

第九次科创作业 —— TCAD仿真入门

1. TCAD是什么？为什么我们要做TCAD？

TCAD (Technology Computer-Aided Design) 是一种半导体工艺和器件的计算机辅助设计工具。课件中使用的是 Synopsys 公司的 Sentaurus TCAD，最常用的三个模块是：

- **SDE (结构编辑器)**：绘制器件几何形状、定义区域类型和掺杂分布、生成网格；
- **SPROCESS (工艺仿真)**：通过工艺指令（离子注入剂量、能量等）进行物理化学反应的模拟，生成更接近实际的器件结构；
- **SDEVICE (器件仿真)**：根据器件结构和电学仿真条件，对网格节点进行 Poisson-电子-空穴 (Poisson-Electron-Hole) 方程的数值求解。

为什么我们要做TCAD？

1. **可视化器件内部物理过程**：TCAD可以帮助我们看到器件内部的载流子分布、电场分布、电势分布等微观信息，帮助我们更好地理解器件的工作状态。
2. **高效低成本的参数优化**：通过TCAD仿真，可以尝试非常多的参数组合来优化器件设计。如果实际在工厂制造器件然后测试，只能尝试有限的方案，且时间和经济成本都非常高。
3. **辐射损伤研究**：在设计探测器时，必须考虑器件经过辐照后的性能变化。TCAD可以通过引入辐射损伤模型，相对简单地进行辐照效应的研究，这在实验中很难直接测量。

2. TCAD一定是网格越精细越好吗？简单聊聊你对网格划分的理解吧。

网格并不是越精细越好。 网格划分需要在计算精度和计算成本之间进行权衡。

我对网格划分的理解：

- **有限元法的基本原理**：TCAD仿真采用的是有限元法，将求解区域划分成网格，然后求解物理量（如电势、载流子浓度等）在每个网格节点上的数值。每个网格点的数值代表了其周边空间的数值，是一种计算机将空间离散化的处理。网格就是数值求解的基础。
- **网格过细的代价**：
 - 计算量随网格节点数的增加而急剧增大，仿真耗时大大增加；
 - 占用的内存和存储空间也会大幅增加；
 - 当网格已经足够密时，进一步加密对精度的提升非常有限（收敛于真实解），但计算成本却不成比例地增长。因此没有必要将网格划分过细，够用就行。
- **网格过粗的风险**：

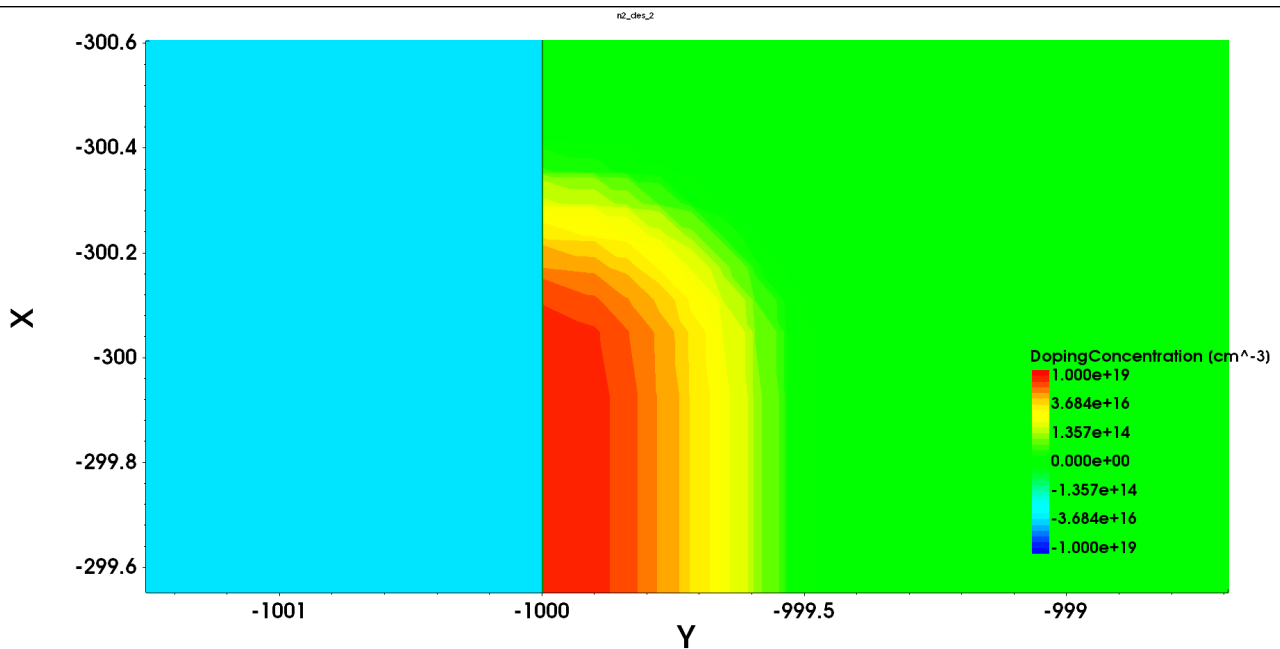
- 如果网格太粗，无法准确捕捉物理量的剧烈变化（如PN结界面处的电势骤变），导致仿真结果偏差较大甚至不收敛。
- **课件中的策略（合理的网格划分方法）：**
 - 整体采用较粗的网格，以减小计算量；
 - 在掺杂浓度梯度变化剧烈的区域（如PN结的界面处），根据 `DopingConcentration` 的 `MaxTransDiff` 参数自动加密网格，保证仿真精度；
 - 这种"粗细结合"的自适应网格策略既保证了关键区域的精度，又控制了整体计算成本。

