

Программа для двумерного моделирования ПТБШ в прямоугольнике на основе диффузионно-дрейфовой модели.

Введение

Поставлена задача создать программу, которая будет находить решение диффузионно-дрейфовой модели транзистора, а в дальнейшем и решение квази-гидродинамической модели его же.

Требования к солверу и алгоритмической начинке.

Алгоритмическая начинка: алгоритм Федоренко. Решение всей системы Segregated solver'ом.

Аппроксимация: FVM + схемы высокой разрешающей способности из PHOENICS.

Использовать возможности современного оборудования : Visual C, OpenMP, Cuda C.

0. Каноническая форма уравнения.

Все уравнения которые здесь рассматриваются должны быть приведены к следующей канонической форме, предложенной пионером CFD Б.Сполдингом:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{V} \cdot \Phi) = \nabla(\Gamma \cdot \nabla\Phi) + S_c + S_p \cdot \Phi.$$

Каноническая форма состоит из нестационарного, конвективного, диффузионного и источникового членов. ($S_p \leq 0$).

Каноническая форма уравнения в безразмерном виде с нулевым источниковым членом имеет следующий вид:

$$Sh \frac{\partial(\Phi')}{\partial t'} + \nabla(\vec{V}' \cdot \Phi') = \frac{1}{Re} \nabla(\Gamma' \cdot \nabla\Phi').$$

Здесь и в дальнейшем штрихом обозначены безразмерные величины. Появились следующие безразмерные комплексы: Sh - «Струхаль», Re - «Рейнольдс». Обезразмеривание уравнений производится по описанию,

предложенному в книге Л.Г. Лойцянского «Механика жидкости и газа. » Везде и всюду мы придерживаемся гидродинамической аналогии.

1. Математическая постановка задачи.

Математическая постановка задачи состоит из системы уравнений справедливой для внутренности расчётной области и граничных условий, справедливых на границе области. Для решения важно и то и другое.

1.1 Внутренность области или система уравнений.

Движение электронного газа в двумерном случае в диффузионно - дрейфовом изотермическом приближении описывается следующей системой уравнений заимствованной из [1]:

$\vec{E} = -grad\varphi;$ $\nabla(\varepsilon\vec{E}) = \frac{q}{\varepsilon_0} \cdot (N_D - N_A + p(x, y) - n(x, y));$ $\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} div(\vec{j}_p);$ $\vec{j}_p = q\mu_p p(x, y)\vec{E} - qD_p \nabla p(x, y);$ $D_p = \mu_p \frac{kT_p}{q};$	(1)
$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} div(\vec{j}_n);$ $\vec{j}_n = q\vec{V}_n n(x, y) + qD_n \nabla n(x, y);$ $D_n = \mu_n \frac{kT_n}{q};$ $\vec{V}_n = \mu_n \vec{E} -$	(2)
$\vec{V}_n = \mu_n \vec{E} -$	(3)

где $p(x, y)$ - концентрация положительно заряженных дырок, ε - относительная диэлектрическая проницаемость материала (безразмерная величина), φ - электрический потенциал в вольтах, q - положительный элементарный заряд, ε_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума, $n(x, y)$ - концентрация отрицательно заряженных электронов которая подлежит расчёту, как и потенциал φ и концентрация дырок N_D - концентрация неподвижных

ионизированных доноров (априори заданная величина), $N_A = N_A(x, y)$ - концентрация неподвижных акцепторов (априори заданная величина), $\mu_{0_n} = 0.215$ - подвижность электронов в алмазе при 300K, $\mu_{0_p} = 0.17$ -

подвижность дырок в алмазе при 300K, $\mu_n = \mu_{0_n} \cdot \left(\frac{T_n}{T_{amb}} \right)^{\alpha_n}$ ($\alpha_n = -1.5$ показатель

степени в формуле для электронов, $T_{amb} = 300K$ - комнатная температура, T_n - температура электронного газа) - подвижность электронов в алмазе для разных температур, эта подвижность входит в формулу для диффузионного и

конвективного членов, $\mu_p = \mu_{0_p} \cdot \left(\frac{T_p}{T_{amb}} \right)^{\alpha_p}$ ($\alpha_p = -1.5$) - аналогичная формула для

температурной зависимости подвижности дырок, $\vec{V}_p = \mu_p(x, y) \vec{E}$ - дрейфовая скорость дырок при слабых полях, при сильных полях дрейфовую скорость

дырок можно выразить следующей формулой $\vec{V}_p = \frac{\mu_p(x, y) \cdot \vec{E}}{1 + \frac{\mu_p(x, y) |\vec{E}|}{V_{sat_p}}}$ - дрейфовая

скорость дырок при сильных электрических полях, где V_{sat_p} - модуль скорости насыщения дрейфовой скорости дырок при сильных полях, а также можно

использовать формулу $\vec{V}_p = V_{sat_p} \cdot \left(1 - \exp \left(\frac{-\mu_p(x, y) |\vec{E}|}{V_{sat_p}} \right) \right) \cdot \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|}$, $\vec{V}_n = -\mu_n(x, y) \cdot \vec{E}$ -

дрейфовая скорость электронов при слабых полях (ВНИМАНИЕ !!! обратите внимание на знак минус), при сильных полях можно взять формулу

$\vec{V}_n = -V_{sat_n} \cdot \left(1 - \exp \left(\frac{-\mu_n(x, y) |\vec{E}|}{V_{sat_n}} \right) \right) \cdot \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|}$, где $\vec{E} = -\nabla \varphi$ - напряжённость электрического

поля, k - постоянная Больцмана, T_p - температура дырочного газа, T_n - температура электронного газа.

1.2 Граничные условия.

А. Потенциал электрического поля.

На истоке, стоке и затворе для потенциала стоят заданные условия Дирихле (заданы значения потенциала), а на остальной границе для него стоят однородные условия Неймана (нормальная производная от потенциала на границе области равна нулю). На истоке всегда $\varphi_{II} = 0$; На стоке всегда неотрицательный $\varphi_C = U_{ИС} \geq 0$, на затворе $\varphi_3 = U_{ЗИ} - \varphi_B \leq 0$, где φ_B - высота Барьера Шоттки.

Б. ND-NA.

