

MIS 隧道器件电流-电压特性的 数值模拟*

夏 永 伟

(中国科学院半导体研究所,北京)

G. Pananakakis and G. Kamarinos

(法国国家科学研究中心格勒诺布尔半导体器件物理实验室)

1988年11月7日收到

本文建立了 MIS 隧道器件的电流-电压特性的数值模拟程序,提出了一种新的计算方法:龙格-库塔数值积分与边界条件的预估-校正处理相结合的算法。利用建立的程序模拟计算了两种不同氧化层厚度的 MIS 隧道器件的电流-电压特性。对 TiW/Si 肖特基二极管,考虑了界面态的静态和动态影响,模拟特性和实验结果相比,令人满意的一致。

主题词: MIS 隧道器件、数值模拟、计算方法

一、引 言

金属氧化物半导体 (MIS) 隧道结构,由于它的各种器件应用(例如 MIS 肖特基二极管, MIS 太阳电池, TETRA—隧道发射极晶体管, MISS 开关器件, 存贮器件和气敏器件等),和这种结构在肖特基接触器件物理的研究中所具有的意义,近来愈来愈受注意。对 MIS 隧道二极管的电学性质从理论和实验两方面都有了一系列的研究^[1-10],先后提出了几个模型。但是,这些模型还不能完全理解和解释 MIS 隧道结构器件特性的某些差异和变化^[9],特别是在研制和设计衬底厚度小于最大耗尽层宽度的 MIS 隧道结构时,更难利用分析模型。因此,建立一个采用严格数学算法、考虑界面态影响的适于分析 MIS 隧道结构的模拟程序是十分必要的。

本文从分析一维半导体器件的非线性微分方程出发,采用文献[11]的隧道电流模型,建立了一个严格的分析程序, Metal-Insulator-Semiconductor Tunnel Structure Analyzer—MISTSA。微分方程组是用龙格-库塔法积分求解,界面条件是用预估-校正法逼近处理的。本文第二节概括了 MISTSA 程序中所用的方程和模型,第三节介绍所采用的算法,第四节概括了计算结果,对 TiW/Si 肖特基二极管,模拟结果与实验结果作了比较。

* 本工作绝大部分是在 LPCS, CNRS, Grenoble, France 完成的。

二、基本方程

图 1 是加偏压 V 的 MIS 二极管的能带。考虑绝缘体是二氧化硅, 其厚度 δ 小于 50 \AA , 电子可以隧道方式穿过。衬底是掺杂浓度为 N_D 的 N 型硅, 厚度为 L , 比最大耗尽层宽度小。对这种结构, 我们只需要作一维分析。

在稳态, 半导体器件分析的基本方程是:

(1) 泊松方程

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_0\epsilon_s}(p - n + N_D) \quad (1)$$

式中 $\phi(x)$ 是电势, $n(x)$ 和 $p(x)$ 分别是电子和空穴密度, ϵ_0 和 ϵ_s 分别是真空和半导体的介电常数, q 是电子电荷, x 是离开 $\text{SiO}_2\text{-Si}$ 界面的距离。

(2) 电流密度方程

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (2)$$

$$J_p = q\mu_p pE - qD_p \frac{dp}{dx} \quad (3)$$

$$J = J_n + J_p \quad (4)$$

式中 J_n 和 J_p 分别是电子和空穴电流密度, J 是总电流密度。假设电子和空穴迁移率 μ_n 、 μ_p 为常量, 对非兼并半导体有爱因斯坦

关系: $D_n = \frac{kT}{q} \mu_n$ 和 $D_p = \frac{kT}{q} \mu_p$, 此处 k 是玻尔兹曼常数, T 是绝对温度。电场

$$E(x) = -\frac{d\phi}{dx}$$

(3) 连续性方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -R_n + \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} \quad (5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -R_p - \frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} \quad (6)$$

式中 R_n 和 R_p 是电子复合速率和空穴复合速率, t 是时间。假设电子空穴成对复合, 则 $R_n = R_p = R$ 。依照 Shockley-Hall-Read 模型, 对处于禁带中心的复合中心, 复合速率为

