

# Численная модель полупроводниковых приборов с учетом тепловых эффектов

В. Романо<sup>1</sup>, А.С. Русаков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Università di Catania, Италия

<sup>2</sup> Bergische University of Wuppertal, Германия, rusakov@inm.ras.ru

**Аннотация** — В работе представлена новая численная модель полупроводниковых приборов, учитывающая тепловые эффекты, возникающие в кристаллической решетке. Уравнения модели получены с помощью принципа максимальной энтропии. В работе приведены результаты численных экспериментов по расчету установившегося решения в МОП транзисторе, а также расчеты электронной схемы, включающей модельный транзистор.

**Ключевые слова** — принцип максимальной энтропии, электротепловое моделирование, модель полупроводников

## I. ВВЕДЕНИЕ

Уменьшение размеров современных транзисторов и увеличение плотности элементов на подложке приводит к необходимости более точного учета тепловых эффектов, влияющих, в том числе, и на электрические параметры схемы [1]. Современные коммерческие программы анализа электронных схем обычно моделируют полупроводниковые приборы с помощью аналитических функций или компактных моделей, которые позволяют быстро оценивать отклик прибора, но могут приводить к неточным результатам для современных технологий. Трудно учесть с помощью компактных моделей разогрев кристаллической решетки, влияние тепловых эффектов на электрические параметры данного транзистора и его влияние на соседние приборы. Поэтому необходимы новые подходы для анализа и верификации электронных схем и, на определенных этапах цикла разработки, таким подходом может стать совместное приборно-схемотехническое моделирование, достаточно точно учитывающее влияние тепловых эффектов. На сегодняшний день предложено несколько эвристических макроскопических моделей разогрева полупроводниковых приборов. Они отличаются между собой коэффициентом теплопроводности и правой частью в уравнении баланса энергии кристаллической решетки [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8].

В нашей работе представлена новая двумерная вы-

числительная модель для совместного электротеплового расчета полупроводниковых приборов. Уравнения модели получены в работах [9, 10] с помощью принципа максимальной энтропии ("maximum entropy principle" или МЕР) из уравнения Больцмана, описывающего электронно-фононное взаимодействие. Принцип максимальной энтропии позволяет замкнуть систему уравнений без использования дополнительных эвристик. В модели электроны описаны как система из 8 моментов. Оптические фононы описываются распределением Бозе-Эйнштейна, а для аппроксимации поведения акустических фононов используется 9 моментов, полученных из МЕР. Все необходимые детали можно найти в работе [9]. В работе [11, 12] показано, что при постоянной температуре кристаллической решетки модель полученная из МЕР оказывается более точной, чем другие стандартные модели. В нашей работе приведены расчеты двумерной модели наноразмерного МОП транзистора. Представлены также результаты совместного электротеплового приборно-схемотехнического расчета схемы инвертора и исследовано влияние разогрева на характеристики схемы.

## II. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Уравнения математической модели имеют следующий вид:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}(n \mathbf{V}) = -R, \quad (1)$$

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

$$\frac{\partial(nW)}{\partial t} + \operatorname{div}(n \mathbf{S}) + nq \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = nC_W, \quad (3)$$

$$\rho_{cv} \frac{\partial T_L}{\partial t} - \operatorname{div}[K(T_L) \nabla T_L] = H, \quad (4)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi, \quad \epsilon \Delta \phi = -q(N_D - N_A - n + p). \quad (5)$$

$n$  и  $p$  – плотность электронов и дырок,  $W$  – энергия электронов,  $T_L$  – температура кристаллической решетки,  $\phi$  – потенциал и  $\mathbf{E} = -\nabla \phi$  электрическое поле.  $N_D$  and  $N_A$  – плотность доноров и акцепторов, соответственно (распределение доноров и акцепторов –

известные функции).  $q$  – элементарный электрический заряд,  $\rho$  – плотность кремния,  $c_V$  – теплоемкость,  $C_W$  – источник энергии, имеющий вид  $C_W = -\frac{W - W_0}{\tau_W}$ , где  $W = 3/2k_B T_L$  и  $\tau_W(W)$  время релаксации,  $k_B$  – постоянная Больцмана и  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость,  $V_p$  – скорость дырок.

