

# 低温半导体器件模拟软件包<sup>\*</sup>

王明网 魏同立 李 壴 肖志雄

(东南大学微电子中心 南京 210096)

**摘要** 本文在通用半导体器件模拟软件 PISCES(版本为 9009I, SunOS4.1 (Zhiping)) 的基础上, 修改了模型方程, 加进了低温参数模型, 成功地开发和编制出了适于低温半导体器件模拟软件 SE-PISCES, 模拟了 77K 下二极管的稳态特性、瞬态特性和交流小信号分析, 并将模拟结果和 300K 下的作了对比分析.

EEACC: 2560B, 2560H

## 1 引言

随着 VLSI 技术的发展, 低温微电子学已成为微电子学的一个十分活跃的分支, 低温双极器件和 BiCMOS 技术可以极大地提高各种电子设备和系统的整体性能水平, 并成为高速计算机、航天电子设备、雷达系统和卫星领域的技术基础<sup>[1]</sup>. 本文在通用半导体器件模拟软件 PISCES 的基础上, 修改了模型方程, 加进了低温参数模型, 成功地开发和编制出了适于低温半导体器件模拟的软件 SE-PISCES, 模拟了 77K 下二极管的稳态特性、瞬态特性, 作了交流小信号分析, 将模拟结果和 300K 下的作了对比分析. 本文各种常数只限于 Si.

## 2 模型方程

模型方程是在漂移扩散模型(文献[2])的式(2.1)~(2.3))的基础上将  $\partial n/\partial t, \partial p/\partial t$  换为  $\partial(n - N_D^+)/\partial t, \partial(p - N_A^-)/\partial t$ , PISCES 中未考虑  $\partial N_D^+/\partial t, \partial N_A^-/\partial t$ , 低温下必须记入这两项才能保持电荷守恒, 参见第五节模拟结果. 称未考虑这两项的低温模型为模型 I, 电子电流密度和空穴电流密度  $J_n, J_p$  如下

$$J_n = qn\mu_n E + qD_n \text{grad}n - \mu_n nkT \text{grad}(\ln(n_{ie}\gamma_n)) \quad (1)$$

$$J_p = qp\mu_p E + qD_p \text{grad}p - \mu_p pkT \text{grad}(\ln(n_{ie}\gamma_p)) \quad (2)$$

其中 grad 为梯度;  $\gamma_n, \gamma_p$  是由于考虑了 Fermi-Dirac 统计而引入的量, 请见文献[2]的式

\* 国家自然科学基金重点资助项目

王明网 男, 1968 年生, 东南大学半导体器件与微电子学专业博士研究生

魏同立 男, 1934 年生, 教授, 东南大学博士导师、微电子中心主任

1995 年 5 月 9 日收到初稿, 1995 年 7 月 31 日收到修改稿

(2.23)~(2.24),其余符号均为通常意义.

低温下杂质不完全电离,是导致常温半导体器件模拟不能直接用于低温的最主要原因.低温下本征载流子浓度很小, $n_i(77K)=6\times 10^{-20}(\text{cm}^{-3})$ ,同样由于低温下的热电压下降,如 $V_T(77K)=6.635\text{meV}$ ,将导致 $\exp(1/V_T)$ 上溢.这些或大或小的数是导致常温半导体器件模拟算法不能直接用于低温的另一主要原因,另外,低温下影响器件性能的效应更多,而且数学表达式远比常温复杂.

### 3 低温参数模型

#### 3.1 不完全电离

常温器件模拟中假设杂质全部电离,低温下则不成立.电离情况可表示为<sup>[3]</sup>

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + k_m(N_D)g_D \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_D}{kT}\right)} \quad (3)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + k_m(N_A)g_A \exp\left(\frac{E_A - E_{Fp}}{kT}\right)} \quad (4)$$

