V.267
XXVII JUGOSLOVENSKA KONFERENCIJA ETAN-a, STRUGA, 6 — 10. JUNA 1983. GODINE

B. Zajc, A. Mirnik

Univerza E. Kardelja
Fakulteta za elektrotehniko
Ljubljana

ANALIZA POLPREVODNIŠKIH STRUKTUR Z METODO KONČNIH ELEMENTOV: DOLOČANJE MATRIK SISTEMA ENAČB

ANALYSIS OF SEMICONDUCTOR STRUCTURES WITH THE AID OF THE FINITE ELEMENT METHOD: MATRIX EVALUATION OF THE SYSTEM OF EQUATIONS

VSEBINA: V članku je prikazano določevanje posameznih matrik sistema enačb, ki je nastal po minimizaciji funkcionalov, v katere smo prevedli osnovne polprevodniške enačbe. Izpeljavo tega sistema smo predstavili preteklo leto. Izbrali smo linearne testne funkcije in sicer strešne pri enodimenzionalni in piramidne funkcije pri dvodimenzionalni obravnavi.

ABSTRACT: The evaluation of the matrices of the set of equations proceeding from the minimization of the functionals into which the fundamental semiconductor equations has been transformed. The derivation of this set was presented last year. Linear test functions has been chossen: ramp functions for one- and pyramide functions for two- dimensional analysis.

1. UVOD

Osnovne polprevodniške enačbe, kontinuitetni in Poissonova, sta biti prevedeni v obliko funkcionalov [1]. Po minimizaciji funkcionalov smo dobili enačbe, ki jih tu ponovno zapišimo. Namesto Poissonove enačbe smo dobili matrično enačbo za popravek potenciala

$$(K^V + L)\delta = M(p-n+N)\Big|_{v_0} - K^V v_0 \qquad \ldots \quad (1)$$

namesto kontinuitetnih enačb pa enačbi za koncentracije elektronov in vrzeli

$$M\frac{\partial n}{\partial t} + K^n n = MG$$
$$M\frac{\partial p}{\partial t} + K^p p = MG \qquad \dots \quad (2)$$

pri tem pa so bile matrike definirane takole

$$K^v_{ij} = \iint_\Omega \nabla\varphi_i \nabla\varphi_j dS; \quad M_{ij} = \iint_\Omega \varphi_i \varphi_j \, dS; \quad L_{ij} = \iint_\Omega (p+n)\Big|_{V_0} \varphi_i \varphi_j dS$$
$$K^n_{ij} = \iint_\Omega \mu_n(\nabla\varphi_i\nabla\varphi_j - \nabla v\nabla\varphi_i \varphi_j) dS;$$
$$K^p_{ij} = \iint_\Omega \mu_p(\nabla\varphi_i\nabla\varphi_j + \nabla v\nabla\varphi_i \varphi_j) dS \qquad \dots \quad (3)$$

Najbolj zanimive pri taki analizi so tokovne gostote, ki jih skozi vozlišče i računamo po naslednjih enačbah:

$$I_{p_i} = \sum_{j=1}^{n} -K^p_{ij} p_j + M_{ij} G_j - M_{ij}\frac{\partial p_j}{\partial t}$$
$$I_{n_i} = \sum_{j=1}^{n} K^n_{ij} n_j - M_{ij} G_j + M_{ij}\frac{\partial n_j}{\partial t} \qquad \dots \quad (4)$$

Metoda zahteva rešitev navedenih enačb, vendar je predhodno potrebno določiti vse matrike K^v, M, L, K^n in K^p. O tem pa nameravamo spregovoriti v tem članku.

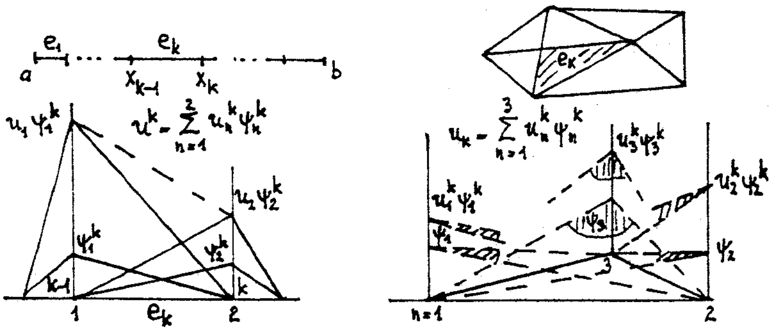
2. IZRAČUN ELEMENTOV MATRIK

2.1 Enodimenzijska analiza

Za testne funkcije bomo uporabili strešne funkcije, ki jih prikazuje slika 1a in enačba

$$\varphi_i = \begin{cases} 0 & ; \; x \le x_{i-1} \\ (x-x_{i-1})/(x_i-x_{i-1}) & ; \; x_{i-1} \le x \le x_i \\ (x_{i+1}-x)/(x_{i+1}-x_i) & ; \; x_i \le x \le x_{i+1} \\ 0 & ; \; x \ge x_{i+1} \end{cases} \qquad \dots \quad (5)$$

