

# 半导体器件模拟中求解载流子方程的混合算法

韩峰岩

(空军装备部, 北京 100843)

**摘要:**针对半导体器件模拟中载流子方程两种基本算法在高注入条件下的不足,提出了一种混合算法。经过理论分析和实际计算表明:这种算法对求解高注入条件下的载流子方程是有效的。

**关键词:**半导体器件;模拟;算法

**中图分类号:**TN301 **文献标识码:**A **文章编号:**1009-3516(2001)02-0041-04

自从1964年Gummel<sup>[1]</sup>首先将数值方法用于求解半导体器件方程以来,数值模拟方法在半导体器件的研究和生产中得到了越来越广泛的应用<sup>[2]</sup>。为了预测器件性能,优化设计参数,必须在各种几何尺寸、各种掺杂、各种温度以及各种工作条件下,求解载流子方程,运算量十分巨大。载流子方程是由三个高度非线性方程组成的方程组,求解非常困难。此方程组的基本解法有两种,即耦合算法和去耦合算法。两种方法都有其局限性,要么收敛速度太慢,要么对迭代初值的要求过高,尤其是在注入水平很高及存在磁场<sup>[3]</sup>的情况下,模拟过程对研究者的经验要求很高,很难得到满意的结果,因此探索求解效率高、易于使用的算法十分必要。

## 1 求解半导体器件载流子方程的基本算法

在稳态情况下,归一化后的半导体载流子方程可表述为

$$\varphi_1 = \nabla^2 \varphi + (N + p - n) = 0 \quad (1)$$

$$\varphi_2 = \nabla \cdot \mu_n (\nabla n - n \nabla \varphi) - R_n = 0 \quad (2)$$

$$\varphi_3 = \nabla \cdot \mu_p (\nabla p + p \nabla \varphi) - R_p = 0 \quad (3)$$

方程(1)又称为Poisson方程,(2)、(3)分别称为电子和空穴的连续性方程。其中, $\varphi$ 为电势; $n$ 、 $p$ 分别为电子和空穴浓度; $N$ 为净掺杂浓度,是位置坐标 $r$ 的函数; $\mu_n$ 、 $\mu_p$ 分别为电子和空穴的迁移率,是 $N$ 的函数; $R_n$ 、 $R_p$ 分别为电子和空穴的复合产生率,是载流子浓度 $n$ 、 $p$ 以及温度 $T$ 的函数。

(1)~(3)是一个高度非线性的二阶微分方程组,要想直接求得解析解是不可能的。求解这个方程组数值解的基本算法有两种,即耦合算法和去耦合算法。

### 1.1 耦合算法

耦合算法也称Newton法,是把方程组作为一个整体用Newton法迭代求解的一种方法。

记  $Y = (\varphi, n, p)^T \quad (4)$

$$\Phi = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)^T \quad (5)$$

$$A = \frac{d\Phi}{dY} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \varphi} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial n} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial p} \\ \frac{\partial \varphi_2}{\partial \varphi} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial n} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial p} \\ \frac{\partial \varphi_3}{\partial \varphi} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial n} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial p} \end{bmatrix} \quad (6)$$

式中  $Y$  称为解向量,  $A$  称为 Jacobi 矩阵。

$$\begin{aligned} A^{(k)} \delta Y &= -\Phi^{(k)} \\ Y^{k+1} &= Y^{(k)} + \delta Y \end{aligned} \quad (7)$$

耦合算法的优点在于,无论工作条件如何,只要满足收敛条件,便以非常快的速度(二次)收敛。但是,耦合算法的稳定性比较差,对迭代初值的要求比较高。如果初值选取不太好,就很容易发散。对于一个复杂的半导体器件问题,较精确地估计初值并不是一件容易的事情,这主要依赖于研究者的经验,在实际计算过程中发散的情况是经常遇到的。