Уравнения замыкания для скорости электронов  $\mathbf{V}$ , потока энергии  $\mathbf{S}$ , теплопроводности  $K(T_L)$  и источника энергии решетки  $H$  получены в [9, 13], используя принцип максимальной энтропии. Уравнение для дырок получено с помощью дрейфо-диффузионного приближения.

В МЕР модели уравнения для скорости электронов  $\mathbf{V}$  и потока энергии  $\mathbf{S}$  имеют вид:

$$\mathbf{V} = D_{11}(W, T_L) \nabla \log n + D_{12}(W, T_L) \nabla W + D_{13}(W, T_L) \nabla \phi, \quad (6)$$

$$\mathbf{S} = D_{21}(W, T_L) \nabla \log n + D_{22}(W, T_L) \nabla W + D_{23}(W, T_L) \nabla \phi, \quad (7)$$

где

$$D_{11}(W, T_L) = D_V \left[ c_{12}^{(e)} F - c_{22}^{(e)} U \right], \quad (8)$$

$$D_{12}(W, T_L) = D_V \left[ c_{12}^{(e)} F' - c_{22}^{(e)} U' \right], \quad (9)$$

$$D_{13}(W, T_L) = D_V \left[ c_{22}^{(e)} e - c_{12}^{(e)} eG \right], \quad (10)$$

$$D_V(W, T_L) = \frac{1}{c_{12}^{(e)} c_{21}^{(e)} - c_{22}^{(e)} c_{11}^{(e)}}, \quad (11)$$

$$D_{21}(W, T_L) = D_S \left[ c_{11}^{(e)} F - c_{21}^{(e)} U \right], \quad (12)$$

$$D_{22}(W, T_L) = D_S \left[ c_{11}^{(e)} F' - c_{21}^{(e)} U' \right], \quad (13)$$

$$D_{23}(W, T_L) = D_S \left[ c_{21}^{(e)} e - c_{11}^{(e)} eG \right], \quad (14)$$

$$D_S(W, T_L) = \frac{1}{c_{22}^{(e)} c_{11}^{(e)} - c_{12}^{(e)} c_{21}^{(e)}}. \quad (15)$$

Коэффициенты  $c_{ij}^{(e)}$  зависят от  $W$  and  $T_L$  (см. [9]). В нашей работе мы используем упрощение, вычисляя их только при  $T_L = 300$  К.

Уравнение для источника энергии фононов имеет вид:

$$H = -(1 + P_S) n C_W + P_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}, \quad (16)$$

где  $P_S = -c^2 \tau_R c_{12}^{(p)}$ ,  $\tau_R$  – время релаксации фононов. В работах [9, 13] используется более общий вид для  $H$ , но для анализа стационарных процессов упрощенный вид  $H$  не приносит дополнительной ошибки.  $R$  описывает процесс генерации и рекомбинации носителей (см., например, [15]), который можно условно разделить на два основных:  $R = R^{SRH} + R^{AU}$ .

$$R^{SRH} = (np - n_i n_i) / (\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)),$$

$$R^{AU} = (C_{cn}n + C_{cp}p)(np - n_i n_i).$$

Мы используем значения  $C_{cn} = 2.8 \times 10^{-31} \text{ см}^6 \text{ с}^{-1}$  и  $C_{cp} = 9.9 \times 10^{-32} \text{ см}^6 \text{ с}^{-1}$ . В наших численных экспериментах собственная концентрация  $n_1 = p_1 = n_i$ ,  $n_i$ . Уравнения для  $\tau_p$  и  $\tau_n$  имеют вид [15]:

$$\tau_n = \frac{\tau_{n0}}{1 + \frac{N_D(x) + N_A(x)}{N_n^{ref}}}, \quad \tau_p = \frac{\tau_{p0}}{1 + \frac{N_D(x) + N_A(x)}{N_p^{ref}}}, \quad (17)$$

где  $\tau_{n0} = 3.95 \times 10^{-4} \text{ с}$ ,  $\tau_{p0} = 3.25 \times 10^{-5} \text{ с}$ ,  $N_n^{ref} = N_p^{ref} = 7.1 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .

На контактах стока и истока ставятся следующие граничные условия:  $-k_L \frac{\partial T_L}{\partial n} = R_{th}^{-1}(T_L - T_{env})$ ,  $R_{th}$  – тепловое сопротивление контакта,  $T_{env}$  – внешняя температура. На боковых границах расчетной области и на границе с оксидом для температуры мы используем граничные условия нулевого потока. На подложке ставятся граничные условия Дирихле. Энергия электронов на контактах транзистора устанавливается равной энергии решетки. Граничные условия для напряжения, концентраций носителей и остальные, необходимые для решения уравнений модели, подробно описаны в [11].

### III. МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МОДЕЛИ

В нашей задаче температура кристаллической решетки  $T_L$  изменяется гораздо медленнее, чем другие переменные. Например, типичное время релаксации температуры в наших расчетах несколько тысяч пикосекунд, а для других переменных время релаксации порядка нескольких пикосекунд. Мы используем это свойство задачи, применяя вариант многоскоростной схемы интегрирования [16, 17], которая является достаточно популярной для решения задачи совместного электро-теплового моделирования электронных схем [18].

Для анализа временного отклика мы решаем уравнения модели, применяя следующую схему интегрирования по времени:

- Этап 1. Решаются уравнения баланса для электронов и дырок при фиксированной температуре решетки, рассчитанной на предыдущем шаге.

$$\frac{\partial \mathcal{U}^k}{\partial t} + F(\mathcal{U}^k, \phi^{k-1}, T_L^{k-1}) = 0, \quad (18)$$

где  $\mathcal{U} = (n, p, W, \phi)$ , where  $k = 1, \dots, N$  номер интервала интегрирования  $[t_{k-1}, t_k]$ ,  $t_k = t_{k-1} + \Delta t$ ,  $\Delta t$  – шаг синхронизации интегрирования.

- Этап 2. Решаются уравнения баланса энергии кристаллической решетки с  $n$  и  $W$ , полученными на первом этапе:

$$\rho_{cV} \frac{\partial T_L^k}{\partial t} - \text{div} [K(T_L^k) \nabla T_L] = H(\mathcal{U}^k, T_L^k). \quad (19)$$

На первом и втором этапе используются разные шаги по времени для интегрирования на достаточно большом интервале  $[t_{k-1}, t_k]$ . Обычно мы можем без потери точности использовать в 100 раз больший шаг по времени для решения (19), чем для (18).

Последовательность таких этапов может быть также рассмотрена как последовательность шагов метода расщепления [19] с шагом  $\Delta t$ , и мы можем ожидать от многоскоростной схемы интегрирования, которую мы используем, первый порядок аппроксимации по времени. Численный метод для решения уравнений на шаге 1 основан на методе экспоненциальной подгонки, так же как в итерационной схеме Гуммеля. Для этой задачи явная схема интегрирования с постоянным шагом оказывается достаточно эффективной и позволяет обойти алгоритмические трудности, обусловленные высокой степенью нелинейности уравнений [11]. Уравнения модели аппроксимируются по пространству на регулярной сетке. Детали алгоритма решения приведены в работе [11].

Для решения уравнения баланса энергии кристаллической решетки (19) используется метод расщепления по пространственным координатам [19]. Уравнения аппроксимируются с помощью неявной схемы по времени и трехточечного шаблона по пространственной координате по каждому из направлений. Полученная система линейных алгебраических уравнений может быть быстро решена с помощью метода прогонки. Важно отметить, что использование неявной схемы по времени для решения (19) позволяет значительно ускорить общее время решения.

