

纳米级 MOSFET 的模拟

刘晓彦 刘恩峰 杜 刚 刘弋波 夏志良 韩汝琦

(北京大学微电子学系, 北京 100871)

摘要: 利用从量子波尔兹曼方程简化得到的双量子修正和计入载流子动量的全流体动力学模型, 编制了流体动力学半导体器件模拟程序, 并对栅长 25nm 的体硅 MOSFET 和栅长 30nm 的 FinFET 结构进行了模拟. 模拟结果表明, 改进后的流体动力学模型在工程应用中能够适应模拟纳米级 MOSFET 的要求, 用于纳米级 MOSFET 的特性研究和优化设计.

关键词: 纳米尺度; 半导体器件模拟; 流体动力学; 量子效应

EEACC: 0240G

中图分类号: T304.02

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2003)S0-0148-05

1 引言

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手段和工具. 用适当的计算机程序来计算半导体器件特性随有关结构参数和物理参数的变化比相应的实验研究更为经济、快捷和方便. 随着集成电路制造技术的发展, 目前的器件线宽已可缩小到纳米尺度. AMD 公司已于 2001 年发表了沟道长度为 15nm 的正常工作的 MOSFET 的实验结果^[1]. 科学技术的发展使微电子学研究的领域正在逐步地由微米进入到纳米尺度. 相应的计算机模拟技术也正在向纳米级发展.

纳米尺度非常接近固体的晶格常数, 而且该尺度下的量子尺寸效应和直接隧穿效应显著. 与大尺度时的情况不同, 此时器件的载流子输运更多地呈现弹道行为. 因此, 纳米尺度的晶体管的模拟必须计入量子效应并发展新型的输运模型. 然而, 无论是从解析还是数值方法的角度来看, 系统地计算这些量子相干效应对于给定器件的输运性质的影响, 都是一个极具挑战性的问题^[2].

目前常用的适于小尺寸半导体器件模拟的方法包括能量平衡模型、流体动力学模型等有限差分半导体器件模拟方法^[3]和基于概率统计的蒙特卡罗方

法^[4]. 这些方法都是基于准经典的输运理论——波尔兹曼方程, 难以模拟量子尺寸效应和直接隧穿效应, 必须加以发展. 求解基于非平衡格林函数理论的量子输运方程的模拟技术在模拟纳米级场效应晶体管等器件中已经取得了一定的进展^[5,6], 但由于其在处理散射等方面的问题, 实用性仍有待进一步验证.

我们在全面研究了包括能量平衡方程在内的各种流体动力学半导体器件模拟方法, 分析了流体动力学法的基本方程, 对比了不同近似条件下的方程和模拟结果的基础上, 开发了在载流子的平均能量中包含动能项的二维 HD 半导体器件模拟程序, 即全流体动力学的模型, 并利用首次提出的双量子修正方法, 实现了 HD 模型下的量子效应模拟. 本文介绍了全流体动力学模型和双量子修正方法, 给出了利用该方法对沟长为 25nm 的 MOSFET 和沟长为 30nm 的 FinFET 的模拟结果. 模拟结果表明, 改进后的流体动力学模型在工程应用中能够适应模拟纳米级 MOSFET 的要求, 用于纳米级 MOSFET 的特性研究和优化设计.

2 流体动力学模拟方法

流体动力学模型是在经典的波尔兹曼方程的基础上近似得到的, 具体的方程组如下^[3]:

$$\frac{1}{q} \nabla \cdot J_n = -U \quad (1)$$

$$\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p = -U \quad (2)$$

$$\nabla \cdot S_n = E \cdot J_n - U \tau_{w_n} - n \frac{\tau_{w_n} - \tau_{w_0}}{\tau_{w_n}} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot S_p = E \cdot J_p - U \tau_{w_p} - p \frac{\tau_{w_p} - \tau_{w_0}}{\tau_{w_p}} \quad (4)$$

上述方程中(1)和(2)式分别是电子和空穴的连续性方程,(3)和(4)式是电子和空穴的能量平衡方程.其中 U 为净复合率, E 为外加电场, n 、 p 分别为电子和空穴的浓度, τ_{w_n} 、 τ_{w_p} 分别是电子和空穴的能量弛豫时间. J_n 、 J_p 分别是电子电流密度和空穴电流密度,其表达式为:

$$J_n = -q\mu_n n \nabla(\varphi - \frac{k_B T_n}{q}) + qD_n \nabla n \quad (5)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla(\varphi + \frac{k_B T_p}{q}) - qD_p \nabla p \quad (6)$$

