

VILNIAUS UNIVERSITETAS  
Kietojo kūno elektronikos katedra  
Krūvio pernašos vyksmų skaitinis modeliavimas

Darbas Nr. 3

**Krūvininkų kinetikos puslaidininkyje esant lokalizacijos centrams  
tyrimas**

Parengė A. Poškus

2015-11-03

## **Turinys**

<b>Darbo tikslas .....</b>	<b>2</b>
<b>1. Užduotys .....</b>	<b>2</b>
<b>2. Kontroliniai klausimai .....</b>	<b>2</b>
<b>3. Darbo teorija.....</b>	<b>4</b>
3.1. Tiesioginiai ir netiesioginiai šuoliai. Rekombinacijos centrai .....	4
3.2. Rekombinacijos sparta. Tolydumo lygtis .....	4
3.3. Krūvininkų gyvavimo trukmės išraiška rekombinacijos centrų parametrais .....	6
3.4. Krūvininkų kinetikos skaitinis modeliavimas esant rekombinacijos centrams .....	7
3.5. Šalutinių krūvininkų injekcija. Difuzijos nuotolis .....	8
3.5.1. <i>Stacionarioji veika esant šalutinių krūvininkų injekcijai</i> .....	9
3.5.2. <i>Perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimas sustabdžius injekciją: rekombinacijos ribota veika</i>	10
3.5.3. <i>Difuzijos ribota veika</i> .....	10
3.6. Sluoksnių poliarizacija dėl krūvininkų persiskirstymo, esant prilipimo lygmenims .....	14
<b>4. Darbo eiga .....</b>	<b>19</b>
4.1. Darbo eiga atliekant I – V variantus .....	19
4.2. Darbo eiga atliekant VI – X variantus .....	30
<b>5. Darbo duomenų analizė .....</b>	<b>36</b>

## Darbo tikslas

I – V variantai: Sumodeliuoti puslaidininkio perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimą laike sustabdžius šaltinių krūvininkų injekciją, nustatyti to mažėjimo būdingųjų laikų priklausomybę nuo lokalizacijos centrų parametrų ir nuo sluoksnio storio.

VI – X variantai: Sumodeliuoti silpnai legiruoto puslaidininkio sluoksnio su dviem užtvariniais kontaktais poliarizaciją įjungus išorinę įtampą; nustatyti poliarizacinės srovės kitimo spartos ir lokalizacijos centrų parametrų sąryšį bei tos spartos priklausomybę nuo temperatūros.

## 1. Užduotys

*I – V variantai:*

1. Naudojant programą GraphiXT, sumodeliuoti skylių injekciją į n puslaidininkio sluoksnį, kuriame egzistuoja rekombinacijos centrai, stacionariomis sąlygomis, kai sluoksnio storis yra daug mažesnis už skylių difuzijos ilgį ir kai sluoksnio storis yra daug didesnis už skylių difuzijos ilgį.
2. Abiem minėtais atvejais sumodeliuoti perteklinių skylių koncentracijos mažėjimą išjungus injekcijos srovę ir atvaizduoti vidutinės skylių koncentracijos sluoksnyje priklausomybę nuo laiko.
3. Patikrinti, ar vidutinės perteklinių krūvininkų koncentracijos mažėjimas laike išjungus šaltinių krūvininkų injekciją yra eksponentinis. Nustatyti to mažėjimo laiko konstantą. Palyginti gautąsias laiko konstantas su teorinėmis vertėmis. Paaiškinti pastebėtus dėsningumus.

*VI – X variantai:*

1. Naudojant programą GraphiXT, sumodeliuoti skylių persiskirstymą silpnai legiruoto p puslaidininkio sluoksnyje su dviem užtvariniais kontaktais įjungus išorinę įtampą, esant dviem temperatūros vertėms. [Sluoksnyje egzistuoja dviejų rūšių skylių prilipimo centrai.]
2. Palyginti gautąjį stacionarųjį skylių pasiskirstymą esant išorinei įtampai su tuo, kurį numato teorija.
3. Atvaizduoti sluoksnio srovės priklausomybes nuo laiko, atitinkančias kiekvieną temperatūrą, ir tose priklausomybėse rasti tiesines arba eksponentines sritis. Apskaičiuoti atitinkamas laiko konstantas. Palyginti gautąsias laiko konstantas su teorinėmis vertėmis. Paaiškinti pastebėtus dėsningumus.

## 2. Kontroliniai klausimai

1. Kas yra tiesioginiai ir netiesioginiai šuoliai? Kas yra rekombinacijos centrai?
2. Kaip apibrėžiama elektronų ir skylių rekombinacijos spartos? Elektronų ir skylių tolydumo lygtys, jų dėmenų prasmė. Kas yra pertekliniai krūvininkai? Kaip apibrėžiama perteklinių krūvininkų gyvavimo trukmė?
3. Elektronų bei skylių išlaisvinimo koeficientų ir gyvavimo trukmių išraiškos gaudyklių parametrais (be išvedimo).
4. Kaip apskaičiuojama užimtų gaudyklių koncentracija kitame laiko žingsnyje modeliuojant krūvininkų kinetiką skaitiniais metodais?
5. Koks yra injektuotų į puslaidininkį šaltinių krūvininkų elektros krūvio neutralizavimo fizikinis mechanizmas? Kokie vyksmai vyksta sluoksnyje po to, kai elektros krūvis yra neutralizuotas? Remdamiesi bendrąja srovės tankio išraiška ir tolydumo lygtimis, išveskite diferencialinę lygtį, kurios sprendinys nusako perteklinių krūvininkų koncentraciją visuose sluoksnio taškuose visais laiko momentais.
6. Injektuotų šaltinių perteklinių krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės stacionariu atveju ir koncentracijos priklausomybė nuo laiko, kai pagrindinis vyksmas yra rekombinacija (užrašykite atitinkamas diferencialines lygtis ir jų sprendinius). Difuzijos nuotolio sąvoka.

7. Injektuotų šalutinių perteklinių krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės stacionariu atveju ir koncentracijos priklausomybė nuo laiko, kai pagrindinis vyksmas yra difuzija (užrašykite atitinkamas diferencialines lygtis ir jų sprendinius). Difuzijos trukmės sąvoka.
8. Kodėl silpnai legiruoto puslaidininkinio sluoksnio, kurio abu kontaktai yra užtvariniai, pusiausviroji krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės esant išorinei įtampai yra eksponentinė?
9. Kodėl silpnai legiruoto puslaidininkinio sluoksnio, kurio abu kontaktai yra užtvariniai, srovės priklausomybė nuo laiko įjungus įtampą iš pradžių yra tiesinė? Kodėl vėlesnėje poliarizacijos stadijoje ta priklausomybė tampa eksponentine?
10. Kodėl silpnai legiruoto puslaidininkinio sluoksnio, kurio abu kontaktai yra užtvariniai, depoliarizacinės srovės priklausomybė nuo laiko skiriasi nuo poliarizacinės srovės laikinės priklausomybės?

### 3. Darbo teorija

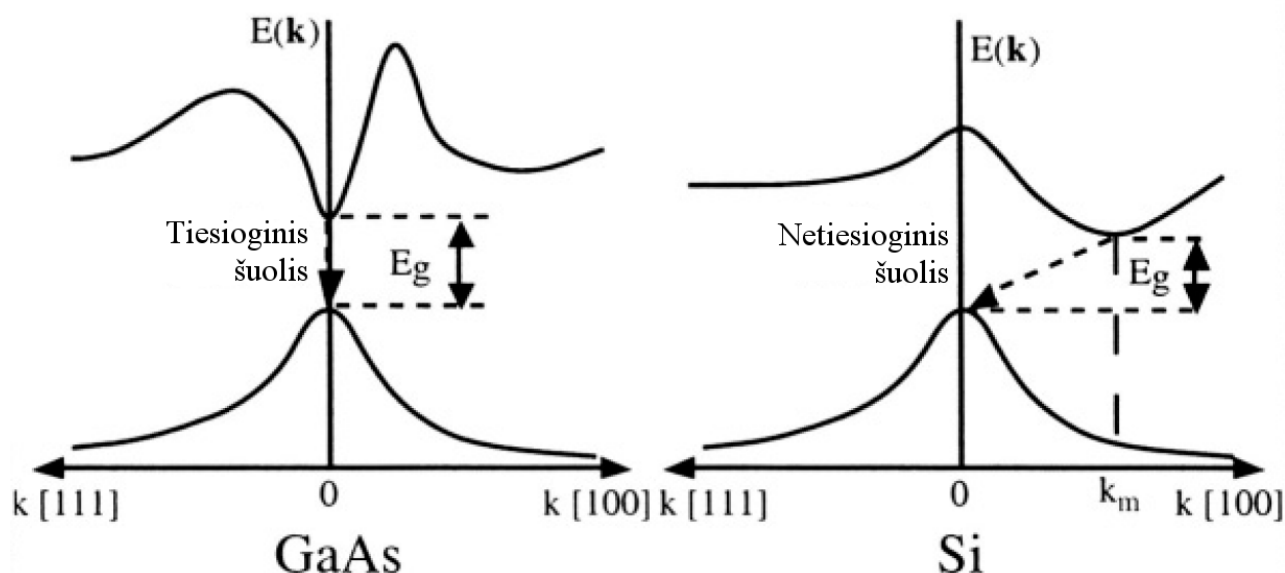
#### 3.1. Tiesioginiai ir netiesioginiai šuoliai. Rekombinacijos centrai

Kai kuriuose puslaidininkiuose, pvz., GaAs laidumo juostos minimumo padėtis  $\mathbf{k}$  erdvėje yra tokia pati kaip valentinės juostos maksimumo padėtis. Kaip matome 3.1 pav., tas taškas yra  $\mathbf{k} = 0$ . Todėl, kai laidumo juostos elektronas rekombinuoja su valentinės juostos skyje, 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, tokiam puslaidininkyje rekombinacijos metu elektronas, kurio impulsas  $\mathbf{k}_m$ , rekombinuoja su skyje, kurios impulsas 0. Todėl, kad nebūtų pažeistas impulso tvermės dėsnis, elektronui arba skylei 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, palyginti didelė rekombinacijos tikimybė išplaukia iš Heizenbergo neapibrėžtumų sąryšio:

$$\Delta k \Delta x \geq \frac{1}{2} \quad (3.1.1)$$

Čia  $\Delta k$  yra pagautojo krūvininko bangos skaičiaus ( $k = p / \hbar$ ) neapibrėžtumas, o  $\Delta x$  yra jo koordinatės neapibrėžtumas. Kadangi  $\Delta x$  yra tarpatominio atstumo eilės, tai iš (3.1.1) išplaukia, kad  $\Delta k$  yra atvirkštinio tarpatominio atstumo eilės, t. y. tos pačios eilės kaip I Brijueno zonos matmenys. Todėl yra palyginti didelė tikimybė, kad lokalizuotojo krūvininko impulsas bus lygus 0 arba  $\hbar k_m$  ir taps galima jo rekombinacija su tokio paties impulso priešingo krūvio laisvuju krūvininko (impulso tvermės dėsnį šiuo atveju užtikrina lokalizacijos centro arba visos kristalo gardelės atotrūkio). Toliau bus aptariama tik tokia netiesioginė krūvininkų rekombinacija.

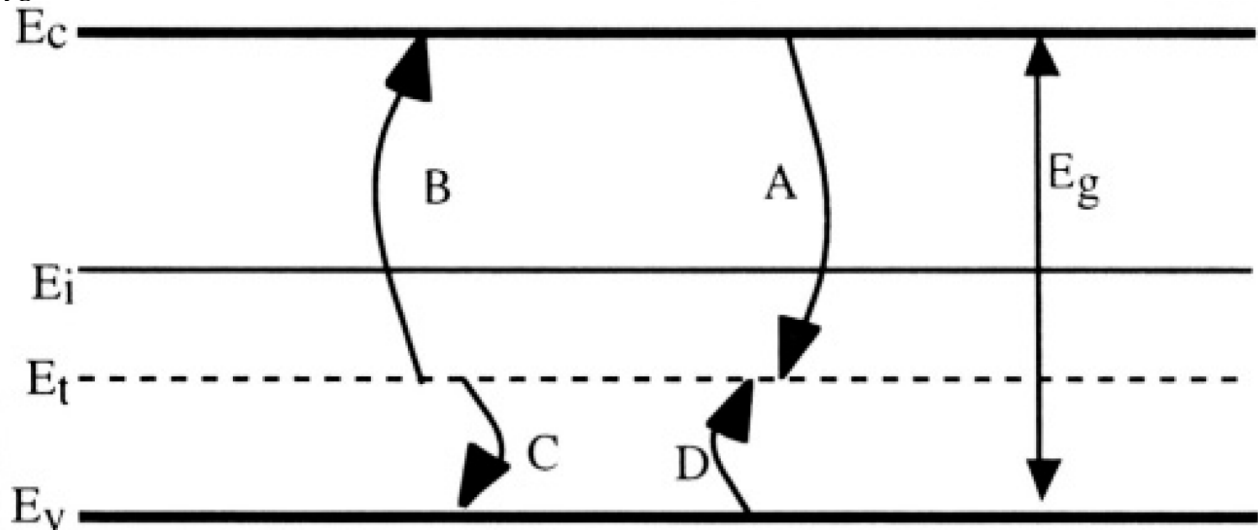


**3.1 pav.** Krūvininkų tarpjuostinės rekombinacijos rūšys: tiesioginiai kvantiniai šuoliai (kairėje) ir netiesioginiai šuoliai (dešinėje)

#### 3.2. Rekombinacijos sparta. Tolydumo lygtis

Dėl kristalo gardelės defektų, kurių yra visuose (net ir pačiuose gryniausiuose) puslaidininkiuose, jų draustinėje juostoje egzistuoja energijos lygmenys. Pvz., 3.2 pav. pavaizduotas vienas toks lygmuo  $E_t$  (indeksas „t“ kilo iš angliško žodžio „trap“ – „gaudyklė“). Akivaizdu, kad yra galimi keturių rūšių kvantiniai

šuočiai, kuriuose gali dalyvauti tas energijos lygmuo: jis gali priimti elektroną iš laidumo juostos (A šuočiai), atiduoti elektroną į valentinę juostą, t. y. priimti skylę iš valentinės juostos (C šuočiai), priimti elektroną iš valentinės juostos, t. y. atiduoti skylę į valentinę juostą (D šuočiai), arba atiduoti elektroną į laidumo juostą (B šuočiai). 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**.



**3.2 pav.** Galimi elektrono kvantiniai šuoliai per rekombinacijos centrą, kurį atitinka energijos lygmuo  $E_t$

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 „skilyų prilipimo lygmeniu“). Jeigu tikimybė, kad po šuolio A įvyks šuočiai C yra daug didesnė, negu tikimybė, kad po šuolio A įvyks šuočiai B, arba jeigu tikimybė, kad po šuolio C įvyks šuočiai A yra daug didesnė, negu tikimybė, kad po šuolio C įvyks šuočiai D, tada lygmuo vadinamas „rekombinacijos centru“. Tačiau nuo šiol *visus* lygmenis, kuris yra draustinėje juostoje, vadinsime „rekombinacijos centrais“ (išskyrus 3.6 skyrių, kuriame bus aptariama sistema, kurioje egzistuoja tik prilipimo lygmenys). Be to, terminu „rekombinacija“ vadinsime visus elektronų arba skilyų šuolius iš atitinkamų leistinių juostų į tuos lygmenis, o terminu „generacija“ – visus elektronų arba skilyų šuolius iš tų lygmenų į atitinkamas leistines juostas.

