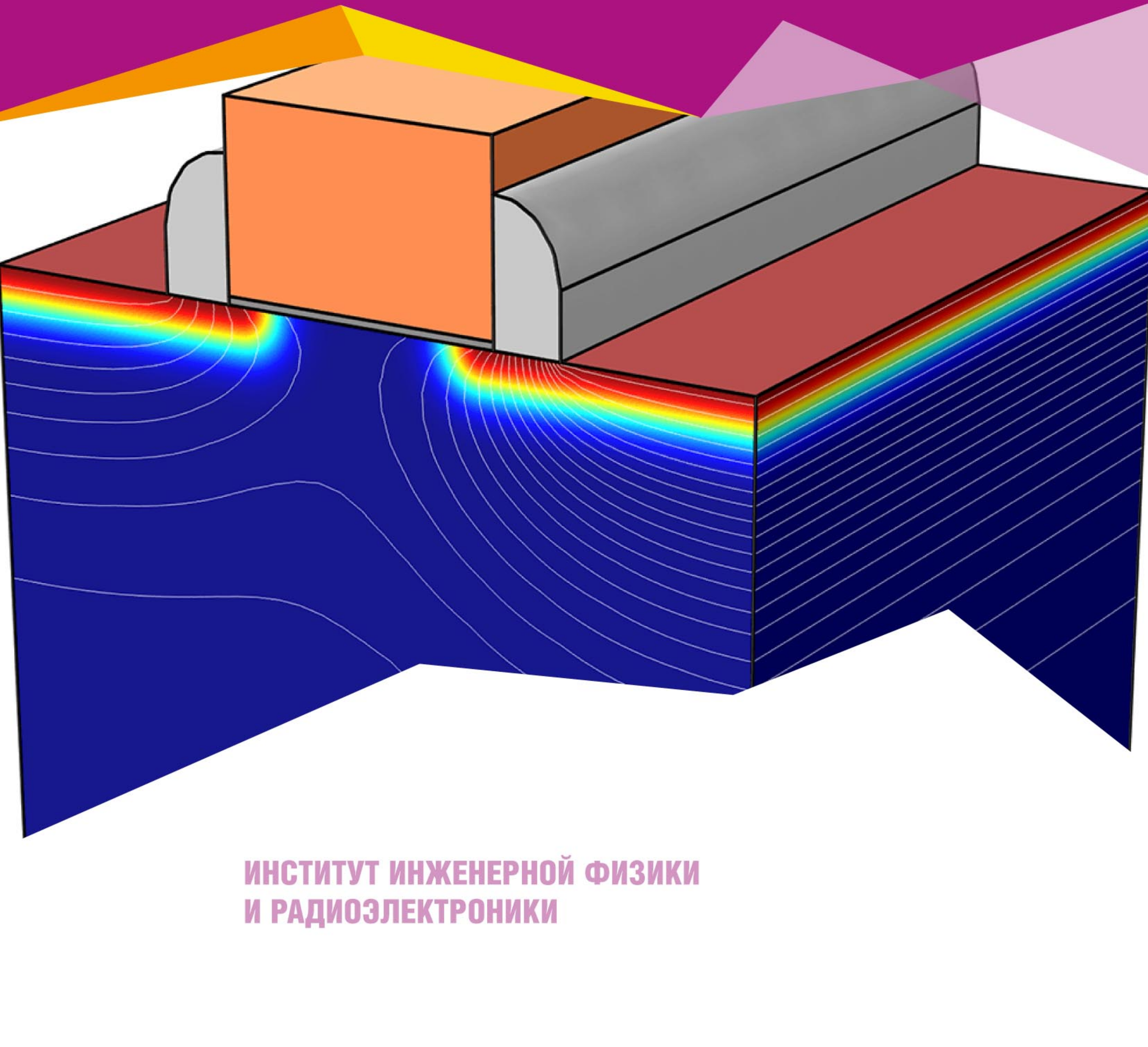
СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
SIBERIAN FEDERAL UNIVERSITY

А. А. Левицкий, П. С. Маринушкин, С. И. Трегубов

ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТРОЙСТВ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Математические модели и программные средства

Учебное пособие



ИНСТИТУТ ИНЖЕНЕРНОЙ ФИЗИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 621.38.001.573(07)
ББК 32.844.1-2я73
Л371

Р е ц е н з е н т ы:

Ф. А. Барон, Ph. D., заместитель главного технолога, АО «Научно-производственное предприятие “Радиосвязь”»;

В. С. Засемков, кандидат технических наук, доцент кафедры радиоэлектронной техники информационных систем ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет»

Левицкий, А. А.

