

УДК 621.382

**И. И. Абрамов**, д-р физ.-мат. наук, проф.  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники, Минск,  
Республика Беларусь

## ПРОБЛЕМЫ И ПРИНЦИПЫ ФИЗИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ.

### Ч. II. Модели полуклассического подхода

*В данной части работы выделены и рассмотрены физико-математические основы моделирования физических процессов в разнообразных элементах микроэлектроники в рамках полуклассического подхода.*

#### Строгие методы

Полуклассический (квазиклассический) подход применим, когда характерные размеры элемента  $L_{\text{хар}}$  гораздо больше длины волны де Бройля  $\lambda_B$  [1]. В целом, это, как правило, выполняется для приборных структур микроэлектроники. В связи с этим данный подход традиционно используется для моделирования элементов микроэлектроники. В настоящее время в рамках полуклассического подхода построено огромное число моделей, описание которых невозможно даже в рамках большой книги. К счастью, это многообразие моделей может быть систематизировано.

Цель данной работы — выделение и рассмотрение физико-математических основ моделирования физических процессов в разнообразных элементах микроэлектроники в рамках полуклассического подхода. При этом будем следовать классификации, предложенной в [2—5], как наиболее полно соответствующей целям цикла статей.

При создании кинетической теории классических систем основополагающей является теорема Лиувилля для полной вероятностной функции распределения  $f^{(N)}$   $N$  одинаковых частиц. После интегрирования по координатам и импульсам  $N - 1$  частиц из **обратимого уравнения Лиувилля** при ряде предположений может быть получена цепочка (или иерархия) уравнений Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона (ББГКИ) для приведенных функций распределения  $f^{(l)}$  [6, 7]. Серьезным недостатком этих уравнений является то, что в уравнение для  $f^{(l)}$  входит  $f^{(l+1)}$ . Таким образом, при **строгом** (в рамках полуклассического) **подходе**

к описанию электронно-дырочной плазмы (ЭДП) в элементах необходимо решать все уравнения цепочки, что практически нереально, так же как и решение исходного уравнения Лиувилля для многочастичной функции распределения  $f^{(N)}$ . Заметим, что здесь в **строгом подходе** (подчеркиваем — но не точном) мы по сути дела **постулировали в качестве "первого шага"** при переходе от реального объекта к его модели **справедливость обратимого уравнения Лиувилля**.

Вследствие практической невозможности использования такого подхода традиционным стал переход к уравнению для одночастичной функции распределения  $f^{(1)}$  (в дальнейшем  $f$ ). Этот переход от обратимых ББГКИ уравнений, например, к **необратимому кинетическому уравнению Больцмана** (КУБ) выполняется в результате введения условия полного ослабления начальных корреляций (условия Боголюбова). Для нас важно отметить, что уже здесь (на "втором шаге") при выводе используются физические допущения с огрублением по пространству, времени и в результате статистического усреднения.

Данное упрощенное КУБ выводится и для твердых тел, включая полупроводники [8]. Традиционно оно записывается в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}}, \quad (1)$$

где **полевой член**

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} = -(\mathbf{v}\nabla_r f) - \frac{1}{m}(\mathbf{F}\nabla_v f) \quad (2)$$

описывает скорость изменения функции распределения  $f$  в результате движения носителей массы  $m$  в  $\mathbf{r}$ - и  $\mathbf{v}$ -пространстве, а **член столкновений**

$$S = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = \int \{f(\mathbf{v}', \mathbf{r}', t) W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')\} d^3v' \quad (3)$$

описывает скорость изменения функции  $f$  в результате столкновений (рассеяния) носителей. Здесь введены следующие обозначения:  $t$  — время;  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор пространства;  $\mathbf{v}$  — скорость носителей;  $\nabla_r, \nabla_v$  — градиенты по соответствующим направлениям;  $\mathbf{F}$  — сила, действующая на носитель и определяемая внешними полями;  $W(\mathbf{v}', \mathbf{v})$  — характеризует вероятность перехода из состояния  $(\mathbf{r}', \mathbf{v}')$  в состояние  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ .

В общем случае при рассмотрении ЭДП в приборных структурах необходимо учитывать то, что она состоит из нескольких сортов подвижных носителей заряда (традиционно — электронов и дырок). КУБ может быть обобщено на этот случай в виде системы кинетических уравнений. При этом происходит существенное усложнение входя-

\* Часть I опубликована в № 8, 2006 г.

щих в них интегралов столкновений  $\{S_i\}$ , которые включают интегралы столкновений электронов с фононами, дефектами решетки разного рода (примесями, дислокациями и т. д.), электронами, а также описывающие процессы типа рекомбинации, ударной ионизации и др. Получаемая система интегро-дифференциальных уравнений должна быть дополнена уравнениями электромагнитного поля Максвелла. Полная система уравнений с соответствующими граничными условиями является **базовой непрерывной кинетической моделью** ЭДП в приборной структуре.

Главные допущения при ее получении: 1) ЭДП — идеальная система; 2) ЭДП — классическая система. Корректность их использования для элементов современных интегральных схем обосновывалась в [9]. Заметим, что некоторые квантовые эффекты могут быть учтены в рамках подхода, близкого к выделенному кинетическому описанию.

Полная система уравнений рассматриваемой **строгой** (с указанными оговорками) **кинетической модели** приборной структуры является очень сложной системой интегро-дифференциальных уравнений. К сожалению, реализация следующих из нее дискретных (численных) моделей является чрезвычайно трудоемкой задачей для современных супер-ЭВМ и в настоящее время не выполнена. Здесь основные проблемы связаны со сложностью задания зонной структуры, вида интегралов столкновений, построения численных моделей и др.

Отметим и еще один строгий метод в рамках полуклассического подхода, основанный на применении при моделировании процессов переноса **метода Монте-Карло** [10–12]. Было доказано, что результаты, полученные с помощью этого метода, полностью согласуются с данными, базирующимися на реализации метода КУБ. Принципиальное отличие заключается в том, что в методе Монте-Карло имитируется движение каждого из носителей заряда, т. е. моделирование осуществляется непосредственно на микроуровне, а не путем расчета микрохарактеристики системы  $f$ .

