

TCAD

Simulacija električnih karakteristika

Dragan Pantić

Copyright © 2018 Dragan Pantić

IZDAVAČ: KATEDRA ZA MIKROELEKTRONIKU

MICRO.ELFAK.NI.AC.RS

Osnovne informacije o licenci.

Prvo izdanje, Novembar 2018.



Contents

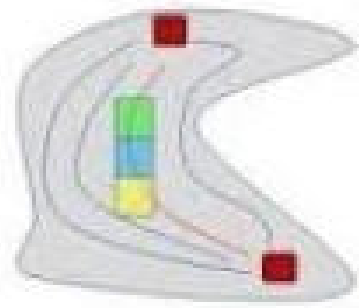
I	Simulacija električnih karakteristika komponenata	
1	Sistem poluprovodničkih jednačina	7
1.1	Poisson-ova jednačina	7
1.2	Jednačine kontinuiteta	9
1.3	Transportne jednačine	9
1.4	Koncentracija nosilaca	14
1.5	Jednačina provodjenja toplote	18
2	Modeli fizičkih parametara	21
2.1	Modeliranje pokretljivosti nosilaca	21
2.1.1	Rasejavanje na termičkim vibracijama kristalne rešetke	22
2.1.2	Rasejavanje na jonizovanim primesama	23
2.1.3	Rasejavanje nosilac-nosilac	25
2.1.4	Rasejavanje na neutralnim primesama	26
2.1.5	Saturacija driftovske brzine	27
2.2	Modeliranje generacije-rekombinacije nosilaca	29
2.2.1	Jednostavni model generacije-rekombinacije nosilaca	31
2.2.2	Direktna rekombinacija nosilaca	31
2.2.3	Shockley-Read-Hall rekombinacija nosilaca	31
2.2.4	Površinska rekombinacija	32
2.2.5	Auger-ova rekombinacija	32
2.3	Modeliranje termičke provodnosti	32

3	Diskretizacija sistema BSE	35
3.1	Domen simulacije i granični uslovi	36
3.2	Metoda konačnih razlika	39
	Bibliography	45
	Books	45
	Articles	45



Simulacija električnih karakteristika komponenata

1	Sistem poluprovodničkih jednačina	7
1.1	Poisson-ova jednačina	
1.2	Jednačine kontinuiteta	
1.3	Transportne jednačine	
1.4	Koncentracija nosilaca	
1.5	Jednačina provodjenja toplote	
2	Modeli fizičkih parametara	21
2.1	Modeliranje pokretljivosti nosilaca	
2.2	Modeliranje generacije-rekombinacije nosilaca	
2.3	Modeliranje termičke provodnosti	
3	Diskretizacija sistema BSE	35
3.1	Domen simulacije i granični uslovi	
3.2	Metoda konačnih razlika	
	Bibliography	45
	Books	
	Articles	



1. Sistem poluprovodničkih jednačina

Da bi se mogle precizno simulirati električne karakteristike poluprovodničkih komponenata najpre je potrebno definisati matematički model. Jednačine koje čine ovaj matematički model se najčešće nazivaju osnovne poluprovodničke jednačine i one su izvedene iz Maxwell-ovih jednačina:

$$\text{rot}\vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}, \quad (1.1)$$

$$\text{rot}\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \quad (1.2)$$

$$\text{div}\vec{D} = \rho, \quad (1.3)$$

$$\text{div}\vec{B} = 0. \quad (1.4)$$

\vec{E} i \vec{D} su vektori električnog polja i dielektričnog pomeraja, a \vec{H} i \vec{B} su vektori magnetnog polja i magnetne indukcije, respektivno. \vec{J} predstavlja gustinu struje, dok je ρ gustina naelektrisanja. $\vec{x} = (x, y, z) \in \mathfrak{R}^3$ su nezavisne prostorne promenljive, a $t \geq 0$ vremenska promenljiva.

Pri izvođenju osnovnih poluprovodničkih jednačina koriste se i neki osnovni izrazi iz fizičke elektronike koji se odnose na poluprovodnike, kao i neke pretpostavke - uprošćenja, koje ne utiču bitnije na preciznost matematičkog modela.

1.1 Poisson-ova jednačina

Poisson-ova jednačina u suštini predstavlja treću Maxwell-ovu jednačinu (1.3). Medjutim, ona se mora najpre malo modifikovati, kako bi se mogla direktno primeniti za rešavanje poluprovodničkih

problema. Najpre uvodimo relaciju izmedju vektora dielektričnog pomeraja \vec{D} i električnog polja \vec{E} :

$$\vec{D} = \varepsilon \cdot \vec{E}, \quad (1.5)$$

gde je ε dielektrična konstanta medijuma za koju se uvodi pretpostavka da je vremenski nepromenljiva i homogena u celom domenu poluprovodnika, ili oksida ako je on prisutan. Realno, ε je tenzor, tj. 3×3 matrica, ali s obzirom da smo pretpostavili da je materijal izotropan, tretiraćemo ε kao skalarnu veličinu. Potrebno je napomenuti da je ova pretpostavka korektna za najveći broj simulacija karakteristika poluprovodničkih komponenata, sa izuzetkom simulacije piezoelektričnih i feroelektričnih efekata.

U sledećem koraku, uvodimo vezu izmedju vektora električnog polja \vec{E} i elektrostatičkog potencijala ψ . Rešavamo (1.4) uvodeći vektor polja \vec{A} , uz podsećanje da je "div rot" bilo kog vektora jednako nuli:

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A} \quad \text{div}(\text{rot} \vec{A}) = 0. \quad (1.6)$$

Ovde je uvedena još jedna pretpostavka da je brzina svetlosti velika u poredjenju sa brzinama nosilaca naelektrisanja koji su od interesa za simulaciju poluprovodničke strukture. Zamenom (1.6) u (1.2) dobijamo:

$$\text{rot} \left(\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0. \quad (1.7)$$

Na osnovu elementarnog poznavanja diferencijalnog računa, poznato je da se vektor polja \vec{z} može izraziti kao gradijent polja, ako je $\text{rot} \vec{z} = 0$, pa je onda vektor električnog polja:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \text{grad} \psi. \quad (1.8)$$

Sada, zamenjujući (1.8) u (1.5), a zatim dobijeni rezultat u (1.3) dobijamo:

$$\vec{D} = -\varepsilon \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \varepsilon \cdot \text{grad} \psi, \quad (1.9)$$

$$\text{div} \left(\varepsilon \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) + \text{div}(\varepsilon \cdot \text{grad} \psi) = -\rho. \quad (1.10)$$

Prvi član u (1.10) je nula pošto smo uveli pretpostavku da je ε homogeno, tako da konačno dobijamo Poisson-ovu jednačinu:

$$\text{div}(\varepsilon \cdot \text{grad} \psi) = -\rho. \quad (1.11)$$

Prostorna gustina naelektrisanja ρ u poluprovodniku ($x \in \Omega$) se može predstaviti kao:

$$\rho = q \cdot (p - n + C), \quad (1.12)$$

gde je q elementarno naelektrisanje, p koncentracija pozitivno naelektrisanih šupljina, n koncentracija negativno naelektrisanih elektrona i C razlika koncentracija primesa (donora i akceptora). Uvodi se pretpostavka da je oksid električno neutralan, pa je u oksidu $\rho = 0$. Konačno, dobijamo Poisson-ovu jednačinu koja se koristi u simulaciji električnih karakteristika poluprovodničkih komponenata:

$$\text{div}(\text{grad} \psi) = \frac{q}{\varepsilon} \cdot (n - p - C). \quad (1.13)$$

1.2 Jednačine kontinuiteta

Jednačine kontinuiteta se mogu direktno da izvedu iz prve Maxwell-ove jednačine (1.1). Primenjujući operator "div" na ovu jednačinu dobijamo:

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot}\vec{H}) = \operatorname{div}\vec{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0. \quad (1.14)$$

Gustinu struje \vec{J} podelimo na dve komponente:

$$\vec{J} = \vec{J}_p + \vec{J}_n, \quad (1.15)$$

gde su \vec{J}_n i \vec{J}_p gustine struja elektrona i šupljina, respektivno. Dalje uvodimo pretpostavku da su naelektrisanja u poluprovodniku, osim pokretnih naelektrisanja (elektroni i šupljine), vremenski invarijantna, čime zanemarujemo uticaje naelektrisanih defekata (vakancije, dislokacije, itd.) koji mogu promeniti svoje naelektrisanje u vremenu. Prema tome:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0, \quad (1.16)$$

pa zamenujući (1.12) i (1.15) u (1.14) i imajući u vidu (1.16) dobijamo:

$$\operatorname{div}(\vec{J}_p + \vec{J}_n) + q \cdot \frac{\partial}{\partial t}(p - n) = 0. \quad (1.17)$$

Dobijeni rezultat je predstavljen prilično trivijalno, s obzirom da je uvedena pretpostavka da su izvori i sink ukupne struje potpuno kompenzovani vremenskom promenom pokretnih nosilaca naelektrisanja. Da bi dobili dve odvojene jednačine kontinuiteta, jednu za elektrone, a drugu za šupljine:

$$\operatorname{div}\vec{J}_n - q \cdot \frac{\partial n}{\partial t} = q \cdot R, \quad (1.18)$$

$$\operatorname{div}\vec{J}_p + q \cdot \frac{\partial p}{\partial t} = q \cdot R, \quad (1.19)$$

uvodimo parametar R koji se fizički može predstaviti kao razlika brzina generacije i rekombinacije parova elektron-šupljina. Ako je $R > 0$ preovladava rekombinacija, a za $R < 0$ generacija.

1.3 Transportne jednačine

Izvodjenje transportnih jednačina nosilaca naelektrisanja u poluprovodniku je veoma složeno, tako da ćemo ovde pri izvodjenju neke korake preskočiti, a neke relacije jednostavno dati bez dokazivanja. Gustina struje naelektrisanih čestica se može predstaviti kao proizvod naelektrisanja čestice, koncentracije čestica i srednje driftovske brzine nosilaca:

$$\vec{J}_p = q \cdot p \cdot \vec{v}_p, \quad (1.20)$$

$$\vec{J}_n = -q \cdot n \cdot \vec{v}_n. \quad (1.21)$$

Najveći problem predstavlja određivanje veze između srednje brzine nosilaca i električnog polja i koncentracije nosilaca naelektrisanja. Da bi dobili informaciju o driftovskoj brzini, potrebno je opisati koncentraciju nosilaca pomoću funkcije raspodele f_v u faznom sedmodimenzionalom

prostoru (koordinate $\vec{x} = (x, y, z)^T$, momenti $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)^T$ i vreme t). Funkcija raspodele određuje koncentraciju nosilaca u jedinici zapremine faznog prostora, tako da se njenim integraljenjem po zapremini V_k dobija koncentracija nosilaca $v(\vec{x}, t)$, pri čemu v može biti n ili p , označavajući elektrone ili šupljine. Normalizacijom (1.22), f_v se definiše kao verovatnoća:

$$v(\vec{x}, t) = \frac{1}{4 \cdot \pi^3} \int_{V_k} f_v(\vec{x}, \vec{k}, t) \cdot d\vec{k}. \quad (1.22)$$

Funkcija raspodele ima osobinu da su njeni izvodi po t duž putanje čestice u faznom prostoru jednaki nuli, što je u skladu sa Liouville-ovom teoremom:

$$\frac{d}{dt} f_v(\vec{x}_v(t), \vec{k}_v(t), t) = 0. \quad (1.23)$$

(1.23) u stvari predstavlja Boltzmann-ovu transportnu jednačinu u implicitnom obliku, pa se razvojem izvoda dobija:

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} + \text{grad}_k f_v \cdot \frac{d\vec{k}_v}{dt} + \text{grad}_x f_v \cdot \frac{d\vec{x}_v}{dt} = 0, \quad (1.24)$$

pri čemu grad_k predstavlja gradijentni operator u odnosu na koordinate momenta \vec{k} , a grad_x gradijentni operator u odnosu na prostorne koordinate \vec{x} . (1.24) pokazuje da su varijacije funkcije raspodele u svakoj tački faznog prostora (\vec{x}, \vec{k}) posledica kretanja čestice u normalnom prostoru (\vec{x}) i prostoru momenata (\vec{k}) . Izvodi \vec{k}_v po vremenu t pomnoženi Plank-ovom konstantom izjednačavaju sumu svih sila \vec{F} :

$$\frac{d\vec{k}_v}{dt} \cdot \hbar = \vec{F}_v \text{ gde je } \hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (1.25)$$

pri čemu je:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (1.26)$$

Ove sile se mogu podeliti u dve grupe:

$$\vec{F}_v = \vec{F}_{ve} + \vec{F}_{vi}, \quad (1.27)$$

gde \vec{F}_{ve} obuhvata sile usled delovanja makroskopskog spoljašnjeg polja, a \vec{F}_{vi} označava unutrašnje lokalne sile usled prisustva defekata i termičkih vibracija kristalne rešetke. Kako je nemoguće na osnovu zakona dinamike izračunati uticaj unutrašnjih sila \vec{F}_{vi} na funkciju raspodele, umesto njih se koriste statističke zakonitosti. Uvodeći veličinu $S_v(\vec{k}, \vec{k}') \cdot d\vec{k}'$ koja predstavlja verovatnoću po jedinici vremena da će nosilac u stanju \vec{k} biti rasejan u zapremini $d\vec{k}'$, možemo da pišemo:

$$\begin{aligned} \text{grad}_k f_v \cdot \frac{\vec{F}_{vi}}{\hbar} &= \int_{V_{k'}} [f_v(\vec{x}, \vec{k}, t) \cdot (1 - f_v(\vec{x}, \vec{k}', t)) \cdot S_v(\vec{k}, \vec{k}') \\ &\quad - f_v(\vec{x}, \vec{k}', t) \cdot (1 - f_v(\vec{x}, \vec{k}, t)) \cdot S_v(\vec{k}', \vec{k})] \cdot d\vec{k}', \end{aligned} \quad (1.28)$$

pri čemu se (1.28) naziva sudarni integral. Prvi član podintegralne funkcije predstavlja broj nosilaca koji se iz stanja \vec{k} rasejava u elementu zapremine $d\vec{k}'$ u jedinici vremena. $f_v(\vec{x}, \vec{k}, t)$ predstavlja verovatnoću da se nosilac nalazi u stanju \vec{k} . $[1 - f_v(\vec{x}, \vec{k}', t)]$ je verovatnoća da je element zapremine $d\vec{k}'$ nezauzet i da zbog toga može prihvatiti česticu. $S_v(\vec{k}, \vec{k}')$ daje *a priori* verovatnoću da će se rasejavanje dogoditi. U skladu sa ovim, drugi član podintegralne funkcije daje broj nosilaca rasejanih iz elementa zapremine $d\vec{k}'$ u stanje \vec{k} u jedinici vremena.