其中  $E_{Fn}$ 、 $E_{Fp}$  为电子、空穴准 Fermi 能级;  $g_D$ 、 $g_A$  为导带、价带简并因子,通常  $g_D=2$ ,  $g_A=4$ ,  $E_D$ 、 $E_A$  为施主和受主能级

$$E_C - E_D = 0.045 - 3.6 \times 10^{-8}(N_D^+ + N_A^-)^{1/3} \quad (\text{磷}) \quad (5)$$

$$E_A - E_V = 0.0438 - 4.08 \times 10^{-8}(N_D^+ + N_A^-)^{1/3} \quad (\text{硼}) \quad (6)$$

杂质浓度较低时,杂质不完全电离, $k_m=1$ ;杂质浓度大于 Mott 转折点  $3\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$  时,杂质全电离, $k_m=0$ .由于(5)、(6)式在不完全电离到全电离的过渡区并不精确,由该二式计算可知,当杂质浓度大于  $10^{18}\text{cm}^{-3}$  时,杂质能级已接近带边或进入带内,杂质几乎或全部电离,如果仍然用  $k_m=1$  来计算,将导致电离率偏低,因此作如下修正,当杂质浓度大于  $10^{18}\text{cm}^{-3}$  而又低于  $3\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ , $k_m$  是由 1 线性变化到 0.

#### 3.2 Fermi-Dirac 统计

载流子浓度用 Fermi-Dirac 统计为文献[2]的式(2.10)~(2.11),导带底、价带顶的态密度分别为

$$N_C = 2\left(\frac{2\pi k T m_c^*}{h^2}\right)^{3/2} \quad (7)$$

$$N_V = 2\left(\frac{2\pi k T m_v^*}{h^2}\right)^{3/2} \quad (8)$$

文[3]未考虑  $m_c^*$ 、 $m_v^*$  与温度的关系,认为其为常数,是不对的.事实上,二者随温度的变化还是比较大的<sup>[4]</sup>

$$m_c^* = m_0(1.045 + 4.5 \times 10^{-4}T) \quad (9)$$

$$m_v^* = m_0(0.523 + 1.4 \times 10^{-3}T - 1.48 \times 10^{-6}T^2) \quad (10)$$

由于用了 Fermi-Dirac 统计,迁移率和扩散系数的关系为文献[2]的式(2.29)~(2.30).

#### 3.3 禁带变窄(BGN)<sup>[4]</sup>

低温热电压约为常温的 1/4,因而 BGN 就显得重要,它直接影响到低温双极器件的性

能. 禁带宽度与温度的关系如下

$$E_g = 1.17 + 1.059 \times 10^{-5}T - 6.05 \times 10^{-7}T^2 \quad T \leq 170\text{K} \quad (11)$$

$$E_g = 1.179 - 9.025 \times 10^{-5}T - 3.05 \times 10^{-7}T^2 \quad T \geq 170\text{K} \quad (12)$$

考虑 BGN 时, 有效本征载流子浓度如文献[2]的式(2.20).

### 3.4 迁移率模型<sup>[3]</sup>

场依赖迁移率模型如文献[2]的式(2.23), 低场迁移率  $\mu_0$  和饱和速度  $V_{sat}$  是与温度有关的

$$\mu_{0n,p} = \mu_{n,p}^{\min} + \frac{\mu_n^L - \mu_{n,p}^{\min}}{1 + (N_T/N_{n,p}^{\text{ref}})^{\alpha_{n,p}}} \quad (13)$$

$$\mu_n^L = 1430 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} (T/300\text{K})^{-2} \quad (14)$$

$$\mu_p^L = 460 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} (T/300\text{K})^{-2.18} \quad (15)$$

$$\mu_n^{\min} = \begin{cases} 80 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} (T/300\text{K})^{-0.45} & T \geq 200\text{K} \\ 80 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} (200\text{K}/300\text{K})^{-0.45} (T/200\text{K})^{-0.15} & T \leq 200\text{K} \end{cases} \quad (16)$$

$$\mu_p^{\min} = \begin{cases} 45 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} (T/300\text{K})^{-0.45} & T \geq 200\text{K} \\ 45 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} (200\text{K}/300\text{K})^{-0.45} (T/200\text{K})^{-0.15} & T \leq 200\text{K} \end{cases} \quad (17)$$

