

ЛИТЕРАТУРА

1. Френкель Я. И. О теории электрического пробоя диэлектриков и полупроводников.— ЖТФ, 1938, т. 5, с. 685.
2. Arnett P. C. Transient conduction in insulators at high fields.— J. Appl. Phys., 1975, v. 46, N 12, p. 5236.
3. Efimov V. M., Kolosanov V. A., Sinitza S. P. Electron and hole conduction in silicon nitride at moderate electric fields.— Phys. Stat. Sol. (a), 1978, v. 49, p. 217.
4. Efimov V. M. Study of thin silicon nitride films by isothermal depolarization of MNOS structures.— Phys. Stat. Sol. (a), 1984, v. 65, p. 177.

Поступила в редакцию 11 ноября 1985 г.

УДК 621.382.82.001

С. Г. МУЛЯРЧИК, В. Г. СОЛОВЬЕВ

(Минск)

РАСЧЕТ ТОКОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Для расчета токов в универсальных программах моделирования полупроводниковых структур удобно использовать интегрирование плотностей токов по площади контактов. Плотности токов в полупроводниковых средах вычисляются на основе решения системы уравнений Пуассона и непрерывности для дырок и электронов при соответствующих граничных условиях, называемой в дальнейшем ФСУ (фундаментальная система уравнений) [1]. На таком естественном пути, как отмечается в работах ряда авторов [2—5], встречаются значительные трудности, в частности необходимость решения самосогласованной задачи с высокой точностью. Чтобы обойти эту трудность, на практике пользуются различными искусственными приемами. Например, интегрируют плотность тока по некоторому окаймляющему контакт сечению, в окрестности которого наблюдается заметное изменение квазиуровней Ферми [2], или, как в [4, 5], переходят к специальным переменным, для которых расчет токов является хорошо обусловленной задачей. Однако перечисленные искусственные приемы расчета токов не могут быть положены в основу универсальных программ моделирования, так как имеют ограниченную область применения.

В статье проводится дальнейшее исследование методики расчета токов. Исходя из требуемой точности расчета плотности токов, оценивается допустимая погрешность решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), формируемых в базисе ψ , Φ_n , Φ_p на основе формулировки Шарфеттера — Гуммеля [6]. Здесь ψ — электростатический потенциал; $\Phi_n = \exp(-\varphi_n)$; $\Phi_p = \exp(\varphi_p)$; φ_p , φ_n — квазиуровни Ферми дырок и электронов (все величины в статье приведены в безразмерном виде). На задаче двумерного моделирования характерных структур биполярного транзистора сравниваются эффективности таких численных методов решения СЛАУ, как метод последовательной верхней релаксации (ПВР), Стоуна с нулевыми ускоряющими параметрами [7], сопряженных градиентов с неполной LL^T -факторизацией [8]. Следует отметить, что использование базиса Φ_n , Φ_p , ψ ограничивает возможный диапазон прикладываемых к приборам напряжений (0—4 В). Однако в диапазоне небольших управляющих напряжений работает основная часть биполярных приборов (биполярные транзисторы, инжекционная логика и др.), для которых указанное ограничение не является критическим.

Перейдем теперь к оценке погрешности расчета тока. Плотность дырочного тока в соответствии с формулировкой Шарфеттера — Гуммеля в

переменных ψ , Φ_n , Φ_p имеет вид

$$J_{i+1/2} = -g_{i+1/2}(\psi_{i+1}, \psi_i)(\Phi_{i+1} - \Phi_i); \quad (1)$$

$$g_{i+1/2} = (\psi_{i+1} - \psi_i)\mu_{i+1/2}h_i^{-1}/[\exp(\psi_{i+1}) - \exp(\psi_i)],$$

