

纳米电子系统中电容矩阵的数值模拟器¹

乐嘉勇 蒋建飞 蔡琪玉

(上海交通大学微 / 纳米科学技术研究院 上海 200030)

摘 要 该文论述了纳米电子系统电容矩阵数值模拟器 SJTU-NANO-FCACI 的原理和应用, 分析了其算法, 并研究了在纳米电子系统中常见的球形导体的电容。结果表明, 该模拟器具有精度高、速度快、应用广泛等特性。

关键词 电容矩阵, 多极点展开, 局部展开

中图分类号 TN911.7

1 引 言

在单电子器件和电路的模拟和分析中, 器件和电路结构所构成的电容矩阵的精确计算起着关键的作用。由于单电子器件和电路中导体的不规则形状, 电容矩阵的计算往往相当复杂, 寻找一种快速电容矩阵计算方法就有很大的意义。为此, 我们分析了 MIT 的 FASTCAP^[1], 并在其基础上开发了一个适合于纳米电子系统电容矩阵计算的数值模拟器 SJTU-NANO-FCACI。该模拟器采用数值方法, 在保证计算精度的前提下, 使用简化算法, 提高了计算效率。它具有很强的适用性, 特别擅长处理不规则导体与多导体系统的电容矩阵计算。应当指出, 虽然 SJTU-NANO-FCACI 是为纳米电子系统研究和开发的, 但它也可用于其它领域内的电容矩阵计算, 如微波集成电路, 微电子机械系统 (MEMS) 等。

本文第 2 节阐述了 SJTU-NANO-FCACI 的电容矩阵算法。第 3 节介绍了如何利用该模拟器计算在纳米电子系统, 特别是单电子系统中常见的球形导体的电容, 并分析了模拟器的计算精度。第 4 节给出了结论。

2 算 法

SJTU-NANO-FCACI 计算电容的基本思想是将系统中的导体表面分割成许多面元。由于这些面元的尺度远小于导体的尺度, 在面元上的电荷可近似看成均匀分布。此时若适当设定各导体的电势, 利用电势与电荷的关系式可以求出各面元上的电荷, 进而求出各导体的自电容与互电容。另外, 为了提高计算效率, 模拟器利用各面元的空间关系采用了一些简化策略。

下面以一个处于均匀介质中的双导体系统为例来分析这一算法。若假定系统的电容分别为 C_{11} , C_{12} , $C_{21}(=C_{12})$ 和 C_{22} , 其中 C_{11} , C_{22} 是两导体的自电容, C_{12} , C_{21} 是它们之间的互电容, 则可以给出如下的电容矩阵方程:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{bmatrix} \quad (1)$$

其中 u_1 , u_2 , Q_1 , Q_2 分别是各导体的电势与电荷。换一个角度, 若导体表面电荷密度 $\sigma(x, y, z)$ 已知, 就可以通过一个积分方程来求解导体的电荷在某指定点处的电势。将导体表面分割成 n 块面元。因为面元上的电荷可近似成均匀分布, 我们就可以通过 (2) 式求得第 j 块面元上的电荷在第 i 块面元中心处形成的电势。

¹ 2001-03-16 收到, 2001-09-06 定稿
国家自然科学基金, 上海市 AM 基金资助

$$\begin{aligned}\varphi_i(x, y, z) &= \int_s \sigma_j(x', y', z') \frac{1}{4\pi\epsilon\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} ds \\ &= \frac{q_j}{s_j} \int_{\text{tile}_j} \frac{1}{4\pi\epsilon\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} ds = P_{i,j}q_j\end{aligned}\quad (2)$$

