

И. Вик

(Кайзерлаутерн, Германия)

## МЕТОД ЧАСТИЦ ДЛЯ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Анонсируется численный метод, основанный на сведении кинетического уравнения для полупроводников к уравнению Власова. Имеются результаты модельных расчетов одно- и двумерной задач пространственно-однородной релаксации с модельным оператором столкновений.

Кинетическая модель для полупроводниковых приборов выглядит следующим образом:

$$f_t + v \partial_x f + E \partial_k f = J(f), \quad (1)$$

$\partial_x, \partial_k$  — градиенты пространственных и волновых векторов;  $f$  — функция распределения электронов в  $x-k$ -пространстве, т. е.  $f \geq 0$ , и ее можно считать нормализованной:  $\int f dx dk = 1$ ;  $v = v(k)$  — заданная функция;  $E$  — электрическое поле, обычно составленное из заданного внешнего поля  $E_{ex}$  и самосогласованной части  $E$ , которая определяется из выражений

$$\operatorname{div} E = \int f dk - p(t, x); \quad \operatorname{rot} E = 0,$$

где  $p(t, x)$  — распределение дырок, которое предполагается известным;  $J(f)$  описывает эффекты столкновений и  $\int \int J(f) dx dk = 0$ . Конечно, такая модель может быть улучшена, но она является основой для нашего рассмотрения. Дополнительно должны быть заданы соответствующие граничные и начальные условия:

$$f(0, x, k) = f_0(x, k).$$

Эта система без столкновительного члена — в точности то, что изучается физикой плазмы с 1939 г., начиная с работ Власова, Ландау и многих других.

В 1961 г. Р. Морс [1] предложил следующий численный метод.

Стартуя из начального множества точек  $z_i^0 = (x_i^0, k_i^0)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , вычисляем  $\tilde{E}$  из выражений

$$\operatorname{div} \tilde{E} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \omega_i(x_i^j); \quad \operatorname{rot} \tilde{E} = 0, \quad (2)$$

где  $\omega_i$  — некоторая сглаживающая функция. Продвигаем точки в соответствии с

$$k_i^{j+1} = k_i^j + \Delta t \tilde{E}(j \Delta t, x_i^j); \quad x_i^{j+1} = x_i^j + \Delta t v(k_i^{j+1}) \quad (3)$$

и возвращаемся снова к (2).

Этот метод частиц в настоящее время конкурирует со многими другими предположениями [1]. Благодаря эволюции компьютеров и математическому улучшению, этот метод пережил все другие и его математическая интерпретация дает нам повод думать, что его распространение применимо на случай полупроводников.

Рассмотрим  $z^0 = \{z_i^0\}$  как распределение реальной начальной конфигурации электронов. Это означает, что мы нуждаемся не в уравнении для модели, а в законах движения частиц. Такие законы, отличные от случая плазмы, могут быть легко добавлены, и мы получаем хорошо известный метод Монте-Карло, широко используемый в силу того, что он очень просто реализуется на компьютере и программа чрезвычайно гибка. Однако с математической точки зрения для этого метода может быть доказана лишь стохастическая

сходимость. Численные же результаты позволяют предположить гораздо более сильную сходимость. Так как уравнения движения представляют собой характеристические уравнения для (1), Котте [2] рассматривает следующую формулу интегрирования:

$$f(t, x, k) = f(t, z) = \int f(t, \tilde{z}) \delta(z - \tilde{z}) d\tilde{z} \approx \sum w_i f(t, z_i). \quad (4)$$

В случае плазмы  $f$  постоянна на характеристиках, в случае полупроводников должно быть добавлено

$$\dot{f}(t, z_i) = J(f), \quad (5)$$

где столкновительный член аппроксимируется той же формулой интегрирования.

Котте в своей диссертации под руководством Равьяра [12] и все остальные представители этой школы использовали правило трапеции с фиксированным размером сетки. Но так как  $k$  не ограничено, численный метод нуждается в модификациях, поэтому статьи Мас-Галлика [6], Дегона [3] и других посвящены доказательствам существования, единственности и сходимости. Ими представлены также и численные результаты для задач с искусственными граничными условиями.

