

## 유한요소법을 이용한 열흐름 방정식의 수치해석

이은구 김태한 \*강성수 \*이동철 김철성  
인하대학교 전자공학과, \*부천대학 정보통신계열  
전화 : 032-610-3364, 핸드폰 : 011-662-3090

### A Numerical Analysis of the Heat Flow Equation using the Finite Element Method

Eun Gu Lee Tae Han Kim Cheol Seong Kim  
Dept. of Electronics Eng., Univ. of INHA  
#253 Yonghyun-dong Nam-Gu, Incheon, Korea

#### 요약

정상상태에서 소자 내부의 격자온도 분포를 해석할 수 있는 시뮬레이터를 제작하였다. Slotboom 변수를 사용하여 열흐름 방정식을 이산화하였다. 또한 격자온도 분포를 고려한 초기 해의 설정 방법을 제안하였다.

제안된 방법의 타당성을 검증하기 위하여 N<sup>+</sup>P 접합 다이오드에 대해 모의실험을 수행하여 MEDICI의 결과와 비교하였다. 순방향 전압-전류 특성은 MEDICI의 결과와 비교하여 7% 이내의 최대 상대오차를 보였고 전위 분포와 온도 분포는 각각 2%, 2% 이내의 최대 상대오차를 보였다. BANDIS에서는 수렴을 위해 평균 3.7회 이하의 행렬 연산이 필요하였으며, MEDICI에서는 평균 5.1회 이하의 행렬 연산이 필요하였다.

#### I. 서론

정전기(electrostatic discharge: ESD)가 반도체 칩의 내부에 유입되는 경우에 수 [A]에 이르는 대 전류가 유기되고<sup>[1][2]</sup>, Latch-up이 발생하는 경우 실리콘 내부에 수백 [mA]의 대 전류가 흐르게 되어 칩이 파괴되므로<sup>[3]</sup> 반도체 칩이 정상적으로 동작되기 위해서는 칩 내부에 이들에 대한 보호회로 설계가 필요하다. 그러나 보호회로에 사용되는 소자에 수백 [mW] 이상의 전력이 소모되면 소자가 파괴되므로 이를 방지하기 위하여 heat sink를 고려하여야 하며<sup>[4]</sup>, 이를 위해 소자가 손상되기 이전의 최대 동작 온도를 정확히 계산할 필요가 있다.

온도 분포를 해석할 수 있는 기존의 소자 시뮬레이터로는 MEDICI<sup>[5]</sup>, ATLAS<sup>[6]</sup>, DAVINCI<sup>[7]</sup> 등이 있다. 그러나 MEDICI의 경우 Box적분법을 근간으로 열 흐름방정식을 해석하므로 온도의 변화가 심한 영역에서는 오차가 증가하여 높은 온도에서도 모의실험이 가능도록 하기 위해서는 Newton Damping 방법이 필요하다. DAVINCI의 경우 소자의 3차원 모의 실험에 있어 구조 자체에서 오

는 수렴성 문제와 많은 해석 절점의 수로 인해 모의실험 시간이 증가하는 문제점이 발생하고 있으며 계산량을 줄이기 위해 유한 차분법으로 이산화를 수행하므로 모의실험 결과에 대한 정확도가 저하된다.

본 논문에서는 기존에 사용되는 소자 시뮬레이터에 비해 수렴특성을 향상시킬 수 있는 열 흐름 방정식의 이산화 방법을 제안한다. 또한 고온에서도 수렴특성을 유지할 수 있도록 열 전도율의 적분방법을 제시한다. 격자 온도를 요소내에서 선형적으로 변화한다고 가정하여 해의 정확도를 높였으며 열 전도율의 적분을 해석적으로 수행함으로써 수렴특성을 향상시켰다.

제안된 방법은 자체 개발한 BANDIS(Basic ANalyzer of Devices and Integrated circuits)에 구현하고, 제안된 방법의 타당성을 검증하기 위하여 정상상태에서 N<sup>+</sup>P 접합 다이오드에 대해 모의실험을 수행하고 MEDICI의 결과와 비교한다.

#### II. 반도체 방정식의 이산화

소자 내부의 전위, 반송자 농도와 격자온도를 계산하는데 필요한 반도체 방정식은 포아송 방정식, 전자 및 정공 연속방정식과 열 흐름방정식으로 구성된다. 식 (1.a)는 열 흐름 방정식이다.

