

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10, D-1000 Berlin 31

H. Gajewski, P. Deuffhard, P. A. Markowich (eds.)

## Tagung NUMSIM '91

5. – 8. Mai 1991

## Collected Abstracts and Papers

---

Herausgegeben vom  
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
1000 Berlin 31  
Verantwortlich: Dr. Klaus André  
Umschlagsatz und Druck: Rabe KG Buch-und Offsetdruck Berlin

ISSN 0933-789X

## Vorwort

NUMSIM 91 fand vom 6.–8. Mai 1991 im Wissenschaftlichen Kommunikations- & Konferenz-Zentrum der Humboldt-Universität in Gosen bei Berlin statt. Im Mittelpunkt dieses Seminars standen Probleme der numerischen Simulation von Ladungstransport- und Technologieprozessen der Mikro- und Optoelektronik. Es führte Spezialisten der physikalischen Modellierung, der numerischen Mathematik und mathematischen Analysis sowie Nutzer von Simulationsprogrammen aus dem deutschsprachigen Raum zusammen. Ziel war die Vermittlung und der Austausch von Erfahrungen, die Diskussion gemeinsamer Aufgabenstellungen und Projekte und — in Anbetracht der deutschen Vereinigung nicht zuletzt — das gegenseitige Kennen- und Verstehenlernen.

Berlin, im Juni 1991

H. GAJEWSKI  
Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik

P. DEUFLHARD  
Konrad-Zuse-Zentrum  
und  
Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik

P. A. MARKOWICH  
Technische Universität Berlin, Fachbereich Mathematik

# Inhalt

## A. Mathematische und physikalische Modellierung

1. **A New Thermodynamic Approach to the Modeling of Semiconductor Devices and Microsensors**  
(G. Wachutka, Swiss Federal Institute of Technology, CH-8093 Zürich) ..... 1
2. **Modelling und Simulation von Dotierungsprozessen in der Mikroelektronik**  
(J. Lorenz / P. Pichler, Fraunhofer-Arbeitsgruppe für Integrierte Schaltungen, D-8520 Erlangen / R. Dürr, Lehrstuhl für Elektronische Bauelemente, Universität Erlangen-Nürnberg, D-8520 Erlangen) ..... 7
3. **Generalized Continuity Equations for Charge Transport in Semiconductor**  
(E. Platen, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, O-1086 Berlin) ..... 13
4. **Modellierung optoelektronischer Bauelemente**  
(H.-J. Wünsche, Humboldt-Universität zu Berlin, O-1040 Berlin) ..... 18
5. **Ortsabhängiges (mikroskopisches) Modell der Driftbeweglichkeit für HGCDTE-Dioden – Anwendung in TOSCA**  
(A. Schenk, Humboldt-Universität zu Berlin, O-1040 Berlin) ..... 23
6. **2D-Simulation des Interbandtunnels in inhomogenen elektrischen Feldern**  
(M. Stahl / A. Schenk / H.-J. Wünsche, Humboldt-Universität zu Berlin, O-1040 Berlin) ..... 29
7. **Numerische Simulation von DFB-Lasern**  
(U. Bandelow, Humboldt-Universität zu Berlin, O-1040 Berlin) ..... 37
8. **Modellierung von Quantum-Well Lasern**  
(H. Wenzel, Humboldt-Universität zu Berlin, O-1040 Berlin) ..... 42
9. **Modellierung von Nichtgleichgewichtsprozessen mit Fokker-Planck-Gleichungen**  
(H. Stephan, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, O-1086 Berlin) ..... 42
10. **Ein Versuch zur allgemeinen Behandlung der Festkörperoberfläche bezüglich der Dotantendiffusion**  
(W. Röpkke, Halbleiterwerk GmbH, O-1200 Frankfurt/Oder) ..... 47

## B. Mathematische Analysis

1. **Various Versions of the Energy Model of hot Carrier Transport in Semiconductor devices**  
(G. Albinus, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin) ..... 48
2. **Quantum Transport in Semiconductors**  
(A. Arnold, Department of Mathematics, Purdue University, West Lafayette & TU-Berlin, Straße des 17. Juni 136, D-1000 Berlin 12) ..... 51

<b>3. Steady State Electron Shock Waves in a Simplified Hydrodynamic Model</b> (U. M. Ascher, Dept. of Computer Science, Univ. of British Columbia, Vancouver / P. A. Markowich, Department of Mathematics, Purdue University, West Lafayette / Paola Pietra, Dept. of Mathematics, Purdue University, West Lafayette and Istituto di Analisi Numerica del CNR, Pavia / Christian Schmeiser, Inst. für Angewandte und Numerische Mathematik, TU-Wien, A 1040 Wien) .....	56
<b>4. The switching behaviour of a PN-diode in the case of low injection</b> (A. Unterreiter, Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135 D-1000 Berlin 10) .....	62
<b>5. Quantum Steady States: The Bloch-Poisson Model</b> (N. Mauser, Inst. für Angewandte Mathematik, TU-Wien, A-1040 Wien) .....	62
<b>6. On the time discretization of the carrier transport equations</b> (H. Gajewski, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39, O-1086 Berlin) .....	67
<b>7. Analytische Probleme des Ladungsträgertransports</b> (K. Gröger, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39, O-1086 Berlin) .....	69
<b>8. An Existence Theorem for Weak Solutions of the Basic Stationary Semiconductor Equations</b> (J. Frehse / J. Naumann, Humboldt-Universität zu Berlin Unter den Linden 6, O-1086 Berlin) .....	70
<b>9. Über die glatte Abhängigkeit der Lösungen des gemischten Randwertproblems der zweidimensionalen Halbleitergleichungen von den Daten</b> (L. Recke, Humboldt-Universität zu Berlin, Unter den Linden 6, O-1086 Berlin) ....	73

## C. Numerische Methodenentwicklung

<b>1. An Adaptive Algorithm for the Solution of Parabolic Equations</b> (F. A. Bornemann, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Heilbronner Straße 10 D-1000 Berlin 31) .....	74
<b>2. Numerical Simulation of High-Voltage Planar <math>pn</math>-Junctions by Self Adaptive Finite Element Methods</b> (R. Kornhuber / R. Roitzsch, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Heilbronner Straße 10 D-1000 Berlin 31) .....	74
<b>3. Behandlung nichtlinearer Modelle im adaptiven Multilevelkonzept</b> (P. Deuffhard, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Heilbronner Straße 10 D-1000 Berlin 31) .....	74
<b>4. An approximate Newton-method for the Semiconductor Device Equations</b> (K. Gärtner, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39 O-1086 Berlin) .....	75
<b>5. Multidimensional Semiconductor Device Simulation</b> (S. Müller / W. Fichtner, Integrated Systems Laboratory, ETH-Zürich) .....	80

6. New Developments in Iterative Methods for Device Simulation (C. Pommerell, Integrated Systems Laboratory, ETH-Zürich) .....	80
7. Massively Parallel Solution of the Three-Dimensional van Roosbroek Equations (O. Heinrichsberger / S. Selberherr / M. Stiftinger, Institute for Microelectronics, Technical University Vienna, Gußhausstraße 27-29, Vienna) .....	81
8. Vorstellung des Halbleiter-Simulationsprogramms BREAKDOWN mit einigen Beispielen an hochsperrenden <i>pn</i> -Übergängen (E. Falck / W. Feiler / W. Gerlach, Technische Universität Berlin, Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12) .....	88
9. Einsatz der Evolutionsstrategie zur Optimierung von Feldringen und mehrstufigen Feldplattenstrukturen (R. Bassus, Technische Universität Berlin, Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12) .....	88
10. Analytische und numerische Probleme der 2D- Prozeßsimulation (R. Hünlich / N. Strecker, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin) .....	89
11. Neuere Verfahren zur Simulation kinetischer Gleichungen (H. Babovsky, IBM Wissenschaftliches Zentrum, Tiergartenstraße 15 D- 6900 Heidelberg) .....	89
 <b>D. Simulationsergebnisse</b>	
1. TOSCA-Simulations of Silicon Devices (B. Heinemann / R. Richter, Institute for Physics of Semiconductors Walter-Korsing-Str. 2 O-1200 Frankfurt (Oder)) .....	90
2. Einsatz der Simulatoren DIOS und TOSCA im VLSI-Bereich (A. Erlebach / A. Hürnich / R. Stephan / U. Todt Zentrum Mikroelektronik Dresden GmbH, Bereich W, Grenzstraße 28, PF 34 O-8080 Dresden) .....	96
3. Neue Anforderungen an die Prozeß- und Bauelementesimulation durch die Mikroelektronik (St. Buschbeck / F. Richter, ZMD GmbH, Unternehmensbereich Forschung/Entwicklung, Grenzstraße 28, O-8080 Dresden) .....	105
4. Der Einfluß der Diffusionstiefe auf das Sperrvermögen planarer <i>pn</i> -Übergänge (W. Reckel, Technische Universität Berlin, Fachbereich 19 Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik, D-1000 Berlin 12) .....	106
5. Numerische Behandlung von Grenzyklen in der Schaltkreissimulation (W. Schmidt / G. Denk, Technische Universität München, Mathematisches Institut D-8000 München 2) .....	106
6. FEM Simulationen der klassischen Elektrotechnik (M. Kasper, Technische Universität Berlin, Fachbereich Elektrotechnik Einsteinufer 17, D-1000 Berlin 10) .....	110
 Teilnehmerliste .....	 116

## A. Mathematische und physikalische Modellierung

### A New Thermodynamic Approach to the Modeling of Semiconductor Devices and Microsensors

G. WACHUTKA

*Laboratorium für Physikalische Elektronik, Institut für Quantenelektronik, ETH-Hönggerberg, CH-8093 Zürich, Switzerland*

#### Abstract

This paper presents a unified theoretical framework for the coupled simulation of carrier and energy transport in semiconductor devices under general ambient conditions including the action of an external magnetic field and the interaction with electromagnetic radiation (light). The formulation of this "thermodynamic model" is based on the principles of irreversible phenomenological thermodynamics, resulting in current relations where the driving forces comprise drift, chemical and thermal diffusion, and deflection by the Lorentz force. Since each of the pertinent transport coefficients corresponds to a specific thermodynamic effect, it may be obtained from theoretical calculations as well as directly from measured data; thus some of the problems inherent in an approach from microscopic kinetic theory can be avoided. The thermodynamical model gives a consistent description of the wide variety of physical phenomena which are relevant for both the operation of electronic devices (e.g., lattice heating, hot carrier and low temperature effects) and the function of microsensors and actuators (e.g., thermoelectricity, galvanomagnetism and thermomagnetism).

## 1. Introduction

Today's integrated circuit semiconductor technology is no longer restricted to the fabrication of "classical" microelectronic devices; there is an increasing tendency to use it also for manufacturing "unconventional" devices such as microsensors and miniaturized actuators [1] or "high  $T_C$ " devices. This is advantageous, as it allows the cost-effective monolithic integration of various and different device functions on the same chip. So, for instance, the on-chip combination of sensor unit, signal conditioning and error compensation can be achieved ("intelligent sensors"), or the embedding of a sensitive electronic device in a self-monitoring and self-protecting control circuitry ("smart" devices).

For short turn-around times in the development of such "microsystems", the device design is more and more successfully supported by numerical simulation. Considering the functional complexity of integrated microsystems, it is evident that, in addition to the electric transport phenomena, an increasing variety of other physical effects has to be accounted for in device modeling. Examples are heat dissipation and cooling in smart power devices, self-heating of VLSI and ULSI structures, thermoelectricity in thermoelements, cooling in Peltier elements, thermal effects in magnetic or optical microsensors, or temperature problems in optoelectronic devices (such as power laser diodes, for instance). For a physically proper treatment of such effects in device and sensor modeling, the coupled simulation of both carrier transport and energy transport is indispensable. Moreover, in the case that the device function involves the interaction of electromagnetic radiation fields with carriers and host lattice, the optical device properties must consistently be incorporated, in particular the coupling of the electromagnetic power flux to the particle and energy balances due to light emission and absorption. Furthermore, if the device is exposed to an external quasi-static magnetic field, the basic equations must include the galvanomagnetic and thermomagnetic effects.

It is commonly believed that such advanced device models should be based upon a momentum expansion of Boltzmann's transport equation which is truncated after the second-order moments ("hydrodynamic model" [2,3]). However, for practical applications many restrictive approximations are unavoidable (e.g., relaxation time approximation) and, therefore, the transport coefficients and energy exchange terms arising in this approach are controversially discussed

up to now. In many cases, they enter the theory simply as heuristic parameter models.

The “thermodynamic model” provides an attractive alternative to microscopic kinetic theory. Based on the principles of irreversible phenomenological thermodynamics, it constitutes a comprehensive framework for the unified and consistent treatment of all of the above-mentioned physical phenomena relevant for both the operation of integrated electronic devices and the function of microsensors and actuators. Using this approach yields governing equations where the functional dependence of the transport coefficients on the state variables and the exterior control parameters may be obtained from theoretical calculations as well as from direct measurement of certain material properties.

## 2. Basic Assumptions and Current Relations

The key idea in the thermodynamic approach consists in regarding the semiconductive medium as a composite thermodynamic system which comprises the subsystems of electrons, holes, and host lattice. Moreover, it may be coupled to an electromagnetic radiation field (“photon gas”), and it may also be affected by the action of a slowly varying external magnetic field. Even if the device as a whole is operated far away from global thermodynamic equilibrium, the constituent components, each of them *per se*, is assumed to be *locally* (i.e., at a fixed position  $\vec{r}$ ) in equilibrium. The three subsystems are able to interact with each other and with the ambient photon field according to certain rules which allow for the various scattering, recombination and generation mechanisms. Under certain basic assumptions discussed elsewhere [4], any accessible state of the composite system can be uniquely characterized by a set of (position- and time-dependent) state variables which, besides the electron and hole quasi-Fermi levels,  $\phi_n$  and  $\phi_p$ , also include the temperatures of the host lattice,  $T_L$ , and those of the carriers,  $T_n$  and  $T_p$  (Fig. 1).

<u>drift-diffusion</u> $n(\vec{r},t), p(\vec{r},t)$ $\psi(\vec{r},t)$	<u>hot carriers</u> $T_n(\vec{r},t), T_p(\vec{r},t)$	
<u>heat transport</u> <u>in host lattice</u> $T_L(\vec{r},t)$	$\vec{S}_{\text{rad}}$ $\vec{B}$ <small>photon field</small> <small>static magnetic field</small>	<u>dynamics of</u> <u>photon fields</u> $\vec{A}(\vec{r},t)$

Figure 1: Semiconductor state variables including thermal, magnetic, and optical effects.

Following Onsager’s general formalism [5], the electron and hole current densities,  $\vec{J}_n$  and  $\vec{J}_p$ , and the heat fluxes of the individual subsystems,  $\vec{Q}_n$ ,  $\vec{Q}_p$ , and  $\vec{Q}_L$ , are related to the gradients of the state variables by a  $15 \times 15$  matrix:



$$\begin{pmatrix} \vec{J}_n \\ \vec{Q}_n \\ \vec{J}_p \\ \vec{Q}_p \\ \vec{Q}_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{L}_{11} & \underline{L}_{12} & \cdots & \underline{L}_{15} \\ \underline{L}_{21} & \underline{L}_{22} & \cdots & \underline{L}_{25} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{L}_{51} & \underline{L}_{52} & \cdots & \underline{L}_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla\phi_n \\ \frac{1}{T_n}\nabla T_n \\ \nabla\phi_p \\ \frac{1}{T_p}\nabla T_p \\ \frac{1}{T_L}\nabla T_L \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

The  $3 \times 3$  submatrices  $\underline{L}_{\alpha\beta}$  depend on the (quasi-static) magnetic induction  $\vec{B}$ . Making use of Onsager's reciprocity theorem, which states that  $\underline{L}_{\alpha\beta}(\vec{B}) = \underline{L}_{\beta\alpha}(-\vec{B})^T$ , and assuming cubic or higher spatial symmetry of the semiconductor material for  $\vec{B} = 0$ , elementary group theoretical arguments lead to the following general structure [6]:

$$\underline{L}_{\alpha\beta}(\vec{B}) = a_{\alpha\beta} \mathbf{1} + b_{\alpha\beta} (\vec{B} \times \cdot) + c_{\alpha\beta} (\vec{B} \times \cdot)^2 \quad (2.2)$$

Here  $a_{\alpha\beta} = a_{\beta\alpha}$ ,  $b_{\alpha\beta} = b_{\beta\alpha}$ , and  $c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha}$  are certain scalar functions of  $|\vec{B}|^2$ , and the symbol  $(\vec{B} \times \cdot)$  denotes the linear operation of taking the vector product of  $\vec{B}$  and another vector. In the absence of a magnetic field, in particular, all  $\underline{L}_{\alpha\beta}$ 's are multiples of the unit matrix.

A further simplification of the current relations is obtained by the assumption of "weak interaction" between electrons and holes in the sense that the fluxes related to the electron subsystem,  $\vec{J}_n$  and  $\vec{Q}_n$ , are not affected by the driving forces associated with the holes,  $\nabla\phi_p$  and  $\nabla T_p$ , and vice versa. Corroborated by the device physicist's experience, this hypothesis is commonly accepted; it is manifested in eq. (2.1) by placing zero blocks on the entries of  $\underline{L}_{13}$ ,  $\underline{L}_{14}$ ,  $\underline{L}_{23}$ ,  $\underline{L}_{24}$ ,  $\underline{L}_{31}$ ,  $\underline{L}_{32}$ ,  $\underline{L}_{41}$ , and  $\underline{L}_{42}$ . One should note that a similar argument does *not* hold for the interaction between the carriers and the host lattice. On the contrary, it is well known that at low temperatures ( $T_L < 100K$  typically) a gradient of  $T_L$  induces a contribution to the electric currents  $\vec{J}_n$  and  $\vec{J}_p$  (*phonon-drag* effect); likewise a gradient of  $\phi_n$  or  $\phi_p$  gives rise to heat flow in the lattice (*electron-drag* effect). Both effects are strongly interrelated because the respective transport matrices are equal:  $\underline{L}_{\alpha 5} = \underline{L}_{5\alpha}$  ( $\alpha = 1 \dots 4$ ).

From the above considerations we recognize that only a small number of the matrix elements in the current relation (2.1) are independent quantities; all the others can be calculated from these. Thus it is convenient to parametrize the coefficients  $a_{\alpha\beta}$ ,  $b_{\alpha\beta}$ , and  $c_{\alpha\beta}$  in terms of few independent transport coefficients, which are physically significant, accessible by measurement and, hence, commonly used for the characterization of material properties. These are the *electric conductivities*  $\underline{\sigma}_n$  and  $\underline{\sigma}_p$ , the *thermal conductivities*  $\kappa_n$ ,  $\kappa_p$ , and  $\kappa_L$ , and the coefficients describing the thermoelectric, galvanomagnetic, and thermomagnetic effects, namely the *thermopowers*  $\underline{P}_n$  and  $\underline{P}_p$ , the *Hall coefficients*  $R_n$  and  $R_p$ , the *Nernst coefficients*  $\eta_n$  and  $\eta_p$ , and the *Righi-Leduc coefficients*  $\mathcal{L}_n$  and  $\mathcal{L}_p$ . With reference to these quantities, the current relations can be re-written in a very compact vector formulation as

$$-\nabla\phi_n = \underline{\sigma}_n^{-1} \vec{J}_n + \underline{P}_n \nabla T_n + \vec{B} \times (R_n \vec{J}_n + \eta_n \nabla T_n) \quad (2.3)$$

$$\vec{Q}_n = \underline{P}_n T_n \vec{J}_n - \kappa_n \nabla T_n + \vec{B} \times (\eta_n T_n \vec{J}_n + \kappa_n \mathcal{L}_n \nabla T_n) \quad (2.4)$$

(and the respective equations for the holes and the lattice). These equations generalize previous results [4,7] in a consistent way; in particular, they constitute the general three-dimensional vector formulation of Callen's two-dimensional model of the thermomagnetic effects [8]. For a physical interpretation of the current relations, one should recall that the quasi-Fermi levels  $\phi_n$  and  $\phi_p$  are composed of the sum of the electric potential  $\psi$  and the respective chemical potentials  $\zeta_n$  and  $\zeta_p$ , which themselves are functions of the carrier concentration and temperature (implicitly defined by the underlying carrier statistics). An expansion of  $\nabla\phi_n$  and  $\nabla\phi_p$  in terms

of these variables reveals that actually drift, chemical diffusion, and thermal diffusion appear as driving forces. The deflecting action of the magnetic field on the electric and thermal currents (*Lorentz force*) is reflected by the vector products with  $\vec{B}$ . Solving eq. (2.3) for the current density  $\vec{J}_n$  and inserting this result into eq. (2.4) (and the analogue for the hole equations) yields somewhat lengthy explicit expressions for the non-zero transport matrices  $\underline{L}_{\alpha\beta}$  which, for the sake of brevity, must be omitted here.

### 3. Balance Equations and Heat Transfer Rates

The dynamical behavior of the composite system of carriers and lattice is governed by physical conservation laws such as the continuity of particle flow

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n + G - R ; \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p + G - R \quad (3.1)$$

( $n, p$  : carrier concentrations;  $G, R$  : generation and recombination rates;  $q$  : elementary charge) and the balance of internal energy for the three individual subsystems. By substitution of the respective current relations for the energy fluxes, one finally arrives at a set of three coupled generalized heat conduction equations comprising

$$c_n \frac{\partial T_n}{\partial t} = \operatorname{div} (\underline{K}_n \nabla T_n + \underline{L}_n \vec{J}_n) + H_n \quad (3.2)$$

and the analogous equation for the holes (as obtained by interchanging the subscripts  $n$  with  $p$ ), and

$$c_L \frac{\partial T_L}{\partial t} = \operatorname{div} (\kappa_L \nabla T_L) + H_L \quad (3.3)$$

Here,  $c_n$  and  $c_L$  denote the heat capacities of the electron gas and the lattice; the transport matrices under the *div*-operator are given by

$$\underline{K}_n = \kappa_n \left[ \underline{1} - \mathcal{L}_n (\vec{B} \times \cdot) \right] \quad (3.4)$$

$$\underline{L}_n = -T_n \left[ \left( \frac{\partial \phi_n}{\partial T_n} \right)_{n,p} + \underline{P}_n \right] - T_n \eta_n (\vec{B} \times \cdot) \quad (3.5)$$

and the heat source (or sink) terms  $H_n$  and  $H_L$  turn out to be

$$H_n = \vec{J}_n \underline{\sigma}_n^{-1} \vec{J}_n + \vec{J}_n \left[ \nabla \left( T_n \left( \frac{\partial \phi_n}{\partial T_n} \right)_{n,p} \right) + \underline{P}_n \nabla T_n \right] + \eta_n \vec{J}_n (\vec{B} \times \nabla T_n) + \left( \frac{\partial u_n}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.6)$$

$$H_L = q \left[ T_p \left( \frac{\partial \phi_p}{\partial T_p} \right)_{n,p} - T_n \left( \frac{\partial \phi_n}{\partial T_n} \right)_{n,p} + \phi_n - \phi_p \right] (G - R) - \left( \frac{\partial u_n}{\partial t} \right)_{coll} - \left( \frac{\partial u_p}{\partial t} \right)_{coll} - \langle \operatorname{div} \vec{S}_{rad} \rangle \quad (3.7)$$

where  $(\partial u_n / \partial t)_{coll}$  and  $(\partial u_p / \partial t)_{coll}$  denote the net energy exchange between carriers and lattice due to intraband scattering, and  $-\langle \operatorname{div} \vec{S}_{rad} \rangle$  is the average (rms) power flux which is transferred from the electromagnetic field to the semiconductor by the Poynting vector  $\vec{S}_{rad}(\vec{r}, t)$ . The other terms in eqs. (3.6)–(3.7) can be classified as Joule heat, Thomson and Peltier heat, Nernst heat, and the energy exchanged through recombination and generation. One should note that, in the special case of steady-state conditions, the expression  $\operatorname{div} (\underline{L}_n \vec{J}_n)$  in eq. (3.2) can be re-calculated (using eq. (3.1)) in terms of the generation-recombination rate and first-order spatial gradients of the state variables, leading to an ordinary thermal conduction equation for  $T_n$  with a modified

heat transfer rate  $\tilde{H}_n = H_n + \text{div}(\underline{L}_n \vec{J}_n)$ , where the result of evaluating  $\text{div}(\underline{L}_n \vec{J}_n)$  contributes as additional generation-recombination heat and Peltier-Thomson heat (cf. eq. (31) in [4]).

Augmented by Poisson's equation,

$$\text{div}(\epsilon \nabla \psi) = q(N_A^- - N_D^+ + n - p) \quad (3.8)$$

(with  $N_A^-, N_D^+$  denoting the concentrations of ionized acceptors and donors, respectively) the system (3.1)–(3.3) couples charge and heat transport in a physically rigorous and consistent way. In the limit of zero magnetic field or under the assumption of equal temperatures of carriers and lattice, the results of previous work [4,6] are retrieved.

The interaction with an ambient photon field is incorporated in the theory by introducing the term  $-\langle \text{div} \vec{S}_{rad} \rangle$  and, moreover, by supplementing the particle generation and recombination rate  $G - R$  by a term  $(G - R)_{rad}$  which accounts for optical contributions. A consistent model for both terms reads [4]

$$-\langle \text{div} \vec{S}_{rad} \rangle = \int_0^\infty \kappa(\vec{r}, \omega) |\vec{S}(\vec{r}, \omega)| d\omega \quad (3.9)$$

$$(G - R)_{rad} = \frac{\int_{E_g/\hbar}^\infty \eta(\omega) \kappa(\vec{r}, \omega)}{\hbar \omega |\vec{S}(\vec{r}, \omega)| d\omega} \quad (3.10)$$

where  $\vec{S}(\vec{r}, \omega)$  denotes the temporal Fourier transform of  $\langle \vec{S}_{rad}(\vec{r}, t) \rangle$ ,  $\kappa(\vec{r}, \omega)$  is the optical absorption coefficient, and  $\eta(\omega)$  is the spectral quantum efficiency. The latter quantities account for all optical properties of the device material; the explicit expressions depend on the operation of the device under consideration. In a photodiode exposed to moderately high light intensity, for example,  $\kappa(\vec{r}, \omega)$  is well approximated by assuming nearly-equilibrium conditions, and  $\vec{S}(\vec{r}, \omega)$  is given as exterior light flux which, after impinging on the semiconductor, is exponentially damped with the local penetration depth  $L = 1/\kappa$  [9]. In a light-emitting diode or laser diode, on the other hand,  $\kappa(\vec{r}, \omega)$  reflects all the stimulated photon emission and absorption processes and, hence, has to be modelled under the supposition of a highly excited semiconductor (see, e.g., [10]). In this case, the electromagnetic power flux  $\vec{S}_{rad}(\vec{r}, t)$  has to be treated as additional dynamic variable, which is obtained by adding up the individual modes resulting from the solution of Helmholtz' equation within the active region.

#### 4. Boundary Conditions

The boundary conditions imposed on the state variables are derived from the same conservation laws which underlie the dynamical equations. For example, the *particle balances* along an interface or outer surface portion of a semiconductor region read

$$\vec{J}_n \cdot \vec{N} = -q R_{surf,n} ; \quad \vec{J}_p \cdot \vec{N} = q R_{surf,p} \quad (4.1)$$

where  $\vec{N}$  denotes the outer unit normal vector, and  $R_{surf,n}$  and  $R_{surf,p}$  are the net surface recombination rates of the carriers, which are given functions of the state variables. Similar boundary conditions hold for the heat fluxes; in particular, by the *conservation of total energy* it is implied that the normal component of the total energy flux

$$\vec{J}_{tot}^u \cdot \vec{N} = (\vec{Q}_L + \vec{Q}_n + \phi_n \vec{J}_n + \vec{Q}_p + \phi_p \vec{J}_p) \cdot \vec{N} \quad (4.2)$$

has to be a continuous function when crossing a surface. For the electric potential, we have *Gauss' law*

$$\epsilon_I \left. \frac{\partial \psi}{\partial N} \right|_I = \epsilon_{II} \left. \frac{\partial \psi}{\partial N} \right|_{II} + \rho_{surf} \quad (4.3)$$

where  $\epsilon_I$  and  $\epsilon_{II}$  are the respective permittivity constants of the materials adjacent to the interface, and  $\rho_{surf}$  is the surface charge density.

Actually the boundary conditions are defined by the surface-projected versions of eqs. (3.1)–(3.3) and (3.8). This proves to be advantageous for two reasons. First, the device can be linked to the electric circuitry and embedded into the thermal environment in a physically proper and, hence, natural way, as the boundary conditions express the continuity of the electric and thermal fluxes when passing across a surface or interface. Secondly, the implementation in a numerical simulation program is straightforward, provided that a flux-conserving discretization method is applied (such as the frequently used “Box Integration” or “Finite Volume Method”).

Omitting a detailed discussion here, we content ourselves with mentioning only few examples of physical effects which are reflected in the boundary conditions: In the case that the semiconductor is separated from the ambient by a thin electrically insulating layer with bad thermal conductance (e.g., oxide or nitride), we find a generalized form of “*Newton’s law of cooling*”

$$\kappa_{sc} \left. \frac{\partial T_L}{\partial N} \right|_{sc} = h_{sc-in}(T_{ext} - T_L) + q(T_p P_p + \phi_p) R_{surf,p} - q(T_n P_n + \phi_n) R_{surf,n} \quad (4.4)$$

where  $\kappa_{sc}$  is the thermal conductivity of the semiconducting material,  $h_{sc-in}$  is the heat-transfer coefficient of the insulating layer, and  $T_{ext}$  denotes the ambient temperature. The second and third term on the right-hand side account for the heat generated by surface recombination.

Along the interface between different or differently doped (semi-)conducting materials, the *Peltier* and *Seebeck effect* are retrieved in the boundary conditions. Therefore, the presented model is in particular applicable to thermoelements integrated on the chip (e.g., thermosensors or cooling elements).

With a magnetic field  $\vec{B}$  acting on the device, the boundary condition for the electric potential  $\psi$  along a non-contacted outer boundary portion of a semiconductor region reads

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial N} \right|_{sc} = -\frac{\rho_{surf}}{\epsilon_{sc}} + \sigma R(\vec{B} \times \nabla \psi) \cdot \vec{N} + (\sigma R P - \eta)(\vec{B} \times \nabla T) \cdot \vec{N} \quad (19)$$

where  $\sigma$ ,  $R$ ,  $P$ ,  $\eta$  denote the ambipolar electric conductivity, Hall coefficient, thermopower, and Nernst coefficient, respectively [6]. Under isothermal conditions, and if the magnetic field  $\vec{B}$  points in a direction perpendicular to  $\vec{N}$ , this equation states the well-known fact that the electric field  $-\nabla \psi$  is tilted by the *Hall angle*  $\theta$  according to the relation  $\tan \theta = \sigma R |\vec{B}|$ .

## 5. Concluding Remarks

With the thermodynamic model a comprehensive framework has been formulated which serves for the simulation of a large variety of physical effects found in advanced electronic devices or microtransducers. It may provide appreciable aid to the device designer as it allows detailed insight into the interplay between the *electrical*, *thermal*, *optical* and *magnetic* device behavior. Since *low temperature conditions* have never been excluded in our theory, we are capable of modeling effects such as impurity freeze-out or phonon-drag which may become relevant in future devices (e.g., “high  $T_c$  devices”).

In situations where *hot carrier effects* become significant, the thermodynamic model provides an attractive alternative to the usual approach via momentum expansion of Boltzmann’s transport equation (“hydrodynamic model” [3]). A comparison shows that there is a tight interrelation between these two models so that virtually the same results are to be expected.

## References

- [1] H. Baltès: *Microtransducers by Industrial IC Technology and Micromachining*. Techn. Digest of the 10th Sensor Symposium of the IEE Japan, May 1991, Tokyo, Japan, pp.17–23.

- [2] K. Bløtekiær: *Transport Equations for Electrons in Two-Valley Semiconductors*. IEEE Trans. Electron Devices, ED-17, 38–47 (1970).
- [3] A. Forghieri et al.: *A New Discretization Strategy of the Semiconductor Equations Comprising Momentum and Energy Balance*. IEEE Trans. on CAD, CAD-7, 231–242 (1988), and references therein.
- [4] G. Wachutka: *Rigorous Thermodynamic Treatment of Heat Generation and Conduction in Semiconductor Device Modeling*. IEEE Trans. on CAD, CAD-9, 1141–1149 (1990).
- [5] L. Onsager: *Reciprocal Relations in Irreversible Processes*. Phys. Rev. 37, 405–426 (1931).
- [6] S. Rudin, G. Wachutka, H. Baltes: *Thermal Effects in Magnetic Microsensor Modeling*. Sensors and Actuators A27, 731–735 (1991).
- [7] A. Nathan, H. Baltes, W. Allegretto: *Review of Physical Models for Numerical Simulation of Semiconductor Microsensors*. IEEE Trans. on CAD, CAD-9, 1198–1208 (1990).
- [8] H. B. Callen: *Thermodynamics*. Wiley, New York, 1960, pp.305–307.
- [9] A. Lui *et al.*: *Electro-Optical Characteristics of Photodiodes: Modeling and Validation*. Proc. 18th Yugoslav Conf. on Microelectronics MIEL-90, May 1990, Zagreb, Yugoslavia, pp.121–124.
- [10] H.-J. Wünsche, M. Mocker: *Gleichungen für die Modellierung von Halbleiter-Injektionslasern*. Wiss. Zeitschrift der Humboldt-Universität Berlin, Math.-Nat. R. 35, 109–120 (1986).

## Modelling und Simulation von Dotierungsprozessen in der Mikroelektronik

J. LORENZ / P. PICHLER

*Fraunhofer-Arbeitsgruppe für Integrierte Schaltungen, Artilleriestraße 12,  
D-8520 Erlangen, Germany*

R. DÜRR

*Lehrstuhl für Elektronische Bauelemente, Universität Erlangen-Nürnberg  
Artilleriestraße 12, D-8520 Erlangen, Germany*

### Abstract

Die Prozeß- und Bauelementesimulation ist ein wichtiges Hilfsmittel bei der Entwicklung und Optimierung mikroelektronischer Bauelemente. In diesem Vortrag wird auf die Simulation der Prozeßschritte Implantation, Diffusion und Oxidation eingegangen.

Wegen ihren geringeren Rechenzeitanforderungen werden analytische Modelle zur Beschreibung der Ionenimplantation häufiger verwendet als Monte-Carlo Programme. Aufbauend auf Verbesserungen des "Numerical Range Scaling" Modells werden ein und zweidimensionale Mehrschichtmodelle vorgestellt, mit deren Hilfe die Ionenimplantation auch für nicht-planare Deckschichten gut beschreiben werden kann.

Fortschrittliche Modelle zur Simulation der Diffusion von Dotierungsatomen führen auf komplizierte Systeme von nichtlinearen steifen partiellen Differentialgleichungen. In diesem Vortrag werden Modelle im Hinblick auf ihre Implementierung in Prozeßsimulationsprogrammen diskutiert. In diesem Zusammenhang ist die Vereinfachung von Modellen und Verringerung der Anzahl der verwendeten Parameter unter Beibehaltung des wesentlichen

physikalischen Inhalts der Modelle von großer Bedeutung. Beispiele für die Anwendung solcher Modelle in ein- und zweidimensionalen Prozeßsimulationsprogrammen werden gegeben.

Bei der Oxidation wird die Diffusion der Dotierungsatome aufgrund veränderter Punktdefektverteilungen modifiziert. Zudem tritt an der Grenzfläche zwischen Silicium und Oxid eine Segregation der Dotierungen auf. Die Implementierung dieser Bedingungen in Prozeßsimulationsprogrammen wird diskutiert. Zudem wird auf das spannungsabhängige Oxidwachstum eingegangen.

## 1. Einleitung

Während der letzten 15 Jahre ist die Simulation halbleitertechnologischer Fertigungsprozesse (Prozeßsimulation) zusammen mit der Bauelementesimulation zu einem unverzichtbaren Werkzeug für die Entwicklung und Optimierung mikroelektronischer Bauelemente geworden. Prozeßmodellierung und -simulation entwickelten sich in der zweiten Hälfte der siebziger Jahre u.a. aus der Notwendigkeit, für das Verständnis der als Prozeßschritt neu eingeführten Ionenimplantation aus elektrisch gemessenen Dotierungsprofilen auf die Verhältnisse nach der Ionenimplantation zurückrechnen zu müssen. Um Dotierungsprofile mit elektrischen Verfahren messen zu können, muß zunächst ein Hochtemperaturschritt zur elektrischen Aktivierung durchgeführt werden. Bei der Auswertung muß die bei diesem Aktivierungsschritt stattfindende Diffusion wieder zurückgerechnet werden. Hierzu werden Modelle zur Beschreibung der Diffusion und Aktivierung von Dotierungsatomen benötigt, die in Simulationsprogrammen implementiert werden müssen. Das so in seiner ersten Version entstandene eindimensionale Prozeßsimulationsprogramm ICECREM [1,2] wurde ebenso wie u.a. das etwas früher veröffentlichte Programm SUPREM [3] der Stanford University seitdem ständig verbessert.

Während im eindimensionalen Fall durch eine hinreichend große Anzahl von Diskretisierungspunkten (typisch etwa 400) hinreichend gute Ergebnisse ohne größeren numerischen Aufwand erzielt werden können, ist bei der zweidimensionalen Prozeßsimulation der Einsatz leistungsfähiger numerischer Methoden unabdingbar, um verlässliche Simulationsergebnisse mit vertretbarem Rechenaufwand zu erhalten. In dieser Abhandlung wird auf bei der Simulation der Prozeßschritte Ionenimplantation und Diffusion verwendete Modelle eingegangen sowie bei der Implementierung in mehrdimensionalen Simulationsprogrammen auftretende Schwierigkeiten diskutiert.

## 2. Ionenimplantation

Zur Simulation der Ionenimplantation werden sowohl analytische Näherungen als auch Boltzmann-Transport Rechnungen und Monte-Carlo Simulationen angewendet. Die beiden letzteren Ansätze gehen von Modellen für die elektronische Abbremsung und nukleare Streuung der implantierten Ionen im Festkörper aus und sind prinzipiell für allgemeine Geometrien anwendbar. Nachteile sind die Schwierigkeiten bei der Behandlung kristalliner Materialien insbesondere im Fall der Boltzmann-Transport Berechnungen sowie vor allem der sehr hohe Rechenzeitbedarf beider Ansätze. Mit Hilfe analytischer Modelle ist es möglich, in den meisten technologisch relevanten Fällen eine gute Beschreibung implantierter Dotierungsverteilungen zu erreichen. Die benötigten Parameter müssen entweder durch Anpassung an gemessene Profile experimentell bestimmt oder können vor allem im Fall amorpher Targets durch Monte-Carlo Simulationen oder Boltzmann-Transport Berechnungen theoretisch berechnet werden. Für die Beschreibung der Implantation in amorphe Targets haben sich Pearson-Verteilungen durchgesetzt [4], die in Abhängigkeit von den auftretenden Parametern als Lösungen einer gewöhnlichen Differentialgleichung angegeben werden können. Hierbei ist zu beachten, daß in Abhängigkeit von Substratmaterial und implantierten Ionen verschiedene Verteilungen verwendet werden müssen. Für die Simulation der Implantation in kristallines Silicium werden i.a. Pearson IV Verteilungen verwendet, während bei amorphen Materialien i.a. Pearson VI und Pearson I Verteilungen die beste Approximation liefern [5]. Es konnte gezeigt werden, daß die verschiedenen Pearson Verteilungen stetig

ineinander übergehen [6]. Die während der Implantation in amorphe Materialien auftretende Amorphisierung läßt sich entweder durch die gewichtete Addition zweier Pearson-Verteilungen [7] oder mittels dosisabhängiger Reichweiteparameter gut annähern. In Fig. 1 sind SIMS-Messungen von Arsenimplantation mit einer Energie von 80 keV und verschiedenen Dosen in Silicium mit Simulationen mit dem eindimensionalen Prozeßsimulationsprogramm ICECREM [2] verglichen. Deutlich erkennbar ist die gute Beschreibung der unterschiedlich stark ausgeprägten Profilausläufer durch die ICECREM-Simulation, die im Gegensatz zum oben genannten Modell von Tasch [7] bei der Gewichtung der beiden Pearson-Verteilungen die Amorphisierungsdosis verwendet.

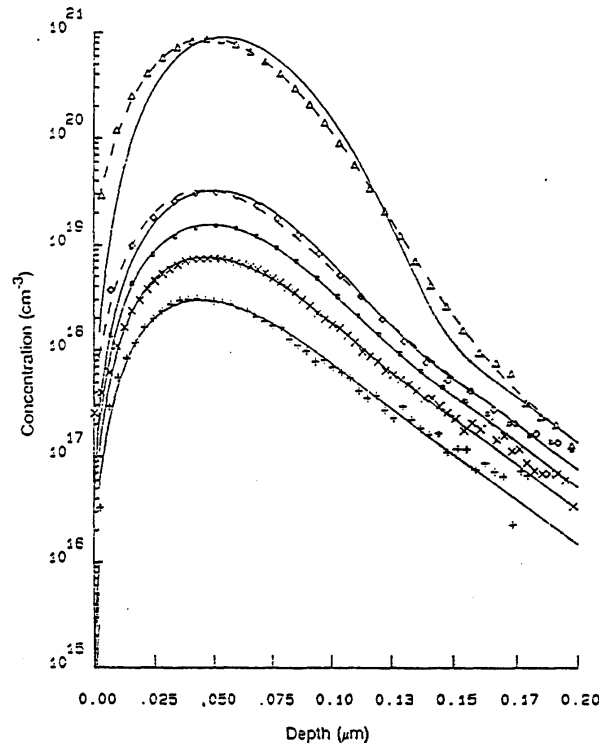


Figure 1: Beispiel für Messung und Simulation des Restchanneling (ICECREM 4.2): Implantation von Arsen, Energie 80 keV, Dosen  $2 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$ ,  $5 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$ ,  $1 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-2}$ ,  $2 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-2}$ ,  $5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$

Die Simulation der Implantation durch Schichten ist aus mehreren Gründen von großer Bedeutung. Es werden meist dünne Streuoxide zur Unterdrückung des Channeling mitverwendet. Maskenkanten sind meist nicht ideal senkrecht, so daß im Bereich der Kante die Maskendicke z.T. nicht zur Maskierung ausreicht. Für selbstadjustierte Strukturen wird teilweise durch Masken hindurchimplantiert. Durch geeignete Mehrschichtmodelle ist es möglich, Dotierungsprofile nach Implantationsschritten sowohl in als auch unterhalb von Masken gut zu beschreiben. Bewährt hat sich vor allem das "Improved Numerical Range Scaling" Modell, das aufgrund des vom Substrat abweichenden Streuverhaltens der Maske das Dotierungsprofil im Silicium sowohl in der Tiefe verschiebt als auch seine Breite abändert [8]. Für die zweidimensionale Simulation von Dotierungsprofilen wird i.a. eine laterale Faltung mit Gauß- oder Pearson-Verteilungen verwendet [9]. Hierbei ist zu beachten, daß die laterale Profilform von der Tiefe abhängt [10,9]. Dies läßt sich in einfachster Form durch einen parabolischen Ansatz für das Quadrat der lateralen Standardabweichung beschreiben. Die für diesen Ansatz benötigten Parameter können für amorphe Materialien mittels des Boltzmann-Transport Programms RAMM [9] berechnet werden. RAMM berechnet durch Lösung einer Volterra-Integralgleichung Tabellen für vertikale, laterale

und gemischte Reichweitmomente bis zu einer vorzuziehenden Energie, wobei die Berechnung einer Tabelle z.B. für Bor in amorphes Silicium für Energien bis zu 6 MeV etwa 8 Stunden Rechenzeit auf einer RISC-Workstation benötigt.

Bei der Implementierung solcher analytischer Modelle in Prozeßsimulationsprogrammen ist vor allem zu beachten, daß das im Simulationsprogramm verwendete numerische Gitter während der Implantation angepaßt werden muß. Es ist i.a. nicht hinreichend, nach der Implantation das Gitter zu adaptieren, da dann unzulässig große Interpolationsfehler auftreten. Zudem ist zur Vermeidung eines unkontrolliert großen Fehlers eine adaptive laterale Diskretisierung der über das verwendete zweidimensionale Mehrschichtmodell in die laterale Faltung eingehenden Topographie erforderlich.

### 3. Diffusion

Für die Simulation der Diffusion von Dotierungsatomen sind in den letzten 15 Jahren von vielen Forschungsgruppen zahlreiche Modelle unterschiedlicher Komplexität entwickelt worden. Die meisten Modelle gehen von den Fick'schen Gesetzen aus, die durch Annahme von meist konzentrations-, z.T. aber auch explizit zeit- oder ortsabhängigen Diffusionskoeffizienten an die Gegebenheiten in Halbleitermaterialien angepaßt wurden. Zudem zeigte sich die Notwendigkeit, nicht nur Gradienten der Dotierung sondern auch des elektrischen Potentials, von Punktdefektkonzentrationen und in moderneren Modellen z.T. auch von Dotierungs-Defekt-Paaren als die Diffusion treibende Kräfte zu berücksichtigen. Außerdem ist der Einfluß einer unvollständigen elektrischen Aktivierung zu berücksichtigen. Die volle Mitnahme dieser physikalischen Einflüsse führt auf große Systeme partieller Differentialgleichungen mit einer Vielzahl schwer meßbarer Parameter. Hierbei gehört das Modell von Orłowski [11], in dem im Falle einer Dotierung drei partielle Differentialgleichungen für die Diffusion von Dotierungsatomen, Gitterleerstellen und Zwischengitteratomen sowie eine gewöhnliche Differentialgleichung für die Clusterdynamik gelöst werden müssen, zu den Modellen mittlerer Komplexität. Berücksichtigt man alle wichtigen Einflüsse wie z.B. auch die Paarbildung von Dotierungsatomen mit Defekten in verschiedenen Ladungszuständen, so ergeben sich wesentlich kompliziertere Gleichungssysteme. Z.B. wird in [12] aus thermodynamischen Überlegungen auf ein vollständiges System von 13 partiellen Differentialgleichungen zur physikalisch konsistenten Beschreibung der Paardiffusion geschlossen. Unter Berücksichtigung der hohen Beweglichkeit der Ladungsträger können in diesem System die verschiedenen Ladungszustände zusammengefaßt werden, was auf ein System von 5 partiellen Differentialgleichungen sowie einer zusätzlichen Gleichung für die Ladungsneutralität führt [12]. Vereinfacht man dieses System weiter unter der Annahme eines lokalen Gleichgewichts zwischen Punktdefekten, Dotierungen und Punktdefekt-Dotierungs Paaren [13], so erhält man für die eindimensionale Simulation der Diffusion einer Dotierung ein System bestehend aus einer partiellen und einer gewöhnlichen Differentialgleichung, das z.B. eine physikalisch sinnvolle Beschreibung für die Phosphordiffusion liefert [13]. Der Nachteil dieses Modells ist jedoch, daß bei verschiedenen Implantationsdosen verschiedene Modellparameter verwendet werden müssen, so daß die gemachten Vereinfachungen als zu drastisch bezeichnet werden müssen [12]. Setzt man hingegen ein lokales Gleichgewicht zwischen Leerstellen und Zwischengitteratomen sowie zwischen Defekten und Dotieratom-Defekt Paaren an und behält insbesondere eine effektive Diffusion der Cluster bei, so erhält man im eindimensionalen Fall ein System bestehend aus einer partiellen Differentialgleichung für die Dotierungskonzentration, einer gewöhnlichen Differentialgleichung für die Punktdefektkonzentration sowie zwei nichtlinearen Gleichungen für die Clusterkonzentration und die Ladungsdichten [12,14]. Im zweidimensionalen Fall wird aus der gewöhnlichen Differentialgleichung für die Punktdefektkonzentration eine partielle Differentialgleichung im Ort. Die partielle Differentialgleichung für die Dotierungskonzentration lautet im



eindimensionalen Fall für eine Donatordotierung

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{total}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (C_{A+} + mC_C) = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{AI} \frac{C_{I^0}}{C_{I^{eq}}} + D_{AV} \frac{C_{I^{eq}}}{C_{I^0}} \right) \left( \frac{\partial C_{A+}}{\partial x} + C_{A+} \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{n}{n_i} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} C_{A+} \left( D_{AI} - D_{AV} \left( \frac{C_{I^{eq}}}{C_{I^0}} \right)^2 \right) \frac{\partial}{\partial x} \frac{C_{I^0}}{C_{I^{eq}}} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{eff} m^2 n_i^m C_{sol}^{1-2m} \left( C_{A+} \frac{n}{n_i} \right)^{m-1} \left( \frac{n}{n_i} \frac{\partial C_{A+}}{\partial x} + C_{A+} \frac{\partial}{\partial x} \frac{n}{n_i} \right) \right) \end{aligned}$$

Hierbei steht C für eine Konzentration, D ist ein Diffusionskoeffizient. Der Index A steht für eine Fremdatomart, hier einen Donator, AV bzw. AI sind Donator-Leerstellen bzw. Donator-Zwischengitteratompaare, die Exponenten 0 bzw. + stehen für den neutralen bzw. einfach positiven Ladungszustand, der Exponent eq für einen Gleichgewichtswert. n ist die Elektronendichte,  $n_i$  die intrinsische Ladungsträgerdichte, m die Clustergröße,  $C_{sol}$  die Löslichkeit der Dotierung im Silicium,  $D_{eff}$  ein effektiver Diffusionskoeffizient,  $\frac{\partial}{\partial x}$  und  $\frac{\partial}{\partial t}$  die Orts- und Zeitableitung.

In Fig. 2 sind SIMS-Messungen von Phosphorprofilen nach Implantation mit einer Energie von 150 keV und verschiedenen Dosen, Kurzeitausheilen bei 1000°C für 20 sec und anschließender Temperung bei 1000°C für 60 min mit Simulationen verglichen. Es ergibt sich, daß mit dem vorgestellten Modell über einen weiten Konzentrationsbereich, d.h. in diesem Fall bei Implantationsdosen von  $1 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-2}$  bis  $3 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-2}$  mit einem einheitlichen Parametersatz eine gute Voraussage der experimentellen Profile erzielt wird.

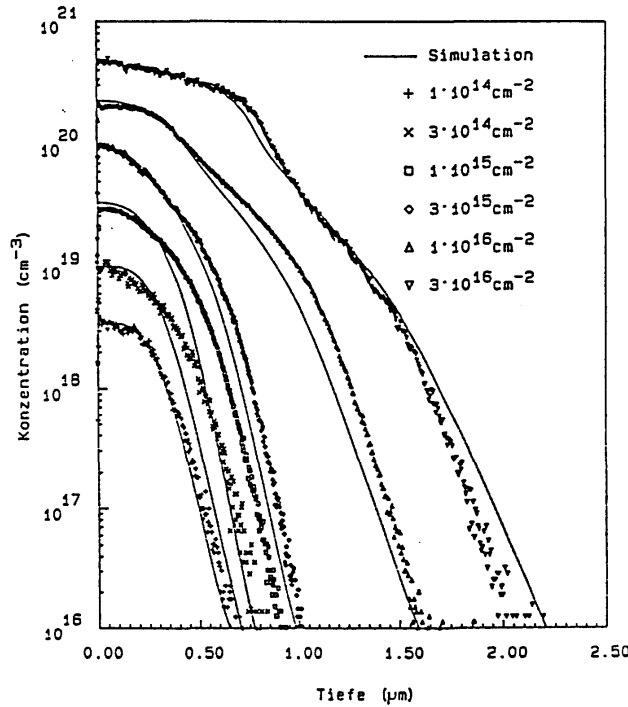


Figure 2: Vergleich zwischen SIMS-Messungen und Simulationen für Implantation von Phosphor, Energie 200 keV, verschiedene Dosen, und Temperung bei 1000°C für 60 min.

#### 4. Oxidation

Bei der Simulation der Oxidation kommt neben der Geometrieänderung durch das Oxidwachstum noch die Punktdefektgeneration an der Grenzfläche zwischen Silicium und Oxid hinzu, die u.a. zur sogenannten "Oxidationsbeschleunigten Diffusion" führt, sowie die Segregation der Dotierungen an der Grenzfläche. Letztere führt auf eine Cauchyrandbedingung, in die besonders bei den Dotierungen Arsen und Phosphor sehr steile Gradienten eingehen. Hinsichtlich der Simulation des Oxidwachstums sind die Berücksichtigung der Diffusion des Oxidationsmittels durch das Oxid, der Grenzflächenreaktion, des viskoelastischen Flusses des Oxids und des Drucks der Nitridmaske Stand der Technik. Hier gehen spannungsabhängige Diffusionskoeffizienten, Reaktionsraten und Viskositäten ein. Physikalische und mathematische Schwierigkeiten sind hierbei vor allem die hinreichend genaue Vermessung der Oxidgeometrien, die konsistente Formulierung der Spannungsabhängigkeiten sowie die Generation und Adaption eines geeigneten Gitters für die numerischen Rechnungen.

