

УДК 621.382

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧ КИНЕТИКИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Д. В. Опасин, Б. Н. Шамраев

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, Саров

В докладе представлены результаты работы по созданию программы, позволяющей моделировать функционирование полупроводниковых структур в условиях воздействия на них ионизирующего излучения в двумерной постановке.

Рассмотрены разные виды записи уравнений непрерывности для электронов и дырок и соответствующие разностные схемы для их решения. Приведены результаты тестирования схем на одномерных расчетах. Рассмотрена разностная схема для совместного решения системы нелинейных уравнений: уравнения Пуассона и уравнений непрерывности электронов и дырок для решения двумерных задач.

Рассмотрены проблемы сходимости итераций метода Ньютона, применяемого при решении системы нелинейных уравнений.

Тестирование программы проводилось моделированием режимов работы идеального МДП-транзистора (металл–диэлектрик–полупроводник).

Ключевые слова: статистика носителей заряда, дрейф, диффузия, система нелинейных уравнений, метод Ньютона.

Кратко рассмотрим структуру идеального МДП-транзистора, приведенную на рис. 1, которая типична для двумерных задач.

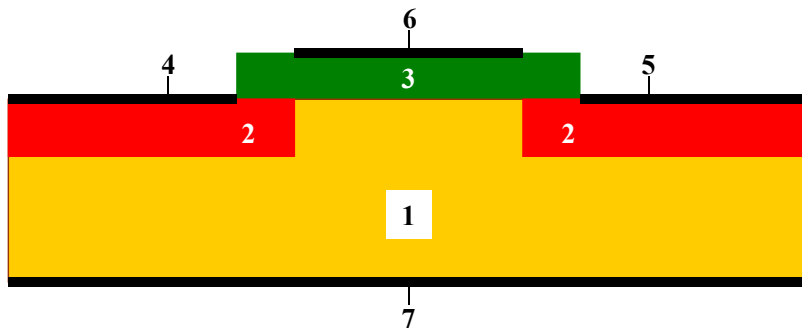


Рис. 1. Структура идеального МДП-транзистора

На рис. 1 цифрами 1 и 2 отмечены области полупроводника (кремния), легированные акцепторами с концентрацией $N_A = 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Области 2 полупроводника дополнительно легированы донорами с концентрацией $N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Примеси предполагаются полностью ионизированными. Диэлектрическая проницаемость кремния $\epsilon = 11,8$. Сверху к полупроводнику примыкают омические контакты: слева 4 – омический контакт «исток», справа 5 – омический контакт «сток». Когда между контактами «исток», «сток» приложена разность потенциалов, в полупроводнике течет электрический ток от «истока» к «стоку».

Над полупроводником расположен слой 3 идеального диэлектрика SiO_2 с диэлектрической проницаемостью $\epsilon = 4$. К диэлектрику сверху примыкает контакт 6 «затвор».

Снизу к полупроводнику примыкает омический контакт «подложка» 7.

Подавая потенциал на затвор, можно управлять работой МДП-транзистора.

При моделировании процессов в полупроводниках обычно используется система дифференциальных уравнений [1 – 6]:

$$\operatorname{div} \vec{E} = -\operatorname{div} \operatorname{grad} \varphi = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} (p - n + \rho^{\text{imp}}), \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{j}_n + S, \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{j}_p + S. \quad (3)$$

Уравнение (1) – уравнение Пуассона для потенциала электрического поля, уравнения (2) и (3) – уравнения непрерывности для электронов и дырок. Здесь φ – электрический потенциал (В); \vec{E} – вектор напряженности электрического поля (В/см); $e = 1,6021765 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд электрона; ε – диэлектрическая проницаемость среды; $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – диэлектрическая постоянная; $e\rho^{\text{imp}}$ – плотность заряда на возбужденных примесях (Кл/см³); n – концентрация электронов (см⁻³); p – концентрация дырок (см⁻³); t – время (с); j_n – плотность потока электронов (см⁻²с⁻¹); j_p – плотность потока дырок (см⁻²с⁻¹); S – член, отвечающий за работу источников пар электронов и дырок (см⁻³с⁻¹).

Плотности потоков электронов и дырок в диффузионно-дрейфовом приближении описываются выражениями

$$\begin{aligned} \vec{j}_n &= \bar{v}_n n - D_n \operatorname{grad} n, \\ \vec{j}_p &= \bar{v}_p p - D_p \operatorname{grad} p, \end{aligned} \quad (4)$$

где D_n, D_p – коэффициенты диффузии электронов и дырок (см²/с); \bar{v}_n, \bar{v}_p – скорости носителей заряда (см/с) определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \bar{v}_n &= -\mu_n \vec{E}, \\ \bar{v}_p &= \mu_p \vec{E}, \end{aligned}$$

где μ_n, μ_p – подвижности электронов и дырок (см²/В·с).

Концентрации электронов и дырок описываются функциями распределения (5), зависящими от значения электрического потенциала φ и значений квазиуровней ферми ψ_n, ψ_p электронов и дырок [1 – 3]

$$\begin{aligned} n &= n(\tilde{\chi}_C) = N_C F_{1/2}(\tilde{\chi}_C), \\ p &= p(\tilde{\chi}_V) = N_V F_{1/2}(\tilde{\chi}_V). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь N_C, N_V – эффективные плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне (см⁻³); $F_{1/2}$ – интеграл Ферми–Дирака (6) [1 – 6]; величины $\tilde{\chi}_C, \tilde{\chi}_V$ определяются соотношениями (7).

$$F_{1/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{y^{1/2}}{\exp(y-x) + 1} dy. \quad (6)$$

$$\tilde{\chi}_C = -\frac{\chi_C}{kT}, \quad \chi_C = E_C - (\psi_n + \varphi), \quad (7)$$

$$\tilde{\chi}_V = -\frac{\chi_V}{kT}, \quad \chi_V = (\psi_p + \varphi) - E_V.$$

Здесь $k = 8,617343 \cdot 10^{-5}$ эВ/К – постоянная Больцмана; T – температура (К); E_C – нижняя граница зоны проводимости полупроводника (эВ); E_V – верхняя граница валентной зоны. Величины χ_C, χ_V из (7) далее будем называть электрохимическими потенциалами электронов и дырок (эВ).

На рис. 2 приведена диаграмма энергетических зон полупроводника, положение электрохимических потенциалов электронов и дырок в запрещенной зоне. Ширина запрещенной зоны $E_g = E_C - E_V$ (эВ).

