



Un Procedimiento para Obtener la Solución de la Función Potencial en Materiales Semiconductores

A Procedure to Obtain the Solution of the Potential Function in Semiconductor Materials

A. De Moya^{*a}, A. Perez^a, J. Plaza^a, E. Tlelo^b, A. Torres^b.

^a Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia.

^b Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica. Tonantzinla, México.

Recibido 29.03.10; Aceptado 06.12.10; Publicado en línea 17.01.11.

Resumen

Las ecuaciones de estado no lineales requieren del empleo de algoritmos de integración numérica para obtener su solución. Mostramos el procedimiento para obtener la solución de una función implícita como lo es la función potencial eléctrico, cuya evaluación es imprescindible para la descripción y/o predicción a nivel físico del comportamiento de los dispositivos semiconductores [1].

Palabras clave: Semiconductores, Algoritmos, Solución.

Abstract

The nonlinear state equations require the use of numerical integration algorithms for their solution. We show the procedure to obtain an implicit solution as is the electric potential function, which is imperative for the description and / or prediction on the physical level of the behavior of semi-conductor devices [1].

Keywords: Semiconductors, Algorithms, Solution.

PACS: 02.60.Jh, 68.35.bg.

© 2010 Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Introducción

El potencial en un semiconductor es función de diversos parámetros, como son la concentración local de dopado, la temperatura, los potenciales externos y la posición. Por su naturaleza, su evaluación es compleja y difícil de obtener. La fuerte evolución del potencial con la distancia aunado al escalamiento de los dispositivos hace necesaria su revisión y solución con voltajes mayores y longitudes cada vez más pequeñas. La solución al problema se presentó en DCDIS 2005 para potenciales superficiales de 0.25 V [2]; tomamos el procedimiento allí descrito y damos la

solución para potenciales superficiales del orden de 2 voltios.

Considerando el potencial superficial U_s como el potencial en $x = 0$ y el potencial del sustrato U_b como el potencial en $x = \infty$, la función del potencial normalizada tiene la forma:

$$\frac{dU}{dx} = \frac{\sqrt{2}}{\lambda} * \sqrt{(U_b - U(x)) \sinh(U_b) - \cosh(U_b) + \cosh(U(x))}. \quad (1)$$

* aldemard@gmail.com

Esta función de estado no lineal se puede resolver empleando algoritmos de integración numérica multistep con control automático del orden y tamaño del paso.

2. Planteamiento del Problema

Funciones de estado no lineales de la forma $x = f(x,t)$, tal como la ecuación (1), deben resolverse numéricamente, empleando algoritmos de integración numérica. Para implementar el algoritmo de Adams-Moulton de primer orden [3], se requiere como mínimo de las condiciones de frontera U_b y U_0 para calcular f_0 ; adicionalmente, debe definirse el tamaño del paso h . Así, considerando $h = 30$ con $U_b = 0$ y $U_0 = 1$, en sus corridas iniciales el programa presentó inestabilidades desde las primeras iteraciones, como puede verse en la figura 1. El programa ejecutado en MATLAB, contiene en su ciclo básico las siguientes 3 instrucciones:

$$u(n+1) = u(n) + h*f(n), \quad f(n+1) = k1*sqrt((ub1 - u(n+1))*sinh(ub1) - cosh(ub1) + cosh(u(n+1))) \text{ y } u(n+1) = u(n) + h*(f(n+1)),$$

donde $k1$ es una constante igual a -0594.

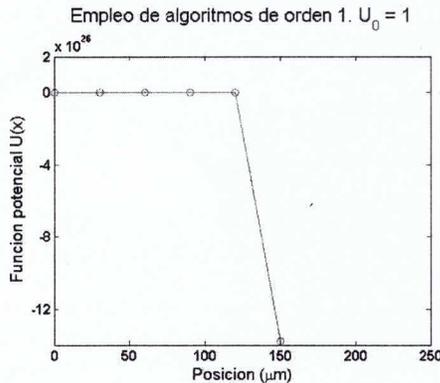


Fig. 1: El algoritmo se indetermina en las 6 primeras iteraciones.

