

TCAD Sentaurus 教學

Part 4: Schottky Contact 模擬

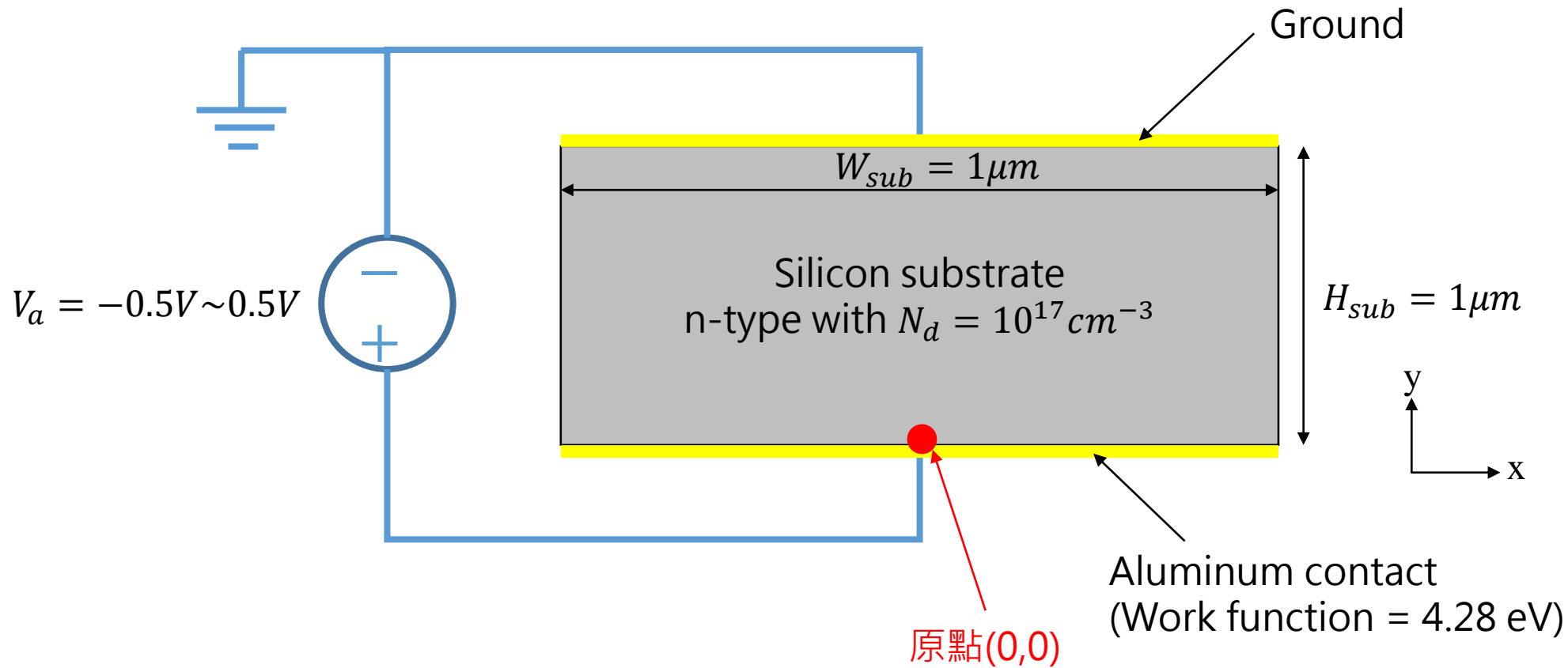
BY TA 張耀均

2019/06/05

Outline

- Al n-type Schottky Contact 模擬流程和結果
 - 元件結構和參數
 - 元件結構檔 (.txt)
 - Command 檔 (.cmd)
 - 查看Contact 電流 (_des.plt)
 - 查看平衡狀態時的電荷分佈、電場、Band diagram (_des.tdr)
- Pt p-type Schottky Contact 模擬注意事項和結果

待模擬Al Schottky Contact 的結構 & 參數



Al Schottky Contact 元件模型檔位置

- 元件模型檔位置在/usr/TCAD_tutorial/Structure 的 Al_Schottky.txt
- 接下來幾頁投影片會講解一些裡面重要的地方。

Reference Windows 設定

```
##-----##  
##   Ref Windows   ##  
##-----##
```

Comment block，這部分是要定義reference windows，以利接下來doping profile 和mesh profile 的設定

```
(sdedr:define-refeval-window "Ref_Contact" "Rectangle" (position 0 0 0)  
(position 1 0.02 0))
```

在contact 附近 $0.02\mu\text{m}$ 設定一個Ref_Contact window，這邊是要做很濃的doping 讓Schottky barrier 很窄，電子可以穿隧 (tunnel) 過去

```
(sdedr:define-refeval-window "Ref_Bulk" "Rectangle" (position 0 0.02 0)  
(position 1 1 0))
```

剩下的部分就設定為Ref_Bulk

Doping 設定

```
##-----##  
##      Doping      ##  
##-----##
```

Comment block，這部分是要定義各個reference window 的doping

```
(sdedr:define-constant-profile "n1e17" "DopingConcentration" 1e17)  
(sdedr:define-constant-profile-placement "Place_Bulk" "n1e17"  
"Ref_Bulk")
```

小細節：注意這邊的語法變為placement，不同於之前的region（見part 3），因為我們現在是對ref window 定義placement，而不是幾何區域。

```
(sdedr:define-constant-profile "n1e20" "DopingConcentration" 1e20)  
(sdedr:define-constant-profile-placement "Place_Contact" "n1e20"  
"Ref_Contact")
```

