DIE ERWEITERUNG VON MINIMOS AUF EIN 3D SIMULATIONSPROGRAMM

M. Thurner, S. Selberherr

Institut für Allgemeine Elektrotechnik und Elektronik
Technische Universität Wien
Gusshausstraße 27–29, A–1040 Wien, AUSTRIA

ZUSAMMENFASSUNG:

Ein dreidimensionales Simulationsprogramm für MOSFET's ist durch die Erweiterung von MINIMOS (Vers.4) in die dritte Dimension entwickelt worden. Das physikalische Modell basiert auf dem 'hot-electron-transport' Modell, dieses umfaßt die Poisson Gleichung, die Kontinuitätsgleichungen und ein selbstkonsistentes System von Gleichungen für die Ströme, die Beweglichkeiten und die Ladungsträgertemperaturen. Um die CPU–Zeit und den Speicherbedarf so klein wie möglich zu halten, werden die standard Diskretisierung der finiten Differenzen und das SOR–Verfahren (successive over relaxation) verwendet. Zur Gleichverteilung des Diskretisierungsfehlers ist ein automatisch adaptiver Gittergenerator entwickelt worden. Mit unserem Simulationsprogramm konnten dreidimensionale Effekte, wie erhöhte Schwell– und Durchbruchspannung für MOS-Transistoren mit schmalem Kanal und Akkumulation von Ladungsträgern an der Kanalkante, erfolgreich modelliert werden. Unsere Analysen zeigen deutlich, daß dreidimensionale Berechnungen für genaue Bauteilmodellierungen unabdingbar sind.

1 Einleitung

Die heutige ULSI–Technik fordert neue Methoden im Bauteilentwurf. Die gegenwärtigen integrierten Schaltungen enthalten Transistoren von extrem kleinen Abmessungen daher hängen die Kennlinien dieser Bauteile stark von dreidimensionalen Effekten ab. Zweidimensionale Simulationsprogramme sind Stand der Technik, diese können aber keinerlei Weiteneffekte berücksichtigen und gerade diese gewinnen steigende Bedeutung für gegenwärtige und zukünftige ULSI MOS Bauteile. Deshalb haben wir das zweidimensionale MINIMOS Programm mit zusätzlichen dreidimensionalen Simulatoreigenschaften versehen. Der Zweck dieses Berichtes ist es ein dreidimensionales Modell vorzustellen, die Grenzen einer zweidimensionalen Näherung zu zeigen und durch Vergleiche von 2D– mit 3D–Resultaten einen besseren physikalischen Einblick zu erhalten.

Im Kapitel 2 wollen wir kurz Details des physikalischen Modelles, der Gleichungen und

der Annahmen des dreidimensionalen Simulationsprogrammes aufzeigen.
Die numerischen Methoden und einige mathematische Untersuchungen über die Konvergenz der Lösung werden im Kapitel 3 diskutiert.
Abschließend präsentieren wir einige Resultate von unseren Simulationen und diskutieren diese in Kapitel 4. Es werden auch Effekte präsentiert, die aus der Theorie und von praktischen Messungen bekannt sind, aber bisher noch nicht modelliert worden sind.

2 Das physikalische Modell für die Erweiterung

Die MOSFET Bauteilstruktur, wie sie in den drei Dimensionen simuliert wurde, ist in Fig. 1 gezeigt. Das Feldoxyd, das die Kanalweite begrenzt, kann an der Rückseite des Modelles gesehen werden. Die dreidimensionale mathematische Formulierung ist durch die Halbleitergleichungen gegeben.

$$div\ grad\ \psi = \frac{q}{\varepsilon}(n - p - C) \tag{2.1}$$

$$div\ J_n = qR \tag{2.2}$$

$$div\ J_p = -qR \tag{2.3}$$

Für das 'hot-electron-transport' Modell [1] schreiben wir weiter:

$$J_n = -q\mu_n(n\ grad\ \psi - grad\ (U_{t_n} n)) \tag{2.4}$$

$$J_p = -q\mu_p(p\ grad\ \psi + grad\ (U_{t_p} p)) \tag{2.5}$$

$$U_t = U_{t_0} + \frac{2}{3}\tau_\epsilon v_{sat}^2(\frac{1}{\mu_{LISF}} - \frac{1}{\mu_{LIS}}) \tag{2.6}$$

τ_ϵ bezeichnet die Energierelaxationszeit, die als konstant angenommen wird.
Die Funktion μ_{LIS} verbindet die Beweglichkeit beeinflußt durch Gitter– und ionisierte Störstellenstreuung mit dem Einfluß der Oberflächen Streuung und ergibt somit die Beweglichkeit von kalten Landungsträgern. Die Beweglichkeit μ_{LIS} wird dann mit dem Einfluß der treibenden Kraft F und der Sättigungsgeschwindigkeit v_{sat} verbunden, woraus die Beweglichkeit μ_{LISF} von heißen Ladungsträgern resultiert.

