Etude physique numérique du fonctionnement de composants semiconducteurs distribués pour applications très hautes fréquences

Ali El Moussati¹ & Christophe Dalle²

- $^{1}\,$ Laboratoire d'Electronique et Télécommunications, ENSA Oujda, Maroc
- ² IEMN-DHS, UMR 8520, Groupe Silphyde, Cité Scientifique, Avenue Poincaré BP 60069, 59652 Villeneuve d'Ascq Cédex

christophe.dalle@iemn.univ-lille1.fr

Résumé. Un modèle physique numérique électromagnétique temporel bidimensionnel pour la simulation du fonctionnement de composants semiconducteurs distribués haute-fréquences est décrit. Il est basé sur une résolution cohérente des équations de Maxwell et des équations constituant le modèle macroscopique de transport de type dérive-diffusion. Son potentiel est illustré à l'aide de résultats portant sur le fonctionnement en régime d'amplification et d'oscillations continues d'une diode à avalanche et temps de transit distribuée microonde.

Abstract. A time-domain two-dimensional electromagnetic physical modelling of non linear distributed semi-conductor devices is presented. It is based on a self-consistent solution of both Maxwell's equations and a macroscopic transport model based on the drif-diffusion approximation. The microwave travelling-wave IMPATT (IMPact Avalanche and Transit Time) diode or Distributed IMPATT diode (DIMPATT) is the non linear test structure chosen to validate the model. RF simulations under amplification and CW oscillation operating mode have been performed in order to illustrate the potential of the new modelling.

La modélisation physique numérique quasi-électrostatique (ou électrique) est utilisée de façon intensive dans l'étude des composants semiconducteurs haute-fréquences. Cette approche simplifiée ne répond plus systématiquement aux impératifs résultant de l'évolution actuelle de la technologie des composants et circuits électroniques. En effet, des phénomènes physiques liés au transport des charges libres mais aussi les effets électromagnétiques (EM) doivent être pris en compte dans la conception des circuits haute-fréquences et de forte intégration comme les MMICs ou les structures distribuées [1]. L'approche physique électromagnétique est la plus appropriée pour répondre à ces nouvelles exigences mais représente un effort important en terme de développement de modèle et coût d'exploitation [2]. Dans ce contexte, nous avons développé un modèle physique numérique temporel EM basé sur une résolution cohérente des équations de Maxwell et des équations de conservation constituant le modèle macroscopique stationnaire de transport des charges libres de type dérive-diffusion. Ce modèle est décrit dans ces grandes lignes. Son potentiel est illustré par des résultats provenant de l'étude physique du fonctionnement non linéaire d'une diode à avalanche et temps de transit distribuée (DIMPATT en terminologie anglo-saxonne) en régime d'amplification et d'oscillations continues aux fréquences microondes. Le fonctionnement de ce composant, dont la structure est proche de celle d'une ligne de transmission, est basé sur la propagation et l'amplification d'une onde EM dans un milieu actif présentant une conductivité dynamique négative

1 Modélisation électromagnétique dans le domaine temporel

La structure géométrique d'une diode DIMPATT ressemble à celle d'une diode IMPATT mésa classique à double zone de transit étirée suivant par exemple une direction Z (Fig. 1). La séquence des couches épitaxiées suivant la direction X est P+PNN+. Les couches P+ et N+ fortement dopées forment les collecteurs ohmiques alors que la zone NP centrale constitue la zone active.

Les plans (Y,Z) extrêmaux sont considérés comme des conducteurs parfaits. Deux directions de l'espace se distinguent en rapport avec les phénomènes physiques régissant le comportement dynamique de la structure. En effet, les phénomènes de transport des charges se produisent principalement suivant la direction X alors que l'onde électromagnétique se propage suivant la direction Z. La dimension du composant suivant la direction Y est considérée comme suffisamment importante pour considérer les grandeurs physiques comme uniformes dans cette direction et de plus négliger les effets au niveau des plans (X,Z) extrémaux. Suivant toutes ces hypothèses, l'espace modélisé se limite à un plan (X,Z). Ainsi, d'un point de vue électromagnétique, la diode DIMPATT est similaire à un guide d'onde actif multicouche à plans parallèles.

