

VILNIAUS UNIVERSITETAS
Kietojo kūno elektronikos katedra
Krūvio pernašos vyksmų skaitinis modeliavimas

Darbas Nr. 1

Šotkio diodo voltamperinės charakteristikos tyrimas

Parengė A. Poškus

2014-09-03

Turinys

Darbo tikslas	2
1. Užduotys	2
2. Kontroliniai klausimai	2
3. Darbo teorija.....	3
3.1. Šotkio kontakto energijos juostų diagrama	3
3.2. Nuskurdinimo artinys Šotkio kontaktui	5
3.3. Šotkio kontaktas esant išorinei įtampai	7
3.4. Šotkio diodo kontaktinio potencialų skirtumo teorinė išraiška	9
3.5. Einšteino sąryšis	10
3.6. Šotkio diodo atgalinės srovės išraiška.....	11
3.7. Paviršinių gaudyklių įtaka Šotkio kontakto savybėms.....	12
3.8. Šotkio efektas	12
4. Skaitinio modeliavimo metodo teorija.....	14
5. Darbo eiga	16
6. Darbo duomenų analizė	23

Darbo tikslas

Sumodeliuoti Šotkio diodo voltamperinę charakteristiką, palyginti Šotkio diodo teorinio modelio išvadas su skaitinio modeliavimo rezultatais.

1. Užduotys

1. Naudojant programą GraphiXT, apskaičiuoti Šotkio diodo elektros srovę esant kelioms elektrodų potencialų skirtumo vertėms.
2. Nubraižyti gautąją voltamperinę charakteristiką. Pagal ją apytiksliai nustatyti kontaktinį potencialų skirtumą ($I - V$ variantai). Ištirti Šotkio efekto įtaką atgalinei srovei ($VI - X$ variantai).
3. Gautuosius dydžius (kontaktinį potencialų skirtumą, srovės vertes, nuskurdintojo sluoksnio storį) palyginti su vertėmis, kurios išplaukia iš teorinio modelio.

2. Kontroliniai klausimai

1. Šotkio diodo energijos lygmenų diagrama (esant termodinaminei pusiausvyrai ir esant tiesioginei arba atgalinei išorinei įtampai). Kontaktinio potencialų skirtumo sąvoka.
2. Nuskurdinimo artinio Šotkio diodui esmė ir pagrindinės jo išvados (nuskurdintojo sluoksnio storio ir kontaktinio potencialų skirtumo sąryšis, elektrinio lauko priklausomybė nuo koordinatės).
3. Šotkio diodo srovės komponentės ir jų priklausomybė nuo išorinės įtampos. Šotkio diodo voltamperinės charakteristikos bendrasis pavidalas.
4. Einšteino sąryšio išvedimas.
5. Atgalinės srovės priklausomybės nuo įtampos aiškinimas.
6. Kas yra Šotkio efektas? Kokią įtaką jis turi Šotkio diodo voltamperinei charakteristikai?
7. Šotkio diodo skaitinio modeliavimo taikant dreifo ir difuzijos artinį esmė: sprendžiamoji diferencialinių lygčių sistema, išvestinių skaičiavimas baigtinių skirtumų metodu.

Literatūra:

1. Colinge J. P., Colinge C. A. Physics of semiconductor devices. New York: Kluwer Academic Publishers, 2002. 436 p.
2. Зи С. М. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х кн. – М.: Мир, 1984.

3. Darbo teorija

3.1. Šotkio kontakto energijos juostų diagrama

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

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

Šotkio kontakto elektrinėms savybėms suprasti patogiau pasinaudoti energijos juostų diagrama. Puslaidininkinių įtaisų energijos juostų diagramose nurodomos šios trys energijos: 1) Fermio energija F (dar vadinama Fermio lygmeniu); 2) laidumo juostos apatinis kraštas E_c , 3) valentinės juostos viršutinis kraštas E_v . Be to, energijos juostų diagramose kartais pavaizduojamas ir vakuumo lygmuo – elektrono energija vakuume, prie pat puslaidininkio paviršiaus. Fermio energija lemia energijos lygmenų užpildą, kurią nusako Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - F}{kT}\right)}, \quad (3.1.1)$$

čia $f(E)$ yra vidutinis elektronų skaičius kvantinėje būsenoje, kurios energija E (kitais sakant, tikimybė, kad sistemoje yra tos būsenos elektronas), k yra Bolemano konstanta, T yra absoliutinė temperatūra. Prieš sudarant Šotkio kontakto energijos juostų diagramą, naudinga prisiminti priežastis, dėl kurių energijos juostų diagramos yra dažnai naudojamos puslaidininkinių įtaisų veikimo analizei, ir kartu – kelias formules, kurios žinomos iš kietojo kūno elektronikos kurso. Pagal energijos juostų kraštų E_c ir E_v kitimą erdvėje galima spręsti apie elektrinio potencialo φ pasiskirstymą:

$$E_c = E_{c0} - e\varphi, \quad E_v = E_{v0} - e\varphi, \quad (3.1.2)$$

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

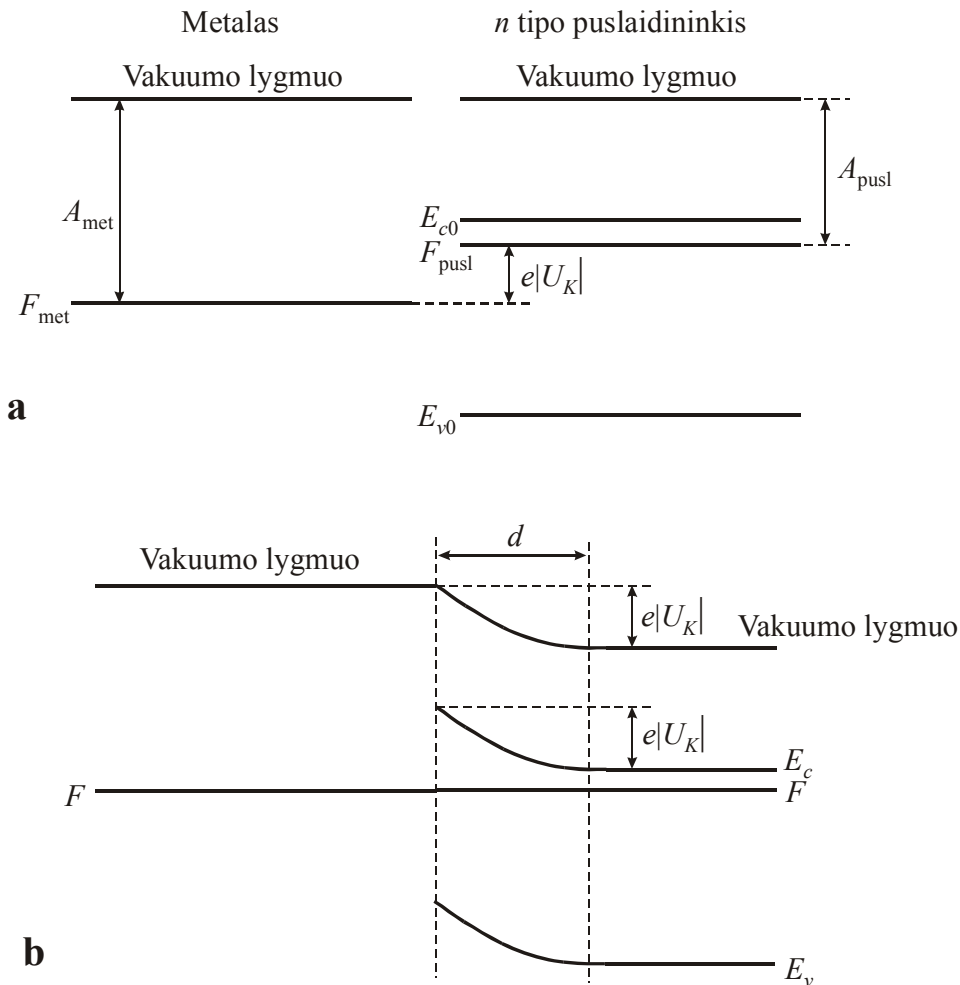
$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right), \quad p = N_v \exp\left(\frac{E_v - F}{kT}\right); \quad (3.1.3)$$

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

$$j_n = en\mu_n\mathcal{E} + eD_n \frac{dn}{dx}, \quad j_p = ep\mu_p\mathcal{E} - eD_p \frac{dp}{dx}; \quad (3.1.4)$$

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

Šotkio kontakto energijos diagramos sudarymą iliustruoja 3.1 pav. Pradedame nuo izoliuotų medžiagų – metalo ir n tipo puslaidininkio. Kol tarp jų nėra kontakto, vidinio elektrinio lauko nėra (potencialas φ visur yra lygus nuliui), todėl, pagal (3.1.2), energijos juostos yra „plokščios“, kaip pavaizduota 3.1a pav. Akivaizdu, kad abiejų medžiagų Fermio energijos nesutampa. Tai reiškia, kad, sudarius elektrinį kontaktą tarp metalo ir puslaidininkio, sistema nebus termodinaminėje pusiausvyroje. [Fermio energijos fizikinė prasmė – tai vidutinis darbas, kurį reikia atlikti, norint padidinti elektronų skaičių puslaidininkyje vienetu. T. y. Fermio energija – tai elektronų sistemos cheminis potencialas, perskaičiuotas vienam elektronui. Termodinamikoje įrodoma, kad tuo atveju, kai sistema yra termodinaminėje pusiausvyroje (t. y. sistemoje nevyksta šilumos persiskirstymas, neteka elektros srovė, nėra difuzijos), sistemos cheminis potencialas yra vienodas visuose sistemos taškuose. Vadinasi, kai sistema yra termodinaminėje pusiausvyroje, Fermio energija turi būti vienoda visuose sistemos taškuose.] Sudarius kontaktą, prasidės elektronų apykaita tarp



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

abiejų medžiagų. Elektronų srautas iš medžiagos su mažesniu išlaisvinimo darbu (t. y. su didesne Fermio energija) į medžiagą su didesniu išlaisvinimo darbu (t. y. su mažesne Fermio energija) bus didesnis už priešingos krypties elektronų srautą. 3.1 pav. atveju elektronų išlaisvinimo darbas puslaidininkyje yra mažesnis už jų išlaisvinimo darbą metalė. Taigi, atsiranda elektronų srautas iš puslaidininkio į metalą. Kadangi elektrono krūvis neigiamas, tai elektros srovės kryptis bus priešinga – iš metalo į puslaidininkį. Ši elektros srovė yra neelektrostatinės prigimties (t. y. ji nėra susijusi su elektriniu lauku). Dėl šios neelektrostatinės srovės puslaidininkis įgyja perteklinį teigiamą krūvį, o metalas – perteklinį neigiamą krūvį. Tai reiškia, kad metalo potencialas tampa mažesnis už puslaidininkio potencialą. T. y. atsiranda elektrinis laukas, kurio kryptis priešinga neelektrostatinės srovės krypčiai. Šis laukas lėtina elektronų perėjimą iš puslaidininkio į metalą, todėl krūvio persiskirstymas sulėtėja. Praėjus tam tikram laikui, krūvininkų persiskirstymas baigiasi, t. y. sistema atsiduria termodinaminėje pusiausvyroje. Šioje būsenoje Fermio lygmuo yra vienodas visuose taškuose, tačiau energijos juostos yra užlinkusios. Šio užlinkimo priežastis – minėtasis elektrinis laukas, t. y. potencialo kitimas erdvėje. Pagal (3.1.2), potencialo kitimas erdvėje reiškia, kad juostų kraštai taip pat priklauso nuo koordinatės („užlinksta“). Taip pat užlinksta ir visi kiti energijos lygmenys – tame tarpe ir vakuuminio lygmens. Šis laukas egzistuoja tik siauroje srityje arti kontakto. Toliau nuo kontakto elektrinis laukas lygus nuliui, t. y. energijos juostos yra plokščios, o Fermio lygmuo yra tokiu pačiu atstumu nuo juostų kraštų, kaip ir izoliuotame puslaidininkyje (žr. 3.1b pav.). Juostų užlinkimo dydis yra proporcingas potencialų skirtumui tarp metalo ir puslaidininkio. Iš 3.1 pav. matyti, kad šis užlinkimas yra lygus skirtumui tarp Fermio lygmenų izoliuotose medžiagose. T. y. metalo ir puslaidininkio potencialų skirtumas termodinaminėje pusiausvyroje (*kontaktinis potencialų skirtumas*) lygus

$$U_K \equiv \varphi_{\text{met}} - \varphi_{\text{pusl}} = \frac{1}{e}(F_{\text{met}} - F_{\text{pusl}}); \quad (3.1.5)$$

čia F_{met} ir F_{pusl} yra Fermio energijos *izoliuotuose* metale ir puslaidininkyje (žr. 3.1a pav.), o φ_{met} ir φ_{pusl} yra jų potencialai, *sudarius sandūrą* (čia turimi omenyje potencialai erdvės srityse, kuriose nėra erdvinio krūvio, t. y. pakankamai toli nuo kontakto).

