

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZIKOS FAKULTETAS

Krūvio pernašos vyksmų skaitinis modeliavimas

Parengė A. Poškus

2013 09 18

Turinys

1. Puslaidininkinių įtaisų skaitinio modeliavimo teorinis pagrindas.....	1
1.1. Energijos slėniai. Atvirkštinė gardelė	1
1.2. Fononai.....	4
2. Šotkio diodo modeliavimas.....	5
2.1. Šotkio kontakto energijos juostų diagrama	5
2.2. Nuskurdinimo artinys Šotkio kontaktui	6
2.3. Šotkio kontaktas esant išorinei įtampai	9
2.4. Šotkio diodo kontaktinio potencialų skirtumo teorinė išraiška.....	11
2.5. Einšteino sąryšis.....	12
2.6. Šotkio diodo atgalinės srovės išraiška.....	13
2.7. Paviršinių gaudyklių įtaka Šotkio kontakto savybėms.....	14
2.8. Šotkio efektas	14
2.9. Šotkio diodo skaitinio modeliavimo metodo teorija	16
3. Krūvio pernašos ypatybės dielektriniuose sluoksniuose.....	18
3.1. Elektrofotografinis procesas.....	18
3.2. Krūvininkų kinetika fotojautriajame sluoksnyje.....	18
3.3. Pulio ir Frenkelio efektas	20
3.4. Lanževeno rekombinacijos modelis	21
4. Krūvininkų generacijos ir rekombinacijos reiškiniai puslaidininkiuose.....	22
4.1. Tiesioginiai ir netiesioginiai šuoliai. Rekombinacijos centrai	22
4.2. Rekombinacijos sparta. Tolydumo lygtis.....	22
4.3. Krūvininkų gyvavimo trukmės išraiška rekombinacijos centrų parametrais.....	24
4.4. Krūvininkų kinetikos skaitinis modeliavimas esant rekombinacijos centrams.....	25
4.5. Šalutinių krūvininkų injekcija. Difuzijos nuotolis	26
4.5.1. <i>Stacionarioji veika esant šalutinių krūvininkų injekcijai</i>	27
4.5.2. <i>Perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimas sustabdžius injekciją: rekombinacijos ribota veika</i>	28
4.5.3. <i>Difuzijos ribota veika</i>	28
4.6. Sluoksnio poliarizacija dėl krūvininkų persiskirstymo, esant prilipimo lygmenims	31
4.7. Kraštinės sąlygos sprendžiant krūvininkų kinetikos lygtis	37
4.7.1. „Skaidrūs“ skiriamieji paviršiai	37
4.7.2. Paviršinės gaudyklės	38
4.7.3. Ominiai kontaktai	38
4.7.4. Krūvininkų injekcija per paviršinį potencialo barjerą.....	39
5. pn diodo modeliavimas	40
5.1. Įvadas. Nuskurdinimo artinys	40
5.2. pn diodas esant išorinei įtampai	42
5.3. pn diodo tiesioginė srovė.....	45
6. Krūvininkų sklaida	47
6.1. Kvantinė krūvininkų sklaidos teorija	47
6.2. Joninė priemaišinė sklaida	49
6.2.1. <i>Debajaus ekranavimo nuotolis</i>	49
6.2.2. <i>Joninės priemaišinės sklaidos spartos apskaičiavimas</i>	50
6.2.3. <i>Atsitiktinio dydžio (pvz., sklaidos kampo) verčių generavimas, kai yra žinomas jo skirstinys</i>	51
6.3. Fononinė sklaida	53

6.3.1. <i>Nepolinė sklaida akustiniais fononais</i>	53
6.3.2. <i>Kampinių koordinacijų reikšmių generavimas, kai sklaida yra izotropinė</i>	55
6.3.3. <i>Nepolinė sklaida optiniais fononais</i>	56
6.3.4. <i>Tarpslėnė sklaida</i>	57
6.3.5. <i>Polinė sklaida optiniais fononais</i>	59
7. Viendalelis Monte Karlo metodas	61
7.1. Įvadas	61
7.2. Viendalelės Monte Karlo programos struktūra	62
7.3. Lėkio trukmės skaičiavimas. Dreifo proceso modeliavimas.....	63
7.4. Sklaidos proceso modeliavimas	65
7.5. Viendalelio Monte Karlo metodo taikymo pavyzdys: GaAs neigiamojo diferencialinio laidumo modeliavimas	67
8. Puslaidininkinių įtaisų modeliavimas daugiadaleliu Monte Karlo metodu	69
8.1. Daugiadalelis Monte Karlo metodas	69
8.2. Pagrindinės puslaidininkinio įtaiso modeliavimo Monte Karlo metodu ypatybės	70
8.3. Superdalelė	71
8.4. Puslaidininkinio įtaiso geometrijos apibrėžimas	72
8.5. Dalelių išėjimo pro kontaktus ir atspindžio nuo laisvojo paviršiaus modeliavimas	72
8.6. Ominių ir Šotkio kontaktų modeliavimas Monte Karlo metodu.....	73
8.7. Erdvinio krūvio tankio apskaičiavimas Monte Karlo programoje	74
8.8. Puasono lygties sprendimas ir lauko stiprio skaičiavimas baigtinių skirtumų metodu.....	75
8.9. Laiko žingsnio Δt ir atstumų tarp gretimų mazgų Δx , Δy pasirinkimas	76
8.10. Naujų dalelių kūrimas. Įtaiso voltamperinių charakteristikų skaičiavimas.....	78
8.11. Puslaidininkinio įtaiso Monte Karlo modeliavimo programos struktūrinė schema.....	79
8.12. Daugiadalelio Monte Karlo metodo taikymo pavyzdys: elektronų dreifo greičio paviršiaus modeliavimas	79
Literatūra	84

1. Puslaidininkinių įtaisų skaitinio modeliavimo teorinis pagrindas

1.1. Energijos slėniai. Atvirkštinė gardelė

Kaip žinoma iš kietojo kūno elektronikos kurso, idealiojo kristalo vienelektroninės Šrėdingerio lygties

$$\hat{H}^{(0)}\Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.1.1)$$

pilnoji ortogonalioji sprendinių sistema – tai Blocho bangos

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(-iE_{\mathbf{k}}t / \hbar), \quad (1.1.2a)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})), \quad (1.1.2b)$$

kur $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ yra periodinė spindulio vektoriaus \mathbf{r} funkcija, kurios periodiškumas yra toks pats, kaip kristalo gardelės periodiškumas, \mathbf{k} yra elektrono bangos vektorius, o $E_{\mathbf{k}}$ yra elektrono energija. Elektrono judėjimo būseną nusako Blocho bangos vektorius \mathbf{k} . Indeksas „ \mathbf{k} “ energijos žymenyje „ $E_{\mathbf{k}}$ “ nurodo, kad elektrono energija yra bangos vektoriaus funkcija. Visuose pagrindiniuose puslaidininkiuose (Ge, Si, GaAs ir InP) elektronų energijos priklausomybė nuo \mathbf{k} yra sudėtinga daugiareikšmė funkcija, kuri turi kelis minimumus ir maksimumus. Šios funkcijos verčių (energijų) visuma, kuri atitinka laisvąsias elektrono būsenas, sudaro vadinamąją **laidumo juostą**, o energijų visuma, kuri atitinka kovalentiniuose cheminiuose ryšiuose dalyvaujančių elektronų būsenas, sudaro **valentinę juostą**. Skirtingų energijos lygmenų užpildą kiekvienoje iš šių juostų nusako vadinamoji **Fermio ir Dirako funkcija**:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)}; \quad (1.1.3)$$

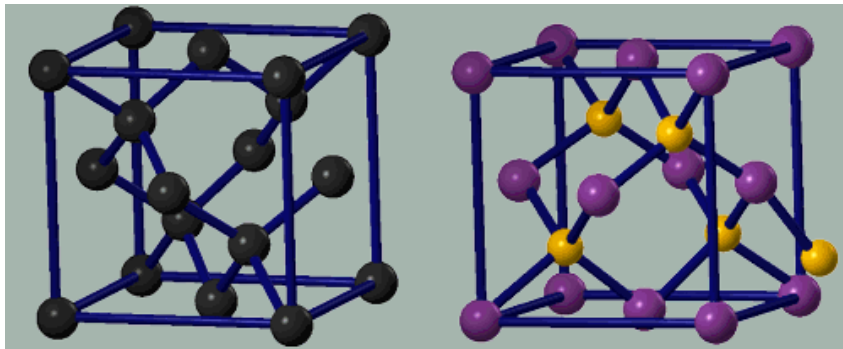
čia E_F yra Fermio energija. Akivaizdu, kad energijos lygmenų užpilda sparčiai mažėja didėjant energijai E . Todėl dažnai galima laikyti, kad visi elektronai yra susitelkę laidumo juostos minimumuose, o visos skylės yra susitelkusios valentinės juostos maksimumuose. Tokiais atvejais pakanka žinoti tik funkcijos $E_{\mathbf{k}}$ pavidalą laidumo juostos minimumų aplinkoje ir valentinės juostos maksimumų aplinkoje. Laidumo juostos minimumai ir valentinės juostos maksimumai vadinami **energijos slėniais**. Žinome, kad ekstremumo aplinkoje bet kuri funkcija yra apytiksliai kvadratinė (t. y. proporcinga argumento nuokrypio nuo minimumo taško kvadratui). Izotropinio slėnio atveju tai reiškia, kad energijos slėnyje izoenerginiai paviršiai yra apytiksliai sferiniai. Tada krūvininko kinetinės energijos priklausomybė nuo bangos vektoriaus yra parabolinė:

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \quad (1.1.4)$$

čia m^* yra krūvininko efektinė masė ekstremumo aplinkoje, o bangos vektorius k atskaitomas nuo ekstremumo taško. Tačiau dažnai tokia aproksimacija yra nepriimtina. Tada izotropinio energijos slėnio neparaboliškumą nusako **neparaboliškumo koeficientas** α .

$$E_{\mathbf{k}}(1 + \alpha E_{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \equiv \gamma(E_{\mathbf{k}}). \quad (1.1.5)$$

Energijos slėnių padėtys \mathbf{k} erdvėje yra susijusios su kristalo simetrija. Pagrindinių puslaidininkių (Si, Ge, GaAs ir InP) Bravė gardelė yra kubinė paviršiuje centruota, o jos bazę sudaro du atomai. Vienas atomas yra gardelės mazge, o kitas pasislinkęs pirmojo atžvilgiu išilgai narvelio pagrindinės įstrižainės 1/4 jos ilgio (žr. 1.1 pav.). Bet kuriai kristalo gardelei \mathbf{k} erdvėje galima sudaryti vadinamąją **atvirkštinę gardelę**.



(a)

(b)

1.1 pav. Si ir Ge (a) bei GaAs ir InP (b) kristalų gardelių elementarieji narveliai

Atvirkštinės gardelės primityvusis narvelis sudaromas šitaip. Jeigu tiesioginės gardelės primityviojo narvelio briaunas nusako vektoriai \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 ir \mathbf{a}_3 , tada atvirkštinės gardelės primityviojo narvelio briaunas nusako vektoriai

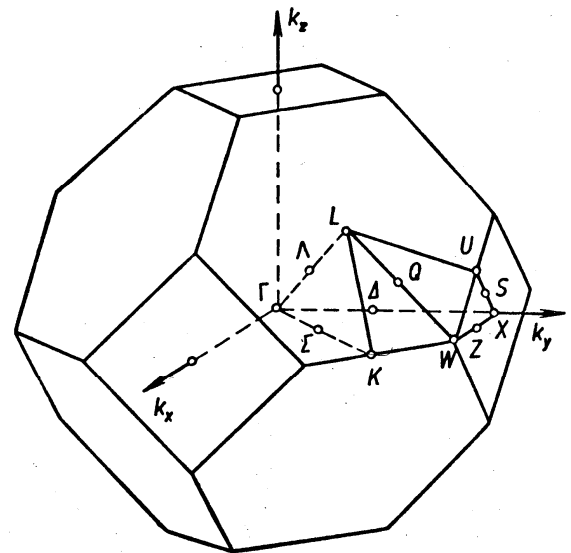
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{V_0}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{V_0}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{V_0}; \quad (1.1.6)$$

čia V_0 yra tiesioginės gardelės primityviojo narvelio tūris, o laužtiniai skliaustai žymi vektorinę sandaugą. Atvirkštinės gardelės mazgai yra išsidėstę taškuose, kuriuos atitinka šie bangos vektoriai:

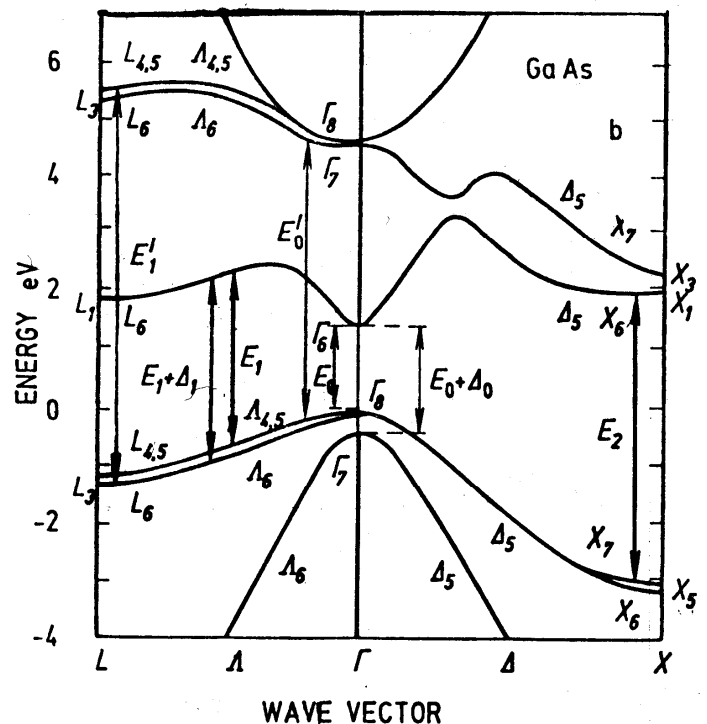
$$\mathbf{g} = \sum_{i=1}^3 g_i \mathbf{b}_i; \quad (1.1.7)$$

čia g_i ($i = 1, 2, 3$) yra bet kokie sveikieji skaičiai. Jeigu tiesioginė gardelė yra kubinė (kaip Ge, Si, GaAs ir InP atvejais), tada atvirkštinė gardelė taip pat yra kubinė. Aukščiau apibrėžtieji vektoriai \mathbf{g} – tai atvirkštinės gardelės translacijos vektoriai (*translacijos vektoriai* – tai vektorius, kuriuo lygiagrečiai paslinkus begalinę gardelę, galutinė gardelės padėtis yra neatskiriama nuo pradinės). \mathbf{k} erdvės taškai, kurie skiriasi atvirkštinės gardelės translacijos vektoriais, yra lygiaverčiai. Todėl visos fiziškai skirtingos elektrono būsenos yra sutelktos atvirkštinės gardelės pirmojoje Brijueno zonoje. Pirmoji Brijueno zona sudaroma, sujungus atvirkštinės gardelės mazgą $\mathbf{g} = 0$ su artimiausiais mazgais ir per kiekvienos tokiu būdu gautos atkarpos vidurį nubrėžus jai statmeną plokštumą. Pirmoji Brijueno zona – tai šių plokštumų gaubiama erdvės sritis. Jos pavidalas Ge, Si, GaAs ir InP atveju yra toks, kaip pavaizduota 1.2 pav. Be to, 1.2 pav. pavaizduotos pirmosios Brijueno zonos simetrijos ašys: ketvirtosios eilės [100] (1.2 pav. ši ašis pažymėta Δ), antrosios eilės ašis [110] (Σ) ir trečiosios eilės ašis [111] (Λ). Brijueno zonos centras ($k = 0$) žymimas Γ . Taškai, kuriuose ašys Δ , Σ ir Λ kerta Brijueno zonos paviršius žymimi atitinkamai X , K ir L (žr. 1.2 pav.). Atstumas nuo taško Γ iki taško X lygus $2\pi/a$, kur a yra kristalo (tiesioginės) gardelės konstanta, t. y. 1.1 pav. pavaizduotojo Bravė narvelio briaunos ilgis.

Energijos slėniai yra taškuose Γ , L ir X . Žinyuose dažniausiai pateikiama elektrono energijos priklausomybė nuo banginio vektoriaus absoliutinės vertės, kai Blocho bangos sklidimo kryptis yra lygiagreti kuriai nors iš dviejų aukščiausios eilės simetrijos ašių: Δ ir Λ . Pvz., 1.3 pav. pavaizduoti energijos slėniai GaAs atveju. Viršutinės kreivės (su minimumu taške Γ) atitinka laidumo juostą, o apatinės kreivės (su maksimumu taške Γ) – valentinę juostą. Kaip matome, ir laidumo, ir valentinė juosta turi keletą šakų. T. y. laidumo juostoje egzistuoja kelių rūšių elektronai, o valentinėje juostoje egzistuoja kelių rūšių skylės. Tačiau apytiksluose praktiniuose skaičiavimuose galima kai kurių šakų nepaisyti arba skirtingas šakas apjungti į vieną. Pvz., jeigu skirtingų laidumo juostos šakų energijos skirtumas yra žymiai didesnis už kT , tada, pagal Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkciją (1.1.3), didžioji dauguma elektronų užims kvantines būsenas, kurios atitinka žemesniąją šaką, todėl



1.2 pav. Ge, Si, GaAs ir InP kristalų gardelių pirmoji Brijueno zona



1.3 pav. GaAs energijos juostų schema

aukštesniųjų šakų galima nepaisyti. Pvz., modeliuojant laisvojo elektrono judėjimą GaAs, dažnai pakanka atsižvelgti tik į mažiausios energijos laidumo juostos šaką, kurios slėniai 1.3 pav. pažymėti Γ_6 , L_1 ir X_1 .

Skaičiuojant kvantinių šuolių iš pradinės būsenos į daugelį galimų galutinių būsenų tikimybes, reikia skaičiuoti integralus galutinių būsenų atžvilgiu. Integruoti įprasta energijos atžvilgiu. Tokių integralų pointegralinėje funkcijoje yra daugiklis, kuris vadinamas **energinio būsenų tankiu**. Tai yra kvantinių būsenų skaičius, kuris tenka vienetiniam energijos intervalui ir vienetiniam tūriui. Apskaičiuosime būsenų tankio priklausomybę nuo krūvininko energijos E_k . Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad laisvosios dalelės būsenų tankis konfigūracinėje erdvėje yra $1/h^3$; čia h yra Planko konstanta ($h = 2\pi\hbar$). [Čia turimos omenyje tik *erdvinio judėjimo* būsenos, t. y. nepaisoma dalelių sukinių.] Taigi, būsenų skaičius konfigūracinės erdvės tūrio elemente $d^3r d^3p$ yra lygus $d^3r d^3p/h^3$. Kadangi $p = \hbar k$, tai būsenų skaičius spindulių vektorių ir bangos vektorių erdvės tūrio elemente $d^3r d^3k$ yra $d^3r d^3k/(2\pi)^3$. Vadinasi, būsenų skaičius kristalo tūrio vienetė ir bangos vektorių erdvės tūrio elemente d^3k yra $d^3k/(2\pi)^3$. Kadangi energija priklauso tik nuo bangos vektoriaus modulio (bangos skaičiaus) k , tai naudosime sferinio sluoksnio pavidalo tūrio elementą. Jeigu to sluoksnio spindulys yra k , o storis dk , tada jo tūris yra $d^3k = 4\pi k^2 dk$. Energinis būsenų tankis $N(E_k)$ yra lygus būsenų skaičius tame tūrio elemente ir atitinkamo energijos pokyčio dE_k santykiui:

$$N(E_k) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \cdot [k(E_k)]^2 \frac{dk}{dE_k}. \quad (1.1.8)$$

Taigi, skaičiuojant integralą visų galimųjų kvantinių būsenų atžvilgiu, integravimo kintamojo pakeitimas „ $k \rightarrow E_k$ “ atliekamas pagal tokią taisyklę:

$$k^2 dk \rightarrow 2\pi^2 N(E_k) dE_k. \quad (1.1.9)$$

Išreiškę bangos skaičių k iš (1.1.4) arba (1.1.5) ir įrašę į (1.1.8), gauname, kad parabolinės juostos atveju būsenų tankio priklausomybė nuo energijos yra tokio pavidalo:

$$N(E_k) = \frac{(2m^*)^{3/2} \sqrt{E_k}}{4\pi^2 \hbar^3}, \quad (1.1.10)$$

o neparabolinės juostos atveju reikia naudoti bendresnę formulę:

$$N(E_k) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\gamma(E_k)} \frac{d\gamma(E_k)}{dE_k} = \frac{(2m^*)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} (1 + 2\alpha E_k) \sqrt{E_k (1 + \alpha E_k)}, \quad (1.1.11)$$

kur funkcija $\gamma(E_k)$ apibrėžiama (1.1.5) sąryšiu (parabolinės juostos atveju $\gamma(E_k) \equiv E_k$, todėl formulė (1.1.11) virsta formule (1.1.10)). Reikia turėti omenyje, kad (1.1.10) ir (1.1.11) formulės nusako tik *apibrėžtos sukinių projekcijos* kvantinių būsenų tankį. Pilnutinis būsenų skaičius yra du kartus didesnis, nes kiekviename energijos lygmenyje gali būti du elektronai, kurių sukinių projekcijos (kryptys) yra priešingos. (1.1.10) ir (1.1.11) reiškiniuose nėra daugiklio 2, nes vėliau tos formulės bus naudojamos, skaičiuojant sklaidos spartą, o sklaidos metu elektrono sukinių kryptis nesikeičia.

Šalia juostų neparaboliškumo, reikia atsižvelgti ir į juostų anizotropiją. Paraboliniame anizotropiniame energijos slėnyje izoenerginiai paviršiai yra elipsoido formos. Tai reiškia, kad elektrono efektinę masę nusako trys vertės, kurių kiekviena atitinka vieną iš trijų elipsoido pagrindinių ašių: m_x^* , m_y^* ir m_z^* . Tačiau dažnai tokį elipsoidinį minimumą galima formaliai pakeisti sferiniu (izotropiniu) minimumu, kurio aplinkoje elektrono efektinė masė lygi **būsenų tankio efektinei masei** $m_d^* = (m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/3}$. Atitinkamai, energijos išraiškose (1.1.4) ir (1.1.5) bei būsenų tankio išraiškose (1.1.10) ir (1.1.11) vietoj m^* reikia naudoti būsenų tankio efektinę masę.

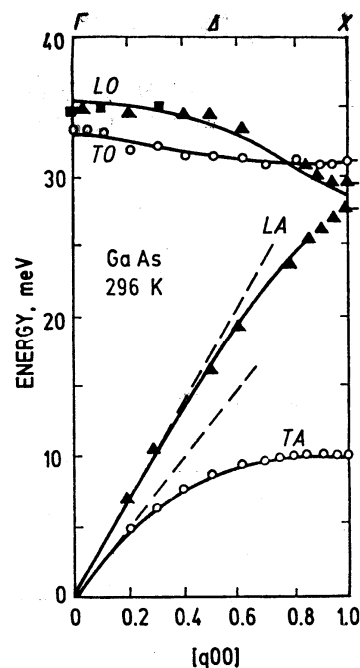
1.2. Fononai

Bet koki N atomų sistemos virpamąjį judėjimą galima išreikšti $3N$ *normaliųjų virpesių* (kitaip vadinamų *normaliosiom modom*) suma. Kiekvieną normalųjį virpesį galima laikyti atomų poslinkio plokščiąja banga, kuri sklinda kristalu, ir aprašyti kaip kvantinę kvazidalelę – *fononą*. Fononai, kaip ir kitos kvazidalelės, yra apibūdinami bangos vektoriumi k , dažniu ω ir energija. Fonono energija yra lygi jo dažnio ir Planko konstantos sandaugai: $\hbar\omega$. Fononai klasifikuojami pagal atomų virpesių kryptį atžvilgiu bangos judėjimo krypties (išilginiai arba skersiniai) ir pagal tai, ar šių virpesių metu elementariojo narvelio masės centras juda (akustiniai fononai), ar nejuda (optiniai fononai). Aišku, kad optiniai fononai egzistuoja tik kristaluose, kurių Bravė narvelyje yra daugiau negu vienas atomas. Pagrindinių puslaidininkių (Si, Ge, GaAs ir InP) Bravė narvelyje yra 8 atomai (žr. 1.1 pav.). Fonono dažnio priklausomybė nuo jo bangos vektoriaus k vadinama *dispersijos dėsniu*. Fononų dispersijos dėsnis yra daugiareikšmė funkcija, t. y. jis turi keletą *šakų*. Kaip ir elektrono atveju, visos fiziškai skirtingos fonono bangos vektoriaus vertės yra sutelktos atvirkštinės gardelės pirmojoje Brijueno zonoje, kuri pavaizduota 1.2 pav. Žinyuose fononų dispersijos dėsnis dažniausiai pateikiamas trim grafikais, kurie nusako fononų energijos priklausomybę nuo banginio vektoriaus absoliutinės vertės, kai bangos sklidimo kryptis yra lygiagrečiai kuriai nors iš trijų Brijueno zonos simetrijos ašių (1.2 pav. šios ašys pažymėtos Δ , Σ ir Λ). Pažymėjus atomų skaičių Bravė narvelyje raide p , šakų skaičius bendroju atveju yra lygus $3p$. Iš jų 3 atitinka akustinius fononus (2 atitinka skersinius, 1 – išilginius), o likusios $3p - 3$ atitinka optinius fononus ($2p - 2$ atitinka skersinius, $p - 1$ – išilginius). Tačiau dažniausiai dėl kristalo simetrijos kai kurios šakos sutampa arba yra "uždraustos". Pvz., aukščiau minėtųjų puslaidininkių dispersijos dėsnis kryptimi [100] (Δ) turi tik keturias šakas (žr. 1.4 pav.) – TA (skersiniai akustiniai fononai), LA (išilginiai akustiniai fononai), TO (skersiniai optiniai fononai) ir LO (išilginiai optiniai fononai). Visoms akustinės šakoms būdinga tai, kad taške $k = 0$ fonono energija lygi nuliui, o kai k žymiai mažesnis už atvirkštinės gardelės konstantą, fonono energija proporcinga k (žr. 1.4 pav.). Visoms optinėms šakoms būdinga tai, kad fonono energija didžiausia taške $k = 0$, o energijos priklausomybė nuo k yra silpnesnė, negu akustinių šakų atveju (žr. 1.4 pav.). Todėl, skaitmeniškai modeliuojant sklaidą optiniais fononais, dažniausiai tariama, kad optinio fonono energija yra konstanta, t. y. nepriklauso nuo k (tačiau skirtingų rūšių optinių fononų energijos gali būti skirtingos).

Apibrėžtos rūšies ir apibrėžto bangos vektoriaus fononų vidutinį skaičių nusako *Bozė ir Einšteino pasiskirstymo funkcija*:

$$n(\omega) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}; \quad (1.2.1)$$

čia ω yra fononų dažnis, o $n(\omega)$ yra duotosios rūšies fononų, kurių dažnis ω , skaičius.



1.4 pav. Fononų dispersijos dėsnis GaAs kristale kryptimi [100]. Ant X ašies atidėtas dydis $ka/(2\pi)$; čia k yra bangos skaičius, o a yra gardelės konstanta

2. Šotkio diodo modeliavimas

2.1. Šotkio kontakto energijos juostų diagrama

Kontaktai būna dviejų rūšių – ominiai ir užtvariniai. Užtvariniai kontaktai dar vadinami „Šotkio kontaktais“. **Ominiai kontaktai** sudaro sąlygas nekliudomam krūvininkų judėjimui iš kontakto medžiagos (metalo) į puslaidininkį arba atvirkščiai. **Šotkio kontaktai** sudaro potencialinę barjerą, kurį turi įveikti krūvininkas, judėdamas tarp dviejų medžiagų.

Nors fizikiniai reiškiniai, kurie vyksta ominiuose kontaktuose, yra nemažiau sudėtingi už fizikinius reiškinis, kurie vyksta Šotkio kontaktuose, tačiau puslaidininkinio įtaiso teoriniame modelyje omino kontakto matematinis aprašymas yra žymiai paprastesnis, negu Šotkio kontakto (modeliavimo metu galima laikyti, kad omino kontakto srityje nėra erdviųjų elektrinių krūvių ir neatsiranda kontaktinis potencialų skirtumas). Todėl smulkiau aptarsime tik Šotkio kontaktą.

Šotkio kontakto elektrinėms savybėms suprasti patogiu pasinaudoti energijos juostų diagrama. Puslaidininkinių įtaisų energijos juostų diagramose nurodomos šios trys energijos: 1) Fermio energija F (dar vadinama Fermio lygmeniu); 2) laidumo juostos apatinis kraštas E_c , 3) valentinės juostos viršutinis kraštas E_v . Be to, energijos juostų diagramose kartais pavaizduojamas ir vakuumo lygmuo – elektrono energija vakuume, prie pat puslaidininkio paviršiaus. Prieš sudarant Šotkio kontakto energijos juostų diagramą, naudinga prisiminti priežastis, dėl kurių energijos juostų diagramos yra dažnai naudojamos puslaidininkinių įtaisų veikimo analizei, ir kartu – kelias formules, kurios žinomos iš kietojo kūno elektronikos kurso. Pagal energijos juostų kraštų E_c ir E_v kitimą erdvėje galima spręsti apie elektrinio potencialo φ pasiskirstymą:

$$E_c = E_{c0} - e\varphi, \quad E_v = E_{v0} - e\varphi, \quad (2.1.1)$$

čia E_{c0} ir E_{v0} yra juostų kraštai, kai elektrinis laukas yra lygus nuliui. Pagal skirtumą tarp Fermio energijos F ir juostų kraštų galima apskaičiuoti elektronų ir skylių tankius n ir p :

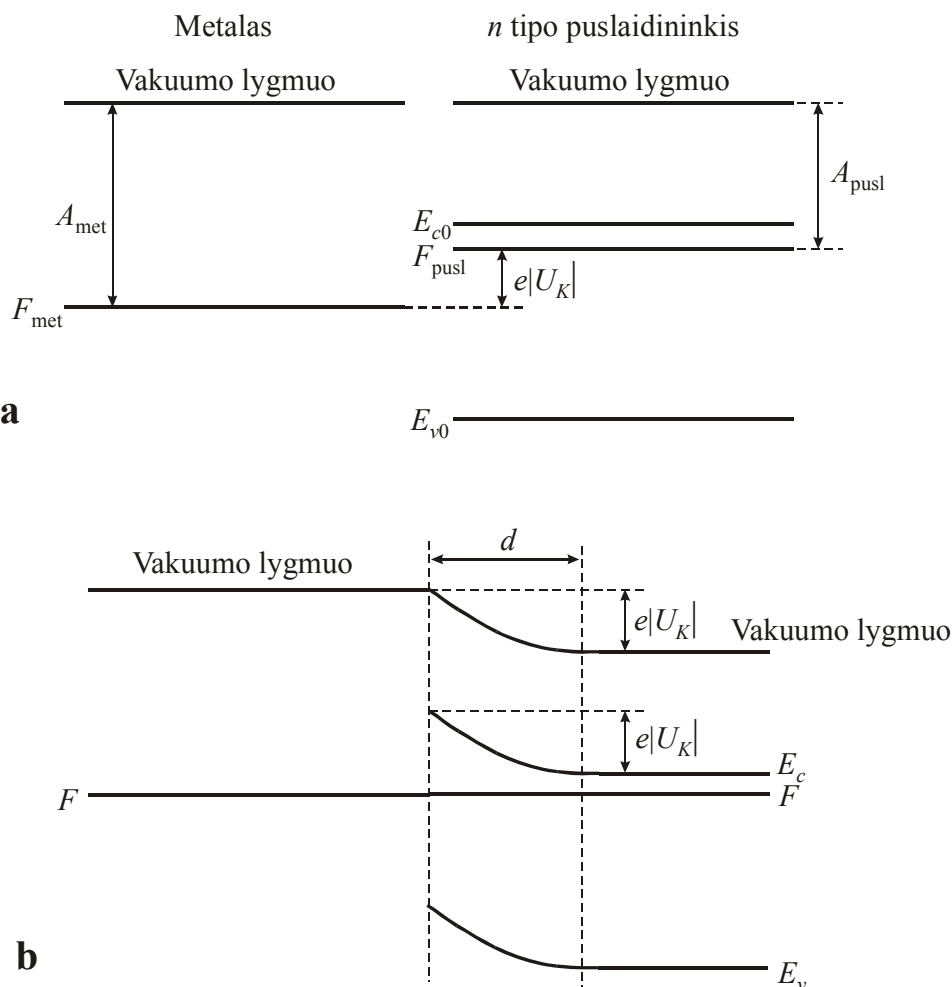
$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right), \quad p = N_v \exp\left(\frac{E_v - F}{kT}\right); \quad (2.1.2)$$

čia N_c ir N_v yra vadinamieji efektingi būsenų tankiai laidumo ir valentinėje juostose (pastarosios koncentracijų išraiškos galioja tada, kai puslaidininkis yra neišsigeimęs, t. y. kai jo Fermio lygmuo F yra draustinėje juostoje, toli nuo leistinių juostų kraštų, t. y. $E_c - F \gg kT$ ir $F - E_v \gg kT$). Žinant potencialą φ bei krūvininkų tankius n ir p , galima apskaičiuoti elektrinio lauko stiprį $\mathcal{E} = -d\varphi/dx$, bei krūvininkų tankių gradientus dn/dx ir dp/dx (vienmačio modelio atveju). Žinant elektrinio lauko stiprį bei krūvininkų tankius ir jų gradientus, galima apskaičiuoti elektronų ir skylių srovių tankius:

$$j_n = en\mu_n\mathcal{E} + eD_n \frac{dn}{dx}, \quad j_p = ep\mu_p\mathcal{E} - eD_p \frac{dp}{dx}; \quad (2.1.3)$$

čia pirmieji dėmenys nusako elektronų ir skylių dreifinių srovių tankius, o antrieji – elektronų ir skylių difuzinių srovių tankius (μ_n ir μ_p yra elektronų ir skylių judrumai, o D_n ir D_p – difuzijos koeficientai). Kaip matome, pagal energijų E_c , E_v ir F priklausomybę nuo koordinatės galima apskaičiuoti visus puslaidininkinio įtaiso būseną nusakančius dydžius (krūvininkų koncentracijas ir srovių tankius).

Šotkio kontakto energijos diagramos sudarymą iliustruoja 2.1 pav. Pradedame nuo izoliuotų medžiagų – metalo ir n tipo puslaidininkio. Kol tarp jų nėra kontakto, vidinio elektrinio lauko nėra (potencialas φ visur yra lygus nuliui), todėl, pagal (2.1.1), energijos juostos yra „plokščios“, kaip pavaizduota 2.1a pav. Akivaizdu, kad abiejų medžiagų Fermio energijos nesutampa. Tai reiškia, kad, sudarius elektrinį kontaktą tarp metalo ir puslaidininkio, sistema nebus termodinaminėje pusiausvyroje. [Fermio energijos fizikinė prasmė – tai vidutinis darbas, kurį reikia atlikti, norint padidinti elektronų skaičių puslaidininkyje vienetu. T. y. Fermio energija – tai elektronų sistemos cheminis potencialas, perskaiciuotas vienam elektronui. 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 sistema yra termodinaminėje pusiausvyroje, Fermio energija turi būti vienoda visuose sistemos taškuose.] Sudarius kontaktą, prasidės elektronų apykaita tarp abiejų medžiagų. Elektronų srautas iš medžiagos su mažesniu išlaisvinimo darbu (t. y. su didesne Fermio energija) į medžiagą su didesniu išlaisvinimo darbu (t. y. su mažesne Fermio energija) bus didesnis už priešingos krypties elektronų srautą. 2.1 pav. atveju elektronų išlaisvinimo darbas puslaidininkyje yra mažesnis už jų išlaisvinimo darbą metale. Taigi, atsiras elektronų srautas iš puslaidininkio į metalą. Kadangi elektrono krūvis neigiamas, tai elektros srovės kryptis bus priešinga – iš metalo į puslaidininkį. Ši elektros srovė yra neelektrostatinės prigimties (t. y. ji nėra susijusi su elektriniu lauku). Dėl šios neelektrostatinės srovės puslaidininkis įgyja perteklinį teigiamą krūvį, o metalas – perteklinį neigiamą krūvį. Tai reiškia, kad metalo potencialas tampa mažesnis už puslaidininkio potencialą. T. y. atsiranda elektrinis laukas, kurio kryptis priešinga neelektrostatinės srovės kryptiai. Šis laukas lėtina elektronų perėjimą iš puslaidininkio į



2.1 pav. Šotkio kontakto energijos juostų diagramos sudarymas. a – izoliuotų metalo ir n tipo puslaidininkio energijos juostos, b – Šotkio kontakto energijos juostų diagrama termodinaminėje pusiausvyroje. A_{met} ir A_{pusl} yra elektrono išlaisvinimo darbai metale ir puslaidininkyje, F yra Fermio energija, U_K yra kontaktinis potencialų skirtumas tarp metalo ir puslaidininkio, d yra nuskurdintojo sluoksnio storis.

metalą, todėl krūvio persiskirstymas sulėtėja. Praėjus tam tikram laikui, krūvininkų persiskirstymas baigiasi, t. y. sistema atsiduria termodinaminėje pusiausvyroje. Šioje būsenoje Fermio lygmuo yra vienodas visuose taškuose, tačiau energijos juostos yra užlinkusios. Šio užlinkimo priežastis – minėtasis elektrinis laukas, t. y. potencialo kitimas erdvėje. Pagal (2.1.1), potencialo kitimas erdvėje reiškia, kad juostų kraštai taip pat priklauso nuo koordinatės („užlinksta“). Taip pat užlinksta ir visi kiti energijos lygmenys – tame tarpe ir vakuomo lygmuo. Šis laukas egzistuoja tik siauroje srityje arti kontakto. Toliau nuo kontakto elektrinis laukas lygus nuliui, t. y. energijos juostos yra plokščios, o Fermio lygmuo yra tokiu pačiu atstumu nuo juostų kraštų, kaip ir izoliuotame puslaidininkyje (žr. 2.1b pav.). Juostų užlinkimo dydis yra proporcingas potencialų skirtumui tarp metalo ir puslaidininkio. Iš 2.1 pav. matyti, kad šis užlinkimas yra lygus skirtumui tarp Fermio lygmenų izoliuotose medžiagose. T. y. metalo ir puslaidininkio potencialų skirtumas termodinaminėje pusiausvyroje (**kontaktinis potencialų skirtumas**) lygus

$$U_K \equiv \varphi_{\text{met}} - \varphi_{\text{pusl}} = \frac{1}{e}(F_{\text{met}} - F_{\text{pusl}}); \quad (2.1.4)$$

čia F_{met} ir F_{pusl} yra Fermio energijos *izoliuotuose* metale ir puslaidininkyje (žr. 2.1a pav.), o φ_{met} ir φ_{pusl} yra jų potencialai, *sudarius sandūrą* (čia turimi omenyje potencialai erdvės srityse, kuriose nėra erdvinio krūvio, t. y. pakankamai toli nuo kontakto).

2.2. Nuskurdinimo artinys Šotkio kontaktui

Dabar aptarsime erdvinio elektrinio krūvio tankio, elektrinio lauko stiprio ir potencialo priklausomybes nuo koordinatės Šotkio kontakte termodinaminės pusiausvyros sąlygomis. Visų pirma reikia pastebėti, kad pilnutinis krūvis puslaidininkyje yra priešingas pilnutiniam krūviui metale, nes pilnutinis sandūros krūvis turi būti lygus nuliui. Metale elektronų būsenų tankis yra toks didelis, kad visas perteklinis

krūvis „sutelpa“ į vieną paviršinį atominį sluoksnį. Todėl galima laikyti, kad metale perteklinis krūvis yra ne tūrinis, o paviršinis (t. y. krūvio sluoksnio storį galima laikyti lygiu nuliui). Paviršinis krūvis apibūdinamas paviršiniu krūvio tankiu σ (matuojamas C/m²). Iš elektrostatikos kurso žinoma, kad paviršinio krūvio tankio σ sukuriama elektrinio lauko stipris yra lygus

$$\mathcal{E}_\sigma = \frac{\sigma}{2\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (2.2.1)$$

(ši lygybė nesunkiai įrodoma, pasinaudojus Gauso teorema). Skaičiuojant pilnutinį elektrinio lauko stiprį, prie metalo paviršinio krūvio lauko (2.2.1) reikia pridėti puslaidininkyje egzistuojančio erdvinio krūvio sukuriamą elektrinį lauką. Pastarąjį lauką galima apskaičiuoti, naudojantis vadinamuoju nuskurdinimo artiniu, kuris aprašytas kitoje pastraipoje.

Nesunku pastebėti, kad elektronų tankis priekontaktinėje puslaidininkio srityje, kurioje egzistuoja elektrinis laukas, turėtų būti žymiai mažesnis už krūvininkų tankį neutraliojoje puslaidininkio dalyje. Ši išvada išplaukia iš elektronų tankio n išraiškos (2.1.2). Kaip matyti 2.1b pav., kontakto plokštumoje Fermio lygmuo yra toliau nuo laidumo juostos krašto, negu puslaidininkio tūryje. Pagal (2.1.2), krūvininkų tankio natūraliojo logaritmo sumažėjimas yra lygus atstumo tarp Fermio lygmens ir laidumo juostos krašto padidėjimui (t. y. potencialinio barjero aukščiui), padalytam iš kT . Antra vertus, minėtasis potencialinio barjero aukštis yra lygus kontaktiniam potencialų skirtumui U_K , padaugintam iš elementariojo krūvio e (žr. 2.1b pav.). Praktikoje $e|U_K| = (0.4 \div 0.9)$ eV. Turint omenyje, kad kambario temperatūroje $kT \approx 0.0254$ eV, galima teigti, kad puslaidininkio elektronų tankio logaritmas prie pat kontakto yra dydžiu $(0.4 \div 0.9) / 0.0254 = (16 \div 35)$ mažesnis, negu puslaidininkio tūryje. Tai atitinka elektronų tankio santykinį sumažėjimą $e^{16} \div e^{35} = 10^7 \div 10^{15}$ kartų. Vadinasi, priekontaktinėje puslaidininkio srityje, kurioje egzistuoja elektrinis laukas, elektronų koncentracija yra keliomis eilėmis mažesnė už jų koncentraciją puslaidininkio tūryje. Todėl šis priekontaktinis sluoksnis vadinamas **nuskurdintuoju sluoksniu**. Žinome, kad elektrinio neutralumo sąlygomis legiruotame puslaidininkyje pagrindinių krūvininkų koncentracija yra praktiškai lygi priemaišinių atomų koncentracijai. Vadinasi, sumažėjus pagrindinių krūvininkų tankiui, atsiranda nesukompensuotas priešingo ženklo erdvinis krūvis, kurį sukuria priemaišų jonai. Taigi, nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja erdvinis elektrinis krūvis, kurio šaltiniai yra jonizuoti priemaišų atomai. n tipo puslaidininkyje tai yra teigiamieji donorų jonai. Kadangi nuskurdintame sluoksnyje šių atomų tankis yra daug didesnis už elektronų tankį, tai nepadarysime didelės klaidos, jeigu laikysime, kad nuskurdintame sluoksnyje iš viso nėra elektronų. Šis artinys vadinamas **nuskurdinimo artiniu**. Nors ši prielaida yra tik apytikslė ir ji negalioja nuskurdintojo sluoksnio viename krašte, tačiau ji leidžia pakankamai tiksliai teoriškai aprašyti pagrindines Šotkio kontakto savybes.

Laikant, kad nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja tik jonizuotų priemaišų krūvis, erdvinio krūvio tankio ρ (C/cm³) pasiskirstymas yra toks, kaip pavaizduota 2.2a pav. Čia taškas $x = 0$ atitinka kontakto plokštumą, o taškas $x = d$ atitinka nuskurdintojo sluoksnio kraštą (d yra nuskurdintojo sluoksnio storis). Taigi, tolygaus legiravimo atveju erdvinio krūvio pasiskirstymą n tipo puslaidininkio Šotkio kontakte galima užrašyti šitaip:

$$\rho(x) = \sigma\delta(x) + \begin{cases} 0 & x < 0; \\ eN_D, & 0 < x < d; \\ 0 & x > d. \end{cases} \quad (2.2.2)$$

Čia pirmasis dėmuo atspindi neigiamąjį krūvį metale (kadangi tai yra paviršinis krūvis, o ne tūrinis krūvis, tai šiame dėmenyje yra Dirako delta funkcijos pavidalo daugiklis $\delta(x)$). N_D yra donorų tankis puslaidininkyje.

Žinant erdvinio krūvio pasiskirstymą, elektrinio lauko pasiskirstymą galima apskaičiuoti, išsprendus Puasono lygtį:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = \frac{\rho}{\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (2.2.3)$$

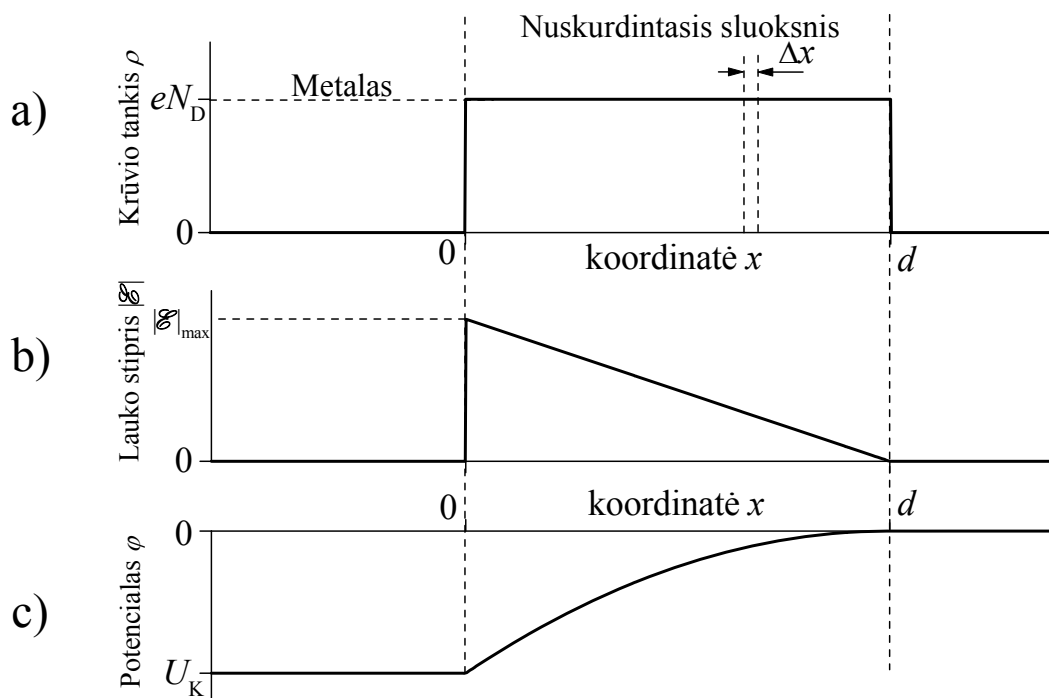
Paviršinio krūvio tankis metalo paviršiuje:

$$\sigma = eN_D d. \quad (2.2.4)$$

Tas paviršinis krūvis sukuria vienalytį elektrinį lauką

$$|\mathcal{E}_\sigma| = \frac{\sigma}{2\varepsilon_0\varepsilon} = \frac{eN_D d}{2\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (2.2.5)$$

Tokį patį elektrinį lauką prie metalo paviršiaus sukuria ir nuskurdintojo sluoksnio krūvis, nes tas krūvis yra priešingas metalo krūviui. Vadinasi, pilnutinis elektrinio lauko stipris prie metalo paviršiaus yra 2 kartus didesnis:



2.2 pav. Erdvinio elektrinio krūvio tankio (a), elektrinio lauko stiprio (b) ir potencialo (c) priklausomybė nuo koordinatės Šotkio kontakte nuskurdinimo artinyje.

$$|\mathcal{E}(0)| = \frac{eN_D d}{\varepsilon_0 \varepsilon}. \quad (2.2.6)$$

Tai yra Puasono lygties pradinė (kraštinė) sąlyga. Suintegravus, gaunama:

$$|\mathcal{E}(x)| = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ \frac{eN_D}{\varepsilon_0 \varepsilon} (d - x), & 0 < x < d; \\ 0, & x > d. \end{cases} \quad (2.2.7)$$

Suintegravus dar kartą, gaunama potencialo priklausomybė nuo koordinatės:

$$\varphi(x) = -\int_d^x \mathcal{E}(x) dx = \int_x^d \mathcal{E}(x) dx = \begin{cases} -\frac{eN_D d^2}{2\varepsilon_0 \varepsilon}, & x < 0; \\ -\frac{eN_D}{2\varepsilon_0 \varepsilon} (d - x)^2, & 0 < x < d; \\ 0, & x > d. \end{cases} \quad (2.2.8)$$

Taip apibrėžus potencialo atskaitos tašką, potencialo φ vertė srityje $x < 0$ yra lygi anksčiau minėtam kontaktiniam potencialų skirtumui U_K . Vadinasi,

$$U_K = -\frac{eN_D d^2}{2\varepsilon_0 \varepsilon}. \quad (2.2.9a)$$

Išreiškę d , gauname

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon}{eN_D} |U_K|}. \quad (2.2.9b)$$

Taigi, nuskurdintojo sluoksnio storis d yra tiesiog proporcingas kvadratinei šakniai iš kontaktinio potencialų skirtumo ir atvirkščiai proporcingas kvadratinei šakniai iš priemaišinių jonų koncentracijos N_D . Reikia turėti omenyje, kad ši formulė galioja tik termodinaminėje pusiausvyroje. Esant išorinei įtampai U , prie kontaktinio potencialo U_K reikia pridėti U (žr. (2.3.2) formulę).

2.2b pav. akivaizdu, kad elektrinis laukas yra stipriausias kontakto plokštumoje ($x = 0$). Iš (2.2.9b) ir (2.2.7) išplaukia tokia didžiausiojo elektrinio lauko stiprio išraiška:

$$|\mathcal{E}|_{\max} = \sqrt{\frac{2eN_D}{\varepsilon_0 \varepsilon}} |U_K|. \quad (2.2.10)$$

Pvz., kai $N_D = 10^{22} \text{ m}^{-3}$, $\varepsilon = 11,8$ (Si dielektrinė skvarba), o $U_K = 0,7 \text{ V}$, tada $E_{\max} \approx 5 \cdot 10^6 \text{ V/m}$.

2.3. Šotkio kontaktas esant išorinei įtampai

2.1b pav. matome, kad Šotkio kontakte egzistuoja potencinis barjeras, kurį turi įveikti elektronai, kurie juda iš puslaidininkinio į metalą arba iš metalo į puslaidininkį. Termodinaminėje pusiausvyroje šio potencinio barjero aukštis iš puslaidininkio pusės yra lygus $e|U_K|$, o iš metalo pusės barjero aukštis lygus $e|U_K| + (E_{c0} - F_{\text{pusl}})$; čia žymenys „ E_{c0} “ ir „ F_{pusl} “ turi tą pačią prasmę, kaip 2.1a pav. [Tikrovėje potencinio barjero aukštis yra šiek tiek mažesnis dėl puslaidininkio elektrono sąveikos su jo veidrodiniu atspindžiu metale, tačiau čia šis reiškinys nebus nagrinėjamas.] Potencinį barjerą įveikia tik tie elektronai, kurių energija didesnė už barjero „viršūnę“ (ji yra kontakto plokštumoje). Termodinaminėje pusiausvyroje tokių elektronų skaičius abiejose kontakto pusėse yra vienodas, todėl elektronų srautai iš puslaidininkio į metalą ir iš metalo į puslaidininkį yra vienodi ir pilnutinė elektronų srovė lygi nuliui (žr. 2.3a pav.).

Dabar tarkime, kad prie kontakto prijungta išorinė įtampa. Priklausomai nuo įtampos poliarumo, skiriama **tiesioginė įtampa** (kai išorinės įtampos poliarumas yra priešingas kontaktinio potencialų skirtumo poliarumui) ir **atgalinė įtampa** (kai išorinės įtampos ir kontaktinio potencialų skirtumo poliarumai yra vienodi). Kadangi nuskurdintajame sluoksnyje elektronų koncentracija yra žymiai mažesnė, negu neutraliojoje puslaidininkio srityje ir metale, tai jo laidumas yra žymiai mažesnis už neutraliosios srities ir metalo laidumą (t. y. varža yra žymiai didesnė). Tai reiškia, kad didžioji išorinės įtampos dalis tenka nuskurdintajam sluoksniui ($0 < x < d$). Srityse $x < 0$ ir $x > d$ įtampos kritimas yra mažas. Todėl, prijungus įtampą, šiose srityse elektrinis laukas yra labai silpnas (praktiškai lygus nuliui) ir energijos juostos lieka plokščios. Išorinė įtampa pasireiškia tuo, kad pasikeičia potencinio barjero aukštis iš puslaidininkio pusės: tiesioginės įtampos atveju jis sumažėja (2.3b pav.), o atgalinės įtampos atveju jis padidėja (2.3c pav.). Barjero aukštis iš metalo pusės beveik nepriklauso nuo įtampos. Iš Fermio ir Dirako funkcijos (2.3) išplaukia, kad galinčių įveikti potencinį barjerą elektronų skaičius eksponentiškai priklauso nuo barjero aukščio. Tiksliau, padidėjus barjero aukščiui dydžiu ΔE , galinčių jį įveikti elektronų skaičius sumažėja $\exp(\Delta E/kT)$ karto. Vadinasi, išorinė įtampa keičia elektronų srautą iš puslaidininkio į metalą (tiesioginė įtampa tą srautą padidina, o atgalinė sumažina), tačiau beveik nekeičia elektronų srauto iš metalo į puslaidininkį. Todėl Šotkio kontaktu tekančios srovės priklausomybė nuo išorinės įtampos U yra tokio pavidalo:

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right]; \quad (2.3.1)$$

čia I_s yra vadinamoji **soties srovė**, kuri nusako pastovų elektronų srautą iš metalo į puslaidininkį, o eksponentinis dėmuo nusako priklausantį nuo išorinės įtampos elektronų srautą iš puslaidininkio į metalą. (2.3.1) ir kitose formulėse teigiama U vertė atitinka tiesioginę įtampą, o neigiama – atgalinę įtampą.

