



博士生开题报告

# 氮化镓HEMT器件的近结热仿真 与热设计

博士生：沈扬

导师：曹炳阳 教授

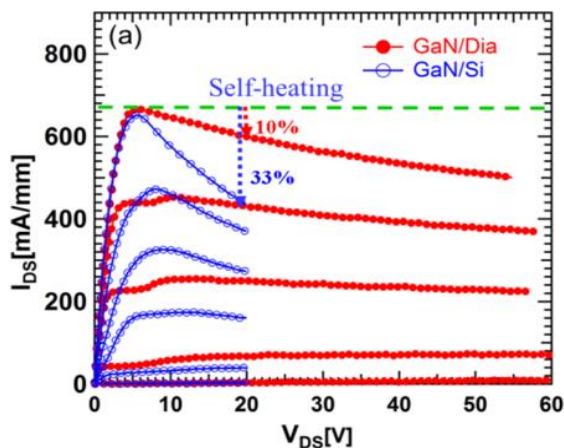
2024年7月

# 汇报提纲

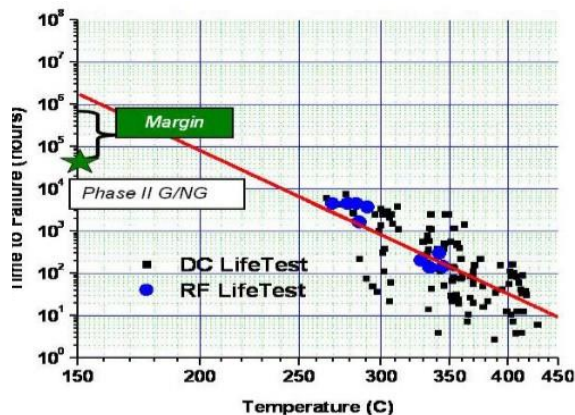
1. 背景及关键科学问题
2. 研究现状及研究内容
3. 已完成工作
4. 未来研究计划

# 研究背景-氮化镓HEMT器件的热问题

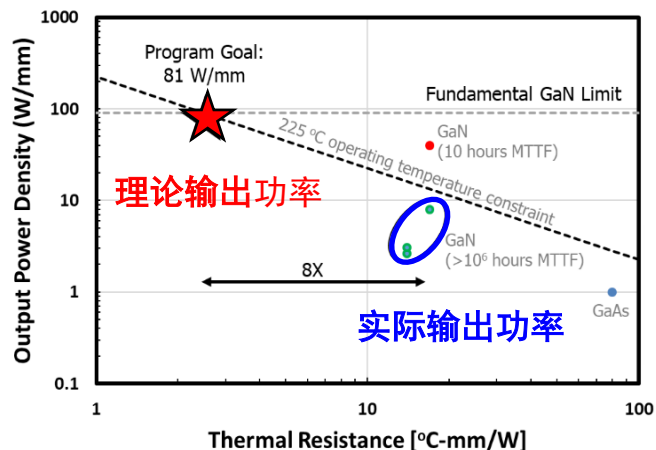
□ **热问题**已成为氮化镓等电子器件发展的瓶颈



器件**电学性能退化**



器件寿命随结温**指数衰减**



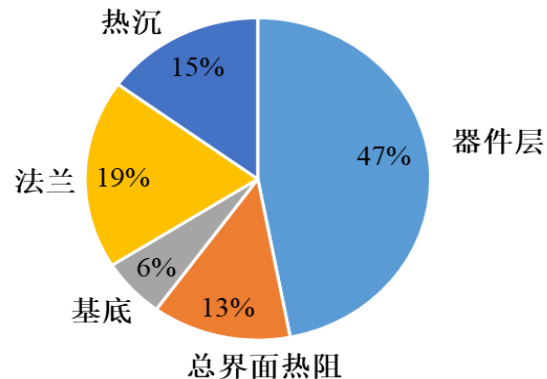
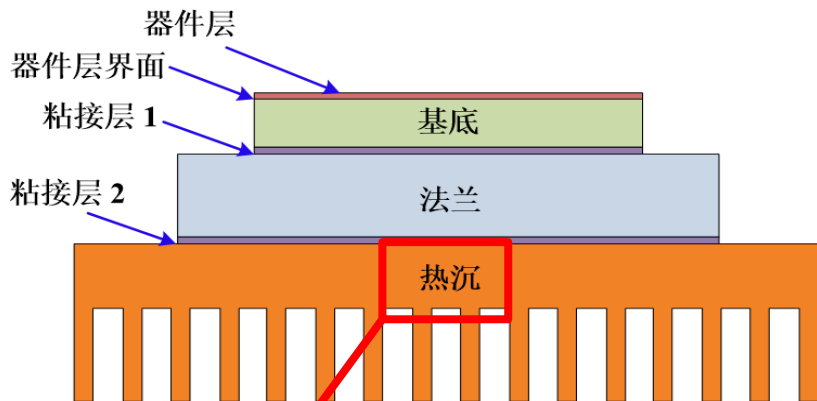
氮化镓功放**实际功率远小于理论值**

- 由自热效应引起的器件**输出电流退化**甚至可达到近**50%**
- 器件结温每增加**1°C**，可靠性就会下降**5%**
- 目前氮化镓HEMT功率放大器实际功率比理论功率小**一个量级**
- **器件热管理**对于发挥**材料优良电学特性**及**提高器件可靠性**至关重要。

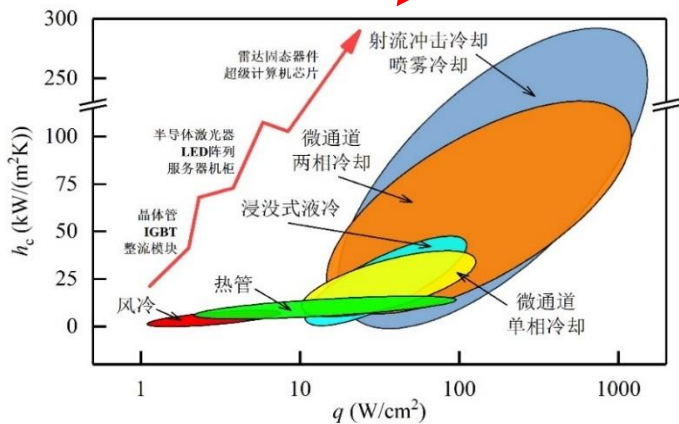
[1] K. Ranjan, S. Arulkumaran, G. Ng, et al., "Investigation of self-heating effect on DC and RF performances in AlGaN/GaN HEMTs on CVD-diamond," IEEE Journal of the Electron Devices Society, vol. 7, pp. 1264–1269, 2019

[2] M. Rosker, C. Bozada, H. Dietrich, et al., "The DARPA wide band gap semiconductors for RF applications (WBGs-RF) program: Phase II results," CS ManTech, vol. 1, pp. 1–4, 2009

