

Este exemplar corresponde à redação final da tese
defendida por GUIDO COSTA SOUZA
DE ARAÚJO e aprovada pela Comissão
Julgadora em 10 / 10 / 90.
Bern Waldman
Orientador

Simulação Bidimensional de Dispositivos MOSFET¹

Guido Costa Souza de Araújo² *Guido*

Orientador: Prof. Dr. Bernard Waldman³

Departamento de Eletrônica e Microeletrônica

FEE - UNICAMP

10/10/90

¹Dissertação apresentada na Faculdade de Engenharia Elétrica da Unicamp, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

²O autor é formado em Engenharia Elétrica pela Universidade Federal de Pernambuco, e é Professor Auxiliar do Departamento de Ciência da Computação - IMECC - UNICAMP

³Professor do Departamento de Eletrônica e Microeletrônica - LED - FEE - UNICAMP.

“Quase todos os homens desconhecem igualmente
sua exata liberdade e sua verdadeira servidão.”

Memórias de Adriano, Marguerite Yourcenar

*A Silvana,
meus pais,
e meus irmãos.*

Agradecimentos

Na realização deste trabalho muitas pessoas nos ajudaram direta ou indiretamente. Em ordem alfabética:

Antônio Gonçalves de quem recebi valiosas sugestões sobre a preparação das figuras. Prof. Claudio Carvalho pelo apoio na elaboração da redação em \LaTeX . Katherine Sales, a quem devo parte da revisão ortográfica dos primeiros esboços. Prof. Dr. Petrónio Pulino pelas discussões sempre muito proveitosas sobre a aplicação de técnicas de simulação numérica a equações diferenciais. Aos colegas do DCC – IMECC que possibilitaram uma atmosfera de trabalho estimulante e criativa.

Em especial desejaria expressar meu reconhecimento ao Prof. Dr. Bernard Waldman, meu orientador, pelas discussões técnicas e filosóficas que permitiram que este trabalho se desenvolvesse a contento.

SUMÁRIO

Com a drástica diminuição das dimensões nas novas gerações de transistores MOS VLSI, um aumento considerável de efeitos dimensionais no comportamento destes dispositivos tem surgido. Isto traz como consequência imediata, a impossibilidade de utilização dos modelos clássicos analíticos no projeto e no estudo destes transistores. A proposta deste trabalho é a de desenvolver um simulador bidimensional para transistores MOSFET de canal curto, que permita uma caracterização precisa destes dispositivos em equilíbrio termodinâmico. Nesta situação, a influência de efeitos dimensionais sobre V_T pode ser melhor estudada, possibilitando assim a obtenção de uma primeira aproximação para o projeto destes dispositivos.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Modelos de Dispositivos Semicondutores	3
2.1	Projeto e Modelamento	3
2.2	Modelos de Circuito Equivalente	5
2.3	Modelos Físicos Analíticos	6
2.4	Modelos Físicos Numéricos	7
2.5	Evolução Histórica	8
3	Dispositivo MOSFET	12
3.1	Histórico	12
3.2	Estrutura do MOSFET	13
3.2.1	Implantação iônica	15
3.2.2	Difusão	17
3.2.3	Implantação e recozimento	18
3.2.4	Exemplos	21
3.3	Modelo Físico	22
3.3.1	Equação de Poisson	22
3.3.2	Equações da continuidade	25
3.3.3	Equação de transporte dos portadores	28
3.4	Normalização das Equações	31
3.5	Condições de contorno	32
3.5.1	Contatos ôhmicos	33
3.5.2	Fronteiras artificiais	35
3.5.3	Interface semicondutor-isolante	36
4	Discretização das Equações Básicas	37
4.1	Considerações Gerais	37
4.2	Técnicas de Discretização	39

4.2.1	Método de diferenças-finitas	39
4.2.2	Elementos-finitos	41
4.3	Discretização da Equação Geral $div \vec{F} = g$	42
4.4	Discretização da Equação de Poisson	48
4.5	Discretização da Equação de Continuidade	50
4.5.1	Análise da variação de n e p com ψ	53
4.5.2	Determinação de aproximações para n , p e suas derivadas	57
4.5.3	Determinação das aproximações para as equações da continuidade	59
4.5.4	Implementação numérica da função de Bernoulli	60
4.6	Discretização das Condições de Fronteira	62
4.6.1	Contatos ôhmicos	62
4.6.2	Fronteiras artificiais	63
4.6.3	Interface semiconductor-isolante	68
5	Simulação em Equilíbrio Termodinâmico	72
5.1	Modelo Físico do Equilíbrio	72
5.2	Especificação do Problema Matemático	73
5.2.1	Método de Newton	74
5.2.2	Enumeração da malha	76
5.2.3	Solução do sistema $A.\psi = B$	77
5.2.4	Iteração Newton/SOR Inexata	80
5.3	Exemplos de Simulação	82
6	Conclusão	93
A	Programa DOPMOS	96
B	Convergência do sistema linear $A.\psi = B$	119
C	Programa EQMOS	121

Tabela de Símbolos

$A_{\partial R_{i,j}}$	elemento de área
D	coeficiente de difusividade
\vec{D}	vetor deslocamento elétrico
D_0	coeficiente da equação de Arrhenius
D_I	dose da implantação iônica
D_n	constante de difusão para elétrons
D_p	constante de difusão para lacunas
E	campo elétrico
E	energia
\vec{E}	vetor campo elétrico
E_a	energia de ativação
\vec{F}_{ext}	força externa
\vec{H}	vetor campo magnético
I	distribuição do perfil de impurezas implantadas
I_D	corrente de dreno
\vec{J}	vetor densidade de portadores
L	comprimento do canal projetado do MOSFET
L_D	comprimento de Debye
L_{ef}	comprimento efetivo do canal do MOSFET
N	concentração de impurezas
Q_{int}	carga armadilhada na interface semiconductor-isolante
R	taxa de geração-recombinação de rede
R_p	distância projetada da implantação iônica
R_{sup}	taxa de recombinação superficial
S	inclinação de sub-limiar ($= \partial I_D / \partial V_G$)
T	temperatura absoluta
U_t	tensão térmica ($= k.T/q$)
V_D	potencial aplicado ao dreno
V_G	potencial aplicado a porta

V_S	potencial aplicado a fonte
V_T	potencial de limiar
W	abertura na máscara de implantação
W	largura do dispositivo MOSFET
W_D	largura da região de depleção do dreno
W_S	largura da região de depleção de fonte
d_{iso}	espessura do isolante da porta
h	constante de Planck ($= 6.626176 \times 10^{-34} \text{ J.s}$)
\vec{k}	vetor momentum
k	constante de Boltzmann ($= 1.380662 \times 10^{-23} \text{ J/K}$)
n	densidade volumétrica de elétrons
n_i	concentração intrínseca
n_x	número de linhas de discretização paralelas a direção y
n_y	número de linhas de discretização paralelas a direção x
\vec{n}	vetor normal
p	densidade volumétrica de lacunas
q	carga elementar ($= 1.6021892 \times 10^{-19} \text{ C}$)
r_j	profundidade da junção de fonte e dreno
\vec{s}	vetor posição espacial
t	tempo
\vec{v}_n	velocidade média de deslocamento dos elétrons
\vec{v}_p	velocidade média de deslocamento das lacunas
∂C_{ij}	fronteira do sub-domínio ∂R_{ij}
∂R_{ij}	sub-domínio de discretização
ϵ_0	permissividade elétrica no vácuo ($= 8.854187818 \times 10^{-12} \text{ F/m}$)
ϵ_{iso}	permissividade elétrica do isolante
ϵ_{sem}	permissividade elétrica no semicondutor
ϕ_F	potencial associado ao nível de Fermi
ϕ_n	potencial associado ao nível quasi-fermi para elétrons
ϕ_p	potencial associado ao nível quasi-fermi para lacunas
ϕ_S	potencial na interface semicondutor-isolante
μ_n	mobilidade dos elétrons
μ_p	mobilidade das lacunas
ψ	potencial elétrico
ψ_b	potencial de contato
ψ_c	potencial externo aplicado ao contato
ρ	densidade volumétrica de carga elétrica
σ_p	desvio padrão

Capítulo 1

Introdução

Uma observação em profundidade da última década, pode nos mostrar que o ritmo desenvolvido pela pesquisa em microeletrônica continua crescente. Novos dispositivos semicondutores, mais complexos e velozes, estão sendo propostos e estudados. Por outro lado, processos tecnológicos avançados, envolvendo técnicas de manipulação da matéria cada vez mais audaciosos, continuam surgindo aceleradamente.

A velocidade vertiginosa com que estas novas tecnologias estão despontando, traz consigo, entretanto, algumas consequências que ainda não foram devidamente avaliadas. Dentre estas consequências duas parecem, sob nosso ponto de vista, se destacar pela sua importância e pelo papel que poderão desempenhar no futuro.

A primeira diz respeito à necessidade de novos modelos físicos que nos permitam compreender em profundidade o funcionamento destes dispositivos. Nesta linha, têm-se estudado a utilização de teorias baseadas nas aproximações semi-clássicas de Boltzmann e na teoria de transporte quântico.

A segunda consequência está relacionada à incapacidade das equações analíticas, derivadas de modelos clássicos, preverem com exatidão o comportamento destes novos dispositivos. Durante muito tempo, o projeto dos dispositivos semicondutores prescindiu de modelos que descrevessem detalhadamente a física do seu funcionamento. Isto porque, os primeiros dispositivos semicondutores possuíam dimensões suficientemente grandes, o que permitia a utilização de modelos simplificados que levavam a equações analíticas simples e de fácil manipulação. Estas aproximações eram realizadas, devido à impossibilidade de se resolver analiticamente o sistema de equações básicas dos dispositivos semicondutores, ou seja: a equação de Poisson e as equações da continuidade para elétrons e lacunas. Por outro lado, a solução numérica deste sistema demandava um esforço

computacional muito além do que existia disponível na época.

Com o surgimento dos dispositivos sub-micrométricos, esta abordagem tornou-se completamente inócua. Desde que as dimensões destes dispositivos sejam muito reduzidas, um grande número de efeitos dimensionais não previstos pelas equações clássicas são verificados.

Em dispositivos MOSFET, por exemplo, a redução apreciável do comprimento de canal, quando comparado com a largura das regiões de depleção de fonte e dreno, acarreta um grande número de problemas, tais como: variação do potencial de limiar com a tensão de dreno, diminuição do controle da corrente de dreno pela tensão de porta, aparecimento de portadores quentes, etc

Torna-se claro, portanto, que somente a solução numérica do sistema de equações básicas poderá incorporar, de maneira natural, a presença de efeitos dimensionais no comportamento destes dispositivos. Além disto, o aumento considerável da velocidade dos novos computadores permite que obtenhamos soluções muito precisas em tempos relativamente curtos.

O objetivo deste trabalho é detalhar o modelo físico completo de um dispositivo MOSFET, resolver o problema da simulação bidimensional deste dispositivo em equilíbrio termodinâmico, e analisar alguns efeitos dimensionais resultantes da aplicação desta simulação a dispositivos de canal longo e curto.

O Capítulo 2 trata de relatar a evolução histórica e os vários modelos utilizados no estudo dos dispositivos semicondutores.

No Capítulo 3, procuramos detalhar a estrutura física dos dispositivos MOSFET, as equações básicas utilizadas no seu modelamento, e as condições de contorno relacionadas às fronteiras do dispositivo com o meio que o cerca.

A discretização das equações básicas e das condições de fronteira do MOSFET é feita no Capítulo 4, sendo válida para o dispositivo em situação de equilíbrio termodinâmico ou não.

O Capítulo 5 é dedicado à solução numérica das equações do MOSFET em equilíbrio termodinâmico. Nesta situação, o dispositivo pode ser descrito exclusivamente pela equação de Poisson, e os resultados obtidos são muito úteis como uma boa introdução para o estudo dos efeitos dimensionais em dispositivos sub-micrométricos. Ainda neste capítulo, determinamos a distribuição bidimensional de potencial para dispositivos de $5.0\mu m$ e $1.0\mu m$, investigamos o deslocamento do potencial de limiar resultante do encurtamento do canal, e discutimos as causas que levam ao surgimento de fenômenos de *punchthrough* em dispositivos de canal curto.

O Capítulo 6 resume as principais conclusões obtidas, e faz algumas sugestões de como utilizar este trabalho em futuras pesquisas sobre simulação de dispositivos MOSFET's.

Capítulo 2

Modelos de Dispositivos Semicondutores

2.1 Projeto e Modelamento

O método geral de projeto na área de dispositivos semicondutores, pode ser dividido em duas fases. Numa primeira fase, o projeto do dispositivo é realizado tomando-se como base o desempenho desejado para o mesmo. São extraídos do projeto, então, parâmetros tecnológicos que serão utilizados nas etapas de fabricação do dispositivo.

Numa segunda fase, as características elétricas do dispositivo fabricado são medidas, de modo a estimar o seu desempenho. Uma comparação entre o desempenho obtido e aquele que foi projetado será realizada, e de acordo com o resultado, o projeto do dispositivo será eventualmente modificado. Esta mudança no projeto resultará em novos parâmetros tecnológicos, que serão utilizados numa nova fase de fabricação.

Este método de tentativas e erros está intimamente associado à impossibilidade, quase que absoluta, de que possamos realizar um controle completo sobre os parâmetros físicos que definem as etapas de fabricação dos dispositivos semicondutores.

Normalmente, uma vez alcançado o desempenho desejado para o dispositivo, são derivadas regras de projeto que serão repassadas aos projetistas de circuitos, de modo a ajudar a reduzir o número de interações necessárias às futuras gerações de dispositivos.

Daí a necessidade de modelos que possam descrever com precisão o processo de fabricação e o comportamento destes dispositivos. Uma vez que estes modelos

sejam capazes de prever adequadamente o funcionamento do dispositivo projetado, poderemos obter uma boa aproximação para o desempenho real do mesmo, minimizando assim, o número de etapas de tentativa e erro que serão necessárias durante sua fabricação.

De modo geral, podemos classificar os modelos físicos utilizados nos dispositivos semicondutores em dois grupos. Modelos voltados para o processo tecnológico de fabricação, e modelos usados para previsão do comportamento e do desempenho elétrico do dispositivo.

Modelos para processos tecnológicos como oxidação, implantação iônica, epitaxia e difusão foram extensamente estudados, podendo ser facilmente encontrados em pacotes de programas que dão resultados bem razoáveis, como por exemplo o SUPREM [Suprem 78].

Os modelos físicos usados no processo de fabricação de dispositivos, formam uma área extremamente vasta em microeletrônica que está além do objetivo deste trabalho. Procuraremos nos dedicar aqui, aos modelos físicos utilizados para descrever o comportamento dos dispositivos semicondutores, sob o ponto vista de seu funcionamento como um elemento de circuito eletrônico.

Os modelos físicos, tanto aqueles voltados para fabricação como os voltados para a operação de dispositivos, foram inicialmente utilizados nas suas formas mais simples, ou seja, fórmulas analíticas fechadas obtidas através da aproximação das equações que formavam os modelos.

Posteriormente, com a introdução de técnicas de simulação numérica baseadas em computadores, soluções mais precisas puderam ser obtidas. O surgimento da simulação de modelos físicos veio reduzir, substancialmente, os custos e os tempos necessários ao desenvolvimento de novos dispositivos. Através da possibilidade do projetista simular o processo tecnológico de fabricação e a operação do dispositivo resultante, tornou-se mais efetiva a manipulação dos parâmetros de projeto, permitindo assim, que após algumas etapas de simulação os objetivos do mesmo fossem atingidos. A idéia era simular, usando recursos computacionais, protótipos de dispositivos que levariam semanas para serem confeccionados, garantindo assim uma boa aproximação para o início do processo de fabricação.

Tomemos como exemplo um processo CMOS VLSI que envolva nove etapas de litografia, seis implantações iônicas e várias etapas de difusão, oxidação e recozimento¹. A simulação deste processo, e a determinação das características do dispositivo resultante, poderia ser realizada em matéria de alguns minutos a algumas horas. Por outro lado, um experimento real tomaria normalmente algumas semanas ou até meses.

¹Em inglês: *annealing*.

Obviamente, o número de incertezas nos parâmetros físicos dos modelos utilizados é muito grande. Ainda que a precisão obtida por estes modelos seja considerável, não podemos supor que a utilização de simulação nos leve à total eliminação das etapas de fabricação e caracterização.

Por outro lado, uma primeira aproximação para estes parâmetros, antes do início da fabricação propriamente dita, pode significar uma considerável redução no número de interações necessário. Alguns autores chegam a supor uma diminuição em torno de 40% [Selberherr 83], nos custos finais do projeto de um dispositivo semiconductor, se durante o mesmo a simulação for usada intensamente.

2.2 Modelos de Circuito Equivalente

De forma geral, podemos distribuir os modelos de dispositivos de estado sólido em dois grandes grupos: modelos de circuitos equivalentes e modelos físicos de dispositivos.

Os modelos de circuitos equivalentes são baseados no comportamento dos dispositivos, obtido através das características elétricas medidas entre seus terminais. A utilização destes modelos tornou-se bastante popular entre os projetistas de dispositivos e circuitos, devido à grande facilidade com que podem ser implementados, e à rapidez com que os resultados do desempenho elétrico dos dispositivos podem ser avaliados.

A obtenção de um modelo de circuito equivalente é feita através da determinação das relações entre os parâmetros físicos utilizados no processo de fabricação do dispositivo (dopagem, geometria, etc ...), e os elementos de circuito que formarão o modelo abstrato equivalente.

Com a evolução dos dispositivos, entretanto, novas estruturas mais poderosas surgiram, levando a operação dos dispositivos para regiões de altas frequências e fortes não-linearidades. A obtenção de elementos de circuito, para um modelo de circuito equivalente que incorporasse características de operação mais genéricas para polarização, não-linearidade, dependência da frequência de operação, etc..., tornou-se então uma tarefa extremamente difícil. Por este motivo, os modelos baseados em circuitos equivalentes tiveram sua aplicação limitada a alguns dispositivos específicos.

2.3 Modelos Físicos Analíticos

Os modelos baseados no equacionamento físico dos dispositivos utilizam as equações fundamentais da física dos semicondutores, ou seja as leis de Maxwell e as equações de transporte de Boltzmann. A partir destas leis, é determinado um conjunto de fórmulas que possibilitam uma descrição completa do funcionamento elétrico do dispositivo, independentemente das condições de operação às quais este estará sujeito.

A utilização de modelos físicos de dispositivos permitiu que as restrições na simulação de certos domínios de operação dos mesmos fossem eliminadas. Deste modo, simulações de dispositivos semicondutores utilizando modelos físicos têm sido realizadas, com o intuito de analisar desempenho em regimes dc, alta-frequência, transitórios, etc

Devido ao fato de que manipulam grandezas físicas fundamentais (campo elétrico, potencial elétrico, densidade de portadores, etc ...), os modelos físicos permitem ainda uma visão interna detalhada do funcionamento do dispositivo, dentro de uma ampla faixa de operação.

O objetivo imediato da adoção de modelos físicos para dispositivos semicondutores foi a procura de soluções analíticas fechadas que descrevessem com exatidão o seu funcionamento. Na prática, entretanto, em quase todos dispositivos semicondutores, as técnicas de análise que conduzem às equações para campo elétrico, distribuição de portadores, correntes e tensão, requerem aproximações, a fim de permitir que as equações de transporte dos portadores sejam resolvidas.

Sob o ponto de vista matemático, a solução analítica requer também um conhecimento aprofundado do comportamento físico do dispositivo. De outro modo, não seria possível a identificação de aproximações nas suas variáveis, que levassem à consequente simplificação de suas equações, e à posterior obtenção de uma solução analítica fechada.

Dispositivos com geometrias predominantemente verticais, como diodos, transistores FET's² de canal longo, células solares, etc..., podem ser analisados através de soluções analíticas produzindo boas aproximações. No entanto, este tipo de solução não é suficientemente precisa para descrever com exatidão o funcionamento de estruturas bidimensionais, como transistores MOSFET³ sub-micrométricos, onde os efeitos dimensionais tornam-se predominantes. No caso destes dispositivos, devem ser utilizadas simulações numéricas baseadas em modelos bi ou tridimensionais, elaboradas a partir das equações básicas dos semicondutores.

A utilização de modelos físicos tornou-se, já há algum tempo, uma técnica

²Em inglês: *Field Effect Transistor*.

³Em inglês: *Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor*.

padrão na análise e no projeto de dispositivos semicondutores. Por este motivo, adotaremos de agora em diante o termo *modelo* como um forma resumida para a expressão *modelo físico*.

2.4 Modelos Físicos Numéricos

A simulação de dispositivos semicondutores, a partir de modelos numéricos, surgiu nos últimos dez anos como um ferramenta extremamente poderosa na análise, e no projeto das novas gerações de dispositivos eletrônicos.

Conforme mencionamos anteriormente, a redução dos custos associada a utilização de técnicas de simulação é considerável. Podemos nos perguntar então, por quê somente mais recentemente o uso de simulação de processos e dispositivos se intensificou? As técnicas matemáticas para discretização e solução numérica de equações diferenciais, que regem o funcionamento dos dispositivos semicondutores, são relativamente antigas. Devemos observar entretanto que, apesar disto, os computadores daquela época não possuíam capacidade de realizar tais simulações em um tempo razoavelmente curto. Por outro lado, as dimensões utilizadas nos projetos daqueles primeiros dispositivos eram muito grandes, o que permitia uma solução analítica aproximada muito próxima do comportamento real do dispositivo, com um custo consideravelmente menor.

No entanto, a crescente demanda por dispositivos menores e mais velozes, aliada ao surgimento de modelos mais sofisticados para processos e dispositivos, tem feito com que as técnicas de simulação numérica venham ganhando um impulso considerável.

A redução drástica do tamanho dos dispositivos, tem aumentado a influência de efeitos bi e tridimensionais no comportamento dos mesmos, efeitos estes que não podem ser previstos através das soluções analíticas anteriormente utilizadas.

Deste modo, a solução analítica oferece uma aproximação adequada somente em dispositivos onde os efeitos dimensionais são considerados como desprezíveis. No caso de dispositivos MOSFET sub-micrométricos, por exemplo, a utilização de métodos numéricos na solução das equações é simplesmente obrigatório.

A obtenção da solução numérica, na simulação de um dispositivo semicondutor, requer que as equações básicas do dispositivo sejam discretizadas e linearizadas em cada ponto pertencente ao domínio da estrutura geométrica do dispositivo. Suponha, por exemplo, que se n é o número de equações que define o dispositivo, teremos então um conjunto de n equações algébricas e lineares aplicada a cada um dos m pontos que compõem a estrutura discretizada do dispositivo. Deste modo, criamos um sistema de $n \times m$ equações algébricas lineares,

que será resolvido através de qualquer método matemático conhecido.

Como é de se esperar, os resultados da simulação numérica não são equações que relacionam grandezas como campo elétrico, potencial e densidade de portadores em determinadas regiões do dispositivo. A simulação numérica permite-nos determinar valores para estas grandezas, em cada um dos pontos escolhidos no dispositivo.

Por outro lado, a necessidade de uma grande quantidade de pontos dentro da estrutura do dispositivo faz com que, para uma determinação precisa da solução, a simulação numérica precise de quantidades substanciais de tempo de computação e memória .

Em compensação, os resultados obtidos são extremamente precisos e permitem uma observação detalhada da distribuição das grandezas estudadas ao longo de toda a estrutura do dispositivo. Esta visão dos resultados possibilita uma análise bastante aprofundada dos efeitos da geometria e dos processos de fabricação no funcionamento final do dispositivo.

A tendência crescente de novos dispositivos com estruturas cada vez mais complexas e velozes, aliado ao crescimento do poder computacional dos novos computadores, apontam para um aumento considerável da importância da área de simulação de dispositivos dentro da microeletrônica.

2.5 Evolução Histórica

Conforme destacamos na Sec.2.3, os primeiros dispositivos semicondutores eram projetados através de resultados analíticos, obtidos por meio de soluções aproximadas das equações de Maxwell, e das equações de transporte de Boltzmann.

De uma maneira geral, o dispositivo era dividido em regiões nas quais eram realizadas aproximações lineares e definidas condições de fronteira apropriadas. Um exemplo clássico deste tipo de análise, foi o trabalho realizado por Shockley em artigo sobre os transistores unipolares [Shockley 62], onde foi introduzida a aproximação de canal gradual.

As soluções analíticas resultantes deste método, mostraram-se ser extremamente úteis para problemas de natureza unidimensional envolvendo dispositivos unipolares de grande geometria. Suas vantagens, como facilidade de implementação e simplicidade da análise, garantiram-lhe a aplicação em uma boa gama de dispositivos.

Entretanto, este tipo de análise tornou-se inadequada no caso de dispositivos onde os mecanismos de transporte deixam de ser predominantemente unidimensionais, ou onde ocorrem grandes variações de campo elétrico e densidade de

portadores. No caso destes dispositivos, faz-se necessário, conforme foi visto em Sec.2.4, a utilização de simulação numérica.

O início da aplicação de simulação numérica a modelos de dispositivos semicondutores deu-se aproximadamente em 1964 a partir do célebre trabalho de Gummel. Em seu artigo [Gummel 64], é mostrado que esta técnica poderia ser utilizada com sucesso, na caracterização de um transistor bipolar de silício, através de um modelo estacionário unidimensional.

Posteriormente, De Mari aplicou modelos unidimensionais à solução numérica de junções p-n [De Mari 67]. Neste artigo, De Mari introduz uma normalização de grandezas que facilitou consideravelmente a manipulação numérica do problema.

Alguns anos mais tarde, em 1969, Scharfetter e Gummel [Scharfetter 69] propõem a utilização de simulação numérica unidimensional, visando modelar diodos Read de silício (Impatt). A técnica adotada pelos mesmos na solução das equações da continuidade tornou-se clássica em problemas unidimensionais, sendo estendida posteriormente com sucesso a problemas bidimensionais.

A aplicação de modelos bidimensionais, na solução das equações básicas dos dispositivos semicondutores, foi inicialmente restringida face à pouca capacidade computacional disponível naqueles dias.

Os casos de dispositivos com estruturas predominantemente bidimensionais, eram resolvidos através de aproximações realizadas nos modelos, tomando-se como base o conhecimento qualitativo prévio do funcionamento do dispositivo.

Com o aumento da complexidade dos dispositivos e a diminuição de suas dimensões, a simulação numérica bidimensional tornou-se prioritária, no caso de dispositivos predominantemente planares.

A aplicação de modelos unidimensionais, entretanto, permanecerá ainda presente na solução de problemas em dispositivos verticais tais como: diodos de barreira Schottky, diodos de junção p-n, e outros dispositivos cujo mecanismo de transporte dos portadores seja vertical.

Utilizando modelos bidimensionais, Kennedy e O'Brien [Kennedy 70] realizaram simulação numérica em transistores de efeito campo de junção (JFETs). A mesma técnica foi utilizada mais tarde em transistores bipolares por Slotboom [Slotboom 73].

Devido à importância da estrutura MOSFET na implementação de circuitos VLSI, um grande esforço tem sido desenvolvido na simulação destes dispositivos, visando estudar problemas como análise da tensão de ruptura, determinação de novos modelos para potencial de limiar, verificação da ocorrência de fuga de corrente no substrato, etc

Várias implementações baseadas em modelos bidimensionais foram realizadas, produzindo pacotes de programas disponíveis comercialmente ou sob domínio

público. Podemos citar por exemplo: o MINIMOS [Selberherr 80], CADDET [Toyabe 79], GEMINI [Greenfield 80] dentre outros.

As atenções em simulação de dispositivos também têm se concentrado nos transistores MESFETs de GaAs, devido à crescente utilização deste dispositivos em supercomputadores e em sistemas avançados de comunicação. Programas para simulação destes dispositivos também foram desenvolvidos, como por exemplo o CUPID [Wada 79].

O aumento da complexidade e a diminuição das dimensões das novas gerações de dispositivos induziram à realização de estudos que terminaram por comprovar [Yoshii 82] a importância de efeitos tridimensionais na operação destes dispositivos.

No caso dos transistores MOSFET, o surgimento de geometrias VLSI com comprimento de canal da ordem de grandeza de sua largura, veio acentuar ainda mais a necessidade da utilização de modelos tridimensionais, uma vez que os modelos bidimensionais não se mostravam suficientemente precisos na caracterização destes dispositivos.

Semelhantemente ao que ocorreu no início da utilização dos modelos bidimensionais, o crescimento da utilização de modelos completamente tridimensionais estará condicionado ao aumento da capacidade computacional disponível.

Grandes avanços também têm sido obtidos na utilização de simulação tridimensional para investigação de problemas relacionados a transistores MOSFETs de canal curto. Análises resultantes de simulação tridimensional têm produzido algumas respostas para problemas, tais como: altas densidades de corrente, injeção de portadores quentes, avaliação da tensão de ruptura e variação da tensão de limiar [Husain 82].

Como resultado destes trabalhos, alguns programas surgiram com o intuito de possibilitar simulação tridimensional de dispositivos. Podemos citar por exemplo, o WATMOS [Husain 82].

No início dos anos 80, alguns bons resumos ([Bank 83] e [Fichtner 83]) sobre as pesquisas em simulação de dispositivos semicondutores foram feitos. Mais recentemente, a pesquisa em simulação de dispositivos tem evoluído no sentido de investigar novos algoritmos de simulação [Mayergoyz 86], e identificar modelos mais sofisticados que descrevam, com precisão, a mobilidade dos portadores, as taxas de recombinação e geração, e a distribuição espacial de cargas no dispositivo. Os progressos e os problemas enfrentados atualmente nesta área podem ser encontrados adequadamente condensados em [Selberherr 89].

De uma forma geral, podemos caracterizar os novos dispositivos semicondutores, como sujeitos a problemas advindos da drástica redução de suas dimensões. Ou seja, elevações em campos elétricos, densidade de portadores e

corrente. Estes problemas, atuando separadamente ou em conjunto, levam ao surgimento de condições de não-equilíbrio nas equações de transporte dos portadores. As equações de transporte tradicionais, baseadas no modelo de difusão-deslocamento, não levam em conta o *aquecimento* do portador. Deste modo, novos modelos para os mecanismos de transporte deverão ser estudados a fim de incluir estes efeitos.

A tendência de redução das dimensões dos dispositivos na direção de 0.1 μm , eleva a importância da aplicação de modelos para transporte de portadores baseados na Teoria de Transporte Quântico. Atualmente, isto tem sido feito apenas no sentido de analisar novos dispositivos com dimensões extremamente pequenas, onde fenômenos de transporte quântico efetivamente ocorrem. Isto acontece, porque a aplicação da Teoria de Transporte Quântico ainda se encontra muito restrita, face ao volume computacional fabuloso necessário à sua utilização.

Capítulo 3

Dispositivo MOSFET

3.1 Histórico

O princípio básico do transistor de efeito campo foi proposto na década de '30 por Lilienfeld [Lilienfeld 30] e Heil [Heil 35]. A idéia principal consistia na utilização de um campo elétrico perpendicular a uma superfície, que permitisse o surgimento de um canal contendo portadores através do qual, a corrente pudesse fluir entre dois terminais localizados nesta superfície. Devido ao fato de que esta corrente era predominantemente formada por portadores de uma única polaridade, estes dispositivos passaram a ser denominados de dispositivos unipolares.

O princípio de efeito campo proposto por Lilienfeld foi depois estudado por Shockley e Pearson [Shockley 40] no final da década de '40. Posteriormente em artigo sobre o transistor de efeito campo unipolar [Shockley 62], Shockley propôs uma análise para este dispositivo baseada na realização de aproximação unidimensional para o campo elétrico no canal ($E_x \ll E_y$). Este modelo, conhecido como *canal gradual*, tornou-se a principal ferramenta de análise dos transistores de efeito campo.

Por volta de 1960, Kahng e Atalla propuseram e fabricaram um dispositivo que implementava o princípio do transistor de efeito campo. Este dispositivo era formado pelo crescimento térmico de um óxido sobre um substrato de silício dopado. Sobre este óxido, era depositado um metal onde aplicava-se uma tensão que induzia a formação de um campo elétrico, criando assim o canal desejado junto à interface semicondutor-óxido. A estrutura Metal-Oxido-Semicondutor utilizada deu o nome ao transistor de efeito campo resultante: MOSFET.

Após a sua implementação, o transistor MOSFET tornou-se fundamental no desenvolvimento dos circuitos integrados VLSI, como microprocessadores e memórias. Como consequência imediata, um grande esforço tecnológico foi e vem

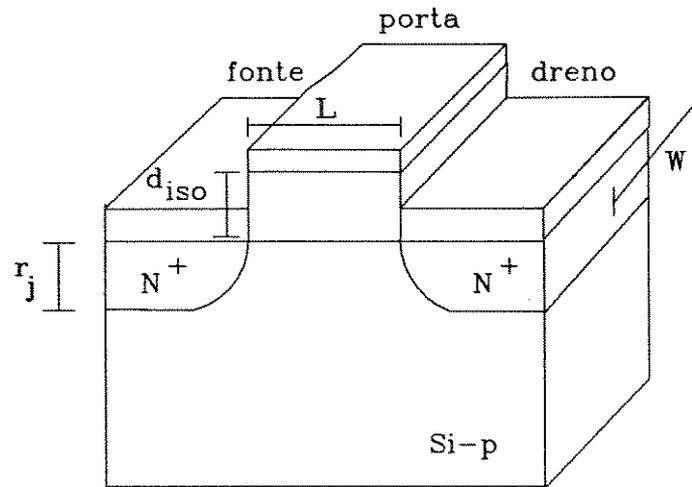


Figura 3.1: Estrutura do dispositivo MOSFET canal-n

sendo feito na investigação de novos modelos e estruturas para estes dispositivos.

Neste capítulo, nos dedicaremos a realizar uma análise sucinta da estrutura do MOSFET, e das principais etapas que formam o processo de fabricação deste dispositivo. Procuraremos também, investigar as equações resultantes de seu modelo físico, bem como as condições de contorno que se impõem a este modelo.

3.2 Estrutura do MOSFET

A estrutura básica do dispositivo MOSFET está ilustrada na Fig.3.1. Graças à maior mobilidade dos elétrons em relação às lacunas ($\mu_n \approx 2\mu_p$), o dispositivo MOSFET canal-n (transistor n-MOS), cuja corrente é predominantemente transportada por elétrons, tornou-se um dispositivo para o qual dirigiu-se a maior parte da pesquisa científica sobre os dispositivos de efeito campo. Por este motivo, escolhemos desenvolver este trabalho usando este dispositivo, de modo que a partir de agora usaremos o nome MOSFET para designar em especial o transistor MOSFET canal-n.

O MOSFET é um dispositivo de quatro terminais consistindo de um substrato semiconductor dopado (tipo-p) no qual são formadas duas regiões n^+ fortemente dopadas denominadas fonte e dreno¹. Nestas regiões são construídos contatos

¹Em inglês: *source and drain*.

metálicos ôhmicos que permitem o acesso à região de canal do dispositivo.

Entre os contatos de fonte e dreno é formado um isolante (geralmente dióxido de silício ou nitreto de silício). Sobre este isolante é depositado um contato de metal, polisilício dopado ou uma combinação de siliceto e polisilício, denominado de porta². A finalidade deste eletrodo, como já foi mencionado anteriormente, é controlar a formação do canal através da aplicação de uma tensão elétrica.

Os principais parâmetros do MOSFET são: o comprimento de canal L , a largura de canal W , a espessura do isolante d_{iso} , a profundidade da junção r_j e o perfil de dopagem do substrato (N).

Dentro de um circuito integrado, o transistor MOSFET está circundado por outros dispositivos. Por este motivo, é necessário a formação de um óxido espesso em torno do transistor (óxido de campo) de modo a isolá-lo. Consideraremos esta isolamento ideal, o que nos permite investigar o dispositivo separadamente sem levar em conta a sua interação com o meio que o cerca.

A metodologia de projeto para um dispositivo como o MOSFET é baseada na possibilidade de que possamos modificar o comportamento elétrico simulado do dispositivo, a partir de alterações nos seus parâmetros de fabricação. Deste modo, a simulação elétrica de um dispositivo MOSFET passa necessariamente pela correta avaliação de seus parâmetros geométricos (L, r_j , etc ...) e de sua composição (tipo dos materiais, distribuição de dopantes, etc...) , sem que para isto tenhamos que fabricar o mesmo.

Assim sendo, devemos poder ser capazes também de simular as várias etapas do processo de fabricação do dispositivo. Este tipo de simulação é denominada *simulação de processo*, e tem sido largamente utilizada sob a forma de programas de computador como o ICECREM, LADIS, MEMBRE, RECIPE, SUPRA e o amplamente conhecido SUPREM [Suprem 78].

A maior barreira na simulação elétrica de dispositivos semicondutores se encontra justamente na incerteza dos resultados das simulações de processo. Devido à falta de conhecimento aprofundado dos mecanismos físicos e químicos que controlam os processos de fabricação, os modelos não são suficientemente precisos. Como consequência, os resultados das simulações de processo que utilizam estes modelos ainda não refletem com grande exatidão a estrutura física do dispositivo fabricado.

