

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КОНОТОПСЬКИЙ ІНСТИТУТ

Кафедра електронних
приладів і автоматики

Кваліфікаційна робота бакалавра
**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ БАЗОВИХ КОМПОНЕНТІВ
НАПІВПРОВІДНИКОВОЇ ТЕХНОЛОГІЇ: ДІОДІВ ТА БІПОЛЯРНИХ
ТРАНЗИСТОРІВ**

Студент гр. ЕІ₃-81_к

С.М. Янковський

Науковий керівник,
к.ф.-м.н., доцент

І.П. Бурик

Конотоп 2022

РЕФЕРАТ

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні основи принципу дії, структурні та робочі характеристики напівпровідникових діодів та біполярних транзисторів.

Мета роботи полягає у вивченні фізичних моделей напівпровідникових діодів та біполярних транзисторів, алгоритмів їх комп'ютерного моделювання, аналізу отриманих експериментальних результатів.

При виконанні роботи для розробки та створення структур напівпровідникових діодів та біполярних транзисторів використовувалися методи комп'ютерного приладно-технологічного моделювання у програмному середовищі Silvaco TCAD.

У результаті проведених досліджень було виконано ряд моделювань структур напівпровідникових діодів та біполярних транзисторів, набуто навичок роботи з транспортними моделями, зроблено висновки про особливості застосування таких елементів в сучасній мікроелектроніці.

Робота складається із вступу, трьох розділів основної частини та висновків. У першому розділі наведено огляд сучасних систем програмного моделювання та їх можливостей. У другому розділі описано методи розробки, опису фізичної моделі діодів та біполярних транзисторів, алгоритм створення віртуальної моделі в програмному середовищі та отримання результатів у зручному для сприйняття вигляді. У третьому розділі було спроектовано віртуальні моделі описаних діодних та біполярних транзисторних структур, проаналізовано та порівняно результати моделювання з реальними характеристиками.

Робота викладена на 35 сторінках, у тому числі включає 13 рисунків, список цитованої літератури із 31 джерела, 1 додаток.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: БІПОЛЯРНИЙ ТРАНЗИСТОР, НАПІВПРОВІДНИКОВИЙ ДІОД, КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

ЗМІСТ

	С.
ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1. МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ЕЛЕМЕНТІВ	5
1.1. Загальні відомості TCAD симуляторів.....	5
1.2. Програмне середовище DECKBUILD	7
1.3. Програмне середовище COMSOL Multiphysics.....	11
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ	14
2.1. Methodика моделювання в TCAD.....	14
2.2. Моделювання біполярних транзисторів на основі алмазу.....	15
2.3. Моделювання PIN-діодів на основі алмазу.....	17
РОЗДІЛ 3. ОБРОБКА ТА ПОРІВНЯННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ МОДЕЛЮВАННЯ	23
3.1. PIN-діодні структури	23
3.2. Об'ємні структури із процесом старіння.....	26
ВИСНОВКИ	31
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	32
ДОДАТОК А. СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ РОБОТИ	35

ВСТУП

Ця робота ілюструє ключові аспекти інструментів Silvaco TCAD, демонструючи їх здатність розуміти фізичну поведінку та потенціал структури пристрою. Симулятори пристроїв Silvaco TCAD забезпечують унікальне уявлення про внутрішню роботу аналізованого структурного пристрою з використанням різноманітних складних моделей на основі фізики та передових чисельних вирішувачів, що забезпечують стабільні обчислення.

Будь-який напівпровідниковий прилад представлений структурою, електричні та фізичні властивості якої дискретизовано на сітку вузлів. Дво-/тривимірна структура пристрою може бути виходом симулятора процесу або може бути надана з вхідного файлу який містить інформацію про сітку, типи матеріалів, профілі легування в конкретних областях, назви клем та правильно визначені граничні умови із застосованими зовнішніми електричними, оптичними, механічними, магнітними та тепловими полями.

Також надається великий набір електрофізичних моделей для характеристики поведінки різних фізичних ефектів, присутніх у напівпровіднику. Симулятор пристрою обчислює вихідні характеристики за розв'язування набору диференціальних рівнянь у похідних похідних за допомогою ітераційних чисельних методів. Більш складні розв'язувачі можуть бути (неітераційними) прямими розв'язувачами. Двовимірне моделювання пристрою з правильно підібраними каліброваними моделями та чітко визначеною відповідною структурою сітки є дуже корисними для прогнозного параметричного аналізу нової конструкції пристроїв [1-7]

РОЗДІЛ 1

МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ЕЛЕМЕНТІВ

1.1. Загальні відомості TCAD симуляторів

Комп'ютерне моделювання стало невід'ємною частиною науки та техніки. Цифровий аналіз компонентів, зокрема, важливий при розробці нових продуктів або оптимізації дизайну. На сьогоднішній день існує широкий спектр варіантів моделювання який доступний дослідникам які використовують все, від базових мов програмування до різноманітних пакетів високого рівня, що реалізують передові методи. Хоча кожен із цих методів має свої унікальні властивості, усі вони об'єднують спільну проблему [8-15].

Розглядаючи, що робить програмне забезпечення надійним, корисно пам'ятати про модель, яка точно відображає те, що відбувається в реальному світі. Середовище комп'ютерного моделювання – це просто переклад фізичних законів реального світу у свою віртуальну форму. Наскільки спрощення відбувається в процесі перекладу, допомагає визначити точність отриманої моделі. Тому було б ідеально мати середовище моделювання, яке включало б можливість додати будь-який фізичний ефект до вашої моделі.

Досвідчені користувачі можуть піти глибше та використати свої знання для розробки індивідуальних рішень, застосовних до їх унікальних обставин. Сучасні наносистеми в напівпровідниковій електроніці представляють собою, перш за все, ІМС, що містять в собі приблизно до 1 мільярда кремнієвих транзисторів, всі з яких знаходяться в робочому стані. Швидкий розвиток та складність таких схем змушує розробників на всіх етапах проектування та виготовлення використання потужних комп'ютерів [17-22].

В даний час загальнопризнаною є така точка зору, відповідно до якої успішна розробка як цифрової, так і аналогової ІМС неможлива без точного

комп'ютерного моделювання схем, яка в своїй послідовності залежить від точного математичного моделювання роботи транзисторів і технології їх виготовлення [23-31].

Можливість підвищення реальних параметрів і характеристика транзисторів задовго до виготовлення кремнієвого чіпа стала основною причиною широкого використання системи TCAD-моделювання в напівпровідниковій промисловості.

Згідно з оцінкою експертів з ITRS [1], що публікуються в інтернеті, розвиток напівпровідників нанотехнологій у 21 столітті, спрямованих на створення нової елементної бази електроніки, можливо тільки на основі поєднання складних засобів нановизначень (нанодіагностики) з розробкою та використанням TCAD систем нових поколінь.

Суть приладно-технологічного моделювання різних напівпровідникових структур мікро- і наноелектроніки (в тому числі нанотранзисторів, транзисторів, у яких один із характерних розмірів лежить в нанометровому діапазоні) полягає в забезпеченні неперервного взаємозв'язку між технологічними параметрами та електрофізичними, тепловими, оптичними та іншими характеристиками приладу.

Циклічний розрахунок технології виготовлення фізичних процесів переносу електронів і дірок в приладах дають змогу оптимізувати технологічний маршрут і конструкції, що моделюються. При цьому використовувані моделі представляють собою в основному ієрархічно вибудовані багатомірні краєві задачі, які відображають весь накопичений до моменту розробки моделей научно-технічного потенціалу моделювання.

Рішення цих задач можна отримати тільки численними методами, для того в TCAD широко використовується метод кінцевих елементів. В ньому зручно відзначити, що розробка перших TCAD-систем розпочалась в кінці 70-х років минулого століття, а до теперішнього часу вже змінилось декілька поколінь.

1.2. Програмне середовище DECKBUILD

DeckBuild — це інтерактивне графічне середовище виконання для розробки вхідних кодів для моделювання процесів і пристроїв. Він складається з вікна для створення та редагування вхідної колоди, вікна для виводу і керування симулятором, а також набору спливаючих вікон для кожного симулятора, які забезпечують повну підтримку мови та під час виконання.

DeckBuild є надзвичайно потужним і гнучким інструментом, який простий у використанні та надає безліч автоматизованих функцій, які раніше вимагали від користувача операцій. Серед цих функцій – здатність DeckBuild до генерування безпомилкового синтаксису симулятора на основі зручних спливаючих вікон [2]

Ця функція дозволяє здійснювати прозорий перехід від одного симулятора до іншого, автоматичне визначення сітки та маски інформації та застосування вбудованих засобів вимірювання (вилучення). До DeckBuild ці завдання часто вимагали втручання користувача і займали надзвичайно багато часу.

Автоматизуючи ці завдання, DeckBuild дозволяє зосередитися на реальній роботі тобто точному моделюванню. DeckBuild також пропонує кілька потужних засобів, яких раніше не було. Одне з таких об'єктів, глобальний оптимізатор, дозволяє оптимізувати всю вхідну структуру навіть між різними симуляторами.

На рис. 1.1 зображено відкрите робоче вікно в програмному середовищі DeckBuild.

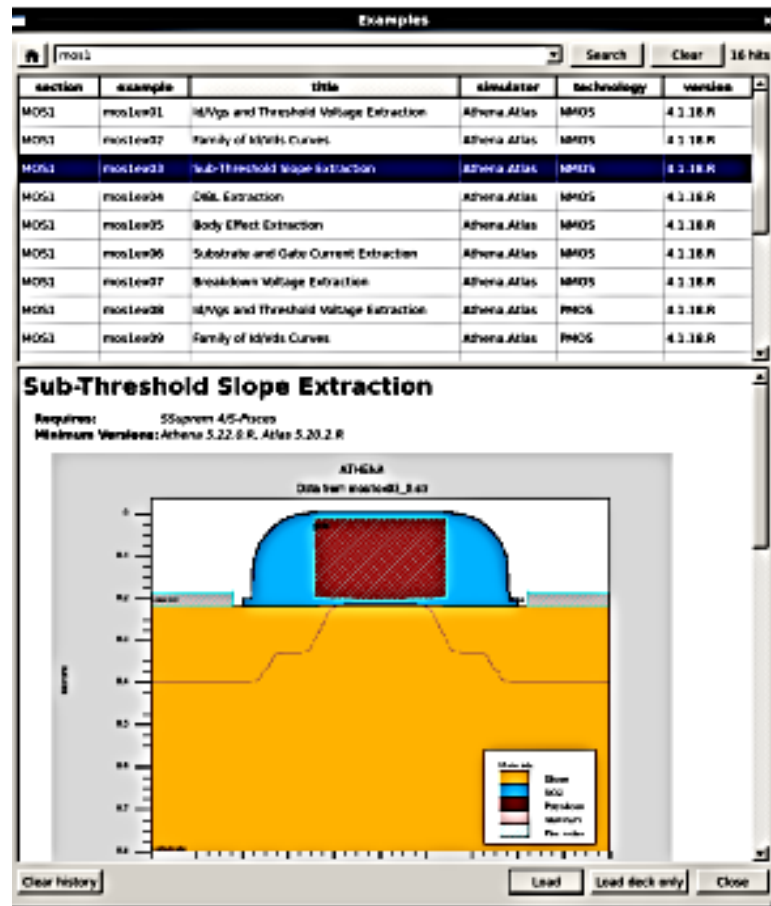


Рис.1.1. Інтерфейс програмного середовища DeckBuild [3]

DeckBuild також забезпечує безперерйну інтеграцію з DEVEDIT та його адаптивними можливостями сітки. Крім того, інтерфейс UTMOST дозволяє вилучення пакетів з параметрами SILVACO UTMOST III для завантаження даних з одного або кількох запусків моделювання пристрою та виконання вилучення параметрів моделі SPICE [4]

DeckBuild пропонує реальну гнучкість завдяки можливості використовувати системні команди UNIX у колодах моделювання та додаткової функції виконання моделювання на віддалених хостах, коли DeckBuild працює локально. Однією з нових функцій є комунікаційні інтерфейси EXACT. EXACT використовує нові параметри командного рядка каналу введення та виведення, щоб відправити на виконання колоду моделювання. EXACT потім отримують витягнуті результати з DECKBUILD.

DeckBuild має численні спеціальні інструменти для симулятора та інструменти загального стилю налагодження, такі як:

- потужні оператори екстракту;
- введення файлів процесу на основі графічного інтерфейсу;
- виконання рядків за рядком та інтуїтивно зрозумілі повідомлення про помилки.

Він містить велику бібліотеку з сотень прикладів попереднього запуску, які охоплюють широкий спектр технологій та матеріалів і швидко дозволяють користувачеві стати високопродуктивним у TCAD.

Особливості програмного середовища:

- інтерактивна розробка та налагодження імітаційних колод на основі графічного інтерфейсу;
- оптимізація потоків моделювання шляхом інтеграції всіх симуляторів Silvaco та інструментів візуалізації TCAD в один графічний інтерфейс;
- потужна мова вилучення, здатна вимірювати параметри процесу та пристрою, як наприклад товщину чи напругу, і створювати всі форми одновимірних кривих (IdVd / IdVg.);
- автоматизована візуалізація моделювання створених структур і витягнутих кривих;
- потужний механізм постобробки, який дозволяє створювати звіти у форматі PDF та відео про хід моделювання;
- інтегрований модуль Python-3 для підтримки розширеного симулятора керувати та витягувати механізми, а також реалізовувати користувацький графічний інтерфейс компонентів;
- потужний редактор потоку моделювання, що дозволяє об'єднати індивідуальні площі моделювання на складні ієрархічні потоки;
- відстежуйте хід моделювання, переглядаючи структури та вихід, створений на кожному етапі процесу;
- включає 500 прикладів моделювання TCAD, які класифіковані та проіндексовані для швидкого пошуку;

- повністю інтегрована система черги дозволяє виконувати завдання моделювання балансу навантаження на Oracle Grid Engine, LSF або вбудовану чергу Silvaso;

- інтегрований механізм оптимізації для обробки калібрування та завдання оптимізації;

- підтримує всі сучасні платформи Linux і Windows і працює на складній IT-інфраструктурі, як от віртуалізовані та віддалені середовища.

Візуалізація в TCAD та програмному середовищі DeckBuild. TonyPlot — це потужний інструмент візуалізації для відображення 2D та 3D даних, згенерованих симуляторами Silvaso TCAD та інструментами для вилучення паразитів, які вирішують поле.

На рис. 1.2 відображено приклад візуалізації досліджуваного об'єкта за допомогою програмного середовища DeckBuild.

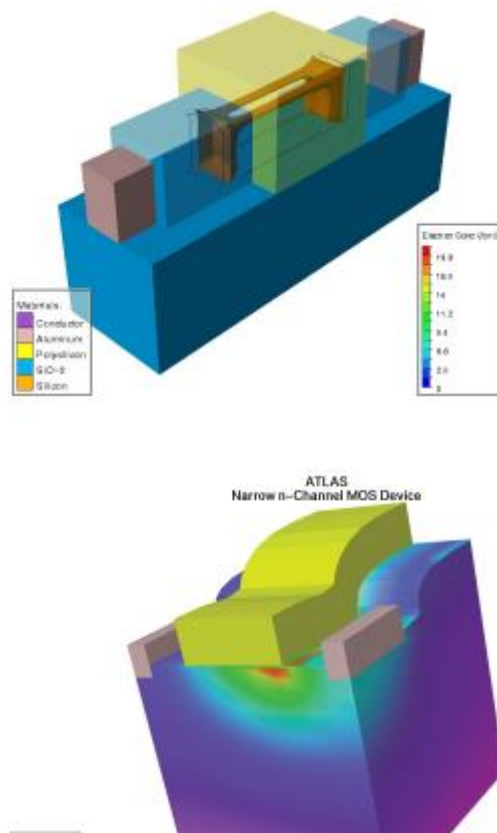


Рис.1.2 Програмне середовище DeckBuild з прикладом візуалізації [5]

Створені для інтуїтивної взаємодії, яскраві режими візуалізації TopyPlot опорні області, контури, ізоповерхні, промені та вектори. Це забезпечує багато специфічних для TCAD функцій візуалізації, таких як емуляція HP4154, одновимірні лінії вирізу з 2D-структур, анімація маркерів для відображення векторного потоку, інтеграція файлів журналів або 1D даних і повністю настроювання [6].

Візуалізація TCAD та особливості:

- обертання та масштабування за допомогою інтуїтивно зрозумілих дій миші;
- зондування точок у тривимірній структурі:
- побудуйте контури поверхні та ізоповерхні для будь-якої змодельованої змінної;
- інструмент площини розрізу для створення 2D-зрізів;
- підтримує всі поширені 1D та 2D перегляди даних, включаючи: 1D x-y дані, 2D-контурні дані, 2D-сітки, діаграми Сміта та полярні діаграми;
- інтегрований набір зондів, лінійок та інших вимірювальних інструментів дозволяє детально аналізувати 1D і 2D структури;
- анімовані маркери дозволяють швидко візуалізувати векторні величини всередині пристроїв;
- редактор функцій і макросів дозволяє визначати складні функції та макроси, які можна візуалізувати як звичайні одновимірні величини, можливість обчислення M-графіків для OLED-пристроїв.

1.3. Програмне середовище COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics — це потужне інтерактивне середовище моделювання, яке використовується для моделювання та вирішення всіх видів наукових та інженерних проблем. Програмне забезпечення забезпечує потужне інтегроване середовище робочого столу з Model Builder, який дає вам повний огляд моделі та доступ до всіх функцій [7].

В програмному середовищі легко розширити звичайні моделі для одного типу фізики на мультифізичні моделі, які вирішують пов'язані фізичні явища - і роблять це одночасно. Щоб отримати доступ до цієї потужності, не потрібні глибокі знання математики чи чисельного аналізу. Використовуючи вбудовані фізичні інтерфейси та розширену підтримку властивостей матеріалів, можна створювати моделі визначення відповідних фізичних величин - таких як властивості матеріалу, навантаження, обмеження, джерела та потоки - замість визначення базових рівнянь.

Завжди можна застосувати ці змінні, вирази або числа безпосередньо до твердих і рідких областей, меж, ребер і точок незалежно від обчислювальної сітки. Потім програмне забезпечення COMSOL Multiphysics внутрішньо компілює набір рівнянь, що представляють всю модель.

Можна отримати доступ до можливостей COMSOL Multiphysics як окремого продукту через гнучкий графічний інтерфейс користувача (GUI), у програмах, створених за допомогою Application Builder і розгорнутих за допомогою COMSOL Compiler™ або COMSOL Server™, або шляхом програмування сценаріїв на Java® або MATLAB® мова (для цього потрібна ліцензія LiveLink™ для MATLAB®).

Використовуючи ці фізичні інтерфейси, можна виконувати різні типи досліджень, зокрема:

- стаціонарні та залежні від часу (перехідні) дослідження;
- лінійні та нелінійні дослідження;
- дослідження власних частот, модальних і частотних характеристик

Під час розв'язування моделей програмне забезпечення COMSOL Multiphysics збирає та вирішує задачу за допомогою набору передових інструментів чисельного аналізу. Програмне забезпечення виконує аналіз разом із адаптивним уточненням сітки (якщо вибрано) та контролем помилок за допомогою різноманітних чисельних вирішувачів.

На рис. 1.3 зображено приклад моделювання в програмному середовищі COMSOL Multiphysics.

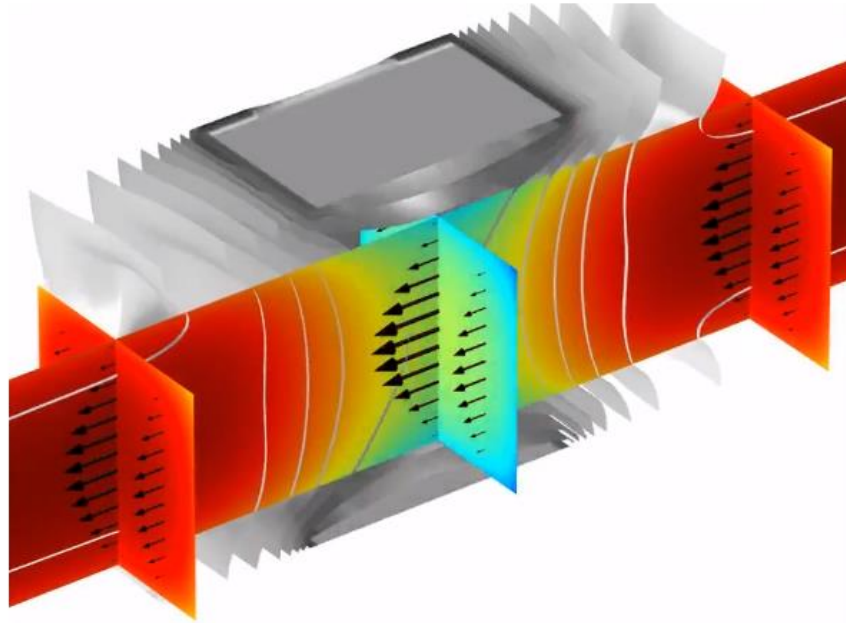


Рис.1.3 Приклад моделювання напівпровідникового елемента в програмному середовищі COMSOL Multiphysics [8]

Дослідження можуть використовувати багатопроцесорні системи та кластерні обчислення, а також можна виконувати пакетні завдання та параметричні розгортки. Програмне забезпечення COMSOL Multiphysics створює послідовності для запису всіх кроків, які створюють геометрію, сітку, фізику, дослідження та налаштування вирішувача, а також візуалізацію та презентацію результатів [9,27].

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Методика моделювання в TCAD

Моделювання напівпровідникового процесу — це моделювання виготовлення напівпровідникових приладів, таких як транзистори та діоди. Це галузь автоматизації електронного проектування та частина підгалузі, відомої як технологія CAD або TCAD. Кінцевою метою моделювання процесу є точне прогнозування розподілу активної легованої добавки, розподілу напружень і геометрії пристрою. Моделювання процесу зазвичай використовується як вхід для моделювання пристрою, моделювання електричних характеристик пристрою. Розглядаючи процес проектування інтегральної схеми як серію кроків зі зниженням рівня абстракції, логічний синтез буде на найвищому рівні, а TCAD, будучи найближчим до виготовлення, буде фазою з найменшою кількістю абстракції.

Через детальне фізичне моделювання, моделювання процесу майже виключно використовується для допомоги в розробці окремих пристроїв, як дискретних, так і як частини інтегральної схеми. Виготовлення інтегральних схем вимагає ряду етапів обробки називається потоком процесу. Моделювання процесу включає моделювання всіх суттєвих етапів технологічного процесу, щоб отримати профілі легування та напружень і, меншою мірою, геометрію пристрою. Вхідними даними для моделювання процесу є перебіг процесу та макет. Макет вибирається як лінійний розріз у повному макеті для 2D-симуляції або прямокутний виріз з макета для 3D-симуляції [10-14].

На додаток до нещодавнього розширення сфери моделювання процесу, завжди було бажання мати більш точні моделювання. Однак для мінімізації часу обчислень найчастіше використовуються спрощені фізичні моделі. Але скорочення розмірів пристроїв висуває зростаючі вимоги до точності

профілів легувальних примесів і напружень, тому для кожного покоління пристроїв додаються нові моделі процесу, щоб відповідати новим вимогам щодо точності. Багато моделей були задумані дослідниками задовго до того, як вони були потрібні, але іноді нові ефекти розпізнаються та розуміються лише тоді, коли інженери-технологи виявляють завдання та проводяться експерименти [15-31]. У будь-якому випадку тенденція додавати більше фізичних моделей та розглядати більш детальні фізичні ефекти триватиме і може прискоритися.

2.2. Моделювання біполярних транзисторів на основі алмазу

Серед комутаційних пристроїв, біполярний транзистор (BJT) є важливою складовою силової електроніки. Через відсутність ізолятора затвора, поверхневу провідність із гідротермінацією та потенційно нижчий опір, BJT на основі алмазу мають потенційні переваги у високопотужних та високотемпературних застосуваннях [10].

Ключовим параметром для силових BJT є коефіцієнт посилення струму як відношення струму колектора до струму бази. Через низьку якість шарів n-типу описані BJT на основі алмазів не працювали добре і страждали від низького посилення струму. Щоб виростити алмаз n-типу, легування фосфором з донорним рівнем $\sim 0,6$ еВ нижче мінімумів зони провідності та рухливістю близько $100 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ реалізовано. Доступний широкий діапазон рівнів легування фосфором як для орієнтації субстрату (001), так і для (111).

Високолеговані шари мають два типи механізмів провідності: зонна провідність через вільні електрони, створені донорними станами фосфору, і стрибкова провідність через донорні стани, пов'язані з фосфором. Останній є домінуючим механізмом транспортування фосфорного легування концентрації вище 10^{19} cm^{-3} і дає питомий опір менше 100 Омсм при кімнатній температурі. Властивості переходу легованих шарів демонструють

звичайні властивості напівпровідникового переходу завдяки зонній провідності.

У главі представлено моделювання ВJT на основі алмазів з використанням симулятора Atlas від Silvaco, в якому пропонуються та обговорюються два методи польових пластин, щоб зменшити поверхневе електричне поле на краях, щоб уникнути раннього поломки ВJT на основі алмазів.

Для зменшення електричного поля на краях ВJT на основі алмазу запропоновано і показано на рис. 2.1 два методи польових пластин.

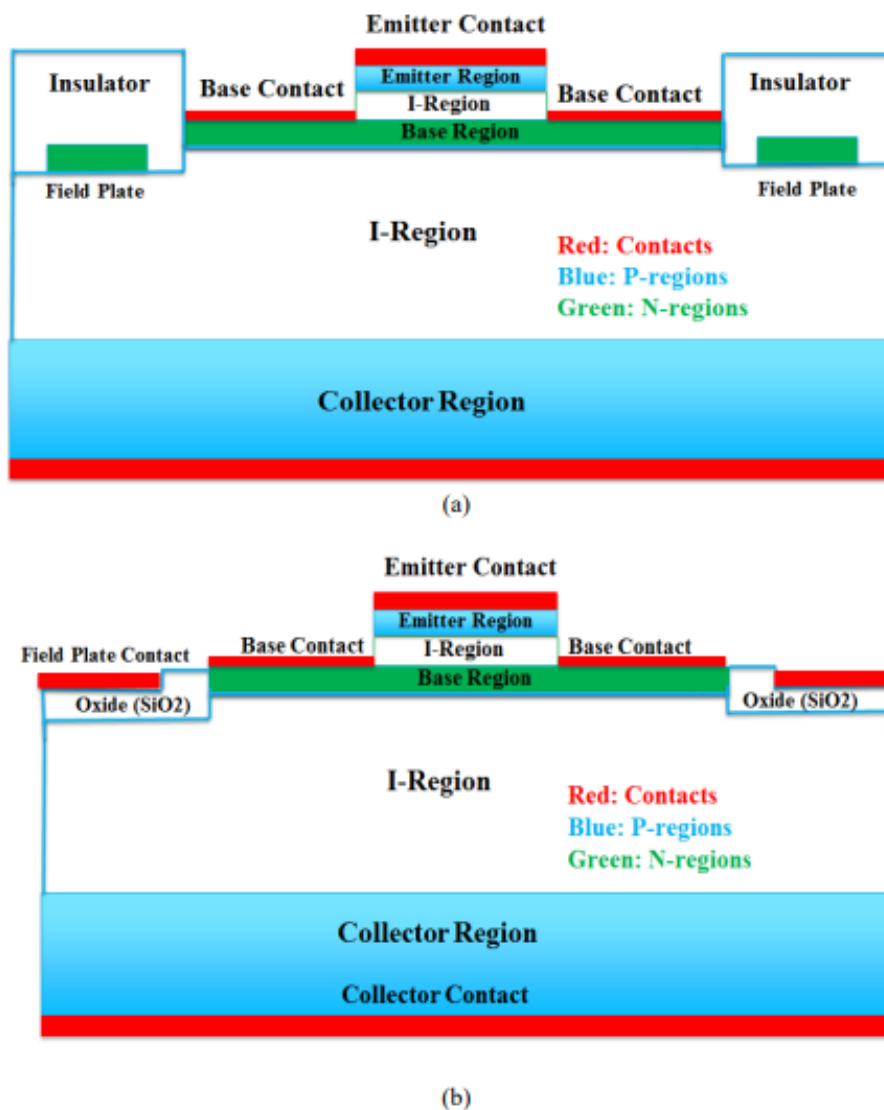


Рис.2.1. Моделювання транзистора за допомогою двох методів пластин у програмному середовищі Silvaco [11]

Концепція польової пластини полягає в підвищенні напруги пробою за рахунок зменшення піків електричного поля на краях пристрою. Полева пластина - це металевий електрод або сильно легована область, яка обриває лінії високого електричного поля при більш високих умовах зміщення на поверхнях та/або краю. Це призводить до зменшення піку електричного поля на поверхні та/або на краях.

2.3 Моделювання PIN-діодів на основі алмазу

Оскільки вдосконалення технології пристроїв на основі алмазів продовжуються з точки зору відповідних технологій вирощування та процесів після відпалу, важливо зрозуміти походження зворотнього струму витоку та поведінку таких дефектів, як різьбові дислокації в характеристиках зворотнього пробою. Було проведено кілька досліджень механізмів витоку інших матеріалів, таких як GaN, гетероструктури GaN/AlGaIn/GaN, InGaAs та Pr_2O_3 , з яких зроблено висновок, що емісія Пула-Френкеля домінує в різних діапазонах температур. Однак дослідження для аналізу зворотного струму не проводилося.

Досліджування PIN-діодів на алмазній основі, виготовлених на об'ємних алмазних підкладках, порівнюючи експериментальні дані з теорією. Температурна залежність зворотних ВАХ свідчить про те, що у зворотному струмі в основному переважає стрибкова провідність при низьких електричних полях в той час як домінуючим механізмом провідності є емісія Пула-Френкеля (PFE) у високих електричних полях. При стрибкоподібній провідності енергія носіїв нижча за максимальну енергію потенційного бар'єру між двома місцями захоплення, і, таким чином, носії можуть транспортуватися за тунельним механізмом. Однак носії можуть подолати бар'єр-пастку за допомогою термоелектронного механізму на основі ПФЕ при високому електричному полі. Представлені тут моделі стрибкоподібної провідності та PFE описують транспортування носія через потоки дислокації

в алмазі, і ці моделі потім підходять до експериментальних даних у діапазоні температур $323 \text{ K} < T < 423 \text{ K}$ [12]

Методика моделювання полягає в тому що різьбові дислокації (TD) впливають на електричні властивості алмазу, зокрема в гомеоепітаксіальних CVD синтетичних алмазних матеріалах, і вони впливають на транспортування носіїв в пристроях на основі алмазу. За рахунок утворення множин паралельних шляхів, ці дислокації можуть погіршити характеристики пристрою на основі алмазів через збільшення струму витоку.

Матеріали відносять до емісії Пула-Френкеля (PFE) провідності, яка описує польове випромінювання та повторне захоплення носіїв заряду з локалізованих станів, пов'язаних з дислокаціями потоку в континуум електронних станів. Оскільки ПФЕ виникає внаслідок термічної активації під електричним полем, цей механізм часто доводиться спостерігати при високих температурах і високих електричних полях. Струм, пов'язаний з PFE, визначається за формулою:

$$I = \frac{S\sigma}{t} V \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right) \exp\left(\frac{q}{kT} \sqrt{\frac{qV}{\pi\epsilon_i t}}\right), \quad (2.1)$$

де V - прикладена напруга;

S - загальна площа поперечного перерізу пластини;

t - загальна товщина шару, який охоплюють TD;

i -шар структури PIN-діода та області виснаження n - і p -області;

ϕ_B - висота бар'єру для випромінювання носіїв із захоплених станів;

k - постійна Больцмана;

T – температура;

q - заряд електрона;

ϵ_i — оптична (високочастотна) проникність алмазу.

Під час процесу PFE, оскільки час проходження носія для подолання висоти бар'єру коротший, ніж час діелектричної релаксації алмазу, немає достатнього часу для поляризації середовища; таким чином, використовується оптична (високочастотна) константа діелектричної проникності, яка є менш, ніж низькочастотний, у якому більше поляризаційних механізмів сприяє повній поляризації. Крім того, σ , що є провідністю, моделюється як:

$$\sigma = \frac{q\mu N_{TD}}{t}, \quad (2.2)$$

де N_{TD} – щільність дислокації потоку (см^{-2});

μ – рухливість носіїв у континуумі.

Для збільшення прикладеної напруги бар'єр для тунелювання носіїв до зони провідності/валентної зони знижується. Це збільшує ймовірність стрибків від/до ділянок дислокації потоку і, таким чином, збільшує провідність.

Аналіз температури за допомогою програмного середовища Silvaco. На рис. 2.2а показано типовий набір експериментальних напівлогарифмічних зворотних зміщень ВАХ діамантового PIN-діода в діапазоні температур 323-423 К. Всього порівняно 4 зразки: D300 (круглий поперечний переріз діаметром 280 мкм), D100 (круглий перетин діаметром 80 мкм), L400 (квадратний переріз 380 мкм \times 380 мкм) і L150 (квадратний переріз 130 мкм \times 130 мкм) відповідно, з подібними вольтамперними характеристиками. Як показано на рис. 2.2, для одного пристрою D300 струм з підвищенням температури монотонно зростає.

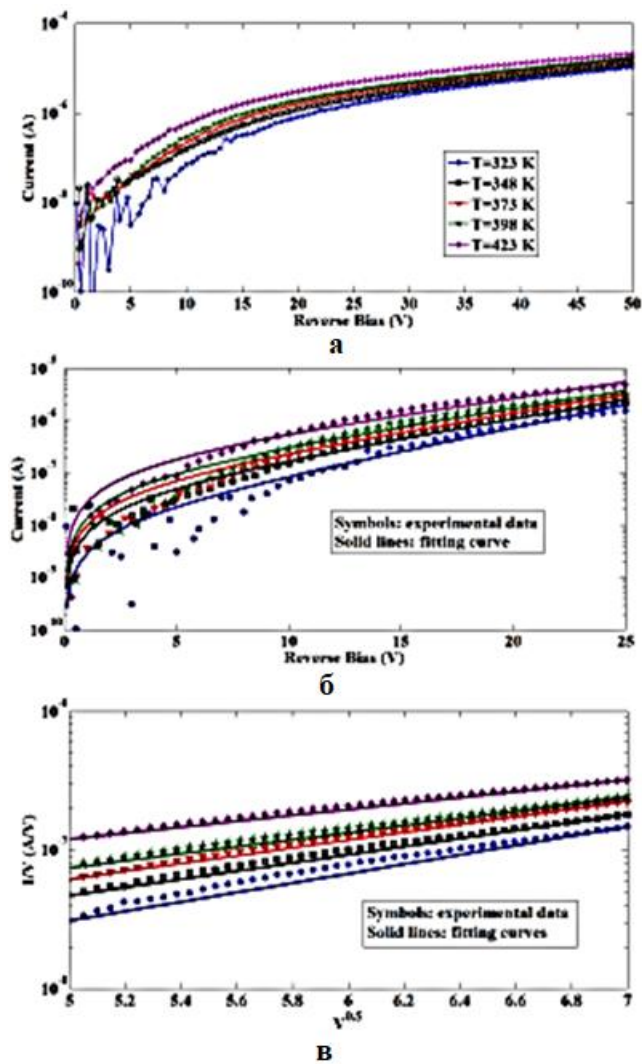


Рис. 2.2. Експериментальні ВАХ для зразка D300, коли температура змінюється від 323 К до 423 К (а) та ВАХ на основі механізму стрибків у порівнянні з експериментальними даними (б) ВАХ як функції застосовуваних зворотних напруг зміщення на основі механізму PFE (в) [13]

Для малих умов зворотного зміщення та струмів струм є шумним через експериментальні межі вимірювання. Для інтерпретації спостережуваних електричних характеристик, показаних на рис. 2.3а, підходить до дані виконуються за допомогою рівнянь (2.1) і (2.2) на рис. 2.6б і рис. 2.6в, відповідно.

Як показано на рис. 2.2 б, графік залежності $\ln(I)$ від V показує, що експериментальні дані дуже добре відповідають кривим підгонки стрибкової провідності при низьких електричних полях.

З кривих підгонки на рис. 2.6 б визначено, що середня відстань стрибків становить приблизно $5,5 \pm 0,39$ нм, тоді як енергія активації за допомогою нахилів графіка Арреніуса при малих полях визначена як приблизно $0,241 \pm 0,026$ еВ.

На рис. 2.2 с показано графік залежності $\ln(I/V)$ від V та відповідне підгонку з використанням рівняння (2.2) з b і m як параметрами підгонки. Як бачимо, отримано чудове узгодження, що свідчить про домінування транспорту Пула-Френкеля у високих електричних полях.

Для того щоб витягти загальну ефективну товщину i -шару (t), різьблення щільність дислокацій (NTD), висота бар'єру (ϕ_B), параметри m і b витягнуті з даних для всіх чотирьох зразків як функція температури, показані на рис. 2.3.

Як видно на рис. 2.3, і m , і b показують залежність $1/T$, що відповідає PFE. При вилученні щільності TD та висоти бар'єру рухливість носіїв (μ) приймається рівною $1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ в i -шарі з низьким легуванням.

На рис. 2.3 суцільна лінія підгонки експериментальних даних демонструє температурну залежність, очікувану для механізму PFE. Загальна товщина i -шару $1,33$ мкм і висота емісійного бар'єру $0,293$ еВ отримані з нахилів $m(T)$ і $b(T)$ відповідно.

Товщина i -шару добре порівнюється з експериментально виміряною товщиною на основі вимірювання ємності-напруги ($C-V$) плюс товщина n - та p -областей. Крім того, витягується викид висоти бар'єру $0,293$ еВ сумісна з аналогічними дослідженнями для інших матеріалів, де випромінювання Пула-Френкеля є домінуючим механізмом транспортування.

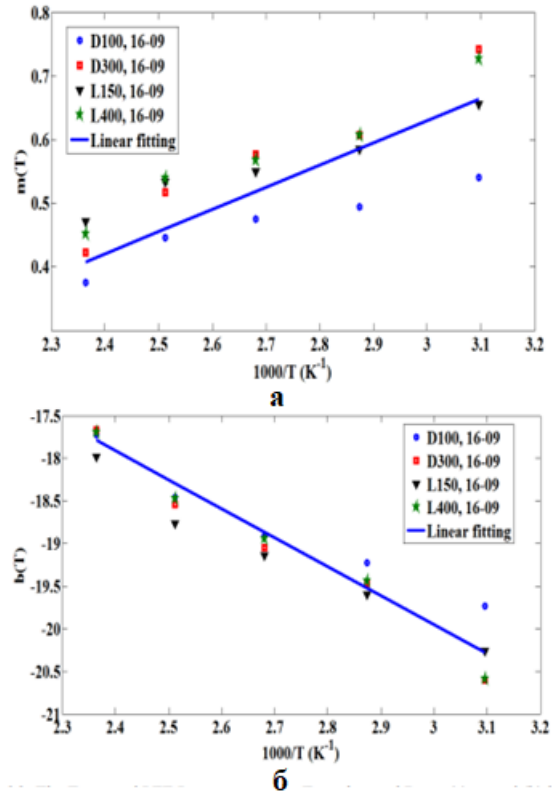


Рис 2.3. Вилучені параметри PFE з експериментальних даних для m (а) і \ln як функція температури (б) [14]. Суцільні сині лінії представляють лінійні параметри m і \ln параметрів

РОЗДІЛ 3

ОБРОБКА ТА ПОРІВНЯННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ МОДЕЛЮВАННЯ

3.1. PIN-діодні структури

Для узагальнення моделі, розглянутої вище, модель Пула-Френкеля була включена в моделювання 3D TCAD, виконане за допомогою Silvaco Atlas, в якому одночасно вирішуються стандартні статистичні дані та рівняння транспорту для вільних носіїв для моделювання електричних характеристик пристроїв [15-23].

Модель стрибкового руху для носіїв, що перебувають у домішкових станах, включена в наше моделювання. Крім того, необхідна неповна модель іонізації для точного фіксування концентрацій вільних і захоплених носіїв, оскільки енергії активації алмазів n-типу і р-типу є висока (близько кількох сотень меВ). У випадку алмазу n-типу використовується постійне значення 0,57 еВ для енергії активації допантів фосфору, тоді як значні зміни енергії активації допантів бору як функції легуванням концентрації використовується для алмазу р-типу.

На основі рівняння нейтральності заряду під час виконання моделювання розраховується концентрація вільних носіїв. Ще один важливий параметр — низькопольна рухливість носіїв залежить від легування концентрації та температури решітки алмазу. На основі підгонки до експериментальних вимірювань Хола для електронів і дірок, емпірична модель мобільності реалізована в Atlas за допомогою вбудованого інтерпретатора мови С.

Крім того, температурна залежність ширини забороненої зони включена в моделювання для температур вищих за кімнатну.

Для правильного моделювання реалістичних діамантових PIN-діодів в умовах зворотного зміщення в 3D-симуляції змішаного режиму

використовується паралельна комбінація ідеального PIN-діода на основі алмазів і опору шунта. Змішане моделювання – це симулятор ланцюга моделювати відносно невеликі схеми, які містять напівпровідникові прилади, для точних компактних моделей, яких не існує, або схеми, де пристрої відіграють важливу роль, повинні бути точно змодельовані.

Як показано на рис. 3.1, опір шунта в змішаному режимі моделювання залежить від електричного поля та температури на основі механізму викиду Пула-Френкеля.

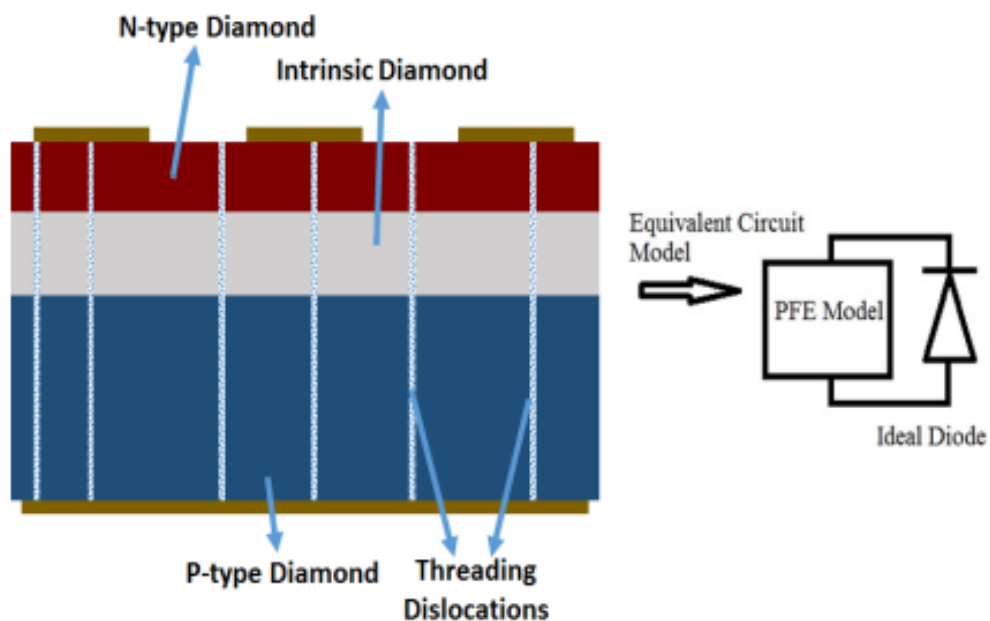


Рис 3.1. Моделювання TCAD PIN-діодів на основі алмазів [17]

На рис. 3.2 представлені результати моделювання з використанням середніх параметрів, отриманих на рис. 3.2, у порівнянні з експериментальними даними для діапазону температур 323-423 К. Як показано на рис. 3.3, існує хороша узгодженість між результатами моделювання та експериментальними даними.

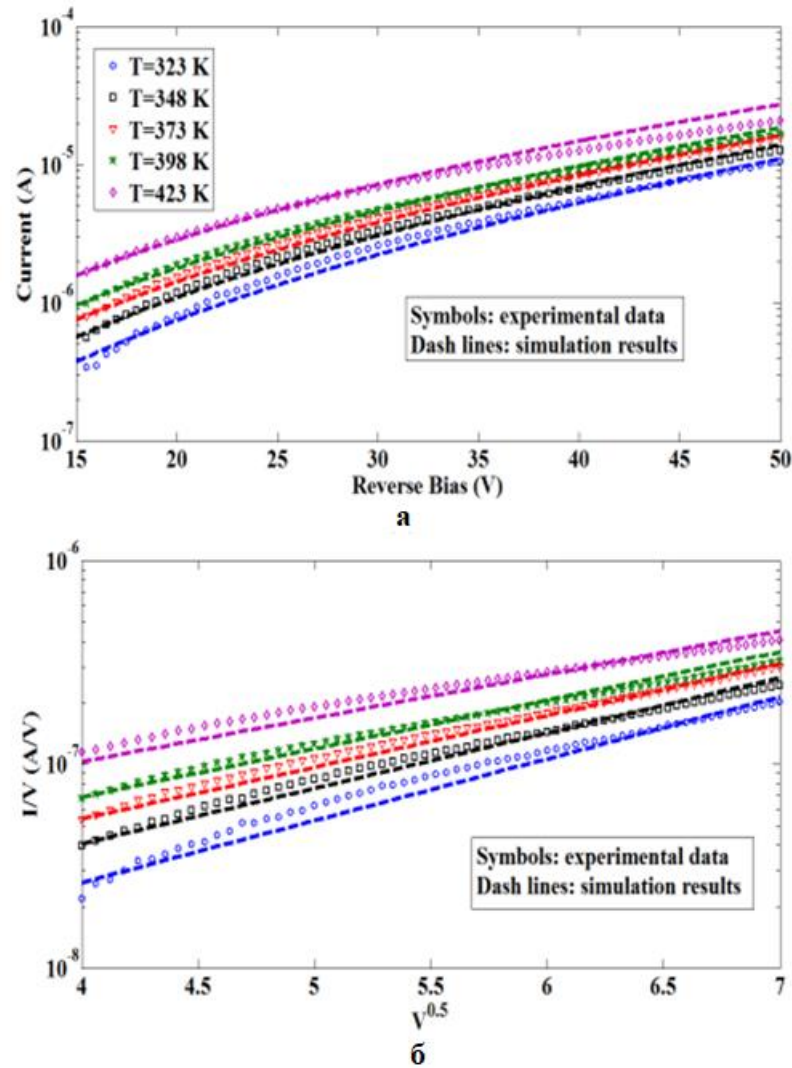


Рис. 3.2 Змодельовані ВАХ в порівнянні з експериментальними даними зразка D300, коли температура змінюється від 323 К до 423 К(а) та відображення PFE результатів моделювання порівняно з експериментальними даними зразка D300 (б) [17]

Щоб дослідити вплив щільності TD на характеристики I-V, на рис. 3.3 показані змодельовані характеристики I-V для зразка D300 при 323 К. Воно демонструє, що щільність TD не впливає на прямі характеристики I-V навіть для високої щільності TD, тоді як вона значно змінює зворотні I-V характеристики, тому щільність TD слід ретельно контролювати в процесі виготовлення.

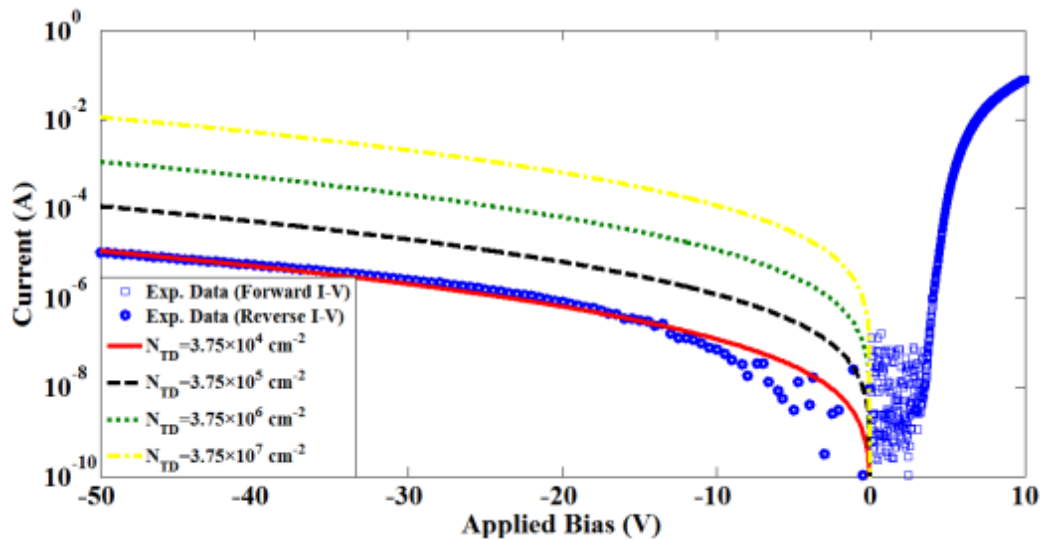


Рис 3.3 Змодельовані ВАХ зразка D300 при 323 К для різної густини гвинтових дислокацій [17]

3.2. Об'ємні структури із процесом старіння

У першій структурі, показаній на рис. 3.4а, польові пластини є N+ областями з обох боків пристрою, тоді як на рис. 3.4 б представлено другий метод, у якому польові пластини є металевими.

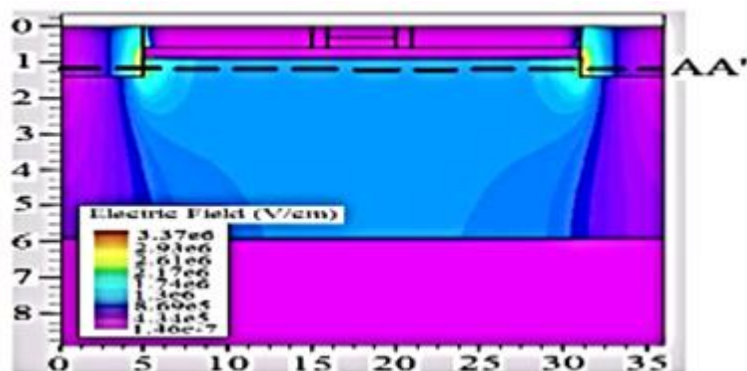
Варто згадати, що польові пластини в обох методах можуть бути покриті ділянками ізолятора, щоб мінімізувати вплив польових пластин на I-V характеристики ВІТ. У ВІТ на основі алмазу існує і-шар між областями випромінювача та бази, а також між базою та в області колектора, щоб зменшити складові струму витоку.

На рис. 3.5 представлено 2D розподіл електричного поля трьох структур при однакових умовах зміщення ($V_{CE} = -500$ В і $V_{EB} = 4,7$ В): а - ВІТ на основі алмазу без будь-якої польової пластини, б - ВІТ на основі алмазу з польовими пластинами як показано на рис. 3.4 а і рис. 3.4 в.

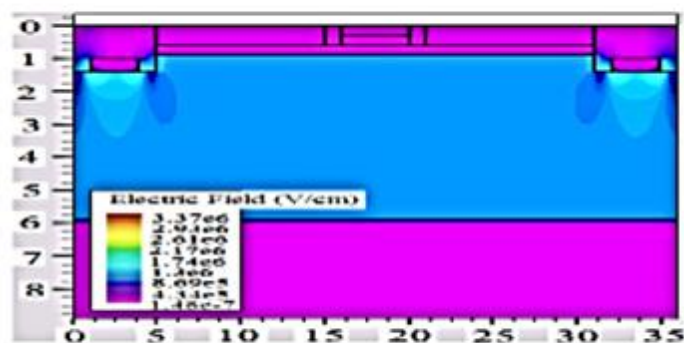
ВІТ на основі алмазу з польовими пластинами, як показано на рис. 3.4 б. Як показано на рис. 3.5, без будь-якої польової пластини на краях шару між базовою та колекторною областями є плями гарячого електричного поля, тоді як перша архітектура з польовими пластинами (рис.3.4а) усуває ці гарячі

точки, а друга архітектура польових пластин (рис.3.4б) переміщує гарячі точки від країв до оксидних областей навколо польових пластин.

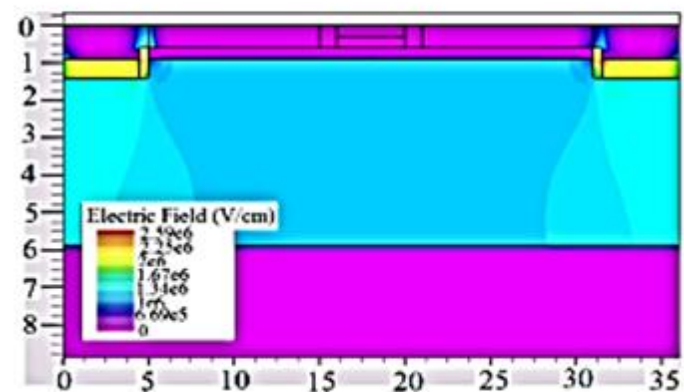
Щоб кількісно порівняти електричне поле на краях ВІТ, на рис. 3.5 представлено порівняння між електричним полем конструкції без будь-якої польової пластини та структури, показаної на рис. 3.5 а на лінії розрізу АА'.



а



б



в

Рис. 3.4 Розподіл електричного поля ВІТ на основі алмазів без будь-якої польової пластини (а), ВІТ на основі алмазу з польовими пластинами (б),

і на основі алмазу ВІТ з польовими пластинами (в), при $V_{CE} = -500$ В і $V_{EB} = 4,7$ В [22].

Рис. 3.5 демонструє, що польові пластини зменшують електричне поле на краях пристрою, де є ймовірність раннього пробію. На рис. 3.5 показано, що електричні поля на краях для випадків із польовими пластинами, покритими повітрям та SiO_2 , подібні.

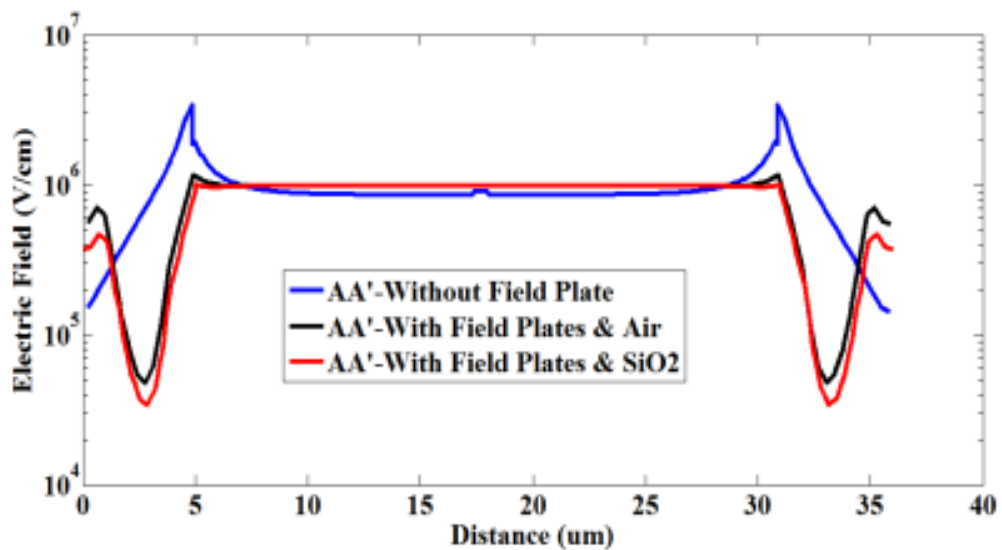


Рис. 3.5 Електричне поле на лінії розрізу AA' для трьох випадків [22]: ВІТ без будь-якої польової пластини, ВІТ з польовими пластинами (показано на рис. 3.4 а), оточені повітрям і SiO_2 відповідно при $V_{CE} = -500$ В і $V_{EB} = 4,7$ В

Для подальшого вдосконалення електро зменшення поля на краях пристрою, рис. 3.6 показує, що високоякісні матеріали можуть бути реалізовані для оточування польових пластин. Як показано на рис. 3.6, електричне поле на краях зменшується більше, коли використовуються матеріали з високим вмістом к.

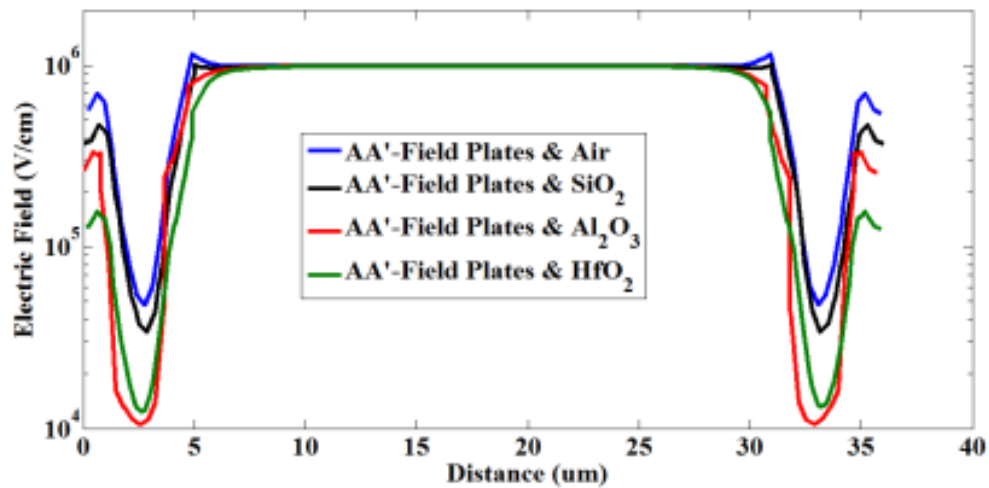


Рис 3.6. Електричне поле на лінії розрізу AA' для різних матеріалів, включаючи високоякісні матеріали, що оточують польові пластини при $V_{CE} = -500$ В і $V_{EB} = 4,7$ В [22]

Для другої запропонованої конструкції з польовими пластинами, показаними на рис. 3.6б, електричні поля на лінії розрізу AA' показані на рис. 3.7 при $V_{CE} = -500$ В і $V_{EB} = 4,7$ В. Як видно, електричні поля на краях пристрою з польовими пластинами приблизно на порядок нижче, ніж у пристрою без польової пластини, тоді як вище електричне поле має місце на оксиді поблизу польових пластин

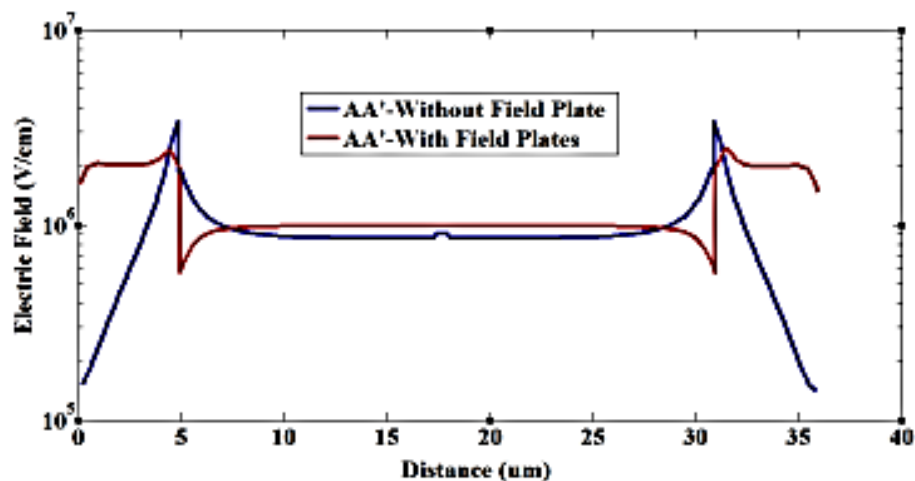


Рис. 3.7 Електричне поле на лінії розрізу AA' для ВJT на основі алмазів без будь-якої польової пластини та ВJT на основі алмазу з польовими пластинами, показаними на рис. 3.4б, при $V_{CE} = -500$ В і $V_{EB} = 4,7$ В [22]

Провідність через різьбові дислокації (TD) у PIN-діодах на основі алмазу була проаналізована при різних температурах на основі електричної провідності через TD, описаної механізмами стрибкової провідності та емісії Пула-Френкеля (PFE). При малих і високих електричних полях відповідно. Ці моделі забезпечують відмінну підгонку до струму витоку в залежності від температури та зміщення. Енергія активації та середня відстань стрибків були отримані з експериментальних даних на основі стрибків рівняння провідності [22].

З рівнянь ПФЕ з експериментальних даних було виділено висоту бар'єру TD та щільність TD алмазу. Нарешті, результати моделювання TCAD, які добре узгоджувалися з експериментальними даними, підтвердили стрибкоподібну провідність і механізм PFE як основні джерела зворотного струму в вимірюваних PIN-діодах на основі алмазів.

ВИСНОВКИ

У першому розділі наведено загальні відомості TCAD симуляторів, та звернено увагу на такі програмні середовища як DeckBuild та COMSOL Multiphysics. DeckBuild є надзвичайно потужним і гнучким інструментом, який простий у використанні та надає безліч автоматизованих функцій. Серед цих функцій – здатність DeckBuild до генерування безпомилкового синтаксису симулятора на основі зручних спливаючих вікон. Програмне забезпечення COMSOL Multiphysics створює послідовності для запису всіх кроків, які створюють геометрію, сітку, фізику, дослідження та налаштування вирішувача, а також візуалізацію та презентацію результатів

У другому розділі наведено методику моделювання в TCAD та описано на прикладі біполярних транзисторів, PIN-діодів які на основі алмазу. Моделювання процесу зазвичай використовується як вхід для моделювання пристрою, моделювання електричних характеристик пристрою. Розглядаючи процес проектування інтегральної схеми як серію кроків зі зниженням рівня абстракції, логічний синтез буде на найвищому рівні, а TCAD, будучи найближчим до виготовлення, буде фазою з найменшою кількістю абстракції.

У третьому розділі описано провідність у PIN-діодах на основі алмазу була проаналізована при різних температурах на основі електричної провідності через TD, описаної за допомогою механізму емісії Пула-Френкеля (PFE). Ця модель забезпечила чудове пристосування до струму витоку, оскільки функція температури та зміщення.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Technology developments and first measurements of Low Gain Avalanche Detectors (LGAD) for high energy physics applications/ G. Pellegrini et al. // Nucl. Instrum. Methods A. – 2014. – 765.
2. 4D tracking with ultra-fast silicon detectors/ H. F. W. Sadrozinski et al.// Rep. Prog. Phys. – 2018.– Vol. 81, no. 2.
3. First FBK production of 50 um ultra-fast silicon detectors/ V. Sola et al.// Nucl. Instrum. Methods A, 924, 2019, 11th International Hiroshima Symposium on Development and Application of Semiconductor Tracking Detectors.
4. Radiation hardness of the low gain avalanche diodes developed by NDL and IHEP in China/ Y. Fan et al. // Nucl. Instrum. Methods A. – 2020.– 984.
5. Beam test results of NDL Low Gain Avalanche Detectors (LGAD) / S. Xiao et al. // Nucl. Instrum. Methods A. – 2021 – 989.
6. Radiation effects on NDL prototype LGAD sensors after proton irradiation/ Y. Tan et al. // Nucl. Instrum. Methods A. – 2021. – 1010.
7. Development of a technology for the fabrication of low-gain avalanche diodes at bnl / G. Giacomini et al. // Nucl. Instrum. Methods A. – 2019.– 934.
8. A Mobility Model Including the Screening Effect in MOS Inversion Layer/ Masayoshi Shirahata, Hiromi Kusano, Norihiko Kotani, Shigeru Kusanoki, Yoichi Akasaka, // IEEE Transactions on Computer-Aided Design, Vol. 11.
9. MOS Device Modeling at 77 K / Siegfried Selberherr // IEEE Transactions on Electron Device, Vol.36, No 8, August 1989
10. Single-Electron Transistor (SET) Process and Device Simulation Using SYSPROPSYS TCAD Tools/ Uda Hashim, Amiza Rasmi // American Journal of Applied Sciences. – 2006.– 3 (7) . – P. 1933-1938.
11. Process and Device Simulation of 20nm CMOS Inverter using Sentaurus Synopsys TCAD/ Muhammad Suhaimi Sulong, Asyiatul Asyikin Jamry, Siti Maryaton Shuadah Shuib, Rahmat Sanudin, Marlia Morsin, Mohd Zainizan

Sahdan // FEIIC Symposium on Engineering and Technology, Kuching, Sarawak, Malaysia, 15-16 December 2008

12. Compact Model of Drain Current in Short-Channel Triple-Gate FinFETs/ N. Fasarakis, A.Tsormpatzoglou, D.H.Tassis, I.Pappas, K.Papathanasiou, M.Bucher, G.Ghibaudo, C.A.Dimitriadis // IEEE Transactions on electron devices, vol. 59, No.7, July 2012

13. Investigation of conduction mechanisms of Ion-Conducting, bridging memory devices (CBRAM/PMC/ECM) / K. B. Campbell // 2012.

14. Study of Multilevel Programming in Programmable Metallization Cell (PMC) Memory / U. Russo, D. Kamalanathan, D. Ielmini, A. L. Lacaita, M. N. Kozicki // IEEE Trans. on Electron Devices. – 2012. – vol. 33, no. 2. – P. 257-259.

15 / J. R. Jameson et al // IEEE Electron Device Letters. – 2012. – vol. 33, no. 2. – pp. 257-259.

16. Voltage-driven on-off transition and tradeoff with program and erase current in Programmable Metallization Cell (PMC) memory/ D. Kamalanthan, U. Russo, D. Ielmini, and M. N. Kozicki // IEEE Electron Device Letters. – 2009. – vol. 30, no. 5. – P. 553-555.

17. Redox-Based Resistive Switching Memories – Nanoionic Mechanisms, Prospects, and Challenges / R. Waser, R. Dittmann, G. Staikov, K. Szot // Adv. Mater. – 2009. – vol. 21. – P. 2632-2663.

18. Electrochemical Methods: fundamentals and applications / A. Brad, L. Faulkner // 1 st ed. New York, United State of America: John Wiley and sons, 1980.

19. The theory of Electrical Conduction and breakdown" in Solid Dielectrics/ J. J. O'Dwyer // Oxford: Clarendon Press, 1973.

20. Mass transport in chalcogenide electrolyte films - materials and applications/ M. N. Kozicki, M. Mitkova // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2006. – vol. 352. – P. 567-577.

21. Exponential ionic drift: fast switching and low volatility of thin-film memristors/ D. B. Strukov, R. S. Williams // *Appl Phys A.* – 2009. – vol. 94. – P. 515-519.
22. The proposed model is verified by 3-D TCAD mixed-mode device simulations / S. Stehlik, K. Shimakawa, T. Wagner, and M. Frumar // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2012. – vol. 45. – P. 205304-205308.
23. Ag-Photodoping in Ge-Chalcogenide Amorphous Thin Films-Reaction Products and their Characterization/ M. Mitkova, M. N. Kozicki // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* – 2007. – vol. 68. – P. 866-872.
24. Ag doped chalcogenide glasses and their applications/ M. Frumar, T. Wagner // *Solid State and Materials Science.* – 2003. – vol. 7. – P. 117-126.
25. <https://silvaco.co.kr/examples> – Silvaco, TCAD Exaples, дата доступу: 20.05.2022 р.
26. Приладово-технологічне моделювання Silvaco TCAD при викладанні навчальних дисциплін інженерно-технічного циклу / [І.П. Бурик, А.О. Головня, М.М. Іващенко] // *Матеріали X Науково-методичної конференції, м.Суми, 14-15 травня 2020 р.* – Суми: СумДУ, 2020. – С. 39-41.
27. Доля П.Г. *Основи моделювання в COMSOL Multiphysics* / Доля П.Г. — Харків: Просвіта, 2019. - 167с.
28. <https://silvaco.com/> — головний сайт програми, дата доступу: 22.05.2022.
29. <https://www.electronics-tutorials.ws/> — навчальний довідник, дата доступу: 27.02.2021
30. *Micro- and nano- mechanics* / B.C. Prorok, Y. Zhu, H.D. Espinosa // *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology.* - American Scientific Publishers, 2004. – Vol. 5. – 670p.
31. <https://www.photond.com/> — бібліотека результатів експериментів у середовищі TCAD, дата доступу: 20.04.2022

СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ



КОНОТОПСЬКИЙ ІНСТИТУТ
СУМСЬКОГО ДЕРЖАВНОГО УНІВЕРСИТЕТУ

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ БАЗОВИХ КОМПОНЕНТІВ НАПІВПРОВІДНИКОВОЇ ТЕХНОЛОГІЇ: ДІОДІВ ТА БІПОЛЯРНИХ ТРАНЗИСТОРІВ

Студент гр. ЕІз-81к

С.М. Янковський

Науковий керівник
к.ф.-м.н., доцент

І.П.Бурик

Конотоп 2022

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні основи принципу дії, структурні та робочі характеристики напівпровідникових діодів та біполярних транзисторів.

Мета роботи полягає у вивченні фізичних моделей напівпровідникових діодів та біполярних транзисторів, алгоритмів їх комп'ютерного моделювання, аналізу отриманих експериментальних результатів.