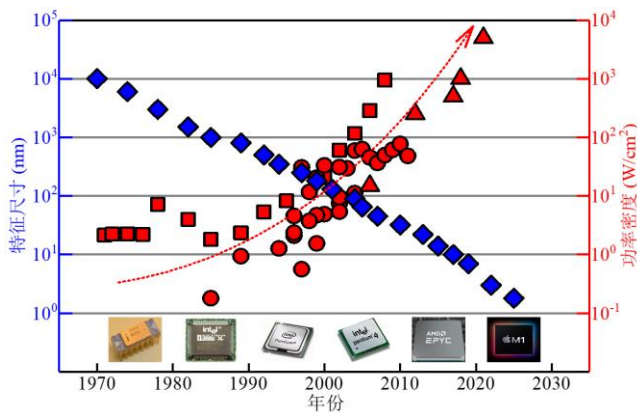
# 研究背景-芯片热管理和典型散热方式



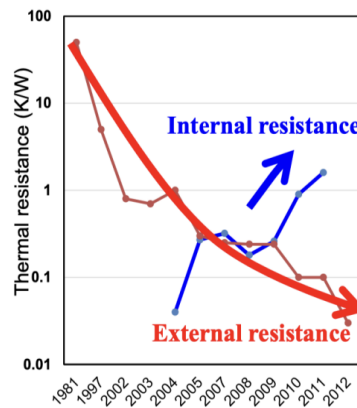
氮化镓HEMT器件横截面结构及各部分热阻占比



电子器件中典型散热方式的性能



芯片特征尺寸、功率密度及热阻占比逐年变化

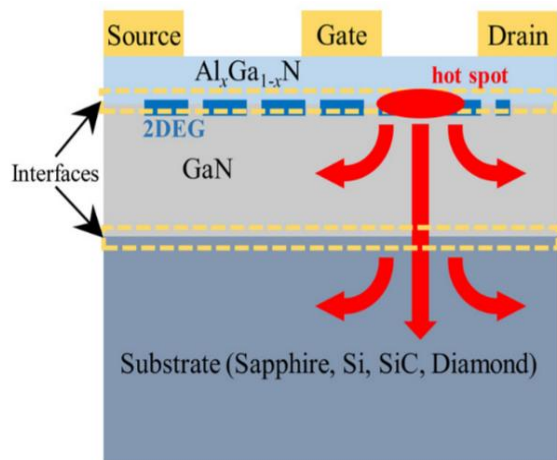


- **器件内部热阻**已经取代外部热阻成为主导散热的核心因素
- **开展器件内部的热仿真与热设计**对于解决芯片热瓶颈至关重要

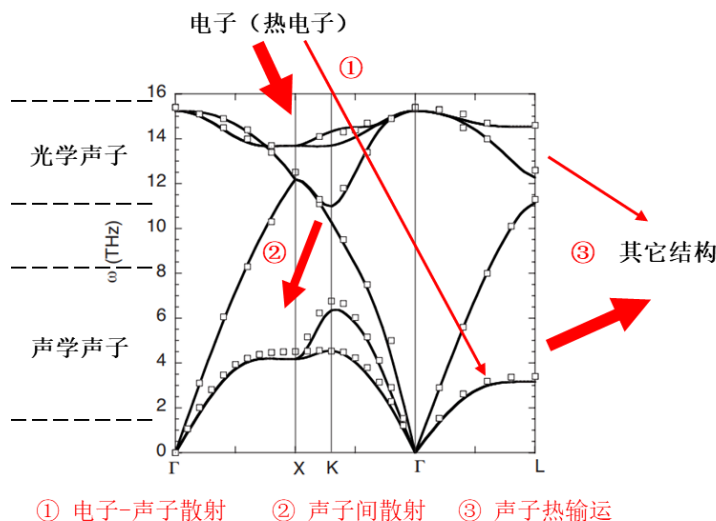
# 关键科学问题-近结非傅里叶热运输

➤ 器件内的热传递主要涉及以下三种非傅里叶导热：

- ✓ 纳米结构中连续性介质假定不适用，导热机制为**弹道输运**
- ✓ 当电子和声子处于非平衡状态传递热量时，要考虑**多载流子耦合效应**
- ✓ 晶体管超快热脉冲条件下，热量以**热波**的形式传递

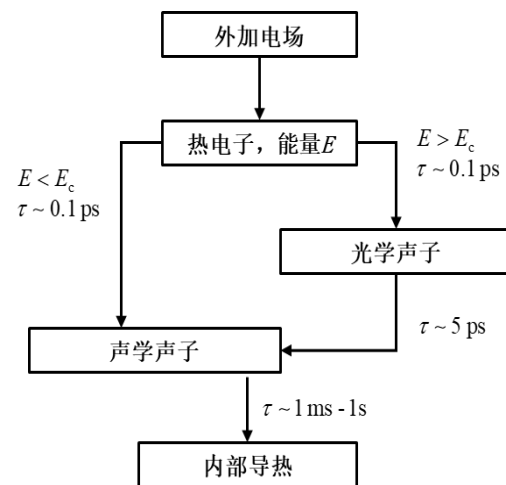


氮化镓器件近结热输运



① 电子-声子散射 ② 声子间散射 ③ 其它结构

沟道区的非平衡产热过程



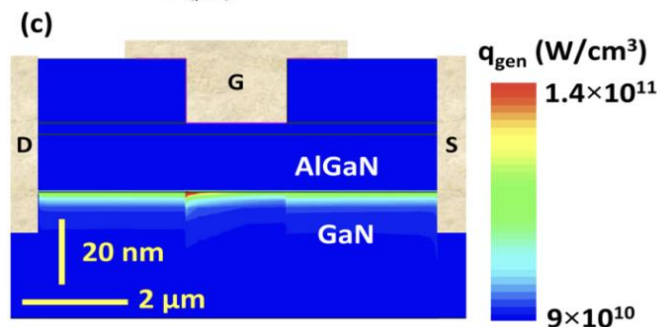
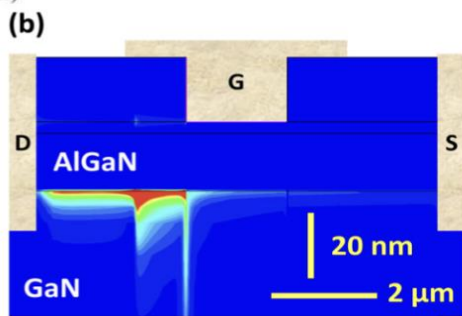
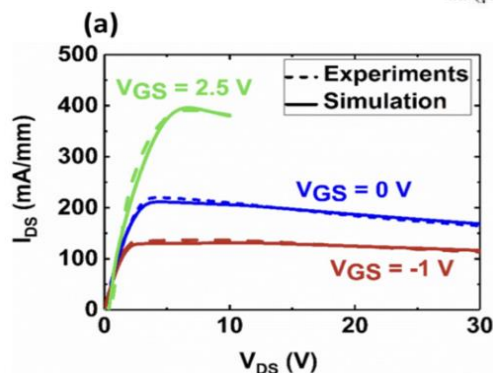
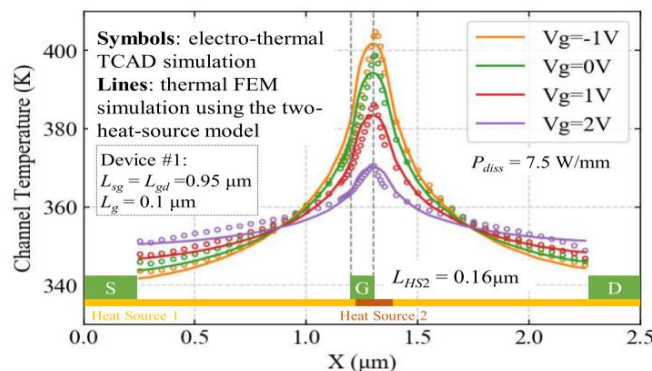
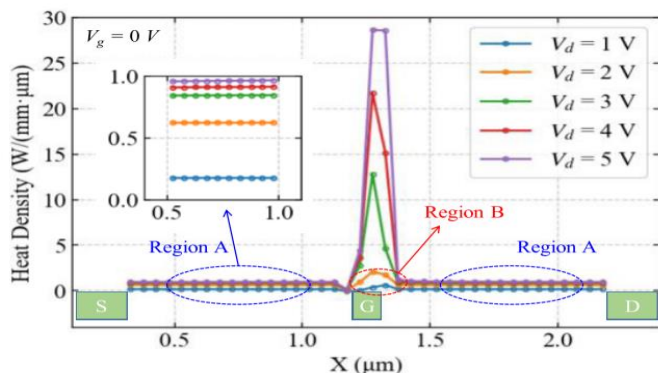
热产生及传递的特征时间

➤ 微纳米尺度下**非平衡效应**、**弹道输运**、**边界散射**、**界面效应**和**超快过程**等在内的**非傅里叶效应**，对**器件内部传热规律**有着决定性的影响。

[1] D.S. Tang, B.Y. Cao. Phonon thermal transport and its tunability in GaN for near-junction thermal management of electronics: A review. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2022, 200: 123497

# 关键科学问题-电热耦合输运

- 晶体管内部的产热主要是焦耳热，其分布受到器件工作偏置电压的显著影响，决定了器件内部的传热过程



相同功耗下不同偏置电压下的氮化镓HEMT沟道产热分布及温度场

- 单纯的热学仿真无法准确地模拟器件的热行为，需开展电热耦合分析。

[1] B. Chatterjee, C. Dundar, T. E. Beechem, et al., "Nanoscale electro-thermal interactions in AlGaIn/GaN high electron mobility transistors," Journal of Applied Physics, vol. 127, no. 4, p. 044 502, 2020.