把Ref_Contact 的doping 設為 10^{20}cm^{-3} （很濃）

建立元件模型並產生Mesh

- 看懂.txt 檔後，把內容複製到Sentaurus Structure Editor 建立元件模型，存檔，然後產生mesh。
- 接下來我們來講解command file (.cmd)。

Command File 位置

- Command file 在/usr/TCAD_tutorial/Command 的 Al_Schottky.cmd
- 記得把Command file 存到和mesh 同一個資料夾。
- 接下來幾頁投影片會講解一些裡面重要的地方。

Electrode Section

我們讓contact 偏壓從0V (平衡狀態) 開始

```
Electrode {  
  { Name="Al_contact" Voltage=0.0 }  
  { Name="Ground" Voltage=0.0 }  
}
```

Schottky WorkFunction=4.28 }

這邊定義了Schottky contact 金屬的功函數！
鋁的功函數為4.28 eV。

Solve Section

```
Solve {  
  #-initial solution:  
  Poisson  
  Coupled { Poisson Electron }
```

這邊只要解Electron 不需要解Hole，因為Substrate 是n type，Hole (minority carrier) 在這個元件影響不大。

掃電壓的指令，quasi-stationary 假設每個電壓點都近似平衡狀態

定義掃電壓的步階大小

```
  #-sweep voltage:  
  quasistationary (InitialStep = 0.010 MaxStep = 0.050 MinStep=0.005  
    Goal {name= "Al_contact" voltage = -0.5})  
    {Coupled {Poisson Electron} }  
  quasistationary (InitialStep = 0.010 MaxStep = 0.050 MinStep=0.005  
    Goal {name= "Al_contact" voltage = 0.5})  
    {Coupled {Poisson Electron} }  
}
```

目標是把Al_contact 掃到-0.5V

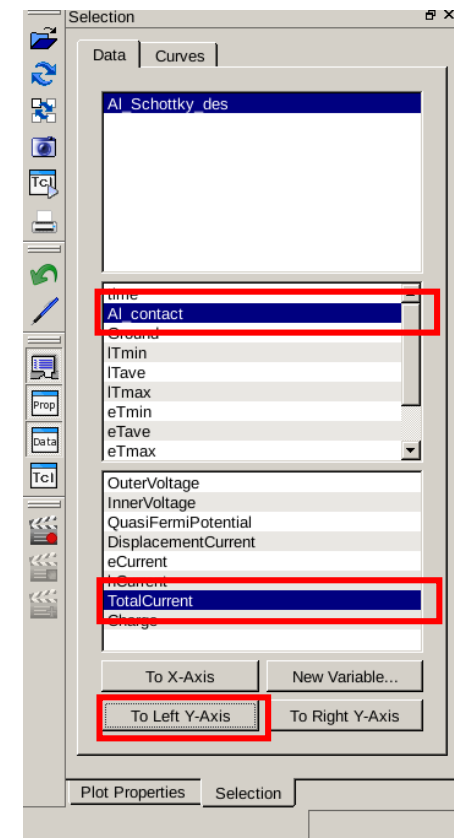
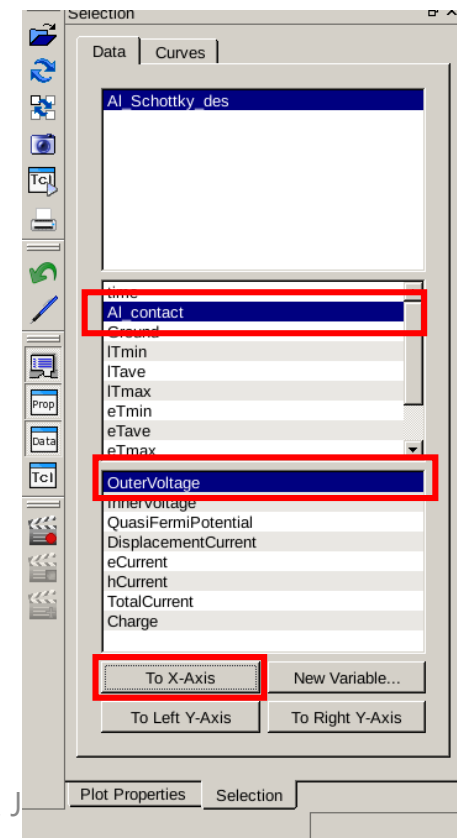
Al_contact 掃到-0.5V之後再掃到0.5V

(接上頁) 為何要先掃到-0.5V 再掃到0.5V ?