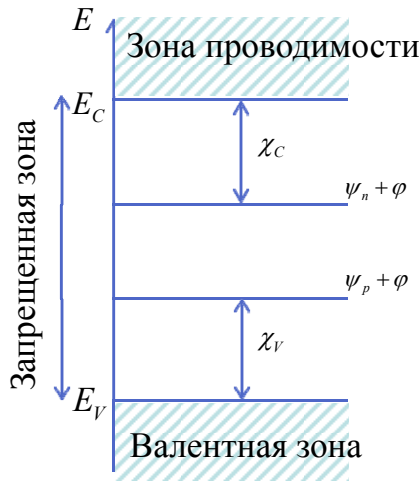


Рис. 2. Схема расположения энергетических зон в полупроводнике

В докладе ограничимся рассмотрением невырожденного полупроводника, когда $\chi_C, \chi_V \geq 5kT$. Для концентраций электронов и дырок используется статистика Больцмана $F_{1/2}(x) = e^{-x}$:

$$n = N_C e^{\frac{1}{kT}(E_C - (\psi_n + \phi))}, \quad p = N_V e^{\frac{1}{kT}((\psi_p + \phi) - E_V)}. \quad (8)$$

В расчетах в качестве начального приближения часто используется равновесное состояние полупроводника, когда квазиуровни Ферми электронов и дырок совпадают. Для полупроводника в равновесном состоянии выполняется соотношение

$$np = n_i^2 = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right),$$

где n_i – собственная концентрация носителей заряда. Равновесные значения концентраций электронов и дырок p_S, n_S и квазиуровня Ферми ψ_S определяются из условия электронейтральности (9)

$$(p_S - n_S) + \rho_S^{\text{imp}} = 0, \quad \rho_S^{\text{imp}} = N_D - N_A. \quad (9)$$

Подставляя соотношения (8), получаем:

$$n_S = \frac{1}{2} \left(\rho_S^{\text{imp}} + \sqrt{(\rho_S^{\text{imp}})^2 + 4n_i^2} \right), \quad p_S = \frac{n_i^2}{n_S}; \quad \psi_S = kT \ln \left(\frac{p_S}{n_i} \right). \quad (10)$$

Подвижности носителей заряда зависят от концентрации примесей, температуры и напряженности электрического поля [6]. В слабых электрических полях зависимость подвижностей от концентраций примесей и температуры определяется соотношением (см. (1.130), (1.131) и табл. 1.4 в [0]):

$$\mu_{\text{Low}}(N_{\text{imp}}, T) = \mu_0(T) + \frac{\mu_1(T)}{1 + N_{\text{imp}}/\mu_2(T)},$$

$$\mu_k(T) = N_k \left(\frac{T}{T_0} \right)^{-\beta_k}, \quad k = 0, 1, 2.$$

Здесь $T_0 = 300 \cdot \text{K}$, N_{imp} – концентрация примесей. Параметры для расчета подвижностей приведены в табл. 1.

Таблица 1

Параметры для расчета подвижностей носителей заряда

	$\frac{N_0}{\text{см}^2/\text{В/с}}$	$\frac{N_1}{\text{см}^2/\text{В/с}}$	$\frac{N_2}{10^{17} \text{ см}^{-3}}$	β_0	β_1	β_2
Электроны	88,0	1252,0	1,432	0,57	2,33	-2,546
Дырки	54,3	407,3	2,670	0,57	2,33	-2,546

Зависимости подвижностей от напряженности поля определяются соотношениями (см. (1.194) в [6]):

$$\mu(E) = \frac{\mu_{\text{Low}}}{\left[1 + \left(\frac{\mu_{\text{Low}} |E|}{v_{\text{sat}}}\right)^\beta\right]^{1/\beta}}, \quad v_{\text{sat}} = a \left(\frac{T}{300}\right)^b,$$

где $a = 10^7$ см/с, $b = -0,87$, $\beta = 2$ для электронов и $a = 8,37 \cdot 10^6$ см/с, $b = -0,52$, $\beta = 1$ для дырок.

Поскольку концентрации электронов и дырок определяются соотношениями (5), плотности потоков (4) при постоянной температуре можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \vec{j}_n &= \bar{v}_n n - D_n \nabla n = \left(\mu_n n - \frac{D_n}{kT} \frac{\partial n}{\partial \tilde{\chi}_C} \right) \nabla \varphi - \frac{D_n}{kT} \frac{\partial n}{\partial \tilde{\chi}_C} \nabla \psi_n, \\ \vec{j}_p &= \bar{v}_p p - D_p \nabla p = \left(\frac{D_p}{kT} \frac{\partial p}{\partial \tilde{\chi}_V} - \mu_p p \right) \nabla \varphi + \frac{D_p}{kT} \frac{\partial p}{\partial \tilde{\chi}_V} \nabla \psi_p. \end{aligned} \quad (11)$$

В равновесном состоянии плотности потоков равны нулю: $j_n = j_p = 0$, $\nabla \psi_n = \nabla \psi_p = 0$. Отсюда получаем соотношения Эйнштейна для коэффициентов диффузии электронов и дырок:

$$D_n = \mu_n kT \frac{n}{\frac{\partial n}{\partial \tilde{\chi}_C}}, \quad D_p = \mu_p kT \frac{p}{\frac{\partial p}{\partial \tilde{\chi}_V}}. \quad (12)$$

Для невырожденного полупроводника $\frac{\partial n}{\partial \tilde{\chi}_C} = n$, $\frac{\partial p}{\partial \tilde{\chi}_V} = p$. Коэффициенты диффузии

$$D_n = \mu_n kT, \quad D_p = \mu_p kT.$$

Уравнения непрерывности для электронов и дырок можно записать тремя способами.

Первый вариант – «классический».

Уравнения непрерывности имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= -\text{div}(\bar{v}_n n - D_n \nabla n), \quad D_n = \mu_n kT, \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\text{div}(\bar{v}_p p - D_p \nabla p), \quad D_p = \mu_p kT. \end{aligned} \quad (13)$$

Второй вариант – дрейф носителей заряда и диффузия электрохимических потенциалов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= -\text{div}(\bar{v}_n n - \hat{D}_n \nabla \tilde{\chi}_C), \quad \hat{D}_n = \mu_n kT n, \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\text{div}(\bar{v}_p p - \hat{D}_p \nabla \tilde{\chi}_V), \quad \hat{D}_p = \mu_p kT p. \end{aligned} \quad (14)$$

Третий вариант – диффузия квазиуровней Ферми электронов и дырок:

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= -\operatorname{div}(-\bar{D}_n \nabla \psi_n), \quad \bar{D}_n = \mu_n n, \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\operatorname{div}(\bar{D}_p \nabla \psi_p), \quad \bar{D}_p = \mu_p p.\end{aligned}\tag{15}$$

Рассмотрим аппроксимацию дифференциальных уравнений. Двумерные расчеты проводились на ортогональной регулярной сетке. Соприкасаемость соседних областей узел в узел. Основные расчетные величины $n_i, p_i, \rho_i^{\text{imp}}, \varphi_i, \psi_{n_i}, \psi_{p_i}$ определены в центрах ячеек (индекс i – номер рассматриваемой ячейки). Величины $E_{ij}, \mu_{nij}, \mu_{p_{ij}}, D_{n_{ij}}, D_{p_{ij}}$ определены в центрах граней ячеек (индекс j – номер соседней ячейки). Сетка выбирается таким образом, чтобы размеры ячеек не превосходили значения дебаевской длины [1 – 3]:

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0 k T}{e N}},$$

где N – концентрация примесей. Пример сетки приведен на рис. 3.