Различают два метода Монте-Карло, а именно: многочастичный и одночастичный. В **многочастичном методе Монте-Карло** имитируется движение большого числа носителей заряда. Оптимальное число носителей при моделировании нестационарных процессов в полупроводниках лежит от нескольких тысяч до десятков (и даже сотен) тысяч и зависит от конкретной задачи. При моделировании стационарных задач, как правило, применяется **одночастичный метод Монте-Карло**, когда осуществляется имитация движения одного электрона в пространстве волнового вектора  $\mathbf{k}$  в течение достаточно длительного времени. Это время зависит от многих факторов, в частности, требуемой точ-

ности, зонной структуры и учитываемых механизмов рассеяния.

Сложность применения к плазме элементов заключается в необходимости использования в общем случае многочастичного метода Монте-Карло, а следовательно, точность моделирования сильно зависит от числа частиц  $N^*$ . К сожалению, высокая адекватность результатов моделирования может достигаться лишь при достаточно точном задании зонной структуры материала и большом числе носителей. Так, для одной из наиболее адекватных в настоящее время моделей (но не строгой!), основанной на **методе Монте-Карло частиц** (см. далее) и реализованной в программе DAMOCLES фирмы IBM [13], требуется десятки (от 10 до 100!) часов при расчете одной точки вольт-амперной характеристики (ВАХ)  $n$ -МОП-транзистора в двумерном случае на вычислительной системе с векторным процессором IBM 3090/600E (одной из лучших в то время). Комментарии, как говорится, излишни.

Таким образом, две строгие модели полуклассического подхода практически нереализуемы и являются результатом, по крайней мере, двух шагов и этапов приближений, если считать уравнение Лиувилля следствием "первого шага" для первой модели, а уравнения Гамильтона — для второй. В статистической физике показана эквивалентность указанных двух исходных формализмов при описании классических систем частиц. Эта эквивалентность, по сути дела, и является первопричиной отмеченного ранее согласования результатов по методу КУБ и методу Монте-Карло. Поэтому в литературе часто метод Монте-Карло рассматривается всего лишь как один из численных методов решения КУБ. Точнее в данном случае допустимо говорить, что он является "методом неявного решения КУБ" [14].

### Иерархия приближений и исходных уравнений полуклассического подхода

Традиционными при построении моделей элементов микроэлектроники являются следующие физические допущения:

- диэлектрическая и магнитная проницаемости постоянны и не зависят от координаты и времени в материале одного вида;
- пренебрегается влиянием магнитного поля на электрическое.

Оценка справедливости данных предположений приведена в [15]. С введением данных допущений из уравнений электромагнитного поля Максвелла остаются только два уравнения:

\* При "строгой" реализации  $N \rightarrow \infty$ , что, конечно же, нереально.

$$\nabla \mathbf{J}_{\text{полн}} = 0; \quad (4)$$

$$\nabla \mathbf{D} = \rho, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{J}_{\text{полн}} = \partial \mathbf{D} / \partial t + \mathbf{J}_{\text{пров}}; \quad (6)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}; \quad (7)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (8)$$

Здесь введены следующие обозначения:  $\mathbf{J}_{\text{полн}}$ ,  $\mathbf{J}_{\text{пров}}$  — векторы плотности полного тока и тока проводимости;  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{D}$  — векторы напряженности электрического поля и индукции;  $\rho$  — плотность полного электрического заряда;  $\varphi$  — электростатический потенциал;  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость.

Для доопределения в модели двух величин  $\rho$ ,  $\mathbf{J}_{\text{пров}}$  необходимо изначально использовать либо метод КУБ, либо метод Монте-Карло. К сожалению, даже с применением описанных предположений реализация соответствующих моделей элементов практически невозможна. Для преодоления отмеченных сложностей при построении моделей приборных структур на основе данных двух методов полуклассического подхода используются дальнейшие упрощения (огрубления по пространству и времени) и преобразования. Они, по сути дела, являются вынужденными вследствие изложенного. В результате может быть выведена иерархия приближений и соответствующих им исходных уравнений (моделей). Рассмотрим их.

Обычным при редукции систем уравнений (моделей), полученных первым методом КУБ, является **приближение времени релаксации**, а для второго метода Монте-Карло — **объединение (группировка) носителей заряда в макрочастицы** (методы Монте-Карло частиц [9–12]).

В **приближении времени релаксации** предполагается, что интеграл столкновений (3) может быть представлен в виде [8]

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (9)$$

где  $f_0$  — равновесная функция распределения;  $\tau$  — время релаксации, которое в общем случае зависит от  $\mathbf{v}$  (или  $\mathbf{k}$ ) и  $\mathbf{r}$ . Данное приближение обычно выполняется при небольших отклонениях  $f$  от  $f_0$ , т. е. равновесных значений.

Кроме того, традиционно предполагается независимость механизмов рассеяния, что позволяет записать для  $\tau$  соотношение [8]

$$\frac{1}{\tau} = \sum_l \frac{1}{\tau_l}, \quad (10)$$

где  $\tau_l$  — время релаксации для  $l$ -го механизма рассеяния. Зависимость  $\tau$  от  $\mathbf{r}$ , как правило, не учи-

тывается в явном виде, поэтому  $\tau$  часто называется временем релаксации импульса. Считается, что данное приближение может быть достаточно строго обосновано лишь при выполнении двух условий: если столкновения частиц упругие и если время рассеяния зависит только от угла рассеяния. Заметим, что для сложных законов дисперсии (например, для Ge и Si дырочного типа проводимости) строгое введение понятия времени релаксации вызывает затруднения. **Прямые методы** на основе непосредственного решения КУБ не получили широкого распространения, за исключением простейших задач по расчету объемных свойств полупроводников, а именно: дрейфовой скорости, подвижности и др.

Для метода Монте-Карло ситуация иная. На начальном этапе развития данный метод, как правило, также использовался для расчета объемных свойств материалов. Качественный прорыв произошел после начала разработки **методов Монте-Карло частиц** для моделирования полупроводниковых приборов. Обзор ранних работ приведен в [10, 12]. В процессе использования данных методов описание движения электронов в реальном пространстве осуществляется с помощью их группировки в некоторые макрочастицы (в дальнейшем просто частицы) [10].

Методам Монте-Карло частиц свойствен ряд следующих наиболее серьезных недостатков:

- часто они не имеют строгого обоснования;
- достаточно адекватные результаты моделирования приборных структур, как правило, достигаются при относительно точном задании зонной структуры твердого тела и детальном знании скоростей большого числа механизмов рассеяния. К сожалению, модели для некоторых из них еще весьма далеки от совершенства;
- в общем случае не известно, какое число частиц  $N$  будет достаточно для получения результатов требуемой точности.