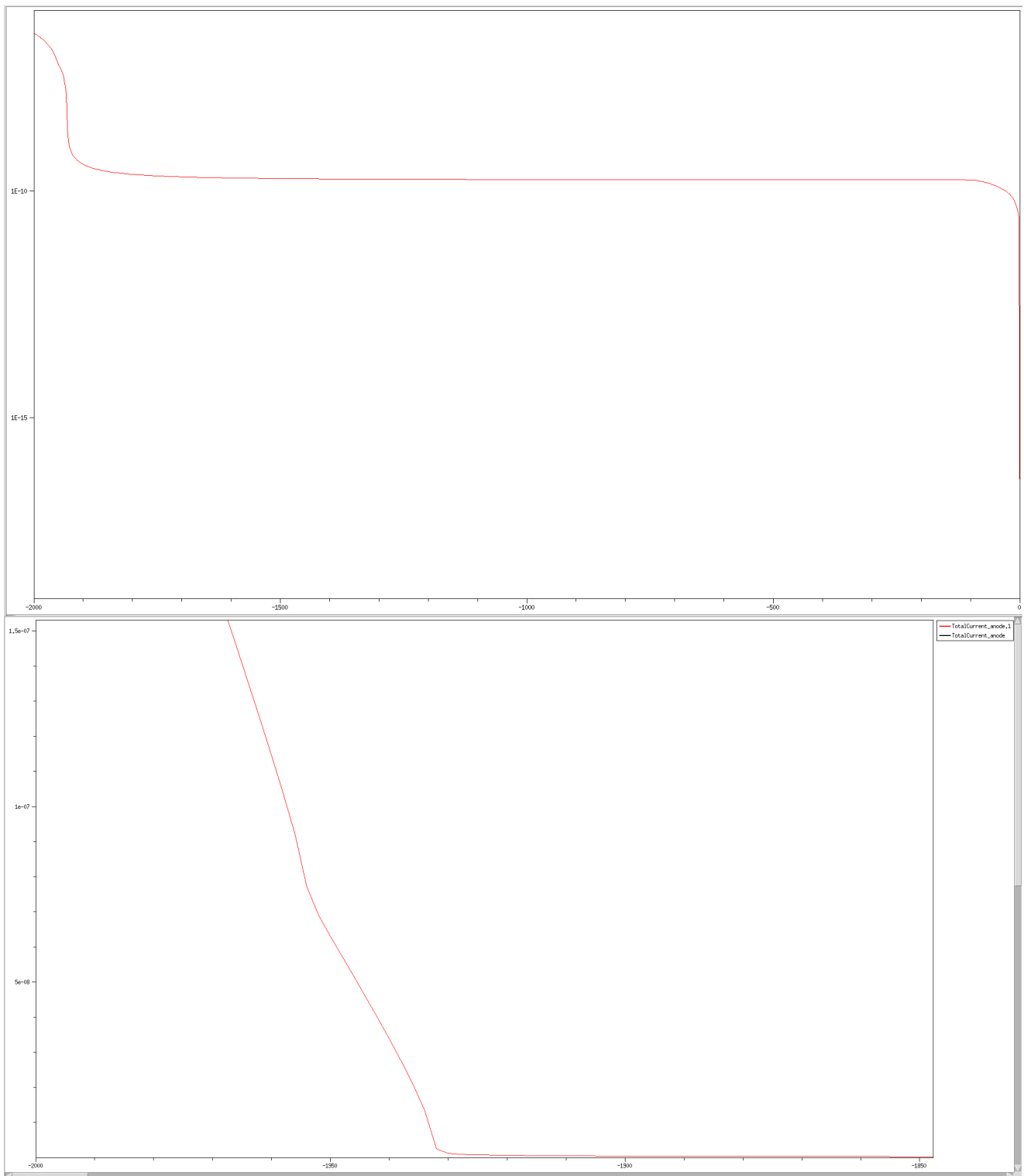
$N_{nodes} \uparrow \Rightarrow$ 精度 $\uparrow$ (收敛于真实解), 计算成本 $\uparrow\uparrow$