Por outro lado, uma forte demanda por dispositivos cada vez menores e mais sofisticados vem surgindo. Nestes dispositivos os efeitos bi ou tridimensionais são acentuados e dependem fortemente da precisão das etapas de fabricação, em especial daquelas que definem o perfil de dopagem. A necessidade de modelos que

²Em inglês: *gate*.

possam simular estas etapas com precisão, tem motivado um grande crescimento na área de simulação de processos nos últimos anos.

De uma maneira geral, os principais processos de fabricação de dispositivos semicondutores são: epitaxia, corrosão, deposição, implantação iônica, oxidação térmica e difusão. O processo de litografia pode ser considerado como uma etapa isolada, cuja única finalidade é fornecer uma flexibilidade na definição das conexões do circuito.

Dentre as etapas mencionadas, a implantação iônica e a difusão desempenham um papel fundamental, uma vez que estão diretamente relacionadas com a definição do perfil de dopagem. Por este motivo, nas três seções que se seguem investigaremos modelos utilizados na simulação destas etapas.

3.2.1 Implantação iônica

A implantação iônica é uma das técnicas de dopagem mais utilizadas na fabricação de dispositivos semicondutores. Resumidamente, a implantação iônica consiste em se fazer incidir sobre um substrato um feixe de íons dopantes altamente energético.

A distribuição final destes dopantes no semicondutor é denominada perfil de dopagem, e a determinação de um modelo para o mesmo é extensamente investigada na literatura.

O modelo exato para o perfil de dopagem pode ser obtido através da realização, por meio do método de Monte Carlo, da simulação do processo de implantação propriamente dito. Este procedimento, entretanto, demanda um esforço computacional e um tempo consideráveis, uma vez que seria necessário invocar as leis da mecânica estatística.

Os modelos utilizados em Engenharia, por outro lado, devem ser suficientemente simples de modo a permitir sua utilização na solução de problemas tecnológicos de ordem prática. Por esta razão, a utilização de funções distribuição, onde os parâmetros (desvio padrão, média, etc...) possam ser medidos experimentalmente, mostrou-se ser uma solução mais adequada para o problema de modelamento do perfil de dopagem.

Baseada nesta argumentação surgiu a teoria LSS proposta por Lindhard, Scharff e Schiøtt [Lindhard 63], onde a física relacionada à distância de implantação é extensivamente estudada. Como resultado deste trabalho foram catalogadas várias curvas experimentais, que relacionam a energia de implante E à distância projetada³ R_p , e ao desvio padrão σ_p da distribuição de dopantes

³Em inglês: *projected range*.

r_1	$1,259 \times 10^{-3} \mu m/keV^k$
r_2	$-2,743 \times 10^{-7} \mu m/keV^k$
r_3	$1,290 \times 10^{-9} \mu m/keV^k$
s_1	$6,542 \times 10^{-4} \mu m/keV^k$
s_2	$-3,161 \times 10^{-6} \mu m/keV^k$
s_3	$1,371 \times 10^{-8} \mu m/keV^k$
s_4	$-2.252 \times 10^{-11} \mu m/keV^k$

Tabela 3.1: Coeficientes polinomiais para aproximação de R_p e σ_p (Fósforo em Silício).

estudada. Dificuldades no armazenamento computacional, fazem com que normalmente sejam utilizadas funções polinomiais que se aproximem destas curvas. Deste modo, R_p e σ_p podem ser aproximados pelos polinômios:

$$R_p = \sum_{k=1}^n r_k \cdot E^k \quad (3.1)$$

$$\sigma_p = \sum_{k=1}^n s_k \cdot E^k \quad (3.2)$$

onde r_k e s_k são coeficientes polinomiais com dimensão [$\mu m/keV^k$], cujos valores estão relacionados na Tab.3.1 para o caso da implantação de fósforo em silício. Estes coeficientes dependem, como é de se esperar, da espécie de íons dopantes e do material do qual é feito o substrato. No caso do dispositivo MOSFET que estudaremos, as regiões n^+ serão formadas, portanto, através da implantação de íons de fósforo sobre um substrato de silício.

Vários problemas associados com a implantação iônica durante o processamento de um dispositivo semiconductor têm sido investigados. Podemos citar, por exemplo: a assimetria da função de distribuição [Gibbons 73], a implantação através do óxido de porta em determinados processos MOS [Ryssel 83], e as mudanças na função distribuição devido ao espalhamento lateral causado pela variação da espessura na borda da máscara [Runge 77].

Todos estes problemas oferecem uma complexidade adicional ao modelo de implantação, de modo que a sua investigação não será objetivo deste trabalho. No decorrer deste, consideraremos uma implantação iônica cujo perfil de dopagem possa ser razoavelmente bem descrito por uma função distribuição unidimensional do tipo Gaussiana simples:

$$I(y) = \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \cdot \exp\left(\frac{-(y - R_p)^2}{2\sigma_p^2}\right) \quad (3.3)$$

onde a distância projetada R_p e o desvio padrão σ_p dependem exclusivamente da energia E , sendo calculados a partir dos polinômios das Eqs.(3.1)-(3.2). D_I é a dose do implante realizado, medida em [átomos.cm⁻²].

3.2.2 Difusão

O processo de difusão é o mecanismo físico responsável pela penetração térmica das impurezas no substrato semiconductor. Estas impurezas são previamente depositadas em outra etapa denominada de pré-deposição, normalmente realizada por meio de implantação iônica.

Para uma pré-deposição realizada através de implantação iônica, a difusão é feita no sentido de refazer a rede cristalina do semiconductor dos danos causados pelo bombardeamento iônico, e estabelecer o perfil de dopagem desejado. Neste caso, o mecanismo de difusão é denominado de *recozimento*.

A etapa de difusão modifica o perfil de dopagem aumentando a penetração do mesmo dentro do substrato. O mecanismo de penetração obedece à lei de difusão de Fick:

$$\frac{\partial I}{\partial t} = D \cdot \text{div}(\text{grad } I) \quad (3.4)$$

onde I é a função densidade volumétrica de dopantes, e D o coeficiente de difusão dos dopantes no semiconductor a uma dada temperatura T .

A difusão de dopantes no semiconductor ocorre por meio de mecanismos intersticiais e de vacâncias. Os modelos para os mecanismos intersticiais de difusão ainda não estão muito bem estabelecidos, o que nos leva a considerar um modelo para o coeficiente de difusão baseado exclusivamente em vacâncias. O modelo clássico de Arrhenius, oferece uma razoável aproximação para o coeficiente D como função da energia de ativação E_a e da temperatura T :

$$D = D_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right) \quad (3.5)$$

onde $D_0 = 3,85 \text{ cm}^2/\text{s}$ e $E_a = 3,66 \text{ eV}$ para o caso de uma difusão de fósforo em silício.

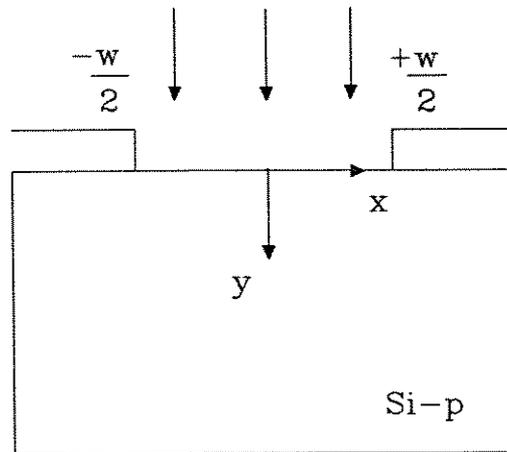


Figura 3.2: Implantação iônica de impurezas

3.2.3 Implantação e recozimento

No processo de fabricação de um dispositivo MOSFET, as etapas de implantação iônica seguida de recozimento desempenham um papel fundamental, como foi dito anteriormente, uma vez que são responsáveis pela formação do perfil de impurezas do dispositivo. Nesta seção, procuraremos definir um modelo que nos permita simular esta sequência de etapas, e obter assim uma aproximação adequada para o perfil. Este perfil será necessário no Cap.5, para a simulação bidimensional do dispositivo MOSFET.

O modelamento do problema de implantação e recozimento é feito a partir da solução da equação de Fick na sua forma bidimensional, para uma dada condição inicial correspondente ao perfil de dopantes implantado. Esta abordagem analítica foi primeiramente desenvolvida em [Lee 76], sendo posteriormente refinada em [Lee 81] a fim de levar em conta condições iniciais mais realistas. A seguir, descreveremos resumidamente esta abordagem e a maneira pela qual implementamos o modelo resultante da mesma.

Supomos uma implantação iônica seletivamente realizada, de modo a evitar a ocorrência de canalização dos íons na rede⁴. Consideraremos uma distribuição Gaussiana sem espalhamento lateral, como uma aproximação razoável para o perfil de dopagem implantado. A implantação iônica é feita em uma superfície de silício, através de uma abertura em uma máscara de comprimento W (Fig.3.2).

O perfil de impurezas resultante final é suposto ter a distribuição:

⁴Em inglês: *channeling*.

$$I(y) = \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \cdot \exp\left(\frac{-(y - R_p)^2}{2\sigma_p^2}\right) \quad (3.6)$$

válida para $-\frac{W}{2} < x < \frac{W}{2}$ e $y > 0$.

Uma posterior difusão em ambiente inerte ou oxidante deve ser feita em seguida de modo a realizar a penetração do perfil implantado e a refazer a rede cristalina danificada. O perfil de dopantes será determinado, portanto, através da aplicação da Lei de Fick (Eq.(3.4)) que em duas dimensões reduz-se a:

$$\frac{\partial I}{\partial t} = D \cdot \left[\frac{\partial^2 I}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 I}{\partial y^2} \right] \quad (3.7)$$

onde t é o tempo de difusão. A condição inicial imposta à Eq.(3.7) será o perfil resultante da implantação:

$$I_0(x, y, 0) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq -\frac{W}{2} \text{ ou } x \geq \frac{W}{2} \\ \frac{D_I}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \cdot \exp\left(\frac{-(y-R_p)^2}{2\sigma_p^2}\right) & \text{se } -\frac{W}{2} < x < \frac{W}{2} \end{cases}$$

Durante a difusão em ambiente inerte consideraremos que não ocorre evaporação de dopantes na superfície do semiconductor. Isto é expresso através da condição de contorno:

$$\left. \frac{\partial I}{\partial y} \right|_{y=0} = 0 \quad (3.8)$$

A solução da Eq.(3.7) sujeita à condição inicial, Eq.(3.6), e à condição de fronteira, Eq.(3.8), não é uma tarefa simples de ser realizada. Outrossim, isto é feito por meio da convolução entre a condição inicial desejada, e a solução da equação a um impulso unitário. Ou seja:

$$I(x, y, t) = \int_0^{+\infty} \int_{-\frac{W}{2}}^{+\frac{W}{2}} I_0(x, y, 0) \cdot I_\delta(x, y, t) dx' dy' \quad (3.9)$$

onde $I_\delta(x, y, t)$ é a solução da Eq.(3.7) para uma condição inicial na forma de um impulso unitário de Dirac.

Deste modo, a obtenção de um perfil de dopagem para um dado perfil implantado genérico (que no nosso caso será Gaussiano) passa necessariamente pela solução da Eq.(3.7) quando sujeita a uma condição inicial do tipo $I(x', y', 0) = \delta(x', y')$. Este trabalho foi realizado faz algum tempo, durante a busca de uma solução para o problema de propagação de calor em sólidos [Carslaw 59]. O resultado obtido foi:

$$I_{\delta}(x, y, t) = \frac{1}{4\pi Dt} \cdot \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right) \cdot \left[\exp\left(-\frac{(y-y')^2}{4Dt}\right) + \exp\left(-\frac{(y+y')^2}{4Dt}\right) \right] \quad (3.10)$$

onde $-W/2 \leq x' \leq +W/2$ e $y' \geq 0$. Substituindo este resultado, juntamente com o $I_0(x, y, 0)$, anteriormente definido, teremos após alguma álgebra:

$$I(x, y, t) = \frac{D_I}{4\pi Dt} \cdot I_x(x, t) \cdot I_y(y, t) \quad (3.11)$$

onde

$$I_x(x, t) = \sqrt{\pi Dt} \cdot \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x + \frac{W}{2}}{2\sqrt{Dt}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x - \frac{W}{2}}{2\sqrt{Dt}}\right) \right] \quad (3.12)$$

$$I_y(y, t) = \sigma_p \cdot \sqrt{\frac{2\pi Dt}{4Dt + 2\sigma_p^2}} \cdot [\Omega(y, t) + \Omega(-y, t)] \quad (3.13)$$

$$\Omega(y, t) = \exp\left[-\frac{(y - R_p)^2}{4Dt + 2\sigma_p^2}\right] \cdot \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{R_p}{\sigma_p \cdot \sqrt{\frac{\sigma_p^2}{Dt} + 2}} + \frac{1}{2\sqrt{Dt + 2\left(\frac{Dt}{\sigma_p}\right)^2}}\right) \right] \quad (3.14)$$

Como podemos verificar a partir Eq.(3.11), o perfil da distribuição de dopantes resultante é um produto de duas distribuições desacopladas no espaço, uma distribuição transversal I_y e uma distribuição lateral I_x .

A Eq.(3.11) foi implementada numericamente a fim de podermos dispor de um perfil de dopantes bidimensional, necessário à simulação da estrutura MOSFET. Nesta implementação, houve a necessidade de determinar valores para a função erf . Isto foi feito através da aproximação [Hastings 55]:

$$\operatorname{erf} x = 1 - (a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_4 t^4 + a_5 t^5) \cdot \exp(-x^2) + \epsilon(x) \quad (3.15)$$

onde

$$t = \frac{1}{1 + px} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} p &= 0.3275911 & a_3 &= 1.421413741 \\ a_1 &= 0.254829592 & a_4 &= -1.453152027 \\ a_2 &= -0.284496736 & a_5 &= 1.061405429 \end{aligned}$$

sendo válida para $0 \leq x < +\infty$. O módulo do erro desta aproximação $|\epsilon(x)|$ é menor que 10^{-7} , sendo considerado como apropriado para nossa aplicação.

Perfis de dopagem mais realistas podem ser obtidos a partir de considerações mais rigorosas sobre os modelos usados na etapa de implantação iônica. Para uso deste trabalho, entretanto, consideraremos o perfil proposto anteriormente como suficiente.

3.2.4 Exemplos

O modelo de implantação iônica e conseqüente difusão proposto na secção acima, foi implementado sob a forma de um programa em FORTRAN 77 denominado DOPMOS cuja listagem está no Apêndice A. Usando este programa, foram realizadas várias simulações com o intuito de se determinar perfis de dopagem bidimensionais para transistores MOSFET. Um dos exemplos simulados foi de um transistor com comprimento de canal $L = 1.0\mu m$ e espessura de óxido $d_{i,so} = 500 \text{ \AA}$, construído sobre um substrato de silício tipo-p dopado com $N = 10^{16} \text{ átomos.cm}^{-3}$.

Foram realizadas simulações de implantação de fonte e dreno usando várias combinações de energias de implante e dose, visando com isto analisar a eficácia do modelo. Dentre as simulações realizadas, escolhemos aquela que utilizou uma energia de 40 keV e dose de $D_I = 10^{16} \text{ átomos.cm}^{-2}$, como referência para os dispositivos a serem estudados.

A etapa posterior de recozimento foi feita usando uma temperatura de $1000 \text{ }^\circ\text{C}$ durante um intervalo de tempo de 900 s .

O resultado obtido nesta simulação é mostrado na Fig.3.3, onde é representada somente a região abaixo do óxido de porta. Como podemos observar, o canal projetado ($L = 1.0\mu m$) é reduzido para $0.6\mu m$ devido a ocorrência de sub-difusão lateral de fonte e dreno. A profundidade de junção encontrada ($\tau_j = 3000 \text{ \AA}$) está de acordo com os valores obtidos através da utilização de modelos unidimensionais.

Uma distribuição semelhante a esta foi também determinada, no caso de um dispositivo com $L = 5.0\mu m$. Nesta situação o perfil encontrado é parecido com aquele da Fig.3.3, a menos do efeito da subdifusão lateral na redução do canal do dispositivo, que é insignificante (canal efetivo $L_{ef} = 4.6\mu m$).

Deste modo, consideramos o modelo proposto como adequado às necessidades deste trabalho.

3.3 Modelo Físico

O modelo físico dos dispositivos MOSFET pode ser analisado, sem perda de generalidade, a partir do modelo clássico dos dispositivos semicondutores. Deste modo, o modelamento do MOSFET será consequência da aplicação, ao modelo clássico, de condições iniciais e de fronteira específicas do MOSFET. Assim sendo, nesta secção procuraremos determinar o modelo genérico para os dispositivos semicondutores, os parâmetros físicos das equações resultantes deste modelo, e as condições de contorno impostas no caso do MOSFET.

As equações que formam o modelo físico dos dispositivos semicondutores são denominadas frequentemente de equações básicas, e podem ser derivadas das equações de Maxwell e de várias equações da física do estado sólido. Esta tarefa entretanto, é extremamente árdua, trabalhosa e envolve um vasto conjunto de considerações sobre o campo da física dos semicondutores. Por esta razão, não nos dedicaremos a realizar as demonstrações que levam às equações básicas, podendo o leitor encontrá-las em textos mais especializados sobre o assunto []. Relacionaremos isto sim, para efeito de precisão do modelo, todas as hipóteses físicas que levam à obtenção destas equações.

As equações que formam o modelo físico de um dispositivo semicondutor podem ser divididas em três grupos: equação de Poisson, equações da continuidade derivadas diretamente das leis de Maxwell, e equações de transporte de portadores obtidas a partir das aproximações de Boltzmann. A seguir, estudaremos cada uma destas equações.

3.3.1 Equação de Poisson

A equação de Poisson é derivada diretamente da terceira lei de Maxwell:

$$\text{div } \vec{D} = \rho \quad (3.17)$$

onde \vec{D} é o vetor deslocamento elétrico e ρ a densidade volumétrica de carga elétrica. O vetor deslocamento \vec{D} e o vetor campo elétrico \vec{E} , são relacionados pela equação:

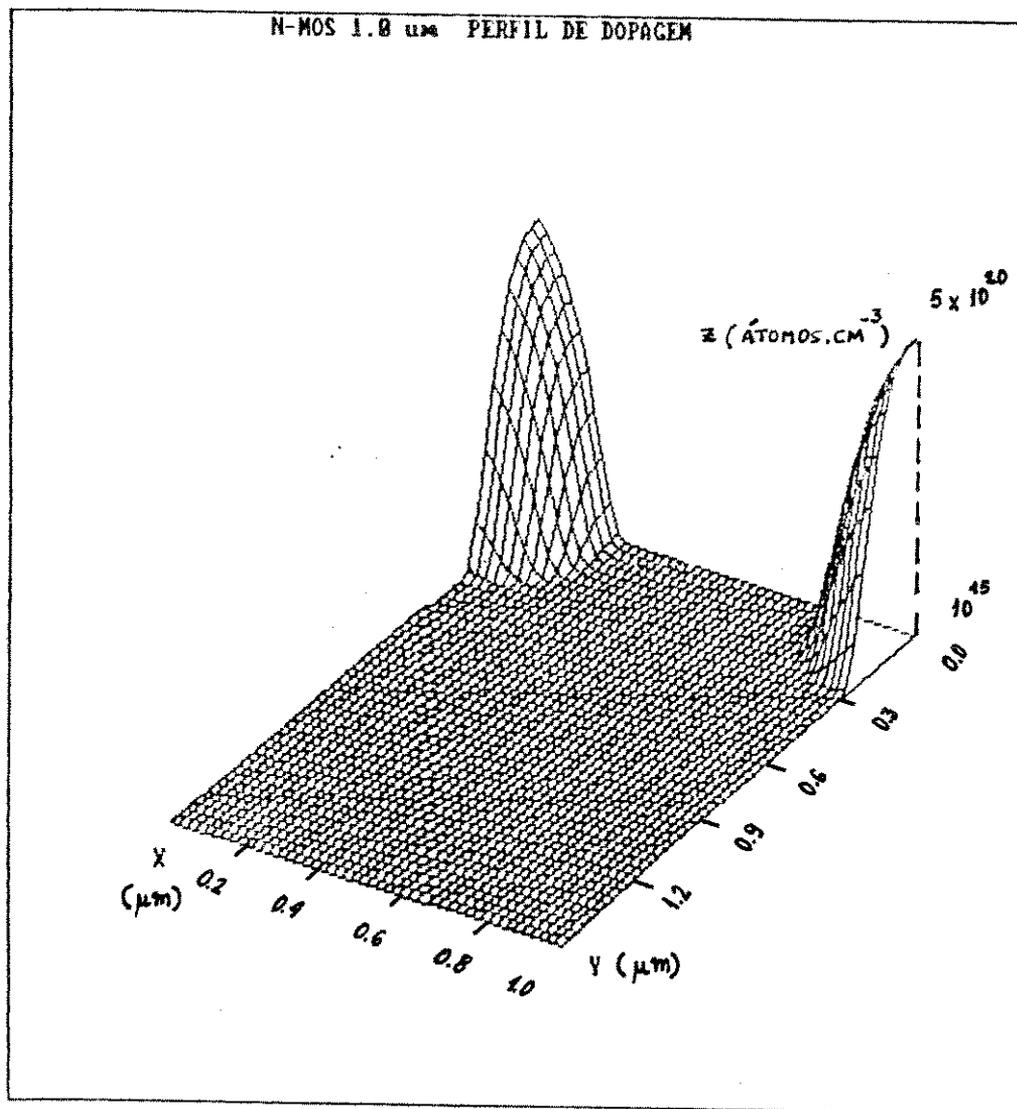


Figura 3.3: Perfil de dopagem para MOSFET - 1.0 μm

$$\vec{D} = \epsilon_{sem} \cdot \vec{E} \quad (3.18)$$

válida para todos os materiais que possuam uma permissividade elétrica ϵ independente do tempo. Deste modo, fenômenos de polarização devido a forças mecânicas, fenômenos piezoelétricos e ferroelétricos não podem ser investigados ao supormos a Eq.(3.18) válida. A permissividade elétrica deve ser considerada formalmente um tensor de duas dimensões. No entanto, a baixa anisotropia e a boa homogeneidade dos materiais utilizados na fabricação dos dispositivos semicondutores, permitem-nos considerar ϵ_{sem} como uma grandeza escalar. No caso do silício $\epsilon_{sem} = 11.7\epsilon_0$, onde ϵ_0 é a permissividade elétrica do vácuo.

O vetor campo elétrico é definido como:

$$\vec{E} = -grad \psi \quad (3.19)$$

onde ψ é a função potencial elétrico. Substituindo direta mente as Eqs.(3.18)-(3.19) na Eq.(3.17) teremos:

$$div(grad \psi) = \frac{-\rho}{\epsilon_{sem}} \quad (3.20)$$

A densidade volumétrica de carga elétrica ρ pode ser expressa pelo produto da carga elétrica elementar q , pela soma das densidades de lacunas p , elétrons n e cargas ionizadas N :

$$\rho = q \cdot (p - n - N) \quad (3.21)$$

As densidades de elétrons e lacunas em cada ponto do semicondutor são obtidas das aproximações de Boltzmann dependendo de maneira exponencial do potencial elétrico ψ :

$$n = n_i \cdot \exp \left[\frac{q}{kT} (\psi - \phi_n) \right] \quad (3.22)$$

$$p = n_i \cdot \exp \left[\frac{q}{kT} (\phi_p - \psi) \right] \quad (3.23)$$

onde n_i é a concentração intrínseca do substrato, e ϕ_n e ϕ_p correspondem respectivamente ao potencial associado aos *níveis quasi-fermi* para elétrons e lacunas.

3.3.2 Equações da continuidade

As equações da continuidade para elétrons e lacunas podem ser obtidas da primeira lei de Maxwell:

$$\text{rot } \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (3.24)$$

onde \vec{H} é o vetor campo magnético, \vec{J} o vetor densidade de corrente. Aplicando a operação de divergência em ambos os membros e substituindo a Eq.(3.20) na equação resultante teremos:

$$\text{div } \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3.25)$$

É fisicamente correto afirmarmos que em temperaturas normais o transporte de carga é feito fundamentalmente por elétrons e lacunas. Isto nos permite dizer que o vetor densidade de corrente pode ser dividido em duas partes: uma componente \vec{J}_n devido aos elétrons, e uma componente \vec{J}_p devido às lacunas.

$$\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p \quad (3.26)$$

Substituindo a Eq.(3.26) na Eq.(3.25) teremos:

$$\text{div}(\vec{J}_n + \vec{J}_p) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3.27)$$

A variação no tempo da densidade volumétrica de carga ρ pode ser reescrita usando a Eq.(3.21):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = q \frac{\partial (p - n)}{\partial t} - \frac{\partial N}{\partial t} \quad (3.28)$$

Desde que afirmamos ser a densidade total de corrente formada somente por elétrons e lacunas, as cargas fixas que entram na composição de N não participarão do transporte de carga no semiconductor. Ou seja, serão invariantes no tempo. Por outro lado, as contribuições de N devido a vacâncias, deslocamentos, de defeitos na rede⁵, armadilhas de recombinação ou outras cargas que variam seu estado com o tempo, são em geral suficientemente pequenas e podem ser desprezadas. Como resultado destas considerações teremos que:

$$q \frac{\partial N}{\partial t} = 0 \quad (3.29)$$

⁵Em inglês: *charged defects*.

Substituindo esta equação na Eq.(3.28) e fazendo uso do resultado obtido na Eq.(3.27):

$$\operatorname{div}(\vec{J}_n + \vec{J}_p) + q \cdot \frac{\partial}{\partial t}(p - n) = 0 \quad (3.30)$$

Esta equação exprime o fato de que os fluxos de portadores (elétrons e lacunas) entrando e saindo de uma dada região do semiconductor, são compensadas por variações no tempo da densidade de portadores nesta região.

A fim de determinar uma equação da continuidade para cada portador, devemos definir R como sendo uma função que descreve a taxa de geração ou recombinação de rede para elétrons e lacunas. Deste modo teremos:

$$\operatorname{div} \vec{J}_n - q \cdot \frac{\partial n}{\partial t} = q \cdot R \quad (3.31)$$

$$\operatorname{div} \vec{J}_p + q \cdot \frac{\partial p}{\partial t} = -q \cdot R \quad (3.32)$$

Valores positivos de R correspondem à recombinação e negativos à geração. Um modelo preciso para R deve ser, portanto, obtidos com base em conhecimentos de física do estado sólido.

A importância dos efeitos de geração e recombinação depende do tipo de dispositivo que se deseja modelar. Por exemplo, em dispositivos bipolares tais como diodos p-n e transistores BJT, as influências da geração-recombinação no dispositivo são muito fortes. Por outro lado, em dispositivos unipolares como o MESFET, diodos Schottky e MOSFET's, os modelos para os dispositivos produzem em geral resultados satisfatórios, mesmo se os efeitos da geração e recombinação forem desprezados.

Em algumas condições de operação dos dispositivos unipolares entretanto, os efeitos da geração e recombinação são acentuados e devem ser considerados. Como exemplo, podemos citar a investigação de fenômenos relacionados a ocorrência de fortes campos elétricos e situações de ruptura ⁶.

Em um material semiconductor uniformemente dopado e em equilíbrio termodinâmico, as concentrações de elétrons (n) e lacunas (p) estão variando permanentemente devido ao processo de geração e recombinação resultante da energia térmica do sistema. Existe entretanto, um balanço dinâmico entre as taxas de geração e recombinação. Isto resulta em uma situação de equilíbrio entre as densidades n e p de modo que:

$$n_i^2 = n \cdot p \quad (3.33)$$

⁶Em inglês: *breakdown*.

onde n_i é a concentração intrínseca de portadores.

A presença de algum estímulo externo pode desequilibrar esta situação, levando a alterações nos processos de geração e recombinação de modo a restaurar a situação de equilíbrio anterior. Se, como consequência de um estímulo externo um excesso de elétrons for injetado no dispositivo, o processo de recombinação irá dominar a fim de restaurar o equilíbrio.

Os principais mecanismos através dos quais atuam os processos de geração e recombinação são: transições por fonons (mecanismo térmico), recombinação Auger (transições por meio de três partículas), ionização por impacto, recombinação superficial e transições causadas por fótons (mecanismo óptico).

A contribuição térmica nos processos de geração e recombinação é, basicamente, devido à transição de fonons da rede, causados por armadilhas⁷ resultantes da introdução de níveis de energia na banda proibida. Usualmente estes processos são idealizados através do modelo de Shockley-Read-Hall [Shockley 52].

A recombinação Auger envolve três partículas, de modo que na recombinação de um par elétron-lacuna é cedida energia para uma terceira partícula. A recombinação Auger torna-se significativa em regiões onde existem simultaneamente, altas concentrações de elétrons e lacunas.

A terceira contribuição para os processos de geração e recombinação é devida à ionização por impacto. Este processo é basicamente o reverso da recombinação Auger, ou seja, pares elétrons-lacunas são gerados a partir do consumo de energia de uma terceira partícula fortemente energética.

O processo de geração e recombinação superficial ainda não está muito bem investigado. Para efeito de modelamento, frequentemente considera-se a utilização de fórmulas estruturalmente equivalentes às do modelo de Shockley-Read-Hall para o substrato, tomando-se os cuidados adequados com os parâmetros.

O último mecanismo responsável pelo processo de geração e recombinação que discutiremos é a recombinação por fótons. Este processo, envolve a transição de elétrons e lacunas das bandas de condução e valência, através da absorção ou emissão de fótons. No caso de semicondutores com regiões de transição diretas tais como GaAs, este processo tem uma importância destacada, o que já não ocorre no caso do silício.

A taxa de geração e recombinação total da rede cristalina, conhecida como taxa de recombinação da rede R , pode ser expressa pela soma das contribuições individuais de cada um dos mecanismos acima estudados.

No caso do MOSFET, os efeitos da geração e recombinação no comportamento elétrico do dispositivo são muito pequenos e podem ser desprezados. No entanto,

⁷Em inglês: *traps*.

afim de permitir uma maior generalização deste trabalho, consideramos R em todos os desenvolvimentos matemáticos realizados.

3.3.3 Equação de transporte dos portadores

O vetor densidade de corrente de um conjunto de partículas carregadas e em movimento pode ser determinado, sem perda de generalidade, através do produto da carga da partícula, sua densidade e a velocidades média associada ao seu movimento. Deste modo, para elétrons e lacunas teremos respectivamente:

$$\vec{J}_n = -q.n.\vec{v}_n \quad (3.34)$$

$$\vec{J}_p = q.p.\vec{v}_p \quad (3.35)$$

onde \vec{v}_n e \vec{v}_p são respectivamente as velocidades médias para elétrons e lacunas. Como podemos observar nas Eqs.(3.34)–(3.35), o maior problema na determinação das densidades de corrente é a obtenção de expressões que relacionem corretamente a velocidade média dos portadores (tanto devido a difusão como a deslocamento⁸) ao vetor campo elétrico \vec{E} , e à densidade de portadores n e p . Assim sendo, devemos através de conhecimentos físicos, determinar funções do tipo:

$$\vec{v}_n = \vec{v}_n(n, \vec{E}) \quad (3.36)$$

$$\vec{v}_p = \vec{v}_p(p, \vec{E}) \quad (3.37)$$

Esta tarefa se insere num contexto de Física Estatística cujo estudo está longe de ser objetivo deste trabalho. Por este motivo, e por ser este resultado facilmente encontrado na literatura especializada, indicaremos a seguir somente o roteiro utilizado na obtenção do mesmo.

A fim de se obter informações a cerca da velocidade média dos portadores, devemos poder descrever o comportamento destes portadores em um espaço de sete dimensões representado pelas componentes do vetor de coordenadas espaciais $\vec{s} = (x, y, z)$, pelas componentes do vetor momentum $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ e pelo tempo t . A este espaço multidimensional denominaremos *espaço de fase*.

Uma função distribuição de probabilidade $f(\vec{s}, \vec{k}, t)$ poderá descrever a densidade da concentração de portadores por unidade de volume do espaço de fase. Esta função distribuição deve estar de acordo com o teorema de Liouville sobre a conservação do número de estados ao longo do tempo:

⁸Em inglês: *drift*.

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{s}, \vec{k}, t) = 0 \quad (3.38)$$

A Eq.(3.38) é denominada de equação de transporte de Boltzmann na forma implícita. A solução desta equação numa forma fechada é impossível, mas uma simplificação para a mesma pode ser realizada se considerarmos as seguintes hipóteses:

- A probabilidade da ocorrência de espalhamento de portadores é independente das forças externas aplicadas.
- As colisões são consideradas completamente elásticas e os portadores se chocam instantaneamente.
- As interações entre portadores podem ser desprezadas
- As forças externas são aproximadamente constantes, dentro de um intervalo de comprimento da ordem de grandeza das dimensões do pacote de onda associado ao movimento do portador.

As suposições feitas acima, permitem-nos reescrever a Eq.(3.38) numa forma mais simplificada:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + 2\pi \frac{\vec{F}_{ext}}{h} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}_g \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{s}} = \\ - \int (f(\vec{s}, \vec{k}) \cdot P(\vec{k}', \vec{k}) - f(\vec{s}, \vec{k}') \cdot P(\vec{k}, \vec{k}')) d\vec{k}' \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde \vec{F}_{ext} é a força externa aplicada, $\vec{v}_g = d\vec{s}/dt$ é a velocidade de grupo dos portadores, e h a constante de Planck. A função $P(\vec{a}, \vec{b})$ é definida como a probabilidade por unidade de tempo, que um portador no estado de momentum \vec{a} seja espalhado para dentro de um volume correspondente ao estado de momentum \vec{b} . A equação Eq.(3.39) é conhecida como equação de transporte de Boltzmann. Sua solução é longa e trabalhosa, só podendo ser obtida através da utilização das seguintes aproximações:

- O semiconductor é suposto ser infinitamente largo.
- As densidades de estados associadas as bandas de energia são consideradas parabólicas.

- A indução magnética é suposta nula, o que nos permite desprezar a força de Lorentz
- Os efeitos resultantes de semicondutores degenerados são desprezados
- As variações espaciais dos tempos de colisão dos portadores e da estrutura das bandas são desprezíveis.
- As variações espaciais da força externa são desprezíveis.
- Todos os processos de espalhamento são considerados completamente elásticos.
- As variações espaciais e temporais da temperatura dos portadores foram supostas desprezíveis

Através da utilização destas aproximações, a Eq.(3.39) pode ser resolvida e por meio desta solução, chegamos às aproximações para as velocidades médias dos portadores (Eqs.(3.36)–(3.37)). Usando estas aproximações nas Eqs.(3.34)–(3.35) teremos:

$$\vec{J}_n = q \cdot n \cdot \mu_n \cdot \vec{E} + q \cdot D_n \cdot \text{grad } n \quad (3.40)$$

$$\vec{J}_p = q \cdot p \cdot \mu_p \cdot \vec{E} - q \cdot D_p \cdot \text{grad } p \quad (3.41)$$

onde μ_n e μ_p são os coeficientes de mobilidade para elétrons e lacunas respectivamente. Os coeficientes D_n e D_p representam as constantes de difusão e estão relacionadas com as mobilidades por meio das equações de Einstein:

$$D_n = \mu_n \cdot \frac{kT}{q} \quad (3.42)$$

$$D_p = \mu_p \cdot \frac{kT}{q} \quad (3.43)$$

Como podemos observar, as equações de densidade de corrente obtidas são formadas pela soma de dois termos: um termo resultante da difusão de portadores e outro devido à corrente deslocamento causada pela aplicação de um campo elétrico.

Ao observarmos as equações de densidade de corrente, notamos a necessidade de realizar algumas considerações sobre os coeficientes de mobilidade dos portadores, desde que a simulação de dispositivos requer que possamos prever com precisão valores para estes parâmetros.

A mobilidade dos portadores está relacionada intimamente com o tempo de relaxação dos portadores dentro de uma rede cristalina. Este tempo de relaxação, por sua vez, determina a taxa através da qual os elétrons e lacunas mudam de *vector momentum* dentro da rede. Deste modo, a mobilidade representa, em última instância, uma medida da relação entre o movimento dos portadores e a ocorrência de eventos de espalhamento dos mesmos na rede. Estes eventos, responsáveis pelo espalhamento de elétrons e lacunas, são resultantes da ocorrência de: vibrações na rede cristalina, impurezas ionizadas, impurezas neutras, vacâncias, deslocamentos, fenômenos de superfície, presença de elétrons e lacunas. Infelizmente muitos destes mecanismos, e especialmente suas interações, são extremamente complicados e difíceis de modelar.

No caso da simulação de dispositivos semicondutores, o propósito deverá ser o de buscar, dentre os vários modelos da literatura, aqueles que ofereçam uma formulação matemática simples mas suficientemente precisa. Os resultados obtidos no modelo escolhido não devem apresentar grandes discrepâncias em relação às medidas experimentais. Por outro lado, a complexidade matemática do mesmo deve ser tal que não degrade a velocidade da simulação [Selberherr 83]. A escolha de modelos para μ_n e μ_p deverá portanto, contemplar não somente a precisão, mas também a minimização do custo computacional necessário à sua implementação.