S_n 、 S_p 分别是电子和空穴的能流密度,其表达式为:

$$S_n = -k_n \nabla T_n - (\tau_{w_n} + k_B T_n) \frac{J_n}{q} \quad (7)$$

$$S_p = -k_p \nabla T_p + (\tau_{w_p} + k_B T_p) \frac{J_p}{q} \quad (8)$$

ω_n 、 ω_p 分别是电子和空穴的平均能量,其表达式为:

$$\omega_n = \frac{3}{2} k_B T_n + \frac{1}{2} m_n^* v_n^2 \quad (9)$$

$$\omega_p = \frac{3}{2} k_B T_p + \frac{1}{2} m_p^* v_p^2 \quad (10)$$

其中 k_B 为波尔兹曼常数; T_n 、 T_p 分别是电子和空穴的温度; m_n^* 、 m_p^* 分别为电子和空穴的有效质量; v_n 、 v_p 分别为电子和空穴的漂移速度.

在一般情况下,为了简化动能项通常被忽略.但是由于在小尺寸半导体器件中载流子的平均速度很高,载流子的平均能量中的动能项已经与热能项处于同一个数量级,忽略动能项将带来较大误差,因此在我们的模拟中,采用的是全 HD 模型,即在载流子的平均能量中包含动能项.

3 双量子修正

根据统计物理的基本理论,电子的热学波长等于 $\pi\eta \sqrt{2/mk_B T}$,在室温的情况下这个值大概是 8nm 左右,如果器件的沟道长度可以与这个值相比拟的时候,那么在进行器件模拟的时候必须考虑量

子效应.量子效应将对器件诸多方面产生影响,比如半导体/绝缘体界面处的载流子浓度分布, I - V 特性, C - V 特性等.

理论上讲,半导体中载流子的量子输运问题必然要涉及到量子力学中的多体问题,考虑到多体问题的复杂性,必须进行一些化简.现在比较常用的方法主要包括:自洽求解薛定鄂方程与泊松方程,Wigner 函数方法,非平衡格林函数方法以及他们的化简与扩展等.自洽求解薛定鄂方程与泊松方程比较准确,但由于多维情况的边界条件所需的波函数难以确定,目前的求解过程还主要停留在一维上,该方法还需要很多的 CPU 时间,难以用于半导体器件的模拟.Wigner 函数方法,非平衡格林函数方法是目前比较流行的方法,但是这些方法非常复杂,在求解过程中也会遇到边界条件的问题,同时需要很大的内存,耗时长等等困难.

从 Wigner 函数方法可以推导出量子玻尔兹曼方程(quantum boltzmann equation,简称 QBE),如前所述,作为数值模拟半导体器件的玻尔兹曼方程是以此为基础,所以目前数值模拟半导体器件中量子效应很多都是在 QBE 的基础上进行的.QBE 具有以下形式^[7]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f - \frac{q}{\eta} \nabla_r U \cdot \nabla_k f + C_q = \frac{\partial f}{\partial t_{\text{coll}}} \quad (11)$$

QBE 与经典的玻尔兹曼方程在形式上一致,只是多了一个描述量子效应的修正项 C_q , C_q 可以写作:

$$C_q(k, r, t) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{(1/2i)^{2\alpha}}{\eta(2\alpha+1)!} \nabla_r^{2\alpha+1} U \cdot \nabla_k^{2\alpha+1} f \quad (12)$$

其物理意义是对势能((11)式中的 U)的空间变化做量子的修正.在经典情况下 η 趋于零,那么 QBE 就会简化为经典的玻尔兹曼方程.

在工程应用中,只考虑(12)式中的低阶项,取 $\alpha=1$,则可化简为:

$$C_q = -\frac{\eta^2}{12m^*} \nabla^2 \ln(n) \nabla_k f \quad (13)$$

把(13)代入(11)得到:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f - \frac{q}{\eta} \nabla_r [U - \frac{\eta^2}{12m^*} \nabla^2 \ln(n)] \\ \times \nabla_k f = \frac{\partial f}{\partial t_{\text{coll}}} \end{aligned} \quad (14)$$