Na posmaznem elementu e_k bosta od nič različni le funkciji φ_{k-1} in φ_k, ki pripadata vozliščema k-1 in k. Zato bodo vse matrike tridiagonalne. Postopek računanja matrik pa vršimo na sledeč način. K vsakemu členu matrik, ki bo različen od nič, izračunamo prispevek posameznega elementa, nato pa te prispevke seštejemo. Na vsakem elementu e_k torej izračunamo štiri člene: (k-1,k-1), (k-1, k), (k,k-1) in (k,k). Le-ti sestavljajo matriko R^k dimenzije 2x2.



Slika 1: Testne funkcije: a) strešne in b) piramidne funkcije

$$R^k = \begin{bmatrix} R^k_{11}, & R^k_{12} \\ R^k_{21}, & R^k_{22} \end{bmatrix} \qquad R_k = \begin{array}{c} (o) \\ \\ (k-1) \\ (k) \\ \\ (n) \\ \end{array} \begin{bmatrix} o \ldots o & , & o \ldots o \\ \vdots \quad \vdots & & \vdots \quad \vdots \\ o \ldots R^k_{11} & , & R^k_{12} \ldots o \\ o \ldots R^k_{21} & , & R^k_{22} \ldots o \\ \vdots \quad \vdots & & \vdots \quad \vdots \\ o \ldots o & , & o \ldots o \\ (o) \quad (k-1) & & (k) \quad (n) \end{bmatrix}$$

$$R = \sum_{k=o}^{n} R_k \qquad \ldots \quad (6)$$

Matriko R^k lahko preuredimo v matriko R_k dimenzije $(n+1)x(n+1)$. Če vse matrike R_k seštejemo, dobimo iskano matriko R. Zato bo naša naloga le izračun prispevka posameznih elementov k celotni matriki, torej le izračun matrike R^k.

Ko celotno matriko R izračunamo, lahko zaradi znanih vrednosti iskanih funkcij v vozlišču o (robni pogoj) črtamo prvo vrstico v matrikah. Prvi stolpec pa upoštevamo na desni strani matričnih enačb. Podobno lahko naredimo pri n-tem vozlišču.

Izračunajmo torej matrike M, K^v, L, K^n in K^p. Na k-tem elementu nastopata od nič različni funkciji φ_{k-1} in φ_k.

$$\varphi_{k-1} = (x_k - x)/h_k$$
$$\varphi_k = (x - x_{k-1})/h_k$$
$$h_k = x_k - x_{k-1} \qquad \ldots \quad (7)$$

Vsak integral lahko zapišemo kot vsoto delnih integralov. Zato lahko namesto integracije preko celotnega območja Ω izvedemo integracijo preko posameznih elementov, potem pa te integrale seštejemo. Najprej izračunajmo matriko M.

$$M_{ij} = \sum_{k=1}^{n} M_{ijk} = \sum_{k=1}^{n} \int_{e_k} \varphi_i \varphi_j dx \quad \ldots (8)$$

Členi matrike M_k bodo različni od nič le za $i=k-1,k$ in $j=k-1,k$. Po enostavnem integriranju dobimo matriko M^k, ki jo vstavimo v matriko M_k.

$$M^k = \frac{h_k}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \ldots (9)$$

Na popolnoma enak način izračunamo še matriko K^v.

$$K^{vk} = \frac{1}{h_k} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \ldots (10)$$

Nekoliko se izračun zaplete pri matriki L. Tukaj razmišljamo takole. Koncentraciji p in n sta na elementu e_k odvisni le od vrednosti v vozliščih k-1 in k.

$$n^k = \varphi_{k-1} n_{k-1} + \varphi_k n_k$$
$$p^k = \varphi_{k-1} p_{k-1} + \varphi_k p_k \quad \ldots (11)$$

Če zgornja izraza vstavimo v enačbo za L_{ij} (3) dobimo za matriko L:

$$L^k = \frac{h_k}{12}\left((p_{k-1}+n_{k-1}) \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} + (p_k+n_k) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}\right) \quad \ldots (12)$$

