ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΚΡΟΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΝΑΝΟΔΙΑΤΑΞΕΙΣ»

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του ΧΑΡΑΛΑΜΠΟΥ ΚΑΡΑΚΑΣΗ

«Ανάπτυξη μοντέλου αγωγιμότητας ετεροεπαφής Schottky»

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

Δρ. Γλέζος Νικόλαος, Ερευνητής Α' Βαθμίδας, Ε.ΚΕ.ΦΕ «Δ»

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Δρ. Γλέζος Νικόλαος, Ερευνητής Α' Βαθμίδας, Ε.ΚΕ.ΦΕ «Δ»

Δρ. Κυρίτσης Απόστολος, Αναπληρωτής Καθηγητής, Σ.Ε.Μ.Φ.Ε

Δρ. Τσουκαλάς Δημήτριος, Καθηγητής, Σ.Ε.Μ.Φ.Ε

ΑΘΗΝΑ, Οκτώβριος 2021

ΠΡΟΛΟΓΟΣ – ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα εργασία εκπονήθηκε στα πλαίσια του μεταπτυχιακού προγράμματος σπουδών «Μικροσυστήματα και Νανοδιατάξεις» της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, κατά το ακαδημαϊκό έτος 2020-2021, υπό την επίβλεψη του Δρ. Νικόλαου Γλέζου.

Για την διεκπεραίωση της παρούσας πτυχιακής θα ήθελα να ευχαριστήσω, αρχικά, τον επιβλέποντα αυτής της διπλωματικής εργασίας κ. Νικόλαο Γλέζο διευθυντή ερευνών του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε "Δημόκριτος" για την καθοδήγηση, την υπομονή του και την καταλυτική του συμμετοχή με τις χρήσιμες παρατηρήσεις του όλο αυτό το διάστημα.

.....

Χαράλαμπος Καρακάσης

© (2021) Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. All rights Reserved. Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σ’αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περιεχόμενα

ΠΡΟΛΟΓΟΣ – ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ 1
Περίληψη 5
Abstract 6
Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή 7
1.1 Μοντελοποίηση και ο στόχος της 7
1.1.1 Διαδικασία Μαθηματικής Μοντελοποίησης 8
1.2 Επαφή p-n 9
1.2.1 Περιοχή απογύμνωσης 10
1.2.2 Θερμοδυναμική ισορροπία 11
1.2.3 Πόλωση διόδου p-n και χαρακτηριστική τάσης ρεύματος 12
1.2.4 Χωρητικότητα p-n επαφής 16
1.2.5 Χρήση επαφών p-n 17
1.3 Ετεροεπαφές 18
1.3.1 Ετεροεπαφές ημιαγωγού-ημιαγωγού 18
1.3.2 Ετεροεπαφές με διαμόρφωση μέσω εμπλουτισμού (Modulation-doped heterojunctions) . 19
1.3.3 Επαφή μετάλλου-ημιαγωγού (επαφή Schottky) 21
Κεφάλαιο 2: Δομή ανορθωτικής επαφής 27
2.1 Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών 27
2.1.1 Θερμοδυναμική ισορροπία 28
2.1.2 Ορθή πόλωση 29
2.1.3 Ανάστροφη πόλωση 29
2.2 Περιοχή απογύμνωσης W 30
2.3 Φαινόμενο Schottky 32
2.3.1 Χαρακτηριστική τάσης-πυκνότητας ρεύματος 34
2.3.2 Ενδιάμεσες καταστάσεις- Παγίδες 35
2.4 Συμμετοχή του φαινομένου της διάχυσης φορέων στην αγωγιμότητα 37
2.4.2 Προσέγγιση του ολοκληρώματος διάχυσης 38
2.4.3 Χαρακτηριστική τάσης-πυκνότητας ρεύματος 39
2.4.4 Μια καλύτερη προσέγγιση της εξίσωση διάχυσης-ολίσθησης 39
2.4.5 Αναλυτική εξίσωση διάχυσης-ολίσθησης με φορτίο είδωλο 41

2.4.6 Ευκινησία με εξάρτηση από το ηλεκτρικό πεδίο 42
2.5 Φαινόμενα δημιουργίας-επανασύνδεσης φορέων 45
2.5.1 Διαδικασίες επανασύνδεσης-δημιουργίας 45
2.5.2 Χαρακτηριστικός χρόνος ζωής των φορέων μειονότητας-παγίδων 46
2.5.3 Ρυθμός δημιουργίας- επανασύνδεσης φορέων 46
2.5.4 Εξισώσεις Racko- Donoval 49
2.5.5 Πυκνότητα φορέων με εξάρτηση από το ρυθμό δημιουργίας- επανασύνδεσης φορέων 49
2.5.6 Σχέση πυκνότητας ρεύματος-τάσης 51
Κεφάλαιο 3: Αποτελέσματα 54
3.1 Μελέτη χαρακτηριστικής J-V της διόδου Schottky και σύγκριση μοντέλων Simmons-Schottky. . 54
3.2 Σύγκριση προσέγγισης Simmons και αναλυτικής εξίσωσης 59
3.3 Επίδραση του φορτίου ειδώλου στην ηλεκτρική χαρακτηριστική 62
3.4 Σύγκριση πυκνοτήτων ρεύματος με ευκινησία σταθερή και με εξάρτηση από το ηλεκτρικό πεδίο 64
3.5 Σύγκριση πυκνοτήτων ρεύματος-τάσης λαμβάνοντας υπόψη τους μηχανισμούς επανασύνδεσης-δημιουργίας 66
Κεφάλαιο 4: Συμπεράσματα 72
Βιβλιογραφία – Αναφορές 73
Παράρτημα Α 74
Παράρτημα Β 76

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία γίνεται μελέτη και ανάπτυξη του μοντέλου αγωγιμότητας της ετεροεπαφής μετάλλου-ημιαγωγού (Schottky) με τη χρήση της *Mathematica*. Πιο συγκεκριμένα, θα μελετηθούν και θα συγκριθούν τα μοντέλα αγωγιμότητας του Schottky, της διάχυσης με σταθερή και μεταβλητή ευκινησία από το ηλεκτρικό πεδίο, αλλά και επανασύνδεσης- δημιουργίας φορέων. Αρχικά, θα γίνει μια εισαγωγή στη μοντελοποίηση. Στο δεύτερο κομμάτι του πρώτου κεφαλαίου θα γίνει αναφορά στις ετεροεπαφές, τα είδη τους, τα πλεονεκτήματα, τα μειονεκτήματα και τις εφαρμογές των επαφών μετάλλου-ημιαγωγού. Στη συνέχεια θα μελετηθεί η δομή της ανορθωτικής επαφής μετάλλου-ημιαγωγού και θα αναπτυχτούν τα διάφορα μοντέλα. Στο τρίτο κεφάλαιο της εργασίας θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα και θα συγκριθούν οι χαρακτηριστικές καμπύλες J-V που θα προκύψουν από την ανάλυση που έγινε και τα μοντέλα που αναπτύχθηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο. Τέλος, στο τέταρτο και τελευταίο κεφάλαιο θα εξαχθούν τα συμπεράσματα για τα αποτελέσματα του προηγούμενου κεφαλαίου.

Λέξεις Κλειδιά: Δίοδος Schottky, ετεροεπαφή μετάλλου- ημιαγωγού, φορτίο είδωλο, επανασύνδεση- δημιουργία φορέων, χαρακτηριστική ρεύματος- τάσης

Abstract

The purpose of this thesis is to develop and study a conductivity model of the metal-semiconductor heterojunction (Schottky junction) by using Mathematica. More specifically, the conductivity models of Schottky, drift- diffusion with constant and mobility depended from the electric field, but also generation- recombination mechanism will be studied, analyzed and compared. First, an introduction to modeling and its objectives will be made. The second part of the first chapter will be focused on the heterojunctions, heterojunction types, advantages, disadvantages and their applications. Then the structure of the metal-semiconductor rectifier contact will be studied and the various models will be developed. In the third and fourth chapters of this work, the characteristic J-V curves of the models developed in the previous chapter will be presented, compared and conclusions will be made.

Keywords: Schottky diode, metal-semiconductor heterojunction, mirror charge, generation-recombination mechanism, current-voltage characteristic

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

1.1 Μοντελοποίηση και ο στόχος της

Μοντελοποίηση ορίζεται ως η ανάπτυξη μαθηματικής περιγραφής ενός φαινομένου, ενός συστήματος ή μιας διαδικασίας και η μελέτη τους με τη χρήση μαθηματικών εργαλείων. Τα εργαλεία αυτά μπορεί να είναι ένα σύστημα εξισώσεων, ένα σύνολο αριθμών, ένας αλγόριθμος, μια στοχαστική διαδικασία κ.α. Ουσιαστικά, μαθηματική Μοντελοποίηση είναι η διαδικασία ανάπτυξης και η μελέτη ενός μαθηματικού μοντέλου. Επομένως, μαθηματικό μοντέλο (Mathematical Model) είναι η περιγραφή ενός φαινομένου, ενός συστήματος ή μιας διαδικασίας χρησιμοποιώντας μαθηματικές έννοιες και σύμβολα.

Η έννοια του φαινομένου, στον παραπάνω ορισμό, εμπεριέχει συστήματα από τελείως διαφορετικά επιστημονικά πεδία, όπως από τις φυσικές επιστήμες, τις επιστήμες της μηχανικής, τα οικονομικά, τις κοινωνικές επιστήμες αλλά και τις ανθρωπιστικές σπουδές. Ακριβώς λόγω του τεράστιου εύρους των πιθανών εφαρμογών, αντίστοιχα μεγάλος είναι και ο αριθμός των εν δυνάμει διαφορετικών μαθηματικών μοντέλων, όπως και των πιθανών μαθηματικών εργαλείων, τα οποία χρησιμοποιούνται για τη μελέτη και την επίλυση των μοντέλων.