где $\mu_{i+1/2}$ — подвижность в средней точке i -го промежутка; h_i — шаг дискретизации. Рассмотрим ошибку вычисления Φ , определяющую точность расчета J , так как электростатический потенциал из-за сильного диагонального преобладания СЛАУ линейаризованного уравнения Пуассона может быть легко найден для заданного значения Φ с высокой степенью точности. Обозначим величину Φ на m -й итерации Гуммеля (либо одной из его модификаций, которые в дальнейшем также будем называть гуммелевскими) [9] через Φ^m , а ее точное значение в решении алгебраизованной ФСУ — через Φ^T . Тогда справедливо следующее выражение для абсолютной погрешности расчета тока в соответствии с формулой (1):

$$\Delta J_{i+1/2} = -g_{i+1/2}(\epsilon_{i+1} - \epsilon_i),$$

где $\epsilon_i = \Phi_i^T - \Phi_i^m$ есть абсолютная погрешность величины Φ в двух соседних точках сетки на m -й гуммелевской итерации. В дальнейшем удобно перейти к относительной погрешности

$$\xi_{i+1/2} = \Delta J_{i+1/2}/J_{i+1/2} = (\epsilon_{i+1} - \epsilon_i)/(\Phi_{i+1}^m - \Phi_i^m).$$

Используя теперь очевидное соотношение $\Phi_i^m - \Phi_i^{m-1} = \epsilon_i^m - \epsilon_i^{m-1}$ и предполагая высокой скорость сходимости гуммелевских итераций (т. е. $\epsilon_i^m \ll \epsilon_i^{m-1}$), получим следующую оценку для $\xi_{i+1/2}$:

$$\xi_{i+1/2} \leq 2\delta/|\Phi_{i+1}^m - \Phi_i^m|,$$

где $\delta = \max_i |\Phi_i^m - \Phi_i^{m-1}|$ — максимальное изменение экспоненциальных функций квазиуровней Ферми на гуммелевской итерации. Очевидно, что наибольшая погрешность расчета плотности тока

$$\xi = \max_i \xi_{i+1/2} \leq 2\delta / \min_i |\Phi_{i+1}^m - \Phi_i^m| \quad (2)$$

наблюдается в точках с наименьшим изменением квазиуровней Ферми на шаге сетки. Если относительное изменение Φ в соседних узлах сетки составляет 10^{-6} (в шестом знаке после запятой), то для обеспечения погрешности расчета плотности тока, не превосходящей 1%, необходимо достичь относительного изменения Φ на гуммелевских итерациях 10^{-8} (в восьмом знаке после запятой). Алгоритмы типа Гуммеля предполагают решение на каждой их итерации СЛАУ, являющихся конечно-разностными аналогами уравнений непрерывности. Поэтому относительная погрешность решения этих систем должна быть значительно меньше, чем 10^{-3} .

Обратимся теперь к сравнению методов решения СЛАУ. В силу большой размерности систем в задачах численного моделирования двумерных полупроводниковых структур традиционно используются экономичные по требуемой памяти итерационные методы последовательной верхней релаксации (ПВР) и Стоуна. В последнее время разработан высокоэффективный метод решения СЛАУ — метод сопряженных градиентов с неполной LL^T -факторизацией. Для использования этого метода необходимо, чтобы матрица A системы $Ax = b$ являлась симметрической, положительно определенной и имела только отрицательные внедиагональные члены. Эти условия выполняются при алгебраизации уравнений непрерывности и Пуассона в используемом базисе ψ , Φ_n , Φ_p [2]. Из разработанных к настоящему времени модификаций, различающихся лишь процедурой неполной факторизации, нами выбран метод с неполной LL^T -факторизацией, названный в первоисточнике [8] как ICCG(0). В сравнении с методом Стоуна он требует для хранения информации лишь

