

A. Mirnik, B. Zajc
 Univerza Edvarda Kardelja
 Fakulteta za elektrotehniko
 Ljubljana, Tržaška 25

Numerična analiza polprevodniških struktur
 z metodo končnih elementov

Numerical Analysis of Semiconductor Structures
 with the Aid of the Finite Element Method

VSEBINA - V članku je prikazana izpeljava enačb, potrebnih za numerično analizo polprevodniških struktur s pomočjo metode končnih elementov. Izpeljane enačbe veljajo tako pri eno- kot pri dvodimenzijki analizi. Predstavljeni so rezultati enosmerne enodimenzijske analize matematičnega modela polprevodniške diode. Poleg tega je podana tudi primerjava z metodo končnih diferenc.

ABSTRACT - The derivation of the systems of equations for the numerical analysis of mathematical models of semiconductor devices with the aid of the finite element method is presented in this paper. The derived equations can be used in one- as well as in two-dimensional analysis. The results of DC one-dimensional analysis of semiconductor junction diode are shown and some comparison between the finite element method and the finite difference method are done.

1. UVOD

Metoda končnih elementov je nastala v zvezi z letalsko industrijo leta 1956. Najprej so jo uporabljali pri analizi procesov, ki jih lahko opišemo z Laplaceovo ali s Poissonovo enačbo. Ti enačbi lahko preprosto prevedemo na iskanje minimuma funkcionala. Leta 1963 je Melosh dokazal, da je metoda končnih elementov del Rayleigh-Ritzove metode. Lee in Szabo (1969) ter Szi-
 enkiewicz (1972) pa so pokazali, da lahko enačbe mehanike, prenosa toplote in druge rešujemo z metodo uteženih residuov, kot npr. Galerkinova metoda.

To pomeni, da z metodo končnih elementov lahko rešujemo poljubne parcialne diferencialne enačbe. Osnovni princip metode je v tem, da območje analize razdelimo na elemente, na njih pa konstruiramo linearno neodvisne poskusne funkcije $\psi_i(x_j), \psi_i(x_j) = \delta_{ij}$. Linearna kombinacija teh funkcij predstavlja približek rešitve /6/. Naša naloga je torej v tem, da poiščemo koeficiente linearne kombinacije.

2. MATEMATIČNI MODEL POLPREVODNIŠKIH STRUKTUR

Matematični model polprevodniških struktur predstavljajo Poissonova enačba ter kontinuitetni in transportni enačbi za elektrone in vrzeli (en. 1 do 5). Podane so v normirani obliki.

$$-\nabla v = p - n + N \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \bar{J}_n + G \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \bar{J}_p + G \quad (3)$$

$$\bar{J}_n = -\mu_n (n\nabla v - \nabla n) \quad (4)$$

$$\bar{J}_p = -\mu_p (p\nabla v + \nabla p) \quad (5)$$

Simboli v enačbah (1) do (5) imajo standardni pomen. Potrebno je še določiti robne in začetne pogoje. Na kontaktnih predpostavimo neskončno hitrost površinskih rekombinacij, zato tam vlada termodinamično ravnovesje. Potencial ter koncentraciji elektronov in vrzeli so zato na kontaktnih poznani/4,5/. Na izoliranih robovih pa predpostavimo ničelno hitrost površinskih rekombinacij. Zato bodo normalne komponente tokovih gostot enake nič. Vektor \bar{n} predstavlja normalo na rob v smeri iz območja analize. Zato bodo tudi normalne komponente gradientov potenciala ter koncentracij elektronov in vrzeli enake nič.

$$\bar{n} \bar{J}_n = \bar{n} \bar{J}_p = 0 \quad (6)$$

$$\bar{n} \nabla n = \bar{n} \nabla p = 0 \quad (7)$$

$$\bar{n} \nabla v = 0 \quad (8)$$

Območje analize označimo z Ω , njegov rob pa z Γ .

Začetni pogoji so podani kot enosmerne razmere pred preklpom.

3. IZPELJAVA SISTEMOV ENAČB

Poissonova enačba

Vse enačbe bomo reševali z Galerkinovo metodo. Poissonovo enačbo množimo s poskusno funkcijo φ_i ter integriramo preko celotnega območja Ω . Pri tem lahko uporabimo še divergenčni teorem in Greenove formule.

$$\int_{\Gamma} \varphi_i \bar{n} \nabla v \, ds = \iint_{\Omega} (\nabla v \nabla \varphi_i - (p - n + N) \varphi_i) \, dS \quad (9)$$

Leva stran enačbe (9) je enaka nič za vsa vozlišča območja Ω , ki ne ležijo na kontaktih. Če leži vozlišče i v notranjosti, je na robu funkcija φ_i enaka nič, če pa leži na izoliranem robu, pa je robni pogoj enak nič. Za vsa vozlišča, ki ležijo na kontaktih, pa leva stran enačbe (9) predstavlja negativno vrednost električnega naboja, ki je povezan z vozliščem i .

