

VILNIAUS UNIVERSITETAS
Kietojo kūno elektronikos katedra
Vyksmų puslaidininkiniuose prietaisuose modeliavimas

Darbas Nr. 2

pn sandūros savybių termodinaminėje pusiausvyroje tyrimas

Parengė A. Poškus

2013-05-09

Turinys

1. Užduotys	2
2. Darbo teorija	5
2.1. Elektronų ir skylių koncentracijos puslaidininkyje. Fermio energija	5
2.2. Krūvininkų dreifas ir difuzija	9
2.3. Elektrono energijos lygmenys esant elektriniam laukui. Einšteino sąryšis	10
2.4. Netolygusis legiravimas ir vidinis elektrinis laukas.....	11
2.5. pn sandūros energijos juostų diagrama termodinaminėje pusiausvyroje. Kontaktinis potencialų skirtumas.....	13
2.6. Nuskurdinimo artinys	15
2.7. Tolygiai legiruotų p ir n puslaidininkų sandūros skaitmeninis modeliavimas.....	18
2.8. Netolygiai legiruotų p ir n puslaidininkų sandūros skaitmeninis modeliavimas	18
3. Nelyginių variantų atlikimo metodika	21
4. Lyginių variantų atlikimo metodika	24

1. Užduotys

Nelyginių variantų užduotys:

1. Ištirti nuskurdintojo sluoksnio savybes tolygiai legiruotoje pn sandūroje, kai išorinė įtampa lygi nuliui (**MicroTec** projekto vardas “**2.1 (short diode)**”).
2. Atvaizduoti erdvinio krūvio, elektronų ir skylių koncentracijų, elektrinio lauko stiprio ir potencialo pasiskirstymų pjūvius išilgai Y ašies (t. y. gilyn į padėklo tūrį). Elektronų ir skylių koncentracijos turi būti atvaizduotos viename grafike. Visus pjūvius išsaugoti vėlesnei analizei programos „SibGraf 2D“ duomenų failų pavidalu.
3. Padidinti akceptorių koncentraciją p tipo srityje 5 kartus (kad legiravimas taptų stipriai asimetrinis), atvaizduoti elektronų ir skylių koncentracijų pasiskirstymų pjūvius išilgai Y ašies. Abu pjūvius išsaugoti vėlesnei analizei programos „SibGraf 2D“ duomenų failų pavidalu.
4. Įsitikinti, kad nuskurdintajame sluoksnyje beveik nėra laisvųjų krūvininkų, t. y. kad teorinėje analizėje galima naudoti nuskurdinimo artinį.
5. Pagal užduoties Nr. 2 rezultatus nustatyti kontaktinį potencialų skirtumą V_D , didžiausią elektrinio lauko stiprį \mathcal{E}_{\max} ir nuskurdintojo sluoksnio storį w (nuskurdintojo sluoksnio storis – tai atstumas tarp taško, kuriame elektronų koncentracija lygi pusei didžiausios elektronų koncentracijos, ir taško, kuriame skylių koncentracija lygi pusei didžiausios skylių koncentracijos). Šias vertes palyginti su teorinėm vertėm, kurios apskaičiuotos, naudojant nuskurdinimo artinį.
6. Pagal užduoties Nr. 3 rezultatus nustatyti nuskurdintojo sluoksnio dalių, tenkančių n ir p sritims, storius x_{dn} ir x_{dp} , palyginti su teorinėm vertėm (x_{dn} – tai atstumas nuo p ir n sričių kontakto plokštumos iki taško, kuriame elektronų koncentracija lygi pusei didžiausios elektronų koncentracijos, o x_{dp} – tai atstumas nuo kontakto plokštumos iki taško, kuriame skylių koncentracija lygi pusei didžiausios skylių koncentracijos).

Žemiau pateiktos donorų ir akceptorių koncentracijų vertės nelyginiams variantams.

- | | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. $N_D = 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. | 19. $N_D = 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. |
| 3. $N_D = 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. | 21. $N_D = 7 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. |
| 5. $N_D = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. | 23. $N_D = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. |
| 7. $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. | 25. $N_D = 8 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. |
| 9. $N_D = 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. | 27. $N_D = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. |
| 11. $N_D = 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. | 29. $N_D = 1.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. |
| 13. $N_D = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. | 31. $N_D = 7 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. |
| 15. $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. | 33. $N_D = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. |
| 17. $N_D = 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. | |

Lyginių variantų užduotys:

1. Sumodeliuoti realistiško pn diodo gamybos procesą (jonų implantaciją ir difuziją). **MicroTec** projektai: "**2.2 (realistic diode)**", "**2.2 merge**" ir "**2.2 example**".
2. Atvaizduoti priemaišinių atomų ir krūvininkų koncentracijų, erdvinio krūvio tankio, potencialo ir elektrinio lauko stiprio pasiskirstymų pjūvius išilgai Y ašies (t. y. gilyn į padėklo tūrį) ant struktūros kairiojo krašto ($x = 0$). Priemaišinių atomų, elektronų ir skylių koncentracijos turi būti atvaizduotos viename grafike. Visus pjūvius išsaugoti vėlesnei analizei programos „SibGraf 2D“ duomenų failų pavidalu.
3. Padidinti bazės legiravimo laipsnį 10 kartų ir pakartoti 2 užduotį.
4. Pagal užduočių Nr. 2 ir Nr. 3 rezultatus nustatyti kontaktinį potencialų skirtumą V_D , didžiausią elektrinio lauko stiprį \mathcal{E}_{\max} , lauko stiprį neutraliojoje bazės dalyje (prie bazės omino kontakto, taške $y = 0.6 \mu\text{m}$) ir nuskurdintojo sluoksnio storį w , esant abiem bazės legiravimo laipsniams. Paaiškinti tų dydžių pokytį, padidinus bazės legiravimo laipsnį 10 kartų.
5. Patikrinti teorinį sąryšį tarp priemaišinių atomų koncentracijos ir elektrinio lauko potencialo netolygiojo legiravimo atveju.
6. Įsitikinti, kad elektrinio lauko stipris pasiekia maksimumą tame pačiame taške, kuriame erdvinio krūvio tankis keičia ženklą.

2 – 16 variantai	18 – 34 variantai
<p>2 – 16 lyginiuose variantuose bazė yra n tipo, o emiteris yra p tipo. Bazė legiruota fosforu, o emiteris – boru. Visų pirma implantuojamas fosforas (energija 200 keV), o po to – boras (energija 10 keV, dozė 10^{15}cm^{-3}). Atkaitinimo trukmė po fosforo implantavimo – 1 val. (modeliavimo žingsnis – 200 s), o po boro implantavimo – 5 min (žingsnis – 20 s). Fosforo implantavimo dozės įvairiems variantams:</p> <p>2. $Q_p = 1 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>4. $Q_p = 2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>6. $Q_p = 3 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>8. $Q_p = 5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>10. $Q_p = 8 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>12. $Q_p = 1 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>14. $Q_p = 1.2 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>16. $Q_p = 1.5 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.</p>	<p>18 ÷ 34 lyginiuose variantuose bazė yra p tipo, o emiteris yra n tipo. Bazė legiruota boru, o emiteris – arsenu. Visų pirma implantuojamas boras (energija 100 keV), o po to – arsenas (energija 60 keV, dozė 10^{15}cm^{-3}). Po boro implantavimo atkaitinimas nereikalingas; po arseno implantavimo atkaitinimo trukmė – 1 val. (modeliavimo žingsnis – 200 s). Boro implantavimo dozės įvairiems variantams:</p> <p>18. $Q_B = 1 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>20. $Q_B = 1.5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>22. $Q_B = 2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>24. $Q_B = 3 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>26. $Q_B = 5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>28. $Q_B = 8 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>30. $Q_B = 1 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>32. $Q_B = 1.2 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.</p> <p>34. $Q_B = 1.5 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.</p>

Kontroliniai klausimai

1. Paaiškinkite, kas yra puslaidininkio laidumo juosta, valentinė juosta ir draustinė juosta.
2. Paaiškinkite Fermio energijos fizikinę prasmę, užrašykite Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkciją. Užrašykite bendrąsias elektronų ir skylių koncentracijų išraiškas.
3. Paaiškinkite, kodėl priemaišinių atomų įterpimas gali žymiai padidinti elektronų arba skylių koncentraciją puslaidininkyje. Paaiškinkite terminus „donorai“, „akceptoriai“, „n puslaidininkis“, „p puslaidininkis“.
4. Puslaidininkinio diodo sąvoka. pn sandūros sąvoka.
5. pn diodo energijos juostų diagramos sudarymas. Kodėl, sudarius kontaktą tarp n ir p tipo puslaidininkių, atsiranda kontaktinis potencialų skirtumas? Kontaktinio potencialų skirtumo išraiška.
6. Nuskurdinimo artinio esmė.
7. Erdvinio krūvio tankio, elektrinio lauko stiprio ir potencialo priklausomybės nuo koordinatės nuskurdinimo artinyje.
8. Įrodyti, kad asimetrinio legiravimo atveju nuskurdintojo sluoksnio storį ir didžiausią elektrinio lauko stiprį lemia bazės legiravimo laipsnis.
9. Pagrindiniai skirtumai tarp tolygiai legiruotų p ir n puslaidininkių sandūros ir realistiškos pn sandūros.
10. Vidinio elektrinio lauko neutraliojoje bazės dalyje fizikinė kilmė.
11. Kodėl potencialo priklausomybė nuo koordinatės, esant netolygiam legiravimui, yra tokio paties pavidalo, kaip priemaišinių atomų koncentracijos logaritmo priklausomybė nuo koordinatės? Kuo skiriasi vidinio elektrinio lauko potencialo priklausomybės nuo koordinatės n ir p tipo puslaidininkiuose?

Literatūra

1. **Mouthaan** T. Semiconductor Devices Explained Using Active Simulation. – Baffins Lane, Chichester, England: John Wiley & Sons Ltd., 1999. – 326 p.
2. Зи С. М. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х кн. – М.: Мир, 1984.

2. Darbo teorija

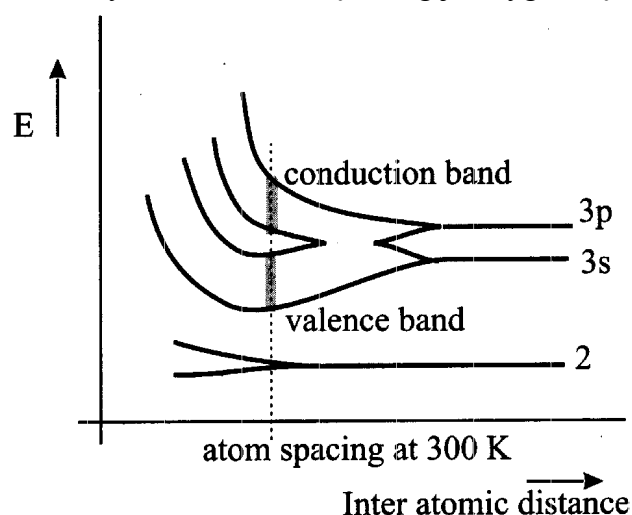
2.1. Elektronų ir skylių koncentracijos puslaidininkyje. Fermio energija

Puslaidininkių elektrines savybes lengviausia aprašyti, naudojantis *energijos juostų modeliū*. Pagrindiniai šio modelio teiginiai yra pateikti žemiau.

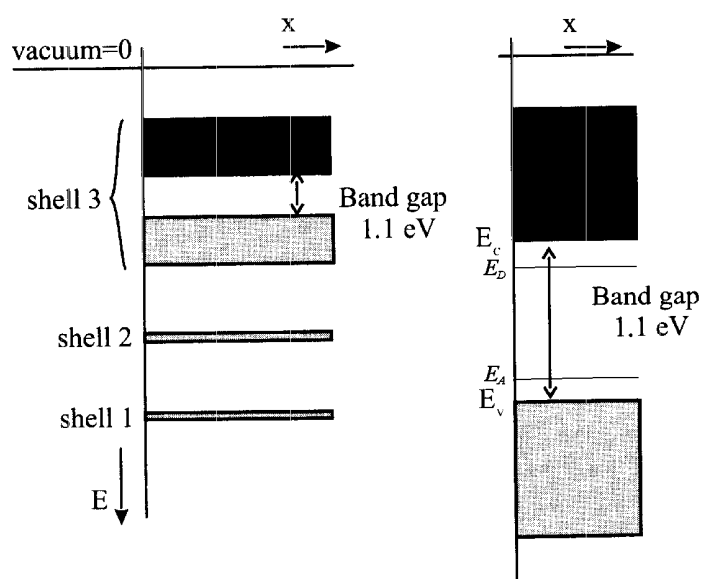
Susidarant atominiam ryšiui, dėl tarpatominių jėgų atomų energijos lygmenys išplinta, sudarydami taip vadinamas *energijos juostas* (žr. 2.1.1 pav.). Puslaidininkio elektrines savybes lemia energijos juostos, kurios susidaro, skylant lygmenims, kurie atitinka išorinį (dalinai užpildytą) elektronų sluoksnį. Pavyzdžiui, Si atomo išorinis (trečiasis) elektroninis sluoksnis turi keturis elektronus. T. y. Si kristale iš N atomų egzistuoja $4N$ elektronų, kurie dalyvauja cheminiuose ryšiuose. Todėl, susidarant Si kristalui iš N atomų, išorinio sluoksnio energijos lygmenys išplinta, sudarydami dvi energijos juostas, kurių kiekviena sudaryta iš $4N$ artimų energijos lygmenų.

Apatinioji iš jų vadinama *valentine juosta* (angl. *valence band*) o viršutinioji vadinama *laidumo juosta* (angl. *conduction band*). Tarpas tarp šių juostų vadinamas *draustine energijos juosta* (angl. *band gap*, žr. 2.1.2 pav.). Silicio draustinės energijos juostos plotis lygus 1.1 eV. Valentine juostą užima elektronai, kurie sudaro cheminį ryšį tarp Si atomų, o laidumo juostą – elektronai, kurie nėra susieti su atomais ir gali laisvai judėti kristalu. Atomų ryšys Si kristale yra *kovalentinio* tipo. Tai reiškia, kad kiekvienas iš keturių išorinio sluoksnio elektronų yra “suporuotas” su vienu kaimyninio Si atomo elektronu (elektronai, kuriuos Si atomas “gavo” iš kaimyninių atomų, papildo atomo valentinį elektronų sluoksnį iki pilno užpildymo). Kai kristalas yra žemiausios energijos būsenos, visi elektronai dalyvauja cheminiuose ryšiuose, t. y. valentinė juosta yra pilnai užpildyta, o laidumo juosta yra tuščia. Tačiau praktikoje dalis elektronų visuomet būna dėl šiluminio judėjimo sužadinti į laidumo juostą. Todėl bet kuriuo laiko momentu egzistuoja tam tikras laisvųjų elektronų skaičius laidumo juostoje. Esant išoriniam elektriniam laukui, šie elektronai juda priešinga laukui kryptimi ir tokiu būdu sukuria elektros srovę. Jeigu puslaidininkis yra grynas, tuomet valentinėje juostoje egzistuoja lygiai toks pats neužimtų būsenų skaičius. Šios neužimtų būsenos vadinamos *skylėmis*. Išoriniame elektriniame lauke skylės elgiasi kaip teigiamai įelektrintos laisvosios dalelės, t. y. juda lauko kryptimi.

Energijos juostų modelyje tikimybę, kad duotasis energijos lygmuo E yra užimtas elektrono, nusako *Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija*:



2.1.1 pav. Atomo energijos lygmenų išplitimas į energijos juostas kietajame kūne.



2.1.2 pav. Silicio energijos juostų schema.

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - F}{kT}\right)}; \quad (2.1.1a)$$

čia k yra Bolcmano konstanta, T yra temperatūra, o F yra **Fermio energija** arba **Fermio lygmuo**. Fermio lygmens fizikinė prasmė – tai vidutinis darbas, kurį reikia atlikti, norint sumažinti laisvųjų krūvininkų skaičių puslaidininkyje vienetu. T. y. Fermio lygmuo – tai cheminis potencialas, perskaičiuotas vienam krūvininkui. Termodinamikoje įrodoma, kad tuo atveju, kai sistema yra termodinaminėje pusiausvyroje (t. y. sistemoje nevyksta šilumos persiskirstymas, neteka elektros srovė, nėra difuzijos), sistemos cheminis potencialas yra vienodas visuose sistemos taškuose. Vadinasi, kai puslaidininkis yra termodinaminėje pusiausvyroje, Fermio lygmuo yra vienodas visuose puslaidininkio taškuose.

