

УДК 517.957

МЕТОДИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М. В. Горбатенко, С. С. Дьяков, Д. В. Опасин, Б. Н. Шамраев
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Рассмотрены разностные схемы для решения уравнений непрерывности носителей заряда в полупроводниках с целью выбора экономичной схемы для решения многомерных задач воздействия излучения на полупроводники. Описана модификация классической кинетики Шокли–Холла–Рида, сохраняющая заряд при рекомбинации. Проведено сравнение результатов расчетов с аналитическими оценками и экспериментальными данными по пробой ($p-n$)-перехода.

Ключевые слова: статистика носителей заряда, дрейф, диффузия, кинетика рекомбинации, пробой ($p-n$)-перехода.

Введение

Целью работы является отбор моделей и схем счета для решения многомерных задач воздействия излучения на функционирование полупроводниковых приборов. Исследования методического характера необходимы для совершенствования моделей физических процессов, подбора значений параметров моделей и повышения точности используемых математических методов моделирования. Для анализа результатов используются экспериментальные данные из различных источников.

Воздействие излучения моделируется источниками пар *электрон–дырка*. Результат воздействия обычно оценивается по фототокам при релаксации заряда за счет процессов переноса носителей заряда и кинетики рекомбинации.

Методические расчеты выявили ряд недостатков моделей и расчетных схем. Во–первых, общепринятая схема линеаризации системы уравнений переноса носителей заряда и Пуассона с последующим использованием метода Ньютона в условиях сильной неравновесности при действии источника требует большого числа итераций на шаге по времени [1, 2]. Во–вторых, классическую кинетику Шокли–Холла–Рида (ШХР) [3–8] можно использовать только в стационарном случае. В нестационарном случае необходимо решать систему дифференциальных уравнений для концентраций носителей заряда и возбужденных примесей либо модифицировать уравнения кинетики.

1. Основные уравнения

При моделировании процессов переноса заряда в полупроводниках и диэлектриках в одномерном случае обычно используется система уравнений вида [3–8]

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} &= -\frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon} (p - n + \rho^{imp}); \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= -\frac{\partial J_n}{\partial x} - R + S; \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{\partial J_p}{\partial x} - R + S.\end{aligned}$$

Первое уравнение системы — уравнение Пуассона для потенциала электрического поля φ . Следующие два уравнения — уравнения непрерывности токов для электронов и дырок с концентрациями n и p . Здесь t — время; x — пространственная переменная; $e = 1,6021765 \cdot 10^{-19}$ Кл — заряд электрона; ϵ — диэлектрическая проницаемость (для кремния $11,7 \div 12$); $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ Ф/м — диэлектрическая постоянная; $e\rho^{imp}$ — заряд на возбужденных примесях; J_n, J_p — плотности потоков электронов и дырок; R — скорость рекомбинации; S — скорость генерации пар электрон–дырка различными источниками.

Плотности потоков в диффузионно–дрейфовом приближении определяются соотношениями

$$J_n = v_n n - D_n \frac{\partial n}{\partial x}; \quad J_p = v_p p - D_p \frac{\partial p}{\partial x}. \quad (1)$$

Здесь $v_n = -\mu_n E$, $v_p = \mu_p E$ — скорости электронов и дырок, где μ_n, μ_p — подвижности, $E = -\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ — напряженность электрического поля; D_n, D_p — коэффициенты диффузии.

2. Статистика носителей заряда

Носителями заряда в полупроводниках являются электроны и дырки. Концентрации носителей заряда описываются функциями распределения

$$n = N_C F_{1/2}(\widehat{\chi}_C); \quad p = N_V F_{1/2}(\widehat{\chi}_V). \quad (2)$$

Здесь $\widehat{\chi}_C = -\frac{\chi_C}{kT}$, $\widehat{\chi}_V = -\frac{\chi_V}{kT}$, где $\chi_C = E_C - (\psi_n + \varphi)$, $\chi_V = (\psi_p + \varphi) - E_V$; E_C — нижняя граница эффективной зоны проводимости; E_V — верхняя граница эффективной валентной зоны; ψ_n, ψ_p — квазиуровни Ферми электронов и дырок; $N_C = 2M_n \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2}\right)^{3/2}$ — эффективная плотность состояний электронов в зоне проводимости; $N_V = 2M_p \left(\frac{2\pi m_p kT}{h^2}\right)^{3/2}$ — эффективная плотность состояний дырок в валентной зоне; M_n — число минимумов энергии в зоне проводимости; M_p — число максимумов энергии в валентной зоне; m_n, m_p — эффективные массы электронов и дырок; $h = 4,13566743$ эВ·с — постоянная Планка; $k = 8,617343 \cdot 10^{-5}$ эВ/К — постоянная Больцмана; T — температура; $F_{1/2}(x)$ — интеграл Ферми–Дирака [3–8]:

$$F_{1/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{y^{1/2}}{\exp(y-x)+1} dy. \quad (3)$$

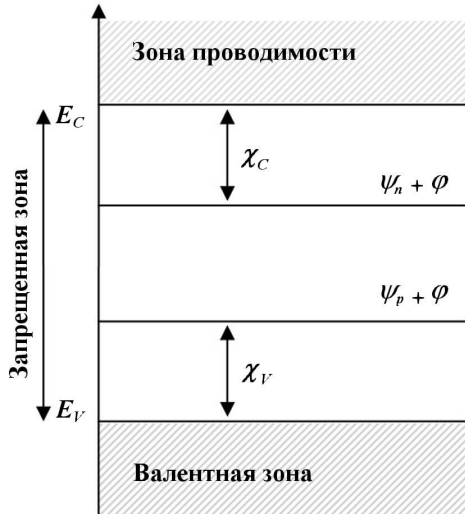


Схема уровней энергии полупроводника приведена на рис. 1. Отсчет энергий ведется от E_V .

В случае, когда $\chi_C > 5kT$ и $\chi_V > 5kT$, полупроводник называется невырожденным. При этом $F_{1/2}(x) \approx e^x$, концентрации носителей заряда (2) определяются статистикой Максвелла–Больцмана:

$$n = N_C \exp(\widehat{\chi}_C); \quad p = N_V \exp(\widehat{\chi}_V). \quad (4)$$

В равновесном состоянии квазиуровни Ферми электронов и дырок совпадают: $\psi = \psi_n = \psi_p$. Для невырожденного полупроводника в равновесном состоянии

$$np = n_i^2 = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right), \quad (5)$$

Рис. 1. Схема уровней энергии полупроводника

где $E_g = E_C - E_V$ — ширина запрещенной зоны, n_i — собственная концентрация электронов и дырок в чистом полупроводнике. Это соотношение справедливо и для примесных полупроводников.

При слабом вырождении полупроводника $kT < \chi_C$, $\chi_V < 5kT$. В этом случае необходимо использовать более точное приближение для интеграла Ферми—Дирака (3). В настоящее время предложено достаточно много различных аппроксимаций интеграла (3). Проблема заключается в экономичности и согласовании точности прямых (расчет концентраций по значениям квазиуровней Ферми) и обратных (расчет квазиуровней Ферми по значениям концентраций) вычислений. Достаточно простой является аппроксимация вида (см. (1.87) в [8])

$$F_{1/2}(x) \approx F_{1/2}^{appr}(x) = z + 0,15z^2, \quad z = \ln(1 + e^x).$$

Следует отметить, что погрешность этой аппроксимации в диапазоне существенного вырождения полупроводника $-1 < x < 0$ — в четвертой значащей цифре.