#### 5. Probleme bei der mehrdimensionalen Simulation

Für die Entwicklung mehrdimensionaler Prozeßsimulationsprogramme sind vor allem drei Problemfelder von Bedeutung: Es werden weiter verbesserte physikalische Modelle für die Prozeßschritte benötigt. Solche Ansätze führen zumeist zu einer Erhöhung der Modellkomplexität, was steigende Ansprüche hinsichtlich der Extraktion der benötigten Parameter sowie der Leistungsfähigkeit der verwendeten Verfahren stellt. Komplexere Geometrien, z.B. Gräben, vergrabene SOI-Schichten, bewegte Ränder und Änderungen des topologischen Zusammenhangs während eines Prozeßschrittes stellen hohe Anforderungen an Gittergeneration, Diskretisierung und numerische Verfahren bei der Lösung der zugehörigen zwei- und dreidimensionalen freien Randwertprobleme. Zudem sind leistungsfähigere numerische Verfahren zur Minimierung der Rechenzeiten sowie zur Kontrolle der räumlichen und zeitlichen Diskretisierungsfehler nötig. Erschwerend kommt hinzu, daß Defekte sehr viel schneller und weiter diffundieren als Dotierungsatome und daher das Diffusionsproblem jeweils zwei stark unterschiedliche interne Zeit- und Längenskalen aufweist.

#### Literatur

- [1] H. Ryssel, K. Habegger, K. Hoffmann, G. Prinke, R. Dümcke, A. Sachs: *Simulation of Doping Processes*. IEEE Trans. Electron Devices, ED-27(8), 1484 (1980).
- [2] P. Pichler, A. Barthel, R. Dürr, N. Holzer, J. Lorenz, H. Ryssel, K. Schott: *One- and Two-Dimensional Process Simulation with ICECREM and COMPLAN*. In: Lecture Notes and Digest of the NASECODE VI Associated Short Course and Software Forum, (ed.: W. Crans), p. 173, Boole Press, Dublin (1989).
- [3] D.A. Antoniadis, R.W. Dutton: IEEE Trans. Electron Devices, ED-26, 490 (1979).
- [4] W. K. Hofker: Philips Res. Repts. Suppl. No. 8, 41 (1975).
- [5] H. Ryssel, L. Gong, J. Lorenz: *Improvements in Simulation of Implantation Profiles*. In: Proc. 1989 International Symposium on VLSI Technology, Systems and Applications, Taipei, Taiwan 17.-19.5.1989.
- [6] M. Kuhn: *Analytische Modelle für Implantationsverteilungen in Silicium*. Diplomarbeit, Universität Erlangen-Nürnberg, (1987).
- [7] Al. F. Tasch, H. Shin, C. Park, J. Alvis, S. Novak: J. Electrochem. Soc. Vol. 136 (3), 810 (1989).

- [8] R.J. Wierzbicki, J. Lorenz, A. Barthel: *Simulation of Ion Implantation into Multilayer Structures*. In: Proc. ESSDERC '89 (eds.: A. Heuberger, H. Ryssel, P. Lange), p.193, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg (1989).
- [9] J. Lorenz, W. Krüger, A. Barthel: *Simulation of the Lateral Spread of Implanted Ions: Theory*. In: Proceedings of the Sixth International Nascocode Conference, (ed.: J.J.W. Miller), p. 513, Boole Press, Dublin (1989).
- [10] G. Hobler, E. Langer, S. Selberher: In: (ed.: K. Board, D.R.J. Oven), *Simulation of Semiconductor Processes and Devices*. Vol. 2, pp. 256, Pineridge Press, Swansea U.K., (1986).
- [11] M. Orlowski: *Progress in Process Simulation for Submikron MOSFET's*. In: Simulation of Semiconductor Devices and Processes, (eds.: G. Baccarani, M. Rudan), Vol. 3, pp. 393, Tecnoprint, Bologna (1988).
- [12] R. Dürr: *Beschreibung der Dualen Diffusion von Dotieratomen in Silicium für die Anwendung in der Prozeßsimulation*. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, (1991).
- [13] R. Dürr, P. Pichler: *A Consistent Pair-diffusion Based Steady-state Model for Phosphorus Diffusion*. In: Proc. ESSDERC '89, (eds.: A. Heuberger, H. Ryssel, P. Lange), p.297, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg (1989).
- [14] R. Dürr, P. Pichler, H. Ryssel: *On Limitations of Pair-Diffusion Models for Phosphorus Diffusion*. To be published in Simulation of Semiconductor Processes and Devices, Vol. 4 (1991).

## Generalized Continuity Equations for Charge Transport in Semiconductors

E. PLATEN

*Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39, O - 1086 Berlin, Germany*

### 1. Introduction

Van Roosbroeck (1950) [3] developed already phenomenological charge transport equations for a homogeneous non degenerate semiconductor. These equations are widely used now to model semiconductor devices.

Starting from a microscopic stochastic hopping model with particle interaction we derived in Platen (1990) [2] in a rigorous way charge transport equations which work also in several previously unsatisfactorily modelled situations. These equations are consistent in a rather general sense and include also Van Roosbroeck's equations as a special case. In the following we will give a description of these generalized continuity equations for charge transport in semiconductors and add a short discussion on the microscopic model.

### 2. The equations for the flow of electrons and holes

$\overline{W} \subset \mathbb{R}^3$  is a three-dimensional bounded domain representing the spatial extension of the semiconductor.

In a semiconductor there are charge carriers of two types: electrons in the conduction band

$$\overline{E}_c = [\underline{e}_c, \overline{e}_c]$$

and positive holes in the valence band

$$\overline{E}_v = [\underline{e}_v, \overline{e}_v].$$

These two bands are separated by a gap ( $\bar{e}_v, \bar{e}_c$ ) of the length

$$\Delta E = \bar{e}_c - \bar{e}_v.$$

The equations for the three-dimensional flow of electrons and holes in a semiconductor contain, as principal dependent variables the hole and electron concentrations,  $p$  and  $n$ , the flow densities  $J_p$  and  $J_n$ , and the electrostatic potential  $V$ . For simplicity in this paper we consider  $V$  as a given function from  $[0, \infty) \times \bar{W}$ . It will usually be characterized by the Poisson equation, similar as in Van Roosbroeck's equations.

The charge carrier transport equations have the form:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -r - \text{div} J_p \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -r - \text{div} J_n \quad (2.2)$$

in  $\underline{R}_+ \times W$ .

Here

$$J_p = -\sigma_p \text{grad}[eV + \mu_v] \quad (2.3)$$

and

$$J_n = \sigma_n \text{grad}[eV + \mu_c] \quad (2.4)$$

are the hole and electron flow densities, which depend on the conductivities  $\sigma_p$  and  $\sigma_n$  and the chemical potentials  $\mu_v$  and  $\mu_c$  in the valence and conduction band.  $r$  denotes the net recombination rate and will be specified in (2.12). In the paper we restrict ourself to the case of a drain- and source-free region without contacts, and thus obtain the boundary condition:

$$\nu \cdot J_p = \nu \cdot J_n = 0 \quad (2.5)$$

on  $\underline{R}_+ \times \partial W$ , where  $\nu$  denotes the outward unit normal to the boundary  $\partial W$ . We remark, that the proposed approach yields corresponding assertions also for situations with drains, sources and contacts.

Since we are describing a nonequilibrium dynamics we also need initial electron and hole concentrations,  $n_0$  and  $p_0$ .

So far the above equations look similar to the Van Roosbroeck's equations but our equations differ from them essentially in the structure of the conductivities  $\sigma_p$  and  $\sigma_n$  and in the net recombination rate  $r$  and the chemical potentials  $\mu_v$  and  $\mu_c$ . All these variables are related to the occupation rates in the valence and conduction band,  $R_v$  and  $R_c$ . In particular we have the occupation rates of the states

$$R_v = \left( 1 + \exp \left\{ -\frac{1}{kT} (\mu_v - E) \right\} \right)^{-1} \quad (2.6)$$

for  $E \in \bar{E}_c$  in the valence band and

$$R_c = \left( 1 + \exp \left\{ -\frac{1}{kT} (\mu_c - E) \right\} \right)^{-1} \quad (2.7)$$

for  $E \in \bar{E}_c$  in the conduction band on  $\underline{R}_+ \times \bar{W}$ . Here  $k$  is the Boltzman constant and  $T$  the absolute temperature. Obviously, in both bands we have Fermi-Dirac statistics characterized

by the corresponding chemical potentials. We remark that Van Roosbroeck's equations are based on the Boltzmann approximation.

Using the occupation rates,  $R_v$  and  $R_c$ , and the density of states we can write the concentration of holes as

$$p = \int_{\bar{E}_v} (1 - R_v) \lambda dE \quad (2.8)$$

and the concentration of electrons as

$$n = \int_{\bar{E}_c} R_c \lambda dE. \quad (2.9)$$

An important result from our approach is the nonlinear logistic structure of the conductivities  $\sigma_p$  and  $\sigma_n$ . These have the following form:

$$\sigma_p = \psi \int_{\bar{E}_v} \frac{1}{kT} R_v (1 - R_v) \lambda^2 dE \quad (2.10)$$

and

$$\sigma_n = \psi \int_{\bar{E}_c} \frac{1}{kT} R_c (1 - R_c) \lambda^2 dE, \quad (2.11)$$

where  $\psi$  is a material parameter. We remark that the conductivities are bounded and vanish for zero or full occupation,  $R = 0$  or  $R = 1$ . The above conductivities give also a natural model for the degenerate case when the chemical potentials are located within the bands. For nearly constant density of states in the non degenerate case it follows from (2.10) and (2.8) the following form for the conductivity  $\sigma_p$

$$\sigma_p \approx \frac{\psi}{kT} \lambda \int_{\bar{E}_v} (1 - R_v) \lambda dE = \frac{\psi}{kT} \lambda p,$$

which is Van Roosbroeck's conductivity of the valence band. An analogous result holds for the conductivity of the conduction band.

In the general case we obtain the net recombination rate  $r$  in the form

$$\begin{aligned} r &= C_r \left[ R_c(\underline{e}_c) (1 - R_v(\bar{e}_v)) \exp \left\{ \frac{\Delta E}{2kT} \right\} - R_v(\bar{e}_v) (1 - R_c(\underline{e}_c)) \exp \left\{ -\frac{\Delta E}{2kT} \right\} \right] \\ &= C_r \left( 1 + \exp \left\{ \frac{1}{kT} (\mu_v - \bar{e}_v) \right\} \right)^{-1} \left( 1 + \exp \left\{ \frac{1}{kT} (\mu_c - \underline{e}_c) \right\} \right)^{-1} \\ &\quad \left[ \exp \left\{ \frac{1}{kT} \left( \mu_c - \frac{1}{2} \Delta E \right) \right\} - \exp \left\{ \frac{1}{kT} \left( \mu_v - \frac{1}{2} \Delta E \right) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

We note that for equal chemical potentials  $\mu_v = \mu_c$  a vanishing net recombination rate  $r = 0$  follows. The above nonlinear structure of  $r$  then drives in our case with reflecting boundary conditions the whole system from any initial electron and hole concentration into an equilibrium with equal chemical potentials  $\mu_v = \mu_c$ . Here  $C_r$  is a material constant.

### 3. The microscopic stochastic model

We suppose that microscopic objects exist (e.g. localized states, atoms) which we call states. At these states the electrons may stay and they are allowed to jump from state to state. We suppose that the durations of a jump itself is small in comparison with the mean waiting time until the next jump of the electron.

Our microscopic stochastic model is based on an interacting particle system which is called an exclusion process (see Platen (1989) [1]). These particles represent electrons which are jumping according to a Markov kernel on a given set of states. However any jump which would take an electron to an already occupied state is excluded.

Most properties of the semiconducting material are modelled by the random counting measure of states  $N_n$ . Here the parameter  $n$  represents the mean number of states per unit volume. The random measure of states is characterized by the given density of states  $\lambda$  on the spatial and energetic domain  $\bar{Q} = \bar{W} \times (\bar{E}_c \cup \bar{E}_v)$ .

$\lambda$  is assumed to be twice continuous differentiable in spatial and energetic direction. For mathematical reasons we suppose at the band edges that  $\lambda$  together with its first derivative in energy direction vanishes but the second derivative is strictly positive. By a slight modification of the approach one can also handle other shapes of band edges. A wide class of semiconducting materials can be modelled in this way.

The microscopic stochastic hopping of electrons is modelled via a Markov kernel with intensity

$$w_t(u, q) = \gamma \exp \left\{ -\frac{2}{\alpha} |\tilde{q} - \tilde{u}| - \frac{e}{2kT} (V(t, \tilde{q}) - V(t, \tilde{u})) - \frac{2}{\beta} |q_4 - u_4| - \frac{1}{2kT} (q_4 - u_4) \right\} \quad (3.1)$$

for a jump at time  $t$  from a point  $u = (u_1, u_2, u_3, u_4) \in \bar{Q}$  into a point  $q = (q_1, q_2, q_3, q_4) \in \bar{Q}$ . Here  $\tilde{u} = (u_1, u_2, u_3) \in \bar{W}$  denotes the spatial coordinates of  $u$  and  $u_4$  is the energy coordinate of  $u$ . An analogous notation holds for  $q \in \bar{Q}$ . From the mathematical point of view it turns out that the specific form of the jump intensity is not important. Only the first and second moments of the jumps influence the macroscopic dynamics. In this sense our approach is robust.

In our model an electron at a state at  $u$  waits an exponential time with parameter

$$\varrho(u) = \int_{\bar{Q} \setminus \{u\}} w_t(u, q) \frac{1}{n} N_n(dq)$$

At the end of this time it chooses a state  $q$  with probability

$$n^{-1} w_t(u, q) / \varrho(u).$$

If  $q$  is vacant, then it jumps to  $q$ , whereas if  $q$  is occupied, then it stays at  $u$ . Therefore we will have at most one particle at each site at any given time instant.

We incorporate the assumptions about the microscopic behaviour of the electrons within the given semiconducting material into the specification of the parameters of the jump rate  $w_t$ , where we mentioned already that only the mean and covariance of the jumps are relevant. Here  $\beta$  is the energetic scattering width which is assumed to be much smaller than the gap width  $\Delta E$ . Analogously  $\alpha$  denotes the spatial scattering width.

To scale the dynamics in a proper way we also have to choose the preexponential factor  $\gamma$ .

Let us remark that one can approximately write

$$V(t, \tilde{q}) - V(t, \tilde{u}) \approx \text{grad} V(t, \tilde{u}) \cdot (\tilde{q} - \tilde{u})$$

For sufficiently small  $\tilde{q} - \tilde{u}$ , where  $-\text{grad } V$  is the electrical field.

We note from (3.1) that jumps into lower energy levels have a higher jump rate than those into higher ones. Further, we have the highest spatial jump rate into the direction of the electrical field.

The jump rate (3.1) applies to an isotropic material but the approach can be generalized also to the anisotropic case. The general approach would also give answers to the cases of extremely low temperature or strong electrical fields which would yield phase transitions in the macroscopic dynamics.

For the mathematical derivation of the macroscopic equations (2.1)–(2.12) for the flow of electrons and holes we refer to Platen (1990) [2]. It is based upon a law of large numbers proved in Platen (1989) [1] for the macroscopic stochastic model with respect to a number of states per unit volume  $n \rightarrow \infty$  and an investigation of the asymptotics of the electron concentration for vanishing scattering width.

## References

- [1] Platen, E.: *A law of large numbers for wide range exclusion processes in random media.* J. Stochastic Processes and their Applications 31, pp. 33–49 (1989).
- [2] Platen, E.: *A stochastic approach to hopping transport in semiconductors.* Journal of Statistical Physics, Vol 59, No. 5/6, pp. 1329–1353 (1990).
- [3] Van Roosbroeck, W.: Bell System Tech. J. 29, pp. 560–607 (1950).

# Modellierung optoelektronischer Bauelemente

H.-J. WÜNSCHE

Institut für Optik und Spektroskopie, Humboldt-Universität zu Berlin, Fachbereich Physik,  
Invalidenstraße 110, O-1040 Berlin

## 1. Einführung

Wichtigste Grundlage für die Simulation des Stromflusses in Halbleiterbauelementen ist bis heute das System der van-Roosbroeck-Gleichungen. In meinem Vortrag werde ich der Frage nachgehen, welche Modifikationen und Erweiterungen dieses Ihnen wohlbekannten Systems im Falle optoelektronischer Bauelemente erforderlich sind. Offensichtlich sind es das Licht und seine Wechselwirkung mit dem Halbleiter, die als zusätzliche Komponenten auftreten. Für deren mathematische Beschreibung sind prinzipiell die Maxwellgleichungen zuständig. Allerdings verhindert deren große Komplexität eine direkte Nutzung für Simulationsrechnungen. Ein einheitliches vereinfachtes System für alle Typen optoelektronischer Bauelemente gibt es jedoch nicht. In der Literatur findet man unterschiedlichste Varianten, die den jeweiligen Erfordernissen angepaßt sind. Ich werde nicht erst versuchen, einen Überblick darüber zu geben. Auch eigene Ergebnisse auf diesem Gebiet will ich nicht vordergründig anbieten, sondern einige anerkannte Ansätze plausibel machen.

Diese schriftliche Darstellung meines Vortrages kann keine eigenständige Publikation sein, sondern bestenfalls eine Erinnerungshilfe für die Seminarteilnehmer. Da der Platz sehr beschränkt ist, verzichte ich auf Abbildungen und führe nur den zentralen Abschnitt 6 etwas detaillierter aus.

## 2. Nichtoptische Besonderheiten

Gegenüber dem Silizium-Standard des van-Roosbroeck-Systems sind bei den meisten optoelektronischen Bauelementen einige Besonderheiten zu beachten, die mit dem Licht direkt nichts zu tun haben. Oft tritt die Tunnelgeneration als Konkurrenzprozeß auf (s. Vortrag v. M.Stahl). Kleine Massen führen zur Trägerentartung schon bei geringen Dichten, so daß die Fermistatistik angewendet werden muß. Das hat wiederum Konsequenzen für die Modellierung der kinetischen Koeffizienten - ich verweise nur auf den Vortrag von A. Schenk. Eine weitere wesentliche Besonderheit gegenüber Si ist das Auftreten von Heteroübergängen. Zugunsten des "Optischen" will ich auf die Behandlung dieser Fragen aber hier verzichten.

## 3. Rate der induzierten Übergänge

Generation bzw. Rekombination von Ladungsträgern infolge der Absorption bzw. Emission von Licht sind grundlegend für die Funktion optoelektronischer Bauelemente. Sie müssen in den van-Roosbroeck-Gleichungen als entsprechende Nettorekombinationsraten berücksichtigt werden. Die Nettorate der durch Licht der Frequenz  $\omega$  induzierten Rekombinationsakte pro Volumen ist

$$R_{stim}(\omega) = \frac{\epsilon_0}{2\hbar} \operatorname{Im}\{\epsilon_{cv}(\omega)\} |\vec{\mathcal{E}}_\omega|^2. \quad (3.1)$$

Neben der Dielektrizitätskonstanten des Vakuums  $\epsilon_0$  und Plancks Wirkungsquantum  $\hbar$  geht hier der Interbandanteil der optischen Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon_{cv}(\omega)$  und die elektrische Feldintensität des Lichtes (letzter Faktor) ein. Ersteres ist eine Materialfunktion und letzteres erfordert eine zusätzliche optische Gleichung. Bevor ich darauf näher eingehe, sei noch die spontane strahlende Rekombination erwähnt. Diese hängt von der Lichtintensität nicht ab, kann oft ganz gut durch den Ausdruck  $B \cdot (np - n_i^2)$  approximiert werden und soll aus Zeitgründen nicht weiter erörtert werden.



#### 4. Modell für $Im\{\epsilon_{cv}(\omega)\}$

Diese Größe ist über die Beziehung

$$\frac{\omega}{\bar{n}c} Im\{\epsilon_{cv}(\omega)\} = -\alpha(\omega) \equiv g(\omega) \quad (4.1)$$

mit den physikalisch anschaulicheren Größen Absorptionskoeffizient  $\alpha(\omega)$  bzw. Gainkoeffizient  $g(\omega)$  verknüpft ( $\bar{n}$  = Brechungsindex,  $c$  = Lichtgeschwindigkeit). In Halbleitern mit parabolischen Bändern und direkten optischen Übergängen gilt näherungsweise

$$\alpha(\omega) = const. \cdot \sqrt{\hbar\omega - E_g} \cdot f_n \cdot f_p \cdot \left\{ \exp \frac{\hbar\omega + F_p - F_n}{kT} - 1 \right\}, \quad (4.2)$$

Für  $\hbar\omega < E_g$  ist  $\alpha = 0$ . Über die Besetzungsfaktoren  $f_n, f_p$  für Elektronen bzw. Löcher und die entsprechenden Quasiferminiveaus  $F_n, F_p$  in der geschweiften Klammer hängt  $\alpha$  von den Ladungsträgerkonzentrationen ab. Wenn  $F_n$  hinreichend weit über  $F_p$  liegt (große Flußspannungen) wird  $\alpha$  im Spektralbereich  $E_g < \hbar\omega < F_n - F_p$  negativ. Das Licht wird dort nicht absorbiert, sondern verstärkt. Das ist eine Voraussetzung für den Lasereffekt. Dieser Vorzeichenwechsel ist unabhängig von allen Näherungen, solange die Elektronen- und Löcherensembles durch Quasiferminiveaus charakterisiert werden können. Die genaue spektrale Abhängigkeit  $\alpha(\omega)$  wird u.a. durch Vielteilcheneffekte beeinflusst, deren Berechnung ein eigenständiges theoretisches Problem ist [1], das selbst umfangreiche numerische Rechnungen erfordert. Wegen dieser Komplexität wurden solche Effekte bei Simulationen bisher nicht berücksichtigt.

#### 5. Lichtgleichungen für Photoempfänger

Die bisherigen Formeln gelten für alle Typen optoelektronischer Bauelemente. Es fehlen nun noch Gleichungen zur Bestimmung der Feldintensität  $|\vec{\mathcal{E}}_\omega|^2$  in (3.1). Hier geht die Einheitlichkeit der Beschreibung verloren. Bei Photoempfängern wird das Licht von außen eingestrahlt. In den meisten Fällen ist es inkohärent und seine Ausbreitung wird durch die geometrische Optik beschrieben. Auf die Darlegung der entsprechenden Gleichungen verzichte ich und gehe gleich zum anders gearteten Fall des Halbleiterlasers über.

#### 6. Lichtgleichungen für Fabry-Perot-Heterolaser

Moderne Heterolaser verfügen alle über einen inneren Wellenleiter. Mathematisch bedeutet das u.a., daß die optische Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon = \epsilon(\vec{r}, \omega)$  nur extrem schwach von der Longitudinalkoordinate  $z$  abhängt und transversal so beschaffen ist, daß die zugehörigen homogenen Maxwellgleichungen

$$rot \vec{\mathcal{H}} = i\omega \epsilon_0 \epsilon \vec{\mathcal{E}} \quad rot \vec{\mathcal{E}} = -i\omega \mu_0 \vec{\mathcal{H}} \quad (6.1)$$

nichttriviale Lösungen haben, die innerhalb des Wellenleiters konzentriert sind und außerhalb exponentiell abklingen. Diese geführten Moden sind die Träger des Laserlichtes. Man kann die Feldamplituden in (3.1) nach ihnen entwickeln. Das gibt für die totale stimulierte Rate nach Mittelung über einige Schwingungsperioden des Lichts

$$R_{stim} = \frac{\epsilon_0}{2\hbar} \sum_{\nu, m} Im\{\epsilon_{cv}(\omega_{\nu m})\} P_{\nu m} |\vec{\mathcal{E}}_{\nu m}(\vec{r})|^2, \quad (6.2)$$

wobei  $\nu$  und  $m$  die Moden durchnummerieren (s.u.). Nichtdiagonalterme treten wegen der Inkohärenz zwischen verschiedenen Moden nicht auf und bei geeigneter Normierung der modalen Felder sind die Koeffizienten  $P_{\nu m}$  gerade die modalen Lichtleistungen. Deren Bestimmung lassen wir noch offen und widmen uns zunächst der Berechnung der modalen Felder.

## 6.1. Wellenleitungsgleichung

Wegen der schwachen  $z$ -Abhängigkeit von  $\epsilon$  macht man den Ansatz

$$\vec{E} = a(z)\vec{E}(\vec{r}_t, z)e^{i\omega t} \quad \vec{H} = a(z)\vec{H}(\vec{r}_t, z)e^{i\omega t} \quad (6.3)$$

und behandelt die  $z$ -Abhängigkeit von  $\vec{E}$  und  $\vec{H}$  parametrisch. Das bedeutet Separation der Maxwellgleichungen in einen longitudinalen und einen transversalen Teil.

Transversal entstehen vektorielle Gleichungen mit der Separationskonstanten  $\beta$  als Eigenwert, deren numerische Lösung aber bis heute problematisch ist. Fast immer wird deshalb von einer aus geometrischen Gründen möglichen approximativen Reduktion auf eine *skalare Wellenleitungsgleichung* vom Typ

$$[\nabla_t^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\vec{r}, \omega)] E(\vec{r}, \omega) = \beta^2 E(\vec{r}, \omega) \quad (6.4)$$

Gebrauch gemacht. Für den Laser sind die isolierten Eigenwerte  $\beta_\nu^2$  ( $\nu = 0, 1, \dots$ ) interessant, die den geführten Transversalmoden entsprechen. Sie hängen noch parametrisch von  $z$  und  $\omega$  ab, weil in (6.4) nur der transversale Anteil  $\nabla_t$  des Nabla-Operators auftaucht. Die Separationskonstante  $\beta$  ist die Wurzel aus dem Eigenwert von (6.4). Es ist üblich, die Wurzel mit positivem Realteil als  $\beta_\nu$  und die andere als  $-\beta_\nu$  zu bezeichnen.

Für die entsprechenden Amplituden ergibt die Separation

$$i\frac{\partial a_\nu^\pm}{\partial z} = \pm\beta_\nu a_\nu^\pm \quad \text{bzw.} \quad a_\nu^\pm(z) \sim \exp(\mp \int \beta_\nu dz) \quad (6.5)$$

In (6.3) eingesetzt liefern  $a_\nu^+$  und  $a_\nu^-$  in  $z$ -Richtung bzw. entgegengesetzt laufende Wellen.

## 6.2. Resonanzbedingung

In einem Fabry-Perot-Laser werden diese Wellen an den Endflächen bei  $z = 0$  bzw.  $z = L$  reflektiert:

$$a^+(0) = r_0 a^-(0) \quad \text{und} \quad a^-(L) = r_L a^+(L). \quad (6.6)$$

Auf die Berechnung der Amplitudenreflexionskoeffizienten  $r_0$  und  $r_L$  gehe ich nicht ein. Physikalisch liefert diese Reflexion die notwendige Rückkopplung für den sich selbst aufrechterhaltenden Laservorgang. Mathematisch ergibt sich daraus ein Eigenwertproblem für den Exponenten in (6.5). Dessen Realteil selektiert erlaubte Frequenzen  $\omega_{\nu m}$

$$\int_0^L dz \operatorname{Re}\{\beta_\nu(\omega, z)\} = m\pi \quad (m \text{ ganz}) \quad \longrightarrow \quad \omega = \omega_{\nu m} \quad (6.7)$$

Zu jeder Transversalmode  $\nu$  gehören also mehrere *Longitudinalmoden*, die sich durch die Anzahl  $m$  der Halbwellen im Resonator unterscheiden. Der Imaginärteil des longitudinalen Eigenwertproblems liefert die sogenannte *Schwellenbedingung*

$$\int_0^L dz \operatorname{Im}\{\beta_\nu(\omega_{\nu m}, z)\} = \mathcal{L}_n \frac{1}{r_0 r_L} \quad \text{für } P_{\nu m} \neq 0. \quad (6.8)$$

Physikalisch: eine Mode  $\nu m$  kann nur lasern, wenn ihre Verstärkung im Innern die Auskoppelverluste an den Endflächen genau kompensiert.

Wird die bis hier vernachlässigte spontane Emission in die Moden wenigstens näherungsweise berücksichtigt, so gilt anstelle der Schwellenbedingung

$$P_{\nu m} = \frac{\delta P_{\nu m}^{sp}}{\mathcal{L}_n \frac{1}{r_0 r_L} - \int_0^L dz \operatorname{Im}\{\beta_\nu(\omega_{\nu m}, z)\}}. \quad (6.9)$$

Auf Formeln für die in eine Mode spontan emittierte Leistung  $\delta P_{\nu m}^{sp}$ , die stets positiv aber sehr klein ist (typische Werte liegen noch unter einem  $\mu W$ ), sei hier verzichtet.

### 6.3. 2D-Approximation

Auch in longitudinal homogenen Lasern ist die elektrische Lichtintensität wegen (6.5) prinzipiell von  $z$  abhängig. Setzt man sie aber in der stimulierten Emission (6.2) näherungsweise bezüglich  $z$  konstant, so werden auch die Trägerdichten konstant, damit  $\epsilon$  und auch  $\beta_\nu$ . Die  $z$ -Integrationen in (6.7) und (6.9) sind dann trivial und diese Gleichungen bilden zusammen mit der Wellenleitungs- und den van-Roosbroeck-Gleichungen ein in der transversalen Ebene selbstkonsistent zu lösendes System. Diese 2D-Approximation ist die Grundlage für alle in der Literatur beschriebenen Laser-Simulatoren, die von den van-Roosbroeck-Gleichungen ausgehen. Der erste dieser Art war HILADIES [2], der derzeit fortgeschrittenste ist MINILASE [3], der zusätzlich noch eine Wärmeleitungsgleichung umfaßt und auch Quantum-Well-Laser beschreiben kann.

### 6.4. Quasi 3D-Approach

Von unserer Gruppe wurde in Kooperation mit H.Gajewski und J.Rehberg vom Karl-Weierstraß-Institut Berlin erfolgreich versucht, die 2D-Approximation zu überwinden [4]. Ausgangspunkt war ein ganz irdischer Trick zur Behandlung von Gleichung (6.9), die ein extremer numerischer Störenfried ist. Wegen der bereits erwähnten Kleinheit des Zählers wird nämlich der Nenner im Laserregime ebenfalls sehr klein. Die Lösung liegt also ganz dicht am Pol und bereits kleinste Ungenauigkeiten während der Iteration haben katastrophale Auswirkungen. Wir haben diese Gleichung deshalb aus der 2D-Simulation eliminiert und die modalen Leistungen zunächst als externe Parameter behandelt, die "per Hand" variiert werden. Man erhält so relativ schnell  $\beta_\nu$  als Funktion dieser Leistungen  $P$ . Mit dieser Funktion  $\beta_\nu(P)$  wird (6.9) ein in sich geschlossenes System nichtlinearer transzendenter Gleichungen, das nach der 2D-Simulation "relativ einfach" gelöst werden kann.

Hat man aber einmal die Funktionen  $\beta_\nu(P)$ , so kann man damit auch direkt in jede Gleichung für die  $z$ -abhängigen Amplituden (z.B. (6.5)) eingehen. Wegen  $P_{\nu m}(z) \sim (|a_{\nu m}^+(z)|^2 + |a_{\nu m}^-(z)|^2)$  ergibt das gewöhnliche Differentialgleichungen, die nichtlinear aber autonom sind und halbwegs gutartig lösbar. Das ist die Grundidee für unseren "quasi 3D-approach".

### 6.5. Beam Propagation Method

Diese Methode ist in gewissem Sinne alternativ zur Entwicklung nach Eigenmoden. Grundlage ist der Feldansatz

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{E}(\vec{r}_t, z) e^{(i\omega t - \beta_0 z)} \quad (6.10)$$

(analog für  $\vec{\mathcal{H}}$ ). Die reelle Konstante  $\beta_0$  wird so gewählt, daß die kurzwelligen Oszillationen des Feldes durch den Exponentialterm beschrieben werden und  $\vec{E}$  nur langsam veränderlich ist. Einsetzen in die Maxwellgleichungen ergibt dann für die Hauptkomponente des  $E$ -Feldes bei Vernachlässigung deren zweiter  $z$ -Ableitung (paraxiale Näherung) die Gleichung

$$2i\beta_0 E(\vec{r}, \omega) = [\nabla_t^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{r}, \omega) - \beta_0^2] E(\vec{r}, \omega). \quad (6.11)$$

Sie ist formal zur zeitabhängigen Schrödingergleichung analog und beschreibt die Ausbreitung des  $E$ -Feldes in positive  $z$ -Richtung den Wellenleiter entlang (rückwärts gilt eine analoge Gleichung). Bei der praktischen Lösung startet man bei einem  $z_0$  mit einer geschätzten transversalen Feldverteilung und läßt diese so lange hin und her propagieren, bis sie stationär ist. Das funktioniert allerdings nur dann gut, wenn  $\epsilon(\vec{r})$  langsam variierend ist bzw. nur kleine Sprünge hat.

## 7. Laser mit Bragg-Rückkopplung

Das sind moderne Laser, bei denen  $\epsilon$  in longitudinaler Richtung periodisch moduliert ist (s. z.B. Kap. 7 in [7]).

$$\epsilon(\vec{r}_t, z) = \epsilon(\vec{r}_t, z + \Lambda) \quad \Lambda = \text{Bragg-Periode} \quad (7.1)$$

Dadurch werden hin- und rücklaufende Wellen gekoppelt, der entsprechende Feldansatz ist

$$\vec{\mathcal{E}} = [a^+(z)e^{-i\vec{k}z} + a^-(z)e^{i\vec{k}z}] \vec{E}(\vec{r}_t, z) e^{i\omega t}. \quad (7.2)$$

Je nach den Annahmen für  $\vec{E}$  ergeben sich unterschiedliche Gleichungen für die Amplituden  $a^\pm$ . Nimmt man dafür eine geführte Mode des über eine Bragg-Periode gemittelten Wellenleiters, so ergeben sich die sogenannten *Coupled-Mode-Gleichungen* (s. Beitrag von U. Bandelow). Bei der ebenfalls benutzten *Transfermatrix-Methode* hingegen wird angenommen, daß das Bragg-Gitter stückweise konstant ist,  $\vec{E}$  in jedem Teilstück eine Mode des lokalen Wellenleiters ist und an den Grenzflächen entsprechende Reflexionen stattfinden.

Genauere Ausführungen sind hier nicht möglich. Ich möchte aber wenigstens erwähnen, daß es inzwischen gut ausgearbeitete Simulationsprogramme gibt (z.B. CLADISS [5]), die diese longitudinalen Gleichungen auch für recht komplexe longitudinal inhomogene Mehrelement-Laser lösen, für den transversalen Ladungsträgertransport allerdings sehr grobe Annahmen machen.

## 8. Quantum-Well Laser

Das sind Laser mit Schichten, deren Dicken im Nanometerbereich liegen und damit klein im Vergleich zur Elektronenwellenlänge sind (s. z.B. Kap. 9 in [7]). Dadurch tritt eine Größenquantisierung auf, die insbesondere die optischen Eigenschaften spürbar modifiziert. Für die Modellierung dieses Effekts ist zusätzlich zu den oben diskutierten Gleichungen noch eine Schrödingergleichung zu lösen - allerdings in einem Gebiet, daß mikroskopisch klein im Vergleich zu den sonstigen Bauelementedimensionen ist.

## 9. Vertical Cavity Laser

Bei diesen Lasern breitet sich das Laserlicht nicht parallel zu den epitaktischen Schichten (zur Chipoberfläche) aus, sondern senkrecht dazu und wird durch die Chipoberfläche abgestrahlt [6]. Die nun vertikale Resonatorlänge ist nicht viel größer als die Wellenlänge. Damit ist eine transversal-longitudinal-Separation der Maxwellgleichungen hinfällig, man muß echt dreidimensional rechnen. Da diese Laser zugleich von großer praktischer Bedeutung sind, stellen sie die zukünftige Herausforderung für Simulanten dar.

## References

- [1] R. Zimmermann: *Many-particle theory of highly excited semiconductors*. Teubner-Texte zur Physik, Bd. 18, Leipzig (1988).
- [2] T. Ohtoshi, K. Yamaguchi, C. Nagaoka, T. Uda, Y. Murayama and N. Chinone: *A two-dimensional device simulator of semiconductor lasers*. Sol.-State Electr. 30, p. 627 (1987).
- [3] G. H. Song, K. Hess, T. Kerkhoven, and U. Ravaioli: *Twodimensional simulator for semiconductor lasers*. Proc. of the Intern. IEEE Electron Device Meeting, Washington, p. 143 (1989).
- [4] H.-J. Wünsche, H. Gajewski, and J. Rehberg: *Treat power as a parameter: a method for quasi 3D modelling of semiconductor lasers*. Submitted to Electronics Letters.

- [5] P. Vankwikelberge, G. Morthier, and R. Baets: *CLADISS, a longitudinal, multi-mode model for the analysis of the static, dynamic and stochastic behaviour of diode lasers with distributed feedback*. Submitted to IEEE Journ. of Quantum Electronics (1990).
- [6] K. Iga, F. Koyama, and S. Kinoshita: *Surface emitting semiconductor lasers*. IEEE Journ. Quant. Electr. 24, p. 1845 (1988).
- [7] G. P. Agrawal and N. K. Dutta: *Long-wavelength semiconductor lasers*. Van Nostrand Reinhold, New York (1986).

## Spatially Variable (Microscopic) Model of the Drift Mobility for HgCdTe Diodes—Application in TOSCA

A. SCHENK

*Humboldt-Universität zu Berlin, Fachbereich Physik, Institut für Optik und Spektroskopie, Invalidenstraße 110, O-1040 Berlin, Germany*

### Abstract

Ein mikroskopisches Modell der Driftbeweglichkeit in  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  ( $x \approx 0.2$ ) wird auf der Grundlage des Kohlerschen Variationsverfahrens abgeleitet. Die relevanten Streumechanismen, Entartung, Kane-Bänder und strukturelle Punktdefekte werden berücksichtigt. Die Abhängigkeit der Elektronen-Beweglichkeit von der Lage des Fermi-Niveaus wird untersucht. Das Modell wird mit Messungen der Hall-Beweglichkeit unter Einschluß berechneter Hall-Faktoren verglichen. Die Ortsabhängigkeit der Driftbeweglichkeit von Elektronen und schweren Löchern wird anhand einer  $n^+n^-p$ -Diode demonstriert. Dazu wurde das Beweglichkeitsprogramm selbstkonsistent in den 2D Bauelemente-Simulator TOSCA eingebaut. Man erhält Beweglichkeitsprofile der Elektronen und schweren Löcher, demonstriert am Beispiel der Streuung an polar-optischen Phononen und ionisierten Störstellen. Neben dem Dotierungsprofil und den dominanten Streuprozessen wird die lokale Beweglichkeit von Entartungs- und Abschirmungseffekten bestimmt. Stark dotierte und positiv vorgespannte Übergänge zeigen eine beträchtliche Veränderung des Beweglichkeitsprofils. Die mittlere Beweglichkeit wächst mit steigender positiver Spannung, was zu steileren  $I-U$ -Kurven führt. Im Sperfall wird das Beweglichkeitsprofil nur leicht verändert, es spiegelt jedoch direkt die wachsende Verarmung durch ein breiter werdendes Beweglichkeitsminimum wider.

### 1. Introduction

In the small gap system  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  with  $x \approx 0.2$  the drift mobility becomes a function of the local carrier density not only due to the doping profile but also as a consequence of degeneracy and screening. The latter features are important in highly doped regions of infrared photodiodes—all the Coulombic scattering mechanisms are effectively screened and, furthermore, all scattering processes depend directly on the position of the Fermi level. The commonly used factorization of the conductivity in the form 'charge density multiplied by a constant mobility' fails in this case. To overcome this drawback a fully microscopic mobility model has been established on the basis of Kohler's variational method (first momentum of the Boltzmann equation) which takes into account all relevant scattering mechanisms in  $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$ . The Kohler variational method is right both for treating the inelastic optical-phonon scattering and for ending up with a numerical expense still suitable for application in device simulation programs. It was another goal to implement the model into the 2D simulator TOSCA to test its suitability and to study the physical effects in a selfconsistent calculation.

## 2. Analytical Model

The considered scattering mechanisms include polar optical (po), piezoelectric (pz), and acoustic (ac) phonon modes, ionized impurity scattering (cc), neutral impurity scattering (nc), alloy scattering (dis), and strain field scattering (sf). For clarity we restrict ourselves to the four dominant processes in the composition and temperature range of interest: po-, cc-, nc-, and sf-scattering. All expressions below hold for electrons, those for heavy and light holes follow immediately from  $m_c \rightarrow m_{hh, lh}$ ,  $n \rightarrow p_{hh, lh}$ , and  $\xi = kT/E_g \rightarrow 0$  in the case of heavy holes.

Alternatively to the invalid relaxation time approximation because of the inelastic po-scattering, the Kohler variational method [1] was applied. In first order, the mobility is determined by the 'golden rule' transition probabilities then. The scattering matrix elements were taken in the form with the Bloch factors set to 1. A Kane model was used for the band structure, and screening was described in Thomas-Fermi approximation including degeneracy [1]. For the po-scattering both HgTe- and CdTe-like longitudinal and transverse optical phonon modes were taken into account [2], [3]. The details of the scattering processes can be found in [2], [4] and the references therein.

The electron mobility is given by the expression

$$\mu_n = -\frac{16en}{9\pi\hbar^2}d_0^{-1}, \quad (2.1)$$

where  $n$  denotes the electron density and  $e$  the elementary charge. The quantity  $d_0$ , which contains all the information about the scattering processes, can be written in the following form:

$$\begin{aligned} d_0 = & \frac{m_c^2}{6(2\pi)^4\hbar^4} \int_0^\infty dE \left(\frac{d\gamma}{dE}\right)^2 \frac{\partial f}{\partial E} \left\{ A^{nc} \frac{1}{2} \lambda^4 \gamma^{*2}(E) + \right. \\ & + A^{sf} \lambda^2 \left[ \gamma^*(E) + \frac{\gamma^*(E)}{1 + \gamma^*(E)} - 2\mathcal{L}_n(1 + \gamma^*(E)) \right] + \\ & + A^{cc} \left[ \mathcal{L}_n(1 + \gamma^*(E)) - \frac{\gamma^*(E)}{1 + \gamma^*(E)} \right] + \\ & + \sum_{i=1}^2 \frac{A_i^{po}}{\omega_{LOi}} f_B(\omega_{LOi}) \frac{1 - f(E + \hbar\omega_{LOi})}{1 + f(E)} \frac{[1 + 2\frac{E + \hbar\omega_{LOi}}{E_g}]}{[1 + 2\frac{E}{E_g}]} \times \\ & \times [\lambda^2 \gamma^{*\frac{1}{2}}(E) \gamma^{*\frac{1}{2}}(E + \hbar\omega_{LOi}) + g_+^i(E, \lambda)]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

In (2.2) the following abbreviations were used:

$$\gamma(E) = E\left(\frac{E}{E_g} + 1\right), \quad \gamma^*(E) = \frac{4}{E_\lambda} \gamma(E), \quad E_\lambda = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_c}, \quad (2.3)$$

$$\lambda^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_s} \left[ \frac{d}{d\eta_c} n + \frac{d}{d\eta_v} p \right], \quad \eta_c = F_n - (E_c - e\varphi), \quad \eta_v = E_v - e\varphi - F_p, \quad (2.4)$$

$$g_+^i(E, \lambda) = 2\lambda^2 \mathcal{L}_n \left[ \frac{q_{min}^2(E) + \lambda^2}{q_{max}^2(E) + \lambda^2} \right] + \lambda^4 \frac{q_{max}^2(E) - q_{min}^2(E)}{(q_{max}^2 + \lambda^2)(q_{min}^2 + \lambda^2)}, \quad (2.5)$$

$$q_{max}^2(E) = \frac{2m_c}{\hbar^2} [\gamma^{\frac{1}{2}}(E + \hbar\omega_{LOi}) \mp \gamma^{\frac{1}{2}}(E)]^2. \quad (2.6)$$

The meaning of the parameters in (2.2)-(2.6) is as follows:  $f$ -Fermi function,  $\lambda^{-1}$ -screening length,  $f_B$ -Bose function,  $\hbar\omega_{LOi}$ -LO-phonon energy of the  $i$ -th constituent,  $E_g$ -gap energy,  $\epsilon_s$ -static dielectric function,  $\eta_{c,v}$ -electrochemical energies,  $F_{n,p}$ -quasi Fermi levels,  $\varphi(\vec{r})$ -electrostatic potential, and  $E_{c,v}$ -band edge energies. The quantities  $A^{nc}$ ,  $A^{sf}$ ,  $A^{cc}$ , and  $A^{po}$  result from the calculation of the transition matrix elements. They contain a variety of microscopic physical parameters, which all are available from experiment (for details see [4] and the references therein). The electrically active doping profile is included in  $A^{cc}$ .

The remaining integral in (2.2) could be solved analytically in the limits of nondegeneracy and total degeneracy under certain assumptions, but it was impossible to find a satisfactory interpolation for the transition region. Therefore, the last integration is carried out by a combination of the Gauss and the Laguerre method with only a few points.

In order to calculate the carrier densities very quickly, an interpolation formulae of Stahl [5] for the modified Fermi integral  $J_{1/2}$

$$J_{1/2}(\eta, \xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{[x(1 + \xi x)]^{1/2} (1 + 2\xi x)}{1 + \exp(x - \eta)} \quad (2.7)$$

( $\xi = kT/E_g$ ) has been used, which differs from the exact result by less than 1% in the region  $\xi = [0 \text{ to } 0.1]$ . The first derivative of this interpolation formula was used to determine the screening length after (2.4).

The model was carefully checked by comparing the theoretical results with experimental data of the electron and hole Hall mobilities [6], [3] over the whole temperature range. Since no difference between the Hall and drift mobility is obtained within the used order of the Kohler method, Hall factors both for impurity scattering and for the high temperature po-scattering were calculated to improve the check at least in the low and high temperature ranges. Due to the uncertainty in some microscopic parameters resulting from published data by different authors, a final fit was possible within a factor of about 2. This should be much more than the error by the method itself. The fit served to fix the ambiguous microscopic parameters and led to a satisfactory agreement between the described model and measured mobilities in  $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$ .

### 3. Numerical Results

The mobility model was implemented into the 2D device simulator *TOSCA* [7], which solves the van Roosbroeck system of semiconductor device equations by the method of finite elements [8], [9]. One is faced with a self-consistent problem, because the variables of these equations, the electrostatic potential  $\varphi(\vec{r})$  and the carrier densities  $n(\vec{r})$ ,  $p(\vec{r})$  (or the quasi Fermi levels  $F_n(\vec{r})$ ,  $F_p(\vec{r})$ , respectively), enter the mobility. A particular switch forces *TOSCA* to pass on the carrier densities and quasi Fermi levels, determined at each grid point by the main program, to the mobility subroutine. The electron and heavy hole mobilities (the contribution of light holes can be neglected) then are calculated for all grid points and enter the current matrix equations.

In order to demonstrate the major effects, a narrow, quasi 1D stripe with 213 vertices was chosen for the 2D domain, which had a size of  $0.3 \times 11 \mu m^2$ . The doping profile was assumed to vary in y-direction only.

The concentration of assumed completely ionized residual impurities and the corresponding free carrier densities in a  $n^+n^-p$  junction of an infrared diode are shown in Fig. 1. For clarity, the set of microscopic parameters was chosen such, that po- and cc-scattering dominate (nc- and sf-scattering suppressed).

The resulting mobility profiles for electrons and heavy holes in thermodynamic equilibrium are given in Fig. 2. These profiles can be interpreted in the following way: Within the  $n^+$ -region the electron gas is highly degenerate, and screening results in a large electron mobility value, despite the scatterer concentration is high. The profile is constant there, because the degeneracy is total. In the  $n^+n^-$ -region screening becomes less efficient, and the electron mobility goes down reaching its minimum in the depletion layer. In the p-region both kinds of carriers are nondegenerate. The electron mobility follows the decrease in the total impurity concentration there, reaching a maximum at the p-contact. A detailed analysis shows, that cc-scattering dominates the electron mobility over the whole structure.

In the case of heavy holes the cc-scattering dominates only in the  $n^+$ -region. The hole mobility directly reflects the impurity profile there. Within the  $n^-p$ -region the po-scattering is the most important one. Since screening has only little effect here, the hole mobility becomes almost

constant. It follows from Fig. 2, that both mobility profiles vary over one order of magnitude. Fig. 3 demonstrates the change in the electron mobility profile, if an external voltage is applied. A forward bias injects electrons into the  $n^-$ -region, where they become more and more degenerate. The mobility increases with rising voltage. At  $U = 0.1V$  its value in the  $n^-$ -region becomes larger than the unchanged one in the  $n^+$ -region because of the lower impurity concentration in this part of the junction. A new maximum emerges distinctly in the p-region, where degeneracy effects come into play at higher biases, but at the same time the Fermi level remains pinned on the p-side boundary, since the p-contact was taken as ideal Ohmic.

Obviously, the averaged electron mobility (as average over the whole device) increases with rising positive voltage. The mobility itself becomes a function of the external voltage.

If the diode is reverse biased, the mobility profile changes only within the depletion region. It decreases slightly due to the rising depletion, and the "mobility well" broadens to the same extent as the depletion region.

The forward I-U characteristic of the investigated diode is shown in Fig. 4. For comparison, results with three constant values of the electron mobility are also presented. No constant averaged mobility value can reproduce the correct I-U characteristic over the whole positive voltage axis. At biases higher than 50 mV a strong deviation from the presented model occurs. This is due to the injection of majority carriers accompanied by an increase of the averaged mobility.

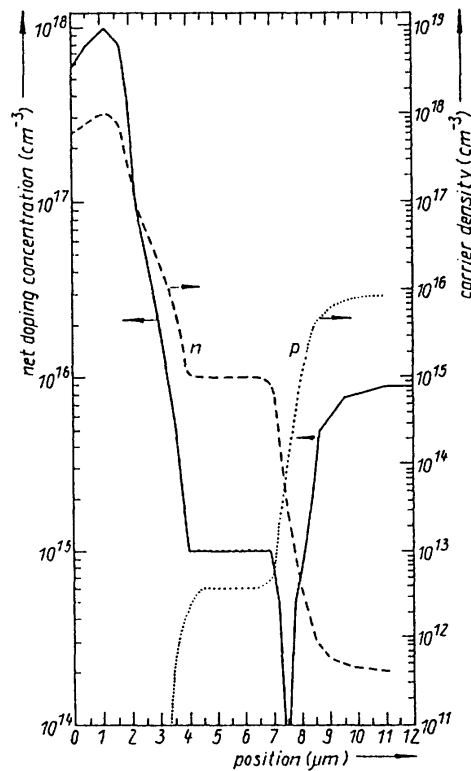
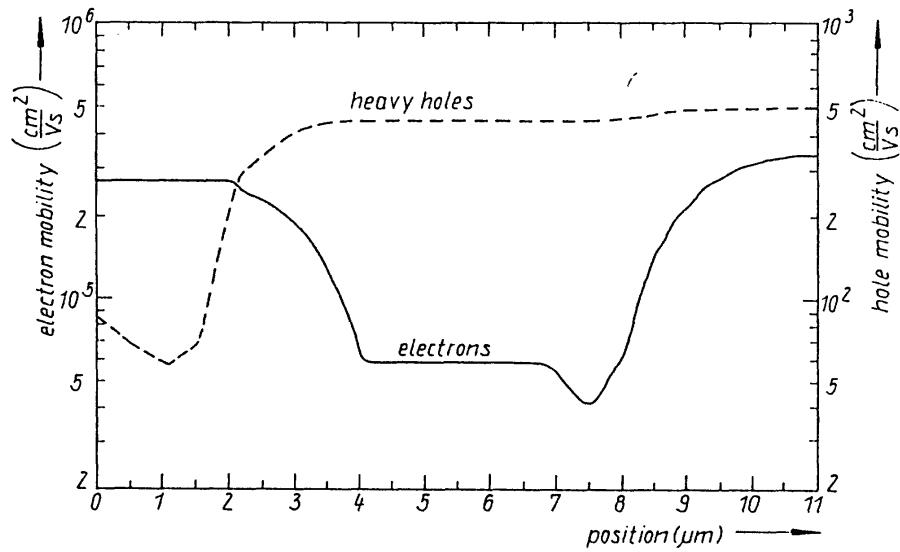
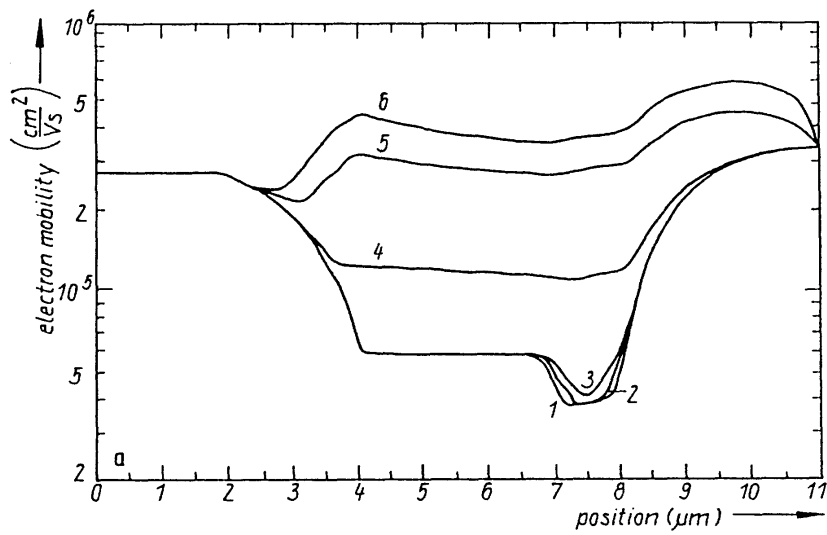


Figure 1: Net doping profile of the assumed, completely ionized, residual impurities of the  $n^+n^-p$  junction (—) and the corresponding free carrier densities

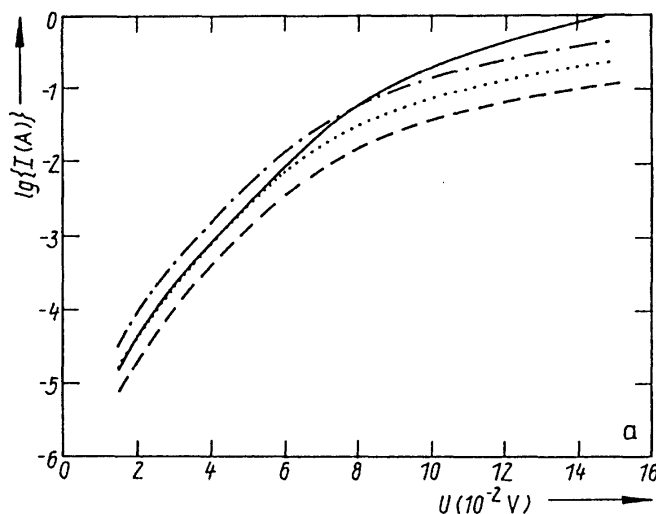




**Figure 2:** Electron and heavy hole mobility profiles of the junction of Fig. 1. Only po- and cc-scattering were taken into account



**Figure 3:** Electron mobility of the  $n^+n^-p$  junction for different applied voltages: (1) -200 mV, (2) -100 mV, (3) 0 V, (4) +50 mV, (5) +100 mV, (6) +150 mV



**Figure 4:** Comparison of the I-U characteristics of the  $n^+n^-p$  junction with spatially variable model (—) and with constant electron mobilities:  $1 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  (- - -),  $2 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  (· · ·),  $4 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  (- · -). The constant heavy hole mobility is  $\mu_{hh} = 300 \text{ cm}^2/\text{Vs}$

#### 4. Summary

The local mobility in a  $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$  photodiode is determined by the doping profile, by the dominating scattering mechanisms, and by degeneracy and screening effects. All these effects were described in a microscopic model, which was incorporated into the 2D device simulator *TOSCA*. Since the mobility depends on the carrier density, except Boltzmann statistics holds utterly, its profile may change with applied voltage. This leads to an increasing averaged mobility in the case of majority carrier injection. I-U curves become steeper than they would be using a constant mobility value.

