УДК 519.63, 621.382

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ СХЕМ С ВЕСАМИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В ДИОДНЫХ СИЛОВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

С. А. Мещеряков[1]

Представлены результаты исследований устойчивости конечно-разностных схем с весами, используемых при численном моделировании переходных процессов в диодных силовых полупроводниковых структурах в диффузионно-дрейфовом тепловом приближении с учетом паразитных и нагрузочных элементов. Показано, что при весе $0.5 < \omega < 0.7$ конечно-разностная схема для уравнений непрерывности в широком диапазоне значений шага по времени может быть неустойчивой с колебательным поведением решения.

Ключевые слова: моделирование, конечные разности, численные методы, полупроводниковые приборы, уравнение непрерывности, диффузия, дрейф.

1. Введение. Современное развитие численных методов решения уравнений математической физики в области моделирования полупроводниковых приборов позволяет исследовать достаточно широкий круг задач, связанный с анализом поведения приборных структур в разных режимах работы. Для силовых полупроводниковых структур характерны достаточно жесткие статические и динамические режимы работы, характеризующиеся рядом весьма значительных нелинейных физических эффектов, возникающих внутри полупроводника. Кроме того, сами уравнения, описывающие полупроводниковую структуру, нелинейны. В частности, для диффузионно-дрейфового теплового приближения выписывается система дифференциальных уравнений в частных производных, разрешимая в общем виде только численными методами, связанными с переходом от непрерывных функций к их разностным аналогам. Несмотря на существование известных методов анализа характеристик конечно-разностных (КР) схем для наиболее известных типов уравнений в частных производных, изложенных, например, в [1, 2], до сих пор остается актуальным исследование поведения КР-аппроксимаций в том или ином конкретном случае, связанном с наличием достаточно существенных искажений, вносимых исследуемыми физическими процессами в поставленную математическую задачу.

Целью настоящей статьи является численное исследование устойчивости конечно-разностных схем с весами применительно к уравнениям непрерывности для свободных носителей заряда при расчете переходных процессов в силовых полупроводниковых структурах с учетом паразитных и нагрузочных элементов.

2. Постановка задачи. Электрическая эквивалентная схема, используемая в модельной задаче расчета переходных процессов, представлена на рис. 1.

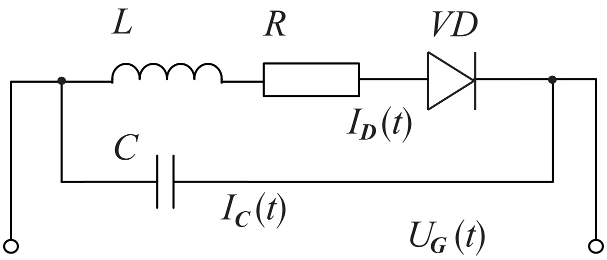

Рис. 1. Эквивалентная схема модельной задачи

Эта схема включает в себя непосредственно саму диодную структуру VD и нагрузочные и паразитные элементы R, L и C. Представленная эквивалентная схема наиболее полно соответствует конструкции промышленно выпускаемых силовых полупроводниковых диодов и методам измерения и оценки параметров переходных процессов, протекающих в них, — нагрузочный резистор R содержит последовательное сопротивление контактных областей и корпусных выводов структуры и ограничительный резистор схемы измерения, паразитная индуктивность L связана в основном с индуктивностью корпусных выводов, а паразитная емкость C связана с емкостями схемы измерения.

Согласно схеме в произвольный момент времени t в измерительной цепи протекает ток $I_D(t) + I_C(t)$, определяемый параметрами схемы и падением напряжения на диодной структуре $U_D(t)$, при этом $I_D(t)$

[1] Государственный научно-исследовательский испытательный институт проблем технической защиты информации ФСТЭК России, ул. 9 Января, д. 280а, 394026, г. Воронеж; ст. науч. сотр., e-mail: sam291074@yandex.ru

удовлетворяет уравнению баланса напряжения:

$$U_G(t) - U_D(t) - RI_D(t) - L\,\frac{\partial I_D(t)}{\partial t} = 0. \tag{1}$$

Здесь $U_G(t)$ — напряжение генератора в электрической цепи в произвольный момент времени. Ток через емкость C может быть определен как $I_C(t) = C\,\dfrac{\partial U_C(t)}{\partial t}$.

