

ГОУ ВПО «Воронежский государственный  
технический университет»

А.В. Арсентьев А.В. Строгонов Д.С. Шацких

**МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Утверждено Редакционно-издательским советом  
университета в качестве учебного пособия

Воронеж 2011

УДК 22.183.4

Арсентьев А.В. Моделирование технологических процессов: учеб. пособие / А.В. Арсентьев, А.В. Строгонов, Д. С. Шацких. Воронеж: ГОУВПО «Воронежский государственный технический университет», 2011. 82 с.

В учебном пособии рассматривается моделирование технологических процессов в современной микро- и нанoeлектронике.

Издание соответствует требованиям Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по направлению 210100 «Электроника и микроэлектроника», специальности 210104 «Микроэлектроника и твердотельная электроника», дисциплине «Математическое моделирование технологических процессов и интегральных микросхем».

Предназначено студентам очной формы обучения.

Учебное пособие подготовлено в электронном виде в текстовом редакторе MS Word for Windows и содержится в файле Учебное пособиеМодТехПроц.doc.

Табл. 1. Ил. 7. Библиогр.: 8 назв.

Научный редактор д-р физ.-мат. наук, проф. С.И. Рембеза

Рецензенты: кафедра физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета (зав. кафедрой д-р физ.-мат. наук, проф. Е.Н. Бормонтов); д-р техн. наук, проф. М.И. Горлов

© Арсентьев А.В., Строгонов А.В., Шацких Д.С., 2011

© Оформление. ГОУВПО «Воронежский государственный технический университет», 2011

## ВВЕДЕНИЕ

Математическое моделирование сначала полупроводниковых приборов, а затем и технологических процессов микроэлектроники, открывшееся пионерской работой Гуммеля в 1964 г., к настоящему времени прошло стадию первоначальных научных исследований и всё больше становится рабочим инструментом как для проектировщиков, так и для технологов. В настоящее время в дополнение к уже имеющимся и уже зарекомендовавшим себя прикладным программным пакетам на рынке появляются новые, и перед их потенциальными покупателями-специалистами микроэлектронной отрасли возникает задача выбора пакета с необходимыми возможностями и по приемлемой цене, поскольку программная продукция на мировом рынке стоит дорого. Введение настоящего курса в учебный план специальности 210104 «Микроэлектроника и твердотельная электроника» имеет целью ознакомить студентов с основными идеями машинного моделирования, апробированными и используемыми в современной микроэлектронике.

При изучении настоящей дисциплины основное внимание в моделировании как технологических процессов, так и полупроводниковых приборов уделено методу конечных разностей, а с методами конечных элементов, граничных элементов и Монте-Карло дается общее ознакомление.

Данную дисциплину нельзя считать законченной и устоявшейся в связи с тем, что с уменьшением размеров интегральных элементов, ростом их быстродействия и с развитием возможностей микроэлектронной технологии могут стать необходимыми новые физические идеи и численные методы. Однако мы рассчитываем, что идеи и методы, изложенные в настоящем пособии, сохранят свою

актуальность в прикладных разработках и серийном полупроводниковом производстве в течение 5-7 лет.

Процесс проектирования современных БИС и СБИС достиг того уровня, когда натурные эксперименты на макетах не только стали экономически невыгодными, но и не гарантируют эффективной работы реальной БИС. Отсюда вытекает настоятельная необходимость сквозного математического моделирования на всех основных этапах проектирования: "технология - элемент - схема".

Моделирование основных технологических процессов позволяет решать задачи получения профиля примесей, электрофизических характеристик полупроводниковых слоев и топологии проектируемых элементов, что, в свою очередь, обеспечивает исходными данными для решения задач проектирования элементов схемы.

Моделирование физических процессов в интегральных структурах позволяет получить основные электрические характеристики элементов, необходимых для основных эксплуатационных параметров проектируемой схемы.

Следует отметить также, что математическое моделирование физических процессов является мощным инструментом фундаментальных научных исследований как в области создания принципиально новой элементной базы, так и для разработки перспективных технологических процессов.

Математической моделью (ММ) какого-либо объекта называется любое математическое описание, отражающее состояние или поведение объекта с требуемой степенью точности. Сам процесс получения модели и расчет с ее помощью требуемых характеристик называется математическим моделированием. В литературе часто встречается близкий по смыслу термин «симулирование», под которым понимается получение количественных результатов на ЭВМ.

К математическим моделям предъявляются требования универсальности, адекватности, точности и экономичности.

Универсальность ММ оценивается по числу решаемых с помощью этой модели задач проектирования.

Точность ММ определяется по относительной или абсолютной погрешности моделируемых параметров, то есть характеризует разницу между истинным значением и значением, вычисленным по этой модели.

Адекватность ММ – это способность модели отображать поведение объекта в заданной области с требуемой точностью. Обычно адекватность ММ определяется величиной этой области. Но при оценке адекватности рассматриваются лишь те свойства модели, которые необходимы проектировщику на данном конкретном этапе.

Экономичность ММ определяется затратами вычислительных ресурсов при моделировании. Количественная оценка экономичности ММ чаще всего определяется как число машинных операций, затраченных на расчет одного выходного параметра. Дополнительно указываются требуемые расходы оперативной памяти. Такая оценка экономичности позволяет сравнивать модели, реализованные на различных ЭВМ.

Указанные выше противоречивые требования к ММ на практике удовлетворяют обычно компромиссно путем использования не единой, а множества различных моделей, объединенных в так называемые библиотеки моделей, каждая из которых ориентирована на решения достаточно узкого класса задач проектирования.

Из всего многообразия уравнений в частных производных рассмотрим лишь те, которые используются при моделировании типовых технологических процессов и элементов ИС. К таким уравнениям в первую очередь относится уравнение эллиптического типа, которое может быть записано в виде

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + D \frac{\partial U}{\partial x} + E \frac{\partial U}{\partial y} + Fu = f(x, y) \quad (1.1)$$

Уравнения эллиптического типа возникают в следующих типовых задачах моделирования:

- распределение поля и потенциала в диэлектрических пленках (уравнение Лапласа);
- равновесное распределение зарядов, поля, потенциала в различных слоях полупроводниковых элементов (уравнение Пуассона);
- равновесное распределение температуры в силовых полупроводниковых приборах.

Второй по распространенности тип уравнений – уравнения параболического типа:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + D \frac{\partial U}{\partial x} + E \frac{\partial U}{\partial y} + G \frac{\partial U}{\partial t} + Fu = f(x, y, t) \quad (1.2)$$

Этот тип уравнения встречается при решении следующих задач:

- моделирование процессов окисления и диффузии (2-е уравнение Фика);
- моделирование эпитаксиального наращивания полупроводниковых слоев;
- моделирование нестационарных режимов работы полупроводниковых приборов (уравнение непрерывности).

Математическая постановка задачи моделирования на основе вышеприведенных уравнений включает в себя формулировку начальных (гиперболические уравнения) и граничных условий (гиперболические и эллиптические уравнения). В общем случае различают три типа граничных условий:

- граничное условие первого рода (условие Дирихле):

$$U|_{r_1} = g_1(x, y) \quad (1.3)$$

•граничное условие второго рода (условие Неймана):

$$\left. \frac{\partial U}{\partial n_{\perp}} \right|_{r_2} = g_2(x, y) \quad (1.4)$$

•граничное условие третьего рода (условие Робина):

$$\left( \frac{\partial U}{\partial n_{\perp}} + \gamma(x, y)U \right) \Big|_{r_3} = g_3(x, y) \quad (1.5)$$

## 1. МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

Метод конечных разностей (МКР) исторически один из первых методов, но он не потерял до сих пор популярности в силу своей относительной простоты. В основе метода лежит переход от непрерывного множества к дискретному.

Область непрерывного изменения аргументов заменяется конечным дискретным множеством точек, называемых сеткой или решеткой, а само множество точек сетки называется ее узлами. Узлы, лежащие внутри области определения аргументов, называются внутренними, узлы, принадлежащие границам области – граничными.

Функции непрерывного аргумента рассматриваются здесь как функции дискретного аргумента, определяемые в узлах сетки. Эти функции называются сеточными функциями. Основным оператором в МКР – разностный оператор, который заменяет дифференциальный оператор.

Таким образом, исходная система дифференциальных уравнений в МКР сводится к системе алгебраических уравнений, которую принято называть конечно-разностной схемой задачи. Эффективность такого перехода определяется следующими свойствами разностных схем: согласованность, точность, устойчивость, эффективность.

Разностная схема называется согласованной, если погрешность аппроксимации убывает при измельчении сетки, то есть, по существу, это свойство сводится к требованию, чтобы в пределе при стремлении к нулю величины шагов сетки построенная разностная алгебраическая система уравнений совпадала с исходной дифференциальной.

Точность численного решения определяется двумя основными источниками ошибок: ошибки округления, зависящие от длины разрядной сетки ЭВМ, и ошибки



аппроксимации, возникающие в результате замены дифференциального оператора разностным. В зависимости от последних конечно-разностные схемы подразделяются на схемы второго порядка точности – наиболее распространенные схемы обычной точности, и схемы более высокого порядка, которые называются схемами повышенной точности.

Устойчивость – более тонкое свойство, и в первом приближении разностная схема считается устойчивой, если на каждом последующем шаге вычислительной процедуры любая из ошибок не возрастает. Если обозначить через  $\varepsilon^n$  – значение ошибки на  $n$ -шаге, а соответственно через  $\varepsilon^{n+1}$  – на  $n + 1$ , то тогда из очевидного равенства

$$|\varepsilon^{n+1}| = G|\varepsilon^n|.$$

Вышеприведенное определение можно записать в виде условия для так называемого множителя перехода  $G$

$$|G| \leq 1.$$

При определении критериев устойчивости широко распространенным является метод Неймана, как наиболее простой и надежный. Однако метод применим, строго говоря, лишь для линейных задач. На практике используются различные модификации этого метода, позволяющие учесть и оценить нелинейности как самой задачи, так и граничных условий.

Эффективность разностной схемы чаще всего оценивается числом операций (всех или только арифметических, или только умножений и делений), затрачиваемых на обработку одного узла схемы.

В общем случае алгоритм моделирования, строящийся на основе МКР, состоит из 3-х основных процедур:

- построение сетки;
- переход к сеточным функциям и аппроксимация дифференциальных операторов разностными;
- решение полученной системы алгебраических уравнений.

### 1.1. Построение сетки

Для одномерной задачи сетка, представляющая в данном случае множество точек  $x_i$  при  $i=0, \dots, n$ , строится путем разбиения области изменения аргумента  $[x_0, x_n]$  на  $n$  отрезков. Графически такая сетка может быть представлена в виде отрезка прямой линии (рис. 1.1). Расстояние между двумя соседними узлами сетки  $h_i = x_{i+1} - x_i$  называется шагом сетки

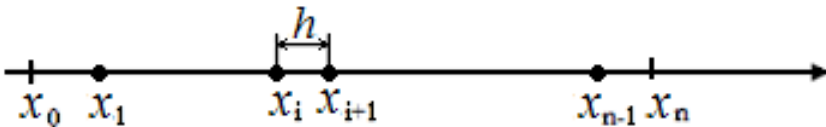


Рис. 1.1. Одномерная сетка

Сетка называется регулярной (равномерной), если шаг сетки  $h_i$  постоянен.

Для многомерной задачи построение сетки проводится аналогично по каждому аргументу отдельно и, возникающие при этом ячейки сетки представляют собой разнообразные плоские фигуры (двухмерная задача) или, соответственно, объемные фигуры (трехмерная задача). Примеры основных вариантов двухмерной сетки представлены на рис. 1.2.

Наиболее распространенной формой двумерной сетки является прямоугольная (рис. 1.2а).

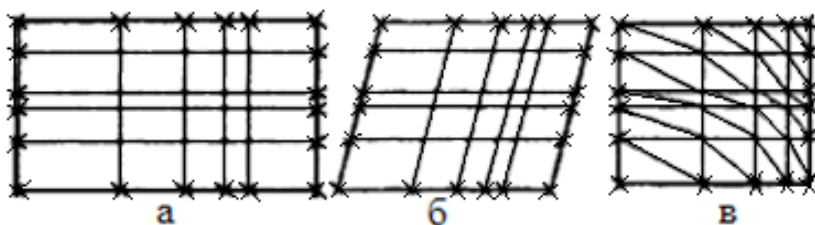


Рис. 1.2. Наиболее распространенные варианты сеток:  
а - прямоугольная, б - косоугольная, в – треугольная

Выбор типа сетки и ее размеров зависит от геометрии моделируемого объекта, а также от требований к точности и экономичности конструируемой модели. Под оптимальной подразумевают сетку, обеспечивающую заданную точность моделирования при минимальном числе узлов. В общем виде проблема построения оптимальной сетки не решена.

## 1.2. Построение разностных операторов

Множество узлов сетки, используемых для описания разностного оператора, называют шаблоном этого оператора. Вид шаблона определяется типом математического уравнения, требуемой точностью и конкретным численным методом. В качестве примера приведены на рис. 1.3 несколько наиболее распространенных шаблонов для эллиптического уравнения.

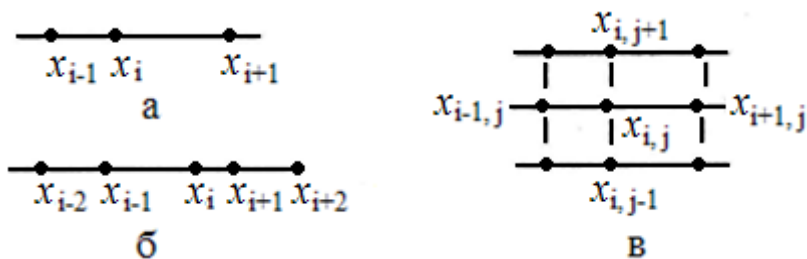


Рис. 1.3. Варианты шаблонов для эллиптического уравнения: а) 3-точечный шаблон одномерной задачи для разностной схемы обычной точности; б) 5-точечный шаблон одномерной задачи для разностной схемы повышенной точности; в) 5-точечный шаблон типа "крест" двухмерной задачи для разностной схемы - обычной точности.

