三维漂移扩散模型在半导体器件等领域的有限元仿真研究

王芹

摘　要

本文研究了三维漂移扩散模型的稳定化有限元算法及其在半导体器件等领域的仿真应用，并基于三维并行自适应有限元平台 PHG，研制了三维半导体器件数值模拟并行有限元求解器 DevSim。

在有限元算法方面，本文设计了自适应迎风稳定化有限元方法 SUPG-IP，并与 SUPG（streamline upwind/Petrov-Galerkin）方法进行了对比研究。数值实验表明，两种方法的精度和收敛阶基本相当。分别使用标准有限元方法、SUPG 方法和 SUPG-IP 方法对三维 KcsA 钾离子通道进行模拟计算，结果显示，SUPG-IP 方法可以处理更大范围的边界浓度和更高的电压条件，展示出该方法的优越性。此外，文中分析了经典的基于指数拟合技巧的 Zlamal 有限元方法，并通过 PN 结的数值算例对比了 SUPG-IP 方法和 Zlamal 方法的表现。数值结果表明，SUPG-IP 方法更加稳健，可以模拟大偏压以及高掺杂器件，而 Zlamal 方法可以保持电流守恒，但在稳健性上稍微逊色一些。

在半导体器件模拟方面，基于三维并行自适应有限元平台 PHG，本文研制了三维半导体器件数值模拟并行有限元求解器 DevSim，并嵌入到了本小组开发的半导体器件及其辐照损伤效应仿真的应用软件系统 3Ddevice 中。该软件包含了完整的数值模拟三大主要流程：前处理、求解器、后处理，界面友好，功能完整。文中通过 DevSim 对几种典型的半导体器件进行了模拟测试，所得计算结果与理论相符，且 PN 结的模拟结果与商业软件 Sentaurus 的结果吻合较好，验证了算法的有效性。基于电离损伤耦合模型，文中对双极器件 LPNP 的辐照损伤效应进行了模拟计算，成功模拟出了 LPNP 晶体管受电离辐射影响后出现的基极电流增大和电流增益退化的现象。最后文中对 PN 结和 LPNP 晶体管进行了大规模网格的并行模拟测试，其中 PN 结的测试网格达 8 亿单元并使用 2048 进程计算，展示了算法良好的并行可扩展性。

此外，本文还将漂移扩散模型应用到了纳米材料的研究中。实验发现，具有三维互通纳米通道和空间带电性的 HEMAP（2-hydroxyethyl methacrylate phosphate）水凝胶膜在盐差能转换和阳离子选择性上表现出优异的能力。基于三维漂移扩散模型和上述有限元方法，文中从数值模拟的角度再次验证了该结论。

本文中所有数值计算均在科学与工程计算国家重点实验室 LSSC-IV 集群上完成。

关键词：漂移扩散模型，有限元方法，半导体器件，DevSim，纳米通道