

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ  
В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ

УДК 519.63

Н. А. КУДРЯШОВ, С. С. КУЧЕРЕНКО, Ю. И. СЫЦЬКО  
(Москва)

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ПРЯМЫХ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ  
ТЕОРИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ

**Введение.** При проектировании различных устройств в микроэлектронике возникает ряд задач, которые могут быть решены методами математического моделирования электрофизических процессов в полупроводниковых структурах. Как правило, при математическом моделировании процессов в полупроводниках используется диффузионно-дрейфовая модель, состоящая из уравнений непрерывности для подвижных носителей заряда и уравнения Пуассона для потенциала. Эта система, называемая фундаментальной (ФСУ), является нелинейной системой уравнений в частных производных, поэтому аналитические решения задач с ФСУ возможны только в случае специальных краевых условий. В этой связи для математического моделирования полупроводниковых устройств в последние годы интенсивно развиваются численные методы решения ФСУ. Наиболее эффективными здесь оказываются неявные разностные схемы. При этом решение нелинейной системы алгебраических уравнений, полученной в результате разностной аппроксимации ФСУ, проводится либо итерационным методом Гуммеля [1, 2], суть которого состоит в поочередном решении на каждом временном слое разностных аналогов уравнения Пуассона и уравнений непрерывности, либо итерационным методом Ньютона [3, 4], когда системы разностных уравнений решаются совместно. Как показывает численный эксперимент, при расчете структур в режиме высокого уровня инжекции (больших приложенных напряжений) первый метод имеет низкую скорость сходимости. Недостатком второго метода являются большие вычислительные затраты на каждом шаге интегрирования и сильная зависимость скорости сходимости от выбора начального приближения потенциала и концентраций носителей заряда. Основная трудность, возникающая при решении ФСУ численными методами, связана с наличием малого параметра при старших производных в уравнении Пуассона. Данное обстоятельство приводит к плохой обусловленности матрицы Якоби, соответствующей ФСУ. В теории нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений для решения задач с плохо обусловленными матрицами Якоби (так называемые жесткие задачи) разработаны эффективные  $L$ -устойчивые и жесткоустойчивые методы. Применяя метод прямых [5] для решения нестационарных задач с ФСУ, смешанную задачу можно свести к задаче Коши для системы дифференциально-алгебраических уравнений (ДАУ) и использовать при ее решении  $L$ - и жесткоустойчивые методы. Такой подход был применен в [6] при расчете переходных процессов в двумерных МДП-структурах. Решение задачи Коши проводилось двухшаговым  $L$ -устойчивым методом второго порядка точности. Использование в качестве неизвестных функций

квазипотенциалов Ферми несколько ухудшило эффективность метода, порождения полученной из ФСУ системы дифференциально-алгебраических уравнений. На примере решения одномерных задач показана эффективность предложенной методики.

**Математическая постановка и алгоритм решения.** Динамика носителей заряда в полупроводниковых структурах в предположении справедливости статистики Больцмана в одномерном случае описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} \partial n / \partial t &= -\partial j_n / \partial x - R(p, n) + G(x, t); \\ \partial p / \partial t &= -\partial j_p / \partial x - R(p, n) + G(x, t); \\ 0 &= \kappa^2 \partial^2 \varphi / \partial x^2 + (p - n + N(x)); \\ j_n &= -\mu_n (\partial n / \partial x - n \partial \varphi / \partial x); \\ j_p &= -\mu_p (\partial p / \partial x + p \partial \varphi / \partial x); \\ R(n, p) &= (pn - n_e^2) (1 / (\tau_p (n + n_e) + \tau_n (p + n_e)) + c_n n + c_p p). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $n, p$  — плотности электронов и дырок;  $\varphi$  — потенциал электрического поля;  $N$  — концентрация ионизованных примесей;  $j_n, j_p$  — плотности потоков электронов и дырок;  $\mu_n, \mu_p$  — их подвижности;  $R(n, p), G(x, t)$  — скорости рекомбинации и генерации носителей;  $n_e$  — собственная концентрация носителей заряда;  $\tau_n, \tau_p$  — время жизни носителей в модели Шокли — Рида;  $c_n, c_p$  — коэффициенты ожереккомбинации.