Iš 3.2 pav. aišku, kad rekombinacijos centrų energijos lygmuo elgiasi kaip „tarpininkas“, pereinant elektronui iš laidumo juostos į valentinę juostą arba atvirkščiai. Kai kuriuose puslaidininkuose (pvz., silicije) toks elektronų ir skilyų rekombinacijos mechanizmas yra pagrindinis.

Kiekvienas iš keturių šuolių, kurie parodyti 3.2 pav., yra apibūdinamas savo sparta, t. y. tos rūšies šuolių skaičiumi tūrio vienetą per laiko vienetą (tas spartas žymėsime tomis pačiomis raidėmis, kuriomis 3.2 pav. yra žymimi atitinkami šuoliai, t. y. A, B, C ir D). Nuo šiol apibendrinsime „rekombinacijos spartos“ sąvoką: **elektronų rekombinacijos spartą** apibrėšime sąryšiu

$$R_n = A - B, \quad (3.2.1a)$$

o **skilyų rekombinacijos spartą** apibrėšime sąryšiu

$$R_p = C - D. \quad (3.2.1b)$$

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* veiksmų (pvz., apšvietimo) sąlygotos generacijos spartą (nes „vidinė“ generacijos sparta, kuri susijusi su krūvininkų išlaisvinimu iš gaudyklių, įeina į rekombinacijos spartos apibrėžtį). Pažymėjus elektronų ir skilyų generacijos spartas atitinkamai  $G_n$  ir  $G_p$ , galima užrašyti šias elektronų ir skilyų **tolydumo lygtis**:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n + (G_n - R_n), \quad (3.2.2a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p + (G_p - R_p). \quad (3.2.2b)$$

Toliau tarsime, kad išorinė generacijos sparta lygi nuliui:  $G_n = G_p = 0$ . Rekombinacijos spartas  $R_n$  ir  $R_p$  galima susieti su pilnosios 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:

$$R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n}, \quad (3.2.3a)$$

$$R_p = \frac{\Delta p}{\tau_p}; \quad (3.2.3b)$$

čia  $\tau_n$  ir  $\tau_p$  yra atitinkamai elektrono ir skylės **vidutinė gyvavimo trukmė**, t. y. vidutinis laikas, kurį išbūna elektronas laidumo juostoje arba skylė valentinėje juostoje iki rekombinacijos. Taigi, (3.2.2a,b) lygtis vienmačio judėjimo atveju galima užrašyti šitaip:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -R_n + \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} = -\frac{\Delta n}{\tau_n} + \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x}, \quad (3.2.4a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -R_p - \frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x} = -\frac{\Delta p}{\tau_p} - \frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x}. \quad (3.2.4b)$$

### 3.3. Krūvininkų gyvavimo trukmės išraiška rekombinacijos centrų parametrais

Elektronų rekombinacijos spartą  $R_n$  išreikšime 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  $N_t - n_t$ :

$$R_{nr} = v_{th,n} \sigma_n n (N_t - n_t). \quad (3.3.1)$$

Čia  $v_{th,n}$  yra vidutinis elektronų šiluminio judėjimo greitis, o  $\sigma_n$  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 kryptiai, o elektrono būseną nusako plokščia banga, kurios amplitudė yra vienoda visame kristalo skerspjūvyje). Greitis  $v_{th,n}$  yra apibūdinamas kaip elektrono greičio modulio vidurkis. Maksvelo ir Bolcmano pasiskirstymo atveju šis vidurkis yra lygus

$$v_{th,n} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_n^*}}, \quad (3.3.2)$$

čia  $m_n^*$  yra elektronų efektinė masė. Kadangi

$$n_t = N_t f(E_t), \quad (3.3.3)$$

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

$$R_{nr} = v_{th,n} \sigma_n n N_t (1 - f(E_t)). \quad (3.3.4)$$

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

$$R_{ng} = a_n n_t = a_n N_t f(E_t). \quad (3.3.5)$$

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 kryptių šuolių sparta yra vienoda, t. y.

$$R_{nr} = R_{ng}. \quad (3.3.6)$$

Įrašius (3.3.4) ir (3.3.5) į (3.3.6) ir pasinaudojus tuo, kad  $f(E_t)$  yra Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija

$$f(E_t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F}{kT}\right)}, \quad (3.3.7)$$

o elektronų koncentracija neišsigimusiam puslaidininkyje yra lygi

$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right), \quad (3.3.8)$$

gaunama tokia elektronų išlaisvinimo koeficiento išraiška:

$$a_n = v_{th,n} \sigma_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right). \quad (3.3.9)$$

Taigi, elektronų išlaisvinimo koeficientas eksponentiškai mažėja didėjant energijos lygmenis „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

$$R_{pr} = v_{th,p} \sigma_p p N_t f(E_t), \quad (3.3.10)$$

$$R_{pg} = a_p N_t (1 - f(E_t)). \quad (3.3.11)$$

Čia  $v_{th,p}$  yra vidutinis skylių šiluminio judėjimo greitis (jo išraiška yra analogiška (3.3.2), tačiau vietoj  $m_n^*$  reikia naudoti skylių efektinę masę  $m_p^*$ ). Be to, kadangi skylės yra išlaisvinamos į valentinę juostą, tai vietoj laidumo juostos efektinio būsenų tankio  $N_c$  reikia naudoti valentinės juostos efektinį būsenų tankį  $N_v$ , o energijos lygmenis „gylį“ reikia atskaityti nuo valentinės juostos krašto  $E_v$ . Taigi, skylių išlaisvinimo koeficiento išraiška yra

$$a_p = v_{th,p} \sigma_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right). \quad (3.3.12)$$

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 (3.3.7) 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 (3.3.4) taps daug didesnė už išlaisvinimo spartą (3.3.5). Šiomis sąlygomis

$$R_n \approx R_{nr} \approx v_{th,n} \sigma_n n N_t \approx v_{th,n} \sigma_n \Delta n N_t. \quad (3.3.13)$$

Čia, užrašant paskutiniąją lygybę, pasinaudota tuo, kad pagal prielaidą  $n \gg n_0$ , t. y.  $n \approx \Delta n$ . Palyginus (3.3.13) su (3.2.3a), galima teigti, kad perteklinių elektronų gyvavimo trukmė  $\tau_n$  puslaidininkyje yra lygi

$$\tau_n = \frac{1}{v_{th,n} \sigma_n N_t}. \quad (3.3.14a)$$

Analogiškai, perteklinių skylių gyvavimo trukmė  $\tau_p$  puslaidininkyje yra lygi

$$\tau_p = \frac{1}{v_{th,p} \sigma_p N_t}. \quad (3.3.14b)$$

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

$$R_n = R_p. \quad (3.3.15)$$

Kaip bus aišku iš 3.5 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 (3.3.15) 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 (3.3.14a) arba (3.3.14b)).

### 3.4. Krūvininkų kinetikos skaitinis modeliavimas esant rekombinacijos centrums

Skaitmeniškai modeliuojant krūvininkų kinetiką, kai egzistuoja pagavimo į rekombinacijos centrus ir išlaisvinimo iš jų vyksmai, pilnutinėje laisvųjų krūvininkų koncentracijos kitimo spartos išraiškoje (3.2.4a,b) atsiranda papildomas dėmuo, kuris nusako kiekvienos rūšies krūvininkų rekombinacijos spartą. Tą rekombinacijos spartą reikia apskaičiuoti remiantis rekombinacijos centrų parametrais, t. y. pagavimo



skerspjūviais  $\sigma_n$  ir  $\sigma_p$  bei rekombinacijos centrų energijos lygmens „gyliu“ draustinėje juostoje. Taigi, reikia naudoti šias formules:

$$R_n = v_{th,n} \sigma_n n (N_t - n_t) - a_n n_t, \quad (3.4.1a)$$

$$R_p = v_{th,p} \sigma_p p n_t - a_p (N_t - n_t), \quad (3.4.1b)$$

Čia

$$a_n = v_{th,n} \sigma_n N_c \exp\left(-\frac{\Delta E_n}{kT}\right), \quad (3.4.2a)$$

$$a_p = v_{th,p} \sigma_p N_v \exp\left(-\frac{\Delta E_p}{kT}\right). \quad (3.4.2b)$$

Šiose formulėse  $\Delta E_n$  žymi lygmens gylį, atskaitytą nuo laidumo juostos krašto ( $\Delta E_n = E_c - E_t$ ), o  $\Delta E_p$  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  $E_g$ :

$$\Delta E_n + \Delta E_p = E_g. \quad (3.4.3)$$

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 krūvinų 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  $\Delta t$  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

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = R_n - R_p. \quad (3.4.4)$$

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

$$n_t(x_i, t_{l+1}) = n_t(x_i, t_l) + \left. \frac{\partial n_t}{\partial t} \right|_{x_i, t_l} \Delta t. \quad (3.4.5)$$

### 3.5. 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

$$\tau_\mu = \frac{\epsilon_0 \epsilon}{\sigma}; \quad (3.5.1)$$

čia  $\sigma$  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 injektuoti 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  $\tau_n$  ir  $\tau_p$  yra daug didesnės negu  $\tau_\mu$ . Todėl iki rekombinacijos pertekliniai krūvininkai spėja nudifunduoti tam tikrą atstumą gilyn į puslaidininkio tūrį. Pvz., jeigu injektuojami elektronai į p tipo puslaidininkį (žr. 3.3 pav.), tada injektuoti 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

$$\Delta n = \Delta p. \quad (3.5.2)$$

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. (3.5.2)). Galima sakyti, kad perteklinių šalutinių krūvininkų pasiskirstymas “valdo” perteklinių pagrindinių krūvininkų pasiskirstymą. Tarkime, kad šalutiniai krūvininkai yra elektronai (kaip 3.3 pav.). Tada jų elektros srovė (kuri yra grynai difuzinė) lygi

$$j_n = eD_n \frac{dn}{dx} \equiv eD_n \frac{d\Delta n}{dx}. \quad (3.5.3)$$

Įrašę (3.5.3) į (3.2.4a), gauname:

$$\frac{\Delta n}{\tau_n} - D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} + \frac{\partial \Delta n}{\partial t} = 0. \quad (3.5.4)$$

Praktiškai yra svarbūs trys atskirieji šios lygties atvejai, kurių kiekvieną atitinkanti lygtis yra gaunama iš (3.5.4) lygties, prilyginus nuliui kurį nors vieną iš trijų dėmenų kairiojoje lygybės pusėje. Toliau aptariami tie trys atskiri atvejai.

### 3.5.1. Stacionarioji veika esant šalutinių krūvininkų injekcijai

Jeigu procesas stacionarus, tada krūvininkų koncentracija ir laidumo srovės tankis nepriklauso nuo laiko. Todėl (3.5.4) lygties trečiasis dėmuo (laikinė išvestinė) lygus nuliui. Taigi, stacionariąją veiką aprašo lygtis

$$D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} - \frac{\Delta n}{\tau_n} = 0. \quad (3.5.5)$$

Kaip žinoma iš diferencialinių lygčių teorijos, (3.5.5) lygties bendrasis sprendinys yra

$$\Delta n(x) = A \cdot \exp\left(-\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_n}}\right) + B \cdot \exp\left(\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_n}}\right). \quad (3.5.5a)$$

Tolstant nuo paviršiaus  $x = 0$ , pro kurį injektuojami elektronai,  $\Delta n$  turi artėti į nulį dėl perteklinių krūvininkų rekombinacijos. Vadinasi, (3.5.5) lygties viena kraštinė sąlyga yra

$$\Delta n(+\infty) = 0. \quad (3.5.6)$$

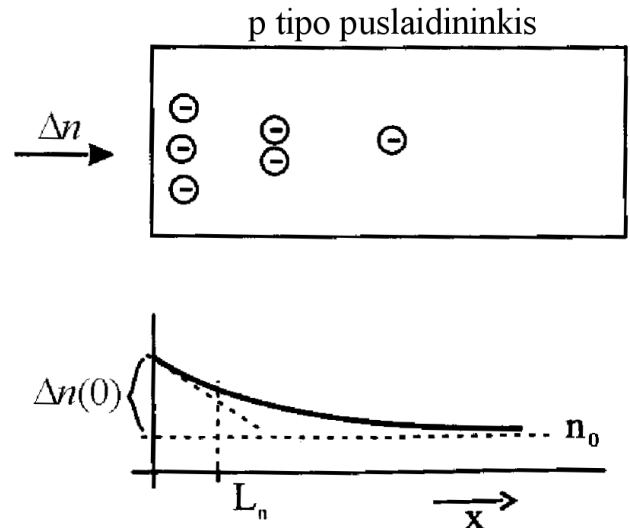
Kita kraštinė sąlyga nusako perteklinių elektronų koncentraciją prie injekcijos paviršiaus  $\Delta n(0)$ . Aišku, kad šis dydis priklauso nuo išorinių veiksnių (injekcijos intensyvumo), todėl laikysime, kad jis yra žinomas. (3.5.5a) funkcija tenkina kraštinę sąlygą (3.5.6) tik tuo atveju, kai  $B = 0$ . Vadinasi, vykstant elektronų injekcijai į p tipo puslaidininkį, perteklinių krūvininkų koncentracija eksponentiškai mažėja, tolstant nuo injekcijos paviršiaus (žr. 3.3 pav.):

$$\Delta n(x) = \Delta p(x) = \Delta n(0) \exp\left(-\frac{x}{L_n}\right); \quad (3.5.7)$$

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

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n}. \quad (3.5.8)$$

Elektronų difuzijos nuotolis – tai vidutinis atstumas, kurį nudifunduoja injektuotas elektronas p tipo puslaidininkyje iki rekombinacijos. Matematiškai difuzijos nuotolis nusako atstumą, kuriame perteklinių krūvininkų koncentracija ( $\Delta n$  ir  $\Delta p$ ) sumažėja  $e \approx 2,7$  kartų, lyginant su didžiausia verte (žr. (3.5.7)).



3.3 pav. Perteklinių elektronų injekcija į p tipo puslaidininkį

Skylių injekcijos į n tipo puslaidininkį atveju galioja analogiškai sąryšiai. Šiuo atveju perteklinių krūvininkų pasiskirstymą „valdo“ skylių pasiskirstymas, todėl

$$\Delta n(x) = \Delta p(x) = \Delta p(0) \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right); \quad (3.5.9)$$

čia  $L_p$  yra **skylių difuzijos nuotolis**, kuris lygus

$$L_p = \sqrt{D_p \tau_p}. \quad (3.5.10)$$

### 3.5.2. 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  $\Delta n$  ir  $\Delta p$  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 (3.5.4) 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 tapachiai 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

$$\frac{\Delta n}{\tau_n} - \frac{d\Delta n}{dt} = 0. \quad (3.5.11)$$

Šios lygties sprendinys yra eksponentiškai mažėjanti laike funkcija:

$$\Delta n(x, t) = \Delta n(x, 0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right). \quad (3.5.12)$$

Tačiau aptariamuoju krūvininkų injekcijos atveju krūvininkų pasiskirstymas yra nevienalytis. Stacionarioje veikoje tą pasiskirstymą nusako (3.5.7) funkcija. Injekcijos išjungimo momentu galioja (3.5.5) lygybė, t. y. negalioja (3.5.11) 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 (3.5.7) (žr. 3.4 pav.). Todėl tolesniame krūvininkų koncentracijos mažėjimo etape galima nepaisyti krūvininkų difuzijos ir apytiksliai galioja (3.5.12) lygybė.

