

Розрахункова робота № 1

Розробка та дослідження кінетичної моделі польового транзистора методом частинок.

Мета роботи.

Формування у студентів знань, навичок та умінь щодо побудови фізико-топологічних моделей процесів та об'єктів, теоретичних основ та математичного апарату моделювання електронних процесів.

Теоретичні відомості та рекомендації щодо моделювання.

Фізична модель переносу заряду у напівпровідниках.

Одним з найважливіших етапів створення напівпровідникових приладів та інтегральних схем, особливо із мікронними та нанометровими розмірами, є фізико-топологічне моделювання. Побудовані моделі мають адекватно описувати перенесення заряду у напівпровідниках за наявності сторонніх полів та враховувати ряд специфічних ефектів, що виникають під час такого перенесення. Основним завданням таких моделей є аналіз протікання нарівноважних електронних процесів під дією динамічних зовнішніх впливів. Об'єктами фізико-топологічного моделювання напівпровідникових приладів є кристалічна решітка напівпровідника, колектив носіїв заряду та сторонні електричні та магнітні поля.

Для моделювання процесів переносу у напівпровідниках використовують кілька підходів. Найбільш точні моделі ґрунтуються на статистичному методі, який дозволяє безпосередньо отримати функцію розподілу частинок, а отже і всі інтегральні характеристики, які характеризують поведінку колективу носіїв заряду.

Основою статистичного методу є так зване кінетичне рівняння - інтегро-диференційне рівняння, яке розв'язують відносно функції розподілу частинок $N(\vec{r}, \vec{k}, t)$.

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\vec{v} \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} - \frac{\vec{F}}{\hbar} \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} + \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c$$

Це рівняння фактично описує вплив на функцію розподілу просторових неоднорідностей розподілу (градієнтів концентрації чи температури), сторонніх полів та стохастичних процесів (зіткнень між частинами чи з локальними порушеннями періодичності кристалічної решітки).

Останні описуються так званим інтегралом зіткнень, який обчислюється складним способом з урахуванням імовірностей розсіювання різних видів.

Для спрощення обчислення інтегралу зіткнень використовують наближення часу релаксації, яке полягає в припущенні, що зміна функції розподілу за інтервал часу dt пропорційна значенню самої функції та довжині інтервалу.

$$dN = N(\vec{r}, \vec{k}, t) dt / \tau$$

Спрощене таким чином кінетичне рівняння широко використовується для моделювання стаціонарних чи нестаціонарних електронних процесів у випадках, коли завданням є отримати вже усереднені величини, що характеризують колектив носіїв заряду та залежать тільки від координати та часу.

Альтернативним підходом до моделювання переносу зарядів у напівпровіднику є метод Монте-Карло. Взагалі так називають групу методів, що використовують ймовірнісні експерименти для визначення поведінки модельованого об'єкту. В електроніці такий ймовірністний метод моделювання колективних ефектів переносу заряду через поводження окремих частинок називають методом частинок.

Суть методу частинок.

Метод частинок дозволяє моделювати колективні процеси переносу заряду розглядаючи рух окремих частинок під дією зовнішніх сил. Розрізняють одно- та багаточастинковий метод.

Одночастковим методом моделюють рух однієї частинки протягом тривалого часу, вважаючи зовнішні діючі сили сталими протягом усього

експерименту. Статистичні розподіли знаходять шляхом усереднення результатів багатьох експериментів.

Багаточастковий метод розглядає колектив часток одночасно і для отримання інтегральних параметрів ансамблю, їх усереднюють за ансамблем.

Очевидно, що для моделювання динамічних процесів придатен багаточастковий метод, оскільки рух ансамблю частинок розглядається одночасно і зовнішні впливи можуть бути описані функціями часу.

В роботі ми реалізуємо спрощений варіант багаточасткової моделі Монте-Карло для електронної плазми к напівпровіднику. Ансамбль електронів буде представлений порівняно невеликою кількістю макрочастинок, для яких ефективна маса та заряд обраховуються з урахуванням коефіцієнту помноження.

Рух частинок моделюють за допомогою напівкласичних рівнянь руху:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_k E(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \left(\vec{e}_x \frac{\partial E}{\partial k_x} + \vec{e}_y \frac{\partial E}{\partial k_y} + \vec{e}_z \frac{\partial E}{\partial k_z} \right)$$

Поля, що діють на частинки, обчислюють, розв'язуючи рівняння Пуасона узгоджено з рівняннями руху. Вплив періодичного електричного поля кристалічної решітки виявляють через закон дисперсії та відповідні ефективні маси. Взаємодії електронів з фононами, дефектами решітки та іншими носіями (розсіювання) враховують як миттєві квазіймовірнісні процеси, що призводять до зміни хвильового вектору електрона.