Jeigu energijos lygmuo E yra aukščiau Fermio lygmens ir jeigu $E - F \gg kT$, tada (2.1.1a) trupmenos skaitiklio antrasis (eksponentinis) dėmuo yra daug didesnis už pirmąjį dėmenį (vienetą), todėl vieneto galima nepaisyti:

$$f(E) \approx \exp\left(\frac{F - E}{kT}\right) \quad (\text{jeigu } E - F \gg kT) \quad (2.1.1b)$$

Tikimybė, kad duotasis energijos lygmuo E yra laisvas (kitai sakant, kad jį užima skylė), yra lygi $1 - f(E)$. Jeigu energijos lygmuo E yra žemiau Fermio lygmens ir jeigu $F - E \gg kT$, tada (2.1.1a) trupmenos skaitiklio antrasis (eksponentinis) dėmuo yra daug mažesnis už pirmąjį dėmenį (vienetą), todėl

$$1 - f(E) \approx \exp\left(\frac{E - F}{kT}\right) \quad (\text{jeigu } F - E \gg kT) \quad (2.1.1c)$$

Jeigu puslaidininkyje egzistuoja tam tikros tiksliai apibrėžtos energijos E būsenos, kurių koncentracija yra N , tada tos būsenos elektronų koncentracija yra lygi $N \cdot f(E)$, o tos būsenos skylių koncentracija yra lygi $N \cdot (1 - f(E))$. Remiantis šiuo faktu, yra apibrėžiamos vadinamosios efektinės būsenų koncentracijos. **Laidumo juostos efektinė būsenų koncentracija** N_c – tai yra laidumo juostos būsenų koncentracija, kuri būtų reikalinga, kad gauti teisingą laisvųjų elektronų koncentraciją, jeigu visi laidumo juostą sudarantys energijos lygmenys sutaptų su laidumo juostos apatiniu kraštu E_c . Jeigu $E_c - F \gg kT$, iš šios apibrėžties ir (2.1.1b) formulės išplaukia tokia laisvųjų elektronų koncentracijos išraiška:

$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right). \quad (2.1.2a)$$

Analogiškai, **valentinės juostos efektinė būsenų koncentracija** N_v – tai yra valentinės juostos būsenų koncentracija, kuri būtų reikalinga, kad gauti teisingą skylių koncentraciją, jeigu visi valentinę juostą sudarantys energijos lygmenys sutaptų su valentinės juostos viršutiniu kraštu E_v . Jeigu $F - E_v \gg kT$, iš šios apibrėžties ir (2.1.1c) formulės išplaukia tokia skylių koncentracijos išraiška:

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_v - F}{kT}\right). \quad (2.1.2b)$$

Tačiau reikia turėti omenyje, kad iš tikro energinės būsenos yra pasiskirsčiusios visoje leistinių energijų juostoje, o tikroji tų būsenų koncentracija nėra lygi nei N_c , nei N_v (būtent todėl būsenų koncentracijos N_c ir N_v vadinamos „efektinėmis“).

Kambario temperatūroje $kT = 0.025$ eV. Šis dydis yra daug mažesnis už draustinės juostos plotį. Dažniausiai Fermio lygmuo būna nutolęs nuo laidumo ir valentinės juostų kraštų daugiau negu per $3kT$. Todėl normaliomis sąlygomis elektronų ir skylių koncentracijų išraiškos (1.2.2a) ir (1.2.2b) yra pakankamai tikslios praktiniams taikymams.

(1.2.2a) ir (1.2.2b) formulės tinka ir gryniems, ir priemaišiniams puslaidininkiams. Parametrai N_c , N_v , E_c ir E_v priklauso nuo puslaidininkio kristalo struktūros ir beveik nepriklauso nuo priemaišų atomų rūšies ir koncentracijos. Vadinasi, vienintelis parametras, kurį gali pakeisti priemaišų atomų įterpimas į puslaidininkį, yra Fermio energija F . (1.2.2) formulėse matyti, kad

didėjant F (t. y. artėjant Fermio lygmeniui prie laidumo juostos), elektronų koncentracija auga, o skylių koncentracija mažėja, tačiau elektronų ir skylių koncentracijų sandauga nesikeičia:

$$np = N_c N_v \exp\left(\frac{E_v - E_c}{kT}\right) = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right); \quad (2.1.3)$$

čia $E_g = E_c - E_v$ yra draustinės energijos juostos plotis. Žinant vienos rūšies krūvininkų koncentraciją, pagal (2.1.3) formulę galima apskaičiuoti ir kitos rūšies krūvininkų koncentraciją.

Grynojo puslaidininkio elektronų ir skylių koncentracijos žymimos atitinkamai n_i ir p_i . Kadangi $n_i = p_i$, tai formulę (2.1.3) galima užrašyti šitaip:

$$pn = n_i^2 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right). \quad (2.1.4)$$

Tikslesnėje analizėje reikia atsižvelgti į tai, kad, augant priemaišų koncentracijai, draustinės juostos plotis E_g šiek tiek mažėja (žr. laboratorinio darbo Nr. 5a aprašą), t. y. krūvininkų koncentracijų sandauga didėja. Nors dydis n_i vadinamas "krūvininkų koncentracija grynajame silicyje", tačiau praktikoje jis dažniausiai apibrėžiamas pagal formulę (2.1.4), t. y. kaip šaknis iš krūvininkų koncentracijų sandaugos. Vadinasi, n_i taip pat didėja, augant priemaišų koncentracijai.

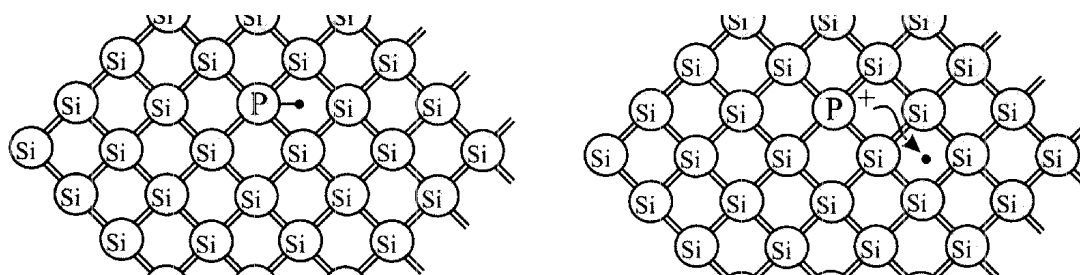
Grynujų puslaidininkių laidumas yra mažas, nes juose yra palyginti mažai laisvųjų elektronų ir skylių. Pasinaudojus tuo, kad $n_i = p_i$, ir (2.1.2) formulėmis, gaunama tokia Fermio energijos išraiška grynajam puslaidininkiiui:

$$F = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln \frac{N_c}{N_v} \approx \frac{E_c + E_v}{2} \quad (2.1.5)$$

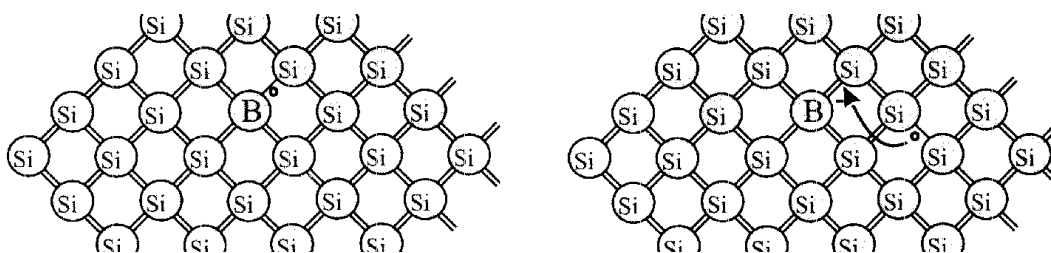
(čia pasinaudota tuo, kad N_c ir N_v yra tos pačios eilės dydžiai). Taigi, grynajame puslaidininkyje Fermio lygmuo yra maždaug ties draustinės energijos juostos viduriu, t. y. palyginti toli nuo laidumo ir valentinės juostų kraštų. Todėl skylių ir elektronų koncentracijos grynajame puslaidininkyje yra palyginti mažos. Pvz., kambario temperatūroje grynajame silicyje $n_i \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

Elektronų ir skylių skaičių silicyje galima pakeisti, pakeitus dalį silicio atomų trivalenčiais arba penkiavalenčiais atomais. Priemaišinių atomų įterpimas į puslaidininkį, siekiant pakeisti jo laidumą, vadinamas puslaidininkio *legiravimu*. Kad toks atomų pakeitimas būtų įmanomas, reikia, kad tie priemaišiniai atomai būtų maždaug tokio paties didumo kaip ir Si atomai ir kad jie galėtų difunduoti pro Si kristalo gardelę ir tokiu būdu pasklisti tam tikrame kristalo tūryje. Tokiai atomų difuzijai reikalinga aukšta temperatūra ($> 1000^\circ\text{C}$). Šio proceso technologija buvo aprašyta aukščiau. Dabar smulkiau aptarsime priemaišinių atomų vaidmenį.

Kaip minėta aukščiau, Si kristale kiekvienas Si atomas sudaro kovalentinius ryšius su keturiais kaimyniniais atomais. Šie kaimyniniai atomai yra tetraedro viršūnėse, tačiau dėl vaizdumo laikysime, kad jie yra išsidėstę kvadrato viršūnėse, t. y. trimatę gardelę pakeisime dvimate gardele (žr. 2.1.3 pav.). Tarkime, kad šioje gardelėje kai kurie Si atomai pakeisti fosforo (P) atomais. Fosforas yra penkiavalentis, t. y. jis turi penkis elektronus išoriniame sluoksnyje. Kad P atomas galėtų pakeisti Si atomą, keturi iš šių penkių elektronų turi būti suporuoti su keturių kaimyninių Si atomų elektronais (žr. 2.1.3 pav.). Jeigu gardelės energija yra maža (t. y. temperatūra yra žema), tuomet penktasis elektronas liks susijęs su fosforo atomu. Tai reiškia, kad jis užims energijos lygmenį, kuris yra žemiau laidumo juostos krašto. Kadangi šio elektrono ryšys su atomu yra silpnas, tai šis energijos lygmuo yra palyginti arti laidumo juostos krašto (2.1.2 pav. šis lygmuo pažymėtas E_D). Laidumo juostos krašto ir šio lygmens skirtumas nusako donoro atomo *jonizavimo energiją*. Jeigu temperatūra yra pakankamai aukšta, tuomet egzistuoja didelė tikimybė, kad šis penktasis elektronas atitrūks nuo P atomo ir taps laisvu elektronu, t. y. užims energijos lygmenį laidumo juostoje, o fosforo atomas taps teigiamuoju jonu (2.1.3 pav.). Tokie atomai, kurių įterpimas į puslaidininkį padidina laisvųjų elektronų skaičių, vadinami *donorais*, o atitinkami energijos lygmenys draustinėje energijos juostoje vadinami *donoriniais lygmenimis*. Iš (2.1.3) formulės išplaukia, kad, padidėjus elektronų koncentracijai, skylių koncentracija turi tiek pat kartų sumažėti. Todėl, įterpus donoro atomų į puslaidininkį, laisvųjų elektronų koncentracija jame tampa didesnis už skylių koncentraciją. Tokie puslaidininkiai vadinami *n tipo puslaidininkiais*. Fizikinė skylių koncentracijos sumažėjimo n tipo puslaidininkyje priežastis yra ta, kad elektronų perkėlimui į



2.1.3 pav. Fosforo atomas dvimatėje silicio gardelėje



2.1.4 pav. Boro atomas dvimatėje silicio gardelėje.

laidumo juostą eikvojama kristalo atomų šiluminio judėjimo energija. Jeigu kristale yra pakankamai daug donoro atomų, tuomet didžioji šios energijos dalis išeikvojama donoro atomų jonizavimui, todėl mažiau tos energijos lieka Si atomų jonizavimui (t. y. skylių sukūrimui valentinėje juostoje).

Kambario temperatūroje beveik visi fosforo atomai silicyje yra jonizuoti, t. y. netekę vieno elektrono. Vadinasi, laisvųjų elektronų koncentracijos padidėjimas dėl legiravimo fosforu yra lygus fosforo atomų koncentracijai N_D . Jeigu ši koncentracija yra daug didesnė už n_i (kuri, kaip minėta, lygi 10^{10} cm^{-3}), tuomet galima laikyti, kad $n = N_D$. Rasime Fermio energiją n tipo puslaidininkyje. Visų pirma (2.1.2a) lygybės kairiojoje pusėje pakeičiame elektronų koncentraciją n donorų koncentracija N_D . Išreiškę F , gauname:

$$F = E_c + kT \ln \frac{N_D}{N_c}.$$

Dydį N_c išreiškime elektronų koncentracija n_i grynajame puslaidininkyje. Tuo tikslu vėl pasinaudojame (2.1.2a) formule grynajam puslaidininkiui, laikydami, kad $N_c = N_v$. Tokiu atveju, pagal (2.1.5),

$$n_i = N_c \exp\left(\frac{E_v - E_c}{2kT}\right), \quad N_c = n_i \exp\left(\frac{E_c - E_v}{2kT}\right).$$

Irašius šią N_c išraišką į aukščiau užrašytą F išraišką, gaunama tokia apytikslė Fermio energijos išraiška n tipo puslaidininkiui:

$$F \approx \frac{E_c + E_v}{2} + kT \ln \frac{N_D}{n_i}. \quad (2.1.6)$$

Kaip matome, n tipo puslaidininkyje Fermio lygmuo yra pasislinkęs link laidumo juostos krašto, ir šis poslinkis yra tuo didesnis, kuo didesnė donoro atomų koncentracija N_D .

Dabar tarkime, kad Si kristalo gardelėje kai kurie Si atomai pakeisti boro (B) atomais (žr. 2.1.4 pav.). Boras yra trivalentis, t. y. jis turi tris elektronus išoriniame sluoksnyje. Šie trys elektronai sudaro kovalentines jungtis su trim kaimyniniais Si atomais (2.1.4 pav. šios jungtys pažymėtos dvigubais brūkšneliais). Ketvirtajai jungčiai susidaryti trūksta vieno elektrono, t. y. toje vietoje egzistuoja viena laisva elektroninė būseną (2.1.4 pav. ši jungtis pažymėta vienu brūkšneliu). Šios elektroninės būsenos energija yra šiek tiek didesnė už elektronų, kurie sudaro jungtis tarp Si atomų, energiją. Tai reiškia, kad ši elektroninė būseną atitinka energijos lygmenį, kuris yra aukščiau valentinės juostos krašto. Energijos kiekis, kuris reikalingas elektrono perkėlimui iš jungties tarp Si atomų į laisvą būseną prie B atomo yra palyginti mažas, todėl šis energijos lygmuo yra palyginti arti valentinės juostos krašto (2.1.2 pav. šis lygmuo pažymėtas E_A). Šio lygmens ir valentinės juostos krašto skirtumas nusako boro atomo jonizavimo energiją. Jeigu temperatūra yra pakankamai aukšta,

tuomet egzistuoja didelė tikimybė, kad šį lygmenį užpildys elektronas iš valentinės juostos. Tuomet valentinėje juostoje atsiranda skylė, o boro atomas tampa neigiamuoju jonu (2.1.4 pav.). Tokie atomai, kurių įterpimas į puslaidininkį padidina skylių skaičių, vadinami **akceptoriais**, o atitinkami energijos lygmenys draustinėje energijos juostoje vadinami **akceptoriniais lygmenimis**. Iš (2.1.3) formulės išplaukia, kad, padidėjus skylių koncentracijai, elektronų koncentracija turi tiek pat kartu sumažėti. Todėl, įterpus akceptorių atomų į puslaidininkį, laisvųjų skylių koncentracija jame tampa didesnė už elektronų koncentraciją. Tokie puslaidininkiai vadinami **p tipo puslaidininkiais**. Elektronų koncentracijos sumažėjimas p tipo puslaidininkyje aiškinamas taip pat, kaip skylių koncentracijos sumažėjimas n tipo puslaidininkyje (žr. aukščiau).

Kambario temperatūroje beveik visi boro atomai silicyje yra jonizuoti, t. y. pagavę vieną elektroną. Vadinasi, laisvųjų skylių koncentracijos padidėjimas dėl legiravimo boru yra lygus boro atomų koncentracijai N_A . Jeigu ši koncentracija yra daug didesnė už n_i , tuomet galima laikyti, kad $p = N_A$. Tokiu atveju Fermio energija p tipo puslaidininkyje randama tokiu pačiu būdu, kaip ir Fermio energija n tipo puslaidininkyje (žr. aukščiau):

$$F \approx \frac{E_c + E_v}{2} - kT \ln \frac{N_A}{n_i}. \quad (2.1.7)$$

Kaip matome, p tipo puslaidininkyje Fermio lygmuo yra pasislinkęs link valentinės juostos krašto, ir šis poslinkis yra tuo didesnis, kuo didesnė akceptorius atomų koncentracija N_A .

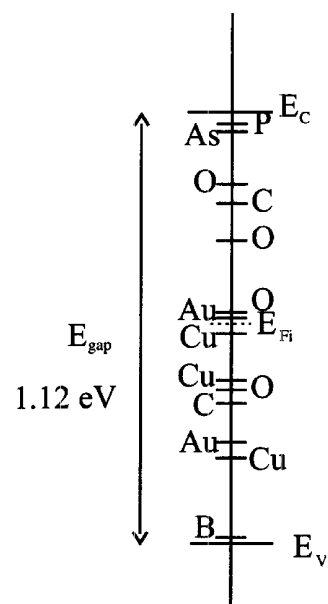
Taigi, legiravimo būdu galima padidinti elektronų arba skylių skaičių puslaidininkyje ir tokiu būdu padidinti jo laidumą. Tačiau pagrindinė legiravimo nauda yra ta, kad, sukūrus n tipo sritį p tipo padėkle arba p tipo sritį n tipo padėkle, riboje tarp p ir n sričių susidaro taip vadinama pn sandūra. pn sandūros yra daugelio puslaidininkinių prietaisų (pvz., diodų ir bipolinių tranzistorių) pagrindinis elementas. Apie pn sandūras rašoma 2.5 – 2.8 skirsniuose.

Priemaišų atomai gali būti įvairūs. Tačiau iš to, kas aukščiau pasakyta, aišku, kad donoro vaidmenį gali atlikti tik tie atomai, kurie sukuria energijos lygmenis pakankamai arti laidumo juostos krašto (t. y. lengvai netenka elektrono), o akceptorių vaidmenį gali atlikti tik tie atomai, kurie sukuria energijos lygmenis pakankamai arti valentinės juostos krašto (t. y. lengvai priima elektroną). Kitaip sakant, atomo jonizavimo energija turi būti pakankamai maža. 2.1.5 pav. pavaizduoti įvairių elementų atomų energijos lygmenys Si kristalo gardelėje. Akivaizdu, kad geriausi donoriai yra fosforas (jonizavimo energija 0.045 eV) ir arsenas (0.054 eV), o geriausias akceptorius yra boras (jonizavimo energija 0.045 eV).

