

自主可控的功率半导体器件仿真工具研发进展

(一): 二维计算的精度

庄池杰^{1,2}, 石清元^{1,2}, 林 波², 彭晞雨¹, 吴 丹², 刘志成¹, 李 立²,
施连军³, 任李鑫³, 纪瑞朗², 余占清^{1,2}, 吴锦鹏^{1,2}, 魏晓光², 曾 嵘¹

(1. 新型电力系统运行与控制全国重点实验室(清华大学电机系), 北京 100084; 2. 北京怀柔实验室, 北京 101400; 3. 清华大学能源互联网创新研究院, 北京 100084)

摘 要: 功率半导体器件是电力电子装备电流开断和电能转换的核心。作为全球最大的功率半导体消费国, 中国功率器件自给率低, 严重依赖进口, 亟需自主化突破。功率半导体器件仿真软件作为器件多物理场分析、设计优化的必备工具, 研发难度大、周期长、见效慢。国内使用的功率半导体 TCAD 软件几乎全部由 Synopsys、Silvaco 等国外公司垄断。作为国产替代的第一步, 自 2019 年以来, 团队按照“先追赶、再并跑、最后超越”的思路, 开展功率半导体器件国产仿真工具的研发工作。该文在分析功率器件物理模型、求解难点的基础上, 介绍了自主可控的功率半导体器件二维仿真工具的初步研发进展, 与垄断商业软件 Synopsys TCAD Sentaurus Device 计算结果开展了详细比对, 在测试的算例和物理模型上, 自研软件二维计算的精度向国际垄断商业软件看齐。

关键词: 功率半导体器件; 仿真工具; 二维; 漂移扩散模型; 国产替代

Progress of Power Semiconductor Device Simulation Tool Development Part I: Accuracy of Two-dimensional Calculations

ZHUANG Chijie^{1,2}, SHI Qingyuan^{1,2}, LIN Bo², PENG Xiyu¹, WU Dan², LIU Zhicheng¹, LI Li², SHI Lianjun³,
REN Lixing³, JI Ruilang², YU Zhanqing^{1,2}, WU Jinpeng^{1,2}, WEI Xiaoguang², ZENG Rong¹

(1. State Key Laboratory of Power System Operation and Control, Department of Electrical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 2. Beijing Huairou Laboratory, Beijing 101400, China; 3. Energy Internet Research Institute, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Power semiconductor devices are the core of electrical energy conversion in power electronic equipment. As the world's largest consumer of power semiconductors, China faces a low self-sufficiency rate and a heavy reliance on imports, highlighting an urgent need for breakthroughs. Power semiconductor device simulation software, as an essential tool for multi-physics analysis and design optimization of devices, presents significant challenges in terms of high development complexity and low return on investment. Currently, almost all power semiconductor TCAD tools in use are developed by foreign companies such as Synopsys and Silvaco. Since 2019, the team has carried out the research and development work of power semiconductor device simulation tools. Based on the analysis of the physical models and solution difficulties of power semiconductor devices, this paper focuses on introducing the preliminary research progress of the two-dimensional simulation tool for power semiconductor devices, and conducts a detailed comparison with the calculation results of the world-leading commercial software Synopsys TCAD Sentaurus Device to verify the accuracy of the two-dimensional calculations.

Key words: power semiconductor device; simulation tool; two dimension; drift-diffusion model; research progress

0 引言

功率半导体器件是电力电子装备电能转换和

电流开断的核心, 是连接弱电与强电之间的桥梁。

中国是全球最大的功率半导体消费国, 每年贡献约 40% 的功率半导体市场。据预测, 我国功率器件市场将以 4.5% 的复合年均增长率持续增长, 至 2027 年有望达到 238 亿美元。另一方面, 功率器件自给率仅为 23%, 严重依赖进口, 亟需自主化突破。

基金资助项目: 国家自然科学基金集成项目(U2166602); 国家自然科学基金青年学生基础研究项目(博士研究生)(524B2107)。
Project supported by National Natural Science Foundation of China (U2166602, 524B2107).

半导体器件仿真工具 TCAD(technology computer-aided design)用于半导体器件的工艺流程以及电学性能模拟,是进行器件多物理场分析、结构设计的必备工具。设计一款功率器件需要反复优化沟道结构、掺杂等,设计周期往往长达半年至一年。准确的TCAD仿真结果可为实际器件设计和优化提供依据,大幅缩短设计周期,节约研发成本。

作为基础性工具,功率半导体仿真软件的研发门槛高、难度大、周期长、见效慢,涉及到物理、数学、计算机多个学科,单纯复现垄断商软的结果已非常艰难。其研发门槛,首先是器件本身复杂的物理机制和繁多的物理参数;其次,与上述物理机制对应的强耦合非线性数学模型,表现为强对流占优的非线性对流扩散方程,求解难度很大^[1-2];再次,器件还与外部电路系统耦合,即使成熟的商业软件也难以保证 100%收敛。目前,国内使用的功率半导体 TCAD 软件几乎全部由 Synopsys、Silvaco 等国外公司垄断。

习近平总书记在全国科技大会、国家科学技术奖励大会、两院院士大会上指出:针对基础软件等瓶颈制约,加大技术研发力度,确保重要产业链、供应链自主安全可控。

针对国产高压大容量功率半导体器件,特别是高端集成门极换流晶闸管(integrated gate commutated thyristor, IGCT)器件研发需求,为了解决功率半导体器件设计的高效、准确仿真以及器件—装备协同优化难题,自 2019 年以来,按照“先追赶、再并跑、最后超越”的思路,开展了国产功率半导体器件仿真工具的研发工作。

作为国产替代的第一步,本文重点不在于介绍功率半导体器件仿真的算法创新和实现细节,而是在介绍功率半导体器件物理模型、求解难点的基础上,着重介绍自主可控的功率半导体器件二维仿真工具的研发进展,通过与垄断商业软件 Synopsys TCAD Sentaurus Device 计算结果的详细比对,客观反映当前研发水平。关于计算速度的对比在后续文章中详细介绍。

1 功率半导体器件物理模型

描述半导体器件内部物理机制,最基本的模型是漂移扩散模型^[1,3],其包括泊松方程和载流子连续性方程,如式(1)。基本物理量包括:电势 ψ , 电子浓度 n 和空穴浓度 p 。

$$\begin{cases} \nabla \cdot \varepsilon \nabla \psi + q(p - n + N_D^+ - N_A^-) + \rho_{\text{trap}} = 0 \\ \frac{\partial n}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{J}_n + R - G = 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_p + R - G = 0 \end{cases} \quad (1)$$

式中:泊松方程反映了电势梯度(即电场强度 E 的反方向)的散度与载流子密度的关系。 q 表示元电荷; ε 表示材料介电常数; N_D^+ 和 N_A^- 分别表示掺杂的施主元素和受主元素原子的浓度; ρ_{trap} 表示缺陷引起的电荷。载流子连续性方程表示载流子浓度随时间的变化与电流密度、复合率和生成率的关系。 $\mathbf{J}_n$ 和 $\mathbf{J}_p$ 分别表示电子电流密度矢量和空穴电流密度矢量; R 代表载流子复合率; G 代表载流子生成率^[3]。电流密度矢量可表示为:

$$\begin{cases} \mathbf{J}_n = \mu_n n \mathbf{E}_n + \mu_n \frac{kT}{q} \lambda_n \nabla n \\ \mathbf{J}_p = \mu_p p \mathbf{E}_p - \mu_p \frac{kT}{q} \lambda_p \nabla p \end{cases} \quad (2)$$

式中: μ_n 和 μ_p 分别为电子和空穴的迁移率; k 为玻耳兹曼常数; T 为晶格温度; λ_n 和 λ_p 为因 Fermi-Dirac 分布引入的修正系数。