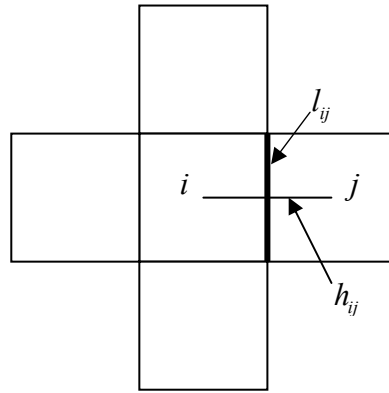


Рис. 3. Пример двумерной сетки

Разностный вид уравнения Пуассона определяется соотношением:

$$\frac{1}{S_i} \sum_j E_{ij} l_{ij} = -\frac{1}{S_i} \sum_j \frac{\varphi_j - \varphi_i}{h_{ij}} l_{ij} = \frac{e}{\varepsilon_i \varepsilon_0} (p - n + \rho^{\text{imp}})_i,\tag{16}$$

где S_i – площадь ячейки; l_{ij} – длина общего ребра соседних ячеек; h_{ij} – расстояние между центрами соседних ячеек (рис. 3).

При решении уравнений непрерывности (13) в первом варианте применяется метод расщепления по процессам: отдельно решаются уравнение дрейфа и уравнение диффузии. Уравнение дрейфа для электронов имеет вид

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\operatorname{div}(v_n n),\tag{17}$$

аппроксимируется разностным уравнением

$$\frac{\bar{n}_i^k - n_i^k}{\Delta t} = -\frac{1}{S_i} \sum_j v_{n_{ij}} n_{ij} \cdot l_{ij},\tag{18}$$

где n_{ij} – концентрация электронов в центре общей грани соседних ячеек, \bar{n}_i^k – концентрация электронов, полученная после решения уравнения дрейфа, Δt – шаг по времени, k – номер шага по времени. При решении уравнения (17) используют коррекцию потоков. Необходимо использовать методы коррекции потоков, которые дают скорректированные значения концентрации на границах ячеек (например, метод Superbee).

Далее решается уравнение диффузии

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\operatorname{div}(-D_n \nabla n),$$

разностный вид которого определяется соотношением

$$\frac{n_i^{k+1} - \bar{n}_i^k}{\Delta t} = \frac{1}{S_i} \sum_j D_{nij} \frac{n_j^{k+1} - n_i^{k+1}}{h_{ij}} l_{ij}. \quad (19)$$

Для дырок аналогичные рассуждения. В равновесном состоянии из условия $j_n = j_p = 0$ и соотношений (11) следует, что должно выполняться условие

$$\mu_n n - \frac{D_n}{kT} \frac{\partial n}{\partial \tilde{\chi}_C} = 0, \quad \frac{D_p}{kT} \frac{\partial p}{\partial \tilde{\chi}_V} - \mu_p p = 0. \quad (20)$$

При решении уравнения дрейфа (18) используются концентрации на границе ячеек, при решении уравнения диффузии (19) участвуют концентрации в центрах ячеек и коэффициенты диффузии не зависят от концентраций. Поэтому при численном решении разностных уравнений (18), (19) не обеспечивается выполнение условий (20). Отсюда появляется существенная погрешность равновесности состояния, зависящая от размера ячеек сетки. Погрешность равновесности будем определять соотношением

$$\max_i \left| \frac{\chi_C + \chi_V}{E_g} - 1 \right| \quad (21)$$

При решении уравнений непрерывности (14) во втором варианте также используется расщепление по процессам. Сначала решается уравнение дрейфа (18) при этом определяются концентрации на границе ячеек. Затем вычисляются коэффициенты диффузии, далее решается уравнение диффузии электрохимического потенциала

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \operatorname{div}(\hat{D}_n \nabla \tilde{\chi}_C) \quad (22)$$

Уравнение (22) нелинейное, решается итерационным методом Ньютона. Разностный вид уравнения определяется соотношением

$$\frac{n_i^m + \left(\frac{\partial n}{\partial \tilde{\chi}_C} \right)_i^m (\tilde{\chi}_{Ci}^{m+1} - \tilde{\chi}_{Ci}^m) - \bar{n}_i^{k+1}}{\Delta t} = \frac{1}{S_i} \sum_j \hat{D}_{nij} \frac{\tilde{\chi}_{Cj}^{m+1} - \tilde{\chi}_{Ci}^{m+1}}{h_{ij}} l_{ij}, \quad (23)$$

где $m=0,1,2,\dots$ – итерации Ньютона, $n_i^{m=0} = \bar{n}_i^{k+1}$ – начальное приближение. Коэффициенты диффузии зависят от концентраций на границах ячеек. В уравнении дрейфа (18) и в коэффициентах диффузии уравнений (14) используются скорректированные значения концентраций электронов и дырок, это обеспечивает выполнение соотношений (20). Равновесное состояние достигается с высокой точностью.

При решении уравнений непрерывности (15) в третьем варианте, уравнение дрейфа (18) не решается. Концентрации электронов и дырок на границе ячеек для коэффициентов диффузии уравнений (15) определяются усреднением концентраций в соседних ячейках. Уравнения (15) нелинейные, решаются итерационным методом Ньютона. Разностный вид уравнения непрерывности для электронов определяется соотношением (для дырок аналогично):

$$\frac{\left(\frac{\partial n}{\partial \tilde{\chi}_C} \right)_i^m (\psi_i^{m+1} - \psi_i^m) - kT(n_i^m - n_i^k)}{\Delta t} = \frac{1}{S_i} \sum_j \bar{D}_{nij} \frac{\psi_{nj}^{m+1} - \psi_{ni}^{m+1}}{h_{ij}} l_{ij},$$

где $n_i^{m=0} = n_i^k$ – начальное приближение.

Здесь тоже используется расщепление: отдельно решается уравнение Пуассона для электрического потенциала, отдельно уравнения непрерывности. На итерациях Ньютона в уравнениях непрерывности значение электрического потенциала не меняется. Это приводит к задержке выхода на равновесное состояние, которое в данном варианте также достигается с высокой точностью.