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)} \quad (7)$$

这里 n_i 是本征载流子浓度, τ_n 和 τ_p 分别是电子和空穴的寿命。

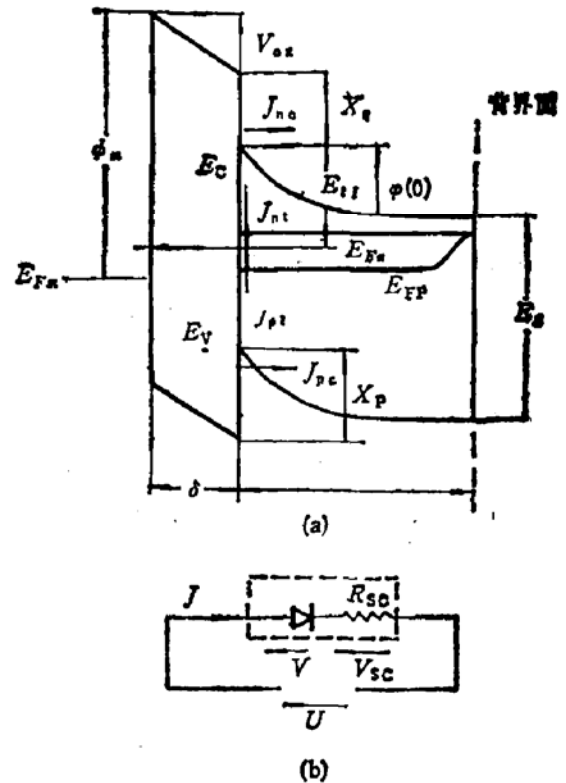


图 1 (a) MIS 隧道二极管的能带图(N 型半导体)
(b) MIS 隧道二极管的电学表示

在稳态, $\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = 0$, 方程(5)和(6)变为

$$\frac{dJ_n}{dx} = qR \quad (8)$$

$$\frac{dJ_p}{dx} = -qR \quad (9)$$

假设在 $x = L$ 处, 背接触是欧姆接触, 则

$$\phi(L) = 0 \quad (10)$$

$$n(L) = n_0 = N_D \quad (11)$$

$$p(L) = p_0 = \frac{n_i}{N_D} \quad (12)$$

式中 n_0 和 p_0 是电子和空穴的热平衡体密度.

在 $\text{SiO}_2\text{-Si}$ 界面 ($x = 0$), 从电中性条件

$$Q_{ss} + Q_f + Q_{sc} + Q_{ms} + Q_{mb} = 0 \quad (13)$$

可以得到电势的界面条件. 式中 Q_f 是氧化层中的固定电荷, Q_{sc} 是半导体中的空间电荷, Q_{ms} 和 Q_{mb} 分别是正金属板和背金属板上的电荷. 这里引进电荷 Q_{ms} 是因为在衬底厚度小于最大耗尽层宽度时, 在 $x = L$ 处电场不等于零, 在金属板上存在电荷层. 当然, 在衬底厚度大于最大耗尽层宽度的所谓厚衬底情况, $E(L)$ 和 Q_{mb} 都等于零. Q_{ss} 是界面态电荷:

$$Q_{ss} = q \sum_i (N_{iD}(i)(1 - \lambda)(1 - f_i) - N_{iA}(i)\lambda f_i) \quad (14)$$

此处 $N_{iD}(i)$ 和 $N_{iA}(i)$ 是第 i 个界面态上的施主型和受主型密度; 对施主型态, $\lambda = 0$, 对受主型态, $\lambda = 1$; f_i 是能级为 E_{ii} 的第 i 个界面态的占据几率. 按高斯定律

$$Q_{ms} = C_{ox}V_{ox} = \frac{\epsilon_0\epsilon_{ox}}{\delta} V_{ox} \quad (15)$$

$$Q_{mb} = -\epsilon_0\epsilon_s E(L) \quad (16)$$

$$Q_{sc} = -\epsilon_0\epsilon_s (E(0) - E(L)) \quad (17)$$

式中 ϵ_{ox} 是氧化物介电常数, C_{ox} 是单位面积的氧化层电容, V_{ox} 是氧化层上的压降, $V_{ox} = V - \phi(0) - \phi_{ms}$, V 是外加电压, $\phi(0)$ 是半导体的表面势, ϕ_{ms} 是金属和半导体间的功函数差. 从(13)–(17)可以得到

$$E(0) = \frac{\epsilon_{ox}(V - \phi(0) - \phi_{ms})}{\epsilon_0\delta} - \frac{Q_{ss} + Q_f}{\epsilon_0\epsilon_s} \quad (18)$$

此外, 也可以得到电子电流和空穴电流的两个边界条件. 从图 1 和参考文献[11]有

$$J_n(0) = J_{ns} - J_{nr} \quad (19)$$

$$J_p(0) = J_{ps} - J_{pr} \quad (20)$$

式中 J_{ns} 和 J_{ps} 分别是金属进入导带和价带的电子和空穴直接隧道电流密度

$$J_{ns} = -qn_0V_{cs}e^{-\frac{\hbar}{2\delta}} \left(e^{-\frac{q(\Delta V_{ox} - \phi(0))}{4T}} - \frac{n(0)}{n_0} \right) \quad (21)$$

$$J_{pc} = q p_0 V_{cp} e^{-\frac{1}{2} \frac{\delta}{x_p}} \left(e^{-\frac{q(\Delta V_{ox} - \phi(0))}{kT}} - \frac{p(0)}{p_0} \right) \quad (22)$$

