

КОНСТРУИРОВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ В ЗАДАЧЕ О ПЕРЕНОСЕ ЗАРЯДА В 2D КРЕМНИЕВОМ ТРАНЗИСТОРЕ MOSFET С НАНОКАНАЛОМ ИЗ ОКСИДА КРЕМНИЯ

Б.В. Семисалов¹

¹ Новосибирский государственный университет, Новосибирск

DESIGN OF NUMERICAL ALGORITHMS FOR THE PROBLEM OF CHARGE TRANSPORT IN A 2D SILICON MOSFET TRANSISTOR WITH A SILICON OXIDE NANOCANNEL

B.V. Semisalov¹

¹Novosibirsk State University, Novosibirsk

We are concerned with the problem of charge transport in a 2D silicon MOSFET transistor occupying a domain Ω with a silicon oxide nanochannel occupying a domain Ω_G . After proposing an additional boundary condition for the electric potential on the common boundary of the domains Ω and Ω_G we design two numerical algorithms for finding approximate solutions of this problem. The first algorithm is a new one and uses interpolation polynomials of spline-collocation and the sweep method. The second algorithm is based on the well-known longitudinal-transverse sweep method. By using these algorithms we obtain graphs of stationary solutions of our problem. We also compare the workability and efficiency of the proposed algorithms for various values of parameters.

Введение

К настоящему моменту существует достаточно много математических моделей, описывающих с той или иной степенью достоверности физические явления в полупроводниковых приборах. В процессе поиска приближённых решений задач физики полупроводников возникает проблема построения численных алгоритмов для этих моделей. Актуальность конструирования подобных алгоритмов не вызывает сомнений, поскольку на сегодняшний день полупроводниковые устройства являются неотъемлемой частью многих электронных приборов. От характеристик этих устройств существенно зависит мощность и надёжность современных вычислительных машин. Рассчитать все характеристики полупроводника с необходимой точностью – и есть задача математического моделирования.

В данной работе мы рассмотрим недавно предложенную *гидродинамическую МЕР модель* (см. статью [1]), которая представляет собой квазилинейную нестационарную систему уравнений, записанных в форме законов сохранения, полученных из системы моментов *уравнения Больцмана*. При этом для замыкания системы моментов в модели использован *принцип максимума энтропии* (или *МЕР от Maximum Entropy Principle*). Упомянутая система уравнений в двумерном случае в безразмерном виде записывается так:

$$\begin{cases} R_t + \text{div}(\mathbf{J}) = 0, & \mathbf{J}_t + \frac{2}{3} \nabla \sigma = R\mathbf{Q} + c_{11}\mathbf{J} + c_{12}\mathbf{I}, \\ \sigma_t + \text{div}(\mathbf{I}) = (\mathbf{J}, \mathbf{Q}) + cP, & \mathbf{I}_t + \nabla(\varepsilon R) = \frac{5}{3} \sigma\mathbf{Q} + c_{21}\mathbf{J} + c_{22}\mathbf{I}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь R – электронная плотность, E – энергия электрона, $\mathbf{J} = R\mathbf{u}$, $\mathbf{I} = R\mathbf{q}$, $\mathbf{u} = (u^{(x)}, u^{(y)})$ – вектор скорости электронов (за основу принята декартова система координат (x, y)), $\mathbf{q} = (q^{(x)}, q^{(y)})$ – поток энергии, $P = R(\frac{2}{3}E - 1)$, $\sigma = RE$, $\varepsilon = \frac{10}{9}E^2$, $\mathbf{Q} = \nabla\varphi = (\varphi_x, \varphi_y)$, $\varphi = \varphi(t, x, y)$ – электрический потенциал, удовлетворяющий уравнению Пуассона:

$$\Delta_{x,y}\varphi = \Delta\varphi = \varphi_{xx} + \varphi_{yy} = \beta(R - \rho); \quad (2)$$

$\rho = \rho(x, y)$ – плотность легирования (заданная на множестве Ω функция). Коэффициенты

c_{11}, \dots, c_{22}, c системы (1) являются гладкими функциями от энергии E , выражения для которых приведены в работе [2], $\beta > 0$ – постоянная (по поводу постоянной β см. [3], здесь также подробно описан процесс обезразмеривания системы (1) и уравнения Пуассона (2)). Заметим, что для нахождения приближенных решений математической модели (1), (2) в работах [4–6] предложены различные вычислительные алгоритмы.

