

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Николаева, В. И. Рыжий, Б. Н. Четверушкин, Метод расчета двумерных полупроводниковых структур в квазигидродинамическом приближении, *Докл. АН СССР*, 1988, том 298, номер 6, 1367–1371

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.84

10 декабря 2024 г., 15:36:02



шения справедливо для уравнения Смолуховского с непрерывно изменяющимися массами частиц, корректность которого в интегральной форме установлена в [5].

В заключение хочу выразить глубокую признательность за обсуждение результатов А.В. Бобылеву, В.А. Тупчиеву, Б.Л. Рождественскому, С.Н. Кружкову.

Обнинский институт атомной энергетики

Поступило
11 II 1987

ЛИТЕРАТУРА

1. Карлеман Т. Математические задачи кинетической теории газов. М.: ИЛ, 1960. 120 с.
2. Волощук В.М., Седунов Ю.С. Процессы коагуляции в дисперсных системах. Л.: Гидрометеоиздат, 1975. 320 с.
3. Галкин В.А. — Метеорол. и гидрол., 1983, № 12, с. 11–19.
4. Галкин В.А. — Там же, 1984, № 5, с. 33–39.
5. Галкин В.А. — ДАН, 1985, т. 285, № 5, с. 1087–1091.

УДК 519.6:621.3

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

В.А. НИКОЛАЕВА, В.И. РЫЖИЙ, Б.Н. ЧЕТВЕРУШКИН

МЕТОД РАСЧЕТА ДВУМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР В КВАЗИГИДРОДИНАМИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

(Представлено академиком А.А. Самарским 9 XII 1986)

В последнее время для математического моделирования плотной электронно-дырочной (электронной) плазмы в полупроводниковых структурах наряду с традиционной дрейфово-диффузионной моделью (ДДМ) [1–3] достаточно плодотворно стал использоваться квазигидродинамический подход [4–9]. Привлечение квазигидродинамической модели (КГМ) вместо более простого дрейфово-диффузионного описания связано с необходимостью моделирования процессов в элементах субмикронных размеров, в особенности элементов интегральных схем на основе материалов A_3B_5 . В таких субмикронных элементах электронно-дырочная плазма существенно неравновесна, а ее параметры (концентрация, средняя направленная скорость и средняя энергия) связаны с напряженностью электрического поля не локальным образом, т.е. ДДМ становится некорректной [10].

В настоящей работе описан метод численного решения пространственно двумерной системы уравнений КГМ с учетом самосогласованного поля в достаточно общей математической постановке для моделирования нестационарных электронных процессов в полупроводниковых структурах. Математическое моделирование на основе КГМ сопряжено с серьезными вычислительными трудностями, решение которых связано с ключевыми проблемами прикладной математики [11]. В работе предлагается полуневная разностная схема совместного решения уравнения Пуассона для потенциала электрического поля с уравнениями непрерывности и изменения энергии. Предложенный алгоритм расчета может быть успешно использован для преодоления подобной вычислительной проблемы при решении ДДМ, в рамках которой опыт математического моделирования имеет почти 20-летнюю историю (см. библиографию в [1–3]).

1. Для описания электронной плазмы (ЭП) используется система, состоящая из уравнения непрерывности для концентрации электронов n , уравнения для плот-

ности энергии ЭП ϵ и уравнения Пуассона для потенциала самосогласованного электрического поля φ :

$$(1) \quad \frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j} = R,$$

$$(2) \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \operatorname{div} Q = -\mathbf{j} \operatorname{grad} \varphi + P,$$

$$(3) \quad \Delta \varphi = \frac{4\pi e}{\kappa} (n - N).$$

Здесь e — заряд электрона ($e = |e|$), κ — диэлектрическая проницаемость решетки, N — распределение ионизованных примесей (доноров) в структуре, \mathbf{j} — плотность электронного тока, Q — плотность потока энергии, члены R и P описывают процессы рекомбинации (генерации) электронов и процессы энергетической релаксации за счет взаимодействия электронов с фононами.

Будем считать, что межэлектронные столкновения обеспечивают не только максвеллизацию электронов, принадлежащих отдельным долинам, но и приводят к установлению междолинного баланса, определяемого единой эффективной температурой T .