Finalmente as equações de continuidade para elétrons e lacunas podem ser derivadas, ao substituímos as Eqs.(3.40)–(3.41) nas Eqs.(3.31)–(3.32). Uma vez feito isto, e considerando que estamos interessados na situação de estado estacionário, ficamos então com:

$$\text{div}(D_n \cdot \text{grad} n + \mu_n \cdot n \cdot \vec{E}) = R(\psi, n, p) \quad (3.44)$$

$$\text{div}(D_p \cdot \text{grad} p - \mu_p \cdot p \cdot \vec{E}) = R(\psi, n, p) \quad (3.45)$$

Todas as hipóteses feitas até o momento, juntamente com as equações de Poisson e de continuidade anteriormente derivadas, definem um conjunto de equações que formarão o esqueleto do que podemos chamar de modelo físico básico dos dispositivos semicondutores.

3.4 Normalização das Equações

Durante a simulação numérica de um dispositivo semicondutor, as operações matemáticas realizadas podem, por vezes, demandar um elevado tempo de computação, como resultado da grande diferença de ordens de grandeza entre os parâmetros envolvidos. No caso das equações básicas dos dispositivos semicondutores, frequentemente são realizadas operações entre, por exemplo, dimensões

Descrição	Grandeza Normalizada	Fator de Normalização
Coordenadas	x, y	$L_D = \sqrt{\epsilon_{sem} U_t / q n_i}$
Potencial elétrico	ψ	$U_t = \frac{kT}{q}$
Níveis quasi-fermi	ϕ_n, ϕ_p	U_t
Tensão aplicada	V_D, V_G e V_S	U_t
Campo elétrico	E_x, E_y	U_t / L_D
Densidade de portadores	n e p	n_i
Densidade de impurezas	N e Q_{int}	n_i
Carga elétrica	ρ	$-q \cdot n_i$

Tabela 3.2: Fatores de normalização segundo De Mari.

em microns, e parâmetros que representam concentração de impurezas com ordens de grandeza extremamente elevadas (p.ex. 10^{16} átomos.cm⁻³).

Visando contornar estes problemas, buscou-se desenvolver algumas formas de normalização das variáveis envolvidas na simulação, permitindo assim uma maior homogeneidade nas ordens de grandeza das mesmas. Dentre as propostas encontradas na literatura, utilizaremos aquela sugerida em [De Mari 67], uma vez que a mesma oferece uma forma de normalização simples, que acreditamos ser suficiente aos nossos propósitos. A normalização de De Mari utiliza um conjunto de fatores (vide Tab.3.2) que serão aplicados na normalização de cada um dos tipos de variáveis utilizadas.

A utilização destes fatores nas equações que compõem o modelo físico estudado na Sec.3.3, dará como resultado um conjunto de equações normalizadas que adotaremos com o nome de *equações básicas dos semicondutores*, de agora em diante:

$$\text{div} \vec{E} = p - n - N \quad (3.46)$$

$$\text{div}(D_n \cdot \text{grad} n + \mu_n \cdot n \cdot \vec{E}) = R(\psi, n, p) \quad (3.47)$$

$$\text{div}(D_p \cdot \text{grad} p - \mu_p \cdot p \cdot \vec{E}) = R(\psi, n, p) \quad (3.48)$$

3.5 Condições de contorno

Nas secções anteriores, nos dedicamos a analisar as equações que formam o modelo básico dos dispositivos semicondutores. Nesta secção, iremos modelar a estrutura física do MOSFET, discutida na Sec.3.3, bem como investigar as condições de

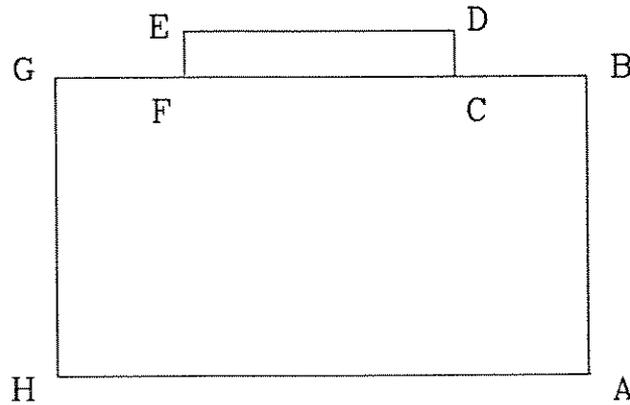


Figura 3.4: Modelo ideal da estrutura MOSFET

fronteira impostas por esta estrutura ao modelo físico que elaboramos na secção anterior.

O esquema de uma estrutura MOSFET ideal pode ser esquematizado de acordo com a Fig.3.4. Como podemos observar, o domínio R do dispositivo é formado por um substrato de silício tipo-p, onde foram construídas duas regiões fortemente dopadas, que atuam como contatos ôhmicos de fonte (\overline{FG}) e dreno (\overline{BC}). Entre estes contatos ôhmicos é construído um isolante (retângulo CDEF), cuja interface com o semicondutor é definida pela fronteira \overline{CF} . Sobre este isolante, é depositado um metal (\overline{DE}) que atua como terminal de porta do dispositivo. A fronteira \overline{AH} define um contato ôhmico de substrato e os segmentos \overline{AB} e \overline{GH} são introduzidos artificialmente de modo a isolar o dispositivo do meio que o cerca.

Baseando-se no que foi analisado, as fronteiras do MOSFET podem ser divididas em três grupos: contatos ôhmicos (\overline{BC} , \overline{FG} e \overline{AH}), fronteiras artificiais (\overline{AB} , \overline{GH}) e interface semicondutor isolante (\overline{CF}). A seguir, estudaremos cada um destes tipos de fronteiras.

3.5.1 Contatos ôhmicos

Os contatos ôhmicos do MOSFET da Fig.3.4, serão considerados para efeito de simulação como ideais. Como consequência, poderemos supor que somente a queda de potencial devida ao contato⁹ ocorre no mesmo. Deste modo, o potencial

⁹Em inglês: *built-in voltage*.

ψ no contato vale:

$$\psi = \psi_c + \psi_b \quad (3.49)$$

onde ψ_b corresponde ao potencial de contato resultante da formação da barreira entre o metal e o semiconductor fortemente dopado. O potencial ψ_c representa o potencial externo aplicado ao contato. Normalmente durante a simulação de dispositivos MOSFET's, os contatos de fonte e substrato estão interconectados e são tomados como referência de potencial para o dispositivo simulado.

A Eq.(3.49) corresponde a uma condição de contorno para o potencial em um contato ôhmico. Resta-nos agora portanto, determinar condições de contorno para as concentrações n e p .

A hipótese de contato ôhmico ideal permite que duas suposições físicas possam ser realizadas: equilíbrio dos portadores e neutralidade de cargas. A situação de equilíbrio de portadores será válida, desde que possamos considerar uma velocidade de recombinação infinita na superfície do contato. Esta suposição, apesar de ainda ser polêmica entre os físicos, oferece uma condição de contorno que se adequa bem à simulação sem afetar os resultados obtidos. Deste modo, considerando-a como verdadeira:

$$n.p = 1 \quad (3.50)$$

A suposição de neutralidade de cargas permite-nos escrever:

$$p - n - N = 0 \quad (3.51)$$

A solução do sistema de equações formado pelas Eqs.(3.50)-(3.51), cujas incógnitas são n e p , vale:

$$n = \frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \quad (3.52)$$

$$p = \frac{N}{2} - \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \quad (3.53)$$

A partir das Eqs.(3.52)-(3.53) o valor do potencial de contato pode ser facilmente obtido:

$$\psi_b = \ln \left(\frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \right) \quad (3.54)$$

Aglutinando as Eqs.(3.49),(3.52), (3.53) e (3.54) teremos as condições de fronteira para ψ , n e p nos contatos ôhmicos da Fig.3.4.

$$\psi = \psi_c + \ln \left(\frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \right) \quad (3.55)$$

$$n = \frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \quad (3.56)$$

$$p = \frac{N}{2} - \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \quad (3.57)$$

3.5.2 Fronteiras artificiais

As fronteiras artificiais \overline{AB} e \overline{GH} do MOSFET da Fig.3.4 não existem no dispositivo real. A introdução das mesmas é feita de modo a isolar o dispositivo do meio que o cerca. No entanto, a escolha destas fronteiras não é feita de forma completamente arbitrária. A partir de um conhecimento prévio do comportamento elétrico do MOSFET real, podemos observar que determinados parâmetros são atenuados na direção perpendicular a estas fronteiras. Seria fisicamente razoável por exemplo, considerarmos que uma vez que o dispositivo esteja suficientemente distante de outros, o potencial elétrico na direção perpendicular às fronteiras artificiais será atenuado. Ou seja, poderemos supor $\partial\psi/\partial\vec{n} = 0$, onde \vec{n} é um vetor perpendicular à fronteira artificial. Destes modo:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\vec{n}} = \text{grad } \psi \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.58)$$

mas $\vec{E} = -\text{grad } \psi$ logo:

$$\vec{E} \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.59)$$

Argumento semelhante pode ser usado no caso dos vetores densidade de corrente. Uma vez que os dispositivos vizinhos estão localizados a uma distância razoável, é possível considerarmos que na direção das fronteiras artificiais a densidade de corrente será atenuada. Sendo assim, podemos supor:

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.60)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.61)$$

Agrupando as condições de contorno para as fronteiras artificiais, ficamos com:

$$\vec{E} \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.62)$$

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.63)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.64)$$

3.5.3 Interface semiconductor-isolante

A fronteira \overline{CF} do dispositivo MOSFET da Fig.3.4 corresponde à interface entre o semiconductor e o isolante. A aplicação da Lei de Gauss determinará condições de fronteira para o campo elétrico:

$$\epsilon_{sem} \cdot \vec{E}_{sem} \cdot \vec{n} - \epsilon_{iso} \cdot \vec{E}_{iso} \cdot \vec{n} = Q_{int} \quad (3.65)$$

onde, ϵ_{sem} e ϵ_{iso} correspondem às permissividades elétricas do semiconductor e do isolante, e $\vec{E}_{sem} \cdot \vec{n}$ e $\vec{E}_{iso} \cdot \vec{n}$ são os módulos das componentes dos vetores campo elétrico na direção perpendicular à interface. O termo Q_{int} representa a carga armadilhada na interface cujo valor aproximado em um processo MOS clássico é de $Q_{int} \approx 9 \times 10^{10} \text{átomos.cm}^{-3}$.

No caso dos vetores densidade de corrente, as componentes perpendiculares devem corresponder à taxa de recombinação superficial R_{sup} . Ou seja:

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n} = -q \cdot R_{sup} \quad (3.66)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{p} = q \cdot R_{sup} \quad (3.67)$$

Novamente aqui, poderemos supor velocidade de recombinação infinita de modo que $R_{sup} = 0$.

Aglutinando as equações obtidas, no caso da interface semiconductor-isolante teremos:

$$\epsilon_{sem} \cdot \vec{E}_{sem} \cdot \vec{n} - \epsilon_{iso} \cdot \vec{E}_{iso} \cdot \vec{n} = Q_{int} \quad (3.68)$$

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n} = -q \cdot R_{sup} \quad (3.69)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{p} = q \cdot R_{sup} \quad (3.70)$$

Capítulo 4

Discretização das Equações Básicas

4.1 Considerações Gerais

No capítulo anterior, elaboramos um modelo físico para os dispositivos semicondutores, e estudamos as condições de contorno que se aplicam à estrutura de um transistor MOS.

A partir do modelo construído foram derivadas equações básicas, que em conjunto com as condições de contorno, formam um sistema de equações diferenciais parciais cujas incógnitas são (ψ , n e p):

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E} &= p - n - N \\ \operatorname{div}(D_n \cdot \operatorname{grad} n - \mu_n \cdot n \cdot \vec{E}) &= R(\psi, n, p) \\ \operatorname{div}(D_p \cdot \operatorname{grad} p + \mu_p \cdot p \cdot \vec{E}) &= R(\psi, n, p) \end{aligned} \tag{4.1}$$

A solução analítica deste sistema, entretanto, é impossível de ser obtida. Por este motivo, frequentemente o dispositivo é dividido em regiões, onde são realizadas aproximações lineares que levam à determinação de soluções analíticas.

No caso do MOSFET, estas aproximações são conhecidas como *modelo de canal gradual* [Shockley 62], e têm como pressuposto o fato de que a componente transversal (E_y) do campo elétrico é muito maior que a componente lateral do mesmo (E_x). Desde que E_x depende do comprimento do canal L , este modelo somente é válido em dispositivos de canal longo, onde não ocorram interações entre as regiões de depleção de fonte e dreno.

Alguns critérios normalmente são utilizados na definição do que sejam transistores MOS de canal longo ou curto. O critério mais frequentemente empregado é aquele que classifica os transistores de canal curto como transistores no qual $L < W_S + W_D$, onde W_S e W_D são respectivamente as larguras de depleção de fonte e dreno.

Utilizando este critério, e tomando-se os parâmetros físicos normalmente utilizados na fabricação do MOSFET, consideraremos transistores de canal curto como aqueles no qual $L < 1.0\mu m$.

Uma vez que o modelo de canal gradual não é válido para transistores de canal curto, e desde que o sistema (4.1) não permite uma solução analítica, a análise destes transistores deve ser feita através da aplicação de métodos numéricos.

Qualquer aproximação numérica para a solução de um sistema de equações diferenciais parciais, como as equações básicas, consiste essencialmente de três tarefas.

Primeiramente o domínio R do sistema, ou seja a estrutura geométrica do dispositivo, é dividido em um número adequado de sub-domínios ∂R_k , nos quais a solução das equações pode ser aproximada com a precisão desejada.

Numa segunda etapa, as equações diferenciais são aproximadas em ∂R_k , resultando em um sistema de equações algébricas não-lineares dentro de cada sub-domínio, cujas variáveis dependentes são os valores das variáveis contínuas (ψ, n, p) em pontos discretos do sub-domínio ∂R_k . Obviamente que a realização destas aproximações implica em um conhecimento prévio do comportamento das variáveis dependentes dentro do sub-domínio em questão. Uma vez que cada sub-domínio contribui com um sistema de equações algébricas não-lineares, fica fácil antever que o resultado desta etapa será um grande sistema de equações algébricas não-lineares, cujas variáveis serão os valores das incógnitas das equações básicas, em cada um dos pontos discretizados que compõem o domínio geométrico do dispositivo (ψ_k, n_k, p_k) .

A terceira etapa do problema consiste na solução deste sistema algébrico não-linear, de forma a minimizar o tempo de computação e o espaço de memória a serem consumidos nesta tarefa.

Devemos ressaltar, que o procedimento acima mencionado não produzirá uma solução analítica para o problema formulado. No melhor dos casos, o que poderemos obter será uma solução exata para o sistema de equações algébricas não-lineares determinado a partir da discretização do problema. Deste modo, a solução numérica produzida estará tão próxima da solução exata quanto mais fina for a divisão da estrutura geométrica do dispositivo em sub-domínios, e quanto mais precisa for a aproximação realizada nas equações básicas dentro de cada sub-domínio.

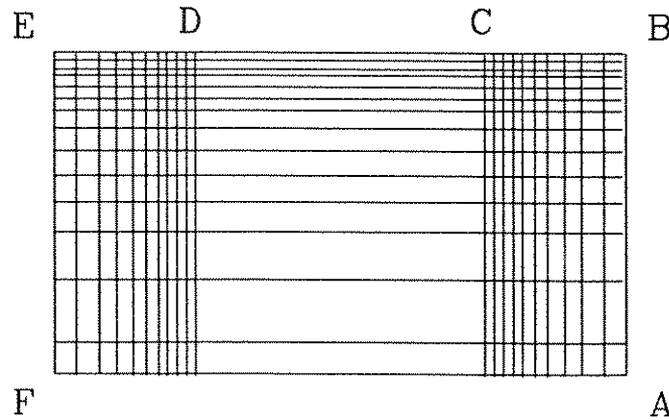


Figura 4.1: Malha para discretização usando diferenças-finitas

4.2 Técnicas de Discretização

As técnicas numéricas mais comumente utilizadas na discretização das equações básicas dos semicondutores, são o método de diferenças-finitas e o método de elementos-finitos. Ambos os métodos são baseados na realização de aproximações para as equações básicas, dentro dos sub-domínios ∂R_k , em que foi dividida a estrutura do dispositivo.

4.2.1 Método de diferenças-finitas

O método de diferenças-finitas utiliza uma discretização da estrutura do dispositivo, na qual os sub-domínios resultantes ∂R_k têm a forma retangular. Isto é feito dividindo-se o dispositivo em uma malha de pontos de intersecção, formada por retas paralelas ao eixo coordenados, conforme pode ser visto na Fig.4.1.

Deste modo, o método de diferenças-finitas torna-se particularmente interessante para dispositivos que apresentem uma estrutura geométrica mais simples e regular, como por exemplo, os transistores MOS.

Uma vez que a malha de discretização tenha sido gerada, os termos diferenciais das equações a discretizar são substituídos por diferenças finitas derivadas da sua expansão em série de Taylor. Como consequência, as equações diferenciais são substituídas por equações algébricas cuja solução é feita numericamente.

A técnica de diferenças-finitas tem sido exhaustivamente aplicada ao modelamento de dispositivos semicondutores, resultando em um grande volume de

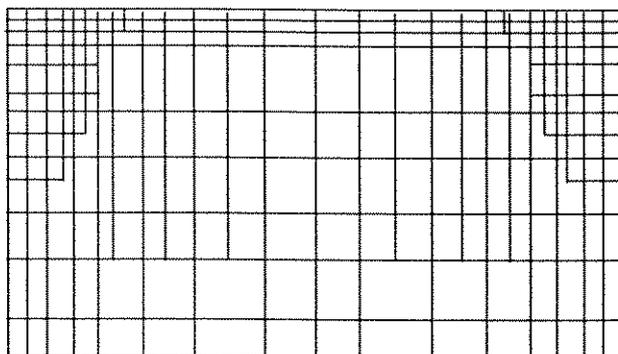


Figura 4.2: Malha para discretização usando caixas-finitas

informações valiosas sobre suas propriedades de estabilidade e de convergência numérica. Os primeiros trabalhos em simulação numérica de dispositivos semicondutores, tais como [Gummel 64], [Scharfetter 69] e [Slotboom 73], foram realizados utilizando esquemas de diferenças-finitas uni e bidimensionais.

É muito comum encontrarmos nos dispositivos semicondutores, pequenas regiões de suas estruturas onde ocorrem variações muito rápidas de ψ , n e p (p.ex. junções p-n, barreiras Schottky, etc...). Sendo assim, faz-se necessário nestas regiões a presença de malhas muito finas, que permitam uma aproximação adequada para estas variáveis. A maior desvantagem do método de diferenças-finitas, está justamente no fato de que a presença de uma malha fina em uma dada região do dispositivo, implicará na presença de uma malha idênticamente fina em outras regiões. Isto resulta em um aumento considerável de pontos em uma certa região do dispositivo, onde a suavidade das variações de ψ , n e p , não demanda uma malha muito fina.

Uma solução para este problema foi relatado alguns anos atrás [Franz 83], com o nome de método das *caixas-finitas*. Este método, na realidade uma generalização do método de diferenças-finitas, procura resolver o problema evitando o prolongamento desnecessário das linhas que formam a malha de discretização (Fig.4.2). Ou seja, as linhas que formam a malha são prolongadas somente até determinadas regiões onde existe a real necessidade de um número maior de pontos.

Este método vem ganhando muitos adeptos, desde que oferece as potencialidades do método de diferenças-finitas, aliado a uma redução no número de

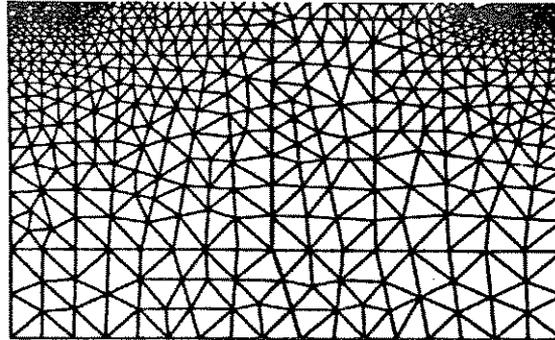


Figura 4.3: Malha para discretização usando elementos-finitos

pontos de discretização da malha. Como consequência imediata, isto traz uma diminuição considerável no tempo de computação.

4.2.2 Elementos-finitos

O método de elementos-finitos foi originalmente desenvolvido, por volta de 1940, para ser utilizado na análise estrutural de problemas em Engenharia. A aplicação de elementos-finitos em dispositivos semicondutores, foi primeiramente descrita no início dos anos 70 [Buturla 75].

Apesar de serem ambos baseados na discretização da estrutura do dispositivo, a abordagem matemática utilizada em elementos-finitos é fundamentalmente diferente daquela usada no método de diferenças-finitas.

Em elementos-finitos, as equações são discretizadas tomando-se como base uma função analítica simples, que se aproximará da solução desejada dentro de cada sub-domínio (elemento) em que é dividido o dispositivo. A solução global é obtida então, através da combinação das soluções para cada um dos sub-domínios.

Diferentemente de diferenças-finitas entretanto, o método de elementos-finitos possibilita que a divisão da estrutura do dispositivo seja feita usando sub-domínios (elementos) com outras formas que não apenas a retangular (Fig.4.3). Isto permite uma flexibilidade maior na investigação de dispositivos semicondutores com geometrias não-planares, e com distribuições fortemente não-lineares de campo elétrico e densidade de portadores [Snowden 86].

Outra importante vantagem deste método sobre diferenças-finitas é o fato de que nenhuma complicação adicional é introduzida ao problema, caso sejam utilizados sub-domínios (elementos) com tamanhos diferentes dentro de um mesmo

dispositivo.

Apesar de suas inúmeras qualidades, o método de elementos-finitos tem apresentado algumas desvantagens quando aplicado às equações básicas dos dispositivos semicondutores. Estas dificuldades estão relacionadas principalmente com a implementação do método, e com os problemas associados à sua convergência e estabilidade [Snowden 86].

Deste modo, no trabalho de discretizar o sistema (4.1) nós optamos aqui por utilizar o método de diferenças-finitas. Os argumentos que nos levaram a esta escolha não são rigorosamente formais, desde que sob o ponto de vista matemático ambos os métodos são mutuamente exclusivos. No entanto, na solução do sistema de equações básicas dos dispositivos semicondutores, o método de diferenças-finitas tem se mostrado mais vantajoso [Snowden 86]. Isto porque a utilização de diferenças-finitas resulta, conforme notamos acima, em uma implementação mais simplificada, além de produzir soluções com convergência garantida dentro de certas faixas de operação do dispositivo.

4.3 Discretização da Equação Geral $div \vec{F} = g$

De acordo com o que foi mencionado anteriormente, no método clássico de diferenças-finitas, o domínio R das equações básicas é dividido em sub-domínios ∂R_k por meio de uma malha formada por um conjunto de linhas paralelas aos eixos coordenados \vec{a}_x e \vec{a}_y . No caso específico dos dispositivos MOSFET, esta tarefa é simplificada, uma vez que as fronteiras do domínio R deste dispositivo são também linhas retas paralelas aos eixos de coordenados.

Deste modo, são distribuídas dentro do domínio retangular R (Fig.4.1), n_x linhas paralelas ao eixo-y e n_y linhas paralelas ao eixo-x. A primeira e última linha em cada direção coincidem com as fronteiras do domínio que limita o dispositivo. Sendo assim, teremos $n_x \cdot n_y$ pontos de intersecção nos quais buscaremos uma solução aproximada para o sistema (4.1).

A escolha da forma como a malha estará distribuída dentro do dispositivo, é uma tarefa extremamente importante que depende fundamentalmente do conhecimento qualitativo prévio, da distribuição da solução (ψ, n, p) ao longo do domínio R . Naquelas regiões, onde se espera que ocorram fortes gradientes de potencial e de densidade de portadores (p.ex. junções, interfaces, etc...), devem ser alocados um número maior de pontos de discretização. Por outro lado, nas regiões onde a distribuição destas grandezas é mais suave (p.ex. substrato) a malha poderá ser consideravelmente menos densa.

Obviamente que a utilização de algum método automático de geração de ma-

lha pode contribuir sensivelmente para a redução do número de pontos utilizados na simulação, na medida em que o refinamento da malha passará a ser feito à medida que a computação progredir. Desde que estamos procurando soluções simplificadas para o problema da simulação de dispositivos MOSFET, não utilizaremos neste trabalho métodos adaptativos para geração de malhas.

Resumindo o que foi dito: as malhas utilizadas na solução de problemas por diferenças-finitas em transistores MOS, devem possuir altas densidades de pontos nas regiões de fonte, dreno, interface semiconductor-isolante e vizinhanças.

Deste modo, se considerarmos os segmentos \overline{DE} , \overline{BC} e \overline{CD} respectivamente associados à fonte, dreno e interface, a malha da Fig.4.1 pode ser considerada uma boa candidata à solução do problema de discretizar a estrutura MOSFET. Matematicamente esta malha pode ser definida como um conjunto de pontos M , tal que $M = \{(x_i, y_j), 1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y\}$.

A discretização do sistema (4.1) será feita em uma pequena região compreendendo o ponto (x_i, y_j) e seus quatro vizinhos (x_{i-1}, y_j) , (x_{i+1}, y_j) , (x_i, y_{j-1}) e (x_i, y_{j+1}) . O ponto central (x_i, y_j) , que define a região onde será realizada a discretização, está separado dos seus vizinhos por incrementos que valem :

$$h_i = x_i - x_{i-1} \quad (4.3)$$

$$h_{i+1} = x_{i+1} - x_i \quad (4.4)$$

$$k_j = y_j - y_{j-1} \quad (4.5)$$

$$k_{j+1} = y_{j+1} - y_j \quad (4.6)$$

Este procedimento, normalmente conhecida como método dos cinco pontos, é esquematizado na Fig.4.4. Naquela figura, o sub-domínio ∂R_{ij} é representado pela região contida no interior do retângulo tracejado ∂C_{ij} , cujos lados interceptam as linhas de discretização em seus pontos médios. Estes pontos médios têm portanto, coordenadas definidas por :

$$x_{i+1/2} = (x_{i+1} + x_i)/2 \quad (4.7)$$

$$x_{i-1/2} = (x_i + x_{i-1})/2 \quad (4.8)$$

$$y_{j-1/2} = (y_j + y_{j-1})/2 \quad (4.9)$$

$$y_{j+1/2} = (y_{j+1} + y_j)/2 \quad (4.10)$$

Conforme mencionamos anteriormente, para cada ponto (x_i, y_j) e seus domínios associados, vale o sistema de equações básicas dos dispositivos semicondutores (sistema (4.1)). Uma observação mais cuidadosa deste sistema permite-nos

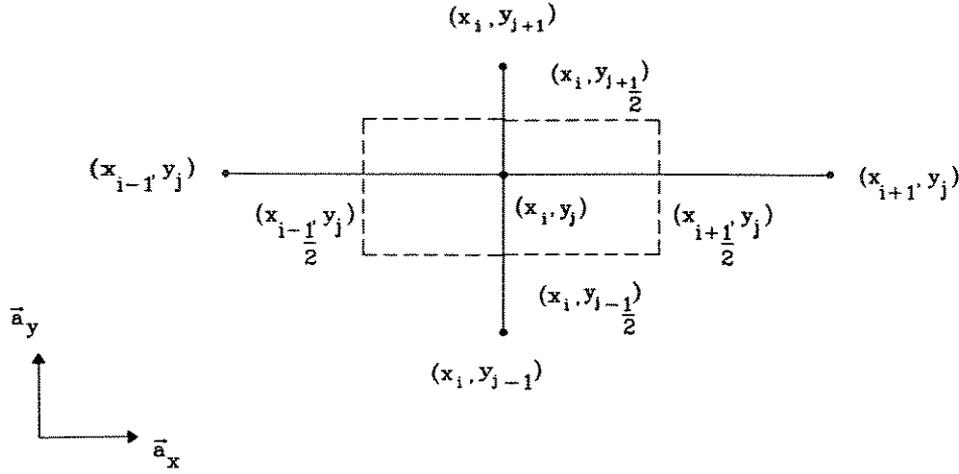


Figura 4.4: Sub-domínio ∂R_{ij} e pontos vizinhos associados

identificar uma grande semelhança entre tipos das equações básicas que compõem o mesmo. Utilizando-nos desta semelhança, podemos reescrever as equações básicas na forma:

$$\text{div } \vec{F} = g \quad (4.11)$$

onde, $\vec{F} = f_x \cdot \vec{a}_x + f_y \cdot \vec{a}_y$ é uma função vetorial, e g , uma função escalar, com \vec{F} e g dependendo do tipo da equação reescrita.

Deste modo, discretizar o sistema (4.1) significa de uma forma geral realizar a discretização da equação genérica Eq.(4.11). O problema que se coloca então, será o de se obter uma discretização para a equação diferencial $\text{div } \vec{F} = g$, dentro de cada um dos sub-domínios ∂R_{ij} que compõem o domínio da estrutura do dispositivo MOSFET.

A solução para Eq.(4.11) pode ser obtida através da aplicação, em ambos os membros, de integração no sub-domínio ∂R_{ij} :

$$\iint_{\partial R_{ij}} \text{div } \vec{F} \, dx \, dy = \iint_{\partial R_{ij}} g \, dx \, dy \quad (4.12)$$

Definiremos agora duas etapas na solução da Eq.(4.12). Numa primeira etapa, realizaremos a discretização da integral dupla do membro à esquerda desta equação. Em seguida, determinaremos uma aproximação para a integral da função g no membro da direita. Assim sendo, podemos definir:

$$M_e = \iint_{\partial R_{ij}} \operatorname{div} \vec{F} \, dx \, dy \quad (4.13)$$

$$M_d = \iint_{\partial R_{ij}} g \, dx \, dy \quad (4.14)$$

Inicialmente investigaremos a discretização de M_e . O cálculo da integral de \vec{F} dentro do sub-domínio ∂R_{ij} , pode ser simplificada através da aplicação direta do Teorema da Divergência:

$$\iint_{\partial R_{ij}} \operatorname{div} \vec{F} \, dx \, dy = \oint_{\partial C_{ij}} \vec{F} \cdot \vec{n} \, ds \quad (4.15)$$

onde ds é o elemento de linha sobre o caminho retangular ∂C_{ij} , \vec{n} o vetor unitário normal ao caminho de integração, e $\vec{F} \cdot \vec{n}$ a projeção do vetor \vec{F} na direção perpendicular a fronteira ∂C_{ij} .

A fronteira ∂C_{ij} é formada pela união dos lados do retângulo tracejado da Fig.4.4, ou seja $\partial C_{ij} = \partial C_{ij}^1 \cup \partial C_{ij}^2 \cup \partial C_{ij}^3 \cup \partial C_{ij}^4$. Deste modo, a integral fechada da Eq.(4.15) é equivalente ao somatório das quatro integrais de linha correspondentes a cada um dos lados ∂C_{ij}^k [$k = 1, 4$] que formam a fronteira ∂C_{ij} . Substituindo a Eq.(4.15) na Eq.(4.13) teremos:

$$M_e = \sum_{k=1}^4 \int_{\partial C_{ij}^k} \vec{F} \cdot \vec{n} \, ds \quad (4.16)$$

A fim de simplificar a nomenclatura iremos redefinir os termos integrais da Eq.(4.16) como sendo:

$$I_k = \int_{\partial C_{ij}^k} \vec{F} \cdot \vec{n} \, ds \quad (4.17)$$

A Eq.(4.16) assume então a forma :

$$M_e = \sum_{k=1}^4 I_k \quad (4.18)$$

Os limites de integração para cada uma das integrais I_k são definidos portanto como:

$$\partial C_{ij}^1 : x = x_{i+1/2} \text{ e } y_j - k_j/2 \leq y \leq y_j + k_{j+1}/2 \quad (4.19)$$

$$\partial C_{ij}^2 : y = y_{j+1/2} \text{ e } x_i - h_i/2 \leq x \leq x_i + h_{i+1}/2 \quad (4.20)$$

$$\partial C_{ij}^3 : x = x_{i-1/2} \text{ e } y_j - k_j/2 \leq y \leq y_j + k_{j+1}/2 \quad (4.21)$$

$$\partial C_{ij}^4 : y = y_{j-1/2} \text{ e } x_i - h_i/2 \leq x \leq x_i + h_{i+1}/2 \quad (4.22)$$

As componentes do vetor unitário \vec{n} também variam ao longo da fronteira, assumindo em cada um dos lados os seguintes valores :

$$\partial C_{ij}^1 : \vec{n} = \vec{a}_x \quad (4.23)$$

$$\partial C_{ij}^2 : \vec{n} = \vec{a}_y \quad (4.24)$$

$$\partial C_{ij}^3 : \vec{n} = -\vec{a}_x \quad (4.25)$$

$$\partial C_{ij}^4 : \vec{n} = -\vec{a}_y \quad (4.26)$$

O problema agora passa a ser o de calcular os termos I_k do somatório da Eq.(4.16), em cada um dos lados da fronteira ∂C_{ij} :

Sendo assim, poderemos realizar a discretização das integrais I_k para cada um dos lados da fronteira ∂C_{ij} , ou seja :

$$I_1 = \int_{y_j - k_j/2}^{y_j + k_{j+1}/2} f_x dy \quad (4.27)$$

$$I_2 = - \int_{x_i + h_{i+1}/2}^{x_i - h_i/2} f_y dx \quad (4.28)$$

$$I_3 = \int_{y_j + k_{j+1}/2}^{y_j - k_j/2} f_x dy \quad (4.29)$$

$$I_4 = - \int_{x_i + h_i/2}^{x_i + h_{i+1}/2} f_y dx \quad (4.30)$$

A aproximação para as integrais acima deve ser feita com muito cuidado de modo a permitir uma correta discretização para M_e . Suporemos por hipótese, que as variações das componentes f_x e f_y em ∂C_{ij}^k sejam tão suaves, que podemos considerá-las constantes e iguais aos seus valores nos pontos médios de ∂C_{ij}^k . Isto será verdadeiro se pudermos garantir uma malha de discretização suficientemente densa em todas as regiões do dispositivo. Tomando esta suposição como verdadeira, poderemos aproximar as integrais I_k por \bar{I}_k , dadas por:

$$\begin{aligned} \bar{I}_1 &= f_x(x_{i+1/2}, y_j) \cdot \Delta y \\ &= f_x(x_{i+1/2}, y_j) \cdot [(y_j + k_{j+1}/2) - (y_j - k_j/2)] \\ &= f_x(x_{i+1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2 \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned}
\bar{I}_2 &= -f_y(x_i, y_{j+1/2}) \cdot \Delta x \\
&= -f_y(x_i, y_{j+1/2}) \cdot [(x_i - h_i/2) - (x_i + h_{i+1}/2)] \\
&= f_y(x_i, y_{j+1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2
\end{aligned} \tag{4.32}$$

$$\begin{aligned}
\bar{I}_3 &= f_x(x_{i-1/2}, y_j) \cdot \Delta y \\
&= f_x(x_{i-1/2}, y_j) \cdot [(y_j - k_j/2) - (y_j + k_{j+1}/2)] \\
&= -f_x(x_{i-1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2
\end{aligned} \tag{4.33}$$

$$\begin{aligned}
\bar{I}_4 &= -f_y(x_i, y_{j-1/2}) \cdot \Delta x \\
&= -f_y(x_i, y_{j-1/2}) \cdot [(x_i + h_{i+1}/2) - (x_i - h_i/2)] \\
&= -f_y(x_i, y_{j-1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Uma vez realizada a discretização das integrais I_k , devemos concentrar nossa atenção agora na linearização das componentes f_x e f_y . No caso dos dispositivos semicondutores, conforme vimos anteriormente, estas componentes dependem de (ψ, n, p) através de funções fortemente não-lineares. Deste modo, a linearização destas componentes deve ser feita de forma cautelosa a fim de evitar erros de convergência na solução numérica desejada. O problema de estimar uma aproximação para as componentes f_x e f_y dentro de ∂R_{ij} , não será estudado entretanto aqui nesta secção. Por enquanto, iremos apenas supor que estas aproximações possam ser obtidas, e que sejam representadas pelas funções \bar{f}_x e \bar{f}_y . Substituindo-as nas equações Eqs.(4.31)–(4.34) teremos :

$$\bar{I}_1 = \bar{f}_x(x_{i+1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2 \tag{4.35}$$

$$\bar{I}_2 = \bar{f}_y(x_i, y_{j+1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2 \tag{4.36}$$

$$\bar{I}_3 = -\bar{f}_x(x_{i-1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2 \tag{4.37}$$

$$\bar{I}_4 = -\bar{f}_y(x_i, y_{j-1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2 \tag{4.38}$$

Finalmente, substituindo as aproximações das Eqs.(4.35)–(4.38) na Eq.(4.18) iremos obter uma discretização para M_e :

$$M_e = \sum_{k=1}^4 \bar{I}_k \tag{4.39}$$

$$M_e = \overline{f_x}(x_{i+1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2 + \overline{f_y}(x_i, y_{j+1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2 - \\ - \overline{f_x}(x_{i-1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2 - \overline{f_y}(x_i, y_{j-1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2 \quad (4.40)$$

A etapa seguinte, na determinação de uma discretização para a equação geral $div \vec{F} = g$, consistirá na obtenção de uma aproximação para o membro da direita M_d (Eq.(4.14)). Supondo que na malha de discretização definida os sub-domínios ∂R_{ij} são tomados suficientemente pequenos, M_d pode ser aproximado por \overline{M}_d de modo que:

$$\overline{M}_d = g(x_i, y_j) \cdot A_{\partial R_{ij}} \quad (4.41)$$

onde, $A_{\partial R_{ij}}$ representa a área do retângulo que forma o sub-domínio ∂R_{ij} , e $g(x_i, y_j)$ é o valor da função g no ponto (x_i, y_j) . Observando a Fig.4.4 podemos determinar $A_{\partial R_{ij}} = (h_i/2 + h_{i+1}/2) \cdot (k_j/2 + k_{j+1}/2)$. Substituindo na Eq.(4.41) teremos :

$$\overline{M}_d = g(x_i, y_j) \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \quad (4.42)$$

Semelhantemente ao que foi dito na obtenção das aproximações para as componentes de \vec{F} , a malha utilizada deverá ser projetada adequadamente de modo a evitar também que variações abruptas em g resultem em erros no processo numérico.

