

получения неправильного решения из-за выхода численного решения за пределы допустимой области.

Эти новые подходы используются в последней версии программы «KinFitSim» (2.0), где они были внедрены и апробированы в ходе численного решения различных схем кинетических реакций (т.е. жестких и нежестких систем ОДУ). В данной публикации описаны *впервые* исследованные свойства точного и численного решений автономных систем ОДУ специального вида и сформулированы в виде леммы и теоремы.

Литература: 1. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла и Дж. Уатта. М.: Мир, 1979. 312 с. 2. Клименко А.В., Свирь И.Б. Моделирование кинетических механизмов для фотохимического анализа / АСУ и приборы автоматики. 2002. Вып. 121. С. 30 - 34. 3. Svir I.B., Klymenko A.V., Platz M.S. KinFitSim – a software package to fit kinetic data / Радиоэлектроника и информатика. 2001. № 1. С. 132-136. 4. Svir I.B., Klymenko A.V., Platz M.S. The KinFitSim package – a

software package to fit kinetic data to any mechanism / АСУ и приборы автоматики. 2001. Вып. 116. С. 24 – 38. 5. Бахвалов Н.С. Численные методы. М.: Наука, 1973. 632 с. 6. Хайпер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи: Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 512 с. 7. Волков Е.А. Численные методы. М.: Наука, 1982. 255 с. 8. Gear C.W. Numerical initial value problem in ordinary differential equations. Prentice-Hall, 1971. 253 p. 9. Жаботинский А.М. / Биофизика, 1964. № 9. С. 306. 10. Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Наука, 1982. 331 с. 11. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. В 3-х томах. Т. 1. Физматлит, 1948. 680 с.

Поступила в редколлегию 28.08.2004

Рецензент: д-р техн. наук, ст. науч. сотр. Свирь И.Б.

Клименко Алексей Викторович, старший научный сотрудник лаборатории “Математического и компьютерного моделирования” ХНУРЭ. Научные интересы: численное моделирование физико-химических процессов, программирование, уравнения математической физики. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14.

УДК 621.382.323

МОДЕЛЬ ПТШ СУБМИКРОННЫХ РАЗМЕРОВ НА КРЕМНИИ. ЧАСТЬ I. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

*ЗУЕВ С.А., СТАРОСТЕНКО В.В.,
ТЕРЕЩЕНКО В.Ю., ЧУРЮМОВ Г.И.,
ШАДРИНА А.А.*

Предлагается модель кремниевого полевого транзистора с затвором Шоттки субмикронных размеров с учетом процессов переноса и локализации тепла в приборе. Модель по топологии прибора и уровням легирования позволяет рассчитать его интегральные и дифференциальные характеристики, исследовать различные режимы, в том числе и нехарактерные для номинального режима работы. Моделирование проводится в кинетическом приближении методом крупных частиц.

Введение

В настоящее время деятельность по моделированию полупроводниковых приборов и технологических процессов при их создании весьма активна. Однако работа по созданию эффективных методов расчета и универсальных быстродействующих программ еще далеко не завершена.

Общее состояние моделирования материалов для полупроводниковых приборов (ППП), систем и устройств с ППП наиболее полно отражено в монографиях Хокни, Иствуда [1] и Бубенникова [11].

Анализ современного состояния вопроса показал, что существует потребность в моделях полупроводниковых приборов субмиллиметрового диапазона,

позволяющих по геометрическим и электрическим параметрам рассчитывать их интегральные и дифференциальные характеристики, исследовать влияние различных факторов на режимы работы приборов, проводить анализ и выбор материалов, оптимизировать характеристики приборов по определенным конструктивным параметрам, исследовать нестандартные режимы работы. Подобного рода модели должны позволять рассчитывать широкий спектр характеристик приборов на ультракоротких временах, исследовать влияние различных процессов рассеяния на его характеристики, анализировать шумы, учитывать то обстоятельство, что технологические размеры моделируемых приборов весьма малы (размеры неоднородностей сравнимы с дебаевской длиной волны носителей) и характерные частоты прибора очень высоки (периоды рабочих частот соизмеримы с характерными временами рассеяния). Данные требования не позволяют использовать модели, соответствующие достаточно грубым приближениям, таким как, например, дрейфово-диффузионное, квази- или псевдогидродинамическое; и даже гидродинамическое приближение не может быть использовано из-за ограничения характерной длины между столкновениями частиц. Таким образом, при описании процессов, протекающих в приборах на очень высоких частотах, необходимо применять кинетическое приближение.

