

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Моделирование проводимости биполярного транзистора

Выполнил студент
423 группы
Виданов Михаил Павлович

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

Москва
2021

1 Введение

Полупроводниковые приборы стали неотъемлемой частью жизни: практически любое электронное устройство имеет в себе множество транзисторов. С развитием промышленности их структура становится сложнее, размеры меньше, производство дороже, проявляются новые физические эффекты и предельные свойства материалов. Таким образом, компьютерное моделирование позволяет ускорить разработку новых микросхем за счет сокращения циклов прототипирования и проверки работоспособности прототипов методом проб и ошибок. Кроме того, численные методы позволяют рассчитать характеристики элементов, которые еще не были или еще не могут быть сделаны.

В данной работе будут рассмотрены различные подходы к моделированию полупроводниковых приборов, границы их применимости и выбрана оптимальная модель для поставленной задачи.

2 Постановка задачи и методы решения

↑ Классический подход	Компактные модели	Подходят для моделирования схем
	Диффузионно-дрейфовая модель	Хороший результат вплоть до размера в 0.5 мкм
	Гидродинамическая модель	Учитывает эффект всплеска скорости
	Монте Карло/Кинетическое уравнение Больцмана	Точное в классическом приближении
↓ Квантовый подход	Метод квантовой гидродинамики	Сохраняет особенность классической модели + квантовые поправки
	Квантовый метод Монте-Карло	Сохраняет особенность классической модели + квантовые поправки
	Уравнения квантовой кинетики (Вигнера)	Точность до функции распределения одной частицы
	Метод функции Грина	Включает и пространственные и временные поправки
	Решение уравнения Шредингера для n тел	Может быть решено только для небольшого числа частиц

Рис. 1: Иерархия транспортных моделей

2.1 Постановка задачи

Целью данной работы является расчет входной и выходной характеристик, а также распределения потенциала биполярного транзистора, изображенного на Рис. 2, зная его геометрию, концентрацию носителей заряда, тип проводимости и температуру. Полученные данные сравнить с экспериментальными.

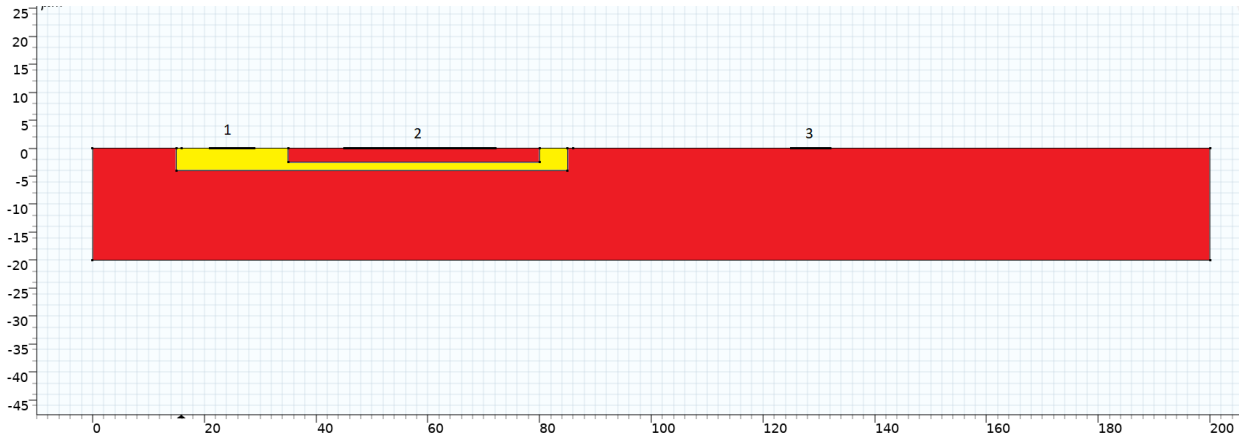


Рис. 2: Внешний вид биполярного транзистора. Красным и желтым выделены p- и r-области, 1, 2, 3 - эмиттер, база и коллектор соответственно. Размеры приведены в микрометрах.

Температура транзистора в ходе моделирования $T = 293.15K$, концентрации носителей заряда в области эмиттера равна $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ в области базы и $8 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ в области коллектора. Диэлектрическая проницаемость материала, подвижность электронов и дырок равны 11.7 , $1450 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$ и $500 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$ соответственно. Все размеры приведены на рисунке (в микрометрах). Данная модель является двумерной.