In unsereren Simulationen wird die Poisson Gleichung (2.1) immer vollständig dreidimensional gelöst. Für die erste Stufe der Erweiterung über dem 2D 'hot-electron-transport' Modell nehmen wir vernachlässigbaren Strom in die Richtung der Kanalweite als natürliche Vereinfachung der Kontinuitätsgleichungen (2.2 bis 2.3) an.

$$J_{n_z} = J_{p_z} = 0$$

Bei Gültigkeit der Boltzmann Statistik ist die vorherige Annahme gleich mit konstanten Quasiferminiveaus in die dritte Dimension:

$$\frac{\partial \varphi_n}{\partial z} = \frac{\partial \varphi_p}{\partial z} = 0$$

Unter diesen Bedingungen können wir die Trägerdichten im gesamten Simulationsgebiet ausdrücken indem wir die zweidimensionale Lösung der Kontinuitätsgleichungen, die in der Mitte der Kanalweite berechnet wird, folgendermaßen erweitern:

$$n_{x,y,z} = n_{x,y,\frac{w}{2}} \cdot exp(-\frac{1}{U_t} \cdot (\psi_{x,y,\frac{w}{2}} - \psi_{x,y,z})) \tag{2.10}$$

$$p_{x,y,z} = p_{x,y,\frac{w}{2}} \cdot exp(+\frac{1}{U_t} \cdot (\psi_{x,y,\frac{w}{2}} - \psi_{x,y,z})) \tag{2.11}$$

Der Index $\frac{w}{2}$ kennzeichnet die Mitte der Kanalweite.
Die zweite Stufe der 3D Version erhält man mit der Annahme von vernachlässigbarem Strom in die dritte Dimension für die Majoritätsträger und der voll dreidimensionalen Lösung der Kontinuitätsgleichung der Minoritätsträger.
In der dritten Stufe werden die Kontinuitätsgleichungen für Minoritäten und Majoritäten vollständig dreidimensional gelöst.
Mit dem vorhin beschriebenen Modell konnten bekannte Effekte, wie 'channel narrowing', erhöhte Schwell- und Durchbruchspannung bei MOSFET's mit schmalem Kanal verglichen mit weitem Kanal, simuliert werden.

3 Die numerische Methode

Der vollständig automatisch adaptive Gitterverfeinerungsalgorithmus wurde wesentlich verbessert um den Diskretisierungsfehler der partiellen Differentialgleichungen möglichst gleichzuverteilen. Die Diskretisierung durch standard finite Differenzen in alle drei Dimensionen ist genauer in [2] beschrieben. Die drei gekoppelten nichtlinearen Differentialgleichungen werden mit dem Gummel–algorithmus gelöst. Die Lösungen der linearisierten Gleichungen werden mit dem SOR–Verfahren berechnet. Der Relaxationsfaktor ω des SOR–Verfahrens wird im Falle der Poisson Gleichung durch ein adaptives Verfahren [5] bestimmt währen dieser bei den dreidimensionalen Kontinuitätsgleichungen konstant 1.5 gesetzt wird. Mit einer guten Startlösung wurde die Endlösung zweimal so schnell (eingeschlossen der Zeit zur Findung der Startlösung) denn ohne erreicht. Durch einige Untersuchungen konnte somit eine sichere und schnelle Konvergenz erzielt werden.

Die Lösung für das Gleichungssystem $A \cdot x = b$ kann bei Verwendung des SOR–Verfahrens mit wenig Aufwand für die Präkonditionierung vereinfacht angeschrieben werden:

$$x_i^{(n+1)} = (1-\omega) \cdot x_i^{(n)} + \omega(b_i - \sum_j x_j^{(n+1)} a_j - \sum_k x_k^{(n)} a_k) \tag{3.1}$$

für $j < i$ und $k > i$ während $i = 1...NX \cdot NY \cdot NZ$.
Unter Berücksichtigung der speziellen Linearisierung durch finite Differenzen (mit NX Punkten in x–Richtung, NY Punkten in y–Richtung, NZ Punkten in z–Richtung)

kann (3.1) reduziert werden:

$$\begin{aligned} x_i^{(n+1)} = (1-\omega)\cdot x_i^{(n)} + \omega(b_i - \\ - x_{i-1}^{(n+1)} a_{i-1} - x_{i-NX}^{(n+1)} a_{i-NX} - x_{i-NXY}^{(n+1)} a_{i-NXY} - \\ - x_{i+1}^{(n)} a_{i+1} - x_{i+NX}^{(n)} a_{i+NX} - x_{i+NXY}^{(n)} a_{i+NXY}) \end{aligned} \tag{3.2}$$