Ας δούμε όμως, πιο συγκεκριμένα, τους στόχους ενός μαθηματικού μοντέλου. Πολύ συνοπτικά θα λέγαμε ότι οι στόχοι της μαθηματικής μοντελοποίησης ενός συγκεκριμένου συστήματος (φαινομένου) είναι οι εξής:

- Η μελέτη και κατανόηση της συμπεριφοράς πολύπλοκων συστημάτων με τη χρήση των Μαθηματικών.

- Η χρήση και η ανάπτυξη νέων, μαθηματικών εργαλείων που απαιτούνται για τη επίλυση ενός μοντέλου.

- Η πρόβλεψη / προσομοίωση (prediction/simulation) συμπεριφορών και ιδιοτήτων πολύπλοκων συστημάτων μέσω των μαθηματικών μοντέλων.

- Ο έλεγχος των υποθέσεων ενός μοντέλου και η αντίστοιχη βελτίωσή του.

Ο τελευταίος στόχος είναι ιδιαίτερα σημαντικός καθώς δεν υπάρχει το «τέλειο μοντέλο», καθώς όλα τα μοντέλα βασίζονται σε ορισμένες υποθέσεις/παραδοχές που ορισμένες από αυτές δεν είναι απόλυτα σωστές.

Γιατί όμως χρειαζόμαστε υποθέσεις/παραδοχές για κάθε μαθηματικό μοντέλο ενός πραγματικού φαινομένου; Πρώτον, επειδή όλα τα πραγματικά συστήματα – φαινόμενα είναι ιδιαίτερα πολύπλοκα και αποτελούνται ή περιγράφονται από ένα τεράστιο εύρος (ακόμη και άπειρο πολλές φορές) διαφορετικών παραμέτρων. Δεύτερον, κανένα μαθηματικό μοντέλο δεν μπορεί να συμπεριλάβει όλες αυτές τις παραμέτρους, οι οποίες πολλές φορές είναι επιπλέον άγνωστες. Η τρίτη και σημαντικότερη παρατήρηση είναι ότι δεν απαιτείται από το μοντέλο να συμπεριλαμβάνει όλες τις πιθανές παραμέτρους που επηρεάζουν ένα σύστημα αλλά μόνο τις πιο σημαντικές.

1.1.1 Διαδικασία Μαθηματικής Μοντελοποίησης

Η διαδικασία μαθηματικής μοντελοποίησης οποιουδήποτε φαινομένου μπορεί να περιγραφεί ακολουθώντας τα παρακάτω βήματα:

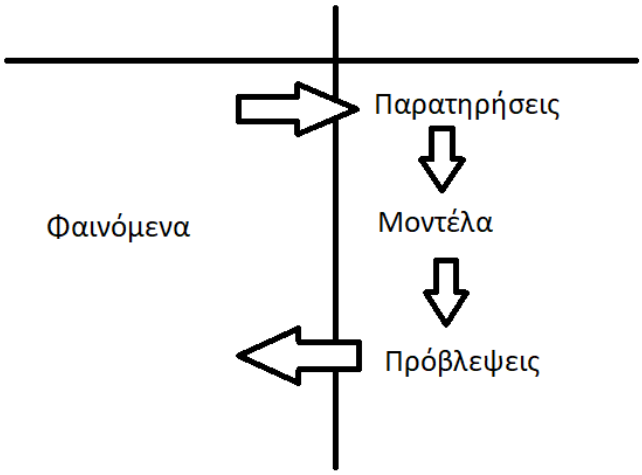
Βήμα 1: Συλλογή και οργάνωση δεδομένων, από πειραματικές μετρήσεις, για ένα συγκεκριμένο σύστημα – φαινόμενο.

Βήμα 2: Δημιουργία ενός μαθηματικού μοντέλου του συστήματος, μέσω κατάλληλων υποθέσεων/παραδοχών.

Βήμα 3: Επίλυση του μαθηματικού προβλήματος με τη χρήση υπαρχόντων, είτε με τη δημιουργία νέων, μαθηματικών εργαλείων.

Βήμα 4: Έλεγχος των προβλέψεων του μοντέλου μέσω πειραματικών παρατηρήσεων.

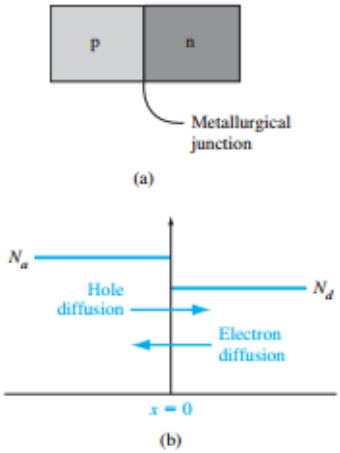
Βήμα 5: Αν οι προβλέψεις του μοντέλου δεν είναι ικανοποιητικές απαιτείται βελτίωση του μοντέλου και των υποθέσεων στις οποίες έχει βασισθεί και επανάληψη της διαδικασίας.



Σχήμα 1.1. Διαγραμματική περιγραφή της διαδικασίας της μαθηματικής μοντελοποίησης (Barbosa 2003).

1.2 Επαφή p-n

Η επαφή p-n αποτελεί μια βασική δομή των ημιαγωγικών διατάξεων για αυτό το λόγο η θεωρία της είναι πολύ σημαντική στην κατανόηση της λειτουργίας των επαφών αυτού του είδους. Η γεωμετρία της επαφής p-n φαίνεται στο σχήμα 1.2, ενώ η κατασκευή τους συνήθως γίνεται επεμβαίνοντας κατάλληλα με ειδικές μεθόδους στα άκρα ενός ημιαγώγιμου μονοκρυστάλλου. Δηλαδή, η επαφή p-n είναι ένας μονοκρύσταλλος, όπου μια περιοχή είναι νοθευμένη με δότες (n τύπου περιοχή) και η άλλη με αποδέκτες (p τύπου), για το λόγο αυτό καλείται και ομοεπαφή (homojunction). Στις περισσότερες περιπτώσεις, θεωρούμε ότι κάθε περιοχή είναι ομοιόμορφα νοθευμένη. Μεταξύ αυτών περιοχών δημιουργείται μια περιοχή ηλεκτρικά ουδέτερη περιοχή, η περιοχή απογύμνωσης, που είναι υπεύθυνη για την ιδιότητα που εμφανίζουν οι επαφές να επιτρέπουν ή όχι τη ροή του ρεύματος.

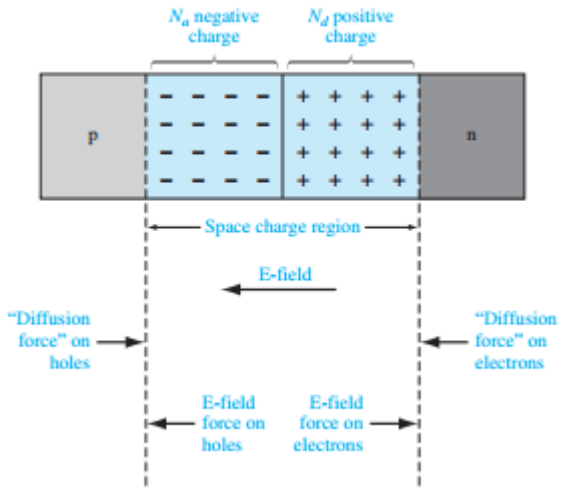


Σχήμα 1.2. (a) Απλοποιημένη γεωμετρία μιας επαφής p-n (b) συγκεντρώσεις δοτών και αποδεκτών σε μια επαφή p-n (Neamen 2003).

1.2.1 Περιοχή απογύμνωσης

Κατά την υλοποίηση μιας p-n επαφής, αρχικά υπάρχουν μόνο οπές στην p-περιοχή και μόνο ηλεκτρόνια στην n-περιοχή. Οι οπές με τα αρνητικά ιόντα της πρόσμιξης που δρουν ως αποδέκτες ηλεκτρονίων στην p-περιοχή και τα ηλεκτρόνια με τα θετικά φορτισμένα ιόντα της πρόσμιξης που δρουν ως δότες ηλεκτρονίων στην n-περιοχή εξασφαλίζουν την ηλεκτρική ουδετερότητα στις δύο αυτές περιοχές. Όμως, λόγω της ύπαρξης βαθμίδας συγκέντρωσης τόσο για τις οπές όσο και για τα ηλεκτρόνια οι οπές αρχίζουν να κινούνται προς την n-περιοχή και τα ηλεκτρόνια προς την p-περιοχή. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την αλληλο-εξουδετέρωση των φορέων και τη δημιουργία εκατέρωθεν της επαφής δύο τμημάτων «απογυμνωμένων» από τους φορείς τους, δηλαδή ένα τμήμα στον ημιαγωγό-n με θετικά ιόντα μόνο, χωρίς ηλεκτρόνια και ένα τμήμα στον ημιαγωγό-p με αρνητικά ιόντα μόνο, χωρίς οπές (Σχήμα 1.3). Σε αντίθεση με τους ευκίνητους φορείς των ημιαγωγών (ελεύθερα ηλεκτρόνια και οπές) που τείνουν να διαχέονται προς τις περιοχές με τη μικρότερη συγκέντρωσή τους, η συγκέντρωση των αρνητικών ιόντων στα οποία μετατράπηκαν οι αποδέκτες του τμήματος τύπου p και η συγκέντρωση των θετικών ιόντων στα οποία μετατράπηκαν οι δότες στο τμήμα τύπου n, παραμένουν αμετάβλητες, αφού τα ιόντα μένουν ακίνητα στο σώμα του μονοκρυστάλλου. Έτσι, το υλικό χάνει τοπικά την ηλεκτρική του ουδετερότητα και οι πλευρές της ένωσης φορτίζονται με αντίθετα ηλεκτρικά φορτία, με αποτέλεσμα να εμφανίζεται μια διαφορά δυναμικού, της οποίας το ηλεκτροστατικό πεδίο εμποδίζει την παραπέρα διάχυση των φορέων προς το απέναντι τμήμα της ένω-

σης. Τα δύο αυτά τμήματα (n-p συνιστούν την περιοχή απογύμνωσης (depletion region) της διόδου (Σχήμα 1.3). Έξω από την περιοχή απογύμνωσης η δομή των ημιαγωγών παραμένει ως είχε καθώς η βαθμίδα συγκέντρωσης και ηλεκτρικό πεδίο αλληλοεξουδετερώνονται.