Izvod \vec{x}_v po vremenu predstavlja grupnu brzinu nosilaca:

$$\frac{d\vec{x}_v}{dt} = \vec{u}_v. \quad (1.29)$$

Smenjujući izraze (1.25) do (1.29) u (1.24), dobija se Boltzmann-ova transportna jednačina u eksplicitnom obliku:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_v}{\partial t} + \frac{\vec{F}_{ve}}{\hbar} \cdot \text{grad}_k f_v + \vec{u}_v \cdot \text{grad}_x f_v &= \\ &= - \int_{V_{k'}} [f_v(\vec{x}, \vec{k}, t) \cdot (1 - f_v(\vec{x}, \vec{k}', t)) \cdot S_v(\vec{k}, \vec{k}') \\ &\quad - f_v(\vec{x}, \vec{k}', t) \cdot (1 - f_v(\vec{x}, \vec{k}, t)) \cdot S_v(\vec{k}', \vec{k})] \cdot d\vec{k}'. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Rešavanje ove jednačine, da bi se odredile koncentracije nosilaca i driftovske brzine, predstavlja veoma težak problem, s obzirom da se radi o integro-diferencijalnoj jednačini sa sedam nezavisnih promenljivih. Zbog toga se koriste iterativne metode za njeno rešavanje, koje su takodje veoma teške i komplikovane sa numeričke tačke gledišta, pa je zbog toga neophodno uvesti neke pretpostavke kako bi se procedura rešavanja pojednostavila.

Alternativna mogućnost je da se Boltzmann-ova transportna jednačina rešava Monte Carlo metodom, tj. da se simulira kretanje svake od čestica posebno na mikroskopskom nivou, ali i ova metoda ima svojih nedostataka zbog toga što je veoma zahtevna u pogledu potrebnih računarskih resursa i potrebnog CPU vremena za rešavanje.

Zbog toga se, da bi se procedura rešavanja pojednostavila, uvode određene pretpostavke:

- verovatnoća rasejavanja je nezavisna od spoljašnjih sila;
- vreme trajanja sudara je daleko kraće od srednjeg vremena kretanja čestice između dva sudarna procesa;
- interakcije nosilac-nosilac su zanemarljive;
- spoljašnje sile su konstantne u okviru dimenzija koje su kompatibilne sa fizičkim dimenzijama talasnog paketa koji opisuje kretanje čestice.

Pretpostavljajući da su svi procesi rasejavanja elastični, Boltzmann-ova transportna jednačina se može aproksimirati običnom diferencijalnom jednačinom:

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} + \frac{\vec{F}_{ve}}{\hbar} \cdot \text{grad}_k f_v + \vec{u}_v \cdot \text{grad}_x f_v = - \frac{f_v - f_{vo}}{\tau_v}. \quad (1.31)$$

Ako pretpostavimo da u trenutku $t = 0$ sve spoljašnje sile prestanu da deluju i da je f_v homogeno, tada je:

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} + \frac{\vec{F}_{ve}}{\hbar} \cdot \text{grad}_k f_v + \vec{u}_v \cdot \text{grad}_x f_v = 0, \quad (1.32)$$

pa onda sledi da će se funkcija raspodele menjati samo zbog uticaja sudara, tako da je:

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} + = - \frac{f_v - f_{vo}}{\tau_v}, \quad (1.33)$$

pri čemu je rešenje ove diferencijalne jednačine:

$$f_v(\vec{x}, \vec{k}, t) = f_{vo}(\vec{x}, \vec{k}) + (f_v(\vec{x}, \vec{k}, 0) - f_{vo}(\vec{x}, \vec{k})) \cdot e^{-t/\tau_v}. \quad (1.34)$$

f_{vo} je ravnotežna funkcija raspodele, dok je τ_v vreme relaksacije, tj. vreme potrebno da se čestica iz eksitovanog stanja vrati u stanje ravnoteže. Da bi dobili strujne jednačine, pomnožićemo relaciju

(1.31) grupnom brzinom \vec{u}_v i integraliti je po V_k , tako da dobijamo:

$$\int_{V_k} \vec{u}_v \cdot \frac{\partial f_v}{\partial t} \cdot d\vec{k} + \int_{V_k} \vec{u}_v \cdot \left(\frac{\vec{F}_{ve}}{\hbar} \cdot \text{grad}_k f_v \right) \cdot d\vec{k} + \int_{V_k} \vec{u}_v \cdot (\vec{u}_v \cdot \text{grad}_x f_v) \cdot d\vec{k} =$$

$$= - \int_{V_k} \vec{u}_v \cdot \frac{f_v - f_{vo}}{\tau_v} \cdot d\vec{k}. \quad (1.35)$$

Za rešavanje (1.35) korišćićemo poznata rešenja četiri integrala koja se mogu pronaći u literaturi:

$$\int_{V_k} \vec{u}_v \cdot \frac{\partial f_v}{\partial t} \cdot d\vec{k} = 4\pi^3 \cdot \frac{\partial}{\partial t} (v \cdot \vec{v}_v), \quad (1.36)$$

$$\int_{V_k} \vec{u}_v \cdot \left(\frac{\vec{F}_{ve}}{\hbar} \cdot \text{grad}_k f_v \right) \cdot d\vec{k} = -4\pi^3 \cdot \vec{F}_{ve} \cdot \frac{v}{m_v^*}, \quad (1.37)$$

$$\int_{V_k} \vec{u}_v \cdot (\vec{u}_v \cdot \text{grad}_x f_v) \cdot d\vec{k} = \frac{4\pi^3}{m_v^*} \cdot \text{grad}_x (v \cdot kT), \quad (1.38)$$

$$\int_{V_k} \vec{u}_v \cdot \frac{f_v - f_{vo}}{\tau_v} \cdot d\vec{k} = 4\pi^3 \frac{v \cdot \vec{v}_v}{\tau_v}. \quad (1.39)$$

\vec{v}_v je driftovska brzina, m_v^* efektivna masa i τ_v srednje vreme sudara. Spoljašnje sile \vec{F}_{ve} se mogu izraziti preko električnog polja \vec{E} , ukoliko zanemarimo uticaj magnetnog polja, tj. Lorentz-ove sile, kao:

$$\vec{F}_{ne} = -q \cdot \vec{E}, \quad \vec{F}_{pe} = q \cdot \vec{E}. \quad (1.40)$$

Takodje, u (1.38) je pretpostavljeno da je driftovska energija nosilaca zanemarljivo mala u poredjenju sa njihovom termičkom energijom, pa zbog toga ova relacija ne važi za slučaj "vrućih" nosilaca.

Koristeći gornje relacije dobijamo diferencijalne jednačine za driftovske brzine elektrona i šupljina:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \cdot \vec{v}_n) + \frac{q}{m_n^*} \cdot n \cdot \vec{E} + \frac{1}{m_n^*} \cdot \text{grad}(n \cdot kT) = -\frac{n \cdot \vec{v}_n}{\tau_n}, \quad (1.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (p \cdot \vec{v}_p) + \frac{q}{m_p^*} \cdot p \cdot \vec{E} + \frac{1}{m_p^*} \cdot \text{grad}(p \cdot kT) = -\frac{p \cdot \vec{v}_p}{\tau_p}, \quad (1.42)$$

koje nažalost nemaju rešenje u zatvorenom obliku. Da bi dobili neko približno rešenje, uvodimo efektivne pokretljivosti elektrona i šupljina μ_e i μ_p :

$$\mu_n = \frac{q \cdot \tau_n}{m_n^*}, \quad (1.43)$$

$$\mu_p = \frac{q \cdot \tau_p}{m_p^*}. \quad (1.44)$$

Posle množenja (1.41) i (1.42) odgovarajućim srednjim vremenima sudara τ_v i naelektrisanjem ($+q$ ili $-q$), imajući u vidu (1.20) i (1.21) konačno dobijamo:

$$\tau_n \cdot \frac{\partial \vec{J}_n}{\partial t} + \vec{J}_n = q \cdot \mu_n \cdot n \left(\vec{E} + \frac{1}{n} \cdot \text{grad} \left(n \cdot \frac{kT}{q} \right) \right), \quad (1.45)$$

$$\tau_p \cdot \frac{\partial \vec{J}_p}{\partial t} + \vec{J}_p = q \cdot \mu_p \cdot p \left(\vec{E} - \frac{1}{p} \cdot \text{grad} \left(p \cdot \frac{kT}{q} \right) \right). \quad (1.46)$$

Srednja vremena sudara τ_v su veoma mala i reda su desetog dela pikosekunde tako da se jednačine (1.45) i (1.46) mogu posmatrati kao singularno perturbacione, pa zbog toga njihova rešenja razvijamo u redove po perturbacionom parametru a to je vreme sudara:

$$\vec{J}_n(\tau_n) = \sum_{i=0}^{\infty} \vec{J}_{ni} \cdot (\tau_n)^i, \quad (1.47)$$

$$\vec{J}_p(\tau_p) = \sum_{i=0}^{\infty} \vec{J}_{pi} \cdot (\tau_p)^i. \quad (1.48)$$

Nulti članovi redova ($i = 0$) su algebarske jednačine:

$$\vec{J}_{no} = q \cdot \mu_n \cdot n \left(\vec{E} + \frac{1}{n} \cdot \text{grad} \left(n \cdot \frac{kT}{q} \right) \right), \quad (1.49)$$

$$\vec{J}_{po} = q \cdot \mu_p \cdot p \left(\vec{E} - \frac{1}{p} \cdot \text{grad} \left(p \cdot \frac{kT}{q} \right) \right), \quad (1.50)$$

tako da je:

$$\vec{J}_n = \vec{J}_{no} + O(\tau_n), \quad (1.51)$$

$$\vec{J}_p = \vec{J}_{po} + O(\tau_p). \quad (1.52)$$

Ako sada pretpostavimo da je temperatura rešetke konstantna ($T = \text{const.}$) i uvedemo Einstein-ove relacije:

$$D_n = \mu_n \cdot \frac{kT}{q}, \quad (1.53)$$

$$D_p = \mu_p \cdot \frac{kT}{q}, \quad (1.54)$$

kako bi definisali difuzione koeficijente D_n i D_p , dobijamo strujne jednačine u dobro poznatom obliku kao sumu driftovske i difuzione komponente struje:

$$\vec{J}_n \cong q \cdot n \cdot \mu_n \cdot \vec{E} + q \cdot D_n \cdot \text{grad}n, \quad (1.55)$$

$$\vec{J}_p \cong q \cdot p \cdot \mu_p \cdot \vec{E} - q \cdot D_p \cdot \text{grad}p. \quad (1.56)$$

Na kraju, sumiraćemo sve pretpostavke koje su uvedene pri izvodjenju ovih jednačina.

- Pretpostavljeno je da su svi procesi rasejavanja elastični, što znači da je rasejavanje na optičkim fononima, koje predstavlja osnovni mehanizam rasejavanja kod GaAs, zanemareno.
- Prostorne varijacije vremena sudara i zonske strukture je zanemareno što podrazumeva sporu promenu koncentracije nosilaca.
- Zanemareni su efekti degeneracije pri aproksimaciji integrala rasejavanja.
- Zanemarene su prostorne varijacije spoljašnjih sila što podrazumeva sporu promenu vektora električnog polja.
- Ignoriše se uticaj Lorentz-ove sile s obzirom da je pretpostavljeno da je $\vec{B} = 0$.
- Prostorne i vremenske varijacije temperature nosilaca su zanemarene, a takodje, pretpostavljeno je da su temperature nosilaca i rešetke jednake. Zbog toga je nekorektna simulacija difuzije "vrućih" nosilaca.
- Pretpostavljen je parabolični oblik energetske zone, što je dodatni razlog da se degenerisani poluprovodnici tretiraju nekorektno.
- Dimenzije poluprovodnika su beskonačne. Kod realnih struktura funkcija raspodele se menja na veoma kompleksan i neregularan način u zavisnosti od granica strukture i eventualno prisutnih kontakata i međupovršina.

1.4 Koncentracija nosilaca

Da bi dobijeni rezultati simulacije bili kvalitativno i kvantitativno korektni neophodni su precizni modeli za određivanje koncentracije nosilaca u poluprovodničkim strukturama. Zbog toga ćemo najpre razmotriti klasične modele za modeliranje koncentracije nosilaca. Pretpostavljajući paraboličnu i izotropnu zonsku strukturu poluprovodnika, gustina mogućih stanja u provodnoj i valentnoj zoni u funkciji energije se može predstaviti kao:

$$\rho_c(E) = \frac{4\pi \cdot (2 \cdot m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c}, \quad (1.57)$$

$$\rho_v(E) = \frac{4\pi \cdot (2 \cdot m_p^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E_v - E}. \quad (1.58)$$

E_c i E_v predstavljaju energije dna provodne i vrha valentne zone, i njihova razlika je jednaka širini zabranjene zone $E_g = E_c - E_v$. Širina zabranjene zone zavisi od temperature i u slučaju silicijuma se može dosta dobro modelirati izrazom:

$$E_g = 1.17eV - \frac{7.02 \cdot 10^{-4} eV \cdot \left(\frac{T}{K}\right)^2}{1108 + \left(\frac{T}{K}\right)}, \quad (1.59)$$

ili

$$E_g = 1.1785eV - 9.025 \cdot 10^{-5} eV \cdot \left(\frac{T}{K}\right) - 3.05 \cdot 10^{-7} eV \cdot \left(\frac{T}{K}\right)^2. \quad (1.60)$$

Širine zabranjene zone osnovnih nedopiranih poluprovodničkih materijala na temperaturi od 300K date su u Tabeli 1.1.

Temperaturna zavisnost efektivnih masa elektrona i šupljina modelira se polinomima, pri čemu su vrednosti koeficijenta fitovani na osnovu eksperimentalno dobijenih rezultata:

$$m_n^* = m_o \cdot \left(1.045 + 4.5 \cdot 10^{-4} \cdot \left(\frac{T}{K}\right) \right), \quad (1.61)$$

Table 1.1: Širine zabranjene zone osnovnih nedopiranih poluprovodničkih materijala na T=300K.

Poluprovodnik	E_g [eV]	dE_g/dT [eVK ⁻¹]
Si	1.12	$-2.7 \cdot 10^{-4}$
GaAs	1.35	$-5.0 \cdot 10^{-4}$
Ge	0.67	$-3.7 \cdot 10^{-4}$

$$m_p^* = m_o \cdot \left(0.532 + 1.4 \cdot 10^{-3} \cdot \left(\frac{T}{K} \right) - 1.48 \cdot 10^{-6} \cdot \left(\frac{T}{K} \right)^2 \right). \quad (1.62)$$

Vrednosti efektivnih masa osnovnih nedopiranih poluprovodničkih materijala na T=300K su date u Tabeli 1.2.

