

8.1 Model driftu a difuze

Podrobnější popis

1 Základní rovnice pro polovodiče

Popis elementární podstaty fyzikálních jevů v strukturách z polovodičových materiálů je umožněn matematickými nástroji kvantové fyziky. Jejich použitím získáme model chování částic na atomární úrovni ve formě vlnových funkcí, jejichž kmitočet a vlnová délka je provázána s energií a momentem hybnosti částic. Chování elektronu v krystalu polovodiče popisujeme jako superpozici různých vlnových funkcí, tzv. vlnový paket (balík). Energie a hybnosti tohoto paketu získáme řešením Schrödingerovy rovnice, která je srdcem teorie kvantové fyziky. Zkoumání pohybu elektronu v struktuře polovodiče potom představuje problém jednoho vlnového paketu, který je vystaven vlivu vnějších polí a vlivu vzájemné interakce (kolizí) s krystalovou mřížkou.

Avšak modelování polovodičových prvků a součástek v praxi představuje problém transportu částic v makroskopickém měřítku. V takovém případě uvažujeme popis pohybu nosičů náboje (např. elektronu) mezi jednotlivými kolizemi Newtonovými zákony a samotné interakce popisujeme statisticky nástroji kvantové fyziky. Takový systém je možné popsat Boltzmanovou kinetickou rovnicí, jejímž řešením je distribuční funkce nosičů náboje v objemu polovodiče. Takové řešení však vyžaduje náročný matematický aparát, proto byla zavedena řada zjednodušení, které redukuje takový systém v jednoduchou soustavu parciálních diferenciálních rovnic, které tvoří matematický popis polovodičů nazývaný model driftu a difuze. Tyto rovnice jsou také v některých publikacích nazývány jako Základní rovnice pro polovodiče. Jejich forma vychází z Maxwellových rovnic (8.1B.1), ze kterých se dají pomocí idealizujících předpokladů snadno odvodit, jak se přesvědčíme v následujících odstavcích.

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (8.1B.1a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (8.1B.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (8.1B.1c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (8.1B.1d)$$

V uvedených rovnicích \mathbf{E} značí elektrického pole a \mathbf{D} elektrickou indukci, \mathbf{H} intenzitu magnetického pole a \mathbf{B} magnetickou indukci, \mathbf{J} značí proudovou hustotu, ρ hustotu volného náboje a t čas.

Pro úplný popis je potřeba definovat tzv. materiálové vztahy

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (8.1B.2a)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (8.1B.2b)$$

kde ε představuje permitivitu a μ permeabilitu prostředí. Obecně se jedná o tenzory druhého řádu (anizotropní charakter), avšak pro běžné materiály používané polovodičových prvcích mohou být považovány za skaláry (isotropní charakter). Hodnoty relativní permitivity pro nejběžnější materiály jsou uvedeny v tab. 8.1B.1. Vztahy (8.1B.2) jsou platné pouze v polovodičových materiálech s časově invariantní permitivitou a permeabilitou a při zanedbání polarizace vlivem mechanických sil. Z tohoto důvodu nejsou vztahy (8.1B.2) dostatečné pro popis piezoelektrických a feroelektrických jevů.

Tab. 8.1B.1 Typické hodnoty relativní permitivity [44].

Material	ε_r []
Si	11,7
SiO ₂	3,9
Si ₃ N ₄	7,2
GaAs	12,5
Ge	16,1

1.1 Poissonova rovnice

Třetí Maxwellovu rovnici (8.1B.1c), která má formu Poissonovy parciální diferenciální rovnice, můžeme použitím vztahů (8.1B.2a) a (8.1B.3) rozepsat do tvaru pro elektrický potenciál Ψ (8.1B.4).

$$\mathbf{E} = -\nabla \Psi, \quad (8.1B.3)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \Psi) = -\rho \quad (8.1B.4)$$

Pro použití rovnice (8.1B.4) v analýze polovodičů definujeme hustotu volného náboje ρ jako součin elementárního náboje q a koncentrace nosičů náboje, tj. součtu koncentrace kladně nabitých děr p , koncentrace záporně nabitých elektronů n , které jsou kompenzovány koncentrací pevného náboje příměsí C (donorů či akceptorů) v atomové mřížce polovodiče.

$$\rho = q(p - n + C), \quad (8.1B.5)$$

kde $C = N_D - N_A$ odpovídá koncentraci příměsí definované jako součet koncentrace ionizovaných donorů N_D a ionizovaných akceptorů N_A včetně znaménka kompenzovaného náboje.

Nyní můžeme sloučením (8.1B.4) a (8.1B.5) obdržet finální tvar Poissonovy rovnice (8.1B.6) vhodnou pro modelování elektrostatického pole polovodičových struktur.

$$\nabla \cdot (\nabla \Psi) = \frac{q}{\varepsilon}(n - p - C) \quad (8.1B.6)$$

1.2 Rovnice kontinuity

Rovnici kontinuity můžeme odvodit přímo z první Maxwellovy rovnice (8.1B.1a). Aplikováním operátoru divergence na tuto rovnici a s uvážením toho, že divergence rotace vektoru je rovna nule, obdržíme

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{H} = \nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (8.1B.7)$$

Pokud vektor proudové hustoty \mathbf{J} rozložíme na součet složky \mathbf{J}_p způsobenou děrami a složky \mathbf{J}_n způsobenou elektrony

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_p + \mathbf{J}_n \quad (8.1B.8)$$

a uvážením toho, že pevný náboj v krystalické mřížce polovodiče je časově invariantní, tj.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0, \quad (8.1B.9)$$

dostáváme

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_p + \mathbf{J}_n) + q \frac{\partial}{\partial t}(p - n) = 0. \quad (8.1B.10)$$

Tato rovnice vyjadřuje to, že zřídlové oblasti proudové hustoty jsou plně kompenzovány časovou změnou volného náboje. Abychom obdrželi rovnici kontinuity zvlášť pro elektrony a díry, musíme zavést společnou funkci R , která vyjadřuje četnost generace a rekombinace elektronů a děr. Potom dostáváme

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_n) - q \frac{\partial n}{\partial t} = qR, \quad (8.1B.11a)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_p) + q \frac{\partial p}{\partial t} = -qR. \quad (8.1B.11b)$$

Vyjádření četnosti R vyžaduje dobrou znalost fyzikálních mechanismů generace a rekombinace v polovodičových materiálech a je jedním z klíčových parametrů pro získání relevantních výsledků simulací polovodičových struktur.