Целью настоящей работы является рассмотрение топологической модели СВЧ полевого транзистора планарной архитектуры с затвором Шоттки на основе кремния. Поскольку в полевом транзисторе планарной архитектуры смысловую нагрузку несут только два измерения, целесообразно рассматривать двумерную структуру, полагая, что в третьем направлении перенос носителей в среднем равен нулю.

Кинетическое приближение

В основе модели лежит система уравнений Больцмана и Пуассона, которая решается численно. При моделировании в рамках кинетического приближения поведение носителей заряда в полупроводнике описывается одночастичными функциями распределения зарядов i -го сорта $f_i(\vec{v}, \vec{r}, t)$, здесь i определяет тип носителя.

Классические одночастичные функции распределения удовлетворяют кинетическому уравнению Больцмана [1, 3]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{v}\vec{\nabla}_r f) + \frac{1}{\hbar}(\vec{F}_i\vec{\nabla}_k f) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i, \quad (1)$$

где \vec{v}_i – скорость носителя заряда; \vec{F}_i – сила, действующая на него со стороны внешнего электромагнитного поля и остальных носителей заряда;

$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i$ – интеграл столкновений, который описывает процессы рассеяния носителей на неоднородностях кристаллической решетки, т.е. взаимодействие носителей с примесями, фононами, парные кулоновские столкновения частиц, процессы рекомбинации и генерации и т.п.

Потенциал электрического поля в активной области прибора удовлетворяет уравнению Пуассона [1]:

$$\Delta\varphi = -\frac{1}{\varepsilon}(\rho(\vec{r}) - \sum_i e_i \int f_i d\vec{v}_i), \quad (2)$$

где ρ – объемный заряд примесей; $\sum_i e_i \int f_i d\vec{v}_i$ – объемный заряд, создаваемый свободными носителями тока в активной области прибора.

Граничные условия для функции распределения определяются инжекционными и отражательными свойствами соответствующих границ. Носители всех типов, сталкиваясь с границами электродов, выбывают из рассмотрения, на остальных границах их учет проводится путем зеркального отражения. Граничные условия для уравнения Пуассона – значения потенциала либо его производной на границах области.

В связи с тем, что истинные начальные условия для решения поставленной задачи достаточно сложны и не могут быть определены с высокой точностью, задачу их нахождения можно решить динамически. В качестве начальных условий в (1) можно принять равномерное пространственное распределение электронов в областях с однородной плотностью примесей и максвелловское распределение по скоростям вблизи энергии, соответствующей температуре кристалла полупроводника. Далее, проводится предварительное моделирование с нулевыми значениями потенциалов на электродах до тех пор, пока функции распределения не установятся. В резуль-

тате такого моделирования определяются истинные распределения, которые могут считаться начальными условиями для дальнейшего решения задачи.

Для учета тепловых процессов, происходящих в кристалле полупроводника, система уравнений кинетического приближения дополнена уравнением теплопроводности, которое в активной области прибора записывается в следующем виде [9, 10]:

$$c\rho \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right] + q(x, y, t), \quad (3)$$

где c – удельная теплоемкость кристалла; ρ – его плотность; $K(T)$ – коэффициент теплопроводности; $q(x, y, t)$ – плотность источников тепловыделения. В уравнении (1.3) коэффициент теплопроводности зависит от температуры T , что существенно влияет на динамику распространения тепла. В качестве источников тепла в уравнении теплопроводности выступают процессы обмена энергии между электронным газом и кристаллической решеткой, представляемые в уравнении Больцмана (1) в виде фононного рассеяния.

Величина $q(x, y, t)$ имеет смысл количества тепла, приобретенного или потерянного на участке кристалла единичного объема за единицу времени, и пропорциональна количеству процессов рассеяния носителей на фононах. При рассеянии на акустических фононах величина приращения плотности источников тепловыделения равна:

$$\pm \Delta q(x, y, t) = \frac{\varepsilon}{S_{яч} \cdot dt}.$$

Знак \pm определяет, излучается фонон или поглощается носителем заряда: в случае излучения – решетка получает энергию, в случае поглощения – отдает. При рассеянии на акустических фононах энергия фонона $\varepsilon = 2\hbar v_s \langle k \rangle \approx 1\text{мэВ}$.