由此可见量子修正是在势能部分进行的,把这个修

正项单独写成：

$$U_q = -\frac{\eta^2}{12m^*} \nabla^2 \ln(n) \quad (15)$$

通常把这个修正称为量子势^[8]。在此基础上我们提出了适于有限差分法模拟半导体器件的双量子势修正。如果忽略载流子准费米能级随位置变化对量子势的贡献,则上式可以进一步化简为：

$$U_q = -\frac{q\eta^2}{k_B T 12m^*} \nabla^2 \varphi \quad (16)$$

于是可以通过修正 HD 方程的基本变量： φ 和 n , 将量子效应的修正计入到经典的 HD 模型中。

定义两个新的变量,分别代表经过量子修正后的电势与电子浓度：

$$\varphi_{new} = \varphi + \varphi_{qn} \quad (17)$$

$$n_{new} = ne^{\varphi_{qn}} \quad (18)$$

把这两个新的变量代入经典的 HD 方程组,便可得到修正后的量子 HD 方程。

我们提出的双量子修正方法,与其他的量子修正方法如密度梯度法等相比,没有引入新的方程,只是在原有方程的基础上对载流子浓度和电势做修正,方程的复杂性降低,收敛性改善,稳定性提高。

4 模拟结果与分析

利用我们开发的 HD 模拟程序模拟了纳米尺度的半导体器件。该模拟程序中包含多种模型,如低场迁移率模型、高场迁移率模型、产生复合模型、禁带宽度变窄效应、量子效应等丰富的物理模型。模拟的器件结构包括:沟道长度为 25nm 的体硅 MOSFET,和新型的沟长为 30nm 的 FinFET 器件。

栅长为 25nm 的 MOSFET 采用 MIT 给出的 Super-halo 掺杂剖面的 nMOSFET 结构。其模拟结果如图 1 所示。图 2 给出了与 MIT 给出的 DD 模型模拟结果的对比^[9]。

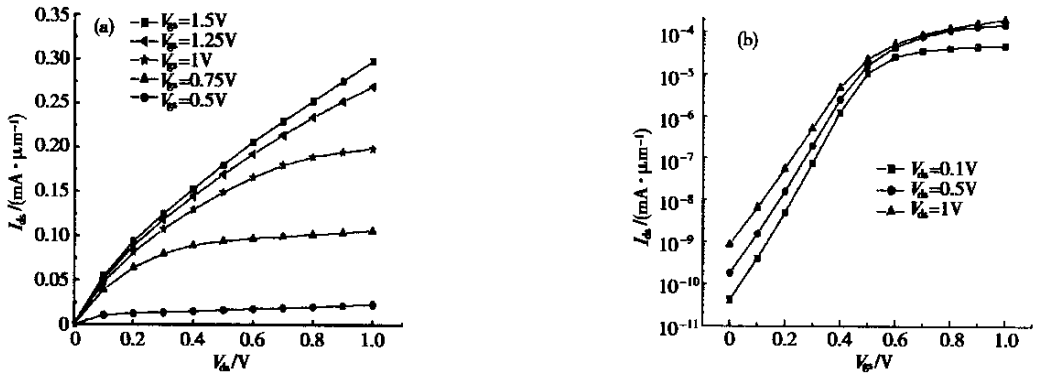


图 1 栅长为 25nm 的 MOSFET 的模拟结果 (a)输出特性;(b)转移特性

Fig. 1 Simulating results of MOSFET with 25nm gate length (a) Output characteristics; (b) Transfer characteristics

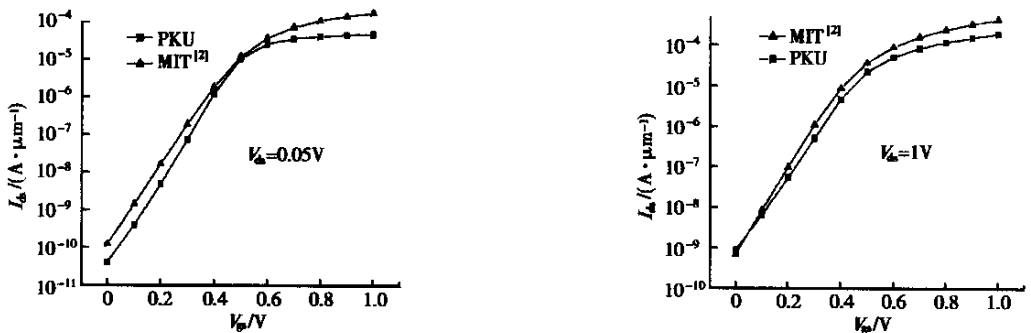


图 2 与 MIT 结果的对比

Fig. 2 Comparison of simulating results with MIT's results

FinFET 是一种能够抑制短沟效应,使 MOS 器件进一步缩小的新型器件^[10]. 利用我们的模拟程序对这种新结构进行了模拟. 模拟中采用的器件结构如图 3 所示,其栅长为 30nm,宽度是 25nm,其中硅层的宽度为 20nm,栅氧化层的厚度为 2.5nm. 电极位于器件的两侧,分别是位于 x 等于 0 和 x 等于 25nm 处,长度等于 30nm 的线段. 源电极和漏电极分别是 y 等于 0.1 μm 和 y 等于 0 处的两条线段. 源区和漏区采用了高斯分布的 n 型掺杂,峰值为 $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$,结深为 35nm(横向),衬底为均匀掺杂,杂质浓度为 $2 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$. 图 4 给出了模拟得到的转移和输出特性. 由模拟结果可见,流体动力学模拟程序

能够正确地模拟纳米级的 MOSFET,并能用于新型器件结构的研究.