Система (1) записана в безразмерном виде. Использовалась следующая нормировка:

$$\begin{aligned} n' / N_0 &= n, \quad p' / N_0 = p, \quad \varphi' / \varphi_T = \varphi, \\ x' / L_0 &= x, \quad t' / t_0 = t, \quad \mu'_{n,p} / \mu_0 = \mu_{n,p}, \end{aligned}$$

где  $N_0 = \max |N(x)|$ ;  $\varphi_T = kT/e$  — тепловой потенциал;  $L_0$  — характерный размер рассматриваемой структуры;  $t_0 = L_0^2 / \mu_0 \varphi_T$ ;  $\mu_0 = \min(\mu_p, \mu_n)$ ; штрихи относятся к размерным величинам. При выбранной нормировке параметр  $\kappa$  равен  $L_D / L_0$ ,  $L_D = (\epsilon \epsilon_0 \varphi_T / e N_0)^{1/2}$  — дебаевская длина экранирования. Для практически используемых полупроводниковых устройств значение  $\kappa$  находится в пределах  $10^{-8} - 10^{-3}$  (для кремниевой структуры длиной 100 мкм с  $N_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $\kappa = 4 \cdot 10^{-5}$ ).

Рассматривается полупроводниковая структура с заданным распределением концентрации легирующей примеси  $N(x)$ . Контакты предполагаются омическими. В этом случае значения концентраций носителей на границе  $p^r, n^r$  определяются по формуле

$$p^r = -N/2 + (N^2/4 + n_e^2)^{1/2}, \quad n^r = n_e^2/p^r, \quad (2)$$

условия на потенциал имеют вид

$$\varphi(0, t) = 0, \quad \varphi(1, t) = U_0(t) + \Delta\varphi, \quad (3)$$

где  $U_0(t)$  — заданное внешнее напряжение;  $\Delta\varphi$  — встроенный потенциал. Начальное условие задается аналитически по приближенным формулам либо предварительно находится методом установления из решения задачи (1) — (3) при постоянном  $U_0 = U_0(0)$ .

Для численного решения задачи, описываемой системой (1) с соответствующими граничными (2), (3) и начальными условиями, используем метод прямых [5]. На отрезке  $[0, 1]$  введем неравномерную пространственную сетку с узлами  $\{x_i\}$ ,  $i = 0, 1, \dots, N, N+1$ . Шаги этой сетки обозначим  $h_i = x_{i+1} - x_i$ ,  $\bar{h}_i = (h_{i+1} + h_i)/2$ . Определим значения

сеточных функций  $\{\varphi_i(t)\} = \{\varphi(x_i, t)\}$ ,  $\{n_i(t)\} = \{n(x_i, t)\}$ ,  $\{p_i(t)\} = \{p(x_i, t)\}$ .

После перехода от дифференциальных операторов в правой части (1) к их разностным аналогам рассматриваемая краевая задача сводится к решению задачи Коши

$$dY/dt = F(W, t), Y(t=0) = Y_0, \quad (4)$$

где

$$Y = \{Y_j\}, Y_j = 0, Y_{j+1} = n_i, Y_{j+2} = p_i, i = 1, 2, \dots, N, j = 3i;$$

$$W = \{W_j\}, W_j = \varphi_i, W_{j+1} = n_i, W_{j+2} = p_i, i = 0, 1, \dots, N+1;$$

$Y_0$  соответствует начальным условиям исходной задачи;  $F$  — вектор конечно-разностной аппроксимации правых частей системы (1). Вид  $F$  будет конкретизирован далее.

