

УДК 621.3.049.771

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО. ПОДХОД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Д.С. СПЕРАНСКИЙ, В.М. БОРЗДОВ

*Белорусский государственный университет  
пр. Независимости 4, Минск, Беларусь*

*Поступила в редакцию 16 октября 2008*

Рассмотрены некоторые аспекты разработки программного комплекса моделирования процессов переноса носителей заряда в интегральных полупроводниковых структурах методом Монте-Карло. Основное внимание уделено построению эффективной объектной иерархии, которая дает возможность повторного использования написанного ранее кода, а также минимизирует проблемы, возникающие при разработке программного комплекса несколькими программистами. В качестве иллюстрации работоспособности описанного комплекса приведены результаты расчета вольт-амперной характеристики (ВАХ) интегрального  $n$ -канального МОП-транзистора и проведено их сравнение с известными экспериментальными данными.

*Ключевые слова:* метод Монте-Карло, объектно-ориентированное программирование (ООП), МОП-транзистор, ВАХ.

### Введение

Развитие современной интегральной электроники в настоящее время невозможно без широкого применения математического моделирования на этапе разработки и проектирования интегральных схем (ИС). Одной из важнейших задач, решаемых на этом этапе, является моделирование переноса носителей заряда в активных элементах ИС с целью прогнозирования их электрических характеристик [1–3].

В настоящее время существует и активно развивается несколько подходов к такого рода моделированию. Во-первых — это подход, основанный на прямом решении кинетического уравнения Больцмана [3], во-вторых — подход, основанный на решении фундаментальной системы уравнений (ФСУ) [2], в-третьих — это непосредственное моделирование процессов переноса носителей заряда в приборной структуре методом Монте-Карло [4–6].

Как известно, для решения уравнения Больцмана применительно к конкретным полупроводниковым приборам необходимо вводить различные приближения, позволяющие значительно упростить само уравнение переноса. Таковыми, в частности, являются гидродинамическое и квазигидродинамическое приближения [3]. Однако при практическом использовании последних приходится делать дополнительные упрощения, значительно ограничивающие их применение при моделировании реальных приборных структур.

В связи с этим широкое распространение при моделировании электрических характеристик элементов ИС получил подход, основанный на решении фундаментальной системы уравнений в рамках диффузионно-дрейфового приближения [2, 3]. Это приближение применимо в случае локальной и линейной феноменологической зависимости плотности тока от градиента электростатического потенциала и концентрации носителей заряда. Более того, предполагается, что их плотность достаточно мала, так что принципом Паули можно пренебречь и считать, что каждый носитель заряда дрейфует в электрическом поле и диффундирует независимо от

остальных носителей. При этом электрическое поле не нарушает заметным образом равновесное распределение носителей заряда по скоростям и энергиям.

Одним из наиболее перспективных подходов к моделированию процессов переноса носителей заряда в приборных структурах интегральной электроники является кинетический подход с использованием численного метода Монте-Карло [4–6]. Применительно к моделированию переноса в полупроводниковых структурах этот метод представляет собой процедуру изменения во времени волнового вектора  $\mathbf{k}$  и координат или радиуса-вектора  $\mathbf{r}$  каждой частицы моделируемого ансамбля при ее движении совместно со статистическим накоплением этих параметров (далее под методом Монте-Карло будет пониматься именно эта процедура). Доказано, что накопленные данные позволяют построить функцию распределения  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ , которая совпадает с решением соответствующего уравнения Больцмана [4, 7]. Таким образом, метод Монте-Карло является численным, непрямым методом решения данного уравнения.

Метод Монте-Карло позволяет исследовать различные физические процессы на микроскопическом уровне, что дает возможность избежать наложения большинства ограничений на характеристические длины. Единственным таким ограничением в данном случае остается неравенство  $L_{ch} \gg \lambda_e$ , где  $\lambda_e$  — длина волны Де-Бройля, а  $L_{ch}$  — характеристический размер прибора. В то же время, помимо моделирования переноса электронов в объемных полупроводниковых структурах, метод Монте-Карло можно применять и к структурам с одно- и двумерным электронным газом, поскольку в этом случае существуют направления, вдоль которых движение частиц является свободным [4].

