

A Importância da Condição Inicial e do Pré-Condicionamento na Simulação de Dispositivos Semicondutores

K.F. VAZ¹, P.C.M. MACHADO², Escola de Engenharia Elétrica e de Computação, UFG, Cx.P. 131, 74001-970 Goiânia, GO, Brasil.

Resumo. Na simulação de dispositivos semicondutores são obtidos sistemas de equações em que as matrizes possuem dimensões elevadas, são esparsas, assimétricas e mal-condicionadas. Neste trabalho, apresentaremos como a solução desses sistemas é influenciada pelo pré-condicionamento do sistema e qual a melhor condição inicial para garantirmos uma convergência com um número menor de iterações.

1. Introdução

Atualmente, um dos dispositivos semicondutores mais utilizados em aplicações analógicas e digitais é o Transistor de Efeito de Campo de Semicondutor e Metal - MESFET. Este dispositivo é praticamente indispensável em aplicações eletrônicas de alta velocidade, tais como sistemas de comunicações com fibras ópticas e satélites, telefonia celular, etc [3].

A necessidade de reduzir o tempo e o custo do desenvolvimento de tais dispositivos tem levado a um crescente interesse em modelá-los e prever o seu desempenho antes de sua fabricação. Uma categoria de modelo com essas características e que utiliza uma representação mais exata do dispositivo é o modelo do dispositivo físico. Este tipo de modelo descreve o dispositivo em termos da física do transporte de portadores (as equações dos semicondutores), sendo assim possível relacionar a geometria e as propriedades dos materiais ao desempenho elétrico do dispositivo [7].

Um dos modelos físicos mais utilizados consiste na resolução das equações de Poisson e da continuidade (Modelo Clássico [6]). Um método comumente utilizado na solução dessas equações consiste em suas discretizações usando o método de diferenças finitas em uma malha uniforme bidimensional. As equações obtidas são então resolvidas através de um processo auto-consistente, alternando a solução de cada equação (Poisson e continuidade) até a convergência ser alcançada dentro de um limite pré-definido (Método de Gummel [4]).

¹kfvaz@hotmail.com

²pcesar@eee.ufg.br

Na discretização destas equações são obtidos sistemas de equações em que as matrizes possuem dimensões elevadas (da ordem de 8000x8000), são esparsas, assimétricas e mal-condicionadas. Utilizando-se o Método do Gradiente Bi-Conjugado [2] sem pré-condicionamento para a resolução dos sistemas de equações, observa-se, especialmente na equação da continuidade, uma difícil convergência.

Nos métodos iterativos, a condição inicial também influencia de forma considerável para a convergência do sistema, podendo haver um grande número de iterações até a convergência ser alcançada ou até mesmo o sistema não convergir. Neste trabalho verificaremos a importância da condição inicial e do pré-condicionamento na convergência dos sistemas de equações, mostrando que o pré-condicionamento é indispensável e obtendo a melhor condição inicial para uma solução mais rápida.

2. Modelo Clássico

O modelo clássico consiste na resolução das equações de Poisson e da continuidade. As equações são as seguintes:

(i) A equação de Poisson

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \psi) = q(n - N_D), \quad (2.1)$$

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 e N_D é a densidade de dopantes doadores.

(ii) A equação da continuidade

$$\nabla \cdot J = 0, \quad (2.2)$$

onde J é a densidade de corrente eletrônica, dada por

$$J = -qn\mu\nabla\psi + k_B T\mu\nabla n,$$

onde μ é a mobilidade eletrônica, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura.

3. Discretização das Equações

A técnica numérica mais utilizada na resolução das equações diferenciais parciais, que constitui as equações de um semiconductor, é o método das diferenças finitas, que consiste na discretização das equações através de um domínio geométrico específico do modelo de dispositivo. Utilizando este método, discretizamos as equações de Poisson e da continuidade.

