

电流连续性方程离散技术优劣判据

滕志猛 何野 童勤义

(东南大学微电子中心 南京 210018)

摘要 本文提出了一套判断电流连续性方程离散技术优劣的基本判据,为选择合适的离散方法提供了依据,并根据这套判据,提出了一种新的有限差分方法。误差分析和数值实验结果都表明,该方法优于不完全满足基本判据的 SG 方法和 SUPG 方法。

关键词 电流连续性方程,离散方法,基本判据

1 引言

众所周知,数值振荡和侧风扩散现象是用数值方法求解对流扩散方程所存在的主要问题,为了解决这些问题,在流体力学、空气动力学、微电子学等不同领域里已提出了许多方法^[1-12]。然而在实际应用中如何选择合适的方法离散对流扩散方程一直是个难题。为此,文献[12]提出了一套对流扩散方程离散技术优劣判据,并提出了 CUPID (Corner UPwInD) 方法。可是,尽管 CUPID 方法满足全部判据,它却内在地具有严重的侧风扩散现象。因此那套判据不能准确地评价对流扩散方程离散方法的优劣。

电流连续性方程是典型的对流扩散方程之一,在半导体器件模拟中通常采用 SG (Scharfetter-Gummel) 方法离散^[1]。可是当漂移项相对于扩散项占优时,SG 方法为了稳定数值解而引入的人为扩散项在漂移方向的垂直方向(侧风方向)上的分量可能使它产生严重的侧风扩散现象^[6]。为了解决这个问题,根据流线迎风的思想^[3],提出了一些有限元方法^[6,7]。然而,使用这些方法得到的数值结果中在陡峭层附近出现了数值振荡^[9]。

为了解决上述问题,本文首先给出了一套新的判据,然后提出了一种满足全部判据的有限差分方法。与侧风效应相关的离散误差分析和数值实验结果表明,该方法优于经典的 SG 方法和 SUPG (Streamline Upwind Petrov/Galerkin) 方法^[5-7]。

2 基本判据

一般说来,一个好的电流连续性方程离散方法应该是稳定的,且精度较高,花费计算机内存和计算时间较少。具体地讲,它必须满足:(1)通过一个特定的面离开一个网格单元流量必须与通过它们的公共面进入下一个网格单元的流量一致。这个条件通常称为“相互性”准则,很容易被满足。(2)为了避免数值振荡,离散方程中的影响系数总是具有相同的符号。(3)对于一个给定的单元,在缺少源项和边界条件时,为了与偏微分方程一致,影响系数的和应该等于中心节点上变量的系数。(4)为了有效地减小侧风效应,人为

1993-04-22 收到,1994-05-30 定稿

滕志猛 男,1964年生,博士生,现从事半导体器件模拟方面的工作。

童勤义 男,1940年生,教授,博士生导师,从事半导体和微电子学方面的研究。

扩散项应该只加在漂移方向上。(5)为了消除过扩散和扩散不足现象,人为扩散项应该是理想的。(6)无条件收敛。(7)格式简单,使用节点少,从而花费计算机内存和计算时间不多。(8)如果可能,满足能量守恒定律。

3 有限差分方法

稳态电子电流连续性方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_n = R, \quad (1)$$

式中 R 是净产生复合率, \mathbf{J}_n 是电子电流密度(假设电子电荷为单位电荷), 由漂移项和扩散项组成

$$\mathbf{J}_n = -\mathbf{V}n + D_n \nabla n, \quad (2)$$

\mathbf{V} 为电子漂移速度, D_n 为电子扩散系数, n 为电子密度。由于 SG 方法内在的侧风扩散现象是由侧风方向上的人为扩散项分量引起的, 因此要消除侧风扩散现象就必须消除这一分量。为了解决这个问题, 在某一局域 Ω_s 上, 设 \mathbf{V}, D_n 分别为常矢量和常数, 且 \mathbf{V} 的大小为 V , 方向与 x 轴成 θ 角, 即流线方向矢量为