Если энергетический спектр электронов каждой долины изотропен, то, ограничиваясь рассмотрением невырожденной ЭП, а также пренебрегая генерационно-рекомбинационными процессами, имеем

$$(4) \quad \epsilon = \frac{3}{2} nT,$$

$$(5) \quad \mathbf{j} = -en\mu \operatorname{grad} \varphi + \operatorname{grad} (Tn\mu),$$

$$(6) \quad Q = -\left(\frac{5}{2} + \xi\right) Tn\mu \operatorname{grad} \varphi - \operatorname{grad} \left[\frac{5/2 + \xi}{e} T^2 n\mu \right],$$

$$(7) \quad R = 0, \quad P = \frac{n(T_1 - T)}{\tau_e}.$$

Здесь μ — эффективная подвижность электронов, которую для определенности будем полагать

$$(8) \quad \mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_1} \right)^q \frac{1}{1 + Re^{-\Delta/T}}$$

для материалов типа GaAs и $\mu = \mu_0 (T/T_1)^q$ для материалов типа Si; T_1 — температура решетки. Для обоих типов материалов время энергетической релаксации имеет вид $\tau_e = \tau_{e_0} (T/T_1)^s$. Здесь q и s — числа, определяемые доминирующими механизмами релаксации импульса и энергии. Величину ξ будем считать не зависящей от T . Наборы чисел q , s и ξ для разных материалов, вообще говоря, различны (см. подробнее [12]).

Граничные условия к уравнениям (1)–(7), естественно, зависят от типа структуры. Мы будем для определенности рассматривать полевой транзистор с затвором Шоттки (ПТШ).

Как будет видно из дальнейшего, предлагаемый алгоритм обладает достаточной общностью и не связан жестким образом с конкретным видом коэффициента подвижности μ , времени релаксации энергии τ_e , а также с видом граничных и начальных условий.

2. Остановимся сначала на вопросе об аппроксимации уравнений (1)–(7). Следует отметить, что использование явной разностной схемы, как это делается в

[9], здесь нецелесообразно, поскольку из-за соображений устойчивости возникает жесткое ограничение на шаг по времени.

Уравнения непрерывности (1) и изменения энергии (2) аппроксимируются чисто неявной экспоненциальной схемой [12], аналогичной схеме Шарфеттера—Гуммеля для уравнений непрерывности ДДМ [3]. Достоинством экспоненциальной схемы является то, что она монотонна, в отличие от обычной центрально-разностной аппроксимации [13]. Это означает, что для любой функции φ разностные аналоги уравнений (1), (2) дают положительное (неотрицательное) решение $n(x, z, t) \geq 0$, $T(x, z, t) > 0$ независимо от дискретизации по пространству, т.е. эта схема не требует достаточно подробной сетки.

Перейдем теперь к вопросу об аппроксимации уравнения Пуассона (3). Простым методом решения нестационарных задач (это относится и к ДДМ) является полунеявный метод, в котором решение задачи на $l + 1$ слое определяется следующим образом: 1) из уравнения Пуассона, в котором правая часть считается известной с предыдущего l -го временного слоя, находится φ^{l+1} ; 2) с этим значением потенциала φ^{l+1} по неявной схеме решаются уравнения (1), (2) для определения n^{l+1} , T^{l+1} (или уравнения непрерывности для ДДМ).

Однако величина шага по времени, обеспечивающая устойчивый счет, сильно зависит от уровня легирования N . При больших N она становится столь малой, что данный метод, как и чисто явные схемы, практически непригоден для расчетов на современных ЭВМ. Этим же недостатком обладает и неявный метод Гуммеля [3], основанный на попеременном итерировании разностного уравнения Пуассона и уравнений непрерывности, широко используемый при решении ДДМ.

В данной работе для совместного решения уравнений квазигидродинамики (1), (2) и уравнения Пуассона (3) предлагается использовать другой подход, опирающийся на методы решения уравнений энергии и диффузии излучения, применяемые в задачах динамики излучающего газа [14]. Этот же метод практически без изменений можно применять и для решения уравнений ДДМ.

Уравнение Пуассона мы заменяем его разностным аналогом вида

$$(9) \quad \varphi_{\bar{x}\hat{x}}^{l+1} + \varphi_{\bar{z}\hat{z}}^{l+1} = n_{ij}^l + \tau \{ [D(T^l)n_{\bar{x}\hat{x}}^l + [D(T^l)n^l]_{\bar{z}\hat{z}} - (a^l \varphi_{\bar{x}}^{l+1})_{\hat{x}} - (b^l \varphi_{\bar{z}}^{l+1})_{\hat{z}}] - N_{ij}.$$

Уравнение (9) получено следующим образом. В разностной аппроксимации уравнения Пуассона, записанной на $l + 1$ слое, $\varphi_{\bar{x}\hat{x}}^{l+1} + \varphi_{\bar{z}\hat{z}}^{l+1} = n^{l+1} - N$ представим n^{l+1} как $n^l + \tau(n^{l+1} - n^l)/\tau$, а разностную производную n по времени подставим из полунеявной схемы для уравнения непрерывности:

$$(10) \quad \frac{n^{l+1} - n^l}{\tau} = [D(T^l)n^l]_{\bar{x}\hat{x}} + [D(T^l)n^l]_{\bar{z}\hat{z}} - (a^l \varphi_{\bar{x}}^{l+1})_{\hat{x}} - (b^l \varphi_{\bar{z}}^{l+1})_{\hat{z}},$$

где $a_{ij} = 0,5(n_{i-1j}\mu(T_{i-1j}) + n_{ij}\mu(T_{ij}))$, $b_{ij} = 0,5(n_{ij-1}\mu(T_{ij-1}) + n_{ij}\mu(T_{ij}))$. В результате получим уравнение (9). Из него находим φ^{l+1} , считая n^l , T^l известными с предыдущего временного слоя.