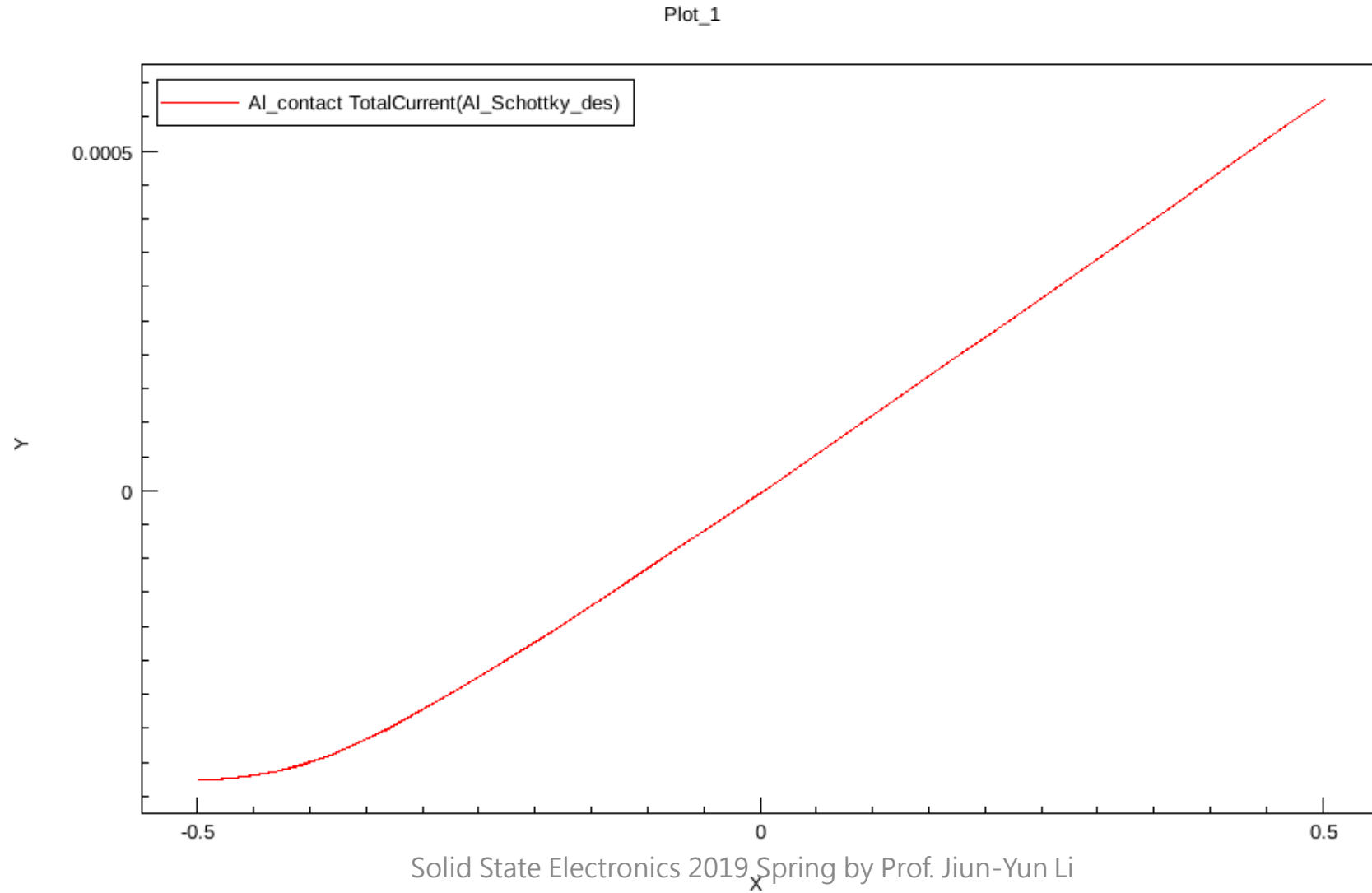
- 半導體的carrier transport 是**非線性**的現象，因此求解器很難直接把一個非平衡狀態的電流解得很精準，這也是為什麼我們一開始先把Al_contact 設為0V (平衡狀態) 的原因。
- 所以如果我們想畫出-0.5V 到0.5V 的電流，一個方法是從平衡位置 (0V) 出發，到-0.5V，再到0.5V。
- 這種先解平衡狀態再慢慢推到非平衡狀態的技巧我們稱為**Ramp**，在解非線性的方程式很實用，可加快求解器的收斂。

求解器求解並觀看結果

- 回到MobaXterm 輸入 **sdevice + .cmd**檔開始求解。
- 解完後輸入 **svisual &**，開啟Sentaurus Visual，在裡面開啟 _des.plt檔觀看contact 電流結果。
- 如右圖所示，點選AI_contact 的 OuterVoltage To X-Axis
- 再點選AI_contact 的 TotalCurrent To Left Y-Axis