3. 给PIN添加JTE结构，分析击穿电压的变化

首先照搬一下PPT上的代码，跑出来的结果如图所示

没有添加JTE结构时：





可以看出在反向电压为1950V左右时将PIN器件击穿

JTE的原理

课件中提到：在N++边缘，相同数目的电场线需要从更窄的地方通过，导致N++边缘出现**电场尖峰**（电场强度远高于中心区域），这会引发**边缘提前击穿**，降低器件的实际击穿电压。

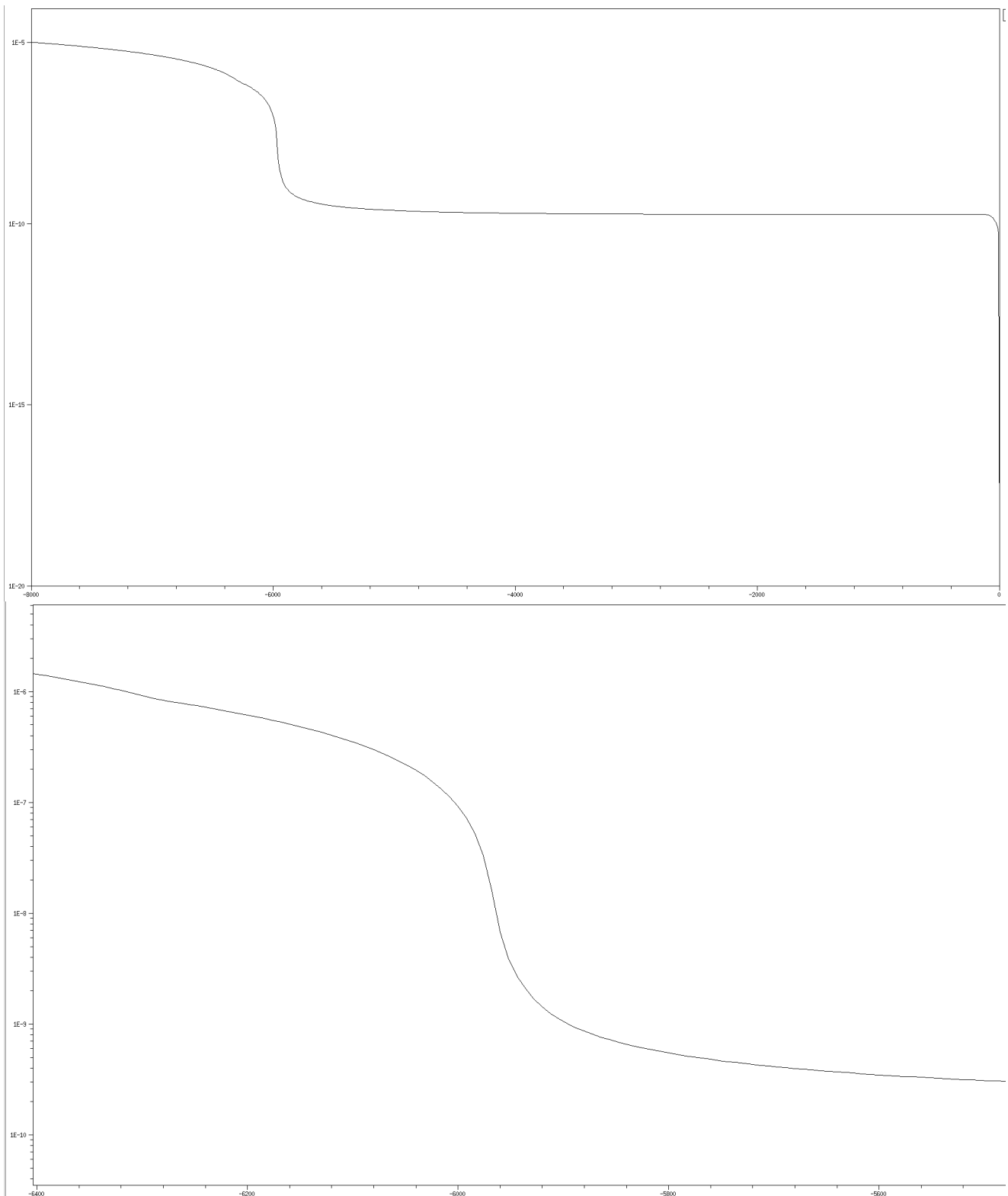
JTE的解决方案：在N++边缘注入一圈掺杂浓度较低的N型掺杂（N-），将N++边缘"包裹住"。这样原本在界面上陡降的电势被稀释到一个较宽的范围，原来的超高电场尖峰被拆分成多个小尖峰，从而改善边缘击穿现象，提高器件的击穿电压。

