

Abstrakt

Modelom budú (sú) demonštrované základné javy vedenia prúdu cez PN prechod ako sú: driftový prúd, difúzny prúd, vytvorenie vyprázdnenej oblasti pri závernom pólovaní, injekcia minoritných nosičov do opačne dotovaných oblastí pri priepustnom pólovaní, volt-ampérová charakteristika a jej zodpovedajúce priestorové rozloženie elektrónov a dier.

1 Úvod

2 Rovnice polovodičov

Význam použitých symbolov:

ε	permiivta prostredia (kremíku)
ψ	elektrický potenciál
\mathbf{E}	intenzita elektrického poľa
q	náboj elektrónu
p, n	koncentrácie dier a elektrónov
N_D, N_A	koncentrácie donorov a akceptorov ¹
$\mathbf{J}_n, \mathbf{J}_p$	prúdy elektrónov a dier jednotkou plochy
μ_n, μ_p	pohyblivosti nosičov
D_n, D_p	difúzne konštanty (Fickov zákon)
U_n, U_p	miera generácie a rekombinácie elektrónov a dier

Poissonova rovnica²:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = -q(p - n + N_D - N_A) \quad (1)$$

Prúdy:

$$\mathbf{J}_n = \overbrace{qn\mu_n \mathbf{E}}^{\text{drift}} + \overbrace{qD_n \nabla n}^{\text{difúzia}} \quad (2)$$

$$\mathbf{J}_p = qp\mu_p \mathbf{E} - qD_p \nabla p \quad (3)$$

Rovnice kontinuity (zachovanie resp. časová spojitosť náboja):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{J}_n + U_n \quad (4)$$

¹Pre jednoduchosť stačí uvažovať prípad, kde všetky prímiesové atómy sú zionizované.

²Jedna z Maxwellových rovníc v diferenciálnom tvare $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$, kde $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \implies \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = -\rho$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_p - U_p \quad (5)$$

Je dobré pripomenúť vzťah $\mathbf{E} = -\nabla\psi$. Prvý sčítanec na pravej strane rovníc (2) a (3) predstavuje driftový prúd (daný pohyblivosťou nábojov a intenzitou elektrického poľa), druhý sčítanec predstavuje difúzny prúd podľa prvého Fickovho zákona, teda úmerný spádu koncentrácie nábojov a difúznej konštanty.

Rovnice (1) až (5) tvoria sústavu vzájomne previazaných nelineárnych rovníc s 5 neznámymi ($\psi, \mathbf{J}_n, \mathbf{J}_p, n, p$). Dosadením (2) do (4) a (3) do (5) je možné riešiť 3 rovnice s neznámymi (ψ, n, p). Tento postup bude využitý v stati 4.1.

3 MKP, FEniCS a stratégia riešenia

K numerickému riešeniu rovníc polovodičov použijeme diskretizáciu metódou konečných prvkov (MKP) s využitím programových nástrojov akademicko - vedeckej výpočtovej platformy FEniCS [1].

• Variacna forma • Mixed formy vs decoupling • Casova diskretizacia

4 Implementácia

•

4.1 Matematické úpravy

• Dosadením (2) do (4) a (3) do (5) a vyžitím vzťahu $\mathbf{E} = -\nabla\psi$ dostávame nasledovnú sústavu rovníc s 3 neznámymi (ψ, n, p) - tj. Poissonovu rovnicu a rovnice kontinuity elektónov a dier:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = -q(p - n + N_D - N_A) \quad (6)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot (-n\mu_n \nabla \psi + D_n \nabla n) + U_n \quad (7)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot (-p\mu_p \nabla \psi - D_p \nabla p) + U_p \quad (8)$$

• stále sú vzájomne previazané • To je dosť závažná nepríjemnosť.