Рівняння руху та рівняння Пуасона є диференційними у часткових похідних у часі та просторі. Розв'язання таких систем аналітичними методами надзвичайно складно, натомість на практиці здебільшого використовують наближені чисельні методи, зокрема метод кінцевих різниць (метод сіток).

Основні припущення моделі. Квантування часу та простору.

Нормування координат.

Для формування спрощеної кінетичної моделі переносу заряду у напівпровіднику введемо наступні припущення:

1. Топологію модельованого приладу вважатимемо однорідною за однією координатою та перейдемо до двовимірної задачі.
2. Ансамбль модельних частинок задамо розміром у кілька тисяч. Коефіцієнт помноження визначимо за реальною концентрацією нерівноважених електронів відповідно до концентрації домішки та температури.
3. Рух частинок вважатимемо балістичним під дією електричного поля.
4. Стохастичні процеси (генерацію, рекомбінацію, розсіювання) вважатимемо миттєвими та визначатимемо за допомогою ймовірнісного експерименту.

Приведення рівняння руху до скінчено-різницевої форми призведе до припущення, що кожна частинка рухається із прискоренням відповідно до прикладеної сили (під дією стороннього електричного поля) протягом часу вільного пробігу, тобто до тих пір, доки не відбувається ймовірнісний акт розсіювання, який миттєво змінює її хвиловий вектор. В межах такого припущення пропонується схема, за якої силу, що діє на частинку обраховують через дискретні проміжки часу, між якими вважається, що частинка рухається рівноприскорено. Таке припущення фактично є сітковою апроксимацією диференційного рівняння у часі та називається «принципом квантування часу». Дискрету часу обирають виходячи з припустимої похибки моделювання.

Розв'язання диференційних рівнянь у часткових похідних щодо координат методом скінчених різниць також є наближеним. Для інтегрування такої системи диференційних рівнянь використовують апроксимацію у вигляді просторової сітки, у вузлах якої обчислюють величини потенціалу (для рівняння Пуасона).

Якщо наперед задати припустиме значення помилки обчислення координат частинки на кожному кроці часової сітки, то можна ввести припущення, що координата частинки є невизначеною у межах деякого скінченого елемента площини. Якщо ці елементи подати у вигляді регулярної просторової сітки, то координати частинок можна нормувати на крок сітки та подати у вигляді цілих номерів строк та стовпчиків сітки. Зручність використання сіток моделі значно

підвищиться, якщо сітку, на якій визначаються координати частинок зробити співпадаючою з тою, на якій інтегруються системи диференційних у просторі рівнянь.

Алгоритм моделі

Вхідними даними для кінетичної моделі напівпровідникового приладу є:

1. Топологія та профілі легування приладу, характер границь області моделювання, розташування електродів.
2. Параметри матеріалу ділянок приладу, концентрації домішок, температура.
3. Функції потенціалів електродів у часі.

Результатами моделювання вважатимемо:

1. Збережені координати усіх частинок на кожному часовому кроці.
2. Кількість частинок, що перетнули границю стоку за кожний часовий крок.

На початку визначимо потрібні константи та масиви для зберігання даних.

N_p - кількість частинок;

M - коефіцієнт помноження ;

N_t, dt - кількість часових кроків та довжина кроку;

N_x, N_y, h - кількість кроків сітки по координатах та просторовий крок;

$x[N_t \ N_p], y[N_t \ N_p]$ - координати частинок збережені у часі;

$v_x[N_p], v_y[N_p]$ - проекції швидкості кожної частинки;

$n[N_x \ N_y]$ - матриця густини заряду;

$V[N_x \ N_y]$ - сітка потенціалів;

$E_x[N_x \ N_y], E_y[N_x \ N_y]$ - проекції напруженості електричного поля;

Для багатодолинного напівпровідника, яким наприклад є арсенід галія, важливо також зберігати інформацію про належність частинки до певної долини.

Це впливає на ефективну масу частинки та на ймовірності різних типів розсіювання. Для цього додамо масив $m[N_p]$.

Для збереження статистичної інформації про динамічні процеси, що моделюються, (у нашому випадку про кількість частинок, що перетнули границю стоку да кожен часовий крок) введемо масив $x[N_t]$.