3.1. Discretização da Equação de Poisson

Neste trabalho, a discretização bidimensional da equação de Poisson, por uma malha uniforme, proporciona uma melhor estimativa de $\psi_{i,j}$ em termos do potencial discretizado dos seus quatro pontos vizinhos. A equação de diferenças finitas para a

equação de Poisson (2.1) é,

$$\frac{\psi_{i-1,j} - 2 \cdot \psi_{i,j} + \psi_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{i,j-1} - 2 \cdot \psi_{i,j} + \psi_{i,j+1}}{\Delta y^2} = \frac{-q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} ((N_D)_{i,j} - n_{i,j}).$$

Considerando uma malha uniforme, $\Delta x = \Delta y$, assim:

$$4\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j} - \psi_{i,j-1} - \psi_{i,j+1} = \Delta x^2 \left(\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \right) ((N_D)_{i,j} - n_{i,j}). \quad (3.1)$$

3.2. Discretização da Equação da Continuidade

A equação (2.2) discretizada tem a seguinte forma

$$\nabla \cdot J = \frac{(J_x)_{i+1/2,j} - (J_x)_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{(J_y)_{i,j+1/2} - (J_y)_{i,j-1/2}}{\Delta y}, \quad (3.2)$$

onde

$$(J_x)_{i+1/2,j} = \frac{1}{h_i} \left[C((\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}), T_{i+1,j}, T_{i,j})(n\mu)_{i+1,j} - C((\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}), T_{i,j}, T_{i+1,j})(n\mu)_{i,j} \right],$$

com expressão similar para $(J_y)_{i,j+1/2}$. Aqui, C é uma função definida por [1]

$$C(x, y, z) \equiv p(y, z) B\left(\frac{x - a(y-z)}{p(y, z)}\right), \quad (y \neq z) \quad (3.3)$$

onde $p(y, z) \equiv \frac{z-y}{\ln(z-y)}$. Para temperatura constante, devemos usar o seguinte limite:

$$\lim_{T \rightarrow T_0} C(x, T_0, T) = T_0 B(x/T_0),$$

onde $B(t) \equiv t(e^t - 1)^{-1}$ é a função de Bernoulli. Quando há grandes variações nos valores de potenciais de um ponto para qualquer um de seus pontos vizinhos, a função C provoca picos no sistema (valores absolutos muito altos comparados com os demais) tornando o sistema mal-condicionado, o que dificulta ou até mesmo impossibilita a convergência.

A discretização da equação de Poisson e da continuidade pode ser expressa na forma matricial como:

$$[A_p] \cdot [\psi] = [B_p]; \quad [A_c] \cdot [n] = [B_c]. \quad (3.4)$$

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

4. Dispositivo Simulado

A Figura 1 apresenta o dispositivo simulado neste trabalho. Esta simulação requer a solução das equações com as seguintes condições de contorno:

$$\frac{\partial \psi}{\partial u} = 0 \quad \frac{\partial n}{\partial u} = 0$$

em toda a superfície, exceto a fonte, a porta e o dreno. A variável u representa a direção perpendicular às superfícies consideradas. Nesta simulação, tomamos o potencial na fonte como V_s igual a $0.0V$, no dreno V_d varia de $0.0V$ a $1.4V$ e na porta V_g pode variar de $0.0V$ a $-7.0V$. A temperatura é considerada a ambiente ($T_0 = 300K$) em todo o dispositivo. A dimensão total do dispositivo é $180nm \times 45nm$. O MESFET simulado possui uma camada dopada com $N_D = 10^{23}m^{-3}$, com espessura de $30nm$.



Figura 1: Seção transversal de um MESFET.

5. O Método de Gummel

1. A partir das condições iniciais $\psi^{(0)}$ e $n^{(0)}$, resolve-se a equação de Poisson (3.1) para determinar a distribuição de potencial $\psi^{(1)}$.
2. Substitui-se o resultado da resolução da equação de Poisson, $\psi^{(1)}$, na equação da continuidade (3.2) para determinar a densidade de elétrons $n^{(1)}$. Concluindo-se, assim, uma iteração do método de Gummel.
3. Nas demais iterações, a equação de Poisson é novamente resolvida usando o novo valor de $n^{(1)}$, determinando-se $\psi^{(2)}$ e assim por diante.

Este procedimento iterativo é repetido até as distribuições de potencial e da densidade de elétrons convergirem para o limite pré-estabelecido.