Все три схемы опробованы на одномерных расчетах. В качестве примера, для иллюстрации вышесказанного, приведем результаты расчета установления равновесного состояния симметричного ступенчатого p-n перехода. Слева доноры, справа акцепторы. Геометрия расчета приведена на рис. 4.

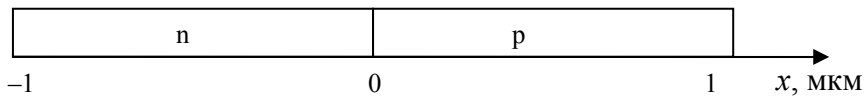


Рис. 4. Геометрия одномерных расчетов

Параметры расчета: $-1 \leq x \leq 1$ мкм, $N_D(x < 0) = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $N_A(x > 0) = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $T = 290 \text{ К}$ ($kT = 0,025 \text{ эВ}$), $L_D = 0,04 \text{ мкм}$. Начальные значения концентраций электронов и дырок определяются локальными равновесными состояниями (соотношения (10)). Возникает скачок значений квазиуровней Ферми на границе между донорами и акцепторами.

Граничные условия – классические омические контакты. Граничные значения концентраций равны начальным значениям концентраций вблизи границы области. Потенциал электрического поля на правом конце равен нулю, потенциал на левом конце соответствует контактной разности U_K (определяется разностью значений уровней Ферми в областях p и n).

На рис. 5 приведены распределения электрического потенциала, полученные в расчетах, проведенным по трем схемам на моменты времени 0,005 (сверху) и 0,015 нс (снизу) соответственно. Для схемы 1 шаг сетки равен 0,005 мкм, для схем 2 и 3 шаг сетки 0,02 мкм.

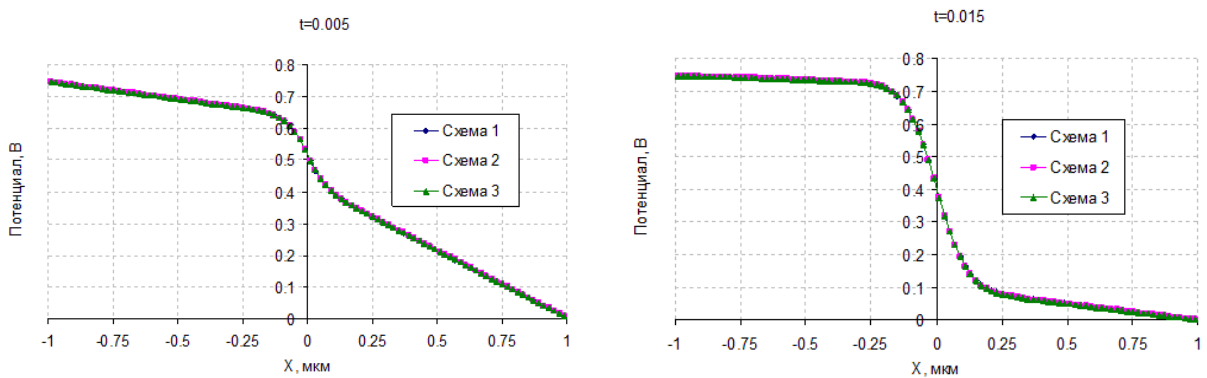


Рис. 5. Распределения электрического потенциала

На рис. 6 приведены распределения концентраций электронов и дырок, полученные в этих расчетах. Различия в значениях концентраций заметны только в логарифмической шкале.

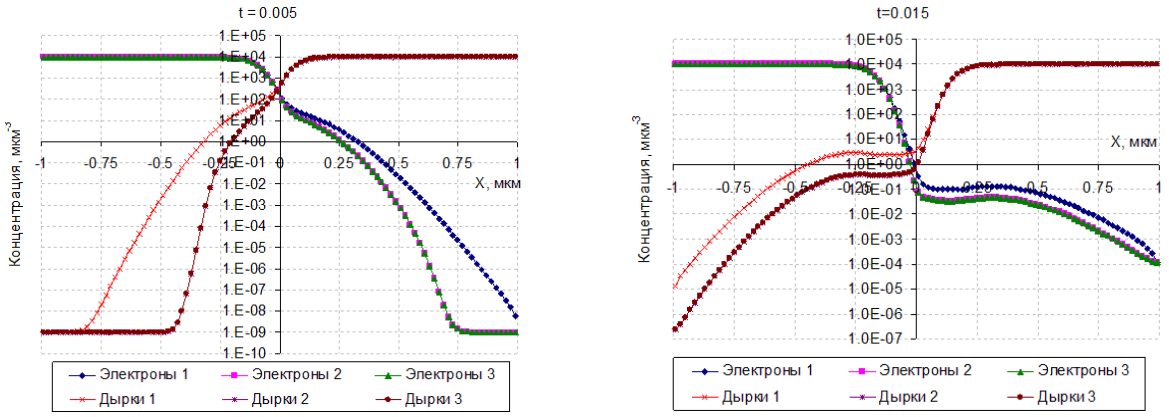


Рис. 6. Распределения концентраций электронов и дырок

На рис. 7 приведены зависимости погрешности равновесности состояния от времени, полученные в этих расчетах.

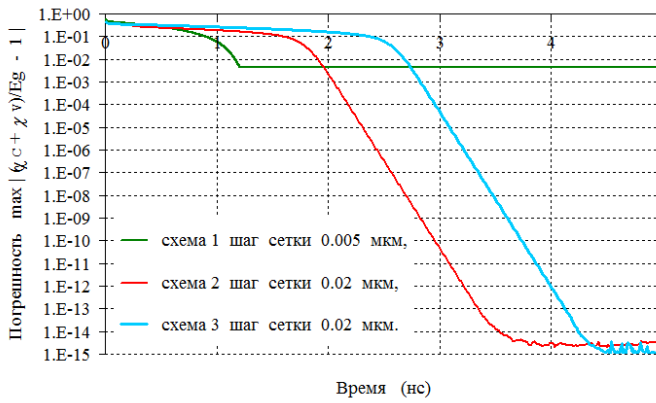


Рис. 7. Зависимости погрешности равновесности состояния от времени в расчетах по схемам 1 – 3

На рис. 5 и 6 видно, что все три схемы решения системы уравнений дают близкие результаты. Решения, полученные по схемам 2 и 3, практически не отличаются друг от друга. Приемлемой точности по установлению равновесного состояния по схеме 1 можно добиться, используя сетки с очень мелким шагом. Данная схема не приемлема для решения многомерных задач. Наилучший результат дает схема 2, но она требует мелкого шага по времени. Ограничение на шаг по времени диктуется схемой решения уравнений дрейфа электронов и дырок. Поэтому особый интерес для решения многомерных задач представляет схема 3, которой мы ограничимся в дальнейшем.