### 3.5.3. Difuzijos ribota veika

Jeigu pagrindinė krūvininkų koncentracijų kitimo priežastis yra jų persiskirstymas erdvėje dėl šalutinių perteklinių krūvininkų difuzijos, tada (3.5.4) 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 (3.5.6) reikia naudoti kraštinę sąlygą

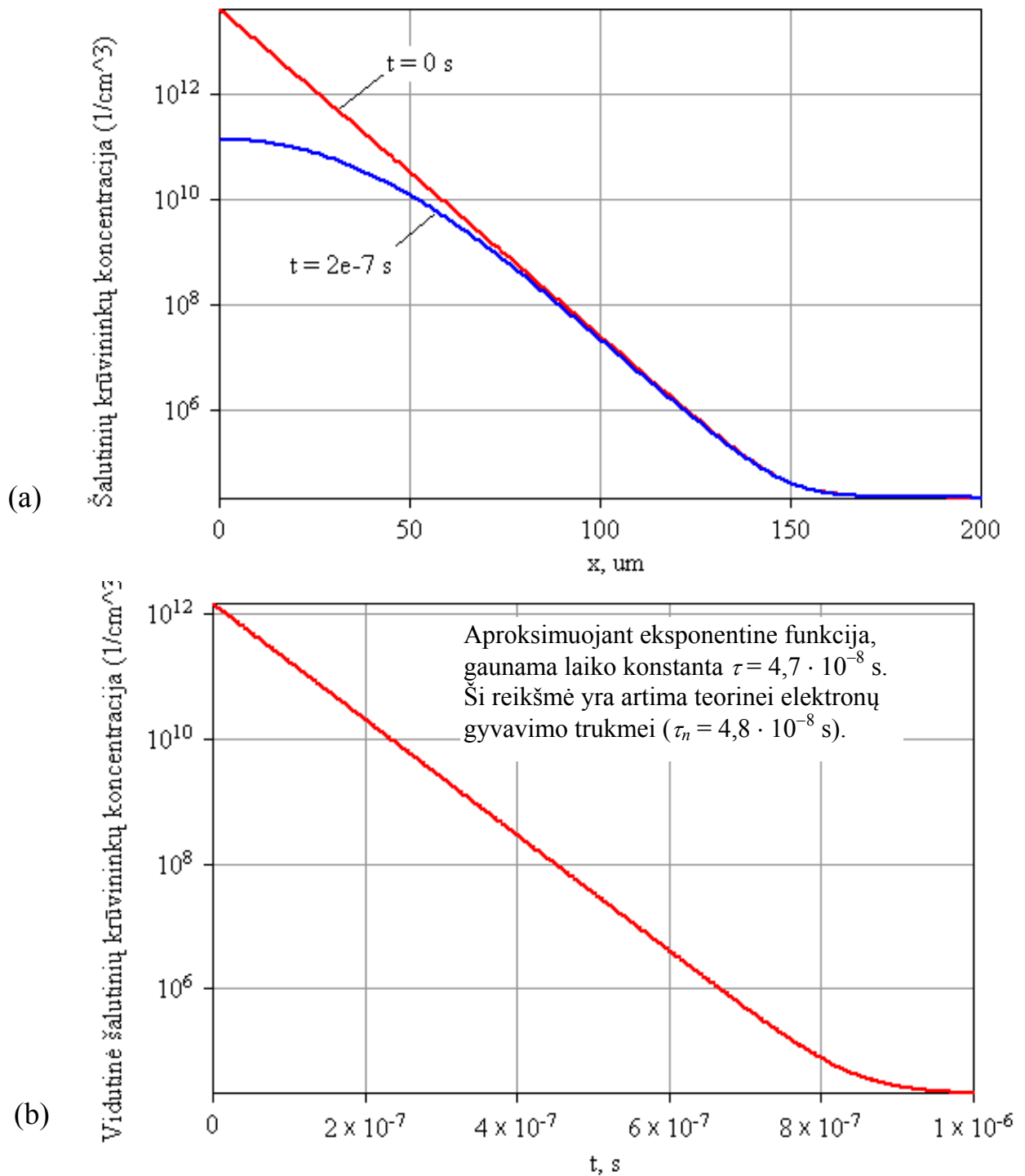
$$\Delta n(w_p) = 0, \quad (3.5.13)$$

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

$$w_p \ll L_n, \quad (3.5.14)$$

eksponentines funkcijas, kurios įeina į bendrojo (3.5.5) lygties sprendinio išraišką (3.5.5a), galima aproksimuoti tiesinėmis funkcijomis (tam reikia pasinaudoti apytiksle lygybe  $\exp(x) \approx 1 + x$ , kai  $x \ll 1$ ). Vadinasi, šiuo atveju (3.5.5) lygties sprendinys, kuris atitinka kraštinę sąlygą (3.5.13), yra lygus

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



**3.4 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

$$\Delta n(x) = \Delta n(0) \left( 1 - \frac{x}{w_p} \right). \quad (3.5.15)$$

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

$$\frac{d\Delta n}{dx} = -\frac{\Delta n(0)}{w_p}. \quad (3.5.16)$$

Palyginimas: kai difuzijos nuotolis yra daug mažesnis už  $w_p$ , tada injekcijos išjungimo momentu perteklinių krūvininkų koncentracija atitinka (3.5.7) lygybę, iš kurios išplaukia, kad

$$\frac{d\Delta n}{dx} = -\frac{\Delta n(0)}{L_n} \exp\left(-\frac{x}{L_n}\right); \quad (3.5.17)$$

Kadangi aptariamuoju atveju  $w_p \ll L_n$ , tai pastarojo reiškinio modulis yra daug mažesnis už  $\Delta n(0) / w_p$ . Vadinasi, kai galioja (3.5.14) 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 omino elektrodo (arba pn sandūros, kuri ekstraguoja perteklinius krūvininkus) yra daug mažesnis už šalutinių krūvininkų difuzijos nuotolį, tada (3.5.4) lygtyje galima nepaisyti pirmojo dėmens ir ta lygtis virsta šia lygtimi:

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2}. \quad (3.5.18)$$

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

$$\tau(w) = \frac{w^2}{D_n}, \quad (3.5.19)$$

t. y. sąryšis tarp  $\tau(w)$  ir  $w$  yra toks pats kaip sąryšis tarp  $\tau_n$  ir  $L_n$  (žr. (3.5.8)). Kadangi injektuoti elektronai yra skirtingais atstumais nuo elektrodo, tai skirtingi elektronai tą atstumą nueis per skirtingą laiką. Šiuo atveju vidutinė difuzijos trukmė  $\tau_{\text{dif}}$  randama apskaičiavus visų  $\tau$  verčių svartinį vidurkį, naudojant elektronų koncentraciją  $n(x)$  kaip svorinį daugiklį (čia  $w = w_p - x$ ). T. y.

$$\tau_{\text{dif}} = \frac{1}{Q_n(0)} \int_0^{w_p} \Delta n(x, 0) \tau(w_p - x) dx; \quad (3.5.20)$$

čia atsižvelgta į tai, kad atstumas  $w$  nuo taško  $x$  iki omino 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):

$$Q_n(t) = \int_0^{w_p} \Delta n(x, t) dx. \quad (3.5.21)$$

Kadangi elektronų pradinis pasiskirstymas erdvėje yra apytiksliai tiesinis, iš (3.5.20) ir (3.5.19) formulių išplaukia

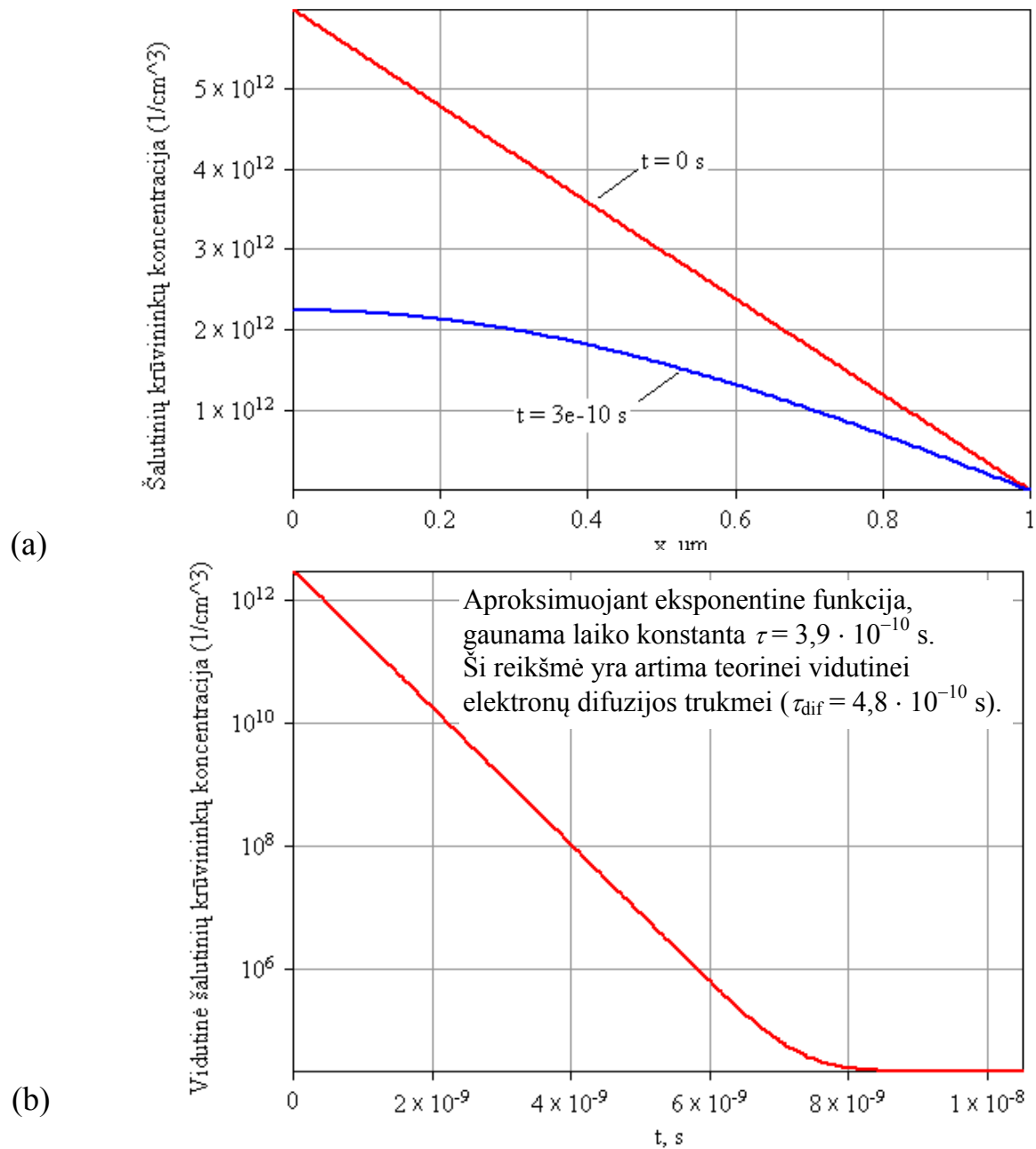
$$\tau_{\text{dif}} = \frac{w_p^2}{2D_n}. \quad (3.5.22)$$

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

$$Q_n(t) \approx Q_n(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_{\text{dif}}}\right). \quad (3.5.23)$$

Šis eksponentinis mažėjimas yra akivaizdžiai matomas 3.5 pav.

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



**3.5 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) Vidutinės perteklinių krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo laiko sustabdžius injekciją

### 3.6. 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.

$$ep\mu E = eD \frac{dp}{dx}, \quad (3.6.1)$$

čia  $p$  yra skylių koncentracija,  $\mu$  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:

$$D = \frac{kT}{e} \mu. \quad (3.6.2)$$

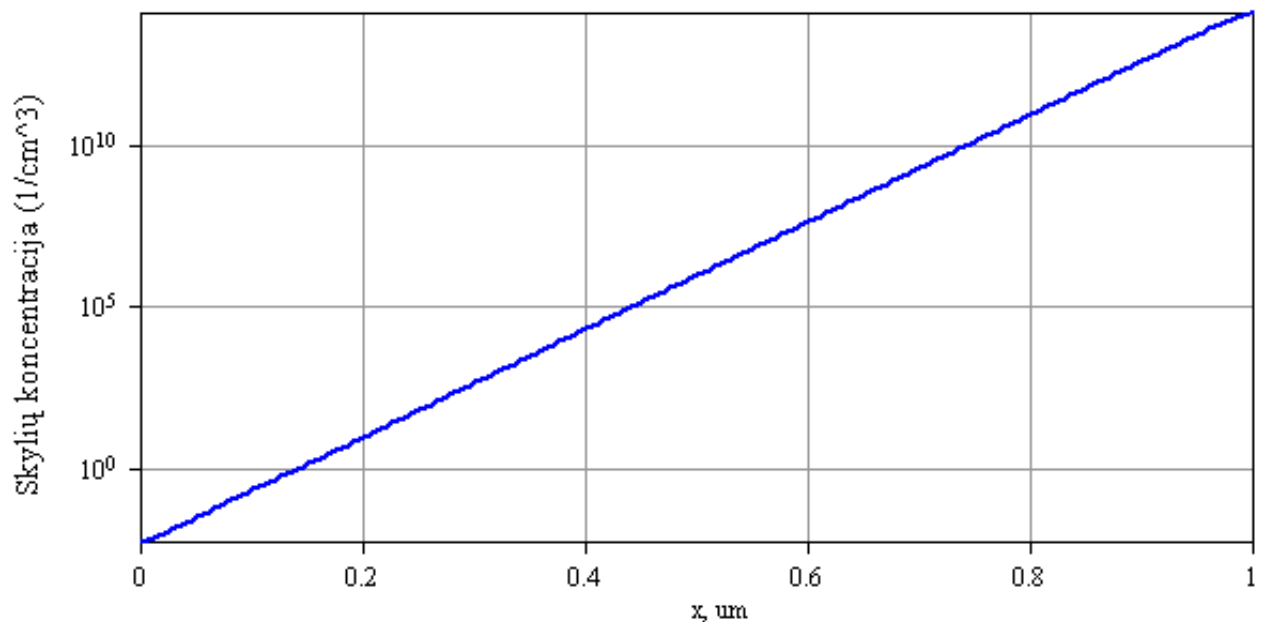
Tada (3.6.1) lygtį galima užrašyti taip:

$$\frac{dp}{dx} - \frac{eE}{kT} p = 0. \quad (3.6.3)$$

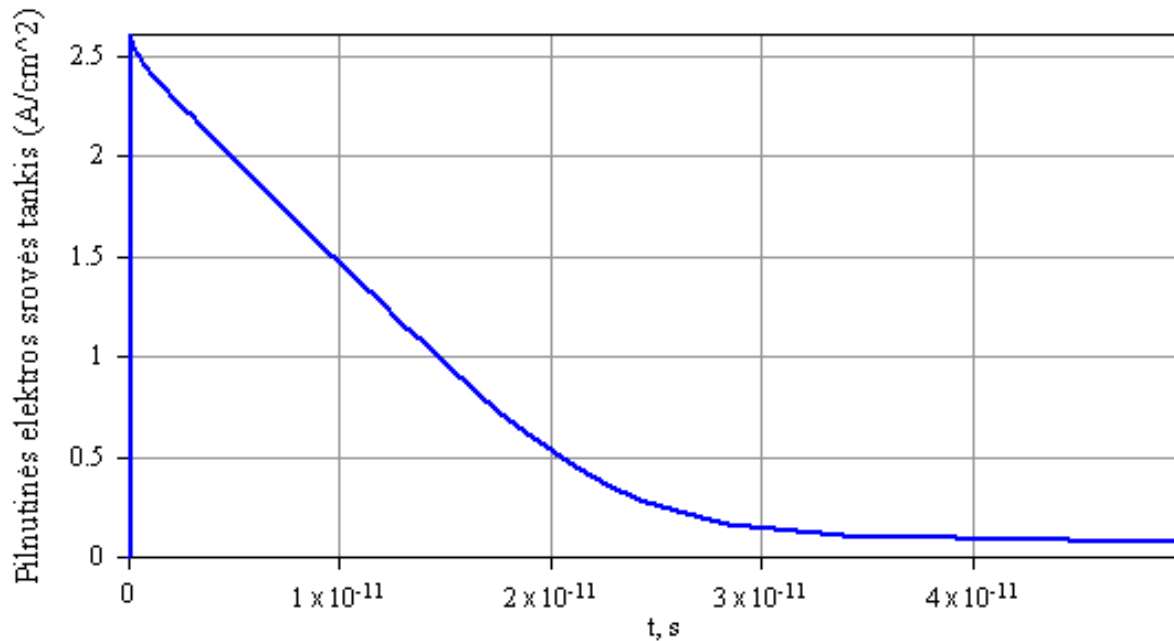
Kadangi pagal prielaidą  $E$  yra konstanta, tai (3.6.3) lygties sprendinys yra eksponentinė funkcija

$$p = p_0 \exp\left(\frac{eE}{kT} x\right). \quad (3.6.4)$$

T. y. stacionarioje būsenoje skylių koncentracija eksponentiškai didėja nuo vieno sluoksnio krašto link kito, elektrinio lauko kryptimi (žr. 3.6 pav.).



