

Твердотельная электроника

УДК 621.382.323; 621.382.82

В.И. Тимофеев, д-р техн. наук, Е.М. Фалеева

Методы численного решения систем релаксационных уравнений для анализа субмикронных гетероструктур

Представлен обзор методов решения системы релаксационных уравнений для анализа субмикронных гетероструктур. При использовании описанных методов было учтено влияние сильных электрических полей и высоких градиентов изменения характеристик носителей заряда.

In the paper review of the methods of relaxation equations system solution for submicron heterostructure analysis was presented. It was taken into account of high electric fields and high gradients of charge carriers characteristics when these methods are used.

Введение

По мере миниатюризации полупроводниковых структур возрастает необходимость в построении новых моделей для их описания. На данном этапе развития моделирования субмикронных структур уже существует ряд моделей, но, как правило, они являются аналитическими, направленными на получение интегральных характеристик, либо в них нет полного учета влияния времен релаксации импульса и энергии носителей заряда на процессы разогрева электронного газа (к примеру, работы [1–3]). Для получения более полного представления о физических процессах, происходящих в объеме полупроводниковой структуры, следует составлять численные модели. Это является сложной задачей с точки зрения описания происходящих в структуре процессов (сильные электрические поля, высокие градиенты изменения распределений концентрации, скоростей, энергии и времен релаксации носителей), и, как следствие, влечет за собой большие вычислительные затраты при моделировании. В работе описаны некоторые аспекты составления численных моделей и моделирования субмикронных структур, которые, по мнению авторов, являются ключевыми для получения адекватных результатов.

Решение системы релаксационных уравнений

Моделирование характеристик твердотельных структур может осуществляться с помощью решения следующих релаксационных уравнений [4]:

– сохранения частиц

$$v_x \frac{\partial n}{\partial x} + v_y \frac{\partial n}{\partial y} = 0; \quad (1)$$

– сохранения энергии

$$v_x \frac{\partial T_e}{\partial x} + v_y \frac{\partial T_e}{\partial y} = -\frac{T_e - T_0}{\tau_p} + \frac{2E_D}{3k\tau_E}(\gamma - 1); \quad (2)$$

– сохранения импульса

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{e\varepsilon_x}{m^*} - \frac{v_x}{\tau_p}, \quad (3)$$

$$v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} = \frac{e\varepsilon_y}{m^*} - \frac{v_y}{\tau_p}; \quad (4)$$

– Пуассона

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = -\rho / \varepsilon \varepsilon_0; \quad (5)$$

– плотности тока

$$\mathbf{j} = -en\mathbf{v}, \quad (6)$$

где v , v_x , v_y – скорость дрейфа носителей заряда и её проекции на оси координат x и y соответственно, n – концентрация носителей заряда, ε_x , ε_y – проекции напряженности электрического поля на оси координат x и y соответственно, T_e – электронная температура, T_0 – равновесная температура (температура кристаллической решетки), τ_p – время релаксации импульса, τ_E – время релаксации энергии, $E_D = \frac{m^* v^2}{2}$ – энергия направленного дрейфового движения носителей, m^* – эффективная масса, $\gamma = \frac{2\tau_E}{\tau_p}$, k – постоянная Больцмана, e – заряд электрона, φ – потенциал, ρ – плотность заряда, ε – диэлектрическая проницаемость, ε_0 – электрическая постоянная.

При моделировании субмикронных структур, особенно, если эти структуры содержат неоднородности (например, гетеропереходы и квантовые точки), нужно учитывать большие градиенты поля. Поэтому сходимость метода сильно

зависит от выбора начального приближения и шага сетки.

Уравнение Пуассона является дифференциальным уравнением в частных производных второго порядка эллиптического типа. В общем виде дифференциальное уравнение эллиптического типа может быть представлено как [5]:

$$-\nabla \cdot (c \nabla \psi) + a\psi = f \text{ для области } \Omega, \quad (7)$$

где ψ – искомая величина, а коэффициенты c , a , f определяются в моделируемой области Ω .