$$\mathbf{L} = \cos\theta \mathbf{i} + \sin\theta \mathbf{j}, \quad (3)$$

则在局域 Ω_s 上, (1)式可改写成

$$\frac{\partial J_E}{\partial L} + \nabla \cdot \mathbf{J}_D = R, \quad (4)$$

式中 J_E 为 \mathbf{J}_n 在流线方向上的漂移电流密度分量, \mathbf{J}_D 为 \mathbf{J}_n 的扩散电流密度分量。而(2)式可改写成

$$J_L = -Vn + D_n \partial n / \partial L \quad (5)$$

和

$$J_V = D_n \partial n / \partial L_V, \quad (6)$$

式中 J_L, J_V 分别为 \mathbf{J}_n 在漂移方向和侧风方向上的分量, $\partial n / \partial L, \partial n / \partial L_V$ 分别为漂移方向和侧风方向上的偏导数。对(5)式采用 SG 方法离散, 其离散格式等价于

$$J_L = -Vn + D_n \partial n / \partial L + D_\alpha \partial n / \partial L \quad (7)$$

的中心有限差分格式, 式中 D_α 为理想的人为扩散项系数

$$D_\alpha = D_n (\alpha \coth \alpha - 1), \quad (8)$$

α 为流线网格 Peclet 数 ($V\Delta L / 2D_n$)。将(6)式和(7)式与(2)式进行比较可以看出, 离散后的漂移电流密度和扩散电流密度可分别表示成

$$J_E = -Vn + D_\alpha \partial n / \partial L \quad (9)$$

和

$$J_D = D_n \nabla n \quad (10)$$

的中心有限差分格式。

对于图 1 所示的均匀网格, 用中心有限差分方法离散(9)和(10)式, 然后代入(4)式的中心有限差分格式中, 得到

$$F_1 = D_n \frac{n(i+1, j) + n(i-1, j) + n(i, j+1) + n(i, j-1) - 4n(i, j)}{h^2}$$

$$\begin{aligned}
 & -D_a \frac{n(i,j) - n_U}{\Delta L^2} + V \frac{n(i,j) + n_U}{2\Delta L} + D_a \frac{n_D - n(i,j)}{\Delta L^2} \\
 & -V \frac{n_D + n(i,j)}{2\Delta L} - R(i,j) = 0, \quad (11)
 \end{aligned}$$

式中 h 为网格单元长度, ΔL 为流线网格单元长度, U, D 分别为流线与局域 Ω_i 的上下游

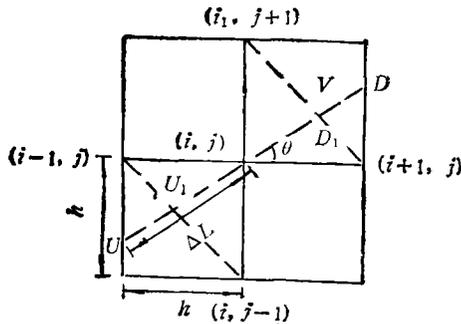


图1 二维均匀网格

边界的交点。从上述的推导过程中可以看出, 本文方法只采用了一维 SG 格式和中心有限差分格式, 没有经过其它任何处理。而且 (11) 式满足第 2 节中的全部条件。因此, 它既无数值振荡和侧风效应, 也无过扩散或扩散不足的现象。然而 U 和 D 不是网格点。为此, 采用下面的线性插值公式

$$(0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ):$$

$$\text{若 } 0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$$

$$n_U = n(i-1, j)(1 - \text{tg } \theta) + n(i-1, j-1)\text{tg } \theta \quad (12)$$

$$\Delta L = h / \cos \theta \quad (13)$$

若 $45^\circ < \theta \leq 90^\circ$

$$n_U = n(i, j-1)(1 - \text{ctg } \theta) + n(i-1, j-1)\text{ctg } \theta \quad (14)$$

$$\Delta L = h / \sin \theta \quad (15)$$

同样, 能得到 n_D 的插值公式。若 θ 在其它角度范围 ($90^\circ, 180^\circ$), ($180^\circ, 270^\circ$) 或 ($270^\circ, 360^\circ$) 中, 线性插值公式可类似地求得。

4 离散误差分析

众所周知, 经典的利用 Taylor 级数在中心网格节点上展开分析离散误差的方法不能用来分析漂移项占优时的对流扩散方程的离散误差 (因为它无法解释一阶迎风格式优于二阶中心有限差分格式的原因)。为此考虑到此时的离散误差主要是通过侧风效应体现出来的, 我们分析经典的 SG 方法和本文方法的与侧风效应相关的离散误差。