В данной статье ограничимся рассмотрением невырожденного полупроводника.

3. Граничные условия

Одним из видов граничных условий, который будем применять в приведенных далее расчетах, является омический контакт. При этом на границах полупроводника задаются равновесные значения концентраций электронов и дырок. Как отмечалось ранее, в равновесном состоянии квазиуровни Ферми электронов и дырок совпадают: $\psi = \psi_n = \psi_p$. Уровень Ферми, концентрации электронов n_S , дырок p_S и возбужденных примесей равновесного однородного примесного полупроводника определяются из условия электронейтральности

$$(p_S - n_S) + \rho_s^{imp} = 0. \quad (6)$$

При комнатной температуре $T = 300$ К концентрации возбужденных доноров N_D^+ и акцепторов N_A^- практически совпадают с концентрациями доноров N_D и акцепторов N_A . Тогда $\rho_s^{imp} = N_D - N_A$.

В общем случае необходимо решать трансцендентное уравнение относительно потенциала Ферми, используя функции распределения (4) для концентраций электронов, дырок и примесей.

Решая систему уравнений (5) и (6), получаем для невырожденного полупроводника

$$n_S = \frac{1}{2} \left(\rho_s^{imp} + \sqrt{(\rho_s^{imp})^2 + 4n_i^2} \right); \quad p_S = \frac{n_i^2}{n_S}.$$

В статье приведены результаты расчетов ступенчатого (p - n)-перехода. В этом случае значения электростатического потенциала на границах задаются таким образом, чтобы $\Delta\varphi = U_K - U$, где $\Delta\varphi$ — разность потенциалов на границах, U — приложенное напряжение ($U > 0$ — прямое, $U < 0$ — обратное). U_K — контактная разность уровней Ферми в n и p областях.

4. Подвижности носителей заряда

Подвижности носителей заряда в полупроводниках определяются различными механизмами рассеяния и зависят от напряженности электрического поля, температуры, концентрации и типа примесей. Краткий обзор различных моделей для расчета подвижностей носителей заряда приведен в работе [8].

Достаточно распространен подход, при котором выделяется зависимость подвижности от концентрации примесей и температуры в слабых электрических полях. При моделировании авторы использовали зависимость из [8] (см. (1.130), (1.131) и табл. 1.4) вида

$$\begin{aligned} \mu_{\text{Low}}(N_{imp}, T) &= \mu_0(T) + \frac{\mu_1(T)}{1 + N_{imp}/\mu_2(T)}, \\ \mu_k(T) &= N_k \left(\frac{T}{T_0} \right)^{-\beta_k}, \quad k = 0, 1, 2 \end{aligned} \quad (7)$$

в диапазоне значений температур $250 < T < 500$ К. Здесь $T_0 = 300$ К; N_{imp} — концентрация примесей. Значения параметров приведены в табл. 1.

В сильных электрических полях необходимо учитывать насыщение скоростей носителей заряда, например, с использованием следующих соотношений из [8] (см. (1.194)):

$$\mu(E) = \frac{\mu_{Low}}{\left[1 + \left(\frac{\mu_{Low} |E|}{v_{sat}}\right)^\beta\right]^{1/\beta}}, \quad v_{sat} = a \left(\frac{T}{300}\right)^b, \quad (8)$$

где $a = 10^7$ см/с; $b = -0,87$; $\beta = 2$ для электронов и $a = 8,37 \cdot 10^6$ см/с; $b = -0,52$; $\beta = 1$ для дырок.

Таблица 1

Значения параметров для расчета подвижностей носителей заряда

Носители заряда	$N_0, \text{см}^2/\text{В/с}$	$N_1, \text{см}^2/\text{В/с}$	$N_2, 10^{17} \text{см}^{-3}$	β_0	β_1	β_2
Электроны	88,0	1 252,0	1,432	0,57	2,33	-2,546
Дырки	54,3	407,3	2,670	0,57	2,33	-2,546

5. Движение носителей заряда

Движение электронов и дырок за счет дрейфа и диффузии описывается соответственно уравнениями $\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial J_n}{\partial x}$ и $\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x}$.

Используя функциональные зависимости для определения концентраций (2), выражения для плотностей потоков (1) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} J_n &= v_n n - D_n \frac{\partial n}{\partial \widehat{\chi}_C} \frac{\partial \widehat{\chi}_C}{\partial x} = \left(\mu_n n - \frac{D_n}{kT} \frac{\partial n}{\partial \widehat{\chi}_C} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{D_n}{kT} \frac{\partial n}{\partial \widehat{\chi}_C} \frac{\partial \psi_n}{\partial x}; \\ J_p &= v_p p - D_p \frac{\partial p}{\partial \widehat{\chi}_V} \frac{\partial \widehat{\chi}_V}{\partial x} = - \left(\mu_p p - \frac{D_p}{kT} \frac{\partial p}{\partial \widehat{\chi}_V} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{D_p}{kT} \frac{\partial p}{\partial \widehat{\chi}_V} \frac{\partial \psi_p}{\partial x}. \end{aligned} \quad (9)$$

В равновесном состоянии плотности потоков электронов и дырок равны нулю; для потенциалов Ферми электронов и дырок выполняются соотношения $\psi_n = \psi_p$, $\frac{\partial \psi_n}{\partial x} = \frac{\partial \psi_p}{\partial x} = 0$. Отсюда при условии $\frac{\partial \Gamma}{\partial x} = 0$ получаем равенства

$$\mu_n n - \frac{D_n}{kT} \frac{\partial n}{\partial \widehat{\chi}_C} = 0; \quad \mu_p p - \frac{D_p}{kT} \frac{\partial p}{\partial \widehat{\chi}_V} = 0, \quad (10)$$

а затем известные соотношения Эйнштейна [3–5] для коэффициентов диффузии

$$D_n = \mu_n kT \frac{n}{\frac{\partial n}{\partial \widehat{\chi}_C}}; \quad D_p = \mu_p kT \frac{p}{\frac{\partial p}{\partial \widehat{\chi}_V}}. \quad (11)$$

На практике полученные соотношения используют и вдали от равновесного состояния [1–8].

Используя соотношения (9) с коэффициентами диффузии (11), можно записать уравнения движения носителей заряда в следующих трех вариантах.

Вариант 1: классический. Для невырожденного полупроводника с распределениями концентраций носителей заряда (4) коэффициенты диффузии определяются соотношениями

$$D_n = \mu_n kT; \quad D_p = \mu_p kT;$$

уравнения движения имеют вид

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(v_n n - D_n \frac{\partial n}{\partial x} \right); \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(v_p p - D_p \frac{\partial p}{\partial x} \right). \quad (12)$$

Вариант 2: диффузия электрохимического потенциала $\widehat{\chi}_C$ и $\widehat{\chi}_V$. Используя коэффициенты диффузии $\widehat{D}_n = D_n \frac{\partial n}{\partial \widehat{\chi}_C} = \mu_n kT n$ и $\widehat{D}_p = D_p \frac{\partial p}{\partial \widehat{\chi}_V} = \mu_p kT p$, получаем следующие уравнения непрерывности носителей заряда:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(v_n n - \widehat{D}_n \frac{\partial \widehat{\chi}_C}{\partial x} \right); \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(v_p p - \widehat{D}_p \frac{\partial \widehat{\chi}_V}{\partial x} \right). \quad (13)$$

Вариант 3: диффузия квазипотенциала Ферми. Уравнение непрерывности для электронов с коэффициентом диффузии (11) и плотностью потока (9) имеет вид $\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(v_n n - \mu_n kT n \frac{\partial \widehat{\chi}_C}{\partial x} \right)$, $\widehat{\chi}_C = -\frac{E_C - (\psi_n + \varphi)}{kT}$. Для дырок — аналогично. Отсюда получим следующий вид уравнений непрерывности для электронов и дырок:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\overline{D}_n \frac{\partial \psi_n}{\partial x} \right); \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\overline{D}_p \frac{\partial \psi_p}{\partial x} \right). \quad (14)$$

Коэффициенты диффузии:

$$\overline{D}_n = \mu_n n; \quad \overline{D}_p = \mu_p p.$$

Для уменьшения затрат времени на вычисления используем расщепление по физическим процессам. Сначала решаем уравнения дрейфа для электронов и дырок, далее — уравнения диффузии носителей заряда, а затем — уравнение Пуассона для потенциала поля.