### Алгоритм моделирования

Рассмотрим основные принципы метода Монте-Карло. Процесс переноса носителей заряда (например, электронов) в полупроводнике может быть представлен в виде отрезков их свободного движения во внешних полях, разделенных мгновенно протекающими актами рассеяния [7].

На рис. 1,а приведена временная диаграмма поведения одного электрона. Символом "\*" на этой диаграмме обозначены акты рассеяния, а  $\Delta t$  — это время коррекции поля. Очевидно, что время свободного пробега есть случайная величина. Таким образом, согласно данной схеме изменения волнового вектора электрона  $\mathbf{k}$  происходят при рассеянии, т.е. в моменты времени  $t_i$ , а также между актами рассеяния — вследствие действия приложенных внешних полей. Поэтому при кинетическом моделировании необходимо определять в заданные моменты времени волновой вектор электрона или энергию, а также его координаты.

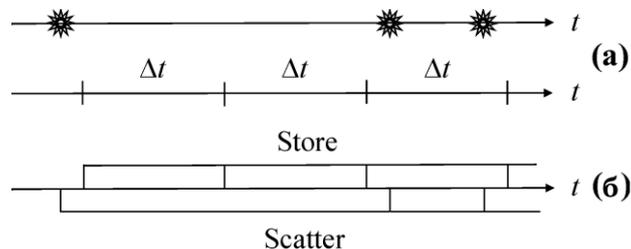


Рис. 1 Временная диаграмма поведения электрона (а) и работы алгоритма моделирования (б)

Если совместить первую и вторую оси на рис. 1,а, то приходим к временной диаграмме работы алгоритма (рис. 1,б), позволяющего через равные промежутки времени движения электрона или ансамбля электронов фиксировать в разного рода сумматорах состояния частицы или ансамбля, а в моменты времени  $t_i$  разыгрывать изменение состояния электрона при рассеянии. После каждого обращения к подпрограмме розыгрыша рассеяния (Scatter) или подпрограмме сохранения состояния (Store) следует обращаться к подпрограмме моделирования свободного движения носителя заряда во внешнем электрическом поле с соответствующим значением времени свободного пробега  $\tau \in (0, \infty)$ , которое определяется суммарной интенсивностью рассеяния частиц и разыгрывается с применением случайного, равномерно распределенного на отрезке  $[0,1]$  числа  $r$ . Описанная процедура является базисом при разработке любого рода программ численного статистического моделирования кинетических процессов методом Монте-Карло.

При моделировании движения электрона во внешнем электрическом поле считается, как правило, что это поле имеет макроскопический характер, т.е., во-первых, оно много меньше атомных полей и, во-вторых, достаточно плавно изменяется в пространстве и времени. Характерные длины, на которых имеет место заметное изменение поля, много больше постоянной решетки, а время его изменения много больше величины  $\hbar/E$ . В рамках сформулированных выше приближений движение носителя заряда можно рассматривать как движение квазиклассической частицы с эффективной массой  $m^*$ , не учитывая при этом периодический потенциал.

Определение состояния электрона после акта рассеяния предполагает выбор механизма рассеяния, приводящего к прерыванию свободного пробега, расчет модуля волнового вектора  $\mathbf{k}$  и определение его направления после рассматриваемого акта. Выбор конкретного механизма рассеяния осуществляется в общем случае путем розыгрыша его по процедуре Неймана, исходя из величин интенсивностей рассеяния для данной энергии носителя. Таким же способом, зная угловое распределение, разыгрывается направление волнового вектора после рассеяния.

Описанный выше алгоритм моделирования процессов переноса носителей заряда с одной стороны довольно нагляден, а с другой — удачно подходит для организации вычислительного эксперимента. Удобным способом реализации программ моделирования переноса методом Монте-Карло, на наш взгляд, является применение технологий объектно-ориентированного программирования [8].

Ключевая идея ООП заключается в том, что программа является моделью некоторых аспектов реальности. Фундаментальные понятия моделируемой реальности представляются в виде абстракций, называемых классами. Класс — это сложный тип данных, содержащий как собственно информацию о состоянии того или иного моделируемого объекта, так и набор правил по которым осуществляется взаимодействие рассматриваемого объекта с другими объектами модели. Организация программы в виде взаимодействия таких абстракций реально приводит к уменьшению взаимозависимостей между частями программы, что, в свою очередь, дает возможность для повторного использования ранее написанного кода, а также практически сводит к нулю проблемы, возникающие при разработке программного кода несколькими программистами. Ниже остановимся на примере разработки программного комплекса моделирования процесса переноса носителей заряда в исследуемой приборной структуре.

