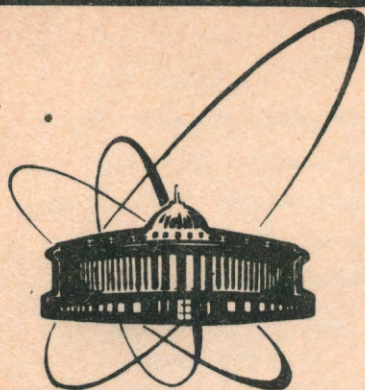


91-341



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

P11-91-371

Л. Т. Зикатанов\*, М. С. Касчиев\*

МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ  
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ

---

\*Институт математики БАН, София

1991

## 1. Введение

В последнее время интенсивно изучаются физические процессы в полупроводниковых приборах, такие как перенос зарядов в кремниевых и других структурах. Моделирование этих процессов, имеющих большой практический интерес, приводит к необходимости разрабатывать вычислительные методы, учитывающие специфику физических задач [1-7].

В соответствии с современными представлениями, физические процессы в полупроводниковых приборах описываются системой нелинейных дифференциальных уравнений диффузионно-дрейфовой модели [1]:

$$-\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi = Q(n, p, C), \text{ для } x, y \in \Omega \quad (1.1)$$

$$-\operatorname{div} J_n = -q \cdot R, \text{ для } x, y \in \Omega_1 \quad (1.2)$$

$$-\operatorname{div} J_p = q \cdot R, \text{ для } x, y \in \Omega_1, \quad (1.3)$$

где  $\Omega = \Omega_1 \cup \Phi$  (рис. 1) и

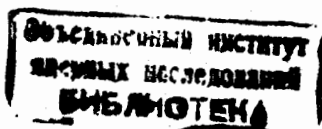
$$Q(n, p, C) = \begin{cases} 0, & \text{для } x, y \in \Phi \\ \frac{q}{\varepsilon} \cdot (p - n + C), & \text{для } x, y \in \Omega_1 \end{cases}$$

$$J_n = -q \mu_n \operatorname{grad} \psi + q \mu_n \operatorname{grad} n, \quad (1.4)$$

$$J_p = -q \mu_p \operatorname{grad} \psi - q \mu_p \operatorname{grad} p. \quad (1.5)$$

Уравнение (1.1) является уравнением Пуассона для электростатического потенциала  $\psi$ , а уравнения (1.2) и (1.3) называются уравнениями неразрывности для носителей заряда.

В этих уравнениях функции  $\mu_n$  и  $\mu_p$  представляют собой модели подвижности электронов  $n$  и дырок  $p$ , а в генерационно-рекомбинационном члене  $R$  включены генерация-рекомбинация по Шокли-Холлу-Риду и межзонная оже-рекомбинация [1]. Функция



$C(x, y)$  определяет концентрацию примесей,  $q$  - элементарный заряд протона,  $\epsilon$  - диэлектрическая проницаемость среды,  $u_t = kT/q$ , где  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура среды.

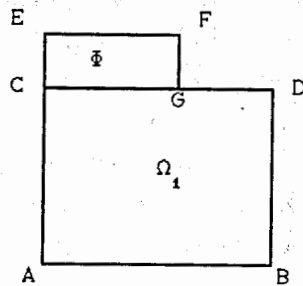


Рис.1

Сформулируем краевые условия (рис.1). На границах AC, CE, GF, BD имеем  $\frac{\partial \psi}{\partial \nu} = 0$ , а на границах AB, GD, EF функция  $\psi$  задана.

На границах AC и BD  $\frac{\partial n}{\partial \nu} = 0$  и  $\frac{\partial p}{\partial \nu} = 0$ , а на границах AB и GD

функции  $n$  и  $p$  определяются по формулам

$$n = \frac{C + \sqrt{C^2 + 4 \cdot n_i^2}}{2}, \quad p = \frac{-C + \sqrt{C^2 + 4 \cdot n_i^2}}{2},$$

где  $n_i = 1,6 \times 10^{10} \text{ [см}^{-3}\text{]}$  для кремния.