ND - NA двумерное распределение заданное и известное перед началом моделирования. Это распределение не меняется в процессе вычислений и считывается из текстового файла перед началом вычислений. Распределение в случае двумерной задачи рассматриваемой в данной работе имеет вид :

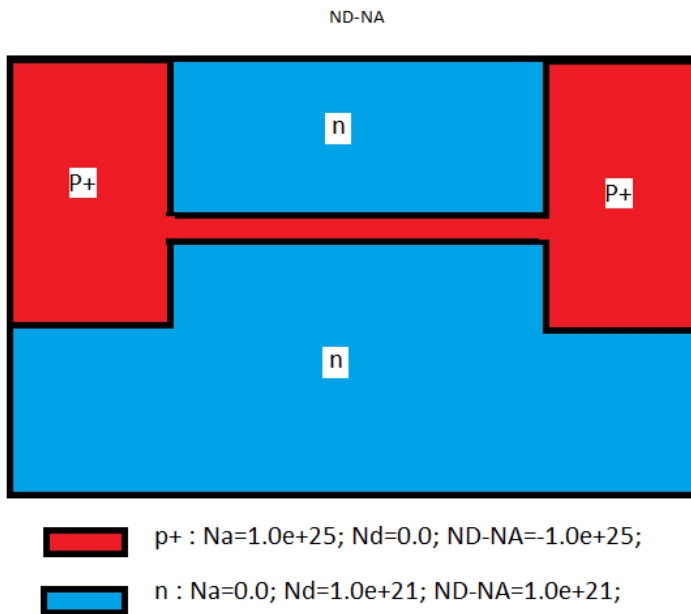


Рис. 1. Схема канального транзистора для тестирования создаваемого программного обеспечения.

В. Концентрация электронов и дырок.

Граничные условия для концентрации электронов n и дырок p на истоке и стоке следуют из условия электронейтральности полупроводника и являются условиями Дирихле (задана концентрация $n = N_D$, $p = N_A$). На затворе для

концентрации ставится граничное условие третьего рода - оно связывает плотность потока носителей с их концентрацией (о нём будет рассказано отдельно). На остальной границе нормальная компонента тока через границу равна нулю (граничное условие третьего рода).

2. Геометрия задачи.

Данная задача рассматривается в условиях прямоугольной геометрии. Рассматривается решение уравнений (1) и (2) в прямоугольнике в подзатворной области. Длина расчётной области 1000нм (1мкм), высота 300нм. Расстояние от истока до затвора 200нм. Протяжённость затвора 200нм. Расстояние от затвора до стока 600нм.

3. Обезразмеривание уравнений.

Обезразмеривание уравнений (1), (2) и (3) очень важно по причине дискретности вещественной арифметики в ЭВМ. Обезразмеривание будем проводить согласно учебнику [3].

3.1 Уравнение для электрического потенциала φ .

Начнём с уравнения для потенциала (1). В каноническом размерном виде оно имеет вид:

$$\nabla(\varepsilon \cdot \nabla \varphi(x, y)) + \frac{q}{\varepsilon_0} \cdot (N_D - N_A + p(x, y) - n(x, y)) = 0, \quad (1.A)$$

$$\text{где } \Gamma = \varepsilon, \quad S_c = \frac{q}{\varepsilon_0} \cdot (N_D - N_A + p(x, y) - n(x, y)), \quad S_p \equiv 0.$$

Обозначим штрихом безразмерные значения электрического потенциала, концентрации электронов, концентрации неподвижных ионизированных доноров N_D , подвижности электронов, времени, координат, напряжённости электрического поля и абсолютной температуры электронного газа электронов.

$$\varphi = \Phi \varphi'; \quad n = N n'; \quad N_D = N \cdot N'_D; \quad \mu_n = M \cdot \mu'_n; \quad t = T t'; \quad x = L x'; \quad y = L y'; \quad \vec{E} = \frac{\Phi}{L} \vec{E}'; \quad T_n = \Theta \cdot \theta'_n.$$

(*)

Аналогично, подвижности дырок, температуры дырочного газа, концентрации неподвижных акцепторов : $\mu_p = M \cdot \mu'_p$, $T_p = \Theta \cdot \theta'_p$, $N_A = N \cdot N'_A$. (продолжение *)

Подставляя эти значения в уравнение для электрического потенциала (1) получим:

$\nabla(\varepsilon \nabla \varphi'(x, y)) + \frac{L^2 q N}{\Phi \varepsilon_0} \cdot (N'_D - N'_A + p'(x, y) - n'(x, y)) = 0$	(1.Б)
--	-------

Где безразмерный комплекс обозначим $So = \frac{L^2 q N}{\Phi \varepsilon_0}$. (So - от Source).

Данная конкретная задача диктует нам следующие масштабы величин:

Масштаб	Значение
L (длина)	1e-8
Φ (потенциал)	1
q/ε_0 (отношение фундаментальных физических постоянных)	1.809516581e-8
N (концентрация) является производным от L и равен $1/L^3$:	1e+24

таблица 1.

Таким образом, значения расстояний для x' и y' измеряются в десятках нанометров (10нм это единица для x' и y'), φ' - измеряется в вольтах, концентрация изменяется в величинах, где единица соответствует концентрации носителей в $1e+24 \text{ м}^{-3}$.

Для таких значений масштабов (значения которых продиктованы конкретной задачей) безразмерный комплекс So равен 1.809516581.

Уравнение (1) приобретает вид :

$\nabla(\varepsilon \nabla \varphi'(x, y)) + So \cdot (N'_D - N'_A + p'(x, y) - n'(x, y)) = 0$	(1.С)
--	-------

Замечание 1. В уравнении (1.С) все величины приличные (порядка единицы). Поэтому для уравнения (1.С) погрешности вещественной арифметики будут существенно меньшими, чем для исходного уравнения (1). Чтобы получить значения рассчитанных величин после решения уравнения (1.С) в единицах СИ то нужно безразмерные рассчитанные значения величин умножить на значения масштабов из таблицы 1.

3.2 Уравнение переноса концентрации электронов n .

Рассмотрим теперь уравнение переноса концентрации электронов. Подставляя значения (*) в уравнение (3) получим:

$\frac{L^2}{TM\Phi} \cdot \frac{\partial n'}{\partial t'} + \nabla (\vec{V}'_n \cdot n') = \frac{k\Theta}{q\Phi} \nabla (D'_n \nabla n')$	(3.A)
---	-------

где $\vec{V}'_n = -\mu'_n(x, y) \cdot \vec{E}'$ - безразмерная дрейфовая скорость электронов при слабых полях, $D'_n = \mu'_n T'_n$ - безразмерный коэффициент диффузии электронов.