3.2. Nuskurdinimo artinys Šotkio kontaktui

Dabar aptarsime erdvinio elektrinio krūvio tankio, elektrinio lauko stiprio ir potencialo priklausomybes nuo koordinatės Šotkio kontakte termodinaminės pusiausvyros sąlygomis. Visų pirma reikia pastebėti, kad pilnutinis krūvis puslaidininkyje yra priešingas pilnutiniam krūviui metale, nes pilnutinis sandūros krūvis turi būti lygus nuliui. Metale elektronų būsenų tankis yra toks didelis, kad visas perteklinis krūvis „sutelpa“ į vieną paviršinį atominį sluoksnį. Todėl galima laikyti, kad metale perteklinis krūvis yra ne tūrinis, o paviršinis (t. y. krūvio sluoksnio storį galima laikyti lygiu nuliui). Paviršinis krūvis apibūdinamas paviršiniu krūvio tankiu σ (matuojamas C/m^2). Iš elektrostatikos kurso žinoma, kad paviršinio krūvio tankio σ sukuriama elektrinio lauko stipris yra lygus

$$\mathcal{E}_\sigma = \frac{\sigma}{2\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (3.2.1)$$

(ši lygybė nesunkiai įrodoma, pasinaudojus Gauso teorema). Skaičiuojant pilnutinį elektrinio lauko stiprį, prie metalo paviršinio krūvio lauko (3.2.1) reikia pridėti puslaidininkyje egzistuojančio erdvinio krūvio sukuriamą elektrinį lauką. Pastarąjį lauką galima apskaičiuoti, naudojantis vadinamuoju nuskurdinimo artiniu, kuris aprašytas kitoje pastraipoje.

Nesunku pastebėti, kad elektronų tankis priekontaktinėje puslaidininkio srityje, kurioje egzistuoja elektrinis laukas, turėtų būti žymiai mažesnis už krūvininkų tankį neutraliojoje puslaidininkio dalyje. Ši išvada išplaukia iš elektronų tankio n išraiškos (3.1.3). Kaip matyti 3.1b pav., kontakto plokštumoje Fermio lygmuo yra toliau nuo laidumo juostos krašto, negu puslaidininkio tūryje. Pagal (3.1.3), krūvininkų tankio natūraliojo logaritmo sumažėjimas yra lygus atstumo tarp Fermio lygmens ir laidumo juostos krašto padidėjimui (t. y. potencinio barjero aukščiui), padalintam iš kT . Antra vertus, minėtasis potencinio barjero aukštis yra lygus kontaktiniam potencialų skirtumui U_K , padaugintam iš elementariojo krūvio e (žr. 3.1b pav.). Praktikoje $e|U_K| = (0.4 \div 0.9) \text{ eV}$. Turint omenyje, kad kambario temperatūroje $kT \approx 0.0254 \text{ eV}$, galima teigti, kad puslaidininkio elektronų tankio logaritmas prie pat kontakto yra dydžiu $(0.4 \div 0.9) / 0.0254 = (16 \div 35)$ mažesnis, negu puslaidininkio tūryje. Tai atitinka elektronų tankio santykinį sumažėjimą $e^{16} \div e^{35} = 10^7 \div 10^{15}$ kartų. Vadinasi, priekontaktinėje puslaidininkio srityje, kurioje egzistuoja elektrinis laukas, elektronų koncentracija yra keliom eilėm mažesnė už jų koncentraciją puslaidininkio tūryje. Todėl šis priekontaktinis sluoksnis vadinamas **nuskurdintuoju sluoksniu**. Žinome, kad elektrinio neutralumo sąlygomis legiruotame puslaidininkyje pagrindinių krūvininkų koncentracija yra praktiškai lygi priemaišinių atomų koncentracijai. Vadinasi, sumažėjus pagrindinių krūvininkų tankiui, atsiranda nesukompensuotasis priešingo ženklo erdvinis krūvis, kurį sukuria priemaišų jonai. Taigi, nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja erdvinis elektrinis krūvis, kurio šaltiniai yra jonizuoti priemaišų atomai. n tipo puslaidininkyje tai yra teigiamieji donorų jonai. Kadangi nuskurdintame sluoksnyje šių atomų tankis yra žymiai didesnis už elektronų tankį, tai nepadarysime didelės klaidos, jeigu laikysime, kad nuskurdintame sluoksnyje *iš viso* nėra elektronų. Šis artėjimas vadinamas **nuskurdinimo artiniu**. Nors ši prielaida yra tik apytikslė ir ji negalioja nuskurdintojo sluoksnio viename krašte, tačiau ji leidžia pakankamai tiksliai teoriškai aprašyti pagrindines Šotkio kontakto savybes.

Laikant, kad nuskurdintame sluoksnyje egzistuoja tik jonizuotų priemaišų krūvis, erdvinio krūvio tankio ρ (C/cm^3) pasiskirstymas yra toks, kaip pavaizduota 3.2a pav. Čia taškas $x = 0$ atitinka kontakto plokštumą, o taškas $x = d$ atitinka nuskurdintojo sluoksnio kraštą (d yra nuskurdintojo sluoksnio storis). Taigi, tolygaus legiravimo atveju erdvinio krūvio pasiskirstymą n tipo puslaidininkio Šotkio kontakte galima užrašyti šitaip:

$$\rho(x) = \sigma\delta(x) + \begin{cases} 0 & x < 0; \\ eN_D, & 0 < x < d; \\ 0 & x > d. \end{cases} \quad (3.2.2)$$

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

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

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = \frac{\rho}{\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (3.2.3)$$

Paviršinio krūvio tankis metalo paviršiuje:

$$\sigma = eN_D d. \quad (3.2.4)$$

Tas paviršinis krūvis sukuria vienalytį elektrinį lauką

$$|\mathcal{E}_\sigma| = \frac{\sigma}{2\varepsilon_0\varepsilon} = \frac{eN_D d}{2\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (3.2.5)$$

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

$$|\mathcal{E}(0)| = \frac{eN_D d}{\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (3.2.6)$$

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

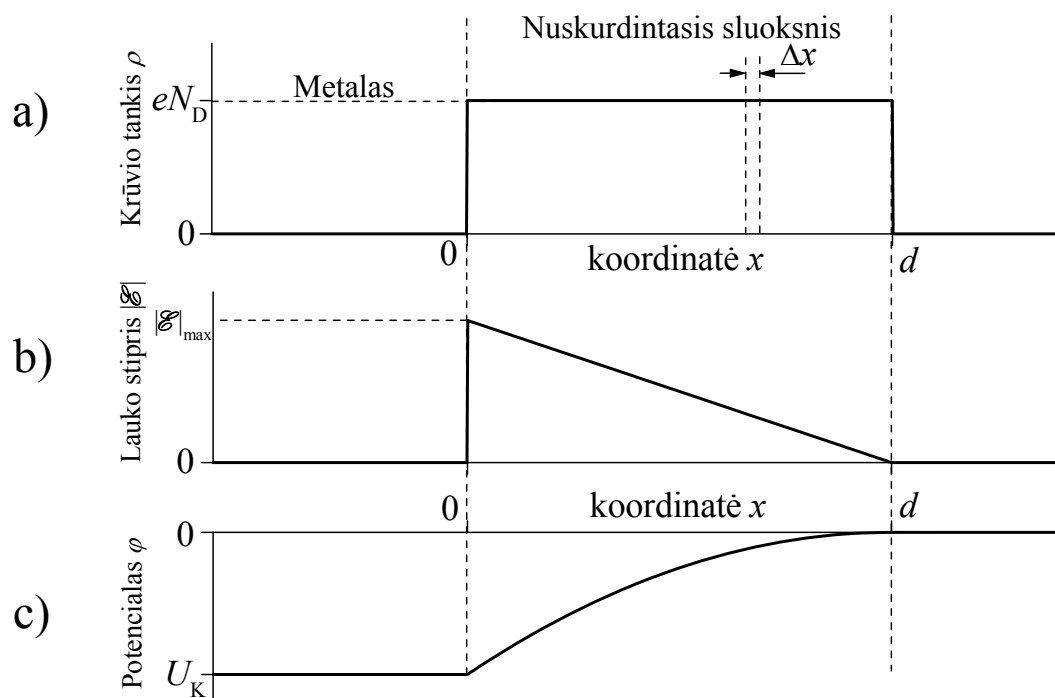
$$|\mathcal{E}(x)| = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ \frac{eN_D}{\varepsilon_0\varepsilon}(d-x), & 0 < x < d; \\ 0, & x > d. \end{cases} \quad (3.2.7)$$

Suintegravus dar kartą, gaunama potencialo priklausomybė nuo koordinatės:

$$\varphi(x) = -\int_d^x \mathcal{E}(x)dx = \int_x^d \mathcal{E}(x)dx = \begin{cases} -\frac{eN_D d^2}{2\varepsilon_0\varepsilon}, & x < 0; \\ -\frac{eN_D}{2\varepsilon_0\varepsilon}(d-x)^2, & 0 < x < d; \\ 0, & x > d. \end{cases} \quad (3.2.8)$$

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

$$U_K = -\frac{eN_D d^2}{2\varepsilon_0\varepsilon}. \quad (3.2.9a)$$



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

Išreiškę d , gauname

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon}{eN_D} |U_K|}. \quad (3.2.9b)$$

Taigi, nuskurdintojo sluoksnio storis d yra tiesiog proporcingas kvadratinei šakniai iš kontaktinio potencialų skirtumo ir atvirkščiai proporcingas kvadratinei šakniai iš priemaišinių jonų koncentracijos N_D . Reikia turėti omenyje, kad ši formulė galioja tik termodinaminėje pusiausvyroje. Esant išorinei įtampai U , prie kontaktinio potencialo U_K reikia pridėti U (žr. (3.3.2) formulę).

3.2b pav. akivaizdu, kad elektrinis laukas yra stipriausias kontakto plokštumoje ($x = 0$). Iš (3.2.9b) ir (3.2.7) išplaukia tokia didžiausiojo elektrinio lauko stiprio išraiška:

$$|\mathcal{E}|_{\max} = \sqrt{\frac{2eN_D}{\varepsilon_0\varepsilon} |U_K|}. \quad (3.2.10)$$

Pvz., kai $N_D = 10^{22} \text{ m}^{-3}$, $\varepsilon = 11,8$ (Si dielektrinė skvarba), o $U_K = 0.7 \text{ V}$, tada $E_{\max} \approx 5 \cdot 10^6 \text{ V/m}$.

