

ESTUDIOS SOBRE DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS Y MATERIALES

Peltzer y Blancá Eitel L.^{1,2}, Cappelletti Marcelo A.^{1,2}, Cédola Ariel P.¹ y Napán Maldonado Rocío P.¹

¹Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos, GEMyDE
Departamento de Electrotecnia, Facultad de Ingeniería, UNLP
Calle 48 y 116, 1er piso, La Plata

²Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB), 59Nº 789 - CONICET
Email: eitelpyb@ing.unlp.edu.ar

Palabras Claves: modelización, modelos de primeros principios, semiconductores, fotodiodos, radiación.

Resumen

El desarrollo de modelos numéricos que brinden conocimientos previos sobre propiedades, tanto de materiales como de dispositivos electrónicos, es de suma importancia en la actualidad. El notable incremento de la capacidad de cómputo ha hecho posible desarrollar complejos códigos de computadora que permiten implementar estos modelos. Para ello se resuelven ecuaciones básicas cuyas soluciones posibilitan realizar predicciones con una gran precisión. El estudio de las propiedades microscópicas de materiales y dispositivos lleva a dos puertos, en primer lugar, a entender los procesos microscópicos que ocurren dentro de estos y segundo, a predecir el comportamiento macroscópico que pueden presentar. Además, permiten acceder a un conocimiento que muchas veces desde el punto de vista experimental es imposible de obtener. La gran virtud de este tipo de emprendimiento es que se pueden desarrollar, tanto materiales que presenten propiedades determinadas, como así también dispositivos basados en nuevos materiales que muestren comportamientos apropiados para una determinada función, denominados dispositivos de diseño.

INTRODUCCIÓN

En su forma más común, uno hace referencia y usa la palabra “modelo” para referirse a una versión simplificada y estilizada de una parte del mundo real, la cual estamos interesados en describir. Una pregunta que podríamos hacer es: ¿Qué clase de entidad son los modelos? En este punto las opiniones divergen. Algunos enfocan sobre aspectos formales de los modelos viéndolos como ecuaciones o un conjunto de estructuras teóricas, mientras que opuesto a este punto de vista, están los que los piensan como entidades abstractas (no matemáticas). Lo expuesto nos lleva necesariamente a hacernos otra pregunta, no pensándolos como entidades abstractas, ¿Por qué tenemos modelos numéricos de sistemas reales? Las respuestas son variadas, acorde a la rama de la ciencia que se trate. La complejidad de estudiar un determinado fenómeno con todos sus efectos, es a veces tan grande que hace imposible explicarlos completamente. Las teorías en muchos casos se vuelven extremadamente complejas y el desarrollo de un modelo aporta a su clarificación. Cuando se analiza a un sistema al cual se lo trata experimentalmente, intentando obtener un conjunto de parámetros propios, no siempre es posible alcanzar, dentro de él, cualquier posición, en cambio un modelo numérico, sí lo puede hacer. El resultado de un experimento, donde se desarrollan un conjunto de fenómenos, es la suma de todos los aportes realizados por los diferentes efectos, que aparecen como una cantidad única. Los modelos numéricos pueden desentrañar cada una de las componentes que constituyen el valor mencionado, mostrando claramente su procedencia y su aporte al valor total. Esto nos brinda el peso con que cada parte contribuye al resultado final.

La llave para entender el sistema modelado yace en el desarrollo de modelos satisfactorios que representen lo más aproximadamente posible al sistema que se desea estudiar. Es bien sabido

que la física no estudia la naturaleza sino modelos de ella. De acuerdo a nuestra descripción es claro que la importancia de los modelos numéricos aumenta a medida que aumenta la complejidad de los sistemas a tratar. Pero estos no son la “panacea”, el remedio para todas las enfermedades, sino que debemos entender que ellos son una aproximación, una idealización de un problema real, el cual debe ser profundamente entendido y justificado en el desarrollo del modelo.

