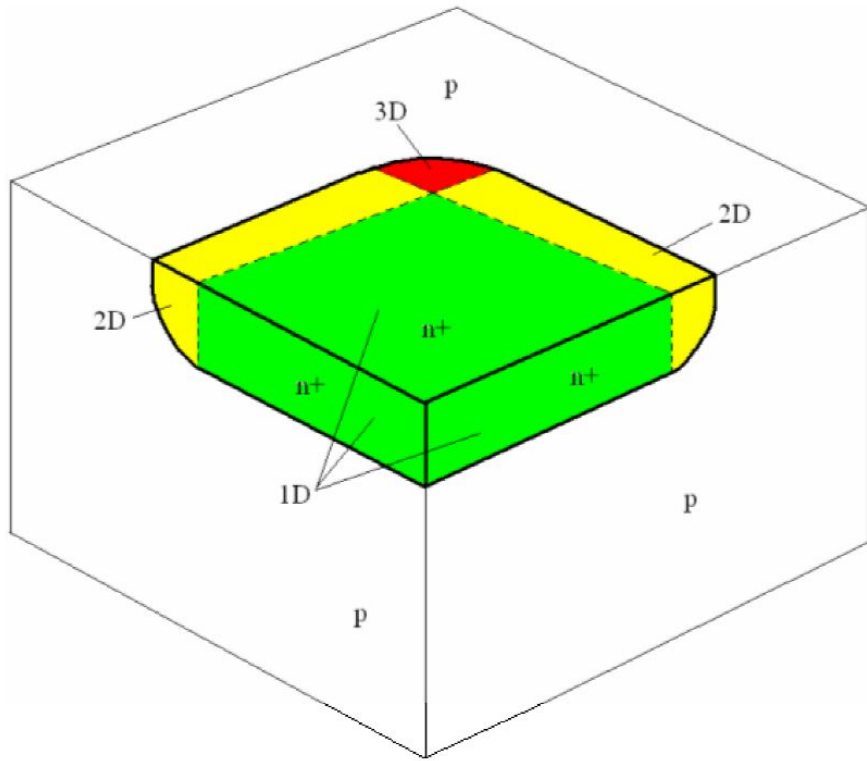
Основные уравнения и модели, используемые в программе

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

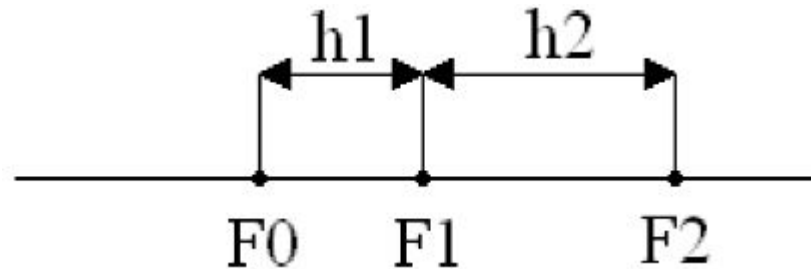
линейные координаты $\frac{d^2 F}{dr^2}$

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:

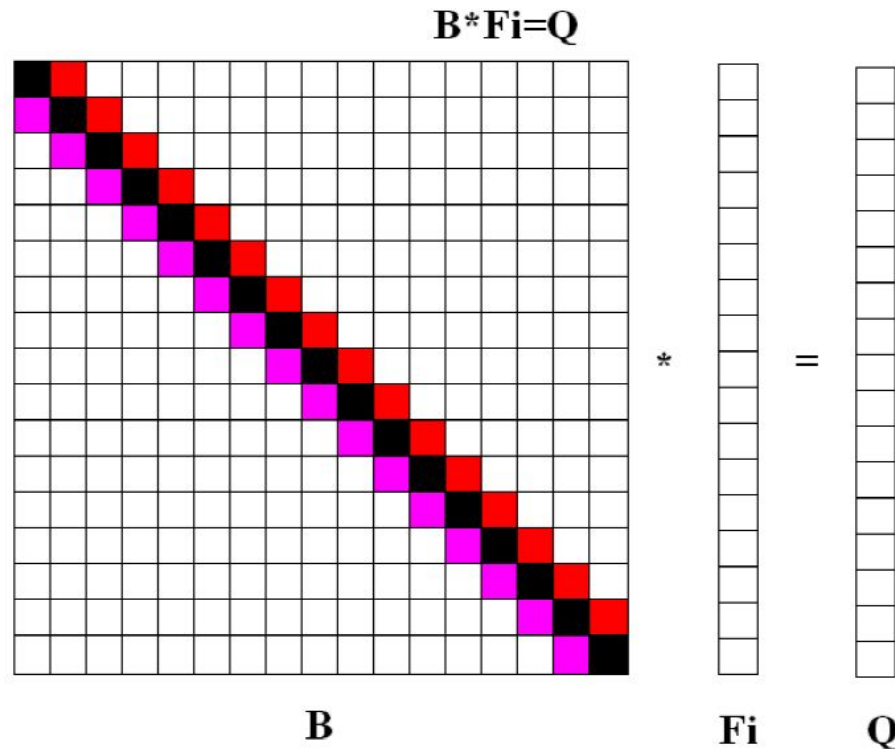
$$B \cdot \varphi = Q$$

, где B – квадратная матрица коэффициентов левой части уравнения

φ – 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 φ):

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

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.

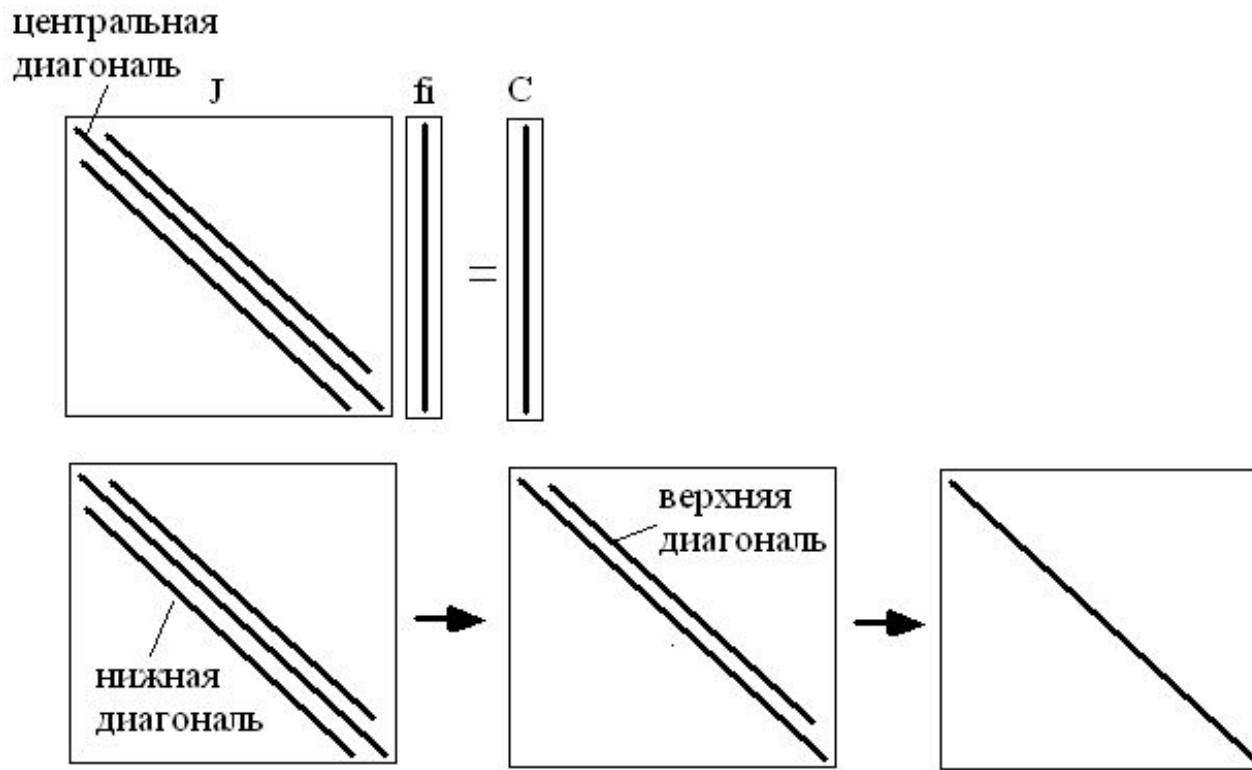


Иллюстрация метода прогонки для решения системы линейных уравнений

Вычисление ошибки

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

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

где: $N_{\text{узн}}$ – 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 p-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.