Однако, на рис. 7 видно, что «замораживание» потенциала в схеме 3 приводит к задержке установления равновесного состояния. Этого можно избежать, если отказаться от расщепления и решать совместно уравнение Пуассона (16), уравнение непрерывности электронов (23) и уравнение непрерывности дырок. В этом случае система дифференциальных уравнений (1) – (3) аппроксимируется системой нелинейных разностных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{1}{S_i} \sum_j E_{ij}^m l_{ij} &= -\frac{1}{S_i} \sum_j \frac{\phi_j^m - \phi_i^m}{h_{ij}} l_{ij} = \frac{e}{\epsilon_i \epsilon_0} (p - n + \rho^{\text{imp}})_i^m, \\ \frac{n_i^m - n_i^0}{\Delta t} &= \frac{1}{S_i} \sum_j (\bar{D}_n)_{ij}^{m-1} \frac{\psi_{n_j}^m - \psi_{n_i}^m}{h_{ij}} l_{ij}, \\ \frac{p_i^m - p_i^0}{\Delta t} &= -\frac{1}{S_i} \sum_j (\bar{D}_p)_{ij}^{m-1} \frac{\psi_{p_j}^m - \psi_{p_i}^m}{h_{ij}} l_{ij}. \end{aligned} \tag{24}$$

Здесь $m = 0, 1, 2, \dots$ – номер итерации для верхнего момента времени, $m = 0$ – нижний момент времени. В диэлектрике решается только уравнение Пуассона с нулевой правой частью.

Для решения системы (24) используется метод Ньютона. Концентрации носителей заряда невырожденного полупроводника на итерации m представляются в виде

$$\begin{aligned} n_i^m &= n_i^{m-1} \left(1 + \frac{(\psi_n + \varphi)_i^m - (\psi_n + \varphi)_i^{m-1}}{kT} \right), \\ p_i^m &= p_i^{m-1} \left(1 - \frac{(\psi_p + \varphi)_i^m - (\psi_p + \varphi)_i^{m-1}}{kT} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Подставляя выражения (25) в систему (24), получаем систему линейных уравнений относительно неизвестных величин: $(\psi_n)_i^m$, $(\psi_p)_i^m$, φ_i^m . Результаты одномерных расчетов по этой схеме совпадают с результатами расчетов по схеме 2. Эта схема позволяет в обычных ситуациях повысить шаг по времени.

Далее в докладе будут приведены результаты двумерных расчетов МДП – транзистора. Структура транзистора была приведена на рис. 1. Для данной структуры заданы следующие граничные условия. На свободной поверхности полупроводника нормальная составляющая напряженности электрического поля, плотности потоков электронов и дырок равны нулю. На свободной поверхности диэлектрика нормальная составляющая напряженности электрического поля равна нулю. На границе полупроводника с диэлектриком задано условие непрерывности вектора электрической индукции. На контакте затвор задается значение потенциала. Граничные условия на омических контактах полупроводника подразумевают задание равновесных значений концентраций электронов и дырок, которые соответствуют равновесному значению квазиуровня Ферми (10). Значения равновесных концентраций электронов и дырок определяем из условия электронейтральности (9).

Далее будут приведены результаты двумерных расчетов. Рассмотрим расчет начального состояния транзистора (отсутствует напряжение на контактах).

На затворе задан потенциал $\varphi_3 = 0$ В. На контактах полупроводника $\psi_n = \psi_p = \psi$. На контакте «подложка» $\psi_{II} = 0,173188947$ В, $\varphi_{II} = 0$ В. На контакте «исток» $\psi_{II} = 0,173188947$ В, $\varphi_{II} = \psi_{II} - \psi_{II} = 0,8033073$ В. На контакте «сток» $\psi_C = 0,173188947$ В, $\varphi_C = \psi_C - \psi_{II} = 0,8033073$ В.

Дебаевская длина $L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0 kT}{eN}} = 0,013$ мкм для $N = 10^{17}$ см⁻³.

Сетка выбиралась таким образом, чтобы размеры ячеек 0,01 мкм не превышали значения дебаевской длины.

Шаг по времени выбирался в соответствии с минимальными значениями времени диэлектрической релаксации $[0 - 0]$ $\tau_\varepsilon = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{\sigma} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{e (\bar{D}_n + \bar{D}_p)}$, где $\sigma = e(\mu_n n + \mu_p p)$ – удельная

проводимость. В конкретном расчете порядка $4 \cdot 10^{-5}$ нс. Отсюда получаем условие

$$\Delta t \leq \tau_{\varepsilon \min}; \quad \frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon} (\bar{D}_n + \bar{D}_p) \Delta t \leq 1.$$

На рис. 8 – 10 приведены распределения концентраций электронов, дырок и электрического потенциала, полученные в расчете на момент 0,7 нс.