На границе раздела CG граничные условия имеют вид

$$(J_n, \nu) = 0 \text{ и } (J_p, \nu) = 0.$$

Здесь (...) означает скалярное произведение в  $\mathbb{R}^2$ , а  $\nu$  - вектор внешней нормали.

Неизвестными функциями в уравнениях (1.1)-(1.3) являются концентрации электронов и дырок  $n$  и  $p$  и электростатический потенциал  $\psi$ . После подходящей нормировки [1] система (1.1)-(1.3)

принимает вид (не будем вводить новые обозначения):

$$-\text{div grad } \psi = f(n, p, C), \quad (1.6)$$

$$-\text{div } J_n = -R, \quad (1.7)$$

$$-\text{div } J_p = -R, \quad (1.8)$$

$$J_n = -\mu_n \text{ grad } \psi + u_t \mu_n \text{ grad } n, \quad (1.9)$$

$$J_p = \mu_p \text{ grad } \psi + u_t \mu_p \text{ grad } p. \quad (1.10)$$

Краевые условия для  $n, p, \psi$  остаются прежними.

Цель работы состоит в разработке конечноэлементной схемы, сохраняющей основные физические принципы, такие как экспоненциальная зависимость электронов и дырок  $n$  и  $p$  от электростатического потенциала  $\psi$  и построение итерационного метода решения системы (1.6)-(1.9).

## 2. Итерационный метод

Дальнейшие рассуждения будем проводить при предположении, что  $\Phi = 0$ .

### 2.1. Квазилинеаризация уравнения Пуассона

Рассмотрим уравнение Пуассона для электростатического потенциала:

$$-\text{div grad } \psi = p - n + C. \quad (2.1)$$

Предположим, что в соответствии со статистикой Больцмана для носителей заряда имеем

$$n = u \cdot e^\psi, \quad (2.2)$$

$$p = v \cdot e^{-\psi}. \quad (2.3)$$

Подставляя (2.2)-(2.3) в (2.1), получаем, что

$$-\text{div grad } \psi + u \cdot e^\psi - v \cdot e^{-\psi} - C = 0. \quad (2.4)$$

Запишем (2.4) в виде

$$L(\psi) = 0. \quad (2.5)$$

Введем непрерывный параметр  $0 \leq t < \omega$ , от которого зависит неизвестная функция  $\psi$  и запишем эволюционное уравнение непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН), соответствующее уравнению (2.5):

$$L(\psi) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = -L(\psi), \quad (2.6)$$

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) - \text{заданная функция,}$$

удовлетворяющая краевым условиям для  $\psi$ . Положим  $w = \frac{\partial \psi}{\partial t}$ . Применяя к задаче Коши (2.6) метод Эйлера, получаем итерационную схему

$$L(\psi_k) \cdot w = -L(\psi_k), \quad (2.7)$$

$$\psi_{k+1} = \psi_k + \tau_k w_k. \quad (2.8)$$

С уменьшением нормы невязки  $\delta_k = |L(\psi_k)|$  "временной шаг"  $\tau_k$  стремится к 1. В (2.6) через  $L$  обозначена производная Фреше оператора  $L$  [8].

В данном случае уравнение (2.7) принимает следующий вид:

$$-\text{div grad } w_k + w_k(n+p) = \text{div grad } \psi_k + (p-n+C). \quad (2.9)$$

## 2.2. Линеаризация уравнения неразрывности

Предположим, что функция  $\psi$  задана, и рассмотрим генерационно-рекомбинационный член в уравнениях (1.7), (1.8), для описания которого используем аппроксимационную формулу [1]:

$$R = \frac{np-1}{f(n,p)}. \quad (2.10)$$

Введем следующие обозначения:

$$W_p = \frac{p}{f(n,p)}, \quad (2.11)$$

$$W_n = \frac{n}{f(n,p)}, \quad (2.12)$$

$$W = \frac{1}{f(n,p)}. \quad (2.13)$$

Подставляя выражения (2.11)-(2.13) в уравнения неразрывности, получаем уравнения

$$L_1(n) \equiv -\text{div } J_n + nW_p = W, \quad (2.14)$$

$$L_2(p) \equiv -\text{div } J_p + pW_n = W. \quad (2.15)$$

Предлагаемый здесь итерационный метод является модификацией двухступенчатого итерационного метода Сеидмана-Чу [2], и его алгоритм состоит в следующем:

1) Задается начальное приближение для  $\psi$ ,  $n$  и  $p$  во всей структуре прибора.