• Poissonova rovnica - varacna forma atd³ •

³ dx predstavuje vektor takého rozmeru, ako je rozmer priestorových súradníc riešenej úlohy

Časová diskretizácia rovnice (7):

$$\frac{n_i - n_{i-1}}{dt} = \nabla(-\mu_n n_{i-1} \nabla \psi_i) + \nabla \cdot (D_n \nabla n_i) + U_n \quad (9)$$

$$n_i - \nabla \cdot (dt D_n \nabla n_i) = n_{i-1} - \nabla(dt \mu_n n_{i-1} \nabla \psi_i) + dt U_n \quad (10)$$

Z toho bilinéarna a lineárna forma pre MKP $a(n, v) = L(v)$ (neznámu n_i budeme ďalej označovať jednoducho n) získaná vynásobením oboch strán (10) testovacou funkciou v a následným integrovaním podľa dx :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} n v \, dx + \int_{\Omega} dt D_n \nabla n \nabla v \, dx = \\ = \int_{\Omega} n_{i-1} v \, dx - \int_{\Omega} dt \mu_n n_{i-1} \nabla \psi_i \nabla v \, dx + \int_{\Omega} dt U_n v \, dx \end{aligned} \quad (11)$$

(8)

4.2 Okrajové podmienky

i++i

4.3 Scaling

Pokiaľ majú výsledky - predovšetkým elektrických veličín ako potenciál či prúdové hustoty - kvantitatívne zodpovedať realistickým hodnotám, je nutné aplikovať realistické hodnoty materiálových i rozmerových konštánt. Tým však vzniknú obrovské rozdiely v rádoch jednotlivých veličín, čo má za následok jednak zbytočne vysokú výpočtovú cenu (resp. čas výpočtov), jednak možnú stratu numerickej riešiteľnosti. Preto sa rovnice násobia ešte pred výpočtom škálovacími konštantami [?] [?] a následne sa spätne „zrozmerňujú“ až výsledky.

Účelom tohto článku je odvodenie a zostavenie výpočtového modelu s následným kvalitatívnym overením jeho funkčnosti. Pre jednoduchosť bude preto tento model bezrozmerný, tj. konštanty budú jednotkové.

4.4 Výpočtové prevedenie (Python)

```
# Mesh and function space
nx = 100
ny = 1
mesh = RectangleMesh(Point(0.0, 0.0), Point(x_length, y_length)
    , nx, ny, 'crossed')
V = FunctionSpace(mesh, "CG", 1)
Vn=V
Vp=V
```

```
#####
## Poisson
#####
rho = Expression("q * (p - n + Nd - Na)", q=q, p=p0, n=n0, Nd=Nd
, Na=Na, degree=1)
Psi = TrialFunction(V)
v_psi = TestFunction(V)
a = -inner(grad(Psi), grad(v_psi)) * dx
L = -rho/eps_Si*v_psi*dx

Psi_result = Function(V)
#solve(a==L, Psi_result, [bc_psi1, bc_psi2])
```

```
#####
## n, p Continuity
#####
n_il = Function(Vn)
n_il.assign(n0)
n = TrialFunction(Vn)
vn = TestFunction(Vn)
#an = n*vn*dx + dt*Dn*inner(grad(n), grad(vn))*dx
an = n*vn*dx + dt*D_n*inner(grad(n), grad(vn))*dx
Ln = n_il*vn*dx + dt*mob_n*n_il*inner(grad(Psi_result), grad(vn)
)*dx

n_result = Function(Vn)
#solve(an==Ln, n_result, [bc_n1, bc_n2])

p_il = Function(Vp)
p_il.assign(p0)
p = TrialFunction(Vp)
vp = TestFunction(Vp)
ap = p*vp*dx + dt*D_p*inner(grad(p), grad(vp))*dx
Lp = p_il*vp*dx - dt*mob_p*p_il*inner(grad(Psi_result), grad(vp)
)*dx

p_result = Function(Vp)
#solve(ap==Lp, p_result, [bc_p1, bc_p2])
```

```
Psi_result = Function(V)
n_result = Function(Vn)
p_result = Function(Vp)
#solve(a==L, Psi_result, [bc_psi1, bc_psi2])
#solve(an==Ln, n_result, [bc_n1, bc_n2])
#solve(ap==Lp, p_result, [bc_p1, bc_p2])
```