$$N_{\text{ref}} = 1.12 \times 10^{17} \text{cm}^{-3} (T/300\text{K})^{3.2} \quad (18)$$

$$N_{\text{ref}} = 2.23 \times 10^{17} \text{cm}^{-3} (T/300\text{K})^{3.2} \quad (19)$$

$$\alpha_{n,p} = 0.72 \times (T/300\text{K})^{0.065} \quad (20)$$

$$V_{satn} = 1.45 \times 10^7 \sqrt{\tanh(155\text{K}/T)} \text{cm/s} \quad (21)$$

$$V_{satp} = 9.05 \times 10^6 \sqrt{\tanh(312\text{K}/T)} \text{cm/s} \quad (22)$$

### 3.5 复合模型<sup>[3]</sup>

SRH 复合、俄歇复合分别为文献[2]的式(2.6)、(2.7), 但  $c_n, c_p$  如下

$$c_n = 1.26 \times 10^{-31} T^{0.14} \text{cm}^{-6}/\text{s} \quad (23)$$

$$c_p = 3.55 \times 10^{-32} T^{0.18} \text{cm}^{-6}/\text{s} \quad (24)$$

## 4 数值技术及其收敛性

为了防止数据溢出, 设置最大正数为  $10^{305}$ , 最小正数为  $10^{-305}$ , 最大  $e$  指数为 705, 最小  $e$  指数为 -705, 计算机则用国家专用集成电路系统工程中心的 Sun Sparc 1<sup>+</sup>.

### 4.1 初始值的选取

式(3)、(4)左端含有  $N_D^+, N_A^-$ , 用文[5]的方法计算不考虑掺杂所引进的内在电场时的电离率, 从而得到  $N_D^+, N_A^-, n, p$ , 由此再算热平衡时的值, 以此值作为初始值.

### 4.2 迭代方法

低温器件数值模拟中的数值发散比常温更为严重, 集 Gummel 法和 Newton 法的优点,

采用混合解法，先用 Gummel 法，当两次 Gummel 循环的电位之差低于一定值时切换到 Newton 法，从而不发散且有较高的收敛速度。不管 Newton 法还是 Gummel 法，每迭代一次，由  $n, p$  算  $E_{Fn}, E_{Fp}$ ，再由  $E_{Fn}, E_{Fp}, N_D^+, N_A^-$  和式(3)、(4)算  $N_D^+, N_A^-$ ，并算出  $dN_D^+/d\Psi$ 、 $dN_A^-/d\Psi$ 、 $dN_D^+/dn$ 、 $dN_A^-/dp$ ，再转入下一次迭代。当  $N_D$  大于  $N_A$  时， $N_A^- = N_A$ ，当  $N_A$  大于  $N_D$  时， $N_D^+ = N_D$ ，因而  $N_D^+$  几乎不依赖于空穴浓度  $p$ ，同理  $N_A^-$  几乎不依赖于  $n$ 。由计算可知  $dN_D^+/dp, dN_A^-/dn$  要比  $dN_D^+/dn, dN_A^-/dp$  低 15 个数量级以上，可以忽略，并不影响模拟精度。

#### 4.3 瞬态分析

对于瞬态分析，宜采用 TR-BDF2 法[6]，对于电流连续性方程  $\partial(n - N_D^+)/\partial t = F_n(\Psi, n, p)$  有如下格式

$$\text{TR: } \frac{\partial(n_{ktr} - N_{Dktr}^+) - (n_{k-1} - N_{Dk-1}^+)}{\gamma \Delta t_k} = \frac{1}{2}(F_n(k_{tr}) + F_n(k-1)) \quad (25)$$

$$\text{BDF2: } \frac{\frac{2-\gamma}{1-\gamma}(n_k - N_{Dk}^+) - \frac{1}{\gamma(1-\gamma)}(n_{ktr} - N_{Dktr}^+) + \frac{1-\gamma}{\gamma}(n_{k-1} - N_{Dk-1}^+)}{\Delta t_k} = F_n(k) \quad (26)$$

