

2. Cottet G. M. *Methods particulières pour l'équation de Boltzmann* // P. et. M. Curie Paris, 1982.
3. Degond P., Niclot B. Numerical analysis of the weighted particle method applied to the semiconductor Boltzmann equation // *Num. Math.*—1989.—55.—P. 599.
4. Dobrushin R. L. Vlasov's equation // *Funct. Anal. Appl.*—1979.—13.—P. 115.
5. Geyer Th., Wick J. A deterministic particle method solving the linearized Boltzmann equation // *Computing.*—1990.—43.—P. 199.
6. Mas-Gallic S. A deterministic particle method for the linearized Boltzmann equation // *Transp. Theory Stat. Phys.*—1978.—16.—P. 855.
7. Moock H. Eine finite Particle Methode für die Boltzmann — Maxwell — Gleichung für Halbleiter (to appear).
8. Motta S., Russo G., Moock H., Wick J. Point approximation of a space-homogeneous transport equation // *Num. Math.*—1990.—56.—P. 763.
9. Motta S., Wick J. A new numerical method for kinetic equations in several dimensions // *Computing* (to appear).
10. Neunzert H. Mathematical investigation on particle-in-cell methods // *Proc. of the XIIIth Symp. Advance. Probl. Meth. Fluid Mech., Fluid Dynamics.*—1978.—9.
11. Neunzert H., Wick J. Die Theorie der asymptotischen Verteilung und die numerische Lösung von Integro-differentialgleichungen // *Num. Math.*—1973.—21.—P. 234.
12. Raviart P. A. An analysis of particle methods // *Num. Methods in Fluid Dynamics.*—Berlin e. a.: Springer, 1983.—(Lect. not. math.; N 1127).
13. Victory H. D., Allen E. J., Ganguly K. The convergence theory of particle-in-cell methods for multidimensional Vlasov-Poisson systems // *SIAM* (to appear).

*Поступила в редакцию 11 ноября 1991 г.*

УДК 621.382 : 518.6

**Д. Х. Навон**

*(Массачусетс, США)*

## ЭФФЕКТЫ ГОРЯЧИХ НОСИТЕЛЕЙ В СОВРЕМЕННЫХ СУБМИКРОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ

Описаны оригинальные методы проектирования и анализа субмикронных полупроводниковых приборов, для которых необходимо учитывать эффекты горячих носителей. Методы основаны на сочетании решения кинетических уравнений с использованием метода Монте-Карло и уравнений более простых моделей — дрейфово-диффузионной или гидродинамической. Приведены расчеты некоторых приборов, дающие хорошее совпадение с экспериментом.

**Введение.** С приходом СВИС-технологии размеры полупроводниковых приборов сильно уменьшились до субмикронных для обеспечения быстродействия и плотности упаковки. Микроскопические характеристики переноса носителей в этих малых приборах становятся более сложными, чем в больших приборах. Эффекты горячих носителей — одни из наиболее важных аспектов физики субмикронных приборов, и эти явления широко изучаются. Например, такие эффекты, как всплеск скорости, ударная ионизация, термоионная эмиссия в больших полях и переход в боковые долины в сложных полупроводниках, являются важными моментами в проектировании субмикронных приборов с адекватными свойствами.

Традиционное моделирование приборов при решении дрейфово-диффузионных самосогласованных уравнений (ДДУ) долгое время признавалось стандартной техникой численного моделирования. Однако в приложении ДДУ к моделированию субмикронных приборов не проявляются некоторые точно

предсказанные явления, связанные с горячими носителями. Из-за сверхмалых геометрических размеров субмикронных приборов распределение сильнородного электрического поля часто существует внутри этих приборов даже при нормальном напряжении.

Обычная дрейфово-диффузионная аппроксимация основана на двух предположениях: 1) установление температурного равновесия между подвижными носителями и кристаллической решеткой и 2) зависимость локальной подвижности носителей от поля. Когда носители попадают в область электрического поля с высокими градиентами, они приобретают энергию, которая может сильно превышать энергию температурного равновесия.