Kadangi pilnutinį potencialų skirtumą tarp metalo ir puslaidininkio ($U_K + U$) sąlygoja nuskurdintojo sluoksnio erdvinis krūvis, tai aišku, kad, kintant tam potencialų skirtumui, turi keistis ir nuskurdintojo sluoksnio krūvis. Kadangi erdvinio krūvio tankis nuskurdintame sluoksnyje yra pastovus (jis lygus eN_D), tai pilnutinis to sluoksnio krūvis gali pasikeisti, tik pakitus nuskurdintojo sluoksnio storiui d . Vadinasi, kintant išorinei įtampai U , keičiasi ir nuskurdintojo sluoksnio storis d . Šis sąryšis gaunamas iš (2.2.9b) lygybės, pakeitus kontaktinį potencialų skirtumą U_K pilnutiniu potencialų skirtumu. Atsižvelgus į anksčiau minėtą įtampos ženklų taisyklę, pilnutinio potencialų skirtumo modulis yra lygus $|U_K| - U$. Todėl

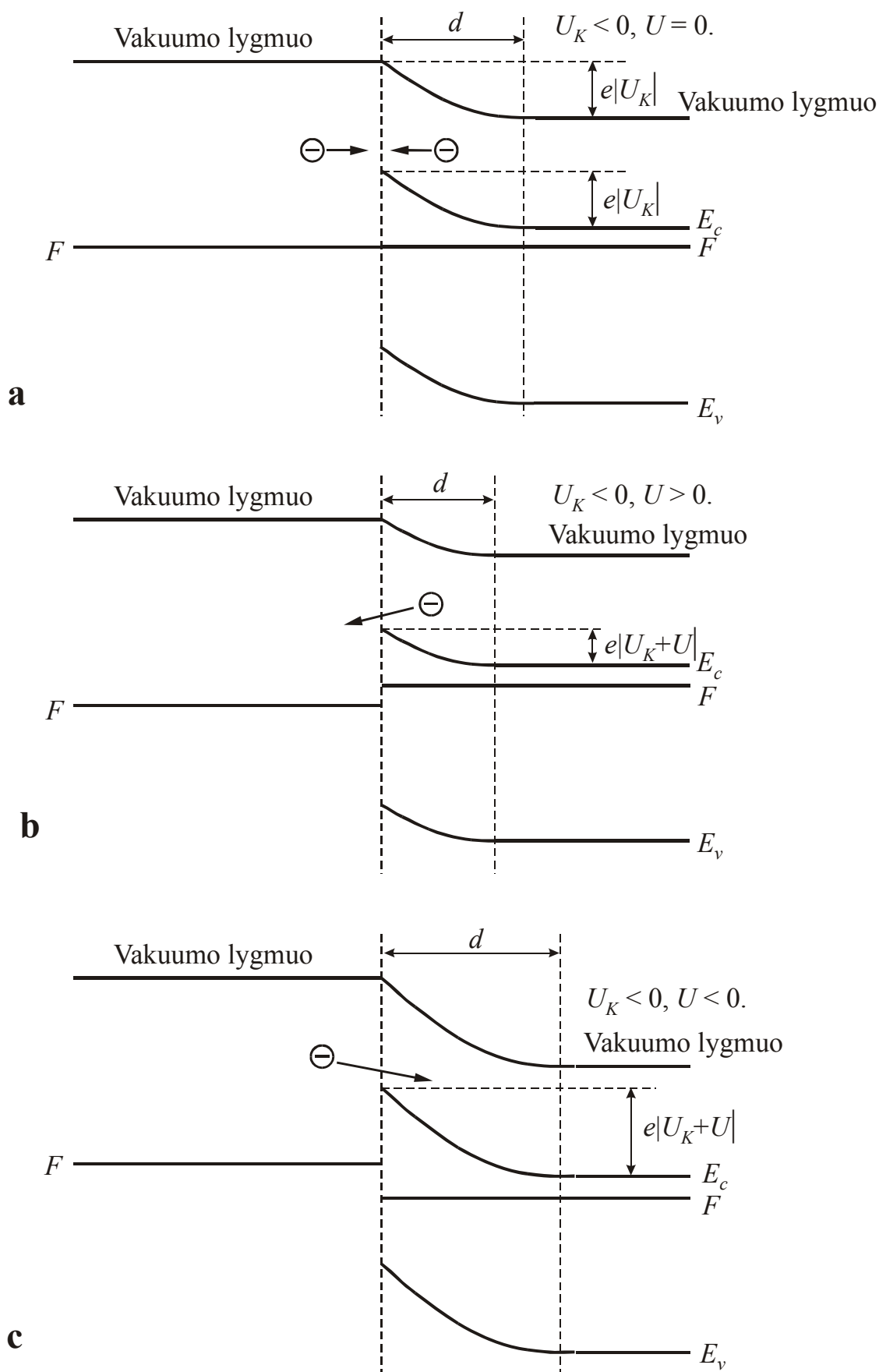
$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon}{eN_D}} (|U_K| - U). \quad (2.3.2)$$

Tiesioginė įtampa U gali tapti didesnė už $|U_K|$. Tada (2.3.2) formulės taikyti negalima. Tada ir visas anksčiau aprašytas teorinis modelis tampa netinkamas, nes nustoja galioti pagrindinė nuskurdinimo artinio prielaida (kad elektrinis laukas egzistuoja tik nuskurdintame sluoksnyje, kuriame praktiškai nėra laisvųjų krūvininkų).

Šotkio diodo soties srovė – tai viršbarjerinės elektronų injekcijos (kitai vadinamos **termoelektroninės emisijos**) iš metalo į puslaidininkį srovė. Šios srovės tankį (t. y. srovę ploto vienetui) apytiksliai nusako vadinamoji **Ričardsono lygtis**:

$$j_s = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right); \quad (2.3.3)$$

čia Φ_b yra potencialo barjero aukštis iš metalo pusės, T yra temperatūra, o A^* yra **efektinė Ričardsono konstanta**:



2.3 pav. Šotkio kontakto energijos juostų diagrama termodinaminėje pusiausvyroje (a), prijungus tiesioginę įtampą (b) ir prijungus atgalinę įtampą (c).

$$A^* = \frac{4\pi m_t e k^2}{h^3} = \frac{m_t}{m_0} A = \frac{m_t}{m_0} \cdot 1,20173 \cdot 10^6 \text{ Am}^{-2} \text{ K}^{-2}; \quad (2.3.4)$$

čia m_0 yra elektrono masė vakuume, m_t yra puslaidininkio elektronų efektinė masė statmena paviršiumi kryptimi (bendroju atveju masė gali priklausyti nuo pasirinktosios krypties), e yra elektrono krūvis, k yra Bolemano konstanta, h yra Planko konstanta, o A yra „elementarioji“ Ričardsono konstanta, kuri atitinka elektronų emisiją į vakuumą (A išraiška skiriasi nuo A^* išraiškos tuo, kad vietoj m_t yra m_0).

Irašius j_s išraišką (2.3.3) į Šotkio diodo VACh išraišką (2.3.1), gaunama tokia teorinė formulė:

$$j = AT^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right]. \quad (2.3.5)$$

Jeigu nepaisoma vadinamojo Šotkio efekto (potencialo barjero aukščio sumažėjimo esant elektriniam laukui), tada Φ_b nepriklauso nuo U ir VACh pavidalą lemia tik laužtiniuose skliaustuose esantis reiškinys.

2.4. Šotkio diodo kontaktinio potencialų skirtumo teorinė išraiška

Metalo ir puslaidininkio kontakto kontaktinis potencialų skirtumas – tai toks metalo ir puslaidininkio potencialų skirtumas, kai elektros srovė yra lygi nuliui, t. y. kai elektronų srautas iš puslaidininkio į metalą yra lygus priešingos krypties elektronų srautui. Elektronų srautą iš metalo į puslaidininkį išreiškia Ričardsono lygtis (2.3.3). Teoriškai išreikšime elektronų srautą iš puslaidininkio į metalą. Remsimės prielaida, kad elektronų laisvasis kelias puslaidininkyje yra daug mažesnis už nuskurdintojo sluoksnio storį. Tada teoriškai skaičiuojant galima atsižvelgti tik į puslaidininkio elektronus, esančius prie pat kontakto plokštumos. Jeigu metalo ir puslaidininkio kontaktas yra plokštumoje $x=0$, elektronų, kurie pereina iš puslaidininkio į metalą, srovės tankis yra lygus

$$j_{p \rightarrow m} = -en(0)\langle v_x \rangle; \quad (2.4.1)$$

čia $n(0)$ yra elektronų koncentracija taške $x=0$, v_x yra elektrono greičio x komponentė, o $\langle v_x \rangle$ elektronų, kurių $v_x < 0$, greičio x komponentės vidurkis (čia laikoma, kad puslaidininkis yra puserdvyje $x > 0$). Skaičiuodami šį vidurkį, remsimės tuo, kad termodinaminėje pusiausvyroje elektronų greičių skirstinys yra apytiksliai lygus Maksvelo skirstiniui. T. y. santykinė dalis elektronų, kurių greičio x komponentė yra tarp v_x ir $v_x + dv_x$, yra lygi

$$f(v_x)dv_x = \left(\frac{m^*}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m^* v_x^2}{2kT}\right) dv_x; \quad (2.4.2)$$

čia $f(v)$ yra Maksvelo pasiskirstymo tikimybės tankis (m^* yra elektrono efektinė masė puslaidininkyje). Tada

$$\langle v_x \rangle \equiv \int_{-\infty}^0 v_x f(v_x) dv_x = -\sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} = -\frac{\bar{v}}{4}; \quad (2.4.3)$$

čia \bar{v} yra vidutinis elektrono šiluminio judėjimo greitis (greičio modulio vidurkis). Elektronų koncentraciją $n(0)$ galima apytiksliai apskaičiuoti naudojantis tuo, kad didžioji dauguma laisvųjų elektronų užima energines būsenas, kurios yra arti laidumo juostos apatinio krašto, ir tuo, kad energijos lygmens E užpilda (t. y. vidutinis duotosios energijos E elektronų skaičius) yra proporcinga $\exp(-E/kT)$. Šio proporcingumo koeficientas yra konstanta, kuri priklauso tik nuo puslaidininkio prigimties ir nepriklauso nuo koordinatės (jeigu puslaidininkis yra vienalytis). Todėl, kaip akivaizdu iš Šotkio diodo energijos lygmenų diagramos (žr. 2.3 pav.), elektronų koncentracija taške $x=0$ esant termodinaminei pusiausvyrai yra $\exp(e|U_K|/kT)$ kartų mažesnė negu puslaidininkio tūryje (t. y. toli nuo kontakto plokštumos, kai erdvinio krūvio tankis ir elektrinis laukas lygūs nuliui, o energijos lygmenys nepriklauso nuo koordinatės). Antra vertus, n puslaidininkyje beveik visi elektronai atsiranda dėl donoro atomų jonizavimo. Kadangi beveik visi donoro atomai yra jonizuoti (netekę elektrono), tai elektronų koncentracija elektrinio neutralumo sąlygomis yra lygi donoro atomų koncentracijai N_d . Taigi,

$$n(0) = N_d \exp\left(-\frac{e|U_K|}{kT}\right). \quad (2.4.4)$$

Irašę vidutinio greičio išraišką (2.4.3) ir koncentracijos išraišką (2.4.4) į srovės tankio išraišką (2.4.1), gauname srovės, kurią sąlygoja elektronų pernaša iš puslaidininkio į metalą, tankį termodinaminėje pusiausvyroje:

$$j_{p \rightarrow m} = eN_d \exp\left(-\frac{e|U_K|}{kT}\right) \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}}. \quad (2.4.5)$$

Kadangi termodinaminės pusiausvyros sąlygomis ši srovė yra priešinga termoelektroninės injekcijos srovei (2.3.3), tai gauname lygtį kontaktinio potencialų skirtumo $|U_K|$ atžvilgiu. Iš jos išplaukia tokia $|U_K|$ išraiška:

$$|U_K| = \frac{\Phi_b}{e} + \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{eN_d}{A^*T^2} \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} \right). \quad (2.4.6)$$

2.5. Einšteino sąryšis

Krūvininkų generacijos ir rekombinacijos bei jų pagavimo į gaudykles ir išlaisvinimo iš gaudyklių vyksmai Šotkio diodų savybėms turi palyginti mažą įtaką. Modeliuojant Šotkio diodą, galima teigti, kad minėtieji vyksmai jame nevyksta, t. y. elektronų koncentracija gali keistis tik dėl jų laidumo srovės, kurios tankio bendroji išraiška yra šitokia:

$$j_n = en\mu_n \mathcal{E} + eD_n \frac{\partial n}{\partial x}; \quad (2.5.1)$$

čia μ_n yra elektronų judris, \mathcal{E} yra elektrinio lauko stipris (kadangi energija taip pat žymima raide „ E “, tai elektrinį lauką žymėsime kitokiu šriftu), D_n yra elektronų difuzijos koeficientas. Pirmasis dėmuo (2.5.1) reiškinyje nusako vadinamąją **dreifo srovę** (t. y. kryptingą elektronų judėjimą elektriniame lauke dėl jėgos, kuria tas laukas veikia elektronus), o antrasis dėmuo nusako **difuzijos srovę** (t. y. elektronų persiskirstymą erdvėje dėl betvarkio šiluminio judėjimo). Aišku, kad modeliuojant Šotkio diodą abu dėmenys yra vienodai svarbūs, nes, pvz., termodinaminėje pusiausvyroje, kai pilnutinis laidumo srovės tankis yra lygus nuliui, egzistuoja nuskurdintasis sluoksnis, kuriame yra stiprus elektrinis laukas, taigi ir dreifo srovė. Kad pilnutinė srovė būtų lygi nuliui, minėtąją dreifo srovę visuose erdvės taškuose turi kompensuoti difuzijos srovė.

Vadinasi, pusiausvirąjį erdvinį krūvininkų pasiskirstymą puslaidininkyje lemia jų difuzijos ir dreifo pusiausvyra. Antra vertus, jeigu yra žinomi krūvininkų būsenų energinis tankis juostose $N(E)$ bei juostų kraštų energijos kiekviename taške, tada krūvininkų koncentraciją kiekviename taške galima apskaičiuoti, padauginus energinį tankį $N(E)$ iš funkcijos $f(E)$, kuri yra lygi vidutiniam energijos E kvantinės būsenos elektronų skaičiui, ir suintegravus sandaugą $N(E)f(E)$ energijos E atžvilgiu (pvz., elektronų atveju reikėtų integruoti nuo laidumo juostos apatinio krašto E_c iki $+\infty$). Nagrinėjant puslaidininkinių prietaisų stacionariąją būseną, kai nėra termodinaminės pusiausvyros (pvz., esant pastoviai išorinei įtampai arba pastoviam apšvietimui), dažniausiai galima teigti, kad funkcija $f(E)$ yra tokio paties pavidalo, kaip termodinaminėje pusiausvyroje, t. y. Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija (1.1.3), tačiau Fermio lygmuo E_F bendruoju atveju gali priklausyti nuo koordinatės. Be to, Fermio lygmuo gali būti skirtingas elektronams ir skylėms (tada tie du Fermio lygmenys yra vadinami atitinkamai elektronų ir skylių **Fermio kvazilygmenimis**). Dydis n , kuris įeina į elektronų srovės tankio išraišką (2.5.1), yra minėtasis reiškinio $N(E)f(E)$ integralas elektronų energijos atžvilgiu (nuo $E_c(x)$ iki $+\infty$). Akivaizdu, kad srovės išraiška (2.5.1) gali būti teisinga tik tuomet, kai elektrono judris ir difuzijos koeficientas nepriklauso nuo energijos arba kai daugumos elektronų energijos priklauso palyginti siauram energijos intervalui, kuriame judris ir difuzijos koeficientas yra praktiškai pastovūs. Iš pastarųjų dviejų sąlygų dažniausiai yra tenkinama antroji sąlyga, nes, pagal Fermio ir Dirako funkciją, daugumos elektronų energijos priklauso energijos intervalui nuo E_c iki $E_c + 2kT$. Palyginus kT/e vertę su tipiškais kontaktinio potencialų skirtumo vertėmis ($U_K = (-0.4 - -0.9)$ V), galima pastebėti, kad kT/e yra viena eile mažesnis. Todėl nebus didelės klaidos, jeigu tarsime, kad visų elektronų energija yra lygi E_c . Tada judris μ_n ir difuzijos koeficientas D_n , kurie yra (2.5.1) reiškinyje, atitinka laidumo juostos apatiniame krašte esančius elektronus.

Taigi, išsiaiškinome, kodėl, apskaičiuojant srovės tankį (2.5.1), galima tarti, kad judris μ ir difuzijos koeficientas D yra konstantos. Kitas klausimas yra tų dviejų konstantų tarpusavio sąryšis. Kad judris ir difuzijos koeficientas turėtų būti vienareikšmiškai susiję tarpusavyje, aišku iš tokių bendrų samprotavimų. Kaip minėta, dreifo ir difuzijos pusiausvyra lemia stacionarųjį krūvininkų pasiskirstymą erdvėje. Pvz., padidinus μ_n vertę ir nepakeitus D_n vertės, dreifo srovė, kuri priešinasi elektronų difuzijai iš puslaidininkio į metalą (Šotkio diode), kompensuos difuzinę srovę esant silpniam laukui. Tai reiškia, kad į metalą pereis mažiau elektronų, nuskurdintojo sluoksnio plotis ir $|U_K|$ bus mažesni, o elektronų koncentracija puslaidininkyje padidės. Tačiau $|U_K|$ turi būti lygus tiksliai apibrėžtai vertei (2.1.4), kuri išplaukia iš kvantinės statistinės mechanikos. Kitaip sakant, krūvininkų judriai ir difuzijos koeficientai turi būti tokie, kad, nusistovėjus stacionariai būsenai, krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės atitiktų (2.1.2) formules. Išvesime judrio ir difuzijos koeficiento sąryšį, kuris išplaukia iš šio reikalavimo. Kaip minėta, bendruoju atveju (2.1.2) formulėse Fermio lygmuo bei juostų kraštai priklauso nuo koordinatės. Tačiau, kad būtų paprasčiau, judrio ir difuzijos koeficiento sąryšį išvesime, remdamiesi prielaida, kad yra termodinaminė pusiausvyra. Tada Fermio energija yra konstanta (nuo koordinatės gali priklausyti tik energijos lygmenys). Termodinaminėje pusiausvyroje laidumo srovė (2.5.1) yra tapačiai lygi nuliui visuose sistemos taškuose:

$$en\mu_n \mathcal{E} + eD_n \frac{dn}{dx} \equiv 0. \quad (2.5.2)$$

Į šia lygtį įrašome bendrąją neišsigimusio puslaidininkio elektronų koncentracijos išraišką (2.1.2):

$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \quad (2.5.3)$$

ir atsižvelgiame į tai, kad termodinaminėje pusiausvyroje F nepriklauso nuo koordinatės (t. y. $dF/dx = 0$), o laidumo juostos krašto E_c priklausomybė nuo koordinatės puslaidininkyje yra susijusi tik su tuo, kad į E_c išraišką įeina dėmuo $-e\varphi(x)$, kur $\varphi(x)$ yra elektrinio lauko potencialas:

$$E_c(x) = E_{c0} - e\varphi(x). \quad (2.5.4)$$

Tada

$$\frac{dn}{dx} = N_c \frac{d}{dx} \left[\exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \right] = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \cdot \frac{e}{kT} \frac{d\varphi}{dx} = -n \frac{e\mathcal{E}}{kT}. \quad (2.5.5)$$

Įrašę (2.5.5) į (2.5.2), randame minėtąjį difuzijos koeficiento ir judrio sąryšį, kuris vadinamas **Einšteino sąryšiu**:

$$D_n = \frac{kT}{e} \mu_n. \quad (2.5.6)$$

Jeigu krūvininkų persiskirstymas erdvėje yra modeliuojamas remiantis (2.5.1) išraiška ir taikant Einšteino sąryšį (2.5.6), tada sumodeliuotas stacionarusis krūvininkų pasiskirstymas erdvėje yra toks, koks turėtų būti pagal Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkciją (pvz., elektronų koncentracija taške $x = 0$ atitinka (2.4.4) formulę), nors tiesiogiai Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija modeliavimo metu nėra naudojama.

2.6. Šotkio diodo atgalinės srovės išraiška

Pagal apytikslę teorinę formulę (2.3.5) Šotkio diodo atgalinė srovė turėtų sparčiai įsotinti didėjant atgalinei įtampai (tiksliau, didėjant atgalinės įtampos moduliui). Kai $|U| > 3 kT/e$, srovė turėtų praktiškai nepriklausyti nuo U ir būti lygi j_s . Tačiau iš tikrųjų taip nėra: atgalinė srovė įsotina daug lėčiau. Taip yra todėl, kad pilnutinę atgalinę srovę sąlygoja ne vien elektronų injekcija iš metalo į puslaidininkį, bet ir elektronų injekcija iš puslaidininkio į metalą:

$$j = j_{m \rightarrow p} + j_{p \rightarrow m} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right) - en(0) \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} \quad (2.6.1)$$

(čia pasinaudota Ričardsono lygtimi (2.3.3) ir (2.4.1) bei (2.4.3) formulėmis). Kadangi nusistovėjus srovei ji yra vienoda visuose sistemos taškuose, tai ši vertė turi būti lygi laidumo srovei (2.5.1) prie metalo ir puslaidininkio skiriamojo paviršiaus. Esant pakankamai didelei atgalinei įtampai, didžiausią laidumo srovės dalį sudaro dreifo srovė, t. y. (2.5.1) išraiškoje galima palikti tik pirmąjį dėmenį. Taigi, (2.6.1) reiškinys turi būti apytiksliai lygus (2.5.1) reiškinio pirmajam dėmeniui:

$$A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right) - en(0) \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} = en(0) \mu_n |\mathcal{E}(0)|. \quad (2.6.2)$$

Teorinė elektrinio lauko stiprio $\mathcal{E}(0)$ išraiška, atitinkanti atgalinę įtampą, yra gaunama iš (2.2.10) formulės, joje vietoj kontaktinio potencialų skirtumo U_K naudojant pilnutinį potencialų skirtumą, kurio modulis lygus $|U_K| - U$:

$$|\mathcal{E}(0)| = \sqrt{\frac{2eN_D}{\epsilon_0 \epsilon} (|U_K| - U)}. \quad (2.6.3)$$

Iš (2.6.2) išplaukia elektronų koncentracijos taške $x = 0$ išraiška, kuri tinka esant didelėms atgalinėms įtampoms:

$$n(0) = \frac{A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right)}{e \mu_n |\mathcal{E}(0)| + e \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}}}. \quad (2.6.4)$$

Vadinasi, didėjant atgalinei įtampai, elektronų koncentracija prie Šotkio kontakto mažėja palyginti lėtai – atvirkščiai proporcingai kvadratinei šakniai iš įtampos. Todėl elektronų injekcija iš puslaidininkio į metalą pasireiškia ir esant 1 – 2 V atgalinei įtampai. Atitinkama atgalinės srovės išraiška gaunama, įrašius (2.6.4) reiškinį į (2.6.2) lygybės dešiniąją pusę:

$$j_{\text{atg}} = \frac{A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right)}{1 + \frac{1}{\mu_n |\mathcal{E}(0)|} \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}}}. \quad (2.6.5)$$

Matome, kad didėjant atgalinei įtampai U , atgalinė srovė didėja, artėdama prie soties srovės, kurią nusako Ričardsono lygtis (2.3.3).

2.7. Paviršinių gaudyklių įtaka Šotkio kontakto savybėms

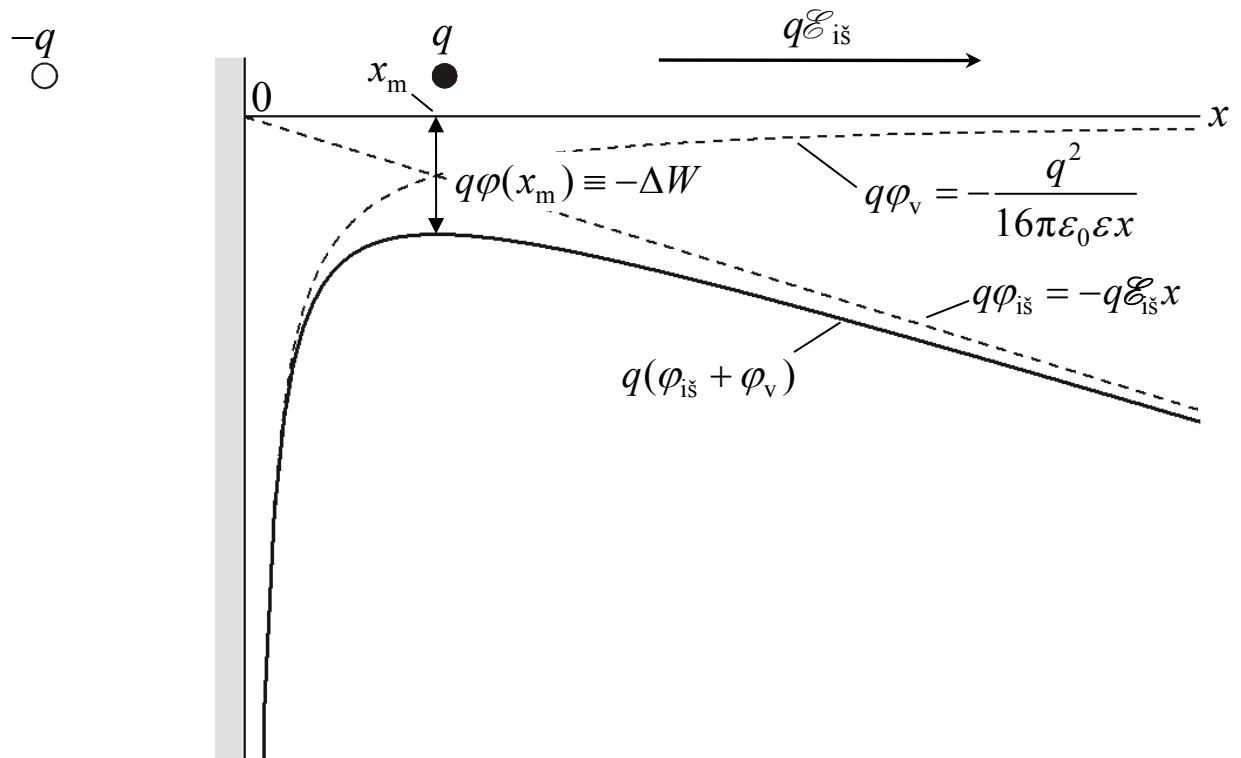
Anksčiau buvo teigiama, kad Šotkio kontakto potencialinio barjero aukštis yra lygus metalo ir puslaidininkio išlaisvinimo darbų skirtumui. Tikrovėje taip nėra, nes puslaidininkio savybės kontakto plokštumoje skiriasi nuo puslaidininkio savybių tūryje. Kadangi puslaidininkio paviršiuje esančių atomų cheminiai ryšiai nėra įsotinti (t. y. dalis ryšių yra „nutraukti“), tie atomai persitvarko ir paviršiaus elektroninė konfigūracija pasikeičia. Tai pasireiškia papildomų energijos lygmenų atsiradimu draustinėje juostoje (kadangi šie lygmenys yra lokalizuoti ant puslaidininkio paviršiaus, tai juos galima vadinti „paviršiniaisiais“ lygmenimis). Be to, ant puslaidininkio paviršiaus gali nusėsti pašaliniai atomai (oksidavimasis ir adsorbcija), kurie taip pat sukuria papildomas elektrones būsenas. Šie reiškiniai turi didelę įtaką kontaktiniam potencialų skirtumui U_K . Patirtis rodo, kad metalo ir puslaidininkio potencialų skirtumas dažniausiai būna tarp -0.4 V ir -0.9 V, ir šis kontaktinis potencialų skirtumas priklauso nuo kontakto gamybos technologijos.

2.8. Šotkio efektas

Anksčiau buvo remiamasi prielaida, kad potencialo barjero aukštis iš metalo pusės yra pastovus. Tačiau tikslesnė analizė rodo, kad esant atgalinei įtampai tas potencialo barjero aukštis priklauso nuo įtampos: didėjant atgalinei įtampai, potencialo barjero aukštis mažėja. Atitinkamai didėja atgalinė srovė. Šis krūvininkų injekcijos iš metalo į puslaidininkį arba dielektriką (atskiru atveju – termoelektroninės emisijos į vakuumą) potencialo barjero sumažėjimas, esant išoriniam laukui, kuris „padeda“ krūvininkams išlėkti iš metalo, yra vadinamas **Šotkio efektu**. Dėl Šotkio efekto nėra atgalinės srovės įsotinimo, kurį numato (2.3.1) formulė. Toliau yra išvesta minėtojo potencialo barjero sumažėjimo išraiška.

Jeigu taškinis krūvis q , kuris įterptas į puslaidininkio tūrį, yra arti elektrodo, tada to krūvio elektrinis laukas veiks elektrodo elektronus. Todėl ant metalo paviršiaus atsiras paviršinis priešingo ženklo krūvis. Elektrostatika įrodo, kad elektrinis laukas, kurį metalo išorėje sukuria šis paviršinis krūvis, yra toks pats kaip „veidrodinio“ krūvio, kuris yra priešingoje skiriamojo paviršiaus pusėje ir tokiu pačiu atstumu nuo jo kaip pradinis krūvis (žr. 2.4 pav.). Vadinasi, pagal Kulono dėsnį šio elektrinio lauko stipris yra

$$\mathcal{E}_v = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0\epsilon(2x)^2} = -\frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x^2}. \quad (2.8.1)$$



2.4 pav. Injekcijos iš metalo į puslaidininkį potencialo barjero sumažėjimas dėl išorinio elektrinio lauko

Čia x yra taškinio krūvio q koordinatė, atskaityta nuo metalo paviršiaus (žr. 2.4 pav.). Pilnutinis elektrinis laukas, kuris veikia krūvį q , yra išorinio lauko \mathcal{E}_{is} ir veidrodinio krūvio lauko \mathcal{E}_v algebrinių verčių suma (žodžiai „algebrinių verčių“ vartojami tam, kad pabrėžti, jog būtina atsižvelgti į abiejų laukų ženklus, t. y. į jų kryptį). Jeigu pradinis krūvis q atsiranda dėl injekcijos iš metalo į puslaidininkį, o išorinio elektrinio lauko kryptis yra tokia, kad jis „tempia“ tą krūvį gilyn į puslaidininkį (t. y. tolyn nuo elektrodo), tada minėtasis veidrodinio krūvio elektrinis laukas sąlygoja injekcijos potencialo barjero sumažėjimą (žr. 2.4 pav.). Šį sumažėjimą galima apskaičiuoti pasinaudojus tuo, kad krūvininko potencinė energija elektriniame lauke yra lygi jo krūvio q ir to lauko potencialo φ sandaugai. Potencialas φ šiuo atveju yra lygus išorinio lauko potencialo φ_{is} ir veidrodinio krūvio lauko potencialo φ_v sumai. Krūvininko potencinė energija išoriniame elektriniame lauke yra lygi

$$\Phi_{is} = q\varphi_{is} = -q\mathcal{E}_{is}x. \quad (2.8.2)$$

Tai yra mažėjanti funkcija, nes, pagal prielaidą, išorinis laukas verčia krūvininką judėti teigiamąja ašies x kryptimi (o jėga yra lygi potencinės energijos išvestinei su minuso ženklu). Šią potencinės energijos komponentę 2.4 pav. atitinka punktyrinė tiesė. Apskaičiuosime veidrodinio krūvio lauko potencialą. Taikysime potencialo apibrėžtį: tai yra elektrinio lauko stiprio integralas nuo duotojo taško iki taško, kuriame potencialas lygus nuliui. Veidrodinio krūvio potencialą prilyginsime nuliui taške $x = +\infty$. Vadinasi, to potencialo vertė taške x yra lygi

$$\varphi_v = \int_x^{\infty} \mathcal{E}_v dx = -\int_x^{\infty} \frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x^2} dx = -\frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x}. \quad (2.8.3)$$

Krūvininko potencinė energija veidrodinio krūvio elektriniame lauke yra lygi

$$\Phi_v = q\varphi_v = -\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon x}. \quad (2.8.4)$$

Tai yra didėjanti funkcija. Šią potencinės energijos komponentę 2.4 pav. atitinka hiperbolės pavidalo punktyrinė linija. Pilnutinė krūvininko potencinė energija yra (2.8.2) ir (2.8.4) funkcijų suma (ištininė kreivė):

$$\Phi = \Phi_{is} + \Phi_v = -q\mathcal{E}_{is}x - \frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x}. \quad (2.8.5)$$

Akivaizdu, kad ši potencinė energija turi maksimumą. To maksimumo padėtis x_m apskaičiuojama prilyginus nuliui (2.8.5) funkcijos išvestinę x atžvilgiu. Šitaip gauname:

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon\mathcal{E}_{is}}}. \quad (2.8.6)$$

Irašę (2.8.6) į (2.8.5), gauname didžiausią krūvininko potencinę energiją:

$$\Phi_{\max} = \Phi(x_m) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{q^3\mathcal{E}_{is}}{\pi\epsilon_0\epsilon}} \equiv -\Delta W. \quad (2.8.7)$$

Svarbiausias rezultatas yra tas, kad ši energija yra neigiama. Kai nėra išorinio lauko, krūvininko potencinė energija didėja, didėjant x , ir asimptotiškai artėja prie 0. T. y., kai nėra išorinio lauko, potencialo barjero „viršūnė“ yra ties nuline potencine energija. Vadinasi, išorinis laukas, kuris verčia krūvininkus judėti tolyn nuo elektrodo (gilyn į puslaidininkį arba dielektriką), sumažina potencialo barjerą, kuris trukdo krūvininkams pereiti iš elektrodo į puslaidininkį.

Į puslaidininkį iš metalo injektuojamų krūvininkų srovė yra proporcinga $\exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$, kur W yra potencialinio barjero aukštis iš metalo pusės. Dėl Šotkio efekto šis barjeras sumažėja dydžiu ΔW , kurį išreiškia (2.8.7) lygybė. Vadinasi, injekcijos srovė I atitinka lygybę

$$I = I_0 \exp\left(\frac{\Delta W}{kT}\right) = I_0 \exp\left(\frac{1}{2} \frac{\beta \sqrt{|q\mathcal{E}_{is}|}}{kT}\right), \quad (2.8.8)$$

kur I_0 yra injekcijos srovė nuliniame lauke (tada ją tiksliai kompensuoja priešingos krypties injektinė srovė), o konstanta β apibrėžiama sąryšiu

$$\beta \equiv \sqrt{\frac{|q|^3}{\pi\epsilon_0\epsilon}}. \quad (2.8.9)$$

Apskaičiuosime ΔW vertę, naudodami tas pačias kintamųjų vertes, kaip ir ankstesniame pavyzdyje, kuriame buvo apskaičiuotas elektrinio lauko stipris Šotkio diode, arti elektrodo ($q = e$, $\epsilon = 11,8$). Minėtame ankstesniame pavyzdyje buvo gauta elektrinio lauko stiprio vertė $5 \cdot 10^6$ V/m. Naudojant šio skyriaus

terminologiją, šis laukas yra „išorinis“, nes jis nesusijęs su veidrodiniu krūviu. Vadinasi, šią elektrinio lauko stiprio vertę reikia įrašyti į (2.8.7) formulę vietoj \mathcal{E}_{is} . Taip gauname $\Delta W = 0,024$ eV. Taigi, šiuo atveju Šotkio efektas pasireiškia tuo, kad, esant kambario temperatūrai (kai $kT = 0,0254$ eV), elektronų injekcijos iš metalo į puslaidininkį srovė padidėja $\exp(0,024 / 0,0254) \approx 2,6$ karto. Tai yra atgalinė srovė. Vadinasi, Šotkio efektas padidina atgalinę srovę. Be to, dėl Šotkio efekto atgalinė srovė neįsisotina didėjant atgalinei įtampai. Taip yra todėl, kad didėjant atgalinei įtampai stiprėja elektrinis laukas prie elektrodo paviršiaus, todėl mažėja potencialo barjero aukštis ir didėja elektronų injekcija iš metalo į puslaidininkį.

2.9. Šotkio diodo skaitinio modeliavimo metodo teorija

Jeigu nėra elektronų atsiradimo (generacijos) ir išnykimo (rekombinacijos) vyksmų, tada elektronų koncentracijos dalinė išvestinė laiko atžvilgiu yra priešinga jų srauto tankio gradientui (*tolydumo lygtis*):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x}. \quad (2.9.1)$$

Ši lygtis kartu su srovės tankio išraiška (2.5.1) sudaro diferencialinių lygčių sistemą dalinėmis išvestinėmis. Elektrinio lauko stipris \mathcal{E} , kuris įeina į srovės tankio išraišką (2.5.1), priklauso nuo krūvio pasiskirstymo sluoksnyje ir nuo išorinės įtampos. Šis elektrinis laukas apskaičiuojamas išsprendus *Puasono lygtį*:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} = \frac{\rho(x, t)}{\epsilon_0 \epsilon}; \quad (2.9.2)$$

čia ρ yra erdvinio krūvio tankis. Paprasčiausio Šotkio diodo atveju jis yra lygus

$$\rho(x, t) = e(N_d - n(x, t)); \quad (2.9.3)$$

čia N_d yra pastovi donorų koncentracija, o n yra elektronų koncentracija, kuri priklauso nuo koordinatės ir laiko. Vienas iš minėtų lygčių sistemos skaitinio sprendimo būdų yra toks. Modeliuojamas x verčių intervalas yra suskaidomas į mažesnius vienodo pločio intervalus (tų intervalų kraštus vadinsime „mazgais“). Elektrinio lauko vertės visuose mazguose išreiškiamos einamosiomis koncentracijų vertėmis (t. y. išsprendžiama Puasono lygtis) ir apskaičiuojamas dreifo srovės tankis (t. y. pirmasis dėmuo (2.5.1) reiškinyje) visuose mazguose. Elektronų koncentracijos išvestinė x atžvilgiu apskaičiuojama baigtinių skirtumų metodu:

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=x_i} \approx \frac{n_{i+1} - n_{i-1}}{2\Delta x}; \quad (2.9.4)$$

čia n_i yra koncentracijos vertė i -tajame mazge. Tos išvestinės naudojamos skaičiuojant difuzijos srovės vertes visuose mazguose. Paskui apskaičiuojama pilnutinė laidumo srovė visuose mazguose (t. y. sudedamos dreifo ir difuzijos srovės). Laidumo srovės išvestinė koordinatės atžvilgiu, kuri yra (2.9.1) lygybės dešiniojoje pusėje, skaičiuojama analogiškai (žr. (2.9.4)). Reikia turėti omenyje, kad (2.9.4) formulė tinka tik vidiniams mazgams. Paviršiniuose mazguose reikia taikyti „vienpusę“ išvestinę, t. y. (2.9.4) trupmenos skaitiklis turi būti lygus verčių, kurios atitinka paviršinį mazgą ir gretimą mazgą, skirtumui, o vardiklis turi būti lygus Δx . Tokiu būdu pagal (2.9.1) lygtį gaunama koncentracijos kitimo sparta kiekviename mazge. Paskui, remiantis ta sparta, pasirenkamas „laiko žingsnis“ Δt ir apskaičiuojamos elektronų koncentracijos visuose mazguose vėlesniu laiko momentu:

$$n(x_i, t_{l+1}) = n(x_i, t_l) + \left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{x_i, t_l} \Delta t; \quad (2.9.5)$$

čia t_l yra einamasis laikas (l yra laiko vertės numeris), o $t_{l+1} = t_l + \Delta t$ yra vėlesnysis laikas. Šis procesas tęsiamas, kol pasiekiamas reikalingas galutinis laikas.

Šis algoritmas vadinamas „išreikštiniu“ algoritmu, nes elektronų koncentracija duotajame mazge vėlesniu laiko momentu išreiškiamas tik per *to paties* mazgo parametrus (koncentraciją ir jos laikinę išvestinę) ankstesniu laiko momentu. Šis algoritmas turi vieną trūkumą: esant dideliems Δt , jis tampa nestabilus. Algoritmo stabilumas yra susijęs su apvalinimo paklaidomis. Mat kompiuterio atmintyje skaičiai saugomi ne begaliniu tikslumu. Pvz., pridėjus prie skaičiaus 1 skaičių 10^{-17} , daugelis kompiuterių gaus skaičių 1 (o ne $1 + 10^{-17}$). *Apvalinimo paklaida* – tai mažiausias skaičius, kurį pridėjus prie vieneto, gaunamas skaičius, kuris skiriasi nuo vieneto. Kadangi elektronų erdvinis pasiskirstymas laiko momentu t_{l+1} išreiškiamas elektronų pasiskirstymu laiko momentu t_l (žr. (2.9.5)), tai apvalinimo paklaidos duotuoju laiko momentu įtakoja sprendinį visais vėlesniais laiko momentais. Algoritmo *nestabilumas* pasireiškia tuo, kad šios apvalinimo paklaidos kaupiasi skaičiavimų eigoje ir galų gale viršija tikrąjį lygties sprendinį. Algoritmo *stabilumas* pasireiškia tuo, kad apvalinimo paklaidų duotuoju laiko momentu įtaka vėlesniems laiko momentams silpsta, einant į ateitį. Kitaip sakant, stabilus algoritmas turi savybę „užmiršti“ apvalinimo paklaidas, kurios egzistavo prieš tam tikrą laiko žingsnių skaičių. Išreikštinio algoritmo stabilumui reikia, kad Δt būtų pakankamai mažas, o Δx – pakankamai didelis. Tačiau praktikoje Δx negali būti padidintas virš

tam tikros vertės. Taip yra dėl dviejų priežasčių. Visų pirma, didinant Δx , mažėja mazgų skaičius, t. y. rastasis sprendinys suteikia mažiau informacijos. Antra, didinant Δx , didėja kitos rūšies paklaidos – **dėmenų atmetimo paklaidos**, kurios susijusios su tuo, kad išvestinių išraiška baigtiniais skirtumais (2.9.4) yra apytikslė. Toks šių paklaidų pavadinimas kilo iš to, kad (2.9.4) formulė yra gauta iš funkcijos $n(x,t)$ išraiškos Teiloro eilute x atžvilgiu, kurioje yra atmesti antrojo laipsnio ir aukštesnių laipsnių dėmenys. Didinant Δx , dėmenų atmetimo paklaida didėja, t. y. apytikslė lygybė (2.9.4) tampa vis mažiau tiksli, o tai savo ruožtu iškraipo sprendinį.

3. Krūvio pernašos ypatybės dielektriniuose sluoksniuose

3.1. Elektrofotografinis procesas

Elektrofotografija yra vaizdų kopijavimo metodas, kurio pagrindiniai etapai yra pateikti toliau:

1. Elektrinimas. Metalinio cilindro paviršius, kurias padengtas fotojautrios medžiagos sluoksniu, yra tolygiai įelektrinamas.
2. Apšvietimas. Sukant cilindrą ir vienu metu skenuojant kopijuojamo dokumento paviršių šviesos šaltiniu, dokumento atvaizdas suprojektuojamas į cilindro paviršių. Apšviestos cilindro paviršiaus sritys išsielektrina. Nusodintas krūvis lieka tik neapšviestose srityse. Šis likęs krūvis vadinamas „slaptuoju vaizdu“.
3. Ryškinimas. Ant cilindro paviršiaus nusodinamos elektringos tonerio dalelės. Jų krūvis gali būti to paties ženklo, kaip elektrinimo metu nusodintas krūvis, arba priešingas. Jeigu krūvių ženklai yra priešingi, tada tonerio dalelės pritraukiamos prie neapšviestų vietų (kuriose cilindro paviršius yra įelektrintas). Tokiu būdu suformuojamas pozityvinis atvaizdas. Jeigu reikalingas negatyvas, tada tonerio dalelių krūvis turi būti to paties ženklo kaip ir cilindro elektrinimo krūvis.
4. Vaizdo perkėlimas. Tonerinis vaizdas, kuris suformuotas ant cilindro paviršiaus, perkeliamas ant popieriaus.
5. Popieriaus elektros krūvio dalinis neutralizavimas ir popieriaus (su ant jo nusėdusiu toneriu) atskyrimas nuo cilindro paviršiaus.
6. Vaizdo fiksavimas ant popieriaus.
7. Cilindro paviršiaus liekamojo elektros krūvio neutralizavimas (apšviečiant) ir tonerio likučių pašalinimas nuo cilindro paviršiaus.

3.2. Krūvininkų kinetika fotojautriajame sluoksnyje

Elektrofotografinio įrenginio cilindro fotojautrusis sluoksniu gali būti sudarytas iš dviejų arba trijų posluoksnių arba gali būti vienalytis. Toliau nagrinėsime paprasčiausią atvejį, kai šis sluoksniu yra vienalytis. Vienas jo paviršius yra laisvasis, o kitas liečiasi su elektrodu. Taigi, sistema turi tik vieną elektrodą (tokia veika vadinama **elektrografine veika**). Elektrodo potencialas laikomas lygiu nuliui. Krūvis nusodinamas ant laisvojo paviršiaus; paskui tas pats paviršius yra apšviečiamas.

Medžiagos, kurių pagrindu gaminamas elektrofotografinių įrenginių cilindrų fotojautrusis sluoksniu, yra dielektrikai. T. y. normaliomis sąlygomis jose praktiškai nėra laisvųjų krūvininkų. Krūvininkai (elektronai ir skylės) atsiranda dėl apšvietimo, vykstant vadinamajam **fotogeneracijos** vyksmui. Dėl šio vyksmo sukuriama per laiko vienetą tūrio vienetą krūvininkų porų skaičių vadinsime **fotogeneracijos sparta**. Fotogeneracijos sparta duotajame sluoksniu taške yra proporcinga fotonų srauto tankiui I tame taške (fotonų **srauto tankis** – tai fotonų skaičius ploto vienetui per laiko vienetą). Jeigu tarsime, kad koordinatė x atskaitoma nuo apšviestojo paviršiaus gilyn į sluoksniu, tada fotonų srauto tankis eksponentiškai mažėja didėjant x :

$$I(x) = I_0 \exp(-\gamma x); \quad (3.2.1)$$

čia I_0 yra krantinčiųjų fotonų srauto tankis (taške $x = 0$), o γ yra šviesos sugerties koeficientas. Vidutinis atsiradusių krūvininkų porų skaičius, kuris atitinka vieną sugertą fotoną, yra vadinamas fotogeneracijos **kvantiniu našumu**. Jeigu kiekvienas sugertas fotonas sukuria vieną krūvininkų porą, tada kvantinis našumas yra lygus vienetui, o fotogeneracijos sparta yra lygi tūrio vienetą per laiko vienetą sugeriamų fotonų skaičiui, t. y. išvestinei $-dI/dx = \gamma I(x)$. Tačiau bendruoju atveju fotogeneracijos kvantinis našumas yra mažesnis už vienetą, t. y. kai kurie fotonai gali būti sugerti ir be krūvininkų porų kūrimo. Tada fotogeneracijos sparta yra

$$G_f = -\eta \frac{dI}{dx} = \eta \gamma I_0 \exp(-\gamma x) = \eta \gamma I(x); \quad (3.2.2)$$

čia η yra fotogeneracijos kvantinis našumas.

Kadangi prieš fotogeneraciją sluoksniu buvo įelektrintas, tai jame egzistuoja elektrinis laukas, kuris priverčia fotogeneruotus elektronus ir skyles judėti priešingomis kryptimis. Vieno ženklo krūvininkai juda link apšviestojo paviršiaus (ant kurio buvo nusodintas krūvis) ir neutralizuoja ten esančius jonus, o kito ženklo krūvininkai juda link elektrodo ir išeina iš sluoksniu. Dėl šių vyksmų sluoksniu išsielektrina, t. y. jo paviršiaus potencialas mažėja. Siekiant sumažinti kopijuojamo vaizdo iškraipymus, išsielektravimo sparta turi būti kuo didesnė.

Esant krūvininkų dvipolės generacijos ir rekombinacijos vyksmams, elektronų ir skylių tolydumo lygtys yra tokios:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} + \alpha - \beta np; \quad (3.2.3a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x} + \alpha - \beta np. \quad (3.2.3b)$$

Čia n ir p yra elektronų ir skylių koncentracijos, j_n ir j_p yra elektronų ir skylių laidumo srovių tankiai:

$$j_n = en\mu_n E; \quad (3.2.4a)$$

$$j_p = ep\mu_p E, \quad (3.2.4b)$$

α yra dvipolės generacijos sparta, o βnp yra dvipolės rekombinacijos sparta, E yra elektrinio lauko stipris. Matome, kad į srovių išraiškas neįeina difuzijos srovė. Taip yra todėl, kad elektrofotografinių sluoksnių darbo sąlygomis (t. y. mažo savitojo laidžio ir stipraus elektrinio lauko sąlygomis) krūvininkų difuzijos vaidmuo yra daug mažesnis už krūvininkų dreifo vaidmenį. Generacijos arba rekombinacijos spartos fizikinė prasmė – tai duotosios rūšies vyksmų skaičius per laiko vienetą tūrio vienetu (SI matavimo vienetas yra $s^{-1} m^{-3}$). Koefficientas β vadinamas **rekombinacijos koeficientu** (jo SI matavimo vienetas yra $m^3 s^{-1}$). Aptariamuoju atveju galima nepaisyti šiluminės dvipolės generacijos; egzistuoja tik dvipolė generacija dėl apšvietimo (fotogeneracija). Vadinasi, generacijos sparta α yra nelygi nuliui tik apšvietimo metu. Jei yra modeliuojamas sluoksnio atsakas į trumpą šviesos impulsą, t. y. į impulsą, kurio trukmę galima laikyti lygia nuliui, tada apšvietimas pasireiškia tik tuo, kad pasikeičia pradinės sąlygos, t. y., pradinio laiko momentu suformuojamas tam tikras pradinis elektronų ir skylių pasiskirstymas, o šio pasiskirstymo tolimesnis kitimas jau vyksta be fotogeneracijos (t. y. koeficientas α (3.2.3a,b) lygčių dešiniuosiose pusėse yra lygus nuliui). Tada pradinė krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės nusakoma (3.2.2) reiškiniu, kuriame I_0 reiškia jau ne fotonų srauto tankį, o pilnutinį šviesos impulso fotonų skaičių ploto vienetui (SI matavimo vienetas yra m^{-2}).

Lauko stipris E , kuris įeina į (3.2.4a,b), priklauso nuo krūvio pasiskirstymo sluoksnyje ir nuo paviršinio krūvio ant sluoksnio laisvojo paviršiaus. Šis elektrinis laukas yra Puasono lygties sprendinys:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho(x,t)}{\epsilon_0 \epsilon}; \quad (3.2.5)$$

čia ρ yra erdvinio krūvio tankis. Aptariamuoju atveju vieninteliai elektrinio lauko šaltiniai sluoksnyje yra laisvieji elektronai ir skylės, todėl

$$\rho(x,t) = e(p(x,t) - n(x,t)). \quad (3.2.6)$$

(3.2.3) – (3.2.6) lygtys sudaro lygčių sistemą. Kad ją išspręsti, reikia pradinių sąlygų (t. y. pradinių krūvininkų pasiskirstymų sluoksnyje $n(x)|_{t=0}$ ir $p(x)|_{t=0}$ bei pradinio paviršinio krūvio tankio) ir kraštinių sąlygų (t. y. srovių j_n ir j_p skaičiavimo taisyklių sluoksnio kraštuose). Tarsime, kad nusodintas krūvis yra teigiamas, o jį neutralizuojantys krūvininkai yra elektronai. Kadangi skylės juda nuo laisvojo paviršiaus link elektrodo, tai skylių srovė prie laisvojo paviršiaus (taške $x = 0$) visada lygi nuliui:

$$j_p(0) = 0. \quad (3.2.7a)$$

Analogiškai, kadangi elektronai juda priešinga kryptimi, tai elektronų srovė prie elektrodo (taške $x = w$) visada lygi nuliui:

$$j_n(w) = 0. \quad (3.2.7b)$$

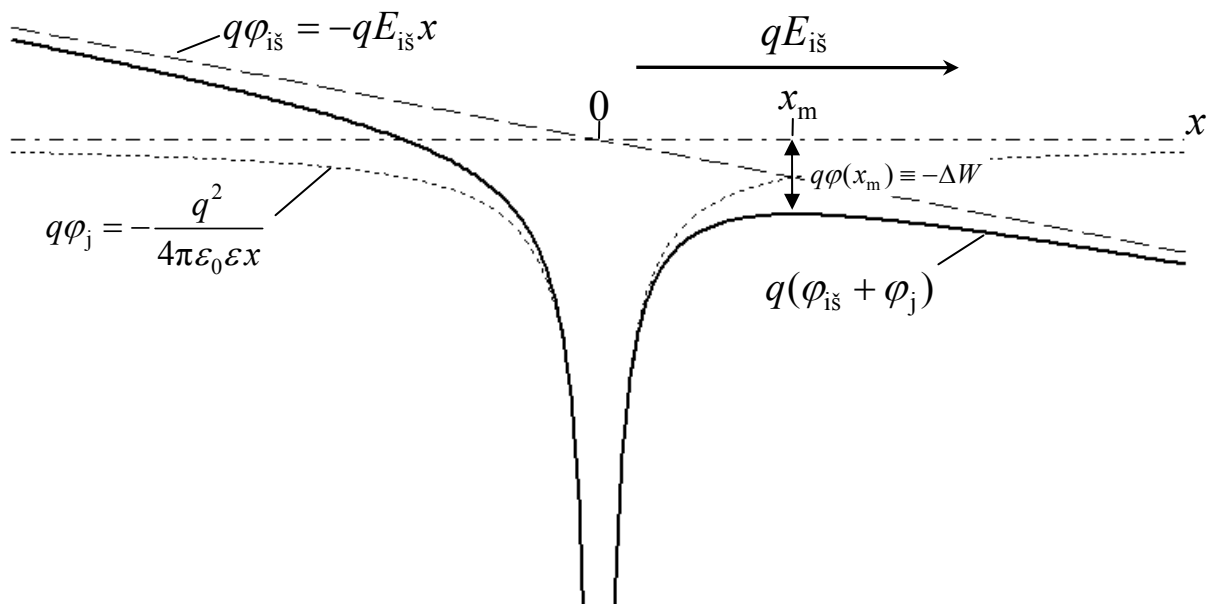
Skylių srovės tankį prie elektrodo galima apskaičiuoti naudojantis prielaida, kad sluoksnio ir elektrodo kontaktas nesudaro jokių kliūčių skylių perėjimui iš sluoksnio į elektrodą. T. y. $j_p(w)$ skaičiuojamas pagal (3.2.4b) formulę, kurioje E yra elektrinis laukas prie elektrodo. Analogišką sąlygą galima taikyti ir skaičiuojant elektronų srovės tankį prie laisvojo paviršiaus. T. y., elektronai be jokių kliūčių patenka iš sluoksnio tūrio ant laisvojo paviršiaus ir kaupiasi ant jo (tai yra tapatu prielaidai, kad elektronų pagavimo į paviršines gaudykles koeficientas yra be galo didelis). Vadinasi, neigiamas erdvinis elektronų krūvis palaipsniui virsta neigiamu paviršiniu krūviu, kuris neutralizuoja nusodintą teigiamą krūvį ir mažina sluoksnio laisvojo paviršiaus potencialą (laikome, kad elektrodo potencialas yra lygus nuliui). Kita laisvojo paviršiaus potencialo mažėjimo priežastis yra skylių išėjimas iš sluoksnio per elektrodą.