1.3 Kinetická rovnice nosičů náboje

V předchozí kapitole jsme uvedli vektor proudové hustoty rozdělený na dvě složky (8.1B.8). Proudovou hustotu nabitých částic můžeme obecně rozepsat jako součin náboje jedné částice, koncentrace částic a průměrné rychlosti (driftové rychlosti) částic. Potom pro proudovou hustotu elektronů a proudovou hustotu děr můžeme psát

$$\mathbf{J}_n = qn \mathbf{v}_n, \quad (8.1B.12a)$$

$$\mathbf{J}_p = qp \mathbf{v}_p, \quad (8.1B.12b)$$

kde \mathbf{v}_n představuje vektor driftové rychlosti elektronů a \mathbf{v}_p vektor driftové rychlosti děr. Hlavním problémem je určení vztahu driftové rychlosti nosičů vůči silám působícím na nosiče. Pomocí řady zjednodušení a předpokladů [44] je možné příčinu nenulové driftové rychlosti rozložit na působení Lorenzovy síly a difúzní síly. Potom můžeme psát

$$\mathbf{J}_n = qn\mu_n \mathbf{E} + qD_n \nabla n, \quad (8.1B.13a)$$

$$\mathbf{J}_p = qp\mu_p \mathbf{E} - qD_p \nabla p. \quad (8.1B.13b)$$

U obou rovnic, první člen na pravé straně představuje složku proudové hustoty způsobenou Lorenzovou silou s uvážením vlivu pouze elektrického pole (vliv magnetické indukce je zanedbána) a zavádí efektivní pohyblivost elektronů μ_n a děr μ_p , které jsou funkcí průměrné četnosti kolize nosičů, a jejich hodnota je zpravidla definována empirickými vztahy. Pohyblivost nosičů náboje je veličina, která má velký vliv na vlastnosti polovodičových součástek a proto je její správná formulace velmi důležitá. Druhý člen na pravé straně rovnic (8.1B.13) představuje vliv difúze nosičů ve směru gradientu jejich koncentrace a zavádí Einsteinovi difúzní konstanty

$$D_n = \mu_n \frac{kT}{q}, \quad (8.1B.14a)$$

$$D_p = \mu_p \frac{kT}{q}, \quad (8.1B.14b)$$

kde k je Boltzmanova konstanta a T je teplota.

2 Fyzikální parametry

Uvedené rovnice (8.1B.6), (8.1B.11) a (8.1B.13) tvoří základní rovnice umožňující analýzu a simulaci většiny polovodičových prvků. Avšak mohou nastat případy, kdy nabývají na významu fyzikální jevy jež nejsou dostatečně v těchto rovnicemi podchyceny. Tak je tomu v případě tunelových proudů skrz velmi tenké vrstvy, které mají významný vliv na vlastnosti prvku. V praxi se ukázalo efektivnější aplikovat v těchto případech empirické korekce, než daný systém rovnic dále rozšiřovat.

Fyzikální parametry v těchto rovnicích definují geometrii prvku, druh polovodičového materiálu a technologii použitou při jeho výrobě. Jejich modelováním se budeme zabývat v následujících odstavcích.

2.1 Dotační profil

Distribuce příměsí v objemu polovodiče, mající za následek nevlastní vodivost typu N nebo P, určuje geometrii a funkci polovodičového prvku. Proto je to naprosto zásadní vstupní informace a tudíž je pochopitelné, že pro přesné výsledky simulací je zapotřebí věrné modelování používaných výrobních procesů, jako jsou iontová implantace, difúze, tepelná oxidace, epitaxní narůstání a jiné, které tuto distribuci (dotační profil) vytvářejí. Díky šíři tohoto tématu se omezíme jen na procesy iontové implantace a difúze atomů příměsí do objemu polovodičového substrátu. Výsledné profily těchto procesů jsou nejčastěji modelovány Gaussovou funkcí

$$G(x) = ae^{-\frac{(x-b)^2}{2c^2}}, \quad (8.1B.15)$$

kde x představuje prostorovou souřadnici, a , b a c jsou reálné konstanty a e je eulerovo číslo. Gaussova funkce je sudá (souměrná podle osy y) a má tvar „zvonu“, kterému přisuzujeme charakter distribuce příměsí v objemu polovodiče jako důsledek lokálně aplikovaných uvedených technologických procesů. Potom konstanta a určuje špičkovou koncentraci příměsí (výšku „zvonu“), b pozici aplikace technologického procesu (souřadnici vrcholu „zvonu“) a c je úměrná difúzi příměsí do substrátu (šířce „zvonu“). V (8.1B.5) jsme zavedli koncentraci pevného náboje C , která odpovídá distribuci příměsí v polovodiči. Pokud uvažujeme, že N_D a N_A značí špičkovou koncentraci akceptorů a donorů (odpovídají koeficientu a), potom můžeme pro obecný P-N přechod v případě jedno rozměrného (1D) problému psát

$$C = N_{Di} + N_D G(x_D, b_D, c_D) - N_A G(x_A, b_A, c_A), \quad (8.1B.16)$$

kde N_{Di} představuje koncentraci příměsí výchozího substrátu, který bývá zpravidla lehce dotován donory, tj. je typu N.

