

## Численное решение задачи о переносе заряда в 2D кремниевом транзисторе MOSFET

*А.С. Шевченко*

Рубцовский институт (филиал) Алтайского государственного  
университета (Рубцовск, Россия)

## Numerical Solution of Charge Transfer Problem in a 2D Silicon MOSFET Transistor

*A.S. Shevchenko*

Rubtsovsk Branch of Altai State University (Rubtsovsk, Russia)

Рассмотрена недавно предложенная гидродинамическая МЕР-модель, представляющая собой квазилинейную систему уравнений, записанных в форме законов сохранения. Эти законы сохранения получены из системы моментных соотношений для уравнения переноса Больцмана. При этом для замыкания системы моментов в модели использован принцип максимума энтропии. Гидродинамическая модель будет использована нами в данной работе для нахождения стационарных решений, описывающих движение электронов в 2D кремниевом транзисторе MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) с наноканалом из оксида кремния.

Рассматриваемая математическая модель в стационарном случае сводится к системе эллиптических квазилинейных уравнений. Для нахождения приближенных решений этих уравнений используем вычислительный алгоритм, основанный на методе установления, методе прямых и на использовании различных видов нестационарной регуляризации уравнений.

С этой целью написан программный комплекс на языке Object Pascal в среде Delphi 6, реализующий вычислительный алгоритм. Приведены результаты полученных решений.

**Ключевые слова:** гидродинамическая модель, 2D кремниевый транзистор MOSFET с наноканалом из оксида кремния, уравнение Пуассона, регуляризация, метод установления, метод прямых.

DOI 10.14258/izvasu(2015)1.2-34

**Введение.** Математическое моделирование физических процессов в полупроводниковых устройствах имеет огромное значение для технических приложений и в последнее время превратилось в быстроразвивающуюся область прикладной математики. Современный уровень развития микроэлектронных технологий позволяет создавать по-

In this paper, we consider a recently proposed hydrodynamical model that represents a quasilinear system of equations in the form of conservation laws. The conservation laws are obtained from a system of moment relations for the Boltzmann transport equation with the maximum entropy principle used in the model for a closure of the system of moments.

In this paper, the hydrodynamic model is utilized to find stationary solutions that describe the motion of electrons in a 2D silicon MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) transistor with a silicon oxide nanochannel.

In the stationary case, the mathematical model is reduced to a system of elliptical quasilinear equations. To find approximate solutions of these equations, we use a computational algorithm based on the method of lines, the stabilization method, and various forms of nonstationary regularization of equations. The computational algorithm is implemented as a software package using Object Pascal in Delphi 6 environment. The results of the obtained solutions are provided.

**Keywords:** hydrodynamic model, 2D silicon MOSFET transistor with a silicon oxide nanochannel, the Poisson equation, regularization, stabilization method, method of lines.

лупроводниковые приборы столь малых размеров, что точность, обеспечиваемая упрощенными аналитическими моделями, становится неприемлемой для анализа и проектирования таких приборов. Необходимы математические модели, более полно описывающие физические процессы, происходящие в полупроводнике.

В данной работе рассматривается МЕР-модель гидродинамического типа, которая была предложена итальянскими физиками Anile и Romano [1, 2]. Она с высокой степенью достоверности описывает процесс переноса заряда в полупроводниковых устройствах субмикронного размера. При попытке поиска численных решений этой модели мы столкнулись с рядом существенных сложностей, обусловленных нелинейностью уравнений модели и наличием в ней малых параметров. С помощью традиционной теории разностных схем эту задачу решить не удалось.

Система уравнений в двумерном случае в безразмерном виде записывается так [2]:

$$\left. \begin{aligned} R_t + \operatorname{div} \mathbf{J} &= 0, \\ \mathbf{J}_t + \nabla \left( \frac{2}{3} RE \right) &= R\mathbf{Q} + c_{11}\mathbf{J} + c_{12}\mathbf{I}, \\ (RE)_t + \operatorname{div} \mathbf{I} &= (\mathbf{J}, \mathbf{Q}) + cR\sigma, \\ \mathbf{I}_t + \nabla \left( \frac{10}{9} RE^2 \right) &= \frac{5}{3} RE\mathbf{Q} + c_{21}\mathbf{J} + c_{22}\mathbf{I}. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{J} = R\mathbf{u}$ ;  $\mathbf{I} = R\mathbf{q}$ ;  $R$  — электронная плотность;  $E$  — энергия электронов;  $\mathbf{u} = (u^{(x)}, u^{(y)})$  — вектор скорости электронов;  $\mathbf{q} = (q^{(x)}, q^{(y)})$  — поток энергии;  $\sigma = \frac{2}{3}E - 1$ ;  $\mathbf{Q} = \nabla\varphi = (\varphi_x, \varphi_y)$ ;  $\varphi = \varphi(t, x, y)$  — электрический потенциал, удовлетворяющий уравнению Пуассона:

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

где  $\rho = \rho(x, y)$  — плотность легирования. Коэффициенты  $c, c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22}$  в системе (1) являются гладкими функциями от  $E$  (см. [2]),  $\beta > 0$  — постоянная.

**1. Постановка задачи.** Гидродинамическая модель (1), (2) используется нами в этой работе для нахождения стационарных решений задачи о переносе заряда в 2D кремниевом транзисторе MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor). Подробное описание такого полупроводникового транзистора с электронной проводимостью приведено в [3]. Характерной особенностью такого транзистора является наличие наноканала из оксида кремния. Схематическое изображение транзистора MOSFET в безразмерных переменных  $x, y$  приведено на рисунке 1.

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

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

$$\Omega = \{(x, y): 0 < x, y < 1\},$$

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

Граничные условия для математической модели (1)–(3) следующие [3, 4]:

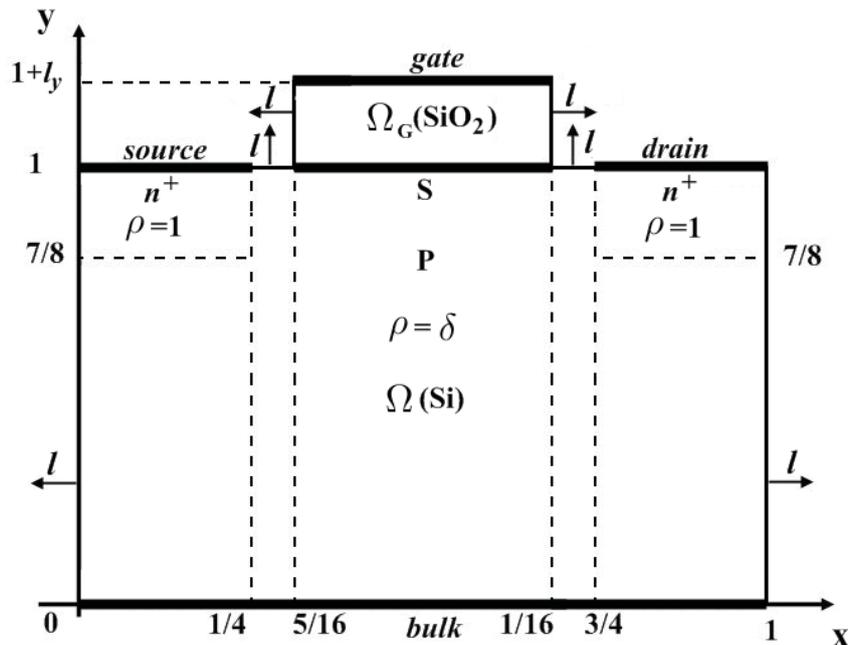


Рис. 1. Схематическое представление 2D кремниевого транзистора MOSFET

$$\varphi = \begin{cases} \ln\left(\frac{N^+}{n_i}\right) \text{ при } y=1, 0 \leq x \leq \frac{1}{4} \text{ (source),} \\ D \text{ при } y=1, \frac{3}{4} \leq x \leq 1 \text{ (drain),} \\ B \text{ при } y=0, 0 \leq x \leq 1 \text{ (bulk);} \end{cases} \quad (4)$$

$$\Phi = G \text{ при } y=1+l_y, \frac{5}{16} \leq x \leq \frac{11}{16} \text{ (gate),} \quad (5)$$

$$(\mathbf{1}, \nabla \varphi) = 0 \text{ на } \Gamma_l, \quad (6a)$$

$$(\mathbf{1}, \nabla \Phi) = 0 \text{ на } \Gamma_l^{(G)}; \quad (6b)$$

условия склейки (см. [4]) на  $S$ :