Для начала необходимо ввести несколько абстрактных понятий. Частица  $C$  — совокупность данных, содержащих информацию о текущем состоянии носителя заряда, т.е. значения радиуса-вектора  $\mathbf{r}(x, y, z)$ , волнового вектора  $\mathbf{k}$ , времени до ближайшего акта рассеяния  $t_f$ , знака электрического заряда  $s$ , а также вектора состояния  $\mathbf{S}$ . В этом векторе хранится информация об энергетической долине, в которой находится частица, а также квантовых числах, характеризующих подзону, в которой находится частица. Для различных случаев смысл информации, содержащейся в векторе  $\mathbf{k}$ , различен.

Среда  $M$  — это совокупность данных (эффективные массы, константы взаимодействия, энергии фононов и др.) и процедур (закон дисперсии, расчет интенсивностей рассеяния, выбор конкретного механизма рассеяния, розыгрыш волнового вектора  $C::\mathbf{k}$  и вектора состояния частицы  $C::\mathbf{S}$  и др.), описывающих среду, в которой происходит перенос частицы  $C$ . Очевидно, что для различных случаев реализации  $M$  (материалы, размерность электронного газа) существуют процедуры, которые могут быть описаны одинаково, хотя реализованы по-разному. Т.е., какова бы ни была среда, для моделирования переноса методом Монте-Карло необходимо: (i) рассчитать интенсивности рассеяния; (ii) определить закон дисперсии; (iii) разыграть механизм рассеяния, зная состояние частицы; (iv) поставить в соответствие конкретной частице значения эффективной массы и непараболичности.

Таким образом, имеет смысл ввести такое понятие, как "базовая среда"  $BM$ , от которого можно строить различные реализации, соответствующие конкретным средам. В теории ООП понятие типа "базовая среда" называется базовым классом, а производные от него абстракции типа "среда" — классами-потомками. В классах-потомках  $M_i$  процедуры, перечисленные выше переопределяются. Они заменяются на свойственные конкретной среде  $M_i$  процедуры, описывающие в ней физические процессы. Присвоив ссылке на объект базового класса ссылку на класс потомок, мы можем, ссылаясь на процедуры базового класса, вызывать процедуры класса потомка, не заботясь о конкретной реализации последнего.

Поясним это на примере. Допустим, моделируемая структура состоит из трех типов полупроводниковых сред: СРЕДА 1, СРЕДА 2, СРЕДА 3. Пусть у частицы закончилось время свободного пробега. После этого необходимо разыграть процесс рассеяния. Для этого надо вызвать соответствующую процедуру (назовем ее РАССЕЙНИЕ). Зная координаты носителя заряда, можно без труда определить? для какой именно среды надо вызывать процедуру РАССЕЙНИЕ. Однако применение прямого вызова приведет к написанию уникального программного кода, практически без возможности его повторного использования для моделирования структур, состоящих из других материалов. Поэтому целесообразно организовать этот вызов следующим образом. Описываем переменную МАТ, указывающую на объект базового класса ВМ ("базовая среда"), т.е. пустую ссылку, затем вызываем соответствующую процедуру, в которой, зная координаты носителя заряда и его вектор состояния  $\mathbf{S}$ , определяем, для какого материала надо вызывать процедуру РАССЕЙНИЕ (например, СРЕДА 2) и присваиваем переменной МАТ ссылку на СРЕДА 2. Таким образом, вызывая процедуру с именем РАССЕЙНИЕ для МАТ, мы тем самым вызываем процедуру с именем РАССЕЙНИЕ для СРЕДА 2.