1. Постановка задачи

В настоящей работе речь пойдет о применении вычислительной модели, разработанной в [5,6] для поиска стационарных решений задачи о переносе заряда в 2D кремниевом транзисторе MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor). Подробное описание такого полупроводникового прибора с электронной проводимостью приведено в [4]. Его характерной особенностью является наличие наноканала из оксида кремния. Схематическое изображение транзистора MOSFET в безразмерных переменных приведено на рис.1.

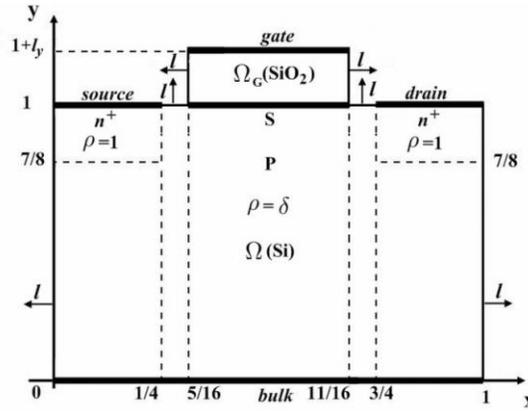


Рис. 1. Схематическое представление 2D кремниевого транзистора MOSFET

Замечание 1.1. Поскольку перенос заряда в наноканале Ω_G (см. рис.1) отсутствует, то в области Ω_G электрический потенциал $\Phi(t, x, y)$ удовлетворяет уравнению Лапласа:

$$\Delta_{x,y} \Phi = \Phi_{xx} + \Phi_{yy} = 0. \quad (3)$$

Здесь $\Omega = \{(x, y) : 0 < x, y < 1\}$, $\Omega_G = \{(x, y) : \frac{5}{16} < x < \frac{11}{16}, 1 < y < 1 + l_y\}$ – наноканал ширины l_y .

Следуя работе [6], напомним, что математическая модель (1), (2) в стационарном случае может быть сведена к системе эллиптических уравнений для неизвестных функций \mathcal{G} , R , φ :

$$\Delta \mathcal{G} = \mathcal{F}^{(\mathcal{G})}(\nabla \mathcal{G}, X, Q, \mathcal{G}) = a_1 |\nabla \mathcal{G}|^2 + a_2(\nabla \mathcal{G}, X) + a_3(\nabla \mathcal{G}, Q) + a_4(X, Q) + a_5 |Q|^2 + bc \mathcal{G}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \Delta R = \mathcal{F}^{(R)}(\nabla \mathcal{G}, \nabla R, Q, \mathcal{G}, R, \rho) = & -b_1 R |\nabla \mathcal{G}|^2 + b_2(\nabla \mathcal{G}, \nabla R) + \\ & + b_3 R(\nabla \mathcal{G}, Q) + b_4(\nabla R, Q) + b_5 R |Q|^2 + \frac{\beta}{1 + \mathcal{G}}(e^{\mathcal{X}} - \rho)R + ncR \mathcal{G}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\Delta \varphi = \mathcal{F}^{(\varphi)}(\chi, \rho) = \beta(e^{\mathcal{X}} - \rho). \quad (6)$$

Здесь $\mathcal{G} = 2/3E - 1$, $X = \nabla R / R$. Конкретные выражения для коэффициентов a_i, b_j ($i, j = 1, \dots, 5$), b и n в (4)–(6), которые являются гладкими функциями от энергии E , приведены в [6].

Для неизвестных \mathcal{G} , R , φ на множествах *source*, *drain*, *bulk* в соответствии с [4–6] выставлены условия Дирихле. На множестве S имеем условия склейки:

$$1/3 \Phi_y = \varphi_y, \quad \Phi = \varphi. \quad (7)$$

Краевые условия для \mathcal{G} , R на S имеют вид $\mathcal{G}_y = 0, R_y = \frac{R}{1+\mathcal{G}}\varphi_y$. На оставшейся части границы области $\Omega \cup \Omega_G$ для \mathcal{G} , R , φ поставлены условия Неймана.