На початку моделювання здійснюється початковий розподіл частинок у просторі та по швидкостях. Розподіляємо частинки випадково, рівномірно по всій просторовій сітці, початкові швидкості встановлюємо в діапазоні $\pm 20\%$ від середньої швидкості носіїв заряду за встановленої температури. Під час розподілу частинок слід заповнити матрицю густини, кожна клітинка якої містить ціле число частинок, що розташовані на її ділянці.

Подальший алгоритм моделі виглядатиме таким чином:

1. Цикл по часових кроках: $i = 1 \dots N_t$

1.1. Розрахунок електричного поля, зумовленого потенціалами електродів.

1.2. Розрахунок електричного поля об'ємного заряду.

1.3. Цикл по всіх частинках: $j = 1 \dots N_p$

1.3.1. Розрахунок нових координат та проєкцій швидкості частинки, виходячи з припущення, щодо її равноприскореного руху протягом dt під дією сили електричного поля відповідно до клітинки, у якій знаходилася частинка.

1.3.2. Визначення, чи належить нова координата частинки області моделювання (перевірка на вихід за границі). У разі порушення граничних умов – зміна координат та швидкості частинки відповідно до типу границі. У разі перетину границі стоку – запис цього факту у окремий лічильник.

1.3.3. Статистичний експеримент, що виявляє, чи має для даної частинки на даному часовому кроці статися акт розсіювання, та його тип. У разі ствердження про розсіювання частинки – зміна швидкості чи інших параметрів частинки відповідно до типу розсіювання.

1.3.4. Затвердження нових координат та швидкості частинки. Запис нових координат у масив для зберігання. Приведення матриці густини заряду у актуальний стан відповідно до зміни координат частинки.

1.4. Запис лічильника частинок, що перетнули сток, до масиву для зберігання.

2. Обробка отриманих результатів моделювання. Побудова графіків та анімації.

Далі розглянемо особливості реалізації кожного пункту окремо.

Для знаходження електричного поля у всій області моделювання потрібно у загальному випадку розв'язати крайові задачі для рівняння Пуасона. Рівняння Пуасона пов'язує між собою просторові розподіли електричного потенціалу та заряду: $\nabla^2 V(x, y) = -q(x, y)$. Розподіл заряду визначається зарядом на електродах та об'ємним зарядом ансамблю частинок. Напруженість електричного поля в кожній точці модельованого простору визначається градієнтом електричного потенціала: $\vec{E} = -grad(V)$.

Принцип суперпозиції для електричного поля дозволяє обчислити окремо дві складові поля у кожній точці – електростатичне поле навколо електродів та поле об'ємного заряду колективу частинок. Поле навколо електродів у такому випадку буде визначено результатом розв'язання крайової задачі для рівняння Лапласа.

Розв'язання рівняння Лапласа.

Рівняння Лапласа $\nabla^2 V = 0$ розв'язують методом скінчених різниць на просторовій сітці з урахуванням крайових умов:

- для границі розділу між напівпровідником та діелектричним середовищем приймають граничні умови Неймана, що характеризуються рівністю нулю похідної потенціалу у напрямку нормалі до границі;
- для поверхні електрода, що екранує електричне поле, та потенціал якого є сталим, приймають граничні умови Дирихле.

Суть методу скінчених різниць полягає в тому, що надаючи просторовим координатам малих приростів, що відповідають кроку просторової сітки, можна замінити часткові похідні функції відношеннями різниць значень функції між сусідніми вузлами сілки до її кроку. Подібним чином можна виразити другі просторові похідні функції через різниці перших похідних:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = [V(x+h, y) + V(x-h, y) - 2V(x, y)]/h^2$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = [V(x, y+h) + V(x, y-h) - 2V(x, y)]/h^2$$

При цьому двовимірне рівняння Лапласа

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = 0$$

зводиться до виразу, що пов'язує потенціал у певному вузлі просторової сітки із потенціалами у чотирьох сусідніх вузлах (п'ятиточкова схема):

$$V(x, y) = [V(x+h, y) + V(x-h, y) + V(x, y+h) + V(x, y-h)]/4$$

Якщо записати у такій формі потенціал для кожного вузла просторової сітки враховуючи граничні умови, отримаємо систему рівнянь, розв'язком якої будуть значення потенціалу. Матриця такої системи буде сильно розрідженою і пряме розв'язання – неефективним.