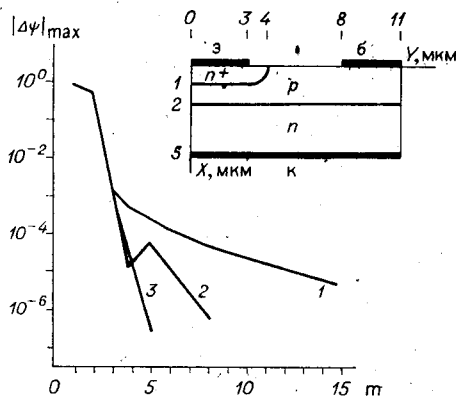


Рис. 1

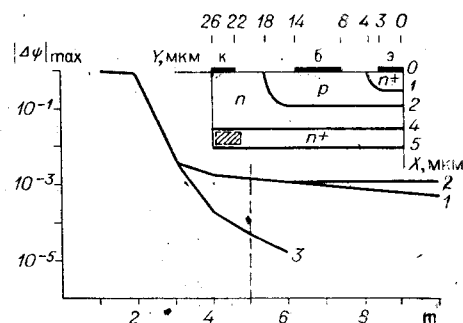


Рис. 2

двух дополнительных массивов. Отметим, что метод Стоуна предполагает использование ускоряющих параметров, выбор которых, вообще говоря, неалгоритмизирован. По этой причине здесь исследуется метод с нулевыми ускоряющими параметрами.

Для сравнения эффективности названных методов решения СЛАУ выбраны вертикальный $n-p-n$ -транзистор (рис. 1), о сложности расчета токов в котором упоминалось в [2], и планарный $n-p-n$ -транзистор (рис. 2), который близок к реальному технологическому конструктивному исполнению. Профиль легирования областей эмиттера, базы и коллектора в обеих структурах принимался одинаковым. Максимальная концентрация легирующей примеси в эмиттере составляла $0,5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ и изменялась по двумерному экспоненциальному закону, в базе — $0,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, которая экспоненциально уменьшалась в направлении X (на краях области и в направлении Y). Коллектор и скрытый слой легированы равномерно ($0,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $0,5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$).

Расчеты выполнялись при $V_0 = -0,7 \text{ В}$, $V_k = 1 \text{ В}$ на универсальном комплексе моделирования твердотельных микросистемных структур, разработанном авторами [10]. Использовалась сетка 33×32 для вертикального транзистора и 23×36 — для планарного. Критерием конца счета служило выполнение двух условий: обеспечение консервативности решения с заданной точностью ($\Delta_\Sigma = |J_0 + J_k + J_6| / (|J_0| + |J_k| + |J_6|) \leq 2 \cdot 10^{-3}$) и малость изменения на соседних гummелевских шагах тока на выводах прибора ($\Delta_J = \max_i |\Delta J_i / J_i| \leq 10^{-3}$, $i \in \{0, k, 6\}$), где J_0 , J_k , J_6 — токи эмиттера, коллектора и базы.

При моделировании вертикального транзистора для всех трех исследуемых методов удалось получить с требуемой точностью токи эмиттера, базы и коллектора (см. таблицу) интегрированием соответствующих плотностей тока по площади контактов. Однако затраты машинного времени на решение этой задачи оказались существенно разными (см. таблицу, где приведены времена для ЕС-1035). В этом смысле ICCG-метод эффективнее метода Стоуна более чем в 2 раза, а в сравнении с ПВР-

Величина	Метод		
	ПВР	Стоуна	ICCG(0)
J_0 , А/см	$0,85367 \cdot 10^{-2}$	$0,85369 \cdot 10^{-2}$	$0,85369 \cdot 10^{-2}$
J_k , А/см	$0,83430 \cdot 10^{-2}$	$0,83431 \cdot 10^{-2}$	$0,83431 \cdot 10^{-2}$
J_6 , А/см	$0,19387 \cdot 10^{-3}$	$0,19171 \cdot 10^{-3}$	$0,19175 \cdot 10^{-3}$
Δ_Σ	$0,56 \cdot 10^{-6}$	$0,12 \cdot 10^{-3}$	$0,12 \cdot 10^{-3}$
Δ_J	$0,38 \cdot 10^{-2}$	$0,58 \cdot 10^{-3}$	$0,72 \cdot 10^{-3}$
t , мин	137	47	20