3.3. Šotkio kontaktas esant išorinei įtampai

3.1b pav. matome, kad Šotkio kontakte egzistuoja potencinis barjeras, kurį turi įveikti elektronai, kurie juda iš puslaidininkinio į metalą arba iš metalo į puslaidininkį. Termodinaminėje pusiausvyroje šio potencinio barjero aukštis iš puslaidininkio pusės yra lygus $e|U_K|$, o iš metalo pusės barjero aukštis lygus $e|U_K| + (E_{c0} - F_{\text{pusl}})$; čia žymenys „ E_{c0} “ ir „ F_{pusl} “ turi tą pačią prasmę, kaip 3.1a pav. [Tikrovėje potencinio barjero aukštis yra šiek tiek mažesnis dėl puslaidininkio elektrono sąveikos su jo veidrodiniu atspindžiu metale, tačiau čia šis reiškinys nebus nagrinėjamas.] Potencinį barjerą įveikia tik tie elektronai, kurių energija didesnė už barjero „viršūnę“ (ji yra kontakto plokštumoje). Termodinaminėje pusiausvyroje tokių elektronų skaičius abiejose kontakto pusėse yra vienodas, todėl elektronų srautai iš puslaidininkio į metalą ir iš metalo į puslaidininkį yra vienodi ir pilnutinė elektronų srovė lygi nuliui (žr. 3.3a pav.).

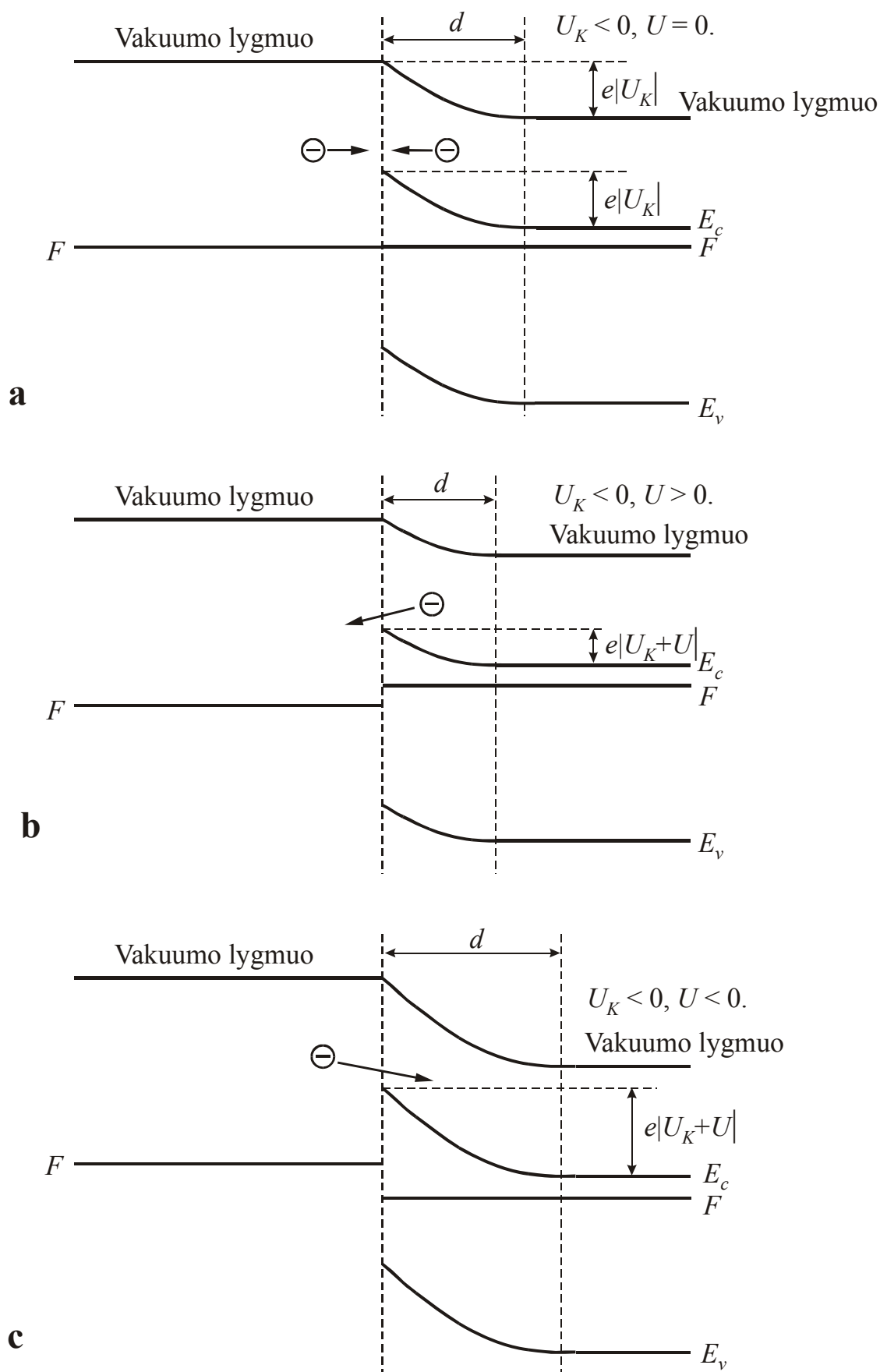
Dabar tarkime, kad prie kontakto prijungta išorinė įtampa. Priklausomai nuo įtampos poliarumo, skiriama **tiesioginė įtampa** (kai išorinės įtampos poliarumas yra priešingas kontaktinio potencialų skirtumo poliarumui) ir **atgalinė įtampa** (kai išorinės įtampos ir kontaktinio potencialų skirtumo poliarumai yra vienodi). Kadangi nuskurdintajame sluoksnyje elektronų koncentracija yra žymiai mažesnė, negu neutraliojoje puslaidininkio srityje ir metale, tai jo laidumas yra žymiai mažesnis už neutraliosios srities ir metalo laidumą (t. y. varža yra žymiai didesnė). Tai reiškia, kad didžioji išorinės įtampos dalis tenka nuskurdintajam sluoksniui ($0 < x < d$). Srityse $x < 0$ ir $x > d$ įtampos kritimas yra mažas. Todėl, prijungus įtampą, šiose srityse elektrinis laukas yra labai silpnas (praktiškai lygus nuliui) ir energijos juostos lieka plokščios. Išorinė įtampa pasireiškia tuo, kad pasikeičia potencinio barjero aukštis iš puslaidininkio pusės: tiesioginės įtampos atveju jis sumažėja (3.3b pav.), o atgalinės įtampos atveju jis padidėja (3.3c pav.). Barjero aukštis iš metalo pusės beveik nepriklauso nuo įtampos. Iš Fermio ir Dirako funkcijos (3.1.1) išplaukia, kad galinčių įveikti potencinį barjerą elektronų skaičius eksponentiškai priklauso nuo barjero aukščio. Tiksliau, padidėjus barjero aukščiui dydžiu ΔE , galinčių jį įveikti elektronų skaičius sumažėja $\exp(\Delta E/kT)$ karto. Vadinasi, išorinė įtampa keičia elektronų srautą iš puslaidininkio į metalą (tiesioginė įtampa tą srautą padidina, o atgalinė sumažina), tačiau beveik nekeičia elektronų srauto iš metalo į puslaidininkį. Todėl Šotkio kontaktu tekančios srovės priklausomybė nuo išorinės įtampos U yra tokio pavidalo:

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right]; \quad (3.3.1)$$

čia I_s yra vadinamoji **soties srovė**, kuri nusako pastovų elektronų srautą iš metalo į puslaidininkį, o eksponentinis dėmuo nusako priklausantį nuo išorinės įtampos elektronų srautą iš puslaidininkio į metalą. (3.3.1) ir kitose formulėse teigiama U vertė atitinka tiesioginę įtampą, o neigiama – atgalinę įtampą.

Kadangi pilnutinį potencialų skirtumą tarp metalo ir puslaidininkio ($U_K + U$) sąlygoja nuskurdintojo sluoksnio erdvinis krūvis, tai aišku, kad, kintant tam potencialų skirtumui, turi keistis ir nuskurdintojo sluoksnio krūvis. Kadangi erdvinio krūvio tankis nuskurdintame sluoksnyje yra pastovus (jis lygus eN_D), tai pilnutinis to sluoksnio krūvis gali pasikeisti, tik pakitus nuskurdintojo sluoksnio storiui d . Vadinasi, kintant išorinei įtampai U , keičiasi ir nuskurdintojo sluoksnio storis d . Šis sąryšis gaunamas iš (3.2.9b) lygybės, pakeitus kontaktinį potencialų skirtumą U_K pilnutiniu potencialų skirtumu. Atsižvelgus į anksčiau minėtą įtampos ženklų taisyklę, pilnutinio potencialų skirtumo modulis yra lygus $|U_K| - U$. Todėl

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon}{eN_D} (|U_K| - U)}. \quad (3.3.2)$$



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

Tiesioginė įtampa U gali tapti didesnė už $|U_K|$. Tada (3.3.2) formulės taikyti negalima. Tada ir visas anksčiau aprašytas teorinis modelis tampa netinkamas, nes nustoja galioti pagrindinė nuskurdinimo artinio prielaida (kad elektrinis laukas egzistuoja tik nuskurdintame sluoksnyje, kuriame praktiškai nėra laisvųjų krūvininkų).

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

$$j_s = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right); \quad (3.3.3)$$

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

$$A^* = \frac{4\pi m_t e k^2}{h^3} = \frac{m_t}{m_0} A = \frac{m_t}{m_0} \cdot 1,20173 \cdot 10^6 \text{ Am}^{-2} \text{ K}^{-2}; \quad (3.3.4)$$

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

Įrašius j_s išraišką (3.3.3) į Šotkio diodo VACh išraišką (3.3.1), gaunama tokia teorinė formulė:

$$j = AT^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right]. \quad (3.3.5)$$

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

3.4. Šotkio diodo kontaktinio potencialų skirtumo teorinė išraiška

Metalo ir puslaidininkio kontakto kontaktinis potencialų skirtumas – tai toks metalo ir puslaidininkio potencialų skirtumas, kai elektros srovė yra lygi nuliui, t. y. kai elektronų srautas iš puslaidininkio į metalą yra lygus priešingos krypties elektronų srautui. Elektronų srautą iš metalo į puslaidininkį išreiškia Ričardsono lygtis (3.3.3). Teoriškai išreikšime elektronų srautą iš puslaidininkio į metalą. Remsimės prielaida, kad elektronų laisvasis kelias puslaidininkyje yra daug mažesnis už nuskurdintojo sluoksnio storį. Tada teoriškai skaičiuojant galima atsižvelgti tik į puslaidininkio elektronus, esančius prie pat kontakto plokštumos. Jeigu metalo ir puslaidininkio kontaktas yra plokštumoje $x=0$, elektronų, kurie pereina iš puslaidininkio į metalą, srovės tankis yra lygus

$$j_{p \rightarrow m} = -en(0)\langle v_x \rangle; \quad (3.4.1)$$

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

$$f(v_x)dv_x = \left(\frac{m^*}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m^* v_x^2}{2kT}\right) dv_x; \quad (3.4.2)$$

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

$$\langle v_x \rangle \equiv \int_{-\infty}^0 v_x f(v_x) dv_x = -\sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} = -\frac{\bar{v}}{4}; \quad (3.4.3)$$