6. Descrição das Condições Iniciais

Para o cálculo da distribuição de potencial e densidade de elétrons, consideramos V_g constante e V_d variando de um valor inicial a um valor final, em intervalos constantes. Neste trabalho, será utilizado o valor inicial de $V_d=0.2V$, valor final de $V_d=1.4V$, em intervalos de $V_d=0.2V$.

6.1. Condição 1

A condição inicial 1, para a distribuição de potencial, considera $\psi_G = V_G$ na porta, $\psi_S = V_S$ na fonte, $\psi_D = V_D$ no dreno. Na região abaixo da fonte considera-se o potencial V_S e abaixo do dreno consideramos o potencial V_D . Na região entre fonte

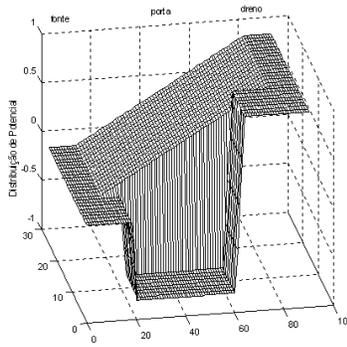


Figura 2: Condição inicial 1 para a distribuição de potencial no MESFET.

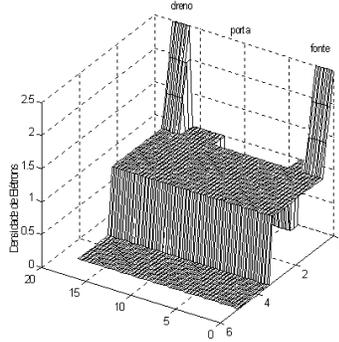


Figura 3: Condição inicial 1 para a densidade de elétrons no MESFET.

e porta consideramos o potencial V_S e entre porta e dreno o potencial é igual a V_D . Para valores abaixo da porta consideramos o potencial V_G , e no substrato, entre a fonte e o dreno, o potencial aumenta linearmente de V_S a V_D . A condição inicial 1 para a distribuição de potencial é ilustrada pela Figura 2.

A densidade de elétrons inicial é dada como segue:

No substrato, a densidade de elétrons é zero. Na camada dopada, a densidade de elétrons é $N_D = 10^{23} m^{-3}$ que normalizada é igual a 1, 0. Nos contatos, $n = 2, 5N_D$ na fonte e no dreno e zero na porta. Nas regiões abaixo da fonte e dreno, os valores decrescem linearmente até serem iguais aos da camada dopada. A densidade de elétrons, para a condição inicial 1, é ilustrada pela Figura 3.

6.2. Condição 2

Aplicando uma tensão no dreno igual a $0,2V$, toma-se a condição 1 para calcular a distribuição de potencial inicial e densidade de elétrons no dispositivo. Para calcular as demais distribuições de potenciais iniciais, toma-se o resultado obtido na tensão anterior e adiciona-se $0,2V$ somente nos valores abaixo do dreno, como mostra a Figura 4. A densidade de elétrons utilizada como valor inicial para um determinado V_D é a densidade de elétrons no V_D anterior.

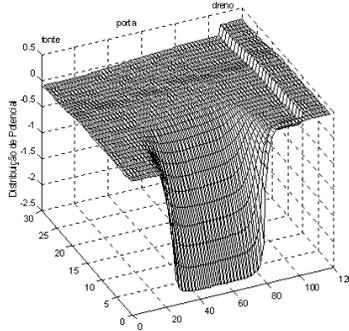


Figura 4: Condição inicial 2 para a distribuição de potencial no MESFET.

6.3. Condição 3

Para a tensão $0,2V$ considera-se a condição inicial 1, tanto para a distribuição de potencial quanto para a densidade de elétrons. Para a tensão de $0,4V$, para o cálculo da distribuição de potencial toma-se o resultado obtido na tensão anterior e adiciona-se $0,2V$ somente aos valores abaixo do dreno (condição 2), enquanto para a densidade de elétrons toma-se o resultado obtido no V_D anterior. Para as demais tensões, soma-se sempre o resultado da tensão anterior à diferença dela com a antecessora, ou seja:

$$cond_k = resultado_{k-1} + (resultado_{k-1} - resultado_{k-2}) \quad (k > 2).$$

Nota-se que a condição 3 (Figura 5), de uma iteração para outra, tem uma diferença menos abrupta, evitando, assim, grandes picos que normalmente fazem com que o sistema encontre dificuldades de convergência.