Таким образом, описание поведения основных носителей в активной области прибора сводится к решению системы уравнений (1) – (3) с соответствующими граничными условиями [1, 2].

В случае, когда существенны эффекты вырождения электронно-дырочной плазмы, ее можно также описывать системой (1)-(3), преобразовав, при этом, соответствующим образом интегралы столкновений [1, 2].

(1)-(3) – сложная система интегро-дифференциальных уравнений большой размерности. Ее решение в общем случае невозможно. Но в частных случаях ее можно преобразовать в другие системы уравнений, эквивалентные ей и вполне разрешимые [1]. Для решения этой системы используются сеточные методы и метод макрочастиц [1,4]. Численное решение уравнения Больцмана сеточными методами при условии, что ансамбль частиц сильно неоднороден по плотности и скорости носителей, что актуально для любого полупроводника, требует очень больших вычислительных затрат и, как

правило, представляется весьма затруднительным. Наиболее оптимальный выбор в данной задаче – метод макрочастиц.

Метод макрочастиц

Суть макрочастичного подхода заключается в представлении функций, описывающих плотность частиц в фазовом или координатном пространстве через совокупность точек или областей в этом пространстве, называемых макрочастицами. Тогда плотность расположения макрочастиц может интерпретироваться как дискретная аппроксимация функций плотности, а координаты и скорости изменяются во времени в соответствии с законами движения с учетом рассеяния носителей на неоднородностях кристаллической решетки. При этом эволюция плотности ансамбля макрочастиц описывает эволюцию аппроксимируемой плотности. Законы, описывающие поведение ансамбля, зависят от некоторых функций (распределение квазиэлектрического поля, распределение давлений и гидродинамических скоростей и т.п.), которые определяются коллективным состоянием плазмы.

Для нахождения этих функций методом макрочастиц вводится эйлерова сетка на оси времени и в координатном пространстве, они вычисляются на пространственной сетке в моменты времени, соответствующие узлам временной сетки, методом Cloud in the Cell [1].

В процессе движения макрочастицы рассеиваются в соответствии с известными вероятностями реальных механизмов рассеяния. При этом для выбора механизма рассеяния в соответствии с его вероятностью используется метод Монте-Карло, впервые предложенный Куросавой [2,6]. Механизмы рассеяния могут быть учтены и другим способом - путем дополнительных добавок в правой части уравнения Больцмана, усредненным образом учитывающих эти механизмы.

Фигурирующие в уравнениях макроскопические параметры получаются усреднением соответствующих величин.

Решение кинетического уравнения Больцмана методом макрочастиц

В кинетическом уравнении изменение функции распределения во времени описывается тремя слагаемыми, из которых первое определяет фазовые переходы на различных рассеивающих центрах, второе – изменение пространственного положения носителей в соответствии со скоростью их движения, а третье – изменение импульса под воздействием внешних сил.

Таким образом, решение кинетического уравнения можно свести к решению уравнений движения для носителей заряда в кристалле с учетом механизмов рассеяния [1, 5]:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{d\vec{k}} \quad \text{и} \quad \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\vec{F}}{m^*}, \quad (4)$$

где $\epsilon_{\vec{k}}$ – энергия носителя; \vec{F} – действующая на него внешняя сила; $m^* = m \frac{q^*}{q}$.

Поскольку магнитное взаимодействие в полевых транзисторах слабо, можно считать, что внешняя сила, действующая на носители заряда – электрическая и определяется как $\vec{F} = \nabla_{\vec{r}} \varphi(\vec{r}, t)$, где φ – потенциал электрического поля, определяемый при решении уравнения Пуассона (2).

В общем случае модель классическая, однако для учета интегралов столкновений можно воспользоваться численными величинами частот рассеяния, полученными методами квантовой механики.

Интегралы столкновений описывают перемещения частиц в фазовом пространстве.

Процесс рассеяния носителя заряда можно рассматривать как переход из одного состояния с квазиимпульсом \vec{k}_i в другое разрешенное состояние с \vec{k}_f . Вероятность ухода из состояния i определяется так:

$$W = \int \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_s | i \rangle|^2 \cdot \delta(E_f - E_i) dS_f, \quad (5)$$

где интеграл берется по всем конечным состояниям S_f , дельта-функция выражает закон сохранения энергии, H_s – гамильтониан рассеяния, чей вид определяется центром рассеяния.