代码修改思路

在课件提供的PIN示例代码基础上，添加JTE结构的思路如下（使用较宽的高斯分布来近似N-掺杂环）：

```
;-----  
; 6b. JTE doping (轻磷掺杂，位于阳极两侧)  
;-----  
(define JTEextension 50.0) ; 每侧延伸宽度 um  
(define JTEhalfWidth (+ Xanode JTEextension))  
  
(sdedr:define-gaussian-profile  
  "DD.JTE"  
  "PhosphorusActiveConcentration"  
  "PeakPos" 0.0  
  "PeakVal" 1e17 ; 峰值浓度1e17 cm-3  
  "ValueAtDepth" 1e11  
  "Depth" 0.6 ; 结深略深于阳极  
  "Gauss"  
  "Factor" 0.8  
)  
  
(sdedr:define-refeval-window  
  "Baseline.JTE"  
  "Line"  
  (position (* JTEhalfWidth -1.0) Ymax 0.0)  
  (position JTEhalfWidth Ymax 0.0)  
)  
  
(sdedr:define-analytical-profile-placement  
  "PL.JTE"  
  "DD.JTE"  
  "Baseline.JTE"  
  "Positive"  
  "NoReplace"  
  "Eval"  
)
```

添加量JTE结果：



添加JTE结构后，N++边缘的电场尖峰会被有效地"抹平"：

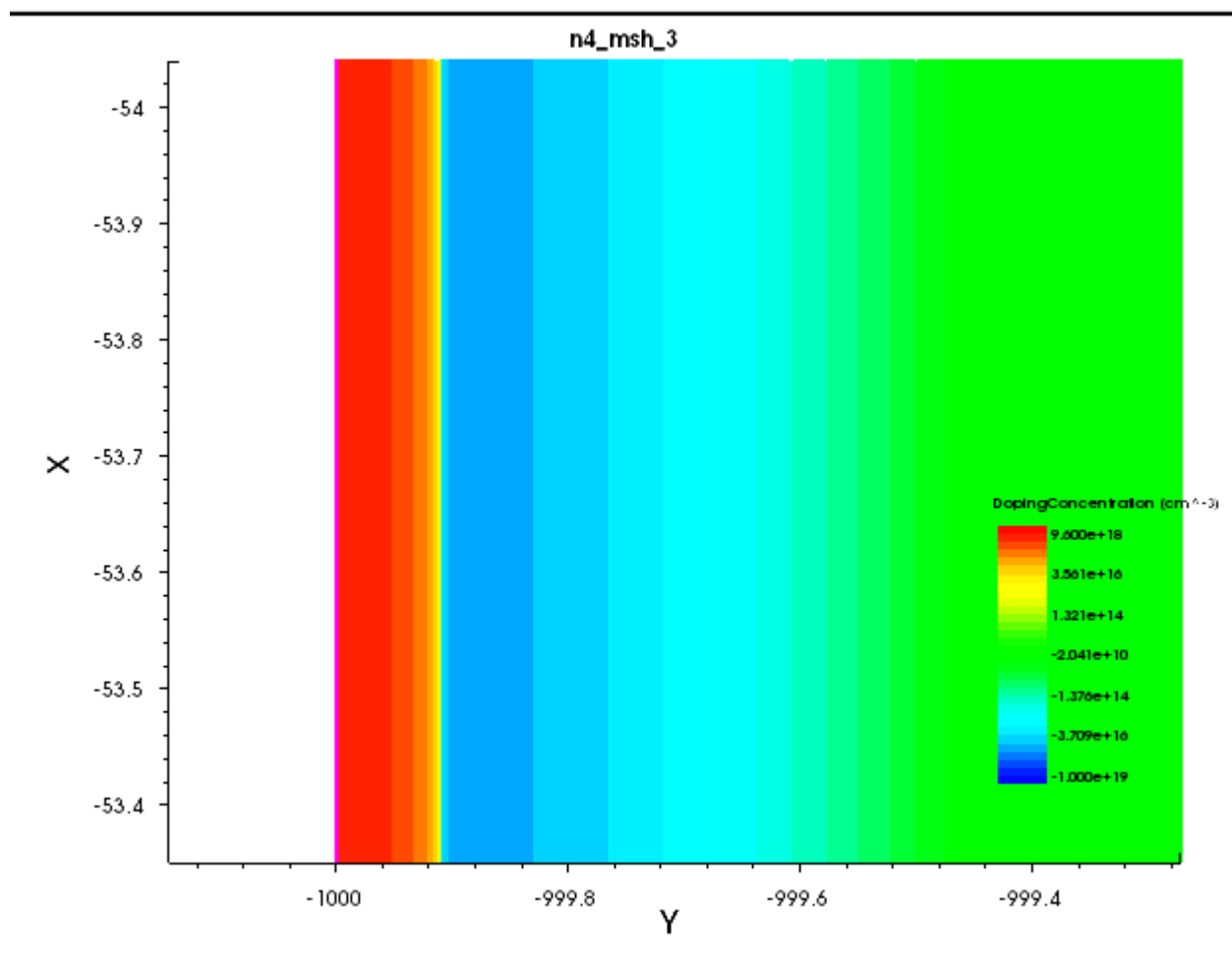
- **无JTE时：** N++边缘电场集中，出现一个很高的电场尖峰，器件在较低的反偏压下就因边缘局部击穿而失效；
- **有JTE后：** 边缘电场分布更均匀，尖峰高度大幅降低，击穿电压显著提高，可以看出击穿电压已经变为5900V，增加了将近3倍。

$$V_{br}^{\text{with JTE}} > V_{br}^{\text{without JTE}}$$

4. 添加增益层，构建DC-LGAD基本结构（选做）

增益层原理

在N++的下方注入一个P+层，形成局部高电场区域。当原初电离产生的电子/空穴经过这段高电场区域时，会被加速并获得足够高的能量，从而在半导体中通过**雪崩电离**过程激发出次级的电子-空穴对。这样器件内部就具有了增益，产生比原初信号大得多的输出信号，提高了信噪比。



加上增益层后，器件的基本结构即为 **DC-LGAD (DC-coupled Low Gain Avalanche Detector)** 的基本结构：N++接触 — P+增益层 — P型高阻硅 — P++接触。