#### IV. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ТЕПЛОВЫХ ЭФФЕКТОВ В МОП ТРАНЗИСТОРЕ

В этой секции представлены результаты численных расчетов модели МОП транзистора (1)-(5), которая получена из принципа максимальной энтропии. Приведены результаты расчетов схемы инвертора, включающей транзистор с шириной затвора 45 нм, описываемый нашей моделью. При расчетах уединенного транзистора мы анализируем устоявшееся решение и временной отклик для схемы инвертора.

В численных расчетах мы моделируем коэффициент теплопроводности как  $K(T_L) = 1.5486 (T_L/300\text{K})^{-4/3}$  В А/см К, где  $c_V = 703 \text{ м}^2/\text{с}^2 \text{ К}$  ([15]), температура окружающей среды  $T_{env}$  принимается равной 300 К. Подвижность дырок равна  $500 \text{ см}^2/\text{В с}$ .

Конфигурация транзистора приведена на рис. 1. Длина канала равна 50 нм, длина затвора 45 нм. Длины контактов стока и истока 25 нм, глубина легирования равна 100 нм. Толщина оксида принята равной 5 нм, а толщина подложки 400 нм. В наших расчетах тепловое сопротивление контактов выбрано таким же,

как в работе [14]:  $R_{th} = 10^{-8} \text{ К м}^2/\text{Ватт}$ . Профиль легирования имеет вид:

$$N_D(x) - N_A(x) = \begin{cases} 10^{17} \text{ см}^{-3} \text{ в } n^+ \text{ области} \\ -10^{14} \text{ см}^{-3} \text{ в } p \text{ области} \end{cases} \quad (20)$$

Напряжение на затворе равно  $V_{DG} = 0.8 \text{ В}$ .

Установившееся решение для энергии и плотности электронов и электростатического потенциала имеет такую же качественную структуру, как при постоянной температуре  $T_L$  (см. ,например, [11]), что показано на рис. 2-4.

На рис. 5 приведена температура решетки, которая в большей части прибора существенно выше, чем температура  $T_{env}$ . В области рядом с подзатворным диэлектриком, где достигается максимум энергии электронов, температура достигает более чем 400 К. Этот эффект, который важно учитывать при проектировании наноразмерных транзисторов, обычно не наблюдается при характерных размерах приборов больше чем 1 микрон. При уменьшении технологических норм, разогрев транзистора существенно влияет на вольт-амперную характеристику прибора. На рис. 6 приведены вольт-амперные характеристики моделируемого транзистора с  $n_+ = 10^{17} \text{ см}^{-3}$  с учетом и без учета разогрева решетки. При увеличении электрического поля увеличивается разница между характерными кривыми, полученными при постоянной и вычисляемой температуре решетки  $T_L$ . На рис. 7 приведены значения температуры решетки при различных значениях теплового сопротивления  $R_{th}$ , который зависит от свойств материалов контактов и от технологического процесса производства электронной схемы. Расчет показывает важность оценки этого параметра для изучения нагрева электронных схем.

Для анализа поведения транзистора в окружении электрической схемы мы промоделировали схему инвертора, используя нашу модель транзистора. На рис. 8 приведены параметры схемы. Входное напряжение на затворе (в вольтах)  $V_{in} = 0.3 \cos(\omega t) + 0.5$ , с частотой  $\omega = 2\pi \cdot 10^9 \text{ рад/с}$ . Напряжение питания  $V_{dd} = 1 \text{ В}$ . Нагрузочная емкость  $C = 0.1 \text{ фФ}$  и  $R = 2 \cdot 10^3 \text{ Ом}$ . Ширина транзистора равна 200 нм. Используя м узловой анализ, для выходного напряжения  $V_{out}$  получим следующее уравнение:

$$C \frac{dV_{out}}{dt} + \frac{V_{out} - V_{dd}}{R} + j(V_{in}, V_{out}, t) = 0, \quad (21)$$