En la actualidad una infinidad de modelos numéricos son utilizados, modelos meteorológicos, con los cuales se puede predecir el clima utilizando las ecuaciones de Navier-Stokes. Modelos estadísticos, utilizados para determinar las tendencias de la economía, el crecimiento de ciudades, la salud de la población, etc. Modelos fluviales, o marítimos, para conocer el movimiento de un río, o el movimiento de sedimentos en un río o en el mar, etc. Modelos portuarios, para conocer el movimiento de sedimentos dentro del puerto y determinar frecuencias de dragado o conocer el oleaje que pueden soportar la estructura del puerto, etc. Modelos de mareas, etc. El increíble avance logrado por los medios de cómputo, los procesadores cada vez más rápidos y rutinas de cálculo cada vez más eficientes, han hecho posible avanzar sobre sistemas cada vez más grandes y complejos, eliminando aproximaciones y pareciéndose cada vez más a los sistemas reales.

En el presente trabajo deseamos desarrollar dos modelos particulares sobre los cuales se ha trabajado, uno de ellos apunta a la modelización de materiales, y la otra a la de dispositivos electrónicos.

MODELIZACIÓN DE MATERIALES

La modelización de un material en nuestro caso, se la plantea para obtener un mejor conocimiento de su comportamiento microscópico, estos determinan la respuesta macroscópica del material.

Los modelos pueden plantearse en dos grandes grupos, los empíricos y los de primeros principios. Los empíricos involucran la participación de datos experimentales en el cálculo. En el caso de los modelos de primeros principios, estos no los necesitan. Los modelos empíricos tienen una fuerte limitación, no se pueden obtener resultados con errores menores que los datos experimentales utilizados. Por otro lado, con ellos no se pueden hacer predicciones que estén fuera del rango de validez del parámetro introducido. El otro tipo de modelo que mencionamos es el de primeros principios. Este resuelve ecuaciones fundamentales, la ecuación de Schroedinger, sin la inclusión de datos experimentales. Esta circunstancia le da una potencialidad muy grande, la cual ha sido corroborada por la experiencia, su poder predictivo, ya que reproduce las tendencias físicas de un sistema con una precisión muy grande. Los modelos de primeros principios que se utiliza, el Full Potential Linear Augmented Plane Waves [1], es una herramienta muy poderosa para obtener propiedades de sólidos cristalinos con mucha precisión. El problema se ataca desde sus constituyentes básicos de los sólidos, los átomos. Este modelo divide al espacio de un sólido en esferas que rodean a los átomos y un espacio intersticial entre ellos, como puede verse en la figura 1.

Dentro de las esferas I la solución de la ecuación de Schroedinger son armónicos esféricos y funciones radiales, mientras que en la zona II, las soluciones son ondas planas. Ambos conjuntos de funciones se empalman apropiadamente sobre los bordes de las esferas conformando una función de onda para todo el sólido. El sistema numérico se debe resolver en forma iterativa, hasta lograr la autoconsistencia de la solución. La ecuación de Schroedinger consta de dos términos, uno debido a la energía cinética y el otro a la potencial. Este último se

construye a partir de potenciales atómicos y se va desarrollando hacia el potencial del cristal a medida que transcurre el cálculo.

