

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»
(СГУ)**

Кафедра физики твёрдого тела

**Настройка алгоритма математической модели электронных процессов в
полупроводниковых структурах с металлическими контактами**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 4052 группы
направления 11.03.04 «Электроника и микроэлектроника»

Института физики

Скрыпникова Дмитрия Павловича

Научный руководитель:

старший преподаватель

должность, ученая степень, ученое звание



подпись, дата

А.В. Митин

инициалы, фамилия

Консультант:

профессор, д.ф.-м.н., профессор

должность, учёная степень, учёное звание



подпись, дата

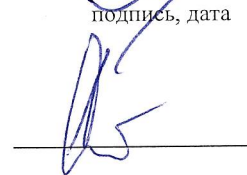
А.И. Михайлов

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

должность, ученая степень, ученое звание



подпись, дата

А.В. Скрипаль

инициалы, фамилия

Саратов 2024

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

Математические модели широко применяются для исследования полупроводниковых структур. Полупроводниковые приборы обычно состоят из чередующихся слоев с разными типами проводимости и концентрацией носителей заряда. Физические процессы в полупроводниках существенно зависят от вида металлических контактов. Идеальные омические контакты довольно трудно получить из-за возникновения барьера для носителей заряда на границе полупроводника и металла. Поэтому математическое моделирование, учитывающее свойства реальных омических контактов, туннелирование и поверхностные состояния, является актуальной задачей.

Для описания динамики пространственного заряда и тока в полупроводниках часто используется локально-полевая математическая модель (ЛПММ). В данной модели скорость дрейфа и коэффициент диффузии носителей заряда являются локальными и мгновенными функциями напряженности электрического поля. ЛПММ обеспечивает адекватное описание электронных процессов в большинстве практически важных случаев.

В данной работе представлена методика настройки и адаптации алгоритма ЛПММ для математического моделирования динамики распределения пространственного заряда и электрического поля в кремниевых структурах с металлическими контактами. Методика включает определение граничных и начальных условий для сходимости разностной схемы и выбор шагов по времени и координате.

Цель и задачи бакалаврской работы

Цель работы — настройка алгоритма математической модели электронных процессов в полупроводниковой структуре в условиях неидеальности одного из омических контактов.

Поставленные задачи:

1. Анализ научно-технической литературы по теме работы;

2. Анализ системы уравнений локально-полевой математической модели, описывающей динамику пространственного заряда и тока в полупроводниковых структурах;
3. Выбор оптимального метода решения системы уравнений модели;
4. Настройка и тестирование алгоритма математической модели;
5. Анализ полученных результатов.

Описание структуры работы

Выпускная квалификационная работа включает введение, пять разделов, в которых обсуждается основное содержание работы, заключение и список литературы из 21 источника, изложена на 40 страницах, содержит 10 рисунков и 2 приложения. Во введении описана актуальность темы работы, а также сформулированы цель и задачи. В первом разделе проведен анализ научно-технической литературы, посвященный рассмотрению локально-полевой математической модели, особенностей ее применения, достоинств и ограничения использования. Далее рассматривается система уравнений ЛПММ, описывающей динамику пространственного заряда и электрического поля в полупроводниковых структурах с металлическими контактами. Во втором разделе проводится поэтапная настройка разработанной модели, заключающаяся в ее тестировании для исследуемой структуры. В третьем разделе рассматриваются численные методы решения дифференциальных уравнений с целью определения наиболее оптимального метода решения. В четвертом разделе рассматривается аппроксимация уравнений ЛПММ с использованием метода конечных разностей на заданной сетке, методика последующего численного решения полученных разностных уравнений на компьютере с учетом выбранных начальных и граничных условий, задаются критерии адекватности выходных данных. В пятом разделе проводится анализ полученных результатов. В заключении сформулированы основные выводы по результатам проведенного исследования. В приложениях представлен программный код для численного решения системы уравнений ЛПММ. Код программы был написан с использованием языка Python.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Локально-полевая математическая модель — это модель для численного моделирования электронных процессов в полупроводниковых устройствах. Эта модель предполагает, что дрейфовая скорость и коэффициент диффузии носителей заряда зависят от напряженности электрического поля локально и мгновенно. В данной работе используется вариант ЛПММ, в котором дрейфовая скорость электронов v_n рассматривается как локальная и мгновенная функция напряженности электрического поля E . Для кремния она определяется известным аналитическим выражением:

$$v_n(E) = \frac{\mu_n E}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu_n E}{v_s}\right)^2}} \quad (1)$$

с параметрами аппроксимации $\mu_n = 1200 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, $v_s = 10^7 \text{ см/с}$, а коэффициент диффузии электронов D_n предполагается постоянным и равным $35 \text{ см}^2/\text{с}$.