Уравнение (1) является нелинейным в силу достаточно сложной зависимости тока $I_D(U_D)$, и для его решения в представляемой модели применяется метод секущих, являющийся модификацией итерационного метода Ньютона [3]. Разложив в ряд Тейлора левую часть уравнения (1) по переменной U_D и дискретизировав это уравнение по времени, получим выражение

$$U^t_{D(j)} = U^t_{D(j-1)} + \frac{U^t_G - U^t_{D(j-1)} - Lh_t^{-1}\bigl(I^t_{D(j-1)} - I^{t-1}_{D(j-1)}\bigr) - RI^t_{D(j-1)}}{1 + \bigl(Lh_t^{-1} + R\bigr)\,\dfrac{I^t_{D(j-1)} - I^t_{D(j-2)}}{U^t_{D(j-1)} - U^t_{D(j-2)}}}\,, \tag{2}$$

где j — номер текущей итерации на рассчитываемом временнóм слое, $t-1$ — индекс предыдущего временнóго слоя, t — индекс рассчитываемого временнóго слоя и h_t — шаг по времени.

Для определения $I_D(U_D)$ в диодной полупроводниковой структуре в динамическом режиме воспользуемся системой уравнений в одномерном диффузионно-дрейфовом тепловом приближении, содержащей уравнение полного тока, два уравнения непрерывности по электронам и дыркам, дополненные уравнениями переноса тока, и уравнение теплопроводности, позволяющее учитывать саморазогрев структуры протекающим током [4]:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right) = \frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0}\,\frac{\partial(J_n + J_p)}{\partial x}\,, \quad \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\,\frac{\partial J_n}{\partial x} + G_n - R_n\,, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q}\,\frac{\partial J_p}{\partial x} + G_p - R_p\,,\\
&J_n = -qn\mu_n\left(\frac{\partial(\varphi + 0.5\delta E_g)}{\partial x} + P_n\,\frac{\partial T}{\partial x}\right) + qD_n\,\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}\,,\\
&J_p = -qp\mu_p\left(\frac{\partial(\varphi - 0.5\delta E_g)}{\partial x} - P_p\,\frac{\partial T}{\partial x}\right) - qD_p\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}\,,\\
&\rho c_p\,\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\,\frac{\partial T}{\partial x}\right) = -(J_n + J_p)\,\frac{\partial\varphi}{\partial x}\,.
\end{aligned} \tag{3}$$

Здесь φ — электрический потенциал; q — заряд электрона; ε_0 — диэлектрическая постоянная; ε — диэлектрическая постоянная полупроводника; J_n и J_p — плотность тока электронов и дырок соответственно; n и p — концентрация электронов и дырок; G_n, R_n, G_p и R_p — темпы генерации и рекомбинации электронов и дырок соответственно; μ_n и μ_p — подвижность электронов и дырок соответственно; δE_g — величина сужения запрещенной зоны полупроводника; P_n и P_p — термоЭДС электронов и дырок соответственно; T — абсолютная температура; D_n и D_p — коэффициенты диффузии электронов и дырок соответственно; ρ — плотность вещества; c_p — удельная теплоемкость вещества; λ — коэффициент теплопроводности вещества.

Таким образом, мы получили двухуровневую численную модель, внутренний уровень которой представлен системой уравнений в частных производных (3), а внешний уровень — обыкновенным дифференциальным уравнением (1).

С моделями электрофизических параметров полупроводников, граничными условиями для различных полупроводниковых структур, описанием дискретизации и методами решения системы уравнений (3) можно ознакомиться, в частности, в работах [4, 5], а с алгоритмом расчета переходного процесса в целом для данной постановки задачи — в работе [6].