Обозначим $\Omega_+ = \{(x, y) : \frac{7}{8} < y < 1, (0 < x < \frac{1}{4}) \cup (\frac{3}{4} < x < 1)\}$. Тогда плотность легирования

$$\rho = \rho(x, y) = \begin{cases} 1, (x, y) \in \bar{\Omega}_+, \\ \delta (= \frac{P}{N^+} = -10^{-3}), (x, y) \in \bar{\Omega} \setminus \bar{\Omega}_+. \end{cases} \quad (8)$$

Непосредственному применению численного алгоритма, разработанного в [6], к поиску приближенных решений краевой задачи для определения функций \mathcal{G} , R , φ в области Ω мешает только одно обстоятельство: условия склейки (7), связывающие потенциал φ с потенциалом Φ .

Пусть l_y – длина наноканала Ω_G . В работе [8] доказано, что если отношение $\varepsilon = l_x / l_y$ мало, то краевую задачу для потенциала φ в области Ω можно доопределить условием:

$$\varphi(x, 1) + 3l_y \varphi_y(x, 1) = G, (x, 1) \in S.$$

2. Описание вычислительных алгоритмов

Вычислительная модель, предложенная в [5, 6], основана на применении *нестационарных регуляризаций*, *метода прямых* и *метода установления* (см. Замечание 2.1). Данная модель использует *интерполяционные полиномы* (см. [7]) и *сплайн-коллокации* для аппроксимации производных неизвестной функции и *метод матричной прогонки* для организации счёта. Несомненным достоинством данной модели является то, что она хорошо согласуется с идеей так называемых алгоритмов без насыщения (см. [7]), т.е. в принципе автоматически учитывает априорную гладкость решения исходной задачи. Но, тем не менее, в некоторых случаях предлагаемая модель проигрывает стандартным методам решения краевых задач, в частности методу продольно-поперечной прогонки (см. по этому поводу раздел 4).

Метод продольно-поперечной прогонки (п.п.п.) нередко используется при поиске численных решений различных нестационарных краевых задач (см. [9]). В связи с этим сравнение эффективности и быстродействия этого метода и вычислительной схемы, предложенной в [5, 6], представляет определённый интерес. Метод п.п.п., основанный на использовании разностных отношений, с помощью которых аппроксимируются производные неизвестных функций, мы будем применять в совокупности с методом прямых, регуляризацией и методом установления. При этом введём пространственную и временную разностные сетки. Переход от предыдущего временного слоя к следующему осуществляется в два этапа:

а) При *продольной прогонке*, идя от левой границы Ω к правой вдоль прямых $y = y_k$, $k = 0, \dots, K$, разностной сетки, по рекуррентным формулам вычисляются значения прогоночных коэффициентов. Затем разрешается правое граничное условие и в обратном ходе (справа налево) с использованием найденных значений прогоночных коэффициентов вычисляются неизвестные функции.

б) В ходе *поперечной прогонки*, двигаясь от нижней границы области Ω к верхней вдоль прямых разностной сетки $x = x_j$, $j = 1, \dots, N$, находим значения прогоночных коэффициентов, используя которые после учёта условия на верхней границе получаем значения неизвестных функций.

Замечание 2.1. Обе вычислительные схемы, которые мы рассмотрим в данной работе, основаны на использовании метода установления. Общая идея этого метода (см. [7]) состоит в том, чтобы провести в нестационарных уравнениях дискретизацию по времени и осуществлять счёт до тех

пор, пока решение не "установится". Иначе говоря, алгоритм, использующий данный метод, будет остановлен только тогда, когда норма разности решений на следующем и предыдущем временных слоях станет близкой к нулю.

3. Реализация алгоритмов

На каждом временном слое в процессе установления (как при использовании п.п.п., так и при реализации алгоритма, основанного на вычислительной модели из [5,6]) необходимо последовательно решать три краевые задачи для регуляризованных уравнений Пуассона (4)–(6). Таким образом, при конструировании алгоритмов прежде всего мы проводим регуляризацию уравнений (4)–(6): в случае применения п.п.п. – это параболическая регуляризация (см. формулу [8]). При использовании технологии, предложенной в [5, 6], мы можем задействовать любую из двух нестационарных регуляризаций – параболическую или Соболевскую.

Для осуществления расчётов необходимо определить начальные данные и запустить цикл метода установления. Вычислительная схема в этом случае представлена на рис. 2а.