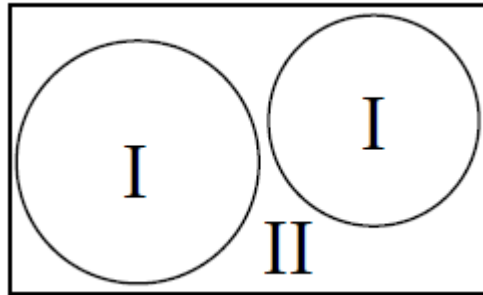


Fig.1

Los ejemplos de aplicación son numerosos, se han realizado cálculos sobre diferentes compuestos buscando diferentes propiedades. Algunos de los materiales que hemos estudiados han sido: β -Sn, SnO_2 , SnO, PbTe, PbSe, FeX (X=Sc, Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu y Zn), γ' - Fe_4N , GaFe_3N , LiH, LiH_2 , LiH_4 , BeH, BeH_2 , BeH_4 , TiC, etc. entre estos hay semiconductores, metales, materiales magnéticos etc. con aplicaciones a la electrónica fundamentalmente, véase como ejemplo el caso del γ' - Fe_4N [2], pero también se han estudiado materiales utilizados como reservorios de hidrógeno, para herramientas de corte, etc. Algunos de ellos aun no han sido creados por el hombre, no obstante ello, por medio de estas herramientas pueden ser estudiados con mucha precisión y determinadas sus propiedades, lo cual es un mecanismo de decisión muy importante.

El material que hemos de desarrollar como ejemplo de aplicación es el TiC (titanio carbono), este es un cerámico extremadamente duro y refractario, utilizado en herramientas. Su estructura es cúbica (Fig.2) como la del cloruro de sodio (sal), con un grupo espacial Pm-3m (225, B1). Los cálculos se desarrollan con la finalidad de obtener la energía total en función del volumen. A partir del ajuste de la curva E vs. V (Fig.3) con la ecuación de estado de Birch-Murnaghan [3] se obtienen parámetros pertenecientes al sistema como la constante teórica de equilibrio, el módulo de Bulk (inversa del módulo de compresibilidad), su derivada con respecto a la presión, etc.

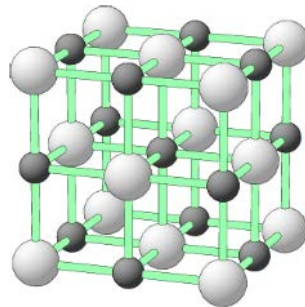


Fig.2.

Como mencionamos previamente $a_{\text{exp}} = 4.328\text{\AA}$ (8.179au) [4, 5], mientras que la calculada teóricamente que hemos obtenido es: $a_{\text{teo}} = 4.267\text{\AA}$ (8.063au). El error obtenido con respecto al valor experimental es del 1%.

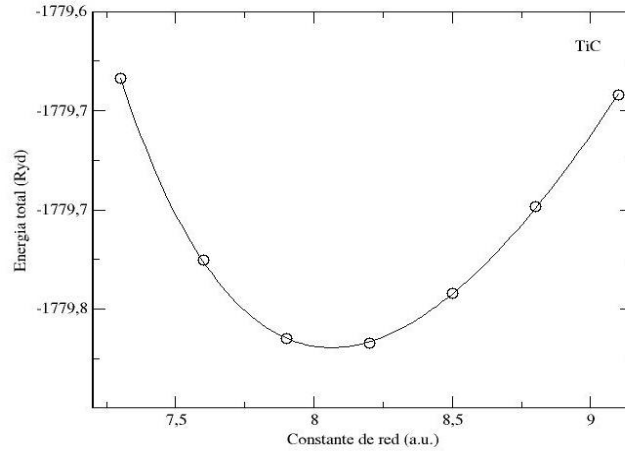


Fig.3

Como parte del cálculo realizado se puede obtener el estado de ocupación (DOS) de cada uno de los orbitales que participan en el compuesto en función de la energía (Fig.4).

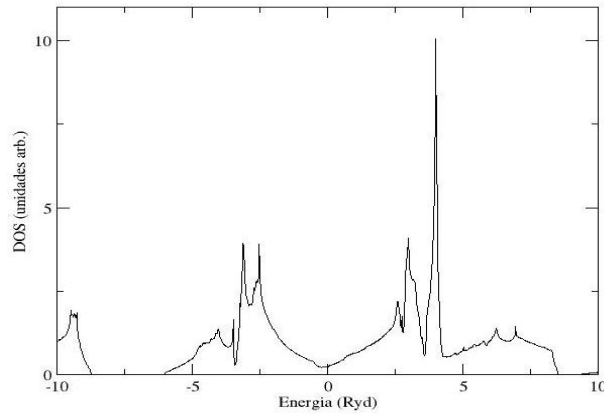


Fig.4.

