

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
МИКРОЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ

УДК 621.382.82.001

А. И. АДАМСОНЕ, Б. С. ПОЛЬСКИЙ

(Рига)

ОБ ОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ МЕТОДА ГУММЕЛЯ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ
МОДЕЛИРОВАНИЯ КОМПОНЕНТ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ

Для моделирования стационарных процессов в компонентах интегральных схем на основе численного решения фундаментальной системы уравнений физики полупроводников широко используется метод Гуммеля [1]. В этом методе, как известно, попеременно итерировуются уравнения неразрывности для носителей заряда и линеаризованное уравнение Пуассона до получения самосогласованного решения. Одна из проблем, которая возникает при реализации этого метода в многомерном случае, — это разработка эффективных итерационных алгоритмов для решения разностных аналогов уравнений неразрывности [2], поскольку последние крайне плохо обусловлены. Уравнения неразрывности для носителей заряда можно записать в переменных n и p (концентрации электронов и дырок) либо в переменных $v = \exp(-\varphi_n)$ и $w = \exp(\varphi_p)$, где $\varphi_n = \varphi - \ln(n/n_{ie})$; $\varphi_p = \varphi + \ln(p/n_{ie})$ (φ_n, φ_p — квазипотенциалы Ферми; φ — потенциал электрического поля; n_{ie} — эффективная собственная концентрация носителей заряда), либо в переменных φ_n и φ_p . Использование тех или иных переменных имеет свои достоинства и недостатки. В переменных n и p матрицы соответствующих систем разностных уравнений несимметричны, что не позволяет применять эффективные итерационные методы решения эллиптических разностных уравнений, разработанные для систем с симметричной положительно определенной матрицей [3, 4]. В переменных v и w соответствующие матрицы симметричны, однако в этом случае эти матрицы очень плохо обусловлены, поскольку коэффициент при старшей производной есть величина порядка $\exp(\varphi)$, а φ сильно меняется по пространственным переменным. Кроме того, этот подход неприменим, когда на структуру поданы обратные смещения, большие 4,5 В (170 в безразмерных единицах), поскольку происходит переполнение разрядной сетки ЭВМ. На практике при использовании итерационного метода ICCG [5] уже при напряжениях около 2 В наблюдается неустойчивость вычислительного процесса. Если же используются переменные φ_n и φ_p , то обусловленность системы разностных уравнений не столь велика, как в предыдущем случае, поскольку коэффициент при старшей производной меняется как n или p . Недостаток этого подхода состоит в том, что уравнения неразрывности в этом случае являются сильно нелинейными относительно φ_n и φ_p . Линеаризация по Ньютону приводит к системе уравнений с несимметричной матрицей.

В настоящей работе, учитывая достоинства и недостатки перечисленных выше подходов, предлагается модификация метода Гуммеля, которая заключается в двухэтапном решении каждого из уравнений неразрывности. На первом этапе уравнения неразрывности достаточно грубо решаются в переменных n и p . Решение определяется методом Булеева

[6]. Найденные промежуточные значения $n^{l+1/2}$ и $p^{l+1/2}$ используются для определения начальных приближений $\varphi_n^{l+1/2}$ и $\varphi_p^{l+1/2}$. После чего в окрестности $\varphi_n^{l+1/2}$ и $\varphi_p^{l+1/2}$ делается специальная линеаризация уравнений неразрывности, в результате которой получаются линейные системы разностных уравнений для определения φ_n^{l+1} и φ_p^{l+1} с симметричными матрицами. Эти системы уравнений решаются методом ICCG.

