

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

Departament d'Enginyeria Electrònica

**SIMULACIÓ MONTE CARLO DE
TRANSISTORES BIPOLARES DE
HETEROUNIÓ ABRUPTA (HBT)**

Autor: Pau Garcias Salvà
Director: Lluís Prat Viñas



Índice

1. Introducción	2
1.1 El papel de la simulación de dispositivos en la electrónica actual.....	2
1.2 Los transistores bipolares de heterounión (HBT).....	7
1.3 La simulación de HBTs.....	9
1.4 Objetivos de la tesis y estructura de esta memoria.....	12
2. Modelo de arrastre-difusión ampliado para HBTs abruptos	14
2.1 Transporte en regiones graduales	15
2.2 Transporte en interfaces de heterounión abruptas	23
2.3 Simulador numérico HBTSIM	25
2.4 Modelo analítico aproximado del HBT	27
2.5 Limitaciones del modelo de arrastre-difusión	34
3. Simulación Monte Carlo de transistores bipolares.....	39
3.1 Fundamentos de los simuladores Monte Carlo.	40
3.2 Algoritmo básico de la dinámica Monte Carlo.	46
3.2.1 Modelos de bandas	46
3.2.2 Dinámica del electrón.....	49
3.2.3 Mecanismos de colisión.....	50
3.2.4 Método MC para una sola partícula (SPMC: <i>Single particle MC</i>).....	56
3.2.5 Método MC para un conjunto de partículas (EMC: <i>Ensemble MC</i>).....	61
3.3 Simulación de transistores bipolares. El simulador MCHBT	63
3.3.1 Bloques básicos en MCHBT para BJTs.	66
3.3.2 Discretización, potencial y campo eléctrico.	69
3.3.3 Tratamiento de los electrones.	71
3.3.4 Tratamiento de los huecos.	78
3.3.5 Criterios de estabilidad espacial y temporal.	79
3.3.6 Extracción de resultados.....	82
4. Implementación del simulador MCHBT.....	87
4.1 La generación de números aleatorios.	88
4.2 Supercomputación y paralelismo.	92
4.2.1 Tendencias en la supercomputación.	92
4.2.2 Sistemas paralelos	94
4.2.3 Parámetros de medida del paralelismo	97
4.3 Supercomputación y MCHBT.....	100
4.4 Optimizaciones secuenciales en MCHBT	106
4.4.1 Técnicas de optimización en procesadores RISC.....	110
4.4.2 Herramientas de análisis de rendimiento	115
4.4.3 Particularización al simulador MCHBT	116

4.5	Optimizaciones paralelas en MCHBT.....	121
4.5.1	Visión general y objetivos.....	121
4.5.2	Paralelización manual con directivas de compilación.....	124
4.5.3	Paralelización de MCHBT.....	129
4.6	El método de MC ponderado (WMC).....	139
5.	Simulación MC de BJTs	145
5.1	Simulación MC de un BJT de GaAs.....	146
5.1.1	Descripción del dispositivo de prueba.....	146
5.2	Análisis comparativo de MCHBT y HBTSIM.....	159
5.3	Desarrollo de la ecuación de balance del momento.....	166
5.4	Aplicación de la ecuación de balance del momento al análisis de transistores bipolares.....	172
5.5	Discusión de la validez del modelo de arrastre-difusión para el análisis de BJTs de GaAs.....	180
6.	Simulación MC de HBTs abruptos.....	185
6.1	Tratamiento Monte Carlo para los HBTs abruptos.....	186
6.1.1	Transmisión de electrones a través de la heterounión.....	187
6.1.2	Cálculo del coeficiente de transmisión cuántica.....	189
6.1.3	Cálculo del estado final del electrón.....	198
6.2	Descripción del dispositivo de prueba.....	205
6.3	Análisis del coeficiente de transmisión cuántico.....	210
6.4	Análisis de la corriente en el dispositivo.....	215
6.4.1	Análisis de la corriente interfacial base-emisor.....	227
6.4.2	Análisis de la corriente a través de la base.....	230
6.4.3	Análisis de la corriente a través de la zona de carga espacial base-colector.....	233
6.5	Discusión de la validez del modelo de DD ampliado para el análisis de HBTs abruptos.....	234
7.	Conclusiones.....	243
	Referencias.....	245
	Apéndice 1. Código fuente del simulador MCHBT.....	262

