

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР СБИС и УБИС

**В. М. Борздов, А. В. Борздов, Д. В. Поздняков,  
О. Г. Жевняк, Д. С. Сперанский, Ф. Ф. Комаров**

---

*Белорусский государственный университет  
Минск, Беларусь  
E-mail: borzdov@bsu.by*

В докладе изложена методология численного моделирования полупроводниковых приборных структур СБИС и УБИС на основе метода Монте-Карло, а также представлены отдельные результаты расчета электрофизических параметров и электрических характеристик этим методом глубоко субмикронных интегральных МОП-транзисторов с длиной канала 100 нм с использованием разработанного авторами программного комплекса.

*Ключевые слова:* численное моделирование полупроводниковых приборов, метод Монте-Карло, интегральный МОП-транзистор

Вопросам моделирования процессов переноса носителей заряда методом Монте-Карло как в объемных полупроводниках, так и в полупроводниковых приборных структурах, включая активные элементы СБИС и УБИС, а также структуры с низкоразмерным электронным газом, к настоящему времени посвящено достаточно большое число работ. Краткий обзор важнейших из них был дан, например, в [1]. Применительно к рассматриваемым в данной статье задачам этот метод является непрямым численным методом решения кинетического уравнения Больцмана.

Принято считать, что первой работой, в которой была показана возможность моделирования процессов переноса носителей заряда в полупроводниковых средах методом Монте-Карло, была статья [2]. В ней были опубликованы результаты расчета функции распределения горячих носителей заряда в p-Ge, что продемонстрировало огромные возможности исследования кинетических явлений в полупроводниках этим методом.

Другой основополагающей работой, послужившей той отправной точкой, после которой началось интенсивное использование метода Монте-Карло для исследования кинетических явлений в полупроводниках, явилась работа [3]. Именно в ней разработана и подробно описана численная кинетическая модель переноса электронов в объемном GaAs и доказано, что результаты численного моделирования позволяют получить в стационарном случае функцию распределения, удовлетворяющую соответствующему уравнению Больцмана. Отметим также, что доказательство для нестационарного процесса переноса носителей было приведено в [4]. В работе [5] введено понятие саморассеяния носителей заряда, позволившего значительно повысить эффективность процедуры Монте-Карло.

Различным аспектам численного моделирования переноса носителей заряда в объемных полупроводниковых средах применительно к моделированию их электрофизических свойств этим методом посвящена монография [6].

Впечатляющие результаты получены отдельными исследователями и научными группами при моделировании переноса горячих электронов в полупроводниках и полупроводниковых приборных структурах, поскольку метод Монте-Карло предоставляет возможность решать уравнение Больцмана при различных начальных и граничных условиях при воздействии на носители сильных и неоднородных электрических полей.

Возможность эффективного использования данного метода для моделирования электрофизических свойств полупроводниковых структур с двумерным электронным газом (2D ЭГ) относительно недавно была продемонстрирована, в частности, в работах [7–9]. Случай квантовых проволок был рассмотрен, например в [10, 11]. К числу работ, посвященных расчету методом Монте-Карло электрофизических свойств квантовых проволок и приборных структур с одномерным электронным газом (1D ЭГ), также относятся [12, 13].

Блок-схему алгоритма моделирования методом Монте-Карло электрофизических свойств и электрических характеристик приборных структур с низкоразмерным электронным газом можно представить в виде, изображенном на рис. 1 [14].