Рассматривается полупроводниковая структура БК – n – ОК, где БК – барьерный контакт, который можно рассматривать как неидеальный омический контакт, а ОК – идеальный омический контакт. Предполагается, что барьерный контакт имеет потенциальный барьер высотой 0,3 эВ для электронов. Для упрощения моделирования также предполагается отсутствие диэлектрического зазора между металлом и полупроводником, а также отсутствие поверхностных электронных состояний на поверхности полупроводника.

На рисунке 1 изображена одномерная система координат для моделируемой структуры, где j – вектор плотности тока проводимости через образец, E – вектор напряжённости электрического поля, v_n – вектор дрейфовой скорости электронов, e_x – единичный вектор оси x , L – длина полупроводникового кристалла.

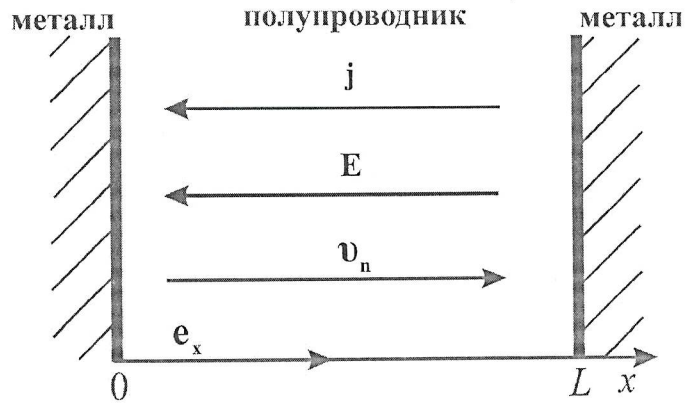


Рисунок 1 – Система координат для моделируемой структуры

Записав уравнение непрерывности для электронов, уравнение Пуассона и выражение, связывающее электрическое поле и потенциал, в выбранной системе координат, получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - v_n(E) \frac{\partial n}{\partial x} - n \frac{\partial v_n(E)}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = q \frac{(n - N_D)}{\varepsilon \varepsilon_0} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} = E \end{cases} \quad (2)$$

где $n = n(x, t)$, $E = E(x, t)$ и $\varphi = \varphi(x, t)$ – концентрация электронов, напряженность электрического поля и потенциал как функции координаты x и времени t соответственно; $N_D = N_D(x)$ – зависимость концентрации доноров от координаты x ; ε – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника (для кремния $\varepsilon = 12$), ε_0 – электрическая постоянная; $v_n(E)$ – дрейфовая скорость электронов, задаваемая аналитическим выражением (1).

Начальные распределения концентрации электронов, электрического поля и потенциала и граничные условия для структуры БК – n – ОК при нулевом смещении ($U = 0$ В) задаются из физических соображений на основе аналитического решения уравнения Пуассона в области пространственного заряда (ОПЗ) БК без учета вклада свободных носителей (электронов) следующим образом:

Начальные условия:

$$n(x, 0) = N_D(x) \text{ при } 0 \leq x \leq L, \quad (3)$$

$$\varphi(x, 0) = \begin{cases} -q \frac{N_D(0)}{2\varepsilon\varepsilon_0} (L_0 - x)^2, & \text{при } 0 \leq x \leq L_0, \\ 0, & \text{при } x > L_0, \end{cases} \quad (4)$$

$$E(x, 0) = \begin{cases} q \frac{N_D(0)}{\varepsilon\varepsilon_0} (L_0 - x), & \text{при } 0 \leq x \leq L_0, \\ 0, & \text{при } x > L_0, \end{cases} \quad (5)$$

где $N_D(x) = N_D = \text{const}$, а L_0 – начальное значение ширины ОПЗ БК, рассчитываемое следующим образом:

$$L_0 = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0\varphi_k}{qN_D}} \quad (6)$$

где φ_k – контактная разность потенциалов в ОПЗ БК.

