



Simulazione di dispositivi a semiconduttore

Relazione di tirocinio

Edmondo Valvo

Ingegneria Elettronica
Tutor Aziendale: Gianluca Piccinini
Tutor Accademico: Guido Masera

Indice

1 Semicoduttore illuminato	3
1.1 Mesh	4
1.2 Regions	4
1.3 Electrodes	5
1.4 Doping	5
1.5 Materials	5
1.6 Models	5
1.7 Solve e Plot	5
1.8 Risultati Simulazione	9
1.9 Analisi teorica	11
1.10 Confronto con equazione di Shockley	12
1.11 Analisi Correnti	15
1.12 Analisi per lunghezze differenti	21
1.13 Lunghezza $50 \mu_m$	21
1.14 Lunghezza $5\mu_m$	24
2 Esperimento di Haynes-Shockley	26
2.1 Bias 0V	26
2.2 Bias 0,5V	29
2.3 Analisi teorica	30
3 Giunzione PN	34
3.1 Analisi	34
3.2 Diagramma a bande, zona di svuotamento e campo elettrico	34
3.3 Capacità di svuotamento	37
3.4 Analisi per bias applicato negativo	39
3.5 Analisi per bias applicato positivo	42
3.6 Analisi correnti	44
3.7 Effetti di generazione-ricombinazione	48
4 Modello SRH	53
4.1 Analisi dei processi fondamentali	53
4.2 Tasso di ricombinazione	58
4.3 Confronto con Padre	59
4.4 Analisi teorica	59
4.5 Simulazione	60

La seguente relazione espone il tirocinio curriculare svolto nel terzo anno del corso di laurea triennale in Ingegneria Elettronica.

Uno degli obiettivi principali alla base di questa esperienza è stato l'approfondimento della conoscenza dei dispositivi a semiconduttore, incontrati per la prima volta nell'ambito del corso di Dispositivi Elettronici, tenuto dal Professore Gianluca Piccinini, relatore di questo lavoro.

L'area principale di interesse è stata la simulazione dei vari dispositivi per mezzo di un tool chiamato *Padre*, presente su nanohub.org.

Inizialmente si è analizzato un semplice pezzo di semiconduttore illuminato e il famoso *esperimento di Haynes-Shockley*.

Successivamente si è passati alla *giunzione pn* nell'analisi della quale è emersa la necessità di approfondire il *modello di ricombinazione indiretto Shockley-Read-Hall (SRH)*.

1 Semiconduttore illuminato

Si ha un semiconduttore uniformemente drogato con drogaggio di tipo p e densità Na=1e16. Si illumina tale semiconduttore sulla faccia sinistra e vi si applicano diversi punti di bias.

- Drogaggio p: $1 \cdot 10^{16} cm^{-3}$
- Lunghezza semiconduttore: 1mm
- Generazione: $2 \cdot 10^{22} cm^{-3} \cdot s^{-1}$ — basso livello di iniezione
- Silicio, T=300K

Per svolgere la simulazione di questo sistema si è utilizzato il tool Padre della piattaforma nanohub.org che, tramite un proprio linguaggio di programmazione, permette di studiare alcune importanti condizioni dei dispositivi elettronici. Nel caso in questione il codice è il seguente:

```
title      homogenous semiconductor (setup)
options    P0

mesh      rect nx=200 ny=4 outf=pdr520.mesh
x.m      n=1 l=0 r=1
x.m      n=40 l=0.01 r=1
x.m      n=200 l=1000 r=1
y.m      n=1 l=0 r=1
y.m      n=2 l=0.001 r=1
y.m      n=4 l=10 r=1

$ Regions specifications
region   num=1 ix.l=1 ix.h=40 iy.l=1 iy.h=4 silicon
region   num=2 ix.l=40 ix.h=200 iy.l=1 iy.h=4 silicon

elec num=1 ix.l=1 ix.h=1 iy.l=1 iy.h=4
elec num=2 ix.l=200 ix.h=200 iy.l=1 iy.h=4

$ Doping specification

dop    region=1 p.type conc=1e+16 uniform
dop    region=2 p.type conc=1e+16 uniform

plot.1d  log dop abs a.x=0 b.x=1000 b.y=10 a.y=10 points ascii
+          outf=pdr520.dop
```

```

$ Materials specifications
material name=silicon taun0=1e-06 taup0=1e-06

$ Specify models
models srh conmob fldmob temperature=300 print
system electrons holes newton

```

Questa prima parte si occupa di descrivere il sistema che si sta studiando, si può infatti vedere il codice come una struttura a blocchi.

1.1 Mesh

In primis sotto “mesh” vengono definiti i parametri su cui andrà ad operare il tool:

- **rect:** indica che la struttura è rettangolare.
- **nx, ny:** corrispondono al numero di punti su ciascun asse che il software utilizzerà per la simulazione
- **x.m, y.m:** in queste righe vengono specificate le dimensioni del sistema, si ha infatti la rigorosa sequenza dei parametri n, l ed r. In particolare tramite n si indica a Padre su quale punto del mesh precedentemente definito si intende operare. Il parametro l corrisponde al valore in μm del punto n, mentre invece il parametro r indica sostanzialmente la risoluzione con cui tale punto verrà simulato. Di conseguenza il sistema in questione avrà lunghezza 1mm e altezza 10 μm e , se non specificata, la profondità (z) sarà 1mm.

1.2 Regions

Si passa poi a definire le regioni del semiconduttore studiato, in questa sezione si raggruppano i punti del mesh nelle ‘regions’ che vengono numerate e di cui poi viene specificato il materiale. Dal codice si può infatti notare che si hanno due regioni:

- **La prima** va da 0 a 0,01 μm (da punto 1 a punto 40 del mesh) sull ‘asse delle x e da 0 a 10 μm sull’asse delle y (da punto 1 a punto 4 del mesh).
- **La seconda** occupa lo spazio rimanente. Si è effettuata questa scelta poiché il sistema studiato è un semiconduttore illuminato da sinistra e avere una piccola regione (region num=1) su cui poi si può definire l’illuminazione risulta particolarmente conveniente.

1.3 Electrodes

Successivamente vengono specificate le posizioni degli elettrodi secondo lo stesso principio delle regioni, è importante notare che **non specificando ulteriori caratteristiche i contatti vengono assunti ohmici dal tool.**

1.4 Doping

A seguire viene definito il drogaggio del semiconduttore:

```
dop region=1 p.type conc=1e+16 uniform
```

- **Dop** indica a padre che si sta specificando il drogaggio.
- Si ha poi la regione, la tipologia, la concentrazione e la modalità, in questo caso uniforme.

1.5 Materials

Sotto “Materials specifications” si ha:

```
material name=silicon taun0=1e-06 taup0=1e-06
```

-material svolge la stessa funzione di dop nel comando precedente

-taun e taup indicano i tempi di vita di elettroni e lacune.

Si possono ovviamente specificare molte altre caratteristiche come energy gap o mobilità a determinate temperature.

1.6 Models

Nella sezione “models” vengono definiti temperatura e alcuni modelli fisici che il tool utilizzerà per la simulazione del sistema.

1.7 Solve e Plot

In questa seconda parte si ha lo svolgimento delle vere e proprie simulazioni tramite i comandi solve e plot. Il codice è:

```

$ Solve for initial conditions
solve init
plot.1d pot a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.pot SP
plot.1d band.val a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.vband
plot.1d band.con a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.cband
plot.1d qfn a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.qfn
plot.1d qfp a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.qfp
plot.1d ele a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.ele
plot.1d hole a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.hole
plot.1d net.charge a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.ro
plot.1d e.field a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.efield
plot.1d recomb a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.recomb +
+ SPLINE NSPLINE=200

solve gen=2.001e22 reg.gen=1 absorp=0 dir.gen=x
plot.1d pot a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.pot SP
plot.1d band.val a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.vband
plot.1d band.con a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.cband
plot.1d qfn a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.qfn
plot.1d qfp a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.qfp
plot.1d ele a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.ele
plot.1d hole a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.hole
plot.1d net.charge a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.ro
plot.1d e.field a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.efield
plot.1d recomb a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.recomb +
+ SPLINE NSPLINE=200
plot.1d j.electron a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jelectron
plot.1d j.hole a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jhole
plot.1d j.total a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jtot

solve v1=1.5 elect=1
solve gen=2e22 reg.gen=1 absorp=0 dir.gen=x
plot.1d pot a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.pot SP
plot.1d band.val a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.vband
plot.1d band.con a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.cband
plot.1d qfn a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.qfn
plot.1d qfp a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.qfp
plot.1d ele a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.ele
plot.1d hole a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.hole
plot.1d net.charge a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.ro
plot.1d e.field a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.efield

```

```

plot.1d recomb a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.recomb+
+ SPLINE NSPLINE=200
plot.1d j.electron a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jelectron
plot.1d j.hole a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jhole
plot.1d j.total a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jtot

```

In primis si simula il sistema all'equilibrio, senza bias o illuminazione scrivendo semplicemente:

solve init

Dopo la linea solve si procede con il plot che permette di visualizzare il comportamento di un parametro entro una determinata regione, ad esempio:

```

plot.1d band.val a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii
outf=pdr520.vband

```

Verrà graficato l'andamento della banda di valenza nella regione $x \in [0,1]\text{mm}$ e $y \in [0,10]\mu\text{m}$, sostanzialmente tutto il semiconduttore.

Successivamente viene introdotta l'illuminazione dalla faccia sinistra, tramite:

solve gen=2.001e22 reg.gen=1 absorp=0 dir.gen=x

- **gen** è il termine di generazione inteso in unità $(s \cdot cm^3)$.
- **reg.gen** specifica la regione in cui avviene tale generazione, proprio per questo si è compiuta la scelta iniziale di creare due zone separate, una che indichi la maggior parte del semiconduttore e l'altra più piccola in cui avviene l'illuminazione.
- **absorp** sta per absorption e indica un coefficiente di assorbimento della radiazione in $(1/\mu\text{m})$.
- **dir.gen** specifica l'asse lungo il quale avviene l'illuminazione.

A seguire si hanno una serie di linee solve in cui si applicano diversi bias, ad esempio:

```

solve v1=1.5 elect=1
solve gen=2e22 reg.gen=1 absorp=0 dir.gen=x

```

Vengono mantenute le specifiche dell'illuminazione ma si aggiunge una tensione di 1,5V applicata all'elettrodo 1.

In alcune situazioni è importante avere un determinato ordine nell'esecuzione delle linee solve, il tool infatti basa ciascuna simulazione su delle predizioni che derivano dalle simulazioni precedenti, proprio per questo si vede molto spesso prima una "solve init" e poi altre condizioni più complesse. Talvolta una disattenzione nell'ordine delle solve può causare errori di convergenza.

Per segnalare la fine del file d'esecuzione si introduce la keyword 'end':

```
plot.1d j.electron a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jelectron
plot.1d j.hole a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jhole
plot.1d j.total a.x=0 b.x=1000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr520.jtot

end
```

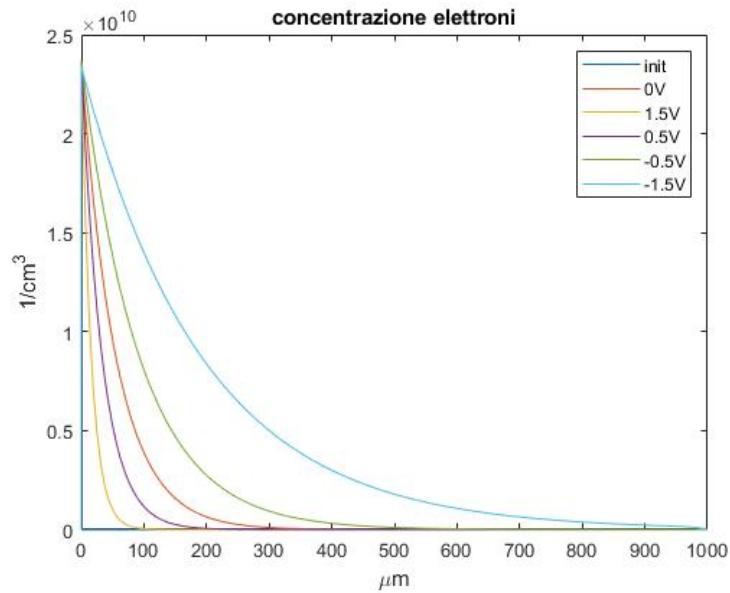


Figure 1: Concentrazioni elettroni da simulazione

1.8 Risultati Simulazione

Dopo aver eseguito il codice, i risultati della simulazione possono essere esportati e analizzati su Matlab che fornisce un’interfaccia grafica decisamente più semplice.

Per il sistema analizzato si hanno i grafici delle figure 1,2 e 3.

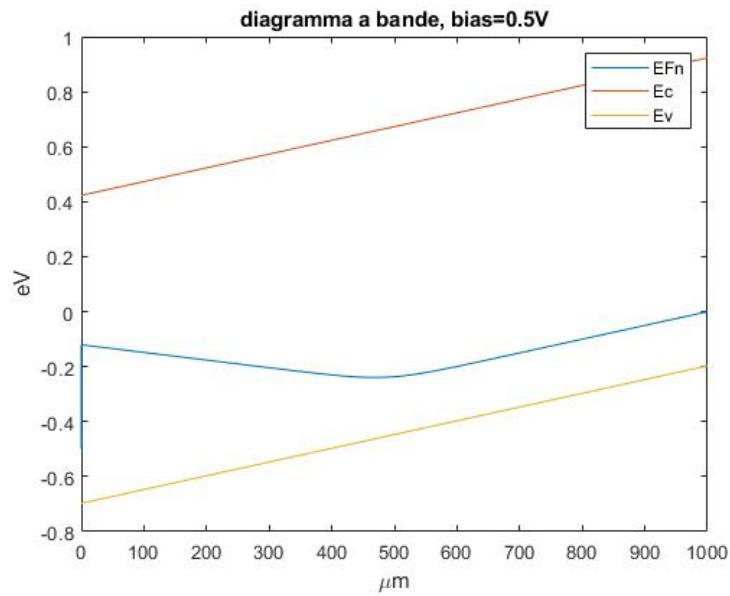


Figure 2: diagramma a bande, bias=0,5V

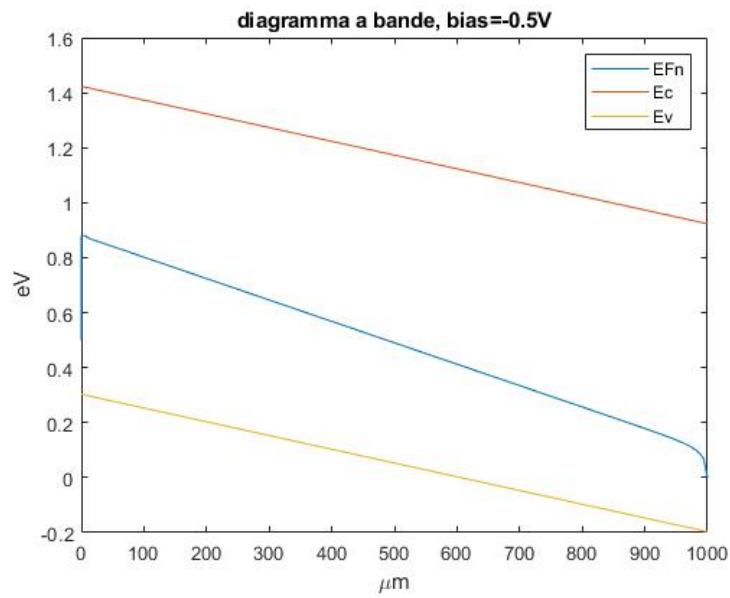
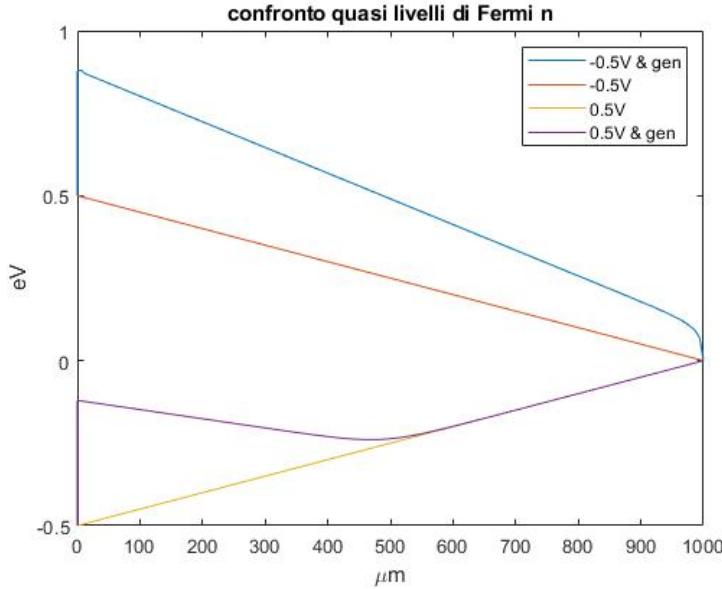


Figure 3: diagramma a bande, bias=-0,5V



Si notano comportamenti interessanti in prossimità della faccia sinistra del semiconduttore, dove avvengono illuminazione e applicazione di bias.

Intuitivamente si può immaginare che i portatori in eccesso, aumentando significativamente la concentrazione di elettroni, comportino un innalzamento del livello di Fermi verso la banda di conduzione che si abbassera man mano che tali elettroni si ricombinano.

Tale andamento varia però a seconda del bias applicato:

- **per bias negativi** si ha un campo elettrico negativo che porterà gli elettroni a diffondere nel verso positivo delle x, essendo essi di carica negativa.
- **per bias positivi** il campo elettrico risulta positivo e tenderà dunque a portare gli elettroni verso la faccia sinistra. Proprio a causa di questo fenomeno gli elettroni torneranno al valore d'equilibrio per x più piccole rispetto al caso di bias negativo.

1.9 Analisi teorica

A questo punto si raffrontano i risultati della simulazione con alcuni calcoli teorici.

Dall'equazione di drift-diffusion:

$$J_n = qn\mu_n\varepsilon + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (1)$$

Sostituendo nell'equazione di continuità e imponendo la stazionarietà ($\frac{dn}{dt} = 0$) si ottiene:

$$\frac{(d^2n')}{(dx^2)} + \frac{(V_a)}{(LV_t)} \frac{dn'}{dx} - \frac{n'}{\tau_n} = 0 \quad (2)$$

Dove n' corrisponde agli elettroni in eccesso e V_a al bias applicato .

