

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ /
MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS**

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2024. Т. 27, № 2. С. 140—145.

DOI: 10.17073/1609-3577j.met202310.604

УДК 621.315:517.958.533.6

**Моделирование функционирования полупроводниковых
приборов с учетом дефектов атомной структуры**

© 2024 г. И. К. Гайнуллин✉

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, д. 1, Москва, 119991, Российская Федерация*

✉ Автор для переписки: Ivan.Gainullin@physics.msu.ru

Аннотация. В работе исследована апробация современных численных методов исследования электрофизических характеристик полупроводниковых приборов. С помощью диффузионно–дрейфовой модели рассчитаны электрофизические характеристики выбранного транзистора. Также был разработан оригинальный программный код для моделирования баллистического электронного транспорта в нанотранзисторах (топологические размеры ~10 нм) с учетом дефектов атомной структуры. Моделирование характеристик полевого нанотранзистора показало, что нарушение кристаллической структуры транзистора, приводит к деградации вольт–амперной характеристики.

Ключевые слова: численные методы, электрофизические характеристики, диффузионно–дрейфовая модель, транзистор

Для цитирования: Гайнуллин И.К. Моделирование функционирования полупроводниковых приборов с учетом дефектов атомной структуры. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2024; 27(2): 140—145. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202310.604>

**Modeling the functioning of semiconductor devices taking
into account defects in the atomic structure**

I. K. Gainullin✉

*Lomonosov Moscow State University,
1 Leninskiye Gory, Moscow 119991, Russian Federation*

✉ Corresponding author: Ivan.Gainullin@physics.msu.ru

Abstract. The paper studies the testing of modern numerical methods for studying the electrophysical characteristics of semiconductor devices. Using the diffusion–drift model, the electrophysical char-

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на V–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 23–25 октября 2023 г.

© 2024 National University of Science and Technology “MISIS”.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

acteristics of the selected transistor are calculated. An original program code was also developed for modeling ballistic electron transport in nanotransistors (topological dimensions of ~10 nm) taking into account defects in the atomic structure. Modeling the characteristics of a field-effect nanotransistor showed that a violation of the crystal structure of the transistor leads to degradation of the I–V curve.

Keywords: numerical methods, electrophysical characteristics, diffusion–drift model, transistor

For citation: Gainullin I.K. Modeling the functioning of semiconductor devices taking into account defects in the atomic structure. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2024; 27(2): 140—145. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202310.604>

Введение

Полупроводниковые приборы (ПП) стали неотъемлемой частью жизни человека: практически любое электронное устройство имеет в себе множество транзисторов. С развитием промышленности их структура становится сложнее, размеры меньше, производство дороже, проявляются новые физические эффекты и предельные свойства материалов. Компьютерное моделирование же обходится намного дешевле и требует значительно меньшего времени. Численный расчет и подбор оптимальных параметров транзисторов позволяет ускорить разработку новых микросхем за счет сокращения циклов прототипирования и проверки работоспособности прототипов методом проб и ошибок. Помимо этого, моделирование позволяет рассчитать характеристики элементов, структура которых настолько сложна, что их производство пока не представляется возможным.

Моделированием электронного транспорта в полупроводниках начали заниматься около полувека назад, когда ПП имели микронные размеры. На таких масштабах хорошо работают полуклассические модели для описания электронного транспорта. Все они в той или иной степени опираются на транспортное уравнение Больцмана (Boltzmann Transport Equation). Среди них следует упомянуть диффузионно–дрейфовую модель [1], гидродинамическую модель [2] и группу методов Монте–Карло, основанных на моделировании движения частиц [3—5]. Достаточно подробное описание вышеперечисленных подходов приведено в обзоре [6]. Область применимости полуклассических моделей ограничивается внизу размерами ~100 нм.