#### Acknowledgement

The author is indebted to Prof. H. Gajewski from Karl-Weierstrass-Institute of Mathematics, Berlin, who implemented the mobility routine into the 2D device simulator *TOSCA*. The unceasing cooperation with him and his collaborators is gratefully acknowledged.

#### References

- [1] W. Brauer and H.-W. Streitwolf: *Theoretische Grundlagen der Halbleiterphysik*. Akademie-Verlag, Berlin 1977 (p.166).
- [2] J. J. Dubowski, T. Dietl, W. Szymanska, and R. R. Galazka: *J. Phys. Chem. Solids* **42**, 351 (1981), and references therein.

- [3] P. Höschl, P. Moravec, V. Prosser, V. Szöcs, and R. Grill: *phys. stat. sol. (b)* **145**, 637 (1988).
- [4] A. Schenk: *phys. stat. sol. (a)* **122**, 413 (1990), and **122**, 723 (1990).
- [5] M. Stahl: unpublished.
- [6] W. Hoerstel and A. Schmiede: private communication.
- [7] H. Gajewski: *TOSCA-Handbook*. Berlin 1989.
- [8] W. van Roosbroeck: *Bell. Syst. tech. J.* **29**, 560 (1950).
- [9] P. A. Markowich: *The Stationary Semiconductor Device Equations*. Springer-Verlag, 1985 (p.133).

## 2D – Simulation des Interbandtunnels in inhomogenen elektrischen Feldern

M. STAHL / A. SCHENK / H.-J. WÜNSCHE  
*Fachbereich Physik der Humboldt-Universität zu Berlin*  
*Invalidenstr. 110, O-1040 Berlin, Germany*

### Abstract

Das Interbandtunneln ist der feldinduzierte Übergang von Ladungsträgern zwischen verschiedenen Bändern. Dieser Prozeß kann insbesondere bei Bauelementen aus direkten Halbleitern einen wesentlichen Einfluß auf die Kennlinien ausüben. Die bisher in der Literatur für die Abschätzung des Tunnelstromes verwendeten Formeln setzten die Homogenität des elektrischen Feldes voraus. Da diese Annahme jedoch in vielen Fällen nicht gerechtfertigt ist, haben wir eine nichtlokale Theorie für inhomogene Felder entwickelt.

Diese wurde in das 2D-Simulationsprogramm TOSCA implementiert. Dabei kam es darauf an, den Potentialverlauf entlang der jeweiligen Richtung des elektrischen Feldes auch zwischen den Gitterpunkten numerisch möglichst genau zu bestimmen, wozu drei verschiedene Varianten untersucht werden. Es zeigt sich, daß i.a. nur eine zweidimensionale Interpolation dieses Verlaufes hinreichend genaue Ergebnisse liefert.

Für Dioden aus  $Hg_{0,8}Cd_{0,2}Te$  wird mit Hilfe dieses Modells gezeigt, daß die Nettotunnelrate und damit auch der Tunnelstrom ganz empfindlich vom Verlauf des elektrischen Feldes abhängen. Darüber hinaus wird demonstriert, daß nicht nur das üblicherweise berücksichtigte Dotierungsprofil in die Tiefe, sondern auch der seitliche Verlauf der Dotierung einen erheblichen Einfluß auf den Tunnelstrom haben kann.

Unter Interbandtunneln versteht man quantenmechanische Übergänge von Ladungsträgern zwischen verschiedenen Bändern im Halbleiter, welche durch das innere elektrische Feld der Bauelemente induziert werden. Diese Prozesse können insbesondere bei Halbleiterdioden aus direktem Material und mit einem schmalen Gap, auf die wir uns hier beschränken wollen, einen starken Einfluß auf die Kennlinien ausüben.

In Abbildung 1 (Seite 30), wo die Energie über dem Ort aufgetragen ist, wurde ein solcher Übergang eines Elektrons vom Valenz- ins Leitungsband schematisch dargestellt. Eine Besonderheit der Interbandtunnelprozesse besteht in ihrer Nichtlokalität, d.h. sie sind immer mit einer Ortsveränderung der beteiligten Ladungsträger um die sogenannte Tunnellänge  $l_t$  verbunden. Das resultiert daraus, daß diese Übergänge ohne Energie- und Impulsaustausch mit anderen Teilchen (wie z.B. den Photonen oder den Phononen) stattfinden. Vielmehr entnehmen die Ladungsträger die zur Überwindung des Gaps benötigte Energie aus dem inneren elektrischen Feld des Bauelementes, womit die gesamte potentielle Energie der Ladungsträger im Halbleiter konstant bleibt, wie dies auch anhand von Abbildung 1 (Seite 30) deutlich wird.

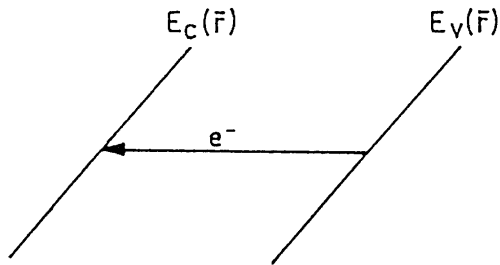


Figure 1: Schematische Darstellung des Interbandtunnels

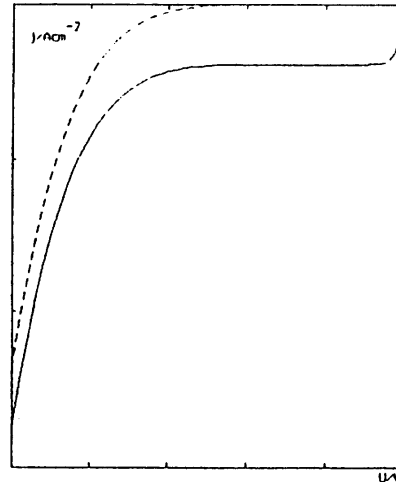


Figure 2: Typische Verläufe der Tunnelkennlinie (---) und der Gesamtkennlinie (—) einer Halbleiterdiode im Sperrfall

In Abbildung 2 (Seite 30) sind typische Verläufe der Tunnelkennlinie und der daraus resultierenden Gesamtkennlinie einer Halbleiterdiode schematisch gezeigt. Man erkennt, daß das typische Sperrverhalten der Diode für große Sperrspannungen durch den Einfluß des Interbandtunnels auf jeden Fall zerstört wird. Jedoch auch für kleinere Sperrspannungen beeinflusst der Tunnelstrom das durch die anderen Stromanteile, wie SHR- und Augerstrom, bestimmte Verhalten der Diode mehr oder weniger stark.

In früheren Arbeiten (z.B. [1], [2]) wurden zur Abschätzung des Tunnelstroms Ausdrücke der Form

$$j_{tu} = j_o(F) \exp\left(\frac{-F_c}{F}\right) \quad (0.1)$$

benutzt, wobei  $F$  das elektrische Feld und  $F_c$  eine kritische Feldstärke bezeichnen. Diese Modelle setzen jedoch die Homogenität des elektrischen Feldes über der gesamten Tunnellänge voraus. Diese Forderung ist für große Sperrspannungen auch recht gut erfüllt, da der Potentialverlauf in der Raumladungszone hier weitgehend linearisiert ist. Für kleine Sperrspannungen dagegen gilt diese Annahme i.a. jedoch nicht mehr, so daß der Tunnelstrom überschätzt wird. Interessant sind aber gerade der Bereich der Kennlinie, wo die Diode noch ein gutes Sperrverhalten zeigt und insbesondere dessen Grenze, die sogenannte Durchbruchspannung. Da (1) jedoch gerade in diesem Bereich kleiner und mittlerer Sperrspannungen versagt, haben wir ein Modell entwickelt, welches die Inhomogenitäten des elektrischen Feldes wesentlich besser berücksichtigt.

Ausführlich beschrieben ist dieses Modell der mittleren Inhomogenität in [3]. Die dortige Herleitung einer Nettorate für die Interbandtunnelübergänge (Nettotunnelrate) an einem Ort  $\vec{r}$  erfolgt im Rahmen der Effektivmassen Näherung. Die Vorteile des Modells beruhen auf der verbesserten näherungsweise Berechnung des Überlappungsintegrals unter der Voraussetzung der mittleren Inhomogenität des elektrischen Feldes

$$\left|1 - \frac{F(x_o + l_i)}{F(x_o)}\right| \ll 1, \quad (0.2)$$

wobei  $x_o$  der Punkt der maximalen Überlappung der Wellenfunktionen und  $l_i$  ein Maß für die Halbwertsbreite der Überlappungsfunktion sind. Für kleine Sperrspannungen, d.h. große

Feldinhomogenitäten fordert diese Bedingung die Homogenität des elektrischen Feldes nur über einer sehr viel kleineren Strecke als der Tunnellänge, während  $l_i$  für große Sperrspannungen in die Größenordnung von  $l_i$  kommt, so daß das Modell der mittleren Inhomogenität für große Sperrspannungen automatisch die schon früher benutzten, dort anwendbaren Ausdrücke der Form (1) reproduziert.

Die Ableitung des Modells der mittleren Inhomogenität läßt sich exakt nur für eine parabolische Bandstruktur ausführen. Insbesondere schmallückige Halbleiter, bei denen das Interbandtunneln ja besonders wahrscheinlich ist, weisen jedoch oft eine starke Kopplung der Bänder auf, was zu einer KANEschen Bandstruktur führt, welche durch

$$E_\mu(\vec{r}, \vec{k}) = E_o(\vec{r}) \pm \frac{E_g}{2} \sqrt{1 + 2 \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{m_c E_g}}; \quad \mu = (c, v) \quad (0.3)$$

$$E_o(\vec{r}) = \frac{E_v + E_c}{2} - e\varphi(\vec{r}) \quad (0.4)$$

beschrieben wird. Dabei bezeichnen  $E_g$  die Gapenergie,  $m_c$  die effektive Bandkantenmasse der Elektronen und  $\vec{k}$  ist der Wellenvektor. Wie in [4] ausführlicher diskutiert wird, ist das Modell der mittleren Inhomogenität jedoch auch hier in vielen Fällen anwendbar.

Man erhält schließlich für die Nettotunnelrate den Ausdruck

$$R_{tu}(\vec{r}) = \frac{3e|e\nabla\varphi(\vec{r})|^4}{32\pi(2\mu E_g)^{5/2}} \frac{m_c m_v}{E_g} [f_c(\vec{r}) - f_v(\vec{r})] S_{red}(\vec{r}) M(\vec{r}). \quad (0.5)$$

Hierbei sind  $f_c(\vec{r})$  bzw.  $f_v(\vec{r})$  die Besetzungsfunktionen der Valenz- und Leitungsbandzustände

$$f_v(\vec{r}) = [1 + \exp(\frac{E_o(\vec{r}) - F_p(\vec{r})}{kT})]^{-1} \quad (0.6)$$

bzw.

$$f_c(\vec{r}) = [1 + \exp(\frac{E_o(\vec{r}) - F_n(\vec{r})}{kT})]^{-1} \quad (0.7)$$

und  $M(\vec{r})$  im wesentlichen die bekannte elektrooptische Funktion

$$M(\vec{r}) = 8\pi z(\vec{r}) \{Ai^2(z(\vec{r})) - z(\vec{r}) [Ai'(z(\vec{r}))]^2\} \quad (0.8)$$

mit

$$z(\vec{r}) = [\frac{3}{2}\Delta S(\vec{r})]^{3/2}, \quad (0.9)$$

$$\Delta S(\vec{r}) = |S_c(\vec{r}) - S_v(\vec{r})| \quad (0.10)$$

und der Airy - Funktion

$$Ai(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \cos(\frac{1}{3}t + xt) \quad (0.11)$$

Das reduzierte Wirkungsintegral ist über

$$S_{red}(\vec{r}) = \frac{|S_c(\vec{r})S_v(\vec{r})|}{\Delta S(\vec{r})}. \quad (0.12)$$

definiert. Die schon erwähnte Nichtlokalität des Interbandtunnelns wird nun über die sogenannten Wirkungsintegrale

$$S_\mu(\vec{r}) = \int_0^{\delta r_\mu} dt \kappa_\mu(\vec{r} + \vec{e}t); \quad \mu = c, v \quad (0.13)$$

berücksichtigt, wobei sich der quasiklassische Wellenvektor bei der KANEschen Bandstruktur zu

$$\kappa_\mu(\vec{r} + \vec{e}t) = \sqrt{\frac{2em_\mu}{\hbar^2}} \sqrt{|(\varphi(\vec{r} + \vec{e}t) - \varphi(\vec{r}_\mu)) [1 - \frac{e}{E_g}(\varphi(\vec{r} + \vec{e}t) - \varphi(\vec{r}_\mu))]|} \quad (0.14)$$

ergibt. Die Integration in (13) erfolgt, beginnend am Aufpunkt  $\vec{r}$ , in Richtung des dortigen elektrischen Feldes

$$\vec{e} = \frac{\nabla\varphi(\vec{r})}{|\nabla\varphi(\vec{r})|} \quad (0.15)$$

bis zu dem jeweiligen klassischen Umkehrpunkt

$$\vec{r}_\mu = \vec{r} + \vec{e} \delta r_\mu, \quad (0.16)$$

wobei sich  $\delta r_\mu$  aus der Bedingung

$$e[\varphi(\vec{r}_\mu) - \varphi(\vec{r})] = \mp \frac{E_g}{2}; \quad \mu = \begin{pmatrix} c \\ v \end{pmatrix} \quad (0.17)$$

ergibt.

Dieses Modell wurde nun in das 2D - Simulationsprogramm TOSCA, welches das Grundgleichungssystem der inneren Elektronik numerisch löst, implementiert. Obwohl der Interbandtunneleffekt auch hier als eindimensionaler Prozeß betrachtet wird, bleibt doch seine grundsätzliche Nichtlokalität erhalten. Es kam also darauf an, den Verlauf des elektrostatischen Potentials in Richtung des elektrischen Feldes am Aufpunkt  $\vec{r}$  in einer gewissen Umgebung dieses Aufpunktes möglichst genau zu bestimmen. Hierzu wurden drei verschiedenen Varianten erstellt und getestet, welche im folgenden kurz beschrieben werden sollen.

Im einfachsten Fall wurde vorausgesetzt, daß die Feldrichtung parallel zu den Gitterlinien des in TOSCA verwendeten Grundgitters verläuft, was insbesondere bei eindimensionalen Modellrechnungen sinnvoll ist. Dann können mit Hilfe eines relativ einfachen Suchalgorithmus prinzipiell alle in Richtung des elektrischen Feldes liegenden Gitterpunkte in eine eindimensionale Interpolation des elektrostatischen Potentials einbezogen werden. Aus Zeitgründen beschränken wir uns bei dieser ersten Variante jedoch auf eine Interpolation 4. Grades.

I.a. weicht die Richtung des elektrischen Feldes jedoch von der Richtung der Gitterlinien aus TOSCA ab. In einer zweiten Variante wurde der Verlauf des elektrostatischen Potentials deshalb mit Hilfe einer Taylorentwicklung 2. Grades in einer gewissen Umgebung des Aufpunktes  $\vec{r}$  extrapoliert, was auf

$$\varphi(\vec{r} + t\vec{e}) = \varphi(\vec{r}) + t\nabla\varphi(\vec{r})\vec{e} + \frac{t^2}{2} \left[ -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_r\epsilon_0} + 2\frac{\partial^2\varphi(\vec{r})}{\partial x\partial y} e_x e_y \right] \quad (0.18)$$

führt, wobei  $\rho(\vec{r})$  die Raumladungsdichte bezeichnet. Obwohl sich der Verlauf des elektrostatischen Potentials in diesem Falle prinzipiell aus den lokalen Größen am Aufpunkt  $\vec{r}$  bestimmt, weist diese Variante jedoch zwei wesentliche Nachteile auf. Einerseits liefert Gleichung (18) nur in einer vergleichsweise kleinen Umgebung von  $\vec{r}$  gute Ergebnisse, so daß sie für große Tunnelängen, d.h. große Feldinhomogenitäten relativ schnell versagt. Andererseits sind in TOSCA weder die partiellen Ableitungen des elektrostatischen Potentials in Richtung der Koordinatenachsen noch dessen gemischte zweite Ableitung, wie sie in (18) benötigt werden, verfügbar, was wiederum zu i.a. nicht gerechtfertigten Einschränkungen führt.

Bei der dritten Variante wurde der Verlauf des elektrostatischen Potentials deshalb mit Hilfe einer zweidimensionalen Interpolation unter Einbeziehung der nächsten Gitterpunkte des Aufpunktes  $\vec{r}$  bestimmt. Ein genaueres Vorgehen durch die Einbeziehung weitere Gitterpunkte ist einerseits aus Zeitgründen nicht möglich und andererseits auch nicht sinnvoll, da auch das Programmsystem TOSCA nicht genauer arbeitet. Obwohl der Potentialverlauf hier also insgesamt nur parabolisch interpoliert wird, weist diese Variante den großen Vorteil auf, daß alle Feldrichtungen gleichberechtigt berücksichtigt werden.

Bei Testrechnungen zum Vergleich der drei eben beschriebenen Varianten wurden die diskutierten Vor- und Nachteile bestätigt. Die zweite Variante liefert somit in den meisten Fällen die ungenauesten Ergebnisse. Obwohl auch die mit der dritten Variante erzielten Resultate, insbesondere für sehr kleine Sperrspannungen, von denen der ersten Variante abweichen, bleiben die Fehler im interessierenden Bereich mittlerer Sperrspannungen in vertretbaren Grenzen, womit sich die dritte Variante als die i.a. zuverlässigste erweist.

Abschließend sollen noch kurz einige Ergebnisse vorgestellt werden, wie sie mit Hilfe des beschriebenen Modells bei der Untersuchung von Photodioden aus  $Hg_{0,8}Cd_{0,2}Te$  erzielt wurden.

Einerseits zeigte sich schon bei eindimensionalen Modellrechnungen, daß die Nettotunnelrate und damit auch der Tunnelstrom sehr empfindlich vom Verlauf des elektrischen Feldes und somit letztlich vom jeweiligen Dotierungsprofil abhängen. In Abbildung 3 (Seite 34) sind die beiden bei den Rechnungen benutzten Verläufe der Nettodotierung über der Tiefe gezeigt. Es sind dies einerseits ein abruptes Dotierungsprofil und andererseits ein in der Raumladungszone wesentlich flacher verlaufendes  $n^+n^-p$ -Profil nach [5], deren asymptotische Werte jedoch ähnlich sind. Der Vergleich der entsprechenden, in Abbildung 4 (Seite 34) dargestellten örtlichen Verläufe der Nettotunnelrate zeigt, daß sich ihr Maximum bei dem flacher verlaufenden Dotierungsprofil sehr stark um ca. 9,5 Größenordnungen verkleinert. Dies kommt natürlich auch in den entsprechenden Kennlinien im Sperrfall, wie sie in Abbildung 5 (Seite 35) gezeigt sind, zum Ausdruck. Während die Struktur mit dem abrupten Dotierungsprofil praktisch kein Sperrverhalten aufweist, wird der Tunnelstrom in der Struktur mit dem flacheren  $n^+n^-p$ -Profil erst bei einer Durchbruchspannung von  $U = -0,27V$  wesentlich.

Andererseits stellte sich bei der zweidimensionalen Modellierung dieser Strukturen heraus, daß auch der seitliche Verlauf der Dotierungskonzentration ein dem Dotierungsprofil in die Tiefe vergleichbar starken Einfluß auf den Tunnelstrom haben kann. In der Abbildung 6 (Seite 35) sind die Höhenlinienbilder der entsprechenden Dotierungsprofile gezeigt. Während in die mit  $y$  bezeichnete Tiefe generell das flache  $n^+n^-p$ -Profil benutzt wurde, ist für den seitlichen Abfall der Dotierungskonzentration in  $x$ -Richtung einmal ein gaußförmiger und einmal ein dem  $n^+n^-p$ -Profil in die Tiefe ähnlicher Verlauf simuliert worden. Die asymptotischen Werte der Dotierungskonzentrationen bleiben dabei, wie auch im eindimensionalen Fall, in etwa vergleichbar. In Abbildung 7 (Seite 36) sind die entsprechenden Oberflächenbilder der Nettotunnelrate gezeigt. Man erkennt, daß im ersten Fall der seitliche  $n^+p$ -Übergang so stark dominiert, daß hier praktisch alle für den Tunnelstrom wesentlichen Ladungsträger erzeugt werden. Weitere Rechnungen zeigten darüber hinaus, daß sich auch bei einer Variation der Halbwertsbreite des seitlichen Gaußabfalls der Dotierungskonzentration keine qualitative Änderung dieser Situation ergibt. Dies wird erst im zweiten Fall erreicht, wo auch das seitliche Dotierungsprofil ähnlich flach wie das in die Tiefe verläuft. Einerseits werden hier die Beiträge zum Tunnelstrom aus dem seitlichen  $np$ -Übergang und dem in die Tiefe vergleichbar und andererseits wird auch die Gesamtzahl der durch das Interbandtunneln erzeugten Ladungsträger wesentlich kleiner. Das spiegelt sich natürlich wiederum auch an den abschließend in Abbildung 8 (Seite 36) gezeigten Kennlinien wieder. Der Tunneldurchbruch der Struktur mit dem flachen seitlichen Dotierungsprofil tritt wesentlich später auf als bei jener mit dem gaußförmigen seitlichen Abfall der Dotierungskonzentration, obwohl die letztere wenigstens in einem vergleichsweise kleinen Bereich das typische Sperrverhalten von Halbleiterdioden aufweist, da der gaußförmige Abfall doch flacher verläuft als bei dem oben diskutierten abrupten Dotierungsprofil.

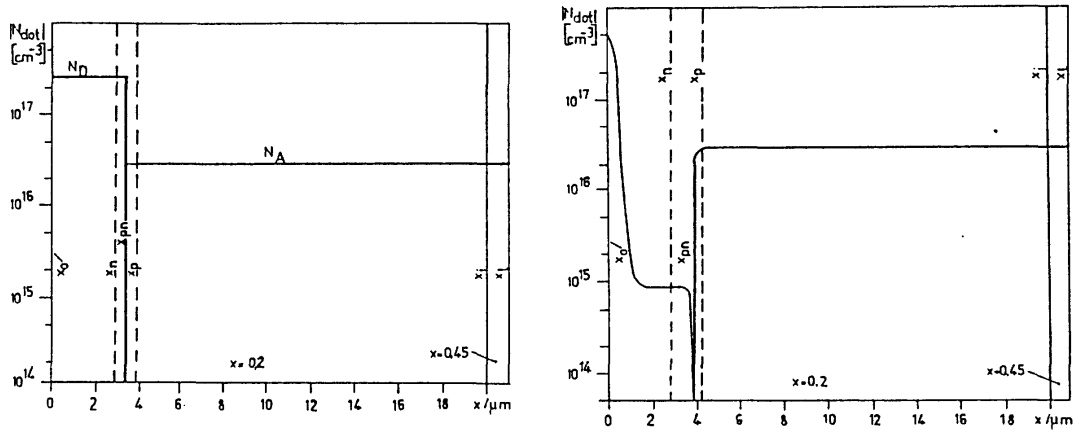


Figure 3: Verläufe der Nettodotierung über der Tiefe für die Struktur mit dem abrupten (a) bzw. dem  $n^+n^-p$  - Profil (b)

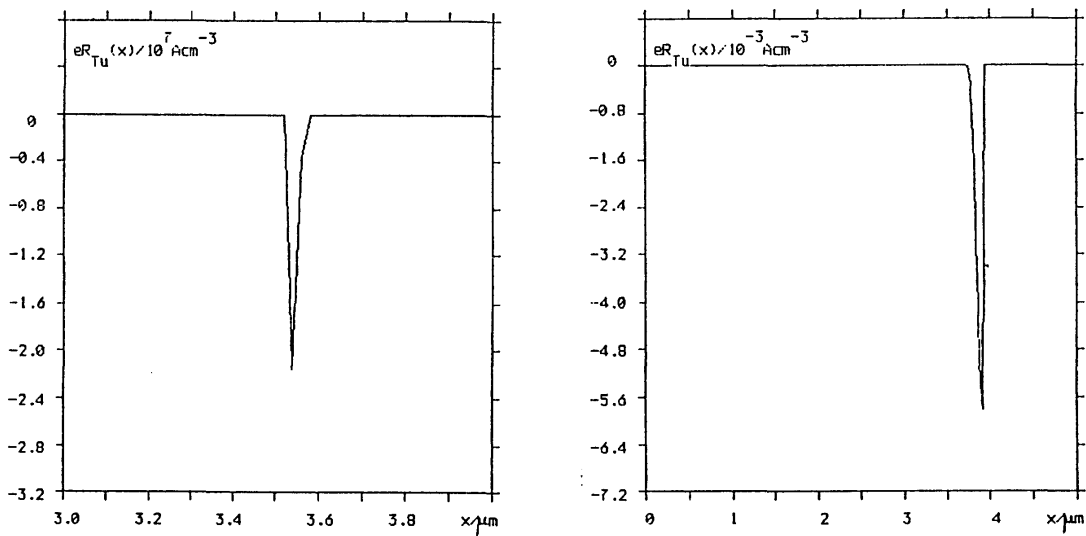


Figure 4: Verläufe der Nettotunnelrate über der Tiefe für die Struktur mit dem abrupten (a) bzw. dem  $n^+n^-p$  - Profil (b)



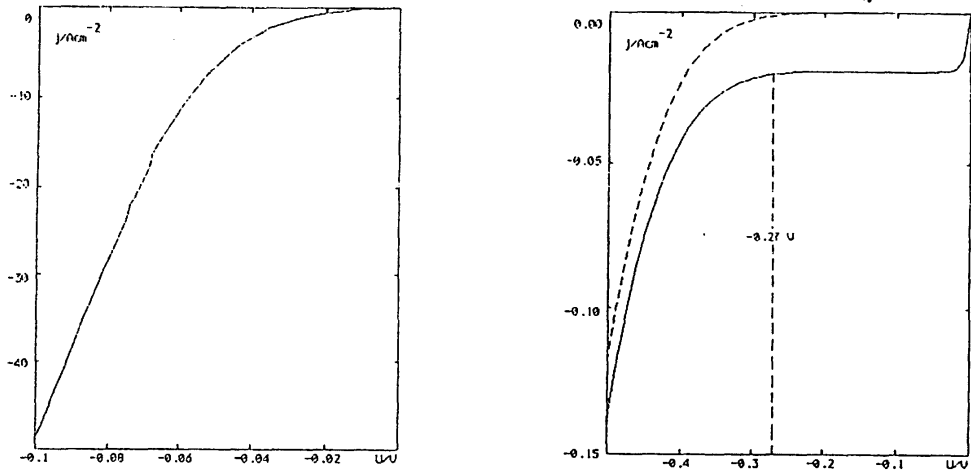


Figure 5: Kennlinien der Struktur mit dem abrupten (a) bzw. dem  $n^+n^-p$ -Profil (b)

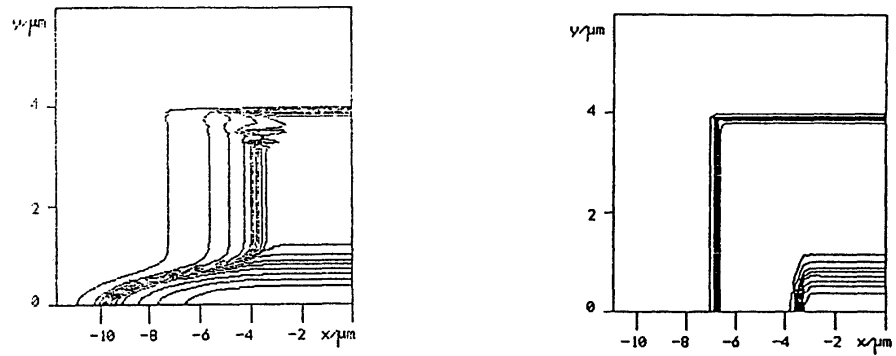


Figure 6: Höhenlinienbilder der Nettodotierung für die Struktur mit dem gaußförmigen (a) bzw. dem  $n^+n^-p$ -ähnlichen (b) seitlichen Abfall der Dotierungskonzentration

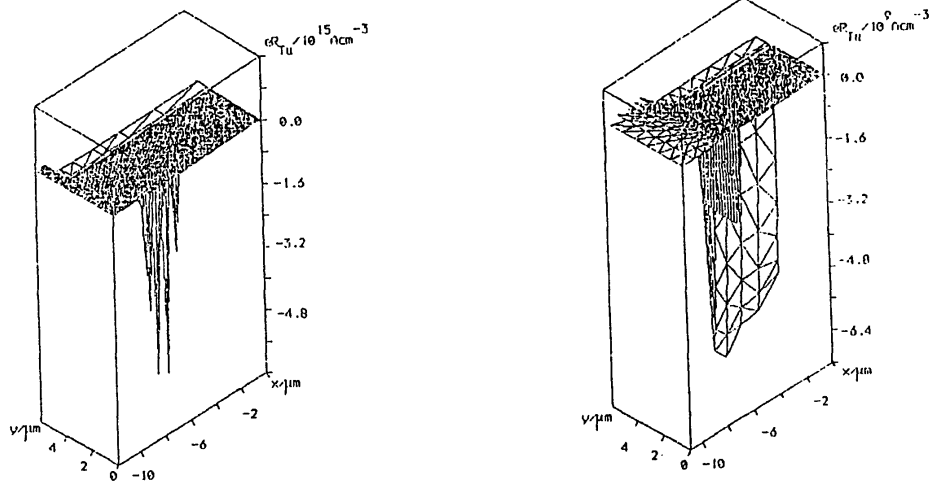


Figure 7: Oberflächenbilder der Nettotunnelrate für die Struktur mit dem gaußförmigen (a) bzw. dem  $n^+n^-p$ -ähnlichen (b) seitlichen Abfall der Dotierkonzentration

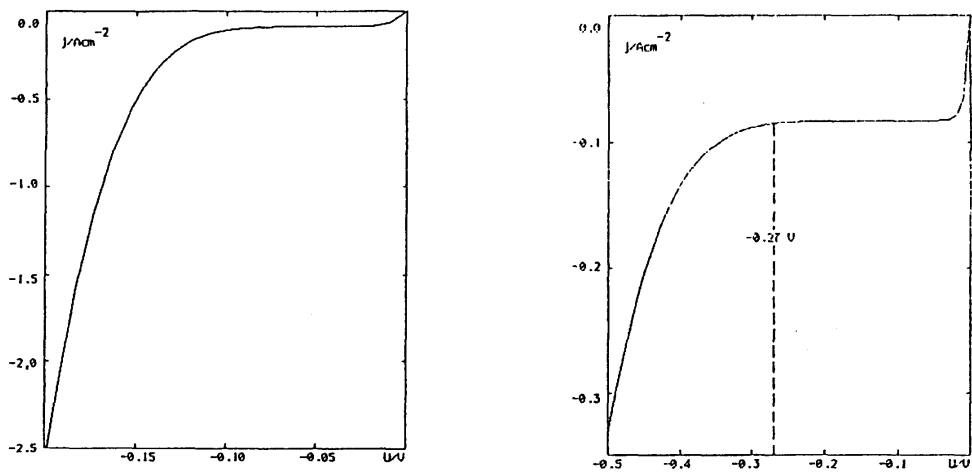


Figure 8: Kennlinien der Struktur mit dem gaußförmigen (a) bzw. dem  $n^+n^-p$ -ähnlichen (b) seitlichen Abfall der Dotierkonzentration

## References

- [1] E.O. Kane: J. Phys. Chem. Sol., 12 (1959), 181.
- [2] J.L. Moll: Physics of Semiconductors, New York, 1964.
- [3] M. Stahl: Diplomarbeit, Berlin, 1988.
- [4] M. Stahl: Dissertation, Berlin, 1991.
- [5] L.O. Bubulac et al.: J. Vac. Sci. Technol. A, 5 (1987) 5, 3166.

## Numerische Simulation von DFB-Lasern

U. BANDELOW

*Institut für Optik und Spektroskopie, Fachbereich Physik der Humboldt-Universität zu Berlin,  
Invalidenstr. 110, O-1040 Berlin, Germany*

### Abstract

DFB-Laser enthalten ein Bragg-Gitter, d.h. eine periodische Änderung des komplexen Brechungsindex in Ausbreitungsrichtung des Lichtes. Zur Beschreibung der Lichtausbreitung werden die coupled-mode-Gleichungen verwendet. Diese stellen ein gewöhnliches Randwertproblem dar, aus dem eine Eigenwertgleichung folgt. Deren Lösung führt zur Fixierung von Wellenlängen und Gains der Lasermoden. Die numerische Lösung der Eigenwertgleichung wird diskutiert, die Abhängigkeit der Eigenwerte, Wellenlängen und Gains von der Bragg-Kopplung grafisch dargestellt.

Dieses Modell longitudinaler Effekte wurde mit einer numerischen 2D-Lösung der gekoppelten Ladungstransport- und Wellenleitungsgleichungen zu einem Gesamtmodell verbunden. Als Anwendungsbeispiel wird der Einfluß der Wellenlängenabhängigkeit von Gain und Brechungsindex auf die Device-Funktion demonstriert.

## 1. Einleitung

DFB-Laser sind HL-Laserdioden, die in Ausbreitungsrichtung des Lichtes (= z-Richtung) eine periodische Störung der Periode  $\Lambda$  im komplexen Brechungsindex bzw. der Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon$  enthalten, wie in der folgenden Abbildung gezeigt wird.

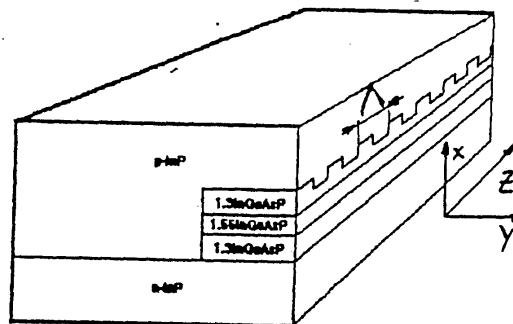


Figure 1: Schematischer Querschnitt durch eine DFB-HL-Laserdiode

Da  $\Lambda$  typisch bei  $200\text{nm}$  liegt, werden zur Herstellung solcher Bragg-Gitter holografische bzw. Elektronenstrahlmethoden angewendet.

Zur theoretischen Behandlung ist es instruktiv, die Fälle der alleinigen Störung von  $Re(\varepsilon)$  (=“Indexgitter”) bzw. dessen Imaginärteils (=“Gaingitter”) getrennt zu untersuchen.

Die physikalische Grundvorstellung ist so, daß eine in z-Richtung laufende Welle am Gitter teilweise zurückgestreut wird und Interferenz einsetzt. Deren Wirkung hängt nun entscheidend von der Frequenz der Welle ab. Die Interferenz wird konstruktiv sein, wenn die aus der Physik wohlbekannte Bragg-Bedingung (hier in erster Ordnung):

$$Re(\beta) = \frac{\pi}{\Lambda} \quad (1.1)$$

für die longitudinale Ausbreitungskonstante  $\beta$  erfüllt ist, sonst destruktiv. Das bedeutet, daß Wellen, die (1.1) annähernd erfüllen, durch das Gitter unterstützt werden. Davon verspricht man sich eine Fixierung von  $\beta$  und damit letztendlich eine Fixierung der Wellenlänge, eine in der optischen Kommunikationstechnik gefragte Eigenschaft.

## 2. Coupled-Mode (CM)-Gleichungen

Nach Abseparation der Zeit genügt der räumliche Anteil des elektrischen Feldes einer komplexen, stationären Wellenleitungsgleichung. Unter der Annahme, daß die periodische Störung  $\Delta\varepsilon$  hinreichend schwach ist, kann man diesen räumlichen Anteil des elektrischen Feldes adiabatisch in einen transversalen (d.h. x,y-abhängigen) und einen z-abhängigen Teil mit Hilfe des Ansatzes

$$E(z) = \vec{e}\Phi(x, y)[A(z)e^{i\frac{\pi}{\Lambda}z} + B(z)e^{-i\frac{\pi}{\Lambda}z}] \quad (2.1)$$

( $\vec{e}$  = Einheitsvektor in Feldrichtung) separieren. Der transversale Teil wird unabhängig vom abgespaltenen z-abhängigen gewöhnlichen Randwertproblem gelöst. Unter der Annahme, daß (1.1) annähernd gilt, gelten für die schwach variierenden Amplituden  $A(z)$ ,  $B(z)$  näherungsweise die Coupled-Mode (CM)-Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial z} A(z) = i(\beta - \frac{\pi}{\Lambda})A(z) + i\kappa B(z) \quad (2.2)$$

$$-\frac{\partial}{\partial z} B(z) = i(\beta - \frac{\pi}{\Lambda})B(z) + i\kappa A(z) \quad (2.3)$$

Die auftretende Kopplungskonstante  $\kappa$  hat die Gestalt

$$\kappa = \frac{k_0^2 \int_0^\infty \int_0^\infty dx dy \int_0^\Lambda dz [\Delta\varepsilon(x, y, z) e^{i\frac{2\pi z}{\Lambda}}] \Phi^2(x, y)}{2\beta \int_0^\infty \int_0^\infty dx dy \Phi^2(x, y)} \quad (2.4)$$

( $k_0 = \frac{\omega}{c}$ ) Sie ist beim Indexgitter reell, beim Gaingitter imaginär. vgl. [1]. Zusammen mit den Randbedingungen

$$A(z = -\frac{L}{2}) = r_0 B(z = -\frac{L}{2}) \quad (2.5)$$

$$B(z = \frac{L}{2}) = r_l A(z = \frac{L}{2}) \quad (2.6)$$

die sich aus der Rückkopplung an den Laserenden ergeben, liegt nun ein korrekt gestelltes, zu lösendes Randwertproblem vor. Wegen einiger Besonderheiten bei der Lösung empfiehlt es sich, den Fall konstanter Koeffizienten zu betrachten, um später mit dieser Kenntnis den weitaus komplizierteren Fall nichtkonstanter Koeffizienten erklären zu können.

Die komplexen Amplitudenreflektivitäten  $r_0, r_l$  sowie  $\kappa L$  werden als unabhängige Parameter betrachtet.

### 3. Lösung der CM-Gleichungen

Die CM-Gleichungen stellen ein homogenes, lineares, gekoppeltes DGL-System erster Ordnung dar, für das der dafür übliche Ansatz

$$A(z) = a_+ e^{i\gamma z} + a_- e^{-i\gamma z} \quad (3.1)$$

$$B(z) = b_+ e^{i\gamma z} + b_- e^{-i\gamma z} \quad (3.2)$$

gemacht und in die CM-Gleichungen eingesetzt wird. Das liefert zwei homogene Gleichungssysteme in  $a_+, b_+$  bzw.  $a_-, b_-$ , da die Koeffizienten für jeden der beiden Exponenten verschwinden müssen. Für die jeweils verbleibenden Koeffizienten existieren nichttriviale Lösungen bei Verschwinden der Systemdeterminanten, was in beiden Fällen zu der folgenden Dispersionsrelation führt:

$$\gamma^2 - \left(\beta - \frac{\pi}{\Lambda}\right)^2 + \kappa^2 = 0 \quad (3.3)$$

Es ergeben sich außerdem die Zusammenhänge

$$b_+ = r a_+ \quad (3.4)$$

und

$$a_- = r b_- \quad (3.5)$$

über die Bragg-Reflexionskoeffizienten  $r$ , die die Gestalt

$$r = \frac{\gamma - \left(\beta - \frac{\pi}{\Lambda}\right)}{\kappa} = \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 + \kappa^2}}{\kappa} \quad (3.6)$$

haben. Bei der Wahl des Wurzelzweiges hat man aus physikalischen Gründen zu fordern, daß

$$\lim_{|\kappa| \rightarrow 0} |r| = 0 \quad (3.7)$$

gilt, da die Bragg-Reflexion bei fehlender Kopplung verschwinden muß. Der mit  $r$  modifizierte Ansatz wird nun in die RB eingesetzt, was wiederum ein homogenes Gleichungssystem in  $a, b$  liefert. Nichttriviale Lösungen  $a, b$  sind bei Erfüllen der Eigenwertgleichung

$$\frac{[r - r_l][r - r_0]}{[1 - r r_l][1 - r r_0]} e^{2i\gamma L} = 1 \quad (3.8)$$

möglich, die die Laserbedingung für DFB-Laser darstellt. Im Grenzfall verschwindender Kopplung ( $|\kappa| \rightarrow 0$ ) vereinfacht sich die Eigenwertgleichung zu

$$r_0 r_l e^{2i\gamma L} = 1 \quad (3.9)$$

was als Fabry-Perot-Bedingung bezeichnet wird, und der Grenzfall reiner innerer Rückkopplung durch das Braggitter ( $r_0; r_l \rightarrow 0$ ) liefert

$$r^2 e^{2i\gamma L} = 1 \quad (3.10)$$

also eine Laserbedingung, die nur dem Gitter geschuldet ist. Die Lösung des jeweils aktuellen Falls von (3.8) liefert ein Spektrum komplexer Eigenwerte  $\gamma$ , die jeweiligen Longitudinalmoden entsprechen. Die komplexen modalen Ausbreitungskonstanten  $\beta$ , die gleichzeitig gemeinsame Separationskonstanten mit dem transversalen Problem darstellen, erhält man nun mit Hilfe von (3.3) zu

$$\operatorname{Re}(\beta) = \delta + \frac{\pi}{\Lambda} \quad (3.11)$$

$$\operatorname{Im}(\beta) = -g_{\text{ampl}} \quad (3.12)$$

wobei  $g_{\text{ampl}}$  die modalen Amplitudenverluste durch das Gitter darstellen.

#### 4. Resultate

Die Diskussion soll sich auf ein Gaingitter ohne äußere Reflektivitäten beziehen. Gaingitter sind in der Literatur wegen ihrer schweren Herstellbarkeit kaum untersucht worden, finden aber zunehmendes Interesse. Eine Behandlung findet man z.B. bei [2]. Die Eigenwerte in Abhängigkeit von der Kopplung sind in Abb.2 gezeigt.

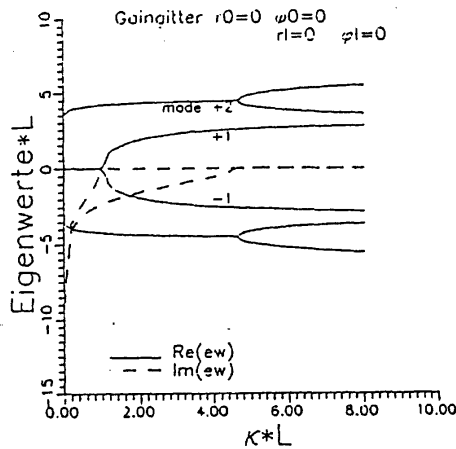


Figure 2: Eigenwerte in Abhängigkeit von der Kopplung

Das longitudinale Modenspacing beträgt wie beim Fabry-Perot-Laser  $\frac{\pi}{L}$ . Es existiert im Unterschied zum Indexgitter eine Braggmode mit entweder reellem oder imaginärem  $\gamma$ . Für wachsende  $\kappa$  fallen die Imaginärteile der  $(\gamma)$  monoton ab, um ab den kritischen Punkten  $\kappa L = (k + 0,5)\pi$  (bzw. 1) schließlich zu verschwinden. Ab dort erfahren die Moden keine Dämpfung mehr durch das Gitter und breiten sich genau mit der Braggfrequenz aus, wie die Abbildung 3 bei  $\delta = 0$  ausweist. Die Realteile spalten in physikalische und unphysikalische Zweige auf.

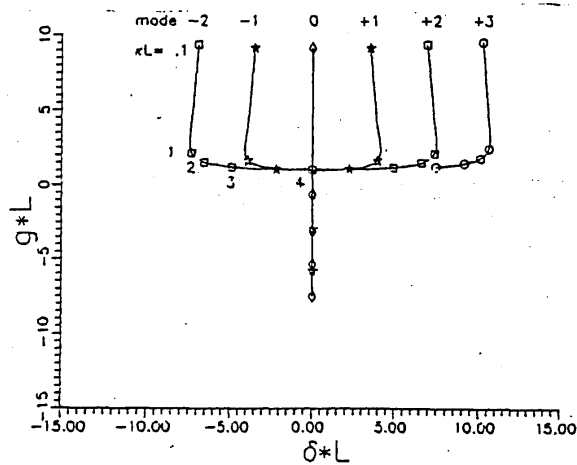


Figure 3: modale Verluste in Abhängigkeit von  $\delta$

Die negativen Verluste ( $g < 0$ ) in Abb.3, die in der Natur nicht auftreten, sind dem Fehler geschuldet, daß man  $\kappa$  als unabhängigen Parameter behandelt und nicht die Änderung der mittleren Verluste bei der Verstärkung der Kopplung durch Einbau von Verlusten in das Gitter berücksichtigt. Erwartungsgemäß überwiegt das Fabry-Perot-Verhalten (alle Moden haben dieselben Verluste) bei endlichen Reflektivitäten und kleinen Kopplungen, wie Abb.4 zeigt.

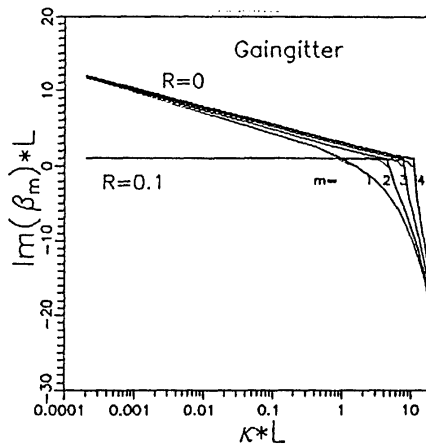


Figure 4: Verluste in Abhängigkeit von  $\kappa$

In der Nähe der kritischen Kopplungen setzt sich dann das Gitter durch, wegen der starken inneren Rückkopplung wird die Rückstreuung an den Enden unwesentlich. Die Abb.5 stellt 100 Longitudinalmoden eines indexgekoppelten DFB-Lasers in der komplexen  $\beta$ -Ebene dar, bei dem typischerweise keine einzelne Braggmode, sondern zwei der Braggfrequenz benachbarte Gittermoden existieren. Man sieht an den Verlusten ( $Im(\beta)$ ) deutlich, daß wenige Moden in der Umgebung der Braggmode vom Gitter unterstützt werden, die übrigen verhalten sich wie Fabry-Perot-Moden. An dieser Stelle wird deutlich, daß in der transversalen Rechnung unbedingt die spektralen Eigenschaften des Gains berücksichtigt werden müssen.

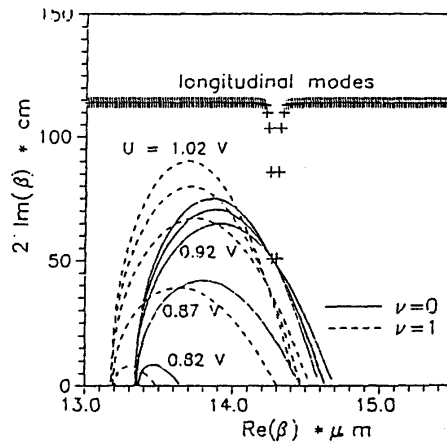


Figure 5: Longitudinalmoden eines Indexgitters mit transversalen  $\beta$

Die Schnittpunkte in Abb.6, die stationären Moden entsprechen, liegen nicht bei den Maxima der Gainparabeln, wie beim Fabry-Perot Laser. Man kann außerdem aus der Tatsache, daß eine Transversalmode einen höheren optischen Gewinn erfährt, nicht mehr schlußfolgern, daß diese schwingt. Das muß zusätzlich numerisch überprüft werden und stellt ein zusätzliches Erfordernis bei der Simulation von DFB-Lasern dar.

## References

- [1] G. P. Agrawal, N. K. Dutta: *Long wavelength semiconductor Laser*. van Nostrand Reinhold, New York, Kap. 7 (1980).
- [2] H. Kogelnik, C. V. Shank: *Coupled-Wave Theory of Distributed Feedback Lasers*. Journal of Appl. Phys., Vol.43, No.5, pp. 2327 (1972).

## Modellierung von Quantum-Well Lasern

H. WENZEL

*Humboldt-Universität zu Berlin, Forschungsbereich Physik, Institut für Optik und Spektroskopie,  
Invalidenstr. 110, O-1040 Berlin, Germany*

### Abstract

Die aktive Schicht von modernen Halbleiterlasern besteht in der Regel aus einem oder mehreren sogenannter "Quantum Wells". Innerhalb einer solchen Schicht versagen die klassischen Drift-Diffusions-Gleichungen. Deshalb ist die numerische Simulation dieser Bauelemente derzeit noch mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden. Mit Hilfe eines vereinfachten Modells für Halbleiterlaser wird dargestellt, wie man die Besonderheiten einer Quantum-Well Struktur näherungsweise berücksichtigen kann. Anhand von Beispielen wird gezeigt, welchen Einfluß Quantum-Well Parameter auf den Schwellenstrom und die Leistungs-Strom-Kennlinie oberhalb der Laserschwelle haben.

## Modeling of non-equilibrium processes by Fokker-Planck Equations

H. STEPHAN

*Karl-Weierstrass-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39, O-1086 Berlin, Germany*

### Abstract

The transport theory of particles in random media distinguishes at least two cases. In processes like Brownian Motion a particle get energy from the medium by thermal interaction and lose energy by friction. So, for large times there is an equilibrium between these two energy transfers and thus a particle leaves any finite domain. In other processes, like ion implantation, a highly energetic particle penetrates into a target, loses all energy, comes to rest and is localized near the surface of the target. Such processes can be modeled by Fokker-Planck Equations (FPE) with the variables  $v$  (velocity) and  $x$  (space coordinate) and degenerate coefficients. The inverse problem, i.e. to find the coefficients of the equation if the stationary solution for fixed initial conditions is given, can be solved analytically.