Поширеним методом знаходження потенціалу на сттці є ітеративний (метод послідовних наближень). На початку обчислення, кожному вузлу сітки призначають довільне початкове значення потенціалу (але наближення початкового значення до реального впливає на збіжність методу). Далі виконують розрахунок потенціалу кожного вузла за п'ятиточновою схемою, враховуючі умови для потенціалів на границі із зовнішнім діелектричним середовищем та на електродах:

$$V_{i,j}^{k+1} = (V_{i-1,j}^k + V_{i+1,j}^k + V_{i,j-1}^k + V_{i,j+1}^k)/4$$

для електрода - $V_{i,j} = const$

для границі діелектричного середовища, наприклад лівої, –

$$V_{i,j}^{k+1} = (V_{i,j}^k + V_{i+1,j}^k + V_{i,j-1}^k + V_{i,j+1}^k) / 4$$

Розраховане значення записують до матриці у випадку, якщо $|(V_{i,j}^{k+1} - V_{i,j}^k) \cdot 100 / V_{i,j}^k| > \varepsilon, \%$.

Критерієм збіжності ітераційного процесу є відсутність розрахованих значень, які відрізнялись би більше, ніж на певну відстань, від відповідних значень попередньої ітерації.

Отримана матриця потенціалів повинна мати розмір на 1 більше, ніж матриця просторової сітки за обома координатами. Значення проекцій вектора напруженості електричного поля обраховується за кінцево-різнісною схемою представлення градієнту – за потенціалами чотирьох вузлів навколо клітинки сітки:

$$E_x^{(i,j)} = (V_{i,j} - V_{i+1,j} + V_{i,j+1} - V_{i+1,j+1}) / 2h$$

$$E_y^{(i,j)} = (V_{i,j} - V_{i,j+1} + V_{i+1,j} - V_{i+1,j+1}) / 2h$$

Поле об'ємного заряду.

Поле об'ємного заряду є електростатичним полем навколо колективу заряджених частинок і, відповідно до принципу суперпозиції, може бути визначене, як сума полів навколо кожної усамітненої частинки. Поле кожної частинки окремо визначається за законом Кулона:

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon} \frac{q}{|\vec{r}|^2} \vec{e}_r.$$

Завдяки припущенню квантування просторових координат в моделі, що тут розглядається, всі частинки зосереджені у клітинках просторової сітки і їх кількість у кожній клітинці зберігається у матриці концентрації. Таким чином кожній клітинці просторової сітки приписаний певний заряд і задача розрахунку поля об'ємного заряду зводиться до визначення кулонівських полів, що спричинені зарядом у кожній клітинці, у всіх інших клітинках.

Проекції вектора напруженості електричного поля у клітинці (i, j) , спричинені зарядом у клітинці (i_0, j_0) залежать від заряду у останній та від відстаней між відповідними рядками та стовпчиками:

$$E_x^{(i,j)} \Big|_{(i_0, j_0)} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{qn_{i_0, j_0}}{r(i-i_0, j-j_0)} \cos\varphi(i-i_0, j-j_0)$$

$$E_y^{(i,j)} \Big|_{(i_0, j_0)} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{qn_{i_0, j_0}}{r(i-i_0, j-j_0)} \sin\varphi(i-i_0, j-j_0)$$

Сталі коефіцієнти, що залежать тільки від геометрії сітки, можна розрахувати завчасно для кожної клітинки сітки відносно лівої верхньої $(i_0 = 0, j_0 = 0)$:

$$r(i-i_0, j-j_0) = h\sqrt{(i-i_0)^2 + (j-j_0)^2}$$

$$\cos\varphi(i-i_0, j-j_0) = h(i-i_0)/r \quad ,$$

$$\sin\varphi(i-i_0, j-j_0) = h(j-j_0)/r$$

$$K_x^{(i,j)} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{q}{r(i, j)} \cos\varphi(i, j)$$

$$K_y^{(i,j)} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{q}{r(i, j)} \sin\varphi(i, j)$$

Тоді

$$E_x^{(i,j)} \Big|_{(i_0, j_0)} = n_{i_0, j_0} K_x^{(|i-i_0|, |j-j_0|)} \quad E_x^{(i,j)} = \sum_{i_0=0}^{Nx} \sum_{j_0=0}^{Ny} n_{i_0, j_0} K_x^{(|i-i_0|, |j-j_0|)}$$

$$E_y^{(i,j)} \Big|_{(i_0, j_0)} = n_{i_0, j_0} K_y^{(|i-i_0|, |j-j_0|)} \quad E_y^{(i,j)} = \sum_{i_0=0}^{Nx} \sum_{j_0=0}^{Ny} n_{i_0, j_0} K_y^{(|i-i_0|, |j-j_0|)}$$

Результуюче поле у кожній клітинці просторової сітки визначається сумою проєкцій полів навколо електродів та поля об'ємного заряду. Це значення використовується для визначення сили, що діє на частинки, приписані до даної клітинки.