Благодаря непрерывно продолжающейся миниатюризации элементной базы, на сегодняшний день актуальны технологии создания ПП с размерами порядка десятков нанометров. При таких размерах значимую роль начинают играть квантовые эффекты, такие как дискретизация (квантование) энергии электрона и туннелирование через потенциальный барьер между затвором и кристаллом. Электронный транспорт в этом случае имеет баллистический характер (т. е. без потерь

энергии) и моделируется в рамках формализма Ландауэра—Бюттикера (Landauer—Buttiker) [7, 8]. Существует несколько альтернативных численных схем реализации формализма Ландауэра—Бюттикера, но наиболее широко используемым является метод неравновесных функций Грина (*Non-Equilibrium Green's Functions* — **NEGF**), который де-факто стал стандартом для моделирования электронного транспорта в наносистемах.

Применимость тех или иных подходов определяется размером ПП:

- для размеров свыше 100 нм хорошо работает диффузионно–дрейфовая модель;
- для размеров менее 20 нм преобладает баллистический электронный транспорт;
- для промежуточных размеров применяется комбинация вышеуказанных подходов, гидродинамическая модель или группа квартовых методов Монте–Карло.

Постановка задачи и метод решения

Полуклассический транспорт зарядов и диффузионно–дрейфовая модель. Полуклассический транспорт зарядов в полупроводниках принято описывать с помощью диффузионно–дрейфовой модели, построенной на основе транспортного уравнения Больцмана [6]. Диффузионно–дрейфовая модель формулируется в виде системы, состоящей из трех групп уравнений.

Уравнение переноса для плотностей электронного и дырочного тока:

$$J_n = q_n(r)\mu_n E + qD_n \nabla n, \quad (1)$$

$$J_p = q_p(r)\mu_p E + qD_p \nabla p.$$

Уравнения непрерывности для электронов и дырок:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = q \nabla J_n + U_n, \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = q \nabla J_p + U_p.$$

Уравнение Пуассона:

$$\nabla(\epsilon \nabla \phi) = -q(p - n + N_D^+ + N_A^-), \quad (3)$$

$$E = -\nabla \phi,$$

где n и p — концентрация электронов и дырок, соответственно; $J_{n,p}$ — ток; $\mu_{n,p}$ — подвижность; $D_{n,p}$ — коэффициент диффузии; $U_{n,p}$ — суммарная скорость генерации/рекомбинации носителей заряда; N_D^+ , N_A^+ — концентрация доноров и акцепторов; q — элементарный заряд; ϕ — электростатический потенциал.

Нелинейная система дифференциальных уравнений (1)–(3) традиционными методами математической физики не решается. Для получения самосогласованного решения применяются итеративные методы, как правило, метод Гуммеля [9] или метод Ньютона [10]. Детальное описание математической модели и численного метода решения системы уравнений для диффузионно–дрейфовой модели методом конечных элементов приводится в диссертационных работах [11–13].

Баллистический транспорт носителей заряда в наносистемах и метод неравновесных функций Грина. При рассмотрении электронного транспорта в наносистемах, как правило, используется модель, состоящая из источника, стока и проводящей наносистемы, находящейся между ними. Источник и сток являются макроскопическими объектами по сравнению с проводящей наносистемой и играют роль резервуаров, в которых поддерживается постоянный химический потенциал. Источник и сток соединяются с наносистемой при помощи проводов (для удобства иногда применяют термины «левый» и «правый» провод), которые также имеют макроскопические размеры и не влияют на квантовую проводимость наносистемы. Важным моментом является описание контакта между проводом и наносистемой. Следует также пояснить, что рассматривается так называемый баллистический электронный транспорт, т. е. носители заряда движутся без диссипации энергии, а длина свободного пробега электрона превышает длину проводящей наносистемы.