Методы предсказания эффектов горячих носителей. По существу, имеются два метода, обычно используемые для моделирования эффектов горячих носителей с использованием уравнений переноса носителей Больцмана (УПБ): 1) метод Монте-Карло (МК); 2) использование моментов уравнения переноса Больцмана.

Реализованный должным образом МК-метод обеспечивает точное решение УПБ.

Задавая материал прибора, структуру и распределение примеси, получим распределение частиц носителей, среднюю дрейфовую скорость, плотность тока, энергию носителей, а также распределение скорости. Соответствующая реализация требует знания всех выражений для рассеяния носителей, энергетической зонной структуры и природы граничных условий прибора. Поскольку при моделировании контакт — контакт на основе МК-метода, в частности в приборах, имеющих низкий потенциальный барьер, используются большие машинные ресурсы, развиваются методы «в областях», которые ограничивают расчеты только физически важными областями. Это позволяет осуществлять с помощью компьютера практическую разработку множеств структур, созданных из различных полупроводниковых материалов. Наш гибридный метод, использующий комбинацию ДДУ- и МК-методов, может еще больше упрощать вычисления.

Другой метод для предсказания эффектов горячих носителей обеспечивается выбором моментов уравнения Больцмана или решением «гидродинамических» уравнений. В настоящее время при анализе полупроводниковых приборов, решая гидродинамические уравнения, пытаются уменьшить машинные затраты и, следовательно, обеспечить практические средства для проектирования приборов. Однако неопределенность значений некоторых физических параметров, как правило, ведет к ограничению точности в анализе с применением этого метода. Чтобы применить параметры, необходимые для создания точного и практичного прибора, наша группа недавно разработала метод, который использует результаты прямых МК-расчетов в областях.

«Гибридный» метод в областях. Гибридное приближение в областях часто делает возможным значительное сокращение машинного времени и практический анализ прибора в структурах, для которых необходимо учитывать конечность времени релаксации. Поэтому традиционные методы, использующие ДДУ, обычно реализованы в доступных программах, ими можно воспользоваться для задания в первом приближении приемлемого распределения электрического поля в структуре прибора. Сейчас одночастичный МК-метод на установление может применяться при использовании ДДУ (генерированное распределение поля для продвижения носителей в электрическом поле). Этот расчет даст среднюю скорость носителей  $v_n$  всюду в заданной области прибора. Область задается так, чтобы включалась та ее часть, в которой имеют место большие градиенты поля. Границы выбираются в областях низких электрических полей, где вполне допустимо предположить максвелловское распределение скорости. О специфике граничных условий будет сообщено ниже.

Поскольку для электронов в одномерном случае

$$J_n = -qnv_n \quad (1)$$

и

$$J_n = qn\mu_n d\Phi_n/dx, \quad (2)$$

где  $\Phi_n$  — квази-ферми-уровень для электронов, совместно они дают

$$v_n = \mu_n d\Phi_n/dx \quad (3)$$

или

$$\mu_n = -\frac{d\Phi_n/dx}{v_n}.$$

В этом случае  $v_n$  получают из МК-решения, задавая подвижность всюду в обозначенной области. Значения этой новой подвижности вводят обратно в ДДУ и пересчитывают распределение потенциала. Процедура продолжается до тех пор, пока два последовательных расчета не дадут одно и то же в пределах допустимой точности распределение электрического поля. Обычно необходимы только одна или две итерации.