Labai dažnai donorinės ir akceptorinės priemaišos egzistuoja vienu metu. Pvz., pn sandūros gaminamos, implantuojant donorinių priemaišų jonus į p tipo padėklą (t. y. į puslaidininkį, kuris turi akceptorinių priemaišų). Vadinasi, tokiu būdu sukurtose n tipo srityse vienu metu yra ir akceptorinių, ir donorinių priemaišų. Tuo atveju, kai donorių ir akceptorių koncentracijos sutampa, o priemaišų atomai yra pilnai jonizuoti, skylių ir elektronų koncentracijos taip pat sutampa, t. y. Fermio lygmuo turi būti draustinės juostos viduryje, kaip ir grynajame puslaidininkyje. Taigi, galima teigti, kad donoriai “kompensuoja” akceptorių poveikį (arba atvirkščiai). Todėl puslaidininkiai, kuriuose vienu metu yra ir akceptorinių, ir donorinių priemaišų, vadinami **kompensuotaisiais puslaidininkiais**.

2.2. Krūvininkų dreifas ir difuzija

Žinant krūvininkų koncentraciją puslaidininkyje, galima apskaičiuoti elektros srovę jame. Elektros srovę sukuria kryptingas krūvininkų judėjimas medžiagoje. **Elektros srovės tankis** – tai krūvis, kuris prateka pro bandinio skerspjūvio ploto vienetą per laiko vienetą. Kryptingas krūvininkų judėjimas, kurį sukelia elektrinis laukas, vadinamas krūvininkų **dreifu**. Elektronų dreifo srovės tankis yra proporcingas elektrinio lauko stipriui \mathcal{E} :



2.1.5 pav. Priemaišų energijos lygmenys

$$j_{dr,n} = en\mu_n \mathcal{E}; \quad (2.2.1)$$

čia μ_n yra elektronų *judris*. Skylių dreifo srovės tankio išraiška yra analogiška elektronų dreifo srovės tankio išraiškai:

$$j_{dr,p} = ep\mu_p \mathcal{E}; \quad (2.2.2)$$

čia μ_p yra skylių judris. Pilnutinis dreifo srovės tankis lygus elektronų srovės tankio (2.2.1) ir skylių srovės tankio (2.2.2) sumai:

$$j_{dr} = e(n\mu_n + p\mu_p) \mathcal{E}. \quad (2.2.3)$$

Puslaidininkiniuose prietaisuose dažnai sutinkama situacija, kai krūvininkų koncentracija vienoje prietaiso srityje labai skiriasi nuo tos pačios rūšies krūvininkų koncentracijos kitoje srityje. Tokiu atveju kartu su krūvininkų dreifu vyksta ir jų difuzija. Bet kokių dalelių, kurių koncentracija yra N , srauto tankį (t. y. dalelių skaičių ploto vienetui per laiko vienetą) vienmatės difuzijos atveju nusako pirmasis Fiko dėsnis:

$$J = -D \frac{\partial N}{\partial x}; \quad (2.2.4)$$

čia D yra difuzijos koeficientas. Elektros srovės tankis gaunamas, padauginus srauto tankį iš vienos dalelės krūvio, t. y. iš $-e$ elektronų atveju ir iš $+e$ skylių atveju. Vadinasi, elektronų ir skylių difuziniai srovės tankiai yra

$$j_{dif,n} = eD_n \frac{dn}{dx}, \quad (2.2.5a)$$

$$j_{dif,p} = -eD_p \frac{dp}{dx}, \quad (2.2.5b)$$

čia D_n yra elektronų difuzijos koeficientas, o D_p yra skylių difuzijos koeficientas. Kaip matome, elektronų difuzinės elektros srovės kryptis yra priešinga elektronų difuzinio srauto kryptiai, o skylių difuzinės elektros srovės kryptis yra ta pati kaip ir skylių difuzinio srauto kryptis.

Taigi, įskaičius difuziją, pilnutiniai elektronų ir skylių srovių tankiai yra lygūs

$$j_n = en\mu_n \mathcal{E} + eD_n \frac{dn}{dx}, \quad (2.2.6a)$$

$$j_p = ep\mu_p \mathcal{E} - eD_p \frac{dp}{dx}. \quad (2.2.6b)$$

Pirmasis dėmuo šių lygybių dešiniojoje pusėje nusako dreifo srovę, o antrasis – difuzijos srovę.

2.3. Elektrono energijos lygmenys esant elektriniam laukui. Einšteino sąryšis

Esant elektriniam laukui, atsiranda dar vienas elektrono energijos dėmuo – elektrono potencinė energija elektriniame lauke. Kaip žinoma iš elektrostatikos kurso, elektriniame lauke, kurio potencialas φ , elektrono potencinė energija lygi $-e\varphi$. Vadinasi, jeigu taške, kuriame elektrinio lauko potencialą susitarta laikyti lygiu nuliui, laidumo ir valentinės juostų kraštai yra E_{c0} ir E_{v0} , tuomet esant elektriniam laukui laidumo ir valentinės juostų kraštai priklauso nuo koordinatės šitaip:

$$E_c(x) = E_{c0} - e\varphi(x), \quad (2.3.1a)$$

$$E_v(x) = E_{v0} - e\varphi(x). \quad (2.3.1b)$$

Analogiškai nuo koordinatės priklauso ir visi kiti energijos lygmenys.

Remiantis krūvininkų koncentracijų išraiškomis (2.1.2a,b), srovės tankio išraiškomis (2.2.6a,b) ir juostų kraštų išraiškomis (2.3.1a,b), galima išvesti krūvininkų judrio ir difuzijos koeficiento sąryšį. Tarkime, puslaidininkis yra termodinaminėje pusiausvyroje. Tuomet elektronų ir skylių srovės visuose puslaidininkio taškuose yra lygios nuliui. Vadinasi, pagal (2.2.6a),

$$j_n = en\mu_n \mathcal{E} + eD_n \frac{dn}{dx} = 0. \quad (2.3.2)$$

Dabar įrašome į (2.3.2) lygtį elektronų koncentracijos išraišką (2.1.2a) ir atsizvelgiame į tai, kad termodinaminėje pusiausvyroje F yra konstanta, o laidumo juostos kraštas E_c priklauso nuo elektrinio lauko potencialo pagal (2.3.1a) formulę. Tuomet

$$\frac{dn}{dx} = N_c \frac{d}{dx} \left[\exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \right] = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \cdot \frac{e}{kT} \frac{d\varphi}{dx} = -n \frac{e\mathcal{E}}{kT}. \quad (2.3.3)$$

Irašę (2.3.3) į (2.3.2), randame judrio ir difuzijos koeficiento sąryšį:

$$D_n = \frac{kT}{e} \mu_n. \quad (2.3.4)$$

Šis sąryšis vadinamas **Einšteino sąryšiu**. Irašę difuzijos koeficiento išraišką (2.3.4) į elektronų srovės tankio išraišką (2.2.6a), randame:

$$j_n = en\mu_n \left(\mathcal{E} + \frac{kT}{e} \cdot \frac{1}{n} \frac{dn}{dx} \right). \quad (2.3.5a)$$

Analogiška formulė galioja skylių srovei:

$$j_p = ep\mu_p \left(\mathcal{E} - \frac{kT}{e} \cdot \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} \right). \quad (2.3.5b)$$

Naudojantis šiomis formulėmis, galima palyginti dvi “varomąsias jėgas”, kurios lemia krūvininkų judėjimą puslaidininkyje: dreifą (\mathcal{E}) ir difuziją $(kT/en)(dn/dx)$. Šiose formulėse matyti, kad tuo atveju, kai krūvininkų koncentracija yra didelė, difuzinė srovė yra daug mažesnė už dreifo srovę. Tačiau šalutinių krūvininkų, kurių koncentracija yra maža, difuzinė srovė gali prilygti dreifo srovei arba netgi daug kartų viršyti dreifo srovę.

Jeigu pilnutinė elektros srovė yra nelygi nuliui, tada nėra termodinaminės pusiausvyros, todėl sistemos negalima apibūdinti viena nepriklausančia nuo koordinatės Fermio energija. Tačiau dažnai galima teigti, kad egzistuoja *lokali* termodinaminė pusiausvyra, t. y. puslaidininkio tūrį galima suskaidyti į mažus elementus, kurių kiekviename krūvininkai yra termodinaminėje pusiausvyroje vienas su kitu (nors jie nėra termodinaminėje pusiausvyroje su kitais tūrio elementais). Tada turi prasmę *priklausančio nuo koordinatės* Fermio lygmens sąvoka. Šiuo atveju taip pat galioja krūvininkų koncentracijų išraiškos (2.1.2a,b). Srovės išraišką Fermio energijos gradientu nesunku išvesti remiantis (2.3.5a,b) formulėmis. Jeigu nuo koordinatės x priklauso ne tik potencialas φ , bet ir Fermio energija F , tada

$$\frac{dn}{dx} = N_c \frac{d}{dx} \left[\exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \right] = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \cdot \frac{1}{kT} \left(\frac{dF}{dx} + e \frac{d\varphi}{dx} \right) = \frac{n}{kT} \left(\frac{dF}{dx} - e\mathcal{E} \right). \quad (2.3.6)$$

Irašę (2.3.6) išraišką į (2.3.5a), gauname:

$$j_n = n\mu_n \frac{dF}{dx}. \quad (2.3.7a)$$

Analogiškai gauname ir skylių srovės tankio išraišką Fermio energijos gradientu:

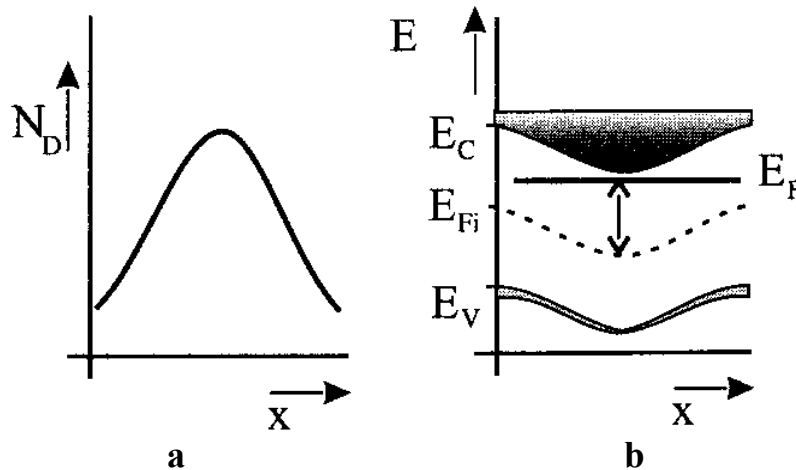
$$j_p = p\mu_p \frac{dF}{dx}. \quad (2.3.7b)$$

2.4. Netolygus legiravimas ir vidinis elektrinis laukas

Donorinių arba akceptorinių priemaišų pasiskirstymas puslaidininkio tūryje retai būna tolygus, t. y. dažniausiai priemaišinių atomų koncentracija priklauso nuo koordinatės. Taip yra dėl puslaidininkinių struktūrų gamybos technologijos, kuri remiasi difuzijos arba jonų implantavimo metodais (jie aprašyti laboratorinio darbo Nr. 1 aprašo teorinėje dalyje). Ir difuzijos, ir jonų implantavimo atveju gaunamas priemaišinių atomų koncentracijos profilis, kuris yra Gauso funkcijos pavidalo arba yra panašus į Gauso funkciją, t. y. turi maksimumą tam tikrame taške ir monotoniškai mažėja tolstant nuo to taško. Taigi, praktikoje dažniausiai gaunamas vadinamasis **netolygus legiravimas**: priemaišinių atomų koncentracija priklauso nuo koordinatės. Įsitikinsime, kad puslaidininkio netolygus legiravimas sąlygoja vidinio elektrinio lauko atsiradimą ir energijos juostų „užlinkimą“. Visų pirma aptarsime n puslaidininkį, kurio donorų koncentracija priklauso nuo koordinatės. Kadangi n puslaidininkyje elektronų koncentracija yra praktiškai lygi donorų koncentracijai, tai netolygiojo legiravimo atveju atsiranda elektronų koncentracijos gradientas. Elektronai difunduoja jų koncentracijos mažėjimo kryptimi, t. y. į šalis nuo priemaišų

koncentracijos maksimumo. Todėl elektronų koncentracija prie maksimumo šiek tiek sumažėja. Atitinkamai, toje srityje jonizuotų donorių koncentracija tampa šiek tiek didesnė už elektronų koncentraciją, ir dėl to atsiranda perteklinis teigiamas krūvis. Šis krūvis traukia aplinkinius elektronus, ir neleidžia jiems nudifunduoti toli. Todėl nusistovi stacionarus erdvinio krūvio pasiskirstymas (teigiamas erdvinis krūvis, kurį supa neigiamo erdvinio krūvio sritis), kuris sąlygoja anksčiau minėtą elektrinį lauką. Vadinasi, netolygiai legiravus puslaidininkį donorinėmis priemaišomis, atsiranda vidinis elektrinis laukas, kuris nukreiptas donorių koncentracijos mažėjimo kryptimi. Netolygiai legiravus puslaidininkį akceptorinėmis priemaišomis, atsiranda elektrinis laukas, kuris nukreiptas akceptorinių koncentracijos didėjimo kryptimi.

Susiesime šio elektrinio lauko potencialą ir priemaišų koncentraciją. Iš elektronų ir skylių koncentracijų išraiškų (2.1.2a,b) išplaukia, kad krūvininkų koncentracijos logaritmas yra proporcingas skirtumui tarp Fermio lygmens ir laidumo arba valentinės juostos krašto. Vadinasi, šio energijų skirtumo priklausomybė nuo erdviųjų koordinačių turėtų būti tos pačios formos kaip ir krūvininkų koncentracijos logaritmo priklausomybė nuo erdviųjų koordinačių. Kadangi Fermio lygmuo – tai cheminis potencialas, tenkantis vienam krūvininkui, tai termodinaminėje pusiausvyroje jis yra vienodas visuose sistemos taškuose. Vadinasi, termodinaminėje pusiausvyroje skirtumai $F - E_c$ ir $E_v - F$ priklauso nuo koordinatės tik tada, kai E_c ir E_v priklauso nuo koordinatės. Šios priklausomybės priežastis – elektrostatinio potencialo φ , kuris įeina į energijų E_c ir E_v išraišką (2.3.1a,b), priklausomybė nuo koordinatės (elektrinio lauko stipris yra nelygus nuliui tada ir tik tada, kai φ kinta erdvėje, nes elektrinio lauko stipris yra lygus potencialo gradientui su minuso ženklu). Taigi, esant elektriniam laukui, energijos lygmenys „užlinksta“ (žr. 1b pav.).



1 pav. Donorių priemaišų koncentracijos (a), bei Fermio lygmens ir juostų kraštų (b) profiliai.

Irašę (2.3.1a,b) į (2.1.2a,b), išreiškę φ ir pasinaudoję tuo, kad n puslaidininkyje n apytiksliai lygus donorių koncentracijai N_D , o p puslaidininkyje p apytiksliai lygus akceptorinių koncentracijai N_A , randame potencialo išraiškas:

$$\text{n puslaidininkyje} \quad \varphi = \frac{kT}{e} \ln \frac{n}{N_c} + \frac{E_{c0} - F}{e} \approx \frac{kT}{e} \ln \frac{N_D}{N_c} + \frac{E_{c0} - F}{e}, \quad (2.4.1a)$$

$$\text{p puslaidininkyje} \quad \varphi = -\frac{kT}{e} \ln \frac{p}{N_v} + \frac{E_{v0} - F}{e} \approx -\frac{kT}{e} \ln \frac{N_A}{N_c} + \frac{E_{v0} - F}{e}, \quad (2.4.1b)$$

Kadangi šiuose reiškiniuose dydžiai N_c , N_v , E_{c0} , E_{v0} ir F yra konstantos, tai potencialų skirtumas tarp bet kurių dviejų taškų x_1 ir x_2 yra lygus

$$\text{n puslaidininkyje} \quad \varphi(x_2) - \varphi(x_1) = \frac{kT}{e} [\ln N_D(x_2) - \ln N_D(x_1)] = \frac{kT}{e} \ln \frac{N_D(x_2)}{N_D(x_1)}, \quad (2.4.2a)$$

$$\text{p puslaidininkyje} \quad \varphi(x_2) - \varphi(x_1) = -\frac{kT}{e} [\ln N_A(x_2) - \ln N_A(x_1)] = \frac{kT}{e} \ln \frac{N_A(x_1)}{N_A(x_2)}, \quad (2.4.2b)$$

Taigi, netolygiai legiravus puslaidininkį donorinėmis priemaišomis, atsiranda elektrinis laukas, kurio potencialo priklausomybė nuo koordinatės yra tos pačios formos kaip priemaišinių atomų

logaritmo priklausomybė nuo koordinatės (tai akivaizdu, palyginus 1a ir 1b pav.). T. y. potencialas yra didžiausias ten, kur didžiausia donorų koncentracija. Netolygiai legiravus puslaidininkį akceptorinėmis priemaisomis, potencialas yra mažiausias ten, kur didžiausia akceptorinių koncentracija (tai tampa akivaizdu, palyginus 6a ir 6c pav. koordinatinių intervale $x > 0.33 \mu\text{m}$).