此处 $\Delta V_{ox} = V_{ox} - V_{ox0}$, V_{ox0} 和 V_{ox} 分别是热平衡和非热平衡条件下氧化层上的压降; V_{cn} 和 V_{cp} 是 SiO₂-Si 界面上电子和空穴的收集速度; x_n 和 x_p 是绝缘层对半导体电子和空穴的势垒高度, 以 eV 为单位; δ 是氧化层厚度, 在式(21)和(22)中以 Å 为单位. J_{ni} 和 J_{pi} 分别是半导体导带电子进入界面态和半导体价带空穴进入界面态的净电流密度:

$$J_{ni} = -q \sum_i C_{ni} N_{ii} ((1 - f_i) n(0) - f_i n_{ii}) \quad (23)$$

$$J_{pi} = q \sum_i C_{pi} N_{ii} (f_i p(0) - (1 - f_i) p_{ii}) \quad (24)$$

式中 C_{ni} 和 C_{pi} 是电子和空穴的俘获截面, N_{ii} 是第 i 态的界面态密度

$$N_{ii} = N_{iiD}(i) \cdot (1 - \lambda) + N_{iiA}(i) \cdot \lambda$$

按照参考文献[11]

$$f_i = \frac{C_{pi} p_{ii} + C_{ni} n(0) + \frac{f_{mi}}{\tau_i}}{C_{ni}(n(0) + n_{ii}) + \frac{1}{\tau_i} + C_{pi}(p(0) + p_{ii})} \quad (25)$$

而且

$$n_{ii} = N_c e^{\frac{E_{ii} - E_c}{kT}} \quad (26)$$

$$p_{ii} = N_v e^{\frac{E_v - E_{ii}}{kT}} \quad (27)$$

$$\tau_i = \tau_{0i} e^{-(x_n + E_{ii}) \frac{1}{2} \delta} \quad (28)$$

$$f_{mi} = (1 + e^{\frac{E_{ii} - E_{fm}}{kT}})^{-1} \quad (29)$$

式中 N_c 和 N_v 是半导体导带和价带的有效态密度, E_c 和 E_v 是在半导体表面的半导体能带边缘. E_{fm} 是金属费米能级, E_{ii} 是第 i 态的能级.

从(19)~(29)可以导出电子和空穴密度的两个边界条件(见第三节方程(B5)和(B6)). 这个模型意味着, 电子电流和空穴电流包括两个分量: 到半导体导带和价带的隧道电流(方程(19)和(20)中右端第一项)和到界面态的隧道电流(方程(19)和(20)中右端第二项). 这里考虑了导带、价带和界面态三种隧道作用. 界面态不仅提供了到界面态的隧道电流, 而且还改变了氧化层压降, 即改变了进入导带与价带的隧道电流的大小.

对热平衡情况, 只需要解方程(1)及边界条件(11)和(18), 采用电子和空穴的热平衡分布

$$n = n_i e^{\frac{q(\phi_{i1} - \phi)}{kT}}$$

$$p = p_i e^{\frac{q(\phi - \phi_{i1}')}{kT}}$$

式中 $q\phi_{i1} = E_{i1}$, E_{i1} 是热平衡时的半导体费米能级.

三、算 法

把 ϕ 、 n 、 p 、 ϕ' 、 $n' = \frac{dn}{dx} = -E$ 和 $p' = \frac{dp}{dx}$ 当作六个自变量, 方程(1)、(9)、(10)、(11)、(12)、(13)、(18)、(19)和(20)可变换为下列方程组:

$$\frac{d\phi}{dx} = \phi' \quad (\text{E1})$$

$$\frac{d\phi'}{dx} = -\frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} (p - n + N_D) \quad (\text{E2})$$

$$\frac{dn}{dx} = n' \quad (\text{E3})$$

$$\frac{dn'}{dx} = \frac{q}{kT} \cdot \frac{R(x)}{\mu_n} + \frac{q}{kT} \phi' n' + \frac{qn}{kT} \cdot \frac{d\phi'}{dx} \quad (\text{E4})$$

$$\frac{dp}{dx} = p' \quad (\text{E5})$$

$$\frac{dp'}{dx} = \frac{q}{kT} \cdot \frac{R(x)}{\mu_p} - \frac{q}{kT} \phi' p' - \frac{qp}{kT} \cdot \frac{d\phi'}{dx} \quad (\text{E6})$$