Table 1.2: Vrednosti efektivnih masa osnovnih nedopiranih poluprovodničkih materijala na T=300K.

Poluprovodnik	m_n^*/m_o	m_p^*/m_o
Si	1.18	0.5
GaAs	0.068	0.5
Ge	0.55	0.3

Da bi dobili izraze za koncentracije nosilaca potrebno je integraliti po energiji funkciju gustine stanja pomnoženu odgovarajućom funkcijom raspodele:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(E) \cdot f_n(E) \cdot dE, \quad (1.63)$$

$$p = \int_{\infty}^{E_v} \rho_v(E) \cdot f_p(E) \cdot dE, \quad (1.64)$$

gde se za funkcije raspodela $f_n(E)$ i $f_p(E)$ uzimaju Fermi-jeve funkcije:

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{fn}}{kT}\right)}, \quad (1.65)$$

$$f_p(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{fp} - E}{kT}\right)}. \quad (1.66)$$

E_{fn} i E_{fp} su Fermi-jeve energije elektrona i šupljina, respektivno. Korišćenjem Fermi-jevih integrala:

$$F_{1/2} = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{y}}{1 + e^{y-x}} \cdot dy, \quad (1.67)$$

(1.63) i (1.64) postaju:

$$n = N_c \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot F_{1/2} \left(\frac{E_{fn} - E_c}{kT} \right), \quad (1.68)$$

$$p = N_v \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot F_{1/2} \left(\frac{E_v - E_{fp}}{kT} \right). \quad (1.69)$$

N_c i N_v predstavljaju efektivne gustine stanja u provodnoj i valentnoj zoni:

$$N_c = 2 \cdot \left(\frac{2\pi \cdot kT \cdot m_n^*}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (1.70)$$

$$N_v = 2 \cdot \left(\frac{2\pi \cdot kT \cdot m_p^*}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (1.71)$$

dok je $F_{1/2}(x)$, kao što je već rečeno, Fermijev integral koji na žalost nema rešenje u zatvorenoj formi. Postoji više načina za aproksimaciju ovog integrala, pri čemu je, sa stanovišta tačnosti, najprihvatljivija tzv. asimptotska i racionalna Chebyshev-ljeva aproksimacija. Primenom ove aproksimacije dobija se:

$$n = N_c \cdot \exp \left(\frac{E_{fn} - E_c}{kT} \right), \quad (1.72)$$

$$p = N_v \cdot \exp \left(\frac{E_v - E_{fp}}{kT} \right). \quad (1.73)$$

U cilju potpunog razumevanja izraza za koncentraciju nosilaca neophodno je precizno definisati E_c , E_v i Fermijeve energije E_{fn} i E_{fp} . Ivice zabranjene zone se mogu predstaviti kao:

$$E_c = E_{co} - \delta E_c - q \cdot \psi, \quad (1.74)$$

$$E_v = E_{vo} - \delta E_v - q \cdot \psi. \quad (1.75)$$

E_{co} i E_{vo} su energije koje odgovaraju dnu provodne i vrhu valentne zone kod intrinzičnog poluprovodnika. δE_c i δE_v su pomeraji ivica zabranjene zone usled prisustva primesa u poluprovodniku, dok je ψ , kao i do sada potencijal.

Fermijeve energije E_{fn} i E_{fp} se mogu predstaviti kao:

$$E_{fn} = E_i - q \cdot \phi_n, \quad (1.76)$$

$$E_{fp} = E_i - q \cdot \phi_p, \quad (1.77)$$

gde su ϕ_n i ϕ_p kvazi-Fermijevi potencijali elektrona i šupljina koji opisuju devijaciju odgovarajućih funkcija raspodele u odnosu na ravnotežno stanje. Važno je napomenuti da je samo razlika između kvazi-Fermijevih potencijala i elektrostatičkog potencijala relevantna za koncentraciju nosilaca. Definisaćemo da je elektrostatički potencijal jednak nuli za intrinzični poluprovodnik kada su

funkcije raspodele u ravnoteži, pa prema tome E_i predstavlja Fermijevu energiju intrinzičnog poluprovodnika. Koristeći gore navedene izraze, koncentracije elektrona i šupljina možemo napisati kao:

$$n = N_c \cdot \exp\left(\frac{E_i - E_{co} + \delta E_{co}}{kT}\right) \cdot \exp\left(\frac{q \cdot (\psi - \varphi_n)}{kT}\right), \quad (1.78)$$

$$p = N_v \cdot \exp\left(\frac{E_{vo} + \delta E_{vo} - E_i}{kT}\right) \cdot \exp\left(\frac{q \cdot (\varphi_p - \psi)}{kT}\right). \quad (1.79)$$

Poisson-ova jednačina u odsustvu primesa i spoljašnjih sila dobija trivijalni oblik:

$$p(\psi = \varphi_n = 0) - n(\psi = \varphi_p = 0) = 0, \quad (1.80)$$

pa se primenjujući ovaj izraz dobija da je:

$$N_c \cdot \exp\left(\frac{E_i - E_c}{kT}\right) = N_v \cdot \exp\left(\frac{E_v - E_i}{kT}\right), \quad (1.81)$$

odakle se veoma jednostavno može izračunati intrinzična Fermijeva energija E_i , odnosno odredjemo razliku E_i i jedne granice zabranjene zone:

$$E_i - E_c = \frac{kT}{2} \cdot \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right) - \frac{E_g}{2}. \quad (1.82)$$

Kada uslov (1.80) nije ispunjen, da bi odredili E_i neophodno je rešiti:

$$N_c \cdot F_{1/2}\left(\frac{E_i - E_c}{kT}\right) = N_v \cdot F_{1/2}\left(\frac{E_v - E_i}{kT}\right) \quad (1.83)$$

primenom neke od numeričkih metoda. Medjutim, kod skoro svih poluprovodnika E_i se nalazi na sredini zabranjene zone, udaljeno od obe granice zabranjene zone. U najvećem broju aplikacija pogodno je definisati tzv. intrinzičnu koncentraciju nosilaca n_i , kao geometrijsku sredinu koncentracija nosilaca u poluprovodniku koji se nalazi u ravnoteži:

$$n_i = \sqrt{n \cdot p}, \quad (1.84)$$

pri čemu ovaj izraz važi i u slučaju kada su u poluprovodniku prisutni defekti. Pod pretpostavkom da za nosioce naelektrisanja važi Boltzmann-ova statistika, n_i je moguće izračunati kao:

$$n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2 \cdot kT}\right). \quad (1.85)$$

Konačno, izrazi za koncentraciju elektrona i šupljina se mogu napisati u dobro poznatoj i opšte prihvaćenoj formi, u funkciji 5 parametara: intrinzične koncentracije nosilaca n_i , elektrostatičkog potencijala ψ , kvazi-Fermijevih potencijala φ_n i φ_p i temperature T :

$$n = n_i \cdot \exp\left(\frac{q \cdot (\psi - \varphi_n)}{k \cdot T}\right), \quad (1.86)$$

$$p = n_i \cdot \exp\left(\frac{q \cdot (\varphi_p - \psi)}{k \cdot T}\right). \quad (1.87)$$

U prisustvu primesa iz Poisson-ove jednačine sada možemo da izračunamo tzv. ugradjeni ("built-in") potencijal ψ_b za koji se pomeraju Fermijeve energije E_{fn} i E_{fp} . Pri ovom izračunavanju se uvodi pretpostavka da je poluprovodnik homogeno dopiran i da nema spoljašnjih uticaja. Tada je Laplasijan elektrostatičkog potencijala jednak nuli, pa je, pod pretpostavkom da važi Boltzmann-ova statistika, Poisson-ova jednačina:

$$n_i \cdot \exp\left(-\frac{q \cdot \psi_b}{kT}\right) - n_i \cdot \exp\left(\frac{q \cdot \psi_b}{kT}\right) + N_D^+ - N_A^- = 0. \quad (1.88)$$

Pretpostavićemo da se fiksna naelektrisanja C sastoje samo od jonizovanih donora N_D^+ i jonizovanih akceptora N_A^- :

$$C = N_D^+ - N_A^-, \quad (1.89)$$

pa se onda iz (1.88) ugradjeni potencijal može predstaviti kao:

$$\psi_b = \frac{kT}{q} \cdot \operatorname{arsinh}\left(\frac{N_D^+ - N_A^-}{2 \cdot n_i}\right). \quad (1.90)$$

Ukoliko u poluprovodniku jedan tip primesa dominira u odnosu na drugi, ovaj izraz se može dodatno pojednostaviti:

$$N_D^+ \gg N_A^- \longrightarrow \psi_b \cong \frac{kT}{q} \cdot \ln\left(\frac{N_D^+}{n_i}\right), \quad (1.91)$$

$$N_A^- \gg N_D^+ \longrightarrow \psi_b \cong -\frac{kT}{q} \cdot \ln\left(\frac{N_A^-}{n_i}\right). \quad (1.92)$$

Medjutim, pretpostavka da Boltzmann-ova statistika važi ne stoji u slučajevima kada je koncentracija nosilaca visoka, zbog toga što se u ovom slučaju Fermijeve energije E_{fn} i E_{fp} pomeraju preko granica zabranjene zone. U ovom slučaju, da bi se dobili korektni rezultati pri simulaciji električnih karakteristika komponenata, neophodno je da se ugradjeni potencijal ψ_b određuje iz daleko kompleksnijeg izraza:

$$N_v \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot F_{1/2}\left(\frac{E_v - E_{fp}}{kT}\right) - N_c \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot F_{1/2}\left(\frac{E_{fn} - E_c}{kT}\right) + N_D^+ - N_A^- = 0, \quad (1.93)$$

što će biti razmatrano u okviru drugog kursa.

1.5 Jednačina provodjenja toplote

Simulacija snažnih poluprovodničkih komponenata veoma često zahteva razmatranje elektrotermičkih fenomena, tj. uticaja povišene temperature, usled zagrevanja, na njihove električne karakteristike. Naime, zbog povećane disipacije dolazi do povećanja temperature u nekim oblastima komponente i ukoliko se komponenta ne hladi može doći do oštećenja komponente i nepovratnih promena njenih električnih karakteristika, pa čak i do otkaza komponente. Zbog toga je veoma važno simulirati ovaj efekat i pri projektovanju komponente voditi računa o njenom hladjenju, tj. odvođenju viška toplote i uspostavljanju ravnotežnog stanja u kojem komponenta stabilno i pouzdano radi. Da bi se ovi efekti mogli uključiti u simulaciju, neophodno je da se u sistem osnovnih poluprovodničkih jednačina uključi i jednačina provodjenja toplote:

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - H = \operatorname{div} k(T) \cdot \operatorname{grad} T. \quad (1.94)$$

Table 1.3: Vrednosti ρ i c na T=300K.

Materijal	c [m ² s ⁻² K ⁻¹]	ρ [VA s ⁻³ m ⁻⁵]
Si	703	2328
SiO ₂	782	2650
Si ₃ N ₄	787	3440
GaAs	351	5316
Ge	322	5323

ρ i c predstavljaju specifičnu gustinu i specifičnu toplotu materijala, u ovom slučaju je to najčešće silicijum. Vrednosti ovih parametara, za materijale koji se najčešće koriste u poluprovodničkoj tehnologiji su date u Tabeli 1.3. Temperaturna zavisnost ρ i c se u ovom slučaju zanemaruje. $k(T)$ i H predstavljaju termičku provodnost i lokalno generisanu toplotu, a njihove modele ćemo razmatrati nešto kasnije.

Samo određivanje raspodele temperature u domenu simulacije bez razmatranja uticaja temperaturnog gradijenta na vrednost struje je veoma gruba aproksimacija i zadovoljava samo u vrlo ograničenom broju aplikacija. Detaljnija analiza zahteva da se u jednačine gustine struja elektrona i šupljina dodaju članovi, tako da dobijamo:

$$\vec{J}_n = q \cdot n \cdot \mu_n \cdot \vec{E} + q \cot D_n \cdot \text{grad}n + q \cdot n \cdot D_n^T \cdot \text{grad}T, \quad (1.95)$$

$$\vec{J}_p = q \cdot p \cdot \mu_p \cdot \vec{E} - q \cot D_p \cdot \text{grad}p - q \cdot p \cdot D_p^T \cdot \text{grad}T. \quad (1.96)$$

Poslednji članovi u gornjim izrazima predstavljaju driftovsku komponentu čiji je uzrok temperaturni gradijent. Termički difuzioni koeficijenti D_n^T i D_p^T su dati kao:

$$D_n^T \cong \frac{D_n}{2 \cdot T}, \quad (1.97)$$

$$D_p^T \cong \frac{D_p}{2 \cdot T}. \quad (1.98)$$

Konačno, nakon svih ovih razmatranja i izvodjenja dobijamo kompletan sistem osnovnih poluprovodničkih jednačina, koji predstavlja "srce" svakog programa koji se koristi za simulaciju električnih karakteristika poluprovodničkih komponenata:

$$\text{div}(\text{grad}\psi) = \frac{q}{\epsilon} \cdot (n - p - C), \quad (1.99)$$

$$\text{div}\vec{J}_n - q \cdot \frac{\partial n}{\partial t} = q \cdot R, \quad (1.100)$$