5 Príklad riešenia - PN prechod; rovnovážny stav, napäťové okrajové podmienky

i++i

5.1 Interpretácia výsledkov

i++i

5.1.1 Koncentrácie voľných nosičov

i++i

5.1.2 Driftový a difúzny prúd

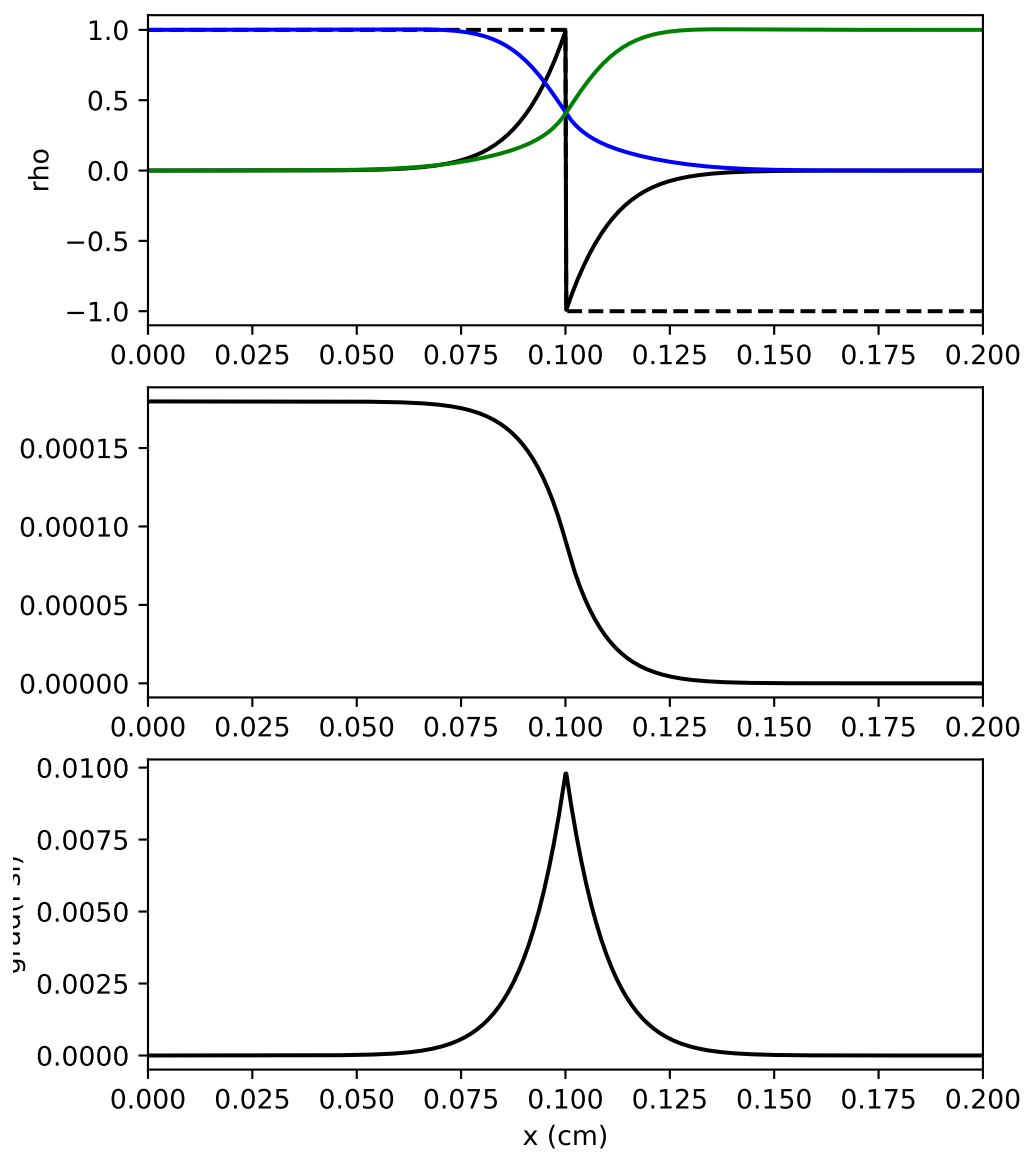