2) Для фиксированных  $n$  и  $p$  вычисляются значения  $W$ ,  $W_n$ ,  $W_p$ .

3) Для заданного  $\psi$  решаются нелинейные уравнения (2.14), (2.15) методом простой итерации или НАМН.

4) С полученными функциями  $n$  и  $p$  решается уравнение (2.4) для  $\psi$  непрерывным аналогом метода Ньютона. Итерации проводятся через уравнение (2.9).

5) Пункты 2)-4) повторяются до выполнения некоторого критерия точности.

Отличие данного метода от классического метода Гуммеля состоит в способе учета вида рекомбинационного члена  $R$ .

## 2.3. Выбор начального приближения

При практической реализации итерационного процесса, описанного выше, необходимо задать достаточно точные начальные приближения. Например, для уравнения (2.4), которое решается методом Ньютона, известно, что начальное приближение должно быть выбрано достаточно "близко" к решению  $\psi$  [2].

Рассмотрим систему (1.6)-(1.8). Заменяя функцию  $C$  на  $\alpha C$ , где  $0 < \alpha \leq 1$ , получим уравнение для электростатического потенциала

$$-\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi = (p-n+\alpha C), \quad (2.16)$$

а условия Дирихле для  $n$  и  $p$  принимают вид

$$n = \frac{\alpha C + \sqrt{\alpha^2 C^2 + 4 \cdot n_i^2}}{2}, \quad p = \frac{-\alpha C + \sqrt{\alpha^2 C^2 + 4 \cdot n_i^2}}{2}. \quad (2.17)$$

Пусть решение, полученное при  $\alpha = \alpha_0$ , обозначим через  $n_0$ ,  $p_0$  и  $\psi_0$ . Далее, полагая  $\alpha = \alpha_1 > \alpha_0$  и используя в качестве начального приближения  $n_0$ ,  $p_0$  и  $\psi_0$ , получаем решение  $n_1$ ,  $p_1$  и  $\psi_1$  при  $\alpha = \alpha_1$ . Продолжая таким образом, при  $\alpha_l = 1$  получаем исходную задачу, которая решается с функциями  $n_{l-1}$ ,  $p_{l-1}$  и  $\psi_{l-1}$  для начальных приближений.

Приведем алгоритм выбора начального приближения.

$$1) \text{ Полагаем } \alpha = \alpha_0 > \frac{n_i}{\max_{x,y \in \Omega} |C(x,y)|}.$$

2) Вычисляем  $n^0$  и  $p^0$  по формулам

$$n^0 = \frac{\alpha C + \sqrt{\alpha^2 C^2 + 4 \cdot n_i^2}}{2}, \quad p^0 = \frac{-\alpha C + \sqrt{\alpha^2 C^2 + 4 \cdot n_i^2}}{2},$$

а  $\psi^0$  выбираем как решение уравнения (2.16).

3) К системе (1.6)–(1.8) применяем итерационный процесс, описанный в п.2.2. Отметим, что в этой системе уравнение (1.6) заменяется на (2.16), а краевые условия Дирихле для  $n$  и  $p$  – на (2.17).

4) Полагаем  $\alpha = A\alpha_0$ , где  $A > 1$ .

5) Повторяем пп. 3)–4) до  $\alpha_l = 1$ .

Отметим, что такой выбор начального приближения не зависит от приложенного напряжения, что очень важно при решении конкретных практических задач.