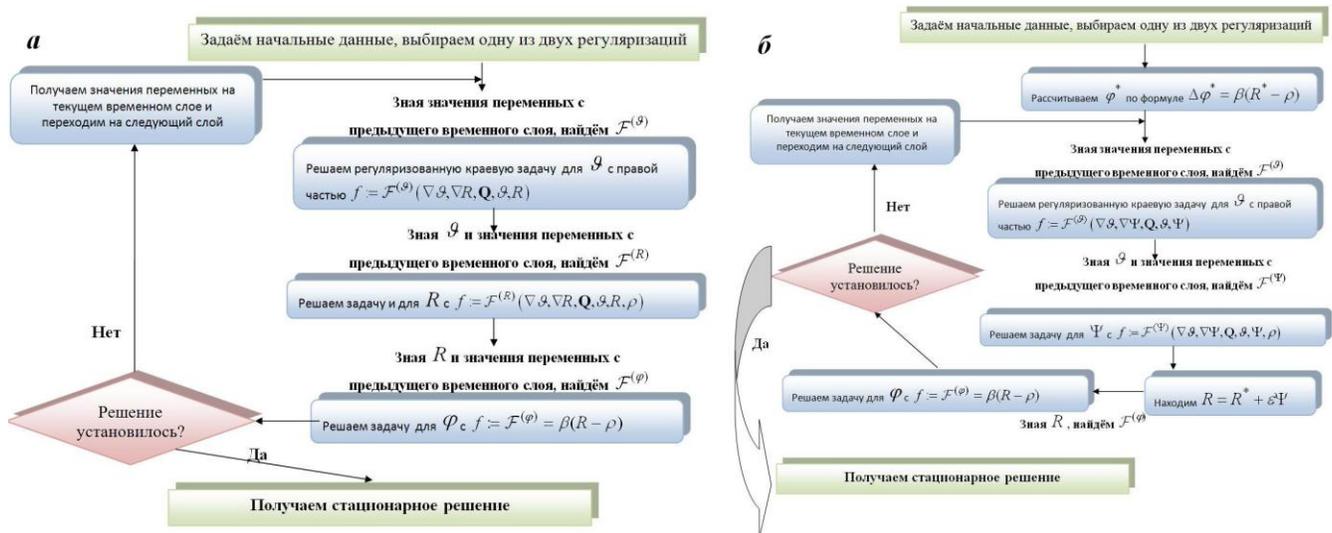


Рис. 2. Схемы вычислительных алгоритмов: а – исходного алгоритма; б – алгоритма, использующего вспомогательные функции

Предлагаемая вычислительная схема (см. рис. 2а) была реализована с помощью языков программирования Delphi 6 (среда Object Pascal) и Java. Написанной программе в качестве входных параметров передавались следующие (в скобках указаны их значения): V_G – напряжение на затворе gate (0,36 – 1 V), V_D – напряжение на стоке (0,36 – 1 V), B – напряжение на корпусе (-0,64 – 0 V), δ – безразмерная плотность легирования в области $\Omega \setminus \Omega_+$ (-0,001 – 0,8), l_y – ширина наноканала (1 – 20 nm), N – количество узлов сетки по оси x (20 – 40), K – количество узлов сетки по оси y (20 – 40), Δ – шаг сетки по времени (0,0001–0,1).

Алгоритм прекращает работу, если достигнута необходимая точность ε_1 (см. Замечание 2.1):

$$\sum_{j=0}^N \sum_{k=0}^K (|R_{jk}^{n+1} - R_{jk}^n| + |\varphi_{jk}^{n+1} - \varphi_{jk}^n| + |\mathcal{Q}_{jk}^{n+1} - \mathcal{Q}_{jk}^n|) \leq \varepsilon_1.$$

Замечание 3.1. Сразу отметим, что при проведении расчётов мы стремились получить стационарное решение задачи о переносе заряда в транзисторе MOSFET при следующих значениях параметров (далее мы будем называть эти значения "желаемым набором параметров"):

$$V_D = 1V, V_G = 1V, B = -25,328, \delta = -0,001, l_y = 20nm, \epsilon_1 = 10^{-5}.$$

Данные значения представляют собой некоторый стандартный тест (см., например: [4]) и часто используются исследователями при организации физических и численных экспериментов.

