

Stochastic model and simulation algorithm for highly nonlinear electron tunneling process governing the electron transport in varistors.

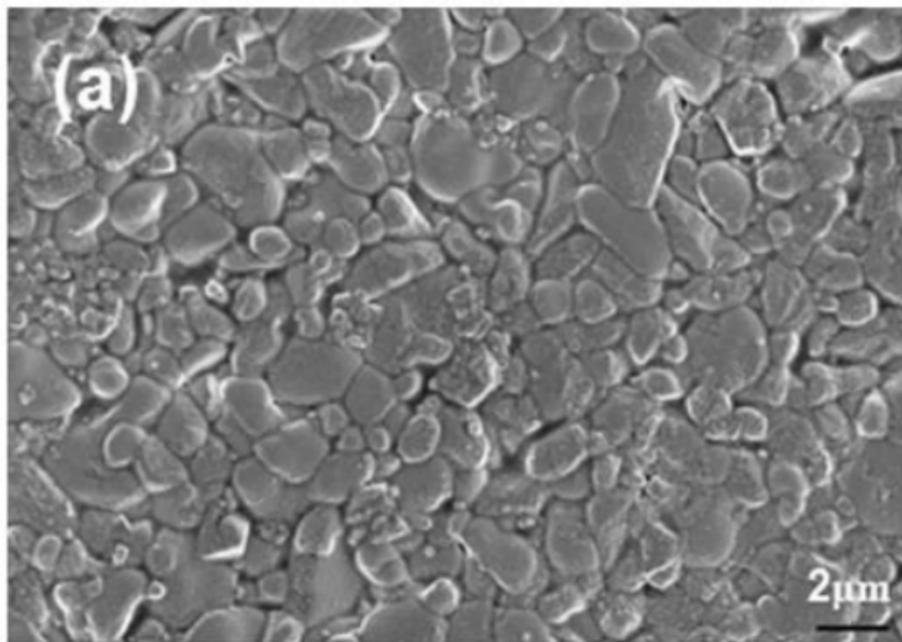
Стохастическая модель и алгоритм моделирования процесса нелинейного туннелирования электронов, определяющих транспорт электронов в варисторах

Сабельфельд К.К.

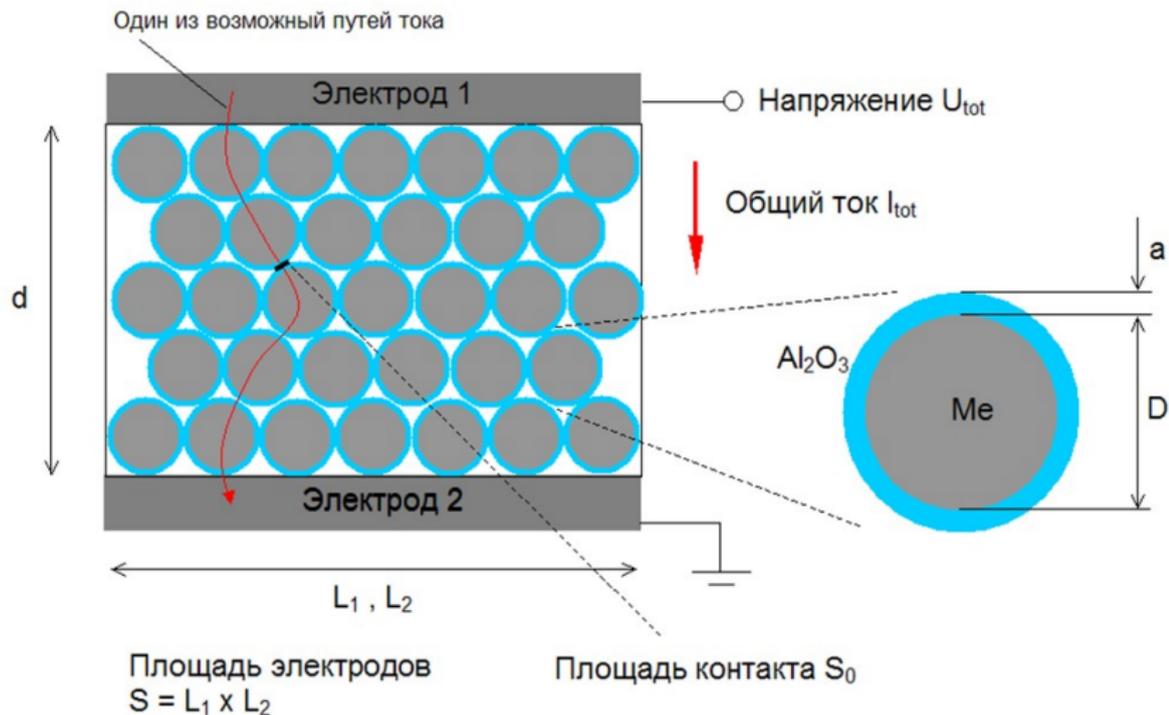
ИВМиМГ СО РАН и Институт математики им. С.Л. Соболева

