

Н. И. ГОРБЕНКО
(Новосибирск)

ППП ЭФЕС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МДП-СТРУКТУР

Введение. В статье приводится описание пакета прикладных программ (ППП) ЭФЕС для моделирования статических режимов многоэлементных МДП-структур в двумерном приближении [1].

Рассматриваются приборы с зарядовой связью, представляющие собой совокупность электродов с разными потенциалами, соединенными между собой периодическим образом и включающие подобласти с диэлектриками и полупроводниками различного типа проводимости и различной степени легирования. Расчет потенциалов проводится конечно-разностными методами с использованием итерационных алгоритмов для решения нелинейных систем алгебраических уравнений, возникающих при аппроксимации краевых задач.

Пакет предназначен для расчета полей в областях с границей произвольного вида, представимого с помощью отрезков кривых второго порядка. На участках границы могут задаваться краевые условия 1-го, 2-го, 3-го родов, условия периодичности или условия сопряжения на поверхностях раздела сред с различными диэлектрическими свойствами. ППП ЭФЕС включает входной язык ВК для описания исходных данных, базу данных и системные средства для обработки и визуализации результатов счета. Пакет имеет модульную структуру и написан на алгоритмическом языке Фортран-IV с некоторым использованием Ассемблера ЕС ЭВМ.

Математическая постановка и алгоритмы решения. Потенциал электрического поля φ — решение уравнения Пуассона

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = - \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_n} \rho \quad (1)$$

в ограниченной области Q с границей Γ . В (1) $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м; ϵ_n — относительная диэлектрическая проницаемость среды (кусочно-постоянная функция координат); ρ — объемная плотность зарядов в полупроводнике (заданная функция координат или определяемая из решения задачи в зависимости от распределения потенциала).

Фактически ППП ЭФЕС рассчитан на решение более широкого класса уравнений

$$\frac{1}{x^\alpha} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = - f(x, y, \varphi), \quad (1a)$$

переходящих в (1) при $\alpha = 0$.

Граница Γ расчетной области предполагается состоящей из кусочно-гладких участков Γ_i , на каждом из которых задается краевое условие одного вида.

На поверхности металлических электродов (их совокупность обозначим S_1) задаются условия 1-го рода:

$$\varphi|_{\Gamma_i} = g_i, \quad \Gamma_i \in S_1, \quad (2)$$

где g_i — заданные числа (вообще говоря, пакет программ допускает постановку граничных условий 1-го рода с заданием g_i как функции координат). На удаленной от электродов границе подложки $\varphi = 0$. На границе раздела сред с различными относительными диэлектрическими постоянными ϵ_+ , ϵ_- выполняются условия сопряжения (непрерывность потен-

циала и скачок нормальной производной):

$$\begin{aligned} \Phi \Big|_{\Gamma_i^+} - \Phi \Big|_{\Gamma_i^-} &= 0; \\ \varepsilon_+ \frac{\partial \Phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma^+} - \varepsilon_- \frac{\partial \Phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma^-} &= \frac{1}{\varepsilon_0} \sigma_i, \end{aligned} \quad (3)$$

где σ — поверхностная плотность зарядов, заданная или зависящая от потенциала. Если МДП-структура имеет периодический характер в направлении оси x и длину периода L , то при некотором $x = a$ (вообще говоря, произвольном) ставится граничное условие периодичности

$$\Phi|_{x=a} = \Phi|_{x=a+L}. \quad (4)$$

В этом случае плоскости $x = a$ и $x = a + L$ включаются в границу области G . Для замыкания расчетной области G могут вводиться дополнительные граничные отрезки Γ_i , на которых из физических соображений ставятся краевые условия или 1-го рода вида (2), или 2-го, или 3-го рода (соответствующие совокупности Γ_i обозначим через S_2 и S_3):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma_i} = \gamma_i, \quad \Gamma_i \in S_2; \quad (5)$$

$$\left(\alpha_i \frac{\partial \Phi}{\partial n} + \beta_i \Phi \right) \Big|_{\Gamma_i} = \gamma_i, \quad \Gamma_i \in S_3. \quad (6)$$

Здесь α_i , β_i , γ_i могут быть заданными числами или функциями координат.