В связи с этим для того, чтобы промоделировать электрические характеристики приборных структур с высокой степенью адекватности, как правило, требуются огромные затраты вычислительных ресурсов ЭВМ (см. ранее). Тем не менее, с использованием методов Монте-Карло частиц получены важные научные результаты по анализу ряда относительно простых приборных структур, в частности диодов, транзисторов и некоторых других [9–14, 16, 17]. В настоящее время данные методы интенсивно совершенствуются [14, 17].

По изложенным причинам вместо **кинетического моделирования** с помощью отмеченных прямых методов и методов Монте-Карло частиц более широкое распространение при исследовании и расчете приборных структур микроэлектроники получили описываемые ниже базовые приближения и соответствующие им модели.

Дальнейшее использование приближения времени релаксации позволяет существенным образом упростить столкновительные члены  $\{S_i\}$  и получить более простые моментные уравнения, составляющие основу известных макроскопических моделей. Заметим, что цепочка уравнений для макроскопических величин, являющаяся математически точным следствием кинетических уравнений, может быть получена после их домножения на соответствующие величины и интегрирования по зоне Бриллюэна. Сложность использования получаемых моментных уравнений, однако, аналогична сложности применения исходных уравнений. Более того, для новых уравнений характерен отмеченный недостаток ББГКИ уравнений. Поэтому при практическом использовании моментных уравнений осуществляется обрыв цепочки и вводится ряд упрощающих предположений, что и составляет суть того или иного макроскопического приближения.

К счастью, в большом числе случаев описание ЭДП в элементах с помощью функций распределения является излишне детальным, поэтому часто достаточно применять уравнения переноса, в которых присутствуют такие важные макроскопические величины, как концентрация частиц, плотность тока, тепловой поток, средняя энергия носителей и др.

Так, уравнения цепочки для нулевого (концентрации  $n_i$ ), первого (плотности момента  $p_i$ ), второго (плотности энергии  $w_i$ ) моментов функции распределения для  $i$ -го сорта носителей заряда имеют вид [18]

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}_i n_i) = \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}; \quad (11)$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}_i p_i) = e n_i \mathbf{E} - \nabla(n_i k_B T_i) + \left(\frac{\partial p_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}; \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}_i w_i) = e n_i \mathbf{v}_i \mathbf{E} - \nabla(\mathbf{v}_i n_i k_B T_i) - \\ - \nabla \mathbf{q}_i + \left(\frac{\partial w_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $T_i$  — эффективная температура  $i$ -го сорта носителей;  $e$  — элементарный (положительный) заряд;  $\mathbf{v}_i$  — средняя скорость;  $\mathbf{q}_i$  — вектор потока тепла;  $\left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$ ,  $\left(\frac{\partial p_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$ ,

$\left(\frac{\partial w_i}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$  — интегралы от столкновительных членов исходного КУБ по импульсному пространству, умноженных перед интегрированием на 1,  $p_i$  и  $\varepsilon_i$  ( $\varepsilon_i$  — закон дисперсии) с соответствующим нормировочным коэффициентом. Задание этих интегралов

в приближении времени релаксации, как правило, не вызывает затруднений. Уравнение (11) — закон сохранения числа частиц (заряда, если (11) умножить на  $e$ ), уравнение (12) — закон сохранения момента, уравнение (13) — закон сохранения энергии (все для  $i$ -го сорта).

Легко заметить, что три уравнения (11)–(13) содержат семь переменных (шесть моментов), а именно:  $n_i$ ,  $\mathbf{v}_i$ ,  $p_i$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $T_i$ ,  $w_i$ ,  $\mathbf{q}_i$ . Следовательно, система уравнений является незамкнутой. Напряженность электрического поля  $\mathbf{E}$  определяется согласно уравнению Пуассона (5) (с учетом (7)). Используя какие-либо дополнительные соображения, необходимо связать моменты более высокого порядка, входящие в (11)–(13), с моментами более низкого порядка. Это позволяет замкнуть систему (11)–(13). Используемые при этом физические предположения и являются сутью того или иного приближения. Именно в этом случае решение получаемой системы уравнений оказывается намного проще уравнений исходной базовой непрерывной кинетической модели.

При макроскопическом описании плазмы полупроводниковых приборов выделяют **три базовых приближения**, а именно [3, 19]: **гидродинамическое**, **квазигидродинамическое** и **диффузионно-дрейфовое**. В гидродинамической исходной модели без изменений используются все три основных уравнения (11)–(13); в квазигидродинамической — (11) и (13); в диффузионно-дрейфовой — (11). Рассмотрим эти приближения.

Для замыкания уравнений (11)–(13) в **гидродинамическом приближении** применяются следующие основные физические предположения [20]:

1) частота парных соударений  $\nu$  является наибольшей из всех частот, т. е.  $\nu \gg \max\{\nu_p, \nu_\varepsilon\}$ ,  $\nu_p$ ,  $\nu_\varepsilon$  — импульсная и энергетическая частоты соударений, причем обычно  $\nu_p \gg \nu_\varepsilon$ ; вследствие этого функции распределения являются сдвинутыми максвелловскими (или фермиевскими);

2) квадратичный изотропный закон дисперсии  $\varepsilon_i = p^2/m_i$ , где  $m_i$  — эффективная масса носителей  $i$ -го сорта.

Ситуация, описываемая п. 1), называется случаем **полного** (или импульсного) контроля, когда парные взаимодействия носителей контролируют не только перераспределение энергии, но и перераспределение импульса. Данный случай удобно также описать с помощью характеристических длин (масштабов), а именно:  $\lambda_{\text{ст}} \ll \min\{\lambda_p, \lambda_\varepsilon, L_{\text{хар}}\}$ , где  $\lambda_{\text{ст}}$  — характерная длина парных столкновений;  $\lambda_p$  — длина релаксации импульса;  $\lambda_\varepsilon$  — длина энергетической релаксации.

В гидродинамическом приближении уравнения, замыкающие систему (11)–(13), например, имеют следующий вид [18]:

$$p_i = m_i n_i v_i; \quad (14)$$

$$w_i = \frac{3}{2} n_i k_B T_i + \frac{m_i}{2} n_i v_i^2; \quad (15)$$

$$q_i = -K_i \nabla T_i, \quad (16)$$

где  $K_i$  — теплопроводность газа носителей в  $i$ -й подзоне. В (16)  $T_i$  предполагается не тензорной, а скалярной величиной. Заметим также, что строго говоря, в соответствии с указанным физическим предположением 1)  $q_i = 0$ .