Índice de tablas

Tabla 2. 1 Concentraciones de electrones en los extremos de la zona neutra de la base según diferentes modelos.....	33
Tabla 4. 1 Latencias en la jerarquía de memoria del Origin2000.....	102
Tabla 4. 2 Latencias de las unidades funcionales en el Origin.....	104
Tabla 4. 3 Técnicas habituales de optimización en arquitecturas RISC.....	109
Tabla 4. 4 Ejecución de una instrucción <i>madd</i> sin aplicar SWP.....	111
Tabla 4. 5 Ejecución de una instrucción <i>madd</i> aplicando SWP.....	112
Tabla 4. 6 Distribución del consumo de CPU por procedimientos.....	119
Tabla 4. 7 Datos de la simulación con paralelización de <i>MCdynam()</i>	134
Tabla 4. 8 Datos de la simulación con paralelización de <i>MCdynam()</i> y <i>chargeCIC()</i>	137
Tabla 5. 1 Parámetros físicos para el GaAs en el simulador MCHBT.....	147
Tabla 5. 2 Parámetros físicos para el GaAs en el simulador HBTSIM.....	148
Tabla 5. 3 Densidad de corriente de electrones en el BJT en función de la anchura de base, w_{Bm} , y del modelo de simulación utilizado: MCHBT o HBTSIM.....	160
Tabla 5. 4 Datos de la simulación MC en los puntos seleccionados.....	176
Tabla 5. 5 Parámetros de la ecuación de balance del momento calculados a partir de los datos de la Tabla 5. 4.....	178
Tabla 5. 6 Corriente de la ecuación de balance del momento calculados a partir de los parámetros de la Tabla 5. 5.....	179
Tabla 6. 1 Parámetros físicos en el simulador HBTSIM.....	206
(base).....	207
(emisor).....	207
Tabla 6. 2 Parámetros físicos en el simulador MCHBT.....	207
Tabla 6. 3 Datos de la simulación MC en dos puntos de la base del HBT.....	235
Tabla 6. 4 Parámetros de la ecuación de balance del momento calculados a partir de los datos de la simulación MC en los puntos de la base del HBT.....	235
Tabla 6. 5 Corrientes de la ecuación de balance del momento calculadas a partir de los datos de la simulación MC en los puntos de la base del HBT.....	236