Finalmente, concluímos a discretização da equação geral da divergência substituindo as aproximações para os membros M_e Eq.(4.40) e M_d Eq.(4.42) na Eq.(4.11):

$$\overline{f_x}(x_{i+1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2 + \overline{f_y}(x_i, y_{j+1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2 - \\ - \overline{f_x}(x_{i-1/2}, y_j) \cdot (k_{j+1} + k_j)/2 - \overline{f_y}(x_i, y_{j-1/2}) \cdot (h_{i+1} + h_i)/2 = \\ = g(x_i, y_j) \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \quad (4.43)$$

4.4 Discretização da Equação de Poisson

A equação de Poisson normalizada define uma relação entre a divergência do vetor campo elétrico \vec{E} e a densidade volumétrica de carga ρ :

$$div \vec{E} = \rho \quad (4.44)$$

Ao compararmos a equação de Poisson com a equação de divergência (Eq.(4.11)), cuja discretização foi realizada anteriormente (Sec.4.3), identificamos:

$$\vec{F} = \vec{E} \quad (4.45)$$

$$g = \rho \quad (4.46)$$

Deste modo, a fim de que a discretização realizada na Sec.4.3 possa ser feita analogamente para a Eq.(4.44), deveremos supor que as hipóteses feitas para o vetor \vec{F} sejam válidas também para \vec{E} . Assim sendo, iremos supor que as componentes E_x e E_y do vetor campo elétrico \vec{E} não variem dentro de cada um dos intervalos correspondentes aos lados do retângulo tracejado ∂C_{ij} (Fig.4.4).

Aplicando à equação de Poisson a mesma discretização que foi feita para a equação geral da divergência (Eq.(4.11)) teremos de acordo com a Eq.(4.40):

$$\begin{aligned} \bar{E}_x|_{i+1/2,j} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} + \bar{E}_y|_{i,j+1/2} \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} - \bar{E}_x|_{i-1/2,j} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \\ - \bar{E}_y|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} = \bar{\rho}_{i,j} \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \end{aligned} \quad (4.47)$$

onde os termos \bar{E}_x e \bar{E}_y seguidos de uma barra e um índice correspondem às aproximações para as componentes do vetor \vec{E} tomadas nos pontos médios dos intervalos ∂C_{ij}^k . A função arbitrária g , anteriormente definida, identifica agora ρ . Assim sendo, definimos a aproximação $\bar{g} = \bar{\rho}_{i,j}$, onde $\bar{\rho}_{i,j}$ é o valor da densidade volumétrica de carga aproximada no ponto (x_i, y_j) .

A próxima etapa no problema de discretizar a Eq.(4.44) é a determinação das aproximações \bar{E}_x e \bar{E}_y nos pontos médios dos intervalos ∂C_{ij}^k , e a obtenção de $\bar{\rho}_{i,j}$.

Desde que consideramos um campo elétrico constante ao longo dos intervalos ∂C_{ij}^k e uma vez que $\vec{E} = -grad \psi$, é razoável supor que as aproximações \bar{E}_x e \bar{E}_y nos pontos médios de ∂C_{ij}^k possam ser derivadas através da interpolação central dos valores do potencial elétrico nos pontos médios dos intervalos de discretização:

$$\bar{E}_x|_{i+1/2,j} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}|_{x_{i+1/2},y_j} = -\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{h_{i+1}} \quad (4.48)$$

$$\bar{E}_y|_{i,j+1/2} = -\frac{\partial \psi}{\partial y}|_{x_i,y_{j+1/2}} = -\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{k_{j+1}} \quad (4.49)$$

$$\bar{E}_x|_{i-1/2,j} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}|_{x_{i-1/2},y_j} = -\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{h_i} \quad (4.50)$$

$$\bar{E}_y|_{i,j-1/2} = -\frac{\partial \psi}{\partial y}|_{x_i,y_{j-1/2}} = -\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{k_j} \quad (4.51)$$

Por outro lado, a densidade de carga normalizada $\bar{\rho}_{i,j}$ vale:

$$\bar{\rho}_{i,j} = p_{i,j} - n_{i,j} - N_{i,j} \quad (4.52)$$

onde $p_{i,j}$, $n_{i,j}$ e $N_{i,j}$ correspondem respectivamente à densidade normalizada de lacunas, elétrons e à densidade líquida de dopantes no substrato. Substituindo as aproximações das Eqs.(4.48)–(4.52) na Eq.(4.47) teremos:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} + \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} + \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} + \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot \psi_{i,j} \\ & - \left(\frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} \right) \cdot \psi_{i-1,j} - \left(\frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} \right) \cdot \psi_{i+1,j} \\ & - \left(\frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot \psi_{i,j-1} - \left(\frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} \right) \cdot \psi_{i,j+1} \\ & = \bar{\rho}_{i,j} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \end{aligned} \quad (4.53)$$

que corresponde à equação de Poisson discretizada em um ponto (x_i, y_j) no interior do subdomínio $\partial R_{i,j}$.

4.5 Discretização da Equação de Continuidade

A equação da continuidade normalizada relaciona basicamente a divergência do vetor densidade de corrente elétrica para elétrons e lacunas (\vec{J}_n e \vec{J}_p) com a função $R(\psi, n, p)$ que descreve o termo de geração e recombinação de portadores no interior do dispositivo:

$$\text{div } \vec{J}_n = R(\psi, n, p) \quad (4.54)$$

$$\text{div } \vec{J}_p = -R(\psi, n, p) \quad (4.55)$$

As equações normalizadas para \vec{J}_n e \vec{J}_p são provenientes do modelo de deriva-difusão para o movimento de portadores:

$$\vec{J}_n = -(\mu_n \cdot n \cdot \text{grad } \psi - D_n \cdot \text{grad } n) \quad (4.56)$$

$$\vec{J}_p = -(\mu_p \cdot p \cdot \text{grad } \psi + D_p \cdot \text{grad } p) \quad (4.57)$$

onde μ_n e μ_p representam as mobilidades, e D_n e D_p os coeficientes de difusão.

Semelhantemente ao que foi feito na Sec.4.4, poderemos identificar na equação da divergência (Eq.(4.11)) os termos correspondentes às equações de continuidade (Eqs.(4.54)–(4.55)):

- Equação para a densidade de corrente dos elétrons:

$$\vec{F} = \vec{J}_n \quad (4.58)$$

$$g = R(\psi, n, p) \quad (4.59)$$

- Equação para a densidade de corrente das lacunas:

$$\vec{F} = \vec{J}_p \quad (4.60)$$

$$g = -R(\psi, n, p) \quad (4.61)$$

Também manteremos para as densidades de corrente as mesmas hipóteses realizadas sobre o vetor \vec{F} , ou seja: \vec{J}_n e \vec{J}_p apresentam variações suficientemente pequenas dentro dos subdomínios ∂R_{ij}^k , de modo que podemos considerá-los constante. Por outro lado, suporemos que o termo de recombinação $R(\psi, n, p)$ não sofre grandes variações dentro do subdomínio ∂R_{ij} , de maneira que as aproximações realizadas para g permanecem corretas também para $R(\psi, n, p)$.

Deste modo, substituindo na Eq.(4.11) a função vetorial genérica \vec{F} pela densidade de corrente e a função escalar g pelo termo de recombinação, seremos capazes de utilizar a mesma discretização já analisada anteriormente:

$$\begin{aligned} \bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} + \bar{J}_{ny}|_{i,j+1/2} \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} - \bar{J}_{nx}|_{i-1/2,j} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \\ - \bar{J}_{ny}|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} = \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \end{aligned} \quad (4.62)$$

$$\begin{aligned} \bar{J}_{px}|_{i+1/2,j} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} + \bar{J}_{py}|_{i,j+1/2} \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} - \bar{J}_{px}|_{i-1/2,j} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \\ - \bar{J}_{py}|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} = -\bar{R}_{i,j} \cdot \frac{(h_i + h_{i+1})}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \end{aligned} \quad (4.63)$$

onde os valores de \bar{J}_{nx} e \bar{J}_{ny} tomados nas coordenadas respectivas, correspondem às funções de aproximação para as componentes em x e y do vetor densidade de corrente de elétrons. A mesma nomenclatura foi adotada para as componentes da densidade de corrente de lacunas \bar{J}_{px} e \bar{J}_{py} . Representado deste modo, a

componente aproximada no eixo-x do vetor densidade de corrente de elétrons no ponto $(x_{i+1/2}, y_j)$ vale $\bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j}$.

A observação das Eqs.(4.62)–(4.63) demonstra a necessidade de se obter as aproximações para as componentes de \bar{J}_n e \bar{J}_p nos pontos médios dos intervalos ∂C_{ij}^k . Com relação ao termo de recombinação $R(\psi, n, p)$, consideraremos que o mesmo pode ser adequadamente aproximado no ponto (x_i, y_j) pela função $\bar{R}_{i,j} = \bar{R}(\psi_{i,j}, n_{i,j}, p_{i,j})$.

A equação das componentes J_{nx} e J_{ny} do vetor densidade de corrente de elétrons será obtida da Eq.(4.56):

$$J_{nx} = -\mu_n \cdot n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} + D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x} \quad (4.64)$$

$$J_{ny} = -\mu_n \cdot n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} + D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial y} \quad (4.65)$$

Semelhantemente as componentes J_{px} e J_{py} podem ser obtidas da Eq.(4.57):

$$J_{px} = -\mu_p \cdot p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} - D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \quad (4.66)$$

$$J_{py} = -\mu_p \cdot p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} - D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial y} \quad (4.67)$$

As Eqs.(4.64)–(4.67) devem ser aproximadas adequadamente a fim de obtermos \bar{J}_{nx} , \bar{J}_{ny} , \bar{J}_{px} , \bar{J}_{py} nos pontos médios dos segmentos ∂C_{ij}^k , valores estes necessários à determinação das equações da continuidade discretizadas (Eqs.(4.62)–(4.63)).

Uma vez supondo que seja possível obter as aproximações para n , p e suas derivadas nos pontos médios dos intervalos ∂C_{ij}^k , poderemos substituí-las juntamente com as aproximações para as componentes do campo elétrico (Eqs.(4.48)–(4.51)) nas equações da densidade de corrente para elétrons e lacunas (Eq.(4.64)eq:Jpy). Uma vez feito isto chegamos assim às aproximações para as componentes J_{nx} e J_{ny} :

$$\bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j} = -\mu_n|_{i+1/2,j} \cdot n_{i+1/2,j} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i+1/2,j} + D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x}|_{i+1/2,j} \quad (4.68)$$

$$\bar{J}_{ny}|_{i,j+1/2} = -\mu_n|_{i,j+1/2} \cdot n_{i,j+1/2} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i,j+1/2} + D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x}|_{i,j+1/2} \quad (4.69)$$

$$\bar{J}_{nx}|_{i-1/2,j} = -\mu_n|_{i-1/2,j} \cdot n_{i-1/2,j} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i-1/2,j} + D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x}|_{i-1/2,j} \quad (4.70)$$

$$\bar{J}_{ny}|_{i,j-1/2} = -\mu_n|_{i,j-1/2} \cdot n_{i,j-1/2} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i,j-1/2} + D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x}|_{i,j-1/2} \quad (4.71)$$

onde $\mu_n|_{i+1/2,j}$ e $D_n|_{i+1/2,j}$ por exemplo, representam a mobilidade e a difusividade dos elétrons.

Semelhante resultado pode ser derivado no caso das lacunas:

$$\bar{J}_{px}|_{i+1/2,j} = -\mu_p|_{i+1/2,j} \cdot p_{i+1/2,j} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i+1/2,j} - D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x}|_{i+1/2,j} \quad (4.72)$$

$$\bar{J}_{py}|_{i,j+1/2} = -\mu_p|_{i,j+1/2} \cdot p_{i,j+1/2} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i,j+1/2} - D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x}|_{i,j+1/2} \quad (4.73)$$

$$\bar{J}_{px}|_{i-1/2,j} = -\mu_p|_{i-1/2,j} \cdot p_{i-1/2,j} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i-1/2,j} - D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x}|_{i-1/2,j} \quad (4.74)$$

$$\bar{J}_{py}|_{i,j-1/2} = -\mu_p|_{i,j-1/2} \cdot p_{i,j-1/2} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i,j-1/2} - D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x}|_{i,j-1/2} \quad (4.75)$$

onde $\mu_p|_{i+1/2,j}$ e $D_p|_{i+1/2,j}$ por exemplo, representam a mobilidade e difusividade das lacunas.

Antes de continuarmos, convém lembrar que as derivadas $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ e $\frac{\partial \psi}{\partial y}$ encontradas nas Eqs.(4.68)–(4.75) equivalem às componentes do vetor campo elétrico. Estas componentes foram consideradas constantes ao longo dos intervalos ∂C_{ij}^k , durante a obtenção da discretização da equação de Poisson, e seus valores foram determinados nas Eqs.(4.48)–(4.51). Assim sendo, para determinar as aproximações listadas nas Eqs.(4.68)–(4.75), precisaremos unicamente obter funções que se aproximem corretamente de n , p e de suas derivadas dentro de cada intervalo ∂C_{ij}^k . Na secção que segue investigaremos o comportamento de n , p e derivadas, e estudaremos um método que nos permita obter coerentemente estas funções.

4.5.1 Análise da variação de n e p com ψ

Analogamente ao que foi feito para a equação de Poisson, iremos considerar as componentes dos vetores \bar{J}_n e \bar{J}_p constantes e iguais ao seu valores nos pontos médios dos intervalos da malha de discretização. Por exemplo, a componente em x do vetor densidade de corrente de elétrons (Eq.(4.64)) no intervalo ($x \in [x_i, x_{i+1}], y_j$) será aproximada por $\bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j}$ em todo intervalo.

A substituição de J_{nx} na Eq.(4.64) por sua aproximação $\bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j}$ ofereceu-nos a oportunidade de investigar o comportamento de n no intervalo em questão. Esta substituição resultará em uma equação diferencial em n , válida no domínio $[x_i, x_{i+1}]$:

$$-\mu_n \cdot n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} + D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x} = \bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j} \quad (4.76)$$

e possuindo condições de contorno:

$$n(x_i, y_j) = n_{i,j} \quad (4.77)$$

$$n(x_{i+1}, y_j) = n_{i+1,j} \quad (4.78)$$

A Eq.(4.76) é facilmente resolvida se considerarmos que a derivada parcial do potencial eletrostático ($\frac{\partial \psi}{\partial x}$) é constante, conforme foi dito anteriormente. No decorrer da solução da Eq.(4.76) devemos considerar a validade da relação de Einstein, e supor que a mobilidade e a difusividade são constantes e iguais ao valor de μ_n e μ_p no meio do intervalo considerado. A solução encontrada foi:

$$n(x \in [x_i, x_{i+1}], y_j) = (1 - \delta_{i,j}^x(x, \psi)) \cdot n_{i,j} + \delta_{i,j}^x(x, \psi) \cdot n_{i+1,j} \quad (4.79)$$

onde:

$$\delta_{i,j}^x(x, \psi) = \frac{1 - \exp\left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \cdot \frac{x - x_i}{h_{i+1}}\right)}{1 - \exp\left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t}\right)} \quad (4.80)$$

representa uma função de crescimento de n ao longo de $[x_i, x_{i+1}]$. Devemos notar que $\delta_{i,j}^x(x, \psi)$ varia exponencialmente com a distância normalizada $(x - x_i/h_{i+1})$ dentro deste intervalo. Esta variação depende entretanto, da diferença normalizada dos valores do potencial eletrostático entre os pontos x_i e x_{i+1} ($(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j})/U_t$), conforme pode ser observado no gráfico da Fig.4.5.

Por meio desta figura, verificamos que ao considerar os valores dos potenciais eletrostáticos de dois pontos vizinhos aproximadamente iguais, de modo que possamos supor $\psi_{i+1,j} = \psi_{i,j}$, a função $\delta_{i,j}^x(x, \psi)$ apresentará uma variação linear:

$$\delta_{i,j}^x(x, \psi) = \frac{x - x_i}{h_{i+1}} \quad (4.81)$$

Esta variação linear de $\delta_{i,j}^x(x, \psi)$ acarretará um comportamento também linear em n (Eq.(4.79)), permitindo assim facilmente estimar $n|_{i+1/2,j}$ e supor que $\frac{\partial n}{\partial x} \approx \frac{\partial n}{\partial x}|_{i+1/2,j}$ no intervalo em questão. Como consequência imediata deste resultado, surge a necessidade de que a malha de discretização deva ser suficientemente densa, a fim de que a diferença entre os valores de $\psi_{i+1,j}$ e $\psi_{i,j}$ não seja muito grande. Deste modo, um critério razoável deve ser definido na escolha da malha de

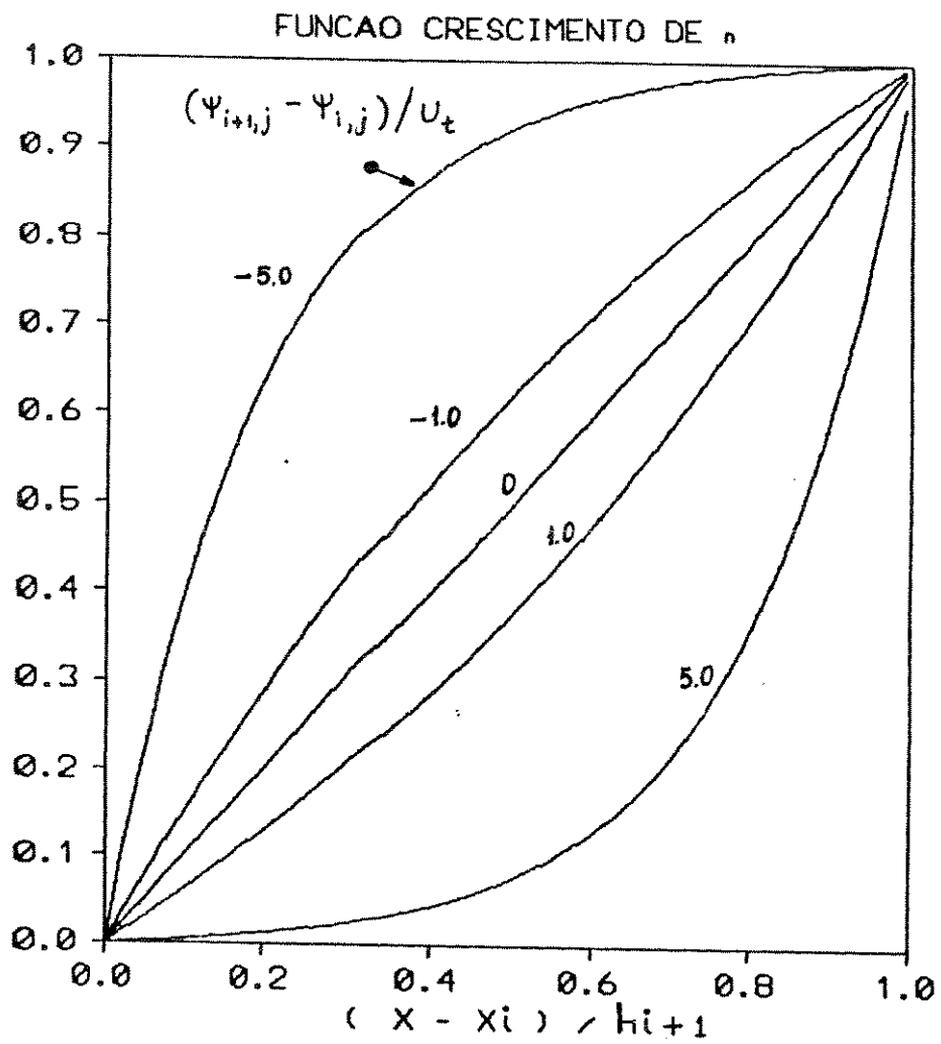


Figura 4.5: Variação de $\delta_{i,j}^x(x, \psi)$ no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$

discretização, a fim de evitar a ocorrência de fortes não-linearidades na variação de n . Tomando-se como base o gráfico da Fig.4.5, poderemos considerar como malhas apropriadas aquelas que produzam diferenças de potenciais, em módulo, menores do que 1. Assim sendo:

$$\left| \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right| < 1 \quad (4.82)$$

ou seja:

$$|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}| < U_t \quad (4.83)$$

A malha de discretização deverá ser construída portanto, de modo que as diferenças dos valores do potencial eletrostático entre dois pontos vizinhos quaisquer, não ultrapasse em módulo $U_t = kT/q \approx 25mV (T = 300K)$. Na simulação de dispositivos de potência (DMOS, por exemplo) ou durante a investigação de tensões de ruptura, frequentemente ocorrem grandes variações de potencial em pequenas regiões do dispositivo. Nestes casos, deve ser tomada uma cautela adicional durante a construção da malha de discretização do dispositivo.

De maneira análoga ao que foi feito para a componente J_{nx} , poderemos determinar a equação diferencial e sua solução para a outra componente J_{ny} :

$$n(x_i, y \in [y_j, y_{j+1}]) = (1 - \delta_{i,j}^y(y, \psi)) \cdot n_{i,j} + \delta_{i,j}^y(y, \psi) \cdot n_{i,j+1} \quad (4.84)$$

onde:

$$\delta_{i,j}^y(y, \psi) = \frac{1 - \exp\left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t} \cdot \frac{y - y_j}{k_{j+1}}\right)}{1 - \exp\left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t}\right)} \quad (4.85)$$

O mesmo procedimento pode ser feito para o caso das lacunas:

$$p(x \in [x_i, x_{i+1}], y_j) = (1 - \delta_{i,j}^x(x, -\psi)) \cdot p_{i,j} + \delta_{i,j}^x(x, -\psi) \cdot p_{i+1,j} \quad (4.86)$$

$$p(x_i, y \in [y_j, y_{j+1}]) = (1 - \delta_{i,j}^y(y, -\psi)) \cdot p_{i,j} + \delta_{i,j}^y(y, -\psi) \cdot p_{i,j+1} \quad (4.87)$$

Esta abordagem do problema, que considera uma aproximação constante para os módulos dos vetores densidade de corrente \vec{J}_n e \vec{J}_p em ∂R_{ij}^k , é uma extensão bi-dimensional das idéias propostas por Scharffeter e Gummel [Gummel 64] e posteriormente estudadas por Mock [Mock 72].

4.5.2 Determinação de aproximações para n , p e suas derivadas

A determinação de aproximações para as densidades de corrente implica, como podemos observar pelas Eqs.(4.68)–(4.75), no cálculo das aproximações para as densidades de portadores n, p e suas derivadas. Utilizando as equações Eq.(4.79) e Eq.(4.84) no caso de elétrons, teremos:

- Intervalo $x \in [x_i, x_{i+1}]$ e $y = y_j$

$$n_{i+1/2,j} = \frac{n_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,i}}{2U_t}\right)} + \frac{n_{i+1,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} \quad (4.88)$$

$$\frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{i+1/2,j} = \frac{\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,i}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{n_{i+1,j} - n_{i,j}}{h_{i+1}} \quad (4.89)$$

- Intervalo $x = x_i$ e $y \in [y_j, y_{j+1}]$

$$n_{i,j+1/2} = \frac{n_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{2U_t}\right)} + \frac{n_{i,j+1}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} \quad (4.90)$$

$$\frac{\partial n}{\partial y} \Big|_{i,j+1/2} = \frac{\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{n_{i,j+1} - n_{i,j}}{k_{j+1}} \quad (4.91)$$

- Intervalo $x \in [x_{i-1}, x_i]$ e $y = y_j$

$$n_{i-1/2,j} = \frac{n_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,i}}{2U_t}\right)} + \frac{n_{i-1,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} \quad (4.92)$$

$$\frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{i-1/2,j} = \frac{\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,i}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{n_{i-1,j} - n_{i,j}}{h_i} \quad (4.93)$$

- Intervalo $x = x_i$ e $y \in [y_{j-1}, y_j]$

$$n_{i,j-1/2} = \frac{n_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{2U_t}\right)} + \frac{n_{i,j-1}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} \quad (4.94)$$

$$\frac{\partial n}{\partial y} \Big|_{i,j-1/2} = \frac{\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{n_{i,j-1} - n_{i,j}}{k_j} \quad (4.95)$$

O mesmo procedimento pode ser utilizado na determinação das aproximações para a densidade p e suas derivadas. Ao compararmos as Eqs.(Eq.(4.79)) e (Eq.(4.84)) para elétrons e as Eqs.(Eq.(4.86)) e (Eq.(4.87)) para lacunas, verificamos que a semelhança existente, somente é quebrada devido ao sinal negativo utilizado no potencial elétrico durante o cálculo de $\delta_{i,j}^y(y, \psi)$. Deste modo, as aproximações para as lacunas serão idênticas àquelas determinadas acima para elétrons, a menos de algumas trocas de sinal devido aos potenciais elétricos.

- Intervalo $x \in [x_i, x_{i+1}]$ e $y = y_j$

$$p_{i+1/2,j} = \frac{p_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} + \frac{p_{i+1,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{2U_t}\right)} \quad (4.96)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{i+1/2,j} = \frac{\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{h_{i+1}} \quad (4.97)$$

- Intervalo $x = x_i$ e $y \in [y_j, y_{j+1}]$

$$p_{i,j+1/2} = \frac{p_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} + \frac{p_{i,j+1}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{2U_t}\right)} \quad (4.98)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{i,j+1/2} = \frac{\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{k_{j+1}} \quad (4.99)$$

- Intervalo $x \in [x_{i-1}, x_i]$ e $y = y_j$

$$p_{i-1/2,j} = \frac{p_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} + \frac{p_{i-1,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{2U_t}\right)} \quad (4.100)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{i-1/2,j} = \frac{\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{p_{i-1,j} - p_{i,j}}{h_i} \quad (4.101)$$

- Intervalo $x = x_i$ e $y \in [y_{j-1}, y_j]$

$$p_{i,j-1/2} = \frac{p_{i,j}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right)} + \frac{p_{i,j-1}}{1 + \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{2U_t}\right)} \quad (4.102)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{i,j-1/2} = \frac{\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t}}{\exp\left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{2U_t}\right) - \exp\left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{2U_t}\right)} \cdot \frac{p_{i,j-1} - p_{i,j}}{k_j} \quad (4.103)$$

Covém notar que as aproximações para as derivadas das densidades de lacunas são idênticas às aproximações para as derivadas dos elétrons, o que facilita consideravelmente a implementação computacional.

4.5.3 Determinação das aproximações para as equações da continuidade

No início da Sec.4.5, iniciamos a discretização da equação da continuidade para elétrons e lacunas, e investigamos a discretização das componentes dos vetores densidade de corrente \bar{J}_n e \bar{J}_p . A busca de aproximações para estas componentes teve como consequência a necessidade de investigar as variações de n , p e suas derivadas, o que foi feito usando a proposta de Gummel. O resultado deste estudo produziu as aproximações desejadas para n , p e derivadas, permitindo-nos agora retornar à discretização das equações da continuidade.

Inicialmente, derivaremos a equação de continuidade discretizada para elétrons. Numa primeira etapa devemos, substituir as aproximações que foram determinadas nas Eqs.(4.88)–(4.95) diretamente nas Eqs.(4.68)–(4.71), obtendo com isto as aproximações para \bar{J}_{nx} e \bar{J}_{ny} . Em seguida, substituindo os resultados encontrados na equação da continuidade para elétrons (Eq.(4.62)), teremos após alguma álgebra:

$$\begin{aligned}
& \left(D_n|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} + \right. \\
& + D_n|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} + \\
& + D_n|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} + \\
& \left. + D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot n_{i,j} - \\
& - \left(D_n|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} \right) \cdot n_{i-1,j} - \\
& - \left(D_n|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} \right) \cdot n_{i+1,j} - \\
& - \left(D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot n_{i,j-1} - \\
& - \left(D_n|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} \right) \cdot n_{i,j+1} +
\end{aligned}$$

$$+ \overline{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} = 0 \quad (4.104)$$

O mesmo procedimento pode ser feito no caso das lacunas resultando em:

$$\begin{aligned} & \left(D_p|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} + \right. \\ & + D_p|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} + \\ & + D_p|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} + \\ & \left. + D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot p_{i,j} - \\ & - \left(D_p|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} \right) \cdot p_{i-1,j} - \\ & - \left(D_p|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} \right) \cdot p_{i+1,j} - \\ & - \left(D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot p_{i,j-1} - \\ & - \left(D_p|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} \right) \cdot p_{i,j+1} + \\ & + \overline{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} = 0 \quad (4.105) \end{aligned}$$

onde $B(x)$ representa a função de Bernoulli, definida como:

$$B(x) = \frac{x}{\exp(x) - 1} \quad (4.106)$$

A função de Bernoulli, quando numericamente implementada, apresenta alguns problemas advindos da precisão numérica do computador utilizado. Na secção seguinte analisaremos sucintamente, uma técnica numérica que normalmente é utilizada para contornar estes problemas.

4.5.4 Implementação numérica da função de Bernoulli

A implementação computacional da função $B(x)$ deve ser feita com muita cautela, a fim de evitar erros de indeterminação numérica¹. Isto pode ocorrer uma vez

¹Em inglês: *overflow, underflow*.

que x representa diferenças muito pequenas do potencial ψ em pontos vizinhos da malha de discretização, fazendo com que o numerador e o denominador de $B(x)$ tendam a zero praticamente juntos. Este problema é facilmente observado ao tomarmos o limite matemático de $B(x)$ quando x tende a zero.

Algumas aproximações racionais para $B(x)$, como aquela proposta a algum tempo por [Hart 68] e utilizada em [Selberherr 80], mostraram-se uma boa solução para o problema:

$$B(x) = \begin{cases} -x & \text{se } x \leq x_1 \\ \frac{x}{\exp(x)-1} & \text{se } x_1 < x < x_2 \\ 1 - \frac{x}{2} & \text{se } x_2 \leq x \leq x_3 \\ \frac{x \cdot \exp(-x)}{1 - \exp(-x)} & \text{se } x_3 < x < x_4 \\ x \cdot \exp(-x) & \text{se } x_4 \leq x < x_5 \\ 0 & \text{se } x \geq x_5 \end{cases}$$

Nesta aproximação, o domínio de x é dividido seccionalmente em trechos. Em cada trecho $B(x)$ é aproximada por outra função na qual a possibilidade de ocorrerem indeterminações numéricas é nula.

Não nos preocuparemos aqui em realizar as considerações matemáticas que levaram à escolha deste tipo de subdivisão para $B(x)$. Devemos ressaltar porém, que os valores de x nos pontos que limitam cada um dos trechos devem ser determinados, e que estes dependem da maneira como as operações matemáticas são implementadas na máquina que se deseje utilizar.

Deste modo os limites x_1 a x_5 serão definidos como:

$$\exp(x_1) - 1 = -1 \quad (4.107)$$

$$\frac{x_2}{\exp(x_2) - 1} = 1 - \left(\frac{x_2}{2}\right)^2 \quad (4.108)$$

$$1 - \frac{x_3}{2} = \frac{x_3 \cdot \exp(-x_3)}{(1 - \exp(-x_3))^{x_3}} \quad (4.109)$$

$$1 - \exp(-x_4) = 1 \quad (4.110)$$

$$\exp(-x_5) = 0 \quad (4.111)$$

onde todos os símbolos que indicam operações matemáticas (exp, +, -, /) devem ser interpretados como implementações numéricas feitas por um computador digital.

4.6 Discretização das Condições de Fronteira

Até o presente momento, nós nos dedicamos a realizar a discretização das equações básicas dos dispositivos semicondutores, somente naqueles pontos pertencentes ao interior da estrutura do dispositivo.

Nesta secção, iremos investigar a discretização das equações de fronteira que foram determinadas anteriormente na Sec.3.5. De acordo com o modelo da estrutura MOS, proposto na Fig.3.4, os segmentos \overline{BC} , \overline{FG} e \overline{AH} representam contatos ôhmicos ideais, os trechos \overline{AB} e \overline{GH} indicam fronteiras artificiais do dispositivo, e o trecho \overline{CF} representa a interface entre o semiconductor e um isolante. A seguir, derivaremos as equações discretizadas de cada uma destas fronteiras.

4.6.1 Contatos ôhmicos

De acordo com o que foi definido na Sec.3.5.1, consideraremos aqui contatos ôhmicos controlados unicamente por tensão. Isto produzirá condições de fronteira, conforme foi estudado (Eqs.(3.55)–(3.57)):

$$\psi = \psi_c + \ln \left(\frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \right) \quad (4.112)$$

$$n = \frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \quad (4.113)$$

$$n = \frac{N}{2} - \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + 1} \quad (4.114)$$

onde N é a concentração de dopantes e ψ_c o potencial aplicado ao contato, quando os contatos de fonte e substrato são interligados e tomados como referência. Usando esta definição para ψ_c , teremos $\psi_c = 0$ para os contatos de fonte (\overline{FG}) e substrato (\overline{AH}), e $\psi_c = V_D$ para o contato de dreno (\overline{BC}).

A discretização das Eqs.(4.112)–(4.114) em cada ponto (x_i, y_j) de um dado contato ôhmico produzirá:

$$\psi_{i,j} = \psi_c|_{i,j} + \ln \left(\frac{N_{i,j}}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_{i,j}}{2}\right)^2 + 1} \right) \quad (4.115)$$

$$n_{i,j} = \frac{N_{i,j}}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_{i,j}}{2}\right)^2 + 1} \quad (4.116)$$

$$p_{i,j} = \frac{N_{i,j}}{2} - \sqrt{\left(\frac{N_{i,j}}{2}\right)^2 + 1} \quad (4.117)$$

O termo $\psi_c|_{i,j}$ da Eq.(4.115) pode ser considerado constante, uma vez que a tensão é aplicada uniformemente ao longo do contato.

A densidade de cargas ionizadas devido à dopagem do substrato ($N_{i,j}$) será positiva quando os dopantes forem doadores de elétrons (impurezas tipo-n), e negativa para dopantes aceitadores de elétrons (impurezas tipo-p). Por este motivo, em algumas situações como nas junções p-n, os valores de $n_{i,j}$ ou $p_{i,j}$ podem assumir valores nulos devido a erros de arredondamento numérico durante a computação das Eqs.(4.116)–(4.117) [Selberherr 83]. Por este motivo, é mais conveniente avaliar $n_{i,j}$ e $p_{i,j}$ em duas situações diferentes:

- Se $N_{i,j} > 0$ então

$$n_{i,j} = \frac{N_{i,j}}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_{i,j}}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (4.118)$$

$$p_{i,j} = \frac{1}{n_{i,j}} \quad (4.119)$$

- Se $N_{i,j} < 0$ então

$$p_{i,j} = \frac{N_{i,j}}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_{i,j}}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (4.120)$$

$$n_{i,j} = \frac{1}{p_{i,j}} \quad (4.121)$$

onde as Eqs.(4.119) e (4.121) são determinadas a partir da condição de equilíbrio termodinâmico (Eq.(3.33)).