Плотность тока  $j_i$  может быть определена согласно соотношению

$$j_i = en_i v_i. \quad (17)$$

Задание столкновительных членов осуществляется с использованием понятий времен релаксации импульса  $\tau_p$  и энергии  $\tau_\varepsilon$  (см. [18] для случая двух долин).

В результате исключений из (11)—(13) с помощью (14)—(17) для каждого сорта носителей остаются три уравнения гидродинамического приближения относительно неизвестных:  $(n_i, p_i, w_i)$ ,  $(n_i, v_i, T_i)$ ,  $(n_i, j_i, w_i)$ ,  $(n_i, v_i, w_i)$  и других возможных основных переменных. Вид этих уравнений часто приводится в литературе [9, 18, 20, 21] и зависит от замыкающих уравнений типа (14)—(17).

В *квазигидродинамическом приближении* используется следующее основное физическое допущение [20]: для частот справедливо соотношение  $v_\varepsilon \ll v \ll v_p$  (для характеристических масштабов:  $\lambda_p < \lambda_{ст} \ll \min\{\lambda_\varepsilon, L_{хар}\}$ ); вследствие этого симметричные части функций распределений являются максвелловскими (или фермиевскими), а антисимметричные части функций распределения — малы.

В данном случае *неполного* (или энергетического) *контроля* парные столкновения будут влиять на распределение энергии между носителями, но никак не повлияют на рассеяние носителя с изменением направления импульса. В этом приближении остаются уравнения (11) и (13). Их удобный вид в случае квадратичного изотропного закона дисперсии и при отсутствии вырождения приведен в [9, 20, 21].

Сравнительный анализ гидродинамического и квазигидродинамического приближений показывает [19, 20], что основные условия применимости первого являются более жесткими по сравнению со вторым. На этом основании делается вывод, что полный контроль в примесных полупроводниках практически не реализуется [20], а ситуация, описываемая в рамках квазигидродинамического приближения, более типична для ЭДП полупроводниковых приборов [9]. Здесь, однако, необходимо сделать несколько важных замечаний:

- полученный в указанных предположениях *полный набор* уравнений и соотношений фактически не используется при дальнейшем построе-

нии модели элемента, а применяются, как правило, лишь основные из них;

- целый ряд результатов не зависит от степени контроля [20];
- основные уравнения гидродинамического приближения включают уравнения квазигидродинамического, а следовательно, более общие в математическом смысле (см. далее);
- многое зависит от конкретных условий замыкания и согласуемых с экспериментом параметров (в гидродинамическом приближении их, как правило, больше). По указанным причинам гидродинамическое приближение достаточно часто применяется при описании ЭДП полупроводниковых приборов и структур.

В *диффузионно-дрейфовом приближении* предполагается, что для характерных масштабов справедливо соотношение [3, 9]:  $L_{хар} > \{\lambda_p, \lambda_\varepsilon\}$ . В данном случае остаются только закон сохранения числа частиц относительно концентрации (11) и замыкающее уравнение для плотности тока. В случае квадратичного изотропного закона дисперсии и при отсутствии вырождения они принимают следующий вид [22]:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{e} \nabla j_i = -R_i; \quad (18)$$

$$j_i = en_i \mu_i E - e \varphi_T \mu_i \nabla n_i, \quad (19)$$

где  $R_i$  — превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации для  $i$ -го сорта носителей;  $\varphi_T$  — температурный потенциал, равный  $k_B T/e$ ;  $T$  — температура кристаллической решетки;  $\mu_i$  — подвижность  $i$ -го сорта носителей.

Описанные базовые приближения и соответствующие им исходные уравнения и порождают основные известные классы моделей приборных структур микроэлектроники полуклассического подхода [2—5]. Важно заметить, что здесь в целом имеет место соответствие рассмотренных уравнений иерархии уравнений статистической теории макроскопических открытых систем [23]. Причем мы описывали иерархию уравнений сверху вниз, т. е., как правило, с более высокой к менее высокой степени адекватности описания физических процессов в элементах.

### Классы моделей

Как следует из предыдущего рассмотрения, применение первого метода синтеза [1] приводит, в сущности, к построению классов *исходных моделей*. Это связано с тем, что в каждом конкретном случае возможны различия в моделях, вызванные следующими факторами:

- число сортов носителей заряда зависит от характера исследуемой плазмы;

- возможно использование разных уравнений замыкания;
- может быть важен учет магнитного поля;
- граничные условия зависят от анализируемой приборной структуры и др.

В целом, процесс синтеза моделей в рамках первого кардинального метода может быть схематично представлен, как показано в табл. 1 [2–5]. В ней отражено возможное подобие моделей, получаемых в рамках полуклассического и квантовомеханического подходов [2, 3].

В данной статье рассмотрим основные классы моделей полуклассического подхода. Методы Монте-Карло частиц часто не совсем точно интерпретируются как численные методы решения кинетического уравнения Больцмана, поэтому ряд авторов их относит к кинетическим моделям [9]. По-видимому, это не верно вследствие изложенного ранее. Кроме того, методы Монте-Карло частиц часто характеризуются достаточно сильно различающимися допущениями, используемыми при объединении носителей заряда в макрочастицы и другими [10, 12, 14], а как результат — адекватностью моделирования. По этим причинам в рамках кинетического моделирования будем выделять два класса моделей: *кинетические модели*, основанные на прямых методах решения КУБ, и *методы Монте-Карло частиц*. Эти два класса моделей формируют верхние иерархические уровни моделей полуклассического подхода. Кинетические модели, к сожалению, не получили широкого распространения при моделировании элементов. В то же время методы Монте-Карло частиц интенсивно исследуются и развиваются, однако отмеченные недостатки приводят к большей целесообразности для широкого применения для анализа и проектирования приборных структур микроэлектроники описываемых далее классов моделей.