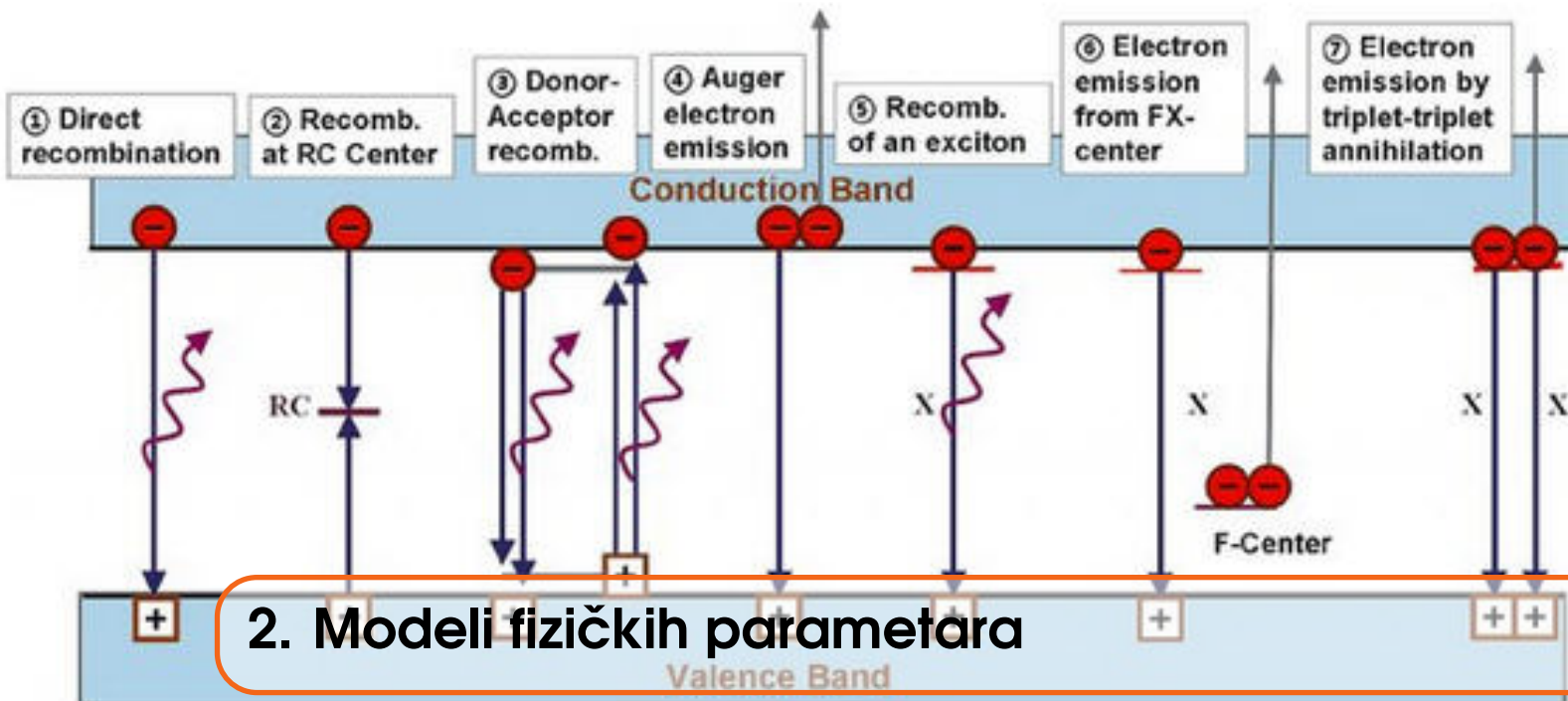
$$\text{div}\vec{J}_p + q \cdot \frac{\partial p}{\partial t} = -q \cdot R, \quad (1.101)$$

$$\vec{J}_n = q \cdot n \cdot \mu_n \cdot \vec{E}_n + q \cdot D_n \cdot \text{grad}n, \quad (1.102)$$

$$\vec{J}_p = q \cdot p \cdot \mu_p \cdot \vec{E}_p - q \cdot D_p \cdot \text{grad}p, \quad (1.103)$$

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - H = \text{div}k(T) \cdot \text{grad}T. \quad (1.104)$$

Rešavanjem gore navedenog sistema dobijamo raspodele različitih fizičkih veličina u domenu simulacije što nam pomaže da bolje shvatimo kako komponente rade i da uočimo neke nepravilnosti koje su posledica lošeg dizajna, a mogu da dovedu do otkaza komponente. Korišćenjem simulatora ove greške je moguće eliminisati u najranijoj fazi projektovanja što bitno utiče na pojeftinjenje komponente, tj. celog sistema, i značajno ubrzava proces razvoja i projektovanja novih tehnologija i uređaja.



Osnovne poluprovodničke jednačine, čije je izvođenje detaljno objašnjeno u prethodnom poglavlju, predstavljaju set diferencijalnih jednačina koje je neophodno rešiti da bi odredili raspodele određenih veličina u definisanom domenu simulacije i na taj način simulirali električne karakteristike poluprovodničkih komponenta. Informaciju o geometriji komponente i raspodelu primesa u domenu simulacije, koja takodje predstavlja jedan od fizičkih parametara, dobijamo simulacijom tehnološkog niza za proizvodnju komponente. Pored toga, postoji još nekoliko fizičkih parametara povezanih sa osnovnim poluprovodničkim jednačinama. Kvantitativna, pa čak i kvalitativna simulacija električnih karakteristika zahteva precizne i uz to primenljive modele ovih parametara.

U ovom poglavlju će biti reči o modelima pokretljivosti elektrona i šupljina u poluprovodniku. Posebna pažnja je posvećena preciznosti ovih modela s obzirom da oni višestruko utiču na struju kroz strukturu, a to je jedan od najvažnijih rezultata koje nam simulacija daje. Takodje, dat je i pregled novih, savremenih modela pokretljivosti koji su ugrađeni u TCAD softverske pakete. Modeli procesa generacije i rekombinacije nosilaca, koji dominantno utiču na parazitne struje i probojne karakteristike komponenta su razmatrani u nastavku ovog poglavlja.

2.1 Modeliranje pokretljivosti nosilaca

U proceduri izvođenja izraza za struju, koja je opisana u prethodnom poglavlju, uvodimo vremena relaksacije τ_n i τ_p , koja određuju srednje vreme između dva rasejavanja elektrona, odnosno šupljina. Takodje, definišemo i pokretljivost nosilaca μ_n i μ_p , s obzirom da je ovaj pojam intuitivno daleko lakše razumeti. Sada ćemo razmotriti različite mehanizme koji utiču na pokretljivost nosilaca. Elektroni i šupljine se u poluprovodniku rasejavaju na termičnim vibracijama rešetke, jonizovanim primesama, neutralnim primesama, defektima (vakancije, intersticije i dislokacije), površinama i međupovršinama, kao i na drugim prisutnim elektronima i šupljinama. Nažalost, najveći broj ovih mehanizama, a posebno njihov međusobni uticaj, je veoma komplikovan i samim tim težak za modeliranje pa ćemo najpre razmotriti nekoliko dobro poznatih pristupa koji se baziraju na fenomenološkim izrazima koji su izvedeni na osnovu eksperimentalno dobijenih rezultata.

2.1.1 Rasejavanje na termičkim vibracijama kristalne rešetke

Osnovni proces koji utiče na rasejavanje nosilaca je njihova interakcija sa termički uzrokovanim vibracijama atoma u kristalnoj rešetki poluprovodnika. Ove vibracije su zavisne od temperature tako da se sa povećanjem temperature pojačavaju vibracije što dovodi do smanjenja pokretljivosti elektrona i šupljina. Teorijski izvedeni izrazi za pokretljivosti μ_n^L i μ_p^L su veoma složeni:

$$\mu_n^L = \frac{2\sqrt{2\pi}}{3} \cdot \frac{q \cdot \hbar^4 \cdot C_1}{(m_n^*)^{5/2} \cdot E_{ac}^2 \cdot (kT)^{3/2}}, \quad (2.1)$$

$$\mu_p^L = \frac{2\sqrt{2\pi}}{3} \cdot \frac{q \cdot \hbar^4 \cdot C_1}{(m_p^*)^{5/2} \cdot E_{av}^2 \cdot (kT)^{3/2}}. \quad (2.2)$$

C_1 je srednja longitudinalna konstanta elastičnosti poluprovodnika i vrednost joj je reda 10^5 VAScm^{-3} . E_{ac} i E_{av} su konstante deformacionog potencijala provodne i valentne zone, respektivno, i njihova vrednost iznosi nekoliko eV. Za potrebe simulacije se umesto ovih komplikovanih koriste jednostavni izrazi:

$$\mu_n^L = \mu_n^o \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{-\alpha_n}, \quad (2.3)$$

$$\mu_p^L = \mu_p^o \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{-\alpha_p}, \quad (2.4)$$

pri čemu se temperatura daje u kelvinovim stepenima, a vrednosti konstanti μ_n^L , μ_p^L , α_n i α_p se određuju fitovanjem na osnovu eksperimentalno određenih vrednosti pokretljivosti. U publikovanim radovima vrednosti ovih koeficijenata su različite, a ovde su u tabeli 2.1 date njihove maksimalne i minimalne vrednosti.

Table 2.1: Maksimalne i minimalne vrednosti parametara.

Materijal	min	max	min	max	min	max	min	max
	μ_n^o [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]	μ_n^o [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]	μ_p^o [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]	μ_p^o [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]	α_n	α_n	α_p	α_p
Si	1240	1600	438	600	2.2	2.6	2.2	2.7
GaAs	7500	9000	250	500	1	1	2.1	2.1
Ge	2694	3900	1800	1900	1.6	1.66	1.3	2.33

Sah i njegovi saradnici su predložili nešto drugačiji model kojim se može odrediti vrednost pokretljivosti nosilaca u silicijumu u temperaturnom opsegu od 4.2 do 600K:

$$\mu_n^L = \frac{1}{\frac{1}{4195 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{-1.5} + \frac{1}{2153 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{-3.13}}}, \quad (2.5)$$

$$\mu_p^L = \frac{1}{\frac{1}{2502 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{-1.5} + \frac{1}{591 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{-3.25}}}. \quad (2.6)$$

Ovaj model kombinuje rasejavanje nosilaca na akustičnim i optičkim fononima kristalne rešetke koristeći jednostavno Mathiessen-ovo pravilo. Sa stanovišta simulacije i ugradnje ovog modela u softverski paket, ne dobija se neko bitnije poboljšanje dobijenih rezultata simulacije u pogledu tačnosti.

2.1.2 Rasejavanje na jonizovanim primesama

Sledeći mehanizam je rasejavanje nosilaca na jonizovanim primesama. Prvi primenljivi model izveden na osnovu teorijskih istaživanja dali su Conwell i Weiskopf:

$$\mu_{n,p}^I = \frac{64 \cdot \varepsilon^2 \cdot (2kT)^{3/2}}{q^3 \cdot CI} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{M_{n,p}^*}} \cdot g_{CW} \left(\frac{12\pi \cdot \varepsilon \cdot kT}{q^2 \cdot CI^{1/3}} \right), \quad (2.7)$$

gde je:

$$g_{CW}(x) = \frac{1}{\ln(1+x^2)}. \quad (2.8)$$

CI predstavlja sumu jonizovanih primesa pomnoženu njihovim naelektrisanjem:

$$CI = \sum_{i=1}^n |Z_i| \cdot C_i. \quad (2.9)$$

Za najveći broj primesa koje se koriste u poluprovodničkim tehnologijama $Z = 1$, osim u nekim slučajevima, kao što je na primer proizvodnja solarnih ćelija gde se koristi cink koji ima dva akceptorska nivoa, pa kada je dvostruko jonizovan imamo da je $Z = 2$. Izraz (2.7) daje recipročnu zavisnost pokretljivosti od ukupne koncentracije jonizovanih primesa za umereno visoke koncentracije, dok je u slučaju jako visokih koncentracija ova zavisnost nešto ublažena ($\sim CI^{-1/3}$). Funkcijom $g_{CW}(x)$ modelira se uticaj susednih jonizovanih primesa koje zbog Coulomb-ovog potencijala "zaklanjaju" jedni druge, tako da postaju neaktivni kao centri rasejavanja. Brooks je donekle popravio ovaj model uzimajući u obzir rasejavanje na slobodnim elektronima i šupljinama:

$$\mu_{n,p}^I = \frac{64 \cdot \varepsilon^2 \cdot (2kT)^{3/2}}{q^3 \cdot CI} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{m_{n,p}^*}} \cdot g_B \left(\frac{24 \cdot m_{n,p}^* \cdot \varepsilon \cdot (kT)^2}{q^2 \cdot \hbar^2 \cdot (n+p)} \right), \quad (2.10)$$

pri čemu je:

$$g_B(x) = \frac{1}{\ln(1+x) - \frac{x}{1+x}}. \quad (2.11)$$

(2.10) daje dobre rezultate za umereno jako dopirane poluprovodnike ($CI < 10^{19} \text{cm}^{-3}$), dok za degenerisane poluprovodnike još uvek ne postoji dovoljno dobar model pokretljivosti. (2.7) i (2.10) daju približno slične rezultate sve dok je koncentracija slobodnih nosilaca približno jednaka koncentraciji jonizovanih primesa. Kada je koncentracija slobodnih nosilaca značajno manja, što je slučaj kod kompenzovanih materijala i u oblasti osiromašenja, izraz (2.10) daje niže vrednosti pokretljivosti zbog činjenice da je u tom slučaju rasejavanje na jonizovanim primesama mnogo efikasnije.

Da bi dobili efektivnu pokretljivost, neophodno je na neki način povezati dve komponente pokretljivosti koje su posledica rasejavanja na termičkim vibracijama kristalne rešetke i rasejavanja na jonizovanim primesama. S obzirom da ova dva mehanizma rasejavanja nisu potpuno nezavisna

ne može se primeniti Mathiessen-ovo pravilo, već se koristi izraz koji su u svom radu predložili Debye i Conwell:

$$\mu_{n,p}^{LI} = \mu_{n,p}^L \cdot (1 + x^2 \cdot (Ci(x) \cdot \cos(x) + si(x) \cdot \sin(x))), \quad (2.12)$$

gde je:

$$x = \sqrt{\frac{6 \cdot \mu_{n,p}^L}{\mu_{n,p}^I}}, \quad (2.13)$$

$$Ci(x) = - \int_x^{\infty} \frac{\cos(t)}{t} \cdot dt, \quad (2.14)$$

$$si(x) = - \int_x^{\infty} \frac{\sin(t)}{t} \cdot dt. \quad (2.15)$$

Ovaj model je veoma komplikovan za programiranje i ugradnju u simulator pa se zbog toga koristi daleko jednostavnija aproksimacija:

$$\mu_{n,p}^{LI} = \mu_{n,p}^L \cdot \left(\frac{1.025}{1 + \left(2.126 \cdot \frac{\mu_{n,p}^L}{\mu_{n,p}^I} \right)^{0.715}} - 0.025 \right). \quad (2.16)$$

Ovom aproksimacijom se određuje pokretljivost sa maksimalnom greškom od 2% ukoliko važi:

$$\mu_{n,p}^L < 13.5 \cdot \mu_{n,p}^I, \quad (2.17)$$

što i nije neko ozbiljnije ograničenje.

Drugi pristup kombinovanog modeliranja pokretljivosti nosilaca usled ova dva mehanizma rasejavanja su predložili Caughey i Thomas, pri čemu su izraz:

$$\mu_{n,p}^{LI} = \mu_{n,p}^{min} + \frac{\mu_{n,p}^L - \mu_{n,p}^{min}}{1 + \left(\frac{CI}{C_{n,p}^{ref}} \right)^{\alpha_{n,p}}} \quad (2.18)$$

fitovali prema eksperimentalnim rezultatima. Numeričke vrednosti parametara pokretljivosti za elektrone i šupljine za Si na 300K, variraju u zavisnosti od autora publikovanih radova, a opseg njihovih promena tj. njihove minimalne i maksimalne vrednosti su date u tabelama 2.2 i 2.3.