Índice de figuras

Figura 1. 1 Límites de validez de los modelos de los dispositivos electrónicos semiconductores y predicción de su relación con el progreso de la tecnología de fabricación [Lundstrom, 1990].	5
Figura 1. 2 Evolución de la frecuencia de transición en diferentes familias de transistores.	7
Figura 2. 1 Niveles de energía en un semiconductor gradual.	16
Figura 2. 2 Niveles de energía en una interfaz abrupta.	23
Figura 2. 3 Comparación entre el modelo numérico (curva <i>a</i>) y analítico (curva <i>b</i> ; curva <i>c</i> : modelo analítico con la caída de tensión en la zona neutra de la base).	32
Figura 2. 4 Corriente de colector según el modelo analítico (2. 69) y sus componentes J_{nB} y J_{nS} .	32
Figura 2. 5 Energía cinética de un electrón inyectado desde el emisor a la base en un HBT abrupto.	37
Figura 3. 1 Celda diferencial en el espacio bidimensional posición-momento.	44
Figura 3. 2 Estructura de bandas de energía típica de materiales del grupo <i>zinc blende</i> .	47
Figura 3. 3 Representación simbólica de las componentes del potencial en el interior de un cristal: potencial macroscópico U_E , potencial periódico U_L y potencial de dispersión U_S .	51
Figura 3. 4 Ejemplos de colisión intervale, con emisión o con absorción de un fonón.	54
Figura 3. 5 Esquema de clasificación de los mecanismos de dispersión y sus propiedades básicas.	54
Figura 3. 6 Diagrama de flujo del algoritmo básico SPMC.	57
Figura 3. 7 Simulación <i>microscópica</i> MC típica de un electrón sometido a un campo eléctrico longitudinal constante en la dirección <i>x</i> : a) trayectorias erráticas en el espacio real; b) evolución temporal del momento longitudinal del electrón.	58
Figura 3. 8 Algoritmo de elección <i>aleatoria</i> del mecanismo responsable de la dispersión.	59
Figura 3. 9 Esquema básico de la simulación EMC: seguimiento de la dinámica de un conjunto de partículas con muestreos simultáneos de su estado. Las marcas (x) indican colisiones de la partícula.	62
Figura 3. 10 Seguimiento de la dinámica de un conjunto de partículas (EMC) con muestreos simultáneos de su estado y resolución de la ecuación de Poisson.	64
Figura 3. 11 Diagrama de flujo del algoritmo básico MC para dispositivos bipolares.	67
Figura 4. 1 Curvas típicas de evolución del <i>speedup</i> con el número de procesadores.	98
Figura 4. 2 <i>Speedup</i> en función de la fracción paralelizable del código.	99
Figura 4. 3 Diagrama esquemático del algoritmo secuencial.	127
Figura 4. 4 Diagrama esquemático del algoritmo paralelizado.	128
Figura 4. 5 Histograma de los diferentes tiempos en una ejecución paralela: a) tiempo útil, b) tiempo de sobrecarga (<i>overhead</i>) y c) tiempo de inactividad.	138
Figura 5. 1 Perfil de impurezas del BJT de GaAs de prueba.	147
Figura 5. 2 Probabilidad relativa de dispersión en el colector del BJT (valle Γ).	149
Figura 5. 3 Probabilidad relativa de dispersión en el colector del BJT (valles L).	150
Figura 5. 4 Campo eléctrico a lo largo del dispositivo en muestreos periódicos de 1ps.	152
Figura 5. 5 Concentración de portadores a lo largo del dispositivo en muestreos periódicos de 1ps.	153
Figura 5. 6 Velocidad longitudinal de los electrones a lo largo del dispositivo en muestreos periódicos de 1ps.	153
Figura 5. 7 Factor de ocupación del valle Γ a lo largo del dispositivo en muestreos periódicos de 1ps.	154
Figura 5. 8 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario.	157