2.5. pn sandūros energijos juostų diagrama termodinaminėje pusiausvyroje. Kontaktinis potencialų skirtumas

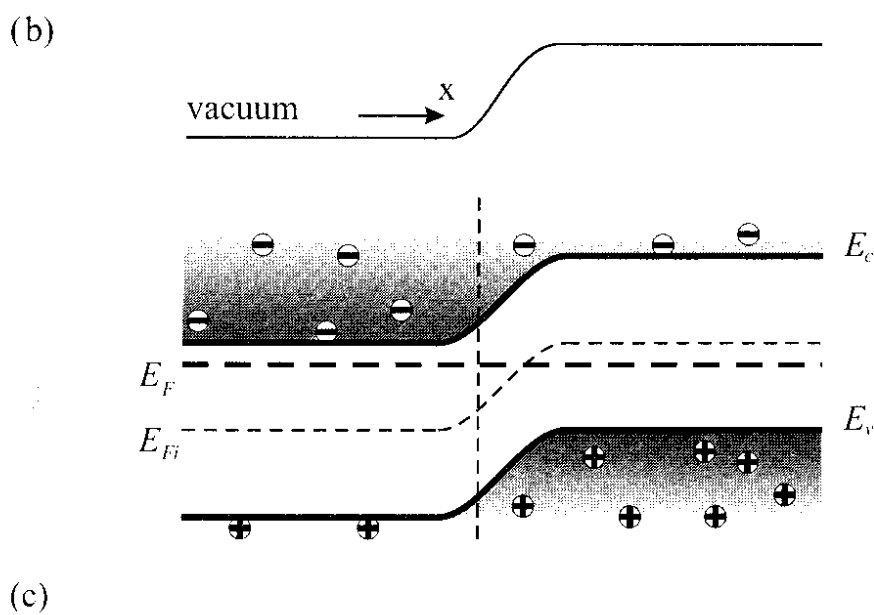
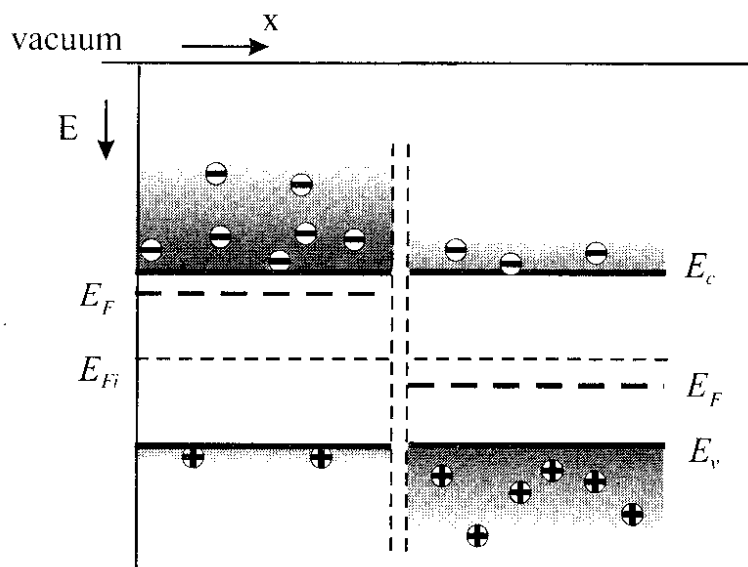
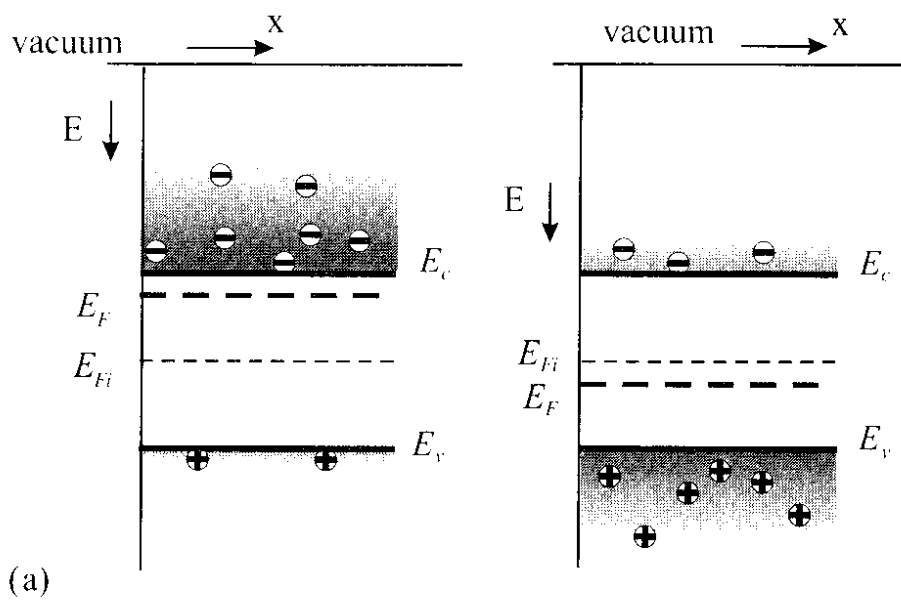
Puslaidininkinis diodas – tai puslaidininkinis prietaisas su viena lyginančia sandūra ir dviem elektriniais kontaktais. **Sandūra** – tai plokščias kontaktas tarp dviejų medžiagų, kurios turi skirtingą energijos juostų struktūrą arba skiriasi Fermio lygmens padėtimi draustinėje energijos juostoje. **Lyginančioji sandūra** – tai sandūra, kurios varža, esant vienam išorinės įtampos poliarumui, žymiai skiriasi nuo varžos, esant priešingam poliarumui. Dėl šios priežasties tokią sandūrą galima naudoti kintamos srovės pavertimui nuolatine srove, t. y. srovės “išlyginimui”. Lyginančiosios sandūros pavyzdys yra vadinamoji **pn sandūra** – p ir n puslaidininkių sandūra. pn sandūra yra pagrindinė puslaidininkinio diodo dalis.

pn sandūros energijos diagramos sudarymą iliustruoja 2 pav. 2 pav. Fermio lygmuo žymimas E_F , o Fermio lygmuo grynajame puslaidininkyje žymimas E_{Fi} (E_{Fi} yra praktiškai draustinės juostos viduryje). Pradedame nuo izoliuotų p ir n puslaidininkių. Laikysime, kad jie yra legiruoti tolygiai (t. y. priemaišų koncentracija yra vienoda visuose puslaidininkio taškuose), todėl vidinio elektrinio lauko nėra ir energijos juostos yra plokščios, kaip pavaizduota 2a pav. Čia pavaizduotas ir vakuomo lygmuo. Kadangi abiejų dalių kristalinė struktūra yra vienoda, tai juostų kraštai abiejuose puslaidininkiuose sutampa. Krūvininkų energijų pasiskirstymą iliustruoja patamsintos sritys: didesnę krūvininkų koncentraciją atitinka tamsesnės sritys.

Sujungus abu puslaidininkius, kaip parodyta 2b pav., jų Fermio lygmenys aiškiai nesutampa, todėl tokia būseną, kurią atitinka 2b pav. energijos diagrama, yra nepusiausvyroji (Fermio lygmuo – tai vienam krūvininkui tenkantis cheminis potencialas, todėl termodinaminėje pusiausvyroje jis turi būti vienodas visuose sistemos taškuose). Priežastis, dėl kurios ši būseną yra nepusiausvyroji – tai krūvininkų koncentracijos gradientas, kuris egzistuoja sandūroje. Kadangi nėra dreifinės srovės, kuri galėtų kompensuoti difuzinę, atsiranda elektronų srautas iš n srities į p sritį, o skylės difunduoja iš p srities į n sritį. Todėl n sritis įgyja perteklinį teigiamą krūvį, o p sritis įgyja perteklinį neigiamą krūvį. Tai reiškia, kad p srities potencialas tampa mažesnis už n srities potencialą. T. y. atsiranda elektrinis laukas, kurio kryptis priešinga difuzinės srovės kryptiai. Šis laukas sukuria dreifinę srovę, kuri dalinai kompensuoja difuzinę srovę, todėl krūvio persiskirstymas sulėtėja. Praėjus tam tikram laikui, difuzinė srovė ir dreifinė srovė visuose sistemos taškuose tiksliai kompensuoja viena kitą, t. y. sistema atsiduria termodinaminėje pusiausvyroje. Šioje būsenoje Fermio lygmuo yra vienodas visuose taškuose, tačiau energijos juostos yra užlinkusios (žr. 2c pav.). Šio užlinkimo priežastis – minėtasis vidinis elektrinis laukas (žr. formulę (1)). Šis laukas egzistuoja tik siauroje srityje arti kontakto. Toliau nuo kontakto elektrinis laukas lygus nuliui, t. y. erdvinis krūvis lygus nuliui, energijos juostos yra plokščios, o Fermio lygmuo yra tokiu pačiu atstumu nuo juostų kraštų, kaip ir izoliuotame puslaidininkyje (žr. 2c pav.). Juostų užlinkimo didumas nusako potencialų skirtumą tarp p ir n sričių. Iš 2 pav. matyti, kad šis užlinkimas yra lygus skirtumui tarp Fermio lygmenų izoliuotuose puslaidininkiuose. Taigi, n ir p sričių potencialų skirtumas termodinaminėje pusiausvyroje (**kontaktinis potencialų skirtumas**) yra

$$V_D \equiv \varphi(n) - \varphi(p) = \frac{1}{e} (F(n) - F(p)); \quad (2.5.1)$$

čia $F(n)$ ir $F(p)$ yra n ir p sričių Fermio energijos prieš sudarant kontaktą tarp jų, o $\varphi(n)$ ir $\varphi(p)$ yra jų potencialai, sudarius sandūrą. Indeksas “D” kontaktinio potencialų skirtumo žymėjime nurodo, kad šis potencialų skirtumas atsiranda dėl krūvininkų difuzijos, o ne dėl išorinio įtampos šaltinio. Nors n ir p sričių potencialai yra skirtingi, tačiau, prijungus prie pn sandūros voltmetrą, jis rodys nulinę įtampą. Taip yra todėl, kad termodinaminėje pusiausvyroje kontaktinį potencialų skirtumą tiksliai kompensuoja neelektrostatinė elektrovaros jėga (kuri pasireiškia minėtąja krūvininkų difuzija).



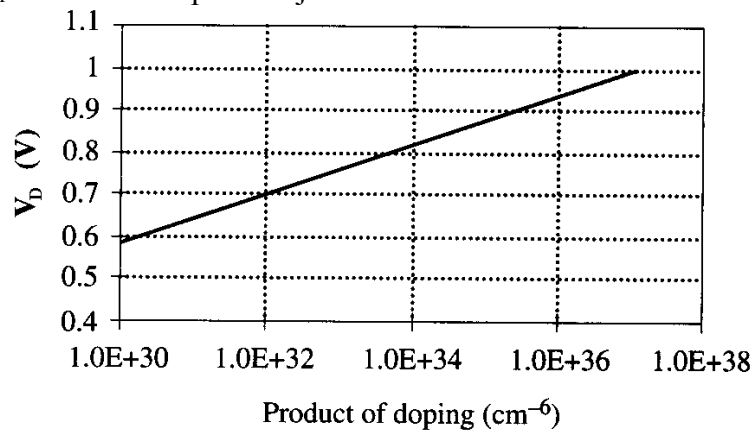
2 pav. Tolygiai legiruotų p ir n puslaidininkių sandūros energijos diagramos sudarymas

Nesunku pastebėti, kad kontaktinio potencialų skirtumo atsiradimo priežastis yra ta pati, dėl kurios atsiranda vidinis elektrinis laukas netolygiai legiravus puslaidininkį (žr. 2.4 poskyrį): tai yra priemaišų koncentracijos kitimas erdvėje. Tačiau 2 pav. atvejis (kai vienas puslaidininkis yra legiruotas tik donorais, o kitas – tik akceptoriais), atitinka ypač netolygų legiravimą: kertant sandūros plokštumą, vienos rūšies priemaišų koncentracija šuoliškai sumažėja iki nulio, o kitos rūšies priemaišų koncentracija šuoliškai padidėja nuo nulio iki tam tikros vertės.

Rasime kontaktinio potencialų skirtumo išraišką priemaišų koncentracijomis. Tam įrašome n ir p puslaidininkių Fermio energijos išraiškas (2.1.6) ir (2.1.7) į kontaktinio potencialų skirtumo išraišką (2.5.1);

$$V_D = \frac{kT}{e} \ln \frac{N_D N_A}{n_i^2}; \quad (2.5.2)$$

čia N_D ir N_A yra donorų koncentracija n srityje, N_A yra akceptorių koncentracija p srityje, o n_i yra elektronų arba skylių koncentracija grynajame puslaidininkyje. Kaip matome, kontaktinis potencialų skirtumas priklauso tik nuo temperatūros ir nuo donorų bei akceptorių koncentracijų sandaugos. 3 pav. pavaizduota silicio pn sandūros kontaktinio potencialų skirtumo priklausomybė nuo sandaugos $N_D N_A$ kambario temperatūroje.



3 pav. Kontaktinio potencialų skirtumo priklausomybė nuo sandaugos $N_D N_A$

Norint aprašyti kitas pn sandūros savybes, reikia žinoti krūvio pasiskirstymą abiejose sandūros pusėse.

2.6. Nuskurdinimo artinys

Krūvininkų koncentracija pereinamojoje srityje, kurioje egzistuoja elektrinis laukas, yra daug mažesnė už krūvininkų koncentraciją neutraliose srityse. Todėl šis pereinamasis sluoksnis vadinamas **nuskurdintuoju sluoksniu**. Žinome, kad priemaišų atomų koncentracija legiruotame puslaidininkyje elektrinio neutralumo sąlygomis praktiškai sutampa su pagrindinių krūvininkų koncentracija. Vadinasi, sumažėjus pagrindinių krūvininkų koncentracijai, atsiranda nesukompensuotas priešingo ženklo erdvinis krūvis, kurį sukuria priemaišų jonai. Taigi, nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja erdvinis elektros krūvis, kurio šaltiniai yra jonizuoti priemaišų atomai, t. y. teigiami donorų jonai į kairę nuo kontakto plokštumos 2c pav. ir neigiami akceptorių jonai į dešinę nuo šios plokštumos (ją nusako punktyrinė linija). Kadangi šių atomų koncentracija yra daug didesnė už laisvųjų krūvininkų koncentraciją, tai nepadarysime didelės klaidos, jeigu laikysime, kad nuskurdintame sluoksnyje iš viso nėra laisvųjų krūvininkų. Šis artinys vadinamas **nuskurdinimo artiniu**. Nors ši prielaida yra tik apytikslė ir ji negalioja nuskurdintojo sluoksnio kraštuose, tačiau ji leidžia pakankamai tiksliai teoriškai aprašyti pagrindines pn sandūros savybes.

Laikant, kad nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja tik jonizuotų priemaišų krūvis, erdvinio krūvio tankio ρ (C/cm³) pasiskirstymas yra toks, kaip pavaizduota 4a pav. Čia taškas $x = 0$ atitinka kontakto plokštumą, o taškai $x = -x_{dn}$ ir $x = x_{dp}$ atitinka nuskurdintojo sluoksnio kraštus (raidė “d” indeksuose kilo iš angliško žodžio “depletion” – “nuskurdinimas”). Taigi, tolygiai legiruotų n ir p sričių atveju erdvinio krūvio pasiskirstymą galima užrašyti šitaip:

$$\rho(x) = \begin{cases} eN_D, & -x_{dn} < x < 0; \\ -eN_A, & 0 < x < x_{dp}; \\ 0 & x < -x_{dn} \text{ arba } x > x_{dp}. \end{cases} \quad (2.6.1)$$

Kadangi sistema visumoje yra neutrali, tai pilnasis neigiamas akceptorių krūvis nuskurdintame sluoksnyje turi būti priešingas pilnajam teigiamam donorų krūviui jame. Vadinasi,

$$eN_A x_{dp} = eN_D x_{dn}. \quad (2.6.2)$$

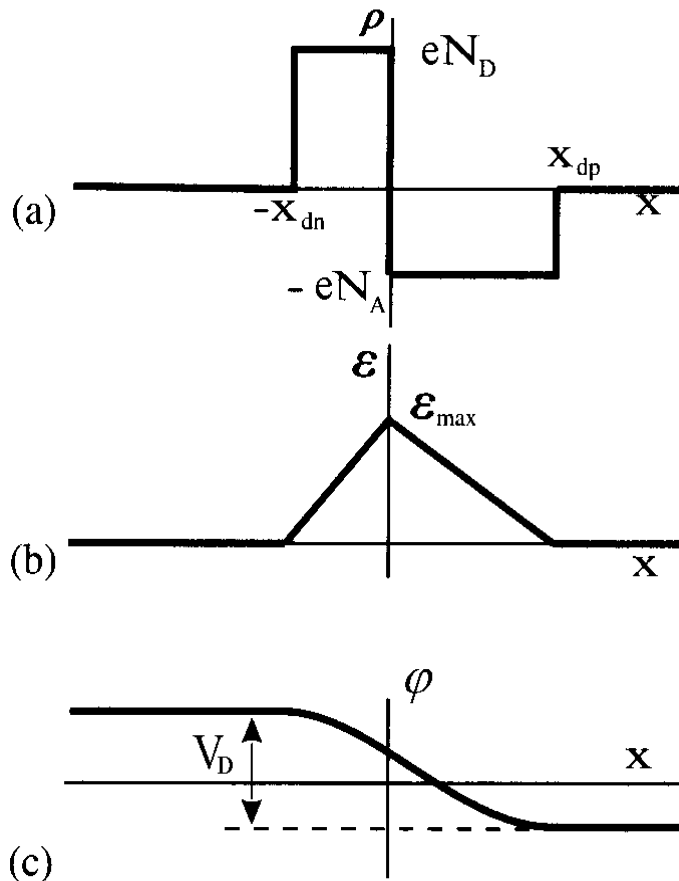
Žinant erdvinio krūvio tankio ρ pasiskirstymą, elektrinio lauko pasiskirstymą galima apskaičiuoti pagal **Puasono lygtį**:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = \frac{\rho(x)}{\varepsilon_0 \varepsilon}; \quad (2.6.3)$$