Ker je Poissonova enačba nelinearna, jo lineariziramo z uvedbo popravka potenciala $\mathcal{J}/1,2,3/$.

$$v = v_0 + \mathcal{J} \quad (10)$$

Desno stran enačbe razvijemo v Taylorjevo vrsto okoli prejšnje vrednosti potenciala v_0 in upoštevamo le linearni in konstantni del vrste. Za popravek \mathcal{J} veljajo homogeni robni pogoji.

$$-\Delta \mathcal{J} + (p+n) \Big|_{v_0} \mathcal{J} = (p-n+N) \Big|_{v_0} + \Delta v_0 \quad (11)$$

Enačbo rešujemo z Galerkinovo metodo.

$$\int_{\Gamma} \varphi_i (\bar{n} \nabla v_0 + \bar{n} \nabla \mathcal{J}) \, ds = \iint_{\Omega} (\nabla \varphi_i \nabla \mathcal{J} + (p+n) \Big|_{v_0} \mathcal{J} - (p-n+N) \Big|_{v_0} \varphi_i + \nabla \varphi_i \nabla v_0) \, dS \quad (12)$$

Za levo stran enačbe veljajo enaki razmisleki, kot pri enačbi (10). Za vse spremljivke vpeljemo linearne kombinacije poskusnih funkcij (13).

$$u = \sum u_i \varphi_i \quad (u = v, \mathcal{J}, n, p, N, G) \quad (13)$$

Če upoštevamo še linearnost operacij integriranja in seštevanja ter obravnavamo le vozlišča izven kontaktov, dobimo matrično enačbo za popravek potenciala (14).

$$(K^v + L) \mathcal{J} = M (p - n + N) \Big|_{v_0} - K^v v_0 \quad (14)$$

Člene matrik lahko izračunamo po formulah (15).

$$K_{ij}^v = \iint_{\Omega} \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j \, dS ; \quad M_{ij} = \iint_{\Omega} \varphi_i \varphi_j \, dS ; \quad L_{ij} = \iint_{\Omega} (p+n) \Big|_{v_0} \varphi_i \varphi_j \, dS \quad (15)$$

Kontinuitetni enačbi

Kontinuitetni enačbi rešujemo popolnoma enako. Zato bomo izpeljali le enačbo za koncentracijo elektronov. Enačbo (2) obravnavamo z Galerkinovo metodo, pri tem pa uporabimo divergenčni teorem. V tako dobljeno enačbo vstavimo še transportno enačbo (4) in dobimo:

$$\int_{\Gamma} \varphi_i \bar{n} \bar{J}_n \, ds = \iint_{\Omega} (-\nabla \varphi_i \mu_n (n \nabla v - \nabla n) - \varphi_i G + \varphi_i \frac{\partial n}{\partial t}) \, dS \quad (16)$$

Leva stran enačbe 16 je enaka nič za vsa vozlišča i , ki ne ležijo na kontaktih.

Če vstavimo vanjo linearne kombinacije (13), dobimo sistem enačb za koncentracijo elektronov.

$$M \frac{\partial n}{\partial t} + K^n n = M G \quad (17)$$

$$K_{ij}^n = \iint_{\Omega} \mu_n (\nabla \varphi_i \nabla \varphi_j - \nabla v \nabla \varphi_i \varphi_j) \, dS \quad (18)$$

Za vsa vozlišča i , ki leže na kontaktih, pa predstavlja izraz na levi strani enačbe (16) tokovo gostoto elektronov skozi to vozlišče.