其中 s_j 是第 j 块面元的面积, $P_{i,j}$ 只与导体的形状、位置及其周围介质有关, 对于确定的系统, 它是固定的. 将 (2) 式推广到整个系统, 就得到了如下的系统方程:

$$Pq = \varphi \quad (3)$$

上式中, q 和 φ 是 n 维向量, P 是一个 n 乘 n 的矩阵, 其中 $P_{i,j}$ 的表达式如下:

$$P_{i,j} = \frac{1}{s_j} \int_{\text{tile}_j} \frac{1}{4\pi\epsilon\sqrt{(x_i-x')^2 + (y_i-y')^2 + (z_i-z')^2}} ds \quad (4)$$

已知 P 和 φ , 可以求解系统方程得到向量 q . 然后将属于各导体的面元上的 q_i 分别累加就得到了系统中每个导体的电荷 Q . 再联合 (1) 式, 就可以得到所求的电容矩阵.

在模拟器中, SJTU-NANO-FCACI 使用迭代法来求解 (3) 式. 此外, 为了提高计算效率, 该程序还采用了多极点展开和局部展开等简化方法^[1].

从以上分析可知, 给定一个多导体系统, 只要能将其各导体表面恰当地划分成许多面元, 就能有效地计算出各导体的自电容与互电容, 而不受导体的具体形状约束. SJTU-NANO-FCACI 正是以包含有面元信息的文件为输入文件的.

3 球形电容计算示例

在纳米电子系统中, 球型电容模型有着广泛的应用. 本节将以球形导体为例, 说明如何恰当地划分导体表面并记录其位置信息, 并进一步验证 SJTU-NANO-FCACI 的电容计算能力. 从第 2 节的算法分析可知, 为了计算球型导体系统的电容, 我们首先要将导体表面正确的划分成许多面元, 并记录其位置信息. 目前的 SJTU-NANO-FCACI 能处理两类面元信息: 矩形面元和三角形面元.

SJTU-NANO-FCACI 对球面的分割如图 1(a) 所示. 图示为一个 $1/8$ 球面, 将其在 x - y 面和 x - z 面上的大圆弧均匀分割成 n 段, 并在球面上作出相应的平行线, 球面就被分割成如图所示的面元系列. 当分割数取足够大时, 面元 $(i, 0)$ 可近似成三角形平面, 而面元 (i, j) 可沿虚线近似成两个三角形平面. 其中, i 为 x - z 方向的面元序数, j 为 x - y 方向的面元序数. 因此, 对于面元 $(i, 0)$, 其三个顶点的坐标值如 (5) 式所示:

$$\left. \begin{aligned}A &= (r \cos(i\Delta\theta), 0, r \sin(i\Delta\theta)) \\ B &= (r \cos((i+1)\Delta\theta), 0, r \sin((i+1)\Delta\theta)) \\ C &= (r \cos(i\Delta\theta) \cos(\Delta\theta), r \cos(i\Delta\theta) \sin(\Delta\theta), r \sin(i\Delta\theta))\end{aligned} \right\} \quad (5)$$

而对于面元 (i, j) , 其 4 个顶点坐标值如 (6) 式所示:

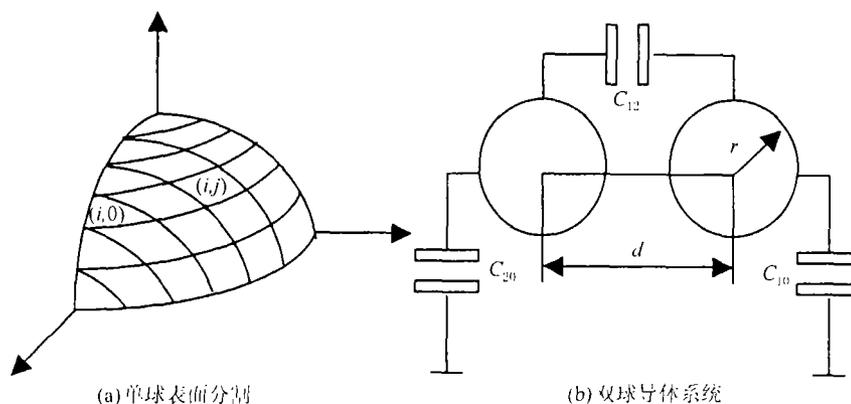


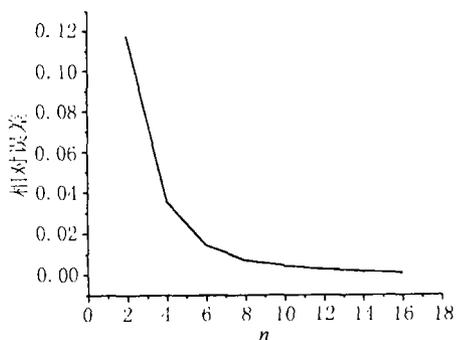
图1 球形导体系统

$$\left. \begin{aligned}
 A &= (r \cos((i+1)\Delta\theta) \cos((j-1)\Delta\theta), r \cos((i+1)\Delta\theta) \sin((j-1)\Delta\theta), r \sin((i+1)\Delta\theta)) \\
 B &= (r \cos((i+1)\Delta\theta) \cos(j\Delta\theta), r \cos((i+1)\Delta\theta) \sin(j\Delta\theta), r \sin((i+1)\Delta\theta)) \\
 C &= (r \cos(i\Delta\theta) \cos(j\Delta\theta), r \cos(i\Delta\theta) \sin((j-1)\Delta\theta), r \sin((i+1)\Delta\theta)) \\
 D &= (r \cos(i\Delta\theta) \cos((j+1)\Delta\theta), r \cos(i\Delta\theta) \sin((j+1)\Delta\theta), r \sin(i\Delta\theta))
 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

(5),(6) 式中, r 为球半径, $\Delta\theta = (\pi/2)/n$ 为每个面元跨越的弧度。其它 7/8 球面上各面元的位置坐标可通过对称变换得到。这样, 整个球面就被分成 $8n^2$ 个三角形面元。本节将通过两个例子来验证上述表面分割方法的有效性。

3.1 单球结构的自电容

对于半径为 r 的球体, 其自电容的理论公式为 $C_{\text{sphere}} = 4\pi\epsilon r$, r 为半径。取半径 $r = 10\text{nm}$, 相对介电常数 $=1$, 改变半圆划分数 n , 用 SJTU-NANO-FCACI 计算其电容。将计算结果与理论值进行比较, 我们可以得到计算的相对误差与 n 值的关系图 (图 2)。由图可知, 随着 n 的增大, 计算结果迅速趋于公式值, 当 $n=8$ 时, 相对误差小于 1%, 当 $n=16$ 时, 相对误差小于 0.1%。

图2 相对误差与 n 值的关系

3.2 双球结构的自电容与互电容

双球结构图示如图 1(b)。图中, r 为球半径, d 为两球的球心距。图中的 C_{10} , C_{20} , C_{12} 可以用 (7) 和 (8) 式近似计算

$$C_{10} = C_{20} = 4r\pi\epsilon \left(1 - \frac{r}{d} + \frac{r^2}{d^2 - r^2} - \frac{r^3}{d^3 - 2dr^2} + \dots \right) \quad (7)$$

$$C_{12} = 4\pi\epsilon \frac{r^2}{d} \left(1 + \frac{r}{d^2 - 2r^2} + \frac{r^4}{d^4 - 4r^2d^2 + 3r^4} + \dots \right) \quad (8)$$

其中 C_{10} , C_{20} 为双球自电容, C_{12} 为双球互电容。取 $n = 8$, 固定球半径 $r = 10\text{nm}$, 球心距 d 从 30nm 变至 100nm , 分别使用公式和 SJTU-NANO-FCACI 对图 1(b) 系统进行计算, 并将结果表示成图 3 所示的电容与球心距的关系曲线。其中虚线代表公式值, 实线代表程序计算值。图中这两条曲线基本重合。