为了考虑真实物理效应,还需对基本方程中的物理量进行更细致的建模。在二维仿真工具的研发过程中,重点考虑了以下物理效应和物理模型:

1) 高掺杂相关的物理效应。以 IGCT 为例,其 n+发射极、p+发射极掺杂浓度大于 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,载流子分布不再满足经典的 Maxwell-Boltzmann 统计,而应采用 Fermi-Dirac 分布模型描述。掺杂杂质浓度提高,也会导致杂质电离程度减弱,此时应考虑不完全电离。同时,禁带宽度也受掺杂浓度影响,需要考虑禁带变窄效应^[3-5]。

2) 载流子迁移率模型^[6-10]。在低电场下,迁移率主要由声子散射、载流子间散射和电离杂质散射的共同作用决定,通常采用低场迁移率模型来综合描述。当载流子漂移速度逐渐接近饱和速度时,迁移率呈现非线性下降趋势,该特性通过高场迁移率饱和模型进行刻画。

3) 复合率的相关模型^[11-16]。肖克利-里德-霍尔(Shockley-Read-Hall, SRH)复合是载流子的主要复合机制^[13]。在载流子大注入条件下,还需要考虑俄歇(Auger)复合^[14]。

4) 碰撞电离模型^[17]。在高场强区域,碰撞电离是载流子生成的主要机制。以 IGCT 器件为例,

关断过程中, 空间电荷区内较高的电场和电流密度叠加引发的动态雪崩是关断失效的主要原因之一。

其他模型还包括产热与传热模型^[18]、缺陷模型等, 在此不再详细阐述。

需要说明的是, 半导体物理对不同类型和结构的器件是通用的。不同器件以及同一器件在不同条件下, 占主导的物理机制有所差别, 因此表现出不同的物理性质和电学特征。

2 功率半导体器件仿真方法

2.1 求解难点

在半导体仿真中, 除器件外, 还包括与器件连接的外电路。器件决定了外电路的拓扑, 外电路决定了器件的边界条件。功率半导体器件仿真, 需要解决描述半导体的漂移扩散模型和描述电路的代数微分方程的耦合求解问题^[19-21]。

功率半导体器件内部过程由偏微分方程系统描述, 而外电路(包括工作电路与驱动电路)由微分代数方程描述。这两种系统在数学性质上存在显著差异, 物理量的数值也存在较大数量级差异, 对耦合求解提出了较大挑战。在半导体器件仿真中, 离散后非线性方程组的雅可比矩阵条件数巨大, 很容易达到或超过 10^{18} ; 一般的迭代计算方法收敛困难^[2,22]。感兴趣的读者可参阅文献^[2], 此处不详细展开。

半导体的漂移扩散模型是强对流占优的扩散方程耦合了泊松方程。在半导体器件仿真中, 通过时间和空间离散, 将耦合的非线性偏微分方程组转化为可由计算机求解的代数方程组。

漂移扩散模型求解的复杂性和难点体现在: 物理机理的复杂性和时间、空间多尺度。半导体方程涉及的物理机理复杂多样, 如载流子的漂移、扩散、生成和复合, 厘清复杂的物理机制, 已是非常困难; 半导体问题在空间、时间上呈现显著的多尺度特性。由于粒子漂移在高场强区域呈现强对流占优, 带来了数值振荡问题; 载流子浓度在几微米宽的 PN 结内可能跨越十余个数量级, 要求局部的网格划分达到亚微米尺度; 电力电子器件开关过程中, 同时涉及纳秒级快变和毫秒级慢变过程, 要求数值算法具有高度灵活性和适应性。

数值振荡的问题, 一直是数学界的研究难点和热点。Godunov 在其博士论文中证明: 求解对流方程的线性格式, 若要保证不产生新的极值 (monotone), 最多只有一阶精度^[23]。对普遍意义上的对流

占优问题, 高于一阶的线性格式, 必然会产生新的极值, 破坏单调性, 严重时出现明显的数值振荡。

载流子浓度的巨大跳跃, 除了如前所述, 使对流问题的求解极易出现数值振荡外, 在解接近于 0 的区域还非常容易解出“负的浓度”, 导致求解中断。

另外, 局部的网格划分极密, 且同时存在纳秒级快速变化和毫秒级慢变过程, 显式时间离散方法将受限于稳定性条件(CFL 条件), 使时间步长小到不可接受。因此时间推进被迫采用隐式算法, 在每个时间步上都要求解非线性方程组。

2.2 器件、电路的解耦求解方法

如前所述, 器件、电路耦合, 使得非线性迭代求解收敛困难。可以采用动态迭代或双层牛顿方法 (two-level Newton method) 解决电路与器件间的耦合问题^[21,24]。

该方法采用分层迭代策略。首先, 在内层迭代中求解器件方程, 获得特定电路条件下的器件等值阻抗与等值电流源。然后, 在外层迭代中, 利用器件的对外等效模型, 求解电路系统, 更新器件电极上的电压, 作为新的边界条件。

上述方法使电路分析与器件仿真能够相对独立地进行, 既确保了两者有效耦合, 又避免了同时直接求解性质差异显著的电路和器件方程组, 提升了求解的鲁棒性。

具体流程如下:

- 1) 分别独立计算器件、电路的稳态解, 作为系统初始稳态的合理猜测。
- 2) 利用双层牛顿方法, 求解器件、电路耦合条件下的稳态解, 提供暂态分析的初始条件。
- 3) 利用双层牛顿方法, 推进暂态仿真, 获得时变条件下的系统行为。

2.3 器件多物理场求解方法

为了求解器件多物理场, 应首先对半导体器件的漂移扩散模型进行时间、空间离散, 得到离散变量的非线性方程组, 再用牛顿迭代求解。

采用基于有限体积法的 Scharfetter-Gummel(SG) 格式, 对半导体器件的主要控制方程(式(1)), 进行空间离散。对控制体积内的物理量进行积分, 可将连续的偏微分方程转化为离散的代数方程。如图 1 所示, SG 格式将电流密度的控制方程在网格节点上进行离散, 对于控制体积 Ω_i , 从节点 i 指向节点 j 的电流密度 J_n 、 J_p 可以通过 i 、 j 顶点上的基础物理量 ψ_i 、 ψ_j 、 n_i 、 n_j 、 p_i 、 p_j 表示为如下形式:

$$\begin{cases} J_n = \frac{D_n}{d_{ij}} \left(n_j B\left(\frac{\psi_j - \psi_i}{V_T}\right) - n_i B\left(\frac{\psi_i - \psi_j}{V_T}\right) \right) \\ J_p = \frac{D_p}{d_{ij}} \left(p_j B\left(\frac{\psi_i - \psi_j}{V_T}\right) - p_i B\left(\frac{\psi_j - \psi_i}{V_T}\right) \right) \end{cases} \quad (3)$$

式中: D_n 、 D_p 为电子和空穴的扩散系数; V_T 为热电压; d_{ij} 为节点 i 、 j 间的距离; $B(x)=x/(\exp(x)-1)$ 为 Bernoulli 函数。SG 格式利用 Bernoulli 函数处理对流项和扩散项, 保证了数值离散矩阵的 M-矩阵性质, 抑制了数值振荡, 实现了稳定的空间离散。空间离散格式细节可参见参文[1,20,25]。

在时间推进上, 可采用二阶 Backward Differentiation Formula(BDF2)等具有 L-Stable 性质的数值格式。在各时间步上, 可以结合局部截断误差估计, 动态调整时间步长, 在控制误差的同时, 提高计算效率。

