

Modelización y simulación numérica de heterojunturas semiconductoras con Python

Contenidos:

- 1) Simulación de heterojunturas semiconductoras
- 2) Modelo y algoritmo numérico
- 3) Resultados
- 4) Conclusiones

1) Simulación de heterojunturas semiconductoras

La posibilidad de fabricar estructuras semiconductoras a partir del apilamiento de capas de distintos materiales ha abierto paso al desarrollo de dispositivos electrónicos con diseños a medida para aplicaciones específicas. Las uniones entre semiconductores diferentes, denominadas heterojunturas, permiten crear dispositivos con banda de energía prohibida variable. Este cambio en el diagrama energético, ya sea abrupto o gradual, facilita la manipulación del transporte de los electrones y huecos, y da lugar a numerosos efectos deseables como el confinamiento de portadores o la separación espacial de electrones y huecos para reducir la recombinación, entre otros. Los pozos cuánticos, cables cuánticos y puntos cuánticos son ejemplos de heteroestructuras semiconductoras de gran utilidad en dispositivos optoelectrónicos modernos, con confinamiento en 2, 1 y 0-dimensiones, respectivamente.

El tipo de heterojuntura (I, II o III) varía según el alineamiento entre las bandas de energía, el cual depende fundamentalmente de los materiales involucrados. Las heterojunturas se basan en su mayoría en la unión entre semiconductores compuestos, es decir, semiconductores obtenidos a partir de la combinación de dos o más elementos de la tabla periódica (en general elementos de los grupos III-V, II-VI o SiGe). Existen compuestos binarios, ternarios, cuaternarios y hasta quinarios de gran importancia práctica. La ventaja de los semiconductores compuestos radica en la posibilidad de controlar propiedades como el ancho de la banda prohibida y la constante de red, en función de la composición. Justamente un requerimiento importante para formar interfaces con un mínimo de imperfecciones es que la constante de red de ambos materiales sea prácticamente idéntica. La variación del ancho de la banda prohibida, por su parte, se traduce en la variación de los espectros de absorción y emisión de fotones, propiedad con aplicación inmediata en el campo de la fotónica.

La simulación numérica de estructuras semiconductoras es una herramienta fundamental en el estudio del comportamiento de los dispositivos electrónicos bajo diferentes condiciones de operación. El modelo más utilizado en el análisis de semiconductores es el modelo de arrastre-difusión, que permite determinar el potencial (V) y las densidades de electrones (n) y huecos (p) en una estructura, y en función de estas todas las magnitudes de interés como corrientes, tasas de recombinación, campo eléctrico, ocupación de trampas, bandas de energía, curvas características, etc. Dada su complejidad, el modelo se resuelve numéricamente a través de códigos computacionales de simulación. En el caso de dispositivos basados en heterojunturas, la simulación es imprescindible a fines de investigar las características físicas de las interfaces, su comportamiento según la polarización, su influencia sobre el funcionamiento del dispositivo, su dependencia con las propiedades de los materiales utilizados, y en base a ello optimizar parámetros para obtener diseños ajustados a requerimientos particulares.

En este trabajo se presenta el desarrollo e implementación de un código computacional para la simulación de heterojunturas semiconductoras. Si bien existen códigos académicos y comerciales para este fin, muchas veces no brindan las opciones requeridas para una dada aplicación, o no incluyen los modelos o materiales que se necesitan, o resultan muy costosos. Por otra parte, el objetivo es incorporar esta rutina a un código de simulación de homojunturas previamente desarrollado, y generar así una herramienta completa para la investigación de dispositivos semiconductores novedosos.

2) Modelo y algoritmo numérico

El modelo de arrastre-difusión está conformado básicamente por las ecuaciones de continuidad de electrones (1) y huecos (2), las ecuaciones de transporte (3) y (4), la ecuación de Poisson (5) y expresiones para los distintos procesos de generación y recombinación de portadores, complementadas con modelos para las movilidades y tiempos de vida media, que a su vez dependen del resto de las variables.

Continuidad de electrones y huecos:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} - R_B + G_B \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} - R_B + G_B. \quad 2$$

n (p) = densidad de electrones (huecos) [$1/\text{cm}^3$]

J_n (J_p) = densidad de corriente de electrones (huecos) [A/cm^2]

R_B = tasa de recombinación [$1/\text{cm}^3 \cdot \text{s}$]

G_B = tasa de generación [$1/\text{cm}^3 \cdot \text{s}$]

x = distancia [cm]

t = tiempo [s]

q = carga del electrón = $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$.