Zapišimo še enačbo za koncentracijo vrzeli.

$$M_i \frac{\partial P_i}{\partial t} + K_i^P p_i = M_i G \quad (19)$$

$$K_{ij}^P = \iint \mu_{ij} (\nabla \varphi_i \nabla \varphi_j + \nabla v \nabla \varphi_i \varphi_j) dS \quad (20)$$

Tokove gostote

Za izračun tokovih gostot skozi kontakte uporabimo enačbe (9), (15) ter (17) do (20), kjer vozlišče i leži na kontaktu. Enačbo (9) odvajamo na čas t , negativna vrednost tega odvoda pa predstavlja tako imenovani nadomestni tok skozi vozlišče i /4/, ki nastopa le ob prehodnem pojavu. Integrale lahko izrazimo kar s členi matrik (15), (18) in (20). Podobno naredimo tudi pri kontinuitetnih enačbah. Tako lahko tokove gostote skozi vozlišče i računamo po naslednjih enačbah:

$$I_{d_i} = \sum_{j=1}^n -K_{ij}^V \frac{\partial v_j}{\partial t} + M_{ij} \frac{\partial P_j}{\partial t} - M_{ij} \frac{\partial n_j}{\partial t} \quad (21)$$

$$I_{n_i} = \sum_{j=1}^n K_{ij}^n n_j - M_{ij} G_j + M_{ij} \frac{\partial n_j}{\partial t} \quad (22)$$

$$I_{p_i} = \sum_{j=1}^n -K_{ij}^P p_j + M_{ij} G_j - M_{ij} \frac{\partial P_j}{\partial t} \quad (23)$$

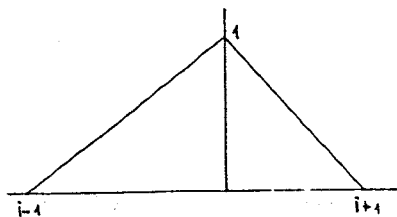
Poskusne funkcije

Na posameznih elementih konstruiramo poskusne funkcije φ_i .

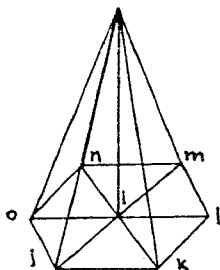
$$\varphi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & ; i = j \\ 0 & ; i \neq j \end{cases} \quad (24)$$

Obravnavamo le linearne funkcije. Pri enodimenzijski analizi so to strešne funkcije (slika 1), pri dvodimenzijski analizi pa piramidne funkcije (slika 2). S pomočjo lastnosti poskusnih funkcij φ_i lahko člene matrik enostavno izračunamo z integracijo preko posameznih elementov. Potencial ter koncentraciji elektronov

in vrzeli so na posameznih elementih odvisni le od vozliščnih vrednosti, ki pripadajo tem elementom.



Slika 1: Strešna funkcija

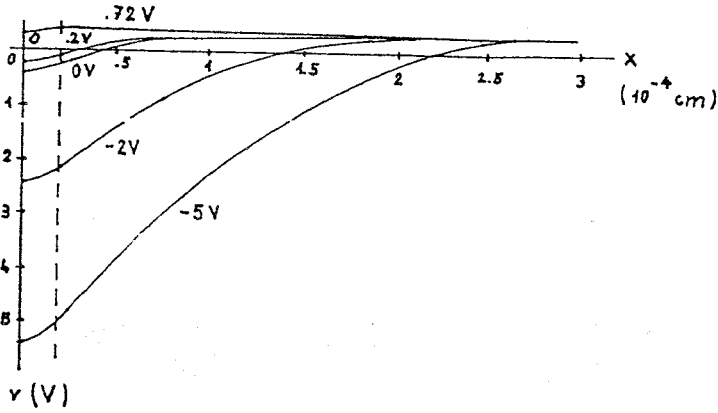


Slika 2: Piramidna funkcija

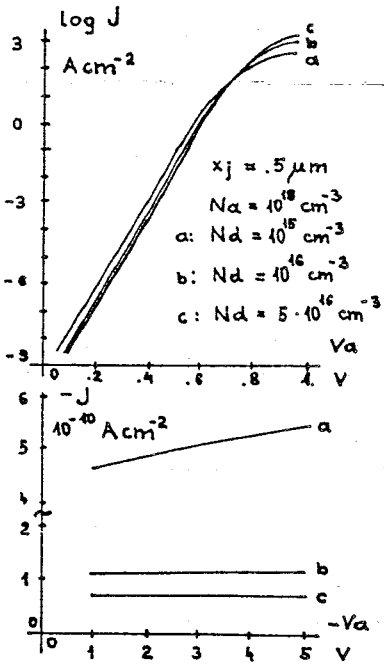
4. REZULTATI

Na koncu si pogledimo še nekaj rezultatov enodimenzijske enosmerne analize polprevodniške diode. V vseh enačbah odpadejo časovni odvodi. Izbrali smo zelo kratko strukturo ($3\ \mu\text{m}$) s koncentracijo akceptorjev $10^{18}\ \text{cm}^{-3}$ in donorjev $10^{15}\ \text{cm}^{-3}$ ter s spojem pri $0.2\ \mu\text{m}$ od anodnega kontakta. Uporabljena je Gaussova porazdelitev primesi. Poteke koncentracij elektronov in vrzeli tu ne prikazujemo, medtem ko potek potenciala kaže slika 3. Na slikah 4 in 5 pa vidimo I-U karakteristike diode pri različnih koncentracijah donorjev in akceptorjev ter pri različnih mestih metalurškega spoja.