**3.6 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  $T = 300 \text{ K}$



**3.7 pav.** Poliarizacinės srovės tankio pradinė priklausomybė nuo laiko, kai prie sluoksnio, kurio parametrai pateikti 3.6 pav. parašėje, prijungiama 1 V įtampa (pradinė sluoksnio būseną atitinka termodinaminę pusiausvyrą)

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

$$I(t) = I_0 \left( 1 - \frac{t}{\tau_{dr}} \right). \quad (3.6.5)$$

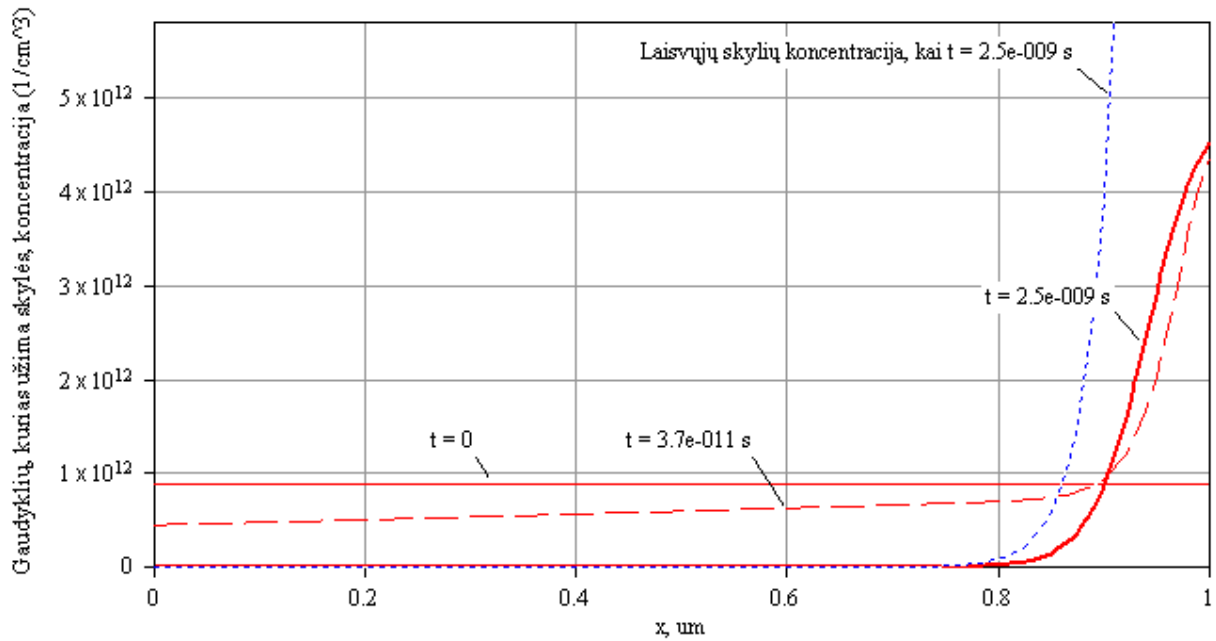
Čia  $\tau_{dr}$  apytiksliai lygus skylės dreifo trukmei nuo vieno sluoksnio krašto iki kito, t. y.

$$\tau_{dr} = \frac{w}{v_{dr}} = \frac{w}{\mu E}, \quad (3.6.6)$$

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. 3.7 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 3.2 pav., nėra šuolių A ir B, o yra tik šuoliai C ir D (šuolis C atitinka skylės pagavimą į lygmenį  $E_i$ , o šuolis D atitinka skylės išlaisvinimą). Anksčiau aprašytos sistemos (kurią atitinka 3.6 pav. ir 3.7 pav.) akceptorinių lygmenys realiaame p puslaidininkyje elgiasi kaip prilipimo lygmenys. Vadinasi, labiau realistiškas modelis yra toks, kai ne visi akceptoriai 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, sutrinkdama skylių pagavimo ir išlaisvinimo vyksmų pusiausvyra 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 pačioje pradžioje pagrindinis vyksmas yra skylių dreifas nuo kairiojo krašto link dešiniojo.





**3.8 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)

Atitinkamai srovės priklausomybė nuo laiko yra tiesinė (žr. (3.6.5) formulę ir 3.7 pav.). Paskui, kai 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 gaudykles, o dalis lieka laisvos (žr. 3.8 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.

$$I(t) \sim a_p p_t|_{x=0}. \quad (3.6.7)$$

Čia  $a_p$  yra skylių išlaisvinimo koeficientas, kurio bendroji išraiška yra (3.4.2b), o  $p_t$  yra pagautų skylių koncentracija, t. y. gaudyklių, kurių neužima elektronai, koncentracija:

$$p_t \equiv N_t - n_t. \quad (3.6.8)$$

Iš (3.4.4) ir (3.4.1b) lygčių išplaukia, kad tuo atveju, kai  $R_n = 0$ , o laisvų skylių koncentracija yra praktiškai nulinė,

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = R_p = -a_p p_t. \quad (3.6.9)$$

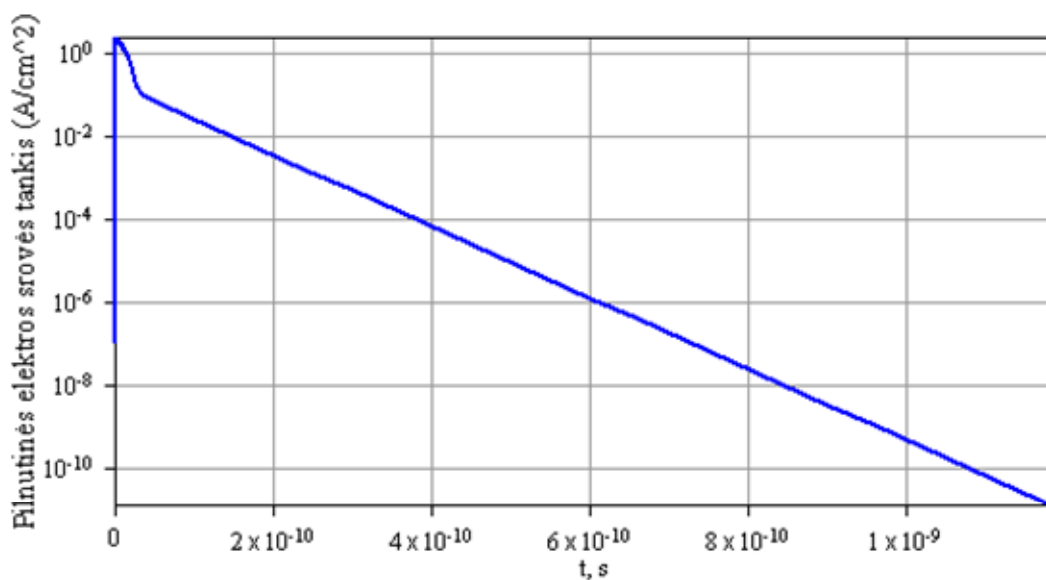
Vadinasi, prie sluoksnio kairiojo krašto pagautų skylių koncentracija eksponentiškai mažėja laike:

$$p_t|_{x=0} \sim \exp(-a_p t). \quad (3.6.10)$$

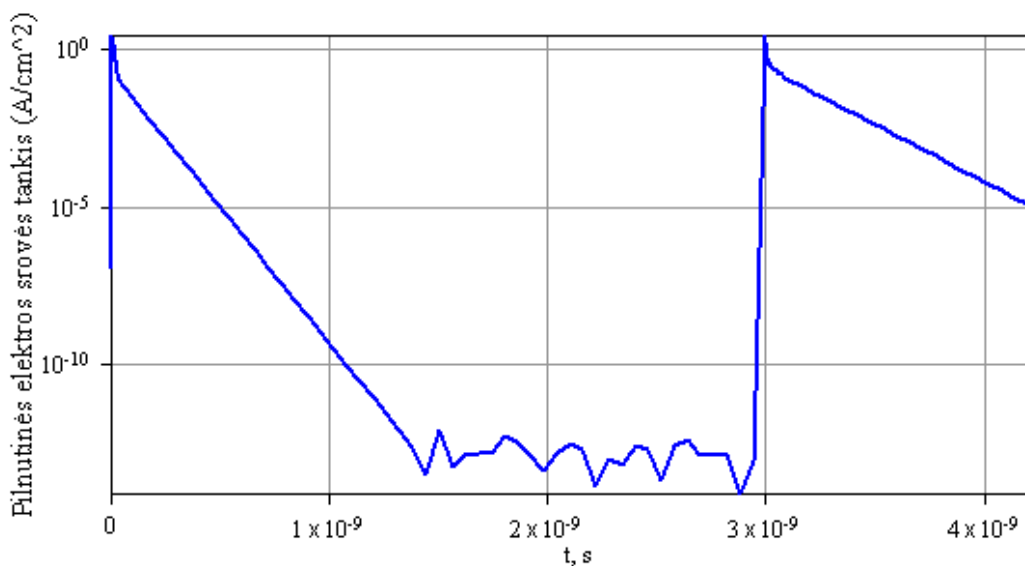
Todėl tokiu pačiu dėsniu mažėja ir elektros srovė (žr. (3.6.7) formulę ir 3.9 pav.).

Dabar tarkime, kad po tam tikro laiko išorinė įtampa išjungama. 3.10 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. 3.13 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. 3.12 pav.). Kad, išjungus įtampą, krūvininkų difuzijos vaidmuo yra daug didesnis negu pagavimo ir išlaisvinimo vaidmuo, galima įsitikinti, pakartojus modeliavimą su kitokia judrio verte. Pvz., 3.11 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).

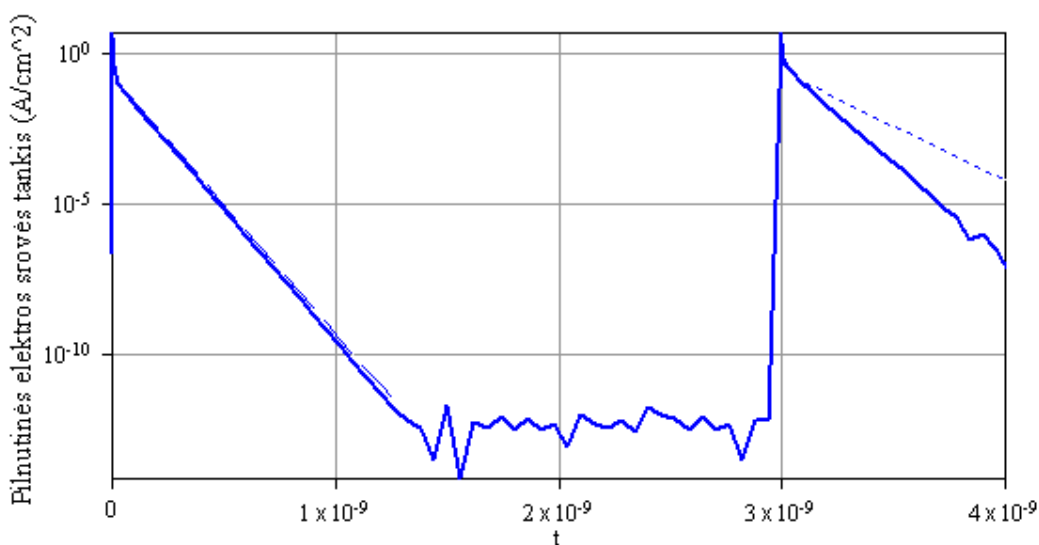
Jeigu sluoksnyje yra kelių tipų skylių gaudyklės, kurių išlaisvinimo koeficientai yra labai skirtingi, tada srovės priklausomybė nuo laiko įjungus įtampą turi kelias eksponentines sritis (žr. 3.14 pav.).