Densidad de corriente (modelo de arrastre-difusión):

$$J_n = -q\mu_n n \frac{\partial}{\partial x} V + Vn + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (3)$$

$$J_p = -q\mu_p p \frac{\partial}{\partial x} V - Vp - qD_p \frac{\partial p}{\partial x}. \quad (4)$$

V = potencial electrostático [V]

μ_n (μ_p) = movilidad de electrones (huecos) [$\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$]

D_n (D_p) = constante de difusión de electrones (huecos) [cm^2/s].

Vn y Vp son parámetros dependientes de la composición de los materiales [V]:

$$Vn = \frac{\chi - \chi_r}{q} + \frac{kT}{q} \ln \frac{N_C}{N_{Cr}}; Vp = -\frac{\chi - \chi_r}{q} - \frac{E_G - E_{Gr}}{q} + \frac{kT}{q} \ln \frac{N_V}{N_{Vr}},$$

donde N_C (N_V) es la densidad efectiva de estados en la banda de conducción (valencia), χ es la afinidad electrónica, E_G es el ancho de la banda prohibida, k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura. El sufijo r indica valores de parámetros correspondientes a un punto de referencia en la estructura del dispositivo.

Ecuación de Poisson:

$$\frac{d}{dx} \varepsilon \frac{dV}{dx} = -q p - n + N_D - N_A. \quad 5$$

N_D (N_A) = densidad de átomos donores (aceptores) ionizados

ε = permitividad dieléctrica = $\varepsilon_r \times 8.85 \times 10^{-14} \text{ F/cm}$.

Como todas las ecuaciones son funciones de V , n y p , el sistema se resuelve en forma autoconsistente aplicando métodos numéricos. Las ecuaciones son normalizadas y discretizadas en una dimensión utilizando un esquema en diferencias finitas. Vale aclarar que para la simulación de estructuras crecidas en capas delgadas, el análisis restringido a una dimensión está plenamente justificado. Para la evaluación de las densidades de corriente J_n y J_p en los puntos intermedios de la malla se utiliza el método de Scharffeter-Gummel, que básicamente consiste en una interpolación exponencial de V , n y p que evita la aparición de inestabilidades numéricas. Lo que se obtiene finalmente es un sistema de ecuaciones acopladas, con tres ecuaciones por cada nodo de la malla (Poisson, continuidad de electrones y de huecos), cuya solución consiste en tres vectores (V , n y p) con los valores del potencial y densidades de portadores en cada nodo. El método iterativo utilizado es el denominado método de Gummel, en el que a partir de soluciones iniciales para los vectores V , n y p se actualiza cada vector en cada

iteración de manera desacoplada: en un primer paso se resuelve Poisson y se calcula V utilizando los vectores de n y p disponibles; con esta nueva versión de V y el vector p inicial se resuelve la ecuación de continuidad de electrones y se determina un nuevo vector n ; luego con estos vectores V y n se resuelve la ecuación de continuidad de huecos y se calcula p , finalizando así la primera iteración; se repite el proceso de manera iterativa hasta verificarse el criterio de convergencia. En cada iteración, además, se actualizan las tasas de recombinación y generación, y los valores de todos los parámetros dependientes de V , n y p . Una ventaja del método de Gummel es que no requiere soluciones iniciales muy cercanas a las soluciones finales para lograr converger.

El código computacional fue desarrollado en lenguaje Python versión 3.4. Se utilizó la distribución Anaconda, que cuenta con los paquetes y librerías de cálculo científico, algoritmos numéricos y funciones de gráficos necesarios (NumPy, SciPy, Matplotlib, etc.), e incluye además la interfaz gráfica Spyder.