Остановимся более подробно на уравнениях непрерывности для электронов и дырок, входящих в систему (3). Данные уравнения являются уравнениями параболического типа относительно функций $n(x,t)$, $p(x,t)$, и к ним могут быть применены конечно-разностные схемы с весами. В этом случае дискретизацию уравнений непрерывности на сетке $\{x_k\}_{k=1}^N$ можно представить в виде

$$\begin{aligned}
\frac{n_k^t - n_k^{t-1}}{h_t} &= \frac{1}{q}\left(\omega\,\frac{\partial J_n^t}{\partial x}\bigg|_k + (1-\omega)\,\frac{\partial J_n^{t-1}}{\partial x}\bigg|_k\right) + G_{nk} - R_{nk}\,,\\
\frac{p_k^t - p_k^{t-1}}{h_t} &= -\frac{1}{q}\left(\omega\,\frac{\partial J_p^t}{\partial x}\bigg|_k + (1-\omega)\,\frac{\partial J_p^{t-1}}{\partial x}\bigg|_k\right) + G_{pk} - R_{pk}\,,
\end{aligned} \tag{4}$$

где ω — некоторый параметр (вес), удовлетворяющий условию $0 < \omega < 1$, а пространственные производные электронного и дырочного тока могут быть представлены как результат интегральной консервативной аппроксимации уравнений переноса для соответствующего временно́го слоя:

$$
\begin{aligned}
&\left.\frac{\partial J_n}{\partial x}\right|_k = A_{nk} n_{k-1} + B_{nk} n_k + C_{nk} n_{k+1}\,,\\
&\qquad A_{nk} = -D_{n(k-1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_{k-1}-\psi_k)}{x_k - x_{k-1}}\,,\\
&\qquad B_{nk} = D_{n(k-1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_{k-1}-\psi_k)\exp(\psi_{k-1}-\psi_k)}{x_k - x_{k-1}} + D_{n(k+1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_{k+1}-\psi_k)\exp(\psi_{k+1}-\psi_k)}{x_{k+1} - x_k}\,,\\
&\qquad C_{nk} = -D_{n(k+1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_{k+1}-\psi_k)}{x_{k+1} - x_k};\\
&\left.\frac{\partial J_p}{\partial x}\right|_k = A_{pk} p_{k-1} + B_{pk} p_k + C_{pk} p_{k+1}\,,\\
&\qquad A_{pk} = D_{p(k-1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_k-\psi_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}\,,\\
&\qquad B_{pk} = -D_{p(k-1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_k-\psi_{k-1})\exp(\psi_k-\psi_{k-1})}{x_k - x_{k-1}} - D_{p(k+1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_k-\psi_{k+1})\exp(\psi_k-\psi_{k+1})}{x_{k+1} - x_k}\,,\\
&\qquad C_{pk} = D_{p(k+1/2)}\,\frac{\operatorname{Ber}(\psi_k-\psi_{k+1})}{x_{k+1} - x_k}\,.
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Здесь $\operatorname{Ber}(x) = \dfrac{x}{1-e^x}$ — функция Бернулли и ψ — нормированный на k_BT/q потенциал; дробные индексы при коэффициентах диффузии D_n и D_p указывают на средневзвешенное значение между двумя узлами сетки.

Согласно теории разностных схем, изложенной, в частности, в [1], устойчивость дискретизации (4) зависит от параметра ω. При значениях $\omega \geqslant 0.5$ схемы с весами являются абсолютно устойчивыми и не зависящими от соотношения шагов по времени и координате. При $\omega = 0.5$ схема является симметричной и при равномерной сетке дискретизации по координате обладает вторым порядком аппроксимации как в пространственной, так и временно́й областях. Схемы с весом ω, отличным от значения 0.5, обладают лишь первым порядком точности по времени.

Данные выводы в [1] были сделаны для параболического уравнения теплопроводности с постоянными коэффициентами в условиях равномерных сеток. Для рассматриваемой нами задачи можно выделить ряд моментов, способных существенно повлиять на устойчивость разностной схемы в зависимости от выбора шага по времени.