Я исследовал этот метод, используя гауссовские формулы интегрирования. В этом случае неограниченность не представляет проблемы [5]. Рассмотрим здесь следующий простой пространственно-однородный пример:

$$k \in \mathbb{R}, \quad f_t + E_{ex} f_k = g(k) - f,$$

где  $g \geq 0$  — заданная  $L^1$ -функция и  $\int g dk = 1$ ,  $E_{ex} = \text{const}$ .

Это простая модель релаксации, где конечное состояние  $g$  будет достигаться экспоненциально. Из характеристик  $k(t) = k^0 + tE_{ex}$  следует, что конечное состояние  $g$ , сконцентрированное при  $k < 0$ , трудно аппроксимировать. Однако простая модель релаксации очень важна, поэтому мы ищем другие возможности.

В случае плазмы указанное уравнение является законом сохранения. Следовательно,  $z^0$  может быть интерпретировано как дискретная мера, аппроксимирующая  $f_0$ . В 1975 г. Нойнцерт [10] показал сходимость в терминах теории меры для одномерной плазмы. В 1978 г. Добрушин [4] опубликовал аналогичный результат. Полное доказательство сходимости в настоящее время сделано Виктори, Алленом и Гангули [13].

В случае полупроводников проблема состоит в том, что после каждого шага по времени дискретная мера преобразуется в дискретную и непрерывную части. Мы должны определить множество новых  $N$  частиц  $z^1 = \{(x_i^1, k_i^1)\}$ ,  $i = 1(1)N$ , необходимых для аппроксимации. Из первого доказательства сходимости для случая плазмы, сделанного Нойнцертом и мною [11] с использованием методов теории чисел, мы заимствуем технику редискретизации для одного измерения [8]. В дальнейшем это обобщено на два измерения Моком в его диссертации [7]. Но мне представляется очень сложным делом написание соответствующей работоспособной трехмерной программы. Если внимательно взглянуть на старое доказательство в [11], можно заметить, что оно работает для законов сохранения в дивергентной форме:

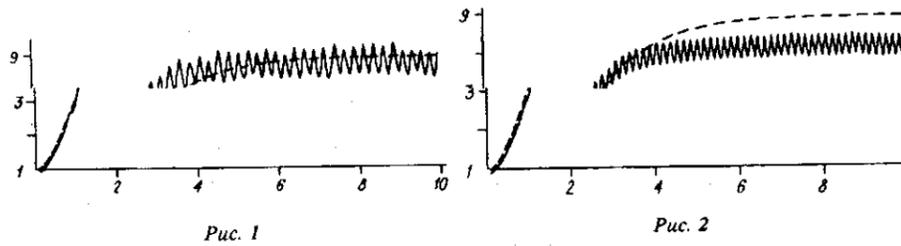
$$f_t + \text{div}_z(fH) = 0.$$

Условие  $\text{div}H = 0$ , выполненное во власовском случае, не обязательно. Несмотря на то что  $\text{div}H \neq 0$ , уравнение движения остается неизменным:  $\dot{z} = H$ . Поэтому попробуем переписать

$$f_t = J(f) \quad \text{в} \quad f_t + \text{div}_k(fH) = 0 \quad (6)$$

и рассмотрим вместо (1)

$$f_t + \text{div}_z(fv) + \text{div}_k(f(K + H)) = 0. \quad (7)$$



Это показывает, что на данном этапе достаточно исследовать лишь (6). Так как  $N$  определяется из столкнвительного члена не единственным образом, получаем некоторую свободу в надлежащем выборе  $N$  для целей численного решения. Здесь я не буду вдаваться в подробности (см. [9]), а покажу некоторые численные результаты. Мы имеем дело с простой релаксационной моделью, точное решение которой может быть получено аналитически. Для сопоставления выберем моменты. В силу того что во всех случаях первые моменты хорошо совпадают, представим графики только моментов второго порядка. Одномерная релаксация с постоянным электрическим полем с использованием  $N$  частиц

$$f_t + E_{ex} = f_0 - f, \quad f_0(k) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-k^2),$$