где ток через транзистор  $j(V_{in}, V_{out}, t)$  вычисляется с помощью уравнений модели. Детальное описание алгоритмов совместного приборно-схемотехнического моделирования можно найти, например, в [14]. Выходное напряжение, полученное с учетом и без учета разогрева решетки, вместе со значением максимальной температуры в приборе показаны на рис. 9. Мак-

симальное значение температуры решетки в транзисторе не достигает пиковых 400 К, в отличие от расчетов установившегося режима уединенного транзистора. Это объясняется меньшим значением среднего напряжения на затворе и, следовательно, меньшим значением среднего электрического поля. Несмотря на это, выходное напряжение заметно изменяется, что обусловлено повышением температуры кристаллической решетки.

#### В. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлена новая численная модель полупроводниковых приборов, учитывающая тепловые эффекты, возникающие в кристаллической решетке. Уравнения модели получены из принципа максимальной энтропии. Проведены численные эксперименты по моделированию установившегося решения в транзисторе и влияния временного отклика электрической схемы с учетом разогрева транзистора. Благодаря использованию многоскоростных методов интегрирования, метода расщепления и неявных схем интегрирования, удается получить решение модели с учетом тепловых эффектов фактически без потери быстродействия, в сравнении с исходным алгоритмом, не учитывающим переменную температуру кристаллической решетки.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] К. О. Петросянц, Тепловое моделирование компонентов МЭС: от субмикронных элементов СБИС до сложных электронных блоков // Микроэлектронные системы. - 2008.
- [2] S. P. Gaur and D. H. Navon, Two-dimensional carrier flow in a transistor structure under nonisothermal conditions // IEEE trans. Electron. Devices. 1976. ED-23. P. 50–57.
- [3] M. S. Adler, Accurate calculations of the forward drop and power dissipation in thyristors // IEEE Trans. Electron. Devices. 1979. ED-25. P. 16–22.
- [4] A. Chrysosafis and W. Love, A computer-aided analysis of one dimensional thermal transient in n-p-n power transistors // Solid-State-Electron. 1978. V. 22. P. 249–256.
- [5] G. Wachutka, Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modeling // IEEE Trans. on Computer-Aided Design. 1990. V. 9. P. 1141–1149.
- [6] R. Stratton, Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers // Phys. Rev. 1962. V. 126. P. 2002–2014.
- [7] D. Chen, E. C. Kan, U. Ravaioli, C-W. Shu, R. Dutton. An improved energy-transport model including nonparabolicity and non-maxwellian distribution effects. IEEE on Electron Device Letters. 1992. V. 13. P. 26–28.
- [8] E. Lyumkis, B. Polsky, A. Shir and P. Visocky, Transient semiconductor device simulation including energy balance equation // Compel. 1992. V. 11. P. 311–325.
- [9] V. Romano and M. Zwierz, Electron-phonon hydrodynamical model for semiconductors // preprint. 2008.
- [10] V. Romano, Non parabolic band hydrodynamical model of silicon semiconductors and simulation of electron devices // Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2001. V. 24.

