

Численное моделирование переноса заряда в полупроводниках

А.С. ИБРАГИМОВА

Рубцовский институт (филиал) Алтайского государственного университета
e-mail: ibragimova@ngs.ru

В данной работе предлагаются численные алгоритмы для нахождения стационарных решений гидродинамических моделей переноса заряда в полупроводниках.

К настоящему моменту существует достаточно много математических моделей, описывающих с той или иной степенью достоверности физические явления в полупроводниковых приборах. Актуальность конструирования подобных моделей не вызывает сомнений, ведь на сегодняшний день полупроводниковые устройства являются неотъемлемой частью многих электронных приборов.

В данной работе рассматриваем задачу о баллистическом диоде и задачи, описывающие движение электронов в 2D кремниевых транзисторах MESFET (metal semiconductor field effect transistor) и MOSFET (metal oxide semiconductor field effect transistor). В качестве математической модели взята недавно предложенная гидродинамическая модель переноса заряда в полупроводниках [1, 2]. Модель представляет из себя квазилинейную систему уравнений, записанных в форме законов сохранения. Эти законы сохранения получены из системы моментных соотношений для уравнения переноса Больцмана путем использования определенной процедуры замыкания.

1. Рассматриваемая модель переноса заряда в двумерном случае в безразмерном виде записывается так [3]:

$$\left. \begin{aligned} R_t + \operatorname{div} \mathbf{J} &= 0, \\ \mathbf{J}_t + \nabla \left(\frac{2}{3} RE \right) &= R\mathbf{Q} + c_{11}\mathbf{J} + c_{12}\mathbf{I}, \\ (RE)_t + \operatorname{div} \mathbf{I} &= (\mathbf{J}, \mathbf{Q}) + cP, \\ \mathbf{I}_t + \nabla \left(\frac{10}{9} RE^2 \right) &= \frac{5}{3} RE\mathbf{Q} + c_{21}\mathbf{J} + c_{22}\mathbf{I}, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$$\Delta\varphi = \varphi_{xx} + \varphi_{yy} = \beta(R - \rho). \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{J} = Ru$, $\mathbf{I} = R\mathbf{q}$, $P = R\left(\frac{2}{3}E - 1\right)$, R – электронная плотность, E – энергия электронов, $\mathbf{u} = (u^{(x)}, u^{(y)})$ – вектор скорости электронов, $\mathbf{q} = (q^{(x)}, q^{(y)})$ – поток энергии, $\mathbf{Q} = \nabla\varphi = (\varphi_x, \varphi_y)$, $\varphi = \varphi(t, x, y)$ – электрический потенциал, $\rho = \rho(x, y)$ – плотность легирования, $\beta > 0$ – некоторая постоянная, коэффициенты c , c_{11} , c_{12} , c_{21} , c_{22} в системе (1) – гладкие функции от E (их конкретный вид приведен в [3]).

Математическая модель (1), (2) используется нами в этой работе для нахождения стационарных решений, описывающих движение электронов в кремниевом транзисторе MESFET. Подробное описание такого полупроводникового транзистора с электронной

$$\left. \begin{aligned} R_t + J_x &= 0, \\ J_t + \left(\frac{2}{3}RE\right)_x &= RQ + c_{11}J + c_{12}I, \\ (RE)_t + I_x &= JQ + cP, \\ I_t + \left(\frac{10}{9}RE^2\right)_x &= \frac{5}{3}REQ + c_{21}J + c_{22}I, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$\varepsilon\varphi_{xx} = R - \rho. \quad (5)$$

Здесь неизвестные функции $J = Ru$, $I = Rq$, $Q = \varphi_x$, P , R , E , u , q , φ переменных t , x имеют тот же физический смысл, что и в двумерном случае, $\rho = \rho(x)$ – плотность легирования (заданная функция на отрезке $[0,1]$), ε – некоторая постоянная.