При проведении расчётов с использованием описанных техник нам удалось получить стационарные распределения энергии E , потенциала φ и плотности электронов R (рис. 3, 4):

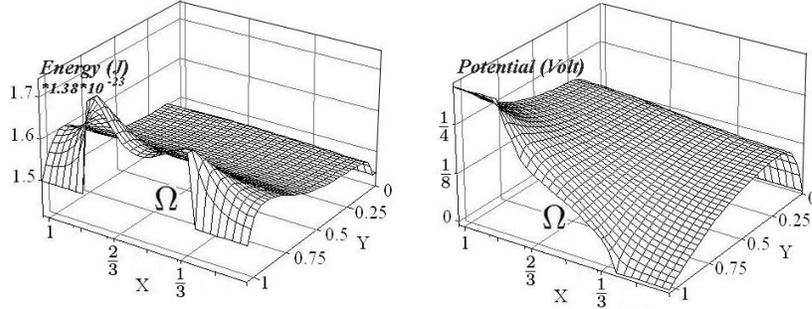


Рис. 3. Результаты расчётов с использованием вычислительной модели из [5,6] с параметрами $V_D = 0,36V, V_G = 0,36V, B = 0, \delta = 0,8, l_y = 20nm, N = 40, K = 30, \epsilon_1 = 10^{-5}$

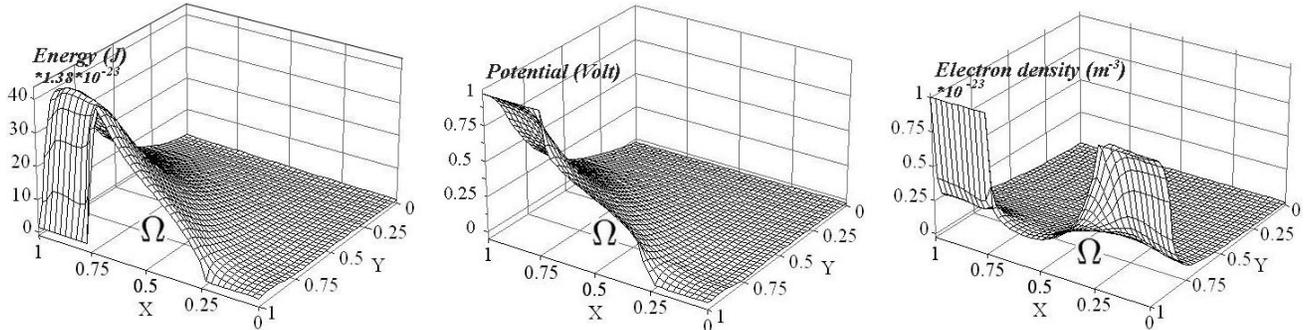


Рис. 4. Результаты расчётов с применением п.п.п. с параметрами $V_D = 1V, V_G = 1V, B = -1, \delta = -0,001, l_y = 20nm, N = 40, K = 40, \epsilon_1 = 10^{-5}$

Найти же решение для желаемого набора параметров (см. Замечание 3.1) не получалось, поскольку метод установления в этом случае не сходил. Данная неприятность, вызванная быстрым ростом значений переменных в процессе установления, переполнением буфера и остановкой работы программы, побудила нас преобразовать уравнения (4)–(6). С этой целью мы ввели новые вспомогательные переменные $\varphi^*(x, y)$, $\varphi(x, y)$, $R^*(y)$, $\Psi(x, y)$, такие что $\varphi = \varphi^* + \varphi$, $\Delta\varphi^* = \beta(R^* - \rho)$, граничные условия для φ^* совпадают с условиями для φ , $\varphi(x, y)$ – решение задачи $\Delta\varphi = \beta(R - R^*)$ с однородными соотношениями на границе.

В расчётах мы использовали два вида вспомогательной функции $R^*(y)$:

$$1) R^* = R^*(y) = 3y^2 - 2y^3, \quad 2) R^* = R^*(y) = \begin{cases} 0, & 0 \leq y \leq \kappa, \\ -3\left(\frac{y-\kappa}{1-\kappa}\right)^4 + 4\left(\frac{y-\kappa}{1-\kappa}\right)^3, & \kappa < y \leq 1 \end{cases} \quad (9)$$

Здесь $\kappa = 7/8 - \epsilon_{small}$, где $0 < \epsilon_{small} < 7/8$.

Вспомогательную функцию $\Psi(x, y)$ определим с помощью соотношения $\Psi = \Delta\varphi = \beta(R - R^*)$. Краевая задача для Ψ была поставлена исходя из условий для R .

Схема алгоритма, полученного в результате преобразований, приведена на рис. 2б.