Граничные условия для БК:

$$n(0, t) = n_c, \quad \text{при } t > 0, \quad (7)$$

$$\varphi(0, t) = -\varphi_k \pm |U|, \quad \text{при } t > 0, \quad (8)$$

$$E(0, t) = \frac{qn_c L_0}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad \text{при } t > 0, \quad (9)$$

где n_c – концентрации электронов на границе с металлом БК: U – постоянное напряжение, прикладываемое к структуре.

Значение концентрации электронов на границе с металлом барьерного контакта, обозначенное как n_c , в начальном приближении, определяется в соответствии с выражением

$$n_c = N_D(0) \exp \left[-\frac{q\varphi_k}{kT} \right], \quad (10)$$

а затем уточняется в ходе численных экспериментов. Критерием адекватности значения n_c является качественное соответствие стационарного распределения электрического потенциала в структуре известным физическим представлениям.

Граничные условия для ОК:

$$n(L, t) = N_D(L), \quad \text{при } t > 0, \quad (11)$$

$$\varphi(L, t) = 0, \quad \text{при } t > 0, \quad (12)$$

$$E(L, t) = 0, \quad \text{при } t > 0. \quad (13)$$

Для расчета ВАХ используется следующее выражение для плотности полного тока через структуру:

$$J(t_{уст})|_U = \frac{1}{L} \int_0^L \left\{ qn(x, t_{уст})v_n(x, t_{уст}) - qD_n \frac{\partial n(x, t_{уст})}{\partial x} + \varepsilon\varepsilon_0 \frac{\partial E(x, t_{уст})}{\partial t_{уст}} \right\} dx, \quad (14)$$

где $t_{уст}$ соответствует моменту установления стационарного решения системы уравнений.

Для решения системы уравнений ЛПММ был выбран метод конечных разностей (МКР). МКР является привлекательным методом для решения системы дифференциальных уравнений ЛПММ из-за его простоты реализации, эффективности, универсальности.

Уравнения системы (2) подвергаются аппроксимации на заданной сетке с использованием шаблона, представленного на рисунке 2, далее проводится численное решение на компьютере полученных разностных уравнений с учетом выбранных начальных и граничных условий.

Системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей коэффициентов, получаемые для уравнений непрерывности и Пуассона, решаются численно методом прогонки. При численном решении третьего уравнения системы (2) ЛПММ используется схема бегущего счета.

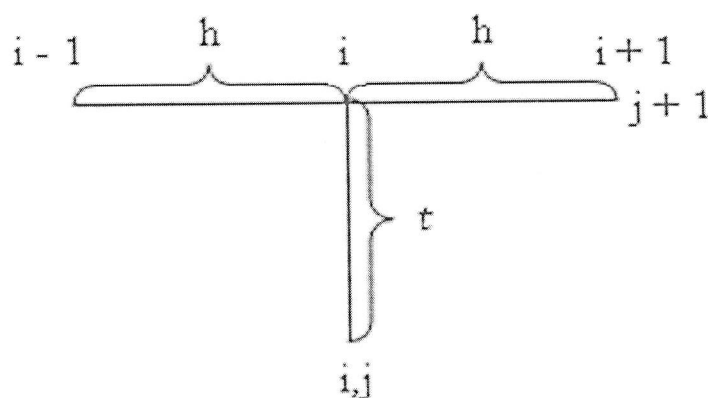


Рисунок 2 – Разностный шаблон

Система разностных уравнений, получаемая с использованием указанного шаблона, имеет следующий вид:

$$\frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{t} = D_n \frac{n_{i+1}^{j+1} - 2 \cdot n_i^{j+1} + n_{i-1}^{j+1}}{h^2} - v_n \frac{n_i^{j+1} - n_{i-1}^{j+1}}{h} - n_i^{j+1} \frac{n_{i+1}^{j+1} - n_{i-1}^{j+1}}{h} \quad (15)$$

$$\frac{\varphi_{i+1}^{j+1} - 2 \cdot \varphi_i^{j+1} + \varphi_{i-1}^{j+1}}{h^2} = q \frac{(n_i^{j+1} - N_d)}{\varepsilon \varepsilon_0} \quad (16)$$

$$E_i^{j+1} = \frac{\varphi_i^{j+1} - \varphi_{i-1}^{j+1}}{h} \quad (17)$$

Для полученной системы разностных уравнений (15)-(17) задаются граничные условия в соответствии с выражениями (7)-(10) для БК:

$$n_0^j = n_c, \quad (18)$$

$$\varphi_0^j = -\varphi_k \pm |U|, \quad (19)$$

$$E_0^j = \frac{qn_c L_0}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (20)$$

и (11)-(13) – для ОК:

$$n_N^j = N_D(L), \quad (21)$$

$$\varphi_N^j = 0, \quad (22)$$

$$E_N^j = 0, \quad (23)$$

где N – номер узла, соответствующего правой границе сетки.

Чтобы обеспечить сходимость разностной схемы, необходимо выбирать шаги по времени и по координате таким образом, чтобы они были меньше значений соответствующих характеристических величин: максвелловского времени релаксации (24) и дебаевской длины экранирования (25).

$$\tau_m = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{N_D q \mu_n} \quad (24)$$

$$l_d = \sqrt{\frac{kT \varepsilon \varepsilon_0}{q^2 N_D}} \quad (25)$$

Критерием малости выходных данных (анализируемых физических величин) для распределения электрического поля является условие $\frac{k \cdot T}{q \cdot l} \geq E(x, t)$ и для распределения потенциала условие $\frac{k \cdot T}{q} \geq \varphi(x, t)$, где l – длина свободного пробега электрона (принималась равной $23 \cdot 10^{-8}$ м).

Для плотности полного тока в качестве критерия установления стационарного решения выбиралось условие:

$$\left| \frac{J(t_z) - J(t_{z-1})}{J(t_z)} \right| \leq 0,01 \quad (26)$$

при z -ом шаге по времени.

Установившиеся распределения потенциала, электрического поля и концентрации электронов, полученные для структуры БК – n – ОК при нулевом смещении ($U = 0$ В) при различных шагах по времени и по координате, представлены на рисунках 3 и 4. Численный эксперимент показал, что для установления решения оказалось достаточным 200 шагов по времени. Красными линиями обозначаются уровни потенциала и напряжённости электрического поля, соответствующие заданному критерию их малости.

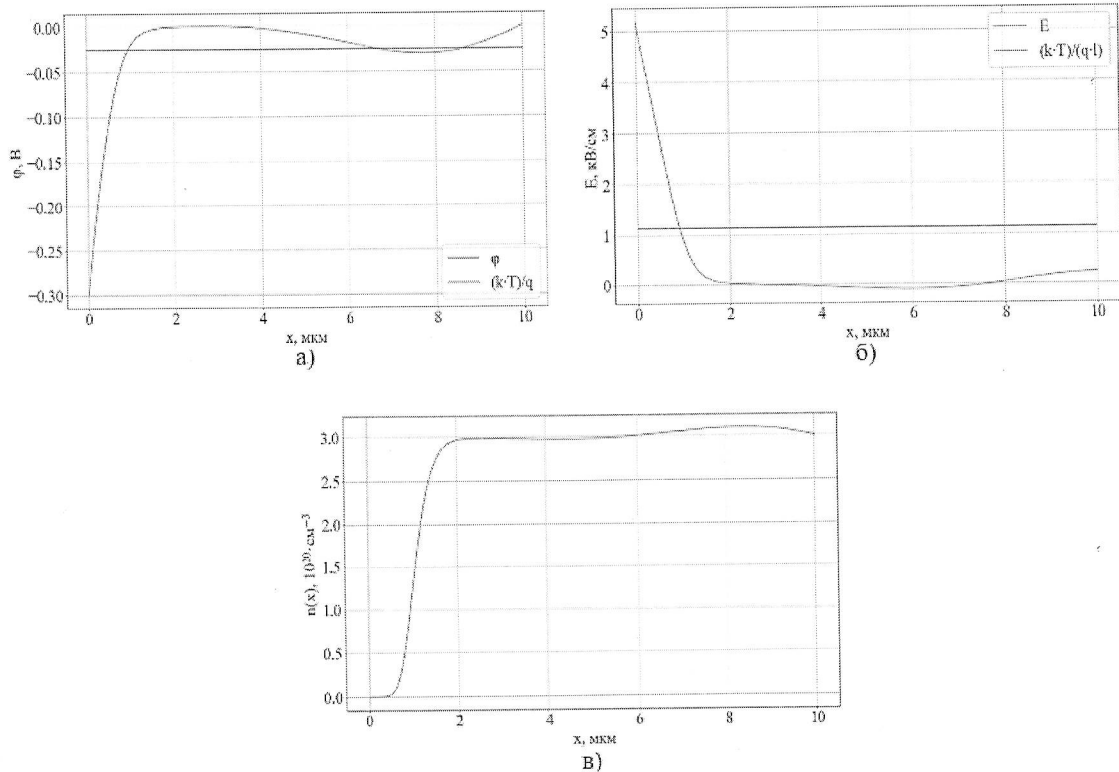


Рисунок 3 – Установившиеся распределения при шаге по времени $\tau = 38$ пс и по координате $h = 50$ нм для: а) потенциала, б) напряженности электрического поля, в) концентрации электронов