4.6.2 Fronteiras artificiais

De acordo com o que foi estudado na Sec.3.5.2 as fronteiras (\overline{AB} e \overline{GH}) são introduzidas artificialmente de modo a isolar o dispositivo do meio que o cerca. Este objetivo é atingido de forma satisfatória, ao supormos que as componentes dos vetores campo elétrico e densidade de corrente se anulam na direção perpendicular à fronteira. Matematicamente isto é expresso através das condições de fronteira de Neumann:

$$\vec{E} \cdot \vec{n} = 0 \quad (4.122)$$

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n} = 0 \quad (4.123)$$

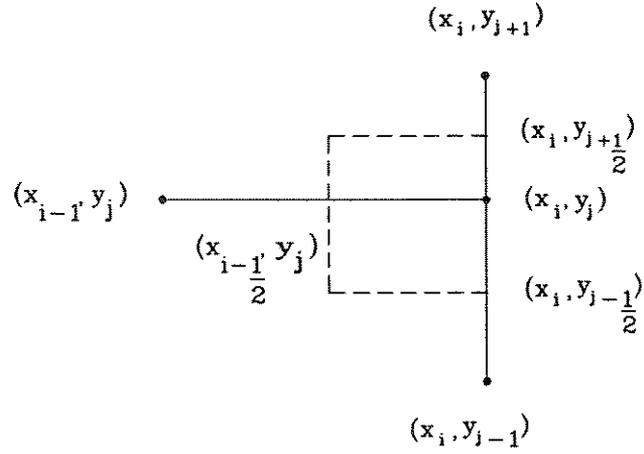


Figura 4.6: Sub-domínio ∂R_{ij} na fronteira artificial da direita

$$\vec{J}_p \cdot \vec{n} = 0 \quad (4.124)$$

onde \vec{n} é um vetor de módulo unitário perpendicular à fronteira em questão.

O sub-domínio ∂R_{ij} , associado a um ponto (x_i, y_j) localizado na fronteira artificial direita (\overline{AB}), pode ser representado de acordo com a Fig.4.6.

Como podemos observar o ponto $(x_{i+1/2}, y_j)$ não aparece na Fig.4.6, uma vez que está localizado fora do domínio do dispositivo, sendo portanto considerado um *ponto auxiliar* cuja única finalidade é a validação matemática das Eqs.(4.122)–(4.124).

Aplicando as Eqs.(4.122)–(4.124) ao ponto (x_i, y_j) teremos:

$$\vec{E} \cdot \vec{n}|_{i,j} = 0 \quad (4.125)$$

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n}|_{i,j} = 0 \quad (4.126)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{n}|_{i,j} = 0 \quad (4.127)$$

A discretização das Eqs.(4.125)–(4.127) pode ser feita usando a técnica de espelhamento² em relação à fronteira, da componente do vetor \vec{E} na direção \vec{n} . Isto é realizado através da utilização de um esquema de interpolação linear em relação a $(x_{i-1/2}, y_j)$ e ao ponto auxiliar $(x_{i+1/2}, y_j)$:

$$\vec{E}_x|_{i+1/2,j} + \vec{E}_x|_{i-1/2,j} = 0 \quad (4.128)$$

²Em inglês: *mirror imaging*.

$$\bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j} + \bar{J}_{nx}|_{i-1/2,j} = 0 \quad (4.129)$$

$$\bar{J}_{px}|_{i+1/2,j} + \bar{J}_{px}|_{i-1/2,j} = 0 \quad (4.130)$$

Em seguida, substituímos a condição da Eq.(4.128) na equação discretizada de Poisson (Eq.(4.47)), e as condições das Eqs.(4.129)–(4.130) nas equações da continuidade discretizadas (Eqs.(4.68)–(4.75)). Ao realizarmos estas substituições devemos tomar o cuidado de eliminar a presença do ponto auxiliar $(x_{i-1/2}, y_j)$ das equações resultantes. Isto é feito tomando o incremento $h_{i+1} = 0$. Assim sendo, teremos:

$$\begin{aligned} \bar{E}_y|_{i,j+1/2} \cdot \frac{h_i}{2} - 2\bar{E}_x|_{i-1/2,j} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} - \bar{E}_y|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i}{2} \\ = \bar{\rho}_{i,j} \cdot \frac{h_i}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \end{aligned} \quad (4.131)$$

$$\begin{aligned} \bar{J}_{ny}|_{i,j+1/2} \cdot \frac{h_i}{2} - 2\bar{J}_{nx}|_{i-1/2,j} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} - \bar{J}_{ny}|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i}{2} \\ = \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \end{aligned} \quad (4.132)$$

$$\begin{aligned} \bar{J}_{py}|_{i,j+1/2} \cdot \frac{h_i}{2} - 2\bar{J}_{px}|_{i-1/2,j} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} - \bar{J}_{py}|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i}{2} \\ = -\bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i}{2} \cdot \frac{(k_j + k_{j+1})}{2} \end{aligned} \quad (4.133)$$

As Eqs.(4.131)–(4.133) acima representadas dependem somente dos valores das componentes aproximadas \bar{E}_x , \bar{E}_y , \bar{J}_{nx} e \bar{J}_{ny} , \bar{J}_{px} e \bar{J}_{py} nos pontos médios especificados. Esta aproximações já foram realizadas e podem ser encontradas nas Eqs.(4.48)–(4.51) para o campo elétrico, e nas Eqs.(4.68)–(4.75) para a densidade de corrente de elétrons e lacunas. Realizando as devidas substituições, teremos após alguma álgebra:

$$\begin{aligned} \left(\frac{h_i}{2k_{j+1}} + 2 \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} + \frac{h_i}{2k_j} \right) \cdot \psi_{i,j} \\ - 2 \left(\frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} \right) \cdot \psi_{i-1,j} - \left(\frac{h_i}{2k_j} \right) \cdot \psi_{i,j-1} - \\ - \left(\frac{h_i}{2k_{j+1}} \right) \cdot \psi_{i,j+1} \\ = \bar{\rho}_{i,j} \cdot \frac{h_i}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \end{aligned} \quad (4.134)$$

$$\begin{aligned}
& \left(D_n|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_{j+1}} + \right. \\
& + 2D_n|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} + \\
& \left. + D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_j} \right) \cdot n_{i,j} - \\
& - 2 \left(D_n|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} \right) \cdot n_{i-1,j} - \\
& - \left(D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_j} \right) \cdot n_{i,j-1} - \\
& - \left(D_n|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_{j+1}} \right) \cdot n_{i,j+1} + \\
& + \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} = 0 \quad (4.135)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(D_p|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_{j+1}} + \right. \\
& + 2D_p|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} + \\
& \left. + D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_j} \right) \cdot p_{i,j} - \\
& - 2 \left(D_p|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} \right) \cdot p_{i-1,j} - \\
& - \left(D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_j} \right) \cdot p_{i,j-1} - \\
& - \left(D_p|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i}{2k_{j+1}} \right) \cdot p_{i,j+1} + \\
& + \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} = 0 \quad (4.136)
\end{aligned}$$

A fronteira artificial da esquerda (\overline{GH}) é representada na Fig.4.7, e a discretização das condições de contorno associadas a mesma pode ser feita utilizando o mesmo procedimento adotado no caso das fronteiras da direita. Isto resultará nas equações:

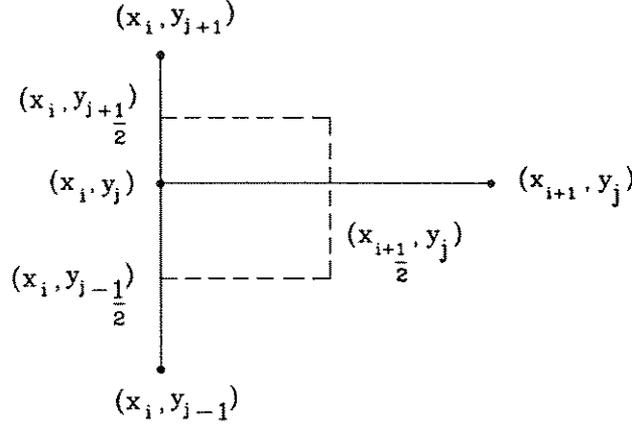


Figura 4.7: Sub-domínio ∂R_{ij} na fronteira artificial da esquerda

$$\begin{aligned}
& \left(2 \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} + \frac{h_{i+1}}{2k_{j+1}} + \frac{h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot \psi_{i,j} \\
-2 & \left(\frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} \right) \cdot \psi_{i+1,j} - \left(\frac{h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot \psi_{i,j-1} - \left(\frac{h_{i+1}}{2k_{j+1}} \right) \cdot \psi_{i,j+1} \\
& = \bar{\rho}_{i,j} \cdot \frac{h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \quad (4.137)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(2D_n|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} + \right. \\
& \quad \left. + D_n|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_{j+1}} + \right. \\
& \quad \left. + D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot n_{i,j} - \\
-2 & \left(D_n|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} \right) \cdot n_{i+1,j} - \\
& \quad - \left(D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot n_{i,j-1} - \\
& \quad - \left(D_n|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_{j+1}} \right) \cdot n_{i,j+1} +
\end{aligned}$$

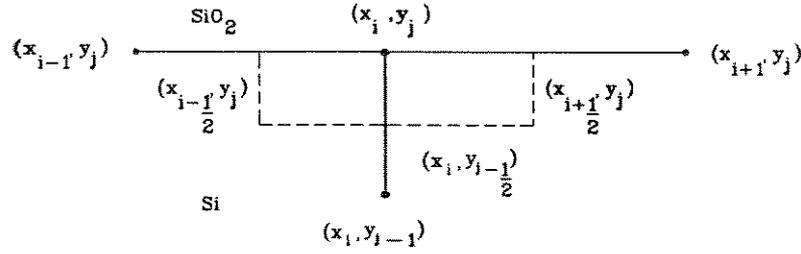


Figura 4.8: Discretização da interface semicondutor isolante

$$+\bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} = 0 \quad (4.138)$$

$$\begin{aligned} & \left(2D_p|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} + \right. \\ & \quad + D_p|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_{j+1}} + \\ & \quad + D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_j} \Big) \cdot p_{i,j} - \\ & - 2 \left(D_p|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} \right) \cdot p_{i+1,j} - \\ & \quad - \left(D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot p_{i,j-1} - \\ & \quad - \left(D_p|_{i,j+1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_{i+1}}{2k_{j+1}} \right) \cdot p_{i,j+1} + \\ & \quad + \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} = 0 \quad (4.139) \end{aligned}$$

4.6.3 Interface semicondutor-isolante

Na estrutura MOS da Fig.3.4 a interface semicondutor-isolante é representada pelo segmento \overline{CF} . Um ponto genérico (x_i, y_j) desta fronteira e seus vizinhos são mostrados na Fig.4.8.

Na Sec.3.5.3 nós derivamos as equações que correspondem às condições de fronteira desta interface:

$$\epsilon_{sem} \cdot \vec{E}_{sem} \cdot \vec{n} - \epsilon_{iso} \cdot \vec{E}_{iso} \cdot \vec{n} = Q_{int} \quad (4.140)$$

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n} = 0 \quad (4.141)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{n} = 0 \quad (4.142)$$

onde ϵ_{sem} e ϵ_{iso} correspondem à permissividade elétrica no semicondutor e no isolante, \vec{E}_{sem} e \vec{E}_{iso} são os vetores campo elétrico nestas regiões e Q_{int} a carga elétrica armazenada na interface. De acordo com o que foi estudado, a Eq.(4.140) corresponde à lei de Gauss aplicada à interface, e as Eqs.(4.141)–(4.142) representam a atenuação das componentes dos vetores densidade de corrente na direção perpendicular à interface.

No ponto (x_i, y_j) estas equações valem:

$$\epsilon_{sem} \cdot \vec{E}|_{i,j-1/2} \cdot \vec{n} - \epsilon_{iso} \cdot \vec{E}|_{i,j+1/2} \cdot \vec{n} = Q_{int} \quad (4.143)$$

$$\vec{J}_n \cdot \vec{n}|_{i,j} = 0 \quad (4.144)$$

$$\vec{J}_p \cdot \vec{n}|_{i,j} = 0 \quad (4.145)$$

onde os valores do vetor campo elétrico no semicondutor e no isolante foram considerados respectivamente nos pontos médios $(x_i, y_{j-1/2})$ e $(x_i, y_{j+1/2})$.

A discretização da Eq.(4.143) pode ser feita usando dois enfoques diferentes. Primeiramente, se supomos o isolante como fazendo parte efetiva da malha de discretização, devemos tomar um cuidado especial durante a simulação deste trecho do dispositivo. Desde que o isolante é suposto ideal, não existirão cargas no seu interior e a equação discretizada de Poisson se reduz à equação discreta de Laplace. Fica evidente, ao usar esta solução, que algum esforço computacional deve ser feito a fim de localizar a posição do isolante dentro da malha de discretização, permitindo com isto identificar o momento em que será usada a equação de Poisson ou Laplace.

Por outro lado, uma vez que no interior do isolante vale a equação de Laplace, podemos supor um campo elétrico constante naquela região. Deste modo, considerando que a espessura do isolante d_{iso} é suficientemente pequena:

$$\vec{E}_y|_{i,j+1/2} = -\frac{V_G - \psi_{i,j}}{d_{iso}} \quad (4.146)$$

onde V_G é a tensão aplicada à porta do dispositivo.

Esta aproximação, juntamente com a Eq.(4.51) são substituídas na Eq.(4.143) resultando em uma condição de fronteira para o potencial na interface:

$$\left(1 + \frac{\epsilon_{iso}}{\epsilon_{sem}} \cdot \frac{k_j}{d_{iso}}\right) \cdot \psi_{i,j} - \psi_{i,j-1} = k_j \cdot \frac{Q_{int}}{\epsilon_{sem}} + \frac{\epsilon_{iso}}{\epsilon_{sem}} \cdot \frac{k_j}{d_{iso}} \cdot V_G \quad (4.147)$$

Este tipo de solução é vantajosa em relação à primeira, uma vez que elimina a necessidade de realizarmos a simulação no interior do isolante, contribuindo assim para a diminuição do tempo de computação.

Com relação à discretização das Eqs.(4.144)–(4.145), o mesmo procedimento de espelhamento utilizado na Sec.4.6.2 pode novamente ser empregado. Assim sendo, teremos:

$$\bar{J}_{ny}|_{i,j+1/2} + \bar{J}_{ny}|_{i,j-1/2} = 0 \quad (4.148)$$

$$\bar{J}_{py}|_{i,j+1/2} + \bar{J}_{py}|_{i,j-1/2} = 0 \quad (4.149)$$

Semelhantemente ao que foi suposto anteriormente, o ponto $(x_i, y_{j+1/2})$ é introduzido de modo a validar matematicamente as Eqs.(4.144)–(4.145). Substituindo as condições expressas pelas Eqs.(4.148)–(4.149) nas equações da continuidade discretizadas (Eqs.(4.62)–(4.63)), e eliminando a presença do ponto auxiliar $(x_i, y_{j+1/2})$ tomando $k_{j+1} = 0$ teremos:

$$\begin{aligned} \bar{J}_{nx}|_{i+1/2,j} \cdot \frac{k_j}{2} - \bar{J}_{nx}|_{i-1/2,j} \cdot \frac{k_j}{2} - 2 \cdot \bar{J}_{ny}|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \\ = \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{k_j}{2} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \end{aligned} \quad (4.150)$$

$$\begin{aligned} \bar{J}_{px}|_{i+1/2,j} \cdot \frac{k_j}{2} - \bar{J}_{px}|_{i-1/2,j} \cdot \frac{k_j}{2} - 2 \cdot \bar{J}_{py}|_{i,j-1/2} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \\ = -\bar{R}_{i,j} \cdot \frac{k_j}{2} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \end{aligned} \quad (4.151)$$

As aproximações para as componentes da densidade de corrente acima foram derivadas das Eqs.(4.68)–(4.75). Realizando as devidas substituições teremos condições de fronteira discretas para as equações da continuidade na interface semiconductor-isolante.

Aglutinando a Eq.(4.147) a estas equações, teremos as equações básicas discretizadas na interface semiconductor-isolante:

$$\left(1 + \frac{\epsilon_{iso}}{\epsilon_{sem}} \cdot \frac{k_j}{d_{iso}}\right) \cdot \psi_{i,j} - \psi_{i,j-1} = k_j \cdot \frac{Q_{int}}{\epsilon_{sem}} + \frac{\epsilon_{iso}}{\epsilon_{sem}} \cdot \frac{k_j}{d_{iso}} \cdot V_G \quad (4.152)$$

$$\begin{aligned}
& \left(D_n|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_{i+1}} + \right. \\
& \quad \left. + D_n|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_i} + \right. \\
& \quad + 2D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \Big) \cdot n_{i,j} - \\
& \quad - \left(D_n|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_i} \right) \cdot n_{i-1,j} - \\
& \quad - \left(D_n|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_{i+1}} \right) \cdot n_{i+1,j} - \\
& - 2 \left(D_n|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot n_{i,j-1} - \\
& \quad \quad \quad + \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j}{2} = 0 \tag{4.153}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(D_p|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_{i+1}} + \right. \\
& \quad \left. + D_p|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_i} + \right. \\
& \quad + 2D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \Big) \cdot p_{i,j} - \\
& \quad - \left(D_p|_{i-1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_i} \right) \cdot p_{i-1,j} - \\
& \quad - \left(D_p|_{i+1/2,j} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{U_t} \right) \cdot \frac{k_j}{2h_{i+1}} \right) \cdot p_{i+1,j} - \\
& - 2 \left(D_p|_{i,j-1/2} \cdot B \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{U_t} \right) \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \right) \cdot p_{i,j-1} - \\
& \quad \quad \quad + \bar{R}_{i,j} \cdot \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j}{2} = 0 \tag{4.154}
\end{aligned}$$

Capítulo 5

Simulação em Equilíbrio Termodinâmico

5.1 Modelo Físico do Equilíbrio

Na situação de equilíbrio termodinâmico em um dispositivo MOSFET, não existe corrente circulando no dispositivo. Deste modo, os níveis *quasi-fermi* para elétrons (ϕ_n) e lacunas (ϕ_p) permanecem alinhados com o nível *fermi* do semiconductor intrínseco (ϕ_F). Como consequência, as equações de densidade de portadores em sua forma normalizadas ficam:

$$n = \exp(\psi - \phi_F) \quad (5.1)$$

$$p = \exp(\phi_F - \psi) \quad (5.2)$$

Estas equações podem ser simplificadas se tomarmos o potencial associado ao nível Fermi como referência para o potencial elétrico no dispositivo.

$$n = \exp(\psi) \quad (5.3)$$

$$p = \exp(-\psi) \quad (5.4)$$

onde os valores de ψ serão de agora em diante referenciados ao potencial ϕ_F . Baseando-se nestas considerações a densidade de cargas pode ser expressa como função do potencial elétrico:

$$\rho = p - n - N \quad (5.5)$$

$$\rho(\psi) = \exp(-\psi) - \exp(\psi) - N \quad (5.6)$$

Como podemos observar, as densidades de carga n e p dependem de maneira não-linear do potencial ψ .

A inexistência de corrente no dispositivo MOSFET em equilíbrio termodinâmico permite-nos afirmar que os vetores densidade de corrente \vec{J}_n e \vec{J}_p são nulos. Deste modo as equações básicas do dispositivo se reduzem exclusivamente à equação de Poisson, e a análise do MOSFET é feita basicamente através da distribuição de potencial. Apesar de restrito, o problema do equilíbrio termodinâmico oferece a possibilidade de investigarmos, em detalhes, a formação do canal tanto no caso de dispositivos com comprimento de canal longo como curto [Araujo 90]. Como consequência disto, seremos capazes de estudar as variações do potencial de limiar¹ (V_T), resultantes do surgimento de efeitos dimensionais no comportamento do dispositivo.

5.2 Especificação do Problema Matemático

No capítulo anterior realizamos a discretização das equações de Poisson e fronteira, em cada um dos pontos (x_i, y_j) que compõem a malha de discretização do dispositivo. Devemos relembrar que obtivemos, para cada ponto no interior do dispositivo, uma equação semelhante àquela determinada na Eq.(4.53). De uma maneira genérica podemos representar esta equação na forma:

$$\alpha_{i,j} \cdot \psi_{i,j} + \alpha_{i-1,j} \cdot \psi_{i-1,j} + \alpha_{i+1,j} \cdot \psi_{i+1,j} + \alpha_{i,j-1} \cdot \psi_{i,j-1} + \alpha_{i,j+1} \cdot \psi_{i,j+1} = \gamma(\psi_{i,j}, N_{i,j}) \quad (5.7)$$

onde

$$\alpha_{i,j} = \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} + \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} + \frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} + \frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \quad (5.8)$$

$$\alpha_{i-1,j} = -\frac{k_j + k_{j+1}}{2h_i} \quad (5.9)$$

$$\alpha_{i+1,j} = -\frac{k_j + k_{j+1}}{2h_{i+1}} \quad (5.10)$$

$$\alpha_{i,j-1} = -\frac{h_i + h_{i+1}}{2k_j} \quad (5.11)$$

$$\alpha_{i,j+1} = -\frac{h_i + h_{i+1}}{2k_{j+1}} \quad (5.12)$$

¹Em inglês: *Threshold Voltage*.

$$\gamma(\psi_{i,j}, N_{i,j}) = \left(\frac{h_i + h_{i+1}}{2} \cdot \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \right) \cdot (e^{\psi_{i,j}} - e^{-\psi_{i,j}} - N_{i,j}) \quad (5.13)$$

Como podemos observar, $\gamma(\psi_{i,j}, N_{i,j})$ é uma função algébrica não-linear dependente da concentração de dopantes $N_{i,j}$, e do potencial $\psi_{i,j}$ no ponto (x_i, y_j) .

Os pontos localizados na fronteira do MOSFET por sua vez, contribuem com equações discretas (vide Sec.4.6) que expressam condições de contorno específicas para o potencial nas fronteiras. Estas equações podem ser representadas por:

$$\beta_{i,j} \cdot \psi_{i,j} + \beta_{i-1,j} \cdot \psi_{i-1,j} + \beta_{i+1,j} \cdot \psi_{i+1,j} + \beta_{i,j-1} \cdot \psi_{i,j-1} + \beta_{i,j+1} \cdot \psi_{i,j+1} = \sigma_{i,j} \quad (5.14)$$

onde os coeficientes β e σ dependem do tipo de condição de fronteira em questão. Obviamente alguns destes coeficientes são nulos, desde que a malha de discretização somente contém aqueles pontos que estão localizados dentro do dispositivo. Diferentemente das equações no interior do dispositivo, nas equações de fronteira os coeficientes σ são constantes que independem do potencial. Deste modo, a Eq.(5.14) é uma equação algébrica e linear.

Aglutinando todas as equações relativas a todos os pontos da malha, formamos um sistema de equações cuja representação será feita através da seguinte equação matricial não-linear:

$$P \cdot \psi = Q(\psi) \quad (5.15)$$

A matriz P é formada pelos coeficientes α provenientes das equações de Poisson discretizadas no interior do dispositivo (Eq.(5.7)), bem como pelos coeficientes β gerados pelas equações de fronteira (Eq.(5.14)). Já a matriz $Q(\psi)$ consiste dos segundos membros destas equações, ou seja, alguns membros de $Q(\psi)$ são constantes ($\sigma_{i,j}$) enquanto outros são funções não-lineares do potencial elétrico ($\gamma(\psi_{i,j}, N_{i,j})$).

O vetor ψ é formado pelos valores do potencial elétrico normalizado em cada um dos pontos da malha de discretização.

A solução do sistema não-linear definido pela Eq.(5.15) torna-se portanto, o principal objetivo a ser buscado no estudo do MOSFET em equilíbrio temodinâmico.

5.2.1 Método de Newton

De uma maneira geral, a solução numérica de uma equação não-linear é obtida através da aplicação do método iterativo de Newton a esta equação. Isto é válido também na solução de sistemas de equações não-lineares, como aquele

representado pela Eq.(5.15). A fim de realizar esta tarefa, iremos inicialmente definir uma função não-linear F , de modo que:

$$F(\psi) = P.\psi - Q(\psi) \quad (5.16)$$

Resolver a Eq.(5.15) significa portanto, determinar um vetor de potenciais elétricos $\bar{\psi}$ que esteja suficientemente próximo da solução da equação:

$$F(\psi) = 0 \quad (5.17)$$

Supondo que $F(\psi)$ é contínua e diferenciável em todos os pontos da malha, poderemos desenvolver a mesma em série de Taylor. Isto nos permite escrever uma aproximação $F(\psi^{(k+1)})$ na vizinhança de $\bar{\psi}$, onde:

$$F(\psi^{(k+1)}) \approx F(\psi^{(k)}) + F'(\psi^{(k)}).(\psi^{(k+1)} - \psi^{(k)}) + \dots \quad (5.18)$$

Assumindo que $\psi^{(k+1)}$ esteja muito próximo da solução da Eq.(5.17), podemos considerar então que $F(\psi^{(k+1)})$ é aproximadamente zero. Nesta situação, os termos da série com ordem maior ou igual a dois são suficientemente pequenos, de modo que podem ser desprezados. A Eq.(5.18) se reduz então à aproximação linear:

$$F(\psi^{(k)}) + F'(\psi^{(k)}).(\psi^{(k+1)} - \psi^{(k)}) = 0 \quad (5.19)$$

Isolando o vetor $\psi^{(k+1)}$:

$$F'(\psi^{(k)}).\psi^{(k+1)} = F'(\psi^{(k)}).\psi^{(k)} - F(\psi^{(k)}) \quad (5.20)$$

A equação acima representa um sistema de equações lineares algébricas que pode ser reescrito como:

$$A.\psi^{(k+1)} = B^{(k)} \quad (5.21)$$

onde:

$$A = F'(\psi^{(k)}) \quad (5.22)$$

$$B^{(k)} = F'(\psi^{(k)}).\psi^{(k)} - F(\psi^{(k)}) \quad (5.23)$$

Convém lembrar que as matrizes A e B são formadas basicamente por constantes ou por funções do potencial na iteração anterior ($\psi^{(k)}$). Consequentemente, deveremos ser capazes de resolver, durante a iteração k , o sistema linear dado pela Eq.(5.21) a fim de determinar o vetor distribuição de potencial na iteração $k + 1$.

A aplicação do método de Newton requer entretanto, que a condição inicial utilizada ($\psi^{(0)}$) esteja contida dentro de uma dada região do domínio da equação. Isto porque o método de Newton garante convergência somente para condições iniciais que estejam localizadas razoavelmente próximas à solução do problema [Dennis 87]. No caso específico do problema do equilíbrio termodinâmico, utilizamos a neutralidade de cargas como uma condição inicial que nos garantirá uma solução convergente, dentro de um número razoavelmente pequeno de iterações. Não investigaremos aqui entretanto, as considerações matemáticas que justificam esta afirmativa.

Uma vez definido o procedimento para a solução do problema, podemos agora propor uma abordagem algorítmica para o método de Newton:

procedimento NEWTON

definir $\psi^{(0)}$ igual ao potencial resultante da neutralidade de cargas

definir erro limite para convergência

definir contador de iteração $k = 0$

repetir até convergir

```
{
  resolver  $A.\psi^{(k+1)} = B$ 
  incrementar iteração  $k$ 
}
```

5.2.2 Enumeração da malha

Antes de nos dedicarmos a resolver o sistema linear resultante a cada iteração de Newton, deveremos determinar uma maneira de enumerar os nós da malha de discretização construída anteriormente. Isto se faz necessário, uma vez que precisaremos definir uma maneira de mapear os valores dos potenciais dos nós, nos elementos do vetor ψ da Eq.(5.21).

Para efeito de análise tomaremos a malha da Fig.5.1 ($n_x = 6$ e $n_y = 4$) como uma amostra, em escala reduzida, da malha utilizada na discretização do MOSFET.

O índice (i, j) indica a posição do nó de coordenada (x_i, y_j) na malha de discretização. Uma nova enumeração, agora linear, pode ser realizada da esquerda para a direita e de cima para baixo, tomando-se como referência o ponto 1 definido na origem dos eixos coordenados. Assim sendo os nós de coordenada (i, j) serão mapeados, de agora em diante, utilizando o índice:

$$p = (j - 1).n_x + i \tag{5.24}$$

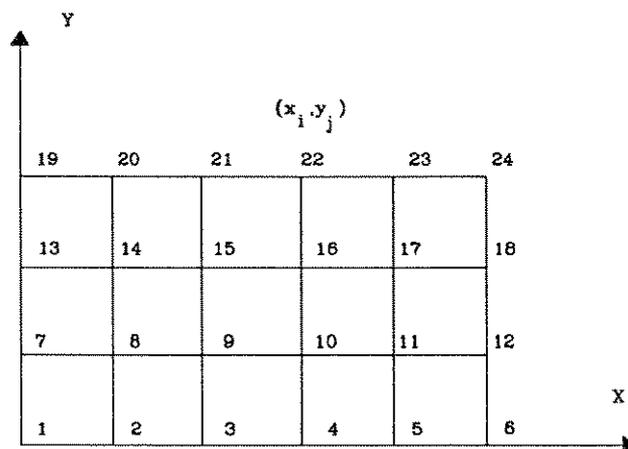


Figura 5.1: Amostra da grade de discretização

onde $p = 1, 2, 3, \dots, n_p$ e $n_p = n_x \cdot n_y$.

Tomando-se como base esta enumeração, todas as variáveis associadas aos nós da malha terão sua simbologia alterada, e seus valores poderão ser armazenados em vetores de dimensão n_p . Por exemplo, o potencial no nó (x_i, y_j) , ou seja $\psi_{i,j}$, será reescrito como ψ_p e valerá:

$$\psi_p = \psi_{(j-1) \cdot n_x + i} \quad (5.25)$$

Desde que estamos tratando da malha de discretização, podemos aproveitar o ensejo para estudar a maneira pela qual os coeficientes das equações discretizadas estão distribuídos dentro das matrizes A e B . Analisando detalhadamente a geração dos elementos da matriz A , obtidos a partir das Eqs.(5.7) e (5.14), iremos observar que o potencial em um dado nó (x_i, y_j) depende basicamente do potencial nos nós imediatamente vizinhos ao mesmo. É de se esperar portanto, que as matrizes A e B possuam uma estrutura larga e extremamente esparsa. Esta conclusão é fundamental, uma vez que dela dependerá a escolha de um método numérico para o sistema da Eq.(5.21).

5.2.3 Solução do sistema $A \cdot \psi = B$

Os métodos de solução de sistemas algébricos podem ser divididos em dois grupos: métodos diretos e métodos indiretos.

Os métodos diretos requerem a fatoração da matriz de coeficientes A . No caso de matrizes largas e esparsas como A , este método acarreta entretanto uma

dificuldade adicional. Durante o procedimento de fatoração, novos elementos não nulos são produzidos na matriz, aumentando por conseguinte o tempo necessário à obtenção da solução. A fim de contornar este problema, algumas estratégias de pivotamento e de manipulação de estruturas de dados são normalmente utilizadas, visando com isto minimizar o preenchimento da matriz por novos elementos.

Diferentemente dos métodos diretos, os métodos iterativos procuram obter a solução de sistemas do tipo $A.\psi = B$ através da geração de uma sequência de soluções aproximadas $\{\psi^{(m)}\}$, com $m = 0, 1, 2, \dots$. Desde que esta sequência é gerada utilizando uma equação do sistema por vez, não existe a necessidade de se armazenar os coeficientes das matrizes A e B . Isto é particularmente útil em problemas onde o domínio é fortemente regular e simétrico, como no caso em questão, quando as equações do sistema podem ser determinadas a medida que a solução é calculada.

Tomando-se como referência a análise feita acima, decidimos optar pela utilização de um método iterativo, mais especificamente pelo método de Gauss-Seidel (GS). Na solução iterativa de Gauss-Seidel, a aproximação para uma dada variável do sistema é obtida através dos valores mais recentes das outras variáveis que participam deste sistema.

Para os sistema da Eq.(5.21) o valor do potencial no nó p e na iteração $m + 1$, ou seja $\psi_p^{(m+1)}$, é função dos valores mais atualizados do potencial nos outros nós que fazem parte da equação p do sistema. Isto pode ser melhor representado pelo esquema:

$$\begin{aligned} \psi_1^{(m+1)} &= b_1 - a_{1,1}.\psi_1^{(m)} - a_{1,2}.\psi_2^{(m)} - \dots - a_{1,n_p-1}.\psi_{1,n_p-1}^{(m)} - a_{1,n_p}.\psi_{1,n_p}^{(m)} \\ \psi_2^{(m+1)} &= b_2 - a_{2,1}.\psi_1^{(m+1)} - a_{2,2}.\psi_2^{(m)} - \dots - a_{2,n_p-1}.\psi_{2,n_p-1}^{(m)} - a_{2,n_p}.\psi_{2,n_p}^{(m)} \\ &\vdots \\ \psi_{n_p}^{(m+1)} &= b_{n_p} - a_{n_p,1}.\psi_1^{(m+1)} - a_{n_p,2}.\psi_2^{(m+1)} - \dots - a_{n_p,n_p-1}.\psi_{n_p,n_p-1}^{(m)} - a_{n_p,n_p}.\psi_{n_p,n_p}^{(m)} \end{aligned} \quad (5.26)$$

De uma maneira algorítmica podemos escrever um procedimento que expressa o esquema proposto acima:

procedimento GS

definir condição inicial $\psi^{(0)}$ arbitrária

definir erro limite para convergência

definir contador de iteração $m = 0$

repetir até convergir

{
fazer para $p = 1, 2, \dots, n_p$

$$\psi_p^{(m+1)} = \frac{1}{a_{pp}} \cdot \left(b_p - \sum_{q=1}^{p-1} a_{pq} \cdot \psi_q^{(m+1)} - \sum_{q=p+1}^{n_p} a_{pq} \cdot \psi_q^{(m)} \right)$$

incrementar iteração m
}

Deveríamos agora analisar as condições de convergência do método iterativo proposto. No entanto, desde que esta tarefa não possui uma relação direta com o objetivo deste trabalho, decidimos apenas realizar, separadamente no Apêndice B, algumas considerações que justificam a convergência do método quando usado neste problema. Ao leitor mais interessado sugerimos ali algumas referências.

O método iterativo de Gauss-Seidel pode também ser representado de forma matricial através da decomposição da matriz de coeficientes A . Assim sendo, o esquema do sistema (5.27) é representado por:

$$M_G \cdot \psi^{(k+1)} = N_G \cdot \psi^{(k)} + B \quad (5.27)$$

onde

$$M_G = D + L \quad (5.28)$$

$$N_G = -U \quad (5.29)$$

e

$$L = [l_{ij}], i < j \quad (5.30)$$

$$D = [d_{ij}], i = j \quad (5.31)$$

$$U = [u_{ij}], i < j \quad (5.32)$$

com $i = 1, 2, \dots, n_p$ e $j = 1, 2, \dots, n_p$. As matrizes L, D e U acima referidas, correspondem à decomposição da matriz de coeficientes A . Mais precisamente, a matriz L é formada pela fatoração de A nos seus elementos abaixo da diagonal, a matriz U pelos elementos acima da diagonal, e D pelos elementos da diagonal.

Graças a sua simplicidade, a iteração de Gauss-Seidel é bastante utilizada na solução de sistemas lineares. Infelizmente, em certos problemas sujeitos a determinadas condições (vide Apêndice B), a convergência do método é muito lenta. Visando corrigir isto, frequentemente uma modificação do método é proposta:

procedimento GSSOR

definir erro limite para convergência

definir contador de iteração $m = 0$

repetir até convergir

{
 fazer para $p = 1, 2, \dots, n_p$
 $\psi_p^{(m+1)} = \frac{w}{a_{pp}} \cdot \left(b_p - \sum_{q=1}^{p-1} a_{pq} \cdot \psi_q^{(m+1)} - \sum_{q=p+1}^{n_p} a_{pq} \cdot \psi_q^{(m)} \right) + (1-w) \cdot \psi_p^{(m)}$
 incrementar iteração m
 }

onde $w \in R$ é o parâmetro de relaxação. Esta técnica é denominada de *Sobre-Relaxação Sucessivas*² ou simplesmente SOR, tendo sido derivada e caracterizada simultaneamente por Franhel e Young (vide [Young 71]). Desde que esta técnica é aplicada na aceleração da convergência do método Gauss-Seidel, passaremos a denominar a iteração feita no algoritmo GSSOR como método GS/SOR. Em termos de matrizes o método GS/SOR pode ser escrito como:

$$M_w \cdot \psi^{(m+1)} = N_w \cdot \psi^{(m)} + w \cdot B \quad (5.33)$$

onde,

$$M_w = D + w \cdot L \quad (5.34)$$

$$N_w = (1-w) \cdot D - w \cdot U \quad (5.35)$$

O parâmetro de relaxação w deve assumir um valor entre 1 e 2, podendo em determinados casos ser calculado de maneira ótima a fim de maximizar a taxa de convergência do método Gauss-Seidel.

5.2.4 Iteração Newton/SOR Inexata

Nas secções anteriores procuramos definir uma solução matemática para o sistema de equações algébricas não-lineares:

$$P \cdot \psi = Q(\psi) \quad (5.36)$$

formado a partir da discretização da equação de Poisson e das condições de fronteira de um dispositivo MOSFET. Conforme foi estudado, o problema se divide em duas etapas: linearização através do método de Newton e solução do sistema linear, resultante a cada iteração, por meio de iteração de GS/SOR.

