

УДК 519.63

И.В. Куликова, И.Е. Лысенко, Н.К. Приступчик, А.С. Лысенко**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ПОЛУПРОВОДНИКА В ДИФфуЗИОННО-ДРЕЙФОВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ***

Настоящая работа посвящена численному моделированию вольтамперных и переходных характеристик $p-n$ -перехода с использованием оригинального программного обеспечения, отличительными особенностями которого являются: учет параметра Куранта для дискретизации по времени, а также противоточная схема. Приведено полученное выражение для расчета шага дискретизации по времени с учетом параметра Куранта. Применение рассчитанного шага дискретизации по времени и противоточной схемы позволило получить устойчивое сходящееся решение при различных уровнях инжекции и без предварительной нормировки фундаментальной системы уравнений полупроводника в диффузионно-дрейфовом приближении. Для решения нестационарных уравнений непрерывности использовалась неявная схема. Уравнение Пуассона решалось для каждого временного шага. Разработанное программное обеспечение и полученные с его помощью результаты, а именно распределения концентраций носителей заряда, плотности объемного заряда, уровня Ферми и электрическое поле в различные моменты времени и ВАХ-структуры, могут быть полезными при моделировании элементной базы полупроводниковых интегральных схем, а также чувствительных элементов хемосенсоров.

Фундаментальная система уравнений полупроводника; метод контрольных объемов; микросистемная техника.

I.V. Kulikova, I.E. Lysenko, N.K. Pristupchik, A.S. Lysenko**NUMERICAL SOLUTION OF NONSTATIONARY FUNDAMENTAL EQUATION SYSTEM SEMICONDUCTOR IN THE DIFFUSION-DRIFT APPROXIMATION**

This paper is devoted the numerical modeling the current-voltage and transient characteristics pn junction with the use original software, distinctive features of which are registration of the Courant parameters for the time sampling, and the counterflow circuit. This obtained expression is shown for the calculation step time discretization taking into account the Courant parameter. Application of calculated step time discretization and counterflow circuit allowed us to obtain stable convergent solution at different injection levels of the semiconductor equations in a diffusion-drift approach. The implicit scheme was used for solving the nonstationary equations. Poisson's equation was solved for each time step. The developed software and obtained results with its aid. The developed software and obtained results with it, namely, the concentration distribution of the charge carriers, volume charge density, and the Fermi level and the electric field at different times, and CVC-structure, may be useful in modeling of semiconductor element base integrated circuits, as well as sensitive elements chemosensor.

The basic semiconductor equations; Finite volume method; Microsystem technology.

Введение. Физические процессы перераспределения концентраций подвижных носителей заряда, протекающие в полупроводниковых структурах с характеристическими размерами более 10 нм, могут быть описаны фундаментальной системой уравнений (ФСУ) полупроводника в диффузионно-дрейфовом приближении. К таким структурам можно отнести не только интегральные элементы микро-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты: № 13-07-00274, 14-07-31234) и Минобрнауки РФ (проекты: 8.797.2014К и 14.575.21.0045).

электронной техники, но и полупроводниковые датчики химических и физических величин [1–5]. Для решения ФСУ используют численные методы [1–5] или приводят задачу к одномерному случаю и решают аналитически [1]. Для получения сходящегося численного решения переходят в новый базис [1–6], однако даже это не всегда позволяет получить адекватное решение при высоких уровнях инжекции. Кроме того, при дискретизации ФСУ в новом базисе получают систему нелинейных уравнений, для решения которой используют метод Ньютона. Стоит также заметить, что решения получают для стационарных случаев. Это накладывает ограничения, препятствующие исследованию переходных процессов моделируемых структур и элементов. В то же время переходные процессы могут быть неправильно интерпретированы в случае съема информации с сенсорных элементов при условии соизмеримости времени переходных процессов измеряемой величины и переходных процессов в электронно-дырочном газе в полупроводниковой структуре и могут привести к нарушению работы устройства в целом.