Динамика в Сибири, 02.03. 2026, Новосибирск

Исследование связано с развитием технологии получения варисторных структур на базе металлических Ni порошков, покрытых тонким слоем туннельно-прозрачного диэлектрика Al_2O_3 .



Варисторы



Уравнение на потенциал

$$\nabla \cdot (\sigma(\varphi(x)) \nabla \varphi) = 0 \quad (1)$$

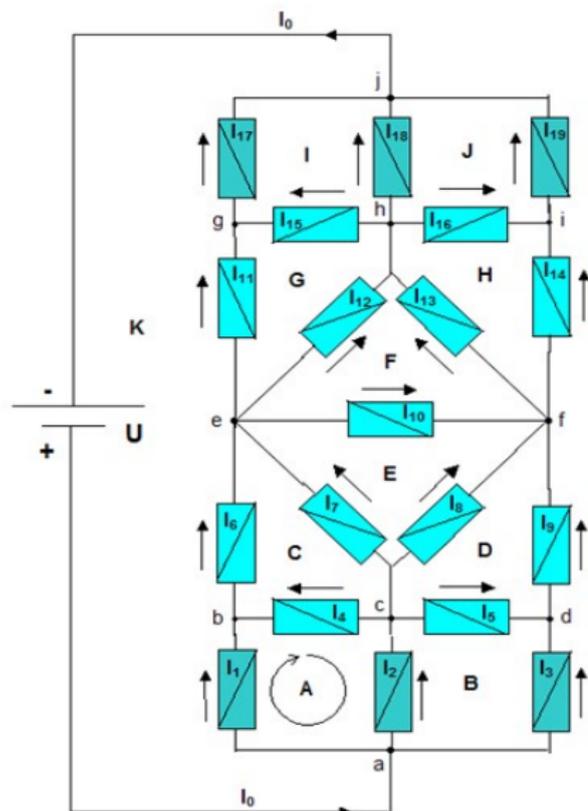
$$\varphi_b = g, \quad \varphi_u = 0 \quad (2)$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right|_{\Gamma_{side}} = 0, \quad (3)$$

Электрическое поле

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad U_{1,2} = \varphi_1 - \varphi_2 .$$

Варисторы



Варисторы

Запишем уравнения Кирхгофа Запишем для узлов:

$$a: I_0 = I_1 + I_2 + I_3$$

$$b: I_1 + I_4 = I_6$$

$$c: I_2 = I_4 + I_7 + I_8 + I_5$$

$$d: I_5 + I_3 = I_9$$

$$e: I_6 + I_7 = I_{11} + I_{12} + I_{10}$$

$$f: I_{10} + I_8 + I_9 = I_{13} + I_{14}$$

$$g: I_{11} + I_{15} = I_{17}$$

$$h: I_{12} + I_{13} = I_{15} + I_{18} + I_{16}$$

$$i: I_{16} + I_{14} = I_{19}$$

$$j: I_{17} + I_{18} + I_{19} = I_0$$

и контуров:

$$A: U_1 - U_4 - U_2 = 0$$

$$B: U_2 + U_5 - U_3 = 0$$

$$C: U_4 + U_6 - U_7 = 0$$

$$D: U_8 - U_9 - U_5 = 0$$

$$E: U_7 + U_{10} - U_8 = 0$$

$$F: U_{12} - U_{13} - U_{10} = 0$$

$$G: U_{11} - U_{15} - U_{12} = 0$$

$$H: U_{13} + U_{16} - U_{14} = 0$$

$$I: U_{17} - U_{18} + U_{15} = 0$$

$$J: U_{18} - U_{19} - U_{16} = 0$$

$$K: -U_{17} - U_{11} - U_6 - U_1 = -U$$

Вероятностная модель туннелирования

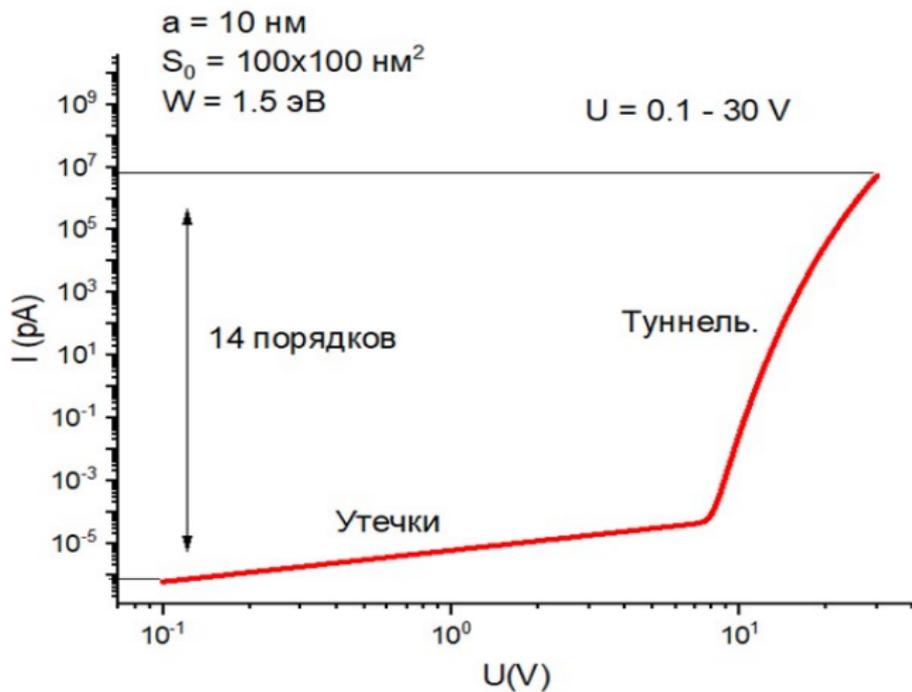
Вероятность туннелирования электрона через слой толщиной a между гранулами определяется частотой процесса туннелирования

$$\begin{aligned} I(U) &= \frac{eS_0(eU)^2}{32\pi\hbar a^2 W} \exp\left(-\frac{16a\pi\sqrt{2mW^3}}{3\hbar eU}\right) + GU = \\ &= AU^2 \exp\left(-\frac{C}{U}\right) + GU, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\text{где } A = \frac{e^3 S_0}{32\pi\hbar a^2 W}, \quad B = \frac{16a\pi\sqrt{2mW^3}}{3\hbar e}. \quad (5)$$

Здесь e – заряд электрона, h – постоянная Планка, m – масса электрона, a – толщина слоя диэлектрика на одиночном зерне, W – высота энергетического барьера между диэлектриком и металлом, U – напряжение на одном переходе металл-диэлектрик-металл, S_0 – площадь (длина) контакта между отдельными зёрнами и зёрнами и электродами. В выражение (4) включен член GU , описывающий процесс утечки зарядов при малых напряжениях.

Варисторы



Алгоритмы со смешанной точностью: метод итерационного уточнения.

Используя рандомизированное вычисление итераций матрицы, на основе случайного выбора ее столбцов или строк, можно построить приближенное решение $\hat{\mathbf{x}} \approx \mathbf{x}$ системы линейных уравнений $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Здесь можно применять рандомизированные варианты любого итерационного метода, основанного на вычислении итераций матрицы, например, методы простой итерации, Якоби, Гаусса-Зейделя, SOR, или любой из вариантов метода Крылова.

Метод итерационного уточнения состоит в следующем: положим вначале $k = 1$, $\mathbf{x}_k = \hat{\mathbf{x}} \approx \mathbf{x}$. Далее запускаем итерации по шагам:

1. Вычисляем невязку $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k$,
2. Решаем рандомизированным методом уравнение

$$A\Delta_k = \mathbf{r}_k,$$

На каждом шаге 2 мы имеем статистическую ошибку ε , которая зависит от дисперсии D и от N_{st} , количества используемых выборок как $\varepsilon \sim \sqrt{D/N_{st}}$.