Для МДП-структур с поверхностным каналом в объеме полупроводника с диэлектрической проницаемостью ε_s и концентрацией акцепторов N_a распределение плотности неподвижных зарядов подчиняется закону Больцмана:

$$\rho = \rho_0 (e^{-\Phi/V_T} - 1). \quad (7)$$

Здесь $\rho_0 = (qN_a)/\varepsilon_s$; $V_T = (kT)/q$; k — постоянная Больцмана; T — температура; q — элементарный заряд ($q = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл и для $T = 300$ К принимается $V_T = 1/40$).

В III ЭФЭС вместо закона Больцмана используется математическая модель с кусочно-постоянным распределением плотности неподвижных зарядов (приближение полного обеднения): в подобласти полупроводника G_1 с положительным значением потенциала Φ полагается $\rho = -\rho_0$, а в остальной его части G_2 — $\rho = 0$, а также $\Phi = 0$. Поверхность Γ_0 раздела подобластей G_1 и G_2 в этом случае является неизвестной и определяется условиями

$$\Phi \Big|_{\Gamma_0} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0} = 0. \quad (8)$$

Таким образом, получаем так называемую задачу со свободной границей.

На границе раздела полупроводник — диэлектрик Γ_{ng} находится положительный поверхностный неподвижный заряд с плотностью

$$\sigma_s = qQ_s, \quad (9)$$

где Q_s — заданное число или функция координат. Кроме того, вблизи этой границы со стороны полупроводника имеется сигнальный заряд подвижных неосновных носителей. Возможны два варианта:

а) сигнальный заряд — подвижный поверхностный заряд с плотностью

$$\sigma_e = -qn_e(x, y), \quad n_e = n_{0e} e^{\frac{\Phi_{ng}}{V_T}}, \quad (10)$$

здесь Φ_{ng} — распределение потенциала на Γ_{ng} ; константа n_{0e} определяется из условия

$$n_{0e} L_2 \int_a^{a+L} e^{\frac{\Phi_{ng}}{V_T}} dx = Q_{ex} \quad (11)$$

где Q_e — заданная величина сигнального заряда в потенциальной яме; L_2 — длина ячейки МДП-структуры в «поперечном» сечении; суммарная плотность поверхностного заряда на границе раздела полупроводник — диэлектрик в этом случае равна

$$\sigma = q(Q_s - n_e); \quad (12)$$

б) сигнальный заряд — подвижный объемный заряд плотности

$$\rho_e(x, y) = qn_{oe} e^{\frac{\varphi(x, y)}{V_T}}, \quad (13)$$

где константа n_{oe} определяется из уравнения

$$n_{oe} \int_{G_1} e^{\frac{\varphi(x, y)}{V_T}} dx dy = Q_e. \quad (14)$$

Предполагается, что граница G_{ng} раздела полупроводник — диэлектрик — плоскость $y = \text{const}$, а суммарная плотность заряда в подложке при этом равна $\rho = \rho_{cb} + \rho_e$.

При наличии в МДП-структуре стоп-канала, выполненного на основе стоп-диффузии (СД), распределение плотности объемного заряда в этой области ρ_{cd} определяется законом Больцмана

$$\rho_{cd} = \rho_0^+ (e^{-\varphi/V_T} - 1), \quad (15)$$

где $\rho_0^+ = \frac{qN_a^+}{\epsilon_S}$; N_a^+ — концентрация акцепторов в области стоп-диффузии.