При проведении расчётов по описанной схеме с применением метода п.п.п. и задании вспомогательной функции $R^*(y)$ вторым способом (см. (9)) нам удалось получить стационарное

решение для желаемого набора параметров (см. Замечание 3.1). Найденные распределения плотности электронов, энергии электронов и электрического потенциала приведены на рис. 5.

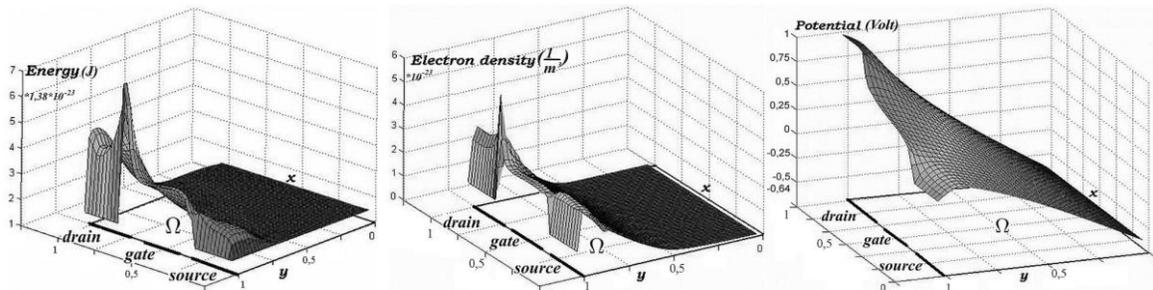


Рис. 5. Результаты расчётов с применением п.п.п. с параметрами $V_D = 1V$, $V_G = 1V$, $B = -25,328$,

$$\delta = -0,001, l_y = 20 \text{ nm}, N = 40, K = 40, \varepsilon_1 = 10^{-5}$$

Использование же алгоритма, основанного на применении вычислительной модели [5,6], не позволяет получить решение для таких значений параметров. Однако в случае, когда параметры принимают иные значения (см. рис. 3), метод установления в совокупности с техникой, описанной в [5,6], сходится значительно быстрее, чем в случае применения п.п.п.

Заключение

В данной работе описаны два эффективных алгоритма поиска стационарных решений задачи о переносе заряда в транзисторе MOSFET. Мы надеемся, что полученные нами результаты стимулируют дальнейшее развитие и совершенствование вычислительных алгоритмов для задач физики полупроводников (и это будет полезным для создания реальных устройств), а предложенные нами методы найдут своё применение при поиске численных решений различных прикладных задач за пределами полупроводниковой тематики.

Список литературы

1. Anile A.M., Romano V. Non parabolic band transport in semiconductors: closure of the moment equations // Cont. Mech. Thermodyn. 1999. Vol. 11. P. 307–325.
2. Blokhin A.M., Bushmanov R.S., Romano V. Asymptotic stability of the equilibrium state for the hydrodynamical model of charge transport in semiconductors based on the maximum entropy principle // Int. J. Engineering Science. 2004. Vol. 42(8–9). P. 915–934.
3. Blokhin A. M., Bushmanov R. S., Rudometova A. S., Romano V. Linear asymptotic stability of the equilibrium state for the 2D MEP hydrodynamical model of charge transport in semiconductors // Nonlinear Analysis. 2006. Vol. 65. P. 1018–1038.
4. Romano V. 2D Numerical Simulation of the MEP Energy-Transport Model with a Finite Difference Scheme // J. Comp. Phys. 2007. V. 221. P. 439–468.
5. Blokhin A.M., Ibragimova A.S. Numerical method for 2D Simulation of a Silicon MESFET with a Hydrodynamical Model Based on the Maximum Entropy Principle // SIAM J.Sci. Comput. 2009. Vol. 31, Issue 3. P. 2015–2046.
6. Блохин А.М., Ибрагимова А.С., Семисалов Б.В. Конструирование вычислительного алгоритма для системы моментных уравнений, описывающих перенос заряда в полупроводниках // Мат. моделирование. 2009. Т. 21. № 4. С.15–34.
7. Бабенко К.И. Основы численного анализа. Москва; Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2002.
8. Блохин А.М., Ибрагимова А.С. К вопросу о вычислении электрического потенциала для 2D кремниевого транзистора с наноканалом из оксида кремния // Мат. моделирование. 2010. Т. 22. № 9. С. 79–94.
9. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967. С. 197.