6. Дрейф носителей заряда

При решении уравнений дрейфа обычно используются методы коррекции потоков, обзор которых приведен в главе 8 монографии [9]. В рассматриваемом случае целесообразно использовать коррекцию концентраций на границах ячеек типа SUPERBEE [9, 10] для последующего расчета коэффициентов диффузии, выполнения в конечных разностях соотношений (10).

Рассмотрим решение уравнения дрейфа электронов (для дырок все рассуждения аналогичны). В разностном виде уравнение записывается следующим образом:

$$n_i^{k+1} = n_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (v_{i+1/2} n_{i+1/2} - v_{i-1/2} n_{i-1/2}). \quad (15)$$

Здесь Δt — шаг по времени; Δx_i — шаг сетки по пространству; k — номер шага по времени. Целые индексы i соответствуют ячейкам счетной сетки; полуцелые — узлам. Для ячейки с номером i значения концентраций в узлах корректируются по формулам

$$n_{i+1/2} = \begin{cases} n_i^k + \frac{\Delta n_i}{2} \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} v_{i+1/2} \right), & \text{если } v_{i+1/2} \geq 0; \\ n_{i+1}^k - \frac{\Delta n_{i+1}}{2} \left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+1}} v_{i+1/2} \right), & \text{если } v_{i+1/2} < 0. \end{cases} \quad (16)$$

Здесь

$$\begin{aligned}\Delta n_i &= \max\text{mod} \left\{ \min\text{mod} (2\Delta n_{i+1/2}, \Delta n_{i-1/2}), \min\text{mod} (\Delta n_{i+1/2}, 2\Delta n_{i-1/2}) \right\}, \\ \Delta n_{i+1/2} &= n_{i+1}^k - n_i^k; \quad \Delta n_{i-1/2} = n_i^k - n_{i-1}^k; \\ \max\text{mod} (x, y) &= \text{sign} (x) \max (|x|, |y|); \\ \min\text{mod} (x, y) &= \text{sign} (x) \max (0, \min (|x|, y \text{sign} (x))).\end{aligned}$$

7. Диффузия носителей заряда

Рассмотрим диффузию электронов. Для дырок рассуждения аналогичные. Расчет диффузии носителей заряда можно выполнять несколькими способами.

Схема 1. Применяется при решении уравнений (12) для невырожденного полупроводника. Классическая неявная разностная схема имеет вид

$$\frac{n_i^{k+1} - \bar{n}_i^{k+1}}{\Delta t} = \frac{2}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \left(D_{i+1/2} \frac{n_{i+1}^{k+1} - n_i^{k+1}}{\Delta x_i} - D_{i-1/2} \frac{n_i^{k+1} - n_{i-1}^{k+1}}{\Delta x_{i-1}} \right).$$

Здесь \bar{n}_i^{k+1} — значения концентраций, полученные при решении уравнения дрейфа электронов (15). Коэффициенты диффузии $D_{i+1/2} = \mu_n (x_{i+1/2}) kT$.

Недостаток данной схемы — плохая компенсация дрейфового потока в соотношениях (10), следовательно, большие погрешности в выравнивании квазиуровней Ферми вдоль равновесного полупроводника.

Схема 2. Применяется при решении уравнений (13). Диффузия электронов описывается уравнением вида

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\widehat{D}_n \frac{\partial \widehat{\chi}_C}{\partial x} \right).$$

Нелинейное уравнение решается стандартным способом с помощью метода Ньютона. Неявная разностная схема имеет вид

$$\frac{n_i^j + \left(\frac{\partial n}{\partial \chi} \right)_i^j (\chi_i^{j+1} - \chi_i^j) - \bar{n}_i^{k+1}}{\Delta t} = \frac{2}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \left(\widehat{D}_{i+1/2} \frac{\chi_{i+1}^{j+1} - \chi_i^{j+1}}{\Delta x_i} - \widehat{D}_{i-1/2} \frac{\chi_i^{j+1} - \chi_{i-1}^{j+1}}{\Delta x_{i-1}} \right).$$

Здесь $j = 0, 1 \dots$ — номер итерации метода Ньютона; $n_i^0 = \bar{n}_i^{k+1}$ — начальное приближение; $\chi = \widehat{\chi}_C$; $\widehat{D}_{i+1/2} = \mu_n (x_{i+1/2}) kT n_{i+1/2}$; $n_{i+1/2}$ — скорректированные значения в узлах сетки (16) при решении уравнений дрейфа (15).

Нетрудно видеть, что при таком подходе обеспечивается компенсация дрейфового потока. Для решения системы уравнений на итерациях по нелинейности можно использовать библиотеки решателей. Диффузионная часть матрицы системы уравнений не меняется на итерациях, "редактируется" главная диагональ.

Схема 3. Применяется при решении уравнений (14). Как видно из соотношений (2), концентрации $n = n(\widehat{\chi}_C) = n(\psi_n + \varphi)$ зависят от квазиуровня Ферми ψ_n и потенциала электрического поля φ . Если "заморозить" изменение поля, то получим разностную схему

$$\begin{aligned}\frac{\left(\frac{\partial n}{\partial \chi} \right)_i^j (\psi_i^{j+1} - \psi_i^j) - kT (n_i^j - \bar{n}_i^{k+1})}{\Delta t} &= \\ &= \frac{2}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \left(\bar{D}_{i+1/2} \frac{\psi_{i+1}^{j+1} - \psi_i^{j+1}}{\Delta x_i} - \bar{D}_{i-1/2} \frac{\psi_i^{j+1} - \psi_{i-1}^{j+1}}{\Delta x_{i-1}} \right).\end{aligned}$$

Здесь $j = 0, 1 \dots$ — номер итерации метода Ньютона; $n_i^0 = \bar{n}_i^{k+1}$ — начальное приближение; $\psi = \psi_n$; $\bar{D}_{i+1/2} = \mu_n(x_{i+1/2}) n_{i+1/2}$. Значения концентраций в узлах при вычислении коэффициентов диффузии можно получить усреднением концентраций из соседних ячеек: $n_{i+1/2} = \frac{1}{2}(n_i + n_{i+1})$. В этом случае предварительное решение уравнений дрейфа (15) не требуется.

Основной недостаток схемы 3 — возможное замедление по времени установления стационарных (равновесных) состояний. Чтобы избежать этого, можно отказаться от "замораживания" электростатического потенциала. Тогда следует решать совместно уравнение Пуассона и уравнения переноса электронов и дырок (14).

Ограничения на шаг сетки дает дебаевская длина [3–5] (расстояние, через которое напряженность электрического поля меняется в e раз):

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0 kT}{eN}},$$

где N — концентрация примесей.