Для любого варианта шаблона конечно-разностный оператор может быть получен следующими основными методами:

- разложением функции в ряд Тейлора;
- интерполяцией функции полиномами;
- методом контрольного объема, основанном на учете законов сохранения, описывающих физику строящейся модели. Разностные схемы, построенные по этому методу, принято называть консервативными.

### 1.3. Метод разложения в ряд Тейлора

Рассмотрим линейное дифференциальное уравнение

$$U'' + p(x)U' + q(x) = f(x)$$

с двухточечными линейными краевыми условиями

$$\left. \begin{aligned} \alpha_0 U(a) + \alpha_1 U'(a) &= A, \\ \beta_0 U(b) + \beta_1 U'(b) &= B \end{aligned} \right\}$$

$$(|\alpha_0| + |\alpha_1| \neq 0, \quad |\beta_0| + |\beta_1| \neq 0),$$

где  $p(x), q(x)$  и  $f(x)$  непрерывны на отрезке  $[a, b]$ .

Одним из наиболее простых методов решения этой краевой задачи является сведение ее к системе конечно-разностных уравнений. Для этого разобьем основной отрезок  $[a, b]$  на  $n$  равных частей длины  $h$  (шаг).

Точки разбиения имеют абсциссы:

$$x_i = x_0 + ih \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n), \quad x_0 = a, x_n = b.$$

Значения в точках деления  $x_i$  искомой функции  $U = U(x)$  (рис. 1.4) и ее производных  $U' = U'(x), U'' = U''(x)$  обозначим соответственно через  $U_i = U_i(x_i), U'_i = U'_i(x_i), U''_i = U''_i(x_i)$ . Введем также обозначения:  $p_i = p(x_i), q_i = q(x_i), f_i = f(x_i)$ .

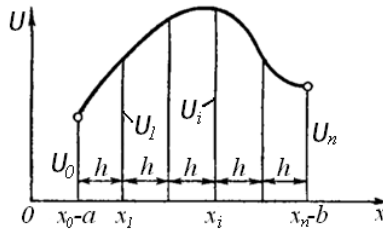


Рис. 1.4. Значения в точках деления  $x_i$  искомой функции и ее производных

Заменяя производные симметричными конечно-разностными отношениями для внутренних точек  $x_i$  отрезка  $[a, b]$ , будем иметь

$$U'_i = \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h}$$

$$U''_i = \frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2}$$

$$(i = 1, 2, \dots, n - 1)$$

Для концевых точек  $x_0 = a$  и  $x_n = b$ , чтобы не выходить за пределы отрезка  $[a, b]$ , можно положить

$$U'_0 = \frac{U_1 - U_0}{h}, \quad U'_n = \frac{U_{n-1} - U_n}{-h}$$

Однако, если функция  $U = U(x)$  достаточно гладкая, то более точные значения дают формулы

$$U'_0 = \frac{-U_2 + 4U_1 - 3U_0}{2h},$$

и

$$U'_n = \frac{3U_n - 4U_{n-1} + U_{n-2}}{2h}, n \geq 2.$$

Действительно, полагая, например,  $U_1 = U(x_0 + h)$  и  $U_2 = U(x_0 + 2h)$  и используя формулу Тейлора, будем иметь:

$$\begin{cases} U_{i+1} = U_i + U'_i(x_{i+1} - x_i) + \frac{U''_i}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{U'''_i}{3!}(x_{i+1} - x_i)^3 + \dots, \\ U_{i-1} = U_i + U'_i(x_{i-1} - x_i) + \frac{U''_i}{2!}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{U'''_i}{3!}(x_{i-1} - x_i)^3 + \dots \end{cases}$$

Отбросив последние слагаемые в разложении в ряд Тейлора, от которых зависит точность конечно-разностного шаблона, получаем следующую систему:

$$\begin{cases} U_{i+1} = U_i + U'_i h + \frac{U''_i}{2!} h^2, \\ U_{i-1} = U_i - U'_i h + \frac{U''_i}{2!} h^2. \end{cases}$$

Вычтем из первого уравнения второе:

$$U_{i+1} - U_{i-1} = 2U'_i h$$

Отсюда находим, что

$$\left[ U'_i = \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} \right] \quad (1.1)$$

Сложив уравнения, находим

$$\left[ U''_i = \frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2} \right] \quad (1.2)$$

Рассмотрим теперь более общий случай, то есть с учетом слагаемых третьей степени:

$$\begin{cases} U_{i+1} = U_i + U_i' h + \frac{U_i''}{2} h^2 + \frac{U_i'''}{6} h^3, \\ U_{i-1} = U_i - U_i' h + \frac{U_i''}{2} h^2 - \frac{U_i'''}{6} h^3. \end{cases}$$

Из первого уравнения данной системы вычтем второе уравнение и найдём значение первой производной функции:

$$U_{i+1} - U_{i-1} = 2U_i' h + \frac{U_i'''}{3!} h^3$$

Отсюда выражаем  $U_i'$

$$U_i' = \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} - \frac{U_i'''}{6} h^3$$

Рассмотрим систему с учетом слагаемых четвертой степени:

$$\begin{cases} U_{i+1} = U_i + U_i' h + \frac{U_i''}{2} h^2 + \frac{U_i'''}{6} h^3 + \frac{U_i^{IV}}{24} h^4, \\ U_{i-1} = U_i - U_i' h + \frac{U_i''}{2} h^2 - \frac{U_i'''}{6} h^3 + \frac{U_i^{IV}}{24} h^4. \end{cases}$$

Сложив первое уравнение со вторым находим  $U_i'$

$$U_{i+1} - U_{i-1} = 2U_i' h + \frac{U_i^{IV}}{12} h^4$$

$$U_i' = \frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2} - \frac{U_i^{IV}}{12} h^4$$



Рассмотрим теперь более частный случай. Разложим в ряд Тейлора функции  $U_1$  и  $U_2$ :

$$\begin{cases} U_1 = U_0 + U_0'(x_1 - x_0) + \frac{U_0''}{2!}(x_1 - x_0)^2, \\ U_2 = U_0 + U_0'(x_2 - x_0) + \frac{U_0''}{2!}(x_2 - x_0)^2. \end{cases}$$

Пусть  $(x_1 - x_0) = h$ . Тогда система примет вид:

$$\begin{cases} U_1 = U_0 + U_0'h + \frac{U_0''}{2}h^2, \\ U_2 = U_0 + 2U_0'h + 2U_0''h^2. \end{cases}$$

Домножив первое уравнение на 4 и вычтя затем из полученного уравнения второе, получим следующее:

$$4U_1 - U_2 = 3U_0 + 2U_0'h$$

Отсюда найдём выражение для первой производной  $U_0'$ :

$$\left[ U_0' = \frac{-3U_0 + 4U_1 - U_2}{2h} \right] \quad (1.3)$$

Рассмотрим более общий случай. Разложив функции  $U_{n-1}$  и  $U_{n-2}$  в ряд Тейлора, получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} U_{n-1} = U_n + U_n'(x_{n-1} - x_n) + \frac{U_n''}{2}(x_{n-1} - x_n)^2, \\ U_{n-2} = U_n + U_n'(x_{n-2} - x_n) + \frac{U_n''}{2}(x_{n-2} - x_n)^2. \end{cases}$$

Полагаем, что  $(x_{n-1} - x_n) = h$ , тогда систему примет вид:

$$\begin{cases} U_{n-1} = U_n + U'_n h + \frac{U''_n}{2} h^2, \\ U_{n-2} = U_n + U'_n h + \frac{U''_n}{2} h^2. \end{cases}$$

Первое уравнение умножим на 4 и вычтем из него второе уравнение. Будем иметь:

$$4U_{n-1} - U_{n-2} = 3U_n - 2U'_n h$$

Из этого уравнения находим значение первой производной  $U'_n$ :

$$\left[ U'_n = \frac{U_{n-2} - 4U_{n-1} + 3U_n}{2h} \right] \quad (1.4)$$

Для пятиточечного шаблона будем иметь

$$\begin{cases} U_{i-2} = U_i + U'_i(x_{i-2} - x_i) + \frac{U''_i}{2}(x_{i-2} - x_i)^2 + \frac{U'''_i}{6}(x_{i-2} - x_i)^3 + \frac{U^{IV}_i}{24}(x_{i-2} - x_i)^4 + \dots, \\ U_{i-1} = U_i + U'_i(x_{i-1} - x_i) + \frac{U''_i}{2}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{U'''_i}{6}(x_{i-1} - x_i)^3 + \frac{U^{IV}_i}{24}(x_{i-1} - x_i)^4 + \dots \\ U_{i+1} = U_i + U'_i(x_{i+1} - x_i) + \frac{U''_i}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{U'''_i}{6}(x_{i+1} - x_i)^3 + \frac{U^{IV}_i}{24}(x_{i+1} - x_i)^4 + \dots \\ U_{i+2} = U_i + U'_i(x_{i+2} - x_i) + \frac{U''_i}{2}(x_{i+2} - x_i)^2 + \frac{U'''_i}{6}(x_{i+2} - x_i)^3 + \frac{U^{IV}_i}{24}(x_{i+2} - x_i)^4 + \dots \end{cases}$$

$$\Delta\varphi(x, y) = -\frac{y}{\varepsilon_0 \varepsilon} (p - n + N).$$

$$\Delta\varphi(x, y) = \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{d^2\varphi}{dy^2} = \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h_x^2} + \frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{h_y^2}.$$

Например рассмотрим уравнение:

$$y'' = 2x$$

$$y|_{x=0} = 1$$

$$y|_{x=1} = 2$$

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} = 2x_i$$

$$\begin{aligned} y_0 - 2y_1 + y_2 &= 8 \cdot 10^{-2} x_1 \\ y_1 - 2y_2 + y_3 &= 8 \cdot 10^{-2} x_2 \\ y_2 - 2y_3 + y_4 &= 8 \cdot 10^{-2} x_3 \\ y_3 - 2y_4 + y_5 &= 8 \cdot 10^{-2} x_4 \end{aligned}$$

В первом уравнении  $y_0$  перенесем в правую часть. Получаем следующую систему:

$$\begin{aligned} -2y_1 + y_2 &= 8 \cdot 10^{-2} x_1 - y_0 \\ y_1 - 2y_2 + y_3 &= 8 \cdot 10^{-2} x_2 \\ y_2 + 2y_3 + y_4 &= 8 \cdot 10^{-2} x_3 \\ y_3 - 2y_4 &= 8 \cdot 10^{-2} x_4 - y_5 \end{aligned}$$

Подставим числовые значения известных величин:

$$\begin{aligned}
 -2y_1 + y_2 &= 0,08 \cdot 0,2 - 1 \\
 y_1 - 2y_2 + y_3 &= 0,08 \cdot 0,4 \\
 y_2 - 2y_3 + y_4 &= 0,08 \cdot 0,6 \\
 y_3 - 2y_4 &= 0,08 \cdot 0,8 - 2
 \end{aligned}$$

Трех диагональная матрица

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = |R|$$

$$Y = A^{-1} \cdot R$$

Из первого уравнения системы выражаем  $y_1$ :

$$y_1 = 0,5y_2 + 0,492$$

Подставим  $y_1$  во второе уравнение и выразим  $y_2$ :

$$y_2 = 0,67y_3 + 0,3067$$

Подставим  $y_2$  в третье уравнение и выразим  $y_3$ :

$$y_3 = 0,75y_4 + 0,1945$$

Подставим  $y_3$  в четвертое уравнение и найдем  $y_4$ :

$$y_4 = 1,7044$$

Далее находим значения  $y_3, y_2, y_1$ :

$$y_3 = 1,4728$$

$$y_2 = 1,2936$$

$$y_1 = 1,1387$$

1.4. Построение разностных операторов путем интерполяции функции полиномами

Пусть  $U(x_i) = U_i$ , тогда первая и вторая производные:

$$\frac{dU(x_i)}{dx}, \quad \frac{d^2U(x_i)}{dx^2}.$$

Выразим значения первой и второй производной, через значение самой функции:

$$\frac{dU_i}{dx} = a_1U_{i-1} + a_2U_i + a_3U_{i+1}$$

$$\frac{d^2U_i}{dx^2} = b_1U_{i-1} + b_2U_i + b_3U_{i+1}$$

В качестве неосновных функций выберем полиномы 1-ой, 2-ой и 3-ей степени

$$U = 1 \quad U' = 0 \quad U'' = 0$$

$$U = x \quad U' = 1 \quad U'' = 0$$

$$U = x^2 \quad U' = 2x \quad U'' = 2$$

В результате получаем следующую систему:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 = 0, \\ -a_1 \cdot (-h) + a_2 \cdot 0 + a_3 \cdot h = 1, \\ a_1 \cdot (-h)^2 + a_2 \cdot 0 + a_3 \cdot h^2 = 2 \cdot 0. \end{cases} \quad (1.5)$$

Находим из данной системы значения коэффициентов  $a_1, a_2, a_3$

Сложив 2-ое уравнение с 3-м получим:

$$2 \cdot a_3 \cdot h^2 = h \quad \Rightarrow \quad a_3 = \frac{1}{2 \cdot h};$$

Подставляя  $a_3$  во второе уравнение получим:

$$a_1 \cdot h + \frac{h}{2 \cdot h} = 1 \quad \Rightarrow \quad a_1 = -\frac{1}{2 \cdot h};$$

Следовательно,  $a_2 = 0$ .

