

Моделирование технологических процессов

Лекция 8

**Методы численного
моделирования
полупроводниковых
приборов**

Вопросы к экзамену

- Базовые уравнения численного моделирования приборов. Дрейфово-диффузионное приближение.
- Базовые уравнения численного моделирования приборов. Термодинамическая и гидродинамическая модели.
- Дискретизация базовых уравнений. Методы построения сетки.
- Проблемы устойчивости и сходимости численного решения. Оценка качества сетки.

В основе численного моделирования полупроводниковых приборов лежит решение системы уравнений в частных производных, описывающей статическое и динамическое поведение носителей в полупроводнике под влиянием внешних полей.

Из уравнений Максвелла получаем уравнение Пуассона и уравнения непрерывности

(где ϵ – диэлектрическая проницаемость; ψ – электростатический потенциал; ρ – плотность объемного заряда; $\rho = -q(n - p + N)$; n , p – концентрация электронов и дырок, соответственно; N – алгебраически суммарная концентрация электрически активной примеси; J_n , J_p – плотность электронного и дырочного тока, соответственно; $(G - R)$ – суммарный вклад процессов генерации – рекомбинации носителей)

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = -\rho$$

$$\operatorname{div} (\epsilon \operatorname{grad} \psi) = -\rho$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{J} + \partial \mathbf{D} / \partial t$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_p + (G - R)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_n + (G - R)$$

Из кинетического уравнения Больцмана получаем для процессов переноса либо дрейфово-диффузионную модель:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n &= -q\mu_n n \text{grad } \varphi_n; \\ \mathbf{J}_p &= -q\mu_p p \text{grad } \varphi_p; \end{aligned}$$

где μ_n, μ_p - подвижности электронов и дырок, соответственно; φ_n, φ_p - квазиуровни Ферми для электронов и дырок

либо гидродинамическую модель:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n &= \mu_n (n \text{grad } E_c + k_B T_n \text{grad } n) \\ \mathbf{J}_p &= \mu_p (p \text{grad } E_v + k_B T_p \text{grad } p) \end{aligned}$$

где E_c, E_v – энергии зоны проводимости и валентной зоны, соответственно; k_B - константа Больцмана; T_n, T_p, T_l - эффективная температура электронов, дырок и решетки

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{S}_n = \mathbf{J}_n \text{grad } E_c + \left. \frac{dW_n}{dt} \right|_{C_1}$$

$$\frac{\partial W_p}{\partial t} + \text{div } \mathbf{S}_p = \mathbf{J}_p \text{grad } E_v + \left. \frac{dW_p}{dt} \right|_{C_1}$$

$$\frac{\partial W_l}{\partial t} + \text{div } \mathbf{S}_l = \left. \frac{dW_l}{dt} \right|_{C_1}$$

W_n, W_p, W_l и S_n, S_p, S_l - энергия и энергетический поток электронов, дырок и решетки

Таким образом, дрейфово-диффузионная модель включает 5 уравнений:

- уравнение Пуассона,
- уравнения непрерывности для электронов и дырок,
- уравнения переноса для электронов и дырок в дрейфово-диффузионном приближении.

Гидродинамическая модель включает 8 уравнений:

- уравнение Пуассона,
- уравнения непрерывности для электронов и дырок,
- уравнения переноса для электронов и дырок в гидродинамическом приближении,
- уравнения энергетического баланса для электронов, дырок и кристаллической решетки.

В термодинамической модели

в уравнениях переноса учитываются также термоэлектрические эффекты, связанные с неоднородным распределением температуры:

$$\operatorname{div} (\varepsilon \operatorname{grad} \psi) = -\rho$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_p + (G - R)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_n + (G - R)$$

$$\mathbf{J}_n = -q \mu_n n (\operatorname{grad} \varphi_n + P_n \operatorname{grad} T)$$

$$\mathbf{J}_p = -q \mu_p p (\operatorname{grad} \varphi_p + P_p \operatorname{grad} T)$$

