NUMERISCHE SIMULATION VON HALBLEITERBAUELEMENTEN

S.Selberherr und H.Pötzl
Abteilung für Physikalische Elektronik
Institut für Allgemeine Elektrotechnik und Elektronik
TU Wien / Österreich

1. Einleitung

Seit der Erfindung des integrierten Schaltkreises in den siebziger Jahren gewinnt die Modellierung von Halbleiterbauelementen stetig an Bedeutung. Speziell die Mikrominiaturisierung von Bauelementen, die für die sogenannte "Very Large Scale Integration (VLSI)" eine Voraussetzung darstellt, erfordert eine rigorose Analyse des elektrischen Verhaltens der verwendeten Bauelemente, um den Anwendern von integrierten Schaltungen das gewünschte und geforderte Maß an Komplexität (mehr als 400.000 Transistoren pro integrierten Schaltkreis) und Zuverlässigkeit garantieren zu können.
Die charakteristische Strategie der klassischen Modellierung von Halbleiterbauelementen ist die Aufteilung des Bauelementes in mehrere, verschiedenartige Teilbereiche, in welchen das elektrische Verhalten mit relativ einfachen Formeln analytisch approximiert werden kann. Diese unabhängig behandelten Teilbereiche werden dann einfach verbunden und die Lösungen an den Rändern angepaßt, um eine Gesamtbeschreibung des Bauelementes zu erhalten. Wenn eine kompakte analytische Modellierung gesucht wird, ist keine andere Vorgangsweise zielführend.
Bei mikrominiaturisierten Bauelementen ist die soeben beschriebene Vorgangsweise nur sehr begrenzt durchführbar, da eine Auftrennung in unabhängig behandelbare Teilgebiete praktisch nicht möglich ist. Weiters können vollkommen neue physikalische Effekte beobachtet werden, die manchmal sogar das elektrische Verhalten eines Bauelementes auf dominante Weise bestimmen. Eine Konsequenz dieses Sachverhaltes ist eine nahezu unvorstellbare Anzahl publizierter Vorschläge, wie diverse Effekte in klassische Modelle einbezogen werden können. In den letzten zehn Jahren wurden über 50.000 Artikel mit dieser Thematik veröffentlicht.
Eine andere, rigorosere Strategie zur Erfassung des elektrischen Verhaltens von Bauelementen ist die numerische, "ab initio" Simulation, die auf fundamentalen physikalischen Prinzipien beruht.

Diese Vorgangsweise gestattet einen direkten Einblick in das Verhalten der relevanten physikalischen Größen im Inneren eines Bauelementes, wodurch eine neue Dimension an Verständnis gewonnen wird, das breitbasig für den verbesserten Entwurf von Bauelementen eingesetzt werden kann. Eine kompakte, analytische Beschreibung kann jedoch auf diese Weise nicht gewonnen werden.

2. Die fundamentalen Halbleitergrundgleichungen

Auch für eine numerische, "ab initio" Simulation eines Halbleiterbauelementes werden Modellannahmen in Form von Gleichungen benötigt. Diese Gleichungen sind jedoch nicht maßgeschneidert für ein bestimmtes Bauelement, sondern beschreiben den grundsätzlichen Stromtransport in Halbleitern. (Ein Bauelement ist durch eine bestimmte Geometrie und eine gezielte technologische Behandlung des Halbleiters konfiguriert.) Das bekannteste Modell für den Stromtransport in Halbleitern wurde von Van Roosbroeck /5/ vorgeschlagen. Es besteht aus der Poisson Gleichung (1), den Stromkontinuitätsgleichungen für Elektronen (2) und Löcher (3) und den Stromrelationen für Elektronen (4) und Löcher (5).