Поскольку нам требуется рассмотреть перенос носителей заряда в какой-либо конкретной приборной структуре, то кроме абстрактного понятия "среда" необходимо ввести еще и абстрактное понятие "приборная структура"  $D$  — совокупность данных и процедур, описывающих реальную приборную структуру. Данная величина включает в себя следующие характеристики: (i) геометрия прибора; (ii) режимы на его электродах; (iii) список сред, из которых состоит прибор; (iv) правила интегрирования уравнений движения и граничные условия для уравнения Больцмана; (v) функцию от координат частицы, возвращающую "среду"  $M_i$ ; (vi) пространственное распределение электрического поля в структуре  $F(\vec{r}, t)$ ; (vii) граничные условия для уравнения Пуассона; (viii) расчет потенциала в структуре (решение уравнения Пуассона). Поэтому имеет смысл ввести такое абстрактное понятие, как "базовая приборная структура"  $DM$ , от которого строить различные реализации, соответствующие конкретному прибору. Это позволит избежать специализации на этапе разработки программного кода, выполняющего базовую операцию моделирования переноса методом Монте-Карло, и увеличить степень повторного использования кода.

На рис. 2 представлена упрощенная структурная схема разработанного нами программного комплекса применительно к моделированию интегральных субмикронных МОП-транзисторов с использованием технологий ООП. Физико-математическая модель переноса носителей заряда в таком транзисторе была взята из [4].

Как видно из рисунка, центральным в этой схеме является объект "МОП-транзистор" (mos: MOSFET). В свою очередь он использует такие объекты, как "Объемный кремний", "Поле" и класс "Ансамбль" (на схеме соответственно блоки Si:CBulkSi, EField:CField и Ensemble:list<CCarrier>). Классы "Примеси" (dop:CDopants), "Геометрия прибора" (geo: CGeometry), "Режимы" (reg:CRegimes) задают начальные условия моделирования.

Представленный таким образом подход к моделированию в виде совокупности абстракций приводит к следующей структуре программного комплекса:

- 1) вначале проводится инициализация переменных, описывающих приборную структуру и ансамбль частиц  $A$ ;
- 2) далее моделируется движение каждой частицы из ансамбля  $A$  в течение времени  $\Delta t$  в поле  $F(\mathbf{r}, t)$ ;
- 3) затем, рассчитывается плотность заряда подвижных носителей, решается уравнение Пуассона и рассчитывается новое значение поля  $F(\mathbf{r}, t)$ ;
- 4) если время моделирования истекло, то рассчитываются параметры прибора, а если нет, то осуществляется переход к п. 2