čia \bar{v} yra vidutinis elektrono šiluminio judėjimo greitis (greičio modulio vidurkis). Elektronų koncentraciją $n(0)$ galima apytiksliai apskaičiuoti naudojantis tuo, kad didžioji dauguma laisvųjų elektronų užima energines būsenas, kurios yra arti laidumo juostos apatinio krašto, ir tuo, kad energijos lygmens E užpilda (t. y. vidutinis duotosios energijos E elektronų skaičius) yra proporcinga $\exp(-E/kT)$. Šio proporcingumo koeficientas yra konstanta, kuri priklauso tik nuo puslaidininkio prigimties ir nepriklauso nuo koordinatės (jeigu puslaidininkis yra vienalytis). Todėl, kaip akivaizdu iš Šotkio diodo energijos lygmenų diagramos (žr. 3.3 pav.), elektronų koncentracija taške $x=0$ esant termodinaminei pusiausvyrai yra $\exp(e|U_K|/kT)$ kartų mažesnė negu puslaidininkio tūryje (t. y. toli nuo kontakto plokštumos, kai erdvinio krūvio tankis ir elektrinis laukas lygūs nuliui, o energijos lygmenys nepriklauso nuo koordinatės). Antra vertus, n puslaidininkyje beveik visi elektronai atsiranda dėl donoro atomų jonizavimo. Kadangi beveik visi donoro

atomai yra jonizuoti (netekę elektrono), tai elektronų koncentracija elektrinio neutralumo sąlygomis yra lygi donoro atomų koncentracijai N_d . Taigi,

$$n(0) = N_d \exp\left(-\frac{e|U_K|}{kT}\right). \quad (3.4.4)$$

Irašę vidutinio greičio išraišką (3.4.3) ir koncentracijos išraišką (3.4.4) į srovės tankio išraišką (3.4.1), gauname srovės, kurią sąlygoja elektronų pernaša iš puslaidininkio į metalą, tankį termodinaminėje pusiausvyroje:

$$j_{p \rightarrow m} = eN_d \exp\left(-\frac{e|U_K|}{kT}\right) \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}}. \quad (3.4.5)$$

Kadangi termodinaminės pusiausvyros sąlygomis ši srovė yra priešinga termoelektroninės injekcijos srovei (3.3.3), tai gauname lygtį kontaktinio potencialų skirtumo $|U_K|$ atžvilgiu. Iš jos išplaukia tokia $|U_K|$ išraiška:

$$|U_K| = \frac{\Phi_b}{e} + \frac{kT}{e} \ln\left(\frac{eN_d}{A^* T^2} \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}}\right). \quad (3.4.6)$$

3.5. Einšteino sąryšis

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

$$j_n = en\mu_n \mathcal{E} + eD_n \frac{\partial n}{\partial x}; \quad (3.5.1)$$

čia μ_n yra elektronų judris, \mathcal{E} yra elektrinio lauko stipris (kadangi energija taip pat žymima raide „E“, tai elektrinį lauką žymėsime kitokiu šriftu), D_n yra elektronų difuzijos koeficientas. Pirmasis dėmuo (3.5.1) reiškinyje nusako vadinamąją **dreifo srovę** (t. y. kryptingą elektronų judėjimą elektriniame lauke dėl jėgos, kuria tas laukas veikia elektronus), o antrasis dėmuo nusako **difuzijos srovę** (t. y. elektronų persiskirstymą erdvėje dėl betvarkio šiluminio judėjimo). Aišku, kad modeliuojant Šotkio diodą abu dėmenys yra vienodai svarbūs, nes, pvz., termodinaminėje pusiausvyroje, kai pilnutinis laidumo srovės tankis yra lygus nuliui, egzistuoja nuskurdintasis sluoksnis, kuriame yra stiprus elektrinis laukas, taigi ir dreifo srovė. Kad pilnutinė srovė būtų lygi nuliui, minėtąją dreifo srovę visuose erdvės taškuose turi kompensuoti difuzijos srovė.

Vadinasi, pusiausvirąjį erdvinį krūvininkų pasiskirstymą puslaidininkyje lemia jų difuzijos ir dreifo pusiausvyra. Antra vertus, jeigu yra žinomi krūvininkų būsenų energinis tankis juostose $N(E)$ bei juostų kraštų energijos kiekviename taške, tada krūvininkų koncentraciją kiekviename taške galima apskaičiuoti, padauginus energinį tankį $N(E)$ iš funkcijos $f(E)$, kuri yra lygi vidutiniam energijos E kvantinės būsenos elektronų skaičiui, ir suintegravus sandaugą $N(E)f(E)$ energijos E atžvilgiu (pvz., elektronų atveju reikėtų integruoti nuo laidumo juostos apatinio krašto E_c iki $+\infty$). Nagrinėjant puslaidininkinių prietaisų stacionariąją būseną, kai nėra termodinaminės pusiausvyros (pvz., esant pastoviai išorinei įtampai arba pastoviam apšvietimui), dažniausiai galima teigti, kad funkcija $f(E)$ yra tokio paties pavidalo, kaip termodinaminėje pusiausvyroje, t. y. Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija (3.1.1), tačiau Fermio lygmuo F bendroju atveju gali priklausyti nuo koordinatės. Be to, Fermio lygmuo gali būti skirtingas elektronams ir skylėms (tada tie du Fermio lygmenys yra vadinami atitinkamai elektronų ir skylių **Fermio kvazilygmenimis**). Dydis n , kuris įeina į elektronų srovės tankio išraišką (3.5.1), yra minėtasis reiškinyje $N(E)f(E)$ integralas elektronų energijos atžvilgiu (nuo $E_c(x)$ iki $+\infty$). Akivaizdu, kad srovės išraiška (3.5.1) gali būti teisinga tik tada, kai elektrono judris ir difuzijos koeficientas nepriklauso nuo energijos arba kai daugumos elektronų energijos priklauso palyginti siauram energijos intervalui, kuriame judris ir difuzijos koeficientas yra praktiškai pastovūs. Iš pastarųjų dviejų sąlygų dažniausiai yra tenkinama antroji sąlyga, nes, pagal Fermio ir Dirako funkciją, daugumos elektronų energijos priklauso energijos intervalui nuo E_c iki $E_c + 2kT$. Palyginus kT/e vertę su tipiškomis kontaktinio potencialų skirtumo vertėmis ($U_K = (-0.4 - -0.9)$ V), galima pastebėti, kad kT/e yra viena eile mažesnis. Todėl nebus didelės klaidos, jeigu tarsime, kad visų elektronų energija yra lygi E_c . Tada judris μ_n ir difuzijos koeficientas D_n , kurie yra (3.5.1) reiškinyje, atitinka laidumo juostos apatiniame krašte esančius elektronus.

Taigi, išsiaiškinome, kodėl, apskaičiuojant srovės tankį (3.5.1), galima tarti, kad judris μ ir difuzijos koeficientas D yra konstantos. Kitas klausimas yra tų dviejų konstantų tarpusavio sąryšis. Kad judris ir difuzijos koeficientas turėtų būti vienareikšmiškai susiję tarpusavyje, aišku iš tokių bendrų samprotavimų. Kaip minėta, dreifo ir difuzijos pusiausvyra lemia stacionarųjį krūvininkų pasiskirstymą erdvėje. Pvz., padidinus μ_n vertę ir nepakeitus D_n vertės, dreifo srovė, kuri priešinasi elektronų difuzijai iš puslaidininkio į

metalą Šotkio diode, kompensuos difuzinę srovę esant silpniam laukui. Tai reiškia, kad į metalą pereis mažiau elektronų, nuskurdintojo sluoksnio plotis ir $|U_K|$ bus mažesni, o elektronų koncentracija puslaidininkyje padidės. Tačiau $|U_K|$ turi būti lygus tiksliai apibrėžtai vertei (3.1.5), kuri išplaukia iš kvantinės statistinės mechanikos. Kitaip sakant, krūvininkų judiai ir difuzijos koeficientai turi būti tokie, kad, nusistovėjus stacionariai būsenai, krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės atitiktų (3.1.3) formules. Išvesime judrio ir difuzijos koeficiento sąryšį, kuris išplaukia iš šio reikalavimo. Kaip minėta, bendruoju atveju (3.1.3) formulėse Fermio lygmuo bei juostų kraštai priklauso nuo koordinatės. Tačiau, kad būtų paprasčiau, judrio ir difuzijos koeficiento sąryšį išvesime, remdamiesi prielaida, kad yra termodinaminė pusiausvyra. Tada Fermio energija yra konstanta (nuo koordinatės gali priklausyti tik energijos lygmenys). Termodinaminėje pusiausvyroje laidumo srovė (3.5.1) yra tapačiai lygi nuliui visuose sistemos taškuose:

$$en\mu_n\mathcal{E} + eD_n \frac{dn}{dx} \equiv 0. \quad (3.5.2)$$

Į šia lygtį įrašome bendrąją neišsigimusio puslaidininkio elektronų koncentracijos išraišką (3.1.3):

$$n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \quad (3.5.3)$$

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

$$E_c(x) = E_{c0} - e\varphi(x). \quad (3.5.4)$$

Tada

$$\frac{dn}{dx} = N_c \frac{d}{dx} \left[\exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \right] = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) \cdot \frac{e}{kT} \frac{d\varphi}{dx} = -n \frac{e\mathcal{E}}{kT}. \quad (3.5.5)$$

Įrašę (3.5.5) į (3.5.2), randame minėtąjį difuzijos koeficiento ir judrio sąryšį, kuris vadinamas **Eišteino sąryšiu**:

$$D_n = \frac{kT}{e} \mu_n. \quad (3.5.6)$$

Jeigu krūvininkų persiskirstymas erdvėje yra modeliuojamas remiantis laidumo srovės tankio išraiška (3.5.1) ir taikant Einšteino sąryšį (3.5.6), tada sumodeliuotas stacionarusis krūvininkų pasiskirstymas erdvėje yra toks, koks turėtų būti pagal Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkciją (pvz., elektronų koncentracija taške $x = 0$ atitinka (3.4.4) formulę), nors tiesiogiai Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija modeliavimo metu nėra naudojama.

3.6. Šotkio diodo atgalinės srovės išraiška

Pagal apytikslę teorinę formulę (3.5.5) Šotkio diodo atgalinė srovė turėtų sparčiai įsisotinti didėjant atgalinei įtampai (tiksliau, didėjant atgalinės įtampos moduliiui). Kai $|U| > 3 kT/e$, srovė turėtų praktiškai nepriklausyti nuo U ir būti lygi j_s . Tačiau iš tikrųjų taip nėra: atgalinė srovė įsisotina daug lėčiau. Taip yra todėl, kad pilnutinę atgalinę srovę sąlygoja ne vien elektronų injekcija iš metalo į puslaidininkį, bet ir elektronų injekcija iš puslaidininkio į metalą:

$$j = j_{m \rightarrow p} + j_{p \rightarrow m} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right) - en(0) \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} \quad (3.6.1)$$

(čia pasinaudota Ričardsono lygtimi (3.3.3) ir (3.4.1) bei (3.4.3) formulėmis). Kadangi nusistovėjus srovei ji yra vienoda visuose sistemos taškuose, tai ši vertė turi būti lygi laidumo srovei (3.5.1) prie metalo ir puslaidininkio skiriamąjo paviršiaus. Esant pakankamai didelei atgalinei įtampai, didžiausią laidumo srovės dalį sudaro dreifo srovė, t. y. (3.5.1) išraiškoje galima palikti tik pirmąjį dėmenį. Taigi, (3.6.1) reiškinys turi būti apytiksliai lygus (3.5.1) reiškinio pirmajam dėmeniui:

$$A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right) - en(0) \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} = en(0) \mu_n |\mathcal{E}(0)|. \quad (3.6.2)$$

Teorinė elektrinio lauko stiprio $\mathcal{E}(0)$ išraiška, atitinkanti atgalinę įtampą, yra gaunama iš (3.2.10) formulės, joje vietoj kontaktinio potencialų skirtumo U_K naudojant pilnutinį potencialų skirtumą, kurio modulis lygus $|U_K| - U$:

$$|\mathcal{E}(0)| = \sqrt{\frac{2eN_D}{\varepsilon_0 \varepsilon} (|U_K| - U)}. \quad (3.6.3)$$

Iš (3.6.2) išplaukia elektronų koncentracijos taške $x=0$ išraiška, kuri tinka esant didelėms atgalinėms įtampoms:

$$n(0) = \frac{A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right)}{e \mu_n |\mathcal{E}(0)| + e \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}}}. \quad (3.6.4)$$

Vadinasi, didėjant atgalinei įtampai, elektronų koncentracija prie Šotkio kontakto mažėja palyginti lėtai – atvirkščiai proporcingai kvadratinei šakniai iš įtampos. Todėl elektronų injekcija iš puslaidininkio į metalą pasireiškia ir esant 1 – 2 V atgalinei įtampai. Atitinkama atgalinės srovės išraiška gaunama, įrašius (3.6.4) reiškinį į (3.6.2) lygybės dešiniąją pusę:

$$J_{\text{atg}} = \frac{A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right)}{1 + \frac{1}{\mu_n |\mathcal{E}(0)| \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}}}}. \quad (3.6.5)$$

Matome, kad didėjant atgalinei įtampai U , atgalinė srovė didėja, artėdama prie soties srovės, kurią nusako Ričardsono lygtis (3.3.3).