Model koji su predložili Scharfetter i Gummel za rasejavanje na jonizovanim primesama u silicijumu na T=300K, koji ima samo dva parametra i koji se veoma mnogo primenjuje, je:

$$\mu_{n,p}^{LI} = \frac{\mu_{n,p}^L}{\sqrt{1 + \frac{CI}{C_{n,p}^{ref} + \frac{CI}{S_{n,p}}}}}, \quad (2.19)$$

Table 2.2: Opseg promene vrednosti parametara modela pokretljivosti elektrona usled rasejavanja na jonizovanim primesama.

min	min	min	max	max	max
μ_n^{min}	α_n	C_n^{ref}	μ_n^{min}	α_n	C_n^{ref}
$\left[\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}\right]$		$[\text{cm}^{-3}]$	$\left[\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}\right]$		$[\text{cm}^{-3}]$
52.2	0.711	$8.5 \cdot 10^{16}$	92	0.91	$1.3 \cdot 10^{17}$

Table 2.3: Opseg promene vrednosti parametara modela pokretljivosti šupljina usled rasejavanja na jonizovanim primesama.

min	min	min	max	max	max
μ_p^{min}	α_p	C_p^{ref}	μ_p^{min}	α_p	C_p^{ref}
$\left[\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}\right]$		$[\text{cm}^{-3}]$	$\left[\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}\right]$		$[\text{cm}^{-3}]$
47.7	0.61	$6.3 \cdot 10^{16}$	65	0.76	$2.4 \cdot 10^{17}$

a vrednosti parametara su: $C_n^{ref} = 3 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $S_n = 350$, $C_p^{ref} = 4 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $S_p = 81$.

Konačno, daćemo i model koji je predložio Sah sa saradnicima, koji kombinuje rasejavanje na jonizovanim primesama i rasejavanje usled termičkih vibracija kristalne rešetke:

$$\mu_n^I = 90 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \left(1 + \frac{2 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}}{CI} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right) \right), \quad (2.20)$$

$$\mu_p^I = 45 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \left(1 + \frac{1.2 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}}{CI} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right) \right), \quad (2.21)$$

$$\mu_{n,p}^{LI} = \frac{1}{\frac{1}{\mu_{n,p}^L} + \frac{1}{\mu_{n,p}^I}}, \quad (2.22)$$

koji i pored ograničenja o kojima je već bilo reči koristi jednostavno Mathiessen-ovo pravilo. Za pokretljivosti $\mu_{n,p}^L$ se koriste izrazi (2.5) i (2.6). Ovaj jednostavan model daje veoma dobre rezultate u opsegu koncentracija $(10^{11}, 10^{20}) \text{cm}^{-3}$.

2.1.3 Rasejavanje nosilac-nosilac

Sledeći mehanizam koji ćemo analizirati je rasejavanje nosilac-nosilac, koji je posebno važan kod snažnih komponenata, s obzirom da kod njih, kada su u stanju provodjenja, koncentracija slobodnih nosilaca može biti daleko iznad koncentracije primesa. Zbog toga se umesto koncentracije jonizovanih primesa CI mora koristiti tzv. efektivna koncentracija CI_{eff} i pri tome se kao centri rasejavanja ne uzimaju samo jonizovane primese već i koncentracija slobodnih elektrona i šupljina:

$$CI_{eff} = 0.34 \cdot CI + 0.66 \cdot (n + p). \quad (2.23)$$

Adler je predložio model dodavanjem jednog člana modelu koji su dali Caughey i Thomas, tako da dobijamo izraz:

$$\mu_{n,p}^{LIC} = \mu_{n,p}^{min} + \frac{\mu_{n,p}^L - \mu_{n,p}^{min}}{1 + \left(\frac{CI}{C_{n,p}^{ref}} \right)^{\alpha_{n,p}} + \left(\frac{\sqrt{n \cdot p}}{14 \cdot C_{n,p}^{ref}} \right)^{\alpha_{n,p}}}. \quad (2.24)$$

Sledeći pristup, koji je takodje predložio Adler, je daleko precizniji. Ovde je rasejavanje nosilaca modelirano kao:

$$\mu^C = \frac{1.428 \cdot 10^{20} \frac{1}{\text{cmVs}}}{\sqrt{n \cdot p} \cdot \ln(1 + 4.54 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2} \cdot (n \cdot p)^{-1/3})}, \quad (2.25)$$

a onda je ono korišćenjem Mathiessen-ovog pravila kombinovano sa originalnim Caughey-Thomas-ovim modelom:

$$\mu_{n,p}^{LIC} = \frac{1}{\frac{1}{\mu_{n,p}^{LI}} + \frac{1}{\mu_{n,p}^C}}. \quad (2.26)$$

Praktično identičan izraz Adler-ovom (2.25) predložen je nešto kasnije, uz uzimanje u obzir i temperaturne zavisnosti koeficijenta:

$$\mu^C = \frac{1.04 \cdot 10^{21} \frac{1}{\text{cmVs}} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{3/2}}{\sqrt{n \cdot p} \cdot \ln\left(1 + 7.45 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^2 \cdot (n \cdot p)^{-1/3}\right)}. \quad (2.27)$$

2.1.4 Rasejavanje na neutralnim primesama

Rasejavanje nosilaca na neutralnim primesama nije toliko izraženo na sobnoj temperaturi, tako da se veoma često zanemaruje. Međutim, ovaj mehanizam postaje veoma bitan kada se radi o simulacijama na veoma niskim temperaurama ($T < 77\text{K}$). Jedan od prvih modela pokretljivosti koji je davao ovu zavisnost je:

$$\mu_{n,p}^N = \frac{q \cdot m_{n,p}^*}{20 \cdot a_B \cdot \hbar \cdot m_0 \cdot \varepsilon \cdot CN}. \quad (2.28)$$

a_B je Bohr-ov radijus ($5.2917706 \cdot 10^{-11}\text{m}$), dok je CN koncentracija neutralnih primesa. Izraz kojim se nešto preciznije modelira ovaj mehanizam rasejavanja:

$$\mu_{n,p}^N = \frac{0.041 \cdot q \cdot m_{n,p}^*}{a_B \cdot \hbar \cdot m_0 \cdot \varepsilon \cdot CN} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot \sqrt{\frac{k \cdot T}{EN_{n,p}}} + \frac{1}{3} \cdot \sqrt{\frac{EN_{n,p}}{k \cdot T}}\right), \quad (2.29)$$

gde je:

$$EN_{n,p} = 0.71(\text{eV}) \cdot \frac{m_{n,p}^*}{m_0} \cdot \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)^2, \quad (2.30)$$

publikovan je tek nedavno, i njime se veoma dobro modelira temperaturna zavisnost na veoma niskim temperaturama ispod 50K . Kao i u prethodnim slučajevima, ova komponenta pokretljivosti sa ostalim mehanizmima rasejavanja je uključena pomoću Mathiessen-ovog pravila:

$$\mu_{n,p}^{LICN} = \frac{1}{\frac{1}{\mu_{n,p}^{LIC}} + \frac{1}{\mu_{n,p}^N}}. \quad (2.31)$$

2.1.5 Saturacija driftovske brzine

Efekat koji veoma značajno utiče na pokretljivost nosilaca je saturacija brzine nosilaca u uslovima jakih električnih polja. Kao što je poznato, driftovska brzina se određuje kao proizvod pokretljivosti i komponente električnog polja u pravcu toka struje:

$$|\vec{v}_n| = -\mu_n^* \cdot \frac{\vec{E} \cdot \vec{J}_n}{|\vec{J}_n|}, \quad (2.32)$$

$$|\vec{v}_p| = \mu_p^* \cdot \frac{\vec{E} \cdot \vec{J}_p}{|\vec{J}_p|}. \quad (2.33)$$

Medjutim, navedeni izrazi važe samo u slučaju kada je difuziona komponenta struje zanemarljivo mala. Zato je bolje umesto komponente električnog polja u pravcu toka struje koristiti gradijent odgovarajućeg kvazi-Fermijevog potencijala:

$$|\vec{v}_n| = \mu_n^* \cdot |\text{grad}\phi_n|, \quad (2.34)$$

$$|\vec{v}_p| = \mu_p^* \cdot |\text{grad}\phi_p|. \quad (2.35)$$

Verovatno prvi izraz koji razmatra uticaj zagrevanje nosilaca na njihovu driftovsku brzinu, pa samim tim i pokretljivost, dao je još davne 1951. godine Schockley:

$$\mu_n^{LICNE} = \frac{\mu_n^{LICN}}{\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{1 + \frac{3\pi}{8} \left(\frac{\mu_n^{LICN} \cdot E_n}{C_S} \right)^2}}}, \quad (2.36)$$

gde je C_S brzina longitudinalnih akustičnih fonona ($\sim 1.66 \cdot 10^6 \text{cms}^{-1}$).

Drugi izraz koji se veoma mnogo koristi u simulaciji je:

$$\mu_n^{LICNE} = \frac{\mu_n^{LICN}}{\left(1 + \left(\frac{E_{n,p}}{E_{n,p}^{crit}} \right)^{\beta_{n,p}} \right)^{1/\beta_{n,p}}}. \quad (2.37)$$

Vrednosti kritičnog polja $E_{n,p}^{crit}$ i parametra $\beta_{n,p}$ za silicijum na $T=300\text{K}$ se mogu naći u velikom broju publikovanih radova koji se bave ovim modelom, dok se njihova temperaturna zavisnost modelira pomoću izraza:

$$E_n^{crit} = 6.98 \cdot 10^3 \frac{\text{V}}{\text{cm}} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^{1.55}, \quad \beta_n = 1.11 \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^{0.66}, \quad (2.38)$$

$$E_p^{crit} = 1.80 \cdot 10^4 \frac{\text{V}}{\text{cm}} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^{1.68}, \quad \beta_p = 1.21 \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^{0.17}. \quad (2.39)$$

Jedan drugačiji pristup modeliranju ovog problema predložili su Scharfetter i Gummel:

$$\mu^{LIE} = \frac{\mu^{LI}}{\sqrt{1 + (\mu^{LI})^2 \cdot \left(\frac{(E/(\mu^L \cdot A))^2}{\mu^L \cdot E/(\mu^L \cdot A) + F} + \left(\frac{E}{\mu^L \cdot B} \right)^2 \right)}}. \quad (2.40)$$

Za μ^{LI} se koristi izraz 2.19, dok su vrednosti parametara: $A_n = 3.5 \cdot 10^3 \text{V/cm}$, $F_n = 8.8$, $B_n = 7.4 \cdot 10^3 \text{V/cm}$, $A_p = 6.1 \cdot 10^3 \text{V/cm}$, $F_p = 1.6$ i $B_p = 2.5 \cdot 10^4 \text{V/cm}$. Ovaj model se često piše u malo drugačijem obliku:

$$\mu^{LIE} = \frac{\mu^{LI}}{\sqrt{1 + \frac{CI}{C^{ref} + CI/S} + \frac{(E/A)^2}{E/A + F} + \left(\frac{E}{B} \right)^2}}. \quad (2.41)$$

Ovaj izraz je veoma pogodan za implementaciju u programe za simulaciju zbog toga što se član $\mu^L \cdot B$ može predstaviti kao saturaciona brzina koja je nezavisna od rasejavanja primesa, tako da se izvođenjem za saturacione brzine dobijaju vrednosti:

$$v_n^{sat} = 1.04 \cdot 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{s}}, \quad (2.42)$$

$$v_p^{sat} = 1.20 \cdot 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{s}}. \quad (2.43)$$

Vrednosti ovih brzina su veoma temperaturno zavisne i mogu se modelirati izrazima:

$$v_n^{sat} = 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^{-0.87}, \quad (2.44)$$

$$v_p^{sat} = 8.37 \cdot 10^6 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \cdot \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^{-0.52}. \quad (2.45)$$

Svakako jedan od modela koji se prvi pojavio i koji se veoma često koristi je onaj koji je predložio Yamaguchi. U ovom modelu se koristi formula koju su dali Scharfetter i Gummel za rasejavanje nosilaca na jonizovanim primesama i redukciju pokretljivosti usled saturacije brzine, ali je dodat i faktor redukcije pokretljivosti zbog prisustva komponente električnog polja normalne na tok struje:

$$\mu_{n,p}^{LIES} = \mu_{n,p}^{LIE} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{|\vec{E} \times \vec{J}_{n,p}|}{E_{n,p}^{crit} \cdot |\vec{J}_{n,p}|}}}, \quad (2.46)$$

a vrednosti kritičnog polja za elektrone i šupljine su:

$$E_n^{crit} = 6.49 \cdot 10^4 \frac{\text{V}}{\text{cm}}, \quad E_p^{crit} = 1.87 \cdot 10^4 \frac{\text{V}}{\text{cm}} \quad (2.47)$$

Većina ovde predstavljenih modela pokretljivosti je ugrađena u TCAD softverske pakete Silvaco i ISE, a njihov uticaj na rezultate simulacije, kao i pregled nekih novijih modela pokretljivosti će biti razmatrani u trećem delu ove skripte gde su predstavljeni primeri simulacije.

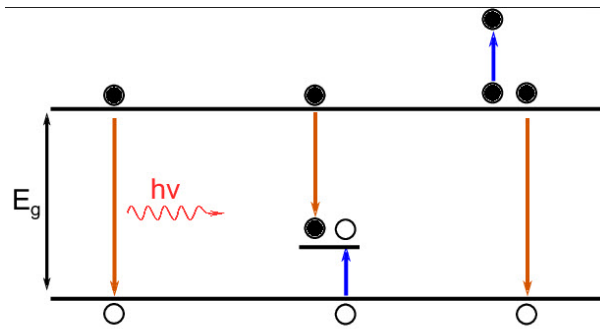


Figure 2.1: Mehanizmi rekombinacije nosilaca u poluprovodniku.