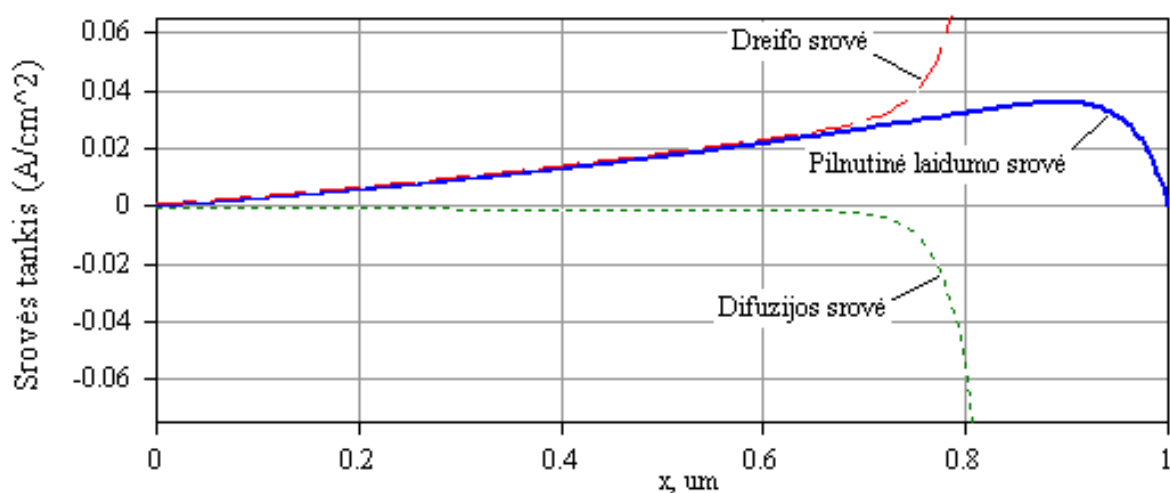
**3.9 pav.** Poliarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko vėlesniame etape (kai srovę lemia skylių išlaisvinimas)



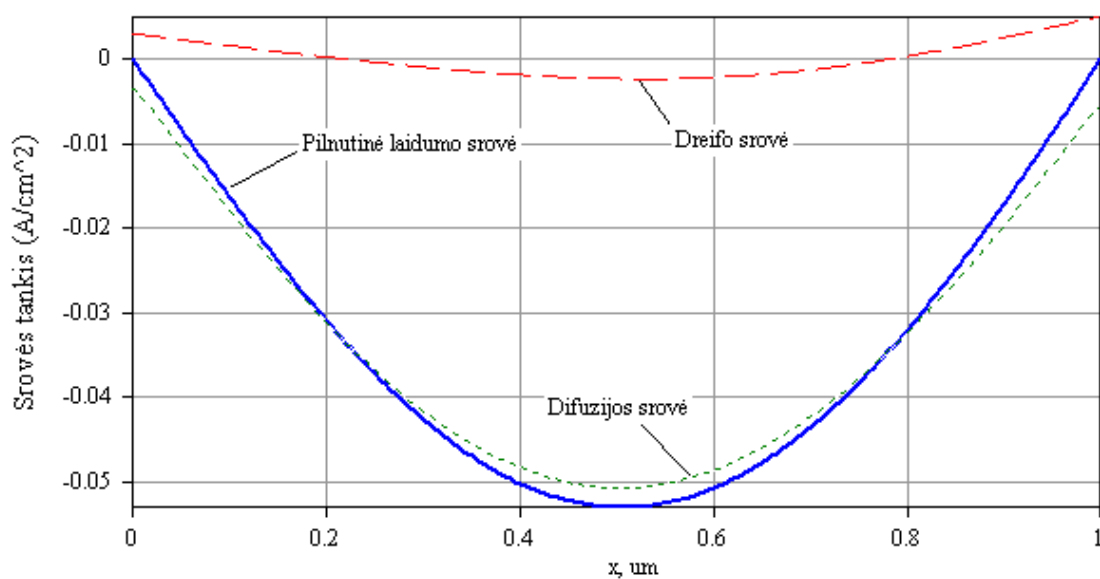
**3.10 pav.** Poliarizacinės ir depoliarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko (įtampa prijungiama laiko momentu  $t = 0$ , o išjungiama laiko momentu  $t = 3 \cdot 10^{-9}$  s)



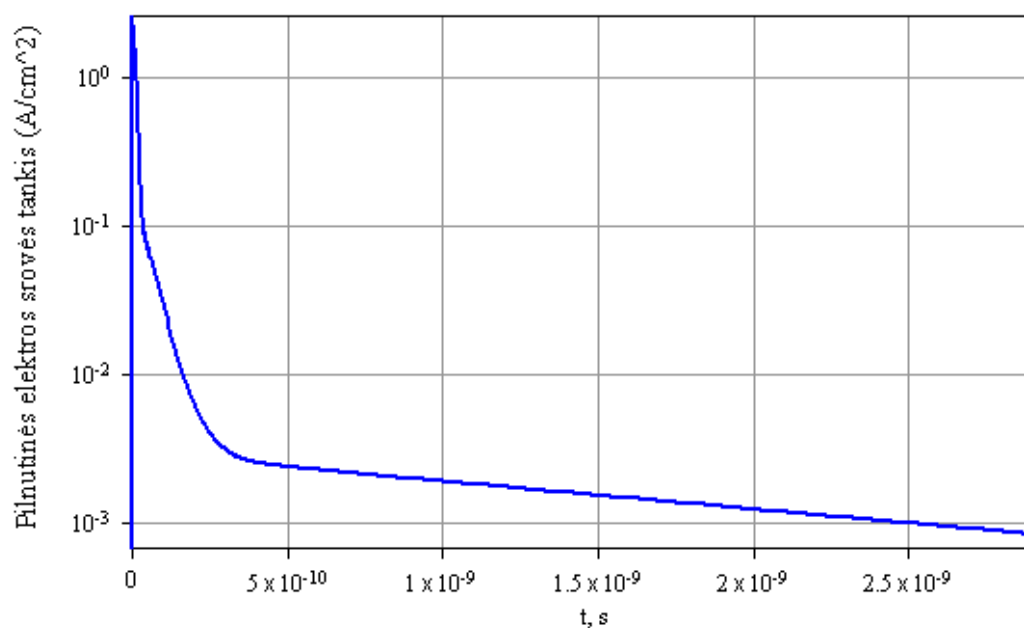
**3.11 pav.** Poliarizacinės ir depoliarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko, kai skylių judris yra du kartus didesnis negu 3.10 pav. Punktyrinė ir taškinė linijos atitinka tiesinio aproksimavimo rezultatus naudojant 3.10 pav. duomenis



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



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



**3.14 pav.** Polarizacinės srovės tankio priklausomybė nuo laiko, kai kartu su skylių prilipimo centrais, kurių parametrai nurodyti 3.6 pav. paraštėje, egzistuoja skylių prilipimo centrai, kurių koncentracija  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , skylių išlaisvinimo darbas 0,5 eV, o pagavimo skerspjūvis  $10^{-10} \text{ cm}^2$

## 4. Darbo eiga

### 4.1. Darbo eiga atliekant I – V variantus

1. Startuojama programa GraphiXT. Naudojant meniu juostos komandą „Modeliavimo nuostatos / Modelio funkcijų failas“, įkeliamas į atmintį failas „CarrierFunc.dll“. Šis failas turėtų būti tame pačiame kataloge, kaip ir failas GraphiXT.exe.
2. Įvykdoma meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Modelio parametrai...“. Parametrų redaktoriaus pasirinkimo lange pasirenkamas failas „CarrierParms.exe“.
3. Parametrų redaktoriaus lange reikia įvesti visą informaciją apie tiriamąją sistemą. Parametrai sugrupuoti pagal kategorijas. Kiekvieną kategoriją atitinka tam tikra parametrų redaktoriaus kortelė:

(a) Kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“ įterpiami nauji krūvininkai (mygtukas „Įterpti arba pašalinti krūvininkus“, o atsidariusiame dialogo lange – mygtukas „Gerai“) ir įvedami elektronų bei skylių parametrai, t. y. pavadinimai (atitinkamai „Elektronai“ ir „Skylės“), trumpieji pavadinimai (atitinkamai „el.“ ir „sk.“), krūviai (atitinkamai  $-1$  ir  $1$ ), efektinės masės (atitinkamai  $0,32m_0$  ir  $0,5m_0$ ), elektronų judris ( $1200 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ ), skylių judris (**I ir II variantuose** –  $400 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ , **III variante** –  $300 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ , **IV ir V variantuose** –  $200 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ ), difuzijos koeficiento apskaičiavimo metodas („Einšteino sąryšis“), laidumo ir valentinės juostų būsenų tankiai (atitinkamai  $2,8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  ir  $1,04 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ). Galutinis šios kortelės pavidalas, kai pasirinktieji krūvininkai yra elektronai, turėtų būti toks, kaip parodyta 4.1 pav.

4.1 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Laisvųjų krūvininkų parametrai“, kai pasirinktieji krūvininkai yra elektronai

- (b) Kortelėje „Sluoksnio storis ir kiti parametrai“ įvedami sluoksnio storis ( $w = 200 \mu\text{m}$ ) ir dielektrinė skvarba ( $\varepsilon = 11,8$ ).
- (c) Kortelėje „Išoriniai parametrai“ užduodami parametrai, kurie matomi 4.2 pav.

**Modelio parametrai**

Sluoksnių storis ir kiti parametrai | Laisvųjų krūvininkų parametrai | Skiriamųjų paviršių pralaidumas | Tūrinių gaudyklių parametrai | Paviršinių gaudyklių parametrai

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas | Skaičiavimo algoritmo parametrai | **Išoriniai parametrai ir kraštinės sąlygos** | Fotogeneracijos parametrai

Temperatūra (T)  K

Elektrodų skaičius ir padėtis

- ☒ Du elektrodai
- ☐ Vienas elektrodas kairiajame krašte
- ☐ Vienas elektrodas dešiniajame krašte

☒ Sistemos kairiojo krašto koordinatė (x0)  um

☐ Sistemos dešiniojo krašto koordinatė (x1)  um

Kairiojo elektrodo pradinis potencialas (U0)  V

Dešiniojo elektrodo pradinis potencialas (U1)  V

Keičiamas šio elektrodo potencialas: ☒ kairiojo ☐ dešiniojo

Išorinio įtampos šaltinio pradinis potencialas (U2)

☒ U2 = U0 ☐ U2 =  V

Elektrodo plotas (S)  cm<sup>2</sup>

Išorinės grandinės varža (R)  Om

Išorinės grandinės talpa (C)  F

Išorinio įtampos šaltinio potencialo laikinė priklausomybė:

4.2 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Išoriniai parametrai“ (I – V variantai)

(d) Kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“ reikia užduoti, kad sluoksnyje egzistuoja dviejų rūšių gaudyklės: donorai ir rekombinacijos centrai. Kaip ir kitose kortelėse, sukuriant naują parametrų rinkinį (šiuo atveju – naujas gaudykles), reikia spustelėti mygtuką „Įterpti arba pašalinti...“ ir t. t. Donorų koncentracija yra  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Visi donorai turi būti jonizuoti, todėl nereikia apibrėžti jokių pagavimo į donorų jonus arba išlaisvinimo iš donorų atomų vyksmų. Taigi, kai pasirinktosios gaudyklės yra donorai, tada kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.3a pav. Rekombinacijos centrų koncentracija **I, III ir V variantuose turi būti  $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , o II ir IV variantuose  $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$** . Rekombinacijos centrai turi elgtis kaip tarpininkai rekombinuojant elektronams ir skylėms arba termiškai generuojant elektronų ir skylių poras. Todėl turi būti du pagavimo į juos vyksmai (vienas – elektronų, kitas – skylių) ir du išlaisvinimo iš jų vyksmai (vienas – elektronų, kitas – skylių). Apibrėžiant pagavimo į rekombinacijos centrą vyksmą, reikia lauke „Pagaunami krūvininkai“ nurodyti pagaunamus krūvininkus (elektronai arba skylės), lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ nurodyti rekombinacijos centro krūvį prieš pagaunant tą krūvininką (atitinkamai  $+1 \cdot e$  arba 0), o teksto įvesties lauke, kuris yra šalia sąrašo lauko „Pagavimo skerspjūvis“, įvesti pagavimo skerspjūvį (atitinkamai  $5 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$  arba  $7 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$ ). Apibrėžiant išlaisvinimo iš gaudyklių vyksmą, reikia lauke „Išlaisvinami krūvininkai“ nurodyti išlaisvinamus krūvininkus (elektronai arba skylės), lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ nurodyti rekombinacijos centro krūvį prieš išlaisvinant tą krūvininką (atitinkamai 0 arba  $+1 \cdot e$ ), sąrašo lauke „Išlaisvinimo koeficientas“ pasirinkti „Shockley-Read-Hall modelis“, paskui spustelėti šalia esantį mygtuką „Modelio param.“, o atsidariusiame dialogo lange įvesti išlaisvinimo darbo vertę (0,54 eV – ir elektronams, ir skylėms). Minėtoji išlaisvinimo darbo vertė atitinka lygmenis, kurie yra Si draustinės juostos centre (Si draustinės juostos plotis yra 1,08 eV). Taigi, kai pasirinktosios gaudyklės yra rekombinacijos centrai, o pasirinktieji vyksmai yra elektronų pagavimas ir išlaisvinimas, tada kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.3b pav.

4.3a pav. Kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“, kai pasirinktosios gaudyklės yra donorai (I – V variantai)

4.3b pav. Kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“, kai pasirinktosios gaudyklės yra rekombinacijos centrai, o pasirinktieji vyksmai yra elektronų pagavimas ir elektronų išlaisvinimas (I – V variantai)

(e) Kortelėje „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“ užduodamos pradinės elektronų ir skylių koncentracijos ir pradiniai gaudyklių krūviai. Šie parametrai turi būti tokie, kad pilnutinis pradinis erdvinio elektros krūvio tankis būtų lygus nuliui (elektrinio neutralumo būseną). Todėl pradinė elektronų koncentracija turi būti lygi donorų koncentracijai, pradinė skylių koncentracija turi būti lygi nuliui, donorų jonų krūvis turi būti  $+1e$ , o pradinis rekombinacijos centrų krūvis turi būti 0. Pvz., kai pasirinktieji laisvieji krūvininkai yra elektronai, o pasirinktosios gaudyklės yra donorai, tada kortelės „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“ pavidalas turi būti toks kaip parodyta 4.4 pav.

**4.4 pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“, kai pasirinktieji laisvieji krūvininkai yra elektronai, o pasirinktosios gaudyklės yra donorai (I – V variantai)

(f) Kortelėje „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ įvedami parametrai, kurie nusako laidumo srovės skaičiavimo taisyklę ant skiriamųjų paviršių. Kadangi yra du skiriamieji paviršiai ir dviejų rūšių krūvininkai, tai egzistuoja keturi tos kortelės variantai. Dešinysis elektrodas abiejų rūšių krūvininkų atžvilgiu turi elgtis kaip ominis kontaktas. Kad būtų teisingai sumodeliuota intensyvi krūvininkų paviršinė rekombinacija prie ominių kontaktų (kuri užtikrina beveik pastovią krūvininkų koncentraciją), reikia užduoti pastovias elektronų ir skylių koncentracijas prie dešiniojo skiriamąjo paviršiaus. Tos koncentracijos turi būti lygios termodinamiškai pusiausvyrosioms vertėms. Kad nustatyti tas vertes, visų pirma reikės modeliuoti termodinaminės pusiausvyros būseną. Termodinaminės pusiausvyros būseną – tai stacionari sistemos būseną, kai prie elektrodų prijungta nulinė įtampa, o elektros krūvio tankis visame sluoksnyje lygus nuliui. Modeliuojant termodinaminės pusiausvyros būseną, nėra svarbu, ar elektrodai yra ominiai, ar užtvariniai, t. y. nepralaidūs abiejų rūšių krūvininkams (abiem kryptimis). Tačiau stacionari būseną yra greičiausiai pasiekama tada, kai abu elektrodai yra užtvariniai. Be to, šiuo atveju yra mažiausios apvalinimo paklaidos. Todėl modeliuojant termodinaminę pusiausvyrą abu skiriamieji paviršiai turi būti nepralaidūs abiejų rūšių krūvininkams. Pvz., kai yra pasirinktas dešinysis skiriamasis paviršius ir kai pasirinktieji krūvininkai yra elektronai, tada kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ iš pradžių turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.5 pav. (paskui, kai bus žinomos krūvininkų koncentracijos termodinaminėje pusiausvyroje, reikės užduoti, kad dešinysis elektrodas yra ominis).



**4.5 pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kai pasirinktas skiriamasis paviršius yra sluoksnio ir dešiniojo elektrodo kontakto plokštuma, o pasirinktieji krūvininkai yra elektronai (atliekant I – V variantus, toks šios kortelės pavidalas atitinka tik darbo pradžią; paskui ją reikės pakeisti)

(g) Kortelėje „Skaičiavimo algoritmo parametrai“ užduodami parametrai, kurie matomi 4.6 pav.