Таблица 1

Процесс синтеза моделей элементов в рамках первого метода

Уровень	Составляющие
Общий подход	Полуклассический Квантовомеханический
Метод	Кинетических уравнений Монте-Карло (имитация движения частиц)
Базовое приближение	Времени релаксации Группировка носителей в макрочастицы Гидродинамическое Квазигидродинамическое
Основной класс	Диффузионно-дрейфовое Кинетические модели Методы Монте-Карло частиц Гидродинамические модели Квазигидродинамические модели Диффузионно-дрейфовые модели Комбинированные модели

Уже отмечалось, что число сортов носителей в плазме элемента, т. е. в каждом конкретном случае, может быть различным, например, электроны и дырки, электроны разных долин, "легкие" и "тяжелые" дырки и др. Увеличение их числа обычно приводит к существенному усложнению задачи. Последнее хотя бы связано со следующими физическими факторами. Так, необходимо различать времена между столкновениями носителей одного и того же и разных сортов. В результате число предельных случаев может заметно возрастать, например, в зависимости от соотношения эффективных масс носителей рассматриваемых в задаче типов. В случае существенного различия эффективных масс (например, электронов и дырок) времена между столкновениями носителей одного сорта обычно относительно малы. Поэтому однозначным является представление о температурах сортов носителей заряда  $\{T_i\}$ , которые, как правило, не равны между собой и не совпадают с температурой кристаллической решетки  $T$  [19]. Следовательно, даже в случае обычных двух сортов носителей заряда, т. е. электронов и дырок, необходимо, строго говоря, рассматривать три подсистемы: электроны, дырки и фононы. Таким образом, в гидродинамическом приближении задача становится сверхсложной — необходимо решать девять основных уравнений типа (11)–(13).

По изложенной причине, как правило, вводятся дополнительные физические допущения, по крайней мере, относительно фононной системы. Так, традиционно полагается равновесность фононной системы с температурой решетки  $T$ , постоянной по всему элементу (температурой термостата  $T = \text{const}$ ). В данном предположении достаточно общий вид уравнений *гидродинамической модели* ЭДП приборных структур приведен в работе [24]. Заметим, что исходные уравнения гидродинамической модели (11)–(13) были модернизированы на такие важные случаи, как гетероструктуры, непараболические законы дисперсии и др.

Достаточно общие системы исходных уравнений гидродинамического приближения предложены в работах [3, 25, 26] для случая, когда температура решетки меняется по приборной структуре. В данных исходных уравнениях, однако, третья подсистема (решетка) описывается приближенно с помощью уравнения теплопроводности для температуры решетки. Наиболее существенное отличие в уравнениях статьи [25] и работ [3, 26] заключается в используемом соотношении для плотности мощности  $P$  в уравнении теплопроводности. В частности, в [25] плотность мощности выражается через новые плотности энергии и интеграл столкновений, что приводит к необходимости привлекать дополнительные допущения. Относительно простой вид уравнений получается лишь для одно-

го типа носителей [25]. Более удобный и простой вид выражения для плотности мощности приведен в работах [3, 26].

В результате основной *обобщенной гидродинамической модели* ЭДП приборных структур микроэлектроники может быть следующая система уравнений [3, 26]:

$$-\nabla \varepsilon \nabla \varphi = q(p - n + N_d^+ - N_a^-); \quad (20)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \mathbf{J}_n = -R; \quad (21)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \nabla \mathbf{J}_p = -R; \quad (22)$$

$$\mathbf{J}_n + n \tau_{pn} \frac{d}{dt} \left( \frac{\mathbf{J}_n}{n} \right) = -q \mu_n n \nabla \left( \varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g - \frac{k_B T_n}{q} \right) + q D_n \nabla n; \quad (23)$$

$$\mathbf{J}_p + p \tau_{pp} \frac{d}{dt} \left( \frac{\mathbf{J}_p}{p} \right) = -q \mu_p p \nabla \left( \varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g + \frac{k_B T_p}{q} \right) - q D_p \nabla p; \quad (24)$$

$$\frac{\partial (n W_n)}{\partial t} + \nabla \mathbf{S}_n = \mathbf{E} \mathbf{J}_n - R W_n - n \left( \frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{wn}} \right); \quad (25)$$

$$\frac{\partial (p W_p)}{\partial t} + \nabla \mathbf{S}_p = \mathbf{E} \mathbf{J}_p - R W_p - p \left( \frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{wp}} \right); \quad (26)$$

$$\rho_T c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla (K \nabla T) + (\mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p) (-\nabla \varphi) + \mathbf{J}_n (-\nabla (A \Delta V_g)) + \mathbf{J}_p \nabla ((1 - A) \Delta V_g) + R (E_{g0} - q \Delta V_g); \quad (27)$$

с замыкающими уравнениями [3, 24]

$$\mathbf{S}_n = -K_n \nabla T_n - (W_n + k_B T_n) \frac{\mathbf{J}_n}{q}; \quad (28)$$

$$\mathbf{S}_p = -K_p \nabla T_p + (W_p + k_B T_p) \frac{\mathbf{J}_p}{q}; \quad (29)$$

$$W_n = \frac{3}{2} k_B T_n + \frac{1}{2} m_n v_n^2; \quad (30)$$

$$W_p = \frac{3}{2} k_B T_p + \frac{1}{2} m_p v_p^2. \quad (31)$$

В (20)–(31) использованы следующие обозначения:  $n, p$  — концентрации электронов и дырок;  $\mathbf{J}_n, \mathbf{J}_p$  — векторы плотности электронного и дырочного токов;  $R$  — превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации;  $N_d^+, N_a^-$  — концен-

трации ионизированных доноров и акцепторов;  $q$  — заряд электрона;  $\mu_n, \mu_p$  — подвижности электронов и дырок;  $D_n, D_p$  — коэффициенты диффузии электронов и дырок;  $T_n, T_p, T$  — температуры электронов, дырок и решетки;  $\tilde{A}, \Delta \tilde{V}_g$  — параметры, описывающие совместное влияние эффектов сильного легирования;  $\rho_T$  — плотность тела;  $c$  — удельная теплоемкость тела;  $K$  — коэффициент теплопроводности;  $A$  — коэффициент асимметрии в сужении ширины запрещенной зоны (ШЗЗ);  $\Delta V_g$  — величина ШЗЗ;  $E_{g0}$  — ШЗЗ собственного полупроводника;  $W_n, W_p$  — средние энергии электронов и дырок;  $W_{n0}, W_{p0}$  — тепловые энергии носителей в равновесии;  $\mathbf{S}_n, \mathbf{S}_p$  — электронные и дырочные потоки энергии;  $v_n, v_p$  — средние скорости электронов и дырок;  $\tau_{pn}, \tau_{pp}$  — времена релаксации момента для электронов и дырок;  $\tau_{wn}, \tau_{wp}$  — времена релаксации энергии для электронов и дырок;  $m_n, m_p$  — эффективные массы электронов и дырок;  $K_n, K_p$  — коэффициенты теплопроводности электронов и дырок, задаваемые с помощью закона Видемана–Франца [8].