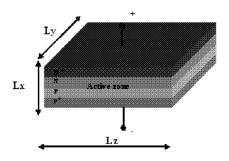


Fig.1. Structure de la diode DIMPATT.

1.1 Formulation analytique du modèle électromagnétique

La modélisation électromagnétique d'un composant semiconducteur dans le domaine temporel repose sur les équations de Maxwell :

$$rot \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$$
$$rot \mathbf{H} = \mathbf{J_c} + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

Un modèle de transport des charges libres doit être associé pour calculer la densité de courant de conduction. Ce modèle est ici un modèle macroscopique stationnaire de type dérive-diffusion :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\operatorname{div} \boldsymbol{J_n} + G - U \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{J_n} \left(J_{nx}, J_{nz} \right)
\frac{\partial p}{\partial t} = +\operatorname{div} \boldsymbol{J_p} + G - U \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{J_p} \left(J_{px}, J_{pz} \right)
\boldsymbol{J_c} \left(J_{cx}, J_{cz} \right) \quad \text{avec} \quad J_{cx} = J_{nx} + J_{px} \quad \text{et} \quad J_{cz} = J_{nz} + J_{pz}
J_{nx} = +n\mu_n \left(E_x - v_{nz} B_y \right) + \mu_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad J_{nz} = +n\mu_n \left(E_z + v_{nx} B_y \right) + \mu_n \frac{\partial n}{\partial z}
J_{px} = +p\mu_p \left(E_x - v_{pz} B_y \right) - \mu_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad J_{pz} = +n\mu_p \left(E_z + v_{px} B_y \right) - \mu_p \frac{\partial n}{\partial z}$$

Dans le but de tenir compte à la fois de l'influence des charges électriques statiques, résultant du profil de dopage de la diode, et des ses conditions de polarisation continue, on distingue les composantes statique et dynamique du champ électrique :

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_{DC} + \boldsymbol{E}_{RF}$$

Ainsi, les équations de Maxwell effectivement résolues sont :

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E}_{RF} = -\mu \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} \quad \operatorname{car} \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{E}_{DC} = 0$$

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{H} = \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{c}} + \varepsilon \frac{\partial \boldsymbol{E}_{RF}}{\partial t}$$

En régime de polarisation continu, le transport des charges est purement unidimensionnel suivant la direction X. En conséquence, un simple modèle statique unidimensionnel (1D) suffit pour déterminer les valeurs initiales de toutes les grandeurs physiques à l'instant t=0. Cette solution 1D est dupliquée suivant l'axe Z pour obtenir la solution initiale 2D complète.

1.2 Formulation numérique du modèle électromagnétique

La formulation numérique du modèle repose sur la méthode des différences-finies et plus spécialement sur des shémas numériques explicites. Cette formulation est en effet naturellement adaptée au calcul sur

machine à architecture parallèle. La discrétisation spatio-temporelle des équations de Maxwell repose sur la méthode classique proposée par Yee [4]. Les équations de continuité dans le modèle de transport sont discrétisées suivant le shéma explicite du deuxième ordre de Nessyahu-Tadmor [5].

Trois types de conditions aux limites sont considérées :

- L'hypothèse de conducteurs métalliques parfaits aux limites des zone P+ et N+ permet d'imposer des composantes de champ éléctrique tangentielles nulles aux plans (Y,Z) extrémaux.
- Un générateur de tension idéal permet d'imposer la composante de champ électrique dans le plan d'entrée (X, Y).
- Des conditions aux limites absorbantes (ABC) de type Higdon sont imposées dans le plan (X, Y) de sortie.

La figure 2 présente l'organigramme du modèle.

La méthode de décomposition de domaine a été utilisée pour adapter de façon optimale l'exploitation du modèle sur un calculateur à architecture parallèle [6]. Cette méthode revient à diviser la structure simulée en portions de taille égale et à affecter les calculs correspondants sur un des processeurs de la machine. La difficulté principale provient de la gestion des conditions aux limites entre les différentes portions. Cette méthode a été implémentée à l'aide de la bibliothèque MPI (Message Passing Interface) [7]. Le modèle est écrit en fortran 90 et exploité sur une machine IBM RS600/SP/375 MHz [8]. Avec 16 nœuds disponibles partageant une mémoire commune, le facteur d'accélération atteint une valeur de l'ordre de 10 par rapport à une machine monoprocesseur. Les temps d'exploitation sont de l'ordre de 12 à 48 heures.