Л371 Приборно-технологическое моделирование устройств микро- и наноэлектроники. Математические модели и программные средства : учеб. пособие / А. А. Левицкий, П. С. Маринушкин, С. И. Трегубов. – Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2020. – 68 с.

ISBN 978-5-7638-4263-0

Рассмотрены математические модели, которые описывают приборные полупроводниковые структуры, технологические процессы их создания и программные средства, обеспечивающие приборно-технологическое моделирование.

Предназначено для магистрантов направления подготовки 110404 «Электроника и наноэлектроника». Может быть рекомендовано студентам всех специальностей и направлений укрупненной группы 110000 «Электроника, радиотехника и системы связи».

Электронный вариант издания см.:
http://catalog.sfu-kras.ru

УДК 621.38.001.573(07)
ББК 32.844.1-2я73

ISBN 978-5-7638-4263-0

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ 3

1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ 6
   1.1. Модели динамики электронов в полупроводниках 6
   1.2. Описание электромагнитных процессов в полупроводниках 8
   1.3. Диффузионно-дрейфовая и гидродинамическая модели 11
   1.4. Одномерная численная модель однородной полупроводниковой структуры 16

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ 26
   2.1. Модель диффузии примесей в полупроводник 26
   2.2. Модель окисления полупроводника 30
   2.3. Модель ионной имплантации 34

3. СИСТЕМЫ ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 37
   3.1. Synopsys Sentaurus TCAD 37
   3.2. Silvaco TCAD 42
   3.3. Devsim 46
   3.4. MicroTec 50
   3.5. Модуль Semiconductor системы COMSOL Multiphysics 56

ЗАКЛЮЧЕНИЕ 60

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК 61

Г л а в а 1

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ

1.1. Модели динамики электронов в полупроводниках

При моделировании полупроводниковых приборов могут использоваться различные подходы: статистическое описание на основе микроскопического описания процесса переноса отдельных носителей заряда (метод Монте-Карло, метод частиц) или макроскопические модели, использующие системы дифференциальных уравнений в частных производных [21; 22].

Возможность применения той или иной модели определяется необходимостью учета неравновесности носителей, характерных особенностей структуры (например наличие гетероперехода), квантовых эффектов и других факторов.

Кинетическое уравнение. Один из подходов к исследованию транспортных свойств неравновесных систем – это использование кинетического уравнения Больцмана, адекватно описывающего кинетические явления в разреженном электронном газе в состояниях, близких к термодинамическому равновесию [22–25]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla_r f + \frac{1}{h}\left(\boldsymbol{F} \cdot \nabla_p f\right) = J\left[f\right], \tag{1.1}$$

где $f\left(\vec{r},\vec{k}\right)$ – функция распределения частиц; $\vec{r}$ и $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ – координата и квазиимпульс частиц ($\vec{k}$ – волновой вектор); $\vec{v} = d\vec{r}/dt$ – скорость носителей заряда; h – постоянная Планка; $\vec{F} = \hbar\, \partial\vec{k}/\partial t$ – обобщенная сила, действующая на носители заряда в кристалле; $J\left[f\right]$ – интеграл столкновений.

С учетом действия электрического $\boldsymbol{E}$ и магнитного $\boldsymbol{B}$ поля на частицу с зарядом q и эффективной массой m, кинетическое уравнение (1.1) можно записать в следующем виде [26]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla_r f + \frac{q}{m}\left(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}\right) \cdot \nabla_p f = J[f]. \tag{1.2}$$

Аналитическое решение данного интегро-дифференциального уравнения представляет собой трудную задачу и может быть найдено только в тривиальных случаях. Трудность решения задачи обусловлена в том числе тем, что интеграл столкновений $J[f]$ является в общем случае нелинейным по функциям распределения. Поиск решения особенно затруднителен в случае моделирования структур с пространственными неоднородностями ($\nabla_r f \neq 0$).

Для моделирования полупроводниковой структуры фундаментальная система уравнений помимо кинетического уравнения включает уравнение Пуассона и уравнения непрерывности для носителей заряда.

Вместе с тем рассчитанные на основе кинетического уравнения функции распределения для электронов и дырок полностью определяют поведение носителей в полупроводниковой структуре. Вычисление моментов кинетического уравнения (как числовых характеристик распределений случайных величин) позволяет построить статистическое описание и выполнить расчет динамических характеристик приборов, включая субмикронные структуры, исследовать их шумовые свойства.

Локальные приближения. Решение кинетического уравнения может рассматриваться в различных физических ситуациях, соответствующих гидродинамическому, квазигидродинамическому и локально-полевому приближению [22; 26].