где P_n , P_p – величины термоэдс для электронов и дырок

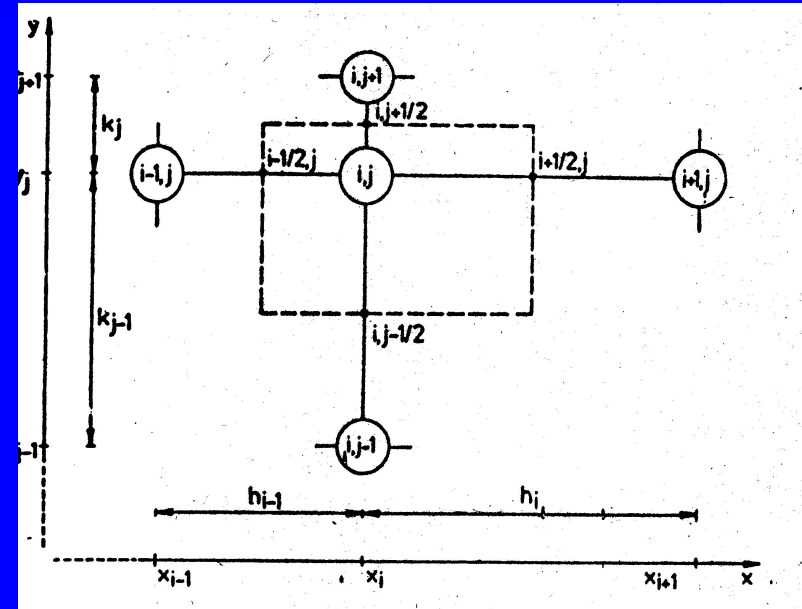
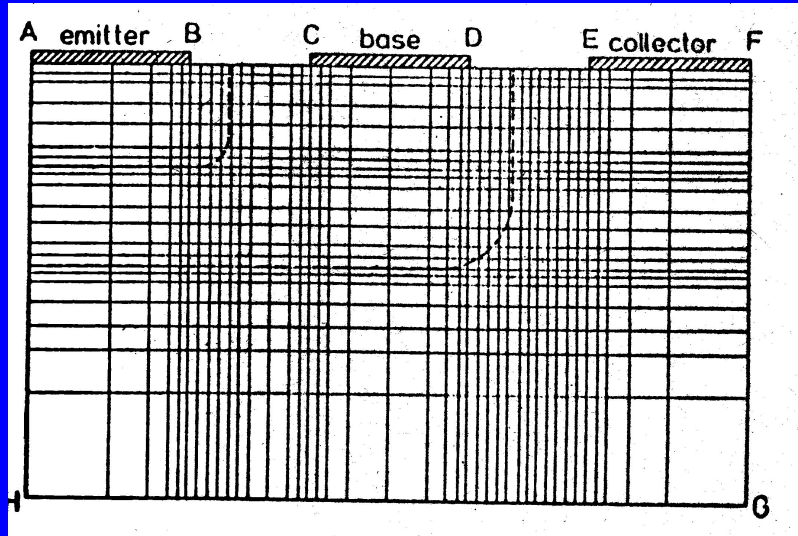
Этапы численного решения системы дифференциальных уравнений в частных производных

- Вся геометрическая область, представляющая исследуемую структуру, должна быть разделена на конечное число подобластей, решение в которых может быть наиболее легко получено с требуемой точностью
- В каждой из подобластей дифференциальные уравнения должны быть аппроксимированы алгебраическими уравнениями, которые включают только дискретные значения непрерывных переменных, входящих в систему дифференциальных уравнений
- Должна быть решена, как правило, очень большая система нелинейных алгебраических уравнений, в которых неизвестные величины представляют собой аппроксимации непрерывных переменных в дискретных точках структуры