$$\frac{1}{3} \Phi_y = \varphi_y, \quad \Phi = \varphi, \quad (7)$$

где

$$\Omega_+ = \left\{ (x, y) : \frac{7}{8} < y < 1, \left( 0 < x < \frac{1}{4} \right) \cup \left( \frac{3}{4} < x < 1 \right) \right\},$$

$$S = \left\{ (x, y) : y=1, \frac{5}{16} < x < \frac{11}{16} \right\},$$

$$\Gamma_l = \left\{ (x, y) : x=0 \cup x=1, 0 < y < 1; \right.$$

$$\left. y=1, \left( \frac{1}{4} < x \leq \frac{5}{16} \right) \cup \left( \frac{11}{16} \leq x < \frac{3}{4} \right) \right\},$$

$$\Gamma_l^{(G)} = \left\{ (x, y) : x = \frac{5}{16} \cup x = \frac{11}{16}, 1 < y < 1+l_y \right\},$$

$\mathbf{1}$  — единичный вектор внешней нормали,

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

$$\beta = \frac{e^2 L^2 N^+}{\zeta K_B T_0} > 0, \quad D = \frac{e}{K_B T_0} V_D + \ln\left(\frac{N^+}{n_i}\right),$$

$$G = \frac{e}{K_B T_0} V_G - 10 + \ln\left(\frac{N^+}{n_i}\right), \quad B = -\ln\left(\frac{P_-}{n_i}\right),$$

$V_D, V_G$  — напряжения смещения (в вольтах), размерные параметры  $e, L, N^+, \zeta, K_B, T_0, P_-, n_i$  приведены в таблице 1.

Математическая модель (1), (2) в стационарном случае сводится к системе эллиптических квазилинейных уравнений (т. е. к системе трех уравнений Пуассона) [5]:

$$\begin{aligned} \Delta \sigma &= \mathcal{F}^{(\sigma)}(\nabla \sigma, \nabla R, \mathbf{Q}, \sigma, R) = \\ &= a_1 |\nabla \sigma|^2 + \frac{1}{R} (\nabla R, a_2 \nabla \sigma + a_4 \mathbf{Q}) + \\ &\quad + a_3 (\nabla \sigma, \mathbf{Q}) + a_5 |\mathbf{Q}|^2 + bc\sigma, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Delta R &= \mathcal{F}^{(R)}(\nabla \sigma, \nabla R, \mathbf{Q}, \sigma, R, \rho) = \\ &= b_1 R |\nabla \sigma|^2 + b_2 (\nabla \sigma, \nabla R) + b_3 R (\nabla \sigma, \mathbf{Q}) + \\ &\quad + b_4 (\nabla R, \mathbf{Q}) + b_5 R |\mathbf{Q}|^2 + \frac{\beta}{1+\sigma} (R - \rho) R + ncR\sigma, \end{aligned} \quad (9)$$

Значение физических параметров

$e$	Заряд электрона	$1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$
$L$	Характерный линейный размер	$4 \times 10^{-7} \text{ m}$
$N^+$	Плотность легирования в зоне $n^+$	$10^{23} \frac{1}{\text{m}^3}$
$T_0$	Температура решетки	300К
$K_B$	Постоянная Больцмана	$1.38 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$
$\zeta(\text{Si})$	Диэлектрическая постоянная (Si)	$1.03545 \times 10^{-10} \frac{\text{C}}{\text{Vm}}$
$\zeta(\text{SiO}_2)$	Диэлектрическая постоянная ( $\text{SiO}_2$ )	$\frac{1}{3} \zeta(\text{Si})$
$P_-$	Плотность легирования в зоне P	$10^{20} \frac{1}{\text{m}^3}$
$n_i$	Внутренняя электронная концентрация	$10^{16} \frac{1}{\text{m}^3}$

$$\Delta\varphi = \mathcal{F}^{(\varphi)}(R, \rho) = \beta(R - \rho), \quad (10)$$

а компоненты векторов  $\mathbf{u}, \mathbf{q}$  определяются следующим образом:

$$\begin{cases} \mathbf{u} = F(E) \left\{ \mathbf{Q} - \frac{1+\sigma}{R} \nabla R - F_0(E) \nabla \sigma \right\}, \\ \mathbf{q} = G(E) \left\{ -\mathbf{Q} + \frac{1+\sigma}{R} \nabla R + G_0(E) \nabla \sigma \right\}. \end{cases}$$