- [11] V. Romano, 2D numerical simulation of the MEP energy-transport model with a finite difference scheme // J. Comp. Physics. 2007. V. 221. P. 439–468.
- [12] A. Marrocco, A.M. Anile, V. Romano and J. M. Sellier, 2D numerical simulation of the MEP energy-transport model with a mixed finite elements scheme // J. Computational Electronics. 2005. V. 4. P. 231–259.
- [13] V. Romano and C. Scordia, Simulations of an electron-phonon hydrodynamical model based on the maximum entropy principle // Proceedings of the 7th Conference on Scientific Computing in Electrical Engineering. - 2008.
- [14] M. Brunk and A. Jüngel, Numerical coupling of electric circuit equations and energy-transport models for semiconductors // SIAM J. Sci. Comput. 2008. V. 30. P. 873–894.
- [15] S. Selberherr, Analysis and simulation of semiconductor devices. Wien - New York, Springer-Verlag. 1984.
- [16] C.W. Gear, R.R. Wells, Multirate linear multistep methods // BIT. 1984. V. 24. P. 484–502.
- [17] M. Guenther, P. Rentrop, Multirate ROW methods and latency of electric circuits // Applied Numerical Mathematics. 1993. V. 13, P. 83–102.
- [18] A. Bartel, M. Guenther, Multirate co-simulation of first order thermal models in electric circuit design // in Scientific Computing in Electrical Engineering - Proceedings SCEE 2002, W. Schilders et al. (eds.). Springer, Berlin. 2002. P. 23–28.
- [19] G.I. Marchuk, Splitting and Alternating Direction Method // In Handbook of Numerical Analysis. 1990. V. 1. P. 197–462.

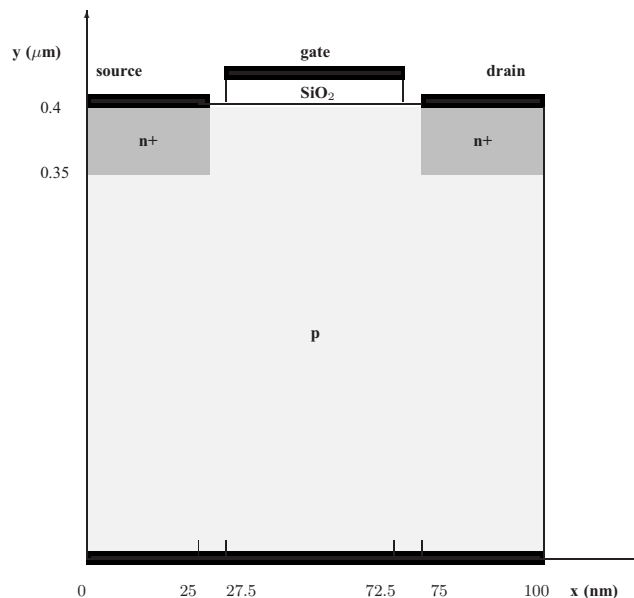
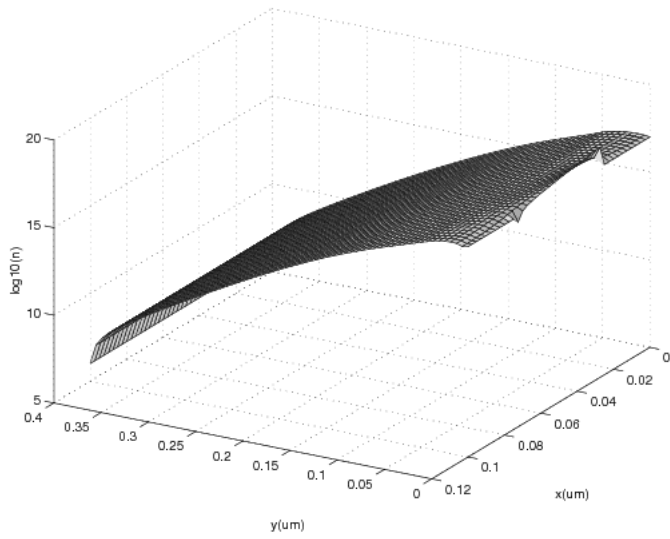
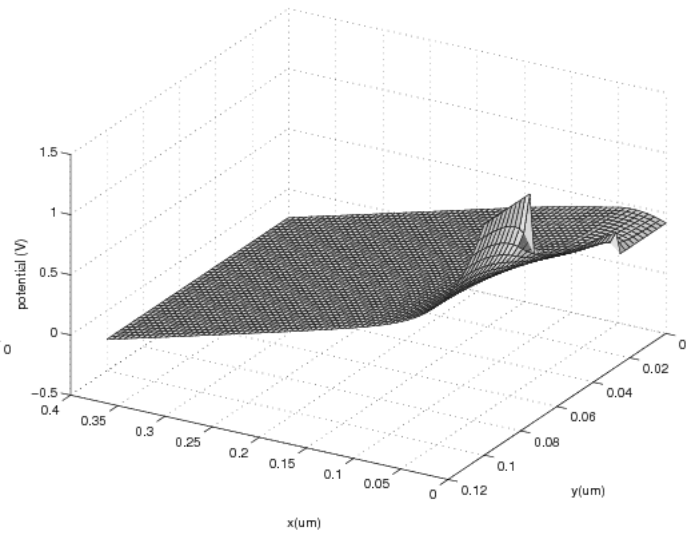