i++i

Literatúra

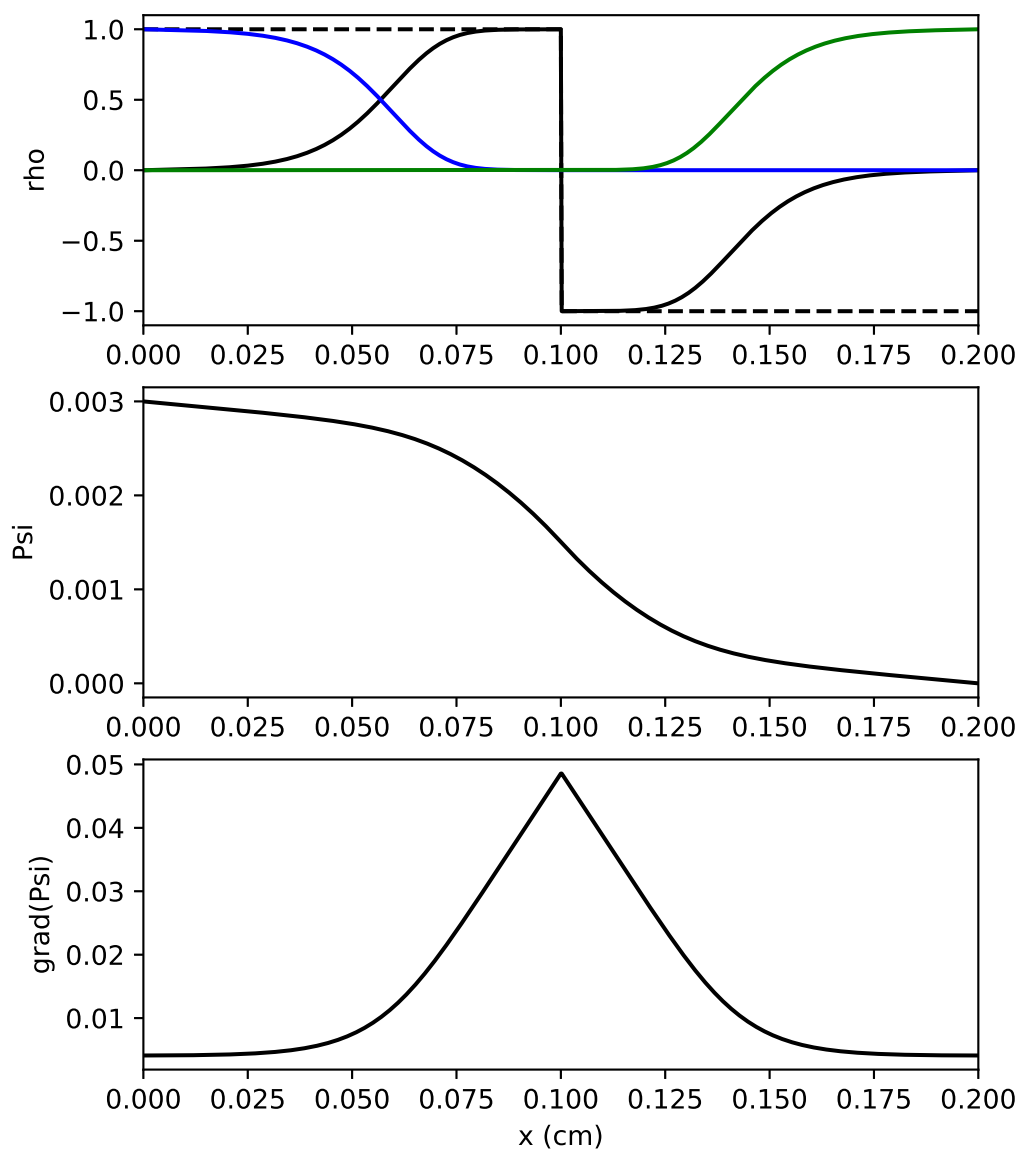
- [1] FEniCS Project. <https://fenicsproject.org>.
- [2] Anders Logg, Kent-Andre Mardal, Garth N. Wells, et al. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012.