4.1 SG 方法 对于图 1 所示的二维网格, 用 SG 方法离散 (1) 式, 得到

$$\begin{aligned}
 F_2 = & a_w n(i-1, j) + a_s n(i, j-1) + a_e n(i+1, j) + a_n n(i, j+1) \\
 & - a_p n(i, j) - R(i, j) = 0, \quad (16)
 \end{aligned}$$

式中

$$a_w = V_x / 2h + (D_{ax} + D_n) / h^2, \quad (17)$$

$$a_s = V_y / 2h + (D_{ay} + D_n) / h^2, \quad (18)$$

$$a_e = -V_x / 2h + (D_{ax} + D_n) / h^2, \quad (19)$$

$$a_n = -V_y / 2h + (D_{ay} + D_n) / h^2, \quad (20)$$

$$a_p = a_w + a_s + a_e + a_n, \quad (21)$$

$$D_{ax} = D_n (\alpha_x \coth \alpha_x - 1), \quad \alpha_x = V_x h / 2D_n, \quad (22)$$

$$D_{ay} = D_n (\alpha_y \coth \alpha_y - 1), \quad \alpha_y = V_y h / 2D_n, \quad (23)$$

$$V_x = V \cos \theta, \quad V_y = V \sin \theta. \quad (24)$$

另一方面, 将 $n(i-1, j)$ 和 $n(i, j-1)$ 在交点 U_1 (见图 1) 上作二阶 Taylor 展开, 可以得到

$$n_{U_1} = \frac{1}{1 + \operatorname{tg} \theta} n(i-1, j) + \frac{\operatorname{tg} \theta}{1 + \operatorname{tg} \theta} n(i, j-1) - E_{U_1}. \quad (25)$$

可以看出, (25) 式右边的第一项和第二项构成了线性插值, 而 E_{U_1} 实际上体现了节点的离散误差

$$E_{U_1} = \frac{h^2 \operatorname{tg} \theta}{(1 + \operatorname{tg} \theta)^2} \left(\frac{\partial^2 n}{\partial L_1^2} \right) \Big|_{U_1}, \quad (26)$$

式中 $(\partial n / \partial L_1)$ 为点 $(i-1, j)$ 至点 $(i, j-1)$ 的方向偏导数。同样, 将 $n(i+1, j)$ 和 $n(i, j+1)$ 在交点 D_1 (见图 1) 上展开可以得到 n_{D_1} 的表达式。用 n_{U_1}, n_{D_1} 分别代替 (11) 式中的 n_U 和 n_D , 然后与 (16) 式比较。在对流占优时, 得到离散方程 (16) 式的相对误差

$$E_n = F_2 - F_1 \approx (V/2\Delta L + D_a/\Delta L^2) E_{U_1}, \quad \alpha \gg 1. \quad (27)$$

考虑到 (16) 式具有侧风效应, 而 (11) 式消除了侧风扩散, 因此, E_n 即为 (16) 式引起侧风扩散的离散误差。可以看出, 它主要由节点离散误差引起。为了更清楚地体现出 E_{U_1} 取决于侧风扩散的特性, 引入

$$\partial n / \partial L_1 = \cos(\theta + 45^\circ) \partial n / \partial L + \sin(\theta + 45^\circ) \partial n / \partial L_V. \quad (28)$$

考虑到

$$\partial n / \partial L = -R/V + D_n(\partial^2 n / \partial L^2 + \partial^2 n / \partial L_V^2) / V, \quad (29)$$

忽略三阶项, 并为简化起见, 取 R 等于零, 则由 (26) 式可得

$$E_{U_1} = (1/4) h^2 \sin 2\theta (\partial^2 n / \partial L_1^2) \Big|_{U_1}. \quad (30)$$

(30) 式清楚地表明, 在 U_1 点的离散误差 E_{U_1} 主要是由侧风扩散引起的。

4.2 本文方法 如前所述, (11) 式消除了侧风扩散。但是线性插值的应用又引起了侧风效应。为此将 $n(i-1, j-1)$, $n(i-1, j)$ 和 $n(i, j-1)$ 在 U 点展开, 忽略三阶项, 可以得到节点离散误差。