3) Resultados

Como caso de estudio se analizó la heterojuntura GaAs/Al_xGa_{1-x}As. El compuesto Al_xGa_{1-x}As es uno de los más utilizados en dispositivos basados en GaAs. Su ancho de banda prohibida puede variar desde 1.42 eV ($x=0$, GaAs) hasta 2.16 eV ($x=1$, AlAs), prácticamente sin alterar su constante de red, lo que lo hace sumamente ventajoso para formar heteroestructuras con baja densidad de defectos en las interfaces. Se introdujeron en el código todos los parámetros característicos del Al_xGa_{1-x}As, dependientes de la composición x . Se simulon estructuras de una unión GaAs/Al_xGa_{1-x}As, considerando distintos tipos y niveles de dopado en cada región, y los resultados se contrastaron con otro programa de simulación (PC1D) y con datos publicados en artículos científicos.

3.1) Juntura N-AlGaAs ($x=0.3$)/p-GaAs en equilibrio térmico. $N_D=1e16 \text{ cm}^{-3}$ (AlGaAs), $N_A=1e16 \text{ cm}^{-3}$ (GaAs). Comparación entre los resultados obtenidos con el código desarrollado en Python y el software PC1D [1].

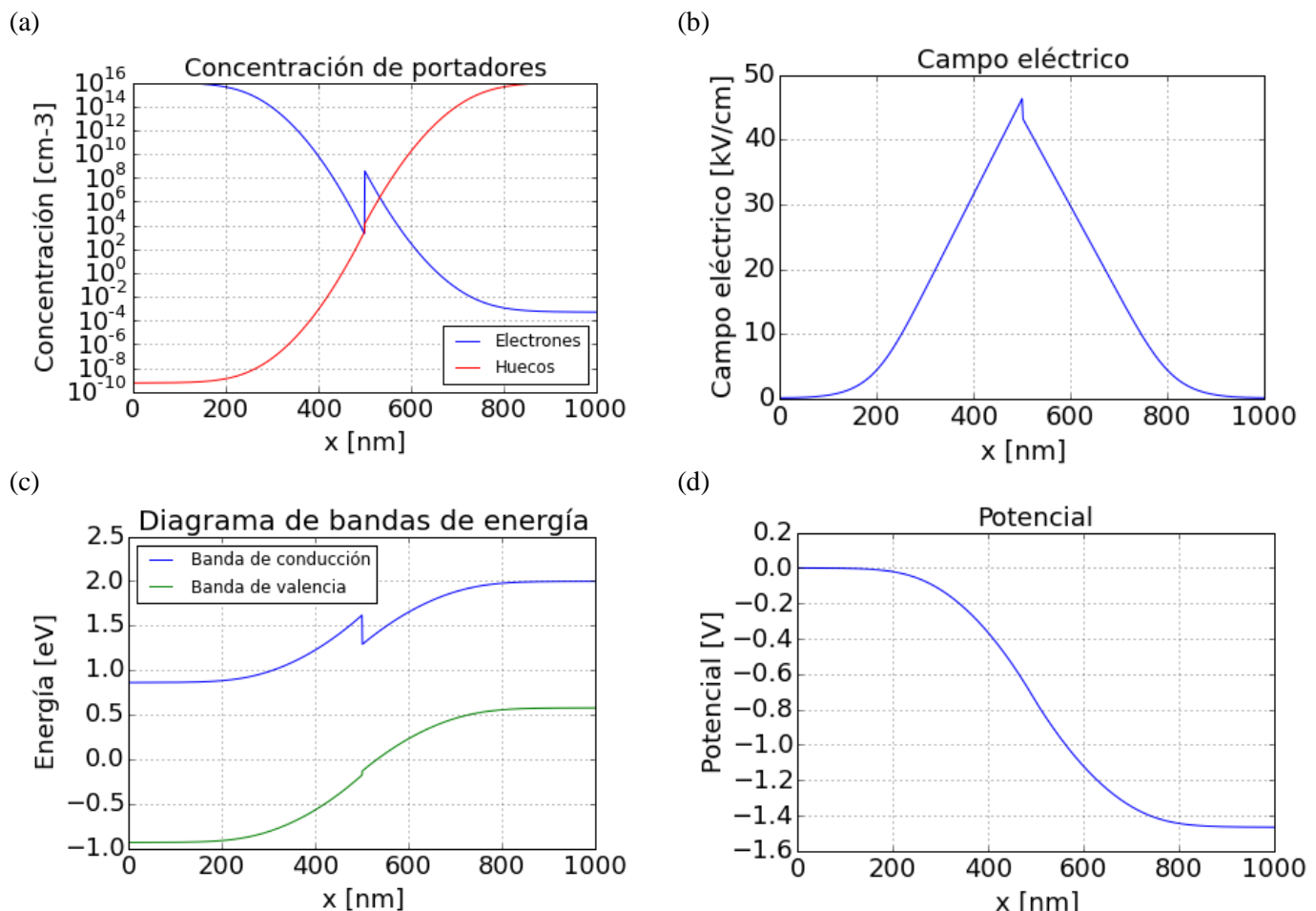


Fig. 1. Simulación de la juntura N-AlGaAs ($x=0.3$)/p-GaAs utilizando el código desarrollado, (a) concentración de portadores, (b) campo eléctrico, (c) bandas de energía y (d) potencial electrostático.