Во-первых, пространственную дискретизацию уравнений целесообразно провести на неравномерной пространственной сетке, позволяющей при относительно небольшом числе узлов сохранить особенности моделируемой структуры. Во-вторых, соответствующие коэффициенты, стоящие при неизвестных n и p в уравнениях (5), являются нелинейными величинами, экспоненциально зависящими от разности потенциалов. Потенциал, в свою очередь, зависит от n и p, значительно изменяющихся в ходе вычислений и, следовательно, накладывающих ограничения на величину временно́го шага. В-третьих, итерационный процесс подбора соответствующего напряжения U_D согласно (2) также может накладывать определенные ограничения на величину шагов.

В сложившейся ситуации анализ устойчивости конечно-разностной схемы (4), аналогичный [1], не представляется возможным. Поэтому мы рассмотрим вычислительный эксперимент по расчету переходного процесса при варьировании веса ω с целью определения его диапазона, значения которого будут давать устойчивые вычисления при относительно большом временно́м шаге. При этом определим нижнюю границу веса как $\omega = 0.5$, так как согласно [1] именно она является некоторым предельным гарантированным условием абсолютной устойчивости конечно-разностных схем с весами.

3. Результаты моделирования. Модельную задачу будем рассматривать на типичной кремниевой диодной структуре с барьером Шоттки, содержащей эпитаксиальную низколегированную пленку, выращенную на сильнолегированной подложке с учетом процессов автолегирования [7] (рис. 2). Контакт к подложке является омическим, к пленке — с барьером Шоттки. Для моделирования были выбраны следующие параметры структуры: высота барьера Шоттки $F_b = 0.75$ эВ; степень легирования n-области $N_D = 10^{15}$ см$^{-3}$; толщина n-области $w_n = 10$ мкм; степень легирования n^+-области $N_D^+ = 5 \times 10^{18}$ см$^{-3}$; толщина n^+-области $w_{n+} = 35$ мкм; времена жизни свободных носителей заряда $\tau_n = 10^{-6}$ с и $\tau_p = 10^{-7}$ с;

площадь контактов $S = 0.1$ см$^{-2}$. Модели основных электрофизических параметров кремния взяты согласно [5]. Значения паразитных и нагрузочных элементов: $R = 10$ Ом, $L = 8$ нГн и $C = 100$ пФ.