3 仿真工具二维计算的精度验证

一款工业仿真工具, 必须做到物理上可信、数学上可靠、工程上可用。

数学上可靠, 除严格理论分析外, 可通过计算结果的网格收敛性来验证。物理上可信, 可凭借与实验数据的对比来确认。垄断商软计算结果已在工业界获得广泛的接纳与认可, 并经过了大量实验的严格验证。因此, 本文通过与垄断商软计算结果的详细比对, 间接验证了仿真工具计算结果的可靠性。以 5 种不同类型和结构的真实功率半导体器件为对象, 通过加密网格, 校验计算结果在数学范畴内是否呈现收敛性和准确性; 将研发的二维仿真工具与国际垄断商软 Synopsys TCAD Sentaurus Device 进行结果比对, 详细比较稳态条件下, 器件内部微观物理量的计算结果, 以验证计算结果在物理意义上是切实可信的。

3.1 典型功率器件的结构及计算设置

3.1.1 PiN 型功率二极管

PiN 型功率二极管设置为 1.2 kV 电压等级, 器件总厚度为 120 μm , 其结构、掺杂及网格划分情况如图 2 所示。其中, 漂移区为均匀掺杂, 浓度为 $8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$; 阳极区、阴极区掺杂均为高斯分布, 峰值掺杂浓度分别为 8×10^{17} 、 $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 结深分别为 10、5 μm 。

二极管稳态仿真考虑正向导通、反向阻断两种工况。正向导通时, 阳极、阴极电压分别为 5、0 V; 反向阻断时, 阳极、阴极电压分别为 0、1 200 V。

3.1.2 功率 BJT

功率 BJT 设置为 1.2 kV 电压等级、NPN 型, 器件总厚度为 220 μm , 其结构、掺杂及网格划分如图 3 所示。其中, 漂移区为均匀掺杂, 掺杂浓度为 $9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$; N+发射区、P 基区、N+集电区掺杂均为高斯分布, 峰值掺杂浓度分别为 10^{20} 、 10^{18} 、 $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 结深分别为 6.5、20、115 μm 。

功率 BJT 稳态仿真考虑集电极-发射极阻断、发射极-基极阻断和基极触发导通 3 种工况。集电极-发射极阻断工况下, 发射极、基极、集电极电压分

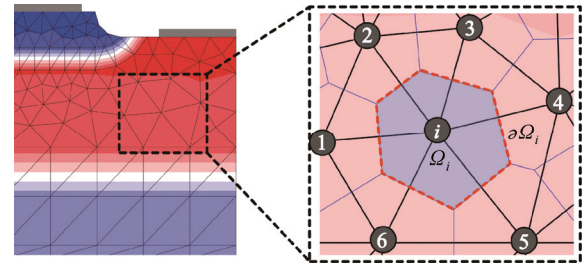


图 1 计算区域与网格

Fig.1 Computing domain and mesh setting

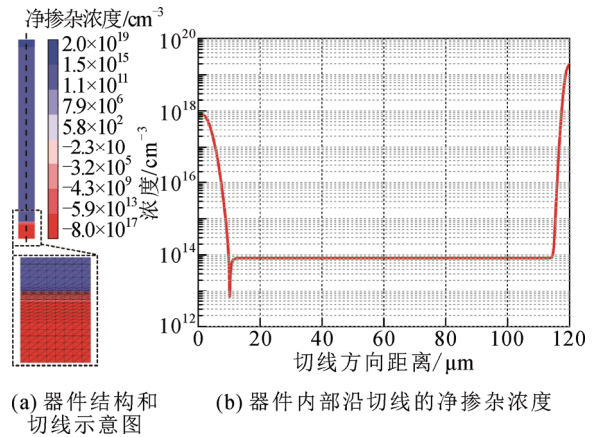


图 2 PiN 型功率二极管结构、掺杂及网格设置

Fig.2 Structure, doping and mesh setting of a PiN power diode

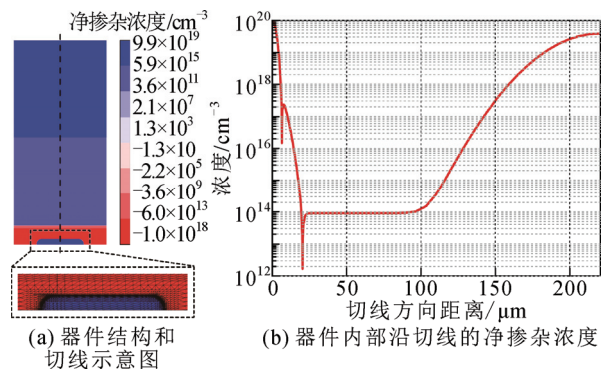


图 3 功率 BJT 结构、掺杂及网格设置

Fig.3 Structure, doping and mesh setting of a power BJT

别为 0、0、1 200 V; 发射极-基极阻断工况下, 发射极、基极、集电极电压分别为 14、0、0 V; 导通工况下, 发射极、基极、集电极电压分别为 0、0.7、5 V。

3.1.3 非对称型 IGCT

非对称型 IGCT(asymmetric IGCT, AS-IGCT)有 N 型缓冲层结构, 能有效减小器件厚度, 降低导通和关断损耗。

用于比对的器件为 6.5 kV 电压等级, 总厚度为 725 μm , 其结构、掺杂及网格划分情况见图 4。其中, 漂移区为均匀掺杂, 掺杂浓度为 $6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$; N+阴极区为余误差分布, 峰值掺杂浓度为 $1.2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$; P+基区、P 基区、N 型缓冲层、P+阳极区掺杂均为高斯分布, 峰值掺杂浓度分别为 4×10^{17} 、 8×10^{14} 、 3×10^{16} 、 $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 。

非对称型 IGCT 稳态仿真考虑正向阻断和门-阴极阻断两种工况。正向阻断工况下, 阳极电压设为 6 500 V, 门极和阴极设为 0 V; 门-阴极阻断工况下, 阳极、门极电压设为 0 V, 阴极电压设为 20 V。

3.1.4 逆阻型 IGCT

逆阻型 IGCT(reverse blocking IGCT, RB-IGCT)的 P 基区设计有波浪结, 可降低因动态雪崩导致 IGCT 阴极重触发失效的风险。

用于比对的器件为 8.5 kV 电压等级, 总厚度为 1 500 μm , 其结构、掺杂及网格划分见图 5。其中, 漂移区为均匀掺杂, 掺杂浓度为 $9.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$; N+阴极区为余误差分布, 峰值掺杂浓度为 $1.2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$; P+基区、P 基区、P 型波浪基区、P 型阳极区、P+阳极区掺杂均为高斯分布, 峰值掺杂浓度分别为 4×10^{17} 、 8×10^{14} 、 8×10^{14} 、 $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。

逆阻型 IGCT 稳态仿真考虑正向阻断、反向阻断和门-阴极阻断 3 种工况。正向阻断工况下, 阳极、门极、阴极电压分别设为 8 500、0、0 V; 反向阻断工况下, 阳极、门极、阴极电压分别设为 -8 500、0、0 V; 门-阴极阻断工况下, 阳极、门极、阴极电压分别设为 0、0、20 V。

3.1.5 外延型 IGCT

外延型 IGCT(epitaxial IGCT, EPI-IGCT)能够有效提高 IGCT 的门-阴极阻断电压, 从而增强器件电流关断能力。

用于比对的外延型 IGCT 为 4.5 kV 电压等级器件, P 基区为三层外延结构, 从阳极至阴极方向, 分别记为 L1、L2 和 L3 外延层; 器件背面有 N 型缓冲层结构; 器件总厚度为 525 μm 。其结构、掺杂

及网格划分情况如图 6 所示。其中, 漂移区为均匀掺杂, 掺杂浓度为 $8.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$; N+阴极区掺杂为余误差分布, 峰值掺杂浓度 $1.2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$; L1、L2、L3 外延层均为均匀掺杂, 掺杂浓度分别为 5×10^{14} 、 1×10^{17} 、 $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$; N 缓冲层、P+阳极区掺杂为高斯分布, 峰值掺杂浓度分别为 3×10^{16} 、 $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 。