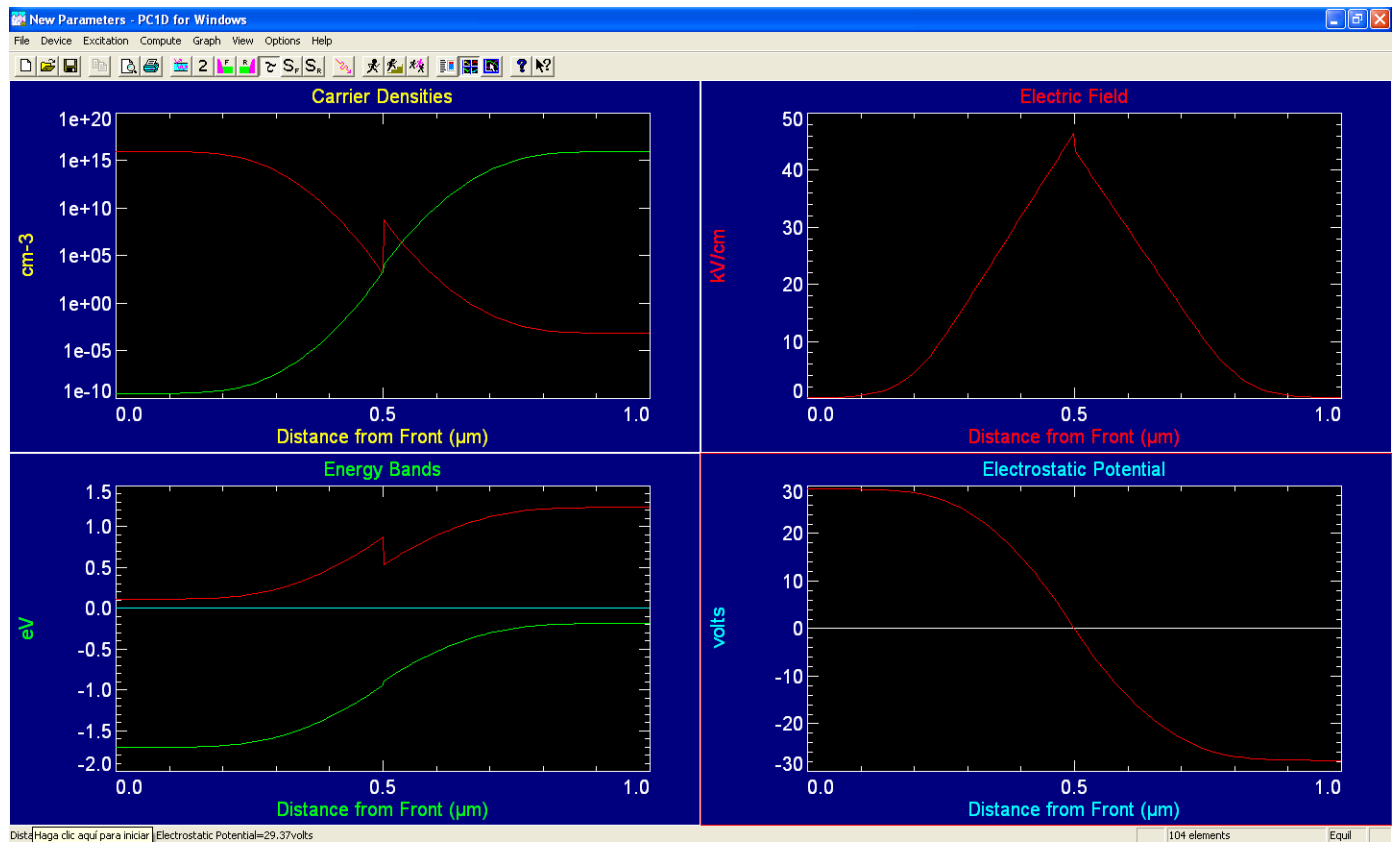


Fig. 2. Simulación de la misma juntura N-AlGaAs ($x=0.3$)/p-GaAs con el software PC1D. Los resultados se muestran en el mismo orden que en la Fig. 1. Cabe aclarar que PC1D muestra el potencial electrostático sin desnormalizar ($V \times q/kT$).