Граничные условия для такого уравнения могут быть следующие.

Дирихле – $h\psi = r$ на границе $\partial\Omega$.

Неймана – $\mathbf{N} \cdot (c \nabla \psi) = g$ на границе $\partial\Omega$.

Обобщенные условия Неймана – $\mathbf{N} \cdot (c \nabla \psi) + q\psi = g$ на границе $\partial\Omega$, где \mathbf{N} единичный вектор нормали; g , q , h и r – функции, определяемые в $\partial\Omega$.

Для транзисторной структуры на свободных границах выбираются граничные условия Неймана, а на электродах – условия Дирихле.

Для решения уравнения (7) необходимо провести его дискретизацию на заданной сетке. В данном случае выбрана треугольная дискретизация по методу конечных элементов. Такой выбор обусловлен как наличием больших градиентов поля в субмикронных структурах, так и наличием неоднородностей структуры на границах раздела. Триангуляция предусматривает неравномерное разбиение моделируемой области с адаптацией шага в области неоднородностей, например, таких, как области электродов. Это значительно сокращает вычислительные затраты по сравнению с использованием равномерной сетки.

Умножим данное уравнение на произвольную функцию v и проинтегрируем по частям полученное выражение по всей области Ω с применением формулы Грина:

$$\oint_{\Omega} ((c \nabla \psi) \nabla v + a\psi v) dx - \oint_{\partial\Omega} \mathbf{N} (c \nabla \psi) v ds = \oint_{\Omega} f v dx.$$

Упростим уравнение для всей границы области, используя обобщенные граничные условия Неймана. Действительно, если принять $q = 0$, то получим условия Неймана, а при $q \rightarrow \infty$ получим условия Дирихле.

После учета граничных условий и переноса всех слагаемых в правую часть получим следующий функционал:

$$\oint_{\Omega} ((c \nabla \psi) \cdot \nabla v + a\psi v - fv) dx - \oint_{\partial\Omega} (-q\psi + g)v ds = 0, \forall v. \quad (8)$$

Нахождение минимума данного функционала будет решением исходного уравнения в частных производных (в нашем случае таким уравнением будет уравнение Пуассона (5)).

После дискретизации выражения (8) получим систему линейных уравнений вида $\mathbf{Ku} = \mathbf{F}$, где вектор \mathbf{u} – столбец неизвестных, матрица \mathbf{K} состоит из коэффициентов c , a , h , и q , а вектор \mathbf{F} состоит из значений правой части уравнения Пуассона, усредненных для каждого треугольника сетки с учетом вклада g . Данная система будет содержать порядка десяти тысяч уравнений, поэтому для ее решения наиболее подходят итерационные методы, такие, как методы Якоби, Гаусса-Зейделя и другие [6].

Если же говорить об уравнении Пуассона (5), то его функционал запишется следующим образом [5]:

$$I(u) = \iint_{\Omega} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 - 2\varphi f \right) dx dy,$$

где $f = -\rho / \varepsilon \varepsilon_0$.

После дискретизации полный полином порядка m имеет вид:

$$\prod_m(x, y) = \sum_{k+r=0}^m \alpha_{kr} x^k y^r; \quad k, r = 1, 2, 3, \dots$$

Он может быть использован для интерполяции функции $\varphi(x, y)$ по значениям в $\frac{1}{2}(m+1)(m+2)$ симметрично расположенных узлах треугольника. Для треугольника $P_1 P_2 P_3$ с координатами вершин (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , (x_3, y_3) соответственно и при $m=1$ интерполирующий полином имеет вид:

$$\prod_1(x, y) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y = \sum_{j=1}^3 \varphi_j p_j^{(1)}(x, y),$$

$$\text{где } \alpha_1(x, y) = \frac{1}{C_{123}} (\tau_{23} + \eta_{23} x - \xi_{23} y),$$