Основные алгоритмы дискретизации

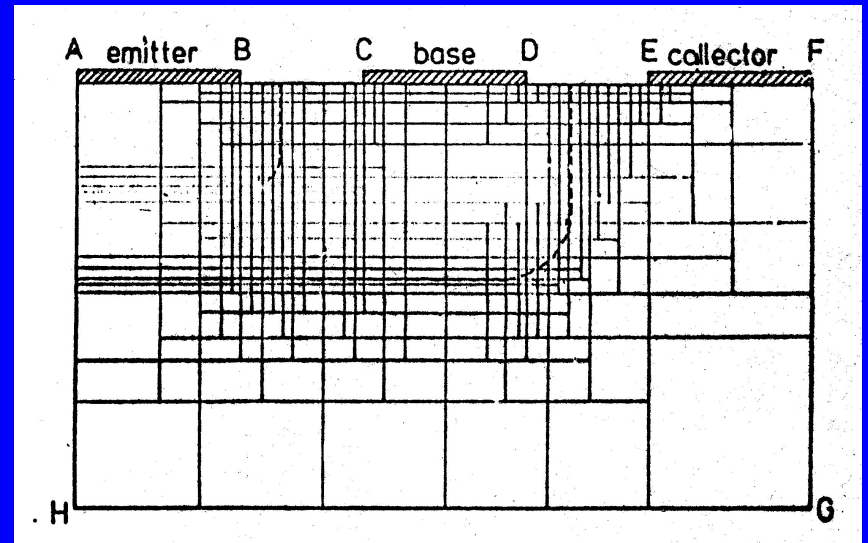
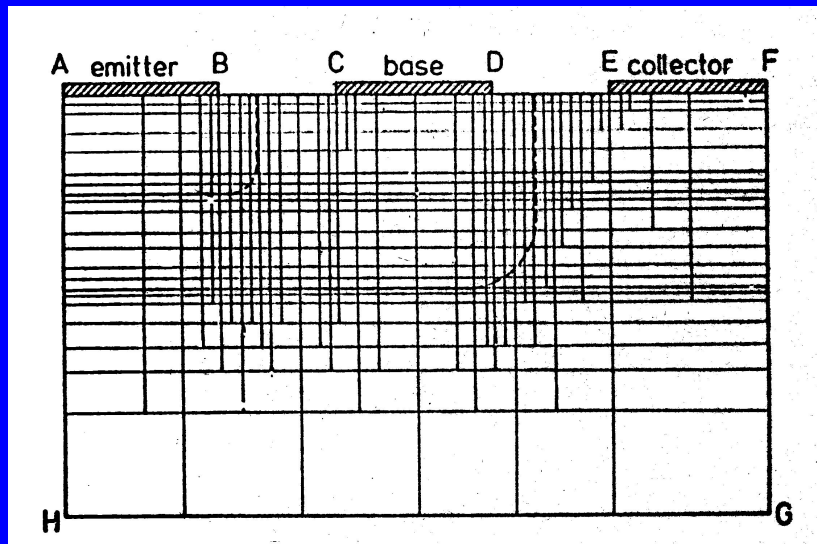
- метод конечных разностей (МКР)
- метод конечных элементов (МКЭ)
- Триангуляция Делоне

