
BOLLETTINO UNIONE MATEMATICA ITALIANA

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

LUCA VINCENZO BALLESTRA

Approssimazione numerica di modelli idrodinamici per semiconduttori

*Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 6-A—La
Matematica nella Società e nella Cultura (2003), n.2, p. 219–222.*

Unione Matematica Italiana

http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2003_8_6A_2_219_0

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Approssimazione numerica di modelli idrodinamici per semiconduttori.

LUCA VINCENZO BALLESTRA

1. – Descrizione del problema matematico.

I modelli idrodinamici descrivono in maniera particolarmente accurata il flusso di elettroni e lacune nei dispositivi elettronici a semiconduttore. Essi, a differenza di modelli di ordine più basso (modello drift-diffusion, modello energy-balance), permettono di investigare fenomeni sofisticati legati al trasporto di carica, quali, per esempio, la generazione di onde d'urto, o l'effetto cosiddetto di velocity overshoot.

Nella tesi di dottorato sono stati analizzati sia il modello idrodinamico convenzionale ([2]) sia il modello idrodinamico esteso ([1]), quest'ultimo caratterizzato dalla presenza di sforzi viscosi nelle equazioni di conservazione del momento e dell'energia. Viene preso in considerazione solo il trasporto di carica negativa (elettroni), mentre si trascura il flusso dei portatori positivi (lacune).

Dal punto di vista matematico, i modelli idrodinamici sono costituiti da un sistema di leggi di conservazione per la densità di carica, di corrente e di energia degli elettroni

$$(1) \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{F}_c(\mathbf{U}) + \operatorname{div} \mathbf{F}_d(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U}) + \mathbf{B}(\mathbf{U}) \mathbf{U} = \mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{E})$$

dove

$$(2) \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} n \\ n\mathbf{v} \\ ne \end{bmatrix}$$

è il vettore delle incognite, essendo rispettivamente n , \mathbf{v} e e la concentrazione, velocità, e energia totale degli elettroni. L'energia totale è definita come

$$(3) \quad e = \frac{3}{2}RT + \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2$$

dove T è la temperatura assoluta, $R = \frac{K_B}{m}$, m la massa efficace degli elettroni, K_B la costante di Boltzmann.

Il flussi convettivi sono espressi come

$$(4) \quad \mathbf{F}_c = \begin{bmatrix} n\mathbf{v} \\ n\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + nRT\mathbf{T} \\ n\mathbf{e}\mathbf{v} + nRT\mathbf{v} \end{bmatrix}$$

dove il simbolo \otimes denota l'usuale prodotto tensore.

I flussi di natura diffusiva sono definiti come

$$(5) \quad \mathbf{F}_d = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ -nRT\mathbf{T} \\ -nRT\mathbf{T}\mathbf{v} + \mathbf{q} \end{bmatrix}$$

\mathbf{q} essendo il flusso di calore.

La componente deviatorica del tensore degli sforzi è

$$(6) \quad \mathbf{T}_{ij}(\mathbf{U}) = \tau_\sigma \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{d} \operatorname{div} \mathbf{v} \right)$$

essendo d la dimensione spaziale e u_i le componenti del vettore velocità. Gli sforzi viscosi sono dunque proporzionali al tempo caratteristico τ_σ , che è nullo nel modello idrodinamico convenzionale.

Il vettore \mathbf{q} rappresenta il flusso di calore, che viene usualmente modellizzato secondo una legge di tipo Fourier

$$(7) \quad \mathbf{q} = -k\nabla T.$$

Infine, le quantità $\mathbf{B}(\mathbf{U})$ e $\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{E})$ rappresentano opportuni contributi di tipo sorgente e reazione rispettivamente, per la cui formulazione, si veda, ad esempio, [3]. Si noti la dipendenza funzionale del termine $\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{E})$ dal campo elettrico \mathbf{E} , che accoppia il problema idrodinamico con una equazione di tipo ellittico (equazione di Poisson) per il potenziale elettrostatico V

$$(8) \quad \operatorname{div}(\varepsilon \nabla V) = q_n(N - n)$$

essendo $\mathbf{E} = -\nabla\phi$. In (8) ε è la permeabilità magnetica del mezzo semiconduttore, e N rappresenta la densità di drogaggio elettronico (doping).

Dal punto di vista matematico, il problema (1)-(7) appare costituito da un sistema di equazioni di tipo iperbolico-parabolico (formalmente analogo al problema di Navier-Stokes della fluidodinamica), con contributi di tipo sorgente e reazione.

2. - Approccio matematico al problema idrodinamico.

Si è inteso innanzitutto analizzare la buona posizione del modello idrodinamico. A questo riguardo è stata investigata, mediante un approccio linearizzato e

con limitazione al caso monodimensionale, la stabilità del problema ai valori iniziali e al contorno (1)-(8). L'analisi ha mostrato, tra l'altro, la buona posizione delle condizioni iniziali e al contorno che vengono prescritte per un caso test molto ricorrente in letteratura, il diodo ballistico $n^+ - n - n^+$ ([3]).

3. - Approssimazione numerica del problema idrodinamico.