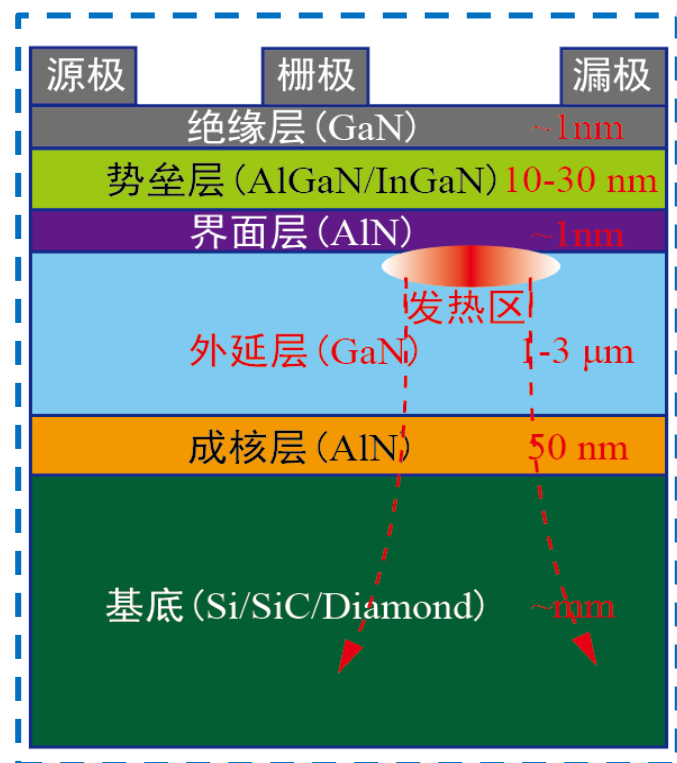
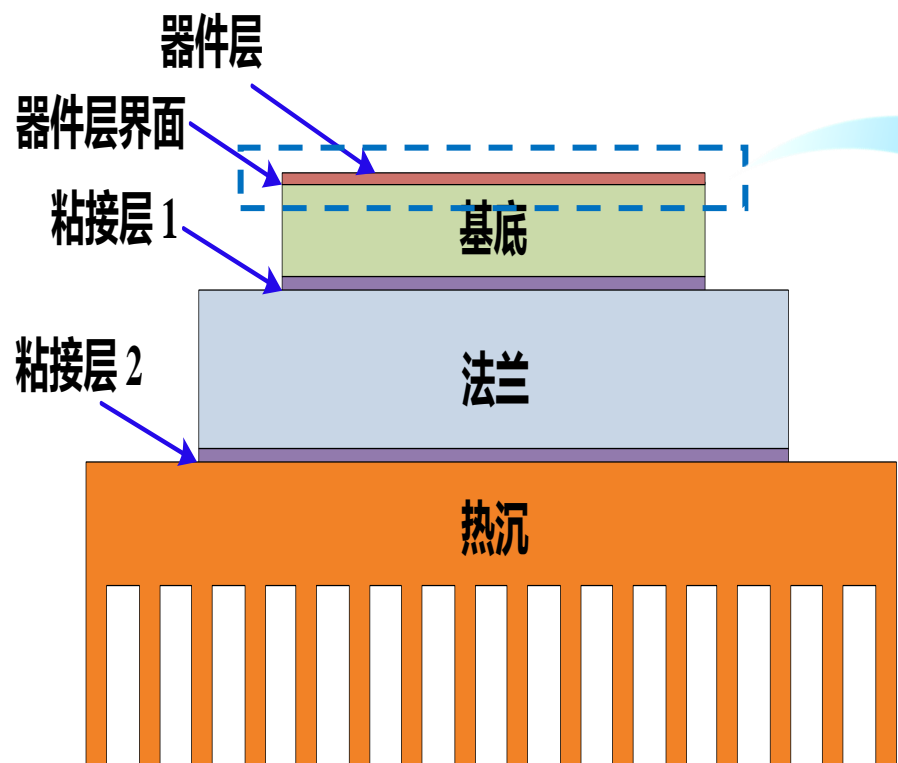
[2] Chen X, Boumaiza S, Wei L. Modeling bias dependence of self-heating in GaN HEMTs using two heat sources[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 2020, 67(8): 3082-3087.