**Граничные условия в областях.** При изучении инжекции электронов, имеющих максвелловское распределение скорости на границе металл — полупроводник (кремний), в слабом однородном электрическом поле с использованием МК-метода наблюдается развитие бимодального закона у функции распределения скорости, как показано на рис. 1. Такое распределение устанавливается при электронной инжекции (в прямом и обратном направлениях), благодаря соударениям вблизи контакта. Данное распределение может быть представлено в виде произведения скорости и смещенного максвелловского распределения:

$$f(v) = |v| \exp[-(v - v_0)^2/2v_{th}^2]. \quad (4)$$

Его можно использовать для задания граничного условия для электронов, инжектированных с левой границы. При больших электрических полях правый пик функции распределения преобладает, в то время как при слабых, приближающихся к нулю полях пики стремятся стать равными во всей области. В таком однородном поле распределение скорости на правом контакте соответствует распределению на левом контакте. Однако при неоднородном распределении поля, существующем в структуре реального прибора, этот случай обычно не встречается. Тогда распределение по скоростям представляет

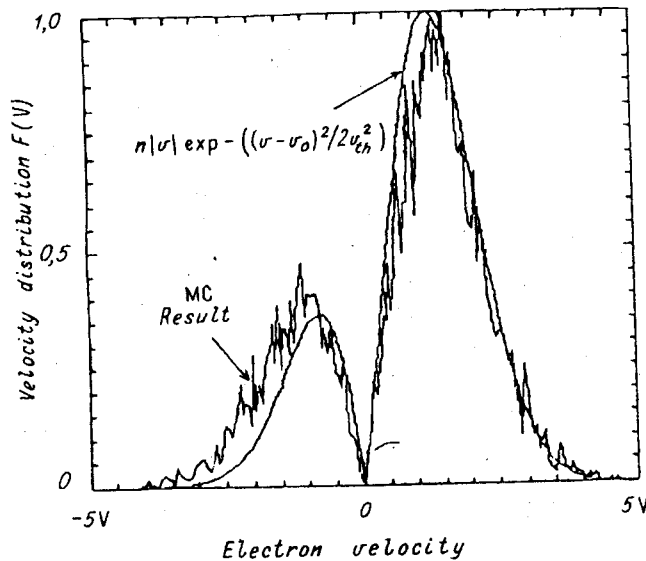


Рис. 1. Функция распределения скорости носителей, пересекающих плоскую границу. Функция распределения этого типа была найдена для электрического поля вплоть до 7 кВ/см

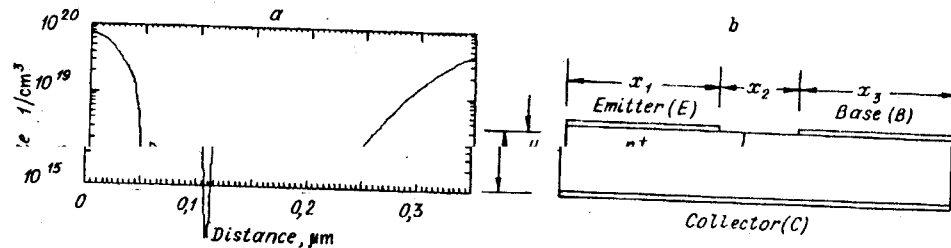


Рис. 2. Вертикальный профиль легирования структуры биполярного транзистора (а) и геометрия структуры (б)

смещенное максвелловское, соответствующее слабому полю на правой границе.

Приближение в областях, использующее бимодальные граничные условия и задействованное в гибридной итерационной МК-процедуре, относится к одномерной кремниевой  $n-p-n$ -биполярной транзисторной структуре с распределением примеси и геометрией (рис. 2, а, б).

Результат обработки показывает 20 %-ный всплеск скорости и длину релаксации между столкновениями более 60 нм. Другим результатом расчета является тот факт, что немаксвелловское распределение скорости в области всплеска скорости такое же, как «более горячее», но максвелловское распределение, находящееся дальше от стыка база-коллектор (рис. 3).

Нами применялся многочастичный МК-метод для расчета транзистора с проникаемой базой (GaAs). Здесь МК-метод может быть эффективным и напрямую применимым, так как только структура с затвором Шоттки включает тормозящий потенциальный барьер. Предсказывается значительный всплеск скорости.