5. 为什么LGAD主流采用P型高阻硅（N++/P+/P-/P++）结构，而不是N型高阻硅（P++/N+/N-/N++）结构？

为什么主流采用P型结构？

核心原因在于器件全耗尽时内部的电场方向，以及电子和空穴的雪崩电离特性差异：

1. 电场方向与载流子漂移方向

当给器件加反向偏压时（即P++接负电压、N++接正电压），器件内部电场方向为：**从N++指向P++**（即从顶部指向底部）。

此时：

- **电子** 在电场作用下向 **N++（顶部阳极）** 漂移；
- **空穴** 在电场作用下向 **P++（底部阴极）** 漂移。

2. 增益层的雪崩电离效率

在P型结构中，增益层是 **P+层**（位于N++下方）：

- 入射粒子从顶部进入后，产生原初电子-空穴对；
 - **电子**向下漂移经过P+增益层（高电场区），在电场中获得足够能量后触发雪崩电离，倍增产生更多次级电子-空穴对；
 - **电子的电离系数 α_n 通常大于空穴的电离系数 α_p** （在硅中），因此电子触发的雪崩增益效率更高。电子产生雪崩倍增是比空穴产生雪崩倍增要更容易的，或者说是只需要更小的电场的，因此更加可控。如果P型硅，就只用加不那么强的电场，然后电子就在增益层雪崩倍增，空穴就不参加雪崩倍增。
 - 产生的信号中，粒子打进来产生的原初电离只占很小一部分，信号的主体来自倍增出来的次级电子空穴对。信号产生的时间就由原初电离到达增益层的时间决定了相同电场下，硅的电子漂移速度大概是空穴的3倍，P型硅由电子来触发这个增益，信号延迟会比N型硅空穴触发要低很多。
 - 虽然P型高阻硅载流子寿命更短，但是基于LGAD器件的设计，我们依旧使用它。
- 在P型结构（N++/P+/P-/P++）中：

电子从P-区进入P+增益层 → 被加速 → 雪崩倍增（效率高）

而在N型结构（P++/N+/N-/N++）中：

空穴从N-区进入N+增益层 → 被加速 → 雪崩倍增（效率低）

3. 总结

主流采用P型高阻硅的 **N++—P+—P-—P++** 结构，主要是为了**利用电子（而非空穴）作为触发雪崩增益的主要载流子**，因为电子在硅中的电离系数更大，增益效率更高。同时，这种结构中电场方向的设计使得电子自然地从小场区漂移进入高场增益区，从而获得有效的内放大。

完整 SDE 代码（PIN + JTE + 增益层）

以下代码在课件提供的 PIN 示例基础上，添加了 **JTE 边缘终端结构** 和 **P+ 增益层**。

```
(sde:clear)

;-----
; 1. Parameters
;-----

(define Ltot 1000.0)
(define Htot 1000.0)

(define depth 0.5)
```

```

(define H0xide 1.0)

(define Lanode (* Ltot 0.6))

(define Xmax (/ Ltot 2.0))
(define Ymax (* Htot -1.0))
(define Xanode (/ Lanode 2.0))

;-----
; 2. Geometry
;-----

; Silicon bulk
(sdegeo:create-rectangle
  (position (* Xmax -1.0) 0.0 0.0)
  (position Xmax Ymax 0.0)
  "Silicon"
  "EPI"
)

; Right oxide
(sdegeo:create-rectangle
  (position (* Xmax 0.5) Ymax 0.0)
  (position Xmax (- Ymax H0xide) 0.0)
  "SiO2"
  "SiO2.Right"
)

; Left oxide
(sdegeo:create-rectangle
  (position (* Xmax -0.5) Ymax 0.0)
  (position (* Xmax -1.0) (- Ymax H0xide) 0.0)
  "SiO2"
  "SiO2.Left"
)

;-----
; 3. Contacts
;-----

(sdegeo:define-contact-set
  "anode"
  4.0
  (color:rgb 1.0 0.0 0.0)
  "##"
)

(sdegeo:define-contact-set
  "cathode"
  4.0

```

```

    (color:rgb 0.0 0.0 1.0)
    "##"
)

; Anode at y = Ymax
(sdegeo:define-2d-contact
  (find-edge-id (position 0.0 Ymax 0.0))
  "anode"
)

; Cathode at y = 0
(sdegeo:define-2d-contact
  (find-edge-id (position 0.0 0.0 0.0))
  "cathode"
)

;-----
; 4. Uniform P-type bulk doping
;-----

(sdedr:define-constant-profile
  "Const.EPI"
  "BoronActiveConcentration"
  1e11
)

(sdedr:define-constant-profile-material
  "PL.EPI"
  "Const.EPI"
  "Silicon"
)

;-----
; 5. P++ cathode doping
;-----

(sdedr:define-gaussian-profile
  "DD.cathode"
  "BoronActiveConcentration"
  "PeakPos" 0.0
  "PeakVal" 1e19
  "ValueAtDepth" 1e11
  "Depth" depth
  "Gauss"
  "Factor" 0.8
)

(sdedr:define-refeval-window
  "Baseline.cathode"
  "Line"