# 关键科学问题-跨尺度热输运

产热区: 10 nm ~ 100 nm

器件层: 1  $\mu\text{m}$  ~ 3  $\mu\text{m}$

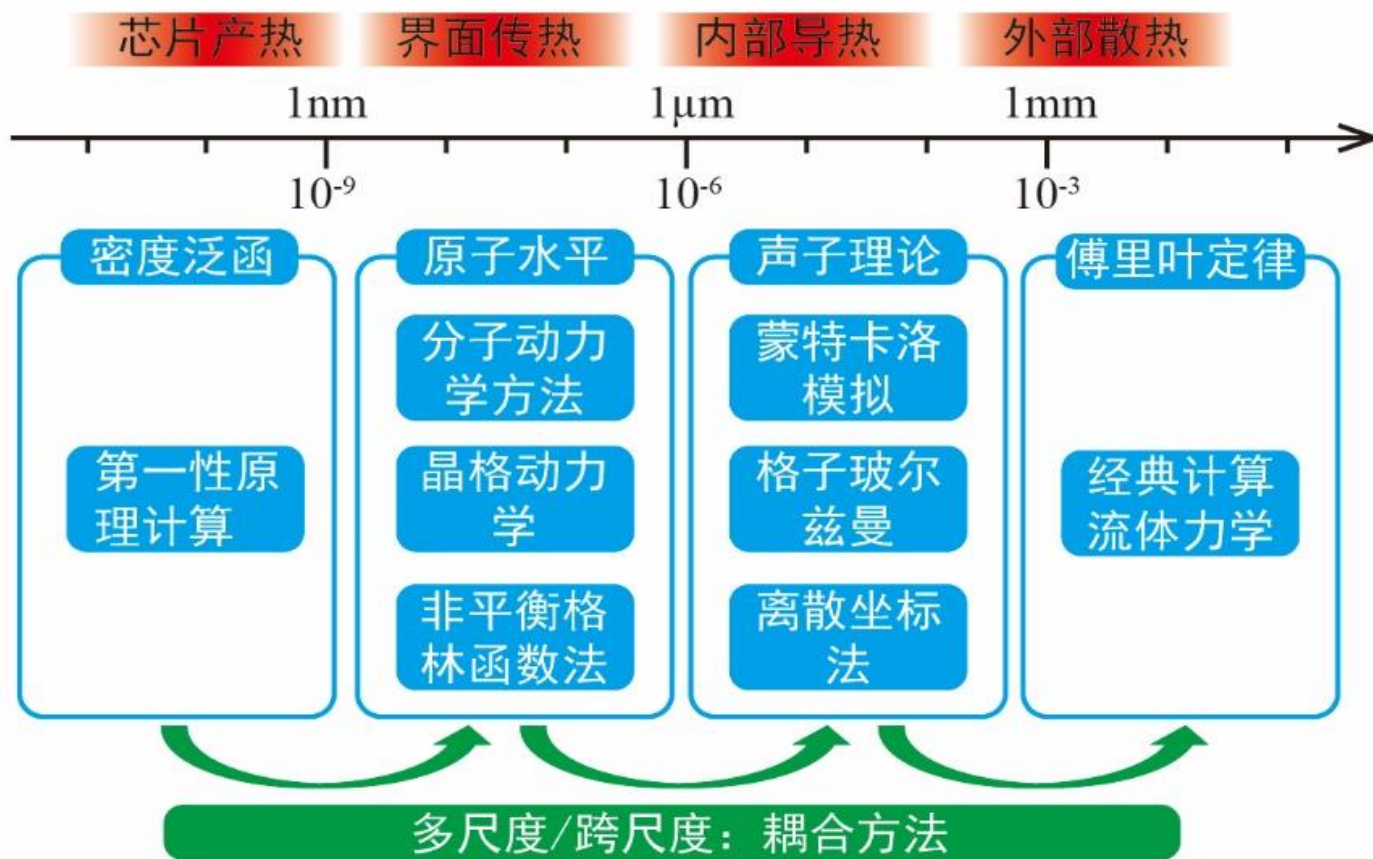
基底及外部:  $\geq 0.1$  mm



氮化镓HEMT器件横截面结构及晶体管放大图

- 氮化镓器件的热量传递涉及从纳米尺度到宏观尺度的跨尺度输运过程。

# 关键科学问题-跨尺度热仿真与热设计



不同尺度热过程的热仿真方法

- 单一方法无法完整地刻画和处理电子器件内从纳米尺度到宏观尺度的跨尺度传热过程的问题，需要耦合不同方法开发跨尺度热仿真与设计方案。



# 汇报提纲

1. 背景及关键科学问题
2. 研究现状及研究内容
3. 已完成工作
4. 未来研究计划

# 研究现状-氮化镓器件的近结非傅里叶热输运

## 非傅里叶导热机理研究

机理研究对象主要为简化的微纳米结构

## 器件热输运过程研究

器件热输运研究主要基于傅里叶导热定律

作者, 年份	主要研究内容
Majumdar, 1993	建立纳米薄膜法向导热的等效热导率模型
Hua & Cao, 2016	基于声子玻尔兹曼方程和蒙特卡罗模拟构建多约束结构的等效热导率模型
Hua & Cao, 2016	建立含内热源加热的纳米薄膜的等效热导率模型
Tang et al., 2016	分析一维薄膜内部超快速脉冲加热下的热波传递行为
Muzychka et al., 2013	基于傅里叶定律建立具有界面热阻的多层结构的热阻模型
Kelvin et al., 2014	基于傅里叶定律建立多热源器件结构的扩展热阻解析解, 分析其热设计参数依赖性
Hua et al., 2019	采用声子蒙特卡罗模拟建立弹道-扩散机制下的扩展热阻模型

- 存在的问题: 非傅里叶导热效应对于实际器件近结热输运过程的影响认识仍然不足。

# 研究现状-氮化镓器件的电热耦合模拟

## 耦合傅里叶导热定律

作者, 年份	研究内容
Sadi, et al., 2006, 2007	采用 <b>电子MC+傅里叶导热定律</b> 分析器件内电子输运
García et al., 2016	采用 <b>电子MC+有限元分析</b> 不同衬底下器件的结温变化
Chen, et al., 2019, 2020	采用 <b>TCAD</b> 分析产热对结温的影响, 以及温度场对器件电学性能的影响
Tang & Cao, 2024	采用 <b>基于傅里叶定律的电热耦合模拟</b> 分析产热机制

无法考虑非傅里叶导热效应对器件电学行为的影响

## 耦合声子玻尔兹曼方程

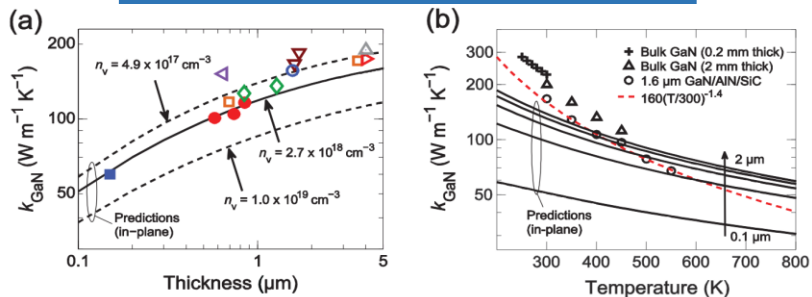
作者, 年份	研究内容
Donmezer & Graham, 2014	采用 <b>TCAD+灰体DOM</b> 分析平均自由程对结温的影响
Hao et al., 2017, 2018	采用 <b>电子MC+色散声子MC</b> 分析器件传热过程
Chatterjee et al., 2020	采用 <b>TCAD+灰体DOM</b> 分析非傅里叶导热对器件热阻分布的影响

主要关注非傅里叶效应对温度的影响, 一般仅局限于某一组偏置电压条件

- **存在的问题:** 大部分电热耦合模拟工作基于傅里叶导热定律; 受限于耦合模拟速度, 非傅里叶热扩展的**偏置依赖性**缺乏详细探讨, 声子弹道输运**对器件电学性能的影响**尚不明确。

# 研究现状-器件跨尺度热仿真与热设计

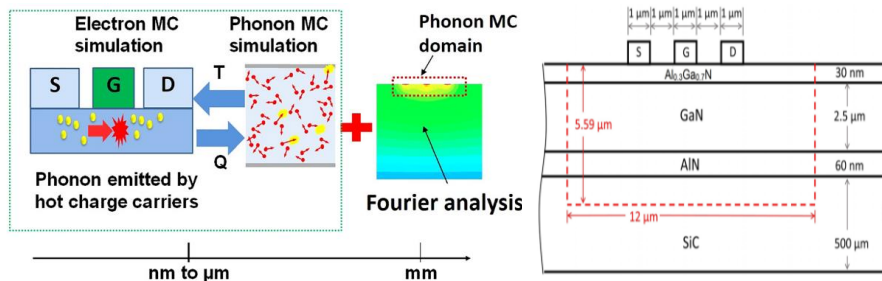
## 模型化耦合算法



作者, 年份	研究内容
Song et al., 2020	采用薄膜法向/面向等效热导率模型+有限元分析器件热阻随设计参数的变化
Cheng et al., 2019	采用第一性原理计算/DMM+有限元分析界面热导对器件结温的影响

独立求解不同尺度算法，通过等效参数联合导热模型来实现耦合求解

## 信息传递耦合算法



作者, 年份	研究内容
Hao et al., 2016	采用有限元+经验参数的声子MC进行单栅器件热仿真
Chatterjee et al., 2020	采用有限元+二维灰体DOM分析器件热阻分布
Li et al., 2023	采用有限元+二维灰体MC分析加热方式对热阻的影响

分区域开展不同尺度的算法，可充分考虑非傅里叶效应

➤ 存在的问题：模型化耦合方法主要采用傅里叶导热定律，且模型参数不准确；信息传递耦合方法目前对器件结构及属性存在过多简化。

# 研究内容

## ■ 研究氮化镓器件内部非傅里叶热运输的特征规律

- 分析弹道运输、超快过程、非平衡效应等非傅里叶导热机制对近结热运输过程的影响。

## ■ 开展氮化镓HEMT器件的电热耦合分析

- 发展器件电热耦合模拟方法，分析器件内部电热耦合作用规律及其对器件温度场及电学性能的影响。

## ■ 开展实际器件的跨尺度热仿真与热设计

- 发展器件跨尺度热仿真方法，对实际器件进行跨尺度热设计。

# 研究思路

## 机理研究与模型构建

### 近结非傅立叶热运输

- 弹道运输
- 超快过程
- 电子-声子非平衡

机理研究提供模型参数



### 电热耦合分析

- 偏置依赖性
- 电热相互作用
- 器件电热性能分析

发展相应模拟算法



## 器件跨尺度仿真方法开发

### 模型化耦合算法

- 数值求解如CV模型、热质模型等非傅里叶导热模型



### 信息传递耦合算法

- 耦合第一性原理计算-晶格动力学-蒙特卡罗模拟-宏观方法



对实际氮化镓HEMT器件进行跨尺度热仿真与热设计

# 汇报提纲

1. 背景及关键科学问题
2. 研究现状及研究内容
3. 已完成工作
4. 未来研究计划

# 已完成工作

## I. 氮化镓器件近结热输运过程的声子蒙特卡洛模拟

- 分析了**声子频谱**对宽禁带半导体器件近结热扩展的影响，发展了可以考虑声子频谱的**等效热导率模型**；
- 发展了**基于第一性原理的稳态全带声子蒙特卡洛模拟**，比较了文献中常用模拟方式的性能，验证了所发展模型的可靠性

