

Modelagem de Dispositivos Eletrônicos Utilizando uma Distribuição Discreta de Impurezas Gerada Randômicamente

Paulo César M. Machado, Ana Paula A. Baleeiro, Keila de Freitas Vaz

Escola de Engenharia Elétrica e de Computação, UFG, C.P. 131, 74001-970, Goiânia, GO

E-mail: pcesar@eee.ufg.br, paulabaleeiro@bol.com.br, kfvaz@hotmail.com

1. Introdução

A necessidade de reduzir o tempo e o custo do desenvolvimento de dispositivos eletrônicos tem levado a um interesse cada vez maior na modelagem e predição das características desses dispositivos antes de sua fabricação. Dessa maneira, modelos que permitem que novas estruturas sejam rigorosamente caracterizadas antes de sua fabricação tornouse uma ferramenta essencial na tecnologia de semicondutores.

Atualmente, um dos mais importantes dispositivos eletrônicos utilizados é o Transistor de Efeito de Campo de Semicondutor e Metal – MESFET, com aplicações em eletrônica de alta velocidade, tais como sistemas de comunicações com fibras ópticas e satélites, telefonia celular, etc. Um dos modelos mais utilizado em sua simulação consiste na resolução das equações de Poisson e da continuidade (Modelo Clássico), que são discretizadas usando o método de diferenças finitas em uma malha uniforme bidimensional [1]. Devido ser grande o número de impurezas doadoras acrescentadas ao material semicondutor, a distribuição de cargas é simplificada considerando-se uma distribuição uniforme de tais impurezas ao longo do volume do dispositivo.

Com a redução cada vez maior das dimensões de tais dispositivos, tornou-se extremamente importante o desenvolvimento de modelos que descrevam com maior precisão o seu comportamento. A distribuição de cargas já não pode ser considerada uniforme, já que o número de impurezas doadoras nesses dispositivos é muito pequeno. Além disso, devido ao processo de fabricação, essas impurezas são randômicamente distribuídas ao longo do dispositivo [3].

Neste trabalho consideramos um modelo mais realista, em que cargas discretas são distribuídas randômicamente nos nós de uma malha bidimensional usando uma técnica de rejeição.

2. Modelo Clássico

O modelo clássico consiste na resolução da equação de Poisson (1) e equação da continuidade (2).

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \psi) = q(n - N_D) \quad (1)$$

$$\nabla \cdot J = 0 \quad (2)$$

$$J = -qn\mu\nabla\psi + k_B T_0 \mu \nabla n \quad (3)$$

onde ϵ_0 é a permissividade do vácuo, ϵ_r é a permissividade relativa do material, ψ é o potencial eletrostático, q é a carga eletrônica, n é a densidade de elétrons, N_D é a densidade de impurezas doadoras, J é a densidade de corrente eletrônica, μ é a mobilidade eletrônica, k_B é a constante de Boltzmann e T_0 é a temperatura ambiente.

A discretização dessas equações utilizando o método das diferenças finitas em uma malha uniforme bidimensional ($\Delta x = \Delta y = \Delta$) nos fornece as seguintes equações [2]:

$$4\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j} - \psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1} = \Delta^2 \left(\frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} \right) ((N_D)_{i,j} - n_{i,j}) \quad (4)$$

$$\nabla \cdot J = \frac{(J_x)_{i+1/2,j} - (J_x)_{i-1/2,j}}{\Delta} + \frac{(J_y)_{i,j+1/2} - (J_y)_{i,j-1/2}}{\Delta} \quad (5)$$

onde

$$(J_x)_{i+1/2,j} = \frac{T_0}{\Delta} B \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{T_0} \right) (n\mu)_{i+1,j} - \frac{T_0}{\Delta} B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{T_0} \right) (n\mu)_{i,j} \quad (6)$$

com expressão similar para $(J_y)_{i,j+1/2}$. $B(t)$ é a função de Bernoulli, definida por $B(t) \equiv t(e^t - 1)^{-1}$.

As equações de Poisson e da continuidade discretizadas podem ser escritas na forma matricial:

$$[A_p] \cdot [\psi] = [B_p] \quad \text{e} \quad [A_c] \cdot [n] = [B_c] \quad (7)$$

As matrizes dos coeficientes $[A]$ têm a forma pentadiagonal, sendo portanto matrizes esparsas.