Acoplando o algoritmo proposto para linearização (NEWTON) ao algoritmo usado na solução do sistema linear (GSSOR,) teremos um procedimento básico para a solução numérica da Eq.(5.36):

²Em inglês: *Successive Over-relaxation (SOR)*.

procedimento NGSSOR

definir $\psi^{(0)}$ igual ao potencial no equilíbrio de cargas

definir erro limite para convergência de Newton

repetir até convergir NEWTON

```
{
  definir erro limite de convergência para Gauss-Seidel-SOR
  repetir até convergir GSSOR
  {
    fazer para  $p = 1, 2, \dots, n_p$  e  $m = 0$ 
      
$$\psi_p^{(m+1)(k+1)} = \frac{w}{a_{pp}} \cdot \left( b_p - \sum_{q=1}^{p-1} a_{pq} \cdot \psi_q^{(m+1)(k+1)} - \sum_{q=p+1}^{n_p} a_{pq} \cdot \psi_q^{(m)(k+1)} \right) +$$

      
$$+ (1 - w) \cdot \psi_p^{(m)}$$

    incrementar iteração m
  }
  incrementar iteração k
}
```

Uma versão simplificada deste procedimento permite um aumento considerável na ordem de convergência do método. Nesta versão, a cada iteração de Newton (laço mais externo de NGSSOR) o sistema linear resultante é resolvido somente até a primeira iteração ($m=0$) do método GS/SOR (laço mais interno de NGSSOR). Uma vez que este procedimento não deixa o método de Newton realizar uma iteração completa iremos denominá-lo de método Newton GS/SOR inexato. De maneira algorítmica isto seria representado por:

procedimento INEXATO

definir erro limite para convergência

definir $\psi^{(0)}$ igual ao potencial no equilíbrio de cargas

definir erro limite para convergência

repetir até convergir

```
{
  fazer para  $p = 1, 2, \dots, n_p$ 
    
$$\psi_p^{(1)(k+1)} = \frac{w}{a_{pp}} \cdot \left( b_p - \sum_{q=1}^{p-1} a_{pq} \cdot \psi_q^{(1)(k+1)} - \sum_{q=p+1}^{n_p} a_{pq} \cdot \psi_q^{(0)(k+1)} \right) +$$

    
$$+ (1 - w) \cdot \psi_p^{(0)}$$

  incrementar iteração k
}
```

A justificativa para o aumento na velocidade de convergência desta iteração, pode ser entendida como função da diminuição do número de iterações necessárias a solução do sistema linear produzido a cada etapa do método de Newton. Esta

assertiva ainda é motivo de investigação, e não será analisada aqui. Ao leitor mais interessado, indicamos [Dennis 87] como uma referência na qual este poderá encontrar maiores detalhes.

O procedimento INEXATO foi implementado usando sub-rotinas construídas em FORTRAN 77. Estas rotinas foram por sua vez, aglutinadas em um programa simulador denominado EQMOS, cuja implementação é detalhada na Apêndice C.

5.3 Exemplos de Simulação

De uma maneira geral existem muitos problemas para os quais a equação não-linear de Poisson tem que ser resolvida separadamente. Primeiramente, em se tratando de dispositivos semicondutores em equilíbrio termodinâmico, como no caso do dispositivos MOSFET que motivou este trabalho. Em situações que envolvam junções reversamente polarizadas podemos reduzir o problema à equação de Poisson não-linear, se assumirmos que o nível quasi-fermi para os portadores majoritários é constante e que o nível de injeção de minoritários é baixo.

Por outro lado, a simulação de dispositivos MOSFET fora do equilíbrio termodinâmico implica na solução do sistema formado pelas equações básicas dos dispositivos semicondutores estudadas anteriormente. Alguns procedimentos usados nesta tarefa, como o algoritmo de Gummel [Gummel 64], requerem que a equação de Poisson seja resolvida separadamente.

No caso específico do dispositivo MOSFET em equilíbrio termodinâmico, a simulação da equação de Poisson nos possibilita determinar a distribuição do potencial ψ em dispositivos de canal curto ($L < 1.0\mu m$) onde o modelo de canal gradual de Shockley [Shockley 62] não é válido.

No restante da secção apresentaremos algumas simulações realizadas através do programa EQMOS, quando foram determinadas distribuições de potencial de dispositivos com comprimentos de canal longo ($5.0\mu m$) e curto ($1.0\mu m$). Usando estes resultados analisaremos os efeitos, no comportamento dos dispositivos, causados pela dependência da sua distribuição de potencial com o comprimento do canal.

Na Sec.3.2.4 foram determinados perfis de dopagem de dispositivos MOSFET com comprimentos de canal de $1.0\mu m$ e $5.0\mu m$. Consideraremos que os perfis ali obtidos representam adequadamente o perfil de impurezas encontrado em um dispositivo efetivamente processado, uma vez que as simulações foram feitas utilizando parâmetros típicos de um processo MOSFET/VLSI. Para efeito de recordação, resumiremos abaixo as características de fabricação do MOSFET simulado:

- Implantação iônica
 - Dopante: Fósforo
 - Energia: 40 keV
 - Dose: 10^{16} átomos.cm⁻³
- Recozimento:
 - Temperatura: 1000 °C
 - Tempo: 900 s

Os parâmetros relacionados à estrutura do dispositivo foram os mesmos tanto para o dispositivo com comprimento de canal $1.0\mu\text{m}$, como para o caso do dispositivo com $5.0\mu\text{m}$ de canal:

- Isolante: SiO_2
- Espessura do óxido: 500 Å
- Material de porta: Alumínio
- Concentração do substrato: 10^{16} átomos.cm⁻³

Ambos os dispositivos foram simulados usando uma malha adequadamente projetada, de modo a evitar a ocorrência de erros de aproximação numérica durante a determinação da distribuição de potencial. Isto foi feito tomando-se uma densidade maior de nós próximo às junções de fonte e dreno, e junto à interface semiconductor-isolante. Foram utilizados $n_x = 48$ linhas paralelas ao eixo y e $n_y = 48$ linhas paralelas ao eixo x. Isto resultou em uma malha composta por um conjunto de $n_p = 2304$ nós.

Com relação aos parâmetros do procedimento numérico, foram usados os seguintes valores:

- Erro limite de convergência: menor que 0.1 mV
- Parâmetro de relaxação (w): 1.8

As distribuições bidimensionais de potencial, obtidas a partir de simulação do canal dos dispositivos para $V_G = 0$ e $Q_{int} = 0$, estão representadas nas Figs.(5.2)–(5.3). Como podemos observar, na região de canal do dispositivo de $5.0\mu\text{m}$ (Fig.5.2) a distribuição lateral do potencial elétrico (direção do eixo x) é praticamente constante, o que já não ocorre no caso do dispositivo de canal curto ($L = 1.0\mu\text{m}$) (Fig.5.3). Esta diferença nas distribuições lateral de potencial

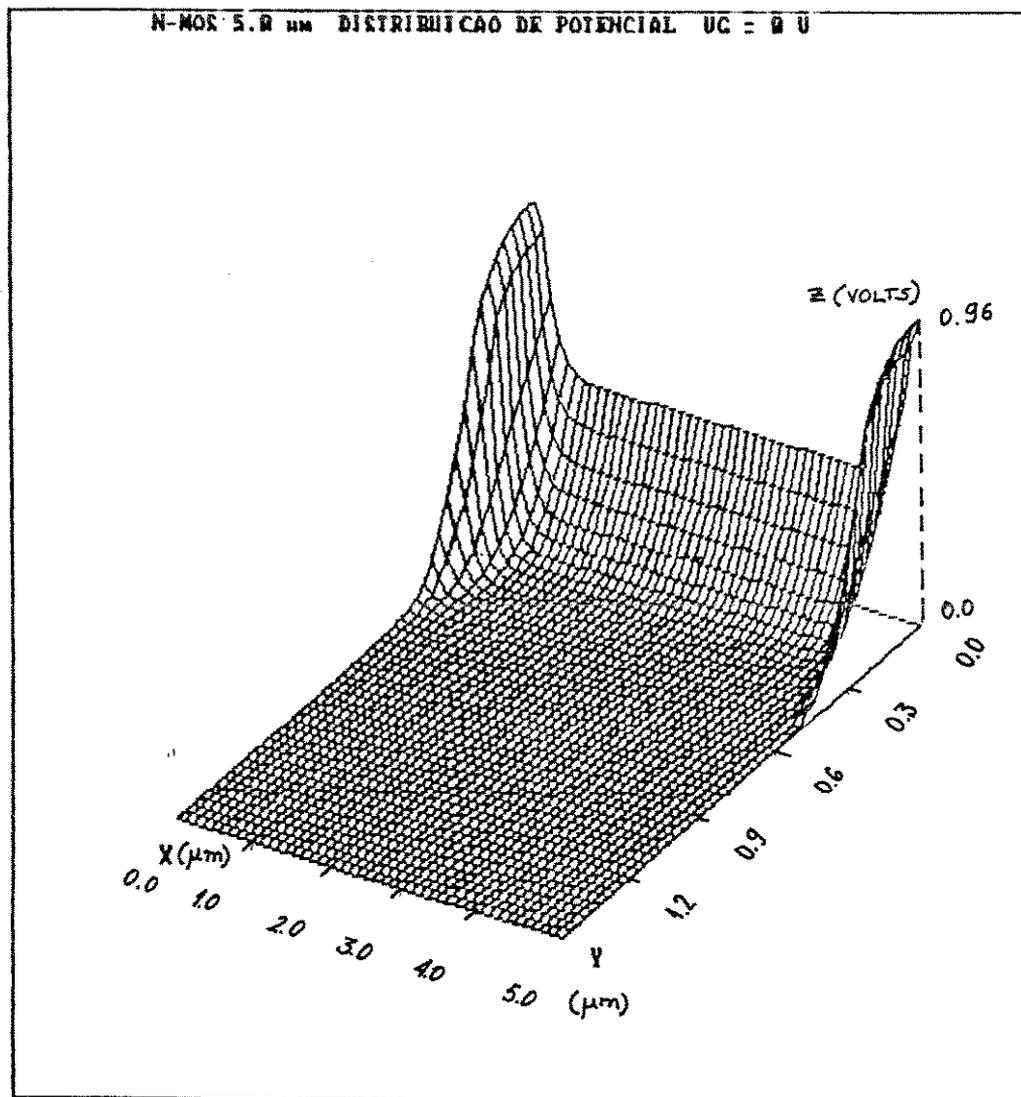


Figura 5.2: Distribuição de potencial – canal $5.0\mu\text{m}$

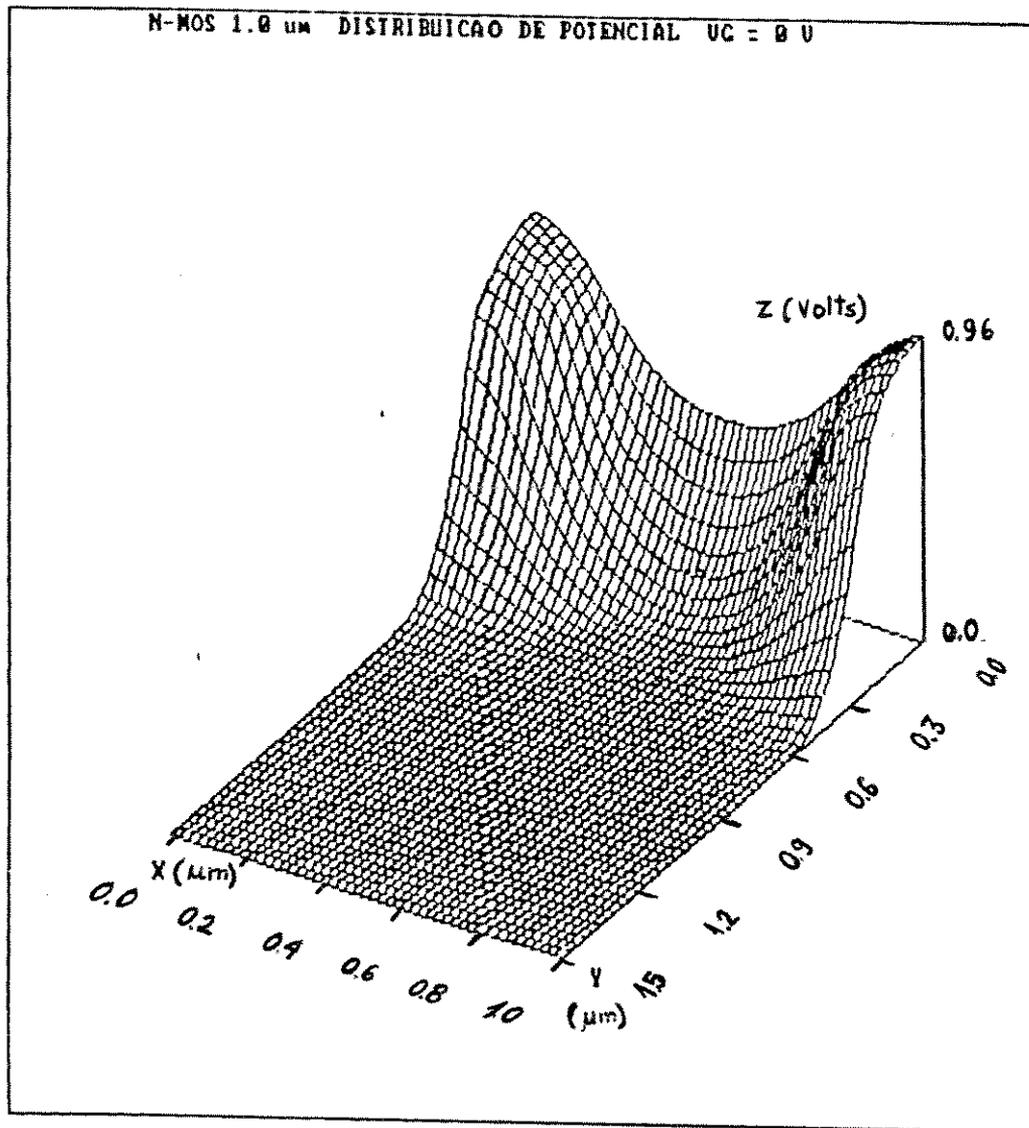


Figura 5.3: Distribuição de potencial - canal 1.0 μm

entre os transistores de canal longo e curto existe, como podemos observar, não somente na superfície do MOSFET mas também a medida que nos afastamos da mesma.

Isto pode ser melhor enfocado a partir dos gráficos das Figs.(5.4)–(5.5), onde estão representados o comportamento lateral do potencial elétrico para ambos os dispositivos. Em cada gráfico são mostradas curvas correspondentes às profundidades de $0\mu m$, $0.1\mu m$ e $0.2\mu m$ em relação à interface semiconductor-isolante. Conforme mencionamos anteriormente, a distribuição lateral de potencial no canal do dispositivo de $5.0\mu m$ (Fig.5.4) é praticamente constante, o que resulta em uma componente lateral do campo elétrico $E_x = -\partial\psi/\partial x \approx 0$, para qualquer profundidade em que esta é calculada. No caso do dispositivo de canal curto (Fig.5.5) o potencial elétrico varia ao longo do canal, de modo que podemos considerar a existência de uma componente lateral do campo elétrico E_x diferente de zero.

Por outro lado, o comportamento transversal (eixo-y) do potencial elétrico destes dispositivos pode ser analisado através de gráficos como aquele da Fig.5.6. Naquela figura são mostradas as variações transversais do potencial em ambos os dispositivos, ao se fazer um corte no centro do canal dos mesmos. A tensão aplicada à porta dos dispositivos foi igual ao potencial de limiar do transistor de canal longo, ou seja $V_T = 0.45 V$, calculado a partir das equações do modelo de canal gradual [Sze 81]. Conforme podemos observar na Fig.5.6, as componentes transversais do campo elétrico ($E_y = -\partial\psi/\partial x$) são diferentes de um dispositivo para o outro, mas não de maneira tão radical quanto as componentes laterais.

Concluindo as observações efetuadas, podemos comprovar a validade da hipótese de Shockley ($E_x \ll E_y$) para transistores de canal longo, como o MOSFET de $5.0\mu m$ que foi estudado. Em se tratando de transistores de canal curto ($L \leq 1.0\mu m$) entretanto, E_x não pode ser desprezada ao ser comparada com E_y , o que invalida a utilização do modelo de canal gradual para estes dispositivos.

Iremos agora investigar o comportamento do potencial de limiar do MOSFET com relação a variação do seu comprimento de canal. Para isto definiremos o potencial de limiar em equilíbrio termodinâmico (V_T), como sendo o valor da tensão de porta na qual o potencial de superfície (ψ_S) calculado no centro do canal vale $2\phi_F$.

Através da Fig.5.6 verificamos que $\psi_S = 0.7 V \approx 2\phi_F$ no caso do transistor de canal longo. Isto está de acordo com o modelo de canal gradual, uma vez que a tensão aplicada à porta foi, conforme dissemos anteriormente, igual ao potencial de limiar deste transistor. Esta mesma tensão foi aplicada à porta do transistor de canal curto, e no entanto o potencial na superfície foi maior ($\psi_S = 0.75 V$) que para o transistor de canal longo. Voltando às distribuições bidimensionais

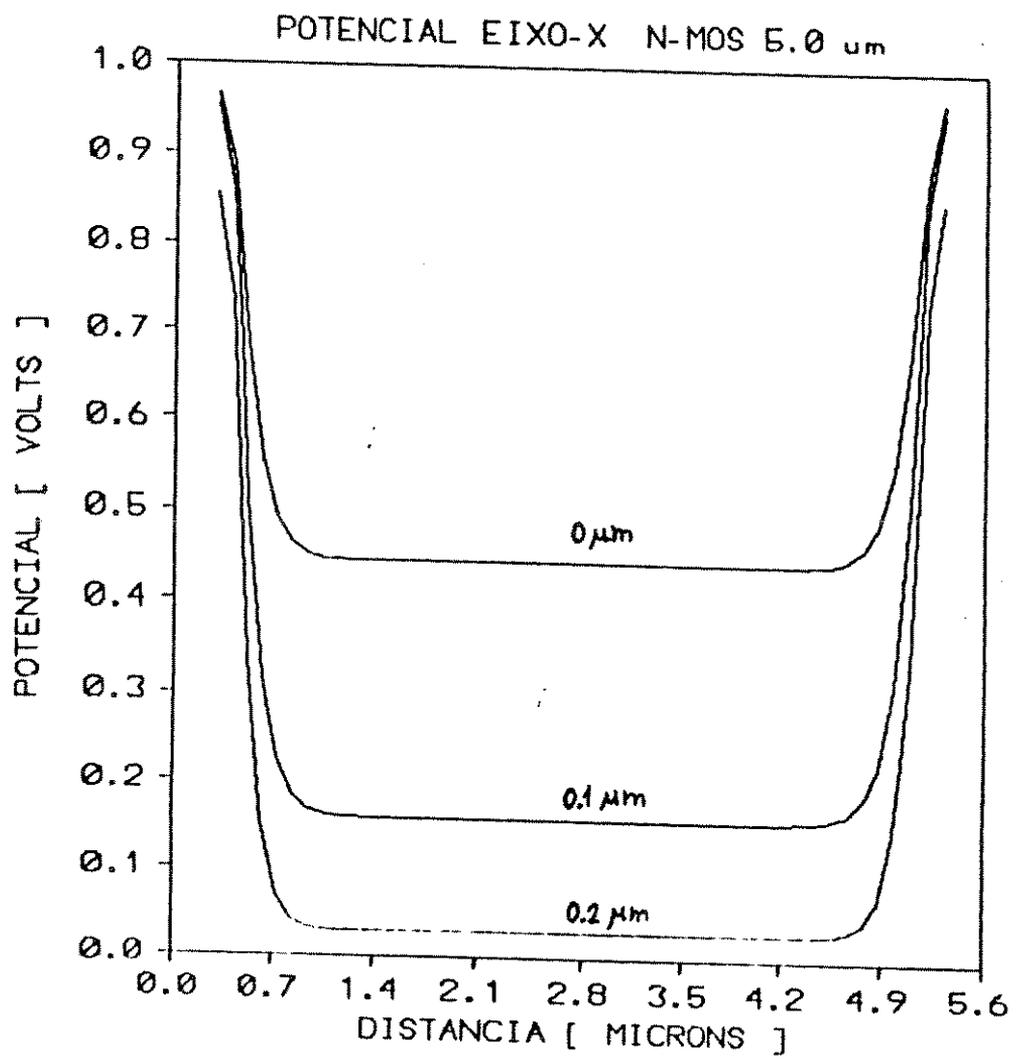


Figura 5.4: Variação lateral do potencial - canal 5.0 μm

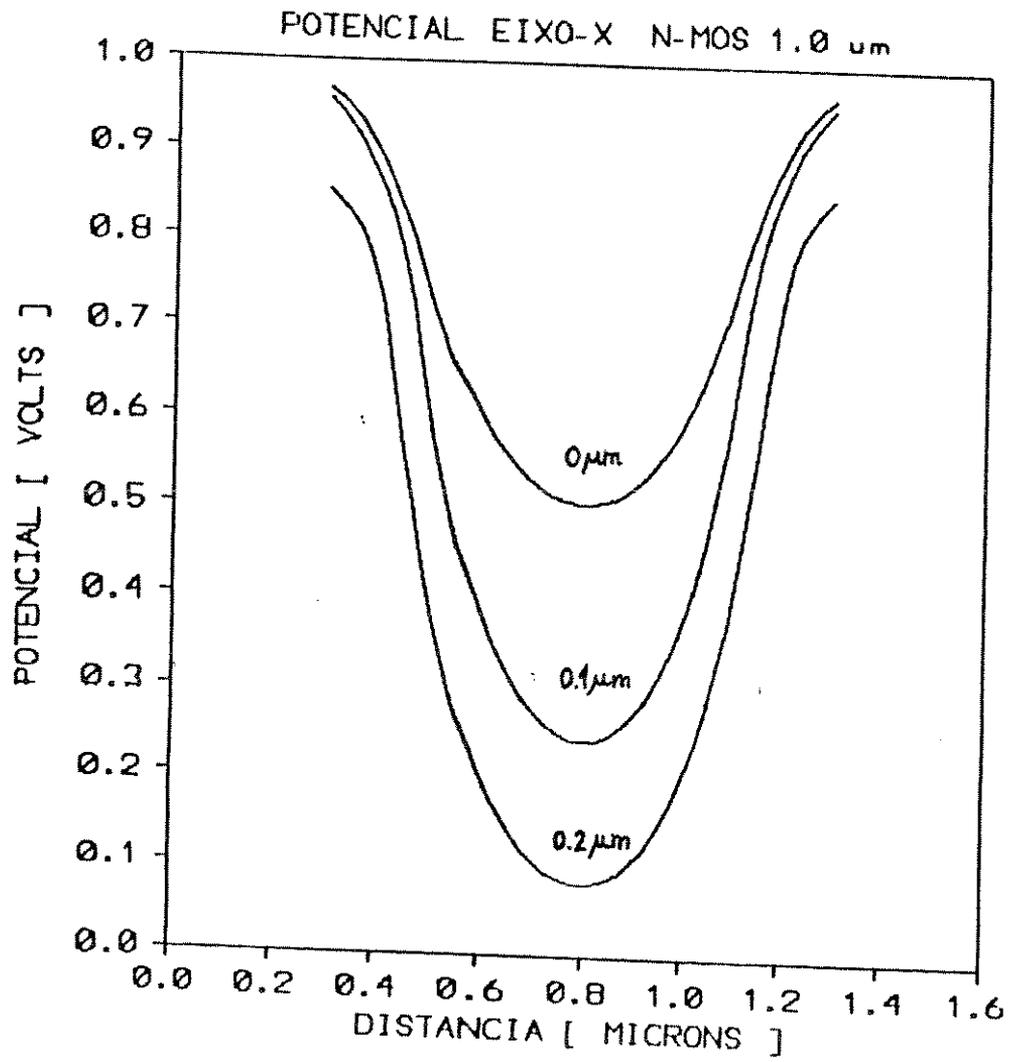


Figura 5.5: Variação lateral do potencial canal 1.0 μm

das Figs.(5.2)–(5.3), podemos observar que este efeito ocorre não somente na superfície mas também ao longo de toda região de canal dos transistores.

Como consequência imediata, podemos concluir que o potencial de limiar necessário à inversão de um transistor de canal curto, é menor que aquele necessário a um transistor de canal longo. Utilizando simulação determinamos em seguida o valor de V_G no qual o potencial de superfície do transistor de $1.0\mu m$ atinge o valor de $2\phi_F$ no centro do canal. O resultado encontrado ($V_G = 0.38V$) é comprovadamente menor que para o transistor de canal longo.

O mecanismo físico que explica a existência deste fenômeno pode ser explicado da seguinte maneira: a diminuição das dimensões do canal em transistores MOSFET vem acompanhada de um aumento da interação entre as regiões de depleção de fonte e dreno. Isto por sua vez permite que uma parcela considerável das cargas ionizadas no canal tenha a terminação de suas linhas de campo localizadas na fonte e no dreno. Como consequência, o número de cargas ionizadas que efetivamente contribuem para a formação do canal é reduzido, diminuindo assim o potencial de porta necessário à formação do canal.

Por meio da utilização do simulador EQMOS somos capazes portanto de obter estimativas confiáveis para os valores do potencial de limiar de transistores MOSFET, independentemente do comprimento do canal, o que não seria possível utilizando somente o modelo de Shockley. Esta possibilidade é extremamente interessante uma vez que nos permite realizar uma primeira aproximação para o projeto do dispositivo sem necessariamente termos que fabricá-lo. Além disto, com o uso de EQMOS somos capazes de determinar curvas que relacionem a variação de V_T com o valor do comprimento de canal (L) (Fig.5.7). Isto permite-nos estudar, em detalhes, a sensibilidade de V_T às variações nas etapas do processo de fabricação que são responsáveis pela definição do canal projetado.

A determinação de V_T em EQMOS é feita através de um algoritmo específico para este fim. Este algoritmo funciona basicamente através da repetição, passo a passo, da simulação numérica da equação de Poisson. A cada etapa do laço de repetição³, o potencial de superfície ψ_S no centro do canal é calculado. Se o valor encontrado for diferente de $2\phi_F$, a tensão de porta é decrementada de $10mV$ e a equação de Poisson é novamente calculada afim de estimar um novo valor para ψ_S . A aproximação inicial para o potencial de porta é tomada como sendo o potencial de limiar do transistor de canal longo. O algoritmo terminará quando $|\psi_S - 2\phi_F| < 10mV$, situação na qual $V_G = V_T$.

Outro efeito importante, resultante também da diminuição no comprimento de canal, pode ser encontrado na distribuição transversal de potencial da Fig.5.6.

³Em inglês: *loop*.

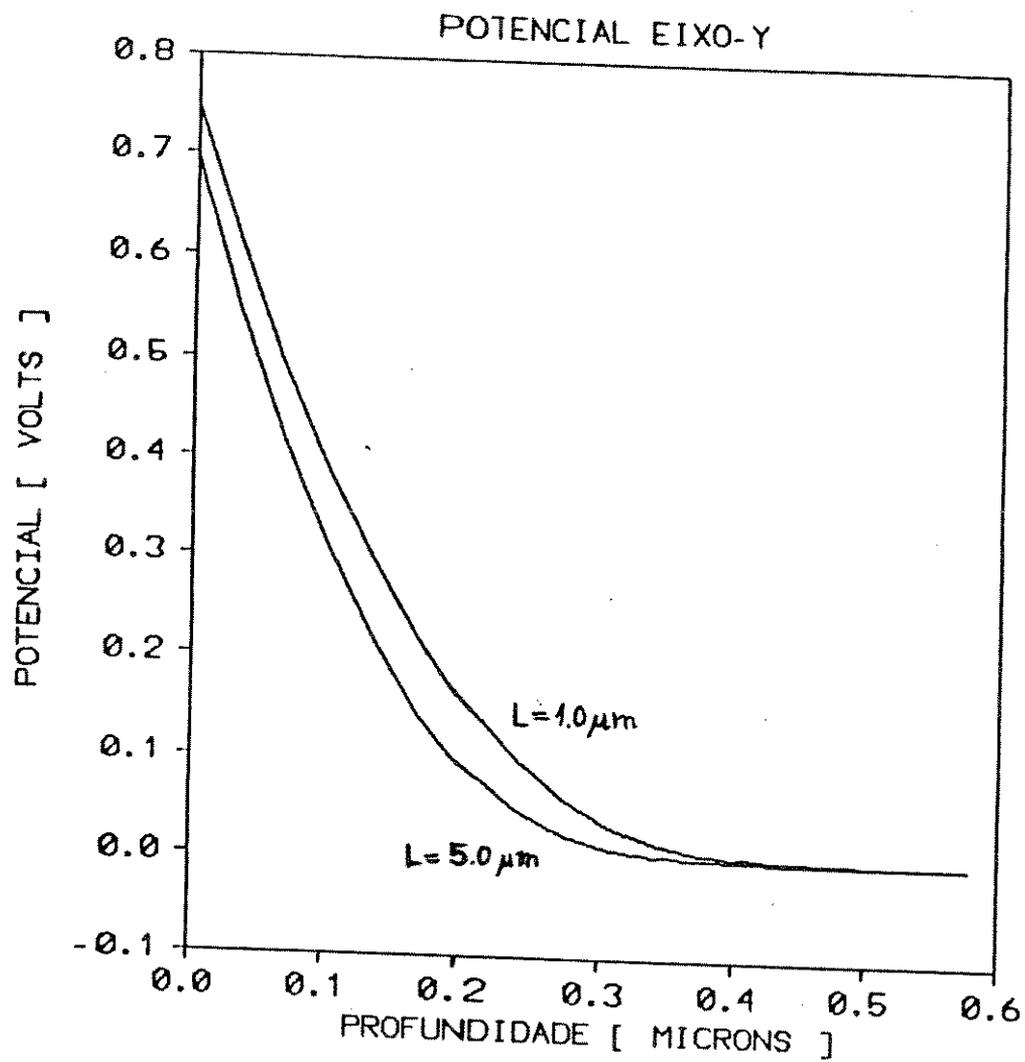


Figura 5.6: Variação transversal do potencial

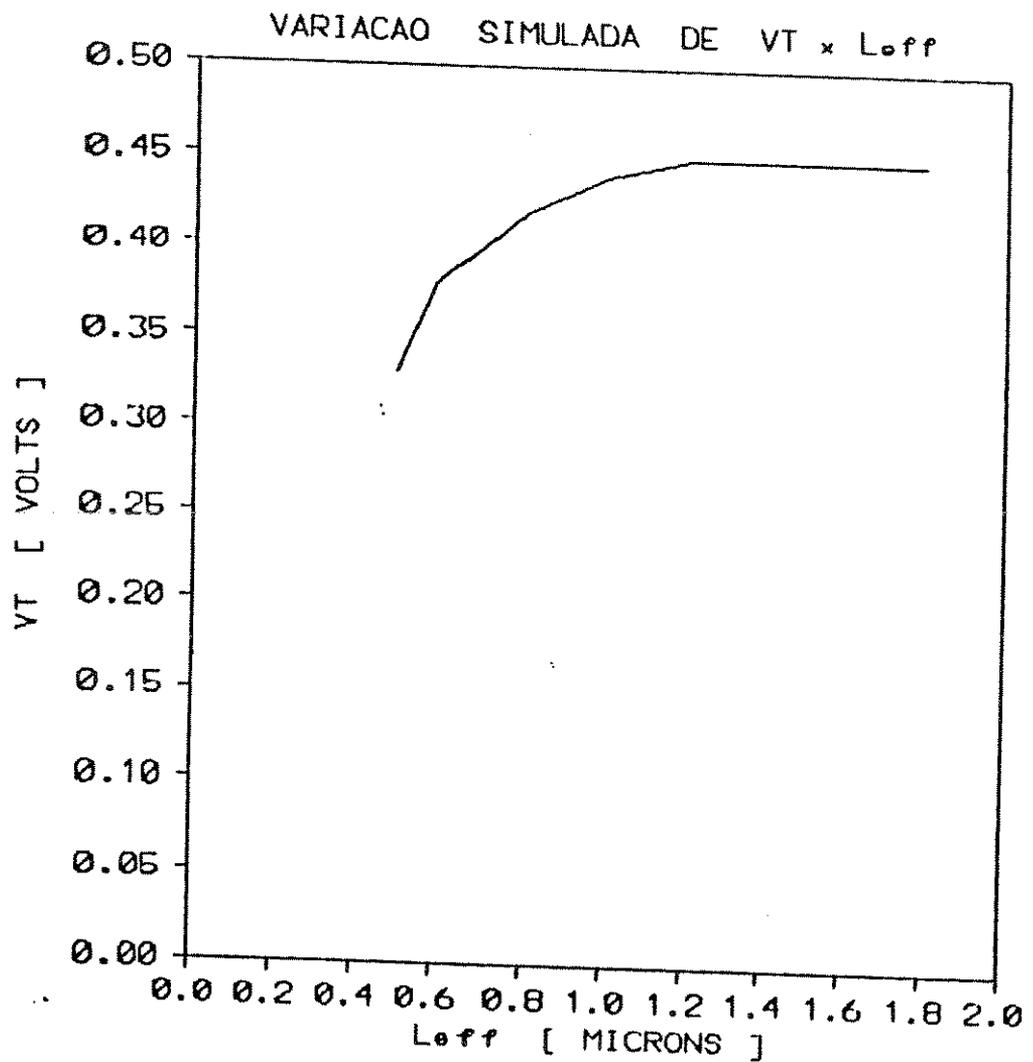


Figura 5.7: Variação de V_T com L

Uma observação cautelosa da mesma nos mostra que a região de depleção do MOSFET de canal curto inicia a uma profundidade de $0.4\mu m$, ou seja, além do início da região de depleção do MOSFET de canal longo ($0.3\mu m$). Uma vez que a componente lateral do campo elétrico (E_x) no MOSFET de canal curto é diferente de zero, acontece que durante a operação do dispositivo fora do equilíbrio termodinâmico, uma parcela considerável da corrente de dreno irá circular no interior do dispositivo usando E_x no seu transporte. Este fenômeno de circulação de corrente no interior do substrato é denominado de *punchthrough*. A presença de *punchthrough* se dá normalmente, a uma profundidade na qual a tensão de porta V_G tem o seu controle reduzido sobre a corrente de dreno, degenerando assim o comportamento elétrico do dispositivo. Como consequência deste fenômeno, é possível deduzir que em dispositivos de canal curto a diminuição da dependência de corrente de dreno I_D com V_G , se refletirá diretamente em uma redução do valor da inclinação de sub-limiar⁴ ($S = \frac{\partial I_D}{\partial V_G}$). Esta variação em S realmente ocorre, e normalmente é utilizada como figura de mérito na avaliação da presença de *punchthrough* em dispositivos MOSFET's.

Resumindo todas as análises feitas até o momento, podemos afirmar que a simulação em equilíbrio termodinâmico corresponde a uma boa aproximação inicial na investigação de efeitos dimensionais no MOSFET. Uma estimativa mais realista para estes efeitos entretanto, deve levar em conta o funcionamento do MOSFET fora do equilíbrio termodinâmico. Isto fica claro no caso da determinação de V_T e S , uma vez que uma estimativa mais efetiva para os mesmos dependerá também da tensão aplicada entre fonte e dreno. Por este motivo, a busca da simulação do dispositivo MOSFET fora do equilíbrio termodinâmico, deve ser o objetivo maior na investigação de dispositivos MOSFET sub-micrométricos.

⁴Em inglês: *subthreshold slope*.

Capítulo 6

Conclusão

A pesquisa em microeletrônica é reconhecidamente um dos ramos de atividade que melhor exemplificam o gênio humano, e sua capacidade de manipular o Universo que o cerca. É realmente impressionante como após algumas poucas décadas de trabalho conseguimos resultados tão profícuos. Mais espantoso ainda, é saber que a velocidade com que caminham estas pesquisas parece não perder o impulso inicial, estabelecido em 1947 com o anúncio do transistor bipolar. As consequências sociais de toda esta revolução entretanto, ainda não foram muito bem avaliadas, e acreditamos que somente após mais algumas décadas seremos capazes de entender as transformações que efetivamente estão ocorrendo.

O problema básico de se projetar dispositivos semicondutores se insere dentro do contexto de todos os problemas em Engenharia: Como determinar modelos matemáticos que descrevam com precisão o comportamento físico destes dispositivos? Ou ainda, como elaborar estes modelos de modo que os mesmos permitam relacionar os parâmetros de fabricação dos dispositivos, com suas características de operação?

De acordo com o que foi investigado neste trabalho, o modelo matemático dos dispositivos semicondutores pode ser definido como um conjunto de equações diferenciais parciais que descrevem as relações entre potencial elétrico, e as densidades de portadores de corrente. Compreender o comportamento destes dispositivos significa, em última instância, resolver este sistema de equações.