Вопрос - как эта ошибка передается в итерационном процессе уточнения. Можно показать, что если зафиксировать число выборок N_{st} и использовать его на каждом шаге итеративного уточнения n , то дисперсия D_n на шаге n оценивается как

$$D_n \leq \lambda^n D_0$$

. где D_0 - дисперсия оценки Монте-Карло при решении линейного уравнения, $\lambda = C/N_{st}$ для некоторой конечной константы C , и N_{st} выбирается так, чтобы $\lambda = C/N_{st} < 1$. Отметим, что при использовании только рандомизированного алгоритма, уменьшение погрешности на один порядок требует увеличения времени расчета не в два раза, как в случае гибридного итерационного уточнения, а в 100 раз.

Вольт-амперная характеристика

Задача при расчете варисторов - построить вольт-амперную характеристику, то есть зависимость тока через варистор в зависимости от приложенного напряжения.

Ток — это отношение электрического заряда, прошедшего через поперечное сечение проводника, ко времени его прохождения:

$$I = Q/t, \quad (6)$$

где Q — количество заряда, прошедшее через образец за время t .

При использовании стохастического алгоритма моделируется движение отдельных электронов как «частиц», и тогда: $Q = q \cdot N_{passed}$, где N_{passed} — это число электронов, которые дошли до противоположного (верхнего) электрода варистора за установленное время.

Стохастический алгоритм моделирования

При прохождении электронов через варистор не все из них достигают противоположного электрода, проходит лишь часть из них, обозначим число таких электронов N_{passed} , остальные электроны могут рекомбинировать в фононы, нагревая варистор, либо их транспорт задерживается на различных дефектах и дислокациях в объеме варистора. После завершения моделирования определенного ансамбля траекторий ток вычисляется по формуле $I = e \cdot N_{passed}/t_{tot}$, где e - заряд электрона, t_{tot} среднее время прохождения электронов через варистор.

Моделирование траекторий электронов

Таким образом, остается описать процесс моделирования траекторий электронов.

Моделирование движение электрона в электрическом поле внутри проводника не представляет труда, поскольку в результате решения уравнения на потенциал мы имеем электрическое поле, поэтому уравнение движения описывается уравнением Ланжевена

$$d\mathbf{x} = -\mu\mathbf{E} dt + \sqrt{2D}d\mathbf{w}(t)$$

где μ - подвижность электронов в данном материале проводника, D - коэффициент диффузии теплового движения, $d\mathbf{w}$ - векторный винеровский дифференциал. Уравнение решается стохастическим аналогом уравнения Эйлера малыми шагами по времени.

Моделирование туннельного перехода

При достижении границы раздела между проводниками, разделенными слоем диэлектрика, разыгрывается туннелирование, то есть туннельный переход от одного зерна к другому. Поскольку вероятность перехода в единице времени описывается величиной $1/I(U)$ где $I(U)$ есть интенсивность (частота) этого события, чрезвычайно мала, то мы моделируем случайное время, за которое туннельный переход происходит с вероятностью 1. В силу малости вероятности перехода асимптотическая плотность вероятностей этого времени имеет экспоненциальный вид, то есть