## II. 氮化镓器件的电热耦合模拟研究

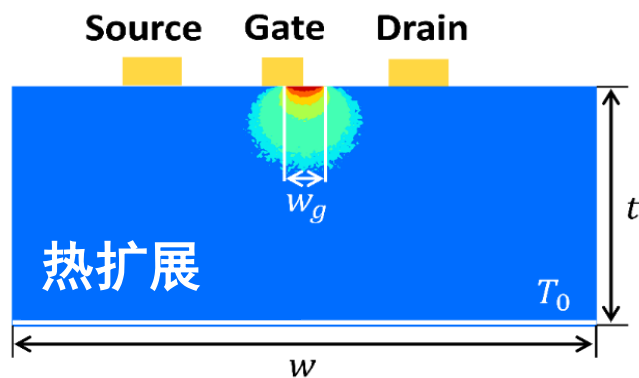
- 发展了**TCAD-声子蒙特卡洛耦合电热模拟方法**，定量分析了偏置依赖性对于器件非傅里叶热输运的影响，构建了**双等效热导率模型**；
- 分析了声子弹道输运对器件电学性能退化的影响，构建了用于**评估器件电热性能的两温度原则**

## III. 器件跨尺度热仿真与热设计

- 完成了**跨尺度热仿真与设计平台**的设计与开发，对实际器件进行了跨尺度耦合模拟及分析

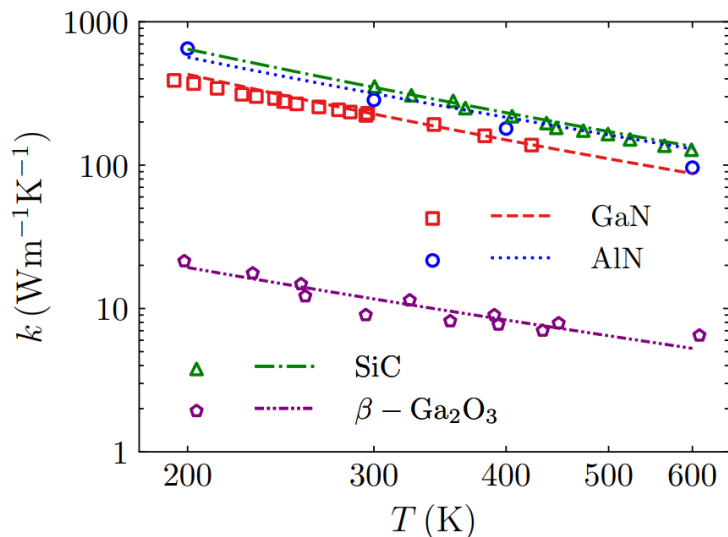


# I. 近结热扩展过程的声子蒙特卡洛模拟

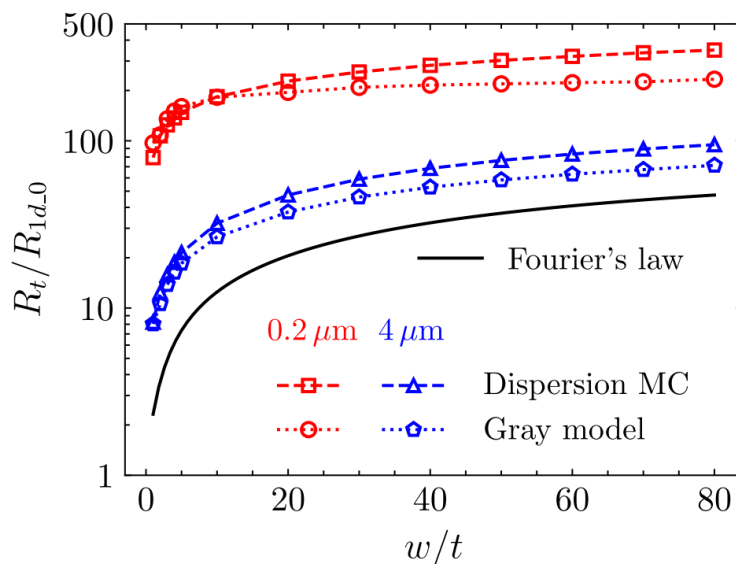


热扩展过程示意图

- 采用声子蒙特卡洛模拟，研究了典型宽禁带半导体 GaN、AlN、SiC、和  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的声子热扩展过程。
- 模拟结果表明基于傅里叶定律的预测相比，弹道效应可以显著提高热阻，且热阻增加程度与声子频谱密切相关。



声子模型预测的热导率随温度变化关系与实验值对比

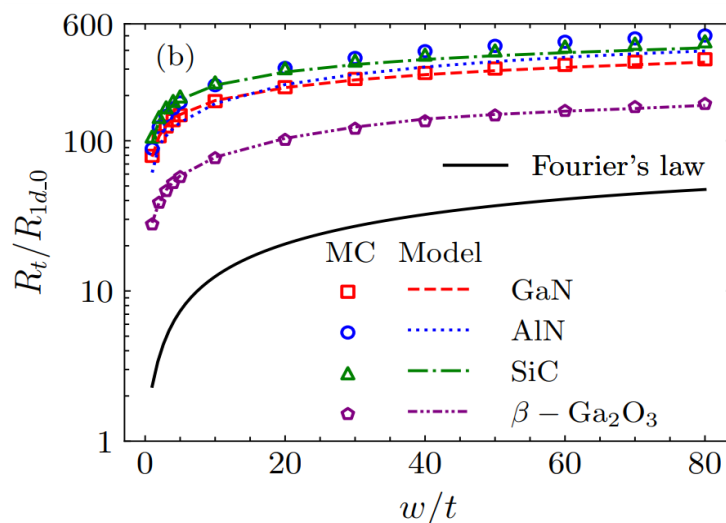
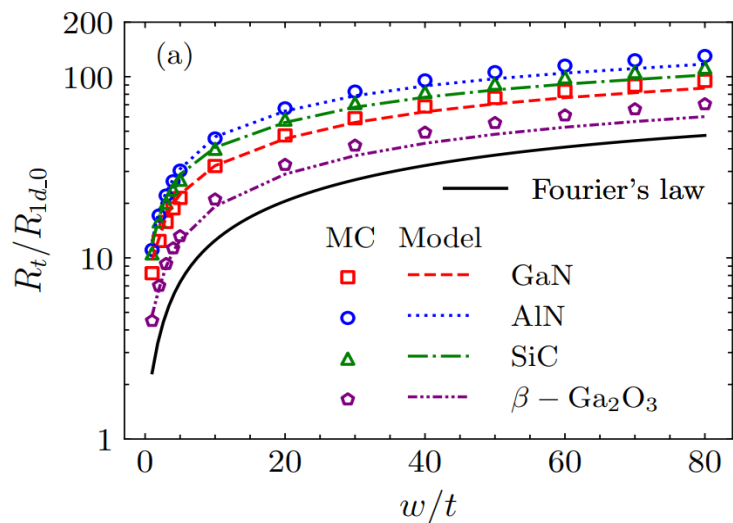


GaN 的无量纲总热阻随  $w/t$  的变化  
 $w_g/w = 0.01$ ,  $t$  分别为  $0.2$  和  $4 \mu\text{m}$

# I. 近结热扩展过程的声子蒙特卡洛模拟

- 基于玻尔兹曼方程推导的半经验热阻模型，发展了可以考虑**声子频谱影响**的**等效热导率模型**

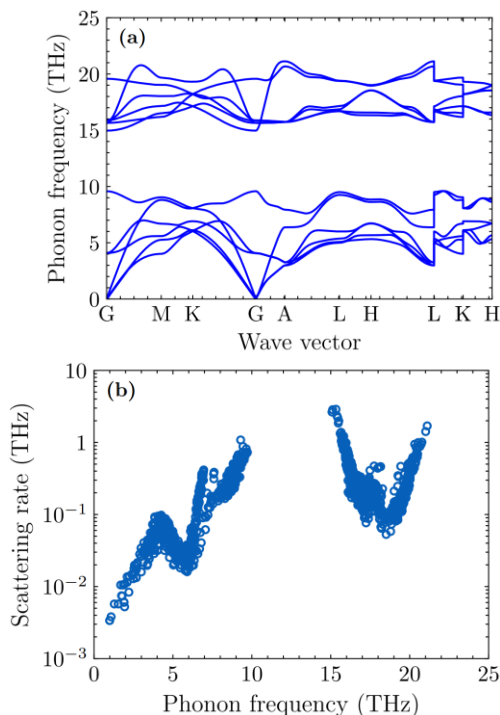
$$k_{\text{eff}} = \frac{1}{3} \sum_j \int_0^{\omega_j} \hbar\omega \frac{\partial f_0}{\partial T} \text{DOS}_j(\omega) v_{g,\omega,j} l_{m,j} d\omega \quad l_{m,j,r} = \frac{l_{0,j}}{(1 + A_w K n_{w-\omega,j})(1 + \frac{2}{3} K n_{t-\omega,j}) r_t r_{wg}}$$