Сформулируем для системы (4), (5) известную в физике полупроводников задачу о баллистическом диоде. Это одномерная задача, описывающая полупроводниковый прибор, разделенный на три части. Первая и третья области представлены высоколегированным материалом, поэтому они называются n^+ областями. В средней же части (в канале) – зона низкой концентрации легирования (так называемая n – область). Поэтому будем рассматривать в качестве характерных величин L и N^+ соответственно ширину $n^+ - n - n^+$ канала и плотность легирования n^+ – зоны. Тогда безразмерная плотность легирования ρ такова, что $1 \geq \rho(x) \geq \delta > 0$, $x \in [0, 1]$. Типичный сглаженный профиль функции $\rho(x)$ изображен на Рис.2.

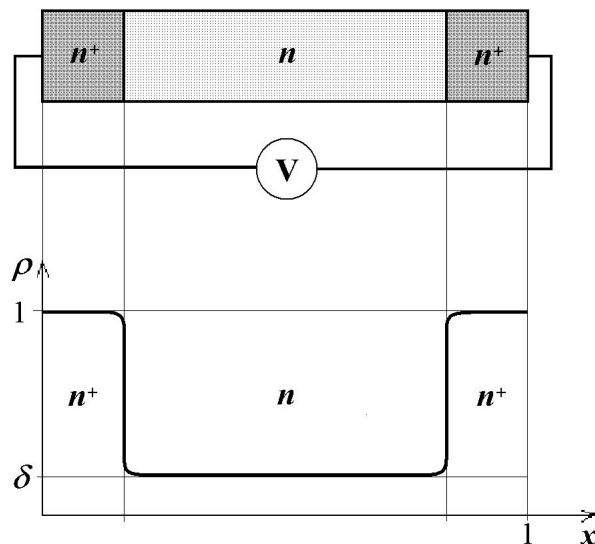


Рис. 2. Схематическое представление $n^+ - n - n^+$ баллистического диода

Для системы (4), (5) зададим граничные условия при $x = 0, 1$, $t > 0$ соответствующие

задаче о баллистическом диоде:

$$\left. \begin{aligned} R(t, 0) = R(t, 1) = 1, \\ E(t, 0) = E(t, 1) = \frac{3}{2}, \\ \varphi(t, 0) = 0, \varphi(t, 1) = B. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где B – напряжение смещения. Кроме того, при $t = 0$ необходимо задать начальные условия.

3. Гидродинамическая модель (1), (2) используется для нахождения стационарных решений, описывающих движение электронов в 2D кремниевом транзисторе MOSFET. Подробное описание такого полупроводникового транзистора с электронной проводимостью приведено в [4]. Характерной особенностью транзистора MOSFET является наличие наноканала из оксида кремния. Схематическое изображение транзистора MOSFET в безразмерных переменных x, y приведено на Рис.3.

Поскольку перенос заряда в наноканале Ω_G отсутствует, то в области Ω_G электрический потенциал $\Phi = \Phi(t, x, y)$ удовлетворяет уравнению Лапласа:

$$\Delta \Phi_{x,y} = \Phi_{xx} + \Phi_{yy} = 0. \quad (7)$$

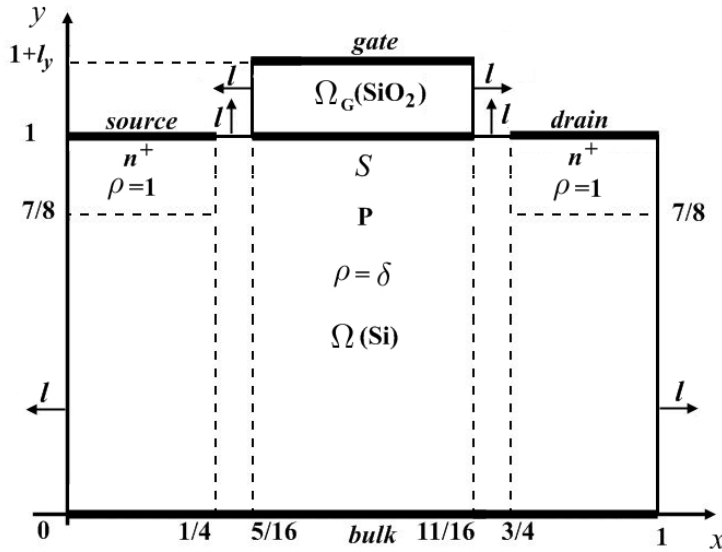


Рис. 3. Схематическое представление 2D кремниевого транзистора MOSFET

Выставим для (1), (2), (7) граничные условия:

$$\varphi = \begin{cases} 0 \text{ при } y = 1, 0 \leq x \leq \frac{1}{4} \text{ (source),} \\ D \text{ при } y = 1, \frac{3}{4} \leq x \leq 1 \text{ (drain),} \\ B \text{ при } y = 0, 0 \leq x \leq 1 \text{ (bulk);} \end{cases} \quad (8)$$

$$\Phi = G \text{ при } y = 1 + l_y, \frac{5}{16} \leq x \leq \frac{11}{16} \text{ (gate),} \quad (9)$$

$$(\mathbf{1}, \nabla \varphi) = 0 \text{ на } \Gamma_l, \quad (10a)$$

$$(\mathbf{1}, \nabla \Phi) = 0 \text{ на } \Gamma_l^{(G)}, \quad (10b)$$

$$\frac{1}{3} \Phi_y = \varphi_y, \quad \Phi = \varphi \text{ на } S, \quad (11)$$

$$\left. \begin{aligned} R &= \begin{cases} 1 \text{ при } y = 1, \left(0 \leq x \leq \frac{1}{4}\right) \cup \left(\frac{3}{4} \leq x \leq 1\right), \\ 0 \text{ при } y = 0, 0 \leq x \leq 1; \end{cases} \\ \sigma &= \begin{cases} 0 \text{ при } y = 1, \left(0 \leq x \leq \frac{1}{4}\right) \cup \left(\frac{3}{4} \leq x \leq 1\right), \\ 0 \text{ при } y = 0, 0 \leq x \leq 1; \end{cases} \\ (\mathbf{1}, \nabla R) &= (\mathbf{1}, \nabla \sigma) = 0 \text{ на } \Gamma_l, \\ \sigma_y &= 0, \quad R_y = \frac{R}{1 + \sigma} \varphi_y \text{ на } S. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Здесь $\Omega = \{(x, y) : 0 < x, y < 1\}$, $\Omega_G = \{(x, y) : \frac{5}{16} < x < \frac{11}{16}, 1 < y < 1 + l_y\}$,
 $S = \{(x, y) : y = 1, \frac{5}{16} < x < \frac{11}{16}\}$, $\rho = \rho(x, y) = \begin{cases} 1, & (x, y) \in \bar{\Omega}_+, \\ \delta (= -10^{-3}), & (x, y) \in \bar{\Omega} \setminus \bar{\Omega}_+, \end{cases}$
 $\Omega_+ = \{(x, y) : \frac{7}{8} < y < 1, \left(0 < x < \frac{1}{4}\right) \cup \left(\frac{3}{4} < x < 1\right)\}$, $\Gamma_l = \{(x, y) : x = 0 \cup x = 1, 0 < y < 1; y = 1, \left(\frac{1}{4} < x \leq \frac{5}{16}\right) \cup \left(\frac{11}{16} \leq x < \frac{3}{4}\right)\}$, $\Gamma_l^{(G)} = \{(x, y) : x = \frac{5}{16} \cup x = \frac{11}{16}, 1 < y < 1 + l_y\}$, D, G, B – константы.

Полученные результаты

1. Разработан и теоретически обоснован новый оригинальный эффективный вычислительный алгоритм решения модельной смешанной краевой задачи для уравнения Пуассона [5]. В основу предлагаемого алгоритма положена идея классического метода прямых и метод установления. При использовании метода установления предлагается два способа регуляризации (параболическая и Соболевская) исходной стационарной модели. Новизна работы заключается в том, что для нахождения численного решения краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений используется метод сплайн-функций.

2. Получены стационарные решения двумерной задачи (MESFET) на основе предложенного вычислительного алгоритма для модельной задачи [6, 7].