Como así también la estructura de bandas (Fig.5), donde describe el comportamiento energético de cada uno de los electrones que posee el compuesto, esta estructura es su “huella dactilar”, la cual es única y lo identifica plenamente.

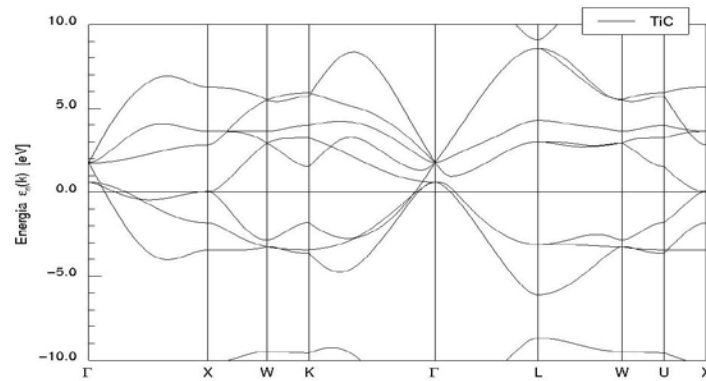


Fig.5.

A partir de estos cálculos y con las herramientas que hemos mencionado, se puede determinar

si un compuesto, cualquiera sea él, es un metal, un semiconductor o un aislante. Finalmente dentro de nuestro cálculo también es posible determinar la distribución de cargas electrónicas en cada uno de los planos cristalinos, en nuestro trabajo hemos elegido el plano [110] (Fig.6).

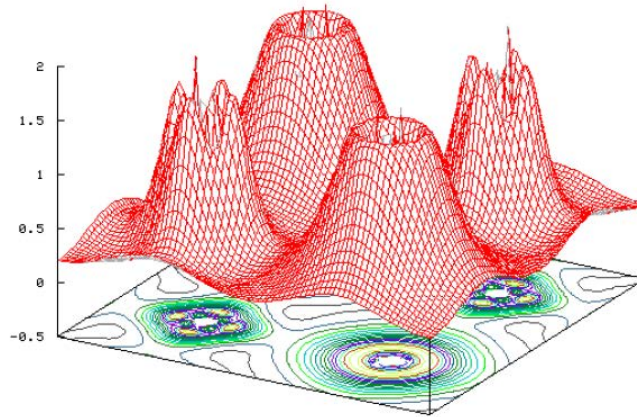


Fig.6

MODELIZACIÓN DE DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS

Una de las principales razones para que los materiales semiconductores sean utilizados en aplicaciones electrónicas de manera eficiente, es la variación que presentan en su conductividad eléctrica, lo cual influye de un modo directo en la capacidad del dispositivo para conducir corriente eléctrica. La conductividad es generalmente sensible a la temperatura, la iluminación, campo eléctrico, campo magnético y cantidades pequeñas de átomos de impurezas.

Si bien el análisis de manera experimental, para estudiar el comportamiento de los dispositivos electrónicos bajo determinadas circunstancias de funcionamiento, es altamente deseable, muchas veces se ve limitado, ya sea debido al alto costo económico, o a la dificultad y el tiempo que requiere la realización de este tipo de ensayos.

El desarrollo de modelos numéricos satisfactorios que representen los procesos físicos involucrados en la operación de los dispositivos electrónicos, constituye por lo tanto una herramienta fundamental para estudiar y caracterizar a los dispositivos con una gran precisión, rapidez y a un costo mucho menor.

Los modelos a los cuales hacemos referencia corresponden a la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad para electrones y huecos. La primera, describe la variación del potencial electrostático a través del semiconductor debido a la distribución de la densidad de carga neta en el material. Por su parte, las ecuaciones de continuidad describen la evolución en el tiempo de las densidades de portadores debido al transporte de carga y a los procesos de recombinación-generación. Estas ecuaciones incluyen a su vez los modelos matemáticos de los mecanismos de arrastre y difusión de portadores, los cuales relacionan los procesos físicos y eléctricos involucrados en los dispositivos.