2.2 Диффузионно-дрейфовая модель

Одним из самых простых приближений в решении транспортно(кинетического) уравнений Больцмана является диффузионно-дрейфовая модель. Ток в ней считается локальной характеристикой, то есть его значение в точке зависит только от мгновенного значения поля и градиента концентрации в этой самой точке. Соответствующая система уравнений выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} J_n = qn(x)\mu_n E(x) + qD_n \frac{dn}{dx} \\ J_p = qp(x)\mu_p E(x) + qD_p \frac{dp}{dx} \\ \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{n} \nabla \mathbf{J}_n + U_n \\ \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{p} \nabla \mathbf{J}_p + U_p \\ \nabla(\varepsilon \nabla V) = -(p - n + N_D^+ - N_A^-), \end{cases} \quad (1)$$

где $n(x)$ и $p(x)$ - концентрации электронов и дырок, J - плотность тока, μ - подвижность, E - напряженность электрического поля, D - коэффициент диффузии, U - скорости генерации и рекомбинации, N_D^+ и N_A^- - донорные и акцепторные концентрации соответственно.

Первые 2 уравнения системы выражают ток через поле и концентрацию, следующие 2 - уравнения непрерывности, а последнее представляет собой уравнение Пуассона.

Численная схема решения должна учитывать:

1. Сохранение числа частиц в полупроводниковом приборе
2. Неотрицательность плотности(концентрации) носителей заряда
3. Гладкость решения

При дискретизации системы необходимо учитывать физические ограничения: размер сетки должен быть меньше радиуса Дебая $r_D = \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{q^2 N}}$, а шаг по времени - времени релаксации диэлектрика $t \approx \frac{\varepsilon}{qn\mu}$.

Простота системы (1) не позволяет учесть ряд важных факторов. Например, в присутствии сильных полей приближение равенства температуры газа электронов и решетки. В этом случае движущая сила становится пропорциональна градиенту не концентрации, а давления (nkT_n), и уравнения для тока может быть переписано в виде:

$$J_n = q(n\mu_n E + D_n \nabla n + nD_T \nabla T_n),$$

где D_T - температурный коэффициент диффузии. Но основным недостатком модели является сильное расхождение результатов с теорией при размерах транзистора меньше 0.5 мкм. Рассмотрим далее подходы, позволяющие обойти эти ограничения.[1]

2.3 Гидродинамическая модель

Данная модель основана на уравнениях Эйлера гидродинамики идеальной жидкости.

$$\begin{cases} n_t + \nabla(n\mathbf{u}) = 0 \\ \mathbf{u}_t + (\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} + \frac{1}{n}\nabla p(n) = \nabla\Phi - \frac{\mathbf{u}}{\tau} \\ \Delta\Phi = n - b(x), \Phi \rightarrow 0 \text{ при } |x| \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2)$$

для $(x, t) \in R^d \times [0, +\infty)$, $d = 1, 2, 3$. Здесь n , \mathbf{u} , Φ - электронная плотность, скорость и электростатический потенциал соответственно. Константа τ - время релаксации скорости, $b(x)$ задает профиль легирования и функция давления $p(n)$ такова, что $n^2 p'(x)$ монотонно возрастает 0 до $+\infty$ на $[0, \infty)$, поэтому функцию давления часто выбирают в виде

$$p(n) = a^2 n^\gamma, n > 0, a \neq 0, \gamma \geq 1$$

Одномерный случай был хорошо изучен аналитически многими авторами (например, [2], [3] и другие). Многомерное же решение изучено лишь асимптотически или в частных случаях (например, [4]).

В отличие от диффузионно-дрейфовой модели, гидродинамическая позволяет корректно учесть эффект всплеска скорости (velocity overshoot [5]). Для выявления необходимости использования этой модели чаще всего сравнивают результаты с диффузионно-дрейфовой.

2.4 Метод Монте-Карло

В отличие от всех предыдущих моделей, метод Монте-Карло основан на моделировании движения отдельных частиц, сопровождаемого мгновенными актами рассеивания. Такой подход, помимо обычно интересующих нас величин, позволяет рассчитать функцию распределения для одной частицы, среднюю скорость дрейфа в присутствии электрического поля, среднюю энергию частиц и другие величины, которые невозможно определить при использовании моделей, описанных выше. Моделирование движения ансамбля частиц также позволяет рассчитать эволюцию электронной и дырочной плотности в нестационарных процессах. Один из способов выбирать времена полета между столкновениями в соответствии с функцией распределения основан на использовании генератора случайных чисел с равномерным распределением.

$$-\ln r = \int_0^{t_r} \Gamma[\mathbf{k}(t')] dt', \quad (3)$$

Здесь r - случайное число в интервале $[0, 1]$, $\Gamma[\mathbf{k}(t')]$ - частота рассеяния, обычно рассчитываемая квантово-механически с помощью теории возмущений. В отсутствие зависимости волнового вектора от времени интеграл берется аналитически, иначе приходится использовать другие методы (например, [6]).