3.7. Paviršinių gaudyklių įtaka Šotkio kontakto savybėms

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

3.8. Šotkio efektas

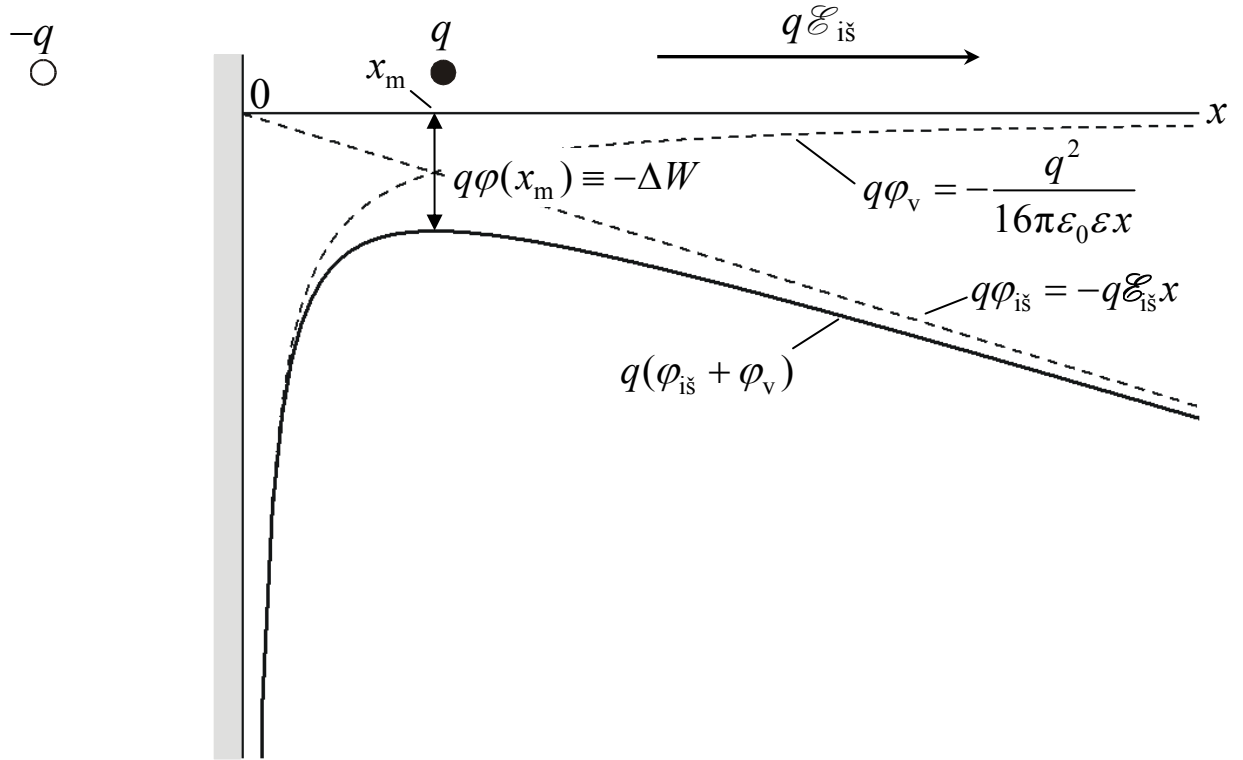
Anksčiau buvo remiamasi prielaida, kad potencialo barjero aukštis iš metalo pusės yra pastovus. Tačiau tikslesnė analizė rodo, kad esant atgalinei įtampai tas potencialo barjero aukštis priklauso nuo įtampos: didėjant atgalinei įtampai, potencialo barjero aukštis mažėja. Atitinkamai didėja atgalinė srovė. Šis krūvininkų injekcijos iš metalo į puslaidininkį arba dielektriką (atskiru atveju – termoelektroninės emisijos į vakuumą) potencialo barjero sumažėjimas, esant išoriniam elektriniam laukui, kuris „padeda“ krūvininkams išlėkti iš metalo, yra vadinamas **Šotkio efektu**. Dėl Šotkio efekto nėra atgalinės srovės įsisotinimo, kurį numato (3.3.1) formulė. Toliau yra išvesta minėtojo potencialo barjero sumažėjimo išraiška.

Jeigu taškinis krūvis q , kuris įterptas į puslaidininkio tūrį, yra arti elektrodo, tada to krūvio elektrinis laukas veiks elektrodo elektronus. Todėl ant metalo paviršiaus atsiras paviršinis priešingo ženklo krūvis. Elektrostatika įrodo, kad elektrinis laukas, kurį metalo išorėje sukuria šis paviršinis krūvis, yra toks pats kaip „veidrodinio“ krūvio, kuris yra priešingoje skiriamojo paviršiaus pusėje ir tokiu pačiu atstumu nuo jo kaip pradinis krūvis (žr. 3.4 pav.). Vadinasi, pagal Kulono dėsnį šio elektrinio lauko stipris yra

$$\mathcal{E}_v = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0\epsilon(2x)^2} = -\frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x^2}. \quad (3.8.1)$$

Čia x yra taškinio krūvio q koordinatė, atskaityta nuo metalo paviršiaus (žr. 3.4 pav.). Pilnutinis elektrinis laukas, kuris veikia krūvį q , yra išorinio lauko \mathcal{E}_{is} ir veidrodinio krūvio lauko \mathcal{E}_v algebrinių verčių suma (žodžiai „algebrinių verčių“ vartojami tam, kad pabrėžti, jog būtina atsižvelgti į abiejų laukų ženklus, t. y. į jų kryptį). Jeigu pradinis krūvis q atsiranda dėl injekcijos iš metalo į puslaidininkį, o išorinio elektrinio lauko kryptis yra tokia, kad jis „tempia“ tą krūvį gilyn į puslaidininkį (t. y. tolyn nuo elektrodo), tada minėtasis veidrodinio krūvio elektrinis laukas sąlygoja injekcijos potencialo barjero sumažėjimą (žr. 3.4 pav.). Šį sumažėjimą galima apskaičiuoti pasinaudojus tuo, kad krūvininko potencinė energija elektriniame lauke yra lygi jo krūvio q ir to lauko potencialo φ sandaugai. Potencialas φ šiuo atveju yra lygus išorinio lauko potencialo φ_{is} ir veidrodinio krūvio lauko potencialo φ_v sumai. Krūvininko potencinė energija išoriniame elektriniame lauke yra lygi

$$\Phi_{\text{is}} = q\varphi_{\text{is}} = -q\mathcal{E}_{\text{is}}x. \quad (3.8.2)$$



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

Tai yra mažėjanti funkcija, nes, pagal prielaidą, išorinis laukas verčia krūvininką judėti teigiamąja ašies x kryptimi (o jėga yra lygi potencinės energijos išvestinei su minuso ženklu). Šią potencinės energijos komponentę 3.4 pav. atitinka punktyrinė tiesė. Apskaičiuosime veidrodinio krūvio lauko potencialą. Taikysime potencialo apibrėžtį: tai yra elektrinio lauko stiprio integralas nuo duotojo taško iki taško, kuriame potencialas lygus nuliui. Veidrodinio krūvio potencialą prilyginsime nuliui taške $x = +\infty$. Vadinasi, to potencialo vertė taške x yra lygi

$$\varphi_v = \int_x^{\infty} \mathcal{E}_v dx = - \int_x^{\infty} \frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x^2} dx = - \frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x}. \quad (3.8.3)$$

Krūvininko potencinė energija veidrodinio krūvio elektriniame lauke yra lygi

$$\Phi_v = q\varphi_v = - \frac{q^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon x}. \quad (3.8.4)$$

Tai yra didėjanti funkcija. Šią potencinės energijos komponentę 3.4 pav. atitinka hiperbolės pavidalo punktyrinė linija. Pilnutinė krūvininko potencinė energija yra (3.8.2) ir (3.8.4) funkcijų suma (išstinė kreivė):

$$\Phi = \Phi_{is} + \Phi_v = -q\mathcal{E}_{is}x - \frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon x}. \quad (3.8.5)$$

Akivaizdu, kad ši potencinė energija turi maksimumą. To maksimumo padėtis x_m apskaičiuojama prilyginus nuliui (3.8.5) funkcijos išvestinę x atžvilgiu. Šitaip gauname:

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\epsilon_0\epsilon\mathcal{E}_{is}}}. \quad (3.8.6)$$

Irašę (3.8.6) į (3.8.5), gauname didžiausią krūvininko potencinę energiją:

$$\Phi_{\max} = \Phi(x_m) = - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{q^3\mathcal{E}_{is}}{\pi\epsilon_0\epsilon}} \equiv -\Delta W. \quad (3.8.7)$$

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

Į puslaidininkį iš metalo injektuojamų krūvininkų srovė yra proporcinga $\exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$, kur W yra potencinio barjero aukštis iš metalo pusės. Dėl Šotkio efekto šis barjeras sumažėja dydžiu ΔW , kurį išreiškia (3.8.7) lygybė. Vadinas, injekcijos srovė I atitinka lygybę

$$I = I_0 \exp\left(\frac{\Delta W}{kT}\right) = I_0 \exp\left(\frac{1}{2} \frac{\beta \sqrt{|\mathcal{E}_{is}|}}{kT}\right), \quad (3.8.8)$$

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

$$\beta \equiv \sqrt{\frac{|q|^3}{\pi \epsilon_0 \epsilon}}. \quad (3.8.9)$$

Apskaičiuosime ΔW vertę, naudodami tas pačias kintamųjų vertes, kaip ir ankstesniame pavyzdyje, kuriame buvo apskaičiuotas elektrinio lauko stipris Šotkio diode, arti elektrodo ($q = e$, $\epsilon = 11,8$). Minėtame ankstesniame pavyzdyje buvo gauta elektrinio lauko stiprio vertė $5 \cdot 10^6$ V/m. Naudojant šio skyriaus terminologiją, šis laukas yra „išorinis“, nes jis nesusijęs su veidrodiniu krūviu. Vadinas, šią elektrinio lauko stiprio vertę reikia įrašyti į (3.8.7) formulę vietoj \mathcal{E}_{is} . Taip gauname $\Delta W = 0,024$ eV. Taigi, šiuo atveju Šotkio efektas pasireiškia tuo, kad, esant kambario temperatūrai (kai $kT = 0,0254$ eV), elektronų injekcijos iš metalo į puslaidininkį srovė padidėja $\exp(0,024 / 0,0254) \approx 2,6$ karto. Tai yra atgalinė srovė. Vadinas, Šotkio efektas padidina atgalinę srovę. Be to, dėl Šotkio efekto atgalinė srovė neįsisotina didėjant atgalinei įtampai. Taip yra todėl, kad didėjant atgalinei įtampai stiprėja elektrinis laukas prie elektrodo paviršiaus, todėl mažėja potencialo barjero aukštis ir didėja elektronų injekcija iš metalo į puslaidininkį.