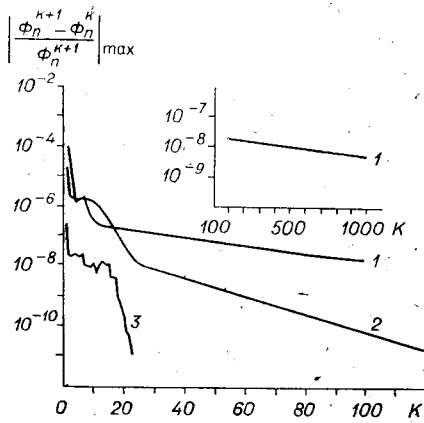


Рис. 3

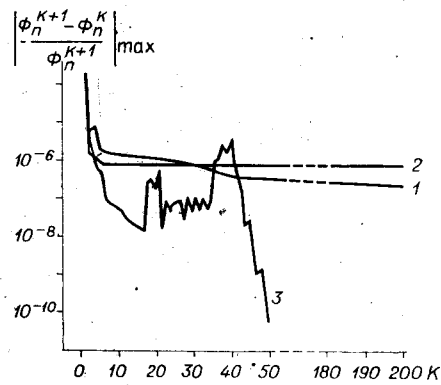


Рис. 4

методом — почти в 7 раз. Такая эффективность достигается за счет действия двух факторов. Во-первых, при использовании ИССГ-метода сходимость итераций Гуммеля оказывается более быстрой (на рис. 1—4 кривые 1—3 относятся соответственно к методам ПВР, Стоуна и ИССГ; $|\Delta\psi|_{\max}$ — максимальное по модулю абсолютное изменение электростатического потенциала). Во-вторых, на решение СЛАУ ИССГ-методом затрачивается по сравнению с двумя другими заметно меньшее время. Последнее утверждение справедливо лишь при достаточно высокой требуемой точности решения СЛАУ. Если на начальных итерациях гуммелевского процесса можно ограничиться относительно невысокой точностью решения СЛАУ, то на его завершающей стадии точность решения должна быть заметно увеличена, чтобы обеспечить расчет тока. Критерием завершения итерационного процесса решения СЛАУ для неизвестной Φ служит условие $\sigma = \max_i |(\Phi_i^{m+1} - \Phi_i^m) / \Phi_i^{m+1}| < \sigma_0$, в расчетах полага-

лось $\sigma_0 = |\Delta\psi|_{\max} \cdot 10^{-6}$. Именно поэтому начиная лишь с третьей гуммелевской итерации метод ИССГ при решении СЛАУ оказывался эффективнее двух других (см. рис. 3, который соответствует пятой итерации Гуммеля). Анализ рисунка показывает, что обусловленность решаемой относительно Φ_n СЛАУ позволяет достигать высоких точностей при использовании методов ИССГ и Стоуна. Метод ПВР за 1000 итераций дает $\sigma \approx 10^{-8}$, однако и такой точности решения СЛАУ для Φ_n оказывается достаточно, чтобы рассчитать в конечном итоге токи на выводах прибора, так как минимальное относительное изменение Φ_n на соседних узлах сетки в области протекания тока составляет $10^{-4} - 10^{-5}$.

При моделировании планарного транзистора еще в большей степени наблюдается различие в характере сходимости гуммелевского процесса (см. рис. 2). При использовании для решения СЛАУ традиционных методов сходимость вычислительного процесса сильно замедляется уже на третьей внешней итерации при достижении $|\Delta\psi|_{\max} \approx 5 \cdot 10^{-3}$. Причина этого — недостаточная точность решения СЛАУ для переменной Φ_n . На рис. 4 приведено σ при решении СЛАУ на пятой внешней итерации (аналогичный характер изменения этой величины наблюдался на всех внешних итерациях, начиная с четвертой). В этой задаче методы ПВР и Стоуна позволяли достигать $\sigma \approx 10^{-6}$. В то же время в моделируемой структуре в заштрихованной на рис. 2 области протекания тока значения Φ_n между соседними узлами сетки различаются лишь в шестом-седьмом знаке. Для расчета тока в этой области с погрешностью, не превосходящей 1%, необходимо добиться в соответствии с (2) $\sigma \approx 10^{-9} - 10^{-10}$, что позволяет достичь лишь метод ИССГ. При его использовании не наблюдается замедления сходимости решения ФСУ (см. рис. 2, кривая 3), и на шестой внешней итерации получено решение, позволив-