$$\mathrm{div}\ \mathrm{grad}\ \Psi = \frac{q}{\varepsilon}\cdot(\ n - p - C\ ) \tag{1}$$

$$\mathrm{div}\ \bar{J}_n - q\cdot\frac{\partial n}{\partial t} = q\cdot R \tag{2}$$

$$\mathrm{div}\ \bar{J}_p + q\cdot\frac{\partial p}{\partial t} = -q\cdot R \tag{3}$$

$$\bar{J}_n = -q\cdot(\mu_n\cdot n\cdot \mathrm{grad}\ \Psi - D_n\cdot \mathrm{grad}\ n) \tag{4}$$

$$\bar{J}_p = -q\cdot(\mu_p\cdot p\cdot \mathrm{grad}\ \Psi + D_p\cdot \mathrm{grad}\ p) \tag{5}$$

Diese Gleichungen konstituieren ein System von gekoppelten partiellen Differentialgleichungen in drei Ortsdimensionen, welches zusammen mit den für ein Bauelement charakteristischen Randbedingungen im Bauelementvolumen gelöst werden muß. Häufig können Symmetrieeigenschaften und "a priori" Kenntnisse eines Bauelementes benutzt werden, um bei einer akzeptablen Einbuße an Genauigkeit die Anzahl der Ortsdimensionen auf zwei oder eins zu reduzieren, wodurch eine erhebliche Ersparnis an numerischem Aufwand zu erzielen ist.
Die abhängigen Veränderlichen in den Gleichungen (1)-(5) sind das elektrostatische Potential Ψ, die Elektronenkonzentration n und die Löcherkonzentration p. Die Gleichungen beinhalten weiters mehrere

physikalische Parameter: die Dielektrizitätskonstante ε, die Nettokonzentration der geladenen Störstellen C in (1), die Nettorekombinationsrate R in (2) und (3), die Beweglichkeiten und Diffusionskoeffizienten der Elektronen μ_n, D_n und Löcher μ_p, D_p in (4) und (5). Die Konstante q representiert die Elementarladung. Die Nettorekombinationsrate sowie die Beweglichkeiten und Diffusionskoeffizienten müssen im allgemeinen als stark nichtlineare Funktionen der abhängigen Veränderlichen behandelt werden /4/, wodurch die Lösung des Systems (1)-(5) signifikant erschwert wird. Die anderen Parameter (ε und C) sind reine Materialeigenschaften.
In Hinblick auf die fortschreitende Mikrominiaturisierung muß natürlich auch die Frage gestellt werden, bis zu welcher Bauelementkleinheit die Gleichungen (1)-(5) tatsächlich den Stromtransport hinreichend genau beschreiben. Diese Frage kann mit dem heutigen Wissen nicht zuverlässig beantwortet werden; als Spekulation gilt, daß Bauelemente mit charakteristischen Abmessungen kleiner als 1μm nur mehr qualitativ in ihrem Verhalten erfaßt werden können. Dieses Problem wird in nächster Zukunft intensiv behandelt werden müssen.
Zur numerischen Lösung des Gleichungssystems (1)-(5) wird das Bauelementvolumen inklusive der Ränder nach den klassischen, mathematischen Methoden (finite Differenzen, finite Elemente) diskretisiert, die Differentialgleichungen mit ihren Parametern durch approximierende algebraische Gleichungen ersetzt und das dadurch erhaltene nichtlineare algebraische Gleichungssystem unter erheblichem Aufwand an Computerresourcen mit Newtonartigen Verfahren gelöst. Eben dieser beachtliche Aufwand an Computerresourcen hat dazu geführt, daß zur Lösung der Gleichungen hochspezialisierte Algorithmen entwickelt wurden. Ein Beispiel dazu stellt die Diskretisierung in "Finite Boxen" dar /1/, welche als rigorose Erweiterung der Methode der finiten Differenzen für Probleme mit örtlich stark heterogenem Lösungsverhalten interpretiert werden kann. Eine genaue Behandlung der diversen physikalischen und mathematischen Details kann in /4/ nachgelesen werden.

3. Ein Beispiel

Mit den folgenden Bildern soll vermittelt werden, welche Aussagekraft die Ergebnisse der numerischen Simulation von Halbleiterbauelementen beinhalten. Die Berechnungen wurden mit dem Programm MINIMOS /2/, /3/ durchgeführt.