Предполагается, что СД-область имеет тот же тип проводимости и диэлектрические свойства, что и подложка, а отличается только более высокой степенью легирования, т. е. $N_a^+ > N_a$. Фактически при этом в СД-области используется модель, аналогично как в подложке, с кусочно-постоянной плотностью заряда: в подобласти подложки с положительным значением потенциала полагается $\rho_{cd} = \rho_0^+$, а в остальной — $\rho_{cd} = 0$. «Свободная граница» определяется также из условий (8).

МДП-структуры с объемным (скрытым) каналом характеризуются наличием вблизи диэлектрика слоя полупроводника (инверсный слой), тип проводимости которого противоположен типу проводимости подложки. Зарядовые пакеты неосновных носителей в такой структуре расположены в объеме полупроводника.

Концентрация неподвижных зарядов ρ_{cb} в инверсном слое (соответствующую подобласть обозначим через G_u) может задаваться тремя способами:

1а) однородное распределение примеси —

$$\rho_{cb}(x, y) = qN_d, (x, y) \in G_u, \quad (16a)$$

где N_d — концентрация доноров в инверсном слое;

1б) распределение примеси в инверсном слое по закону Гаусса —

$$\rho_{cb} = qN_d e^{-\frac{(y-y_0)^2}{h_d^2}}, \quad (16b)$$

здесь h_d — толщина инверсного слоя, который предполагается плоским;

1в) распределение примеси в инверсном слое постоянно вдоль оси y , но меняется вдоль x —

$$\rho_{cb} = qN_d n_u(x), \quad (16b)$$

где $n_u(x)$ — заданная функция от x .

При наличии сигнального заряда в МДП-структуре со скрытым каналом предполагается, что он не выходит за границу инверсного слоя,

а распределение плотности объемного заряда n_e в этом случае определяется законом Больцмана:

$$\rho_e(x, y) = q n_e e^{\frac{\varphi(x, y)}{V T}}, \quad (x, y) \in G_u, \quad (17)$$

где константа n_e находится из условия

$$\int_{G_u} \rho(x, y) dx dy = Q_e. \quad (18)$$

Суммарная плотность заряда в инверсном слое

$$\rho = \rho_{св} + \rho_e. \quad (19)$$

Рассматриваются также МДП-структуры со скрытым каналом, включающие два соприкасающихся инверсных слоя с разными толщинами d_1, d_2 и концентрациями доноров N_{d1}, N_{d2} . Распределение неподвижных зарядов в каждом из них при этом рассчитывается по формулам, аналогичным (16а) — (16в).

По найденному распределению потенциала в МДП-структуре при необходимости проверяется условие пробоя

$$I = \int_{l_H}^{l_K} \alpha \exp \left[\int_{l_H}^{l_K} (\alpha - \beta) dl \right] dl \geq 1, \quad (20)$$

где l — криволинейная координата вдоль некоторой силовой линии поля; l_1 и l_2 — координаты каких-то ее двух точек. Постоянные α и β есть коэффициенты ударной ионизации, определяемые формулами

$$\alpha = \xi_1 \exp(-\gamma_1/E), \quad \beta = \xi_2 \exp(-\gamma_2/E), \quad (21)$$

где E — модуль напряженности электрического поля в точке; $\xi_1, \xi_2, \gamma_1, \gamma_2$ — некоторые заданные константы.

Основной алгоритмической проблемой при численной реализации рассматриваемого класса задач является решение уравнения Пуассона для различных конфигураций границ расчетной области и краевых условий с учетом нелинейности краевой задачи. В пакете реализован метод конечных разностей с использованием прямоугольных сеток с кусочно-постоянными шагами, для решения систем разностных уравнений применены итерационные методы. Предполагается, что заданные функции и форма границы удовлетворяют требованиям, обеспечивающим существование и единственность решения, а также сходимость приближенных решений к точному.