Galutinė laisvojo paviršiaus potencialo vertė vadinama **liekamuoju potencialu**. Kadangi, nusistovėjus sluoksnio būsenai, jame nėra laisvųjų krūvininkų, tai liekamasis potencialas yra susijęs tik su liekamuoju paviršiniu krūviu, t. y. tuo krūviu, kuris nebuvo neutralizuotas pagaunant elektronus iš sluoksnio tūrio. To krūvio paviršinį tankį žymėsime σ_{liek} . Šiomis sąlygomis sluoksnyje egzistuoja vienalytis elektrinis laukas, kurio stipris $\sigma_{\text{liek}} / (\epsilon_0 \epsilon)$; čia ϵ yra sluoksnio dielektrinė skvarba. Todėl liekamasis potencialas yra lygus

$$U_{\text{liek}} = \frac{\sigma_{\text{liek}} w}{\epsilon_0 \epsilon}. \quad (3.2.8)$$

3.3. Pulio ir Frenkelio efektas

Dielektriniuose sluoksniuose vyrauja vadinamasis šuolinis laidumas. T. y. krūvininkai didžiąją laiko dalį yra lokalizuoti medžiagos atomuose ir retkarčiais dėl šiluminio judėjimo „peršoka“ iš vieno atomo į kitą. Jeigu krūvininkas lokalizuotas, tai reiškia, kad egzistuoja potencialo barjeras, kurį krūvininkas turi įveikti, kad taptų laisvas. Įjungus išorinį lauką, to potencialo barjero forma pasikeičia, nes prisideda krūvininko potencialinė energija išoriniame lauke. Todėl gali pasikeisti ir potencialo barjero aukštis. Minėtojo potencialo barjero aukščio sumažėjimas dėl išorinio lauko vadinamas Pulio ir Frenkelio efektu. Šio reiškinio teorinis modelis yra iš esmės toks pats, kaip ir Šotkio efekto, kuris aprašytas 2.8 skyriuje. Tačiau šiuo atveju potencialinį barjerą sąlygoja ne veidrodinės jėgos potencialas (kurio vertė duotajame taške priklauso nuo paties elektrono koordinatės), o pastovus gaudyklės (jono, su kuriuo susietas krūvininkas) potencialas. Kadangi gaudyklės potencialo priklausomybė nuo koordinatės gali būti įvairi, tai ir potencialinio barjero aukščio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprumo gali būti įvairi. Paprasčiausias atvejis – tai taškinio jono, kurio krūvis priešingas pagauto krūvininko krūviui, Kulono potencialas. Vienmatis modelis, kuriame jonas yra taške $x = 0$, skiriasi nuo Šotkio efekto modelio tik tuo, kad šiuo atveju krūvininko nuotolis nuo Kulono jėgos centro yra dvigubai mažesnis ir lygus x (žr. 3.1 pav.). Todėl formulėse (2.8.1) ÷ (2.8.6) vietoj daugiklio 1/16 yra daugiklis 1/4 (barjero aukščio pokytis, lyginant su (2.8.7) formule, yra dvigubai didesnis):



3.1 pav. Lokalizuoto krūvininko, kurios krūvis q , potencialo barjero sumažėjimas dėl išorinio elektrinio lauko

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon E_{i\check{s}}}} \quad (3.3.1)$$

$$q\varphi(x_m) \equiv -\Delta W = -\sqrt{\frac{q^3 E_{i\check{s}}}{\pi\varepsilon_0\varepsilon}} = -2qE_{i\check{s}}x_m = 2q\varphi_{i\check{s}}(x_m). \quad (3.3.2)$$

Dėl šio potencialo barjero sumažėjimo elektronų šuoliai tarp atomų padažnėja $\exp(\Delta W/kT)$ kartų. Tiek pat kartų padidėja ir elektronų judris bei medžiagos laidis:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(\frac{\Delta W}{kT}\right) = \sigma_0 \exp\left(\frac{\beta\sqrt{|E_{i\check{s}}|}}{kT}\right). \quad (3.3.3)$$

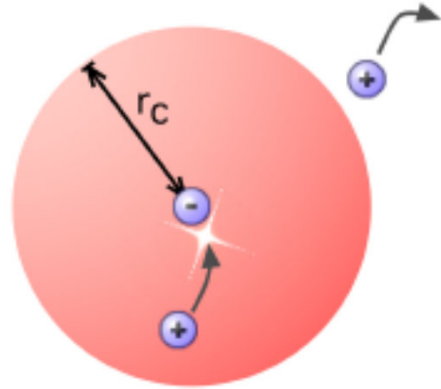
Analogiškas efektas pasireiškia ir skylių atveju. Šis krūvininkų judrio padidėjimas dėl elektrinio lauko yra vadinamas **Pulio ir Frenkelio efektu** (angl. *Poole-Frenkel effect*). Taigi, esant Pulio ir Frenkelio efektui, elektronų ir skylių judrio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio yra tokia:

$$\mu_n = \mu_{0n} \exp(a_n \sqrt{|E|}); \quad (3.3.4a)$$

$$\mu_p = \mu_{0p} \exp(a_p \sqrt{|E|}). \quad (3.3.4b)$$

3.4. Lanževano rekombinacijos modelis

Kitas efektas, kuris yra būdingas mažo laidžio medžiagoms, yra rekombinacijos koeficiento β proporcingumas krūvininkų judriui. Šią priklausomybę numato vadinamasis **Lanževano rekombinacijos modelis**. Kai vyrauja šuolinis laidumas, tada elektronų ir skylių rekombinacijos spartą lemia tikimybė, kad elektronas ir skylė „susitiks“ erdvėje. Remiantis šiuo įvaizdžiu, galima apskaičiuoti rekombinacijos spartą. Kad būtų paprasčiau, tarkime, kad elektronas yra nejudrus, o skylės judri pakeiskime elektrono ir skylės judrių suma. Rekombinacija įvyksta dėl to, kad elektronas ir skylė traukia vienas kitą dėl Kulono sąveikos. Kitaip sakant, elektronas sukuria skylėi potencialo duobę. Skylė, patekusi į tą potencialo duobę, gali būti iš jos išlaisvinta dėl šiluminio judėjimo (žr. 3.2 pav.). Tačiau taip gali atsitikti tik tada, kai Kulono sąveikos potencinė energija yra tos pačios eilės kaip šiluminio judėjimo energija arba mažesnė. Todėl galima suformuluoti sąlygą, iš kurios išplaukia skylės „pagavimo“ atstumo r_c išraiška: tas atstumas turi būti toks, kad Kulono traukos potencinės energijos modulis būtų lygus vidutinei šiluminio judėjimo energijai kT :



3.2 pav. Elektrono ir skylės rekombinacija pagal Lanževano modelį. r_c yra skylės pagavimo nuotolis

Todėl galima suformuluoti sąlygą, iš kurios išplaukia skylės „pagavimo“ atstumo r_c išraiška: tas atstumas turi būti toks, kad Kulono traukos potencinės energijos modulis būtų lygus vidutinei šiluminio judėjimo energijai kT :

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r_c} = kT. \quad (3.4.1)$$

T. y.

$$r_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon kT}. \quad (3.4.2)$$

Ant šios sferos elektrinio lauko stipris yra lygus

$$E = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon r_c^2}. \quad (3.4.3)$$

Todėl galima apskaičiuoti skylių rekombinacinę srovę pro tą paviršių (iš išorės į vidų): ta srovė yra lygi srovės tankio $ep\mu E$ ir sferos ploto $4\pi r_c^2$ sandaugai:

$$I = ep\mu \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon r_c^2} 4\pi r_c^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon} p\mu. \quad (3.4.4)$$

Padalijus šią srovę iš e , gaunamas skylių, kurios rekombinuoja per vieną sekundę su vienu elektronu, skaičius. Žinome, kad rekombinacijos sparta yra apibrėžiama kaip rekombinacijos įvykių skaičius tūrio vienetu per sekundę. Kad gauti šią rekombinacijos spartą, reikia rekombinacijos su vienu elektronu įvykių skaičių per sekundę padauginti iš elektronų koncentracijos n . Vadinasi, rekombinacijos sparta yra lygi

$$R = \frac{e}{\epsilon_0\epsilon} \mu np. \quad (3.4.5)$$

Šis rekombinacijos modelis yra vadinamas **Lanževano rekombinacija**. Daugiklis prieš elektronų ir skylių sandaugą rekombinacijos spartos išraiškoje vadinamas **rekombinacijos koeficientu**. Vadinasi, Lanževano rekombinacijos koeficientas yra lygus

$$\beta = \frac{e(\mu_n + \mu_p)}{\epsilon_0\epsilon} \quad (3.4.6)$$

(čia atsižvelgta į tai, kad pagal prielaidą μ yra lygus elektronų ir skylių judrių sumai).

Kai pasireiškia Pulio ir Frenkelio efektas, tada krūvininkų judris priklauso nuo elektrinio lauko stiprio (žr. (3.2.8a,b)). Todėl ir Lanževano rekombinacijos koeficientas (3.4.6) šiuo atveju priklauso nuo elektrinio lauko stiprio (tuo pačiu – ir nuo koordinatės, nes elektrinio lauko stipris skirtinguose erdvės taškuose bendroju atveju yra skirtingas).

[Šis Lanževano rekombinacijos aiškinimas remiasi tinklalapiu

<http://blog.disorderedmatter.eu/2008/04/04/recombination-in-low-mobility-semiconductors-langevin-theory/>]

4. Krūvininkų generacijos ir rekombinacijos reiškiniai puslaidininkiuose

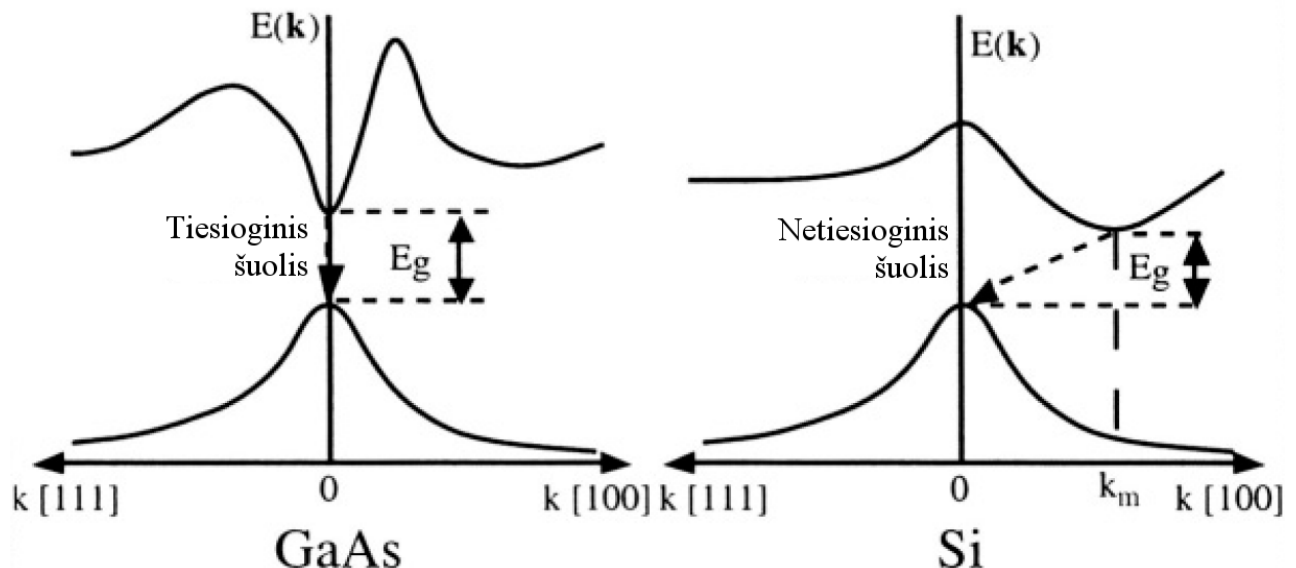
4.1. Tiesioginiai ir netiesioginiai šuoliai. Rekombinacijos centrai

Kai kurių puslaidininkių, pvz., GaAs, laidumo juostos minimumo padėtis \mathbf{k} erdvėje yra tokia pati kaip valentinės juostos maksimumo padėtis. Kaip matome 4.1 pav., tas taškas yra $\mathbf{k} = 0$. Todėl, kai laidumo juostos elektronas rekombinuoja su valentinės juostos skylė, yra tenkinamas impulso (judesio kiekio) tvermės dėsnis. Tai reiškia, kad tokiai rekombinacijai įvykti nereikia jokių papildomų sąlygų. Tačiau, pvz., Ge ir Si laidumo ir valentinės juostos slėnių padėtys \mathbf{k} erdvėje yra skirtingos: valentinės juostos maksimumas yra taške $\mathbf{k} = 0$ o laidumo juostos minimumas yra taške $\mathbf{k}_m \neq 0$ (pastarasis taškas atitinka vadinamąjį „X slėnį“, kuris yra ant Brijueno zonos krašto [100] kryptimi). Taigi, tokia puslaidininkyje rekombinacijos metu elektronas, kurio impulsas \mathbf{k}_m , rekombinuoja su skylė, kurios impulsas 0. Todėl, kad nebūtų pažeistas impulso tvermės dėsnis, elektronui arba skylėi reikia suteikti atitinkamą impulsą (atitinkamai $-\mathbf{k}_m$ arba \mathbf{k}_m). Tai gali atsitikti sugeriant arba emituojant vieną arba kelis fononus. Tačiau toks įvykis yra labai mažai tikėtinas. Todėl silicyje arba germanyje tarpjuostinė rekombinacija praktiškai nepasireiškia. Šiuose puslaidininkiuose rekombinacija vyksta per tarpines būsenas, kurias atitinka diskretūs energijos lygmenys draustinėje energijų juostoje. Tie lygmenys atitinka vadinamuosius *rekombinacijos centrus*. Krūvininkų rekombinacija per rekombinacijos centrus vadinama *Shockley-Read-Hall* rekombinacija.

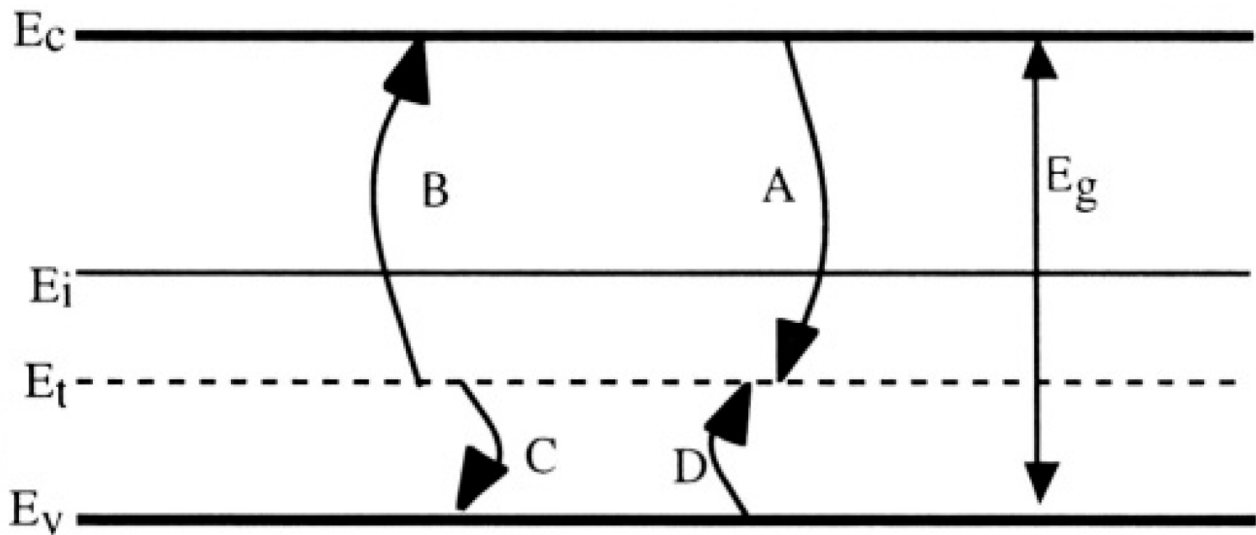
Krūvininko, kuris pagautas į rekombinacijos centrą kristaliniame silicyje arba germanyje, rekombinacijos tikimybė yra daug didesnė negu laisvo krūvininko. Toliau bus aptariama tik tokia netiesioginė krūvininkų rekombinacija.

4.2. Rekombinacijos sparta. Tolydumo lygtis

Dėl kristalo gardelės defektų, kurių yra visuose (net ir pačiuose gryniausiuose) puslaidininkiuose, jų draustinėje juostoje egzistuoja energijos lygmenys. Pvz., 4.2 pav. pavaizduotas vienas toks lygmuo E_t (indeksas „t“ kilo iš angliško žodžio „trap“ – „gaidyklė“). Akivaizdu, kad yra galimi keturių rūšių kvantiniai šuoliai, kuriuose gali dalyvauti tas energijos lygmuo: jis gali priimti elektroną iš laidumo juostos (A šuolis), atiduoti elektroną į valentinę juostą, t. y. priimti skylę iš valentinės juostos (C šuolis), priimti elektroną iš



4.1 pav. Krūvininkų tarpjuostinės rekombinacijos rūšys: tiesioginiai kvantiniai šuoliai (kairėje) ir netiesioginiai šuoliai (dešinėje)



4.2 pav. Galimi elektrono kvantiniai šuoliai per rekombinacijos centrą, kurį atitinka energijos lygmuo E_t

valentinės juostos, t. y. atiduoti skylę į valentinę juostą (D šuolis), arba atiduoti elektroną į laidumo juostą (B šuolis). Lygmuo, kuris neturi elektros krūvio, kai jį užima elektronas, ir turi teigiamą elektros krūvį, kai jo neužima elektronas, yra vadinamas *donoriniu lygmeniu*, o lygmuo, kuris neturi elektros krūvio, kai jo neužima elektronas, ir turi neigiamą elektros krūvį, kai jį užima elektronas, yra vadinamas *akceptoriniu lygmeniu*.

Lygmenys, egzistuojantys draustinėje juostoje, kartais yra klasifikuojami dar ir pagal tai, kokia yra tikimybė, kad į tokį lygmenį pagautas krūvininkas grįš atgal į tą juostą, iš kurios jis buvo pagautas. Jeigu tokio įvykio tikimybė yra palyginti didelė (t. y. jeigu šuolių A ir B tikimybės daug didesnės už šuolių C ir D tikimybes arba atvirkščiai), tada lygmuo vadinamas „prilipimo lygmeniu“ (tiksliau, jeigu vyrauja šuoliai A ir B, tada lygmuo vadinamas „elektronų prilipimo lygmeniu“, o jeigu vyrauja šuoliai C ir D, tada lygmuo vadinamas „skylių prilipimo lygmeniu“). Jeigu tikimybė, kad po šuolio A įvyks šuolis C yra daug didesnė, negu tikimybė, kad po šuolio A įvyks šuolis B, arba jeigu tikimybė, kad po šuolio C įvyks šuolis A yra daug didesnė, negu tikimybė, kad po šuolio C įvyks šuolis D, tada lygmuo vadinamas „rekombinacijos centru“. Tačiau nuo šiol *visus* lygmenis, kuris yra draustinėje juostoje, vadinsime „rekombinacijos centrais“ (išskyrus 4.6 skyrių, kuriame bus aptariama sistema, kurioje egzistuoja tik prilipimo lygmenys). Be to, terminu „rekombinacija“ vadinsime visus elektronų arba skylių šuolius iš atitinkamų leistinių juostų į tuos lygmenis, o terminu „generacija“ – visus elektronų arba skylių šuolius iš tų lygmenų į atitinkamas leistines juostas.

Iš 4.2 pav. aišku, kad rekombinacijos centrų energijos lygmuo elgiasi kaip „tarpininkas“, pereinant elektronui iš laidumo juostos į valentinę juostą arba atvirkščiai. Kai kuriuose puslaidininkuose (pvz., silicijoje) toks elektronų ir skylių rekombinacijos mechanizmas yra pagrindinis.

Kiekvienas iš keturių šuolių, kurie parodyti 4.2 pav., yra apibūdinamas savo sparta, t. y. tos rūšies šuolių skaičiumi tūrio vienetą per laiko vienetą (tas spartas žymėsime tomis pačiomis raidėmis, kuriomis 4.2 pav. yra žymimi atitinkami šuoliai, t. y. A, B, C ir D). Nuo šiol apibendrinsime „rekombinacijos spartos“ sąvoką: *elektronų rekombinacijos spartą* apibrėšime sąryšiu

$$R_n = A - B, \quad (4.2.1a)$$

o *skylių rekombinacijos spartą* apibrėšime sąryšiu

$$R_p = C - D. \quad (4.2.1b)$$

Šitaip apibrėžtos rekombinacijos spartos gali būti ir teigiamos, ir neigiamos, priklausomai nuo to, ar vyrauja tos rūšies krūvininkų pagavimas į rekombinacijos centrus, ar išlaisvinimas iš jų. „Generacijos sparta“ vadinsime *išorinių* veiksmių (pvz., apšvietimo) sąlygotos generacijos spartą (nes „vidinė“ generacijos sparta, kuri susijusi su krūvininkų išlaisvinimu iš gaudyklių, įeina į rekombinacijos spartos apibrėžtį). Pažymėjus elektronų ir skylių generacijos spartas atitinkamai G_n ir G_p , galima užrašyti šias elektronų ir skylių *tolydumo lygtis*:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n + (G_n - R_n), \quad (4.2.2a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p + (G_p - R_p). \quad (4.2.2b)$$

Toliau tarsime, kad išorinė generacijos sparta lygi nuliui: $G_n = G_p = 0$. Rekombinacijos spartas R_n ir R_p galima susieti su pilnutinės krūvininkų koncentracijos (n ir p) ir krūvininkų koncentracijos termodinaminėje

pusiausvyroje (atitinkamai n_0 ir p_0) skirtumais $\Delta n \equiv n - n_0$ ir $\Delta p \equiv p - p_0$ (šie du krūvininkų koncentracijos pokyčiai vadinami, atitinkamai, **perteklinių elektronų koncentracija** ir **perteklinių skylių koncentracija**). Kadangi izoliuotoji sistema visada savaime grįžta į termodinaminės pusiausvyros būseną, tai tuo atveju, kai krūvininkų koncentracija yra didesnė už pusiausvirąją (t. y. kai perteklinių krūvininkų koncentracija yra teigiama), turi vyrauti rekombinacija, o priešingu atveju turi vyrauti generacija. Turint omenyje, kad bet kokią tolydžiąją funkciją pakankamai siaurame intervale galima aproksimuoti tiesės atkarpa, galima teigti, kad tuo atveju, kai perteklinių krūvininkų koncentracija yra pakankamai maža, rekombinacijos sparta yra proporcinga perteklinių krūvininkų koncentracijai:

$$R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n}, \quad (4.2.3a)$$

$$R_p = \frac{\Delta p}{\tau_p}; \quad (4.2.3b)$$

čia τ_n ir τ_p yra atitinkamai elektrono ir skylės **vidutinė gyvavimo trukmė**, t. y. vidutinis laikas, kurį išbūna elektronas laidumo juostoje arba skylė valentinėje juostoje iki rekombinacijos. Taigi, (4.2.2a,b) lygtis vienmačio judėjimo atveju galima užrašyti šitaip:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -R_n + \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} = -\frac{\Delta n}{\tau_n} + \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x}, \quad (4.2.4a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -R_p - \frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x} = -\frac{\Delta p}{\tau_p} - \frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x}. \quad (4.2.4b)$$

4.3. Krūvininkų gyvavimo trukmės išraiška rekombinacijos centrų parametrais

Elektronų rekombinacijos spartą R_n išreiškime suma dviejų dėmenų, kurių vienas nusako elektronų pagavimo į rekombinacijos centrus spartą (R_{nr}), o kitas yra priešingas elektronų terminio išlaisvinimo iš rekombinacijos centrų spartai (R_{ng}). Rekombinacijos centrų, kuriuos užima elektronai, koncentraciją žymėsime n_t , o pilnutinę rekombinacijos centrų koncentraciją žymėsime N_t . Pagavimo sparta R_{nr} yra tiesiog proporcinga laisvų elektronų koncentracijai n ir neužimtų centrų koncentracijai $N_t - n_t$:

$$R_{nr} = v_{th,n} \sigma_n n (N_t - n_t). \quad (4.3.1)$$

Čia $v_{th,n}$ yra vidutinis elektronų šiluminio judėjimo greitis, o σ_n yra elektronų pagavimo skerspjūvis. Pagavimo skerspjūvis – tai plotas įsivaizduojamos plokščios srities, kuri susieta su kiekvienu neužimtu rekombinacijos centru. Pagavimo skerspjūvio vertė parinkta taip, kad geometrinė elektrono pataikymo į tą plotą tikimybė sutaptų su elektrono pagavimo tikimybe (tariama, kad minėtoji plokščia sritis yra statmena elektrono judėjimo kryptčiai, o elektrono būseną nusako plokščia banga, kurios amplitudė yra vienoda visame kristalo skerspjūvyje). Greitis $v_{th,n}$ yra apibrėžiamas kaip elektrono greičio modulio vidurkis. Maksvelo ir Bolcmano pasiskirstymo atveju šis vidurkis yra lygus

$$v_{th,n} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_n^*}}, \quad (4.3.2)$$

čia m_n^* yra elektrono efektinė masė. Kadangi

$$n_t = N_t f(E_t), \quad (4.3.3)$$

kur $f(E_t)$ yra santykinė dalis užimtų rekombinacijos centrų, kurių lygmens vertė E_t , tai

$$R_{nr} = v_{th,n} \sigma_n n N_t (1 - f(E_t)). \quad (4.3.4)$$

Elektronų terminio išlaisvinimo iš rekombinacijos centrų sparta yra proporcinga užimtų centrų koncentracijai:

$$R_{ng} = a_n n_t = a_n N_t f(E_t). \quad (4.3.5)$$

Proporcingumo koeficientą a_n vadinsime **išlaisvinimo koeficientu**. Tai yra tikimybė per laiko vienetą, kad elektronas bus išlaisvintas iš vieno užimto rekombinacijos centro (dydis, kuris atvirkštinis a_n , yra lygus vidutinei elektrono gyvavimo trukmei rekombinacijos centre). Proporcingumo koeficientą a_n galima apskaičiuoti naudojantis tuo, kad termodinaminėje pusiausvyroje abiejų kryptčių šuolių sparta yra vienoda, t. y.

$$R_{nr} = R_{ng}. \quad (4.3.6)$$

Įrašius (4.3.4) ir (4.3.5) į (4.3.6) ir pasinaudojus tuo, kad $f(E_t)$ yra Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija

$$f(E_t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F}{kT}\right)}, \quad (4.3.7)$$

o elektronų koncentracija neišsigimusiame puslaidininkyje yra lygi

$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right), \quad (4.3.8)$$

gaunama tokia elektronų išlaisvinimo koeficiento išraiška:

$$a_n = v_{th,n} \sigma_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right). \quad (4.3.9)$$

Taigi, elektronų išlaisvinimo koeficientas eksponentiškai mažėja didėjant energijos lygmens „gyliui“ draustinėje juostoje, atskaitytam nuo laidumo juostos krašto E_c . Analogiškai išreiškiamas ir skylių išlaisvinimo koeficientas (t. y. elektronų sužadavimo iš valentinės juostos į lygmenį E_t koeficientas). Skylių atveju laisvi ir užimti rekombinacijos centrai „susikeičia vaidmenimis“, nes centras, kurio neužima elektronas – tai yra centras, kurį užima skylė. Vadinasi, skylių pagavimo ir išlaisvinimo spartos yra lygios

$$R_{pr} = v_{th,p} \sigma_p p N_t f(E_t), \quad (4.3.10)$$

$$R_{pg} = a_p N_t (1 - f(E_t)). \quad (4.3.11)$$

Čia $v_{th,p}$ yra vidutinis skylių šiluminio judėjimo greitis (jo išraiška yra analogiška (4.3.2), tačiau vietoj m_n^* reikia naudoti skylės efektingą masę m_p^*). Be to, kadangi skylės yra išlaisvinamos į valentinę juostą, tai vietoj laidumo juostos efektingo būsenų tankio N_c reikia naudoti valentinės juostos efektingą būsenų tankį N_v , o energijos lygmens „gyli“ reikia atskaityti nuo valentinės juostos krašto E_v . Taigi, skylių išlaisvinimo koeficiento išraiška yra

$$a_p = v_{th,p} \sigma_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right). \quad (4.3.12)$$

Tarkime, kad rekombinacijos centrai yra palyginti giliai draustinėje juostoje (pvz., arti jos centro), o puslaidininkis yra p tipo. Tada pagal Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkciją (4.3.7) didžioji dalis rekombinacijos centrų bus laisvi (nes p puslaidininkio Fermio lygmuo yra daug arčiau valentinės juostos, negu draustinės juostos centro). Vadinasi, jeigu į tokį puslaidininkį įterpiama perteklinių elektronų (tiek, kad pilnutinė elektronų koncentracija padidėtų keliomis eilėmis), tada jų pagavimo sparta (4.3.4) taps daug didesnė už išlaisvinimo spartą (4.3.5). Šiomis sąlygomis

$$R_n \approx R_{nr} \approx v_{th,n} \sigma_n n N_t \approx v_{th,n} \sigma_n \Delta n N_t. \quad (4.3.13)$$

Čia, užrašant paskutiniąją lygybę, pasinaudota tuo, kad pagal prielaidą $n \gg n_0$, t. y. $n \approx \Delta n$. Palyginus (4.3.13) su (4.2.3a), galima teigti, kad perteklinių elektronų gyvavimo trukmė τ_n p puslaidininkyje yra lygi

$$\tau_n = \frac{1}{v_{th,n} \sigma_n N_t}. \quad (4.3.14a)$$

Analogiškai, perteklinių skylių gyvavimo trukmė τ_p n puslaidininkyje yra lygi

$$\tau_p = \frac{1}{v_{th,p} \sigma_p N_t}. \quad (4.3.14b)$$

Dinaminėje pusiausvyroje (kai elektronų ir skylių koncentracijos bei visų energijos lygmenų užpildos nepriklauso nuo laiko) galioja lygybė

$$R_n = R_p. \quad (4.3.15)$$

Kaip bus aišku iš 4.5 skyriaus, įterpus į puslaidininkį perteklinių šalutinių krūvininkų (t. y. perteklinių elektronų p puslaidininkyje arba perteklinių skylių n puslaidininkyje), atsiranda tiek pat ir perteklinių *pagrindinių* krūvininkų, t. y. galioja apytikslė lygybė $\Delta n \approx \Delta p$. Todėl iš (4.3.15) lygybės išplaukia, kad dinaminėje pusiausvyroje perteklinių *pagrindinių* krūvininkų (t. y. perteklinių skylių p puslaidininkyje arba perteklinių elektronų n puslaidininkyje) vidutinė gyvavimo trukmė yra lygi perteklinių šalutinių krūvininkų vidutinei gyvavimo trukmei (atitinkamai (4.3.14a) arba (4.3.14b)).

4.4. Krūvininkų kinetikos skaitinis modeliavimas esant rekombinacijos centrams

Skaitmeniškai modeliuojant krūvininkų kinetiką, kai egzistuoja pagavimo į rekombinacijos centrus ir išlaisvinimo iš jų vyksmai, pilnutinėje laisvųjų krūvininkų koncentracijos kitimo spartos išraiškoje (4.2.4a,b) atsiranda papildomas dėmuo, kuris nusako kiekvienos rūšies krūvininkų rekombinacijos spartą. Tą rekombinacijos spartą reikia apskaičiuoti remiantis rekombinacijos centrų parametrais, t. y. pagavimo skerspjūviais σ_n ir σ_p bei rekombinacijos centrų energijos lygmens „gyliui“ draustinėje juostoje. Taigi, reikia naudoti šias formules:

$$R_n = v_{th,n} \sigma_n n (N_t - n_t) - a_n n_t, \quad (4.4.1a)$$

$$R_p = v_{th,p} \sigma_p p n_t - a_p (N_t - n_t), \quad (4.4.1b)$$

Čia

$$a_n = v_{th,n} \sigma_n N_c \exp\left(-\frac{\Delta E_n}{kT}\right), \quad (4.4.2a)$$

$$a_p = v_{th,p} \sigma_p N_v \exp\left(-\frac{\Delta E_p}{kT}\right). \quad (4.4.2b)$$

Šiose formulėse ΔE_n žymi lygmens gylį, atskaitytą nuo laidumo juostos krašto ($\Delta E_n = E_c - E_t$), o ΔE_p žymi lygmens gylį, atskaitytą nuo valentinės juostos krašto ($\Delta E_p = E_t - E_v$). Taigi, suma $\Delta E_n + \Delta E_p$ yra lygi draustinės juostos pločiui E_g :

$$\Delta E_n + \Delta E_p = E_g. \quad (4.4.3)$$

Minėtojo papildomo dėmens (R_n arba R_p) atsiradimas turi įtakos tik koncentracijų kitimo spartų apskaičiavimui, tačiau neturi įtakos bendram modeliavimo algoritmui. Pvz., jeigu yra taikomas išreikštinis metodas, tada kiekvienos rūšies laisvųjų krūvinių koncentracija vėlesniu laiko momentu $t_{l+1} = t_l + \Delta t$ apskaičiuojama dauginant koncentracijos kitimo spartą, atitinkančią ankstesnįjį laiko momentą t_l , iš laiko žingsnio Δt ir paskui pridėdant tą sandaugą prie koncentracijos vertės, kuri buvo laiko momentu t_l . Tačiau, kai yra rekombinacijos centrai, tada reikia analogiškai apskaičiuoti ir užimtų rekombinacijos centrų koncentraciją kiekvienu laiko momentu. Užimtų rekombinacijos centrų koncentracijos laikinė išvestinė yra lygi

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = R_n - R_p. \quad (4.4.4)$$

Jeigu yra taikomas išreikštinis algoritmas, tada n_t vertė kiekvienu laiko momentu apskaičiuojama šitaip:

$$n_t(x_i, t_{l+1}) = n_t(x_i, t_l) + \left. \frac{\partial n_t}{\partial t} \right|_{x_i, t_l} \Delta t. \quad (4.4.5)$$

4.5. Šalutinių krūvininkų injekcija. Difuzijos nuotolis

Kai kurie puslaidininkiniai prietaisai, pvz., diodas ir dvipolis tranzistorius, veikia krūvininkų injekcijos principu. **Krūvininkų injekcijos** esmė yra ta, kad į kažkurią prietaiso sritį nuolat įvedami pertekliniai krūvininkai.

Pirmasis procesas, kuris vyksta puslaidininkyje, į kurį buvo injektuoti krūvininkai, – tai jų erdvinio elektros krūvio neutralizavimas. Šis krūvis neutralizuojamas per vadinamąją **dielektrinės relaksacijos trukmę** arba **Maksvelo relaksacijos trukmę**, kuri lygi

$$\tau_\mu = \frac{\epsilon_0 \epsilon}{\sigma}; \quad (4.5.1)$$

čia σ yra puslaidininkio laidumas. Turint omenyje, kad legiruotų puslaidininkių laidumas dažniausiai būna didesnis už $1 (\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$, o tipiška dielektrinė skvarba yra vienetų eilės, Maksvelo relaksacijos trukmė yra mažesnė už 10^{-12} s.

Šio neutralizavimo mechanizmas priklauso nuo to, ar injektuotieji krūvininkai yra pagrindiniai (t. y. elektronai n puslaidininkyje arba skylės p puslaidininkyje), ar šalutiniai (t. y. skylės n puslaidininkyje arba elektronai p puslaidininkyje). Injektavus pagrindinius krūvininkus, jie greitai (per Maksvelo relaksacijos trukmę) pasiskirsto po visą bandinį ir nuteka pro elektrinius kontaktus. Taip atsitinka dėl injektuotųjų krūvininkų tarpusavio elektrostatinio atostūmio. Jeigu buvo injektuoti šalutiniai krūvininkai, tada jų erdvinis krūvis neutralizuojasi dėl to, kad jie per Maksvelo relaksacijos trukmę “sutraukia” tokį patį skaičių pagrindinių krūvininkų. Paskui perteklinių šalutinių krūvininkų koncentracija pradeda mažėti dėl rekombinacijos. Tačiau rekombinacija yra daug lėtesnis vyksmas negu krūvio neutralizavimas, nes gyvavimo trukmės τ_n ir τ_p yra daug didesnės negu τ_μ . Todėl iki rekombinacijos pertekliniai krūvininkai spėja nudifunduoti tam tikrą atstumą gilyn į puslaidininkio tūrį. Pvz., jeigu injektuojami elektronai į p tipo puslaidininkį (žr. 4.3 pav.), tada injektuotieji elektronai kartu su juos supančiais perteklinių skylių “debesėliais” difunduoja gilyn į puslaidininkį. Šios difuzijos metu vyksta rekombinacija, todėl perteklinių krūvininkų koncentracija mažėja ir tam tikrame gylyje tampa lygi nuliui.

Toliau bus aptariami tik vyksmai, kurie vyksta po to, kai injektuotų šalutinių perteklinių krūvininkų elektros krūvis jau yra neutralizuotas, t. y. galiojant lygybei

$$\Delta n = \Delta p. \quad (4.5.2)$$

Šiuo atveju elektrinis laukas yra silpnas, todėl šalutinių krūvininkų srovė yra grynai difuzinė. Perteklinių pagrindinių krūvininkų srovė nėra grynai difuzinė, nes juos "tempia" paskui save injektuoti šalutiniai krūvininkai (dėl Kulono traukos tarp šalutinių ir pagrindinių krūvininkų). Tačiau, kalbant apie perteklinių krūvininkų koncentracijos priklausomybę nuo koordinatės, atskiras pagrindinių krūvininkų aptarimas nėra būtinas, nes perteklinių pagrindinių krūvininkų koncentracija visuose taškuose yra apytiksliai lygi perteklinių šalutinių krūvininkų koncentracijai (žr. (4.5.2)). Galima sakyti, kad perteklinių šalutinių krūvininkų pasiskirstymas "valdo" perteklinių pagrindinių krūvininkų pasiskirstymą. Tarkime, kad šalutiniai krūvininkai yra elektronai (kaip 4.3 pav.). Tada jų elektros srovė (kuri yra grynai difuzinė) lygi

$$j_n = eD_n \frac{dn}{dx} \equiv eD_n \frac{d\Delta n}{dx}. \quad (4.5.3)$$

Irašę (4.5.3) į (4.2.4a), gauname:

$$\frac{\Delta n}{\tau_n} - D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} + \frac{\partial \Delta n}{\partial t} = 0. \quad (4.5.4)$$

Praktiškai yra svarbūs trys atskirieji šios lygties atvejai, kurių kiekvieną atitinkanti lygtis yra gaunama iš (4.5.4) lygties, prilyginus nuliui kurį nors vieną iš trijų dėmenų kairiojoje lygybės pusėje. Toliau aptariami tie trys atskiri atvejai.

4.5.1. Stacionarioji veika esant šalutinių krūvininkų injekcijai

Jeigu procesas stacionarus, tada krūvininkų koncentracija ir laidumo srovės tankis nepriklauso nuo laiko. Todėl (4.5.4) lygties trečiasis dėmuo (laikinė išvestinė) lygus nuliui. Taigi, stacionariąją veiką aprašo lygtis

$$D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} - \frac{\Delta n}{\tau_n} = 0. \quad (4.5.5)$$

Kaip žinoma iš diferencialinių lygčių teorijos, (4.5.5) lygties bendrasis sprendinys yra

$$\Delta n(x) = A \cdot \exp\left(-\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_n}}\right) + B \cdot \exp\left(\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_n}}\right). \quad (4.5.5a)$$

Tolstant nuo paviršiaus $x = 0$, pro kurį injektuojami elektronai, Δn turi artėti į nulį dėl perteklinių krūvininkų rekombinacijos. Vadinasi, (4.5.5) lygties viena kraštinė sąlyga yra

$$\Delta n(+\infty) = 0. \quad (4.5.6)$$

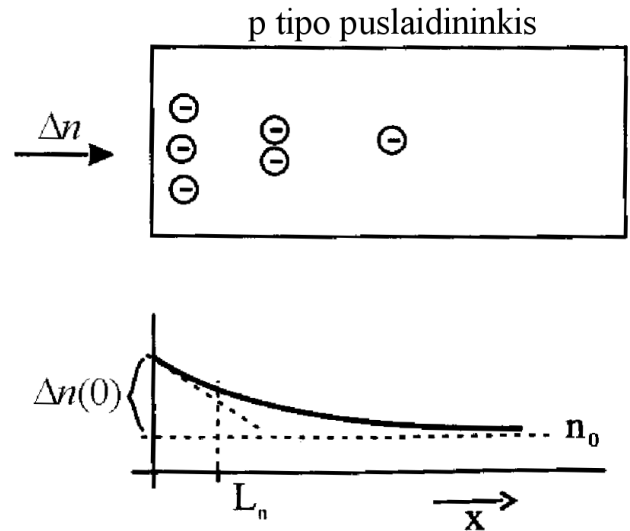
Kita kraštinė sąlyga nusako perteklinių elektronų koncentraciją prie injekcijos paviršiaus $\Delta n(0)$. Aišku, kad šis dydis priklauso nuo išorinių veiksnių (injekcijos intensyvumo), todėl laikysime, kad jis yra žinomas. (4.5.5a) funkcija tenkina kraštinę sąlygą (4.5.6) tik tuo atveju, kai $B = 0$. Vadinasi, vykstant elektronų injekcijai į p tipo puslaidininkį, perteklinių krūvininkų koncentracija eksponentiškai mažėja, tolstant nuo injekcijos paviršiaus (žr. 4.3 pav.):

$$\Delta n(x) = \Delta p(x) = \Delta n(0) \exp\left(-\frac{x}{L_n}\right); \quad (4.5.7)$$

čia L_n yra **elektronų difuzijos nuotolis**, kuris lygus

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n}. \quad (4.5.8)$$

Elektronų difuzijos nuotolis – tai vidutinis atstumas, kurį nudifunduoja injektuotas elektronas p tipo puslaidininkyje iki rekombinacijos. Matematiškai difuzijos nuotolis nusako atstumą, kuriame perteklinių krūvininkų koncentracija (Δn ir Δp) sumažėja $e \approx 2,7$ kartų, lyginant su didžiausia verte (žr. (4.5.7)).



4.3 pav. Perteklinių elektronų injekcija į p tipo puslaidininkį

Skylių injekcijos į n tipo puslaidininkį atveju galioja analogiški sąryšiai. Šiuo atveju perteklinių krūvininkų pasiskirstymą "valdo" skylių pasiskirstymas, todėl

$$\Delta n(x) = \Delta p(x) = \Delta p(0) \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right); \quad (4.5.9)$$

čia L_p yra *skylių difuzijos nuotolis*, kuris lygus

$$L_p = \sqrt{D_p \tau_p}. \quad (4.5.10)$$

4.5.2. Perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimas sustabdžius injekciją: rekombinacijos ribota veika

Tarkime, kad laiko momentu $t = 0$ krūvininkų injekcija sustabdoma. Tada krūvininkų koncentracijos pradeda relaksuoti link pusiausvirųjų verčių. T. y. perteklinių krūvininkų koncentracijos Δn ir Δp artėja į nulį. Taip yra dėl krūvininkų rekombinacijos ir dėl krūvininkų difuzijos link elektrodo, pro kurį pertekliniai krūvininkai pašalinami iš sluoksnio. Jeigu pagrindinis relaksacijos mechanizmas yra rekombinacija, tada (4.5.4) lygtyje galima nepaisyti antrojo dėmens (kuris proporcingas difuzijos srovės divergencijai). Pvz., taip yra tada, kai pradinis perteklinių krūvininkų pasiskirstymas yra vienalytis, t. y. pertekliniai krūvininkai tolygiai užpildo visą tiriamąjį sluoksnį. Tada laidumo srovė tapačiai lygi nuliui (nes koncentracijos gradientas lygus nuliui, o elektrinio lauko nėra), todėl nėra krūvininkų nuotėkio pro elektrodus, o srovės divergencija lygi nuliui. Atitinkama lygtis yra

$$\frac{\Delta n}{\tau_n} - \frac{d\Delta n}{dt} = 0. \quad (4.5.11)$$

Šios lygties sprendinys yra eksponentiškai mažėjanti laike funkcija:

$$\Delta n(x, t) = \Delta n(x, 0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right). \quad (4.5.12)$$

Tačiau aptariamuoju krūvininkų injekcijos atveju krūvininkų pasiskirstymas yra nevienalytis. Stacionarioje veikoje tą pasiskirstymą nusako (4.5.7) funkcija. Injekcijos išjungimo momentu galioja (4.5.5) lygybė, t. y. negalioja (4.5.11) lygybė. Šiame mažų laikų etape dar negalima nepaisyti šalutinių krūvininkų difuzijos: pertekliniai krūvininkai vis dar difunduoja tolyn nuo injekcijos plokštumos, tačiau jie jau nėra papildomi. Todėl prie injekcijos plokštumos krūvininkų koncentracija pradeda mažėti ir (kas yra svarbiausia) koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės pasidaro mažiau stati, t. y. krūvininkų koncentracijos mažėjimas didėjant x tampa daug lėtesnis už eksponentinę funkciją (4.5.7) (žr. 4.4 pav.). Todėl tolesniame krūvininkų koncentracijos mažėjimo etape galima nepaisyti krūvininkų difuzijos ir apytiksliai galioja (4.5.12) lygybė.

4.5.3. Difuzijos ribota veika

Jeigu pagrindinė krūvininkų koncentracijų kitimo priežastis yra jų persiskirstymas erdvėje dėl šalutinių perteklinių krūvininkų difuzijos, tada (4.5.4) lygtyje galima nepaisyti pirmojo dėmens (kuris nusako rekombinacijos spartą). Pvz., taip būna tada, kai atstumas nuo injekcijos plokštumos iki elektrodo yra daug mažesnis už šalutinių krūvininkų difuzijos nuotolį L_n . Tada didžioji dalis injektuotų perteklinių šalutinių krūvininkų pasiekia elektrodą. Jeigu tas elektrodas yra ominis, tada jį pasiekę pertekliniai krūvininkai praktiškai akimirksniu rekombinuoja (kitai sakant, „nuteka“ į elektrodą). Vietoj ominio elektrodo gali būti ir pn sandūra, kurios vaidmuo yra toks pats kaip ominio elektrodo (t. y. perteklinių krūvininkų pašalinimas). Pvz., jeigu tiriamasis sluoksnis yra dvipolio npn tranzistoriaus bazė, tada injekcijos plokštuma atitinka emiterio-bazės sandūros nuskurdintojo sluoksnio kraštą iš bazės pusės, o vietoj minėtojo ominio elektrodo yra bazės-kolektoriaus sandūra, kurios nuskurdintajame sluoksnyje egzistuojantis elektrinis laukas ekstraguoja perteklinius elektronus į kolektorių. Tada difuzijos srovė būna daug didesnė, negu tada kai atstumas iki elektrodo yra didesnis už L_n . Matematiškai šis difuzijos srovės sustiprėjimas išplaukia iš to, kad šiuo atveju (kai prie elektrodo nuolat palaikoma nulinė perteklinių krūvininkų koncentracija) vietoj kraštinės sąlygos (4.5.6) reikia naudoti kraštinę sąlygą

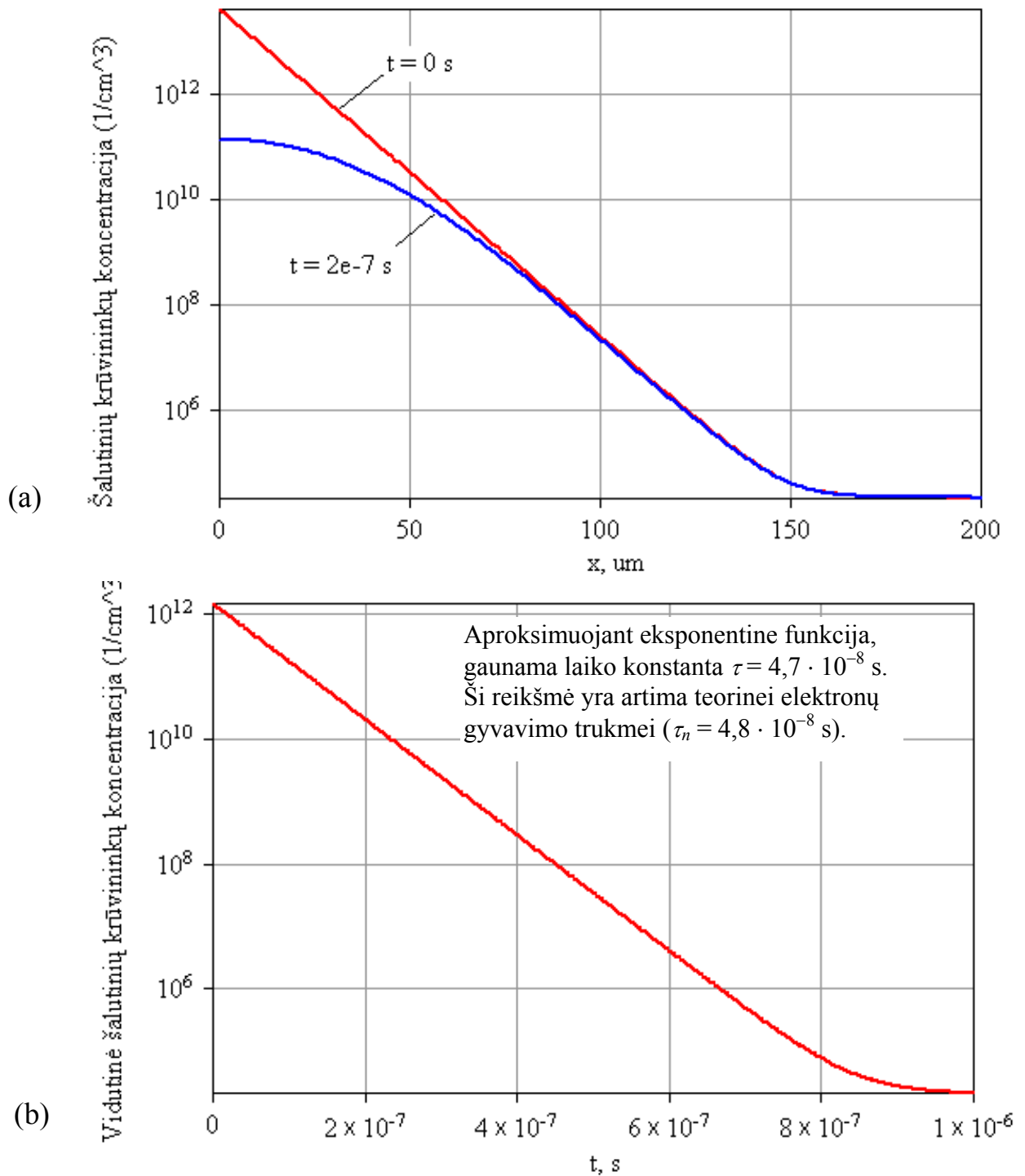
$$\Delta n(w_p) = 0, \quad (4.5.13)$$

kur w_p yra elektrodo koordinatė, t. y. p puslaidininkio sluoksnio storis. Tada, galiojant sąlygai

$$w_p \ll L_n, \quad (4.5.14)$$

eksponentines funkcijas, kurios įeina į bendrojo (4.5.5) lygties sprendinio išraišką (4.5.5a), galima aproksimuoti tiesinėmis funkcijomis (tam reikia pasinaudoti apytiksle lygybe $\exp(x) \approx 1 + x$, kai $x \ll 1$). Vadinasi, šiuo atveju (4.5.5) lygties sprendinys, kuris atitinka kraštinę sąlygą (4.5.13), yra lygus

Elektronų koncentracija sustabdžius jų injekciją į p puslaidininkį. Injekcijos srovė $0,1 \text{ A / cm}^2$, $\mu_n = 400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $p = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $m_n = 0,5m_0$, $T = 300 \text{ K}$, $v_{th,n} = 1,5 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$, $N_t = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $\sigma = 7 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$, $\tau_n = 4,8 \cdot 10^{-8} \text{ s}$



4.4 pav. Perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimas sustabdžius injekciją, kai injekcijos sąlygos atitinka rekombinacijos ribotą veiką. (a) Perteklinių krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės esant nuolatinei šalutinių krūvininkų injekcijai ir praėjus tam tikram laikui po injekcijos sustabdymo. (b) Vidutinės perteklinių krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo laiko sustabdžius injekciją

$$\Delta n(x) = \Delta n(0) \left(1 - \frac{x}{w_p} \right). \quad (4.5.15)$$

Šiuo atveju perteklinių krūvininkų koncentracijos gradientas yra vienodas visame sluoksnio tūryje ir lygus

$$\frac{d\Delta n}{dx} = -\frac{\Delta n(0)}{w_p}. \quad (4.5.16)$$

Palyginimas: kai difuzijos nuotolis yra daug mažesnis už w_p , tada injekcijos išjungimo momentu perteklinių krūvininkų koncentracija atitinka (4.5.7) lygybę, iš kurios išplaukia, kad

$$\frac{d\Delta n}{dx} = -\frac{\Delta n(0)}{L_n} \exp\left(-\frac{x}{L_n}\right); \quad (4.5.17)$$

Kadangi aptariamoju atveju $w_p \ll L_n$, tai pastarojo reiškinio modulis yra daug mažesnis už $\Delta n(0) / w_p$. Vadinasi, kai galioja (4.5.14) nelygybė, tada difuzijos srovė (kuri yra proporcinga krūvininkų koncentracijos išvestinei x atžvilgiu), yra daug didesnė negu tada, kai galioja priešinga nelygybė (t. y. kai $w_p \gg L_n$).

Taigi, kai atstumas nuo paviršiaus, pro kurį injektuojami šalutiniai krūvininkai, iki ominio elektrodo (arba pn sandūros, kuri ekstraguoja perteklinius krūvininkus) yra daug mažesnis už šalutinių krūvininkų difuzijos nuotolį, tada (4.5.4) lygtyje galima nepaisyti pirmojo dėmens ir ta lygtis virsta šia lygtimi:

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2}. \quad (4.5.18)$$

Tai yra vadinamoji **difuzijos lygtis**. Šiuo atveju perteklinių krūvininkų koncentracijos kinta erdvėje ir laike tik dėl difuzijos ir dėl jų pašalinimo per omini kontaktą. Tada perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimo laike spartą lemia vidutinis laikas, per kurį perteklinis krūvininkas pasiekia elektrodą. Tą laiką vadinsime **difuzijos trukme**. Difuzijos vyksmo analizė rodo, kad vidutinis laikas, per kurį difunduojantis elektronas nueina atstumą w , yra lygus

$$\tau(w) = \frac{w^2}{D_n}, \quad (4.5.19)$$

t. y. sąryšis tarp $\tau(w)$ ir w yra toks pats kaip sąryšis tarp τ_n ir L_n (žr. (4.5.8)). Kadangi injektuoti elektronai yra skirtingais atstumais nuo elektrodo, tai skirtingi elektronai tą atstumą nueis per skirtingą laiką. Šiuo atveju vidutinė difuzijos trukmė τ_{dif} randama apskaičiavus visų τ verčių svertinį vidurkį, naudojant elektronų koncentraciją $n(x)$ kaip svorinį daugiklį (čia $w = w_p - x$). T. y.

$$\tau_{\text{dif}} = \frac{1}{Q_n(0)} \int_0^{w_p} \Delta n(x, 0) \tau(w_p - x) dx; \quad (4.5.20)$$

čia atsižvelgta į tai, kad atstumas w nuo taško x iki ominio elektrodo yra lygus $w_p - x$. Daliklis Q_n yra perteklinių elektronų koncentracijos integralas x atžvilgiu nuo 0 iki w_p (t. y. perteklinių krūvininkų skaičius ploto vienetui):

$$Q_n(t) = \int_0^{w_p} \Delta n(x, t) dx. \quad (4.5.21)$$

Kadangi elektronų pradinis pasiskirstymas erdvėje yra apytiksliai tiesinis, iš (4.5.20) ir (4.5.19) formulių išplaukia

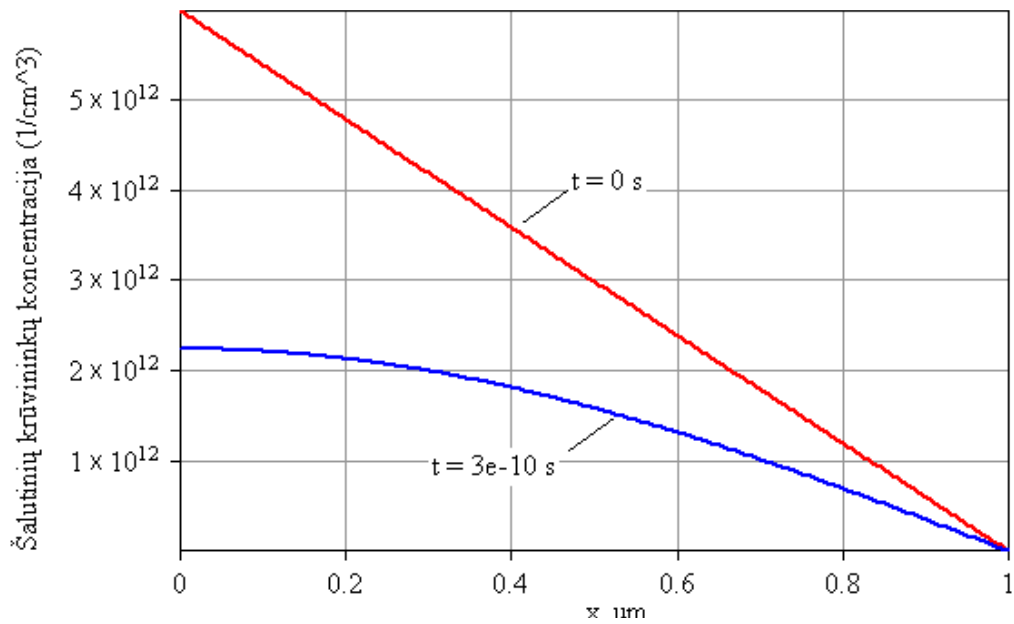
$$\tau_{\text{dif}} = \frac{w_p^2}{2D_n}. \quad (4.5.22)$$

Šiuo atveju pilnutinis perteklinių krūvininkų skaičius mažėja laike apytiksliai eksponentiškai, su laiko konstanta τ_{dif} . T. y.

