

DESARROLLO DE UN ENTORNO GRÁFICO PARA EL ESTUDIO DE MATERIALES SEMICONDUCTORES GaAs Y Si MEDIANTE EL MÉTODO DE MONTE CARLO

J. ALBERTO GARCÍA ,O. AGHZOUT, LUIS GÓMEZ
Dpto. Ingeniería Electrónica y Automática
Universidad de Las Palmas de G.C., Las Palmas 35017, Spain
Phone: +34 928-451-244 Fax: +34 928-451-243
Email: luis@cic.teleco.ulpgc.es, luis@det.ulpgc.es

En esta publicación se presenta la herramienta software Monte Carlo 1.0. Esta herramienta permite el estudio a nivel íntimo de los materiales semiconductores Silicio (Si) y Arseniuro de galio (GaAs) a través de la simulación numérica del transporte de carga en el seno del material semiconductor. La herramienta se ha desarrollado en el lenguaje de programación JAVA y se ejecuta en los sistemas operativos WINDOWS y LINUX/UNIX. Se trata de un programa con fines docentes que facilita el aprendizaje de conceptos tales como el transporte de carga en régimen dinámico desde un enfoque basado en la mecánica cuántica. Se obtienen las relaciones velocidad/campo eléctrico (en régimen estacionario y dinámico), el nivel de ocupación de las bandas de conducción y la característica I-V para el diodo de unión. La estructura modular que se ha empleado en el desarrollo de la herramienta permite su ampliación futura para incorporar nuevos algoritmos y nuevos materiales semiconductores.

1. Introducción

Es común en los actuales planes de estudio de las carreras técnicas disponer de asignaturas de electrónica/optoelectrónica donde se discuten aspectos de física del estado sólido. El estudio de los materiales semiconductores y dispositivos electrónicos precisa de unos conocimientos fundamentales que se apoyan en la denominada física de bandas [1]. Esta disciplina requiere del concurso de la mecánica cuántica para su correcta comprensión. Sin embargo, tanto la dificultad del tema como la escasez de tiempo en los planes de estudio de las carreras técnicas, hacen que el disponer de una herramienta software que facilite este estudio sea de gran utilidad. Además, si dicha ayuda permite al alumno no sólo realizar un acercamiento a este campo del saber sino que asimismo le posibilita un estudio en mayor profundidad, se le ofrece al alumno una herramienta docente que a su vez le inicia en el campo de la investigación. Es por ello que el paquete *software* que se presenta en este artículo sea de interés para la enseñanza de electrónica/microelectrónica en cursos avanzados (3º, 4º y 5º). Asimismo está especialmente indicada como soporte a cursos de tercer ciclo. La presentación del trabajo será de la siguiente forma, en el siguiente apartado se describen los algoritmos implementados. Posteriormente se presenta la aplicación desarrollada. Seguidamente se recogen las características más significativas que ofrece la herramienta. En el

apartado de conclusiones y líneas abiertas se discuten las posibilidades de ampliación de la aplicación.

2. Simulación de Monte Carlo

El análisis de transporte de carga en el seno de un material semiconductor es un problema en el que participan múltiples partículas (electrones/huecos) sometidas a la influencia del potencial debido a la estructura cristalina. Se trata de un problema muy complejo que no puede ser resuelto de forma exacta de forma cerrada. Sin embargo, cuando el sistema de múltiples partículas puede considerarse como un conjunto de cargas independientes, es posible usar un método de aproximación que simula el conjunto de electrones supervisando el comportamiento de uno solo sometido a múltiples mecanismos de dispersión. El método Monte Carlo para una sola partícula es una herramienta útil para el estudio del problema del transporte de cargas, especialmente en el caso de estado estacionario bajo un campo eléctrico estático y uniforme. El objetivo del método Monte Carlo de partícula única aplicado al análisis de transporte es, simular el movimiento de una única carga en el espacio de momentos. Esto se consigue seleccionando la duración del *vuelo* libre de la carga y de los mecanismos de dispersión estocásticamente. La simulación se lleva a cabo mediante la generación de una secuencia de números aleatorios. En la figura siguiente se muestra una interpretación gráfica del desplazamiento del electrón.