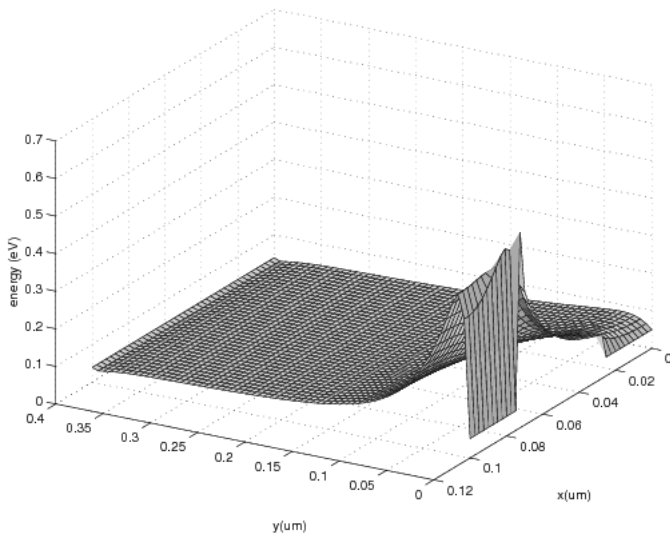
Рис. 1. Конфигурация модельного МОП транзистора



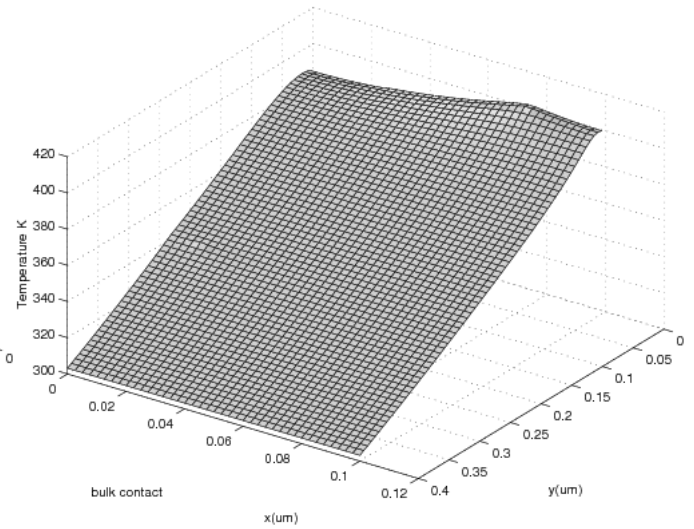
**Рис. 2. Плотность электронов в логарифмическом масштабе**



**Рис. 4. Напряжение в транзисторе**



**Рис. 3. Энергия электронов**



**Рис. 5. Температура в транзисторе**

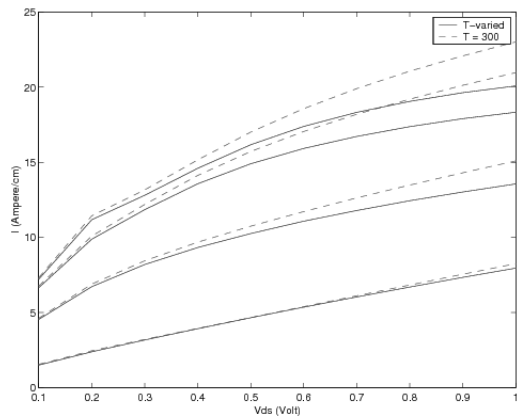


Рис. 6. Ток через транзистор при постоянной и вычисленной температуре  $n_+ = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $R_{th} = 10^{-8}$ .  $V_{DG} = 0.4, 0.6, 0.8, 0.9 \text{ В}$ . Ток увеличивается при увеличении напряжения  $V_{DG}$