4. Skaitinio modeliavimo metodo teorija

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

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x}. \quad (4.1)$$

Ši lygtis kartu su srovės tankio išraiška (3.5.1) sudaro diferencialinių lygčių sistemą dalinėmis išvestinėmis. Elektrinio lauko stipris \mathcal{E} , kuris įeina į srovės tankio išraišką (3.5.1), priklauso nuo krūvio pasiskirstymo sluoksnyje ir nuo išorinės įtampos. Šis elektrinis laukas apskaičiuojamas išsprendus Puasono lygtį:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} = \frac{\rho(x,t)}{\epsilon_0 \epsilon}; \quad (4.2)$$

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

$$\rho(x,t) = e(N_d - n(x,t)); \quad (4.3)$$

čia N_d yra pastovi donorų koncentracija, o n yra elektronų koncentracija, kuri priklauso nuo koordinatės ir laiko. Vienas iš minėtų lygčių sistemos skaitinio sprendimo būdų yra toks. Modeliuojamas x verčių intervalas yra suskaidomas į mažesnius vienodo pločio intervalus (tų intervalų kraštus vadinsime „mazgais“). Elektrinio lauko vertės visuose mazguose išreiškiamos einamosiomis koncentracijų vertėmis (t. y. išsprendžiama Puasono lygtis) ir apskaičiuojamas dreifo srovės tankis (t. y. pirmasis dėmuo (3.5.1) reiškinyje) visuose mazguose. Elektronų koncentracijos išvestinė x atžvilgiu apskaičiuojama baigtinių skirtumų metodu:

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=x_i} \approx \frac{n_{i+1} - n_{i-1}}{2\Delta x}; \quad (4.4)$$

čia n_i yra koncentracijos vertė i -tajame mazge. Tos išvestinės naudojamos skaičiuojant difuzijos srovės vertes visuose mazguose. Paskui apskaičiuojama pilnutinė laidumo srovė visuose mazguose (t. y. sudedamos dreifo ir difuzijos srovės). Laidumo srovės išvestinė koordinatės atžvilgiu, kuri yra (4.1) lygybės dešiniojoje pusėje, skaičiuojama analogiškai (žr. (4.4)). Reikia turėti omenyje, kad (4.4) formulė tinka tik vidiniams mazgams. Paviršiniuose mazguose reikia taikyti „vienpusę“ išvestinę, t. y. (4.4) trupmenos skaitiklis turi būti lygus verčių, kurios atitinka paviršinį mazgą ir gretimą mazgą, skirtumui, o vardiklis turi būti lygus Δx . Tokiu būdu pagal (4.1) lygtį gaunama koncentracijos kitimo sparta kiekviename mazge. Paskui, remiantis ta sparta, pasirenkamas „laiko žingsnis“ Δt ir apskaičiuojamos elektronų koncentracijos visuose mazguose vėlesniu laiko momentu:

$$n(x_i, t_{l+1}) = n(x_i, t_l) + \left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{x_i, t_l} \Delta t ; \quad (4.5)$$

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

Šis algoritmas vadinamas „išreikštiniu“ algoritmu, nes elektronų koncentracija duotajame mazge vėlesniuojų laiko momentu išreiškiama tik per *to paties* mazgo parametrus (koncentraciją ir jos laikinę išvestinę) ankstesniuojų laiko momentu. Šis algoritmas turi vieną trūkumą: esant dideliems Δt , jis tampa nestabilus. Algoritmo stabilumas yra susijęs su apvalinimo paklaidomis. Mat kompiuterio atmintyje skaičiai saugomi ne begaliniu tikslumu. Pvz., pridėjus prie skaičiaus 1 skaičių 10^{-17} , daugelis kompiuterių gaus skaičių 1 (o ne $1 + 10^{-17}$). **Apvalinimo paklaida** – tai mažiausias skaičius, kurį pridėjus prie vieneto, gaunamas skaičius, kuris skiriasi nuo vieneto. Kadangi elektronų erdvinis pasiskirstymas laiko momentu t_{l+1} išreiškiamas elektronų pasiskirstymu laiko momentu t_l (žr. (4.5)), tai apvalinimo paklaidos duotuoju laiko momentu įtakoja sprendinį visais vėlesniais laiko momentais. Algoritmo **nestabilumas** pasireiškia tuo, kad šios apvalinimo paklaidos kaupiasi skaičiavimų eigoje ir galų gale viršija tikrąjį lygties sprendinį. Algoritmo **stabilumas** pasireiškia tuo, kad apvalinimo paklaidų duotuoju laiko momentu įtaka vėlesniems laiko momentams silpsta, einant į ateitį. Kitaip sakant, stabilus algoritmas turi savybę „užmiršti“ apvalinimo paklaidas, kurios egzistavo prieš tam tikrą laiko žingsnių skaičių. Išreikštinio algoritmo stabilumui reikia, kad Δt būtų pakankamai mažas, o Δx – pakankamai didelis. Tačiau praktikoje Δx negali būti padidintas virš tam tikros vertės. Taip yra dėl dviejų priežasčių. Visų pirma, didinant Δx , mažėja mazgų skaičius, t. y. rastasis sprendinys suteikia mažiau informacijos. Antra, didinant Δx , didėja kitos rūšies paklaidos – **dėmenų atmetimo paklaidos**, kurios susijusios su tuo, kad išvestinių išraiška baigtiniais skirtumais (4.4) yra apytikslė. Toks šių paklaidų pavadinimas kilo iš to, kad (4.4) formulė yra gauta iš funkcijos $n(x, t)$ išraiškos Teiloro eilutė x atžvilgiu, kurioje yra atmesti antrojo laipsnio ir aukštesnių laipsnių dėmenys. Didinant Δx , dėmenų atmetimo paklaida didėja, t. y. apytikslė lygybė (4.4) tampa vis mažiau tiksli, o tai savo ruožtu iškraipo sprendinį.

5. Darbo eiga

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 atsidiariusiame dialogo lange – mygtukas „Gera!“) ir įvedami elektronų parametrai. Krūvininkų pavadinimas „Elektronai“, krūvis $-1 \cdot e$, efektinė masė lygi $0.32m_0$ (čia m_0 yra elektrono rimties masė vakuume). Tai yra silicio X slėnio elektronų efektinė masė būsenų tankiui. Elektronų judris yra $1200 \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ (ši vertė atitinka silicio elektronų judrį, kai temperatūra yra 300 K, o priemaišinių jonų koncentracija yra 10^{16} cm^{-3}). Difuzijos koeficientas skaičiuojamas pagal Einšteino sąryšį. Būsenų tankis nenaudojamas, todėl jo galima nekeisti. Šios kortelės galutinis pavidalas turėtų būti toks, kaip parodyta 5.1 pav.

5.1 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Laisvųjų krūvininkų parametrai“

(b) Kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“ reikia nurodyti, kad sluoksnyje yra tolygiai pasiskirstę jonai, kurių koncentracija, priklausomai nuo darbo varianto, yra: 10^{16} cm^{-3} (I ir VI var.), $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (II ir VII var.), $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (III ir VIII var.), $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (IV ir IX var.), 10^{17} cm^{-3} (V ir X var.). Tie jonai – tai jonizuoti donorų atomai (todėl šias gaudykles galima pavadinti „Donorai“). Jonų koncentraciją reikia surinkti įvesties lauke „Gaudyklių koncentracija“. Nors jonai vadinami „gaudyklėmis“, tačiau šiame darbe jų paskirtis yra tik elektronų krūvio neutralizavimas. T. y. nėra jokių pagavimo į tas gaudykles arba išlaisvinimo iš jų vyksmų. Kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“ turi atrodyti taip, kaip parodyta 5.2 pav.

(c) Kortelėje „Sluoksnių storis ir kiti parametrai“ įvedami sluoksnių storis ($1 \mu\text{m}$) ir dielektrinė skvarba ($\epsilon = 11.8$). Tai yra silicio dielektrinė skvarba.

5.2 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“

(d) Kortelėje „Skaiciavimo algoritmo parametrai“ užduodami parametrai, kurie matomi 5.3 pav. Priklausomai nuo donorų koncentracijos, reikia pakeisti parametą „dxR“ (didžiausio ir mažiausio koordinatės intervalų santykis). To parametro vertė, kuri matoma 5.3 pav., atitinka I ir VI variantus ($N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Didėjant N_d vertei, nuskurdintasis sluoksnis siaurėja, o elektronų koncentracijos gradientas prie sluoksnio kairiojo krašto didėja. Todėl parametras „dxR“, kuris lemia mazgų tankį prie kairiojo krašto, turėtų būti tiesiog proporcingas N_d , t. y. $\text{dxR} = N_d / (10^{15} \text{ cm}^{-3})$.

(e) Kortelėje „Išoriniai parametrai“ užduodami parametrai, kurie matomi 5.4 pav. Kadangi kortelėje „Skaiciavimo algoritmo parametrai“ buvo pasirinktas stacionarių būsenų sekos skaičiavimas, tai laiko funkcija, kuri pasirenkama kortelės „Išoriniai parametrai“ apačioje, naudojama tik skaičiuojant pastovių išorinių poveikių (šiuo atveju – išorinės įtampos) vertes. Todėl tą laiko funkciją patogiausia apibrėžti taip, kad vienas sekundė atitiktų 1 V. Tada laiko vertės, kurios bus atidėtos laiko grafikų abscisų ašyje, bus lygios išorinės įtampos vertėms. Išorinės įtampos laikinė priklausomybė yra tiesinis didėjimas nuo vertės -2 V iki vertės 0 V . Šis didėjimas prasideda laiko momentu $t_0 = -2 \text{ s}$ ir baigiasi laiko momentu $t_1 = 0 \text{ s}$, o didėjimo sparta yra 1 V/s . **Pastaba:** Laiko keitimo intervalas („laiko žingsnis“) užduotas kitoje kortelėje – „Skaiciavimo algoritmo parametrai“. Tas intervalas yra $0,05 \text{ s}$ (žr. 5.3 pav.). Kadangi įtampos kitimo sparta yra 1 V/s , tai modeliavimo metu programa keis įtampą kas $0,05 \text{ V}$.

(f) Kortelėje „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ įvedami parametrai, kurie nusako laidumo srovės skaičiavimo taisyklę ant skiriamųjų paviršių. Šiuo atveju kairiajame skiriamajame paviršiuje (jis yra taške $x = 0$ ir skiria kairįjį elektrodą ir tiriamąjį sluoksnį) turi būti potencialo barjeras elektronams, kurie juda iš elektrodo į sluoksnį. Potencialo barjero aukštis turi būti 0.7 eV . Termoelektroninės injekcijos srovė turi būti skaičiuojama pagal Ričardsono lygtį su papildomu daugikliu. Į Šotkio efektą nereikia atsižvelgti. Elektronams, kurie juda iš sluoksnio į kairįjį elektrodą, potencialo barjero aukštis turi būti lygus 0. Taigi, ši kortelė turi atrodyti taip, kaip parodyta 5.5 pav. Modeliuojant termoelektroninę injekciją, reikia remtis prielaida, kad elektronų efektinė masė yra izotropinė, t. y. daugiklis m_t / m_0 , kuris įeina į efektinės Ričardsono konstantos išraišką (3.3.4), yra lygus m^* / m_0 , kur m^* yra būsenų tankio efektinė masė. Jos vertė, kuri buvo įvesta kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“, yra lygi $0.32 m_0$ (žr. 5.1 pav.). Todėl kortelėje „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kuri parodyta 5.5 pav., reikia spustelėti mygtuką „Modelio param.“ ir atsidariusiame dialogo lange įvesti skaičių 0.32 .

Dešinysis elektrodas turi elgtis kaip ominis kontaktas. Todėl kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kuri atitinka ribą tarp sluoksnio ir dešiniojo elektrodo, turi atrodyti taip, kaip parodyta 5.6 pav.