若 $0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$,

$$E_U = \frac{1}{2} h^2 \operatorname{tg} \theta (1 - \operatorname{tg} \theta) (\partial^2 n / \partial y^2) \Big|_U; \quad (31)$$

若 $45^\circ < \theta \leq 90^\circ$,

$$E_U = \frac{1}{2} h^2 \operatorname{ctg} \theta (1 - \operatorname{ctg} \theta) (\partial^2 n / \partial y^2) \Big|_U. \quad (32)$$

与推导 (30) 式的过程一样, 可以得到

若 $0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$,

$$E_U = (1/4) h^2 \sin 2\theta (1 - \operatorname{tg} \theta) (\partial^2 n / \partial L_1^2) \Big|_U; \quad (33)$$

若 $45^\circ < \theta \leq 90^\circ$,

$$E_U = (1/4) h^2 \sin 2\theta (1 - \operatorname{ctg} \theta) (\partial^2 n / \partial L_1^2) \Big|_U. \quad (34)$$

(33) 式和 (34) 式即为本文方法引起侧风扩散的节点离散误差。与 (30) 式比较可以看出:

(1) 本文方法的离散误差总是比经典的 SG 方法的小。(2) E_U 在 θ 等于 45° 时取得最大值, 在 θ 等于 0° 和 90° 时取得最小值; 而 E_V 在 θ 等于 22.5° 和 67.5° 时取得最大值, 在 θ 等于 $0^\circ, 45^\circ$ 和 90° 时取得最小值。因为经典的 SG 方法仅对一维流体线性插值是精确的, 而本文方法在 θ 等于 45° 时, 线性插值也是精确的。所以本文方法比经典的 SG 方法多一个最小点。

5 数值实验

一个常用的鉴别对流扩散方程离散方法优劣的测试例子如图 2 所示。其中 Γ_1, Γ_2 为边界条件, θ 为漂移方向与 x 轴的夹角, 速度的大小归一化为 1; D_n 为常数, x 方向和 y 方向上的长度归一化为 1, R 等于零。对于这个模型, 对流占优时 (1) 式的物理解如图 3 所示。其中, 边界条件与图 2 中的相同, 比例尺也一样, $n = 0, 1$ 分别表示虚线的上面和下面(含线上)内部的电子浓度分布, 且虚线与漂移方向平行。

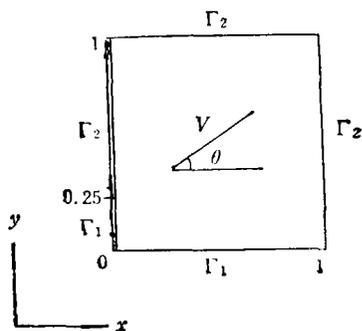


图 2 二维测试例子的分析结构

$$\Gamma_1: n = 1, \quad \Gamma_2: n = 0$$

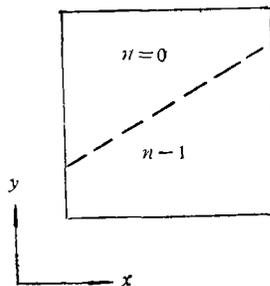


图 3 对流占优时测试例子的物理解

定义数值误差为

$$E = \sum_1^N |n_e - n_i|, \quad (35)$$

式中 N 为网格节点数 (11×11), n_e, n_i 分别为精确解和数值解。图 4 给出了对流占优时 ($V = 1, D_n = 10^{-4}$) 的数值误差随流体方向变化的关系曲线。可以看出, 第 4 节中的分析是合理的。