边界条件成为:

$$\phi(L) = 0 \quad (\text{B1})$$

$$n(L) = n_0 \quad (\text{B2})$$

$$p(L) = p_0 \quad (\text{B3})$$

$$\phi'(0) = -\frac{\epsilon_{0x}(V - \phi_{ms} - \phi(0))}{\epsilon_s \delta} - \frac{Q_{is} + Q_f}{\epsilon_0 \epsilon_s} \quad (\text{B4})$$

$$\begin{aligned} n'(0) = & \frac{q}{kT} n(0) \cdot \phi'(0) - \frac{q}{kT} \frac{n_0}{\mu_n} V_{en} e^{-\frac{1}{2} \frac{\phi(0)}{kT}} \left(e^{\frac{q(\Delta V_{0x} - \phi(0))}{kT}} - \frac{n(0)}{n_0} \right) \\ & + \frac{q}{kT} \frac{1}{\mu_n} \sum_i C_{ni} N_{ii} ((1 - f_i) n'(0) + f_i n_{ii}) \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

$$\begin{aligned} p'(0) = & \frac{q}{kT} p(0) \phi'(0) - \frac{q}{kT} \frac{p_0}{\mu_p} V_{ep} e^{-\frac{1}{2} \frac{\phi(0)}{kT}} \left(e^{\frac{q(\Delta V_{0x} - \phi(0))}{kT}} - \frac{p(0)}{p_0} \right) \\ & + \frac{q}{kT} \frac{1}{\mu_p} \sum_i C_{pi} N_{ii} (f_i p(0) - (1 - f_i) p_{ii}) \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

(E1)→(E6) 和 (B1)→(B6) 形成了有六个边界条件的一阶非线性微分方程组, 我们采用数值积分法^[12]解。

金属-绝缘体-半导体隧道结构分析程序 (MISTSA) 是为解这套方程组而设计编制的。程序采用龙格-库塔法, 并以 Verner 五阶和六阶公式找方程近似解为基础。自动选取积分步长, 保证总体误差小于给定的标准。每经过一个积分步长, 可以得到满足精度要求的 ϕ 、 n 、 p 、 ϕ' 、 n' 和 p' 的值。可以任意选定一些节点, 以便输出 ϕ 、 n 和 p 等量的分布, 两节点之间的距离大小不影响解的收敛性。如只需要输出 $I-V$ 特性, 就不必划定这些节点。

对每一外加电压值,计算过程如下:

(1) 假定 $x=L$ 处自变量 ψ' 、 n' 和 p' 的预估试验值为 α_0 、 β_0 和 γ_0 。从 (B1)–(B3) 已知, $\psi(L)$ 、 $n(L)$ 和 $p(L)$ 为常数值。

(2) 从方程组 (E1)–(E6), 用前一节点上的各变量值(第一个点用 $x=L$ 处的值), 用龙格-库塔积分依次计算当前节点上的各变量值。从 $x=L$ 开始, 依次数值积分, 最后可得到 $x=0$ 处的各变量值。我们称它们为预估值。

(3) 从边界条件 (B4)–(B6), 以及从步骤(2)得到的 $\psi(0)$ 、 $n(0)$ 、 $p(0)$ 和 $\psi'(0)$, 可求得另一套 $\psi'(0)$ 、 $n'(0)$ 和 $p'(0)$, 记为 $\psi'_i(0)$ 、 $n'_i(0)$ 和 $p'_i(0)$, 我们称为校正值。

(4) 校正值与预估值的差值 $F = \Delta\psi'(0) = \psi'_i(0) - \psi'(0)$, $G = \Delta n'(0) = n'_i(0) - n'(0)$ 和 $H = \Delta p'(0) = p'_i(0) - p'(0)$ 在数值上与 $x=L$ 处的试验值 α_0 、 β_0 和 γ_0 有关, 即 F 、 G 和 H 是 α_0 、 β_0 和 γ_0 的隐函数, 用泰勒展开为

$$F(\alpha, \beta, \gamma) = F(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) + \frac{\partial F}{\partial \alpha} \Delta\alpha + \frac{\partial F}{\partial \beta} \Delta\beta + \frac{\partial F}{\partial \gamma} \Delta\gamma$$

$$G(\alpha, \beta, \gamma) = G(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) + \frac{\partial G}{\partial \alpha} \Delta\alpha + \frac{\partial G}{\partial \beta} \Delta\beta + \frac{\partial G}{\partial \gamma} \Delta\gamma$$

$$H(\alpha, \beta, \gamma) = H(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) + \frac{\partial H}{\partial \alpha} \Delta\alpha + \frac{\partial H}{\partial \beta} \Delta\beta + \frac{\partial H}{\partial \gamma} \Delta\gamma$$

改变 α_0 到 $\alpha = \alpha_0(1 + \varepsilon)$ (ε 非常小, 我们取 $\varepsilon = 10^{-6}$), 从 $x=L$ 再积分到 $x=0$, 可以得到