Como posible solución a las inestabilidades se considera el empleo de algoritmos de 2º orden: $x_{n+1} = x_n + 0,5 h [f(x_{n+1}, t_{n+1}) + f(x_n, t_n)]$, con $h = e_{max} / f_n$, y $e_{max} = 0.01$. Obsérvese que la evaluación de U_{n+1} se hace considerando adicionalmente f_n y recalculando h . Así, el algoritmo tendrá dentro del ciclo básico las siguientes instrucciones:

$$u(n+1) = u(n) + 1.5*h*f(n) - 0.5*h*f(n-1);$$

$$f(n+1) = k1*sqrt((ub1 - u(n+1))*sinh(ub1) - cosh(ub1) + cosh(u(n+1)));$$

$$h = abs(emax/f(n+1));$$

$$u(n+1) = u(n) + 0.5*h*(f(n+1) + f(n));$$

Este algoritmo tuvo un buen comportamiento alcanzando rápidamente regiones de potenciales uniformes, que tienden a U_b . En estos puntos el algoritmo pierde estabilidad, como se ve en la figura 2: al tornarse la función muy uniforme f se hace muy pequeño provocando el crecimiento de h , a tal punto que el ajuste en el potencial hace que cambie de signo, provocando de nuevo la inestabilidad ya observada.

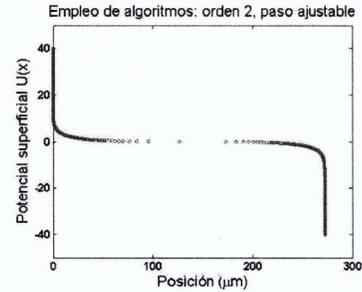


Fig. 2: El algoritmo pierde estabilidad cuando la función alcanza su valor mínimo.

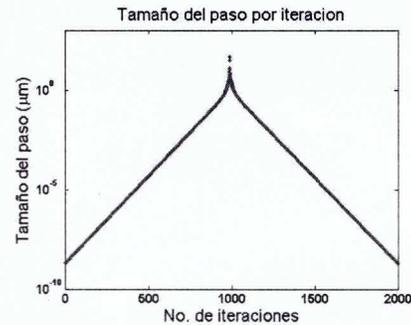


Fig. 3: El tamaño del paso crece al disminuir f provocando la inestabilidad del algoritmo.

Disminuir e_{max} solamente hace que el algoritmo se vuelva más lento y no se corrige la inestabilidad, a diferencia del algoritmo 1 que se torna muy estable para estas condiciones, pero, si el potencial superficial U_0 aumenta, tenemos de nuevo los resultados vistos inicialmente.

3. Método de Solución

Es claro que para este propósito requerimos de algoritmos de paso ajustable y de alta estabilidad. Para resolver nuestro problema recurrimos a algoritmos de integración numérica multistep con control automático de orden y tamaño de paso ajustable, como se indica en la referencia [2]. Por simplicidad en el desarrollo emplearemos algoritmos Adams-Bashforth (predictor) y Adams-Moulton (corrector) hasta de tercer orden [3]. Considerando:

$$M = (U_b - U(x))\sinh(U_b) - \cosh(U_b) + \cosh(U(x)),$$

$$N = -\sinh(U_b) + \sinh(U(x)) \text{ y } k = \sqrt{2}/\lambda,$$

el orden y tamaño del paso se obtienen seleccionando el mayor valor de las relaciones de αh , las cuales recurren a la evaluación de derivadas de ordenes superiores, así:

$$\text{Orden 1: } \alpha_1 h = \frac{\sqrt{2} e_{\max}}{1.3} \sqrt{\frac{1}{U''}}, \quad \frac{1}{U''} = \frac{2 M^{1/2}}{k N} \quad (2)$$