**4.6 pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Skaičiavimo algoritmo parametrai“ (I – V variantai)



Patartina pašalinti „paukščiuką“ nuo žymimųjų laukelių „Įterpti prieš funkcijos pavadinimą“ ir „Įterpti po funkcijos pavadinimo“, kurie yra kai kurių kortelių kairiojoje pusėje (pvz., žr. 4.4 pav.). Tai užtenka padaryti tik vienoje kortelėje. Šie laukeliai nurodo, ar į funkcijų pavadinimus reikia įterpti sluoksnio pavadinimą (numatytasis sluoksnio pavadinimas – tai sluoksnio numeris). To galėtų prireikti, jeigu sistemą sudarytų daugiau negu vienas sluoksnis, o skirtinguose sluoksniuose būtų vienerūšiai krūvininkai (pvz., elektronai), kad skirtųsi tuos krūvininkus atitinkančių funkcijų pavadinimai. Tačiau šiame darbe modeliuojamą sistemą sudaro tik vienas sluoksnis, todėl to nereikia.

- Įvedus visus sistemos parametrus, parametrų redaktoriaus lange reikia spustelėti mygtuką „Gera!“. Paskui reikia įvykdyti meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame lange reikia įvesti galutinį laiką, kuris yra  $1 \cdot 10^{-6}$  s. Be to, reikia pažymėti žymimąjį laukelį „Pirminės funkcijos“ (žr. 4.7 pav.). Tada reikia spustelėti šio dialogo lango mygtuką „Gera!“.

**Ribiniai laikai ir duomenų kiekis**

Pradinis modeliavimo laikas:

Mažiausias vaizduojamas laikas:

Paskutinio apskaičiuoto  $f(t)$  kreivių taško laikas:

Skaičiuojamo  $f(t)$  kreivių taško laikas:

Galutinis laikas:

Atmintyje esančių laiko verčių skaičius:

Modelio ir laisvųjų kreivių duomenų kiekis:  kB

Naudojamas operatyviosios atminties kiekis:  kB

Laisvos operatyviosios atminties kiekis:  kB

☐ Neištrinti modelio duomenų, kurie atitinka pirmąją laiko vertę

Skaičiavimo trukmė:

$f(x,t)$  funkcijos, kurioms reikia dvigubai daugiau atminties (8 baitai vienai reikšmei)

☒ Pirminės funkcijos ☐ Visos funkcijos

**4.7 pav.** Programos GraphiXT dialogo langas, kuriame nurodomas galutinis modeliavimo laikas

- Naudojant programos GraphiXT meniu komandas „Failas / Naujas laiko funkcijų  $f(t)$  grafikas“ ir „Failas / Naujas koordinatės funkcijų  $f(x, t = \text{const})$  grafikas“ (arba atitinkamus įrankių juostos mygtukus) ir komandą „Grafiko nuostatos / Pasirinkti vaizduojamas funkcijas...“, sukuriame šie grafikai:

- laiko grafikas „Vidutinė koncentracija“ (kreivės „Elektronai: vid. konc. ( $1/\text{cm}^3$ )“ ir „Skylės: vid. konc. ( $1/\text{cm}^3$ )“),
- koordinatės grafikas „Skylių koncentracija“ (kreivė „Skylės: konc. ( $1/\text{cm}^3$ )“).

Patartina užduoti logaritminį abiejų grafikų Y ašies mastelį (nes teorija numato eksponentines priklausomybes ir nuo laiko, ir nuo koordinatės). Kreivių parametrų dialogo lange (jis atsidaro pasirinkus komandą „Kreivės pavidalas ir pavadinimas“ iš kontekstinio kreivės meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką ant kreivės pavadinimo kreivių sąrašė) reikia užduoti kreivės plotį, lygų 1 arba 2, ir pakankamai didelį vaizduojamų taškų skaičių (pvz., 1000), kad taškai nebūtų „praretinami“. Be to, jeigu grafike vaizduojamos dvi arba daugiau kreivių, tada turi skirtis jų pavidalas (pvz., spalva). Užduodama sinchronizavimo veika (t. y. tokia veika, kai visų grafikų einamieji laikai yra vienodi). Tam reikia pažymėti žymimąjį laukelį „visi langai“ programos GraphiXT pagrindinio lango apačioje.

Bendri patarimai atvaizduojant modeliavimo duomenis su programa GraphiXT:

- Kad būtų lengviau nustatyti vaizduojamų dydžių vertes iš jų grafikų, patartina užduoti automatinį Y ašies ribų optimizavimą (Y ašies ribų „optimizavimas“ reiškia, kad Y ašies apatinė ir viršutinė ribos tampa lygios mažiausiai ir didžiausiai vaizduojamų funkcijų vertėms duotajame X verčių intervale). Tam reikia spustelėti dešinįjį pelės mygtuką ant kairiosios arba dešinėsios Y ašies, atsidariusiame kontekstiniame meniu pasirinkti komandą „Y ašies nuostatos“ ir atsidariusiame dialogo lange pažymėti laukelius „optimizavimas pasikeitus kreivėms“ ir

„optimizavimas pasikeitus einamajam laikui arba X ašies riboms“. Tas pats dialogo langas atsidaro įvykdžius meniu juostos komandą „Grafiko nuostatos / Paraštės ir ašių nuostatos...“ (tą pačią komandą galima pasirinkti ir iš meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką grafiko lango taške, kuriame nėra jokio objekto).

- Einamąjį laiką galima pakeisti trim būdais: (a) tempiant slankiklį, kuris yra pagrindinio lango apačioje; (b) aktyvavus bet kurį koordinatės grafiką ir surinkus reikalingą einamojo laiko vertę lauke, kuris yra šalia slankiklio (kai aktyvusis grafikas yra laiko grafikas, šalia slankiklio rodomos to grafiko laiko ašies ribos, o ne einamojo laiko vertė); (c) įvedus reikalingą einamojo laiko vertę dialogo lange, kuris atsidaro įvykdžius meniu komandą „Grafiko nuostatos / Ašių ir slankiklio ribos...“ (tą pačią komandą galima pasirinkti ir iš meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką grafiko lango taške, kuriame nėra jokio objekto). Patogesniam einamojo laiko keitimui galima užduoti, kad laiko grafikuose būtų atvaizduojamas einamojo laiko žymeklis. Tam reikia aktyvuoti laiko grafiką (t. y. spustelėti kairįjį pelės mygtuką jo lango plote) ir įvykdyti meniu komandą „Grafiko nuostatos / Rodyti einamąjį laiką“ (tą pačią komandą galima pasirinkti ir iš meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką laiko grafiko lango taške, kuriame nėra jokio objekto). Tada duotajame laiko grafike atsiras einamojo laiko žymeklis – vertikali linija, kuri atitinka einamąjį laiką (ta linija bus matoma tik tada, kai einamasis laikas priklauso to grafiko laiko ašies intervalui). Kai yra matomas einamojo laiko žymeklis, tada yra galimybė pakeisti einamojo laiko vertę dar dviem būdais: „tempiant“ laiko žymeklį pele, kai yra nuspaustas pelės kairysis mygtukas arba pasirinkus komandą „Einamasis laikas...“ iš laiko žymeklio kontekstinio meniu.
  - Norint pakeisti grafiko lango antraštę, reikia įvykdyti meniu komandą „Langas / Grafiko lango antraštė...“ arba spustelėti dešinįjį pelės mygtuką ant to grafiko antraštės ir atsidariusiame kontekstiniame meniu pasirinkti tą pačią komandą.
  - Norint išdėstyti visus grafikus vieną šalia kito (taip, kad būtų užpildytas visas pagrindinio lango plotas), reikia įvykdyti meniu juostos komandą „Langas / Išdėstyti langus vieną šalia kito“. Įvykdžius šią komandą, grafiko langų išsidėstymo tvarką lemia jų aktyvavimo tvarka: aktyvusis grafikas bus viršutinis pirmajame stulpelyje, anksčiau aktyvuotas grafikas bus po juo ir t. t. Vadinasi, norint pakeisti grafikų išdėstymo tvarką, reikia iš eilės spustelėti kairįjį pelės mygtuką kiekviename iš jų atvirkštine tvarka (t. y., pirmasis aktyvuotas grafikas turi būti tas, kuris turėtų atsidurti paskutinio stulpelio apačioje), o paskui įvykdyti komandą „Langas / Išdėstyti langus vieną šalia kito“.
6. Kad pradėti skaičiavimą, įvykdoma programos GraphiXT meniu juostos komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa baigs skaičiuoti (skaičiavimo duomenys automatiškai atvaizduojami grafikuose). Pasibaigus skaičiavimui, projekto failas išsaugomas.
7. Šio etapo skaičiavimo rezultatas yra termodinaminę pusiausvyrą atitinkančios laisvųjų krūvininkų koncentracijos. Kadangi sluoksnis yra vienalytis, tai tos koncentracijos turi nepriklausyti nuo koordinatės. Tačiau dėl apvalinimo paklaidų taip nėra. Todėl reikia naudoti koncentracijos verčių visuose mazguose aritmetinį vidurkį, kurio vertės atvaizduotos minėtame laiko grafike. Kad būtų galima pereiti prie kito modeliavimo etapo (injektuotų skylių stacionaraus pasiskirstymo sluoksnyje modeliavimo), reikia užsirašyti apskaičiuotąsias elektronų ir skylių koncentracijas. Tam reikia spustelėti kairįjį pelės mygtuką ant atitinkamų krūvininkų *vidutinę* koncentraciją vaizduojančios kreivės (arba ant jos pavadinimo kreivių sąrašo), o paskui spustelėti klavišą „End“. Tada programa atvaizduos paskutinįją apskaičiuotą tos rūšies krūvininkų vidutinės koncentracijos vertę.
8. Modifikuojami parametrai redaktoriaus kortelėje „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“. Reikia užduoti, kad dešinysis elektrodas abiejų rūšių krūvininkų atžvilgiu elgiasi kaip ominis kontaktas. Kad būtų teisingai sumodeliuota intensyvi krūvininkų paviršinė rekombinacija prie ominių kontaktų (kuri užtikrina beveik pastovią krūvininkų koncentraciją), reikia užduoti pastovias elektronų ir skylių koncentracijas prie dešiniojo skiriamąjo paviršiaus. Tos koncentracijos turi būti lygios anksčiau gautoms termodinamiškai pusiausvirosioms vertėms. Todėl, kai yra pasirinktas dešinysis skiriamasis paviršius (t. y. sluoksnio ir dešiniojo elektrodo skiriamoji riba), tada kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.8a pav. (elektronų atveju) ir 4.8b pav. (skylių atveju). Koncentracijų vertės gali nebūti lygios vertėms, kurios nurodytos 4.8a,b pav. Kairysis elektrodas turi elgtis kaip injektuojantis elektrodas skylių atžvilgiu ir kaip užtvarinis kontaktas elektronų atžvilgiu. Skylių injekcijos srovės tankis turi būti 0,1 A/cm<sup>2</sup>. Todėl, kai yra pasirinktas kairysis skiriamasis paviršius ir kai pasirinktieji krūvininkai yra skylės, tada kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.9a pav., o kai pasirinktieji krūvininkai yra elektronai, tada ši kortelė turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.9b pav.

**Modelio parametrai**

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaiciavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai	Fotogeneracijos parametrai
Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinių gaudyklių parametrai
			Paviršinių gaudyklių parametrai

Pasirinktas sluoksnis: 1 Pasirinktieji krūvininkai: el.

☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☒ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☒ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc. (nb1) 1e+016 1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☐ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis eV

Injekcijos srauto tankio ir koncentracijos santykis cm/s

Pasirinktas sluoksnis: Dešinysis elektrodas

☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☐ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☐ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc. 1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☐ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis eV ☐ Atsižvelgti į šotkio efektą

Viršbarjerinės injekcijos srovės tankis A/cm<sup>2</sup>

Gera! Atšaukti Taikyti

**4.8a pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kai pasirinktas skiriamasis paviršius yra sluoksnio ir dešiniojo elektrodo kontakto plokštuma, o pasirinktieji krūvininkai yra elektronai (I – V variantai)

**Modelio parametrai**

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaiciavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai	Fotogeneracijos parametrai
Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinių gaudyklių parametrai
			Paviršinių gaudyklių parametrai

Pasirinktas sluoksnis: 1 Pasirinktieji krūvininkai: sk.

☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☒ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☒ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc. (nb2) 20907 1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☐ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis eV

Injekcijos srauto tankio ir koncentracijos santykis cm/s

Pasirinktas sluoksnis: Dešinysis elektrodas

☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☐ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☐ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc. 1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☐ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis eV ☐ Atsižvelgti į šotkio efektą

Viršbarjerinės injekcijos srovės tankis A/cm<sup>2</sup>

Gera! Atšaukti Taikyti

**4.8b pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kai pasirinktas skiriamasis paviršius yra sluoksnio ir dešiniojo elektrodo kontakto plokštuma, o pasirinktieji krūvininkai yra skylės (I – V variantai)

**Modelio parametrai**

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas | Skaičiavimo algoritmo parametrai | Išoriniai parametrai | Fotogeneracijos parametrai

Sluoksnio storis ir kiti parametrai | Laisvųjų krūvininkų parametrai | **Skiriamųjų paviršių pralaidumas** | Tūrinį gaudyklę parametrai | Paviršinių gaudyklę parametrai

Pasirinktas sluoksnis: **Kairysis elektrodas**

☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☐ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☐ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc.  1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☒ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis  eV ☐ Atsižvelgti į šotkio efektą

Viršbarjerinės injekcijos srovės tankis (jvA2): **Konstanta**  A/cm<sup>2</sup>

Pasirinktas sluoksnis: **1** Pasirinktieji krūvininkai: **sk.**  
☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☐ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☐ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc.  1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☒ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis  eV

Injekcijos srauto tankio ir koncentracijos santykis (jva/n2): **Konstanta**  cm/s

**Gera! Atšaukti Taikyti**

**4.9a pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kai pasirinktas skiriamasis paviršius yra sluoksnio ir kairiojo elektrodo kontakto plokštuma, o pasirinktieji krūvininkai yra skylės (I – V variantai)

**Modelio parametrai**

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas | Skaičiavimo algoritmo parametrai | Išoriniai parametrai | Fotogeneracijos parametrai

Sluoksnio storis ir kiti parametrai | Laisvųjų krūvininkų parametrai | **Skiriamųjų paviršių pralaidumas** | Tūrinį gaudyklę parametrai | Paviršinių gaudyklę parametrai

Pasirinktas sluoksnis: **Kairysis elektrodas**

☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☐ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☐ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc.  1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☐ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis  eV ☐ Atsižvelgti į šotkio efektą

Viršbarjerinės injekcijos srovės tankis  A/cm<sup>2</sup>

Pasirinktas sluoksnis: **1** Pasirinktieji krūvininkai: **el.**  
☒ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams  
☐ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu  
☐ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc.  1/cm<sup>3</sup>  
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams  
☐ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis  eV

Injekcijos srauto tankio ir koncentracijos santykis  cm/s

**Gera! Atšaukti Taikyti**

**4.9b pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kai pasirinktas skiriamasis paviršius yra sluoksnio ir kairiojo elektrodo kontakto plokštuma, o pasirinktieji krūvininkai yra elektronai (I – V variantai)

9. Įvedus visus sistemos parametrus, parametrų redaktoriaus lange reikia spustelėti mygtuką „Gera!“. Paskui reikia įvykdyti meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Ištrinti modelio duomenis“.
10. Tolesniame modeliavimo etape bus reikalinga tik skylių koncentracija, kuri yra daug mažesnė negu elektronų koncentracija. Todėl, kad elektronų koncentracijos kreivė „nepaslėptų“ skylių koncentracijos kreivės, patartina ištrinti kreivę „Elektronai: vid. konc. ( $1/\text{cm}^3$ )“ iš grafiko „Vidutinė koncentracija“.
11. Kad pradėti skaičiavimą, įvykdoma programos meniu komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa baigs skaičiuoti (skaičiavimo duomenys automatiškai atvaizduojami grafikuose). Pasibaigus skaičiavimui, projekto failas išsaugomas. Šio modeliavimo etapo rezultatas yra stacionarioji skylių koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės, kuri atvaizduota koordinatės grafike „Skylių koncentracija“.
12. Paskui einamąją sistemos būseną reikės naudoti kaip pradinę būseną. Todėl atliekami šie veiksmai:

**12.1.** Įvykdoma meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame lange reikia spustelėti mygtuką, ant kurio pavaizduota rodyklė į viršų (tas mygtukas yra tarp teksto laukų „Mažiausias vaizduojamas laikas“ ir „Paskutinio apskaičiuoto  $f(t)$  kreivių taško laikas“). Tada programa nukopijuos laiko vertę iš antrojo minėtojo lauko į pirmąjį. Paskui reikia spustelėti šio dialogo mygtuką „Gera!“, o atsiradus perspėjimui – mygtuką „Taip“. Atlikus šiuos veiksmus, bus ištrinti visi modeliavimo duomenys, išskyrus duomenis, atitinkančius paskutiniąją laiko vertę.

