

Fermi-Dirac 분포를 고려한 Poisson 방정식의 이산화 방법

윤석성 이은구 김철성
인하대학교 전자공학과

The discretization method of Poisson equation by considering Fermi-Dirac distribution

Seok-Seong Yoon Eun-Gu Lee Cheol-Sung Kim
Dept. of Electronics Eng., Univ. of Inha
#253 YongHyeon-Dong Nam-Ku, Incheon, Korea

요 약

본 논문에서는 고 농도로 불순물이 주입된 영역에서 전자 및 정공 농도를 정교하게 구현하기 위해 Fermi-Dirac 분포함수를 고려한 포아송 방정식의 이산화 방법을 제안하였다. Fermi-Dirac 분포를 근사시키기 위해서 Least-Squares 및 점근선 근사법을 사용하였으며 Galerkin 방법을 근간으로 한 유한 요소법을 이용하여 포아송 방정식을 이산화하였다.

구현한 모델을 검증하기 위해 전력 BJT 시료를 제작하여 자체 개발된 소자 시뮬레이터인 BANDIS를 이용하여 모의 실험을 수행한 결과, 상업용 2차원 소자 시뮬레이터인 MEDICI에 비해 최대 4%이내의 상대 오차를 보였다.

I 서 론

전력용 BJT 소자의 개발은 실험에만 의존하여 많은 개발 비용과 시간이 요구됨에 따라 이러한 단점을 극복하기 위해서 소자 특성을 정확하게 모의 실험할 수 있는 시뮬레이터가 필요하다.

시뮬레이터를 사용해서 BJT 소자의 안정된 동작 범위를 결정하기 위해서는 정확한 전위 분포와 반송자 농도 및 단자 전류를 정교하게 모델링 할 필요가 있다.

본 논문에서는 전력용 BJT 소자의 베이스와 에미터 영역과 같이 고 농도로 불순물이 주입된 영역에서 정확한 전위 분포를 얻기 위해서 Fermi-Dirac 분포함수를 고려하여 포아송 방정식을 이산화하였다.

기존의 상업용 시뮬레이터인 MEDICI에서는 전자 및 정공 농도를 구하기 위해서 전도대 및 가전자대 가장자리에서의 전위를 기준으로 한 반면에 자체 개발된 BANDIS^[1]에서는 진성 페르미 준위를 기준으로 하였다. 따라서 Fermi-Dirac 분포를 고려하여 포아송 방정식을 이산화하기 위해서 축퇴인자 γ_n, γ_p 를 개선하였다.

포아송 방정식은 소자 구조를 사면체 요소로 잘라 유한 요소법으로 이산화하여 요소내에서 전위가 선형적으로 변한다고 가정하므로 반송자 농도의 적분 오차를 감소시키는 특성과 전위와 지수관계^[2]를 그대로 유지하면서 이산화하였다.

제안된 모델을 검증하기 위해서 전력 BJT 시료를 제작하여 모의 실험하였고 상업용 2차원 소자 시뮬레이터인 MEDICI와 전위 분포를 비교 분석하였다.

2장에서는 Fermi-Dirac 분포함수를 고려하여 근사화 한 방법을 제시하고 3장에서는 근사화 된 분포식에 근거하여 포아송 방정식의 이산화 과정을 보이고 4장에서는 검증을 위해서 MEDICI와의 모의 실험 결과와 비교 분석하였다.

II Fermi-Dirac 분포를 고려한 개선된 축퇴인자의 유도

BJT 소자에서 베이스의 농도가 일반적으로 $n > 0.1N_c$, $p > 0.1N_v$ (N_c, N_v : 유효 상태밀도)인 경우에 축퇴조건으로 전자 및 정공 농도는 Fermi-Dirac 분포함수 $f(E) = 1/1 + e^{(E_F - E)/kT}$ 를 고려하여 다음 식 [1]과 같이

나타낼 수 있다.