Σχήμα 1.3. Η περιοχή απογύμνωσης, το ηλεκτρικό πεδίο και οι δυνάμεις διάχυσης από τη βαθμίδα συγκέντρωσης (Neamen 2003).

1.2.2 Θερμοδυναμική ισορροπία

Στη θερμοδυναμική ισορροπία όπου δεν ασκείται καμία τάση (μηδενική πόλωση) η ενέργεια Fermi είναι σταθερή σε όλη τη δομή, όμως η ζώνη απογύμνωσης δημιουργεί ένα εγγενές φράγμα στη μετακίνηση ηλεκτρονίων διαμέσου αυτής. Το ελάχιστο δυναμικό V_i που πρέπει να επιβληθεί για να υπερπηδηθεί η ζώνη απογύμνωσης από τα ηλεκτρόνια ονομάζεται φράγμα δυναμικού. Αυτό το φράγμα δυναμικού δίνεται από τη σχέση:

$$V_i = |\varphi_{Fp}| + |\varphi_{Fn}| (1.1)$$

Γνωρίζοντας πως η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας δίνεται από τη σχέση:

$$n_0 = N_C e^{\frac{-(E_C - E_F)}{kT}} = n_i e^{\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}} \ (1.2)$$

Από το σχήμα 1.4 έχω:

$$e\varphi_{Fn} = E_{Fi} - E_F \ (1.3)$$

Άρα:

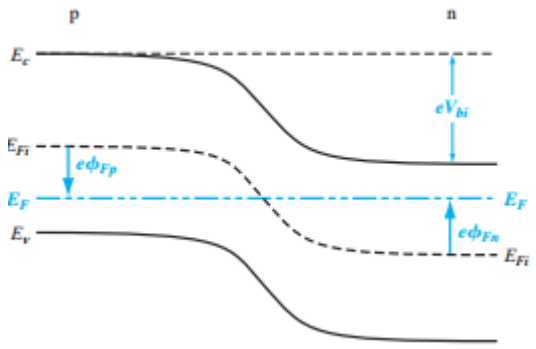
$$(1.2) \overset{(1.3)}{\Longrightarrow} n_0 = n_i e^{\frac{-e\varphi_{Fn}}{kT}} \Longrightarrow \varphi_{Fn} = \frac{-kT}{e} \ln\left(\frac{N_d}{n_i}\right) (1.4)$$

Αντίστοιχα για την p-περιοχή έχω:

$$\varphi_{Fp} = \frac{kT}{e} \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right) \ (1.5)$$

Οπότε:

$$V_i = |\varphi_{Fp}| + |\varphi_{Fn}| = \frac{kT}{e} \ln\left(\frac{N_\alpha N_d}{n_i^2}\right) = V_t \ln\left(\frac{N_\alpha N_d}{n_i^2}\right) (1.6)$$



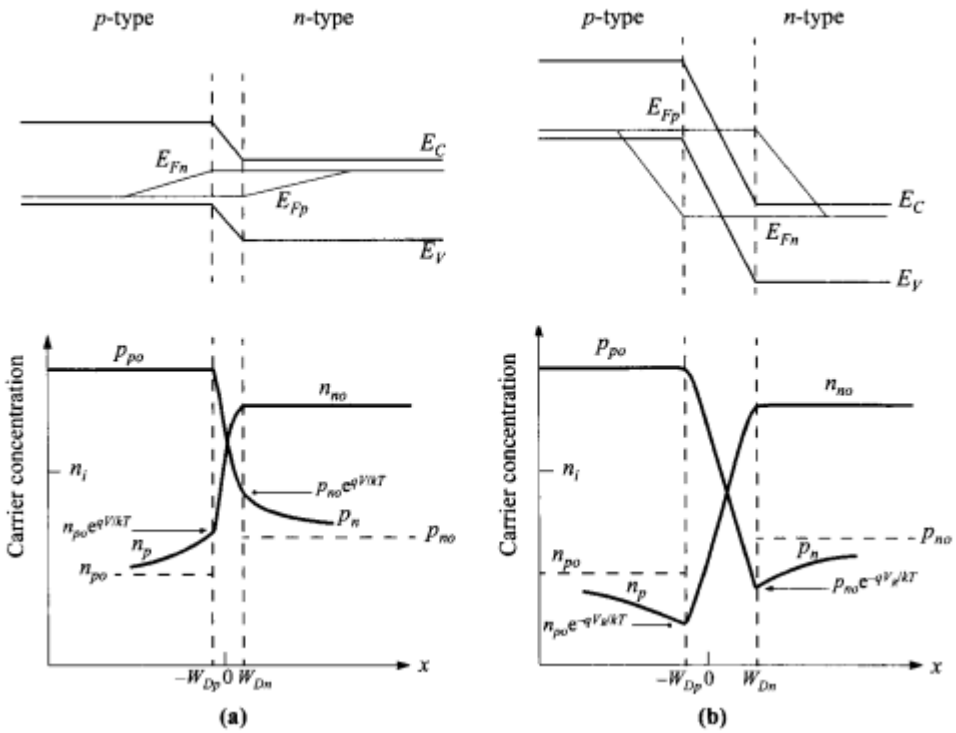
Σχήμα 1.4. Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών επαφής p-n στη θερμοδυναμική ισορροπία (Neamen 2003).

1.2.3 Πόλωση διόδου p-n και χαρακτηριστική τάσης ρεύματος

Ανάλογα με την σύνδεση εξωτερικής πηγής με τα άκρα της διόδου p-n διακρίνουμε δύο είδη πόλωσής της:

- Ορθή πόλωση (forward bias), όταν ο θετικός πόλος της εξωτερικής πηγής συνδέεται με το τμήμα p της διόδου.
- Ανάστροφη πόλωση (reverse bias), όταν ο θετικός πόλος της εξωτερικής πηγής συνδέεται με το τμήμα n της διόδου.

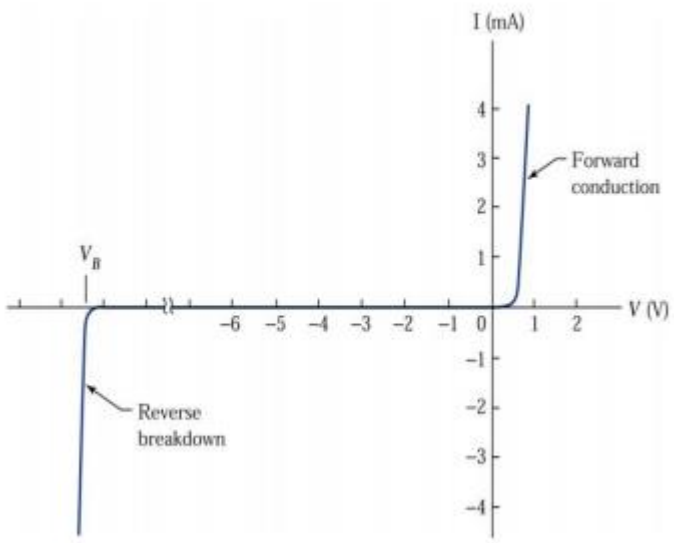
Κατά την ορθή πόλωση της διόδου, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.5, το φράγμα δυναμικού χαμηλώνει με αποτέλεσμα οπές από την p-περιοχή να εισέρχονται στην n-περιοχή και ηλεκτρόνια από την n-περιοχή να εισέρχονται στην p-περιοχή. Παρατηρείται λοιπόν έγχυση φορέων μειονότητας τόσο στην p-περιοχή όσο και στην n-περιοχή. Αυτό έχει ως συνέπεια η περιοχή απογύμνωσης να μικραίνει καθώς το θετικό δυναμικό στην p περιοχή απωθεί τις θετικά φορτισμένες οπές. Η μορφή της χαρακτηριστικής του ρεύματος σε αυτή την περίπτωση παρατηρούμε πως είναι εκθετική (σχήμα 1.6).



Σχήμα 1.5. Ενεργειακά διαγράμματα και κατανομές των ρευμάτων στην (α) ορθή και (b) ανάστροφη πόλωση (Sze and Ng 2006).

Αντίθετα κατά την ανάστροφη πόλωση το φράγμα δυναμικού μεγαλώνει έναντι της τιμής που είχε υπό συνθήκες ανοικτού κυκλώματος με αποτέλεσμα η συγκέντρωση των φορέων μειονότητας να πέφτει κάτω από τις τιμές που είχε αρχικά, ο κάθε τύπος ημιαγωγού. Το γεγονός αυτό αποτρέπει τη διάχυση φορέων στην περιοχή απογύμνωσης, μιας και δεν διαθέτουν την απαιτούμενη ενέργεια για να υπερβούν το φράγμα. Στην πράξη αυτό παρουσιάζεται ως σταθερό ρεύμα που διαρρέει ανάποδα την επαφή. Το ρεύμα αυτό οφείλεται τόσο στη διάχυση, όσο και στη δημιουργία φορέων λόγω της θερμικής διέγερσης του κρυστάλλου (ηλεκτρονίων-

οπών), ενώ γραφικά παρουσιάζεται ως σταθερό ρεύμα. Αλλά, όταν η εξωτερική τάση φθάσει μια ορισμένη τιμή (Vz) που λέγεται τάση διάσπασης ή τάση Zener, παρατηρείται ραγδαία αύξηση του ρεύματος. Το φαινόμενο αυτό καλείται κατάρρευση της διόδου.