3.2) Juntura p-GaAs/N-AlGaAs ($x=0.25$), $N_A=1e17 \text{ cm}^{-3}$ (GaAs), $N_D=1e17 \text{ cm}^{-3}$ (AlGaAs). Comparación de los resultados de las simulaciones propias con resultados teóricos publicados en [2].

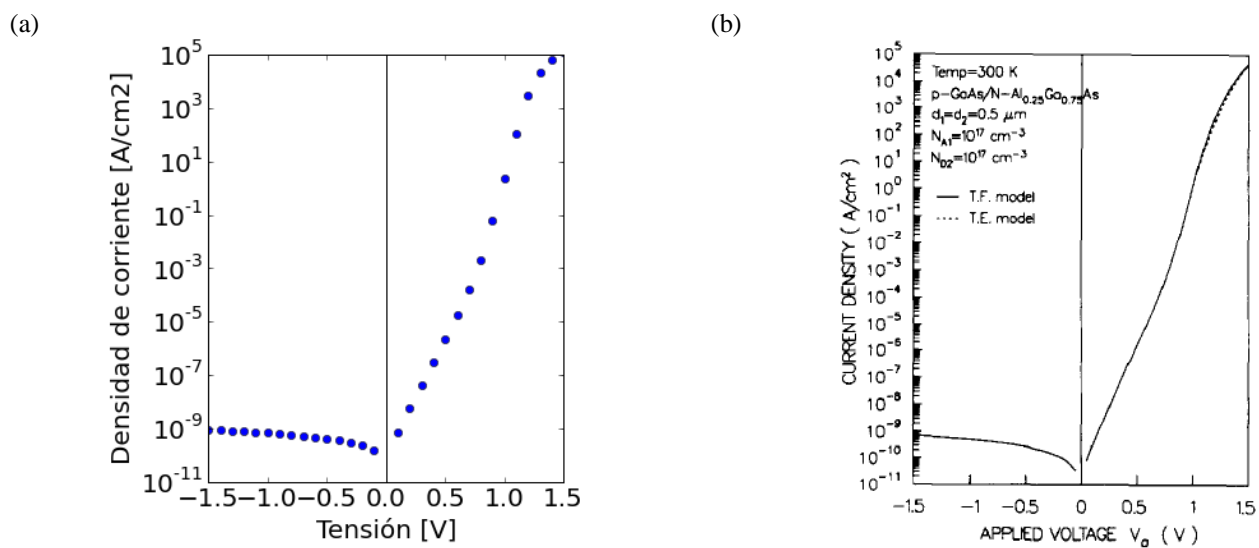


Fig. 3. Simulación de la curva tensión-corriente de la juntura p-GaAs/N-AlGaAs ($x=0.25$), (a) código desarrollado, (b) resultados presentados en [2].