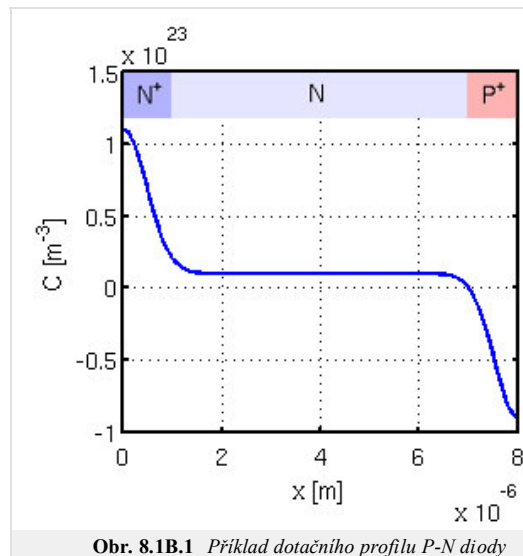
Uvažujme P-N diodu redukovanou na 1D problém o celkové délce $L = 8 \mu\text{m}$ vyrobené ze substrátu křemíku s nízkou výchozí koncentrací donorů $N_{Di} = 10^{21} \text{m}^{-3}$ a vysoce dopovanými oblastmi na protilehlých koncích substrátu tvořených koncentracemi donorů $N_D = 10^{23} \text{m}^{-3}$ a akceptorů $N_A = 10^{23} \text{m}^{-3}$. Šířku P-N přechodu požadujeme

$L_J = 1 \mu\text{m}$. Výsledný dotační profil, zobrazený na obr. 8.1B.1, potom vyjádříme následujícím předpisem

$$C = N_{Di} + N_D e^{\left(-\frac{(x-0)^2}{2c^2}\right)} - N_A e^{\left(-\frac{(x-L)^2}{2c^2}\right)}, \quad (8.1B.17)$$

kde c vyjádříme pomocí žádané šířky přechodu jako

$$c = \frac{L_J}{\sqrt{2 \ln(N_A/N_{Di})}}. \quad (8.1B.18)$$



2.2 Pohyblivost nosičů

Pohyblivost μ je důležitá kvantita, která dává do souvislosti driftovou rychlost nosičů v a elektrické pole E , kterému jsou tyto nosiče vystaveny, vztahem

$$v = \mu E. \quad (8.1B.19)$$

Pohyb nosičů v polovodiči je narušen kolizemi s **krystalovou mřížkou**, příměsí a defekty, tudíž dráha pohybu nosiče mezi dvěma body není přímka. Z důvodu snadnější představitelnosti tohoto jevu se zavedla právě veličina pohyblivosti, která se modeluje s ohledem na mechanismy, které ovlivňují kolize nosičů. Tyto mechanismy mohou být způsobeny např.

- atomovou mřížkou materiálů
- ionizovanými nečistotami
- kolizí nosič-nosič
- neutrálními nečistotami
- intenzitou elektrického pole

Často si vystačíme pouze s tabulkovou hodnotou $\mu_{n,p}^{300}$, udávanou pro daný materiál při teplotě 300K, avšak při tvorbě věrného modelu polovodičové struktury je formulace pohyblivosti nosičů klíčová, protože podchycuje fyzikální jevy, které mají zásadní vliv na vlastnosti polovodičových prvků. V následujících odstavcích se soustředíme na nejběžnější modely pohyblivosti.

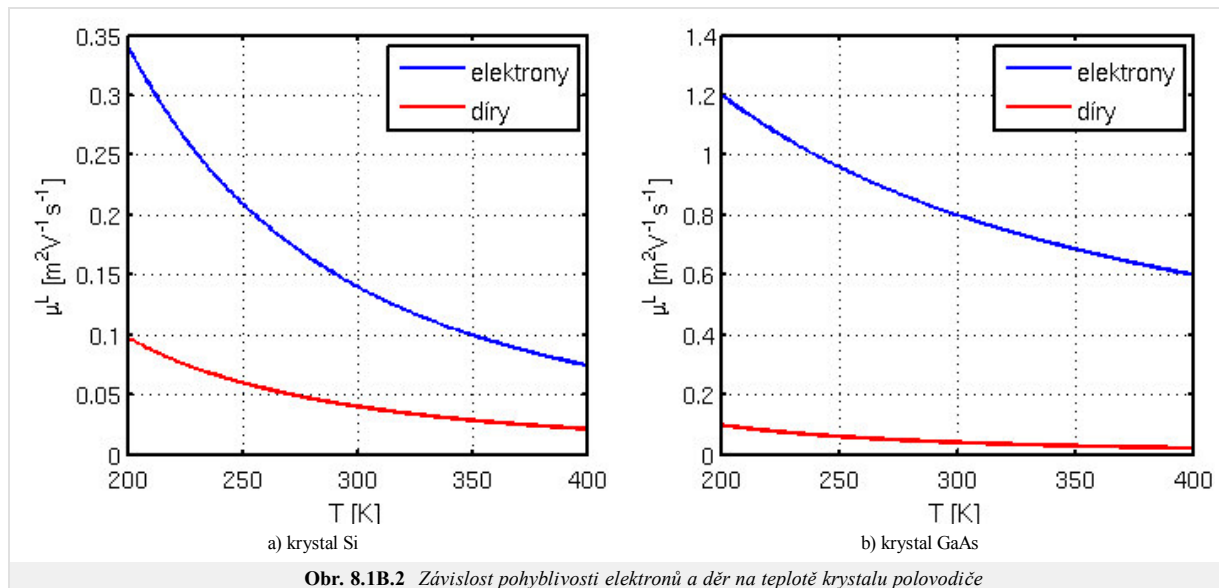
Závislost pohyblivosti nosičů na teplotě mřížky

Jedním ze základních mechanismů ovlivňující kolize jsou vibrace atomů v **mřížce** čistého krystalu polovodiče. Intenzita těchto vibrací je úměrná teplotě mřížky. Modelování tohoto jevu empirickými vztahy (8.1B.20) se opírá o experimentálně naměřené hodnoty pohyblivosti nosičů při různých teplotách, ze kterých byly určeny hodnoty koeficientů a_n a a_p .

$$\mu_n^L = \mu_n^{300} \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{-a_n}, \quad (8.1B.20a)$$

$$\mu_p^L = \mu_p^{300} \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{-a_p}. \quad (8.1B.20b)$$

Vynesené závislosti pohyblivosti nosičů na teplotě v krystalu Si a GaAs jsou uvedeny na obr. 8.1B.2. Typické hodnoty pohyblivosti a koeficientů uvádí tab. 8.1B.2.