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = H + \nabla(\lambda\nabla T) \quad (1.a)$$

여기서 열생성량은 반송자가 전송되는 도중에 전계로부터 얻은 에너지가 격자에 전달되면서 발생되고 전류와 전계의 곱에 비례한다.

$$H = \overline{J_n} \cdot \overline{E_n} + \overline{J_p} \cdot \overline{E_p} \quad (1.b)$$

시뮬레이션 구조를 지배하는 열흐름 방정식 식 (1.b)의 해 T는 무한개의 선형독립인 절점 격자온도

$T_i (i=1, 2, \dots, N)$ 와 대응하는 미지계수의 곱으로 표현될 수 있다. 컴퓨터를 이용하여 해를 구하는 경우에는 사용 가능한 주 메모리의 제한으로 인하여 절점 수  $N$ 을 제한시키므로 열흐름 방정식은 오차를 수반한다. 오차를 수반하는 열흐름 방정식을  $R_T$ 로 정의하면 식 (1)은 식 (2)로 표현된다.

$$R_T = H + d \nabla (\lambda \nabla T) \quad (2)$$

여기서  $d = \frac{T_0}{n_i}$ 이다. 온도  $T$ 가 유한개의 절점 온도의 선형조합으로 표현되는 경우에 각 절점에 이웃한 절점의 영향으로 인하여 발생하는 오차를 소멸시키는 직교가중(orthogonal weighting) 함수  $W$ 를 곱한 후 적분한다. Galerkin 방법에서는 자기 절점에서 1의 값을 가지며 그 외의 절점에서 0의 값을 갖는 직교 가중함수  $W$ 를 도입하여 오차를 최소화시킬 수 있으므로 열흐름 방정식의 적분형을  $F_T$ 이라 정의하면 식 (3)이 구해진다.

$$F_T = \int_{\Omega} R_T W d\Omega \quad (3)$$

$$= \int_{\Omega} H W d\Omega + d \int_{\Omega} \nabla (\lambda \nabla T) W d\Omega$$

$T$ 가 요소 내에서 선형적으로 변화한다고 가정하는 경우에는 우변의 첫 항은 '0'이 되어 계산할 수 없으므로, weak formulation으로 수식을 변형할 필요가 있다. Weak formulation 형태의 방정식을 얻기 위해 식 (3)의 부분적분을 수행하면 식 (4)를 얻을 수 있다.

$$F_T = \int_{\Omega} H W d\Omega + d \int_{\Gamma} \lambda \nabla T \cdot \nabla W d\Gamma \quad (4)$$

$$- d \int_{\Omega} \lambda \nabla T \cdot \nabla W d\Omega$$

경계  $\Gamma$ 에서 주어지는 적분 항인  $\nabla T$ 는 경계 면에 수직인 성분을 의미하며 소자의 시뮬레이션에 사용되는 경계조건은 2가지로 정의한다. 전극에 인가된 전위를 일정하게 유지하는 Dirichlet 경계( $\Gamma_p$ )와 전극을 제외한 나머지 영역은 순 플럭스(Net flux)가 없도록 Neumann 경계( $\Gamma_n$ )를 가정하면 식 (4)의  $\Gamma$ 는  $\Gamma_n$ 과  $\Gamma_p$ 의 합으로 표현된다.

소자를 구성하는 절점 수가  $N$ 개일 때, Galerkin 방법에 사용되는 직교 가중함수  $W$ 는 오차의 최소화를 위해  $N$ 개의 선형함수로 표현된다. 또한 전체 해석영역  $\Omega$ 를 부분 해석영역인  $\Omega_s$ 로 나누어 해석할 때, 요소내의 온도  $T$  및 직교 가중함수  $W$ 는 식 (5)로 표현할 수 있다.

$$W = \sum_{j=1}^N \phi_j(\Omega) W_j = \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N \phi_j^k(\Omega) W_j^k \quad (5a)$$

$$T = \sum_{j=1}^N \phi_j(\Omega) T_j = \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N \phi_j^k(\Omega) T_j^k \quad (5b)$$

식 (5)에서 요소단위로 정의되는  $\phi_j^k(\Omega)$ 는 요소의 형상함수이고  $N_E$ 는 해석영역을 구성하는 총 요소 수이다.  $N_{3D}$ 는 요소를 구성하는 절점 수이며 삼각형인 경우에 3, 사면체인 경우에는 4가 된다.

