

論文 97-34D-8-3

우수한 수렴특성을 갖는 3차원 포아송 방정식의 이산화 방법

(A discretization method of the three-dimensional Poisson's equation with excellent convergence characteristics)

金 泰 漢 *, 李 恩 九 *, 金 鐵 城 *

(Tae Han Kim, Eun Gu Lee, and Cheol Seong Kim)

요 약

3차원 포아송 방정식의 이산화에 채택된 Box 적분법의 이산화 오차를 감소 시키는 반송자 농도의 적분방법을 제안한다. 제안된 반송자 농도의 적분방법에서는 요소내의 전위가 선형적으로 변한다고 가정하고 전위와 지수함수 관계에 있는 반송자 농도를 닫힌 형태(closed form)로 근사화 시킨다.

제안된 방법은 Windows 95상에서 수행되는 3차원 포아송 solver에 구현되었다. 3차원 포아송 solver의 수렴특성과 모의실험 결과의 정확성을 검증하기 위하여 DC 역 바이어스 하에서의 PN 접합 다이오드와 n-MOSFET의 전기적인 특성을 분석하였다.

상업용 3차원 소자 시뮬레이터인 DAVINCI의 모의실험 결과를 기준으로한 소자내의 전위분포의 최대 상대오차는 2.8% 이하였다. PN 접합 다이오드와 n-MOSFET의 전기적인 특성을 분석하는데 각각 평균 11.47과 11.16의 수렴횟수가 필요한 반면에 DAVINCI의 경우에는 각각 평균 21.73과 23.0의 수렴횟수를 보였다.

Abstract

The integration method of carrier concentrations to reduce the discretization error of the box integration method used in the discretization of the three-dimensional Poisson's equation is presented. The carrier concentration is approximated in the closed form as an exponential function of the linearly varying potential in the element.

The presented method is implemented in the three-dimensional Poisson's equation solver running under the Windows 95. The accuracy and the convergence characteristics of the three-dimensional Poisson's equation solver are compared with those of DAVINCI for the PN junction diode and the n-MOSFET under the thermal equilibrium and the DC reverse bias.

The potential distributions of the simulated devices from the three-dimensional Poisson's equation solver, compared with those of DAVINCI, has a relative error within 2.8%.

The average number of iterations needed to obtain the solution of the PN junction diode and the n-MOSFET using the presented method are 11.47 and 11.16 while the those of DAVINCI are 21.73 and 23.0 respectively.

I. 서 론

* 正會員, 仁荷大學校 電子工學科 半導體研究室

(Dept. of Elec. Engineering, Inha Univ.)

接受日: 1997년 1월 9일, 수정완료일: 1997년 7월 14일

3차원 소자의 접합 정전용량, 기생 정전용량, 편치 쓰루 및 항복전압 등의 전기적 특성을 모의실험하는

경우에는 구조 자체에서 발생하는 수렴특성 문제와 해석에 필요한 절점 수의 급격한 증가로 인하여 많은 모의실험 시간이 요구된다. 특히 3차원 포아송 방정식의 수렴특성은 반송자와 불순물 농도의 적분방법에 따라 많은 영향을 받으므로 모의실험 시간을 줄이고 수렴특성을 개선하기 위한 반송자와 불순물 농도의 정확한 적분이 필요하다.

임의의 공간좌표에서 포아송 방정식을 이산화하는 경우에는 일반적으로 box 적분법(BIM)^[1]을 이용하여 반송자와 불순물 농도를 계산한다. 그러나 BIM은 이산화된 구조의 형상에만 적용할 수 있으므로 불순물의 극성이 변하는 접합 근처에서는 모의실험 시에 해의 급격한 변화로 인하여 수렴특성이 매우 불량하고 적분된 전하의 값도 큰 오차를 발생시킨다. 그러므로 BIM을 채택한 기존의 소자 시뮬레이터들^{[2] [3] [4]}과 DAVINCI^[5]의 반송자 농도 적분 방법은 표면 채널 영역, 매립 채널 영역 및 소스(드레인)와 기판의 경계 영역에서 적분오차가 크므로 소자 모의실험에 요구되는 수렴횟수가 증가하게 된다. 이 문제를 해결하기 위해 damping법^{[6] [7]}들을 사용하고 있으나 소자의 전극에 인가되는 바이어스의 변화가 큰 경우에는 수렴특성이 개선되지 않는 문제점이 있다. 2차원 삼각형 구조를 이용하여 포아송 방정식의 이산화 오차를 감소시킬 수 있는 FEM-QSG법^[8]이 발표되었으나 3차원 사면체 구조에 적용할 수 있는 Gaussian quadrature rule을 사용할 경우에는 sampling점의 수가 급격하게 증가하므로 계산시간 면에서는 효율적이지 못하다.

본 논문에서는 3차원 포아송 방정식의 수렴특성을 향상시키기 위해 반송자 농도의 적분 오차를 감소시킬 수 있는 적분방법을 제안한다. 새로운 반송자 농도의 적분방법에서는 요소내에서 전위가 선형적으로 변한다고 가정하고 전위와 지수함수 관계에 있는 반송자 농도를 닫힌 형태(closed form)로 근사화 시킨다.

제안된 이산화 방법의 정확성을 검증하기 위해 정상 상태에서 PN 접합 다이오드와 n-MOSFET의 전위 분포를 추출하고 상용 3차원 소자 시뮬레이터인 DAVINCI의 모의실험 결과와 비교한다. 각각의 소자에 대한 수렴특성을 비교하기 위해 인가된 바이어스에 따른 평균 행렬 연산 횟수를 구하여 DAVINCI의 수렴특성과 비교한다.

본 논문의 2장에서는 포아송 방정식의 이산화 과정을 설명한다. 3장에서는 포아송 방정식의 제작과정을

간략하게 설명하고 4장에서는 제안된 알고리즘의 정확성과 수렴특성을 비교하기 위해 기존의 3차원 소자 시뮬레이터인 DAVINCI와 모의실험 결과를 비교한다. 5장에서는 결론 및 차후과제를 간략하게 서술한다.