Система уравнений (20)–(27) при  $\Delta \tilde{V}_g \rightarrow 0, \Delta V_g \rightarrow 0$  и  $T = \text{const}$  ( $P = [(\mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p)(-\nabla \varphi) + R E_{g0}] \rightarrow 0$ , где  $P$  — плотность мощности в случае неучета эффектов сильного легирования) переходит в систему гидродинамических уравнений работы [24]. Эти системы уравнений и являются основой ряда возможных исходных моделей класса *гидродинамических моделей*.

Предложенная система уравнений [3, 26] удобна, так как с ее помощью после введения дополнительных допущений получается иерархия исходных моделей [3, 27], включающая и известные достаточно общие модели других более низких уровней, в частности, квазигидродинамические и диффузионно-дрейфовые модели.

Достаточно общая система уравнений [28, 29] исходной модели класса *квазигидродинамических моделей* получается при следующих дополнительных к уже отмеченным для гидродинамической модели [24] допущениях [3, 27]: времена релаксации момента  $\tau_{pn} \rightarrow 0, \tau_{pp} \rightarrow 0$ , что полностью согласуется с основным физическим допущением квазигидродинамического приближения. Модели данного класса в настоящее время применяются для учета часто важных в приборных структурах с субмикрометровыми размерами на ряде полупроводников (например, с относительно малыми эффективными массами типа GaAs) эффектов, а именно: разогрев ЭДП, превышение скорости носителей заряда над скоростью насыщения (всплеск скорости) и др.

Общая система уравнений *диффузионно-дрейфовой (тепловой) модели* [3, 30, 31] получается при следующих дополнительных к квазигидродинамической модели допущениях: равенство всех температур  $T_n = T_p = T$ , а  $T \neq \text{const}$ ; постоянство потоков

$$\text{энергии } |S_n| = \text{const}, |S_p| = \text{const} \left( \left[ EJ_n - RW_n - n \left( \frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{wn}} \right) \right] \rightarrow 0, \left[ EJ_p - RW_p - p \left( \frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{wp}} \right) \right] \rightarrow 0 \right).$$

В результате в нее входят уравнения (20)–(22), (27), а также следующие выражения для плотностей токов:

$$J_n = -q\mu_n n \nabla(\varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g - k_B \xi T/q) + qD_n \nabla n; \quad (32)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla(\varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g + k_B \xi T/q) - qD_p \nabla p, \quad (33)$$

причем для коэффициентов диффузии справедливо соотношение Эйнштейна, а  $\xi = 0,5$  [3, 30, 31]. Допустимо использовать и другие значения, в частности  $\xi = 1$ . Справедливости ради отметим, что значение данного коэффициента не столь существенно для приборных структур микроэлектроники, так как вклад члена, содержащего  $\nabla T$ , как правило, пренебрежимо мал.

Если в описанной исходной системе уравнений предположить, что  $T = \text{const}$  ( $P \rightarrow 0$ ), получаются хорошо известные уравнения [3–5], в частности, (20)–(22) с выражениями для плотностей токов:

$$J_n = -q\mu_n n \nabla(\varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g) + q\varphi_T \mu_n \nabla n; \quad (34)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla(\varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g) - q\varphi_T \mu_p \nabla p, \quad (35)$$

где  $\varphi_T = k_B T/q$ . Данная система уравнений обычно применяется в *диффузионно-дрейфовых моделях*, в которых проводится учет эффектов сильного легирования с помощью эмпирических моделей [3]. В случае неучета эффектов сильного легирования ( $\Delta \tilde{V}_g = 0$ ) фундаментальная система уравнений (ФСУ) физики полупроводниковых приборов (20)–(22), (34), (35) принимает традиционный вид [3–5]. В целом, диффузионно-дрейфовые модели в настоящее время наиболее широко используются при исследовании самых разнообразных приборных структур микроэлектроники.

*Исходной моделью* того или иного класса будем называть рассмотренные соответствующие основные уравнения с дополнительными соотношениями, включая условия замыкания и граничные условия.

Несколько специфическое место занимает класс *комбинированных моделей*. Это связано с тем, что его нельзя поставить в самый низ рассматри-

ваемой иерархии моделей. Сущность комбинированных моделей состоит в использовании набора исходных уравнений различных классов моделей, как правило, для различающихся групп носителей. Разбиение на группы можно вести по разным признакам [9]: по типу (сорт) носителей; по пространственному расположению; по энергиям и др. В связи с этим, понятно, что степень адекватности моделей данного класса не может рассматриваться как наименьшая. В зависимости от грамотности разбиения на группы носителей она может варьироваться от наименьшей, характерной для применяемых уравнений модели самого низкого уровня адекватности моделирования, до наибольшей, соответствующей уравнениям модели верхнего иерархического уровня. Заметим, что при комбинировании моделей могут привлекаться и другие подходы, т. е. не обязательно на основе разбиения по группам носителей.

Кроме описанных основных классов моделей можно ввести и другие (дополнительные) классы моделей, например, псевдогидродинамические [9], дрейфовые [32] и др. Однако мы не будем их выделять, так как уже отмечалось, что в рамках одного основного класса моделей уравнения могут различаться вследствие использования дополнительных (не столь кардинальных с физической точки зрения) допущений. Часто такие действия могут интерпретироваться как результат применения третьего метода синтеза моделей (см. далее). Иногда такие модели могут быть отнесены к комбинированным моделям.

К сожалению, полные системы уравнений, составляющие исходные модели, не могут быть решены традиционными методами математической физики. По этим причинам используются и два других метода синтеза моделей [1]. Их привлечение приводит к существенному расширению указанных классов моделей.

Рассмотрим *второй метод синтеза моделей* приборных структур на основе использования различных модельных зависимостей для параметров исходных моделей. В его рамках применяется как полуклассический, так и квантовомеханический подходы к описанию полупроводников. При этом возможны *два пути синтеза моделей* [2–5]: *строгий*, состоящий в создании гибридных моделей; *феноменологический*. В первом случае модель более высокого уровня используется для определения некоторых параметров в областях, где нарушается справедливость менее адекватной базовой модели [2–5]. В основе второго пути синтеза моделей лежит привлечение смыслового физического содержания параметра [2–5]. Данный путь с успехом использовался при создании классических теорий полупроводниковых приборов в рамках диффузи-

онно-дрейфового приближения и синтезе численных моделей различных классов.