Рассмотрим фундаментальную систему уравнений:

$$\operatorname{div} \bar{J}_n = R(p, n); \quad (1)$$

Обозначения такие же, как в [2]. В неравномерной сетке с шагами h_i ($i = 1, 2, \dots, M1$), r_j ($j = 1, 2, \dots, M2$) аппроксимируем (1) — (3) разностной схемой

$$\Lambda_n(\varphi) n = R(p, n); \quad (6)$$

$$\Lambda_p(\varphi) p = R(p, n); \quad (7)$$

$$\Delta^{hr} \varphi = n - p - N. \quad (8)$$

Выражения для разностных операторов Λ_n , Λ_p и Δ^{hr} приведены в [2]. Отметим, что при построении Λ_n и Λ_p использованы аппроксимации Шарфеттера — Гуммеля [7] для (4) и (5). Метод Гуммеля для решения нелинейной системы уравнений (6) — (8) имеет следующий вид:

$$\Lambda_n(\varphi^l) n^{l+1} = R(p^l, n^l); \quad (9)$$

$$\Lambda_p(\varphi^l) p^{l+1} = R(p^l, n^l); \quad (10)$$

$$\Delta^{hr} \varphi^{l+1} = n^{l+1} - p^{l+1} - N + (n^{l+1} + p^{l+1})(\varphi^{l+1} - \varphi^l), \quad (11)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$ — номер итерации. Каждая из систем линейных уравнений (9) — (11) решается каким-либо итерационным методом (внутренним). При этом системы (9) и (10) после умножения на $h_i^* r_j^*$ ($h_i^* = (h_i + h_{i+1})/2$, $r_j^* = (r_j + r_{j+1})/2$) и замены переменных $n^{l+1} = n_{ie} \exp(\varphi^l) v^{l+1}$, $p^{l+1} = n_{ie} \exp(-\varphi^l) w^{l+1}$ приводятся к симметричному виду.

Перейдем к построению модифицированного метода. Рассмотрим аппроксимацию Шарфеттера — Гуммеля x -компоненты электронного тока (4), записанную относительно φ_n :

$$(J_{nx})_{i+1/2j} = B_{i+1/2j} \exp(\varphi_{i+1j}) (\exp(-(\varphi_n)_{i+1j}) - \exp(-(\varphi_n)_{ij})), \quad (12)$$

где

$$B_{i+1/2j} = ((\mu_n^*)_{i+1/2j} (\varphi_{i+1j} - \varphi_{ij})) (h_{i+1} (\exp(\varphi_{i+1j} - \varphi_{ij}) - 1))^{-1}; \quad (13)$$

$$(\mu_n^*)_{i+1/2j} = (\mu_n)_{i+1/2j} [(n_{ie})_{i+1j} (n_{ie})_{ij}]^{1/2}.$$

Перепишем (12) в виде

$$(J_{nx})_{i+1/2j} = -B_{i+1/2j} \exp(\varphi_{i+1j} - (\varphi_n)_{i+1j}) (\exp((\varphi_n)_{i+1j} - (\varphi_n)_{ij}) - 1). \quad (14)$$

Будем считать, что нам известно значение потенциала с предыдущей итерации φ^l , а также промежуточное значение $n^{l+1/2}$, полученное из (9) после нескольких итераций по методу Булеева [6]. Тем самым известно и

$$\varphi_n^{l+1/2} = \varphi^l - \ln(n^{l+1/2}/n_{ie}).$$

Тогда в (14) полагаем

$$\exp(\varphi_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1})_{i+1j}) = \exp(\varphi_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1/2})_{i+1j}) = n_{i+1j}^{l+1/2}/(n_{ie})_{i+1j}. \quad (15)$$

Вторую экспоненту из (14) линеаризуем следующим образом:

$$\begin{aligned} \exp((\varphi_n^{l+1})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1})_{ij}) &= \exp((\varphi_n^{l+1/2})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1/2})_{ij}) + \\ &+ \exp((\varphi_n^{l+1/2})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1/2})_{ij}) [((\varphi_n^{l+1})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1})_{ij}) - \\ &- ((\varphi_n^{l+1/2})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1/2})_{ij})]. \end{aligned} \quad (16)$$