Obr. 8.1B.2 Závislost pohyblivosti elektronů a děr na teplotě krystalu polovodiče

Tab. 8.1B.2 Hodnoty pohyblivosti a koeficientů jejich tepelné závislosti [44].

	Si	GaAs
μ_n^{300} [$\text{m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$]	0,14	0,8
μ_p^{300} [$\text{m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$]	0,4	0,4
a_n []	2,2	1
a_p []	2,2	2,1

Závislost pohyblivosti nosičů na koncentraci ionizovaných příměsí

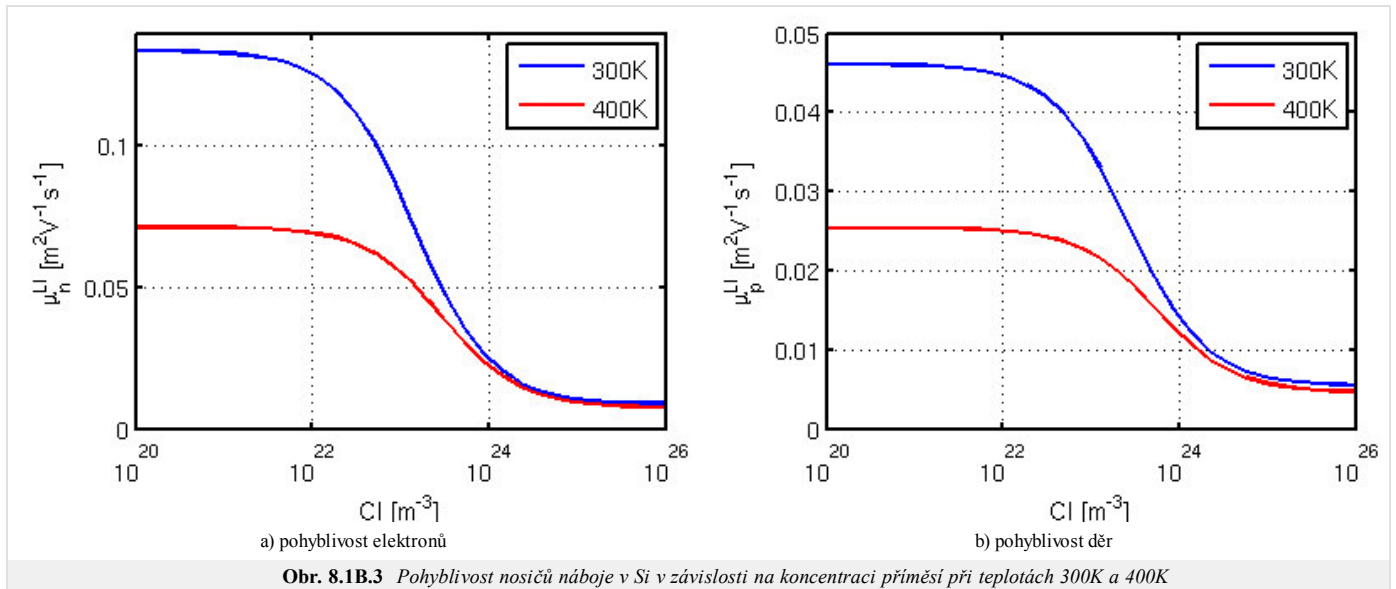
Ionizované příměsí představují především příměsí donorů a akceptorů. Vztahy popisující vliv jejich koncentrace na pohyblivost nosičů jsou definovány pomocí tzv. celkové koncentrace ionizovaných příměsí CI . Tato je definována jako součet koncentrací pevného náboje všech m druhů ionizovaných příměsí násobený absolutní hodnotou jejich normovaného náboje Z

$$CI = \sum_{i=1}^m |Z_i| \cdot C_i. \quad (8.1B.21)$$

Pro obvyklé příměsí je $|Z| = 1$. Avšak, v některých aplikacích, jako jsou solární články s příměsí zinku, mohou být akceptory dvojitě ionizované, což odpovídá hodnotě $|Z| = 2$. Empirické vztahy (8.1B.22) popisují vliv koncentrace příměsí na pohyblivost nosičů v objemu Si a zároveň postihují vliv teploty mřížky krystalu. Na obr. 8.1B.3 jsou vykresleny jejich průběhy při teplotách 300K a 400K.

$$\mu_n^{LI} = 0,0088 \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{-0,57} + \frac{0,1252 \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{-2,33}}{1 + \frac{CI}{1,432 \cdot 10^{23} \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{2,546}}} \quad (8.1B.22a)$$

$$\mu_p^{LI} = 0,00543 \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{-0,57} + \frac{0,0407 \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{-2,33}}{1 + \frac{CI}{2,67 \cdot 10^{23} \left(\frac{T}{300\text{K}}\right)^{2,546}}} \quad (8.1B.22b)$$



Závislost pohyblivosti nosičů na intenzitě elektrického pole

Dalším významný jev jehož důsledkem je změna pohyblivosti nosičů je saturace jejich driftové rychlosti při vysokých intenzitách elektrického pole. Pro křemík je možné použít následující empirický vztah

$$\mu_{n,p}^{LE} = \frac{\mu_{n,p}^L}{\left(1 + \left(\frac{E_{n,p}}{E_{n,p}^{crit}}\right)^{\beta_{n,p}}\right)^{1/\beta_{n,p}}}, \quad (8.1B.23)$$

kde $E_{n,p}$ značí velikost složky elektrického pole ve směru vektoru proudové hustoty. Mezní hodnota elektrického pole $E_{n,p}^{crit}$ a koeficient $\beta_{n,p}$ jsou volené tak, aby výsledný průběh pohyblivosti odpovídal experimentálně zjištěným hodnotám. Tyto koeficienty a jejich závislost na teplotě vyjadřují následující vztahy.