3. Предложено несколько подходов нахождения приближенных решений в задаче о баллистическом диоде [8]: сведение задачи к интегральным уравнениям, использование техники сплайн-функций и схемы предиктор-корректор, применение метода ортогональной прогонки.

4. С помощью вычислительных экспериментов обоснован метод сведения краевой задачи (2), (7), (8 - 11) об определении электрического потенциала в области $\Omega \cup \Omega_G$ к задаче для нахождения потенциала только в области Ω [9]. С этой целью, краевая

задача для потенциала доопределяется, т.е. на множестве S ставится некоторое краевое условие для функции φ . Получены нулевое и первое приближения:

$$\varphi^0(x, 1) + 3l_y \varphi_y^0(x, 1) = G, \quad (x, 1) \in S, \quad (13a)$$

$$\varphi^{(1)}(x, 1) + 3l_y \varphi_y^{(1)}(x, 1) = G - l_y^3 \varphi_{yxx}^{(0)}(x, 1), \quad (x, 1) \in S. \quad (13b)$$

Правомерность такой подмены исходной краевой задачи проверяется путем многочисленных вычислительных экспериментов. Сравнение найденных приближенных решений исходной краевой задачи с результатами вычислений нулевого и первого приближений дает полную уверенность в правильности идеи о замене задачи (2), (7), (8-11) задачами (2), (8), (10a), (13a) (или (13b)).

Расчеты проводились при разных значениях параметров и они показали, что предложенный нами в [6,7] алгоритм сходится в десятки раз быстрее, чем алгоритм продольно-поперечной прогонки.

5. Получены стационарные решения двумерной задачи (MOSFET) на основе предложенного вычислительного алгоритма в [6,7] и с помощью метода продольно-поперечной прогонки [9].

Полученные результаты носят как теоретический, так и вычислительный характер. Данная работа представляет интерес для специалистов в области вычислительной математики и может быть использована для моделирования физических процессов в полупроводниковых устройствах.

Список литературы

- [1] ANILE A.M. , ROMANO V. Non parabolic band transport in semiconductors: closure of the moment equations // Cont. Mech. Thermodyn. 1999. Vol. 11. P. 307–325.
- [2] ROMANO V. Non parabolic band transport in semiconductors: closure of the production terms in the moment equations // Cont. Mech. Thermodyn. 2000. Vol. 12. P. 31–51.
- [3] ROMANO V. 2D Simulation of a Silicon MESFET with a Nonparabolic Hydrodynamical Model Based on the Maximum Entropy Principle // J. Comp. Phys. 2002. Vol. 176. P. 70–92.
- [4] ROMANO V. 2D Numerical Simulation of the MEP Energy-Transport Model with a Finite Difference Scheme // J. Comp. Phys. 2007. Vol. 221. P. 439–468.
- [5] БЛОХИН А.М., ИБРАГИМОВА А.С., КРАСНИКОВ Н.Ю. Об одном варианте метода прямых для уравнения Пуассона // Вычислительные технологии. 2007. Т.12, №2. С. 33–42.
- [6] БЛОХИН А.М., ИБРАГИМОВА А.С., СЕМИСАЛОВ Б.В. Конструирование вычислительного алгоритма для системы моментных уравнений, описывающих перенос заряда в полупроводниках // Математическое моделирование. 2009. Т. 21, № 4. С.15–34.
- [7] БЛОХИН А.М., ИБРАГИМОВА А.С. Numerical method for 2D Simulation of a Silicon MESFET with a Hydrodynamical Model Based on the Maximum Entropy Principle // SIAM J.Sci. Comput. 2009. Vol. 31, Issue 3. P. 2015–2046.
- [8] БЛОХИН А.М., ИБРАГИМОВА А.С. 1D Numerical Simulation of the MEP Mathematical Model in ballistic diode problem // Journal of Kinetic and Related Models. 2009. Vol. 2, № 1. P. 81–107.
- [9] БЛОХИН А.М., ИБРАГИМОВА А.С. К вопросу о вычислении электрического потенциала для 2D кремниевого транзистора с наноканалом из оксида кремния // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, № 9. С.79–94.