Ограничение на шаг по времени дает время диэлектрической релаксации [3–5]

$$\tau_E = \frac{\varepsilon_0\varepsilon}{e(\mu_n n + \mu_p p)},$$

дополненное ограничениями на "куранты" уравнений дрейфа и диффузии типа $v_n \Delta t / \Delta x \leq 1$.

8. Сравнение результатов тестовых расчетов по трем схемам

Рассмотрим тестовый расчет по установлению равновесного состояния симметричного ступенчатого ($p-n$)-перехода. Слева — доноры, справа — акцепторы. Примеси полностью ионизированы. Начальные значения концентраций вычисляются решением системы уравнений (5) и (6) при нулевом значении потенциала, что соответствует локальным равновесным состояниям (скачок значений уровней Ферми на границе между донорами и акцепторами).

Подвижности электронов и дырок рассчитываются по формулам (7), (8). Параметры расчета: $-1 \leq x \leq 1$ мкм; $N_d(x < 0) = 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $N_a(x > 0) = 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $T = 290 \text{ К}$ ($kT = 0,025 \text{ эВ}$); $L_D = 0,04 \text{ мкм}$.

Граничные условия — классические омические контакты. Граничные значения концентраций равны начальным значениям концентраций вблизи границы области. Потенциал электрического поля на правой границе равен нулю, потенциал на левой границе соответствует контактной разности U_K (определяется разностью значений уровней Ферми в областях p и n).

На рис. 2 приведены распределения электростатического потенциала, полученные в расчетах, проведенных по трем схемам на моменты времени $t = 0,005 \text{ нс}$ и $t = 0,015 \text{ нс}$. На рис. 3 (см. также

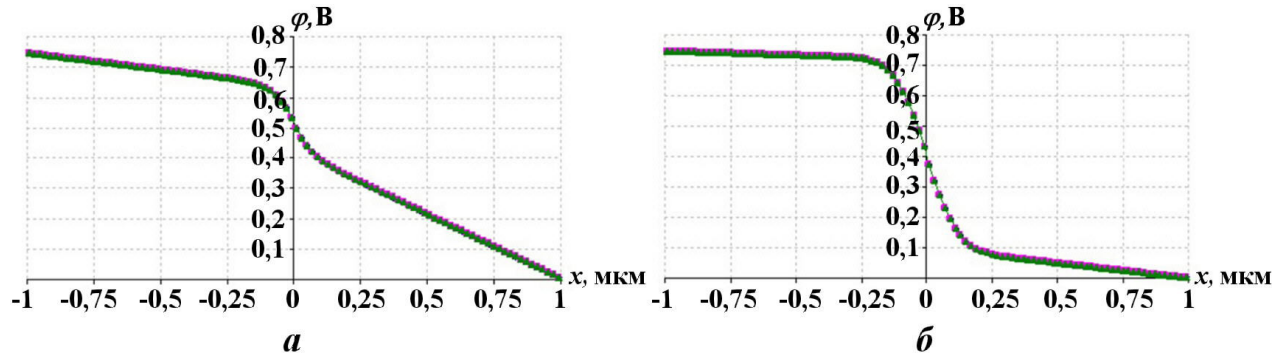


Рис. 2. Распределение электростатического потенциала: $a - t = 0,005$; $b - t = 0,015$: —◆— — схема 1; —■— — схема 2; —▲— — схема 3

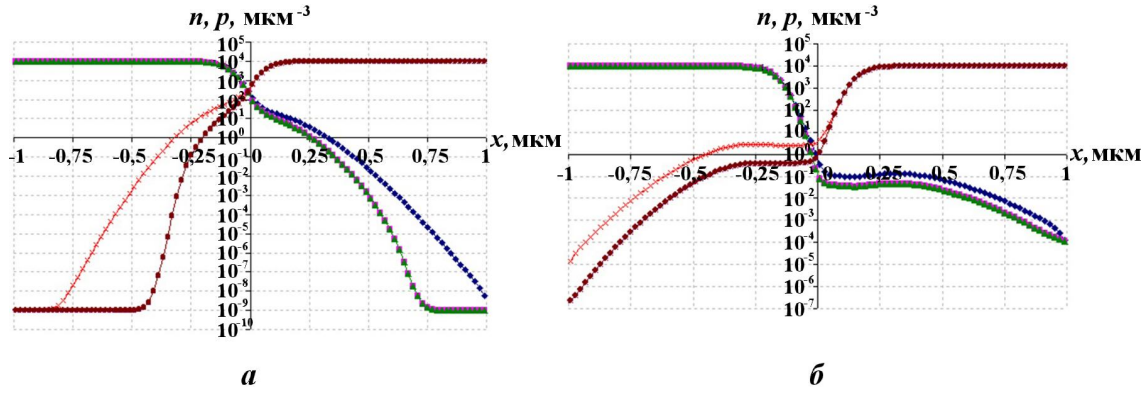


Рис. 3. Распределение концентраций электронов и дырок: $a - t = 0,005$; $b - t = 0,015$; \blacklozenge — электроны, схема 1; \blacksquare — электроны, схема 2; \blacktriangle — электроны, схема 3; \times — дырки, схема 1; $*$ — дырки, схема 2; \bullet — дырки, схема 3

цветную вкладку) приведены распределения концентраций электронов и дырок в этих расчетах на те же моменты времени (в логарифмической шкале).

Из рисунков видно, что все три схемы дают близкие результаты. Особое внимание уделяется определению квазиуровней Ферми электронов и дырок при расчете переходных процессов, поскольку они играют важную роль в расчетах с гетеропереходами. Также от их положения зависят различные кинетики электронов и дырок при учете рекомбинации, ловушек, поверхностных дефектов и т. п.

В равновесном состоянии квазиуровни Ферми электронов и дырок должны совпадать и быть постоянными на всем промежутке. При этом в каждой точке области должно выполняться соотношение $\chi_C + \chi_V = E_g$. Отклонение от равновесности оценивается как наибольшее в области значение $\left| \frac{\chi_C + \chi_V}{E_g} - 1 \right|$. На рис. 4 приведены временные зависимости данного отклонения в расчетах по схеме 1 на разных счетных сетках (с шагами 0,005, 0,01 и 0,02 мкм). На рис. 5 приведено сравнение временных зависимостей отклонения от равновесного состояния в расчете по схеме 1 на сетке с шагом 0,005 мкм и в расчетах по схемам 2 и 3 на сетке с шагом 0,02 мкм.

Из рис. 4 видно, что в случае применения схемы 1 приемлемой точности в распределении квазиуровней Ферми можно достичь на сетках с очень мелким шагом (на порядки меньше дебаевской длины), что объясняется невыполнением в конечных разностях соотношений (10). Как показано на

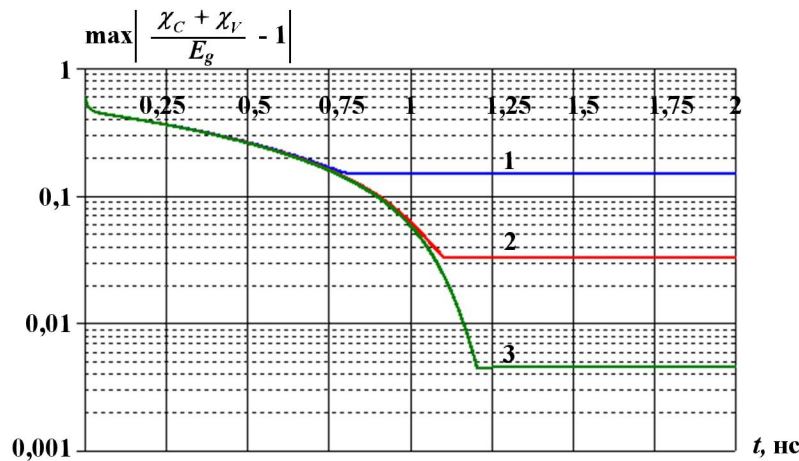


Рис. 4. Зависимости отклонения от равновесного состояния в расчете по схеме 1 на разных сетках (с шагом h) от времени: 1 — $h = 0,02$ мкм; 2 — $h = 0,01$ мкм; 3 — $h = 0,005$ мкм