Основные алгоритмические особенности реализации разностных методов решения краевых задач для уравнения Пуассона описаны в [2]. При этом выделены следующие основные пункты: а) анализ геометрии области; б) вычисление коэффициентов конечно-разностной аппроксимации с учетом краевых условий; в) решение полученной системы сеточных уравнений; г) вычисление различных характеристик решения.

На расчетную область G наносится конечно-разностная сетка и проводится пятиточечная конечно-разностная аппроксимация задачи (1) — (6). При этом разностные уравнения строятся только для внутренних узлов, причем для околоразностных узлов при аппроксимации используются краевые условия. Таким образом, в результате дискретизации краевой задачи получаем систему линейных алгебраических уравнений, в которой число уравнений равно числу неизвестных и числу внутренних узлов

$$AU = g,$$

где $A = \{a_{kl}\}$, $U = \{U_k\}$, $g = \{g_k\}$, $k, l = 1, \dots, M$ — разностный оператор и сеточные функции с компонентами U_k, g_k , соответствующие k -му узлу сетки (M — их общее количество).

При решении задачи со свободной границей, на которой выполняется условие (8), применяется итерационный метод последовательной верхней релаксации с проекцией на ограничение. Если известно приближение U^n , то очередная итерация для k -го узла вычисляется по формулам

$$r_k^{n+1} = g_k - \sum_{l=1}^{k-1} a_{k,l} U_l^{n+1} - \sum_{l=k}^M a_{k,l} U_l^n; \quad (22)$$

$$U_k^{n+1} = \max \{0, U_k^n + \omega r_k^{n+1} / a_{k,k}\},$$

где $\omega \in (0, 2)$ — итерационный параметр. В [3] доказана сходимость этого процесса в предположении симметричности и положительной определенности матрицы A .

При расчете МДП-структур с наличием подвижного сигнального заряда независимо от того, поверхностный он или объемный, система разностных уравнений нелинейна. Для ее решения применяется метод последовательной верхней релаксации с некоторой модификацией, учитывающей необходимость одновременного определения границы зоны обеднения, с учетом зависимости правой части от решения.

Отметим, что потенциал определяет только плотность подвижного сигнального заряда. Поэтому в (22) g_k зависит также от номера итераций

$$g_k^n = \rho_{св} + qn_e^n e^{-\frac{U_k^n}{V_T}}. \quad (23)$$

Константа n_e^n пересчитывается на каждой итерации во всех узлах из условий (11), (14) или (18), которые формально записываются единым образом:

$$qn_e^n \int_{\Omega} e^{\left(\frac{U^n}{V_T}\right)} d\Omega = Q_e. \quad (24)$$

Вычисление интегралов в (24) по поверхности границы полупроводник — диэлектрик в случае (11) и по объему подложки или инверсных слоев для остальных случаев проводится с помощью квадратурных формул, использующих кусочно-линейную аппроксимацию потенциала.

Описание ППП ЭФЭС. В состав ППП ЭФЭС входят следующие компоненты: а) транслятор с входного языка; б) набор модулей, реализующих численные алгоритмы; в) набор модулей, реализующих обработку и вывод результатов счета; г) база данных.

Структура пакета может быть представлена в виде блок-схемы (рис. 1), где альтернативность выполнения работ показана с помощью параллельного соединения блоков, а последовательность выполнения — в виде последовательного соединения.

Работа пакета начинается с ввода входной информации, написанной на языке ВК (с перфокарт или из базы данных).

Программа-транслятор проводит синтаксический анализ правильности текста исходной информации, вычисляет признаки, определяющие геометрию области и краевые условия, тип поставленной задачи, метод ее решения и способ обработки полученных данных. Во время работы она выдает сообщение об ошибках, если таковые имеются, и, если ошибок нет, переводит исходный текст, заданный в символьном виде на проблемно-ориентированном языке ВК, во внутреннюю («понятную» модулям пакета) структуру данных, состоящую из набора массивов и переменных.

