

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

**«РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ
ПРОВОДИМОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ»**

Выполнил студент
423 группы
Михайлов Олег Игоревич

Научный руководитель:
к.ф.-м.н. Гайнуллин Иван Камилевич

МОСКВА

2021

1. ВВЕДЕНИЕ

В современном мире полупроводниковые приборы можно встретить на каждом шагу. Даже современные научные исследования часто базируются на использовании производных транзисторов — ЭВМ. Улучшение характеристик полупроводниковых устройств приводит к заметному увеличению производительности, а также уменьшению размеров приборов из них построенных. Поэтому ускорение процесса разработки новых полупроводниковых приборов может произвести значительный вклад в науку и технику.

Современный цикл разработки полупроводниковых устройств представляет собой петлю из трех шагов:

1. Изменение параметров полупроводника и геометрии устройства
2. Создание тестовых образцов
3. Измерение характеристик тестовых образцов

Значительную часть времени занимает второй пункт. А если учесть, что любое, даже самое маленькое изменение параметров устройства требует создание нового тестового образца, легко понять, что отказ от этого подхода может значительно сэкономить время и деньги.

Использование программного обеспечения позволяющего моделировать полупроводниковые устройства позволит отказаться от значительной части затрат на создание тестовых образцов, обращаясь к ним лишь при итоговой проверке результатов, а остальное время проводить исследования используя компьютерную симуляцию.

На сегодняшний день не существует ПО с открытым кодом, позволяющим моделировать трехмерные полупроводниковые устройства. Российские разработки в этой области позволяют моделировать только двумерные полупроводниковые устройства.

1.1. Моделирование физических процессов в полупроводниках

Моделирование полупроводников как и любая другая задача компьютерной симуляции состоит из двух частей: физической модели, описывающей происходящие процессы и численной схемы, производящей расчеты на базе сформулированных физической моделью формул.

Из-за большой популярности области полупроводниковых устройств, к их моделированию было применено довольно большое количество различных физических моделей и численными схемам в поисках наилучшей их комбинации.

1.1.1. Физические модели электронного транспорта

В зависимости от необходимых масштабов полупроводника и точности могут использоваться различные приближения: от прямого решения уравнения Шредингера для случая n -тел, до использования компактных моделей транзисторов. Но структура всех этих подходов схожа. Основной проблемой является поиск самосогласованного решения двух задач: вычисление потоков заряда, создающего электромагнитные поля и поиск электромагнитных полей, формирующих потоки заряда. Используя систему уравнений Максвелла можно легко найти электромагнитные поля, а учитывая то, что моделирование чаще всего подразумевает в качестве решений только квази-статические состояния, они могут быть сведены к уравнению Пуассона.

Уравнения для поиска потоков заряда также называются транспортными уравнениями, и именно они составляют основное различие моделей:

Дрейфово-диффузионная модель основывается на одноименной системе дифференциальных уравнений. Ее преимущества заключаются в относительной простоте и возможности исследования объектов с размерами превышающими 100 нм, что представляет большой прикладной интерес. Основным недостатком данной модели является её неприменимость к устройствам размерами меньше 100 нм.

Гидродинамическая модель использует уравнения Эйлера гидродинамики идеальной жидкости. Эта модель позволяет работать с образцами размеры которых меньше 100 нм. Недостатком модели являются серьезные ограничения на используемую численную схему и сложности при моделировании больших полупроводниковых устройств.

Метод Монте-Карло в отличии от описанных выше не является упрощением кинетического уравнения Больцмана, а предлагает моделировать стохастическое движения частиц, раскладывая движение частиц или кластеров на свободное перемещение и столкновения. При этом время свободного движения и параметры ударов вычисляются на основании случайных чисел. Такой подход позволит моделировать образцы заметно меньших размеров, а недостатком метода является его низкая скорость.

1.2. Численные методы

Поиск самосогласованного решения уравнений, вне зависимости от модели, является неразрешимой задачей для аналитической математики. Единственным способом отыскать такое решение являются численные методы, которые получили серьезное развитие с появлением ЭВМ.

1.2.1. Метод конечных разностей – МКР

Метод конечных разностей является одним из самых простых численных методов, его принцип строится на построении сетки, для каждого узла которой записывается разностное уравнение – аналог исходного уравнения, в котором производные заменяются различными разностными схемами. В итоге получается система алгебраических уравнений, решением которой являются численные значения искомой функции в узлах сетки. Для нестационарных задач применяются итерационные методы, в котором на каждом шаге по времени вычисляются значения на следующем шаге.

Преимущество МКР заключается в заметно большей по сравнению с другими методами скорости для простых задач. Проблемой метода является его ограничения на геометрию областей и неустойчивость.

1.2.2. Метод конечных объемов – МКВ

Метод конечных объемов основывается на разбиении области на непересекающиеся объемы вокруг узловых точек в которых ищется численное решение. Эти объемы также часто называют контрольными. Используя теорему о дивергенции и заменяя интеграл по объему на интеграл по поверхности контрольных объемов исходное уравнение превращается в систему алгебраических уравнений записанных для узловых точек. Решение системы алгебраических уравнений дает численное решение исходной задачи. Для решения нестационарных задач применяются те же подходы что и в методе конечных разностей.