II. 포아송 방정식의 이산화 방법

식 (1)은 반도체 소자의 전기적인 특성분석에 사용되는 포아송 방정식을 나타낸다.

$$\nabla(\epsilon \nabla \phi) + q(p - n + N_D - N_A) = 0 \quad (1)$$

여기에서 ϕ 는 소자 내부의 전위이고 ϵ 은 유전율이다. n 과 p 는 각각 전자와 정공의 농도이고 $N_D - N_A$ 는 이온화된 불순물 농도이다.

포아송 방정식의 이산화시에 전자 및 정공 농도는 볼츠만 통계를 따르고 고농도 불순물이 주입된 반도체 영역의 경우 Band gap narrowing 효과를 고려하였다. 전자 및 정공의 의사 페르미 준위는 영역적으로 일정하도록 유지^[5] 하였으며 해석하는 온도범위내에서 불순물은 완전 이온화되었다고 가정하였다. 식 (1)에서 사용되는 변수를 정규화하여 식 (2)를 얻는다. 표 1은 정규화에 사용된 변수 및 상수들이다.

$$\nabla(\epsilon_r \nabla u) + \frac{1}{L_D^2} [e^{-u+V_p+u_p} - e^{u+V_n-u_n} + C] = 0 \quad (2)$$

표 1. 포아송 방정식의 정규화에 사용된 변수 및 상수

Table 1. Variables and constants used to normalize the Poisson's equation.

의미	정규화 변수 및 상수
전위	$u = \frac{q}{kT} \phi$
전자 및 정공의 의사 페르미 준위	$u_n = \frac{q}{kT} \phi_n \quad u_p = \frac{q}{kT} \phi_p$
Slotboom 변수	$v = e^{-u_n} \quad w = e^{u_p}$
전자 및 정공 농도	$n = e^{u+V_n} v \quad p = e^{-u+V_p} w$
불순물 농도	$C = \frac{N_D^+ - N_A^-}{n_i}$
Bandgap narrowing 효과	$V_n, \quad V_p$
디바이 길이	$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon_r kT}{q n_i}}$

전위분포는 무한개의 형상함수의 선형조합에 의해

해석영역 내부(Ω)와 경계(Γ)에서 나타낼 수 있으나 컴퓨터를 이용하여 수치해석을 할 경우에는 컴퓨터의 용량이 허용하는 한계내에서 전위를 유한개의 형상함수의 조합으로 표현한다.

$$u = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_i u_i \quad (3)$$

$$u = \sum_{i=1}^N \phi_i u_i \quad (4)$$

단, ϕ_i 는 형상함수

여기에서 N은 해석영역을 구성하는 총 절점수이다.

그림 1은 대표적인 소자의 모의실험 구조인 MOSFET에서의 경계조건을 나타낸다. 전극에서 전위는 일정하게 유지하도록 디리클레(Dirichlet) 경계(Γ_D)를 가정하고 전극을 제외한 나머지 영역에서는 순 플럭스(Net flux)가 없도록 노이만(Neumann) 경계(Γ_N)를 가정한다.

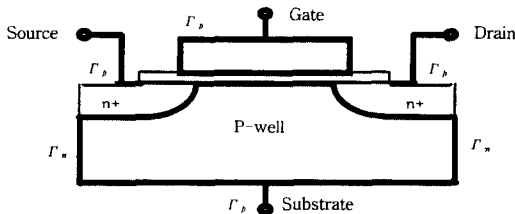


그림 1. 소자의 모의실험에 사용되는 경계조건

Fig. 1. The boundary conditions used in the device simulation.

오차의 최소화를 위해 Galerkin 방법을 적용하여 직교 가중(orthogonal weighted)함수를 유한개의 형상함수들의 선형조합으로 나타낼 수 있다.

$$W = \sum_{i=1}^N \phi_i W_i \quad (5)$$

1. 가중 잔차법(Weighted Residual Method)을 이용한 포아송 방정식의 이산화

해석영역내의 전위를 유한개의 요소의 선형조합으로 해석할 경우에 오차가 발생하므로 각 절점에서 이웃절점의 영향으로 인한 오차를 소멸 시키는 직교 가중(orthogonal weighted)함수를 곱한 후 적분한다. 직교 가중 함수(W_i)는 자기 절점에서 1의 값을 가지며 그 외의 절점에서 0의 값을 갖는 특성이 있다. 적분 형태의 포아송 방정식을 F_1 이라 정의하면 식(6)이 구

해진다.

$$\begin{aligned} F_1 &= \int_{\Omega} R_1(u) W d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \nabla(\epsilon_r \nabla u) W d\Omega \\ &\quad + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} [e^{-u+V_s+u_s} - e^{u+V_s-u_s} + C] W d\Omega \end{aligned} \quad (6)$$

식 (7)은 식 (6)의 우변의 첫항에 대한 부분적분을 수행한 결과이다.

$$\int_{\Omega} \nabla(\epsilon_r \nabla u) W d\Omega = \oint_{\Gamma} \epsilon_r W \nabla u \cdot d\vec{T} - \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla u \cdot \nabla W d\Omega \quad (7)$$

일반적으로 전극을 제외한 경계영역에서 Neumann 경계조건($\nabla u = 0$)이 성립하도록 가정한다면 식 (7)의 우변 첫항은 소멸된다. 식 (7)을 식(6)에 대입하면 식 (8)이 구해진다.

$$\begin{aligned} F_1 &= - \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla u \cdot \nabla W d\Omega \\ &\quad + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} [e^{-u+V_s+u_s} - e^{u+V_s-u_s} + C] W d\Omega \end{aligned} \quad (8)$$

N개의 형상함수의 선형조합으로 나타낸 직교 가중 함수인 식(4)를 식(8)에 대입하면 식(9)가 얻어진다.

$$\begin{aligned} F_1 &= - \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla u \cdot \nabla \left(\sum_{i=1}^N \phi_i W_i \right) d\Omega \\ &\quad + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} [e^{-u+V_s+u_s} - e^{u+V_s-u_s} + C] \left(\sum_{i=1}^N \phi_i W_i \right) d\Omega \end{aligned} \quad (9)$$