3. Localização das Cargas

Todos materiais semicondutores possuem átomos de impurezas introduzidos intencionalmente ou incorporados não intencionalmente. Em dispositivos semicondutores com dimensões da ordem de micrômetros o número de impurezas é tão grande que seu efeito no transporte eletrônico pode ser considerado em termos médios, considerando-se uma distribuição uniforme de impurezas ao longo do material. Densidades que são determinísticas e que existem em toda região substituí o questionamento de onde os átomos de impurezas estão localizados. Contudo, em dispositivos muito pequenos, da ordem de nanômetros, a suposição simplificada de que a distribuição de átomos de impurezas em todo o volume é uniforme não é mais válida, desde que o número de impurezas se torna muito pequeno, então um modelo discreto mais realístico é necessário. Neste caso, devido ao processo de fabricação, os átomos de impurezas estão distribuídos randômicamente nos dispositivos. Desta maneira, diferentes configurações de átomos dopantes resultará em dispositivos diferentes.

Para estudar os efeitos associados com a localização randômica dos átomos de impurezas, definiremos uma região de distribuição discreta de cargas na camada dopada do dispositivo. Fora dessa região a distribuição é considerada uniforme. O número total de átomos dopantes na camada dopada é calculado e a probabilidade p de que um átomo seja um doador é definida como a razão do número total de átomos doadores pelo número total de células nessa camada. Números randômicos são gerados e um número randômico é designado para cada célula da malha na região de cargas discretas. À carga em cada célula da malha é atribuído o valor um, quando o número randômico é menor que a probabilidade p , ou zero em caso contrário. A distribuição de cargas na malha é obtida atribuindo-se aos pontos gerados uma densidade de carga $1/v$, onde v é o volume da célula associada ao nó.

4. Método Numérico

O dispositivo em estudo é um MESFET constituído de um substrato e uma camada dopada, onde estão localizados os três contatos: fonte, porta e dreno (Figura 1). Para o estudo dos efeitos associados à localização randômica das impurezas doadoras nesse dispositivo, uma malha uniforme é utilizada, dividida em células quadradas. É definida uma região discreta de cargas na camada dopada do dispositivo, sendo que fora dessa região a distribuição é considerada uniforme.

O número total de átomos de impurezas doadoras é calculado utilizando a dopagem equivalente da camada dopada e o volume da região discreta de cargas. Aplicando a técnica descrita anteriormente, números randômicos são gerados e uma distribuição discreta de impurezas (N_D) é obtida.

A simulação desse dispositivo requer a solução das equações sujeitas às seguintes condições de contorno: (1) potencial eletrostático (ψ) - na fonte, assumida como referência, o potencial é nulo, no dreno o potencial é igual ao potencial aplicado ao dispositivo e na porta é igual a soma do potencial aplicado à porta com o potencial de contato semiconductor-metal, considerado igual a $-0,8$ V, (2) concentração de elétrons (n) - dada por $n = 2,5N_D$ na fonte e no dreno e zero na porta e (3) demais superfícies - são aplicadas condições de Neumann para as variáveis ψ e n : $\partial\psi/\partial u = 0$ e $\partial n/\partial u = 0$, onde u é a direção normal às superfícies consideradas. Esta condição implica em não haver corrente elétrica fluindo para fora do dispositivo nessas superfícies.

Da discretização dessas equações, para este problema, foram obtidos sistemas de equações em que as matrizes possuem dimensões elevadas (8800×8800), são esparsas (da forma pentadiagonal) e, no caso da equação da continuidade, são mal condicionadas. As equações discretizadas de Poisson e da continuidade, formando dois sistemas de equações, são então resolvidas através de um processo autoconsistente, alternando as soluções de cada equação até a convergência dentro de um limite pré-estabelecido. Devido às grandes dimensões dos sistemas de equações, métodos iterativos são mais adequados e, portanto, para a solução de cada sistema foi utilizado o método do gradiente bi-conjugado, usando-se como pré-condicionador a decomposição LU incompleta e técnicas de esparsidade para armazenamento das matrizes.

5. Resultados Obtidos

Neste trabalho consideramos o MESFET da Figura 1. As dimensões do dispositivo simulado são 350 nm de comprimento, 100nm de altura e 10 nm de largura. Na camada dopada é considerado o valor típico de dopagem uniforme equivalente a $1,0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$. Para efeito da discretização das equações é utilizada uma malha uniforme, de espaçamento 2 nm, resultando em células quadradas (2 nm x 2 nm).

A região discreta de cargas é definida na camada dopada do dispositivo, exceto sob a fonte e o dreno, tendo, portanto, as dimensões 250 nm x 40 nm x 10 nm. A dopagem uniforme equivalente a $1,0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ da camada dopada corresponde a 100 átomos de impurezas doadoras localizadas na região discreta de cargas e distribuídas randômicamente devido ao processo de fabricação do dispositivo.

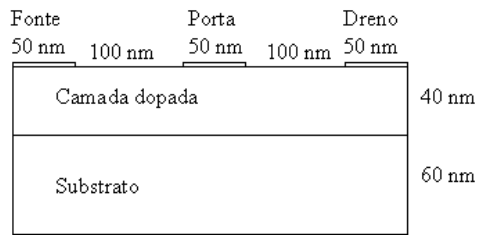


Figura 1. Seção transversal do MEFET simulado.