Метод конечных разностей

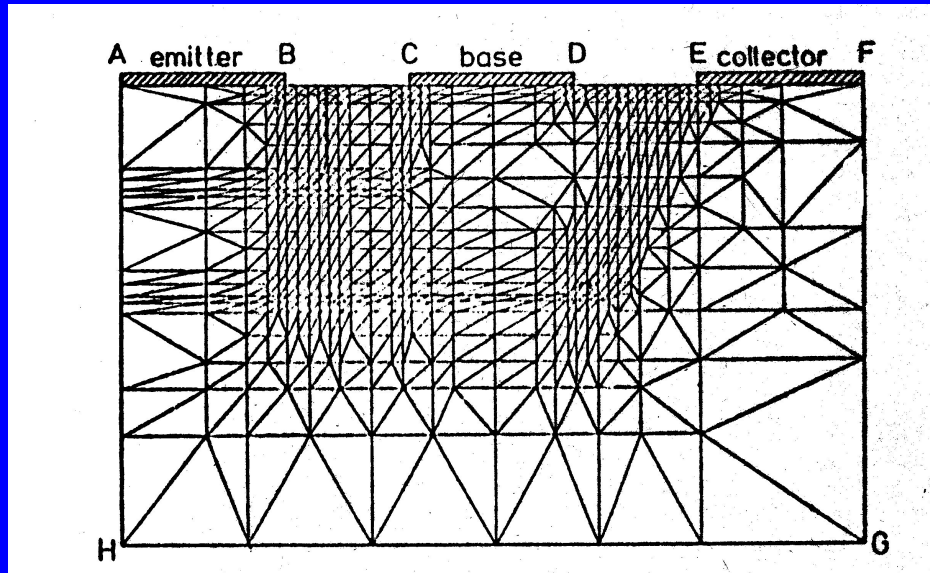


$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}}$$

Метод конечных боксов



Метод конечных элементов



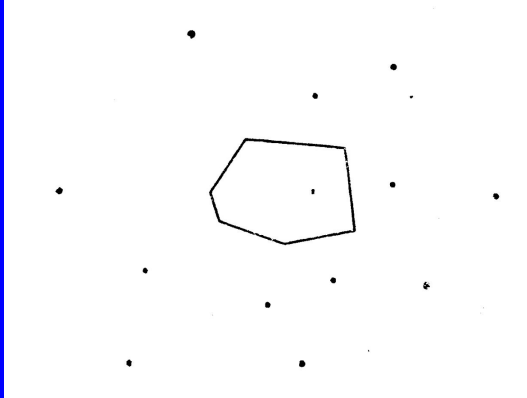
Значение функции внутри элемента:

Для треугольника $u^a(x,y) = a_0 + a_1x + a_2y$;

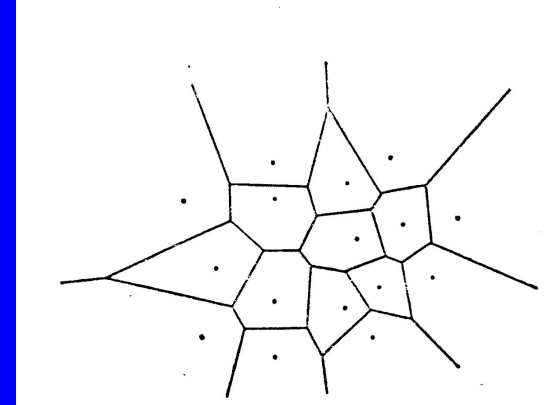
для прямоугольника $u^a(x,y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy$

Метод триангуляции Делоне.

Разбиение Дирихле



Многогранник Дирихле



Разбиение Дирихле

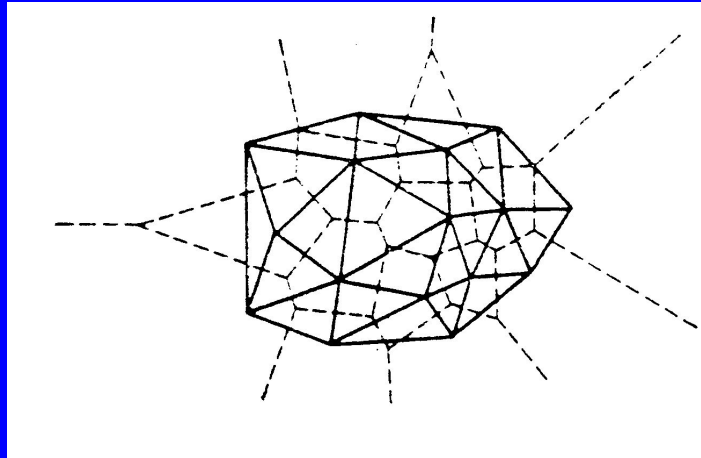
$\{p_i\}$ – набор точек на плоскости, $i = 1, n$

Ячейка Дирихле $\Omega_i = \{p: \|p - p_i\| < \|p - p_j\|, \text{ для всех } j \neq i\}$

Ячейка Дирихле Ω_i есть множество всех точек плоскости, которые лежат ближе к точке p_i , чем к любой другой точке p_j .
Можно определить также как пересечение полуплоскостей.