A Zdrojový kód (Python)

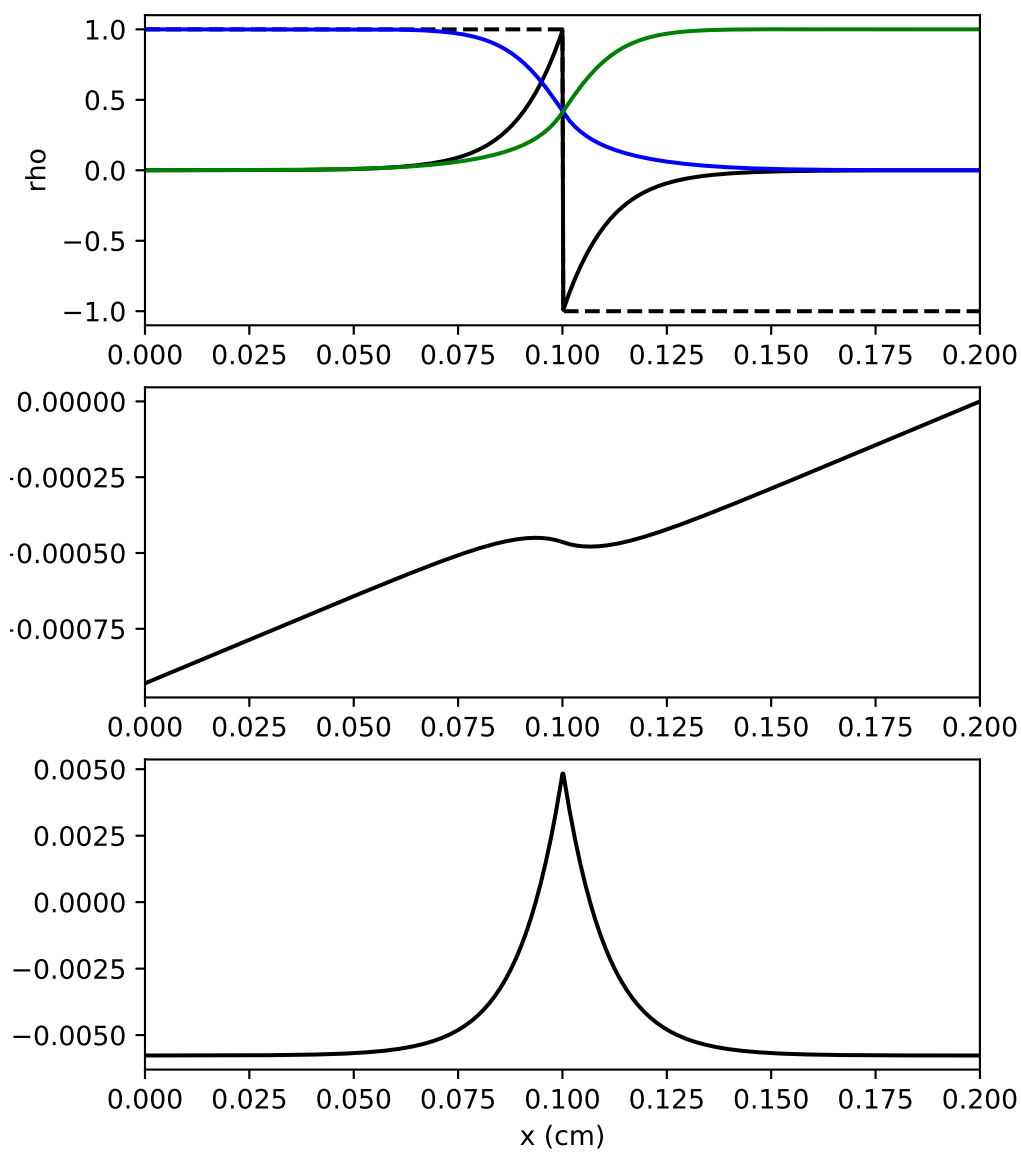
i++i