I modelli idrodinamici possono presentare, se usati per la simulazione di dispositivi elettronici reali, soluzioni alquanto irregolari, caratterizzate da onde d'urto e da altre forme di discontinuità dovute agli elevati campi elettrici o alle forti variazioni del doping (queste ultime possono superare i 20 ordini di grandezza). Per tale ragione, l'approssimazione discreta della equazioni è stata realizzata mediante degli schemi numerici ad elevata stabilità.

In particolare, viene utilizzato il metodo delle differenze finite, dove, per il trattamento delle derivate spaziali del primo ordine (flussi iperbolici), si sono sperimentati sia uno schema del primo ordine monotono, sia uno schema del secondo ordine a variazione totale diminvente (TVD). Precisamente, il metodo del primo ordine corrisponde alla discretizzazione «upwinding» di Roe ([5]), che, per aumentarne l'accuratezza, viene implementata su griglie non uniformi di rettangoli. Ne diamo qui la formulazione in 2 dimensioni spaziali

$$(9) \quad \operatorname{div} \mathbf{F}_c \cong |\mathbf{AX}|_{i+1/2,j} \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{\Delta x_{i+1/2}} + |\mathbf{AX}|_{i-1/2,j} \frac{U_{i,j} - U_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1/2}} \\ + |\mathbf{AY}|_{i,j+1/2} \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{\Delta y_{j+1/2}} + |\mathbf{AY}|_{i,j-1/2} \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{\Delta y_{i-1/2}}$$

essendo $(\mathbf{AX}, \mathbf{AY}) = \nabla \mathbf{F}_c$.

Per la discretizzazione del secondo ordine, è stato scelto uno schema a 5 punti di tipo «fully-one-side upwinding», reso TVD mediante l'impiego di opportuni limitatori di flusso lungo le direzioni associate alle caratteristiche del sottosistema iperbolico ([4], ([5]).

Le derivate del secondo ordine vengono approssimate mediante un usuale schema a tre punti centrato ([4]), mentre per l'avanzamento in tempo si utilizza il metodo di Eulero in avanti.

4. - Risultati numerici.

Per il metodo del primo ordine, è stata compiuta, con limitazione al solo modello idrodinamico convenzionale, una analisi di stabilità lineare, la quale ha permesso di stimare, in funzione della dimensione della griglia di calcolo, il valore massimo del passo di integrazione temporale al di sotto del quale lo schema numerico è stabile (condizione CFL). Detta stima si è manifestata in perfetto accor-

do con la limitazione pratica sul massimo intervallo di tempo che è possibile utilizzare nella simulazione numerica.

I modelli idrodinamici sono stati impiegati per la simulazione dei seguenti dispositivi elettronici: il diodo ballistic $n^+ - n - n^+$, un dispositivo unipolare corrispondente alla semplificazione di un MOSFET, il MESFET bidimensionale. In tutti gli esperimenti numerici, lo schema del primo ordine si è rivelato stabile e capace di descrivere soluzioni estremamente discontinue senza generare oscillazioni spurie. Ciò ha permesso, fra l'altro, di mettere in luce la formazione di onde d'urto nei dispositivi bidimensionali (che si generano a basse temperature di esercizio), fenomeno di cui non si aveva finora evidenza in letteratura.

Il metodo numerico del secondo ordine ha invece manifestato, se pure in presenza di soluzioni fortemente irregolari, problemi di convergenza. Pur essendo uno schema a variazione totale diminuente, esso non consente di eliminare del tutto le oscillazioni numeriche che si generano in corrispondenza di discontinuità dovute a forti variazioni del drogaggio elettronico e ad elevato campi elettrici. È stato tuttavia riscontrato che l'ampiezza delle oscillazioni spurie può essere contrastata mediante il raffinamento della griglia computazionale.

Infine, dal punto di vista fisico, sono stati investigati l'effetto della viscosità presente nel modello idrodinamico esteso sulle onde d'urto, e la dipendenza degli strati limite di bordo dalla dissipazione termica e dagli sforzi viscosi.

BIBLIOGRAFIA

- [1] A. M. ANILE, S. PENNISI, *Thermodynamic derivation of the hydrodynamical model for charge transport in semiconductors*, Phys. Rev. B, **46** (1992), 13186-13193.
- [2] K. BLØTEKJÆR, *Transport equations for electrons in two-valley semiconductors*, IEEE Transactions on Electron Devices, **ED-17** (1970), 38-47.
- [3] C. L. GARDNER, *Shock waves in the hydrodynamic model for semiconductor devices*, in Semiconductors Part II, IMA Volumes in Mathematics and its Applications, **59**, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [4] C. HIRSH, *Numerical computation of internal and external flows*, Vol. 2, John Wiley & Sons, Chichester - New York - Brisbane - Toronto - Singapore, 1990.
- [5] R. J. LEVEQUE, *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhäuser Verlag, Basel, 1990.

Via Cavour 30, 18039 Ventimiglia (IM)

E-mail: luca_b_1973@yahoo.it

Dottorato in Matematica Computazionale e Ricerca Operativa

(Sede amministrativa: Milano) - Cielo XIV

Direttore di ricerca: Prof. Fausto Saleri, Politecnico di Milano