A algumas décadas atrás a abordagem deste problema era feita de maneira extremamente simples. Uma vez que o sistema de equações diferenciais que descreve o comportamento dos dispositivos semicondutores não tem solução analítica, os domínios dos dispositivos eram divididos em regiões onde eram realizadas aproximações lineares nas equações, o que possibilitava a obtenção de soluções analíticas para as mesmas. Estas aproximações levavam em consideração, na

maior parte dos casos, o fato de que os primeiros dispositivos projetados possuíam dimensões razoavelmente grandes. Foi baseando-se nestas hipóteses que Shockley introduziu o *modelo de canal gradual* para os dispositivos MOSFET [Shockley 62].

A utilização de simulação numérica, na solução das equações destes dispositivos, já era entretanto conhecida àquela época. As técnicas de discretização e linearização das equações, bem como os métodos numéricos de solução dos sistemas de equações algébricas não-lineares resultantes, já estavam estabelecidos, e o seu uso era bem dominado. Apesar disto, a utilização de simulação numérica na solução das equações dos dispositivos semicondutores não prosperou. Isto porque a complexidade computacional exigida por esta abordagem era tão grande, que os computadores daquela época não conseguiam resolver o problema em um tempo considerado razoável.

Com o surgimento de computadores cada vez mais velozes no entanto, uma nova forma de investigar os problemas teóricos em microeletrônica vem despondo.

O trabalho que desenvolvemos procurou mostrar esta nova abordagem através do problema da simulação bidimensional em dispositivos MOSFET na situação de equilíbrio termodinâmico. Este problema, conforme pudemos notar, permite uma clara observação das mudanças na distribuição de potencial dentro do MOSFET, resultantes da diminuição do comprimento de seu canal. Usando os resultados desta distribuição, pudemos comprovar a presença de variações no valor de V_T em dispositivos de canal curto, como consequência do aparecimento de interações entre as regiões de depleção de fonte e dreno. Finalmente, as distribuições de potencial encontradas permitiram-nos ainda compreender o mecanismo de funcionamento do fenômeno de *punchthrough*, bem como a sua influência na diminuição da inclinação de sub-limiar do dispositivo.

Consideramos portanto, que este trabalho servirá como uma boa referência para aqueles que estiverem interessados em uma primeira introdução ao problema de simulação de dispositivos semicondutores de uma maneira geral.

A utilização de simulação bidimensional já é hoje em dia, um padrão largamente utilizado no projeto e na investigação de problemas em dispositivos semicondutores, especialmente em MOSFET's sub-micrométricos. Com a ampliação da utilização destas ferramentas, e posteriormente com a possibilidade de se realizar simulações tridimensionais de maneira razoavelmente veloz, acreditamos que uma nova forma de abordagem se estabelecerá, no modo como a pesquisa de dispositivos semicondutores é realizada. As consequências imediatas desta mudança de enfoque, se refletirão principalmente na possibilidade de avaliarmos, com melhor precisão e rapidez, a validade de novos modelos para fenômenos até

o momento ainda pouco compreendidos.

Deste modo, com a elevação dos custos e da complexidade associados à fabricação de novos dispositivos semicondutores, podemos antever, sem incorrer em erro, que a simulação numérica será num futuro não muito distante, uma das principais ferramentas no projeto e na pesquisa básica em microeletrônica.

Com relação a este trabalho, acreditamos que uma extensão natural do mesmo deverá ser a utilização dos modelos aqui desenvolvidos, na elaboração de um programa mais genérico que permita a simulação de MOSFET's em condições reais de operação, ou seja fora do equilíbrio termodinâmico. Uma vez que estes modelos foram obtidos de maneira mais genérica possível, achamos que a sua implementação para outros dispositivos, como MESFET's de GaAs por exemplo, é também uma possibilidade que não deixa de ser interessante. A fim de atingir estes objetivos, entretanto, alguns problemas devem ser melhor investigados, principalmente aqueles relacionados à determinação de modelos mais detalhados para os parâmetros do semicondutor, tais como: mobilidade, taxa de geração e recombinação, etc... .

Apêndice A

Programa DOPMOS

```

c -----
c      calcii.for
c -----
c
c Funcao : Calcular os parametros da implantacao ionica
c
c Versao : V1.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome                Descricao                tipo
c
c drp  - desvio padrao da distancia projetada      R
c e    - variavel auxiliar para energia de implante R
c e0   - permissividade eletrica no vacuo          R
c ed   - permissividade eletrica no isolante       R
c ekev - energia da implanataco ionica             R
c elemi - elemento a ser implanatado              I
c es   - permissividade eletrica no silicio        R
c kb   - constante de Boltzmann                   R
c ld   - comprimento de Debye                      R
c ni   - concentracao intrinseca do silicio        R
c phif - potencial do nivel de fermi               R
c phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c q    - carga elementar                           R
c qint - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c rp   - distancia padrao da implantacao ionica    R
c t    - temperatura do meio                       R
c ut   - potencial termico                         R
c -----

```

```

subroutine calcii (elemi,ekev,rp,drp)

```

```

real*8 ekev,rp,drp
real*8 e
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
integer elemi

```

```

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi

```

```

c elemi - indice referente ao elemento implantado

```

```

c
c      1 = boro
c      2 = fosforo

```

```

c ekev - energia de implante

```

```

c rp - distancia projetada

```

```

c drp - desvio padrao da distancia projetada

```

```

c muda de variavel

```

```

e = ekev

```

```

c salta de acordo com o elemento

```

```
goto (1,2), elewi
```

```
c boro implantado em silicio
```

```
1 rp = e*(3.338-3-e*3.308e-6)  
  drp = e*(1.1781e-3*(2.086e-5-e*(1.403e-7-e*(4.54e-10-e*  
* 5.525e-13))))  
  return
```

```
c fosforo implantado em silicio
```

```
2 rp = e*(1.259e-3-e*(2.743e-7-e*1.290e-9))  
  drp = e*(6.542e-4-e*(3.161e-6-e*(1.371e-8-e*2.252e-11)))  
  return
```

```
end
```

```
c -----
```

```

c -----
c      coedif.for
c -----
c
c Funcao : Calcular o coeficiente de difusao usando a formula
c          de Arrhenius.
c
c Versao : Vi.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c d             - coeficiente de difusao          R
c d0(*)         - vetor de coeficientes da equacao  R
c ea(*)         - vetor de energias de ativacao    R
c elemi        - indice do elemento              I
c temp         - temperatura da difusao          R
c
c -----
c
c subroutine coedif(elemi,temp,d)
c
c real*8 temp,d0,ea,d
c integer elemi
c
c armazena os coeficientes da expressao de arrhenius
c
c dimension d0(2),ea(2)
c data d0 /0.5554,3.85/
c data ea /3.975e4,4.247e4/
c
c calcula coeficiente de difusao
c
c d = d0(elemi)*dexp(-ea(elemi)/(temp))
c
c return
c end
c -----

```

```

c -----
c      doping.for
c -----
c
c Funcao : Realiza implantacao e o recozimento de fonte e dreno
c
c Versao : Vi.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome                Descricao                tipo
c
c amasc - tamanho da abertura da mascara sobre a fonte R
c c(*,*) - matriz concentracao normalizada de dopantes R
c camasc - centro da abertura da mascara sobre a fonte R
c csubstr - concentracao do substrato de silicio R
c dose - dose da implantacao ionica R
c dpthx - abertura na mascara de fonte e dreno R
c dpthy - profundidade da juncao de fonte e substrato R
c e0 - permissividade eletrica no vacuo R
c ed - permissividade eletrica no isolante R
c ekev - energia de implantacao R
c elemi - indice do elemento a ser implantado I
c es - permissividade eletrica no silicio R
c kb - constante de Boltzmann R
c ld - comprimento de Debye R
c max - maxima dimensao da rede I
c ni - concentracao intrinseca do silicio R
c nmax - indice da abcissa onde termina o canal I
c nmin - indice da abcissa onde inicia o canal I
c nx - numero de pontos da rede na direcao x I
c ny - numero de pontos da rede I
c phif - potencial do nivel de fermi R
c phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c q - carga elementar R
c qint - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t - temperatura do meio R
c temp - temperatura de recozimento da implantacao R
c time - tempo de recozimento R
c ut - potencial termico R
c x(*) - vetor de abcissas da rede R
c xmax - maior abcissa da rede I
c y(*) - vetor de ordenadas da rede R
c ymax - maior ordenada da rede I

```

```

c -----
c
c subroutine doping (x,y,nx,ny,c,elemi,dose,temp,ekev,time,max)

```

```

c
c real*8 x(*),y(*),c(max,*)
c real*8 camasc,amasc,dose,ekev,temp,time
c real*8 xmax,ymax
c real*8 csubstr
c real*8 dpthx,dpthy
c real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c integer nx,ny,max,elemi
c integer nmin,nmax

```

```
common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phis,pi
common /impurity/ csubstr
common /junction/ dpthx,dpthy
common /channel/ nmin,nmax
common /surface/ xmax,ymax
```

c definicao do substrato

```
do 40 i=1,nx
do 30 j=1,ny
c(i,j) = -csubstr
30 continue
40 continue
```

c estima centro e tamanho real da abertura na mascara para i/i de fonte

```
camasc = dpthx/2
amasc = dpthx
```

c realiza implante de fonte

```
call iidif (x,y,nx,ny,c,amasc,camasc,elemi,dose,temp,ekev,time,max)
```

c realiza implante de dreno usando simetria

```
do 50 i = nx, int((nmin+nmax)/2) + 1, -1
do 60 j = 1,ny
c(i,j) = c(nx-i+1,j)
60 continue
50 continue
```

```
return
end
```

c -----

```

c -----
c      dopmos.for
c -----
c
c Funcao : Rotina principal do programa de dopagem de fonte e
c          dreno segundo o modelo analitico de Lee.
c
c Versao : Vi.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c c(*,*) - matriz concentracao normalizada de dopantes R
c dose - dose da implantacao ionica de fonte e dreno R
c elemt - indice do elemento a ser implantado I
c energia - energia de implantacao R
c maxx - maxima dimensao da rede na direcao x I
c maxy - maxima dimensao da rede na direcao y I
c nx - numero de pontos da rede na direcao x I
c ny - numero de pontos da rede I
c res - resposta sim ou nao C
c time - tempo de recozimento da implantacao R
c x(*) - vetor de abcissas da rede R
c y(*) - vetor de ordenadas da rede R
c -----
c
c parameter ( maxx = 100 )
c parameter ( maxy = 100 )
c
c real*8 x(maxx),y(maxy),c(maxx,maxy)
c real*8 dose,temp,energia,time
c integer elemt
c integer nx,ny
c character res*1
c
c sinaliza nome do programa e versao
c
c write (*,50)
50 format (/, 'Dopmos - Unicamp ver 1.0 27/07/90',/)
c
c le os dados do dispositivo e do implante
c
c call input (elemt,dose,temp,energia,time)
c
c sinaliza espera
c
c write (*,110)
110 format ('Aguarde ...')
c
c gera a rede
c
c call rede (x,y,nx,ny)
c
c implementa implante e difusao
c
c call doping (x,y,nx,ny,c,elemt,dose,temp,energia,time,maxx)

```

```
write (*,90)
90  format (/, '-----',/)
60  write (*,80)
80  format ('Deseja gerar a rede (s/n)      : ', $)
    read (*,70) res
70  format (a1)
    if (res.eq.'n') go to 10
    if (res.ne.'s') go to 60
    call nsave (x,y,nx,ny,c,maxx)

10  write (*,100)
100 format (/, '-----',/)
    write (*,20)
20  format ('Deseja o perfil de dopagem (s/n) : ', $)
    read (*,30) res
30  format (a1)
    if (res.eq.'n') go to 40
    if (res.ne.'s') go to 10
    call grfdop(x,y,nx,ny,c,maxx)

c
40  end
c
c  -----
c
```

```

c -----
c          grfdop.for
c -----
c
c Funcao : Salva a distribuicao do perfil de dopagem para
c           ser tracado pelo programa Energraphics.
c
c Versao : Vi.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c c(*,*) - matriz concentracao normalizada de dopantes R
c csubstr - concentracao do substrato de silicio R
c dmin - nivel de referencia para a concentracao R
c dpxy - logaritmo da concentracao referenciada R
c e0 - permissividade eletrica no vacuo R
c ed - permissividade eletrica no isolante R
c es - permissividade eletrica no silicio R
c kb - constante de Boltzmann R
c ld - comprimento de Debye R
c maxx - maxima dimensao da rede I
c ni - concentracao intrinseca do silicio R
c nmax - indice da abcissa onde termina o canal I
c nmin - indice da abcissa onde inicia o canal I
c nome - nome do arquivo onde sera salvo o perfil C
c nx - numero de pontos da rede na direcao x I
c ny - numero de pontos da rede I
c phif - potencial do nivel de fermi R
c phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c q - carga elementar R
c qint - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t - temperatura do meio R
c titulo - titulo do grafico a ser tracado C
c ut - potencial termico R
c x(*) - vetor de abcissas da rede R
c xmax - maior abcissa da rede I
c xmaxsg - rotulo do eixo x C
c y(*) - vetor de ordenadas da rede R
c ymax - maior ordenada da rede I
c ymaxsg - rotulo do eixo y C
c zmsg - rotulo do eixo z C
c -----

```

```

subroutine grfdop(x,y,nx,ny,c,maxx)

```

```

real*8 x(*),y(*),c(maxx,*),dpxy,dmin
real*8 csubstr
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
real*8 xmax,ymax
integer nmin,nmax
integer nx,ny
character nome*15,xmsg*50,ymsg*50,zmsg*50,titulo*50

```

```

common /impurity/ csubstr
common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi

```

```

common /surface/ xmax,ymax
common /channel/ nmin,nmax

c   le informacoes do grafico

      write(*,320)
320  format('Titulo do grafico           : ', $)
      read(*,330) titulo
330  format(a50)
      write(*,340)
340  format('Titulo do eixo-x           : ', $)
      read(*,330) xmsg
      write(*,350)
350  format('Titulo do eixo-y           : ', $)
      read(*,330) ymsg
      write(*,360)
360  format('Titulo do eixo-z           : ', $)
      read(*,330) zmsg
      write(*,370)
370  format('Arquivo do grafico         : ', $)
      read(*,380) nome
380  format(a15)

c   abre e salva informacoes para o tracador grafico EnerGraphics

      open(unit=80, file=nome, status='unknown')
      write(80,400) titulo,xmsg,ymsg,zmsg,nmax-nmin+1,ny,
* (x(nmax)-x(nmin))*ld*ie4,ymax*ld*ie4
400  format(a50,/, '30-08-1989',/, a50,/, a50,/, a50,/, i2, ', ', i2, ', 0, ',
* f3.1, ', 0, ', f3.1,/, '4.0,4.0,0.4,130,40',/, '30,20,3,0')

c   calcula nivel de referencia para dopagem

      dmin = dlog10(dabs(csubstr)*ni)

c   salva cada um dos pontos da distribuicao de dopagem

      do 410 i=nmin,nmax
        do 420 j=1,ny
          dpxy = dlog10(dabs(c(i,j)+2*dabs(csubstr))*ni)
          write (80,450) dpxy-dmin
450          format(f12.7)
420          continue
410          continue

c   fecha arquivo

      close(unit=80)

999  return
      end

c   -----

```

iidi.f.for

Funcao : Realizar a implantacao ionica e o recozimento de
uma regio definida por uma abertura de mascara
especificada. Utilizacao do modelo de Lee.

Versao : V1.0 02/08/90

Variaveis :

Nome	Descricao	tipo
al	- coeficiente da equacao de Lee	R
amasc	- tamanho na abertura da mascara	R
b1	- coeficiente da equacao de Lee	R
c(*,*)	- matriz concentracao normalizada de dopantes	R
camasc	- abcissa do centro da abertura da mascara	R
cd	- comprimento de difusao	R
cd2	- quadrado do comprimento de difusao	R
cl	- coeficiente da equacao de Lee	R
cmx	- concentracao maxima da implantacao	R
csubstr	- concentracao do substrato de silicio	R
d	- coeficiente de difusao	R
derf	- funcao erro	R
dose	- dose da implantacao ionica	R
drp	- desvio padrao da distancia projetada da i/i	R
e0	- permissividade eletrica no vacuo	R
ed	- permissividade eletrica no isolante	R
ekev	- energia da implantacao ionica	R
elemi	- indice do elemento a ser implantado	I
es	- permissividade eletrica no silicio	R
kb	- constante de Boltzmann	R
ld	- comprimento de Debye	R
max	- maxima dimensao da rede	I
ni	- concentracao intrinseca do silicio	R
nmax	- indice da abcissa onde termina o canal	I
nmin	- indice da abcissa onde inicia o canal	I
nx	- numero de pontos da rede na direcao x	I
ny	- numero de pontos da rede	I
omega	- funcao para calculo do perfil transversal (y)	R
oxide	- espessura do oxido de porta	R
phif	- potencial do nivel de fermi	R
phims	- diferenca de funcao trabalho metal silicio	R
q	- carga elementar	R
qint	- densidade de cargas armadilhadas na interface	R
rp	- distancia projetada do implante	R
t	- temperatura do meio	R
temp	- temperatura de recozimento	R
time	- tempo de recozimento	R
ut	- potencial termico	R
x(*)	- vetor de abcissas da rede	R
x1	- abcissa referida ao centro da mascara	R
y(*)	- vetor de ordenadas da rede	R
y1	- ordenada referida ao centro da mascara	R

```

subroutine iidif (x,y,nx,ny,c,amasc,camasc,elemi,dose,temp,ekev,
*           time,max)

real*8 x(*),y(*),c(max,*)
real*8 camasc, amasc,dose,ekev,temp,time,oxide,cmax
real*8 rp,drp,cd,d
real*8 xmax,ymax
real*8 omega,derf
real*8 cd2
real*8 csubstr
real*8 xl,yl
real*8 ix,iy,ixy
real*8 al,bl,cl
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
integer nx,ny,max,elemi

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
common /lee/ al,bl,cl,rp,drp
common /impurity/ csubstr
common /channel/ nmin,nmax
common /thick/ oxide

c calcula rp,drp e cmax do substrato (normalizados)

call parimp(elemi,ekev,rp,drp,dose,cmax)

c calcula o coeficiente de difusao

call coedif(elemi,temp,d)

c calcula o comprimento caracteristico de difusao normalizado

cd = dsqrt(d*time)/ld
cd2 = cd*cd

c calcula coeficientes da equacao de lee

al = 4*cd2+2*drp*drp
bl = (rp/drp)*(1/dsqrt(2+drp*drp/cd2))
cl = 1/(2*dsqrt(cd2+2*(cd2/drp)*(cd2/drp)))

do 10,i = 1,nx
  xl = x(i) - camasc
  do 20,j = 1,ny
    yl = y(ny) - y(j)
c embaixo da abertura na mascara ?
c if ((xl.ge.-amasc/2).and.(xl.le.amasc/2)) then
c sim, entao considera implante unidimensional
  ix = dsqrt(pi)*cd*derf(amasc/(2*cd))
  iy = dsqrt(2*pi/al)*cd*drp*(omega(yl)+omega(-yl))
  ixy = cmax/(4*pi*cd2)*ix*iy
else
c nao, implante bidimensional
  ix = dsqrt(pi)*cd*(derf((xl+amasc/2)/(2*cd))-
*           derf((xl-amasc/2)/(2*cd)))
  iy = dsqrt(2*pi/al)*cd*drp*(omega(yl)+omega(-yl))
  ixy = cmax/(4*pi*cd2)*ix*iy

```

```

        endif
c      calcula a dopagem resultante no substrato
        c(i,j) = c(i,j) + ix*y
20     continue
10     continue

        return
        end

c      -----
c      funcao derf (x)
c      -----

real*8 function derf (x)

real*8 a1,a2,a3,a4,a5,t,p,x

x = dabs (x)
p = .3275911
a1 = .254829592
a2 = -.284496736
a3 = 1.421413741
a4 = -1.453152027
a5 = 1.061405429
t = 1.d0 / (1.d0 + p*x)
derf = 1.d0 - t*(a1+t*(a2+t*(a3+t*(a4+t*(a5)))))*dexp(-x**2)

        return
        end

c      -----
c      funcao omega (y)
c      -----

real*8 function omega (y)

real*8 derf
real*8 y
real*8 al,b1,c1,rp,drp

common /lee/ al,b1,c1,rp,drp

omega = dexp(-(y-rp)**2/al)*(1+derf(b1+c1*y))

        return
        end

c      -----

```

```

c -----
c      input .for
c -----
c
c Funcao : Realizar a leitura do arquivo que contem os dados
c           do transistor MOSFET, normalizar as variaveis e
c           fazer a leitura dos parametros da implantacao
c           ionica e do recozimento.
c
c Versao : V1.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome                Descricao                tipo
c
c csubstr - concentracao do substrato de silicio      R
c dose      - dose da implantacao ionica              R
c dpthx    - tamanho do contato de fonte e dreno      R
c e0       - permissividade eletrica no vacuo         R
c ed       - permissividade eletrica no isolante      R
c energia  - energia da implantacao ionica            R
c es       - permissividade eletrica no silicio       R
c kb       - constante de Boltzmann                  R
c ld       - comprimento de Debye                     R
c lproj    - tamanho do canal projetado                R
c name     - nome do arquivo de dados do MOSFET       C
c ni       - concentracao intrinseca do silicio       R
c nmax     - indice da abcissa onde termina o canal   I
c nmin     - indice da abcissa onde inicia o canal    I
c oxide    - espessura do oxido de porta              R
c phif     - potencial do nivel de fermi              R
c phims    - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c q        - carga elementar                          R
c qint     - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c res      - tipo de elemento a implantar             R
c t        - temperatura do meio                      R
c temp     - temperatura do recozimento               R
c time     - tempo de recozimento                     R
c ut       - potencial termico                         R
c xmax     - maior abcissa da rede                    I
c ymax     - maior ordenada da rede                   I
c -----

```

```

subroutine input (elemi,dose,temp,energia,time)

```

```

real*8 xmax,ymax,lproj,csubstr,oxide
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
real*8 dose,temp,energia,time
real*8 dpthx,dpthy
integer elemi
character res*1,name*15

```

```

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
common /impurity/ csubstr
common /junction/ dpthx,dpthy
common /thick/ oxide
common /surface/ xmax,ymax

```

```

c      leitura do nome arquivo MOS

      write(*,100)
100    format('Arquivo de dados MOS           : ', $)
      read(*,65) name
65     format (a15)

c      leitura do arquivo especificado

      open(unit=70, file=name, status='old')
      read(70,*) xmax
      read(70,*) ymax
      read(70,*) lproj
      read(70,*) csubstr
      read(70,*) oxide
      read (70,*) phims
      close(unit=70)

c      determinacao de parametros e grandezas fisicas fundamentais

      pi = 3.1415926
      e0 = (1/(36*pi))*1d-11
      es = 11.7*e0
      ed = 3.9*e0
      q = 1.602d-19
      ni = 1.45d10
      kb = 1.381d-23
      t = 300

c      largura das regioes n+ projetadas de f/d

      dpthx = (xmax-lproj)/2

c      potencial ut

      ut = kb*t/q

c      comprimento debye

      ld = dsqrt ( es*ut/(q*ni) )

c      potencial de fermi silicio - p

      phif = ut * dlog (csubstr/ni)

c      diferenca de funcao trabalho para porta
c      (tomada em relacao ao nivel de fermi phif)

      phims = phims-phif

c      carga armadilhada na interface

      qint = 0.0

c      normalizacao das grandezas

      xmax = xmax/ld*1d-4

```

```
ymax = ymax/ld*id-4
dpthx = dpthx/ld*id-4
csubstr = csubstr/ni
oxide = oxide/ld*id-4
phif = phif/ut
phims = phims/ut
qint = qint/(ld*ni)
```

c le dados do implante de fonte e dreno

```
3 write (*,5)
5 format ('Elemento para implante f/d (b,p) : ',%)
read (*,40) res
40 format (a1)
if (res.eq.'b') then
  elemi = 1
  go to 14
endif
if (res.eq.'p') then
  elemi = 2
else
  go to 3
endif
14 write (*,15)
15 format ('Dose para implante de f/d (atm/cm2) : ',%)
read (*,*) dose
write (*,18)
18 format ('Energia para implante de f/d (keV) : ',%)
read (*,*) energia
write (*,25)
25 format ('Temperatura de recozimento (C) : ',%)
read (*,*) temp
write (*,28)
28 format ('Tempo de recozimento (s) : ',%)
read (*,*) time
```

c converte temperatura de recozimento em Kelvin

```
temp = temp + 273
```

```
return
end
```

c

```

C -----
C      nsave.for
C -----
C
C Funcao : Salvar as coordenadas da rede e o perfil de dopagem
C          gerados.
C
C Versao : V1.0 02/08/90
C
C Variaveis :
C
C Nome          Descricao          tipo
C
C c(*,*) - matriz concentracao normalizada de dopantes R
C e0 - permissividade eletrica no vacuo R
C ed - permissividade eletrica no isolante R
C es - permissividade eletrica no silicio R
C kb - constante de Boltzmann R
C ld - comprimento de Debye R
C nmax - maxima dimensao da rede I
C ni - concentracao intrinseca do silicio R
C nmax - indice da abcissa onde termina o canal I
C nmin - indice da abcissa onde inicia o canal I
C nomearq - nome do arquivo onde sera salvo o perfil C
C nx - numero de pontos da rede na direcao x I
C ny - numero de pontos da rede I
C phif - potencial do nivel de fermi R
C phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
C q - carga elementar R
C qint - densidade de cargas armadilhadas na interface R
C t - temperatura do meio R
C ut - potencial termico R
C x(*) - vetor de abcissas da rede R
C xmax - maior abcissa da rede I
C y(*) - vetor de ordenadas da rede R
C ymax - maior ordenada da rede I
C -----

```

```

subroutine nsave (x,y,nx,ny,c,max)

```

```

real*8 x(*),y(*),c(max,*)
real*8 xmax,ymax
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims
integer max
integer nx,ny
integer nmin,nmax
integer i,j
character*15 nomearq

common /surface/ xmax,ymax
common /channel/ nmin,nmax
common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims

```

```

c salva grade

```

```

write (*,10)
10 format ('Arquivo da rede : ', $)

```

```
      read (*,20) nomearq
20     format (a15)

c     abre, le e fecha o arquivo

      open (unit=40, file=nomearq, status='unknown')
      write (40,*) nx
      write (40,*) ny
      write (40,*) nmin
      write (40,*) nmax
      do 40, i=1, nx
        do 50, j=1, ny
          write (40,30) x(i)*1d*1.e4, y(j)*1d*1.e4, c(i,j)*ni
30         format (f9.7, f9.7, e14.7)
50         continue
40         continue
      close (40)

      end

c     -----
```

```

c -----
c      pariimp.for
c -----
c
c Funcao : Calcular os parametros da implantacao atraves
c           de aproximacoes polinomiais.
c
c Versao : V1.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome                Descricao                tipo
c
c cmax  - concentracao maxima do perfil implantado      R
c dose  - dose da implantacao ionica                  R
c drp   - desvio padrao da distancia projetada         R
c e0    - permissividade eletrica no vacuo             R
c ed    - permissividade eletrica no isolante         R
c ekev  - energia da implantacao ionica               R
c elemi - elemento a ser implantado                   I
c es    - permissividade eletrica no silicio          R
c kb    - constante de Boltzmann                      R
c ld    - comprimento de Debye                        R
c ni    - concentracao intrinseca do silicio          R
c phif  - potencial do nivel de fermi                 R
c phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio  R
c q     - carga elementar                             R
c qint  - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c rp    - desvio padrao da implantacao ionica         R
c t     - temperatura do meio                         R
c ut    - potencial termico                           R
c -----

```

```

c subroutine pariimp (elemi,ekev,rp,drp,dose,cmax)
c
c real*8 ekev,rp,drp,dose,cmax
c real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c integer elemi
c
c common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c
c calcula rp e drp para o implante em silicio
c
c call calcii (elemi,ekev,rp,drp)
c
c ajusta para centimetros rp, drp
c
c rp = rp*1e-4
c drp = drp*1e-4
c
c calcula concentracao de superficie normalizada
c
c if (elemi.eq.1) then
c   cmax = -dose/(dsqrt(2*pi)*drp)/ni
c else
c   cmax = dose/(dsqrt(2*pi)*drp)/ni
c endif

```

```
c   normaliza rp, drp
```

```
    rp = rp/ld  
    drp = drp/ld
```

```
    return  
end
```

```
c
```

```

c -----
c rede.for
c -----
c
c Funcao : Criar a malha (ou rede) de discretizacao
c
c Versao : Vi. 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome                Descricao                tipo
c
c cd      - comprimento de difusao                R
c cd2     - comprimento de difusao ao quadrado    R
c dpthx   - abertura na mascara de fonte e dreno R
c dpthy   - profundidade na juncao de fonte e substrato R
c ipx(3)  - vetor de inicio da grade na direcao x R
c irx(*)  - vetor de incremento da grade na direcao x R
c iry     - incremento da grade na direcao y      R
c name    - nome do arquivo onde sera salva a rede C
c nlx     - numero de pontos na direcao x dentro do canal I
c nmax    - indice da abcissa onde termina o canal I
c nmin    - indice da abcissa onde inicia o canal I
c node    - armazena temporariamente o numero do no I
c npx(*)  - vetor de numero de pontos na direcao x I
c nx      - numero de pontos da rede na direcao x I
c ny      - numero de pontos da rede             I
c x(*)    - vetor de abcissas da rede            R
c xmax   - maior abcissa da rede                I
c y(*)    - vetor de ordenadas da rede          R
c ymax   - maior ordenada da rede               I
c -----

```

```

subroutine rede (x,y,nx,ny)

```

```

real*8 x(*),y(*)
real*8 xmax,ymax
real*8 dpthx,dpthy
real*8 cd,cd2
real*8 irx(3),ipx(3)
real*8 iry
integer nlx,nx,ny,npx(3)
integer nmin,nmax
character name*15

```

```

common /surface/ xmax,ymax
common /channel/ nmin,nmax
common /junction/ dpthx,dpthy

```

```

c define tipo da grade

```

```

nlx = 48
ny = 48

```

```

c constroi a rede de modo que :

```

```

c - 48 pontos na direcao x fiquem entre o inicio e

```

```

c      o final da regioao do canal projetado

c      determina o incremento na direcao x dentro do canal

      irx (2) = (xmax-2*dpthx)/dble(float(nlx-1))
      npx (2) = nlx

c      determina o incremento e o numero de pontos da rede dentro
c      da regioao de fonte

      irx (1) = irx (2)
      npx (1) = int (dpthx/irx(1))
      ipx (1) = 0.d0

c      agora na regioao de dreno

      npx (3) = npx (1)
      irx (3) = irx (1)
      ipx (3) = xmax-irx(3)*dble(float(npx(3)-1))

c      determina o inicio da regioao de canal

      ipx (2) = dpthx

c      constroi a rede na direcao x

      node = 0
      do 10 k = 1,3
        do 20 i = 1,npx(k)
          node = node + 1
          if (i.eq.1) then
            x(node) = ipx (k)
          else
            x(node) = x(node-1) + irx(k)
          endif
20      continue
10      continue

c      avalia numero de pontos na direcao x

      nx = node

c      determina o incremento na direcao y

      iry = ymax/dble(float(ny-1))

c      constroi a rede na direcao y

      node = 1
      y(1) = 0.d0
      do 40 j = 1,ny-1
        y(j+1) = y(j) + iry
40      continue

c      determina inicio e final da regioao de canal projetado

      nmin = npx(1)+1
      nmax = npx(1)+npx(2)

```

return
end

c

Apêndice B

Convergência do sistema linear $A.\psi = B$

A análise de convergência de um determinado método iterativo passa pela decomposição deste sistema em termos das matrizes L , D e U definidas na Sec.5.2.3. Conforme foi analisado naquela secção, o sistema linear $A.\psi = B$ pode ser reescrito como:

$$M_G.\psi^{(m+1)} = N_G.\psi^{(m)} + B \quad (\text{B.1})$$

Deveremos agora investigar quando iterações da forma da Eq.(B.1) poderão convergir para $\psi^{(m+1)} = A^{-1}.B$. Para isto precisaremos utilizar o seguinte Teorema:

Teorema B.1 *Suponha que a matriz B pertence ao sub-espaço vetorial R^{N_p} , e que $A = M_G - N_G \in R^{N_p.N_p}$ é não singular. Se M_G for não-singular e o raio espectral de $M_G^{-1}.N_G$ satisfizer a $\rho(M_G^{-1}.N_G) < 1$ então pode-se provar que a iteração definida pela Eq.(B.1) converge para $\psi = A^{-1}.B$ para qualquer condição inicial $\psi^{(0)}$.*

A prova deste teorema, apesar de simples, não será feita aqui e pode ser encontrada facilmente na literatura específica [Golub 85]. Para efeito de didática, entretanto, teceremos alguns comentários que nos ajudarão a entender a aplicação do mesmo ao problema que estamos estudando.

O Teorema requer que as matrizes A e B sejam não singulares, o que pode ser demonstrado de maneira trivial. Por outro lado, a demonstração de que o raio espectral de $M_G.N_G^{-1}$ é menor que a unidade não é uma tarefa tão simples de ser realizada. A fim de provar esta condição deveremos provar que $M_G.N_G^{-1}$ é

diagonalmente dominante, o que garante um raio espectral menor que a unidade [Golub 85].

Deixaremos esta tarefa de lado por não fazer parte dos objetivos deste trabalho. No entanto, podemos ter uma idéia de quanto $M_G.N_G^{-1}$ é diagonalmente dominante, através da observação da distribuição dos elementos desta matriz quando montamos a mesma. No caso específico que estamos tratando, a matriz $M_G.N_G^{-1} = F'(\psi^{(k)})$, cujos elementos foram determinados de acordo com a Eq.(5.16). Desde que cada equação k , associada aos pontos da malha de discretização, somente relaciona os valores do potencial no ponto k ao potencial nos seus quatro vizinhos, é de se esperar que esta matriz seja fortemente esparsa, e que possa ser rearranjada de modo a apresentar uma grande concentração de elementos na diagonal. Isto é realmente verificado ao se procurar montar esta matriz.

Sem perda de correção, afirmaremos que a matriz $M_G.N_G^{-1}$ é diagonalmente dominante. Assim sendo, de acordo com o teorema mencionado, a iteração Gauss-Seidel proposta na Sec.5.2.3 convergirá para qualquer condição inicial produzida a cada iteração de Newton.

Outra consideração importante no caso de sistemas esparsos, como aquele da Eq.(5.21), diz respeito à relação entre o raio espectral $\rho(M_G.N_G^{-1})$ e a taxa com que o método iterativo convergirá. De uma maneira geral, podemos dizer que quanto mais diagonalmente dominante for a matriz $M_G.N_G^{-1}$ menor será o raio espectral e mais rápida será a convergência da iteração [Golub 85]. Pode-se provar [Golub 85] que o erro de convergência para iterações deste tipo tende a zero, com $\rho(M_G.N_G^{-1})^m$, onde m é o número da iteração.

Deste modo, técnicas que procurem diminuir o raio espectral destas matrizes, como ao método SOR [Young 71] utilizado na Sec.5.2.3, conseguirão aumentar consideravelmente a velocidade de convergência de métodos iterativos, usados na solução de sistemas lineares do tipo da Eq.(B.1).