식 (5)를 절점에 기초한 식 (4)에 대입하면 요소에 기초한 식 (6)이 구해진다.

$$F_T = \int_{\Omega} H \left( \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \phi_j^k W_j^k \right) d\Omega \quad (6)$$

$$+ d \int_{\Gamma} \lambda \nabla \left( \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \phi_j^k T_j^k \right) \cdot \left( \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \phi_j^k W_j^k \right) d\Gamma$$

$$- d \int_{\Omega} \lambda \nabla \left( \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \phi_j^k T_j^k \right) \cdot \nabla \left( \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \phi_j^k W_j^k \right) d\Omega$$

형상함수  $\phi_j^k(\Omega)$ 는 자기 요소  $k$ 에서만 값을 갖고 나머지 요소에서는 0이 되므로, 식 (6)에서  $h$ 와  $k$ 가 일치하지 않는 경우에  $\phi^h \cdot \phi^k$ 항은 0이고  $h$ 와  $k$ 가 일치하는  $\phi^k \cdot \phi^k$ 항만 값을 갖는다. 또한 형상함수  $\phi_j^k(\Omega)$ 는  $k$  요소의  $i (i=1, 2, \dots, N_{3D})$  절점에서 1이며 그 이외의 절점에서 0이므로, 식 (6)은 식 (7)로 표현할 수 있다.

$$F_T = \sum_{k=1}^N \left\{ \int_{\Omega} H \phi^k d\Omega + d \int_{\Gamma} \lambda \nabla \left( \sum_{j=1}^N \phi_j^k T_j^k \right) \cdot \phi^k d\Gamma \quad (7)$$

$$- d \int_{\Omega} \lambda \nabla \left( \sum_{j=1}^N \phi_j^k T_j^k \right) \cdot \nabla \phi^k d\Omega \right\}$$

직각좌표를 전역좌표로 사용하는 경우에 삼각형 요소 혹은 사면체 요소에 대한 적분구간의 규칙성이 없으므로 열생성항을 해석적으로 구할 수 없다. 본 연구에서는 적분구간의 설정이 용이하도록 Galerkin 방법으로 구현된 전역행렬을 국부행렬로 변환하여 해석적으로 해를 구한다. 전역좌표로 표현된 삼각형 혹은 사면체는 좌표 변환을 통해 정규화시킨 삼각형 혹은 사면체로 변환될 수 있다. 전역좌표로 표현된 식 (7)을 국부좌표의 형상함수인  $N_i(\Omega)$ 를 이용하여 변환하면 적분형태의 열흐름 방정식 식 (8)이 구해진다.

$$F_T = \sum_{k=1}^N \left\{ \int_{\Omega} H N_i d\Omega + d \int_{\Gamma} \lambda \nabla \left( \sum_{j=1}^N N_j T_j^k \right) \cdot N_i d\Gamma \quad (8)$$

$$- d \int_{\Omega} \lambda \nabla \left( \sum_{j=1}^N N_j T_j^k \right) \cdot \nabla N_i d\Omega \right\}$$

여기서  $|J|$ 는 좌표변환으로 나타나는 요소의 Jacobian이다.

식 (8)은 시뮬레이션 구조를 유한개의 경계  $\Gamma_s$ 와 영역  $\Omega_s$ 로 분리시킨 형태이며 각각의 요소  $k$ 에 대해 국부행렬을 조립하여 전역행렬을 형성할 수 있으므로 식 (5)에 비해 프로그램이 용이해진다.