Figura 5. 9 Velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario.	157
Figura 5. 10 Densidad de corriente de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario.	158
Figura 5. 11 Factor de ocupación de los valles L a lo largo del dispositivo en régimen estacionario.	158
Figura 5. 12 Energía cinética media de los electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario: a) toda la banda de conducción, b) valle Γ únicamente.	159
Figura 5. 13 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario para una anchura de base $w_{Bm}=0.45\mu\text{m}$ según MCHBT (línea continua) y HBTSIM (línea discontinua).	160
Figura 5. 14 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario para una anchura de base $w_{Bm}=0.30\mu\text{m}$ según MCHBT (línea continua) y HBTSIM (línea discontinua).	161
Figura 5. 15 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario para una anchura de base $w_{Bm}=0.25\mu\text{m}$ según MCHBT (línea continua) y HBTSIM (línea discontinua).	161
Figura 5. 16 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario para una anchura de base $w_{Bm}=0.20\mu\text{m}$ según MCHBT (línea continua) y HBTSIM (línea discontinua).	162
Figura 5. 17 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario para una anchura de base $w_{Bm}=0.15\mu\text{m}$ según MCHBT (línea continua) y HBTSIM (línea discontinua).	162
Figura 5. 18 Relación en el GaAs entre la velocidad media de deriva de los electrones y el campo eléctrico al que se ven sometidos [Tomizawa,1993].	164
Figura 5. 19 Campo eléctrico a lo largo del dispositivo.	172
Figura 5. 20 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario.	173
Figura 5. 21 Velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario.	173
Figura 5. 22 Energía cinética media de los electrones a lo largo del dispositivo en régimen estacionario: a) toda la banda de conducción, b) valle Γ únicamente.	174
Figura 5. 23 Factor de ocupación de los valles L a lo largo del dispositivo en régimen estacionario.	174
Figura 5. 24 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo según HBTSIM para dos valores dispares de velocidad de saturación: a) $v_{sat}=0.8\cdot 10^7\text{ cm/s}$ y b) $v_{sat}=8\cdot 10^7\text{ cm/s}$	182
Figura 5. 25 Concentración media de electrones a lo largo del dispositivo según HBTSIM ajustando la curva característica $v-E_{el}$ del GaAs: ($v_{nsat}=0.8\cdot 10^7\text{ cm/s}$) a) $E_{elh}=5\cdot 10^3\text{ V/cm}$ y b) $E_{elh}=21\cdot 10^3\text{ V/cm}$	183
Figura 6. 1 Dinámica de un electrón cercano a la heterounión abrupta.	188
Figura 6. 2 Discretización en escalera de la barrera de potencial.	191
Figura 6. 3 Efecto de trasvase de energía cinética longitudinal del electrón a energía cinética transversal en una heterounión abrupta.	200
Figura 6. 4 Emisión termoiónica de un electrón por encima de la barrera de potencial.	201
Figura 6. 5 Perfil de impurezas del HBT de InP/InGaAs de prueba.	205
Figura 6. 6 Diagrama de bandas de energía del HBT de InP/InGaAs en equilibrio térmico (HBTSIM).	208
Figura 6. 7 Diagrama de bandas de energía del HBT de InP/InGaAs polarizado: $V_{BE}=0.8\text{V}$, $V_{CE}=1.0\text{V}$ (HBTSIM).	209
Figura 6. 8 Concentración de portadores en el HBT polarizado (HBTSIM).	209
Figura 6. 9 Concentración de electrones en el HBT polarizado (HBTSIM).	210
Figura 6. 10 Detalle del diagrama de E_C para el HBT polarizado.	211
Figura 6. 11 Coeficiente de transmisión para diferentes energías transversales del electrón y con bandas parabólicas y no-parabólicas. Aproximación WKB y resolución numérica de la ecuación de Schrödinger.	212
Figura 6. 12 Coeficiente de transmisión para diferentes valles de la banda de conducción ($E_k=26\text{ meV}$).	214
Figura 6. 13 Coeficiente de transmisión en escala logarítmica ($E_k=26\text{ meV}$).	215
Figura 6. 14 Concentración de electrones a lo largo del dispositivo según MCHBT y según HBTSIM.	218
Figura 6. 15 Velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo según MCHBT y según HBTSIM (escala logarítmica).	218
Figura 6. 16 Velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo según MCHBT.	219
Figura 6. 17 Energía cinética media de los electrones a lo largo del dispositivo (MCHBT).	220
Figura 6. 18 Energía cinética media de los electrones a lo largo del dispositivo por valles de la banda de conducción (MCHBT).	221

Figura 6. 19 Velocidad longitudinal media de los electrones, ocupación relativa de los valles L y campo eléctrico a lo largo del dispositivo (MCHBT).....	221
Figura 6. 20 Energía cinética media y velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo (MCHBT).	222
Figura 6. 21 Distribución energética de los electrones en la región activa del dispositivo. <i>Foto instantánea</i> de los electrones en todos los valles (MCHBT).....	223
Figura 6. 22 Distribución energética de los electrones en la región activa del dispositivo. <i>Foto instantánea</i> de los electrones en el valle Γ (MCHBT).	223
Figura 6. 23 Distribución energética de los electrones en la región activa del dispositivo. <i>Foto instantánea</i> de los electrones en los valles L (MCHBT).	224
Figura 6. 24 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en la región activa del dispositivo. <i>Foto instantánea</i> de los electrones todos los valles (MCHBT).....	224
Figura 6. 25 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en la región activa del dispositivo. <i>Foto instantánea</i> de los electrones en el valle Γ (MCHBT).	225
Figura 6. 26 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en la región activa del dispositivo. <i>Foto instantánea</i> de los electrones en los valles L (MCHBT).	225
Figura 6. 27 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en puntos específicos del dispositivo: a) $x=0.27\mu\text{m}$, b) $x=0.31\mu\text{m}$, c) $x=0.36\mu\text{m}$, d) $x=0.39\mu\text{m}$, e) $x=0.45\mu\text{m}$, f) $x=0.50\mu\text{m}$ g) $x=0.60\mu\text{m}$ (MCHBT).	226
Figura 6. 28 Distribución energética de los electrones inyectados a la base en el punto de interfaz base-emisor (MCHBT).....	227