**Key words:** macroscopic modeling, degenerate Fokker-Planck Equations, inverse problem, ion implantation

## 1. Differential Chapman-Kolmogorov Equation

For deriving a transport equation, which describes the movement of particles in a random medium, we can make in the simplest case the following assumptions:



- 1) We have classical particles which move in a given homogeneous random medium. That means the state of one particle is defined by its velocity and its space coordinate (the state space is  $\mathbb{R}^6$ ) and varies corresponding to the equations of motion  $\dot{\vec{v}}(t) = F(\vec{v}(t))$  and  $\dot{\vec{x}}(t) = \vec{v}(t)$ , where  $F$  is a stochastic force which describes the interaction between the (homogeneous) medium and the particle.
- 2) The particles move independently of each other. That is, the state of all particles can be described by an one-particle probability density  $W(\vec{v}, \vec{x}, t)$  with the properties  $W(\vec{v}, \vec{x}, t) \geq 0$  and  $\int_{\mathbb{R}^6} W(\vec{v}, \vec{x}, t) d\vec{v} d\vec{x} \equiv 1$
- 3) The particle as well as the medium do not have a memory, that is, the stochastic process  $(\vec{v}(t), \vec{x}(t))$  is a Markov process. There exists a conditional probability density  $\omega(\vec{v}, \vec{x} | \vec{v}', \vec{x}'; t)$  which is connected with  $W$  by

$$W(\vec{v}, \vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^6} \omega(\vec{v}, \vec{x} | \vec{v}', \vec{x}'; t) W_0(\vec{v}', \vec{x}') d\vec{v}' d\vec{x}'$$

where  $W_0$  is the initial density and satisfies

$$\omega(\vec{v}, \vec{x} | \vec{v}'', \vec{x}''; s+t) = \int_{\mathbb{R}^6} \omega(\vec{v}, \vec{x} | \vec{v}', \vec{x}'; s) \omega(\vec{v}', \vec{x}' | \vec{v}'', \vec{x}''; t) d\vec{v}' d\vec{x}'$$

It can be shown [2] that under these assumptions the probability density satisfies the following, so-called Differential Chapman-Kolmogorov Equation (with  $v^{(i)}$  and  $x^{(i)}$  as components of  $\vec{v}$  and  $\vec{x}$ ).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W(\vec{v}, \vec{x}, t) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial v^{(i)}} \left( a_i(\vec{v}) W(\vec{v}, \vec{x}, t) \right) + \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial v^{(i)} \partial v^{(j)}} \left( b_{ij}(\vec{v}) W(\vec{v}, \vec{x}, t) \right) + \\ &+ \text{p.v.} \int_{\mathbb{R}^6} \left( Q(\vec{v} | \vec{v}') W(\vec{v}', \vec{x}', t) - Q(\vec{v}' | \vec{v}) W(\vec{v}, \vec{x}, t) \right) d\vec{v}' d\vec{x}' - \sum_{i=1}^3 v_i \frac{\partial}{\partial x^{(i)}} W(\vec{v}, \vec{x}, t) \end{aligned} \quad (1.1)$$

$a_i(\vec{v})$ ,  $b_{ij}(\vec{v})$  and  $Q(\vec{v} | \vec{v}')$  are called drift-, diffusion- and jump-coefficients, respectively. It is possible to calculate these coefficients, if the conditional probability density  $\omega$  is given for small times ( $\forall \varepsilon > 0$ ):

$$\forall |\vec{v}' - \vec{v}| \neq 0 : Q(\vec{v} | \vec{v}') = \lim_{t \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{t} \omega(\vec{v}', \vec{x}' | \vec{v}, \vec{x}; t) \right]$$

$$a_i(\vec{v}) = - \lim_{t \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{t} \int_{|\vec{v}' - \vec{v}| < \varepsilon} \int_{|\vec{x}' - \vec{x}| < \varepsilon} (\vec{v}'^{(i)} - \vec{v}^{(i)}) \omega(\vec{v}', \vec{x}' | \vec{v}, \vec{x}; t) d\vec{v}' d\vec{x}' \right]$$

$$b_{ij}(\vec{v}) = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{t} \int_{|\vec{v}' - \vec{v}| < \varepsilon} \int_{|\vec{x}' - \vec{x}| < \varepsilon} (\vec{v}'^{(i)} - \vec{v}^{(i)}) (\vec{v}'^{(j)} - \vec{v}^{(j)}) \omega(\vec{v}', \vec{x}' | \vec{v}, \vec{x}; t) d\vec{v}' d\vec{x}' \right]$$

The normal, microscopic way to get the coefficients uses these formulas. In this case, we have to estimate the conditional probability density  $\omega(\vec{v}, \vec{x} | \vec{v}', \vec{x}'; t)$  for small times  $t$  by taking into account the physical background of the problem like interaction potentials and scattering cross-sections. The conditional probability density  $\omega$ , however, has to satisfy equation (1.1) as well

(it is the fundamental solution) and thus this way really means to estimate only the solution for small times. This way is less successful, if we are interested in the solution for large times. An other way is to get the coefficients only by using macroscopic properties of the problem without knowing any microscopic interactions. In this case, we can fix a-priori some coefficients getting an equation which describes a somewhat approximated problem. This means, instead of using  $(a, b, Q)$  motivated by microscopic considerations, we regard arbitrary  $(\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{Q} \equiv 0)$  with the intension to get them from the macroscopic behaviour of the solution. That's why we take  $Q \equiv 0$  to simplify equation (1.1). Then, it is an ultraparabolical equation and is called Fokker-Planck Equation.

## 2. Formulation of the Problem

For simplification the following formulas and equations are written in the one-dimensional case ( $v \in [0, \infty)$ ,  $x \in (-\infty, \infty)$ ). Most of the results can be easily transferred to the multi-dimensional case. So we have the following equation (with natural boundary conditions):

$$\frac{\partial}{\partial t} W(v, x, t) = \frac{\partial}{\partial v} (a(v)W) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} (b(v)W) - v \frac{\partial}{\partial x} W, \quad (2.1)$$

and the initial probability density  $W(v, x, 0) = W_0(v, x)$ . To classify the motion of a particle it is useful to take into account its kinetic energy  $E(t) = \frac{1}{2}|v(t)|^2$ . Let  $E_0$  be the initial energy,  $E_+(E)$  the energy gain and  $E_-(E)$  the energy loss of the particle, assuming that the energy transfer between the medium and the particle depends only on the current energy of the particle. In this case we get  $E(t) = E_0 + \int_0^t (E_+(E(t')) - E_-(E(t'))) dt'$ . We can distinguish several cases of interactions depending on the relation between  $E_+$  and  $E_-$ . For the qualitative behaviour of  $W(v, x, t)$  for large times we get:

- 1)  $E_+ \gg E_-$  ,  $W(v, x, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0 \cdot 0$
- 2)  $E_+ \approx E_-$  ,  $W(v, x, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} V(v) \cdot 0$
- 3)  $0 \approx E_+ \ll E_-$  ,  $W(v, x, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \delta(v) \cdot c(x)$

In the first case the velocity becomes higher and higher and a particle leaves any finite domain. In the second case — the equilibrium case, as Brownian motion — we get a stationary probability density of the velocity for large times and a particle leaves any finite domain, too. The third case is the non-equilibrium case. A particle loses all its energy and for large times the velocity becomes equal to zero with certainty and we get a stationary probability density in real space. This case is considered in the following in more detail. We can define: non-equilibrium case  $\stackrel{\text{def}}{\iff} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{v_0}^{\infty} W(v, x, t) dv = 0, \forall v_0 > 0$ . We consider the following problems:

- 1) For which coefficients  $a(v)$  and  $b(v)$  equation (2.1) describes a non-equilibrium case?
- 2) In many cases only the probability density in the real space — the concentration of the particles — is of interest, especially for  $t = \infty$ . Is it possible to separate the concentration  $c(x, t) = \int_0^{\infty} W(v, x, t) dv$  or the stationary solution  $c^*(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} c(x, t)$  from  $W$  without solving equation (2.1) ?
- 3) How to calculate  $a(v)$  and  $b(v)$  if we know properties of the solution  $W$ ?

## 3. Results

Because of physical considerations it is reasonable to set  $a(v) \geq 0$  (friction only diminishes the velocity) and  $b(v) \geq 0$  and to demand  $a(v)$  and  $b(v)$  bounded near  $v = 0$ . In this case it is

necessary for the non-equilibrium case to satisfy (c.f [3]):

$$\int_{v_0}^{\infty} \frac{dv}{B(v)b(v)} < \infty, \quad \int_0^{v_0} \frac{dv}{B(v)b(v)} = \infty, \quad \forall v_0 > 0$$

where

$$B(v) = \exp \left( \int_{v_0}^v \frac{a(v')}{b(v')} dv' \right)$$

It is possible that in a non-equilibrium case  $c^*(x) \equiv 0$ , i.e. for  $t \rightarrow \infty$  the velocity vanishes, the particle, however, leaves any finite domain. A necessary and sufficient condition for  $c^*(x) \neq 0$  is (c.f. [4])

$$\int_0^{v_0} B(v) \left( \int_v^{\infty} \frac{v'}{B(v')b(v')} dv' \right) dv < \infty, \quad \forall v_0 < \infty$$

These conditions lead to  $b(0) = 0$ , i.e. equation (2.1) does not contain any strong elliptical part. The problem in separating  $c^*(x)$  is that the probability density of the velocity for  $t \rightarrow \infty$  is  $\delta(v)$ , i.e. the corresponding stationary equation has no regular solution. It would be better to have  $\delta(v) \cdot \infty$ . Thus we consider another problem:

$$\frac{\partial}{\partial t} \widetilde{W}(v, x, t) = \frac{\partial}{\partial v} \left( a(v) \widetilde{W} \right) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left( b(v) \widetilde{W} \right) - v \frac{\partial}{\partial x} \widetilde{W} + W_0(v, x), \quad \widetilde{W}(v, x, 0) = 0$$

In this equation the initial density acts all the time as a source. Now the corresponding stationary equation has a regular (for  $v \neq 0$ ) solution  $\widetilde{W}^*(v, x)$  and we get

$$c^*(x) = \frac{1}{B(v)} \frac{\partial}{\partial v} \left( B(v)b(v) \widetilde{W}^* \right) \Big|_{v=+0}$$

If the coefficients  $a$  and  $b$  depend on  $v$  and  $x$  this formula is correct, too. In the homogeneous case there is a second way to separate  $c^*(x)$  and  $c(x, t)$ . Let  $\omega(v, x|v_0, x_0; t)$  be the conditional probability density, i.e. the fundamental solution of equation (2.1) as a function of the first pair of variables. It is well known that  $\omega$  is also the fundamental solution of the so-called backward-equation as a function of the second pair of variables.

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(v, x|v_0, x_0; t) = -a(v_0) \frac{\partial}{\partial v_0} \omega + b(v_0) \frac{\partial^2}{\partial v_0^2} \omega + v_0 \frac{\partial}{\partial x_0} \omega$$

For a homogeneous medium (if the coefficients do not depend on  $x$ ) the function  $\omega$  is a function only of  $x - x_0$ . Thus the function  $\tilde{\omega}(v|v_0, x; t)$  with  $\tilde{\omega}(v|v_0, x - x_0; t) = \omega(v, x|v_0, x_0; t)$  is a solution of the equation

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\omega}(v|v_0, x; t) = -a(v_0) \frac{\partial}{\partial v_0} \tilde{\omega} + b(v_0) \frac{\partial^2}{\partial v_0^2} \tilde{\omega} - v_0 \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\omega}$$

Because  $v$  is only a parameter, we can integrate and so  $u(x, v_0, t) = \int_0^{\infty} \tilde{\omega}(v|v_0, x; t) dv$  is solution of the same equation.  $u$  equals the concentration  $c(x, t)$  for fixed initial velocity  $v_0$ :

$$u(x, v_0, t) = c(x, t) \Big|_{\int_0^{\infty} W_0(v, x) dv = \delta(v - v_0)}$$

For  $W_0(v, x) = V(v) \cdot c_0(x)$  we can calculate  $c(x, t)$  in the following way:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, v_0, t) = -a(v_0) \frac{\partial}{\partial v_0} u + b(v_0) \frac{\partial^2}{\partial v_0^2} u - v_0 \frac{\partial}{\partial x} u$$

with the initial and boundary conditions

$$u(x, v_0, 0) = c_0(x) \cdot \delta(v - v_0), u(x, 0, t) = c_0(x)$$

$$\frac{1}{B(v_0)} \frac{\partial}{\partial v_0} u(x; v_0) \Big|_{v_0=\infty} = 0, \quad u(\pm\infty, v_0, t) = 0$$

We get the concentration  $c(x, t) = \int_0^\infty u(x, v_0, t) V(v_0) dv_0$ . The stationary solution  $u^*(x, v_0)$  is the solution of the equation

$$0 = -a(v_0) \frac{\partial}{\partial v_0} u^*(x, v_0) + b(v_0) \frac{\partial^2}{\partial v_0^2} u^*(x, v_0) - v_0 \frac{\partial}{\partial x} u^*(x, v_0) \quad (3.1)$$

and  $c^*(x) = \int_0^\infty u^*(x, v_0, t) V(v_0) dv_0$ .

The last equation shows us how to get the coefficients. In practice — for instance in case of ion implantation — the final concentration  $c^*(x)$  for any given initial velocity is the only property of the solution which can be determined experimentally. So it is naturally to ask, how to get  $a(v), b(v)$ , if  $u(x, v_0)$  is given. It is clear that any given  $u$  contains too much information to calculate  $a$  and  $b$ . Therefore we approximate  $u$  by means of its moments  $E_k(v_0) = \int_{\mathbb{R}} x^k u(x, v_0) dx$  and get from equation (3.1):

$$0 = -a(v_0) E'_k(v_0) + b(v_0) E''_k(v_0) + k v_0 E_{k-1}(v_0), \quad k = 1, 2 \quad (3.2)$$

a system of algebraic equations. It is easy to solve it:

$$a(v) = v \frac{E''_2(v) - 2E_1(v)E''_1(v)}{E'_1(v)E'_2(v) - E'_2(v)E'_1(v)}, \quad b(v) = v \frac{E'_2(v) - 2E_1(v)E'_1(v)}{E'_1(v)E'_2(v) - E'_2(v)E'_1(v)}$$

If we take these coefficients to get a solution  $W$  of equation (2.1), than the  $t \rightarrow \infty$  limit approximates the first two moments of any given  $c^*(x)$ .

In the one-dimensional and homogeneous case the system (3.2) is solvable if  $a$  and  $b$  are given ( $E_0(v_0) \equiv 1$ ):

$$E_k(v_0) = k \int_0^{v_0} B(v) \left( \int_v^\infty \frac{v'}{B(v')b(v')} E_{k-1}(v') dv' \right) dv, \quad k \geq 1$$

#### 4. Generalization

If an approximation by two moments is insufficient, we can consider a full Fokker-Planck equation:

$$\frac{\partial}{\partial t} W = \frac{\partial}{\partial v} (a(v)W) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} (b(v)W) + \frac{\partial^2}{\partial v \partial x} (c(v)W) - d(v) \frac{\partial}{\partial x} W + e(v) \frac{\partial^2}{\partial x^2} W$$

In this case we get a system of four equations for the moments ( $k = 1, \dots, 4$ ):

$$a(v_0) E'_k(v_0) = b(v_0) E''_k(v_0) + k c(v_0) E'_{k-1}(v_0) + k d(v_0) E_{k-1}(v_0) + k(k-1) e(v_0) E_{k-2}(v_0)$$

to calculate five coefficients (one has to be fixed).

An exact solution of the inverse problem is possible only, if we do not set  $Q \equiv 0$ . In this case it is possible to derive a backward equation

$$v_0 \frac{\partial}{\partial x} u(x, v_0) = \int_{\mathbb{R}} [u(x, v'_0) - u(x, v_0)] Q(v'_0 | v_0) dv'_0 - a(v_0) \frac{\partial}{\partial v_0} u + b(v_0) \frac{\partial^2}{\partial v_0^2} u$$

So far it is not clear, however, which properties of  $u(x, v_0)$  are necessary, to solve this problem. In any case, it is not possible to obtain  $a, b$  and  $Q$  analytically for a given  $u$ .

## References

- [1] H. Stephan: *Ionenimplantation und Fokker-Planck-Gleichungen*. Tagungsband des VI. Symposiums "Physikalische Grundlagen zu Bauelementetechnologien der Mikroelektronik". Frankfurt(Oder), Sept. 1990.
- [2] C. W. Gardiner: *Handbook of statistical methods. Springer Series in Synergetics*. Volume 13. Second Edition. 1985
- [3] W. Feller: *The parabolic differential equations and the associated semi-groups of transformations*. Annals of Mathematics. Vol.55, No.3, May, 1952.
- [4] R. Z. Khasminsky: Doklady Akad. Nauk SSSR. Vol.104, No.1, p.22.(Russian)

## Ein Versuch zur allgemeinen Behandlung der Festkörperoberfläche bezüglich der Dotantendiffusion

W. RÖPKE

Halbleiterwerk GmbH, O-1200 Frankfurt/Oder, Germany

### Abstract

Die bei der Behandlung der Epitaxie eingeführte Randbedingung für die Festkörperoberfläche (REIF/DUTTON, WONG) stellt eine Bilanz für die Oberflächenbedeckung des betrachteten Dotanten dar. Diese Beziehung wird verallgemeinert, so daß sie für jeden Hochtemperaturprozeßschritt anwendbar ist. Sie kann sowohl als Randbedingung für die Oberflächenzelle im Festkörper benutzt als auch als neue Zellgleichung betrachtet werden. Für die Oberflächenbedeckung zu Beginn eines Prozeßschrittes werden Ausdrücke angegeben, die aus stark vereinfachenden Annahmen resultieren.

## B. Mathematische Analysis

### Various Versions of the Energy Model of hot Carrier Transport in Semiconductor devices

G. ALBINUS

Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin, Germany

#### Abstract

Besides the generally accepted system of equations of the energy or quasi-hydrodynamic model for the hot carrier transport in semiconductor devices two other equivalent systems of equations are introduced. One of them arises by substituting the energy balance equation by the entropy balance equation, the other results from diagonalizing the leading part of the system of balance equations under fairly general assumptions.

The energy model or the quasi-hydrodynamical model is one of the phenomenological models which allow the simulation of carrier transport in semiconductor devices. The specific assumption which distinguishes the energy model of hot carriers from other phenomenological models is that the electrons in the conductivity band and/or the holes in the valence band of a semiconductor device can be considered as a thermodynamic subsystem with its own temperature. Moreover, but for simplicity only, we assume that electrons and holes have one carrier temperature  $\Theta$  in common and that the lattice temperature is a constant parameter  $T$ . Although the paper is restricted to the Boltzmann statistics, essential parts of it can be extended analogously onto the Fermi-Dirac statistics.

We start from a widely accepted system of equations

$$-\operatorname{div}(\varepsilon \operatorname{grad} U) = f + Q(p - n),$$

$$\begin{aligned} n &= c_n \Theta^{3/2} \exp((F_n + U - E_c)/\Theta), & p &= c_p \Theta^{3/2} \exp(-(F_p + U - E_v)/\Theta), \\ \dot{n} + \operatorname{div} j_n &= -R, & \dot{p} + \operatorname{div} j_p &= -R, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{3}{2}[(n + p)\Theta] + \operatorname{div}(j_{v_n} + j_{v_p}) &= -3\Theta R - \frac{3}{2}(n\omega_n + p\omega_p)(\Theta - 1) \\ &+ j_n \operatorname{grad}(U - E_c) - j_p \operatorname{grad}(U - E_v), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} j_n &= -A_n \operatorname{grad} F_n - (B_n - (F_n + U - E_c)A_n/\Theta) \operatorname{grad} \Theta, \\ j_p &= +A_p \operatorname{grad} F_p - (B_p - (F_p + U - E_v)A_p/\Theta) \operatorname{grad} \Theta, \\ j_{v_n} &= -\Theta B_n \operatorname{grad} F_n - \Theta(C_n - (F_n + U - E_c)B_n/\Theta) \operatorname{grad} \Theta, \\ j_{v_p} &= \Theta B_p \operatorname{grad} F_p - \Theta(C_p + (F_p + U - E_v)B_p/\Theta) \operatorname{grad} \Theta, \end{aligned} \tag{0.1}$$

which models the transport of hot carriers in semiconductor devices (cf. [1], [2], [5], [7], [8]). Therein  $U$ ,  $F_n$  and  $F_p$  denote the scaled electrostatic potential and the electrochemical potentials of electrons and holes, respectively. The scalars  $\varepsilon > 0$ ,  $c_n > 0$ ,  $c_p > 0$ ,  $E_c$ ,  $E_v$  and the doping profile  $f$  are given functions of the coordinates ( $Q = q^2/kT > 0$  is a constant). The netto recombination rate  $R$  is described as usually by Shockley-Read-Hall and Auger terms. The other coefficients  $\omega_n$ ,  $\omega_p$ ,  $A_n$ ,  $A_p$ ,  $B_n$ ,  $B_p$ ,  $C_n$  and  $C_p$  are considered as given material functions which may explicitly depend on the coordinates and which depend on the state variables in general. Such coefficients can be obtained either experimentally or by modelling scattering integrals in the Boltzmann equation for the distribution functions of electrons and holes.

For momentum relaxation times which depend on a power  $\beta$  of the kinetic energy of carriers (e.g.  $\beta = -1/2$ ), one obtains

$$A_n = \mu_n \Theta^\beta n, \quad B_n = (5/2 + \beta)A_n, \quad C_n = (7/2 + \beta)B_n$$

with a material function  $\mu_n > 0$ . Unfortunately, such special momentum relaxation times are not general enough. For a better numerical simulation it will be necessary to describe properties of the coefficients more exactly. Besides measurements more qualitative descriptions are desirable. Under rather general assumptions the coefficients  $A_n$ ,  $B_n$ ,  $C_n$  depend on  $\Theta$  and on the state variable  $z_n := (F_n + U - E_c)/\Theta$ . Meanwhile  $A_n$ ,  $B_n$ ,  $C_n$  and  $D_n := C_n - B_n^2/A_n$  depend rather strongly on  $\Theta$ , these functions are expected to vary rather mildly with  $z_n$  and the quotients  $Q_n := B_n/A_n$ ,  $C_n/B_n$  are expected to depend rather weakly on the temperature too. Furthermore, the coefficients should have positive values only.

Of course, the above system of partial differential equations is to be supplemented by boundary conditions. Up to now we divide the boundary  $\partial\Omega$  of the domain  $\Omega$  in two parts  $\Gamma_D$  and  $\Gamma$ . On  $\Gamma_D$  Dirichlet data are given, but on  $\Gamma$  we choose some natural boundary conditions which include the normal derivatives  $\partial_\nu U$ ,  $\partial_\nu \Theta$  and the normal components  $\nu j_n$ ,  $\nu j_p$  etc. of current densities and which admit boundary conditions of the third kind too. If one looks for thermodynamic potentials which might be applicable as Ljapunov functions for the evolution equations or in controlling the step width in numerical simulation (cf. [3], [4]) the so-called thermodynamic potential

$$g_n + g_p = -c_n \Theta^{5/2} \exp z_n - c_p \Theta^{5/2} \exp z_p =: g(F_n, F_p, \Theta; U)$$

( $z_p = -(F_p + U - E_v)/\Theta$ ) of the two-component carrier gas in exterior potentials  $E_c - U$  or  $-E_v + U$ , respectively, is a good candidate, since the  $3 \times 3$  matrix of the second order partial derivatives is definite, meanwhile the free energy as a function of  $n$ ,  $p$ ,  $\Theta$  does not have this property. The conjugate variables of  $F_n$ ,  $F_p$  and  $\Theta$  with respect to this potential are the densities  $n$ ,  $p$  and the entropy density of the two-component carrier gas. Thus we are lead to an equivalent system of equations

$$\begin{bmatrix} \dot{n} \\ \dot{p} \\ \dot{s} \end{bmatrix} + \operatorname{div} \begin{bmatrix} j_n \\ j_p \\ j_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{3}{2}(n\omega_n + p\omega_p)(\Theta - 1)/\Theta \end{bmatrix} - R \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 3 - z_n - z_p \end{bmatrix} \quad (0.2)$$

$$-\frac{1}{\Theta} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \nabla F_n \cdot j_n - \nabla F_p \cdot j_p + \nabla \Theta \cdot j_s \end{bmatrix}$$

instead of the particle and energy balance equations, where

$$\begin{bmatrix} j_n \\ j_p \\ j_s \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} A_n & 0 & B_n - z_n A_n \\ 0 & A_p & B_p - z_p A_p \\ B_n - z_n A_n & B_p - z_p A_p & \frac{(B_n - z_n A_n)^2}{A_n} + \frac{(B_p - z_p A_p)^2}{A_p} + D_n + D_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla F_n \\ - \nabla F_p \\ \nabla \Theta \end{bmatrix}.$$

The terms on the right-hand side of the entropy balance equation can naturally be interpreted. The system of equations reveals the symmetry of Onsager's relations. The coefficient matrix in the system of current equations is definite such that the leading terms in the nonlinear system of equations define a nice operator from the mathematical point of view. The model describes the thermodynamic equilibrium correctly.

Under rather general integrability conditions on the coefficients of the particle current densities new state variables  $V_n$ ,  $V_p$  can be introduced such that

$$\begin{aligned} j_n &= -\kappa_n \text{grad } V_n + A_n \text{grad}(U - E_c) , \\ j_p &= -\kappa_p \text{grad } V_p + A_p \text{grad}(U - E_v) . \end{aligned} \quad (0.3)$$

Indeed, if there is a factorization

$$j_n = -\kappa_n [a_n \text{grad } F_n + (b_n - z_n a_n) \text{grad } \Theta] \quad (0.4)$$

such that the coefficients  $a_n = a_n(\Theta, z_n)$ ,  $b_n$  satisfy the integrability condition

$$\Theta \partial_1 a_n(\Theta, z) + a_n(\Theta, z) = \partial_2 b_n(\Theta, z) ,$$

then a state variable  $V_n$  is given by

$$V_n := H_n(\Theta, z_n) := \int_1^\Theta b_n(t, 0) dt + \Theta \int_0^{z_n} a_n(\Theta, z) dz .$$

The assumption is fulfilled with  $\kappa = 1$ ,  $a = A$  and  $b = B$ , if the coefficients in the current equations are obtained from the stationary Boltzmann equation with an arbitrary momentum relaxation time approximation of the scattering integrals. Substituting (0.3) in the stationary system (0.1) and combining the balance equations and the Poisson equation we obtain

$$\begin{aligned} -\text{div}(\kappa_n \nabla V_n) &= -R + \text{div}(A_n \nabla E_c) - \varepsilon \nabla(A_n/\varepsilon) \cdot \nabla U \\ &\quad + A_n(f + Qp - Qn)/\varepsilon \\ -\text{div}(\kappa_p \nabla V_p) &= -R - \text{div}(A_p \nabla E_v) + \varepsilon \nabla(A_p/\varepsilon) \cdot \nabla U \\ &\quad - A_p(f + Qp - Qn)/\varepsilon \\ -\text{div}(\Theta(D_n + D_p)\nabla\Theta) &= \Theta R(Q_n + Q_p - 3) - \frac{3}{2}(n\omega_n + p\omega_p)(\Theta - 1) \\ &\quad + j_n \cdot \nabla(U - E_c - Q_n \Theta) - j_p \cdot \nabla(U - E_v + Q_p \Theta) \\ -\text{div}(\varepsilon \nabla U) &= f + Q(p - n). \end{aligned} \quad (0.5)$$

The leading term of this system is of diagonal form, i.e. the original system of equations can be diagonalized in the highest order under rather general conditions. It should be remarked that this remains true, if the coefficients of the current equations depend explicitly on the coordinates and the factorization (0.4) also holds with functions which depend on the coordinates explicitly. Of course, then lower order terms arise additionally to those in (0.5).

The various forms of the energy model are in some sense decisively more complicated than the drift-diffusion model. The single equations are coupled by terms which contain not only the unknown functions, but its derivatives too. Furthermore, the lower order terms contain the gradients of the sought functions quadratically such that the existence of solutions is a mathematical question for which there is no ready-made answer in the theory of partial differential equations. We consider it worthwhile to study the various equivalent systems numerically as well



as from the point of view of the mathematical analysis. In the moment we are concerned with implementing the first version in close analogy to the two-dimensional semiconductor analysis package TOSCA, but I would like to hint that the second version of the model offers us quite another iteration strategy which seems to be close to the Gummel scheme.

## References

- [1] Bass, F.G., Ju. G. Gurevič: *Gorjačie Ėlektrony i sil'nye elektromagnitnye volny v plazme poluprovodnikov i gazovogo razrjada*. Moskva (1975).
- [2] Birjukova, L. Ju., V.A. Nikolaeva, V.I. Ryžij, V.N. Četveruškin: *Algoritmy kvazigidrodinamičeskoj modeli dlja rasčeta processov v elektronnoj plazme submikronnyh poluprovodnikovych struktur*. Matem. Modelirovanie 1, p. 5, 11-22 (1989).
- [3] Gajewski, H., K. Gr"oger: *Semiconductor Equations for variable Mobilities Based on BOLTZMANN Statistics or FERMI-DIRAC Statistics*. Math. Nachr. 140, pp. 7-36 (1989).
- [4] Gajewski, H., u.a.: *TOSCA Handbuch (Two-dimensional SemiConductor Analysis package)*. Berlin (1987).
- [5] Gnudi, A., F. Odeh: *An efficient discretization scheme for the energy-continuity equation in semiconductors*. In eds. G. Baccarani, M. Rudan: SISDEP, vol. 3, pp. 387-9 (Bologna 1988).
- [6] Landau, L.D., E.M. Lifschitz: *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Bd. V., Berlin (1979).
- [7] McAndrew, C.C., E.L. Heasell, K. Singhal: *A comprehensive transport model for semiconductor device simulation*. Semicond. Sci. Technol. 2 (1987) 10, 643-8 and *Modelling thermal effects in energy models of carrier transport in semiconductors*. Semicond. Sci. Technol. 3 (1988) 3, 758-765.
- [8] Wachutka, G.: *Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modelling*. In eds. G. Baccarani, M. Rudan: SISDEP, vol. 3, pp. 83-95 (Bologna 1988).

## Quantum Transport in Semiconductors: Numerical Methods

A. ARNOLD\*

Department of Mathematics, Purdue University, West Lafayette, IN 47907, USA  
and

TU-Berlin, Strasse des 17. Juni 136, D-1000 Berlin 12, Germany

### Abstract

We present two numerical methods (fractional step method and deterministic particle method) for the Quantum Vlasov equation. This model is used to simulate quantum effects in ultra-integrated semiconductor devices.

---

\*The author acknowledges support from the Austrian "Fonds zur Förderung der Wissenschaftlichen Forschung" under Grant No. P6771.

## 1. Introduction

In the last decade the simulation of semiconductor devices has become an important tool to model the performance of newly designed devices. Until now the mostly used numerical simulation software was based on the conventional drift–diffusion equations and also on (semi–)classical Boltzmann models.

Due to the increasing miniaturization of semiconductor devices, physical mechanisms (like quantum effects) become relevant, which cannot be described by (semi–)classical models. Several very small high–frequency devices (like the quantum tunneling diode and quantum wires) can therefore only be simulated by models which fully account for quantum effects. The Wigner equation gives a kinetic formulation of quantum mechanics and, from a numerical point of view, it represents the most promising approach to model quantum transport effects in semiconductors.

In this paper we present two discretization methods for the Quantum Vlasov equation, which allow to describe quantum transport effects in semiconductors.

## 2. The Quantum Vlasov Model

The Wigner (quasi)distribution function  $w = w(x, v, t)$  describes the motion of a (free) electron gas in the  $2d$ -dimensional position – velocity  $(x, v)$ -phase space under the action of the electrostatic potential  $V$ . Its time evolution is governed by the Quantum Liouville (or Wigner) equation (see [25]):

$$w_t + v \cdot \nabla_x w + \frac{q}{m} \Theta_{\hbar}[V]w = 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad v \in \mathbb{R}^d, \quad d = 1, 2 \text{ or } 3, \quad (2.1)$$

with the pseudo–differential operator

$$\begin{aligned} \Theta_{\hbar}[V]w &= i \frac{m}{\hbar} [V(x + \frac{\hbar}{2mi} \nabla_v, t) - V(x - \frac{\hbar}{2mi} \nabla_v, t)] w \\ &= \frac{m}{\hbar} \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}_\eta^d} \int_{\mathbb{R}_v^d} [V(x + \frac{\hbar}{2m} \eta, t) - V(x - \frac{\hbar}{2m} \eta, t)] \cdot \\ &\quad \cdot w(x, v', t) e^{i(v-v') \cdot \eta} dv' d\eta. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Here  $m$  and  $q$  denote the electron mass and the (positive) unit charge, respectively, and  $\hbar$  is the reduced Planck constant. In this kinetic framework the Wigner function formalism parallels the classical situation, and particle density  $n$  and the electric current  $J$  are defined by:

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}^d} w(x, v, t) dv, \quad (2.3)$$

$$J(x, t) = -q \int_{\mathbb{R}^d} v w(x, v, t) dv. \quad (2.4)$$

This similarity of the classical and quantum–mechanical frameworks conceptionally allows a numerical combination of a quantum–mechanical description in the active region of the semiconductor with a (semi–)classical model away from the active region.

In the self–consistent Quantum Vlasov model (2.1) is coupled to the Poisson equation:

$$\Delta V(x, t) = \frac{q}{\varepsilon} [n(x, t) - C(x)], \quad (2.5)$$

where  $\varepsilon$  and  $C(x)$  denote the permittivity and the doping profile of the semiconductor, respectively.

The linear Quantum Liouville equation, as well as the nonlinear Quantum Vlasov equation have been the objective of a detailed mathematical analysis in the past years. Existence and uniqueness results for classical, global in time solutions have been obtained for various, physically interesting situations ([1], [2], [3], [4], [8], [10], [11], [17], [16], [22], [23]).

In a next step of extending the above models it is desirable to incorporate electron scattering, but a physically sound and numerically tractable quantum scattering term for the Wigner formalism is not available yet. However, a relaxation time model for the Quantum Vlasov equation has been successfully employed to simulate quantum tunneling diodes ([15]). In this model the right hand side of (2.1) is replaced by  $\frac{\bar{w} - w}{\tau}$ , where  $\bar{w} = \bar{w}(x, v)$  denotes a steady state Wigner function (see [5], e.g.) and  $\tau$  the relaxation time.

### 3. Discretization

During the last few years solid state physicists have used various numerical methods to simulate quantum effects in semiconductor devices: finite difference schemes ([14], [21]), spectral collocation methods ([20]). In this section we will discuss a fractional step method and a deterministic particle method for the Wigner(-Poisson) equation.

#### 3.1 Fractional Step Method

A fractional step method for the nonlinear Quantum Vlasov system has been first implemented to study quantum effects in plasmas ([13], [24]).

For the linear Quantum Liouville equation (2.1), the method consists in splitting the transport operator  $A = -v \cdot \nabla_x$  and the pseudo-differential operator  $B = -\frac{q}{m} \Theta_{\hbar}[V]$ . Then the split evolution equations can be solved successively:

$$\begin{cases} \tilde{w}_t = A\tilde{w}, & t \in [t_n, t_{n+1}], \\ \tilde{w}(t = t_n) = w_n, \\ w_{n+\frac{1}{2}} := \tilde{w}(t_{n+1}), \end{cases} \quad (3.1)$$

$$\begin{cases} \tilde{w}_t = B\tilde{w}, & t \in [t_n, t_{n+1}], \\ \tilde{w}(t = t_n) = w_{n+\frac{1}{2}}, \\ w_{n+1} := \tilde{w}(t_{n+1}), \end{cases} \quad (3.2)$$

where  $w_n$  and  $w_{n+1}$  denote the approximations of  $w(t)$  at  $t_n$  and  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ , respectively. The explicit solution of (3.1) is given by  $w_{n+\frac{1}{2}}(x, v) = w_n(x - v\Delta t, v)$ . Since the (with respect to  $v$ ) Fourier transformed equation (3.2) reads

$$\tilde{u}_t = -i\frac{q}{\hbar} \left[ V \left( x + \frac{\hbar}{2m}\eta \right) - V \left( x - \frac{\hbar}{2m}\eta \right) \right] \tilde{u}, \quad (3.3)$$

it can also be solved explicitly:

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}_v w_{n+1})(x, \eta) = & \\ & \left( \mathcal{F}_v w_{n+\frac{1}{2}} \right) (x, \eta) \exp \left\{ -i\frac{q}{\hbar} \Delta t \left[ V \left( x + \frac{\hbar}{2m}\eta \right) - V \left( x - \frac{\hbar}{2m}\eta \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

where  $\mathcal{F}_v$  denotes the Fourier transform with respect to  $v$ .

**Theorem 3.1** *Let  $V \in L^\infty(\mathbf{R}^d)$  and the initial Wigner function  $w^I \in L^2(\mathbf{R}^{2d})$ . Then, the fractional step method converges in  $L^2(\mathbf{R}^{2d})$  as  $\Delta t \rightarrow 0$ .*

**Proof.** Since  $A$  generates a  $C_0$ -semigroup of contractions in  $L^2(\mathbf{R}^{2d})$  and  $B$  is a bounded operator, Trotter's product formula for semigroups (see [9], e.g.) shows:

$$e^{(A+B)t} = s - \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ e^{B \frac{t}{N}} e^{A \frac{t}{N}} \right]^N. \quad (3.5)$$

■

By assuming more regularity of  $w^f$ , the method is seen to be of first order.

For the Quantum Vlasov system the nonlinear operator  $B$  is defined by:

$$\begin{aligned} Bw &= -\frac{q}{\varepsilon} \Theta_{\hbar}[V]w, \\ \Delta V &= \frac{q}{\varepsilon} \left[ \int w dv - C \right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Even the resulting nonlinear equation (3.2) can be solved explicitly: the solution is given by (3.4), where  $V$  is obtained from  $\Delta V = \frac{q}{\varepsilon} \left[ \int w_{n+\frac{1}{2}} dv - C \right]$ . The convergence analysis for the nonlinear problem is based on an analogue of (3.5) for the nonlinear semigroup  $e^{(A+B)t}$  (see [6]).

### 3.2 Particle Method

For the application of this method the Wigner equation (2.1) is first reformulated as

$$w_t + v \cdot \nabla_x w - \frac{q}{m} E_1 \cdot \nabla_v w = \int_{\mathbb{R}_v^d} \varphi(x, v - v') w(x, v', t) dv', \quad (3.7)$$

where  $E_1$  is a constant electric field and  $\varphi(x, v)$  results from the potential  $V_2(x)$ :

$$\varphi(x, v) = \frac{q}{\hbar} \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}_\eta^d} \left[ V_2 \left( x + \frac{\hbar}{2m} \eta \right) - V_2 \left( x - \frac{\hbar}{2m} \eta \right) \right] d\eta, \quad (3.8)$$

( $V = V_1 + V_2$ ;  $-\nabla V_1 = E_1$ ). So the pseudo-differential operator can be treated in the same way as the collision integrals in the discretization of the Boltzmann transport equation (see [12], [18]).

The idea of this method is based on the definition of a discrete set of "particles" located at  $(x_i(t), v_i(t))$ ,  $i \in \mathbb{Z}^{2d}$ , with constant phase-space control volumes  $\omega_i$  and weights  $w_i(t)$ . Then the Wigner function  $w = w(x, v, t)$  is approximated in the sense of measures as a linear combination of delta distributions:

$$\tilde{w}(x, v, t) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^{2d}} \omega_i w_i(t) \delta(x - x_i(t)) \otimes \delta(v - v_i(t)). \quad (3.9)$$

The particles are moved along the characteristics of the left hand side of (3.7):

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i, \quad \frac{dv_i}{dt} = -\frac{q}{m} E_1, \quad (3.10)$$

and the time evolution of the weights accounts for the right hand integral operator. Since the integral kernel is singular in  $x$ -direction, one can easily see that  $\Theta \tilde{w}$  is zero for almost every  $t \in \mathbb{R}^+$ , if the particles are initially placed on a regular mesh. Therefore, the kernel of  $\Theta$  is smoothed in  $x$ -direction, yielding:

$$(\Theta^\varepsilon w)(x, v) = \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_v^d} \zeta^\varepsilon(x - x') \varphi(x', v - v') w(x', v') dx' dv', \quad (3.11)$$

where the cut-off function  $\zeta^\varepsilon$  is an approximation of the delta-function. It is defined by

$$\zeta^\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon^d} \zeta \left( \frac{x}{\varepsilon} \right), \quad (3.12)$$

with a rather arbitrary, compactly supported function  $\zeta$ , satisfying  $\int \zeta(x)dx = 1$ . Applying  $\Theta^\epsilon$  to the particle approximation gives the time evolution of the weights:

$$\frac{dw_i}{dt} = \sum_{j \in \mathbb{Z}^{2d}} \omega_j \zeta^\epsilon(x_i - x_j) \varphi(x_j, v_i - v_j) w_j. \quad (3.13)$$

The  $\ell^p(\mathbb{Z}^{2d})$ -convergence ( $1 < p \leq \infty$ ) of the particle approximation  $(w_i(t))_{i \in \mathbb{Z}^{2d}}$  to the exact solution  $(w(x_i(t), v_i(t), t))_{i \in \mathbb{Z}^{2d}}$  has been established in [7] for smooth potentials  $V_2$ . For the physically relevant case of nonsmooth potential barriers convergence has been proved by using weak compactness methods.

The numerical application of the particle method to the Wigner equation together with a self consistent simulation of the resonant tunneling diode is the objective of [19].

## References

- [1] A. Arnold, P. Degond, P. A. Markowich, and H. Steinrück: *The Wigner–Poisson problem in a crystal*. Appl. Math. Lett., vol. 2, no. 2, pp. 187–197 (1989).
- [2] A. Arnold and P. A. Markowich: *The periodic quantum Liouville–Poisson problem*. To appear in Bolletino U.M.I. (1990).
- [3] A. Arnold and F. Nier: *The two–dimensional Wigner–Poisson problem for an electron gas in the charge neutral case*. To appear in Math. Meth. Appl. Sci. (1991).
- [4] A. Arnold and H. Steinrück: *The ‘electromagnetic’ Wigner equation for an electron with spin*. ZAMP, vol.N 10, no. 6, pp. 793–815 (1989).
- [5] A. Arnold, P. A. Markowich, and N. Mauser: *The one–dimensional periodic Bloch–Poisson equation*. To appear in Math. Mod. and Meth. in Appl. Sciences (1991).
- [6] A. Arnold and C. Ringhofer: *A fractional step method for the Wigner–Poisson equation*. In preparation.
- [7] A. Arnold and F. Nier: *Numerical analysis of the deterministic particle method applied to the Wigner equation*. To appear in Math. of Comp. (1991).
- [8] F. Brezzi and P. A. Markowich: *The three–dimensional Wigner–Poisson problem: Existence, uniqueness and approximation*. To appear in Math. Meth. Appl. Sci. (1990).
- [9] A. J. Chorin, T. J. Hughes, M. F. McCracken, and J. E. Marsden: *Product formulas and numerical algorithms*. Comm. Pure Appl. Math., vol. 31, pp. 205–256 (1978).
- [10] P. Degond and P. A. Markowich: *A mathematical analysis of quantum transport in three–dimensional crystals*. To appear in Annali di Mat. Pura ed Appl. (1990)
- [11] P. Degond and P. A. Markowich: *A quantum transport model for semiconductors: the Wigner–Poisson problem on a bounded Brillouin zone*. To appear in M<sup>2</sup>AN (1990).
- [12] P. Degond and B. Niclot: *Numerical analysis of the weighted particle method applied to the semiconductor Boltzmann equation*. Numerische Mathematik, vol. 55 (1989).
- [13] R. Feix: Private communication, 1990
- [14] W. R. Frensley: *Wigner function model of a resonant–tunneling semiconductor device*. Phys. Rev., vol. B36, pp. 1570–1580 (1987).

- [15] N. Kluksdahl, A. M. Krizan, D. K. Ferry, and C. Ringhofer: *Selfconsistent study of the resonant tunneling diode*. Phys. Rev., vol. B36, pp. 7720-7735 (1989).f
- [16] P. A. Markowich: *On the equivalence of the Schrödinger and the quantum Liouville equations*. Math. Meth. in the Appl. Sci., vol. 11, pp. 459-469 (1989).
- [17] P. A. Markowich and C. Ringhofer: *An analysis of the quantum Liouville equation*. ZAMM, vol. 69, pp. 121-127 (1989)
- [18] S. Mas-Gallic: *A deterministic particle method for the linearized Boltzmann equation*. Transp. Theory Stat. Phys., vol. 16, pp. 855-857 (1987).
- [19] F. Nier: *Application de la méthode particulière à l'équation de Wigner-mise en oeuvre numerique*. Manuscript (1991)
- [20] C. Ringhofer: *A spectral method for the numerical simulation of quantum tunneling phenomena*. Technical Report No. 115, Arizona State University (1988).
- [21] V. Ravaoli, M. A. Osman, W. Plötz, N. Kluksdahl, and D. K. Ferry: *Investigation of ballistic transport through resonant-tunneling quantum wells using Wigner function approach*. Physica, vol. 134B, pp. 36-40 (1985).
- [22] H. Steinrück: *The one-dimensional Wigner-Poisson problem and its relation to the Schrödinger-Poisson problem*. Submitted to SIAM J. Anal. (1990).
- [23] H. Steinrück: *The Wigner-Poisson problem in a crystal: Existence, uniqueness, semiclassical limit in the one-dimensional case*: To appear in ZAMM (1990).
- [24] N. D. Suh: *L'étude des structures cohérentes dans l'espace des phases du plasma unidimensionnel électrostatique: aspect classique et quantique*. Thesis at University of Orelans, France (1989).
- [25] V. I. Tatarskii: *The Wigner representation of quantum mechanics*. Sov. Phys. Usp., vol. 26, pp. 311-327 (1983).

## Steady State Electron Shock Waves in a Simplified Hydrodynamic Model

M. ASCHER

*Department of Computer Science, University of British Columbia, Vancouver, Canada*

P. A. MARKOWICH

*Department of Mathematics, Purdue University, West Lafayette, USA*

P. PIETRA

*Department of Mathematics, Purdue University, West Lafayette, USA, and  
Istituto di Analisi Numerica del CNR, Pavia, Italy*

CH. SCHMEISER

*Institut für Angewandte und Numerische Mathematik, Technische Universität Wien, Austria*

### Abstract

We consider an isothermal version of the hydrodynamic model for the flow of electrons in semiconductors. Solutions of a one-dimensional steady-state boundary value problem modelling a current controlled  $n^+nn^+$ -diode are obtained. Our approach is based on a phase plane analysis. Solutions are combinations of trajectory pieces connected by shocks. Existence of solutions is shown by considering a nonlinear eigenvalue problem with the length of the  $n$ -region as parameter. A continuum of solutions is constructed that contains at least one solution for every value of the parameter.

The analytic results are illustrated by numerical computations. For this purpose regularized (viscous) problems have been solved by the general purpose boundary value problem solver COLSYS.

## 1. Introduction

A scaled version of the hydrodynamic model for one-dimensional flow of electrons in a semiconductor reads

$$\begin{aligned} n_t + (nu)_x &= 0, \\ (nu)_t + (nu^2 + nT)_x &= nE + C_J, \\ \left[ n \left( \frac{u^2}{2} + \frac{3}{2}T \right) \right]_t + \left[ nu \left( \frac{u^2}{2} + \frac{3}{2}T \right) + nTu + q \right]_x &= nEu + C_w. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Here  $n$  denotes the electron density,  $u$  the average velocity,  $E$  the (negative) electric field,  $T$  the electron temperature and  $q$  the heat flux (see [6]). The current and energy relaxation terms  $C_J$  and  $C_w$ , respectively, model the effects of collisions of electrons with the semiconductor crystal lattice. These equations represent, respectively, mass conservation, momentum balance and energy balance. They can be understood as the Euler equations for an ideal gas of charged particles under the action of an electric field, modified by the collision terms.

The electric field has to be determined self-consistently from the Poisson equation

$$E_x = n - C(x)$$

where  $C(x)$  denotes the doping profile.

In this paper we shall be interested in a simplified version of (1.1). The energy balance equation will be replaced by the assumption of isothermal flow. The electron temperature is assumed to be constant and equal to the lattice temperature, i.e.  $T = 1$  in the dimensionless model.

For the collision term in the momentum balance equation a relaxation time model is used, i.e.

$$C_J = -\frac{nu}{\tau}$$

with the constant current relaxation time  $\tau$ .

We are interested in steady states of  $n^+nn^+$ -diodes with  $n$ -regions of varying lengths. Assuming that the scaling is such that the doping concentration in the  $n$ -region is equal to one, we consider the differential equations

$$\begin{aligned} \left( \frac{J^2}{n} + n \right)_x &= nE - \frac{J}{\tau}, \\ E_x &= n - 1 \end{aligned} \quad (1.2)$$

with the (given) current density  $J = nu$  for  $0 < x < \beta$  where  $\beta$  is the length of the  $n$ -region.

The influence of the  $n^+$ -regions is modelled by the boundary conditions

$$n(0) = n(\beta) = \bar{n}, \quad (1.3)$$

where  $\bar{n}$  is the doping concentration in the  $n^+$ -regions.

Sonic flow corresponds to  $n = |J|$  with subsonic flow for larger values and supersonic flow for smaller values of  $n$ . An interesting and practically relevant situation is subsonic flow in the  $n^+$ -regions and supersonic flow for  $n = 1$ , implying the following assumption on the parameters:

$$1 < J < \bar{n}$$

In transonic flow the possibility of shocks has to be considered. The jump and entropy conditions read

$$n_l n_r = J^2, \quad n_l < J < n_r \quad (1.4)$$

for the one-sided limits of the electron density at the shock. The entropy condition implies that jumps are only possible from a supersonic to a subsonic state. In the following, points  $(n_l, E)$

and  $(n_r, E)$  will be called *conjugate* when (1.4) holds. The shock conditions can be derived from the regularized momentum equation

$$\left(\frac{J^2}{n} + n\right)_x = nE - \frac{J}{\tau} - \varepsilon n_{xx} \quad (1.5)$$

in the limit  $\varepsilon \rightarrow 0+$ . We also allow for boundary shocks at  $x = \beta$ . The shock conditions are again derived from (1.5) and the boundary conditions (1.3) replaced by

$$\begin{aligned} n(0) &= \bar{n}, \\ n(\beta) &= \bar{n} \quad \text{or} \quad n(\beta) \leq \frac{J^2}{\bar{n}}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

In the following we shall be concerned with the problem (1.2), (1.4), (1.6).

The existence of subsonic solutions of (1.2), (1.3) has been discussed in [3]. These results have been extended to multidimensional potential flow in [4]. The existence of transonic solutions for a one-dimensional problem has been obtained in [5] by justifying the limit  $\varepsilon \rightarrow 0$  in a problem where the momentum balance equation in (1.2) is replaced by (1.5).

In this note we present the results of [2]. The main ingredient of the analysis is the phase portrait of (1.2) which can be obtained explicitly in the vacuum case  $\tau = \infty$ . Therefore the following section is devoted to this simplified situation.

## 2. The Vacuum Case: $\tau = \infty$

For vanishing collision effects a first integral of (1.2) is given by

$$H(n, E, J) = \frac{E^2}{2} + \frac{J^2}{2n^2}(n-1)^2 - n + 1 + \mathcal{L}_n n.$$

The function  $H$  is constant along smooth trajectories of (1.4) and vanishes at the stationary point  $(n, E) = (1, 0)$ . Also  $H$  is convex in a neighbourhood of  $(1, 0)$ .

The phase portrait of (1.2) is depicted in Fig. 1. Note that the sonic line  $n = J$  is a line of singularities. The only trajectory crossing this line is the thickly drawn *critical trajectory*  $T_c$ . A smooth passage between the supersonic and the subsonic regions is only possible at the point  $(n, E) = (J, 0) \in T_c$ . Because of the singularity this point is a point of nonuniqueness for the initial value problem.

Since jumps are only allowed from the supersonic ( $n < J$ ) to the subsonic ( $n > J$ ) region, transonic solutions initially have to follow the critical trajectory into the supersonic regime. Therefore jumps can only lead to the points conjugate to the supersonic part of  $T_c$ . These points lie on the dashed curve in Fig. 1 which we denote by  $T^c$ .

Now we consider the problem (1.2), (1.4), (1.6) with  $\beta$  as a variable parameter and construct a continuum of solutions. The construction starts with the point  $(\bar{n}, 0)$  considered as a solution for  $\beta = 0$ . Obviously, this point can be considered as extremal part of a continuum of subsonic orbits starting and ending on the line  $n = \bar{n}$ . At the other end of this subcontinuum lies a solution consisting of the two segments of  $T_c$  between  $n = J$  and  $n = \bar{n}$ . The  $\beta$ -value corresponding to this solution is denoted by  $2a_c$ .

We continue by constructing transonic solutions starting at the point  $(\bar{n}, E) \in T_c$  with  $E < 0$  and following  $T_c$  into the supersonic region. At some point a shock occurs and then we follow a trajectory starting on  $T^c$  back to  $n = \bar{n}$ .

Denoting the minimal  $n$ -value on  $T_c$  by  $n_*$  we distinguish between two different cases:

**Case 1:**  $\bar{n} \geq J^2/n_*$

After all the points on the supersonic part of  $T_c$  have been used as jump locations we arrive



at a smooth solution by following  $T_c$  back into the subsonic region to  $n = \bar{n}$ . The  $\beta$ -value corresponding to this solution is denoted by  $2a_c + 2b_c$ .

The next step is to turn back into the supersonic region after having returned to the critical point  $(J, 0)$ . Of course, this construction can be continued ad infinitum. The constructed solutions generically have one shock discontinuity. However, the continuum also contains continuous solutions corresponding to the discrete  $\beta$ -values  $\beta_k = 2a_c + 2kb_c$ ,  $k = 1, 2, \dots$ . Fig. 2 shows the electron density for a typical solution with  $\beta_1 < \beta < \beta_2$ .

**Case 2:**  $\bar{n} < J^2/n_*$

In this case (depicted in Fig. 1) the conjugate value  $\underline{n} = J^2/\bar{n}$  of  $\bar{n}$  occurs on the supersonic part of  $T_c$ . Choosing the corresponding point in the upper half plane as the jump location, the jump takes us right back to  $n = \bar{n}$ . For jump locations to the left of  $n = \underline{n}$  we invoke the alternative boundary condition at  $x = \beta$  allowing for boundary jumps.

Starting at the point with  $n = \underline{n}$  in the lower half plane, we move the jump location backwards again and allow for shocks taking us to the right of  $n = \bar{n}$ . Then a subsonic trajectory back to  $n = \bar{n}$  is used. This can be done until the jump location reaches  $n = n_\wedge$  (see Fig. 1).