Σχήμα 1.6. Χαρακτηριστική ρεύματος-τάσης διόδου p-n.

Η χαρακτηριστική I-V μιας ιδανικής διόδου δίνεται από τη σχέση 1.7 που είναι η εξίσωση του Shockley. Προκύπτει από την παραδοχή ότι το συνολικό ρεύμα αποτελείται από το άθροισμα των ρευμάτων διάχυσης των φορέων στην επαφή. Υποθέτοντας ότι το μήκος της περιοχής n είναι μεγάλο σε σχέση με το μήκος διάχυσης οπών L_p, η πυκνότητα του ρεύματος διάχυσης είναι:

$$J_{Dp} = -qD_P \frac{dp_n(x)}{dx} = -qD_P \frac{d\Delta p_n(x)}{dx}$$

διότι:

$$\Delta p_n(x) = p_n(x) - p_{n0} \Longrightarrow \frac{\Delta p_n(x)}{dx} = \frac{dp_n(x)}{dx}$$

όπου για x=0 $\Delta p_n(0) = p_n(0) - p_{n0} = p_{n0} e^{\frac{qV_a}{kT}} - p_{n0} = p_{n0}(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1)$

Από την εξίσωση συνέχειας για τις οπές στάσιμη κατάσταση (steady state):

$$\frac{\partial p_n(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{q}\frac{\partial J_p}{\partial x} - \frac{p_n(x,t) - p_{n0}}{\tau_p} + G(x,t) \Longrightarrow -\frac{1}{q}\frac{\partial J_p}{\partial x} - \frac{p_n(x,t) - p_{n0}}{\tau_p} = 0$$

$$\Longrightarrow \frac{p_n(x,t) - p_{n0}}{\tau_p} = \frac{1}{q} q D_P \frac{d^2 p_n(x)}{dx^2} \Longrightarrow \frac{d^2 p_n(x)}{dx^2} = \frac{\Delta p_n(x)}{{L_p}^2} \Longrightarrow$$

$$\frac{\Delta p_n(x)}{{L_p}^2} = \frac{d^2 \Delta p_n(x)}{dx^2}$$

Με ${L_p}^2 = D_P \tau_p$

Η λύση της εξίσωσης συνέχειας είναι: $\Delta p_n(x) = \Delta p_n(0) e^{-x/L_p} = p_{n0}(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1) e^{-x/L_p}$

Άρα στο x=0:

$$J_{Dp} = -q D_P \frac{d\Delta p_n(x)}{dx} = \frac{q D_P}{L_p} p_{n0} \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1\right) = \frac{q D_P}{L_p} \frac{n_i^2}{N_d} (e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1)$$

Με αντίστοιχο τρόπο βρίσκω την πυκνότητα στην περιοχή p εξαιτίας της διάχυσης των ηλεκτρονίων:

$$J_{Dn} = q n_i^2 \frac{D_n}{L_n N_a} \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1\right)$$

Άρα η ολική πυκνότητα ρεύματος εξαιτίας της διάχυσης των φορέων είναι:

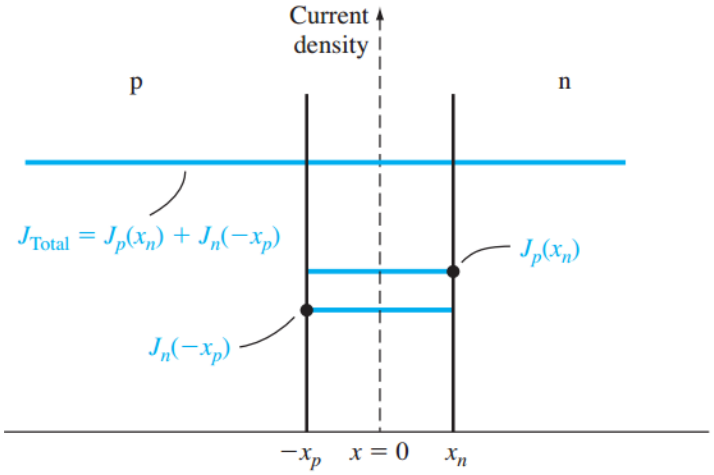
$$J = J_{Dp} + J_{Dn} = q n_i^2 \frac{D_p}{L_p N_d} \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1\right) + q n_i^2 \frac{D_n}{L_n N_a} \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1\right)$$

$$= q n_i^2 \left(\frac{D_p}{L_p N_d} + \frac{D_n}{L_n N_a}\right) \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1\right)$$

$$J = J_S \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1\right) \quad (1.7)$$

Με $J_S = q n_i^2 \left(\frac{D_p}{L_p N_d} + \frac{D_n}{L_n N_a}\right)$

Όπου J είναι το ρεύμα της διόδου, J_S είναι η πυκνότητα του ρεύματος κόρου, V_α είναι η τάση της διόδου και n είναι ο παράγοντας εκπομπής.



Σχήμα 1.7. Πυκνότητες ρεύματος ηλεκτρονίων και οπών στην περιοχή απογύμνωσης.

1.2.4 Χωρητικότητα p-n επαφής

Η περιοχή απογύμνωσης λειτουργεί ως πυκνωτής λόγω της ύπαρξης των φορτίων, άρα έχει τα ακόλουθα χαρακτηριστικά:

- Χωρητικότητα επαφής ή στατική χωρητικότητα φραγμού: $C_{dep} = \frac{\Delta Q}{\Delta V} = \varepsilon \frac{A}{W}$
- Διαφορά δυναμικού: $\Delta V = V_i - V$

όπου: ΔQ η μεταβολή του φορτίου της ζώνης, A η επιφάνεια της ζώνης, W το μήκος της, ε η διηλεκτρική σταθερά του ημιαγωγού, V η εξωτερικά επιβαλλόμενη τάση, V_i το δυναμικό φραγμού, C_T η χωρητικότητα.

Θεωρώντας πως το φορτίο και το πλάτος W της περιοχής απογύμνωσης είναι:

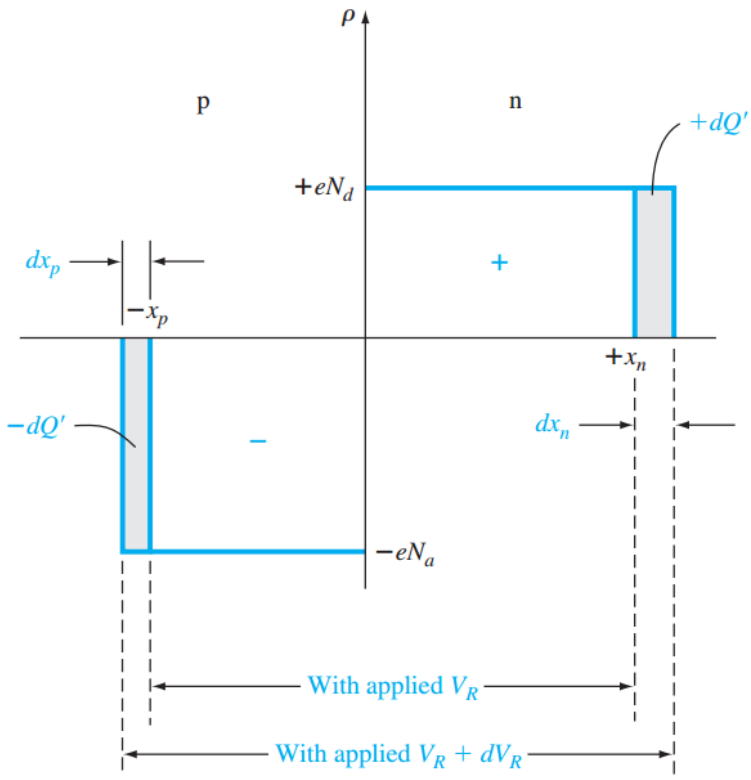
$$Q = eN_dWA$$

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon(V_i - V)}{e}\frac{N_a}{N_d(N_a + N_d)}}$$

Άρα,

$$Q = eN_dWA = eN_dA\sqrt{\frac{2\varepsilon(V_i - V)}{e}\frac{N_a}{N_d(N_a + N_d)}} = A\sqrt{2\varepsilon e(V_i - V)\frac{N_aN_d}{(N_a + N_d)}}$$

Παραγωγίζοντας έχω τη χωρητικότητα της επαφής: $C_{dep} = \frac{\Delta Q}{\Delta V} = \frac{A}{\sqrt{(V_i - V)}}\sqrt{\frac{\varepsilon e}{2}\frac{N_a N_d}{(N_a + N_d)}}$



Σχήμα 1.8. Αλλαγή στην κατανομή του φορτίου χώρου λόγω αλλαγής πόλωσης

1.2.5 Χρήση επαφών p-n

Η επαφή p-n χρησιμοποιείται κυρίως ως:

- Ανορθωτής σε αναλογικά ηλεκτρονικά κυκλώματα (ελεγχόμενοι διακόπτες για τη διέλευση ή όχι του ηλεκτρικού ρεύματος – ημιανόρθωση, πλήρης ανόρθωση)
- Ψαλιδιστές σε ψηφιακά ηλεκτρονικά κυκλώματα (παραγωγή παλμικών σημάτων).
- Συσκευή ελέγχου για την ασφαλή κατεύθυνση του ρεύματος.
- Πολλαπλασιαστής για ανύψωση της τάσης σε εφαρμογές χαμηλής ηλεκτρικής ισχύος, π.χ. σε παλμογράφο, οθόνη Η/Υ, κλπ.
- Για την καταστολή του σπινθήρα που παράγεται στο διακόπτη, όταν διακόπτεται ένα κύκλωμα με υψηλή επαγωγική αντίσταση (π.χ. ένα πηνίο).