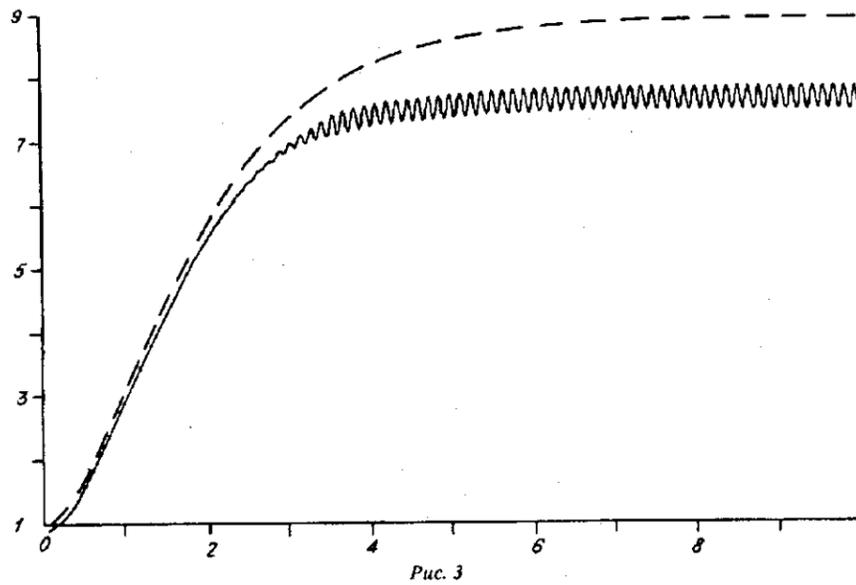
$$\Delta t = 0,025 \text{ (рис. 1)}, \quad \Delta t = 0,01 \text{ (рис. 2)} \text{ и } \Delta t = 0,0025 \text{ (рис. 3)},$$

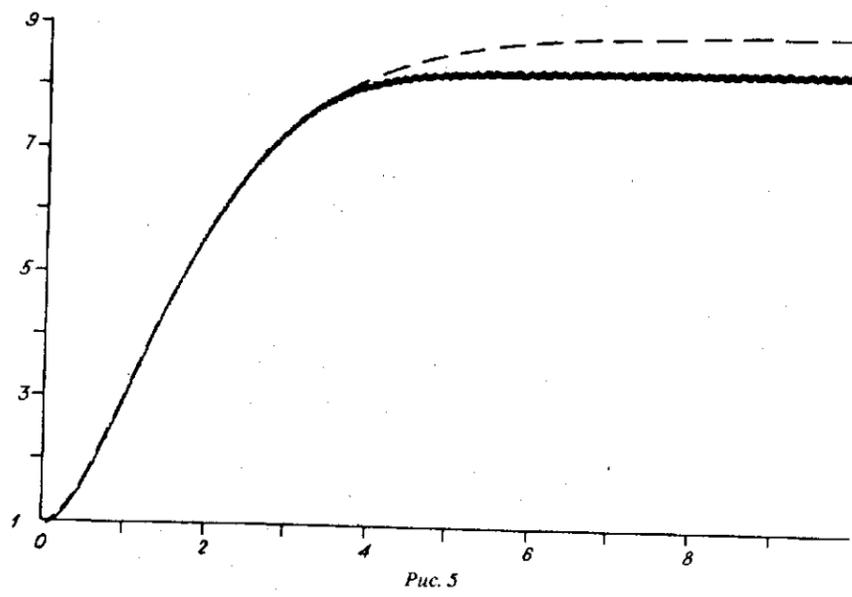
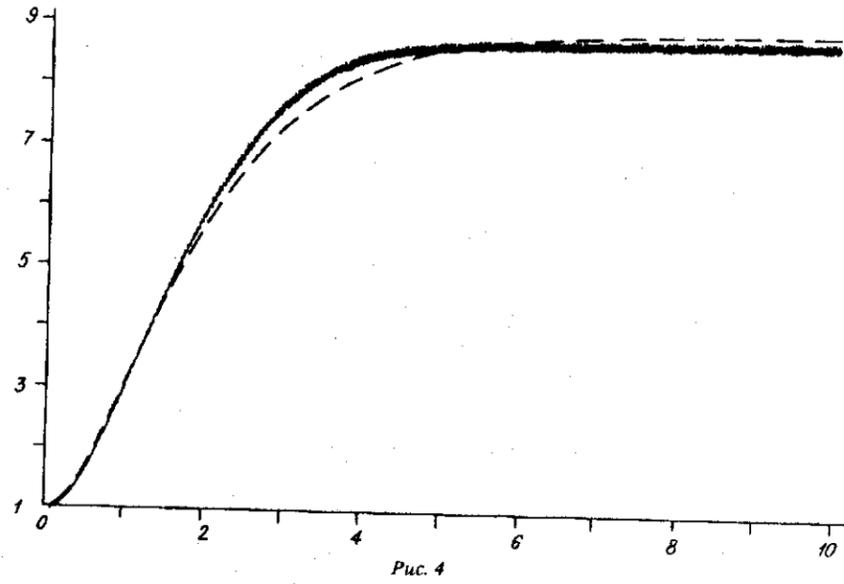
штриховая линия — точное решение.