Risolvendo l'equazione differenziale si ottiene che:
per bias=0,5V

$$n' = n'(0)e^{-0,02965x} = 2.36e10 \cdot e^{-0,02965x} \quad (3)$$

per bias=-0,5V

$$n' = n'(0)e^{-0,02965x} = 2.36e10 \cdot e^{-0,01041x} \quad (4)$$

(Dato che da simulazione i punti sull'asse delle x vengono forniti in μm anche il coefficiente derivante dall'equazione caratteristica dell'equazione differenziale è espresso in μm). A partire da questo valore si può calcolare l'espressione del quasi livello di Fermi:

$$E_f n = E_c + KT \cdot \ln\left(\frac{n_0 + n'}{N_c}\right) \quad (5)$$

Inserendo questa relazione in Matlab e utilizzando come E_c e n_0 quelli forniti da simulazione, si può ottenere il diagramma a bande con il valore ‘teorico’ del quasi livello di Fermi.

Da questi diagrammi a bande è evidente un forte riscontro fra simulazione e valore teorico.

1.10 Confronto con equazione di Shockley

Fino ad ora sono stati analizzati due principali elementi: quasi livello di Fermi e concentrazione di elettroni. Un'importante relazione che lega questi due valori è l'equazione di Shockley:

$$n = n_i \cdot e^{\frac{E_f n - E_i}{KT}} \quad (6)$$

Potrebbe quindi essere interessante vedere come tale relazione modelli il caso in questione sostituendovi i valori ottenuti da simulazione.

Si nota immediatamente una forte somiglianza tra la figura 6 e la figura 1.

Per un' ulteriore analisi, in figura 7 e 8 si ha il confronto delle concentrazioni ottenute tramite Shockley e Padre, per i due punti di bias 0,5V e -0,5V.

Il discostamento delle curve è dovuto ad una differenza nel valore iniziale ma, se questo fosse esattamente lo stesso, si avrebbe una forte coincidenza delle curve in entrambi i casi dato che il loro andamento è sostanzialmente identico.

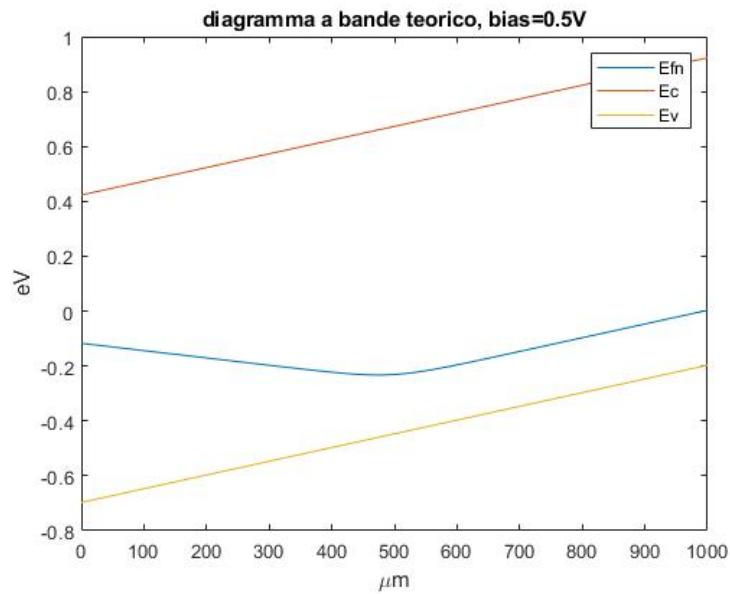


Figure 4: diagramma a bande ottenuto dai calcoli

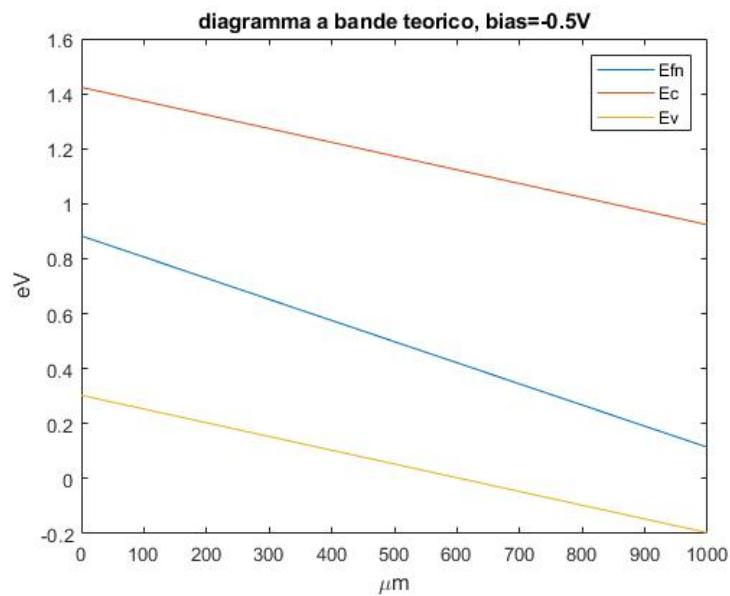


Figure 5: diagramma a bande ottenuto dai calcoli

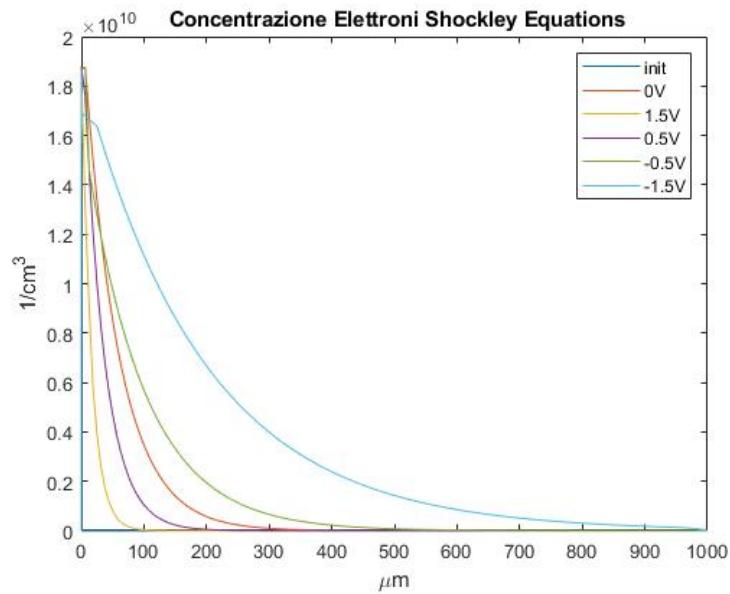


Figure 6: Concentrazioni elettroni ottenute tramite equazione di Shockley

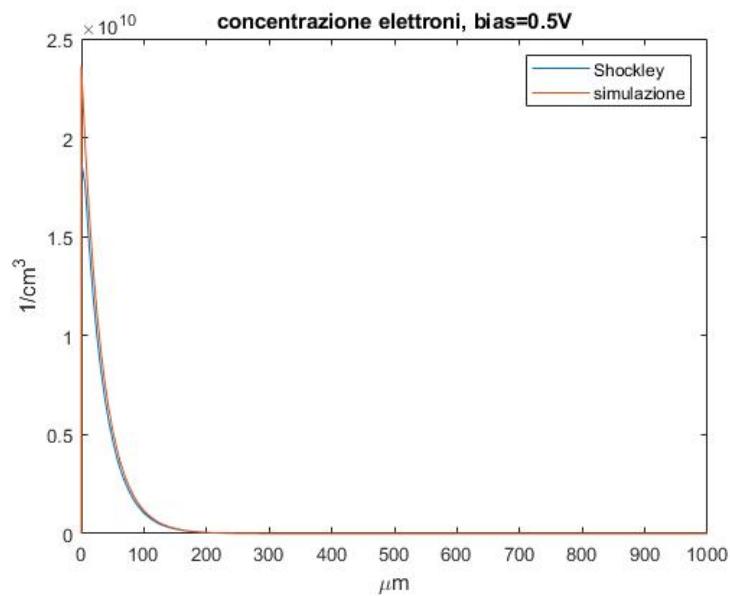


Figure 7: Concentrazioni ottenute tramite Shockley(blù) e Padre(rosso)

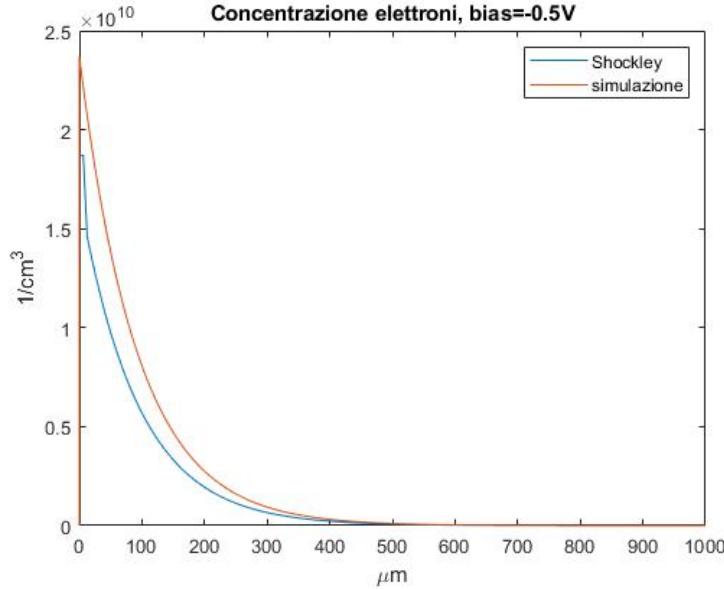


Figure 8: Concentrazioni ottenute tramite Shockley(blu) e Padre(rosso)

1.11 Analisi Correnti

Si procede dunque nell'analisi delle correnti di elettroni nel semiconduttore illuminato:

$$J_n = qn\mu_n\varepsilon + qD_n \frac{dn}{dx} = qn_p\mu_n \frac{V_a}{L} + qn'\mu_n \frac{V_a}{L} + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (7)$$

Dove si utilizza per n' le espressioni ricavate precedentemente.

Si ottengono gli andamenti delle figure 9 e 10.

Si nota in entrambi i casi una forte corrispondenza tra simulazione e calcoli effettuati. Una più attenta analisi rivela però delle incongruenze nei primi $6.26\mu_m$ in entrambi i casi.

Data questa importante differenza si cerca un fattore teorico nelle assunzioni precedentemente fatte.

Una ipotesi effettuata ma non verificata è quella di quasi neutralità, si è infatti supposto che il campo elettrico fosse semplicemente $\frac{V_a}{L}$ ma, in caso di non neutralità, a questo valore andrebbe aggiunto quello dovuto alla distribuzione di cariche.

La carica netta è:

$$= q(p - n + Na - Nd) \quad (8)$$

Che nel caso in questione si semplifica alla seguente espressione:

$$= q(p' - n' - n) \quad (9)$$

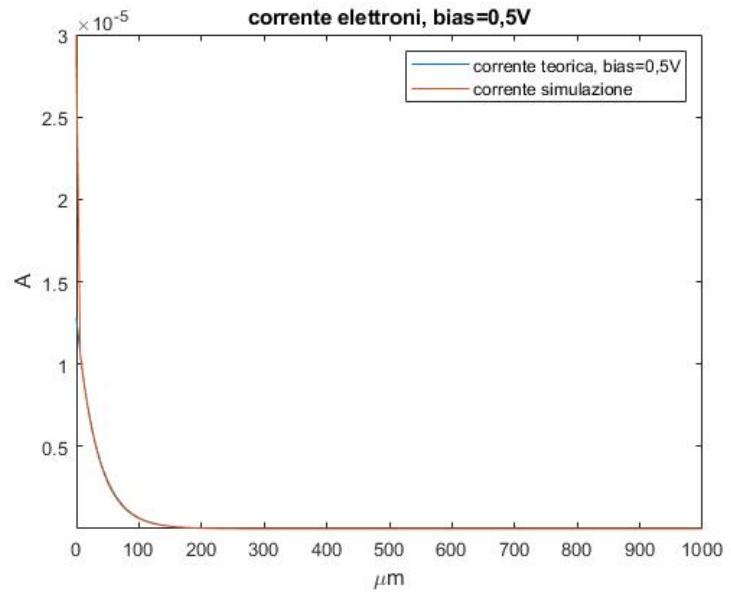


Figure 9: Confronto corrente per bias=0,5V

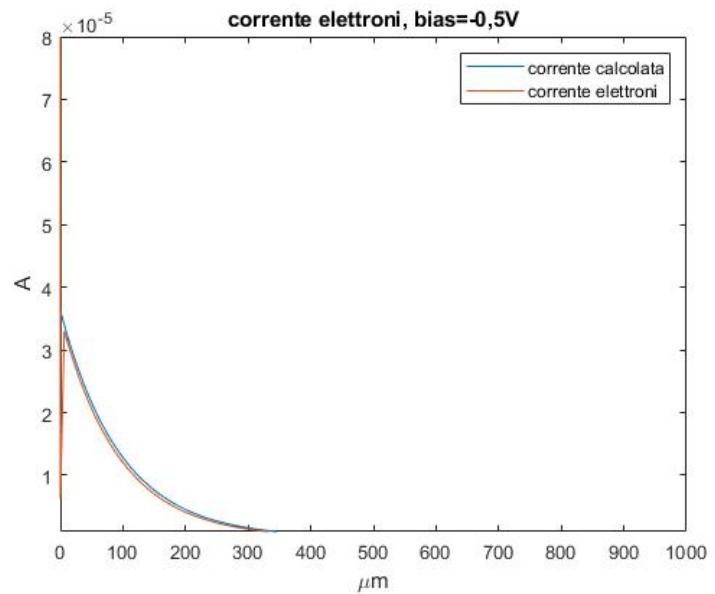


Figure 10: Confronto corrente per bias=-0,5V

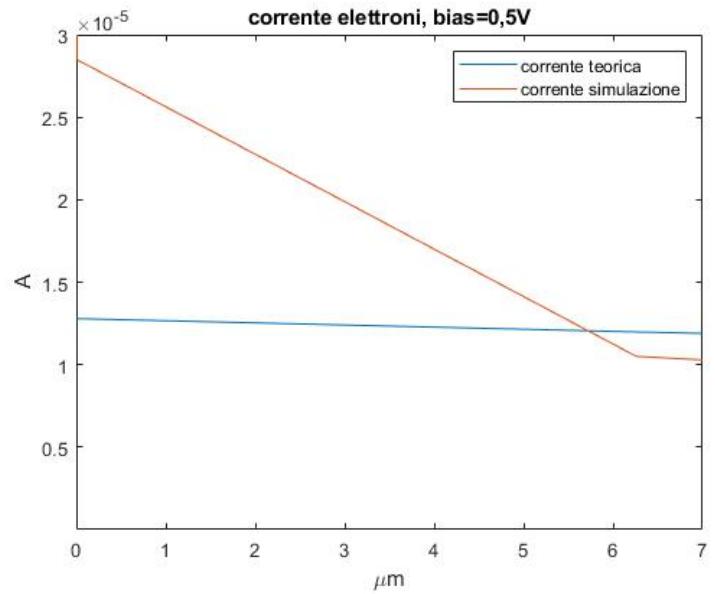


Figure 11: Corrente per bias=0,5V nei primi $7 \mu_m$

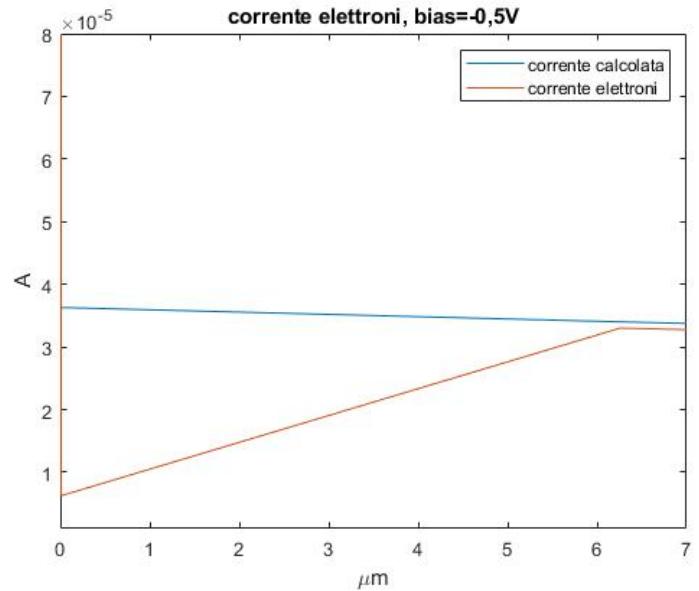


Figure 12: Corrente per bias=-0,5V nei primi $7 \mu_m$

(dove si è ottenuto p' con lo stesso procedimento di n')

per bias=0,5V:

$$p' = p'(0)e^{-0,02264x} = 2.2410^{10}e^{-0,02264x} \quad (10)$$

per bias=-0,5V:

$$p' = p'(0)e^{-0,04188x} = 2.2410^{10}e^{-0,04188x} \quad (11)$$

Plottando questo valore e confrontandolo con quello ottenuto da simulazione si ottengono le figure 13 e 14.

Questi risultati possono essere ancora una volta interpretati intuitivamente. Nel caso di bias positivo il campo elettrico manterrà gli elettroni verso la faccia sinistra del semiconduttore facilitandone la ricombinazione, proprio questo comporta la sostanziale differenza fra i due casi di bias.

Nonostante si tratti di valori nell'ordine di e-9 vi è comunque un'importante discrepanza tra i due casi, in particolare il valore da simulazione va velocemente a 0 nei primi $6.26\mu_m$.

Una fondamentale differenza tra simulazione e calcoli teorici è il modello di ricombinazione, nel codice Padre è stato specificato il modello Shockley-Read-Hall mentre nei calcoli si usa il più semplice modello a ricombinazione diretta.