Вопрос об устойчивости предложенной полунеявной схемы представляет собой нетривиальную задачу из-за сложного нелинейного характера этой системы. В линейном случае для близкой неявной схемы показана абсолютная устойчивость [14]. Проведенные расчеты различных задач по схеме (9) показали, что ограничений на шаг по времени, связанных с устойчивостью счета, для этой схемы нет. Отметим, что в просчитанных вариантах выбирали различные уровни легирования структуры от $N = 10^{16}$ до 10^{19} см⁻³.

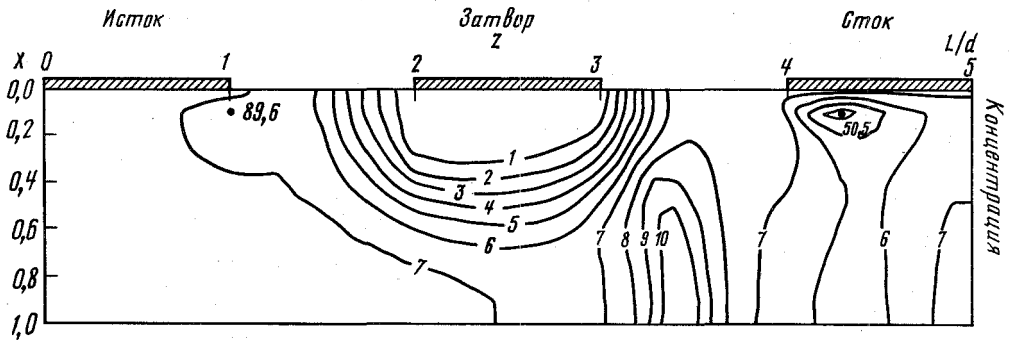


Рис. 1. Линии постоянной концентрации n , 10^{16} см $^{-3}$: 0,41 (1); 0,82 (2); 1,22 (3); 1,63 (4); 2,05 (5); 2,46 (6); 2,85 (7); 3,27 (8); 3,66 (9); 4,08 (10)

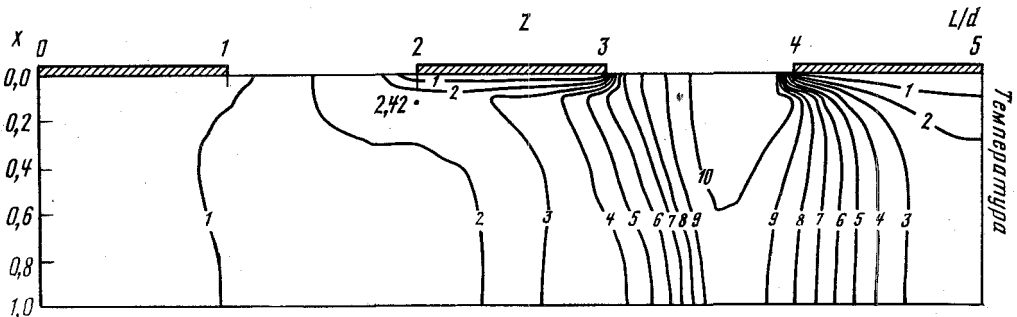


Рис. 2. Изотермы T/T_1 : 1,49 (1); 1,99 (2); 2,49 (3); 2,99 (4); 3,49 (5); 3,99 (6); 4,49 (7); 4,98 (8); 5,48 (9); 5,98 (10)

Остановимся теперь на реализации предложенной полуявной схемы. Итак, на $l+1$ временном слое для определения ϕ^{l+1} решаем линейное разностное пяти-точечное уравнение (9) с соответствующими граничными условиями при помощи какого-либо итерационного метода. В данной работе с этой целью использовался метод $\alpha - \beta$ -итераций [15].

Далее с найденным ϕ^{l+1} переходим к решению чисто неявной схемы, аппроксимирующей уравнения непрерывности и изменения энергии для определения n^{l+1} и T^{l+1} . Здесь мы сталкиваемся с проблемой решения двух сильно нелинейных уравнений для n и T в двумерной геометрии. В работах [6, 7] разработан алгоритм совместного решения уравнений непрерывности и изменения энергии для квазинейтральной электронно-дырочной плазмы. Воспользуемся этой методикой и для рассматриваемой задачи.