Рівняння руху у дискретній формі.

Згідно припущення у моделі, рух частинки протягом кванту часу вважається рівноприскореним під дією сили Лоренца за відсутності магнітного поля:

$$\vec{F} = -q\vec{E}$$

Для i -ї частинки на k -му часовому кроці

$$x(i, k) = x(i, k-1) + v_x(i, k-1) \cdot \Delta t - \frac{q \cdot E_x(x(i, k-1), y(i, k-1)) \cdot \Delta t^2}{2 \cdot m^*(i)}$$

$$y(i, k) = y(i, k-1) + v_y(i, k-1) \cdot \Delta t - \frac{q \cdot E_y(x(i, k-1), y(i, k-1)) \cdot \Delta t^2}{2 \cdot m^*(i)}$$

$$v_x(i, k) = v_x(i, k-1) - \frac{q \cdot E_x(x(i, k-1), y(i, k-1)) \cdot \Delta t}{m^*(i)}$$

$$v_y(i, k) = v_y(i, k-1) - \frac{q \cdot E_y(x(i, k-1), y(i, k-1)) \cdot \Delta t}{m^*(i)}$$

Отримані координати та швидкості нормують відповідно до квантування просторової координати. Значення ефективної маси беруть для кожної частинки відповідно до долини, у якій вона знаходиться. Таким чином визначаються значення координат та швидкостей кожної частинки у випадку, якщо частинка не порушила меж області моделювання та не відбулося випадкового процесу розсіювання.

Урахування граничних умов для рівнянь руху.

Просторова область моделювання обмежена з усіх боків границями між напівпровідником та діелектричним середовищем чи поверхнями електродів.

Якщо обчислені за рівняннями руху координати частинки виходять за ці границі, застосовують спеціальний алгоритм:

Завчасно, перед початком циклу моделювання, формують список границь у вигляді відрізків, що задані координатами кінців з урахуванням типів границь.

Після обчислення координат частинки за рівняннями руху, проводять пошук точок перетину кожного з граничних відрізків з відрізком, що поєднує старі та нові координати частинки. Якщо перетин знайдений, то

- якщо граничний відрізок є границею діелектричного середовища, то частинка вважається такою, що не пододала граничний потенційний бар'єр, та її нові координати обраховуються у наближенні пружного відбиття від границі;
- якщо граничний відрізок є електродом, то частинка вважається поглинутою цим електродом і, відповідно до умови збереження складу статистичного ансамблю, переноситься до області витоку, де розподіляється у ближній до електроду витоку зоні із швидкістю, наближеною до середньої швидкості частинок, яка використовувалась для початкового розподілу.

Нові координати частинки знову перевіряються на перетин границь аж доки частинка не буде зафіксована всередині області моделювання.

Урахування квзіймовірнісних процесів при переносі.

Кінетичне рівняння описує ефекти переносу носіїв у твердому тілі. Ті ефекти, які не залежать від конфігурації та величини зовнішніх полів, входять до інтегралу зіткнень. Це процеси, які пов'язані із розсіюванням потоків носіїв на порушеннях регулярності кристалічної решітки.

Центрами розсіювання можуть бути або локалізовані порушення періодичності решітки - межі, дислокації чи іонізовані атоми домішки, або теплові коливання атомів решітки, які представляються у вигляді квазічастинок - фононів.

Характеристикою кожного типу розсіювання виступає швидкість розсіювання - середня кількість актів розсіювання певного типу за одиницю часу.

$$\lambda(k) = \int w_{k,k'} dV_{k'}$$

Швидкість розсіювання визначають окремо для кожного типу розсіювання а потім сумують. На рис. 1, для n-GaAs показані залежності швидкостей

розсіювання різних типів для електронів, що знаходяться у Γ та L долинах відповідно.