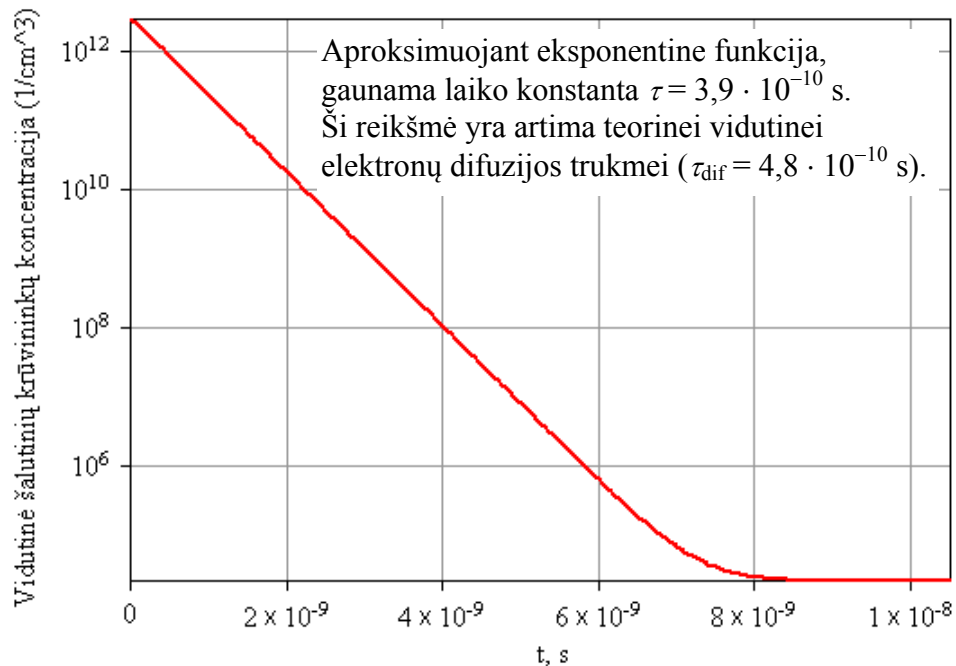
$$Q_n(t) \approx Q_n(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_{\text{dif}}}\right). \quad (4.5.23)$$

Šis eksponentinis mažėjimas yra akivaizdus 4.5 pav.

Elektronų koncentracija sustabdžius jų injekciją į p. pusl. Injekcijos srovė $0,1 \text{ A / cm}^2$, $\mu_n = 400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $p = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $m_n = 0,5m_0$, $T = 300 \text{ K}$, $v_{th,n} = 1,5 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$, $N_t = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $\sigma = 7 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$, $\tau_{dif} = 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ s}$



(a)



(b)

4.5 pav. Perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimas sustabdžius injekciją, kai injekcijos sąlygos atitinka difuzijos ribotą veiką. (a) Krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės esant nuolatinei šalutinių krūvininkų injekcijai ir praėjus tam tikram laikui po injekcijos sustabdymo. (b) Vidutinė perteklinių krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo laiko sustabdžius injekciją

4.6. Sluoksnio poliarizacija dėl krūvininkų persiskirstymo, esant prilipimo lygmenims

Tarkime, prie sluoksnio, kuris yra termodinaminėje pusiausvyroje, pradiniu laiko momentu prijungiama nuolatinė įtampa. Dėl atsiradusio elektrinio lauko prasidės laisvųjų krūvininkų persiskirstymas. Jeigu abu sluoksnio kontaktai yra užtvariniai, tada po tam tikro laiko nusistovės stacionari būseną, kai visuose sluoksnio taškuose dreifo srovę kompensuos difuzijos srovė. Šioje būsenoje prie vieno sluoksnio krašto egzistuoja perteklinis teigiamas krūvis, o prie kito – perteklinis neigiamas krūvis, t. y. sluoksnis poliarizuojasi. Todėl elektros srovę, kuri teka išorinėje grandinėje įjungus arba išjungus išorinę įtampą, vadinsime atitinkamai **poliarizacine srove** arba **depolarizacine srove**. Ši elektros srovė nuolat mažėja nuo pradinės (didžiausios) vertės iki nulio. Aptarsime krūvininkų koncentracijos ir sluoksnio srovės priklausomybę nuo laiko šiomis sąlygomis. Kad analizė būtų paprastesnė, laikysime, kad krūvininkų koncentracijos pokytis neturi žymios įtakos elektrinio lauko stipriui, todėl galima teigti, kad elektrinis laukas

yra konstanta (t. y. nepriklauso nei nuo laiko, nei nuo koordinatės). Ši prielaida tinka, kai laisvųjų krūvininkų koncentracija sluoksnyje yra palyginti maža.

Visų pirma aptarsime paprasčiausią atvejį, kai sluoksnyje yra tik vienos rūšies krūvininkai (skylės) ir pastovi vienos rūšies jonų (akceptorijų) koncentracija. Laikysime, kad visi akceptoriai yra jonizuoti. Kadangi sluoksnio pilnutinis elektros krūvis lygus nuliui, tai akceptorijų jonų skaičius lygus skylių skaičiui. Kaip minėta, stacionarioje būsenoje dreifo srovė lygi difuzijos srovei, t. y.

$$ep\mu E = eD \frac{dp}{dx}, \quad (4.6.1)$$

čia p yra skylių koncentracija, μ yra jų judris, E yra elektrinio lauko stipris, o D yra difuzijos koeficientas. Laikysime, kad difuzijos koeficientas ir judris susiję vienas su kitu Einšteino sąryšiu:

$$D = \frac{kT}{e} \mu. \quad (4.6.2)$$

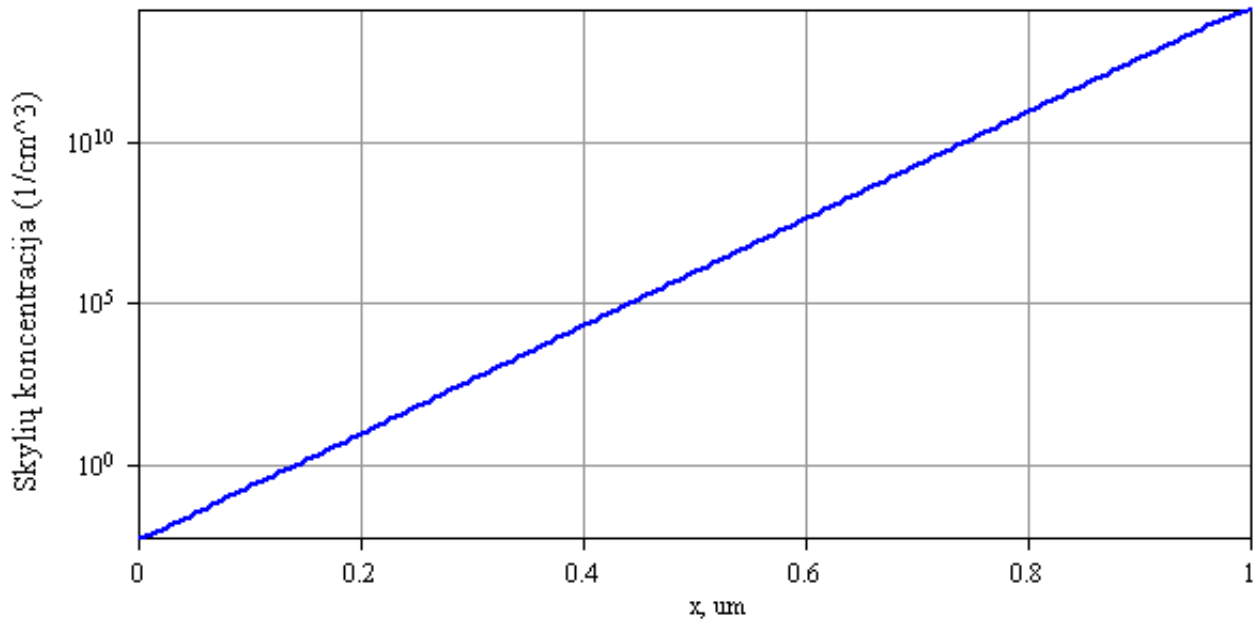
Tada (4.6.1) lygtį galima užrašyti taip:

$$\frac{dp}{dx} - \frac{eE}{kT} p = 0. \quad (4.6.3)$$

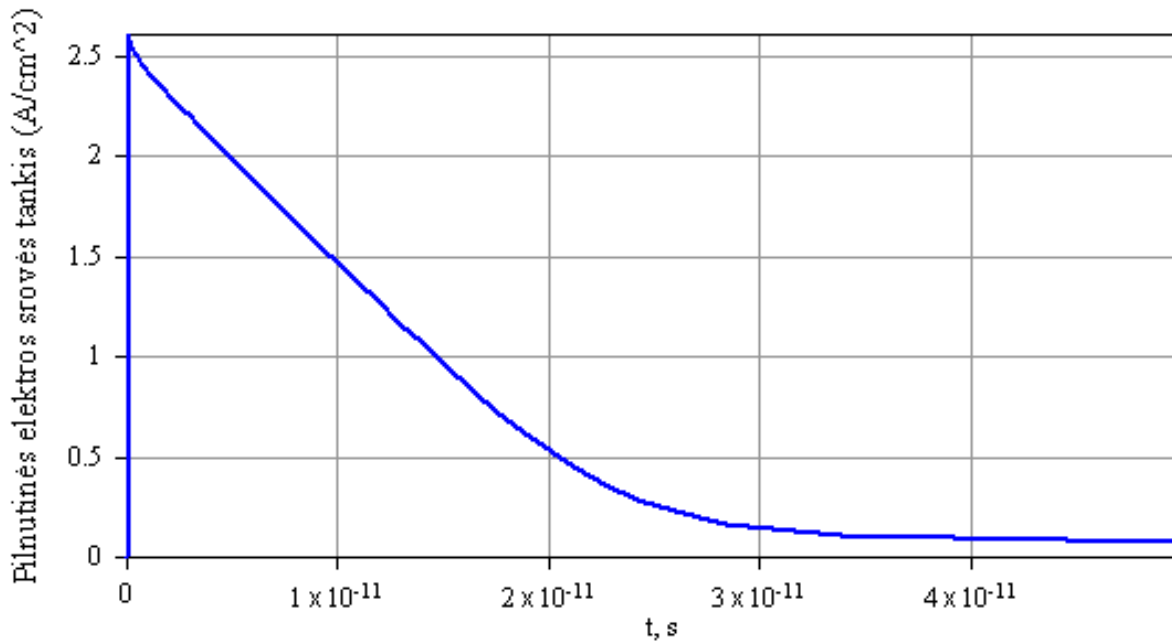
Kadangi pagal prielaidą E yra konstanta, tai (4.6.3) lygties sprendinys yra eksponentinė funkcija

$$p = p_0 \exp\left(\frac{eE}{kT} x\right). \quad (4.6.4)$$

T. y. stacionarioje būsenoje skylių koncentracija eksponentiškai didėja nuo vieno sluoksnio krašto link kito, elektrinio lauko kryptimi (žr. 4.6 pav.).



4.6 pav. Skylių koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės silpnai legiruotame p puslaidininkyje su prilipimo centrais, kai prie sluoksnio prijungta 1 V įtampa, o sluoksnio abu kontaktai yra užtvariniai. Sistemos parametrai: sluoksnio storis $w = 1 \mu\text{m}$, jonizuotų akceptorijų (prilipimo centrų) koncentracija $N_t = 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, pagavimo skerspjūvis $\sigma = 10^{-10} \text{ cm}^2$, skylių išlaisvinimo darbas $\Delta E_p = 0,4 \text{ eV}$, temperatūra $T = 300 \text{ K}$



4.7 pav. Poliarizacinės srovės tankio pradinė priklausomybė nuo laiko, kai prie sluoksnio, kurio parametrai pateikti 4.6 pav. parašėje, prijungiama 1 V įtampa (pradinė sluoksnio būseną atitinka termodinaminę pusiausvyrą)

4.7 pav. pateikti sluoksnio poliarizacinės elektros srovės priklausomybės nuo laiko skaitinio modeliavimo rezultatai šiomis sąlygomis. Matome, kad srovės priklausomybėje nuo laiko egzistuoja tiesinė sritis:

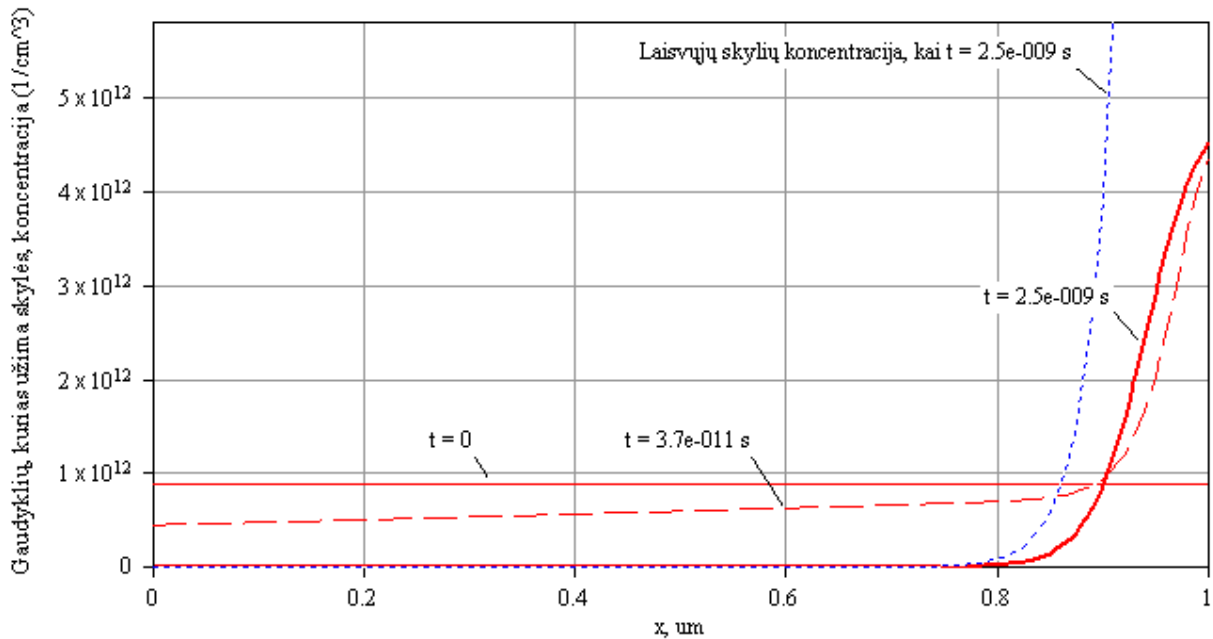
$$I(t) = I_0 \left(1 - \frac{t}{\tau_{dr}} \right). \quad (4.6.5)$$

Čia τ_{dr} apytiksliai lygus skylės dreifo trukmei nuo vieno sluoksnio krašto iki kito, t. y.

$$\tau_{dr} = \frac{w}{v_{dr}} = \frac{w}{\mu E}, \quad (4.6.6)$$

kur $v_{dr} = \mu E$ yra skylių dreifo greitis, o w yra sluoksnio storis. Tokią pradinę srovės priklausomybę nuo laiko galima suprasti, atsižvelgus į tai, kad pradinėje poliarizacijos vyksmo stadijoje didžiojoje sluoksnio dalyje skylių dreifo srovė yra daug didesnė už difuzijos srovę, t. y. didžioji skylių dalis juda pastoviu greičiu lauko kryptimi ir „sustoja“ pasiekusios dešiniąjį sluoksnio kraštą. Kadangi šiame judančių skylių rinkinyje skylių koncentracija yra apytiksliai pastovi, tai tų skylių skaičius tiesiškai mažėja laike, todėl ir pilnutinė srovė tiesiškai mažėja (žr. 4.7 pav.). Tačiau vėliau srovės mažėjimas tampa netiesinis, nes skylių koncentracija didžiojoje sluoksnio dalyje pasidaro jau nebe pastovi ir pradeda labiau pasireikšti difuzija, kurios kryptis priešinga dreifui.

Dabar išsiaiškinsime, kaip srovės priklausomybė nuo laiko pasikeičia esant krūvininkų pagavimui į lokalizacijos centrus. Nagrinėsime atvejį, kai lokalizacijos centrai yra vadinamieji „prilipimo lygmenys“. Taip vadinamos diskrečios energinės būsenos puslaidininkio draustinėje juostoje, iš kurių krūvininkas gali tik grįžti tą pačią leistinių energijų juostą, kurioje jis buvo iki pagavimo. Pvz., jeigu nagrinėjami skylių prilipimo lygmenys, tada, lyginant su rekombinacijos centro energijos lygmens diagrama, kuri pavaizduota 4.2 pav., nėra šuolių A ir B, o yra tik šuoliai C ir D (šuolis C atitinka skylės pagavimą į lygmenį E_c , o šuolis D atitinka skylės išlaisvinimą). Anksčiau aprašytos sistemos (kurią atitinka 4.6 pav. ir 4.7 pav.) akceptorinių lygmenys realiaame p puslaidininkyje elgiasi kaip prilipimo lygmenys. Vadinasi, labiau realistiškas modelis yra toks, kai ne visi akceptoriniai yra jonizuoti, o jonizuotų akceptorinių koncentracija priklauso nuo pusiausvyros tarp krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo vyksmų. Tarkime, kad iš pradžių yra termodinaminė pusiausvyra, t. y. abiejų kryptų šuolių spartos yra vienodos. Laiko momentu $t = 0$ sluoksnio kairiojo krašto potencialas šuoliškai padidėja 1 V. Todėl skylės persiskirsto iš kairiojo krašto į dešiniąjį. Sumažėjus skylių koncentracijai prie kairiojo sluoksnio krašto, sutrikdoma skylių pagavimo ir išlaisvinimo vyksmų pusiausvyrą prie to krašto: išlaisvinimo sparta tampa daug didesnė negu pagavimo sparta. Šiame pavyzdyje skylių prilipimo lygmenys yra palyginti gilūs (skylės išlaisvinimo darbas yra 0,4 eV), o skylių judris yra palyginti didelis ($400 \text{ cm}^2/\text{V/s}$), todėl skylių dreifas yra daug greitesnis vyksmas negu skylių išlaisvinimas. Todėl pradinėje poliarizacijos stadijoje pagrindinis vyksmas yra skylių dreifas nuo kairiojo krašto link dešiniojo. Atitinkamai srovės priklausomybė nuo laiko yra tiesinė (žr. (4.6.5) formulę ir 4.7 pav.). Paskui, kai



4.8 pav. Gaudyklių, kurias užima skylės (t. y. neutralių akceptorinių atomų) koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės išorinės įtampos įjungimo momentu ($t = 0$), tarpiniu momentu ($t = 3,7 \cdot 10^{-11}$ s) ir nusistovėjus dinaminei pusiausvyrai ($t = 2,5 \cdot 10^{-9}$ s). Taškinė linija rodo laisvųjų skylių koncentraciją nusistovėjus dinaminei pusiausvyrai visame sluoksnyje nusistovi apytikslė pusiausvyra tarp dreifo ir difuzijos, pradeda pasireikšti išlaisvinamų skylių srautas: skylės palaipsniui išlaisvinamos iš gaudyklių prie kairiojo krašto ir dreifuoja link dešiniojo krašto, kur jų dalis yra pagaunamos į gaudyklės, o dalis lieka laisvos (žr. 4.8 pav.). Kadangi pagal prielaidą vidutinis laikas iki skylės išlaisvinimo yra daug didesnis negu skylės lėkio trukmė, tai šiame etape pilnutinės srovės priklausomybė nuo laiko yra tokia pati kaip išlaisvinimo spartos priklausomybė nuo laiko kairiajame sluoksnio krašte, t. y.

$$I(t) \sim a_p p_t |_{x=0}. \quad (4.6.7)$$

Čia a_p yra skylių išlaisvinimo koeficientas, kurio bendroji išraiška yra (4.4.2b), o p_t yra pagautų skylių koncentracija, t. y. gaudyklių, kurių neužima elektronai, koncentracija:

$$p_t \equiv N_t - n_t. \quad (4.6.8)$$

Iš (4.4.4) ir (4.4.1b) lygčių išplaukia, kad tuo atveju, kai $R_n = 0$, o laisvų skylių koncentracija yra praktiškai nulinė,

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = R_p = -a_p p_t. \quad (4.6.9)$$

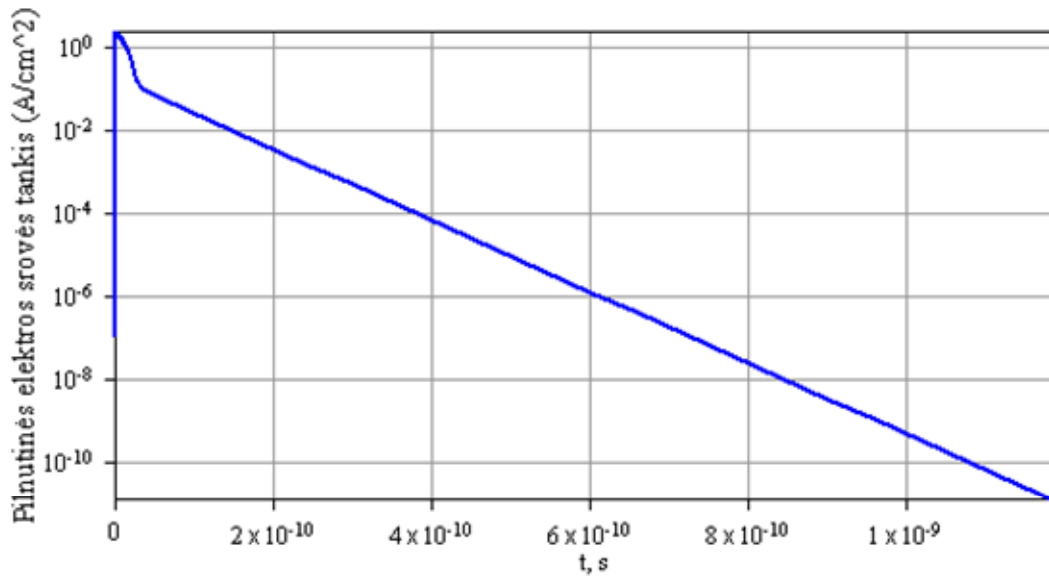
Vadinasi, prie sluoksnio kairiojo krašto pagautų skylių koncentracija eksponentiškai mažėja laike:

$$p_t |_{x=0} \sim \exp(-a_p t). \quad (4.6.10)$$

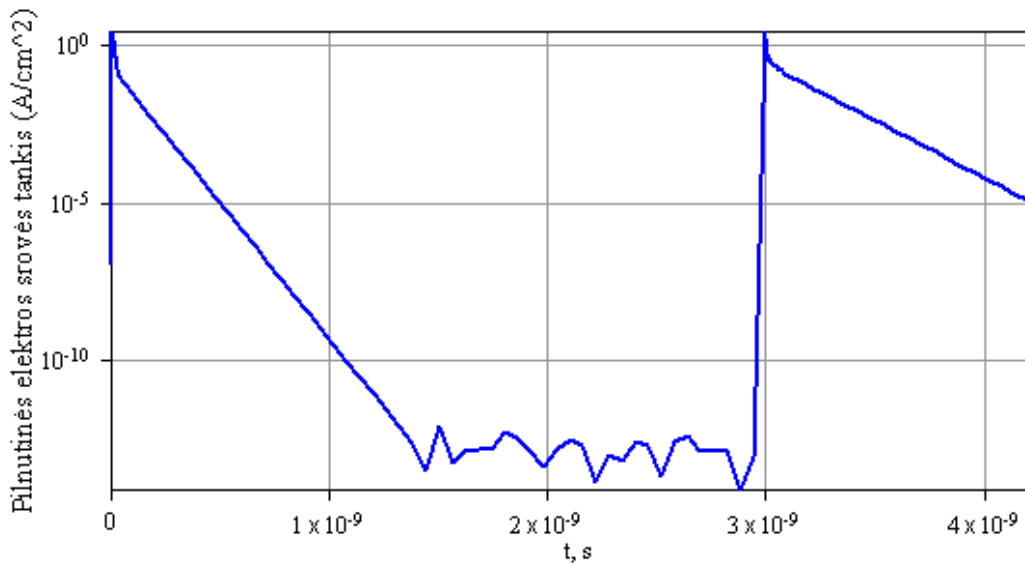
Todėl tokiu pačiu dėsniu mažėja ir elektros srovė (žr. (4.6.7) formulę ir 4.9 pav.).

Dabar tarkime, kad po tam tikro laiko išorinė įtampa išjungama. 4.10 pav. matome, kad srovės mažėjimas laike išjungus įtampą taip pat turi eksponentinę sritį. Tačiau to mažėjimo sparta yra kitokia negu įjungus įtampą. Tai rodo, kad skylių persiskirstymo mechanizmas išjungus įtampą yra kitoks negu įjungus įtampą. Tačiau šiuo atveju to mažėjimo spartos neįmanoma taip paprastai susieti su gaudyklių parametrais kaip ankstesniu atveju (įjungus įtampą). Taip yra todėl, kad išjungus įtampą srovės stiprį lemia skylių difuzija iš sluoksnio dešiniojo krašto. O įjungus įtampą, pagrindinis veiksnys yra skylių išlaisvinimas. 4.13 pav. matome, kad išjungus įtampą difuzijos srovė yra daug didesnė už dreifo srovę. Įjungus įtampą, didžiojoje sluoksnio dalyje yra atvirkščiai: skylės pereina iš sluoksnio kairiojo krašto į dešinįjį dėl jas veikiančio elektrinio lauko (žr. 4.12 pav.). Kad, išjungus įtampą, krūvininkų difuzijos vaidmuo yra daug didesnis negu pagavimo ir išlaisvinimo vaidmuo, galima įsitikinti, pakartojus modeliavimą su kitokia judrio verte. Pvz., 4.11 pav. pavaizduota srovės priklausomybė nuo laiko naudojant dukart didesnę skylių judrį. Matome, kad srovės laikinė priklausomybė įjungus įtampą beveik nepasikeičia, o srovės priklausomybė išjungus įtampą pasikeičia žymiai: laiko konstanta sumažėja beveik du kartus. Taip yra todėl, kad, padidinus judrį, difuzijos koeficientas padidėja tiek pat kartų (dėl Einšteino sąryšio).

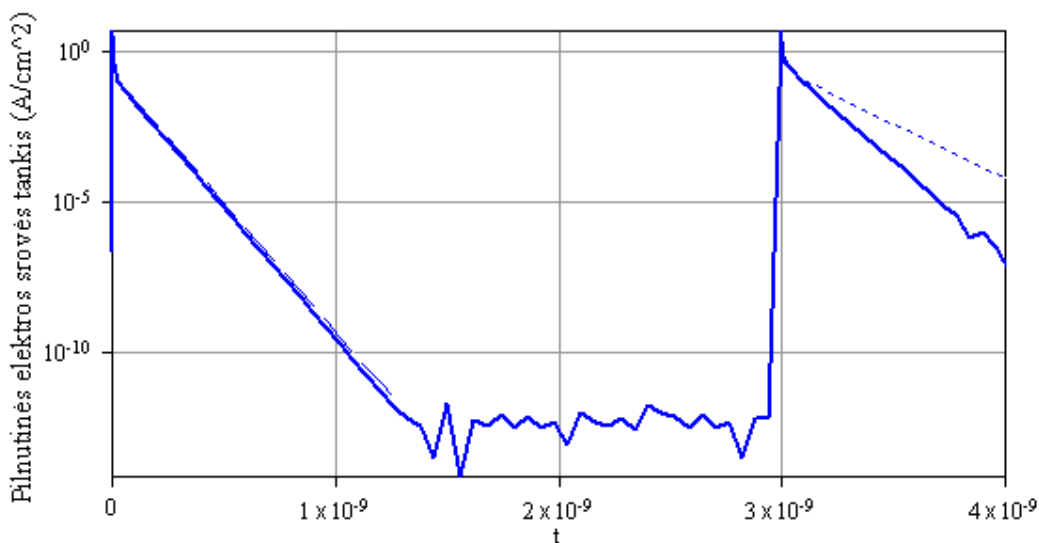
Jeigu sluoksnyje yra kelių tipų skylių gaudyklės, kurių išlaisvinimo koeficientai yra labai skirtingi, tada srovės priklausomybė nuo laiko įjungus įtampą turi kelias eksponentines sritis (žr. 4.14 pav.).



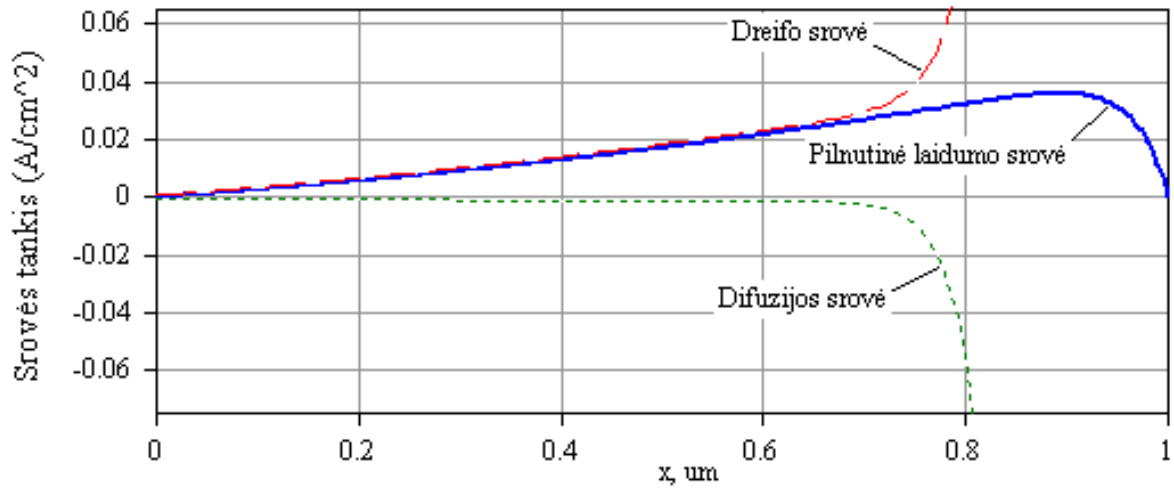
4.9 pav. Poliarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko vėlesniame etape (kai srovę lemia skylių išlaisvinimas)



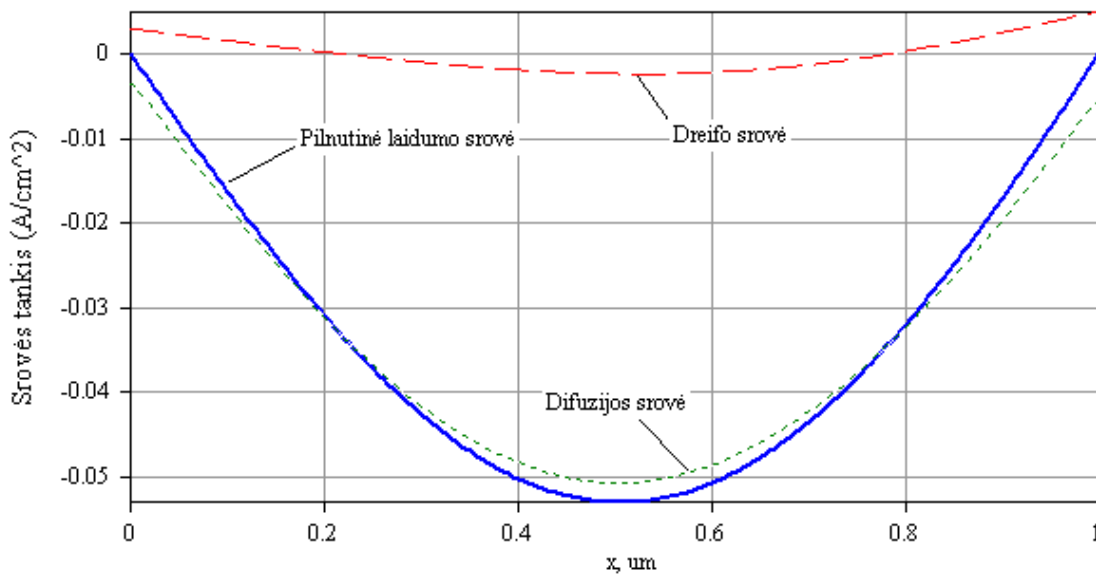
4.10 pav. Poliarizacinės ir depoliarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko (įtampa prijungiama laiko momentu $t = 0$, o išjungiama laiko momentu $t = 3 \cdot 10^{-9}$ s)



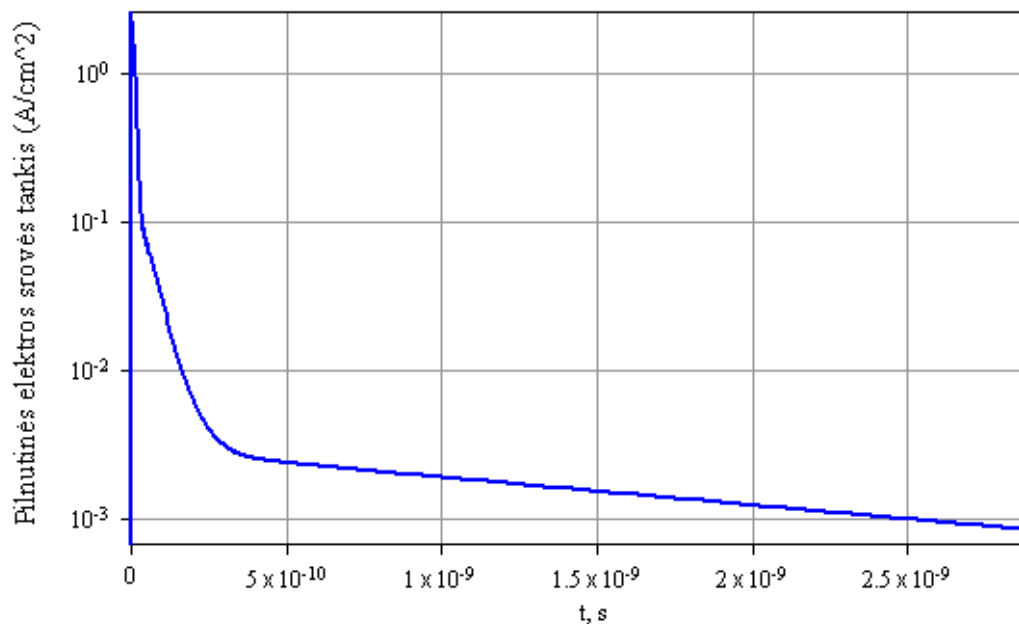
4.11 pav. Poliarizacinės ir depoliarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko, kai skylių judris yra du kartus didesnis negu 4.10 pav. Punktyrinė ir taškinė linijos atitinka tiesinio aproksimavimo rezultatus naudojant 4.10 pav. duomenis



4.12 pav. Skylių laidumo srovė ir jos komponentės (dreifo ir difuzijos srovės) polarizacijos metu (laiko momentu $t = 1,2 \cdot 10^{-10}$ s)



4.13 pav. Skylių laidumo srovė ir jos komponentės (dreifo ir difuzijos srovės) depolarizacijos metu (praėjus $2,4 \cdot 10^{-10}$ s nuo įtampos išjungimo momento)



4.14 pav. Polarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko, kai kartu su skylių prilipimo centrais, kurių parametrai nurodyti 4.6 pav. paraštėje, egzistuoja skylių prilipimo centrai, kurių koncentracija 10^{12} cm^{-3} , skylių išlaisvinimo darbas 0,5 eV, o pagavimo skerspjūvis 10^{-10} cm^2

4.7. Kraštinės sąlygos sprendžiant krūvininkų kinetikos lygtis

Tolydumo lygtys (4.2.4a,b) kartu su bendrosiomis elektronų ir skylių laidumo srovės tankio išraiškomis

$$j_n = en\mu_n\mathcal{E} + eD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (4.7.1a)$$

$$j_p = ep\mu_p\mathcal{E} - eD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (4.7.1b)$$

bei Puasono lygtimi

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} = \frac{\rho(x,t)}{\epsilon_0 \epsilon} \quad (4.7.2)$$

sudaro diferencialinių lygčių sistemą dalinėmis išvestinėmis, kurios sprendinys nusako krūvininkų koncentracijas visuose sistemos taškuose visais laiko momentais. Kad vienareikšmiškai išspręsti šią lygčių sistemą, reikia apibrėžti jos kraštines sąlygas, t. y. krūvininkų koncentracijų arba laidumo srovių vertes ant skiriamųjų paviršių. Tos kraštinės sąlygos priklauso nuo skiriamųjų paviršių savybių. Paprasčiausias atvejis yra užtvarinis kontaktas. Tada kraštinė sąlyga teigia, kad duotosios rūšies krūvininkų laidumo srovė duotajame paviršiniame mazge yra lygi nuliui. Toliau yra aptariami sudėtingesni atvejai.

4.7.1. „Skaidrūs“ skiriamieji paviršiai

Kai krūvininkas pereina iš vienos medžiagos į kitą, pasikeičia to krūvininko judris bei difuzijos koeficientas, kurie įeina į laidumo srovės išraišką (4.7.1a,b). Be to, jeigu abiejų medžiagų laidumo tipas yra skirtingas (vienoje medžiagoje – skylinis, o kitoje – elektroninis), tada pasikeičia ir krūvininko krūvio ženklas. Pastaruoju atveju keičiasi ir krūvininko judėjimo kryptis. Tada krūvininkų pereinimą per skiriamąjį paviršių galima įsivaizduoti kaip elektronų ir skylių (atėjusių iš skirtingų pusių) rekombinaciją tame paviršiuje arba kaip elektronų ir skylių porų paviršinę generaciją, po kurios elektronas ir skylė atsiduria skirtingose to paviršiaus pusėse ir nutolsta nuo jo. Jeigu neelektrostatinės kilmės reiškiniai tame paviršiuje (tokie kaip pagavimas į paviršines gaudykles arba injekcija per potencialo barjerą) neturi žymios įtakos pilnutinei srovei, tada tokį paviršių vadinsime „skaidriu“ paviršiumi. Tokį skiriamąjį paviršių galima modeliuoti naudojant laidumo srovės tolydumo sąlygas, kurios teigia, kad laidumo srovė ir jos išvestinė koordinatės atžvilgiu turi būti tolydžios:

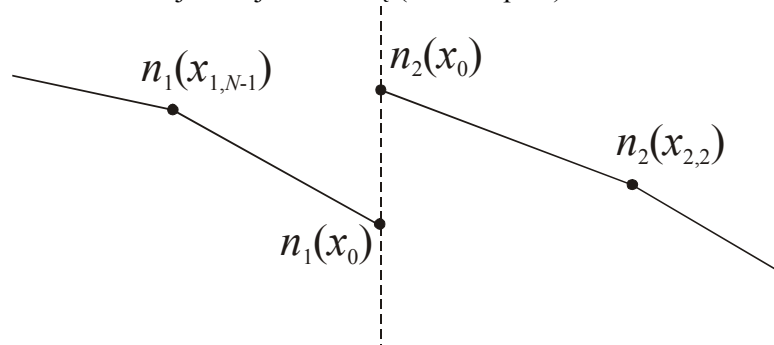
$$j_1(x_0) = j_2(x_0), \quad (4.7.3a)$$

$$\left. \frac{\partial j_1}{\partial x} \right|_{x_0} = \left. \frac{\partial j_2}{\partial x} \right|_{x_0}, \quad (4.7.3b)$$

čia x_0 yra skiriamąjo paviršiaus x koordinatė, o apatinis indeksas prie srovės tankio žymens nusako sluoksnio numerį. Užrašant sluoksnių mazgų koordinačių žymenis, naudosime du indeksus: pirmasis indeksas nusako sluoksnio numerį, o antrasis indeksas (po kablelio) nusako to sluoksnio mazgo numerį. Pvz., $x_{1,N-1}$ atitinka pirmojo sluoksnio mazgą, kurio numeris $N-1$. N yra pilnutinis pirmojo sluoksnio mazgų skaičius. Aišku, kad $x_{1,N} = x_{2,1} = x_0$. (4.7.3a) sąlygą galima užrašyti šitaip:

$$en_1(x_0)\mu_1\mathcal{E}(x_0) + eD_1 \left. \frac{\partial n_1}{\partial x} \right|_{x_0} = en_2(x_0)\mu_2\mathcal{E}(x_0) + eD_2 \left. \frac{\partial n_2}{\partial x} \right|_{x_0}, \quad (4.7.4)$$

čia indeksai prie n , μ ir D nusako sluoksnio numerį. Kadangi krūvininkų judriai ir difuzijos koeficientai skirtinguose sluoksniuose yra skirtingi, tai iš (4.7.4) išplaukia, kad krūvininkų koncentracija ir jos gradientas ant skiriamąjo paviršiaus bendruoju atveju turi trūkį (žr. 4.15 pav.).



4.15 pav. Laisvųjų krūvininkų koncentracijos trūkis ant „skaidraus“ skiriamąjo paviršiaus

Praktinis metodas, kuriuo galima užtikrinti, kad galiotų abi tolydumo sąlygos (4.7.3a,b), yra tiesinio aproksimavimo metodas. Išvestinės, kurios įeina į (4.7.3b) sąlygą, yra apskaičiuojamos baigtinių skirtumų metodu. Tai yra vadinamosios „vienpusės“ išvestinės, t. y. jos apibrėžiamos šitaip:

$$\left. \frac{\partial j_1}{\partial x} \right|_{x_0} \approx \frac{j_1(x_0) - j_1(x_{1,N-1})}{x_0 - x_{1,N-1}}, \quad (4.7.5a)$$

$$\left. \frac{\partial j_2}{\partial x} \right|_{x_0} \approx \frac{j_2(x_{2,2}) - j_2(x_0)}{x_{2,2} - x_0}. \quad (4.7.5b)$$

Taikant tiesinį aproksimavimą, duotųjų krūvininkų laidumo srovės priklausomybė nuo x koordinatėlių intervale nuo $x_{1,N-1}$ iki $x_{2,2}$ yra aproksimuojama tiese:

$$j(x) = A + Bx. \quad (4.7.6)$$

Šiai aproksimacijai naudojami keturi taškai, kuriuos atitinka srovės vertės $j_1(x_{1,N-1})$, $j_1(x_0)$, $j_2(x_0)$ ir $j_2(x_{2,2})$. Dviejų vidurinių taškų x koordinatės sutampa (x_0). Todėl ir atitinkamos dvi srovės vertės, apskaičiuotos pagal (4.7.6), taip pat sutampa. Be to, iš tiesės lygties (4.7.6) išplaukia, kad ir dvi išvestinės (4.7.5a,b) taip pat sutampa ir yra lygios tiesės krypties koeficientui A . Taigi, yra tenkinamos abi tolydumo sąlygos (4.7.3a,b).

4.7.2. Paviršinės gaudyklės

Paviršinės gaudyklės atsiranda dėl paviršinių lokaliųjų būsenų, kurias atitinka energijos lygmenys, esantys puslaidininkio draustinėje juostoje. Tų būsenų paviršinių tankių (skaičių ploto vienetui) žymėsime N_s , o būsenų, kurias užima elektronai, paviršinių tankių žymėsime n_s . Tada elektronų ir skylių pagavimo į paviršines būsenas spartą galima išreikšti formulėmis, kurios analogiškos atitinkamų tūrinės rekombinacijos spartų išraiškoms (4.4.1a,b):

$$S_n = \nu_{th,n} \sigma_n n (N_s - n_s) - a_n n_s, \quad (4.7.7a)$$

$$S_p = \nu_{th,p} \sigma_p p n_s - a_p (N_s - n_s), \quad (4.7.7b)$$

čia S_n ir S_p yra atitinkamai elektronų ir skylių *paviršinės rekombinacijos spartos*. Elektronų ir skylių išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių koeficientai a_n ir a_p yra susiję su atitinkamais pagavimo skerspjūviais σ_n ir σ_p tais pačiais sąryšiais, kaip išlaisvinimo iš tūrinių gaudyklių koeficientai (žr. (4.4.2a,b)). Kadangi dydžiai N_s ir n_s , kurie įeina į (4.7.7a,b) formules, reiškia skaičių *ploto vienetui*, tai paviršinės rekombinacijos spartos S_n ir S_p reiškia rekombinacijos įvykių skaičių ploto vienetui per laiko vienetą. Taigi, šių spartų dimensija yra tokia pati kaip srauto tankio (taip yra vadinamas dalelių skaičius, kuris pereina pro vienetinio ploto paviršiu per laiko vienetą). Tai rodo, kad krūvininkų kinetikos skaitinio modeliavimo metu paviršinė rekombinacija pasireiškia kaip neelektrostatinės kilmės srovė, kuri egzistuoja tik viename – paviršiniame – duotojo sluoksnio mazge. Vadinasi, pvz., išreiškiant pilnutinę elektronų srovę sluoksnio pirmajame mazge (kuris atitinka to sluoksnio kairįjį kraštą), reikia prie elektrostatinės srovės, kurią nusako (4.7.1a,b) formulės, pridėti srovę

$$j_{ns} = eS_n, \quad (4.7.8a)$$

$$j_{ps} = -eS_p. \quad (4.7.8b)$$

Paviršinių gaudyklių įtaka tūrinėms krūvininkų koncentracijoms glūdi antrajame tolydumo lygties (4.2.4a,b) dėmenyje, kuris proporcingas srovės tankio divergencijai. Taip yra todėl, kad, apskaičiuojant srovės tankio išvestinę koordinatės atžvilgiu baigtinių skirtumų metodu (pvz., pagal (4.7.5a) formulę), reikia vartoti pilnutinę laidumo srovę, į kurią įeina ir neelektrostatinės kilmės dėmuo (4.7.8a,b). Palyginimas: tūrinių gaudyklių įtaka atsispindi pirmajame tolydumo lygties (4.2.4a,b) dėmenyje, kuris proporcingas perteklinių krūvininkų koncentracijai.

4.7.3. Ominiai kontaktai

Ominių kontaktų ypatybė yra ta, kad prie ominių kontaktų egzistuoja labai didelė koncentracija paviršinių rekombinacijos centrų, kurių pagavimo skerspjūvis yra palyginti didelis. Nors tų gaudyklių įtaką galima modeliuoti remiantis paviršinės rekombinacijos spartos išraiška (4.7.7a,b), tačiau skaičiavimai tampa daug paprastesni pasinaudojus tuo, kad pagavimo į tas būsenas sparta yra labai didelė, todėl greitai nusistovi dinaminė pusiausvyra tarp pagavimo ir išlaisvinimo vyksmų. Atitinkamai tos gaudyklės elgiasi kaip begalinės talpos krūvininkų rezervuaras, kuris nesudaro jokių kliūčių krūvininkų patekimui į jį ir išlaisvinimui iš jo. Atskirais atvejais, modeliuojant krūvininkų pereinimą per tokį skiriamąjį paviršiu, daugiau nereikia jokios papildomos informacijos, t. y. galima neužduoti jokių kraštinių sąlygų tame paviršiuje, o krūvininkų srovių tankius tame paviršiniame mazge apskaičiuoti taip pat, kaip ir tūryje – pagal (4.7.1a,b) formules (atsižvelgiant į tai, kad šiuo atveju koncentracijos išvestinė x atžvilgiu yra „vienpusė“). Tačiau tokiu atveju, taikant išreikštinį algoritmą, gali atsirasti srovių ir koncentracijų nestabilumas, t. y. krūvininkų

koncentracijos gali pradėti labai svyruoti ir įgyti neturinčias fizikinės prasmės vertes (pvz., neigiamas). Kad pašalinti šį nestabilumą, galima atsižvelgti į tai, kad, esant ypač didelei paviršinių būsenų koncentracijai, prie atitinkamo paviršiaus krūvininkų koncentracijos visomis sąlygomis yra apytiksliai pastovios, t. y. tokios pačios, kaip termodinaminėje pusiausvyroje. Taigi šiuo atveju (pvz., sluoksnio kairiajame krašte) kraštinės sąlygos yra tokios:

$$n(x_1) = n_0 = \text{const}, \quad (4.7.9a)$$

$$p(x_1) = p_0 = \text{const}. \quad (4.7.9b)$$

Vadinasi, tokiam paviršiniame mazge koncentracijų išvestinės laiko atžvilgiu, kurias išreiškia tolydumo lygtys (4.2.4a,b), turi būti tapačiai lygios nuliui.

4.7.4. Krūvininkų injekcija per paviršinį potencialo barjerą

Kadangi, sudarius kontaktą tarp dviejų medžiagų, atsiranda jų kristalo gardelės trūkis, tai gali atsirasti ir laidumo bei valentinės juostų kraštų trūkis, t. y. neelektrostatinės kilmės potencialo barjeras. Tada paviršiniame mazge, kuris priklauso tokio kontakto plokštumai, egzistuoja papildomas laidumo srovės dėmuo, kuris nusako abiejų kryptių viršbarjerinės termoelektroninės injekcijos srautų skirtumą. Taigi termoelektroninė injekcija per paviršinį potencialo barjerą pasireiškia papildomu laidumo srovės dėmeniu, kuris nusako neelektrostatinės kilmės krūvininkų srautą per skiriamąjį paviršių (tas papildomas srovės dėmuo egzistuoja tik paviršiniame mazge). Tarus, kad krūvininkų laisvasis kelias yra daug mažesnis už intervalus tarp mazgų, duotojo sluoksnio krūvininkų termoelektroninės injekcijos srautą į gretimą sluoksnį galima apskaičiuoti remiantis prielaida, kad į gretimą sluoksnį pereina visi paviršinio mazgo krūvininkai, kurių kinetinė energija didesnė už potencialo barjero aukštį ir kurių greitis nukreiptas į sluoksnio išorę (t. y. į gretimą sluoksnį). Pvz., jeigu nagrinėjamas metalo ir puslaidininkio kontaktas, kuris yra plokštumoje $x = 0$, ir jeigu puslaidininkis yra puserdvyje $x > 0$, tada elektronų, kurie pereina iš puslaidininkio į metalą, srovės tankis yra lygus

$$j_{p \rightarrow m} = -e n(0) \Big|_{E_k > \Phi_b} \langle v_x \rangle \Big|_{E_k > \Phi_b}, \quad (4.7.10)$$

čia Φ_b žymi barjero aukštį, o E_k žymi elektronų kinetinę energiją. Krūvininkų, kurių kinetinė energija didesnė už potencialo barjero aukštį, koncentracija ir jų greičio x komponentės vidurkis priklauso nuo krūvininkų greičių pasiskirstymo. Tas pasiskirstymas dažniausiai yra artimas Maksvelo ir Bolcmano pasiskirstymui. Tada srovės tankio komponentė, kuri atitinka duotųjų krūvininkų termoelektroninę injekciją iš duotojo sluoksnio į gretimą sluoksnį, apskaičiuojama pagal formulę

$$j = \frac{qn}{\sqrt{2\pi k T m^*}} (\Phi_b + kT) \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right); \quad (4.7.11)$$

čia q yra duotosios rūšies krūvininkų krūvis, n yra jų pilnutinė koncentracija prie skiriamąjo paviršiaus, m^* yra krūvininkų efektinė masė, k yra Bolcmano konstanta, o T yra absoliučioji temperatūra. Analogiškai galima išreikšti ir priešingos krypties srautą. Pilnutinis srautas yra lygus abiejų kryptių srautų skirtumui.

Jeigu modeliuojama krūvininkų termoelektroninė injekcija iš elektrodo į modeliuojamą sluoksnį, tada termoelektroninės injekcijos srovę galima apskaičiuoti pagal Ričardsono lygtį (2.3.3).

5. pn diodo modeliavimas

5.1. Įvadas. Nuskurdinimo artinys

pn sandūra – tai sandūra tarp p ir n puslaidininkių. Sudarius kontaktą tarp puslaidininkių, prasideda krūvininkų persiskirstymas. Kaip ir sudarius kontaktą tarp metalo ir puslaidininkio (Šotkio diodas), elektronai pereina į medžiagą, kurios išlaisvinimo darbas yra didesnis. Skylių persiskirstymo kryptis yra priešinga. Mikroskopiniu požiūriu, šio persiskirstymo priežastis yra difuzija: krūvininkai difunduoja į medžiagą, kurioje jų krūvininkų koncentracija yra mažesnė. Dėl šio persiskirstymo atsiranda perteklinis teigiamas krūvis n puslaidininkyje ir perteklinis neigiamas krūvis p puslaidininkyje. Dėl šio perteklinio krūvio atsiranda elektrinis laukas ir tuo pačiu – dreifo srovė, kurios kryptis yra priešinga minėtosios difuzijos srovės kryptiai. Po tam tikro laiko nusistovi dinaminė pusiausvyra, kai difuzijos srovę visuose erdvės taškuose kompensuoja dreifo srovė. Vidinis elektrostatinis potencialų skirtumas, kuris egzistuoja sandūroje šios pusiausvyros sąlygomis, yra vadinamas **kontaktiniu potencialų skirtumu**. Jeigu n ir p sritys yra legiruotos tolygiai (t. y. jeigu donorų koncentracija n srityje yra pastovi ir lygi N_D , o akceptorų koncentracija p srityje yra pastovi ir lygi N_A), tada šio kontaktinio potencialų skirtumo teorinė išraiška yra šitokia:

$$U_K = \frac{kT}{e} \ln \frac{N_D N_A}{n_i^2}; \quad (5.1.1)$$

Čia n_i yra elektronų koncentracija gryname puslaidininkyje (pvz., Si atveju, kai $T = 295 \text{ K}$, $n_i \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$).

pn diodas kai kuriais atžvilgiais yra panašus į anksčiau išnagrinėtą Šotkio diodą. Abiem atvejais susidaro kontaktinis potencialų skirtumas, kurio priežastis – neelektrostatinė elektrovaros jėga, kuri atsiranda sudarius kontaktą tarp dviejų medžiagų. Abiem atvejais pusiausviroji būseną – tai tokia būseną, kai dreifo srovė, atitinkanti tą vidinį elektrinį lauką, kompensuoja difuzijos srovę. Abiem atvejais susiformuoja nuskurdintasis sluoksnis. Šotkio diodo atveju nuskurdintasis sluoksnis egzistuoja tik puslaidininkyje, o pn diodo atveju jis egzistuoja abiejose medžiagose. Kadangi nuskurdintame sluoksnyje beveik nėra laisvų elektronų, tai jame egzistuoja erdvinis jonizuotų priemaišų krūvis. n puslaidininkyje tai yra teigiami donorų jonai, o p puslaidininkyje tai yra neigiami akceptorų jonai.