Амплитуда численных осцилляций уменьшается с увеличением числа частиц:

$$23 \text{ частиц, } \Delta t = 0,0025 \text{ (рис. 4)}, \quad 23 \text{ частиц, } \Delta t = 0,001 \text{ (рис. 5)},$$

$$35 \text{ частиц, } \Delta t = 0,0025 \text{ (рис. 6)}, \quad 35 \text{ частиц, } \Delta t = 0,001 \text{ (рис. 7)}.$$





Эти результаты указывают на зависимость сходимости от «отношения» пространственной и временной дискретизаций, что знакомо для разностных схем уравнений первого порядка.  
 В случае двумерной релаксации с использованием 27 частиц,  $\Delta t = 0,05$ , имеем

$$f_t = g - f,$$

$$f_0(k) = \frac{\pi}{\pi-2} (1 - \sin \pi k_1), \quad g(k) = \frac{\pi}{\pi-2} (1 - \sin \pi k_2) \quad (\text{рис. 8}),$$

$$f_0(k) = h(k_1)h(k_2), \quad g(k) = \frac{\pi}{\pi-2} (1 - \sin \pi k_1)(1 - \cos 2\pi k_2) \quad (\text{рис. 9}),$$

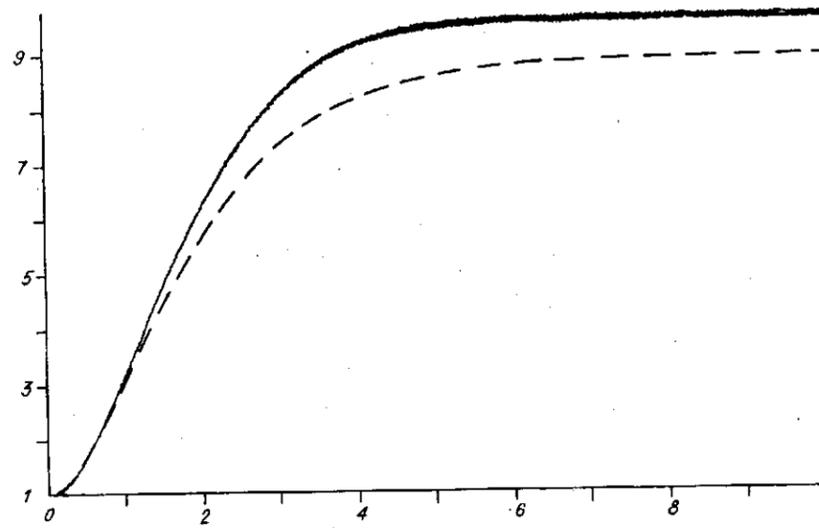


Рис. 6

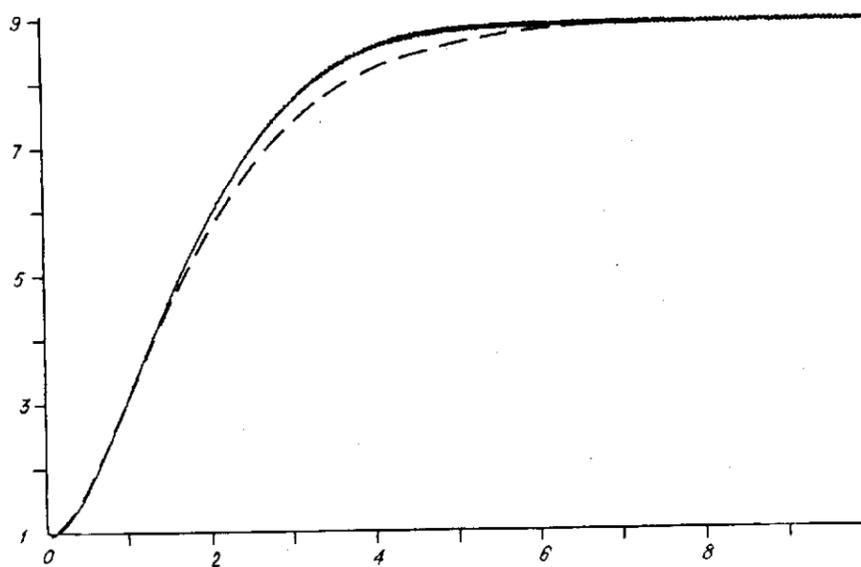
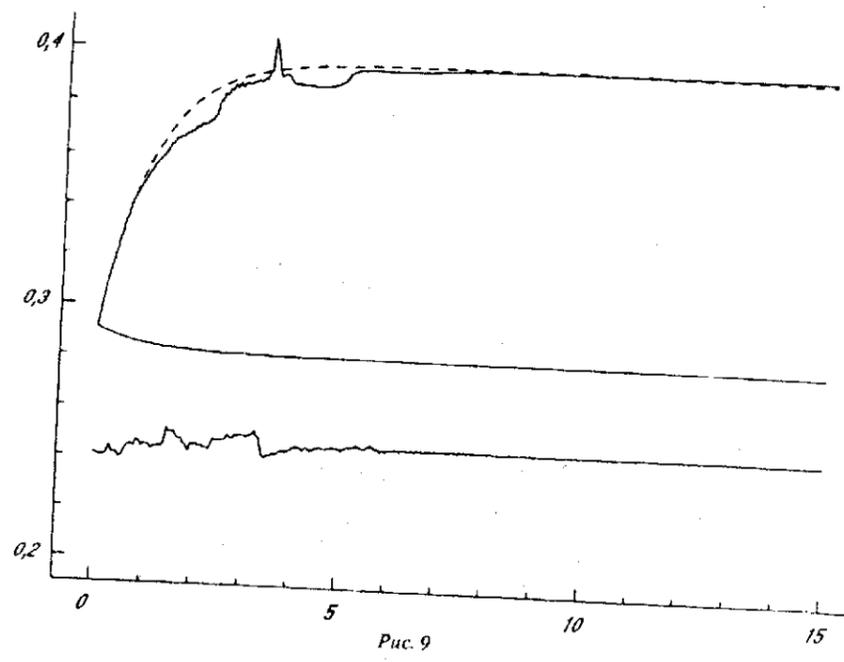
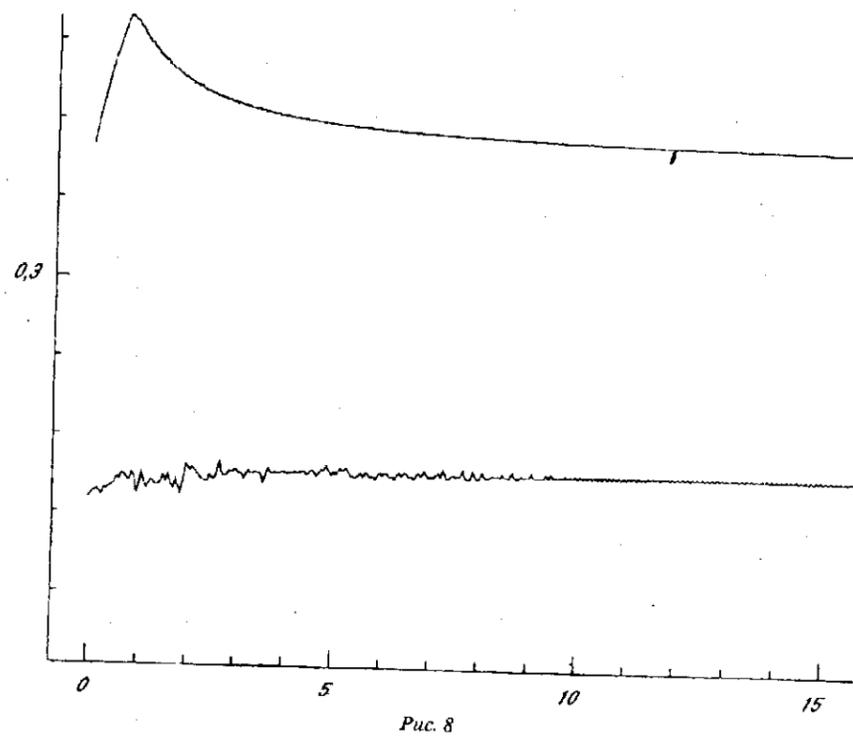


Рис. 7

$$h(x) = \begin{cases} 4x, & 0 \leq x \leq \frac{1}{2} \\ 4(1-x), & \frac{1}{2} \leq x \leq 1 \end{cases}$$

Здесь снова показаны вторые моменты, штриховой линией обозначено истинное решение. В последних примерах уменьшение шага по времени увеличивает точность.

