

10. Гузев А. А. Проводимость кремниевых МДП-структур в области слабой инверсии: Автореф. дис. на соиск. учен. степени канд. физ.-мат. наук.— Новосибирск: Изд-во ИФП, 1980.
11. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.— М.: Наука, 1980.
12. Горбенко Н. И., Катешов В. А., Майоров Ю. К. ППП ЭФЕС — автоматизация решения краевых задач уравнения Пуассона для ЭВМ ЕС.— Новосибирск, 1985. (Препринт/АН СССР, Сиб. отд-ние; 552).

Поступила в редакцию 14 октября 1985 г.

УДК 621.382.82.001

А. И. АДАМСОНЕ, Б. С. ПОЛЬСКИЙ, Л. С. ПОХВАЛИНА,
Я. С. РИМШАНС

(Рига)

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОМПОНЕНТОВ БИПОЛЯРНЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ

Введение. Достижения биполярной технологии привели к существенному уменьшению топологических размеров компонентов современных интегральных схем (ИС). Анализ и проектирование таких компонентов с помощью упрощенных математических моделей становятся затруднительными. Это связано с тем, что традиционные предположения, положенные в основу этих моделей, такие, как одномерность токов, постоянство подвижностей электронов и дырок, несущественность эффектов сильного легирования, возможность разбиения всей структуры на отдельные квазинейтральные области и области с объемной плотностью заряда и ряд других, могут существенно нарушаться в современных компонентах ИС. В связи с этим с середины 60-х годов начало складываться новое направление в моделировании, основанное на численном решении с помощью ЭВМ системы уравнений, описывающей процессы переноса носителей заряда и распределение потенциала электрического поля в приборе.

Особое значение это направление приобрело в связи с появлением функционально-интегрированных компонентов (И²Л, инжекционно-полевой логики и др.), работа которых носит принципиально многомерный характер. Поэтому проблема разработки пакетов прикладных программ (ППП), реализующих численные методы решения вышеуказанной системы уравнений, позволяющих проводить моделирование широкого класса компонентов современных ИС и наделенных хорошими сервисными возможностями, является крайне актуальной. По существу, такие ППП должны стать и становятся неотъемлемой частью системы автоматизированного проектирования (САПР) компонентов ИС. Перспективность и большие возможности такого направления в моделировании компонентов ИС неоднократно отмечались в литературе [1—5].

В настоящей работе дается описание математического и программного обеспечения (ППП «Альфа»), разработанного в ВЦ ЛГУ им. П. Стучки и предназначенного для моделирования широкого класса компонентов биполярных ИС.

Математическая модель. Система уравнений, описывающая процессы переноса носителей заряда в биполярных полупроводниковых приборах, в безразмерном виде представлена таким образом [6, 7]:

$$\operatorname{div} \mathbf{J}_n = R(p, n) + \frac{\partial n}{\partial t}; \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{J}_p = -R(p, n) - \frac{\partial p}{\partial t}; \quad (2)$$

$$\Delta \varphi = n - p - N; \quad N = N_d - N_a. \quad (3)$$

В (1) — (3) использованы общепринятые в физике полупроводниковых приборов обозначения. При моделировании биполярных полупроводниковых приборов необходимо учитывать так называемые эффекты сильного легирования (сужение ширины запрещенной зоны полупроводника), которые, как было показано в [8—10], оказывают существенное влияние на процессы переноса носителей заряда. Если ограничиться рассмотрением статистики Больцмана и считать эффекты сильного легирования не зависящими от уровня инжекции, то в этом случае выражения для плотностей электронного и дырочного токов записываются следующим образом:

$$\mathbf{J}_n = \mu_n (\nabla n - n \nabla \ln n_{ie} - n \nabla (\varphi + \omega)); \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_p = -\mu_p (\nabla p + p \nabla \ln n_{ie} + p \nabla (\varphi + \omega)), \quad (5)$$

где n_{ie} — эффективная собственная концентрация носителей заряда $n_{ie} = \exp(\Delta E_g)$; ΔE_g — эффективное сужение ширины запрещенной зоны; ω — асимметрия в сужении ширины запрещенной зоны со стороны зоны проводимости и валентной зоны. «Параметры сильного легирования» n_{ie} и ω определяются расчетным путем [10—12] либо используются эмпирические формулы [13, 14]. Более сложная математическая модель, также реализованная в ППП «Альфа», учитывающая статистику Ферми для носителей заряда и зависимость эффектов сильного легирования от уровня инжекции, описана в [11, 15] и здесь для краткости не приводится.