На рис. 4 показан временной отклик электронной скорости на мгновенное изменение электрического поля в однородно легированном GaAs. Для слабых

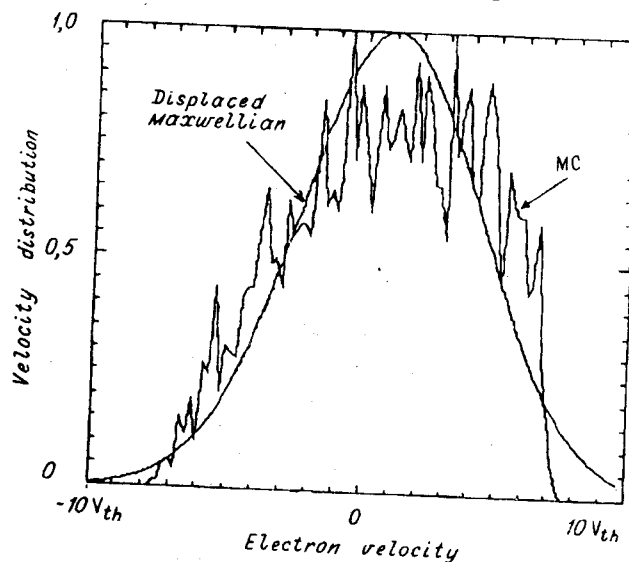


Рис. 3. Функция распределения скорости на расстоянии 0,1 мкм от стыка база-коллектор

полей всплеска скорости не предвидится. Когда поле возрастает, всплеск выше, а время релаксации короче.

Метод гидродинамических уравнений. Моделирование приборов с большими полями, основанное на моментах уравнений переноса Больцмана (МУПБ) или гидродинамических уравнениях, обычно активно используется в твердотельном методе Монте-Карло, времени релаксации энергии, точность метода.

А. Простейший и легче всего объяснимый способ выразить уравнения типа гидродинамических, зависящих от энергии, следующий:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi &= -(q/\epsilon)(p - n + N_D^+ - N_A^-), \\ \nabla \vec{j}_p &= -q(R - G), \\ \nabla \vec{j}_n &= qR, \\ \nabla \vec{S}_p &= \vec{j}_p \vec{F} - pB_p(T_p), \\ \nabla \vec{S}_n &= \vec{j}_n \vec{F} - nB_n(T_n); \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \vec{S}_p &= -k(T_p)\nabla T_p + \vec{j}_p \delta(T_p) k_B T_p / q, \\ \vec{S}_n &= -k(T_n)\nabla T_n - \vec{j}_n \delta(T_n) k_B T_n / q, \\ \delta(T) &= \langle \tau(E) E^2 \rangle / \langle \tau(E) E \rangle; \end{aligned} \quad (6)$$

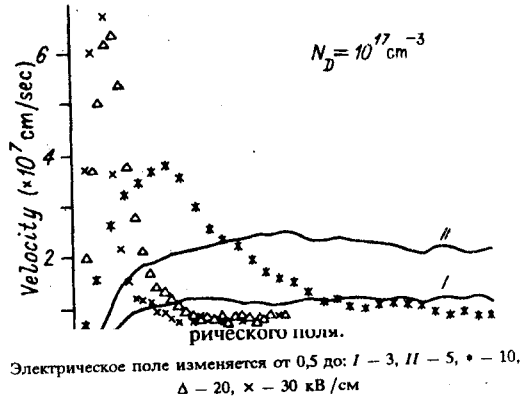
$$\begin{aligned} B_p &= \frac{3}{2} k_B (T_p - T_0) / \tau_{wp} + \frac{3}{2} k_B (T_p - T_n) (n/n_0) / \tau_{wp}, \\ B_n &= \frac{3}{2} k_B (T_n - T_0) / \tau_{wn} + \frac{3}{2} k_B (T_n - T_p) (p/p_0) / \tau_{wn}; \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mu(N_i, T) &= \frac{\mu_0(N_i)}{\{1 + [g(T)^\beta + (g(T)^{2\beta} + 4g(T)^\beta)^{1/2}] / 2\}^{1/\beta}}, \\ g(T) &= B(T) \mu_0(N_i) / qv_{sat}^2, \\ \mu_0(N_i) &= \frac{\mu_0}{\{1 + [N_i / (N_i/a) + b]\}^{1/2}}; \end{aligned} \quad (8)$$

$$\Delta E_g = 9 \left[ \ln(N_i / 10^{17}) + \left( \ln^2(N_i / 10^{17}) + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \right] \text{ meV};$$

$$\begin{aligned} R &= R_{SRH} + R_{AUG} = (pn - n_{ie}^2) \times \\ &\times \{ [\tau_{n0}(p + n_{ie}) + \tau_{p0}(n + n_{ie})]^{-1} + [A_n n + A_p p] \}. \end{aligned} \quad (9)$$

Первые три уравнения в (5) — традиционные ДДУ для электронов, а четвертое и пятое — уравнения баланса энергии. Первый член в правых частях этих последних уравнений представляет скорость джоулева нагрева (или



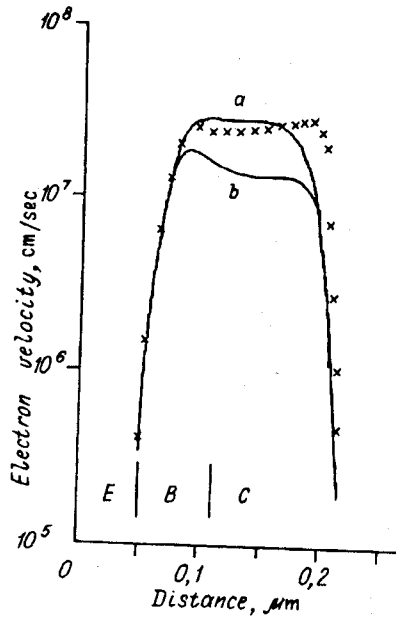


Рис. 5. Распределение скорости электронов биполярного транзистора (см. рис. 2) для  $\gamma = 0,445$  (a) и  $0,6$  (b) в МК-расчете при напряжениях  $V_{BE} = 0,75$  В и  $V_{CE} = 1,80$  В;  $\times$  — МК

охлаждения), в то время как второй член определяет уменьшение скорости энергии вследствие рассеяния носителей.  $S_n$  в выражениях (5), (6) — плотность потока энергии электронов. Приведены также вспомогательные уравнения, включающие выражения для подвижности носителей и зависящие от энергии электронов (или от температуры электронов). Они необходимы для решения гидродинамических уравнений. К сожалению, неизвестны значения для коэффициентов  $\Delta$ ,  $\delta$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  и времен релаксации  $\tau_{wn}$ ,  $\tau_{wp}$ . Их необходимо определять эмпирически или через МК-расчет. Скорости уменьшения энергии  $B_n$  и  $B_p$  вследствие рассеяния носителей берутся связанными с соответствующей температурой  $T_n$  или  $T_p$ , возведенной в степень  $\gamma$ . Экспонента  $\gamma$  зависит от вида энергетической зонной структуры. Большие значения  $\gamma$  означают параболическую зависимость  $E$  от  $k$ , а меньшие — соответствуют степенной или непараболической зависимости. Из

рис. 5 видно, что предположение параболичности зонной структуры определяет несколько больший всплеск скорости, чем предположение непараболичности. Поскольку МК-данные, представленные на этом рисунке, также основаны на предположении параболичности, это тем более

предопределяет более высокий всплеск скорости. Анализируемая здесь кремниевая  $n-p-n$ -биполярная структура и распределение примесей те же самые, что и в транзисторе с 60-нанометровой базой, изображенной на рис. 2, a, b. Заметим, что все пять гидродинамических уравнений (5) решаются одновременно. Первый приближенный расчет делается на основе решения ДДУ.