Здесь появились два новых безразмерных комплекса. Безразмерный комплекс перед нестационарным членом обозначим по аналогии с числом Струхала Sh_n . Величину обратную комплексу перед диффузионным членом обозначим числом Рейнольдса по аналогии с гидродинамикой Re_n .

Таким образом: $Sh_n = \frac{L^2}{TM\Phi}$ - число «Струхала» для электронного газа, $Re_n = \frac{q\Phi}{k\Theta}$ - число «Рейнольдса» для электронного газа. Оценим значения критериев подобия Sh_n и Re_n для данной конкретной задачи, для этого нам потребуется продолжить таблицу 1 и назвать её продолжение таблицей 2.

таблица 2.

Масштаб	Значение
T (время)	1e-16
Θ (температура)	100
$\frac{q}{k}$ (отношение фундаментальных физических постоянных)	1.160365e+4

М (подвижность)	1.0
-----------------	-----

Таким образом, единица безразмерного времени соответствует $1e-16$ единиц реального, единица температуры соответствует 100K.

С учётом таблицы 2 значение безразмерных комплексов для данной задачи следующие:

$Sh_n=1.0$, $Re_n=116.0365$. Это означает, что конвективный член в уравнении для переноса концентрации носителей преобладает над диффузионным. И основной перенос носителей осуществляется не за счёт диффузии, а за счёт конвекции (т.е. за счёт поля).

Уравнение (3.A) в безразмерном виде имеет вид :

$Sh_n \cdot \frac{\partial n'(x', y', t')}{\partial t'} + \nabla(V'_n \cdot n'(x', y', t')) = \frac{1}{Re_n} \nabla(D'_n \nabla n'(x', y', t'))$	(3.Б)
--	-------

Для уравнения (3.Б) также справедливо замечание (1).

Уравнение 3.Б записано в канонической форме Б. Сполдинга. Под безразмерной скоростью конвективного переноса понимается

$$\vec{V}'_n = -V'_{sat_n} \cdot \left(1.0 - \exp\left(\frac{-\mu'_n \cdot |\vec{E}|}{V'_{sat_n}}\right) \right) \cdot \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|}, \text{ под безразмерным коэффициентом диффузии}$$

понимается величина $D'_n = \mu'_n \cdot T'_n$.

3.3 Уравнение переноса концентрации дырок p.

Рассмотрим теперь уравнение переноса концентрации дырок. Подставляя значения (*) в уравнение (2) получим:

$\frac{L^2}{TM\Phi} \cdot \frac{\partial p'}{\partial t'} + \nabla(\vec{V}'_p \cdot p') = \frac{k\Theta}{q\Phi} \nabla(D'_p \nabla p')$	(2.A)
---	-------

где $\vec{V}'_p = +\mu'_p(x, y) \cdot \vec{E}'$ - безразмерная дрейфовая скорость дырок при слабых полях, $D'_p = \mu'_p T'_p$ - безразмерный коэффициент диффузии дырок.

Здесь появились два новых безразмерных комплекса $Sh_p = \frac{L^2}{TM\Phi} = 1.0$,

$$Re_p = \frac{q\Phi}{k\Theta} = 116.0365;$$

Итоговая форма уравнения запишется в следующем каноническом виде :

$Sh_p \cdot \frac{\partial p'(x', y', t')}{\partial t'} + \nabla(V'_p \cdot p'(x', y', t')) = \frac{1}{Re_p} \nabla(D'_p \nabla p'(x', y', t'))$	(2.Б)
--	-------

Для уравнения (2.Б) также справедливо замечание (1).

Уравнение 2.Б записано в канонической форме Б. Сполдинга. Под безразмерной скоростью конвективного переноса понимается

$$\vec{V}'_p = V'_{sat-p} \cdot \left(1.0 - \exp\left(\frac{-\mu'_p \cdot |\vec{E}|}{V'_{sat-p}} \right) \right) \cdot \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|}, \text{ под безразмерным коэффициентом диффузии}$$

понимается величина $D'_p = \mu'_p \cdot T'_p$. Следует особо обратить внимание на знак + перед дрейфовой скоростью дырок при сильных электрических полях.

4. Граничное условие на затворе для концентрации.

Согласно [1] и [2] на затворе (затвор расположен горизонтально сверху, направление внешней нормали к затвору совпадает с направлением оси Oy) задаётся уравнение термоэмиссионно-диффузионной теории контакта металл-полупроводник. Оно связывает плотность потока электронов с их концентрацией:

$\Gamma \frac{\partial n}{\partial y} = \kappa(n_\infty - n);$	(4.А)
$\Gamma = \frac{\mu_n k T_n}{q};$	(4.Б)
$\kappa = \mu_n E_y + v_p;$	(4.С)
$n_\infty = \frac{n_0 v_p}{\mu_n E_y + v_p};$	(4.Д)

Здесь T_n - температура электронного газа, μ_n - подвижность электронов, Данные выражения зависят также от квазиравновесной концентрации электронов n_0 , а также от скорости термоэлектронной рекомбинации на границе металл-полупроводник ν_p . Приведём формулы для этих величин:

$n_0 = N_C \cdot \exp\left(-\frac{q\varphi_B}{kT_n}\right);$	(4.Е)
$\nu_p = \frac{A^* T_n^2}{q N_C} = K \cdot T_n^2$	(4.Ф)

Здесь фигурируют следующие параметры задачи:

N_C - эффективная плотность состояний в зоне проводимости $N_C = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m^* k T_n}{h^2}\right)^{1.5} M_C$, $A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3}$ - эффективная постоянная Ричардсона.

Значения постоянных для данной задачи следующие:

эффективная плотность состояний в зоне проводимости	N_C	0.3135629064e+25
масса электрона	m_0	0.91095e-30
Эффективная масса $m^* = 0.25 \cdot m_0$	m^*	0.22774e-30
постоянная Планка	h	6.62617e-34
Число ПИ	π	3.141
заряд электрона	q	1.602e-19
Постоянная Больцмана	k	1.3806e-23
эффективная постоянная Ричардсона	A^*	3.0031552e+5
Высота барьера Шоттки в вольтах	φ_B	5.5
Постоянная из формулы (12)	K	0.5978477227

таблица 3.