Laikant, kad nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja tik jonizuotų priemaišų krūvis, erdvinio krūvio tankio ρ (C/cm^3) pasiskirstymas yra toks, kaip pavaizduota 5.1a 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:

$$\rho(x) = \begin{cases} eN_D, & -x_{dn} < x < 0; \\ -eN_A, & 0 < x < x_{dp}; \\ 0 & x < -x_{dn} \text{ arba } x > x_{dp}. \end{cases} \quad (5.1.2)$$

Kadangi sistema visumoje neturi elektros krūvio, tai pilnasis neigiamas akceptorų krūvis nuskurdintame sluoksnyje turi būti priešingas pilnajam teigiamam donorų krūviui jame. Vadinasi,

$$eN_A x_{dp} = eN_D x_{dn}. \quad (5.1.3)$$

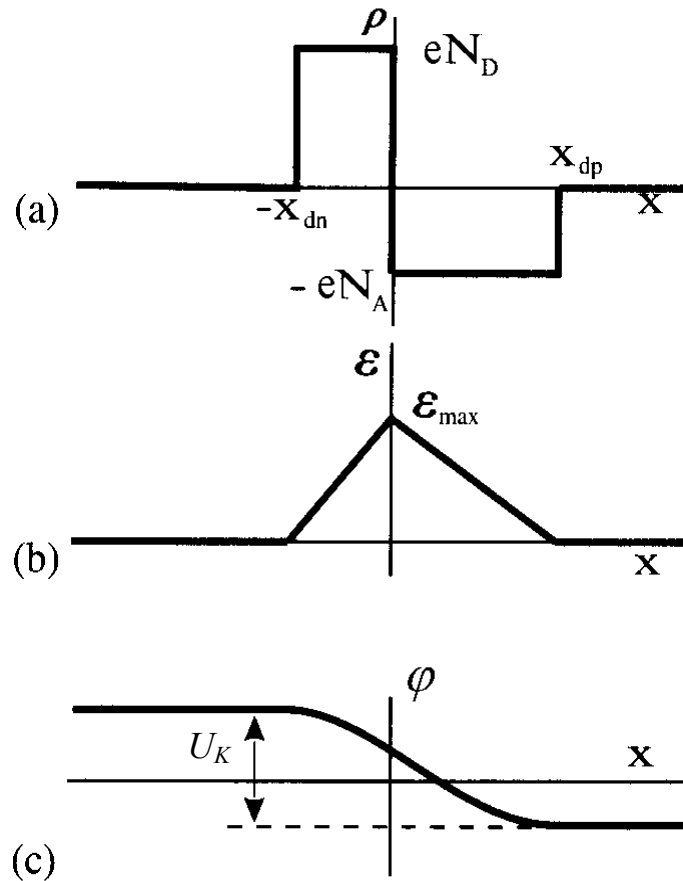
Žinant erdvinio krūvio tankio ρ pasiskirstymą, elektrinio lauko pasiskirstymą galima apskaičiuoti pagal **Puasono lygtį**:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = \frac{\rho(x)}{\varepsilon_0 \varepsilon}; \quad (5.1.4)$$

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

$$\mathcal{E}(x) = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} \int_{-x_{dp}}^x \rho(x) dx. \quad (5.1.5)$$

Įrašę (5.1.2) į (5.1.5), randame:



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

$$\mathcal{E}(x) = \begin{cases} \frac{eN_D}{\varepsilon_0\varepsilon}(x_{dn} + x), & -x_{dn} < x < 0; \\ \frac{eN_A}{\varepsilon_0\varepsilon}(x_{dp} - x), & 0 < x < x_{dp}. \end{cases} \quad (5.1.6)$$

Ši priklausomybė nuo x pavaizduota 5.1b pav. Elektrinio lauko stiprio maksimumas pasiekiamas kontakto plokštumoje $x = 0$. Pagal (5.1.6), šis maksimumas lygus

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{eN_D x_{dn}}{\varepsilon_0\varepsilon} = \frac{eN_A x_{dp}}{\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (5.1.7)$$

Rasime elektrinio lauko potencialą. Duotojo taško potencialas – tai elektrinio lauko stiprio integralas koordinatėms 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

$$\varphi(x) = - \int_{-x_{dn}}^x \mathcal{E}(x) dx. \quad (5.1.8a)$$

Potencialo atskaitos taškas gali būti pasirinktas įvairiai. Pvz., jeigu potencialas atskaitomas nuo taško, kuriame Fermio lygmuo termodinaminėje pusiausvyroje kerta draustinės energijos juostos vidurį (tiksliau, grynojo puslaidininkio Fermio lygmenį F_i), tada termodinaminėje pusiausvyroje

$$\varphi(x) = \frac{1}{e}(F - F_i(x)) \quad (5.1.8b)$$

Šis potencialas pavaizduotas 5.1c pav. Kontaktinis potencialų skirtumas lygus elektrinio lauko integralo nuo $-x_{dn}$ iki x_{dp} absoliutinei vertei:

$$U_K = \left| - \int_{-x_{dn}}^{x_{dp}} \mathcal{E}(x) dx \right| = \frac{1}{2} \mathcal{E}_{\max} (x_{dn} + x_{dp}) \equiv \frac{1}{2} \mathcal{E}_{\max} w; \quad (5.1.9)$$

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

Naudojantis (5.1.7) ir (5.1.9) 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 (5.1.3),

$$\frac{x_{dn}}{x_{dp}} = \frac{N_A}{N_D}. \quad (5.1.10)$$

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 (5.1.7), gauname

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

Šią išraišką įrašę į (5.1.9) ir išreiškę w , gauname

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon (N_D + N_A)}{eN_D N_A}} U_K. \quad (5.1.11)$$

Vadinasi, didžiausią elektrinio lauko stiprį galima išreikšti šitaip:

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{eN_D N_A}{\varepsilon_0 \varepsilon (N_D + N_A)} w = \sqrt{\frac{2eN_D N_A}{\varepsilon_0 \varepsilon (N_D + N_A)}} U_K. \quad (5.1.12)$$

Šiame reiškinyje U_K palyginti silpnai priklauso nuo N_D ir N_A , nes U_K yra proporcingas N_D ir N_A sandaugos logaritmui (žr. (5.1.1)). Pvz., jeigu $N_D \cdot N_A$ kinta nuo 10^{30} cm^{-6} iki 10^{38} cm^{-6} , tada U_K santykinis pokytis yra mažesnis už 30%. Vadinasi, nuskurdintojo sluoksnio storio ir didžiausio elektrinio lauko stiprio priklausomybę nuo N_D ir N_A lemia daugikliai prieš U_K formulėse (5.1.11) ir (5.1.12).

5.2. pn diodas esant išorinei įtampai

Dabar tarkime, kad prie diodo prijungta įtampa. Priklausomai nuo įtampos ženklo, skiriama **tiesioginė įtampa** (kai prie n srities prijungtas neigiamas įtampos šaltinio polius, o prie p srities prijungtas teigiamas polius) ir **atgalinė įtampa** (kai prie n srities prijungtas teigiamas įtampos šaltinio polius, o prie p srities prijungtas neigiamas polius). Kadangi laidumo ir valentinės juostų kraštai priklauso nuo potencialo φ tokiu būdu:

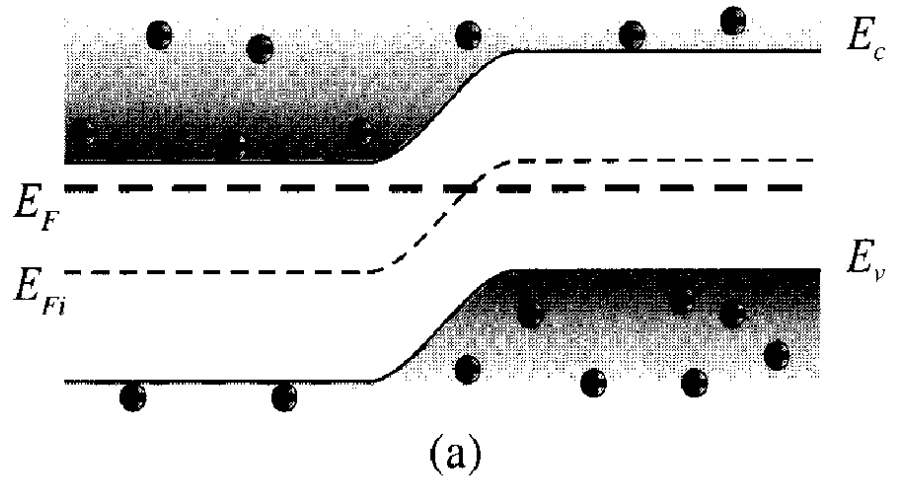
$$E_c = E_{c0} - e\varphi, \quad E_v = E_{v0} - e\varphi, \quad (5.2.1)$$

tai tiesioginės įtampos atveju juostų kraštai n tipo srityje turi pakilti atžvilgiu jų padėties p tipo srityje (5.2b pav.), o atgalinės įtampos atveju jie turi nusileisti atžvilgiu jų padėties p tipo srityje (5.2c pav.).

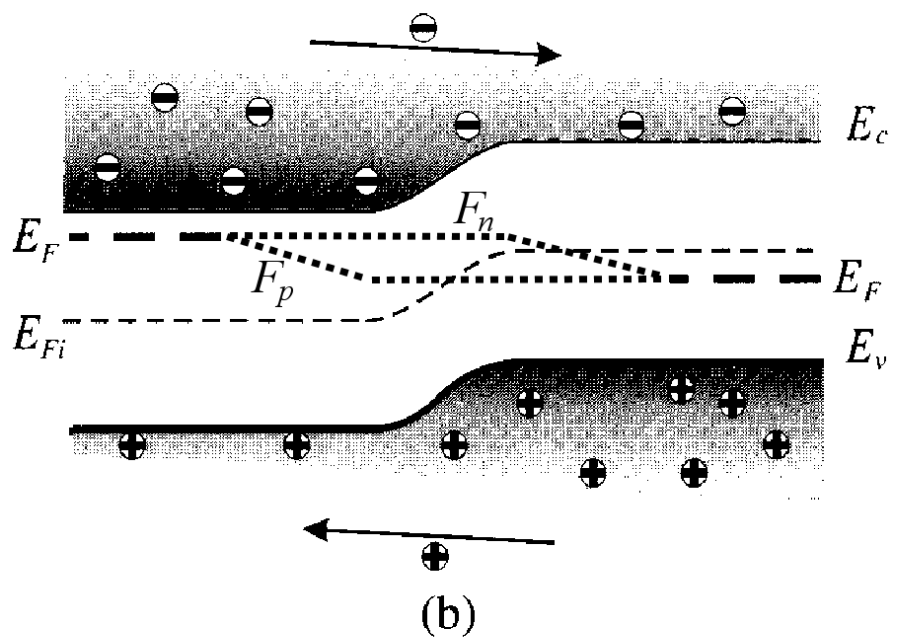
Kadangi nuskurdintajame sluoksnyje krūvininkų yra daug mažiau, negu neutraliose srityse, tai jo laidumas yra daug mažesnis už neutraliųjų sričių laidumą (t. y. varža yra daug didesnė). Vadinasi, galima išskirti tris nuosekliai sujungtas sritis, kurių varžos labai skiriasi: mažos varžos n tipo neutralioji sritis, didelės varžos nuskurdintasis sluoksnis ir mažos varžos p tipo neutralioji sritis. Nuosekliai sujungus kelis rezistorius, kurių varžos labai skiriasi, pilnutinę varžą lemia didžiausioji varža. Tai reiškia, kad didžioji dalis išorinės įtampos tenka didžiausiajai varžai (nuskurdintajam sluoksniui). Vadinasi, neutraliose srityse įtampos kritimas yra mažas. Todėl, prijungus įtampą, šiose srityse energijos juostos lieka plokščios. Išorinė įtampa pasireiškia tuo, kad pasikeičia juostų kraštų skirtumas p ir n srityse: tiesioginės įtampos atveju šis skirtumas sumažėja (5.2b pav.), o atgalinės įtampos atveju jis padidėja (5.2c pav.).

Pagal 5.2a,b,c pav. pateiktas energijos diagramas galima spręsti apie elektros srovės, kuri teka pn diodu, prigimtį. Pagrindinių ir šaltinių krūvininkų judėjimas pro nuskurdintą sluoksnį iš esmės skiriasi. Pagrindiniams krūvininkams juostų užlinkimas nuskurdintame sluoksnyje sukuria potencialinį barjerą. Taip yra dėl to, kad nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja laukas, kurio kryptis sutampa su juostų kraštų augimo kryptimi. Šis laukas veikia elektronus į dešinę, kuri nukreipta į n srities pusę, o skylės veikia į kairę, kuri nukreipta į p srities pusę. T.y., elektrinis laukas nuskurdintame sluoksnyje trukdo pagrindiniams krūvininkams pro jį pereiti. Iš n srities į p sritį gali pereiti tik tie elektronai, kurių energija yra didesnė už laidumo juostos kraštą p srityje. Turint omenyje, kad elektrono energijos ir laidumo juostos krašto skirtumas lygus elektrono kinetinei energijai, tą patį teiginį galima suformuluoti šitaip: iš n srities į p sritį gali pereiti tik tie elektronai, kurių

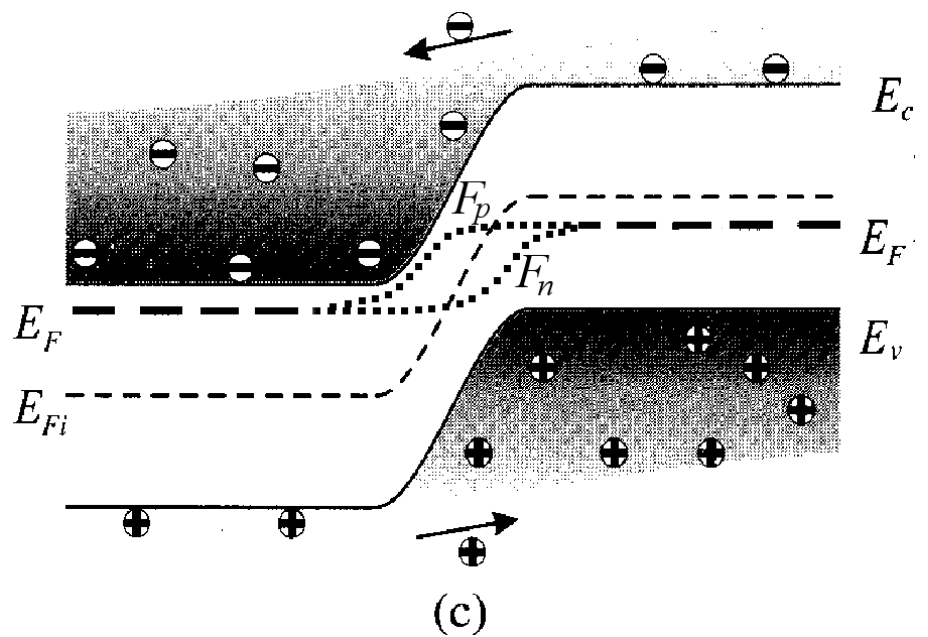
Termodinaminė
pusiausvyra:



Tiesioginė įtampa:



Atgalinė įtampa:



5.2 pav. pn diodo energijos juostų diagramos, esant įvairioms išoriniams įtampoms

kinetinė energija yra didesnė už potencialio barjero aukštį (juostos krašto pokytį nuskurdintajame sluoksnyje). Analogiškai, iš p srities į n sritį gali pereiti tik tos skylės, kurių energija yra žemiau už valentinės juostos kraštą n srityje (priešingai negu elektronų atveju, skylės perėjimui į žemesnį lygmenį reikia išseivoti energiją, o skylėi pereinant į aukštesnį lygmenį, energija išlaisvinama). Krūvininkų perėjimą virš potencialio barjero vadinsime **krūvininkų injekcija**. Šalutinius krūvininkus tas pats elektrinis laukas veikia priešingos krypties jėga. Tai pasireiškia tuo, kad energijos diagramose juostų užlinkimas nuskurdintame sluoksnyje sukuria “nuokalnę” šalutiniams krūvininkams. T.y., patekus elektronui iš p srities į nuskurdintąjį sluoksnį, jame egzistuojantis laukas “nustumia” tą elektroną į n sritį. Vaizdžiai kalbant, elektronas “nuriada” potencine nuokalne į n sritį. Analogiškai, skylės “nuriada” iš n srities į p sritį. Tokį reiškinį vadinsime **krūvininkų ekstrakcija**.

Termodinaminėje pusiausvyroje elektronų srovė lygi nuliui. Tai reiškia, kad injektuojamų į p sritį ir ekstraguojamų iš p srities elektronų srautai tiksliai kompensuoja vienas kitą. Analogiškai, injektuojamų į n sritį ir ekstraguojamų iš n srities skylių srautai tiksliai kompensuoja vienas kitą.

Prijungus tiesioginę įtampą (5.2b pav.), laidumo juostos kraštas p srityje priartėja prie laidumo juostos krašto n srityje (t.y., potencialio barjero aukštis sumažėja), todėl injektuojamų iš n srities į p sritį elektronų srautas padidėja. Ekstraguojamų į p srities į n sritį elektronų srautas beveik nepasikeičia, nes visi elektronai, kurie atsiduria arti nuskurdintojo sluoksnio krašto p srityje, yra ekstraguojami į n sritį. Vadinas, jų srautą riboja tik jų generacijos sparta arti nuskurdintojo sluoksnio krašto, o ši generacijos sparta praktiškai nepriklauso nuo įtampos. Todėl tiesioginės įtampos atveju elektronų injekcija iš n srities į p sritį viršija jų ekstrakciją iš p srities į n sritį. Taigi, atsiranda elektronų srautas iš n srities į p sritį. Analogiškai galima parodyti, kad tiesioginės įtampos atveju atsiranda ir skylių srautas iš p srities į n sritį. Intuityviai aišku, kad tiesioginės įtampos atveju srovės stipris turėtų būti proporcingas krūvininkų, kurių kinetinė energija didesnė už potencialio barjero aukštį, koncentracijai. Kadangi krūvininkų pasiskirstymą energijos lygmenyse nusako Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - F}{kT}\right)}, \quad (5.2.2)$$

tai tokių krūvininkų skaičius eksponentiškai auga, mažėjant barjero aukščiui. Antra vertus, barjero aukščio sumažėjimas yra proporcingas prijungtai tiesioginei įtampai. Vadinas, diodu tekančios srovės stipris eksponentiškai priklauso nuo tiesioginės įtampos didumo. Šia prasme pn diodo VACH yra panaši į Šotkio diodo VACH, nes Šotkio diodo tiesioginė srovė taip pat yra proporcinga puslaidininkio krūvininkų koncentracijai nuskurdintojo sluoksnio krašte, kuris atitinka metalo paviršių, t. y. koncentracijai krūvininkų, kurių kinetinė energija didesnė už potencialo barjero aukštį iš puslaidininkio pusės (žr. (3.4.1) formulę)

Atgalinės įtampos atveju laidumo juostos kraštas p srityje nutolsta nuo laidumo juostos krašto n srityje, t.y., potencialio barjero aukštis padidėja (5.2c pav.). Vadinas, iš n srities į p sritį injektuojamų elektronų ir iš p srities į n sritį injektuojamų skylių srautai sumažėja. Tačiau iš n srities į p sritį ekstraguojamų skylių ir iš p srities į n sritį ekstraguojamų elektronų srautai beveik nepasikeičia, nes, kaip minėta, jų didumą riboja generacijos sparta arti nuskurdintojo sluoksnio kraštų. Vadinas, atgalinės įtampos atveju krūvininkų ekstrakcija viršija jų injekciją. Kadangi krūvininkų ekstrakcija silpnai priklauso nuo įtampos, tai atgalinės srovės stipris taip pat beveik nepriklauso nuo įtampos. Be to, jis yra daug mažesnis už tiesioginės srovės stiprį, nes atgalinę srovę lemia *šalutinių* krūvininkų ekstrakcija, o šalutinių krūvininkų koncentracija yra daug mažesnė už pagrindinių. Toks atgalinės srovės aiškinimas tinka tik esant palyginti mažoms atgalinėms įtampoms. Esant didelei atgalinei įtampai, didžiąją dalį atgalinės srovės sąlygoja krūvininkų generacija nuskurdintojo sluoksnio viduje.

Iš to, kas aukščiau pasakyta, išplaukia pagrindinė pn diodo savybė, kuri panaudojama praktikoje: prijungus tiesioginę įtampą, pn diodo varža yra daug mažesnė už jo varžą, prijungus atgalinę įtampą. Todėl tiesioginė srovė yra daug didesnė už atgalinę.

Matome, kad atgalinės srovės fizikinis mechanizmas pn diode yra kitoks, negu Šotkio diode. Šotkio diodo atgalinė srovė – tai termoelektroninės emisijos iš metalo į puslaidininkį srovė, kurią nusako Ričardsono lygtis, o pn diodo atgalinė srovė yra krūvininkų *generacijos* srovė.

Kaip ir Šotkio diode, pn diodo elektrodų potencialų skirtumas yra praktiškai lygus įtampos kritimui nuskurdintajame sluoksnyje, o pastarasis įtampos kritimas vienareikšmiškai priklauso nuo priemaišinių jonų koncentracijos ir nuskurdintojo sluoksnio storio $w_{dn} + w_{dp}$ (kaip ir termodinaminėje pusiausvyroje). Todėl, esant išorinei įtampai, lieka galioti visos 5.1 skyriaus formulės, tačiau vietoj kontaktinio potencialų skirtumo jose vartoti reiškinį $U_K - U_a$. Čia įtampa U_a yra teigiama tada, kai ji yra tiesioginė, ir neigiama, kai atgalinė. P.vz., nuskurdintojo sluoksnio storis ir didžiausias elektrinio lauko stipris, esant išorinei įtampai, yra lygūs

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon(N_D + N_A)}{eN_D N_A}}(U_K - U_a). \quad (5.2.3)$$

Vadinasi, didžiausią elektrinio lauko stiprį galima išreikšti šitaip:

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{eN_D N_A}{\varepsilon_0\varepsilon(N_D + N_A)} w = \sqrt{\frac{2eN_D N_A}{\varepsilon_0\varepsilon(N_D + N_A)}}(U_K - U_a). \quad (5.2.4)$$

5.3. pn diodo tiesioginė srovė

Praeitame skyriuje buvo trumpai nusakytas pn diodo VACH pavidalas esant tiesioginei įtampai. Buvo teigiama, kad ši VACH dalis yra eksponentinė dėl to, kad tiesioginė įtampa mažina potencialo barjero aukštį, o galinčių įveikti potencialo barjerą elektronų skaičius n puslaidininkyje eksponentiškai didėja mažėjant barjero aukščiui (analogiškai – skylėms p puslaidininkyje). Toks aiškinimas remiasi tuo, kad elektronų koncentracija taške $x = x_{dp}$ (žr. 5.1 pav.) apskaičiuojama dauginant elektronų koncentraciją taške $x = -x_{dn}$ iš $\exp(-\Phi/kT)$, kur Φ yra potencialo barjero aukštis (priklausantis nuo išorinės įtampos). Vadinasi, remiamasi prielaida, kad elektronų energijos skirstinys visame nuskurdintame sluoksnyje yra toks pats, kaip neutraliojoje n puslaidininkio dalyje. Kitaip sakant, tariama, kad elektronų posistemė visame nuskurdintame sluoksnyje lieka termodinaminės pusiausvyros būsenos net ir tada, kai egzistuoja išorinė tiesioginė įtampa. Formaliai ši prielaida pasireiškia tuo, kad elektronams galima priskirti Fermio lygmenį (vadinamąjį **elektronų Fermio kvazilygmenį**), kuris visame nuskurdintame sluoksnyje yra pastovus ir sutampa su Fermio lygmeniu n puslaidininkio neutraliojoje dalyje, toli nuo nuskurdintojo sluoksnio (t. y. taške $x = -\infty$). Tokia prielaida yra leistina tada, kai visų veiksnių, dėl kurių atsiranda nuokrypis dėl termodinaminės pusiausvyros, vaidmuo yra nežymus. Tie veiksniai – tai laidumo srovė ir perteklinių krūvininkų rekombinacija arba generacija. Termodinaminės pusiausvyros sutrikdymas dėl laidumo srovės nuskurdintame sluoksnyje yra nežymus todėl, kas ten yra didelis kompensacijos laipsnis tarp tos rūšies krūvininkų difuzijos srovės ir dreifo srovės, t. y. abi šios srovės yra beveik vienodo absoliutinio didumo ir priešingų ženklų (kaip ir neutraliojoje srityje, kurioje tie krūvininkai yra pagrindiniai). Termodinaminės pusiausvyros sutrikdymas dėl perteklinių krūvininkų rekombinacijos ir generacijos nuskurdintame sluoksnyje yra nežymus todėl, kai, esant tiesioginei arba mažai atgalinei įtampai, į nuskurdintąjį sluoksnį per laiko vienetą krūvininkų skaičius yra daug didesnis už rekombinuojančių jame per laiko vienetą tos rūšies krūvininkų skaičių. Taigi, esant tiesioginei įtampai, nuskurdintajame sluoksnyje galima nepaisyti krūvininkų rekombinacijos ir generacijos reiškinių.

Jeigu elektronai arba skylės, esantys nuskurdintajame sluoksnyje, yra termodinaminėje pusiausvyroje atitinkamai su neutraliaja n sritimi arba neutraliaja p sritimi, tada

$$n(x_{dp}) = n_{n0} \exp\left(-\frac{\Phi}{kT}\right) = n_{n0} \exp\left(-\frac{e(U_K - U_a)}{kT}\right) = n_{p0} \exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right), \quad (5.3.1a)$$

$$p(-x_{dn}) = p_{p0} \exp\left(-\frac{\Phi}{kT}\right) = p_{p0} \exp\left(-\frac{e(U_K - U_a)}{kT}\right) = p_{n0} \exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right). \quad (5.3.1b)$$

Čia n_{n0} ir p_{p0} yra pagrindinių krūvininkų koncentracijos atitinkamose srityse termodinaminėje pusiausvyroje (jeigu injekcijos lygis yra mažas, tada neutraliose srityse pagrindinių krūvininkų koncentracijos lieka beveik tokios pačios ir esant išorinei įtampai), o n_{p0} ir p_{n0} yra šalutinių krūvininkų koncentracijos atitinkamose srityse termodinaminėje pusiausvyroje. *Perteklinių* šalutinių krūvininkų koncentracijos gaunamos atėmus atitinkamai n_{p0} ir p_{n0} :

$$\Delta n(x_{dp}) = n_{p0} \left[\exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right) - 1 \right], \quad (5.3.2a)$$

$$\Delta p(-x_{dn}) = p_{n0} \left[\exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right) - 1 \right]. \quad (5.3.2b)$$

Matome, kad, esant tiesioginei įtampai U_a , šalutinių krūvininkų koncentracija ant nuskurdintojo sluoksnio krašto padidėja $\exp(eU_a/kT)$ kartų. Taip yra dėl šalutinių krūvininkų injekcijos iš kitos diodo srities (kurioje tie krūvininkai yra pagrindiniai). Vyksmai, kurie vyksta injektavus šalutinius krūvininkus, buvo aprašyti 4.5 skyriuje. Tos analizės rezultatai tinka ir šiuo atveju. Pvz., galima teigti, kad elektronų srovė p srityje yra grynai difuzinė, o perteklinių krūvininkų koncentracija toje srityje eksponentiškai priklauso nuo atstumo iki nuskurdintojo sluoksnio krašto (tas atstumas lygus $x - x_{dp}$). To atstumo, vertė, atitinkanti perteklinių krūvininkų koncentracijos sumažėjimą e kartų, yra lygi elektronų (šalutinių krūvininkų) difuzijos nuotoliui (3.5.8). Jeigu p ir n sričių pločiai yra daug didesni už šalutinių krūvininkų difuzijos nuotolius, tada perteklinių krūvininkų koncentracijos sumažėja praktiškai iki nulio. Toks diodas vadinamas **ilguoju diodu**.

Priešingu ribiniu atveju, kai p ir n sričių pločiai yra daug mažesni už šalutinių krūvininkų difuzijos nuotolius, perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimas neutraliojoje srityje, tostant nuo nuskurdintojo sluoksnio krašto, yra tiesinis. Toks diodas vadinamas *trumpuoju diodu*. Pvz., trumpojo diodo p srityje perteklinių elektronų koncentracija atitinka (3.5.15) reiškinį, kuriame vietoj x reikia vartoti $x - x_{dp}$, o w_p reiškia p puslaidininkio neutraliosios dalies storį.

Remiantis bendrąja perteklinių krūvininkų koncentracijos išraiška (3.5.7) arba (3.5.15) ir tuo, kad šalutinių krūvininkų srovė yra grynai difuzinė, galima apskaičiuoti šalutinių krūvininkų srovės vertę bet kuriame neutraliosios diodo dalies taške. Kad gauti pilnutinę srovę, prie šios srovės reikia pridėti pagrindinių krūvininkų srovę. Stacionarioje veikoje pilnutinė srovė yra vienoda visuose diodo taškuose. Todėl tašką, kuriame apskaičiuojama pilnutinė srovė, reikia pasirinkti taip, kad pagrindinių krūvininkų srovės apskaičiavimas būtų kuo paprastesnis. Tas taškas – tai nuskurdintojo sluoksnio kraštas. Taip yra todėl, kad, kaip minėta anksčiau, rekombinacijos nuskurdintajame sluoksnyje galima nepaisyti, todėl pagrindinių krūvininkų srovė ant nuskurdintojo sluoksnio krašto yra apytiksliai lygi tos pačios rūšies krūvininkų srovei ant nuskurdintojo sluoksnio *kito* krašto. Kadangi ant nuskurdintojo sluoksnio kito krašto tie patys krūvininkai yra šalutiniai, tai ten jų srovė yra grynai difuzinė ir taip pat lengvai apskaičiuojama remiantis (3.5.7) arba (3.5.15) formule. Taip gauname šitokią ilgojo pn diodo srovės tankio bendrąją išraišką esant tiesiaginei įtampai:

$$j = \left| eD_p \frac{dp}{dx} \Big|_{x=-x_{dn}} \right| + \left| eD_n \frac{dn}{dx} \Big|_{x=x_{dp}} \right| = eD_p \frac{\Delta p(-x_{dn})}{L_p} + eD_n \frac{\Delta n(x_{dp})}{L_n} = \left(eD_p \frac{p_{n0}}{L_p} + eD_n \frac{n_{p0}}{L_n} \right) \left[\exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right) - 1 \right] \quad (5.3.3a)$$

Trumpojo diodo atveju vienintelis pakeitimas yra tas, kad vietoj difuzijos nuotolių L_p ir L_n reikia naudoti atitinkamai neutraliosios n srities ir neutraliosios p srities storį w_n ir w_p :

$$j = eD_p \frac{\Delta p(-x_{dn})}{w_n} + eD_n \frac{\Delta n(x_{dp})}{w_p} = \left(eD_p \frac{p_{n0}}{w_n} + eD_n \frac{n_{p0}}{w_p} \right) \left[\exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right) - 1 \right]. \quad (5.3.3b)$$

6. Krūvininkų sklaida

6.1. Kvantinė krūvininkų sklaidos teorija

Idealiajame kristale elektrono stacionariausias būsenas nusako Blocho bangos (1.1.2). Tačiau realiųjų kristalų vienelektroninis hamiltonianas \hat{H} skiriasi nuo idealiojo kristalo elektrono hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$. Šis skirtumas vadinamas *trikdžiu*. Hamiltoniano trikdį toliau žymėsime raide \hat{H}' :

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}' . \quad (6.1.1)$$

Trikdžio \hat{H}' priežastis gali būti priemaišų atomai, kristalo gardelės virpesiai, elektronų tarpusavio sąveika, išorinis spinduliavimas ir kt. Pasikeitus hamiltonianui, pasikeičia ir jo tikrinės funkcijos, t. y. elektronų banginės funkcijos. Taigi, Blocho bangos, kuriomis aprašoma elektrono būsena, jau nėra *tikslūs* elektrono Šrėdingerio lygties sprendiniai. Tačiau, kadangi Blocho bangos (1.1.2) sudaro pilnąją ortogonaliąją sistemą, tai tiksliąją banginę funkciją $\Psi(\mathbf{r}, t)$ galima išreikšti Blocho bangų $\Psi_k(\mathbf{r}, t)$ tiesiniu dariniu:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{V_k} c_k(t) \Psi_k(\mathbf{r}, t) . \quad (6.1.2a)$$

Čia indeksas “ V_k ” nurodo, kad sumuojama atžvilgiu visų skirtingų kvantinių būsenų. Koefficientų $c_k(t)$ priklausomybė nuo laiko reiškia, kad elektronas, kurio pradinė būsena buvo aprašoma Blocho banga $\Psi_k(\mathbf{r}, t)$, po tam tikro laiko t atsiduria būsenoje, kurią aprašo Blocho bangų su įvairiais \mathbf{k}' darinys:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{V_{k'}} c_{k \rightarrow k'}(t) \Psi_{k'}(\mathbf{r}, t) . \quad (6.1.2b)$$

Kitais žodžiais, egzistuoja tam tikra tikimybė, kad per laiką t įvyks elektrono kvantinis šuolis iš pradinės būsenos \mathbf{k} į kažkurią iš daugelio galimų galutinių būsenų \mathbf{k}' . Šie kvantiniai šuoliai vadinami elektronų *sklaida*. Turint omenyje banginės funkcijos statistinį aiškinimą ir remiantis formule (6.1.2b), galima teigti, kad šuolio $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ tikimybė per laiką t lygi $|c_{k \rightarrow k'}(t)|^2$. Šuolio tikimybė *per laiko vienetą* lygi išvestinei $\left. \frac{d}{dt} |c_{k \rightarrow k'}(t)|^2 \right|_{t=0}$, kurią žymėsime $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$.

Trikdžių teorija suformuluoja koefficientų $c_{k \rightarrow k'}(t)$ bei jų laikinių išvestinių $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ apytikslio skaičiavimo būdą, laikant, kad hamiltoniano trikdys \hat{H}' yra pakankamai “mažas”, ir kartu suformuluoja šio “mažumo” kriterijų. Pagal trikdžių teoriją, koefficientai $c_{k \rightarrow k'}(t)$ skaičiuojami nuosekliųjų artinių metodu. Jeigu trikdys yra harmoninė dažnio funkcija (pvz., $\sim \sin(\omega t)$), tada jį galima išreikšti dviejų tokio pavidalo trikdžių suma:

$$\hat{H}'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}) \exp(\pm i \omega t) \quad (6.1.3)$$

Tokio trikdžio atveju pirmajame trikdžių teorijos artinyje gaunama, kad šuolio iš būsenos \mathbf{k} į būseną \mathbf{k}' tikimybė per laiko vienetą lygi [1, p. 29]

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar \omega) ; \quad (6.1.4)$$

čia $\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle$ yra trikdžio amplitudės $U(\mathbf{r})$ matricos elementas:

$$\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle = \int_V \psi_{k'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (6.1.5)$$

(čia integruojama kristalo tūriu V). Šuolio tikimybės išraiškoje (6.1.4) matome, kad yra įmanomi tik šuoliai į būsenas, kurių energija tenkina sąlygą

$$E_{k'} = E_k \mp \hbar \omega \quad (6.1.6)$$

(čia viršutinis ženklas atitinka viršutinį ženklą (6.1.3–4) formulėse). Tai yra energijos tvermės dėsnis: nors elektrono energija pasikeičia, tačiau *pilnutinė* energija, į kurią dar įeina ir trikdžių šaltinio (pvz., elektromagnetinės spinduliuotės arba gardelės virpesių) energija, turi likti nepakitusi. Todėl elektrono energijos pokytis ($E_{k'} - E_k$) yra priešingas trikdžių šaltinio energijos pokyčiui ($\pm \hbar \omega$).

Skaidos sparta (sklaidos tikimybė per laiko vienetą) gaunama, sudėjus šuolių iš duotosios pradinės būsenos \mathbf{k} į visas įmanomas galutines būsenas \mathbf{k}' tikimybes (6.1.4). Vadinasi, sklaidos sparta yra lygi

$$W(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^3 \mathbf{k}'. \quad (6.1.12)$$

Šį integralą patogiau skaičiuoti sferinėse koordinatėse (k, θ, ϕ) . Kampai θ ir ϕ apibrėžti 6.1 pav. Kampas θ vadinamas **poliniu kampu**, o kampas ϕ – **azimutiniu kampu**. Kampo θ galimosios vertės yra nuo 0 iki π , o kampo ϕ galimosios vertės yra nuo 0 iki 2π . \mathbf{k} erdvės tūrio elementas sferinėse koordinatėse išreiškiamas šitaip:

$$d^3 \mathbf{k}' = k'^2 \sin \theta dk' d\theta d\phi, \quad (6.1.13)$$

o (6.1.12) integralas išreiškiamas šitaip:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \cdot \sin \theta \int_0^\infty dk' \cdot k'^2 S(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (6.1.14)$$

Tačiau elektrono sklaidos tikimybė nepriklauso nuo ϕ , todėl integravimas kampo ϕ atžvilgiu pasireiškia tik pastoviu daugikliu 2π :

$$W(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^2} \int_0^\pi d\theta \cdot \sin \theta \int_0^\infty dk' \cdot k'^2 S(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (6.1.15)$$

Irašę (6.1.4) į (6.1.15), gauname

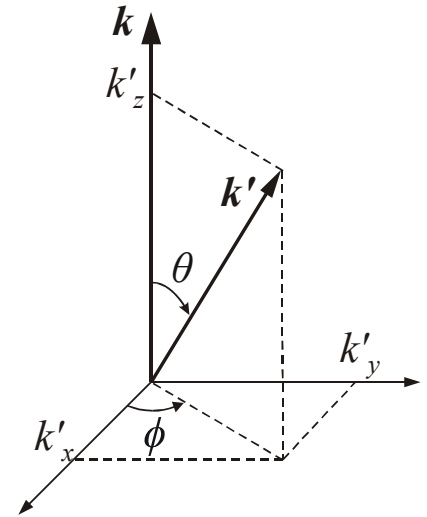
$$W(\mathbf{k}) = \frac{V}{2\pi\hbar} \int_0^\pi d\theta \cdot \sin \theta \int_0^\infty dk' \cdot k'^2 |\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar\omega). \quad (6.1.16)$$

Visas aukščiau užrašytąsias formules galima naudoti ir stacionariojo trikdžio atveju: tada $\omega = 0$. Iš (6.1.6) išplaukia, kad stacionariojo trikdžio atveju elektrono energija nesikeičia; gali pasikeisti tik bangos vektorius kryptis. Tokia sklaida vadinama **tampriąja sklaida**.

Nuokrypiai nuo idealaus gardelės periodiškumo (t. y. hamiltoniano trikdžiai) gali būti įvairios prigimties. Dvi svarbiausios tokių nuokrypių rūšys yra priemaišų atomai ir gardelės virpesiai. Toliau laikysime, kad sklaida gali būti tik šių tipų:

- 1) joninė priemaišinė sklaida (šią sklaidą sąlygoja elektronų kuloninė sąveika su priemaišų jonais);
- 2) nepolinė sklaida akustiniais fononais (šią sklaidą sąlygoja energijos juostų kitimas erdvėje ir laike dėl išilginių akustinių bangų);
- 3) nepolinė sklaida optiniais fononais (šią sklaidą sąlygoja energijos juostų kitimas dėl optinių virpesių; ši sklaida gali būti tarpinė);
- 4) polinė sklaida optiniais fononais (šią sklaidą sukelia kintantis elektrinis laukas, kuris atsiranda, kintant gardelės narvelio dipoliniam momentui dėl išilginių optinių virpesių joniniuose puslaidininkuose, pvz., GaAs, InP ir kt.).

Daugumoje praktikoje sutinkamų atvejų pakanka atsižvelgti tik į anksčiau minėtuosius sklaidos tipus [2, p. 80]. Toliau pateiktas smulkesnis tų sklaidos tipų aprašymas.

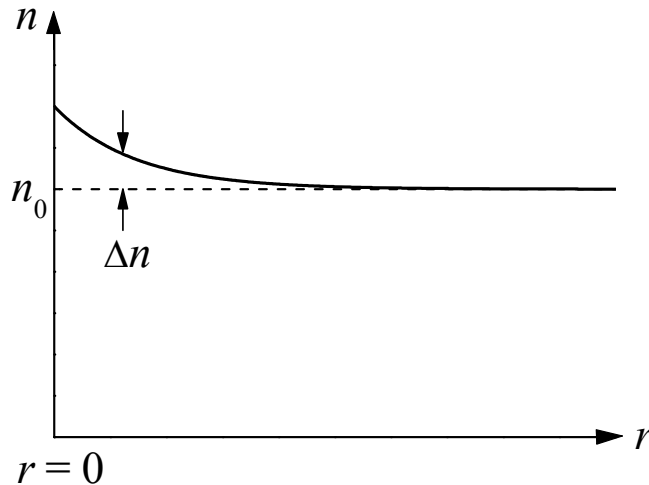


6.1 pav. Kampų θ ir ϕ prasmė. \mathbf{k} – elektrono bangos vektorius prieš pat sklaidos įvykį, \mathbf{k}' – bangos vektorius po sklaidos

6.2. Joninė priemaišinė sklaida

6.2.1. Debajaus ekranavimo nuotolis

Daugelis puslaidininkinių įtaisų turi specialias sritis, kurios elgiasi kaip krūvininkų rezervuarai. Tų sričių pagrindinė paskirtis – krūvininkų generavimas arba jų pašalinimas dėl rekombinacijos. Tose srityse yra padidinta priemaišų (donorų arba akceptorų) koncentracija, todėl krūvininkai yra stipriai sklaidomi dėl sąveikos su priemaišų jonais. Šiuo atveju vienelektroninio hamiltoniano trikdys yra priemaišos jono elektrostatinio lauko potencialas. Apskaičiuosime šį potencialą.



6.2 pav. Laisvųjų elektronų tankio padidėjimas aplink teigiamąjį joną

Iš elektrostatikos žinoma, kad taškinio krūvio $+Ze$ potencialas idealiaame dielektrike yra

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{\epsilon_s r}; \quad (6.2.1)$$

čia ϵ_s yra dielektriko dielektrinė skvarba, o r yra atstumas iki krūvininko. Tačiau puslaidininkyje yra laisvųjų krūvininkų, kurie dalinai ekranuoja priemaišos joną. Pvz., aplink teigiamąjį donorų joną padidėja laisvųjų elektronų koncentracija (žr. 6.2 pav.), todėl to jono efektinis krūvis sumažėja. T. y. aplink donorų joną elektronų koncentracija n tampa didesnė už donorų jonų koncentraciją N_d , todėl atsiranda perteklinis neigiamas krūvis, kurio erdvinis tankis yra lygus $-e \cdot \Delta n$; čia $\Delta n \equiv n - N_d$. Vadinasi, pilnutinis erdvinio krūvio tankis (įskaičius dar ir paties teigiamojo jono krūvį) yra

$$\rho(r) = e(Z\delta(r) - \Delta n); \quad (6.2.2)$$

čia Dirako δ funkcija $\delta(r)$ atspindi prielaidą, kad koordinatinių pradžių taške $r = 0$ yra taškinis krūvis $+Ze$. Įrašę (6.2.2) į Puasono lygtį

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_s} \quad (6.2.3)$$

ir pasinaudoję operatoriaus ∇^2 (laplasiano) išraiška sferinėmis koordinatėmis, gauname tokią lygtį:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\varphi}{dr} \right) = -\frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_s} (Z\delta(r) - \Delta n(r)). \quad (6.2.4)$$

Aišku, kad šios lygties sprendinys priklauso nuo funkcijos $\Delta n(r)$ pavidalo. Jeigu $\Delta n(r)$ yra pakankamai mažas, tada galima naudoti klasikinę (Bolcmano) pasiskirstymo funkciją, todėl

$$\Delta n = n_0 \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) - n_0 = n_0 \exp\left(\frac{e\varphi}{kT}\right) - n_0 \approx \frac{en_0}{kT} \varphi; \quad (6.2.5)$$

čia $U = -e\varphi$ yra elektrono potencinė energija, n_0 yra pusiausviroji elektronų koncentracija toli nuo jono (praktikoje galima laikyti, kad $n_0 \approx N_d$) ir laikoma, kad $|e\varphi| \ll kT$. Įrašę (6.2.5) į (6.2.4), gauname:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\varphi}{dr} \right) - \frac{1}{\lambda_D^2} \varphi = -\frac{Ze}{\epsilon_0 \epsilon_s} \delta(r); \quad (6.2.6)$$

čia λ_D yra vadinamasis **Debajaus ekranavimo nuotolis**:

$$\lambda_D \equiv \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_s kT}{e^2 n_0}} \quad (6.2.7)$$

„Ekranavimo nuotolio“ sąvokos prasmė tampa aiški iš (6.2.6) lygties atskirojo sprendinio išraiškos:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s r} \exp(-r/\lambda_D) \equiv \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s r} \exp(-q_D r). \quad (6.2.8)$$

Čia q_D yra atvirkštinis Debajaus nuotolis. Taigi, Debajaus ekranavimo nuotolis λ_D – tai atstumas, kuriame priemaišinio jono lauko potencialas sumažėja e kartų, lyginant su to potencialo verte, kuri būtų gauta, jeigu nebūtų ekranavimo. Įrašę į (6.2.7) tipiškas kintamųjų vertes ($\varepsilon_s = 11,8$; $kT = 0,0254$ eV; $n_0 = 10^{22} \text{ m}^{-3}$), gauname $\lambda_D = 4 \cdot 10^{-8}$ m. Puslaidininkio nuskurdintame sluoksnyje laisvųjų krūvininkų yra daug mažiau, todėl Debajaus ekranavimo nuotolis yra daug didesnis.

6.2.2. Joninės priemaišinės sklaidos spartos apskaičiavimas

Dabar galima apskaičiuoti sklaidos, kurią sukelia tokio pavidalo trikdys, spartą. Tuo tikslu įrašome trikdžio išraišką (6.2.8) į trikdžio matricos elemento išraišką (6.1.5):

$$\langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle = -\frac{1}{V} \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s} \int_V e^{-i(\mathbf{k}',r)} \frac{1}{r} e^{-q_D r} e^{i(\mathbf{k},r)} d^3r = -\frac{1}{V} \frac{Ze^2}{\varepsilon_0\varepsilon_s} \frac{1}{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2 + q_D^2}. \quad (6.2.9)$$

Įrašę (6.2.9) į šuolio $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ tikimybės per laiko vienetą išraišką (6.1.4) ir atsižvelgę į tai, kad trikdys (6.2.8) yra stacionarusis ($\omega = 0$), gauname

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{Ze^2}{V\varepsilon_0\varepsilon_s} \right)^2 \frac{\delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}})}{(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2 + q_D^2)^2}. \quad (6.2.10)$$

Kadangi šiuo atveju elektrono energija sklaidos metu nepakinta, o elektrono bangos skaičius vienareikšmiškai susijęs su energija (žr. (1.1.4)), tai $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$ ir

$$|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2 = 2k^2(1 - \cos\theta). \quad (6.2.11)$$

Be to, kadangi apibrėžto bangos vektoriaus \mathbf{k} elektronas yra banga, kuri pasiskirsčiusi visame kristalo tūryje, tai elektroną gali sklaidyti bet kuris kristale esantis priemaišinis jonas. Vadinasi, skaičiuojant pilnutinę sklaidos $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ tikimybę, reikia padauginti reiškinį (6.2.10) iš visų kristale esančių priemaišinių jonų skaičiaus $N_j V$; čia N_j yra jonų koncentracija. Tokiu būdu gauname:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_j Z^2 e^4}{V\varepsilon_0^2 \varepsilon_s^2} \frac{\delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}})}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2}. \quad (6.2.12)$$

Matome, kad, didėjant elektrono bangos skaičiui k (ir energijai), sklaidos sparta mažėja. Taip yra todėl, kad, didėjant k , mažėja pradinės ir galutinės elektrono banginių funkcijų sanklota erdvėje (paprasčiau kalbant, tos banginės funkcijos vis labiau skiriasi viena nuo kitos) ir atitinkamai mažėja trikdžio matricos elementas (6.2.9). Pilnutinė sklaidos sparta (įskaitant visas galutines būsenas \mathbf{k}') gaunama įrašius (6.2.12) į (6.1.15):

$$W(\mathbf{k}) = \frac{N_j Z^2 e^4}{2\pi\hbar\varepsilon_0^2 \varepsilon_s^2} \int_0^\pi d\theta \cdot \sin\theta \int_0^\infty dk' \cdot k'^2 \frac{\delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}})}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2}. \quad (6.2.13)$$

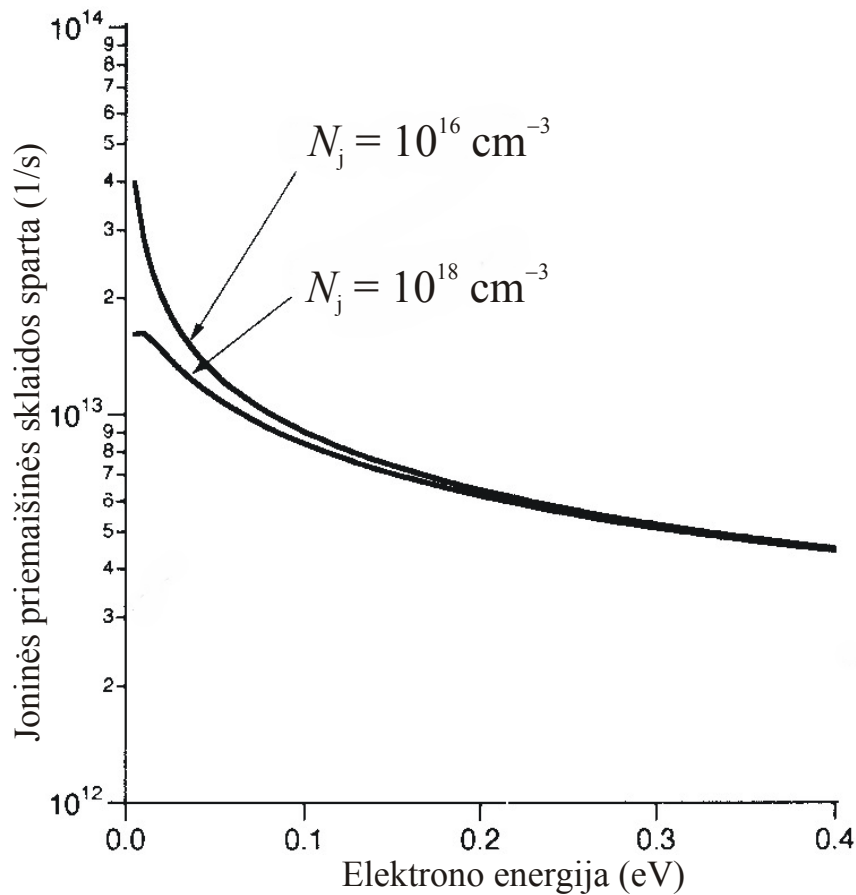
Atlikus integravimo kintamojo pakeitimą (1.1.9) ir pasinaudojus Dirako delta funkcijos savybėmis, šis integralas įgyja tokį pavidalą:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi N_j Z^2 e^4 N(E_{\mathbf{k}})}{\hbar\varepsilon_0^2 \varepsilon_s^2} \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{[2k^2(1 - \cos\theta) + q_D^2]^2}. \quad (6.2.14)$$

Kadangi $\sin\theta d\theta = -d(\cos\theta)$, tai pastarasis integralas lengvai apskaičiuojamas, atlikus integravimo kintamojo pakeitimą „ $\theta \rightarrow \cos\theta$ “. Tokiu būdu randame:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{2\pi N_j Z^2 e^4 N(E_{\mathbf{k}})}{\hbar\varepsilon_0^2 \varepsilon_s^2} \cdot \frac{1}{q_D^2(4k^2 + q_D^2)}. \quad (6.2.15)$$

Sklaidos spartos išraiška (6.2.15) formulė nustoja galioti, kai elektronų koncentracija n_0 yra žymiai mažesnė už jonizuotų priemaišų koncentraciją N_j . Tokia situacija yra galima, pvz., kompensuotame puslaidininkyje, kuriame teigiamųjų priemaišinių jonų (jonizuotų donorų) koncentracija yra apytiksliai lygi neigiamųjų priemaišinių jonų (jonizuotų akceptorijų) koncentracijai. Tada efektas toks, lyg elektronai būtų perėję iš donorų į akceptorius, ir laisvųjų elektronų tankis n_0 yra labai mažas. Kai n_0 artėja į nulį, atvirkštinis Debajaus ekranavimo nuotolis q_D (6.2.6) taip pat artėja į nulį, todėl pagal (6.2.15) apskaičiuotoji sklaidos



6.3 pav. Joninės priemaišinės sklaidos spartos priklausomybė nuo elektrono energijos, esant dviem legiravimo laipsniams

sparta artėja į begalybę. Taip yra todėl, kad joninės priemaišinės sklaidos spartos išraiška buvo gauta, laikant, kad bet kuriuo laiko momentu elektronas sąveikauja ne daugiau negu su *vienu* jonu. Tačiau kai jonus ekranuojančių elektronų yra mažai, tų jonų elektriniai laukai „persikloja“, todėl minėtoji prielaida nustoja būti teisinga. Siekiant išvengti didelių skaičiavimo klaidų, kai elektronų koncentracija yra maža, galima dirbtinai apriboti joninės sklaidos spartą: jeigu pagal (6.2.15) formulę apskaičiuota vertė yra didesnė už 10^{14} s^{-1} , tada tariama, kad joninės sklaidos sparta lygi 10^{14} s^{-1} .

6.3 pav. pavaizduota joninės priemaišinės sklaidos spartos GaAs priklausomybė nuo E_k parabolinių juostų atveju (kai būsenų tankį nusako (1.1.10) formulė), laikant, kad $n_0 = N_j$. Gali būti netikėtas tas faktas, kad sklaidos sparta mažėja, augant jonų koncentracijai N_j . Tai yra ypač akivaizdu mažų energijų srityje (žr. 6.3 pav.). Taip yra dėl to, kad, esant mažoms k vertėms, (6.2.15) trupmenos vardiklis yra apytiksliai proporcingas $q_D^4 \sim n_0^2 \approx N_j^2$ (žr. (6.2.7)), o skaitiklis yra proporcingas N_j . Fizikinė šio sklaidos spartos mažėjimo priežastis yra ta, kad augant n_0 mažėja Debajaus ekranavimo nuotolis, t. y. mažėja erdvės sritis aplink kiekvieną joną, kurioje pasireiškia jo elektrinis laukas. Tačiau šis sklaidos spartos mažėjimas nereiškia, kad, augant priemaišų koncentracijai, auga krūvininkų judris. Mat krūvininkų judris yra proporcingas krūvininkų impulso vidutinei relaksacijos trukmei, o ši priklauso ne vien nuo sklaidos spartos, bet ir nuo sklaidos krypties skirstinio (t. y. nuo vektorių \mathbf{k}' krypties skirstinio). Išreikšime šį skirstinį.

6.2.3. Atsitiktinio dydžio (pvz., sklaidos kampo) verčių generavimas, kai yra žinomas jo skirstinys

Kaip minėta, sklaidos kryptį nusako du kampai θ ir ϕ (žr. 6.1 pav.). Vadinas, norint pilnai aprašyti sklaidos krypties pasiskirstymą, reikia žinoti du tikimybes tankius: kampo ϕ tikimybes tankį $f_\phi(\phi)$ ir kampo θ tikimybes tankį $f_\theta(\theta)$. Turint tuos tikimybes tankius, galėsime apskaičiuoti sklaidos į polinių kampų intervalą $[\theta; \theta + d\theta]$ ir į azimutinių kampų intervalą $[\phi; \phi + d\phi]$ spartas:

$$dW_\theta(\theta) = f_\theta(\theta) d\theta; \quad (6.2.16a)$$

$$dW_\phi(\phi) = f_\phi(\phi) d\phi. \quad (6.2.16b)$$

Dabar suformuluosime bendrąją atsitiktinių skaičių generavimo taisyklę, kuri naudojama Monte Karlo modeliavimo programoje. Tarkime, a yra atsitiktinis dydis (pvz., sklaidos kampas), kurio vertę reikia generuoti. Yra žinomas to dydžio tikimybes tankis $f_a(a)$. Apibrėšime to dydžio **pasiskirstymo funkciją** $W_a(a)$: tai yra santykinė dalis įvykių, kuriuose to dydžio vertė yra mažesnė už duotąją vertę a :

$$W_a(a) \equiv \frac{1}{W} \int_{a_{\min}}^a f_a(a) da ; \quad (6.2.17a)$$

čia a_{\min} yra mažiausioji įmanoma dydžio a vertė, W yra normavimo daliklis:

$$W \equiv \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} f_a(a) da ; \quad (6.2.17b)$$

čia a_{\max} yra didžiausioji įmanoma dydžio a vertė. Tada dydžio a atsitiktinės vertės turi būti skaičiuojamos pagal lygtį

$$W_a(a) = r ; \quad (6.2.18)$$

čia r yra atsitiktinis skaičius, kuris tolygiai pasiskirstęs tarp 0 ir 1. Pritaikysime šią taisyklę kampų θ ir ϕ skaičiavimui. Kadangi visos azimutinio kampo ϕ vertės yra vienodai tikėtinos, šio kampo tikimybės tankis yra konstanta:

$$f_\phi(\phi) = \frac{1}{2\pi} . \quad (6.2.19)$$

Akivaizdu, kad šiuo atveju lygtis (6.2.18) yra tokia:

$$\phi = 2\pi r . \quad (6.2.20)$$

T. y. azimutinio kampo ϕ vertė gaunama, tiesiog padauginus atsitiktinio skaičiaus r , kuris tolygiai pasiskirstęs nuo 0 iki ϕ , reikšmę iš 2π . Polinio kampo θ tikimybės tankis – tai (6.2.14) reiškinių pointegralinis reiškiny (įskaitant ir pastovųjį daugiklį prieš integralą):

$$f_\theta(\theta) = \frac{\pi N_j Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \varepsilon_0^2 \varepsilon_s^2} \frac{\sin \theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} . \quad (6.2.21)$$

Normavimo daliklis šiuo atveju – tai pilnutinė sklaidos sparta $W(\mathbf{k})$. Vadinasi, lygties (6.2.18) kairioji pusė – tai reiškinių (6.2.21) integralas nuo 0 iki θ , padalintas iš $W(\mathbf{k})$. Tokiu būdu gauname:

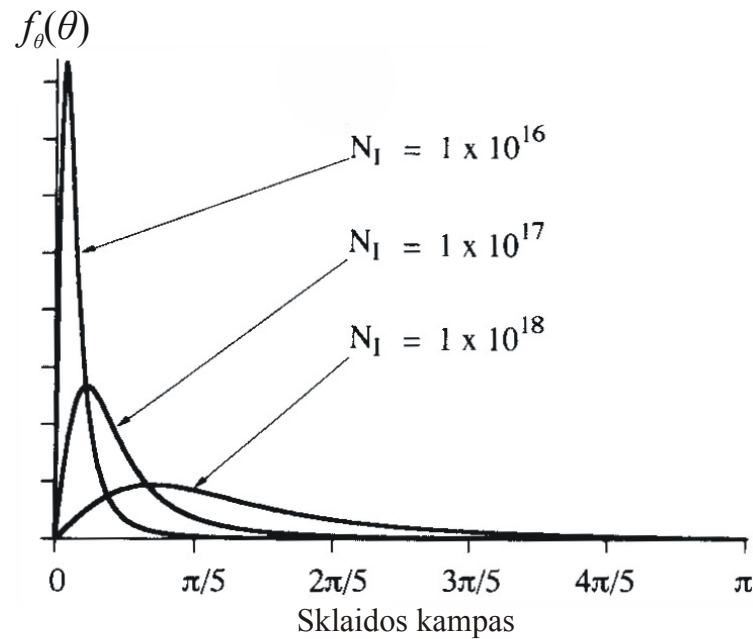
$$\frac{(1 - \cos \theta) [1 + (2k / q_D)^2]}{2 + (1 - \cos \theta)(2k / q_D)^2} = r ; \quad (6.2.22)$$

čia r yra atsitiktinis skaičius, kuris tolygiai pasiskirstęs tarp 0 ir 1 (šis skaičius turi būti generuojamas nepriklausomai nuo atsitiktinio skaičiaus, kuris naudojamas, skaičiuojant kampą ϕ). Lygties (6.2.22) sprendinys yra

$$\cos \theta = 1 - \frac{2r}{1 + (1 - r)(2k / q_D)^2} . \quad (6.2.23)$$

Naudojantis polinio tankio tikimybės tankio išraiška (6.2.21), galima paaiškinti, kodėl, augant jonų koncentracijai N_j , judris mažėja, nors sklaidos sparta taip pat mažėja. Taip yra todėl, kad, augant N_j , didėja sklaidos dideliais kampais tikimybė. Tai akivaizdu 6.4 pav., kuriame pavaizduota funkcija $f_\theta(\theta)$ (čia laikoma, kad $n_0 = N_j$). Matome, kad, esant didesnėms jonų koncentracijoms, kampų θ skirstinys yra platesnis. Vadinasi, nors sklaidos sparta $W(\mathbf{k})$ yra mažesnė, tačiau vidutinis sklaidos įvykių skaičius, kuris reikalingas, kad elektronas „užmirštų“ savo judėjimo istoriją, taip pat yra mažesnis, ir pilnutinis efektas yra tas, kad, padidėjus N_j , vidutinė impulso relaksacijos trukmė sumažėja (vadinasi, judris taip pat sumažėja).