2.2 Modeliranje generacije-rekombinacije nosilaca

Rekombinacija elektrona i šupljina je proces u kojem dolazi do anihilacije oba nosioca, tj. elektron zauzima u jednom, ili iz više koraka upražnjeno mesto. Usled razlike u energiji koju elektron ima pre i posle procesa, ovaj proces je praćen emisijom energije i u zavisnosti od toga kakva je ta emisija procesi rekombinacije se mogu podeliti na radijativne, kod kojih dolazi do emisije fotona, i neradijativne kod kojih se oslobodjena energija u vidu kinetičke energije predaje drugom elektronu. Druga klasifikacija rekombinacionih procesa je napravljena prema načinu na koji se proces odvija, a vezano za energetske nivoe u zabranjenoj zoni poluprovodnika i čestice koje učestvuju u procesu. Različiti tipovi procesa rekombinacije nosilaca su prikazani na slici 2.1. Direktna ("band-to-band") rekombinacija se dešava kada se elektron prebacuje iz provodne zone u valentnu zonu, i pri tome se rekombinuje sa šupljinom. Ovaj direktan prelaz je tipičan primer radijativne rekombinacije. Kod indirektna ("trap") rekombinacije se dešava tzv. indirektna prelaz, pri čemu elektron iz provodne zone najpre biva zahvaćen energetske nivoom koji se nalazi u zabranjenoj zoni poluprovodnika, koji je posledica prisustva primesnih atoma ili defekata u poluprovodniku, a zatim se prebacuje u valentnu zonu i rekombinuje sa šupljinom. Ovaj proces rekombinacije je poznat kao Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinacija. Konačno, Auger-ova rekombinacija u stvari predstavlja direktni prelaz, ali u ovom slučaju se oslobodjena energija predaje drugom elektronu ili šupljini. Prisustvo treće čestice i njen uticaj na brzinu rekombinacije je razlog što ovaj tip rekombinacije razmatramo različito od direktne rekombinacije. Potrebno je napomenuti da svaki od tri opisana mehanizma rekombinacije ima i odgovarajući inverzni proces generacije nosilaca naelektrisanja.

Pored toga, postoje i mehanizmi generacije nosilaca naelektrisanja kojima se ne može pridružiti odgovarajući mehanizam rekombinacije nosilaca. To su, na primer, generacija nosilaca usled apsorpcije svetlosti, ili generacija nosilaca usled jonizacije koja je izazvana visokoenergetskim naelektrisanim česticama. Ovi procesi su u literaturi poznati kao jonizacioni procesi i oni su šematski prikazani na slici 2.2. Generacija nosilaca usled apsorpcije svetlosti se dešava ukoliko je energija fotona svetlosti E_{ph} veća od širine zabranjene zone poluprovodnika. U ovom slučaju se generiše par elektron-šupljina, a višak energije $E_{ph} - E_g$ se predaje drugom elektronu ili šupljini u vidu kinetičke energije. Generacija nosilaca usled jonizacije mlazom visokoenergetskih čestica je sličan proces, pri čemu je razlika jedino u tome što energija ovih čestica može biti višestruko veća od energije koja odgovara širini zabranjene zone poluprovodnika, pa se tom prilikom stvara veći broj parova elektron-šupljina.

Na kraju, postoji i generacioni proces usled udarne jonizacije, i ovaj mehanizam generacije je sinonim Auger-ovoj rekombinaciji, s obzirom da udarnu jonizaciju izazivaju elektroni ili šupljine čija je energija mnogo veća ili manja od energije koja odgovara širini zabranjene zone. Šematski prikaz ovog mehanizma generacije nosilaca je prikazan na slici 2.3. Višak energije koji se javlja pri generaciji para elektron-šupljina, dovoljan je da u inverzno polarisanoj diodi u prisustvu jakih

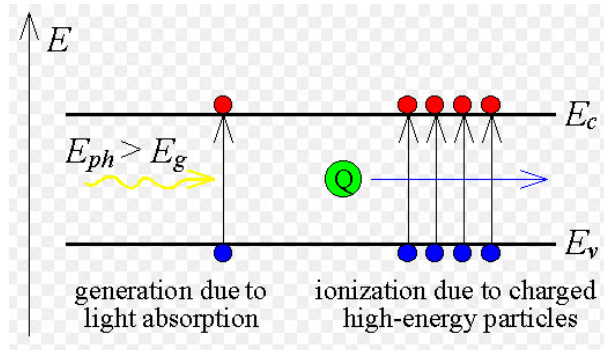


Figure 2.2: Generacija nosilaca usled apsorpcije svetlosti i jonizacije naelektrisanim česticama velike energije.

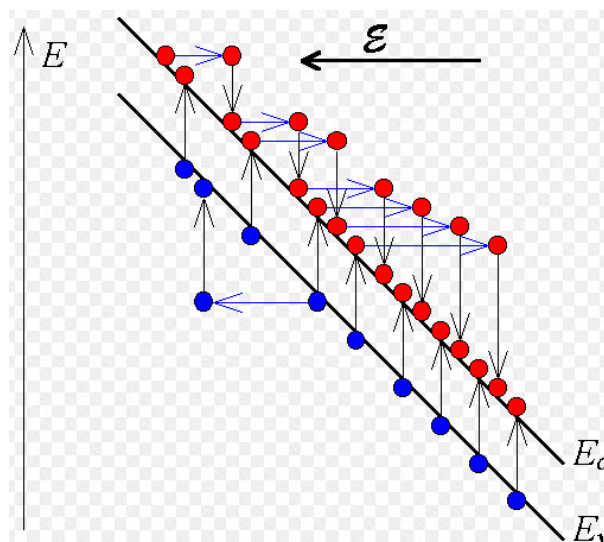


Figure 2.3: Udarne jonizacije i lavinska multiplikacija elektrona i šupljina u prisustvu jakog električnog polja.

električnih polja izazove lavinsku multiplikaciju. Naime, nosioci dobijaju energiju i bivaju ubrzani usled dejstva električnog polja. Dobijena kinetička energija elektrona iz valentne zone je dovoljna da se generiše par elektron-šupljina, a zatim dva nova generisana elektrona generišu nove, što dovodi do lavinskog multiplikacionog efekta.

2.2.1 Jednostavni model generacije-rekombinacije nosilaca

Ovaj najjednostavniji model generacije-rekombinacije nosilaca se zasniva na pretpostavci da je generaciono-rekombinaciona brzina proporcionalna ekscesu gustine nosilaca. Ovim modelom se potvrđuje činjenica da ne postoji rekombinacija nosilaca ako su gustine nosilaca jednake svojim vrednostima u uslovima termičke ravnoteže. Dobijeni izraz za rekombinaciju elektrona u p-tipu poluprovodnika je:

$$U_n = R_n - G_n = \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n}, \quad (2.48)$$

a sličan izraz važi i za rekombinaciju šupljina u n-tipu poluprovodnika:

$$U_p = R_p - G_p = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}, \quad (2.49)$$

gde je parametar τ srednje vreme posle kojeg se višak koncentracije (ekscses) manjinskih nosila rekombinuje. Navedeni izrazi važe samo za kvazi-neutralne poluprovodnike. Brzine rekombinacije većinskih nosilaca su jednake brzinama rekombinacije manjinskih nosilaca pošto mehanizmi rekombinacije u stacionarnom stanju podrazumevaju jednak broj elektrona i šupljina. Zbog toga je brzina rekombinacije većinskih nosilaca određena viškom manjinskih nosilaca, pa brzinu rekombinacije određuju manjinski nosioci.

2.2.2 Direktna rekombinacija nosilaca

Direktna rekombinacija nosilaca zavisi pre svega od gustine raspoloživih elektrona i šupljina, s obzirom da su i elektroni i šupljine neophodni za proces rekombinacije. Zbog toga se može pretpostaviti da je brzina rekombinacije proporcionalna proizvodu koncentracija elektrona i šupljina $n \cdot p$. U uslovima termičke ravnoteže, brzina rekombinacije mora biti jednaka brzini generacije, s obzirom da nema dodatne rekombinacije ili generacije. Kako je u uslovima termičke ravnoteže $n \cdot p = n_i^2$, brzina rekombinacije je:

$$U_{bb} = b \cdot (n \cdot p - n_i^2), \quad (2.50)$$

gde je b bimolekularna rekombinaciona konstanta.

2.2.3 Shockley-Read-Hall rekombinacija nosilaca

Brzina rekombinacije u slučaju indirektno rekombinacije nosilaca je data izrazom:

$$U_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{p + n + 2n_i^2 \cosh\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right)} \cdot N_t \cdot v_{th} \cdot \sigma, \quad (2.51)$$

ali samo izvodjenje navedenog izraza nije predmet ovog kursa. Gore navedeni izraz se može uprostiti, tako da u slučaju $p \gg n$ dobijamo:

$$U_n = R_n - G_n = \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n}, \quad (2.52)$$

dok je u slučaju da je $n \gg p$:

$$U_p = R_p - G_p = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}, \quad (2.53)$$

gde je:

$$\tau_n = \tau_p = \frac{1}{N_t \cdot v_{th} \cdot \sigma}. \quad (2.54)$$

2.2.4 Površinska rekombinacija

Rekombinacija na površini poluprovodnika, kao i na međupovršinama koje su prisutne u strukturi komponente može imati veoma veliki uticaj na električne karakteristike. Razlog leži u tome što se na površinama i međupovršinama nalazi velika koncentracija rekombinacionih centara usled narušavanja kristalne strukture materijala. Pored toga, veliki broj primesa i ostalih nečistoća se nalazi na površini poluprovodnika, s obzirom da je ona neposredno izložena različitim uticajima u toku procesa proizvodnje. U ovom slučaju brzina rekombinacije se definiše kao:

$$U_{s,SRH} = \frac{pn - n_i^2}{p + n + 2n_i^2 \cosh\left(\frac{E_i - E_{s,t}}{kT}\right)} \cdot N_{s,t} \cdot v_{th} \cdot \sigma_s. \quad (2.55)$$

Ovaj izraz je skoro identičan izrazu za SHR rekombinaciju. Jedina je razlika to što se ovde uzima u obzir gustina trapova $N_{s,t}$ na površini ili međupovršini. Navedeni izraz se može uprostiti za slučaj manjinskih nosilaca u kvazi-neutralnim oblastima, tako da na primer za elektrone u kvazi-neutralnoj oblasti p-tipa, gde je $p \gg n$ i $p \gg n_i$ tako da je $E_i = E_{st}$ pa se dobija izraz:

$$U_{s,n} = R_{s,n} - G_{s,n} = v_s(n_p - n_{p0}), \quad (2.56)$$

pri čemu je rekombinaciona brzina v_s :

$$v_s = N_{s,t} \cdot v_{th} \cdot \sigma_s \quad (2.57)$$

2.2.5 Auger-ova rekombinacija

Kod Auger-ove rekombinacije se, kao što je već rečeno, moraju posmatrati tri čestice koje učestvuju u procesu rekombinacije: elektron i šupljina koji se rekombinuju u direktnom, zona-zona prelazu, i elektron ili šupljina koji primaju višak energije. Zbog toga je izraz za brzinu rekombinacije sličan onom za brzinu kod direktne rekombinacije, s tim što je ovde dodata i gustina elektrona i šupljina koji primaju energiju usled anihilacije para elektron-šupljina:

$$U_{Auger} = \Gamma_n n(np - n_i^2) + \Gamma_p p(np - n_i^2). \quad (2.58)$$

Navedeni izraz ima dva člana, s obzirom da postoje dva moguća mehanizma rekombinacije.

2.3 Modeliranje termičke provodnosti

Najveći broj postojećih modela termičke provodnosti u silicijumu i germanijumu se zasniva na radovima Glassbrenner-a i Slack-a. Formula za termičku provodnost u poluprovodnicima koju su oni predložili je:

$$k(T) = \frac{1}{a + b \cdot T + c \cdot T^2}, \quad (2.59)$$

Table 2.4: Vrednosti parametara za modeliranje termičke provodnosti.

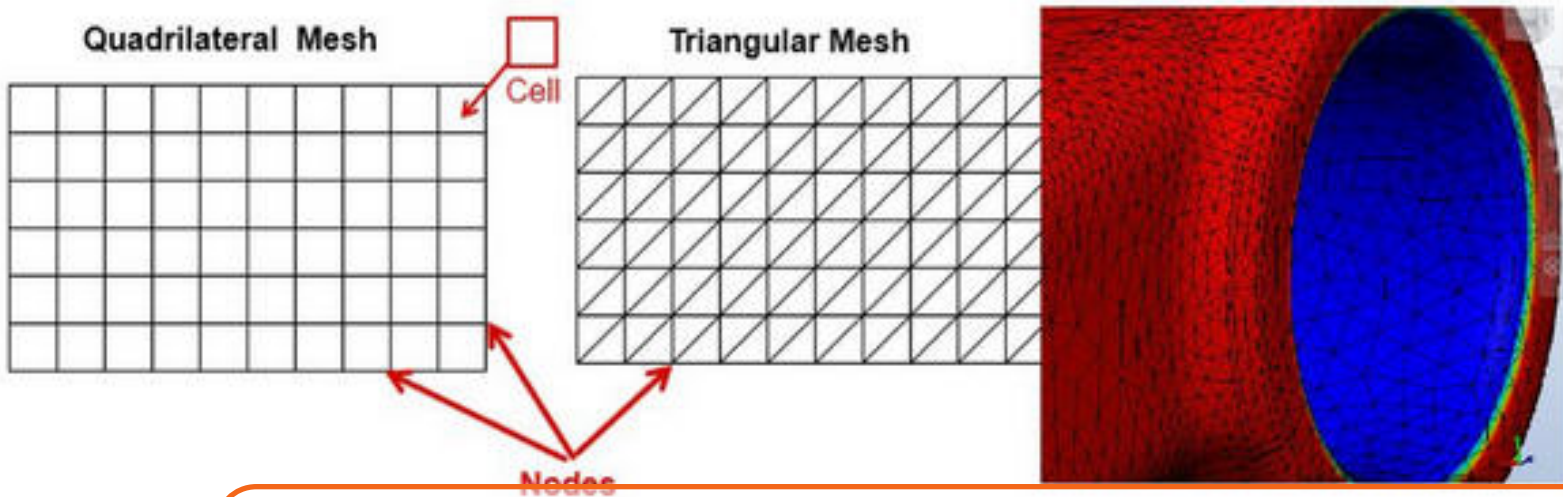
Parametar	Si	Ge
a [$V^{-1}, A^{-1}, cm K$]	0.03	0.17
b [V^{-1}, A^{-1}, cm]	$1.56 \cdot 10^{-3}$	$3.95 \cdot 10^{-3}$
c [$V^{-1}, A^{-1}, cm K^{-1}$]	$1.65 \cdot 10^{-6}$	$3.38 \cdot 10^{-6}$

gde su a , b i c konstante čije su vrednosti date u tabeli 2.4. Upoređivanjem merenih rezultata termičke provodnosti i dobijenih rezultata simulacije dobija se veoma dobro slaganje, odstupanja su manja od 5% u temperaturnom opsegu 250-1000°C za silicijum i 50-700°C za germanijum.

Veoma dobri rezultati se dobijaju pri simulaciji električnih karakteristika komponenata i primenom jednostavnog izraza:

$$k(T) = 1.5486 \frac{VA}{cm K} \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{-4/3} . \quad (2.60)$$

Poseban problem predstavlja modeliranje termičke provodnosti kod jako dopiranih polu-provodnika ($>10^{19} cm^{-3}$), zbog povećanog broja nosilaca. Eksperimentalna merenja poka-zuju da je u ovom slučaju termička provodnost manja za više od 30%, ali se modelima koji uključuju i ovaj efekat ovde nećemo baviti.



