

判断瞬态热场快速算法结果正确性的快捷方法*

张鸿欣

(西安电子科技大学 CAD 所, 西安 710071)

摘要: 分析了时域无条件稳定算法加速计算的原理和由此造成误差的原因, 提出并用实验验证了判断步内建模法(MPWT)模拟的瞬态热过程正确性的“终态-起始段-过程曲线稳定性”的快捷方法。模拟的瞬态过程如正确则必须满足:(1)终态的热斑温度正确、热场形貌合理;(2)瞬态过程的起始段正确;(3)在一定范围内改变计算参数模拟的瞬态过程曲线基本不改变, 即模拟的瞬态过程曲线有稳定性。MESFET 的实例说明, 如果模拟的瞬态能通过这些检查, 它就与实验有较好的一致性。用 MPWT 完成模拟和相应的检查总共所需时间大约为有限差分法模拟同一整个瞬态过程的百分之几。

关键词: 可靠性; 热模拟; 微波功率器件

EAACC: 0170N; 1350F; 2560J

中图分类号: TN 406 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2002)05-0550-05

快速算法结果正确性的快捷方法.

1 引言

瞬态热场既关系到器件的众多机理, 如二次击穿、多发射极微波 HBT 器件的集电极电流突然塌陷的理解, 又关系到如固态脉冲雷达等一系列重要应用。瞬态热场不仅在国外, 近年来国内也有人进行了研究, 如耿莉等的关于功率模块热分布的精确模型^[1]。在瞬态热场的研究中, 真实器件的数值模拟是非常重要的, 因为器件的复杂结构和多种构成材料以及空洞等工艺缺陷使得各种基于解析公式的简化算法受到很大限制。真实器件瞬态热模拟既要考虑有源区的热斑处的工艺细节结构(热源的大小、形状, 电极的形状、厚度等), 又要考虑器件的整体结构(芯片基片和底座以及它们之间的粘接层), 非常耗时。时域无条件稳定性算法(传输线矩阵法(TLM)^[2]、步内建模法(MPWT)^[3])以几个数量级地加速瞬态热场计算的同时也带来了一个大问题, 即如何判断它们的结果是否有足够的精度? 与实验比较只能在器件制成功后方能进行, 与传统的有限差分法比较要花很长的时间, 因此, 需要建立判断这类

2 时域无条件稳定算法加速瞬态热场计算的原理和产生误差的原因

瞬态热过程的计算量由热场的网格数和网格尺寸的相对分布决定。分析器件时, 有源区近邻处的温度梯度大, 网格必须划分得很细, 随着远离有源区的温度梯度逐渐变小, 网格尺寸也逐渐加大, 网格体积会相差数千倍, 对应的热过程时间常数相差在数千倍以上。尽管如此划分大大减少了网格数目, 但由于有限差分法计算瞬态热场的时间步长(以下简称步长)始终必须小于最小网格时间常数的一半左右(否则会发散), 故整个模拟需要很大的计算步数、很长的计算时间。而时域无条件稳定算法, 由于在过程的中后期可以用大步长, 大约是有限差分法的数百倍以至数千倍, 从而大大减少了计算步数, 加快了计算速度。这样处理是基于在瞬态热过程的中后期, 有源区近邻处的热场的相对分布基本不大改变, 而主要作整体的升高, 整体的升高源于远离有源区近邻处的热场的温度升高。大步长时小网格(对应小的时间

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 69876029)

张鸿欣 男, 1938 年出生, 教授, 从事半导体器件的热及与热有关的效应研究。

2001-05-11 收到, 2001-12-31 定稿

©2002 中国电子学会

常数)处的计算不发散,是因为这些方法含有非线性处理,即一个网格与热场其余部分的交换热量并不是步长的线性函数,当步长远大于该网格的时间常数时,交换热量被非线性地抑制在某一值,而不是一直线性增加。非线性处理在步内建模法中以显式方式给出^[3],在传输线矩阵法中则是以隐式方式解决^[2]。但都有这种非线性处理则是共同的。如果步长增加过快,会造成中等时间常数的网格(有时也叫节点)还未被热流充满,就进入到大时间步长,造成“丢步”过多,这是一切时域无条件稳定算法在加速计算的同时,也带来了误差的根本原因。尽管本质上不同的时域无条件稳定算法形成误差的原因是相同的,但各自的数学表达形式不同,甚至相差很大,因此,本文只对步内建模法建立快捷判断法则,其原则对其它方法可能也适用。