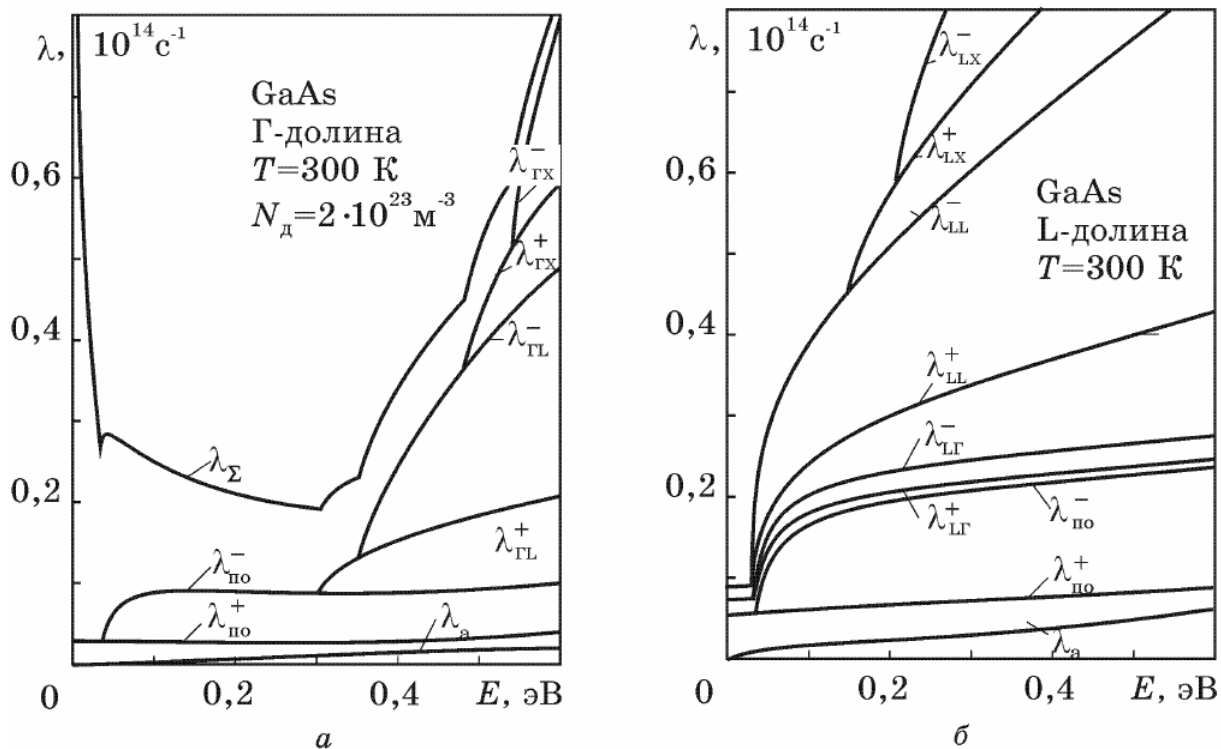


Рис. 1. Швидкості розсіювання різних типів для електронів у GaAs.

Під час акту розсіювання може відбутися зміна вектора швидкості носія, його енергії за рахунок поглинання або випромінювання кванта, або навіть ефективної маси за рахунок міждолинного переходу.

Для досліджуваного матеріала актуальні такі типи розсіювання:

- Розсіювання на іонізованих домішках (**Imp**) - оскільки маса атома домішки на 3-4 порядку перевищує масу електрона, розсіювання вважають пружним. Відбувається зміна тільки напрямку вектора швидкості частинки. Кут розсіювання тим більший, чим менша швидкість носія.
- Розсіювання на акустичних фонах (**Ac**) - для цього типу розсіювання переважає взаємодія носія із повздовжніми коливаннями кристалічної решітки. Енергетична взаємодія електрона з акустичним фононом відбувається але є малою і, в межах спрощеної моделі, акустичне розсіювання можемо також вважати пружним.

- Розсіювання на полярно-оптичних фонах - розсіювання є непружним і може супроводжуватись випромінюванням (POe) або поглинанням (POa) кванту енергії. Середня енергія оптичного фону для арсеніда галію при нормальних умовах дорівнює приблизно 0.03eV.
- Міждолинне розсіювання - для арсеніду галію за нормальних умов актуальні переходи з Γ в L долину та навпаки. Такі переходи також є непружними та супроводжуються випромінюванням чи поглинанням кванту енергії відповідно до відстані між долинами, що для Γ -L долин арсеніду галію складає 0.33eV. Також слід враховувати, що ефективна маса електрона та характеристики розсіювання відрізняються в залежності від того, у якій долині знаходиться електрон.