### 3. Дискретизация

Дискретизация по методу конечных элементов (МКЭ) проводится на основе слабой формы задачи (2.5), (2.14), (2.15), которая состоит в следующем:

Найти функции  $\psi$ ,  $n$  и  $p \in H_E^1(\Omega)$ , удовлетворяющие интегральным тождествам:

$$(L(\psi), w) = 0, \quad (L_1(n), w) = (W, w), \quad (L_2(p), w) = (W, w), \quad (3.1)$$

для  $\forall w \in H_E^1(\Omega)$ . Здесь  $H_E^1(\Omega)$  – подпространство пространства  $H^1(\Omega)$ , с элементами, удовлетворяющими однородным условиям Дирихле на соответствующих границах.

Для аппроксимации (3.1) используем изопараметрические билинейные четырехугольные элементы [9,10]. Пусть  $S^h$  – конечномерное подпространство пространства  $H_E^1(\Omega)$  со стандартными базисными функциями, связанные с конкретным разбиением области  $\Omega$  на четырехугольники. Тогда, если  $\{\phi_k\}_{k=1}^N$  – базис пространства  $S^h$ , функции  $\psi$ ,  $n$  и  $p$  представляются в виде

$$\psi = \sum_{k=1}^N \psi_k \phi_k(x, y), \quad n = \sum_{k=1}^N n_k \phi_k(x, y), \quad p = \sum_{k=1}^N p_k \phi_k(x, y). \quad (3.2)$$

Здесь  $N$  означает число узлов, а  $\psi_k$ ,  $n_k$  и  $p_k$  – значения соответствующих функций в узлах сетки. Пробная функция  $w$  представляется аналогичным образом:

$$w = \sum_{k=1}^N w_k \phi_k(x, y). \quad (3.3)$$

Тогда (3.1) принимает вид

$$(L(\psi), w) = 0, \quad (L_1(n), w) = (W, w), \quad (L_2(p), w) = (W, w), \quad (3.4)$$

для  $\forall w \in S^h$  и называется "стандартная формулировка Галеркина", из которой получаем систему дискретных уравнений

$$L^h(\psi) = 0, \quad L_1^h n = F, \quad L_2^h p = F. \quad (3.5)$$

Остановимся на последних двух системах в (3.5). Когда конвективный член –  $\operatorname{grad} \psi$  мал по сравнению с диффузионным членом, то вклад в диагональные элементы осуществляется только за счет

диффузионного члена. В случае, когда преобладает конвективный член, диагональные элементы матрицы не будут существенными и в зависимости от граничных условий решения этих задач могут иметь осциллирующий характер [4,11].

При применении стандартного метода Галеркина к рассматриваемой задаче наблюдается возникновение "отрицательных" концентраций, что физически невозможно. Избежать этого можно, уменьшая шаг сетки  $h$  до выполнения условия  $h < \frac{2}{\max |E|}$ , где  $E = -\text{grad}\psi$  - напряженность электрического поля. Это очень жесткое ограничение [3], так как  $|E|$  принимает значения  $10^3-10^4$  в безразмерных единицах.

Другим способом подавления возникновения осциллирующих решений является переопределение тестовых функций  $w$ . Рассмотрим конечномерное подпространство  $\hat{S}^h$  пространства  $H_E^1(\Omega)$ , натянутое на базисе  $\{\hat{\phi}_k\}_{k=1}^N$ . Форма Галеркина-Петрова заключается в следующем:

Найти функции  $\psi$ ,  $p$  и  $r \in S^h$ , удовлетворяющие интегральным тождествам (3.4) для  $\forall w \in \hat{S}^h$ .

Рассмотрим канонический элемент  $[-1,1] \times [-1,1]$  (рис.2). Базисные функции пространства  $S^h$  определяем, как в [9,10]. Пусть  $h_1(t) = 0,5(1-t)$ ,  $h_2(t) = 0,5(1+t)$ . Тогда