1.3 Ετεροεπαφές

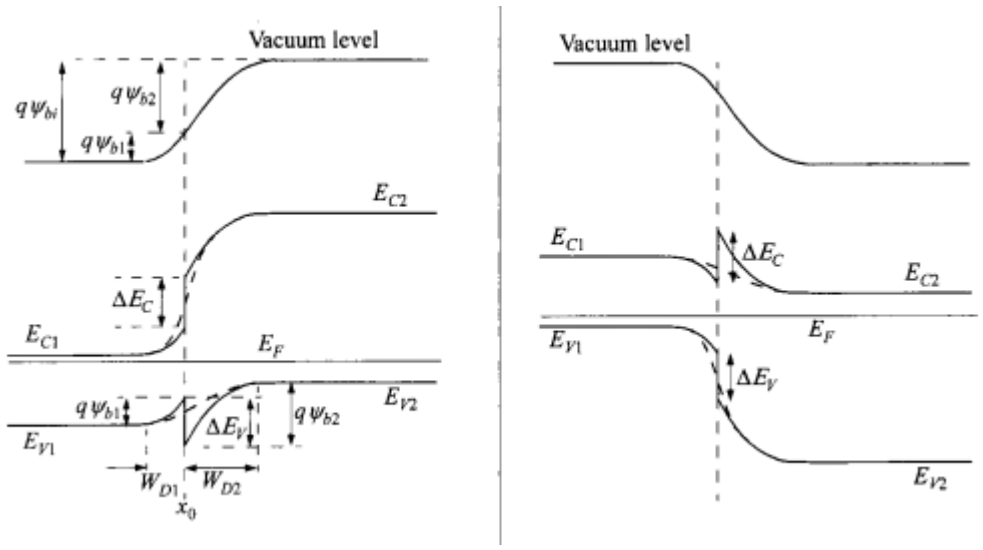
Ετεροεπαφή είναι η επαφή που αποτελείται από διαφορετικά υλικά, τα υλικά αυτά μπορεί να είναι μέταλλα, ημιαγωγοί και μονωτές. Έτσι δημιουργούνται ετεροεπαφές ημιαγωγού-ημιαγωγού (n-p, n-p-n και p-n-p), ετεροεπαφές με διαμόρφωση μέσω εμπλουτισμού (Modulation-doped heterojunctions) και μετάλλου-ημιαγωγού (Schottky barriers). Το χαρακτηριστικό των ετεροεπαφών που παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον και συμβάλει σημαντικά στις ιδιότητες που παρουσιάζουν είναι η ασυνέχεια των ενεργειακών επιπέδων στη διεπιφάνεια. Πιο συγκεκριμένα, επειδή τα διαφορετικά υλικά έχουν διαφορετική δυναμική ενέργεια έχει ως συνέπεια εκεί που είναι χαμηλότερη να δημιουργείται ένα κβαντικό πηγάδι κατά τη διεύθυνση ανάπτυξής της ετεροδομής λόγω του εντοπισμού φορέων. Ωστόσο, στο επίπεδο παράλληλα στην ενδοεπιφάνεια, οι φορείς παραμένουν ελεύθεροι δημιουργώντας έτσι ένα ψευδο-δισδιάστατο σύστημα. Το σύστημα αυτό έχει καινούργια ηλεκτρονική δομή, άρα και ηλεκτρικές και οπτικές ιδιότητες.

1.3.1 Ετεροεπαφές ημιαγωγού-ημιαγωγού

Ετεροεπαφή ημιαγωγών ονομάζεται η επαφή μεταξύ δύο (2) διαφορετικών ημιαγωγών. Αν οι ημιαγωγοί είναι του ίδιου τύπου αγωγιμότητας, δηλαδή είναι n -n και p- p τότε ονομάζεται ισότυπη και αν είναι διαφορετικού τύπου αγωγιμότητας (n-p ή p-n) ονομάζεται ανισότυπη.

Ο πρώτος που χρησιμοποίησε τον όρο ετεροεπαφή ήταν ο Shockley το 1951 και πρότεινε να χρησιμοποιηθούν ως επαφές μεταξύ εκπομπού και βάσης στα διπολικά τρανζίστορ. Τον ίδιο χρόνο ο Gubanov δημοσίευσε μια θεωρητική εργασία για τις ετεροεπαφές, όπου τις κατατάσσει σε κατηγορίες και κάνει μια πρώτη προσπάθεια να αναλύσει τη λειτουργία τους. Αργότερα, ο Kroemer ανέλυσε κάτι παρόμοιο περιγράφοντας θεωρητικά τη λειτουργία των διπολικών τρανζίστορ. Τελικά, η πρώτη ετεροεπαφή έγινε από τον Anderson το 1960.

Οι ετεροεπαφές ημιαγωγών, συνήθως αποτελούνται από ημιαγωγούς με διαφορετικό ενεργειακό χάσμα έτσι ώστε να υπάρχει ασυνέχεια στις ζώνες σθένους και αγωγιμότητας (σχήμα 1.9). Επιπλέον, κατά την εναπόθεση ενός ημιαγωγού σε έναν άλλο με οποιαδήποτε μέθοδο έχει ως αποτέλεσμα την εμφάνιση ατελειών-παγίδων στην επαφή, λόγω του ότι έχουν διαφορετικές σταθερές πλέγματος. Έτσι, κατά τη μεταφορά των φορέων διαμέσου αυτής της περιοχής πολλές φορές η συμπεριφορά τους αποκλίνει από την ιδανική.



Σχήμα 1.9. Ενεργειακά διαγράμματα ανισότυπων n-p ετεροεπαφών (ο n-τύπου ημιαγωγός έχει το μικρότερο ενεργειακό χάσμα).

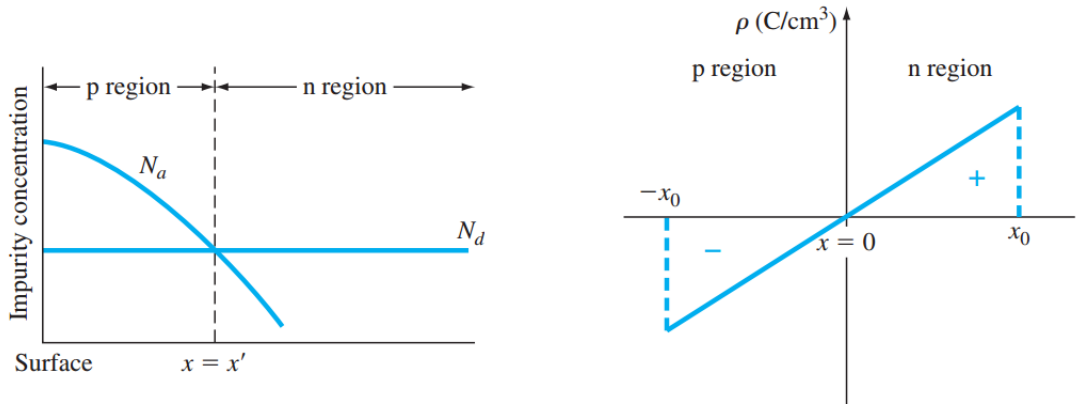
1.3.2 Ετεροεπαφές με διαμόρφωση μέσω εμπλουτισμού (Modulation-doped heterojunctions)

Τόσο στις επαφές p-n, όσο και στις επαφές ημιαγωγού-ημιαγωγού που είδαμε παραπάνω, έχουμε υποθέσει πως κάθε περιοχή του ημιαγωγού είναι ομοιόμορφα νοθευμένη, όμως υπάρχουν επαφές που αποτελούνται από περιοχές με διαφορετική νόθευση. Τέτοιες επαφές χρησιμοποιούνται κυρίως για να επιτευχθούν ειδικά χαρακτηριστικά χωρητικότητας. Τα μοντέλα μεταβλητής νόθευσης που υπάρχουν είναι:

- Επαφές γραμμικά μεταβλητής νόθευσης
- Επαφές με απότομη μεταβολή νόθευσης

1.3.2.1 Επαφές γραμμικά μεταβλητής νόθευσης

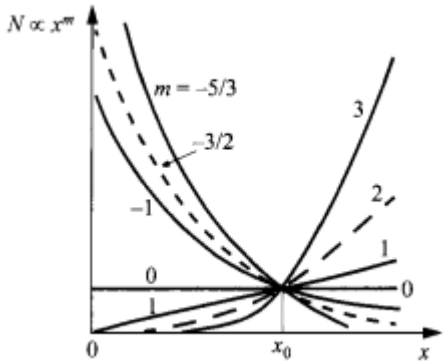
Αυτού του τύπου οι επαφές δημιουργούνται, για παράδειγμα όταν σε έναν νοθευμένο ημιαγωγό τύπου n διαχυθούν αποδέκτες N_α στην επιφάνεια. Έτσι, η συγκέντρωση νόθευσης που επεκτείνεται και στις δύο περιοχές της επαφής (διεπαφή στο $x=x_0$) προσεγγίζεται με γραμμικό τρόπο τόσο στην n, όσο και στην p περιοχή.



Σχήμα 1.10. Συγκεντρώσεις νόθευσης αποδεκτών σε μια επαφή p-n (αριστερά) και η πυκνότητα φορτίου χώρου σε μια γραμμικά μεταβλητής νόθευσης επαφή (δεξιά).