外延型 IGCT 稳态仿真考虑正向阻断和门-阴极阻断两种工况。正向阻断工况下, 阳极、门极、阴

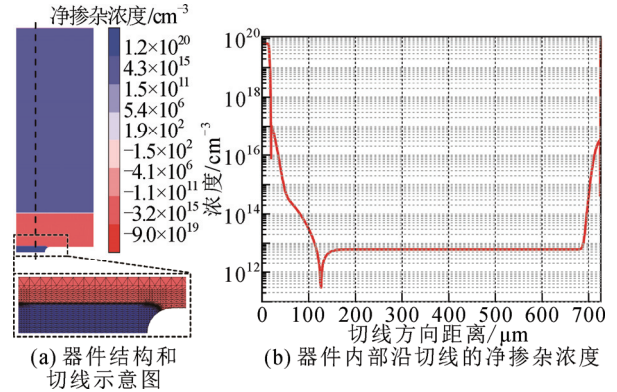


图 4 非对称型 IGCT 结构、掺杂及网格设置

Fig.4 Structure, doping and mesh setting of an AS-IGCT

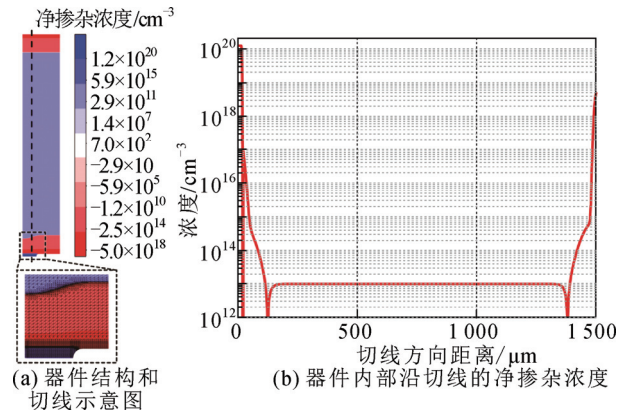


图 5 逆阻型 IGCT 结构、掺杂及网格设置

Fig.5 Structure, doping and mesh setting of an RB-IGCT

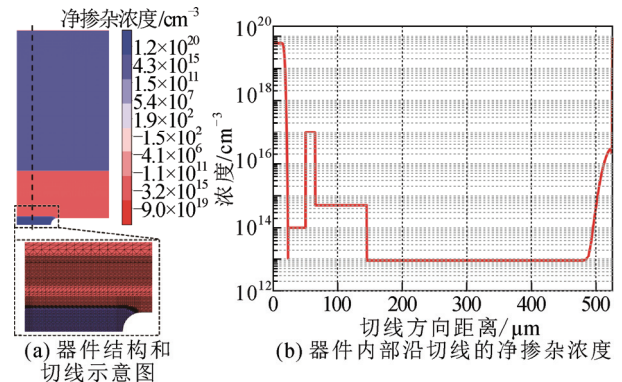


图 6 外延型 IGCT 结构、掺杂及网格设置

Fig.6 Structure, doping and mesh setting of an EPI-IGCT

极电压分别设为 4 500、0、0 V；门-阴极阻断工况下，阳极、阴极、门极电压分别设为 0、20、0 V。

3.2 计算结果的网格收敛性

本节以二极管和功率 BJT 为例，根据计算结果的网格收敛性，验证仿真工具在数学上是可靠的。计算中，开启了所有物理模型。单个模型，以及其它器件的收敛性结果是类似的，本文不再赘述。

3.2.1 网格收敛率的计算方法

将计算域 Ω 的网格划分记为 $T_h(h$ 为网格单元的最大直径)，网格顶点的集合记为 Ω_h ，则归一化后，数值解 u_h 和精确解 u 之间误差 L^2 -范数和 L^∞ -范数定义如下：

$$E_2(u_h) = \frac{1}{\max(|\Pi_h u|)} \left(\sum_{K \in T_h} \int_K (\Pi_h u - u_h)^2 dx dy \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

$$E_\infty(u_h) = \frac{1}{\max(|\Pi_h u|)} \max_{p \in \Omega_h} |\Pi_h u(p) - u_h(p)| \quad (5)$$

式中： Π_h 表示将函数插值到有限元空间的映射。用式(6)计算网格收敛率(收敛阶)：

$$R_{\text{convergence}} = \log_2 \left(\frac{E^{h_1}}{E^{h_2}} \right) / \log_2 \left(\frac{h_1}{h_2} \right) \quad (6)$$

式中： E^{h_1} 和 E^{h_2} 分别表示尺寸为 h_1 和 h_2 的网格剖分下的误差范数。

测试收敛率时，如图 7 所示，用边中点细化方式加细网格。对每个三角形，依次连接每条边的中点，将其细化为 4 个小三角形。

3.2.2 网格收敛性数值结果

随计算网格尺寸的减小，数值解逼近真实解。因此，将细化次数较多的解作为参考解，并计算相应的误差范数。

1) PiN 型功率二极管

以正向导通工况为例，初始网格数为 2 432，加密次数记为 N ；以网格加细 5 次后的解作为参考解。表 1 与表 2 给出了 3 个基本物理量的误差及收敛率结果。

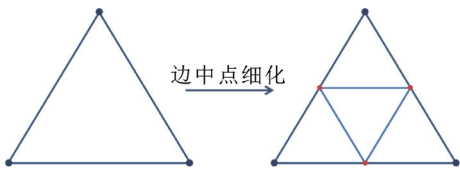


图 7 三角单元的细化示意图

Fig.7 Refinement of each triangular element

2) 功率 BJT

以集电极-发射极阻断工况为例，初始网格数为 4 888，加密次数记为 N 。以网格加细 4 次后的解作为参考解。表 3 与表 4 给出了 3 个基本物理量的误差及收敛率结果。

由表 1—表 4 可以看出，3 个基本物理量的计算结果均接近 2 阶收敛，仿真工具的计算结果在数学上是可靠的。

表 1 PiN 型功率二极管算例 L^2 -范数下的误差及网格收敛率
Table 1 Error and convergence rate of numerical method for a

PiN power diode (L^2 -norm)						
N	$E_2(\psi)$	ψ 收敛阶	$E_2(n)$	n 收敛阶	p	p 收敛阶
0	3.14	—	1.15×10^1	—	1.15×10^1	—
1	3.18×10^{-1}	3.30	8.95×10^{-1}	3.68	8.95×10^{-1}	3.68
2	1.03×10^{-1}	1.63	2.71×10^{-1}	1.73	2.70×10^{-1}	1.73
3	2.82×10^{-2}	1.87	0.71×10^{-1}	1.94	0.71×10^{-1}	1.94
4	6.00×10^{-3}	2.23	1.47×10^{-2}	2.27	1.47×10^{-2}	2.27

表 2 PiN 型功率二极管算例 L^∞ -范数下的误差及网格收敛率
Table 2 Error and convergence rate of numerical method

for a PiN power diode (L^∞ -norm)						
N	$E_\infty(\psi)$	ψ 收敛阶	$E_\infty(n)$	n 收敛阶	$E_\infty(p)$	p 收敛阶
0	1.38×10^{-1}	—	4.79×10^{-1}	—	4.79×10^{-1}	—
1	1.26×10^{-2}	3.45	2.96×10^{-2}	4.02	2.96×10^{-2}	4.02
2	4.08×10^{-3}	1.62	8.95×10^{-3}	1.73	8.95×10^{-3}	1.73
3	1.12×10^{-3}	1.86	2.36×10^{-3}	1.93	2.36×10^{-3}	1.93
4	2.40×10^{-4}	2.22	4.92×10^{-4}	2.26	4.92×10^{-4}	2.26