$$E_n^{crit} = 857 \cdot 10^3 \left(\frac{T}{300K}\right)^{1,55}, \quad (8.1B.24a)$$

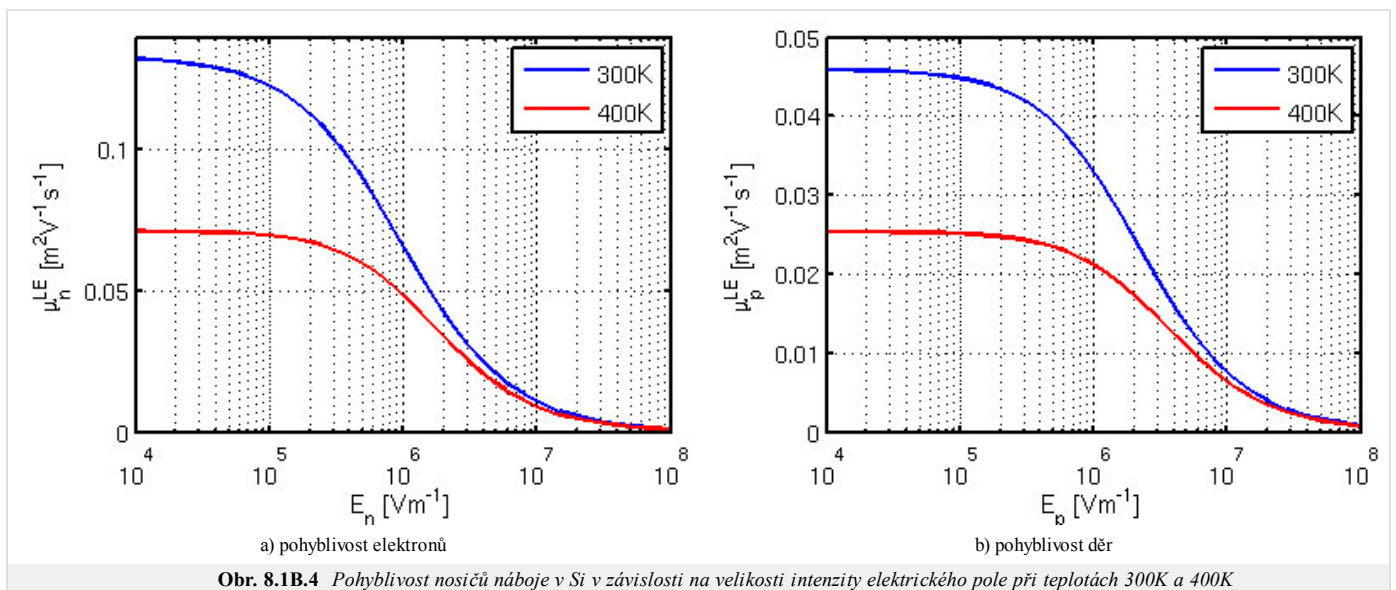
$$E_p^{crit} = 1800 \cdot 10^3 \left(\frac{T}{300K}\right)^{1,68}, \quad (8.1B.24b)$$

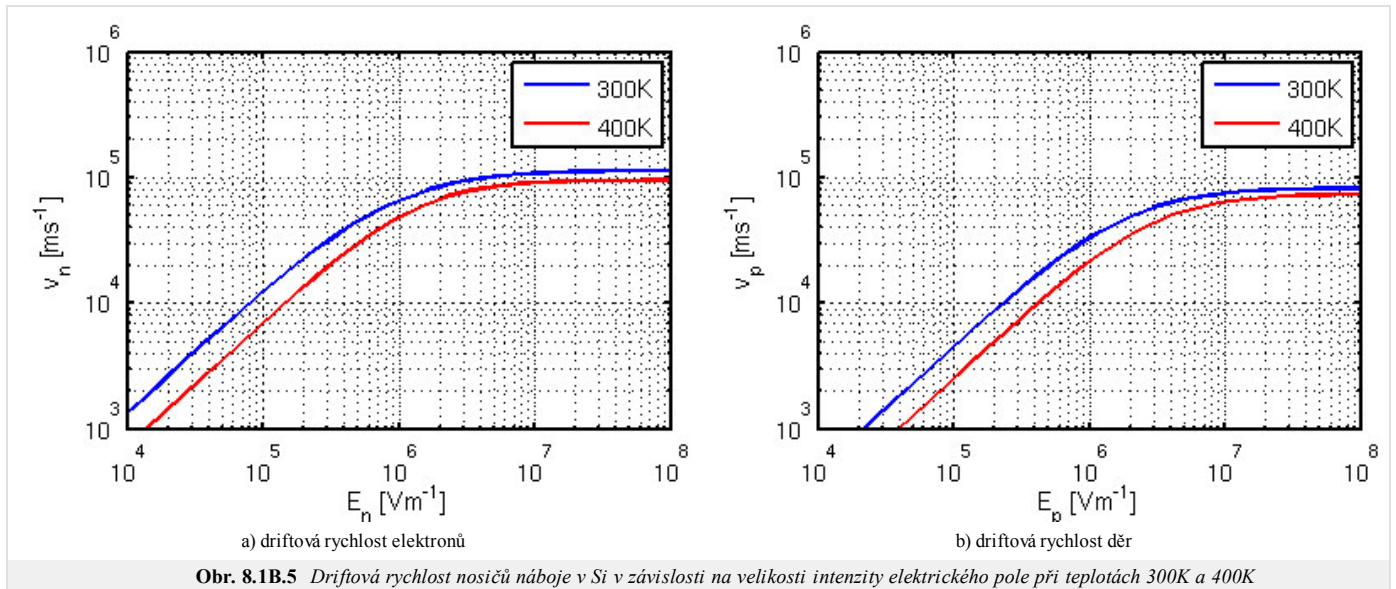
$$\beta_n = 1,11 \left(\frac{T}{300K}\right)^{0,66}, \quad (8.1B.25a)$$