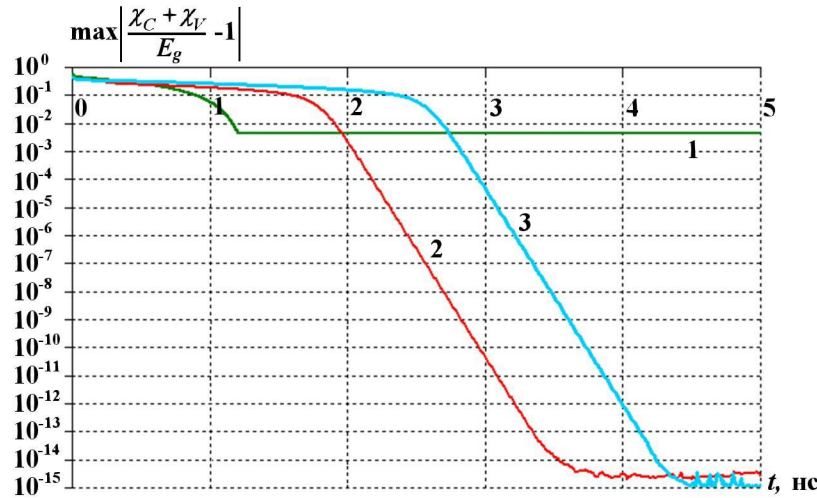


Рис. 5. Зависимости отклонения от равновесного состояния от времени в расчетах: 1 — $h = 0,005$ мкм, схема 1; 2 — $h = 0,02$ мкм, схема 2; 3 — $h = 0,02$ мкм, схема 3

рис. 5, при использовании схем 2 и 3 более высокая точность обеспечивается на более грубых сетках (с шагом порядка дебаевской длины). Схема 1 имеет погрешность, которая хоть и уменьшается с уменьшением размера ячеек сетки, но все равно оказывает существенное влияние, что также видно из рис. 3. Схема 1 неприемлема для многомерных задач. Из рис. 5 видно, что схема 3 затягивает установление равновесного состояния, что подтверждает сказанное в разд. 7. Таким образом, для проведения расчетов отдается предпочтение применению схемы 2.

9. Рекомбинация носителей заряда

В широкозонных диэлектриках и полупроводниках типа кремния прямые переходы носителей заряда между энергетическими зонами маловероятны. Основную роль играет механизм рекомбинации с помощью центров рекомбинации — ловушек (энергетических уровней, расположенных в запрещенной зоне), например, атомов доноров и акцепторов. Различные случаи многоцентровых задач рассмотрены в монографии [3].

В обычном состоянии ловушка пустая — центр нейтрален. Ловушки, на возбужденных уровнях которых находятся электроны, называются ловушками электронов (акцепторами). Вероятность заполнения одновалентного уровня электроном равна

$$f_n = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_t - \psi_t}{kT}\right) + 1},$$

где E_t — энергия уровня ловушки; ψ_t — уровень Ферми ловушки. Соответственно ловушки, на возбужденных уровнях которых находятся дырки, называются ловушками дырок (донорами). Вероятность заполнения уровня дыркой равна

$$f_p = \frac{1}{\exp\left(-\frac{E_t - \psi_t}{kT}\right) + 1}.$$

Вводя концентрацию ловушек N_t , получаем концентрации электронов $n_t = N_t f_n$ и дырок $p_t = N_t f_p$, захваченных на ловушках.

Типичные времена рекомбинации на донорах и акцепторах в объеме невырожденного кремния — десятки микросекунд. Казалось бы, рекомбинацией можно пренебречь, но есть ситуации со слабым

вырождением, например, при больших концентрациях примесей. Вблизи границ полупроводника могут быть дефекты и технологические примеси с энергетическими уровнями в глубине запрещенной зоны.

При расчетах широко применяется кинетика ШХР. Перечислим процессы взаимодействия ловушки с зоной проводимости и валентной зоной на примере акцепторов:

1. Нейтральный центр захватывает свободный электрон из зоны проводимости. Скорость захвата электрона $R_n = r_n (N_t - n_t) n = r_n N_t (1 - f_n) n$.
2. Отрицательно заряженный центр отдает электрон в зону проводимости. Скорость генерации электронов $G_n = c_n n_t = c_n N_t f_n$.
3. Нейтральный центр захватывает электрон из валентной зоны. Скорость генерации дырок $G_p = c_p (N_t - n_t) = c_p N_t (1 - f_n)$.
4. Отрицательно заряженный центр отдает электрон в валентную зону (захват дырки). Скорость рекомбинации пары электрон–дырка $R_p = r_p n_t p = r_n N_t f_n p$.

Здесь c_n, c_p, r_n, r_p — коэффициенты рекомбинации.

Система кинетических уравнений имеет следующий вид:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n; \quad \frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p; \quad \frac{\partial n_t}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial n}{\partial t}. \quad (17)$$

В равновесном случае $G_n - R_n = 0$ и $G_p - R_p = 0$. Отсюда получаем соотношения

$$c_n n_t^S = r_n (N_t - n_t^S) n_S; \quad c_p (N_t - n_t^S) = r_p n_t^S p_S.$$

Здесь n_S, p_S — равновесные концентрации электронов и дырок; n_t^S — равновесная концентрация возбужденных ловушек. Связь коэффициентов рекомбинации выглядит следующим образом:

$$c_n = r_n n_1, \quad n_1 = n_S \left(\frac{1}{f_n^S} - 1 \right) = n_S \frac{N_t - n_t^S}{n_t^S};$$

$$c_p = r_p p_1, \quad p_1 = \frac{p_S}{\frac{1}{f_n^S} - 1} = p_S \frac{n_t^S}{N_t - n_t^S}.$$

При этом $n_1 p_1 = n_S p_S$.

Систему кинетических уравнений (17) можно переписать следующим образом:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{n(1-f_n) - n_1 f_n}{\tau_n} = R^{\text{ШХР}} + \frac{n + n_1}{N_t} \frac{n_t - \tilde{n}_t}{\tau_n}; \quad (18)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{p f_n - p_1 (1-f_n)}{\tau_p} = R^{\text{ШХР}} - \frac{p + p_1}{N_t} \frac{n_t - \tilde{n}_t}{\tau_p}; \quad (19)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = -\frac{n_t - \tilde{n}_t}{\tau_t} = N_t \frac{\partial f_n}{\partial t} = -N_t \frac{f_n - \tilde{f}_n}{\tau_t};$$

$$R^{\text{ШХР}} = -\frac{pn - p_1 n_1}{\tau_p (n_1 + n) + \tau_n (p_1 + p)};$$

$$\tilde{n}_t = N_t \tilde{f}_n = N_t \frac{r_n n + r_p p_1}{r_n (n_1 + n) + r_p (p_1 + p)} = N_t \frac{\tau_p n + \tau_n p_1}{\tau_p (n_1 + n) + \tau_n (p_1 + p)}$$

с характерными временами

$$\frac{1}{\tau_t} = \frac{1}{\tau_p} \frac{p + p_1}{N_t} + \frac{1}{\tau_n} \frac{n + n_1}{N_t}, \quad \frac{1}{\tau_n} = r_n N_t, \quad \frac{1}{\tau_p} = r_p N_t. \quad (20)$$

Здесь $R^{\text{ШХР}}$ — скорость рекомбинации ШХР; \tilde{n}_t — эффективная концентрация возбужденных ловушек. Коэффициенты r_n и r_p определяются через сечения захвата электронов σ_n и дырок σ_p с помощью соотношений

$$r_n = \sigma_n v_n^T; \quad r_p = \sigma_p v_p^T,$$

где v_n^T, v_p^T — средние скорости теплового движения электронов и дырок.