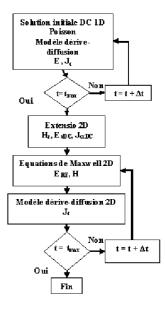


Fig.2. Organigramme du modèle

2 Résultats

La structure de test est une diode DIMPATT millimétrique au silicium à double zone de transit à profil de dopage uniforme. L'épaisseur et le niveau de dopage des zones épitaxiées suivant la direction X sont respectivement : $P^+: 0.25 \mu m/2.2 \times 10^{24} m^{-3}$, $P: 0.25 \mu m/2. \times 10^{23} m^{-3}$, $N: 0.25 \mu m/2. \times 10^{23} m^{-3}$ et $N^+: 0.25 \mu m/2.2 \times 10^{24} m^{-3}$. La valeur de l'incrément spatial dans la direction X est typiquement 10^{-8} m et de 10^{-7} m dans la direction de propagation Z. La valeur de l'incrément temporel et au pire de $8\cdot 10^{-17}$ s pour les équations de Maxwell et de $4\cdot 10^{-15}$ s pour les équations de continuité. A 100 GHz, une période simulée dure 10^{-11} s.

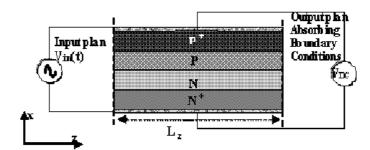


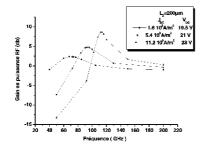
Fig.3. Structure de diode DIMPATT simulée

La structure simulée typique est représentée Fig. 3. Un générateur de tension sinusoïdal est connecté dans le plan (X,Y) d'entrée. Les conditions aux limites absorbantes appliquées dans le plan (X,Y) de sortie reviennent à considérer le guide actif comme connecté en toutes circonstances à son impédance

caractéristique. Autrement dit, le modèle permet l'étude de la propagation d'une onde EM progressive dans un milieu semiconducteur actif fortement non linéaire que ce soit en régime d'amplification ou en régime d'oscillations. La distribution spatio-temporelle du champ EM permet de calculer le gain entre l'entrée et la sortie du dispositif par l'intermédiaire de l'analyse de Fourier de la puissance obtenue par le théorème de Poynting. Les résultats présentés ici concernent un fonctionnement en régime d'amplication et en régime d'oscillations à la température de 500 K.

2.1 Régime d'amplification

Les caractéristiques géométriques et technologiques de la zone active NP de la diode DIMPATT ainsi que ses conditions de polarisation continue et radiofréquence déterminent une bande de fréquence à l'intérieur de laquelle la conductance transversale dynamique (direction X) de la diode est négative et est ainsi capable d'augmenter l'intensité du champ EM s'y propageant longitudinalement (direction Z). A titre d'exemple, la figure 4 montre l'évolution fréquentielle du gain entrée/sortie de la diode définie précédemment pour trois valeurs de densité de courant de polarisation continue J_0 . La longueur de la diode est ici de 200 μ m dans la direction de propagation Z. Le niveau du signal d'entrée est ici de 0,2 V. D'un point de vue général, les résultats montrent que la diode présente un gain positif sur une large bande de fréquence atteignant facilement plusieurs dizaines de GHz et même une centaine de GHz pour la valeur de densité de courant de polarisation continue la plus élevée. Cependant, ce gain n'est pas uniforme. Il présente une valeur maximale dont l'acuité augmente avec J_0 . Cette valeur peut être associée à une fréquence de résonance de façon comparable à ce qui est fait pour la diode IMPATT de structure mésa classique. Pour les fréquences de fonctionnement au-delà de cette fréquence de résonance, le gain en puissance du composant décroît lentement alors qu'aux fréquences de fonctionnement inférieures, il décroît beaucoup plus abruptement. En effet, dans ce cas, les conditions de transit des électrons et des trous ne permettent pas à la structure de présenter une résistance négative transversale et la diode n'est pas capable d'amplifier. L'onde EM se progage à travers un milieu semiconducteur globalement à pertes. Ces résulats sont qualitativement cohérents avec des résulats publiés précédemment [9]. Ils montrent que le modèle physique permet ici une bonne définition du gain de la structure et une bonne description des phénomènes de pertes.