A partir de la modelización y la simulación numérica es posible reproducir resultados experimentales y predecir el comportamiento de dispositivos aún no desarrollados frente a una inmensa gama de estímulos. Esto resulta muy útil para diseñar y desarrollar dispositivos con características especiales, que presenten por ejemplo un desempeño optimizado frente a aplicaciones específicas.

Utilizando los modelos matemáticos mencionados anteriormente, hemos desarrollado nuestro propio código de simulación por computadora para el análisis de dispositivos, en particular, fotodiodos y celdas solares (Fig.7). El código generado resuelve numéricamente las ecuaciones con condiciones de contorno apropiadas mediante el método de diferencias finitas. Los valores de parámetros físicos tales como tiempos de vida media y movilidades de portadores, son obtenidos a partir de mediciones experimentales.

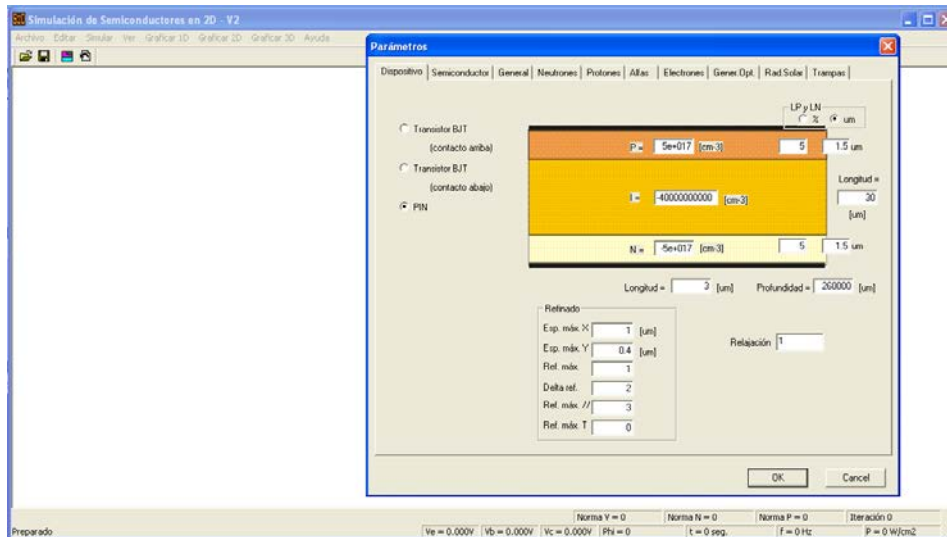


Fig.7.

A través del código de simulación desarrollado hemos estudiado el comportamiento de fotodiodos de silicio bajo los efectos de la radiación espacial y lumínica. El medio ambiente de radiación espacial degrada a los dispositivos que componen sistemas en órbita, originándole daños que los pueden conducir a un mal funcionamiento. En este caso, el análisis experimental in situ o en un ambiente de operación similar, resultaría muy beneficioso. Sin embargo, el enorme costo económico que implicaría llevar a cabo una misión espacial, o efectuar ensayos con aceleradores de partículas de altas energías, hacen que el estudio de los dispositivos electrónicos mediante modelos numéricos y simulación sea una alternativa más que conveniente para poder predecir su respuesta bajo los efectos de la radiación espacial.

El estudio llevado a cabo nos ha permitido diseñar dispositivos con mayor tolerancia a la radiación, con el objetivo de volverlos inmunes a eventos que puedan disminuir su confiabilidad, asegurando de esta manera su correcto funcionamiento durante el ciclo de vida completo del sistema.