Более подробно особенности баллистического электронного транспорта рассмотрены в книге [14]. Общая концепция метода NEGF заключается в том, что проводящая наносистема и контакты задаются в виде матриц, а электронный ток получается из этих матриц с помощью определенной последовательности математических операций. Подробное описание NEGF приведено в книгах [14, 15]. Общепринятый подход к расчету баллистического транспорта в наносистемах (квантового транспорта) описан в книге [14]. Этот подход базируется на теории Ландауэра (Landauer), в которой квантовый

транспорт определяется рассеянием электронов. Вольт–амперная характеристика рассчитывается следующим образом:

$$I(V) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int dE T(E, V) [f_1(E, V) - f_2(E, V)], \quad (4)$$

где $T(E, V)$ — коэффициент пропускания (прохождения электрона); $f_{1,2}(E, V)$ — распределение Ферми–Дирака (Fermi–Dirac) для электронов на источнике и стоке.

Основная задача заключается в вычислении коэффициента пропускания $T(E, V)$, который является безразмерной величиной. Общей практикой является использование метода неравновесных функций Грина. Этот метод задействует матричное представление основных физических величин, включая волновую функцию и Гамильтониан системы. Коэффициент пропускания вычисляется следующим образом:

$$TM(E, V) = \text{Trace}(G_1 \times G \times G_2 \times G^+),$$

$$G(E, V) = [E - H(V) - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1},$$

$$\Gamma_{1,2}(E, V) = i[\Sigma_{1,2} - \Sigma_{1,2}^+],$$

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(V), \quad (5)$$

где $\Gamma_{1,2}$ — матрицы уширения, описывающие каналы проводимости источника и стока; G — матрица запаздывающей функции Грина; $\Sigma_{1,2}(E, V)$ — матрицы собственной энергии, описывающие взаимодействие с контактами; $H(V)$ — Гамильтониан системы, зависящий от потенциального профиля наносистемы (псевдопотенциала); U , i — мнимая единица.

Результаты и обсуждение

Для апробации экспериментальных и расчетно–теоретических методов, рабочей группой было исследовано два транзистора существенно разных размеров. В первом разделе с помощью диффузионно–дрейфовой модели изучается биполярный транзистор с максимальным размером порядка 100 мкм. А во втором разделе путем моделирования баллистического транспорта изучается влияние атомных дефектов на электрические характеристики полевого транзистора с характерными размерами 5 нм.

Изучение характеристик отдельного транзистора. Для моделирования характеристик выбранного транзистора был разработан оригинальный программный код решения уравнений диффузионно–дрейфовой модели методом конечных элементов. Первым шагом была проведена качественная