čia $\varepsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-14}$ F/cm yra elektrinė konstanta, o ε yra medžiagos dielektrinė skvarba. T. y. elektrinio lauko stipris yra proporcingas erdvinio krūvio integralui:

$$\mathcal{E}(x) = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} \int_{-x_{dp}}^x \rho(x) dx. \quad (2.6.4)$$

Įrašę (2.6.1) į (2.6.4), randame:



4 pav. Erdvinio krūvio tankis, elektrinio lauko stipris ir potencialas pn sandūroje

$$\mathcal{E}(x) = \begin{cases} \frac{eN_D}{\varepsilon_0 \varepsilon} (x_{dn} + x), & -x_{dn} < x < 0; \\ \frac{eN_A}{\varepsilon_0 \varepsilon} (x_{dp} - x), & 0 < x < x_{dp}. \end{cases} \quad (2.6.5)$$

Ši priklausomybė nuo x pavaizduota 4b pav. Elektrinio lauko stiprio maksimumas pasiekiamas kontakto plokštumoje $x = 0$. Pagal (2.6.5), šis maksimumas lygus

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{eN_D x_{dn}}{\varepsilon_0 \varepsilon} = \frac{eN_A x_{dp}}{\varepsilon_0 \varepsilon}. \quad (2.6.6)$$

Rasime elektrinio lauko potencialą. Duotojo taško potencialas – tai elektrinio lauko stiprio integralas koordinatų atžvilgiu su minuso ženklu. Integruoti reikia nuo taško, kurio potencialą susitarta laikyti lygiu nuliui, iki duotojo taško x . Pvz., jeigu potencialas atskaitomas nuo n tipo neutraliosios srities potencialo, tuomet

$$\varphi(x) = - \int_{-x_{dn}}^x \mathcal{E}(x) dx. \quad (2.6.7a)$$

Programa **MicroTec** potencialą atskaito nuo taško, kuriame Fermio lygmuo termodinaminėje pusiausvyroje kerta draustinės energijos juostos vidurį (tiksliau, grynojo puslaidininkio Fermio lygmenį F_i). Tuomet termodinaminėje pusiausvyroje

$$\varphi(x) = \frac{1}{e} (F - F_i(x)) \quad (2.6.7b)$$

Šis potencialas pavaizduotas 4c pav. (t.p. žr. 2c pav.). Kontaktinis potencialų skirtumas lygus elektrinio lauko integralo nuo $-x_{dn}$ iki x_{dp} absoliutinei vertei:

$$V_D = \left| - \int_{-x_{dn}}^{x_{dp}} \mathcal{E}(x) dx \right| = \frac{1}{2} \mathcal{E}_{\max} (x_{dn} + x_{dp}) \equiv \frac{1}{2} \mathcal{E}_{\max} w; \quad (2.6.8)$$

čia $w = x_{dn} + x_{dp}$ yra nuskurdintojo sluoksnio storis.

Naudojantis (2.6.6) ir (2.6.8) sąryšiais, nuskurdintojo sluoksnio storį $w = x_{dn} + x_{dp}$ galima išreikšti donorų ir akceptorų koncentracijomis N_D ir N_A . Tuo tikslu visų pirma išreiškiame p sričiai tenkančios nuskurdintojo sluoksnio dalies storį x_{dp} visu sluoksnio storium w . Pagal (2.6.2),

$$\frac{x_{dn}}{x_{dp}} = \frac{N_A}{N_D}. \quad (2.6.9)$$

Vadinasi, $x_{dn} \equiv w - x_{dp} = (N_A/N_D)x_{dp}$, t. y. $x_{dp} = (N_D/(N_D+N_A)) \cdot w$. Įrašę tai į maksimalaus elektrinio lauko išraišką (2.6.6), gauname

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{eN_D N_A}{\varepsilon_0 \varepsilon (N_D + N_A)} w.$$

Šią išraišką įrašę į (2.6.8) ir išreiškę w , gauname

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon (N_D + N_A)}{eN_D N_A}} V_D. \quad (2.6.10)$$

Vadinasi, didžiausią elektrinio lauko stiprį galima išreikšti šitaip:

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{eN_D N_A}{\varepsilon_0 \varepsilon (N_D + N_A)} w = \sqrt{\frac{2eN_D N_A}{\varepsilon_0 \varepsilon (N_D + N_A)}} V_D. \quad (2.6.11)$$

Šiame reiškinyje V_D palyginti silpnai priklauso nuo N_D ir N_A , nes V_D yra proporcingas N_D ir N_A sandaugos logaritmui (žr. (2.5.2)). Pvz., jeigu $N_D \cdot N_A$ kinta intervale, kuris atitinka 3 pav. apatinės ašies ribas (nuo 10^{30} cm^{-6} iki 10^{38} cm^{-6}), tuomet V_D santykinis pokytis yra mažesnis už 30%. Vadinasi, nuskurdintojo sluoksnio storio ir didžiausio elektrinio lauko stiprio priklausomybę nuo N_D ir N_A lemia daugiausiai prieš V_D formulėse (2.6.10) ir (2.6.11).

Dažniausiai pn sandūros legiravimas yra stipriai asimetrinis, t. y. $N_D \gg N_A$ arba $N_A \gg N_D$. Stipriau legiruotoji sritis vadinama **emiteriu**, o silpniau legiruotoji – **baze**. Pažymėjus emiterio priemaišų koncentraciją N_E , o bazės priemaišų koncentraciją N_B , iš (2.6.9) gauname

$$x_B = \frac{N_E}{N_B} x_E \gg x_E;$$

čia x_B ir x_E yra nuskurdintojo sluoksnio dalys, kurios tenka bazei ir emiteriui. T. y. beveik visas nuskurdintojo sluoksnio plotis tenka bazei. Be to, iš nelygybės $N_E \gg N_B$ išplaukia

$$\frac{N_E N_B}{N_E + N_B} \approx \frac{N_E N_B}{N_E} = N_B,$$

todėl asimetrinės sandūros atveju formulės (2.6.10) ir (2.6.11) supaprastėja:

$$w \approx \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon}{e N_B}} V_D, \quad (2.6.12)$$

$$\mathcal{E}_{\max} \approx \frac{e N_B}{\varepsilon_0 \varepsilon} w \approx \sqrt{\frac{2e N_B}{\varepsilon_0 \varepsilon}} V_D. \quad (2.6.13)$$

Taigi, nuskurdintojo sluoksnio plotis w yra atvirkščiai proporcingas šakniai iš priemaišų koncentracijos bazėje, o didžiausias elektrinio lauko stipris \mathcal{E}_{\max} yra tiesiog proporcingas šakniai iš priemaišų koncentracijos bazėje. Vadinasi, asimetrinio legiravimo atveju nuskurdintojo sluoksnio savybės lemia priemaišų koncentracija bazėje.

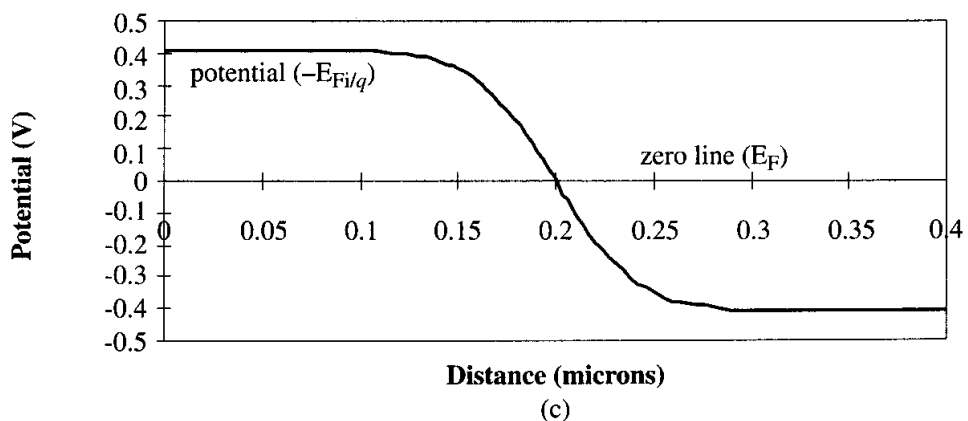
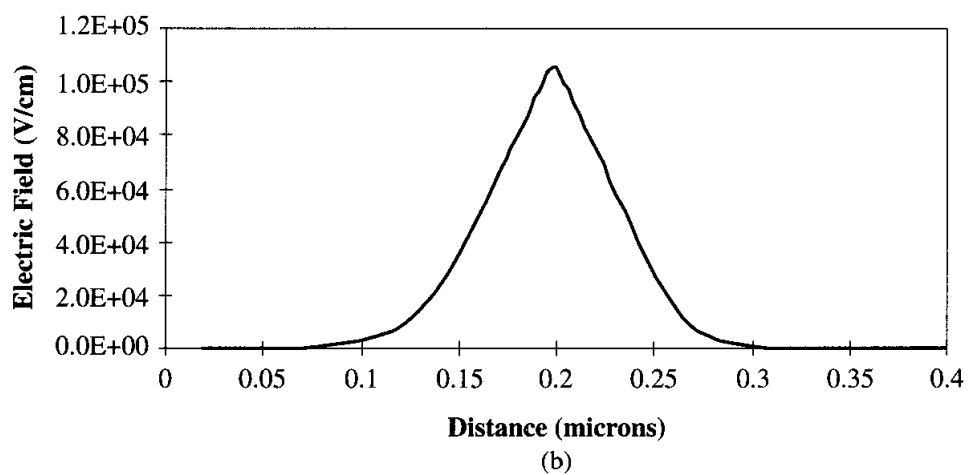
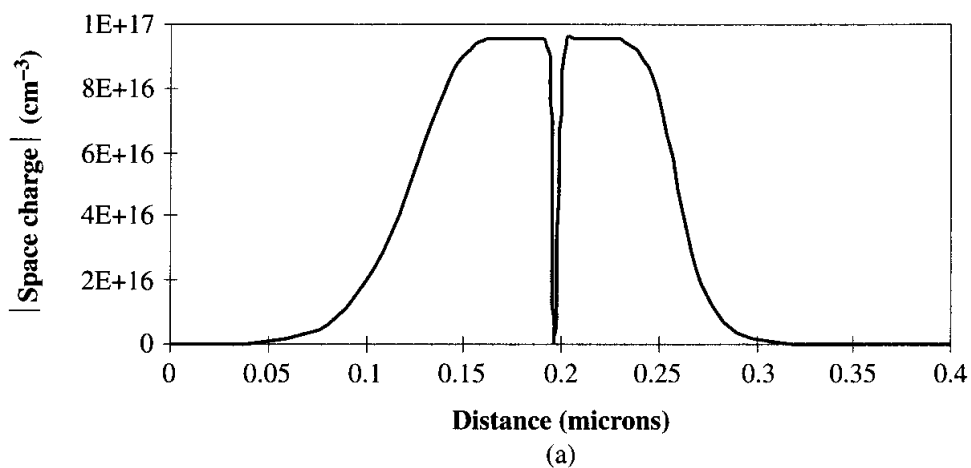
2.7. Tolygiai legiruotų p ir n puslaidininkių sandūros skaitmeninis modeliavimas

Palyginus skaitmeninio modeliavimo rezultatus su aukščiau aprašytais teorinės analizės rezultatais, matomi tik nežymūs skirtumai. 5 pav. pavaizduoti tolygiai ir simetriškai legiruotos pn sandūros skaitmeninio modeliavimo rezultatai (erdvinio krūvio absoliutinės vertės logaritmo, elektrinio lauko stiprio ir potencialo priklausomybės nuo koordinatės). Kaip matome, pagrindinis skirtumas, lyginant su aukščiau aptartu idealizuotu atveju yra tas, kad nuskurdintajame sluoksnyje erdvinis krūvis nėra tiksliai lygus jonizuotų priemaišinių atomų krūvio tankiui (t. y. negalioja artinys (2.6.1)). Arti nuskurdintojo sluoksnio kraštų laisvųjų krūvininkų koncentracija tampa tos pačios eilės, kaip priemaišinių atomų koncentracija, todėl, tiksliai skaičiuojant, reikia atsižvelgti į laisvuosius krūvininkus. Tai pasireiškia laipsnišku erdvinio krūvio sumažėjimu, tolstant nuo kontakto plokštumos gilyn į n arba p sritį (plg. 5a pav. ir 4a pav.). Atitinkamai, elektrinio lauko stiprio priklausomybė nuo koordinatės neturi lūžio nuskurdintojo sluoksnio kraštuose (plg. 5b pav. ir 4b pav.). Modeliavimo metodu gautoji potencialo priklausomybė nuo koordinatės (5c pav.) yra labai panaši į tą, kuri gaunama nuskurdinimo artinyje (4c pav.).

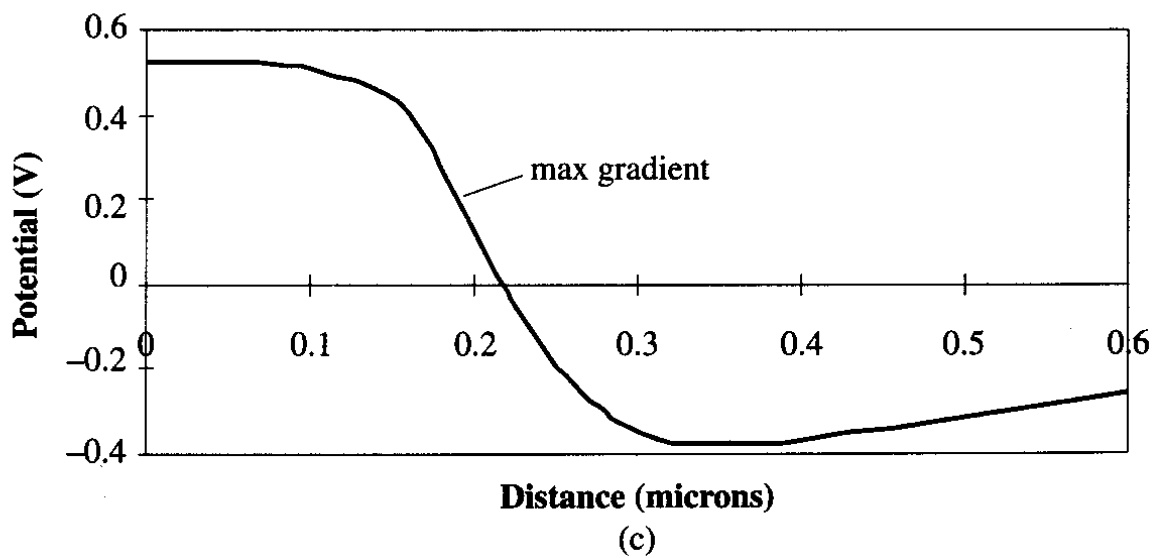
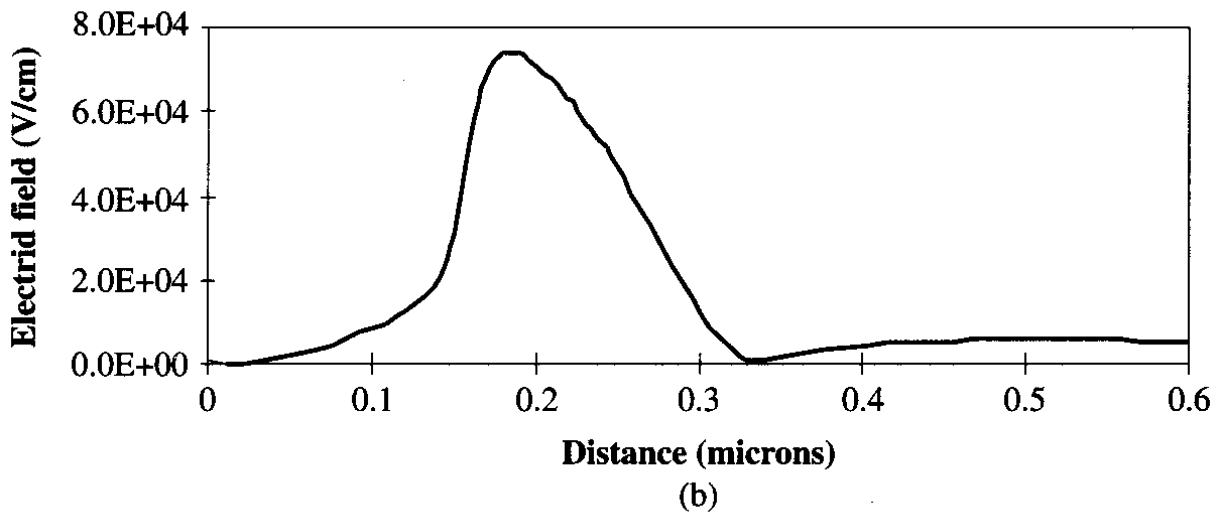
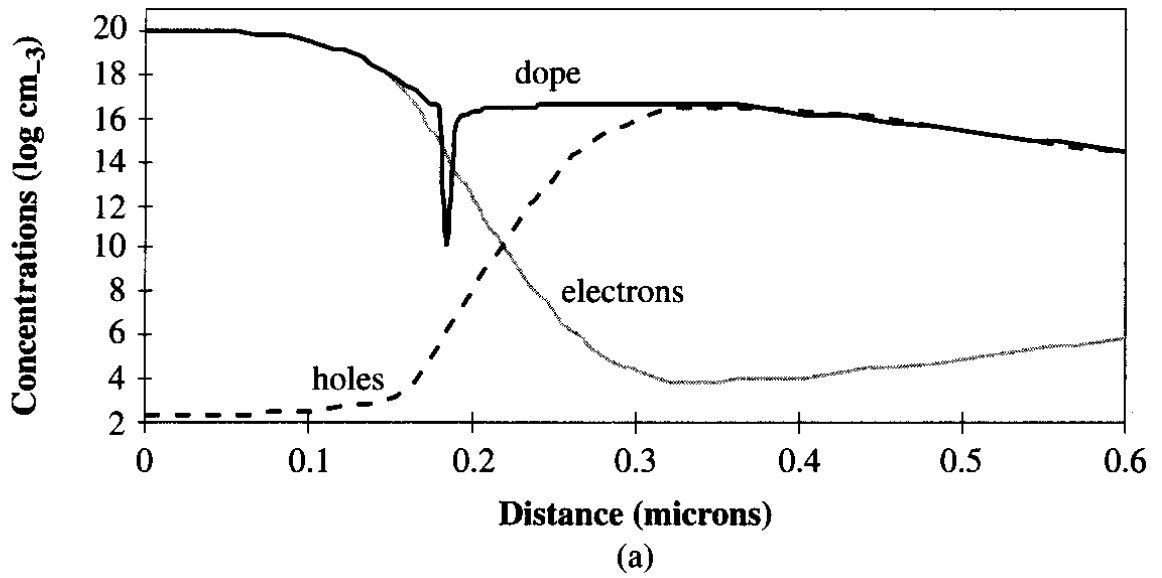
2.8. Netolygiai legiruotų p ir n puslaidininkių sandūros skaitmeninis modeliavimas