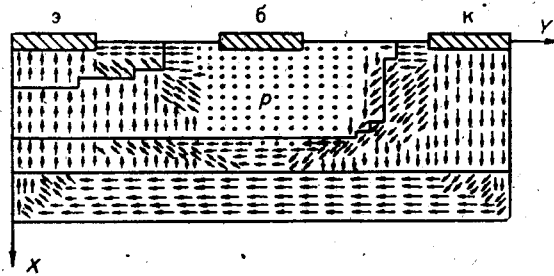


Рис. 5

шее интегрированием по контактам рассчитать токи на выводах прибора ($J_e = 9,566 \times 10^{-3}$, $J_b = 2,172 \cdot 10^{-4}$, $J_k = 9,346 \cdot 10^{-3}$ А/см). В случае решения СЛАУ двумя другими методами не удалось найти значения тока коллектора с нужной точностью, хотя токи эмиттера и базы по величине совпадали с вышеуказанными результатами (после 1000 гummелевских

итераций при использовании ПВР-метода ток коллектора равнялся $1,2 \cdot 10^{-3}$ А/см, что почти в 8 раз отличается от правильного значения, приведенного выше).

Рассмотрим распределение плотности электронного тока по структуре прибора (рис. 5), найденное ICCG-методом. Из него видно, что в структуре имеются три участка, вдоль которых распределение тока практически одномерно. Это области под контактами эмиттера и коллектора, в которых составляющая J_x является преобладающей (рис. 6), и большая часть эпитаксиального слоя, в котором превалирует составляющая J_y (рис. 7). Имеются также два участка с резким поворотом вектора плотности тока. Эти участки, на наш взгляд, ответственны за ухудшение обусловленности решаемых систем линейных уравнений.

Подводя итог, отметим следующее. Точность решения СЛАУ на завершающих шагах итерационного гummелевского процесса предопределяется требуемой точностью расчета плотностей токов. Использование метода сопряженных градиентов с неполной LL^T -факторизацией позволяет в отличие от традиционных методов последовательной верхней релаксации и Стоуна (с нулевыми ускоряющими параметрами) рассчитывать в базисе ψ , Φ_n , Φ_p с достаточной точностью как распределение плотностей токов по всей анализируемой структуре прибора, так и токи на его выводах (интегрированием по контактам). Даже в том случае, когда моделируется прибор, поле токов в котором может быть рассчитано традиционными методами, применение ICCG-метода предпочтительнее, так как позволяет существенно сократить затраты машинного времени.

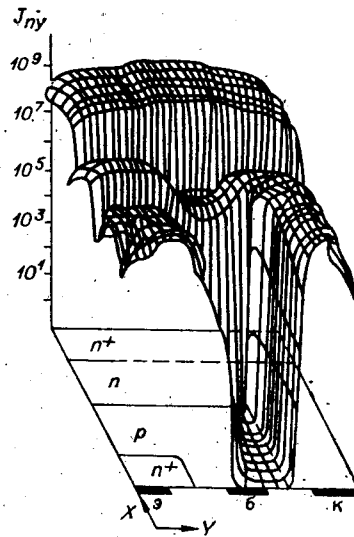
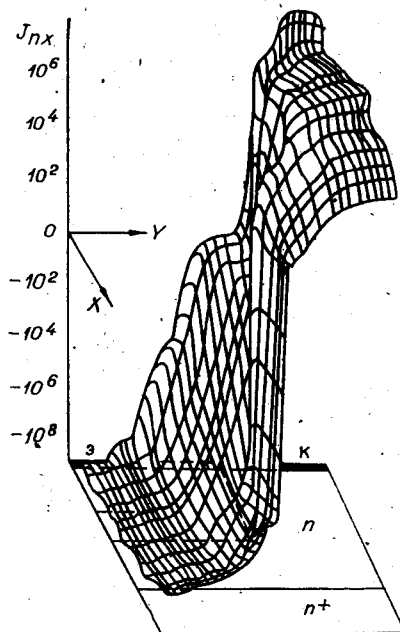