Подвижности μ_n и μ_p считаются зависящими от концентрации легирующей примеси и электрического поля согласно эмпирическим формулам из [16]. Скорость рекомбинации $R(p, n)$ задается с учетом рекомбинации на дефектах, обусловленных наличием легирующей примеси (рекомбинация по Шокли — Холлу — Риду [17]), а также межзонной рекомбинации Оже [18]:

$$R(p, n) = (pn - n_{ie}^2) \left(\frac{1}{\tau_n(p + n_{ie}) + \tau_p(n + n_{ie})} + C_n n + C_p p \right). \quad (6)$$

Для времен жизни носителей заряда τ_n и τ_p используются аппроксимационные выражения вида

$$\tau_n = \frac{\tau_{n0}}{\left(1 + \frac{N_d + N_a}{N_0}\right)^\delta}; \quad \tau_p = \frac{\tau_{p0}}{\left(1 + \frac{N_d + N_a}{N_0}\right)^\delta}, \quad (7)$$

где τ_{n0} , τ_{p0} , N_0 , δ — параметры, определяемые из эксперимента [19]. Коэффициенты рекомбинации Оже C_n и C_p считаются не зависящими от уровня легирования и также задаются из эксперимента [20].

Система уравнений (1) — (5) замыкается граничными и начальными условиями. На омических контактах металл — полупроводник задаются значения потенциала электрического поля φ и концентраций носителей заряда n и p , которые определяются из условий нейтральности и локального термодинамического равновесия. На остальной части поверхности ставятся условия

$$(\nabla \varphi, \mathbf{v}) = 0, \quad (\mathbf{J}_n, \mathbf{v}) = -R_s(p, n), \quad (\mathbf{J}_p, \mathbf{v}) = R_s(p, n), \quad (8)$$

где \mathbf{v} — единичный вектор внешней нормали; R_s — поверхностная скорость рекомбинации.

В ППП «Альфа» реализованы возможности моделирования нестационарных процессов в одномерной и двумерной геометрии, а стационарных процессов $\left(\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = 0\right)$ в одномерной, двумерной и трехмерной геометрии.

Численные методы. Решение краевых задач, сформулированных в предыдущем разделе, в ППП «Альфа» осуществляется методом конечных разностей [21, 22]. Уравнения неразрывности (2), (3) по пространственным переменным аппроксимируются «экспоненциальными» разностными

схемами [23], позволяющими вести расчеты с приемлемой точностью на грубых сетках, несмотря на наличие погранслоев в окрестности p , n -переходов. Оператор Лапласа аппроксимируется стандартным образом [21, 22]. Нелинейная система разностных уравнений в стационарном случае решается методом Гуммеля [24], в котором попеременно итерировуются уравнения неразрывности для носителей заряда и линейризованное уравнение Пуассона (внешний итерационный процесс). Для расчета высоких уровней инжекции используется процедура ускорения [25], которая во многих случаях позволяет существенно повысить скорость сходимости итераций. Определение решений линейризованного уравнения Пуассона и уравнений неразрывности осуществляется внутренними итерационными методами. Для решения линейризованного уравнения Пуассона используется метод верхней релаксации [21], а для решения уравнений неразрывности в ППП «Альфа» реализованы релаксационный метод Федоренко [26], метод Булеева [27] и метод неполного разложения Холецкого с сопряженными градиентами (ICCG) [28]. Программы метода ICCG в двумерном и трехмерном случаях заимствованы из комплекса программ ELLDEC [29].