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha} = \frac{F(\alpha, \beta_0, \gamma_0) - F(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)}{\varepsilon},$$

$$\frac{\partial G}{\partial \alpha} = \frac{G(\alpha, \beta_0, \gamma_0) - G(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)}{\varepsilon}$$

和

$$\frac{\partial H}{\partial \alpha} = \frac{H(\alpha, \beta_0, \gamma_0) - H(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)}{\varepsilon}.$$

与此类似, 可求得 $\frac{\partial F}{\partial \beta}$ 、 $\frac{\partial G}{\partial \beta}$ 、 $\frac{\partial H}{\partial \beta}$ 、 $\frac{\partial F}{\partial \gamma}$ 、 $\frac{\partial G}{\partial \gamma}$ 和 $\frac{\partial H}{\partial \gamma}$ 。令

$$F(\alpha, \beta, \gamma) = G(\alpha, \beta, \gamma) = H(\alpha, \beta, \gamma) = 0,$$

可确立方程组

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial F}{\partial \alpha} & \frac{\partial F}{\partial \beta} & \frac{\partial F}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial G}{\partial \alpha} & \frac{\partial G}{\partial \beta} & \frac{\partial G}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial H}{\partial \alpha} & \frac{\partial H}{\partial \beta} & \frac{\partial H}{\partial \gamma} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Delta\alpha \\ \Delta\beta \\ \Delta\gamma \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} F(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) \\ G(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) \\ H(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) \end{vmatrix}$$

解方程可得一套新的校正试验值 $\alpha_1 (= \alpha_0 + \Delta\alpha)$ 、 $\beta_1 (= \beta_0 + \Delta\beta)$ 和 $\gamma_1 (= \gamma_0 + \Delta\gamma)$, 作为下一次数值积分的 α_0 、 β_0 和 γ_0 , 这就是边界条件的所谓预估-校正处理^[13]。

(5) 重复(2)–(4), 直到 $\frac{\Delta F}{F}$ 、 $\frac{\Delta G}{G}$ 和 $\frac{\Delta H}{H}$ 都小于预先规定的限值 10^{-8} (可改变)。

依这个标准,结果的精度比通常离散数值模拟中采用的 $\frac{\Delta\phi}{\phi} < 10^{-3}$, $\frac{\Delta n}{n} < 10^{-4}$ 和 $\frac{\Delta p}{p} < 10^{-4}$ 明显要好。

对于热平衡情况,只需要解方程 (E1)、(B1) 和 (B4),计算步骤是类似的。

MISTSA 程序在 HP1000 计算机上运行,共 1500 条 FORTRAN 语句行,仅占 16 K 字内存,很容易移植到其它微机上运行。

四、结 果

我们先简要叙述零界面态、零氧化层固定电荷的两种 MIS 二极管 ($\delta = 5 \text{ \AA}$ 和 $\delta = 50 \text{ \AA}$) 的理论研究结果,并与别人的研究结果^[7]作对照。计算中使用的参数值列在表 1 中。

表 1

参量	数值	单位	参量	数值	单位
q	1.6×10^{-19}	库	ϵ_0	8.854×10^{-14}	法/厘米
k	1.38×10^{-23}	焦/K	T	300	K
ϕ_m	1.12	电子伏	n_i	1.45×10^{10}	1/厘米 ³
ϵ_{ox}	3.9		ϵ_{si}	11.9	
N_D	2.8×10^{15}	1/厘米 ³	N_V	1.04×10^{19}	1/厘米 ³
μ_n	500	厘米 ² /伏·秒	μ_p	1300	厘米 ² /伏·秒
V_{th}	5×10^6	厘米/秒	V_{th}	5×10^6	厘米/秒
τ_n	1×10^{-10}	秒	$\tau_n = \tau_p$	5×10^{-10}	秒
C_s	2.5×10^{-2}	厘米 ² /秒	C_s	2.5×10^{-2}	厘米 ² /秒