Окончательно получаем

$$\begin{aligned} (J_{nx}^{l+1})_{i+1/2j} &= -B_{i+1/2j}^* n_{i+1j}^{l+1/2} \exp((\varphi_n^{l+1/2})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1/2})_{ij}) \times \\ &\times ((\varphi_n^{l+1})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1})_{ij}) + B_{i+1/2j}^* n_{i+1j}^{l+1/2} \exp((\varphi_n^{l+1/2})_{i+1j} - \\ &- (\varphi_n^{l+1/2})_{ij}) ((\varphi_n^{l+1/2})_{i+1j} - (\varphi_n^{l+1/2})_{ij} - 1) + B_{i+1/2j}^* n_{i+1j}^{l+1/2}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $B_{i+1/2j}^* = B_{i+1/2j}/(n_{ie})_{i+1j}$.

Аналогичное выражение находится для $(J_{ny})_{ij+1/2}$. Подставив выражения для плотностей тока в уравнение баланса

$$\begin{aligned} [(J_{nx})_{i+1/2j} - (J_{nx})_{i-1/2j}] r_j^* + [(J_{ny})_{ij+1/2} - (J_{ny})_{ij-1/2}] h_i^* &= \\ = R(p_{ij}, n_{ij}) h_i^* r_j^*, \end{aligned} \quad (18)$$

получим линейную систему уравнений относительно φ_n^{l+1} с симметричной матрицей

$$\Lambda_n^*(\varphi^l, n^{l+1/2}) \varphi_n^{l+1} = Q_n(\varphi^l, n^l, p^l, n^{l+1/2}). \quad (19)$$

Таким образом, модифицированный метод можно записать следующим образом:

$$\Lambda_n(\varphi^l) n^{l+1/2} = R(p^l, n^l); \quad (20)$$

$$\Lambda_n^*(\varphi^l, n^{l+1/2}) \varphi_n^{l+1} = Q_n(\varphi^l, n^l, p^l, n^{l+1/2}); \quad (21)$$

$$n^{l+1} = n_{ie} \exp(\varphi^l - \varphi_n^{l+1}); \quad (22)$$

$$\Lambda_p(\varphi^l) p^{l+1/2} = R(p^l, n^l); \quad (23)$$

$$\Lambda_p^*(\varphi^l, p^{l+1/2}) \varphi_p^{l+1} = Q_p(\varphi^l, n^l, p^l, p^{l+1/2}); \quad (24)$$

$$p^{l+1} = n_{ie} \exp(\varphi_p^{l+1} - \varphi^l); \quad (25)$$

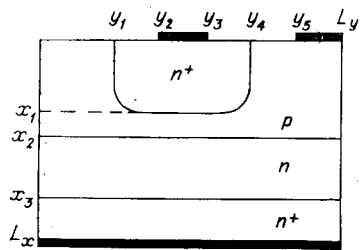
$$\Delta^{hr} \varphi^{l+1} = n^{l+1} - p^{l+1} - N + (n^{l+1} + p^{l+1}) (\varphi^{l+1} - \varphi^l). \quad (26)$$

Линейные системы (20) и (23) решаются методом Булеева [6], а остальные линейные системы уравнений — методом ICCG [5].

Приведем результаты численных экспериментов для транзисторной структуры, изображенной на рисунке. Характерные размеры следующие (мкм): $L_x = 4,5$, $x_1 = 0,7$, $x_2 = 1,5$, $x_3 = 2,5$, $L_y = 45$, $y_1 = 9$, $y_2 = 16,5$, $y_3 = 19,5$, $y_4 = 27$, $y_5 = 41$. Распределение примеси задавалось по аппроксимационным формулам так же, как в [2]. Поверхностная концентрация донорной примеси в эмиттере была $2,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, в коллекторе — 10^{19} см^{-3} . Концентрация доноров в коллекторе $2,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, а поверхностная концентрация акцепторов в базе 10^{18} см^{-3} . Расчеты проводились на неравномерной сетке, содержащей 30×29 узлов. Для окончания итераций контролировалась величина ε_c :

$$\begin{aligned} \varepsilon_c &= \max_{ij} \varepsilon_{ij}; \\ \varepsilon_{ij} &= \begin{cases} \left| \frac{\varphi_{ij}^{l+1} - \varphi_{ij}^l}{\varphi_{ij}^{l+1}} \right|, & \text{если } |\varphi_{ij}^{l+1}| > 1; \\ |\varphi_{ij}^{l+1} - \varphi_{ij}^l|, & \text{если } |\varphi_{ij}^{l+1}| \leq 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (27)$$