직교 가중 함수 W_i 는 절점 i 를 중심으로하는 부분적인 해석영역을 정의한다.

$$\begin{aligned} F_{1i} &= - \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla u \cdot \nabla \phi_i d\Omega \\ &\quad + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} [e^{-u+V_s+u_s} - e^{u+V_s-u_s} + C] \phi_i d\Omega \end{aligned} \quad (10)$$

여기에서 $i=1,2,3,\dots,N$, $\nabla u = \sum_{j=1}^N \nabla \phi_j u_j$, $u = \sum_{j=1}^N \phi_j u_j$

2. Galerkin 방법을 근간으로 하는 포아송 방정식의 유한요소 해석

전체해석 영역 Ω 를 부분해석 영역 Ω_i 로 나누어 해석할 경우에 한 요소내의 전자와 정공 농도를 수치해석 방법이나 좌표변환을 통한 정규화된 사면체의 체적 적분 방법을 이용하여 구할 수 있다. Galerkin 방법으로 구현된 범좌표계 행렬(Global Matrix)은 유한요소 해석으로 구현된 국부좌표계 행렬(Local Matrix)의 함으로 구할 수 있다.¹⁹⁾ 전위와 직교 가중 함수를 나

타내는 선형함수는 각 절점을 포함하는 요소내에서 0과 1의 값을 가지며 그 이외의 요소에서는 0의 값을 가지므로 식 (4)와 식 (5)는 각각 식 (11)과 식 (12)로 표현할 수 있다.

$$u = \sum_{j=1}^{N_E} \phi_j u_j = \sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k u_j^k \quad (11)$$

$$W = \sum_{j=1}^{N_E} \phi_j W_j = \sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k W_j^k \quad (12)$$

N_E : 해석영역에서 총 요소개수

N_{3D} : 한 요소내의 절점수(사면체의 경우: 4)

포아송 방정식의 적분형인 식(8)에 식 (11)과 식 (12)를 대입하면 식 (13)이 구해진다.

$$F_1 = - \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k u_j^k \right) \cdot \nabla \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k W_j^k \right) d\Omega \quad (13) \\ + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} [e^{-u+V_s+u_r} - e^{u+V_s-u_r} + C] \left(\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k W_j^k \right) d\Omega$$

형상함수인 $\phi(\Omega)$ 는 자기 요소내에서만 값을 갖고 나머지 영역에서는 0의 값을 가지므로 식 (13)에서 h 와 k 가 일치하지 않는 경우 $\phi^h \cdot \phi^k$ 항은 0이고 h 와 k 가 일치하는 $\phi^h \cdot \phi^k$ 항은 값을 갖는다.

$$F_1 = \sum_{k=1}^{N_E} \left\{ - \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla \left(\sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k u_j^k \right) \cdot \nabla \left(\sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k W_j^k \right) d\Omega \quad (14) \right. \\ \left. + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} [e^{-u+V_s+u_r} - e^{u+V_s-u_r} + C] \left(\sum_{j=1}^{N_{3D}} \phi_j^k W_j^k \right) d\Omega \right\}$$

3. 좌표변환을 통한 포아송 방정식의 해석

범좌표계의 사면체 요소는 적분구간의 규칙성이 없어 반송자 농도의 적분 범위를 설정할 수 없으므로 적분구간의 설정이 용이하도록 정규화된 사면체로 변환하여 닫힌형태의 해를 구한다. 범좌표계로 표현된 사면체는 좌표변환을 통해 정규화된 사면체로 변환된다. 식(15)는 변환된 좌표계의 형상함수인 N_i 를 이용하여 얻어진 적분형태의 포아송 방정식이다.

$$F_1 = \sum_{k=1}^{N_E} \left\{ - \sum_{i=1}^{N_{3D}} \int_{\Omega} \epsilon_r \nabla N_i \cdot \nabla \left(\sum_{j=1}^{N_{3D}} N_j u_j^k \right) |J| d\Omega, u_i^k \quad (15) \right. \\ \left. + \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega} (e^{-u+V_s+u_r} - e^{u+V_s-u_r} + C) \left(\sum_{j=1}^{N_{3D}} N_j W_j^k \right) |J| d\Omega \right\}$$

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

4. 포아송 방정식의 행렬형태

이산화된 포아송 방정식의 첫항은 전위의 1차 함수

이고, 두번째항은 전위와 지수함수 관계에 있으므로 해를 구하기 위해서는 Newton-Raphson^[10] 방법이 필요하다. 포아송 방정식의 F_1 을 변수 u 에 대해 Taylor 급수로 전개하면 $F_1(u+\Delta u) = F_1(u) + F_1'(u)\Delta u$ 이 되며 Δu 가 0에 수렴할 때 $F_1(u)$ 는 0으로 수렴한다. 식 (16)은 해석을 위한 수식형태이다.

$$F_1'(u)\Delta u = -F_1(u) \quad (16)$$

식(14)에 대해 식(16)을 이용하여 전개하면 포아송 방정식의 이산화에 사용될 행렬형태의 식 (17),(18),(19) 및 식(20)이 구해진다.

$$[\sum_k K_{1ij}^k + \sum_k G_{ij}^k] \Delta u = \{ -K_{1ij} u_j + \sum_k f_{1i}^k \} \quad (17)$$

$$K_{1ij}^k = \int_{\Omega_i} \epsilon_r \nabla N_i \cdot \nabla N_j |J| d\Omega, \quad (18)$$

$$G_{ij}^k = \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega_i} \{ e^{-u+V_s+u_r} + e^{u+V_s-u_r} \} N_i N_j |J| d\Omega, \quad (19)$$

$$f_{1i}^k = \frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega_i} \{ e^{-u+V_s+u_r} - e^{u+V_s-u_r} + C \} N_i |J| d\Omega, \quad (20)$$

식 (17)은 컴퓨터의 수치해석에 사용되는 행렬형태이며 식 (18)은 강성행렬(Stiffness matrix)이다. 식 (19)는 반송자 농도의 적분행렬이며 식 (20)은 순 전하(net charge)의 적분행렬이다.