Применение для решения системы ДАУ (4) традиционных методов (типа Рунге — Кутты, Адамса и т. п.) оказывается неэффективным в силу жесткости рассматриваемой системы. Одним из наиболее эффективных методов решения системы жестких ДАУ является метод Гира [8]. Данный метод относится к классу линейных многошаговых методов типа предиктор-корректор. Применение данного метода позволяет выбирать величину шага интегрирования  $\tau$  и порядок метода (до пятого включительно) из условия минимизации вычислительных процедур на шаге  $\tau$  при заданной ошибке. Алгоритм метода Гира реализован в программе STIFF [9], модификация которой использовалась для решения задачи (4). Шаг коррекции в программе STIFF рассчитывается методом Ньютона — Рафсона. Получаемая при этом система линейных алгебраических уравнений решается с помощью модифицированного для ленточных матриц метода исключений Гаусса.

**Аппроксимация пространственных производных.** Важным моментом при численном решении задачи (4) является аппроксимация дифференциальных операторов в правой части системы (1). Исследовались четыре вида разностной аппроксимации уравнения непрерывности. Применение интегроинтерполяционного метода приводит к следующей аппроксимации производной от плотности потока электронной компоненты (для дырочной аналогично):

$$(\partial j_n / \partial x)_i \sim ((j_n)_{i+1/2} - (j_n)_{i-1/2}) / h_i. \quad (5)$$

При простейшей центрально-разностной аппроксимации для  $(j_n)_{i+1/2}$  получается выражение

$$(j_n)_{i+1/2} = (\mu_n)_{i+1/2} (E^+(z_{i+1/2}) n_{i+1} - E^-(z_{i+1/2}) n_i) / h_i; \quad (6)$$

$$E^\pm(z) = 1 \pm z; \quad (7)$$

$$z_{i+1/2} = 1/2 h_i (\partial \varphi / \partial x)_{i+1/2} \sim 1/2 (\varphi_{i+1} - \varphi_i). \quad (8)$$

Как известно [10], монотонность схем с аппроксимацией (6), (7) нарушается при  $z^* > 1$ ,  $z^* = \max_i |z_{i+1/2}|$ , что для большинства практически важных задач приводит к очень жесткому ограничению на величину шага дискретизации по пространству.

Разностные аппроксимации, сохраняющие свойство монотонности при расчетах на грубых сетках, т. е. сетках, содержащих относительно небольшое количество узлов, были предложены в [11, 12]. Они получены на основе применения интегроинтерполяционного метода к разным формам записи выражений для потоков и имеют следующий вид:

$$E^\pm(z) = \pm 2z / (1 - \exp(\mp 2z)); \quad (9)$$

$$E^\pm(z) = \exp(\pm z); \quad (10)$$

$$E^\pm(z) = 2 / (1 + \exp(\mp 2z)). \quad (11)$$

Таблица 1  
Результаты расчетов и вычислительные затраты на сетке с числом узлов 12

АФ	$P/10^{16}$ , см <sup>-3</sup>	$N/10^{16}$ , см <sup>-3</sup>	$j$ , А/см <sup>2</sup>	$m_0$	$m_1$	$m_2$
(9)	2,14	2,66	197,5	53	108	18
(10)	2,14	2,66	198,5	46	80	16
(11)	2,14	2,65	195,7	60	143	26
«Г»	2,18	2,61	148,8			

Таблица 2  
Результаты расчетов и вычислительные затраты на сетке с числом узлов 48

АФ	$P/10^{16}$ , см <sup>-3</sup>	$N/10^{16}$ , см <sup>-3</sup>	$j$ , А/см <sup>2</sup>	$m_0$	$m_1$	$m_2$
(7)	1,85	2,37	132,6	98	249	31
(9)	2,13	2,67	168,3	58	114	20
(10)	2,13	2,67	168,3	58	121	17
(11)	2,13	2,67	167,8	61	105	22
(12)	2,18	2,73	175,7	76	166	20
«Г»	2,17	2,62	140,5			