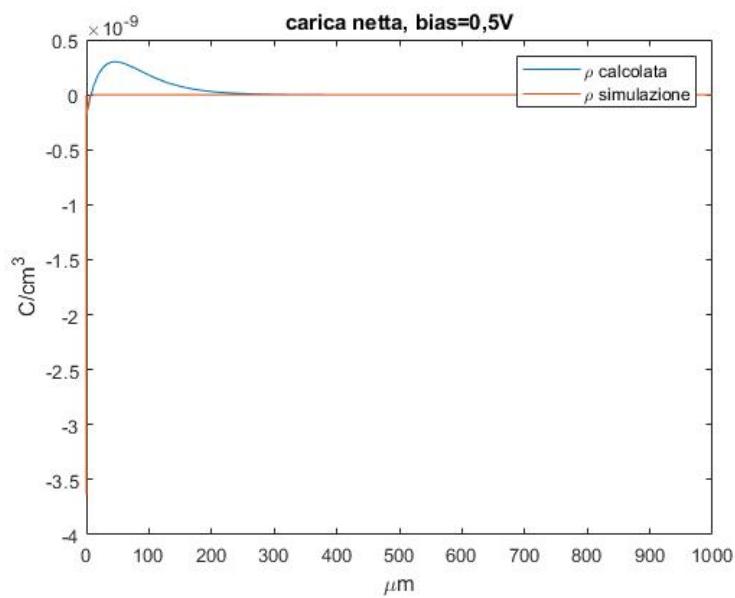


Figure 13: Confronto densità di carica netta per bias=0,5V

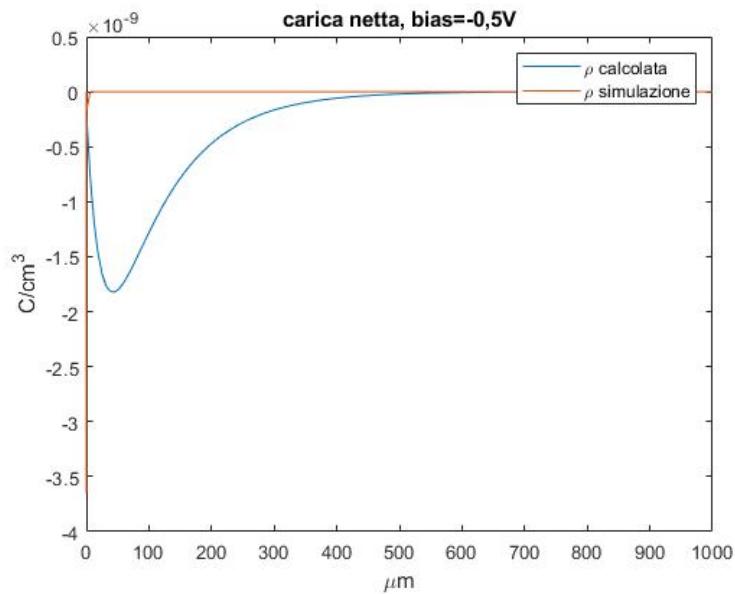


Figure 14: Confronto densità di carica netta per bias=-0,5V

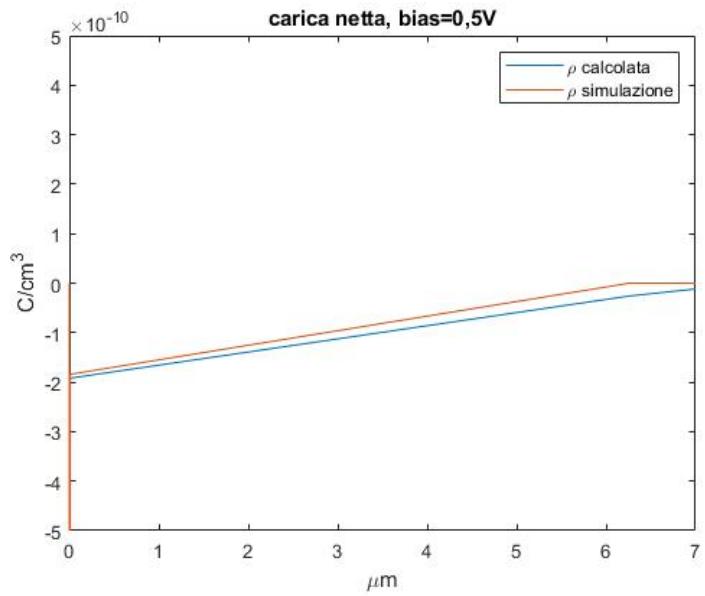


Figure 15: Confronto densità di carica nei primi $7\mu m$ per bias=0,5V

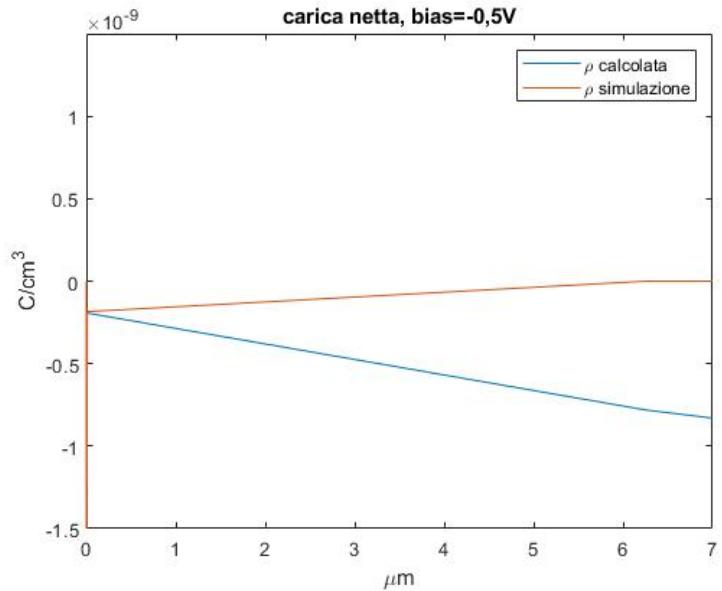


Figure 16: Confronto densità di carica nei primi $7\mu m$ per bias=-0,5V

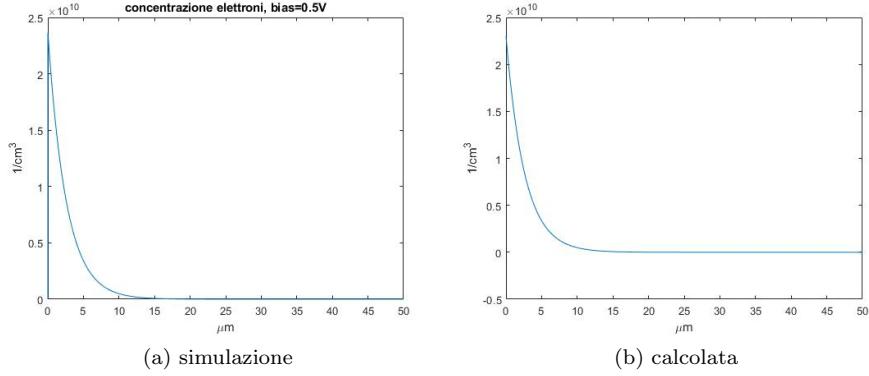


Figure 17: concentrazioni per bias=0.5V

1.12 Analisi per lunghezze differenti

L'analisi appena effettuata può essere ripetuta cambiando la lunghezza del semiconduttore a $5\mu_m$ e $50\mu_m$.

1.13 Lunghezza $50\mu_m$

Seguendo gli stessi passaggi si ottengono le espressioni per le concentrazioni dei minoritari:

-per bias $V_a=0,5V$

$$n' = -101.4 \cdot e^{0.00081137x} + 2.3 \cdot 10^{10} \cdot e^{-0.38541x} \quad (12)$$

-per bias $V_a=-0,5V$

$$n' = -94.4 \cdot e^{0.38541x} + 2.3 \cdot 10^{10} \cdot e^{-0.00081x} \quad (13)$$

Nelle figure 17 e 18 questi andamenti vengono messi a confronto con quelli ottenuti da simulazione.

Si calcolano a questo punto i livelli di Fermi e li si confrontano nelle figure 19 e 20.

Si aggiunge anche in questo caso il confronto con l'equazione di Shockley nelle figure 21 e 22, come per l'analisi con lunghezza 1mm si nota che l'andamento è assolutamente coincidente ma il valore iniziale comporta l'importante differenza vista in figura.

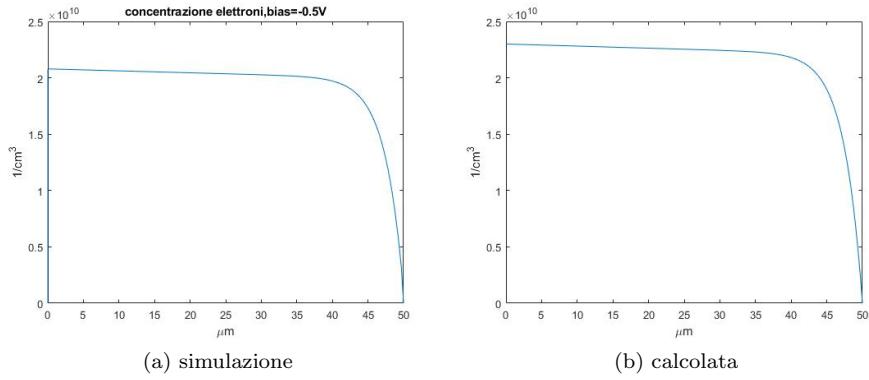


Figure 18: concentrazioni per bias=-0.5V

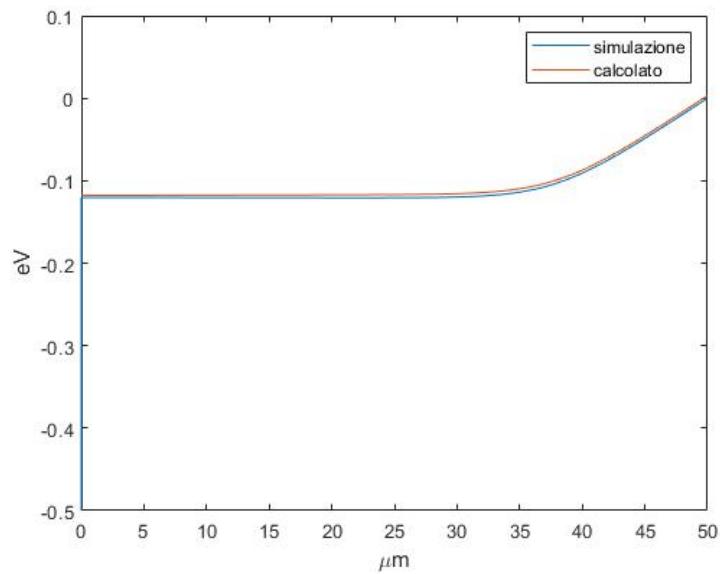


Figure 19: Confronto Quasi livelli di Fermi per bias=0,5V

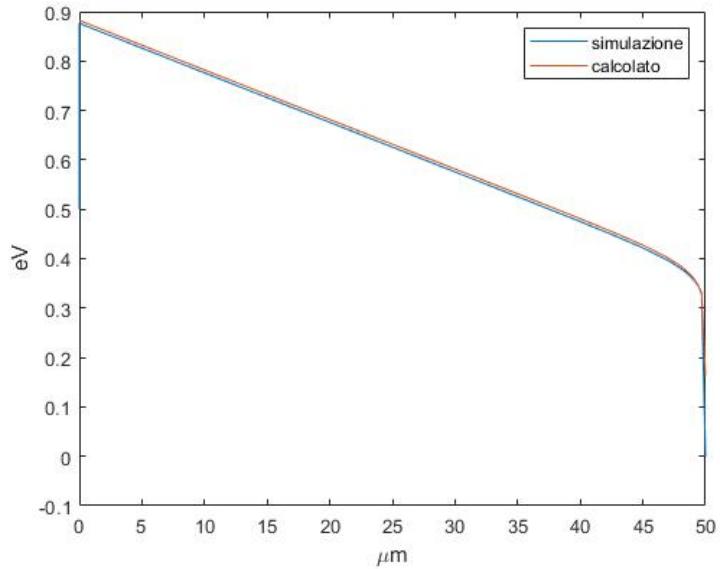


Figure 20: Confronto Quasi livelli di Fermi per bias=-0,5V

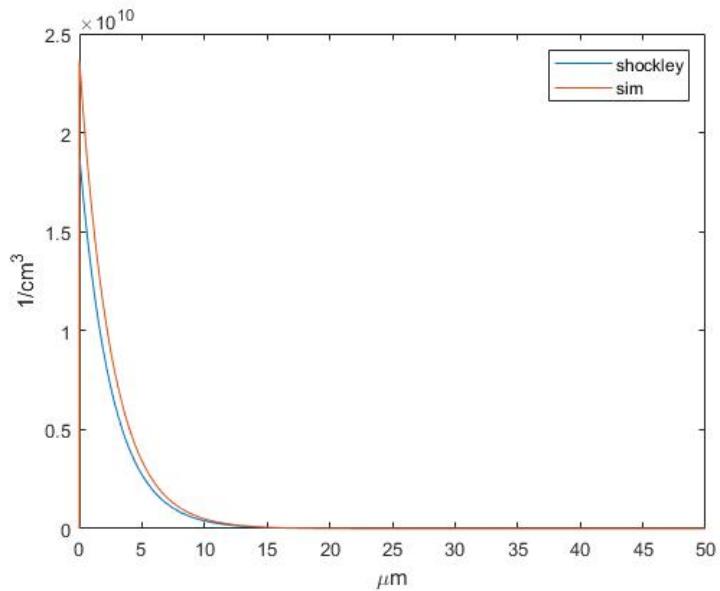


Figure 21: Confronto con Shockley per bias=0,5V

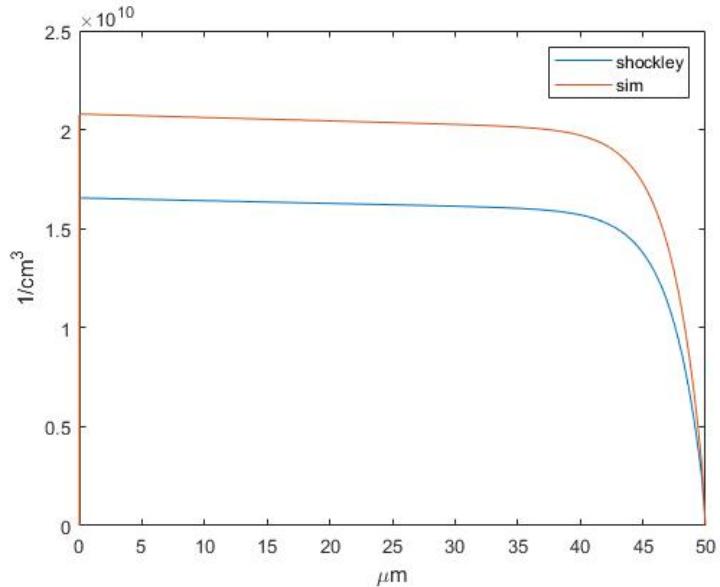


Figure 22: Confronto con Shockley per bias=-0,5V

1.14 Lunghezza $5\mu_m$

Svolgendo la stessa analisi dei casi precedenti si ottiene:

-per bias=0,5V

$$n' = -102.3 \cdot e^{0.000150766x} + 2.3 \cdot 10^{10} \cdot e^{-3.846x} \quad (14)$$

-per bias=-0,5V

$$n' = -42.93 \cdot e^{3.846x} + 9.651 \cdot 10^9 \cdot e^{-0.000150766x} \quad (15)$$

L'unica vera differenza tra osservazioni teoriche e simulazione si ha nelle concentrazioni per bias a -0,5V. Padre mantiene i contatti neutrali imponendo le concentrazioni nulle ma comunque mostra un accumulo di cariche sulla faccia sinistra non previsto dal semplice modello utilizzato.

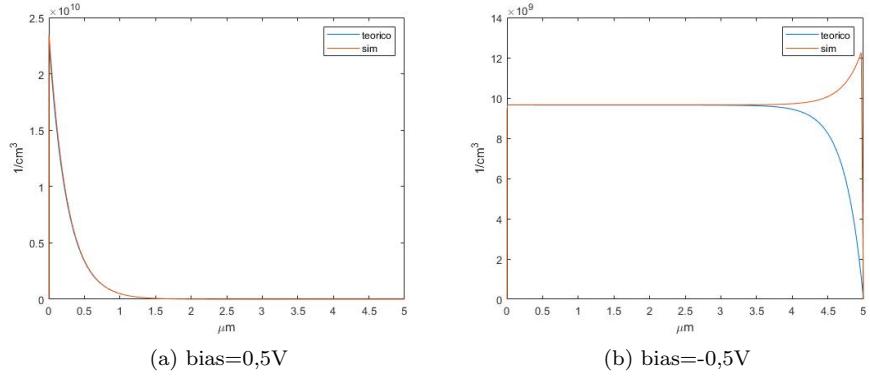


Figure 23: confronto concentrazioni elettroni

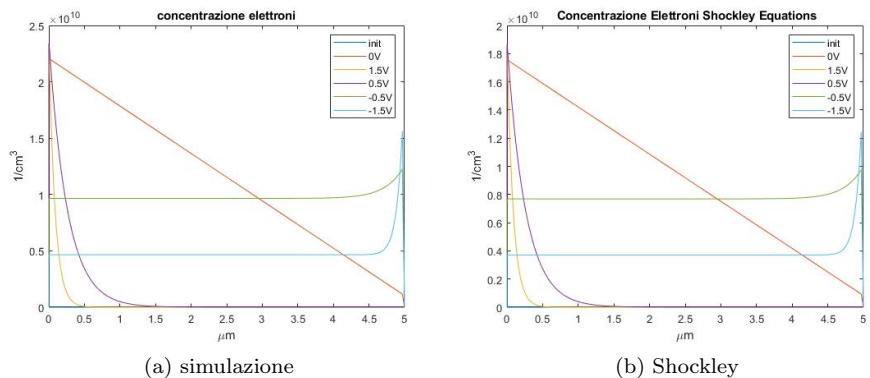


Figure 24: confronto Shockley e simulazione

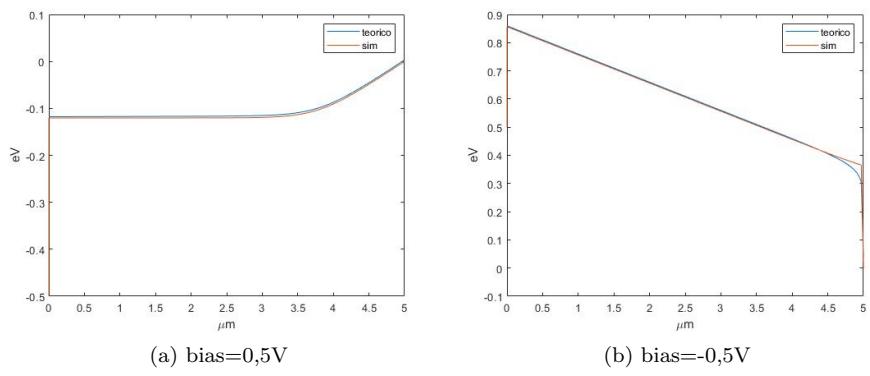


Figure 25: confronto quasi livelli di Fermi

2 Esperimento di Haynes-Shockley

Utilizzando Padre è possibile analizzare anche il comportamento di dispositivi a semiconduttore in un transitorio, come ad esempio nell'esperimento di Haynes-Shockley.

Questo esperimento consiste nella generazione localizzata di portatori in eccesso e nell'analisi dei conseguenti processi di diffusione.

Si sono analizzate due principali situazioni, una con bias applicato nullo e una con bias pari a 0,5V.

2.1 Bias 0V

Si ha dunque un semiconduttore lungo 2mm e alto 10 μm con drogaggio uniforme di tipo p pari a 10^{16} cm^{-3} .

A parte le dimensioni si hanno le stesse caratteristiche definite nelle simulazioni del semiconduttore illuminato.

Si definisce una regione (region 2) in cui avviene completamente l'illuminazione di modo che poi nella Solve line basterà solo specificare quest'ultima.