Bild 1 zeigt die Dotierungsprofile (C in(1)) zweier miniaturisierter MOS-Transistoren mit einer Kanallänge von 1.2µm, was dem heutigen internationalen Forschungsstandard entspricht. Man erkennt deutlich die hoch dotierten Wannen des Source- und Draingebietes sowie die Kanalimplantation dazwischen. Das rechte Profil unterscheidet sich vom linken durch eine zweite Kanalimplantation in der Tiefe der pn-Übergänge.

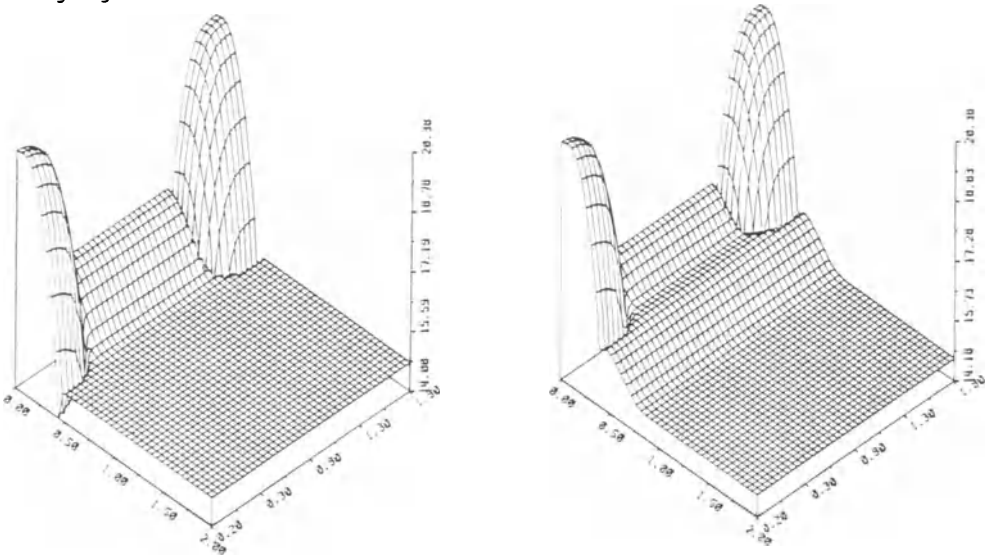

Bild 1: Dotierungsprofil, log., cm^{-3}

In Bild 2 sind die Isolinien des elektrostatischen Potentials für den Arbeitspunkt 0V an Source, Gate, sowie Substrat und 7V an Drain dargestellt. Für diesen Arbeitspunkt ist im Falle einer n-MOS Logik erwünscht, daß der Transistor sperrt. Man sieht deutlich im linken Transistor einen Sattel im Potential, welcher als typisches Anzeichen des "punch-through" Effektes zu werten ist. Dies bedeutet, daß das Gate nicht in der Lage ist, die für das Sperren notwendige Potentialbarriere zwischen Source und Drain hinreichend in die Bauelementetiefe zu manifestieren (Man beachte die Potentialinsel oberhalb des Sattels, welche den Einflußbereich des Gates skizziert). Im rechten Teilbild erkennt man klar, daß die zuzügliche tiefere Kanalimplantation den "punch-through" Effekt unterdrückt. Der eben erklärte Sachverhalt läßt sich noch anschaulicher aus den Stromdichteverteilungen entnehmen, die in Bild 3 gezeigt sind. Man erkennt deutlich einen vergrabenen Kanal im linken Teilbild, der durch das Gate nicht beeinflußt werden kann. Im rechten Teilbild ist ein minimaler Rest von Stromdichte (man beachte den Achsenmaßstab) unmittelbar an der Grenzschicht zum Gateoxid zu finden, was für einen sperrenden MOS-Transistor typisch ist.