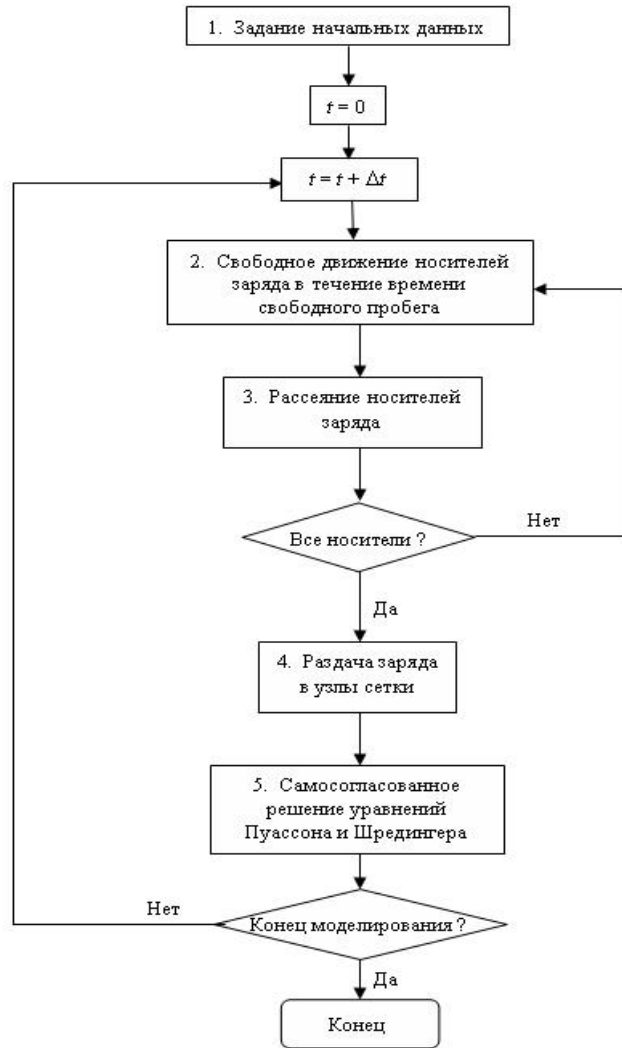


Рис. 1. Блок-схема алгоритма моделирования

Как следует из этого рисунка, основными блоками алгоритма моделирования являются: 1) блок ввода начальных данных, включающий задание начальных значений электростатического потенциала и электрического поля, координат и импульсов носителей заряда, а также внешние условия, при которых будет осуществляться моделирование структуры; 2) блок расчета изменения волнового вектора и координат носителя заряда при его движении за время свободного пробега; 3) блок моделирования рассеяния носителей заряда, включающий выбор механизма рассеяния, определение состояния носителя после рассеяния и розыгрыш нового времени свободного пробега; 4) процедура распределения заряда в узлы сетки для аппроксимации плотности подвижного заряда в узлах сетки; 5) блок решения уравнений Пуассона и Шредингера для оценки электростатического потенциала и электрического поля в узлах сетки.

Таким образом, метод Монте-Карло является весьма мощным средством исследования особенностей процессов переноса носителей заряда и расчета электрофизических свойств различных полупроводниковых структур, широко используемых в микро- и нанoeлектронике. В то же время требуется проведение дальнейших интенсивных исследований с целью повышения адекватности уже разработанных численных моделей на основе этого метода. Одним из важнейших направлений повышения точности и адекватности такого рода моделей является обеспечение полного самосогласованного численного решения системы всех уравнений, описывающих процессы переноса и рассеяния носителей заряда в моделируемой структуре [13]. Применительно к элементам УБИС и квантоворазмерным приборным структурам такая система уравнений включает в себя три уравнения — уравнения Больцмана, Пуассона и Шредингера [1, 14].

Так, в частности, для полупроводниковой приборной структуры с двумерным электронным газом в канале эта система уравнений может быть записана в следующем виде:

$$\frac{df}{dt} + \mathbf{v} \nabla_r f + \mathbf{k} \nabla_k f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cm}, \quad (3)$$

$$\epsilon_0 \nabla \frac{d}{dz} \left( \epsilon(z) \frac{d\phi(z)}{dz} \right) = -\rho(z), \quad (4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi_i(z)}{dz} \right] + V(z)\psi_i(z) = E_i\psi_i(z), \quad (5)$$