Una de las principales contribuciones que hemos realizado en este campo es la determinación de parámetros nunca antes presentados en la literatura, como son la potencia lumínica umbral (LIT: Light Intensity Threshold) [6, 7], el espesor de la región intrínseca umbral (IRTT: Intrinsic Region Thickness Threshold) [8] y la polarización inversa umbral (RBT: Reverse Bias Threshold) [9] para fotodiodos PIN y PN de silicio. El LIT es el valor de la potencia lumínica incidente para la cual la degradación debido a la irradiación con protones de la corriente total de un fotodiodo PIN, con una región intrínseca de espesor igual a IRTT, es despreciable (Fig.8).

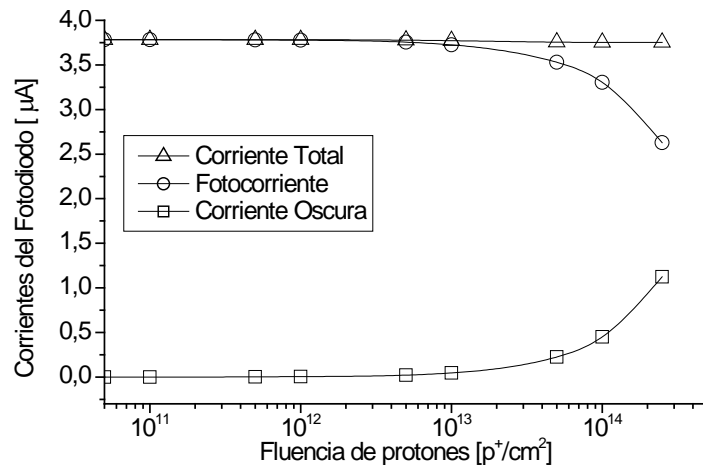


Fig.8.

Cada valor de LIT está asociado a un único valor de IRTT, y a un único valor de RBT en el caso de fotodiodos PN. El RBT corresponde a la polarización inversa aplicada a un fotodiodeo PN de modo que, trabajando bajo una potencia lumínica igual a LIT, la variación de la corriente total del dispositivo sometido a la radiación de protones es prácticamente nula.

Si bien las componentes de la corriente total de los fotodiodos, la fotocorriente y la corriente oscura, sufren cambios producto de la radiación, estos cambios son compensados como resultado de la aplicación de los parámetros hallados a través de las simulaciones, lográndose que el punto de operación del dispositivo no varíe aún siendo expuesto a trabajar en un medio ambiente tan hostil como el espacial.

En un trabajo reciente [10] se propuso un método iterativo para diseñar fotodiodos PIN de silicio con una mayor tolerancia a la radiación de protones y con una máxima respuesta a la iluminación. El método es rápido y simple de implementar. Permite calcular los valores óptimos del espesor de la capa intrínseca y de la longitud de onda de la luz incidente, en función de la potencia lumínica y la máxima fluencia de protones que se prevé afectará al dispositivo analizado. El método es útil para el diseño de dispositivos a ser usados en misiones espaciales, lo que representa un aporte importante para la industria de semiconductores de uso espacial.

Otra contribución importante es la obtención de expresiones analíticas que posibilitan el análisis de características esenciales de los dispositivos estudiados, de manera simple y en función de escasos parámetros. Estas expresiones son sumamente útiles, por ejemplo, en la aplicación de fotodiodos como dosímetros. Además, son aptas para su inclusión en modelos de dispositivos utilizados en programas de simulación de circuitos electrónicos tipo SPICE.

Entre los modelos analíticos propuestos, se destacan los siguientes: Variación de la corriente total de fotodiodos PIN en función de la fluencia de radiación incidente (protones y neutrones), dimensiones del dispositivo e intensidad lumínica [6]; variación de la corriente oscura de fotodiodos PIN en función de la fluencia de radiación y el espesor de la región intrínseca [7]; responsividad y longitud de onda máximas en función de las dimensiones del fotodiodeo [7]; variación de la corriente oscura de fotodiodos irradiados con neutrones, en función de la posición del nivel de trampa profunda dominante en la banda prohibida [11].