表 3 功率 BJT 算例 L^2 -范数下的误差及网格收敛率

Table 3 L^2 -norm error and convergence rate of numerical method for a power BJT

N	$E_2(\psi)$	ψ 收敛阶	$E_2(n)$	n 收敛阶	$E_2(p)$	p 收敛阶
0	4.79×10^{-2}	—	2.33×10^{-4}	—	2.32×10^{-4}	—
1	1.00×10^{-2}	2.26	1.04×10^{-4}	1.16	1.20×10^{-4}	0.99
2	2.59×10^{-3}	1.95	3.01×10^{-5}	1.79	3.41×10^{-5}	1.82
3	4.71×10^{-4}	2.46	6.22×10^{-6}	2.28	8.21×10^{-6}	2.06

表 4 功率 BJT 算例 L^∞ -范数下的误差及网格收敛率

Table 4 L^∞ -norm error and convergence rate of numerical method for a power BJT

N	$E_\infty(\psi)$	ψ 收敛阶	$E_\infty(n)$	n 收敛阶	$E_\infty(p)$	p 收敛阶
0	1.28×10^{-3}	—	3.24×10^{-4}	—	4.58×10^{-4}	—
1	2.02×10^{-4}	2.66	2.56×10^{-4}	0.33	2.33×10^{-4}	0.98
2	9.17×10^{-5}	1.14	7.99×10^{-5}	1.69	6.81×10^{-5}	1.77
3	1.02×10^{-5}	3.18	1.69×10^{-5}	2.23	1.46×10^{-5}	2.22

3.3 稳态微观物理量的计算精度

仿真工具计算结果在物理上的可信度通过与 Sentaurus Device 进行比对来间接验证。

对前述 5 种真实功率器件的 12 种工况, 采用相同计算网格, 分别使用自研工具和 Synopsys TCAD Sentaurus Device 计算器件的稳态, 比较微观物理量的计算偏差。相对差异定义为:

$$E_{\text{relative}} = \max_i \left(\frac{|x_{\text{ours}}(i) - x_{\text{ref}}(i)|}{|x_{\text{ref}}(i) + \varepsilon|} \right) \quad (7)$$

式中: $x_{\text{ours}}(i)$ 和 $x_{\text{ref}}(i)$ 分别为自研工具和垄断商业软件 Synopsys TCAD Sentaurus Device 在第 i 个网格顶点上的 (ψ, n, p) 计算值; ε 为给定的正数, 对静电势取 1×10^{-3} , 对载流子浓度取 $1 \times 10^{-8} \times \max(x_{\text{ref}})$, 是为了避免在物理量几乎为 0 的区域以 0 作为分母。

逐个开启每个物理模型, 根据式(7)中相对差异定义, 逐网格点比对电子浓度 n 、空穴浓度 p 和电势 ψ 的相对差异, 取每个变量在全部点上的最大相对差异作为该变量的“最大相对差异”取值, 结果如图 8 所示。从图 8 可以看出, 相对差异大于 1×10^{-6} 的情形仅占总数的 0.6%, 但仍优于 1×10^{-5} ; 相对差异的中位值小于 1×10^{-10} ; 98.2% 的情形, 相对差异小于 1×10^{-7} 。

低场迁移率、高场迁移率、碰撞电离模型是重要且实现比较复杂的物理模型。表 5—表 7 单独给出了单独开启这 3 个物理模型时的相对差异。单独开启其它物理模型的相对差异是类似的, 不再赘述。

同时开启所有物理模型, 相对差异分布如表 8 所示。自研工具与垄断商软的相对差异最大值仅为 3.23×10^{-8} , 小于千万分之一, 证实自研工具具有很高的精度。值得注意的是, 表 8 中的最大差异优于表 5—表 7, 是由于正负偏差抵消导致的。

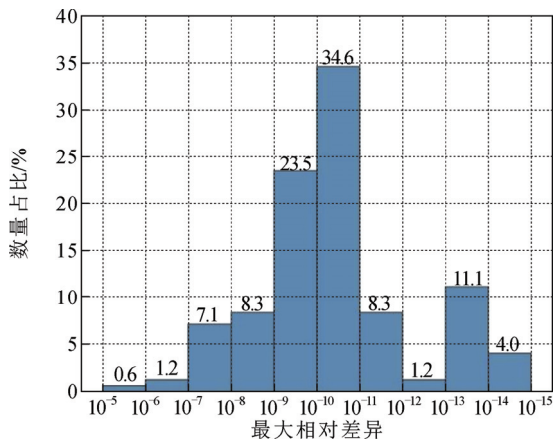


图 8 逐个模型比对时各物理量最大相对差异分布

Fig.8 Relative difference distribution for each single model

表 5 仅开启低场迁移率模型时的相对差异

Table 5 Relative difference between our solver and sentaurus device with only the low-field mobility model enabled

器件类型(工况)	n 相对差异	p 相对差异	ψ 相对差异
二极管(正向导通)	4.81×10^{-14}	4.33×10^{-14}	1.61×10^{-14}
二极管(反向阻断)	2.24×10^{-12}	5.21×10^{-14}	9.85×10^{-15}
功率 BJT(集-射极阻断)	1.58×10^{-11}	5.82×10^{-10}	9.99×10^{-12}
功率 BJT(射-基极阻断)	7.60×10^{-12}	4.20×10^{-10}	1.44×10^{-12}
功率 BJT(基极触发导通)	8.07×10^{-14}	2.57×10^{-12}	9.08×10^{-15}
AS-IGCT(正向阻断)	1.37×10^{-6}	1.78×10^{-6}	1.23×10^{-10}
AS-IGCT(门-阴极阻断)	1.47×10^{-8}	2.88×10^{-8}	7.51×10^{-8}
RB-IGCT(正向阻断)	6.84×10^{-10}	8.28×10^{-10}	8.39×10^{-11}
RB-IGCT(反向阻断)	1.51×10^{-10}	5.03×10^{-10}	9.40×10^{-10}
RB-IGCT(门-阴极阻断)	2.42×10^{-11}	5.48×10^{-11}	2.15×10^{-11}
EPI-IGCT(正向阻断)	4.98×10^{-7}	4.58×10^{-7}	8.84×10^{-10}
EPI-IGCT(门-阴极阻断)	2.93×10^{-8}	2.21×10^{-8}	5.32×10^{-8}

表 6 仅开启高场迁移率模型时的相对差异

Table 6 Relative difference between our solver and sentaurus device with only the high-field mobility model enabled

器件类型(工况)	n 相对差异	p 相对差异	ψ 相对差异
二极管(正向导通)	8.79×10^{-14}	8.76×10^{-14}	2.54×10^{-14}
二极管(反向阻断)	3.85×10^{-12}	2.29×10^{-13}	7.08×10^{-15}
功率 BJT(集-射极阻断)	1.34×10^{-11}	5.59×10^{-10}	1.06×10^{-11}
功率 BJT(射-基极阻断)	3.25×10^{-8}	2.99×10^{-9}	2.37×10^{-11}
功率 BJT(基极触发导通)	3.69×10^{-9}	9.69×10^{-9}	7.73×10^{-10}
AS-IGCT(正向阻断)	2.47×10^{-10}	3.93×10^{-10}	1.97×10^{-11}
AS-IGCT(门-阴极阻断)	1.39×10^{-9}	2.73×10^{-9}	7.65×10^{-9}
RB-IGCT(正向阻断)	1.58×10^{-8}	5.42×10^{-8}	6.00×10^{-10}
RB-IGCT(反向阻断)	1.32×10^{-8}	4.37×10^{-8}	9.65×10^{-8}
RB-IGCT(门-阴极阻断)	6.46×10^{-9}	2.38×10^{-8}	4.60×10^{-8}
EPI-IGCT(正向阻断)	1.86×10^{-10}	1.70×10^{-10}	1.13×10^{-10}
EPI-IGCT(门-阴极阻断)	9.68×10^{-9}	5.86×10^{-9}	4.40×10^{-9}

表 7 仅开启碰撞电离模型时的相对差异

Table 7 Relative difference between our solver and sentaurus device with only the impact ionization model enabled