Таким образом, моделирование нестационарного распределения подвижных носителей заряда в полупроводниковых структурах является актуальной задачей, поскольку позволяет получать вольтамперные характеристики (ВАХ) полупроводниковых элементов любой конфигурации [1–6], изучать переходные процессы, а также предвидеть поведение полупроводниковых сенсорных элементов [7–10].

Следует отметить, что переходные процессы в полупроводниковых структурах характеризуются малыми постоянными времени (порядка нескольких пикосекунд), вместе с тем величины «переходных» токов могут отличаться от рабочих на порядки [10].

Математическая модель. ФСУ в диффузионно-дрейфовом приближении может быть представлена в виде системы из 3-х уравнений с учетом соотношений Эйнштейна для коэффициентов диффузии электронов и дырок следующим образом [1]:

$$\begin{cases} \int \frac{\partial n}{\partial t} dV = \int \varphi_T \mu_n \text{grad}(n) d\Omega - \int \mu_n n \text{grad}(\varphi) d\Omega + R_n(x, y, z, t); \\ \int \frac{\partial p}{\partial t} dV = \int \varphi_T \mu_p \text{grad}(p) d\Omega + \int \mu_p p \text{grad}(\varphi) d\Omega + R_p(x, y, z, t); \\ \text{div}(\text{grad}(\varphi)) = -\frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} (p - n + N_D - N_A), \end{cases} \quad (1)$$

где n, p – концентрация электронов и дырок; R_n, R_p – скорость процессов рекомбинации и генерации; μ_n, μ_p – подвижность электронов и дырок; ε – диэлектрическая проницаемость среды; ε_0 – электрическая постоянная; φ_T – температурный потенциал; e – заряд электрона; N_D, N_A – концентрация ионов доноров и акцепторов соответственно.

Для дискретизации по времени была использована неявная схема. Уравнение Пуассона решалось для каждого временного шага.

При дискретизации по пространству уравнений непрерывности в дифференциальном виде возникают проблемы из-за наличия первых производных по координате, которые описывают миграционную составляющую переноса заряда. И именно они вызывают необходимость переходить в новый базис и понижают порядок дискретизации, а также приводят к расхождению решения при высоких уровнях инжекции и больших градиентах поля.

В настоящее время при численном решении диффузионно-дрейфовых уравнений в гидродинамике широко применяются так называемые противопоточные схемы [11].

Применение противопоточной схемы предполагает использование интегро-дифференциального представления уравнений. Для апробации модели была выбрана кремниевая структура р-п-перехода. Решение системы (1) было получено для одномерного нестационарного случая. Дискретное представление уравнений непрерывности на равномерной сетке будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{n_i^k - n_i^{k-1}}{h_t} h_x = \varphi_T \mu_n \frac{n_{i+1}^k - 2n_i^k + n_{i-1}^k}{h_x} - \\ - \mu_n n_i^k \left(\max \left[-\frac{\varphi_i^k - \varphi_{i-1}^k}{h_x}, 0 \right] + \max \left[\frac{\varphi_{i+1}^k - \varphi_i^k}{h_x}, 0 \right] \right) + \\ + \mu_n n_{i-1}^k \max \left[\frac{\varphi_i^k - \varphi_{i-1}^k}{h_x}, 0 \right] + \mu_n n_{i+1}^k \max \left[-\frac{\varphi_{i+1}^k - \varphi_i^k}{h_x}, 0 \right]; \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{p_i^k - p_i^{k-1}}{h_t} h_x = \varphi_T \mu_p \frac{p_{i+1}^k - 2p_i^k + p_{i-1}^k}{h_x} - \\ - \mu_p p_i^k \left(\max \left[\frac{\varphi_i^k - \varphi_{i-1}^k}{h_x}, 0 \right] + \max \left[-\frac{\varphi_{i+1}^k - \varphi_i^k}{h_x}, 0 \right] \right) + \\ + \mu_p p_{i-1}^k \max \left[-\frac{\varphi_i^k - \varphi_{i-1}^k}{h_x}, 0 \right] + \mu_p p_{i+1}^k \max \left[\frac{\varphi_{i+1}^k - \varphi_i^k}{h_x}, 0 \right], \end{aligned} \quad (3)$$

где h_t – шаг дискретизации по времени; h_x – шаг дискретизации по координате x .