Praktikoje pn sandūros formuojamos įterpiant donoro jonus į p puslaidininkį arba įterpiant akceptorius jonus į n puslaidininkį. Tam naudojami difuzijos arba jonų implantavimo metodai. Kaip minėta, šie metodai visada yra susiję su netolygiu priemaišų pasiskirstymu puslaidininkio („padėklo“) tūryje. Pvz., 6a pav. pavaizduotas priemaišinių atomų pasiskirstymas, kuris gaunamas po dviejų implantavimų: visų pirma implantuojami akceptorius jonai, o paskui implantuojami donoro jonai. Šiame pavyzdyje akceptorius jonų koncentracija yra daug mažesnė, negu donoro jonų. Be to, akceptorius jonai pasiskirstę didesniame tūryje, negu donoro jonai (pastarieji susitelkę arti padėklo paviršiaus). Taigi, tokia struktūra atitinka pn sandūrą, kurios n sritis yra emiteris (n sritis yra arti padėklo paviršiaus), o p sritis yra bazė (ji yra kitoje padėklo pusėje). 6a pav. priemaišinių jonų koncentraciją vaizduoja storoji ištisinė linija.

Aštrus minimumas viršutinėje ištisinėje kreivėje 6a pav. atsiranda dėl to, kad programa **MicroTec** atvaizduoja donorų ir akceptorių koncentracijų *skirtumą*. Taške, kuriame puslaidininkio laidumo tipas keičiasi iš n į p , šis skirtumas tampa lygus nuliui (akceptorių koncentracija lygi donorų koncentracijai). Todėl tame taške to skirtumo modulio logaritmas (kuris atidėtas ant vertikaliosios ašies) artėja į $-\infty$. Kadangi nuskurdintajame sluoksnyje beveik nėra laisvųjų elektronų ir skylių, tai galima laikyti, kad visą erdvinį krūvį sąlygoja priemaišų jonai. Vadinasi, 6a pav. viršutinės ištisinės kreivės minimumo taške keičiasi ne tik laidumo tipas, bet ir erdvinio krūvio ženklas (į kairę nuo to taško erdvinis krūvis yra teigiamas, o į dešinę – neigiamas). 6b pav. matyti, kad elektrinio lauko stiprio maksimumas yra tame pačiame taške. Šis rezultatas išplaukia iš Puasono lygties (2.6.3): bet kurios funkcijos (taip pat ir elektrinio lauko stiprio priklausomybės nuo koordinatės) išvestinė maksimumo taške yra lygi nuliui. Kadangi Puasono lygtis (2.6.3) teigia, kad elektrinio lauko išvestinė koordinatės atžvilgiu yra proporcinga erdvinio krūvio tankiui ρ , tai elektrinio lauko maksimumo taške galioja lygybė $\rho = 0$, t. y. erdvinis krūvis keičia ženklą.



5 pav. Tolygiai legiruotos pn sandūros modeliavimo rezultatai. a – erdvinio krūvio tankio absoliutinė vertė logaritminiame mastelyje (krūvis išreikštas elementariojo krūvio e vienetais), b – elektrinio lauko stipris, c – potencialas.



6 pav. Netolygiai legiruotų p ir n puslaidininkių sandūros modeliavimo rezultatai. a – donorų ir akceptorijų jonų koncentracijų skirtumo dešimtainis logaritmas (storoji ištisinė linija) ir laisvųjų elektronų bei skylių koncentracijų dešimtainiai logaritmas (atitinkamai, plonoji ištisinė linija ir punktyrinė linija), b – elektrinio lauko stipris, c – potencialas.

3. Nelyginių variantų atlikimo metodika

1. Programos **MicroTec** lange „Select Project“ pasirenkamas projektas „2.1 (short diode)“. Po to atidaromas langas „Project Settings“, kuriame užduodamos parametrų vertės. Projekto parametrai sugrupuoti į direktyvas. Kiekviena direktyva atitinka giminingų parametrų grupę. Norint pakeisti parametro vertę, reikia du kartus spragtelėti ant jos. Norint įterpti direktyvą, reikia kairiuoju mygtuku spragtelėti ant projekto pavadinimo (jis nurodytas pirmojoje eilutėje), po to spragtelėti dešiniuoju mygtuku ir pasirinkti "Add Directive", o po to pasirinkti reikalingą direktyvą. Parametrai įterpiami analogiškai, tačiau spragtelėti reikia ne ant projekto pavadinimo, o ant parametrų grupės (direktyvos) pavadinimo. Norint pašalinti direktyvą arba parametą, reikia spragtelėti dešiniuoju pelės mygtuku ant direktyvos arba parametro pavadinimo ir pasirinkti „Delete“. Kiekvieno projekto skaičiavimo rezultatai įrašomi į failą, kurio vardo plėtinys yra „.3D“ arba „.2D“ (atliekant kai kuriuos projektus, sukuriama ir „.3D“, ir „.2D“ failas). Rezultatų failų vardai būna nurodyti lango „Project Settings“ pirmoje eilutėje, šalia projekto pavadinimo. Tie failai būna tame pačiame kataloge, kuriame įdiegta programa **MicroTec**.

Dėmesio! Kartais dėl netinkamų parametrų verčių arba dėl modeliavimo programos klaidų rezultatų failai nėra sukuriama. Tada, jeigu su tuo kompiuteriu anksčiau jau buvo atliekamas tas projektas, programos **MicroTec** kataloge išliks nepakitę senieji rezultatų failai, kurie gali atitikti visiškai kitokias parametrų vertes. Todėl, siekiant išvengti nesusipratimų, prieš pradėdant skaičiavimus patartina ištrinti senuosius rezultatų failus.

2. Parametrų grupė „Basic/Mesh“ apibrėžia visos struktūros matmenis bei koordinatinį tinklą. Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Number of X-nodes	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius X kryptimi	4
Number of Y-nodes	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius Y kryptimi	150
Domain X size (μm)	Struktūros matmenys X kryptimi	1
Domain Y size (μm)	Struktūros matmenys Y kryptimi	2

Kitų šios grupės parametrų keisti nereikia (jų įtaka modeliavimo rezultatams yra silpna).

3. Parametrų grupė „Electrodes“ apibrėžia elektrodų padėtis ir matmenis. Šioje parametrų grupėje turi būti dvi direktyvos „Ohmic electrode“. Viena iš šių direktyvų atitinka viršutinį elektrodą ($y = 0$), o kita – apatinį ($y = 2 \mu\text{m}$). Kiekvienoje direktyvoje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Electrode location	Elektrodo padėtis. 1 atitinka viršutinį elektrodą, o 2 – apatinį.	1 arba 2
Electrode number	Elektrodo numeris (turi sutapti su „Electrode location“)	1 arba 2
Electrode left edge (μm)	Elektrodo kairiojo krašto X koordinatė	0
Electrode right edge (μm)	Elektrodo dešiniojo krašto X koordinatė	1

4. Parametrų grupė „IV-data/IV-data“ apibrėžia voltamperinės charakteristikos taškus, t. y. įtampas, kurioms esant, reikia apskaičiuoti srovės stiprį. Šio darbo užduotis reikalauja, kad pn sandūra būtų termodinaminėje pusiausvyroje. Vadinasi, šiuo atveju reikia, kad voltamperinė charakteristika turėtų tik vieną tašką, kuris atitinka nulinę išorinę įtampą. Todėl užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Number of IV-points to compute	Voltamperinės charakteristikos taškų skaičius	1
Initial voltage for contact #1	Pirmojo elektrodo pradinis potencialas	0
Initial voltage for contact #2	Antrojo elektrodo pradinis potencialas	0

Esant tokioms parametrų vertėms, kiti šios grupės parametrai neturės jokios įtakos skaičiavimo rezultatams.

5. Kadangi šiame darbe tiriama tolygiai legiruotoji pn sandūra, kurios neįmanoma gauti difuzijos bei jonų implantacijos metodais, tai panaudojama programos **MicroTec** galimybė dirbti su vartotojo

apibrėžtomis tolygaus legiravimo sritimis. Tolygaus legiravimo sričių padėtis, matmenis ir legiravimo laipsnius apibrėžia direktyvos „Analytical doping data“. Šiuo atveju reikalingos dvi tokios direktyvos: viena atitinka n tipo sritį, o kita – p tipo sritį. Kiekvienoje direktyvoje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Left edge of the well (μm)	Srities kairiojo krašto X koordinatė	0
Right edge of the well (μm)	Srities dešiniojo krašto X koordinatė	1
Top edge of the well (μm)	Srities viršutinio krašto Y koordinatė (viršutinei sričiai – 0, o apatinei sričiai – 1)	0 arba 1
Bottom edge of the well (μm)	Srities apatinio krašto Y koordinatė (viršutinei sričiai – 1, o apatinei sričiai – 2)	1 arba 2
Doping concentration (cm^{-3})	Priemaišinių atomų koncentracija	N_D arba $-N_A^*$
X -characteristic length (μm)	Būdingasis atstumas, kuris nusako priemaišų koncentracijos mažėjimo spartą X kryptimi už srities ribų**	0.05
Y -characteristic length (μm)	Būdingasis atstumas, kuris nusako priemaišų koncentracijos mažėjimo spartą Y kryptimi už srities ribų**	$1\text{e-}06^{***}$

* Ženklas prieš priemaišų koncentracijos vertę nusako priemaišų tipą: pliusas atitinka donorus, o minusas – akceptorius (t. y. šis ženklas nusako priemaišos jono elektrinio krūvio ženklą). Neturi reikšmės, kuri iš dviejų sričių bus laikoma n sritimi, o kuri – p sritimi. Kitaip pasirinkus n ir p sritis, vienintelis pokytis bus tas, kad visos priklausomybės nuo y bus atspindėtos atžvilgiu vidurinio taško $y = 1 \mu\text{m}$.

** Laikoma, kad už srities ribų priemaišų koncentracijos mažėjimą X kryptimi nusako Gauso funkcija $N_0 \exp(-(x-x_l)^2/L_x^2)$ (kai $x < x_l$) arba $N_0 \exp(-(x-x_r)^2/L_x^2)$ (kai $x > x_r$), o Y kryptimi – Gauso funkcija $N_0 \exp(-(y-y_t)^2/L_y^2)$ (kai $y < y_t$) arba $N_0 \exp(-(y-y_b)^2/L_y^2)$ (kai $y > y_b$); čia x_l , x_r , y_t ir y_b yra srities kraštų koordinatės (pirmieji keturi šios grupės parametrai), N_0 yra priemaišų koncentracija srities viduje (penktasis parametras), o L_x ir L_y yra būdingieji atstumai (šeštasis ir septintasis parametrai).

*** Darbo užduotis reikalauja, kad taške $y = 1 \mu\text{m}$ šuoliškai pasikeistų priemaišų koncentracijos. Todėl paskutinis parametras (L_y) turi būti kuo mažesnis. Vertė $10^{-6} \mu\text{m}$ yra pakankamai maža (užrašas „1e-06“ yra tapatus „ 10^{-6} “).

6. Uždavus visų parametrų vertes, nuspaudžiamas mygtukas „Run“. Užsidarius DOS langui, nuspaudžiamas mygtukas „3D Output“. Tuomet atsidaro dvimačių profilių vizualizavimo programa „SibGraf 3D“.

7. Naudojant programos „SibGraf 3D“ meniu „Plot“ (senesnėje versijoje – „Surface“), paeilui atvaizduojamos dydžių, kurie minimi darbo užduotyje Nr. 2, priklausomybės nuo x ir y , o po to atvaizduojami jų pjūviai Y kryptimi. Šie pjūviai išsaugomi failų pavidalu vėlesnei analizei. Paviršiai, kuriuos reikia atvaizduoti, yra šie:

„Electron concentration (cm-3)“ – elektronų koncentracija (cm^{-3});


„Hole concentration (cm-3)“ – skylių koncentracija (cm^{-3});

„Net space charge density (cm-3)“ – erdvinio krūvio tankis, išreikštas elementariųjų krūvių skaičiumi į kubinį centimetrą (t. y. matavimo vienetas – e/cm^3);

„Electrostatic potential (V)“ – elektrinis potencialas (V);

„Y-Electric field (V/cm)“ – elektrinio lauko stiprio dedamoji Y kryptimi (V/cm).

Pastaba: Programa „SibGraf 3D“, kuri įeina į MicroTec 4, turi meniu komandą „Plot/Select“, kuri pateikia didesnę dvimačių profilių pasirinkimą. Jeigu kurio nors iš anksčiau minėtų profilių nėra meniu „Plot“, tada tą profilį reikia pasirinkti iš sąrašo, kuris atsidaro pasirinkus „Plot/Select“. Programa „SibGraf 3D“, kuri įeina į MicroTec 3, neturi komandos „Select“ (t. y. visi dvimačiai profiliai, kurie gali būti pavaizduoti, yra išvardyti meniu „Surface“).

Atvaizdavus kiekvieną iš šių paviršių, reikia spragtelėti mygtuką „ZY“ . Tuomet atsidaro vienmačių pjūvių atvaizdavimo programa "SibGraf 2D", kurioje atvaizduotas pasirinkto paviršiaus pjūvis Y kryptimi. Šį pjūvį reikia įrašyti į diską, naudojant programos „SibGraf 2D“ meniu komandą „File/Save As“ (vėliau šį failą bus galima atidaryti, naudojant programos „SibGraf 2D“ meniu komandą „File/Open“).

8. Programos **MicroTec** lange „Project Settings“ akseptorių koncentracija padidinama 5 kartus, nuspaudžiamas mygtukas „Run“, o po to 7 punkte aprašytu būdu atvaizduojamos ir išsaugomos elektronų bei skylių koncentracijų priklausomybės nuo y (kitų trijų dydžių – erdvinio krūvio tankio, potencialo ir elektrinio lauko stiprio – šiame punkte nereikia).

9. Visos gautosios priklausomybės nuo y atspausdinamos (tai galima atlikti ne laboratorinių darbų metu). Abiejų rūšių krūvininkų koncentracijos turi būti pavaizduotos kartu. Taigi, krūvininkų koncentracijos turi būti pateiktos dviejuose grafikuose: vienas atitinka užduotis Nr. 2 ir 5, o kitas – užduotis Nr. 3 ir 6. Visi kiti dydžiai (potencialas, elektrinio lauko stipris ir erdvinio krūvio tankis) turi būti pavaizduoti atskiruose grafikuose, kurių kiekvienas atitinka pradinę akseptorių koncentraciją. Vadinasi, iš viso turi būti 5 grafikai: 2 grafikai su koncentracijomis (kiekviename – po tris kreives) ir 3 grafikai su potencialo, elektrinio lauko ir erdvinio krūvio tankio priklausomybėmis nuo koordinatės (kiekviename – po vieną kreivę).

10. Analizuojant gautąsias priklausomybes nuo y , atliekamos užduotys Nr. 4, 5 ir 6 (tai galima atlikti ne laboratorinių darbų metu). Atliekant šias užduotis, reikia naudoti programą „SibGraf 2D“, kuri įeina į programų paketo **MicroTec** sudėtį. Turint duomenų failus, kurie buvo gauti 7 ir 8 punktuose, šią analizę galima atlikti, ir naudojant demonstracinę **MicroTec** versiją (tačiau su demonstracine versija neįmanoma atlikti 6 – 8 punktuose minėtų skaičiavimų). Teorinių skaičiavimų metu laikyti, kad absoliutinė temperatūra lygi $T = 300$ K, silicio dielektrinė skvarba $\varepsilon = 11.8$, elektronų koncentracija grynajame silicyje, esant 300 K temperatūrai, $n_i = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

Pastabos:

1) Jeigu programa "SibGraf 2D" jau atidaryta, tuomet, spaudžiant programos "SibGraf 3D" mygtuką "ZY", naujas langas neatsidaro, o pjūvis atvaizduojamas jau atidarytame "SibGraf 2D" lange. Tokiu būdu viename "SibGraf 2D" lange galima atvaizduoti kelis pjūvius. Kitas būdas įterpti kreivę į "SibGraf 2D" grafiką: galima pasinaudoti programos „SibGraf 2D“ meniu komandomis „Plot/Copy“ ir „Plot/Paste“ (senesnėje „SibGraf 2D“ versijoje – „Curve/Copy“ ir „Curve/Paste“).