Pri izračunu matrik K^n in K^p razmišljamo enako. Potencial na elementu e_k lahko zapišemo:

$$v^k = \varphi_{k-1} v_{k-1} + \varphi_k v_k \quad \ldots (13)$$

Poleg tega sta gibljivosti elektronov in vrzeli μ_n in μ_p zaradi lastnosti strešnih funkcij na posameznem elementu konstantni. Če to upotevamo, lahko izračunamo člene matrik K^n in K^p

$$K^{nk} = \frac{\mu_{nk}}{h_k}\left(\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} - \frac{v_k - v_{k-1}}{2} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\right)$$

$$K^{pk} = \frac{\mu_{pk}}{h_k}\left(\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{v_k - v_{k-1}}{2} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\right) \quad \ldots (14)$$

2.2 Dvodimenzionalna analiza

Poskusne funkcije izberemo kot piramidne funkcije (16). Zato polprevodniško strukturo razdelimo na trikotnike. Na elementu e_k so piramidne funkcije izražene z izrazom

$$\begin{bmatrix}\psi_1^k\\ \psi_2^k\\ \psi_3^k\end{bmatrix} = \frac{1}{2P_k}\begin{bmatrix} x_2^k y_3^k - x_3^k y_2^k) + (y_2^k - y_3^k)x + (x_3^k - x_2^k)y \\ (x_3^k y_1^k - x_1^k y_3^k) + (y_3^k - y_1^k)x + (x_1^k - x_3^k)y \\ (x_1^k y_2^k - x_2^k y_1^k) + (y_1^k - y_3^k)x + (x_2^k - x_1^k)y \end{bmatrix} \qquad \dots (15)$$

Pri tem $\psi_{n_i}^k$ pomeni funkcijo φ_i na elementu e_k. Na posameznem elementu pa lahko še upoštevamo relacijo

$$\iint_{e_k} \psi_i^l \psi_j^m \psi_k^n \, dS = \frac{l!\ m!\ n!}{(l+m+n+2)!}\, 2P_e \qquad \dots (16)$$

Postopamo enako kot pri enodimenzijski analizi. Matrike računamo na posameznih elementih, na koncu pa vse prispevke posameznih elementov k členom matrike seštejemo. Računamo torej matriko R^k dimenzije 3x3.

$$\begin{array}{c} (o) \\ \\ \\ R_k = (n_2) \\ (n_3) \\ )n) \\ \end{array} \begin{bmatrix} o \ldots o \ldots o \ldots o \ldots o \\ o \quad R_{11}^k \ldots R_{12}^k \ldots R_{13}^k \ldots o \\ o \ldots R_{22}^k \ldots R_{22}^k \ldots R_{23}^k \ldots o \\ o \ldots R_{31}^k \ldots R_{32}^k \ldots R_{33}^k \ldots o \\ o \ldots o \ldots o \ldots o \ldots o \end{bmatrix} \qquad R^k = \begin{bmatrix} R_{11}^k & R_{12}^k & R_{13}^k \\ R_{21}^k & R_{22}^k & R_{23}^k \\ R_{31}^k & R_{32}^k & R_{33}^k \end{bmatrix}$$

$$(o) \quad (n_1) \quad (n_3) \quad (n_3) \quad (n) \qquad \dots (17)$$

Le-to vstavimo v matriko R_k, ki predstavlja prispevek posameznega elementa k celotni matriki. Na koncu pa zopet seštejemo vse matrike R_k in dobimo matriko R, ki jo iščemo.

Kot pri enodimenzijski analizi lahko integral preko celotnega območja Ω razbijemo na vsoto integralov preko elementov e_k. Poglejmo matriko M. Število elementov naj bo t.

$$M_{ij} = \sum_{k=1}^{t} M_{ijk} = \sum_{k=1}^{t} \iint_{e_k} \psi_{n_i}^k \psi_{n_j}^k \, dS \qquad \dots (18)$$

Z upoštevanjem izraza (16) dobimo v primeru, kada sta vozlišči i in j sosedni na elementu e_k, izraz za M_{ij}

$$M_{ijk} = \begin{cases} P_k/6\ ; & i=j \\ P_k/12; & i \neq j \end{cases} \qquad \dots (19)$$

Za nesosedna vozlišča i in j je člen $M_{ij}=0$.