Аппроксимация (9) получила широкое распространение и известна как аппроксимация Шарфеттера — Гуммеля. Недостатком аппроксимационных функций (АФ) (9)—(11) является необходимость вычисления экспонент, что замедляет процесс счета. Для сравнения с эффективностью аппроксимаций (9)—(11) была рассмотрена не требующая вычисления экспонент АФ, обладающая свойством монотонности и совпадающая при  $z \rightarrow 0$  с АФ (7) с точностью  $O(z^2)$ :

$$E^{\pm}(z) = (1 \pm (z + z^3/6)) / (1 + z^2/2 + |z^3|/6). \quad (12)$$

В уравнении Пуассона дифференциальный оператор аппроксимировался следующим образом:

$$(\partial^2 \varphi / \partial x^2)_i \sim ((\varphi_{i+1} - \varphi_i) / h_{i+1} - (\varphi_i - \varphi_{i-1}) / h_i) / h_i.$$

**Примеры расчетов.** Приведем результаты численных расчетов для тестовой диодной структуры [10]. Длина структуры  $L_0 = 2$  мкм, глубина залегания  $p-n$ -перехода  $x_E = 1$  мкм, распределение примесей  $N(x)$  задавалось формулой

$$N(x) = c_E \exp(-(x/L_0)^2) - c_B,$$

$c_E = 5 \cdot 10^{20}$  см<sup>-3</sup>,  $c_B = 5 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>, параметр  $L_0$  выбирался из условия  $N(x_E) = 0$ . К структуре было приложено напряжение  $U_0 = 0,7$  В (прямое смещение). Параметры в выражении для скорости рекомбинации по модели Шокли — Рида  $\tau_n = 2 \cdot 10^{-10}$  с,  $\tau_p = 10^{-10}$  с. Расчеты проводились на последовательности неравномерных сеток, построенных аналогично [10]. В отличие от [10]  $\mu_n$  и  $\mu_p$  считались константами, что привело к некоторому количественному расхождению результатов расчетов [10] и данной работы. Поскольку рассматривалась стационарная задача, изложенный метод применялся как метод установления. Результаты расчетов методом прямых представлены в табл. 1, 2. В них приведены значения  $p$ ,  $n$  в точке  $x_E = 1$  мкм, плотность тока  $j$ , а также вычислительные затраты:  $m_0$  — количество шагов по времени до достижения установившегося режима;  $m_1$ ,  $m_2$  — количество вычислений правой части  $F$  и матрицы Якоби  $\partial F / \partial Y$  для разных видов АФ. Из табл. 1 видно, что среди АФ

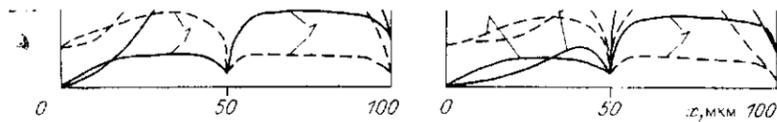


Рис. 1. Распределение концентрации  $n$  (сплошные линии) и  $p$  (пунктирные линии) на моменты времени:

1 —  $t = 10$  нс; 2 —  $t = 0,1$  мкс при  $G = 4 \cdot 10^{23}$  см $^{-3}$ с $^{-1}$ ;  $a$  — несмещенный диод  $U_0 = 0$ ; б — приложено запирающее напряжение  $U_0 = 5$  В

(9)–(11) несколько более экономичной является АФ (10). Результаты расчетов с АФ (12) на грубой сетке существенно отличаются от «точного численного» решения, полученного на мелкой сетке с числом узлов 96, которое с хорошей точностью совпадает с решением при АФ (9)–(11), приведенным в табл. 2. Поскольку при АФ (7) нарушено условие монотонности разностной схемы, решение задачи для этой АФ не было получено. Из результатов расчетов на мелкой сетке (см. табл. 2) видно, что схема с АФ (12) дает результаты, близкие к результатам расчетов по схемам с АФ (9)–(11), хотя вычислительные затраты при этом несколько выше. Удовлетворительные результаты на мелкой сетке дает и АФ (7), однако ее точность и эффективность ниже АФ (12). В табл. 1, 2 (последняя строка «Г») для сравнения приведены также результаты расчетов итерационным методом Гуммеля с использованием в качестве неизвестных функций квазипотенциалов Ферми  $\psi_n$  и  $\psi_p$  [13]:

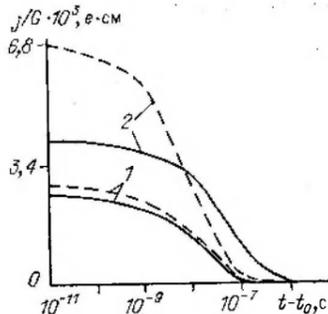
$$n = n_e \exp(-\psi_n + \phi), \quad p = n_e \exp(\psi_p - \phi).$$

Аппроксимационные функции для плотности потоков, полученные в результате конечно-разностной аппроксимации ФСУ, записанной для  $(\psi_n, \psi_p, \phi)$ , отличаются от рассмотренных АФ (7)–(12). Поэтому численное решение тестового примера итерационным методом Гуммеля не совпадает с решением, рассчитанным методом прямых (отличие решений находится в пределах 15%). Вычислительные затраты при расчете данного примера как методом прямых, так и итерационным методом Гуммеля примерно совпадают (~10 с процессорного времени ЕС-1060). Однако при решении других стационарных задач, в частности режимов работы диода в условиях больших приложенных напряжений, метод прямых оказался гораздо экономичнее итерационного метода Гуммеля.

Для проверки эффективности решения нестационарных задач рассматривались фотоэлектрические процессы в диоде при импульсном воздействии интенсивного однородного оптического излучения длительностью  $t_0 = 0,1$  мкс. На рис. 1, 2 представлены результаты расчетов динамики носителей заряда и релаксации фототока в симметричном диоде длиной 100 мкм с концентрацией примесей  $N_0 = 10^{16}$  см $^{-3}$ ,  $\tau_n = \tau_p = 10^{-7}$  с. Из приведенных на рис. 1 распределений концентрации носителей видно, что в случае несмещенного диода ( $U_0 = 0$ ) рост концентрации фотогенерированных носителей приводит к исчезновению области объемного заряда  $p-n$ -перехода. Соответственно падение встроенного потенциала происходит в толще  $p$ -области (ее сопротивление больше сопротивления  $n$ -области из-за меньшей подвижности дырок:  $\mu_n/\mu_p \approx 3$ ) и частично в приконтактной области. При приложенном обратном напряжении электрическое поле в  $p-n$ -переходе приводит к выносу фотогенерированных носителей из перехода, в результате область объемного заряда не исчезает и падение потенциала на  $p-n$ -переходе сохраняется.

На рис. 2 приведены зависимости фототока от времени после выключения импульса при низком (кривые 1) и высоком (кривые 2) уровне фотовозбуждения. При низком уровне фотовозбуждения ( $\Delta n \ll N_0$ ,  $\Delta n$  —

Рис. 2. Релаксация фототока после выключения импульса оптического излучения интенсивностью  $G = 4 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}\text{с}^{-1}$  (кривые 1) и  $G = 4 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}\text{с}^{-1}$  (кривые 2): сплошные кривые —  $U_0 = 0$ ; штриховые —  $U_0 = 5 \text{ В}$



характерное значение концентрации фотогенерированных носителей) полученное значение фототока на момент выключения импульса хорошо согласуется с предсказанием линейной теории [14] и практически не зависит от приложенного напряжения так же, как и релаксация фототока. При высоком уровне фотовозбуждения ( $\Delta n \gg N_0$ ) вследствие появления значительных индуцированных полей в толще  $n$ - и  $p$ -областей фототок зависит от приложенного напряжения, причем скорость релаксации фототока тем выше, чем больше приложенное напряжение.