6.4. Resultados

Como mostra a Tabela 1, a condição inicial 3 contribui, significativamente, para a redução do número de iterações do método de Gummel realizadas na convergência do sistema. Certamente, um fator preponderante é o fato dela atenuar a diferença

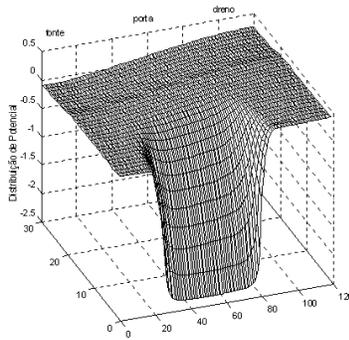


Figura 5: Condição inicial 3 para a distribuição de potencial no MESFET.

dos valores da distribuição de potencial e densidade de elétrons entre pontos vizinhos. Outro fator importante é que parte-se sempre de um resultado mais próximo do que se espera obter e isto faz com que normalmente os métodos numéricos melhorem a taxa de convergência.

Nota-se que, para algumas tensões, o número de iterações do método de Gummel da condição 3 foi maior do que o esperado. Isto ocorre porque ao resolver o sistema (3.4), pelo método do gradiente bi-conjugado, este não convergiu, gerando um erro muito grande nesta iteração, e retardando a convergência.

Tabela 1: Número de iterações realizadas para o sistema convergir à partir das condições iniciais, com o sistema sem pré-condicionamento.

Vd	Condição 1	Condição 2	Condição 3
0.2	36	36	33
0.4	58	66	52
0.6	126	107	137
0.8	123	97	93
1.0	150	100	59
1.2	271	127	47
1.4	176	120	148

7. Pré-condicionamento das Matrizes

Ao discretizarmos a equação da continuidade, forma-se um sistema de grandes dimensões, sendo que as matrizes $[A]$ de (3.4) são, neste trabalho, matrizes de dimensões 8145×8145 , pentadiagonais, esparsas, assimétricas e, no caso da equação da continuidade, mal-condicionadas. Como vimos na comparação das condições

iniciais, embora tendo encontrado a melhor condição, os métodos numéricos ainda apresentam dificuldade para convergir. Isso ocorre porque o método do gradiente bi-conjugado foi usado sem pré-condicionamento das matrizes e, sendo essas mal-condicionadas, houve dificuldade na convergência do sistema.

Segundo [5], o método do gradiente bi-conjugado deve convergir com um número máximo de iterações igual a dimensão da matriz dos coeficientes, sendo que, normalmente, deve convergir com um número bem menor de iterações que a dimensão da matriz. Como neste trabalho as matrizes são de dimensões 8145×8145 , adotamos como número máximo de iterações o valor de 8000. Observamos que na condição 3, no caso da tensão $0,6V$, o número de iterações de Gummel foi maior que nas outras condições, como mostra a Tabela 1. Isso ocorre porque ao resolvermos o sistema pelo método do gradiente bi-conjugado sem pré-condicionamento, o método atinge o limite máximo de iterações estabelecido (8000) sem convergir. Assim, uma iteração do método de Gummel é concluída com um erro muito grande, e como este fato ocorre várias vezes, o método leva mais tempo e um maior número de iterações para convergir. Ao pré-condicionarmos as matrizes, o tempo e o número de iterações reduzem de maneira excepcional, como pode ser observado na Tabela 2.

Tabela 2: Número de iterações realizadas para o sistema convergir à partir das condições iniciais, com o sistema pré-condicionado.

Vd	Condição 1	Condição 2	Condição 3
0.2	33	33	33
0.4	58	52	52
0.6	97	90	84
0.8	126	104	64
1.0	145	112	55
1.2	161	118	51
1.4	176	123	48

Tabela 3: Comparação do número de iterações com e sem pré-condicionamento.