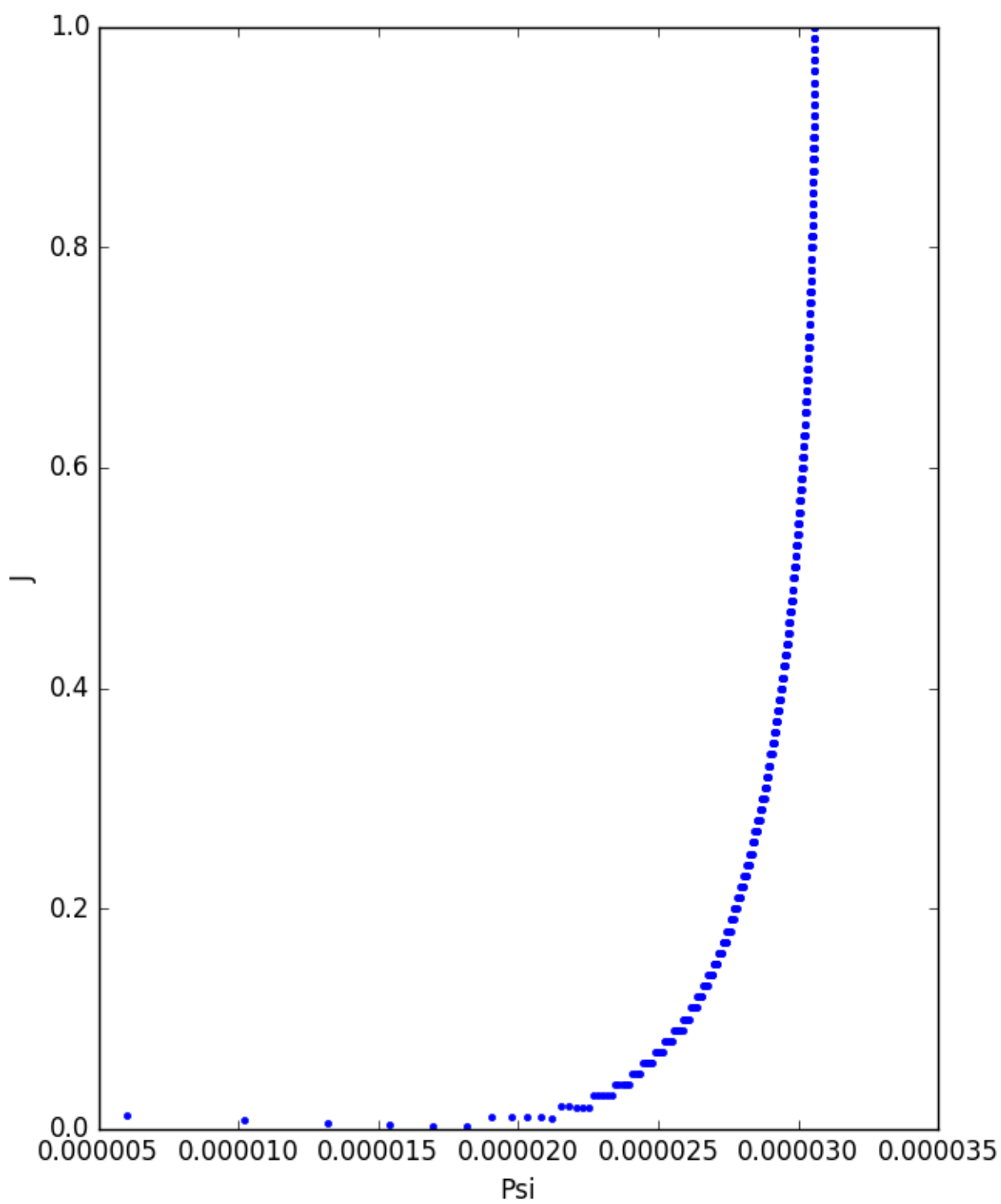
Obr. 1:



Obr. 2:



Obr. 3:



Obr. 4: