

一维PN结二极管稳态模型的数值模拟

张志刚, 刘长军, 黄卡玛, 古 健

(四川大学 电子信息学院, 四川 成都 610064)

摘 要: 用GUMMEL提出的一种非耦合算法对一维PN结二极管进行数值模拟, 数值计算中采用有限差分结合解三对角矩阵的方法, 通过对电场和电势的计算, 得到了正偏、反偏和零偏置情况下电场、电势分布。收敛速度和计算的精确程度较普通算法有了一定的提高, 为下一步射频二极管非稳态模拟奠定了基础。

关键词: 半导体器件; 非耦合算法; PN结

中图分类号: TN3

文献标识码: A

文章编号: 1008-8814(2005)01-0028-03

在完成半导体器件的结构尺寸、杂质分布设计之后, 通过数值模拟技术对器件的性能做出定量的预计, 减少研制费用、缩短设计周期。器件模拟可以为设计提供更深层次的信息—内部各物理量的分布。八十年代, 国外许多科研人员对半导体PN结器件进行了大量的研究, 并且取得了不少成果, 由于当时计算机条件的限制, 使得模型较为简单, 采用的近似也较多, 人为干预也比较多。PN结是电子系统的构成基础, 而对一维PN结二极管的研究也是对其它半导体元件进行数值模拟的基础。本文的主要目的是建立一种PN结二极管的一维稳态的计算机分析模型, 并且编制程序进行数值模拟。

1 研究内容及方法

1.1 基本方程

通常情况下, 半导体器件的行为可由电子连续性方程、空穴连续性方程和泊松方程描述。要用一组耦合、非线性、刚性的偏微分方程来描述^{[1], [2]}。

电子、空穴连续性方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} = G - R + (1/q) \nabla \cdot J_n \\ \frac{\partial p}{\partial t} = G - R - (1/q) \nabla \cdot J_p \end{cases} \quad (1a)$$

电子与空穴流方程为:

$$\begin{cases} J_n = qn\mu_n E + qD_n \nabla n \\ J_p = qp\mu_p E - qD_p \nabla p \end{cases} \quad (2a)$$

$$\text{泊松方程: } \nabla^2 \varphi = -q(p - n + N) / \epsilon \quad (3)$$

其中:

n : 电子浓度(m^{-3}); p : 空穴浓度(m^{-3}); E : 电场(V/m); φ : 电势(V); J_n : 电子流密度(A/m^2); J_p : 空穴流密度(A/m^2); N : 净掺杂浓度(m^{-3}); ϵ : 介电常数; G : 产生项; R : 复合项; μ_n : 电子迁移率($\text{m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$); μ_p : 空穴迁移率($\text{m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$); D_n : 电子扩散系数(m^2/s); D_p : 空穴扩散系数(m^2/s)^[3]。

收稿日期: 2004-10-20

作者简介: 张志刚(1978-),男,山西省大同市人,硕士研究生,主要从事电磁兼容和微波电路相关的工作。

移率($\text{m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$); D_n : 电子扩散系数(m^2/s); D_p : 空穴扩散系数(m^2/s)^[3]。

1.2 一维稳态模拟分析以及算法

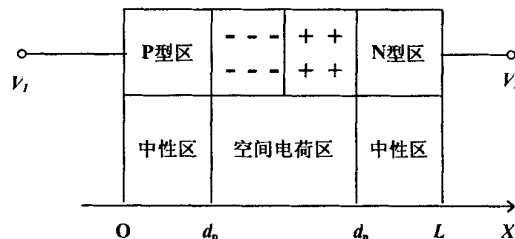


图1 一维PN结二极管模型

如图1所示。为本文采用的一维PN结的模型, 结长为 L , 假定半导体材料载流子浓度满足玻尔兹曼统计分布决定; 杂质全部电离, 边界上($x=0$ 和 $x=L$ 处)为热平衡态。PN结为 p^+nm^+ 结构, 两侧采用欧姆接触, 在 n^+ 基底硅材料上掺杂一定浓度的杂质, 在起表面上生长一层 n 型外延层^[4]。器件两端无电流堆积, 边界上的温度为 300k 。在边界上载流子浓度满足: $np = n_i^2$, $p - n + N = 0$, 其中: n_i 为本征载流子浓度(m^{-3})。器件内部初始温度为 300k 。

$$\begin{cases} G - R + (1/q) \nabla \cdot J_n = 0 \\ G - R - (1/q) \nabla \cdot J_p = 0 \end{cases} \quad (4a)$$

$$\text{对于稳态}^{[5]}, \text{不考虑时间因子: } \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \frac{\partial p}{\partial t} = 0, \text{ 此} \quad (4b)$$

时方程变为:

$$\begin{cases} J_n = qn\mu_n E + qD_n \nabla n \\ J_p = qp\mu_p E - qD_p \nabla p \end{cases} \quad (4c)$$

$$\nabla^2 \varphi = -q(p - n + N) / \epsilon \quad (4d)$$

采用有限差分的方法解上述方程组, 具体计算过程中做以下处理^{[6], [7]}:

(I) 为使计算结果更加精确以及防止计算过程出现的溢出, 将方程组进行“归一化”处理。

(2) 确定采用非耦合算法^[8]来求解一维模拟的几个基本方程。

非耦合算法: 将三个方程按照顺序迭代求解

$$\begin{matrix} p_0 & \leftarrow & \varphi_1 & \leftarrow & n_1 & \leftarrow & p_1 & \leftarrow & \varphi_2 & \leftarrow & n_2 & \leftarrow & p_2 & \leftarrow & \varphi_3 \\ n_0 & \leftarrow & p_0 & \leftarrow & \varphi_1 & \leftarrow & n_1 & \leftarrow & p_1 & \leftarrow & \varphi_2 & \leftarrow & n_2 & \leftarrow & p_2 \end{matrix}$$

每得到一次解(n_1, p_1, φ_1)要计算三次, 本文主要

介绍求解的第一步即假设 p_0, n_0 固定求解

φ_1 的过程而得到电场、电势的分布情况。经

归一化处理后, 泊松方程可以表示为:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -(p - n + N) \quad (5)$$

(1) 第一类边界条件下, 即假定

$$\varphi(0) = V_1, \quad \varphi(L) = V_2.$$

对各物理量离散化: 对于稳态 φ, n, p 只是空间的函数, 将 PN 结 N 等分, 这样各物理量可以写为: $\varphi(k), n(k), p(k)$, 其中: $k \in [0, N]$, $\Delta x = L/N = h$, 这样泊松方程离散化为:

$$\begin{aligned} & \varphi(k+1) + \varphi(k-1) - 2\varphi(k) \\ &= -h^2 \times [p(k) - n(k) + N(k)] \\ &= C(k) \quad k \in [1, N-1] \end{aligned}$$

$k=1$ 时:

$$\begin{aligned} & \varphi(0) - 2\varphi(1) + \varphi(2) \\ &= C(1) \Rightarrow -2\varphi(1) + \varphi(2) \\ &= C(1) - \varphi(0) \end{aligned}$$

$$k=2 \text{ 时: } \varphi(1) - 2\varphi(2) + \varphi(3) = C(2)$$

$k=N-1$ 时:

$$\begin{aligned} & \varphi(N-2) - 2\varphi(N-1) + \varphi(N) = C(N-1) \\ & \Rightarrow \varphi(N-2) - 2\varphi(N-1) = C(N-1) - \varphi(N) \end{aligned}$$

最后得到矩阵形式的方程为:

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & -2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varphi(1) \\ \varphi(2) \\ \varphi(3) \\ \dots \\ \varphi(N-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C(1) - \varphi(0) \\ C(2) \\ C(3) \\ \dots \\ C(N-1) - \varphi(N) \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$(2) \text{ 第二类边界条件下, 即 } \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=N} = 0.$$

用类似的方法, 泊松方程以及边界条件离散化处理过程为:

$$\begin{aligned} & \varphi(k+1) + \varphi(k-1) - 2\varphi(k) \\ &= -h^2 \times [p(k) - n(k) + N(k)] \\ &= C(k) \quad k \in [1, N-1] \end{aligned}$$

$$k=1 \text{ 时: } \varphi(0) - 2\varphi(1) + \varphi(2) = C(1)$$

$$k=2 \text{ 时: } \varphi(1) - 2\varphi(2) + \varphi(3) = C(2)$$

依次类推:

$k=N-1$ 时:

$$\varphi(N-2) - 2\varphi(N-1) + \varphi(N) = C(N-1)$$

$$\text{边界条件为: } \begin{cases} \varphi(0) - \varphi(1) = 0 \\ \varphi(N-1) - \varphi(N) = 0 \end{cases} \quad (7)$$

这样可以得到三对角矩阵方程为:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varphi(0) \\ \varphi(1) \\ \varphi(2) \\ \varphi(3) \\ \dots \\ \varphi(N-1) \\ \varphi(N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C(0) \\ C(1) \\ C(2) \\ C(3) \\ \dots \\ C(N-1) \\ C(N) \end{bmatrix} \quad (8)$$

其中: $C(0)=0, C(N)=0$ 由边界条件得到。在上述边界条件下求解矩阵方程(6)、(8), 可得PN结的电势 φ 的分布, 再根据 $E = -\nabla \varphi$ 得到PN结电场 E 的分布情况。

2 模拟结果及分析

(1) 在第一类边界条件下: PN结两端处于零偏置状态以及在正偏和反偏状态条件下(两端加1伏特的正或反偏置电压)所得到电势与电场分布如图2和图3。由图2可以看出, PN结电势在边界两点之间变化, PN结空间电荷区的电势变化最大, 可见电压主要降落在电荷区上, 并且大部分电压降落于电荷区轻掺杂一侧, 这与理论结果基本相符。

由图3可以看出: 突变PN结空间电荷区内的电场呈线性分布最大的场强位于 $x=500$ 处(P型区与N型区的分界处), 电场连续。中性区的电场基本无变化。正偏条件下, 电场升高。而反偏条件下, 电场降低。

$$(2) \text{ 在第二类边界条件下: } \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=L} = 0,$$

PN结二极管的电势、电场分布, 如图4、图5所示。

由图4可以看到, 第二类边界条件下, 电势基本降落在PN结的空间电荷区, 而中性区的电势变化很小, 这与实际情况相符合。图5所示, 这一条件下, 中性区的电场近似为零, 电场基本上分布在PN结的空间电荷区。电场最大值也在 $x=500$ 处, 且在空间电荷区线性分布。

3 结 语

对一维PN结二极管在零偏、正偏、反偏以及第二类边界条件下的电场、电势分布做了数值模拟, 得到了电场和电势的分布, 与理论结果吻合较好。在数值计算中应用了有限差分结合解三对角矩阵的方法, 使用Fortran语言编程, 计算速度和结果精确程度都得到了一定的提高。下一步工作是继续使用前述的非耦合算法对模型的其它重要物理参量进行求解。本文工作是非耦合算法的第一步, 它为后面的非稳态PN结求解奠定了很好的基础。