5. 반송자 농도의 적분행렬

반송자 농도는 벌크 영역에서 불순물 농도에 준하는 값을 가지며 접합부에서는 큰 변화율을 가지고 있으므로 포아송 방정식의 수렴특성에 많은 영향을 준다. 반송자 농도를 범좌표계에서 수치해석 방법으로 적분하면 많은 계산 시간이 필요한 반면에 임의의 형태를 갖는 사면체 요소를 좌표변환을 통해 정규화된 사면체로 변환하여 적분을 수행하면 닫힌 형태의 다항식으로 수식을 유도할 수 있으므로 적은 연산량으로도 이산화 오차를 감소시킬 수 있다.

식 (21)과 식 (22)는 범 좌표계에서 3차원 공간에 대한 정규화된 전자 농도를 볼츠만 통계로 간략화하여 나타낸 것이다.

$$n = n_i \int_{\Omega} e^{u-u_s} d\Omega \quad (21)$$

$$p = n_i \int_{\Omega} e^{-u+u_s} d\Omega \quad (22)$$

일반적으로 요소내에서 전위는 선형으로 변한다고

가정한다면 식(23)이 얻어진다.

$$u = a_1 + a_2x + a_3y + a_4z \quad (23)$$

식 (24)는 전위 식(23)을 범좌표계에서 국부좌표계로 나타낸 결과이다. 그림 2는 임의의 사면체에 대해 범좌표계(X,Y,Z)에서 국부좌표계(p,v,w)로 좌표변환을 나타낸 결과이다.

$$u = u_1 + u_{21}p + u_{31}v + u_{41}w \quad (24)$$

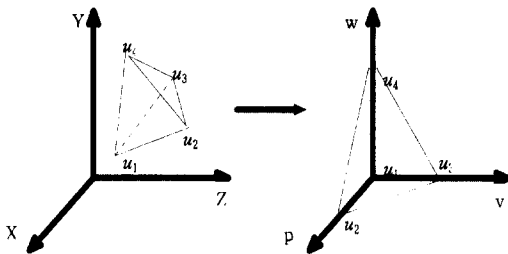


그림 2. 임의의 요소의 좌표변환

Fig. 2. The coordinate transformation of any element.

변환된 사면체는 적분 구간의 설정이 가능한 형태를 가지고 있으며 식 (25)는 전자농도의 적분식을 국부좌표계로 나타낸 결과이다.

$$n = n_i \int_0^1 \int_0^{1-w} \int_0^{1-v-w} e^{u-u_n} |J| dp dv dw \quad (25)$$

식(25)에 대하여 적분을 수행하면 닫힌 형태의 식 (26)을 얻는다. 프로그램으로 수식을 구현하기 위해서는 분모항이 0 이되는 각 조건별로 수식을 변형한다. 여기서 $uu_n = u - u_n$ 이다.

$$n = n_i \left\{ -e^{uu_1 - uu_4} \left(\frac{1}{(uu_2 - uu_1)(uu_3 - uu_1)(uu_4 - uu_1)} \right) + e^{uu_2 - uu_4} \left(\frac{1}{(uu_2 - uu_1)(uu_3 - uu_2)(uu_4 - uu_2)} \right) - e^{uu_3 - uu_4} \left(\frac{1}{(uu_4 - uu_3)(uu_3 - uu_2)(uu_3 - uu_1)} \right) + e^{uu_4 - uu_1} \left(\frac{1}{(uu_4 - uu_1)(uu_4 - uu_2)(uu_4 - uu_3)} \right) \right\} \quad (26)$$

정공의 경우도 같은 방법으로 유도될 수 있다.

금속학적 접합이 한 요소를 통과할 경우에는 정확한 반송자 농도의 적분영역의 설정을 위해 영역적으로 상수가 되는 전자 및 정공의 의사 페르미 준위 (u_n , u_p)에 따라 접합부와 요소 경계의 교점을 연결하여 요소를 분할한다. 한 절점과 나머지 3절점 사이에

금속학적 접합이 이루어 지면 4개의 사면체가 형성되고 두 절점과 두 절점 사이에 금속학적 접합이 이루어 지면 6개의 사면체가 형성된다.

이 방법은 2차원 구조에 대한 반송자 농도의 적분방법에 관한 논문에서 우수성이 검증되었으며^[11]

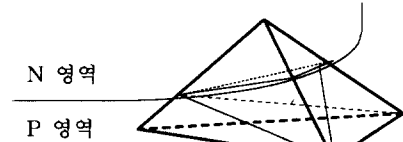


그림 3. 반송자 농도의 적분에서 금속학적 접합에서의 4개의 요소 분할

Fig. 3. First element partition in PN junction for the carrier concentration integration.

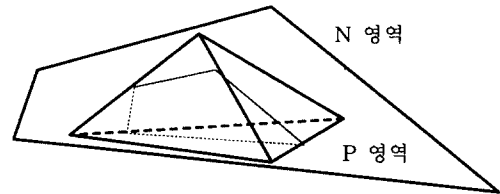


그림 4. 반송자 농도의 적분에서 금속학적 접합에서의 6개의 요소 분할

Fig. 4. Second element partition in PN junction for the carrier concentration integration.

본 논문에서는 동일한 방법으로 4면체를 기본 요소로 하는 3차원 구조에 대하여 확장하였다.

6. 불순물 농도의 적분행렬

식 (27)은 국부좌표계로 나타낸 불순물 농도의 적분행렬을 나타낸다.

$$\frac{1}{L_D^2} \int_{\Omega_s} C N_i |J| d\Omega_s \quad (27)$$

여기에서 N_i 는 국부 좌표계의 형상함수이고 $|J|$ 는 좌표간 Jacobian이다. C 는 $N_D - N_A$ 을 나타내고 공간 좌표의 선형함수로 가정한다.

$$C = C_1 + C_{21}p + C_{31}v + C_{41}w \quad (28)$$

식 (29)는 형상함수에 따른 불순물 농도의 적분이다.

$$\int_{\Omega_s} C N_i d\Omega_s = \int_{\Omega_s} (C_1 + C_{21}p + C_{31}v + C_{41}w) N_i d\Omega_s \quad (29)$$

금속학적 접합이 한 요소를 통과할 경우에 불순물 농도의 정확한 적분을 위해 접합부와 요소 경계의 교점을 연결하여 요소를 분할한다. 한 절점과 나머지 3 절점으로 구성되어 있으면 4개의 사면체가 형성되고 두 절점과 두 절점으로 구성되어 있으면 6개의 사면체가 형성된다. 요소의 분할은 그림 3과 그림 4와 같다.