### 1.2 去耦合算法

去耦合算法也叫 Gummel 法,是一种将方程组看作三个独立方程顺次求解的方法。去耦合算法的求解过程如图 1 所示。

去耦合算法的稳定性比较好,即使是比较粗糙的初值也能够得到满意的结果。但是,去耦合算法的收敛速度较慢(线性),而且仅适用于中、低注入水平。当注入水平较高,方程之间的耦合很强,去耦合算法的效率极低,甚至得不到收敛结果。

本文旨在寻求一种既适合于高注入水平,又对迭代初值要求较低的算法。提出了一种混合算法,即将电子和空穴的连续性方程(2)、(3)耦合求解,而将 Poisson 方程(1)独立求解。

## 2 混合算法的收敛性分析

混合算法的求解过程如图 2 所示。

它与去耦合算法的差别在于,方程(2)、(3)不是单独求解,而是用 Newton 法耦合求解,这在对应强耦合方面比去耦合算法有明显的优越性。下面分析混合算法的收敛性。

### 2.1 Kantorovich 定理与实用收敛判据

Kantorovich 定理是关于 Newton 法收敛充分条件的一个定理。对于由  $m$  个方程组成的方程组

$$\Phi(Y) = 0 \quad (8)$$

记 Jacobi 矩阵为 
$$A(Y) = \{a_{ij}\} = \left\{ \frac{\partial \phi_i}{\partial Y_j} \right\} \quad (9)$$

取矢量  $V$  的范数为 
$$\|V\| = \text{Max} |v_i| \quad 1 \leq i \leq m \quad (10)$$

矩阵  $A$  的范数为 
$$\|A\| = \text{Max} \sum_{j=1}^m |a_{ij}| \quad (11)$$

Kantorovich 定理可表述如下:

1) 对于初值  $Y = Y^{(0)}$ , Jacobi 矩阵  $A(Y^{(0)})$  的逆  $\Gamma_0$  存在,并且 
$$\| \Gamma_0 \| \leq B_0 \quad (12)$$

2)  $Y^{(0)}$  满足 
$$\| \Gamma_0 \Phi(Y^{(0)}) \| \leq \eta_0 \quad (13)$$

3) 在(16)式定义的区域,  $\Phi(Y)$  二次连续可微,且满足 
$$\sum_{j,k=1}^m \left| \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial y_j \partial y_k} \right| \leq K \quad i = 1, 2, 3, \dots, m \quad (14)$$

4) 常数  $\eta_0, B_0$  和  $K$  满足不等式 
$$h_0 \equiv \eta_0 B_0 K \leq 0.5 \quad (15)$$

那么,方程组在  $Y^{(0)}$  的如下邻域内有解  $Y^*$ , 
$$\|Y - Y^{(0)}\| \leq \frac{1 - \sqrt{1 - 2h_0}}{h_0} \eta_0 \quad (16)$$