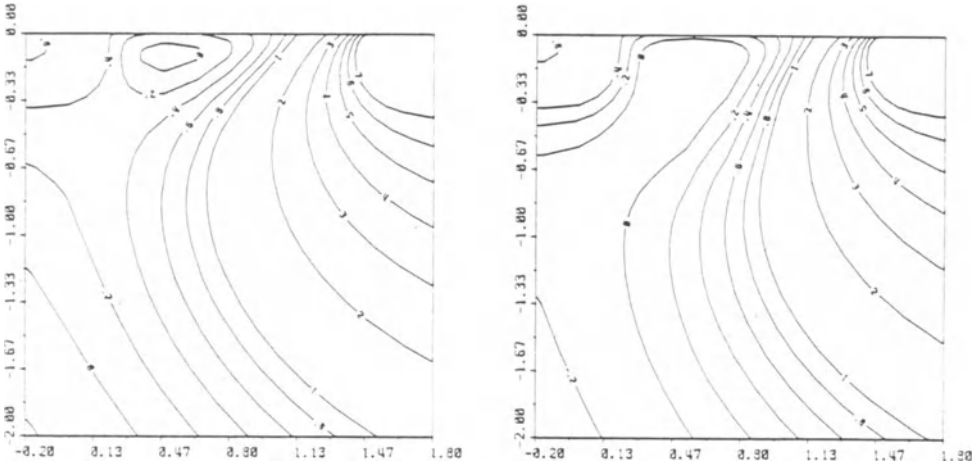

Bild 2: Elektrostatisches Potential, lin., V

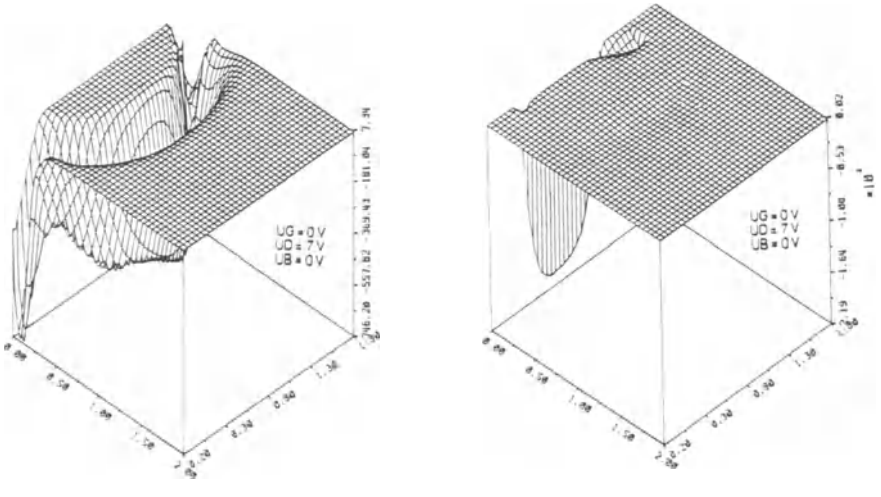

Bild 3: Elektronenstromdichte, lin., Acm^{-2}

Literatur

/1/ Franz A.F., Franz G.A., Selberherr S., Ringhofer C., Markowich P., **"Finite Boxes - A Generalization of the Finite Difference Method Suitable for Semiconductor Device Simulation"**, IEEE Trans.Electron Devices, Vol.ED-30, No.9, pp.1070-1082, (1983).

/2/ Schütz A., Selberherr S., Pötzl H.W., **"Analysis of Breakdown Phenomena in MOSFET's"**, IEEE Trans.Computer-Aided-Design of Integrated Circuits, Vol.CAD-1, pp.77-85, (1982).

/3/ Selberherr S., Schütz A., Pötzl H.W., **"MINIMOS - a Two-Dimensional MOS Transistor Analyzer"**, IEEE Trans.Electron Devices, Vol.ED-27, pp.1540-1550, (1980).

/4/ Selberherr S., **"Analysis and Simulation of Semiconductor Devices"**, Springer, Wien New-York, (1984).

/5/ VanRoosbroeck W.V., **"Theory of Flow of Electrons and Holes in Germanium and Other Semiconductors"**, Bell Syst.Techn.J., Vol.29, pp.560-607, (1950).