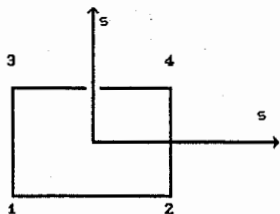


Рис. 2

$$\phi_1(r,s) = h_1(r)h_1(s)$$

$$\phi_2(r,s) = h_2(r)h_1(s)$$

$$\phi_3(r,s) = h_1(r)h_2(s)$$

$$\phi_4(r,s) = h_2(r)h_2(s)$$

В [11] базис в  $\hat{S}^h$  строится следующим образом:

$$\hat{\phi}_1(r,s) = h_1(r)(1+3\sigma_{12}h_2(r))h_1(s)(1+3\sigma_{13}h_2(s))$$

$$\hat{\phi}_2(r,s) = h_2(r)(1+3\sigma_{12}h_1(r))h_1(s)(1+3\sigma_{24}h_2(s))$$

$$\hat{\phi}_3(r,s) = h_1(r)(1+3\sigma_{34}h_2(r))h_2(s)(1+3\sigma_{13}h_1(s))$$

$$\hat{\phi}_4(r,s) = h_2(r)(1+3\sigma_{34}h_1(r))h_2(s)(1+3\sigma_{24}h_1(s)).$$

Значения  $\sigma_{ij}$  выбираются в зависимости от конкретной задачи. Разные варианты выбора этих параметров рассмотрены в [11]. Для рассматриваемой задачи значения  $\sigma_{ij}$  выбраны так, чтобы для уравнения Пуассона на равномерной сетке полученная система алгебраических уравнений была эквивалентной разностной схеме, выведенной интегро-интерполяционным методом [12].

Для вычисления интегралов в (3.4) использована квадратурная формула, точная для полиномов третьей степени на каноническом элементе. Узлами квадратурной формулы являются точки  $(0,-1)$ ,  $(1,0)$ ,  $(0,1)$ ,  $(-1,0)$ ,  $(0,0)$ . Аппроксимация коэффициентов в узлах квадратуры для билинейных элементов подобна аппроксимации, рассмотренной в [13]. При таком выборе квадратуры полученная нами схема совпадает со схемой Шарфеттера-Гуммеля [1-5] и, следовательно, является монотонной.

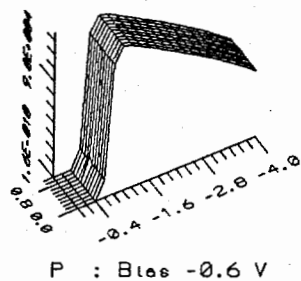
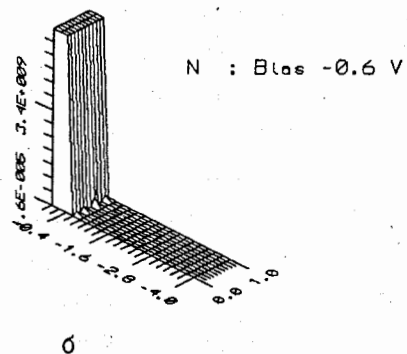
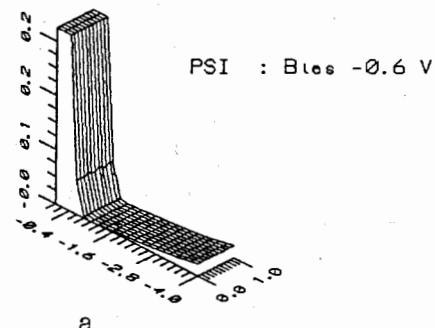
#### 4. Тестовый пример

Пусть  $\Omega$ -прямоугольная область в  $\mathbb{R}^2$ ,  $\Omega = [0,1] \times [-4,0]$ . Введем функцию  $C(x)$  следующим образом:

$$C(x,y) = \begin{cases} 10^{20}, & \text{для } x \in [0,1], y \in [-0.5,0] \\ -10^{15}, & \text{для } x \in [0,1], y \in [-4,-0.5]. \end{cases}$$

В рассматриваемом примере функции  $\mu_n$  и  $\mu_p$  зависят от напряженности электрического поля и концентраций электронов и дырок. Начальные приближения получены методом, описанным в п. 2.3. Значения параметра  $\alpha$  выбраны следующим образом:

$$\alpha_1 = 10^{-3}, \alpha_2 = 10^{-2}, \alpha_3 = 10^{-1}, \alpha_4 = 5 \cdot 10^{-1}, \alpha_5 = 1.$$



в  
Рис.3

Число внутренних итераций для уравнений неразрывности никогда не превосходит 4, а число итераций HAHH, которые проводятся для  $\psi$ , не превосходит 3.