$$n = N_c F_{1/2} \left(\frac{E_{Fn} - E_c}{kT} \right) \quad [1a]$$

$$p = N_v F_{1/2} \left(\frac{E_v - E_{Fp}}{kT} \right) \quad [1b]$$

위 식을 $\eta_n' = (E_{Fn} - E_c)/kT$, $\eta_p' = (E_v - E_{Fp})/kT$ 라 치환하고 진성 페르미 준위를 기준으로 한 축퇴인자는 다음 식 [2]와 같이 개선할 수 있다.

$$\gamma_n = \frac{F_{1/2}(\eta_n')}{e^{\eta_n'}} \cdot \frac{N_c}{n_i} \quad [2a]$$

$$\gamma_p = \frac{F_{1/2}(\eta_p')}{e^{\eta_p'}} \cdot \frac{N_v}{n_i} \quad [2b]$$

여기서 η_n, η_p 는 각각 진성 페르미 준위를 기준으로 한 정규화된 전위이고 n_i 는 진성 반송자 농도이다.

위 식을 Fermi-Dirac 분포함수에 관하여 정리하면 다음 식 [3]과 같이 나타낼 수 있다.

$$F_{1/2}(\eta_n') = F_{1/2} \left(\frac{E_{Fn} - E_c}{kT} \right) = \frac{n}{N_c} \quad [3a]$$

$$F_{1/2}(\eta_p') = F_{1/2} \left(\frac{E_v - E_{Fp}}{kT} \right) = \frac{p}{N_v} \quad [3b]$$

식 [3]의 $F_{1/2}(\eta_s)$ 항은 Fermi-Dirac 분포함수의 1/2 order 적분형태로 직접 계산할 수 없으므로 오차를 최소화하며 적분의 계산 시간을 줄이기 위해서 3개 영역으로 나누어 근사시키고 높은 정확도를 요구하는 모의 실험 영역에서는 다시 세부 구간으로 분할하여 근사화하였다.

분할된 영역에 따른 $F_{1/2}(\eta_s')$ 는 각 구간에 따라 다음 식 [4]와 같이 근사화하였다.

$$\textcircled{1} \quad \eta_s' < -10 \quad F_{1/2}(\eta_s) \approx e^{\eta_s'} \quad [4a]$$

$$\textcircled{2} \quad -10 \leq \eta_s' < 5 \quad F_{1/2}(\eta_s) \approx e^{(a + b\eta_s' + c\eta_s'^2)} \quad [4b]$$

$$\textcircled{3} \quad 5 \leq \eta_s' \quad F_{1/2}(\eta_s) \approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\eta_s'^2 + \frac{\pi^2}{6} \right)^{3/4} \quad [4c]$$

위 식 [4a]는 저 농도 영역에서는 볼츠만 근사가 여전히 유효함을 나타내고 식 [4b]는 2계 Discrete Least-Squares 근사법으로 지수 근사하여 얻어진 결과 식이며 정확도를 위해서 $-10 \leq \eta_s' < 5$ 범위 내에서 4개의 세부 구간으로 나누어 근사화하였다. 계수 a, b, c 는 수치해석을 통해서 얻어진 상수 값이고 식 [4c]는

Blackmore 근사식^[3]을 사용함을 보인다.

근사화 된 Fermi-Dirac 분포함수는 포아송 방정식의 이산화 과정에서 정규화 된 전위와 전자 및 정공 Slotboom 변수에 대한 도함수가 필요하게 된다. 그러나 구간에 따라 근사화 된 식 [4]는 각 경계에서 미분이 불가능하므로 그림 1의 관계를 이용하여 Joyce-Dixon 근사식^[4]인 다음 식 [5a]와 점근선 확장을 이용한 식 [5b]를 이용해서 수치 해석적인 방법으로 구현하였다.