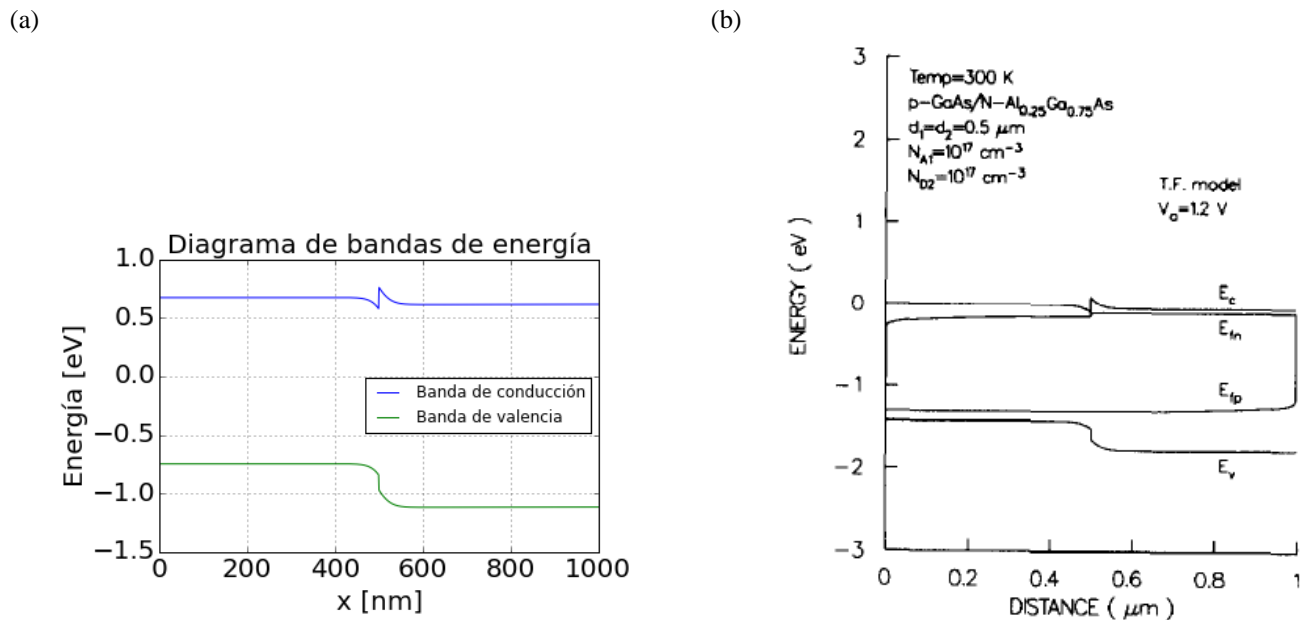
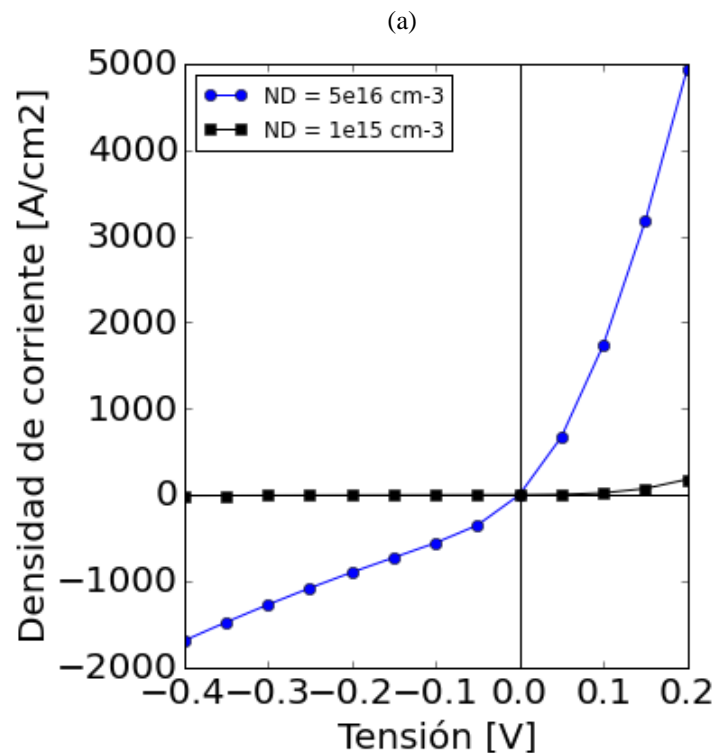


Fig. 4. Simulación del diagrama de bandas de energía de la misma juntura p-GaAs/N-AlGaAs ($x=0.25$), con una polarización aplicada de $V_a=1.2$ V, (a) código desarrollado, (b) resultados presentados en [2].

3.3) Juntura n-GaAs/N-AlGaAs ($x=0.25$), con $N_D=1e15$ cm⁻³ (GaAs), $N_D=1e15$ cm⁻³ y $5e16$ cm⁻³ (AlGaAs). Simulación de las curvas tensión corriente para distintas densidades de dopantes donores en el AlGaAs. La Fig. 5 (a) muestra el incremento de la corriente con el nivel de dopado, tanto en inversa como en directa. Este incremento está asociado a la forma que adopta el borde de la banda de conducción según la concentración de dopantes. En las Fig. 5 (b) y (c) se observa el borde de la banda de conducción de la heterojuntura, calculado tensiones aplicadas (V_a) de +0.1 V y -0.1 V, respectivamente. Como se puede apreciar, el incremento del dopado reduce la altura y el espesor de la barrera de energía, lo que causa que la corriente sea mayor tanto en polarización inversa como en directa. A mayor dopado la heterojuntura muestra un comportamiento óhmico, es decir, pierde la característica de rectificación.