in welcher wieder $i = 1...NX \cdot NY \cdot NZ$.
Im Fall der Poisson Gleichung wurden zwei zusätzliche Schritte eingeführt um die Konvergenz zu verbessern. Erstens wird eine SOR Subiteration im Kanalbereich für eine verbesserte Startlösung durchgeführt. Zweitens wurde ein zweiter Schritt für das SOR-Verfahren implementiert [4]; mit (3.2) können wir schreiben:

$$x_i^{(n+2)} = x_i^{(n-1)} \cdot \gamma^{(n)} + x_i^{(n+1)} \cdot (1 - \gamma^{(n)}) \tag{3.3}$$

γ ist ein Faktor, der von der Anzahl der Punkte und dem Iterationszyklus abhängt. $\gamma \propto \frac{1}{N}$ worin N die Zahl der Iterationszyklen ist. Durch diese Verbesserungen erhalten wir sicherere und schnellerere Konvergenz auch für schlecht konditionierte Probleme.

4 Einige Ergebnisse

Im Folgenden werden wir einige Ergebnisse, die mit dem erweiterten MINIMOS für einen realistischen MOSFET mit einem $1\mu m$ x $1\mu m$ Kanal berechnet wurden, präsentieren. Die geometrischen Spezifikationen des MOSFET's sind in Fig. 1 angegeben. Die Dicke des Gateoxydes ist $15nm$; die Substratdotierung beträgt $2 \cdot 10^{16} cm^{-3}$.

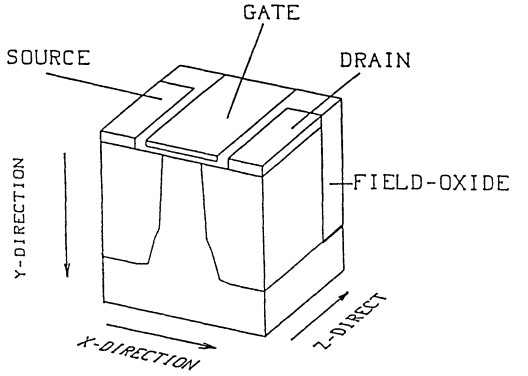

Fig.1: Perspektive der dreidimensionalen MOSFET-Struktur.

Für eine detailierte Präsentation wollen wir zwei Effekte herausgreifen. Zuerst die Schwellspannung und 'channel narrowing', anschließend als neuen Effekt die Akkumulation der Minoritäten an der Kanalkante.

Schwellspannung

Die Ergebnisse der dreidimensionalen Simulation mit dem erweiterten MINIMOS sind

in Fig. 2 und 3 gezeigt. Der Arbeitspunkt liegt mit $U_D = 2.0V$,$U_S = U_B = 0.0V$ und $U_{GS} = 0.73V$ nahe der Schwellspannung.

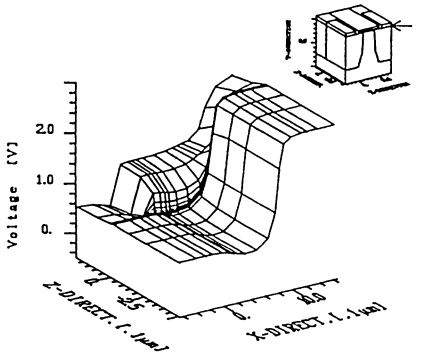

Fig.2: 3D–Zeichnung des Oberflächenpotentials bei $U_{DS} = 2.0V$, $U_{BS} = 0.0V$, $U_{GS} = 0.73V$.

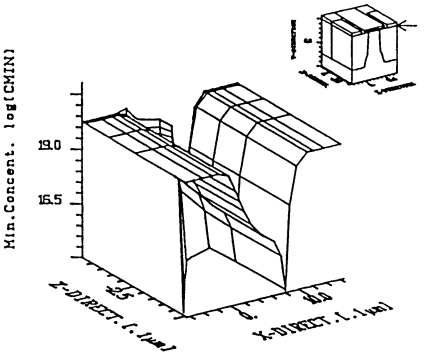

Fig.3: 3D–Zeichnung der Minoritätsträgerdichte bei $U_{DS} = 2.0V$, $U_{BS} = 0.0V$, $U_{GS} = 0.73V$.