**12.2.** Dabar reikia pakeisti laiko vertę, kad laikas būtų lygus 0. Tam reikia spustelėti kairįjį pelės mygtuką ant bet kurios modelio  $f(t)$  funkcijos pavadinimo *laiko grafiko* kreivių sąrašė. Tada atsidaro dialogo langas su tos kreivės taško X ir Y vertėmis („X“ šiuo atveju reiškia laiko vertę). Lauke „X“ reikia įvesti 0 ir spustelėti kairįjį pelės mygtuką bet kur „laisvame“ to grafiko plote. **Pastaba:** Minėtasis dialogo langas atsidaro tik tada, kai pasirinktosios kreivės laiko apibrėžties intervalas arba jo dalis priklauso grafiko laiko ašies intervalui. Jeigu taip nėra, tada visų pirma reikia pakeisti laiko ašies ribas. Paprasčiausia tai pasiekti dukart spustelėjus kairįjį pelės mygtuką ant laiko ašies.

**12.3.** Įvykdoma meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame lange, laukuose „Mažiausias vaizduojamas laikas“ ir „Skaičiuojamo  $f(t)$  kreivių taško laikas“ reikia įvesti 0. Be to, reikia pažymėti laukelį „Neištrinti modelio duomenų, kurie atitinka pirmąją laiko vertę“. To reikia, kad vėliau būtų paprasčiau kelis kartus pakartoti modeliavimą naudojant tą pačią pradinę sistemos būseną (vėliau atliekant komandą „Ištrinti modelio duomenis“, bus ištrinami visi modeliavimo duomenys išskyrus duomenis, kurie atitinka pirmąją laiko vertę, t. y. pradinę sistemos būseną). Taigi, dabar langas „Ribiniai laikai ir duomenų kiekis“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.10 pav. (lauke „Einamasis modeliavimo laikas“ gali būti ir kitoks skaičius, tačiau tas skaičius neturi įtakos modeliavimo eigai). Paskui reikia spustelėti šio dialogo mygtuką „Gera!“.

**4.10 pav.** Programos GraphiXT dialogo langas, kuriame nurodomas galutinis modeliavimo laikas, prieš pradedant modeliuoti skylių koncentracijos mažėjimą išjungus injekciją

13. Tolesniame modeliavimo etape reikės modeliuoti perteklinių skylių koncentracijos mažėjimą nutraukus injekciją. Tuo tikslu vėl atidaroma modelio parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ ir užduodama nulinė skylių injekcijos srovė (t. y. 4.9a pav. vietoj „0.1“ turi būti „0“).
14. Kad pradėti skaičiavimą, įvykdoma programos GraphiXT meniu juostos komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa baigs skaičiuoti (skaičiavimo duomenys automatiškai atvaizduojami grafikuose). Šio modeliavimo etapo rezultatas yra vidutinės skylių koncentracijos priklausomybė nuo laiko, kuri atvaizduota laiko grafike „Vidutinė koncentracija“.
15. Projekto failas išsaugomas. Jo pagrindu sukuriamas kitas failas (meniu komanda „Failas / Įrašyti kaip...“).
16. Atidaroma modelio parametrų redaktoriaus kortelė „Sluoksnio storis ir kiti parametrai“ ir užduodamas 200 kartų mažesnis sluoksnio storis ( $1\ \mu\text{m}$ ).
17. Atidaroma modelio parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ ir vėl užduodamas skylių injekcijos srovės tankis  $0,1\ \text{A}/\text{cm}^2$ .
18. Pakeitus minėtuosius sistemos parametrus, parametrų redaktoriaus lange reikia spustelėti mygtuką „Gera!“, o atsiradus perspėjimui – mygtuką „Taip“. Paskui reikia įvykdyti meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame lange reikia įvesti galutinį laiką, kuris yra  $2 \cdot 10^{-8}\ \text{s}$  (t. y. 50 kartų mažesnis, negu modeliuojant didesnio storio sluoksnį). Be to, reikia išjungti nuostatą „Neištrinti modelio duomenų, kurie atitinka pirmąją laiko vertę“. Tada reikia spustelėti šio dialogo lango mygtuką „Gera!“.
19. Grafike „Skylių koncentracija“ patartina užduoti tiesinį Y ašies mastelį, o X ašies ribos turėtų būti 0 ir 1.
20. Kad pradėti skaičiavimą, įvykdoma programos GraphiXT meniu juostos komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa baigs skaičiuoti (skaičiavimo duomenys automatiškai atvaizduojami grafikuose). Pasibaigus skaičiavimui, projekto failas išsaugomas. Šio modeliavimo etapo rezultatas yra stacionarioji skylių koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės (esant mažesniai sluoksnio storiui), kuri atvaizduota koordinatės grafike „Skylių koncentracija“.
21. Pakartojami 12 – 14 punktai. Šio modeliavimo etapo rezultatas yra vidutinės skylių koncentracijos priklausomybė nuo laiko (esant mažesniai sluoksnio storiui), kuri atvaizduota laiko grafike „Vidutinė koncentracija“.

#### 4.2. Darbo eiga atliekant VI – X variantus

1. Startuojama programa GraphiXT. Naudojant meniu juostos komandą „Modeliavimo nuostatos / Modelio funkcijų failas“, įkeliamas į atmintį failas „CarrierFunc.dll“. Šis failas turėtų būti tame pačiame kataloge, kaip ir failas GraphiXT.exe.
2. Įvykdoma meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Modelio parametrai...“. Parametrų redaktoriaus pasirinkimo lange pasirenkamas failas „CarrierParms.exe“.
3. Parametrų redaktoriaus lange reikia įvesti visą informaciją apie tiriamąją sistemą. Parametrai sugrupuoti pagal kategorijas. Kiekvieną kategoriją atitinka tam tikra parametrų redaktoriaus kortelė:
 

(a) Kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“ įterpiami nauji krūvininkai (mygtukas „Įterpti arba pašalinti krūvininkus“, o atsidadariusiame dialogo lange – mygtukas „Gera!“) ir įvedami tų krūvininkų parametrai, t. y. pavadinimas („Skylės“), trumpasis pavadinimas („sk.“), krūvis ( $+1 \cdot e$ ), efektinė masė ( $1 \cdot m_0$ ), judris ( $400 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ ), difuzijos koeficiento apskaičiavimo metodas („Einšteino sąryšis“), valentinės juostos būsenų tankis ( $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ). Galutinis šios kortelės pavidalas turėtų būti toks, kaip parodyta 4.11 pav.

4.11 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Laisvųjų krūvininkų parametrai“ (VI – X variantai)

(b) Kortelėje „Sluoksnių storis ir kiti parametrai“ įvedami sluoksnio storis ( $w = 1 \mu\text{m}$ ) ir dielektrinė skvarba ( $\epsilon = 11,8$ ).

(c) Kortelėje „Išoriniai parametrai“ užduodami parametrai, kurie matomi 4.12 pav.

(d) Kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“ reikia užduoti, kad sluoksnyje egzistuoja dviejų rūšių gaudyklės (skylių prilipimo centrai), kurios skiriasi skylių išlaisvinimo darbu. Kaip ir kitose kortelėse, sukuriant naują parametrų rinkinį (šiuo atveju – naujas gaudykles), reikia spustelėti mygtuką „Įterpti arba pašalinti...“ ir t. t. Pirmosios rūšies gaudyklių koncentracija **VI ir VIII variantuose yra  $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , VII ir IX var. –  $10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , o X var. –  $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$** . Toje pačioje kortelėje reikia apibrėžti skylių pagavimo į tas gaudykles ir išlaisvinimo iš jų vyksmus. Apibrėžiant pagavimo į gaudyklę vyksmą, reikia lauke „Pagaunami krūvininkai“ nurodyti pagaunamus krūvininkus (skylės), lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ nurodyti gaudyklės krūvį prieš pagaunant skylę ( $-1 \cdot e$ ), o teksto įvesties lauke, kuris yra šalia sąrašo lauko „Pagavimo skerspjūvis“, įvesti pagavimo skerspjūvį ( $10^{-10} \text{ cm}^2$ ). Apibrėžiant išlaisvinimo iš gaudyklių vyksmą, reikia lauke „Išlaisvinami krūvininkai“ nurodyti išlaisvinamus krūvininkus (skylės), lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ nurodyti gaudyklės krūvį prieš išlaisvinant skylę (0), sąrašo lauke „Išlaisvinimo koeficientas“ pasirinkti „Shockley-Read-Hall modelis“,



**Modelio parametrai**

Sluoksnio storis ir kiti parametrai | Laisvųjų krūvininkų parametrai | Skiriamųjų paviršių pralaidumas | Tūrinių gaudyklių parametrai | Paviršinių gaudyklių parametrai

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas | Skaičiavimo algoritmo parametrai | Išoriniai parametrai ir kraštinės sąlygos | Fotogeneracijos parametrai

Temperatūra (T)  K

Elektrodų skaičius ir padėtis

- ☒ Du elektrodai
- ☐ Vienas elektrodas kairiajame krašte
- ☐ Vienas elektrodas dešiniajame krašte

☒ Sistemos kairiojo krašto koordinatė (x0)   $\mu\text{m}$

☐ Sistemos dešiniojo krašto koordinatė (x1)   $\mu\text{m}$

Kairiojo elektrodo pradinis potencialas ( $U_0$ )  V

Dešiniojo elektrodo pradinis potencialas ( $U_1$ )  V

Keičiamas šio elektrodo potencialas: ☒ kairiojo ☐ dešiniojo

Išorinio įtampos šaltinio pradinis potencialas ( $U_2$ )

☒  $U_2 = U_0$  ☐  $U_2 =$   V

Elektrodo plotas (S)   $\text{cm}^2$

Išorinės grandinės varža (R)   $\Omega\text{m}$

Išorinės grandinės talpa (C)  F

Išorinio įtampos šaltinio potencialo laikinė priklausomybė:

4.12 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Išoriniai parametrai“ (VI – X variantai)

paskui spustelėti šalia esantį mygtuką „Modelio param.“, o atsidariusiame dialogo lange įvesti išlaisvinimo darbo vertę (VI ir VII var. –  $0,35 \text{ eV}$ , o VIII, IX ir X var. –  $0,4 \text{ eV}$ ). Taigi, kai yra pasirinktos pirmosios rūšies gaudyklės, tada kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.13 pav. Analogiškai reikia apibrėžti ir antrosios rūšies skylių gaudykles bei pagavimo į jas ir išlaisvinimo iš jų vyksmus. II rūšies gaudyklės skiriasi nuo I rūšies gaudyklių tik dviejų parametrų vertėmis: koncentracija (II rūšies gaudyklių koncentracija turi būti **penkis kartus mažesnė**, negu pirmosios rūšies) ir skylių išlaisvinimo darbas (II rūšies gaudyklių atveju jis turi būti **viena dešimtąja elektronvolto didesnis** negu I rūšies).

**Modelio parametrai**

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas | Skaičiavimo algoritmo parametrai | Išoriniai parametrai ir kraštinės sąlygos | Fotogeneracijos parametrai

Sluoksnio storis ir kiti parametrai | Laisvųjų krūvininkų parametrai | Skiriamųjų paviršių pralaidumas | Tūrinių gaudyklių parametrai | Paviršinių gaudyklių parametrai

Sluoksnių skaičius:

Pasirinktas sluoksnis:

Sluoksnio pavadinimas

☐ Įterpti prieš funkcijos pavadinimą

☐ Įterpti po funkcijos pavadinimo

Gaudyklių rūšių skaičius:

Pasirinktosios gaudyklės:

Tūrinių gaudyklių pavadinimas  Trumpas pavad.:

Gaudyklių koncentracija ( $N_t$ ):

$1/\text{cm}^3$

Tūrinių gaudyklių sričių parametrai

Sričių skaičius:

Pasirinktoji sritis:

Srities plotis   $\mu\text{m}$

Srities poslinkis   $\mu\text{m}$

Didžiausia koncentracija   $1/\text{cm}^3$

Kairysis pusėjimo nuotolis   $\mu\text{m}$

Dešinysis pusėjimo nuotolis   $\mu\text{m}$

Krūvininkų pagavimo į tūrines gaudykles parametrai

Vyksmų skaičius:

Pasirinktas vyksmas:

Pagavimo vyksmo pavadinimas

Pagaunami krūvininkai:  (krūvis: +1)

Pradinis gaudyklių krūvis (qct1)  \*e

Pagavimo skerspjūvis (ct1):

$\text{cm}^2$

Krūvininkų išlaisvinimo iš tūrinių gaudyklių parametrai

Vyksmų skaičius:

Pasirinktas vyksmas:

Išlaisvinimo vyksmo pavadinimas

Išlaisvinami krūvininkai:  (krūvis: +1)

Pradinis gaudyklių krūvis (qgt1)  \*e

Išlaisvinimo koeficientas (gt1):

4.13 pav. Kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“, kai pasirinktos I rūšies gaudyklės (VI ir VIII var.)



(e) Kortelėje „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“ užduodami pradinė skylių koncentracija ir pradiniai gaudyklių krūviai. Šie parametrai turi būti tokie, kad pilnutinis pradinis erdvinio elektros krūvio tankis būtų lygus nuliui (elektrinio neutralumo būseną). Todėl pradinė skylių koncentracija turi būti lygi I rūšies gaudyklių koncentracijai, I rūšies gaudyklių pradinis krūvis turi būti  $-1e$ , o II rūšies gaudyklių pradinis krūvis turi būti 0. Pvz., kai yra pasirinktos I rūšies gaudyklės, tada kortelės „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“ pavidalas turi būti toks kaip parodyta 4.14 pav.