При условии, что время между столкновениями гораздо больше их длительности, интеграл столкновений в уравнении (1) можно представить через вероятности рассеяния (5) как [6]:

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_s = \sum_j \left\{ W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}) \right\} \cdot \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}}) dk',$$

где суммирование идет по всем механизмам рассеяния, $W(\vec{k}', \vec{k})$ – вероятность перехода $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$.

Введем $W_s(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}')$ – вероятность ухода из

состояния \vec{k} . Эта величина связана с временем между актами рассеяния одного типа соотношением:

$$\frac{1}{\tau_s(\vec{k})} = W_s(\vec{k}).$$

Поскольку процессы рассеяния на различных рассеивающих центрах являются независимыми, общее время свободного пролета носителя заряда (время между двумя любыми актами рассеяния) определяется как сумма времен рассеяния [1, 2]:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_s \frac{1}{\tau_s} = \Gamma. \quad (6)$$

Сочетая решение уравнений движения за время, соответствующее свободному пробегу носителей между двумя произвольными актами рассеяния, с выбором механизма рассеяния и осуществлением соответствующего фазового перехода, можно на каждом временном этапе получить функцию рас-

предела всего ансамбля носителей заряда в заданной области.

Макрочастица i выбывает из точки импульсного пространства в результате рассеяния s -м механизмом с вероятностью $W_s^i(k)$, причем в зависимости от механизма рассеяния частица может менять свой тип (междолинный переход). Согласно закону сохранения энергии находятся новые энергия и импульс макрочастицы после рассеяния. Углы рассеяния определяются случайным образом по заданным функциям распределения. Ненормированные вероятности рассеяния частиц $W_s^i(k)$ называются его частотами.

В общем случае разрешить уравнение для плотности вероятности не представляется возможным, поэтому в [14] было предложено ввести механизм "саморассеяния", который не дает изменений квазиимпульса частицы. Интенсивность саморассеяния при любой энергии выбирается такой, чтобы привести реальные процессы к выбранной постоянной:

$$\Gamma = \sum_s \lambda_s + \lambda_0 = \text{const}. \quad (7)$$

Дифференциальная частота этого процесса (вероятность перехода $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$ в результате саморассеяния) определяется так:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = \lambda_0(\vec{k}) \cdot \delta(\vec{k} - \vec{k}').$$

При применении описанного метода в рамках нашей задачи точность решения будет в значительной мере зависеть от того, насколько адекватно представляются акты рассеяния носителей на различных неоднородностях решетки. При рассмотрении механизмов рассеяния наибольший интерес представляет вероятность рассеяния, т.е. время между двумя актами рассеяния на идентичных центрах и изменение квазиимпульса носителя в результате акта рассеяния, поскольку они определяют вклад данных рассеивающих центров в изменение общего поведения ансамбля.

Для кремния наиболее характерными являются следующие механизмы рассеяния [6, 12, 13]:

1. *Рассеяние на деформационном потенциале на продольных LA-фононах (DLA-рассеяние)*. Частота рассеяния –

$$\lambda(k) = \lambda_{0DLA} T k m_{\text{эф}}^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{\sin^2 \gamma}{m_l} + \frac{\cos^2 \gamma}{m_t}},$$

где $\lambda_{0DLA} = 2.9834 \cdot 10^{14}$; k – нормированный на величину 10^9 квазиимпульс электрона; T – нормированная на 735K температура кристаллической решетки; $m_{\text{эф}}$ – эффективная масса плотности состояний; m_t – поперечная эффективная масса, m_l – продольная эффективная масса; γ – угол вектора квазиимпульса с осью кристалла.

2. *Деформационное рассеяние на поперечных TA-фононах (DTA-рассеяние)*. Частота рассеяния –

$$\lambda(k) = \lambda_{0DTA} T k m_{\text{эф}}^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{\sin^2 \gamma}{m_l} + \frac{\cos^2 \gamma}{m_t}} S(\gamma),$$

где $S(\gamma) = \frac{512}{315\pi} \frac{1}{\sqrt{1 + \mu \text{ctg}^2 \gamma}}$ – функция распределения, $\mu = \frac{m_t}{m_l}$, $\lambda_{0DTA} = 6.645 \cdot 10^{13}$.