Modelio parametrai

Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinį gaudyklę parametrai	Paviršinių gaudyklę parametrai
Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaiciavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai ir kraštinės sąlygos	Fotogeneracijos parametrai	
Didžiausias santykinis koncentracijų pokytis per vieną modeliavimo laiko žingsnį (maxChange) <input type="text" value="0.001"/>		Didžiausias modeliavimo laiko žingsnis (dtMax) <input type="text" value="0"/> s		
Grafiko ir modeliavimo laiko žingsnių santykio min. ir maks. vertės: minR= <input type="text" value="1000"/> maxR= <input type="text" value="3000"/>		Didžiausias grafiko laiko žingsnis (dtMax_graph) <input type="text" value="0"/> s		
Mažiausias modeliavimo proceso trukmės ir grafiko laiko žingsnio santykis (minR_graph) <input type="text" value="1"/>				
Kiekviename mazge didžiausią santykinį konc. pokytį apibrėžti atžvilgiu krūvininkų arba gaudyklę, kurių krūvio tankis tame mazge: <input type="radio"/> yra didžiausias <input checked="" type="radio"/> greičiausiai kinta laike				
Daugkalis f skaičiuojant slenkstinę koncentraciją (jeigu $n < f * n_{Max}$, tada n laikoma lygia 0) (f) <input type="text" value="1e-025"/>				
Krūvininkų koncentracijas glodinti kas <input type="text" value="10"/> laiko žingsnių (jeigu = 0, neglodinama).		Koncentracijų glodinimo metodas: <input checked="" type="radio"/> pagal tris taškus <input type="radio"/> pagal penkis taškus		
<input checked="" type="checkbox"/> Glodinti koncentracijų laikinių išvestinių priklausomybes nuo laiko				
<input checked="" type="checkbox"/> Sustabdyti modeliavimą pasiekus stac. būseną. Būsenos stacionarumo kriterijus: mažiausioji adaptyvaus eksponentinio glodinimo parametro vertė (alphaMin) <input type="text" value="0.2"/>				
<input checked="" type="checkbox"/> Apskaičiuoti stacionarių sistemos būsenų seką, atitinkančią kelias pastovias išorinių poveikių (išorinės įtampos ir apšvietimo) vertes				
Intervalas tarp laiko verčių, kurios naudojamos skaičiuojant išorinių poveikių vertes pagal atitinkamas laikines priklausomybes (interval) <input type="text" value="0.05"/> s				
Didžiausia modeliavimo stacionarios būsenos nusistovėjimo proceso trukmė (maxTime) <input type="text" value="1e-009"/> s				
Koordinatės intervalų tarp gretimų mazgų apskaičiavimo nuostatos:				
Pasirinktas sluoksnis: <input type="text" value="1"/>		Pradinis mazgų skaičius sluoksnyje (nX) <input type="text" value="201"/>		
Didžiausio ir mažiausio intervalų santykis (dxR) <input type="text" value="10"/>				
Kairiajame sluoksnio krašte intervalas yra: <input type="radio"/> didžiausias <input checked="" type="radio"/> mažiausias				
Dešiniajame sluoksnio krašte intervalas yra: <input checked="" type="radio"/> didžiausias <input type="radio"/> mažiausias				
Daugelio gių veikos nuostatos:				
<input checked="" type="radio"/> Optimizuoti modeliavimo gių skaičių				
<input type="radio"/> Naudoti pastovų modeliavimo gių skaičių				
Modeliavimo gių skaičius (nThreads) <input type="text"/>				

Geri Atšaukti Taikyti

5.3 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Skaiciavimo algoritmo parametrai“

Modelio parametrai

Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinį gaudyklę parametrai	Paviršinių gaudyklę parametrai
Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaiciavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai ir kraštinės sąlygos	Fotogeneracijos parametrai	
Temperatūra (T) <input type="text" value="300"/> K	Kairiojo elektrodo pradinis potencialas (U0) <input type="text" value="-2"/> V			
<input checked="" type="radio"/> Du elektrodai <input type="radio"/> Vienas elektrodas kairiajame krašte <input type="radio"/> Vienas elektrodas dešiniajame krašte	Dešiniojo elektrodo pradinis potencialas (U1) <input type="text" value="0"/> V			
	Keičiamas šio elektrodo potencialas: <input checked="" type="radio"/> kairiojo <input type="radio"/> dešiniojo			
	Išorinio įtampos šaltinio pradinis potencialas (U2) <input checked="" type="radio"/> U2 = U0 <input type="radio"/> U2 = <input type="text"/>			
<input checked="" type="radio"/> Sistemos kairiojo krašto koordinatė (x0) <input type="text" value="0"/> um	Elektrodo plotas (S) <input type="text" value="1"/> cm ²			
<input type="radio"/> Sistemos dešiniojo krašto koordinatė (x1) <input type="text" value="0.2"/> um	Išorinės grandinės varža (R) <input type="text" value="0"/> Ohm			
	Išorinės grandinės talpa (C) <input type="text" value="0"/> F			
	Išorinio įtampos šaltinio potencialo laikinė priklausomybė: <input type="text" value="Tiesinis kitimas"/>			
	Tiesinio kitimo pradžios laikas (tU1) <input type="text" value="-2"/> s			
	Potencialo kitimo sparta (dU/dt) <input type="text" value="1"/> V/s			
	Tiesinio kitimo pabaigos laikas (tU2) <input type="text" value="0"/> s			

Geri Atšaukti Taikyti

5.4 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Išoriniai parametrai“

Modelio parametrai

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

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

Pasirinktas sluoksnis: **Kairysis elektrodas** | 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.
☐ Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams
☒ Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį

Potencialo barjero aukštis (A1) eV ☐ Atsižvelgti į Šotkio efektą

Viršbarjerinės injekcijos srovės tankis (jvA1):

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

Potencialo barjero aukštis (Ea1) eV

Injekcijos srauto tankio ir koncentracijos santykis (jva/h1):

5.5 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kuri atitinka kairiąją sistemos kraštą

Modelio parametrai

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

Sluoksnio storis ir kiti parametrai | Laisvųjų krūvininkų parametrai | Skiriamųjų paviršių pralaidumas | Tūrinį 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.
☐ 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

☐ Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams
☐ Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu
☐ Prie paviršiaus yra pastovi krūvininkų konc.
☐ 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^2

5.6 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, kuri atitinka dešiniąją sistemos kraštą

(g) Kortelėje „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“ užduodami pradinė elektronų koncentracija (ji turi būti lygi donorų koncentracijai) ir donorų jonų krūvis (+1). Kadangi pagal sąlygą visi donorų atomai yra jonizuoti, tai paprasčiausias būdas nurodyti donorų krūvinę būseną yra pažymėti laukelį „Visų gaudyklių pradinis krūvis yra vienodas“ ir gretimame įvesties lauke surinkti skaičių „1“. Galutinis šios kortelės pavidalas turėtų būti toks, kaip parodyta 5.7 pav.

5.7 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“

Patartina pašalinti „paukščiuką“ nuo žymimųjų laukelių „Įterpti prieš funkcijos pavadinimą“ ir „Įterpti po funkcijos pavadinimo“, kurie yra kai kurių kortelių kairiojoje pusėje (pvz., žr. 5.1 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 skirtingi tuos krūvininkus atitinkančių funkcijų pavadinimai. Tačiau šiame darbe modeliuojamą sistemą sudaro tik vienas sluoksnis, todėl to nereikia.

Reikia turėti omenyje, kad elektrodų potencialai, kurie nurodyti kortelėje „Išoriniai parametrai“ (žr. 5.4 pav.), yra tik elektrostatiniai potencialai. Į tiesiogiai matuojamą įtampą U (kuri vartojama, pvz., Šotkio diodo voltamperinės charakteristikos išraiškoje (3.3.5)), bendruoju atveju įeina ir neelektrostatinė elektrovaros jėga (evj), kurios minėti potencialai neatspindi. Taigi, potencialų skirtumas $U_0 - U_1$ bendruoju atveju nėra lygus tiesiogiai matuojamai įtampai tarp elektrodų. Taip yra ir šiame darbe, nes Šotkio diodo atveju egzistuoja neelektrostatinė elektrovaros jėga, kuri priverčia dalį elektronų išeiti iš sluoksnio, kai susiformuoja elektrinis kontaktas tarp sluoksnio ir kairiojo elektrodo. Ši neelektrostatinė evj modeliuojama naudojant viršbarjerinės injekcijos modelį (žr. 5.5 pav.). Termodinaminėje pusiausvyroje šią neelektrostatinę evj tiksliai kompensuoja kontaktinis potencialų skirtumas. Kadangi termodinaminėje pusiausvyroje srovė lygi nuliui, tai šiame darbe kontaktinis potencialų skirtumas U_K skaičiuojamas šitaip: randama tokia kairiojo elektrodo potencialo vertė U_0 , kai srovė lygi nuliui. Taip nustačius U_K vertę, galima apskaičiuoti ir tiesiogiai matuojamą įtampą U :

$$U = U_0 - U_1 - U_K. \quad (5.1)$$

Nors šiame darbe $U_0 - U_1 < 0$, tačiau U gali būti ir teigiama, ir neigiama, nes $U_K < 0$ (t. y. metalo potencialas termodinaminėje pusiausvyroje yra mažesnis už puslaidininkio potencialą).

- Įvedus visus sistemos parametrus, parametrų redaktoriaus lange reikia spustelėti mygtuką „Gerai“ arba „Taikyti“. Paskui reikia įvykdyti programos GraphiXT meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“. Atsidariusiame dialogo lange reikia įvesti pradinį ir galutinį laikus, kurie priklausomai nuo varianto, lygūs **-1 s ir -0.2 s (I – V variantai)** arba **-1,7 s ir -0,7 s (VI – X variantai)** (žr. 5.8 pav.). Pradinis laikas turi būti įvestas trijuose laukuose: „Pradinis modeliavimo laikas“, „Mažiausias vaizduojamas laikas“ ir „Skaičiuojamo $f(t)$ kreivių taško laikas“. Be to, kad visų funkcijų vertės būtų saugomos atmintyje didžiausiu tikslumu (15 reikšminių skaitmenų), reikia pažymėti žymimąjį laukelį „Visos funkcijos“ šio dialogo apačioje (žr. 5.8 pav.). Paskui reikia spustelėti mygtuką „Gerai“.

Ribiniai laikai ir duomenų kiekis

Pradinis modeliavimo laikas: -1

Mažiausias vaizduojamas laikas: -1

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

Skaičiuojamo $f(t)$ kreivių taško laikas: -1

Galutinis laikas: -0.2

Atmintyje esančių laiko verčių skaičius: 0 Ištrinti modelio duomenis

Modelio ir laisvųjų kreivių duomenų kiekis: 0 kB

Naudojamas operatyviosios atminties kiekis: 9972 kB

Laisvos operatyviosios atminties kiekis: 2097151 kB

☐ Neištrinti modelio duomenų, kurie atitinka pirmąją laiko vertę

Skaičiavimo trukmė: 0 : 00 : 00.000 = 0:00:00

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

☒ Pirminės funkcijos ☒ Visos funkcijos

Užduoti kiekvienai $f(x,t)$ funkcijai skiriamą atminties kiekį...

Pradėti skaičiuoti Gerai Atšaukti Taikyti

5.8 pav. Programos GraphiXT dialogo langas, kuriame nurodomi pradinis ir galutinis modeliavimo laikai (šios laikų vertės atitinka I – V variantus)

5. 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...“, sukuriama šie grafikai:
- laiko grafikas „Elektros srovė“ (kreivė „Pilnutinės elektros srovės tankis (A/cm^2)“),
 - koordinatės grafikas „Elektronų koncentracija ir erdvinis krūvis“ (kreivės „Erdv. kr. tankis (e/cm^3)“ ir „Elektronai: konc. ($1/\text{cm}^3$)“),
 - koordinatės grafikas „Elektrinis laukas“ (kreivė „El. laukas (V/cm)“),
 - laiko grafikas „Sluoksnių krūvis“ (kreivė „Sluoksnių elektros krūvis (e/cm^2)“).

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:

- 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 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. 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 modeliavimą, įvykdoma programos GraphiXT meniu juostos komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa apskaičiuoja visą voltamperinę charakteristiką (laiko vertę, kuri atidėta laiko grafikuose ant absčių ašies, yra lygi išorinės įtampos vertei, išreikštai voltais).