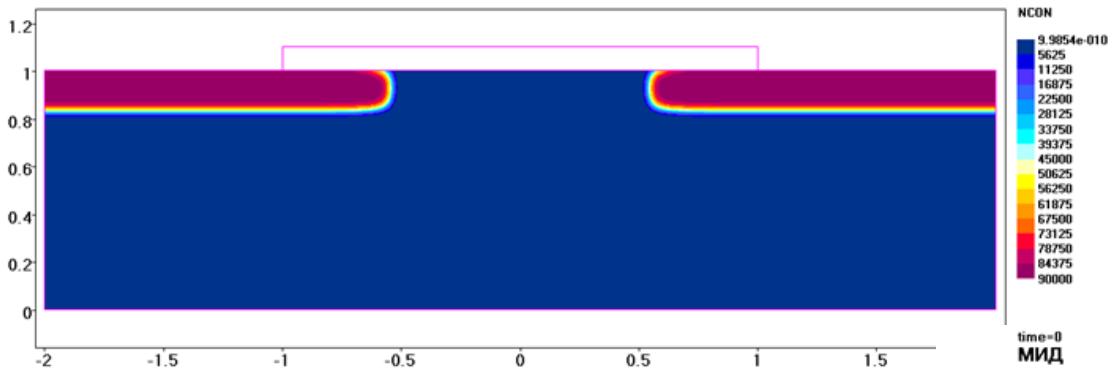


Рис. 8. Распределение концентрации электронов

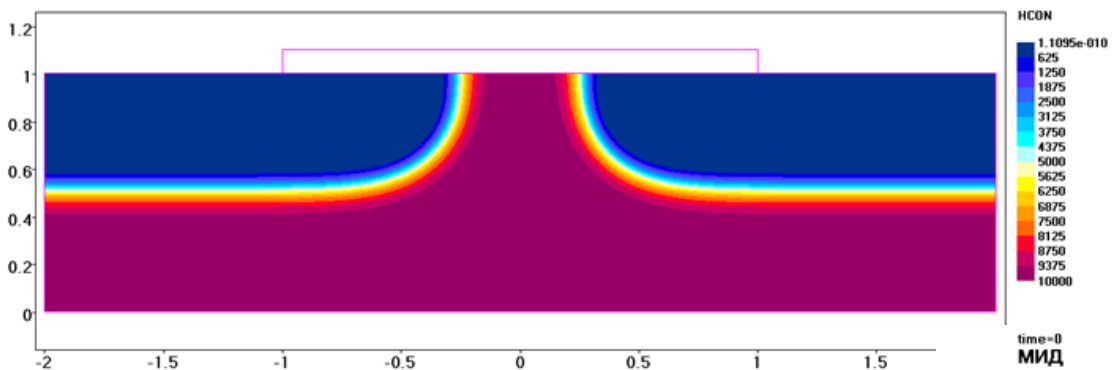


Рис. 9. Распределение концентрации дырок

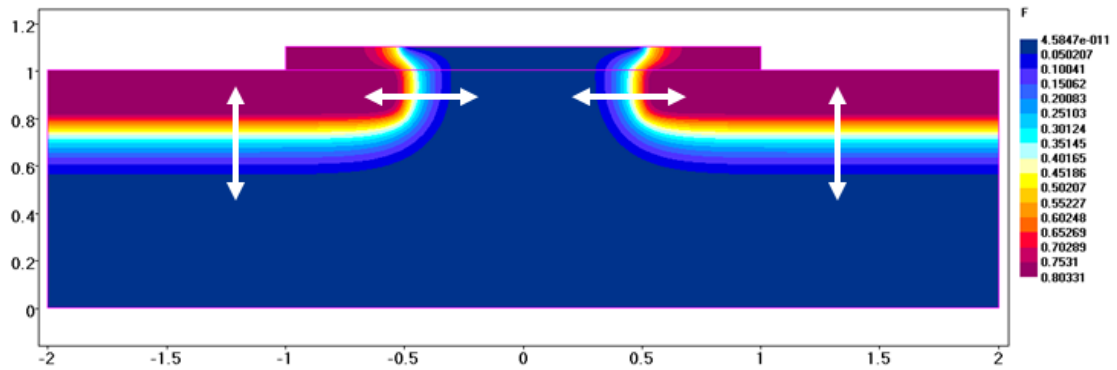


Рис. 10. Распределение электрического потенциала

Из рис. 8 – 10 видно, что решение симметрично относительно вертикальной оси $x = 0$. На рис. 10 стрелками отмечены 4 p - n перехода. Ширина вертикальных переходов согласуется с аналитической оценкой

$$L_k = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 U_k (N_D + N_A)}{e N_D N_A}} = 0,3395 \text{ мкм.}$$

Следующий расчет получен с использованием этого начального состояния. На затвор подается потенциал 3 В.

На рис. 11 – 13 приведены распределения потенциала, концентрации электронов и дырок, полученные в расчете на момент времени 0,7 нс. На рис. 10 видно, что в полупроводнике под затвором формируется проводящий канал из электронов. К моменту времени 0,7 нс достигнуто стационарное равновесное состояние, канал полностью сформирован.

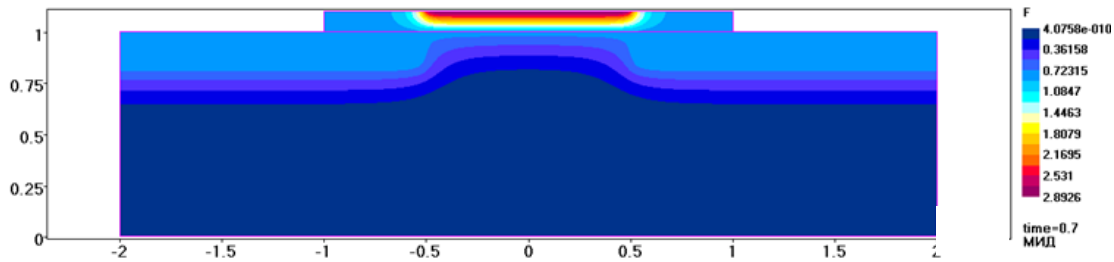


Рис. 11. Распределение потенциала

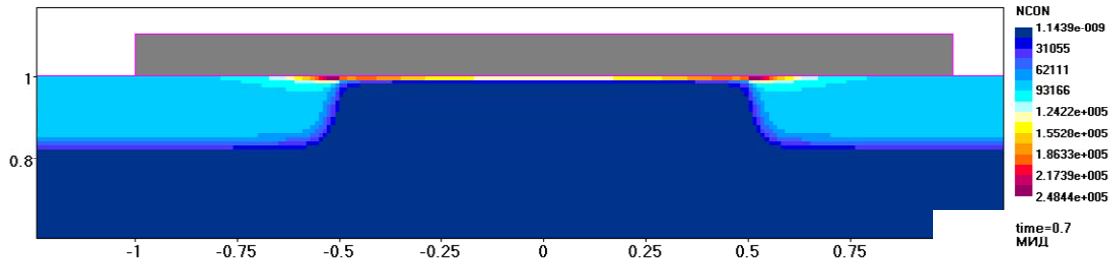


Рис. 12. Распределение концентрации электронов

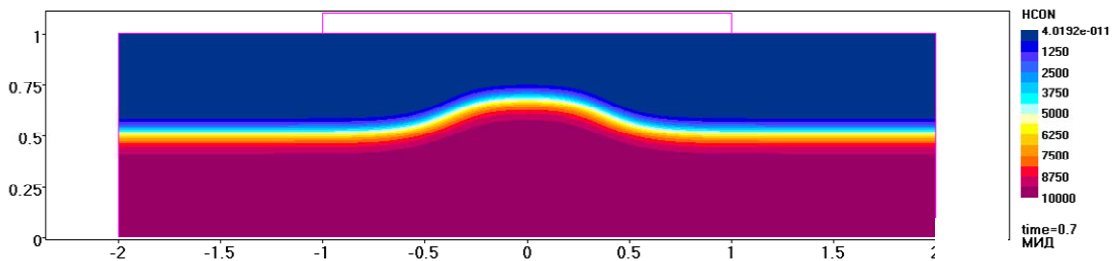


Рис. 13. Распределение концентрации дырок

На рис. 14 приведены распределения равновесных значений величин напряженности поля, потенциала, концентраций электронов и дырок, времен диэлектрической релаксации вдоль вертикальной оси симметрии в полупроводнике.