Здесь  $|\nabla\sigma|^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$  и т. д.,

$$a_2 = -1 + (1 + \sigma) \{ b' G(E) - a' F(E) \},$$

$$a_3 = a' F(E) - b' G(E) - b F(E) F_0(E),$$

$$a_4 = -b(1 + \sigma) F(E), \quad a_5 = b F(E),$$

$$b_1 = -m' F(E) F_0(E) + n' G(E) G_0(E),$$

$$b_2 = (1 + \sigma) \{ n' G(E) - m' F(E) \},$$

$$b_3 = -\frac{1}{(1 + \sigma)^2} + m' F(E) - n' G(E) - n F(E) F_0(E),$$

$$b_4 = \frac{1}{1 + \sigma} + b F(E) F_0(E), \quad b_5 = n F(E),$$

$$a = a(E) = \frac{2}{5} \frac{c_{21}}{1 + \sigma} - c_{11},$$

$$b = b(E) = \frac{2}{5} \frac{c_{22}}{1 + \sigma} - c_{12},$$

$$m = m(E) = \frac{c_{11} - a}{1 + \sigma}, \quad n = n(E) = \frac{c_{12} - b}{1 + \sigma},$$

$$F(E) = -\frac{c_{22} - \frac{5}{3} E c_{12}}{\det}, \quad G(E) = -\frac{c_{21} - \frac{5}{3} E c_{11}}{\det},$$

$$F_0(E) = 1 - \frac{\frac{5}{3} E c_{12}}{c_{22} - \frac{5}{3} E c_{12}}, \quad G_0(E) = 1 - \frac{\frac{5}{3} E c_{11}}{c_{21} - \frac{5}{3} E c_{11}},$$

$$\det = c_{11} c_{22} - c_{21} c_{12}, \quad a' = \frac{da}{d\sigma} = \frac{3}{2} \frac{da}{dE}$$

и т. д.

Для завершения постановки задачи сформулируем для функций  $\sigma, R$  граничные условия:

$$\left. \begin{aligned} R &= \begin{cases} 1 \text{ при } y = 1, \left( 0 \leq x \leq \frac{1}{4} \right) \cup \left( \frac{3}{4} \leq x \leq 1 \right), \\ 0 \text{ при } y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1; \end{cases} \\ \sigma &= \begin{cases} 0 \text{ при } y = 1, \left( 0 \leq x \leq \frac{1}{4} \right) \cup \left( \frac{3}{4} \leq x \leq 1 \right), \\ 0 \text{ при } y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1; \end{cases} \\ (\mathbf{1}, \nabla \sigma) &= (\mathbf{1}, \nabla R) = 0 \text{ на } \Gamma_1, \\ \sigma_y &= 0, R_y = \frac{R}{1 + \sigma} \varphi_y \text{ на } S. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Граничные условия (11) выставлены в соответствии с рекомендациями из [3, 5].

В работе [6] с помощью вычислительных экспериментов обосновывается метод сведения краевой задачи (2)–(7) об определении электрического потенциала в области  $\Omega \cup \Omega_G$  к задаче для нахождения потенциала только в области  $\Omega$ . С этой целью краевая задача для потенциала доопределяется, т. е. на множестве  $S$  ставится некоторое краевое условие для функции  $\varphi$ :

$$\varphi(x, 1) + 3l_y \varphi_y(x, 1) = G, \quad (x, y) \in S. \quad (12)$$

А потенциал  $\Phi(x, y)$  определяем по следующей формуле:

$$\begin{aligned} \Phi(x, y) &= 3l_y \varphi_y(x, 1) (\eta - 1) + G = \\ &= [G - \varphi(x, 1)] \eta + \varphi(x, 1), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\eta = \frac{y - 1}{l_y}, \quad 0 \leq \eta \leq 1.$$

Таким образом, для поиска стационарных решений задачи о переносе заряда в транзисторе MOSFET (8)–(10), (4), (6а), (11), (12) применяем вычислительный алгоритм, разработанный в [5] и успешно примененный там для расчета конкретных полупроводниковых устройств.

**2. Описание вычислительного алгоритма.** Вычислительная модель, предложенная в [5], основана на применении нестационарных регуляризаций, метода прямых и метода установления.