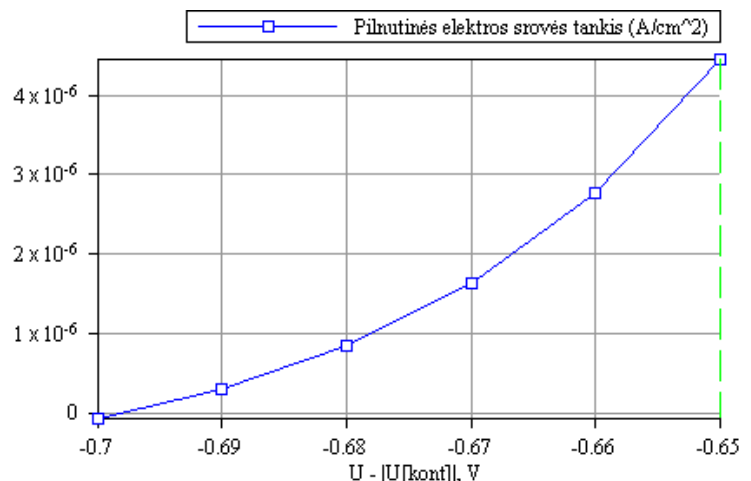
Tolesnė darbo dalis yra skirtinga I – V variantams ir VI – X variantams.

I – V variantai:

Naudojantis gautomis srovės ir įtampos vertėmis, reikia apytiksliai nustatyti kontaktinį potencialų skirtumą, t. y. U_0 vertę, kuriai esant srovė yra lygi nuliui. Paskui jį reikia patikslinti. Toliau yra paaiškinta, kaip atlikti šią darbo dalį.

7. Kad nebūtų prarasti turimi duomenys, reikia išsaugoti projektą (.gxt failą), o paskui jo pagrindu sukurti kitą projekto failą (tam galima panaudoti meniu juostos komandą „Failas / Įrašyti kaip...“).
8. Randamos dvi gretimos U_0 vertės, kurios atitinka priešingus srovės ženklus. Mažesniąją iš tų verčių reikia įvesti dialogo lango „Ribiniai laikai ir duomenų kiekis“ laukuose „Mažiausias vaizduojamas laikas“ ir „Skaičiuojamo $f(t)$ kreivių taško laikas“, o didesniąją – lauke „Galutinis laikas“. Tada reikia spustelėti šio dialogo lango mygtuką „Gera“, o paskui pasirodžius dviem perspėjimams – mygtuką „Taip“.
9. Parametrų redaktoriaus kortelėje „Skaičiavimo algoritmo parametrai“ parametro „interval“ vertė sumažinama 5 kartus (turi būti 0,01). Tada reikia spustelėti parametrų redaktoriaus lango mygtuką „Gera“ arba „Taikyti“.
10. Kad pradėti modeliavimą, įvykdoma programos GraphiXT meniu juostos komanda „Pradėti skaičiuoti“. Laukiama, kol programa apskaičiuoja voltamperinės charakteristikos dalį, kuri yra tarp dviejų minėtųjų U_0 verčių.
11. Antrasis projektas (atitinkantis siauresnį įtampų intervalą) taip pat yra išsaugomas.
12. Naujojoje voltamperinėje charakteristikoje taip pat yra randamos dvi gretimos U_0 vertės, kurios atitinka priešingus srovės ženklus. Tų dviejų U_0 verčių vidurkis yra galutinė kontaktinio potencialo vertė (jos paklaida yra $\pm 0,005$ V). Pvz., 5.9 pav. atitinka kontaktinį potencialų skirtumą $(0,695 \pm 0,005)$ V.

Pastaba: Tolesnis kontaktinio potencialo vertės tikslinimas yra beprasmis, nes skaitinio modeliavimo sisteminė paklaida gali būti didesnė už 0,005 V.



5.9 pav. Šotkio diodo voltamperinės charakteristikos dalies, kuri atitinka artimas nuliui srovės vertes, pavyzdys

VI – X variantai:

Reikia pakartoti modeliavimą, kai yra atsižvelgiama į Šotkio efektą. Prieš tai reikia išsaugoti projektą (.gxt failą) ir jo pagrindu sukurti kitą projekto failą (tam galima panaudoti meniu juostos komandą „Failas / Įrašyti kaip...“). Paskui reikia atidaryti parametų redaktoriaus kortelę „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“, pažymėti laukelį „Atsižvelgti į Šotkio efektą“ (5.5 pav.) ir spustelėti mygtuką „Gera“ arba „Taikyti“. Tada reikia ištrinti duomenis (GraphiXT meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Ištrinti modelio duomenis“) ir spustelėti mygtuką „Pradėti skaičiuoti“. Programa iš naujo apskaičiuos voltamperinę charakteristiką.

6. Darbo duomenų analizė

I – V variantai:

Pagrindinius skaitinio modeliavimo rezultatus reikia pavaizduoti grafiškai. Turi būti atspausdinti šie grafikai:

- Šotkio diodo voltamperinė charakteristika;
- voltamperinės charakteristikos dalis, kuri atitinka artimą nuliui srovės vertę;
- grafikas su trim kreivėm, kurios nusako elektronų koncentracijos priklausomybes nuo koordinatės esant trims išorinės įtampos vertėms (tas vertes reikėtų pasirinkti taip, kad aiškiai matytųsi nuskurdintojo sluoksnio storio priklausomybė nuo išorinės įtampos);
- grafikas su trim kreivėm, kurios nusako elektrinio lauko stiprio priklausomybes nuo koordinatės esant trims išorinės įtampos vertėms (tos vertės turi būti tos pačios, kaip ir koncentracijų priklausomybėse).

Skaitinio modeliavimo rezultatus reikia palyginti su teorinio skaičiavimo duomenimis. Lyginamieji dydžiai yra:

- kontaktinis potencialų skirtumas (teorinė formulė (3.4.6));
- voltamperinės charakteristikos forma, esant tiesioginei ir mažai atgalinei įtampai (teorinė formulė (3.3.5));
- nuskurdintojo sluoksnio storis, esant įvairioms išorinės įtampos vertėms (teorinė formulė (3.3.2));
- elektrinio lauko stiprio priklausomybės nuo koordinatės bendrasis pavidalas.

Kadangi visas sluoksnio krūvis yra sutelktas nuskurdintajame sluoksnyje, o donorų jonų koncentracija yra pastovi, tai nuskurdintojo sluoksnio storį paprasčiausia apskaičiuoti padalijus sluoksnio krūvį, išreikštą elementariojo krūvio vienetais, iš donorų jonų koncentracijos N_D . Sluoksnio krūvis yra GraphiXT projektų failuose (kreivė „Sluoksnio elektros krūvis ($1/\text{cm}^2$)“).

Lyginant teorinę ir skaitiniais metodais apskaičiuotą voltamperines charakteristikas, reikia patikrinti, ar srovės natūraliojo logaritmo priklausomybė nuo įtampos, kai $U > 5 kT / e$, yra tiesinė ir ar tos tiesės polinkis (krypties koeficientas) yra lygus e / kT (taip turėtų būti pagal teorinę formulę (3.3.5)). Tam reikia tiesiškai aproksimuoti kelių paskutiniųjų voltamperinės charakteristikos taškų natūraliuosius logaritmus. Aproksimuoti galima naudojant programą GraphiXT (meniu komanda „Duomenų analizė / Elementarioji analizė“, analizės tipas „Tiesinis aproksimavimas“) arba kitas programas, pvz., Origin. Kad perkelti duomenis iš GraphiXT į kitą programą, reikia visų pirma juos įrašyti į teksto failą. Tam galima panaudoti meniu juostos komandą „Failas / Įrašyti modelio duomenis į teksto failus...“ arba kreivės kontekstinio meniu komandą „Įrašyti kreivės duomenis į failą...“.

Jeigu skaitinio modeliavimo ir teorinio skaičiavimo rezultatai akivaizdžiai skiriasi, tada reikėtų trumpai aptarti tuos skirtumus ir pabandyti juos paaiškinti.

Reikėtų vengti formalių (trivialių) išvadų. Pvz., skaitinio modeliavimo metu termoelektroninės injekcijos iš metalo į puslaidininkį srovė skaičiuojama pagal Ričardsono lygtį (3.3.3). Todėl teiginys „skaitinio modeliavimo būdu gautoji srovė atitinka Ričardsono lygtį“ nieko nesako. Netrivialus rezultatas yra tas, kad ši lygybė rodo, jog esant pakankamai didelei atgalinei įtampai, praktiškai nepasireiškia elektronų injekcija iš puslaidininkio į metalą (todėl pilnutinė srovė tampa lygi elektronų injekcijos iš metalo į puslaidininkį srovei, kurią nusako Ričardsono lygtis), ir šį reiškinį galima sėkmingai sumodeliuoti taikant dreifo ir difuzijos artinį bei baigtinių skirtumų metodą.

VI – X variantai:

Pagrindinius skaitinio modeliavimo rezultatus reikia pavaizduoti grafiškai. Turi būti atspausdinti šie grafikai:

- grafikas su dviem Šotkio diodo voltamperinėmis charakteristikomis esant atgalinėms įtampoms – įskaitant Šotkio efektą ir neįskaitant jo;
- grafikas su trim kreivėmis, kurios nusako elektronų koncentracijos priklausomybes nuo koordinatės esant trim išorinėms įtampoms vertėms, kai yra atsižvelgiama į Šotkio efektą (tas vertes reikėtų pasirinkti taip, kad aiškiai matytųsi nuskurdintojo sluoksnio storio priklausomybė nuo išorinės įtampos);
- grafikas su trim kreivėmis, kurios nusako elektrinio lauko stiprio priklausomybes nuo koordinatės esant trim išorinėms įtampoms vertėms, kai yra atsižvelgiama į Šotkio efektą (tos vertės turi būti tos pačios, kaip ir koncentracijų priklausomybėse).

Skaitinio modeliavimo rezultatus reikia palyginti su teorinio skaičiavimo duomenimis. Lyginamieji dydžiai yra:

- soties srovė (teorinė formulė (3.3.3));
- voltamperinės charakteristikos forma, esant atgalinėms įtampoms (teorinė formulė (3.6.5));
- atgalinės srovės pokytis įskaičius Šotkio efektą (teorinė formulė (3.8.8));
- nuskurdintojo sluoksnio storis, esant įvairioms išorinėms įtampoms vertėms (teorinė formulė (3.3.2));
- elektrinio lauko stiprio priklausomybės nuo koordinatės bendrasis pavidalas.

Kadangi visas sluoksnio krūvis yra sutelktas nuskurdintajame sluoksnyje, o donorų jonų koncentracija yra pastovi, tai nuskurdintojo sluoksnio storį paprasčiausia apskaičiuoti padalijus sluoksnio krūvį, išreikštą elementariojo krūvio vienetais, iš donorų jonų koncentracijos N_D . Sluoksnio krūvis yra GraphiXT projektų failuose (kreivė „Sluoksnio elektros krūvis ($1/\text{cm}^2$)“).

Jeigu skaitinio modeliavimo ir teorinio skaičiavimo rezultatai akivaizdžiai skiriasi, tada reikėtų trumpai aptarti tuos skirtumus ir pabandyti juos paaiškinti.

Reikėtų vengti formalių (trivialių) išvadų. Pvz., skaitinio modeliavimo metu termoelektroninės injekcijos iš metalo į puslaidininkį srovė skaičiuojama pagal Ričardsono lygtį (3.3.3). Todėl teiginys „skaitinio modeliavimo būdu gautoji soties srovė atitinka Ričardsono lygtį“ nieko nesako. Netrivialus rezultatas yra tas, kad ši lygybė rodo, jog esant pakankamai didelei atgalinei įtampai, praktiškai nepasireiškia elektronų injekcija iš puslaidininkio į metalą (todėl pilnutinė srovė tampa lygi elektronų injekcijos iš metalo į puslaidininkį srovei, kurią nusako Ričardsono lygtis), ir šį reiškinį galima sėkmingai sumodeliuoti taikant dreifo ir difuzijos artinį bei baigtinių skirtumų metodą.