Величина всплеска скорости, предсказанного моделью, ощутимо зависит от времени релаксации энергии  $\tau_{wn}$ . Как и ожидалось, здесь более короткое время релаксации ведет к восстановлению равновесия между горячими носителями и решеткой, вызывая уменьшение всплеска энергии.

Б. В некоторых более новых расчетах моменты уравнения переноса Больцмана используются для получения системы уравнений переноса, в процессе решения которых можно получить распределение плотности носителей, среднюю скорость носителей, энергию и поток энергии. В эту модель включены обычный член энергии и модифицированное соотношение Эйнштейна. Далее приведены трехмерные уравнения переноса Больцмана вместе с уравнениями для импульса  $\vec{p}$ , энергии  $E$ , моментов УПБ, выраженных в терминах средней скорости релаксации импульса  $\vec{C}_p$  и средней скорости релаксации энергии  $\tau_w$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\vec{r}}{dt} \nabla_{\vec{r}} f + \frac{d\vec{k}}{dt} \nabla_{\vec{k}} f = \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{coll}; \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \int p(\text{УПБ}) d\vec{k} &\Rightarrow \frac{1}{n} \nabla(n\vec{U}) - \vec{F} = \vec{C}_p; \\ \frac{1}{n} \int \epsilon(\text{УПБ}) d\vec{k} &\Rightarrow \frac{1}{n} \nabla(n\vec{S}) - \vec{v} \vec{F} = C_w; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned}\vec{C}_p(\vec{r}) &\equiv \frac{1}{n(\vec{r})} \iint [\vec{p}(\vec{k}') - \vec{p}(\vec{k})] \sum_i S_i(\vec{k}, \vec{k}', \vec{r}) f(\vec{k}, \vec{r}) d\vec{k}' d\vec{k}, \\ C_w(\vec{r}) &\equiv \frac{1}{n(\vec{r})} \iint [\varepsilon(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k})] \sum_i S_i(\vec{k}, \vec{k}', \vec{r}) f(\vec{k}, \vec{r}) d\vec{k}' d\vec{k};\end{aligned}\quad (12)$$

$$C_p(r) \stackrel{\Delta}{=} -\frac{qv(r)}{\mu(r)}, \quad C_w(r) \stackrel{\Delta}{=} -\frac{w(r) - w_0}{\tau_w(r)}.\quad (13)$$

Более традиционная форма этих уравнений приведена ниже:

$$\frac{d}{dx} J = -q(G - R),\quad (14)$$

$$J = \mu n \left( qF + k_B \frac{dT}{dx} \right) + qD_{eff} \frac{dn}{dx},\quad (15)$$

$$\frac{dS}{dx} = JF - \frac{1}{\tau_E} \frac{3}{2} nk_B T \left( 1 - \frac{T_0}{T} + \frac{\lambda}{3} \right),\quad (16)$$

$$S = -\delta \frac{k_B T}{q} J \left( 1 + \frac{\lambda}{5} \right) - \Delta \left( \frac{k_B}{q} \right)^2 qn\mu T \nabla T,\quad (17)$$

где

$$\lambda \equiv \frac{v^2}{v_{th}^2} \equiv \frac{m^* v^2}{k_B T} (< 1),\quad (18)$$

$$\mu \equiv \frac{q\tau_p}{m^*} = \frac{\mu_0}{1 - \frac{3}{2} \frac{\mu_0}{\tau_E v_s^2} \left( \frac{k_B T_0}{q} + \frac{1}{\delta} \frac{S}{J} \right)},\quad (19)$$

$$D_{eff} \equiv \mu \frac{k_B T}{q} (1 - \lambda).\quad (20)$$

Значения подвижности  $\mu_0$  в слабых полях, время релаксации энергии  $\tau_w$  и  $v_s$  могут быть взяты из других эмпирических данных или расчетов при моделировании методом МК. В этой формулировке используются следующие предположения: постоянство скалярной эффективной массы  $m^*$ , постоянство температуры  $T$  и закон Видмана — Франца для тепловой проводимости. В противоположность традиционным моделям, которые рассматривают подвижность носителей как функцию только энергии, используемые здесь выражения подвижности зависят также от пространственного градиента энергии.