Получаем следующее выражение для первой производной:

$$\frac{dU_i}{dx} = \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2 \cdot h}$$

Таким же образом находим значения первой производной в крайней левой и крайней правой точках:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 = 0, \\ -a_1 \cdot (-h) + a_3 \cdot h = 1, \\ a_1 \cdot (-h)^2 + a_3 \cdot h^2 = -2 \cdot h. \end{cases}$$

Сложив 2-ое уравнение с 3-м получим:

$$2 \cdot a_3 \cdot h^2 = -h \quad \Rightarrow \quad a_3 = -\frac{1}{2 \cdot h}.$$

Подставляя  $a_3$  во второе уравнение получим:

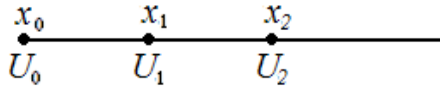
$$-a_1 \cdot h - \frac{1}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad a_1 = -\frac{3}{2 \cdot h}.$$

Следовательно,

$$-\frac{3}{2 \cdot h} + a_2 - \frac{1}{2 \cdot h} = 0.$$

Значение производной в крайней левой точке:

$$\frac{dU_0}{dx} = a_1 U_0 + a_2 U_1 + a_3 U_2$$



$$\frac{dU_0}{dx} = \frac{-3U_0 + 4U_1 - U_2}{2 \cdot h}$$

Значение производной в крайней правой точке найдём из системы:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 = 0, \\ -a_1 \cdot (-h) + a_3 \cdot h = 1, \\ a_1 \cdot (-h)^2 + a_3 \cdot h^2 = 2 \cdot h. \end{cases}$$

Сложив 2-ое уравнение с 3-м получим:

$$2 \cdot a_3 \cdot h^2 = 3 \cdot h \quad \Rightarrow \quad a_3 = \frac{3}{2 \cdot h}.$$

Подставляя  $a_3$  во второе уравнение получим:

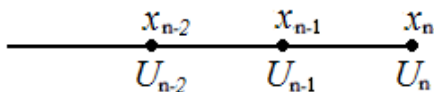
$$-a_1 \cdot h + \frac{3}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad a_1 = \frac{1}{2 \cdot h}.$$

Следовательно,

$$a_2 = -\frac{4}{2 \cdot h}.$$

Значение производной в крайней правой точке:

$$\frac{dU_n}{dx} = \frac{U_{n-2} - 4U_{n-1} + 3U_n}{2 \cdot h}$$



Найдём значение второй производной из следующей системы:

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 = 0, \\ -b_1 \cdot (-h) + b_3 \cdot h = 0, \\ b_1 \cdot (-h)^2 + b_3 \cdot h^2 = 2. \end{cases}$$

Общий вид системы отличается от системы (1.5) только правой частью.



Находим из данной системы значения коэффициентов.  
Сложив 2 уравнение с 3-м получим:

$$2 \cdot b_3 \cdot h^2 = 2 \quad \Rightarrow \quad b_3 = \frac{1}{h^2}.$$

Следовательно,

$$b_1 = \frac{1}{h^2} \quad b_2 = -\frac{2}{h^2}.$$

Итоговое выражение:

$$\frac{d^2 U_i}{dx^2} = \frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2}.$$

В качестве примера рассмотрим систему:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 = 0, \\ -a_1 \cdot h + a_3 \cdot h = 1, \\ a_1 \cdot h_1^2 + a_3 \cdot h_2^2 = 0. \end{cases}$$

Выведем формулы для пятиточечного шаблона. В качестве неосновных функций выберем полиномы 1-ой, 2-ой, 3-ей, 4-ой и 5-ой степени.

$U = 1$	$U' = 0$	$U'' = 0$
$U = x$	$U' = 1$	$U'' = 0$
$U = x^2$	$U' = 2x$	$U'' = 2$
$U = x^3$	$U' = 3x^2$	$U'' = 6x$
$U = x^4$	$U' = 4x^3$	$U'' = 12x^2$

Применяя метод интерполяции функции полиномами, получаем следующую систему:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 = 0, \\ -2a_1h - a_2h + 0 + a_4h + 2a_5h = 1, \\ 4h^2a_1 + a_2h^2 + a_4h^2 + 4a_5h^2 = 0, \\ -8h^3a_1 - a_2h^3 + a_4h^2 + 8a_5h^3 = 0, \\ 16h^4a_1 + a_2h^4 + a_4h^4 + 16a_5h^4 = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 = 0, \\ -2a_1h - a_2h + 0 + a_4h + 2a_5h = 0, \\ 4h^2a_1 + a_2h^2 + a_4h^2 + 4a_5h^2 = 2, \\ -8h^3a_1 - a_2h^3 + a_4h^2 + 8a_5h^3 = 0, \\ 16h^4a_1 + a_2h^4 + a_4h^4 + 16a_5h^4 = 0. \end{cases}$$

### 1.5. Метод прогонки

При применении метода конечных разностей к краевым задачам для дифференциальных уравнений второго порядка получается трехдиагональная система линейных алгебраических уравнений, каждое из которых содержит три соседних неизвестных. Для решения такой системы разработан специальный метод, получивший название метода прогонки.

Рассмотрим линейное дифференциальное уравнение

$$U'' + p(x)U' + q(x) = f(x)$$

с двухточечными линейными краевыми условиями

$$\left. \begin{aligned} \alpha_0 U(a) + \alpha_1 U'(a) &= A, \\ \beta_0 U(b) + \beta_1 U'(b) &= B \end{aligned} \right\}$$

$$(|\alpha_0| + |\alpha_1| \neq 0, \quad |\beta_0| + |\beta_1| \neq 0),$$

где  $p(x), q(x)$  и  $f(x)$  непрерывны на отрезке  $[a, b]$ .

От линейного дифференциального уравнения обычным приемом перейдем к конечно-разностному уравнению. Для этого разобьем отрезок  $[a, b]$  на  $n$  равных частей с шагом  $h = (b - a)/n$ . Полагая  $x_i = x_0 + ih, x_0 = a, x_n = b$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, n$ ) и вводя обозначения:  $p(x_i) = p_i, q(x_i) = q_i, f(x_i) = f_i, U(x_i) = U_i$ , для внутренних точек  $x = x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n - 1$ ) отрезка  $[a, b]$  вместо линейного дифференциального уравнения получаем систему конечно-разностных уравнений

$$\begin{aligned} b_1 x_1 + c_1 x_2 &= d_1 \\ a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 &= d_2 \\ \dots & \\ a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} &= d_i \\ \dots & \\ a_{m-1} x_{m-2} + b_{m-1} x_{m-1} + c_{m-1} x_m &= d_{m-1} \\ a_m x_{m-1} + b_m x_m &= d_m \end{aligned}$$

Линейная система состоит из  $(n + 1)$  уравнений первой степени относительно неизвестных. Эту систему можно решить обычным способом. Однако мы сейчас укажем другой, более короткий путь, получивший название метода прогонки.

Метод прогонки осуществляется в два этапа: прямая прогонка, при которой находятся вспомогательные коэффициенты и обратная прогонка при которой находятся уже значения самой функции.

Прямая прогонка. Из первого уравнения находим:

$$x_1 = \alpha_1 x_2 + \beta_1,$$

где  $\alpha_1 = -\frac{c_1}{b_1}, \quad \beta_1 = -\frac{d_1}{b_1}$

Подставим во второе уравнение значение  $x_1$ :

$$a_2(\alpha_1 x_2 + \beta_1) + b_2 x_2 + c_2 x_3 = d_2$$

Так как  $x_2 = \alpha_2 x_3 + \beta_2$ , то получаем следующее:

$$(a_2 \alpha_1 + b_2) x_2 + a_2 \beta_1 + c_2 x_3 = d_2,$$

где  $\alpha_2 = \frac{-c_2}{a_2 \alpha_1 + b_2}, \quad \beta_2 = -\frac{d_2 - a_2 \beta_1}{a_2 \alpha_1 + b_2}$

В общем случае:

$$x_i = \alpha_i x_{i+1} + \beta_i,$$

где  $\alpha_i = -\frac{c_i}{a_i \alpha_{i-1} + b_i}, \quad \beta_i = -\frac{d_i - a_i \beta_{i-1}}{a_i \alpha_{i-1} + b_i}$

Обратная прогонка. При  $1 < i < m$ , получаем, что

$$x_{m-1} = \alpha_{m-1} x_m + \beta_{m-1}$$

Так как  $a_m x_{m-1} + b_m x_m = d_m$ , то

$$a_m(\alpha_{m-1} x_m + \beta_{m-1}) + b_m x_m = d_m$$

Отсюда находим значение  $x_m$

$$x_m = \frac{d_m - a_m \beta_{m-1}}{b_m + a_m \alpha_{m-1}}$$

$$x_i = \alpha_i x_{i+1} + \beta_i$$

Алгоритм прогонки

Вычисление прогоночных коэффициентов  $a, b, c, d$   
 $\alpha_i, \beta_i$  при  $(1 \leq i \leq m)$

При  $i = 1$  получаем:

$$\alpha_1 = -\frac{c_1}{\gamma_1} \quad \beta_1 = \frac{d_1}{\gamma_1} \quad \gamma_1 = b_1$$

При  $i = 2, 3, \dots, m-1$

$$\alpha_i = -\frac{c_i}{\gamma_i}, \quad \beta_i = \frac{d_i - a_i \beta_{i-1}}{\gamma_i}, \quad \gamma_i = a_i \alpha_{i-1} + b_i$$

При  $i = m$

$$\beta_m = \frac{d_m - a_m \beta_{m-1}}{\gamma_m} \quad \gamma_m = a_m \alpha_{m-1} + b_m \quad x_m = \beta_m$$

Таким образом для решения системы трехдиагональных уравнений методом прогонки вначале необходимо найти прогоночные коэффициенты – прямой ход прогонки. Для начала счета необходимо принять, что при  $i = 0$   $\gamma_i = 0$  и  $\beta_i = 0$ .

Затем выполняется обратный ход прогонки, который заключается в расчете вектора неизвестных  $u_i$  с учетом только что рассчитанных прогоночных коэффициентов.

Рассмотрим в качестве примера следующую систему уравнений:

$$\begin{array}{rcl} 5x_1 - x_2 & & = 2 \\ 2x_1 + 4,6x_2 - x_3 & & = 3,3 \\ 2x_2 + 3,6x_3 - 0,8x_4 & & = 2,6 \\ & 3x_3 + 4,4x_4 & = 7,2 \end{array}$$

Согласно алгоритму прогонки для этой системы вычислим значения прогоночных коэффициентов:

При  $i = 1$  из первого уравнения получаем:

$$\gamma_1 = b_1 = 5, \quad \Rightarrow \quad \alpha_1 = -\frac{c_1}{\gamma_1} = 0,2 \quad \beta_1 = \frac{d_1}{\gamma_1} = 0,4$$

При  $i = 2, 3 \dots, m - 1$  из второго уравнения находим:

$$\gamma_2 = b_2 + a_2\alpha_1 = 4,6 + 2 \cdot 0,2 = 5$$

$$\alpha_2 = -\frac{c_2}{\gamma_2} = \frac{1}{5} = 0,2 \quad \beta_2 = \frac{d_2 - a_2\beta_1}{\gamma_2} = \frac{3,3 - 2 \cdot 0,4}{5} = 0,5$$

Из третьего уравнения находим:

$$\gamma_3 = b_3 + a_3\alpha_2 = 3,6 + 2 \cdot 0,2 = 4$$

$$\alpha_3 = -\frac{c_3}{\gamma_3} = \frac{0,8}{4} = 0,2 \quad \beta_3 = \frac{d_3 - a_3\beta_2}{\gamma_3} = \frac{2,6 - 2 \cdot 0,5}{4} = 0,4$$

При  $i = m$  из последнего четвертого уравнения находим:

$$\gamma_4 = b_4 + a_4\alpha_3 = 4,4 + 3 \cdot 0,2 = 5$$

$$\alpha_4 = -\frac{c_4}{\gamma_4} \quad \beta_4 = \frac{d_4 - a_4\beta_3}{\gamma_4} = \frac{7,2 - 3 \cdot 0,4}{5} = 1,2$$

## 2. ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИОННО-ДРЕЙФОВОЙ МОДЕЛИ (ФСУ ДДМ)

Как известно, физико-математическую основу для синтеза моделей структур элементов интегральных схем на структурно-физическом уровне составляет фундаментальная система уравнений (ФСУ) полупроводника. Однако решение ее в общем виде представляет большие математические трудности. Это приводит к необходимости использования того или иного приближения.

Наиболее просто ФСУ полупроводника записывается в диффузионно-дрейфовом приближении. Следует отметить, что это приближение является корректным лишь при небольших отклонениях системы от термодинамического равновесия и в случае, когда полупроводниковая структура невырождена, а ее характерные размеры достаточно велики по сравнению с фундаментальными длинами. Другими словами, область применимости диффузионно-дрейфовых моделей оказывается весьма ограниченной и, кроме того, постоянно сужается в связи с ростом степени интеграции элементов ИС. Вместе с тем, благодаря своей простоте, диффузионно-дрейфовая модель является наилучшей отправной точкой для ознакомления с методами и алгоритмами построения математических моделей элементов современных ИС.

ФСУ полупроводника в общем случае состоит из уравнения Пуассона, уравнений непрерывности для электронов и дырок и кинетического уравнения Больцмана. В диффузионно-дрейфовом приближении решение кинетического уравнения дает простые выражения для плотностей токов электронов и дырок в виде суммы плотностей диффузионного и дрейфового токов этих носителей заряда. Поэтому ФСУ в диффузионно-дрейфовом



приближении содержит не кинетическое уравнение Больцмана, а результат его решения - выражения для плотностей токов электронов и дырок.

ФСУ полупроводника в диффузионно-дрейфовом приближении имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \varphi = -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} (p - n + N_d - N_a), \\ \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n + G + R, \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p + G + R. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (2.1) \\ (2.2) \end{array}$$

где (2.1) - уравнение Пуассона;

(2.2) - уравнения непрерывности для электронов и дырок;

$\Delta$  - оператор Лапласа;

$\varphi$  - потенциал электрического поля;

$\varepsilon_0$  - электрическая постоянная;

$\varepsilon$  - относительная диэлектрическая проницаемость полупроводникового кристалла;

$n, p, N_a, N_d$  - концентрации свободных электронов, дырок, ионизированных акцепторов и доноров, соответственно;

$RG_{n(p)} = R_{n(p)} - G_{n(p)}$  - темп рекомбинации-генерации электронов (дырок), соответственно.

$J_n, J_p$  - плотности токов электронов и дырок определяемые выражениями:

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \nabla n \quad (2.3)$$

$$\vec{J}_p = qp\mu_p \vec{E} - qD_p \nabla p \quad (2.4)$$

где  $D_n, D_p$  - коэффициенты диффузии электронов и дырок;

$\mu_n, \mu_p$  - подвижности электронов и дырок;

$E$  – напряженность электрического поля.