5. Обезразмеривание граничного условия на затворе.

Безразмерное граничное условие на затворе для концентрации имеет вид:

$\mu' \theta \frac{\partial n'}{\partial y'} = \frac{K \Theta q L}{M k} \cdot N'_C \theta^2 \exp\left(\frac{-q\varphi_B}{k\Xi}\right) - \frac{\Phi q}{\Theta k} \cdot \mu' E'_y n' - \frac{K \Theta q L}{M k} \cdot \theta^2 n'$	(13)
--	------

Обозначим : $B_1 = \frac{K\Theta qL}{Mk}$, $B_2 = \frac{q\varphi_B}{k\Theta}$, $B_3 = \frac{\Phi q}{\Theta k}$, $B_4 = \frac{K\Theta qL}{Mk} = B_1$.

Тогда уравнение (13) запишется в виде:

$\mu' \theta \frac{\partial n'}{\partial y'} = B_1 \cdot N'_c \theta^2 \exp\left(\frac{-B_2}{\theta}\right) - B_3 \cdot \mu' E'_y n' - B_1 \cdot \theta^2 n'$	(14)
---	------

Параметры B_i для данной задачи принимают следующие значения:

Параметр	Значение
B1	6.937114212e-3
B2	638.2447525
B3	116.0445005
N'_c	0.3135629064

таблица 4.

6. Аппроксимация граничных условий.

Каноническая форма граничного условия, согласно С.Патанкару [4] имеет на затворе вид:

$a_p n'_p = a_s n'_s + b$	(15)
---------------------------	------

где P - граничный узел, S - ближайший внутренний снизу узел, b - правая часть.

Значения коэффициентов на затворе для концентрации после приведения подобных слагаемых вычисляются по формуле:

$a_p = \mu' \theta + B_3 (\delta y')_s \mu' E'_y + B_1 (\delta y')_s \theta^2$	(16.1)
$a_s = \mu' \theta$	(17.1)
$b = B_1 N'_c (\delta y')_s \theta^2 \exp\left(\frac{-B_2}{\theta}\right)$	(18.1)

Казалось бы, используя формулы (16.1-18.1) вопрос с граничным условием на затворе можно считать закрытым. Но если присмотреться к уравнению (16.1) более пристально и сравнить его с уравнением (17.1) можно обнаружить, что для данной дискретизации граничного условия на затворе нарушены правила Патанкара (нарушено диагональное преобладание). Диагональный

коэффициент a_p может быть меньше чем внедиагональный коэффициент a_s . Наш алгоритм основан на сглаживателе Гаусса-Зейделя (алгоритм Гаусса-Зейделя является базовым итерационным алгоритмом в многосеточном методе). А для метода Гаусса-Зейделя, согласно критерию Скарбороу, для сходимости требуется диагональное преобладание.

Запустим алгоритм на основе формул 16.1 -18.1 и убедимся в невыполнении диагонального преобладания:

Таблица 5.

a_p	a_s	$B_3(\delta y')_s \mu' E'$
3.834109e-3	7.390332e-3	-9.799718e-3
1.165406e-2	1.648293e-2	-1.107237e-2
1.876650e-2	2.337328e-2	-1.085027e-2
2.573604e-2	3.012519e-2	-1.063264e-2

Таблица 5 наглядно демонстрирует невыполнение критерия Скарбороу. Поэтому применим метод отложенной коррекции (неявно учтём только те зависимости, которые удовлетворяют диагональному преобладанию, а остаток запишем в правую часть, т.е. явно). Согласно методу отложенной коррекции граничное условие на затворе для концентрации принимает следующий вид:

$a_p = \mu' \theta + B_1 (\delta y')_s \theta^2, \quad B_1 > 0, \quad (\delta y')_s > 0, \theta^2 > 0$ (обеспечивается строгое диагональное преобладание, сравни с a_s)	(16.2)
$a_s = \mu' \theta$	(17.2)
$b = B_1 N'_C (\delta y')_s \theta^2 \exp\left(\frac{-B_2}{\theta}\right) - B_3 (\delta y')_s \mu' E'_y \cdot n'_{p_old_iteration}$ <small>or old time step</small>	(18.2)

Форма записи граничного условия на затворе для концентрации (16.2,17.2,18.2) обладает диагональным преобладанием и удовлетворяет критерию Скарбороу. Форма 16.2-18.2 замедляет скорость передачи информации о граничном условии на затворе, благодаря чему процесс решения всей нелинейной задачи становится более устойчивым. Если сравнивать процедуру решения нелинейной системы уравнений с задачей минимизации, то, применяя метод отложенной коррекции, мы сокращаем размер шага в направлении градиента

(антиградиента) и тем самым точно не пропустим (не промахнёмся мимо) точку экстремума.

Стандартные граничные условия формируются следующим образом (например, для потенциала):

Условие Дирихле: $\varphi = U_{ИС}$	$a_p = 1.0; a_s = 0.0; b = U_{ИС};$
Однородные условия Неймана: $\frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0$	$a_p = 1.0; a_s = 1.0; b = 0.0;$

Для концентрации всё несколько сложнее:

На свободной границе полный ток равен нулю. Например рассмотрим нижнюю границу расчётной области :

$$j_{py} = q\mu_p p(x) E_y - qD_p \frac{dp(x)}{dy};$$

$$D_p = \mu_p \frac{kT}{q};$$

$$a_p p_p = a_n p_n + b$$

$$a_p = a_n = \frac{kT}{qh_y};$$

$$b = -\frac{1}{2} \left(\frac{E_{yp} + E_{yn}}{2} \right) \cdot (p_n + p_p);$$

Верхняя граница расчётной области:

$$a_p p_p = a_s p_s + b$$

$$a_p = a_s = \frac{kT}{qh_y};$$

$$b = +\frac{1}{2} \left(\frac{E_{yp} + E_{ys}}{2} \right) \cdot (p_s + p_p);$$

Правая граница:

$$a_p p_p = a_w p_w + b$$

$$a_p = a_w = \frac{kT}{qh_x};$$

$$b = +\frac{1}{2} \left(\frac{E_{xp} + E_{xw}}{2} \right) \cdot (p_w + p_p);$$

Левая граница (ток равен нулю):

$$a_p p_p = a_E p_E + b$$

$$a_p = a_E = \frac{kT}{qh_x};$$

$$b = -\frac{1}{2} \left(\frac{E_{xp} + E_{xE}}{2} \right) \cdot (p_E + p_p);$$

Нормировка: мы разделим правую часть, т.е. b на $\frac{kT}{qh}$ тем самым получив

$$a_p = a_w = 1.0.$$

Граничное условие нулевой нормальный ток через границу:

$$j = \mu_p F_p p_p - D_p \frac{p_s - p_p}{\delta x_p} = 0;$$

Множитель $\mu_p F_p$ может быть как положительным, так и отрицательным.