Рис. 7

Рис. 6

ЛИТЕРАТУРА

1. Носов Ю. Р., Петросяц К. О., Шилин В. А. Математические модели элементов интегральной электроники.— М.: Сов. радио, 1976.
2. Slotboom J. W. Computer-aided two-dimensional analysis of bipolar transistors.— IEEE Trans., 1973, v. ED-20, N 8, p. 669—679.
3. Sguhar M. A. Two-dimensional MOS-transistor simulation.— Közp. fiz. cuf. intez., 1981, N 13, p. 1—19.
4. Mock M. S. A two-dimensional mathematical model of the insulated-gate field effect transistor.— Sol. St. Electron., 1973, v. 16, p. 601.
5. Toyabe T., Ujii K., Okaba T. e. a. Method and application of a two-dimensional analysis of I²L.— Trans. Inst. Electron. and Commun., 1979, v. 62, N 3, p. 215—222.
6. Sharfetter D. L., Gummel H. K. Large-signal analysis of silicon Read diode oscillator.— IEEE Trans., 1969, v. ED-16, p. 64—77.
7. Stone H. L. Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations.— SIAM J. Numer. Anal., 1968, v. 5, N 3, p. 530—558.
8. Meijerink J. A., van der Vorst H. A. An iterative solution method for linear system of which the coefficient matrix is a symmetrical M-matrix.— Math. Comput., 1977, v. 31, N 137, p. 148—162.
9. Абрамов И. И., Мулярчик С. Г. Метод векторной релаксации систем в задачах многомерного численного анализа полупроводниковых приборов.— Изв. вузов. Радиоэлектроника, 1981, т. 24, № 6.
10. Мулярчик С. Г., Соловьев В. Г. Автоматическое формирование уравнений при численном моделировании элементов интегральных схем.— Изв. вузов. Радиоэлектроника, 1983, т. 26, № 6.

Поступила в редакцию 25 ноября 1985 г.

УДК 621.315.592 : 517.949.2

Ю. А. БЕРЕЗИН, О. Е. ДМИТРИЕВА
(Новосибирск)

СХЕМА РАСЩЕПЛЕНИЯ ДЛЯ ДРЕЙФОВО-ДИФФУЗИОННОЙ МОДЕЛИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В статье [1] предложена схема численного интегрирования системы дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих нестационарную дрейфово-диффузионную модель полупроводниковой плазмы. Область применения схемы существенно ограничена предположением о постоянстве коэффициентов подвижности и диффузии. В настоящей работе изложено обобщение схемы [1] на случай произвольных зависимостей этих коэффициентов от координат и времени. Запишем исходную систему уравнений в следующем виде (см., например, [2]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} &= \frac{4\pi q}{\epsilon} (n - p - N); \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_n n \frac{\partial \Phi}{\partial x} - D_n \frac{\partial n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_n n \frac{\partial \Phi}{\partial y} - D_n \frac{\partial n}{\partial y} \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_n n \frac{\partial \Phi}{\partial z} - D_n \frac{\partial n}{\partial z} \right) = G - R; \\ \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_p p \frac{\partial \Phi}{\partial x} + D_p \frac{\partial p}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_p p \frac{\partial \Phi}{\partial y} + D_p \frac{\partial p}{\partial y} \right) - \\ &- \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_p p \frac{\partial \Phi}{\partial z} + D_p \frac{\partial p}{\partial z} \right) = G - R, \end{aligned} \quad (1)$$

где Φ — потенциал; n, p — концентрация электронов и дырок; μ_n, μ_p — коэффициенты подвижности электронов и дырок; D_n, D_p — коэффициенты диффузии электронов и дырок; G, R — скорости генерации и рекомбинации электронно-дырочных пар; N — плотность заряда легирующих