Dopo una prima simulazione del sistema all'equilibrio si passa all'illuminazione del semiconduttore, in particolare una radiazione uniforme nella regione che va da $x = 1000\mu_m$ a $x = 1001\mu_m$.

Nella seconda solve si ha la prima analisi in transitorio, viene infatti introdotta una generazione con tempo di salita g.tau pari a 5e-15s, questo significa che per t=5e-15s si ha il picco della generazione che però viene interrotta a t=1ps. La seguente linea di codice specifica che tale generazione decadrà con un tempo di discesa pari a 5ps e la simulazione verrà interrotta per t=21ps.

Questo processo viene ripetuto per altri istanti di tempo nelle figure 28 e 29.

Si nota chiaramente dai grafici che col passare del tempo i portatori in eccesso diffondono fino a tornare al valore d'equilibrio.

Questa simulazione produce il risultato mostrato in figura 30.

```

|title      homogenous semiconductor (setup)
|options    P0

mesh      rect nx=200 ny=4 outf=pdr826.mesh
x.m      n=1 l=0 r=1.01
x.m      n=40 l=1000 r=0.99
x.m      n=80 l=1000.001 r=1.01
x.m      n=120 l=1001 r=0.99
x.m      n=200 l=2000 r=1.01
y.m      n=1 l=0 r=1
y.m      n=2 l=0.001 r=1
y.m      n=4 l=10 r=1

$ Regions specifications
region   num=1 ix.l=1 ix.h=40 iy.l=1 iy.h=4 silicon
region   num=2 ix.l=40 ix.h=120 iy.l=1 iy.h=4 silicon
region   num=3 ix.l=120 ix.h=200 iy.l=1 iy.h=4 silicon

elec num=1 ix.l=1 ix.h=1 iy.l=1 iy.h=4
elec num=2 ix.l=200 ix.h=200 iy.l=1 iy.h=4

$ Doping specification
dop   region=1 p.type conc=1e+16 uniform
dop   region=2 p.type conc=1e+16 uniform
dop   region=3 p.type conc=1e+16 uniform
plot.1d log dop abs a.x=0 b.x= 500 b.y=10 a.y=10 points ascii
+          outf=pdr826.dop

$ Materials specifications
material name=silicon taun0=1e-06 taup0=1e-06

$ Specify models
models srh conmob fldmob temperature=300 print
system electrons holes newton

```

Figure 26: codice Padre

```

$ Solve for initial conditions
solve init
plot.1d pot a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.pot SP
plot.1d band.val a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.vband
plot.1d band.con a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.cband
plot.1d qfn a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.qfn
plot.1d qfp a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.qfp
plot.1d ele a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.ele
plot.1d hole a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.hole
plot.1d net.charge a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.ro
plot.1d e.field a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.efield
plot.1d recomb a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.recomb SPLINE NSPLINE=200

$ Solve for light source
log outf=gen0
solve GEN=2e22 REG.GEN=2 ABSORP=0 DIR.GEN=y
+ G.TAU=5e-15 TSTEP=1e-10 TSTOP=1e-12
solve G.TAU=5e-12 TSTOP=2.1e-11
plot.1d pot a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.pot SP
plot.1d band.val a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.vband
plot.1d band.con a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.cband
plot.1d qfn a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.qfn
plot.1d qfp a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.qfp
plot.1d ele a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.ele
plot.1d hole a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.hole
plot.1d net.charge a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.ro
plot.1d e.field a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.efield
plot.1d recomb a.x=0 b.x=2000 a.y=10 b.y=10 ascii outf=pdr826.recomb SPLINE NSPLINE=200

```

Figure 27: Prime due solve lines (condizioni iniziali e illuminazione)

```

solve init
solve GEN=2e22 REG.GEN=2 ABSORP=0 DIR.GEN=y
+ G.TAU=5e-15 TSTEP=1e-10 TSTOP=1e-12
solve G.TAU=5e-12 TSTOP=3.1e-11

```

(a) t=31ps

```

solve init
solve GEN=2e22 REG.GEN=2 ABSORP=0 DIR.GEN=y
+ G.TAU=5e-15 TSTEP=1e-10 TSTOP=1e-12
solve G.TAU=5e-12 TSTOP=1.1e-8

```

(b) t=11ns

Figure 28: Solve lines per diversi istanti di tempo

```

solve init
solve GEN=2e22 REG.GEN=2 ABSORP=0 DIR.GEN=y
+ G.TAU=5e-15 TSTEP=1e-10 TSTOP=1e-12
solve G.TAU=5e-12 TSTOP=7e-7

```

(a) t=0,7

```

solve init
solve GEN=2e22 REG.GEN=2 ABSORP=0 DIR.GEN=y
+ G.TAU=5e-15 TSTEP=1e-10 TSTOP=1e-12
solve G.TAU=5e-12 TSTOP=1.1e-5

```

(b) t=11

Figure 29: Solve lines per diversi istanti di tempo

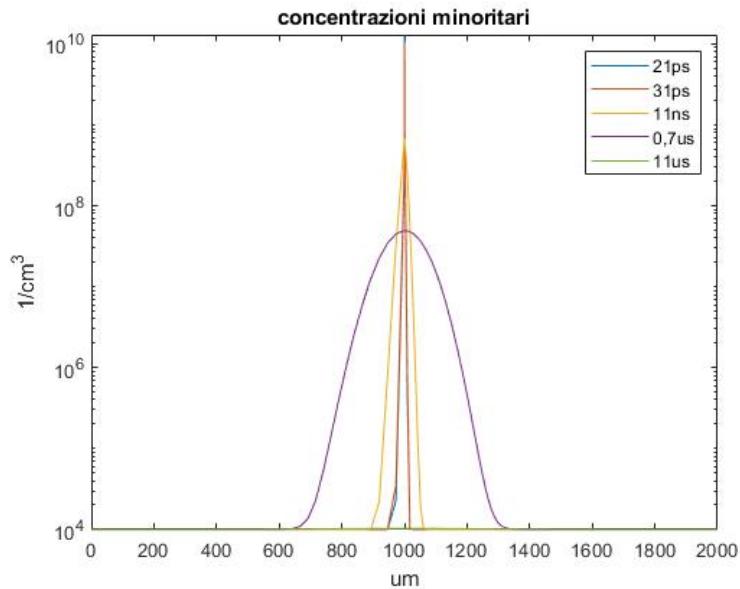


Figure 30: concentrazione elettroni simulata per diversi istanti di tempo

```

solve v1=0.5
solve GEN=2e22 REG.GEN=2 ABSORP=0 DIR.GEN=y
+ G.TAU=5e-15 TSTEP=1e-10 TSTOP=1e-12
solve G.TAU=5e-12 TSTOP=3.1e-11

```

Figure 31: Aggiunta del bias nella linea Solve

2.2 Bias 0,5V

In questo caso oltre alla diffusione si ha un campo elettrico che aggiunge una componente di trasporto all'andamento dei portatori nel tempo.

L'unica modifica che viene effettuata al codice è l'aggiunta di:

solve v1=0.5

Portando al codice in figura 31 e alle distribuzioni in figura 32.

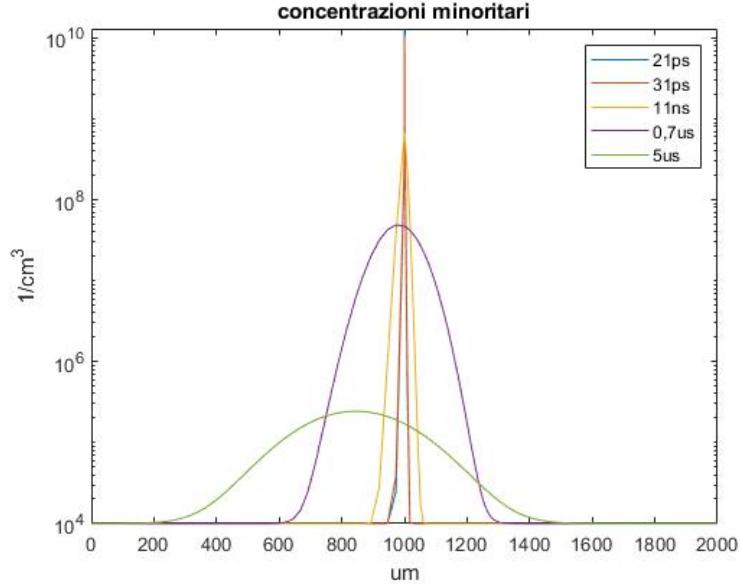


Figure 32: concentrazione elettroni simulata per diversi istanti di tempo

2.3 Analisi teorica

Dalle equazioni di Drift-Diffusion si ha:

$$\frac{dn'}{dt} - \mu_n \varepsilon \frac{dn'}{dx} - D_n \frac{d^2 n'}{dx^2} + \frac{n'}{\tau_n} = 0 \quad (16)$$

Nel caso in questione la soluzione deve essere della forma:

$$n' = \frac{H}{\sqrt{Bt}} \cdot e^{-\frac{(x-vt)^2}{Ct} - \frac{t}{E}} \quad (17)$$

Dove H,B,v,C ed E sono parametri da trovare.

A questo punto si possono calcolare $\frac{dn'}{dt}$, $\frac{dn'}{dx}$, $\frac{d^2 n'}{dx^2}$ e sostituirli nella (16):

$$\frac{H}{\sqrt{Bt}} \cdot e^\eta \cdot \left[\frac{-1}{2t} + \frac{x-vt}{Ct} (2v + 2\mu_n \varepsilon) + \frac{(x-vt)^2}{(Ct)^2} (C - 4D_n) - \frac{1}{E} + \frac{2D_n}{Ct} \right] = \frac{-n'}{\tau_n} \quad (18)$$

dove $\eta = -\frac{(x-vt)^2}{Ct} - \frac{t}{E}$.

A questo punto confrontando con la (17) si nota subito che si devono imporre $v = -\mu_n \varepsilon$ e $C = 4D_n$, ottenendo:

$$\frac{H}{\sqrt{Bt}} \cdot e^\eta \cdot \left[-\frac{1}{2t} - \frac{1}{E} + \frac{1}{2t} \right] = -\frac{H}{\sqrt{Bt}} \cdot e^\eta \cdot \frac{1}{E} = -\frac{n'}{\tau_n} \quad (19)$$

Sempre per confronto con la (17) si impone $E = \tau_n$, da cui:

$$n' = \frac{H}{\sqrt{Bt}} e^\eta \quad (20)$$

Rimangono da trovare i due parametri H e B, per fare ciò si calcola il numero di elettroni generati nell'istante t=0 con campo elettrico nullo.

$$N = A \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H}{\sqrt{Bt}} e^\eta dx = A \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H}{\sqrt{Bt}} e^{\frac{x^2}{4D_n t}} dx = A \frac{\sqrt{D_n t 4\pi} H}{\sqrt{Bt}} \quad (21)$$

Dove A è l'area della sezione del semiconduttore, imponendo $B = D_n$ si ricava:

$$H = \frac{N}{A \sqrt{4\pi}} \quad (22)$$

Sostituendo si ricava finalmente la soluzione:

$$n' = \frac{N}{A} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi D_n t}} \cdot e^{-\frac{(x+\mu_m \varepsilon t)^2}{4D_n t} - \frac{t}{\tau_n}} \quad (23)$$

Nel caso in esame la generazione ottica è $G = 2 \cdot 10^{22} \frac{1}{scm^3}$, il Δx in cui avviene la generazione è $1\mu_m$ e l'intervallo di tempo $\Delta t = 1 \cdot 10^{-12}s$, dunque:

$$G = 2 \cdot 10^{22} \frac{1}{scm^3} = 2 \cdot 10^{10} \frac{1}{s\mu_m^3} \quad (24)$$

$$\frac{N}{A} = G \cdot \Delta x \cdot \Delta t = 2 \cdot 10^{10} \cdot 10^{-12} = 2 \cdot 10^{-2} \frac{1}{(\mu_m)^2} \quad (25)$$

sostituendo nella (23) questo valore e quello del campo elettrico dei due casi si ottengono gli andamenti delle figure 33 e 34.

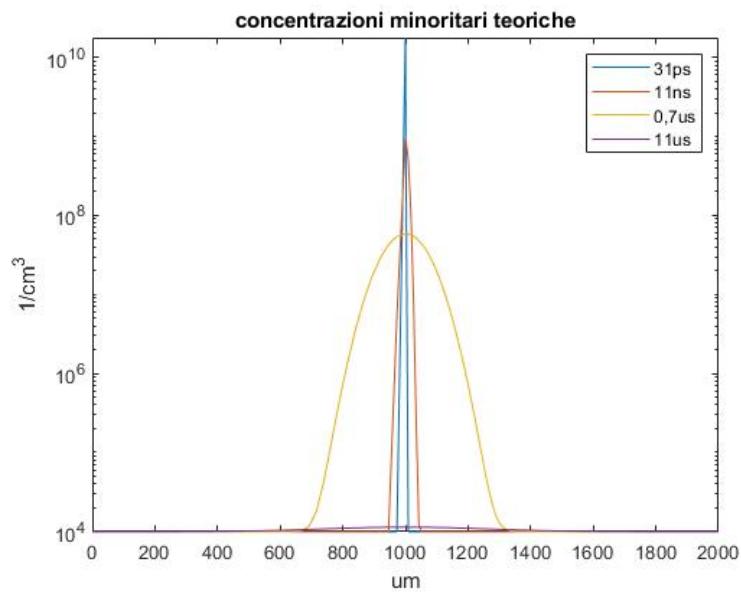


Figure 33: Concentrazione elettroni calcolata per diversi istanti di tempo con campo elettrico nullo

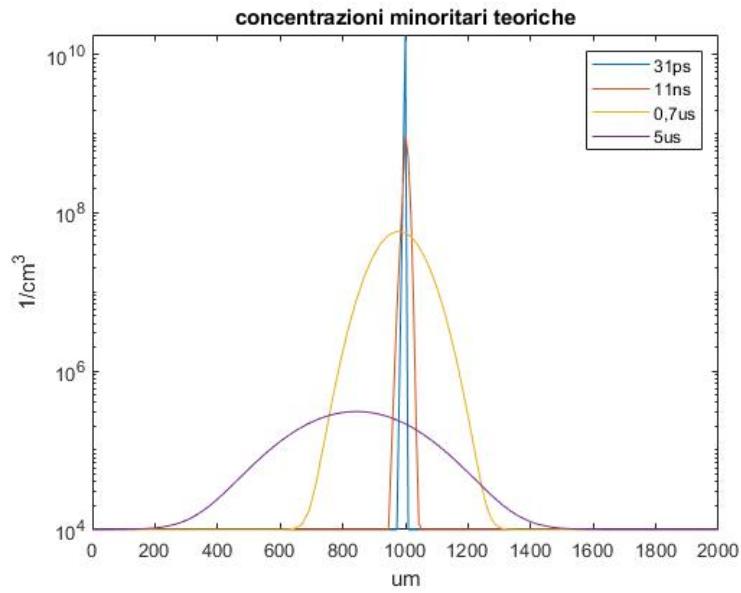


Figure 34: Concentrazione elettroni calcolata per diversi istanti di tempo con bias applicato

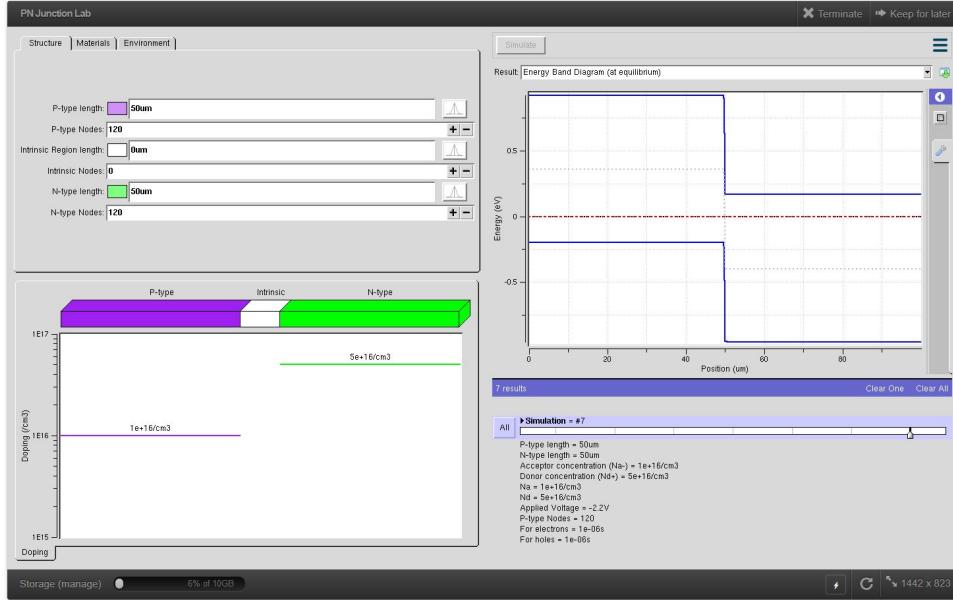


Figure 35: Interfaccia grafica pn junction lab

3 Giunzione PN

Il sistema analizzato è una giunzione pn brusca e asimmetrica in silicio a temperatura ambiente, con livelli di drogaggio nei due lati pari a $Na = 10^{16} \text{cm}^{-3}$ e $Nd = 5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, e sezione trasversale $A = 1 \text{mm}^2$.

Per simulare questo sistema risulta particolarmente conveniente l'utilizzo del ‘pn-junction lab’, un'estensione di Padre che permette di effettuare le simulazioni tramite una semplice interfaccia grafica.

3.1 Analisi

Una volta ottenuti, i risultati possono essere esportati su Matlab e analizzati con più facilità.