3 步内建模法的基本概念和加速原理

步内建模法详见文献[3],它在与有限差分法(FD)、TLM 类似的网格上进行,其模型如图 1 所示。其中 C_m 为通常意义的节点热容,新定义的网络热容 C_{ntw} 为除节点体积元外热场的其余部分的有效

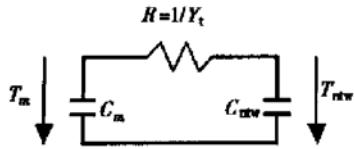


图 1 节点 m 与热场其余部分的热交换模型

Fig. 1 Heat exchange model between a node and its surroundings

热容。由于扩散某一距离所需时间是距离的平方函数,因此主要是近邻节点起作用,这是将网络热容近似为六个近邻点热容之和的物理基础。在步内建模法中除节点温度 T_m 外,还定义了对应的网络温度 T_{ntw} 。

$$T_{ntw} = \sum g_k T_k + P_m / Y_t \quad (1)$$

其中

$$Y_t = \sum Y_k \quad (2)$$

$$g_k = Y_k / Y_t \quad (3)$$

P_m 为体元 m 的功耗; Y_k 为节点 m 到其近邻节点 k ($k=$ 上、下、左、右、后或前) 的热导。

根据图 1 所示的模型,节点 m 的 i 次迭代结果

为:

$$T_m(i) = T_m(i-1)f_{\text{散}} + T_{\text{int}}f_{\text{汇}} \quad (4)$$

$$f_{\text{散}} = \exp(-\Delta t/\tau) \quad (5)$$

Δt 为时间步长,

$$f_{\text{汇}} = 1 - f_{\text{散}} \quad (6)$$

$$\tau = C_m C_{ntw} / (Y_t (C_m + C_{ntw})) \quad (7)$$

$$T_{\text{int}} = (T_m(i-1)C_m + T_{ntw}C_{ntw}) / (C_m + C_{ntw}) \quad (8)$$

为了包括长程效应(非近邻节点间的热交换),在对节点 m 进行计算之后,随即进行如下更新。

$$T_m(i-1) + f_L(T_m(i) - T_m(i-1)) \Rightarrow T_m(i-1) \quad (9)$$

$$f_L = f_n f_{\text{汇}} \quad \text{或} \quad 1.999 \quad \text{当 } f_n f_{\text{汇}} \geq 1.999 \quad (10)$$

计算在整个热场完成后,进行 $T_m(i-1) \Rightarrow T_m(i)$ 的操作,然后开始下一轮迭代。在本文计算中,一般取 $f_n = 2.25$ 。

图 1 模型的特点是节点 m 与热场其余部分的交换热流在时间步内并不是常数,这种对步内效应建模的非线性处理是 MPWT 具有时域无条件稳定性的原因。在计算中起始时间步长通常取最小节点的时间常数的一半,然后以几何级数递增,最后步长被限制在某一值,如起始步长的约 1000 倍,即计算被加速 $10^2 \sim 10^3$ 倍。(9) 式和(10)式考虑了大时间步长的非近邻体积元的热交换,因此,步内建模法在大时间步长加速计算时仍有较高精度。

显然如果步长增加过快,也会形成前述的“丢步”,造成误差。

4 快捷判断方法

判断主要指对有源区热斑的瞬态热过程的判断,器件热场是一整体,有源区热斑的瞬态热过程正确,热场其它部分的瞬态热过程也应该正确。

4.1 终点热场正确性检查

终点检查可以发现网格划分是否过粗。瞬态热过程计算量的增大大于网格数的一次方,网格划分原则是空间分辨率够用即可。终态的热斑温度、热场形貌与正确模拟的稳态热场的热斑温度、热场形貌是否接近,是对网格划分是否够细的直接检查。作为对比的稳态热场(网格划分一般更细一些)由另一分析软件得到,它的正确性可由一套检查规则^[4]保证。

其核心如下: 对任何芯片、任何热源形状和分布, 正确模拟稳态热场在各水平剖面的平均值, 都必须严格等于张鸿欣^[4]提出的平均值守恒定理的预期值.