Аналогично поступают и с самим рассеянием: сначала с вероятностью, пропорциональной частоте, выбирают конкретный механизм рассеяния, а потом уже в нем определяют конечное состояние рассеянной частицы в соответствии с функцией распределения.

Для более точного результата или моделирования переходных процессов вместо одной частицы используют ансамбль, причем число частиц в моделируемом ансамбле ($10^4 - 10^5$) меньше их фактического числа, так что каждая из них представляет собой «супер-частицу».

Пространственный и временной шаг при расчете, помимо условий из пункта 2.2, должны удовлетворять неравенству $v_{max} \cdot \Delta t \leq l_{max}$, где v_{max} - максимальное значение групповой скорости электронов.

Метод Монте-Карло позволяет получать хорошие численные результаты при любых полях и размерах транзисторов, в которых квантовыми эффектами еще можно пренебречь.

2.5 Квантово-механические уточнения моделей

При существенном уменьшении размеров транзистора (порядка нанометров), квантовые эффекты вносят значительный вклад, что проявляется в двух основных тенденциях: (1) длина волны де Бройля оказывается сравнимой с характерными размерами областей, в результате чего становится важным учет волновых свойств электронов; (2) время пролета электрона через транзистор становится равным или даже меньшим характерного времени релаксации энергии и импульса, что делает золотое правило Ферми неприменимым. Значительный вклад, однако, могут вносить и многие другие эффекты, такие как

дискретизация энергии, туннелирование сквозь оксидную пленку, рассеяние с диссипацией энергии и другие.

Допустимым является уточнение гидродинамической модели и метода Монте-Карло для учета квантовых эффектов, таких как дискретизация энергии, туннелирование сквозь оксидную пленку, с сохранением уже имеющихся недостатков этих моделей. Например, использование граничных условий рассеяния первого порядка (scattering boundary conditions), хоть и является сильным упрощением, позволяет с некоторой точностью учесть «утечку» электронов.

2.6 Метод функции Вигнера

Основан на решении транспортного уравнения Вигнера-Больцмана для функции (квазивероятностного) распределения Вигнера, которая не может быть введена аналогично классической из-за принципа неопределенности и не удовлетворяет ее некоторым общим свойствам (например, функция Вигнера отрицательна в запрещенной области). [7] Так как любой транзистор является открытой системой, часто бывает удобно использовать свойство, согласно которому начальные условия во всем пространстве могут быть заменены начальными условиями внутри устройства и значением на границе для всех моментов времени. [8] Непосредственное решение транспортного уравнения может быть получено любым подходящим численным методом (в литературе чаще всего встречается Монте-Карло).

2.7 Метод функции Грина

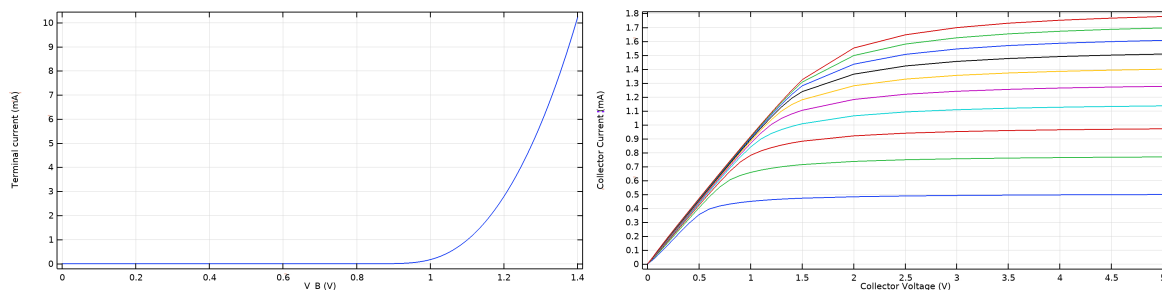
Ряд методов, основанных на нахождении функции Грина системы. Открытая система разбивается на несколько закрытых, для которых возможно численное или аналитическое нахождение волновых функций и функции Грина, путем решения соответствующих уравнений (не обязательно уравнения Шредингера). Например, в методе рекурсивной функции Грина, решается уравнение Шредингера с граничными условиями Дирихле, после чего посредством рекурсивного решения, откуда и пошло название метода, уравнения Дайсона (в некоторой литературе Швингера) находят функцию Грина всей системы.

Методы эти, хоть и дают в большинстве случаев точный результат, не могут быть применимы при определенных условиях. (1) Когда исходная система не может быть разбита на интересующие нас модули. (2) В системе присутствуют случайные потенциалы, нарушающие общую симметрию. (3) Часть методов не позволяет рассчитать волновую функцию в области рассеяния. [9]

3 Результаты моделирования

Численное решение было получено с помощью ПО COMSOL Multiphysics с использованием диффузионно-дрейфовой модели, являющейся оптимальной для нашей задачи.