$$\beta_p = 1,21 \left(\frac{T}{300K}\right)^{0,17}. \quad (8.1B.25b)$$

Na obr. 8.1B.4 jsou znázorněny průběhy odpovídající výše uvedeným vztahům. Obr. 8.1B.5 znázorňuje efekt saturace driftové rychlosti nosičů vlivem velikosti intenzity elektrického pole, kdy pro driftovou rychlost platí

$$v_{n,p} = \mu_{n,p}^{LE} E_{n,p}. \quad (8.1B.26)$$





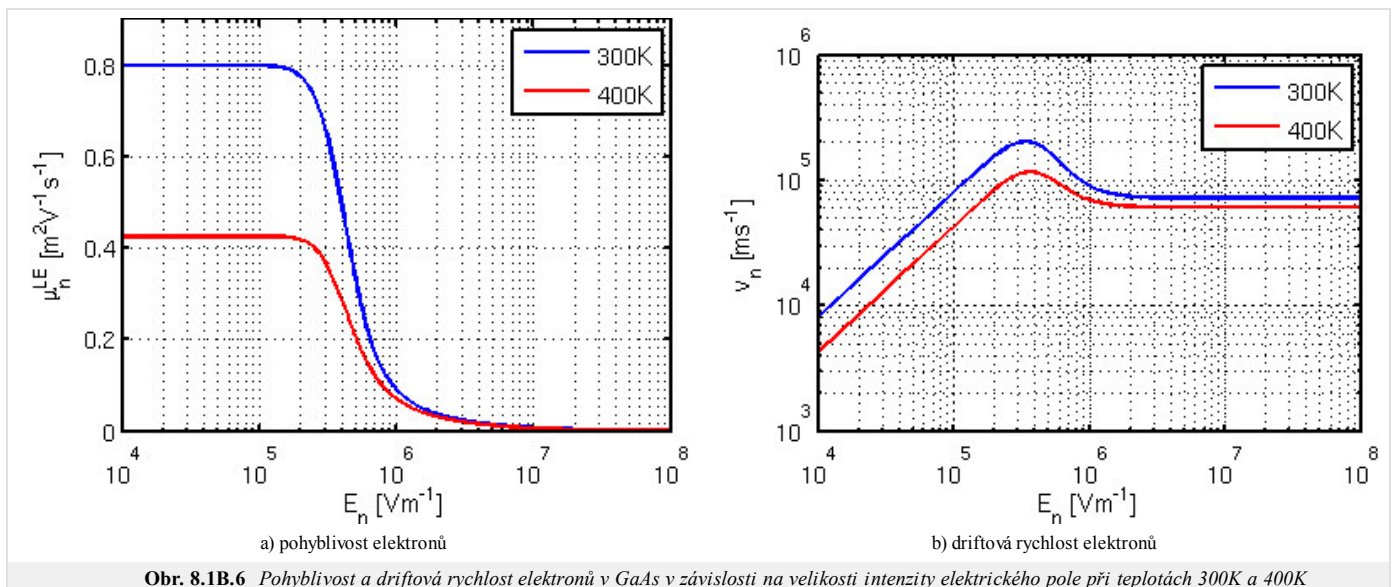
Pro elektrony v GaAs je možno tento jev modelovat následujícím vztahem

$$\mu_n^{LE} = \frac{\mu_n^L + v_{sat} \frac{(E_n)^3}{(E_n^{crit})^4}}{1 + \left(\frac{E_n}{E_n^{crit}}\right)^4}, \quad (8.1B.27)$$

kde E_n opět značí velikost složky elektrického pole ve směru vektoru proudové hustoty E_n^{crit} je jeho kritická hodnota a v_{sat} je teplotně závislá saturační rychlost elektronů, která je modelovaná vztahem

$$v_{sat} = \frac{v_{sat}^{300}}{(1 - A_n) + A_n \left(\frac{T}{300K}\right)}, \quad (8.1B.28)$$

kde hodnota koeficientu A_n je určována experimentálně. Pro typické hodnoty koeficientů $E_n^{crit} = 400 \times 10^3 \text{ Vm}^{-1}$, $A_n = 0,56$ a $v_{sat}^{300} = 72 \times 10^3 \text{ ms}^{-1}$, jsou na obr. 8.1B.6 vykresleny závislosti pohyblivosti a driftové rychlosti elektronů na velikosti intenzity elektrického pole. Když si uvědomíme, že podle (8.1B.12) je velikost driftové rychlosti přímo úměrná velikosti proudu, můžeme na obr. 8.1B.6b pozorovat oblast záporného diferenciálního odporu, který je důsledkem Gunnova jevu, jež je podstatou činnosti mnoha mikrovlnných aktivních prvků vyrobených z GaAs.



2.3 Generace a rekombinace nosičů

V předchozích odstavcích byla zmíněna funkce R , která popisuje četnost generace a rekombinace elektronů a děr. Uvažujme homogenně dotovaný polovodič, který je v tepelné rovnováze, tj. procesy generace a rekombinace vybuzené tepelnou energií jsou v dynamické rovnováze. Pro tento stav můžeme definovat rovnovážné koncentrace elektronů n_0 a děr p_0 , jež jsou svázaný následujícím vztahem

$$n_0 p_0 = n_i^2, \quad (8.1B.29)$$

kde n_i představuje intrinsickou koncentraci. Pokud polovodič vybudíme vnějším stimulem, rovnováha mezi procesy generace a rekombinace bude narušena a tím budou narušeny i koncentrace elektronů a děr z jejich rovnovážných hodnot. V rovnicích kontinuity (8.1B.11) je tohoto narušení je vyjádřeno funkcí R . Podle toho, který

fyzikální jev je příčinou generace a rekombinace nosičů náboje, rozlišujeme

- R^{SRH} (Shockley-Read-Hall) přechody fononů
- R^{OPT} přechody fotonu
- R^{SURF} povrchové jevy
- R^{AU} Augerovy trojité přechody
- R^{II} nárazová ionizace

Jednotlivé formulace R kombinujeme pouhým sečtením $R = R^{SRH} + R^{OPT} + R^{AU} + R^{SURF} + R^{II}$.