Для решения нестационарных задач используется полунейная, абсолютно устойчивая разностная схема первого порядка точности по времени [30]. Решение на временном слое $l+1$ в этой схеме осуществляется следующим образом. Вначале по известному значению потенциала φ^l из уравнений неразрывности определяются концентрации электронов и дырок n^{l+1} и p^{l+1} . С этими значениями концентраций решается уравнение неразрывности для полного тока, являющееся следствием уравнений (1)–(3):

$$\begin{aligned} \operatorname{div}((\mu_n n + \mu_p p) \nabla \varphi) = & -\frac{\partial}{\partial t} \Delta \varphi + \operatorname{div}(\mu_n \nabla n - \mu_p \nabla p) - \\ & - \operatorname{div}((\mu_n n - \mu_p p) \nabla \ln n_{ie}) - \operatorname{div}((\mu_n n + \mu_p p) \nabla \omega) \end{aligned} \quad (9)$$

— и определяется значение потенциала $\varphi^{l+1/2}$ на дробном шаге $l+1/2$. Окончательное значение потенциала φ^{l+1} затем находится из решения дополнительного уравнения типа Пуассона со специально выбранным параметром [31, 32]. Выбор этого параметра обеспечивает абсолютную устойчивость схемы и выполнение разностного аналога уравнения Пуассона на слое $l+1$ с точностью $O(\tau^3)$ (τ — величина шага по времени) [30]. Решение нестационарных задач осуществляется с автоматическим выбором шага по времени и контролем локальной погрешности.

Программная реализация. Все подпрограммы ППП «Альфа» написаны на языке Фортран-IV и реализованы на ЕС ЭВМ. Пакет организован по модульному принципу [33–35], что позволяет значительно облегчить работу с ним, и что самое главное, упрощает процедуру изменения и развития пакета. Более того, при таком подходе пользователь имеет возможность включить в пакет собственные модели подвижности, рекомбинации, эффектов сильного легирования и др., соблюдая определенные правила написания соответствующих подпрограмм. Для пакета на внешнем носителе создан архив для хранения результатов расчетов. Наличие архива позволяет организовать процедуру счета с продолжением при решении трудных задач, требующих больших затрат машинного времени. В этом случае результаты промежуточных расчетов, предварительно занесенные в архив, используются в дальнейшем в качестве начального приближения. Кроме того, при расчете вольт-амперных характеристик, а также при небольших вариациях исходных данных результаты предыдущего расчета, занесенные в архив, также могут использоваться в качестве начального приближения для последующих расчетов.

Для ППП «Альфа» разработан специализированный входной язык, на котором задается вся необходимая для проведения расчетов информация: разностная сетка, расположение контактов металл — полупроводник, напряжения на этих контактах и режим их изменения, времена жизни носителей заряда, коэффициенты рекомбинации Оже, модель эффектов

сильного легирования, режим обмена с внешним архивом и т. д. Эта информация обрабатывается специальными программами ввода и проверки, которые осуществляют контроль правильности вводимых данных и в случае наличия ошибок выдают диагностические сообщения. Наличие входного языка заметно облегчает работу с пакетом и позволяет проводить расчеты пользователю, минимально знакомому с основами численных методов решения уравнений в частных производных. Структура и возможности входного языка подробно изложены в [36].

Остановимся еще на одном вопросе, а именно на задании распределения легирующей примеси $N = N_d - N_a$. Предусмотреть в пакете задание распределения легирующей примеси для всех структур, встречающихся в практике проектирования интегральных схем, практически невозможно. Поэтому в ППП «Альфа» реализован другой подход. Для каждой конкретной структуры (или класса структур) пользователь должен, соблюдая определенные правила, написать подпрограмму DOPING, в которой по тем или иным аппроксимационным формулам вычисляется донорная и акцепторная примесь, причем параметры для этой подпрограммы могут быть заданы средствами входного языка. Если пользователь располагает пакетом программ, позволяющим вычислять распределение примеси на основе непосредственного моделирования технологического процесса, то с помощью подпрограммы DOPING осуществляется стыковка ППП «Альфа» с пакетом расчета легирующей примеси.

К недостаткам нынешней версии ППП «Альфа» следует отнести отсутствие подпрограмм автоматического построения сетки по пространственным переменным и подпрограмм графической обработки результатов расчетов.