Шаг дискретизации по времени h_t для получения сходящегося решения рассчитан на основе условия Куранта, зависит от сеточного шага h_x и описывается следующим выражением:

$$h_t = h_x \sqrt{\frac{m}{kT}} \cdot CFL, \quad (4)$$

где CFL – коэффициент, определяющий какую часть шага по координате пролетает частица за один шаг по времени.

Результаты моделирования. Было разработано программное обеспечение для численного решения ФСУ полупроводника в диффузионно-дрейфовом приближении для одномерного нестационарного случая. В частности, были рассчитаны вольт-амперные и переходные характеристики диода с учетом подвижности носителей заряда, диэлектрической проницаемости, профиля легирования. Результат приведен на рис. 1.

На рис. 2 представлены распределение концентрации подвижных носителей заряда, плотность объемного заряда, уровень Ферми и напряженность электрического поля в структуре.

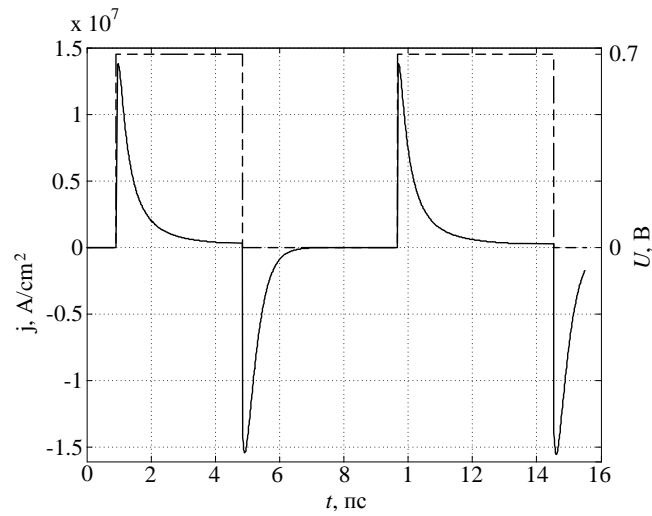


Рис. 1. Переходные характеристики р-п-перехода ($U(t)$ – пунктирная линия, $j(t)$ – сплошная линия)

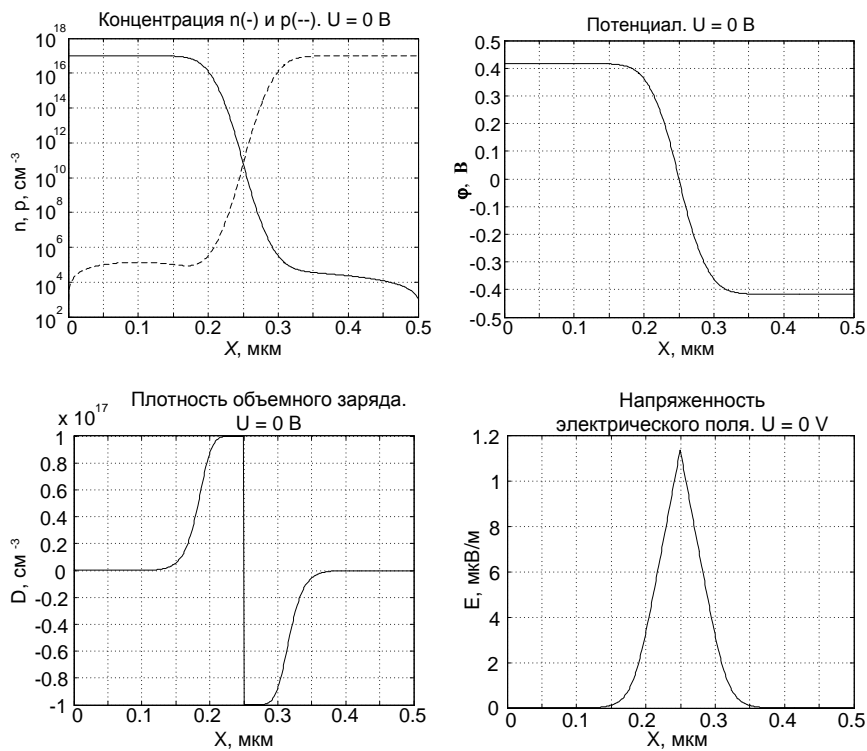


Рис. 2. Графики распределения концентрации носителей заряда, плотности объемного заряда, уровня Ферми и электрическое поле