模型预测的不同宽禁带半导体的无量纲总热阻与蒙特卡洛模拟结果对比

$$\frac{wg}{w} = 0.01 \quad (a) \quad t = 4 \mu m \quad (b) \quad t = 0.2 \mu m$$

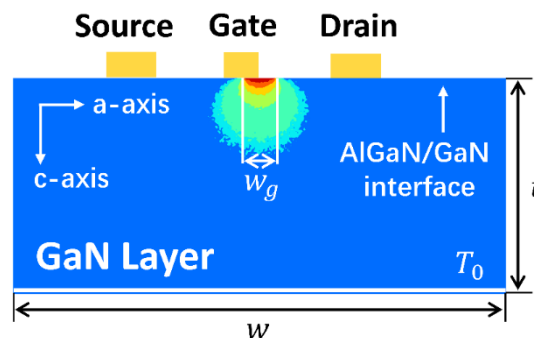
# I. 近结热扩展过程的声子蒙特卡罗模拟



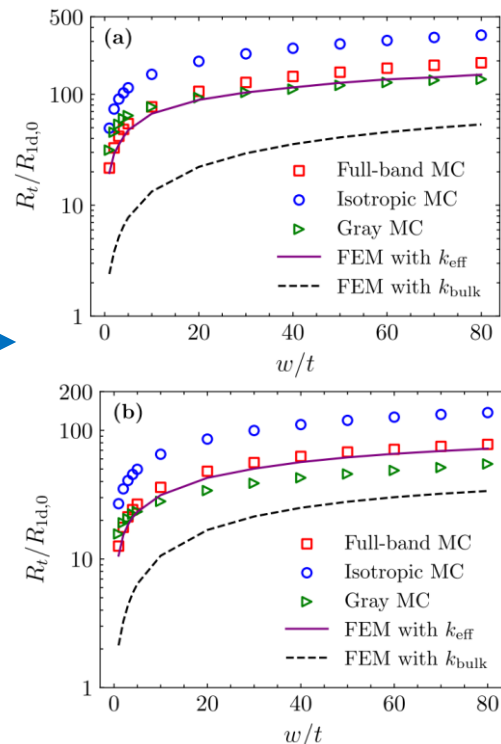
$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \vec{v}_{g,k} \cdot \nabla f_k = \frac{f_{0,k} - f_k}{\tau_k} + \dot{S}_k$$

求解氮化镓传热过程的**全带**声子玻尔兹曼方程

声子态性质



氮化镓层**近结热扩展**过程示意图



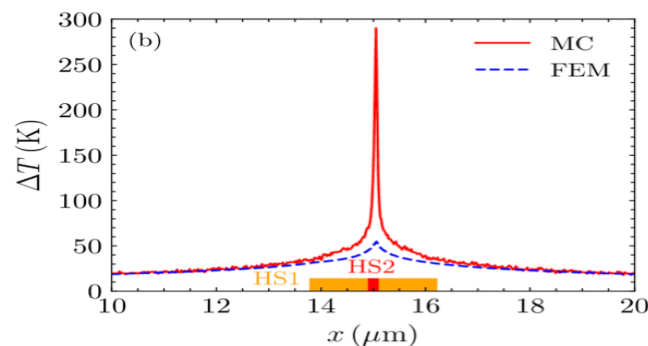
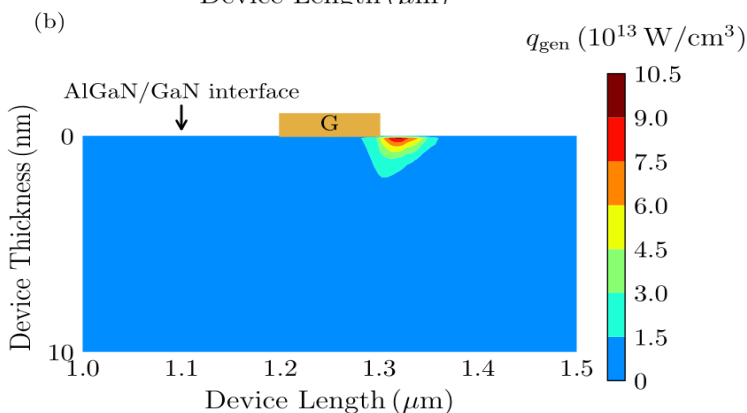
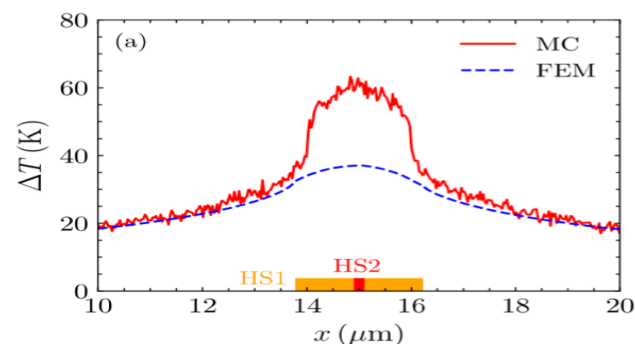
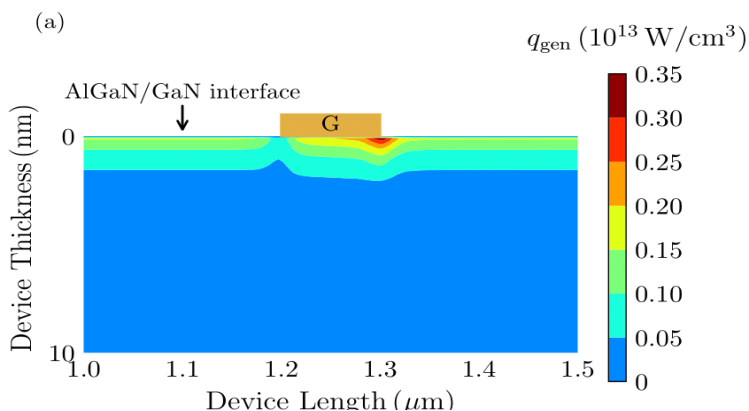
不同几何参数下扩展热阻

**第一性原理计算**氮化镓声子色散及弛豫时间

系统比较了基于**经验声子属性**的各向同性MC模拟，**灰体MC模拟**，以及基于**等效热导率的有限元仿真**在预测氮化镓扩展热阻上的表现，强调了**在模拟中直接纳入第一性原理计算的声子属性的重要性**。

# II. 氮化镓器件的电热耦合模拟研究

- **TCAD仿真**输出产热分布，用于驱动**声子蒙特卡洛模拟**得到温度场
- 焦耳热分布具有**强烈的偏置电压依赖性**，在相同的功耗下也可以导致明显不同的温度分布



产热分布

沟道温度分布

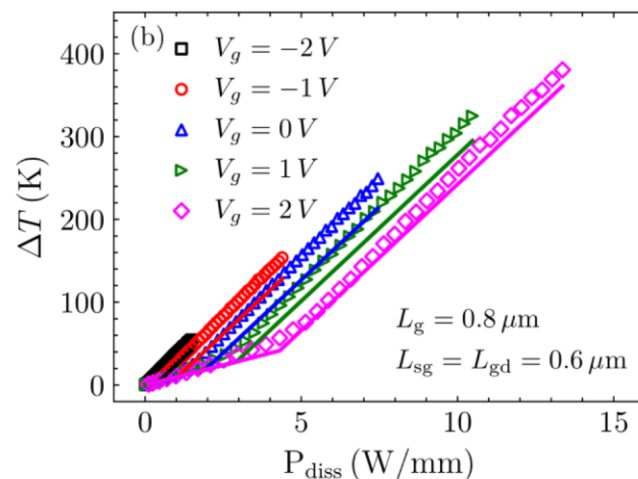
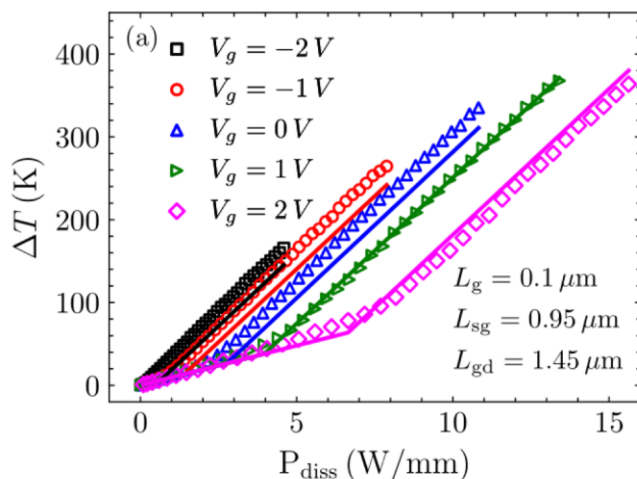
总功率均为5 W/mm时，**不同偏置电压下**氮化镓器件沟道产热及温度分布