Численные эксперименты показывают разумное поведение решения для малого числа частиц, поэтому имеет смысл продолжить теоретическое исследование данного метода.



#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.

1. *Methods in Computational Physics* /Eds. B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg.—N.Y.: Academic Press, 1970.—Vol. 9.
2. Cottet G. M. *Méthodes particulières pour l'équation d'Euler dans le plan*. Thèse 3<sup>e</sup> cycle.—Univ. P. et M. Curie Paris, 1982.
3. Degond P., Niclot B. Numerical analysis of the weighted particle method applied to the semiconductor Boltzmann equation // *Num. Math.*—1989.—55.—P. 599.
4. Dobrushin R. L. Vlasov's equation // *Funct. Anal. Appl.*—1979.—13.—P. 115.
5. Geyer Th., Wick J. A deterministic particle method solving the linearized Boltzmann equation // *Computing.*—1990.—43.—P. 199.
6. Mas-Gallic S. A deterministic particle method for the linearized Boltzmann equation // *Transp. Theory Stat. Phys.*—1978.—16.—P. 855.
7. Moock H. Eine finite Particle Methode für die Boltzmann — Maxwell — Gleichung für Halbleiter (to appear).
8. Motta S., Russo G., Moock H., Wick J. Point approximation of a space-homogeneous transport equation // *Num. Math.*—1990.—56.—P. 763.
9. Motta S., Wick J. A new numerical method for kinetic equations in several dimensions // *Computing* (to appear).
10. Neunzert H. Mathematical investigation on particle-in-cell methods // *Proc. of the XIIIth Symp. Advance. Probl. Meth. Fluid Mech., Fluid Dynamics.*—1978.—9.
11. Neunzert H., Wick J. Die Theorie der asymptotischen Verteilung und die numerische Lösung von Integro-differentialgleichungen // *Num. Math.*—1973.—21.—P. 234.
12. Raviart P. A. An analysis of particle methods // *Num. Methods in Fluid Dynamics.*—Berlin e. a.: Springer, 1983.—(Lect. not. math.; N 1127).
13. Victory H. D., Allen E. J., Ganguly K. The convergence theory of particle-in-cell methods for multidimensional Vlasov-Poisson systems // *SIAM* (to appear).

*Поступила в редакцию 11 ноября 1991 г.*

ДК 621.382 : 518.6

**Д. Х. Навон**

*(Массачусетс, США)*

#### **ЭФФЕКТЫ ГОРЯЧИХ НОСИТЕЛЕЙ В СОВРЕМЕННЫХ СУБМИКРОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ**

Описаны оригинальные методы проектирования и анализа субмикронных полупроводниковых приборов, для которых необходимо учитывать эффекты горячих носителей. Методы основаны на сочетании решения кинетических уравнений с использованием метода Монте-Карло и уравнений более простых моделей — дрейфово-диффузионной или гидродинамической. Приведены расчеты некоторых приборов, дающие хорошее совпадение с экспериментом.

**Введение.** С приходом СБИС-технологии размеры полупроводниковых приборов сильно уменьшились до субмикронных для обеспечения быстроты и плотности упаковки. Микроскопические характеристики переноса носителей в этих малых приборах становятся более сложными, чем в больших приборах. Эффекты горячих носителей — одни из наиболее важных аспектов физики субмикронных приборов, и эти явления широко изучаются. Например, такие эффекты, как всплеск скорости, ударная ионизация, термоионная эмиссия в больших полях и переход в боковые долины в сложных полупроводниках, являются важными моментами в проектировании субмикронных приборов с адекватными свойствами.

Традиционное моделирование приборов при решении дрейфово-диффузионных самосогласованных уравнений (ДДУ) долгое время признавалось стандартной техникой численного моделирования. Однако в приложении ДДУ к моделированию субмикронных приборов не проявляются некоторые точно