Примеры расчетов. В качестве примера использования ППП «Альфа» приведем результаты численного моделирования И²Л структуры (рис. 1). Поверхностные концентрации легирующей примеси для этой структуры были следующими (см^{-3}): в эмиттере $5 \cdot 10^{19}$, в базе и инжекторе $5 \cdot 10^{18}$, в коллекторе $5 \cdot 10^{20}$, концентрация доноров в эмиттере $2 \cdot 10^{16}$. Характерные размеры (мкм): $x_1 = 0,6$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$, $L_x = 5$, $y_1 = 4$, $y_2 = 20$, $y_3 = 24$, $y_4 = 30$, $y_5 = 34$, $L_y = 44,6$. «Параметры сильного легирования» n_i и ω определялись путем предварительного решения квазиравновесной задачи [10—12]. Времена жизни носителей заряда задавались по формуле (7) с $\tau_{n0} = \tau_{p0} = 10^{-6}$ с, $N_0 = 10^{14}$ см^{-3} , $\delta = 0,5$, а коэффициенты рекомбинации Оже полагались $C_n = 1,7 \cdot 10^{-31}$ $\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$, $C_p = 1,2 \cdot 10^{-31}$ $\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$ [20]. Была проведена серия расчетов при следующих условиях: напряжения равнялись на инжекторе V_I и эмиттере $V_E = 0$, а на базе и в коллекторе V , причем величина V варьировалась от 0,55 до 0,825 В с шагом 0,025 В. Результаты расчетов вольт-амперной характеристики и зависимости коэффициента усиления β вертикального транзистора ($\beta = J_c/J_B$) от тока коллектора приведены на рис. 2 и 3. Расчеты проводились на неравномерной сетке, содержащей 34×47 узлов. Внешний итерационный процесс заканчивался, если относительное изменение потенциала на двух последующих внешних итерациях не превосходило 10^{-3} . Уравнения неразрывности решались методом ICCG. Для расчета одной точки вольт-амперной характеристики требовалось от 3 до 20 внешних итераций. Для расчета всей характеристики понадобилось 112 внешних итераций и 47,7 мин машинного времени на ЭВМ ЕС-1060. Помимо этого, были проведены еще два расчета. В первом величины приложенных напряжений полагались следующими: $V_I = 0,72$ В, $V_B = 0,7$ В, $V_C = 0,005$ В, $V_E = 0$. Вычисленные токи равнялись (А/см): $J_I = -0,717 \times 10^{-2}$, $J_B = -0,697 \cdot 10^{-2}$, $J_C = -386 \cdot 10^{-2}$, $J_E = 0,181 \cdot 10^{-1}$ (положительные токи вытекают, а отрицательные втекают в прибор). Для этого варианта потребовалось семь внешних итераций и 2,8 мин машинного времени. Во втором расчете $V_I = 0,72$ В, $V_B = 0,005$ В, $V_C = 0,7$ В, $V_E = 0$, а вычисленные токи равнялись (А/см): $J_I = -0,794 \cdot 10^{-2}$, $J_B = 0,143 \cdot 10^{-2}$, $J_C = 0,35 \cdot 10^{-6}$, $J_E = 0,649 \cdot 10^{-2}$. Для этого варианта потребовалось пятнадцать внешних итераций и 6,5 мин машинного времени.

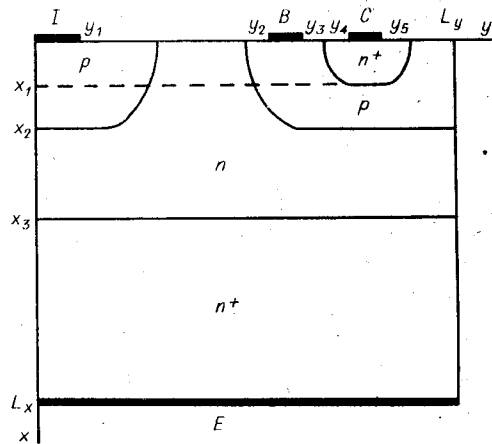


Рис. 1. Схематическое изображение структуры И²Л

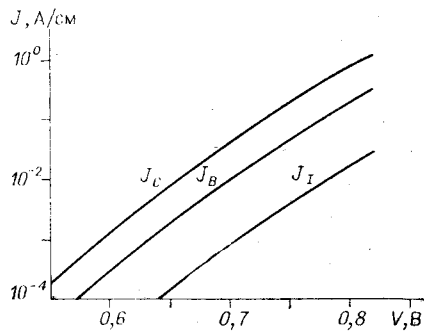


Рис. 2. Зависимость токов коллектора, базы и инжектора от V

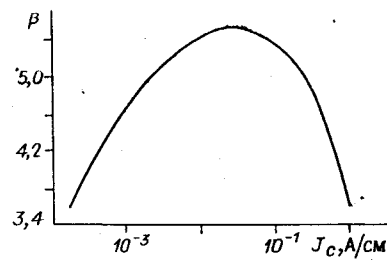


Рис. 3. Зависимость коэффициента усиления вертикального транзистора от плотности коллекторного тока