$$\alpha_2(x, y) = \frac{1}{C_{123}} (\tau_{31} + \eta_{31} x - \xi_{31} y),$$

$$\alpha_3(x, y) = \frac{1}{C_{123}} (\tau_{12} + \eta_{12} x - \xi_{12} y),$$

φ_j – значения функции $\varphi(x, y)$ в вершинах p_j :

$$p_j^{(1)}(x, y) = \frac{1}{C_{jkr}} (\tau_{kr} + \eta_{kr} x - \xi_{kr} y) = \frac{D_{kr}}{C_{jkr}},$$

$$\tau_{kr} = x_k y_r - y_k x_r, \quad \eta_{kr} = y_k - y_r, \quad \xi_{kr} = x_k - x_r,$$

$$D_{kr} = \begin{bmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_k & y_k \\ 1 & x_r & y_r \end{bmatrix}, \quad C_{jkr} = \begin{bmatrix} 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \\ 1 & x_r & y_r \end{bmatrix}, \quad \text{причем}$$

(j, k, r) – произвольная перестановка из $(1, 2, 3)$,

а $|C_{jkr}|$ – удвоенная площадь треугольника $P_1 P_2 P_3$.

На рис. 1 представлен пример разбиения моделируемой транзисторной структуры на треугольные ячейки по методу Делоне. Видно, что в областях контактов, где есть неоднородности потенциала, треугольная сетка сгущается.

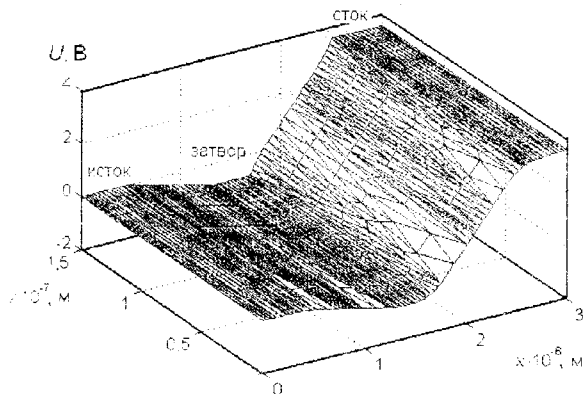


Рис. 1. Пример треугольного разбиения транзисторной структуры

Распределение потенциала в результате решения уравнения Пуассона находится с учетом распределения концентрации подвижных носителей заряда в правой части уравнения в каждом внешнем цикле. Выход из внешнего цикла осуществляется при условии достижения функцией $\varphi(x, y)$ минимума в соответствии с условием $\varphi''(x, y) \leq \delta$ (δ – заданное близкое к нулю число).

Для нахождения распределения концентрации носителей заряда используется метод Ньютона. В простейшем случае этот метод описывается формулой [7]:

$$n_{i+1} = n_i - F_i^{(-1)} F_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots,$$

где целевая функция $F_i = \rho / \epsilon \epsilon_0 + \Delta \varphi$.

Но, из-за наличия больших градиентов поля, более подходящим является метод Ньютона-Рафсона с дроблением шага, так как в нем заложена адаптация шага для каждого узла сетки:

$$n_{i+1} = n_i - \alpha_i F_i^{(-1)} F_i.$$

Величина α_i выбирается так, чтобы обеспечить убывание целевой функции на каждой итерации. Этот выбор связан с проверкой неравенства:

$$f(x_i + \alpha_i p_i) - f(x_i) \leq \delta \cdot \alpha_i (f'(x_i), p_i),$$

где $p_i = -(f''(x_i))^{-1} \cdot f'(x_i)$ – направление спуска, а $0 < \delta < 1/2$ – некоторое заданное число, общее для всех итераций. Если это неравенство выполняется при $\alpha_i = 1$, то шаг принимается равным единице и осуществляется следующая итерация. Если нет – дробится до тех пор, пока неравенство не выполнится.