Вид для выражений темпа рекомбинации-генерации определяется действующим механизмом этих процессов. К основным механизмам рекомбинации-генерации носителей заряда можно отнести:

1) рекомбинацию-генерацию Шокли-Рида-Холла (через ловушечный уровень):

$$RG_{ШРХ} = \frac{np - n_i^2}{\tau_{n0}(p + n_i) + \tau_{p0}(n + n_i)}, \quad (2.5)$$

где  $n$ ,  $p$  - концентрации, в общем случае, неравновесных свободных электронов и дырок, соответственно;

$n_i = (n_0 p_0)^{1/2}$  – концентрация равновесных электронов (дырок) в собственном полупроводнике ( $n_0$ ,  $p_0$  – концентрации равновесных электронов и дырок, соответственно)

$\tau_{n0} = (\alpha_n N_t)^{-1}$ ,  $\tau_{p0} = (\alpha_p N_t)^{-1}$  – характеристические времена, определяемые коэффициентами захвата неравновесных электронов ( $\alpha_n$ ) и дырок ( $\alpha_p$ ) ловушками с концентрацией  $N_t$ ; (при записи выражения (2.5) сделано предположение, что уровень ловушки совпадает с уровнем Ферми в собственном полупроводнике, т.е. расположен вблизи середины запрещенной зоны).

2) Оже-рекомбинацию (при больших концентрациях свободных носителей заряда):

$$RG_0 = (np - n_i^2)(A_n \cdot n + A_p \cdot p), \quad (2.6)$$

где  $A_n$ ,  $A_p$  - коэффициенты Оже-рекомбинации.

Важно отметить, что выражения (2.5),(2.6) справедливы только в установившемся режиме (т.е. при

продолжительной стационарной генерации неравновесных носителей заряда, когда начинает выполняться равенство  $RG_n = RG_p$ ). Поэтому при моделировании переходных процессов, строго говоря, следует использовать более общие выражения для темпов рекомбинации-генерации.

## 2.1. Набор независимых переменных для ФСУ

Если в уравнения непрерывности (2.2) подставить выражения для плотностей токов (2.3), (2.4) и темпов рекомбинации-генерации носителей заряда (2.5), (2.6), а также учесть, что  $E = -\text{grad } \varphi$  (в отсутствии магнитного поля), то получим систему из трех дифференциальных уравнений с тремя неизвестными: электростатическим потенциалом  $\varphi$ , концентрацией свободных электронов  $n$  и свободных дырок  $p$ .

Набор независимых переменных  $\{\varphi, n, p\}$  представляет собой один из трех возможных наборов независимых переменных, относительно которых может решаться ФСУ полупроводника. В качестве других независимых переменных можно выбрать либо электростатический потенциал  $\varphi$  и квазипотенциалы Ферми для электронов  $\varphi_n$  и дырок  $\varphi_p$ , либо электростатический потенциал  $\varphi$  и экспоненты квазипотенциалов Ферми для электронов  $\Phi_n = \exp(-\varphi_n)$  и дырок  $\Phi_p = \exp(\varphi_p)$ .

Однако относительно двух последних наборов переменных ФСУ записана неявно. Для явного вида требуется выразить концентрации электронов и дырок через электростатический потенциал и квазипотенциалы Ферми.

Полагая, что полупроводниковая структура невырождена и, следовательно, справедливо распределение Больцмана для носителей заряда, концентрацию равновесных электронов и дырок можно записать в виде:

$$n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - F}{kT}\right), \quad p_0 = N_V \exp\left(\frac{E_V - F}{kT}\right), \quad (2.7)$$

где  $N_C$ ,  $N_V$  – эффективная плотность состояний в зоне проводимости и в валентной зоне, соответственно;

$E_C$ ,  $E_V$  – энергии, соответствующие дну зоны проводимости и потолку валентной зоны, соответственно;

$F$  – уровень Ферми;

$k$  – постоянная Больцмана;

$T$  – термодинамическая температура.

Учитывая, что в собственном полупроводнике концентрация равновесных свободных электронов и дырок одинакова и равна

$$n_i = p_i = N_C \exp\left(-\frac{E_C - F_i}{kT}\right) = N_V \exp\left(\frac{E_V - F_i}{kT}\right),$$

перепишем выражения (2.7) в виде:

$$n_0 = n_i \exp\left(\frac{F - F_i}{kT}\right), \quad p_0 = n_i \exp\left(\frac{F_i - F}{kT}\right), \quad (2.8)$$

где  $F_i$  – уровень Ферми в собственном полупроводнике.

Выражения (2.8) справедливы, только если полупроводник находится в равновесии. При нарушении равновесия концентрация электронов  $n$  уже не равна  $n_0$ , а концентрация дырок  $p \neq p_0$  и, кроме того,  $n_0 p_0 \neq n_i^2$ . Для сохранения формы записи для концентраций неравновесных носителей заряда в виде (2.8) вводят понятие квазиуровней Ферми для электронов  $F_n$  и дырок  $F_p$ , которые не совпадают между собой. Итак, если полупроводник находится в

неравновесном состоянии, выражения для концентраций неравновесных электронов и дырок принимают вид:

$$n = n_i \exp\left(\frac{F_n - F_i}{kT}\right), \quad p = n_i \exp\left(\frac{F_i - F_p}{kT}\right) \quad (2.9)$$

Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике  $F_i$  зависит от положения потолка валентной зоны  $E_v$  и дна зоны проводимости  $E_c$  ( $F_i \approx (E_c + E_v)/2$ ), которые могут изменяться в соответствии с пространственным изменением электростатического потенциала  $\varphi$ . Тогда можно записать  $F_i = F_{i0} - e\varphi$ . Выберем в качестве точки отсчета энергий положение уровня Ферми в собственном полупроводнике  $F_{i0}$ , т.е.  $F_{i0} = 0$ . Тогда  $F_i = -e\varphi$ .

Обозначим через  $\varphi_T$  тепловой потенциал, равный  $kT/e$ . Тогда выражения для концентраций носителей заряда (2.9) принимают вид:

$$n = n_i \exp\left(\frac{\varphi - \varphi_n}{\varphi_T}\right), \quad p = n_i \exp\left(\frac{\varphi_p - \varphi}{\varphi_T}\right), \quad (2.10)$$

где  $\varphi_n = -F_n/e$ ,  $\varphi_p = -F_p/e$  – квазипотенциалы Ферми для электронов и дырок, соответственно.

Используя полученные выражения для  $n$  и  $p$  (2.10) совместно с соотношением Эйнштейна  $D_{n(p)} = \mu_{n(p)} \varphi_T$  (которое справедливо для невырожденного полупроводника), выражения для плотностей токов носителей заряда (2.3), (2.4) можно представить в более простом виде:

$$\begin{aligned} j_n &= eD_n \nabla n + en\mu_n E = -en\mu_n \nabla \varphi_n = \\ &= -e\mu_n n_i \exp[(\varphi - \varphi_n)/\varphi_T] \nabla \varphi_n, \\ j_p &= -eD_p \nabla p + ep\mu_p E = -ep\mu_p \nabla \varphi_p = \\ &= -e\mu_p n_i \exp[(\varphi_p - \varphi)/\varphi_T] \nabla \varphi_p. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Подставляя вместо концентраций и плотностей токов носителей заряда их выражения через электростатический потенциал и квазипотенциалы Ферми (2.10), (2.11), можно записать ФСУ явно относительно наборов переменных

$\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$  или  $\{\varphi, \Phi_n, \Phi_p\}$ .

Использование в качестве независимых переменных наборов  $\{\varphi, n, p\}$  и  $\{\varphi, \Phi_n, \Phi_p\}$  нежелательно, поскольку функции  $n, p, \Phi_n, \Phi_p$  экспоненциально зависят от своих аргументов, и диапазон изменения их значений в пределах рассматриваемой полупроводниковой структуры может быть весьма значительным (десятки порядков), что обуславливает увеличение вычислительных погрешностей в процессе итерационного решения ФСУ. В принципе, эти погрешности могут быть уменьшены за счет увеличения числа итераций, но это приведет и к увеличению продолжительности счета. Поэтому предпочтительнее решать ФСУ относительно переменных  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$ . В дальнейшем мы будем рассматривать ФСУ именно относительно этого набора переменных.

Итак получаем 3 основных вида набора независимых переменных:

1.  $\{\varphi, p, n\}$

2.  $\{\varphi, \varphi_p, \varphi_n\}$        $p = n_i e^{\frac{\varphi_p - \varphi}{\varphi_T}}$        $n = n_i e^{\frac{\varphi - \varphi_n}{\varphi_T}}$

3.  $\{\varphi, \Phi_p, \Phi_n\}$        $\Phi_p = e^{\frac{\varphi_p}{\varphi_T}}$        $\Phi_n = e^{-\frac{\varphi_n}{\varphi_T}}$

## 2.2. Граничные условия

Вид граничного условия зависит от того, с какой областью граничит рассматриваемая область моделирования:

- на границе с омическим контактом:

$$\varphi_{i^*} = U_{i^*} + \ln \left( \left[ (N_{di^*} - N_{ai^*})^2 / 4 + 1 \right]^{1/2} + (N_{di^*} - N_{ai^*}) / 2 \right), \quad \varphi_{ni^*} = \varphi_{pi^*} = U_{i^*},$$

где  $U_{i^*}$  - значение внешнего потенциала в граничном узле  $i^*$  (в рассматриваемой задаче  $i^*=0$  или  $i^*=N$ );

- на границах, удаленных от активной области, можно приближенно считать потенциалы неменяющимися:

$$\varphi_{i^*} = \varphi_{i^*\pm 1}, \quad \varphi_{ni^*} = \varphi_{ni^*\pm 1}, \quad \varphi_{pi^*} = \varphi_{pi^*\pm 1};$$

(знак "+" следует брать, если  $i^*=0$ , знак "-" - если  $i^*=N$ );

- на границе с диэлектриком (считается, что поля в диэлектрике нет):

$$(\varphi_{i^*\pm 1} - \varphi_{i^*}) / (x_{i^*\pm 1} - x_{i^*}) = \sigma_{i^*}, \quad J_{ni^*\pm 1/2} = R_{Si^*}, \quad J_{pi^*\pm 1/2} = -R_{Si^*},$$

где знак "+" следует брать, если  $i^*=0$ , знак "-" - если  $i^*=N$ ;

$\sigma_{i^*}$  - нормированная поверхностная плотность зарядов на соответствующей границе;

$R_{Si^*}$  - скорость изменения концентрации носителей заряда за счет поверхностной рекомбинации:

$$R_{Si^*} = \frac{\exp(\varphi_{pi^*} - \varphi_{ni^*}) - 1}{(\exp(\varphi_{i^*} - \varphi_{ni^*}) + 1) / s_{pi^*} + (\exp(\varphi_{pi^*} - \varphi_{i^*}) + 1) / s_{ni^*}},$$

где  $s_{ni}^*$ ,  $s_{pi}^*$  – скорости рекомбинации электронов и дырок на соответствующей границе; (предполагается, что уровень ловушки расположен посередине запрещенной зоны).

$$1. \varphi = U \quad \varphi = \rho_0 \quad n = n_0 \quad \lambda_0 \rho_0 = n_i^2$$

$$2. \varphi = 0,$$

$$\frac{\partial J}{\partial n} = 0$$

$$3. \varphi = U$$

$$J_{nБ} = A_n T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{\varphi_T}\right) \exp\left(\frac{U}{\varphi_T} - 1\right)$$

$$J_{pБ} = A_p T^2 \exp\left(\frac{E_g - \Phi_b}{\varphi_T}\right) \exp\left(\frac{U}{\varphi_T} - 1\right)$$

$$J_n = J_{nБ} \quad J_p = J_{pБ}$$

$$4. \varphi = \varphi_s$$

Условие Гаусса:

$$\varepsilon_0 \varepsilon_n \vec{E}_n - \varepsilon_0 \varepsilon_d \vec{E}_d = Q_{ss}.$$

### 2.3 Численные решения уравнения Пуассона

В общем случае аналитическое решение ФСУ (даже в диффузионно-дрейфовом приближении) весьма затруднительно. Для получения аналитических выражений применяют так называемый метод региональных приближений. Суть его заключается в том, что



полупроводниковую структуру разбивают на квазинейтральные области (т.е. области, обогащенные свободными носителями заряда) и области пространственного заряда (т.е. области, обедненные свободными носителями заряда, например, области  $p$ - $n$ -переходов). Помимо этого используют и другие допущения (например, допущение о ступенчатом или линейном распределении атомов примеси, об отсутствии рекомбинации свободных носителей заряда в  $p$ - $n$ -переходах, о низком уровне инжекции и др.). С учетом этих допущений ФСУ записывается еще проще и поэтому допускает аналитическое решение

Если задача описывает прибор с протеканием тока, то ФСУ ДДМ будет включать уравнения Пуассона и хотя бы одно уравнение непрерывности. Если протекания тока через прибор практически нет (например, в структуре металл-диэлектрик-полупроводник или в обратно смещенном  $p$ - $n$ -переходе), то ФСУ будет состоять из одного лишь уравнения Пуассона. Уравнение Пуассона, таким образом, является особым в том смысле, что обязательно присутствует в задаче моделирования.

К настоящему времени известно более десятка способов численного решения уравнения Пуассона — как прямых, так и итерационных. Поскольку для достижения решения достаточно владеть одним хорошо себя зарекомендовавшим методом, полный обзор методов для решения уравнения Пуассона здесь не дается.

## 2.4. Нормировка ФСУ

Для удобства численного решения ФСУ осуществляют нормировку входящих в нее величин. В таблице приведены основные нормируемые и нормирующие величины.