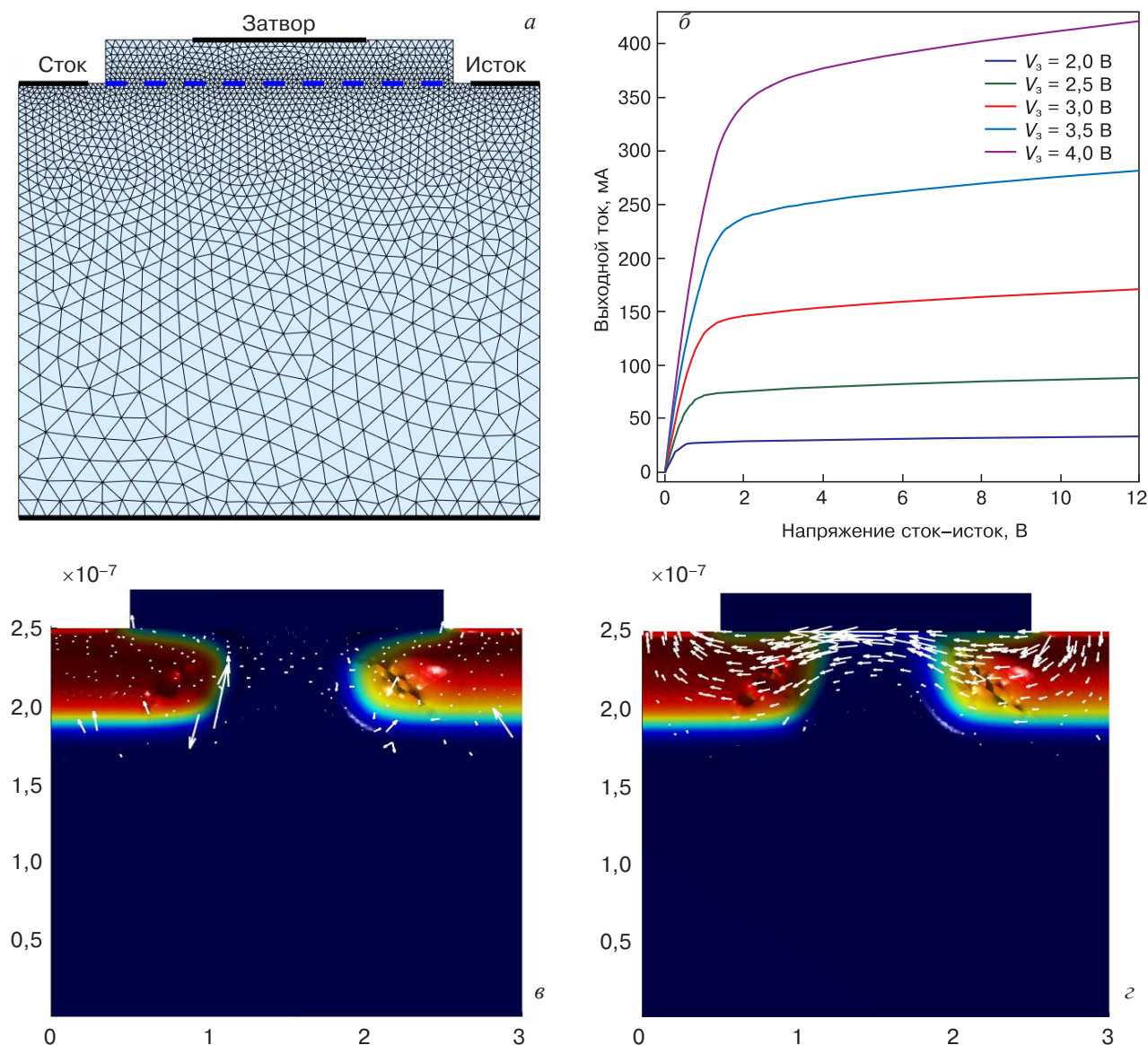


Рис. 1. Геометрическая модель двумерного полевого транзистора (а), включая сетку разбиения на конечные элементы, и выходные ВАХ (б), а также распределение электронной плотности и электронного тока для моделируемого транзистора в закрытом (в) и открытом (г) состояниях

Fig. 1. Geometric model of a two-dimensional field-effect transistor (a), including a finite element mesh and output current-voltage characteristics (b), as well as the distribution of electron density and electron current for the simulated transistor in the closed (v) and open (r) states

верификация разработанного программного кода на примере двумерного полевого транзистора, геометрическая структура которого показана на рис. 1, а. На рис. 1, в и г видно, что при нулевом напряжении на затворе, канал между истоком и стоком закрыт, а ток практически отсутствует. При увеличении напряжения на затворе увеличивается концентрация носителей заряда между истоком и стоком, т. е. канал открывается, что приводит к росту тока.

Моделирование ВАХ полевого нанотранзистора с учетом атомных дефектов его кристаллической структуры. Моделирование баллистического транспорта в нанотранзисторе с учетом атомных дефектов его кристаллической структуры про-

водилось с помощью оригинального программного кода, реализующего трехмерную методику NEGF, в которой атомная структура наносистемы и электростатический потенциал учитываются с помощью теории функционала плотности (*Density Functional Theory — DFT*).