4.2 起始阶段正确性检查

用 FD 对开始阶段(从 5%~10% 稳态热斑温升, FD 完成此阶段计算所需时间一般是其完成整个瞬态过程的数百分之一) 进行计算, 比较 FD 和 MPWT 二者的结果, 如果不一致, 说明步内建模法的初始步长选得太大.

4.3 过程曲线稳定性检查

在瞬态热过程的模拟中, 计算参数(目前惟一的计算参数就是步长递增因子)的不同对应在时域以不同的离散点集合表征连续的时间区间, 集合(离散点的数目和分布)决定了模拟的结果. 如果对应几个不同离散点集合的几组计算参数(目前就是几个不同的步长递增因子)计算的瞬态过程都正确, 那么这几个模拟的过程则一定逼近真实瞬态过程, 彼此也应当很接近. 因此当计算参数在一定范围内改变, 得到的瞬态过程曲线基本不改变时, 即过程曲线有稳定性, 计算的过程就基本上正确; 反之, 如果没有稳定性, 说明计算参数取值不当.

作为实例, 我们计算了一个 GaAs 微波功率器件芯片. 图 2 所示的芯片包括了源栅漏电极, 是简化的器件模型结构. 为清楚起见, 将栅长方向尺寸放大了 20 倍. 图 2 结构是器件 50 个单元中的一个. 根据等效结构模型^[5], 几十个单元的一维阵列可以近似为无限长, 取一个作为代表分析即可.

首先用另一软件对该结构进行稳态模拟(栅宽方向等分为 40 步, 栅长方向等分为 84 步, 垂直方向不等分为 13 步), 得到的热斑温度为 52.11°C, 保留这么高的精度从实验上看无意义, 但从研究算法精确度上看有意义.

计算瞬态时先把该结构沿栅宽不等分为 23 步, 沿栅长方向为 13 步, 垂直方向与稳态热场计算一样分为 13 步. 计算的瞬态热场的终点热斑为 55.9°C, 比稳态的热斑温度 52.1°C 高约 8%, 误差显然过大, 原因是栅长方向网格划分过粗. 将栅长方向划分为 25 步重新计算, 终点热斑温升为 52.14°C, 与稳态的热斑温度 52.11°C 实际上已无区别. 再强调一下, 52.14°C 和 52.11°C 的差别在实验上无意义, 但在估价算法的精确度上有意义.

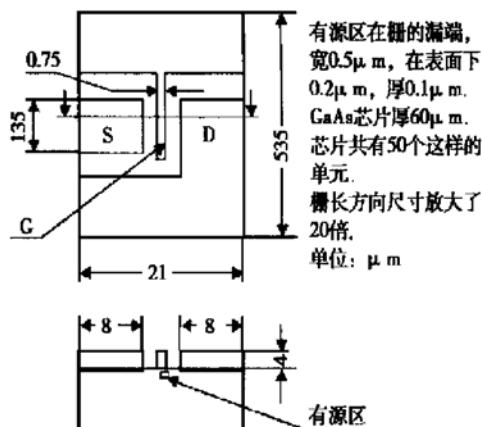


图 2 GaAs 微波功率器件芯片的一个单元结构

Fig. 2 Structure of a cell of GaAs microwave power device

计算初始时间步长均为 2.3×10^{-11} s, 最终被限定在 1.6×10^{-6} s. 图 3 所示初始阶段检查说明步长递增因子 $k = 1.01$ 太大, 即在时域离散表征点取得太疏; 中间阶段检查说明 $k = 1.001$ 还大, 如图 4 所示; $k = 1.0001$ 和 $k = 1.00005$ 的两条曲线已很难区分, 它们的曲线形状都有稳定性, 如图 5 所示.