III. 시뮬레이터의 제작

포아송 방정식의 모의실험은 PC에서 동작하는 Windows 95 환경하에서 개발되었으며 프로그램 언어로는 MS Visual C++2.0을 사용하였다.

소자의 모의실험에 사용된 3차원 구조는 상용 2차원 공정 시뮬레이터인 TSUPREM-4에 의해 생성된 2차원 삼각형 구조를 깊이 방향으로 확장한 프리즘 구조를 다시 세 개의 사면체로 분할된 구조를 사용하였다.^[13]

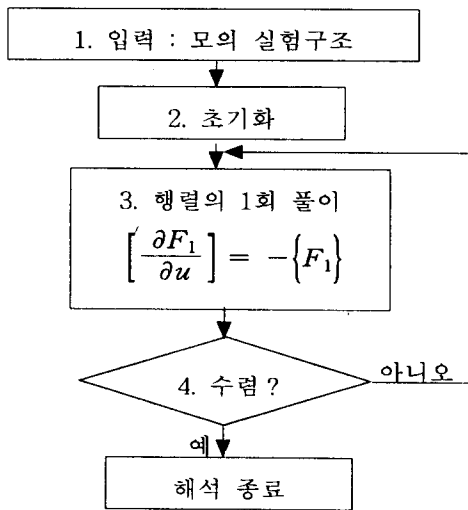


그림 5. 포아송 방정식의 해석을 위한 흐름도

Fig. 5. The flowchart of the solver for the Poisson's equation.

강한 비선형성을 갖는 포아송 방정식의 행렬해석에는 전진 해법을 이용하며 Newton-Raphson 방법으로 행렬의 반복 연산을 수행하여 전위분포를 얻는다. Newton-Raphson 방법을 이용하여 해를 구하는 경우에 참값에 근사한 초기해를 설정하는 작업이 필요하며 본 연구에서는 전하 중성조건을 이용한 초기해 설정방법^[5], 전 단계에서 얻어진 해로부터 소자 내부의

전위의 초기해를 설정하는 방법과 이전에 얻어진 두 개의 해를 이용하여 전위의 초기해를 설정하는 방법 등을 사용한다.

포아송 방정식의 해석 절차는 4단계로 구성되며 1 단계에서는 모의실험구조 및 모의실험에 사용할 물리적 모델을 입력 값으로 한다. 2 단계에서는 한 바이어스 간격의 해석에 필요한 변수들을 초기화 또는 변화시키며 3 단계에서는 포아송 방정식의 풀이를 위해 행렬을 구성하여 연산을 수행한다. 강한 비선형성을 보이는 포아송 방정식의 해는 행렬의 반복 연산으로 구하며 수렴조건은 각 절점전위의 최대 변동이 허용오차보다 작은 경우로 정한다. 4 단계에서는 Δu 의 최대값이 사용자에 의해 주어진 전위의 허용오차보다 크면 수렴하지 못한 것으로 판단하여 3단계부터 4단계까지 반복 연산한다.

IV. 결과 및 고찰

제안된 포아송 방정식에 사용된 이산화 방법의 정확성과 수렴특성을 검증하기 위해 열 평형상태와 DC 역바이어스 상태에서 PN 접합 다이오드와 n-MOSFET의 전위 분포와 평균 행렬 연산 횟수를 구하여 상용 3차원 소자 시뮬레이터인 DAVINCI의 모의실험 결과와 비교한다.

포아송 방정식의 모의실험은 90MHz의 Pentium PC에서 동작하는 Windows 95 환경하에서 수행되었으며 DAVINCI는 HP 9000/715 workstation에서 수행되었다.

1. PN 접합 다이오드 모의실험

소자의 모의실험에 사용되는 PN 접합 다이오드의 불순물 농도 분포는 상용 2차원 공정 시뮬레이터인 TSUPREM-4를 사용하여 계산하였고 별도로 제작된 프로그램을 이용하여 2차원 불순물 분포 및 모의실험 구조를 3차원으로 확장하여 포아송 solver의 입력에 사용하였다. 모의실험조건으로 전위의 수렴에 필요한 허용오차를 각각 0.0001×0.02584 [V]와 0.00001×0.02584 [V] 이하의 허용오차를 고려하여 수행하였으나 모의실험의 정확도 및 수렴특성에는 차이가 없음을 확인하였다.

그림 6(a)는 모의실험에 사용되는 PN 접합 다이오드의 기본구조이고 그림 6(b)는 깊이 방향의 1차원 불순물의 농도 분포를 나타낸다. 표면으로부터 $0.48 [\mu$

m] 깊이에서 금속학적 접합이 이루어 졌으며 N 영역의 최대 표면 농도는 $2.22 \times 10^{20} [\text{cm}^{-3}]$ 이고 P 영역에는 $3.0 \times 10^{15} [\text{cm}^{-3}]$ 의 불순물이 도핑되었다.

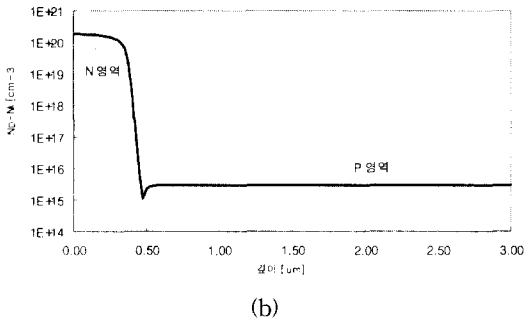
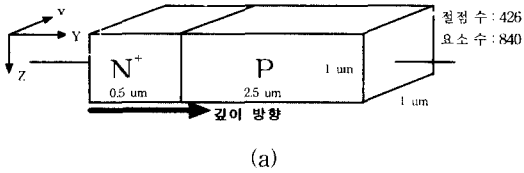


그림 6. 모의실험용 PN 접합 다이오드 1차원 불순물 분포. (a) PN 접합 다이오드 구조 (b) 1차원 불순물 분포

Fig. 6. The doping profile of the PN junction diode used for the simulation, (a) PN junction diode (b) The one-dimensional doping profile.