Now the jump location is moved to the right again, but now the subsonic trajectory after the jump is followed until it reaches  $n = \bar{n}$  for the second time. Then the construction is continued in the obvious way until the jump location returns to the critical point  $(J, 0)$ .

The discussion is completed as in Case 1.

By continuity arguments the constructed solution sets in both cases contain at least one solution for every positive value of  $\beta$ . While there is a one-to-one relation between  $\beta$  and points on the continuum in Case 1, it has been proven in [2] that in Case 2 the continuum contains up to three solutions for certain values of  $\beta$ .

### 3. Finite Relaxation Time and Numerical Methods

For the system (1.2) with  $\tau < \infty$  the phase portrait cannot be determined explicitly. However a qualitative analysis is still possible.

It remains true that the sonic line  $n = J$  is a line of singularities. Also, in a neighbourhood of the critical point  $(J, 1/\tau)$  the critical trajectory consists of two branches like in the vacuum case.

The stationary point in the supersonic region is now given by  $(n, E) = (1, J/\tau)$ . Instead of being a center as in the vacuum case it now becomes asymptotically stable. It is a stable oscillatory point for

$$\tau > \frac{1}{2} \quad \text{and} \quad J > \frac{2\tau}{\sqrt{4\tau^2 - 1}} \quad (3.1)$$

and nonoscillatory otherwise.

The essential qualitative result about the phase portrait is that the branch of the critical trajectory pointing into the supersonic region converges to the stationary point  $(1, J/\tau)$ . An important ingredient of the proof [2] is the Lyapunov function

$$L(n, E; J) = H(n, E - J/\tau, J)$$

with  $H(n, E, J)$  defined in the previous section. It satisfies

$$L_x = -\frac{J}{\tau n}(n-1)^2$$

excluding the existence of periodic solutions. Fig. 3 shows a typical phase portrait. The construction of the solution continuum is somewhat more involved than in the vacuum case, but the ideas are the same. The main existence result also holds for  $\tau < \infty$ .

An interesting qualitative difference between the hydrodynamic model and the classical drift-diffusion model is the occurrence of oscillatory solutions in the supersonic region. The electron density for different values of the relaxation time is depicted in Fig. 4. The solid and the dashed curves correspond to cases where the conditions (3.1) are satisfied. The solid curve has been computed with a large relaxation time. In the case of the dotted curve, the relaxation time was chosen small enough such that the conditions (3.1) are violated. As expected, the oscillations disappear and the solution is qualitatively similar to that of the drift-diffusion model. The solutions in Figs. 2 and 4 have been computed by solving the regularized problem, where the momentum equation is replaced by (1.5). As additional boundary condition we chose

$$\left(\frac{J^2}{n} + n\right)_x = nE - \frac{J}{\tau} \quad \text{at } x = 0,$$

i.e. the unperturbed momentum equation at  $x = 0$ . The general purpose BVP solver COLSYS [1] has been applied to this regularized problem. Continuation in  $\varepsilon$  is used, starting with large values of  $\varepsilon$ , where the problem is easy to solve. While  $\varepsilon$  is decreased gradually, the grid can be adapted to the sharpening solution profile. This continuation was stopped for  $\varepsilon = 0.001$ , when the solution was judged sufficiently close to the limiting case  $\varepsilon = 0$ .

## References

- [1] U. Ascher, J. Christiansen, and R.D. Russel: *Collocation software for boundary value ODEs*. Trans. Math. Soft. 7, pp. 209–222 (1981).
- [2] U. Ascher, P.A. Markowich, P. Pietra, and C. Schmeiser: *A phase plane analysis of transonic solutions for the hydrodynamic semiconductor model*. Submitted, 1991.
- [3] P. Degond and P. A. Markowich: *On a one-dimensional steady-state hydrodynamic model for semiconductors*. Appl. Math. Letters 3, pp. 25–29 (1990).
- [4] P. Degond and P. A. Markowich: *A steady state potential flow model for semiconductors*. Submitted, 1990.
- [5] I.M. Gamba: *Stationary transonic solutions for a one-dimensional hydrodynamic model for semiconductors*. Technical Report # 143, Center for Applied Mathematics, Purdue University (1990).
- [6] P. A. Markowich, C. Ringhofer, and C. Schmeiser: *Semiconductor Equations*. Springer-Verlag, Wien–New York, (1990).

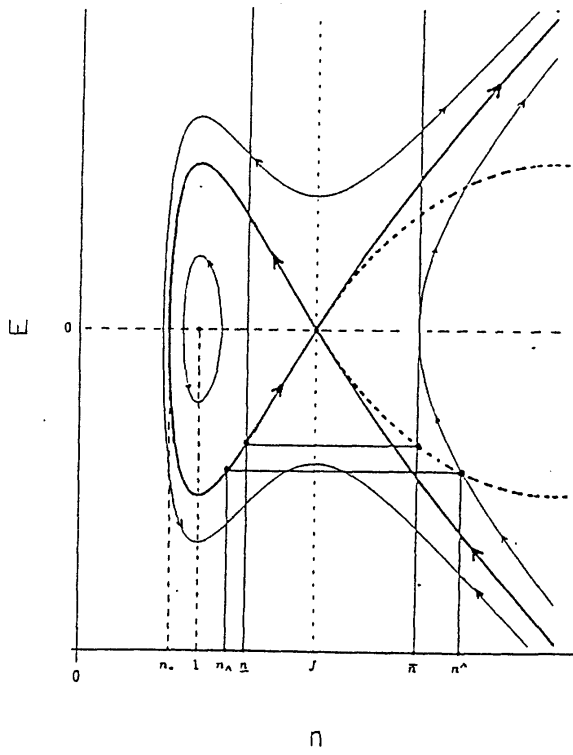


Fig. 1: Phase portrait in the vacuum case

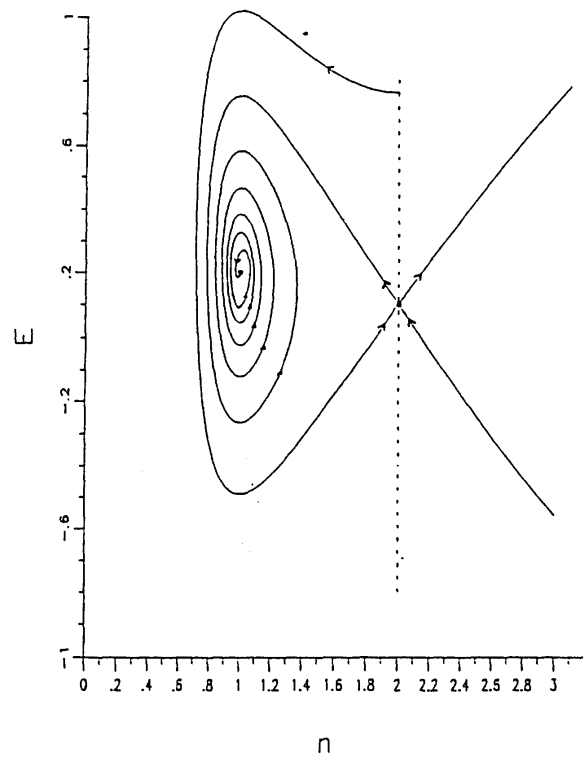


Fig. 3: Phase portrait for  $\tau < \infty$

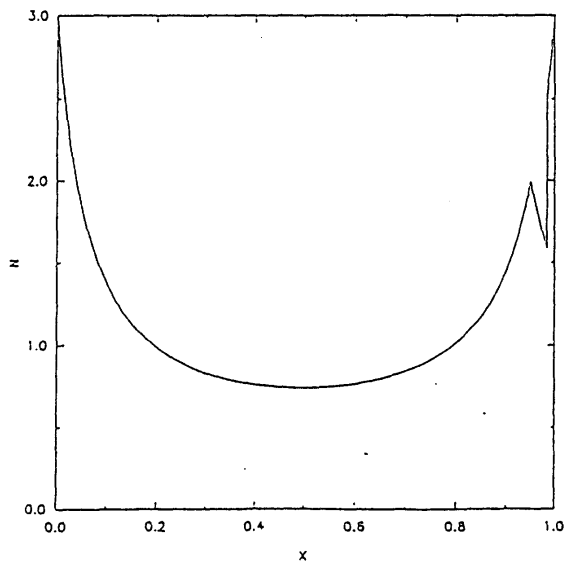


Fig. 2: Electron density for  $\beta_1 < \beta < \beta_2$

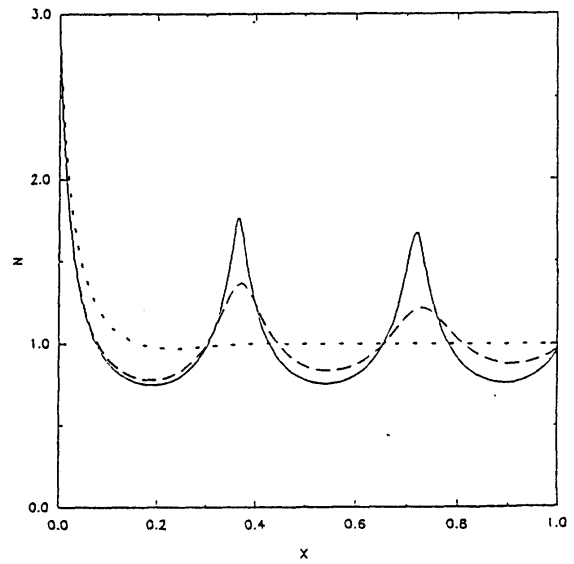


Fig. 4: Supersonic oscillations

# The switching behaviour of a PN-diode in the case of low injection

A. UNTERREITER

*Technische Universität Berlin, Forschungsbereich 3, MS 6-2, Straße des 17. Juni 135  
D-1000 Berlin 10, Germany*

## Abstract

Instead of studying the behaviour of a single PN-diode being part of an integrated circuit, a different, but frequently equivalent physical system consisting of a PN-diode, a serial Ohmic resistance  $\omega$  and a voltage source is investigated. The analysis is restricted on situations where the diode is abruptly switched from forward to backward direction.

The standard model to describe the dynamics of the diode's charge densities are the drift-diffusion equations of van Roosbroeck. These coupled partial differential equations (three spatial dimensions, one time dimension) are subjected to boundary conditions arising from usual assumptions on the diode's contacts as well as from Kirchhoff's laws.

Under simplifying — but in applications often valid — assumptions (zero space charge approximation and low injection limit) the interesting current-time characteristic  $I(t)$  satisfies a nonlinear Volterra integral equation of the second kind

$$\exp(-U - \omega I) = 1 + cI_F + [I - I_F] * g,$$

where  $I_F$  denotes the current that has flown through the device when it was biased in forward direction,  $c$  is a parameter depending on the shape of the diode as well as on its physical properties (diffusion length, mean lifetimes of electrons/holes etc) and  $g$  is an analytic, completely monotone kernel.  $1 * g$  tends to  $c$  as  $t$  tends to infinity.  $-U$  is the potential generated by the voltage source for  $t > 0$  (biasing in backward direction).

Existence, uniqueness, boundedness and smoothness results of  $I$  are presented.

Providing that  $g(t) = O(t^{-\alpha})$ ,  $\alpha \in [0, 1]$ , for  $t \rightarrow 0$  a singular perturbation analysis of the integral equation with respect to a physically small parameter  $\epsilon$  yields the (experimentally observed) existence of a constant-current phase for  $t \in [0, t_0]$ , where  $t_0$  is uniquely determined by

$$(1 * g)(t_0) = [1 + (I(0+)/I_F)]^{-1}.$$

$I(0+)$  does not depend on the diode but on  $\omega$  and the applied voltages.

It is also proven, that  $g(t) = O(t^{-(1/2)})$  for  $t \rightarrow 0$  does always hold for one-dimensional (restriction to just one spatial dimension via symmetry arguments) models.

## Quantum Steady States: The Bloch-Poisson Model

N. MAUSER \*

*Institut für Angewandte Mathematik, TU-Wien, Wiedner Hauptstr. 8-10  
A-1040 Wien, Austria*

## Abstract

We present the Bloch-Poisson model describing quantum steady states of electrons in thermal equilibrium. A mathematical analysis for the one-dimensional periodic case is given. The existence of a unique smooth solution is proved, a convergent iterative procedure useful for numerical calculations is obtained and the classical limit is analyzed.

## 1. Introduction

The scope of this model is a quantum mechanical access to the steady states of an electron ensemble in thermal equilibrium. We consider a one-electron approximation with a self-consistent

---

\*The author acknowledges support from the "Österreichischer Fonds zur Förderung der Wissenschaftlichen Forschung"; Project No. P6771.

potential describing the Coulomb interaction of the electrons with each other and with a background of (positive) ions.

A common way of setting up the model is based on one-electron wave functions obtained from the eigenvalue problem of the Schrödinger equation  $H\psi_i(r) = E_i\psi_i(r)$ ,  $i \in \mathbb{N}_0$  (e.g. [7]). The charge density for a given temperature  $T^*$  is calculated from  $n(r) = \sum_i w_i(\beta^*)\bar{\psi}_i(r)\psi_i(r)$ , where the temperature  $T^*$  enters via  $\beta^* = 1/k_B T^*$  in the occupation probabilities  $w_i$ . For electrons,  $w_i$  should be Fermi-Dirac ( $F - D$ ) distributed, but at room temperature Boltzmann statistics are a good approximation:  $w_i(\beta^*) = Z(\beta^*)e^{-\beta^*E_i}$  with the normalization constant  $Z(\beta^*)$ .

A crucial point is the effective potential occurring in the one-body Hamilton operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{eff}}(r). \quad (1.1)$$

The most important part of  $V_{\text{eff}}$  is the direct Coulomb term  $-qV(r) = -q \int G(r, r')n(r')dr'$  where  $G(r, r')$  is the Green's function of the Poisson equation and  $q$  is the unit charge. This potential, however, should be corrected by other density dependent terms, the so-called exchange and correlation potentials which take into account the Pauli principle and the Coulomb repulsion of the electrons ("exchange-correlation hole").

For consistency with the underlying antisymmetrized ansatz in the reduction of the many body problem, the use of  $F - D$  statistics should be linked with the inclusion of an exchange term in  $V_{\text{eff}}$ . On the other hand, our choice  $V_{\text{eff}}(r) = -qV(r)$  together with Boltzmann statistics agrees with a Hartree ansatz (for details and possible extensions of the Bloch-Poisson model, see [5]).

In order to avoid the above Schrödinger eigenvalue problem by means of a parabolic evolution equation, we describe the system by the unnormalized density matrix [3], [4]:

$$\rho(r, s, \beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} \bar{\psi}_i(r)\psi_i(s) \quad (1.2)$$

which is subject to the Bloch equation

$$\rho_\beta(r, s, \beta) = -H_r \rho(r, s, \beta) \quad (1.3)$$

$$\rho(r, s, \beta = 0) = \delta(r - s) \quad (1.4)$$

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r - qV(r). \quad (1.5)$$

$H_r$  acts only on the  $r$ -variable; we could equally use  $\frac{1}{2}(H_r + H_s)$  instead.

To achieve self-consistency, we calculate the normalized charge density for  $\beta = \beta^*$  fixed, and solve the Poisson equation:

$$n(r) = \rho(r, r, \beta^*) / \int \rho(y, y, \beta^*) dy \quad (1.6)$$

$$\Delta V(r) = \frac{q}{\epsilon_s}(n(r) - C(r)) \quad (1.7)$$

where  $\epsilon_s$  is the permittivity and  $C(r)$  the doping profile of the considered semiconductor.

We remark that  $\rho(\beta)$ , described by the system (1.3)–(1.7) represents the density matrix in thermal equilibrium only for  $\beta = \beta^*$ , and  $\rho(\beta)$  is just an auxiliary quantity for  $\beta \neq \beta^*$ . This situation contrasts the linear Bloch equation [3], [9], where  $\rho(\beta)$  represents the correct density matrix for any temperature. Note that a direct coupling of the Bloch and the Poisson equation for all  $\beta$  is not correct, since the Hamiltonian (1.5) would then be  $\beta$ -dependent via the potential, and additional terms in (1.3) occur.

## 2. The one-dimensional periodic Bloch-Poisson equation

We now specialize to a periodic problem on  $(0, 2\pi)$ . In the sequel, the index 'p' will denote periodic functions, for example  $\delta_p(x) = \sum_{k \in \mathbf{Z}} \delta(x - kL)$ .

After an appropriate scaling, the Bloch-Poisson system reads:

$$\rho_\beta = \frac{\varepsilon^2}{2} \rho_{rr} + V(r)\rho; \quad r, s \in (0, 2\pi), \beta \in (0, \beta^*], \quad (2.1)$$

$$\rho(0, s, \beta) = \rho(2\pi, s, \beta), \rho_r(0, s, \beta) = \rho_r(2\pi, s, \beta), \quad s \in (0, 2\pi), \beta \in (0, \beta^*], \quad (2.2)$$

$$\rho(r, s, \beta = 0) = \delta_p(r - s); \quad r, s \in (0, 2\pi), \quad (2.3)$$

$$n(r) = \frac{\rho(r, r, \beta^*)}{\int_0^{2\pi} \rho(y, y, \beta^*) dy}, \quad (2.4)$$

$$V_{rr}(r) = n(r) - C(r), \quad r \in (0, 2\pi), \quad (2.5)$$

$$V(0) = V(2\pi) = 0, \quad V_r(0) = V_r(2\pi). \quad (2.6)$$

The periodicity of the initial datum in  $s$  implies the  $2\pi$ -periodicity of the solution  $\rho$  in  $s$ .  $\varepsilon$  denotes the scaled Planck constant and is given by  $\varepsilon^2 = \frac{2\pi\varepsilon_s \hbar^2}{mLq^2}$ . In order to be able to solve the periodic Poisson equation (2.5) we have to require charge neutrality on  $(0, 2\pi)$ , i.e.:

$$\int_0^{2\pi} C(r) dr = 1. \quad (2.7)$$

The potential at  $x = 0$  and  $x = 2\pi$  was chosen to be zero, but this choice does not influence the problem.

In the following we give a short sketch of the proof of unique solvability of (2.1)–(2.6); for more details see [2].

## 3. Existence

We consider the symmetrized version of the Bloch equation (2.1) and set  $\varepsilon = \sqrt{2}$  for notational simplicity. Thus we have the system

$$\rho_\beta = \frac{1}{2} (\rho_{rr} + \rho_{ss} + V(r)\rho + V(s)\rho); \quad r, s \in (0, 2\pi), \quad \beta \in (0, \beta^*], \quad (3.1)$$

together with (2.2)–(2.6).

The proof relies on holomorphic semigroups on Sobolev spaces with real negative index:

$W_p^{\sigma, q}((0, 2\pi)^n)$ ,  $\sigma \geq 0$ ,  $1 \leq q \leq \infty$  denotes 'periodic' Sobolev spaces, which are defined as the closure of  $C_p^\infty([0, 2\pi]^n)$  with respect to the  $W^{\sigma, q}((0, 2\pi)^n)$ -norm (see [1]). Let  $\mathcal{D}'_p((0, 2\pi)^n)$  denote the complex-valued, 'periodic' distributions on  $(0, 2\pi)^n$ . Then we define for  $\sigma \in \mathbf{R}$  (see [10]):

$$H_p^\sigma((0, 2\pi)^n) := \left\{ \begin{aligned} f(\xi) &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \sum_{\mu \in \mathbf{Z}^n} f_\mu e^{i\mu \cdot \xi} \in \mathcal{D}'_p((0, 2\pi)^n) \\ g(\xi) &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \sum_{\mu \in \mathbf{Z}^n} f_\mu (1 + |\mu|^2)^{\frac{\sigma}{2}} e^{i\mu \cdot \xi} \in L_p^2((0, 2\pi)^n) \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

equipped with the norm

$$\|f\|_{\sigma, p}^2 = \sum_{\mu \in \mathbf{Z}^n} |f_\mu|^2 (1 + |\mu|^2)^\sigma. \quad (3.3)$$

Here  $\xi$  and  $\mu$  denote  $n$ -dimensional vectors and multiindices, resp.. The spaces  $H_p^\sigma$  are reflexive Hilbert spaces and the dual of  $H_p^\sigma$  is  $H_p^{-\sigma}$ . It is easy to verify that the norms of  $W^{\sigma, 2}$  and  $H_p^\sigma$  are equivalent for  $\sigma \geq 0$ .

**Lemma 3.1** a)  $\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial^2}{\partial s^2}$  with periodic boundary conditions generates an analytic contraction-semigroup of angle  $\frac{\pi}{2}$  (see [8]) on  $H_p^\sigma((0, 2\pi)^2)$ ,  $\sigma \in \mathbf{R}$ .

b) Let  $V \in W_p^{\alpha, \infty}(0, 2\pi)$ ,  $\alpha \geq 0$ . Then  $\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial^2}{\partial s^2} + V(r) + V(s) \right)$  generates an analytic semigroup  $U(\beta)$ ,  $\beta \geq 0$  on  $H_p^\sigma((0, 2\pi)^2)$ ,  $|\sigma| \leq \alpha$ .

Since the initial condition for  $\rho$ ,

$$\delta_p(r-s) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k \in \mathbf{Z}} e^{ik(r-s)} \quad (3.4)$$

lies in  $H_p^\sigma((0, 2\pi)^2)$  for  $\sigma < -\frac{1}{2}$ , we will consider equation (3.1) in  $H_p^{-\frac{3}{4}}((0, 2\pi)^2)$ .

We define the fixed point operator  $F$  for the potential: For  $V \in W_p^{\frac{3}{4}, \infty}(0, 2\pi)$  equation (3.1), (2.3) defines the density matrix  $\rho[V]$  and hence (2.4) the density  $n[V]$ . Then the Poisson equation (2.5) furnishes  $\tilde{V} = F(V)$ .

The choice of the space for  $V$  stems mainly from the imbeddings  $W_p^{\frac{3}{4}, \infty}(0, 2\pi) \hookrightarrow C_p^{0, \frac{3}{4}}([0, 2\pi])$  in Lemma 3.2 and  $W_p^{2,1}(0, 2\pi) \hookrightarrow W_p^{\frac{3}{4}, \infty}(0, 2\pi)$  which makes  $F$  a compact self map.

The regularization property of the Bloch-Poisson system is expressed in

**Lemma 3.2** Let  $V \in W_p^{\frac{3}{4}, \infty}(0, 2\pi)$ . Then  $\rho \in C((0, \beta^*] \rightarrow C_p^{2, \frac{1}{4}}([0, 2\pi]^2)$  and  $\rho_\beta \in C((0, \beta^*] \rightarrow C_p^{0, \frac{1}{4}}([0, 2\pi]^2)$ .

Another intrinsic property is the existence of an upper and lower solution:

**Lemma 3.3** Let  $V \in W_p^{\frac{3}{4}, \infty}(0, 2\pi)$  with  $\underline{V} \leq V(r) \leq \overline{V}$ ,  $r \in [0, 2\pi]$ .

a) Then  $0 < \underline{\rho}(r, s, \beta) \leq \rho(r, s, \beta) \leq \overline{\rho}(r, s, \beta)$  for  $\beta > 0$ , where the lower solution  $\underline{\rho}$  (upper solution  $\overline{\rho}$ ) satisfies  $\underline{\rho}_\beta = \frac{1}{2}(\underline{\rho}_{rr} + \underline{\rho}_{ss}) + \underline{V}\underline{\rho}$  ( $\overline{\rho}_\beta = \frac{1}{2}(\overline{\rho}_{rr} + \overline{\rho}_{ss}) + \overline{V}\overline{\rho}$ ) with the same boundary and initial conditions as (3.1).

We define  $X_S = \left\{ V \in W_p^{\frac{3}{4}, \infty}(0, 2\pi) \mid \|V\|_{W_p^{\frac{3}{4}, \infty}(0, 2\pi)} \leq S \right\}$ ,  $S > 0$  and prove

**Lemma 3.4** Let  $C \in L_p^1(0, 2\pi)$ . Then  $F$  is a compact selfmap on  $X_S$  for  $S$  sufficiently large, and  $F$  is continuous on  $X_S$ .

We remark that, for  $\beta^*$  sufficiently small, we have contractivity of the map  $F$  and hence existence and uniqueness of a solution of the Bloch-Poisson equation.

Applying Schauder's fixed point theorem to  $F$  (and bootstrapping the regularity of the solution) we state the main result of this section in

**Theorem 3.5** Let  $C \in L_p^1(0, 2\pi)$ . Then the Bloch-Poisson problem (3.1), (2.14)–(2.18) has a solution  $(\rho, n, V)$  satisfying:

$$\rho \in C((0, \beta^*] \rightarrow C_p^{2,1}([0, 2\pi]^2), \quad (3.5)$$

$$n \in H_p^{\frac{3}{2}}(0, 2\pi), \quad (3.6)$$

$$V \in W_p^{2,1}(0, 2\pi). \quad (3.7)$$

#### 4. Uniqueness and Approximation

For an equilibrium potential  $V$  and a perturbation  $\Delta V$ , the inequality

$$\int_0^{2\pi} (n[V + \Delta V](r) - n[V](r))\Delta V(r)dr \geq 0 \quad (4.1)$$

is a well known stability principle in the analysis of stationary semiconductor equations (see [6], [7]). In thermodynamical equilibrium, this monotonicity property reflects the tendency of electrons to occupy states of low (potential) energy.

This inequality is proved via the Frechet derivative of the map

$$V \rightarrow n[V] = \frac{\rho[V](r, r, \beta^*)}{\int_0^{2\pi} \rho[V](y, y, \beta^*)dy}, W_p^{1,\infty}(0, 2\pi) \rightarrow C_p[0, 2\pi]:$$

$$\Delta V \in W_p^{1,\infty}(0, 2\pi) \rightarrow Dn[V]\Delta V \in C_p[0, 2\pi]. \quad (4.2)$$

**Lemma 4.1** *Let  $V, \Delta V \in W_p^{1,\infty}(0, 2\pi)$ . Then*

$$\int_0^{2\pi} (Dn[V]\Delta V)(r)\Delta V(r)dr \geq 0. \quad (4.3)$$

An indirect proof using (4.1) and the Poisson equation gives the uniqueness of the solution  $(\rho, n, V)$  of the Bloch–Poisson problem.

In section 3 we saw contractivity of the fixed point iteration  $F$  for  $\beta^*$  sufficiently small. For large  $\beta^*$ , however, this iteration cannot be used to numerically compute the steady state solution  $(\rho, n, V)$ . The following relaxation algorithm can be employed to calculate the solution of the Bloch–Poisson equation: For  $V_0 \in X_S$  we define the iteration

$$V_{n+1} = (1 - \omega)V_n + \omega F(V_n), \quad (4.4)$$

with  $\omega \in (0, 1]$ . If  $\omega$  is chosen sufficiently small (depending on  $\beta^*$ ), this iteration converges to  $V$ , the solution of the Bloch–Poisson system; the proof crucially relying on (4.1).

#### 5. The Classical Limit

The limit of the solutions of the Bloch–Poisson problem as the scaled Planck constant  $\epsilon$  tends to zero cannot be directly carried out in the density matrix formulation. We have to consider the auxiliary function

$$y^\epsilon(x, \eta, \beta; \beta^*) = \frac{\rho^\epsilon(x + \frac{\epsilon}{2}\eta, x - \frac{\epsilon}{2}\eta, \beta)}{\int_0^{2\pi} \rho^\epsilon(x, x, \beta^*)dx}, \quad (5.1)$$

and the Wigner function  $w^\epsilon(x, v; \beta^*)$  as the Fourier transform of (5.1) with respect to  $\eta$ . This shows the advantage of the Wigner formalism to allow for the classical limit.

A rather lengthy and technical proof using compactness methods finally gives:

**Theorem 5.1** *Let  $C \in L^1(0, 2\pi)$ ,  $\int_0^{2\pi} C(x)dx = 1$ ,  $\beta^* > 0$  hold. Then the solutions  $(w^\epsilon, n^\epsilon, V^\epsilon)$  of the (Boltzmann distributed) steady-state Wigner–Poisson problem satisfy:*

$$w^\epsilon(x, v; \beta^*) \rightarrow w^0(x, v; \beta^*) \text{ in } L^2((0, 2\pi) \times \mathbb{R}_v) \text{ weakly} \quad (5.2)$$

$$n^\epsilon \rightarrow X(\beta^*)\exp(\beta^*V^0) \text{ in } L^2(0, 2\pi) \text{ weakly} \quad (5.3)$$

$$V^\epsilon \rightarrow V^0 \text{ in } W_0^{1,q}(0, 2\pi) \text{ strongly for every } 1 \leq q < \infty, \quad (5.4)$$

$$w^0(x, v; \beta^*) = \frac{\sqrt{\beta^*X(\beta^*)}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\beta^* \left(-\frac{v^2}{2} + V^0(x)\right)\right). \quad (5.5)$$



where  $(V^0, X(\beta^*))$  is the unique solution of

$$V_{xx}^0 = X(\beta^*) \exp(\beta^*(V^0(x)) - C(x)), \quad 0 < x < 2\pi \quad (5.6)$$

$$V^0(0) = V^0(2\pi) = 0, \quad V_x^0(0) = V_x^0(2\pi). \quad (5.7)$$

Clearly,  $w^0$  is a Boltzmann-distributed solution of the steady-state Vlasov equation:

$$vw_x^0 + V_x^0 w_v^0 = 0, \quad w^0(x=0) = w^0(x=2\pi). \quad (5.8)$$

## References

- [1] R. A. Adams: *Sobolev Spaces*. Academic Press, New York, NY (1975).
- [2] A. Arnold, P. A. Markowich and N. Mauser: *The one-dimensional periodic Bloch-Poisson equation*. To appear in *Math. Mod. and Meth. in Appl. Sciences* (1991).
- [3] R. P. Feynman: *Statistical mechanics: a set of lectures*. In W. A. Benjamin (ed.): *Frontiers in Physics*, London (1972).
- [4] W. Lui and J. Frey: *A simplified method for quantum size effect analysis in submicron devices*. *J. Appl. Phys.*, vol. 64 (12), p. 6790 (1988).
- [5] N. J. Mauser: *Quantum steady states by means of a self-consistent Bloch equation*. Manuscript.
- [6] M. S. Mock: *On equations describing steady-state carrier density distribution in a semiconductor device*. *Comm. Pure and Appl. Math.* vol. 25, page 781 (1972).
- [7] F. Nier: *A stationary Schrödinger-Poisson system arising from the modelling of electronic devices*. To appear in *Forum Math.* (1990).
- [8] M. Reed and B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics 2: Fourier Analysis, Self-Adjointness*. Academic Press, New York, San Francisco, and London (1975).
- [9] H. Steinrück and F. Odeh: *The Wigner function for thermal equilibrium*. Submitted to *ZAMP* (1990).
- [10] Hans Triebel: *Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators*. North Holland, Amsterdam (1978).

## On the time discretization of the carrier transport equations

H. GAJEWSKI

Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39, O-1086 Berlin, Germany

### Abstract

Zur Zeitdiskretisierung der van Roosbroeck-Gleichungen wird häufig das implizite Euler-Verfahren benutzt. Die eindeutige Lösbarkeit der dabei entstehenden elliptischen Systeme kann jedoch in der Regel nur unter drastischen Kleinheitsbedingungen an die Zeitschrittweite garantiert werden.

Im Vortrag wird ein halbimplizites Schema erläutert, das für beliebige Zeitschritte auf eindeutig lösbare (Zeit-) diskrete Gleichungen führt. Dieses Verfahren wurde ursprünglich zum Beweis von Existenzaussagen verwendet [1] und geht von der Ersetzung der Poisson-Gleichung durch die Erhaltungsgleichung für die Gesamtstromdichte aus. Dadurch läßt sich auch ein natürliches Abstandsmaß auf den Lösungstrajektorien einführen, das eine rationelle Zeitschrittsteuerung ermöglicht.

Van Roosbroeck's equations modelling carrier transport in a domain  $G$  occupied by semiconductor material may be written as follows

$$\begin{aligned} \rho_t + \nabla \cdot (I_n + I_p) &= 0, & \rho &= -\nabla \cdot \varepsilon \nabla \phi, \\ n_t - \nabla \cdot I_n &= R, & I_n &= -\sigma_n(n) \nabla(\phi - v_n), & n &= e_n(v_n), \\ p_t + \nabla \cdot I_p &= R, & I_p &= -\sigma_p(p) \nabla(\phi + v_p), & p &= e_p(v_p). \end{aligned}$$

Here:  $\phi, v_n, v_p$  are the electrostatic potential and the resp. chemical potentials of electrons and holes to be determined.

$e_{n,p}$  and  $\sigma_{n,p}$  are given monotone functions,  $R = R(n,p)$  is the rate of recombination-generation.

Completed by suitable boundary conditions, this system of nonlinear partial differential equations, can be rewritten (cf. [1]) as evolution equation with the special structure:

$$u_t + A(u, v) = 0 \quad , \quad u = Ev, \quad (*)$$

where

$$u = (\rho, n, p) \quad , \quad v = (\phi, v_n, v_p).$$

Here the operator  $A$  is defined in terms of  $I_n, I_p$  and  $R$ , whereas the operator  $E$  is gradient of the convex functional

$$e(v) = \int \left\{ \frac{\varepsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \int_0^{v_n} e_n(s) ds + \int_0^{v_p} e_p(s) ds \right\} dG.$$

In [1] the existence of solutions of (\*) was shown by using the following scheme of time-discretization

$$u(t + \tau) - u(\tau) + \tau A(u(t), v(t + \tau)) = 0, \quad u(t) = E(v(t)).$$

In a more familiar form this system reads

$$\begin{aligned} n(t + \tau) - n(t) + \tau \nabla \cdot \sigma_n(n(t)) \nabla(\phi(t + \tau) - v_n(t + \tau)) &= \tau R, \\ p(t + \tau) - p(t) + \tau \nabla \cdot \sigma_p(p(t)) \nabla(\phi(t + \tau) + v_p(t + \tau)) &= \tau R, \\ -\nabla \cdot \varepsilon \nabla \phi(t + \tau) &= f + \exp(v_p(t + \tau)) - \exp(v_n(t + \tau)), \end{aligned}$$

where  $f$  is the density of impurities.

A crucial role in the proof of convergence plays the conjugate functional

$$e^*(u) = \sup_w \langle u, w \rangle - e(w),$$

where  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  denotes the pairing between suitable functional spaces and  $w$  runs over all admissible test vectors. Especially, in the case  $u = Ev$  one finds that

$$F(u) := e^*(Ev) = \langle u, v \rangle - e(v).$$

Because of the convexity of  $e^*$  it holds

$$a(u_1, u_2) := 1/2(F(u_1) + F(u_2)) - F\left(\frac{u_1 + u_2}{2}\right) \geq 0.$$

Therefore, in view of the uniqueness results of the paper [1] it seems to be very natural to introduce

$$d(u_1, u_2) = (a(u_1, u_2))^{1/2}$$

as a measure of distance between two states  $u_1$  and  $u_2$ . Accordingly, we suggest calculating a new time-step  $\tau_n$  from the old one  $\tau$  by the rule

$$\tau_n d(u(t+\tau), u(t)) \leq c\tau \quad , \quad c = \text{constant of accurateness.}$$

In fact we have made some good numerical experiences with this method of time-step-controlling (cf. [2]).

**Remark 1.**  $F(u)$  can be interpreted physically as the free energy of the state  $u$ .

**Remark 2.** Let  $(u(t), v(t))$  be a trajectory of (\*). Then we have

$$\begin{aligned} (F(u(t)))_t &= \langle u, v \rangle - e(v)_t \\ &= \langle u_t, v \rangle + \langle u, v_t \rangle - \langle Ev, v_t \rangle \\ &= \langle u_t, v \rangle = - \langle A(u, v), v \rangle . \end{aligned}$$

From here it becomes clear, that the operator  $A$  is closely related to the rate of dissipation of the process.

In the commonly considered case of Boltzmann-statistics given by  $e_n = e_v = \exp$ , the functionals defined above can be calculated more explicitly:

$$\begin{aligned} e(v) &= \int \{ \epsilon/2 |\nabla \phi|^2 + \exp(v_n) - 1 + \exp(v_p) - 1 \} dG, \\ F(u) &= \int \{ \epsilon/2 |\nabla \phi|^2 + n(\log n - 1) + 1 + p(\log p - 1) + 1 \} dG. \\ a(u_1, u_2) &= 1/4 \int \left\{ \epsilon/2 |\nabla(\phi_1 - \phi_2)|^2 \right. \\ &\quad \left. + (n_1 - n_2) \log \frac{n_1}{n_2} + (n_1 + n_2) \log \left( 1 - \left( \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + (p_1 - p_2) \log \frac{p_1}{p_2} + (p_1 + p_2) \log \left( 1 - \left( \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} \right)^2 \right) \right\} dG \\ &\geq 1/8 \int \left\{ \epsilon |\nabla(\phi_1 - \phi_2)|^2 + \frac{(n_1 - n_2)^2}{n_1 + n_2} + \frac{(p_1 - p_2)^2}{p_1 + p_2} \right\} dG. \end{aligned}$$

## References

- [1] H. Gajewski, K. Gröger: *Semiconductor equations for variable mobilities based on Boltzmann statistics or Fermi-Dirac-statistics*. Math. Nachr. 140, pp. 7-36 (1989) .
- [2] B. Heinemann, R. Richter: *TOSCA-Simulations of Silicon Devices*.

## Analytische Probleme des Ladungsträgertransports

K. GRÖGER

*Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39, O-1086 Berlin, Germany*

### Abstract

Die mathematische Modellierung des Ladungsträgertransports in Halbleiterbauelementen führt auf ein Rand-Anfangswertproblem für das elektrostatische Potential und die Ladungsträgerdichten. Die Modellgleichungen hängen von der zugrunde gelegten Statistik ab. Sowohl im Falle der Boltzmann-Statistik als auch im Falle der Fermi-Dirac-Statistik kennt man a-priori-Abschätzungen, mit deren Hilfe die Existenz einer Lösung des entsprechenden Rand-Anfangswertproblems garantiert werden kann. Demgegenüber bereitet der Nachweis

der Einzigkeit der Lösung im Falle der Fermi-Dirac-Statistik Schwierigkeiten. In dem Vortrag wird auf eine Methode zur Erlangung neuer a-priori-Abschätzungen eingegangen und angedeutet, daß diese Abschätzungen auch im Falle der Fermi-Dirac-Statistik für den Nachweis der Einzigkeit der Lösung ausreichen, wenn man sich auf zweidimensionale Gebiete beschränkt. Die Ergebnisse wurden gemeinsam mit J. Rehberg erhalten.

## An Existence Theorem for Weak Solutions of the Basic Stationary Semiconductor Equations

J. FREHSE AND J. NAUMANN

*Humboldt-Universität zu Berlin, Fachbereich Mathematik, Unter den Linden 6  
O-1086 Berlin, Germany*

### 1. Introduction

Let  $\Omega \subset \mathbf{R}^N$  be a bounded domain which is assumed to represent to cross-section ( $N = 2$ ) or the spatial region ( $N = 3$ ) of a semiconductor device. We consider the stationary drift-diffusion equations which govern the distribution of carriers in  $\Omega$ :

$$-\Delta\psi = p - n + f, \quad (1.1)$$

$$-\operatorname{div}(D_1(\nabla n, \nabla\psi)\nabla n - n\mu_1(\nabla\psi)\nabla\psi) = r(n, p)(1 - np), \quad (1.2)$$

$$-\operatorname{div}(D_2(\nabla p, \nabla\psi)\nabla p + p\mu_2(\nabla\psi)\nabla\psi) = r(n, p)(1 - np), \quad (1.3)$$

where

$$\begin{aligned} \psi &= \text{electrostatic potential,} \\ n &= \text{electron density,} \\ p &= \text{hole density,} \\ f &= \text{net impurity (doping) concentration,} \\ D_1, D_2 &= \text{electron resp. hole diffusion coefficients,} \\ \mu_1, \mu_2 &= \text{electron resp. hole mobilities} \\ r(\sigma, \tau) &= \frac{r_0}{r_1 + r_2\sigma + r_3\tau}, \quad \sigma, \tau \in [0, \infty) \quad (r_i = \text{const} > 0; i = 0, 1, 2, 3). \end{aligned}$$

Let  $\partial\Omega$  denote the boundary of  $\Omega$ . Throughout the paper we suppose that

$$\begin{aligned} \partial\Omega &\text{ is Lipschitzian,} \\ \partial\Omega &= \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \text{ with } \Gamma_0 \cap \Gamma_1 = \emptyset, \text{ meas } \Gamma_0 > 0. \end{aligned}$$

We complete system (1.1)–(1.3) by the boundary conditions:

$$\psi = \psi_0, \quad n = n_0, \quad p = p_0 \quad \text{on } \Gamma_0, \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\nu} = \frac{\partial n}{\partial\nu} = \frac{\partial p}{\partial\nu} = 0 \quad \text{on } \Gamma_1 \quad (1.5)$$

where  $\psi_0$ ,  $n_0$  and  $p_0$  are given functions on  $\Gamma_0$  ( $\nu =$  unit outward normal along  $\Gamma_0$ ).

### 2. Assumptions

We impose the following conditions upon the functions  $D_i$  and  $\mu_i$  ( $i = 1, 2$ ):

$$D_i \in C(\mathbf{R}^N \times \mathbf{R}); \quad (2.1)$$

$$0 < d_{i1} \leq D_i(\xi, \eta) \leq d_{i2} < \infty \quad \forall \xi, \eta \in \mathbf{R}^N \quad (d_{ij} = \text{const}); \quad (2.2)$$

$$(D_i(\xi, \eta) - D_i(\xi', \eta)) \cdot (\xi - \xi') > 0 \quad \forall \xi, \xi', \eta \in \mathbb{R}^N, \xi \neq \xi'; \quad (2.3)$$

$$\mu_i \in C(\mathbb{R}^N), \quad (2.4)$$

$$|\mu_i(\xi)\xi| \leq \mu_{i0} = \text{const} < \infty \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^N. \quad (2.5)$$

Notice that (2.5) permits to take into account the effect of velocity saturation with respect to the electric field strength  $E = -\nabla\psi$ .

Let  $H^1(\Omega)$  ( $= W^{1,2}(\Omega)$ ) denote the usual Sobolev space. Our conditions on the data are as follows:

$$f \in L^s(\Omega) \quad (1 < s < \infty \text{ if } N = 2, s = \frac{6}{5} \text{ if } N = 3); \quad (2.6)$$

$$\begin{cases} \psi_o, n_o, p_o \in H^1(\Omega), \\ \text{ess inf}_{\Gamma_o} n_o \geq 0, & \text{ess inf}_{\Gamma_o} p_o \geq 0, \\ \text{ess sup}_{\Gamma_o} n_o < \infty, & \text{ess sup}_{\Gamma_o} p_o < \infty. \end{cases} \quad (2.7)$$

Without any loss of generality, we may assume that  $n_o, p_o \in L^\infty(\Omega)$ .

### 3. Results

Define

$$V = \{\varphi \in H^1(\Omega) : \varphi = 0 \text{ a.e. on } \Gamma_o\}.$$

**Theorem 3.1 (existence).** *Let (2.1) – (2.7) be satisfied. Then there exist functions  $\psi, n, p \in H^1(\Omega)$  such that*

$$\int_{\Omega} \nabla\psi \cdot \nabla\varphi dx = \int_{\Omega} (p - n + f)\varphi dx \quad \forall \varphi \in V, \quad (3.1)$$

$$\begin{cases} \int_{\Omega} D_1(\nabla n, \nabla\psi) \nabla n \cdot \nabla\varphi dx - \int_{\Omega} n\mu_1(\nabla\psi) \nabla\psi \cdot \nabla\varphi dx = \\ = \int_{\Omega} r(n, p)(1 - np)\varphi dx \end{cases} \quad \forall \varphi \in V, \quad (3.2)$$

$$\begin{cases} \int_{\Omega} D_2(\nabla p, \nabla\psi) \nabla p \cdot \nabla\varphi dx + \int_{\Omega} p\mu_2(\nabla\psi) \nabla\psi \cdot \nabla\varphi dx = \\ = \int_{\Omega} r(n, p)(1 - np)\varphi dx \end{cases} \quad \forall \varphi \in V, \quad (3.3)$$

$$0 \leq n \leq K_1 + \text{ess sup}_{\Gamma_o} n_o, \quad 0 \leq p \leq K_2 + \text{ess sup}_{\Gamma_o} p_o \quad \text{a.e. in } \Omega, \quad (3.4)$$

$$\psi = \psi_o, \quad n = n_o, \quad p = p_o \quad \text{a.e. on } \Gamma_o \quad (3.5)$$

where the constants  $K_1, K_2$  depend only on  $d_{ij}, \mu_{oi}$  ( $i, j = 1, 2$ ), the data (2.6), (2.7) and the constant of imbedding  $H^1(\Omega) \subset L^{q^*}(\Omega)$  ( $q^* =$  Sobolev imbedding exponent).

**Sketch of proof.** Let  $\varepsilon > 0$ . Combining the theory of monotone operators and Schauder's fixed point theorem we obtain the existence of a triple  $\{\psi_\varepsilon, n_\varepsilon, p_\varepsilon\} \in [H^1(\Omega)]^3$  such that

$$\int_{\Omega} \nabla\psi_\varepsilon \cdot \nabla\varphi dx = \int_{\Omega} (p_\varepsilon - n_\varepsilon + f)\varphi dx \quad \forall \varphi \in V, \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} D_1(\nabla n_\varepsilon, \nabla\psi_\varepsilon) \nabla n_\varepsilon \cdot \nabla\varphi dx - \int_{\Omega} \frac{n_\varepsilon}{1 + \varepsilon n_\varepsilon} \mu_1(\nabla\psi_\varepsilon) \nabla\psi_\varepsilon \cdot \nabla\varphi dx = \\ & = \int_{\Omega} r(n_\varepsilon, p_\varepsilon) \left(1 - \frac{n_\varepsilon p_\varepsilon}{(1 + \varepsilon n_\varepsilon)(1 + \varepsilon p_\varepsilon)}\right) dx \quad \forall \varphi \in V, \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\int_{\Omega} D_2(\nabla p_\varepsilon, \nabla \psi_\varepsilon) \nabla p_\varepsilon \cdot \nabla \varphi dx + \int_{\Omega} \frac{p_\varepsilon}{1 + \varepsilon p_\varepsilon} \mu_2(\nabla \psi_\varepsilon) \nabla \psi_\varepsilon \cdot \nabla \varphi dx = \quad (3.8)$$

$$= \int_{\Omega} r(n_\varepsilon, p_\varepsilon) \left(1 - \frac{n_\varepsilon p_\varepsilon}{(1 + \varepsilon n_\varepsilon)(1 + \varepsilon p_\varepsilon)}\right) dx \quad \forall \varphi \in V$$

$$n_\varepsilon \geq 0, p_\varepsilon \geq 0 \text{ a.e. in } \Omega, \quad \psi_\varepsilon = \psi_o, n_\varepsilon = n_o, p_\varepsilon = p_o \text{ a.e. on } \Gamma_o. \quad (3.9)$$

The function  $\varphi = \frac{n_\varepsilon - n_o}{1 + |n_\varepsilon - n_o|}$  is admissible in (3.7). We obtain

$$\text{meas}\{x \in \Omega : |n_\varepsilon - n_o| \geq t\} \leq \frac{c_1}{\log(1+t)} \quad \forall \varepsilon > 0, \forall t > 0$$

( $c_1 = \text{const} > 0$  independent of both  $\varepsilon$  and  $t$ ). An analogous estimate is true with respect to  $p_\varepsilon - p_o$ . Hence

$$\int_{\Omega} (|\nabla n_\varepsilon|^2 + |\nabla p_\varepsilon|^2) dx \leq \text{const} \quad \forall \varepsilon > 0,$$

$$n_\varepsilon \leq K_1 + \text{ess sup}_{\Gamma_o} n_o, \quad p_\varepsilon \leq K_2 + \text{ess sup}_{\Gamma_o} p_o \quad \text{a.e. in } \Omega, \quad \forall \varepsilon > 0 \quad (3.10)$$

and

$$\int_{\Omega} (\psi_\varepsilon^2 + |\nabla \psi_\varepsilon|^2) dx \leq \text{const} \quad \forall \varepsilon > 0.$$

The passage to limit  $\varepsilon \rightarrow 0$  in (3.6) – (3.10) gives the statement of Theorem 3.1.

**Theorem 3.2 (Estimation of  $n$  and  $p$  from below).** *Let (2.1), (2.2) and (2.4), (2.5) be satisfied. Assume that*

$$n_o, p_o \in H^1(\Omega),$$

$$\text{ess inf}_{\Gamma_o} n_o > 0, \quad \text{ess inf}_{\Gamma_o} p_o > 0.$$

Let  $\psi, n, p \in H^1(\Omega)$  satisfy (3.2), (3.3), and let

$$n \geq 0, p \geq 0 \quad \text{a.e. in } \Omega, \quad \text{ess sup}_{\Omega} n < \infty, \quad \text{ess sup}_{\Omega} p < \infty,$$

$$n = n_o, p = p_o \quad \text{a.e. on } \Gamma_o.$$

Then there exist positive constants  $K_3, K_4$  such that

$$n \geq K_3, p \geq K_4 \quad \text{a.e. in } \Omega.$$

**Sketch of proof.** Let  $\delta > 0$ . The function  $\varphi = ((n+\delta)^{-\sigma} - k^{2\sigma/(\sigma-1)})^+$  ( $\sigma > 1$  an appropriately chosen constant,  $k \geq k_o = (\text{ess inf}_{\Gamma_o} n_o)^{(1-\sigma)/2}$ ) is admissible in (3.2).

Define

$$w = (n + \delta)^{(1-\sigma)/2}, \quad A_k = \{x \in \Omega : w(x) > k\}.$$

Then (3.2) implies

$$\int_{A_k} |\nabla w|^2 dx \leq \gamma k^2 \text{meas } A_k \quad \forall k \geq k_o$$

( $\gamma = \text{const} > 0$  independent of  $k$ ). By a standard argument,

$$w \leq \text{const} \quad \text{a.e. in } \Omega$$

where the constant does not depend on  $\delta$ . Whence there exists a positive bound on  $n$  from below.

An analogous argument applies to  $p$ .

# Über die glatte Abhängigkeit der Lösungen des gemischten Randwertproblems der zweidimensionalen Halbleitergleichungen von den Daten

L. RECKE

Humboldt-Universität zu Berlin, Fachbereich Mathematik, Unter den Linden 6,  
O-1086 Berlin, Germany

## Abstract

Es sei  $(u_o, n_o, p_o) \in W_{r_o}^1(\Omega)^3$  ( $u_o$  elektrostatisches Potential,  $n_o$  bzw.  $p_o$  Elektronen- bzw. Löcherdichte,  $r_o < 2$ ) eine Lösung des gemischten Randwertproblems für das van-Roosbroeck-System in einem Lipschitz-Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ . Ferner besitze das in dieser Lösung linearisierte Randwertproblem in  $W_2^1(\Omega)$  nur die triviale Lösung  $u = n = p = 0$ . Dann existiert ein  $r \in ]2, r_o]$ , so daß das Randwertproblem mit leicht gestörten Daten (Dotierung, Beweglichkeiten, vorgegebene Randwerte) genau eine Lösung  $(u, n, p) \in W_r^1(\Omega)^3$  nahe  $(u_o, n_o, p_o)$  besitzt, und diese Lösung hängt glatt von den Daten ab. Zum Beweis werden ein Satz von T. Valent über die Differenzierbarkeit von Nemycki-Operatoren, ein Regularitätssatz von K. Gröger für Lösungen gemischter Randwertprobleme sowie der Satz über implizite Funktionen benutzt.

## C. Numerische Methodenentwicklung

### An Adaptive Algorithm for the Solution of Parabolic Equations

F. A. BORNEMANN

*Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Heilbronner Straße 10, D-1000 Berlin 31, Germany*

#### Abstract

The solution of parabolic equations in the presence of nasty space geometries and discontinuous coefficients requires an adaptive procedure in time as well as in space. This will yield to highly nonuniform triangulations in space using a multilevel FEM method. An approach is presented in which neither this nonuniform triangulations does influence the adaptive time stepping nor the adaptive time steps does influence the behavior of the spatial FEM method. For the latter an efficient preconditioning is presented, which turns out to be the key for the error estimation as well. Numerical examples in 2D clearly show the significant perspectives opened by the new approach.

### Numerical Simulation of High-Voltage Planar $pn$ -Junctions by Self Adaptive Finite Element Methods

R. KORNUBER / R. ROITZSCH

*Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Heilbronner Straße 10, D-1000 Berlin 31, Germany*

#### Abstract

The potential distribution of reverse biased  $pn$ -junctions can be described by a double obstacle problem for the Laplacian. This problem is solved by a self adaptive Finite Element Method involving automatic termination criteria for the iterative solver, local error estimation and local mesh refinement. Special attention is paid to the efficient resolution of the geometries typically arising in semiconductor device simulation. The algorithm is applied to a reverse biased  $pn$ -junction with multi-step field plate and stop-electrode to illustrate its efficiency and reliability.