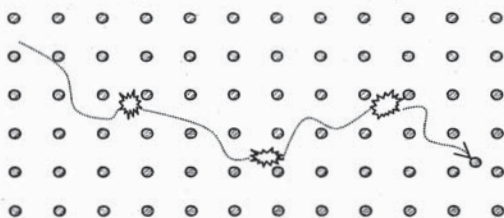


Figura 1: Representación del movimiento de un electrón en su desplazamiento por el semiconductor mientras es sometido a múltiples dispersiones (modelo bidimensional para la red cristalina).

La simulación de Monte Carlo aborda lo anterior mediante la consideración del conjunto de mecanismos involucrados en el modelo. Así, para el problema que se ilustra en la figura 1, si se desea obtener información del transporte de carga en la estructura cristalina que se representa, se realizan los siguientes pasos:

1. Modelado del problema a nivel físico (incluyendo mecanismos que afecten al movimiento de la carga eléctrica).
2. Se hace circular una carga a través del cristal y se le asignan los diversos mecanismos de dispersión de forma aleatoria.
3. Se repite el proceso n veces.

El modelado a nivel físico implica la evaluación de expresiones matemáticas de cierta complejidad [2] donde se tiene en cuenta los mecanismos de deriva y dispersión. Los mecanismos de dispersión que se han considerado en la herramienta son los debido a fonones intra e inter-valle

(dos valles) y a las impurezas ionizadas. La selección de cada dispersión se efectúa usando la siguiente función,

$$\Lambda_n(E_k) = \frac{\sum_{j=1}^n W_j(E_k)}{\Gamma} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

que es una sumatoria de las velocidades de dispersión normalizadas. Dicha selección se realiza mediante un sorteo aleatorio que en base al resultado (siempre inferior a la unidad) y a la figura 2, permite simular el auténtico proceso de dispersión en el material cristalino.

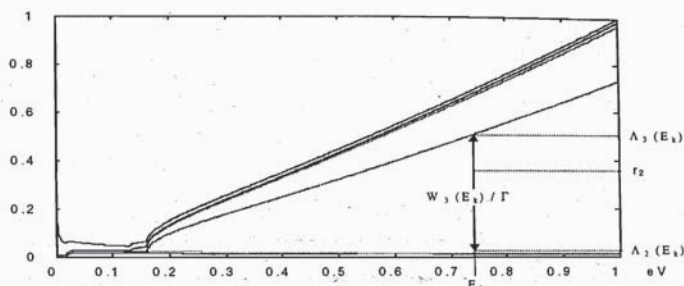


Figura 2: Selección de un mecanismo de dispersión haciendo uso de $\Lambda_n(E_k)$.

3. Descripción de la herramienta

Desde un primer momento se planteó la necesidad de disponer de un entorno de trabajo que fuera amigable y con clara orientación pedagógica. Es por ello que el entorno seleccionado para el desarrollo de la aplicación ha sido del tipo *windows*. Se incorporan los menús desplegables así como una ventana de ayuda hipertexto (ayuda tanto del programa como de contenidos teóricos) y demás utilidades propias de los programas *windows* (manejador de ficheros, barras de desplazamiento, editor de texto...). Se incorpora una herramienta paravisualizar gráficas; de esta forma el usuario no debe abandonar el entorno de trabajo para completar su estudio. La herramienta Monte Carlo 1.0 incluye tres conjuntos de algoritmos claramente diferenciados: Método de Monte Carlo para el análisis mediante una sola partícula, mediante un conjunto de éstas y el que permite la simulación de un dispositivo semiconductor. El primer conjunto agrupa los algoritmos que simulan el desplazamiento de la carga en el seno de un semiconductor sometido a un campo eléctrico constante. El segundo conjunto abarca la pareja de programas que simulan el desplazamiento de una distribución de carga bajo campo constante. El disponer de una nube de carga permite el estudio del régimen dinámico. Por último se dispone del programa que efectúa la simulación de los diodos semiconductores de GaAs y Si (este tipo de simulación conlleva la resolución numérica de la ecuación de Poisson [2]).