### Основные нормируемые и нормирующие величины

Нормируемая величина	Обозначение нормируемой величины	Обозначение нормирующей величины
Координата	$x$	$x_0 = \max(x)$
Коэффициент диффузии носителей заряда	$D_n, D_p$	$D_0 = \max(D_n, D_p)$
Время, времена жизни	$t, \tau_{n0}, \tau_{p0}$	$x_0^2/D_0$
Электростатический потенциал и квазипотенциалы Ферми	$\varphi, \varphi_n, \varphi_p$	$\varphi_T = kT/e$
Концентрации носителей заряда, атомов примеси	$n, p, N_d, N_a$	$n_i$
Подвижность	$\mu_n, \mu_p$	$D_0/\varphi_T$

В соответствии с таблицей и выражениями (2.10), (2.11) ФСУ (2.1), (2.2) принимает вид:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \gamma(\exp(\varphi - \varphi_n) - \exp(\varphi_p - \varphi) + N_a - N_d) \quad (2.12)$$

$$\exp(\varphi - \varphi_n) \cdot \left( \frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{\partial\varphi_n}{\partial t} \right) = \frac{\partial J_n}{\partial x} - RG_n \quad (2.13)$$

$$\exp(\varphi_p - \varphi) \cdot \left( \frac{\partial\varphi_p}{\partial t} - \frac{\partial\varphi}{\partial t} \right) = -\frac{\partial J_p}{\partial x} - RG_p, \quad (2.14)$$

где  $\gamma = \frac{en_i x_0^2}{\varepsilon\varepsilon_0\varphi_T}$

$$J_n = -\exp(\varphi - \varphi_n) \frac{\partial\varphi_n}{\partial x}, \quad J_p = -\exp(\varphi_p - \varphi) \frac{\partial\varphi_p}{\partial x} \quad (2.15)$$

## 2.5. Конечно-разностный вид уравнения Пуассона

Проинтегрируем нормированное уравнение Пуассона (2.12) по одной из ячеек, т.е. по области, ограниченной соседними потоковыми точками  $G_i = (x, x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2})$  (рис. 2.1).

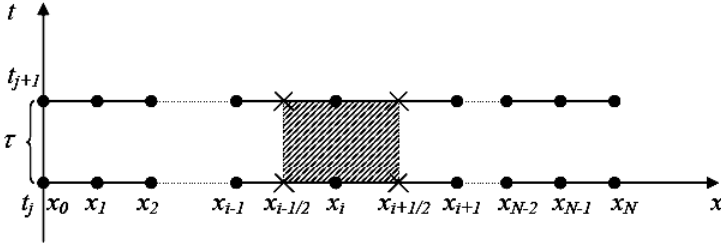


Рис. 2.1. Пространственно-временная сетка для области моделирования

Узлы сетки обозначены точками, потоковые точки - крестами; штриховкой обозначена пространственно-временная ячейка, по которой проводится интегрирование уравнений непрерывности для записи их в конечно-разностном виде;

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left( \frac{d^2 \varphi}{dx^2} - \gamma (\exp(\varphi - \varphi_n) - \exp(\varphi_p - \varphi) + N_a - N_d) \right) dx = 0$$

Или

$$\frac{d\varphi}{dx} \Big|_{x=x_{i+1/2}} - \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{x=x_{i-1/2}} - \gamma (\exp(\varphi_i - \varphi_{ni}) - \exp(\varphi_{pi} - \varphi_i) + N_{ai} - N_{di})(x_{i+1/2} - x_{i-1/2}) = 0$$

Полагая, что производная  $\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=x_{i+1/2}} \approx \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{x_{i+1} - x_i}$ ,

получим конечно-разностный вид уравнения Пуассона:

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \gamma(\exp(\varphi_i - \varphi_{ni}) - \\ & - \exp(\varphi_{pi} - \varphi_i) + N_{ai} - N_{di})(x_{i+1/2} - x_{i-1/2}) = 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

В базисе  $\{\psi, n, p\}$  будем иметь:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon \varphi_T} (p - n + N_{sub})$$

Преобразуем дифференциальный оператор в конечно-разностный:

$$\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h_x^2} = -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon \varphi_T} (p_0 e^{-\psi_i} - n_0 e^{\psi_i} + N_{sub})$$

$$\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1} = -\frac{q h_x^2}{\varepsilon_0 \varepsilon \varphi_T} (p_0 e^{-\psi_i} - n_0 e^{\psi_i} + N_{sub})$$

На основе формул составляем трехдиагональную матрицу:

$$\begin{vmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & & * & & \\ & & & * & \\ & & & & -1 & -2 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \dots \\ \psi_{n-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} R_1(\psi) - \psi_0 \\ \dots \\ R_i(\psi) \\ \dots \\ R_{n-1}(\psi) - \psi_n \end{vmatrix}$$

## 2.6. Метод Зейделя

Метод Зейделя можно рассматривать как модификацию метода Якоби. Основная идея модификации состоит в том, что при вычислении очередного  $(k+1)$ -го приближения к неизвестному  $x_i$  при  $i > 1$  используют уже найденные  $(k+1)$ -е приближения к неизвестным  $x_1, \dots, x_{i-1}$ .

На  $(k+1)$ -й итерации компоненты приближения  $x^{(k+1)}$  вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned}
 x_1^{(k+1)} &= b_{12}x_2^{(k)} + b_{13}x_3^{(k)} + \dots + b_{1m}x_m^{(k)} + c_1, \\
 x_2^{(k+1)} &= b_{21}x_1^{(k+1)} + b_{23}x_3^{(k)} + \dots + b_{2m}x_m^{(k)} + c_2, \\
 x_3^{(k+1)} &= b_{31}x_1^{(k+1)} + b_{32}x_2^{(k+1)} + \dots + b_{3m}x_m^{(k)} + c_3, \\
 &\dots\dots\dots \\
 x_m^{(k+1)} &= b_{m1}x_1^{(k+1)} + b_{m2}x_2^{(k+1)} + b_{m3}x_3^{(k+1)} + \dots + c_m.
 \end{aligned}$$

Введем нижнюю и верхнюю треугольные матрицы

$$B_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{m1} & b_{m2} & b_{m3} & \dots & 0 \end{bmatrix},$$

$$B_2 = \begin{bmatrix} 0 & b_{12} & b_{13} & \dots & b_{1m} \\ 0 & 0 & b_{23} & \dots & b_{2m} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_{3m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Тогда расчетные формулы метода примут вид:

$$x^{(k+1)} = B_1 x^{(k+1)} + B_2 x^{(k)} + c.$$

Заметим, что  $B = B_1 + B_2$  и поэтому решение исходной системы удовлетворяет равенству:

$$\bar{x} = B_1 \bar{x} + B_2 \bar{x} + c.$$

Метод Зейделя иногда называют также методом Гаусса-Зейделя, процессом Либмана, методом последовательных замещений.

В общем случае алгоритм метода выглядит следующим образом:

1. Дискретизация уравнения
2. Задание исходного приближения  $\psi_i^0$
3. Задание погрешности  $\varepsilon = 10^{-6}$
4. Вычисление  $\psi_i^1$
5. Оценка погрешности  $|\psi_i^1 - \psi_i^0|$
6.  $\varepsilon$  устр.

## 2.7. Метод Ньютона

Знаменитый метод Ньютона является одним из наиболее эффективных методов решения самых разных нелинейных задач. Расчетную формулу метода можно получить, используя различные подходы.

Представим функцию  $R(\psi)$  в окрестности точки  $\psi^0$  по формуле Тейлора:

$$R(\psi) = R(\psi^0) + \left. \frac{\partial R}{\partial \psi} \right|_{\psi=\psi^0} (\psi - \psi^0)$$

Найдём значение производной для выражения

$$A(p_0 e^{-\psi} - n_0 e^{\psi} + N_{sub})$$

$$\frac{\partial}{\partial \psi} [A(p_0 e^{-\psi} - n_0 e^{\psi} + N_{sub})] = A(-p_0 e^{-\psi} - n_0 e^{\psi})$$

Распишем  $\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}$ :

$$\begin{aligned} \psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1} &= A(p_0 e^{-\psi_i^0} - n_0 e^{\psi_i^0} + N_{sub}) - \\ -A(p_0 e^{-\psi_i^0} + n_0 e^{\psi_i^0}) (\psi_i - \psi_i^0) &= -A(p_0 e^{-\psi_i^0} + n_0 e^{\psi_i^0}) \psi_i + \\ +A[p_0 e^{-\psi_i^0} (1 + \psi_i) - n_0 e^{\psi_i^0} (1 - \psi_i^0) + N_{sub}] \end{aligned}$$

Получаем искомое уравнение из которого строится трехдиагональная матрица:

$$\psi_{i-1} - (2 + D_i)\psi_i + \psi_{i+1} = R_i^*(\psi^0)$$

$$\begin{vmatrix} -(2 + D_i) & 1 & & & \\ 1 & -(2 + D_i) & 1 & & \\ & & * & & \\ & & & * & \\ & & & 1 & -(2 + D_i) \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_i \\ \dots \\ \psi_{n-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} R_1^*(\psi^0) - \psi_0 \\ \dots \\ R_i^*(\psi^0) \\ \dots \\ R_{n-1}^*(\psi^0) - \psi_n \end{vmatrix}$$

В базисе  $\{\varphi, \Phi_p, \Phi_n\}$  будем иметь

$$n = n_i e^{\psi - \frac{\varphi_n}{\varphi_T}} \quad p = n_i e^{\frac{\varphi_p}{\varphi_T} - \psi}$$

При  $\psi = \frac{\varphi}{\varphi_T}$  получаем:

$$n = n_i \Phi^{-1} \Phi_p \quad n = n_i \Phi \Phi_n$$

$$\frac{\Phi_{i-1} - 2\Phi_i + \Phi_{i+1}}{h_x^2} = -\frac{qn_i}{\varepsilon_0 \varepsilon \varphi_T} (\Phi^{-1} \Phi_p - \Phi \Phi_n + N_{sub})$$

## 2.8. Аппроксимация уравнений непрерывности

Существует три наиболее распространенных метода аппроксимации уравнений непрерывности:

- 1) Неконсервативная;
- 2) Простая консервативная;
- 3) Интегральная консервативная.

В 1-ом закон сохранения не учитывается, во 2-ом и 3-ем учитывается.

Запишем уравнения непрерывности:

$$\begin{cases} -\frac{1}{q} \nabla J_n = G - R \\ \frac{1}{q} \nabla J_p = G - R \end{cases}$$

Примем условные обозначения:

$$\psi = \frac{\varphi}{\varphi_T}$$

$$\mu_n \varphi_T = D_n$$



### 2.8.1. Неконсервативная аппроксимация уравнения непрерывности

Рассмотрим неконсервативную аппроксимацию уравнения непрерывности в базис  $\{\psi, \Phi_n, \Phi_p\}$ .

Уравнение плотности электронного и дырочного тока примет вид:

$$\begin{aligned} J_n &= qn\mu_n\vec{\varepsilon} + qD_n\nabla n = qn\mu_n(-\nabla\varphi) + qD_n\nabla(n_1e^\psi\Phi_n) = \\ &= -qn_1e^\psi\Phi_nD_n + qD_n n_1(e^\psi\Phi_n + e^\psi\nabla\Phi_n) = \\ &= qD_n n_1e^\psi\nabla\Phi_n \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} J_p &= qp\mu_p\vec{\varepsilon} - qD_p\nabla p = \\ &= qn_1e^{-\psi}\Phi_p\mu_p(-\nabla\psi)\varphi_T - qD_p\nabla(n_1e^{-\psi}\Phi_p) - \\ &- qD_p n_1(-e^{-\psi}\nabla\psi\Phi_p + e^{-\psi}\nabla\Phi_p) = \\ &= -qD_p n_1e^{-\psi}\nabla\Phi_p \end{aligned} \quad (2.18)$$

В этом же базисе определим стационарное уравнение Пуассона, заменив дифференциальный оператор на конечно-разностный:

$$\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h_x^2} = -\frac{qn_1e^\psi}{\varepsilon_0\varepsilon\varphi_T}(\Phi_p e^{-2\psi} - \Phi_n + N_{sub})$$

Стационарные уравнения непрерывности:

$$\begin{cases} -\frac{1}{q}\nabla J_n = G - R \\ \frac{1}{q}\nabla J_p = G - R \end{cases}$$

Подставляя (2.17) в уравнение непрерывности получим:

$$-\frac{1}{q}\nabla(qD_n n_1e^\psi\nabla\Phi_n) = G - R$$

Таким образом, получим, что стационарное уравнение непрерывности имеет вид:

$$\nabla\psi e^\psi \nabla\Phi_n + e^\psi \nabla^2\Phi_n = -\frac{G-R}{D_n n_i}$$

От дифференциальных операторов переходим к конечно-разностным.

Распишем слагаемые и множители:

$$\nabla^2\Phi_n = \frac{\Phi_{n_{i-1}} - 2\Phi_{n_i} + \Phi_{n_{i+1}}}{h^2}$$

Далее аппроксимируем выражение вида  $\nabla\psi\nabla\Phi_n$  для трех произвольных узлов:

$$\begin{aligned} \nabla\psi\nabla\Phi_n &= \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h} \cdot \frac{\Phi_{n_{i+1}} - \Phi_{n_{i-1}}}{2h} = \\ &= \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \Phi_{n_{i+1}} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \Phi_{n_{i-1}} \end{aligned}$$

В матричном виде это уравнение имеет вид:

$$\begin{pmatrix} -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 \\ \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} \\ 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Phi_{n_1} \\ \dots \\ \Phi_{n_{i-1}} \\ \Phi_{n_i} \\ \Phi_{n_{i+1}} \\ \dots \\ \Phi_{n_{k-1}} \end{pmatrix}$$

Формат матрицы равен числу узлов на ветке. В матричном виде это равенство имеет вид:

$$\begin{vmatrix} 0 & \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} & 0 \\ -\frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} & 0 & \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -\frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \Phi_{n1} \\ \dots \\ \Phi_{n_{i-1}} \\ \Phi_{n_i} \\ \Phi_{n_{i+1}} \\ \dots \\ \Phi_{n_{k-1}} \end{vmatrix}$$

где порядок матрицы равен числу узлов сетки за вычетом двух крайних.