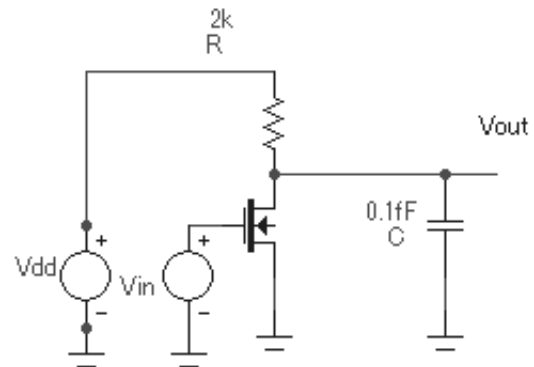


Рис. 8. Схема инвертора для расчета переходного процесса в транзисторе

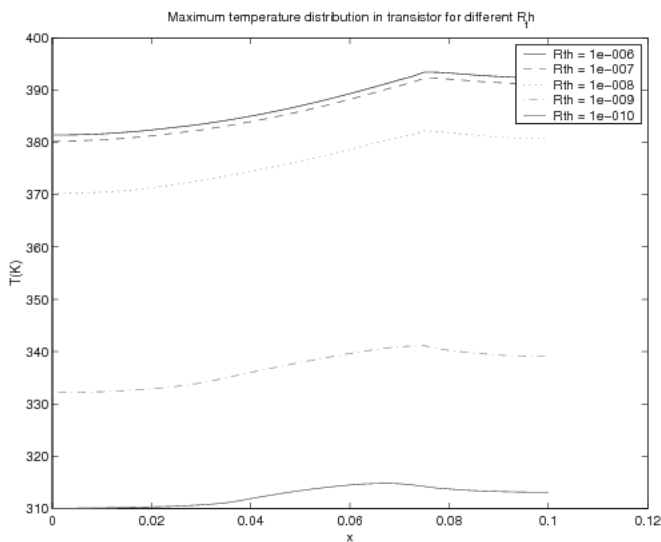


Рис. 7. Максимальная температура в транзисторе при разных значения  $R_{th}$

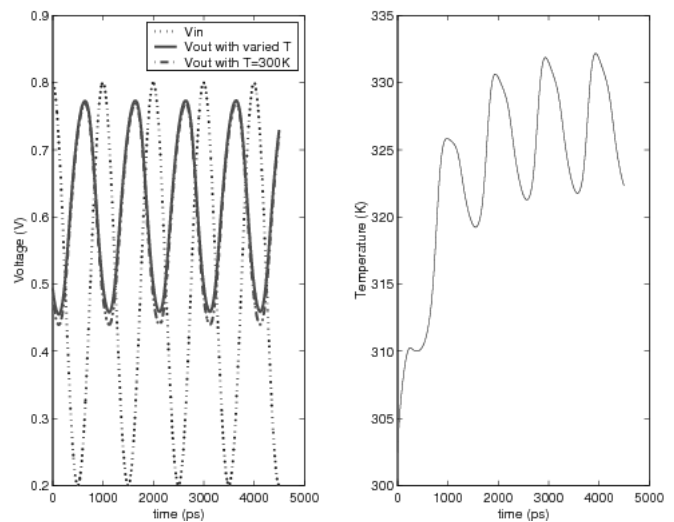


Рис. 9. Слева – входное и выходное напряжение в зависимости от времени. Справа – максимальное значение температуры в транзисторе в зависимости от времени