### III. 시뮬레이터의 제작

$F_u, F_v, F_w, F_T$ 는 각각 Poisson 방정식

유한요소법을 이용한 열흐름 방정식의 수치해석

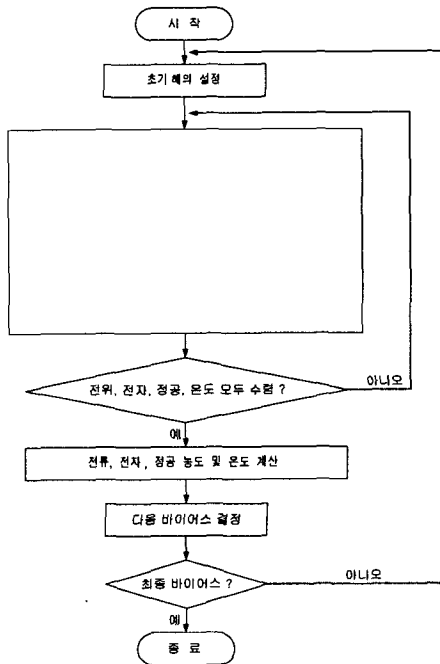


그림 1. 정상상태에서 격자 온도 분포 해석을 위한 흐름 선도.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_u}{\partial u} & \frac{\partial F_u}{\partial v} & \frac{\partial F_u}{\partial w} & \frac{\partial F_u}{\partial T} \\ \frac{\partial F_v}{\partial u} & \frac{\partial F_v}{\partial v} & \frac{\partial F_v}{\partial w} & \frac{\partial F_v}{\partial T} \\ \frac{\partial F_w}{\partial u} & \frac{\partial F_w}{\partial v} & \frac{\partial F_w}{\partial w} & \frac{\partial F_w}{\partial T} \\ \frac{\partial F_T}{\partial u} & \frac{\partial F_T}{\partial v} & \frac{\partial F_T}{\partial w} & \frac{\partial F_T}{\partial T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u \\ \Delta v \\ \Delta w \\ \Delta T \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_u \\ F_v \\ F_w \\ F_T \end{bmatrix}$$

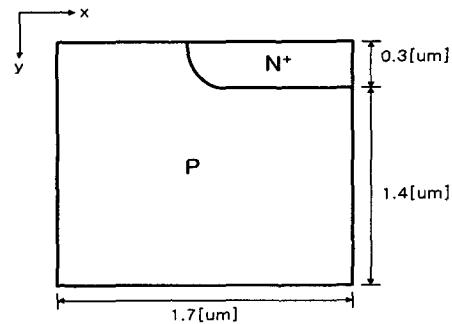
. 정상상태에서 전자 및 정공 연속방정식과 열 흐름 방정식의 이산화 수식이다. 그림 1은 Newton 방법은 근간으로 반도체 방정식을 해석하기 위한 흐름도이다. 1 단계는 각 전극의 바이어스 조건 및 모의 실험구조를 입력값으로 한다. 2 단계에서 현재의 전극 바이어스를 결정한 후 초기해를 설정한다. 3 단계에서 행렬의 구성 및 연산을 수행한다. 4 단계에서는  $\Delta u$ ,  $\Delta v$ ,  $\Delta w$ ,  $\Delta T$ 에 대해 수렴조건을 판단한다. 5 단계에서 전류 및 반도체 농도와 conductance를 구한다. 6 단계에서 다음 바이어스를 결정한다.

IV. 결과 및 고찰

제안된 알고리즘은 자체 개발한 소자 시뮬레이터인 BANDIS에 구현되었고 정확도를 검증하기 위해 N<sup>+</sup>P 접합 다이오드에 대해 모의실험을 수행한 후 상용 소자 시뮬레이터인 MEDICI의 결과와 비교하였다. 모의실험 시

저전계하의 이동도 모델을 사용하였고 밴드 갭 협폭 효과를 고려하였으나 생성-재결합율은 고려하지 않았다. BANDIS의 모의실험은 433 [MHz] DEC Alpha Workstation, Windows NT4.0에서 수행되고, MEDICI는 HP 9000/715 Workstation, HP Unix에서 수행된다.

모의실험에 사용된 N<sup>+</sup>P 접합 다이오드는 상용 공정 시뮬레이터인 TSUPREM-4를 사용하여 제작하였으며 0.8[ $\mu\text{m}$ ]의 설계규격을 갖는 ASIC용 공정으로써  $2.7 \times 10^{15} [\text{cm}^{-3}]$  농도의 보론(B) 기판 위에 100KeV의 에너지로  $9.0 \times 10^{12} [\text{cm}^{-2}]$  농도의 보론을 이온주입하고, 1150 $^{\circ}\text{C}$ 에서 열처리하여 P-well을 생성시켰다.



절점수 : 6334

요소수 : 18237

그림 2. N<sup>+</sup>P 접합 다이오드의 구조.

다음 단계로 80KeV의 에너지로  $6.0 \times 10^{15} [\text{cm}^{-2}]$  농도의 비소(As)를 이온 주입하고, 950 $^{\circ}\text{C}$ 에서 열처리하여 주입된 이온을 확산시켜 N+영역을 형성하였다. 제작된 다이오드는 표면에서 0.3[ $\mu\text{m}$ ] 깊이에서 금속학적 접합이 이루어졌고 불순물 농도 분포는 그림 2와 같다. 그림 3은 열 흐름 방정식을 적용한 경우와 적용하지 않은 경우의 모의실험으로부터 구한 인가 전압 대비 전류이다. 격자온도가 증가한 경우 이동도가 감소하므로 전류는 21.34% 감소하였다.