Рассеяния на фононах характеризуют обмен энергией между газом свободных электронов и кристаллической решеткой. При рассеянии на акустических фононах решетки с продольным и поперечным типом взаимодействия носителей с акустической волной решетки доля энергии, которую приобретает либо теряет электрон в результате столкновения с фононом $\Delta \epsilon = \hbar k_F s \ll \epsilon$, где k_F – квазиимпульс Ферми; s – скорость звука в Si, γ – произвольный угол рассеяния.

Так как Si является гомеоплярным кристаллом, следовательно, в нем отсутствует рассеяние на полярных и неполярных оптических фононах

3. *Электрон-электронное рассеяние* (рассеяние электрона на равновесном электронном газе). Частота

$$\text{рассеяния} - \lambda(k) = \lambda_{0ee} \cdot \frac{nm}{k^3} \cdot L\left(\frac{k^2}{q_0^2}\right),$$

где $\lambda_{0ee} = 0.319 \cdot 10^{-12}$, $q_0 = 0.01363277612$ – нормированная обратная длина экранирования Дебая,

$$L(\xi) = \ln(1 + 2\xi) - \frac{1}{1 + (2\xi)^{-1}} - \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{1 + 2\xi^{-1} \cdot (1 + (2\xi)^{-1})}.$$

В Si можно выделить две таких частоты – частота продольного и поперечного рассеяния. При этом в выражении для $\lambda(k)$ m принимает значения m_l или m_t соответственно.

4. *Рассеяние на ионах примеси*. Такое рассеяние является квазиупругим, и его частота соответствует времени релаксации импульса.

Частота рассеяния на ионах донорной примеси при концентрациях порядка $N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ и температурах выше 50K в приближении Конуэлла и Вайскопфа:

$$\lambda(k) = \frac{1}{\tau(k)} = \lambda_{0IM} \cdot m_{\text{эф}}^{\frac{1}{2}} N E_k^{-3/2} \cdot \ln \left[1 + A \frac{E_k^2}{N^{2/3}} \right],$$

$$\text{где } E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{\sin^2 \gamma}{m_l} + \frac{\cos^2 \gamma}{m_t} \right),$$

$\lambda_{0IM} = 0.863 \cdot 10^{-34}$, N – нормированная на N_D концентрация, $A = 0.257 \cdot 10^{58}$.

5. *Рассеяние на нейтральных примесях.* Нейтральные примеси, которые могут захватывать электрон на глубокий уровень, малоэффективны как центры рассеяния. Более эффективным является резонансное рассеяние на ловушках с мелкими уровнями [4]. Частота такого рассеяния определяется по формуле Скляра [4]:

$$\lambda(k) = \lambda_{0NI} \frac{N_N}{m_{\text{эф}} k} \cdot \frac{\Gamma^2}{\Delta k^2 + \Gamma^2},$$

где $\lambda_{0NI} = 1.4540 \cdot 10^{11}$; N_N – нормированная на N_D концентрация нейтральной примеси; $\Gamma = \sqrt{k_r k}$ – ширина резонанса, $k_r = 0.0259$ соответствует энергии резонанса $E_r(\text{Si}) = 5$ мэВ.

На рис. 1 приведены характерные частоты рассеяния для Si при 300K и концентрации примесей порядка $N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$.

Для перехода от уравнений модели к их двумерным аналогам рассматриваем макрочастицы как цилиндры с образующей, параллельной оси z. Распределение плотности заряда подобных двумерных частиц описывается функцией, называемой форм-фактором частиц $G_m(\vec{r})$, здесь под \vec{r} подразумевается (x, y), а $\int G_m(\vec{r}) d\vec{r} = 1$.