Заключение. В настоящей работе было выполнено численное моделирование ВАХ и переходных характеристик р-п-перехода с использованием разработанного программного обеспечения, отличающегося тем, что дискретизация по времени

ФСУ полупроводника в диффузионно-дрейфовом приближении выполнена с учетом параметра Куранта, а также тем, что в основе вычислительного алгоритма лежит противопоточная схема. Разработанное программное обеспечение и полученные с его помощью результаты могут быть полезными как для моделирования элементной базы полупроводниковых интегральных схем, так и для моделирования чувствительных элементов хемотронных устройств микросистемной техники.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Обухов И.А.* Неравновесные эффекты в электронных приборах. – Севастополь: Изд-во «Вебер», 2010. – 303 с.
2. *Selberherr S.* Analysis and Simulation of Semiconductor Devices. – New York: Springer-Verlag/Wien, 1984. – 295 p.
3. *Marie X., Balkan N.* Semiconductor Modeling Techniques // Springer Series in Materials Science. – 2012. – Vol. 159. – 261 p.
4. *Рындин Е.А., Леньшин А.С.* Методика численного моделирования спектрометрических газочувствительных сенсорных систем // Инженерный вестник Дона. – 2012. – № 4. – Ч. 2. – URL: <http://www.ivdon.ru> (дата обращения: 14.08.2014).
5. *Коноплев Б.Г., Рындин Е.А., Денисенко М.А.* Метод проектирования функционально-интегрированных лазеров-модуляторов // Инженерный вестник Дона. – 2013. – № 3. – URL: <http://www.ivdon.ru> (дата обращения: 14.08.2014).
6. *Tomoko Shimada, Shinji Odanaka.* A numerical method for a transient quantum drift-diffusion model arising in semiconductor devices // J Comput Electron. – 2008. – № 7. – P. 485-493.
7. *Лысенко И.Е.* Модель равновесия подвижных элементов микромеханических зеркал с внутренними подвесами // Инженерный вестник Дона. – 2013. № 2. – URL: <http://www.ivdon.ru> (дата обращения: 14.08.2014).
8. *Рындин Е.А., Куликова И.В.* Алгоритм физико-топологического моделирования ПТШ // Известия ТРТУ. – 2000. – № 3 (17). – С. 150-154.
9. *Шпак А.А., Куликова И.В.* Методика расчета эквивалентных механических параметров мембран сложной топологии для элементов микросистемной техники // Инженерный вестник Дона. – 2013. – № 2 (25). – С. 41-46.
10. *Фрайден Дж.* Современные датчики: справочник. – М.: Техносфера, 2005. – 592 с.
11. *Зализняк К.Е.* Основы вычислительной физики. Ч. 1. Введение в конечно-разностные методы. – М.: Техносфера, 2008. – 224 с.

REFERENCES

1. *Obukhov I.A.* Neravnovesnye efekty v elektronnykh priborakh [Nonequilibrium effects in electronic devices]. Sevastopol': Izd-vo «Veber», 2010, 303 p.
2. *Selberherr S.* Analysis and Simulation of Semiconductor Devices. New York: Springer-Verlag/Wien, 1984, 295 p.
3. *Marie X., Balkan N.* Semiconductor Modeling Techniques, *Springer Series in Materials Science*, 2012, Vol. 159, 261 p.
4. *Ryndin E.A., Len'shin A.S.* Metodika chislennoogo modelirovaniya spektrometricheskikh gazochuvstvitel'nykh sensorynykh sistem [The method of numerical simulation spectrometric gas sensitive sensor systems], *Inzhenernyy vestnik Dona* [Engineering Journal of Don], 2012, No. 4, Part 2. Available at: <http://www.ivdon.ru> (accessed 14 August 2014).
5. *Konoplev B.G., Ryndin E.A., Denisenko M.A.* Metod proektirovaniya funktsional'no-integrirovannykh lazerov-modulyatorov [Design method of functionally-integrated laser-modulators], *Inzhenernyy vestnik Dona* [Engineering Journal of Don], 2013, No. 3. Available at: <http://www.ivdon.ru> (accessed 14 August 2014).
6. *Tomoko Shimada, Shinji Odanaka.* A numerical method for a transient quantum drift-diffusion model arising in semiconductor devices, *J Comput Electron*, 2008, No. 7, pp. 485-493.
7. *Lysenko I.E.* Model' ravnovesiya podvizhnykh elementov mikromekhanicheskikh zerkal s vnutrennimi podvesami [Equilibrium model of mobile elements micromechanical mirrors with internal suspensions], *Inzhenernyy vestnik Dona* [Engineering Journal of Don], 2013, No. 2. Available at: <http://www.ivdon.ru> (accessed 14 August 2014).