Если итерационный процесс плохо сходится, то используется ускоренный метод Ньютона третьего порядка [7]:

$$x_{i+1} = x_i - F_i^{-1} F_i - \frac{1}{2!} F_i^{-1} F_i'' (F_i^{-1} F_i) (F_i^{-1} F_i),$$

$$i = 0, 1, 2, \dots$$

Из-за быстрой сходимости этого метода, добиться с его помощью заданной точности довольно трудно, поэтому он используется для нахождения начального приближения для метода Ньютона-Рафсона с дроблением шага.

Для решения уравнений (2)–(4) можно применить метод итераций (последовательных приближений). Так как в данные уравнения входит некая функция от координат $z(x, y)$ и ее первая производная, то можно записать: $z = f(z)$. Тогда z_n будет выражаться через z_{n-1} по следующей рекуррентной формуле [7]: $z_n = f(z_{n-1})$.

Ниже приведены результаты расчета скоростей носителей заряда с помощью описанных методов для трех разных профилей потенциальной ямы в гетероструктурном полевом транзисторе (рис. 2).

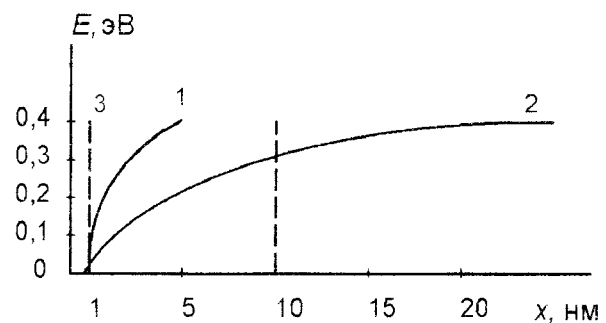


Рис. 2. Профили потенциальных ям в гетероструктурном транзисторе: 1 – «треугольная» яма шириной 4 нм, 2 – «треугольная» яма шириной 20 нм («хвост» «треугольной» ямы направлен в сторону подложки); 3 – «прямоугольная» яма шириной 9 нм

Расчеты приведены для напряжения на истоке – 0 В, на затворе – 0 В и на стоке – 4 В. Для субмикронной структуры с длиной канала 0,2 мкм этот режим является режимом насыще-

ния и сопровождается сильным разогревом электронного газа. В таком режиме повышение скорости носителей получено для треугольного профиля – у дна, а для прямоугольного – у стенок потенциальной ямы. Это может быть связано с изменением механизмов взаимодействия электронов с оптическими фононами, рассеяние на которых преобладает при повышении температуры электронного газа.

Результаты расчетов влияния профиля гетероперехода на распределение скорости электронов показаны на рис. 3–5. Области электродов совпадают с областями, обозначенными на рис. 1. Видно, что без учета квантовых эффектов в случае «треугольной» потенциальной ямы (рис. 2, кривая 1) влияние на распределение дрейфовой скорости носителей заряда практически отсутствует.