其中  $\gamma = \frac{t_{ktr} - t_{k-1}}{\Delta t_k} = 2 - \sqrt{2}$ ； $\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$  为第  $k$  步的时间步长。

#### 4.4 交流小信号分析

对于交流小信号分析，应先算好直流稳压下的解  $(\Psi_{10}, n_{10}, p_{10})$ ，以此解为初始条件来计算交流时的值。设施加在第  $i$  个电极上的交流正弦偏压、解分别具有文献[6]的式(2.19)、(2.20~2.22)，参照文[6]的式(2.26)、(2.27)可得关于  $\bar{\Psi}, \bar{n}, \bar{p}$  的方程组

$$\begin{bmatrix} \frac{dF_y}{dn} & \frac{dF_y}{dp} & \frac{dF_y}{dp} \\ \frac{dF_n}{dn} & \frac{dF_n}{dn} + D_1 & \frac{dF_n}{dp} \\ \frac{dF_p}{dn} & \frac{dF_p}{dn} & \frac{dF_p}{dp} + D_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ \bar{n} \\ \bar{p} \end{bmatrix} = b \quad (27)$$

其中  $D_1, D_2$  为  $n \times n$  的矩阵 ( $n$  为网格点数)，非对角元素均为 0， $D_1$  的第  $i$  个对角元素为  $-j\omega \left(1 - \frac{dN_{D_i}^+}{dn}\right)$  (下标  $i$  表第  $i$  个结点处的值)， $D_2$  的第  $i$  个对角元素为  $-j\omega \left(1 - \frac{dN_{A_i}^-}{dp}\right)$ ， $b$  为长度是  $3n$  的向量，包含了交流边界条件。

#### 4.5 截断技术<sup>[7]</sup>

半导体方程中含有非线性项  $\exp(\Delta\Psi/kT)$ ， $\Delta\Psi$  为电势  $\Psi$  的改变量，该项线性化为  $\exp(\Delta\Psi/kT) = 1 + \Delta\Psi/kT$ ，对于  $\Delta\Psi$  的估计，如果太低，只要多迭代几步即可收敛，但过高估计，往往欲速则不达，即一步迭代就有可能偏离真值更远。由上式可知，在低温下，这种过高估计将导致比常温更严重的偏离，这是低温模拟比常温更易发散的主要原因之一，因此，每次迭代时对电势变化量  $\Delta\Psi$  作如下限制

$$\Delta\Psi' = \begin{cases} \Delta\Psi_{\lim} & \Delta\Psi \geq \Delta\Psi_{\lim} \\ \Delta\Psi & -\Delta\Psi_{\lim} < \Delta\Psi < \Delta\Psi_{\lim} \\ -\Delta\Psi_{\lim} & \Delta\Psi \leq -\Delta\Psi_{\lim} \end{cases} \quad (28)$$

其中  $\Delta\Psi_{\text{lim}}$  是  $\Delta\Psi$  的限制因子, SE-PISCES 中选  $\Delta\Psi_{\text{lim}} = \ln 10 \times r \times kT/q$ , 对于  $r=5$ ,  $\Delta\Psi_{\text{lim}}(300\text{K})=0.3\text{V}$ ,  $\Delta\Psi_{\text{lim}}(77\text{K})=0.076\text{V}$ . 第  $m-1$  次和第  $m$  次迭代所得的电子浓度  $n^{m-1}, n^m$  有如下关系:  $n^m/n^{m-1} \approx \exp(q\Delta\Psi/kT)$ , 由上式知, 如果  $\Delta\Psi$  被过高估计, 将导致电子浓度被过高估计几个数量级, 低温下更严重, 对于电子浓度变化量  $\Delta n = n^m - n^{m-1}$  作如下限制

$$\Delta n' = \begin{cases} \lambda n^{m-1} & \Delta n \leq -n^{m-1} \\ \Delta n & -n^{m-1} \leq \Delta n \leq 10^r \times (n^{m-1} + 1) \\ 10^r \times (n^{m-1} + 1) & \Delta n \geq 10^r \times (n^{m-1} + 1) \end{cases} \quad (29)$$

SE-PISCES 中取  $r=5$ .