Представим его в следующем виде: $\mu_p F_p = f_{\max}(0.0, \mu_p F_p) + f_{\min}(0.0, \mu_p F_p) (*)$ здесь первое слагаемое положительно, а второе отрицательно. Каноническая форма записи граничного условия имеет вид: $a_p p_p = a_E p_E + b$.

Для коэффициентов a_p, a_E должно выполняться правило положительности значений. Используя представление (*) формулы для коэффициентов можно записать в виде:

$$a_p = f_{\max}(0.0, \mu_p F_p) + \frac{D_p}{\delta x_p};$$

$$a_E = \frac{D_p}{\delta x_p}; \quad b = -f_{\min}(0.0, \mu_p F_p) \cdot p_p;$$

Для такой формы записи выполняется правило Патанкара насчёт положительности коэффициентов.

6.5. Надёжные граничные условия для концентрации на затворе.

Самое надёжное и простое граничное условие на затворе это однородное условие Дирихле для концентрации. Т.е. положим $n_3 = N_{\text{собственная}} \approx 10^{13} \frac{1}{\text{см}^3}$.

Во вторых можно предложить поставить условие равенства нулю тока (диффузионный ток + конвективный ток = нулю).

7. Аппроксимация уравнений.

При аппроксимации уравнений мы стремимся применять схемы аппроксимации, применяемые без ограничения общности в самых разнообразных условиях. Под разнообразными условиями понимаются различные расчётные сетки: обычные прямоугольные, треугольные, шестигранные соты, произвольный выпуклый многогранник возникающий, например, в методе подсеточного разрешения геометрии. Данные сетки способны описать довольно сложную геометрию. Единственное ограничение на такие сетки накладывает алгоритм решения СЛАУ, т.е. сетка должна допускать вложенность - состоять из группы вложенных сеток каждая последующая из которых более грубая и как бы вложена в подробную сетку.

Способом аппроксимации на таких сетках является метод контрольного объёма (МКО) предложенный проф. Минесотского университета С.Патанкаром. Данный метод аппроксимации (МКО) подходит для аппроксимации уравнения конвекции-диффузии. Уравнение конвекции диффузии имеет вид:

$\underbrace{\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t}}_{\text{нестационарный}} + \underbrace{\nabla(\rho\vec{V}\Phi)}_{\text{конвективный}} = \underbrace{\nabla(\Gamma\nabla\Phi)}_{\text{диффузионный}} + \underbrace{S_C + S_P \cdot \Phi}_{\text{источниковый}}$	(19)
---	------

где ρ - коэффициент перед нестационарным членом, \vec{V} - поле скоростей с компонентами u и v , Γ - коэффициент диффузии, $S_C + S_P \cdot \Phi$ - линеаризованный источниковый член, для него должно быть $S_P < 0$ согласно правилам Патанкара.

Данное уравнение содержит нестационарный, конвективный, диффузионный и источниковый члены.

Квазигидродинамические уравнения (1) и (2) также являются частными случаями уравнения конвекции - диффузии (19).

Для простейшей декартовой прямоугольной сетки аппроксимация по способу контрольного объёма принимает вид:

$$a_P \Phi_P = a_E \Phi_E + a_W \Phi_W + a_N \Phi_N + a_S \Phi_S + b,$$

где

$$a_E = D_e A(|P_e|) + [-F_e, 0]; a_W = D_w A(|P_w|) + [F_w, 0];$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + [-F_n, 0]; a_S = D_s A(|P_s|) + [F_s, 0];$$

$$b = S_C \Delta x \Delta y + a_P^0 \Phi_P^0;$$

$$D_e = \frac{\Gamma_e \Delta y}{(\delta x)_e}; D_w = \frac{\Gamma_w \Delta y}{(\delta x)_w}; D_n = \frac{\Gamma_n \Delta x}{(\delta y)_n}; D_s = \frac{\Gamma_s \Delta x}{(\delta y)_s}; \text{ коэффициенты диффузии,}$$

$$F_e = (\rho u)_e \Delta y; F_w = (\rho u)_w \Delta y; F_n = (\rho v)_n \Delta x; F_s = (\rho v)_s \Delta x; \text{ коэффициенты конвекции,}$$

$$P_e = \frac{F_e}{D_e}; P_n = \frac{F_n}{D_n}; P_w = \frac{F_w}{D_w}; P_s = \frac{F_s}{D_s}; \text{ - сеточные числа Пекле.}$$

$A(|P|) = \left[0, (1 - 0.1|P|)^5 \right]$ - схема со степенным законом, придуманная С.Патанкарком.

8. Насыщение дрейфовой скорости дырок в Алмазе.

От того насколько правильно будет воспроизведена данная зависимость (см. рис. 1) зависит правдоподобие расчёта и его сходимость. Поэтому чрезвычайно важно точно воспроизвести данную зависимость.