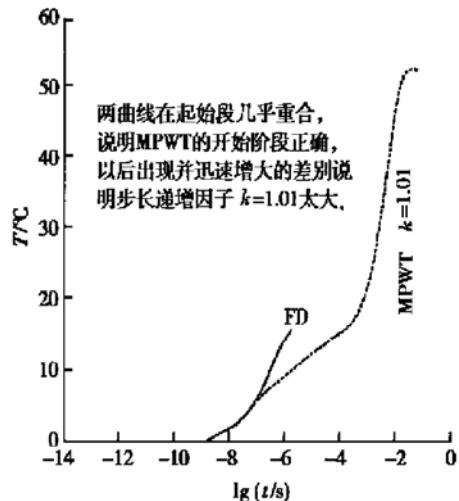


图 3 对步长递增因子的起始段检查

Fig. 3 Beginning stage check for time step increment factor

以上快捷检查共用了大约 6 个快速模拟时间, 仅为用有限差分法检验整个模拟的瞬态过程所花时间的百分之几.

我们还计算了上述器件的冷却过程, 器件先以 2.34W 功率加热至稳态, 然后断电, 在一系列冷却时刻的测量值和模拟的温升如表 1 所示, 计算的和

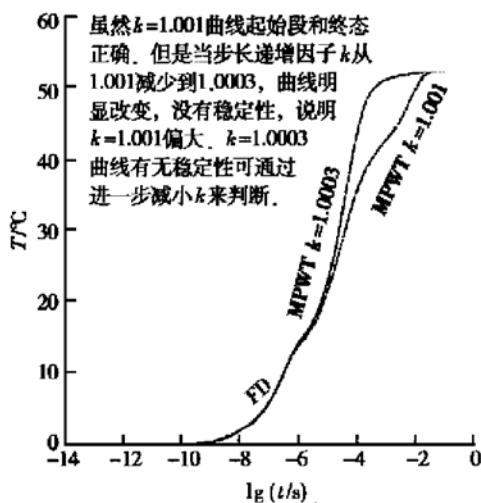


图4 对步长递增因子的过程稳定性检查

Fig. 4 Check for time step increment factor by transient curve stability

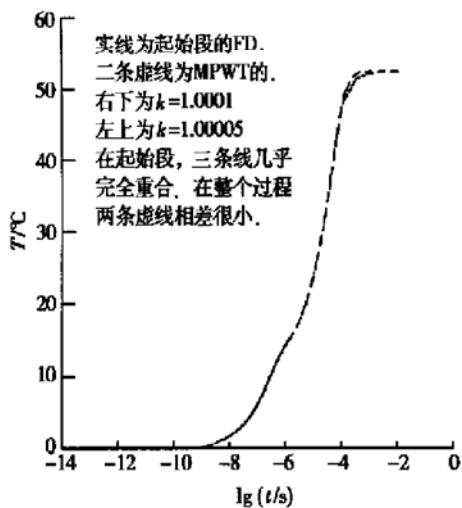


图5 瞬态过程稳定性检查

Fig. 5 Check for transient stability

测量的冷却过程的趋势相当一致。计算的温升比测量的高，这是由于计算的是影响可靠性的峰值沟道温升，测量的是整个器件的某种平均沟道温升。根据文献[3]在稳态时峰值沟道温升比测量的(某种平均沟道温升)约高20%，考虑到这一因素，计算值与测量值实际上基本一致。随着冷却，峰值沟道温度与平均沟道温度差别在减小，故表中的模拟值和测量值的差别呈下降趋势。另外由于在 $50\mu s$ 的冷却时间，底座上表面的温度还来不及变化，故在以上的冷却过程计算中，近似把芯片的下表面(即底座上表面)的温度固定在它的稳态值 5.6°C (由另一计算得出)。计算中GaAs的导热率为 $40.8\text{W}/(\text{m} \cdot ^{\circ}\text{C})$ ，热

容为 $350\text{J}/(\text{kg} \cdot ^{\circ}\text{C})$ ，密度为 $5320\text{kg}/\text{m}^3$ 。金的导热率为 $312\text{W}/(\text{m} \cdot ^{\circ}\text{C})$ ，热容为 $130\text{J}/(\text{kg} \cdot ^{\circ}\text{C})$ ，密度为 $19300\text{kg}/\text{m}^3$ 。