На основе информации, полученной в результате работы программы-транслятора ВК, выполняется геометрическая обработка, т. е. кодирование узлов сетки в зависимости от их расположения в области, а затем для околограничных узлов вычисляются и запоминаются коэффициенты конечно-разностной аппроксимации. Затем происходит обращение к одному из итерационных модулей пакета, который решает сформулированную систему уравнений. Эти модули в совокупности обеспечивают автоматическое построение разностных уравнений и их решение для практически произвольных конфигураций МДП-структур.

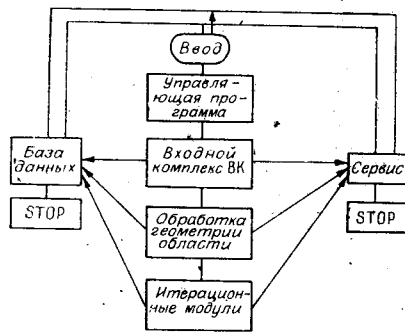


Рис. 1

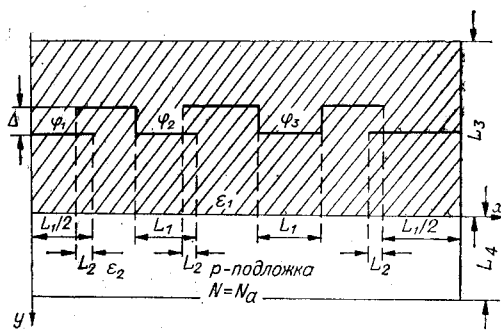


Рис. 2

Оперативная обработка выходной информации осуществляется сервисной системой пакета, которая позволяет автоматизировать расчет и построение эквипотенциалей, линий равно модуля напряженности, силовых линий, векторного поля напряженности, графики различных функциональных зависимостей. Система дает возможность получить выходной документ в традиционном числовом виде с текстовыми комментариями, в виде рисунков и графиков на АЦПУ или графопостроителе. Система может работать совместно с пакетом или автономно, используя исходную информацию из базы данных. Работа сервисного комплекса управляется директивами входного языка.

Входная информация и результаты решения полевых задач хранятся в базе данных, работа с которой также проводится с помощью входного языка ВК. Вся информация в базе данных хранится в нескольких файлах в виде набора записей. Информация о структуре данных в базе отсутствует. Она полностью определяется программами, осуществляющими ввод-вывод. Предусмотрены следующие операции манипулирования с записями: поиск, модификация (включая замену одной записи другой полностью или частично), исключение, включение новых записей, получение справочной информации о количестве и состоянии информации. База может быть организована на магнитных дисках или лентах.

Пример использования пакета. В качестве примера приведем описание поперечного сечения ячейки трехфазного прибора с зарядовой связью из поли-Si с перекрывающимися электродами (рис. 2).

При расчете использовались следующие обозначения исходных данных: $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 3,9$, $\epsilon_3 = 11,7$; $L_1 = 5$, $L_2 = 2$, $L_3 = 5$, $L_4 = 10$ мкм; $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = 2$, $\varphi_3 = 7$ В, $N_a = 10^{15}$ см⁻³.

Задание исходной информации на языке ВК для данной структуры в ППП ЭФЕС выглядит следующим образом:

ТОЧКИ: 1(0, 0); 2(30.51, 0); 3(30.51, -10); 4(0, -10); 5(0, 5);
 6(30.51, 5); 7(0, 0.17); 8(5, 0.17); 9(3, 0.34); 10(5, 17, 0.34);
 11(5.17, 0.17); 12(15.17, 0.17); 13(13.17, 0.34); 14(15.34, 0.34);
 15(15.34, 0.17); 16(25.34, 0.17); 17(25.34, 0.34); 18(27.34, 0.34);
 19(25.51, 0.17); 20(30.51, 0.17); 21(0, 0.51); 22(30.51, 0.51);
 ГРА: 1: $U = 0$; 2: $U = 2$; 3: $U = 7$; 4: $3.9 * U' = 11.7 * U'$; 5: $U' = 3.9 * U'$;
 ОТР: 1 [7, 8]; [19, 20]; (5, 6); (4, 3); 2(9, 10, 11, 12);
 3[13, 14, 15, 16, 17, 18]; 4(1, 2); 5(21, 22);
 ХСЕ: 0(5) 4.95(15) 5.22(5) 15.12(15) 15.39(5) 25.29(15) 25.55(5) 30.51;
 YCE: -10(30) 0(10) 0.16(10) 0.35(10) 0.51(10) 5;
 ТИП: SYM = 0;