器件类型(工况)	n 相对差异	p 相对差异	ψ 相对差异
二极管(正向导通)	4.83×10^{-14}	4.85×10^{-14}	1.35×10^{-14}
二极管(反向阻断)	2.24×10^{-12}	2.38×10^{-12}	1.03×10^{-14}
功率 BJT(集-射极阻断)	1.46×10^{-11}	3.69×10^{-10}	1.17×10^{-11}
功率 BJT(射-基极阻断)	1.09×10^{-10}	9.69×10^{-8}	1.49×10^{-12}
功率 BJT(基极触发导通)	8.22×10^{-14}	7.91×10^{-14}	8.19×10^{-15}
AS-IGCT(正向阻断)	1.09×10^{-10}	1.68×10^{-10}	2.64×10^{-11}
AS-IGCT(门-阴极阻断)	4.93×10^{-11}	3.75×10^{-11}	1.95×10^{-11}
RB-IGCT(正向阻断)	1.83×10^{-10}	9.86×10^{-11}	6.68×10^{-11}
RB-IGCT(反向阻断)	2.96×10^{-10}	8.33×10^{-10}	2.05×10^{-9}
RB-IGCT(门-阴极阻断)	3.02×10^{-11}	4.14×10^{-10}	2.31×10^{-11}
EPI-IGCT(正向阻断)	1.93×10^{-7}	1.77×10^{-7}	3.32×10^{-10}
EPI-IGCT(门-阴极阻断)	4.93×10^{-11}	1.43×10^{-11}	3.51×10^{-11}

表 8 开启所有模型时的相对差异

Table 8 Relative difference between our solver and sentaurus

device with all the models enabled			
器件类型(工况)	n 相对差异	p 相对差异	ψ 相对差异
二极管(正向导通)	4.97×10^{-9}	4.72×10^{-9}	2.03×10^{-10}
二极管(反向阻断)	1.88×10^{-11}	4.72×10^{-9}	4.12×10^{-10}
功率 BJT(集-射极阻断)	1.82×10^{-11}	4.99×10^{-10}	9.93×10^{-12}
功率 BJT(射-基极阻断)	2.44×10^{-10}	3.48×10^{-9}	1.36×10^{-11}
功率 BJT(基极触发导通)	1.15×10^{-8}	1.43×10^{-8}	5.55×10^{-9}
AS-IGCT(正向阻断)	2.61×10^{-10}	2.44×10^{-10}	4.82×10^{-10}
AS-IGCT(门-阴极阻断)	4.79×10^{-10}	2.71×10^{-10}	9.46×10^{-10}
RB-IGCT(正向阻断)	3.14×10^{-8}	1.51×10^{-8}	3.77×10^{-10}
RB-IGCT(反向阻断)	3.23×10^{-8}	1.26×10^{-8}	2.56×10^{-8}
RB-IGCT(门-阴极阻断)	4.79×10^{-10}	1.08×10^{-9}	5.43×10^{-10}
EPI-IGCT(正向阻断)	1.68×10^{-9}	1.61×10^{-9}	5.40×10^{-10}
EPI-IGCT(门-阴极阻断)	2.13×10^{-8}	5.08×10^{-10}	9.24×10^{-11}

值得说明的是, 自研工具的物理模型和具体算法实现, 仍在持续迭代优化中; 计算精度的具体数据也与计算设置(如器件结构、工况、牛顿迭代的收敛判据、网格划分)有关。

然而, 文中数据反映的结果趋势是确定的, 代表了自研工具当前的水平。笔者相信, 通过持续迭代, 自研工具的计算结果的可信度、可靠性将不断提升。

4 功率器件的暂态特性计算及典型应用

在功率器件研发中, 非常关注通态压降、通流能力、关断能力等指标。这些指标往往相互矛盾, 须结合实际工作电路, 进行大量暂态、稳态仿真, 不断优化设计, 以实现性能指标的平衡。

本章以非对称及逆阻 IGCT 为例, 仿真标准测试回路中的 IGCT 器件单次开通、关断过程, 并对比自研工具与垄断商软的计算结果。

图 9 给出了标准测试回路及 IGCT 器件的驱动电路。标准测试回路参考了 MMC 工程中子模块的参数, 母线电压 $V_{DC}=2800\text{ V}$, 钳位电容 $C_{CL}=20\text{ }\mu\text{F}$, 电阻 $R_s=0.4\text{ }\Omega$, 限流电感 $L_i=1\text{ }\mu\text{H}$, 线路杂散电感 $L_{CL}=0.3\text{ }\mu\text{H}$, 负载电感 $L_{load}=100\text{ }\mu\text{H}$ 。FRD 为快恢复二极管, DUT 为被测器件, 本章中为两种 IGCT。IGCT 器件采用单 GCT 元胞模型, 驱动回路杂散阻抗 $L_{gu}=1\text{ nH}$, $R_{gu}=1\text{ m}\Omega$ 。仿真设置中, 在 $1\text{ }\mu\text{s}$ 时, 电流源 I_{trig} 将 IGCT 触发开通; 在 $145\text{ }\mu\text{s}$ 时, 门极驱动回路中的 MOSFET 导通, 电压源 V_{off} 在 IGCT 门、阴极之间施加 20 V 反向电压, 将其关断; 重点关注器件阳极电压、阳极电流、门极电流和驱动回路中门、阴极间的电压。

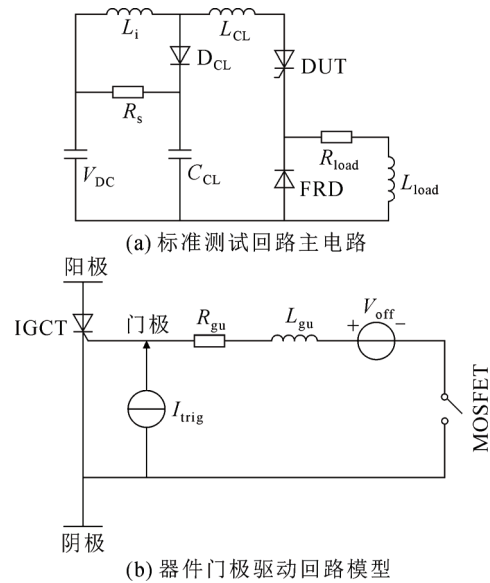


图 9 MMC 用标准测试回路及 IGCT 驱动电路模型

Fig.9 Test circuit for MMC and IGCT driver circuit

非对称 IGCT 关断过程的仿真波形如图 10 所示。在工程可接受范围内, 主回路中器件的电压、电流波形高度一致。

逆阻型 IGCT 关断过程的仿真波形如图 11 所示。从放大关断波形可以看出, 主回路中器件的电压、电流波形高度一致。

实际优化设计过程需要穷举大量结构参数, 反复进行类似计算。图 10、图 11 给出了器件关断能力优化的具体案例, 验证了仿真工具的暂态计算能力与准确性。关于如何用器件-电路联合仿真来优化器件, 可参见文献[24]。

5 结论

经过 5 年研发, 形成了功率半导体器件二维仿真工具初代版本。本文在分析研发难点的基础上, 详细对比了自研工具与垄断商软的计算结果。

对 5 种功率器件(PiN 二极管、功率 BJT、非对称型 IGCT、逆阻型 IGCT 和外延型 IGCT)、12 种工况和不同物理模型穷举组合, 计算区域内每个网格点的稳态电子、空穴和电势计算结果, 均与垄断商软高度吻合; 在测试的算例和物理模型上, 自研软件二维计算的精度向国际垄断商业软件看齐。