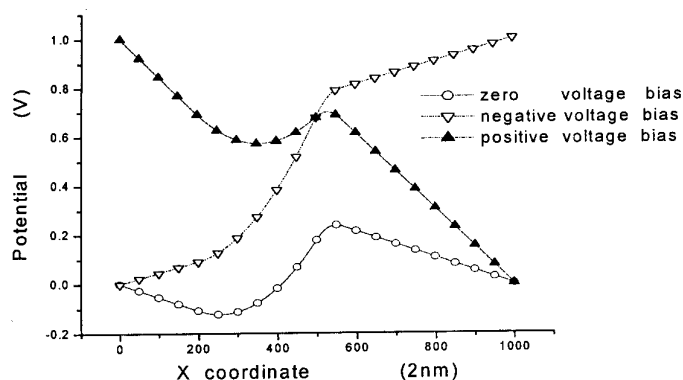


图2 零偏、正偏、反偏电压条件下一维PN结二极管电势分布

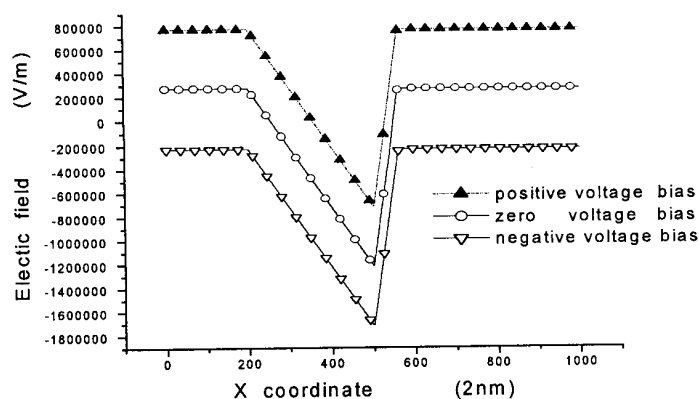


图3 零偏、正偏、反偏电压条件下一维PN结二极管的电场分布

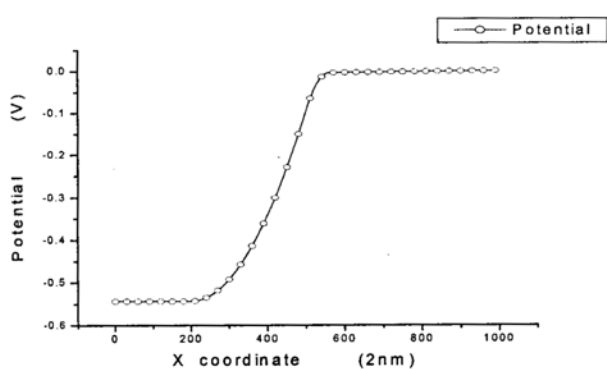


图4 第二类边界条件下一维PN结二极管的电势分布

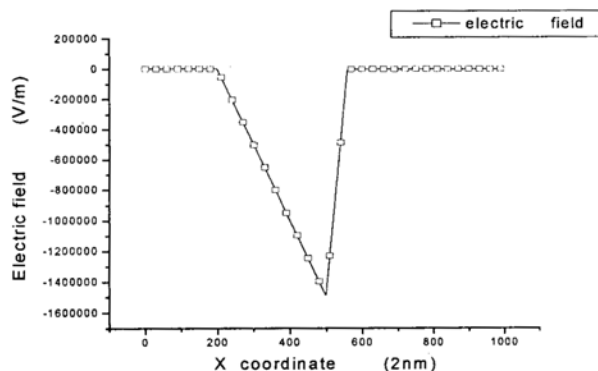


图5 第二类边界条件下一维PN结二极管的电场分布

参考文献:

- [1] 吉利久. 计算微电子学[M]. 北京: 科学出版社, 1996.
- [2] Reinhold Ludwig, Pavel Bretchko. RF Circuit Design: Theory and Applications[M]. Publishing House of Electronics industry, 2002.
- [3] 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生. 半导体物理学[M]. 北京: 电子工业出版社, 2003.
- [4] 曹培栋. 微电子技术基础[M]. 北京: 电子工业出版社, 2001.
- [5] 余穗, 蔡新华, 黄文华. 半导体器件烧毁的物理机理[J]. 物理, 1999, 28(6): 356.
- [6] 余穗. 半导体器件一维模拟的耦合、非耦合及“混合”算法[J]. 武陵学刊, 1999, 20(3): 34.
- [7] 郭杰荣. PN二极管对高功率微波激励的响应研究[D]. 西安电子科技大学硕士论文, 2001.
- [8] H. Gummel. A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations[J]. IEEE Trans on Electron Devices, 1964, (11): 445.

Numerical Simulation on One-Dimensional Steady State PN Diode

ZHANG Zhi-gang, LIU Chang-jun, HUANG Ka-ma, GU Jian

(College of Electronics and Information Engineering, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Abstract: A numerical simulation on one-dimensional PN diode by a decoupled algorithm advanced by Gummel is presented in this paper. The distribution of electric fields and potentials within a PN diode is achieved, when it is applied with zero biasing, negative biasing, and positive biasing respectively. Both convergence and precision of the numerical simulation are improved compared with traditional method. This work is the foundation of the simulation on radio frequency (RF) PN diode in unsteady state.

Key words: Semiconductor devices; Decoupled algorithm; PN junction