Apêndice C

Programa EQMOS

```

c -----
c          bvpsor.for
c -----
c
c Funcao : Realizar a solucao numerica da equacao de Poisson na
c          forma bi-dimensional usando Newton-Gauss/Seidel/SOR.
c
c Versao : V1.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c a0            - coeficiente (i,j) da equacao linear          R
c a1            - coeficiente (i+1,j) da equacao linear        R
c a2            - coeficiente (i-1,j) da equacao linear        R
c a3            - coeficiente (i,j+1) da equacao linear        R
c a4            - coeficiente (i,j-1) da equacao linear        R
c c(*,*)       - matriz concentracao normalizada de dopantes  R
c dro          - derivada da densidade de cargas no substrato  R
c e0           - permissividade eletrica no vacuo              R
c ed           - permissividade eletrica no isolante           R
c eps         - erro limite para convergencia                  R
c es          - permissividade eletrica no silicio             R
c h1          - incremento de (i,j) a (i+1,j)                  R
c h2          - incremento (i,j) a (i-1,j)                      R
c h3          - incremento (i,j) a (i,j+1)                     R
c h4          - incremento (i,j) a (i,j-1)                     R
c iter        - contador do numero de iteracoes               I
c k           - indice de (i,j)                                I
c k1          - indice de (i+1,j)                               I
c k2          - indice (i-1,j)                                  I
c k3          - indice (i,j+1)                                  I
c k4          - indice (i,j-1)                                  I
c kb         - constante de Boltzmann                           R
c kont       - chave de convergencia                            I
c ld         - comprimento de Debye                             R
c limax      - numero maximo de iteracoes                       I
c max        - maxima dimensao da rede                          I
c ni         - concentracao intrinseca do silicio              R
c nmax       - indice da abcissa onde termina o canal          I
c nmin       - indice da abcissa onde inicia o canal           I
c nx         - numero de pontos da rede na direcao x           I
c ny         - numero de pontos da rede                         I
c oxide      - espessura do oxido de porta                     R
c phif       - potencial do nivel de fermi                     R
c phims      - diferenca de funcao trabalho metal silicio     R
c pi         - 3.1415926 ...                                     R
c q          - carga elementar                                  R
c qint       - densidade de cargas armadilhadas na interface  R
c ro         - densidade de cargas no interior do MOSFET       R
c t          - temperatura do meio                              R
c u(*)       - vetor distribuicao bi-dimensional de potencial  R
c unew       - nova aproximacao para o potencial               R
c vg         - tensao aplicada a porta                          R
c ut         - potencial termico                                 R
c w          - parametro do metodo SOR                          R
c x(*)       - vetor de abcissas da rede                        R

```

```

c      y(*) - vetor de ordenadas da rede                                R
c
c      -----
c
c      subroutine bvpsor(x,y,nx,ny,c,u,eps,w,limax,iter,max)
c      real*8 x(*),y(*),c(max,*),u(*),eps,w,unew
c      real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c      real*8 oxide
c      real*8 vg
c      real*8 ro,dro,a0,a1,a2,a3,a4,b,h1,h2,h3,h4
c      integer ny,nx,iter,kont,limax,nmin,nmax
c
c      common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c      common /thick/ oxide
c      common /bias/ vg
c      common /channel/ nmin,nmax
c
c      inicio do processo iterativo
c
c      iter = 0
10    iter = iter + 1
c      kont = 0
c
c      fronteiras artificiais
c      -----
c
c      i = 1
20    do 40 j=2,(ny-1)
c      determinacao de indices
c      k = (j-1)*nx + i
c      k1 = k + 1
c      k2 = k - 1
c      k3 = k + nx
c      k4 = k - nx
c      determinacao dos coeficientes
c      a0 = 1.d0
c      if (i.eq.1) then
c      a1 = -1.d0
c      a2 = 0.d0
c      endif
c      if (i.eq.nx) then
c      a1 = 0.d0
c      a2 = -1.d0
c      endif
c      a3 = 0.d0
c      a4 = 0.d0
c      b = 0.d0
c      gauss - seidel
c      unew = b/a0-a1/a0*u(k1)-a2/a0*u(k2)-a3/a0*u(k3)-a4/a0*u(k4)
c      metodo sor
c      unew = w*unew + (1.d0 - w)*u(k)
c      teste de convergencia do valor u(i,j)
c      if(dabs(u(k)-unew).le.eps) go to 30
c      kont = kont + 1
30    u(k) = unew
40    continue
c      if (i.ne.nx) then
c      i = nx

```

```
go to 20
endif
```

```
c interface semiconductor isolante
c -----
```

```
      j = ny
do 60 i = nmin, nmax
c      determinacao de indices
      k = (j-1)*nx + i
      k1 = k + 1
      k2 = k - 1
      k3 = k + nx
      k4 = k - nx
c      determinacao dos incrementos
      h4 = y(j) - y(j-1)
c      determinacao dos coeficientes
      a0 = 1/h4 + ed/(es*oxide)
      a1 = 0.d0
      a2 = 0.d0
      a3 = 0.d0
      a4 = -1/h4
      b = qint/es + (ed/es)*vg/oxide
c      gauss - seidel
      unew = b/a0 - a1/a0*u(k1) - a2/a0*u(k2) - a3/a0*u(k3) - a4/a0*u(k4)
c      metodo sor
      unew = w*unew + (1.d0 - w)*u(k)
c      teste de convergencia do valor u(i,j)
      if(dabs(u(k)-unew).le.eps) go to 50
      kont = kont + 1
50      u(k) = unew
60      continue
```

```
c pontos interiores
c -----
```

```
do 90 i = 2, (nx-1)
do 80 j = 2, (ny-1)
c      determinacao de indices
      k = (j-1)*nx + i
      k1 = k + 1
      k2 = k - 1
      k3 = k + nx
      k4 = k - nx
c      determinacao dos incrementos
      h1 = x(i+1) - x(i)
      h2 = x(i) - x(i-1)
      h3 = y(j+1) - y(j)
      h4 = y(j) - y(j-1)
c      determinacao dos coeficientes
      a0 = -(h3+h4)*(1/h1+1/h2) - (h1+h2)*(1/h3+1/h4) - dro(u(k)) *
*      (h2+h1)*(h4+h3)/2
      a1 = (h3+h4)/h1
      a2 = (h3+h4)/h2
      a3 = (h1+h2)/h3
      a4 = (h1+h2)/h4
      b = (ro(u(k),c(i,j))-dro(u(k))*u(k))*(h2+h1)*(h3+h4)/2
c      gauss - seidel
```

```

      unew = b/a0-a1/a0*u(k1)-a2/a0*u(k2)-a3/a0*u(k3)-a4/a0*u(k4)
c      metodo sor
      unew = w*unew + (1.00 - w)*u(k)
c      teste de convergencia do valor u(i,j)
      if(dabs(u(k)-unew).le.eps) go to 70
      kont = kont + 1
70      u(k) = unew
80      continue
90      continue

c      teste de convergencia global

      if(kont.eq.0) go to 100
      if(iter.lt.limax) go to 10

100     return
       end

c      -----
c      funcao ro
c      -----
c
c      funcao      : calcular a densidade de carga n - p - n
c      parametros : potencial eletrico u
c                  dopagem c

      real*8 function ro(u,c)

      real*8 u,c

      ro = dexp(u) - dexp(-u) - c

      return
      end

c      -----
c      funcao dro
c      -----
c
c      funcao      : calcular a derivada da densidade de carga d(n - p - n)/du
c      parametros : potencial eletrico u

      real*8 function dro(u)

      real*8 u

      dro = dexp(u) + dexp(-u)

      return
      end

c      -----

```

```

c -----
c          calcvt.for
c -----
c
c Funcao : calcular o potencial de limiar (Vt) do transistor.
c
c Versao : V1.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c cox           - capacitancia de oxido          R
c csubstr       - concentracao de substrato      R
c e0            - permissividade eletrica no vacuo R
c ed            - permissividade eletrica no isolante R
c es            - permissividade eletrica no silicio R
c kb            - constante de Boltzmann         R
c ld            - comprimento de Debye           R
c ni            - concentracao intrinseca do silicio R
c oxide         - espessura do oxido de porta   R
c phif          - potencial do nivel de fermi    R
c phims         - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c pi            - 3.1415926 ...                  R
c q             - carga elementar                R
c qint         - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c ut            - potencial termico              R
c vt            - potencial de limiar do transistor longo R
c
c -----

```

```

subroutine calcvt(vt)

```

```

real*8 vt
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
real*8 oxide,csubstr,cox
integer nx,ny,max
character res*1

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
common /thick/ oxide
common /impurity/ csubstr

```

```

desnormaliza algumas grandezas

```

```

phims = phims*ut
phif = phif*ut
ed = ed*q/(ut*ld)
es = es*q/(ut*ld)
csubstr = csubstr*ni
oxide = oxide*ld

```

```

calcula capacitancia de oxido

```

```

cox = ed/oxide

```

```

calcula potencial de limiar do transistor de canal longo
usando o modelo de Shockley

```

```
vt = phims+2*phif+(1/cox)*dsqrt(2*q*es*csubstr*2*phif)
```

```
c    normaliza algunas grandezas
```

```
phims = phims/ut  
phif  = phif/ut  
ed    = ed*(ut*ld)/q  
es    = es*(ut*ld)/q  
csubstr = csubstr/ni  
oxide = oxide/ld
```

```
return  
end
```

```
c    -----
```

```

c -----
c          eqmos.for
c -----
c
c Funcao : Rotina principal do simulador de MOSFET em equilibrio
c            termodinamico
c
c Versao : V1.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome                Descricao                tipo
c
c c(*,*) - vetor concentracao normalizada de dopantes      R
c maxx - maxima dimensao da rede na direcao y              I
c maxy - maxima dimensao da rede na direcao y              I
c nx - numero de pontos da rede na direcao x               I
c ny - numero de pontos da rede na direcao y               I
c res - resposta das perguntas                             C
c u(*) - vetor distribuicao de potencial normalizado         R
c x(*) - vetor abcissas da rede                            R
c y(*) - vetor ordenadas da rede                           R
c -----

```

```

program eqmos

parameter ( maxx = 100 )
parameter ( maxy = 100 )

real*8 x(maxx),y(maxy),c(maxx,maxy),u(maxx*maxy)
integer nx,ny
character res*1

c sinaliza mensagem

write (*,150)
150 format (/, 'EqMos - Unicamp ver 1.0 27/07/90',/)

call input

call nread (x,y,nx,ny,c,maxx)

write (*,160)
160 format (/, '-----',/)

40 call poisson(x,y,nx,ny,c,u,maxx)

230 write (*,160)

170 write(*,190)
190 format('Deseja a solucao numerica (s/n) : ',%)
read(*,180) res
180 format(ai)
if(res.eq.'n') go to 200
if(res.ne.'s') go to 170
call output(x,y,nx,ny,u,iter,eps)

```

```
200 write (*,160)

50 write (*,60)
60 format ('Grafico do potencial u (s/n) : ',*)
read (*,30) res
30 format (a1)
if (res.eq.'n') go to 80
if (res.ne.'s') go to 50
call grfu(x,y,nx,ny,u)

80 write (*,160)

220 write (*,90)
90 format ('Grafico do potencial ux (s/n) : ',*)
read (*,100) res
100 format (a1)
if (res.eq.'n') go to 110
if (res.ne.'s') go to 220
call grfux(x,y,nx,ny,u)

110 write (*,160)

210 write (*,120)
120 format ('Grafico do potencial uy (s/n) : ',*)
read (*,130) res
130 format (a1)
if (res.eq.'n') go to 140
if (res.ne.'s') go to 210
call grfuy(x,y,nx,ny,u)

140 end
```

c

```

c -----
c      grfu.for
c -----
c
c Funcao : Salvar em arquivo a distribuicao bi-dimensaoal de
c          potencial eletrico calculada, para ser tracada pelo
c          programa Energraphics da Enertronics Inc.
c
c Versao : V1.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c e0            - permissividade eletrica no vacuo          R
c ed            - permissividade eletrica no isolante       R
c es            - permissividade eletrica no silicio        R
c kb            - constante de Boltzmann                    R
c ld            - comprimento de Debye                       R
c ni            - concentracao intrinseca do silicio        R
c nmax          - indice da abcissa onde termina o canal    I
c nmin          - indice da abcissa onde inicia o canal     I
c nome          - nome do arquivo onde sera salvo o potencial C
c nx            - numero de pontos da rede na direcao x     I
c ny            - numero de pontos da rede                  I
c phif          - potencial do nivel de fermi                R
c phims        - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c pi            - 3.1415926 ...                              R
c q             - carga elementar                            R
c qint         - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t             - temperatura do meio                       R
c titulo        - titulo do grafico a ser tracado          C
c ut            - potencial termico                          R
c x(*)          - vetor de abcissas da rede                  R
c xmsg          - rotulo do eixo x do grafico                C
c xmax          - maior abcissa da rede                      I
c y(*)          - vetor de ordenadas da rede                R
c ymsg          - rotulo do eixo y do grafico                C
c ymax          - maior ordenada da rede                     I
c zmsg          - rotulo do eixo z do grafico                C
c -----

```

```

subroutine grfu(x,y,nx,ny,u)

```

```

real*8 x(*),y(*),u(*)
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
real*8 xmax,ymax
integer nx,ny
integer nmin,nmax
character nome*15,xmsg*50,ymsg*50,zmsg*50,titulo*50

```

```

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
common /surface/ xmax,ymax
common /channel/ nmin,nmax

```

```

write(*,320)

```

```

320  format('Titulo do grafico           : ', $)
      read(*,330) titulo
330  format(a50)
      write(*,340)
340  format('Titulo do eixo-x           : ', $)
      read(*,330) xmsg
      write(*,350)
350  format('Titulo do eixo-y           : ', $)
      read(*,330) ymsg
      write(*,360)
360  format('Titulo do eixo-z           : ', $)
      read(*,330) zmsg
      write(*,370)
370  format('Arquivo para a saida grafica : ', $)
      read(*,380) nome
380  format(a15)

      open(unit=80, file=nome, status='unknown')
      write(80,400) titulo,xmsg,ymsg,zmsg,nmax-nmin+1,ny,
* (x(nmax)-x(nmin))*1d*1e4,ymax*1d*1e4,4/((x(nmax)-x(nmin))*1d*1e4)
400  format(a50,/, '30-08-1989',/, a50,/, a50,/, a50,/, i2, ', ', i2, ', 0, ',
* f3.1, ', 0, ', f3.1,/, f3.1, ', 4,2,130,40',/, '30,20,3,0')
      do 410 i=nmin,nmax
          do 420 j=1,ny
              k = (j-1)*nx + i
              write(80,450) (u(k) + phif)*ut
450              format(f12.7)
420          continue
410      continue
      close(unit=80)

999  return
      end

```

```

c -----
c          gr fux.for
c -----
c
c Funcao : Salvar a distribuicao lateral de potencial ao longo
c           do dispositivo numa profundidade especificada.
c
c Versao : V1.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c e0            - permissividade eletrica no vacuo          R
c ed            - permissividade eletrica no isolante       R
c es            - permissividade eletrica no silicio        R
c kb            - constante de Boltzmann                    R
c ld            - comprimento de Debye                       R
c ni            - concentracao intrinseca do silicio        R
c nmax          - indice da abcissa onde termina o canal    I
c nmin          - indice da abcissa onde inicia o canal     I
c nome          - nome do arquivo onde salvar o potencial    C
c nx            - numero de pontos da rede na direcao x     I
c ny            - numero de pontos da rede                  I
c phif          - potencial do nivel de fermi                R
c phims         - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c pi            - 3.1415926 ...                              R
c q             - carga elementar                            R
c qint         - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t             - temperatura do meio                       R
c u(*,*)        - vetor distribuicao bi-dimensional de potencial R
c ut           - potencial termico                           R
c x(*)          - vetor de abcissas da rede                  R
c y(*)          - vetor de ordenadas da rede                 R
c -----

```

```

subroutine grfux(x,y,nx,ny,u)

real*8 x(*),y(*),u(*)
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
integer nx,ny,nmin,nmax
character nome*15

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
common /channel/ nmin,nmax

write(*,370)
370 format('Arquivo para ux          : ',%)
read(*,380) nome
380 format(a15)

open(unit=90,file=nome,status='unknown')
write(*,410)
410 format('Profundidade y          : ',%)
read(*,*) jp
j=ny-jp

```

```
do 420 i=nmin,nmax,1
  k = (j-1)*nx + i
  write(90,450) x(i)*ld*ie4, (u(k)+phif)*ut
450   format(f12.7,f12.7)
420   continue
      close(unit=90)

999   return
      end
```

c

```

c -----
c          grfuy.for
c -----
c
c Funcao : Salvar a distribuicao transversal de potencial no
c          centro do canal
c
c Versao : V1.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c e0            - permissividade eletrica no vacuo          R
c ed            - permissividade eletrica no isolante       R
c es            - permissividade eletrica no silicio        R
c kb            - constante de Boltzmann                    R
c ld            - comprimento de Debye                       R
c ni            - concentracao intrinseca do silicio        R
c nmax          - indice da abcissa onde termina o canal    I
c nmin          - indice da abcissa onde inicia o canal     I
c nome          - nome do arquivo onde salvar o potencial    C
c nx            - numero de pontos da rede na direcao x     I
c ny            - numero de pontos da rede                  I
c phif          - potencial do nivel de fermi                R
c phims         - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c pi            - 3.1415926 ...                              R
c q             - carga elementar                            R
c qint         - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t             - temperatura do meio                       R
c u(*)          - vetor distribuicao bi-dimensional de potencial R
c ut           - potencial termico                          R
c x(*)          - vetor de abcissas da rede                  R
c y(*)          - vetor de ordenadas da rede                R
c -----

```

```

subroutine grfuy(x,y,nx,ny,u)

real*8 x(*),y(*),u(*)
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
integer nx,ny,nmin,nmax
character nome*15

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
common /channel/ nmin,nmax

write(*,370)
370 format('Arquivo para uy          : ',*)
read(*,380) nome
380 format(a15)

open(unit=90,file=nome,status='unknown')
i = (nmin + nmax)/2
do 420 j=ny,1,-1
  k = (j-1)*nx + i
  write(90,450) (y(ny)-y(j))*ld*1e4, (u(k)+phif)*ut
450 format(f12.7,f12.7)

```

```
420  continue
      close(unit=90)
```

```
999  return
      end
```

```

c -----
c          inicial.for
c -----
c
c Funcao : Realizar uma estimativa inicial para o potencial
c          baseada no equilibrio de cargas.
c
c Versao : V1.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c c(*,*) - matriz concentracao normalizada de dopantes R
c e0 - permissividade eletrica no vacuo R
c ed - permissividade eletrica no isolante R
c es - permissividade eletrica no silicio R
c kb - constante de Boltzmann R
c ld - comprimento de Debye R
c max - maxima dimensao da rede I
c ni - concentracao intrinseca do silicio R
c nx - numero de pontos da rede na direcao x I
c ny - numero de pontos da rede I
c phif - potencial do nivel de fermi R
c phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c pi - 3.1415926 ... R
c q - carga elementar R
c qint - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t - temperatura do meio R
c u(*) - vetor distribuicao bi-dimensional de potencial R
c ut - potencial termico R
c x(*) - vetor de abcissas da rede R
c y(*) - vetor de ordenadas da rede R
c -----

```

```

subroutine inicial(x,y,nx,ny,c,u,max)
real*8 x(*),y(*),c(max,*),u(*)
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
integer nx,ny,max

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi

c aproximacao inicial : equilibrio termodinamico

do 20 i=1,nx
  do 10 j=1,ny
    k = (j-1)*nx + i
    u(k) = dlog(dabs(c(i,j))/2.d0+dsqrt(c(i,j)*c(i,j)/4.d0+1.d0))
    if (c(i,j).lt.0) then
      u(k) = -u(k)
    endif
  10 continue
20 continue

return
end

```

```

c -----
c      input . for
c -----
c
c Funcao : Realizar a leitura do arquivo contendo as caracteris-
c          ticas do transistor MOSFET e normalizar as variaveis
c
c Versao : V1.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c ae            - afinidade electronica do silicio          R
c csubstr       - concentracao do substrato de silicio      R
c dpthx         - abertura na mascara de fonte/dreno        R
c dpthy         - profundidade da juncao fonte/substrato    R
c e0            - permissividade eletrica no vacuo          R
c ed            - permissividade eletrica no isolante        R
c eg            - "band-gap" do silicio                      R
c es            - permissividade eletrica no silicio         R
c kb            - constante de Boltzmann                    R
c ld            - comprimento de Debye                       R
c lproj         - comprimento projetado de canal            R
c xmax         - maxima dimensao da rede                    I
c name         - le o nome do arquivo de dados MOSFET       C
c ni            - concentracao intrinseca do silicio        R
c oxide        - espessura do oxido de porta                R
c phif         - potencial do nivel de fermi                 R
c phim         - funcao trabalho do metal de porta          R
c phims        - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c pi           - 3.1415926 ...                               R
c q            - carga elementar                             R
c qint         - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t            - temperatura do meio                         R
c ut           - potencial termico                            R
c xmax         - maior abcissa da rede                       I
c ymax         - maior ordenada da rede                      I
c -----

```

```

subroutine input

```

```

real*8 xmax,ymax,lproj,csubstr,oxide
real*8 ae,eg,phim
real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
real*8 dpthx,dpthy
character name*15

common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
common /impurity/ csubstr
common /junction/ dpthx,dpthy
common /thick/ oxide
common /surface/ xmax,ymax

```

```

c leitura do nome arquivo MOS

```

```

write(*,100)

```

```
100 format('Arquivo de dados MOS : ', $)
```

```
read(*,65) name
```

```
65 format (a15)
```

```
c leitura do arquivo especificado
```

```
open(unit=70, file=name, status='old')
```

```
read(70,*) xmax
```

```
read(70,*) ymax
```

```
read(70,*) lproj
```

```
read(70,*) csubstr
```

```
read(70,*) oxide
```

```
read(70,*) phi_m
```

```
close(unit=70)
```

```
c determinacao de parametros e grandezas fisicas fundamentais
```

```
pi = 3.1415926
```

```
e0 = (1/(36*pi))*1d-11
```

```
es = 11.9*e0
```

```
ed = 3.9*e0
```

```
q = 1.602d-19
```

```
ni = 1.45d10
```

```
kb = 1.381d-23
```

```
ae = 4.15
```

```
eg = 1.1
```

```
t = 300
```

```
c largura das regioes n+ projetadas de f/d
```

```
dpthx = (xmax-lproj)/2
```

```
c potencial ut
```

```
ut = kb*t/q
```

```
c comprimento debye
```

```
ld = dsqrt( es*ut/(q*ni) )
```

```
c potencial de fermi silicio - p
```

```
phi_f = ut * dlog( csubstr/ni)
```

```
c diferenca de funcao trabalho para porta
```

```
phi_ms = phi_m - ae - eg/2 - phi_f
```

```
c carga armadilhada na interface
```

```
qint = 0
```

```
c normalizacao das grandezas
```

```
xmax = xmax/ld*1d-4
```

```
ymax = ymax/ld*1d-4
```

```
dpthx = dpthx/ld*1d-4
```

```
csubstr = csubstr/ni
```

```
oxide = oxide/ld*ld-4  
phif  = phif/ut  
phims = phims/ut  
qint  = qint*(ld**2)  
es    = es*(ut*ld)/q  
ed    = ed*(ut*ld)/q
```

```
return  
end
```

c

```

c -----
c      nread.for
c -----
c
c Funcao : Realizar a leitura do arquivo contendo as coordena-
c          das da rede e o perfil de dopagem
c
c Versao : V1.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c c(*,*) - matriz concentracao normalizada de dopantes  R
c e0 - permissividade eletrica no vacuo  R
c ed - permissividade eletrica no isolante  R
c es - permissividade eletrica no silicio  R
c kb - constante de Boltzmann  R
c ld - comprimento de Debye  R
c max - maxima dimensao da rede  I
c ni - concentracao intrinseca do silicio  R
c nmax - indice da abcissa onde termina o canal  I
c nmin - indice da abcissa onde inicia o canal  I
c nomearq - nome do arquivo onde sera lida a rede  C
c nx - numero de pontos da rede na direcao x  I
c ny - numero de pontos da rede  I
c phif - potencial do nivel de fermi  R
c phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio  R
c pi - 3.1415926 ...  R
c q - carga elementar  R
c qint - densidade de cargas armadilhadas na interface  R
c t - temperatura do meio  R
c ut - potencial termico  R
c x(*) - vetor de abcissas da rede  R
c xmax - maior abcissa da rede  I
c y(*) - vetor de ordenadas da rede  R
c ymax - maior ordenada da rede  I
c -----
c
c subroutine nread (x,y,nx,ny,c,max)
c
c real*8 x(*),y(*),c(max,*)
c real*8 xmax,ymax
c real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c integer max
c integer nx,ny
c integer nmin,nmax
c integer i,j
c character*15 nomearq
c
c common /surface/ xmax,ymax
c common /channel/ nmin,nmax
c common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c
c le nome da rede
c
c write (*,10)

```

```

c -----
c      poisson.for
c -----
c
c Funcao : Realizar a leitura dos parametros do metodo numerico e
c          da tensao aplicada na porta e escolher entre calcular
c          Vt ou nao.
c
c Versao : V1.0 02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome          Descricao          tipo
c
c c(*,*) - matriz concentracao normalizada de dopantes      R
c e0 - permissividade eletrica no vacuo                      R
c ed - permissividade eletrica no isolante                   R
c eps - erro limite de para convergencia                    R
c es - permissividade eletrica no silicio                    R
c kb - constante de Boltzmann                                R
c kvt - chave para informar que e para calcular Vt          I
c ld - comprimento de Debye                                  R
c lmax - numero maximo de iteracoes                          I
c max - maxima dimensao da rede                              I
c ni - concentracao intrinseca do silicio                    R
c nmax - indice da abcissa onde termina o canal              I
c nmin - indice da abcissa onde inicia o canal              I
c nx - numero de pontos da rede na direcao x                 I
c ny - numero de pontos da rede                              I
c phif - potencial do nivel de fermi                          R
c phims - diferenca de funcao trabalho metal silicio        R
c pi - 3.1415926 ...                                         R
c q - carga elementar                                        R
c qint - densidade de cargas armadilhadas na interface       R
c res - resposta sim ou nao                                   C
c t - temperatura do meio                                    R
c u(*) - vetor distribuicao bi-dimensional de potencial        R
c vg - tensao aplica a porta                                  R
c ut - potencial termico                                      R
c w - parametro de aceleracao do metodo SOR                   R
c x(*) - vetor de abcissas da rede                             R
c y(*) - vetor de ordenadas da rede                           R
c -----
c
c subroutine poisson(x,y,nx,ny,c,u,max)
c
c real*8 x(*),y(*),c(max,*),u(*),vg,w,eps
c real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c integer nx,ny,max,lmax,kvt
c integer nmin,nmax
c character res*1
c
c common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c common /bias/ vg
c common /channel/ nmin,nmax
c
c calcular o potencial de limiar ?

```

```

200 write(*,210)
210 format('Calcular o valor de Vt (s/n)      : ',%)
read(*,220) res
220 format(a1)
kvt = 0
if (res.eq.'n') go to 110
if (res.ne.'s') go to 200
kvt = 0

c entrada de dados

c somente le Vg se nao for para calcular Vt

110 if (kvt.eq.0) then
write(*,115)
115 format('Tensao de porta (Volts)        : ',%)
read(*,*) vg
else
c estima Vg igual ao potencial de limiar no transistor longo
call calcvt (vg)
endif

write(*,120)
120 format('Numero maximo de iteracoes      : ',%)
read(*,*) limax
write(*,130)
130 format('Precisao desejada              : ',%)
read(*,*) eps
write(*,140)
140 format('Parametro de relaxacao (1 < w < 2) : ',%)
read(*,*) w
write(*,150)
150 format('Aguarde ....')

c normaliza e refere a tensao de porta

vg = vg/ut-phims-phif

c inicializa aproximacoes para o potencial eletrico u(i,j)

call inicial (x,y,nx,ny,c,u,max)

c chama subrotina bvpsor solucao (usando gauss-seidel/sor)

call bvpsor(x,y,nx,ny,c,u,eps,w,limax,iter,max)

c calcula o no' no meio e no centro do canal
kvt = 1
k = (ny-1)*nx+(nmin+nmax)/2

if (kvt.eq.1) then
c repete ate' determinar Vt
do 300, while (dabs(dabs(u(k))-dabs(phif)).gt.(10.d-3/ut))
c chama subrotina bvpsor solucao (usando gauss-seidel/sor)
call bvpsor(x,y,nx,ny,c,u,eps,w,limax,iter,max)
c decrementa vg de 10 mV
vg = vg - 10.e-3/ut

```

```
300     enddo
c       mostra o Vt calculado
       write (*,230) (vg+phims+phif)*ut
230     format (/,'Vt =',f5.2,' V')
       endif

       return
       end
```

```
c -----
```

```

c -----
c      output.for
c -----
c
c Funcao : Salvar o numero de iteracoes, o erro cometido e os
c           valores numericos correspondentes a distribuicao
c           bi-dimensional de potencial
c
c Versao : Vl.0  02/08/90
c
c Variaveis :
c
c Nome           Descricao           tipo
c
c e0             - permissividade eletrica no vacuo           R
c ed             - permissividade eletrica no isolante        R
c eps            - erro limite para a convergencia            R
c es             - permissividade eletrica no silicio         R
c iter           - numero de iteracoes realizadas            I
c kb             - constante de Boltzmann                     R
c ld             - comprimento de Debye                        R
c ni             - concentracao intrinseca do silicio         R
c narq           - nome do arquivo onde salvar o potencial     C
c nx             - numero de pontos da rede na direcao x      I
c ny             - numero de pontos da rede                   I
c phif           - potencial do nivel de fermi                 R
c phims          - diferenca de funcao trabalho metal silicio R
c pi             - 3.1415926 ...                               R
c q              - carga elementar                             R
c qint          - densidade de cargas armadilhadas na interface R
c t              - temperatura do meio                        R
c u(*,*)        - vetor distribuicao bi-dimensional de potencial R
c ut             - potencial termico                           R
c x(*)           - vetor de abcissas da rede                   R
c y(*)           - vetor de ordenadas da rede                 R
c -----
c
c subroutine output(x,y,nx,ny,u,iter,eps)
c real*8 x(*),y(*),u(*),eps
c real*8 e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c integer nx,ny,iter
c character narq*15
c
c common /physics/ e0,es,ed,q,ni,kb,t,qint,ut,ld,phif,phims,pi
c
c write (*,50)
50 format ('Nome do arquivo           : ', $)
c read (*,60) narq
60 format (a15)
c
c abre, escreve e fecha arquivo
c
c open(unit=60,file=narq,status='new')
c write(60,10) iter,eps
10 format('Num. de iteracoes : ',i3,'/', 'Erro absoluto : ',e7.1, '/')
c write(60,20)
20 format(t11,'x',t25,'y',t42,'u(x,y)',/)

```

```
c      salva tabela
      do 40 i=1,nx
        do 30 j=1,ny
          k = (j-1)*nx + i
          write(60,25)x(i)*1d*1e4,y(j)*1d*1e4,(u(k)+phif)*ut
25          format(t5, f9.5,t25, f9.5,t45, f9.5)
30          continue
40          continue
      close(unit=60)

      return
      end
```

c

Bibliografia

- [Araujo 90] G. Araújo, P. Pulino, B. Waldman, *Bi-dimensional Simulation of MOSFET's in Thermal Equilibrium*, V Congresso Brasileiro de Microeletrônica, Unicamp, 1990.
- [Bank 83] R. E. Bank, D. J. Rose, W. Fichtner, *Numerical Methods of Semiconductor Device Simulation*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-30, pp. 1031–1041, 1983.
- [Buturla 75] E. M. Buturla, P. E. Cottrel, *Steady State Analysis of Field Effect Transistor via Finite Element Method*, Tech. Digest of IEEE Int. Electron Device Meeting, pp. 51–54, 1975.
- [Carslaw 59] H. Carslaw and J. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, London: Oxford 1959,
- [De Mari 67] A. De Mari, *An Accurate Numerical Steady-State One Dimensional Solution of The p-n Junction*, Solid-State Electron., vol. 11 pp. 33–58, 1967.
- [Dennis 87] J. E. Dennis Jr., R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, New Jersey, 1987.
- [Fichtner 83] W. Fichtner, D. J. Rose, R. E. Bank, *Semiconductor Device Simulation*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-30, pp. 1081–1030, 1983.
- [Franz 83] A. F. Franz, G. A. Franz, S. Selberherr, C. Ringhofer, P. Markowich, *Finite-Boxes – A Generalization*

- of The Finite-Difference Method Suitable for Semiconductor Device Simulation*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-30, pp. 1072-1082, 1983.
- [Gibbons 73] J. F. Gibbons, S. Mylroie, *Estimation of Impurity Profiles in Ion-Implanted Amorphous Targets Using Joined Half-Gaussian Distributions*, Applied Physics Letters, 22 No. 11, pp. 568-569, 1973.
- [Golub 85] G. H. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computation*, The Johns Hopkins University Press, 1985.
- [Greenfield 80] J. A. Greenfield, R. W. Dutton, *Nonplanar VLSI Device Analysis using the Solution of Poisson's Equation*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-27, pp. 1520-1532, 1980.
- [Gummel 64] H. K. Gummel, *A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations*, pp. 455-465, October 1964.
- [Hart 68] J. F. Hart, E. W. Cheney, C. L. Lawson, H. J. Maehly, *Computer Approximations*, Wiley, 1968.
- [Hastings 55] C. Hastings Jr., *Approximations for Digital Computers*, Princeton University Press, 1955.
- [Heil 35] O. Heil, *British Patent 439,457*, 1935.
- [Husain 82] A. Husain, S. G. Chamberlain, *Three-dimensional Simulation of VLSI MOSFET's : The Three-dimensional Simulation Program WATMOS*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-29, pp. 631-638, 1982.
- [Ihantola 64] H. K. J. Ihantola, J. L. Moll, *Design Theory of a Surface Field-Effect Transistor*, Solid-State Electron., vol. 7 pg. 423, 1964.
- [Kennedy 70] D. P. Kennedy, R. R. O'Brien, *Computer-Aided Two-Dimensional Analysis of The Junction-Effect Transistor*, IBM T. Res. Dev., vol. 14, pp. 95-116, 1970.

- [Lee 76] Hee-Gook Lee, J. D. Sansbury, R. W. Dutton, J. L. Moll, *Modeling and Measurement of Surface Impurity Profiles of Laterally Diffused Regions*, IEEE J. Solid-State Circuits, vol. SC-13, pp. 455-461, 1976.
- [Lee 81] Hee-Gook Lee, R. W. Dutton, *Modeling and Measurement of Surface Impurity Profiles of Laterally Diffused Regions*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-28, pp. 1136-1147, 1981.
- [Lilienfeld 30] J. E. Lilienfeld, *U.S. Patent 1,745,175*, 1930.
- [Lindhard 63] J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiøtt, *Range Concepts and Heavy Ion Ranges*, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33, No.14, 1 - 42, 1963.
- [Mayergoyz 86] I. D. Mayergoyz, *Solution of The Nonlinear Poisson Equation of Semiconductor Device Theory*, pp. 195-199, 1986.
- [Mock 72] M. S. Mock, *A Two-Dimensional Mathematical Model of Insulated-Gate Field-Effect Transistor*, Solid-State Electron., vol. 16 pp. 601-609, 1972.
- [Runge 77] H. Runge, *Distribution of Implanted Ions under Arbitrarily Shaped Mask Edges*, Phys. Stat. Sol. (a)39, pp. 595-599, 1977.
- [Ryssel 83] H. Ryssel, K. Hoffmann, *Process and Device Simulation for MOS-VLSI Circuits*, The Hague: Martinus Nijhoff, pp. 125-179, 1983.
- [Scharfetter 69] D. L. Scharfetter, H. K. Gummel, *Large-Signal Analysis of a Silicon Read Oscillator*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-16, pp. 64-77, , January, 1969.
- [Selberherr 80] S. Selberherr, A. S. Schutz, H. W. Potzl, *MINI-MOS - A Two-Dimensional MOS Transistor Analyzer*, IEEE J. Solid-State Circuits, vol. SC-15, pp. 605-614, 1973.
- [Selberherr 83] Siegfried Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, Springer-Verlag, April 1984.

- [Selberherr 89] Siegfried Selberherr, *The State of the Art in Device Simulation*, pp. 151–166, 1989.
- [Shockley 40] W. Shockley, G. L. Pearson, *Modulation of Conductance of Thin Films of Semiconductors by Surface Charges*, Phys. Rev. 74, 232 1948.
- [Shockley 52] W. Shockley, W. T. Read, *Statistics of the Recombination of Holes and Electrons*, Phys. Rev. 5, 835-842 1952.
- [Shockley 62] W. Shockley, *A Unipolar Field-Effect Transistor*, Proc. IRE, pp. 1365–1377, , November, 1962.
- [Slotboom 73] J. W. Slotboom, *Computer-Aided Two-Dimensional Analysis of Bipolar Transistors*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-20, pp. 669–679, 1973.
- [Snowden 86] Christopher M. Snowden, *Introduction to Semiconductor Device Modelling*, World Scientific, 1986.
- [Suprem 78] D. A. Antoniadis, S. E. Hansen, R. W. Dutton, Report 5019-2, Stanford University, 1978.
- [Sze 81] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, 1981.
- [Toyabe 79] T. Toyabe, S. Asai, *Analytical Models of Threshold Voltage and Breakdown Voltage of Short-Channel MNOSFET's Derived from Two-Dimensional Analysis*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-26, pp. 453–461, 1979.
- [Wada 79] T. Wada, J. Frey, *Physical Basis of Short-Channel MESFET Operation*, IEEE J. Solid-State Circuits, vol. SC-14, pp. 398–412, 1979.
- [Yoshii 82] A. Yoshii, H. Kitazawa, M. Tomizawa, S. Horiguchi, *A Three-dimensional Analysis of Semiconductor Devices*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-29, pp. 184–189, 1982.
- [Young 71] D. M. Young, *Interactive Solution of Large Linear Systems*, Academic Press, New York, 1971.

```

10  format ('Arquivo da rede           : ', $)
    read (*,20) nomearq
20  format (a15)

c   sinaliza espera

    write (*,60)
60  format ('Aguarde ...')

c   abre, le e fecha arquivo

    open (unit=40, file=nomearq, status='unknown')
    read (40,*) nx
    read (40,*) ny
    read (40,*) nmin
    read (40,*) nmax
    do 40, i=1, nx
        do 50, j=1, ny
            read (40,30) x(i), y(j), c(i,j)
30  format (f9.7, f9.7, e14.7)
c   renormaliza
        x(i) = x(i)/ld*1.e-4
        y(j) = y(j)/ld*1.e-4
        c(i,j) = c(i,j)/ni
50  continue
40  continue
    close (40)

    return
    end

c   -----

```