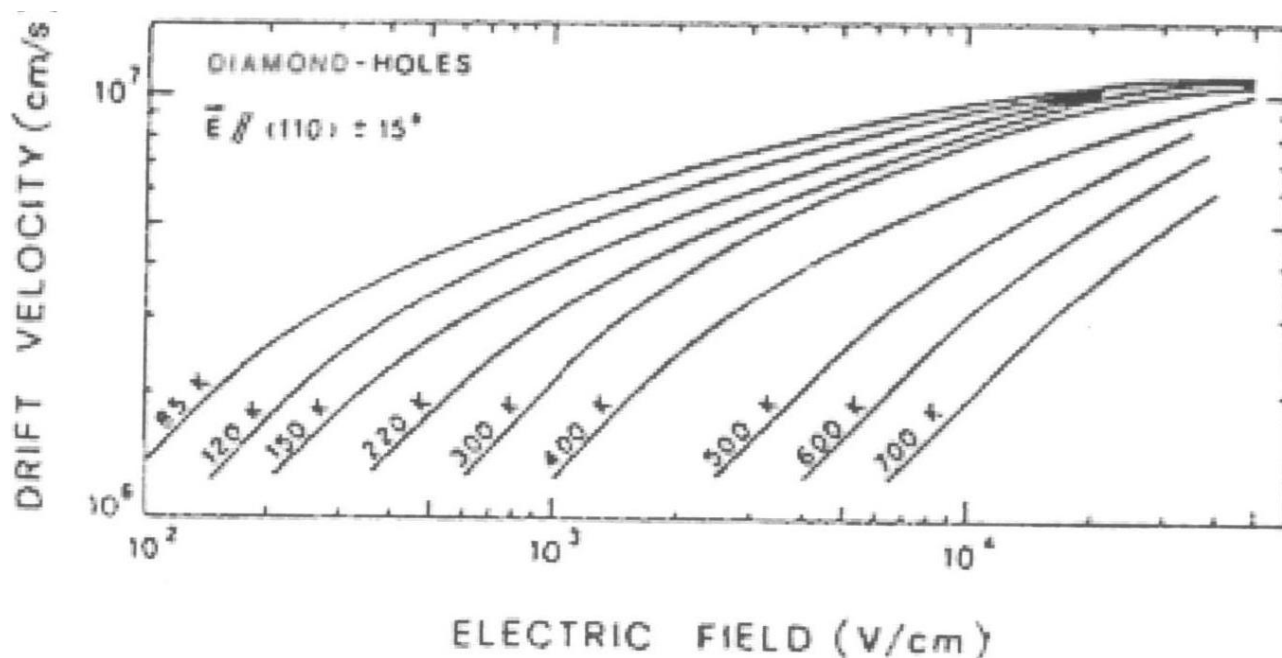


Рис. 1. Дрейфовая скорость дырок в алмазе в зависимости от температуры.

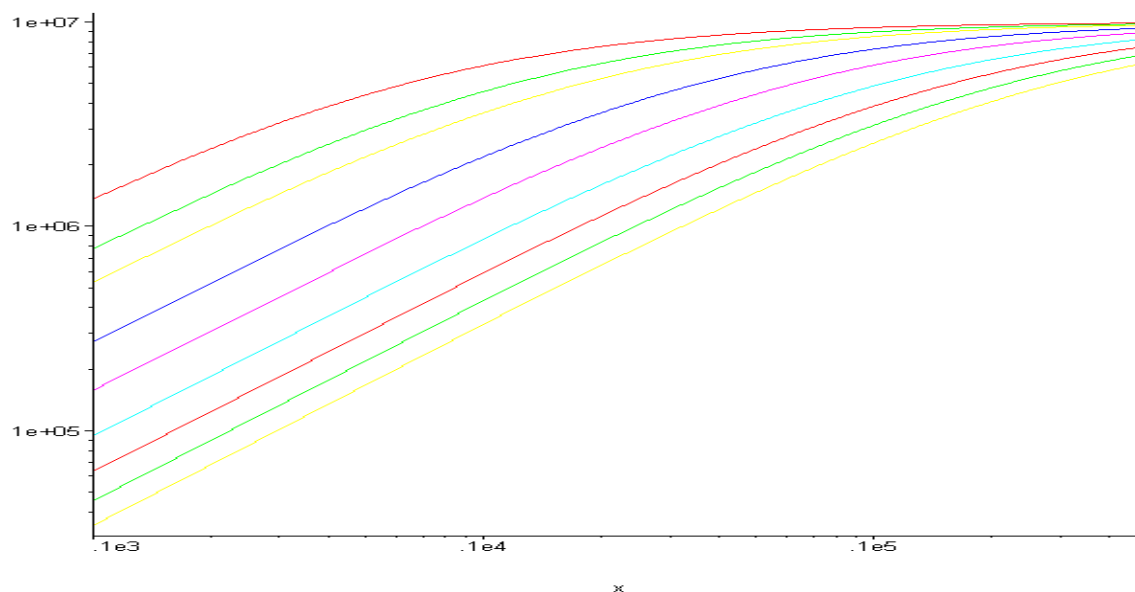


Рис. 2 . Аппроксимация зависимости с рисунка 1.

Для аппроксимации используется следующая формула:

$$V_{дрейфа} = \frac{\mu_0 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-1.813} \cdot |E|}{1.0 + \frac{\mu_0 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-1.813} \cdot |E|}{V_{sat}}},$$

здесь $\mu_0 = 1600 \frac{см^2}{В \cdot с}$ - подвижность дырок при слабых полях, $V_{sat} = 10^7 \frac{см}{с}$ - скорость насыщения дрейфовой скорости дырок (верхний предел дрейфовой скорости), T - температура в К, $|E|$ - модуль напряжённости электрического поля В/см.

8.1. Безразмерная напряжённость электрического поля.

Если график рис. 1 справедлив в диапазоне $E \in [10^2..5 \cdot 10^4] \frac{В}{см}$, то это будет $E \in [10^4..5 \cdot 10^6] \frac{В}{м}$,

в безразмерных единицах при выбранных масштабах это будет $E' \in [10^{-4}..5 \cdot 10^{-2}] \frac{\Phi}{L}$.

Безразмерный $V_{sat} = 10^{-3} \frac{L}{T}$, безразмерная подвижность $\mu_0 = 0.16 \frac{L^2}{\Phi T}$.