Если число итераций не превосходило 10, то требовалось $\varepsilon_c < 10^{-7}$. Если число итераций было больше 10, но меньше 20, то $\varepsilon_c < 10^{-4}$, в противном случае $\varepsilon_c < 10^{-3}$. Такой критерий окончания итераций вызван сле-



дующими соображениями. На низких уровнях инжекции метод Гуммеля обладает практически квадратичной скоростью сходимости, т. е. высокая точность может быть получена после относительно небольшого количества итераций, если при этом достаточно точно решаются уравнения неразрывности. В то же время столь жесткий критерий окончания итераций в этой ситуации

необходим для вычисления малых токов без существенной потери точности. На средних и высоких уровнях инжекции при вычислении токов большой потери точности не происходит, и требование к точности окончания итераций может быть ослаблено.

Для внутренних итераций при решении уравнений неразрывности использовался следующий критерий окончания итераций: либо начальная невязка уменьшалась на 4 порядка, либо относительное изменение неизвестных при двух последующих итерациях не превосходило $\min(10^{-6}, \epsilon_c/50)$. Кроме того, накладывались дополнительные ограничения на максимальное и минимальное число итераций. На первом этапе (работает метод Булеева) разрешалось выполнять от 5 до 15 итераций, а на втором этапе (ICCG) — от 15 до 50 итераций.

В табл. 1 приведены значения токов, протекающих через выводы прибора, полученные модифицированным методом для напряжения $V_{св} = 1$ В, а $V_{вв}$ варьировалось от 0,35 до 0,75 В с шагом 0,05 В. Расчет токов осуществлялся непосредственным интегрированием плотностей токов по контактам прибора. Из результатов, приведенных в табл. 1, видно выполнение закона Кирхгофа даже при очень малых значениях токов. Отметим, что получить баланс по токам при использовании обычного гуммелевского процесса (9)–(11) и метода Булеева для решения уравнений неразрывности (9), (10) не удалось при напряжении $V_{вв}$ меньше чем 0,55 В.

В табл. 2 и 3 приведены вычислительные затраты, потребовавшиеся для этого расчета модифицированным методом (графа 1) и обычным методом (9)–(11) (графа 2), когда уравнения неразрывности (9) и (10) решались относительно переменных v и w методом ICCG. Обозначения в таблицах следующие: IT — число гуммелевских итераций; IT_n , IT_p , IT_ϕ — полное число внутренних итераций, потребовавшихся для нахождения n , p и ϕ ; t — машинное время в секундах (расчеты проводились на ЭВМ ЕС 1060). В табл. 2 приведено также отношение

$$\rho^{l+1}/\rho^l = \frac{\|(n^{l+1} + p^{l+1})(\phi^{l+1} - \phi^l)\|}{\|(n^l + p^l)(\phi^l - \phi^0)\|},$$

$$\|z\| = \left(\sum_{ij} (z_{ij})^2 h_i^* r_j^*\right)^{1/2},$$

которое характеризует уменьшение невязки в линеаризованном уравне-

Таблица 1

$V_{вв}$, В	J_E , А/см	$-J_B$, А/см	$-J_C$, А/см
0,35	1904E-10	32E-10	1872E-10
0,40	1282E-9	12E-9	1270E-9
0,45	8675E-9	55E-9	8620E-9
0,50	5883E-8	31E-8	5852E-8
0,55	3992E-7	19E-7	3973E-7
0,60	2704E-6	12E-6	2691E-6
0,65	1800E-5	80E-6	1292E-5
0,70	1087E-4	51E-5	1082E-4
0,75	4724E-4	23E-4	4701E-4