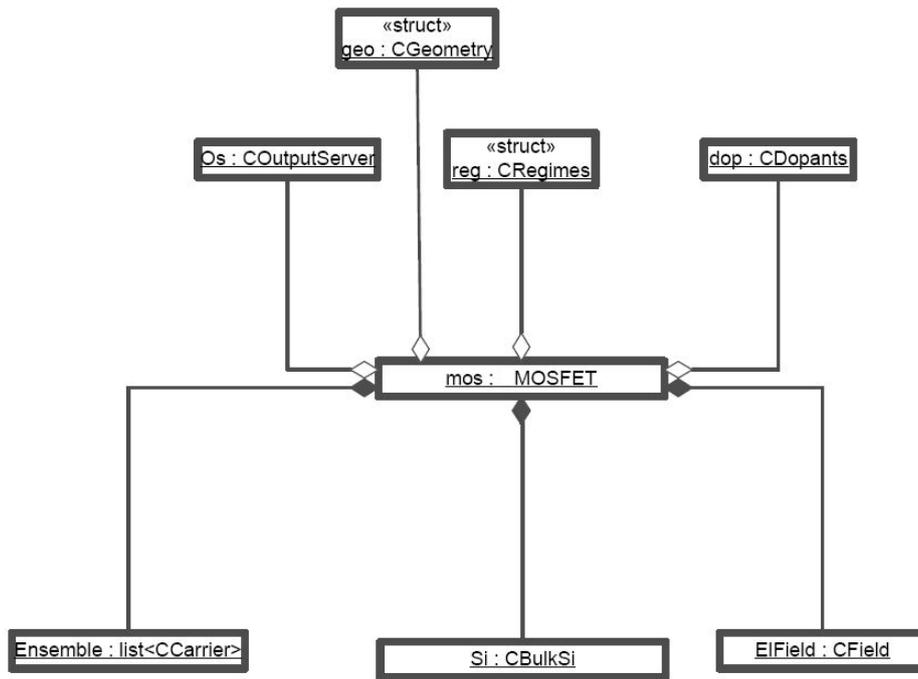


Рис. 2. Структурная схема комплекса моделирования МОП-транзистора

### Апробация комплекса моделирования

С помощью разработанного на основе технологий ООП комплекса моделирования был проведен вычислительный эксперимент по расчету электрических характеристик конкретного исследуемого МОП-транзистора. На рис. 3 для примера показаны ВАХ прибора с длиной канала  $L_{ch}=0,25\text{мкм}$ , концентрацией легирующей примеси в подложке  $N_A=4\cdot 10^{23}\text{м}^{-3}$  и толщиной подзатворного окисла  $d_{ox}=5,6\text{нм}$ . Результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными, взятыми из [9].

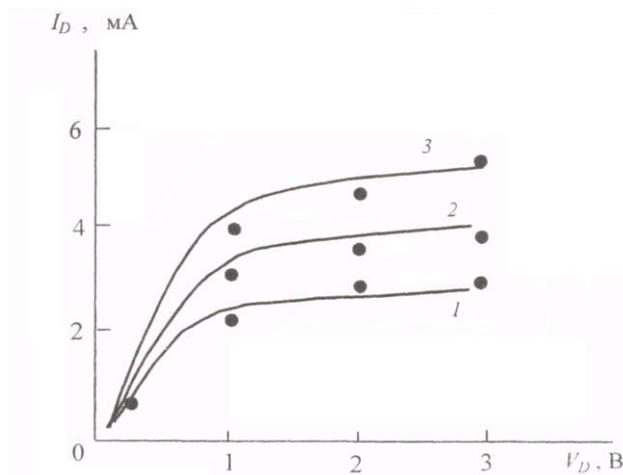


Рис. 3 Зависимость тока стока  $I_D$  от напряжения на стоке  $V_D$  при трех значениях напряжения на затворе  $V_G$ : 1 —  $V_G=2$  В; 2 —  $V_G=2,5$  В; 3 —  $V_G=3$  В; точки – результаты эксперимента [9]

Как следует из рис. 3, результаты вычислительного эксперимента находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

### Заключение

Таким образом, использование технологии ООП позволяет создавать гибкие программы моделирования приборов с высокой степенью повторного использования программного кода и

с возможностью изменения их составных частей без разрушения системы взаимоотношений между различными блоками программы. Рассмотренный подход в рамках метода Монте-Карло позволяет моделировать приборы микро- и наноэлектроники с различной структурой. При этом возможно использование моделей любой степени сложности, в том числе, с учетом различных "тонких" физических эффектов.

## THE MONTE CARLO SEMICONDUCTOR DEVICE STRUCTURES SIMULATION APPROACH USING THE OBJECT-ORIENTED PROGRAMMING TECHNOLOGY

D.S. SPERANSKY, V.M. BORZDOV

### Abstract

This work is devoted to some aspects of the development of charge carrier transport simulation software in semiconductor device structures using Monte Carlo method. The main attention is paid to the creation of the efficient object hierarchy, which allows to increase the program code reusability and to make the programmer's team-working more convenient. As an example the results of integral submicron *n*-channel MOS-transistor's current-voltage characteristics calculation is shown compared with experimental data.

### Литература

1. Борздов В.М., Комаров Ф.Ф. Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Минск, 1999.
2. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Минск, 1999.
3. Кремлев В.Я. Физико-топологическое моделирование структур элементов БИС. М., 1990.
4. Борздов В.М. Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники / В.М. Борздов, О.Г. Жевняк, Ф.Ф. Комаров, В.О. Галенчик. Минск, 2007.
5. Хокни Р., Иствуд Д. Численное моделирование методом частиц. М., 1987.
6. Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation, ed. by S. Selberherr. Springer-Verlag, Wien–New York, 1989.
7. Иващенко В.М., Митин В.В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло. Киев, 1990.
8. Borzdov V.M., Galenchik V.O., Pozdnyakov D.V. et al. // EUROCON 2005 The Int. conf. on "Computer as a tool" Serbia & Montenegro. Belgrade, 21–24 Nov. 2005. Vol. 1. P. 886–888.
9. Roldan J.B. // Semicond. Sci. Technol. 1997. N 12. P. 321–330.