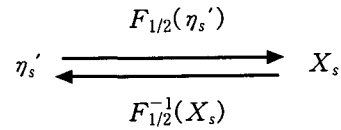


그림 1. 페르미 함수와 역 페르미 함수와의 관계

$$F_{1/2}^{-1}(X_s) = \ln(X_s) + aX_s + b(X_s)^2 + c(X_s)^3 + d(X_s)^4 \quad [5a]$$

$$F_{1/2}^{-1}(X_s) = \left[\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4} X_s \right)^{4/3} - \frac{\pi^2}{6} \right]^{1/2} \quad [5b]$$

여기서 X_s 는 유효 상태밀도로 정규화 된 $\frac{n}{N_c}$ 혹은 $\frac{p}{N_v}$ 이다. 위 식 [5a]에서 모의 실험에 사용되어진 상수값 a, b, c, d 는 표 1과 같다.

계수 값	사용되어진 상수값
a	3.5355e-1
b	-4.950e-3
c	1.484e-4
d	-4.43e-6

표 1. 모의실험에 사용되어진 상수값

III Fermi-Dirac 분포를 고려한 포아송 방정식의 이산화

반도체 소자의 전기적인 특성 분석에 사용되는 포아송 방정식은 다음 식 [6]과 같다.

$$\nabla(\epsilon \nabla \phi) + q(p - n + N_D - N_A) = 0 \quad [6]$$

여기서 ϵ 는 유전율이고 ϕ 는 열 전압으로 정규화 된 소자내부의 전위이고 ψ_n, ψ_p 는 열 전압으로 정규화 된 전자 및 정공 의사 페르미 준위이며 $N_D - N_A$ 는 이온화 된 불순물 농도이다.

전자 및 정공 농도에 관한 항을 Fermi-Dirac 분포를 고려한 항인 식 [2]의 축퇴인자와 Slotboom 변수를 포함하는 식으로 나타낼 수 있으며 이를 위 식 [6]에 대입하면 다음 식 [7]과 같이 정리된다.

$$\nabla(\epsilon_r \nabla u) + \frac{1}{L_D^2} (\gamma_p e^{-u+V_1} w - \gamma_n e^{u+V_1} v + C) = 0 \quad [7]$$

여기서 V_n , V_p 는 Band gap narrowing 효과를 고려한 변수이고 v , w 는 전자 및 정공 Slotboom 변수로 각각 $v = e^{-u}$, $w = e^u$ 이다. 그리고 C 는 진성 반송자 농도로 정규화 된 이온화 된 순 불순물 농도이고 디바이 길이 L_D 는 $L_D^2 = \sqrt{\epsilon_0 k T / q^2 n_i}$ 인 관계가 있으며 해석하는 온도 범위 내에서 불순물은 완전 이온화되었다고 가정하였다.

전자 및 정공의 농도와 불순물 농도를 해석적인 식으로 변환시키기 위해서 가중 잔차법(weighted residual method)을 적용하여 이산화를 수행하였고 제한된 절점 수로 인해 오차를 수반하는 포아송 방정식을 R_1 으로 정의하였다.

정규화 된 전위 u 가 유한개의 절점 전위의 선형조합으로 표현되는 경우에 각 절점에 이웃한 절점의 영향으로 인하여 발생하는 오차를 Galerkin 방법을 사용하여 자기 절점에서 '1', 그 이외의 절점에서는 '0'의 값을 갖는 직교 가중함수 W 를 도입하여 최소화하였다.

포아송 방정식의 적분형을 F_u 라 정의하면 다음 식 [8]과 같이 된다.

$$\begin{aligned} F_u &= \int_{\Omega} R_1(u) W d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \nabla(\epsilon_r \nabla u) W d\Omega \\ &\quad + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} [\gamma_p e^{-u+V_1} w - \gamma_n e^{u+V_1} v + C] W d\Omega \end{aligned} \quad [8]$$

우변의 첫 항은 전위 u 가 요소 내에서 선형적으로 변화한다고 가정하는 경우에 '0'이 되어 계산할 수 없으므로 weak formulation으로 부분적분을 수행하였다.