где  $f=f(\mathbf{k}, x, y, t)$  – функция распределения электронов,  $\mathbf{k}(x, y)$ ,  $\mathbf{r}(x, y)$ ,  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(x, y)$  – соответственно волновой вектор, радиус вектор, и скорость электрона,  $t$  – время,  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cm}$  – интеграл столкновений,  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная,  $\epsilon = \epsilon(z)$  – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника,  $\phi(z)$  – электростатический потенциал,  $\rho(z)$  – плотность электронного газа,  $\hbar$  – редуцированная постоянная Планка,  $m^*(z)$  – эффективная масса электрона,  $\psi_i(z)$  и  $V(z)$  – соответственно огибающая волновой функции и потенциальная энергия электрона в направлении квантования,  $E_i$  – энергия  $i$ -ой подзоны. При этом уравнение (3) самосогласованной системы (3)–(5) решается численным методом Монте-Карло путем имитации движения двумерных заря-

женных частиц в канале прибора, а уравнения (4) и (5) – соответствующими численными методами решения дифференциальных уравнений [15].

Необходимо отметить, что в зависимости от типа, конструкции и режима работы моделируемого прибора исходная система уравнений Больцмана, Пуассона и Шредингера может видоизменяться и упрощаться. Так, например, в случае постоянного электрического поля в приборе уравнение Пуассона самосогласованно решаться не будет, а для резонансно-туннельных структур часто можно воспользоваться хорошо известными решениями уравнения Шредингера. Примеры моделирования различных приборных структур на основе описанного подхода можно найти в монографиях авторов [1,14].

В качестве конкретного примера в данном докладе рассмотрен глубоко субмикронный кремниевый МОП-транзистор с длиной канала 0,1 мкм, моделируемая область которого приведена на рис. 2, а на рис. 3 представлены результаты расчета таких электрофизических параметров транзистора, как функция распределения электронов по энергии в канале транзистора и его вольтамперные характеристики (ВАХ).