1.3.2.2 Επαφές με απότομη μεταβολή νόθευσης

Εκτός από τις επαφές με γραμμικά μεταβλητή νόθευση που είδαμε παραπάνω υπάρχουν και επαφές όπου η συγκέντρωση νοθεύσεων δίνεται από τη σχέση: $N = Bx^m$ $\mu\varepsilon$ $x > 0$. Η περίπτωση όπου m=0, αντιστοιχεί στην επαφή ομοιόμορφης νόθευσης, όπου m=1 στην επαφή γραμμικά μεταβλητής νόθευσης που είδαμε παραπάνω. Ενώ, όταν m<0 έχουμε τη λεγόμενη επαφή απότομης μεταβολής νόθευσης (hyperabrupt junction), όπου η χωρητικότητα γίνεται μια σταθερή συνάρτηση της τάσης ανάστροφης πόλωσης που είναι το χαρακτηριστικό των διόδων βαρακτορ (varactor).



Σχήμα 1.11. Διάφορες κατανομές νόθευσης (κανονικοποιημένες στο x_o) για επαφές με απότομη μεταβολή νόθευσης.

1.3.3 Επαφή μετάλλου-ημιαγωγού (επαφή Schottky)

Η πρώτη συστηματική έρευνα στις ανορθωτικές διατάξεις μετάλλου-ημιαγωγού οφείλεται στον Braun, ο οποίος το 1874 παρατήρησε ότι ένας ανορθωτής τάσης μπορεί να κατασκευαστεί φέρνοντας σε επαφή ένα σουλφίδιο μετάλλου (χαλκού ή σιδήρου) με υδράργυρο. Έτσι παρατήρησε την εξάρτηση της συνολικής αντίστασης ενός σημείου επαφής από το δυναμικό πόλωσης και τις διεπιφανειακές καταστάσεις. Αυτοί οι πρώτοι ανορθωτές δεν χρησιμοποιήθηκαν μόνο σαν ανιχνευτές κρυστάλλων, αλλά το 1900 περίπου χρησιμοποιήθηκαν την πρώτη εποχή του ραδιοφώνου. Στη συνέχεια, το 1931 ο Wilson διατύπωσε την θεωρία μεταφοράς (transport theory) στους ημιαγωγούς βασιζόμενος στη θεωρία ζωνών (band theory) των στερεών, όπου ήταν η κυρίαρχη θεωρία που εφαρμόστηκε μετά στις επαφές μετάλλου-ημιαγωγού. Το 1938 ο Schottky πρότεινε ότι το φράγμα δυναμικού θα μπορούσε να προκύψει από μόνιμα χωρικά φορτία στον ημιαγωγό χωρίς την παρουσία χημικού στρώματος. Το μοντέλο που προέκυψε από αυτήν την πρόταση είναι γνωστό ως φράγμα Schottky (Schottky barrier). Το 1938, ο Mott επινόησε ένα πιο κατάλληλο θεωρητικό μοντέλο το οποίο είναι γνωστό ως φράγμα Mott. Τα μοντέλα αυτά αναπτύχθηκαν περαιτέρω από τον Bethe το 1942 με αποτέλεσμα να προκύψει το μοντέλο της θερμιονικής εκπομπής που περιγράφει με ακρίβεια την ηλεκτρική συμπεριφορά.

Οι επαφές μετάλλου-ημιαγωγού συμπεριφέρονται είτε ως ανορθωτικές, είτε ως ωμικές όπου ανεξάρτητα από το πρόσημο της της εφαρμοζόμενης τάσης η επαφή δείχνει μικρή αντίσταση.

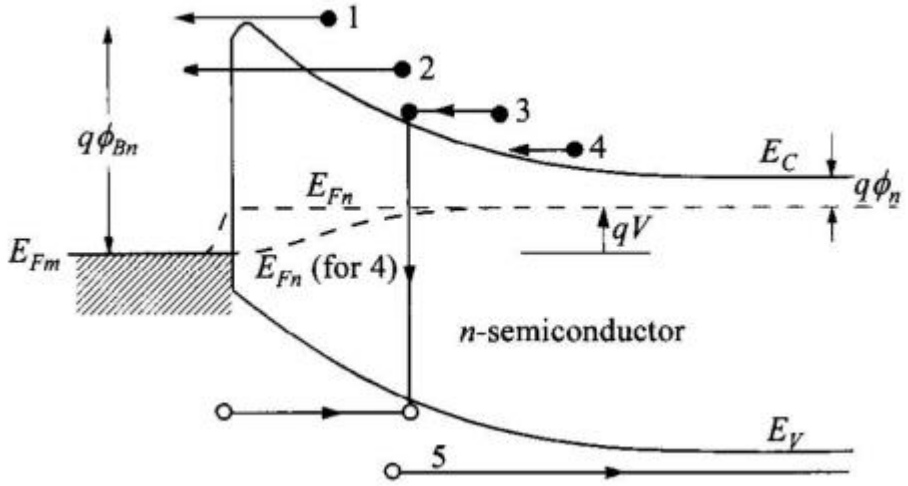
1.3.3.1 Ανορθωτική επαφή

Όπως αναφέραμε στην ιστορική αναδρομή που έγινε παραπάνω το κύριο μοντέλο που περιγράφει σχετικά με ακρίβεια τη μεταφορά ρεύματος στους ημιαγωγούς υψηλής ευκινησίας είναι αυτό της θερμιονικής εκπομπής που θα αναπτυχθεί εκτενέστερα στο επόμενο κεφάλαιο. Η μεταφορά ρεύματος στις επαφές μετάλλου- ημιαγωγού πραγματοποιείται κυρίως μέσω των φορέων πλειονότητας. Υπάρχουν 5 διαφορετικές διαδικασίες μεταφοράς στην ορθή πόλωση, αυτές είναι:

- εκπομπή ηλεκτρονίων από τον ημιαγωγό στο μέταλλο υπερπηδώντας το φράγμα δυναμικού [η κυρίαρχη διαδικασία για διόδους Schottky με ημιαγωγούς με μέτρια συγκέντρωση προσμίξεων (π.χ. Si με) σε μέτριες θερμοκρασίες (π.χ. 300 K)],

- φαινόμενο σήραγγος (σημαντική για ημιαγωγούς με υψηλή συγκέντρωση προσμίξεων και υπεύθυνη για τις περισσότερες ωμικές επαφές),
- επανασύνδεση στην περιοχή απογύμνωσης
- διάχυση ηλεκτρονίων στην περιοχή απογύμνωσης
- έγχυση οπών από το μέταλλο και διάχυσή τους στον ημιαγωγό (ισοδύναμη με την διαδικασία επανασύνδεσης στην ουδέτερη περιοχή).

Επιπροσθέτως, μπορεί να υπάρξει ρεύμα διαρροής στις άκρες λόγω υψηλού ηλεκτρικού πεδίου στην περιφέρεια της επαφής ή ρεύμα στην διεπιφάνεια λόγω ύπαρξης παγίδων.



Σχήμα 1.12. Οι βασικές διαδικασίες μεταφοράς υπό ορθή πόλωση. (1) Θερμιονική εκπομπή, (2) Φαινόμενο σήραγγος, (3) Επανασύνδεση, (4) Διάχυση ηλεκτρονίων και (5) Διάχυση οπών.

Η θεωρία θερμιονικής εκπομπής διέπεται από τις υποθέσεις ότι:

- το ύψος του φράγματος είναι κατά πολύ μεγαλύτερο της ποσότητας κΤ
- θερμική ισορροπία αποκαθίσταται στο επίπεδο που καθορίζει την εκπομπή
- η ύπαρξη ενός δικτύου ροής ρεύματος δεν επηρεάζει την ισορροπία αυτή, έτσι ώστε μπορεί να γίνει η υπέρθεση δύο ροών ρεύματος – μία από το μέταλλο στον ημιαγωγό και η άλλη από τον ημιαγωγό στο μέταλλο, η κάθε μία με διαφορετικό επίπεδο Fermi (Quasi Fermi Level).

Αν η θερμιονική εκπομπή είναι ο μοναδικός μηχανισμός, τότε το είναι σταθερό εντός της περιοχής απογύμνωσης (Σχήμα 1.12). Λόγω αυτών των υποθέσεων, το σχήμα του φράγματος είναι ασήμαντο και η ροή ρεύματος εξαρτάται μόνο από το ύψος φράγματος. Η πυκνότητα ρεύματος από τον ημιαγωγό στο μέταλλο δίνεται από την συγκέντρωση των η-λεκτρονίων με τιμές ενεργειών επαρκείς έτσι ώστε να υπερπηδήσουν το φράγμα δυναμικού αντίθετα της κατεύθυνσης :

$$J_{S\to m} = \int_{E_C'}^{\infty} u_x \, dn$$

όπου $E_C' = E_F + q\varphi_B$ είναι η ελάχιστη απαιτούμενη ενέργεια για θερμιονική εκπομπή εντός του μετάλλου και u_x είναι η ταχύτητα φορέων προς την κατεύθυνση της μεταφοράς.

Η πυκνότητα ηλεκτρονίων σε μία οριακή ενεργειακή έκταση δίνεται από τη σχέση:

$$dn = N(E)F(E)dE = \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3}\sqrt{E - E_C}\, e^{\frac{-(E-E_C')}{kT}} dE$$

όπου $N(E)$και $F(E)$ η πυκνότητα καταστάσεων και η συνάρτηση επιμερισμού και m_n^* η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου στον ημιαγωγό.