С этой целью вместо уравнения Пуассона  $\Delta_{xy} \Phi = \Phi_{xx} + \Phi_{yy} = f(x, y)$  рассматриваются его нестационарные регуляризации:

1) параболическая регуляризация

$$u_t = \Delta u - f(x, y); \quad (14)$$

2) регуляризация Соболева

$$u_t - \Delta u_t = \Delta u - f(x, y); \quad (15)$$

3) гиперболическая регуляризация

$$u_t + Ku_t = \Delta u - f(x, y). \quad (16)$$

Здесь  $u = u(t, x, y)$  — новая неизвестная функция;  $K > 1$  — постоянная;  $t > 0$  — временная переменная.

При этом производную  $u_{xx}$  в уравнениях (14)–(16) заменяем не разностным отношением, а используем для аппроксимации ее интерполяционный многочлен с узлами в нулях многочлена Чебышева. В результате получаем краевую задачу ОДУ второго порядка. Для поиска приближенных решений полученных систем ОДУ используем сплайн-интерполяцию. В результате приходим к трехточечной схеме:

$$\begin{aligned} & \left\{ I_N - \frac{h_y^2}{6} B_r \right\} \hat{U}_k - \left\{ I_N + \frac{h_y^2}{3} B_r \right\} \hat{U}_k + \\ & + \left\{ I_N - \frac{h_y^2}{6} B_r \right\} \hat{U}_{k+1} = \frac{h_y^2}{6} \{ P_{k-1} + 4P_k + P_{k+1} \}, \quad (17) \\ & k = \overline{1, K-1} \end{aligned}$$

с краевыми условиями

$$\hat{U}_1 = A_0 \hat{U}_0 + L_0, \quad \hat{U}_K = A_K \hat{U}_{K-1} + L_K. \quad (18)$$

Здесь  $\hat{U}$  — вектор значений неизвестных в узлах интерполяции функции;  $N$  — количество узлов интерполяции;  $I_N$  — единичная матрица порядка  $N$ ;  $h_y$  — ширина сетки сплайн-интерполяции; элементы матриц  $A_0$  и  $A_K$  и компоненты векторов  $L_0$  и  $L_K$  определяются из граничных условий при  $y = 0$  и  $y = 1$ , а конкретные выражения для матрицы  $B_r$  и вектора  $P$  записаны в [5].

Систему алгебраических уравнений (18) будем решать методом матричной прогонки.

Достоинством данной модели является то, что она хорошо согласуется с идеей так называемых алгоритмов без насыщений, т. е. в принципе автоматиче-

ски учитывает априорную гладкость решения исходной задачи.

### 3. Реализация вычислительного алгоритма.

На каждом временном слое в процессе установления необходимо последовательно решать три краевые задачи для регуляризованных уравнений Пуассона (8)–(10).

Для осуществления расчетов нужно определить начальные данные. Задав начальные значения переменных, запускаем цикл метода установления, в котором, отталкиваясь от значений переменных, рассчитанных на предыдущем и текущем временных слоях, вычисляем правые части  $\mathcal{F}^{(\sigma)}(\nabla\sigma, \nabla R, \mathbf{Q}, \sigma, R)$ ,  $\mathcal{F}^{(R)}(\nabla\sigma, \nabla R, \mathbf{Q}, \sigma, R, \rho)$ ,  $\mathcal{F}^{(\varphi)}(R, \rho)$  и решаем уравнения для  $\sigma$ ,  $R$ ,  $\varphi$  соответственно. Данный цикл работает до тех пор, пока решение не установится.

Обсудим теперь результаты вычислительных экспериментов. С этой целью написан программный комплекс на языке Object Pascal в среде Delphi 6, реализующий данный вычислительный алгоритм для поиска стационарных решений задачи о переносе заряда в 2D кремниевом транзисторе MOSFET.

В программе предусмотрено следующее:

1. Задание:

а) параметры, характеризующие вычислительный алгоритм:  $N$  — количество узлов сетки по  $x$ ,  $K$  — количество узлов сетки по  $y$ ,  $\Delta$  — шаг разностной сетки по времени,  $\varepsilon$  — точности (т. е. алгоритм прекращает работу, если

$$\sum_{j=0}^N \sum_{k=0}^N (|R_{jk}^{n+1} - R_{jk}^n| + |\sigma_{jk}^{n+1} - \sigma_{jk}^n| + |\varphi_{jk}^{n+1} - \varphi_{jk}^n|) \leq \varepsilon);$$

б) параметры, характеризующие исходную задачу:  $V_G$  — напряжение на затворе «gate»,  $V_D$  — напряжение на стоке «drain»,  $B$  — безразмерное напряжение на подложке «bulk»,  $l_y$  — толщина наноканала,  $\delta$  — безразмерная плотность легирования в области  $\Omega \setminus \Omega_+$ .