3.2 Diagramma a bande, zona di svuotamento e campo elettrico

Si nota immediatamente un forte riscontro tra la figura 36 e l'andamento che ci si aspetta, per confermare la validità di tali risultati si calcola il potenziale di built in:

$$q\phi_{Sp} = q\chi + \frac{E_g}{2} + k_B T \ln\left(\frac{Na}{n_i}\right) = 4.96 \text{eV} \quad (26)$$

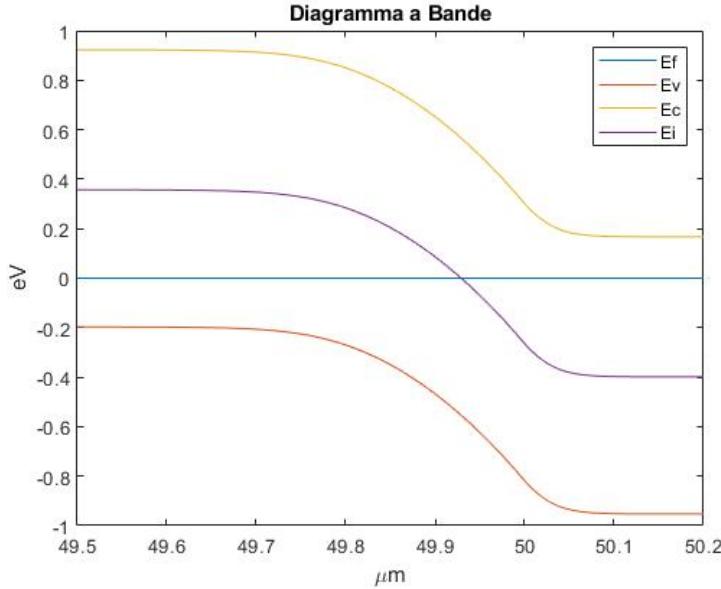


Figure 36: Diagramma a bande simulato all'equilibrio

$$q\phi_{Sn} = q\chi + \frac{E_g}{2} + k_B T \ln\left(\frac{Nd}{n_i}\right) = 4.22 eV \quad (27)$$

$$V_b i = q\phi_{Sp} - q\phi_{Sn} = 0.74 eV \quad (28)$$

Noto il potenziale di built in si possono ricavare le dimensioni delle regioni svuotate, ottenendo:

$$x_{d0} = 339 nm \quad (29)$$

$$x_{p0} = 282.5 nm \quad (30)$$

$$x_{n0} = 56.5 nm \quad (31)$$

Anche in questo caso, analizzando il grafico relativo alla densità di carica (figura 37) si ottiene una buona corrispondenza fra teoria e simulazione.

Si passa ora all'analisi del campo elettrico, dalla teoria si sa che:

$$\varepsilon(0) = -q \frac{N_a}{\epsilon} x_{p0} = -4.364 \cdot 10^4 \frac{V}{cm} \quad (32)$$

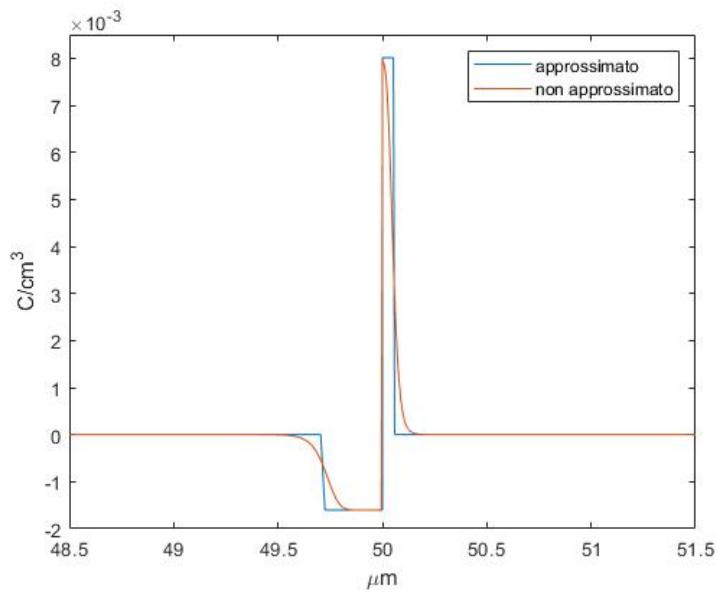


Figure 37: Densità di carica

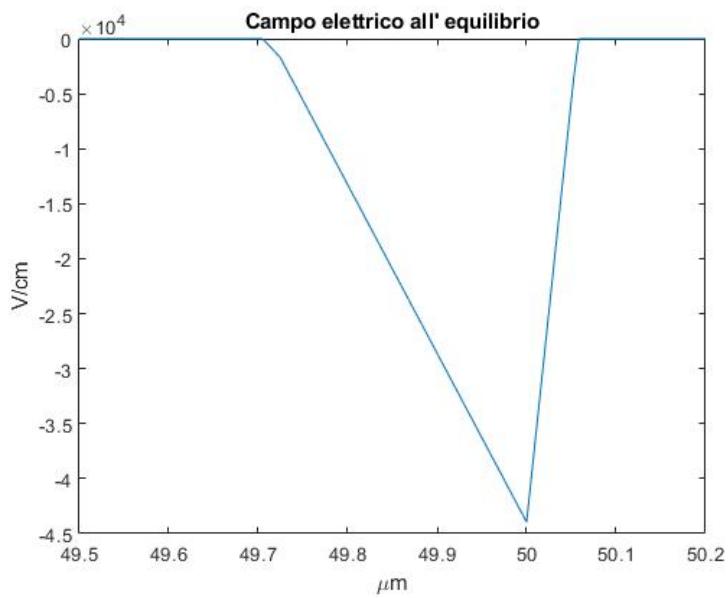


Figure 38: Campo elettrico

```

log off

log acfile=plot31474-30.ac
  solve v1=0 vstep=-0.11578947368421054 nstep=20 elect=1
+      ac freq=10

log off

end

```

Figure 39: Codice per calcolo effetti capacitivi

3.3 Capacità di svuotamento

Padre e di conseguenza le sue estensioni, come pn-junction lab, permettono di analizzare anche gli effetti capacitivi all'interno del sistema simulato tramite la porzione di codice in figura 39. Il comando log permette di salvare i risultati delle simulazioni che seguono, in particolare viene prima chiuso il log precedente tramite “log off” e poi se ne apre un secondo con “log acfile=...”.

Dalla documentazione di Padre si vede che la struttura di un comando log deve seguire la seguente sintassi:

Syntax

LOG file specification control

Dove file specification può essere una tra le seguenti possibilità:

file specification

Outfile or Ivfile = filename
Acfile = filename

Acfile si usa per salvare dati su simulazioni AC mentre invece outfile e ivfile vengono impiegati nell'analisi delle caratteristiche I-V.

Dopo questi comandi log si ha una linea solve in cui viene eseguita la simulazione della giunzione pn per diversi punti di bias.

Proprio questo permette di ottenere un grafico dell'andamento della capacità di svuotamento per unità di area al variare della tensione, mostrato in figura 40. La capacità di svuotamento ha espressione:

$$C_{dep} = A \sqrt{\frac{q\epsilon N_{eq}}{2(V_{bi} - V_a)}} \quad (33)$$

Per $V_a = 0V$ si ha

$$Teorico : C_{dep}(0) = 305.6pF \quad (34)$$

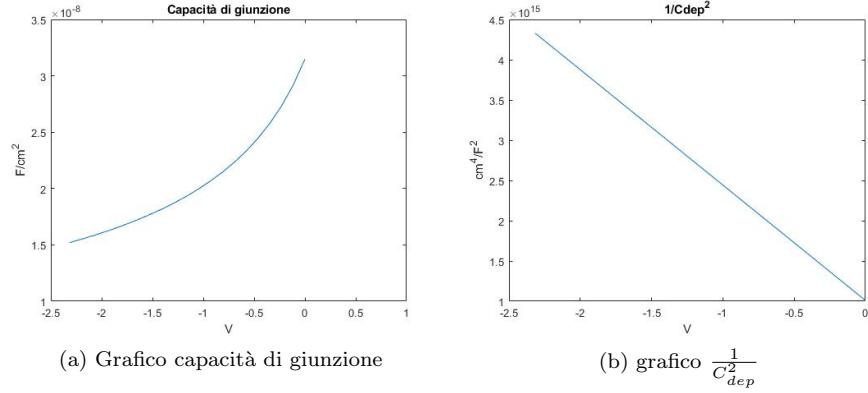


Figure 40: Capacità di giunzione

$$Simulazione : C_{dep}(0) = 314.8 \mu F \quad (35)$$

Ottenendo dunque un riscontro numerico che può essere suffragato dal confronto fra grafico ottenuto tramite Padre e quello ottenuto analiticamente (figura 41).

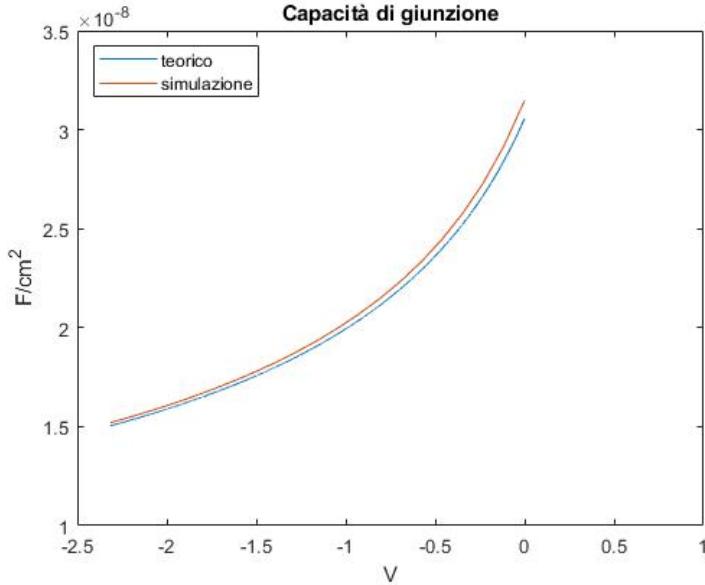


Figure 41: confronto capacità di giunzione

3.4 Analisi per bias applicato negativo

Da un'analisi del campo elettrico si può ottenere il punto di bias V_a che ne raddoppi il valore, in particolare:

$$V_{bi} - V_a = -\frac{1}{2}x_d(V_a)\varepsilon(0)|_{V_a} \quad (36)$$

Sapendo che,

$$x_d(V_a) = \sqrt{\frac{2\epsilon}{qN_{eq}}(V_{bi} - V_a)} \quad (37)$$

Si possono sostituire sia $x_d(V_a)$ che $\varepsilon(0)|_{V_a}$ nella (36),

$$V_{bi} - V_a = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\epsilon}{qN_{eq}}(V_{bi} - V_a) \cdot 2\varepsilon(0)|_{eq}} \quad (38)$$

Risolvendo per V_a si ottiene $V_a = -2.2V$.

Semplicemente cambiando il bias in pn junction lab si ottengono i dati relativi a questa nuova situazione e osservando il grafico del campo elettrico si verificano i calcoli appena effettuati.

Avendo applicato una tensione negativa si entrerà in polarizzazione inversa che comporta alcuni importanti cambiamenti tra cui, un aumento della zona di

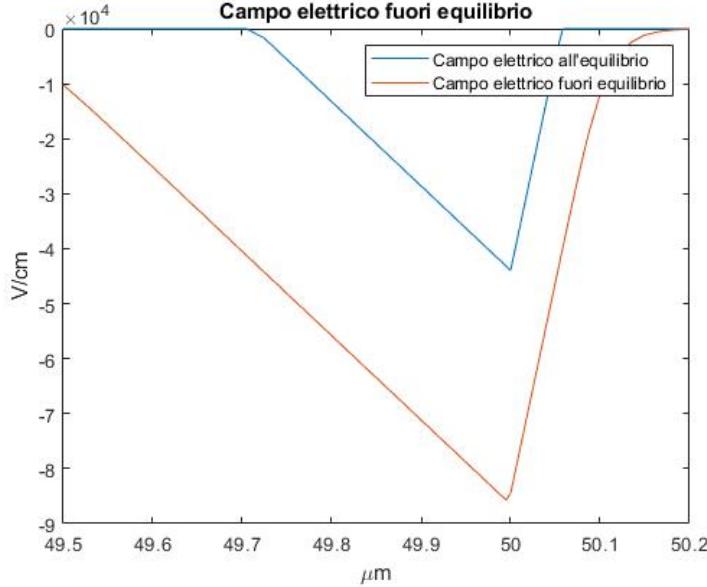


Figure 42: Confronto campo elettrico per i due punti di bias

svuotamento e della barriera di potenziale alla giunzione:

$$x_d(V_a) = \sqrt{\frac{2\epsilon}{qN_{eq}}(V_{bi} - V_a)} = 675.5nm \quad (39)$$

$$x_n = x_d \cdot \frac{N_a}{N_a + N_d} = 112.58nm \quad (40)$$

$$x_p = x_d \cdot \frac{N_d}{N_a + N_d} = 562.92nm \quad (41)$$

Osservando il diagramma a bande si ha un immediato riscontro delle affermazioni precedenti ma anche una forte differenza rispetto al caso teorico per quanto riguarda i quasi livelli di Fermi che vengono considerati costanti nella zona di svuotamento.

Considerando il quasi livello di Fermi n come asse di riferimento a 0eV si ottiene:

$$(E_{fn} - E_v)|_{+\infty} = -q\chi - E_g + q\phi_{sn} = -0.95eV \quad (42)$$

$$(E_{fp} - E_v)|_{+\infty} = q\chi + E_g - q\phi_{sp} = 0.21eV \quad (43)$$

Sapendo il valore della barriera e Efp-Ev si ottiene il valore Efp=2.2eV. Sempre seguendo il modello teorico approssimato questi livelli decadranno esponenzialmente con la ricombinazione dei minoritari iniettati nei due lati. Si può fare

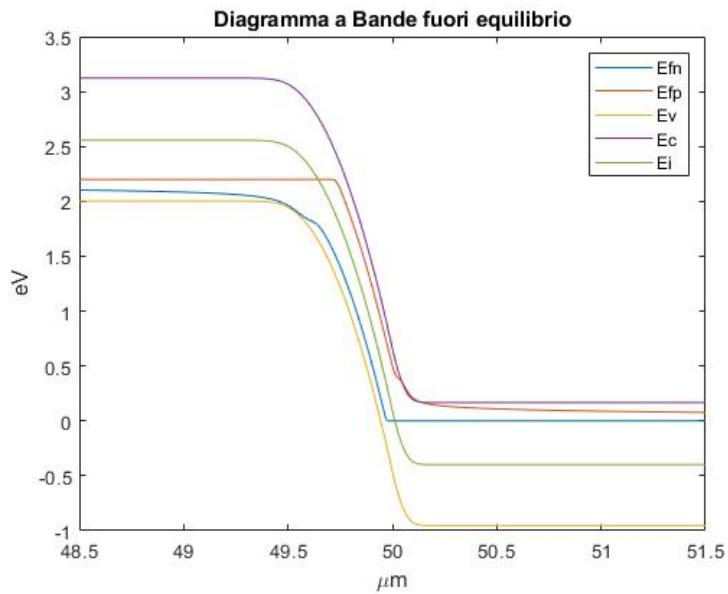


Figure 43: Diagramma a bande per $V_a = -2.2V$

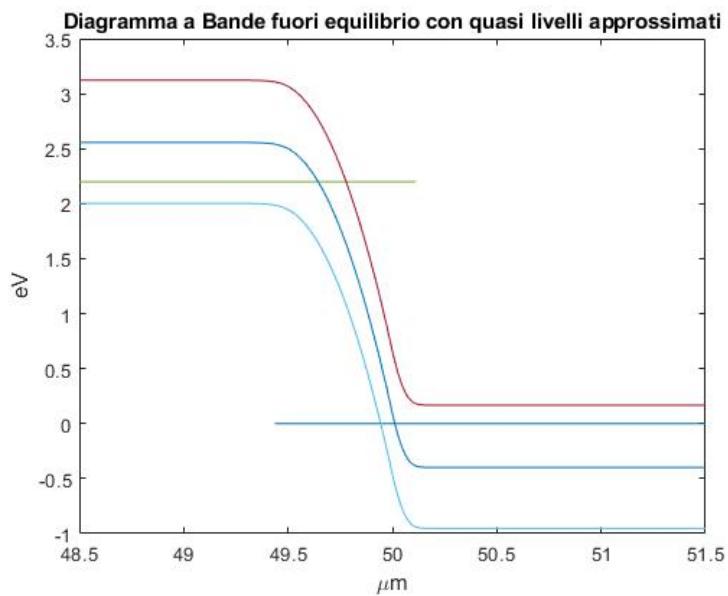


Figure 44: Diagramma a bande ottenuto dal modello teorico

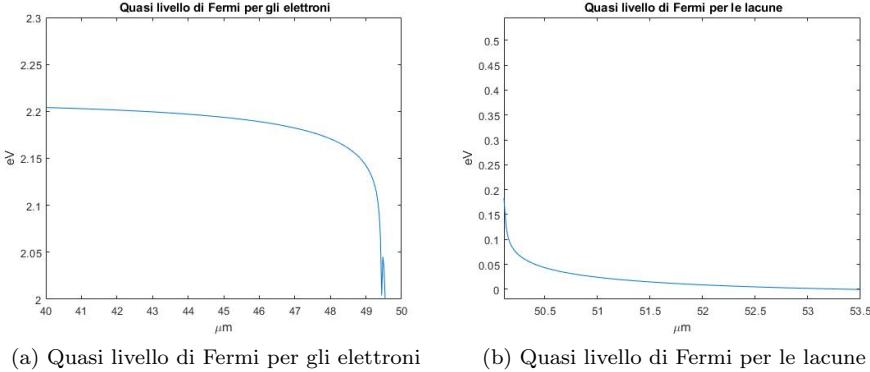


Figure 45: Evoluzione quasi livelli di Fermi

una stima di tale andamento prendendo l'espressione dei minoritari in eccesso per ciascuna delle due parti:

$$n'_p(x) = n'_p(-x_p) \frac{\sinh(\frac{w_p+x}{L_n})}{\sinh(\frac{w_p-x_p}{L_n})} \quad (44)$$

$$p'_n(x) = p'_n(x_n) \frac{\sinh(\frac{w_n-x}{L_p})}{\sinh(\frac{w_n-x_n}{L_p})} \quad (45)$$

Dove $n'_p(-x_p)$ e $p'_n(x_n)$ si sono ottenuti tramite la legge della giunzione.

A questo punto utilizzando le equazioni di Shockley si ricavano gli andamenti dei quasi livelli di Fermi:

$$E_{fn} = E_{fi} + KT \cdot \ln\left(\frac{n_{p0} + n'_p(x)}{n_i}\right) \quad (46)$$

$$E_{fp} = E_{fi} - KT \cdot \ln\left(\frac{p_{n0} + p'_n(x)}{n_i}\right) \quad (47)$$

Inserendo queste espressioni in Matlab si ottiene la figura 45.