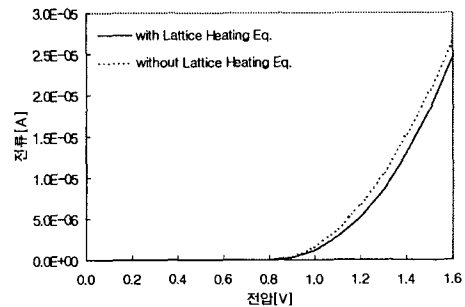


그림 3 N<sup>+</sup>P 접합 다이오드의 전류-전압 특성.

그림 4는 BANDIS와 MEDICI의 모의 실험으로부터 구한 PN 접합 다이오드의 온도 분포를 나타낸다. 다이오드의 P형 전극 바닥에 온도 전극을 두어 300K를 유지하게 하였으며, 온도 전극 경계를 제외한 나머지 경계에서는 Neumann 경계조건 ( $\nabla T = 0$ )이 성립한다고 가정하였다.

접합이 없는 P형 영역의 온도 분포에서 BANDIS와 MEDICI의 결과는 최대 상대오차 1.1%로 유사하게 나타났으며, 온도 전극 경계를 제외한 경계 영역에서 모두 Neumann 경계 조건을 만족하고 있다.

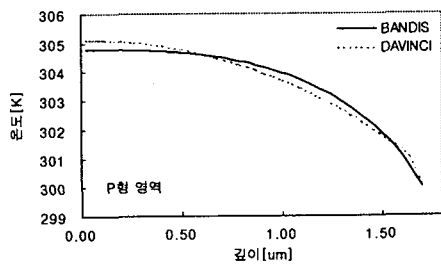


그림 4 다이오드 내부의 온도 분포.

## V. 결론

정상상태에서 소자의 내부 격자온도 분포를 해석할 수 있는 소자 시뮬레이터를 제작하였다. 또한 열흐름방정식의 이산화 방법과 수렴특성을 향상시키기 위해 열전도율의 정교한 적분방법을 제안한다. 열전도율의 적분은 5차까지 테일러 급수를 전개하여 닫힌 형태(closed form)의 해를 얻었다.

반도체 방정식의 해를 안정하게 예측하기 위한 초기해의 설정 방법으로 소자 내부의 온도 분포를 고려한 전하 중성 조건을 이용한 방법, 전 단계의 해를 이용하는 방법, 전단계의 두 개의 해를 이용한 투영법 등을 사용한다.

제작된 시뮬레이터의 정확성을 검증하기 위하여 갖는 N<sup>+</sup>P 접합 다이오드에 대해 모의실험을 수행하여 소자의 전압-전류 특성과 소자 내부의 전위 분포와 온도 분포를 MEDICI의 결과와 비교하였다.

N<sup>+</sup>P 접합 다이오드의 전압-전류 특성은 7% 이내의 최대 상대오차를 보였고 전위 분포와 온도 분포는 MEDICI의 결과와 각각 2%, 2% 이내의 최대 상대오차를 보였다.

N<sup>+</sup>P 접합 다이오드의 전기적인 특성과 온도분포를 분석한 결과 BANDIS에서는 수렴을 위해 평균 3.7회 이하의 행렬 연산이 필요하였으며, MEDICI에서는 평균 5.1회 이하의 행렬 연산이 필요하였다.

## 참고문헌

- [1] Loews Anatole, 1992 EOS/ESD Tutorial, EOS/ESD Association Inc., Dallas, Texas, 1992.
- [2] R.G.Renninger, "Mechanisms of Charged-Device Model Electrostatic Discharges," EOS/ESD Association Inc., pp.127-143, 1991.
- [3] Phillip E. Allen and douglas R. Holberg, "CMOS Analog Circuit Design," Oxford University Press, Inc., pp.66~71, 1987.
- [4] The Heatsink Guide web page, <http://www.heatsink-guide.com/>.
- [5] TMA MEDICI Manual, Technology Modeling Association, Inc., 1993.
- [6] SILVACO International, ATLAS manual, 2D Device Simulation Framework, Santa Clara, CA, 1994.
- [7] TMA, DAVINCI manual, Technology Modeling Associates, California, 1995.