Метод NEGF в сочетании с псевдопотенциалом, описывающим атомную структуру ПП, позволяет моделировать характеристики ПП с учетом его атомной структуры и дефектов. Для иллюстрации такой возможности было проведено моделирование ВАХ полевого транзистора, имеющего ту же структуру, что и в предыдущем разделе. В отличие от предыдущего раздела, проводящий кристалл Si описывается псевдопотенциалом, полученным с

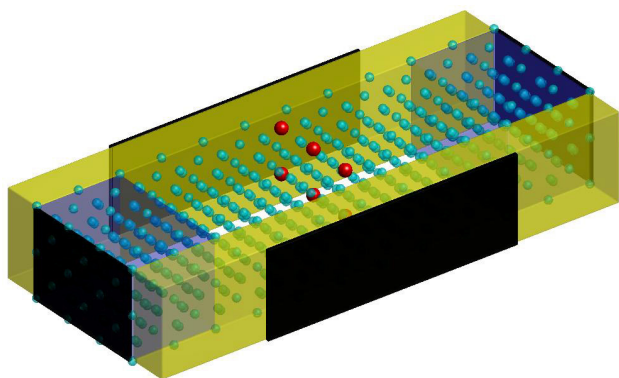


Рис. 2. Иллюстрация моделируемого транзистора. Желтым выделены области SiO_2 , фиолетовым — легированные области Si, черным — контакты, красным — атомы Si, удаленные при моделировании транзистора с поврежденной кристаллической структурой

Fig. 2. Illustration of the simulated transistor.

Yellow highlights the SiO_2 regions, purple highlights the doped Si regions, black highlights the contacts, and red highlights the Si atoms removed during the simulation of the transistor with a damaged crystal structure

помощью теории функционала плотности, т. е. учитывая его атомную структуру. Размер проводящего канала (кристалла Si) был выбран $11 \times 3 \times 2$ ячеек кристаллической решетки ($\sim 5 \times 1,5 \times 1 \text{ нм}^3$).

Было проведено две серии расчетов. В обеих сериях вычислялась величина тока между истоком и стоком, как функция напряжения на затворе. В первом случае расчеты проводились для кристалла кремния с идеальной структурой, а во втором в середине канала искусственным образом была удалена часть атомов кремния (рис. 2). Удаление атомов проводилось по следующему алгоритму: для каждой из 6-и ячеек в середине канала был удален один атом, находящийся в середине верхней грани (на рис. 2 удаленные атомы показаны красным).

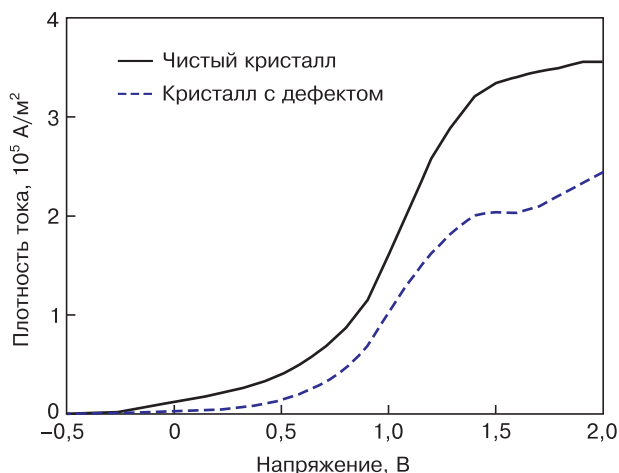


Рис. 3. Зависимость плотности тока от напряжения, приложенного к затвору, в транзисторе с чистой и дефектной кристаллической структурой

Fig. 3. Current density versus gate voltage in a transistor with a pure and defective crystal structure

Из рис. 3 видно, что ВАХ нанотранзистора с идеальной и дефектной кристаллической структурой существенно отличаются друг от друга. Даже удаление относительно небольшого числа атомов ведет к существенной деградации ВАХ. Это объясняется тем, что при удалении атомов полностью или частично блокируются некоторые каналы проводимости. В грубом приближении каналом проводимости является цепочка атомов кремния, ориентированная в направлении между истоком и стоком. При удалении даже одного из атомов этой цепочки эффективность электронного транспорта по ней существенно уменьшается. Это ведет к уменьшению коэффициента пропускания всего кристалла и уменьшению электрического тока.