$$\text{Orden 2: } \alpha_2 h = \frac{\sqrt[3]{12} e_{\max}}{1.2} \sqrt[3]{\frac{1}{U'''}} \quad (3)$$

$$\frac{1}{U'''} = \frac{4 M^{3/2}}{k (2 M \cosh(U(x)) - N^2)}$$

$$\text{Orden 3: } \alpha_3 h = \frac{\sqrt[4]{24} e_{\max}}{1.4} \sqrt[4]{\frac{1}{U^{(4)}}} \quad (4)$$

$$\frac{1}{U^{(4)}} = \frac{8 M^{5/2}}{k (3 N^3 - 6 N M \cosh(U(x)) + 4 M^2 \sinh(U(x)))}$$

Las parejas de algoritmos predictor – corrector empleadas y su respectivo orden son:

$$\text{Orden 1: } u_{n+1} = u_n + hf_n, \quad u_{n+1} = u_n + hf_{n+1}, \quad \text{donde } f_n = \frac{dU}{dx_n} \quad (5)$$

$$\text{Orden 2: } u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}h(3f_n - f_{n-1}), \quad u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}h(f_{n+1} + f_n) \quad (6)$$

$$\text{Orden 3: } u_{n+1} = u_n + \frac{1}{12}h(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}),$$

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{12}h(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) \quad (7)$$

En la implementación automáticamente se selecciona el orden del algoritmo y se define el tamaño del paso tomando el mayor valor de h(i):

$$h(1) = (\text{abs}(2 * e_{\max} * \text{In}2))^0.3846;$$

$$h(2) = (\text{abs}(12 * e_{\max} * \text{In}3))^0.2775;$$

$$h(3) = (\text{abs}(24 * e_{\max} * \text{In}4))^0.1786;$$

donde In_i son los inversos de las derivadas de orden $i + 1$.

$$\text{In}2 = s * M^{0.5} / N;$$

$$\text{In}3 = 2 * s * M^{1.5} / (2 * M * \cosh(u(n)) - N^2);$$

$$\text{In}4 = 4 * s * M^{2.5} / (3 * N^3 - 6 * N * M * \cosh(u(n)) + 4 * M^2 * \sinh(u(n)));$$

Aunque el algoritmo es muy estable y evoluciona rápidamente hacia las regiones donde la función es uniforme, su paso se hace cada vez más pequeño, por lo que el avance en la función se torna lento, como se ve en la figura 4 en profundidades mayores a 260 μm . Note al inicio del gráfico el empleo más frecuente del algoritmo de mayor orden y la disminución paulatina del tamaño del paso al igual que

el incremento en la recurrencia al algoritmo de menor orden.

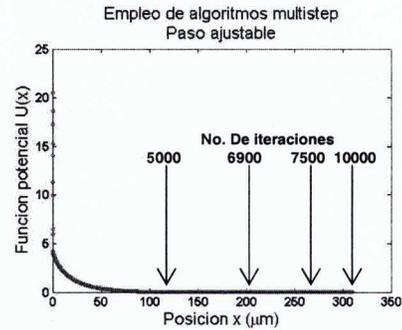


Fig. 4: La función es muy uniforme en profundidades mayores a 150 μm .

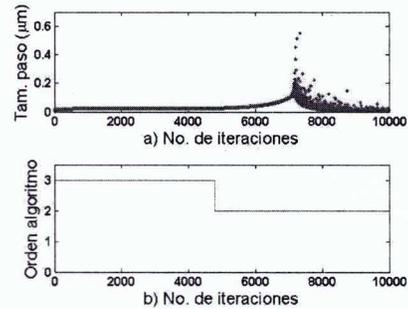


Fig. 5: Se nota el empleo más frecuente de algoritmos de mayor orden. La progresiva disminución del paso afecta la evolución en el cálculo de la función pues su avance en x es cada vez menor.