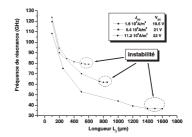


Fig.5. Fréquence de résonance en fonction de la longueur L_z du composant.

La figure 5 présente l'évolution de la fréquence de résonance en fonction de la longueur dans la direction Z de la structure pour trois valeurs de densité de courant de polarisation continue. Pour une valeur de densité J_0 , la fréquence de résonance ressemble à une exponentielle décroissante de la longueur L_z . Cependant, lorsque la diode atteint une certaine dimension, son comportement dynamique devient instable. Cet effet parasite se produit pour des longueurs de composant de plus en plus faible au fur et à mesure que la densité de courant de polarisation continue augmente. Cette évolution résulte de l'augmentation de la conductance dynamique négative avec le densité de courant J_0 . Pour une longueur L_z donnée de composant, on retrouve bien que la fréquence de résonance augmente avec J_0 .

En régime d'oscillations, le plan d'entrée (X, Y) est considéré comme court-circuité et les conditions aux limites absorbantes sont maintenues dans le plan de sortie. En général, les oscillations démarrent à partir des fluctuations liées au bruit ou à cause du régime transitoire résultant de la mise en régime de polarisation continue du composant. Dans notre cas, la simulation démarre dans les conditions d'un régime de polarisation continue établi et il nous faut donc introduire une légère perturbation en début de simulation dans le plan d'entrée pour provoquer, le cas échéant, le démarrage d'une oscillation. Ainsi, pour des conditions de polarisation fixées, la longueur du composant dans la direction de propagation Z a été variée et différents modes de fonctionnement ont été observés. La figure 7 montre l'évolution temporelle de la tension radiofréquence dans le plan (Y, Z) de sortie du composant pour une tension de polarisation continue $V_{dc}=20.5~{
m V}$ et une densité de courant de polarisation continue $J_0 = 4.8 \cdot 10^8 \, \text{A.m}^{-2}$. Pour une longueur de composant de 200 μ m, la perturbation initiale entraı̂ne une légère réaction mais l'onde EM en résultant se propage sur une trop courte distance et demeure d'une trop faible amplitude pour compenser les pertes ohmiques dans la structure et en fin compte l'oscillation naissante s'amortie. Une longueur de composant de l'ordre de 500 μ m apparaît comme la longueur minimale pour que l'oscillation puisse rester entretenue.

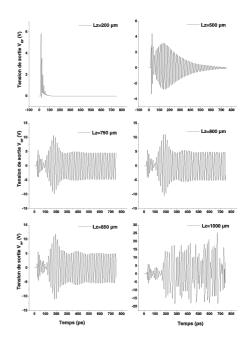


Fig.6. Tension de sortie en fonction de la longueur L_z du composant.

2.2 Régime continu d'oscillations

Malgré l'intensité importante du champ EM atteinte durant la phase transitoire, le niveau de tension hyperfréquence en régime établi demeure faible car l'onde EM amplifiée peine à compenser les pertes radio-fréquences de la structure. Pour des longueurs de composant plus importantes comme $L_z=750$, 800 et 850 μ m, l'amplitude du niveau hyperfréquence de sortie est plus important. Le composant présente un niveau de tension hyperfréquence de sortie significatif en régime continu d'oscillations de l'ordre de 5 V. Le taux de modulation radio-fréquence sature à un niveau de l'ordre de 25%. Ces résultats sont cohérents avec ceux issus de travaux précédents [10]. A ce propos, la figure 7 présente le spectre de la tension de sortie pour une longueur de composant de 800 μ m. Ce résultat montre que le signal généré est à peu près monochromatique. La fréquence fondamentale d'oscillation est ici de l'ordre de 62 GHz. On observe simplement l'existence d'une faible composante de tension à l'harmonique 2 résultant du comportement naturellement non-linéaire du composant. La figure 7 nous montre enfin que pour des longueurs de structure supérieure à 1000 μ m, le comportement dynamique du composant tend à devenir instable et un fonctionnement paramétrique est observé.