전체해석 영역 Ω 를 부분해석 영역 Ω_s 로 나누어 해석할 경우 한 요소내에서 전자 및 정공 농도는 좌표변환을 통한 정규화 된 사면체의 체적 적분 방법을 이용하여 구할 수 있으므로 전위와 직교 가중함수를 해석 영역에 따라 다음 식 [9]와 같이 나타낼 수 있다.

$$u = \sum_{j=1}^{N_E} \psi_j(\Omega) u_j = \sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k(\Omega_s) u_j^k \quad [9a]$$

$$W = \sum_{j=1}^{N_E} \psi_j(\Omega) W_j = \sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k(\Omega_s) W_j^k \quad [9b]$$

N_E : 해석하는 총 요소 개수

N_{2D} : 한 요소내 절점 수(삼각형의 경우 3)

포아송 방정식의 적분형인 식 [8]에 식 [9]를 대입하고

형상함수 ψ_j^k 는 자기 요소 k 에서만 '0'에서 '1'의 값을 갖고 나머지 요소에서는 '0'이 되므로 h 와 k 가 일치하는 항만 값을 갖게 되는 특성을 이용하여 다음 식 [10]과 같이 정리된다.

$$\begin{aligned} F_u &= \oint_{\Gamma} \epsilon_r \nabla \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k u_j^k \right) \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k W_j^k \right) d\Gamma \\ &\quad - \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k u_j^k \right) \cdot \nabla \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k W_j^k \right) d\Omega \\ &\quad + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} \left[\gamma_p e^{-u+V_1} \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k u_j^k \right) \right. \\ &\quad \quad \left. - \gamma_n e^{u+V_1} \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k u_j^k \right) \right] \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k W_j^k \right) d\Omega \\ &\quad + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} C \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{2D}} \psi_j^k W_j^k \right) d\Omega \end{aligned} \quad [10]$$

직각좌표를 전역좌표로 사용하는 경우에 사면체 요소에 대한 적분구간의 규칙성이 없으므로 적분구간의 설정이 용이하도록 변좌표계 행렬을 국부좌표의 행렬로 변환하면 다음 식 [11]로 정리된다.

$$\begin{aligned} F_u &= \sum_{k=1}^{N_E} \left\{ \sum_{j=1}^{N_{2D}} \oint_{\Gamma} \epsilon_r \nabla u \cdot N_i |J_r| d\Gamma \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=1}^{N_{2D}} \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla u \cdot \nabla N_i |J| d\Omega \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} (\gamma_p e^{-u+V_1} w - \gamma_n e^{u+V_1} v + C) N_i |J| d\Omega \right\} \end{aligned} \quad [11]$$

여기서 N_i 는 국부좌표의 형상함수이고 $|J|$ 는 좌표변환으로 나타나는 요소의 Jacobian이다.

IV 결과 및 고찰

유한 요소법을 이용하여 Fermi-Dirac 분포함수를 고려한 포아송 방정식을 이산화 하였고 자체 개발된 소자 시뮬레이터인 BANDIS를 이용하여 모의 실험하였다.

모의 실험에 사용된 BJT 시료는 상업용 2차원 공정 시뮬레이터인 TSUPREM-4로 제작하였으며 dimension은 그림 2와 같고 2차원 불순물의 농도 분포는 그림 3과 같다.

제안된 모델의 모의 실험은 DEC 600[MHz] PWS의 Windows NT 환경하에서 수행하였고 검증을 위해서 상업용 2차원 소자 시뮬레이터인 MEDICI를 이용하여 동일한 시료를 가지고 HP 9000/715 workstation의 Unix 환경하에서 모의 실험하였다.

그림 4는 '0' 바이어스하에서의 모의 실험 결과로 시료

의 $x=0$ 인 단면에 대해서 MEDICI와의 전위 분포를 비교하였다.

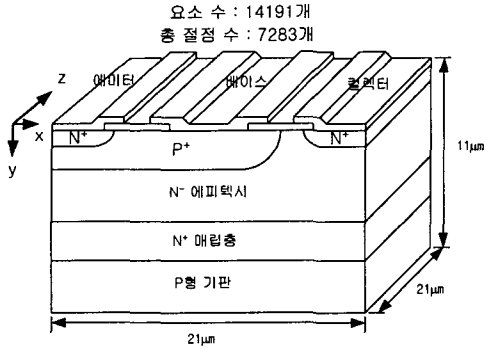


그림 2. 모의실험용 BJT 소자의 기본 구조

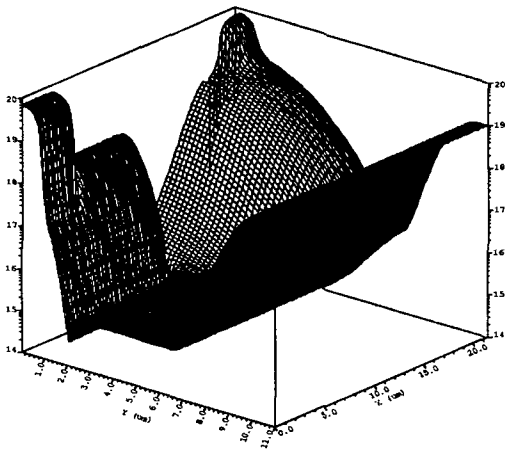


그림 3. BJT 소자의 불순물 농도 분포의 조감도

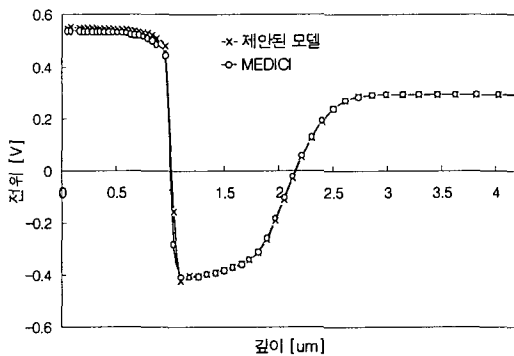


그림 4. 제안된 모델과 MEDICI 결과와의 전위 분포 비교

금속학적 접합부를 제외한 영역에서 최대 4%의 상대 오차를 보였고 전하 중성 영역에서는 거의 오차가 나타나지 않았으며 금속학적 접합부 근처에서의 오차는 포아송 방정식의 전하적분 방법에 따른 차이로, 본 논문에서 제안된 방법은 금속학적 접합부를 기준으로 영역을 나누어 단면 형태로 계산^[4]하는 반면 MEDICI의 경우에는 박스 적분법을 사용하기 때문에 접합부에서 최대 44%의 상대오차를 얻었다.

V 결론

정확한 전위 분포와 반송자 농도를 구하기 위해서 Fermi-Dirac 분포함수를 고려한 포아송 방정식의 이산화 방법을 제안하였다.

제안된 방법의 정확성을 검증하기 위해 전력 BJT 시료를 제작하여 '0' 바이어스하에서 모의 실험하였고 MEDICI의 모의 실험 결과와 비교하여 금속학적 접합부에서 최대 44%의 오차와 그 이외의 영역에서는 최대 4%이내의 정확성을 얻었다.

차후과제는 Fermi-Dirac 분포함수를 전자 및 정공 연속 방정식에 고려하여 이산화 수행함으로써 전력 BJT 소자의 베이스와 에미터 영역과 같이 고 농도의 불순물이 존재하는 전력 소자의 정확한 I-V 특성을 예측할 수 있을 것으로 기대한다.

참고 문헌

- [1] 김태한, "변형된 결합법을 이용한 혼합모드 소자-회로 시뮬레이터 구현에 관한 연구," 인하대학교 대학원 박사논문, 1998.
- [2] 김태한, 이은구, 김철성, "우수한 수렴특성을 갖는 3차원 포아송 방정식의 이산화 방법," 대한전자공학회 논문집 제34권 D편 제8호, pp.15-25, 1997
- [3] J.S.Blackmore "Approximations for Fermi-Dirac Integrals. Especially the Function $F_{1/2}(\eta)$ Used to Describe Electron Density in a Semiconductor," *Solid-State Electronics*, 25(11), 1067-1076, November 1982.
- [4] W.B. Joyce and R.W.Dixon, "Analytic Approximation for the Fermi Energy of an ideal Fermi Gas," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 31, pp. 354-356, 1977.