С привлечением *третьего метода синтеза* на основе аппроксимаций о характере поведения искомых функций удастся построить практически реализуемые модели элементов микроэлектроники из рассмотренных моделей, синтезированных в результате применения первого и второго методов. По этой причине данные три метода синтеза могут часто интерпретироваться и в качестве трех стадий процесса построения моделей [2—5].

Анализ известных моделей приборных структур позволяет представить процесс их синтеза в рамках третьего метода, как схематично показано в табл. 2 [2—5].

Выделяются два принципиально различных типа представления среды: дискретная (дискретные модели) и непрерывная (непрерывные модели). При этом возможны два способа построения моделей: физический и формальный. Физический, представляющий для нас больший интерес вследствие изложенного ранее, является эффективным инструментом построения моделей. В соответствии с типом среды обычно выделяются и два вида моделей: распределенные и с сосредоточенными параметрами. Первые, как правило, применяются в рамках дискретного представления о среде, вторые — в рамках непрерывного. Исключением, по видимому, являются модели, использующие комбинацию того и другого представления. В рамках указанных видов моделей можно выделить их три возможных разновидности, а именно: электрические, физико-топологические и макромоделли.

Приведем определения электрической и физико-топологической моделей, представляющих для нас наибольший интерес, согласно работам [4, 5].

*Физико-топологической моделью* будем называть модель элемента, параметрами которой являются технологические и электрофизические параметры.

В литературе используется вместо "технологические параметры" эквивалентный в данном случае термин — "конструктивно-технологические параметры".

Таблица 2

Процесс синтеза моделей элементов в рамках третьего метода

Уровень	Составляющие
Среда	Дискретная Непрерывная
Способ построения	Физический Формальный
Вид модели	Распределенная С сосредоточенными параметрами
Разновидности модели	Электрическая Физико-топологическая Макромодель

*Электрической моделью* на уровне эквивалентных схем будем называть модель элемента, аналоговыми компонентами которой являются диоды, источники тока и напряжения, резисторы, конденсаторы, емкости и катушки индуктивности или их сочетания.

В принципе могут входить и простые элементы, например транзисторы, однако при моделировании они представляются отмеченными компонентами.

Таким образом, проведенное рассмотрение позволяет показать, что два общих подхода к описанию явлений переноса и выделенные три основных метода синтеза моделей и допускают осуществить систематизацию моделей приборных структур микроэлектроники — объектов физики открытых систем.

### Пределы применимости подходов

В литературе много внимания уделяется оценке справедливости применяемых приближений. Тем не менее, проведенный анализ еще весьма далек от завершения. Пойдем по "пути наименьшего сопротивления". Рассмотрим сначала уравнения, вызывающие наименьшее число возражений (ограничений).

В системе уравнений обобщенной гидродинамической модели — это уравнение Пуассона (20), уравнения непрерывности электронов (21) и дырок (22). Детальный анализ выполнимости условия квазистационарности электромагнитного поля (исходя из уравнений Даламбера для скалярного и векторного потенциалов) позволяют сделать вывод, что данное приближение, приводящее к уравнению Пуассона, справедливо для полупроводниковых активных областей вплоть до частот около 100 ГГц [33]. Уравнения непрерывности (21), (22) также носят достаточно общий характер и, по существу, являются следствием первого уравнения Максвелла (4), т. е. закона сохранения заряда, если представить его покомпонентно для электронов и дырок. При этом должно быть применимо понятие "концентрации носителей", так как речь идет о макроскопическом описании процессов. Таким образом, основные ограничения, как правило, возникают далее при конкретизации соотношений для плотностей токов, плотности полного электрического заряда и рекомбинации-генерации. Для этого необходимо детальное знание процессов, происходящих при транспорте носителей заряда, в частности, механизмов рассеяния, включая процессы рекомбинации-генерации, и др.

Достижимо ли это в рамках полуклассического подхода? Для ответа на этот вопрос необходимо, прежде всего, проанализировать ключевое уравнение рассматриваемого подхода — кинетическое уравнение Больцмана (1). Данное уравнение может быть получено из более строгого уравнения Лиу-

вилля — фон Неймана при ряде физических предположений. К основным из них относятся [33, 34]:

- взаимодействие между носителями предполагается слабым;
- справедлива зонная теория и понятие эффективной массы;
- допустимо классическое описание пролета носителей заряда после столкновений;
- рассматриваются только точечные соударения;
- пренебрегается взаимодействием носитель-носитель в интеграле столкновений;
- вероятность рассеяния не зависит от внешнего поля;
- газ носителей заряда невырожден.

Ясно, что заранее оценить справедливость всего комплекса отмеченных физических допущений для той или иной конкретной приборной структуры и соответствующих управляющих воздействий не представляется возможным для базовой непрерывной кинетической модели. Возможны лишь приближенные весьма грубые оценки.

Поэтому далее рассмотрим только предельные оценки допустимого использования основных подходов. Так, оценка применимости того или иного базового приближения может быть получена на основе указанных соотношений для характерных масштабов. С этой целью необходимо использовать хорошо известные выражения для фундаментальных длин:

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{mv_T}; \quad (36)$$

$$\lambda_p = v_T \tau_p; \quad (37)$$

$$\lambda_\varepsilon = v_T \sqrt{\tau_p \tau_\varepsilon}, \quad (38)$$

где  $v_T$  — тепловая скорость;  $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ .

Используя формулу для длины волны де Бройля (36), можно оценить диапазоны применимости полуклассического и квантовомеханического подходов. Для кремния Si и арсенида галлия GaAs при комнатной температуре  $\lambda_B(\text{Si}) \approx 2$  нм, а  $\lambda_B(\text{GaAs}) \approx 25$  нм. Следовательно, предел применимости полуклассического подхода при комнатной температуре можно оценить следующим образом:  $L_{\text{хар}} \geq 0,01$  мкм (для Si) и  $L_{\text{хар}} \geq 0,03$  мкм (для GaAs).

На основе формул (37) и (38) допустимо оценить диапазон справедливости базовых приближений полуклассического подхода. Однако мы не будем этого делать, так как многое зависит от конкретных механизмов рассеяния носителей заряда и некоторых других факторов.