8. *Ryndin E.A., Kulikova I.V.* Algoritm fiziko-topologicheskogo modelirovaniya PTSh [The algorithm physical-topological modeling with], *Izvestiya TRTU [Izvestiya TSURE]*, 2000, No. 3 (17), pp. 150-154.
9. *Shpak A.A., Kulikova I.V.* Metodika rascheta ekvivalentnykh mekhanicheskikh parametrov membran slozhnoy topologii dlya elementov mikrosistemnoy tekhniki [The method of calculating the equivalent mechanical properties of the membranes of complex topology for items Microsystem technology], *Inzhenernyy vestnik Dona [Engineering Journal of Don]*, 2013, No. 2 (25), pp. 41-46.
10. *Frayden Dzh.* Sovremennye datchiki [Modern sensors]: cpravochnik. Moscow: Tekhnosfera, 2005, 592 p.
11. *Zaliznyak K.E.* Osnovy vychislitel'noy fiziki [Foundations of computational physics]. Part 1. Vvedenie v konechno-raznostnye metody [Introduction to finite-difference methods]. Moscow: Tekhnosfera, 2008, 224 p.

Статью рекомендовал к опубликованию д.ф.-м.н., профессор А.А. Лаврентьев.

Куликова Ирина Владимировна – Южный федеральный университет; e-mail: cuttlefish99@mail.ru; 347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44; тел.: +78634371603; кафедра конструирования электронных средств; доцент.

Лысенко Игорь Евгеньевич – e-mail: ielysenko@sfedu.ru; кафедра конструирования электронных средств; зав. кафедрой.

Приступчик Никита Константинович – e-mail: nkpristupchik@sfedu.ru; кафедра конструирования электронных средств; доцент.

Лысенко Александр Сергеевич – e-mail: designcenter61@gmail.com; кафедра конструирования электронных средств; студент.

Kulikova Irina Vladimirovna – Southern Federal University; e-mail:cuttlefish99@mail.ru; 44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia; phone: +78634371603; the department of electronic apparatuses design; associate professor.

Lysenko Igor Evgenievich – e-mail: ielysenko@sfedu.ru; the department of electronic apparatuses design; head of department.

Pristupchik Nikita Konstantinovich – e-mail: nkpristupchik@sfedu.ru; the department of electronic apparatuses design; associate professor.

Lysenko Aleksandr Sergeevich – e-mail: designcenter61@gmail.com; the department of electronic apparatuses design; student.

УДК 54.057: 54.06: 546.831:547:681

Т.А. Моисеева, Т.Н. Мясоедова, Е.Н. Шишляникова

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ЦИРКОНИЙ СОДЕРЖАЩЕГО ПОЛИАНИЛИНА*

Освещена актуальность применения полимеров в различных областях электроники. Показано, что одним из наиболее перспективных является полианилин и композиты на его основе. Для получения полианилина и композита полианилин/диоксид циркония использована окислительная химическая полимеризация анилина. Для установления форм полианилина

* Работа выполнена на оборудовании ЦКП «Микросистемная техника и интегральная сенсорика» (ЮФУ) и поддержана государственным заданием Минобрнауки РФ (тема № 213.01-11/2014-14).