Подобное множество ячеек называется разбиением Дирихле; оно полностью покрывает плоскость без наложений

Триангуляция Делоне



Пусть две точки сетки называются соседними в смысле Дирихле тогда и только тогда, когда они имеют общую грань ненулевой длины многоугольника (ячейки) Дирихле.

Если соединить все соседние в смысле Дирихле точки отрезками прямых линий, то получим разбиение (триангуляцию) Делоне. Соответствующие линии построений Дирихле и Делоне взаимно ортогональны.

Если четыре или более точек лежат на одной окружности, то они могут быть триангулированы произвольным образом.

Проблема сходимости численного решения

Базовые дифференциальные уравнения для моделирования полупроводниковых приборов после дискретизации могут быть представлены как система большого числа нелинейных алгебраических уравнений $F(x)=0$.

Система может быть решена итеративно методом Ньютона

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)\Delta x = -F(x_0)$$

Точность вычислений может быть потеряна при расчете правой части и при расчете Якобиана.

На точность вычислений влияет также предельная (аппаратная) точность, с которой можно задавать значение аргумента и приращение Δx .

Коэффициент усиления ошибки в процессе численного решения

Количественно распространение ошибки вычислений задается коэффициентом усиления ошибки, который определяется для функции $y(x)$ как отношение относительного изменения функции к вызвавшему его относительному изменению аргумента

$$C_x^y = \left(\frac{dy}{y} \right) / \left(\frac{dx}{x} \right) = \frac{x}{y} \frac{dy}{dx}$$

$$C_J = (10^4 - 10^{10}); C_F = (10^1 - 10^4); \varepsilon_x = 10^{-16}; \varepsilon_y = 10^{-1}$$

Факторы, определяющие сходимость численного решения

Сходимость зависит от

- разрядности вычислительной системы (машинная точность);
- коэффициента усиления ошибки при расчете правой части;
- коэффициента усиления ошибки при расчете Якобиана;
- особенностей решаемой физической проблемы

Аппаратная точность определяется разрядностью используемой вычислительной системы и считается известной заранее.

Степень нарастания ошибки при расчете правой части зависит, в основном, от параметров сетки, а для Якобиана — еще и от особенностей характеристик в рабочей точке (например, при расчете пробойных явлений) .

Оценка качества сетки

Оценка коэффициента усиления ошибки для расчета Якобиана

$$C_J < \max(q_i) (L_{\max} / h_{\min})^2$$

q_i – фактор качества для каждого i -го треугольного элемента сетки, L_{\max} – максимальный размер домена

$q = 1$ для равностороннего треугольника (идеальное качество)

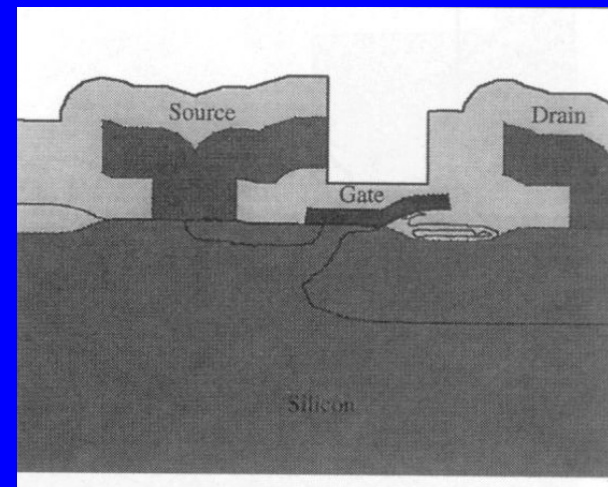
$q \gg 1$ для вырождающихся треугольников