Здесь приведем лишь часто встречающиеся оценки пределов применимости диффузионно-дрейфового приближения [15, 32, 35]: 1) до частот  $10^{12}$  Гц; 2) для  $L_{\text{хар}}$ , больших нескольких сотых микрометра; 3) до градиентов концентраций приме-

сей в  $10^{24}$  см<sup>-4</sup>; 4) до плотностей токов  $10^6$  А/см<sup>2</sup>. Данные оценки должны рассматриваться как очень оптимистические. Скорее, они могут быть отнесены к наиболее строгим макроскопическим приближениям в рамках полуклассического подхода в свете изложенного ранее (в особенности для  $L_{\text{хар}}$ ). Более реальными, по-видимому, являются приведенные в [2, 3] для кремния при комнатной температуре целесообразные диапазоны применимости основных подходов: 1) квантовомеханический —  $L_{\text{хар}} \leq 0,01$  мкм; 2) полуклассический\* —  $0,01 \leq L_{\text{хар}} \leq 0,1$  мкм; 3) макроскопический (диффузионно-дрейфовое приближение) —  $L_{\text{хар}} \geq 0,1$  мкм. Для арсенида галлия и полупроводников с более легкими эффективными массами по сравнению с кремнием числовые значения необходимо увеличить ориентировочно в 2—5 раз.

В заключение отметим, что ситуация еще более усложняется при анализе адекватности той или иной конкретной модели в рамках описанных приближений и классов. Этот вопрос будет более подробно рассматриваться в следующей статье, посвященной проблемам и принципам численного моделирования приборных структур микроэлектроники.

#### Список литературы

1. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34—37.
2. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 5. С. 3—9.
3. Абрамов И. И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Минск: БГУ, 1999. 189 с.
4. Абрамов И. И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем": Учеб. пос. Минск: БГУ, 1999. 92 с.
5. Абрамов И. И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
6. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.—Л.: Гостехиздат, 1946. 120 с.
7. Гуров К. П. Основания кинетической теории (метод Боголюбова). М.: Наука, 1966. 352 с.
8. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.
9. Рыжий В. И., Баннов Н. А. Математическое моделирование субмикронных элементов интегральных схем: состояние и проблемы // Микроэлектроника. 1987. Т. 16. № 6. С. 484—496.
10. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.
11. Реклайтис А. С., Мицкявичюс Р. В. Метод Монте-Карло в физике полупроводников. М.: Знание, 1988. 32 с.
12. Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo method for semiconductor device simulation. Wien, New York: Springer-Verlag, 1989. 344 p.
13. Laux S. E., Fischetti M. V., Frank D. J. Monte Carlo analysis of semiconductor devices: The DAMOCLES program // IBM J. Res. Develop. 1990. V. 34. N 4. P. 466—494.
14. Kosina H., Nedjalkov M., Selberherr S. Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation // IEEE Trans. 2000. V. ED-47. N 10. P. 1898—1908.

\* Имеются в виду модели повышенной по сравнению с диффузионно-дрейфовыми моделями адекватности моделирования.

15. **Гаврилов О. Т., Тиходеев Ю. С.** Основные ограничения макроскопического рассмотрения процессов в полупроводниковых приборах // *Электронная техника. Сер. 2. Полупроводниковые приборы*. 1973. Вып. 1. С. 61–71.
16. **Борздов В. М., Комаров Ф. Ф.** Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Минск: БГУ, 1999. 235 с.
17. **Сидоров А. А., Вьюрков В. В., Орликовский А. А.** Применение метода Монте-Карло для моделирования кремниевых полевых нанотранзисторов // *Микроэлектроника*. 2004. Т. 33. № 4. С. 243–255.
18. **Bløtekjær K.** Transport equations for electrons in two-valley semiconductors // *IEEE Trans.* 1970. V. ED-17. N 1. P. 38–47.
19. **Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г.** Физика полупроводников. М.: Наука, 1990. 688 с.
20. **Басе Ф. Г., Гуревич Ю. Г.** Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975. 400 с.
21. **Кокин А. А., Толстихин В. И.** О моделировании процессов переноса в монополярных полупроводниковых структурах с субмикронными размерами // *Микроэлектроника*. 1984. Т. 13. Вып. 1. С. 24–40.
22. **Van Roosbroeck W.** Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors // *Bell System Techn. J.* 1950. V. 29. P. 560–607.
23. **Климонтович Ю. Л.** Турбулентное движение и структура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем. М.: Наука, 1990. 320 с.
24. **A new discretization strategy of the semiconductor equations comprising momentum and energy balance / A. Forghieri, R. Guerrieri, P. Ciampolini, A. Gnudi, V. Rudan, G. Vaccarani // IEEE Trans.** 1988. V. CAD-7, N 2. P. 231–241.
25. **Wang C. T.** A new set of semiconductor equations for computer simulation of submicron devices // *Solid-State Electron*. 1985. V. 28. N 8. P. 783–788.
26. **Abramov I. I.** A new system of equations for submicron VLSI and ULSI device simulation // *The Third International Seminar on Simulation of Devices and Technologies*. Obninsk, 1994. P. 21–22.
27. **Abramov I. I.** Hierarchy of models for small semiconductor device simulation // In: *Physics, chemistry and application of nanostructures*. Minsk, 1995. P. 257–259.
28. **Cook R. K.** Numerical simulation of hot-carrier transport in silicon bipolar transistors // *IEEE Trans.* 1983. V. ED-30. N 9. P. 1103–1110.
29. **Бубенников А. Н.** Моделирование интегральных микро-технологий, приборов и схем. М.: Высш. шк., 1989. 320 с.
30. **Абрамов И. И., Харитонов В. В.** Многомерное численное моделирование элементов интегральных схем с совместным учетом эффектов сильного легирования, саморазогрева и температуры окружающей среды // *Электронное моделирование*. 1991. Т. 13. № 4. С. 60–64.
31. **Абрамов И. И., Харитонов В. В.** Многомерные физические процессы в элементах и фрагментах кремниевых СБИС // *Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника*. 1991. Вып. 2. С. 32–36.
32. **Кремлев В. Я.** Физико-топологическое моделирование структур элементов БИС. М.: Высш. шк., 1990. 144 с.
33. **Process and device modeling / Ed. by W. L.** Engl. Amsterdam: Elsevier Science Publ., 1986. 462 p.
34. **Selberherr S.** Analysis and simulation of semiconductor devices. Wien, New York: Springer-Verlag, 1984. 294 p.
35. **Носов Ю. Р., Петросянц К. О., Шилин В. А.** Математические модели элементов интегральной электроники. М.: Советское радио. 1976. 304 с.