Vd	Sem condicionamento	Com condicionamento
	iterações	iterações
0.2	38	34
0.4	64	44
0.6	137	64
0.8	206	52
1.0	500	46
1.2	368	44
1.4	162	41

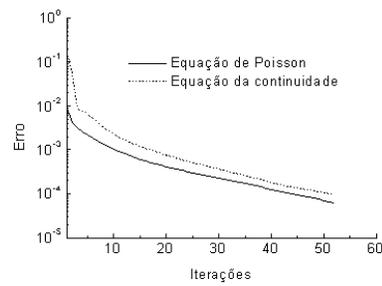


Figura 6: Erro em cada iteração para o sistema com pré-condicionamento.

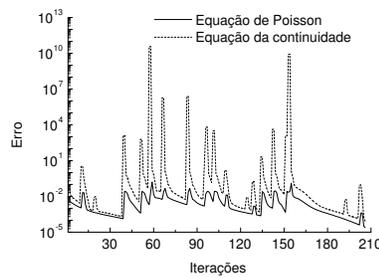


Figura 7: Erro em cada iteração para o sistema sem pré-condicionamento.

Considerando a condição 3, visto que ela apresentou um melhor desempenho e aplicando uma tensão de $-3.0V$ na porta, tem-se os resultados apresentados pela Tabela 3. Ao aumentarmos em módulo os valores das tensões na porta, diminui-se o valor da corrente elétrica no dispositivo, o que dificulta a simulação para estas tensões. Na simulação de dispositivo semicondutores, o que ocorre é que na resolução da equação da continuidade (3.2), a função C , (3.3), pode retornar valores, em módulo, muito grandes na matriz dos coeficientes, o que a torna mal-condicionada, dificultando a resolução do sistema pelo método do gradiente bi-conjugado. Se o Bi-CG converge rapidamente, consequentemente, o método de Gummel também converge, mas se, ao contrário, o Bi-CG atinge o limite pré-definido de iterações máxima sem alcançar a convergência, isso significa que uma iteração do método de Gummel foi concluída com erro muito grande, tendo um grande custo computacional e também um tempo muito maior de simulação. Assim, com o pré-condicionamento, o sistema converge diretamente para a solução das equações, e o erro é sempre decrescente, como podemos verificar na Figura 6, diferente do que ocorre no sistema sem pré-condicionamento, Figura 7. Não somente o número de iterações diminui, como o tempo, que na verdade é o principal ganho para esse tipo de simulação que, geralmente, demandam muito tempo. A redução chega a ser de 95% do tempo para

a convergência do sistema sem o condicionamento das matrizes.

8. Conclusão

A escolha de uma condição inicial adequada contribui, efetivamente, para que se chegue ao resultado de forma mais rápida, o que para simulação de dispositivos semicondutores é muito importante, já que diminui consideravelmente o tempo de simulação. Contudo, no caso do pré-condicionamento, não só diminui o número de iterações e o tempo, como também, garante a convergência dos métodos numéricos.

Abstract. In semiconductor device simulations it can be obtained equation systems with matrices that possess the following properties: high dimensions, sparsity, asymmetry and ill-conditioning. In this work we have studied how this system solution is affected by the system preconditioning and which is the better initial condition in order to guarantee the convergency with few iterations.

Referências

- [1] E.A.B. Cole e C.M. Snowden, Numerical algorithms for modelling microwave semiconductor device, *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, **8** (1995), 13-27.
- [2] J.H. Ferziger, “Numerical Methods for Engineering Application”, Wiley-Interscience, New York, 1998.
- [3] J.M. Golio, “Microwave MESFETs and HEMTs”, Artech House, Boston, 1991.
- [4] H.K. Gummel, A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations, *IEEE Transaction Electron Device*, **11** (1964), 455-465.
- [5] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling e B.P. Flannery, “Numerical Recipes in Fortran”, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [6] C.M. Snowden, “Semiconductor Device Modelling”, Springer-Verlag, Londres, 1989.
- [7] K.F. Vaz, F.A.P. Osório, A.N. Borges e P.C.M. Machado, ‘Atomistic’ simulation of ultra-submicron MESFETs, *Microelectronics Journal*, **34** (2003), 599-602.