Αν όλες οι ενέργειες ηλεκτρονίων πάνω από E_C θεωρούνται κινητικές ενέργειες τότε:

$$\frac{1}{2} m_n^* u^2 = E - E_C$$

Αν η ταχύτητα αναλυθεί στις συνιστώσες τις με την συνιστώσα x παράλληλη στην κατεύθυνση της μεταφοράς, τότε:

$$u^2 = u_X^2 + u_Y^2 + u_Z^2$$

Γνωρίζοντας ότι:

$$4\pi u^2 du = du_x du_y du_z$$

Έχω:

$$J_{S\to m} = 2q(\frac{m^*}{h})^3 e^{-\frac{q\Phi_n}{kT}} \int_{u_{0x}}^{\infty} u_x e^{(-\frac{m^* u_x^2}{2kT})}\, du_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-\frac{m^* u_y^2}{2kT})}\, du_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-\frac{m^* u_z^2}{2kT})} du_z$$

$$= (\frac{4\pi q m^* k^2}{h^3}) T^2 e^{-\frac{q\Phi_n}{kT}} e^{(-\frac{m^* u_{0x}^2}{2kT})}$$

Γνωρίζοντας ότι ταχύτητα είναι η ελάχιστη απαιτούμενη ταχύτητα στην κατεύθυνση x για να υπερπηδηθεί το φράγμα και δίνεται από:

$$\frac{m^* u_{0x}^2}{2} = q(V_i - V)$$

Και ότι όταν δεν έχω πόλωση ισχύει:

$$J_{S\to m} = J_{m\to S}$$

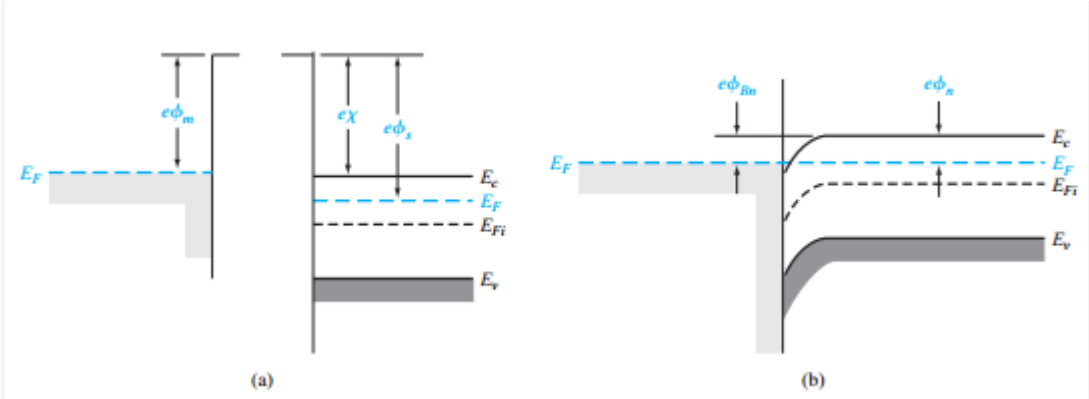
Καταλήγω στη σχέση της συνολικής πυκνότητας ρεύματος για την ορθή πόλωση:

$$J_{tot} = A^* T^2 e^{-q\Phi_b/kT} \left(e^{qV_a/nkT} - 1\right)$$

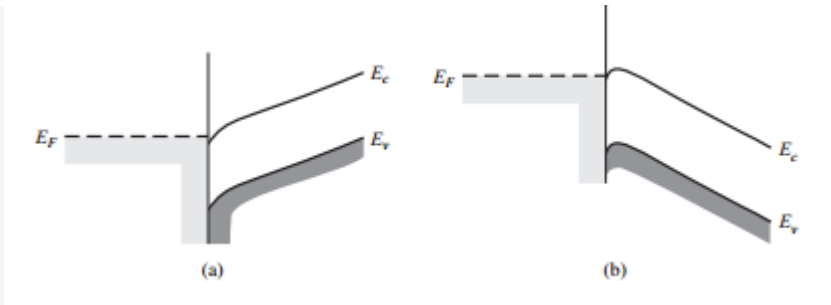
Με $A^* = (\frac{4\pi q m^* k^2}{h^3})$ τη σταθερά Richardson.

1.3.3.2 Ωμική επαφή

Ως ωμική επαφή ορίζεται η επαφή μετάλλου-ημιαγωγού που έχει αμελητέα αντίσταση σε σχέση με τη συνολική του κυρίως σώματος του ημιαγωγού. Μια ικανοποιητική ωμική επαφή για να θεωρείται ωμική δεν πρέπει να περιορίζει τη ροή του ρεύματος, σε επαφές τύπου n ισχύει $\Phi_m<\Phi_n$, ενώ σε τύπου p ισχύει $\Phi_m>\Phi_n$. Τα ηλεκτρόνια από το μέταλλο μεταβαίνουν στη ζώνη αγωγιμότητας του ημιαγωγού, έτσι δημιουργείται μια περιοχή συσσώρευσης ηλεκτρονίων κοντά στην επαφή που έχει ως συνέπεια να έχουμε ηλεκτρόνια αγωγιμότητας τόσο στη μεταλλική όσο και στην ημιαγώγιμη πλευρά. Σε αντίθεση με τις διόδους Schottky, όπου η περιοχή απογύμνωσης διαχωρίζει τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας του μετάλλου από αυτά του ημιαγωγού στις ωμικές επαφές όταν τα ηλεκτρόνια υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου κινηθούν από το μέταλλο προς τον ημιαγωγό ή αντίστροφα δεν χρειάζεται να υπερπηδήσουν κάποιο (σημαντικό) φράγμα δυναμικού, καθώς τα ηλεκτρόνια έχουν σχεδόν την ίδια ενέργεια.



Σχήμα 1.13. Ενεργειακό διάγραμμα ωμικής επαφής μετάλλου-ημιαγωγού n τύπου (a) πριν την επαφή και (b) μετά την επαφή.



Σχήμα 1.14. Ενεργειακό διάγραμμα ωμικής επαφής μετάλλου-ημιαγωγού n τύπου με εφαρμογή (a) θετικής τάσης στο μέταλλο (b) θετικής τάσης στο ημιαγωγό.

1.3.3.3 Πλεονεκτήματα επαφής μετάλλου-ημιαγωγού

Τα πλεονεκτήματα που παρουσιάζουν οι επαφές μετάλλου- ημιαγωγού σε σχέση με τα άλλα είδη επαφών είναι τα εξής:

- Εμφανίζουν μικρή τάση κατωφλίου στην ορθή πόλωση περίπου 0.2-0.3 volts, που είναι σημαντικό διότι μπορούμε να αποκτήσουμε την ίδια ένταση του ρεύματος εφαρμόζοντας λιγότερη τάση V.
- Εμφανίζουν μικρή χωρητικότητα επαφής,
- Εμφανίζουν μικρούς χρόνους αποκατάστασης, λόγω του γεγονότος ότι η αγωγιμότητα τους οφείλεται μόνο σε ένα είδος φορέων,
- Μπορούν να δουλέψουν σε υψηλές συχνότητες για αυτό χρησιμοποιούνται στα ραντάρ.

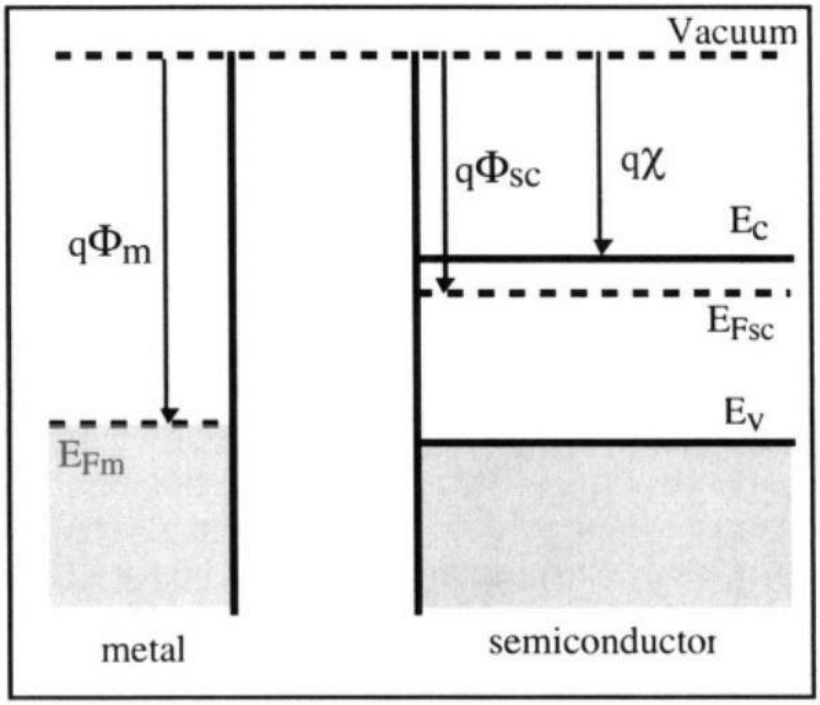
1.3.3.4 Εφαρμογές επαφής μετάλου-ημιαγωγού

Οι ανορθωτικές επαφές μετάλλου-ημιαγωγού είναι σημαντικές για το σχεδόν συνεχές ρεύμα της ανάστροφης πόλωσης όπου για το λόγω αυτό χρησιμοποιούνται ως ηλιακά κύτταρα, φωτο-ανιχνευτές (Filatzikioti et al. 2019) και ανιχνευτές ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (Semenov et al. 2010). Λόγω της μικρής χωρητικότητας της επαφής τους χρησιμοποιούνται σε τροφοδοτικά και γενικά σε κυκλώματα εισόδου, όπως κυκλώματα σύσφιξης. Ως ωμικές επαφές χρησιμοποιούνται στα κυκλώματα εισόδου ηλεκτρονικών και ημιαγωγικών διατάξεων.