MISTSA 可用来模拟一些物理效应。N型衬底掺杂浓度为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, 相应最大耗尽层宽度约为 $1 \mu\text{m}$ 。衬底厚度为 $0.6 \mu\text{m}$ 。假设 $\phi_{ms} = 0.2 \text{ V}$, $x_n = x_p = 0.5 \text{ eV}$ (低势垒情况)。图 2 和图 3 分别给出有很薄氧化层 ($\delta = 5 \text{ \AA}$) 的 MIS 肖特基二极管和有厚氧化层 ($\delta = 50 \text{ \AA}$) 的 MIS 二极管的电势、电子和空穴密度分布和 $I-V$ 特性。当外加电压小于 ϕ_{ms} 时,两种二极管的电势分布几乎相同(图 2(a) 和图 3(a))。由于衬底厚度小于耗尽层宽度,电中性区不存在,在背金属电极和半导体间的界面(背界面)上电场不等于零。当外加电压超过 ϕ_{ms} 时,两种二极管有一些差别。在厚氧化层二极管中,出现了电中性区,背界面上电场为零;而在薄氧化层二极管中,不出现电中性区,背界面上电场也不为零,氧化层上电压降很小。必须指出,外加电压一直到 -0.3 V , $\text{SiO}_2\text{-Si}$ 界面上少子浓度没有超过多子浓度,亦即表面达不到反型状态(图 2(b))。对 5 \AA 、 10 \AA 、 15 \AA 、 20 \AA 和 30 \AA 厚氧化层二极管模拟指出,当氧化层厚度超过 10 \AA , 表面会出现弱反型状态,外加电压直到 -0.3 V 仍不出现强反型状态。当外加电压从 ϕ_{ms} 值降低时,多子和少子密度同时减少。然而,对 50 \AA 氧化层而言,在 -0.4 V 半导体表面呈现强反型(图 3(b))。这个结果与文献[7]的结果相同。图 2(b)还表明,外加电压较高时,表面电子和空穴密度分布几乎是平的。图 2(c) 和图 3(c) 给出两种 MIS 二极管的 $I-V$ 特性。

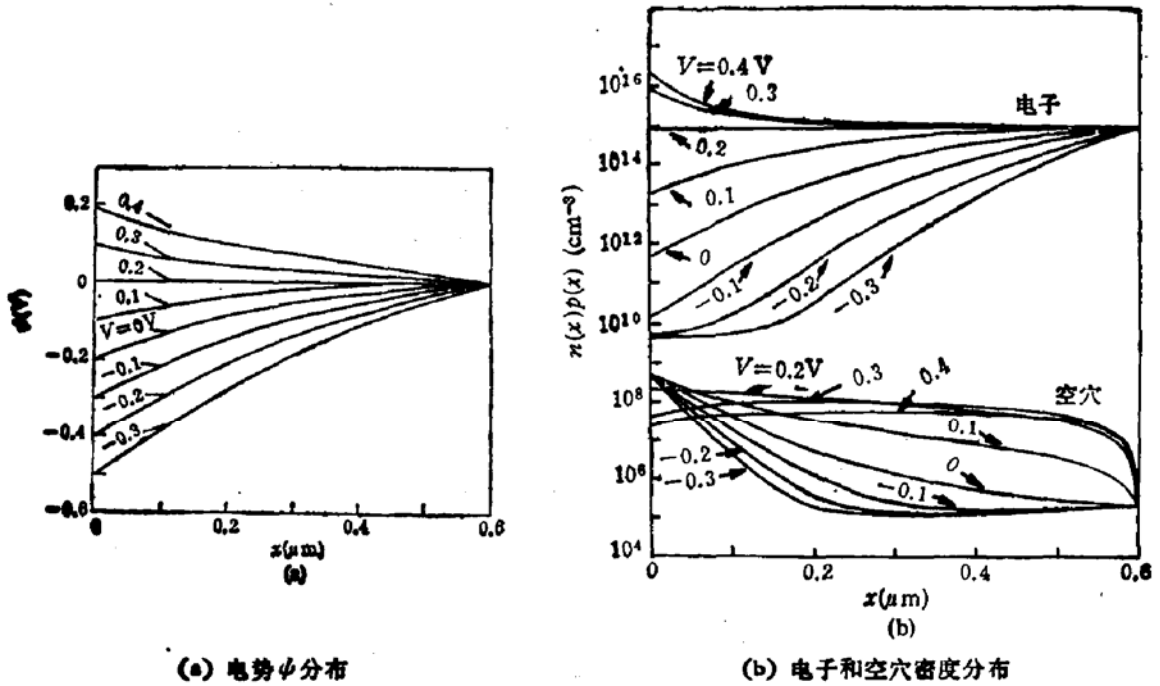


图2 MIS 肖特基二极管 ($\delta = 5 \text{ \AA}$) 的模拟结果

适当改变本文中的电流模型 (19)~(29), 修改相应程序段, 可研究其它一些物理效应。

图4给出对 TiW/Si 肖特基二极管的模拟结果. 这种二极管是由法国汤姆逊 (Thomson) 公司半导体实验室在 (111) 晶向 N 型外延硅层 ($N_D = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $\phi_m = 0.2 \text{ eV}$, $L = 0.4 \mu\text{m}$) 上, 溅射 TiW 合金 (Ti5%, W95%) 而形成的. 背接触做在 N⁺ 硅埋层上. 这种二极管是 STL 逻辑电路^[13] 的重要元件. 假定取 $x_s = x_p = 0.82 \text{ eV}$ (高