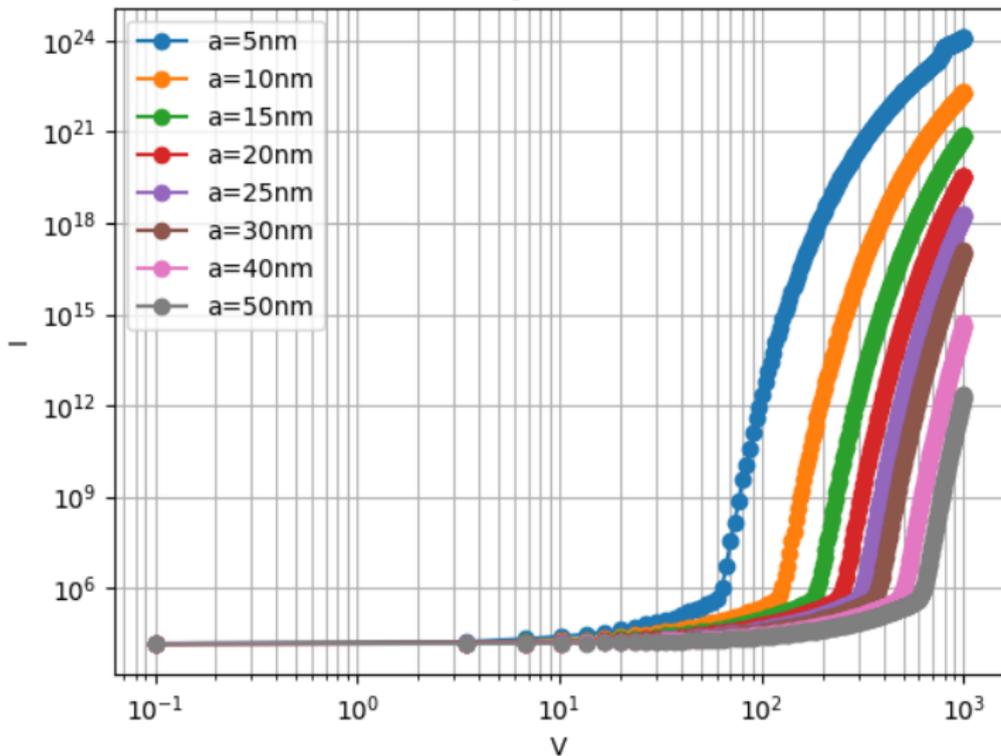
$$F(t) = I(U) \exp(-t/I(U)) .$$

Отсюда получаем моделирующую формулу для времени ожидания, пока случится туннельный переход:

$$t_{tunn} = -I^{-1}(U) \log(RAND) .$$

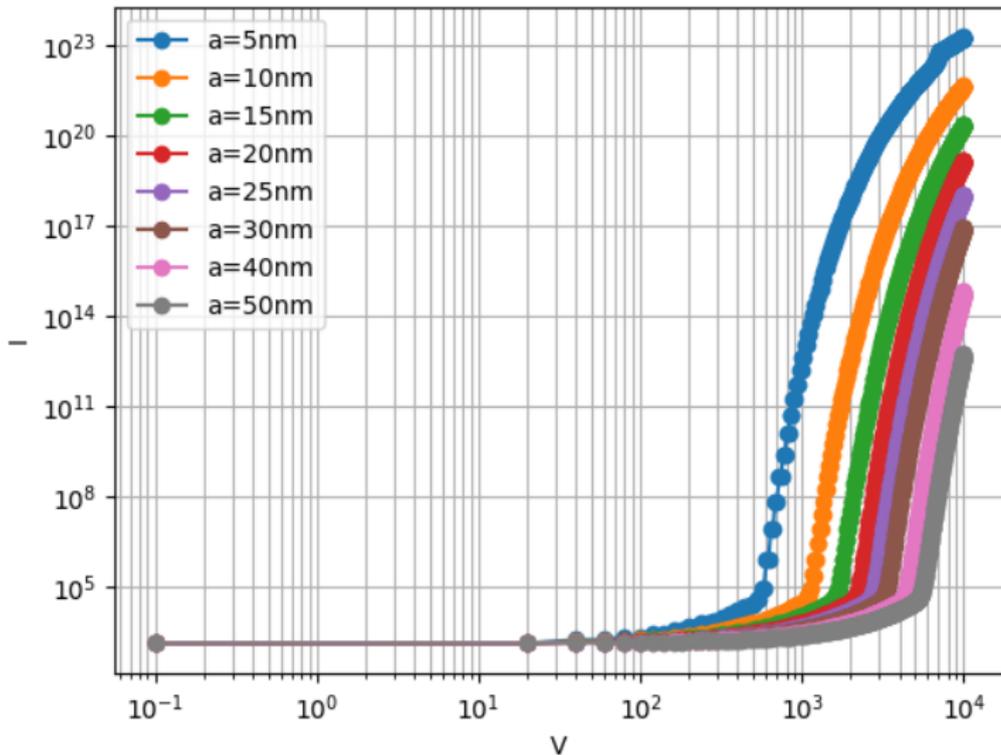
10x10.png

10 by 10 nodes



80x10.png

80 by 10 nodes



Спасибо за внимание !