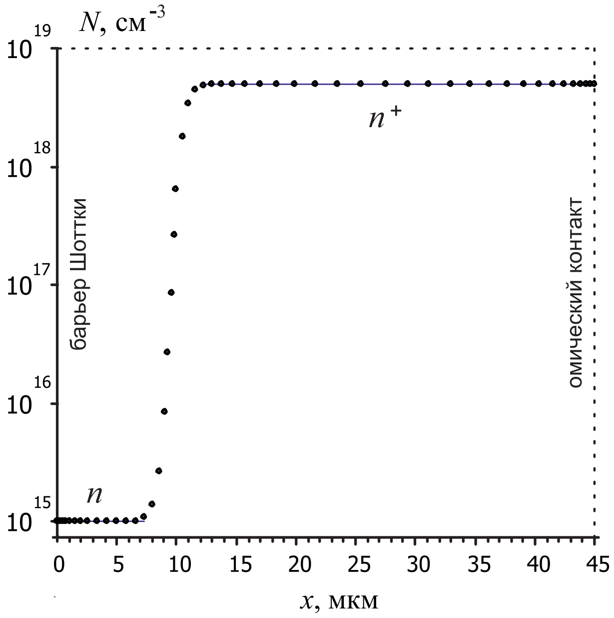

Рис. 2. Профиль распределения примеси в моделируемой структуре

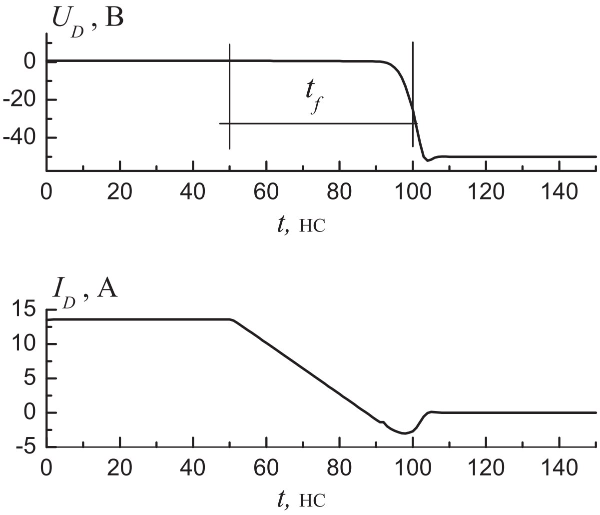

Рис. 3. Временны́е диаграммы переключения диодной структуры на импульсном сигнале

Начальное условие в виде точки вольт-амперной характеристики рассчитывалось согласно [8, 9]. Граничное условие для потенциала определяется приложенным напряжением, вычисленным согласно (2). Граничные условия для концентраций свободных носителей заряда на барьерном контакте рассчитываются в рамках комбинированной диффузионно-термоэмиссионной теории Кроуэлла–Зи [9, 10] из уравнений

$$J_n\big|_{x=0} = A_n T^2 \exp\left(\frac{-qF_b}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{-q\varphi_n\big|_{x=0}}{k_B T} - 1\right),$$

$$J_p\big|_{x=0} = A_p T^2 \exp\left(\frac{-(E_g - qF_b)}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{-q\varphi_p\big|_{x=0}}{k_B T} - 1\right),$$

где A_n и A_p — постоянные Ричардсона для электронов и дырок соответственно, F_b — высота потенциального барьера металл-полупроводник, E_g — ширина запрещенной зоны полупроводника, k_B — постоянная Больцмана, φ_n и φ_p — квазиуровни Ферми для электронов и дырок соответственно. Для обратного омического контакта концентрации носителей берутся равновесными: $n\big|_{x=L} = n_0$ и $p\big|_{x=L} = p_0$.

Все вычисления проводились с использованием программы [11]. На рис. 3 приведены результаты моделирования переходного процесса переключения из открытого состояния диода в статическом режиме с током $I_D = 13.5$ А ($U_D = 0.7$ В) в закрытое состояние с обратным напряжением $U_D = -50$ В. Длительность фронта переключающего импульса генератора составляет $t_f = 50$ нс.

Рассмотрим поведение схем с весами в двух разных случаях. Первый случай — это продолжение статического состояния диодной структуры, заданной начальным условием (диапазон 0–50 нс на рис. 3). В этом случае система должна оставаться в состоянии, определенном на момент времени $t = 0$ ($U_D = 0.7$ В, $I_D = 13.5$ А), возможно, с некоторой незначительной погрешностью. Второй случай — это непосредственный процесс переключения из статического состояния диодной структуры, заданной начальным условием (моделируется сдвигом диаграммы на рис. 3 влево на 50 нс).

Результаты моделирования переходного процесса с шагом по времени $h_t = 0.01$ нс при разных значениях веса для этих двух случаев отличаются весьма незначительно, несмотря на разницу в условиях начала расчета (см. рис. 4). Это объясняется тем, что в данной постановке вычислительного эксперимента и в том, и в другом случае напряжение U_D на полупроводниковой структуре изменяется медленно из-за нагрузочных элементов в моделируемой электрической цепи.