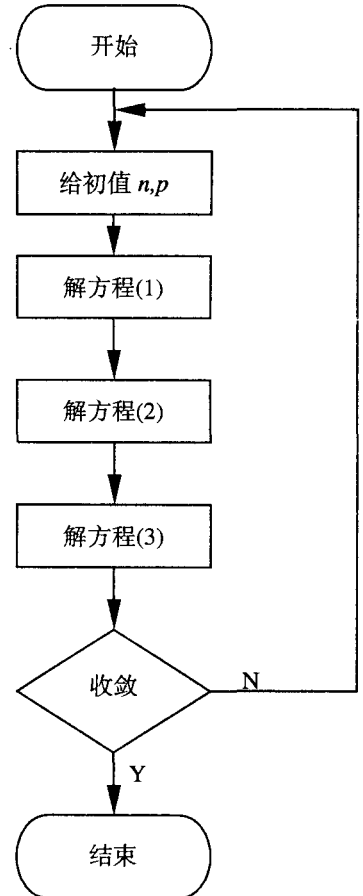


图 1 去耦合算法流程图

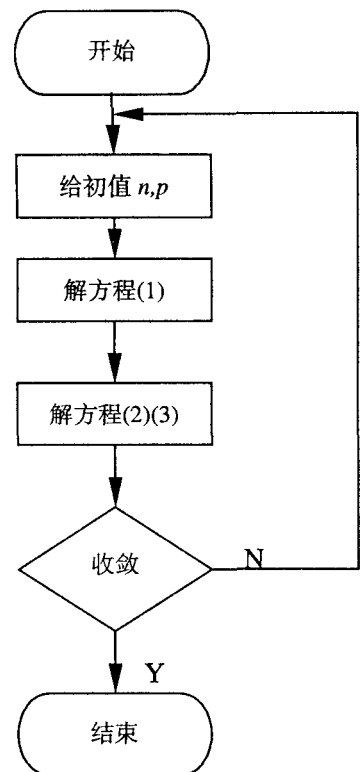


图 2 混合算法流程图

并且,随着迭代的进行,  $Y^{(k)}$  以二次速度收敛于  $Y^*$ ,  $|Y^{(k)} - Y^*| \leq \frac{1}{2^{k-1}}(2h_0)^{2k-1}\eta_0$  (17)

式(15)作为半导体器件方程的收敛性判据,使用时并不十分方便,主要是由于  $B_0$  很难估计。下面对定理判据做一些修正。

引入参数  $\alpha$ , 使得  $K \leq |A(Y^{(0)})| \cdot \alpha$  (18)

代入式(15)得  $|A(Y^{(0)})| \cdot |A(Y^{(0)})^{-1}| \cdot \eta_0 \alpha \leq 0.5$  (19)

考虑到矩阵  $A$  的条件数满足  $|A| \cdot |A^{-1}| \geq 1$  (20)

取  $|A(Y^{(0)})| \cdot |A(Y^{(0)})^{-1}| = 1$  (21)

那么式(19)变为  $\eta_0 \leq 0.5/\alpha$  (22)

式(22)就是半导体器件方程收敛性的实用判据。

### 2.2 混合算法二次收敛的条件

为了计算简便,对于一维情况,采用均匀网格,节点为

$$\{x_0, x_0 + h, x_0 + 2h, \dots, x_0 + Mh\}$$
 (23)

1) Poisson 方程的收敛条件

经计算可得

$$\alpha = \frac{\text{Max}[h^2(n_k + P_R)]}{\text{Max}[4 + h^2(n_k + P_R)]} \quad k = 1, 2, \dots, M$$
 (24)

式中  $n_k, P_R$  为节点  $k$  的电子和空穴浓度。在实际器件中,  $h^2(n_k + P_R)$  很大,因此  $\alpha$  非常接近于 1。则

$$\eta_0 \leq 0.5$$
 (25)

2) 方程(1)~(3)作为整体的收敛条件

三个方程作为一个整体  $\alpha = \frac{\text{Max}[4h^2(n_k + P_R)]}{\text{Max}[4 + 2h^2(n_k + P_R)]} \quad k = 1, 2, \dots, M$  (26)

在实际器件中  $\alpha$  接近于 2, 因此

$$\eta_0 \leq 0.25$$
 (27)

3) 方程(2)、(3)作为整体的收敛条件

(2)、(3)方程作为整体  $\alpha = \frac{\text{Max}[h^2(n_k + P_R)]}{\text{Max}[h^2(n_k + P_R)]} = 1 \quad k = 1, 2, \dots, M$  (30)

因此

$$\eta_0 \leq 0.5$$
 (31)

从以上分析可见,混合算法对初值的要求,较之耦合法已大大降低。

### 3 计算验证

以简单功率二极管的一维数值模拟为例,对混合算法进行验证。

图 3 所示是在较低注入条件下,三种算法采用同一迭代初值收敛速度的比较。

从图中容易看出,在低注入条件下,去耦合算法效率较高,混合算法的效率介于耦合算法和去耦合算法之间。图 4 所示是在较高注入条件下,三种算法采用同一迭代初值收敛速度的比较。