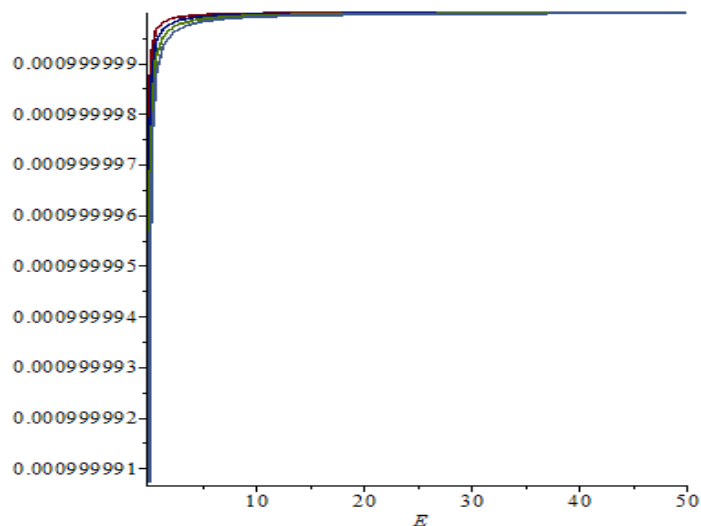
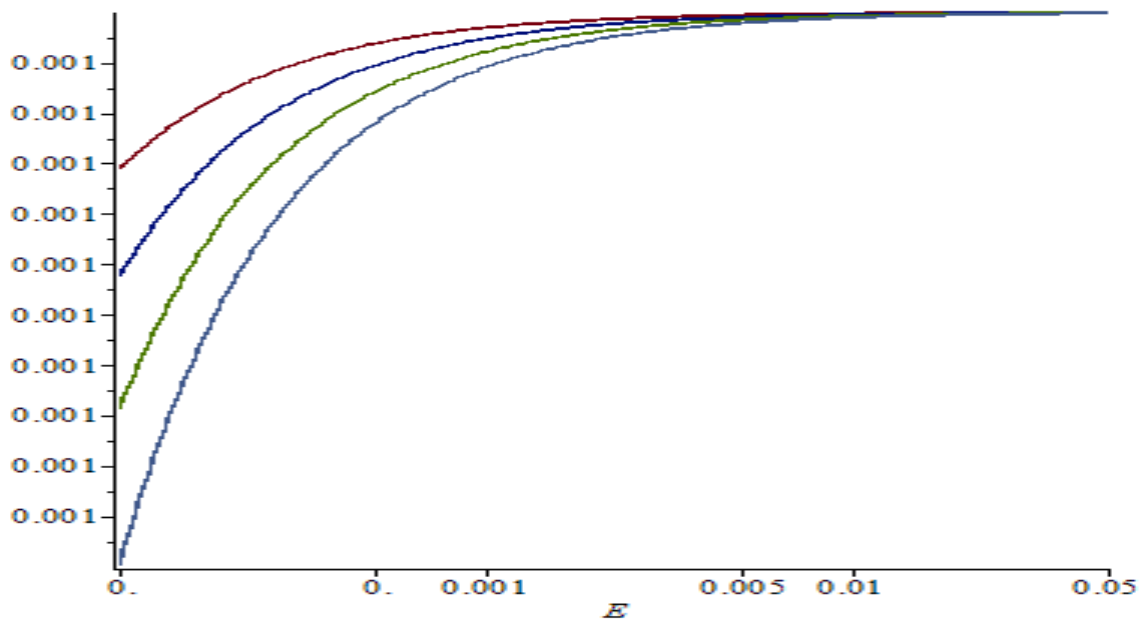


Рис. 3. Дрейфовая скорость при полях E рассчитанных программой.

По результатам численного дифференцирования найденного поля потенциала среднее значение модуля напряжённости порядка 1.0, а максимальное значение порядка 23.5. Это для области размерами $100 \cdot 100 \text{ нм}^2$ и напряжениях $v_{\text{drain}} = +5\text{В}$, $v_{\text{gate}} = 0.0$ - $\varphi_{\text{III}} = -5.5\text{В} < 0.0$. Вывод. дрейфовая скорость при таких полях равна скорости насыщения $v_{\text{sat}} = 10^{-3} \frac{L}{T}$. Тот же график при значениях $E' \in [10^{-4}..5 \cdot 10^{-2}] \frac{\Phi}{L}$ даёт:



9. Влияние нагрева.

После начала расчёта температура активной области ПТШ начинает расти. Это приводит к тому, что мы имеем температуры большие, чем начальная и, следовательно, при том-же модуле напряжённости электрического поля меньшую дрейфовую скорость см. рис. 2. Меньшая дрейфовая скорость более благоприятна для сходимости вычислительного процесса. Судя по последним вычислительным экспериментам, дрейфовая скорость во всей расчётной области равна своему предельному максимальному значению.

Введём постоянную: $\tau_e = 1nc = 10^{-12}c$ - время релаксации энергии.

Расчёт нового значения температуры во внутренних точках активной области производится по явной схеме в соответствии с формулой:

$\begin{aligned} \Xi^{new} = & \Xi + \frac{5\tau}{3n} \nabla \left(\mu \Xi \vec{E} n + \mu \Xi \nabla \left(\frac{k \Xi n}{q} \right) \right) + \\ & + \frac{2q\tau}{3k} \mu (E_x^2 + E_y^2) + \frac{2q\tau}{3kn} \left(\mu \vec{E} \nabla \left(\frac{k \Xi n}{q} \right) \right) - \frac{\tau}{\tau_e} (\Xi - \Xi_0); \end{aligned}$	(20)
--	------

В граничных точках температуру можно получить копированием из ближайшей внутренней точки (если бы мы решали уравнение теплопередачи, то это бы было эквивалентно однородным условиям Неймана на всей границе области).

Здесь предполагается, что нам известны текущие значения подвижности $\mu(x, y)$, напряжённости электрического поля $\vec{E}(x, y)$, температуры $\Xi(x, y)$ и концентрации носителей $n(x, y)$. Здесь также фигурируют постоянные τ - шаг по времени, τ_e - время релаксации энергии, q - положительный элементарный заряд, k - постоянная Больцмана, Ξ_0 - температура, полученная путём численного моделирования трёхмерного теплоотвода (прибор в корпусе на массивном теплоотводе. Это отдельная задача, которая решается отдельно т.к. её характерные времена намного больше времён характерных для моделирования активной области ПТШ. Для моделирования активной области ПТШ температура Ξ_0 является параметром сообщаемым извне.).

Формула [20] получена из работы [1]. Формулу 20 будем называть «update temperature». Такой «update temperature» должен происходить каждый шаг по времени. В программе нужно сделать так, чтобы влияние нагрева всегда можно было отключить.

10. Обезразмеривание «update temperature».

Так как в программе мы работаем в безразмерных величинах, то процедура "update temperature" также должна быть записана в безразмерном виде.