Представленная на Рис. 3(а) входная характеристика отражает основные закономерности работы биполярного транзистора: наличие у него напряжения открытия, связанного с разностью потенциалов на р-п переходе и последующий нелинейный рост. Из Рис. 3(б) виден эффект насыщения в зависимости тока коллектора от напряжения коллектор-эмиттер при постоянном токе базы.



(а) Входная характеристика транзистора при напряжении коллектора 5В, напряжении эмиттера 0В. (б) Выходная характеристика транзистора для токов базы от 10 до 100 мА с шагом 10 мА.

Рис. 3

Из Рис. 4 видно убывание потенциала от коллектора к эмиттеру, равное напряжению между ними и протекание тока в этом же направлении, что полностью соответствует общеизвестным принципам функционирования биполярных транзисторов.

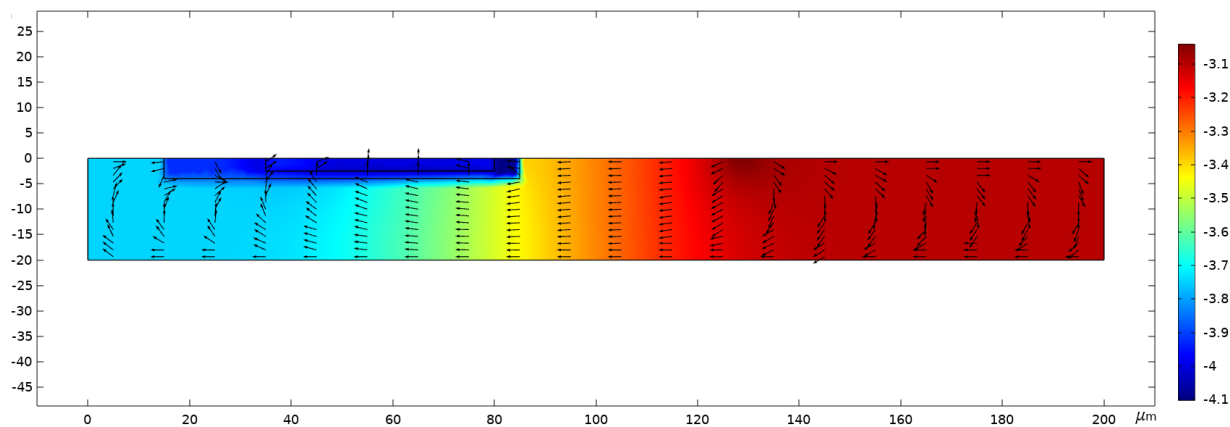


Рис. 4: Распределение потенциала в транзисторе и направление тока

4 Выводы

Представленная модель на качественном уровне описывает работу транзистора. Расчеты воспроизводят основные количественные характеристики, полученные экспериментально, что позволяет использовать представленную модель для прогнозирования характеристик работы транзистора в экстремальных условиях, которые сложно воспроизвести в эксперименте.

5 Список литературы

1. Vasileska D. et al. Semiconductor device modeling //Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. – 2008. – Т. 5. – №. 6. – С. 999-1030.
2. Degond P., Markowich P. A. On a one-dimensional steady-state hydrodynamic model for semiconductors //Applied Mathematics Letters. – 1990. – Т. 3. – №. 3. – С. 25-29.
3. Gamba I. M. Stationary transonic solutions of a one-dimensional hydrodynamic model for semiconductors //Communications in Partial Differential Equations;(United States). – 1992. – Т. 17.
4. Hsiao L., Markowich P. A., Wang S. The asymptotic behavior of globally smooth solutions of the multidimensional isentropic hydrodynamic model for semiconductors //Journal of Differential Equations. – 2003. – Т. 192. – №. 1. – С. 111-133.
5. Ruch J. G. Electron dynamics in short channel field-effect transistors //IEEE Transactions on Electron Devices. – 1972. – Т. 19. – №. 5. – С. 652-654.
6. Rees H. D. Calculation of distribution functions by exploiting the stability of the steady state //Journal of physics and Chemistry of solids. – 1969. – Т. 30. – №. 3. – С. 643-655.
7. Santos L. F. et al. An Analytical Solution for the Wigner-Boltzmann Transport Equation in the Relaxation Time Approximation //arXiv preprint arXiv:1705.00247. – 2017.
8. Bordone P. et al. Quantum transport of electrons in open nanostructures with the Wigner-function formalism //Physical Review B. – 1999. – Т. 59. – №. 4. – С. 3060.
9. Rotter S. et al. Modular recursive Green's function method for ballistic quantum transport //Physical Review B. – 2000. – Т. 62. – №. 3. – С. 1950.