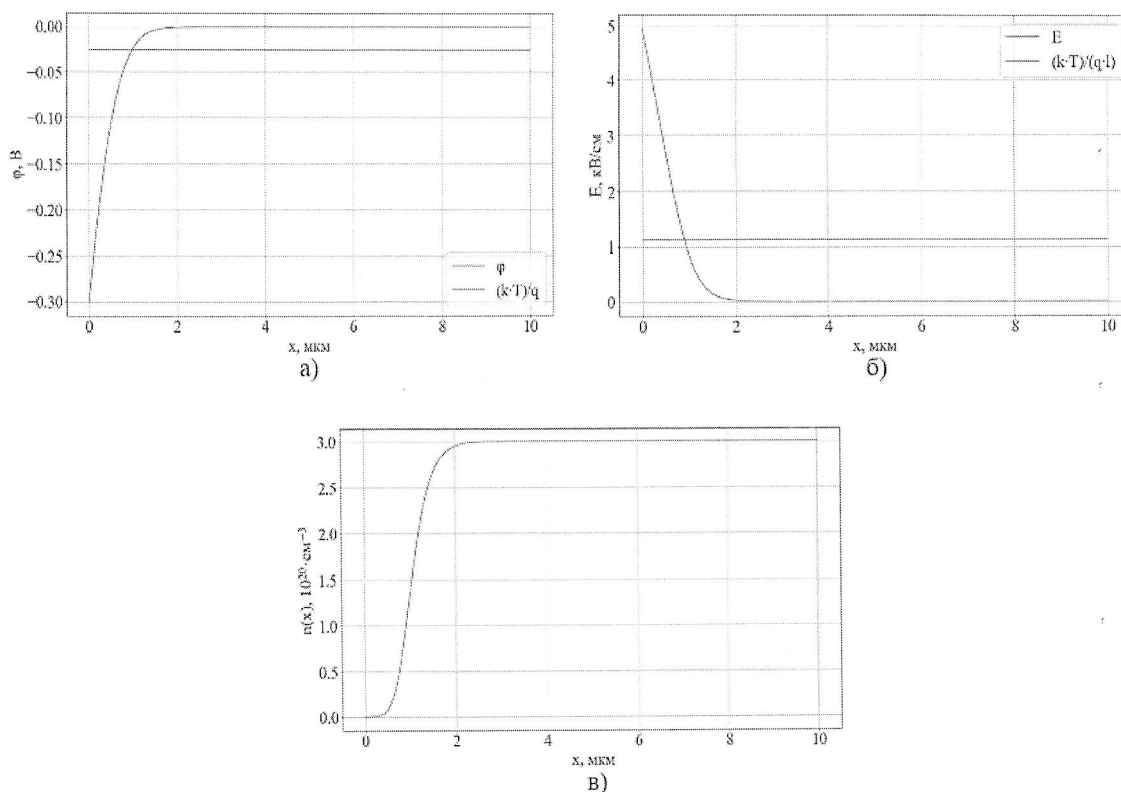


Рисунок 4 – Установившиеся распределения при шаге по времени $\tau = 10$ пс и по координате $h = 50$ нм для: а) потенциала, б) напряженности электрического поля, в) концентрации электронов

Неявная разностная схема для уравнения непрерывности является безусловно устойчивой, но выбор шагов по времени и по координате показал, что решение начинает расходиться при шагах по времени $\tau \geq 38$ пс и по координате $h \geq 80$, а при выборе шагов по времени $\tau = 10$ пс и по координате $h = 50$ нм наблюдается сходимость решения. Оптимальные шаги по времени и координате обеспечивают соответствие получаемых распределений потенциала, электрического поля и концентрации электронов заданному критерию малости и известным физическим представлениям.