Для расчета одного варианта переходного процесса на неравномерной пространственной сетке, содержащей 70 узлов с относительной точностью

$$\varepsilon = 10^{-2} \left( \varepsilon = \left[ \sum_i^N (f_i^n - f_i^k)^2 / |f_i^k|^2 \right]^{1/2} \right),$$

где  $f_i^n, f_i^k$  — сеточное значение одной из функций ( $n, p, \varphi$ ) на шаге предиктора и корректора соответственно, потребовалось 80—120 неравномерных шагов по времени и 1 мин времени процессора ЕС-1060. Сравнение вычислений с различными АФ показало, что АФ (9)—(11) имеют примерно одинаковую эффективность, однако вычислительные затраты при использовании АФ (9) несколько ниже. При расчетах с АФ (12) объем вычислений в 1,5 раза больше, чем с АФ (9)—(11). Проводились также расчеты рассмотренного примера итерационным методом Гуммеля [15]. При этом потребовалось  $\sim 10^7$  шагов по времени и  $\sim 90$  мин процессорного времени. Относительная точность  $\varepsilon^*$  задавалась на уровне  $10^{-2}$  ( $\varepsilon^* = \max_i \{ |f_i^{k+1} - f_i^k| / |f_i^k| \}$ , где  $f_i^k$  — ненулевое значение одной из функций ( $\psi_n, \psi_p, \varphi$ ) в  $i$ -й точке пространственной сетки на  $k$ -й итерации). Низкая эффективность расчетов итерационным методом Гуммеля объясняется сильной нелинейной связью функций  $n, p, \varphi$  в режиме воздействия интенсивного оптического излучения (аналогично случаю высокого уровня инжекции).

Таким образом, проведенные расчеты показывают достаточно высокую эффективность методики расчета полупроводниковых структур на основе метода прямых и жесткоустойчивых методов Гира.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gummel H. K. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady-state transistor calculation // IEEE Trans.—1964.—ED-11.—P. 455.
2. Polssky B. S., Rimshans J. S. Numerical simulation of transient processes in 2-D bipolar transistors // Solid-State Electron.—1981.—2, N 12.—P. 1081.
3. Turgeon I. J., Navon D. H. Two-dimensional carrier flow in a transistor structure under reactive circuit conditions // IEEE Trans.—1978.—ED-25, N 7.—P. 837.
4. Manck O., Engl W. L. Two-dimensional computer simulation for switching a bipolar transistor out of saturation // IEEE Trans.—1975.—ED-22, N 6.—P. 339.
5. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений.—М.: Физматгиз, 1960.—Т. 2.
6. Bank R. E., Coughran W. M., Fichtner W. et al. Transient simulation of silicon devices and circuits // IEEE Trans.—1985.—CAD-4, N 4.—P. 436.
7. Rafferty C. S., Pinto M. R., Dutton R. W. Iterative methods in semiconductor device simulation // IEEE Trans.—1985.—CAD-4, N 4.—P. 462.
8. Gear C. W. Simultaneous numerical solution of differential-algebraic equation // IEEE Trans.—1971.—ST-18, N 1.—P. 89.
9. Захаров А. Ю., Турчанинов В. И. STIFF — программа для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (адаптация для ЭВМ БЭСМ-6) // Инструкция ИПМ АН СССР, 1977.

10. Польский Б. С. Численное моделирование полупроводниковых приборов.— Рига: Зинатне, 1986.
11. Scharfetter D. L., Gummel M. K. Large signal analysis of a silicon read diode oscillator // IEEE Trans.— 1969.— ED-16, N 1.— P. 64.
12. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрофизики.— М.: Наука, 1985.
13. Майоров С. А., Руденко А. А., Шипилин А. В. О численном методе решения системы уравнений для потенциала и носителей заряда в полупроводниковых структурах // Журн. вычисл. математики и мат. физики.— 1980.— 20, № 1.
14. Викулов И. М., Стафеев В. И. Физика полупроводниковых приборов.— М.: Сов. радио, 1980.
15. Кудряшов П. А., Кучеренко С. С. Численное моделирование переходных процессов в полупроводниковых неоднородно легированных структурах в условиях высокого уровня фотовозбуждения // Тр. Респ. конф. по численным методам и средствам проектирования и испытания элементов РЭА.— Таллин: Таллин. политехн. ин-т, 1987.— Т. 1.

*Поступила в редакцию 19 декабря 1988 г.*

---