Šiame skyriuje gautos sklaidos spartos išraiškos galioja tik parabolinių juostų artinyje. Laidumo juostos neparaboliškumas tampa svarbus, tik esant aukštai elektrono energijai. Tada joninės priemaišinės sklaidos vaidmuo yra žymiai mažesnis už kitų rūšių sklaidos vaidmenį [1, p. 235], todėl joninės priemaišinės sklaidos spartos išraiška neparabolinės juostos atvejui čia nepateikiama. Tačiau reikia turėti omenyje, kad neparabolinių juostų atveju būsenų tankis $N(E_k)$, kuris įeina į (6.2.15) reiškinių, turi būti skaičiuojamas pagal (1.1.11) formulę.



6.4 pav. Joninės priemaišinės sklaidos kampo θ tikimybės tankis, esant trims legiravimo laipsniams

6.3. Fononinė sklaida

6.3.1. Nelineinė sklaida akustiniais fononais

Žinome, kad fononai yra kristalo gardelės virpesių kvantai. Gardelės jonų virpėjimas aplink jų pusiausvyros taškus sukelia momentinius energijos juostų pokyčius (žr. 6.5 pav.), kurie, savo ruožtu, sukelia elektronų sklaidą. Šiame skyriuje aptarsime tik sklaidą, kurią sukelia *nepoliniai* fononai, t. y. tokie fononai, kurie nėra susiję su kristalo gardelės dipolinio momento pokyčiais.

Elektronų ir fononų sąveika yra vienas iš vyraujančių sklaidos mechanizmų integrinių grandinių komponentuose. Net ir tada, kai temperatūra yra žema (t. y. fononų skaičius yra mažas), egzistuoja didelė savaiminės fononų emisijos tikimybė, nes krūvininkai gali įgyti didelę energiją (dėl stipraus elektrinio lauko) ir paskui dalį tos energijos prarasti fonono pavidalu.

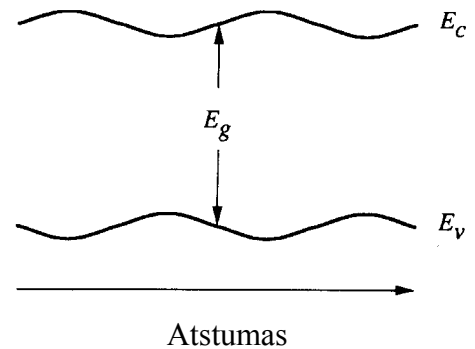
Kadangi akustinių virpesių metu kaimyninių kristalo gardelės atomai juda viena kryptimi, tai gardelės deformacija atsiranda dėl to, kad kaimyninių narvelių poslinkiai nėra tiksliai vienodi (nors ir labai artimi vienas kitam). T. y. gardelės deformacija yra proporcinga gretimų narvelių atomų poslinkių *skirtumui*. Todėl vienelektroninio hamiltoniano trikdys (sąveikos potencialas), dėl kurio atsiranda sklaida išilginiais akustiniais fononais, yra proporcingas atomų poslinkio iš savo pusiausvyros padėčių *išvestinei* koordinatė atžvilgiu [1, p. 41]:

$$H'(\mathbf{r}, t) = \Xi_d \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t). \quad (6.3.1)$$

Čia $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ yra gardelės nuokrypis nuo pusiausvyros padėties taške \mathbf{r} laiko momentu t , o Ξ_d yra proporcingumo koeficientas, kuri vadinama *deformacijos potencialu* (jo matavimo vienetas yra eV). Kuo didesnis deformacijos potencialas, tuo didesnę energijos juostų pokytį sąlygoja duotojo dydžio deformacija. Žymėjimas $\nabla \cdot \mathbf{u}$ reiškia vektoriaus \mathbf{u} divergenciją. Kubinės simetrijos kristaluose elektrono sąveika su akustiniais fononais įmanoma tik tada, kai fononai yra išilginiai. Šalia deformacijos potencialo Ξ_d , nelineinės sklaidos akustiniais fononais tikimybės skaičiavimui reikalingas medžiagos tamprumo koeficientas c_L , kuris lemia išilginių garso bangų greitį v_L [1, p. 41]:

$$\frac{\omega_q}{q} = v_L = \sqrt{\frac{c_L}{\rho}}. \quad (6.3.2)$$

Čia q yra fonono bangos skaičius, ω_q yra fonono dažnis, o ρ yra medžiagos tankis.



6.5 pav. Energijos juostų kitimas dėl kristalo gardelės deformavimo

Akustinių fononų atveju sklaidos iš būsenos \mathbf{k} į būseną \mathbf{k}' tikimybė per laiko vienetą yra lygi [1, p. 43]

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi \Xi_d^2 q^2}{\rho \omega_q V} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} \mp \hbar \omega_q); \quad (6.3.3)$$

čia \mathbf{k}' turi būti toks, kad galiojūt impulso tvermės dėsnis:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}. \quad (6.3.4)$$

\mathbf{q} yra fonono bangos vektorius, o $\hbar \omega_q$ yra fonono energija. (6.3.3) reiškinyje ir tolimesniuose reiškinyuose viršutinis ženklas atitinka fonono sugertį (išnykimą), o apatinis ženklas atitinka fonono emisiją (atsiradimą). Taigi, kiekvienos rūšies fononai sąlygoja du sklaidos vyksmus, kurių tikimybės per laiko vienetą yra skirtingos: fononų sugertis ir fononų emisija. (6.3.3) reiškinyje n_q yra duotosios būsenos fononų vidutinis skaičius (jį nusako Bozė ir Einšteino pasiskirstymo funkcija (1.2.1)). Delta funkcija atspindi energijos tvermės dėsnį: jeigu elektronas sugeria būsenos \mathbf{q} fononą, tada elektrono energija turi padidėti dydžiu $\hbar \omega_q$, o jeigu fononas emituojamas, tada elektrono energija tuo pačiu dydžiu sumažėja:

$$E_{\mathbf{k}'} = E_{\mathbf{k}} \pm \hbar \omega_q. \quad (6.3.5)$$

Parabolinių juostų atveju elektrono energiją galima išreikšti pagal (1.1.4). Įrašę tą išraišką į energijos tvermės dėsnį (6.3.5), gauname:

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar \omega_q. \quad (6.3.6)$$

Įrašę \mathbf{k}' išraišką (6.3.4) į (6.3.6), gauname:

$$\pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta}{m^*} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} = \pm \hbar \omega_q. \quad (6.3.7)$$

Iš čia gaunama tokia sklaidos kampo θ kosinuso išraiška:

$$\cos \theta = \frac{1}{2} \left(\mp \frac{q}{k} + \frac{\hbar \omega_q}{E_{\mathbf{k}}} \frac{k}{q} \right). \quad (6.3.8)$$

Kambario temperatūroje akustinių fononų, kurie dalyvauja sklaidoje, energija yra žymiai mažesnė už $k_B T$, todėl elektronų sąveiką su akustiniais fononais galima laikyti tampriąja (t. y. galima laikyti, kad elektrono energija sklaidos metu nekinta), o apibrėžtos būsenos akustinių fononų skaičių galima įvertinti pagal apytikslę formulę $n(\omega) \approx k_B T / \hbar \omega$ (žr. (1.2.1)). Kadangi pastarasis skaičius yra žymiai didesnis už vienetą, tai $n_q \approx n_q + 1$. Atlikus šiuos pakeitimus ir atsižvelgus į (6.3.2) bei (6.3.7), sklaidos tikimybės išraišką (6.3.3) galima perrašyti šitaip:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi \Xi_d^2 k_B T}{\hbar c_L V} \frac{k}{q E_{\mathbf{k}}} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta \right); \quad (6.3.9)$$

Be to, prilyginus delta funkcijos argumentą nuliui, gaunamos mažiausioji ir didžiausioji įmanomos q vertės:

$$\begin{aligned} q_{\min} &= 0, \\ q_{\max} &= 2k. \end{aligned} \quad (6.3.10)$$

Pilnutinė akustinės fononinės sklaidos sparta skaičiuojama pagal bendrąją formulę (6.1.12), tačiau šiuo atveju reikia integruoti \mathbf{q} atžvilgiu:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^3 \mathbf{k}' = \frac{\Xi_d^2 k_B T}{8\pi^2 \hbar c_L} \frac{k}{E_{\mathbf{k}}} \int \frac{1}{q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta \right) d^3 \mathbf{q}. \quad (6.3.11)$$

Suintegravus, gaunama tokia akustinės fononinės sklaidos spartos išraiška:

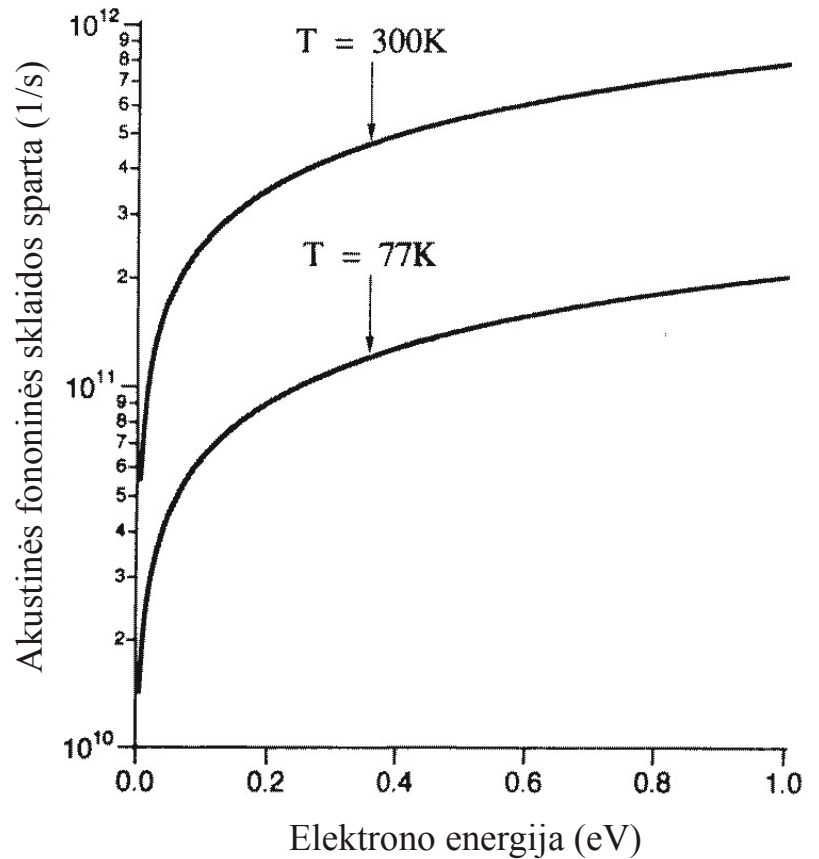
$$W_{\text{par}}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi \Xi_d^2 k_B T}{\hbar c_L} N(E_{\mathbf{k}}); \quad (6.3.12)$$

čia indeksas „par“ nusako, kad ši formulė galioja parabolinių juostų atveju. Čia $N(E_{\mathbf{k}})$ skaičiuojamas pagal (1.1.10) formulę. Neparabolinių juostų atveju [1, p. 236]

$$W(\mathbf{k}) = \frac{2\pi \Xi_d^2 k_B T}{\hbar c_L} N(E_{\mathbf{k}}) \frac{(1 + \alpha E_{\mathbf{k}})^2 + \frac{1}{3} (\alpha E_{\mathbf{k}})^2}{(1 + 2\alpha E_{\mathbf{k}})^2}; \quad (6.3.13)$$

čia α yra neparaboliškumo koeficientas, o būsenų tankis $N(E_{\mathbf{k}})$ skaičiuojamas pagal (1.1.11) formulę. **Pastaba:** (6.3.13) formulėje ir visose tolesnėse formulėse energija yra atskaitoma nuo slėnio „dugno“, t. y. nuo mažiausios energijos. Bangos vektorius \mathbf{k} taip pat yra atskaitomas nuo vertės, kuri atitinka slėnio dugną.

6.6 pav. pavaizduota akustinės fononinės sklaidos spartos priklausomybė nuo elektrono energijos GaAs Γ slėnyje, esant dviem temperatūroms. Sklaidos spartos didėjimas, augant elektronų energijai, aiškinamas tuo, kad sklaidos sparta proporcinga būsenų tankiui $N(E_k)$, kuris yra didėjant energijos funkcija. T. y., kuo didesnė elektrono energija, tuo didesnis skaičius būsenų, į kurias jis gali būti išsklaidytas. Todėl ir sklaidos sparta yra didesnė. Sklaidos spartos didėjimas didėjanti temperatūrai yra susijęs su tuo, kad didėjant temperatūrai didėja fononų skaičius (ši akustinių fononų skaičiaus didėjimą atspindi daugiklis T , kuris įeina į sklaidos spartos išraiškas (6.3.12) ir (6.3.13)).



6.6 pav. Akustinės fononinės sklaidos spartos priklausomybė nuo elektrono energijos

6.3.2. Kampinių koordinatų reikšmių generavimas, kai sklaida yra izotropinė

Nepolinė fononinė sklaida yra izotropinė. Tai reiškia, kad, jeigu sklaidos taškas yra sferos centre, tada tikimybė, kad po sklaidos elektronas išlėks pro duotąjį tos sferos ploto elementą dS , yra lygi to ploto elemento ir visos sferos ploto santykiui. Naudojant sferines koordinates, sferos ploto elementas išreiškiamas šitaip:

$$dS = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi. \quad (6.3.13a)$$

(žr. 6.7 pav.). Vadinasi, kai sklaida yra izotropinė, tada sklaidos į tą ploto elementą tikimybė yra lygi

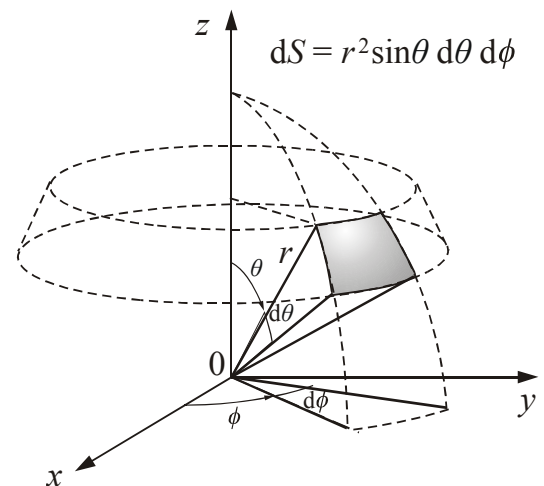
$$dP = \frac{dS}{4\pi r^2} = \frac{1}{4\pi} \sin \theta d\theta d\phi. \quad (6.3.13b)$$

Kampai ϕ ir θ generuojami nepriklausomai vienas nuo kito. Azimutinis sklaidos kampas ϕ generuojamas pagal formulę (6.2.20). Kad išvesti polinio sklaidos kampo θ generavimo formulę, reikia taikyti anksčiau aprašytą bendrą metodą, t. y. visų pirma generuoti atsitiktinį skaičių r , kuris tolygiai pasiskirstęs nuo 0 iki 1, o paskui spręsti (6.2.18) lygtį. Šiuo atveju tos lygties kairiojoje pusėje turi būti funkcija

$$P(\theta) = \int_0^\theta f(\theta') d\theta', \quad (6.3.13b)$$

čia $f(\theta)$ yra kampo θ tikimybės tankis. To tikimybės tankio išraiška gaunama iš (6.3.13b) formulės, taikant bendrąją tikimybės tankio apibrėžtį: tai yra funkcija, kurią padauginus iš $d\theta$, turi būti gauta tikimybė, kad elektronas bus išsklaidytas į kampų intervalą nuo θ iki $\theta + d\theta$. Ši tikimybė gaunama, suintegravus (6.3.13b) reiškinį azimutinio kampo ϕ atžvilgiu nuo 0 iki 2π . Taip gauname:

$$dP = \frac{1}{2} \sin \theta d\theta. \quad (6.3.13c)$$



6.7 pav. Sferos paviršiaus elementas, į kurį yra išsklaidomas elektronas

Tai yra tikimybė, kad elektronas bus išsklaidytas į žiedinę juostą, kuri atitinka polinio kampo intervalą nuo θ iki $\theta + d\theta$ (žr. 6.7 pav.).

$$f(\theta) \equiv \frac{dP}{d\theta} = \frac{1}{2} \sin \theta. \quad (6.3.13d)$$

Irašius pastarąjį reiškinį į (6.3.13b), gaunamas reiškinys

$$P(\theta) = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta). \quad (6.3.13e)$$

Irašius šį reiškinį į (6.2.18) lygties kairiąją pusę ir išreiškus $\cos \theta$, gaunama galutinė formulė, pagal kurią reikia generuoti polinio kampo θ vertes, kai sklaida yra izotropinė:

$$\cos \theta = 1 - 2r; \quad (6.3.14)$$

čia r yra atsitiktinis skaičius, kuris tolygiai pasiskirstęs tarp 0 ir 1.

6.3.3. Nepolinė sklaida optiniais fononais

Nors optinių virpesių atveju kaimyniniai kristalo atomai juda priešingomis kryptimis (o akustinių virpesių atveju jie juda ta pačia kryptimi), tačiau sklaida optiniais nepoliniais fononais gali būti analizuojama iš esmės tais pačiais metodais, kaip sklaida akustiniais nepoliniais fononais.

Kadangi optinių virpesių metu kristalo gardelės narvelio atomai juda priešingomis kryptimis, tai kristalo gardelės deformacija yra „sutelkta“ kiekviename narvelyje. Vadinasi, šiuo atveju deformaciją nusako pats atomo nuokrypis nuo pusiausvyros padėties (o ne gretimų narvelių atomų poslinkių skirtumas, kaip akustinių virpesių atveju). Todėl vienelektroninio hamiltoniano trikdys (sąveikos potencialas), dėl kurio atsiranda nepolinė sklaida optiniais fononais, yra tokio pavidalo [1, p. 46]:

$$H'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad (6.3.15)$$

čia $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ yra gardelės nuokrypis nuo pusiausvyros padėties taške \mathbf{r} laiko momentu t , o \mathbf{D}_0 yra optinio deformacijos potencialo konstanta (vektorinis dydis, kurio dimensija yra eV/cm). Šiuo atveju, atlikus skaičiavimus, kurie analogiški praeitame skyriuje atliktiems skaičiavimams, gaunama tokia nepolinės optinės sklaidos iš būsenos \mathbf{k} į būseną \mathbf{k}' tikimybės per laiko vienetą išraiška [1, p. 47]

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi D_0^2}{\rho \omega_0 V} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq \cos \theta}{m^*} \mp \hbar \omega_0 \right) \quad (6.3.15a)$$

čia n_0 yra optinių fononų skaičius, o ω_0 yra jų dažnis. Nepolinės optinės sklaidos metu elektronas gali arba likti tame pačiame laidumo juostos slėnyje, arba pereiti į kitą slėnį. Kai sklaida yra tame pačiame slėnyje, tada joje dalyvaujančių fononų bangos vektorius yra mažas, o tarp slėnės sklaidos atveju fononų bangos skaičius yra palyginti didelis (I Brijueno zonos matmenų eilės). Optinių fononų energija priklauso nuo jų bangos vektoriaus: mažo bangos vektoriaus (arti I Brijueno zonos centro) optinių fononų energija yra šiek tiek didesnė, negu arti zonos krašto (žr. 1.4 pav.). Indeksas „0“ parodo, kad yra nagrinėjama sklaida slėnio viduje, kai sklaidą sąlygoja palyginti mažo bangos vektoriaus optiniai fononai (tarp slėnės sklaida bus aptariama kitame skyriuje). Kadangi $\cos \theta$ mažiausia reikšmė yra -1 , o didžiausia reikšmė $+1$, tai iš reikalavimo, kad delta funkcijos argumentas būtų lygus nuliui, išplaukia didžiausio ir mažiausio optinio fonono bangos skaičiaus išraiškos:

$$q_{\min} = k \left| 1 - \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_0}{E_k} \right)^{1/2} \right|, \quad (6.3.15b)$$

$$q_{\max} = k \left[1 + \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_0}{E_k} \right)^{1/2} \right]. \quad (6.3.15c)$$

Kaip ir nagrinėjant akustinę sklaidą, pilnutinė nepolinės optinės fononinės sklaidos sparta (esant duotai pradinei elektrono būsenai \mathbf{k}) gaunama suintegravus (6.3.15a) reiškinį visų galimų galutinių būsenų atžvilgiu. Kadangi galutinę būseną lemia fonono bangos vektorius \mathbf{q} , tai integruoti galima \mathbf{q} atžvilgiu. Tada parabolinės laidumo juostos atveju gaunama tokia nepolinės sklaidos optiniais fononais tikimybės per laiko vienetą išraiška [1, p. 48]:

$$W_{\text{par}}(\mathbf{k}) = \frac{\pi D_0^2}{\rho \omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) N(E_k \pm \hbar \omega_0), \quad (6.3.16)$$

Dažnio ω_0 ir apibrėžto bangos vektoriaus optinių fononų skaičių nusako Bozė ir Einšteino pasiskirstymo funkcija

$$n_0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right) - 1}. \quad (6.3.17)$$

(6.3.15a)–(6.3.16) formulėse viršutinis ženklas atitinka fonono absorbciją, o apatinis – fonono emisiją. Tos formulės galioja tik tada, kai kvantinio šuolio metu elektronas lieka tame pačiame slėnyje. Būsenų tankis $N(E_k)$ apskaičiuojamas pagal (1.1.10) formulę.

Neparabolinės laidumo juostos atveju nepolinės optinės sklaidos slėnyje sparta lygi [1, p. 236]

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi D_o^2 [n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}]}{\rho\omega_0} N(E_{k'}) F(E_k, E_{k'}), \quad (6.3.18)$$

kur

$$F(E_k, E_{k'}) = \frac{(1 + \alpha E_k)(1 + \alpha E_{k'})}{(1 + 2\alpha E_k)(1 + 2\alpha E_{k'})}. \quad (6.3.19)$$

Čia α yra duotojo slėnio neparaboliškumo koeficientas (žr. (1.1.5)), o $E_{k'} = E_k \pm \hbar\omega$. Formulėje (6.3.18) būsenų tankis $N(E_k)$ apskaičiuojamas pagal (1.1.11) formulę.

Optinių fononų energija yra tos pačios eilės, kaip vidutinė krūvininkų šiluminio judėjimo energija kambario temperatūroje ($k_B T$), todėl optinė fononinė sklaida yra netamprioji (kitaip negu akustinė fononinė sklaida, kurią sąlygoja daug mažesnės energijos akustiniai fononai).

Nepolinė optinė sklaida yra izotropinė (kaip ir nepolinė akustinė sklaida), todėl sklaidos kampai ϕ ir θ turi būti generuojami pagal tas pačias formules, kaip ir nepolinės akustinės sklaidos atveju, t. y. pagal (6.2.20) ir (6.3.14) formules.

6.3.4. Tarpslėnė sklaida

Vykstant nepolinei sklaidai trumpabangiais optiniais arba akustiniais fononais, elektronas gali peršokti į kitą laidumo juostos slėnį. Pvz., elektronas gali peršokti iš Γ slėnio (kuris yra Brijueno zonos centre) į kurį nors iš L slėnių (kurie išsidėstę $\langle 111 \rangle$ kryptimis ant Brijueno zonos krašto) arba į kurį nors iš X slėnių (kurie išsidėstę $\langle 100 \rangle$ kryptimis ant Brijueno zonos krašto). Tokia sklaida vadinama **tarpslėne sklaida**. Kubinės simetrijos puslaidininkuose, jeigu pradinis slėnis nėra vienas iš L slėnių, nepolinė optinė fononinė sklaida visada yra tarpslėnė. Taip yra dėl vadinamųjų atrankos taisyklių, kurios išplaukia iš kristalo simetrijos ir kurios draudžia netarpslėnę sklaidą Γ ir X slėniuose [1, p. 48]. Kai pradinis slėnis yra L slėnis, tada nepolinė optinė fononinė sklaida gali būti ir tarpslėnė, ir netarpslėnė. Taigi, nagrinėjant kubinės singonijos puslaidininkius, praeito skyriaus formules (nusakančias netarpslėnės optinės fononinės sklaidos spartą) galima taikyti tik tada, kai elektronas yra L slėnyje. Sąveikos potencialo, kuris nusako tarpslėnę sklaidą, pavidalas panašus į (6.3.15) [1, p. 49]:

$$H'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_{ij} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad (6.3.20)$$

kur \mathbf{D}_{ij} yra tarpslėnės deformacijos potencialas, kuris nusako tarpslėnės sklaidos intensyvumą. Atitinkama tarpslėnės sklaidos tikimybė per laiko vienetą parabolinės juostos atveju lygi [1, p. 49]

$$W_{\text{par}}(\mathbf{k}) = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho\omega_{ij}} [n(\omega_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}] N_j(E_{k'}), \quad (6.3.21)$$

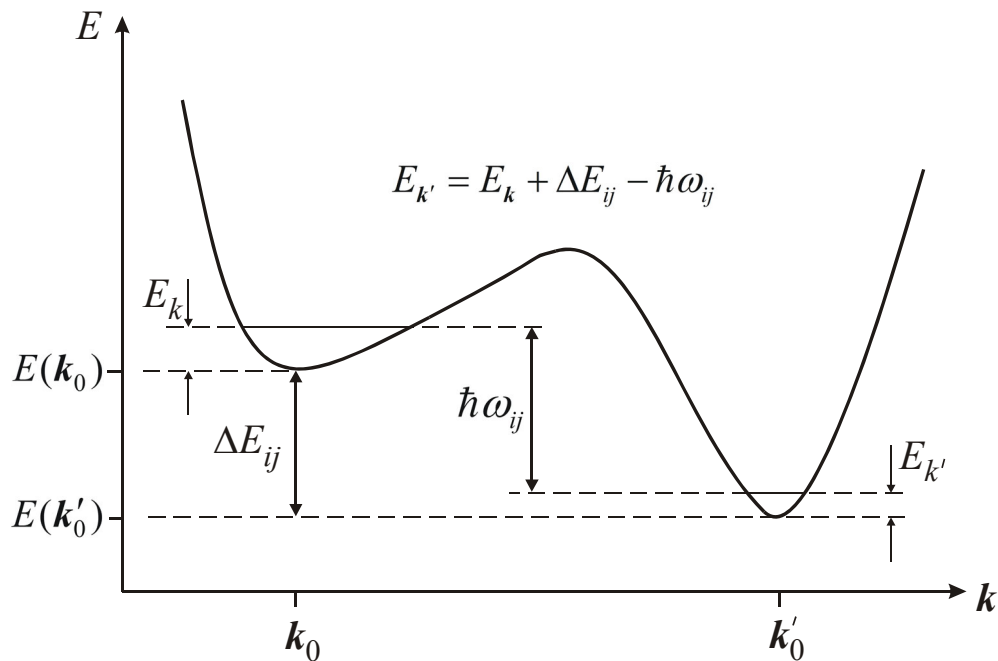
kur ω_{ij} yra fononų dažnis arti Brijueno zonos krašto, Z_j yra galimų ekvivalenčių galutinių slėnių skaičius, o N_j yra būsenų tankis *galutiniame slėnyje*. $E_{k'}$ yra elektrono energija galutiniame slėnyje. Kadangi ši energija yra atskaitoma nuo *galutinio* slėnio mažiausios energijos, o pradinė energija E_k yra atskaitoma nuo *pradinio* slėnio mažiausios energijos, tai energijos tvermės dėsnis šiuo atveju užrašomas šitaip:

$$E_{k'} = E_k + \Delta E_{ij} \pm \hbar\omega_{ij}, \quad (6.3.21a)$$

kur ΔE_{ij} yra pradinio ir galutinio slėnių mažiausių energijų skirtumas (žr. 6.8 pav.):

$$\Delta E_{ij} = E(\mathbf{k}_0) - E(\mathbf{k}'_0). \quad (6.3.21b)$$

Čia \mathbf{k}_0 ir \mathbf{k}'_0 yra bangos vektoriai, atitinkantys pradinio ir galutinio slėnių mažiausios energijos vertes, o $E(\mathbf{k}_0)$ ir $E(\mathbf{k}'_0)$ yra tos energijos vertės, kai energijos atskaitos vertė yra bendra abiem slėniams. Reikia atkreipti dėmesį į tai, kad $N_j(E_{k'})$ yra *galutinio* slėnio energinis būsenų tankis. Kai juostos yra parabolinės, $N_j(E_{k'})$ apskaičiuojamas pagal (1.1.10) formulę, o neparabolinių juostų atveju – pagal (1.1.11) formulę. Kadangi elektrono efektinės masės m^* skirtinguose slėniuose yra skirtingos, tai $N_j(E_k)$ nėra lygus



6.8 pav. Energijos tvermės dėsnis, kai elektronas pereina į mažesnės energijos slėnį ir yra emituojamas fononas, kurio energija $\hbar\omega_{ij}$

pradinio slėnio būsenų tankiui $N(E_k)$ (žr. būsenų tankio išraišką (1.1.10)). Dažnis ω_{ij} yra šiek tiek mažesnis už dažnį ω_0 , kuris atitinka artimą nuliui optinio fonono banginį vektorių (žr. 1.4 pav.). Palyginus (6.3.21) su netarp slėnės optinės fononinės sklaidos spartos išraiška (6.3.16), akivaizdu, kad abi formulės yra vienodo pavidalo. Tai ir suprantama, nes jos abi nusako tą patį fizikinį vyksmą – nepolinę optinę fononinę sklaidą. Skirtumas yra tik kiekybinis: skiriasi galutinės elektrono būsenos apibrėžtys (vienu atveju galutinė elektrono būseną atitinka tą patį slėnį, o kitu atveju ji atitinka kitą slėnį). Be to, tarp slėnės sklaidos spartos išraiškoje yra daugiklis Z_j , kurio nėra netarp slėnės sklaidos spartos išraiškoje.

Ekvivalenčių galutinių slėnių skaičius Z_j nustatomas, remiantis šuolio kryptimi ir šiais duomenimis: ekvivalenčių L slėnių skaičius Brijueno zonoje lygus 4, o ekvivalenčių X slėnių skaičius Brijueno zonoje lygus 3 [2, p. 86]. Tačiau kartais laikoma, kad ekvivalenčių X slėnių skaičius lygus 6, t. y. priešinguose Brijueno zonos kraštuose esantys slėniai, kurių padėty skiriasi atvirkštinės gardelės translacijos vektoriumi, yra laikomi skirtingais ekvivalenčiais slėniais [3]. Naudojant formulę (6.3.21), reikia atkreipti dėmesį, kad deformacijos potencialas D_{ij} būtų apibrėžtas tam pačiam slėnių skaičiui Z_j , kuris įeina į šią formulę [2, p. 96]. Pvz., jeigu žinyne D_{ij} vertė apibrėžta X slėnių skaičiui $Z_j = 6$, o formulėje (6.3.21) naudojamas $Z_j = 3$, tada žinyne pateiktąją D_{ij} vertę reikia padauginti iš $\sqrt{2}$. Šuoliai tarp ekvivalenčių slėnių, kurie yra priešinguose Brijueno zonos kraštuose, vadinami **g procesais**, o kitų rūšių šuoliai tarp ekvivalenčių slėnių vadinami **f procesais** arba **h procesais**, priklausomai nuo atstumo tarp pradinio ir galutinio slėnių [2, p. 87].

Neparabolinės laidumo juostos atveju tarp slėnės sklaidos sparta lygi [1, p. 236]

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi D_{ij}^2 [n(\omega_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}]}{\rho \omega_{ij}} Z_j N_j(E_{k'}) F_{ij}(E_k, E_{k'}), \quad (6.3.22)$$

$$F_{ij}(E_k, E_{k'}) = \frac{(1 + \alpha_i E_k)(1 + \alpha_j E_{k'})}{(1 + 2\alpha_i E_k)(1 + 2\alpha_j E_{k'})}. \quad (6.3.23)$$

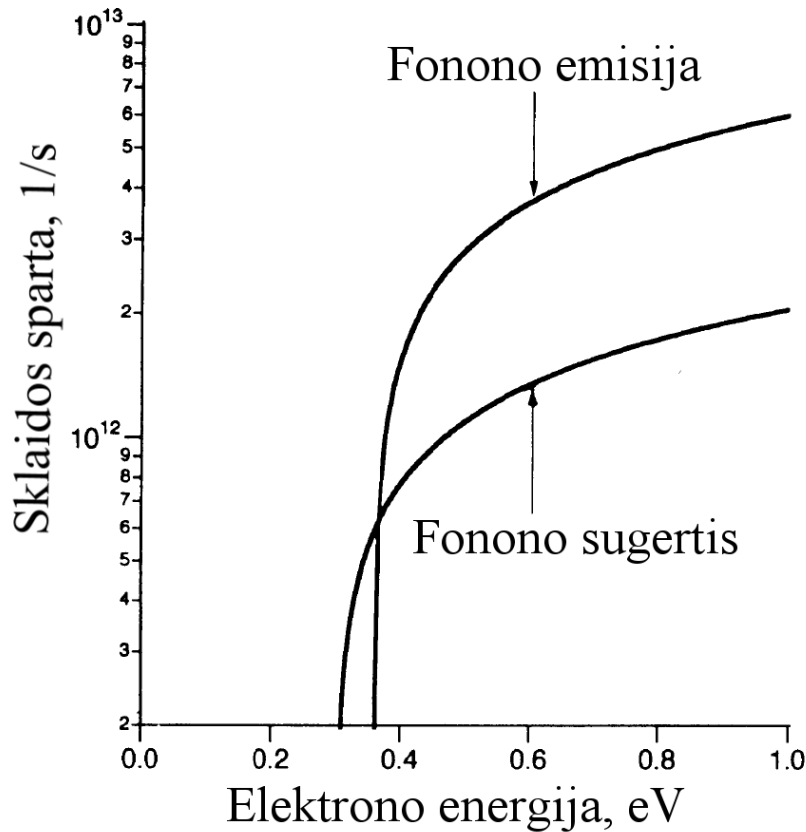
Čia α_i ir α_j yra atitinkamai pradinio ir galutinio slėnių neparaboliškumo koeficientai.

6.9 pav. parodyta galio arsenido elektronų optinės fononinės sklaidos iš Γ slėnio į L slėnį spartos priklausomybė nuo elektrono energijos. Matome, kad egzistuoja tam tikra mažiausia („slenkstinė“) elektrono energija, nuo kurios tampa galima tokia sklaida. Taip yra todėl, kad galio arsenido Γ slėnio energija yra mažesnė už L slėnio energiją, t. y. (6.3.21a) formulėje $\Delta E_{ij} < 0$. Kitaip sakant $\Delta E_{ji} > 0$ (čia $\Delta E_{ji} \equiv -\Delta E_{ij}$). Slenkstinę elektrono energiją galima apskaičiuoti išreiškus E_k iš (6.3.21a) formulės:

$$E_k = E_{k'} + \Delta E_{ji} \mp \hbar\omega_{ij}, \quad (6.3.23a)$$

čia, kaip ir anksčiau, viršutinis ženklas reiškia fonono absorbciją, o apatinis reiškia fonono emisiją. Mažiausia galima E_k vertė gaunama įrašius vietoj $E_{k'}$ nulį:

$$E_{k \min} = \Delta E_{ji} \mp \hbar\omega_{ij}. \quad (6.3.23a)$$



6.9 pav. GaAs elektronų sklaidos iš Γ slėnio į L slėnį spartos priklausomybė nuo elektrono energijos. Kadangi GaAs Γ slėnio energija yra mažesnė už L slėnio energiją, tai šis vyksmas, sugeriant fononą, tampa galimas tik tada, kai elektrono energija Γ slėnyje (atskaičyta nuo to slėnio dugno) yra didesnė už $\Delta E_{ji} - \hbar\omega_{ij}$. Šis vyksmas emituojant fononą yra galimas tik tada, kai elektrono energija $> \Delta E_{ji} + \hbar\omega_{ij}$. Čia $\Delta E_{ji} = -\Delta E_{ji} > 0$ yra galutinio (L) ir pradinio (Γ) slėnių energijų skirtumas

Tarpslėnės sklaidos atveju elektrono bangos vektoriaus pokytis yra artimas Brijueno zonos spinduliui. Tačiau elektrono judėjimo modeliavimui reikalingas tik bangos vektoriaus nuokrypis nuo \mathbf{k} vertės, atitinkančios galutinio slėnio mažiausią energiją (žr. 1.1 skyrių), kuris yra daug mažesnis už Brijueno zonos matmenis.

6.3.5. Polinė sklaida optiniais fononais

Polinę fononinę sklaidą sukelia tik išilginiai fononai [1, p. 49] ir tik joniniuose puslaidininkuose (pvz., GaAs). Polinė sklaida išilginiais akustiniais fononais (pjezoelektrinė sklaida) svarbi tik labai žemose temperatūrose ir labai grynuose puslaidininkuose. Kambario temperatūroje pjezoelektrinės sklaidos galima nepaisyti. Polinės optinės fononinės sklaidos atveju vienelektroninio hamiltoniano trikdys yra (6.1.3) pavidalo, o jo amplitudė lygi

$$U(\mathbf{r}) = e \int E_{\parallel}(\mathbf{r}) dl, \quad (6.3.24)$$

kur E_{\parallel} yra elektrinio lauko stipris, kurį sąlygoja kristalo gardelės elementariojo narvelio dipolinio momento kitimas, sklindant išilginei optinei deformacijos bangai, o l yra koordinatė bangos sklaidimo kryptimi. Šį elektrinį lauką galima susieti su teigiamųjų ir neigiamųjų jonų reliatyviuoju poslinkiu $\mathbf{u} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$ (čia \mathbf{u}_+ žymi narvelio teigiamojo jono poslinkį, o \mathbf{u}_- – neigiamojo jono poslinkį):

$$E_{\parallel}(\mathbf{r}) = -\frac{N e^* u(\mathbf{r})}{V \epsilon_0 \epsilon_{\infty}}, \quad (6.3.25)$$

kur N yra jonų porų skaičius, V yra kristalo tūris, ϵ_{∞} yra dielektrinė skvarba optiniame diapazone (kai joninė poliarizacija jau nepasireiškia), $u(\mathbf{r}) = |\mathbf{u}(\mathbf{r})|$, o e^* yra efektinis krūvis [1, p. 51]:

$$e^* = \sqrt{\epsilon_0} \left(\frac{VM}{N} \right)^{1/2} \omega_0 \epsilon_{\infty} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_s} \right)^{1/2}, \quad (6.3.26)$$

kur M yra teigiamojo ir neigiamojo jonų redukuotoji masė ($1/M = 1/M_+ + 1/M_-$), ω_0 yra optinių fononų dažnis, o ε_s yra statinė dielektrinė skvarba. Įrašę (6.3.25) į (6.3.24) ir pasinaudoję tuo, kad plokščios bangos atveju $u(\mathbf{r}) = u_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})} = u_0 e^{iql}$ (čia \mathbf{q} yra fonono bangos vektorius, o $q = |\mathbf{q}|$), gauname

$$U(\mathbf{r}) = i \frac{N}{V} \frac{e \cdot e^*}{q \varepsilon_0 \varepsilon_\infty} u(\mathbf{r}). \quad (6.3.27)$$

Parabolinės laidumo juostos atveju sklaidos poliniais optiniais fononais tikimybė per laiko vienetą lygi [1, p. 53]:

$$W_{par}(\mathbf{k}) = \frac{e^2 \omega_0}{8\pi \varepsilon_0 \varepsilon_p} \cdot \frac{k}{E_k} [n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}] \ln \left(\frac{q_{max}}{q_{min}} \right), \quad (6.3.28)$$

kur ω_0 yra optinių fononų dažnis (fononų energijos ir redukuotosios Planko konstantos santykis), $1/\varepsilon_p = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_s$, o q_{max} ir q_{min} yra fonono bangos skaičiaus q ribinės vertės:

$$q_{min} = k \left| 1 - \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_0}{E_k} \right)^{1/2} \right|, \quad (6.3.29a)$$

$$q_{max} = k \left[1 + \left(1 \pm \frac{\hbar \omega_0}{E_k} \right)^{1/2} \right] \quad (6.3.29b)$$

(šios formulės išplaukia iš energijos ir impulso tvermės dėsnių). Formulėse (6.3.28) ir (6.3.29) viršutinis ženklas atitinka fonono absorbciją, o apatinis – fonono emisiją.

Neparabolinės laidumo juostos atveju vietoj (6.3.28) gauname [1, p. 236]

$$W(\mathbf{k}) = \frac{e^2 \omega_0 [n(\omega_0) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}]}{8\pi \varepsilon_0 \varepsilon_p} \cdot \frac{k}{\gamma(E_k)} \frac{d\gamma(E_{k'})}{dE_{k'}} F_0(E_k, E_{k'}), \quad (6.3.30)$$

kur

$$F_0(E_k, E_{k'}) = \frac{1}{C} \left[A \ln \left| \frac{\sqrt{\gamma(E_k)} + \sqrt{\gamma(E_{k'})}}{\sqrt{\gamma(E_k)} - \sqrt{\gamma(E_{k'})}} \right| + B \right]. \quad (6.3.31)$$

Čia $E_{k'} = E_k \pm \hbar \omega$, funkciją $\gamma(E_k)$ apibrėžia formulė (1.1.5) (kurioje energija E_k atskaitoma nuo minimumo energijos $E(\mathbf{k}_0)$), o koeficientai A , B ir C lygūs

$$A = \{2(1 + \alpha E_k)(1 + \alpha E_{k'}) + \alpha[\gamma(E_k) + \gamma(E_{k'})]\}^2,$$

$$B = -2\alpha \sqrt{\gamma(E_k)\gamma(E_{k'})} \{4(1 + \alpha E_k)(1 + \alpha E_{k'}) + \alpha[\gamma(E_k) + \gamma(E_{k'})]\},$$

$$C = 4(1 + \alpha E_k)(1 + \alpha E_{k'})(1 + 2\alpha E_k)(1 + 2\alpha E_{k'}),$$

7. Viendalelis Monte Karlo metodas

7.1. Įvadas

Puslaidininkinių įtaisų (pvz., diodo arba tranzistoriaus) teorinėje analizėje yra įprasta elektros srovę aprašyti taip pat, kaip skysčio (ištininės terpės) judėjimą. Toks artinys nėra tikslus, nes tikrovėje elektros srovę sąlygoja daugelio atskirų dalelių (elektronų ir skylių) judėjimas įtaiso tūryje. Tikslus teorinis įtaiso aprašymas gali būti gautas, tik išsprendus Bolcmano kinetinę lygtį ir Maksvelo lygtis. Tačiau tos lygtys bendruoju atveju yra pernelyg sudėtingos, kad jas būtų įmanoma išspręsti tiksliai. Todėl jų sprendimas remiasi kai kuriom supaprastinančiom prielaidom. Tai yra vadinamieji „dreifo ir difuzijos“ bei „hidrodinaminis“ modeliai. Šių modelių tinkamumas yra ribotas, ir šiuolaikiniams puslaidininkiniams įtaisams jie netinka. Laimei, egzistuoja netiesioginis šio uždavinio sprendimo būdas, kuris nereikalauja jokių išankstinių prielaidų ir supaprastinimų. Tas metodas – tai vadinamasis **Monte Karlo metodas**.

Monte Karlo modeliavimo esmė yra ta, kad kiekviena dalelė yra „sekama“ nuo jos atsiradimo (t. y. generavimo arba įėjimo į įtaisą) iki išnykimo (t. y. rekombinavimo arba išėjimo iš įtaiso). Šio proceso metu kiekviena dalelė patiria daug sklaidos įvykių. Laisvo lėkio laiko intervalai tarp sklaidos momentų yra atsitiktiniai (jie apskaičiuojami, naudojant atsitiktinių skaičių generatorių). Konkretus sklaidos tipas bei dalelės judėjimo kryptis po sklaidos taip pat pasirenkami atsitiktinai. Todėl dalelių judėjimo trajektorijos yra netvarkios (chaotiškos). Tokiu būdu apskaičiuojamus daugelio dalelių trajektorijas, tampa įmanoma sumodeliuoti įtaiso charakteristikas. Nors, taikant Monte Karlo metodą, nėra naudojama Bolcmano kinetinė lygtis, tačiau Monte Karlo modeliavimo rezultatas yra Bolcmano kininės lygties ir Maksvelo lygčių sprendinys, kuris yra tuo tikslesnis, kuo didesnis apskaičiuotų trajektorijų skaičius. Taigi, galima teigti, kad Monte Karlo metodas yra netiesioginis Bolcmano kininės lygties ir Maksvelo lygčių sprendimo metodas. Monte Karlo metodas tinka, modeliuojant ir stacionariąją (nepriklausančią nuo laiko), ir nestacionariąją (kintančią laike) įtaiso būseną. Kadangi šis modeliavimas remiasi „pirmaisiais principais“, tai, naudojant Monte Karlo metodą, tampa įmanoma sukurti pilną įtaiso veikimo vaizdą, iki pačių smulkesnių detalių. Galima teigti, kad šis metodas „imituoja gamtą“.

Terminą „Monte Karlo metodas“ XX a. penktajame dešimtmetyje išpopuliarino keli fizikai ir matematikai, kurie dirbo vadinamajam „Manheteno projektui“ („*Manhattan Project*“), kurio tikslas buvo pirmosios atominės bombos sukūrimas. Vienas iš jų buvo italų fizikas Enrikas Fermis. Jis naudojo atsitiktinius skaičius, skaičiuodamas neutronų judėjimo kryptį, skilus urano branduoliui. Kadangi Monte Karlo metodas reikalauja intensyvių skaičiavimų, tai jo populiarumas visada buvo susijęs su kompiuterių greitaiegiškumu. Didėjant kompiuterių pajėgumams, palaiptiesiui augo ir šiuo metodu sprendžiamų uždavinių skaičius, ir jo vartotojų skaičius. Šiuo metu paprastų puslaidininkinių struktūrų modeliavimui Monte Karlo metodu jau nėra reikalingi superkompiuteriai; tokius uždavinius galima spręsti ir personaliniu kompiuteriu.

Kaip minėta, puslaidininkinio įtaiso pilnąją teorinį aprašymą sudaro Maksvelo lygtys ir Bolcmano kinetinė lygtis. Maksvelo lygtys nusako jėgas, kurios veikia kiekvieną krūvininką, o Bolcmano kinetinė lygtis nusako daugelio dalelių sistemos statistinių savybių kitimą laike dėl minėtųjų jėgų ir dėl sklaidos. Maksvelo lygtis, kuri yra svarbiausia puslaidininkinių įtaisų aprašymui, yra ši:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho; \quad (7.1.1)$$

čia \mathbf{D} yra elektrinės slinkties vektorius, ρ yra elektros krūvio erdvinis tankis, o ∇ yra diferencialinis operatorius „nabla“, kuris apibrėžiamas šitaip:

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z};$$

čia x , y ir z yra Dekarto koordinatės, o \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y ir \mathbf{e}_z yra atitinkami vienetiniai vektoriai (vektorinius fizikinius dydžius žymėsime pastorintu pasvirusiu šriftu, o skaliarinius fizikinius dydžius žymėsime normalaus storio pasvirusiu šriftu). Žymuo „ $\nabla \cdot \mathbf{D}$ “ reiškia vektorių ∇ ir \mathbf{D} skaliarinę sandaugą, kuri yra lygi vektorių \mathbf{D} divergencijai (ji dar žymima šitaip: „ $\text{div } \mathbf{D}$ “). Izotropinėje medžiagoje sąryšis tarp elektrinės slinkties ir elektrinio lauko stiprio vektorių yra toks:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}; \quad (7.1.2)$$

čia ε yra medžiagos dielektrinė skvarba, ε_0 yra elektrinė konstanta ($\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ F/m), o \mathbf{E} yra elektrinio lauko stiprio vektorius. Jeigu ε nepriklauso nuo koordinatų, tada, įrašę (7.1.2) į (7.1.1), gauname tokią lygtį:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon}. \quad (7.1.3)$$

Žinome, kad elektrinio lauko stipris \mathbf{E} yra lygus elektrostatinio (skaliarinio) potencialo φ gradientui:

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (7.1.4)$$

Irašę (7.1.4) į (7.1.3), gauname vadinamąją **Puasono lygtį**:

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon}. \quad (7.1.5)$$

Teoriškai aprašant daugelio dalelių sistemą, reikia naudoti statistinius analizės metodus, t. y. vietoj atskirų dalelių judėjimo reikia nagrinėti tų dalelių statistinio skirstinio kitimą. Skirstinį nusako vadinamasis **tikimybės tankis** $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Tai yra dalelės spindulio vektoriaus \mathbf{r} , impulso (judesio kiekio) vektoriaus \mathbf{p} ir laiko t funkcija, kurios prasmė yra tokia: dydis $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}$ yra lygus tikimybei, kad atsitiktinai pasirinktos dalelės spindulys vektorius yra koordinačių erdvės tūrio elemente $d^3\mathbf{r}$, kuriam priklauso taškas \mathbf{r} , o jos impulso vektorius yra impulsų erdvės tūrio elemente $d^3\mathbf{p}$, kuriam priklauso taškas \mathbf{p} . Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad apibrėžto impulso \mathbf{p} dalelė yra plokščioji banga, kurios bangos vektorius \mathbf{k} susijęs su \mathbf{p} tokiu sąryšiu:

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}; \quad (7.1.6)$$

čia \hbar yra redukuotoji Planko konstanta. Todėl toliau laikysime, kad tikimybės tankis yra kintamųjų \mathbf{r} , \mathbf{k} ir t funkcija: $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$. Šią funkciją nusako **Bolcmano kinetinė lygtis**:

$$\frac{df}{dt} = -\mathbf{v} \cdot \nabla f - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{coll}}; \quad (7.1.7)$$

čia \mathbf{v} yra dalelės greičio vektorius, o $\nabla_{\mathbf{k}}$ yra operatorius ∇ , kuris veikia tik bangos vektoriaus komponentes. Išsiaiškinsime šios lygties dešinėsios pusės atskirų dėmenų prasmę. Pirmasis dėmuo $(-\mathbf{v} \cdot \nabla f)$ atspindi tikimybės tankio f kitimą dėl dalelių sistemos masės centro tiesaus ir tolygaus judėjimo (toks judėjimas būtų stebimas, jeigu nebūtų išorinių jėgų ir jeigu dalelės nesąveikautų tarpusavyje). Antrasis dėmuo $(-1/\hbar) \partial \mathbf{p} / \partial t \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f$ atspindi f kitimą dėl jėgų, kurios suteikia dalelėms pagreitį, t. y. dėl Lorencio jėgos, kurią sąlygoja elektrinis ir magnetinis laukai:

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}); \quad (7.1.8)$$

čia q yra dalelės elektros krūvis, \mathbf{B} yra magnetinės indukcijos vektorius, o $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ yra vektorių \mathbf{v} ir \mathbf{B} vektorinė sandauga. Minėtieji elektrinis ir magnetinis laukai gali būti ir išoriniai (sukurti išorinių šaltinių), ir lokaliniai (dėl dalelių tarpusavio toliasiekės sąveikos). Trečiasis dėmuo $(\partial f / \partial t)_{\text{coll}}$ atspindi staigius funkcijos f pokyčius dėl dalelių sklaidos (indeksas „coll“ kilo iš angliško žodžio „collisions“ – „susidūrimai“). Šį dėmenį galima išreikšti šitaip:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \sum_{\mathbf{k}'} [f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')]; \quad (7.1.9)$$

čia $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ yra dalelės sklaidos iš būsenos \mathbf{k} į būseną \mathbf{k}' tikimybė per laiko vienetą. Pirmasis dėmuo laužtiniuose skliaustuose nusako būsenos \mathbf{k} dalelių skaičiaus augimą dėl sklaidos iš visų kitų būsenų \mathbf{k}' , o antrasis dėmuo nusako būsenos \mathbf{k} dalelių skaičiaus mažėjimą dėl sklaidos į visas kitas būsenas \mathbf{k}' . Ši sklaida gali būti laikoma akimirksnine.

Dauguma puslaidininkinių įtaisų modelių, kurie naudojami praktikoje, yra pagrįsti aukščiau minėtųjų pagrindinių lygčių (t. y. Bolcmano kinetinės lygties ir Maksvelo lygčių) apytiksliais sprendiniais. Vienas iš šių modelių yra vadinamasis **dreifo ir difuzijos modelis**, kurio pagrindinės lygtys yra elektronų ir skylių tolydumo lygtys. Šis modelis buvo taikomas ankstesniuose skyriuose. Dreifo ir difuzijos modelis negali aprašyti krūvininkų greičių pasiskirstymo, nes pagal šį modelį išoriniame lauke visi vienaarūšiai krūvininkai juda vienodu greičiu, kuris lygus dreifo greičiui. Taigi, dreifo ir difuzijos modelis negali teisingai aprašyti šiluminių triukšmų ir kitų reiškinių, kurie susiję su krūvininkų greičių statistiniu „išsibarstymu“. Monte Karlo metodas neturi minėtųjų trūkumų.

7.2. Viendalelės Monte Karlo programos struktūra

Bet kokios puslaidininkinės struktūros elektrines savybes lemia didelio skaičiaus (milijonų arba daugiau) elektronų arba skylių judėjimas ir tarpusavio sąveika. Tačiau atskirais atvejais tokią daugelio sąveikaujančių dalelių sistemą galima aproksimuoti daugelio vienodų *nepriklausomų* dalelių sistema. Tada sistemos parametrus galima apskaičiuoti, nagrinėjant tik vienos dalelės judėjimą pakankamai ilgame laiko tarpe, o po to apskaičiavus mus dominančio dydžio (pvz., elektrono greičio, energijos, impulso) laikinį vidurkį. Tai yra pagrindinė viendalelio Monte Karlo metodo prielaida.

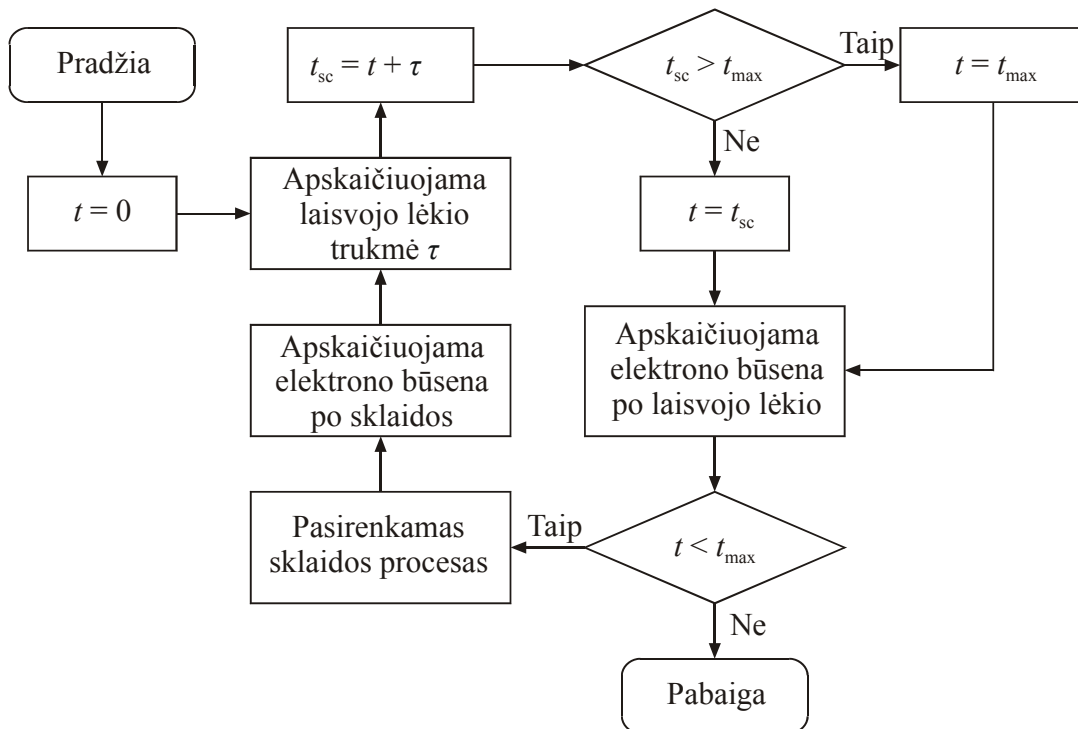
Bendroji elektrono judėjimo modeliavimo viendaleliu Monte Karlo metodu tvarka yra tokia. Užduodami išorinio elektrinio lauko stipris ir pradinė elektrono būsena (erdvinės koordinatės ir bangos

vektorius). Pasirenkamas pilnutinis elektrono judėjimo laikas t_{max} (pilnutinė modeliuojamojo proceso trukmė). Po to cikliškai atliekami šie keturi žingsniai:

1. Apskaičiuojami laisvojo lėkio trukmė τ ir sklaidos momentas $t_{sc} = t + \tau$ (čia t yra einamasis laikas).
2. Apskaičiuojama elektrono būsena laisvojo lėkio pabaigoje.
3. Pasirenkamas sklaidos tipas.
4. Apskaičiuojamas elektrono bangos vektorius po sklaidos.

Šie keturi žingsniai kartojami tol, kol proceso trukmė nepasiekia t_{max} . Taigi, viendalelės Monte Karlo programos supaprastinta struktūrinė schema yra tokia, kaip pavaizduota 7.1 pav.

Norint rasti elektrono vidutinį dreifinį greitį v , reikia padalyti elektrono nueitą kelią lauko kryptimi (l) iš proceso trukmės. Kelią l galima nustatyti arba tiesiogiai (pagal elektrono koordinatę) arba pagal pilnutinį elektrinio lauko atliktą darbą A : $l = A/(e|\mathcal{E}|)$; čia e yra elektrono krūvis, o $|\mathcal{E}|$ yra išorinio elektrinio lauko stipris. Darbas A randamas, sudėjus visus elektrono energijos pokyčius dreifo metu (t. y. tarpuose tarp visų sklaidos įvykių). Žinant vidutinį dreifinį greitį, judris apskaičiuojamas pagal formulę



7.1 pav. Viendalelės Monte Karlo programos supaprastinta struktūrinė schema

$$\mu = \frac{v}{|\mathcal{E}|}.$$

Laisvojo lėkio trukmė, sklaidos tipas ir sklaidos kryptis, kurie nustatomi žingsniuose 1, 3 ir 4, yra atsitiktiniai dydžiai. Kiekvienas iš šių dydžių pasirenkamas, naudojant atsitiktinių skaičių generatorių. Tie skaičiai turi būti generuojami taip, kad skirtingų verčių pasikartojimo dažnis atitiktų to dydžio skirstinį.

Anksčiau minėtieji žingsniai 1 ir 2 smulkiau aprašyti 7.3 skyriuje, o žingsniai 3 ir 4 – 7.4 skyriuje.

7.3. Lėkio trukmės skaičiavimas. Dreifo proceso modeliavimas

Laisvojo lėkio trukmė priklauso nuo sklaidos tikimybės per laiko vienetą. Ši tikimybė lygi sumai tikimybių, kurios atitinka skirtingus sklaidos tipus (pvz., priemaišinė arba fononinė sklaida):

$$W(E_k) = \sum_{j=1}^n W_j(E_k). \quad (7.3.1)$$

Čia indeksas j nusako sklaidos rūšį, o E_k yra elektrono, kurio bangos vektorius \mathbf{k} , energija.

Kaip ir kitus atsitiktinius dydžius, laisvojo lėkio trukmę τ Monte Karlo programoje reikia generuoti taikant bendrąjį metodą, kuris aprašytas 6.2.3 skirsnyje, t. y. reikia spręsti lygtį

$$P(\tau) = r, \quad (7.3.2)$$

čia $P(\tau)$ yra tikimybė, kad lėkio trukmė bus mažesnė už τ , o r yra atsitiktinis skaičius, kuris tolygiai pasiskirstęs nuo 0 iki 1. Išvesime šios tikimybės išraišką. Laiko intervalą τ suskaidysime į N siaurų intervalų $\Delta\tau$. Jeigu $\Delta\tau$ yra pakankamai mažas, tada vieno tokio intervalo metu elektrono energijos E_k pokytis yra neįžymus, todėl ir sklaidos sparta $W(E_k)$ beveik nepakinta. Vadinasi, vidutinis sklaidos įvykių skaičius per laiką $\Delta\tau$ yra lygus

$$\bar{x} = W(E_k)\Delta\tau. \quad (7.3.3)$$

Kadangi, esant pastoviai sklaidos spartai, skirtingi sklaidos įvykiai yra nepriklausomi vienas nuo kito, tai sklaidos įvykių skaičius per laiką $\Delta\tau$ yra pasiskirstęs pagal Puasono skirstinį. Tiksliau, taip būna tada, kai galioja dar viena sąlyga – pakankamai maža sklaidos tikimybė per laiką $\Delta\tau$. Šią sąlygą visada galima užtikrinti, parinkus pakankamai mažą $\Delta\tau$. Taigi, galiojant šioms sąlygoms, tikimybė, kad per laiką $\Delta\tau$ įvyks x sklaidos įvykių, yra nusakoma Puasono skirstiniu:

$$p(x) = \frac{\bar{x}^x}{x!} e^{-\bar{x}} \quad (x = 0, 1, 2, \dots) \quad (7.3.4)$$

Pagal minėtąją dydžio $P(\tau)$ apibrėžtį, tikimybė, kad τ trukmės laiko tarpe nebus nė vieno susidūrimo (t. y., kad elektronas judės laisvai laiką τ arba ilgiau), yra lygi $1 - P(\tau)$. Antra vertus, ši tikimybė yra lygi sandaugai tikimybių, kad nebus susidūrimo nė viename iš minėtų $\Delta\tau$ trukmės laiko tarpų. Kiekviena iš pastarųjų tikimybių yra lygi

$$p(0) = e^{-\bar{x}} = e^{-W(E_k)\Delta\tau}. \quad (7.3.5)$$

Sudauginę šias tikimybes ir perėję prie ribos $\Delta\tau \rightarrow 0$, gauname:

$$1 - P(\tau) = \exp\left[-\int_0^\tau W(E_k) dt\right]. \quad (7.3.6)$$

Išreiškę $P(\tau)$ ir įrašę į (7.3.2), išvedame lygtį:

$$1 - \exp\left[-\int_0^\tau W(E_k) dt\right] = r. \quad (7.3.7a)$$

Kadangi atsitiktinis skaičius r yra tolygiai pasiskirstęs nuo 0 iki 1, tai skaičius $1 - r$ taip pat yra tolygiai pasiskirstęs nuo 0 iki 1. Todėl (7.3.7a) lygybės dešiniojoje pusėje vietoj r galima rašyti $1 - r$. Taip gauname galutinę lygtį:

$$\exp\left[-\int_0^\tau W(E_k) dt\right] = r. \quad (7.3.7b)$$

Šios lygties sprendimas yra sudėtingas, nes nežinomas (τ) yra integralo viršutinis rėžis. Bendroju atveju to integralo negalima išreikšti elementariosiomis funkcijomis, nes k (vadinasi, ir E_k) kinta laike, o $W(E_k)$ priklausomybė nuo E_k yra sudėtinga.

Sunkumų, kurie susiję su minėtojo integralo skaičiavimu, išvengiama tokiu būdu. Apibrėžiamas naujas sklaidos tipas – „virtualioji sklaida“ (*self-scattering*), kurios metu elektrono būseną nepasikeičia ir kurios tikimybė per laiko vienetą $W_0(E_k)$ yra parinkta taip, kad naujoji pilnutinė sklaidos tikimybė per laiko vienetą nepriklausytų nuo energijos [1, p. 81]:

$$W_0(E_k) = \Gamma - \sum_{j=1}^n W_j(E_k) \quad \text{arba} \quad \Gamma = \sum_{j=0}^n W_j(E_k), \quad (7.3.8)$$

kur Γ yra konstanta, kuri nusako naują pilnutinę sklaidos tikimybę per laiko vienetą. Tada (7.3.6) ir (7.3.7b) formulės tampa daug paprastesnės:

$$1 - P(\tau) = e^{-\Gamma\tau}, \quad (7.3.9)$$

$$e^{-\Gamma\tau} = r. \quad (7.3.10)$$

Atitinkamai, lėkio trukmė skaičiuojama pagal formulę

$$\tau = -\frac{\ln(r_1)}{\Gamma}, \quad (7.3.11)$$

čia r_1 yra atsitiktinis skaičius, kuris tolygiai pasiskirstęs tarp 0 ir 1.

Konstantos Γ vertė turi būti parinkta taip, kad visame tiriamajame energijų intervale ji nebūtų mažesnė už tikrąją pilnąją tikimybę (7.3.1), nes priešingu atveju modeliuojant galėtų būti gauta neigiama virtualiosios sklaidos sparta $W_0(E_k)$ (žr. (7.3.8), pirmoji lygybė). Tačiau Γ vertė neturi būti pernelyg didelė, kad virtualiosios sklaidos įvykių dažnis netaptų pernelyg didelis. Taip yra todėl, kad virtualiosios sklaidos įvykiai nėra tikrieji sklaidos įvykiai, todėl modeliavimo ciklai, kurių metu programa apdoroja virtualiosios sklaidos įvykius, fizikiniu požiūriu atitinka nenaudingai praleistą laiką. Taigi, siekiant minimizuoti

modeliavimo trukmę, konstantą Γ reikėtų prilyginti didžiausiai $W(E_k)$ vertei tiriamajame energijų intervale (tačiau teisingi modeliavimo rezultatai būtų gauti ir naudojant bet kokią didesnę Γ vertę).

Laikysime, kad išorinis elektrinis laukas \mathcal{E} , kuris veikia elektronus, erdvėje kinta daug lėčiau negu kristalo tarpatominis laukas. Tada elektrono bangos vektoriaus pokytis per laisvojo lėkio trukmę τ yra lygus

$$\Delta \mathbf{k} = -\frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \tau. \quad (7.3.12)$$

7.4. Sklaidos proceso modeliavimas

Norint teisingai aprašyti sklaidos įtaką elektrono judėjimui, reikia žinoti diferencialinio sklaidos skerspjūvio priklausomybę nuo sklaidos kampo ir nuo elektrono būsenos. Tam reikia žinoti sklaidos tipą. Tarkime, kad egzistuoja n sklaidos tipų (neįskaitant virtualiosios sklaidos, kuri minėta 7.3 skyriuje). Tada sklaidos tipą elektrono lėkio pabaigoje galima pasirinkti, naudojant atsitiktinių skaičių generatorių ir funkcijas $\Lambda_j(E_k)$, kurios apibrėžiamos šitaip [1, p. 84]:

$$\Lambda_j(E_k) = \frac{\sum_{i=1}^j W_i(E_k)}{\Gamma} \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (7.4.1)$$

(konstanta Γ apibrėžta 7.3 skyriuje). j -tojo tipo sklaida pasirenkama tuo atveju, jeigu atsitiktinis skaičius r_2 , kuris tolygiai pasiskirstęs tarp 0 ir 1, priklauso intervalui

$$\Lambda_{j-1}(E_k) < r_2 \leq \Lambda_j(E_k) \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (7.4.2)$$

(čia laikoma, kad $\Lambda_0 = 0$). Jeigu $r_2 > \Lambda_n$, pasirenkama virtualioji sklaida, kurios metu elektrono judėjimo būseną nepakinta, t. y. sklaidos faktiškai nėra. Paprogramės, kuris pasirenka sklaidos tipą, struktūrinė schema galėtų būti tokia, kaip pavaizduota 7.2 pav.

Pasirinkus sklaidos tipą, reikia apskaičiuoti elektrono bangos vektorių \mathbf{k}' po sklaidos. Šio vektoriaus absoliutinė vertė randama, naudojantis energijos tvermės dėsnium ir (1.1.4) arba (1.1.5) formule. Joninės sklaidos atveju elektrono energija nepakinta (nes jono kuloninis laukas yra stacionarus), o fononinės sklaidos atveju elektrono energija pakinta dydžiu, kuris lygus arba priešingas fonono energijai $\hbar\omega_0$, priklausomai nuo to, ar fononas buvo absorbuotas, ar emituotas:

$$E_{k'} = E_k \pm \hbar\omega_0. \quad (7.4.3)$$

Elektrono momentinis greitis (t. y. elektrono Blocho bangos grupinis greitis) lygus

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_k}{d\mathbf{k}}. \quad (7.4.4)$$

Pagal (1.1.5), vektoriaus \mathbf{k}' absoliutinė vertė lygi

$$k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* E_{k'} (1 + \alpha E_{k'})}, \quad (7.4.5)$$

kur $E(\mathbf{k}'_0)$ žymi galutinio slėnio minimumo tašką.

Be absoliutinės vertės k' , reikia žinoti ir vektoriaus \mathbf{k}' kryptį. Sklaidos azimutinis kampas ϕ , kurį nusako vektoriaus \mathbf{k}' projekcija į statmeną \mathbf{k} kryptį plokštumą (žr. 6.1 pav.), yra tolygiai pasiskirstęs tarp 0 ir 2π , t. y. jis skaičiuojamas pagal (6.2.20) formulę:

$$\phi = 2\pi r_3; \quad (7.4.6)$$

čia r_3 yra atsitiktinis skaičius, kurio galimos vertės tolygiai pasiskirsčiusios intervale nuo 0 iki 1. Sklaidos polinis kampas (t. y. kampas tarp vektorių \mathbf{k} ir \mathbf{k}') priklauso nuo sklaidos tipo. Kai elektroną išsklaido jonas, sklaidos polinis kampas θ randamas pagal formulę (6.2.23):

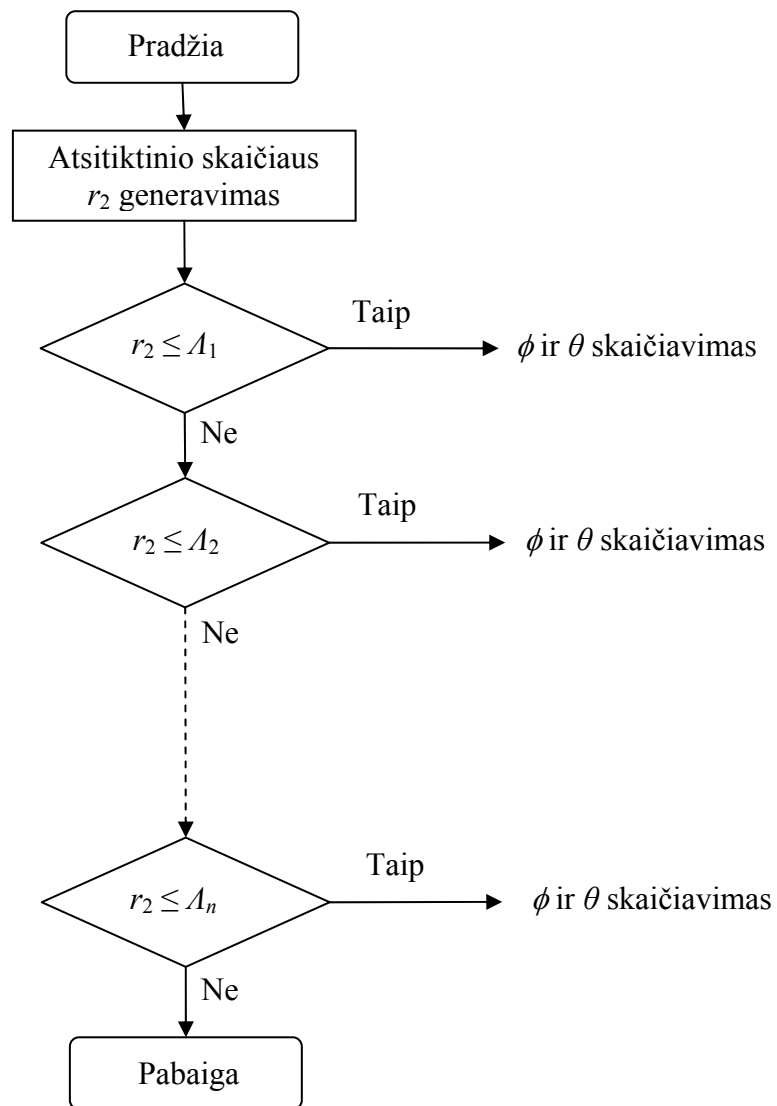
$$\cos \theta = 1 - \frac{2r_4}{1 + (1 - r_4) \left(\frac{2k}{q_D} \right)^2}, \quad (7.4.7)$$

o kai elektroną išsklaido polinis optinis fononas, kampas θ skaičiuojamas pagal formules [1, p. 55]

$$\cos \theta = \frac{1 + f - (1 + 2f)^{r_4}}{f}, \quad (7.4.8a)$$

$$f = \frac{2\sqrt{E_k E_{k'}}}{\left(\sqrt{E_k} - \sqrt{E_{k'}} \right)^2}. \quad (7.4.8b)$$

Čia r_4 yra atsitiktinis skaičius, kurio vertės tolygiai pasiskirsčiusios intervale nuo 0 iki 1.



7.2 pav. Sklaidos tipo pasirinkimo struktūrinė schema.

Reikia turėti omenyje, kad formulėse (7.4.6), (7.4.7) ir (7.4.8a) kampų θ ir ϕ atskaitos kryptys yra susietos su vektoriaus \mathbf{k} kryptimi (žr. 6.1 pav.). Tačiau \mathbf{k} kryptis nuolat kinta dėl sklaidos. Kadangi modeliavimo metu siekiama rasti elektrono judėjimo kryptį laboratorinėje (nejudančioje) atskaitos sistemoje, tai po kiekvieno sklaidos įvykio elektrono bangos vektoriaus komponentes reikia perskaičiuoti, atliekant tokią koordinatų transformaciją [1, p. 93]:

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ \frac{-k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & \frac{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin \theta \cos \phi \\ k' \sin \theta \sin \phi \\ k' \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (7.4.9)$$

Čia dydžiai k_x , k_y ir k_z yra pradinio bangos vektoriaus \mathbf{k} Dekarto komponentės laboratorinėje atskaitos sistemoje, dydžiai $k' \sin \theta \cos \phi$, $k' \sin \theta \sin \phi$ ir $k' \cos \theta$ – tai galutinio bangos vektoriaus \mathbf{k}' Dekarto komponentės koordinatų sistemoje, kuri pavaizduota 6.1 pav. ($k' = |\mathbf{k}'|$), o dydžiai k_x' , k_y' and k_z' – tai bangos

vektoriaus \mathbf{k}' Dekarto komponentės *laboratorinėje* atskaitos sistemoje (t. y. jos skiriasi nuo Dekarto komponentių, kurios pavaizduotos 6.1 pav., nors žymėjimai yra tie patys).

Vykstant nepolinei fononinei sklaidai (kuri gali būti tarpšlėnė), vektorius \mathbf{k}' yra pasiskirstęs izotropiškai [1, p. 45 ir p. 48]. T. y. kampas θ tarp \mathbf{k}' ir bet kokios fiksuotos krypties erdvėje turi būti skaičiuojamas pagal formulę

$$\cos \theta = 1 - 2r_4. \quad (7.4.10)$$

Šiuo atveju kampas ϕ ir θ patogiau atskaityti nuo laboratorinės Dekarto koordinačių sistemos, kurioje apibrėžtos elektrono koordinatės, ašių X ir Z . Tada

$$\begin{aligned} k'_x &= k' \sin \theta \cos \phi, \\ k'_y &= k' \sin \theta \sin \phi, \\ k'_z &= k' \cos \theta. \end{aligned} \quad (7.4.11)$$

Taigi, nepolinės sklaidos optiniais arba akustiniais fononais atveju koordinačių transformacijos atlikti nereikia.

7.5. Viendalelio Monte Karlo metodo taikymo pavyzdys: GaAs neigiamojo diferencialinio laidumo modeliavimas

Elektronų dreifo greičio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio dažnai turi maksimumą (žr. 7.3 pav.). Dreifo greičio sumažėjimas, kai elektrinis laukas viršija tam tikrą slenkstinę vertę, yra vadinamas *neigiamuoju diferencialiniu laidumu* (NDL). Minėtasis slenkstinis elektrinis laukas dažniausiai būna artimas 4 kV/cm. Galio arsenido neigiamojo diferencialinio laidumo priežastis yra elektronų pernaša iš Γ slėnio, kuriame jų efektinė masė yra maža ($0,063m_0$, kur m_0 yra elektrono rimties masė vakuume), į L slėnį, kuriame jų efektinė masė yra didelė ($0,23m_0$). Žinome, kad elektronų judris yra lygus

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*}; \quad (7.5.1)$$

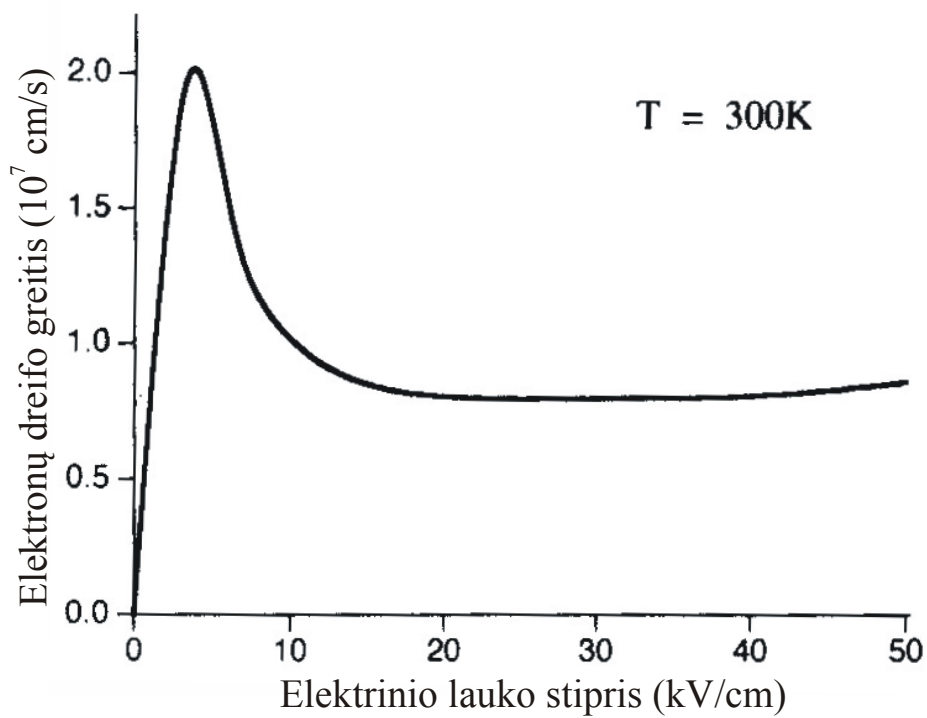
čia τ yra elektronų impulso relaksacijos trukmė, o m^* yra elektronų efektinė masė. Vadinasi, elektronų efektinės masės padidėjimas yra susijęs su jų judrio sumažėjimu. Tuo pačiu sumažėja ir dreifo greitis, kuris lygus

$$v = \mu \mathcal{E}; \quad (7.5.2)$$

čia \mathcal{E} yra elektrinio lauko stipris.

Elektronų pernaša iš Γ slėnio į L slėnį vyksta dėl to, kad elektrinis laukas „įkaitina“ elektronus. Kitaip sakant, elektronų netvarkiojo judėjimo vidutinė kinetinė energija stipriame elektriniame lauke gali žymiai viršyti jų šiluminio judėjimo energiją ($k_B T$). Atitinkamai, pagal Bolcmano pasiskirstymo funkciją, padidėja ir tikimybė aptikti elektronus aukštesniuose energijos lygmenyse, kurių užpilda normaliomis sąlygomis yra praktiškai lygi nuliui. Kai elektrono vidutinė kinetinė energija tampa tos pačios eilės, kaip L ir Γ slėnių energijų skirtumas (GaAs atveju – maždaug 0,3 eV), tampa pastebimas L slėnio užpildos augimas ir elektronų dreifo greičio mažėjimas.

Kadangi būsenų tankis yra proporcingas $(m^*)^{3/2}$ (žr. (1.1.11)), tai būsenų tankis L slėnyje yra daug didesnis už būsenų tankį Γ slėnyje. Todėl, esant pakankamai aukštai elektronų energijai, *dauguma* elektronų pereina į L slėnį (nors Γ slėnio energija yra mažesnė). Tolimesnis elektronų dreifo greičio ir vidutinės energijos augimas, stiprėjant elektriniam laukui, yra žymiai lėtesnis, nes L slėnyje yra žymiai didesnė optinės fononinės sklaidos, emituojant fononą, tikimybė. Ši sklaida neleidžia žymiai išaugti elektronų energijai (sumažina energijos relaksacijos trukmę), t. y. sulėtina tolimesnį elektronų „kaitimą“.



7.3 pav. Elektronų dreifo greičio galio arsenide priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio 300 K temperatūroje, kai jonizuotų priemaišų koncentracija lygi 10^{14} cm^{-3} (iš [1]).

8. Puslaidininkinių įtaisų modeliavimas daugiadaleliu Monte Karlo metodu

8.1. Daugiadalelis Monte Karlo metodas

7 skyriuje aprašyto viendalelio Monte Karlo metodo trūkumai yra šie:

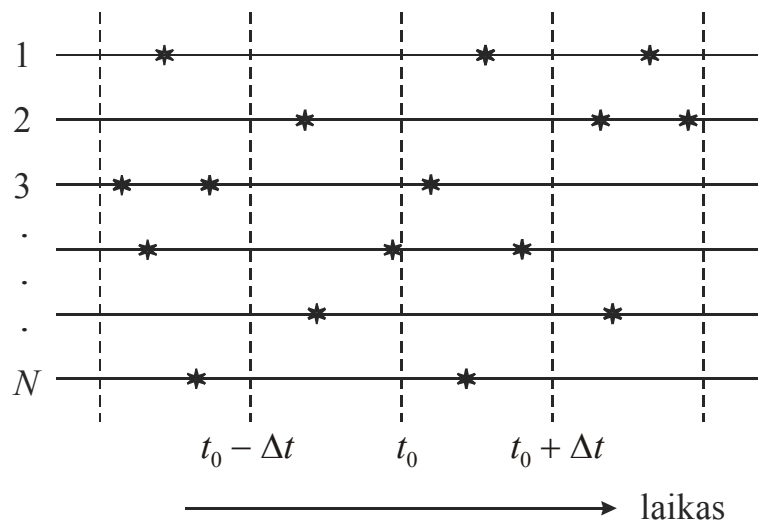
1. Kadangi viendaleliu Monte Karlo metodu modeliuojamas tik *vieno* krūvininko judėjimas, tai šis metodas netinka, aprašant reiškinius, kurie susiję su krūvininkų srautais, t. y. su krūvininkų ištekėjimu iš tam tikros erdvės srities arba įtekėjimu į ją. Tokių reiškinių pavyzdžiai yra krūvininkų difuzija ir erdvinio krūvio susidarymas dėl krūvininkų trūkumo („nuskurdinimas“) arba pertekliaus („akumuliacija“).
2. Kadangi viendalelis Monte Karlo metodas remiasi *laikinių* vidurkių skaičiavimu, tai šiuo metodu neįmanoma modeliuoti krūvininkų judėjimą apibūdinančių dydžių kitimo laike. Pvz., viendalelis metodas netinka, tiriant krūvininkų dreifinio greičio priklausomybę nuo laiko, krūvininkų energijos relaksaciją (t. y. „karštųjų“ krūvininkų termalizaciją), krūvininkų judėjimą kintamajame elektriniame lauke ir kt.

Taigi, viendalelis Monte Karlo metodas netinka, modeliuojant puslaidininkinius įtaisus (pvz., diodus arba tranzistorius), nes visų puslaidininkinių įtaisų veikimui esminę įtaką turi juose susidarantys erdviniai krūviai. Norint modeliuoti šiuos erdvinis krūvius bei puslaidininkinių įtaisų laikines charakteristikas, reikia naudoti daugiadalelį Monte Karlo metodą.

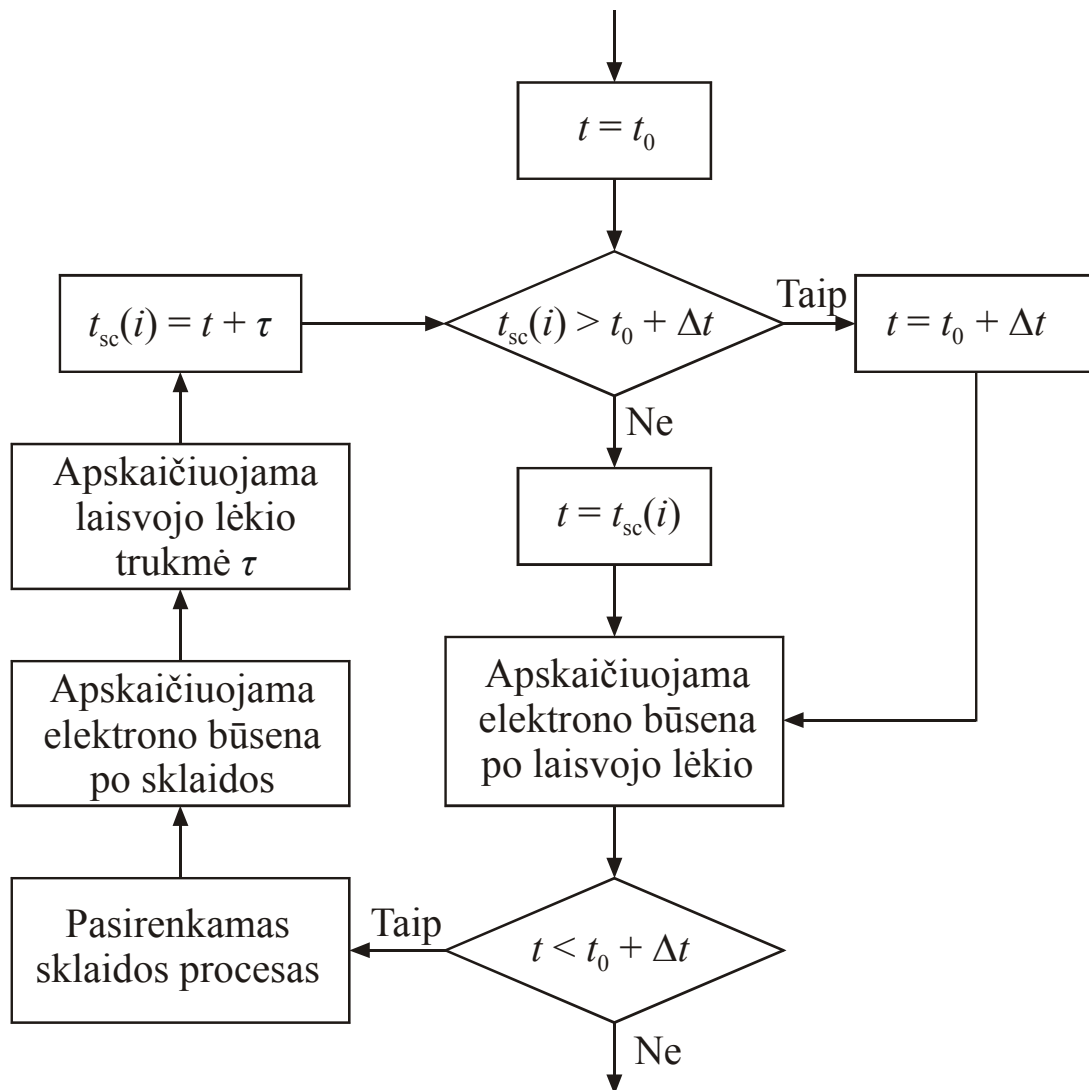
Daugiadalelio Monte Karlo metodo esmė yra ta, kad *vienu metu* modeliuojamas daugelio dalelių judėjimas. T. y. programa cikliškai „pereina“ per visas daleles. Šio ciklo periodą žymėsime Δt . 8.1 pav. grafiškai pavaizduota daugiadalelio Monte Karlo modeliavimo struktūrinė schema. Šioje schemoje laiko ašis nukreipta iš kairės į dešinę. Kiekviena horizontali išsistinė linija žymi vieną iš N dalelių. Žvaigždutės ant išsistinių linijų žymi sklaidos įvykius. Taigi, atkarpa tarp bet kurių dviejų gretimų žvaigždutėlių nusako dalelės laisvojo lėkio trukmę. Vertikalios punktyrinės linijos žymi laiko momentus, kai programa apskaičiuoja kiekvienos dalelės būseną. 8.2 pav. pavaizduota vienos (i -tosios) dalelės judėjimo tarp dviejų tokių momentų (nuo t_0 iki $t_0 + \Delta t$) modeliavimo struktūrinė schema. Matome, kad šiame laiko intervale kiekvienos dalelės judėjimas modeliuojamas iš esmės taip pat, kaip ir viendalelėje Monte Karlo programoje (plg. su 7.1 pav.). Yra tik du neesminiai skirtumai:

- 1) programiniame bloke, kuris pavaizduotas 8.2 pav., galutinio laiko momento vaidmenį atlieka ne viso modeliuojamojo proceso trukmė t_{\max} , o laikas $t_0 + \Delta t$, kai programa turės „persijungti“ prie kitos dalelės;
- 2) pradėjus vykdyti programinį bloką, kuris pavaizduotas 8.2 pav., i -tosios dalelės sklaidos (t. y. laisvojo lėkio pabaigos) momentas $t_{sc}(i)$ jau yra žinomas, todėl „įėjimas“ į modeliavimo ciklą yra ne ties laisvojo lėkio trukmės τ skaičiavimu (kaip 7.1 pav.), o ties sąlygos $t_{sc} > t_0 + \Delta t$ tikrinimu.

Akivaizdu, kad daugiadalelė programa turi vienu metu saugoti atmintyje visų dalelių sklaidos momentus $t_{sc}(i)$ ($i = 1, 2, \dots, N$) ir visų dalelių einamąsias būsenas (t. y. bangos vektoriaus komponentes, energijos slėnį ir energiją to slėnio dugno atžvilgiu).



8.1 pav. Sklaidos įvykių ir dalelių būsenų skaičiavimo laiko momentai daugiadalelėje Monte Karlo programoje. Horizontalios išsistinės linijos atitinka skirtingas daleles. Žvaigždutės ant išsistinių linijų žymi atitinkamų dalelių sklaidos įvykius. Vertikalios punktyrinės linijos žymi dalelių būsenų skaičiavimo momentus.



8.2 pav. i -tosios dalelės judėjimo laiko tarpe nuo t_0 iki $t_0 + \Delta t$ modeliavimo daugiadalelėje Monte Karlo programoje supaprastinta struktūrinė schema. Laikas t_0 – tai ankstesniojo „persijungimo“ prie kitos dalelės momentas, o laikas $t_0 + \Delta t$ yra kito tokio „persijungimo“ momentas.

8.2. Pagrindinės puslaidininkinio įtaiso modeliavimo Monte Karlo metodu ypatybės

Modeliuojant puslaidininkinį įtaisą, reikia atsižvelgti į du naujus reiškinius:

1. Kadangi puslaidininkinis įtaisas turi baigtinius matmenis, tai dalelių judėjimas yra apribotas erdvėje. Todėl tenka modeliuoti dalelės elgesį, kai ji atsiduria įtaiso krašte. Jeigu tame krašte nėra elektrinio kontakto, tada dalelė *atsispindi* nuo krašto. Jeigu tame krašte yra elektrinis kontaktas, tada dalelė *išeina* iš įtaiso (t. y. pilnutinis modeliuojamų dalelių skaičius N sumažėja vienetu). Be to, reikia modeliuoti ir dalelių *jėjimą* į įtaisą pro kontaktus, nes nuostoviojoje veikoje pilnutinis dalelių skaičius įtaiso viduje turi būti apytiksliai pastovus.
2. Elektrinio lauko stipris (ir potencialas) priklauso nuo krūvio pasiskirstymo įtaiso viduje. Vadinasi, iš vienos pusės, elektrinio lauko pasiskirstymas erdvėje valdo krūvininkų judėjimą, o iš kitos pusės, šis judėjimas gali sukurti erdvinį krūvį, kuris keičia elektrinį lauką. Taigi, tarp elektrinio lauko ir krūvininkų judėjimo yra grįžtamas ryšys (jie priklauso vienas nuo kito). Tokiais atvejais elektrinis laukas vadinamas *suderintiniu lauku* („self-consistent field“). Potencialo priklausomybę nuo erdvinio krūvio tankio nusako *Puasono lygtis*

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon}; \quad (8.2.1)$$

čia φ yra elektrinis potencialas, ρ yra erdvinio elektrinio krūvio tankis (C/m^3), ε_0 yra elektrinė konstanta, ε yra aplinkos dielektrinė skvarba, o x, y ir z yra Dekarto koordinatės.

Minėtasis „grįžtamasis ryšys“ tarp elektrinio lauko stiprio ir krūvininkų pasiskirstymo modeliuojamas, sprendžiant Puasono lygtį po kiekvieno Δt trukmės laiko žingsnio, t. y. laiko momentais, kurie atitinka vertikaliąsias punktyrines linijas 8.1 pav. Pvz., laiko momentu t_0 apskaičiuojamas erdvinio krūvio tankio pasiskirstymas (naudojant visų elektronų koordinates tuo laiko momentu), ir išsprendžiama Puasono lygtis (t. y. randamas potencialo φ pasiskirstymas). Po to, modeliuojant krūvininkų judėjimą laiko tarpe nuo t_0 iki $t_0 + \Delta t$, laikoma, kad potencialo pasiskirstymas lieka pastovus. Taigi, laiko tarpe nuo t_0 iki $t_0 + \Delta t$ krūvininkai juda stacionariame (tačiau nebūtinai vienalyčiame) elektriniame lauke, kuris atitinka krūvio pasiskirstymą, kuris egzistavo laiko momentu t_0 .

Puasono lygtis sprendžiama baigtinių skirtumų metodu (smulkiau apie tai rašoma 8.8 skyriuje). Šių skaičiavimų trukmė labai priklauso nuo uždavinio dimensijos: trimatės Puasono lygties sprendimas trunka žymiai ilgiau, negu dvimatės arba vienmatės. Jeigu modeliavimas atliekamas personaliniu kompiuteriu, tada trimačių modelių panaudojimas užimtų pernelyg daug laiko. Todėl dažniau naudojami dvimačiai modeliai, kuriuose laikoma, kad viena iš elektrinio lauko vektoriaus Dekarto dedamųjų (pvz., z dedamoji) yra lygi nuliui. Tokiu atveju Puasono lygties (8.2.1) kairiojoje pusėje nelieka išvestinės z atžvilgiu:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon}; \quad (8.2.2)$$

Tokia prielaida yra leistina, jeigu modeliuojamojo įtaiso parametrai nepriklauso nuo z koordinatės, o jo matmenys Z kryptimi yra žymiai didesni už matmenis x ir y kryptimis. Tada visų krūvininkų sukuriamų laukų z komponentės vidutiniškai kompensuoja viena kitą, ir pilnutinio elektrinio lauko z komponentė yra artima nuliui beveik visame įtaiso tūryje.

Toliau bus kalbama tik apie dvimatį Monte Karlo modeliavimą. Reikia turėti omenyje, kad čia žodis „dvimatis“ nusako tik *Puasono lygties* (8.2.2) dimensiją. Krūvininkų judėjimas įtaiso viduje lieka trimatis, nors kiekvieno krūvininko z koordinatė neturi jokios įtakos potencialui (ir elektrinio lauko stipriui). T. y. elektrinio lauko pasiskirstymas yra toks, lyg kiekvienas krūvininkas būtų „ištemptas“ išilgai Z ašies į begalinio ilgio „siūlą“. Tačiau krūvininko energija priklauso nuo visų trijų bangos vektoriaus komponentių, todėl krūvininko *bangos vektoriaus* z komponentė (k_z) lieka tokia pati svarbi, kaip ir kitos dvi komponentės (k_x ir k_y).

8.3. Superdalelė

Integrinių grandinių elementų (diodų, tranzistorių ir kt.) tipiški matmenys yra mikronų arba dešimtųjų mikrono dalių eilės, o legiravimo laipsniai kinta nuo 10^{14} cm^{-3} iki 10^{20} cm^{-3} (*legiravimu* vadinamas priemaišų jonų įterpimas į puslaidininkį, siekiant pakeisti jo laidumo tipą ir dydį, o *legiravimo laipsniu* – priemaišinių jonų koncentracija). Tokiose pačiose ribose kinta ir laisvųjų krūvininkų koncentracijos. Remiantis šiais duomenimis, galima apskaičiuoti tipišką laisvųjų krūvininkų skaičių puslaidininkiniame įtaise. Laikant, kad puslaidininkinio įtaiso plotis ir aukštis yra lygūs $W = H = 1 \text{ } \mu\text{m}$, gylis lygus $D = 10 \text{ } \mu\text{m}$, o legiravimo laipsnis (laisvųjų elektronų koncentracija) $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, pilnutinis laisvųjų elektronų skaičius įtaise yra lygus $N_{\text{el}} = N_D \cdot W \cdot H \cdot D = 1,000,000$. Atliekant Monte Karlo modeliavimą personaliniu kompiuteriu, toks modeliujamų dalelių skaičius yra pernelyg didelis, nes modeliavimas truktų pernelyg ilgai. Tačiau nėra būtina modeliuoti visų elektronų judėjimą. Galima modeliuoti tik mažos dalies elektronų judėjimą – su sąlyga, kad tie elektronai yra išrinkti visiškai atsitiktinai. Atsitiktinio išrinkimo sąlyga yra reikalinga tam, kad neatsirastų sisteminės paklaidos, o būtų tik atsitiktinės paklaidos. Skaičiavimų atsitiktinės paklaidos („šratinis triukšmas“) yra atvirkščiai proporcingos šakniai iš modeliujamų dalelių skaičiaus. Monte Karlo modeliavimo patirtis rodo, kad, pvz., Šotkio diodo arba lauko tranzistoriaus voltamperines charakteristikas galima sumodeliuoti pakankamai tiksliai, naudojant tik kelis tūkstančius dalelių. Tačiau, skaičiuojant erdvinio krūvio tankį ρ (kuris yra Puasono lygties (8.2.2) dešiniojoje pusėje), reikia naudoti tikrąją krūvininkų koncentraciją. Taigi, kiekviena išrinktoji dalelė atstoja $N_{\text{el}} / N_{\text{dal}}$ elektronų; čia N_{el} yra tikrasis elektronų skaičius, o N_{dal} yra modeliujamųjų dalelių skaičius. Todėl tokios dalelės vadinamos *superdalelėmis*. Toliau superdaleles vadinsime tiesiog „dalelėmis“. Santykį $N_{\text{el}} / N_{\text{dal}}$ žymėsime N_{pp} (indeksai *pp* yra kilę iš angliško termino „*per particle*“, kuris nurodo, kad turimas omenyje elektronų skaičius vienai modeliujamai dalelei):

$$N_{pp} = \frac{N_{\text{el}}}{N_{\text{dal}}}. \quad (8.3.1)$$

Skaičiuojant erdvinio krūvio tankį ρ , sprendžiant Puasono lygtį arba skaičiuojant elektros srovę, kuri teka elektrodais, kiekvienai dalelei reikia priskirti krūvį

$$e_{\text{dal}} = eN_{pp}. \quad (8.3.2)$$

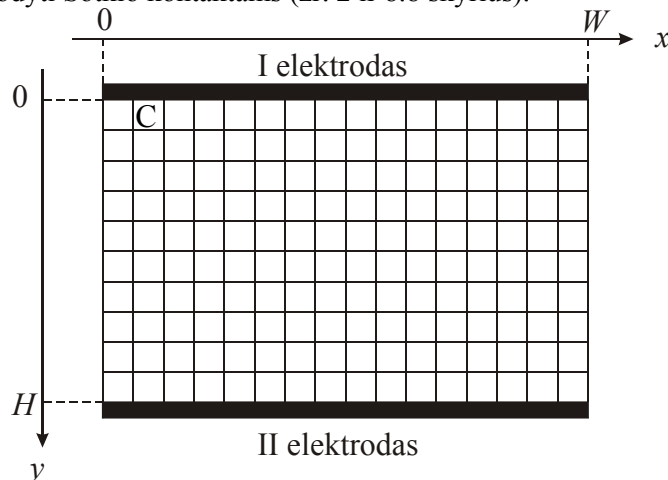
Tačiau, modeliuojant atskiros dalelės laisvąjį lėkį ir sklaidą, reikia laikyti, kad jos krūvis yra lygus vieno elektrono krūviui e .

8.4. Puslaidininkinio įtaiso geometrijos apibrėžimas

Modeliavimas prasideda nuo įtaiso geometrijos apibrėžimo. Paprasčiausiu atveju įtaiso geometrijos apibūdinimui pakanka šių duomenų:

1. Įtaiso matmenys – ilgis W , aukštis H ir gylis D . Ilgį matuosime x kryptimi, aukštį – y kryptimi, o gylį – z kryptimi. x ir y ašių kryptys parodytos 8.3 pav. z ašis nukreipta į brėžinio plokštumą. Įtaiso skerspjūvio, kuris pavaizduotas 8.3 pav., kairiojo viršutinio krašto koordinatės yra $x = 0$, $y = 0$. Kadangi modelis yra dvimatis, tai įtaiso matmenys z kryptimi (gylis D) neturi įtakos elektrinio lauko pasiskirstymui ir srovės tankiui. Tačiau pilnutinis krūvininkų skaičius įtaiso viduje yra proporcingas jo tūriui (taigi, ir įtaiso gyliui D). Vadinasi, įtaiso gylis D pasireiškia tik kaip pastovus daugiklis, skaičiuojant dydžius, kurie proporcingi pilnutiniam krūvininkų skaičiui įtaiso viduje (pvz, pilnutinę elektros srovę).
2. Skirtingo legiravimo laipsnio sričių padėtys įtaiso viduje. Paprasčiausia modeliuoti stačiakampio formos sritis, kurių kraštai lygiagretūs x ir y ašims. Tada, norint pilnai nusakyti priemaišų pasiskirstymą, reikia nurodyti pilnutinį legiravimo sričių skaičių, kiekvienos srities dviejų priešingų kampų koordinates (x_1, y_1 ir x_2, y_2), jonų koncentraciją kiekvienoje srityje ir priemaišinio jono krūvį. Paprasčiausiame puslaidininkiniame įtaise (rezistoriuje arba Šotkio diode) yra tik viena legiravimo sritis, kurios matmenys sutampa su viso įtaiso matmenimis (žr. 8.3 pav.).
3. Elektrodo padėtys. Laikysime, kad elektrodai gali būti tik ant viršutinio arba apatinio paviršiaus (t. y. plokštumose $y = 0$ ir $y = H$). Tada kiekvieno elektrodo padėčiai nusakyti pakanka nurodyti, ant kurio iš dviejų minėtųjų paviršių jis yra, ir to elektrodo kraštų x koordinates. 8.3 pav. atveju elektrodo kraštų x koordinatės sutampa su viso įtaiso kraštų x koordinatėmis ($x = 0$ ir $x = W$).

Vienintelis elektrodo parametras, kuris nėra susijęs su jo geometrija, yra kontaktinis potencialų skirtumas. Jį reikia nurodyti Šotkio kontaktams (žr. 2 ir 8.8 skyrius).

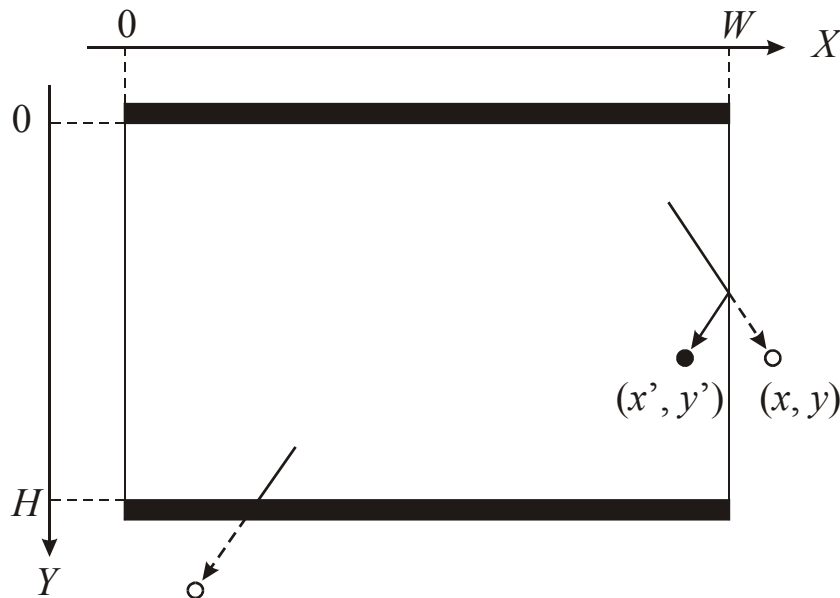


8.3 pav. Puslaidininkinio rezistoriaus arba Šotkio diodo modelis ir koordinatinis tinklas.

8.5. Dalelių išėjimo pro kontaktus ir atspindžio nuo laisvojo paviršiaus modeliavimas

Modeliuojant puslaidininkinį įtaisą Monte Karlo metodu, reikia nuolat tikrinti, ar dalelė neatsidūrė už modeliujamojo įtaiso skerspjūvio ribų, t. y. erdvės srityse $x < 0$, $y < 0$, $x > W$ arba $y > H$ (žr. 8.3 pav.). Šis patikrinimas atliekamas kiekvieno dreifo pabaigoje, t. y. prieš pat sklaidos įvykį (8.1 pav. sklaidos įvykius žymi žvaigždutės) arba prieš persijungiant prie kitos dalelės (8.1 pav. šiuos persijungimus žymi vertikalios punktyrinės linijos). Jeigu galioja viena iš minėtųjų keturių nelygybių, tada reikia nustatyti, ar toje vietoje yra įtaiso laisvasis paviršius, ar elektrinis kontaktas. Jeigu $x < 0$ arba $x > W$, tai reiškia, kad toje vietoje yra laisvasis paviršius, nes kontaktai gali būti tik ant viršutinio arba apatinio paviršiaus. Jeigu $y < 0$ arba $y > H$, tada, norint nustatyti, ar ten yra laisvasis paviršius, reikia palyginti dalelės x koordinatę su tame paviršiuje esančių elektrodo kraštų koordinatėmis.

Jeigu toje vietoje, kur dalelė išėjo iš įtaiso, yra elektrodas, tada ta dalelė padaroma „neaktyvia“, t. y. su jas nustojama atlikti veiksmus, kurie pavaizduoti 8.2 pav. struktūrinėje schemeje. Pasibaigus einamajam Δt trukmės laiko žingsniui, ta dalelė visiškai pašalinama iš modelio, t. y. pilnutinis dalelių skaičius



8.4 pav. Dalelių atspindys nuo laisvojo paviršiaus ir išėjimas pro elektrodus.

sumažinamas vienetu. Dalelės „aktyvumo“ indikatorius vaidmenį gali atlikti, pvz., energijos slėnio, kuriame yra dalelė, numeris. Jeigu Γ , L ir X slėniai žymimi numeriais 1, 2 ir 3, tada bet koks kitoks slėnio numeris galėtų reikšti, kad ta dalelė yra neaktyvi ir turi būti pašalinta iš modelio.

Jeigu toje vietoje, kurioje dalelė išėjo iš įtaiso, yra laisvasis paviršius, tada dalelė grąžinama atgal į įtaiso tūrį, „atspindint“ ją nuo paviršiaus, pro kurį ji išėjo. Šį atspindį iliustruoja 8.4 pav. Šiame paveiksle viena dalelė atsispindi nuo įtaiso dešiniojo paviršiaus ($x = W$). Tos dalelės koordinatės ir banginio vektoriaus dedamosios po atspindžio skaičiuojamos tokiu būdu:

$$x' = W - (x - W), \quad y' = y, \quad z' = z; \quad (8.5a)$$

$$k'_x = -k_x, \quad k'_y = k_y, \quad k'_z = k_z. \quad (8.5b)$$

Kita 8.4 pav. pavaizduotoji dalelė išeina pro apatinį elektrodą. Ši dalelė turi būti pašalinta iš modelio.

8.6. Ominių ir Šotkio kontaktų modeliavimas Monte Karlo metodu

8.5 skyriuje buvo aprašytas krūvininkų atspindys nuo laisvojo paviršiaus ir išėjimas pro kontaktus. Tačiau aišku, kad ši taisyklė nėra pakankama kontaktų modeliavimui, nes ji nieko nesako apie krūvininkų *įėjimą* į įtaisą. Šiuo požiūriu ominių kontaktų modeliavimas skiriasi nuo Šotkio kontaktų modeliavimo. Kadangi ominiai kontaktai praktiškai nesudaro jokių kliūčių krūvininkų judėjimui, tai realiuose įtaisuose pagrindinių krūvininkų trūkumas prie ominių kontaktų yra greitai pašalinamas, ekstrahuojant iš kontakto trūkstamus krūvininkus. Todėl ominiai kontaktai modeliuojami tokiu būdu: jeigu viename iš priekontaktinių narvelių (pvz., narvelyje, kuris 8.3 pav. pažymėtas raide C) elektronų skaičius yra mažesnis už teigiamųjų donoro jonų skaičių (t. y. jeigu egzistuoja perteklinis teigiamas krūvis), tada tame narvelyje „sukuriama“ tiek elektronų, kad vėl būtų atstatytas elektrinis neutralumas. Tų elektronų greičiai turi būti nukreipti į puslaidininkio tūrį (t. y. tolyn nuo kontakto). Tačiau, jeigu egzistuoja perteklinis *neigiamas* krūvis (t. y. jeigu elektronų yra daugiau, negu priemaišinių jonų), tada nebandoma atstatyti elektrinio neutralumo, nes pertekliniai elektronai gali būti vėl išsklaidyti atgal į puslaidininkio tūrį [2, p. 184 – 185].

Elektronų judėjimo pro Šotkio kontaktus paprasčiausias modelis yra toks: nėra atliekami jokie veiksmas, kurie susiję su elektrinio neutralumo atstatymu. T. y. nėra modeliuojamas elektronų įėjimas į puslaidininkį pro Šotkio kontaktą: toks kontaktas tik sugeria elektronus [1, p. 128 – 129]. Aišku, kad toks modelis netinka atgalinės srovės pro Šotkio kontaktą skaičiavimui, nes tą srovę sukuria elektronų injekcija iš metalo į puslaidininkį (žr. 2.3c pav.). Tačiau praktikoje atgalinė srovė būna labai maža ir turi labai silpną įtaką elektrinio krūvio tankio bei potencialo pasiskirstymui puslaidininkiniame įtaise. Todėl, modeliuojant krūvio ir potencialo pasiskirstymą, net ir toks paprastas Šotkio kontaktų aprašymas yra priimtinas. Jeigu prie Šotkio kontakto yra prijungta pakankamai didelė tiesioginė įtampa ($|U| \gg kT/e$), tada eksponentinis dėmuo srovės išraiškoje (2.3.1) yra žymiai didesnis už atgalinę srovę I_s (kuri, kaip minėta, nėra įskaitoma), todėl srovės stiprio santykinė paklaida dėl atgalinės srovės nepaisymo yra maža.