Просуммируем матрицы.

$$\begin{vmatrix} -\frac{2}{h^2} & \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) & 0 \\ \left(\frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) & -\frac{2}{h^2} & \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \left(\frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) & -\frac{2}{h^2} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \Phi_{n1} \\ \dots \\ \Phi_{n_{i-1}} \\ \Phi_{n_i} \\ \Phi_{n_{i+1}} \\ \dots \\ \Phi_{n_{k-1}} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \left(-\frac{G-R}{D_n n_i} e^{-\psi}\right)_1 + \left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} - \frac{1}{h^2}\right) \Phi_{n0} \\ \left(-\frac{G-R}{D_n n_i} e^{-\psi}\right)_i \\ \left(-\frac{G-R}{D_n n_i} e^{-\psi}\right)_{k-1} - \left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} + \frac{1}{h^2}\right) \Phi_{nk} \end{vmatrix}$$

Далее проделаем те же вычисления и для дырок.

$$J_p = -q D_p n_i e^{-\psi} \nabla \Phi_p$$

Подставляя (2.18) в уравнение непрерывности получим:

$$\frac{1}{q} \nabla J_p = G - R$$

Таким образом, получим, что стационарное уравнение непрерывности имеет вид:

$$\begin{aligned}\nabla(e^{-\psi}\nabla\Phi_p) &= \frac{G-R}{D_n n_i} \\ -\nabla\psi\nabla\Phi_p + \nabla^2\Phi_p &= \frac{G-R}{D_n n_i} e^\psi\end{aligned}$$

От дифференциальных операторов переходим к конечно-разностным.

Распишем слагаемые и множители:

$$\nabla^2\Phi_p = \frac{\Phi_{p_{i-1}} - 2\Phi_{p_i} + \Phi_{p_{i+1}}}{h^2}$$

Далее аппроксимируем выражение вида  $\nabla\psi\nabla\Phi_p$  для трех произвольных узлов:

$$\nabla\psi\nabla\Phi_p = \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \Phi_{p_{i+1}} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \Phi_{p_{i-1}}$$

Матрица коэффициентов:

$$\begin{aligned}& \begin{vmatrix} -\frac{2}{h^2} & \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) & 0 \\ \left(\frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) & -\frac{2}{h^2} & \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \left(\frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) & -\frac{2}{h^2} \end{vmatrix} \times \\ & \times \begin{vmatrix} \Phi_{p_1} \\ \dots \\ \Phi_{p_{i-1}} \\ \Phi_{p_i} \\ \Phi_{p_{i+1}} \\ \dots \\ \Phi_{p_{k-1}} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \left(\frac{G-R}{D_n n_i} e^{\psi_i}\right)_1 + \left(\frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) \Phi_{p_0} \\ \left(\frac{G-R}{D_n n_i} e^{\psi_i}\right)_i \\ \left(\frac{G-R}{D_n n_i} e^{\psi_i}\right)_{k-1} - \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2}\right) \Phi_{p_k} \end{vmatrix}\end{aligned}$$

Сформированное уравнение надлежит решать далее методом прогонки или одним из итерационных методов. Однако дальнейшее численное решение будет устойчивым лишь в том случае, если в матрице коэффициентов (т.е. в квадратной матрице в левой части уравнения) будет обеспечено так называемое диагональное преобладание, т.е. превосходство абсолютных величин элементов главной диагонали над элементами в боковых диагоналях (в кодиагоналях). Очевидно, потеря преобладания произойдет в том случае, когда  $\psi_{k+1} - \psi_{k-1} \geq 4$  или, иначе, разность потенциалов между соседними узлами превышает  $2\varphi_T$  или, еще иначе, если на сетке дискретизируется полупроводниковый прибор, внутри которого поле может превосходить  $2\varphi_T/h$ .

Данное ограничение иногда называют условием Шарфеттера-Гуммеля, однако в действительности формулировка предела устойчивости зависит, как будет показано, от выбора базиса и способа аппроксимации, а также включает неоднородность коэффициента диффузии на сетке, имеющую место в реальных задачах.

Можно избежать неустойчивости введением более мелких сеток либо использованием других способов аппроксимации.

Говоря о диагональном преобладании как условии устойчивости решения матричного уравнения, необходимо установить и верхний предел преобладания. А именно, при алгебраическом суммировании элементов матрицы, различающихся на несколько порядков, процессор сначала выравнивает порядки, сдвигая мантиссу меньшего (по модулю) числа вправо и заполняя освободившиеся слева разряды незначащими нулями. Если такой сдвиг будет слишком большим, то меньшее число может выйти за пределы значимости.

Потеря значимости означает, что информация, заключенная в коддиагоналях, не будет использована в ходе отыскания решения. Пределы потери значимости зависят от разрядности процессора, однако оптимально такое преобладание, когда элементы главной диагонали превосходят элементы в коддиагоналях не более чем на порядок.

Дополнительное неудобство полученного уравнения, связанное с выбором базиса  $\{\psi, \Phi_n, \Phi_p\}$ , состоит в том, что оно содержит экспоненты от абсолютного значения потенциала, что может легко привести к переполнению разрядной сетки компьютера. Базис  $\{\psi, n, p\}$  свободен от этого недостатка.

Обратимся к базису  $\{\psi, n, p\}$ . Уравнения переноса в этом базисе имеют вид:

$$J_n = qn\mu_n \vec{\varepsilon} + qD_n \nabla n$$

$$J_p = qp\mu_p \vec{\varepsilon} - qD_p \nabla p$$

Если выразить поле  $\vec{\varepsilon}$  через  $(-\nabla\psi\varphi_T)$  и использовать соотношение Эйнштейна. Уравнение непрерывности для электронов можно записать в виде:

$$J_n = qn\mu_n(-\varphi_T \nabla\psi) + qD_n \nabla n = -qnD_n \nabla\psi + qD_n \nabla n$$

Подставляя (2.17) в уравнение непрерывности получим:

$$\nabla(n\nabla\psi + \nabla n) = -\frac{G - R}{D_n}$$

Таким образом, получим, что стационарное уравнение непрерывности имеет вид:

$$\nabla n \nabla \psi + n \nabla^2 \psi + \nabla^2 n = - \frac{G - R}{D_n}$$

От дифференциальных операторов переходим к конечно-разностным.

$$\begin{aligned} \nabla n \nabla \psi &= \frac{n_{i+1} - n_{i-1}}{2h} \cdot \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h} = \\ &= \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} n_{i+1} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} n_{i-1} \\ n \nabla^2 \psi &= n_i \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} \end{aligned}$$

Распишем слагаемые и множители:

$$\nabla^2 n = \frac{n_{i-1} - 2n_i + n_{i+1}}{h^2}$$

Дискретизируя на сетке дифференциальный оператор в скобках в левой части подобно предыдущему случаю, приходим к матрице

$$\begin{vmatrix} \left[ \left( -\frac{2}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( \frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] & 0 \\ \left[ \left( \frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( -\frac{2}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( \frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \left[ \left( \frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( -\frac{2}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] \end{vmatrix}$$

$$\times \begin{vmatrix} n_1 \\ \dots \\ n_{i-1} \\ n_i \\ \dots \\ n_{i+1} \\ \dots \\ n_{k-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \left( -\frac{G-R}{D_n} \right)_1 - \left( \frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \right) n_0 \\ \vdots \\ \left( -\frac{G-R}{D_n} \right)_i \\ \vdots \\ \left( -\frac{G-R}{D_n} \right)_{k-1} - \left( \frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - \psi_{i+1}}{4h^2} \right) n_k \end{vmatrix}$$

Уравнение плотности дырочного тока имеет вид:

$$J_p = qp\mu_p \vec{\varepsilon} - qD_p \nabla p = -qpD_p \nabla \psi + qD_p \nabla p$$

Уравнение непрерывности имеет вид:

$$\frac{1}{q} \nabla J_p = G - R$$

Подставляя (2.18) в уравнение непрерывности получим:

$$\nabla(-p\nabla\psi + \nabla p) = \frac{G - R}{D_p}$$

Таким образом, получим, что стационарное уравнение непрерывности имеет вид:

$$-\nabla p \nabla \psi + p \nabla^2 \psi + \nabla^2 p = \frac{G - R}{D_p}$$

От дифференциальных операторов переходим к конечно-разностным.

$$\begin{aligned} \nabla p \nabla \psi &= \frac{p_{i+1} - p_{i-1}}{2h} \cdot \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h} = \\ &= \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} p_{i+1} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} p_{i-1} \end{aligned}$$

$$p \nabla^2 \psi = p_i \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2}$$

Распишем слагаемые и множители:

$$\nabla^2 p = \frac{p_{i-1} - 2p_i + p_{i+1}}{h^2}$$



В матричном виде это уравнение имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \left[ \left( -\frac{2}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( \frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] & 0 \\ \left[ \left( \frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( -\frac{2}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( \frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \left[ \left( \frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \right) \right] & \left[ \left( -\frac{2}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{4h^2} \right) \right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ \dots \\ p_{i-1} \\ p_i \\ p_{i+1} \\ \dots \\ p_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left( -\frac{G-R}{D_p} \right)_1 - \left( \frac{1}{h^2} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{4h^2} \right) p_0 \\ \vdots \\ \left( -\frac{G-R}{D_p} \right)_i \\ \vdots \\ \left( -\frac{G-R}{D_p} \right)_{k-1} - \left( \frac{1}{h^2} + \frac{\psi_{i-1} - \psi_{i+1}}{4h^2} \right) p_k \end{pmatrix}$$

Устойчивость зависит от моделируемых полей, знака и плотности пространственного заряда и шага разностной сетки. Следует иметь в виду, что заряд и поле подразумеваются не "истинные", т.е. полученные как окончательные решения, а некоторые промежуточные, с которыми приходится иметь дело в ходе итерационного отыскания решения. В целом данный базис, как и предыдущий, содержит ограничения устойчивости в области высоких полей.

### 2.8.2. Консервативная простая аппроксимация уравнения непрерывности

Вообще свойство консервативности разностных схем означает соблюдение некоторых законов сохранения на разностной сетке, то есть разностная схема строится на основе некоторого закона сохранения — массы, энергии, импульса и т.д. При этом соблюдение закона сохранения обеспечивается

не с некоторой погрешностью, которая уменьшается в пределе с измельчением шага сетки, как это бывает в неконсервативных схемах, а закладывается в разностную схему изначально и обеспечивается точно даже в тех случаях, когда вследствие крупного шага сетки или других причин разностная схема не вполне адекватно моделирует выбранный объект. Применительно к диффузионно-дрейфовому моделированию полупроводниковых приборов консервативность схемы означает соблюдение закона сохранения заряда на сетке.

### Теорема Остроградского-Гаусса.

Запишем уравнения Остроградского-Гаусса для замкнутой поверхности  $S$ , ограничивающей объем  $V$ :

$$\oint J_n \vec{\eta} dS = \int_V R dV$$

где  $R$  – рекомбинация,  $\eta$  означает единичный вектор-нормаль к поверхности  $S$ . В одномерном случае выделим в окрестности каждого узла к сетки ячейку длиной  $h$  (рис. 2.2).

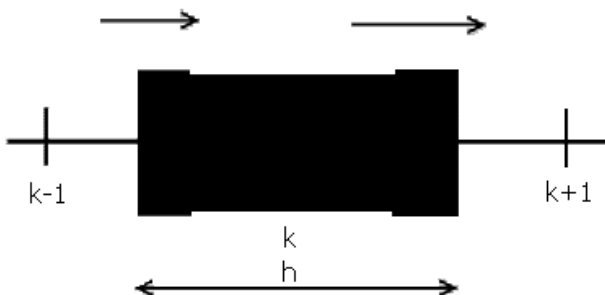


Рис. 2.2. Построение ячейки для консервативной аппроксимации уравнения непрерывности на одномерной сетке

Уравнение непрерывности для электронов, представленное по теореме Остроградского-Гаусса, примет вид:

$$J_{n_{i+1/2}} - J_{n_{i-1/2}} = Rh$$

В базисе  $\{\psi, \Phi_n, \Phi_p\}$  уравнение переноса для дырок имеет вид

$$J_n = qD_n n_i e^{\psi} \nabla \Phi_n$$

Токи на границах ячейки

$$J_{n_{i+1/2}} = qD_n n_{i_0} e^{\psi+1/2} \frac{\Phi_{n_{i+1}} - \Phi_{n_i}}{h}$$

$$J_{n_{i-1/2}} = qD_n n_{i_0} e^{\psi-1/2} \frac{\Phi_{n_i} - \Phi_{n_{i-1}}}{h}$$

Вычитая уравнения, получаем:

$$J_{n_{i+1/2}} - J_{n_{i-1/2}} = Rh$$

Базис  $\{\psi, \Phi_n, \Phi_p\}$

$$qD_n n_{i_0} \left[ e^{\psi-1/2} \Phi_{n_{i-1}} - \left( e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2} \right) \Phi_{n_i} + e^{\psi+1/2} \Phi_{n_{i+1}} \right] = R_i h^2$$

$D_n$  можно перенести в правую часть

$$\psi_{i+1/2} = \frac{\psi_{i+1} + \psi_i}{2}$$

Имея теперь коэффициенты для  $k$ -ой ячейки и распространяя на всю сетку, получим матричное уравнение с трехдиагональной матрицей коэффициентов:

$$\begin{pmatrix} [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] [e^{\psi+1/2}] \\ [e^{\psi-1/2}] [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] [e^{\psi+1/2}] \\ \vdots \\ [e^{\psi-1/2}] [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \Phi_{n_1} \\ \dots \\ \Phi_{n_{i-1}} \\ \Phi_{n_i} \\ \Phi_{n_{i+1}} \\ \dots \\ \Phi_{n_{k-1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left( \frac{Rh^2}{qD_n n_{i_0}} \right)_1 - (e^{\psi-1/2}) \Phi_{n_0} \\ \left( \frac{Rh^2}{qD_n n_{i_0}} \right)_i \\ \left( \frac{Rh^2}{qD_n n_{i_0}} \right)_{k-1} - [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] \Phi_{n_k} \end{pmatrix}$$

Уравнение непрерывности для дырок, представленное по теореме Остроградского-Гаусса, примет вид:

$$J_{p_{i+1/2}} - J_{p_{i-1/2}} = -Rh$$

Токи на границах:

$$J_{p_{i+1/2}} = -qD_p n_{i_0} e^{-\psi_{i+1/2}} \frac{\Phi_{p_{i+1}} - \Phi_{p_i}}{h}$$

$$J_{p_{i-1/2}} = -qD_p n_{i_0} e^{-\psi_{i-1/2}} \frac{\Phi_{p_{i+1}} - \Phi_{p_{i-1}}}{h}$$

Получим выражение:

$$e^{-\psi_{i-1/2}} \Phi_{p_{i-1}} - (e^{-\psi_{i+1/2}} + e^{-\psi_{i-1/2}}) \Phi_{p_i} + e^{-\psi_{i+1/2}} \Phi_{p_{i+1}} = \frac{R_i h^2}{qD_p n_{i_0}}$$

Имея теперь коэффициенты для  $k$ -ой ячейки и распространяя на всю сетку, получим матричное уравнение с трехдиагональной матрицей коэффициентов:

$$\begin{pmatrix} [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] [e^{\psi+1/2}] \\ e^{\psi-1/2} [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] [e^{\psi+1/2}] \\ \vdots \\ e^{\psi-1/2} [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \Phi_{p1} \\ \Phi_{p2} \\ \dots \\ \Phi_{pi-1} \\ \Phi_{pi} \\ \Phi_{pi+1} \\ \dots \\ \Phi_{pk-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left( \frac{R\hbar^2}{qD_p p_{i_0}} \right) - (e^{\psi-1/2}) \Phi_{p_0} \\ \left( \frac{R\hbar^2}{qD_p p_{i_0}} \right) \\ \left( \frac{R\hbar^2}{qD_p p_{i_0}} \right) - [- (e^{\psi-1/2} + e^{\psi+1/2})] \Phi_{pk} \end{pmatrix}$$

Очевидно, что в матрице преобладание элементов главной диагонали над кодиагоналями обеспечено, и в этом базисе консервативная формулировка разностной схемы для уравнения непрерывности устойчива. Однако наличие элементов вида  $\exp(\psi)$  ограничивав диапазон моделируемых потенциалов в приборе.