3.5 Analisi per bias applicato positivo

Risulta a questo punto interessante confrontare questi risultati con un caso in polarizzazione diretta, in particolare $V_a=0.6V$. Osservando i diagrammi a bande si nota una sostanziale corrispondenza tra i quasi livelli di Fermi, almeno nelle zone in cui essi sono costanti. Effettuando gli stessi calcoli svolti per la polarizzazione inversa si ottengono gli andamenti esponenziali dei quasi livelli di Fermi nel modello approssimato. Bisogna notare che nella simulazione tramite pn junction lab la neutralità dei contatti viene ottenuta imponendo le concentrazioni dei portatori a zero e proprio per questo i quasi livelli hanno

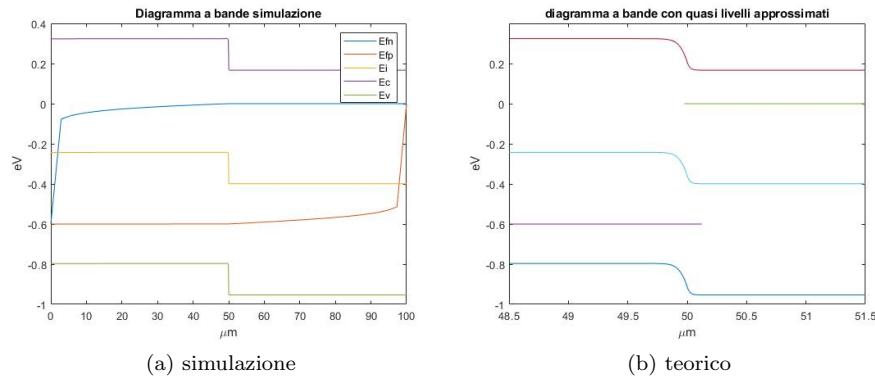


Figure 46: Confronto diagrammi a bande

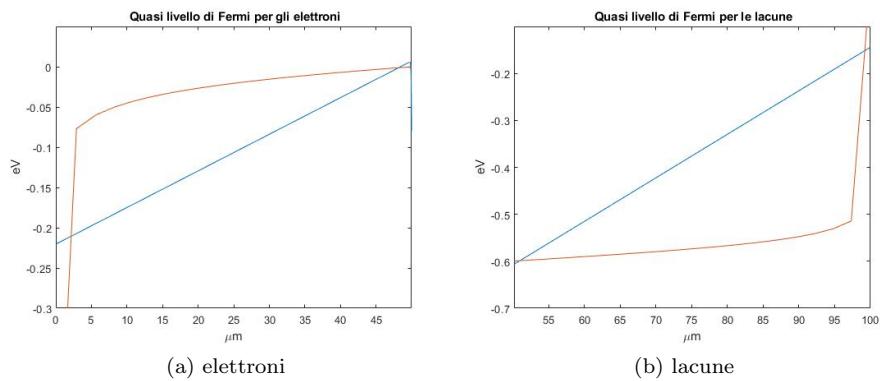


Figure 47: Confronto evoluzione quasi livelli di Fermi (in rosso quelli ottenuti tramite simulazione e in blu quelli calcolati teoricamente)

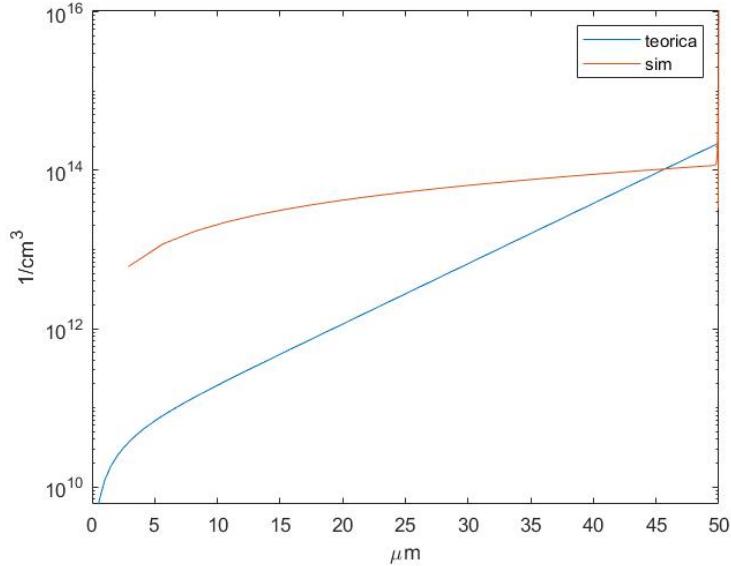


Figure 48: Confronto concentrazione elettroni

l’andamento in figura. Un’altra importante osservazione è che, rispetto al caso di polarizzazione inversa, i minoritari iniettati sono molti di più. Svolgendo i calcoli:

$$n'_p(-x_p) = \frac{n_i^2}{N_a} \cdot (e^{\frac{V_a}{V_t}} - 1) = 2.21 \cdot 10^{14} \quad (48)$$

$$p'_n(x_n) = \frac{n_i^2}{N_d} \cdot (e^{\frac{V_a}{V_t}} - 1) = 4.42 \cdot 10^{13} \quad (49)$$

Proprio per questo, tutti i minoritari non verranno ricombinati nei 50um dei due lati e dunque i quasi livelli non torneranno al valore d’equilibrio.

3.6 Analisi correnti

Si calcolano ora le correnti di minoritari nelle zone neutre, il primo passo è ovviamente ottenere l’espressioni dei minoritari,(44) e (45). In figura 48 e 49 si confrontano tali andamenti con quelli simulati, si nota immediatamente un’importante discrepanza che può essere ricondotta ancora ua volta al fatto che Padre per simulare i contatti neutri impone semplicemente le concentrazioni a 0, mutando drasticamente l’andamento risultante.Tale fenomeno potrebbe non risultare evidente dai grafici in cui in entrambi i casi l’ultimo punto sembra essere di circa 10^{12} , osservando però il file .txt su cui Padre scrive i dati in fase di esportazione il problema diventa subito evidente (figure 50 e 51)

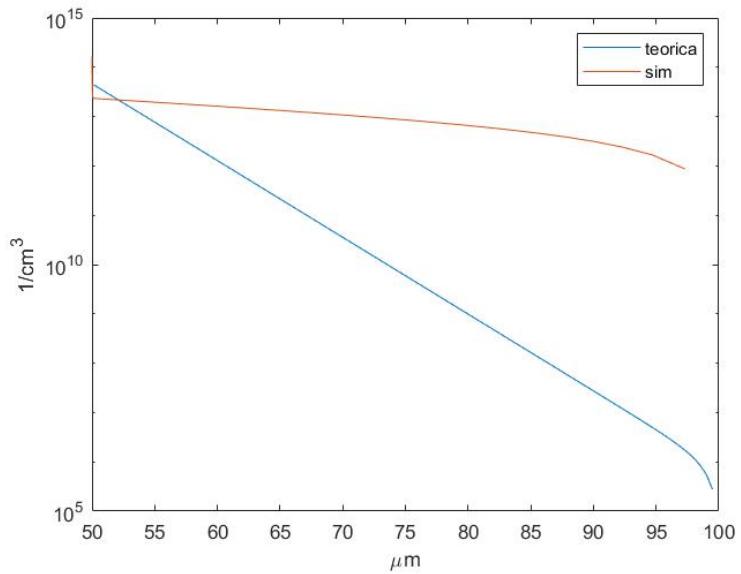


Figure 49: Confronto concentrazione lacune

1	-	n - Electron Density
2	-	
3	-	Position (um), Carrier Density (/cm³)
4		
5		0, 0
6		2.89888737459, 6071887279084.62
7		5.65283038044, 11752948215874.6
8		8.26907623601, 17169090533374.6
9		10.7545097988, 22342949306474.6
10		13.1156716834, 27293528423274.6
11		15.3587754739, 32036888837474.6
12		17.4897240747, 36586684015274.6
13		19.5141252456, 40954596697574.6

Figure 50: colonne di dati relativi alla concentrazione di elettroni simulata (μ_m a sinistra, cm^{-3} a destra)

475	70.2904990635,	10646749675414.9
476	72.5224891307,	9630022745144.92
477	74.9999981053,	8564902248054.92
478	76.5706333162,	7920400694374.92
479	78.2198002876,	7267409501164.92
480	79.9514256075,	6605771838124.92
481	81.7696321935,	5935095684054.92
482	83.6787491087,	5254687128134.92
483	85.6833218697,	4563468884144.92
484	87.7881232688,	3859879923794.92
485	89.9981647378,	3141749849114.92
486	92.3187082803,	2406135857104.92
487	94.7552789999,	1649088973794.92
488	97.3136782554,	865181106026.924
489	99.9999974738,	0

Figure 51: colonne di dati relativi alla concentrazione di lacune simulata(μ_m a sinistra, cm^{-3} a destra)

Fatta questa osservazione, si procede al calcolo delle correnti:

$$J_{n,diff}(x) = qAD_n \frac{dn'_p}{dx} = qA \frac{D_n}{L_n} n'_p(-x_p) \frac{\cosh(\frac{w_p+x}{L_n})}{\sinh(\frac{w_p-x_p}{L_n})} \quad (50)$$

$$J_{p,diff}(x) = -qAD_p \frac{dp'_n}{dx} = qA \frac{D_p}{L_p} p'_n(x_n) \frac{\cosh(\frac{w_n-x}{L_p})}{\sinh(\frac{w_n-x_n}{L_p})} \quad (51)$$

Dall'analisi delle figure 52 e 53 è chiaro che l'errore evidenziato precedentemente si propaga, ovviamente, anche nel grafico delle correnti.

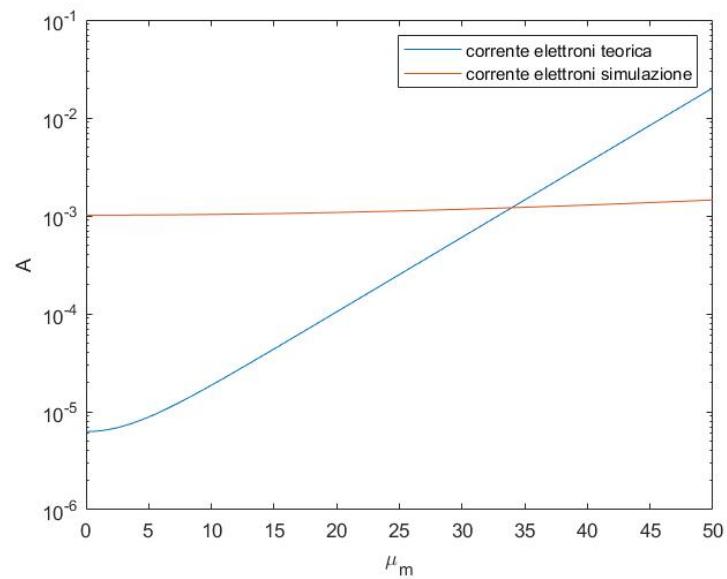


Figure 52: Confronto corrente elettroni

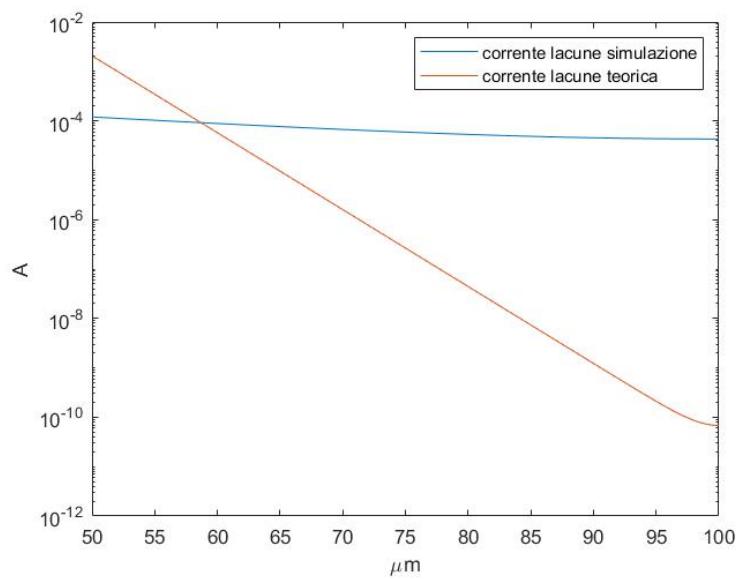


Figure 53: Confronto corrente lacune

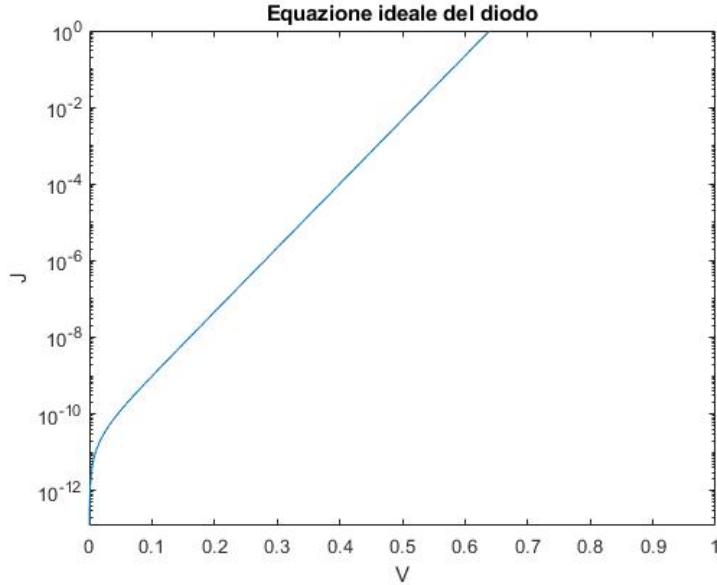


Figure 54: Equazione ideale del diodo

3.7 Effetti di generazione-ricombinazione

Nella trattazione delle correnti nella giunzione pn si giunge ad un'importante equazione chiamata *equazione ideale del diodo*:

$$J = J_s(e^{\frac{qV}{RT}} - 1) \quad (52)$$

Dove J_s è

$$J_s = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} \quad (53)$$

Utilizzando come parametri $\mu_n = 1250 \frac{cm^2}{V_s}$ e $\mu_p = 300 \frac{cm^2}{V_s}$ si ottiene l'andamento di figura 54. Si possono ancora una volta utilizzare pn junction lab e Padre per confrontare il modello teorico con il caso reale (figure 55 e 56). Si nota chiaramente che per bassi livelli di corrente il modello ideale si discosta dalla corrente reale. Questo è dovuto principalmente al fatto che nella regione di svuotamento avvengono **processi di generazione e ricombinazione** non considerati nella derivazione dell'equazione ideale del diodo.

Tenendo conto di questi effetti si complica l'espressione della corrente:

$$J = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} e^{\frac{V}{V_t}} + \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} e^{\frac{V}{V_t}} + q \frac{W}{2\tau_r} n_i e^{\frac{V}{2V_t}} \quad (54)$$

Dove W rappresenta la zona di svuotamento e τ_r il tempo di vita di ricombinazione calcolabile tramite:

$$\tau_r = \frac{1}{\sigma_0 v_{th} N_t} \quad (55)$$

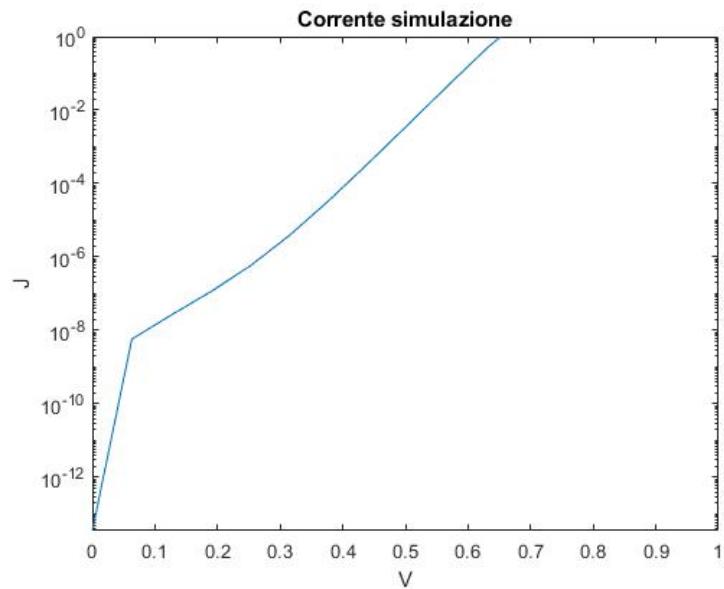


Figure 55: Corrente ottenuta da simulazione

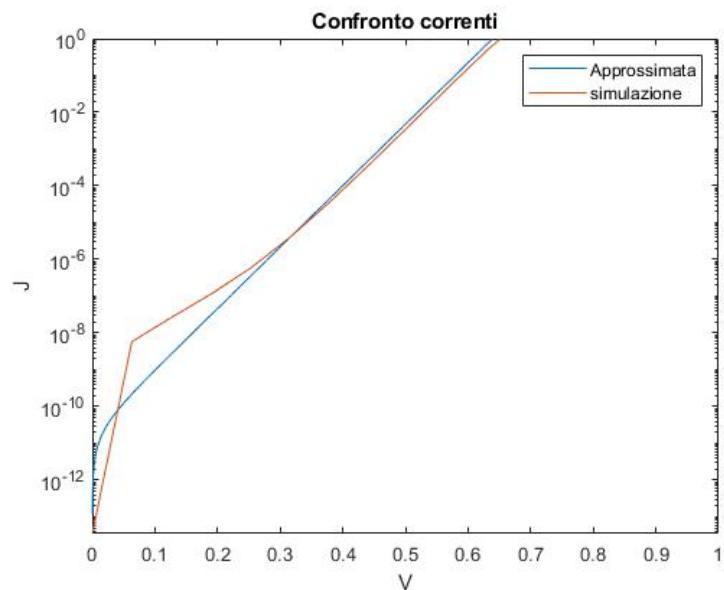


Figure 56: Confronto tra simulazione e caso ideale

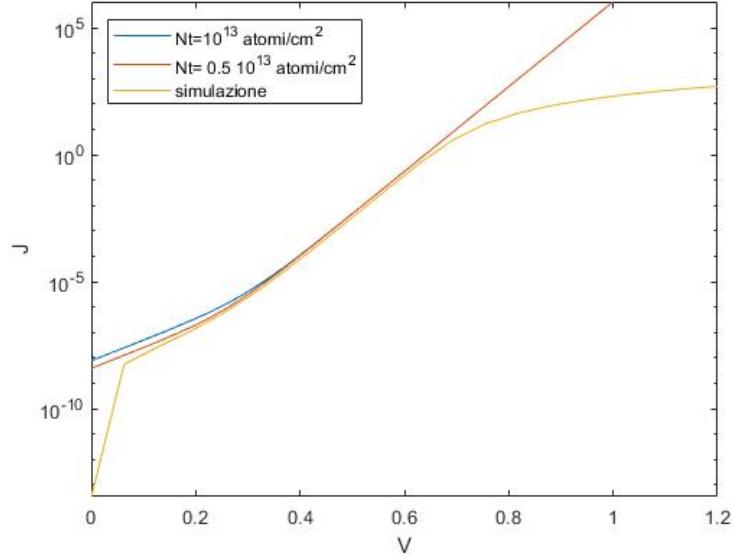


Figure 57: Confronto correnti considerando effetti di generazione e ricombinazione

Con,

- σ_0 sezione di cattura, ovvero una misura dell'efficacia di un centro di ricombinazione nel catturare un elettrone o una lacuna, espressa in cm^2 .
- v_{th} velocità termica media, ottenibile tramite $v_{th}^2 = \frac{3KT}{m_n}$ dove m_n è la massa efficace dell'elettrone.
- N_t densità dei centri di ricombinazione, espressa in $\frac{atoms}{cm^2}$.

