

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

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 [?].

i+Variacna forma+i+Mixed formy vs decoupling+i+Casova diskretizacia+i

4 Implementácia

i++i

4.1 Matematické úpravy

i++i Dosadením (??) do (??) a (??) do (??) 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:

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

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

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

i+stále sú vzájomne previazané+i To je dosť závažná nepríjemnosť.

i+Poissonova rovnica - varacna forma atd³+i

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

Časová diskretizácia rovnice (??):

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

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

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 (??) testovacou funkciou v a následným integrovaním podľa dx :

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

(??)

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
```