Пренебрежение зависимостью  $\Delta T_n$  эквивалентно предположению о том, что тепловой поток  $\vec{Q}$  равен нулю, и тогда выражение подвижности (19) приобретает традиционный вид зависимости только от энергии. Коэффициент  $\lambda$  (18) обобщает соотношение Эйнштейна и получается из обычного члена энергии.

Метод МУПБ был применен к электронам, инжектированным в область, имеющую трапециевидное распределение поля, типа изображенного на вставке рис. 6. Видно, что форма распределения скорости, рассчитанной в области однородного поля, является в основном смещенной максвелловской. Однако для быстро возрастающего поля распределение несколько асимметрично. Но впоследствии для уменьшающегося поля распределение снова становится максвелловским. Все три кривые рис. 6 соответствуют одной и той же энергии 58 мэВ или примерно двум тепловым энергиям. Значение коэффициента непараболичности зоны проводимости предполагается равным  $0,5 \text{ эВ}^{-1}$ . Следовательно, нельзя уверенно предположить, что все три области имеют одинаковое время релаксации.

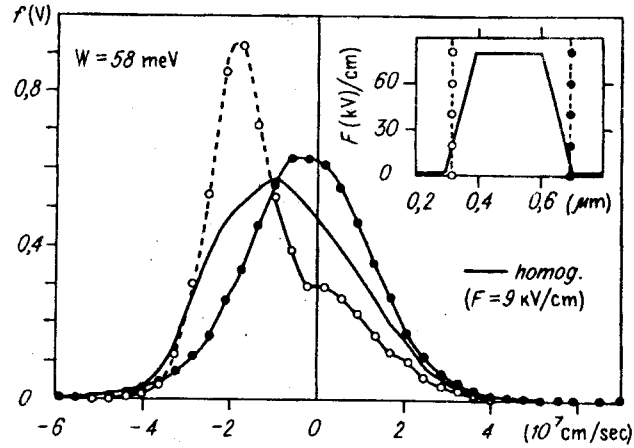


Рис. 6. Функции распределения скорости для возрастающего (○), убывающего (●) и однородного (—) полей

Коэффициенты переноса в МУПБ обычно трактуются как функции средней энергии  $w$ . Часто эти зависимости от энергии получают из МК-расчетов в однородном поле. Нет гарантии, что эти однородные данные могут быть использованы в неоднородном случае. Чтобы проверить действительность этих гипотез, были проведены МК-расчеты с неоднородным распределением электрического поля (см. рис. 6). Зонные структуры предполагались и параболическими, и непараболическими. Затем на график наносилась обратная величина подвижности электронов в зависимости от средней энергии  $w$  и от  $s/v$ -плотности потока энергии, деленной на скорость (рис. 7). Как показано на рис. 8, время релаксации энергии  $\tau_w$  может быть представлено независимо от энергии только тогда, когда зонная структура предполагается непараболической; для кремния получено значение 0,3 пс. Средний поток энергии  $S$ , взятый из МК-расчета, в большинстве областей пропорционален обычному потоку энергии, однако в области убывающего поля, где скорость быстро падает, тепловой поток доминирует над обычным потоком энергии. Эти идеи сейчас обобщаются в моделировании биполярных транзисторов.

**Полный метод Монте-Карло.** Программа DAMOCLES, реализующая МК-метод, недавно создана группой ученых из фирмы IBM. Она моделирует потоки электронов и дырок в 2-мерных биполярных транзисторных структурах.