Tutti questi valori fanno parte delle caratteristiche del modello di ricombinazione SRH, una ricombinazione di tipo indiretto. Per σ_0 e N_t si assumono valori ragionevoli come $10^{-15} cm^2$ e $10^{13} \frac{atoms}{cm^2}$, rispettivamente.

Dal grafico in figura 57 si possono trarre alcune importanti conclusioni, innanzitutto si nota che tramite questo nuovo modello si ottiene un'approssimazione decisamente migliore rispetto al caso precedente.

Successivamente, per valori di tensione e corrente bassi predomina la corrente di ricombinazione, tale concetto può essere ulteriormente analizzato tornando alla nuova espressione della corrente e introducendo il fattore di idealità η . Si può infatti notare che i termini esponenziali possono essere espressi come:

$$J \propto e^{\frac{V}{\eta V_t}} \quad (56)$$

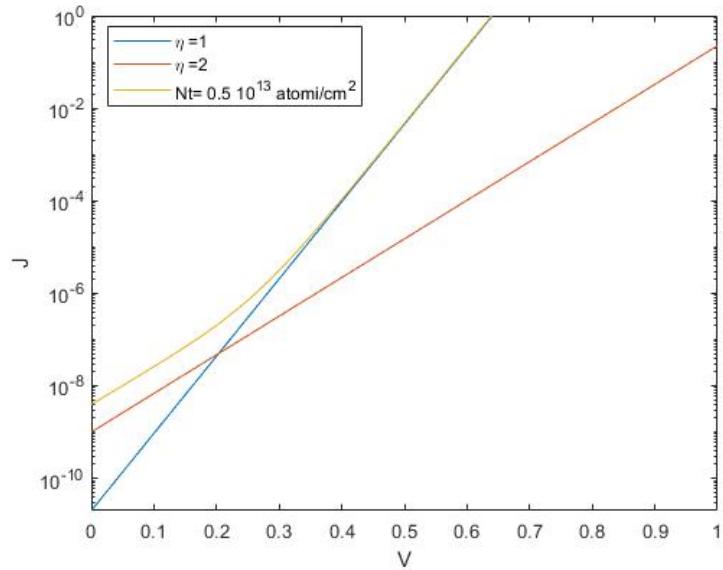


Figure 58: confronto al variare di η

Con $\eta \in [1, 2]$, per confronto, sempre utilizzando Matlab e adeguati coefficienti di proporzionalità, si può ottenere la figura 58. Si vede chiaramente che in primis l'andamento è sostanzialmente quello per $\eta = 2$, che corrisponde al contributo della corrente di ricombinazione, mentre invece per tensioni maggiori tende a predominare la corrente di diffusione con $\eta = 1$.

Osservando meglio questo grafico si può però vedere che per tensioni ancora più elevate la curva si allontana di molto anche dall'espressione della corrente che tiene conto di generazione e ricombinazione.

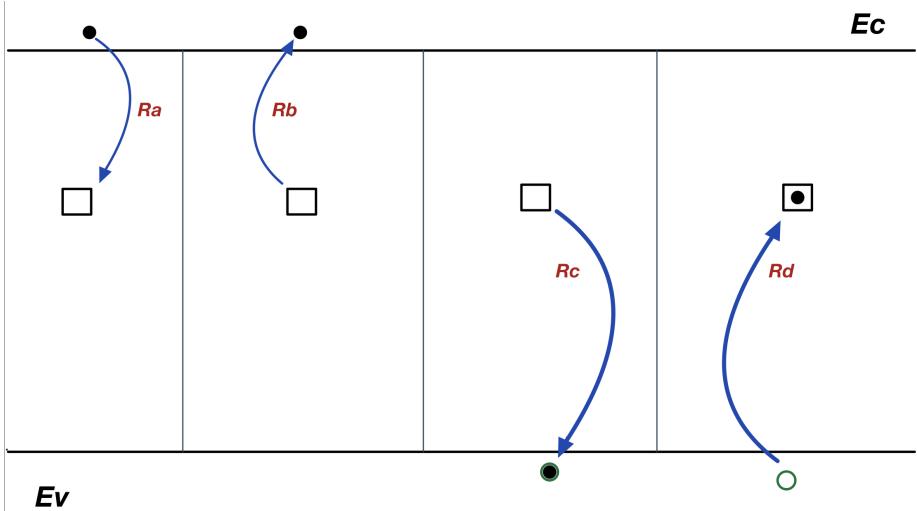


Figure 59: Interazioni fra portatori e centri di ricombinazione

4 Modello SRH

Il modello di ricombinazione Shockley-Read-Hall (SRH) è un modello di ricombinazione indiretta che meglio descrive il comportamento di semiconduttori a banda proibita indiretta come il Silicio, rispetto ad una più semplice ricombinazione diretta.

Alla base di questo modello vi è l'interazione fra i portatori nelle due bande e i **centri di ricombinazione** localizzati nella banda proibita.

4.1 Analisi dei processi fondamentali

In figura 59 si può osservare una rappresentazione dei quattro processi fondamentali alla base del modello SRH:

- **R_a**, Cattura di un elettrone
- **R_b**, Emissione di un elettrone
- **R_c**, Cattura di una lacuna
- **R_d**, Emissione di una lacuna

Vi sono dunque dei centri di ricombinazione posizionati ad un determinato livello energetico E_t nella banda proibita che facilitano i processi di generazione e ricombinazione.

Indicando con N_t la densità dei centri di ricombinazione si ha che il valore dei centri non occupati equivale a $N_t \cdot (1 - F)$, dove F è la statistica di Fermi-Dirac:

$$F = \frac{1}{1 + e^{\frac{(E_t - E_f)}{kT}}} \quad (57)$$

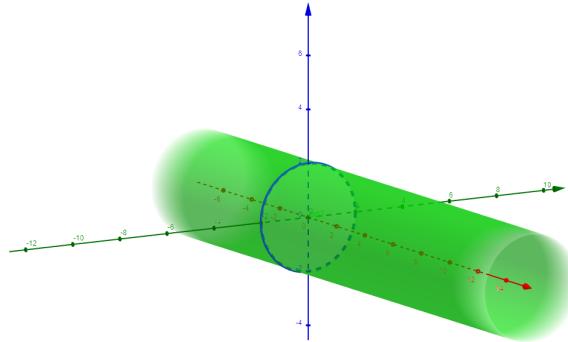


Figure 60: Visualizzazione sezione di cattura

A questo punto si può intuire che la velocità di cattura di un elettrone deve essere proporzionale al numero totale di elettroni e al numero di centri non occupati ($n \cdot N_t[1 - F]$). La relazione completa per Ra è:

$$Ra = v_{th} \sigma_n n N_t (1 - F) \quad (58)$$

dove v_{th} è la velocità termica dei portatori ($\frac{cm}{s}$) e σ_n corrisponde alla sezione di cattura (cm^2).

Per comprendere come $v_{th} \cdot \sigma_n$ sia la corretta costante di proporzionalità nella descrizione della velocità di cattura di un elettrone si osservi la figura 60.

Si supponga che un elettrone abbia come sezione trasversale un cerchio (di area pari a σ_n) analogo a quello posto nell'origine della figura e che tale elettrone si muova lungo l'asse x con velocità v_{th} . Allora l'elettrone occuperà il volume descritto dal cilindro (notare che $v_{th} \cdot \sigma_n$ dimensionalmente è $\frac{cm^3}{s}$) e **nel caso in cui un centro di ricombinazione si trovi all'interno di tale cilindro l'elettrone verrà catturato**.

Risulta a questo punto interessante vedere come varia la velocità di cattura al variare del livello energetico E_t a cui si trovano i centri di ricombinazione.

Si prende in considerazione un semplice pezzo di semiconduttore di tipo p con droggaggio $N_a = 10^{17}$ e si hanno come valori:

- $\sigma_0 = 5 \cdot 10^{-15} cm^2$
- $N_t = 2 \cdot 10^{15} \frac{atomi}{cm^3}$
- $v_{th} = 10^7 \frac{cm}{s}$
- $n = 2102.5 \frac{1}{cm^3}$

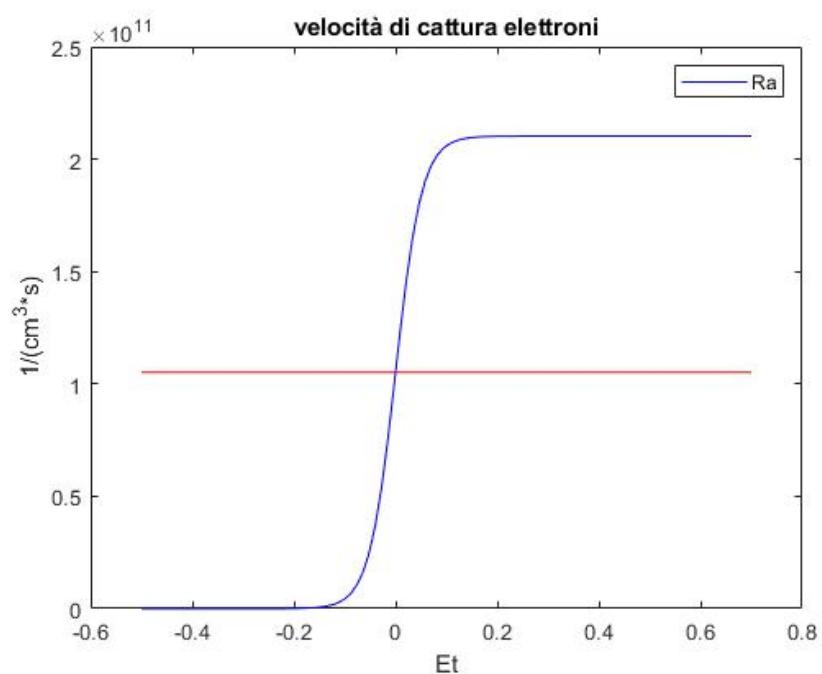


Figure 61: Ra

In figura 61 si ha la velocità di cattura in blu e in rosso il suo valore quando il livello energetico coincide con il livello di Fermi.

Si può notare come all'aumentare di E_t aumenti anche R_a , intuitivamente si può infatti pensare che per livelli energetici alti la probabilità che tali livelli siano occupati diminuisce e i centri saranno dunque disponibili per la ricombinazione di eventuali elettroni.

Per bilanciare questo fenomeno si ha l'emissione degli elettroni che corrisponde alla seconda parte della figura 1. In questo caso l'espressione sarà proporzionale al numero di centri liberi:

$$Rb = e_n \cdot N_t F \quad (59)$$

Per ottenere il fattore di proporzionalità chiamato *probabilità di emissione* si può procedere imponendo che all'equilibrio termodinamico questi ultimi due eventi devono essere uguali:

$$Ra = Rb \quad (60)$$

$$v_{th} \sigma_n n N_t (1 - F) = e_n \cdot N_t F \quad (61)$$

$$e_n = \frac{v_{th} \sigma_n n (1 - F)}{F} \quad (62)$$

Tuttavia si può notare che:

$$\frac{1 - F}{F} = \frac{1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E_t - E_f}{KT}}}}{\frac{1}{1 + e^{\frac{E_t - E_f}{KT}}}} = \frac{1}{\frac{1}{1 + e^{\frac{E_t - E_f}{KT}}} - 1} = e^{\frac{E_t - E_f}{KT}} \quad (63)$$

e per Shockley,

$$n = n_i \cdot e^{\frac{E_f - E_i}{KT}} \quad (64)$$

Sostituendo nella (62) le espressioni (63) e (64) si ottiene,

$$e_n = v_{th} \sigma_n n_i \cdot e^{\frac{E_t - E_i}{KT}} \quad (65)$$

In figura 62 si può osservare questo andamento, come ci si aspettava all'aumentare del livello energetico aumenta la probabilità che l'elettrone riesca a fare il salto in banda di conduzione.

Si possono fare ragionamenti simili per gli altri due processi, cattura ed emissione di una lacuna, R_c ed R_d rispettivamente.

$$Rc = v_{th} \sigma_p p N_t F \quad (66)$$

$$Rd = e_p \cdot N_t (1 - F) \quad (67)$$

$$e_p = v_{th} \sigma_p n_i \cdot e^{\frac{E_i - E_t}{KT}} \quad (68)$$

Dalle figure 63 e 64 si evince una sostanziale specularità dei processi di cattura ed emissione di lacune ed elettroni.

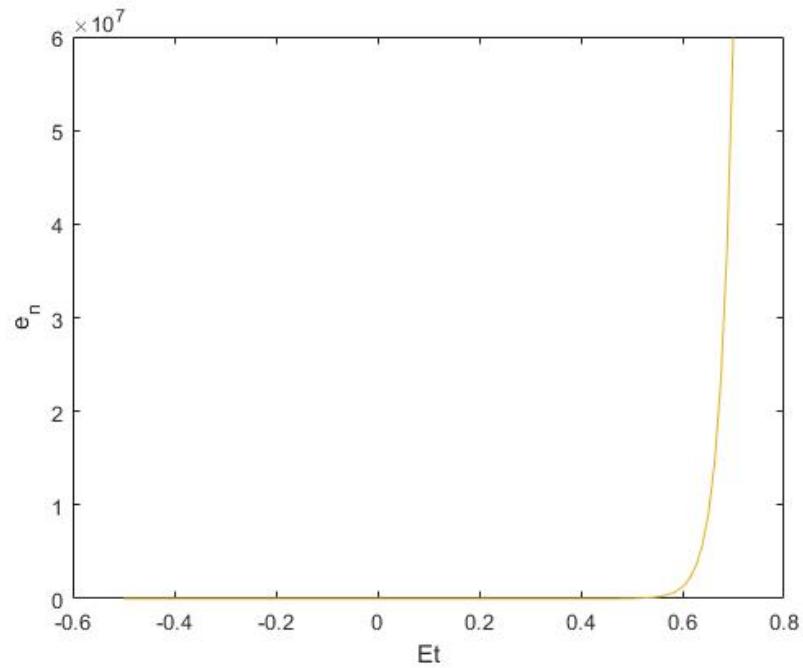


Figure 62: Probabilità di emissione degli elettroni

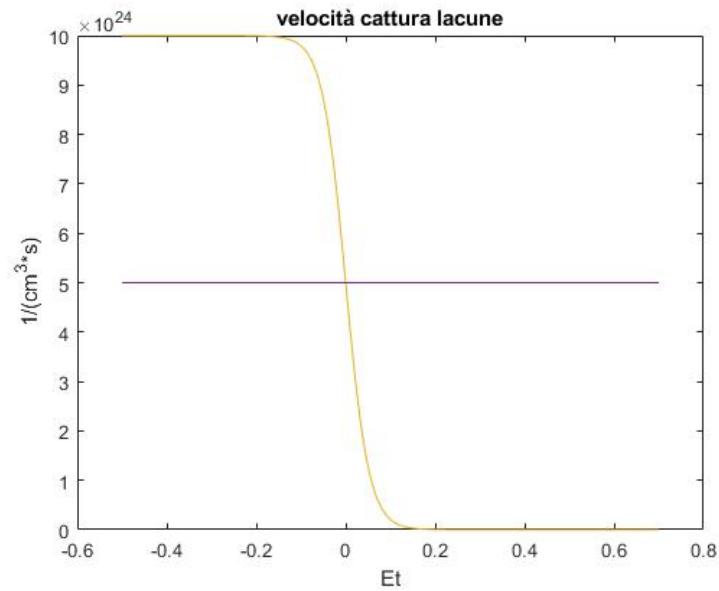


Figure 63: Velocità di cattura lacune

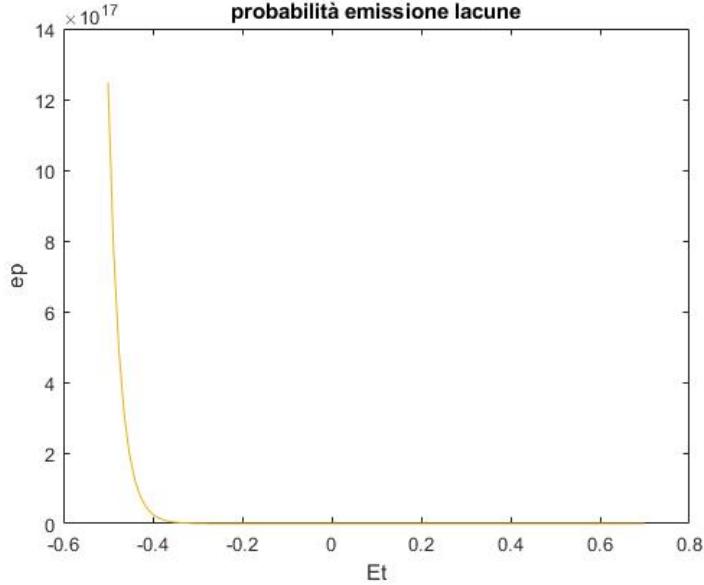


Figure 64: Probabilità di emissione lacune

4.2 Tasso di ricombinazione

Per ricavare il tasso di ricombinazione U si può osservare che per **conservazione della carica** anche in condizioni di non-equilibrio deve valere:

$$Ra - Rb = Rc - Rd \quad (69)$$

Sostituendo nella (69) le relazioni ottenute precedentemente si avrà:

$$v_{th}\sigma_n N_t [n(1-F) - F \cdot n_i \cdot e^{\frac{E_i - E_t}{KT}}] = v_{th}\sigma_p N_t [p \cdot F - n_i \cdot e^{\frac{E_i - E_t}{KT}} + n_i \cdot e^{\frac{E_t - E_i}{KT}} F] \quad (70)$$

A questo punto è importante osservare che si sta ricavando un'espressione di carattere generale che deve valere anche fuori equilibrio. Proprio per questo la distribuzione di Fermi F non può più essere considerata come fattore noto. Si procede dunque a ricavarne l'espressione a partire dalla (70).

$$v_{th}\sigma_n N_t n + v_{th}\sigma_p N_t n_i \cdot e^{\frac{E_i - E_t}{KT}} = F \cdot v_{th} N_t (\sigma_p p + \sigma_p n_i e^{\frac{E_i - E_t}{KT}} + \sigma_n n + \sigma_n n_i e^{\frac{E_t - E_i}{KT}}) \quad (71)$$

$$F = \frac{v_{th}\sigma_n N_t n + v_{th}\sigma_p N_t n_i \cdot e^{\frac{E_i - E_t}{KT}}}{v_{th} N_t (\sigma_p p + \sigma_p n_i e^{\frac{E_i - E_t}{KT}} + \sigma_n n + \sigma_n n_i e^{\frac{E_t - E_i}{KT}})} \quad (72)$$

F sarà dunque:

$$F = \frac{\sigma_n n + \sigma_p n_i e^{\frac{E_i - E_t}{KT}}}{\sigma_p p + \sigma_p n_i e^{\frac{E_i - E_t}{KT}} + \sigma_n n + \sigma_n n_i e^{\frac{E_t - E_i}{KT}}} \quad (73)$$

Sostituendo ora a primo membro della (70) si ottiene l'espressione del tasso netto di ricombinazione \mathbf{U} indipendente da F:

$$Ra - Rb = \mathbf{U} = v_{th}\sigma_n N_t \cdot \frac{\sigma_p(pn - n_i^2)}{\sigma_p(p + n_i e^{\frac{Ei-Et}{KT}}) + \sigma_n(n + n_i e^{\frac{Et-Ei}{KT}})} \quad (74)$$

4.3 Confronto con Padre

4.4 Analisi teorica

Dopo aver delineato a livello teorico questo modello di ricombinazione lo si prova ad utilizzare e confrontare con le simulazioni del tool Padre. La struttura simulata è un semplice pezzo di semiconduttore con lato $L = 400\mu m$ e droggaggio di tipo p con $Na = 10^{17} \frac{1}{cm^3}$. Su tale semiconduttore non viene applicato alcun bias ma viene illuminato sulla faccia sinistra con tasso di generazione $2 \cdot 10^{20} \frac{1}{cm^3 \cdot s}$.