Reikia turėti omenyje, kad, modeliuojant dalelių išėjimą ir įėjimą pro kontaktus, yra neišvengiami pilnutinio dalelių skaičiaus įtaiso tūryje statistiniai svyravimai, net jeigu įtaisas veikia stacionarioje veikoje. Tokios krūvininkų skaičiaus fliktuacijos stebimos ir realiuose puslaidininkiniuose įtaisuose.

8.7. Erdvinio krūvio tankio apskaičiavimas Monte Karlo programoje

Sprendžiant Puasono lygtį (8.2.2), reikia žinoti erdvinio krūvio tankio ρ priklausomybę nuo koordinatinių x ir y . Tiksliau, turi būti žinomi krūvio tankiai koordinatinio tinklo mazguose (t. y. taškuose, kuriuose susikerta 8.3 pav. pavaizduotosios vertikalios ir horizontalios koordinatinės linijos). Kad būtų lengviau aprašyti šių krūvio tankių skaičiavimo metodiką, sudarysime antrąjį koordinatinį tinklą, kuris pavaizduotas 8.5 pav. punktyrinėmis linijomis. Kaip matome, pagrindinio koordinatinio tinklo (kuris pažymėtas ištinėmis linijomis ir kuris sudaromas taip, kaip parodyta 8.3 pav.) mazgai yra antrojo koordinatinio tinklo narvelių centrai. Kad būtų trumpiau, toliau „mazgais“ vadinsime tik ištinėsių linijų sankirtos taškus, o „narveliais“ – tik punktyrinio tinklo narvelius. Taip apibrėžus narvelius, jų skaičius yra lygus mazgų skaičiui, tačiau narveliai yra nevienodo dydžio: kampinių narvelių tūris yra keturis kartus mažesnis už pilno narvelio tūrį, o paviršinių narvelių tūris yra du kartus mažesnis už pilno narvelio tūrį (žr. 8.5 pav.).

Laikysime, kad puslaidininkyje yra tik vieno tipo laisvieji krūvininkai – elektronai – ir tik vieno tipo priemaišos – teigiamieji donorų jonai. Tada krūvio tankis mazge (i, j) yra lygus

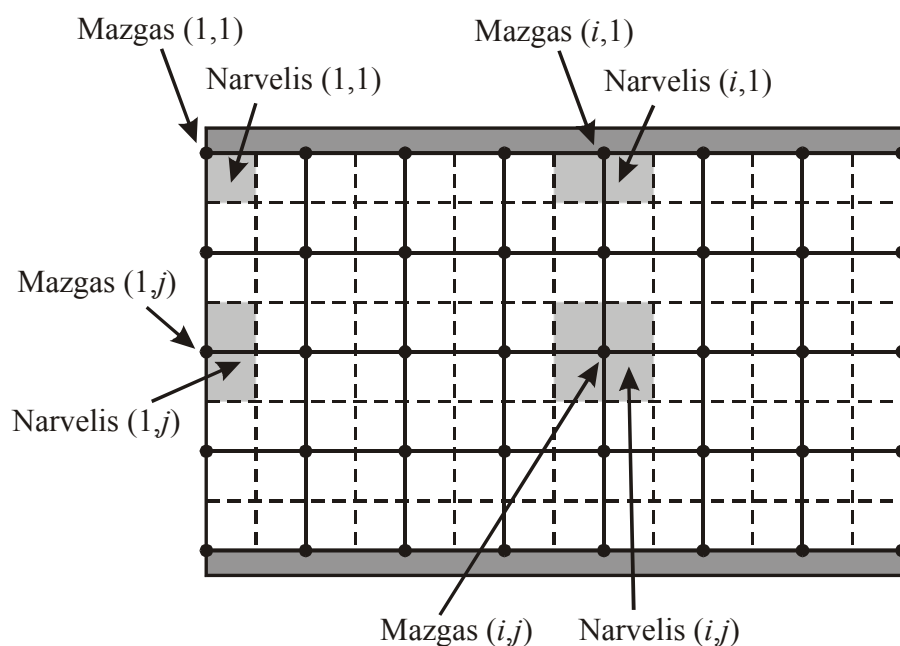
$$\rho_{i,j} = e(N_{Di,j} - n_{i,j}); \quad (8.7.1)$$

čia $N_{Di,j}$ yra donorų koncentracija mazge (i, j) , o $n_{i,j}$ yra elektronų koncentracija mazge (i, j) . Kadangi donorų jonai yra nejudrūs, tai donorų koncentracija nepriklauso nuo laiko, tačiau ji gali priklausyti nuo koordinatės (jeigu legiravimas yra netolygus). Donorų pasiskirstymas užduodamas, apibrėžiant įtaiso geometriją (žr. 8.4 skyrių). Paprasčiausiame rezistoriaus arba Šotkio diodo modelyje galima laikyti, kad puslaidininkis legiruotas tolygiai, t. y. donorų tankis yra vienodas visuose mazguose: $N_{Di,j} = N_D = const$. Elektronų koncentracijos kiekviename mazge $(n_{i,j})$ gali būti skaičiuojamos dviem būdais:

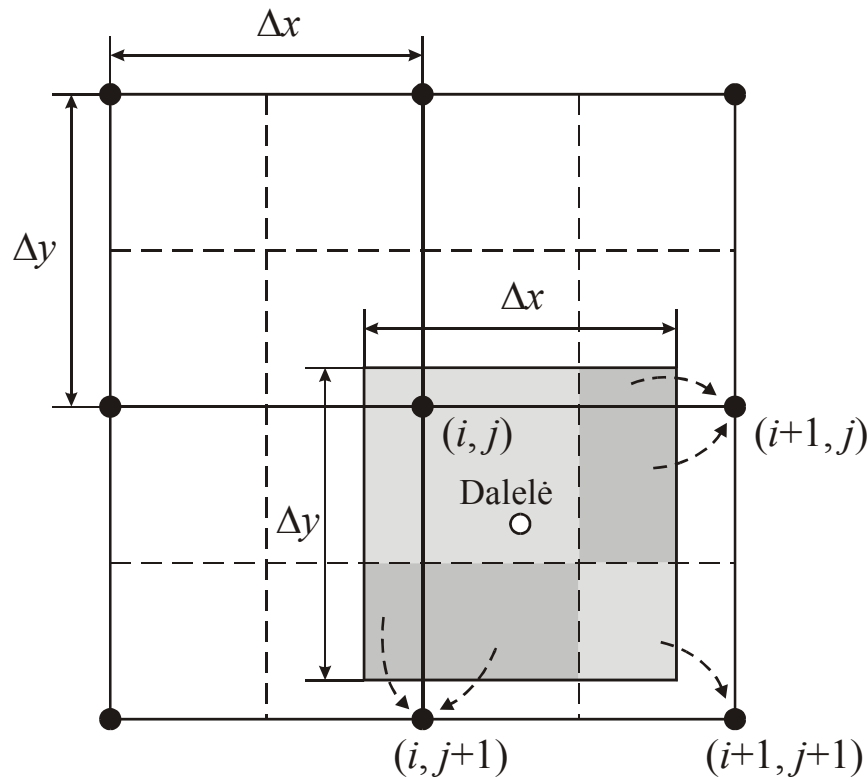
I būdas (artimiausio mazgo metodas). Naudojant šį metodą, elektronų koncentracija kiekviename mazge prilyginama vidutinei elektronų koncentracijai atitinkamame narvelyje. Tuo tikslu dalelių skaičius kiekviename narvelyje (N_{ij}) padauginamas iš elektronų skaičiaus vienai dalelei N_{pp} ir padalinamas iš narvelio tūrio. Narvelio tūris – tai narvelio skerspjūvio ploto ($\Delta x \cdot \Delta y$) ir įtaiso gylio D sandauga. Taigi, naudojant šį būdą, elektronų koncentracija mazge (i, j) yra lygi

$$n_{i,j} = N_{i,j} \frac{N_{pp}}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot D}; \quad (8.7.2)$$

Kadangi dalelių skaičius dažniausiai būna gana mažas (iki kelių dešimčių tūkstančių dalelių visame įtaise, arba iki kelių dešimčių dalelių viename narvelyje), tai yra neišvengiami dideli statistiniai dalelių skaičiaus kiekviename narvelyje svyravimai. Siekiant sumažinti šių statistinių fliktuacijų įtaką krūvio tankiui, naudojamas kitas elektronų koncentracijos skaičiavimo būdas, kuris aprašytas toliau.



8.5 pav. Koordinatinio tinklo mazgai ir narveliai.



8.6 pav. „Elektronų debesies“ metodas, skaičiuojant elektronų koncentracijas mazguose. Punktyrinės rodyklės rodo mazgus, kuriems priskiriamos dalelės krūvio dalys (keturi patamsinti stačiakampiai).

II būdas („elektronų debesies“ metodas). Naudojant šį metodą, laikoma, kad kiekvienos dalelės krūvis yra tolygiai pasiskirstęs erdvės srityje, kurios matmenys $\Delta x \cdot \Delta y \cdot D$ ir kurios centre yra ta dalelė. Tos srities skerspjūvis parodytas 8.6 pav. (patamsintas kvadratas; 8.6 pav. atveju galioja lygybė $\Delta x = \Delta y$, tačiau tai nėra būtinoji sąlyga). Skaičiuojant elektronų koncentracijas mazguose, laikoma, kad kiekvienos dalelės krūvis yra „išdalintas“ tarp keturių narvelių (8.6 pav. atveju tai yra narveliai (i, j) , $(i+1, j)$, $(i, j+1)$ ir $(i+1, j+1)$). Kiekvienam iš tų narvelių tenkanti krūvio dalis yra lygi su dalele susietojo stačiakampio ploto daliai, kuri priklauso atitinkamam narveliui. Šios keturios dalys – tai sritys, į kurias tą stačiakampį dalina punktyrinės tiesės (žr. 8.6 pav.). Punktyrinės rodyklės parodo atitinkamą tarp tų keturių sričių ir mazgų, kuriuose skaičiuojamas erdvinio krūvio tankis.

8.8. Puasono lygties sprendimas ir lauko stiprio skaičiavimas baigtinių skirtumų metodu

Puasono lygtis (8.2.2) dažniausiai sprendžiama **baigtinių skirtumų metodu**, kurio esmė yra ta, kad išvestinės yra pakeičiamos baigtinių skirtumų santykiais. Taikant šį metodą, antrosios išvestinės, kurios yra Puasono lygties kairiojoje pusėje, yra išreiškiamos šitaip:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x^2} \right|_{x_i, y_j} \approx \frac{\varphi_{i+1, j} - 2\varphi_{i, j} + \varphi_{i-1, j}}{(\Delta x)^2}; \quad (8.8.1a)$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial y^2} \right|_{x_i, y_j} \approx \frac{\varphi_{i, j+1} - 2\varphi_{i, j} + \varphi_{i, j-1}}{(\Delta y)^2}; \quad (8.8.1b)$$

čia žymuo $\varphi_{i, j}$ reiškia potencialo vertę taške, kurio koordinatės x_i, y_j (t. y. pirmasis indeksas prie „ φ “ nusako mazgo numerį X kryptimi, o antrasis indeksas – mazgo numerį Y kryptimi). Įrašę (8.8.1a,b) į Puasono lygtį (8.2.2), gauname tiesinių algebrinių lygčių sistemą:

$$\frac{\varphi_{i+1, j} - 2\varphi_{i, j} + \varphi_{i-1, j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\varphi_{i, j+1} - 2\varphi_{i, j} + \varphi_{i, j-1}}{(\Delta y)^2} = -\frac{\rho_{i, j}}{\varepsilon_0 \varepsilon}; \quad (8.8.2)$$

$i = 1, 2, \dots, K, j = 1, 2, \dots, L$, išskyrus mazgus prie elektrodų.

Čia $\rho_{i, j}$ yra erdvinio krūvio tankis mazge (i, j) , K yra mazgų skaičius X kryptimi, o L yra mazgų skaičius Y kryptimi. Pilnutinis lygčių skaičius turi būti lygus nežinomųjų potencialų skaičiui. Šis skaičius yra šiek tiek

mažesnis už pilnutinį mazgų skaičių KL , nes mazgų, kurie yra prie elektrodų, potencialai yra užduoti iš anksto (kiekvieno tokio mazgo potencialas yra lygus atitinkamo elektrodo potencialui). Kitais žodžiais, elektrodų potencialai naudojami kaip Puasono lygties kraštinės sąlygos. Todėl (8.8.2) lygtis reikia spręsti tik toms indeksų i ir j poroms, kurios atitinka vidinius mazgus arba mazgus, esančius įtaiso laisvajame paviršiuje.

Čia reikia pastebėti, kad, norint teisingai sumodeliuoti 2.2 skyriuje aprašytąjį nuskurdinimo reiškinį prie Šotkio kontakto, į mazgų, kurie yra prie tokio kontakto, potencialą turi įeiti ir kontaktinis potencialų skirtumas U_K . Tačiau yra žinoma, kad kontaktinis potencialų skirtumas negali būti tiesiogiai išmatuotas voltmetru (nes jį tiksliai kompensuoja neelektrostatinė elektrovaros jėga). Taigi, Šotkio kontakto potencialas, kurį „mato“ įtaiso elektronai, turi skirtis nuo to kontakto tiesiogiai matuojamo potencialo, kurį matytų eksperimentatorius. Pvz., jeigu duotasis kontaktas yra įžemintas, tada jo „išorinis“ potencialas lygus nuliui. Tačiau, jeigu tai yra Šotkio kontaktas, kurio $U_K = -0.7$ V, tada, sprendžiant Puasono lygtį, reikia laikyti, kad visų mazgų, kurie yra ant to kontakto, potencialai yra lygūs -0.7 V. Dėl šios priežasties, užduodant Šotkio kontakto parametrus, kartu su 8.4 skyriuje minėtais geometriniais parametrais reikia užduoti ir kontaktinį potencialų skirtumą U_K .

Lygčių (8.8.2) kairioji pusė priklauso tik nuo penkių kaimyninių mazgų potencialų: mazgo (i,j) ir keturių mazgų, kurie jį supa: $(i-1,j)$, $(i+1,j)$, $(i,j-1)$, $(i,j+1)$. Gali iškilti klausimas, ką reikia daryti tuo atveju, kai kuris nors iš pastarųjų keturių mazgų atsiduria įtaiso išorėje, t. y. kai kuris nors indeksas tampa lygus 0 arba pirmasis indeksas tampa lygus $K+1$ arba antrasis indeksas tampa lygus $L+1$ (taip atsitinka tada, kai mazgas (i,j) yra įtaiso laisvajame paviršiuje). Vienas iš galimų atsakymų yra „veidrodinio atspindžio“ artinys: galima laikyti, kad tokio „išorinio“ mazgo potencialas yra lygus jo veidrodinio atspindžio potencialui. Pvz., mazgo $(0,j)$ potencialas lygus mazgo $(2,j)$ potencialui ($\varphi_{0,j} = \varphi_{2,j}$), o mazgo $(K+1,j)$ potencialas yra lygus mazgo $(K-1,j)$ potencialui ($\varphi_{K+1,j} = \varphi_{K-1,j}$).

Naudojantis aukščiau suformuluotomis taisyklėmis, galima vienareikšmiškai išspręsti tiesinių algebrinių lygčių sistemą (8.8.2), t. y. apskaičiuoti visų mazgų potencialus $\varphi_{i,j}$, kai yra žinomi krūvio tankiai tuose mazguose $\rho_{i,j}$ (šių krūvio tankių skaičiavimas buvo aprašytas 8.7 skyriuje). Šią lygčių sistemą gali sudaryti iki kelių dešimčių tūkstančių lygčių (pvz., kai $K = L = 100$, lygčių skaičius yra artimas $KL = 10000$). Tokias dideles tiesinių algebrinių lygčių sistemas įprasta spręsti artutiniais metodais. Paprasčiausias iš šių metodų yra vadinamasis **Gauso ir Zeidelio metodas** (*Gauss-Seidel method*). Tai yra vienas iš **iteracinių metodų**, t. y. prie galutinio sprendinio artėjama nuosekliais „žingsniais“ (iteracijom). Kiekvieno žingsnio rezultatas – visų mazgų potencialai. Kiekvieno mazgo potencialas gaunamas, išreiškus $\varphi_{i,j}$ iš (8.8.2) lygčių:

$$\varphi_{i,j} = \frac{(\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i+1,j})/(\Delta x)^2 + (\varphi_{i,j-1} + \varphi_{i,j+1})/(\Delta y)^2 + \rho_{ij}/(\epsilon_0 \epsilon)}{2/(\Delta x)^2 + 2/(\Delta y)^2}. \quad (8.8.3)$$

Kaip matome, mazgo (i,j) potencialas išreiškiamas keturių kaimyninių mazgų potencialais. Priklausomai nuo potencialų skaičiavimo tvarkos, kai kurie iš minėtųjų keturių potencialų gali būti jau atnaujinti, o kiti dar gali būti imami iš ankstesniosios iteracijos. Pvz., jeigu potencialai skaičiuojami i ir j didėjimo tvarka (t. y. $\varphi_{1,1}, \varphi_{2,1}, \dots, \varphi_{K,1}; \varphi_{1,2}, \varphi_{2,2}, \dots, \varphi_{K,2}; \dots; \varphi_{1,L}, \varphi_{2,L}, \dots, \varphi_{K,L}$), tada, skaičiuojant potencialą $\varphi_{i,j}$, potencialai $\varphi_{i-1,j}$ ir $\varphi_{i,j-1}$ jau yra atnaujinti, o potencialai $\varphi_{i+1,j}$ ir $\varphi_{i,j+1}$ – dar ne. Gauso ir Zeidelio metodo ypatybė yra ta, kad, skaičiuojant reiškinį (8.8.3), nereikia kreipti dėmesio, kurie iš naudojamų potencialų priklauso einamajai iteracijai (jau yra atnaujinti), o kurie – praeitai iteracijai: su visais potencialais elgiamasi vienodai, ir ankstesniosios iteracijos potencialų nereikia saugoti atmintyje. Taigi, kiekvienoje iteracijoje pakanka tik apskaičiuoti reiškinį (8.8.3) visiems vidiniams mazgams ir visiems mazgams, kurie yra laisvajame paviršiuje (ne prie elektrodų). Tokios iteracijos kartojamos tol, kol potencialai stabilizuojasi. T. y. iteracinis procesas nutraukiamas tada, kai nustatoma, kad duotosios iteracijos rezultatas (visų mazgų potencialai) skiriasi nuo ankstesniosios iteracijos potencialų mažiau už tam tikrą iš anksto pasirinktą mažą dydį. Pvz., iteracijas galima baigti, kai didžiausias mazgo potencialo pokytis tampa mažesnis už 10^{-8} V (toku atveju visų mazgų potencialai būtų nustatyti 10^{-8} V tikslumu).

Apskaičiavus visų mazgų potencialus, galima apskaičiuoti ir elektrinio lauko stiprio pasiskirstymą: elektrinio lauko stiprio komponentės viduje stačiakampio, kurio kampuose yra mazgai (i,j) , $(i+1,j)$, $(i,j+1)$ ir $(i+1,j+1)$, yra lygios

$$\mathcal{E}_x \approx \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{\Delta x}, \quad \mathcal{E}_y \approx \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{\Delta y}. \quad (8.8.4)$$

8.9. Laiko žingsnio Δt ir atstumų tarp gretimų mazgų Δx , Δy pasirinkimas

Kaip aukščiau minėta, Puasono lygtis sprendžiama diskretiems laiko momentams, kurie skiriasi vienas nuo kito vadinamuoju „laiko žingsniu“ Δt . Siekiant užtikrinti Monte Karlo modeliavimo proceso stabilumą ir pakankamai tikslus rezultatus, reikia naudoti kuo mažesnę laiko žingsnį Δt ir kuo mažesnius

koordinatinio tinklo žingsnius Δx , Δy (t. y. atstumus tarp gretimų mazgų) Laiko žingsnis Δt turi būti toks, kad per laiką Δt elektrinio lauko pasiskirstymas įtaiso tūryje nespėtų žymiai pasikeisti (nes modeliavimo metu laikoma, kad laiko intervale nuo $t - \Delta t$ iki t krūvininkai juda *stacionariame* elektriniame lauke, kuris atitinka laiko momentu $t - \Delta t$ buvusį erdvinio krūvio pasiskirstymą). Erdviniai žingsniai Δx ir Δy turi būti žymiai mažesni už tam tikrą būdingąjį atstumą, kuriame elektrinis laukas pastebimai pasikeičia (nes tik tada galima naudoti baigtinių skirtumų metodą, t. y. apytikslės lygybes (8.8.1a,b) ir (8.8.4)).

Kuo mažesnis Δt , tuo dažniau reikia spręsti Puasono lygtį, o Δx ir Δy lemia mazgų skaičių ir tuo pačiu – skaičiavimų apimtį, sprendžiant Puasono lygtį baigtinių skirtumų metodu. Taigi, dydžių Δt , Δx ir Δy mažinimas yra susijęs su skaičiavimų trukmės didėjimu. Praktikoje visada siekiama kompromiso tarp skaičiavimų trukmės ir tikslumo. Žemiau aprašyti kriterijai, kuriais remiantis, pasirenkami minėtieji žingsniai.

Laiko žingsnis Δt turi būti mažesnis už atvirkštinį plazminį dažnį ω_p , t. y.

$$\Delta t < \frac{1}{\omega_p}. \quad (8.9.1)$$

Plazminis dažnis – tai laisvųjų elektronų kolektyvinių virpesių teigiamųjų jonų elektriniame lauke dažnis. Šiuos virpesius galima įsivaizduoti taip. Jeigu visus puslaidininkiniame įtaise esančius elektronus paslinktume viena kryptimi vienodu mažu atstumu, tada viename įtaiso paviršiuje atsirastų nesukompensuotasis neigiamas krūvis, o kitame – toks pats teigiamas krūvis. Todėl atsirastų elektrinis laukas, kuris stengtųsi gražinti elektronus į pradinę padėtį. Pašalinus išorinį poveikį, minėtasis elektrinis laukas sukeltų visų laisvųjų elektronų kolektyvinius virpesius. Šių virpesių dažnis yra plazminis dažnis. Plazminis dažnis yra lygus

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon_0 \epsilon m^*}}; \quad (8.9.2)$$

čia m^* yra elektrono efektinė masė, ϵ yra dielektrinė skvarba, o n yra elektronų koncentracija. Atvirkštinis plazminis dažnis $1/\omega_p$ apytiksliai nusako mažiausią įmanomą laiką, per kurį elektronų koncentracija duotajame erdvės taške gali žymiai pasikeisti. Būtent todėl reikia, kad galiojūt sąlyga (8.9.1): ši sąlyga užtikrina, kad elektrinio lauko pokytis per laiką Δt yra nežymus. Elektronų koncentracija n , kuri įeina į (8.9.2), yra kintama. Skaičiuojant plazminį dažnį (8.9.2), reikia naudoti didžiausią įmanomą elektronų koncentraciją įtaise. Kadangi elektrinio neutralumo sąlygomis elektronų koncentracija yra lygi donorų jonų koncentracijai, tai (8.9.2) reiškinyje vietoj n galima naudoti didžiausią donorų koncentraciją. Jeigu puslaidininkis turi kelis elektronų energijos slėnius, kurie skiriasi elektronų efektinėmis masėmis, tada reikia naudoti mažiausią efektinę masę. Pvz., GaAs atveju mažiausia efektinė masė yra Γ slėnyje ($m^* = 0.067m_0$, kur $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg yra elektrono masė vakuume), o $\epsilon = 12.9$. Tada, laikant, kad didžiausias legiravimo laipsnis yra $5 \cdot 10^{17}$ cm⁻³, plazminis dažnis (8.9.2) yra lygus maždaug $4.3 \cdot 10^{13}$ s⁻¹. Todėl tokiu atveju laiko žingsnis Δt turėtų būti mažesnis už $2 \cdot 10^{-14}$ s = 0.02 ps.

Aplink kiekvieną teigiamąjį joną susidaro laisvųjų elektronų debesys, kuris dalinai ekranuoja to jono elektrinį lauką. Atstumas, kuriame tie pertekliniai elektronai ekranuoja didžiąją dalį jono elektrinio lauko, – tai vadinamasis **Debajaus ekranavimo nuotolis** (arba tiesiog „Debajaus nuotolis“), kuris lygus

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon k_B T}{e^2 n}}; \quad (8.9.3)$$

čia k_B yra Bolcmano konstanta, o T yra absoliutinė temperatūra. Debajaus nuotolis – tai mažiausias atstumas, kuriame elektronų koncentracija gali žymiai pasikeisti. Kadangi elektrinį lauką lemia erdvinio krūvio pasiskirstymas, tai Debajaus nuotolį galima aiškinti ir kaip mažiausią atstumą, kuriame elektrinis laukas gali žymiai pasikeisti. Todėl Debajaus nuotolį λ_D reikia naudoti kaip koordinatinio tinklo žingsnių Δx ir Δy pasirinkimo kriterijų. T. y. atstumai Δx ir Δy turi būti mažesni už λ_D :

$$\Delta x, \Delta y < \lambda_D. \quad (8.9.4)$$

Kaip ir plazminis dažnis (8.9.1), Debajaus nuotolis (8.9.3) turi būti skaičiuojamas, naudojant didžiausią elektronų koncentraciją įtaiso modelyje. GaAs atveju, kai $n = 5 \cdot 10^{17}$ cm⁻³, o $T = 300$ K, Debajaus nuotolis lygus $\lambda_D = 60$ Å.

Naudojant sąlygas (8.9.1) ir (8.9.4), laiko žingsnį Δt ir koordinatinio tinklo žingsnį (Δx , Δy) galima pasirinkti nepriklausomai vieną nuo kito. Tačiau tada, priklausomai nuo dalelių greičio, dalelių nueitas kelias per laiką Δt galėtų tapti didesnis už Δx arba Δy . Tai reikštų, kad per laiką Δt žymiai pasikeičia erdvinio krūvio tankio pasiskirstymas įtaiso tūryje, ir nustotų galiooti viena iš modeliavimo prielaidų: kad laiko tarpe tarp dviejų Puasono lygties sprendimų (nuo $t - \Delta t$ iki t) elektronai juda stacionariame elektriniame lauke.

Todėl, pasirinkus dydžių Δt , Δx ir Δy vertes pagal sąlygas (8.9.1) ir (8.9.4), dar reikia patikrinti, ar galioja sąlyga

$$l_{\max} < \Delta x, \quad l_{\max} < \Delta y; \quad (8.9.5)$$

čia l_{\max} yra didžiausias atstumas, kurį gali nueiti elektronas per laiką Δt . Šis atstumas lygus

$$l_{\max} = v_{\max} \cdot \Delta t, \quad (8.9.6)$$

kur v_{\max} yra didžiausias elektrono judėjimo greitis puslaidininkyje ($\approx 10^8$ cm/s). Jeigu sąlyga (8.9.5) negalioja, reikia sumažinti Δt , kad ta sąlyga galiotų. Kitas būdas – padidinti Δx arba Δy (tačiau tai gali būti neįmanoma, nes Δx ir Δy turi dar tenkinti ir sąlygą (8.9.4)).

8.10. Naujų dalelių kūrimas. Įtaiso voltamperinių charakteristikų skaičiavimas

Modeliuojant puslaidinikinį įtaisą Monte Karlo metodu, naujas daleles reikia kurti dviejuose modeliavimo etapuose:

- 1) užduodant pradinį krūvininkų pasiskirstymą įtaiso viduje;
- 2) palaikant elektrinį neutralumą prie ominių kontaktų (žr. 8.6.5 skyrių).

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas dažniausiai parenkamas taip, kad erdvinio krūvio tankis visuose įtaiso taškuose būtų artimas nuliui. Tai reiškia, kad elektronų skaičius kiekviename narvelyje turi būti lygus donorų jonų skaičiui tame narvelyje (kadangi su kiekviena dalele yra susieti N_{pp} elektronų, tai dalelių skaičius yra N_{pp} kartų mažesnis). Analogiškai, palaikant elektrinį neutralumą prie ominio kontakto, reikia generuoti tiek dalelių, kiek jų trūksta iki elektrinio neutralumo atitinkamame priekontaktiniame narvelyje (pvz., narvelyje, kuris 8.5 pav. pažymėtas ($i, 1$)). Generuojant daleles duotajame narvelyje, dalelių y koordinatė prilyginama 0 arba H (t. y. naujosios dalelės yra atitinkamo kontakto paviršiuje), o x koordinatės pasirenkama atsitiktinai (tačiau tik duotojo narvelio ribose).

Kitas klausimas yra generuojamų dalelių energijos ir banginiai vektoriai. Dalelių energijos turi atitikti Bolcmano skirstinį. Tai reiškia, kad kiekvienos dalelės energija apskaičiuojama, naudojant atsitiktinį skaičių r , kuris tolygiai pasiskirstęs tarp 0 ir 1:

$$E_k = -1.5 \cdot k_B T \ln(r). \quad (8.10.1)$$

Žinant dalelės energiją E_k , jos banginio vektoriaus modulis k (bangos skaičius) išreiškiamas iš (1.3.5):

$$k = \frac{\sqrt{2m^* E_k (1 + \alpha E_k)}}{\hbar}. \quad (8.10.2)$$

Naujai generuojamų dalelių bangos vektoriaus kryptį pasiskirstymas turi būti izotropinis (t. y. visos kryptys yra lygiavertės). Tai reiškia, kad kampai ϕ ir θ , kurie nusako bangos vektoriaus kryptį (žr. 6.1 pav.), turi būti skaičiuojami, naudojant du atsitiktinius skaičius r_1 ir r_2 , kurie tolygiai pasiskirstę tarp 0 ir 1:

$$\phi = 2\pi r_1, \quad (8.10.3a)$$

$$\cos \theta = 1 - 2r_2. \quad (8.10.3b)$$

Apskaičiavus ϕ ir θ , bangos vektoriaus komponentės skaičiuojamos šitaip:

$$k_x = k \sin \theta \cos \phi,$$

$$k_y = k \sin \theta \sin \phi, \quad (8.10.4)$$

$$k_z = k \cos \theta.$$

Tačiau, jeigu dalelė sukuriama prie ominio kontakto, siekiant atstatyti jo elektrinį neutralumą, tada jos greičio vektorius turi būti nukreiptas į įtaiso tūrį (priešingu atveju ta dalelė tuoj pat išeitų pro tą kontaktą). Tai reiškia, kad tuo atveju, kai ominis kontaktas yra ant viršutinio paviršiaus ($y=0$), dalelė turi judėti į apačią ($k_y > 0$), o tuo atveju, kai kontaktas yra ant apatinio paviršiaus ($y=H$), dalelė turi judėti į viršų ($k_y < 0$). Todėl, sukūrus tokią dalelę, reikia patikrinti, ar k_y tenkina minėtąją nelygybę. Jeigu ši nelygybė negalioja, tada reikia pakeisti k_y ženklą.

Jeigu visų kontaktų potencialai yra pastovūs, tada Monte Karlo modeliavimo metu anksčiau ar vėliau bus pasiekta būseną, kurioje visų mazgų potencialai ir krūvio tankiai juose yra apytiksliai pastovūs (išskyrus atsitiktinius svyravimus). Tai yra įtaiso stacionarioji veika. Šioje veikoje galima skaičiuoti kiekvienu kontaktu tekančią srovę. Tuo tikslu reikia skaičiuoti pilnutinį pro kiekvieną kontaktą išėjusių elektronų skaičių. Be to, ominių kontaktų atveju reikia skaičiuoti ir prie to kontakto sukurtų elektronų skaičių. Kontakto srovė gaunama, padauginus šių dviejų skaičių skirtumą iš elektrono krūvio ir padalinus iš modeliavimo proceso trukmės. Atlikus tokius skaičiavimus įvairiems elektrodo potencialams, gaunamos kontaktų srovių priklausomybės nuo įtampų tarp elektrodų – *voltamperinės charakteristikos*.

8.11. Puslaidininkinio įtaiso Monte Karlo modeliavimo programos struktūrinė schema

Naudojantis tuo, kas pasakyta 8.2–8.10 skyriuose apie puslaidininkinių įtaisų modeliavimą, galima sudaryti visos programos struktūrinę schemą. Ši schema pavaizduota 8.8a,b pav. 8.8a pav. parodytas bendrasis programos vaizdas. 8.8b pav. parodyta svarbiausioji programos dalis – vieno elektrono judėjimo modeliavimas laiko tarpe tarp dviejų Puasono lygties sprendimų. 8.8c pav. pavaizduoti paruošiamieji veiksmai, kurie atliekami programos pradžioje. 8.8a–c pav. parodyti ir vardai paprogramių, kuriose atliekamas kiekvienas veiksmas (tie vardai atitinka vieną konkrečią programą – MonteCarlo5.dll).

Aptarsime 8.8b pav. struktūrinę schemą. Akivaizdu, kad ši schema yra iš esmės tokia pati, kaip ir 8.2 pav. pavaizduotoji daugiadalelio Monte Karlo metodo schema, nors ir šiek tiek smulkesnė (joje yra išskirti atsitiktinių skaičių generavimo momentai, virtualioji sklaida atskirta nuo tikrosios sklaidos ir parodyta, kad santykinės sklaidos spartos A_j yra imamos iš sklaidos spartų lentelės, o ne skaičiuojamos analiziškai po kiekvieno sklaidos įvykio). Jeigu nepaisysime pakeitimų, kurie susiję su modeliavimo proceso žingsnių smulkesniu aprašymu, tada, lyginant su 8.2 pav., 8.8b pav. schemoje yra tik du pakeitimai. Tie pakeitimai atspindi kai kurias puslaidininkinio įtaiso modeliavimo ypatybes:

- 1) Baigus skaičiuoti elektrono būseną laisvojo lėkio pabaigoje, reikia patikrinti, ar dalelė yra „aktyvi“, t. y. ar ji yra neišėjo pro kontaktą. Kaip minėta 8.5 skyriuje, dalelės „aktyvumo“ indikatorius vaidmenį gali atlikti slėnio numeris. Pvz., programoje MonteCarlo5.dll išėjusių pro kontaktą dalelių energijos slėnio numeris prilyginamas 9. Kai dalelė tampa „neaktyvia“, su ja nustojama atlikti visus veiksmus, kurie susiję su dreifo ir sklaidos modeliavimu. Vėliau visos dalelės, kurių slėnio numeris lygus 9, bus pašalintos iš modelio (žr. 8.8a pav.).
- 2) Joninė priemaišinė sklaida yra vienintelis iš aukščiau aprašytų sklaidos procesų, kurio sparta priklauso nuo elektronų koncentracijos n (ji įeina į Debajaus ekranavimo nuotolio išraišką (6.2.7)) ir nuo jonų koncentracijos N_j (ji įeina į sklaidos spartos išraišką (6.2.15)). Kadangi bendruoju atveju elektronų koncentracija yra kintama, o jonų koncentracija gali būti skirtinga įvairiose įtaiso vietose (netolygiojo legiravimo atveju), tai joninės sklaidos spartą neįmanoma apskaičiuoti iš anksto, kaip kitiems sklaidos procesams, kurių sparta priklauso tik nuo elektrono energijos. Todėl joninės sklaidos spartą reikia skaičiuoti analiziškai (pagal formulę (6.2.15)) po kiekvieno sklaidos įvykio (o ne imti iš sklaidos spartų lentelės, kaip tai daroma visų kitų sklaidos tipų atveju).

Modeliavimo pabaigoje pilnutinis išėjusių pro kiekvieną kontaktą dalelių skaičius atimamas iš pilnutinio sukurtų prie to kontaktų dalelių skaičiaus, po to šis skirtumas padauginamas iš vienos dalelės krūvio eN_{pp} ir padalinamas iš t_{\max} . Rezultatas yra kiekvieno kontakto srovės stipris. Voltamperinė charakteristika gaunama, pakartojus visą modeliavimo procesą kelioms kontaktų (arba vieno kontakto) potencialų vertėms.

8.12. Daugiadalelio Monte Karlo metodo taikymo pavyzdys: elektronų dreifo greičio paviršiaus modeliavimas

Puslaidininkinių įtaisų matmenys šiuolaikinėse integrinėse grandinėse dažnai būna mažesni už $1 \mu\text{m}$. Todėl elektronų pernašos nuo vieno elektrodo iki kito trukmė gali tapti mažesnė už jų impulso relaksacijos trukmę (taip vadinamas vidutinis laikas, per kurį elektronas praranda *kryptingojo* judėjimo greitį). Tai reiškia, kad „šaltieji“ elektronai, kurie buvo injektuoti į įtaisą, gali nespėti pasiekti stacionariojo dreifo greičio per judėjimo trukmę. Vienas iš šio reiškinio požymių yra tas, kad vidutinis elektronų *kryptingojo* judėjimo greitis (t. y. dreifo greitis) mažo įtaiso viduje gali tapti didesnis už dreifo greitį didesnių matmenų bandinyje, esant tam pačiam elektrinio lauko stipriui. Tai yra vadinamasis **dreifo greičio paviršius**.

Kad taptų galimas dreifo greičio paviršius, reikia dviejų sąlygų:

- 1) krūvininkų judris (kitai sakant, dreifo greitis, atitinkantis duotąją elektrinio lauko stiprio vertę) turi mažėti didėjant vidutinei krūvininkų energijai;
- 2) energijos relaksacijos trukmė turi būti žymiai didesnė už impulso relaksacijos trukmę.

Pirmoji sąlyga galioja visuose puslaidininkiuose. Taip yra todėl, kad, didėjant vidutinei krūvininkų energijai didėja ir pilnutinė sklaidos sparta, t. y. mažėja impulso relaksacijos trukmė τ_{imp} , kuri yra vienareikšmiškai susijusi su stacionarioju dreifo greičiu v_s :

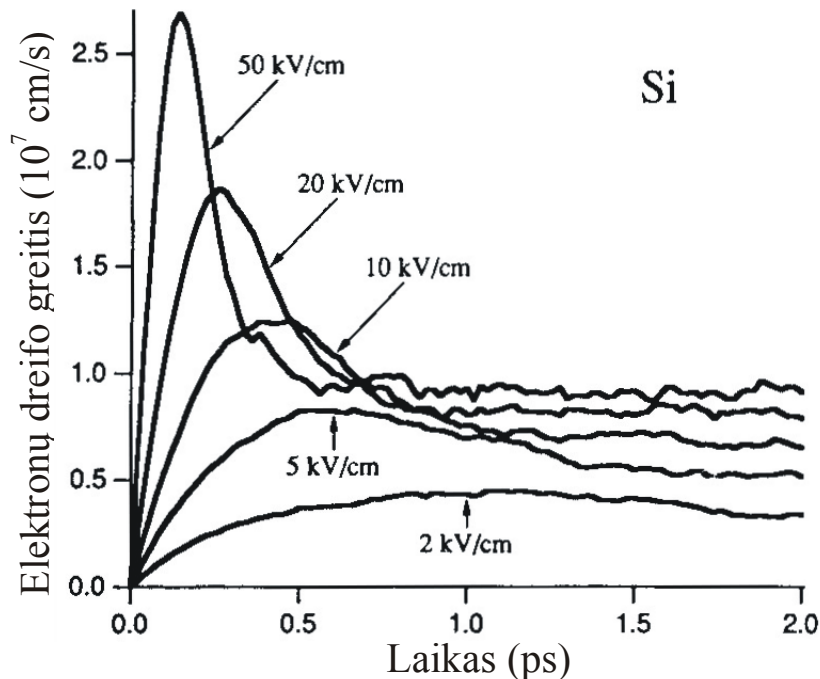
$$v_s = \tau_{\text{imp}} \frac{eE}{m} \quad (8.12.1)$$

Antroji sąlyga galioja tada, kai krūvininkų vidutinė energija yra pakankamai didelė. Taip yra todėl, kad, nors sklaidos įvykiai efektyviai mažina *kryptingo* judėjimo greitį (pvz., izotropinės sklaidos atveju *kryptingo* judėjimo greitis prarandamas jau po vieno sklaidos įvykio), tačiau vidutinis *energijos* pokytis vieno sklaidos įvykio metu yra ribotas: pvz., joninės priemaišinės sklaidos metu krūvininko energija nekinta, o fononinės sklaidos metu energijos pokytis yra lygus fonono energijai, t. y. šimtųjų elektronvolto dalių eilės. Todėl,

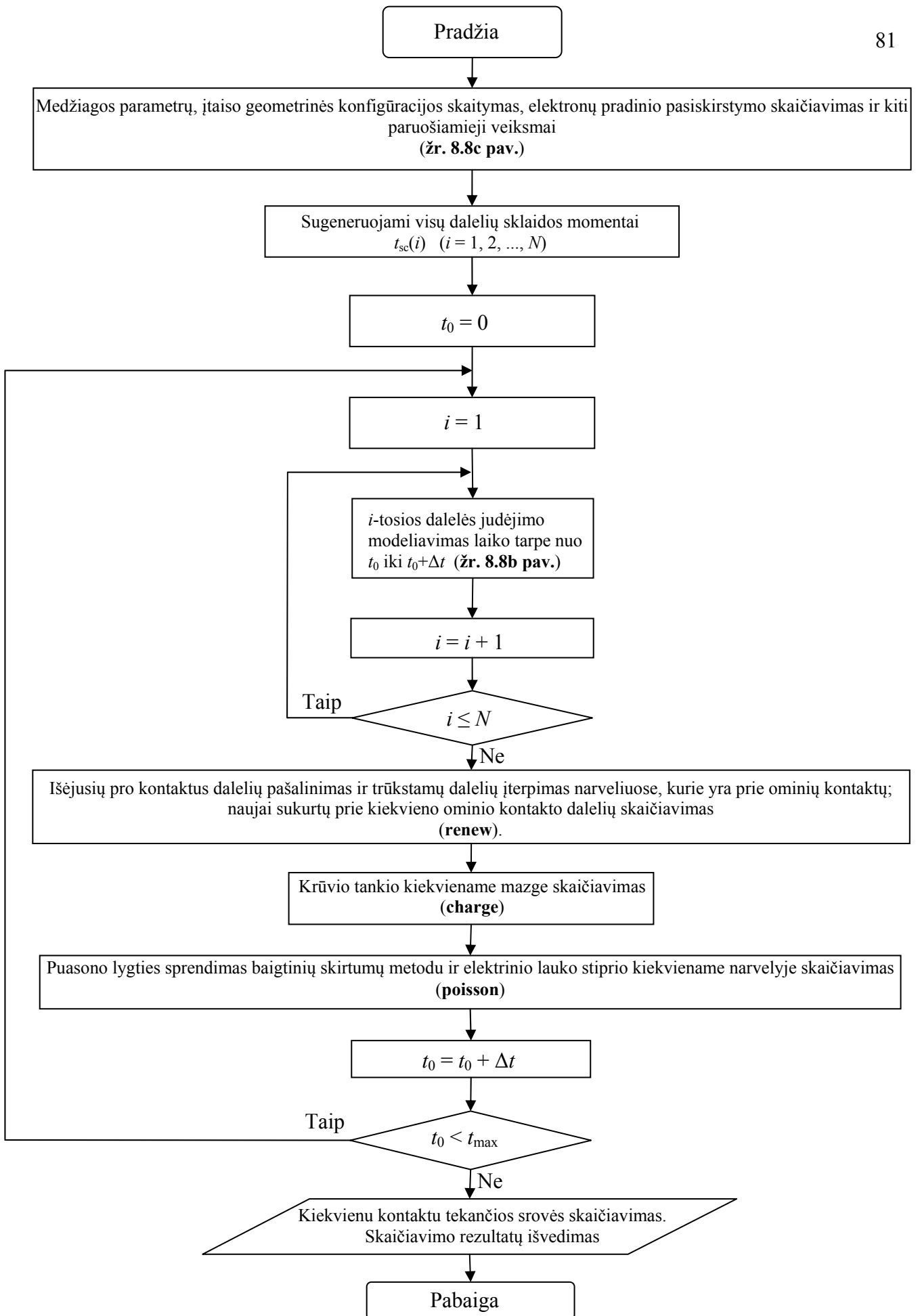
jeigu stacionarioji vidutinės energijos vertė (atitinkanti duotą elektrinio lauko stiprį) yra palyginti didelė (pvz., dešimtųjų elektronvolto dalių eilės), tada, įjungus tą lauką, reikės palyginti daug sklaidos įvykių, kol krūvininkai „įkais“ iki tos energijos vertės, o išjungus lauką, reikės palyginti daug sklaidos įvykių, kol krūvininkų vidutinė energija sumažės iki šiluminės energijos (kT).

Galiojant minėtoms dviem sąlygoms, dreifo greičio perviršio reiškinį galima paaiškinti šitaip. Tarkime, laiko momentu $t = 0$ į puslaidininkio sluoksnį buvo injektuoti krūvininkai (arba buvo įjungtas stiprus elektrinis laukas). Iš pradžių krūvininkų vidutinė energija yra artima šiluminei energijai kT . Jeigu sluoksnyje egzistuoja stiprus elektrinis laukas, tada krūvininkai pradės „kaisti“, t. y. jų vidutinė betvarkio judėjimo energija pradės didėti. Vidutinis *kryptingo* judėjimo greitis (kitai sakant, dreifo greitis) taip pat pradės didėti. Tačiau tas didėjimas užtruks trumpiau negu energijos didėjimas (nes, kaip minėta, impulso relaksacijos trukmė stipriame elektriniame lauke yra mažesnė negu energijos relaksacijos trukmė). Todėl dreifo greičio augimas baigsis esant energijai, kuri mažesnė už pusiausvirąją energiją, atitinkančią tą elektrinio lauko stiprį. Toliau didėjant vidutinei krūvininkų energijai, vidutinis dreifo greitis pradės mažėti (dėl anksčiau minėto sklaidos spartos didėjimo). Todėl dreifo greičio priklausomybė nuo laiko esant pakankamai stipriam elektriniame lauke turi maksimumą (žr. 8.7 pav.). O jei vidutinė krūvininkų lėkio per sluoksnį trukmė yra artima laikui, kuris atitinka tą maksimumą, tada vidutinis matuojamasis dreifo greitis yra didesnis už dreifo greitį, kuris būtų gautas kelis kartus storesniame sluoksnyje.

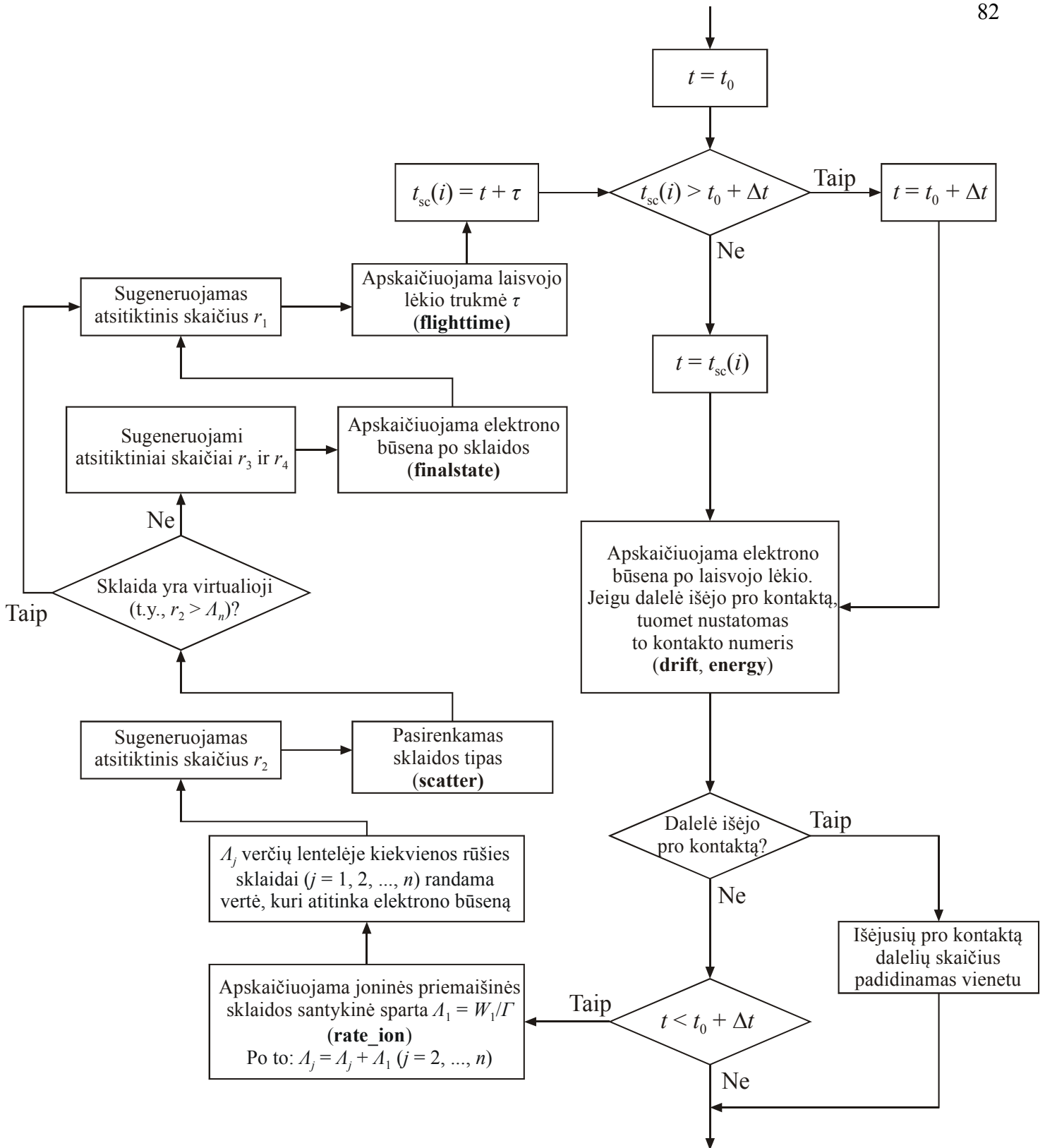
Toks dreifo greičio perviršio aiškinimas tinka visiems puslaidininkiams. Tačiau galio arsenide pasireiškia dar vienas reiškinys, kuris sustiprina dreifo greičio perviršio efektą: esant pakankamai aukštai elektronų energijai, tampa įmanoma elektronų pernaša iš Γ slėnio į L slėnį. Kadangi L slėnyje elektronų efektinė masė yra didesnė, negu Γ slėnyje, tai būsenų tankis taip pat yra didesnis (žr. (1.1.11)). Todėl, esant pakankamai stipriam elektriniame lauke, dauguma pagreitinėtų elektronų jau po pirmųjų netampriosios sklaidos įvykių pereina iš Γ į L slėnį. Kadangi elektronų dreifo greitis yra atvirkščiai proporcingas efektinei masei (žr. (8.12.1) formulę), tai elektronų dreifo greitis L slėnyje yra mažesnis, negu Γ slėnyje. Vadinasi, GaAs atveju dreifo greitis sumažėja ne vien dėl padidėjusios sklaidos spartos, bet ir dėl elektronų efektinės masės padidėjimo, jiems perėjus iš Γ slėnio į L slėnį.



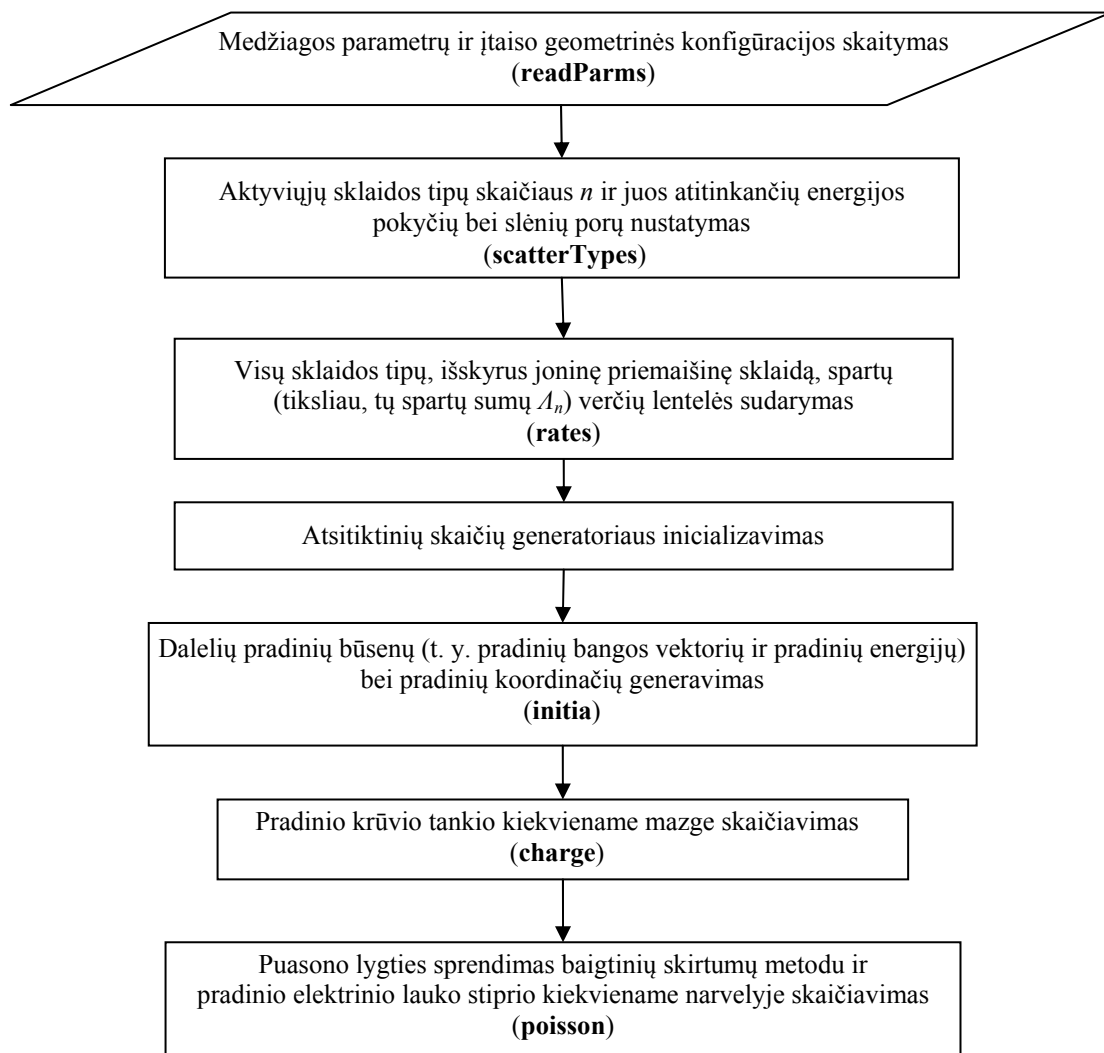
8.7 pav. Elektronų dreifo greičio silicyje priklausomybė nuo laiko, esant kelioms elektrinio lauko stiprio vertėms. Priemaišų jonų koncentracija lygi 10^{20} m^{-3} .



8.8a pav. Puslaidininkinio įtaiso Monte Karlo modeliavimo programos MonteCarlo5.dll struktūra. Pastorintu šriftu užrašyti vardai paprogramių, kuriose atliekami nurodytieji veiksmai (jeigu paprogramės vardo nėra, tai reiškia, kad tas veiksmas atliekamas pagrindinėje programoje).



8.8b pav. i -tosios dalelės judėjimo laiko tarpe nuo t_0 iki $t_0 + \Delta t$ modeliavimas puslaidininkinio įtaiso Monte Karlo modeliavimo programoje MonteCarlo5.dll. Pastorintu šriftu užrašyti vardai paprogramių, kuriose atliekami nurodytieji veiksmai (jeigu paprogramės vardas nenurodytas, tai reiškia, kad tas veiksmas atliekamas pagrindinėje programoje).



8.8c pav. Paruošiamieji veiksmai, vykdant puslaidininkinio įtaiso Monte Karlo modeliavimo programą MonteCarlo5.dll.

Literatūra

1. **Tomizawa K.** Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices. – Boston, London: Artech House, 1993. – 342 p.
2. **Moglestue C.** Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices. – London: Chapman & Hall, 1993. – 326 p.
3. **Dargys A., Kundrotas J.** Handbook on physical properties of Ge, Si, GaAs and InP. – Vilnius: Science and Encyclopedia Publishers, 1994. – 264 p.