Вид временны́х диаграмм показывает, что процесс расчета в зависимости от значения ω имеет колебательное поведение с выраженным экспоненциально нарастающим или убывающим характером. В качестве

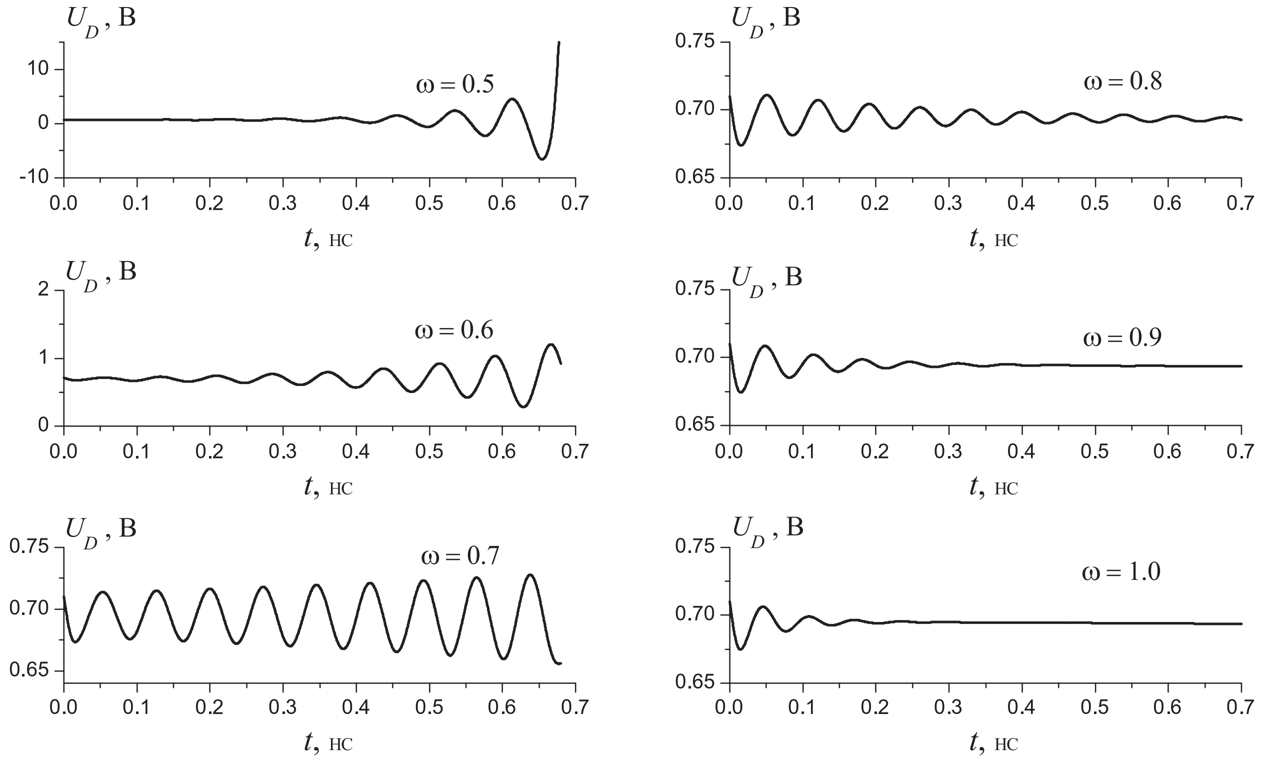

Рис. 4. Временны́е диаграммы изменения напряжения в начале переходного процесса

модели, описывающей это колебательное поведение, можно использовать выражение вида

$$f(t) = f_0 + \operatorname{sign}(\alpha) f_1 \exp(\alpha t) \sin(\beta t), \tag{6}$$

где $f_0 \approx U_D$, а α и β — некоторые параметры, имеющие размерность, обратную времени. В таблице приведены значения этих параметров, рассчитанные по временны́м диаграммам на рис. 4 в зависимости от значения веса.