Обратимся теперь к базису  $\{\psi, n, p\}$ , который теперь не буде содержать  $\exp(\psi)$ . Уравнение переноса для дырок имеет обычный вид:

$$J_n = -qnD_n \nabla \psi + qD_n \nabla n$$

Токи на границах ячейки:

$$J_{n_{i+1/2}} = -q \frac{n_{i+1} - n_i}{2} D_n \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} + qD_n \frac{n_{i+1} - n_i}{h}$$

$$J_{n_i-1/2} = -q \frac{n_i - n_{i-1}}{2} D_n \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h} + q D_n \frac{n_i - n_{i-1}}{h}$$

Вычитая два последних выражения, получаем после группировки:

$$\begin{aligned} q D_n \left( \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{2} + \frac{1}{h} \right)_{n_{i-1}} &+ \left[ \left( -q \frac{D_n \psi_{i+1} - \psi_i}{2h} - \frac{q D_n}{h} \right) \right. \\ &- \left. \left( -q \frac{D_n \psi_i - \psi_{i-1}}{2h} - \frac{q D_n}{h} \right) \right] n_i - \\ &- \left( \frac{q D_n \psi_{i+1} - \psi_i}{2h} - \frac{q D_n}{h} \right)_{n_{i+1}} = Rh \end{aligned}$$

С помощью полученного выражения можно образовать матричное уравнение с трехдиагональной матрицей коэффициентов. Можно видеть, однако, что диагональное преобладание зависит от соотношения полей на границах ячейки и может быть нарушено при полях, превышающих  $6 \varphi_T/h$ .

### 2.8.3. Консервативная интегральная аппроксимация уравнения непрерывности (метод Шарфеттера-Гуммеля)

Как было показано в предыдущих пунктах, большинство численных подходов к уравнению непрерывности имеет ограничения устойчивости при моделировании сильных полей в приборе. Целью формулировки Шарфеттера-Гуммеля является построение такой аппроксимации для уравнения непрерывности, которая была бы устойчивой в сильных полях.

Сначала выберем базис  $\{\psi, \Phi_n, \Phi_p\}$ , в котором математическое выражение намного короче и идея Шарфеттера-Гуммеля таким образом иллюстрируется яснее. Запишем уравнение переноса для дырок в этом базисе как

$$J_p = -qD_p n_i e^{-\psi} \nabla \Phi_p$$

Введем локальную систему координат с началом в узел  $k$  (рис 2.3)

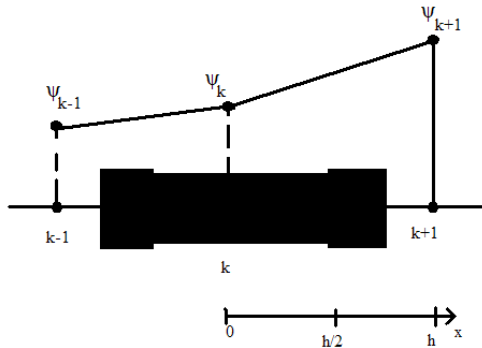


Рис. 2.3. Ячейка на разностной сетке для аппроксимации Шарфеттера-Гуммеля

Считаем, что между соседними узлами  $(k, k+1)$   $J_p = \text{const} = J_{pk+1/2}$ ,  $E = \text{const} = E_{k+1/2}$ , т.е. потенциал линейно изменяется от узла к узлу.

$$J_{p_{i+1/2}} - J_{p_{i-1/2}} = -Rh$$

Т.к. мы приняли, что потенциал изменяется от узла к узлу, то

$$J_{p_{i+1/2}} = \text{const}$$

$$\varepsilon = \text{const} \Rightarrow \psi(x) = \psi_i + \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} x$$

Получим уравнение плотности дырочного тока:

$$J_p = -qD_p n_{i0} e^{-\psi} \frac{d\Phi_p}{dx}$$

$$J_{p_{i+1/2}} e^{\psi_i} e^{\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} dx} = -qD_p n_{i0} d\Phi_p$$

Теперь разделяем переменные и интегрируем дифференциальное уравнение переноса в пределах между узлами ( $k, k+1$ ):

$$\int_0^h J_{p_{i+1/2}} e^{\psi_i} e^{\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} dx} = \int_{\Phi_{p_i}}^{\Phi_{p_{i+1}}} -qD_p n_{i0} d\Phi_p$$

Интегрируя оба выражения, получим:

$$J_{p_{i+1/2}} e^{\psi_i} \frac{h}{\psi_{i+1} - \psi_i} (e^{\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} h} - 1) = -qD_p n_{i0} (\Phi_{p_{i+1}} - \Phi_{p_i})$$

Выразим из предыдущего выражения  $J_{p_{i+1/2}}$

$$J_{p_{i+1/2}} = -\frac{qD_p n_{i0}}{h} (\psi_{i+1} - \psi_i) \frac{e^{-\psi_i}}{e^{\psi_{i+1} - \psi_i} - 1} \Phi_{p_{i+1}} + \frac{qD_p n_{i0}}{h} e^{-\psi_i} \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{e^{\psi_{i+1} - \psi_i} - 1} \Phi_{p_i}$$



Т.к. мы приняли, что потенциал изменяется от узла к узлу, то

$$\varepsilon = \text{const} \Rightarrow \psi(x) = \psi_i + \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h} x$$

Получим дифференциальное уравнение переноса в пределах между узлами ( $k, k+1$ ):

$$\int_0^{-h} J_{p_{i-1/2}} e^{\psi_i} e^{\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h} x} dx = -q D_p n_{i0} \int_{\Phi_{p_i}}^{\Phi_{p_{i-1}}} d\Phi_p$$

Проинтегрируем оба выражения:

$$J_{p_{i-1/2}} e^{\psi_i} \frac{h}{\psi_i - \psi_{i-1}} (e^{-(\psi_i - \psi_{i-1})} - 1) = +q D_p n_{i0} (\Phi_{p_i} - \Phi_{p_{i-1}})$$

Выразим из предыдущего выражения  $J_{p_{i-1/2}}$

$$J_{p_{i-1/2}} = -\frac{q D_p n_{i0}}{h} e^{-\psi_i} \frac{-(\psi_i - \psi_{i-1})}{e^{-(\psi_i - \psi_{i-1})} - 1} \Phi_{p_{i-1}} + \frac{q D_p n_{i0}}{h} e^{-\psi_i} \frac{-(\psi_i - \psi_{i-1})}{e^{-(\psi_i - \psi_{i-1})} - 1} \Phi_{p_i}$$

Теперь вычтем и перегруппируем компоненты так, чтобы выделить коэффициенты при  $\Phi_{pk-1}, \Phi_{pk}, \Phi_{pk+1}$ ;

$$J_{p_{i+1/2}} - J_{p_{i-1/2}} = -R_i h$$

В итоге получим выражение:

$$\begin{aligned}
& -\frac{qD_p n_{i0}}{h} e^{-\psi_i} \frac{-(\psi_i - \psi_{i-1})}{e^{-(\psi_i - \psi_{i-1})} - 1} \Phi_{p_{i-1}} \frac{qD_p n_{i0}}{h} e^{-\psi_i} \left( \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{e^{\psi_{i+1} - \psi_i} - 1} \right. \\
& \quad \left. + \frac{-(\psi_i - \psi_{i-1})}{e^{-(\psi_i - \psi_{i-1})} - 1} \right) \Phi_{p_i} - \\
& -\frac{qD_p n_{i0}}{h} e^{-\psi_i} \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{e^{\psi_{i+1} - \psi_i} - 1} \Phi_{p_{i+1}} = -R_i h \\
& \frac{z}{e^z - 1}
\end{aligned}$$

При стремлении  $z$  к 0 получается неопределённость 0/0, чтобы избавиться от неопределённости разложим  $e^z$  в ряд Тейлора с первыми тремя членами:

$$e^z = 1 + z + \frac{z^2}{2}$$

Неопределённость исчезает.

$$\frac{z}{1 + z + \frac{z^2}{2} - 1} = \frac{1}{1 + \frac{z}{2}} > 0$$

Базис  $\{\psi, n, p\}$

$$J_p = -qD_p p \nabla \psi - qD_p \nabla p = qp\mu_p \varepsilon - qD_p \frac{dp}{dx}$$

$$qD_p p' - qp\mu_p \varepsilon + J_p = 0$$

Преобразуя, предыдущее выражение, получим

$$p' - p \frac{\varepsilon}{\varphi_T} + \frac{J_p}{qD_p} = 0$$

Введём обозначения:

$$p = UV$$

Получим:

$$p' = U'V + V'U$$

Заменяем слагаемые:

$$U'V + V'U - UV \frac{\varepsilon}{\varphi_T} + \frac{J_p}{qD_p} = 0$$

Преобразуя выражение, получим

$$U'V + U \left( V' - V \frac{\varepsilon}{\varphi_T} \right) + \frac{J_p}{qD_p} = 0$$

Выберем  $V_{max}$ , чтобы приравнять скобку к нулю.

$$V' - V \frac{\varepsilon}{\varphi_T} = 0$$

Перенесём слагаемые с  $V$  в одну сторону:

$$\frac{V'}{V} = \frac{\varepsilon}{\varphi_T}$$

Возьмём первообразную и получим необходимую  $V$ :

$$V = V_0 e^{\frac{\varepsilon}{\varphi_T} x}$$

Полученное выражение подставим в уравнение:

$$U' V_0 e^{\frac{\varepsilon}{\varphi_T} x} + \frac{J_p}{qD_p} = 0$$

Выразим  $U'$ :

$$U' = -\frac{J_p}{qD_p V_0} = \frac{\varphi_T}{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{\varphi_T} x}$$

Берём первообразную:

$$U = \frac{J_p}{qD_p V_0} \frac{\varphi_T}{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{\varphi_T} x} + U_0$$

В итоге получим выражение:

$$p = \left( \frac{J_p}{qD_p V_0} \frac{\varphi_T}{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{\varphi_T} x} + U_0 \right) V_0 e^{\frac{\varepsilon}{\varphi_T} x}$$

$$p(x) = \frac{J_p}{qD_p} \frac{\varphi_T}{\varepsilon} + C_0 e^{-\frac{\varepsilon}{\varphi_T} x}$$

Граничные условия:

Если  $x=0$ , то  $p=p_i$

$$p_i = \frac{J_p}{qD_p} \frac{\varphi_T}{\varepsilon} + C_0 \quad \Rightarrow \quad C_0 = p_i - \frac{J_p}{qD_p} \frac{\varphi_T}{\varepsilon}$$

В этом случае выражение для  $p_{i+1}$  будет иметь вид:

$$\begin{aligned} p_{i+1} &= \frac{J_{p_{i+1/2}}}{qD_p} \frac{\varphi_T}{\varepsilon_{i+1/2}} + \left( p_i - \frac{J_{p_{i+1/2}}}{qD_p} \frac{\varphi_T}{\varepsilon_{i+1/2}} \right) e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}} = \\ &= \frac{J_{p_{i+1/2}}}{qD_p} \frac{\varphi_T}{\varepsilon_{i+1/2}} + p_i e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}} - \frac{J_{p_{i+1/2}}}{qD_p} \frac{\varphi_T}{\varepsilon_{i+1/2}} e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}} \end{aligned}$$

Выражение для плотности дырочного тока на граничных точках:

$$J_{p_{i+1/2}} = \frac{qD_p \varepsilon_{i+1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}}} p_{i+1} - \frac{qD_p \varepsilon_{i+1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}}} e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}} p_i$$

Введём коэффициенты:

$$\begin{aligned} C_{p_i} &= \frac{qD_p \varepsilon_{i+1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}}} \\ b_1 &= \frac{qD_p \varepsilon_{i+1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}}} e^{-\frac{\varepsilon_{i+1/2} h}{\varphi_T}} \end{aligned}$$

Выражение для плотности дырочного тока на граничных точках:

$$J_{p_{i-1/2}} = \frac{qD_p \varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T h}} p_{i-1} - \frac{qD_p \varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T h}} e^{-\frac{\varepsilon_{i-1/2} h}{\varphi_T}} p_i$$

Введём коэффициенты:

$$a_{p_i} = \frac{qD_p \varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T h}}$$

$$b_2 = \frac{qD_p \varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T}{1 - e^{-\varepsilon_{i-1/2} / \varphi_T h}} e^{-\frac{\varepsilon_{i-1/2} h}{\varphi_T}}$$

В итоге получим:

$$a_{p_i} p_{i-1} + b_{p_i} p_i + c_{p_i} p_{i+1} = R_i h$$

$$b_{p_i} = b_1 - b_2$$

Исследование, аналогичное проделанному в базисе  $\{\psi, \Phi_n, \Phi_p\}$ , позволяет утверждать, что матрица коэффициентов в имеет преобладание элементов главной диагонали над боковыми, и аппроксимация уравнения непрерывности по методу Шарфеттера-Гуммеля в базисе  $\{\psi, n, p\}$  также устойчива как в сильных, так и в слабых полях.