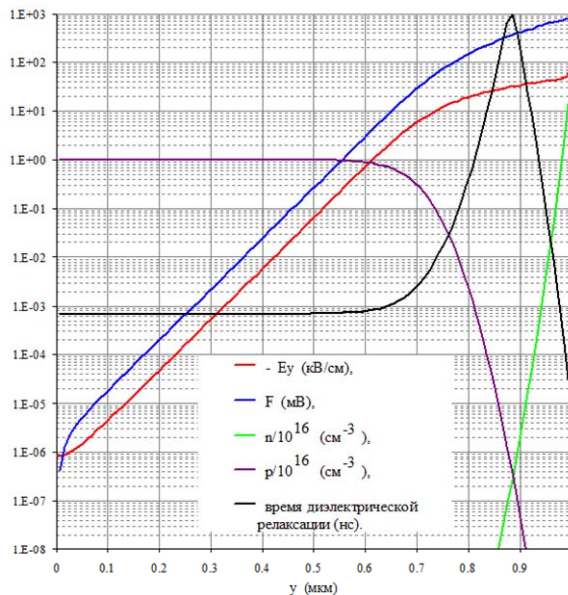


Рис. 14. Распределение равновесных значений величин на оси симметрии

Приведенные распределения значений величин хорошо согласуются с аналитическими оценками. В объеме полупроводника вблизи подложки основные носители заряда дырки, их концентрация на 13 порядков превышает концентрацию неосновных носителей – электронов. При продвижении к диэлектрику концентрация дырок падает, концентрация электронов растет. Образуется область обеднения, которая заканчивается в точке, где концентрации электронов и дырок совпадают. Далее наблюдается область слабой инверсии, где концентрация электронов становится больше концентрации дырок. Область канала – область сильной инверсии, с высокой концентрацией электронов.

Канал обладает высокой проводимостью. Основной характеристикой канала является стационарная стоковая вольтамперная характеристика (ВАХ), приведенная на рис. 15.

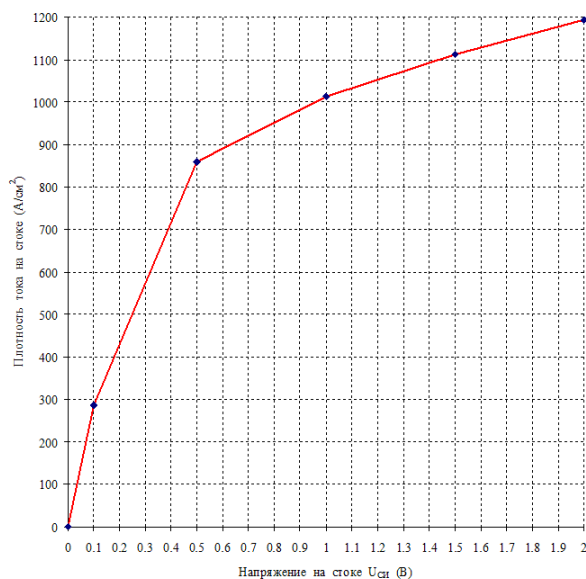


Рис. 15. Стоковая ВАХ МДП-транзистора при потенциале затвора 3 В

Специфика расчетов заключается в наличии зон обеднения с малыми концентрациями носителей заряда. Например, вблизи канала, в р-п переходах. Эти области очень чувствительны к действию источников носителей заряда. Вклад источника на шаге по времени в таких областях может заметно превышать текущее значение концентраций. Решение, полученное на нижний момент времени является плохим начальным приближением для верхнего момента времени, что приводит к ухудшению сходимости итераций метода Ньютона.

Сходимость итераций контролируется разницей значений решения на соседних итерациях и зависит от выбора начального приближения для верхнего момента времени. При разложении концентраций на итерации (25) подразумевается, что выполнены соотношения

$$\frac{\left| (\psi_n + \varphi)_i^m - (\psi_n + \varphi)_i^{m-1} \right|}{kT} < 1, \quad \frac{\left| (\psi_p + \varphi)_i^m - (\psi_p + \varphi)_i^{m-1} \right|}{kT} < 1. \quad (26)$$

При плохом начальном приближении для верхнего момента времени соотношения (26) могут заметно нарушаться. Причинами плохого начального приближения могут служить ступенчатая подача напряжения на контакты, действие источника.

В этих случаях при большом значении шага по времени наблюдается увеличение числа итераций вплоть до их расхождения. Для обеспечения возможности счета необходимо уменьшать шаг до 10^{-6} – 10^{-7} нс в зависимости от напряжения, мощности источника.

Другой стандартный подход заключается в контроле изменений электрического потенциала, концентраций электронов и дырок на итерациях. Для схем расщепления при последовательном решении уравнения Пуассона и уравнений непрерывности используется коррекция решения Виалле и Моте $[0, 0]$.

$$\begin{aligned}
\delta\varphi &= \varphi^m - \varphi^{m-1}, \\
\delta\bar{\varphi} &= \frac{|\delta\varphi|}{\delta\varphi} kT \ln \left(1 + \frac{|\delta\varphi|}{kT} \right), \\
\varphi^m &= \varphi^{m-1} + \delta\bar{\varphi}.
\end{aligned} \tag{27}$$

Аналогично для ψ_n^m, ψ_p^m .

Нами реализована модификация схемы демпфирования (27) для совместного решения системы уравнений. Вычисляем изменения величин на итерации:

$$\begin{aligned}
\delta\varphi &= \varphi^m - \varphi^{m-1}, \\
\delta\psi_n &= \psi_n^m - \psi_n^{m-1}, \\
\delta\psi_p &= \psi_p^m - \psi_p^{m-1},
\end{aligned} \tag{28}$$

ограничиваем отклонения концентраций, затем изменение потенциала:

$$\begin{aligned}
(\delta\varphi + \delta\psi_n)'' &= \frac{|\delta\varphi + \delta\psi_n|}{\delta\varphi + \delta\psi_n} kT \ln \left(1 + \frac{|\delta\varphi + \delta\psi_n|}{kT} \right), \\
(\delta\varphi + \delta\psi_p)'' &= \frac{|\delta\varphi + \delta\psi_p|}{\delta\varphi + \delta\psi_p} kT \ln \left(1 + \frac{|\delta\varphi + \delta\psi_p|}{kT} \right), \\
(\delta\varphi)'' &= \frac{|\delta\varphi|}{\delta\varphi} kT \ln \left(1 + \frac{|\delta\varphi|}{kT} \right),
\end{aligned} \tag{29}$$

далее корректируем решение на итерации:

$$\begin{aligned}
\varphi^m &= \varphi^{m-1} + \delta\varphi''; \\
\psi_n^m &= \psi_n^{m-1} + (\delta\varphi + \delta\psi_n)'' - \delta\varphi''; \\
\psi_p^m &= \psi_p^{m-1} + (\delta\varphi + \delta\psi_p)'' - \delta\varphi''.
\end{aligned} \tag{30}$$