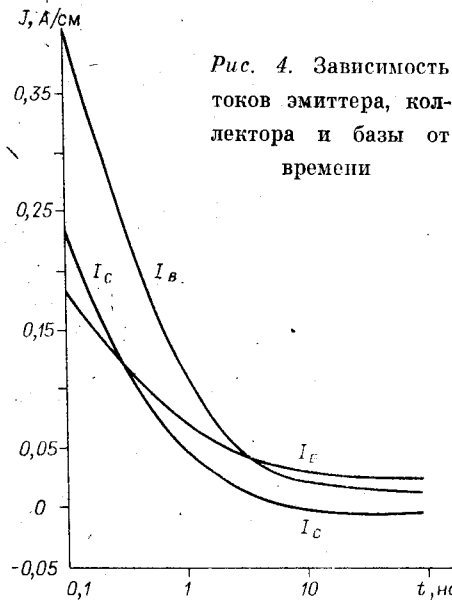


Рис. 4. Зависимость токов эмиттера, коллектора и базы от времени

Результаты расчета переходного процесса для этой структуры показаны на рис. 4. В качестве начального условия бралось решение стационарной задачи с $V_E = 0$, $V_I = 0,72$ В, $V_B = 0,005$ В, $V_C = 0,7$ В. В момент времени $t = 0$ значения V_B и V_C скачком изменялись до значений 0,7 и 0,005 В соответственно, и интегрирование продолжалось до $t = 100$ нс. Величина шага по времени выбиралась автоматически с контролем локальной погрешности. Заданная точность равнялась 10^{-2} . Потребовалось 375 шагов по времени и 3 ч машинного времени.

ЛИТЕРАТУРА

1. Reiser M. Computing methods in semiconductor problems.—Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 1974, N 10, p. 441—466.
2. Афонцев С. А., Григорьев Н. И., Кунилов В. А., Петров Г. В. Использование двумерных численных моделей для анализа и моделирования полупроводниковых приборов.—Зарубеж. радиоэлектроника, 1975, № 8.
3. Носов Ю. Р., Петросянец К. О., Шилин В. А. Математические модели элементов интегральной электроники.—М.: Сов. радио, 1976.
4. Engl W. L., Dirks H., Meinerzhagen B. Device modelling.—Proc. IEEE, 1983, v. 71, N 1, p. 10—33.
5. Fichtner W., Rose D. J., Bank R. E. Semiconductor device simulation.—IEEE Trans., 1983, v. ED-30, N 9, p. 1018—1030.
6. Van Roosbroeck W. Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors.—Bell System Techn. J., 1950, v. 29, p. 560—608.
7. De Mari A. An accurate numerical steady-state one-dimensional solution of the pn junction.—Sol.-St. Electron., 1968, v. 11, N 1, p. 33—58.
8. De Man H. J. The influence of heavy doping on the emitter efficiency of a bipolar transistor.—IEEE Trans., 1971, v. ED-18, N 10, p. 833—835.
9. Van Overstraeten R. J., De Man H. J., Mertens R. P. Transport equations in heavily doped silicon.—IEEE Trans., 1973, v. ED-20, N 3, p. 290—298.