Utilizando um programa para geração de números randômicos e a técnica descrita anteriormente, uma possível distribuição discreta de impurezas doadoras (N_D) é mostrada na Figura 2.

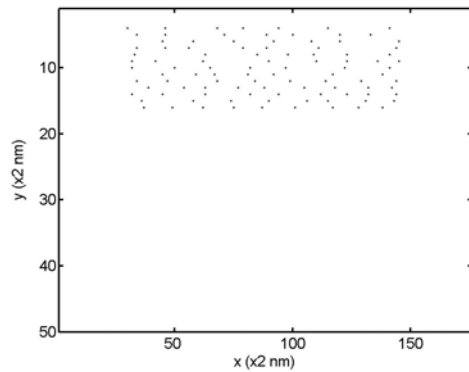


Figura 2. Uma possível distribuição discreta de impurezas gerada randômicamente para o MEFET simulado.

A distribuição de potencial eletrostático (ψ) para o MEFET simulado com a distribuição discreta de impurezas gerada randômicamente é mostrada na Figura 3 para uma tensão de porta $V_{GS} = 0,0$ V e uma tensão de dreno $V_{DS} = 1,0$ V. A figura mostra que a natureza discreta das cargas resulta em uma distribuição de potencial não-uniforme na camada dopada, apresentando picos nas posições correspondentes à posição das impurezas doadoras, consideradas como cargas discretas.

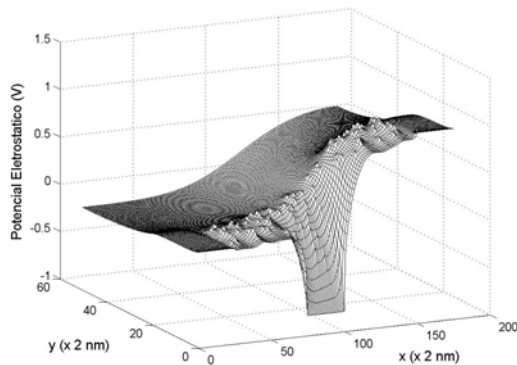


Figura 3. Distribuição do potencial eletrostático (ψ) para o MEFET para $V_{GS} = 0,0$ V e $V_{DS} = 1,0$ V.

A distribuição da densidade eletrônica (n) para o MEFET simulado com a mesma distribuição de impurezas e para as mesmas tensões aplicadas é mostrada na Figura 4. A figura mostra que a distribuição de potencial não-uniforme causada pela distribuição discreta de impurezas doadoras cria picos na distribuição eletrônica na camada dopada do dispositivo. Esses picos estão situados nas localizações das impurezas doadoras carregadas positivamente que atraíram os elétrons carregados negativamente.

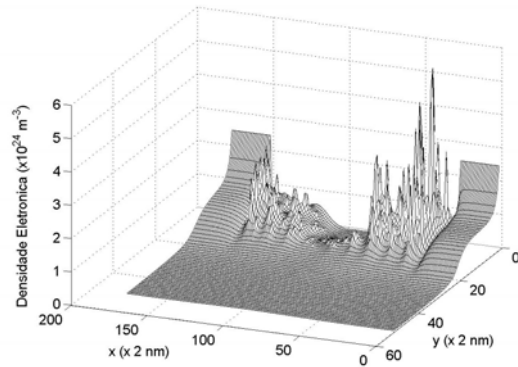


Figura 4. Distribuição da densidade eletrônica (n) para o MEFET para $V_{GS} = 0,0$ V e $V_{DS} = 1,0$ V.

6. Conclusões

Os efeitos de uma distribuição discreta de impurezas doadoras geradas randômicamente na distribuição de potencial e na distribuição eletrônica de um MEFET foram estudados. As simulações mostraram picos na densidade eletrônica causados pela distribuição não-uniforme do potencial eletrostático na camada dopada do dispositivo. Os picos estão situados nos locais correspondentes às impurezas discretas carregadas positivamente, que atraíram os elétrons carregados negativamente.

7. Agradecimentos

Agradecemos à Fundação de Apoio a Pesquisa, FUNAPE – UFG pelo suporte financeiro.

Referências

- [1] E. A. Cole e C. M. Snowden, Numerical algorithms for modelling microwave semiconductor devices, *Int. Journal of Num. Mod. Elect. Net. Dev. and Fields*, 8 (1995), 13-27.
- [2] K. F. Vaz e P. C. M. Machado, A importância da condição inicial e do pré-condicionamento na simulação de dispositivos semicondutores, *TEMA – Tend. Mat. Apl. Comput.*, 5 N° 1 (2004), 155-164.
- [3] J. Zhou e D. K. Ferry, 3D simulation of deep-submicron devices, *IEEE Comput. Sci. Eng.*, 2 (1995), 30-37.