# II. 氮化镓器件的电热耦合模拟研究

## 双等效热导率模型

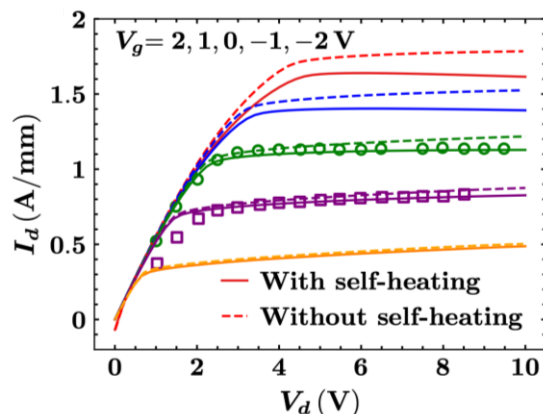
$$T_m = T_0 + \frac{k_{\text{bulk}}}{k_{\text{HS1}}} P_1 R_1 + \frac{k_{\text{bulk}}}{k_{\text{HS2}}} P_2 R_2$$

- **HS1:** 表征当  $V_d < V_{\text{dsat}}$  器件处于线性区时，整个沟道内部的**均匀产热**。
- **HS2:** 表征当  $V_d > V_{\text{dsat}}$  器件处于饱和区时，栅极下方靠近漏极一侧的**集中产热**。

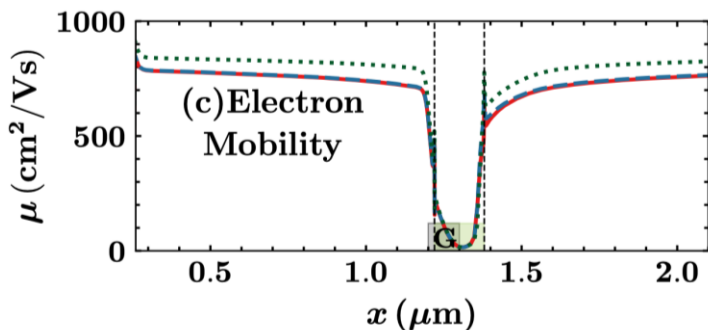
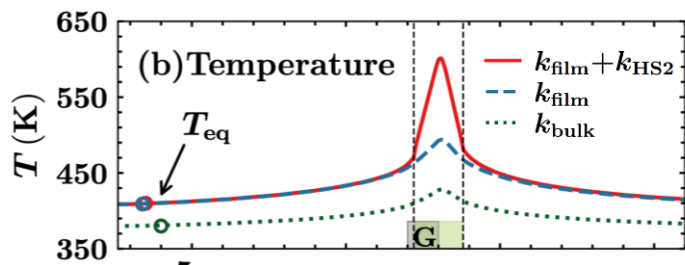


针对不同几何尺寸的HEMT器件，不同偏置电压下模型预测与电热耦合模拟得到的器件结温随功率变化的对比

# II. 氮化镓器件的电热耦合模拟研究



器件输出电流由于自热效应而下降



采用不同等效热导率模拟得到的沟道温度和电子迁移率分布

器件过热不仅会导致**可靠性问题**，还会因电子迁移率等与温度相关的材料特性而导致**电学性能下降**。

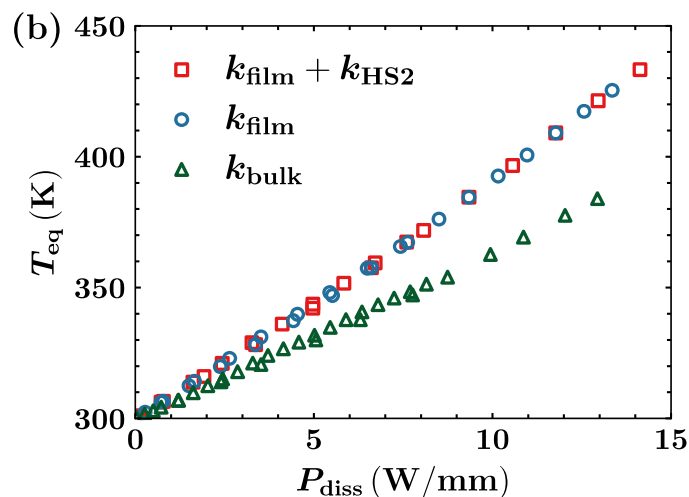
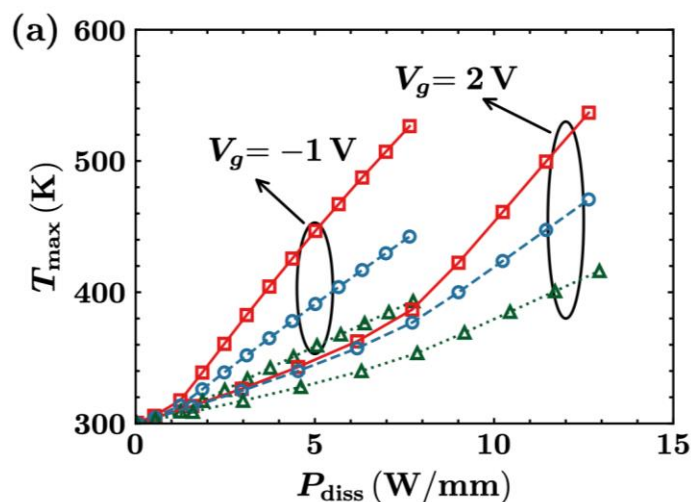
- ✓ **法向弹道效应**，体现为薄膜的等效热导率降低，可均匀提高沟道温度，**降低沟道的电子迁移率**
- ✓ **热源尺寸和声子自由程相当引起的弹道效应**，主要提升高场热源区域的温度，**其对器件电学性能几乎没有影响**
- 在漏极下方靠近栅极一侧的**高场区域**中**电子速度饱和**，其几乎不受温度变化的影响
- 器件电气性能的下落主要取决于**低场区域**的温度

# II. 氮化镓器件的电热耦合模拟研究

## 衡量器件电热性能的双温度原则

- $T_{\max}$  (最高沟道温度)：衡量器件可靠性，受到法向弹道效应和由热源尺寸引起的弹道效应的同时影响，具有强烈的偏置电压依赖性
- $T_{\text{eq}}$  (等效沟道温度)：衡量器件电学性能下降，仅受到法向弹道效应的影响，几乎不受偏置电压的影响

$$T_{\text{eq}}(V_{\text{GS}}, V_{\text{DS}}) = T_{\text{uniform}}(V_{\text{GS}}, V_{\text{DS}}) \big|_{@I_{\text{DS, self-heating}}=I_{\text{DS, uniform}}}$$



$T_{\max}$ 和 $T_{\text{eq}}$ 在不同偏置电压下随功耗的变化

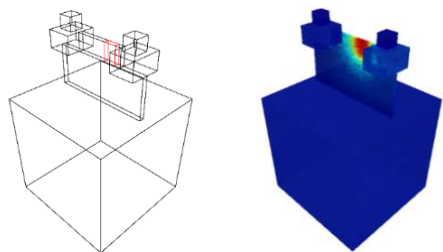
$T_{\max}$ 和 $T_{\text{eq}}$ 的行为显著不同，在实际器件热设计优化中应同时考虑两个指标！