**4.14 pav.** Parametrų redaktoriaus kortelė „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“, kai yra pasirinktos I rūšies gaudyklės (VI – X variantai)

(f) Kortelėje „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ įvedami parametrai, kurie nusako laidumo srovės skaičiavimo taisyklę ant skiriamųjų paviršių. Kadangi yra du skiriamieji paviršiai, tai egzistuoja du tos kortelės variantai. Reikalingas skiriamasis paviršius nurodomas pasirenkant sluoksnį sąrašo lauke „Pasirinktas sluoksnis“. Reikia nurodyti, kad abu skiriamieji paviršiai yra nepralaidūs skylėms. Pvz., kai yra pasirinktas dešinysis skiriamasis paviršius, tada kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.15 pav.

4.15 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kai pasirinktas skiriamasis paviršius yra sluoksnio ir dešiniojo elektrodo kontakto plokštuma (VI – X variantai)

(g) Kortelėje „Skaičiavimo algoritmo parametrai“ užduodami parametrai, kurie matomi 4.16 pav.

4.16 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Skaičiavimo algoritmo parametrai“ (VI – X variantai)

Patartina pašalinti „paukščiuką“ nuo žymimųjų laukelių „Įterpti prieš funkcijos pavadinimą“ ir „Įterpti po funkcijos pavadinimo“, kurie yra kai kurių kortelių kairiojoje pusėje (pvz., žr. 4.14 pav.). Tai užtenka padaryti tik vienoje kortelėje. Šie laukeliai nurodo, ar į funkcijų pavadinimus reikia įterpti sluoksnio pavadinimą (numatytasis sluoksnio pavadinimas – tai sluoksnio numeris). To galėtų prireikti, jeigu sistemą sudarytų daugiau negu vienas sluoksnis, o skirtinguose sluoksniuose būtų vienerūšiai krūvininkai (pvz., elektronai), kad skirtųsi tuos krūvininkus atitinkančių funkcijų pavadinimai. Tačiau šiame darbe modeliuojamą sistemą sudaro tik vienas sluoksnis, todėl to nereikia.

- Įvedus visus sistemos parametrus, parametrų redaktoriaus lange reikia spustelėti mygtuką „Gera!“. Paskui reikia įvykdyti meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame lange reikia įvesti galutinį laiką, kuris yra  $5 \cdot 10^{-8}$  s. Be to, reikia pažymėti žymimąjį laukelį „Pirminės funkcijos“ (žr. 4.17 pav.). Tada reikia spustelėti šio dialogo lango mygtuką „Gera!“.

**4.17 pav.** Programos GraphiXT dialogo langas, kuriame nurodomas galutinis modeliavimo laikas (VI – X variantai)

- Naudojant programos GraphiXT meniu komandas „Failas / Naujas laiko funkcijų  $f(t)$  grafikas“ ir „Failas / Naujas koordinatės funkcijų  $f(x, t = \text{const})$  grafikas“ (arba atitinkamus įrankių juostos mygtukus) ir komandą „Grafiko nuostatos / Pasirinkti vaizduojamas funkcijas...“, sukuriame šie grafikai:

- laiko grafikas „Pilnutinė srovė“ (kreivė „Pilnutinės elektros srovės tankis ( $A/cm^2$ )“),
- koordinatės grafikas „Skylių koncentracija“ (kreivė „Skylės: konc. ( $1/cm^3$ )“),

Kreivių parametrų dialogo lange (jis atsidaro pasirinkus komandą „Kreivės pavidalas ir pavadinimas“ iš kontekstinio kreivės meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką ant kreivės pavadinimo kreivių sąrašė) reikia užduoti kreivės plotį, lygų 1 arba 2, ir pakankamai didelį vaizduojamų taškų skaičių (pvz., 1000), kad taškai nebūtų „praretinami“. Užduodama sinchronizavimo veika (t. y. tokia veika, kai visų grafikų einamieji laikai yra vienodi). Tam reikia pažymėti žymimąjį laukelį „visi langai“ programos GraphiXT pagrindinio lango apačioje.

Bendri patarimai atvaizduojant modeliavimo duomenis su programa GraphiXT:

- Kad būtų lengviau nustatyti vaizduojamų dydžių vertes iš jų grafikų, patartina užduoti automatinį Y ašies ribų optimizavimą (Y ašies ribų „optimizavimas“ reiškia, kad Y ašies apatinė ir viršutinė ribos tampa lygios mažiausiai ir didžiausiai vaizduojamų funkcijų vertėms duotajame X verčių intervale). Tam reikia spustelėti dešinįjį pelės mygtuką ant kairiosios arba dešinėsios Y ašies, atsidariusiame kontekstiniame meniu pasirinkti komandą „Y ašies nuostatos“ ir atsidariusiame dialogo lange pažymėti laukelius „optimizavimas pasikeitus kreivėms“ ir „optimizavimas pasikeitus einamajam laikui arba laiko ašies riboms“. Tas pats dialogo langas atsidaro įvykdžius meniu juostos komandą „Grafiko nuostatos / Paraštės ir ašių nuostatos...“ (tą pačią komandą galima pasirinkti ir iš meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką grafiko lango taške, kuriame nėra jokio objekto).
- Einamąjį laiką galima pakeisti trim būdais: (a) tempiant slankiklį, kuris yra pagrindinio lango apačioje; (b) aktyvavus bet kurį koordinatės grafiką ir surinkus reikalingą einamojo laiko vertę lauke, kuris yra šalia

slankiklio (kai aktyvusis grafikas yra laiko grafikas, šalia slankiklio rodomos to grafiko laiko ašies ribos, o ne einamojo laiko vertė); (c) įvedus reikalingą einamojo laiko vertę dialogo lange, kuris atsidaro įvykdžius meniu komandą „Grafiko nuostatos / Ašių ir slankiklio ribos...“ (tą pačią komandą galima pasirinkti ir iš meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką grafiko lango taške, kuriame nėra jokio objekto). Patogesniai einamojo laiko keitimui galima užduoti, kad laiko grafikuose būtų atvaizduojamas einamojo laiko žymeklis. Tam reikia aktyvuoti laiko grafiką (t. y. spustelėti kairįjį pelės mygtuką jo lango plote) ir įvykdyti meniu komandą „Grafiko nuostatos / Rodyti einamąjį laiką“ (tą pačią komandą galima pasirinkti ir iš meniu, kuris atsidaro spustelėjus dešinįjį pelės mygtuką laiko grafiko lango taške, kuriame nėra jokio objekto). Tada duotajame laiko grafike atsiras einamojo laiko žymeklis – vertikali linija, kuri atitinka einamąjį laiką (ta linija bus matoma tik tada, kai einamasis laikas priklauso to grafiko laiko ašies intervalui). Kai yra matomas einamojo laiko žymeklis, tada yra galimybė pakeisti einamojo laiko vertę dar dviem būdais: „tempiant“ laiko žymeklį pele, kai yra nuspaustas pelės kairysis mygtukas arba pasirinkus komandą „Einamasis laikas...“ iš laiko žymeklio kontekstinio meniu.

- Norint pakeisti grafiko lango antraštę, reikia įvykdyti meniu komandą „Langas / Grafiko lango antraštė...“ arba spustelėti dešinįjį pelės mygtuką ant to grafiko antraštės ir atsidariusiame kontekstiniame meniu pasirinkti tą pačią komandą.
  - Norint išdėstyti visus grafikus vieną šalia kito (taip, kad būtų užpildytas visas pagrindinio lango plotas), reikia įvykdyti meniu juostos komandą „Langas / Išdėstyti langus vieną šalia kito“. Įvykdžius šią komandą, grafiko langų išsidėstymo tvarką lemia jų aktyvavimo tvarka: aktyvusis grafikas bus viršutinis pirmajame stulpelyje, anksčiau aktyvuotas grafikas bus po juo ir t. t. Vadinas, norint pakeisti grafikų išdėstymo tvarką, reikia iš eilės spustelėti kairįjį pelės mygtuką kiekviename iš jų atvirkštine tvarka (t. y., pirmasis aktyvuotas grafikas turi būti tas, kuris turėtų atsidurti paskutinio stulpelio apačioje), o paskui įvykdyti komandą „Langas / Išdėstyti langus vieną šalia kito“.
6. Kad pradėti skaičiavimą, įvykdoma programos GraphiXT meniu juostos komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa baigs skaičiuoti (skaičiavimo duomenys automatiškai atvaizduojami grafikuose). Pasibaigus skaičiavimui, projekto failas išsaugomas.
  7. Tolesniame modeliavimo etape einamąją sistemos būseną (t. y. termodinaminės pusiausvyros būseną) reikės naudoti kaip pradinę būseną. Todėl atliekami šie veiksmai:
    - 7.1. Įvykdoma meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame lange reikia spustelėti mygtuką, ant kurio pavaizduota rodyklė į viršų (tas mygtukas yra tarp teksto laukų „Mažiausias vaizduojamas laikas“ ir „Paskutinio apskaičiuoto  $f(t)$  kreivių taško laikas“. Tada programa nukopijuos laiko vertę iš antrojo minėtojo lauko į pirmąjį. Paskui reikia spustelėti šio dialogo mygtuką „Gera!“, o atsiradus perspėjimui – mygtuką „Taip“. Atlikus šiuos veiksmus, bus ištrinti visi modeliavimo duomenys, išskyrus duomenis, atitinkančius paskutiniąją laiko vertę.
    - 7.2. Dabar reikia pakeisti laiko vertę, kad laikas būtų lygus 0. Tam reikia spustelėti kairįjį pelės mygtuką ant bet kurios modelio  $f(t)$  funkcijos pavadinimo *laiko grafiko* kreivių sąrašė. Tada atsidaro dialogo langas su tos kreivės taško X ir Y vertėmis („X“ šiuo atveju reiškia laiko vertę). Lauke „X =“, reikia įvesti 0 ir spustelėti kairįjį pelės mygtuką bet kur „laisvame“ to grafiko plote. **Pastaba:** Minėtasis dialogo langas atsidaro tik tada, kai pasirinktosios kreivės laiko apibrėžties intervalas arba jo dalis priklauso grafiko laiko ašies intervalui. Jeigu taip nėra, tada visų pirma reikia pakeisti laiko ašies ribas. Paprasčiausia tai pasiekti dukart spustelėjus kairįjį pelės mygtuką ant laiko ašies.
    - 7.3. Įvykdoma meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame lange, laukuose „Mažiausias vaizduojamas laikas“ ir „Skaičiuojamo  $f(t)$  kreivių taško laikas“ reikia įvesti 0. Be to, reikia pažymėti laukelį „Neištrinti modelio duomenų, kurie atitinka pirmąją laiko vertę“. To reikia, kad vėliau būtų paprasčiau kelis kartus pakartoti modeliavimą naudojant tą pačią pradinę sistemos būseną (vėliau atliekant komandą „Ištrinti modelio duomenis“, bus ištrinami visi modeliavimo duomenys išskyrus duomenis, kurie atitinka pirmąją laiko vertę, t. y. pradinę sistemos būseną). Galutinis laikas turi būti  $5 \cdot 10^{-11}$  s. Taigi, dabar langas „Ribiniai laikai ir duomenų kiekis“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 4.18 pav. (lauke „Einamasis modeliavimo laikas“ gali būti kitoks skaičius, tačiau tas skaičius neturi įtakos modeliavimo eigai). Paskui reikia spustelėti šio dialogo mygtuką „Gera!“.
  8. Vėl atidaroma modelio parametrų redaktoriaus kortelė „Išoriniai parametrai“ ir užduodamas kairiojo elektrodo pradinis potencialas 1 V. Kad išsaugoti parametrų pakeitimus, reikia spustelėti parametrų redaktoriaus mygtuką „Gera!“.
  9. Kad pradėti skaičiavimą, įvykdoma programos GraphiXT meniu juostos komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa baigs skaičiuoti (skaičiavimo duomenys automatiškai atvaizduojami grafikuose). Pasibaigus skaičiavimui, reikia vėl įvykdyti meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“, padidinti galutinį laiką 10 kartų ir pratęsti modeliavimą. Šitaip

**4.18 pav.** Programos GraphiXT dialogo langas, kuriame nurodomas galutinis modeliavimo laikas, prieš pradedant modeliuoti skylių kinetiką įjungus išorinę įtampą (VI – X variantai)

reikia padidinti galutinį laiką iki  $5 \cdot 10^{-8}$  s (iš viso – 4 modeliavimo etapai, kurių kiekvieno galutinis laikas yra 10 kartų didesnis negu ankstesniojo etapo).

10. Projekto failas išsaugomas.
11. Einamojo projekto pagrindu sukuriamas kitas failas (menu komanda „Failas / Įrašyti kaip...“).
12. Atidaroma modelio parametrų redaktoriaus kortelė „Išoriniai parametrai“ ir užduodama aplinkos temperatūra 280 K.
13. Ištrinami visi modeliavimo duomenys (įskaitant pirmąją laiko vertę), parametrų redaktoriaus kortelėje „Išoriniai parametrai“ užduodama nulinė įtampa (žr. 4.12 pav.) ir pakartojami 6 – 10 punktai. [Kad pavyktų ištrinti pirmąją laiko vertę, reikia įvykdyti menu komandą „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“ ir išjungti nuostatą „Neištrinti modelio duomenų, kurie atitinka pirmąją laiko vertę“.]

## 5. Darbo duomenų analizė

Pagrindinius skaitinio modeliavimo rezultatus reikia pavaizduoti grafiškai:

I – V variantuose turi būti atspausdinta stacionarioji skylių koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės esant injekcijai ir vidutinės skylių koncentracijos priklausomybė nuo laiko išjungus injekciją. Kiekvienu atveju reikia atlikti tiesinę arba eksponentinę aproksimaciją ir gautosios kreivės polinkį palyginti su teoriniu. Taigi, I – V variantuose iš viso turi būti mažiausiai 4 grafikai (po du grafikus kiekvienam sluoksnio storiui).

VI – X variantuose turi būti atspausdinti mažiausiai trys grafikai, vaizduojantys sluoksnio srovės priklausomybes nuo laiko įvairiuose poliarizacijos vyksmo etapuose. Tų grafikų laiko ašies ribas ir Y ašies mastelį reikia pasirinkti taip, kad aiškiai matytųsi atvaizduotos priklausomybės tiesinis arba eksponentinis pobūdis atitinkamame intervale. Be to, VI – X variantuose reikia atspausdinti galutinę skylių koncentracijos priklausomybę nuo koordinatės. Šiuos grafikus reikia atspausdinti kiekvienai temperatūrai. Taigi, VI – X variantuose iš viso turi būti mažiausiai 8 grafikai (po 4 grafikus kiekvienai temperatūrai). Kiekvienu atveju reikia atlikti tiesinę arba eksponentinę aproksimaciją ir gautosios kreivės polinkį palyginti su teoriniu.

Rezultatų aptarime ir išvadose reikia paaiškinti bendrąją gautųjų priklausomybių pavidalą ir skaitinio modeliavimo rezultatus palyginti su teorinio modelio išvadomis. Kadangi aptariant modeliavimo rezultatus reikia remtis grafikais, kuriuos atvaizdavo programa GraphiXT, tai, siekiant pagrįsti savo teiginius, gali tekti atspausdinti ir daugiau grafikų, kuriuose pavaizduotos kitų fizikinių dydžių priklausomybės nuo laiko arba nuo koordinatės.