10. Mock M. S. Transport equations in heavily doped silicon and current gain of a bipolar transistor.—Sol-St. Electron., 1973, v. 16, N 11, p. 1251—1259.
11. Польский Б. С., Римшанс Я. С. Метод расчета одномерных биполярных структур с учетом эффектов сильного легирования и статистики Ферми — Дирака.— Изв. вузов. Радиоэлектроника, 1982. Рукопись деп. в ВИНТИ, № 4273—82 Деп.
12. Римшанс Я. С. Моделирование эффективного сужения ширины запрещенной зоны сильнолегированного кремния с учетом электрон-дырочного экранирования.— Изв. АН ЛатвССР. Сер. ФТН, 1984, № 5.
13. Slotboom J. W., De Graaf H. C. Measurements of bandgap narrowing in silicon bipolar transistor.—Sol-St. Electron., 1976, v. 19, N 10, p. 857—862.
14. Wieder A. W. Emitter effects in shallow bipolar devices: measurements and consequences.—IEEE Trans., 1980, v. ED-27, N 8, p. 1402—1408.
15. Polsky B. S., Rimshans J. S. Two-dimensional numerical simulation of bipolar semiconductor devices taking into account heavy doping effects and Fermi statistics.—Sol-St. Electron., 1983, v. 26, N 4, p. 275—279.
16. Caughey D. M., Thomas R. E. Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field.—Proc. IEEE, 1967, v. 55, N 12, p. 2192—2193.
17. Shockley W., Read W. Statistics of the recombination of holes and electrons.—Phys. Rev., 1952, v. 87, p. 835—842.
18. Блекмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках.— М.: Мир, 1964.
19. Fossum J. G., Lee D. S. A physical model for the dependence of carrier life time on doping density in nondegenerate silicon.—Sol-St. Electron., 1982, v. 25, N 8, p. 741—747.
20. Tyagi M. S., Van Overstraeten R. E. Minority carrier recombination in heavily doped silicon.—Sol-St. Electron., 1983, v. 26, N 6, p. 577—597.
21. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.— М.: Наука, 1977.
22. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем.— М.: Наука, 1971.
23. Scharfetter D. L., Gummel H. K. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator.—IEEE Trans., 1969, v. ED-16, N 1, p. 64—77.
24. Gummel H. K. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady-state transistor calculations.—IEEE Trans., 1964, v. ED-11, N 10, p. 455—465.
25. Polsky B. S. On speeding-up of iteration convergence in semiconductor problems.—Sol-St. Electron., 1984, v. 27, N 2, p. 191—194.
26. Федоренко Р. П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений.— ЖВМ и МФ, 1961, т. 1, № 5.
27. Булеев Н. И. Метод неполной факторизации для решения двумерных и трехмерных уравнений типа диффузии.— ЖВМ и МФ, 1970, т. 10, № 4.
28. Meijerink J. A., Van der Vorst H. A. An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix.—Math. of Comp., 1977, v. 31, N 137, p. 148—162.
29. Богданова М. С., Голубева А. А., Капорин И. Е. и др. О комплексе программ для решения разностных краевых задач.— В кн.: Разностные методы математической физики. М.: МГУ, 1981.
30. Польский Б. С., Римшанс Я. С. Об одной разностной схеме для решения нестационарных задач теории полупроводниковых приборов.— В кн.: Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск: ВЦ; ИТПМ СО АН СССР, 1985, т. 16, № 4.
31. Польский Б. С., Римшанс Я. С. Численное моделирование переходных процессов в биполярных полупроводниковых приборах.— Изв. АН ЛатвССР. Сер. ФТН, 1978, № 4.
32. Polsky B. S., Rimshans J. S. Numerical simulation of transient processes in 2-D bipolar transistors.—Sol-St. Electron., 1981, v. 24, N 12, p. 1081—1085.
33. Коновалов А. Н., Яненко Н. Н. Модульный принцип построения программ как основа создания пакета прикладных программ для решения задач механики сплошной среды.— В кн.: Комплексы программ математической физики. Новосибирск: Наука, 1972.
34. Ильин В. П. Вопросы технологии пакетов программ для задач математической физики.— В кн.: Разработка пакетов прикладных программ. Новосибирск: Наука, 1982.
35. Карпов В. Я., Корягин Д. А., Самарский А. А. Принципы разработки пакетов прикладных программ для задач математической физики.— ЖВМ и МФ, 1978, т. 18, № 2.
36. Польский Б. С., Похвалина Л. С., Римшанс Я. С. Пакет прикладных программ «Альфа-СД83» для моделирования стационарных процессов в биполярных полупроводниковых приборах в двумерном приближении.— РФАП ЛатвССР, 1984, Инв. № ИМ0032.

Поступила в редакцию 14 октября 1985 г.