Contact 電流結果

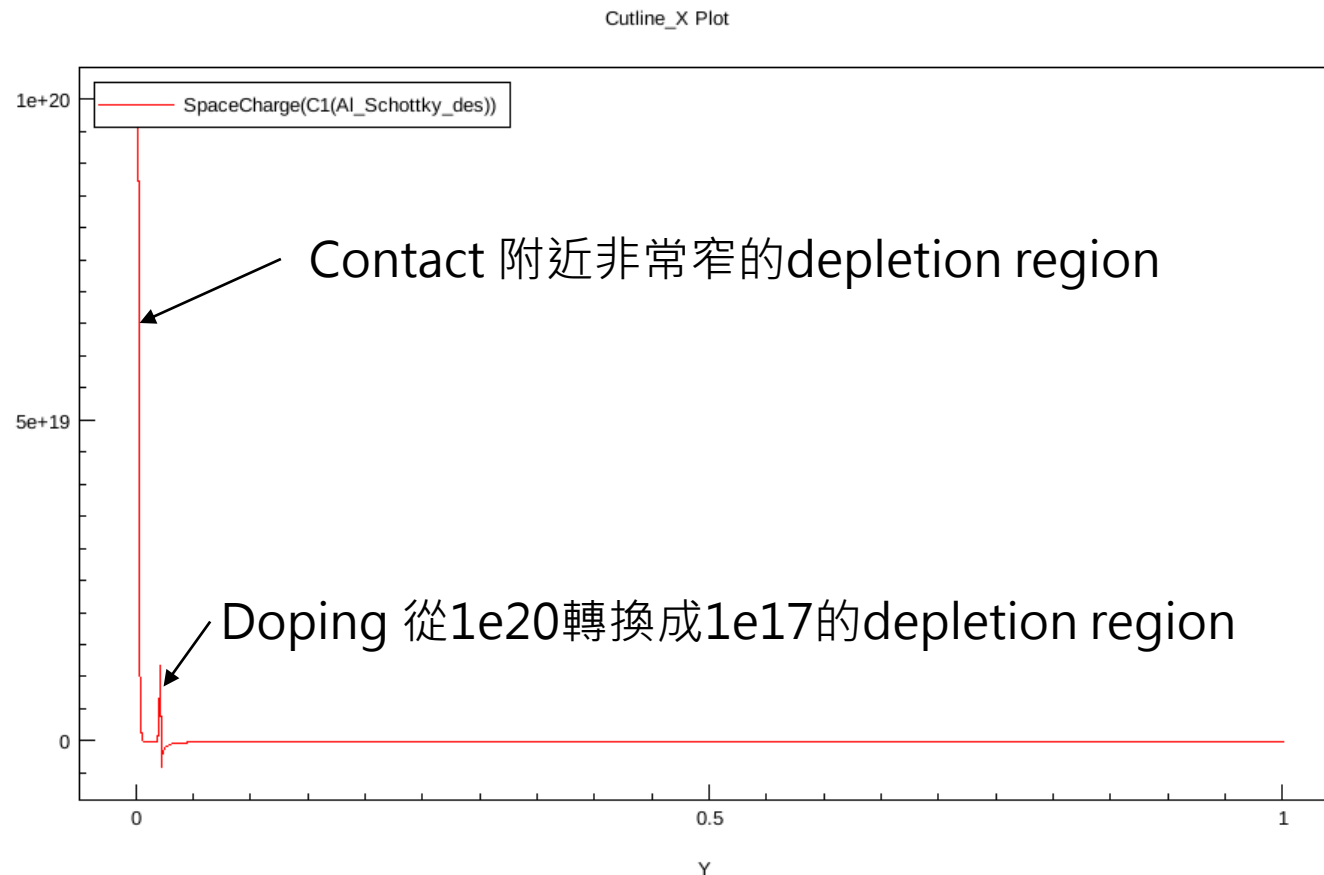


關於作業第1題...

- 作業第1題還要大家看charge distribution、electric field和band diagram，應該是要大家看**0 V (平衡狀態)**時的_des.tdr檔。
- 由於剛才掃電壓最後是掃到0.5 V，因此_des.tdr檔只有存0.5 V (最終電壓) 的_des.tdr檔。
- 想要看0 V 時的_des.tdr檔，要回去Command file 把掃電壓的部分刪掉，或轉變成註解 (在前面加星號*) 。

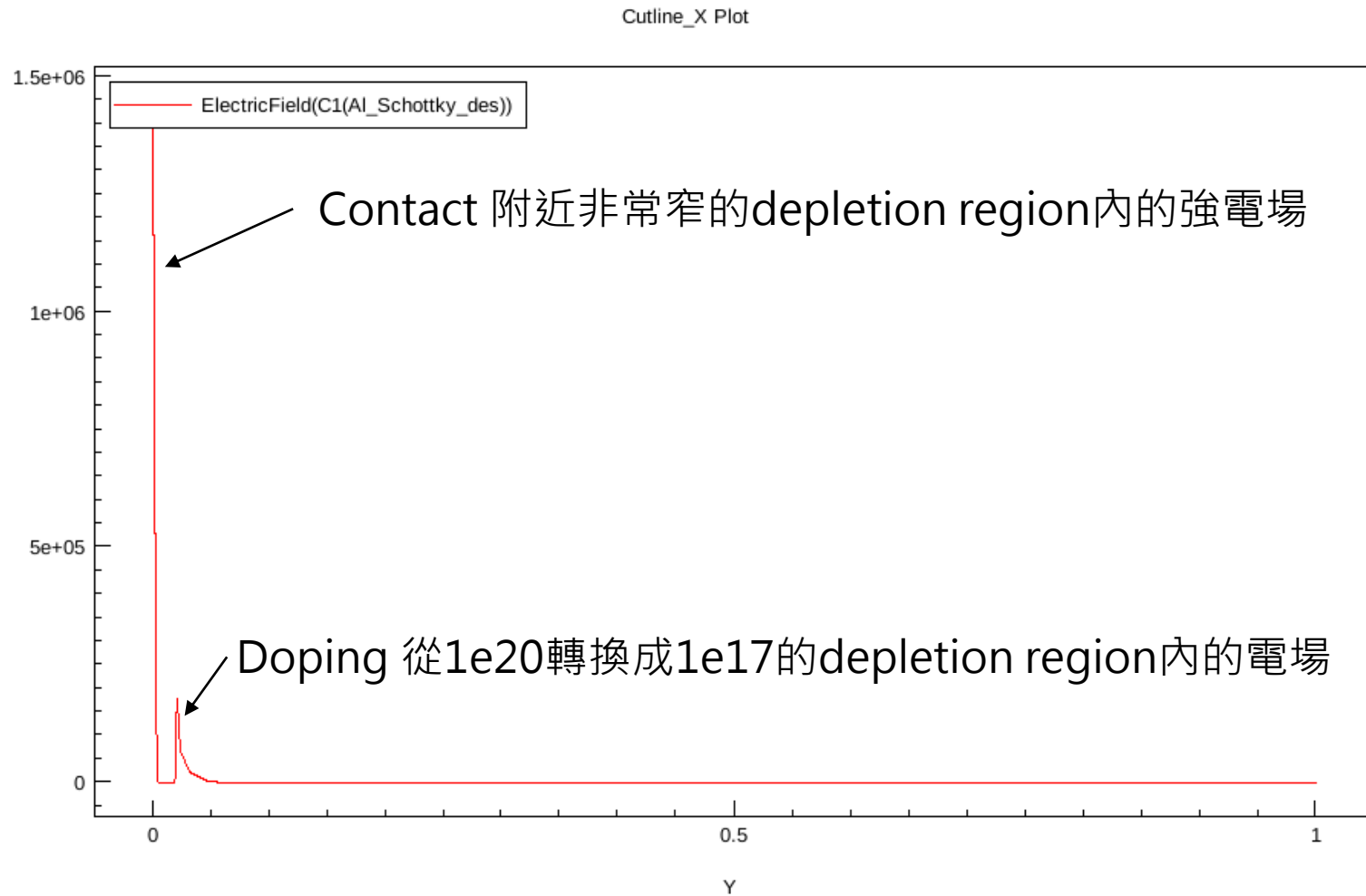
橫截線上的Charge Distribution

- 改完Command file模擬完不掃電壓的情況後，開啟Sentaurus Visual，在內部開啟_des.tdr檔，在元件上定義 $x=0.5$ （元件對稱軸）的橫截線。（定義橫截線的教學在Part 2中）
- 選取SpaceCharge觀看結果如下。

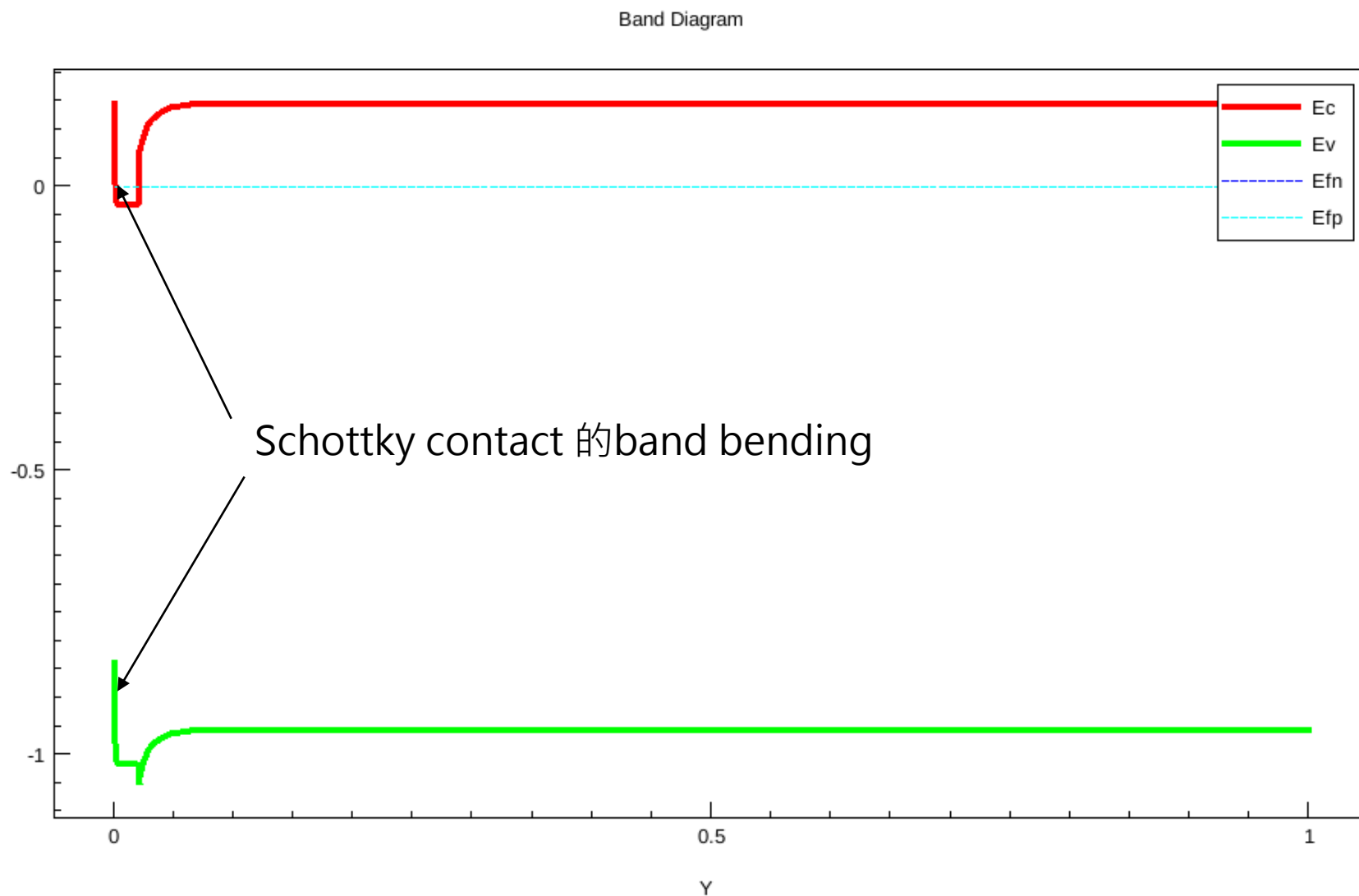


橫截線上的Electric Field

- 接上頁，選取ElectricField觀看結果如下。



橫截線的Band Diagram

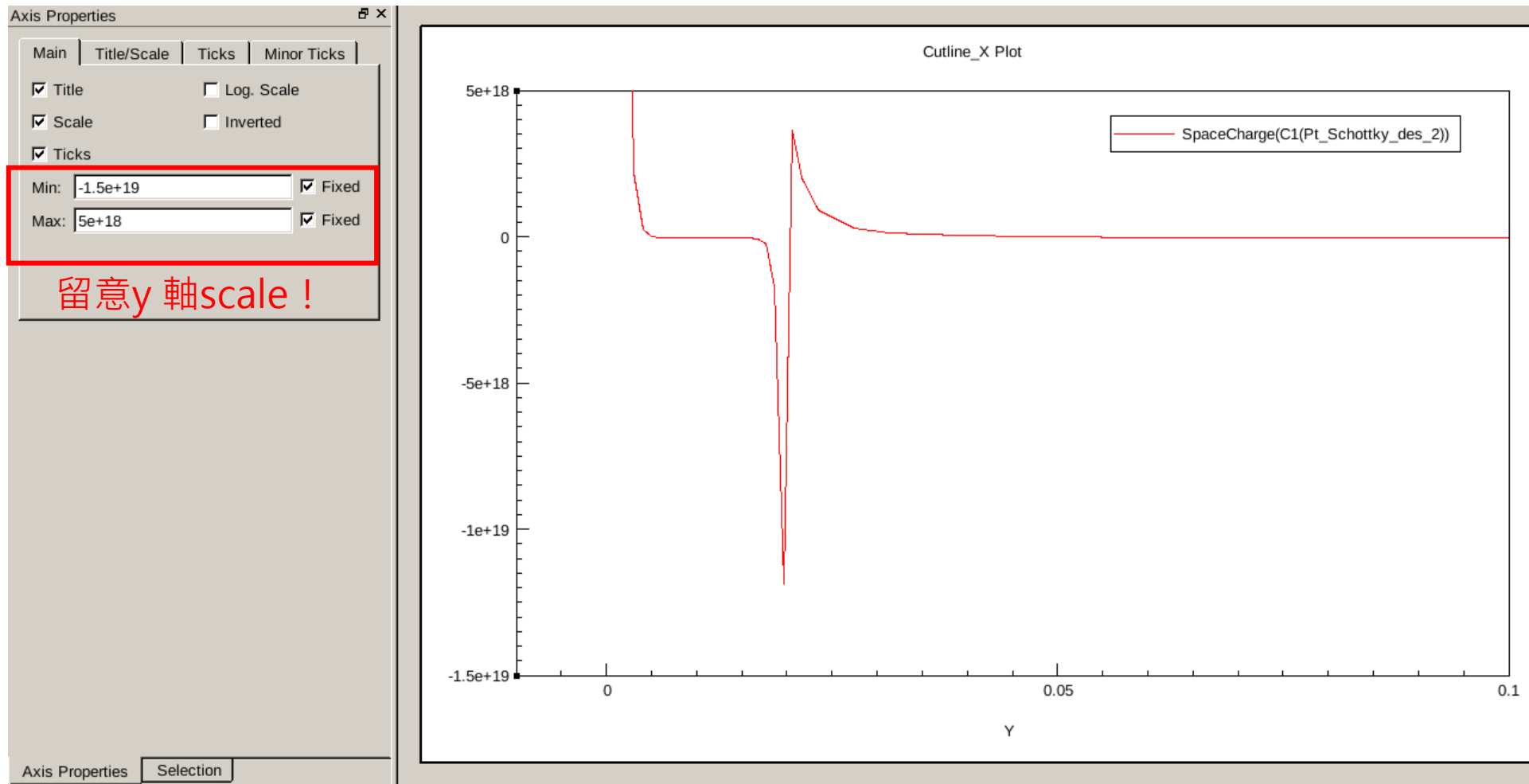


先點選作圖的區域，右邊工具列就會出現可以直接畫band diagram的圖像

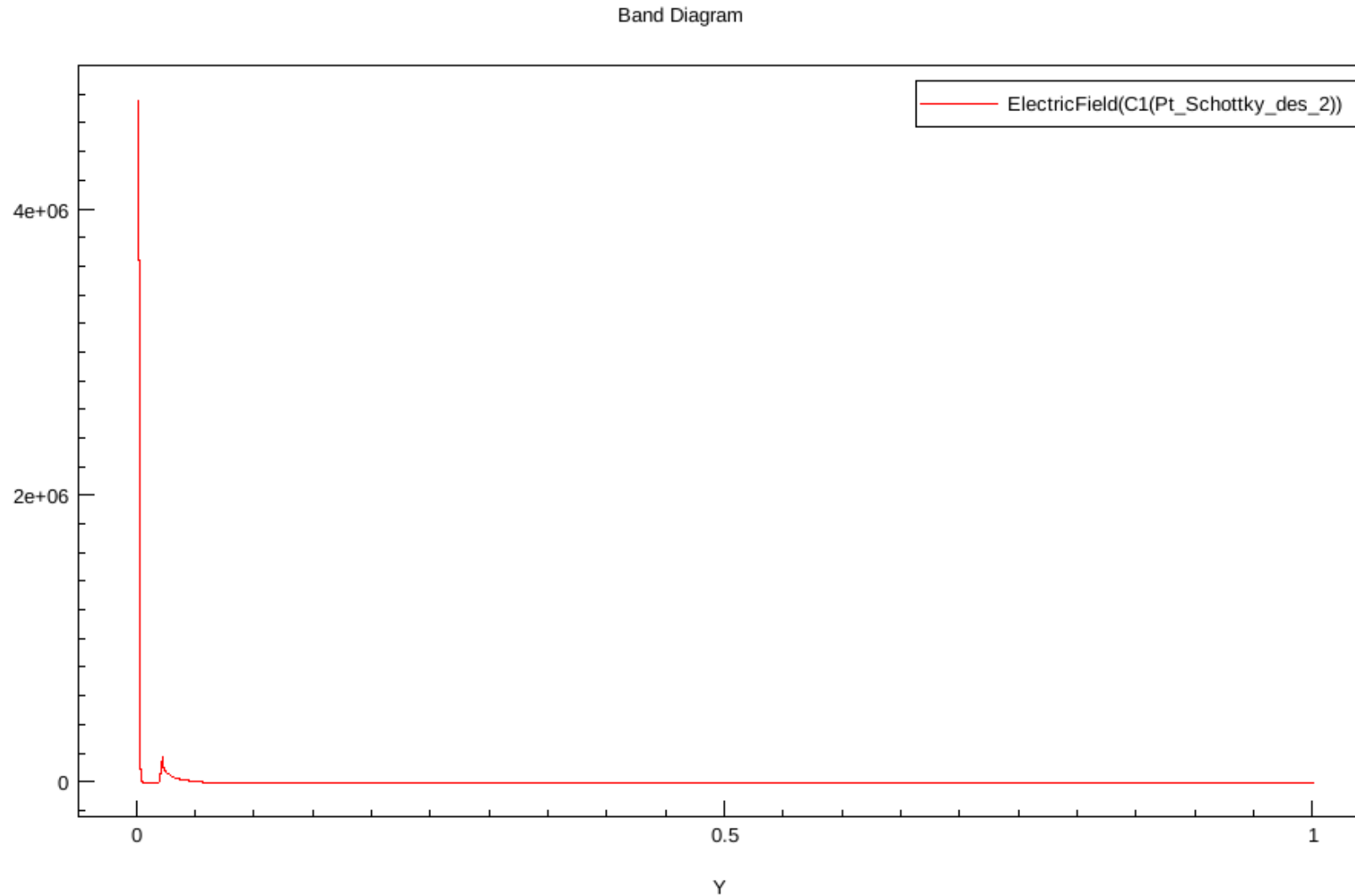
將Contact 金屬改成Pt & Substrate 改P Type

- 作業第一題也問把金屬改成Pt，Substrate 改成p type ($N_a = 10^{16} \text{cm}^{-3}$) 的狀況，這邊說明一些需要注意的事項。
 1. Command file 中Solve Section 原本Coupled {Poisson Electron} 要改成Coupled {Poisson Hole} ，包含 quasistationary 內的部分也要改。
 2. 我自己跑的結果電洞濃度在contact 附近會大得非常誇張，原因還不清楚...，所以最後在看電荷濃度 (SpaceCharge) 時要調一下y 軸scale，否則看不到depletion region 電荷變化。
- 以下幾頁附上改p type 後的結果。

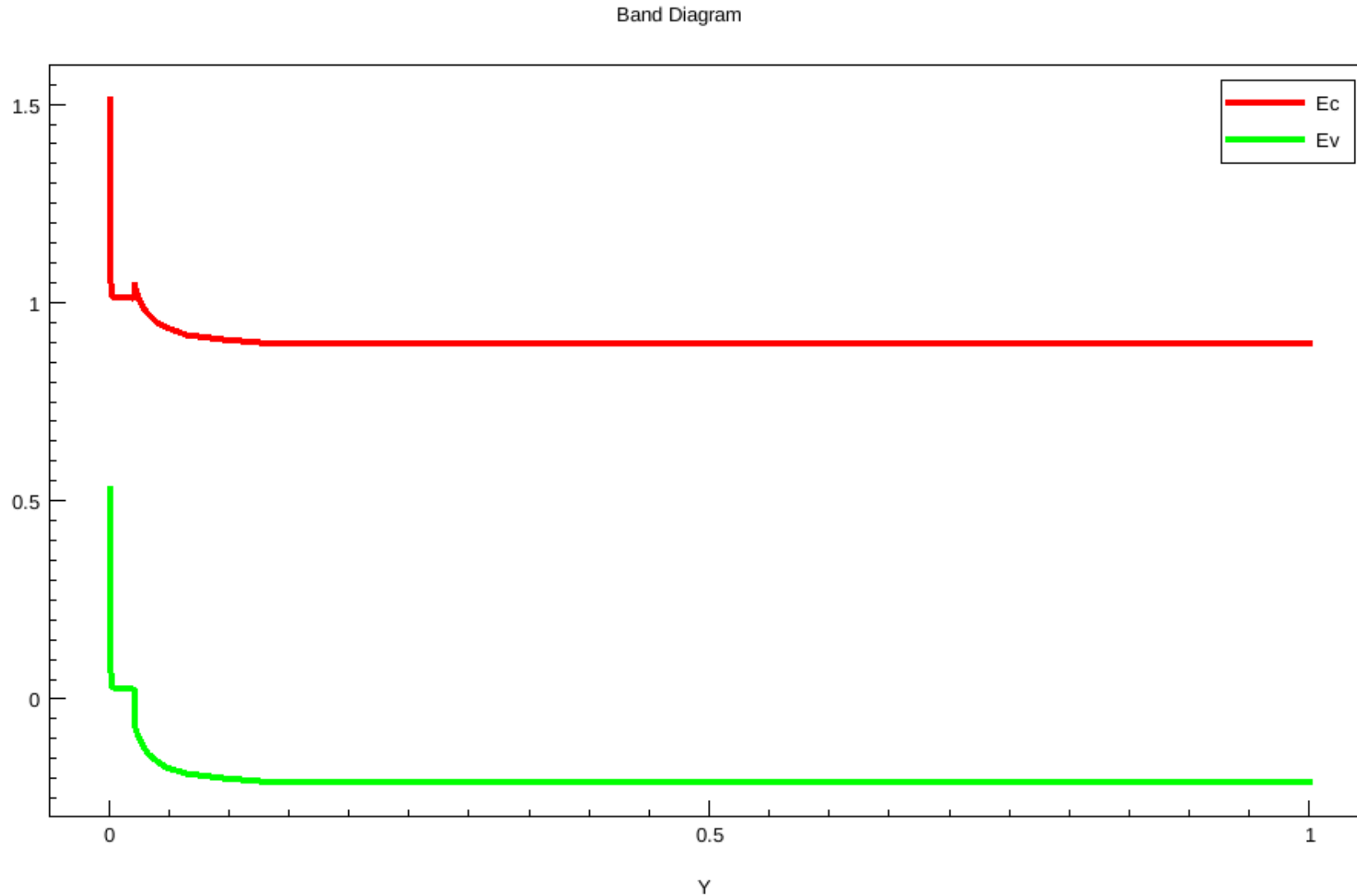
橫截線上的Charge Distribution (p type, Pt)



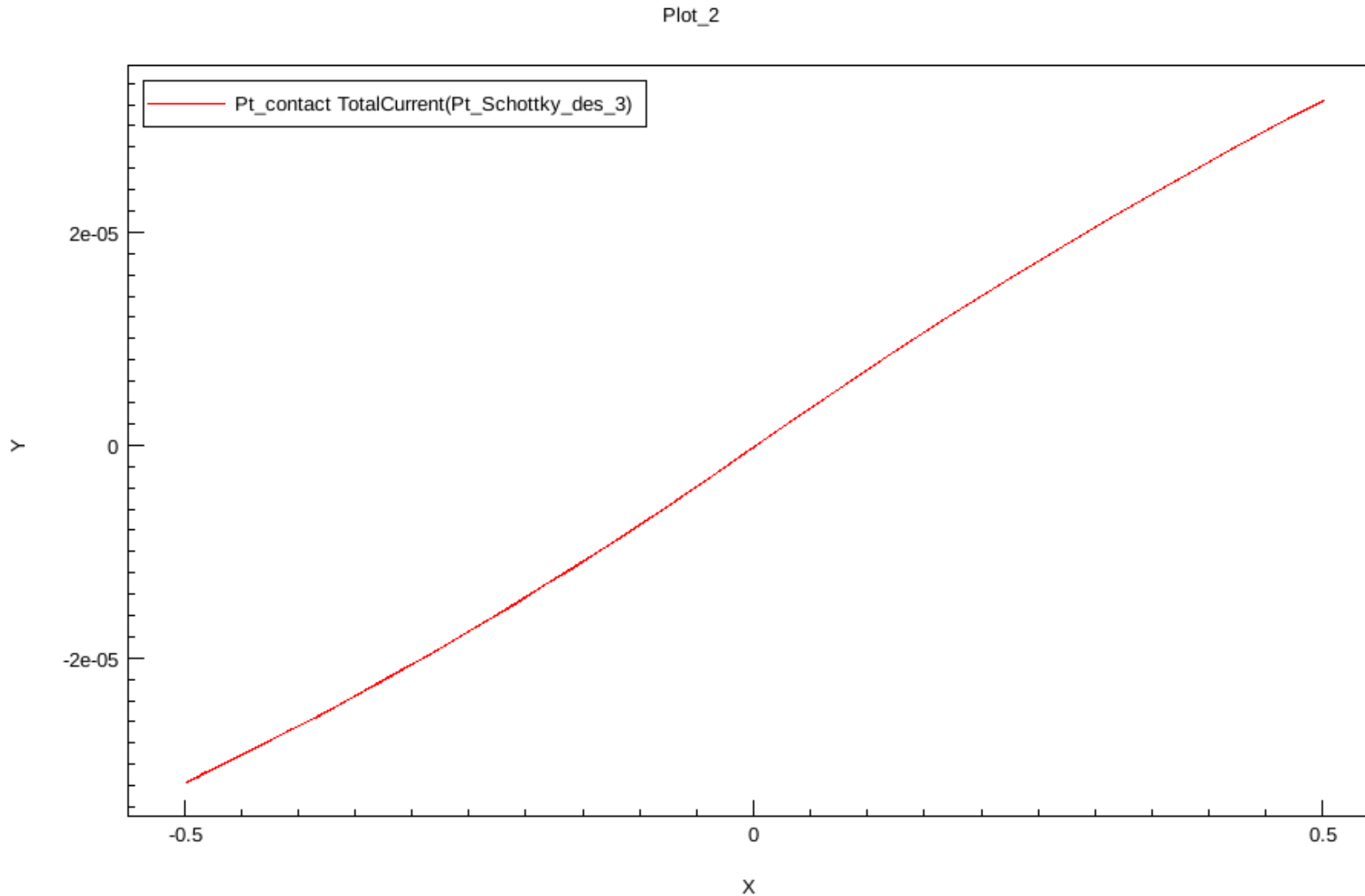
橫截線上的Electric Field (p type, Pt)



橫截線的Band Diagram (p type, Pt)



Contact 電流結果 (p type, Pt)



總結

- Schottky contact 的模擬也就是各位作業的第1題，各位只需要修改範例的.txt 檔和.cmd 檔應該就可以順利做出來。