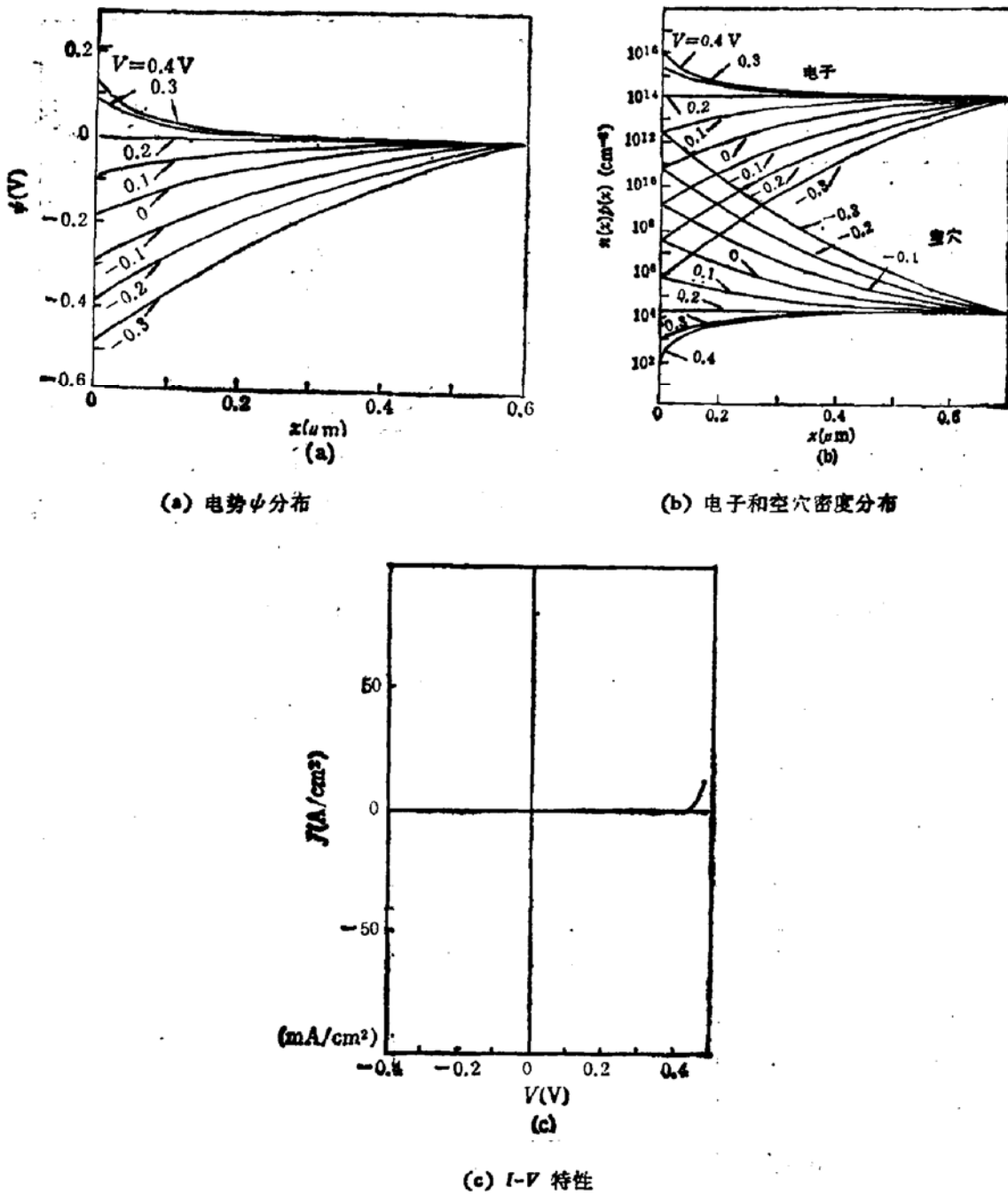


图3 MIS 隧道二极管 ($\delta = 50 \text{ \AA}$) 的模拟结果

势垒), $\delta = 6 \text{ \AA}$ 和 $Q_f = 0$, 假定界面态是两个单独的受主态, 其能级分别在导带底下 0.07 eV ($N_{AA} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) 和 0.30 eV ($N_{AA} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)。图中曲线 a 是 $I-V$ 特性。这里已扣除串联电阻 ($R_{ss} = 7 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}^2$) 的影响。曲线 b 是用 MISTSA 程序模拟的结果。从图可见, 取得了令人满意的一致。