Кинетика рекомбинации ШХР — это отбрасывание "лишних" слагаемых в правых частях уравнений (18) и (19). Корректнее говорить о жесткости системы, т. е. о ситуациях, когда времена релаксации заряда на ловушках τ_t существенно меньше времен захвата электронов τ_n и дырок τ_p ловушкой. Такое возможно, например, когда параметр p_1 в (20) существенно больше концентрации ловушек N_t .

На рис. 6 приведены зависимости равновесных концентраций электронов n_0 и дырок p_0 , параметров n_1 и p_1 от концентрации акцепторов с энергией уровня $E_t = 0,04$ эВ. Видно, что $p_0 \approx N_t$ и условие $p_1 \gg N_t$ (т. е. жесткость системы) обеспечивается, пока концентрации акцепторов меньше 10^{17} см^{-3} .

Таким образом, классическая кинетика рекомбинации ШХР — это система уравнений вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{\partial p}{\partial t} = R^{\text{ШХР}}; \\ n_t &= \tilde{n}_t \left(f_n = \tilde{f}_n \right). \end{aligned} \quad (21)$$

При использовании такой кинетики при решении нестационарных задач (как, например, в [2]) нарушается закон сохранения заряда при изменении концентрации возбужденных примесей. На практике используется модификация кинетики ШХР, обеспечивающая выполнение закона сохранения заряда при рекомбинации.

Два уравнения (21) заменяются одним уравнением для произведения концентраций

$$\frac{\partial (np)}{\partial t} = R^{\text{ШХР}} (n + p) = -\frac{pn - p_1 n_1}{\tau_{\text{ШХР}}}$$

с характерным временем рекомбинации $\tau_{\text{ШХР}} = \tau_p \frac{n_1 + n}{n + p} + \tau_n \frac{p_1 + p}{n + p}$, которое дает объективную информацию о ходе релаксации $np \rightarrow n_s p_s$.

Схема вычислений имеет следующий вид:

1. Вычисляется заряд в ячейке на текущий момент времени $\rho^k = p^k - n^k - n_t^k$.
2. Количество электронов на ловушках для следующего момента времени

$$n_t^{k+1} = N_t f_n^{k+1} = N_t \frac{\tau_p n^k + \tau_n p_1}{\tau_p (n_1 + n^k) + \tau_n (p_1 + p^k)}.$$

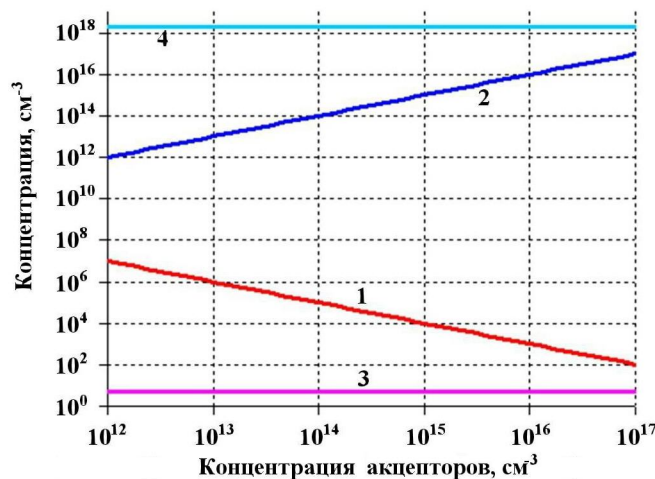


Рис. 6. Зависимости равновесных концентраций электронов (1) и дырок (2), параметров n_1 (3) и p_1 (4) от концентрации акцепторов

3. Вычисляется характерное время рекомбинации

$$\tau_{\text{ПШХР}} = \tau_p \frac{n_1 + n^k}{n^k + p^k} + \tau_n \frac{p_1 + p^k}{n^k + p^k},$$

а затем по неявной схеме — произведение концентраций электронов и дырок

$$(np)^{k+1} = \frac{n^k p^k + n_1 p_1 \frac{\Delta t}{\tau_{\text{ПШХР}}}}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_{\text{ПШХР}}}}.$$

4. Решается система уравнений

$$\begin{aligned} n^{k+1} p^{k+1} &= (np)^{k+1}; \\ p^{k+1} - n^{k+1} &= \rho^k + n_t^{k+1} \end{aligned}$$

для концентраций электронов и дырок на следующий момент времени.

10. Моделирование установления стационарных состояний (p - n)-перехода

В качестве примера рассмотрим расчет по установлению равновесного состояния симметричного ступенчатого (p - n)-перехода для промежутка $-5 \leq x \leq 5$ на сетке с шагом $h = 0,01$ мкм. Ширина запрещенной зоны $E_g = 1,12$ эВ; энергии уровней доноров $E_t = 1,08$ эВ и акцепторов $E_t = 0,04$ эВ; коэффициенты кинетики $r_n = r_p = 2 \cdot 10^{-5}$ мкм³нс⁻¹; $T = 290$ К; $N_d (-5 \leq x \leq 0) = N_a (0 \leq x \leq 5) = 10^{16}$ см⁻³.

Начальные значения концентраций электронов, дырок и возбужденных примесей вычисляются решением системы уравнений (5) и (6) при нулевом значении потенциала. Подвижности электронов и дырок рассчитываются по формулам (7), (8).

Граничные условия — модифицированные омические контакты: $\varphi(5) = 0$; $\varphi(x = -5) = U_k = \psi(-5) - \psi(5)$; граничные значения концентраций для дрейфа частиц равны равновесным значениям. Диффузионные потоки частиц на границах равны нулю; $n(x = -5) = n_S(-5)$; $n(5) = n_S(5)$; $p(x = -5) = p_S(-5)$; $p(5) = p_S(5)$; $J_{n,p}^{\text{дифФ}}(-5) = J_{n,p}^{\text{дифФ}}(5) = 0$.

На рис. 7 приведена зависимость от времени погрешности равновесности состояния.