以关断能力优化为例, 开展了器件暂态特性计算。非对称型与逆阻型 IGCT 在标准测试回路中的单次开通、关断过程暂态计算结果与商软高度一致。

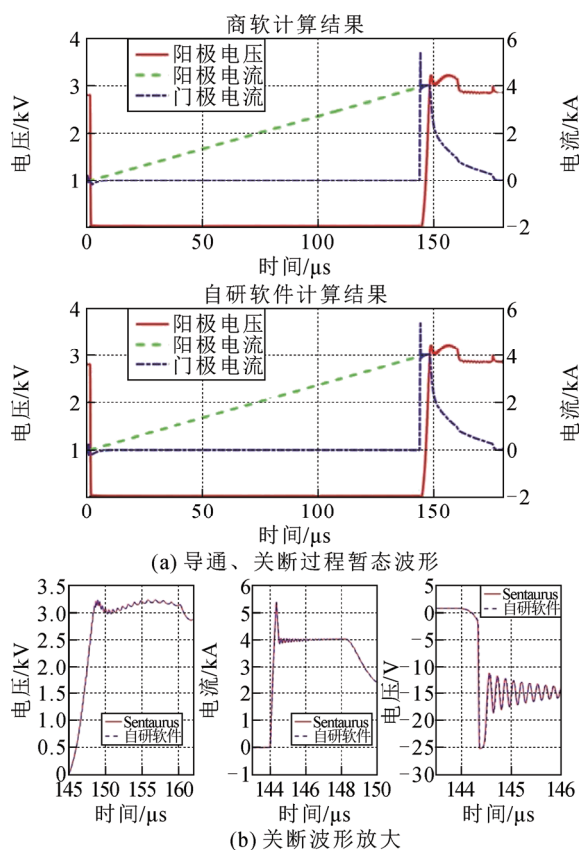


图 10 非对称型 IGCT 的暂态波形对比

Fig.10 Comparison of simulated transients of AS-IGCT

后续将持续优化二维仿真工具, 并开展三维工具研发工作。

附录见本刊网络版(<http://hve.epri.sgcc.com.cn>)。

参考文献 References

- [1] SELBERHERR S. Analysis and simulation of semiconductor devices[M]. Vienna, Austria: Springer, 1984.
- [2] ASCHER U, MARKOWICH P A, SCHMEISER C, et al. Conditioning of the steady state semiconductor device problem[J]. SIAM Journal on Applied Mathematics, 1989, 49(1): 165-185.
- [3] SCHENK A. Advanced physical models for silicon device simulation[M]. Vienna, Austria: Springer, 1998.
- [4] SLOTBOOM J W, DE GRAAFF H C. Measurements of bandgap narrowing in Si bipolar transistors[J]. Solid-State Electronics, 1976, 19(10): 857-862.
- [5] BENNETT H S, WILSON C L. Statistical comparisons of data on band-gap narrowing in heavily doped silicon: electrical and optical measurements[J]. Journal of Applied Physics, 1984, 55(10): 3582-3587.
- [6] KLAASSEN D B M. A unified mobility model for device simulation—I. Model equations and concentration dependence[J]. Solid-State Electronics, 1992, 35(7): 953-959.
- [7] CANALI C, MAJANI G, MINDER R, et al. Electron and hole drift velocity measurements in silicon and their empirical relation to electric field and temperature[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1975, 22(11): 1045-1047.

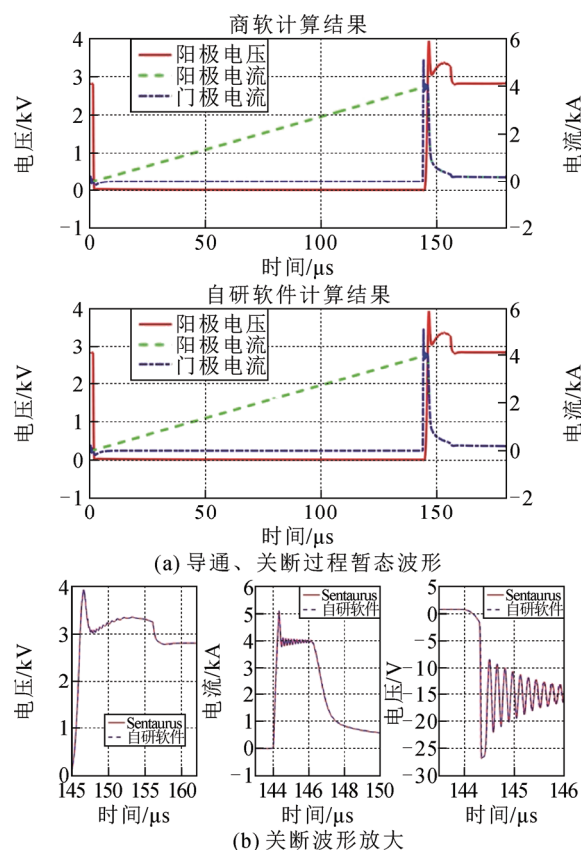


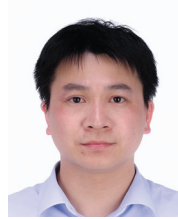
图 11 逆阻型 IGCT 关断波形对比

Fig.11 Comparison of simulated transients of RB-IGCT

- [8] MASETTI G, SEVERI M, SOLMI S. Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1983, 30(7): 764-769.
- [9] ARORA N D, HAUSER J R, ROULSTON D J. Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1982, 29(2): 292-295.
- [10] CAUGHEY D M, THOMAS R E. Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field[J]. Proceedings of the IEEE, 1967, 55(12): 2192-2193.
- [11] HÄCKER R, HANGLEITER A. Intrinsic upper limits of the carrier lifetime in silicon[J]. Journal of Applied Physics, 1994, 75(11): 7570-7572.
- [12] ROULSTON D J, ARORA N D, CHAMBERLAIN S G. Modeling and measurement of minority-carrier lifetime versus doping in diffused layers of n⁺-p silicon diodes[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1982, 29(2): 284-291.
- [13] SCHENK A. A model for the field and temperature dependence of Shockley-Read-Hall lifetimes in silicon[J]. Solid-State Electronics, 1992, 35(11): 1585-1596.
- [14] HULDT L, NILSSON N G, SVANTESSON K G. The temperature dependence of band-to-band Auger recombination in silicon[J]. Applied Physics Letters, 1979, 35(10): 776-777.
- [15] TYAGI M S, VAN OVERSTRAETEN R. Minority carrier recombination in heavily-doped silicon[J]. Solid-State Electronics, 1983, 26(6): 577-597.
- [16] FOSSUM J G, LEE D S. A physical model for the dependence of

carrier lifetime on doping density in nondegenerate silicon[J]. Solid-State Electronics, 1982, 25(8): 741-747.

- [17] REGGIANI S, GNANI E, RUDAN M, et al. Experimental extraction of the electron impact-ionization coefficient at large operating temperatures[C]//Proceedings of the IEEE International Electron Devices Meeting. San Francisco, USA: IEEE, 2004: 407-410.
- [18] WACHUTKA G K. Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modeling[J]. IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, 1990, 9(11): 1141-1149.
- [19] PALM E, VAN DE WIELE F. Current lines and accurate contact current evaluation in 2-D numerical simulation of semiconductor devices[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1985, 32(10): 2052-2059.
- [20] BANK R E, ROSE D J, FICHTNER W. Numerical methods for semiconductor device simulation[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1983, 30(9): 1031-1041.
- [21] BANK R E, COUGHRAN W M, FICHTNER W, et al. Transient simulation of silicon devices and circuits[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1985, 32(10): 1992-2007.
- [22] SAAD Y. Iterative methods for sparse linear systems[M]. 2nd ed. Philadelphia, USA: SIAM, 2003.
- [23] GODUNOV S K. Different methods for shock waves[D]. Moscow, Russia: Moscow State University, 1954.
- [24] SHI Q, ZHUANG C, LIU J, et al. Hybrid parallel collaborative simulation framework integrating device physics with circuit dynamics for PDAE-modeled power electronic equipment[EB/OL].[2024-12-23]. <https://github.com/QY-Shi/HPC-framework>.
- [25] SHI Q Y, ZHUANG C J, LIN B, et al. Adaptive local mesh refinement in 2-D finite volume method for steady state and transient simulations of semiconductor devices[J]. IEEE Transactions on Magnetics, 2024, 60(12): 7202604.