Таким образом показано, что наличие дефектов в атомной структуре может приводить к деградации характеристик полупроводниковых приборов. На качественном уровне это согласуется с экспериментальными данными.

Заключение

Для моделирования функционирования отдельных полупроводниковых приборов с топологическими размерами 90 нм и выше разработан оригинальный трехмерный программный код решения уравнений диффузионно-дрейфовой модели методом конечных элементов. Для создания перспективных устройств с топологическими размерами десятки нанометров актуально моделировать баллистический электронный транспорт. Для этого разработан оригинальный программный код, реализующий трехмерную методику расчета баллистического электронного транспорта с учетом атомной структуры на основе метода неравновесных функций Грина.

Библиографический список / References

1. Scharfetter D.L., Gummel D.L. Large signal analysis of a silicon Read diode oscillator. *IEEE Transaction on Electron Devices*. 1969; 16(1): 64—77. <https://doi.org/10.1109/t-ed.1969.16566>
2. Stratton R. Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers. *Physical Review*. 1962; 126(6): 2002. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.126.2002>
3. Jacoboni C., Reggiani L. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials. *Reviews of Modern Physics*. 1983; 55(3): 645—705. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.55.645>
4. Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo method for semiconductor device simulation. Springer Science & Business Media; 2012.
5. Hess K. Monte Carlo device simulation: full band and beyond. Boston: Kluwer Academic Publishing; 1991.
6. Vasilevsk D., Mamaluy D., Khan H.R., Raleva K., Goodnick S.M. Semiconductor device modeling. *Journal*

of Computational and Theoretical Nanoscience. 2008; 5(6): 999—1030. <https://doi.org/10.1166/jctn.2008.2538>

7. Landauer R. Electrical transport in open and closed systems. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*. 1987; 68(2): 217—228. <https://doi.org/10.1007/BF01304229>

8. Buttiker M. Coherent and sequential tunneling in series barriers. *IBM Journal of Research and Development*. 1988; 32(1): 63—75. <https://doi.org/10.1147/rd.321.0063>

9. Gummel H.K. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations. *IEEE Transactions on electron devices*. 1964; 11(10): 455—465. <https://doi.org/10.1109/t-ed.1964.15364>

10. Apostol T.M. Calculus. V. II: Multi-variable calculus and linear algebra, with applications to differential equations and probability. John Wiley & Sons; 1969. 673 p.

11. Bortolossi A. 3D finite element drift diffusion simulation of semiconductor devices. 2014. <https://hdl.handle.net/10589/94468>

12. Aspé R., Esteban F. Simulation tool development for semiconductor devices based on drift-diffusion and Monte Carlo. 2015.

13. Tribbia C. 3D transient drift-diffusion simulation of semiconductor devices in presence of impact ionization. 2016.

14. Datta S. Quantum transport: atom to transistor. Cambridge University Press; 2005.

15. Datta S. Electronic transport in mesoscopic systems. Cambridge university press; 1997.

Информация об авторе / Information about the author

Гайнуллин Иван Камилевич — доктор физ.-мат. наук, доцент, Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, Москва, 119992, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6249-0322>; e-mail: Ivan.Gainullin@physics.msu.ru

Ivan K. Gainullin — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Physics, Lomonosov Moscow State University, 1–2 Leninskiye Gory, Moscow 119992, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6249-0322>; e-mail: Ivan.Gainullin@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 27.10.2023; поступила после доработки 23.05.2024; принята к публикации 03.06.2024
Received 27 October 2023; Revised 23 May 2024; Accepted 3 June 2024

* * *