En diferentes corridas de los algoritmos se observan inestabilidades cuando el producto del paso por la primera derivada es mucho mayor que el valor de la función, $hf_n \gg u_n$, empleando e_{\max} como parámetro, por lo que nos preguntamos: ¿cuál será el mayor valor de e_{\max} con el que el algoritmo es estable? Para responder este interrogante evaluamos el mayor valor de e_{\max} en función de f , modificando los valores de las condiciones iniciales U_s . Los datos obtenidos nos muestran comportamientos como el de la figura 6. Así, implementamos los algoritmos multistep de paso ajustable actualizando periódicamente e_{\max} según la relación $e_{\max} = 10^{-(5 + 2.941 * \text{Log}10(f_n))}$.

La estabilidad permite evaluar la función a profundidades mayores a los 100 μm , pero la inversión en el signo de f crea inestabilidades que se solucionan empleando sistemáticamente desde un paso anterior a la inversión, algoritmos de primer orden con h fijo (0,5 μm).

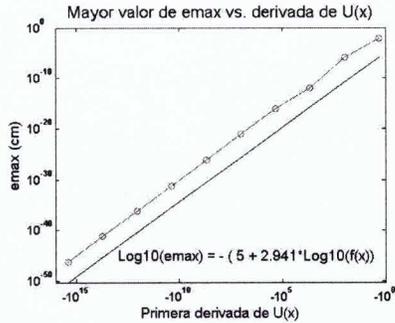


Fig. 6: La región que está por encima de los datos es una región de inestabilidad. La recta por estar en una región de alta estabilidad garantiza la obtención de la solución con un mínimo de iteraciones.

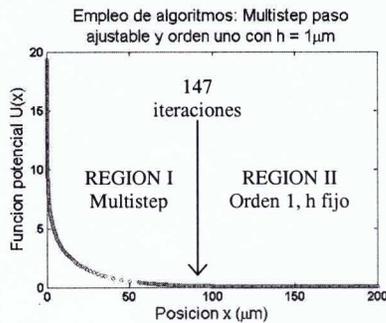


Fig. 7: El empleo inicial del algoritmo multistep paso ajustable, con ajuste de e_{max} garantiza el rápido avance y debe permutarse a algoritmos de orden 1 antes de llegar a la región de inestabilidades.

4. Discusión de Resultados

Los problemas de estabilidad y lenta evolución encontrados en los primeros intentos por resolver nuestra función potencial eléctrico hacen ver que los métodos de integración numérica deben ser inspeccionados desde el inicio hasta el final de su ejecución, de tal forma que de acuerdo a la evolución de los cálculos se harán los debidos ajustes. Numéricamente tenemos estabilidad en el algoritmo, a

expensas de la disminución en el tamaño del paso, optimizamos al poder seleccionar el orden del algoritmo, y debemos forzar a que el tamaño del paso no sea muy pequeño. De esta manera tenemos resultados como se muestran en la figura 7; allí, con 1000 iteraciones avanzamos en la evaluación de $U(x)$ hasta $900 \mu\text{m}$.

5. Conclusiones

Se muestra que la solución numérica de ecuaciones de estado no lineales empleando algoritmos de integración numérica multistep es una herramienta robusta, útil en diferentes disciplinas. Las soluciones deben incluir una evaluación periódica de la evolución de la función y sus derivadas para optimizar los algoritmos.

6. Agradecimientos:

Al Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica de México y al Grupo de Instrumentación y Metrología de la Universidad del Atlántico.

Referencias

- [1] Nicollian E. H. and Brews J. R., "MOS (Metal Oxide Semiconductor) Physics and Technology", John Wiley & Sons, New York, 1982.
- [2] J. Plaza-Castillo, et al. "Solution of the surface potential versus distance at various bulk potentials for silicon", Fourth International DCDIS Conference, 2005 Watam Pres, 333p.
- [3] Chua L. O. and Lin P. M., "Computer-Aided Analysis of Electronic Circuits: Algorithms and Computational Techniques", Prentice-Hall, Englewood Cliffs NJ, 1975.