### 3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ДИФфуЗИОННО-ДРЕЙФОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Изучив приемы сведения отдельных уравнений ФСУ к матричным уравнениям, посмотрим теперь, как объединить эти уравнения для достижения конечной цели — моделирования прибора в целом.

#### 3.1. Алгоритм Гуммеля

Запишем стационарную ФСУ ДДМ в базисе  $\{\psi, n, p\}$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon\varphi_T} (p - n + N) \\ -\frac{1}{q} \nabla J_n = G - R \\ \frac{1}{q} \nabla J_p = G - R \end{array} \right.$$

Трудность решения системы состоит в том, что концентрации носителей в правой части есть функции от потенциала, т.е.  $p = p(\psi)$ ,  $n = n(\psi)$ , а распределение потенциала, в свою очередь, зависит от распределения заряда, т.е. концентрации носителей. В выражения для  $j_n$ ,  $j_p$  входит потенциал  $\psi$ , а в выражение для  $R$  — концентрации  $n, p$ , т.е.  $j_n = j_n(n, \psi)$ ,  $j_p = j_p(p, \psi)$ ,  $R = R(n, p)$ . Таким образом, в системе нельзя выделить ни одного уравнения, которое можно было бы решить независимо от остальных.

Вариант преодоления данной сложности был предложен Гуммелем: решать уравнения поочередно, а при решении какого-либо уравнения относительно выбранного

параметра распределения остальных считать фиксированными. При этом для начала расчета неизбежно придется задаваться некоторыми исходными приближениями искомых распределений, построенными на основании качественных физических соображений. Кроме того, если исходное приближение задано не слишком точно, то после прохождения серии решений уравнений полученные распределения  $\{\psi, n, p\}$  не будут взаимно согласованными, т.е. не будут решениями ФСУ. Неизбежно поэтому заикливание алгоритма, т.е. введение итераций — повторение цепочки расчетов до достижения взаимного согласования распределений.

### Метод Гуммеля

1. Задаем исходные приближения. Номер итерации  $m = 0$ ,

$\psi^0, n^0, p^0$  - начальное приближение

$$2. \quad a_{\psi_i} \psi_{i-1} + b_{\psi_i} \psi_i + c_{\psi_i} \psi_{i+1} = R_{\psi_i}$$

$$a_{n_i} n_{i-1} + b_{n_i} n_i + c_{n_i} n_{i+1} = R_{n_i}$$

$$a_{p_i} p_{i-1} + b_{p_i} p_i + c_{p_i} p_{i+1} = R_{p_i}$$

3. Решив уравнения Пуассона найдём  $\rightarrow \psi^1$

Затем решая уравнения непрерывности найдём в первом приближение:

$$4. \quad \psi^1 \rightarrow \text{непр.}(n) \rightarrow n^1$$



$$5. \psi^1 \rightarrow \text{непр.}(p) \rightarrow p^1$$

Расхождение по потенциалу и концентрации  
(сравниваем с  $\varepsilon$ )

6. Проверка погрешности

$$|\psi^1 - \psi^0| \quad ? \quad \varepsilon_\psi$$

$$|n^1 - n^0| \quad ? \quad \varepsilon_n$$

$$|p^1 - p^0| \quad ? \quad \varepsilon_p$$

Если погрешность больше заданной, то уравнение  
прорешиваем снова с  $n^1, p^1, \psi^1$  (итерационный метод)

$$7. \text{ Если нет, то } n^1, p^1 \rightarrow \text{Пуассон} \rightarrow \psi^2$$

Сходимость возможно не всегда.

Причина расхождения: Теорема Мокка.

Данная теорема доказывает, что алгоритм Гуммеля может расходиться в приборах с высоким уровнем рекомбинации, поэтому при использовании этого метода желательно, чтобы рекомбинация была нулевой или минимальной.

### 3.2. Метод Сейдмана-Чу

Плохая сходимость и даже потеря сходимости алгоритма Гуммеля при высоких уровнях инжекции заставляет искать ослабления ограничения, налагаемого теоремой Мока, путем более внимательного отношения к

рекомбинации. Метод Сейдмана-Чу модифицирует алгоритм Гуммеля посредством специального представления рекомбинационного члена.

Уравнения непрерывности и Пуассона запишутся в виде:

$$\begin{cases} a_{\psi_i} \psi_{i-1} + b_{\psi_i} \psi_i + c_{\psi_i} \psi_{i+1} = R_{\psi_i} \\ a_{p_i} p_{i-1} + b_{p_i} p_i + c_{p_i} p_{i+1} = R_{p_i} \\ a_{n_i} n_{i-1} + b_{n_i} n_i + c_{n_i} n_{i+1} = R_{n_i} \end{cases}$$

Разложим рекомбинацию в ряд Тейлора:

$$R_{n_i} R_{n_i}^0 + \left. \frac{\partial R}{\partial n} \right|_{n_i^0} (n_i - n_i^0)$$

$$R_{p_i} R_{p_i}^0 + \left. \frac{\partial R}{\partial p} \right|_{p_i^0} (p_i - p_i^0)$$

Подставим полученное в систему уравнений.

$$a_{n_i} n_{i-1} + \left( b_{n_i} - \left. \frac{\partial R}{\partial n} \right|_{n_i^0} \right) n_i + c_{n_i} n_{i+1} = R_{n_i}^0 - \left. \frac{\partial R}{\partial n} \right|_{n_i^0} n_i^0$$

Данный метод приводит к улучшению устойчивости в областях с высоким уровнем рекомбинации.

В отношении генерации возможны два случая: если есть внешний источник генерации, то его можно считать постоянным, не зависящим от  $n$ ,  $p$ ; если нет внешнего источника, то генерация существенна лишь в обедненных областях, где ее темп значительно меньше темпа рекомбинации в областях с высоким уровнем инжекции. В

обоих случаях генерация не препятствует сходимости алгоритма решения ФСУ ДДМ.

### 3.3. Обобщенный метод Сейдмана-Чу

$$a_n n_{i-1} + b_n n_i + c_n n_{i+1} = R_{n_i}(n, p)$$

$$R_{\text{шрх}} = \frac{np - n_{i_0}^2}{i_p(p + n_{i_0}) + i_n(n + n_{i_0})}$$

$$R_{n_i} = R^0(n, p) + \frac{\partial R^0}{\partial n} (n_i - n_i^0) + \frac{\partial R^0}{\partial p} (p_i - p_i^0)$$

$$R_{p_i} = -//-$$

### 3.4. Метод Ньютона для ФСУ ДДМ

Уравнение Пуассона:

$$a_{\psi_i} \psi_{i-1} + b_{\psi_i} \psi_i + c_{\psi_i} \psi_{i+1} = R_{\psi_i}$$

Уравнение непрерывности по электронам:

$$a_{n_i} n_{i-1} + b_{n_i} n_i + c_{n_i} n_{i+1} = R_{n_i}$$

Уравнение непрерывности по дыркам:

$$a_{p_i} p_{i-1} + b_{p_i} p_i + c_{p_i} p_{i+1} = R_{p_i}$$

Решаются сразу три уравнения:

Пусть известно:  $R_\psi^0, R_n^0, R_p^0$

$$R_\psi^0 + \frac{\partial R_\psi^0}{\partial \psi} (\psi - \psi^0) + \frac{\partial R_\psi^0}{\partial n} (n - n^0) + \frac{\partial R_\psi^0}{\partial p} (p - p^0)$$

$$R_n^0 + \frac{\partial R_n^0}{\partial \psi} (\psi - \psi^0) + \frac{\partial R_n^0}{\partial n} (n - n^0) + \frac{\partial R_n^0}{\partial p} (p - p^0)$$

$$R_p^0 + \frac{\partial R_p^0}{\partial \psi} (\psi - \psi^0) + \frac{\partial R_p^0}{\partial n} (n - n^0) + \frac{\partial R_p^0}{\partial p} (p - p^0)$$

В каждом узле три неизвестных.

$$\begin{bmatrix} a_\psi \\ a_n \\ a_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left( b_\psi - \frac{\partial R_\psi^0}{\partial \psi} \right) & \left[ -\frac{\partial R_\psi^0}{\partial n} \right] & \left[ -\frac{\partial R_\psi^0}{\partial p} \right] \\ -\frac{\partial R_n^0}{\partial \psi} & \left( b_n - \frac{\partial R_n^0}{\partial n} \right) & -\frac{\partial R_n^0}{\partial p} \\ -\frac{\partial R_p^0}{\partial \psi} & -\frac{\partial R_p^0}{\partial n} & \left( b_p - \frac{\partial R_p^0}{\partial p} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_\psi \\ c_n \\ c_p \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} i-1 \\ \psi_i \\ n_i \\ p_i \\ i+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{\psi_i}^0 \\ R_{n_i}^0 \\ R_{p_i}^0 \end{bmatrix}$$

Метод Гуммеля, в сравнении с Ньютоном, характеризуется многочисленными затратами машинного времени. Метод Ньютона лучше сходится (сверхлинейный)

### 3.5. Решение нестационарной ФСУ

В составе ФСУ ДДМ нестационарными являются только уравнения непрерывности, которые относятся к классу параболических дифференциальных уравнений с частными

производными. Члены равнений непрерывности вида  $-(1/q)\nabla j$  аппроксимируются по методам, алогичным рассмотренным для стационарных уравнений непрерывности, а переход с одного временного слоя на другой подчиняется закономерностям, общим для численных методов решения параболических уравнений. Подобный переход может осуществляться по явной или неявной схеме, однако наиболее распространен неявный метод Кранка-Никольсона, характеризующийся вторыми порядками аппроксимации как по пространству, так и по времени.

Нестационарное уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla J_n + G - R$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla J_p + G - R$$

Распишем уравнения:

$$\frac{\partial n}{\partial t} \approx \frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{h_t}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx \frac{p_i^{j+1} - p_i^j}{h_t}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} \approx \frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{h_t}$$

$$n_i^{j+1} = [(a_n n_{i-1}^j + b_n n_i^j + a_n n_{i+1}^j) + (G - R)_i^j] h_t + n_i^j$$

$$n_i^{j+1} = \left[ \omega \left( \frac{1}{q} \nabla J_n \right)^i + (1 - \omega) \left( \frac{1}{q} \nabla J_n \right)^{i+1} + (G - R) \right] + n_i^j$$

$\omega = 0$  – неявный метод Эйлера

$\omega = 1$  – явный метод Эйлера

$\omega = 0.5$  – метод Кранка-Никольсона

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При изучении настоящей дисциплины основное внимание в моделировании как технологических процессов, так и полупроводниковых приборов уделено методу конечных разностей, а с методами конечных элементов, граничных элементов и Монте-Карло дается общее ознакомление.

Данную дисциплину нельзя считать законченной и устоявшейся в связи с тем, что с уменьшением размеров интегральных элементов, ростом их быстродействия и с развитием возможностей микроэлектронной технологии могут стать необходимыми новые физические идеи и численные методы. Однако мы рассчитываем, что идеи и методы, изложенные в настоящем пособии, сохранят свою актуальность в прикладных разработках и серийном полупроводниковом производстве в течение 5-7 лет.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Самарский А.А., Андреев В.Б. Разностные методы для эллиптических уравнений. - М.: Наука, 1976. 352 с.
2. Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. Последние достижения: Пер. с англ. / Под ред. Д. Миллера. - М.: Радио и связь, 1989. 280 с.
3. Бубенников А.Н., Садовников А.Д. Физико-технологическое проектирование биполярных элементов кремниевых БИС. - М.: Радио и связь, 1991. 288 с.
4. Степаненко И.П. Основы теории транзисторов и транзисторных схем. - М.: Энергия, 1973. - 608 с.
5. Данилина Н.И., Дубровская Н.С., Кваша О.П., Смирнов Г.Л., Феклистов Г.И. Численные методы. - М.: Высш. школа, 1976. 368 с.
6. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. - М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1959. 608 с.
7. Автоматизация проектирования БИС. В 6 кн.:Кн.5. В.Я. Кремлев. Физико-топологическое моделирование структур элементов БИС.-М.: Высшая школа, 1990.-144 с.
8. Калиткин Н.Н. Численные методы. - М.:Наука, 1978.-512 с.



## Оглавление

ВВЕДЕНИЕ .....	3
1. МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ.....	8
1.1. Построение сетки.....	10
1.2. Построение разностных операторов .....	11
1.3. Метод разложения в ряд Тейлора .....	12
1.4. Построение разностных операторов путем интерполяции функции полиномами .....	21
1.5. Метод прогонки .....	26
2. ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДИФFUЗИОННО- ДРЕЙФОВОЙ МОДЕЛИ (ФСУ ДДМ).....	32
2.1. Набор независимых переменных для ФСУ .....	35
2.2. Граничные условия .....	39
2.3 Численные решения уравнения Пуассона.....	40
2.4. Нормировка ФСУ.....	41
2.5. Конечно-разностный вид уравнения Пуассона.....	43
2.6. Метод Зейделя.....	45
2.7. Метод Ньютона .....	46
2.8. Аппроксимация уравнений непрерывности .....	48
2.8.1. Неконсервативная аппроксимация уравнения непрерывности.....	49
2.8.2. Консервативная простая аппроксимация уравнения непрерывности.....	57
2.8.3. Консервативная интегральная аппроксимация уравнения непрерывности (метод Шарфеттера-Гуммеля).....	62

3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ДИФфуЗИОННО-ДРЕЙФОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	71
3.1. Алгоритм Гуммеля.....	71
3.2. Метод Сейдмана-Чу.....	73
3.3. Обобщенный метод Сейдмана-Чу .....	75
3.4. Метод Ньютона для ФСУ ДДМ.....	75
3.5. Решение нестационарной ФСУ .....	76
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	79
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	80

Учебное издание

Арсентьев Алексей Владимирович

Строгонов Андрей Владимирович

Шацких Дмитрий Сергеевич

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

В авторской редакции

Компьютерная верстка Д.С. Шацких, А.В. Арсентьева

Подписано к изданию 06.06.2011

Уч.-изд. л. 4,1

Объём данных 9,3 МБ

ГОУВПО «Воронежский государственный технический  
университет»

394026 Воронеж, Московский просп., 14