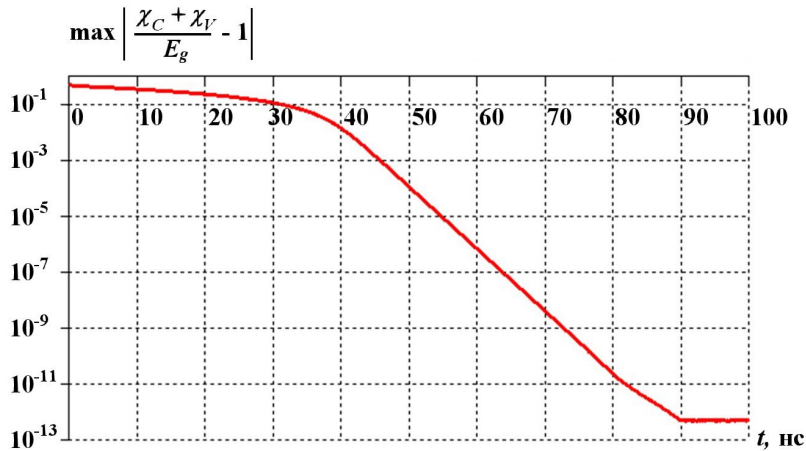


Рис. 7. Зависимость от времени погрешности равновесности состояния (выравнивание уровней Ферми)

На рис. 8–10 приведены распределения равновесных величин в области барьера: напряженность электрического поля E , электростатический потенциал φ , плотность электрического заряда q/e (e — заряд электрона), границы зоны проводимости E_C и валентной зоны E_V , а также концентрации электронов n и дырок p в логарифмической шкале.

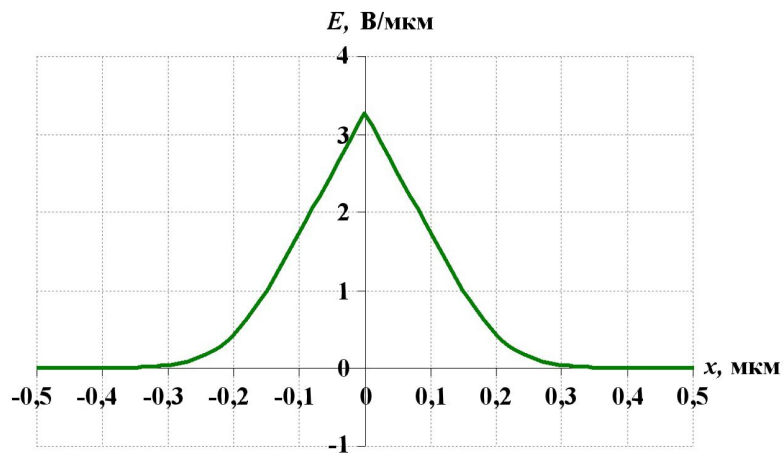


Рис. 8. Распределение напряженности электрического поля вблизи барьера

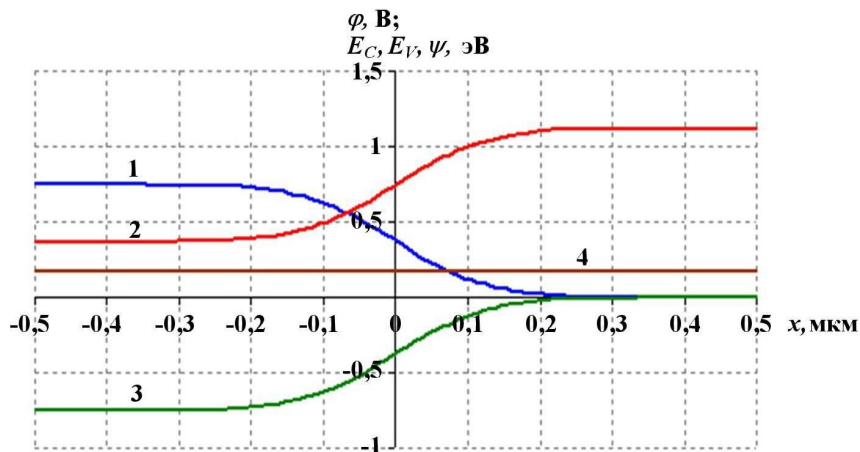


Рис. 9. Распределение равновесных величин вблизи барьера: 1 — φ ; 2 — E_C ; 3 — E_V ; 4 — ψ

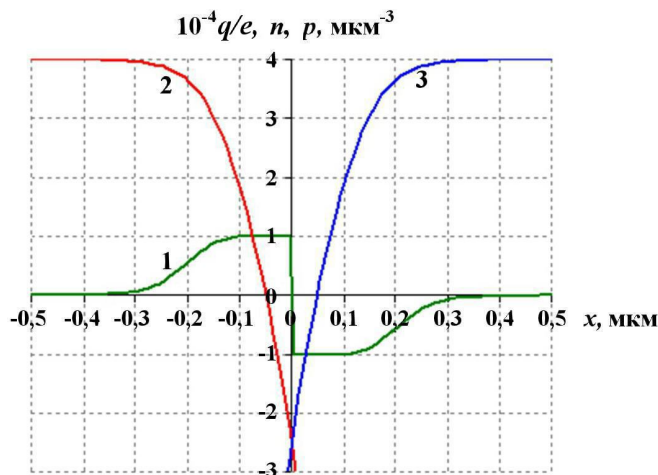


Рис. 10. Распределение равновесных величин вблизи барьера: 1 — $10^{-4}q/e$; 2 — n ; 3 — p

Из рис. 7 и 8—10 видно, что с очень высокой точностью достигается равновесное состояние. При проведении расчетов установления неравновесных стационарных состояний стартовали с равновесного состояния, варьировались значения приложенного напряжения. Положительные значения напряжения соответствуют прямому включению ($p-n$)-перехода, отрицательные — обратному включению. Результаты моделирования хорошо согласуются с классическими аналитическими оценками [3—5].

На рис. 11 (см. также цветную вкладку) приведены распределения концентраций возбужденных ловушек (доноров и акцепторов) при разных режимах работы, на рис. 12 (см. также цветную вкладку) — распределения времен $\tau_{\text{ШХР}}$. Можно проследить границы барьеров. При прямом напряжении зона перехода сужается, а при обратном — расширяется. Времена рекомбинации $\tau_{\text{ШХР}}$ велики.

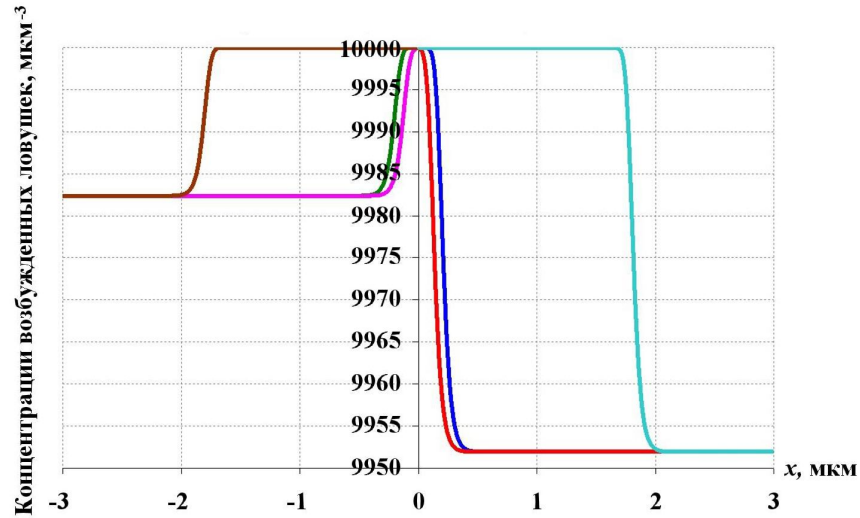


Рис. 11. Распределения концентраций возбужденных ловушек при разных режимах работы