그림 7과 그림 8은 열평형 상태의 소자 내부의 전위 분포이다. 제안된 방법을 이용한 모의실험의 전위 분포(실선)와 DAVINCI의 전위 분포(점선)는 각각 금속학적 접합부에서 최대 2%와 2.5%의 상대오차를 보이고 있으며 이외의 전하 중성영역에서는 거의 오차를 나타

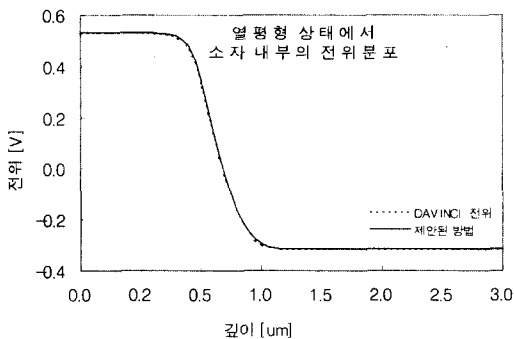


그림 7. 열평형 상태에서 소자 내부의 전위 분포

Fig. 7. The potential profile of the PN diode under the equilibrium condition.

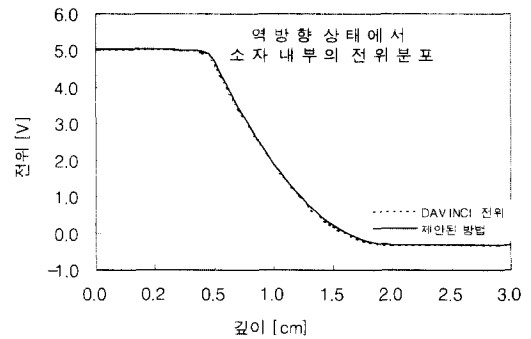


그림 8. 역방향 상태에서 소자 내부의 전위 분포

Fig. 8. The potential profile of the PN diode under the DC reverse bias condition.

내지 않고 있다.

금속학적 접합부에서 나타나는 오차는 포이송 방정식의 전하적분 방법에 기인된다. 본 논문에서 제안된 방법에서는 영역을 나누어 단편 형태로 계산하는 반면에 DAVINCI에서는 박스 적분법을 적용하기 때문이며 전하중성 영역에서는 각 요소내의 반송자 농도가 거의 균일하므로 별 차이를 보이지 않기 때문이다. 각각의 전하적분 알고리즘 차이에 의한 전기적인 특성은 2차원의 모의실험 구조에 대해 검증을 완료하였으며^{11) [12]} 제안된 방법을 이용한 모의실험의 결과가 DAVINCI에 비해 더 정확한 결과를 나타내었다.

표 2는 열 평형상태와 역방향 바이어스 상태에서의 수렴횟수를 비교한 결과이다. 역 방향 바이어스가 인가된 경우의 초기해는 열 평형상태에서 구한 해를 이용하였다.

제안된 방법에 의한 모의실험에서 평균 수렴횟수는 11.47이고 DAVINCI의 모의실험에서는 21.73이므로 DAVINCI에 비해 47 %가 감소하였다. 열 평형 상태의 수렴특성에는 별 차이가 없으나 높은 역바이어스가 인가된 경우에는 매우 큰 차이를 나타내었다. DAVINCI의 모의실험에서는 반복연산 도중에 전위의 overshoot가 일어날 경우를 가정하여 overshoot로 인한 악화된 수렴특성을 향상시키기 위해 Bank-Rose damping방법을 사용하였으나 제안된 방법에서는 damping방법을 사용하지 않았음에도 불구하고 DAVINCI를 이용한 모의실험보다 좋은 수렴특성을 얻었다. 특히 단자에 인가되는 바이어스의 증가가 커질수록 DAVINCI에 사용된 damping방법은 수렴특성을 개선시키는데 효과적이지 못함을 보이고 있다.

표 2. PN 접합 다이오드의 수렴 횟수의 비교.

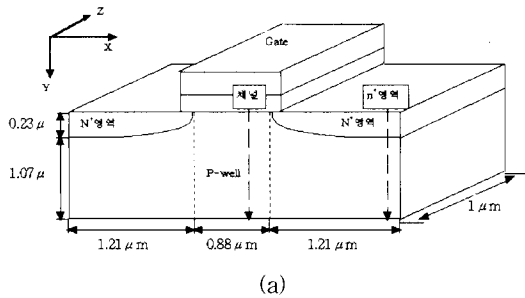
Table 2. The convergence characteristics for the PN diode.

역 방향 바이어스 [V]	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0
제안된 방법	6	9	10	10	11	11	11	11	12	12	12	13	14	15	15
DAVINCI	7	12	14	17	17	18	19	20	21	23	17	24	36	40	41

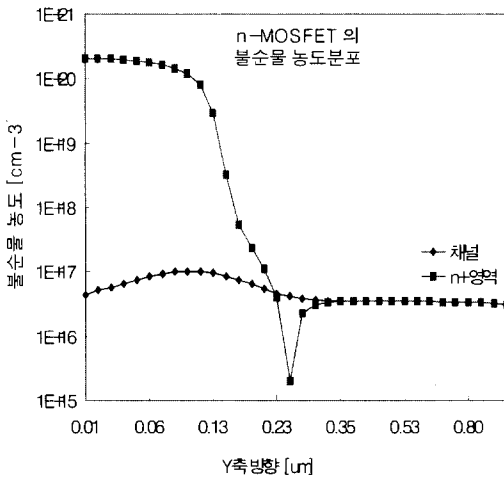
2. n-MOSFET 모의실험

소자의 모의실험에 사용되는 3차원 n-MOSFET의 불순물 농도는 상용 2차원 공정 시뮬레이터인 TSUPREM-4를 사용하여 얻은 후에 별도의 프로그램을 이용하여 2차원 불순물 분포와 모의실험 구조를 3차원 구조로 확장하였다.