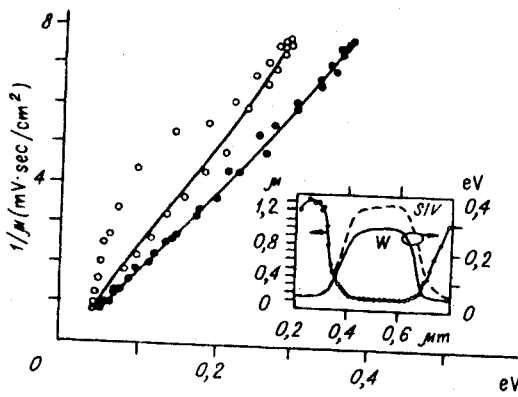


Рис. 7. Подвижность в зависимости от  $W$  (○) и  $S/V$  (●) из МК-расчета (однородное (—) и неоднородное (○, ●) поля)

Используется точная зонная структура, а не аппроксимация эффективной массы. Включено электрон-электронное рассеяние, которое является нелинейным эффектом в МК-расчетах. Рассматриваются также взаимодействия плазмонов. Субмикронные приборы моделируются как при 300, так и при 77 К. Используется статистика Ферми — Дирака, квантовые эффекты не учитываются. Отметим, что для расчета одной точки необходимо 10 ч работы программы на Фортране с использованием векторного процессора.

Сомнительна, однако, практическая ценность этой программы для проектирования полупроводниковых приборов. Но некоторые интересные расчеты были сделаны для



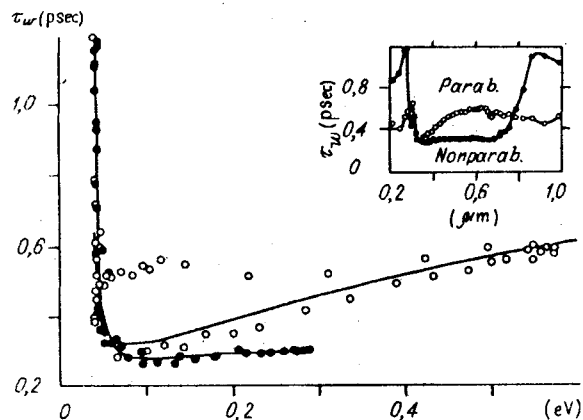


Рис. 8. Время релаксации энергии, полученное из параболической (○) и непараболической (●) зонных моделей (— — однородная)

ряда структур, сконструированных из различных полупроводниковых материалов.

Был рассчитан кремниевый МДП-прибор с длиной канала 60 нм. Выяснено, что: а) всплеск скорости при 77 К больше, чем при 300 К; б) мал эффект включения электрон-электронных взаимодействий даже для МДП с длиной канала 250 нм.

Полученные с помощью ЭВМ данные хорошо совпадают с экспериментальными измерениями.

**Заключение.** Гибридный метод в областях был разработан для практического анализа и проектирования субмикронных полупроводниковых структур. Решение уравнений типа гидродинамических ведет к уменьшению машинных затрат для этого типа анализа, однако значения нескольких физических параметров необходимо определять из отдельного источника. Недавние расчеты показали, что подвижность носителей должна рассматриваться как функция от  $s/v$ -плотности потока энергии, деленного на среднюю скорость носителей, а не просто как функция от энергии электронов. Наконец, представлены результаты расчетов, выполненных с помощью полного МК-метода и включающих некоторые явления, часто не учитываемые в традиционном МК-анализе.

Поступила в редакцию 11 ноября 1991 г.

УДК 538.971

М. Джафари Раухани, А. М. Гюи, М. Лярусс, Д. Эстев

(Тулуза, Франция)

## ОБЗОР ТЕОРИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ НА ГРАНИЦЕ

Описываются приближение сплошных сред и моделирование в атомном масштабе и сопоставляются их результаты, в частности, в определении критической толщины, при которой образуются граничные дефекты.

**Введение.** Граничные дефекты, особенно граничные дислокации, изучаются в течение нескольких десятилетий. Интересно, что первые атомные модели дислокаций больше имели отношение к поверхностным, нежели к объемным дислокациям [1, 2]. Далее последовало приращение к несоот-