Для моделювання процесу розсіювання у спрощеній кінетичній моделі використовують значення ймовірностей розсіювання різних типів, які безпосередньо залежать від швидкостей розсіювання. Сума ймовірностей розсіювання усіх типів для даного значення енергії електрона буде менше одиниці і виражає повну ймовірність відбуття акту розсіювання.

Алгоритм моделі розсіювання полягає в проведенні для кожної частинки на кожному часовому кроці статистичного експерименту за методом Монте-Карло, під час якого випадкове значення порівнюється із масивом значень ймовірностей розсіювання різних типів. Якщо число виявилось всередині певного проміжку ймовірностей - вважається, що відбулося розсіювання певного типу, якщо число вийшло за межі повної ймовірності - вважається, що розсіювання не відбулося.

У табл. 1. наведені табульовані значення ймовірностей розсіювання різних типів для Γ та L долин арсеніду галію відповідно. Стовпчики таблиці відповідають значенням енергії електрона в eV.

Таблиця 1. Ймовірності розсіювання різних типів в GaAs.

Г долина	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
Ac	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
POe	0,10	0,10	0,1	0,1	0,1
POa	0,11	0,15	0,2	0,225	0,24
Г-L	0,12	0,21	0,4	0,65	0,8
Imp	0,20	0,235	0,41	0,7	0,9
L долина	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
Ac	0,025	0,03	0,035	0,04	0,05
POe	0,035	0,04	0,045	0,05	0,06
POa	0,1	0,105	0,11	0,115	0,12
L-Г	0,275	0,59	0,75	0,9	1

Для кожного акту розсіювання, що відбувся, в залежності від його типу обраховують випадковий кут розсіювання у заданому проміжку кутів та зміну енергії частинки відповідно до випроміненого чи поглинутого кванту. В результаті обраховуються нові значення швидкості частинки на наступний часовий проміжок. Для міждолинного переходу також важливо зафіксувати, що частинка відтепер належить іншій долині і має відповідну ефективну масу.

Крім розсіювання, важливу роль у моделюванні кінетики носіїв заряду у напівпровіднику відіграє процес генерації-рекомбінації нерівноважених носіїв заряду. Цей процес також є статистичним і характеризується швидкістю рекомбінації носіїв. Для спрощеної кінетичної моделі може бути запропонована схема, за якою для кожної частинки відбувається окремий статистичний експеримент навколо одного значення ймовірності рекомбінації. Якщо прийнято рішення про відбуття рекомбінації, то, відповідно до збереження статистичного ансамблю моделі, вважається, що одночасно відбувся і акт генерації. Фактично частинка зникає звідти, де була і одночасно з'являється у довільному місці модельованого простору із швидкістю, близькою до середньої швидкості носіїв,

що використовувалась при початковому розподілі. Результатом такого акту буде зміна нових координат та швидкості частинки, що розглядається.

Розрахунок інтегральних характеристик електронного компоненту за кінетичною моделлю.

Кінетичне моделювання процесів переносу заряду супроводжується прийняттям багатьох припущень та спрощень, які є сумнівними з точки зору кількісних обрахунків. Єдиним критерієм адекватності таких припущень є відповідність моделі початковій меті моделювання - якщо модель дозволяє отримати потрібні результати з прийнятною похибкою, то припущення, спрямовані на її спрощення, є прийнятними.

Метою побудови даної моделі було отримання інформації про залежність числа носіїв заряду, що перенесли енергію від витoku до стоку транзистора від потенціалу на заслоні. Ця кількість обраховується на кожному часовому проміжку і фактично являє собою заряд, перенесений до стоку в одиницю часу, тобто струм.

$$I_i = x_i M q / \delta t$$

Потенціал заслони в даній моделі прийнято лінійно збільшуваним протягом моделювання, тож інтегральним результатом буде залежність

$$I_d(V_{gs}) \Big|_{V_{ds}=const}.$$

Завдання до виконання роботи.

Частина 1. Побудова кінетичної моделі.

1. За даними таблиці 1, вибравши номер варіанту за передостанньою цифрою номера залікової книжки, розрахувати параметри ансамблю макрочастинок, часових інтервалів та просторової сітки.