Систему разностных уравнений для n и T с соответствующими граничными условиями будем линеаризовать при помощи итерационного метода Ньютона. На каждой k -й итерации по Ньютону система для нахождения $\delta n^{(k+1)} = n^{(k+1)} - n^{(k)}$, $\delta T^{(k+1)} = T^{(k+1)} - T^{(k)}$ с линейными по каждой переменной, но связанными между собой через переменные уравнениями решается при помощи матричной модификации $\alpha - \beta$ -итерационного алгоритма [15].

Достоинством описанной методики является высокая скорость сходимости внешнего итерационного процесса по Ньютону (при этом всегда есть хорошее начальное приближение — решение с предыдущего временного слоя), а также отсутствие внутреннего итерационного процесса между двумя линеаризованными, но связанными через переменные уравнениями для $\delta n^{(k+1)}$ и $\delta T^{(k+1)}$.

3. Описанный алгоритм использовал при расчете структур на основе GaAs и Si. Анализировалась эволюция во времени распределений концентрации, эффективной температуры и потенциала при расчете переходного процесса. Приведем пример одного расчетного варианта. На рис. 1, 2 изображены линии постоянной концентрации и температуры в фиксированный момент времени $t = 0,05 \cdot 10^{-12}$ с для GaAs-ПТШ с параметрами (см., например, [2]): $d = 0,25$ мкм, $L = 1,25$ мкм, $\kappa = 12$, $N = 3 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$, $\mu_0 = 10^4$ см 2 /В · с, $\tau_{\epsilon_0} = 10^{-12}$ с, $R = 94$, $\Delta/T_1 = 13,2$; $T_1 = 300$ К, $q = 0$, $s = 0$, $\xi = 0$, $\varphi_n = 0$, $\varphi_z = -0,5$ В, $\varphi_c = 0,8$ В (для истока, затвора и стока соответственно).

В результате проведенного двумерного моделирования ПТШ удалось выявить ряд эффектов, которые невозможно получить в рамках ДДМ. В частности, происходит сильный разогрев ЭП в области с наибольшей разностью потенциалов между затвором и стоком (рис. 2). Следует обратить также внимание на образование домена концентрации под стоком, который нужно рассматривать как проявление нелинейных эффектов, присущих данной задаче (рис. 1). Наибольший разогрев ЭП происходит именно в месте образования домена.

Анализ найденных распределений n , T и φ для различных расчетных вариантов указывает на существенность эффектов неравновесности и нелокальности в ЭП полупроводниковых структур субмикронных размеров.

Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша
Академии наук СССР, Москва

Поступило
30 XII 1986

ЛИТЕРАТУРА

1. Носов Ю.Р., Петросяни К.О., Шилин В.А. Математические модели элементов интегральной электроники. М.: Сов. радио, 1976. 304 с.
2. Валиев К.А., Пашинцев Ю.И., Петров Г.В. Применение контакта металл-полупроводник в электронике. М.: Радио и связь, 1981. 304 с.
3. Польский Б.С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. Рига: Зинатне, 1986. 168 с.
4. Гарбер Г.З. — Электронная техника. Полупроводниковые приборы. Сер. 2, 1985, вып. 2 (175), с. 103–107.
5. Абачев М.К., Бутакова Н.Г., Zubov A.B., Орликовский А.А. — Микроэлектроника, 1986, т. 15, вып. 5, с. 398–401.
6. Николаева В.А., Рыжий В.И., Четверушкин Б.Н. — ДАН, 1986, т. 288, № 6, с. 1342–1346.
7. Николаева В.А., Рыжий В.И., Четверушкин Б.Н. — ИФЖ, 1986, т. 51, вып. 3, с. 492–501.
8. Николаева В.А., Рыжий В.И., Четверушкин Б.Н. — ИФЖ, 1986, т. 51, вып. 4, с. 645–650.
9. Widiger D.J., Kizialli I.C., Hess K., Coleman J.J. — IEEE Trans. Electr. Dev., 1985, vol. ED-32, № 6, p. 1092–1103.
10. Баннов Н.А., Рыжий В.И. — Электрон. пром-сть, 1984, вып. 9 (137), с. 3–8.
11. Самарский А.А., Четверушкин Б.Н. — Вестн. МГУ. Сер. 15, 1986, № 3, с. 9–20.
12. Николаева В.А., Рыжий В.И., Четверушкин Б.Н. Препринт ИПМ АН СССР, 1986, № 190. 28 с.
13. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
14. Садовников А.Д., Черняев А.В. — Дифф. уравн., 1987, т. 23, № 7, с. 1262–1268.
15. Четверушкин Б.Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. М.: Наука, 1985. 304 с.