3. Diskretizacija sistema BSE

Sistem parcijalnih diferencijalnih jednačina koji predstavlja sistem osnovnih poluprovo-dničkih jednačina, zajedno sa definisanim domenom simulacije i odgovarajućim graničnim uslovima, ne može se rešiti eksplicitno, već se mora rešavati nekom od pogodnih numeričkih tehnika. Rešavanje jednog ovakvog problema:

$$\lambda^2 \cdot \text{div grad}\psi - n + p + C = 0, \quad (3.1)$$

$$\text{div}(D_n \cdot \text{grad}n - \mu_n \cdot n \cdot \text{grad}\psi) - R(\psi, n, p) = 0, \quad (3.2)$$

$$\text{div}(D_p \cdot \text{grad}p - \mu_p \cdot p \cdot \text{grad}\psi) - R(\psi, n, p) = 0, \quad (3.3)$$

predstavlja veoma kompleksan numerički problem koji podrazumeva najpre njegovu diskretizaciju, imajući u vidu domen simulacije i granične uslove a zatim i ostale probleme vezane za izbor najpogodnije tehnike rešavanja, konvergenciju, itd. Prvi problem sa kojim se ovde susrećemo je domen simulacije, koji je najpre potrebno podeliti u konačan broj oblasti (silicijum, oksid, polisilicijum, itd.), u zavisnosti od strukture čije električne karakteristike simuliramo. Drugi problem je diskretizacija diferencijalnih jednačina, tj. njihova aproksimacija odgovarajućim algebarskim jednačinama. U zavisnosti od izabrane metode diskretizacije u najvećoj meri zavisi tačnost rešenja, kao i CPU vreme potrebno za rešavanje problema. To se najbolje može videti sa slike 3.2 gde su prikazane četiri metode za diskretizaciju jednog jednostavnog profila primesa. Jasno je da će rešavanje na uniformnoj mreži koja ima više od 9000 diskretizacionih čvorova zahtevati najviše CPU vremena za simulaciju. Primena metoda konačnih razlika, konačnih kutija ili konačnih elemenata značajno smanjuje broj tačaka diskretizacije u domenu simulacije i skraćuje potrebno vreme simulacije. Pored toga, primena neuniformnih i adaptivnih diskretizacionih mreža ima svojih prednosti u pogledu brzine konvergencije pri rešavanju sistema osnovnih poluprovodničkih jednačina. Ovde ćemo detaljno objasniti metodu konačnih razlika, dok su preostale dve metode predmet proučavanja u okviru drugih kurseva.

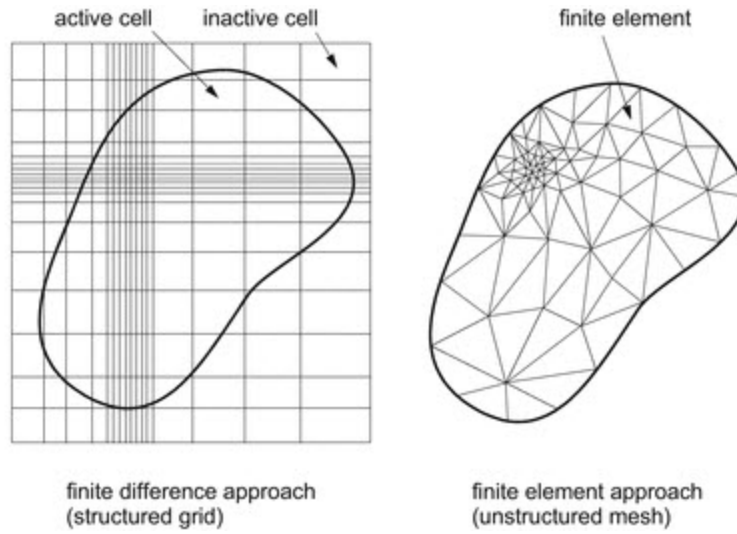


Figure 3.1: Poređenje metoda diskretizacije.

3.1 Domen simulacije i granični uslovi

Sistem osnovnih poluprovodničkih jednačina je potrebno rešiti u domenu $D \in R^n$ ($n = 1, 2, 3$) koji u stvari predstavlja geometriju komponente. U suštini sve poluprovodničke strukture su trodimenzionalne, međutim, u velikom broju slučajeva dovoljno je problem rešavati u 2D, pa nekad čak i u 1D, što zavisi od dimenzija komponente i samog problema. Na ovaj način se procedura diskretizacije sistema jednačina i njihovog rešavanja mogu značajno pojednostaviti.

Granica domena simulacije ∂D , koja predstavlja ravan u slučaju 3D simulacije, ili pravu definisanu jednostavno sa dve tačke u slučaju 2D simulacije, se može podeliti na dva dela:

$$\partial D = \partial D_P \cup \partial D_A, \quad (3.4)$$

gde je ∂D_P deo koji odgovara tzv. fizičkim granicama domena, npr. medjupovršina Si/SiO₂, dok ∂D_A predstavlja tzv. veštačke ("artificial") granice domena simulacije koje se uvode da bi se komponenta čije karakteristike simuliramo odvojila od ostalih komponenta integrisanog kola. Na slici 3.3 prikazan je domen simulacije planarnog MOS tranzistora. Ukupni domen simulacije je poligon $A - B - C - D - E - F - G - H - A$. Sistem osnovnih poluprovodničkih jednačina se rešava u subdomenu $A - B - E - F - G - H - A$, dok se u subdomenu $B - C - D - E - B$, koji predstavlja izolator, rešava Laplace-ova jednačina:

$$\text{div}(\text{grad}\psi) = 0, \quad (3.5)$$

s obzirom da se u ovoj oblasti zanemaruje prisustvo pokretnih nosilaca, tj. $n = p = C = 0$.

Granice $A - B$, $E - F$, $C - D$ i $B - E$ predstavljaju fizičke granice domena ∂D_P , tj. tri idealna kontakta i medjupovršinu poluprovodnika i izolatora. Granice $A - H$, $B - C$, $D - E$, $F - G$ i $G - H$ su veštačke granice ∂D_A . Ove granice ne postoje kod realne komponente i uvode se samo za potrebe simulacije. Međutim, ove granice se ne uvode *a priori*, već na osnovu prethodnih znanja o radu komponente. Pored ostalog, ove granice se uvode i da bi se pojednostavio postupak rešavanja sistema osnovnih poluprovodničkih jednačina. Granica $G - H$ predstavlja tzv. "daleku" granicu, koja se uvodi kako bi se domen simulacije ograničio samo na oblast komponente koji je od interesa za rad komponente. Ako znamo da je debljina pločice oko $500\mu\text{m}$, a da se skoro svi značajniji efekti koji utiču na rad MOS tranzistora dešavaju u uskoj oblasti uz površinu poluprovodnika, jasno je da se uvođenjem veštačke granice $G - H$ drastično smanjuje domen simulacije bez značajnijeg uticaja na tačnost simulacije. ∂D_P se grubo može podeliti na tri dela, i to:

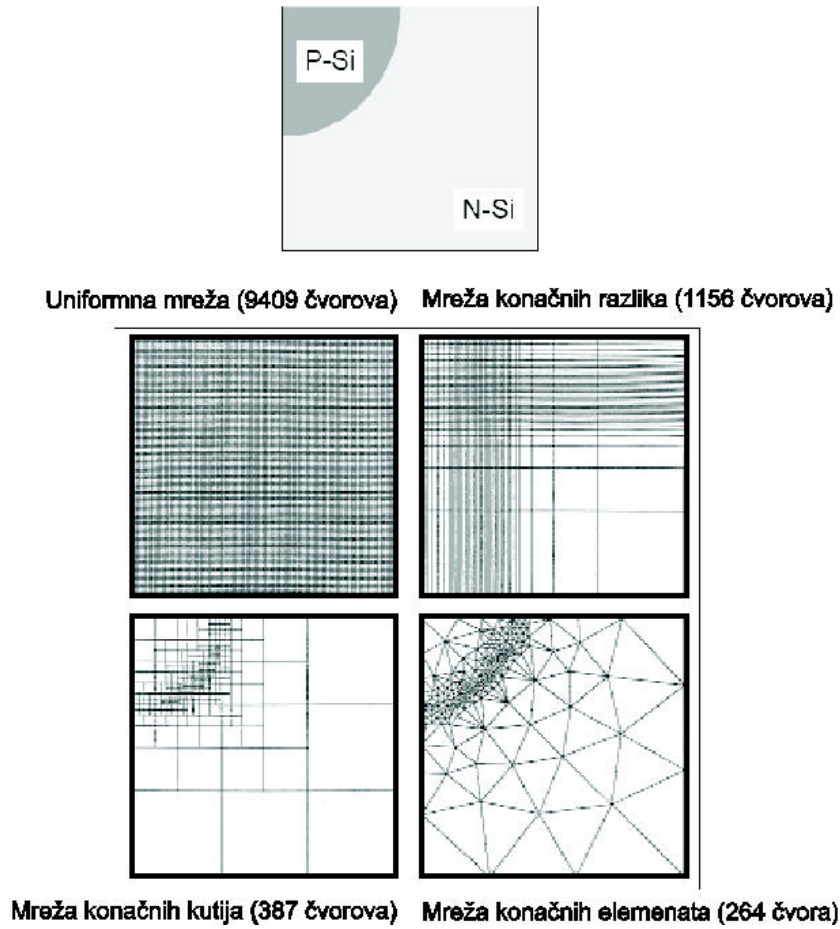


Figure 3.2: Broj diskretizacionih čvorova mreže u zavisnosti od metoda diskretizacije.

$$\partial D_P = \partial D_O \cup \partial D_S \cup \partial D_I. \quad (3.6)$$

∂D_O je deo fizičkih granica domena koji predstavlja omske kontakte, ∂D_S Schottky-jeve kontakte, dok su ∂D_I međupovršine poluprovodnika i izolacionih oblasti.

Kod omskog kontakta granični uslov se uvodi kao jednostavan Dirichlet-ov granični uslov gde su površinski potencijal ψ_S , koncentracije elektrona i šupljina n_S i p_S fiksirani. Kvazi-Fermijev potencijali manjinskih i većinskih nosilaca su jednaki primenjenom naponu, tj. $\phi_n = \phi_p = V_{appl}$. Površinski potencijal ψ_S ima vrednost koja je konzistentna sa uslovom neutralnosti, tj. rešavanjem:

$$n_S + N_A^- = p_S + N_D^+ \quad (3.7)$$

po ψ_S , n_S i p_S , pošto su vrednosti ϕ_n i ϕ_p poznate, pod pretpostavkom da važi Boltzmann-ova statistika, dobija se:

$$n_S = \frac{1}{2} \left[(N_D^+ - N_A^-) + \sqrt{(N_D^+ - N_A^-)^2 + 4n_{ie}^2} \right], \quad (3.8)$$

$$p_S = \frac{n_{ie}^2}{n_S}, \quad (3.9)$$

$$\psi_S = \phi_n + \frac{kT}{q} \ln \frac{n_S}{n_{ie}} = \phi_p - \frac{kT}{q} \ln \frac{p_S}{n_{ie}}. \quad (3.10)$$

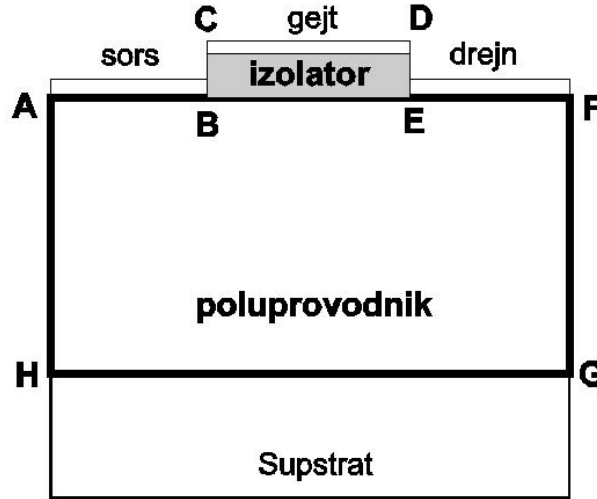


Figure 3.3: Geometrija domena simulacije i granica kod planarnog MOS tranzistora.

Priroda Schottky-jevog kontakta je veoma kompleksna, međutim, za potrebe simulacije se najčešće koristi veoma uprošćen model. U programima se ovaj kontakt modelira na dva načina, tako što se definiše funkcija izlaznog rada metala od kojeg je elektroda (WF - "Work Function" metod) ili se definiše brzina površinske rekombinacije na elektrodi (SR - "Surface Recombination" metod).

WF metod definiše površinski potencijal na Schottky-jevim kontaktima kao:

$$\psi_S = AFFINITY + \frac{E_g}{2q} + \frac{kT_L}{2q} \ln \frac{N_C}{N_V} - WORKFUN + V_{appl}, \quad (3.11)$$

gde je $AFFINITY$ afinitet elektrona poluprovodničkog materijala, E_g širina zabranjene zone, N_C gustina stanja u provodnoj zoni, N_V gustina stanja u valentnoj zoni i T temperatura. U praksi se uzima da je:

$$WORKFUN = AFFINITY + \phi_B, \quad (3.12)$$

gde je ϕ_B visina barijere međupovršine Si/SiO₂ u eV.

Kod SR metod Schottky-jev kontakt se definiše preko SURF.REC parametra. U ovom slučaju kvazi-Fermijevi nivo više nisu jednaki primenjenom naponu V_{appl} . Umesto toga, ovi parametri se definišu preko strujnih graničnih uslova na površini:

$$J_{sn} = q \cdot VSURFN(n_S - n_{eq}) \exp\left(\frac{\Delta\phi_b}{kT}\right), \quad (3.13)$$

$$J_{sp} = q \cdot VSURFN(p_S - p_{eq}) \exp\left(\frac{\Delta\phi_b}{kT}\right), \quad (3.14)$$

gde su J_{sn} i J_{sp} struje elektrona i šupljina na kontaktu, n_S površinska koncentracija elektrona i p_S površinska koncentracija šupljina. n_{eq} i p_{eq} su ravnotežne koncentracije elektrona i šupljina u uslovima kada je brzina površinske rekombinacije beskonačna ($\phi_n = \phi_p = V_{appl}$). Ako brzine površinske rekombinacije elektrona i šupljina nisu definisane u ulaznoj datoteci programa, onda se njihova vrednost računa kao:

$$VSURF_n = \frac{RICH_n \cdot T^2}{q \cdot N_C}, \quad (3.15)$$

$$VSURF_p = \frac{RICH_p \cdot T^2}{q \cdot N_V}, \quad (3.16)$$

gde su $RICH_n = 110A/cm^2/K^2$ i $RICH_p = 30A/cm^2/K^2$ efektivne Richardson-ove konstante elektrona i šupljina koje uzimaju u obzir efekte kvantno-mehaničke refleksije i tunelovanja.