2. Задати необхідні масиви для зберігання координат, мас та швидкостей частинок, матриці потенціалів, векторів електричного поля та матриці концентрації.
3. Написати процедуру для розв'язання рівняння Лапласа для електричних потенціалів на просторовій сітці з граничними умовами для заданої топології. Необхідною точністю розв'язку вважати 0.01%.
4. Написати процедуру для розрахунку поля об'ємного заряду на тій самій просторовій сітці за матрицею концентрації.
5. Записати головний цикл кінетичної моделі у часових інтервалах та внести у нього для кожного часового інтервалу такі розрахунки:
 - a. Розрахунок електричного поля у топології задачі.
 - b. Розрахунок поля об'ємного заряду за матрицею концентрації.
6. Додати цикл по ансамблю макрочастинок, для кожної частинки додати:
7. Розрахунок сили, що діє на частинку.
 - a. Розрахунок нової координати частинки за часовий проміжок у наближенні рівноприскореного руху.
 - b. Розрахунок нової швидкості частинки у тому самому наближенні.
 - c. Оцінку виконання граничних умов руху частинок, коригування координат частинок відповідно до умов перетину границь топології.
8. Додати до циклу по частинках статистичний експеримент для вибору типу розсіювання та визначення його наслідків.
9. Додати лічильник, що накопичує інформацію про частинки, які перетнули площину стоку за одиницю часу.

Частина 2. Дослідження кінетичної моделі.

1. Задати потенціали на електродах моделі відповідно до варіанту Таб. 1.
2. Провести моделювання процесу переносу заряду у польовому транзисторі за задани проміжок часу.

3. Побудувати двомірні зображення ансамблю частинок на кількох часових інтервалах за допомогою процедури *scatter* системи Matlab.
4. Розрахувати на кожному інтервалі часу кількість частинок, що перетнули площину стоку. Записати таблично та побудувати графічно залежність струму стоку від напруги сток-затвор за результатами моделювання.

Таблиця 1

	Варіант 1	Варіант 2	Варіант 3
Конструкція (1 – витік, 2 – заслін, 3 – стік)			
Розміри	$l_1 = l_2 = l_3/2 = l_4 = l_5 = 1,0$ мкм, $d = 1,0$ мкм, $D = 3,0$ мкм		
Матеріал	n-GaAs	n-GaAs	n-GaAs
Концентрація домішки	$2.1 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$	$2.1 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$	$2.1 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-3}$
Температура	77К	300К	373К
Кількість макрочастинок	200		
Потенціал витоку, В	0		
Потенціал стоку, В	5	2	1
Потенціал затвору, В	Змінюється лінійно від 0 до -0.2В	Змінюється лінійно від 0 до -0.5В	Змінюється лінійно від 0 до -1.0В
Середня швидкість носіїв за вказаних потенціалів	$2 \cdot 10^5$ м/с		

Контрольні запитання.

1. Перелік об'єктів електронних процесів у твердих тілах.
2. Які процеси у оточуючому середовищі відносять до електронних і чому?
3. Рівні моделювання електронних процесів.
4. Суть принципу дискретизації часу під час кінетичного моделювання.
5. Що таке самоузгоджена задача?
6. Принцип суперпозиції електромагнітних полів. Його застосування у моделюванні електронних процесів. Його обмеження.

7. Розв'язання рівняння Пуасона методом сіток. Навести різницьову схему.
8. Граничні умови рівняння Пуасона для метода сіток.
9. Моделювання процесу переносу заряду методом частинок. Навести структурну схему алгоритму.
10. Нормування задач моделювання електронних процесів. Навести принцип.
11. Моделювання зіткнення частинок з границями розділу середовищ.
12. Які електронні процеси вважають квазіймовірнісними і чому?
13. Які інтегральні характеристики можна отримати з моделі електронного процесу?

Література.

1. Хокни Р. Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. - М.: Мир, 1987.
2. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1984.
3. Москалюк В.О., Мінаков В.В., Шовкун І.Д., Теорія електромагнітного поля, конспект лекцій для підготовки бакалаврів електроніки/ К., КПІ, 1994, -76 с.
4. Москалюк В.А., «Физика электронных процессов, часть II. Динамические процессы», учебн. пособие. – Киев, изд. «Аверс», 2004. С 186.
5. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaAs/>
6. Сигорский В. П. Математический аппарат инженера. К.: Техніка, 1975
7. Самарский А А. Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. - М.: Наука, 1978.
8. Сигов Ю.С. Численные методы кинетической теории плазмы. - М.: МФТИ, 1984.