Задача решается на регулярной и нерегулярной сетке. Полученные решения на различных сетках практически одинаковы.

На рис.3а, б, в показаны графики функций  $\psi$ ,  $n$  и  $p$ , полученные при приложенном напряжении  $-0,6$  В. Из этих рисунков видно полное отсутствие осцилляций, которое подтверждает эффективность метода Галеркина-Петрова решения таких задач.

#### Б. Заключение

В работе предложен и реализован в виде программ итерационный метод решения уравнений диффузионно-дрейфовой модели моделирования полупроводниковых приборов. Аппроксимация этих уравнений осуществляется по методу конечных элементов с использованием формы Галеркина-Петрова. Правильное определение пробных функций приводит к монотонным схемам, исключающим возникновение осциллирующих дискретных решений. Данный подход может быть применен к решению и других практических задач этого класса.

Авторы благодарят В. П. Ильина, Н. И. Горбенко и О. Пензина из ВЦ СО АН СССР за творческие обсуждения и помощь в работе.

#### Литература

1. Selberherr S. // Analysis and simulation of semiconductor devices- Wien- New York, Springer-Verlag, 1984.
2. Абрамов И., Харитонов В. // Численное моделирование элементов интегральных схем. Минск: Высшая школа, 1990.



3. Польский Б. // Численное моделирование полупроводниковых приборов. Рига: Зинатне, 1986.

4. Huang, M.-D. // The constant-flow patch test- a unique guideline for the evaluation of discretisation schemes for the current continuity equations- IEEE Trans., Vol. CAD-4, No. 4, October 1985.

5. Sharfetter D. // Gummel H. IEEE Trans., Vol. ED-14, No. 1, 1969.

6. Fichtner W. Rose D., Bank R. // Semiconductor device simulation- IEEE Trans., Vol. ED-30, No. 9, September 1983.

7. Bank R., Rose D., Fichtner W. // Numerical methods for semiconductor device simulation- IEEE Trans., Vol. ED-30, No. 9, September 1983.

8. Говурин М. // Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итерационных методов. Изв. вузов, Сер. матем., № 5(6), 1958.

9. Стренг Г., Фикс Дж. // Теория метода конечных элементов. Москва: Мир, 1977.

10. Сьярле Ф. // Метод конечных элементов для эллиптических задач. Москва: Мир, 1980.

11. Флетчер К. // Численные методы на основе метода Галеркина. Москва: Мир, 1988.

12. Самарский А. // Теория разностных схем. Москва: Мир, 1977.

13. Markowich P., Zlamal M. // Inverse-average-type finite element discretisations of self-adjoint second order elliptic problems, Preprint, Technische Universität Wien.

Рукопись поступила в издательский отдел  
5 августа 1991 года.

Зикатанов Л.Т., Касчиев М.С.

P11-91-371

Метод конечных элементов для моделирования полупроводниковых приборов

Разработан итерационный метод решения системы нелинейных уравнений диффузионно-дрейфовой модели для моделирования полупроводниковых приборов. Дискретизация уравнений проводится по методу Петрова-Галеркина с использованием билинейных конечных элементов. Показано, что полученная схема является монотонной и осциллиции решения в области р-п перехода отсутствуют. Приведены численные расчеты при моделировании одного полупроводникового прибора.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод авторов

Zikatanov L.T., Kaschiev M.S.

P11-91-371

The Finite Element Method for Simulation of the Semiconductor Devices

An iterative method for solving the system of nonlinear equations of the drift-diffusion representation for the simulation of the semiconductor devices is worked out. The Petrov-Galerkin method is taken for the discretization of these equations using the bilinear finite elements. It is shown that the numerical scheme is a monotonous one and there are no oscillations of the solutions in the region of p-n transition. The numerical calculations of the simulation of one semiconductor device are presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1991