$\theta^{new} = \theta + \frac{B_8 \tau'}{n'} \nabla \left(\Phi \mu' \theta \vec{E}' n' + \mu' \nabla (B_5 \theta n') \right) +$ $+ B_7 \tau' \mu' (E_x'^2 + E_y'^2) + \frac{B_6 \tau'}{n'} \left(\mu' \vec{E}' \nabla (B_5 \theta n') \right) - \frac{\tau'}{\tau_e'} (\theta - \theta_0);$	(21)
--	------

Здесь штрихованные величины безразмерны. При этом у нас получились следующие безразмерные комплексы:

Имя комплекса	Формула	значение
B_5	$\frac{k\Theta}{q}$	8.61798e-3
B_6	$\frac{2M\Phi Tq}{3\Theta L^2 k}$	77.35766667
B_7	$\frac{2M\Phi^2 Tq}{3\Theta L^2 k}$	77.35766667
B_8	$\frac{5TM}{3L^2}$	1.6667
τ_e'	Время релаксации энергии	1e+4

При использовании явной схемы нет механизмов, ограничивающих температуру электронного газа. При использовании явной схемы (даже при сильной нижней релаксации и передачи в явную схему ограниченных значений дрейфовой скорости вместо очень больших значений напряжённости электрического поля) всё равно наблюдается неуклонный рост температуры, который ничем не ограничивается. В итоге спустя некоторое количество расчётных итераций температура увеличится и наступит переполнение вещественной арифметики. Также было обнаружено, что нижний предел температур также уменьшается и когда он становится отрицательным, возникает переполнение вещественной арифметики. Нижняя релаксация способна лишь замедлить этот процесс, но не остановить его, т.к. насыщения температуры при явной схеме не наблюдается (нет ограничивающих температуру механизмов).

Вывод. Надо использовать неявную схему т.к. в ней имеются механизмы ограничивающие температуру. Например, граничные условия Дирихле будут препятствовать неограниченному росту температуры).

11. Уравнение переноса для температуры электронного газа.

Решать уравнение переноса для энергии значительно лучше, чем воспользоваться явной схемой, т.к. появляется больше механизмов контролируемых изменения температуры. К числу таких механизмов, прежде всего, относятся граничные условия (например, Дирихле) а также можно прибегнуть к искусственному ограничению источникового члена в уравнении энергии.

Рассмотрим величину: $w = \frac{3}{2}kT$ - средняя кинетическая энергия электронов (носителей). Пусть n - концентрация носителей. Определим относительный коэффициент Пельтье $\xi = \frac{5}{3}$ - это просто константа. Сформулируем уравнение переноса для величины nw . Уравнение энергии принимает вид:

$\frac{\partial(nw)}{\partial t} + \nabla(\xi \vec{V}nw) = \nabla(\xi D_n \nabla(nw)) + S_{\text{dimensional}}$	(22)
---	------

Это обычное уравнение конвекции-диффузии. Вид источникового члена $S_{\text{dimensional}}$ пока уточнять не будем. Уравнение энергии (22) записано в размерном виде. Уравнение энергии нужно обезразмерить. Безразмерное уравнение энергии принимает вид:

$Sh_{nw} \frac{\partial(n'\theta)}{\partial t'} + \nabla(\vec{V} \cdot n'\theta) = \frac{1}{Re_{nw}} \nabla(D_n \nabla(n'\theta)) + S$	(23)
--	------

здесь все величины безразмерные, а \vec{V} - дрейфовая скорость (та же самая что используется в уравнении для концентрации, т.е. тоже ограничена при сильных полях как и в уравнении для концентрации), $D_n = \mu'\theta$ - коэффициент диффузии

(тот же самый что используется в уравнении для концентрации, т.е. с учётом искусственной диффузии.).

Безразмерные комплексы равны:

Название комплекса	Формула	значение
Sh_{nw}	$\frac{1}{\Phi M \xi}$	0.6
Re_{nw}	$\frac{3q\Phi}{2k\Theta}$	174.0667508

Источниковый член в размерном виде принимает значение

$$S_{dimensional} = q\vec{E} \cdot \vec{j}_n - \frac{n(w - w_0)}{\tau_e} =$$

$$= q\mu_n n (E_x^2 + E_y^2) + q\vec{E} \nabla (D_n n) - \frac{n(w - w_0)}{\tau_e}$$

Начнём обезразмеривать источниковый член согласно учебнику Л.Г.Лойцянского.

$$S_{размерный} = \frac{qMN\Phi^2}{L^2} \mu' n' |E'|^2 + \frac{q\Phi kM\Theta N}{L^2 q} \vec{E}' \cdot \nabla (\mu' \theta n') - \frac{3}{2} \frac{Nk\Theta}{T} \cdot \frac{n'(\theta' - \theta_{amb})}{\tau_e'};$$

Это выражение надо домножить на величину $\frac{2L^2}{3k\xi\Phi MN\Theta}$. Произведём домножение:

$S = B_9 \mu' n' E' ^2 + B_{10} \vec{E}' \cdot \nabla (\mu' \theta n') - B_{11} \cdot \frac{n'(\theta' - \theta_{amb})}{\tau_e'};$	(24)
---	------

Безразмерный источниковый член в уравнении энергии. Здесь все величины безразмерны.

Безразмерные комплексы равны:

Название комплекса	Формула	Значение
--------------------	---------	----------

B_9	$\frac{2q\Phi}{3k\xi\Theta}$	46.4146
B_{10}	$\frac{2}{3\xi}$	0.4
B_{11}	$\frac{1}{\xi\Phi M}$	0.6

После процедуры обезразмеривания все величины принимают "приличные" значения и их можно использовать при вычислениях на ЭВМ.

Максвеловское время релаксации энергии принимает значение $1e+4$ в безразмерных единицах (это $1\text{пс}=1e-12\text{с}$ в размерных).

12. Решение уравнений.

13. Результаты математического моделирования.

14. Заключение.

Литература.

1. Г.З.Гарбер Нелинейное динамическое моделирование полевых СВЧ транзисторов с затвором Шоттки на арсениде галлия. Обзоры по электронной технике Серия 2 Полупроводниковые приборы Выпуск 2(1532) М. ЦНИИ "Электроника" 1990г. (граничное условие на затворе для уравнения концентрации).
2. С. Зи Физика полупроводниковых приборов. М. "МИР" 1984.
3. Л.Г. Лойцянский Механика жидкости и газа.
4. С. Патанкар Численные методы теплообмена и динамики жидкости. М.Энергия, 1984.

5. Г.З. Гарбер Двумерное нелокальное моделирование полевых транзисторов с затвором Шоттки на арсениде галлия. Обзоры по электронной технике. Серия 2. Полупроводниковые приборы. Выпуск 3 (1341) 1988.