La figure 8 est maintenant une comparaison entre les évolutions de la tension hyperfréquence de sortie de la structure en fonction de sa longueur pour deux points de polarisation continue différents. D'un point de vue général, les résultats montrent que le régime de fonctionnement radiofréquence demeure similaire dans les deux cas. Cependant, les plages de longueur de composant permettant l'obtention d'un régime d'oscillations continu sont différentes ; de l'ordre de 500-950 μ m pour $V_{dc}=20,5$ V et de l'ordre de 1200-1800 μ m pour $V_{dc}=19,5$ V. En effet, le niveau de résistance négative transversal est plus faible pour le niveau de polarisation continue le plus bas. En conséquence, l'onde EM a besoin de se propager et de s'amplifier sur une distance plus importante pour compenser les pertes radiofréquences et atteindre un niveau suffisant permettant l'obtention d'un régime d'oscillations stable. Notons que dans les deux régimes de polarisation, une longueur de composant trop importante fini par entraîner un régime de fonctionnement instable. La figure 8 nous montre enfin que pour des longueurs de structure supérieure à 1000 μ m, le comportement dynamique du composant tend à devenir instable et un fonctionnement paramétrique est observé.

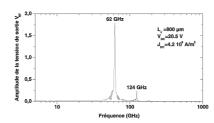


Fig.7. Spectre fréquentiel de la tension de sor-

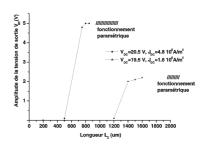


Fig.8. Tension de sortie en fonction de la longueur du composant

3 Conclusion

Une modélisation physique numérique temporelle électromagnétique est présentée dans cet article. Elle est basée sur la résolution cohérente dans deux dimensions de l'espace des équations de Maxwell et d'un modèle de transport macroscopique de type dérive-diffusion. Il est appliqué à un composant semiconducteur fortement non linéaire à savoir la diode DIMPATT dont le principe de fonctionnement est basé sur la propagation et l'amplification d'une onde EM dans un milieu semiconducteur actif présentant une conductivité dynamique négative dans la direction transversale à la direction de propagation de l'onde. Les capacités actuelles du modèle sont illustrées par des résultats concernant le mode de fonctionnement de la structure en régime d'amplification et d'oscillations continues. Notre but est dans un avenir proche le couplage d'un modèle de transport des charges de type énergie-moment permettant l'étude de structures fonctionnant au THz. De plus, la possibilité d'inclure dans la simulation les connexions au composant ainsi que des éléments de circuit externes sera nécessaire pour augmenter le caractère prédictif du modèle [11].

Références

- K. C. Gupta, Emerging trends in Millimeter-Wave CAD, IEEE Trans. Microwave Theory Tech., 46 (6), 747 (1998)
- 2. R. O. Grondin, S. M. El-Ghazaly & S. Goodnick, A review of global modeling of charge transport in semiconductors and full-wave electromagnetics, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **47** (6), 817 (1999)
- 3. M. Franz & J. B. Beyer, The travelling-wave IMPATT mode, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **26**, 861 (1978)
- 4. K. S. Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media, *IEEE Trans. Antennas Propagation*, **14** (3), 302 (1966)
- 5. H. Nessyahu & E. Tadmor, Non-Oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws, J. Comp. Phys., 87, 408 (1990)
- 6. A. Tosseli & O. Widlund, Domain decomposition method Algorithms and Theory, Springer series in Computational Mathematics, **34** (2004)
- 7. W. Gropp, E. Lusk & A. Skjelum, Using MPI: portable parallel programming with Message-Passing-Interface, *Cambridge, Massachussets* MIT Press (2004).
- 8. A. El Moussati, Nouveaux algorithmes pour la modélisation physique macroscopique électronique et électromagnétique des circuits microondes à l'état solide Thèse d'Université, Lille, Décembre 2004
- 9. Y. Fukuoka & T. Itoh, Field analysis of a millimeter-wave GaAs double-drift IMPATT diode in the travelling-wave mode, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **33**, 216 (1985)
- 10. R. K. Mains & G. I. Haddad, Travelling-wave IMPATT amplifiers and oscillators, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **34** (9), 965 (1986)
- 11. M. Franz & J. B. Beyer, The travelling-wave IMPATT diode: Part II- The effective wave impedance and equivalent transmission line, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **28** (3), 215 (1980)