Значения параметров аппроксимации

ω	f_0, В	f_1, В	α, нс$^{-1}$	β, нс$^{-1}$
0.5	0.695	0.03	8.95	147.45
0.6	0.695	0.03	4.85	87.66
0.7	0.695	0.03	0.23	86.24
0.8	0.695	0.03	−5.23	90.53
0.9	0.695	0.03	−10.51	95.43
1.0	0.695	0.03	−17.93	100.86

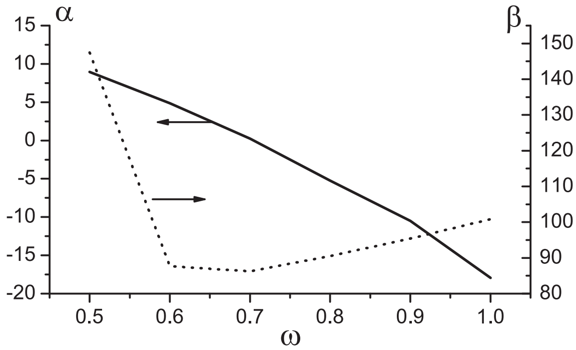

Рис. 5. Зависимость параметров колебательного уравнения (6) от веса ω

Анализ приведенных в таблице параметров показывает, что в точке перехода от неустойчивого вычислительного процесса к устойчивому согласно модели (6) экспоненциальный коэффициент α меняет знак, а коэффициент β имеет минимум (рис. 5). При значении $0.5 < \omega < 0.7$ вычислительный процесс для задачи (2), (3) является неустойчивым. Эксперимент показывает, что подобная ситуация наблюдается даже при уменьшении шага по времени вплоть до $h_t = 10^{-4}$ нс (дальнейшее уменьшение величины шага не целесообразно из-за существенного увеличения времени расчета). Аналогичное поведение свойственно и задаче моделирования p–n-переходной диодной структуры с омическими контактами.

4. Заключение. Решение дифференциальных уравнений непрерывности в задаче моделирования переходных процессов в силовых полупроводниковых диодных структурах с использованием конечно-разностной аппроксимации по схеме с весами может быть неустойчивым для значений $0.5 < \omega < 0.7$.

При постановке задачи (2), (3) эффективнее всего использовать неявную схему с $\omega = 1.0$, так как эта схема устойчива, а количество вычислений на каждом временно́м слое минимально (по сравнению с другими величинами ω). При этом следует иметь в виду, что схема имеет только первый порядок точности по времени и может характеризоваться накоплением погрешности при значительных рассчитываемых временны́х промежутках [1, 2].

Нестабильность вычислительной схемы связана с особенностями итерационного процесса подбора напряжения, используемого в качестве одного из граничных условий в системе (3). В пользу этого предположения говорит тот факт, что при непосредственно поданном напряжении генератора на диодную структуру (отсутствуют R, L и C) колебательного поведения вычислений в диапазоне веса $0.5 < \omega < 0.7$ не наблюдается.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке численных моделей и методов расчета динамических характеристик полупроводниковых структур в диффузионно-дрейфовом тепловом приближении, а также программных пакетов на их основе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
2. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. М.: Наука, 1989.
3. *Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В.* Вычислительные методы для инженеров. М.: Высшая школа, 1994.
4. *Бубенников А.Н.* Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. М.: Высшая школа, 1989.
5. *Мулярчик С.Г.* Численное моделирование микроэлектронных структур. Минск: Университетское, 1989.
6. *Мещеряков С.А., Прокопьев А.И., Золотухина О.А.* Численная модель расчета переходных процессов в структурах с барьером Шоттки на основе карбида кремния // Вестн. Воронежского гос. техн. ун-та. 2007. № 8. 67–70.
7. *Готра З.Ю.* Технология микроэлектронных устройств. М.: Радио и связь, 1991.
8. *Мещеряков С.А., Прокопьев А.И., Прокопьева О.А.* Моделирование зарядопереноса в структурах с барьером Шоттки на основе карбида кремния // Вестн. Воронежского гос. техн. ун-та. 2006. № 11. 69–71.
9. *Prokopyev A.I., Mesheryakov S.A.* Static characteristics of high-barrier Schottky diode under high level injection // Solid-St. Electron. 1999. **43**, N 9. 1747–1753.
10. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов: В 2-х книгах. Кн. 1. М.: Мир, 1984.
11. Программа численного моделирования статических, динамических и частотных характеристик полупроводниковых диодов Шоттки “Барьер–1D”. Свидетельство гос. регистрации 2010614839.

Поступила в редакцию
14.02.2011