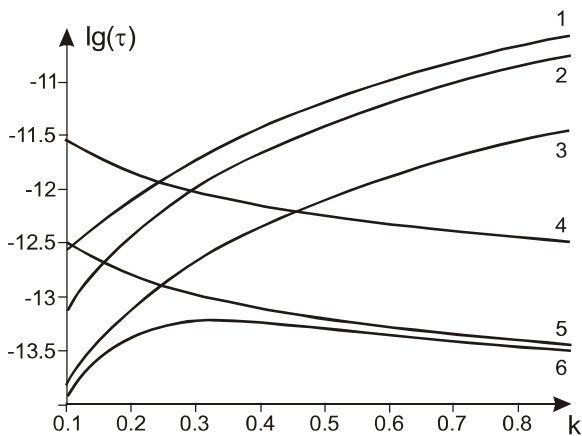


Рис. 1. Характерные частоты рассеяния для Si: 1 – на ионах примеси; 2 – электрон-электронное поперечное; 3 – электрон-электронное продольное; 4 – DTA; 5 – DLA; 6 – суммарная частота

Тогда функция распределения:

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) = \sum_j G_m(\vec{r} - \vec{r}_j^i(t)) \cdot \delta(\vec{k} - \vec{k}_j^i(t)),$$

где $\vec{r}_j^i(t)$, $\vec{k}_j^i(t)$ – координаты и квазиимпульс j-й частицы i-го сорта в момент t.

При переходе к двумерным макрочастицам необходимо выполнение следующих условий:

а) из закона сохранения заряда: $q \int f_i d\vec{k} = \tilde{q} \int \tilde{f}_i d\vec{k}$, \tilde{q} – заряд на единицу длины по z;

б) из уравнений (3): $\frac{d\tilde{\epsilon}_i}{d\vec{k}} = \frac{d\tilde{\epsilon}_i}{d\vec{k}}$ и $\tilde{q}\vec{k} = q\vec{k}$.

Уравнения движения (3) модифицируются следующим образом:

$$\frac{d\tilde{r}_j^i}{dt} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d\tilde{\epsilon}_i}{d\vec{k}_j^i}$$

$$\text{и } \frac{d\tilde{k}_j^i(t)}{dt} = -\frac{\tilde{q}}{\hbar} \cdot \int \tilde{E}(\vec{r}, t) \cdot G_m(\vec{r}, \tilde{r}_j^i(t)) dt.$$

В рамках описанного выше приближения, для решения уравнения Пуассона, необходимо провести дискретизацию области моделирования. Для этого вводится сетка, определяемая:

$$\vec{r}_{ij} = [x_i, y_i], x_i = (i-1) \cdot h_{x_i} \text{ и } y_i = (i-1) \cdot h_{y_i},$$

где h_{x_i} , h_{y_i} – размер ячейки, $0 < i < N_x + 1$, $0 < j < N_y + 1$.

Уравнение Пуассона (5) принимает вид:

$$\Delta\phi = Q^n - Q^N,$$

здесь $Q^N = \frac{4\pi e}{\chi} \cdot N_{\text{impl}}$ – распределение примесей,

$Q^n = \frac{4\pi\hbar\tilde{e}}{\chi} \cdot \sum \int \tilde{f}_i d\vec{k}$ – распределение макрочастиц с форм-фактором G_m .

Область моделирования $(N_x + 1)(N_y + 1) = G$, $G = \sum G_{ij}$ – ящик из G_{ij} ячеек, где σ_{ij} – площадь ячейки. Введем в рассматриваемой области функцию:

$$\Psi_{ij}(\vec{r}) = \begin{cases} 1/\sigma_{ij}, & \vec{r} \in G_{ij}; \\ 0, & \vec{r} \notin G_{ij}. \end{cases}$$

Определим сеточное ядро как:

$$G_e(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{i,j'} \Psi_{ij}(\vec{r}) \Psi_{i'j'}(\vec{r}'),$$

тогда $Q_{ij}^n = \int G_e(\vec{r}_{ij}, \vec{r}) \cdot Q^n(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{|\sigma_{ij}|} \cdot \int Q^n(\vec{r}) d\vec{r}$ – полный заряд в ячейке.

Распределение заряда описывается ядром:

$$G(\vec{r}, \vec{r}_j^i(t)) = \int G_m(\vec{r}_j^i(t)) \cdot G_e(\vec{r}, \vec{r}') d\vec{r}'.$$

Обозначим

$$\phi_{ij} = \phi(x_i, y_j) \text{ и } Q_{ij} = Q^N(x_i, y_j) - Q_{ij}^n.$$

По пятиточечной схеме уравнение Пуассона преобразуется в систему уравнений:

$$h_x^{-2} (\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}) + h_y^{-2} (\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}) = Q_{ij}, \quad (8)$$

которая решается численно одним из известных методов [7-9].