Основными преимуществами данного метода являются сохранение основных величин во всей области даже для грубой расчетной сетки, а также его применимость к областям со сложной геометрией. Основной проблемой метода является сложность построения схемы больших порядков.

1.2.3. Метод конечных элементов – МКЭ

Метод конечных элементов состоит в том, что сопоставляя каждому элементу – области из разбитого исследуемого объема, аппроксимирующую функцию, которая равна нулю вне своего элемента, найти такие коэффициенты для функций, чтобы

их сумма оказалась решением исходной задачи. Исходную граничную задачу приводят к слабой форме, из которой формируют систему линейных алгебраических уравнений. Решением этой системы являются коэффициенты аппроксимирующих функций, а их сумма является решением исходной задачи.

Недостатком этого метода является большая сложность его реализации и некоторые сложности с построением правильной сетки разбиения. Однако этот метод имеет серьезные преимущества над классическими численными методами, в частности полностью произвольная форма исследуемой области, возможность варьирования размеров сетки в зависимости от необходимой точности и результат сразу в виде готовой функции, без необходимости дополнительной аппроксимации.

2. ПОСТАНОВКА И МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Задачей, для решения которой было разработано специальное ПО – было моделирование различных полупроводниковых устройств размером порядка 1 мкм. Для моделирования была выбрана дрейфово-диффузионная модель, которая лучше всего подходит для работы с объектами таких размеров.

2.1. Уравнения дрейфово-диффузионной модели

Система уравнений, составляющая основную суть дрейфово-диффузионной модели состоит из нескольких частей:

- Уравнений для тока:

$$\vec{J}_n = qn(\vec{r})\mu_n\vec{E}(\vec{r}) + qD\nabla n; \quad \vec{J}_p = qp(\vec{r})\mu_p\vec{E}(\vec{r}) - qD\nabla p; \quad (2..1)$$

- Уравнений непрерывности:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\nabla \cdot \vec{J}_n + U_n; \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q}\nabla \cdot \vec{J}_p + U_p; \quad (2..2)$$

- Уравнения Пуассона:

$$\nabla \cdot (\varepsilon\nabla V) = -(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (2..3)$$

Здесь U_n и U_p - скорость рекомбинации и генерации носителей заряда, рассчитываемые отдельно.

2.2. Численный метод

Для решения системы дифференциальных уравнений был выбран метод Галеркина - частный случай численной схемы конечных элементов, позволяющий

значительно ускорить скорость вычислений за счет сеток состоящих из разных элементов.

Для решения системы уравнений методом МКЭ необходимо составить их слабые формы, то есть задачи решения дифференциальных уравнений превратились в задачу на отыскание таких функций u из Гильбертова пространства V , что:

$$\forall v \in V, a(u, v) = f(v) \quad (2..4)$$

Здесь в качестве билинейной формы $a(u, v)$ используется скалярное произведение в L^2 .

Метод Галеркина заключается в сужении области поиска решение u до n -мерного подпространства $V_n \subset V$, что позволяет представить u_n , как конечную линейную комбинацию базиса V_n : $u_n = \sum_{j=1}^n u_j e_j$. Рассматривая в качестве тестовых функций v – базис V_n имеем:

$$a \left(\sum_{j=1}^n u_j e_j, e_i \right) = \sum_{j=1}^n u_j a(e_j, e_i) = f(e_i) \quad (2..5)$$

Это уравнение является системой линейных алгебраических уравнений на u_j . Решение этой системы и подстановка значений в формулу для разложения u_n по базису дает приближенное решение исходной задачи.

Для МКЭ подпространство V_n выбирается исходя из его базиса – функций соответствующих вершинам сетки дискретизации пространства, имеющих ненулевое значение только в области элемента соответствующего вершине.

Поиск самосогласованного решения происходит по специальному алгоритму: задается начальное распределение носителей заряда, после чего решается уравнение Пуассона, затем рассчитываются распределения носителей зарядов используя уравнения непрерывности на основе полученного потенциала из уравнения Пуассона. На этом этапе есть два распределения носителей и потенциала. Сравнивая их и если разность слишком велика - вновь решаем уравнение Пуассона уже для рассчитанного распределения зарядов, а для полученного потенциала рассчитываем новые распределения зарядов которые сравниваем с предыдущими. Эти операции

повторяются до тех пор, пока разность в распределениях не станет меньше, чем точность необходимая от наших расчетов, после чего вычисляются токи.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Разработанное ПО было протестировано на полевом транзисторе. Были получены распределения потенциала и концентрации электронов, а также его выходные характеристики.