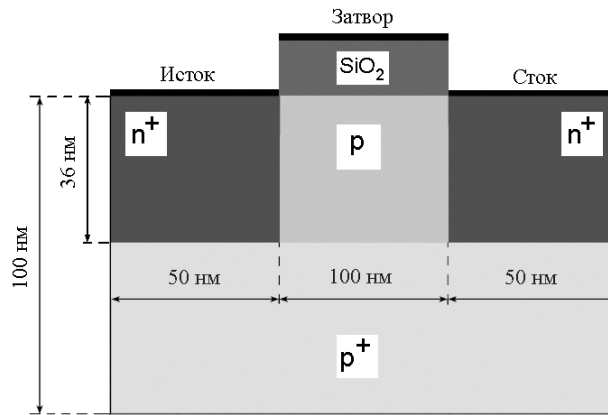


Рис. 2. Моделируемая область МОП-транзистора

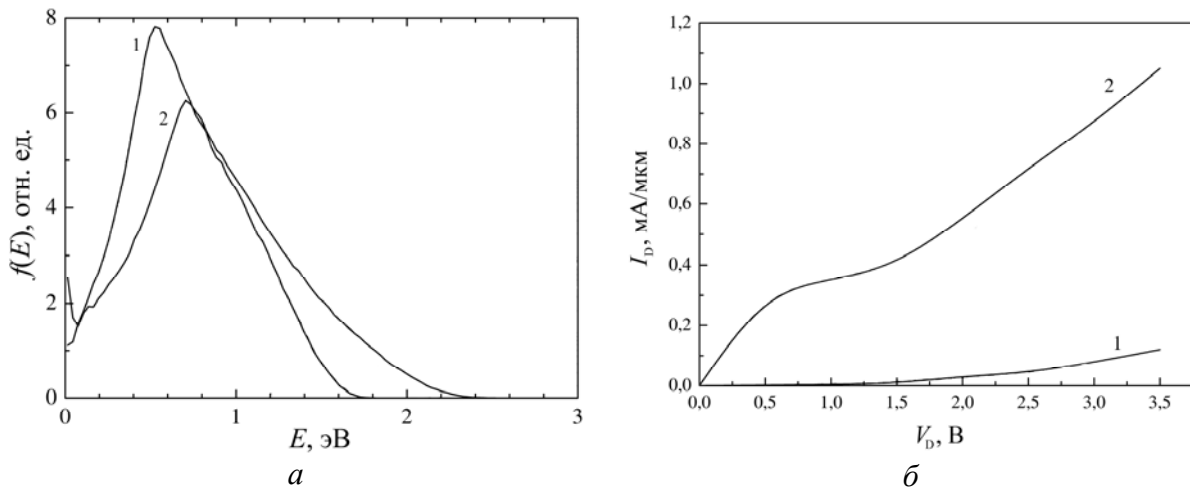


Рис. 3. а) Функции распределения электронов по энергии в области у стока при напряжении на затворе  $V_G = 2$  В и напряжениях на стоке  $V_D = 2$  В (кривая 1) и 3 В (кривая 2) и б) ВАХ моделируемого транзистора (кривая 1 – напряжение на затворе  $V_G = 1$  В, 2 –  $V_G = 2$  В). Температура  $T = 300$  К

## ЛИТЕРАТУРА

1. Борздов, В. М. Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники / В. М. Борздов, О. Г. Жевняк, Ф. Ф. Комаров, В. О. Галенчик. Минск. БГУ, 2007. 175 с.
2. Kurosawa, T. Monte Carlo calculation of hot electron problem / T. Kurosawa // J. Phys. Soc. Jpn. 1966. Vol. 21. P. 424–426.
3. Fawcett, W. Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide / W. Fawcett, A.D. Boardman, S. Swain. // J. Phys. Chem. Solids. 1970. Vol. 31. № 9. P. 1963–1990.
4. Reklaitis, A. The calculation of electron transient response in semiconductors by the Monte Carlo technique / A. Reklaitis // Phys. Lett. A. 1982. Vol. 88. № 7. P. 367–370.
5. Rees, H. D. Calculation of steady state distribution function by exploiting stability / H.D. Rees // Phys. Lett. A. 1968. Vol. 26. № 9. P. 416–418.
6. Иващенко, В. М. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло / В.М. Иващенко, В.В. Митин. Киев. Наук. думка, 1990. 192 с.
7. Fischetti, M. V. Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers / M.V. Fischetti, S.E. Laux // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48. № 4. P. 2244–2274.
8. Расчет электрофизических параметров гетероструктуры  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  / А.В. Борздов [и др.] // Электроника инфо. 2006. № 10. С. 36–38.
9. Моделирование переноса электронов в транзисторе на гетероструктуре  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  / А. В. Борздов [и др.] // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. 2006. №1. С. 112–117.
10. Gaska, F. L. Hot-electron relaxation dynamics in quantum wires / F.L. Gaska [et al.] // J. Appl. Phys. 1994. Vol. 76. № 2. P. 1021–1028.
11. Borzdov, V. Monte Carlo simulation of device structures with one-dimensional electron gas / V. Borzdov [et al.] // Proc. SPIE: Micro- and Nanoelectronics-2005. 2006. Vol. 6260. P. 62601N-1–62601N-11.
12. Pozdnyakov, D. Calculation of electrophysical parameters of thin undoped  $GaAs$ -in- $Al_2O_3$  quantum nanowires and single-wall armchair carbon nanotubes / D. Pozdnyakov, A. Borzdov, V. Borzdov, V. Labunov // Proc. SPIE: Micro- and Nanoelectronics 2009. 2010. Vol. 7521. P. 75210S-1–75210S-9.
13. Моделирование влияния поперечного электрического поля на дрейфовую скорость электронов в  $GaAs$  квантовой проволоке / А.В. Борздов [и др.] // Микроэлектроника. 2010. Т. 39. № 6. С. 436–442.
14. Борздов, В. М. Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники / В. М. Борздов, Ф. Ф. Комаров. Минск. БГУ, 1999. 235 с.
15. Самарский, А. А. Численные методы / А. А. Самарский, А. В. Гулин. М.: Наука, 1989. 429 с.