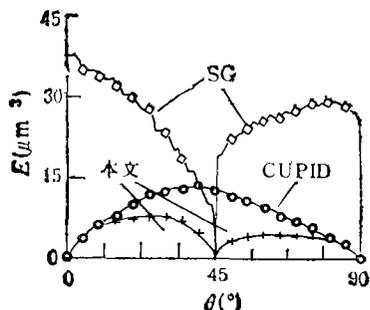


图 4 数值误差随漂移方向变化的关系曲线

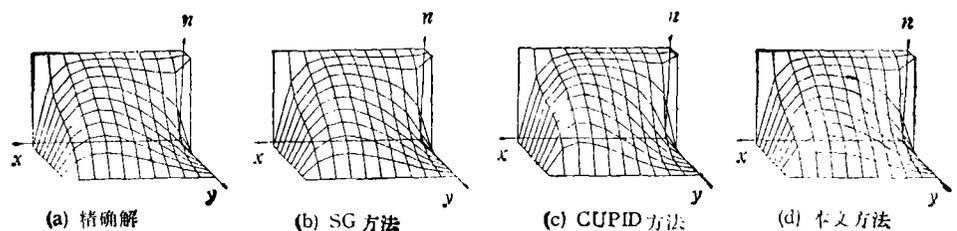
(图中 SG 应为 CUPID, CUPID 应为 SG)

提出了满足全部判据的有限差分方法。理论分析和数值实验结果表明, 该方法优于经典

的数值误差随流体方向变化的关系曲线。可以看出, 第 4 节中的分析是合理的。本文方法明显优于 CUPID 方法和 SG 方法。对于扩散占优流体, CUPID 方法出现了过扩散现象, 局域上电子密度的值比精确解大得多, 如 $y = 0.8$ 时; 而 SG 方法和本文方法给出了十分合理的结果, 与精确解基本一致(如图 5 所示)。

6 结论

本文提出了一套评价对流扩散方程离散方法优劣的判据, 为选择合适的离散方法离散电流连续性方程和发展新的离散方法提供了依据。并且提出了满足全部判据的有限差分方法。理论分析和数值实验结果表明, 该方法优于经典

图 5 数值解 ($V = 1, D_n = 0.1$)

的 SG 方法, 且因为客观地避免了数值振荡, 所以, 它也优于 SUPG 方法。本文方法格式简单, 易于插入现有的半导体器件模拟软件中, 具有十分广阔的应用前景。另外, 本文提出的离散误差分析方法可以用来分析其它的类似问题。

参 考 文 献

- [1] Scharfetter D L, Gummel H K. IEEE Trans. on ED, 1969, ED-16(1): 64--77.
- [2] Selberherr S, Schütz A, Pötzl H W. IEEE Trans. on ED, 1980, ED-27(8): 1540--1547.
- [3] Bürgler J F, Bank R E, Fichtner W, *et al.* IEEE Trans. on CAD, 1989, CAD-8(5): 479--489.
- [4] Bank R E, Rose D J, Fichtner W. IEEE Trans. on ED, 1983, ED-30(9): 1031--1041.
- [5] Brooks A N, Hughes T J R. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., 1982, 32(2): 199--259.
- [6] He Y, Cao G. IEEE Trans. on CAD, 1991, CAD-10(12): 1579--1582.
- [7] Sharma M, Carey G F. IEEE Trans. on CAD, 1989, CAD-8(6): 590--597.
- [8] Tan G L, Yuan X L, Zhang Q M, *et al.* IEEE Trans. on CAD, 1989, CAD-8(5): 468--478.
- [9] Leonard B P. Int. J. Num. Meth. Fluids, 1988, 8(9): 1291--1318.
- [10] Rice J G, Schnipke R J. Int. J. Num. Meth. Eng., 1985, 48(2): 313--327.
- [11] Shemirani F, Jambunathan K. Int. J. Num. Meth. Fluids, 1992, 14(9): 1245--1257.
- [12] Patel M K, Cross M, Markatos N C. Int. J. Num. Meth. Eng. 1988, 26(12): 2279--2304.

ASSESSMENT OF THE DISCRETIZATION SCHEME FOR CURRENT CONTINUITY EQUATION

Teng Zhimeng He Ye Tong Qinyi

(Microelectronics Center, Southeast University, Nanjing 210018)

Abstract This paper presents a set of basic criteria to assess discretization schemes, which provides for choosing a proper discretization scheme of current continuity equation. According to the basic criteria, this paper also presents a new finite difference scheme. Both error analysis and numerical results show that the present scheme is superior to the Scharfetter-Gummel (SG) and Streamline Upwind Petrov/Garlerkin (SUPG) schemes in which the basic criteria are not satisfied.

Key words Current continuity equation, Discretization scheme, Basic criteria