Si analizzerà principalmente l'evoluzione dei portatori minoritari e quale sia la dipendenza dal livello energetico Et a cui sono posti i centri di ricombinazione. A tal proposito si cerca di semplificare l'espressione di \mathbf{U} .

In primis si può assumere che le sezioni di cattura di lacune ed elettroni siano uguali $\sigma_p = \sigma_n = \sigma_0$:

$$\mathbf{U} = v_{th}\sigma_0 N_t \cdot \frac{(pn - n_i^2)}{p + n + 2n_i \cosh(\frac{Et-Ei}{KT})} \quad (75)$$

Un'altra ipotesi valida in questa situazione è quella di *basso livello di iniezione* che porta alla seguente semplificazione:

$$\mathbf{U} = v_{th}\sigma_0 N_t \cdot \frac{(n - n_0)}{1 + \frac{2n_i}{n_0 + p_0} \cosh(\frac{Et-Ei}{KT})} \quad (76)$$

Si definisce τ_r :

$$\tau_r \equiv \frac{1 + \frac{2n_i}{n_0 + p_0} \cosh(\frac{Et-Ei}{KT})}{v_{th}\sigma_0 N_t} \quad (77)$$

Ma allora a questo punto \mathbf{U} può essere semplicemente riscritto come:

$$\mathbf{U} = \frac{n - n_0}{\tau_r} \quad (78)$$

Ottenuta questa espressione si procede nel ricavare quella dei minoritari.

Dal modello matematico dei semiconduttori si ha:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \cdot \frac{dJ_n}{dx} - \mathbf{U} \quad (79)$$

e

$$J_n = qn\mu_n\varepsilon + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (80)$$

```

ETrap      = vector      trap energy levels = Et - Ei (eV)
NTRap     = vector      trap densities (/cm**3)

```

Figure 65: Screen manuale Padre

Nella situazione in esame il campo elettrico ε si può considerare nullo non avendo bias applicato, imponendo questa condizione e la stazionarietà ($\frac{dn}{dt} = 0$) la (80) diventa:

$$D_n \frac{d^2n}{dx^2} - \mathbf{U} = D_n \frac{d^2n}{dx^2} - \frac{n'}{\tau_r} = 0 \quad (81)$$

L'equazione caratteristica sarà quindi:

$$D_n \cdot \lambda^2 - \frac{1}{\tau_r} = 0 \quad (82)$$

Le cui radici sono ovviamente:

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{1}{\sqrt{D_n \tau_r}} \quad (83)$$

La soluzione generale ha la forma:

$$n'(x) = A \cdot e^{\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_r}}} + B \cdot e^{-\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_r}}} \quad (84)$$

Con l'ipotesi di lato lungo si pone $A=0$ e conoscendo il valore nell'origine $n'(0)$ si ottiene:

$$n'(x) = n'(0) \cdot e^{-\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_r}}} \quad (85)$$

4.5 Simulazione

Tramite Padre **si possono manipolare solamente due parametri** del modello appena descritto: Nt e $Et - Ei$ (figura 65). Per avere congruenza tra sistema simulato e quello teorico si impone in Padre che il tempo di vita per gli elettroni sia $10^{-6}s$ (comando: taun0=1e-6), questo equivale a dire che (per $Et=Ei$):

$$\tau_r = \frac{1}{v_{th} \sigma_0 N_t} = 10^{-6}s \quad (86)$$

Si impone anche che la mobilità sia $\mu_n = 1247 \frac{cm^2}{s}$ e si utilizza come $n'(0)$ quello fornito da Padre, sostituendo nella (85) si ottiene la figura 66. A questo punto si cambia il posizionamento dei centri di ricombinazione scrivendo in Padre nella Material line "etrap=0.4", questo significa che $Et-Ei=0.4$ e il coseno iperbolico nell'espressione di τ_r non è più 1. Si utilizza dunque la (77) invece della (86) come espressione di τ_r , queste modifiche portano al grafico in figura 67.

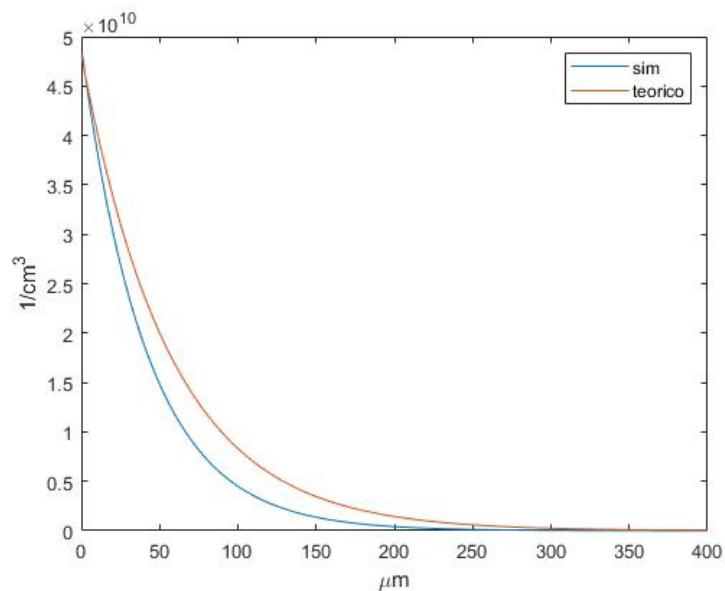


Figure 66: Confronto dell'andamento dei minoritari per $\text{Et}=\text{Ei}$

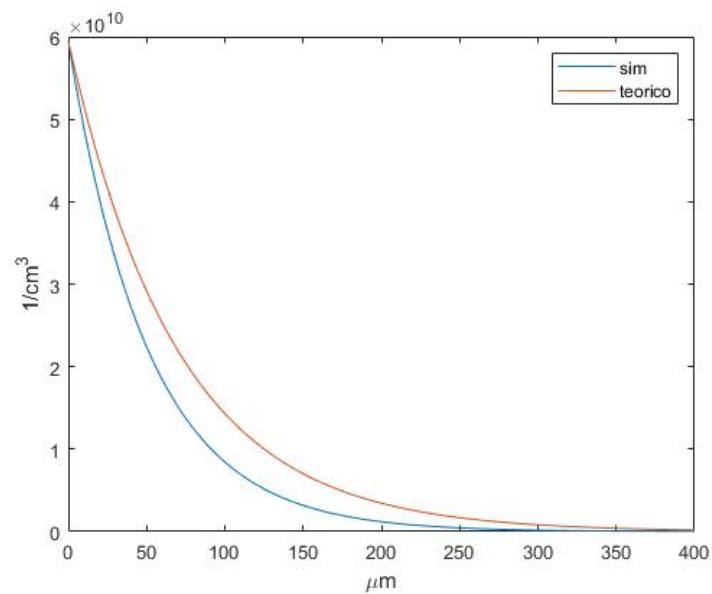


Figure 67: Confronto dell'andamento dei minoritari per $\text{Et}-\text{Ei}=0,4$

Boundary Value Problems

R2021a

Boundary value problem solvers for ordinary differential equations

Boundary value problems (BVPs) are ordinary differential equations that are subject to boundary conditions. Unlike initial value problems, a BVP can have a finite solution, no solution, or infinitely many solutions. The initial guess of the solution is an integral part of solving a BVP, and the quality of the guess can be critical for the solver performance or even for a successful computation. The `bvp4c` and `bvp5c` solvers work on boundary value problems that have two-point boundary conditions, multipoint conditions, singularities in the solutions, or unknown parameters. For more information, see [Solving Boundary Value Problems](#).

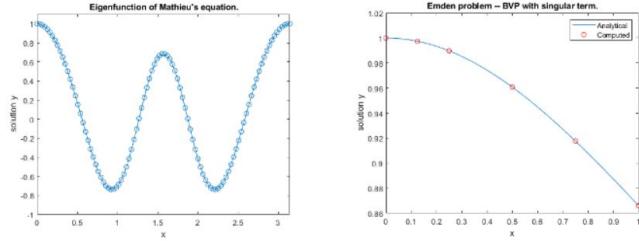


Figure 68: Descrizione bvp5c

Risulta evidente che il modello appena impiegato è un'approssimazione piuttosto grossolana del caso simulato. A tal proposito si cerca di ridurre il numero di approssimazioni fatte nella derivazione della (85), la più evidente è probabilmente quella relativa alle sezioni di cattura, ovvero:

$$\sigma_p = \sigma_n = \sigma_0 \quad (87)$$

Rimuovendo questa approssimazione si torna alla (74), il che significa che l'equazione differenziale da risolvere diventa:

$$D_n \frac{d^2n}{dx^2} - \mathbf{U} = D_n \frac{d^2n}{dx^2} - v_{th} \sigma_n N_t \cdot \frac{\sigma_p (pn - n_i^2)}{\sigma_p (p + n_i e^{\frac{Ei-Et}{KT}}) + \sigma_n (n + n_i e^{\frac{Et-Ei}{KT}})} = 0 \quad (88)$$

Per risolvere questo problema si utilizza Matlab, in particolare la funzione `bvp5c` la cui descrizione si trova in figura 68. Proprio da questa breve descrizione si evince l'importanza della **"initial guess"** nella risoluzione di tale problema. Nel caso in esame, a meno di risolvere analiticamente tale equazione differenziale, bisogna utilizzare come predizioni le espressioni delle figure 66 e 67. Operativamente in Matlab si sono implementati tre file per ciascuna delle due situazioni ($Et-Ei=0$, $Et-Ei=0.4$):

- **eqne.m**, in questo file viene descritta l'equazione vera e propria (figura 69), è importante notare come l'equazione differenziale (88) sia stata scomposta in un sistema di equazioni differenziali di primo grado nella linea 9.
- **bcfcn.m**, qui vengono specificate le condizioni al contorno, ciascun elemento del vettore res in linea 2 è da intendersi come equazione uguagliata a 0, ad esempio il primo elemento equivale a $n'(0) = 4.818e10$ (figura 70).
- **guess.m**, tramite questa funzione viene implementata la predizione descritta precedentemente. Per comprendere il codice di figura 71 si deve

```

1  function equazione=eqne(x,n)
2 - Dn=3.242e9;
3 - vth=1e7;
4 - sigman=1.8e-16;
5 - sigmap=1e-15;
6 - Nt=1e15;
7 - p=1e17;
8 - ni=9.96262e9;
9 - equazione=[n(2); (Nt*sigman*sigmap*vth*(p*n(1)-ni^2))/(Dn*((p+ni)*sigmap+sigman*(n(1)+ni)))];
```

Figure 69: eqne.m

```

1  function res=bfcfn(na,nb)
2 - res=[na(1)-4.818e10 nb(1)];
3 - end
```

Figure 70: bfcfn.m

ricordare che l'equazione differenziale originaria è stata spezzata in due equazioni separate, in particolare:

Equazione 1

$$\frac{dn_1}{dx} = n_2 \quad (89)$$

Equazione 2

$$\frac{dn_2}{dx} = v_{th}\sigma_n N_t \cdot \frac{\sigma_p(pn_1 - n_i^2)}{D_n(\sigma_p(p + n_i e^{\frac{E_i - E_t}{KT}}) + \sigma_n(n_1 + n_i e^{\frac{E_t - E_i}{KT}}))} \quad (90)$$

Tutte le funzioni appena descritte vengono messe insieme tramite il codice mostrato in figura 72, eseguendo tale codice e selezionando *sigma_n* in eqne.m di modo che si abbia perfetta congruenza tra le curve, si arriva alla figura 73.

```

1  function g=guess(x)
2 - g=[ (sqrt(3.242e9*1e-6).*exp(x./sqrt(3.242e9*1e-6))) exp(x./sqrt(3.242e9*1e-6)) ];
3 -
4 - end
```

Figure 71: guess.m

```

2451 -      xmesh=linspace(0,400,237);
2452 -      solinit=bvpinit(xmesh,@guess);
2453
2454 -      sol=bvp5c(@eqne,@bcfcn,solinit)
2455
2456
2457
2458 -      figure(16);
2459 -      plot(xn,n0);
2460 -      hold on;
2461 -      plot(sol.x,sol.y(1,:));
2462 -      legend('simulazione','soluzione numerica');
2463 -      hold off;

```

Figure 72: Utilizzo bvp5c

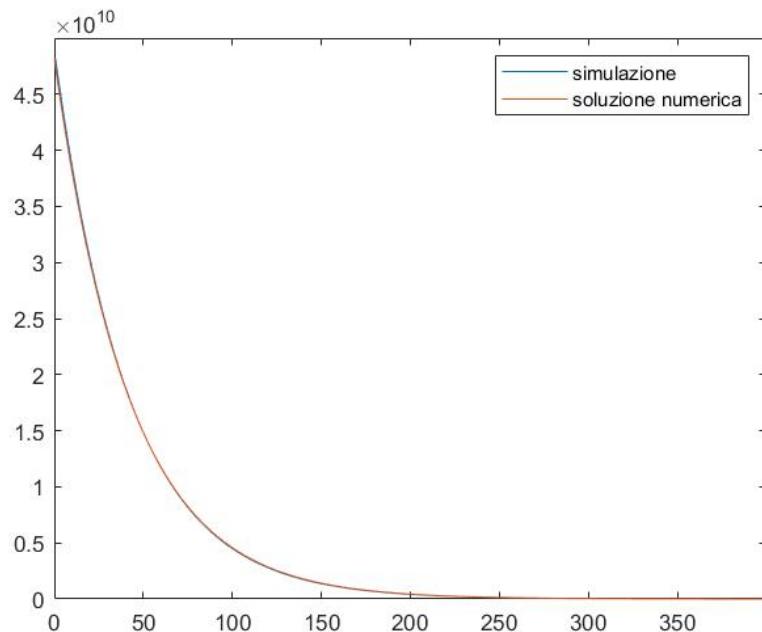


Figure 73: Confronto tra simulazione e risultato ottenuto tramite bvp5c

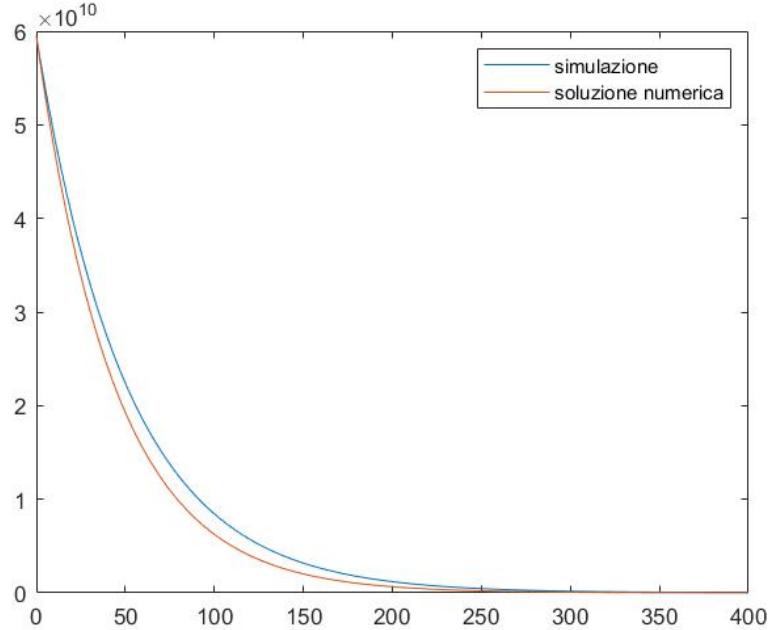


Figure 74: Confronto tra simulazione e risultato ottenuto tramite bvp5c, Et-Ei=0.4

Notare che la sovrapposizione delle curve deriva da una supposizione sul valore di σ_n . Non sapendo infatti esattamente quali σ_n e σ_{guess} utilizzzi Padre si è fatto in modo che tutti gli altri parametri coincidessero (v_{th}, D_n, N_t, p e n_i) e poi si è imposto $\sigma_n = 1.8 \cdot 10^{-16}$ a posteriori per avere sovrapposizione delle curve. Nonostante si abbia una congruenza 'artificiale' è importante notare che in ogni caso la soluzione numerica trovata da Matlab è della forma giusta a meno dei due parametri ignoti che sono stati fissati tramite questo passo iniziale.

Ripetendo una procedura analoga e utilizzando il nuovo σ_n si può ricavare l'andamento dei minoritari nel caso di Et-Ei=0.4, mostrato a confronto con la simulazione in figura 74. Analizzando la figura 74 si nota un grande miglioramento rispetto al confronto col modello semplificato ma anche una leggera differenza tra le due curve che potrebbe essere dovuta ad una cattiva predizione nel file guess.m di questa nuova situazione. Bisogna infatti ricordare che non avendo risolto analiticamente l'equazione differenziale si usa come predizione proprio la curva di figura 67 che, come sottolineato precedentemente, è un'approssimazione grossolana di quella simulata.

References

- [1] Mark R. Pinto, kent smith, Muhammad Alam, Steven Clark, Xufeng Wang, Gerhard Klimeck, Dragica Vasileska (2014), "Padre," <https://nanohub.org/resources/padre>. (DOI: 10.4231/D30C4SK7Z).
Manuale Padre.
- [2] Saumitra Raj Mehrotra, Abhijeet Paul, Gerhard Klimeck, Gloria Wahyu Budiman (2014), "Drift-Diffusion Lab," <https://nanohub.org/resources/semi>. (DOI: 10.4231/D3M90239B).
Drift Diffusion Lab
- [3] Dragica Vasileska, Matteo Mannino, Michael McLennan, Xufeng Wang, Gerhard Klimeck, Saumitra Raj Mehrotra, Benjamin P Haley (2014), "PN Junction Lab," <https://nanohub.org/resources/pntoy>. (DOI: 10.4231/D3GH9B95N).
PN Junction Lab