La herramienta diseñada incorpora dos tipos de salida. Una de ellas permite visualizar en tiempo real la evolución de las curvas de parámetros tales como la velocidad media del electrón o el potencial. La otra salida consiste en un conjunto de ficheros donde se almacenan los datos de la simulación para su posterior representación gráfica (incluida en la aplicación). La herramienta

Monte Carlo 1.0 se ha implementado en el lenguaje de programación Java (JDK versión 1.1.7) haciendo uso del lenguaje C para el código nativo incorporado (para reducir el tiempo de cómputo). Los requisitos para el funcionamiento correcto del programa Monte Carlo 1.0 son: un ordenador con procesador 486 o superior, un mínimo de 16 MB de memoria RAM y 1 MB de espacio en el disco duro. El programa se dispone en un CD-ROM y cuenta con un fichero de autoinstalación.

4. Resultados obtenidos con Monte Carlo 1.0

La herramienta permite el estudio del comportamiento de los materiales semiconductores sometidos a un conjunto amplio de posibilidades: variación de concentraciones, perfil de concentración, cambios con la temperatura... En este apartado se recogen los resultados más sobresalientes obtenidos con la aplicación. En la figura 3 se muestra el diodo bajo estudio (el usuario lo describe de forma interactiva).

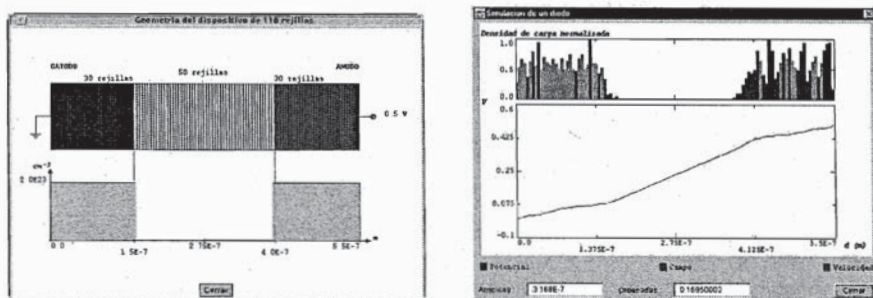


Figura 3: Ventana de diseño del diodo semiconductor y resultados obtenidos.

También se muestra en la figura 3 la curva de distribución potencial eléctrico para el diodo anterior, n^+i-n^+ GaAs. En este caso se han empleado 8000 partículas, 400 pasos temporales, temperatura ambiente (300 K) y una concentración de $1E10 \text{ m}^{-3}$. Los histogramas representan la distribución de carga (en tiempo de simulación).

5. Conclusiones

Se ha presentado la herramienta docente Monte Carlo 1.0 que consiste en un paquete software para el estudio de los materiales semiconductores Arseniuro de Galio (GaAs) y Silicio (Si). Los resultados obtenidos son acordes con los que se recogen en la bibliografía [1], [2]. El reducido tiempo de cómputo y la facilidad de uso de la misma la aconsejan como complemento de asignaturas de electrónica avanzada. Como líneas abiertas se proponen la incorporación de otros semiconductores (SiGe, SiC, PIn...), así como extender las simulaciones a dos y tres dimensiones.

Referencias

- [1] S. M. Sze, "Semiconductor Devices", John Wiley and Sons, 1985.
- [2] K. Tomizawa, "Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Device", ArtechHouse, 1993.