2) Norint išsaugoti „SibGraf 2D“ grafiką vėlesnei analizei, reikia įvykdyti programos SibGraf 2D meniu komandą „File/Save As“. Standartinis „SibGraf 2D“ duomenų failo vardo plėtinys yra „mtp“. Jeigu failas buvo įrašytas į diską, naudojant plėtinį „mtp“, tuomet to failo vardas matysis, įvykdžius „SibGraf 2D“ komandą „File/Open“. SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą **MicroTec 4**, šį plėtinį prideda automatiškai. „SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą **MicroTec 3**, šio plėtinio neprieda automatiškai, todėl vartotojas turi įvesti pilną failo vardą.

3) Jeigu "SibGraf 2D" grafike atvaizduotos kelios kreivės, tuomet, vykdant komandą „Plot/Copy“ (senesnėje „SibGraf 2D“ versijoje – „Curve/Copy“), į atmintį nukopijuojama tik aktyvioji kreivė, kuri pavaizduota raudona spalva (senesnėje versijoje – geltona spalva). Norint pakeisti aktyviają kreivę, reikia naudoti klavišus „↑“ arba „↓“.

4) "SibGraf 2D" aktyvioji kreivė turi aktyvųjį tašką, kuris pažymėtas juodu kryželiu (senesnėje versijoje – raudonu kryželiu). To taško abscisė ir ordinatė yra pateiktos laukuose „X“ ir „Y“, kurie yra po grafiku. Norint pakeisti aktyvųjį tašką, reikia naudoti klavišus „→“ arba „←“. Aktyvųjį tašką galima panaudoti, matuojant įvairius atstumus (pvz., priemaišų profilio plotį).

5) Tuo atveju, kai programos „SibGraf 2D“ lange atvaizduoti keli dydžiai, kurie skiriasi vienas nuo kito keliomis eilėmis, arba tuomet, kai pavaizduotasis dydis labai sparčiai kinta erdvėje (kaip, pvz., krūvininkų koncentracijos), patartina naudoti logaritminį ordinačių ašies mastelį. Tuo tikslu reikia spragtelėti mygtuką „logY“. Tuomet ant ordinačių ašies atidedamas dešimtainis logaritmas.

6) "SibGraf 2D" versija, kuri įeina į **MicroTec 4**, turi meniu komandas „File/Export Data“ ir „File/Import Data“, kurios leidžia išsaugoti duomenis teksto (ASCII) faile (skaičių stulpelių pavidalu) bei grafiškai atvaizduoti ASCII formato duomenis. Jeigu grafike yra kelios kreivės, tada išsaugoma tik pirmoji kreivė. „SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą **MicroTec 3**, tokios galimybės neturi.

7) "SibGraf 3D" versija, kuri įeina į **MicroTec 4**, turi meniu komandas „File/Export Data“ ir „File/Import Data“, kurios leidžia išsaugoti duomenis teksto (ASCII) faile (skaičių stulpelio pavidalu) bei grafiškai atvaizduoti ASCII formato duomenis. Išsaugomas tik vienas dvimatis profilis, kuris matomas programos lange. „SibGraf 3D“ versija, kuri įeina į programų paketą **MicroTec 3**, tokios galimybės neturi.

4. Lyginių variantų atlikimo metodika

4.1. Bendros pastabos

Naudojant programų paketą **MicroTec**, bet kurios realistiškos puslaidininkinės struktūros modeliavimas visuomet atliekamas trimis etapais:

- I. Priemaišų pasiskirstymo struktūros viduje modeliavimas. Tai atlieka programa **SiDif** ("two-dimensional SIMulator for DIffusion and oxidation" – dvimatis difuzijos ir oksidacijos simulatorius). Pvz., šis procesas buvo modeliuojamas darbe Nr. 1.
- II. Struktūros fragmentų sujungimas, paslinkimas, simetrizavimas arba pratęsimas iki visos struktūros kraštų. Tai atlieka programa **MergIC** ("program for MERGing fragments of IC elements" – integrinių grandinių fragmentų sujungimo programa).
- III. Gautosios struktūros elektrinių savybių modeliavimas. Tai atlieka programa **SemSim** ("two-dimensional steady-state SEMiconductor device SIMulator" – dvimatis stacionariosios būsenos puslaidininkinių prietaisų simulatorius).

Kiekvienas iš šių etapų atitinka vieną **MicroTec** projektą. Kuriant naują **MicroTec** projektą, visuomet reikia nurodyti, kurį iš aukščiau minėtųjų trijų etapų jis atitiks. Tai atliekama, pasirenkant programą (SiDif, MergIC arba SemSim) sąraše "Method". Nuo šio pasirinkimo priklausys parametrai, kuriuos galima užduoti lange "Project Settings", tipai.

Atliekant II ir III etapus, reikia užduoti parametrai, kuris nusako ankstesniojo etapo rezultatų failą (atliekant II etapą, šis parametras yra "Fragment/Input file", o atliekant III etapą, šis parametras yra "Numerical doping data"). Atliekant bet kurį etapą, rezultatų failo vardas sugeneruojamas automatiškai, ir vartotojas jo pakeisti negali. Šis vardas yra nurodytas parametrai sąrašo pirmojoje eilutėje, greta projekto pavadinimo.

Programos **MicroTec** variantas, kuris instaliuotas VU FF kompiuterių klasėje (613 k.), jau turi projektus, kurie reikalingi pn diodo modeliavimui. Šių projektų pavadinimai yra:

- I. "2.2 (realistic diode)" – jonų implantacijos ir difuzijos modeliavimas;
- II. "2.2 merge" – fragmento paslinkimas arba pratęsimas iki struktūros kraštų;
- III. "2.2 example" – pn diodo elektrinių savybių modeliavimas.

Šie trys projektai ir naudojami šiame darbe.

Žemiau pateiktas smulkesnis šio darbo parametrai bei metodikos aprašymas.

4.2. Realistiško pn diodo modeliavimas naudojant programų paketą **MicroTec**

1. Programos **MicroTec** lange „Select Project“ pasirenkamas projektas „2.2 (realistic diode)“. Po to atidaromas langas „Project Settings“, kuriame užduodamos parametrai vertės. Projekto parametrai sugrupuoti į direktyvas. Kiekviena direktyva atitinka giminingų parametrai grupę. Norint pakeisti parametrai vertę, reikia du kartus spragtelėti ant jos. Norint įterpti direktyvą, reikia kairiuoju mygtuku spragtelėti ant projekto pavadinimo (jis nurodytas pirmojoje eilutėje), po to spragtelėti dešiniuoju mygtuku ir pasirinkti "Add Directive", o po to pasirinkti reikalingą direktyvą.

Parametrai įterpiami analogiškai, tačiau spragtelėti reikia ne ant projekto pavadinimo, o ant parametrų grupės (direktyvos) pavadinimo. Norint pašalinti direktyvą arba parametą, reikia spragtelėti dešiniuoju pelės mygtuku ant direktyvos arba parametro pavadinimo ir pasirinkti „Delete“. Kiekvieno projekto skaičiavimo rezultatai įrašomi į failą, kurio vardo plėtinys yra „3D“ arba „2D“ (atliekant kai kuriuos projektus, sukuriama ir „3D“, ir „2D“ failas). Rezultatų failų vardai būna nurodyti lango „Project Settings“ pirmoje eilutėje, šalia projekto pavadinimo. Tie failai būna tame pačiame kataloge, kuriame įdiegta programa **MicroTec**.

Dėmesio! Kartais dėl netinkamų parametrų verčių arba dėl modeliavimo programos klaidų rezultatų failai nėra sukuriami. Tada, jeigu su tuo kompiuteriu anksčiau jau buvo atliekamas tas projektas, programos **MicroTec** kataloge išliks nepakitę senieji rezultatų failai, kurie gali atitikti visiškai kitokias parametrų vertes. Todėl, siekiant išvengti nesusipratimų, prieš pradėdant skaičiavimus patartina ištrinti senuosius rezultatų failus.

2. Parametrų grupė „Domain and Mesh“ apibrėžia struktūros fragmento matmenis bei koordinatinį tinklą, kuris naudojamas, modeliuojant jonų implantaciją ir difuziją. Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Number of nodes NX	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius X kryptimi (išilgai padėklo paviršiaus)	15
Number of nodes NY	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius Y kryptimi (gilyn į padėklą)	40
Domain size in X -direction (μm)	Struktūros matmenys X kryptimi	1
Domain size in Y -direction (μm)	Struktūros matmenys Y kryptimi	0.6
Mesh generation	Jeigu šis parametras lygus 1, tuomet intervalai tarp gretimų koordinatinių linijų yra vienodo pločio, o jeigu 0, tuomet linijų tankis auga, artėjant prie koordinatinių pradžių taško.	0
X -mesh exponent (μm)	Parametras, kuris nusako, kaip sparčiai koordinatinės linijos turi tankėti, artėjant prie kairiojo struktūros krašto ($x = 0$) išilgai X ašies (šis parametras naudojamas tik tuomet, kai "Mesh generation" lygus 0). Kuo didesnis šis parametras, tuo didesnis koordinatinių linijų tankis prie kairiojo struktūros krašto ir tuo jis mažesnis prie dešiniojo krašto.	0
Y -mesh exponent (μm)	Analogiškas parametras Y kryptimi	2

3. Parametrų grupė „Numerical solution“ apibrėžia kai kuriuos diferencialinių lygčių skaitmeninio sprendimo parametrus (pvz., parametrus, kurie lemia skaičiavimo rezultatų tikslumą). Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Batch mode switch	Jeigu 1, tuomet visi skaičiavimo proceso žingsniai atliekami be pauzių, o jeigu 0, tuomet po kiekvieno žingsnio programa sustabdoma ir laukiama, kol vartotojas nuspaus klavišą "Enter".	1
Background impurity conc (cm^{-3})	Priemaišų koncentracijų skaičiavimo paklaida (cm^{-3}). Ji turi būti daug mažesnė už priemaišų koncentracijas didžiojoje struktūros dalyje. Šiame darbe priemaišų koncentracijos visuose taškuose yra didesnės už 10^{15} cm^{-3} , todėl paklaidos vertė 10^{12} cm^{-3} yra pakankamai maža.	$1\text{e}+12$

4. Parametrų grupė „Substrate“ apibrėžia silicio padėklo orientaciją ir pradinę priemaišų koncentraciją jame. Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Lattice Orientation	Padėklo kristalo gardelės orientacija (t. y. padėklo paviršiaus Milerio indeksai)	111
Initial Boron conc (cm^{-3})	Pradinė boro atomų koncentracija padėkle (cm^{-3})	$1\text{e}+12$

5. Parametrų grupė „Phosphorus implant“ (variantai Nr. 2 – 16) arba „Boron implant“ (variantai Nr. 18 – 34) apibrėžia bazės priemaišų implantacijos langą, implantacijos dozę ir implantuojamų jonų energiją. Parametrų vertės:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Phosphorus implant mask (μm)	Pusiau begalinio lango, pro kurį implantuojami bazės priemaišiniai jonai, dešiniojo krašto x koordinatė (μm) arba kairiojo krašto x koordinatė su minuso ženklu. Šiame darbe bazės priemaišiniai atomai implantuojami tolygiai visame paviršiuje, todėl krašto koordinatė turi būti žymiai didesnė už struktūros matmenis X kryptimi (pvz., 2, 5 ir pan.).	2
Phosphorus implant dose (cm^{-2})	Fosforo (boro) implantacijos dozė (cm^{-2}), t. y. implantuotų atomų skaičius, kuris tenka paviršiaus ploto vienetui. Ši dozė priklauso nuo varianto numerio (žr. darbo užduotis).	Q_P arba Q_B
Phosphorus implant energy (keV)	Implantuojamų bazės priemaišinių jonų energija (keV). Fosforo atveju ši energija yra 200 keV, o boro atveju – 100 keV.	200 arba 100

6. Parametrų grupė „Annealing“ apibrėžia atkaitinimo sąlygas po bazės jonų implantavimo. Šis atkaitinimas reikalingas tik variantuose Nr. 2 – 16 (po fosforo implantavimo). Atliekant variantus Nr. 18 – 34, po bazės jonų (boro) implantavimo reikia iš karto pereiti prie emiterio jonų (arseno) implantavimo (7 punktas). Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Temperature (degrees C)	Atkaitinimo temperatūra ($^{\circ}\text{C}$).	1000
Annealing time (s)	Atkaitinimo trukmė (s)	3600
Time step	Difuzijos proceso modeliavimo laiko žingsnis (s)	200

7. Parametrų grupė „Boron implant“ (variantai Nr. 2 – 16) arba „Arsenic implant“ (variantai Nr. 18 – 34) apibrėžia emiterio priemaišų implantacijos langą, implantacijos dozę ir implantuojamų jonų energiją. Parametrų vertės:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Boron implant mask (μm)	Pusiau begalinio lango, pro kurį implantuojami emiterio priemaišiniai jonai, dešiniojo krašto x koordinatė (μm) arba kairiojo krašto x koordinatė su minuso ženklu. Šiame darbe laikoma, kad emiterio jonai implantuojami intervale nuo $x = 0$ iki $x = 0.5 \mu\text{m}$. Todėl šis parametras lygus 0.5.	0.5
Boron implant dose (cm^{-2})	Boro (arseno) implantacijos dozė (cm^{-2}), t. y. implantuotų atomų skaičius, kuris tenka paviršiaus ploto vienetui.	$1e+15$
Boron implant energy (keV)	Implantuojamų emiterio priemaišinių jonų energija (keV). Boro atveju ši energija yra 10 keV, o arseno atveju – 60 keV	10 arba 60

8. Antroji parametrų grupė „Annealing“ apibrėžia atkaitinimo sąlygas po emiterio priemaišinių jonų implantavimo. Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Temperature (degrees C)	Atkaitinimo temperatūra ($^{\circ}\text{C}$).	1000
Annealing time (s)	Atkaitinimo trukmė (s). Boro atveju ši trukmė yra 300 s, o arseno atveju – 3600 s.	300 arba 3600
Time step	Difuzijos proceso modeliavimo laiko žingsnis (s). Boro atveju šis žingsnis yra 20 s, o arseno atveju – 200 s.	20 arba 200

9. Uždavus visų parametrų vertes, nuspaudžiamas mygtukas „Run“. Užsidarius DOS langui, programos MicroTec instaliavimo kataloge turi atsirasti rezultatų failas P0000033.3D, kuris bus panaudojamas sekančiame etape, kaip programos MergIC pradinių duomenų failas.

10. Programos **MicroTec** lange „Select Project“ pasirenkamas projektas „2.2 merge“. Po to atidaromas langas „Project Settings“, kuriame užduodamos parametų vertės. Šie parametrai paaiškinti žemiau.

11. Parametų grupė „Domain and Mesh“ apibrėžia visos struktūros matmenis bei koordinatinį tinklą. Parametrai, kuriuos reikia užduoti šioje grupėje, sutampa su atitinkamais parametrais, kurie minimi 2 punkte:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Domain X -size (μm)	Struktūros matmenys X kryptimi	1
Domain Y -size (μm)	Struktūros matmenys Y kryptimi	0.6
Number of nodes NX	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius X kryptimi (išilgai padėklo paviršiaus)	15
Number of nodes NY	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius Y kryptimi (gilyn į padėklą)	40

12. Parametų grupė „Fragment“ apibrėžia struktūros fragmento, kuris buvo pagamintas pirmame etape, patalpinimo į galutinę struktūrą taisyklę (mat, galutinės struktūros matmenys gali skirtis nuo pradinio fragmento matmenų). Parametrai, kuriuos reikia užduoti šioje grupėje, yra šie:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Location (μm)	Fragmento kairiojo krašto X koordinatė galutinėje struktūroje (μm). Šiuo atveju fragmento kairysis kraštas sutampa su visos struktūros kairiuoju kraštu, t. y. šis parametras turi būti lygus 0.	0
Fragment symmetrization type	Fragmento simetrizavimo tipas. Jeigu šis parametras lygus 0, tuomet fragmentas nėra simetrizuojamas. Jeigu šis parametras lygus 1, tuomet fragmentas atspindimas atžvilgiu savo dešiniojo krašto, o po to gautasis atspindys apjungiamas su pradiniu fragmentu. Jeigu šis parametras lygus -1, tuomet fragmentas analogiškai simetrizuojamas atžvilgiu savo kairiojo krašto.	0
Fragment stretch (μm)	Tarpas tarp sujungiamų simetrinių fragmentų (μm). Priemaišų koncentracija šiame tarpe sutampa su priemaišų koncentracija pradinio fragmento krašte, kurio atžvilgiu atliekamas simetrizavimas. Šis parametras naudojamas tik tuomet, kai "Fragment symmetrization type" nėra lygus nuliui. Taigi, šiame darbe šio parametro vertė gali būti bet kokia.	0.55
Flood or override	Jeigu šis parametras lygus 1, tuomet priemaišų koncentracijos fragmento kraštuose pratęsiamos iki visos struktūros kraštų. Jeigu šis parametras lygus 0, tuomet priemaišų koncentracijos pakeičiamos tik fragmento viduje, o ant jo ribų ir už jų lieka lygios nuliui arba ankstesniųjų direktyvų "Fragment" užduotoms vertėms.	1
Input file	Programos SiDif rezultatų failas, kuris apibrėžia pradinį fragmentą. Šiuo atveju šis parametras turi būti lygus projekto "2.2 (realistic diode)" rezultatų failo vardui, t. y. P0000033.3D.	

13. Uždavus visų parametų vertes, nuspaudžiamas mygtukas „Run“. Užsidarius DOS langui, programos **MicroTec** instaliavimo kataloge turi atsirasti rezultatų failas P0000034.3D, kuris bus panaudojamas sekančiame etape, kaip programos **SemSim** pradinių duomenų failas.

14. Programos **MicroTec** lange „Select Project“ pasirenkamas projektas „2.2 example“. Po to atidaromas langas „Project Settings“, kuriame užduodamos parametų vertės. Šie parametrai paaiškinti žemiau.

15. Parametų grupė "Numerical doping data" turi tik vieną parametą su tokiu pačiu pavadinimu. Šis parametras nusako programos **MergIC** rezultatų failą su priemaišų koncentracijomis galutinėje struktūroje. Šiuo atveju šis parametras turi būti lygus projekto "2.2 merge" rezultatų failo vardui, t. y. P0000034.3D.

16. Parametų grupė „Basic/Mesh“ apibrėžia visos struktūros matmenis bei koordinatinį tinklą. Šioje parametų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Number of X -nodes	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius X kryptimi	15
Number of Y -nodes	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius Y kryptimi	40
Domain X size (μm)	Struktūros matmenys X kryptimi	1
Domain Y size (μm)	Struktūros matmenys Y kryptimi	0.6

Kitų šios grupės parametrų keisti nereikia (jų įtaka modeliavimo rezultatams yra silpna).

17. Parametrų grupė „Electrodes“ apibrėžia elektrodų padėtis ir matmenis. Šioje parametrų grupėje turi būti dvi direktyvos „Ohmic electrode“. Viena iš šių direktyvų atitinka viršutinį elektrodą ($y = 0$), o kita – apatinį ($y = 0.6 \mu\text{m}$). Kiekvienoje direktyvoje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Electrode location	Elektrodo padėtis. 1 atitinka viršutinį elektrodą, o 2 – apatinį.	1 arba 2
Electrode number	Elektrodo numeris (turi sutapti su „Electrode location“)	1 arba 2
Electrode left edge (μm)	Elektrodo kairiojo krašto X koordinatė	0
Electrode right edge (μm)	Elektrodo dešiniojo krašto X koordinatė. Viršutiniam elektrodai šis parametras turi būti 0.4, o apatiniam – 1.	0.4 arba 1

18. Parametrų grupė „IV-data/IV-data“ apibrėžia voltamperinės charakteristikos taškus, t. y. įtampas, kurioms esant, reikia apskaičiuoti srovės stiprį. Šio darbo užduotis reikalauja, kad pn sandūra būtų termodinaminėje pusiausvyroje. Vadinasi, šiuo atveju reikia, kad voltamperinė charakteristika turėtų tik vieną tašką, kuris atitinka nulinę išorinę įtampą. Todėl užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Number of IV-points to compute	Voltamperinės charakteristikos taškų skaičius	1
Initial voltage for contact #1	Pirmojo elektrodo pradinis potencialas	0
Initial voltage for contact #2	Antrojo elektrodo pradinis potencialas	0

Esant tokioms parametrų vertėms, kiti šios grupės parametrai neturės įtakos rezultatams.

19. Uždavus visų parametrų vertes, nuspaudžiamas mygtukas „Run“. Užsidarius DOS langui, nuspaudžiamas mygtukas „3D Output“. Tuomet atsidaro dvimačių profilių vizualizavimo programa „SibGraf 3D“.

20. Naudojant programos „SibGraf 3D“ meniu „Plot“ (senesnėje versijoje – „Surface“), paėliui atvaizduojamos dydžių, kurie minimi darbo užduotyje Nr. 2, priklausos nuo x ir y , o po to atvaizduojami jų pjūviai Y kryptimi. Šie pjūviai išsaugomi failų pavidalu vėlesnei analizei. Paviršiai, kuriuos reikia atvaizduoti, yra šie:

„Electron concentration (cm^{-3})“ – elektronų koncentracija (cm^{-3});

„Hole concentration (cm^{-3})“ – skylių koncentracija (cm^{-3});


„Net doping concentration (cm^{-3})“ (senesnėje versijoje – „Doping concentration“) – donorų ir akceptorijų koncentracijų skirtumas (cm^{-3});

„Net space charge density (cm^{-3})“ – erdvinio krūvio tankis, išreikštas elementariųjų krūvių skaičiumi į kubinį centimetrą (t. y. matavimo vienetas – e/cm^3);

„Electrostatic potential (V)“ – elektrinis potencialas (V);

„Y-Electric field (V/cm)“ – elektrinio lauko stiprio dedamoji Y kryptimi (V/cm).

Pastaba: Programa „SibGraf 3D“, kuri įeina į MicroTec 4, turi meniu komandą „Plot/Select“, kuri pateikia didesnę dvimačių profilių pasirinkimą. Jeigu kurio nors iš anksčiau minėtų profilių nėra meniu „Plot“, tada tą profilį reikia pasirinkti iš sąrašo, kuris atsidaro pasirinkus „Plot/Select“. Programa „SibGraf 3D“, kuri įeina į MicroTec 3, neturi komandos „Select“ (t. y. visi dvimačiai profiliai, kurie gali būti pavaizduoti, yra išvardyti meniu „Surface“).

Atvaizdavirus kiekvieną iš šių paviršių, reikia spragtelėti mygtuką „ZY“ . Tuomet atsidaro vienmačių pjūvių atvaizdavimo programa "SibGraf 2D", kurioje atvaizduotas pasirinkto paviršiaus pjūvis Y kryptimi. Šį pjūvį reikia įrašyti į diską, naudojant programos „SibGraf 2D“ meniu komandą „File/Save As“ (vėliau šį failą bus galima atidaryti, naudojant programos „SibGraf 2D“ meniu komandą „File/Open“).

21. Projekto „**2.2 (realistic diode)**“ parametrų sąrašė bazės priemaišinių jonų implantavimo dozė padidinama 10 kartų (žr. 5 punktą), nuspaudžiamas mygtukas „Run“, po to pasirenkamas projektas „**2.2 merge**“, nuspaudžiamas mygtukas „Run“, o po to pasirenkamas projektas „**2.2 example**“ ir vėl nuspaudžiamas mygtukas „Run“ (kadangi pastarųjų dviejų projektų parametrai jau užduoti, tai nėra reikalo atidaryti jų parametrų sąrašus). Nuspaudžiamas mygtukas „3D Output“ ir pakartojamas 20 punktas.

22. Visos gautosios priklausomybės nuo y atspausdinamos (tai galima atlikti ne laboratorinių darbų metu). Abiejų rūšių krūvininkų ir priemaišų koncentracijos turi būti pavaizduotos kartu. Taigi, krūvininkų ir priemaišų koncentracijos turi būti pateiktos dviejuose grafikuose: vienas atitinka pradinę bazės implantacijos dozę, o kitas – 10 kartų didesnę implantacijos dozę. Visi kiti dydžiai (potencialas, elektrinio lauko stipris ir erdvinio krūvio tankis) turi būti pavaizduoti atskiruose grafikuose. Kiekviename iš pastarųjų trijų grafikų turi būti po dvi kreives: viena atitinka pradinę bazės implantacijos dozę, o kita – 10 kartų didesnę implantacijos dozę. Vadinasi, iš viso turi būti 5 grafikai: 2 grafikai su koncentracijomis (kiekviename – po tris kreives) ir 3 grafikai su potencialo, elektrinio lauko ir erdvinio krūvio tankio priklausomybėmis nuo koordinatės (kiekviename – po dvi kreives).

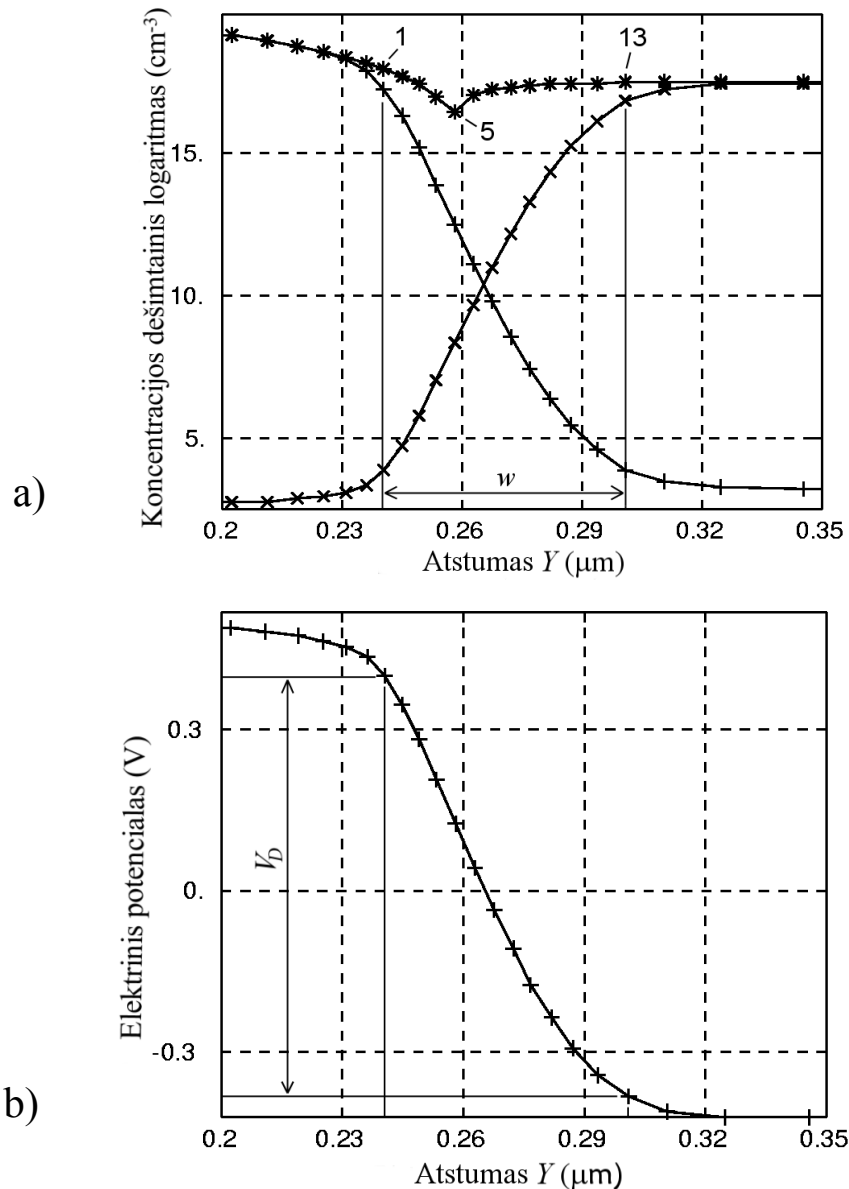
4.3. Modeliavimo duomenų analizė

Darbo užduotys Nr. 4, 5 ir 6 atliekamos, analizuojant gautuosius grafikus. Atliekant šias užduotis, reikia naudoti programą „SibGraf 2D“, kuri įeina į programų paketo **MicroTec** sudėtį. Turint duomenų failus, kurie buvo gauti 19 punkte, šią analizę galima atlikti, ir naudojant demonstracinę **MicroTec** versiją (tačiau su demonstracine versija neįmanoma atlikti skaičiavimų).

7 pav. pavaizduotas modeliavimo rezultatų pavyzdys (krūvininkų bei priemaišinių jonų koncentracijos ir potencialas). Nuskurdintasis sluoksnis – tai sritis, kurioje laisvųjų elektronų ir skylių koncentracijos yra bent 2 kartus mažesnės už priemaišų koncentraciją. T. y. matuojant nuskurdintojo sluoksnio storį w , reikia rasti visus koordinatinio tinklo mazgus, kuriuose tenkinama ši sąlyga, ir išmatuoti atstumą tarp kraštinių mazgų. 7 pav. atveju šią sąlygą tenkina 13 mazgų, todėl nuskurdintojo sluoksnio storiumi reikia laikyti atstumą tarp taškų Nr. 1 ir Nr. 13 (žr. 7a pav.). Kontaktinis potencialų skirtumas matuojamas tarp tų pačių taškų (žr. 7b pav.).

Tikrinant teorinius sąryšius (2.4.2a) ir (2.4.2b), reikia pasirinkti du taškus bazės neutraliojoje dalyje, rasti jų potencialų skirtumą pagal modeliavimo duomenis (pvz., 6c pav.), o po to apskaičiuoti tą patį potencialų skirtumą pagal (2.4.2a) arba (2.4.2b) formulę. Formulę (2.4.2a) reikia naudoti tuo atveju, kai bazė yra n tipo (lyginiai variantai Nr. 2 – 16), o formulę (2.4.2b) – tuo atveju, kai bazė yra p tipo (lyginiai variantai Nr. 18 – 34). Tuos du taškus galima pasirinkti, pvz., taip, kad pirmasis iš jų atitiktų potencialo maksimumą (n tipo bazėje) arba minimumą (p tipo bazėje), o antrasis – bazės ominių kontaktą ($y = 0.6 \mu\text{m}$). Tuomet 6 pav. atveju pirmasis taškas būtų $y = 0.33 \mu\text{m}$. Kaip matome 6b pav., tai yra tas pats taškas, kuriame elektrinis laukas keičia ženklą (nes elektrinis laukas yra lygus potencialo išvestinei su minuso ženklu, o potencialo maksimumo arba minimumo taške ši išvestinė lygi nuliui).

Visuose teoriniuose skaičiavimuose reikia laikyti, kad absoliutinė temperatūra lygi $T = 300 \text{ K}$, o silicio dielektrinė skvarba $\epsilon = 11.8$.



7 pav. a) Priemaišų (*), laisvųjų elektronų (+) ir laisvųjų skylių (x) koncentracijų dešimtinių logaritmų priklausos nuo koordinatės y (grafike parodytas nuskurdintojo sluoksnio storis w). b) Elektrinio potencialo priklausos nuo koordinatės y (grafike parodytas kontaktinis potencialų skirtumas V_D).

Pastabos:

1) Programos "SibGraf 3D" lange pjūvio išilgai Y ašies padėtį nusako žalia linija (ją galima pakeisti, naudojant klavišus „→“ arba „←“), o pjūvio išilgai X ašies padėtį – raudona linija (ją galima pakeisti, naudojant klavišus „↑“ arba „↓“).

2) Jeigu programa "SibGraf 2D" jau atidaryta, tuomet, spaudžiant programos "SibGraf 3D" mygtuką "ZY", naujas langas neatsidaro, o pjūvis atvaizduojamas jau atidarytame "SibGraf 2D" lange. Tokiu būdu viename "SibGraf 2D" lange galima atvaizduoti kelis pjūvius. Kitas būdas įterpti kreivę į "SibGraf 2D" grafiką: galima pasinaudoti programos „SibGraf 2D“ meniu komandomis „Plot/Copy“ ir „Plot/Paste“ (senesnėje „SibGraf 2D“ versijoje – „Curve/Copy“ ir „Curve/Paste“).

3) Norint išsaugoti „SibGraf 2D“ grafiką vėlesnei analizei, reikia įvykdyti programos SibGraf 2D meniu komandą „File/Save As“. Standartinis „SibGraf 2D“ duomenų failo vardo plėtinys yra „mtp“. Jeigu failas buvo įrašytas į diską, naudojant plėtinį „mtp“, tuomet to failo vardas matysis,

įvykdžius „SibGraf 2D“ komandą „File/Open“. SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 4, šį plėtinį prideda automatiškai. „SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 3, šio plėtinio neprideda automatiškai, todėl vartotojas turi įvesti pilną failo vardą.

4) Jeigu "SibGraf 2D" grafike atvaizduotos kelios kreivės, tuomet, vykdant komandą „Plot/Copy“ (senesnėje „SibGraf 2D“ versijoje – „Curve/Copy“), į atmintį nukopijuojama tik aktyvioji kreivė, kuri pavaizduota raudona spalva (senesnėje versijoje – geltona spalva). Norint pakeisti aktyviają kreivę, reikia naudoti klavišus „↑“ arba „↓“.

5) "SibGraf 2D" aktyvioji kreivė turi aktyvųjį tašką, kuris pažymėtas juodu kryželiu (senesnėje versijoje – raudonu kryželiu). To taško abscisė ir ordinatė yra pateiktos laukuose „X“ ir „Y“, kurie yra po grafiku. Norint pakeisti aktyvųjį tašką, reikia naudoti klavišus „→“ arba „←“. Aktyvųjį tašką galima panaudoti, matuojant įvairius atstumus (pvz., priemaišų profilio plotį).

6) Tuo atveju, kai programos „SibGraf 2D“ lange atvaizduoti keli dydžiai, kurie skiriasi vienas nuo kito keliom eilėm, arba tuomet, kai pavaizduotasis dydis labai sparčiai kinta erdvėje (kaip, pvz., krūvininkų koncentracijos), patartina naudoti logaritminį ordinačių ašies mastelį. Tuo tikslu reikia spragtelėti mygtuką „logY“. Tuomet ant ordinačių ašies atidedamas dešimtainis logaritmas.

7) "SibGraf 2D" versija, kuri įeina į MicroTec 4, turi meniu komandas „File/Export Data“ ir „File/Import Data“, kurios leidžia išsaugoti duomenis teksto (ASCII) faile (skaičių stulpelių pavidalu) bei grafiškai atvaizduoti ASCII formato duomenis. Jeigu grafike yra kelios kreivės, tada išsaugoma tik pirmoji kreivė. „SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 3, tokios galimybės neturi.

8) "SibGraf 3D" versija, kuri įeina į MicroTec 4, turi meniu komandas „File/Export Data“ ir „File/Import Data“, kurios leidžia išsaugoti duomenis teksto (ASCII) faile (skaičių stulpelio pavidalu) bei grafiškai atvaizduoti ASCII formato duomenis. Išsaugomas tik vienas dvimatis profilis, kuris matomas programos lange. „SibGraf 3D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 3, tokios galimybės neturi.