```

```

    (position (* Xmax -1.0) 0.0 0.0)
    (position Xmax 0.0 0.0)
)

(sdedr:define-analytical-profile-placement
  "PL.cathode"
  "DD.cathode"
  "Baseline.cathode"
  "Negative"
  "NoReplace"
  "Eval"
)

;-----
; 6a. P+ GAIN LAYER (新增, 位于阳极下方)
;    硼掺杂, 峰值 5e17, 结深 0.6 μm
;-----
(sdedr:define-gaussian-profile
  "DD.gain"
  "BoronActiveConcentration"
  "PeakPos" 0.0
  "PeakVal" 5e17
  "ValueAtDepth" 1e11
  "Depth" 0.6
  "Gauss"
  "Factor" 0.8
)

(sdedr:define-refeval-window
  "Baseline.gain"
  "Line"
  (position (* Xanode -1.0) Ymax 0.0)
  (position Xanode Ymax 0.0)
)

(sdedr:define-analytical-profile-placement
  "PL.gain"
  "DD.gain"
  "Baseline.gain"
  "Positive" ; 向硅内部 (Y 增大方向)
  "NoReplace"
  "Eval"
)

;-----
; 6b. N++ anode doping (结深调浅至 0.2 μm)
;    窗口与增益层相同
;-----
(sdedr:define-gaussian-profile
  "DD.anode"

```

```

    "PhosphorusActiveConcentration"
    "PeakPos" 0.0
    "PeakVal" 1e19
    "ValueAtDepth" 1e11
    "Depth" 0.2 ; 原为 0.5，现变浅以形成 N++/P+ 结
    "Gauss"
    "Factor" 0.8
)

(sdedr:define-refeval-window
  "Baseline.anode"
  "Line"
  (position (* Xanode -1.0) Ymax 0.0)
  (position Xanode Ymax 0.0)
)

(sdedr:define-analytical-profile-placement
  "PL.anode"
  "DD.anode"
  "Baseline.anode"
  "Positive"
  "NoReplace" ; 不覆盖，与增益层叠加（净掺杂为二者之差）
  "Eval"
)

; -----
; 6c. JTE doping (N-, 位于阳极两侧，保持不变)
; -----

(define JTEextension 50.0)
(define JTEhalfWidth (+ Xanode JTEextension))

(sdedr:define-gaussian-profile
  "DD.JTE"
  "PhosphorusActiveConcentration"
  "PeakPos" 0.0
  "PeakVal" 1e17
  "ValueAtDepth" 1e11
  "Depth" 0.6
  "Gauss"
  "Factor" 0.8
)

(sdedr:define-refeval-window
  "Baseline.JTE"
  "Line"
  (position (* JTEhalfWidth -1.0) Ymax 0.0)
  (position JTEhalfWidth Ymax 0.0)
)

(sdedr:define-analytical-profile-placement

```

```

"PL.JTE"
"DD.JTE"
"Baseline.JTE"
"Positive"
"NoReplace"
"Eval"
)

;-----
; 7. Mesh
;-----

(sdedr:define-refeval-window
  "RW.Global"
  "Rectangle"
  (position -10000.0 -10000.0 0.0)
  (position 10000.0 10000.0 0.0)
)

(sdedr:define-refinement-size
  "RD.Global"
  (* Ltot 4e-2)
  (* Htot 4e-2)
  (* 0.1 0.1) ; 将最小尺寸固定为 0.01 μm 左右，以分辨增益层
  (* 0.1 0.1)
)

; 局部加密：阳极/增益层区域（建议添加，提升收敛性）
(sdedr:define-refeval-window
  "RW.GainRegion"
  "Rectangle"
  (position (* Xanode -1.0) (- Ymax 2.0) 0.0) ; Y 坐标注意 Ymax 为负
  (position Xanode Ymax 0.0)
)

(sdedr:define-refinement-size
  "RD.GainRegion"
  (* Xanode 0.05) ; 水平方向最大 5% 阳极半宽
  0.5 ; 垂直方向最大 0.5 μm
  0.02 ; 最小尺寸 0.02 μm
  0.02
)

(sdedr:define-refinement-placement
  "RPL.GainRegion"
  "RD.GainRegion"
  "RW.GainRegion"
)

(sdedr:define-refinement-function
  "RD.Global"
  "DopingConcentration"

```

```
    "MaxTransDiff"
    1.0
)

(sdedr:define-refinement-placement
  "RPL.Global"
  "RD.Global"
  "RW.Global"
)

;-----
; 8. Save and build mesh
;-----

(sde:save-model "n@node@")
(sde:build-mesh "snmesh" "" "n@node@_msh")
```