Таблица 2

$V_{вв}$, В	ϵ_c		ρ^l/ρ^l		IT		t , с	
	1	2	1	2	1	2	1	2
0,35	2E-7	1E-6	3E-6	1E-5	11	11	110	97
0,40	2E-8	3E-7	1E-6	5E-5	6	11	58	92
0,45	7E-8	3E-7	1E-5	5E-5	6	11	58	92
0,50	7E-8	1E-7	1E-5	3E-5	6	10	65	86
0,55	4E-8	3E-7	3E-6	3E-5	6	11	62	94
0,60	3E-8	6E-7	5E-6	2E-5	6	11	63	94
0,65	7E-9	8E-7	3E-7	4E-6	8	11	85	97
0,70	5E-7	6E-7	2E-7	3E-7	11	11	118	100
0,75	1E-4	1E-4	1E-6	3E-6	17	18	175	165

Таблица 3

V_{BE} , В	IT_{Φ}		IT_n		IT_p	
	1	2	1	2	1	2
0,35	55	55	236	176	356	218
0,40	30	55	149	176	179	196
0,45	30	55	149	176	178	196
0,50	30	50	184	160	213	187
0,55	30	55	149	176	219	202
0,60	30	55	149	176	227	205
0,65	40	55	198	176	291	216
0,70	55	55	302	176	342	231
0,75	85	90	451	288	449	393

Таблица 4

V_{CB} , В	ε_c	ρ^l/ρ^1	IT	IT_{Φ}	IT_n	IT_p
1,5	2E-8	9E-5	7	35	199	246
2,5	3E-8	1E-5	7	35	211	249
3,5	1E-9	3E-5	6	30	185	229
4,5	3E-9	3E-5	6	30	185	227
5,5	3E-9	5E-5	6	30	185	227
6,5	8E-10	2E-5	6	30	185	227
7,5	1E-9	1E-5	6	30	185	226
8,5	2E-9	1E-5	6	30	185	227
9,5	2E-9	2E-5	6	30	185	226
10	2E-9	2E-5	6	30	185	227

нии Пуассона в ходе гummелевского итерационного процесса. Из результатов, приведенных в табл. 2 и 3, следует, что затраты машинного времени в обоих случаях отличаются не очень сильно (на низких уровнях инжекции модифицированный метод эффективнее приблизительно в 1,5 раза). В то же время модифицированный метод за меньшее число гummелевских итераций (IT) позволяет достичь более высокой точности за счет более эффективного решения уравнений неразрывности.

В табл. 4 даны результаты расчетов для случая $V_{BE} = 0,6$ В, а V_{CB} варьировалось от 1 до 10 В с шагом 0,5 В. Из таблицы видно, что модифицированный метод позволяет эффективно находить решение вплоть до обратных напряжений $V_{CB} = 10$ В. В то же время получить решение обычным методом (с использованием ИССГ для уравнений непрерывности) для V_{CB} , больших 2 В, не удалось.

Таким образом, предложенный модифицированный метод представляется весьма перспективным для решения стационарных задач моделирования компонент интегральных схем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gummel H. K. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady-state transistor calculations // IEEE Trans.—1964.—V. ED-11, N 10.—P. 455.
2. Польский Б. С. Численное моделирование полупроводниковых приборов.—Рига: Зинатне, 1986.
3. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений.—М.: Наука, 1978.
4. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.—М.: Наука, 1977.
5. Meijerink J. A., Van der Vorst H. A. An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix // Math. Comput.—1977.—V. 31, N 137.—P. 148.
6. Булеев Н. И. Метод неполной факторизации для решения двумерных уравнений типа диффузии // ЖВМ и МФ.—1970.—Т. 10, № 4.
7. Scharfetter D. L., Gummel H. K. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator // IEEE Trans.—1969.—V. ED-16, N 1.—P. 64.

Поступила в редакцию 12 июня 1987 г.