## 5 模拟结果

模拟的二极管见[6], 杂质浓度分布、电极号、外加电阻值、 $V_1$  和  $V_{A1}$  的定义均同文献[6]. 图 1 是电流  $I_1$  随  $V_{A1}$  变化图, 实线、虚线分别表示未加电阻、加电阻的情形. 由图可知, 77K 下的电流小, 是由于内建电势增大所致. 图中的各点是用 hp4145B 半导体参数分析仪所测得的结果, 模拟结果和测量结果吻合得相当好. 图 2 是在外加电阻状态下  $V_{A1}$  突然从 2V 降到 -2V, 电流  $I_1$  随时间变化图, 77K 下每隔 5 个值才打点一次, 由点的横坐标可知 77K 下的时间步长比 300K 下的小得多, 77K 时几乎只要 300K 的四分之一时间即可达到平衡, 是由于低温下迁移率增大的缘故, 图 3 是用模型 I 所模拟得到的 77K 下的结果, 流过电极 1、2 的电流  $I_1, I_2$  的大小不一样. 说明低温下必须考虑  $\partial N_B^+/\partial t, \partial N_A^-/\partial t$ , 才能保持电荷守恒. 图 4 是在外加电阻状态下  $V_{A1}$  经过 2.5 纳秒从 2V 线性降到 -2V, 电流  $I_1$  随时间变化图, 77K 比 300K 快一倍, 图 5 是未加电阻时电极 1 加频率为 1000Hz、振幅为的正弦交流电压所模拟得到的电容  $C_{12}$  随直流偏压  $V_1$  的变化图, 77K 下的电容比 300K 的小, 是由于杂质不完全电离, 空间电荷区较宽所致. 图 6 是电导  $G_{12}$  随直流偏压  $V_1$  的变化图, 图 5、图 6 中的虚线分别是用模型 I 所模拟得到的 77K 下的  $C_{12}, C_{21}, G_{12}, G_{21}$  的值,  $C_{12}$  不等于  $C_{21}$ ,  $G_{12}$  不等于  $G_{21}$ . 有关模拟结果更详细的叙述请参见文献[8].