На примере концентрации электронов нетрудно убедиться в выполнении соотношения, которое использовалось в методе Ньютона:

$$\begin{aligned}
n^m &= N_C \exp \left[-\frac{E_g - (\psi_n + \varphi)^{m-1} - (\delta\psi_n + \delta\varphi)''}{kT} \right] = n^{m-1} \left(1 + \frac{|\delta\varphi + \delta\psi_n|}{kT} \right)^\zeta; \\
\zeta &= \frac{|\delta\varphi + \delta\psi_n|}{\delta\varphi + \delta\psi_n} = \pm 1.
\end{aligned}$$

В рамках нашей схемы вычислений можно увеличить шаг по времени. А именно, когда шаг по времени превышает значение времени диэлектрической релаксации в ячейке r_E ($\tau_{E \min} \leq \tau_E \leq \Delta t$), проводится дополнительная коррекция отклонений:

$$\begin{aligned}
\delta\varphi'' &= \frac{\tau_E}{\Delta t} \delta\varphi''; \\
(\delta\varphi + \delta\psi_n)'' &= \frac{\tau_E}{\Delta t} (\delta\varphi + \delta\psi_n)''; \\
(\delta\varphi + \delta\psi_p)'' &= \frac{\tau_E}{\Delta t} (\delta\varphi + \delta\psi_p)''.
\end{aligned} \tag{31}$$

Возможности схем демпфирования продемонстрируем на примере расчета изменения начального состояния транзистора при воздействии на него источника пар электрон–дырка. Зависимость количества рождаемых пар от времени задается соотношением:

$$S(t) = \begin{cases} \frac{S_{\max}}{t_i} t & \text{при } 0 \leq t \leq t_i, \\ \frac{S_{\max}}{t_i} (2t_i - t) & \text{при } t_i \leq t \leq 2t_i, \\ 0 & \text{при } 2t_i \leq t. \end{cases}$$

Здесь $t_i = 0,15$ нс – полуширина импульса, $S_{\max} = 0,24$ мкм⁻³нс⁻¹ – амплитуда импульса. Схематическое изображение приведено на рис. 16.

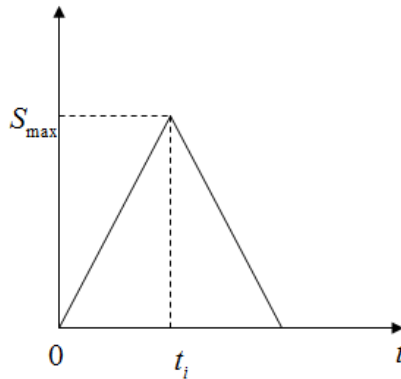


Рис. 16. Импульс источника пар электрон–дырка

Попытка проведения расчета без демпфирования с шагом $4 \cdot 10^{-5}$ нс привела к расхождению итераций. Пришлось снизить шаг по времени до 10^{-6} нс, число итераций на шаге при этом 10 – 20.

При использовании схемы демпфирования (28) – (30) удалось провести расчет с шагом $4 \cdot 10^{-5}$ нс, при этом шаг $\Delta t < \tau_{E_{\min}}$. Максимальное число итераций 20.

Дополнительно проведен расчет с шагом 10^{-4} нс. В этом случае $\Delta t > \tau_{E_{\min}}$, сработала дополнительная коррекция отклонений решения (31). Максимальное число итераций 35.

Заключение

Результаты работы можно охарактеризовать как этап создания исследовательской двумерной программы, позволяющей численно моделировать функционирование КМОП структур в условиях воздействия ионизирующего излучения.

Отработана схема вычислений. Рассмотрены разные варианты записи уравнений непрерывности электронов и дырок и соответствующие разностные схемы для их решения. Проведен анализ схем на одномерных расчетах. Реализована конечноразностная схема для совместного решения системы нелинейных уравнений: уравнения Пуассона и уравнений непрерывности электронов и дырок для решения двумерных задач.

Выполнено тестирование программы при моделировании режимов работы транзистора. Проведено сопоставление аналитических оценок с результатами одномерных и двумерных расчетов.

Для решения проблемы сходимости итераций метода Ньютона введена схема демпфирования отклонений решения на итерациях, которая хорошо зарекомендовала себя в случаях, когда решение

с нижнего момента времени является плохим начальным приближением для верхнего момента времени (например, при действии различных источников носителей заряда).

Литература

1. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. – М.: Наука, 1977. – С. 672.
2. Степаненко И. П. Основы теории транзисторов и транзисторных схем. Изд. 4-е. – М.: Энергия, 1977. – С. 672.
3. Гуртов В. А. Твердотельная электроника. Учебное пособие. Изд. 2-е. – М.: 2005. – С. 492.
4. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Том I. – М.: Мир, 1984. – С. 456.
5. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Том II. – М.: Мир, 1984. – С. 456.
6. Schenk A. Advanced Physical Models for Silicon Device Simulation. – Wien: Springer-Verlag Wien New York, 1998. – P. 369.
7. Виалле Ж. Э., Мотте С. Моделирование гетероперехода с учетом статистики Ферми-Дирака: система уравнений и численные методы решения стационарных задач // IV Международная конференция по моделированию полупроводниковых приборов и интегральных схем. Дублин, июнь, 1985. Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов: сб. докл. / под ред. Миллера Д. – М.: Радио и связь, 1989. – С. 242 – 248.
8. Виалле Ж. Э., Мотте С. Моделирование переходных характеристик гетероструктур // IV Международная конференция по моделированию полупроводниковых приборов и интегральных схем. Дублин, июнь, 1985. Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов: сб. докл. / под ред. Миллера Д. – М.: Радио и связь, 1989. – С. 248 – 253.

METHODS TO SOLVE 2D KINETICS PROBLEMS FOR CHARGE CARRIERS IN SEMICONDUCTORS

D. V. Opasin, B. N. Shamraev

Russian Federal Nuclear Center –
All-Russian Research Institute of Experimental Physics, Sarov

The report describes the results of the work to create a program that allows simulating the operation of the semiconductor devices under the ionizing irradiation in 2D approximation.

We consider different forms to write continuity equations for the electrons and holes, as well as respective difference schemes for their solution. We show the results of testing the schemes in 1D computations. We show the difference scheme for joint solution of a system of nonlinear equations: Poisson equation and continuity equations for the electrons and holes to solve 2D problems.

Convergence problems for iterations of Newton method used in solution of a system of non-linear equations are discussed.

The program was tested by simulation of the operation modes for the ideal MDS-transistor (metal-dielectric – semiconductor).

Key words: charge carriers statistics, drift, diffusion, a system of non-linear equations, Newton method.