Kontakt koji nije povezan sa strujnim ili naponskim izrazom i potpuno je izolovan dielektrikom naziva se plivajući kontakt ("floating contact"). U najvećem broju simulatora za ovakve kontakte, a to su na primer plivajući gejtovi kod EPROM-a, se uzima da je raspodela naelektrisanja:

$$\int_S DdS = Q_{FG}, \quad (3.17)$$

gde je D vektor dielektričnog pomeraja, a Q_{FG} injektovano naelektrisanje.

Što se, na kraju, veštačkih granica domena tiče, uzimaju se tzv. prirodni granični uslovi, tj. prvi izvodi potencijala, koncentracije elektrona i šupljina u pravcu normale na površinu su jednaki nuli:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} &= 0, \\ \frac{\partial n}{\partial \vec{n}} &= 0, \\ \frac{\partial p}{\partial \vec{n}} &= 0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

3.2 Metoda konačnih razlika

Kod klasičnog metoda konačnih razlika, domen simulacije u kojem se rešava sistem osnovnih poluprovodničkih jednačina je podeljen na subregione uz pomoć diskretizacione mreže koja se formira linijama koje su paralelne koordinatnim osama. Zbog toga je ovaj pristup veoma pogodan kod rectangularnih domena, s obzirom da se tada linije diskretizacione mreže poklapaju sa granicama domena simulacije. Primer diskretizacione mreže konačnih razlika je prikazan na slici 3.2. Mreža ima NX linija paralelnih y-osi, i NY linija paralelnih x-osi, što znači da ima $NX \cdot NY$ čvorova u kojima je potrebno odrediti rešenje sistema diferencijalnih jednačina (3.1-3.3). Zbog toga je potrebno da se izvede algebarska jednačina za svaki čvor diskretizacione mreže. Zamenićemo najpre diferencijalne jednačine u unutrašnjim čvorovima diskretizacione mreže diferencnim jednačinama primenjujući klasičnu diskretizaciju sa 5 čvorova. Pri tome koristimo sledeće oznake, kao što je to prikazano na slici 3.4:

$$h_i = x_{i+1} - x_i, \quad i = 1, NX - 1, \quad (3.19)$$

$$k_j = y_{j+1} - y_j, \quad j = 1, NY - 1. \quad (3.20)$$

Da bi dodatno uprostiti pisanje komplikovanih izraza, usvojićemo da je:

$$u_{i,j} = u(x_i, y_j), \quad i = 1, NX; j = 1, NY, \quad (3.21)$$

$$u_{i+1/2,j} = u\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}, y_j\right), \quad i = 1, NX - 1; j = 1, NY, \quad (3.22)$$

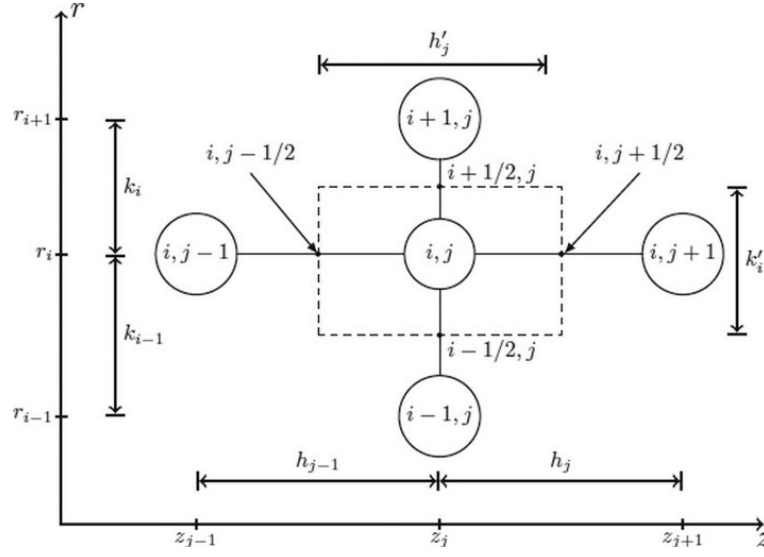


Figure 3.4: Usvojena nomenklatura kod izvodjenja diskretizacije metodom konačnih razlika.

$$u_{i,j+1/2} = u\left(x_i, \frac{y_j + y_{j+1}}{2}\right), \quad i = 1, NX; j = 1, NY - 1. \quad (3.23)$$

Postoji nekoliko načina za izvodjenje diferencnih jednačina iz diferencijalnih jednačina, a ovde će biti prikazan i analiziran najjednostavniji način. Najpre ćemo eksplicitno predstaviti operatore "div" i "grad":

$$\lambda^2 \cdot \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) - n + p + C = 0, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x} - \mu_n \cdot n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial y} - \mu_n \cdot n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - R(\psi, n, p) = 0, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x} - \mu_p \cdot p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial y} - \mu_p \cdot p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - R(\psi, n, p) = 0. \quad (3.26)$$

Pretpostavljamo da je problem dvodimenzionalan, tako da su parcijalni izvodi svih parametara po trećoj dimenziji jednaki nuli. Prema tome, ako je u tri puta diferencijabilna funkcija, onda njene parcijalne izvode po x i y možemo pisati kao:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + \frac{h_{i-1} - h_i}{4} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + O\left(\frac{h_i^3 + h_{i-1}^3}{h_i + h_{i-1}}\right), \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i,j+1/2} - u_{i,j-1/2}}{\frac{k_i + k_{i-1}}{2}} + \frac{k_{i-1} - k_i}{4} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{i,j} + O\left(\frac{k_i^3 + k_{i-1}^3}{k_i + k_{i-1}}\right). \quad (3.28)$$

Lokalna greška odsecanja O praktično predstavlja reziduum koji dobijamo kada rešenje kontinualnog problema zamenimo u diskretizacionu šemu. Ako definišemo:

$$h = \max(h_i; i = 1, NX - 1), \quad (3.29)$$

$$k = \max(k_j; j = 1, NY - 1), \quad (3.30)$$

onda $O(h)$ ili $O(h^2)$ predstavljaju linearnu ili kvadratnu grešku odsecanja. U izrazima (3.27) i (3.28) lokalna greška odsecanja je drugog reda za slučaj uniformne i kvazi-uniformne diskretizacione mreže, pri čemu je kvazi-uniformna mreža ona za koju važi:

$$h_{i+1} = h_i \cdot (1 + O(h_i)), \quad i = 1, NX - 2, \quad (3.31)$$

$$k_{j+1} = k_j \cdot (1 + O(k_j)), \quad j = 1, NY - 2. \quad (3.32)$$

Medjutim, kao što je već nekoliko puta spomenuto, rešenje poluprovodničkih jednačina se u nekim delovima domena simulacije veoma brzo menja, dok je u drugim delovima skoro konstantno, tako da je u najvećem broju slučajeva neophodna veoma neuniformna diskretizaciona mreža kako bi se smanjio broj diskretizacionih tačaka. U tim slučajevima usvajamo najgori slučaj po nas da je lokalna greška odsecanja prvog reda, tako da sistem osnovnih poluprovodničkih jednačina (3.24-3.26), za diskretizacione čvorove u unutrašnjosti domena simulacije ($1 < i < NX$ i $1 < j < NY$), možemo napisati u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} & \lambda^2 \left(\frac{\frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i+1/2,j} - \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i+1}}{2}} + O(h) \cdot \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3}|_{i,j} + \right. \\ & \left. + \frac{\frac{\partial \psi}{\partial y}|_{i,j+1/2} - \frac{\partial \psi}{\partial y}|_{i,j-1/2}}{\frac{k_i + k_{j+1}}{2}} + O(k) \cdot \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3}|_{i,j} \right) - \\ & -n_{i,j} + p_{i,j} + C_{i,j} = 0. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Slično Poisson-ovoj jednačini, jednačina kontinuiteta za elektrone postaje:

$$\begin{aligned} & \frac{(-J_{nx})|_{i+1/2,j} - (-J_{nx})|_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + O(h) \cdot \frac{\partial^2 J_{nx}}{\partial x^2}|_{i,j} + \\ & \frac{(-J_{ny})|_{i,j+1/2} - (-J_{ny})|_{i,j-1/2}}{\frac{k_j + k_{j-1}}{2}} + O(k) \cdot \frac{\partial^2 J_{ny}}{\partial y^2}|_{i,j} - \\ & -R(\psi, n, p)|_{i,j} = 0. \end{aligned} \quad (3.34)$$

J_{nx} i J_{ny} predstavljaju skalirane gustine struje elektrona u x i y smeru, respektivno:

$$J_{nx} = \mu_n \cdot n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} - D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x}, \quad (3.35)$$

$$J_{ny} = \mu_n \cdot n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} - D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial y}. \quad (3.36)$$

Na sličan način se dobija jednačina kontinuiteta za šupljine:

$$\begin{aligned} & \frac{(-J_{px})|_{i+1/2,j} - (-J_{px})|_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + O(h) \cdot \frac{\partial^2 J_{px}}{\partial x^2}|_{i,j} + \\ & \frac{(-J_{py})|_{i,j+1/2} - (-J_{py})|_{i,j-1/2}}{\frac{k_j + k_{j-1}}{2}} + O(k) \cdot \frac{\partial^2 J_{py}}{\partial y^2}|_{i,j} - \\ & -R(\psi, n, p)|_{i,j} = 0. \end{aligned} \quad (3.37)$$

J_{px} i J_{py} predstavljaju skalirane gustine struje šupljina u x i y smeru, respektivno:

$$J_{px} = \mu_p \cdot p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} + D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (3.38)$$

$$J_{py} = \mu_p \cdot p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} + D_p \cdot \frac{\partial p}{\partial y}. \quad (3.39)$$

Sledeći korak je zamena vrednosti $\partial \psi / \partial x$, $\partial \psi / \partial y$, J_{nx} , J_{ny} , J_{px} i J_{py} u središnjim tačkama odgovarajućim diferencnim aproksimacijama. Koristi se pretpostavka da su vrednosti ovih veličina konstantne u okviru svakog intervala, pa se za elektrostatički potencijal dobija:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i+1/2,j} = \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{h_i} + O(h^2) \cdot \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3}|_{i+1/2,j}, \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial y}|_{i,j+1/2} = \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{h_i} + O(k^2) \cdot \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3}|_{i,j+1/2}. \quad (3.41)$$

Posle zamene u (3.33) dobijamo:

$$\begin{aligned} & \lambda^2 \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{h_i} \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{h_{i-1}} + \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{k_j} \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{k_{j-1}} \right) - \\ & -n_{i,j} + p_{i,j} + C_{i,j} = 0. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Ovako dobijena diskretizovana Poisson-ova jednačina ima lokalnu grešku odsecanja koja je proporcionalna rastojanju izmedju čvorova diskretizacione mreže i trećem izvodu elektrostatičkog potencijala u slučaju neuniformne mreže.

Diskretizacija jednačina kontinuiteta je daleko složeniji problem i zbog toga ćemo ovde preskočiti neke korake u proceduri diskretizacije. Naime, cilj nije da studenti nauče kompletnu proceduru diskretizacije ovako složenih izraza, već da se samo upoznaju sa postupcima i načinom diskretizacije, a to su na primeru Poisson-ove jednačine mogli da nauče.

Uvodjenjem određenih aproksimacija, koje su prvi predložili Sharfetter i Gummel, dobija se

diskretna forma jednačine kontinuiteta za elektrone:

$$\begin{aligned}
& D_n|_{i+1/2,j} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot n_{i+1,j} - B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i+1,j}}{Ut}\right) \cdot n_{i,j}}{h_i \cdot \frac{h_i + h_{i-1}}{2}} - \\
& - D_n|_{i-1/2,j} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i-1,j}}{Ut}\right) \cdot n_{i,j} - B\left(\frac{\Psi_{i-1,j} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot n_{i-1,j}}{h_{i-1} \cdot \frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + \\
& + D_n|_{i,j+1/2} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot n_{i,j+1} - B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j+1}}{Ut}\right) \cdot n_{i,j}}{k_j \cdot \frac{k_j + k_{j-1}}{2}} - \\
& - D_n|_{i,j-1/2} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j-1}}{Ut}\right) \cdot n_{i,j} - B\left(\frac{\Psi_{i,j-1} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot n_{i,j-1}}{k_{j-1} \cdot \frac{k_j + k_{j-1}}{2}} - \\
& - R(\psi, n, p)|_{i,j} = 0.
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Potpuno analogno se dobija i diskretna forma jednačine kontinuiteta za šupljine:

$$\begin{aligned}
& D_p|_{i+1/2,j} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot p_{i+1,j} - B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i+1,j}}{Ut}\right) \cdot p_{i,j}}{h_i \cdot \frac{h_i + h_{i-1}}{2}} - \\
& - D_p|_{i-1/2,j} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i-1,j}}{Ut}\right) \cdot p_{i,j} - B\left(\frac{\Psi_{i-1,j} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot p_{i-1,j}}{h_{i-1} \cdot \frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + \\
& + D_p|_{i,j+1/2} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot p_{i,j+1} - B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j+1}}{Ut}\right) \cdot p_{i,j}}{k_j \cdot \frac{k_j + k_{j-1}}{2}} - \\
& - D_p|_{i,j-1/2} \cdot \frac{B\left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j-1}}{Ut}\right) \cdot p_{i,j} - B\left(\frac{\Psi_{i,j-1} - \Psi_{i,j}}{Ut}\right) \cdot p_{i,j-1}}{k_{j-1} \cdot \frac{k_j + k_{j-1}}{2}} - \\
& - R(\psi, n, p)|_{i,j} = 0,
\end{aligned} \tag{3.44}$$

gde je B Bernoulli-jeva funkcija definisana kao:

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1}. \tag{3.45}$$

Sada kada konačno imamo diskretizovan sistem osnovnih poluprovodničkih jednačina, primenom odgovarajućih numeričkih metoda i tehnika moguće je rešiti ovaj veoma složen problem. U delu skripte koji se odnosi na primere simulacije dati su neki komentari koji će studentima biti od velike koristi za izbor odgovarajuće metode za rešavanje nekih specifičnih problema, kao i za

definisanje nekih parametara numeričkih metoda. Međutim, detaljnija analiza samih numeričkih tehnika je predmet nekih drugih kurseva.



Bibliography

Books

Articles

