

Diss. ETH No. 11639

# Simulation of Carrier Generation in Advanced Silicon Devices

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY  
ZURICH

for the degree of  
Doctor sc. techn.

presented by  
ULRICH KRUMBEIN  
Dipl. Phys., University of Kaiserslautern  
born 14 January 1964  
citizen of Germany

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. W. Fichtner, examiner  
Prof. Dr. H. Melchior, co-examiner

1996

# Zusammenfassung

In den letzten Jahrzehnten haben sich Simulationsprogramme zu einem weit akzeptierten Werkzeug in der Entwicklung neuer Halbleitertechnologien entwickelt. Sie helfen, die Zahl kostenintensiver Entwurfs- und Fabrikationszyklen durch quantitative Aussagen über das Bauelemente- und Schaltkreisverhalten zu reduzieren. Seit der ersten vollständig numerischen Modellierung von bipolaren Transistoren, die auf partiellen Differentialgleichungen basiert und von Gummel [1] vorgeschlagen wurde, haben sich die zugrunde liegenden Gleichungen und physikalischen Modelle stetig verbessert, um die zwingenden Anforderungen schrumpfender Bauelementabmessungen zu erfüllen. In den achtziger Jahren basierte ein konventioneller Bauelementesimulator auf den Drift-Diffusions-Gleichungen und enthielt die Shockley-Read-Hall- und Auger-Rekombination, sowie Stossionisation. So wie die Bauelementgleichungen auf die allgemein benutzten hydrodynamischen Gleichungen oder die Energie-Bilanz-Gleichungen erweitert wurden, müssen auch die physikalischen Modellen verbessert und in Simulationsprogrammen zugänglich gemacht werden.

Diese Dissertation beschäftigt sich mit fortschrittlichen Generations-Rekombinations-Modellen, die in der Simulation moderner Siliziumbauelemente wie Hocheffizienzsolarzellen oder nichtflüchtige Speicher benötigt werden.

Wir haben ein Programm geschrieben, das optische Generationsraten auf der Grundlage der Transfermatrixmethode berechnet. Ein Modell wurde entwickelt und implementiert, das invertierte Pyramidenstrukturen, wie sie in Hocheffizienzsolarzellen benutzt werden, in einer ökonomischen Weise beschreibt.

Um Flash-EPROM-Bauelemente zu simulieren, müssen die folgenden Beiträge in einem Bauelementesimulationsprogramm verfügbar sein: Band-Band-Tunneln, defektassistiertes Tunneln, isolierte Gatter, Fowler-Nordheim-Tunneln und die Injektion heisser Elektronen über Oxydbarrieren. Wir haben diese Features in dem mehrdimensionalen Bauelementesimulationsprogramm *Dessis* implementiert. Für Band-Band- und defektassistiertes Tunneln fanden wir Einschränkungen der zugrundeliegenden Annahmen. Die Annahme konstanter Quasi-Fermi-Niveaus über die Tunnellänge führt zu einer Sättigung der Tunnelgeneration im 'pre-breakdown'-Bereich hoch dotierter *pn*-Übergänge. Für Diodenstrukturen mit Gatter zeigten wir die Notwendigkeit, die Existenz von Anfangs- und Endzuständen beim Tunneln zu überprüfen und implementierten entsprechende Algorithmen.

Für alle Implementationen wurden Bauelementesimulationen durchgeführt und konnten in den meisten Fällen mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden.

# Abstract

During the last decades simulation programs have become well accepted tools in the development of new semiconductor technologies. They help to reduce the number of costly design and fabrication cycles by predicting quantitatively device and circuit performance. Since the first fully numerical modeling of bipolar transistors based on partial differential equations was suggested by Gummel [1], the underlying equations and physical models improved continuously to meet the stringent demands of shrinking device size. In the eighties a conventional device simulator was based on the drift-diffusion equations and included Shockley-Read-Hall recombination, Auger recombination and impact ionization. As the device equations were extended to the commonly used hydrodynamic or energy balance equations, the physical models must be improved and be available in device simulation programs.

This thesis deals with advanced generation-recombination models needed in the simulation of modern silicon devices like high efficiency solar cells or nonvolatile memories.

As part of the research reported in this thesis, I wrote a program which calculates optical generation rates based on the transfer matrix method. A model to describe economically inverted pyramid structures as they are used in high efficiency solar cells was developed for 2-dimensional simulations and implemented.

In order to simulate flash EPROM devices the following features must be available in a device simulation program: band-to-band tunneling, defect-assisted tunneling, floating gates, Fowler-Nordheim tunneling, and hot electron injection. I implemented these features in the

multi-dimensional device simulation program *Dessis*. For band-to-band and defect-assisted tunneling I found limitations of the underlying assumptions. The assumption of constant quasi Fermi levels within the tunneling length leads to saturating tunneling generation in the pre-breakdown range of highly doped *pn*-junctions. I implemented non-local tunneling models, derived and programmed local models assuming constant gradients of the quasi Fermi levels. Both improved models does not exhibit anymore unphysical saturation in the reverse characteristics of highly doped *pn*-junctions. For gated diode structures I showed the requirement to verify the existence of initial and final tunneling states and implemented corresponding algorithms.

Device simulations were performed for all implemented features and in most of the cases they could be compared with experimental results.