Dominantním mechanismem je Shockley-Read-Hall rekombinace a generace, která je modelována jako past mezi valenčním a vodivostním pásmem polovodiče (v zakázaném pásmu). Výsledná funkce má následující podobu

$$R^{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n+n_1) + \tau_n(p+p_1)}, \quad (8.1B.30)$$

kde τ_n a τ_p jsou doby života nosičů, n_1 a p_1 jsou koncentrace definované energetickou hladinou pastí. Pokud je hladina pastí právě uprostřed zakázaného pásma, jsou tyto koncentrace rovné intrinsické, tj. $p_1 = n_1 = n_i$.

3 Analýza základních rovnic a okrajové podmínky

První sekci byl uveden soubor základních rovnic (8.1B.6), (8.1B.11) a (8.1B.13). Je důležité zmínit, že ve vztazích proudových hustot (8.1B.13) byly opomenuty složky proudu způsobené zúžením zakázaného pásma a teplotním gradientem, protože jsou vlivy těchto efektů považovány za zanedbatelné. Avšak je nutné si uvědomit, že vztahy pro proudy se tímto mohou stát nekorektní, pokud některý ze zmíněných efektů zásadně nabude na významu.

Použitím (8.1B.6) a substitucí rovnic proudové hustoty (8.1B.13) do rovnic kontinuity (8.1B.11) dostáváme systém tří parciálních diferenciálních rovnic (8.1B.31) s proměnnými Ψ , n a p .

$$\nabla \cdot (\nabla \psi) - \frac{q}{\epsilon}(n - p - C) = 0, \quad (8.1B.31a)$$

$$\nabla \cdot (D_n \nabla n - n \mu_n \nabla \psi) - R = \frac{\partial n}{\partial t}, \quad (8.1B.31b)$$

$$\nabla \cdot (D_p \nabla p + p \mu_p \nabla \psi) - R = \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (8.1B.31c)$$

Za předpokladu, že parametry D_n , D_p , μ_n a μ_p jsou vždy kladné a pokud funkce R neobsahuje derivace druhého (nebo vyššího) řádu podle prostorových souřadnic a první (nebo vyšší) derivace koncentrací n a p podle času, potom jsou (8.1B.31b) a (8.1B.31c) parabolické parciální diferenciální rovnice. Rovnice (8.1B.31a) představuje eliptickou parciální diferenciální rovnici.

Pro matematickou analýzu potřebujeme znát počáteční odhad proměnných Ψ , n a p v doměně, ve které jsou tyto rovnice platné a okrajové podmínky. Tato ohraničená doména D je obecně trojrozměrná, tak jako prakticky všechny polovodičové struktury. Avšak v mnoha případech můžeme tuto doménu považovat za dvojrozměrnou, či dokonce za jednorozměrnou, čímž se analyzovaný problém zásadně zjednoduší.

Nechť ∂D značí dílčí hranice domény D . Tato může být z principu rozdělena na dvě části

$$\partial D = \partial D_p \cup \partial D_a, \quad (8.1B.32)$$

kde ∂D_p značí ty části hranice, které představují skutečné, fyzické, hranice, jako jsou kontakty a rozhraní. Naopak ∂D_a značí umělé rozhraní, které zavádíme, například, za účelem vyčlenění dílčí struktury z rozměrného substrátu nebo oddělení sousedních prvků na jednom substrátu, tudíž nepředstavují fyzickou hranici.

Zmíněné rozdělení hranic ilustrativně popíšeme na idealizované geometrii 2D planárního MOS tranzistoru, viz. obr. 8.1B.7. Celá doména je reprezentována mnohoúhelníkem $A-B-C-D-E-F-G-H-B$. Rovnice (8.1B.31) platí pouze v subdoměně $A-B-E-F-G-H-B$. Izolant, ohraničený body $B-C-D-E-B$, můžeme charakterizovat buď Laplaceovou rovnicí pro elektrostatický potenciál (8.1B.33) nebo předpokladem absence nosičů náboje (8.1B.34).

$$\nabla \cdot \nabla (\Psi) = 0 \quad (8.1B.33)$$

$$n = p = C = 0 \quad (8.1B.34)$$

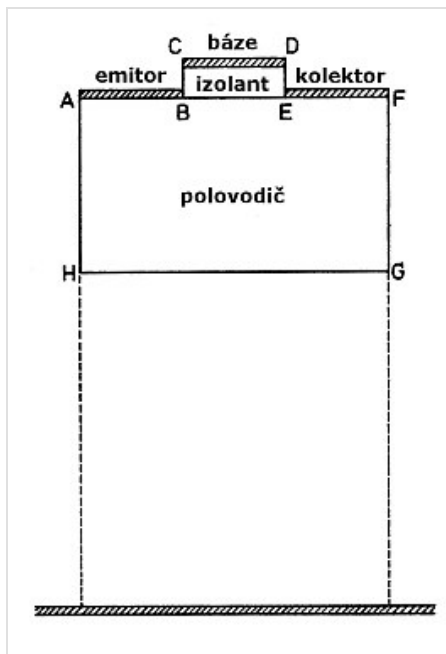
Avšak použití těchto rovnic znemožňuje určení proudu procházející bázi a vliv náboje izolační vrstvy oxidu.