上述两个示例验证了 SJTU-NANO-FCACI 对球面分割方法的有效性, 同时也验证了 SJTU-NANO-FCACI 在求解复杂形状导体电容方面的能力。

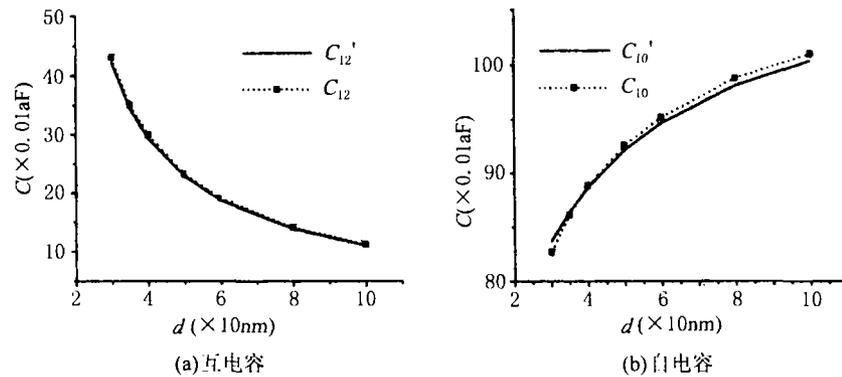


图 3 电容和球心距关系曲线

4 结 论

球形电容器的电容公式计算和 SJTU-NANO-FCACI 模拟器对电容的计算的比较表明, SJTU-NANO-FCACI 模拟器是纳米电子系统电容矩阵非常有效的计算和设计工具。事实上我们已经利用它有效地设计和分析了电子空穴对单电子陷阱存储器^[2]。SJTU-NANO-FCACI 采用优化的数值方法计算电容矩阵, 具有通用、高效的特点, 这对于提高纳米电子系统中的设计和分析能力, 促进纳米电子学的发展具有积极意义。

参 考 文 献

- [1] K. Nabors, J. White, FastCap: A multipole accelerated 3-D capacitance extraction program, IEEE Trans. on Computer-Aided Design, 1991, 10(11), 1447-1459.
- [2] 程子川, 蒋建飞, 蔡琪玉, 电子空穴对单电子陷阱存储器的设计和分析, 电子学报, 2000, 28(11), 134-136.

NUMERICAL SIMULATOR OF CAPACITANCE MATRIX FOR NANO-ELECTRONIC SYSTEM

Le Jiayong Jiang Jianfei Cai Qiyu

(Res. Inst. of Micro/Nano Sci. & Tech., Shanghai Jiaotong Univ., Shanghai 200030, China)

Abstract The principle and application of numerical simulator of capacitance matrix for nano-electronic system called SJTU-NANO-FCACI is studied. The algorithm of the program is analyzed. With the program, the capacitances of spherical capacitor, which are often used in nano-electronics, are calculated and compared with the approximate formula. The results demonstrate that the program has a high calculation precision, a fast calculation speed and can be used in many applications.

Key words Capacitance matrix, Multipole expansion, Local expansion

乐嘉勇: 男, 1976 年生, 硕士, 现在美国卡内基-梅隆大学电机工程系攻读博士学位.

蒋建飞: 教授, 博士生导师, 曾任第二届、第三届、第五届和第六届中国国家自然科学基金委员会电子学与信息系统学科评审组成员; 中国集成电路大全前八分册编著委员. 长期从事微电子学, 纳米电子学和超导电子学的研究. 在国际和国内重要学术刊物上发表论文 120 余篇; 由科学出版社和国防工业出版社等出版学术著作六部; 现在主要研究领域纳米电子学, 纳米物理学和超导电子学.

蔡琪玉: 副教授, 长期从事微电子学, 纳米电子学和超导电子学的研究. 在国际和国内重要学术刊物上发表论文 40 余篇; 现在主要研究领域纳米电子学和超导电子学.