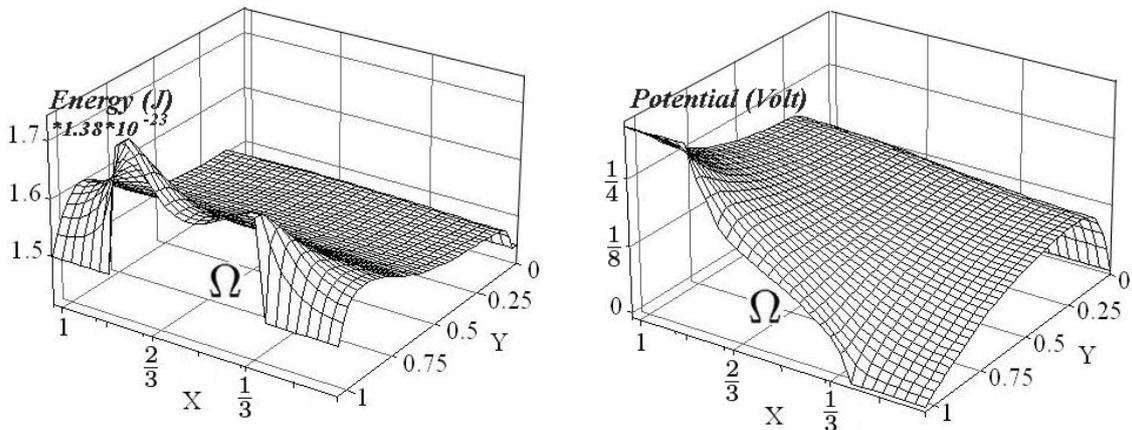


Рис. 2. Стационарные решения для электрического потенциала и энергии электронов

в) начальные данные для искомым функций  $\sigma$ ,  $R$ ,  $\varphi$ .

2. Выбор регуляризации (параболическая, соболевская или гиперболическая).

3. Хранение физических параметров, необходимых для расчетов (табл.).

4. Сохранение полученных данных в файле.

Полученные стационарные решения строим с помощью математического пакета Mathematica. На рисунке 2 представлены стационарные решения для электрического потенциала, энергии электронов. Результаты получены при следующих параметрах:  $V_D = 0.36V$ ,  $V_G = 0.36V$ ,  $B = 0$ ,  $\delta = 0.8$ ,  $l_y = 20nm$ ,  $N = 30$ ,  $K = 40$ ,  $\varepsilon = 10^{-5}$ .

В работе [6] для нахождения стационарных решений задачи о переносе заряда в транзисторе MOSFET применяется метод продольно-поперечной прогонки, но он сходится в десятки раз медленнее, чем алгоритм предложенной в данной статье.

**Заключение.** Проведено множество численных экспериментов. Полученные результаты являются физически правдоподобными и имеют как теоретическую, так и прикладную направленность. Данная работа представляет интерес для специалистов в области вычислительной математики и может быть использована для моделирования физических процессов в полупроводниковых устройствах.

### Библиографический список

1. Anile A.M., Romano V. Non parabolic band transport in semiconductors: closure of the moment equations // *Cont. Mech. Thermodyn.* — 1999. — V. 11.

2. Romano V. 2D simulation of a silicon MESFET with a non-parabolic hydrodynamical model based on the maximum entropy principle // *J. Comp. Phys.* — 2002. — V. 176.

3. Romano V. 2D Numerical Simulation of the MEP Energy — Transport Model with a Finite Difference Scheme // *J. Comp. Phys.* — 2007. — V. 221.

4. Lab C., Caussignac P. An energy-transport model for semiconductor heterostructure devices: application to AlGaAs/GaAs MODFETs // *COMPEL.* — 1999. — V. 18, № 1.

5. Блохин А.М., Ибрагимова А.С., Семисалов Б.В. Конструирование вычислительного алгоритма для системы моментных уравнений, описывающих перенос заряда в полупроводниках // *Математическое моделирование.* — 2009. — Т. 21, № 4.

6. Блохин А.М., Ибрагимова А.С. К вопросу о вычислении электрического потенциала для 2D кремниевого транзистора с наноканалом из оксида кремния // *Математическое моделирование.* — 2010. — Т. 22, № 9.