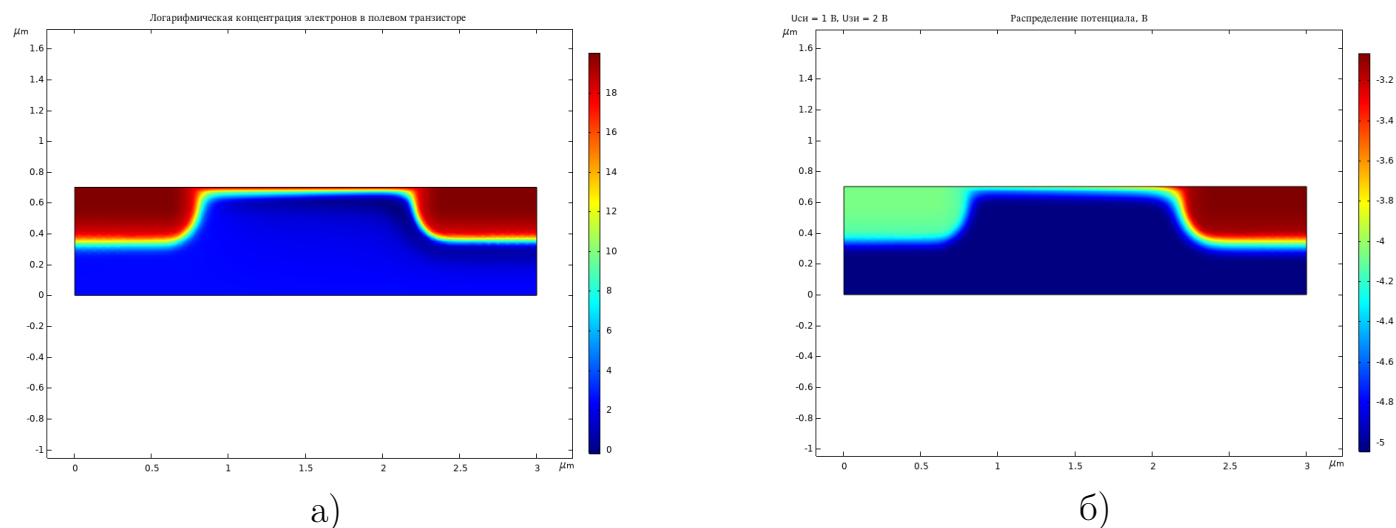


Рис. 3.1: Результаты моделирования: концентрация электронов (а), распределение потенциала (б)

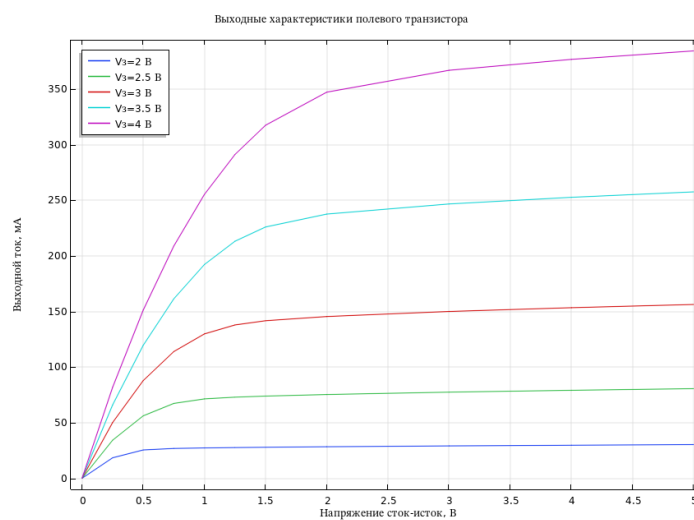


Рис. 3.2: Выходные характеристики моделируемого транзистора

4. ВЫВОДЫ

В ходе работы был разработан прототип программного обеспечения для моделирования электронной проводимости в полупроводниковых приборах. Проведено моделирование работы полевого транзистора и получено качественное совпадение.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. A. Mauri, A. Bortolossi, G. Novielli, R. Sacco. 3D Finite Element Modeling of Current Densities in Semiconductor Transport with Impact Ionizations // Politecnico di Milano. 2014.
2. F. Balestra. New Semiconductor Devices // Acta Physica Polonica A 2008. vol. 114, number 5. p. 945-972.
3. D. Vasileska, D. Mamaluy, H. Khan, K. Raleva. Semiconductor device modeling // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. 2008. vol. 5.
4. J. Colinge, C. Colinge. Physics of semiconductor devices // Kluwer Academic Publishers. 1996.
5. D. Vasileska, K. Raleva, S. Goodnick. Monte Carlo Device Simulations // Arizona State University. 2011.
6. U. Ravaioli. New Developments in Monte Carlo Device Simulation. // Beckman Institute. 1986
7. А. М. Блохин, Д. А. Крымских, Численное исследование одной гидродинамической модели переноса носителей заряда в полупроводниках. // Матем. моделирование, 1997, том 9, номер 3, 40–50
8. S. Repin , One Hundred Years of the Galerkin Method. // Computational Methods and Applied Mathematics, 2017, vol.17, 351-357.
9. El-Saba Muhammad. Numerical Simulation of Semiconductor Devices and Circuits: Modeling and Simulation Concepts. // Ain Shams University. 2020
10. S. Shamsir, S. Hasan, O. Hassan, P. Sarathi, R. Hossain. Semiconductor Device Modeling and Simulation for Electronic Circuit Design. // Modeling and Simulation in Engineering. 2020