Durch die dreidimensionale Darstellung des Oberflächenpotentials (Fig. 2) ist nicht direkt erkennbar warum die Schwellspannung für MOSFET's mit schmalem Kanal höher sein soll als für solche mit weitem. Jedoch ist in Fig. 3 leicht ersichtlich, daß die Kanalladung der Minoritäten (in unserem Falle Elektronen), die für den Strom verantwortlich sind, kleiner ist als in der 2D–Simulation angenommen. Dieser Effekt ist in der Begrenzung des Kanales begründet. Dieser Effekt wird umso dominierender je schmäler der Kanal wird. Daher muß die Schwellspannung mit schmäler werdendem Kanal steigen. Der gut bekannte Effekt des 'channel narrowing' resultiert aus den selben Gründen.

<u>Die Akkumulationn der Minoritäten an der Kanalkante</u>

In bestimmten Arbeitspunkten kann sich der Effekt des 'channel narrowing' in sein

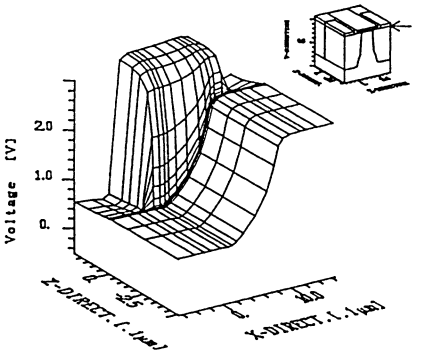

Fig.4: 3D–Zeichnung des Oberflächenpotentials bei $U_{DS} = 2.0V$, $U_{BS} = 0.0V$, $U_{GS} = 3.0V$.

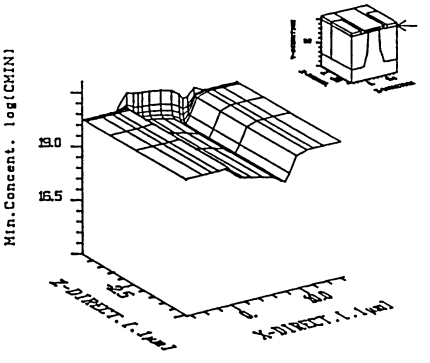

Fig.5: 3D–Zeichnung der Minoritätsträgerdichte bei $U_{DS} = 2.0V$, $U_{BS} = 0.0V$, $U_{GS} = 3.0V$.

Gegenteil umkehren, sodaß an der Kanalkante die Minoritätsträger akkumulieren (Fig. 5). Der Arbeitspunkt ist mit $U_D = 2.0V, U_S = U_B = 0.0V$ und $U_{GS} = 3.0V$ gegeben. Die korrespondierende dreidimensionale Darstellung des Oberflächenpotentials ist in Fig. 4 gezeigt. Die Erklärung dieses Effektes ist einfach; bei sehr hohen Gatespannungen zwingt das elektrische Feld in der Feldoxyd–Halbleiter Schicht die Elektronen (in unserem Falle) in diesem Gebiet zu akkumulieren. So kann eine hohe Stromdichte an der Kanalkante beobachtet werden, dies ist auch in der $I_D - U_{GS}$ Kennlinie (Fig. 6) ersichtlich.

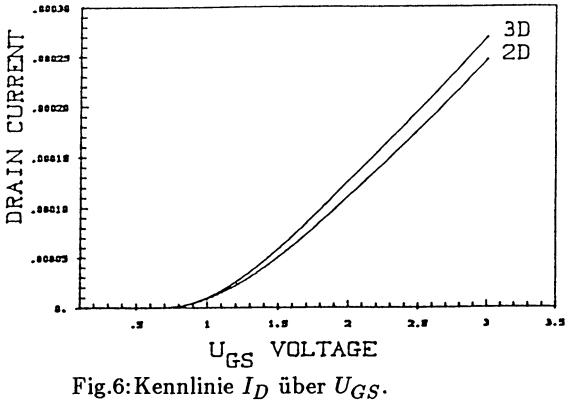

Fig.6: Kennlinie I_D über U_{GS}.

Literatur:

[1] S.Selberherr, The status of MINIMOS, Proc. Simulation of semiconductor devices and processes, pp 2-15, Swansea, 1986

[2] S.Selberherr, Analysis and simulation of semiconductor devices , ISBN 3-211-81800-6, Springer, WIEN NEW-YORK, 1984

[3] S.M.Sze,Physics of semiconductor devices, ISBN 0-471-09837-X, John Wiley & sons, 1981

[4] L.A.Hageman,Franklin T.Luk,David M.Young, On the equivalence of certain iterative acceleration methods, SIAM J.NUMER.ANAL., pp 852-873, vol. 17 No. 6, Dec 1980

[5] O.Axelsson,Solution of linear systems of equations;Iterative methods, Lecture notes in mathematics 574, SMT, 1976