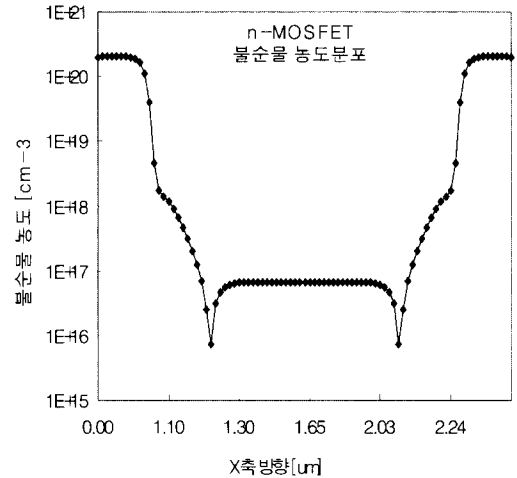
그림 9(a)는 모의실험에 사용된 n-MOSFET의 기본 구조이고 그림 9(b)는 전극의 Y 방향의 1차원 불순물 농도 분포를 나타낸다. 그림 9(c)는 Y좌표가 0.04 [μm] 인 깊이에서 전극의 X 방향의 1차원 불순물 농도분포를 나타낸다. N^+ 영역의 최대 표면 불순



(a)



(b)



(c)

그림 9. 모의실험용 n-MOSFET 구조 (a) n-MOSFET의 기본 구조(b) n-MOSFET의 Y 방향 농도분포 (c) 표면근처의 실리콘 영역에서 n-MOSFET의 X 방향 농도분포

Fig. 9. The doping profile of the n-MOSFET used in the simulation. (a) The structure of the n-MOSFET (b) The doping profile in the y-direction. (c) The doping profile in the x-direction near the Si-SiO₂ interface.

물 농도는 $2.06 \times 10^{20} [\text{cm}^{-3}]$ 이고 2차원 TSUPREM-4의 모의실험으로부터 얻어진 n-MOSFET 구조는 3856개의 절점과 7280개의 요소로 구성되어 있으며 별도의 프로그램으로 확장된 3차원 모의실험 구조는 11568개의 절점과 43680개의 요소로 구성되어 있다. DAVINCI의 모의실험에는 프리즘이 사용되므로 11568개의 절점과 14560개의 요소가 사용된다.

그림 10는 열평형 상태의 n-MOSFET의 내부 전위분포이다.

열평형 상태와 P-well에 -5 [V]와 드레인에 10 [V]의 DC 역 바이어스를 인가했을 경우에 제안된 방법을 이용한 모의실험의 전위분포와 DAVINCI의

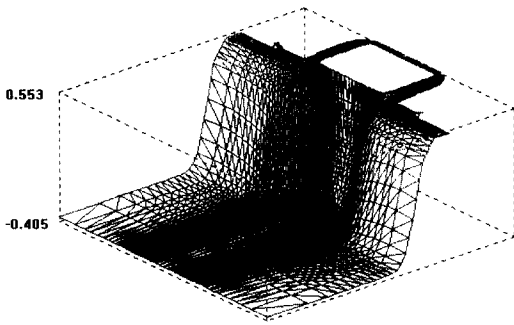


그림 10. 열 평형상태에서 n-MOSFET의 내부 전위분포

Fig. 10. The potential profile under the thermal equilibrium.

전위분포는 N^+ 영역과 P-well의 금속학적 접합부에서 각각 최대 2%와 2.8%의 상대오차를 보였으며 이외의 전하 중성영역에서는 거의 오차를 나타내지 않았다. 금속학적 접합부에서 나타나는 오차는 포아송 방정식의 전하적분 방법의 차에 기인된다. 본 논문에서 제안된 방법에서는 금속학적인 접합부를 기준으로 영역을 나눈후에 닫힌 형태로 반송자 농도를 적분하는 반면에 DAVINCI에서는 박스 적분법을 적용하기 때문이며 전하중성 영역에서는 각 요소내의 반송자 농도가 거의 균일 하므로 별 차이를 보이지 않고 있다.

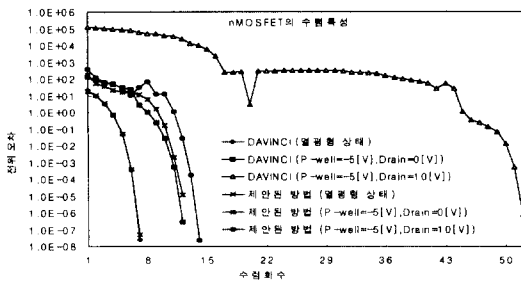


그림 11. n-MOSFET의 수렴 회수의 비교

Fig. 11. The convergence characteristics for the n-MOSFET.

각각의 전하적분 알고리즘 차이에 의한 전기적인 특성은 2차원의 모의실험 구조에 대해 검증을 완료하였다.^[11] 그러므로 2차원 삼각형 구조를 3차원 프리즘 구조로 확장시킨 DAVINCI의 모의실험 결과와 간접적으로 정확도를 비교할 수 있으며 제안된 방법을 이용한 모의실험 결과가 DAVINCI에 비해 정확한 결과를 나타내었다고 볼 수 있다.

그림 11은 열 평형상태의 해를 이용하여 드레인에 10 [V]의 DC 역방향 바이어스를 인가한후에 최종적으로 P-well에 -5 [V]의 DC 역방향 바이어스를 인가했을때의 수렴특성이다.