表1 不同冷却时刻的模拟和电学法测量的沟道温升
第1次测量的环境温度为 25°C ，第2次测量的环境温度为 60°C 。

Table 1 Simulated and measured channel temperature rise at times relative to the moment MESFET turned off from on Measurement 1 carried out at surrounding temperature 25°C , Measurement 2 at 60°C .

| 测量时间/ μs | 模拟值/ $^{\circ}\text{C}$ | 测量值/ $^{\circ}\text{C}$ | |
|---------------------|-------------------------|-------------------------|------|
| | | 第1次 | 第2次 |
| 5 | 20.9 | 18.0 | 18.6 |
| 15 | 17.6 | 16.4 | 16.6 |
| 20 | 16.0 | 14.9 | 15.3 |
| 25 | 15.4 | 13.5 | 13.7 |
| 35 | 13.6 | 12.2 | 12.7 |
| 50 | 11.7 | 11.0 | 11.5 |

5 结论

本文提出的“终态-初始段-过程曲线稳定性”的判断方法可以对步内建模法快速模拟的瞬态热过程的正确性进行快捷判断。

由于所有时域无条件稳定快速算法产生误差的原因基本相同，因此本文提出的方法原则上也适合其它快速算法计算的瞬态热过程的正确性的判断。

致谢 感谢信息产业部电子十三研究所李道成同志提供测量结果。

参考文献

- [1] Geng li, Cheng Zhiming, Kruemmer R, et al. A precise model for simulation of temperature distribution of power modules. Chinese Journal of Semiconductors, 2001, 22(5): 548 [in Chinese] [耿莉, 陈治明, Kruemmer R, 等. 一种用于功率模块热分布特性研究的精确模型. 半导体学报, 2001, 22(5): 548]
- [2] Johns P B. A simple explicit and unconditionally stable routine for the solution of diffusion equation. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1977, 11(17): 1307
- [3] Zhang H X, Webb P W. A modified finite difference method for modelling diffusion processes. International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields, 1996, 9(3): 215

- [4] Zhang Hongxin. A method of verifying the simulated steady thermal field of a semiconductor device. Chinese Journal of Semiconductors, 2001, 22(4) : 496 (in Chinese) [张鸿欣. 模拟器件稳态热场正确性的判断方法. 半导体学报, 2001, 22(4) : 496]
- [5] Zhang Hongxin. Equivalent structure model for calculating peak channel temperature of GaAs MESFET. Chinese Journal of Semiconductors, 1998, 19(8) : 591 (in Chinese) [张鸿欣. GaAs 场效应微波功率器件稳态热场分析的等效结构模型. 半导体学报, 1998, 19(8) : 591]

A Quick Check Routine for the Simulated Transient by Time Domain Unconditionally Stable Fast Method*

Zhang Hongxin

(CAD Institute, Xidian University, Xi'an 710071, China)

Abstract: A quick routine called “ending point-initial stage-curve shape stability” check is proposed for MPWT (modelling the diffusion processes within the time step). According to this check routine, conditions for a correct simulated transient must include: (1) The hot spot temperature and morphology of ending field of the transient need to be very close to that of the simulated steady thermal field whose accuracy is guaranteed by the check rules proposed by author; (2) The transient temperature of hot spot up to 5% ~ 10% of its steady value has to be very close to that calculated by finite difference (FD); (3) Simulated transient curve shape should change very little when the parameters, such as initial time step and step increasing factor, change in some extent. An example of MESFET shows that once the simulated transient passes these checks, the simulation will have good agreement with experiment. The time for a MPWT simulation and relevant checks is only a few percent of that cost by finite difference method.

Key words: reliability; thermal simulation; microwave power device

EAACC: 0170N; 1350F; 2560J

Article ID: 0253-4177(2002)05-0550-05

* Project supported by National Natural Science Foundation of China (No. 69876029)

Zhang Hongxing male, was born 1938, professor. He is engaged in the research on the thermal and its effect in semiconductor devices.

Received 11 May 2001, revised manuscript received 31 December 2001

© 2002 The Chinese Institute of Electronics