$$q = (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2) / (4a - 3),$$

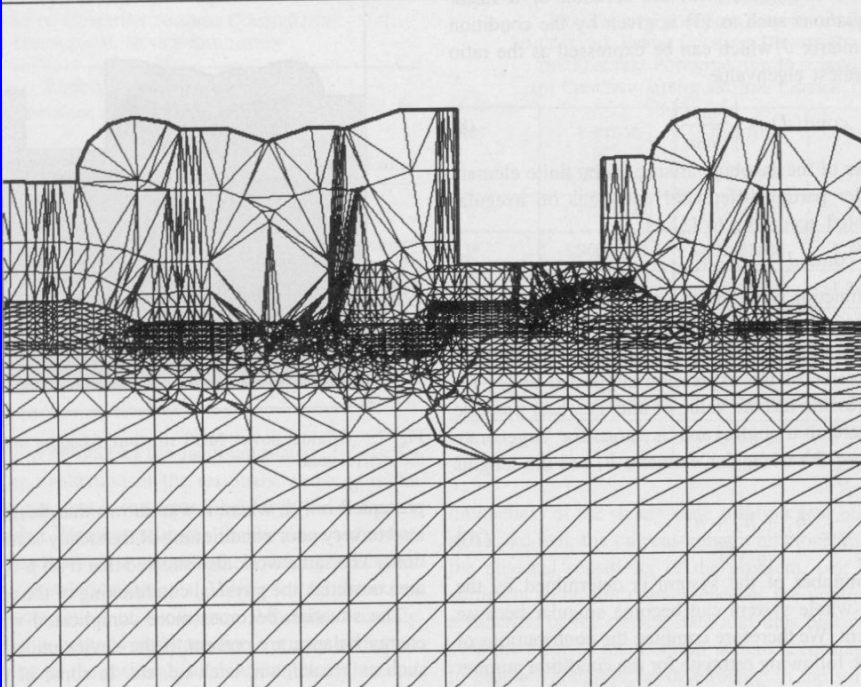
h_i – стороны треугольника, a - площадь

✓

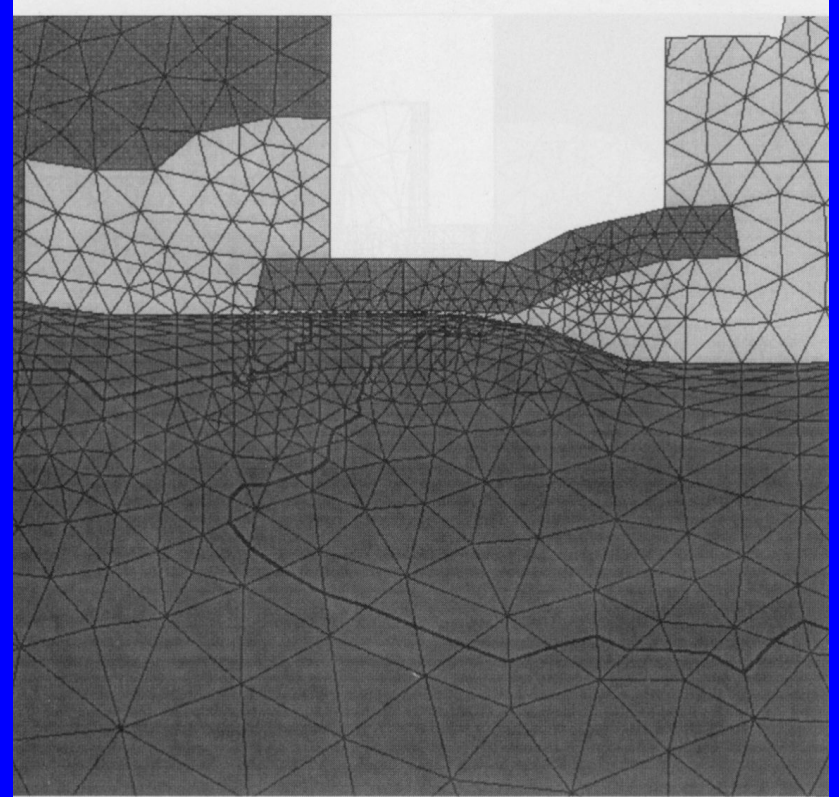
Исходная структура



Перестроение сетки



Сетка после технологического
моделирования в TSUPREM-4
3800 узлов, $C_J < 7 \times 10^{15}$



Результаты перестроения сетки
1153 узла, $C_J < 10^{10}$