Выбор приближения зависит от того, насколько существенную роль играет вклад от столкновений носителей заряда. С уменьшением концентрации электронов n и, соответственно снижением частоты межэлектронных столкновений, осуществляется последовательный переход от гидродинамического, к квазигидродинамическому и далее к локально-полевому приближению.

На локальной зависимости плотности тока от электрического поля E и концентрации носителей заряда строится широко применяемое диффузионно-дрейфовое приближение. Диффузионно-дрейфовая модель формируется на основе уравнения Пуассона для электрической индукции и объемного заряда, уравнения непрерывности, связывающего электрический ток и заряд, а также уравнений переноса для электронов и дырок. Ток проводимости складывается из дрейфовой и диффузионной составляющих, которые также зависят от поля E

и концентрации носителей заряда. Дрейфовая часть тока учитывает подвижность носителей заряда под действием приложенного электрического поля, а диффузионная – движение носителей, обусловленное градиентом их концентрации. Когда диффузионной составляющей тока можно пренебречь, используют дрейфовое приближение, в рамках которого не учитывается влияние диффузии.

В неравновесной ситуации диффузионно-дрейфовое приближение не позволяет моделировать поведение носителей заряда и вследствие нелокальной зависимости скорости дрейфа носителей от электрического поля требуется принимать во внимание зависимость подвижности электронов и дырок от их энергии (температуры).

В этом случае фундаментальную систему уравнений для моделирования необходимо дополнить уравнениями баланса энергии носителей заряда, то есть перейти к модели, соответствующей гидродинамическому приближению (или температурной модели).

Если диффузионно-дрейфовая модель хорошо работает для относительно протяженных полупроводниковых структур, то для малоразмерных (субмикронных) структур необходимо переходить к гидродинамическому приближению, учитывающему инерционность разогрева носителей заряда. Учет нелокальных эффектов с помощью гидродинамического приближения обеспечивает решение практически важных задач, к которым относятся моделирование субмикронных структур, исследование эффекта всплеска скорости дрейфа носителей заряда.

Фундаментальная система уравнений, используемая в диффузионно-дрейфовой модели, имеет наиболее простой вид. Благодаря этому она может использоваться как исходное приближение при рассмотрении процессов в полупроводниковых приборных структурах. Однако в связи с уменьшением технологических норм для интегральных схем и, соответственно, размеров приборных структур область применения этой модели непрерывно сужается [9].

Подробнее диффузионно-дрейфовая и гидродинамическая модели будут рассмотрены ниже.

Моделирование квантовых эффектов. Моделирование полупроводниковых приборов, представляющих собой низкоразмерные структуры, требует особого подхода. К таким структурам относятся квантовые ямы, сверхрешетки (фотонные кристаллы), гетероструктуры, пористые полупроводники и др. Поведение носителей заряда в таких структурах определяют такие квантово-механические явления: квантовое ограничение, баллистический транспорт и квантовая интерференция, туннелирование.

К числу приборов, использующих квантовые эффекты, относятся, например, транзисторы с высокой подвижностью электронов (High-electron-mobility transistor – HEMT) и биполярные транзисторы с гетеропереходом, полупроводниковые лазеры.

Рассмотрение подходов к моделированию подобных устройств выходит за рамки данного пособия.

1.2. Описание электромагнитных процессов в полупроводниках

Численное моделирование полупроводниковых приборов основывается на системе уравнений в частных производных, описывающих статические и динамические процессы, обусловленные влиянием на носители заряда внешних полей [2; 21]. Часть соотношений (уравнение Пуассона и уравнение прерывности) в неявном виде представлено в уравнениях Максвелла, а уравнения переноса, описывающие материальные свойства полупроводниковой среды, – вычислением моментов кинетического уравнения.

Уравнения электромагнитного поля. В качестве основы для построения модели воспользуемся уравнениями Максвелла в дифференциальной форме:

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\partial \boldsymbol{B} / \partial t; \tag{1.3}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} + \partial \boldsymbol{D} / \partial t; \tag{1.4}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho; \tag{1.5}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0. \tag{1.6}$$

В соответствии с этими уравнениями электрическое $\boldsymbol{E}$ и магнитное $\boldsymbol{H}$ поля, электрическая $\boldsymbol{D}$ и магнитная $\boldsymbol{B}$ индукции, а также плотности электрического заряда ρ и тока $\boldsymbol{j}$ связаны между собой в любой точке пространства в любой момент времени t. Здесь и далее все величины, обозначенные полужирным шрифтом, как, например, оператор «набла» («гамильтониан») $\nabla = \boldsymbol{e}_x \partial/\partial x + \boldsymbol{e}_y \partial/\partial y + \boldsymbol{e}_z \partial/\partial z$, являются векторами.