Наличие пространственной сетки приводит к изменению форм-фактора макрочастиц (вместо $G_m(\vec{r} - \vec{r}_j^i(t))$ вводим $G(\vec{r}, \vec{r}_j^i(t))$), в данном случае

форма частицы подстраивается под сетку. Такая процедура называется “размазыванием” заряда по ячейкам сетки. С учетом этого сила, входящая в уравнения движения:

$$\vec{F}(\vec{r}_j^i(t)) = -q \sum_{m,n} G(r_{mn}, \vec{r}_j^i(t)) \cdot \vec{E}(\vec{r}_{mn}),$$

где m и n – номера узлов сетки, суммирование ведется по тем узлам, где $G \neq 0$.

Электрическое поле определяется следующим образом:

$$E_x(r_{mn}) = \frac{1}{2h_x} (\Phi_{m-1,n} - \Phi_{m+1,n}),$$

$$E_y(r_{mn}) = -\frac{1}{2h_y} (\Phi_{m,n-1} - \Phi_{m,n+1}). \quad (9)$$

Уравнения движения двумерных частиц:

$$\frac{d\vec{r}_j^i}{dt} = \frac{\vec{k}_j^i}{\tilde{m}_i}, \quad \frac{d\vec{k}_j^i}{dt} = \frac{\vec{F}(\vec{r}_j^i)}{\hbar}, \quad (10)$$

где $\tilde{m}_i = m_i \frac{\tilde{q}}{q}$.

Для их численного решения необходимо провести дискретизацию по времени, заменяя dt на τ – характерное время рассеяния, определяющее время между двумя переходами в импульсном пространстве (аналог интеграла столкновений для уравнений движения).

Таким образом, схему решения уравнения Больцмана можно представить в виде (рис. 2):

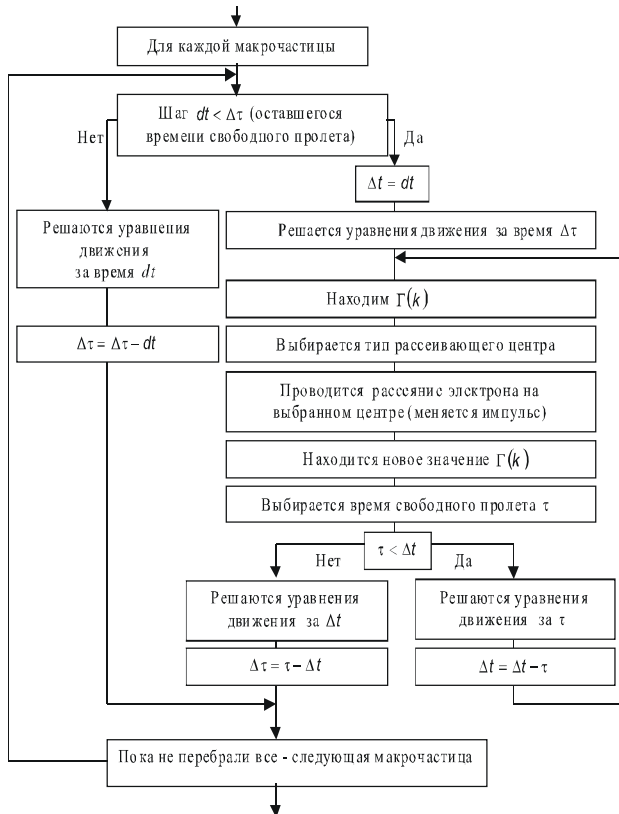


Рис. 2. Схема решения уравнения Больцмана

Общая блок-схема модели для расчета полупроводниковых приборов представлена на рис. 3.



Рис.3. Блок-схема модели для расчета полупроводниковых приборов

Прямым результатом моделирования таким методом является общая функция распределения носителей в активной области прибора $f(\vec{v}, \vec{r}, t)$. Она позволяет определить все необходимые физические и схемотехнические параметры, такие как плотность электронов проводимости $n(\vec{r}, t)$, плотность токов в области транзистора $\vec{J}(\vec{r}, t)$, плотность $K(\vec{r}, t)$ и поток $\vec{Q}(\vec{r}, t)$ кинетической энергии в области прибора, по следующим формулам:

$$n(\vec{r}, t) = \int d^3v \cdot f(\vec{v}, \vec{r}, t),$$

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \int d^3v \cdot \vec{v} \cdot f(\vec{v}, \vec{r}, t),$$

$$K(\vec{r}, t) = \frac{m}{2} \cdot \int d^3v \cdot \vec{v}^2 \cdot f(\vec{v}, \vec{r}, t),$$