그림 11의 결과로부터 제안된 방법에 의한 모의실험의 평균횟수가 DAVINCI에 비해 평균 51.48 %가 감소하였음을 볼 수 있다. DAVINCI의 모의실험에서는 반복연산 도중에 전위의 overshoot가 일어날 경우를 가정하여 수렴특성을 향상시키기 위해 Bank-Rose damping방법을 사용하고 있으나 제안된 방법에서는 damping방법을 사용하지 않음에도 불구하고 DAVINCI 모의실험보다 뛰어난 수렴특성을 얻었다. DAVINCI의 경우에 10 [V] 정도의 높은 역바이어스가 인가되는 경우에는 초기의 전위오차가 열전압 (thermal voltage)의 10만배 이상으로 overshoot하면서 열전압의 100배정도인 23회 이내의 반복 횟수에서는 Bank-Rose damping방법이 제 기능을 거의 수행하지 못하고 있음을 볼 수 있으며 이 원인은 이미 n-MOSFET에서도 보고되었다^[14].

V. 결론 및 차후과제

3차원 포아송 방정식의 수렴특성을 향상시키기 위해 반송자 농도의 적분 오차를 감소시킬 수 있는 적분방법을 제안하였다. 새로운 반송자 농도의 적분방법에서는 요소내에서 전위가 선형적으로 변한다고 가정하고 전위와 지수함수 관계에 있는 반송자 농도를 닫힌 형태(closed form)로 근사화 시킨다.

제안된 방법의 정확성과 수렴특성을 검증하기 위하여 열 평형상태와 DC 역 바이어스 상태에서 3차원 구조의 PN 접합 다이오드와 n-MOSFET의 모의실험을 수행하였다. 각각의 모의실험으로부터 얻어진 전위 분포는 DAVINCI의 모의실험 결과에 대해 각각 최대 상대오차 2% 와 2.8% 이내의 정확성을 보였다.

PN 접합 다이오드의 전기적인 특성을 분석하는데 평균 11.47회의 수렴횟수가 필요한 반면에 DAVINCI의 경우에는 평균 21.73회의 수렴횟수를 보였으며 n-MOSFET의 전기적인 특성을 분석하는데 평균 11.16회의 수렴횟수가 필요한 반면에 DAVINCI의 경우에는 평균 23.0회의 수렴횟수를 보였다. DAVINCI의 모의실험에서는 반복연산 도중에 전위의 overshoot가 일어날 경우를 가정하여 overshoot로

인한 악화된 수렴특성을 향상시키기 위해 Bank-Rose damping방법을 사용하였으나 제안된 방법에서는 damping방법을 사용하지 않고 DAVINCI 모의실험 보다 좋은 수렴특성을 얻었다.

감사의 글

※ 본 연구는 1996년도 인하대학교 산업과학 기술 연구소 연구비 지원의 일환으로 수행되었습니다.

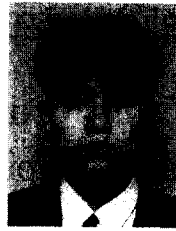
참 고 문 헌

- [1] W. L. Engl, Process and device modeling, North-Holland, pp. 241-243, 1991.
- [2] J. A. Greenfield, "Nonplanar VLSI device analysis using the solution of Poisson's equation," IEEE transactions on electron devices, vol. 27, no. 8, pp. 1520-1533, August 1980.
- [3] P. Ciampolini, A. Pierantoni and G. Baccarani, "Efficient 3-D Simulation of Complex Structures," IEEE trans. on CAD, vol. 10, no. 9, pp. 1141-1149, September 1991.
- [4] G. H. R. Krishna, A. K. Aditya, N. B. Chakrabarti and S. Banerjee, "Finite Element Analysis of Heterojunction Devices," IEEE trans. on CAD, vol. 14, no. 7, pp. 803-814, July 1995.
- [5] TMA DAVINCI Manual, Technology Modeling Association, Inc., 1993.
- [6] Deuffhard, P. "A Modified Newton Method for the Solution of Ill-Conditioned Systems of Nonlinear Equations with Application to Multiple Shooting.," Numer. Math. 22, pp 289-315, 1974.
- [7] Bank, R. E., Rose, D. J., "Global Approximate Newton Methods," Numer. Math. 37, pp. 279-295, 1981
- [8] Gen-Lin Tan, Xiao-Li Yuan, Qi-Ming Zhang, Walter H. Ku and An-Jui Shey, "Two-Dimensional Semiconductor Device Analysis Based on New Finite-Element Discretization Employing the S-G Scheme," IEEE transactions on CAD, vol. 8, no. 5, pp. 468-478, May 1989.
- [9] E. Hinton, D. R. J. Owen, An Introduction to Finite Element Computations, Pineridge Press, 1980.
- [10] Richard L. Burden, J. Douglas Faires, Numerical Analysis, 5th edition, PWS Publishing Company, pp. 56-65, 1993.
- [11] 김태한, 박산하, 김철성, "개선된 반송자 농도의 적분법을 이용한 MOSFET의 문턱전압 및 Subthreshold swing 추출," 대한전자공학회 논문지, 제 33권 A편 제 8호, pp. 114-124, 1996년 8월
- [12] TMA MEDICI Manual, Technology Modeling Association, Inc., 1993.
- [13] 윤현민, 김태한, 김대영, 김철성, "3차원 정상상태의 드리프트-확산 방정식의 해석 프로그램 개발," 대한전자공학회 논문지, 제 34권 D편 제 8호, pp. 41-51 1997년 8월
- [14] Ke-Chin Wu, Goodwin R. Chin, Robert W. Dutton, "A STRIDE Towards Practical 3-D Device Simulation- Numerical and Visualization Considerations," IEEE transactions on CAD, vol. 10, no. 9, pp. 1132-1140, September 1991.

— 저 자 소 개 —

金 泰 漢(正會員) 第 33卷 A編 第 9號 參照

현재 인하대학교 전자공학과 박사 과정 재학중



李 恩 九(正會員)

1972년 3월 20일생. 1995년 2월 인하대학교 전자공학과 졸업(공학사). 1997년 2월 인하대학교 대학원 전자공학과 졸업(공학석사). 1997년 1월~1997년 5월 현대전자 메모리연구소 근무. 1997년 7월~현재 인하대학교 전자공학과 박사 과정 재학중. 주관심 분야는 Mixed mode device-circuit simulator 개발임

金 鐵 城(正會員) 第 33卷 A編 第 9號 參照

현재 인하대학교 전자공학과 교수