El estudio a través de simulaciones del efecto de las trampas profundas sobre la respuesta a la

radiación de los fotodiodos analizados, constituye otro importante aporte del grupo en la búsqueda de métodos para inmunizar dispositivos basados en silicio. La figura 9 muestra como a mayores densidades de dopado con átomos de oro, los fotodiodos ofrecen una mayor resistencia a los efectos irreversibles de la radiación.

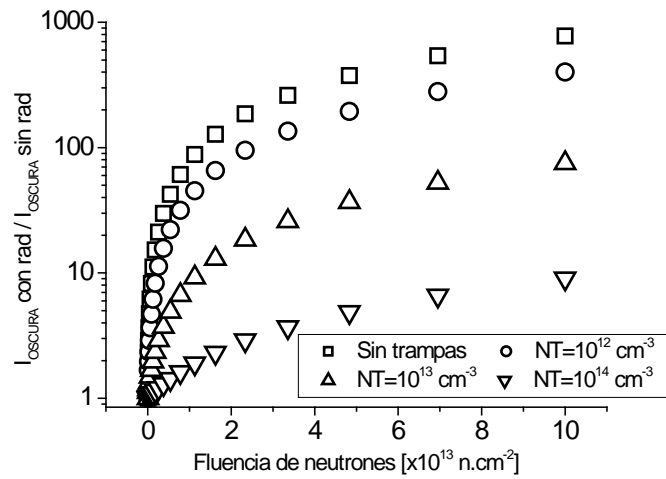


Fig.9.

CONCLUSIONES

Queda claro, que con la simulación y modelización numérica se pueden atacar innumerables problemas, aportando a un conocimiento que de otra manera sería difícil de alcanzar. La modelización de dispositivos brinda la facilidad de reproducir su comportamiento en medioambientes que son difíciles de reproducir en la realidad, lugares como el espacio exterior, etc. Por otro lado, la modelización de materiales no solo permite conocer en forma muy precisa propiedades, a veces, difíciles de obtener experimentalmente, sino que nos permite determinar propiedades de materiales no existentes en la actualidad.

Bibliografía

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, (Karlheinz Schwarz, Techn. Universit"at Wien, Austria), 1999, ISBN 3-9501031-1-2.
- [2] E. L. Peltzer y Blancá, J. Desimoni, N. E. Christensen, H. Emmerich, S. Cottenier. *Physica Status Solidi*, **246**, 5, 906-928(2009)
- [3] F. Birch, *Phys. Rev.* 71(11), 809–824 (1947).
- [4] P. Schwarzkopf and R. Kieffer, *Refractory Hard Metals* (The Macmillan Company, New York, 1953), Chap. 5, p. 67.
- [5] L.E. Toth, *Transition Metal Carbides and Nitrides*, Academic Press, New York, 1971.
- [6] M.A. Cappelletti, U. Urcola y E.L.Peltzer y Blancá, *Semic. Sci. Tech.* 21, 346 (2006).
- [7] M.A. Cappelletti, A.P. Cédola y E.L. Peltzer y Blancá, *Semic. Sci. Tech.* 23, 025007 (2008).
- [8] M.A. Cappelletti, A.P. Cédola y E.L. Peltzer y Blancá, *Proc. ISDRS 2007 Symposium*, ISBN 978-1-4244-1892-3.
- [9] A.P. Cédola, M.A. Cappelletti y E.L. Peltzer y Blancá, *Journal of Electronic Testing: Theory and Applications*. Enviado Septiembre 2010 (paper invitado).
- [10] A.P. Cédola, M.A. Cappelletti, G. Casas y E.L. Peltzer y Blancá, *Nucl. Instr. and Meth. A*, 629, 392 (2011).
- [11] M.A. Cappelletti, A.P. Cédola y E.L. Peltzer y Blancá, *Semic. Sci. Tech.* 24, 105023 (2009).