# III. 跨尺度热仿真与热设计

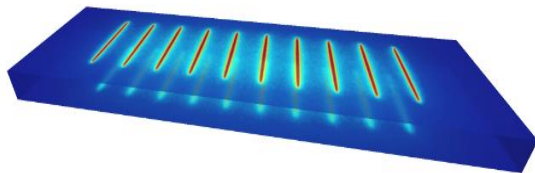
开发了一套**芯片跨尺度热仿真与设计软件**，可以进行**从纳米尺度至宏观尺度的器件热仿真与热设计**，提高芯片热设计的准确性和效率。

## 各类器件热仿真及热设计

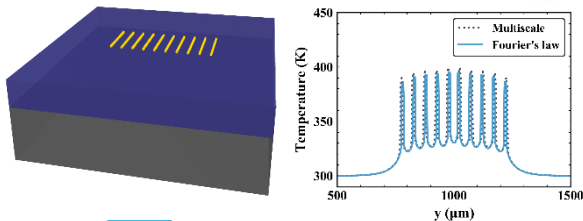
22nm  
FinFET



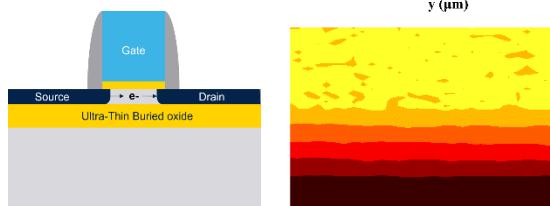
氮化镓  
HEMT



氧化镓  
MOSFET



SOI-  
MOS



## 跨尺度热仿真求解器：

- ✓ 耦合第一性原理计算-机器学习势驱动的晶格动力学-全带声子蒙特卡洛-宏观有限体积法

## 计算机软件著作权登记证书

证书号： 软著登字第12743230号

软件名称： 功率芯片的跨尺度热仿真与热设计系统  
[简称： PowerTDA]  
V1.0

著作权人： 清华大学

项目文档:

- 简介
- 安装指南
- 用户指南
- 贡献指南
- phononmc
- 版本历史
- 预研工作

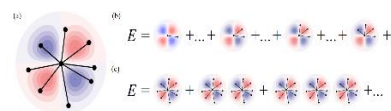
软件文档及用户手册



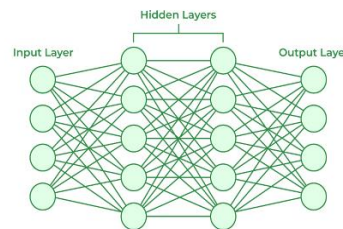
# III. 跨尺度热仿真与热设计

第一性原理计算

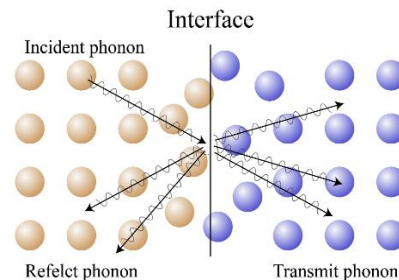
全带声子色散及弛豫时间



ACE: empirical expansion



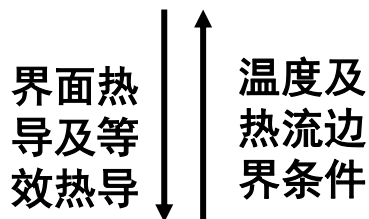
MACE: fully connected multi-layer perceptr



基于机器学习势函数的晶格动力学

模式分辨界面透射谱

晶体管级热运输：全带声子蒙特卡罗



器件级热运输：傅里叶导热定律

# III. 跨尺度热仿真与热设计

热源为4微米时俯视温度场

不同热源宽度下热源中心线温度分布及结温变化

- 热源宽度 200nm 时，采用等效热导率和体材料热导率的宏观方法对温升的低估分别达到了 29.5% 和 45.7%。
- 跨尺度方法对于准确的热仿真与热设计至关重要！

不同界面非晶层厚度下器件温升分布随氧化镓层厚度的变化

# 已完成工作小结

- 分析了**声子频谱**对宽禁带半导体器件近结热扩展的影响，发展了可以考虑声子频谱的**等效热导率模型**；
- 开展了基于第一性原理的稳态**全带声子蒙特卡洛模拟**，比较了文献中常用的考虑声子弹道输运模型的可靠性；
- 发展了TCAD-声子蒙特卡洛耦合电热模拟方法，定量分析了**偏置依赖性**对于非傅里叶声子热扩展的影响，发展了**双等效热导率模型**；
- 分析了声子弹道输运对**器件电学性能退化**的影响，建立了衡量器件电热性能**的两温度原则**；
- 开发了**器件跨尺度热仿真与设计平台**，对实际器件进行了跨尺度热仿真及分析。

# 汇报提纲

1. 研究背景及关键科学问题
2. 研究现状及研究内容
3. 已完成工作
4. 未来研究计划

# 未来研究规划

## 1. 超快速近结导热过程研究：

- 分析**超快热脉冲条件下**氮化镓器件的热输运行为，拓展已发展的等效热导率模型。

## 2. 电子-声子非平衡相互作用的影响研究：

- 基于电子-声子发射谱求解晶体管声子玻尔兹曼方程，**分析电子-声子非平衡作用对导热过程的影响**，拓展已发展的等效热导率模型。

## 3. 器件跨尺度热仿真与热设计：

- 进一步开发模型化耦合算法，对实际**多栅氮化镓HEMT器件进行跨尺度热设计**，分析生长工艺、栅长、栅间距、缓冲层厚度等对器件热阻的影响。

## 4. 仿真及设计效果的实验验证：

- 通过**反射热成像系统验证仿真结果的可靠性**，采用**器件可靠性测试**等方法验证设计的可靠性。

# 现有研究成果

## ➤ SCI论文7篇（1作4篇）

1. **Y. Shen**, Y.C. Hua, H.L. Li, S.L. Sobolev, B.Y. Cao. Spectral thermal spreading resistance of wide-bandgap semiconductors in ballistic-diffusive regime. **IEEE Transactions on Electron Devices**, 2022, 69(6): 3047-3054.
2. **Y. Shen**, X.S. Chen, Y.C. Hua, H.L. Li, L. Wei, B.Y. Cao. Bias dependence of non-Fourier heat spreading in GaN HEMTs. **IEEE Transactions on Electron Devices**, 2023, 70(2): 409-417.
3. **Y. Shen**, H.A. Yang, B.Y. Cao. Near-junction phonon thermal spreading in GaN HEMTs: A comparative study of simulation techniques by full-band phonon Monte Carlo method. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 2023, 211: 124284.
4. **Y. Shen**, and B.Y. Cao. Two-Temperature Principle for Evaluating Electrothermal Performance of GaN HEMTs. **Applied Physics Letters**, 2024, 124(4): 042107.

## ➤ 专利及软件著作权4项

1. 一种基于声子蒙特卡洛模拟的热仿真方法及相关组件 (202410141059. 6). 曹炳阳, **沈扬**.
2. 晶体管自热效应仿真方法、装置及电子设备 (202410141055. 8). 曹炳阳, 唐正来, **沈扬**.
3. 一种氮化镓芯片的热仿真及设计系统. 曹炳阳, **沈扬**, 徐向华.
4. 功率芯片的跨尺度热仿真与热设计系统 (2024SR0339357). 曹炳阳, **沈扬**, 徐向华.

# 现有研究成果

## ➤ 参加国际国内会议5次（获奖3次）

1. **Shen Y**, Chen X S, Hua Y C, Chen X S, Wei L, Cao B Y. Influence of Bias-Dependent Heat Generation on Non-Fourier Thermal Spreading Process in GaN HEMTs. **17th International Heat Transfer Conference**, Cape Town, South Africa, August 14-18, 2023. **(Best Paper Award)**
2. **沈阳**, Chen X S, 华钰超, Wei L, 曹炳阳. 氮化镓晶体管中非傅里叶热扩展的偏置依赖性研究. **中国工程热物理年会传热传质学术会议**, 武汉, 2022. **(王补宣-过增元青年优秀论文二等奖)**
3. **沈阳**, 刘源斌, 曹炳阳. 超临界RP-3航空煤油的热物性: 广义对应态法则和分子动力学模拟研究. **中国航空学会第二十一届燃烧和传热传质会议**, 兰州, 2021. **(优秀论文奖)**

谢谢各位老师！