Hranice $A-B$, $E-F$, $C-D$ a $B-E$ můžeme pokládat za fyzické hranice představující tři kontakty a jedno rozhraní mezi polovodičem a izolantem. Hranice $A-H$, $B-C$, $D-E$, $F-G$ a $G-H$ pokládáme za umělé hranice. Tyto si v reálné struktuře neexistují, ale usnadňují simulaci tím, že strukturu separují od okolního prostředí.

Fyzické hranice mohou být rozděleny do tří kategorií.

$$\partial D_p = \partial D_O \cup \partial D_S \cup \partial D_I, \quad (8.1B.35)$$

kde ∂D_O značí ohmický kontakt, ∂D_S značí Schottkyho kontakt a ∂D_I značí rozhraní s izolantem.



3.1 Ohmický kontakt

Nejjednodušší okrajová podmínka pro ohmický kontakt je Dirichletova okrajová podmínka pro elektrostatický potenciál

$$\psi(t) - \psi_b - \psi_D(t) = 0, \quad (8.1B.36)$$

kde $\psi_D(t)$ značí vnější přiložené napětí a ψ_b značí vestavěný potenciál, který přímo souvisí s příměsí v objemu polovodiče a může být vyjádřen následujícím vztahem

$$\psi_b = \frac{kT}{q} \ln \sinh\left(\frac{C}{2n_i}\right). \quad (8.1B.37)$$

Pokud je polovodič dotován pouze donory nebo akceptory, můžeme použít zjednodušené vztahy

$$N_D \gg N_A \rightarrow \psi_b \cong \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_D}{2n_i}\right), \quad (8.1B.38a)$$

$$N_A \gg N_D \rightarrow \psi_b \cong \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_A}{2n_i}\right). \quad (8.1B.38b)$$

Dále se budeme zabývat okrajovými podmínkami pro koncentraci nosičů. Pokud budeme uvažovat tepelnou rovnováhu (8.1B.29) a absenci prostorového náboje na ohmickém kontaktu, platí následující vztahy.

$$np - n_i^2 = 0, \quad (8.1B.39)$$

$$n - p - C = 0. \quad (8.1B.40)$$

Tyto dvě rovnice mohou být vyjádřeny Dirichletovou okrajovou podmínkou pro elektrony (8.1B.41a) a díry (8.1B.41b).

$$n = \frac{\sqrt{C^2 + 4n_i^2} + C}{2}, \quad (8.1B.41a)$$

$$p = \frac{\sqrt{C^2 + 4n_i^2} - C}{2}. \quad (8.1B.41b)$$

3.2 Schottkyho kontakt

Vzhledem k tomu, že fyzikální popis Schottkyho kontaktu není triviální, používá se pro účely simulace velice zjednodušený model. Pro elektrostatický potenciál můžeme psát Dirichletovu okrajovou podmínku

$$\psi(t) - \psi_b - \psi_s - \psi_D(t) = 0, \quad (8.1B.42)$$

kde $\psi_D(t)$ opět značí vnější přiložené napětí a ψ_s je velikost Schottkyho bariéry, což je charakteristický parametr daný druhem kovu a polovodiče Schottkyho kontaktu. ψ_b opět značí vestavěný potenciál. Okrajová podmínka pro koncentraci nosičů vychází z proudové hustoty protékající kontaktem. Použitím teorie tepelné emise a difúze, lze odvodit následující okrajové podmínky pro závěrně polarizovaný kontakt

$$\mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n} = -qu_n \left(n - \frac{\sqrt{C^2 + 4n_i^2} + C}{2} \right), \quad (8.1B.43a)$$

$$\mathbf{J}_p \cdot \mathbf{n} = -qu_p \left(p - \frac{\sqrt{C^2 + 4n_i^2} - C}{2} \right), \quad (8.1B.43b)$$

kde \mathbf{n} značí normálový vektor kolmý na ∂D , $u_{n,p}$ značí rychlosti tepelné rekombinace.

3.3 Rozhraní polovodič izolant

Další kategorií tvoří rozhraní mezi polovodičem a izolačním materiálem. Na takovém rozhraní musí platit Gaußův zákon,

$$\varepsilon_{sem} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{sem} - \varepsilon_{ins} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{ins} = Q_{int}, \quad (8.1B.44)$$

kde ε_{sem} a ε_{ins} značí permitivitu polovodiče a izolantu. Q_{int} je náboj na rozhraní. Pro tenké izolanty jako jsou vrstvy oxidu, můžeme složku elektrického pole v izolantu kolmou na rozhraní zanedbat, čímž se nám vztah zjednoduší na

$$\varepsilon_{sem} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{sem} = Q_{int}. \quad (8.1B.45)$$

Pokus dále zanedbáme náboj na rozhraní Q_{int} je předchozí podmínka redukována na Neumannovu okrajovou podmínku pro elektrostatický potenciál

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (8.1B.46)$$

Pro nosiče platí, že složky proudu kolmé k rozhraní se musí rovnat rychlosti povrchové rekombinace R^{SURF} , tj. musí platit

$$\mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n} = -qR^{SURF} \quad (8.1B.47a)$$

$$\mathbf{J}_p \cdot \mathbf{n} = qR^{SURF}. \quad (8.1B.47b)$$

Velmi často se povrchová rekombinace zanedbává, a tak získáváme jednodušší podmínky

$$\mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (8.1B.48a)$$

$$\mathbf{J}_p \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (8.1B.48b)$$

3.4 Umělé rozhraní

Posledním případem jsou umělé rozhraní. Zde předpokládáme buď okrajové podmínky (8.1B.49a), (8.1B.49b) a (8.1B.49c), které zaručí, že doména je uzavřená nebo specifické hodnoty pro elektrostatický potenciál a koncentraci nosičů dané vnějšími vlivy.

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (8.1B.49a)$$

$$\frac{\partial n}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (8.1B.49b)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (8.1B.49c)$$