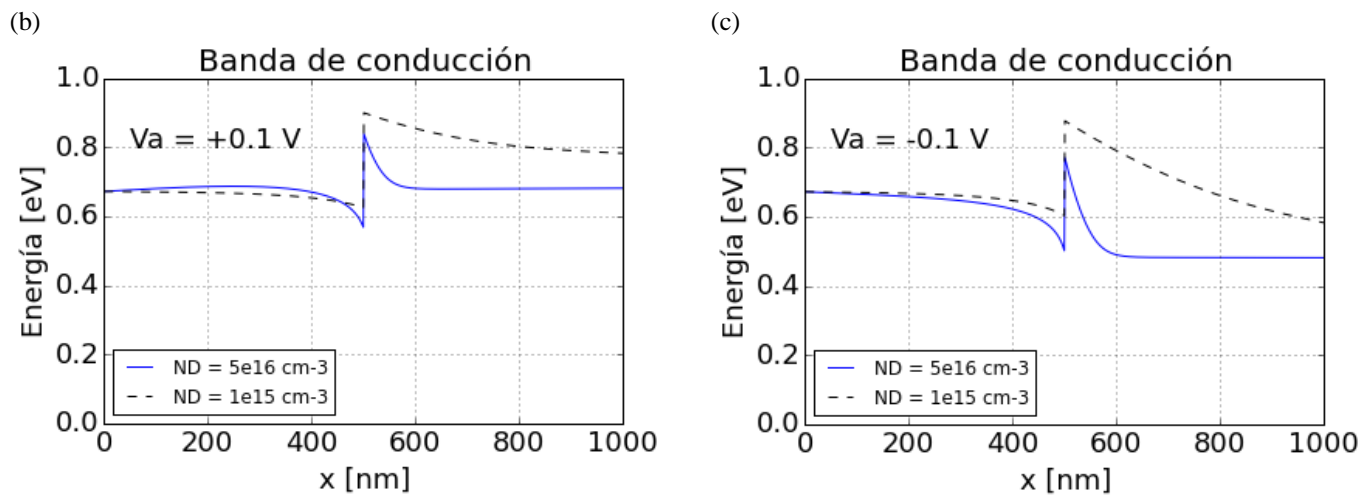


Fig. 5. (a) Simulación de la curva tensión-corriente de la juntura n-GaAs/N-AlGaAs ($x=0.25$). Se aprecia la característica óhmica de la juntura con dopado donador más alto en el AlGaAs. El nivel de dopado altera la barrera de potencial en la interface, tal como se muestra en (b) y (c) para polarización directa e inversa, respectivamente.

4) Conclusiones

Se logró implementar con éxito un código de simulación numérica de heteroestructuras semiconductoras, basado en lenguaje Python. La más que aceptable similitud verificada entre los resultados obtenidos a partir de las simulaciones realizadas con el código, y los cálculos hechos con otro simulador y datos teóricos reportados en la literatura, permite concluir que el código funciona correctamente. Si bien el programa incluye por defecto los parámetros físicos del semiconductor compuesto $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, heterojunturas basadas en cualquier otro material pueden ser analizadas incorporando los parámetros adecuados. El código no solo genera y almacena los gráficos de magnitudes importantes como las densidades de portadores, campo eléctrico, potencial, bandas de energía y curva tensión-corriente, sino que además genera un archivo de texto con los resultados de los cálculos.

Referencias

- [1] PC1D – Software para modelización de celdas solares, en <http://www.engineering.unsw.edu.au/energy-engineering/pc1d-software-for-modelling-a-solar-cell>
- [2] K. Yang et al, “Numerical modeling of abrupt heterojunctions using a thermionic-field emission boundary condition”, *Solid-St. Electron.* 36, 3, pp. 321-330 (1993).

Ing. Ariel Pablo Cédola
GEMyDE - UNLP