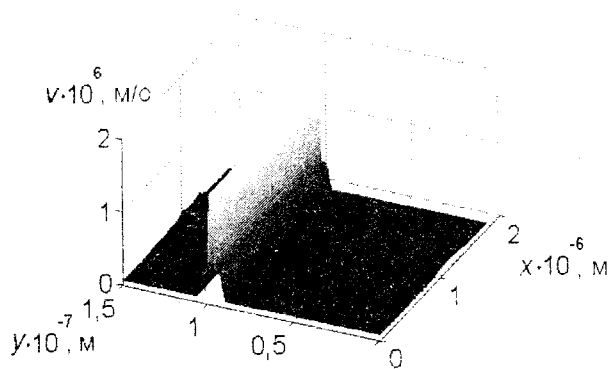


Рис. 3. Распределение скорости носителей заряда для профиля 1

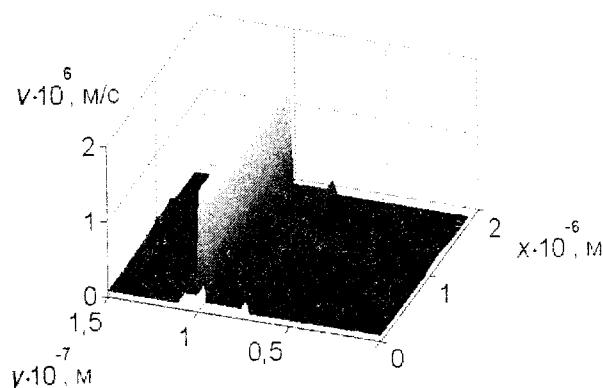


Рис. 4. Распределение скорости носителей заряда для профиля 2

Выводы

1. Для дискретизации уравнения Пуассона наиболее подходящим является метод конечных элементов. Это связано с возможностью неравномерного разбиения моделируемой структуры на элементарные ячейки, что облегчает вычисление напряженности поля в местах его сильных неоднородностей.

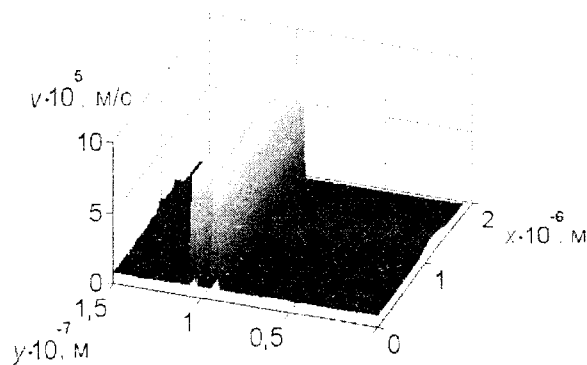


Рис. 5. Распределение скорости носителей заряда для профиля 3

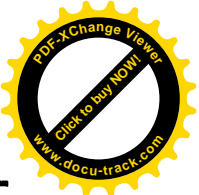
2. При использовании итерационных методов Ньютона наиболее подходящим оказался метод Ньютона-Рафсона с дроблением шага. В качестве вспомогательного также может использоваться ускоренный метод Ньютона третьего порядка для нахождения начального приближения.

3. Сходимость приведенных в работе методов сильно зависит от выбранных начальных приближений. Для нахождения таких приближений приведенная система уравнений (1–6) должна решаться несколько итераций, где начальным приближением для следующей итерации будут служить распределения характеристик носителей заряда в субмикронной структуре, полученные на предыдущем шаге.

4. Рассмотрен пример использования системы релаксационных уравнений для моделирования субмикронных гетероструктур. Приведены расчеты зависимости скорости носителей заряда в потенциальной яме гетеротранзистора от профиля ямы.

Литература

1. Leuzzi G., Stomelly V. Global modeling analysis of HEMTs by the spectral balance technique // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2007. – Vol. 55, № 6. – P. 1405–1412.
2. Movahhedi M., Abdipour A. Efficient numerical methods for simulation of high-frequency active devices // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2006. – Vol. 54, № 6. – P. 2636–2645.
3. Miyaji K., Saitoh M. Compact analytical model for room-temperature-operating silicon single-electron transistors with discrete quantum energy levels // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2006. – Vol. 5, № 3. – P. 167–173.
4. Timofeyev V.I., Amini M., Faleeva E.M. Non-stationary drift of electrons in submicron high



- electron mobility transistor with two heterojunctions // *Electronics and Electrical Engineering*. – 2007. – Vol. 4, № 76. – P. 33–36.
5. *Митчелл Э., Уэйт Р.* Метод конечных элементов для уравнений с частными производными: Пер. с англ. – М.: Мир, 1981. – 216 с.
 6. *Рындин Е.А.* Методы решения задач математической физики: Учебное пособие. – Т.: ТРТУ, 2003. – 119 с.
 7. *Иванов В.В.* Методы вычислений на ЭВМ: Справочное пособие. – К.: Наук. думка. – 1986. – 584 с.
 8. *Ильин В.А.* Итерационные методы решения функциональных уравнений // *Соросовский Образовательный Журнал*. – 2001. – № 2. – С. 116–120.

*Национальный технический университет Украины
«Киевский политехнический институт»*

Поступила в редакцию 18 апреля 2008 г.