### Behandlung nichtlinearer Modelle im adaptiven Multilevelkonzept

P. DEUFLHARD

*Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Heilbronner Straße 10, D-1000 Berlin 31, Germany*

#### Abstract

Der Vortrag beschäftigt sich mit der numerischen Lösung sehr großer nichtlinearer Gleichungssysteme, wie sie bei der Diskretisierung von Randwertproblemen bei partiellen Differentialgleichungen entstehen. Im ersten Teil wird zunächst das Prinzip affininvarianter exakter Newton-Methoden mit Dämpfungsstrategie wiederholt. Für festes vorgegebenes Gitter und geeignete Wahl eines linearen iterativen Lösers werden sodann die zugehörigen inexakten Newton-Techniken entwickelt. Numerische Experimente mit dem Programm GIANT werden dargestellt. Im zweiten Teil des Vortrags werden diese Techniken auf den Fall von Folgen diskretisierter Gleichungen über Gitterfamilien übertragen. Zunächst wird ein (neues) asymptotisches Gitterunabhängigkeitsprinzip bewiesen. Auf dieser Basis wird das Konzept adaptiver Newton-Multilevel-Verfahren herausgearbeitet, bei dem das Zusammenspiel der Diskretisierung mit der inneren und äußeren Iteration mathematisch so sauber wie möglich kontrolliert wird.



# An approximate Newton–method for the Semiconductor Device Equations

K. GÄRTNER

*Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstr. 39, O-1086 Berlin, Germany*

## Abstract

Solving the system of the stationary semiconductor device equations in three dimensions one is strongly interested to reduce the complexity of the problem. An approximate decoupling of the electrostatic potential and the carrier densities, motivated by singular perturbation theory, was introduced in [1]. This reduces the problem to a scalar one and a two times two system. In many (majority carrier) situations the changes in the minorities are mostly determined by the changes of the majorities - so that the problem is reduced to scalar problems. Typical convergence rates are 0.2,...,0.02 in cases where Gummel's method shows slow convergence (MOSFET with current but not very strong recombination). Examples are given to illustrate the method.

## 1. Approximation for van Roosbroeck's Equations

The simplest version of van Roosbroeck's equations still fitting our purposes will be used - with a convenient scaling one arrives at the following system of Poisson's equation and continuity equations for electrons and holes:

$$\begin{aligned}
 -\Delta u &= f - n + p, \\
 -\nabla \cdot J_n &= -R, \quad J_n = \nabla n - n \nabla u, \\
 \nabla \cdot J_p &= -R, \quad J_p = -\nabla p - p \nabla u \quad \text{in } G, \\
 u &= u^0, \quad n = n^0, \quad p = p^0 \quad \text{on } \Gamma_0, \\
 \nu \cdot u + \alpha(u - u^1) &= \nu \cdot J_i = 0, \quad i = n, p \quad \text{on } \Gamma_1.
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

Here:  $G \subset \mathbb{R}^d$ ,  $1 \leq d \leq 3$ , is a Lipschitzian domain with boundary  $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$ ,  $\Gamma_0, \Gamma_1$  are disjoint,  $\Gamma_0$  is closed and has a positive surface measure,  $\nu$  is the outer unit normal at any point of  $\Gamma$ ; the unknown functions  $u, n, p$  represent the electrostatic potential, the densities of electrons and holes, respectively;  $J_n$  and  $J_p$  denote the electron and hole current density;  $R$  the recombination, generation ratio;  $f$  is a given density of impurities;  $u^0, n^0, p^0$  represent boundary values at ohmic (Dirichlet) contacts,  $u^1$  and  $\alpha$  are given functions modelling gate contacts. Einstein relations, relating mobilities and diffusion coefficients by a constant factor, are assumed, too. Let

$$\begin{aligned}
 Au &= f_1 + p - n, \quad (f_1, h) := (f, h) + \int \alpha u^1 h \, d\Gamma_1, \\
 B(u)n &= C(u)p = -R
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

be the discrete version of (1.1) with  $h$  as test function of the discretization. Let  $(U; N; P)$  be a given approximate solution of (1.2) and new variables  $x, y, z$  be introduced via  $u = U + x$ ,  $n = N(1 + x - y)$ ,  $p = P(1 + z - x)$ , so

$$\begin{aligned}
 Au &= f_1 + p - n, \\
 B(U)n + B'_u(N)(u - U) &= \\
 - R(N, P) - R_n N(x - y) - R_p P(z - x), \\
 C(U)p + C'_u(P)(u - U) &= \\
 - R(N, P) - R_n N(x - y) - R_p P(z - x)
 \end{aligned}$$

is the corresponding Newton linearized system. Motivated by [2] and the connected convergence problems in [1] an algorithm was suggested that should be understood as preconditioner decoupling the electrostatic potential and the carrier densities (with  $(\tilde{B}'_u = B'_u - R_p P, \tilde{B} = B + R_n, \tilde{C}'_u = C'_u + R_n N, \tilde{C} = C + R_p, \underline{P} = P1, \underline{N} = N1)$ ):

$$\begin{aligned} (A + P + N)x - Ny - Pz &= f_1 + \underline{P} - \underline{N} - AU \\ &= F_1 + \underline{P} - \underline{N}, \end{aligned}$$

$$\tilde{B}'_u x + \tilde{B}Nx - \tilde{B}Ny + R_p Pz = -\tilde{B}\underline{N} - R(N, P),$$

$$\tilde{C}'_u x - \tilde{C}Px + \tilde{C}Pz - R_n Ny = -\tilde{C}\underline{P} + R(N, P).$$

Choosing  $\tilde{A}^{-1}$  as an approximate inverse of  $A + N + P$  one has the following iteration scheme:

$$\begin{aligned} (\tilde{B}'_u \tilde{A}^{-1} + \tilde{B}(N\tilde{A}^{-1} - E))Ny^{i+1} + ((\tilde{B}'_u + \tilde{B}N)\tilde{A}^{-1} + R_p)Pz^{i+1} = & (1.3) \\ -\tilde{B}\underline{N} - R(N, P) - (\tilde{B}'_u + \tilde{B}N)\tilde{f}_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} ((\tilde{C}'_u - \tilde{C}P)\tilde{A}^{-1} - R_n)Ny^{i+1} + (\tilde{C}'_u \tilde{A}^{-1} + \tilde{C}(E - P\tilde{A}^{-1}))Pz^{i+1} = & (1.4) \\ -\tilde{C}\underline{P} + R(N, P) - (\tilde{C}'_u - \tilde{C}P)\tilde{f}_1, \end{aligned}$$

$$(A + P + N) x^{i+1} = (F_1 + \underline{P} - \underline{N} + Ny^{i+1} + Pz^{i+1}), \quad x^0 = 0. \quad (1.5)$$

$\tilde{A}$  is chosen as  $\tilde{A} = a \text{diag}[A] + N + P$ ,  $a$  damping parameter.  $a = 0$  corresponds to singular perturbation theory, for  $a \geq 1$  holds  $\tilde{A}_{ij}^{-1} \leq (A + N + P)_{ij}^{-1}$  and  $a \rightarrow \infty$  is a modified linearized Gummel scheme. So in some neighbourhood of the thermodynamical equilibrium one has an 'interpolation' between two convergent (in the continuous case) methods.  $a$  is used to approximate a characteristic eigenvalue ( $\alpha$ ) of  $A$  in those (small) parts of the domain with  $n + p \ll |f_1 + p - n|$  - or with other words in parts where the singular perturbed ansatz is violated and  $n + p$  should not be compared with 0 instead of  $\alpha$ . (1.5) guarantees the same smoothness for  $x$  as for  $u$  and should not be simplified.

## 2. Numerical Results

The system (1.3) to (1.5) has been implemented in ToSCA (2d device simulation program of the Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik) in the following manner: The remaining two times two system was solved by simple block forward backward substitution and one iteration starting with the majority carrier density and unmodified diagonal blocks  $\tilde{B}'_u \tilde{A}^{-1} + \tilde{B}(N\tilde{A}^{-1} - E)$ ,  $\tilde{C}'_u \tilde{A}^{-1} + \tilde{C}(E - P\tilde{A}^{-1})$ . In cases without recombination and negative / positive definite  $B'_u / C'_u$  (valid for special discretizations) this blocks are regular. Not any density or field dependence of the mobilities was included in the Jacobian matrices and the tests have been performed for different MOSFETs. Results for an avalanche breakdown are shown here. Figure 1 shows the current voltage characteristics.

Figures 2, 3 give an impression of the influence of the damping parameter  $a$  at various bias conditions.

Figure 4 illustrates the weak recombination coupling even at the highest injection levels and supports the diagonalization of the possibly two iteration processes.

At lower current levels one iteration for solving (1.3) to (1.5) is optimal, in the avalanche region the minority carrier density must be calculated correctly and the singular perturbed ansatz is violated. Together with convergence acceleration three or four iterations should be sufficient to reach the error reduction defined by the outer approximate Newton process.

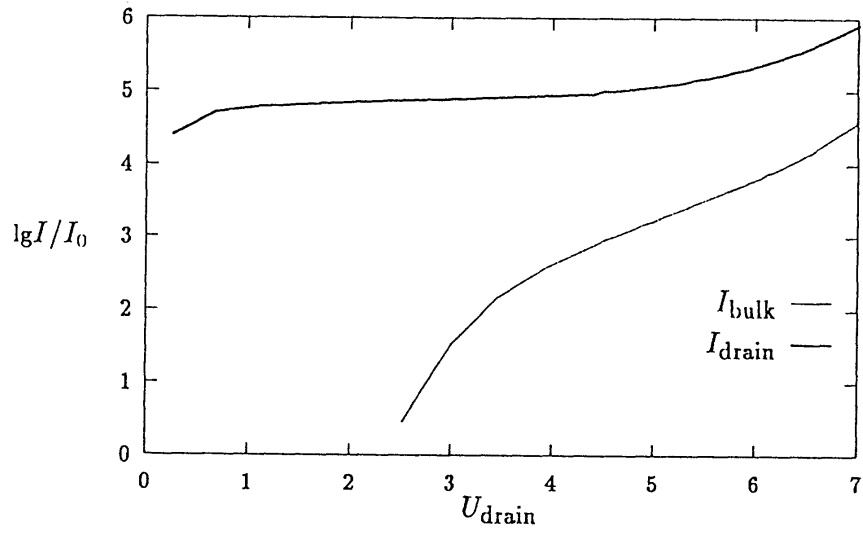


Figure 1: Drain and bulk current with avalanche generation,  $I_0 = 1.e - 8A$ ,  $U_{bulk} = U_{sour} = 0V, U_{gate} = 2V, \mu = \mu(n, p)$

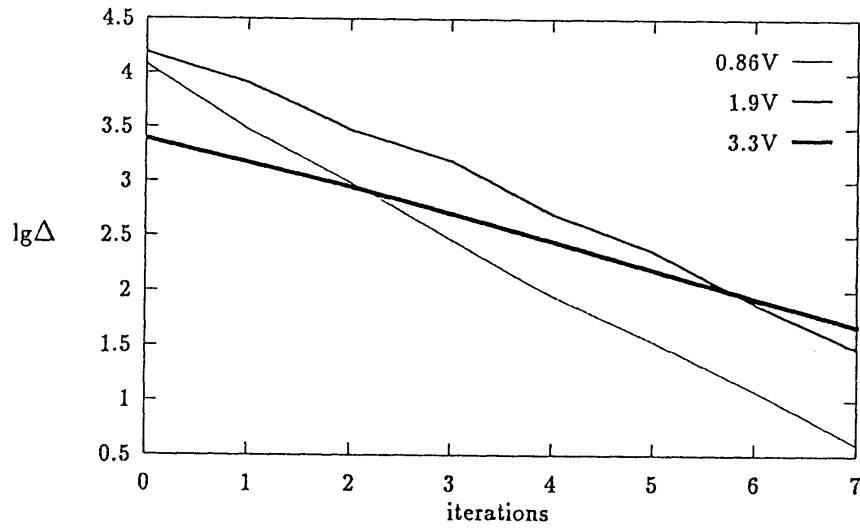


Figure 2: Convergence ratio  $\lg \Delta, \Delta = \max(\frac{U_{i+1} - U_i}{U_0})$  of the ele. potential,  $U_0 = 10^{-4}UT$ ,  $U_{bulk} = U_{sour} = 0V, U_{drain} = 0.86, 1.9, 3.3V, U_{gate} = 2V, \mu = \mu(n, p)$ , damping parameter  $a = 0.05$

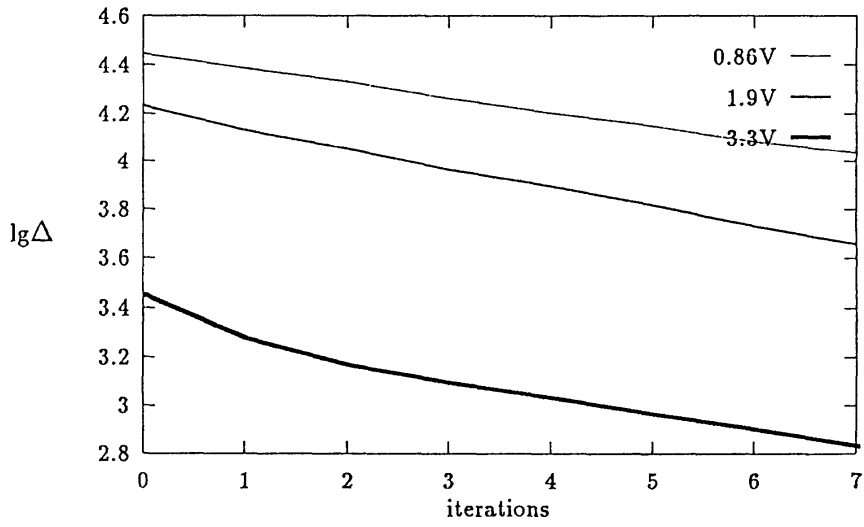


Figure 3: Convergence ratio  $\lg\Delta$  of the ele. potential,  $U_0 = 10^{-4}UT$ ,  $U_{bulk} = U_{sour} = 0V$ ,  $U_{drain} = 0.86, 1.9, 3.3V$ ,  $U_{gate} = 2V$ ,  $\mu = \mu(n, p)$ , damping parameter  $a = 100$

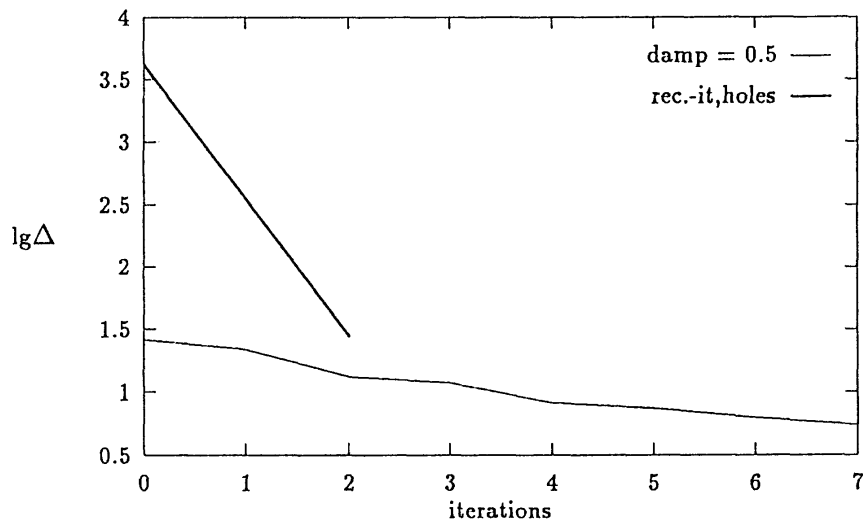


Figure 4: Convergence ratios: inner iteration process for holes and electrons (rec.-it,holes) and outer one for the ele. potential (damp=0.5),  $U_{bulk} = U_{sour} = 0V$ ,  $U_{drain} = 6.94V$ ,  $U_{gate} = 2V$ ,  $\mu = \mu(n, p)$ , damping parameter  $a = 0.5$

Figures 5 and 6 show the same behaviour for another example in a different manner.

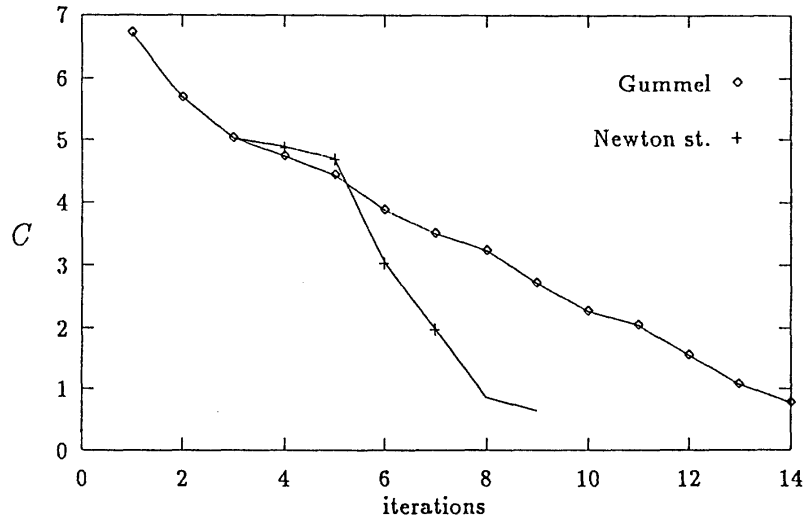


Figure 5: MOSFET,max-norm (corrections)  $C = \log(\Delta U/U_0)$ ,  $I_d = -3.866A/m$ ,  $U_0 = 10^{-6}U_T$ ,  $Bulk = Sour = 0$ ,  $Gate = 1.475V$ ,  $Drain = .1V$

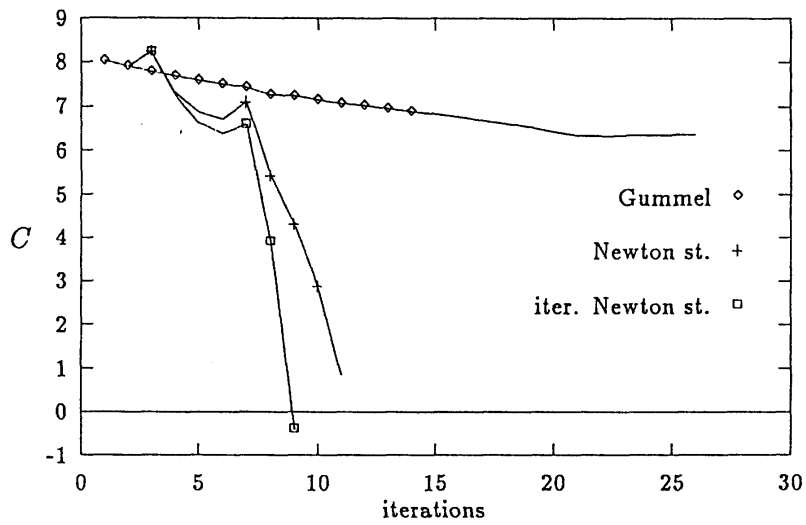


Figure 6: MOSFET,max-norm (corrections)  $C = \log(\Delta U/U_0)$ ,  $I_d = -3.937A/m$ ,  $U_0 = 10^{-7}U_T$ ,  $Bulk = -0.2V$ ,  $Sour = 0$ ,  $Gate = 5V$ ,  $Drain = 2/3V$ , + means one and  $\square$  five iterations to solve the whole modified system

## Acknowledgment

The author wants to thank Prof. Gajewski for many discussions and the support using ToSCA to test the algorithm.

## References

- [1] H. Gajewski and K. Gärtner: *On the iterative solution of van Roosbroeck's equations*. ZAMM (To appear).
- [2] C. Ringhofer and C. Schmeiser: *An approximate Newton method for the solution of the basic semiconductor device equations*, SIAM J. Numer. Anal. **26**, pp. 507–516 (1989).

## Multidimensional Semiconductor Device Simulation

S. MÜLLER / W. FICHTNER

*Integrated Systems Laboratory, ETH-Zürich, Switzerland*

### Abstract

We are currently developing a new simulation package for 1, 2, 3 dimensional device simulation. This package is based upon the solution of the classical three semiconductor equations plus the temperature equation, but could easily be extended by other partial differential equations. The user can control equation solution in a variety of methods and in arbitrary order through the input file.

Up to now, typical device simulators were able to simulate in one, two, or three dimensions only. This has two important drawbacks. First, each modification or extension had to be done in a different program ("had to be invented again for each dimension"). Secondly, in a typical design process the device designer has to switch between the dimensionality of his/her simulation, because of the necessary compromise between computational effort and meaningfulness of the calculation. This meant he had to switch between several programs, was forced to learn different command-languages, and had to live with the different restrictions of each special simulator.

In this contribution we want to demonstrate how we were able to implement a generic device simulator for all three dimensions. The basic difficulty came from the fact that a different discretization is needed in each dimension. Our approach can be divided into two parts: Based on work of G. Heiser in our laboratory, we developed a scheme to handle the geometrical information (i.e. elements, described by their vertices) independent of the dimensionality. We extended this by adding a mechanism to access edge information. Since we use the box method to discretize the semiconductor equations, we only have to provide information about the shapes of the boxes together with an algorithm how to assemble the system of linear equations using this information.

We feel that our work has certain advantages over the traditional approach to device simulation. We illustrate this by showing examples out of the design process of an MCT cell.

## New Developments in Iterative Methods for Device Simulation

C. POMMERELL

*Integrated Systems Laboratory, ETH-Zürich, Switzerland*

### Abstract

The most time-consuming operation in large scale semiconductor device simulation is the solution of sparse systems of linear equations. For 3-D simulations and large 2-D simulations, these systems involve currently between 10,000 and 300,000 unknowns, and their

solution takes more than 90% of the total execution time. Sparse direct solvers cannot be used because of their huge storage requirements. Preconditioned iterative solvers are used instead.

The linear systems in device simulation are unsymmetric and very ill-conditioned, and their matrices have a very irregular sparsity structure due to the large variations in the density of the discretization grids. Most iterative methods and preconditioners fail for this kind of problems. Only biorthogonalisation methods achieve to solve most of these systems. We will report on our experience with the standard BiCG and CGS methods, and with the new Bi-CGSTAB algorithm.

CGS and Bi-CGSTAB achieve to solve most of the linear systems in device simulation when applied with standard incomplete factorization preconditioners, but they still fail on a few particularly badly conditioned systems. We have developed a numerical dropping preconditioner that fills this gap.

PILS, our package of iterative linear solvers, combines a large set of preconditioners and iterative methods. It allows to use faster methods for moderately ill-conditioned linear systems, and switches to more expensive methods whenever the conditioning of these systems requires it.

## Massively Parallel Solution of the Three-Dimensional van Roosbroek Equations

O. HEINREICHBERGER / S. SELBERHERR / M. STIFTINGER

*Institute for Microelectronics, Technical University Vienna, Gusshausstraße 27-29  
Vienna, A-1040 Austria*

### Abstract

In this paper we present our experience with the implementation of the three-dimensional semiconductor device simulator MINIMOS on a massively parallel architecture, the Connection Machine CM2. The emphasis of this work is placed on parallel iterative methods for solving the very large sparse linear systems of equations that arise at each step of the nonlinear solution procedure. Both symmetric and nonsymmetric linear systems are solved by conjugate gradient type iterative methods. The implementation of the parallel preconditioner is the most crucial step. Multicolor incomplete LU factorization preconditioners are compared with polynomial preconditioners.

Several numerical examples from the nonsymmetric linear systems in MINIMOS are given with timing results obtained using the CM2. Comparisons with vector supercomputers are made.

### 1. Overview

Semiconductor device simulators compute the discrete solution of the semiconductor device partial differential equations: The Poisson equation and the carrier (electrons and holes) continuity equations. This system of nonlinear conservation laws is either solved by a damped Newton method or by a nonlinear Gauss-Seidel iteration, the so-called Gummel [6] algorithm. In the latter case, to which we restrict ourselves, each nonlinear (outer) iteration consists of the successive solution of the Poisson equation for the electrostatic potential  $\psi$  and of two carrier continuity equations for the electron and hole concentrations,  $n$  and  $p$ , respectively. Here we consider only three-dimensional nonuniform tensor product grids. For an overview see e.g. [1].

Solving the semiconductor equations means the repeated solution of large sparse linear systems. The coefficient matrices of the discrete continuity equations are nonsymmetric. Our contribution here is largely concerned with the iterative solution of those nonsymmetric linear systems on the CM2. The emphasis is placed on parallel preconditioning methods. See also [4].

Iterative methods applied to the discrete continuity equations have to cope with high condition numbers of the coefficient matrices and the enormous numerical range of the solution vector.

Contrary to the Poisson equation the discrete continuity equations have to be evaluated much more accurately to guarantee the stability of the nonlinear iteration resulting in high iteration counts of the nonsymmetric solver. (see [1], [7]). transformation is numerically infeasible. We use the bi-conjugate gradient squared (BiCGS) [13] method and a stabilized version of this algorithm, BiCGSTAB [15], for these nonsymmetric linear systems.

---

```

Choose  $x_0$  (e.g.  $x_0 = 0$ )
 $r_0 = (b - Ax_0)$ 
Choose  $y_0$  such that  $\langle y_0, r_0 \rangle \neq 0$  (e.g.  $y_0 = r_0$ )
 $p_0 = v_0 = 0$ 
 $\rho_{-1} = 1$ 
 $\omega_0 = 1$ 
 $\alpha = 1$ 
FOR  $n = 0$  STEP 1 UNTIL convergence DO
   $\rho_n = \langle y_0, r_n \rangle$ 
   $\beta = \frac{\rho_n}{\rho_{n-1} \omega_n}$ 
   $p_{n+1} = r_n + \beta(p_n + \omega_n v_n)$ 
   $v_{n+1} = Ap_{n+1}$ 
   $\alpha = \langle y_0, v_{n+1} \rangle$ 
   $s = r_n - \alpha v_{n+1}$ 
   $t = As$ 
   $\omega_{n+1} = \frac{\langle t, s \rangle}{\langle t, t \rangle}$ 
   $r_{n+1} = s - \omega_{n+1} t$ 
   $x_{n+1} = x_n + \alpha p_{n+1} + \omega_{n+1} s$ 
END FOR

```

---

Table 1: BiCGSTAB Algorithm

## 2. The Linear Solvers

The parallel solvers are of (bi-)conjugate gradient type. A relative error of  $10^{-3}$  for the symmetric, and  $10^{-8}$  for the nonsymmetric systems (motivated by numerical experiments only) in the stopping criterion has been found sufficient.

For the Poisson equation the MIC-CG method [5], [10] with a modification factor of  $\alpha = 0.95$  is the optimal choice to the best to our knowledge. On the CM2 we use the CG in the version of Concus, Golub and O'Leary. As preconditioner the reduced system (RS) main diagonal is used. We shall denote this method by RS-CG.

In the case of locally constant carrier temperatures (see [7]) the coefficient matrices of the discrete continuity equations are diagonally similar to symmetric, positive definite matrices and thus have a positive real spectrum. In these linearized discrete systems the matrix coefficients vary rapidly resulting in a high condition number, thus yielding a large iteration count of the linear iterative solver.

Among the number of iterative methods investigated [7] variants of the bi-conjugate gradient method such as the biconjugate gradient squared (BiCGS) method and the BiCGSTAB method [15] (see Table 1) seem to be the optimal choice.

In particular the BiCGSTAB procedure improves one of the main problems of BiCGS, namely



its erratic convergence behavior which often yields significantly more iterations for convergence than necessary. At the same time the rapid convergence of BiCGS is maintained. BiCGSTAB needs two dotproducts more, and one vector update less.

### 3. Preconditioning Methods

Efficient and robust preconditioning is the most critical issue for the iterative solution of the discrete semiconductor equations.

Split incomplete LU preconditioning enables an efficient implementation of the incomplete Choleski and the incomplete LU preconditioner, a technique originally proposed in [3]. However, the ILU preconditioner of the naturally ordered unknowns is rather sequential in nature and thus unattractive on a SIMD architecture. Alternatives are polynomial preconditioners and ILU with multicolor orderings.

For multicolor ILU preconditioning the coefficient matrix is permuted according to some regular replication ('coloring') pattern of the unknowns [12]. A partitioning of the unknowns into sets of different colors resulting in a block structure of the coefficient matrix uncouples the unknowns of the same color. The vector length decreases as the number of colors increases. At the same time the convergence speed – usually – increases. We have made experiments using the simulator NSPCG [11]. The results indicate that more than two colors are not favourable. We therefore implemented a 2-color (red-black) ILU preconditioner. Partitioning the coefficient matrix  $\mathbf{A}$  into blocks

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_R & \mathbf{H}_{RB} \\ \mathbf{H}_{BR} & \mathbf{D}_B \end{pmatrix}$$

(the indices R denote the red, B the black points) the 'reduced system' is obtained by eliminating one of both sets of (e.g. the red) unknowns:

$$(\mathbf{D}_B - \mathbf{H}_{BR}\mathbf{D}_R^{-1}\mathbf{H}_{RB}) x_B = b_B - \mathbf{H}_{BR}\mathbf{D}_R^{-1}b_R \quad (3.1)$$

The preconditioner is then the main diagonal of the reduced system

$$\tilde{\mathbf{D}}_B = \mathbf{D}_B - \text{diag}(\mathbf{H}_{BR}\mathbf{D}_R^{-1}\mathbf{H}_{RB}) \quad (3.2)$$

resulting in a symmetric diagonal scaling:

$$\tilde{\mathbf{D}}_B^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{D}_B - \mathbf{H}_{BR}\mathbf{D}_R^{-1}\mathbf{H}_{RB}) \tilde{\mathbf{D}}_B^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{D}}_B^{\frac{1}{2}} x_B = \tilde{\mathbf{D}}_B^{-\frac{1}{2}} (b_B - \mathbf{H}_{BR}\mathbf{D}_R^{-1}b_R) \quad (3.3)$$

Thus, scaling the red unknowns by the square root of main diagonal  $\mathbf{D}_R$  we may write the preconditioned system in the form

$$(\hat{\mathbf{D}}_B - \hat{\mathbf{H}}_{BR}\hat{\mathbf{H}}_{RB}) \hat{x}_B = \hat{b}_B \quad (3.4)$$

where hats (^) denote preconditioned quantities. Approximately half of the virtual processors in the Connection Machine are inactive during each stage.

Matrix polynomials as preconditioners were originally proposed in order to remove the recursions in the incomplete LU factors [2]. The construction of least squares polynomials that minimize the residual with respect to some weight function [9] is feasible due the positive real spectrum of the coefficient matrices of the uncoupled discrete device equations. The evaluation of matrix polynomials can be carried out recursively and is a fast operation especially on an SIMD architecture.

In Figure 1 we present convergence results obtained from the majority continuity equation solve of the first nonlinear iteration of device 1 (see Section 5). The 2-norm of the relative euclidean solution error is plotted using the BiCGSTAB iterative procedure with various preconditioners: Point Jacobi (JA) i.e. diagonal scaling, the Reduced System (RS), Least Squares polynomials LS(i) up to degree 8, and incomplete LU (ILU) with zero fill-in.

#### 4. Installation on the CM

MINIMOS is a standard FORTRAN 77 program. A two-dimensional simulation provides the initial data prior to the three-dimensional run. The maximum number of gridpoints in each dimension of the self-adaptive grid is 64 nodes. A massive parallelization throughout the whole MINIMOS code for application on the CM2 requires a rewrite of the largest part of the MINIMOS source code in connection machine FORTRAN (CMF) and was not the purpose of this work. Such a rewrite is very time-consuming, of little scientific value, but necessary for a production code on the Connection Machine. A compromise was obtained by leaving the largest part of the MINIMOS code, essentially all parts except the linear system solvers, in the FORTRAN 77 standard and using the Connection Machine for the solution of the linear systems only. Such an implementation achieves parallelization of the most costly computational part – the linear system solution – at relatively low programming costs. That is, the matrix assembly is done on the so-called front-end computer, and the linear system solution is achieved on the Connection Machine. The Connection Machine acts so to speak as a ‘coprocessor’ for linear system solving. An interface using routines from the CMF library was provided to quickly move binary data to and from the Connection Machine’s processors. The matrices are stored by diagonals. For a 262144 node mesh the move of 9 diagonals (matrix+rhs+solution) per solve takes approx. 40 seconds. This time which is independent of the number of processors allocated is in most cases larger than the solution of the linear systems within the CM2. In an actual production code such an IO bottleneck must clearly be avoided.

The linear solvers RS-CG and the RS-BiCGSTAB methods have been benchmarked. Some results are shown in Table 2: Three tensor product grids of  $16^3$ ,  $32^3$  and  $64^3$  points are chosen. The Laplace equation is solved on 8k, 16k and 32k processors using double precision arithmetic.

Using 32k processors we find a megaflop rate of 120 for the  $N = 64^3$  grid. Note that only half of the virtual processors are active due to the red-black mask. Obviously this speed is determined by the speed of the 7 point stencil which executes with roughly 200 megaflops. Correspondingly we obtain approximately 50 megaflops on 16k processors for the same grid. The low speed of the 7-point stencil computation is the reason why polynomial preconditioners are not (yet) competitive. Despite global communication the dotproduct achieves a rate of 300 megaflops. This makes polynomial preconditioners compare unfavorable. We use the RS preconditioner for our device simulation runs therefore.

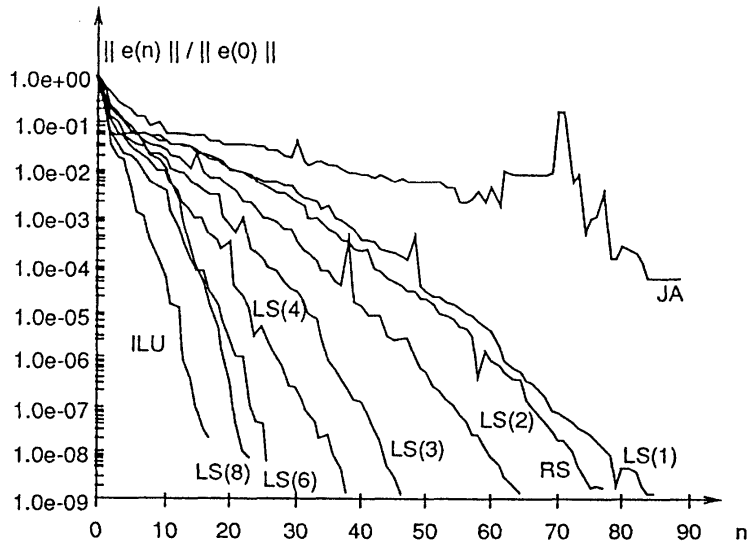


Figure 1: Convergence Curves for the Discrete Majority Continuity Equation of Device 1.

Solver hline # Processors	RS-CG			RS-BiCGSTAB		
	8k	16k	32k	8k	16k	32k
16 × 16 × 16	10	10	10	20	20	20
32 × 32 × 32	40	20	10	50	30	20
64 × 64 × 64	190	110	60	300	160	90

Table 2: RS-CG and RS-BiCGSTAB Benchmarks (msec per iteration)

## 5. Performance Analysis

In this section performance measurements of MINIMOS on a 32k processor Connection Machine CM2 are given. 16k processors are used in all simulations. The reduced system conjugate gradient method is used for the Poisson equation, and the reduced system conjugate gradient squared (RS-BiCGSTAB) method is used for both carrier continuity equations.

We present three device simulation runs of different complexity. Device 1 is an NMOSFET in the subthreshold operating region, device 2 a PMOSFET in the saturation region and device 3 an NMOSFET in saturation with a complex shape of the oxide-semiconductor interface thus requiring a fine mesh. The simulation includes a selfconsistent treatment of impact ionization and carrier recombination.

In Table 3 performance statistics of the three simulations are listed. The rows in Table 3 have the following meaning: Row 1 shows the grid dimensions, row 2 the number of nonlinear (Gummel) iterations. Row 3 through row 9 shows the total times and iteration counts of the linear iterative solvers for the majority and minority carrier continuity (CC) equation and the Poisson equation. The timings do *not* include front-end computation and transfer times to and from the CM2.

As has been outlined in the previous section the implementation using straightforward FORTRAN code and so-called *fieldwise* data (a special CM data format) is far from optimality. The linear solvers execute with approximately 60 megaflops on 16k processors. In the case of a mean convergence degradation factor of 4 (RS vs. ILU) as e.g. in device 3 this corresponds to a 15

megaflop scalar machine using MIC-CG/ILU-BiCGS. For a detailed description of numerical results see [8].

## 6. Some Remarks and Conclusions

The implementation on the Connection Machine has been carried out in a relatively short time by porting the computationally most expensive code onto the Connection Machine. We have learned that the Connection Machine is easy to use and to program although re-programming of selected parts of the software is required.

Complex simulations, say, tasks exceeding 100000 unknowns execute well on the CM2 (no memory problems). However the matrix assembly on the front end computer becomes disastrous slow. Furthermore, the transfer time of the diagonally stored 7-band matrix and the right hand side to and the solution vector from the Connection Machine's processors is in most cases slower than the solution of the linear system itself. For a production code this is not acceptable. Therefore an interaction of the front-end computer with the Connection Machine's processors, which involves computation and transfer of large sets of binary data, must be avoided.

Thinking Machines Corporation is improving its FORTRAN compiler, using a *slice-wise* data layout. Optimization of many basic linear algebra subroutines (such as multiwire nearest neighbour communication for stencil operations, overlapping of communication and computation) is under way. A speedup of CMF-coded FORTRAN code by a factor between 4 to 8 seems realistic. A one gigaflop execution speed of the linear CG and BiCGSTAB solvers is expected. Assuming a mean convergence deterioration factor of 4 corresponding to the ILU(0) preconditioned solvers, this corresponds to 250 megaflops of MIC-CG and ILU-BiCGSTAB. In a recent work [14] high performance implementations of MINIMOS on vector-computers were presented. There it has been shown that megaflop rates exceeding 100 megaflops are obtainable for the MIC-CG and ILU-BiCGS solvers. E.g. the FUJITSU VP200 can execute the triangular solves of the ILU(0) preconditioner, the bottleneck of the overall computation, with 100 megaflops. We expect that a fully optimized code on the CM should thus be at least twice as fast.

The convergence loss factors of the iterative solvers in the presented simulations are larger than three, in some cases larger than 10. A convergence degradation of more than a factor of 10 makes the question of a potential superiority of the Connection Machine or similar massively parallel computer architectures over vector-supercomputers doubtful. Part of this convergence dilemma is believed to be an insufficient 3D mesh. The ILU preconditioner can much more efficiently handle grids that deviate to much from quasi-uniformity. An improved grid generation with respect to conditioning of the linear equations may alleviate this problem and is part of current investigations.

Parallel preconditioning concerning the semiconductor equations is in its early stages. Black-box solvers such as those used in this investigation may not be the ultimate answer. Concepts that are more flexible in nature such as domain decomposition methods, are likely to yield better results on parallel computers. Further research in this field is encouraged.

The following final statements are meant to summarize what we believe a potential user of MINIMOS, e.g. a process/device engineer at a semiconductor manufacturing site, would expect from a Connection Machine implementation: At first double precision hardware is an absolute prerequisite for any implementation. This is not only true for MINIMOS but also for all process simulators, a class of software tools which are also candidates for Connection Machine implementations.

A Connection Machine system with a large number of processors is desirable. On the one hand this provides a powerful computing basis for very large three-dimensional problems, on the other hand a large number of processors may be subdivided, thus enabling more than one simulation to be executed concurrently on the Connection Machine. Concurrency of this type is essential to any integration of simulators such as MINIMOS into a technology CAD framework.

Fast transfer of binary data to and from the Connection Machine's processors is a key requirement for the use of the Connection Machine in a server-client manner. The transfer speeds for large sets of binary data between the Connection Machine and the front-end computer measured in this work are rather slow. We note that modern device/process CAD environments, are based on a computer network, which consists of high performance workstations as visualization tools and supercomputers as the device/process equation solvers. The effectiveness of such a configuration depends quite critically on a fast interconnection between the workstations and the supercomputer hardware.

	Device 1	Device 2	Device 3
Meshpoints	12880	18144	171985
Nonlin. Iter.	5	18	26
Total CPU Time (s)	72	216	5700
Majority CC Lin. Iter.	415	5328	9880
Majority CC Time (s)	8	100	1680
Minority CC Lin. Iter.	3160	5076	22360
Minority CC Time (s)	59	97	3800
Poisson Lin. Iter.	115	540	1014
Poisson Time (s)	5	20	212

Table 3: Performance of MINIMOS on 16k Processors

## References

- [1] Bank, R.E., Rose, D.J., Fichtner, W.: *Numerical Methods for Semiconductor Device Simulation*. IEEE ED-30, pp. 1031-1041, 1983
- [2] Dubois, P.F., Greenbaum, A., Rodrigue, G.H.: *Approximating the Inverse of a Matrix for Use in Iterative Algorithms on Vectors Vector Processors*. Computing, vol. 22, pp. 257-268, 1979.
- [3] Eisenstat, S.C.: *Efficient Implementation of a Class of Preconditioned Conjugate Gradient Methods*. SIAM J.Sci.Stat.Comput., vol. 2, no. 1, Mar. 1981, pp. 1-4.
- [4] Guerrieri, R., et. al.: *Massively Parallel Algorithms for Three-Dimensional Device Simulation*. Proceedings NUPAD 2, July 1990, pp. 35-36
- [5] Gustafsson, I.: *A Class of First Order Factorization Methods*. BIT, 18 (1978), pp. 142-156.
- [6] Gummel, H.K.: *A Selfconsistent Iterative Scheme for One-dimensional Steady State Transistor Calculations*. IEEE ED-11, pp. 455-465, 1964.
- [7] Heinrichsberger, O., Selberherr, S., Stiftinger, M., Traar, K.P.: *Fast Iterative Solution of Carrier Continuity Equations for 3D Device Simulation*. To appear in *SIAM J.Sci.Stat.Comput.*
- [8] Heinrichsberger, O.: *MINIMOS on the Connection Machine*. Technical Report, February 1991, Institute for Microelectronics, Technical University Vienna, Austria.
- [9] Johnson, O.G., Micchelli, A., Paul, G.: *Polynomial Preconditioners for Conjugate Gradient Calculations*. SIAM J.Numer.Anal., vol. 20, no. 2, Apr. 1983, pp 362-376.
- [10] Meijerink, H., Vorst, H.: *An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix*. Math. Comp., 31 (1977), pp. 148-162.

- [11] Oppe, T.C., Joubert, W.D., and Kincaid, D.R.: *NSPCG User's Guide*. Center of Numerical Analysis, University of Texas at Austin, 1984.
- [12] Poole, E.L., Ortega, J.M.: *Multicolor ICCG Methods for Vector Computers*. SIAM J.Numer. Anal., vol. 24, no. 6, Dec. 1987, pp. 1394-1418.
- [13] Sonneveld, P.: *CGS, A Fast Lanczos-Type Solver for Nonsymmetric Systems*. SIAM J.Sci.Stat.Comput., vol. 10, no. 1, Jan. 1989, pp. 36-52.
- [14] Traar, K.P., et. al.: *High Performance Preconditioning on Supercomputers for the 3D Device Simulator MINIMOS*. Proceedings Supercomputing '90, pp. 224-231.
- [15] Vorst, H.A.: *Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of BiCG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems*. To appear in *SIAM J.Sci.Stat.Comput.*

## Vorstellung des Halbleiter-Simulationsprogramms BREAKDOWN mit einigen Beispielen an hochsperrenden $pn$ -Übergängen

E. FALCK / W. FEILER / W. GERLACH

*Technische Universität Berlin, Fachbereich 19 – Elektrotechnik, Institut für Werkstoffe der  
Elektrotechnik, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12, Germany*

### Abstract

Das Halbleiter-Simulationsprogramm BREAKDOWN berechnet durch Lösen der zweidimensionalen Poisson-Gleichung die Potential- und Feldverteilung von hochsperrenden  $pn$ -Übergängen. Durch Anwendung des "Depletion"-Modells erübrigt sich eine Berücksichtigung der Strom- und Kontinuitätsgleichungen im Sperrfall. Unter Vorgabe der Nettodotierungskonzentrationen der festen Gitterstörstellen erfolgt in selbstkonsistenter Weise eine physikalisch korrekte Aufteilung des Halbleiters in Bahngebiete und Raumladungszone. Es ist möglich, bis maximal 5 floatende Gebiete zu berücksichtigen. Anhand der Ionisationsintegrale, die entlang von Feldlinien durch die relativen Feldstärkemaxima im Halbleitergebiet berechnet werden, läßt sich die Durchbruchspannung ermitteln.

Der Lösungsalgorithmus von BREAKDOWN wird vorgestellt. Die wichtigsten Strukturen, die mit dem Programm berechnet werden können, werden gezeigt. Ferner werden Ergebnisse aus Simulationsrechnungen vorgestellt sowie Vergleiche mit experimentellen oder analytischen Ergebnissen vollzogen.

Auf Vergleiche mit dem neuen Programm BDKASK, das in Kooperation mit dem Konrad-Zuse-Zentrum in Berlin entstanden ist, wird eingegangen.

## Einsatz der Evolutionsstrategie zur Optimierung von Feldringen und mehrstufigen Feldplattenstrukturen

R. BASSUS

*Technische Universität Berlin, Fachbereich 19 – Elektrotechnik, Institut für Werkstoffe der  
Elektrotechnik, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12, Germany*

### Abstract

Es wird eine Planarstruktur, die mit einer fünfstufigen Feldplatte und einer Stoppzone versehen ist, bezüglich der sperrfähigkeit optimiert. Der Volumendurchbruch beträgt 2000 Volt. Ohne Feldplatte erreicht die Struktur nur 21% der Volumendurchbruchspannung. Bei einer Begrenzung der lateralen Länge auf  $470\mu m$  wird mit Hilfe der Evolutionsstrategie eine automatische Optimierung der Feldplattenanordnung vorgenommen. Die Durchbruchspannung der optimierten Struktur beträgt 89% des Volumendurchbruchs. Die Methode und die wichtigsten Ergebnisse werden vorgestellt.

## Analytische und numerische Probleme der 2D- Prozesssimulation

R. HÜNLICH / N. STRECKER

*Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin, Germany*

### Abstract

Es wird ein Überblick über den Stand der 2D-Prozesssimulation am Institut für Mathematik gegeben. Dazu werden Simulationsergebnisse zu realistischen technologischen Abläufen vorgestellt, die verwendeten Modelle und Besonderheiten im Zugang zur numerischen Lösung der Gleichungen beschrieben. Die verwendeten nichtlinearen gekoppelten Diffusionsgleichungen und die zugelassenen Klassen von Rand- und Übergangsbedingungen werden unter thermodynamischen Aspekten diskutiert und Ansätze für analytische Untersuchungen vorgestellt.

Bei der Modellierung der Oxydation müssen außerdem konvektive Transportprozesse in den Schichten und an den Phasengrenzen berücksichtigt werden. Für die Oxydationsmittel werden zusätzliche Reaktions-Diffusions-Gleichungen gelöst. Schließlich wird die Modellierung des mechanischen Verhaltens der Schichten diskutiert.

## Neuere Verfahren zur Simulation kinetischer Gleichungen

H. BABOVSKY

*IBM Wissenschaftliches Zentrum, Tiergartenstraße 15, D- 6900 Heidelberg, Germany*

### Abstract

Kinetische Gleichungen beschreiben die Evolution von Teilchendichten im Phasenraum auf der Basis der mikroskopischen Dynamik der Teilchen. Da diese Gleichungen in der Regel sehr komplex sind (6-dimensionaler Phasenraum, 5-dimensionales Stoßintegral), bedient man sich zu ihrer Lösung gewöhnlich sogenannter Teilchen-Simulationsmethoden. Solche Verfahren sind seit den frühen siebziger Jahren in verschiedenen Bereichen der Physik bekannt (u.a. in der Theorie der dünnen Gase, Halbleiterphysik, Schwerionenphysik). Die ursprüngliche und auch heute noch überwiegende Motivation zur Entwicklung dieser Verfahren ist es, das Verhalten "realer" Teilchen in einem reduzierten Teilchenensemble nachzuspielen. Aus verschiedenen Gründen sind solche Verfahren jedoch nur wenig geeignet für moderne Rechnerarchitekturen.

Der Vortrag befaßt sich mit neueren Verfahren zur Simulation kinetischer Gleichungen. Vornehmlich zwei Entwicklungszweige werden angesprochen: einmal die Ausarbeitung von Teilchen "dynamiken", welche zur vektoriellen bzw. zur parallelen Abarbeitung gut geeignet sind. (Solche "Dynamiken" sind zwar nicht mehr physikalisch motiviert, aber was hierdurch an Intuition verloren geht, gewinnt man in Form wesentlich gesteigerter Effizienz wieder.) Zum zweiten gehören hierzu Maßnahmen zur Reduktion von Fluktuationen und systematischen Fehlern, welche insbesondere Simulationen bei kleinen Teilchenzahlen nachhaltig stören. Solche Maßnahmen beinhalten die Einführung von wohlverteilten Zahlenfolgen anstelle von Zufallszahlen ebenso wie die Anwendung von Zeitfilter-Techniken, welche es erlauben, auch mit kleinen Ensembles gute Ergebnisse zu erzielen.

## D. Simulationsergebnisse

### TOSCA–Simulations of Silicon Devices

B. HEINEMANN / R. RICHTER

*Institute for Physics of Semiconductors, Walter-Korsing-Str. 2  
O-1200 Frankfurt (Oder), Germany*

#### 1. Introduction

The important role of numerical simulations for the optimization of semiconductor devices is nowadays unquestionable.

The introduction of advanced semiconductor technologies increases the possibilities for the design of smaller and faster devices as well as for the development of structures with new features. The BiCMOS–technique for instance allows to combine the advantages of MOS and bipolar devices not only at the circuit level but also within single devices. Anisotrope etching techniques, silicon on insulator and wafer bonding technologies open new ways in the field of sensors allowing the on chip integration of sensors and electrical circuits.

The conception of new devices using enlarged technological capabilities requires simulation tools suitable for arbitrarily shaped 2d structures as well as for the study of static and dynamic device behaviour. The inclusion of the influence of light and other charge generating radiation into the drift–diffusion model represents a helpful extension of device simulators. An incorporation of passive external elements into transient simulations can form an idea of the behaviour of the simulated device in an electrical network. While designing new devices in silicon we demonstrate the usefulness of these features implemented in the 2d device simulator TOSCA [1].

#### 2. A bipolar–MOS driver

In the following section, a merged BiCMOS driver device is discussed, which can operate as pull up driver to charge large capacitive loads like interconnections and circuit output stages [2]. The structure occupies only a small area leading to reduced internal parasitic capacitances. Figure 1 (page 91) shows a cross section with an overlying potential distribution of the driver structure while charging a capacitor  $C$  of 0.6 pF. The single device components are a p–channel MOS–transistor (Q1), a vertical npn BJT (Q2) and a lateral pnp BJT (Q3). Q1 controls the base current of Q2 operating in the common collector configuration. The collector of Q2 is connected to  $V_{DD}$  (usually 5 V). In the activated state of the bipolar–MOS structure (e.g. Q1 and Q2 turn on) the source–emitter–voltage  $V_{SE}$  determines essentially the device behaviour because it defines not only the drain–source–voltage of Q1 but also the base–emitter–voltage of Q3. The lateral potential drop in the n–well (base of Q3) due to the collector current of Q2 forward biases the base emitter diode of Q3. Under these operating conditions a positive feedback between Q2 and Q3 can occur so that the thyristor can operate in the forward–conducting mode. Figure 2 (page 91) shows the  $V(t)$ – and  $I(t)$ –characteristics of the bipolar–MOS driver charging a capacitive load of 0.6 pF for  $V_{Source} = 3$  V and 4 V, respectively. In the  $V_{Source} = 3$  V case a small current is driven only by the npn BJT Q2, while increasing  $V_{Source}$  affects the turn on of the small thyristor with enhanced driving capability and operation speed. The switching point of the thyristor is adjustable by  $V_{SE}$ , the collector current of Q2 (capacitive load), the resistivity of the n–well and the channel length of Q1.

If  $V_{SE}$  falls below the holding voltage, the thyristor stops itself. A parasitic effect of the structure is the existence of minorities in the n–well after turning off. Hence, one have to arrange these structures in a separated n–well to protect sensitive circuits against diffusing holes.

The time step control of TOSCA described in [3] tries to keep constant the product of time



step and a measure of distance  $d$  between two successive states of the system  $u_1(\phi^j, n^j, p^j)$  and  $u_2(\phi^{j+1}, n^{j+1}, p^{j+1})$ , dimensionless  $d$  is given by:

$$d(u_1, u_2) = \left( \int_G (n^{j+1} - n^j) \log \frac{n^{j+1}}{n^j} + (p^{j+1} - p^j) \log \frac{p^{j+1}}{p^j} + \frac{\epsilon}{2} |\nabla(\phi^{j+1} - \phi^j)|^2 dG \right)^{1/2} \quad (2.1)$$

$\phi$  denotes the electrostatic potential.  $\epsilon$  is the permittivity,  $n$  and  $p$  are the electron and hole concentrations, respectively. Figure 2 (page 91) gives an impression on the time step control effect, too. The maximum values of  $d$  correspond to minimum time steps. TOSCA used minimum time steps of 9.5 ps and 1.8 ps for the 3 V case and 4 V case, respectively.

