

## S C H L U S S B E R I C H T

## 3D-Simulation von Halbleiterdetektoren

Zuwendungsempfänger: **FV Berlin** Projektträger: **KFA-PFR**  
 Projektleiter: **Gajewski**  
 Förderkennzeichen: **03GA7FV1/2**  
 Laufzeit: **01.07.1997 bis 30.06.2000**

Gesamtförderbetrag: **324.300,00 DM**

| Personalmittel       |          | Betriebsmittel     | Investitionen |
|----------------------|----------|--------------------|---------------|
| Wissenschaftler      | Sonstige |                    |               |
| <b>318.600,00 DM</b> |          | <b>6.000,00 DM</b> |               |

Verbundpartner: KETEK GmbH, Oberschleißheim  
MPI-Semiconductor Laboratory, München

Anzahl der Ergebnisdarstellung

|                         |          |                    |          |
|-------------------------|----------|--------------------|----------|
| Veröffentlichungen:     | <u>2</u> | Konferenzbeiträge: | <u>1</u> |
| Diplomarbeiten:         | <u>0</u> | Dissertationen:    | <u>0</u> |
| Habilitationsschriften: | <u>0</u> |                    |          |

(s. Aufstellung unten)

#### Zusammenfassung der Ergebnisse:

Ziel des Projekts war die Erweiterung des am Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) für die 2D-Simulation von Halbleiterbauelementen entwickelten Programmsystems WIAS-TeSCA zur räumlich dreidimensionalen Berechnung der funktionsbestimmenden Ladungstransportvorgänge in Strahlungsdetektoren. Mit dem erweiterten Programm wurden für die Projektpartner 3D-Simulationen von pn-CCD Schieberegisterstrukturen durchgeführt. Diese Strukturen werden als Röntgen-Detektoren in den Satelliten ABRIXAS und XMM (Xray Multi Mirror) eingesetzt. Das Programm wurde den Partnern zur selbständigen Nutzung übergeben.

Ziel des Projekts war die Erweiterung des am WIAS für die 2D-Simulation von Halbleiterbauelementen entwickelten Programmsystems WIAS-TeSCA (Two and three dimensional Semi-Conductor Analysis package) zur räumlich dreidimensionalen Berechnung der funktionsbestimmenden Ladungstransportvorgänge in Detektorstrukturen. Dazu waren analytisch fundierte Algorithmen zu entwickeln und zu implementieren, die eine hochauflösende, effiziente und zuverlässige numerische Simulation ermöglichen [3],[4]. Stufenweise galt es, die bewährten Vorzüge von WIAS-TeSCA, wie die hohe Flexibilität in der Geometrie sowie die robuste und schnelle Numerik beim Übergang zu 3D-Gittern, zu erhalten und auszubauen, damit zeitabhängige Simulationen für große Strukturen auch unter Berücksichtigung von 3D-Effekten mit vertretbarem Aufwand erfolgen können.

Das Redesign von WIAS-TeSCA als von der Raumdimension des Simulationsgebiets unabhängiges Tool ging im Sinne strukturierter Programmierung objektorientiert [5] vor. Die Implementation erfolgte in C, unter Einbindung vorhandener Fortran-Quellen, mit numerischen Kernen in Fortran. Auf alle die Portabilität behindernden Elemente, darunter auch spezielle C++ Konstrukte, wurde verzichtet. Wir verwendeten pdelib-Komponenten [1] wie die offene Schnittstelle zur Gitterverwaltung (sxgrid) und die Schnittstelle zur linearen Algebra (mxlib, itlib). Als interaktive Online-Graphik kommen gltools [2] zum Einsatz und es gibt eine Schnittstelle zur Eingabesprache lua [6].

In WIAS-TeSCA erfolgt eine Erweiterung des pdelib-Konzeptes hin zur Behandlung eines im Prinzip offenen Satzes von gekoppelten Gleichungen, die auf jeweils eigenen spezifischen Teilen des Gitters definiert und gelöst werden, sich aber dabei auf das Grundgitter des Simulationsgebietes beziehen und in Hinblick auf die selbstkonsistente Lösung des Gesamtsystems über dieses Grundgitter kommunizieren. Dazu korrespondierend erfolgt die Verwaltung von Materialeigenschaften.