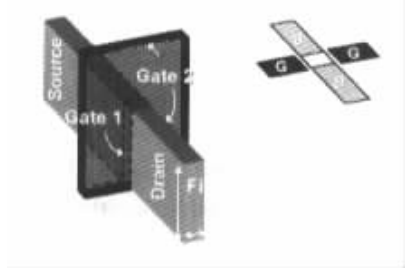


图 3 FinFET 的器件结构

Fig. 3 Structure of FinFET

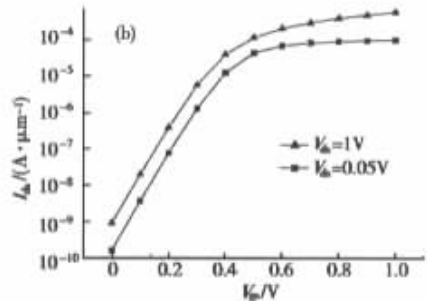
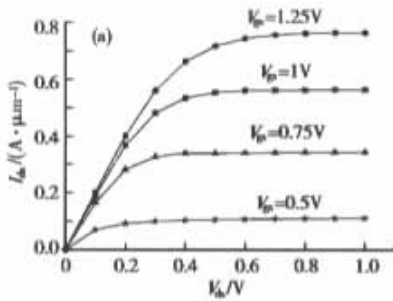


图 4 FinFET 的模拟结果 (a)输出特性;(b)转移特性

Fig. 4 Simulating results of FinFET (a) Output characteristics;(b) Transfer characteristics

5 结论

对于纳米半导体器件模拟研究尚处于起步阶段,与纳米器件的实验进展存在较大差距. 考虑流体动力学法在模拟精度和计算效率上的特点,以工程应用为目标,对流体动力学方法进行改进,采用全流体动力学模型、双量子修正等方法,能够适应模拟纳米级 MOSFET 的要求,为纳米尺寸的新型半导体器件进行特性研究和优化设计的提供了工具.

参考文献

- [1] Yu Bin, Wang H, Joshi A, et al. 15nm gate length planar CMOS transistor. Proceeding of IEDM'2001, 2001:937
- [2] International technology roadmap for semiconductor, 2001 edition
- [3] Selberherr S. Analysis and simulation of semiconductor devices. Springer-Verlag Press, 1984

- [4] Ye Liangxiu. Simulation of Monte Carlo for small size semiconductor devicer. Beijing: Science Press, 1997 [叶良修. 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟. 北京: 科学出版社, 1997]
- [5] Jovanovic D, Venugopal R, Eglely S, et al. Numerical simulation of MOSFETs using nano-equilibrium field theory. The Third NASA Workshop on Device Modeling, 1999
- [6] Svizhenko A, Anantram M P, Govindan T R. 2D quantum simulation of MOSFET using the non equilibrium Green's function method. International Workshop on Computational Electronics, 2000
- [7] Huang H, Jauho A P. Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors. Berlin: Springer-Verlag, 1998
- [8] Tsuchiya H, Fishcer B, Hess K. A full-band Monte Carlo model for silicon nanoscale devices with a quantum mechanical correction of the potential. IEDM Technical Digest, 2000:283
- [9] <http://www.mit.edu>
- [10] Huang Xuejue, Lee Wen-Chin, Kuo C, et al. Sub-50nm P-channel FinFET. IEEE Trans Electron Devices, 2001, 48(5): 881

Device Simulation for Nanoscale MOSFET

Liu Xiaoyan, Liu Enfeng, Du Gang, Liu Yibo, Xia Zhiliang and Han Ruqi

(Department of Microelectronics, Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract: A novel scheme for incorporating quantum effect in classical hydrodynamic model is proposed. No additional equations are needed to solve quantum potential with this scheme, so the complexity of equations is largely reduced. Based on this, a HD simulation program is developed. The 25nm gate length MOSFET and 30nm FinFET are simulated.

Key words: nano-scale; semiconductor device simulation; hydrodynamic model; quantum effect

EEACC: 0240G

Article ID: 0253-4177(2003)S0-0148-05