五、结 论

对于 MIS 隧道结构的电流电压特性, 我们建立了一个模拟程序 MISTSA, 确立了一

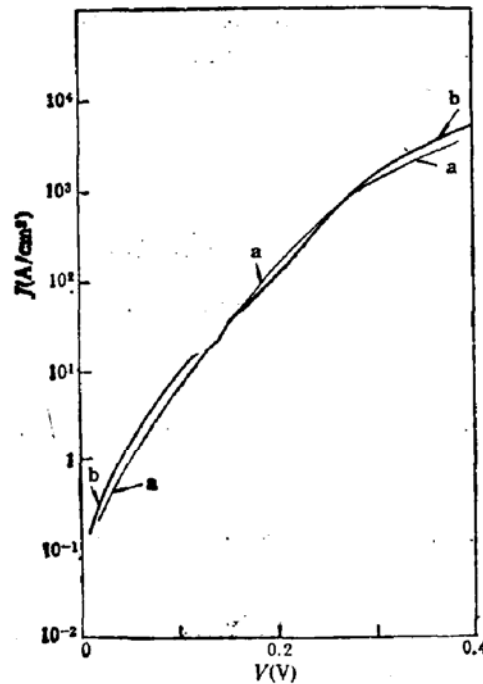


图 4

种新的有效的计算方法,即龙格-库塔数值积分与界面条件的预估-校正处理相结合解半导体器件分析方程。如需要输出各物理量(ψ 、 n 、 p 、 ψ' 等)的分布,可按需要选定节点。如只需要 $I-V$ 特性,而不要 $\psi(x)$ 、 $n(x)$ 和 $p(x)$ 等分布,就不必要选定节点,这时只需要最小的计算机内存。选用其它电流模型代替(19)~(29),计算方法不失一般性。

MISTSA 程序可以帮助我们更好地理解 MIS 隧道结构的器件工作。它也是研制新的 MIS 隧道二极管的有效工具。通过对 5 \AA 和 50 \AA 两种氧化层厚度的 MIS 二极管的理论模拟与参考文献[7]的结果的比较,以及 TiW/Si 肖特基二极管的模拟结果与实验结果的比较,证明了 MISTSA 程序的可用性。

作者感谢法国半导体器件物理实验室 F. Balestra 博士的有益讨论。作者对中国科学院半导体研究所孔令坤同志帮助绘图表示感谢。

参 考 文 献

- [1] M. A. Green, F. D. King and J. Shewchun, *Solid-St. Electron.*, 17, 551 (1974).
- [2] J. Shewchun, M. A. Green and F. D. King, *Solid-St. Electron.*, 17, 563(1974).
- [3] H. C. Card, *Solid-St. Electron.*, 20, 971 (1977).
- [4] E. D. Athanassova and D. I. Puskikarov, *Solid-st. Electron.*, 25, 781 (1982).
- [5] N. G. Tarr, L. Pulfrey and D. S. Camporese, *IEEE Transactions on Electron Devices*, ED-30 1760 (1983).
- [6] A. G. O'Neill, *Solid-st. Electron.*, 29, 305 (1986)
- [7] C. Y. Chang and S. J. Wang, *Solid-st. Electron.*, 29, 339 (1986).
- [8] P. Chattopadhyay and A. N. Daw, *Solid-st. Electron.*, 29, 555(1986).
- [9] P. E. Bagnoli and A. Nannini, *Solid-st. Electron.*, 30, 1005 (1987).
- [10] K. M. Chu and D. L. Pulfrey, *IEEE Transactions on Electron Devices*, ED-35, 188 (1988).
- [11] G. Pananakakis, G. Kamarinos and P. Viktorovitch, *Revue de Physique Appliquée*, 14, 639 (1979).
- [12] G. Pananakakis and G. Kamarinos, *NASECODE 111*, 225 (1983).
- [13] A. Ralston and H. S. Wilf (editors), *Mathematical Method for Digital Computers*, vol. 1. John Wiley &

Sons Inc., (1960).

[14] M. A. Green and J. Shewchun, *J. Appl. Phys.*, 46, 5185 (1975).

[15] G. Pananakakis, B. Andres, G. Kamarinos and T. Barsotti, ESSDERC 86, Cambridge (England), Published by the European Physical Society, 10G, 168, Sept. 8-11 (1986).

Numerical Simulation of Current-Voltage Characteristics of MIS Tunnel Devices

Xia Yonghei

(*Institute of Semiconductors, Academia Sinica*)

Georges Pananakakis and Georges Kamarinos

(*Laboratoire de Physique des Composants à Semiconducteurs, CNRS UA840-ENSERG, Grenoble, France*)

Abstract

A program for the numerical simulation of the current-voltage characteristics of MIS tunnel devices is developed. This paper presents a new and efficient computational method. The differential equations are integrated using Runge-Kutta integral method and the boundary conditions are satisfied according to a prediction-correction method. The current-voltage (I - V) characteristics for MIS tunnel diodes with thin and thick oxide are calculated using the program. Taking into account both the electrostatic and kinetic influences of interface states, a satisfactory fitting between the simulated and the experimental results of I - V characteristics for TiW/Si Schottky diode is obtained.

KEY WORDS: MIS tunnel device, numerical simulation, Computational method