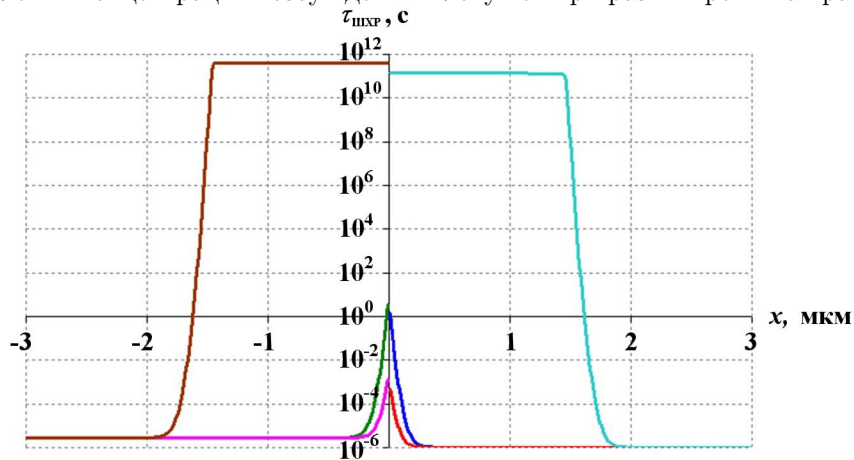


Рис. 12. Распределения времен $\tau_{\text{ШХР}}$ модифицированной кинетики ШХР при разных режимах работы

11. Пробой ($p-n$)-перехода

Начиная с определенного значения обратного напряжения, на реальном ($p-n$)-переходе наблюдается резкий рост силы тока. Это явление получило название пробоя перехода [4—8]. Основной механизм — ударная ионизация в сильных полях. В уравнения непрерывности вводится слагаемое, отвечающее за скорость генерации пар *электрон—дырка*:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial J_n}{\partial x} + G;$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} + G.$$

Темп генерации пар электрон–дырка определяется следующим образом:

$$G = A_n |v_n| n + A_p |v_p| p = \frac{n}{T_n} + \frac{p}{T_p}.$$

Здесь A_n, A_p – коэффициенты ударной ионизации – число пар, генерируемых носителем заряда на единице длины траектории; $T_n = \frac{1}{A_n |v_n|}, T_p = \frac{1}{A_p |v_p|}$ – характерные времена ударной ионизации. В диапазоне значений напряженности электрического поля $(1 \div 10) \cdot 10^5$ В/см будем использовать модель $A = A_\infty \exp\left(-\frac{b}{|E|}\right)$ со значениями параметров для электронов $A_\infty = 1,316 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}, b =$

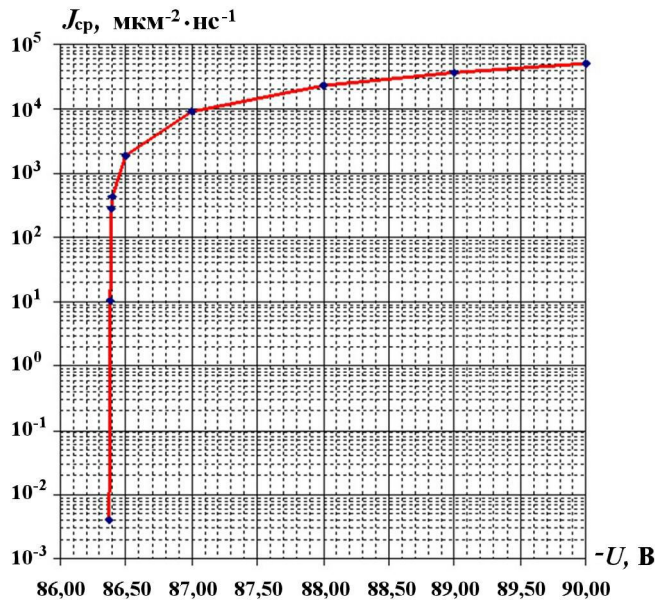


Рис. 13. Вольт-амперная характеристика пробоя (p - n -перехода)

$= 1,474 \cdot 10^6$ В/см; для дырок $A_\infty = 1,818 \times 10^6 \text{ см}^{-1}, b = 2,036 \cdot 10^6$ В/см (см. [8], таблица 1.20).

По данным, приведенным в работе [7], для симметричного ($p-n$)-перехода в кремнии со значениями концентраций примеси 10^{16} см^{-3} пробой происходит при напряженности поля около 400 кВ/см.

В табл. 2 приведены полученные в расчетах значения средней плотности потока частиц и максимальные значения напряженности поля при различных приложенных напряжениях. Наблюдается заметное увеличение плотности потока с ростом напряжения. Следует отметить, что с ростом напряжения увеличения максимального значения поля при пробое не происходит. Это обстоятельство широко используется при проведении оценок пробоя (см. [6], разд. 2.5.3). Вольт-амперная характеристика пробоя перехода приведена на рис. 13.

Таблица 2

Значения средней плотности потока частиц и максимальные значения напряженности электрического поля

$U, \text{ В}$	$J_{\text{ср}}, \text{ мкм}^{-2} \cdot \text{нс}^{-1}$	$E_{\text{max}}, \text{ В/мкм}$
-86,37	0,004047985	36,5400375
-86,38	10,2386371	36,5419585
-86,39	284,815802	36,5393038
-86,4	432,904079	36,5388378
-86,5	1 884,66965	36,5346485
-87	9 087,38674	36,5137500
-88	23 217,1469	36,4721971
-89	36 988,9138	36,4309888
-90	50 414,61	36,3901355

Заключение

Выполнен отбор приемлемой по точности и экономичной по времени вычислений схемы расчета переноса носителей заряда для последующей реализации в многомерных программах.

Проверена применимость модифицированной кинетики рекомбинации ШХР при различных режимах работы ($p-n$)-перехода, которую можно использовать для тестирования частных случаев общей кинетики рекомбинации на ловушках в глубине запрещенной зоны.

На примере описания экспериментальных данных по пробою ($p-n$)-перехода для кремния проведена проверка наборов параметров моделей (перенос, кинетика рекомбинации, ударная ионизация).

Список литературы

1. Виалле Ж. Э., Мотте С. Моделирование гетероперехода с учетом статистики Ферми–Дирака: система уравнений и численные методы решения стационарных задач // IV Межд. конф. по моделированию полупроводниковых приборов и интегральных схем. Дублин, июнь 1985. Сб. докл. / Под ред. Д. Миллера. Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. М.: Радио и связь, 1989. С. 242–248.
2. Виалле Ж. Э., Мотте С. Моделирование переходных характеристик гетероструктур // Там же. С. 248–253.
3. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
4. Степаненко И. П. Основы теории транзисторов и транзисторных схем. Изд. 4-е. М.: Энергия, 1977.
5. Гуртов В. А. Твердотельная электроника: Учеб. пособие. Изд. 2-е. М., 2005.
6. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Том I. М.: Мир, 1984.
7. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Том II. М.: Мир, 1984.
8. Schenk A. Advanced Physical Models for Silicon Device Simulation. Wien: Springer-Verlag Wien New York, 1998. P. 369.
9. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990.
10. Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.

Статья поступила в редакцию 19.02.18.

METHODOLOGICAL ISSUES OF SIMULATING TRANSIENT PROCESSES IN SEMICONDUCTORS / M. V. Gorbatenko, S. S. D'yakov, D. V. Opasin, B. N. Shamrayev (FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov, N. Novgorod region).

The paper considers difference schemes for solving the continuity equations of charge carriers in semiconductors to select a cost-effective scheme for solving multidimensional problems of the radiation effect on semiconductors. A modification to the classic Shockley-Hall-Reed kinetics is described, which provides the charge conservation during recombination. The calculated results are compared with analytical estimates and experimental data on the ($p-n$)-junction breakdown.

Keywords: charge carrier statistics, drift, diffusion, recombination kinetics, ($p-n$)-junction breakdown.