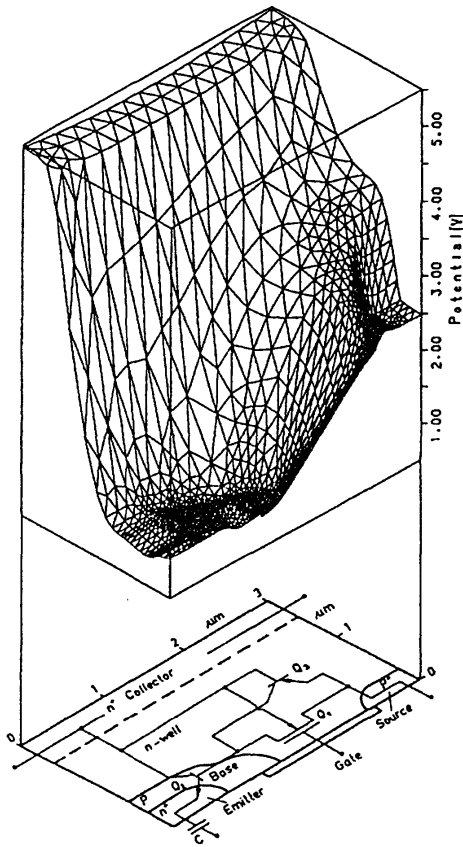


Figure 1: Cross section, equivalent circuit and potential distribution of charging bipolar-MOS driver

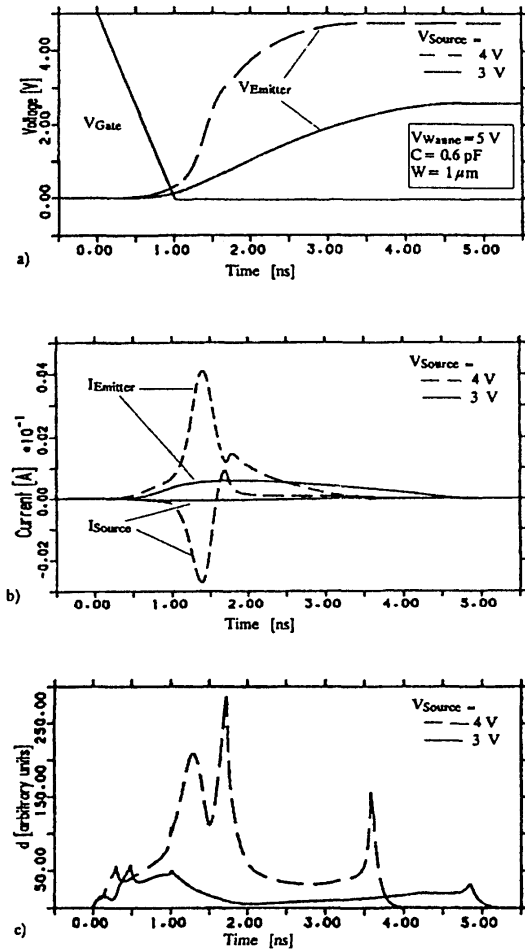


Figure 2: Transient analysis of charging a 0.6 pF capacitance  
a) Voltages vs. time  
b) Currents vs. time  
c) Time step control (see equ.(2.1))

### 3. A high speed memory cell for BiCMOS-technique

In the following, there is described a small sized structure for dynamic random access memory (DRAM) applications [4]; it may be taken as a further development of the BiCMOS driver discussed above. By implantations of a shallow n-layer and a deeper p-layer into the channel region the device gets storage properties. In opposite to conventional DRAM cells the storage charge drives a data line not directly. It is amplified by three merged cell internal transistors (Figure 3 (page 92)). The storage charge in the n-layer (storage region) isolated by the surrounded p-layers modulates a current through the p-layer (buried channel). In the case of "0" state the storage region potential is higher than in that of "1" state caused by a reduced or enhanced amount of electrons, respectively. Figure 4 (page 93) shows the potential distribution of an "1" reading cell. The p-channel junction field effect transistor (JFET) Q2 provides a first signal gain. The vertical BJT Q3 amplifies the

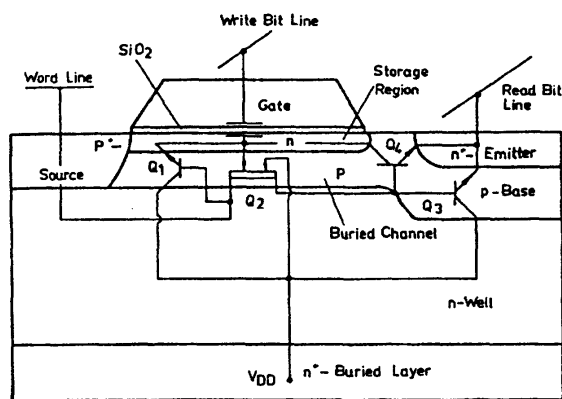


Figure 3: Cross section including the equivalent circuit

JFET current (second gain) and charges the data line (bit line) at which the signal is detected. The lateral BJT Q4 discharges the storage region causing a positive feedback by the decreased gate-source voltage of Q2 (third gain). These mechanisms occurring by the low potential of the storage region acting as JFET gate and blocked up in a "0" reading cell (Figure 5 (page 93)) by the high storage region potential. The BJT Q4 is also used to write the "1" state by injection of electrons into the storage region

while Q1 removes them in the case of writing "0". The implementation of BJTs into the memory structure leads to a fast read access time of about 3 ns within the cell array and to a large output signal of about 1 V. These values are derived from calculations analogous to those of Figure 2 (page 91). Furthermore, 2d simulations were used for a better understanding of the complex mechanisms within the memory cell and for optimizing the parameters for ion implantations and the operation conditions of the cell in a memory array.

### 4. A DEPFET pixel device

The DEPFET (DEpleted P-channel Field Effect Transistor) is a detector amplification structure for measurement of nuclear radiation [5]. An array of DEPFETs controlled by row and column lines provides a position and energy resolution of incident radiation. The DEPFET is arranged on high ohmic n-doped silicon (ca.  $2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$ ). The complete wafer is depleted by a bias voltage on the rear contact. Hence, in the ideal case all electron-hole pairs generated by an incident particle can be comprehended by electrodes at both sides of the wafer. A built in field

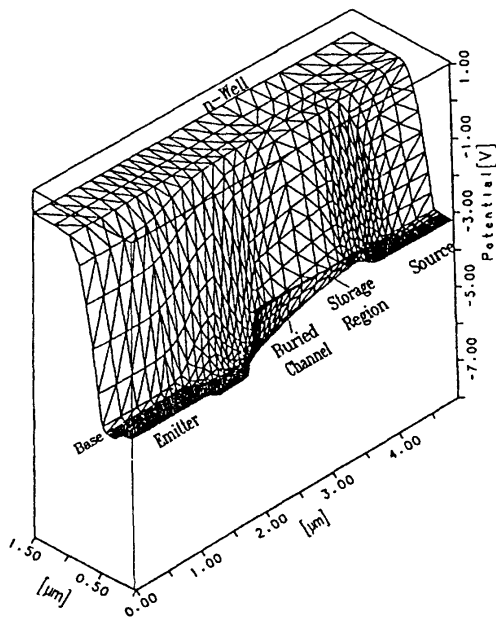


Figure 4: Potential distribution of a reading "1" cell

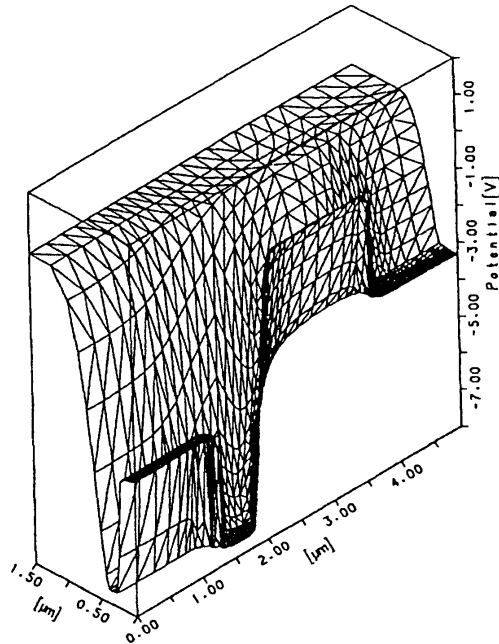


Figure 5: Potential distribution of a reading "0" cell

established by an n-implanted layer causes a potential maximum for electrons in the vicinity of the surface. This region is used as back gate (the so-called internal gate) for the p-channel JFET. Figure 6 (page 94) shows the cross section of the DEPFET and the potential distribution under operation conditions. The internal gate has been completely depleted by a high voltage of the clear contact (15 V). Afterwards, the clear voltage returns to 0 V and the negative drain potential isolates the internal gate from the clear contact. The electrons collected by the internal gate decrease its potential and thus modulate the drain current of the JFET. Figure 7 (page 94) illustrates the collection process of the internal gate after a particle incidence generating 100.000 electron-hole pairs. The most effective collection is achieved, when the optimized drift fields lead all generated electrons to the internal gate and the internal gate is located exactly beneath the JFET channel. TOSCA simulation results were used to optimize the implantation parameters together with the bias conditions for a prototyping of a DEPFET array [6]. The particle incidence into the semiconductor was included by the time and position dependent increase of the charge carrier generation rate in the transient simulation mode of TOSCA. Although the nature of a heavy ion induced generation requires a 3d simulation, the 2d calculations enable a good approximation of the internal voltage swing due to the really generated charge.

## 5. A high sensitive photodiode for optical-fiber communication

Another example for the influence of radiation to semiconductor devices is a high sensitive photodiode designed for a direct coupling of optical-fibers to integrated circuits. Figure 8 (page 94) shows the diode structure.

Besides separating the diode from the other chip the groove is also used to lead the fiber and to ensure a good adjustment to a vertical wall of the diode. The walls of the diode are n<sup>+</sup>-doped and form the cathode. The anode is connected to a small p<sup>+</sup>-region on top of the diode. The photodiode is protected against any bulk dark current by a bottom n-layer. The incident light penetrates the diode horizontally. The unabsorbed light can be reflected by a metal film on the other side of the diode thus doubling the absorption length within the semiconductor. The depletion regions extending from the opposed n<sup>+</sup>-doped walls into a p-doped region result in a small parasitic depletion capacitance as well as in a low cathode-anode-voltage  $V_{CA}$  for the

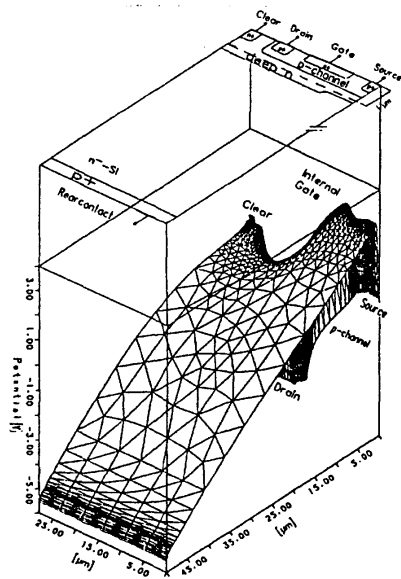


Figure 6: Cross section and potial distribution of the DEPSET pixel device

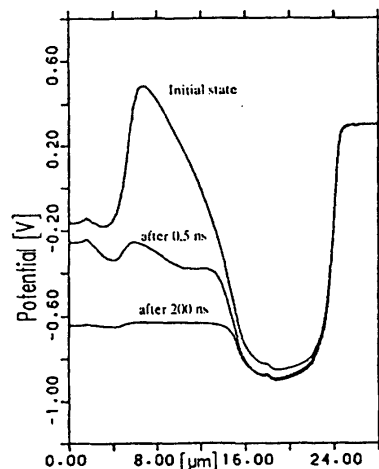


Figure 7: Potential distribution in the depth of the internal gate ( $1 \mu\text{m}$ ) after a particle hit generating  $100,000 e^-/h^+$  pairs

complete depletion of the p-region. Therefore, it is possible to use the low ohmic Czochralski silicon enabling the very attractive integration of the photodiode with the attached amplification circuitry on the same chip. For a typical constallation of coupling a gradient profile optical fiber of  $50 \mu\text{m}$  diameter with a silicon photodiode the capacitance-voltage characteristic and the photodiode response were simulated. The wave length of the light was chosen to  $800 \text{ nm}$ . As in the above example the incident light is taken into account by the generation rate modified locally according to the absorption rate of silicon. The width ( $W$ ), length ( $L$ ) and hight ( $H$ ) of the photodiode are given in Figure 9 (page 95). The capacitance-voltage characteristics (Figure 9 (page 95)) illustrate the breakdown of the cathode anode capacitance when the depletion regions touch each other at very small values of about  $12 \text{ fF}$ . Although there are no diffusion contributions to the anode current the operation speed is constrained by a slow transport of generated holes to the anode. The transit frequency is determined by the time required for the transit of holes from the bottom to the top of the diode. The small vertical drift field can be

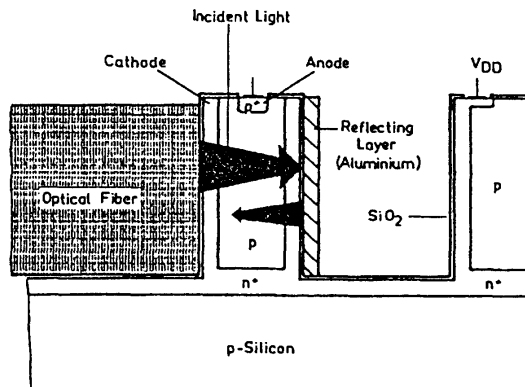


Figure 8: Schematic cross section of the photodiode with coupled optical-fiber

enhanced by a vertical doping gradient of  $10^{14}$  boron atoms per  $50 \mu\text{m}$ . This value does not increase the parasitic capacitance for a operation voltage  $V_{CA}$  of about 4.5 V (Figure 9 (page 95)) but it reduces the delay time to about 25 ns (Figure 10 (page 95)).

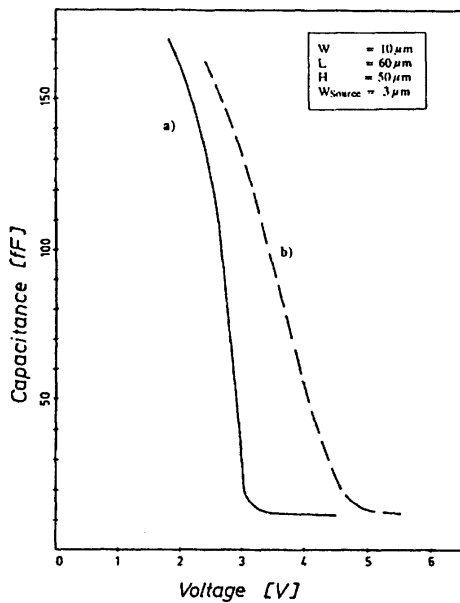


Figure 9:  $C-V$  characteristics a) for uniform doped p-region ( $2 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3}$ ) b) for linear vertical drift doping ( $2 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3}$  bottom concentration;  $3 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3}$  top concentration)

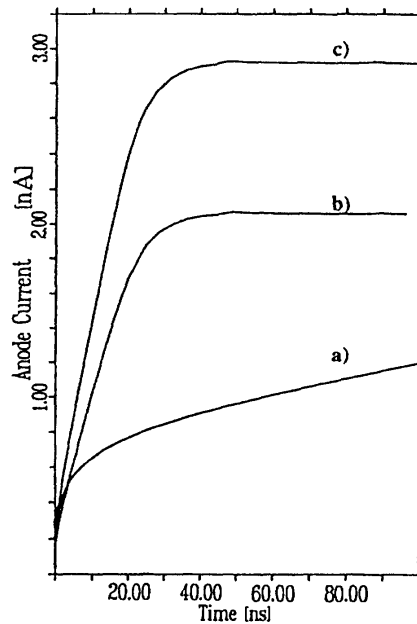


Figure 10: Transient simulations of the photodiode response to a constant 800 nm optical input of 5.5 nW for  $V_{CA}$  of 5 V a) and b) see Figure 9 c) with drift doping and reflecting layer

The effect of a reflecting layer at the rear wall of the diode is illustrated by Figure 10 (page 95), too. A responsivity of 0.54 A/W (anode current per optical power) is achievable by neglecting the loss of the coupling.

## 6. Summary

In this article four new silicon devices were investigated by means of the 2d device simulator TOSCA. By considering an outer capacitance time dependent simulations were performed to gain the insight into the complex processes in combined bipolar-MOS structures. The impact of thyristor effects in dependence on device parameters, which have to be taken into account for the described devices, can be studied with TOSCA. Two further devices detecting the incidence of carrier generating radiation are presented. A better understanding of the dynamical spread of introduced charges was obtained and ways to optimize the device characteristics were shown.

## References

- [1] H. Gajewski, K. Zacharias, H. Langmach, G. Telschow, M. Uhle: "TOSCA user's guide", Karl-Weierstraß-Institute for Mathematics, Berlin 1986.
- [2] W. Winkler, R. Richter, K.E. Ehwald, W.-E. Matzke, B. Heinemann: "Eigenschaften von neuen BiCMOS-Logikgrundschaltungen", 5. Symposium Physikalische Grundlagen zu Bauelementetechnologien der Mikroelektronik, Frankfurt(Oder), 1988, Tagungsband 1, S. 132-136.
- [3] H. Gajewski: "Time Discretization of Carrier Transport Equations", this issue.
- [4] R. Richter, W. Winkler, W.-E. Matzke, K.E. Ehwald, B. Heinemann: "BiCMOSG3 Cell - A Novel High-Speed DRAM Cell Taking Full Advantage of BiCMOS Technology" ESS-DERC'89, pp. 457-460.
- [5] J. Kemmer, G. Lutz: "New Structures for Position Sensitive Semiconductor Detectors", Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, A 273 (1988) p. 588-598.
- [6] P. Klein, et al.: "Design and Performance of Semiconductor Detectors with Integrated Amplification and Charge Storage Capability", 2. Workshop Pixeldetectors, Leuven 1990, Proceedings to be published in Nuclear Instruments & Methods in Physics Research.

## Einsatz der Simulatoren DIOS und TOSCA im VLSI-Bereich

A. ERLEBACH / A. HÜRRICH / R. STEPHAN / U. TODT  
Zentrum Mikroelektronik Dresden GmbH, Bereich W, Grenzstraße 28, PF 34  
O - 8080 Dresden, Germany

### Abstract

Die zweidimensionalen Simulatoren DIOS und TOSCA wurden umfangreich zur Entwicklung einer Basistechnologie für höchstintegrierte Speicher (1M dRAM und 4M dRAM) und in jüngster Zeit für eine multifunktionale VLSI-CMOS-Technologie getestet, angepaßt und eingesetzt. An zwei typischen Einsatzfällen werden die Leistungsfähigkeit dargestellt und Schlußfolgerungen für notwendige Weiterentwicklungen gezogen.

1. Spezielle Probleme des VLSI-MOS-Transistors  
Diffizile halbleiterphysikalische Phänomene müssen mit hoher Genauigkeit modelliert und simuliert werden.  
Hervorzuheben sind:
  - das Avalancheverhalten (zur Analyse des Substratstromes)
  - Untersuchung des Einflusses von Oxidrandgebieten auf die Feldverteilung - bedingt die elektrische Analyse des Mehrschichtsystems und nichtplanarer Gebiete
2. Strahlungsempfindliche VLSI-CMOS-Array  
Intensive Analysen zum Nachweis von Strahlungsteilchen in VLSI-Strukturen werden im Vergleich mit experimentellen Werten und Literaturdaten dargestellt.  
Schwerpunktmäßig werden behandelt:
  - Diskretisierung sehr großer Halbleitergebiete
  - Ableitung, Implementierung und Nutzung von Generationsmodellen für Alpha-, Beta- und Gamma-Teilcheneinfall
  - Analyse des dynamischen Verhaltens beschalteter Speicherzellen

Der Programmkomplex DIOS/TOSCA des Instituts für Mathematik Berlin wird seit 2 bis 3 Jahren im ZMD in der Prozeß- und Bauelementesimulation eingesetzt. Mit diesem geschlossenen System von 2D-Prozeß- und bauelementesimulatoren wurde eine Vielzahl von Rechnungen für Standard-VLSI-Strukturen (Transistoren, Speicherzellen usw.), aber auch für Sonderstrukturen (Hochvoltbauelemente, Bipolartransistoren usw.) durchgeführt. Insgesamt sind sehr gute Erfahrungen mit der Stabilität, Nutzerfreundlichkeit, Rechenzeit (TOSCA) und Modellwelt von DIOS/TOSCA gemacht worden.

Im folgenden sollen 2 Anwendungsbeispiele vorgestellt werden.

## 1. Wechselwirkung von Teilchen ( $\alpha, \beta, \dots$ ) mit VLSI-Strukturen

Schon seit längerer Zeit wird die Wechselwirkung von geladenen Teilchen mit VLSI-Strukturen, insbesondere mit Speicherelementen, intensiv untersucht. Dieses Interesse hat seine Ursache in dem großen Einfluß, den Teilchen, die zumeist aus dem Verpackungsmaterial von Schaltkreisen herrühren, auf "soft error"-Raten von Speicherchips haben. Der Datenverlust wird dadurch verursacht, daß Teilchen in das Silizium eindringen und Ladungsträgerpaare generieren, die durch Diffusions- und Driftprozesse in die Speicherzellen gelangen.

Das Programmsystem TOSCA eröffnet durch das Einführen einer zusätzlichen Generationsrate die Möglichkeit derartige Probleme zu simulieren. Im folgenden sollen einige Forderungen an Rechnungen dieser Art aufgeführt und ihre Realisierung diskutiert werden. Dabei werden vorerst nur Alphateilchen betrachtet.

1. Der Verlauf der Ortsverteilungsfunktion muß hinreichend genau sein, da sonst Abhängigkeiten von Energie und Einfallswinkel als auch charakteristische Zeiten qualitativ verfälscht werden können. In TOSCA wurde die Ortsabhängigkeit durch Überlagerung einer Gauß- und einer reinen Exponentialfunktion, die an Literaturdaten [1], [2], [3—, [7]) angepaßt wurde, realisiert.
2. Das Diskretisierungsgebiet (siehe Abb. 1) muß im Vergleich zu den elektrischen Strukturen (Transistor, Speicherkapazität, Feldtransistor) sehr groß sein, um die hauptsächlich durch Diffusion bedingte laterale Ausbreitung der Ladungsträger (siehe Abb. 2) vollständig zu erfassen. Bei Strukturgrößen von  $1 - 2\mu\text{m}$  (Transistor) wurde ein Triangulierungsgebiet von  $100\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$  gewählt. Damit ist einerseits eine Triangulierung der VLSI-Elemente bis unter 30 nm und andererseits eine grobe Rasterung zur Erfassung des Gesamtgebietes notwendig.
3. Bei steilen pn-Übergängen, die durch Einbringen einer hohen p+-Barriere hinter einer Arsenimplantation erzeugt werden, und zusätzlich anliegenden überhöhten Spannungen ist mit schwacher Avalanchengeneration zu rechnen, die zu einer Erhöhung der Ladungssammlung führt und zu berücksichtigen ist.
4. Der Einfall von Teilchen in VLSI-Strukturen ist ein prinzipiell dreidimensionaler Prozeß. 2D-Bauelementesimulationen führen zu einer Überschätzung des Einflusses des Teilcheneinfalls und damit zu einer Überhöhung der Ladungssammlung. Es sind also, wenn nicht von außen eingegriffen wird, nur tendenzielle Aussagen über die Ladungssammlung (Abhängigkeit von Energie, Winkel, Dotierungs- und Strukturvarianten) bzw. Aussagen über charakteristische Größen (Sammlungseffektivität, charakteristische Zeiten, Maxima und Minima der Ladungssammlung) möglich. Korrekturen könnten über die Anpassung der berechneten Werte an experimentelle und 3D-Simulationsergebnisse oder über die Einführung einer fiktiven Generationsrate, die die Drift und Diffusion in die 3. Dimension berücksichtigt, ermittelt werden.

Es wurde eine Vielzahl von Rechnungen für unterschiedliche Dotierungs- und Strukturverhältnisse in Bezug auf Energieabhängigkeit, Winkelabhängigkeit, Abhängigkeit vom Einfallsort usw. durchgeführt. Zusätzlich ist die Zahl der generierten Ladungsträger bei gleicher Energie variiert

worden. Diese Ergebnisse wurden unter dem Aspekt der 2D-Simulation gewertet und diskutiert. Im Anschluß sollen einige Resultate dargestellt werden. Dabei interessiert besonders die Ladungssammlung und die Potentialverteilung (siehe Abb. 2-4).

1. Abhängigkeit der Ladungssammlung von der Einfallenergie:

Die Energie wurde in einem Bereich von 1 bis 5 MeV variiert.

Dabei werden die Zeitkonstanten von den folgenden Prozessen sichtbar:

- a) unmittelbare Generation in der Raumladungszone
- b) Absaugung der Elektronen durch Drift besonders im oberflächennahen Bereich
- c) Diffusion von Ladungsträgern in die Raumladungszone

Die beiden ersten Prozesse sind nach  $10^{-9}$  bis  $10^{-8}$  s abgeschlossen und bei geringen Energien absolut dominant. Prozess c wird erst nach  $10^{-7}$  bis  $10^{-6}$  s beendet. Dieser bekommt im Fall höherer Energien, wenn die Reichweite die Ausdehnung der Raumladungszone deutlich übersteigt, Bedeutung. Die charakteristische Zeit für den gesamten Ladungssammelprozeß liegt also bei  $10^{-7}$  bis  $10^{-6}$  s. Diese Zeiten werden auch in [1] und [7] angegeben. Die Abhängigkeit der gesammelten Ladung von der Energie zeigt bei ungefähr 4 MeV ein Maximum. Hier ist die Effektivität der Ladungssammlung am höchsten. Experimentelle Ergebnisse bzw. Rechnungen aus [1], [7] und [2] geben ebenfalls Werte im Bereich von 3 bis 4.5 MeV an.

2. Es wurden Rechnungen mit und ohne p+-Barriere durchgeführt. Der Einsatz einer zusätzlichen Bor-Implantation, die zu dieser Barriere führt, bewirkt eine Verringerung der Ladungssammlung. Die Sammlungseffektivität sinkt um rund ein Drittel. Bei Erhöhung der p+-Barriere bzw. Erhöhung der Spannung wirkt die Avalanche-generationsrate dem gewünschten Effekt entgegen, und der Unterschied in der Effektivität der Ladungssammlung wird geringer. In [4] und [5] werden ähnliche Verhältnisse berechnet und gemessen.

Abschließend sollen einige Schlußfolgerungen aus den bisherigen Rechnungen gezogen werden:

1. Die Ladungssammlung wird aufgrund der Vernachlässigung der 3. Dimension zu hoch berechnet. Es werden aber tendenziell richtige Ergebnisse bei der Simulation des Teilcheneinfalls auf VLSI-Strukturen geliefert. Es ist weiterhin möglich, charakteristische Größen des Ladungssammelprozesses in ausreichender Genauigkeit zu gewinnen.

Korrekturen der Absolutwerte der gesammelten Ladung könnten durch Einführung einer fiktiven Generationsrate oder durch Anpassung an experimentelle Daten oder 3D-Simulationsresultate erhalten werden.

## 2. Einfluß der Mehrschichttriangulierung auf die statischen Kennlinien des VLSI-n-Kanal-Transistors

Die Transfer- und die Substratstromkennlinien eines  $1.2\mu\text{m}$  langen n-Kanal-Transistors wurden auf zwei verschiedenen Wegen berechnet:

- 1. Triangulierung nur im Substratgebiet
- 2. Mehrschicht-Triangulierung (Substratgebiet und Oxidgebiet)

Daraus sollte der Einfluß unterschiedlicher Randbedingungen auf die zu ermittelnden elektrischen Größen ersichtlich werden. Im Bereich des Gatekontaktes laufen die Randbedingungen [6]:

$$\epsilon_o \epsilon_{si} \vec{n} \cdot \text{grad } U + \epsilon_o \epsilon_{si} \frac{U - U_a - U_k}{dox} = Q_{ss} \quad (2.1)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{J}_n = \vec{n} \cdot \vec{J}_p = 0 \quad (2.2)$$



mit  
 $U_a$  - am Gate anliegende Spannung,  
 $U_k$  - Kontaktspannung am Gate,  
 $\vec{n}$  - Einheitsvektor in Normalenrichtung zur Grenzfläche.

Im Oxidgebiet dagegen gelten folgende Randbedingungen:

$$\vec{n} \cdot \text{grad } U = \vec{n} \cdot \vec{J}_n = \vec{n} \cdot \vec{J}_p = 0 \quad (2.3)$$

Nach Gleichung (2.3) verschwinden die Normalkomponenten des elektrischen Feldes und des Elektronen- und Löcherstromes. Diese Randbedingungen gelten jeweils für die äußere Begrenzung des Triangulierungsgebietes. Für innere Grenzflächen zwischen Halbleiter und Oxidgebiet werden die Beziehungen

$$\vec{n} \cdot (\epsilon_o \epsilon_{si} \text{ grad } U - \epsilon_o \epsilon_{ox} \text{ grad } U) = Q_{ss} \quad (2.4)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{J}_n = \vec{n} \cdot \vec{J}_p = 0 \quad (2.5)$$

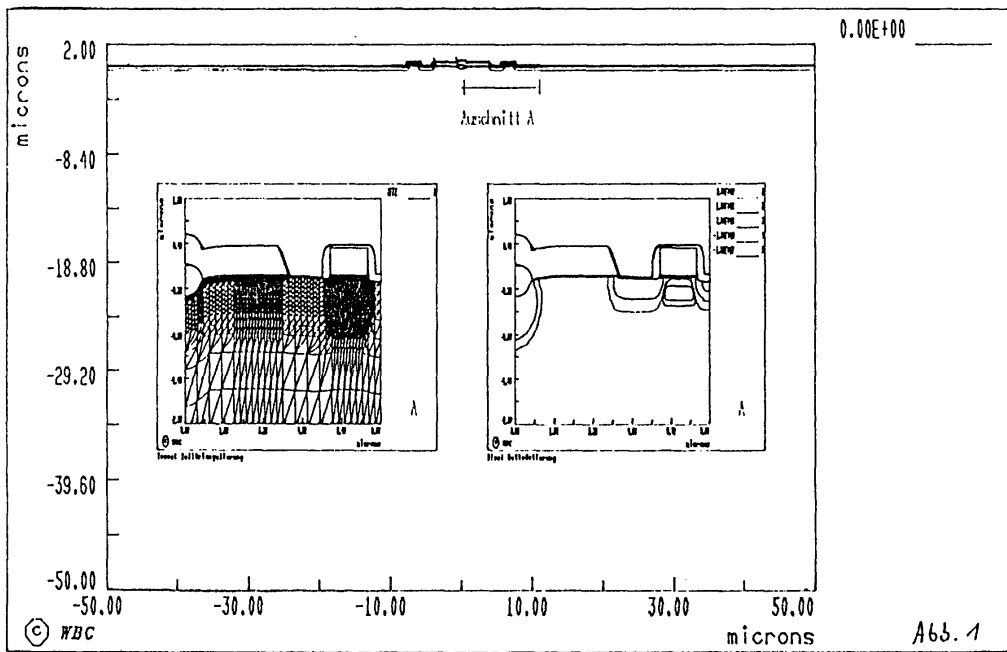
angewendet.

Aus den so formulierten Randbedingungen folgt, daß im Gegensatz zur zweiten Rechnung in der ersten Rechnung keine Streufelder an der Gatekante berücksichtigt werden können. In Abb. 1 wird die laterale Feldstärkenverteilung des n-Kanal-Transistors bei  $U_{gs} = U_{ds} = 5V$  dargestellt. Dabei erfolgte in Abb. 1a die Rechnung nur im Siliziumsubstrat, in Abb. 1b dagegen im Silizium und SiO<sub>2</sub>. Neben dem zu erwartenden Feldstärkepeak am Drain trifft in Abb. 1a noch ein zusätzlicher Peak am Source auf.

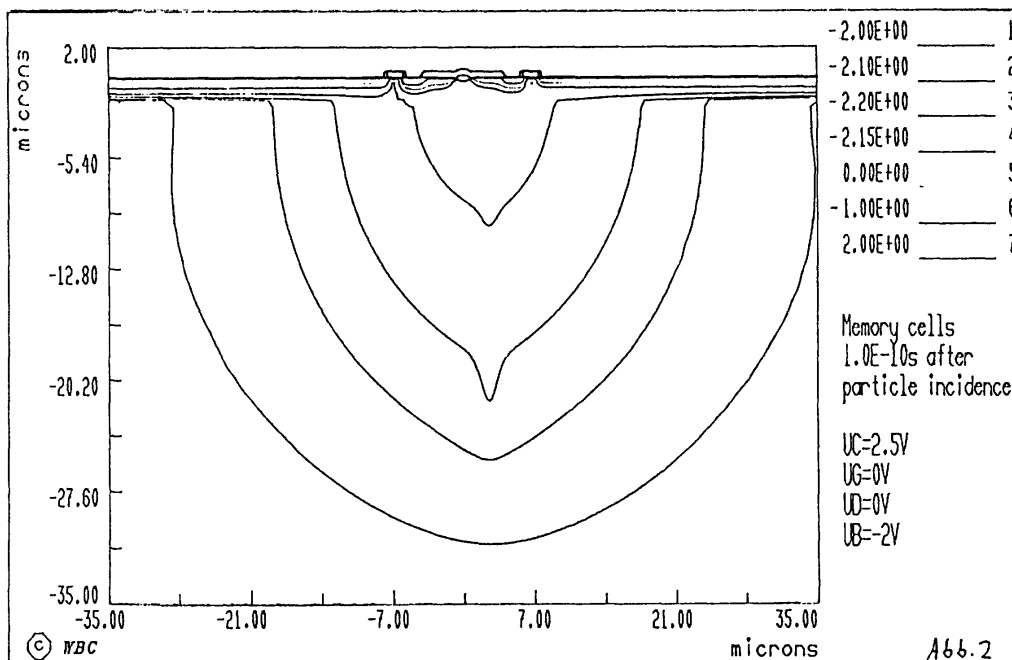
Das Dreiecksgitter am Sourcegebiet ist in Abb. 2 dargestellt. Der Einfluß der Einbeziehung des Oxidgebietes in die 2D-Simulation auf die Transistorkennlinien wird aus den Abb. 3 und 4 deutlich. Abb. 3 zeigt die berechneten Transferkennlinien im Vergleich zur Meßkurve. Die dazugehörigen Substratstromkennlinien sind in Abb. 4 dargestellt. In der Rechnung ohne Einbeziehung des Oxidgebietes tritt ein zweiter Anstieg des Substratstromes auf, der mit dem berechneten Feldstärkepeak am Source zusammenhängt.

Die 2D-Simulation des 1.2µm langen n-Kanal-Transistors mit ausschließlicher Triangulierung des Substratgebietes führt im Vergleich zur Mehrschichttriangulierung zu einer Abweichung im Drainstrom bei  $U_{gs} = U_{ds} = 5V$  von ca. 25 % und zu qualitativ abweichendem Verlauf der Substratstromkennlinie, wodurch Fehlinterpretationen des Einflusses technologischer Parameter provoziert werden.

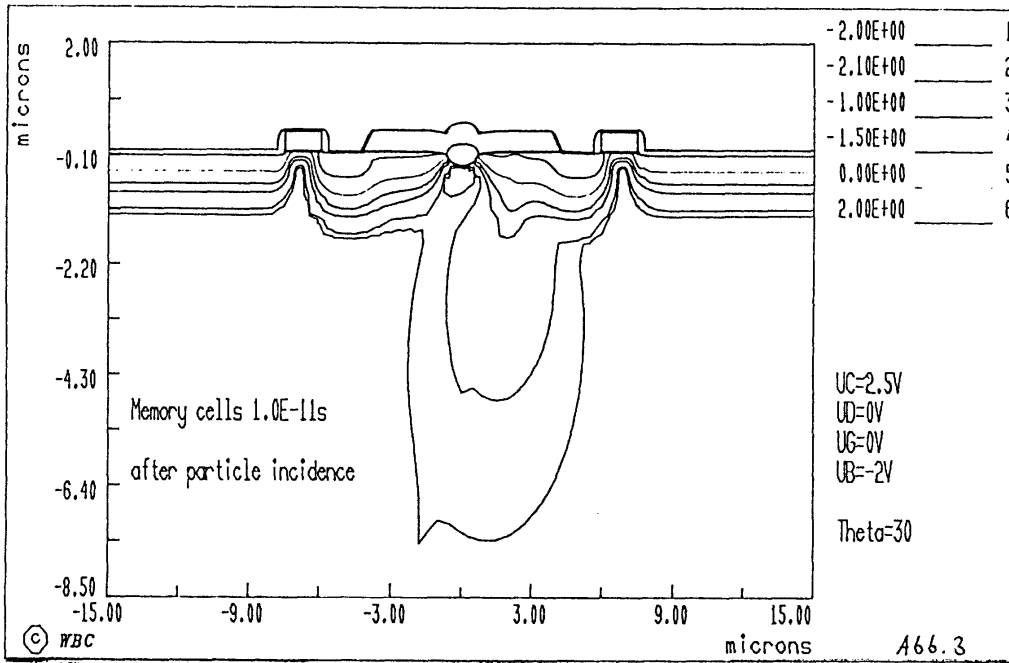
Zur Erfassung von Streufeldern sowie bei nichtplanaren Strukturen ist daher eine Mehrschichttriangulierung erforderlich.



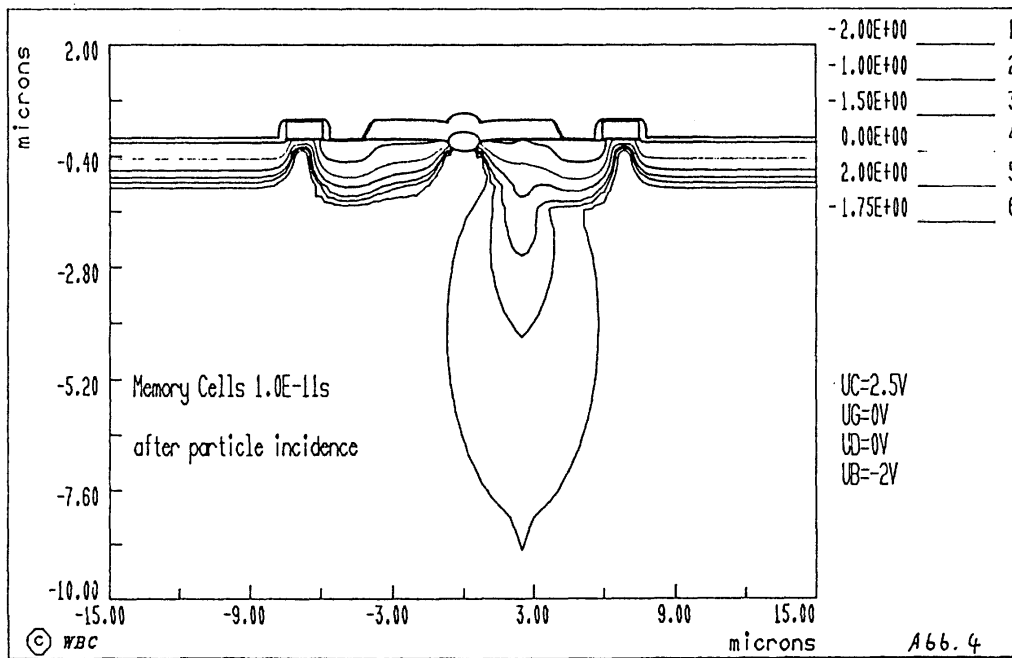
Tosca: Simulationsgebiet und Triangulierung



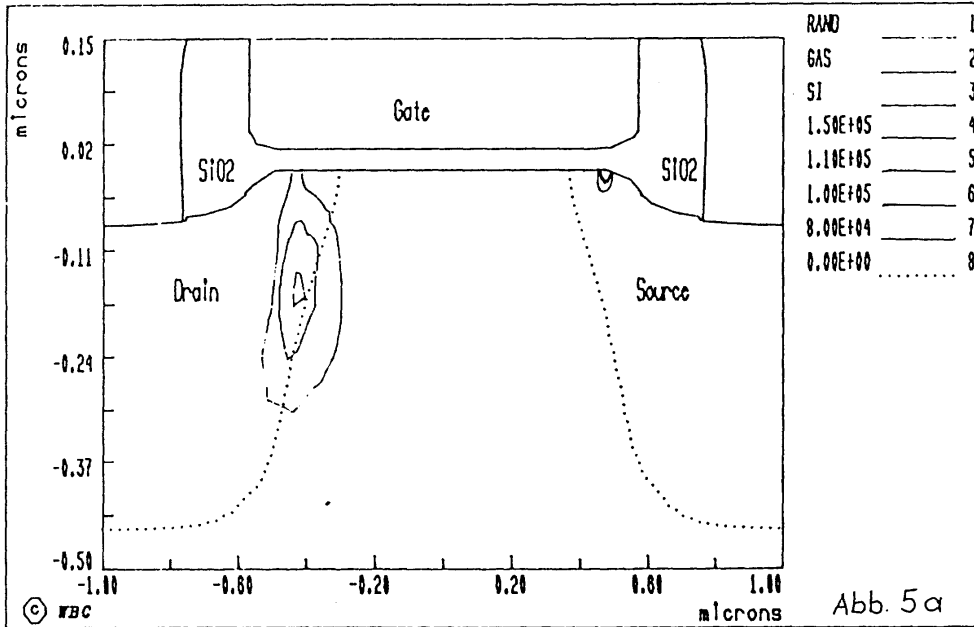
Tosca: Potential distribution



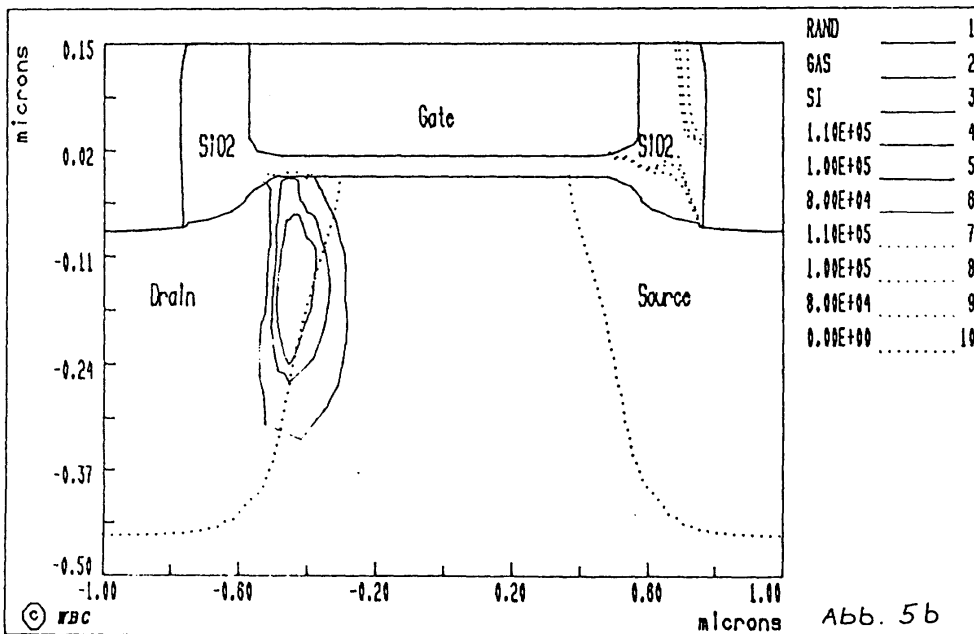
Tosca: Potential distribution



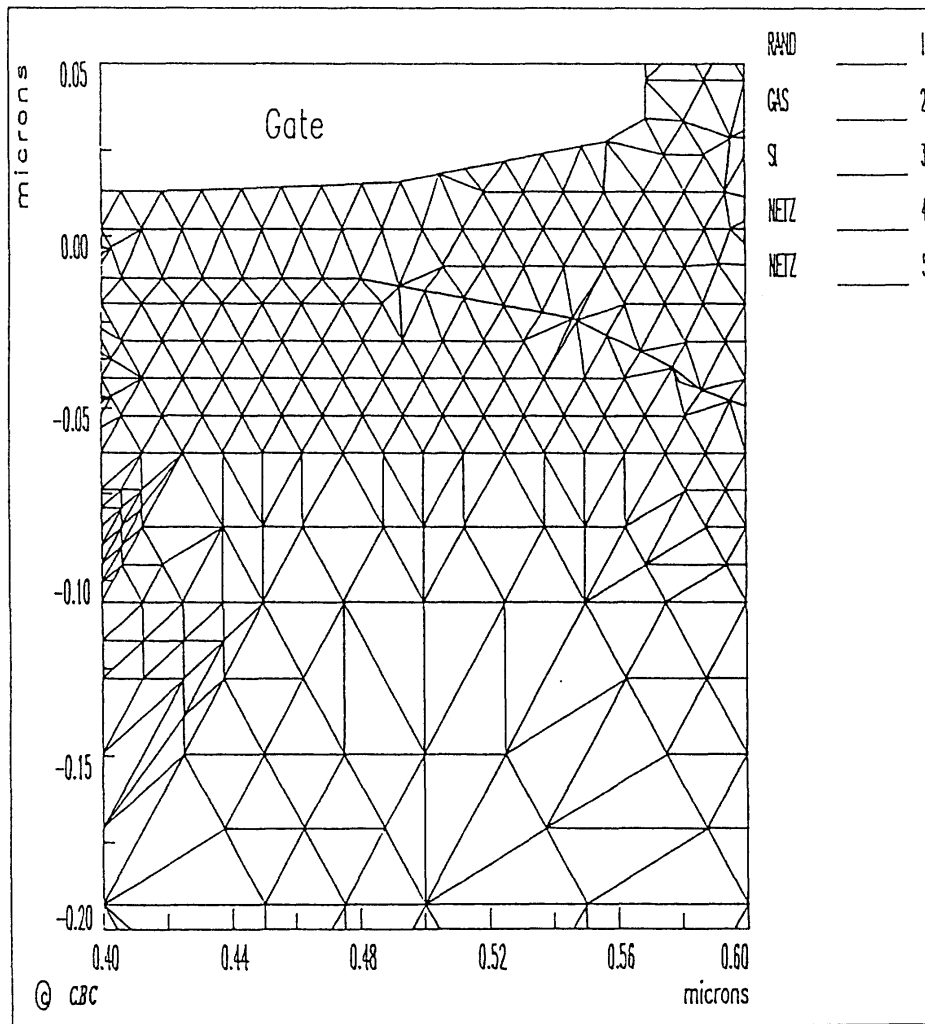
Tosca: Potential distribution



Laterale Feldstärkekomponente TN20/1.2,  $U_{ds}=U_{gs}=5$  V,  $U_{bs}=0$  V

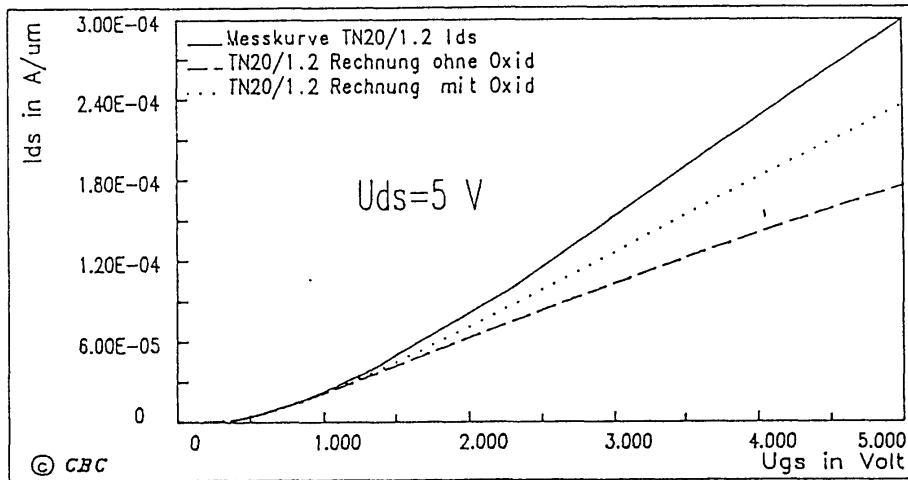


Lat. Feldstärkekomp. TN20/1.2,  $U_{ds}=U_{gs}=5$  V,  $U_{bs}=0$  V, Mehrschichttriangullierung

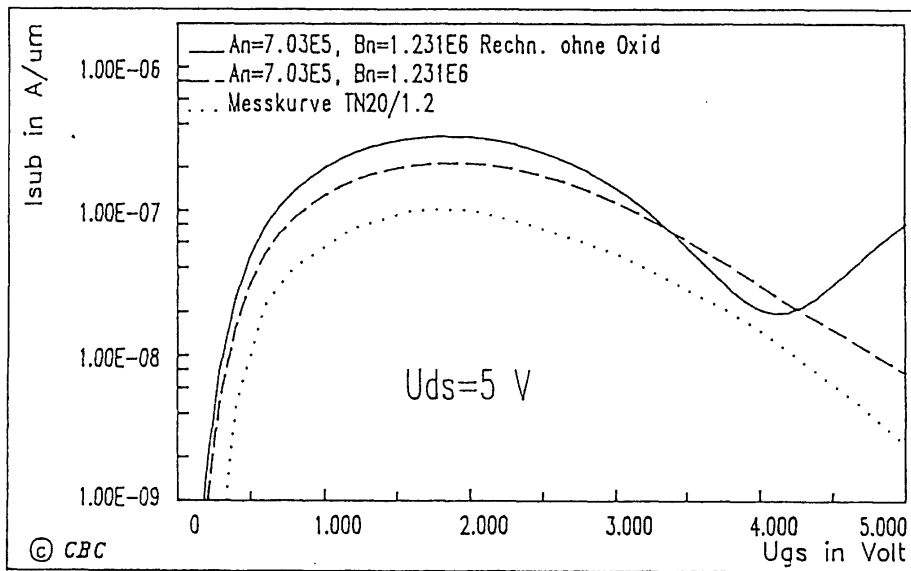


n-Kanal-Transistor, Ausschnitt am Source, Mehrschichttriangulierung

Abb. 6



Einfluss der Mehrschichttriangulierung auf die Transferkennlinie des TN20/1.2 Abb. 7



Einfluss der Mehrschichttriangulierung auf den Substratstrom des TN20/1.2 Abb. 8

## References

- [1] Scott Kirkpatrick: *Modeling Diffusion and Collection of Charge from Ionizing Radiation in Silicon Devices*. IEEE Trans. Electron Devices, Vol. ED-26, Nr. 11, 1979.
- [2] May and Woods: *Soft errors in dynamic Memories*. IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-26, Nr. 1, 1979.
- [3] L.C. Northclift and R.F. Schilling: *Nuclear Data Tables*. A7, p. 233 ff, 1970.
- [4] Kan Takeuchi, Katsuhiro Shimohigashi, Eiji Takeda, Eiji Yamasaki, Toru Toyabe, Kiyoo Itoh: *Alpha-Particle-Induced Charge Collection Measurements for Megabit DRAM Cells*. IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 36, Nr. 9, 1989.
- [5] Kan Takeuchi, Katsuhiro Shimohigashi, Eiji Takeda, Eiji Yamasaki, Toru Toyabe, Kiyoo Itoh: *Experimental Characterization of Induced Charge Collection Mechanism for Megabit DRAM Cells*.
- [6] *TOSCA-Handbuch*. Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Berlin 1990.
- [7] David S. Yaney, J.T. Nelson, Lowell L. Vanskike: *Alpha-Particle Tracks in Silocon and their Effekct on Dynamic MOS RAM Reliability*. IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-26, Nr. 1, 1. 1979.

## Neue Anforderungen an die Prozeß- und Bauelementesimulation durch die Mikroelektronik

ST. BUSCHBECK / F. RICHTER

ZMD GmbH, Unternehmensbereich Forschung/Entwicklung, Grenzstraße 28,  
O-8080 Dresden, Germany

### Abstract

Es wird der im Rahmen der Kooperation ZMD - TUD bisher erreichte Stand auf dem Gebiet der Prozeß- und Bauelementesimulation anhand der Leistungsfähigkeit der vorliegenden Simulatoren und Anwendungsbeispiele gezeigt. Es erfolgt eine Einordnung gegenüber anderen Simulatoren.

Die Entwicklung und der Einsatz der vorliegenden Simulatoren erfolgte vor allem im Rahmen von hochintegrierten dynamischen MOS-Speichertechnologien. Dabei wurden umfassende Simulationen komplexer Technologieabläufe und typischer Bauelementestrukturen (MOS-Transistor, Isolationsstruktur, Speicherzelle) durchgeführt.

Neue Anforderungen durch die Mikroelektronik entstehen vor allem durch eine größere Vielfalt der technologischen Prozesse, neue unkonventionelle Verfahren, eine größere Breite der elektrischen Wirkprinzipien und unkonventionelle Bauelementestrukturen. Einen neuen Schwerpunkt bildet die Simulation von Sensorstrukturen.

Als Schlußfolgerung für die Simulatoren ergeben sich eine Erweiterung bestehender Modelle bezüglich Geltungsbereich und Abhängigkeiten, die Erarbeitung und Implementierung neuer Modelle sowie eine Erweiterung der bestehenden Gleichungssysteme einschließlich numerischer Behandlung. An die Auswertung und Darstellung der Ergebnisse entstehen ebenfalls neue Anforderungen.