ZHUANG Chijie
Ph.D.

Associate professor
Corresponding author

庄池杰(通信作者)

1983—, 男, 博士, 副教授

主要从事功率半导体器件数值模拟、传感与测量研究工作

E-mail: chijie@tsinghua.edu.cn



SHI Qingyuan
Ph.D. candidate

石清元

2000—, 男, 博士生

研究方向为功率半导体器件的物理建模、数值仿真和优化设计

E-mail: shiqy21@mails.tsinghua.edu.cn



ZENG Rong
Ph.D., Professor

曾 嵘

1971—, 男, 博士, 教授, 博导

主要从事高压大容量功率器件及直流输电技术研究工作

E-mail: zengrong@tsinghua.edu.cn

收稿日期 2024-12-10 修回日期 2024-12-24 编辑 卫李静

附录 A

功率器件物理模型极其复杂。限于文章篇幅，为了使读者有直观印象，附录给出部分模型的简要形式，各个模型的完整形式可以参见更加完整的文献[1,3]。

1. 迁移率模型

以电子为例(附录中下标 n 表示电子的模型或系数，下标 p 表示空穴的模型或系数)，低电场迁移率 μ_n^{low} 由 Philips 统一迁移率模型描述[6]，综合考虑了晶格散射 $\mu_{n,L}$ (phonon scattering) 和其他散射机制 $\mu_{n,\text{DAeh}}$ (包括自由载流子和离子化掺杂物的散射)，模型公式较为复杂，具体可以参考[6-10]。

$$\frac{1}{\mu_n^{\text{low}}} = \frac{1}{\mu_{n,L}} + \frac{1}{\mu_{n,\text{DAeh}}} \quad (\text{A1})$$

当电场强度较高时，迁移率的饱和效应使用扩展 Canali 模型刻画。

$$\mu_n = \frac{(\alpha + 1)\mu_n^{\text{low}}}{\alpha + \left(1 + \left(\frac{(\alpha + 1)\mu_n^{\text{low}} F_n^{\text{hfs}}}{v_{\text{sat}}}\right)^\beta\right)^{1/\beta}} \quad (\text{A2})$$

式中：常数 α 、 β 等参见文献[7,10]，电子运动驱动力 F_n^{hfs} 使用准费米势梯度描述。

$$F_n^{\text{hfs}} = |\nabla \phi_n| = \left| \nabla \left(\frac{-E_C - TF_{1/2}^{-1}(n/N_C)}{q} \right) \right| \quad (\text{A3})$$

式中： $F_{1/2}^{-1}(\cdot)$ 为 1/2 阶的 Fermi-Dirac 积分的逆运算； ϕ_n 为电子的准费米势； E_C 为导带能级； N_C 为导带有效态密度。上述符号的完整定义公式参见文献[1,3]。

2. 碰撞电离模型

碰撞电离是引发动态雪崩和器件击穿的主要机制。碰撞电离引起的载流子生成率 G 用下式表示。

$$G = \frac{1}{q} (\alpha_n |J_n| + \alpha_p |J_p|) \quad (\text{A4})$$

其中，碰撞电离系数 α 参见文献[17]，可表示为

$$\alpha = \frac{F_{\text{ava}}}{a(T) + b(T) \exp\left(\frac{d(T)}{F_{\text{ava}} + c(T)}\right)} \quad (\text{A5})$$

式中：系数 a 、 b 、 c 、 d 均为温度的多项式函数[17]；电子运动驱动力 $F_{n,\text{ava}}$ 使用准费米势梯度表示：

$$F_{n,\text{ava}} = |\nabla \phi_n| \quad (\text{A6})$$

3. SRH(Shockley-Read-Hall)复合模型

Shockley-Read-Hall 复合是低掺杂条件下的主

要载流子复合机制，其速率由以下公式描述。

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - \gamma_n \gamma_p n_{\text{ie}}^2}{\tau_p \left(n + \gamma_n n_{\text{ie}} \exp\left(\frac{E_{\text{trap}}}{kT}\right) \right) + \tau_n \left(p + \gamma_p n_{\text{ie}} \exp\left(\frac{-E_{\text{trap}}}{kT}\right) \right)} \quad (\text{A7})$$

式中： τ_n 、 τ_p 为电子、空穴寿命； n_{ie} 为有效本征载流子浓度； E_{trap} 为缺陷能级和本征能级间的能量差； γ_n 、 γ_p 为载流子 Fermi-Dirac 统计分布的修正系数。

4. Auger 复合模型

在载流子的大注入条件下，俄歇复合机制变得显著，其复合速率为：

$$R_{\text{Auger}} = (C_n n + C_p p)(np - n_{\text{ie}}^2) \quad (\text{A8})$$

式中： C_n 、 C_p 为俄歇复合系数。

5. 不完全电离模型

在较高掺杂浓度下，杂质会出现不完全电离，由施主、受主杂质原子浓度 N_D 、 N_A 实际电离生成的有效杂质浓度 N_D^+ 、 N_A^- 可建模为：

$$\begin{cases} N_D^+ = \frac{N_D}{1 + g_D \exp\left(\frac{E_{F,n} - E_D}{kT}\right)} \\ N_A^- = \frac{N_A}{1 + g_A \exp\left(\frac{E_A - E_{F,p}}{kT}\right)} \end{cases} \quad (\text{A9})$$

式中： g_D 、 g_A 为退化系数； E_D 、 E_A 为电离能； $E_{F,n}$ 、 $E_{F,p}$ 为电子和空穴的费米能级。上述符号的完整定义公式参见文献[1,3]。

6. 能带变窄模型

在高掺杂浓度下，半导体的禁带宽度 E_g 会减小，进而影响载流子的漂移速度。有效禁带宽度 $E_{g,\text{eff}}$ 可建模为：

$$\begin{aligned} E_{g,\text{eff}}(T) &= E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} - \\ &E_{\text{ref}} \left(\ln\left(\frac{N_{\text{tot}}}{N_{\text{ref}}}\right) + \sqrt{\left(\ln\left(\frac{N_{\text{tot}}}{N_{\text{ref}}}\right)\right)^2 + 0.5} \right) - \\ &kT_{\text{ref}} \left(\ln\left(\frac{N_v N_C}{N_A N_D}\right) + F_{1/2}^{-1}\left(\frac{N_A}{N_v}\right) + F_{1/2}^{-1}\left(\frac{N_D}{N_C}\right) \right) \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

式中： α 、 β 、 N_{ref} 为拟合系数； $N_{\text{tot}} = N_D + N_A$ 。上述符号的完整定义公式参见文献[1,3]； T_{ref} 表示参考温度。

7. Fermi-Dirac 分布

在高掺杂浓度下，载流子的分布偏离经典的 Maxwell-Boltzmann 统计，应采用 Fermi-Dirac 分布

精确描述其分布特性。对于化学势 η_s ，其 Fermi-Dirac 分布的概率密度函数为：

$$F_{1/2}(\eta_s) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta^{1/2}}{1 + \exp(\eta - \eta_s)} d\eta \quad (\text{A11})$$

Fermi-Dirac 分布导致的修正几乎会影响全部方程和模型。由于过于冗长，此处不再展开叙述。

8. 缺陷模型

缺陷模型用于描述半导体材料中由缺陷(如空位、掺杂等)引起的复合、生成及其对载流子的影响。缺陷通常充当深能级俘获中心，影响载流子寿命与复合速率。缺陷模型的细节非常复杂，受篇幅限制，此处不再展开。