从图中容易看出,在高注入条件下,耦合算法效率较高,混合算法的效率介于耦合算法和去耦合算法之间。

必须指出的是,图 4 是专门选取的一组三种算法都收敛的情况。其实,计算中我们发现,注入水平较高时,在许多情况下,去耦合算法都得不到满意的结果。当迭代初值较粗糙时,耦合算法难以收敛,但混合算法却能得到满意的结果。

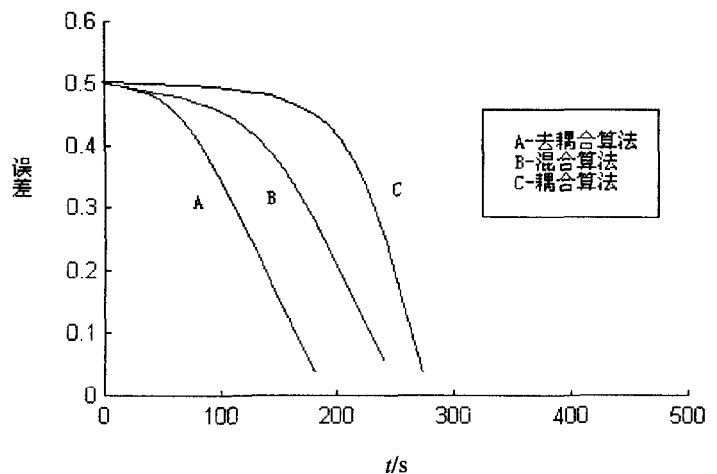


图 3 低注入条件下三种算法计算误差与时间的关系

## 4 结论

理论分析和计算实例说明本文所提出的混合算法对于求解高注入条件下的载流子方程是有效的,尤其在迭代初值的选取上,优于耦合法。

在实际器件的分析中为了提高效率,可以考虑在计算的初期用混合法,而后期用耦合法。

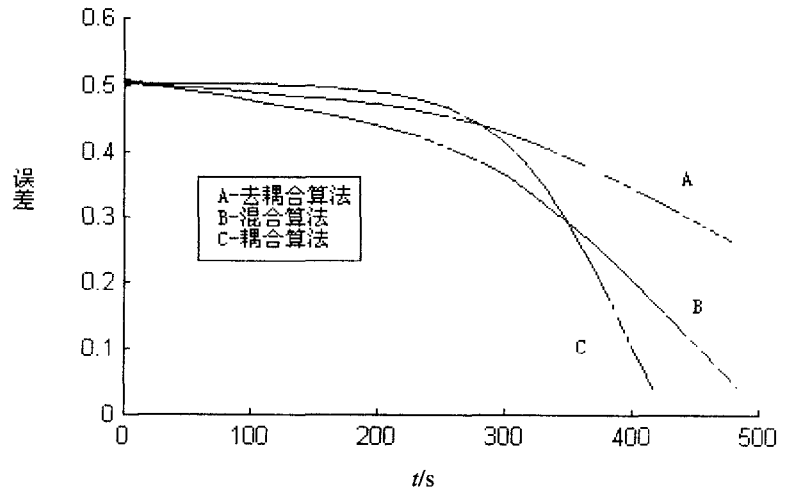


图4 高注入条件下三种算法计算误差与时间的关系

### 参考文献:

- [1] Gummel H K. A Self-consistent Iterative Scheme for one-Dimensional Steady State Transistor Calculations[J]. IEEE, Trans on Electron Device, 1964, 11:455 - 465.
- [2] 赛尔勃赫 S. 半导体器件的分析与模拟[M]. 上海:上海科技文献出版社, 1988.
- [3] 韩峰岩, 徐启华. 磁敏二极管的数值模拟[J]. 半导体学报, 1990, 11(12): 931 - 936.

## A Hybrid Algorithm for Solving Carrier Transport Equations in Semiconductor Device

HAN Feng-yan

(Air Force Material Command, Beijing 100843; China)

**Abstract**·A hybrid algorithm for solving carrier transport equations of semiconductor device is presented in this paper. We can prove theoretically and practically that the hybrid algorithm is superior to couples and de-coupled algorithms in high implantation conditions.

**Key words**·semiconductor device; modeling; algorithm