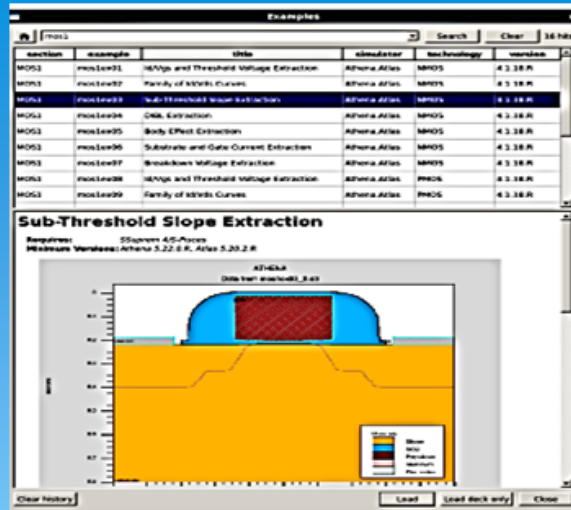


Рис.1.1. Програмне середовище DeckBuild
 DeckBuild — це інтерактивне графічне середовище виконання для розробки входних колод для моделювання процесів і пристроїв. Він складається з вікна для створення та редагування входної колоди, вікна для виводу і керування симулятором, а також набору спливаючих вікон для кожного симулятора, які забезпечують повну підтримку мови та під час виконання.

Активация Win
 Чтобы активировать

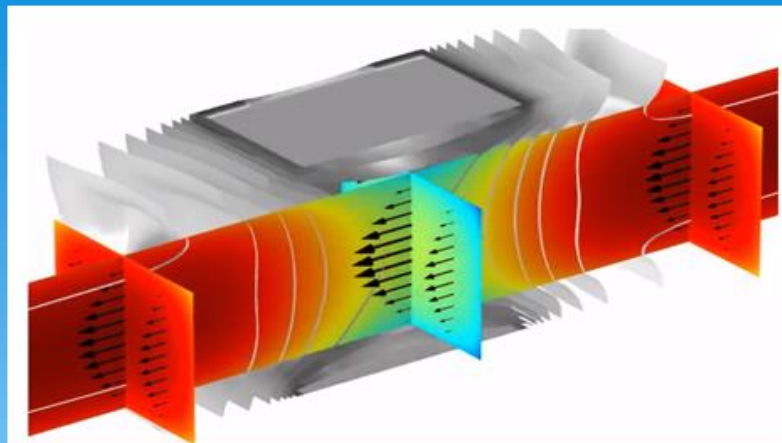


Рис 1.2. Приклад моделювання напівпровідникового елемента в програмному середовищі COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics — це потужне інтерактивне середовище моделювання, яке використовується для моделювання та вирішення всіх видів наукових та інженерних проблем.

Активация Win
 Чтобы активировать

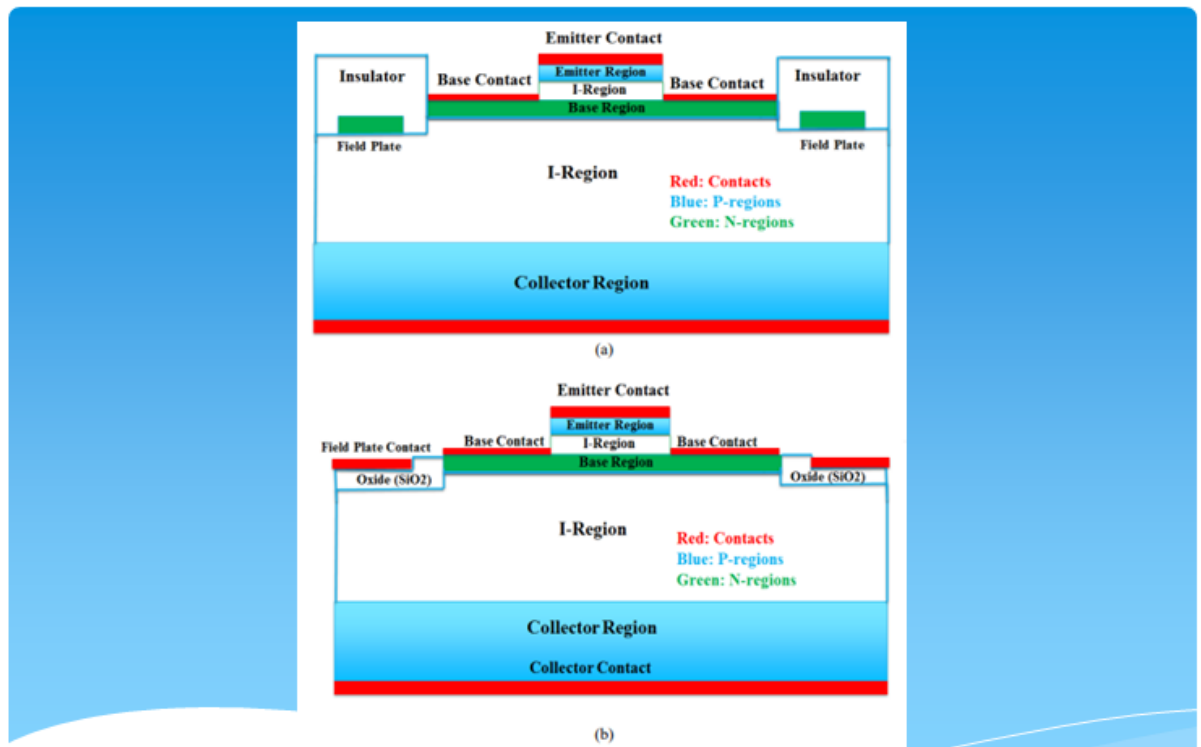


Рис.1.3. Моделювання транзистора за допомогою двох методів пластин тп програмного середовища Silvaco. Активация Win: Чтобы активировать

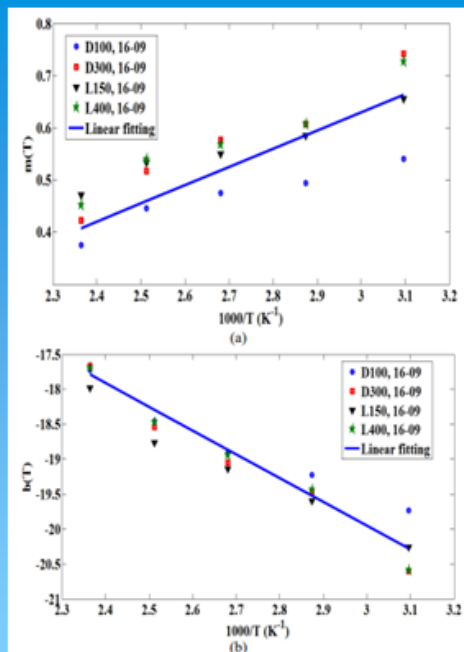


Рис 1.4 Вилучені параметри PFE з експериментальних даних: (а) m і (б) b як функція температури. Суцільні сині лінії представляють лінійні параметри витягнутих m і b параметрів

Активация Win

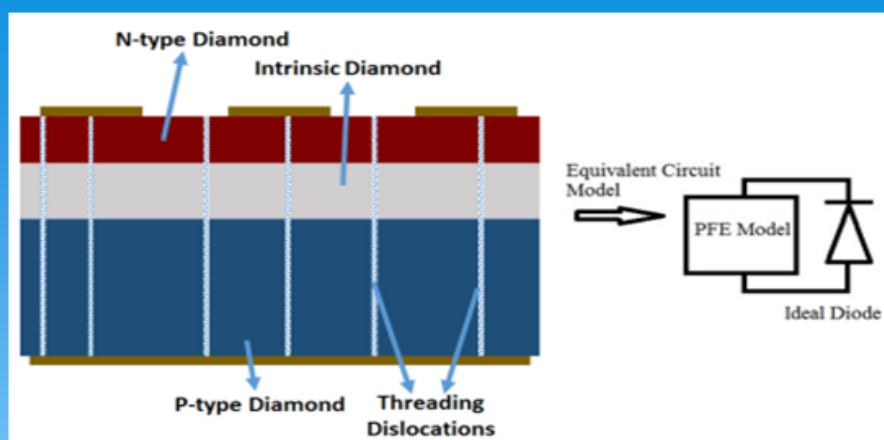


Рис.1.5 Метод моделювання TCAD PIN-діодів на основі алмазів

Змішане моделювання – це симулятор ланцюга моделювати відносно невеликі схеми, які містять напівпровідникові прилади, для точних компактних моделей, яких не існує, або схеми, де пристрої відіграють важливу роль, повинні бути точно змодельовані.

Активация Win
Чтобы активировать

ВИСНОВКИ

У першому розділі наведено загальні відомості TCAD симуляторів, та звернено увагу на такі програмні середовища як DeckBuild та COMSOL Multiphysics. DeckBuild є надзвичайно потужним і гнучким інструментом, який простий у використанні та надає безліч автоматизованих функцій. Серед цих функцій – здатність DeckBuild до генерування безпомилкового синтаксису симулятора на основі зручних спливаючих вікон. Програмне забезпечення COMSOL Multiphysics створює послідовності для запису всіх кроків, які створюють геометрію, сітку, фізику, дослідження та налаштування вирішувача, а також візуалізацію та презентацію результатів

У другому розділі наведено методику моделювання в TCAD та описано на прикладі біполярних транзисторів, PIN-діодів які на основі алмазу. Моделювання процесу зазвичай використовується як вхід для моделювання пристрою, моделювання електричних характеристик пристрою. Розглядаючи процес проектування інтегральної схеми як серію кроків зі зниженням рівня абстракції, логічний синтез буде на найвищому рівні, а TCAD, будучи найближчим до виготовлення, буде фазою з найменшою кількістю абстракції.

У третьому розділі описано провідність у PIN-діодах на основі алмазу була проаналізована при різних температурах на основі електричної провідності через TD, описаної за допомогою механізму емісії Пула-Френкеля (PFE). Ця модель забезпечила чудове пристосування до струму витoku, оскільки функція температури та зміщення.