Mit diesem Konzept wurde zunächst die Lösung der nichtlinearen Poissongleichung zur Berechnung des elektrostatischen Potentials in einer dotierten (dreidimensionalen) Halbleiter-Heterostruktur bei räumlich variabel vorgegebenen quasi Fermipotentialen der Ladungsträgerdichten realisiert. Anschließend wurden die Voraussetzungen zur Einbindung der Ladungsträgertransportgleichungen und folgender optional in das Drift-Diffusions Modell zu integrierender Modelle geschaffen: räumlich aufgelöste Temperaturentwicklung im Bauelement, Störstellendynamik, optisches Feld (Lasermodele) und quantenmechanische Bandstrukturberechnungen.

Mit dem weiterentwickelten Programmsystem WIAS-TeSCA wurden für das MPI-Halbleiterlabor München erfolgreich 3D-Simulationen von pn-CCD-Schieberegisterstrukturen durchgeführt. Diese pn-CCDs (Charge Coupled Device) [7] werden als Röntgen-Detektoren in den ESA-Satelliten ABRIXAS und XMM (Xray Multi Mirror) eingesetzt. Für die weitere Skalierung - die Verkleinerung der Pixelgeometrien - war die Berücksichtigung von 3D-Effekten bei der mathematischen Beschreibung unerlässlich. Diese Halbleiterdetektoren brauchen ein großes Konvertierungsvolumen, um eine gute Energieauflösung und einen breiten Nachweisbereich zu erhalten. Für die Simulation bedeutet das eine große Ausdehnung der Bauelemente bei gleichzeitig sehr feiner Oberflächenstrukturierung. Der Kooperationspartner übergab für die Testrechnungen reale Geometrie- und Dotierungsdaten. Mit Gittern bis zu 150 000 Knoten wurden gute Ergebnisse erzielt.

Der Vergleich mit 2D-Simulationen in Längs- und Querrichtung zeigt Abweichungen des Potentials in den Mulden des CCD-Kanals von einem eV bis zu mehreren eV bei weiterer Verkleinerung der Zellengröße. Zugleich konnte nachgewiesen werden, dass die starken Streufelder die Transfereigenschaften der 3-Phasen-Schieberegister weiter verbessern. Neben dem genaueren Verständnis der Halbleiterdetektoren dienen die 3D-Simulationen in diesem Fall vor allem der Technologieoptimierung, d. h. der Einstellung geeigneter Dotierungsprofile. Zur selbständigen Durchführung weiterer Simulationen wurde beim Projektpartner MPI-Halbleiterlabor eine arbeitsfähige Version von WIAS-TeSCA implementiert. Wesentliche Ergebnisse des Projekts sind auch Gegenstand folgender Publikationen:

H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, H. LANGMACH, R. NÜRNBERG, *3D-Simulation von Halbleiterdetektoren*, in *Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft*, Springer (erscheint).

H.-CHR. KAISER, H. LANGMACH, *Three-dimensional semiconductor device simulation - algorithms and software design*, Algorithmy 2000, Conference on Scientific Computing, High Tatras, Slovak Republic, 10. - 15. Sept. 2000.

G. LUTZ, R.H. RICHTER, L. STRÜDER, *DEPMOS-Arrays for X-ray imaging*, Astronomical Telescopes and Instrumentation 2000: Interferometry in Optical Astronomy, Proceedings of SPIE Vol. 4006, in press (2000) .

## Literatur

- [1] J. FUHRMANN, T. KOPRUCKI, H. LANGMACH, *pdelib: An open modular tool box for the numerical solution of partial differential equations. design patterns*, in Proceedings of the 14th GAMM Seminar on Concepts of Numerical Software, W. Hackbusch, G. Wittum, eds., Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vieweg Verlag, 1998.
- [2] J. FUHRMANN, H. LANGMACH, *gltools*, Weierstrass Institute for Applied Analysis and Stochastics, Mohrenstraße 39, 10117 Berlin, Germany.
- [3] H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik von Ladungstransport in Halbleitern*, GAMM-Mitteilungen 16 (1993), 35-59.
- [4] H. GAJEWSKI, K. GÄRTNER, *On the Discretization of van Roosbroeck's Equations with Magnetic field*, ZAMM 76 (1996), 247-264.
- [5] E. GAMMA, R. HELM, R. JOHNSON, J. VLISSIDES, *Design patterns, elements of reusable object-oriented software*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1995.
- [6] R. IERUSALIMSCY, L. H. DE FIGUEIREDO, W. CELES, *Lua - an extensible extension language*, Software: Practice & Experience 26 (1996), pp. 635-652.
- [7] L. STRÜDER, J. KEMMER, *Neuartige Röntgendetektoren für die Astrophysik*, Physikalische Blätter 52 (1996), 21-26.