Ker so piramidne funkcije na posameznem elementu linearne, bo njihov gradient na tem elementu konstanten. Zapišimo komponento gradienta.

$$a^k=\begin{bmatrix} y_2^k-y_3^k \\ y_3^k-y_1^k \\ y_1^k-y_2^k \end{bmatrix} \qquad b^k = \begin{bmatrix} x_3^k-x_2^k \\ x_1^k-x_3^k \\ x_2^k-x_1^k \end{bmatrix} \qquad \dots (20)$$

S pomočjo zgornjih izrazov lahko izračunamo prispevek elementa e_k k matriki K^V.

$$K^V_{ij} = \sum_{k=1}^{t} K^V_{ijk} = \sum_{k=1}^{t} \iint_{e_k} \nabla\psi^k_{n_i} \nabla\psi^k_{n_j}\, dS$$

$$K^V_{ijk} = (a^k_{n_i} a^k_{n_j} + b^k_{n_i} b^k_{n_j})/(4P_k) \qquad \dots (21)$$

Na elementu e_k so vrednosti koncentracij elektronov in vrzeli ter potenciala odvisne od treh vozliščnih vrednosti.

$$n^k = \sum_{i=1}^{3} n_{n_i}\psi^k_{n_i} \quad p^k = \sum_{i=1}^{3} p_{n_i}\psi^k_{n_i} \quad v^k = \sum_{i=1}^{3} v_{n_i}\psi^k_{n_i} \qquad \dots (22)$$

Zato lahko brez težav izračunamo matriko L, če v izraz (3c) vstavimo zgornje izraze za koncentraciji n in p.

$$L_{ij} = \sum_{k=1}^{t} L_{ijk} = \sum_{k=1}^{t} \iint_{e_k} (p^k+n^k)\, \psi^k_{n_i}\psi^k_{n_j}\, dS$$

$$L_{ijk} = P_k \sum_{m=1}^{3} (p_{n_m} + n_{n_m}) \begin{cases} 1/60\ ; & n_i \neq n_j \neq n_m \\ 1/10\ ; & n_i = n_j = n_m \\ 1/30; & \text{ostalo} \end{cases} \qquad \dots (23)$$

Enako velja za potencial v matrikah K^n in K^p.

$$K^p_{ij} = \sum_{k=1}^{t} K^p_{ijk} = \sum_{k=1}^{t} \iint_{e_k} \mu_p (\nabla\psi^k_{n_i}\nabla\psi^k_{n_j} + \nabla v^k \nabla\psi^k_{n_i}\psi^k_{n_j})\, dS \qquad \dots (24)$$

Tudi pri dvodimenzijski analizi sta gibljivosti elektronov in vrzeli na posameznem elementu konstantni. Zato dobimo:

$$K^n_{ijk} = \frac{\mu_n}{12P_k}(3(a^k_{n_i} a^k_{n_j} + b^k_{n_i} b^k_{n_j}) - \sum_{m=1}^{3} v_{n_m}(a^k_{n_i} a^k_{n_m} + b^k_{n_m} b^k_{n_j}))$$

$$K^p_{ijk} = \frac{\mu_p}{12P_k}(3(a^k_{n_i} a^k_{n_j} + b^k_{n_i} b^k_{n_j}) + \sum_{m=1}^{3} v_{n_m}(a^k_{n_i} a^k_{n_m} + b^k_{n_i} b^k_{n_m})) \qquad \dots (25)$$

3. ZAKLJUČEK

Metoda končnih elementov se je izkazala kot zelo uspešna, kakor na drugih tehničnih področjih, tudi pri analizi polprevodniških struktur. Temelji na variacijskem računu, kjer je potrebno minizirati ustrezno odvisnost v obliki funkcionala. Običajno se tak problem prevede na reševanje Eulerjeve parcialne diferencialne enačbe, ki pa je v splošnem nerešljiva. Zato uvedemo aproksimativne testne funkcije in tvorimo njihovo linearno kombinacijo tako, da dani funkcional minimiziramo. To kombinacijo pa lahko izračunamo z reševanjem algebrskega sistema enačb. Izpeljavo teh enačb smo predstavili preteklo leto, sedaj pa smo skušali predstaviti zapleteno določevanje matrik, ki v njih nastopajo. Področje, ki ga analiziramo, je razdeljeno na posamezne elemente e_k, nad njimi pa konstruiramo testne funkcije, ki nam enostavnejše aproksimativno reševanje problema omogočijo. Izbrane funkcije so take, da so dovolj enostavne za numerično reševanje. Lahko pa upoštevamo seveda tudi testne funkcije višjega reda, ki bi povečale konvergenco.

Literatura:

1 A. Mirnik, B. Zajc: Numerična analiza polprevodniških struktur z metodo končnih elementov; XXVI. Jugoslovenska konferencija ETAN-a, Subutica 1982, str. I. 385

2 G. Strang, G.J.Fix: An Analysis of the Finite Element Method, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1973