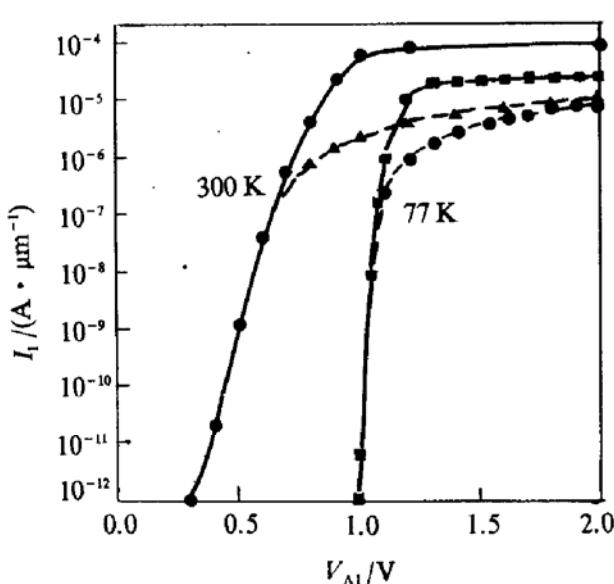


图 1 电流与电压的关系

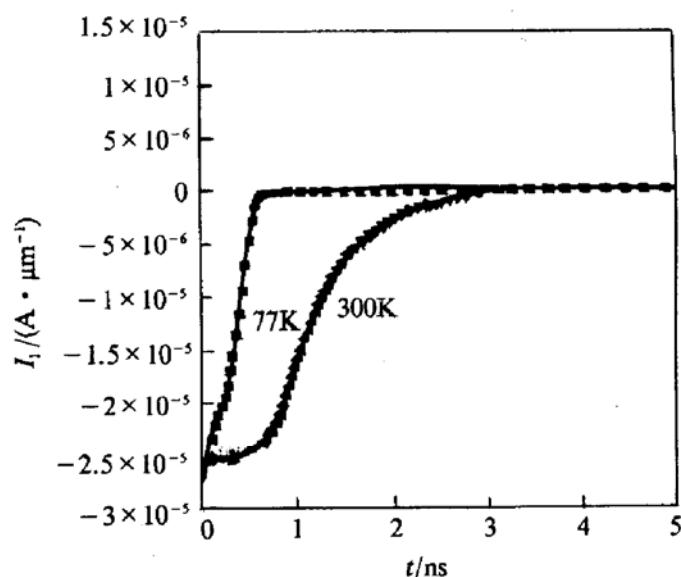


图 2 电压突然反向电流随时间的变化

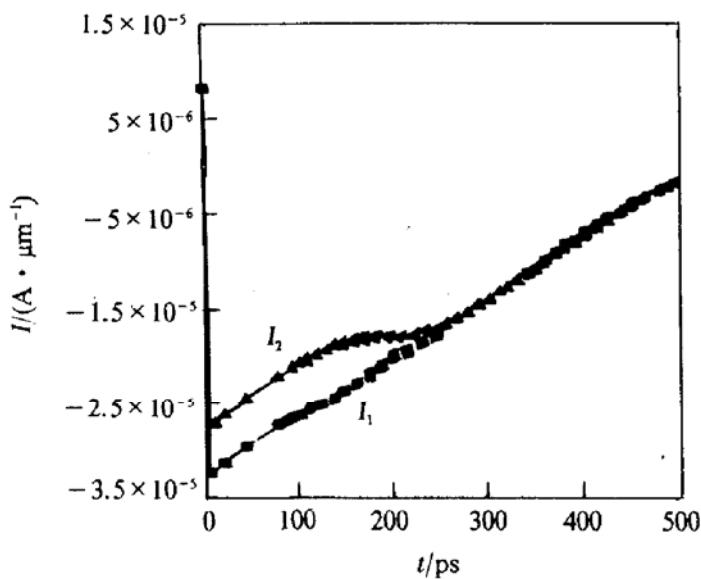


图 3 77K 用模型 I 模拟得到的结果,  
流过二电极的电流大小不一样

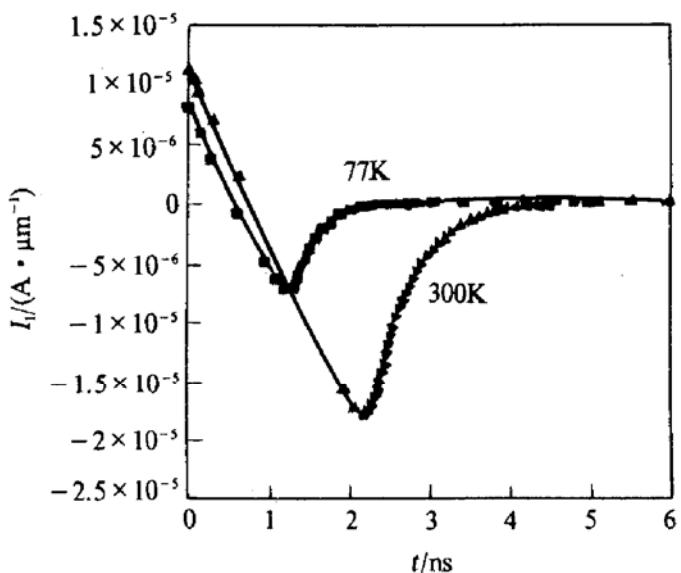


图 4 电压缓慢反向电流随时间的变化

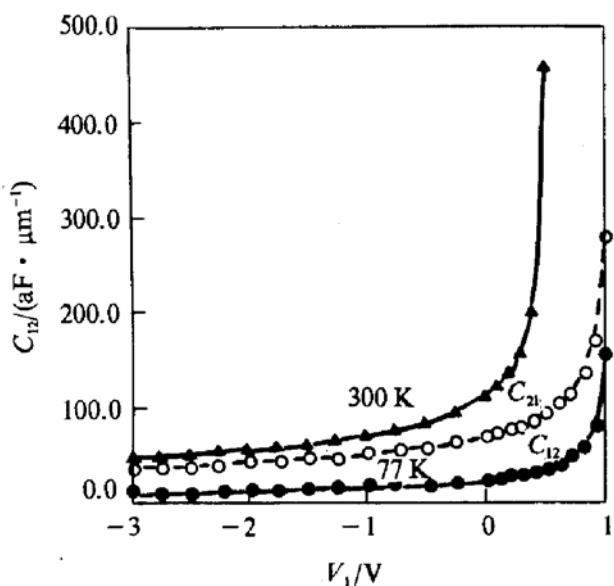


图 5 电容与直流偏压的关系

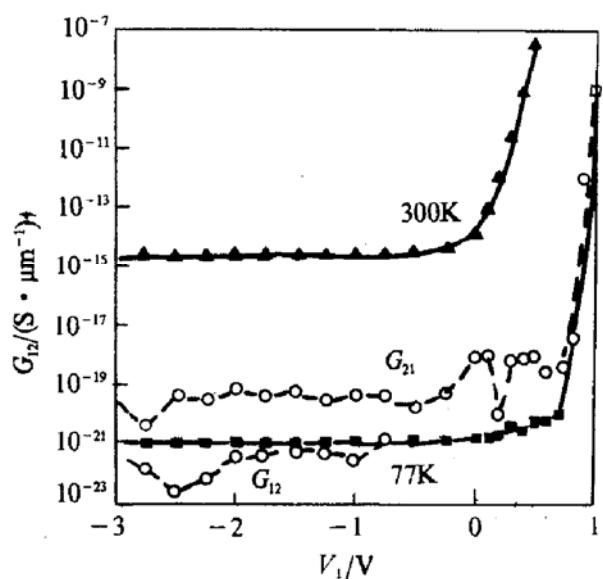


图 6 电导与直流偏压的关系

## 6 结论

低温下,本征载流子浓度很低、热电压下降、冻析效应的影响以及各种物理参数随温度而变化,导致常温半导体器件模拟程序不能直接用于低温。低温下各参数的数量级变化更大,很容易出现非常大或非常小的正数,收敛速度比常温下慢,而且易发散,必须选用恰当的数值技术。本文在通用半导体器件模拟软件 PISCES 的基础上,修改了模型方程,加进了低温参数模型,成功地开发和编制出了适于低温半导体器件模拟软件 SE-PISCES,模拟了 77K

下二极管的稳态特性、瞬态特性,作了交流小信号分析,将模拟结果和300K下的作了对比分析.

### 参 考 文 献

- [1] 魏同立,等,大自然探索,1991,4: 33~42.
- [2] M. R. Pinto *et al.*, PISCES-2B:Poisson and continuity equation solver, Tech. Rep., Stanford Univ., Stanford, CA, Sept., 1984.
- [3] Y. W. Chen *et al.*, IEEE Tran. Electron Devices, 1992, **39**(2):348.
- [4] C. J. Malgorzata *et al.*, IEEE Trans. Electr. Dev., 1989, **36**(8):1475.
- [5] 王明网,等,东南大学学报,1995,25(6):57.
- [6] M. R. Pinto *et al.*, PISCES-2B Supplementary Report, Stanford Univ., Stanford, CA, Sept., 1985.
- [7] Y. W. Yi *et al.*, IEICE Trans. 1991, **E74**(6):1641.
- [8] 王明网,低温双极晶体管的计算机模拟与分析,东南大学博士学位论文,1995,9.

## Software for Simulation of Semiconductor Device at Low Temperature

Wang Mingwang, Wei Tongli, Li Yao and Xiao Zhixiong

(Microelectronics Centre, Southeast University, Nanjing 210096)

Received 9 May 1995, revised manuscript received 31 July 1995

**Abstract** Based on the software PISCES for simulation of semiconductor device, software SE-PISCES for simulation of semiconductor device at low temperature is developed by modifying model equations and adding parameter models for low temperature. The steady-state property, transient property and AC small signal analysis of diode at low temperature are simulated and are compared with the simulation results at 300K.

**EEACC:** 2560B, 2560H