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = \frac{m^2}{2} \cdot \int d^3v \cdot \vec{v}^2 \cdot \vec{v} \cdot f(\vec{v}, \vec{r}, t).$$

Проведя анализ функции распределения, можно получить зависимость от времени всех основных физических характеристик прибора и получить такие схемотехнические параметры как коэффициент усиления по сигналу, набор Y-параметров соответствующего четырехполюсника, проанализировать отношение сигнала к уровню шумов и т.д.

Выводы

Предложена топологическая модель ПТШ субмикронных размеров на кремнии. В результате имитационного моделирования в соответствии с описанным алгоритмом для транзистора с заданной геометрией можно получить все электрофизические характеристики, включая токовые и тепловые. Поскольку решается динамическая задача, статические характеристики могут быть определены путем обработки результатов моделирования, полученных при установившемся процессе.

Литература: 1. *Хокни Р., Иствуд Д.* Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 638 с. 2. *Реклайтис А.С., Мицкявичус Р.В.* Новое в жизни, науке, технике: Метод Монте-Карло в физике полупроводников. М.: Знание, 1988. 38 с. 3. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1984. 456 с. 4. *Поттер Д.* Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975. 392 с. 5. *Рошаль А.С.* Моделирование заряженных пучков. М.: Атомиздат, 1979. 224с. 6. *Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б.* Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984. 352с. 7. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 592с. 8. *Самарский А.А., Андреев В.Б.* Разностные методы для эллиптических уравнений. М.: Наука, 1976. 352с. 9. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616с. 10. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 736с. 11. *Бубенников А.Н.* Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем: Учеб. пособие для спец. "Физика и технология материалов и компонентов электронной техники". М.: Высш.шк., 1989. 320с. 12. *Бонч-Бруевич В.Л., Калашиков С.Г.* Физика полупроводников. М.: Наука, 1977. 672с. 13. *Басс Ф.Г., Гуревич Ю.Г.* Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975. 400с. 14. *Rees H.D.* Calculation of Distribution Functions by Exploiting the Stability of the Steady State, J. Phys. Chem. Solids, 1969. Vol. 30. 643р.

Поступила в редколлегию 12.05.2004

Рецензент: д-р физ.-мат наук, проф. Гордиенко Ю.Е.

Зуев Сергей Александрович, ассистент кафедры радиофизики ТНУ. Научные интересы: моделирование физических процессов в полупроводниковых приборах методом крупных частиц, исследование электронных и тепловых режимов работы полупроводниковых структур, в частности — полевых транзисторов. Адрес: Украина, 95004, Симферополь, ул. Киевская, 127, кв. 35, тел. раб. (0652) 230-360, дом. (0652) 573-683. E-mail: sa_zuev@tnu.crimea.ua.

Старостенко Владимир Викторович, канд. физ.-мат. наук, зав. кафедрой радиофизики ТНУ. Научные интересы: моделирование вакуумных и твердотельных устройств СВЧ, исследование деградационных процессов в различных объектах и средах при воздействии электромагнитных полей. Адрес: Украина, 95022, Симферополь, ул.Б.Куна, 31, кв.13, тел.: раб. (0652)23-03-60, дом. (0652)57-54-01.

Терещенко Владимир Юрьевич, аспирант кафедры радиофизики ТНУ. Научные интересы: моделирование твердотельных устройств СВЧ, исследование воздействия электромагнитных полей на различные среды. Адрес: Украина, 95007, Симферополь, пр. Вернадского, 4, тел. (0652)23-03-60.

Чурюмов Геннадий Иванович, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры ФОЭТ ХНУРЭ. Научные интересы: моделирование нелинейных процессов, СВЧ электроника, лазерная и оптоэлектронная техника. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. 702-10-57.

Шадрин Анатолий Александрович, канд. техн. наук, доцент кафедры радиофизики ТНУ. Научные интересы: математическое моделирование процессов в вакуумных и твердотельных приборах и устройствах СВЧ. Адрес: Украина, 95007, Симферополь, пр. Вернадского, 4, тел. (0652)23-03-60.