Время счета на ЕС 1061 составляло 2,56 мин, при этом количество узлов сеточной области 4686, а относительная точность, с которой определялось приближенное решение, равно 10^{-3} .

ЛИТЕРАТУРА

1. Зи С. Физика полупроводниковых приборов.— М.: Мир, т. 1.
2. Горбенко Н. И., Катешов В. А., Майоров Ю. К. ППП ЭФЕС (автоматизация реше-

УДК 537.222.2

Г. В. ГАДИЯК, И. В. ТРАВКОВ

(Новосибирск)

ИНЖЕКЦИЯ И ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В МНОП-СТРУКТУРАХ

В последнее время значительное внимание уделяется физическим исследованиям проводимости диэлектриков. В основе всех существующих моделей лежит представление о движении носителей (электронов и дырок) с дрейфовой скоростью под действием электрического поля по соответствующей зоне с последующим их захватом на систему дискретных уровней в запрещенной зоне. Локализованные носители могут активироваться с ловушек либо термически, либо туннелированием. Как показывают имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные, экспоненциальная зависимость проводимости диэлектриков от напряженности электрического поля E в достаточно широкой области параметров (полей и температур) обусловлена эффектом Френкеля — Пула — понижением потенциала ионизации ловушек [1].

При типичной концентрации центров захвата $N_t \sim 5 \cdot 10^{18}$ см⁻³ поле накопленного на ловушках пространственного заряда $\sim 2 \cdot 10^6$ В/см становится сравнимым с внешним полем. В связи с необходимостью учета влияния указанного эффекта на проводимость диэлектрика актуально использование численных методов (ввиду сильной нелинейности задачи) для моделирования переноса заряда в МНОП-структурах.

В настоящей работе использовалась монополярная модель переноса электронов в зоне проводимости с захватом на ловушки и последующей их ионизацией, предложенная в [2]:

$$\frac{\partial n_c}{\partial t} + v_d \frac{\partial n_c}{\partial x} = -\sigma_t n_c v_d (N_t - n_t) + v n_t \exp\left(-\frac{\Phi_t - \beta\sqrt{E}}{kT}\right) + I_0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = \sigma_t n_c v_d (N_t - n_t) - v n_t \exp\left(-\frac{\Phi_t - \beta\sqrt{E}}{kT}\right); \quad (2)$$

$$\Delta\varphi = \frac{4\pi q}{\varepsilon_N \varepsilon_0} n_t; \quad E = -\frac{\partial\varphi}{\partial x}; \quad (3)$$

$$I_0 = J_{0x} E_{0x}^2 P_{0x} P_N \Theta(x); \quad \Theta(x) = \frac{\exp(-\alpha_0(\Phi_0 - \Phi_1 - \varphi(x)))}{\int_0^{d_N} \exp(-\alpha_0(\Phi_0 - \Phi_1 - \varphi(x))) dx};$$

$$P_{0x} = \exp\left(-\xi \frac{\Phi_0^{3/2} - (\Phi_0 - \varphi(0))^{3/2}}{E_{0x}}\right); \quad P_N \Rightarrow \exp\left(-\xi \frac{(\Phi_0 - \Phi_1 - \varphi(0))^{3/2}}{E_0}\right);$$