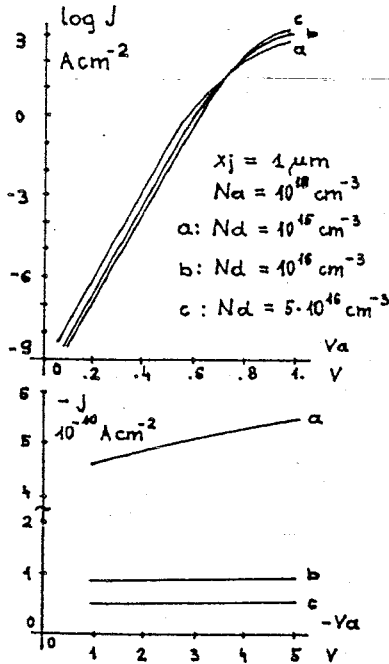
Če primerjamo metodi končnih elementov in končnih diferenc, lahko ugotovimo, da metoda končnih elementov hitreje konvergira. Če bi vzeli poskusne funkcije višjega reda, pa bi bila konvergenca še hitrejša. Poleg tega lahko pri metodi končnih elementov geometrijsko mrežo poljubno zgostimo na mestih, kjer pričakujemo velike spremembe. Pasovna širina matrik je pri metodi končnih elementov sicer večja, kot pri metodi končnih diferenc. Ker pa lahko izberemo manjše število točk v mreži, so dimenzije matrik manjše. Metoda končnih diferenc se zaplete pri izbiri neuniformnega koraka, pri metodi končnih elementov pa je težavnost računanja enaka pri enakomerni in neenakomerni porazdelitvi točk v mreži. Na račun manjše dimenzije matrik in poskusnih funkcij višjega reda pa se pri metodi končnih elementov poveča število računskih operacij, kar pa zopet kompenziramo z manjšo zasedenostjo računalniškega spomina. Pri analizi polprevodnikov z metodo končnih elementov pa ugotovimo, da drži



Sl.: 3.



Sl.: 4.



Sl.: 5.

tudi Kirchhoffov tokovni zakon (vsota vseh tokov, ki pritekajo in odtekajo, je enaka nič).

5. ZAKLJUČEK

Metoda končnih elementov predstavlja uspešen matematični pripomoček za analizo polprevodniških struktur. Uspešna je zlasti pri dvodimenzijski analizi. Če pa uvedemo še poskusne funkcije višjega reda, se lahko število vozlišč oziroma dimenzije matrik sistemov enačb močno zmanjšajo. Poleg tega lahko enostavno upoštevamo vse nelinearne efekte (efekt visokega dopiranja, odvisnost gibljivosti od dopiranja in jakosti električnega polja, ...). Možna je tudi analiza prehodnih pojavov, vendar bi morali časovne odvode obravnavati z metodo končnih diferenc, ker bi sicer prišlo do nepravilne relacije med rezultati v dveh ali večih zaporednih trenutkih.

6. LITERATURA

- /1/ A. Mirnik: Diplomsko delo, Fakulteta za elektrotehniko, Ljubljana, 1979
- /2/ A. Mirnik: Magistrsko delo, Fakulteta za elektrotehniko, Ljubljana, 1981
- /3/ B. Zajc, F. Škedelj, A. Mirnik: Numerično reševanje polprevodniških struktur, Elektrotehniški vestnik, Ljubljana, št. 4, 1979
- /4/ J.J. Barnes, R.J. Lomax: Finite Element Methods in Semiconductor Device Simulation, IEEE Trans., vol. ED-24, No. 8, 1977
- /5/ Tohru Adachi, Akira Yoshii, Tsuneta Sudo: Two-Dimensional Semiconductor Analysis Using Finite Element Method, IEEE Trans., vol. ED-26, No. 7, 1979
- /6/ G. Strang, G.J. Fix: An Analysis of the Finite Element Method, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1973.