## Der Einfluß der Diffusionstiefe auf das Sperrvermögen planarer $pn$ -Übergänge

W. RECKEL

Technische Universität Berlin, Fachbereich 19 – Elektrotechnik, Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12, Germany

### Abstract

Es werden die Ergebnisse einer Parameterstudie, die mit dem Halbleitersimulationsprogramm BREAKDOWN durchgeführt worden ist. Untersucht wird das Sperrverhalten eines diffinierten  $p + n$ -Übergangs, der mit einer einstufigen Feldplatte versehen ist. Ziel der Studie ist es, für verschiedene Diffusionstiefen die Abhängigkeit der Sperrspannung von der Feldplattenlänge zu ermitteln und die Länge so weit zu variieren, bis der Einfluß auf die kritische Feldstärkeüberhöhung am gekrümmten  $pn$ -Übergang zu vernachlässigen ist. Dargestellt werden die Ergebnisse dieser Simulationsrechnungen und die damit erzielbaren Sperrspannungen im Vergleich zur Volumendurchbruchsspannung planparalleler Strukturen.

## Numerische Behandlung von Grenzyklen in der Schaltkreissimulation

W. SCHMIDT / G. DENK

Technische Universität München, Mathematisches Institut, Postfach 202420 D-8000 München 2, Germany

### Abstract

Die Berechnung des Grenzyklus nichtlinearer Oszillatorschaltungen mit konstantem Eingangssignal läßt sich auf ein nichtlineares Randwertproblem mit steifen Differentialgleichungen zurückführen. Durch geeignete Kopplung eines impliziten Integrationsverfahrens an die Mehrzielmethode können diese Randwertaufgaben effizient gelöst werden.

### 1. Mathematische Modellbildung von Oszillatorschaltungen

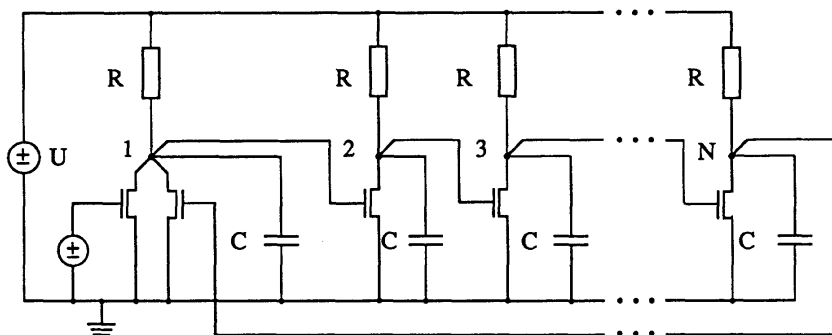


Abb. 1: Ringoszillator mit  $N + 1$  Transistoren

Der Ringoszillator in Abbildung 1 ist eine rückgekoppelte Inverterreihenschaltung mit insgesamt  $N + 1$  Invertiern. Zur Vereinfachung nehmen wir an, daß alle auftretenden Widerstände gleich  $R$  und alle Kapazitäten gleich  $C$  sind. Für die mathematische Modellierung werden alle Transistoren durch ein geeignetes Ersatzschaltbild, hier das von Shichman-Hodges [4], ersetzt. Dies führt im allgemeinen auf ein autonomes System von differential-algebraischen Gleichungen der Form

$$\tilde{f}(y, \dot{y}) = 0, \quad \tilde{f}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n. \quad (1.1)$$



Im Falle eines Ringoszillators mit  $N + 1$  Transistoren ist die Dimension von (1.1)  $5N - 1$ . Wählt man im Transistormodell von Shichman-Hodges die Kapazitäten zwischen Drain und Bulk bzw. Source und Bulk als spannungsunabhängig, dann reduziert sich (1.1) auf ein autonomes System von nichtlinearen, steifen Differentialgleichungen:

$$\dot{y} = f(y), \quad f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n. \quad (1.2)$$

In den folgenden Abschnitten wird ein Algorithmus zur effizienten Berechnung von Grenzzyklen von (1.2) vorgestellt.

## 2. Berechnung des Grenzzyklus

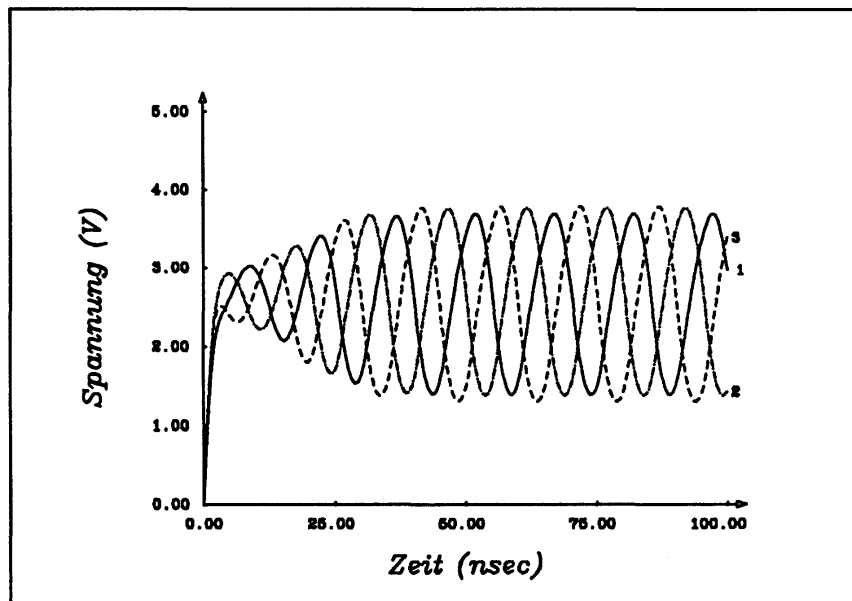


Abb. 2: Einschwingvorgang eines Ringoszillators mit vier Transistoren

Abbildung 2 zeigt das Einschwingverhalten eines Ringoszillators mit vier Transistoren, d. h. die Spannungen an den Knoten 1, 2 und 3 zur Eingangsspannung

$$U(t) = \begin{cases} 0V & \text{für } t < 0, \\ 5V & \text{für } t \geq 0. \end{cases}$$

Nach einer kurzen Phase des Einschwingens beobachtet man nach ca. 30 ns den Übergang zu periodischer Oszillation. Im folgenden wird ein Verfahren zur Berechnung des Grenzzyklus, d. h. des eingeschwungenen Zustandes vorgestellt. Die Kurvenverläufe der Abbildung 2 legen es zunächst nahe, das Anfangswertproblem (1.2) solange zu integrieren, bis sich der periodische Zustand einstellt. Da ein Grenzzyklus im allgemeinen nur zu bestimmten, unbekanntem Anfangswerten  $y(0) = y_0$  existiert bzw. die Einschwingphase sehr lange dauert, ist diese Vorgehensweise nur in seltenen Fällen angebracht. Sowohl die unbekannte Schwingungsdauer  $T$  als auch zugehörige Anfangswerte  $y_0$  können durch Lösen eines nichtlinearen Randwertproblems berechnet werden.

Durch Normierung des Integrationsintervalls  $[0, T]$  auf  $[0, 1]$  erhält man aus (1.2) ein Randwertproblem der Dimension  $n + 1$ :

$$\begin{aligned} \dot{y} &= T f(y), \\ T &= 0. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Die Forderung nach Periodizität der Lösung mit Periode  $T$  liefert  $n$  Randbedingungen, nämlich

$$r(y(0), y(1)) := y(0) - y(1) = 0. \quad (2.2)$$

**Bemerkung:** Die Ankopplung von  $\dot{T} = 0$  an das Differentialgleichungssystem erfolgt hier aus rein formalen Gründen. In der Praxis wird weiterhin nur eine  $n$ -dimensionale Differentialgleichung gelöst. Je nach Komplexität des Problems kann dadurch die Rechenzeit um 5%–10% reduziert werden.

Das System (2.1), (2.2) ist ein nichtlineares Randwertproblem steifer Differentialgleichungen. Da die Phase unbestimmt ist, ist die Lösung nicht eindeutig. Eindeutigkeit läßt sich durch zusätzliche Forderungen erreichen:

- a) Seydel [3] schlägt die Fixierung einer beliebigen Komponente bzw. die Fixierung einer Ableitung vor, z. B.

$$y_k(0) = \alpha \text{ oder } \dot{y}_k(0) = 0, \quad 1 \leq i \leq k \text{ beliebig gewählt.} \quad (2.3)$$

In der Schaltkreissimulation führt dies allerdings zu Schwierigkeiten: häufig sind einzelne Komponenten während der gesamten Integration oder zumindest über größere Intervalle konstant. Eine geeignete Wahl von  $k$  erfordert daher Kenntnis des Lösungsverhaltens.

- b) Um diese Probleme zu vermeiden, wählt Deuffhard [2] nicht den Weg über eine zusätzliche Randbedingung, sondern entwickelt eine spezielle Gauß-Newton-Technik, basierend auf der Floquet-Theorie. Für Details sei hier auf die Originalliteratur [2] verwiesen.

**Bemerkung:** Die Berechnung des Grenzyklus ist ein Spezialfall eines Bifurkationsproblems. Die Periodendauer  $T$  hängt z. B. beim Ringoszillator von der Anzahl  $N$  der Transistoren und von physikalischen Parametern  $\lambda$  ab, also  $T = T(N, \lambda)$ , mit  $\lambda := W/L$ . Hier ist  $W$  die durch die Gate-Elektrode bestimmte Kanalweite und  $L$  die durch den Gain-Source-Abstand gegebene Kanallänge.

### 3. Numerische Lösung der Randwertprobleme

Für die Lösung der Randwertaufgabe (2.1), (2.2) hat sich in der Praxis die Mehrzielmethode [5] bewährt. Für ein  $n$ -dimensionales Problem sei hier eine kurze Beschreibung gegeben:

- 1) Das Integrationsintervall wird in  $m - 1$  Teilintervalle unterteilt:

$$0 = t_1 < t_2 < \dots < t_{m-1} < t_m = 1.$$

- 2) An jedem Knoten  $t_j$  ( $1 \leq j \leq m$ ) wird ein Startvektor  $s_j \in \mathbb{R}^n$  vorgegeben.
- 3) In jedem Teilintervall  $t_j \leq t \leq t_{j+1}$ ,  $1 \leq j \leq m - 1$ , wird durch Lösung einer Differentialgleichung (2.1) mit Anfangswert  $y(t_j) = s_j$  eine Trajektorie  $Y(t_{j+1})$  berechnet. Da diese nicht nur von  $t_j$ , sondern auch von dem Startwert  $s_j$  abhängt, schreiben wir genauer  $Y(t_{j+1}; s_j)$  anstelle von  $Y(t_{j+1})$ .

- 4) Die Forderung nach Stetigkeit der Lösung von (2.1) und (2.2) führt auf ein nichtlineares Gleichungssystem für die Startvektoren  $s_1, \dots, s_m$ :

$$F(s_1, \dots, s_m) := \begin{pmatrix} Y_1(t_2; s_1) - s_2 \\ Y_2(t_3; s_2) - s_3 \\ \vdots \\ Y_{m-1}(t_m; s_{m-1}) - s_m \\ r(s_1, s_m) \end{pmatrix} = 0. \quad (3.1)$$

Das System (3.1) kann mit einem gedämpften Newtonverfahren gelöst werden. Die zugehörige Jacobi-Matrix hat die folgende Blockgestalt:

$$DF := \begin{pmatrix} G_1 & -I & 0 & \dots & 0 \\ 0 & G_2 & -I & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & G_{m-1} & -I \\ A & 0 & \dots & 0 & B \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Die  $n \times n$ -Matrizen  $A$ ,  $B$  und  $G_j$  sind folgendermaßen definiert:

$$G_j := \left. \frac{\partial Y_j(t; s_j)}{\partial s_j} \right|_{t=t_j}, \quad A := \frac{\partial r(s_1, s_m)}{\partial s_1}, \quad B := \frac{\partial r(s_1, s_m)}{\partial s_m}.$$

Üblicherweise erfolgt die Berechnung der Matrizen  $G_j$  durch numerische Differentiation, d. h. zusätzlich zu den Differentialgleichungen des Schrittes 3) müssen noch Anfangswertprobleme zu leicht gestörten Anfangswerten gelöst werden. Insgesamt erfordert ein Zyklus der Newton-Iteration die Lösung von  $n \cdot (m - 1)$  gewöhnlichen Differentialgleichungen der Dimension  $n$ . Da bei dieser Vorgehensweise der Aufwand mit wachsendem  $n$  sehr stark anwächst, muß ein effizienterer Weg zur Berechnung der Jacobi-Matrizen gewählt werden.

#### 4. Berechnung der Jacobi-Matrix

Gemäß Schritt 3) des vorangehenden Abschnitts ist in jedem Intervall  $[t_j, t_{j+1}]$ ,  $1 \leq j \leq m - 1$  ein Anfangswertproblem der Art

$$\dot{y} = f(y) \text{ mit } y(t_j) = s_j \quad (4.1)$$

zu lösen. Ferner ist bekannt, daß die "Jacobi-Blöcke" der folgenden linearen Matrix-Differentialgleichung genügen:

$$\dot{G}_j(t) = f_y(y(t)) \cdot G_j(t) \text{ mit } G_j(t_j) = I \text{ Einheitsmatrix in } \mathbb{R}^{n,n}. \quad (4.2)$$

Da die Differentialgleichung (4.1) steif ist, erfordert ihre Integration ein implizites Verfahren, z. B. ein BDF-Verfahren. Verknüpft man die Integration von (4.1) mit der von (4.2) in geeigneter Weise, so kann der Rechenaufwand drastisch reduziert werden. Zur Vereinfachung der Notation beschränken wir uns auf das Intervall  $[t_0, t_1]$ , d. h. der Index  $j$  wird unterdrückt. Die Überlegungen für alle weiteren Intervalle  $[t_j, t_{j+1}]$ ,  $2 \leq j \leq m - 1$  gelten analog.

Die Integration von (4.1) in  $[t_0, t_1]$  mittels einer  $k$ -Schritt-BDF-Methode führt nach [1] auf die Approximation von  $\dot{y}$  durch

$$\dot{y}_\nu \doteq \alpha y_\nu + \sum_{i=1}^k \alpha_i y_{\nu-i} =: \alpha y_\nu + \beta, \quad (4.3)$$

wobei  $y_\nu := y(t_0 + \nu h)$ . (4.3) eingesetzt in (4.1) liefert das nichtlineare Gleichungssystem

$$\alpha y_\nu + \beta = f(y_\nu). \quad (4.4)$$

Die approximative Lösung von (4.4) mittels Newton-Iteration ergibt für die Iterierte  $y_\nu^{(m+1)}$  das lineare Gleichungssystem

$$y_\nu^{(m+1)} = y_\nu^{(m)} - \underbrace{(-\alpha I + f_y(y_\nu^{(m)}))^{-1}}_{=:P} [f(y_\nu^{(m)}) - \alpha y_\nu^{(m)} - \beta]. \quad (4.5)$$

Analog wird das BDF-Verfahren auf die Matrixdifferentialgleichung (4.2) angewandt:

$$\dot{G}_\nu \doteq \alpha G_\nu + \sum_{i=1}^k \alpha_i G_{\nu-i} =: \alpha G_\nu + \Gamma, \text{ mit } G_\nu := G_1(t_0 + \nu h). \quad (4.6)$$

(4.6) eingesetzt in (4.2) und Auf'—lösen nach  $G_\nu$  liefert das lineare Gleichungssystem

$$G_\nu = (-\alpha I + f_y(y_\nu))^{-1} \Gamma = P \Gamma. \quad (4.7)$$

Da die Matrix  $P$  bzw. deren Dreieckszerlegung bereits in (4.5) benötigt wurde, reduziert sich die Berechnung der  $G_\nu$  auf Matrixmultiplikationen.

Mit Hilfe dieses Verfahrens wurde die Schwingungsdauer  $T$  eines Ringoszillators mit vier Invert-ern, vgl. Abbildung 2, zu 15.16 ns berechnet. Durch die beschriebene Technik der Berechnung der Jacobi-Matrix konnte die Rechenzeit an einer Cyber 995 von 230 s auf 39 s gesenkt werden.

## References

- [1] K. B. Brenan, S. L. Campell, L. R. Petzold: Numerical Solution of Initial Value Problems in Ordinary Differential-Algebraic Equations. New York, Amsterdam, London 1989
- [2] P. Deuffhard: Computation of Periodic Solutions of Nonlinear ODEs. BIT 24 (1984), 456-466
- [3] R. Seydel: Numerical Computation of Periodic Orbits That Bifurcate from Stationary Solutions of Ordinary Differential Equations. Appl. Math. Comp. 9 (1981), 257-271
- [4] H. Shichman, D. A. Hodges: Insulated-gate field-effect transistor switching circuits. IEEE J. Solid-State Circuits, SC-3 (1968), 285-289
- [5] J. Stoer, R. Bulirsch: Numerische Mathematik 2. Berlin, Heidelberg, New York 1990

## FEM Simulationen der klassischen Elektrotechnik

M. KASPER

Technische Universität Berlin, Fachbereich Elektrotechnik, Technologien der Mikroperipherik  
Einsteinufer 17, D-1000 Berlin 10, Germany

### Abstract

Fragestellungen aus allen Bereichen der Elektrotechnik lassen sich durch Bestimmung der magnetischen bzw. elektrischen Feldgrößen lösen. Exemplarisch werden hier die magnetischen Probleme behandelt. Einige Beispiele von modellhaftem Charakter aus den Bereichen der Mikroelektronik und der elektrischen Energiewandler werden diskutiert. Schließlich wird die Berechnung integraler Kenngrößen aus den Feldgrößen betrachtet.

## 1. Einleitung

Ausgangspunkt bei der Behandlung elektromagnetischer Feldprobleme bilden die Maxwell'schen Gleichungen. Die in den Materialbeziehungen:

$$\mathbf{J} = \kappa \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} + \mathbf{J}_P, \quad \mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (1.1)$$

enthaltenen Materialkenngrößen  $\kappa$ ,  $\mu$ ,  $\epsilon$  sind als anisotrop und nichtlinear von der Feldgröße abhängig oder als stückweise konstant anzunehmen. Die permanente magnetische  $\mathbf{J}_P$  und elektrische  $\mathbf{P}$  Polarisation ist in der Regel als stückweise konstante Materialeigenschaft aufzufassen. Üblicher und allgemeiner Ansatz ist die Befriedigung der Quellenfreiheit des magnetischen Feldes durch den Ansatz eines Vektorpotentials.

$$\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A} \quad (1.2)$$

nach Einsetzen in die weiteren Gleichungen erhält man:

$$\text{rot} \mu^{-1} \text{rot} \mathbf{A} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \text{rot} (\mu^{-1} \mathbf{J}_P) \quad (1.3)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \text{grad} \Phi \quad (1.4)$$

Im allgemeinen hat man also ein System aus gekoppelten Differentialgleichungen mit den drei Komponenten des Vektorpotentials  $\mathbf{A}$  und dem Skalarpotential  $\Phi$  zu lösen.

Im zweidimensionalen Fall versteht man das Skalarpotential als gegebenen Anregungsterm, die eingeprägte elektrische Feldstärke  $E_z$ . Das Vektorpotential besitzt dann nur eine Komponente  $\mathbf{A} = A_z \mathbf{e}_z$  und die verbleibenden Feldkomponenten sind:

$$B_x, \quad B_y, \quad E_z \quad (1.5)$$

## 2. Statisches und stationäres Feld

Für statische Felder verschwindet der zeitabhängige Term und man erhält die Differentialgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial x} \mu^{-1} \frac{\partial A_z}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu^{-1} \frac{\partial A_z}{\partial y} = -J_e - \text{rot} (\mu^{-1} \mathbf{J}_P) \quad (2.1)$$

Typische Fragestellungen dieser Art kommen aus dem Bereich der elektromagnetischen Energiewandler. Hierbei wird, bedingt durch die Sättigung des Eisens, die Differentialgleichung stark nichtlinear. Die Permeabilität  $\mu$  ist allein von der magnetischen Flußdichte  $\mathbf{B}$  abhängig. Die Anregungsterme bestehen aus flächenhaft eingepägten Stromdichten oder Permanentmagneten. Diese führen aufgrund der Ableitung zu singulären Anregungsterme.

In den Bildern 1,2 sind Beispiele dieser Art gegeben. Dargestellt sind die Äquipotentiallinien des Vektorpotentials, die zugleich die magnetischen Feldlinien bilden. Die Lösung der nichtlinearen Differentialgleichung erfolgt mit dem Newton-Raphson Verfahren. Das Verfahren hat sich für derartige Problemstellungen bewährt und findet allgemeine Anwendung. Für hoch ausgenutzte Energiewandler, d. h. im Bereich hoher Sättigung, weist die Magnetisierungskennlinie eine starke Nichtlinearität auf, was zu einer Verlangsamung der Konvergenz führt. Durch Dämpfung der Defektkorrektur läßt sich erfahrungsgemäß eine Verbesserung erreichen.

Für bewegte Medien ergibt sich, in Erweiterung der Gleichungen, ein zusätzlicher Term für die Stromdichte.

$$\mathbf{J} = \kappa (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (2.2)$$

Die Berücksichtigung der translatorisch induzierten Wirbelströme führt auf eine Differentialgleichung, die auch erste Ableitungen enthält. Die Gleichung ist vom Diffusions-Konvektionstyp und entspricht in ihrer Form der aus der Strömungsmechanik bekannten Gleichung.

$$\frac{\partial}{\partial x} \mu^{-1} \frac{\partial A_z}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu^{-1} \frac{\partial A_z}{\partial y} + \kappa \left( v_x \frac{\partial A_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial A_z}{\partial y} \right) = -J_e - \text{rot}(\mu^{-1} \mathbf{J}_p) \quad (2.3)$$

In Analogie zur Strömungsmechanik läßt sich eine 'magnetische Reynoldzahl' einführen, die das Verhältnis von Konvektions zu Diffusionsterm beschreibt.

$$R_{em} = \mu \kappa v \ell \quad (2.4)$$

Für  $R_{em} \ll 1$  überwiegt der Diffusionsanteil und die translatorisch induzierten Wirbelströme können vernachlässigt werden. Das Finite Element Gleichungssystem verliert durch die translatorisch induzierten Wirbelströme die Symmetrieeigenschaft.

Um physikalisch sinnvolle Näherungslösungen zu erhalten ist zu fordern, daß in der diskretisierten Form der Konvektionsterm nicht dominant wird. Diese Forderung ist zugleich für die Stabilität des Verfahrens ausschlaggebend. Bei der adaptiven Netzverfeinerung kann diese Forderung in den ersten Iterationsschritten nicht erfüllt werden.

In Bild 3 ist ein Berechnungsbeispiel dargestellt. Das Innere des sich durch zwei Permanentmagnete hindurchbewegenden Kupferstabes ist praktisch feldfrei. Auf der Oberfläche des Leiters fließt ein Strombelag, der das Feld aus dem Leiterinneren verdrängt. Der Strom führt zu einer Verstärkung des Feldes in der Bewegungsrichtung.

### 3. Quasistationäre Felder

Für die Elektrotechnik von besonderer Bedeutung sind Vorgänge im eingeschwungenen Zustand. Zur Beschreibung wird die sinusförmige Zeitabhängigkeit der Felder durch komplexe Größen in Amplitude und Phasenlage dargestellt  $A(t) = Ae^{j\omega t}$ . Die Differentiation nach der Zeit geht so in einen multiplikativen Term über.

$$\frac{\partial}{\partial t} = j\omega, \quad j = \sqrt{-1} \quad (3.1)$$

Die Materialbeziehungen sind als linear anzunehmen, da sonst der Anregungsterm und die Feldgrößen nicht zugleich sinusförmig sein können. Für die Differentialgleichung ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial x} \mu^{-1} \frac{\partial A_z}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu^{-1} \frac{\partial A_z}{\partial y} - j\omega \kappa A_z = -J_e \quad (3.2)$$

Aus dem Imaginärteil folgt, daß der Differentialoperator nicht selbstadjungiert ist. Als Konsequenz ergibt sich, daß der Energieinhalt nicht extremal ist, die Energie also kein äquivalentes Variationsproblem liefert. Für die FEM - Matrix folgt, daß diese zwar symmetrisch jedoch nicht hermitesch ist. Entsprechend liefert die Theorie des CG - Verfahrens keine Konvergenzaussage. Die praktische Erfahrung mit dem CG - Verfahren zeigt jedoch dessen Anwendbarkeit, wenn die komplexen Skalarprodukte wie  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n x_i y_i$  berechnet werden.

Ergänzend sei erwähnt, daß der Imaginärteil der Matrix in der Regel deutlich kleiner als der Realteil ist, da es für die genaue Nachbildung des Stromdichteverlaufs notwendig ist die Seitenlängen der Finiten Elemente kleiner als die Eindringtiefe zu wählen.

In Bild 4 sind Berechnungsergebnisse einer Mikrostripleitung für zwei Zeitpunkte dargestellt. Die Rückwirkung der Selbstinduktion auf das Feld resultiert in einer weitgehenden Stromverdrängung aus dem Leiterinneren und in einer (induktiven) Phasenverschiebung zwischen Strom und Spannung.

#### 4. Berechnung Integraler Größen

Ziel der Lösung des Feldproblems ist im Ingenieurbereich in der Regel die Auswertung integraler Kenngrößen wie Widerstände, Induktivitäten, Kräfte, Energieinhalt... Die Eigentliche Berechnungsgröße, das Vektorpotential ist oben rein formal eingeführt worden und stellt nur eine Hilfsgröße dar. Eine Beurteilung der Berechnungsergebnisse insbesondere der Berechnungsgenauigkeit hat sich daher an der Genauigkeit integraler Größen zu orientieren.

Zunächst ist zu bemerken, daß die interessierenden Funktionale zumeist mit den Feldgrößen verknüpft sind, die sich aus der Ableitung des Vektorpotentials ergeben. Die Differentiale weisen jedoch gegenüber dem Vektorpotential eine geringere Genauigkeit auf.

Ein weitergehender Ansatz zu Berechnung der Störanfälligkeit von Funktionalen besteht in der Auswertung der ersten Gateaux Differentiale, die eine Entwicklung des Funktionals um einen Punkt  $u_0$  ergeben.

$$F[u_0 + \delta u] = F[u_0] + \delta F(u_0, \delta u) + \delta^2 F(u_0, \delta u) + \epsilon[\delta u] \quad (4.1)$$

$$\delta F(u_0, \delta u) = \left. \frac{d}{d\xi} F[u_0 + \xi \cdot \delta u] \right|_{\xi=0} \quad (4.2)$$

Eine Näherung für den Fehler bzw. für die Störanfälligkeit ergibt sich aus der ersten Variation  $\delta F(u_0, \delta u)$ . Zur numerischen Auswertung ist die Näherungslösung und eine lokale Fehlerabschätzung notwendig.

Für Energiefunktionale des statischen Feldes verschwindet das erste Gateaux Differential, da die Energie für diesen Fall ein Variationsprinzip darstellt. Die zweite Variation ist stets positiv.

Für das quasistationäre Feld ergibt sich zur Berechnung der Impedanz der Ausdruck:

$$Z = 2 \frac{S}{II^*} \quad (4.3)$$

mit

$$S = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} \mathbf{E} \mathbf{J}^* + j\omega \mathbf{B} \mathbf{H}^* df, \quad I = \iint_{\Omega} \mathbf{J} df \quad (4.4)$$

Für die erste Variation folgt somit:

$$\delta Z = Z \left[ \frac{\delta S}{S} - 2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{\delta I}{I} \right\} \right] \quad (4.5)$$

Real- (Ohm'scher Widerstand) und Imaginärteil (Induktivität) unterscheiden sich also bezüglich ihres Fehlerverhaltens. Für den Fehler ergibt sich bei unverändertem Netz im wesentlichen eine Abhängigkeit von der Frequenz.

Für andere Funktionale lassen sich die Gateaux Differentiale ebenso leicht berechnen und erlauben zumindest eine qualitative Beurteilung der Störanfälligkeit in Abhängigkeit der Feldgrößen. Eventuell kann dabei Gebrauch vom Charakter der Näherungslösung gemacht werden.

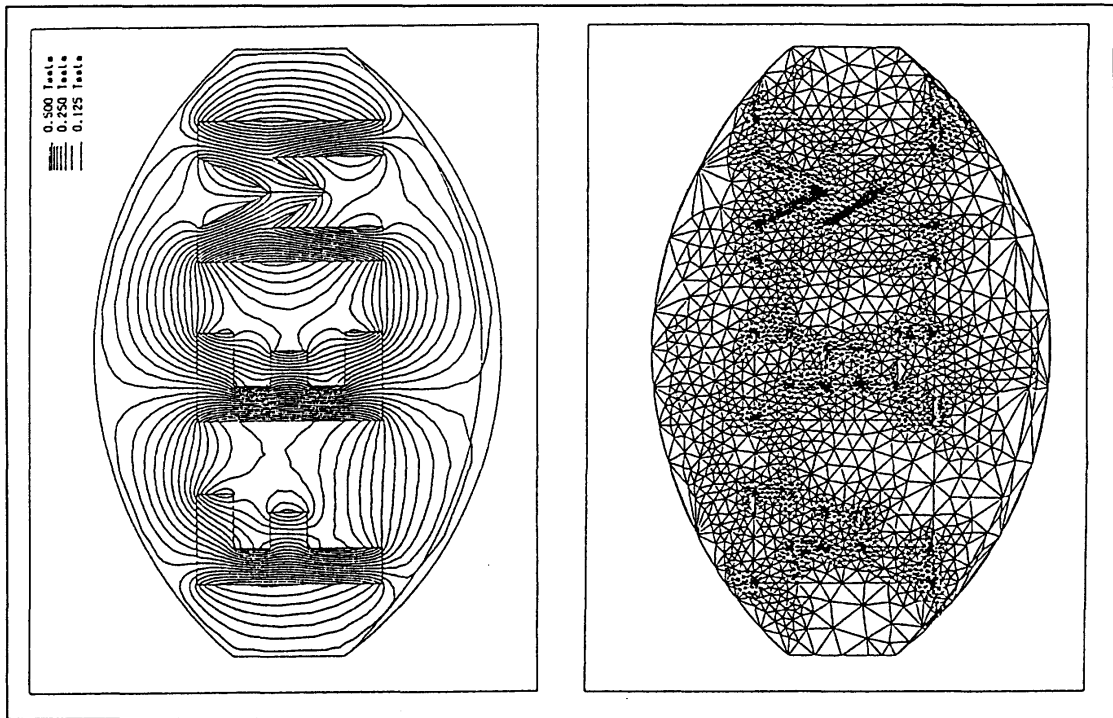


Bild 1: a) Feldverteilung für eine Anordnung aus Permanentmagneten; b) adaptives Finite Elemente Netz.

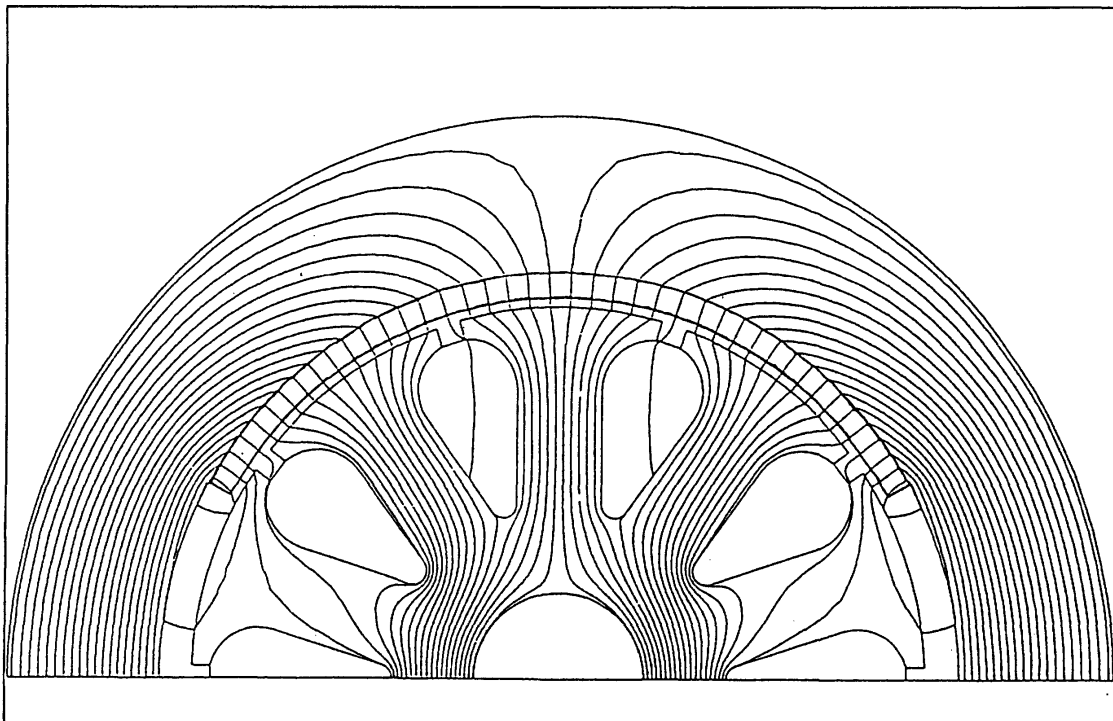


Bild 2: Magnetostatisches Feld in einem Gleichstromkleinmotor.



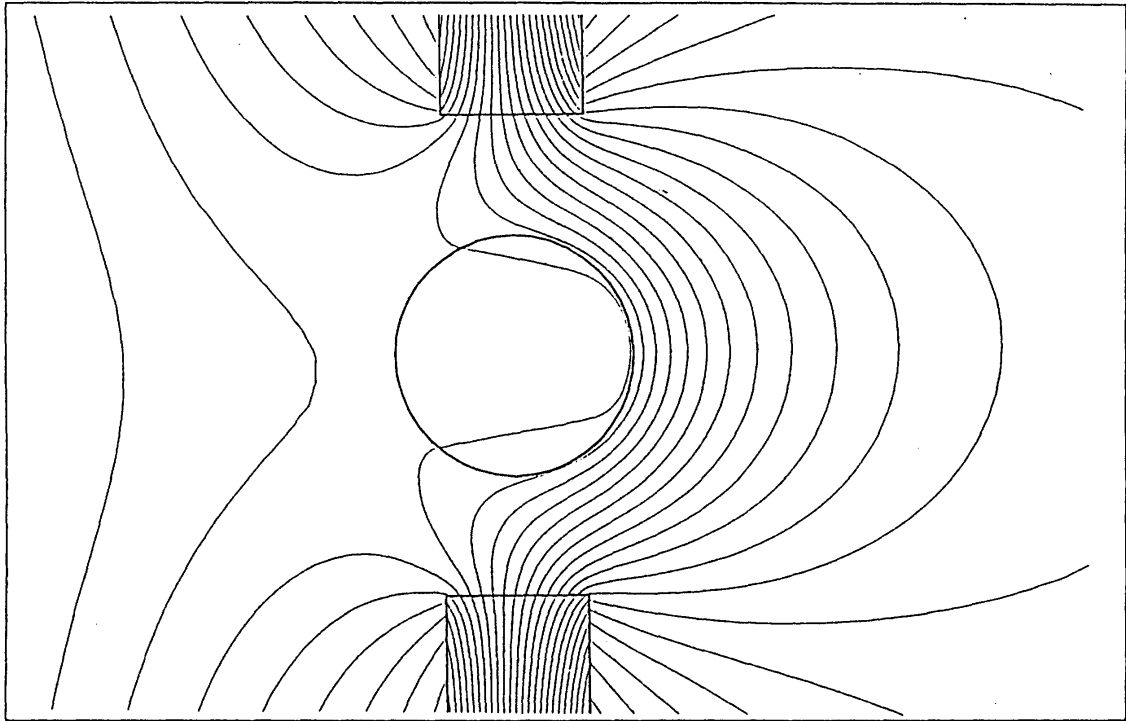


Bild 3: Feldverteilung in einem sich durch Permanentmagnete hindurchbewegenden Kupferstab.

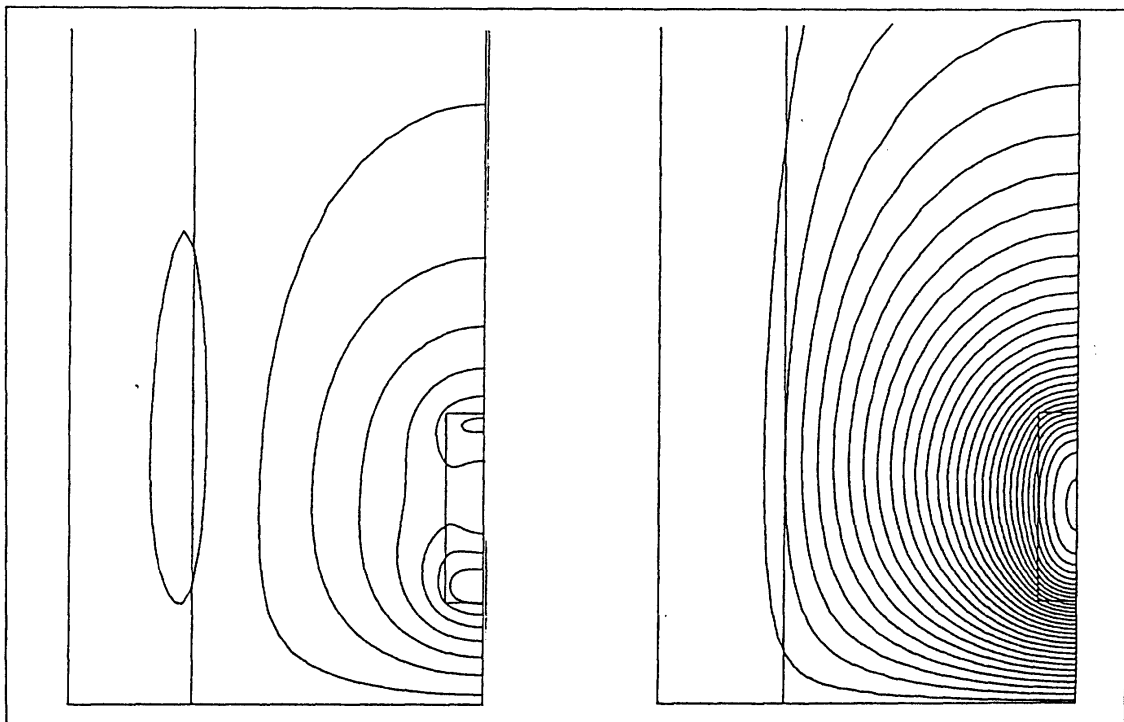


Bild 4: Feld einer geschirmten Mikrostrip Doppelleitung. a) Spannungsmaximum; b) Spannungsnulldurchgang. Aus Symmetriegründen ist  $\frac{1}{4}$  der Anordnung dargestellt.

---

## Teilnehmerliste

1. Dr. Günter Albinus, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
2. Anton Arnold, Technische Universität Berlin, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12
3. Dr. Hans Babovsky, Wissenschaftliches Zentrum, IBM, Tiergartenstraße 15, D-6900 Heidelberg
4. Uwe Bandelow, Fachbereich Physik, Humboldt-Universität zu Berlin, Invalidenstraße 110, O-1040 Berlin
5. Dipl.-Ing. Rainer Bassus, Fachbereich 19, Technische Universität Berlin, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12
6. Folkmar Bornemann, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Heilbronner Straße 10, D-1000 Berlin 31
7. Dr. Steffen Buschbeck, Unternehmensbereich F & E, Zentrum Mikroelektronik GmbH, Grenzstr. 28, PSF 34, O-8080 Dresden
8. Prof. Dr. Peter Deuffhard, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Heilbronner Straße 10, D-1000 Berlin 31
9. Axel Erlebach, Zentrum Mikroelektronik GmbH, Bereich W, Grenzstr. 28, Postfach 34, O-8080 Dresden
10. Dipl.-Phys. Elmar Falck, Fachbereich 19, Technische Universität Berlin, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12
11. Dipl.-Ing. Wolfgang Feiler, Fachbereich 19, Technische Universität Berlin, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12
12. Dipl.-Math. Jürgen Fuhrmann, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
13. Prof. Dr. Herbert Gajewski, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
14. Dr. Klaus Gärtner, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
15. Prof. Dr. Gerlach, Fachbereich 19, Technische Universität Berlin, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12
16. Prof. Dr. Konrad Gröger, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin

17. Prof. Dr. Friedrich Grund, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
18. Dipl.-Ing. Lutz Haase, Fachbereich 19, Technische Universität Berlin, Lebensstraße 1, D-1000 Berlin 12
19. Dipl. -Ing. Bernd Heinemann, Institut für Halbleiterphysik, W.-Korsing-Str. 2, Postfach 409, O-1200 Frankfurt/Oder
20. Otto Heinrichsberger, Institut für Mikroelektronik, Technische Universität Wien, Gußhausstraße 27-29, A-1040 Wien
21. Sabine Hengst, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
22. Knuth Hübner, Institut für Festkörperelektronik/Werkstoffe, Fakultät für elektrotechnik/Informationstechnik, Technische Hochschule Ilmenau, Straße der Jungen Techniker "Faradaybau", O-6300 Ilmenau
23. Dr. Rolf Hünlich, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
24. Peter Kaden, Institut f. Grundlagen d. ETIEL, Technische Universität Dresden, Mommsenstraße 13, O-8027 Dresden
25. Dr. Hans-Christoph Kaiser, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
26. Dr. Manfred Kasper, Fachbereich Elektrotechnik, Technische Universität Berlin, Einsteinufer 17, D-1000 Berlin 10
27. Dr. Ralf Kornhuber, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Heilbronner Straße 10, D-1000 Berlin 31
28. Dr. Udo Krause, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
29. Dr. Hartmut Langmach, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
30. Dr. Alfred Liemant, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
31. Dr. Jürgen Lorenz, Fraunhofer-Arbeitsgruppe für Integrierte Schaltungen, Artilleriestraße 12, D-8520 Erlangen
32. Norbert J. Mauser, Inst. Angew. u. Num. Mathematik, Technische Universität Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10, A-1040 Wien

33. Dr. Regine Model, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
34. Stephan Müller, Integrated Systems Laboratory, ETH Zürich, CH-8092 Zürich
35. Dr. Joachim Naumann, Fachbereich Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin, Postfach 1297, O-1086 Berlin
36. Dr. Reiner Nürnberg, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
37. Dr. J. Piprek, Fachbereich Physik, Humboldt-Universität zu Berlin, Invalidenstraße 110, O-1040 Berlin
38. Dr. Eckhard Platen, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
39. Dr. Wilfred Pohl, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
40. Claude Pommerell, Integrated Systems Laboratory, ETH Zürich, CH-8092 Zürich
41. Doz. Dr. Lutz Recke, Fachbereich Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin, Postfach 1297, O-1086 Berlin
42. Dipl.-Ing. Wolfgang Reckel, Fachbereich 19, Technische Universität Berlin, Jebensstraße 1, D-1000 Berlin 12
43. Dr. Joachim Rehberg, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
44. Dipl.-Ing. Rainer Richter, Institut für Halbleiterphysik, W.-Korsing-Str. 2, Postfach 409, O-1200 Frankfurt/Oder
45. Rainer Roitzsch, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Heilbronner Straße 10, D-1000 Berlin 31
46. Dr. Wilfried Röpke, Halbleiterwerk GmbH, O-1200 Frankfurt/Oder
47. Dr. Andreas Schenk, Schweriner Ring 22, O-1095 Berlin
48. Christian Schmeiser, Institut für Angewandte und Numerische Mathematik, Technische Universität Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10, A-1040 Wien
49. Dipl.-Math. Ilja Schmelzer, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
50. Dr. Walter Schmidt, Mathematisches Institut, Technische Universität München, Postfach 202420, D-8000 München 2

51. Michael Stahl, Lichtenberger Str. 4, O-1020 Berlin
52. Dr. Rolf Stephan, Zentrum Mikroelektronik GmbH, Bereich W, Grenzstr. 29, Postfach 34, O-8080 Dresden
53. Dipl.-Math. Holger Stephan, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
54. Dr. Norbert Strecker, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
55. Dipl.-Math. Horst Szillat, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
56. M. Trott, Institut für Physik, Technische Hochschule Ilmenau, Postfach 327, O-6300 Ilmenau
57. Dr. Steffen Unger, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin
58. Dipl.-Ing. Andreas Unterreiter, Fachbereich 3, Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, D-1000 Berlin 10
59. R. Vanselow, Fakultät Elektrotechnik/Elektronik, Technische Universität Dresden, Mommsenstraße 13, O-8027 Dresden
60. Prof. Dr. Gerhard Wachutka, Institut für Quantenelektronik, Laborat. für Physikalische Elektronik - HPT, ETH Hönggerberg, CH-8048 Zürich
61. H. Wenzel, Fachbereich Physik, Humboldt-Universität zu Berlin, Invalidenstr. 110, O-1040 Berlin
62. Dr. Gerd Winter, Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung, FIT, Postfach 1240, D-5205 Sankt Augustin
63. Dr. Hans-Jürgen Wünsche, Fachbereich Physik, Humboldt-Universität zu Berlin, Invalidenstr. 110, O-1040 Berlin
64. Dr. Klaus Zacharias, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Mohrenstraße 39, O-1086 Berlin

**Veröffentlichungen des Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin**  
**Technical Reports** **Juli 1991**

- TR 89-1. CRAY-HANDBUCH. Einführung in die Benutzung der CRAY X-MP unter UNICOS. (veraltet)
- TR 89-2. P. Deuffhard. Numerik von Anfangswertmethoden für gewöhnliche Differentialgleichungen.
- TR 89-3. A. R. Walter. Ein Finite-Element-Verfahren zur numerischen Lösung von Erhaltungsgleichungen.
- TR 89-4. R. Roitzsch. KASKADE User's Manual.
- TR 89-5. R. Roitzsch. KASKADE Programmer's Manual.
- TR 89-6. H. Melenk; W. Neun. Implementation of Portable Standard LISP for the SPARC Processor.
- TR 89-7. F. A. Bornemann. Adaptive multilevel discretization in time and space for parabolic partial differential equations.
- TR 89-8. G. Maierhöfer; G. Skorobohatj. Implementierung des parallelen TRAPEX auf Transputern.
- 
- TR 90-1. K. Gatermann. Gruppentheoretische Konstruktion von symmetrischen Kubaturformeln.
- TR 90-2. G. Maierhöfer; G. Skorobohatj. Implementierung von parallelen Versionen der Gleichungslöser EULEX und EULSIM auf Transputern.
- TR 90-3. CRAY-Handbuch. Einführung in die Benutzung der CRAY X-MP unter UNICOS 5.1
- TR 90-4. H.-C. Hege. Datenabhängigkeitsanalyse und Programmtransformationen auf CRAY-Rechnern mit dem Fortran-Präprozessor **fpp**.
- TR 90-5. M. Grammel; G. Maierhöfer; G. Skorobohatj. Trapex in POOL; Implementierung eines numerischen Algorithmus in einer parallelen objektorientierten Sprache.
- TR 90-6. P. Deuffhard; A. Hohmann. Einführung in die Numerische Mathematik.
- TR 90-7. P. Deuffhard. Zuses Werk weiterdenken. (Vortrag)
- TR 90-8. M. Wulkow. Numerical Treatment of Countable Systems of Ordinary Differential Equations.
- TR 90-9. R. Roitzsch; R. Kornhuber. BOXES - a Program to Generate Triangulations from a Rectangular Domain Description.
- TR 90-10. U. Nowak; L. Weimann. A Family of Newton Codes for Systems of Highly Nonlinear Equations Algorithm, Implementation, Application.
- TR 90-11. U. Nowak; L. Weimann. GIANT - A Software Package for the Numerical Solution of Very Large Systems of Highly Nonlinear Equations.
- TR 90-12. U. Nowak; U. Pöhle. A Family of Extrapolation Codes for ODEs and DAEs - Part I.
- TR 90-13. W. K. Giloi. Konrad Zuses Plankalkül als Vorläufer moderner Programmiermodelle. (Vortrag)
- 
- TR 91-1. F. Bornemann; B. Erdmann; R. Roitzsch. KASKADE - Numerical Experiments.
- TR 91-2. J. Lügger; W. Dalitz. Verteilung mathematischer Software mittels elektronischer Netze:  
Die elektronische Softwarebibliothek eLib.
- TR 91-3. S. W. C. Noelle. On the Limits of Operator Splitting: Numerical Experiments for the Complex Burgers Equation.
- TR 91-4. Jens Lang. An Adaptive Finite Element Method for Convection-Diffusion Problems by Interpolation Techniques.
- TR 91-5. J. Gottschewski. Supercomputing During the German Reunification.
- TR 91-6. K. Schöffel. Computational Chemistry Software for CRAY X-MP/24 at Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin.
- TR 91-7. Folkmar A. Bornemann. An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimensions.
- TR 91-8. H. Gajewski; P. Deuffhard; P. A. Markowich (eds.). Tagung NUMSIM '91 5.-8. Mai 1991 Collected Abstracts and Papers.

Veröffentlichungen des Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Preprints

Juli 1991

- SC 89-1. H. Zha. *A Numerical Algorithm for Computing the Restricted Singular Value Decomposition of Matrix Triplets.*
- SC 89-2. H. Zha. *Restricted Singular Value Decomposition of Matrix Triplets.*
- SC 89-3. W. Huamo. *On the Possible Accuracy of TVD Schemes.*
- SC 89-4. H. M. Möller. *Multivariate Rational Interpolation: Reconstruction of Rational Functions.*
- SC 89-5. R. Kornhuber; R. Roitzsch. *On Adaptive Grid Refinement in the Presence of Internal or Boundary Layers.*
- SC 89-6. W. Huamo; Y. Shuli. *MmB-A New Class of Accurate High Resolution Schemes for Conservation Laws in Two Dimensions.*
- SC 89-7. U. Budde; M. Wulkow. *Computation of Molecular Weight Distributions for Free Radical Polymerization Systems.*
- SC 89-8. G. Maierhöfer. *Ein paralleler adaptiver Algorithmus für die numerische Integration.*
- SC 89-9. H. Yserentant. *Two Preconditioners Based on the Multi-Level Splitting of Finite Element Spaces.*
- SC 89-10. R. H. W. Hoppe. *Numerical Solution of Multicomponent Alloy Solidification by Multi-Grid Techniques.*
- SC 90-1. M. Wulkow; P. Deuffhard. *Towards an Efficient Computational Treatment of Heterogeneous Polymer Reactions.*
- SC 90-2. P. Deuffhard. *Global Inexact Newton Methods for Very Large Scale Nonlinear Problems.*
- SC 90-3. K. Gatermann. *Symbolic solution of polynomial equation systems with symmetry.*
- SC 90-4. F. A. Bornemann. *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations I. General Theory & 1D-Implementation.*
- SC 90-5. P. Deuffhard; R. Freund; A. Walter. *Fast Secant Methods for the Iterative Solution of Large Nonsymmetric Linear Systems.*
- SC 90-6. D. Wang. *On Symplectic Difference Schemes for Hamiltonian Systems.*
- SC 90-7. P. Deuffhard; U. Nowak; M. Wulkow. *Recent Developments in Chemical Computing.*
- SC 90-8. C. Chevalier; H. Melenk; J. Warnatz. *Automatic Generation of Reaction Mechanisms for Description of Oxidation of Higher Hydrocarbons.*
- SC 90-9. P. Deuffhard; F. A. Potra. *Asymptotic Mesh Independence of Newton-Galerkin Methods via a Refined Mysovskii Theorem.*
- SC 90-10. R. Kornhuber; R. Roitzsch. *Self Adaptive FEM Simulation of Reverse Biased pn-Junctions.*
- SC 90-11. K. Gatermann; A. Hohmann. *Symbolic Exploitation of Symmetry in Numerical Path-following.*
- SC 90-12. A. Walter. *Improvement of Incomplete Factorizations by a Sparse Secant Method.*
- SC 90-13. F. A. Bornemann. *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations II.*
- SC 90-14. J. Ackermann; M. Wulkow. *MACRON - A Program Package for Macromolecular Reaction Kinetics.*
- SC 90-15. M. Wulkow; J. Ackermann. *Numerical Treatment of Polyreactions - Recent Developments.*
- SC 90-16. Hege; Hinnerk; Stüben. *Vectorization and Parallelization of Irregular Problems via Graph coloring.*
- SC 90-17. D. Wang. *Symplectic Difference Schemes for Perturbed Hamiltonian Systems.*
- SC 90-18. H. Caprasse; J. Demaret; K. Gatermann; H. Melenk. *Power-Law Type Solutions of Fourth-Order Gravity for Multidimensional Bianchi I Universes.*
- SC 90-19. U. Nowak. *A Note on Dynamic Sparsing in Stiff Extrapolation Methods.*
- SC 90-20. A. Walter. *Sparse Secant Methods for the Iterative Solution of Large Nonsymmetric Linear Systems.*
- SC 90-21. A. Walter. *Convergence Behavior of Sparse Secant Methods for Incomplete Factorization.*
- SC 91-1. F. A. Bornemann. *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations III.*
- SC 91-2. R. Kornhuber; R. Roitzsch. *Self Adaptive Computation of the Breakdown Voltage of Planar pn-Junctions with Multistep Field Plates.*
- SC 91-3. A. Griewank. *Sequential Evaluation of Adjoints and Higher Derivative Vectors by Overloading and Reverse Accumulation.*
- SC 91-4. P. Deuffhard; F. Potra. *Parameter space geometry and convergence for gauss-newton techniques.*
- SC 91-5. B. Fiedler; J. Scheurle. *Discretization of Homoclinic Orbits, Rapid Forcing and "Invisible" Chaos.*
- SC 91-6. R. H. W. Hoppe; R. Kornhuber. *Multilevel Preconditioned CG-Iterations for Variational Inequalities.*
- SC 91-7. J. Lang; A. Walter. *An Adaptive Discontinuous Finite Element Method for the Transport Equation.*