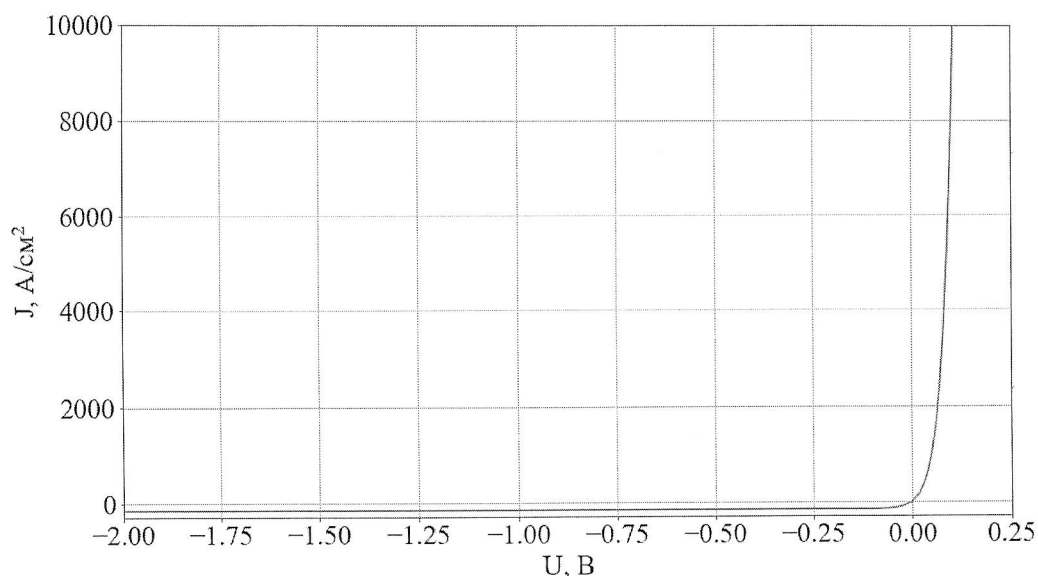


Рисунок 5 – Статическая вольт-амперная характеристика для структуры типа
БК – n – ОК

Как видно из рисунка 5, на полученной в ходе численных экспериментов статической вольт-амперной характеристике (ВАХ), при отрицательных значениях напряжения наблюдается участок насыщения плотности тока, а при положительных значениях напряжения – экспоненциальный рост плотности тока, что соответствует известным физическим представлениям. Анализ распределений потенциала, электрического поля и концентрации электронов, полученных при различных полярностях и значениях приложенного напряжения, показывает, что при положительном значении напряжения смещения происходит уменьшение ОПЗ барьерного контакта, а при отрицательном значении напряжения смещения увеличение его ОПЗ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения данной выпускной квалификационной работы можно сделать следующие выводы:

1. Была выполнена настройка ЛПММ для описания динамики установления распределения заряда и электрического поля в кремниевой структуре в условиях неидеальности одного из омических контактов.
2. Рассмотрены различные численные методы решения дифференциальных уравнений, включая метод конечных разностей, метод конечных элементов и метод конечных объемов. Для решения системы

уравнений ЛПММ был выбран метод конечных разностей из-за его простоты реализации, эффективности, универсальности.

3. Разработан программный код для реализации метода конечных разностей для решения системы уравнений ЛПММ. Код программы был написан с использованием языка Python. Были проведены численные эксперименты с различными значениями параметров ЛПММ, которые подтвердили эффективность и точность выбранного метода. Было установлено, что сходимость выходных данных достигается за счет оптимального выбора шагов по времени и координате, которые должны быть меньше соответствующих характеристических величин: максвелловского времени релаксации и дебаевской длины экранирования. Для исследуемой структуры значения этих величин оказались равными $\tau_m = 184$ пс и $l_d = 239$ нм. Оптимальные значения шагов по времени и координате составили $\tau = 10$ пс и $h = 50$ нм. Установлено, что решение становится некорректным при шагах по времени $\tau \geq 38$ пс и по координате $h \geq 80$ нм. Дополнительно уточнены входные параметры n_c и E_c , которые для исследуемой структуры оказались равными $2,7 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ и $5,2 \text{ кВ/см}$ соответственно. Полученные распределения потенциала, поля, концентрации электронов и статическая ВАХ соответствуют известным физическим представлениям.

4. Предложенная методика применима не только к кремниевым структурам с неидеальными омическими контактами, но и к моделированию других полупроводниковых приборов со схожей или более сложной структурой. Таким образом, методика имеет широкую сферу применения и может стать ценным инструментом для разработчиков полупроводниковых приборов и исследователей в области физики полупроводников.