Κεφάλαιο 2: Δομή ανορθωτικής επαφής

2.1 Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών

Σε έναν n-τύπου ημιαγωγό, τα ενεργειακά διαγράμματα του συστήματος μετάλλου-ημιαγωγού φαίνονται στο σχήμα 2.1. Το γινόμενο $q\Phi_m$ ορίζεται ως το έργο εξόδου του μετάλλου και είναι η ενέργεια που απαιτείται για την εξαγωγή του ηλεκτρονίου από το μέταλλο. Η ενέργεια αυτή ισούται με τη διαφορά ενέργειας από το επίπεδο Fermi μέχρι το επίπεδο του κενού. Με παρόμοιο τρόπο ορίζεται και το έργο εξόδου $q\Phi_{sc}$ του ημιαγωγού. Στην περίπτωση του ημιαγωγού, επειδή γνωρίζουμε πως υπάρχουν ηλεκτρόνια που έχουν ενέργεια μεγαλύτερη από το επίπεδο Fermi , ορίζουμε επιπλέον την ηλεκτρονική συγγένεια (electron affinity) qX ως την ενεργειακή διαφορά μεταξύ επιπέδου κενού και του άκρου της ζώνης αγωγιμότητας. Επιπλέον, σε αυτού του τύπου ημιαγωγό ισχύει $E_{Fm}<E_{Fsc}$.



Σχήμα 2.1. Ενεργειακές ζώνες μετάλλου και ημιαγωγού(Colinge 2002).

2.1.1 Θερμοδυναμική ισορροπία

Όταν μέταλλο και ημιαγωγός έρθουν σε επαφή και κάτω από θερμοδυναμική ισορροπία επέρχεται εξίσωση των επιπέδων Fermi. Εάν για παράδειγμα $E_C > E_{Fm}$ έχουμε μεταφορά ηλεκτρονίων από τον ημιαγωγό στο μέταλλο. Τα ηλεκτρόνια που φεύγουν από τον ημιαγωγό προς το μέταλλο σχηματίζουν πίσω τους μια περιοχή W θετικά φορτισμένη, την περιοχή απογύμνωσης (σχήμα 2.2). Περιοχή πλεονάσματος ηλεκτρονίων δεν σχηματίζεται μέσα στο μέταλλο λόγω της μεγάλης ηλεκτρονικής πυκνότητας των μετάλλων.

Μετά την απομάκρυνση των ηλεκτρονίων προς το μέταλλο, το ύψος του φράγματος ενέργειας που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια του μετάλλου κοιτάζοντας τον ημιαγωγό είναι:

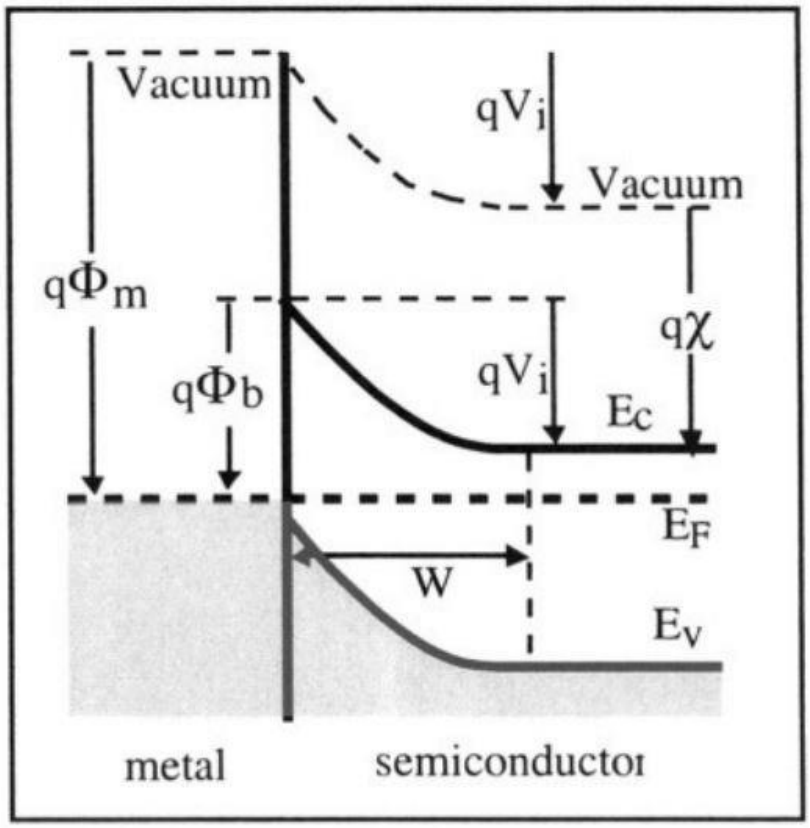
$$q\Phi_b = q\Phi_m - qX \ (2.1)$$

Ενώ, από την πλευρά του ημιαγωγού λόγω της δημιουργίας περιοχής φορτίου χώρου τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια «βλέπουν» φράγμα ενέργειας:

$$qV_i = q\Phi_m - q\Phi_{sc} \ (2.2)$$

$$\text{Άρα, } (2.1), (2.2) \Longrightarrow \ q\Phi_b = \ qV_i + \ (E_C - E_F)$$

Σε θερμοκρασία δωματίου λίγα ηλεκτρόνια έχουν την απαραίτητη ενέργεια E (E> KT/q) για να ξεπεράσουν το φράγμα. Το ρεύμα που δημιουργείται από τη μεταφορά ηλεκτρονίων από τον ημιαγωγό στο μέταλλο ορίζεται ως $I_{s\to m}$ και $I_{m\to s}$ του μετάλλου προς τον ημιαγωγό, αντίστοιχα. Έτσι, στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας και όταν δεν ασκείται καμία τάση στη διάταξη, ισχύει $I_{m\to s} = - I_{s\to m}$. Ως θετική φορά ρεύματος ορίζεται η φορά από τον ημιαγωγό προς το μέταλλο.



Σχήμα 2.2. Ενεργειακές καταστάσεις μετάλλου και ημιαγωγού(Colinge 2002)

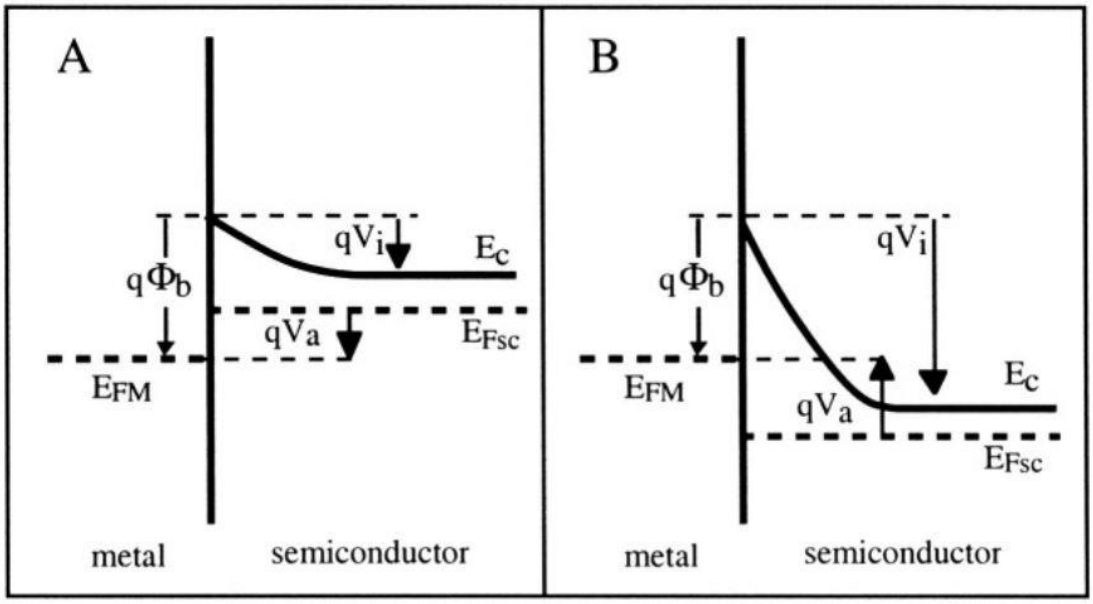
2.1.2 Ορθή πόλωση

Εφαρμόζοντας μια θετική τάση $V_\alpha>0$ στη πλευρά του μετάλλου έχω ορθή πόλωση και το φράγμα δυναμικού από τον ημιαγωγό προς το μέταλλο ελαττώνεται από V_i σε V_i-V_α (με $V_\alpha>0$) (σχήμα 2.3). Έτσι, τα ηλεκτρόνια ολισθαίνουν από τον ημιαγωγό στο μέταλλο. Από την πλευρά του μετάλλου όμως, δεν αλλάζει το φράγμα Φ_b που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια, γι' αυτό το ρεύμα $I_{m\to s}$(από το μέταλλο στον ημιαγωγό) παραμένει το ίδιο με αυτό στη θερμοδυναμική ισορροπία.

2.1.3 Ανάστροφη πόλωση

Αν εφαρμόσουμε μια θετική τάση στην πλευρά του ημιαγωγού, δηλαδή $V_\alpha<0$, το φράγμα δυναμικού από τον ημιαγωγό προς το μέταλλο θα αυξηθεί από V_i σε V_i-V_α = V_i+V_α (γιατί $V_\alpha<0$). Άρα, η τιμή του ρεύματος $I_{s\to m}$ θα μειωθεί, ενώ το $I_{m\to s}$ θα παραμείνει σταθερό. Αυτό θα έχει

ως συνέπεια τη δημιουργία ενός μικρού ανάστροφου ρεύματος από το μέταλλο στον ημιαγωγό που ισούται με τη διαφορά $I_{m\to s}$-$I_{s\to m}$.



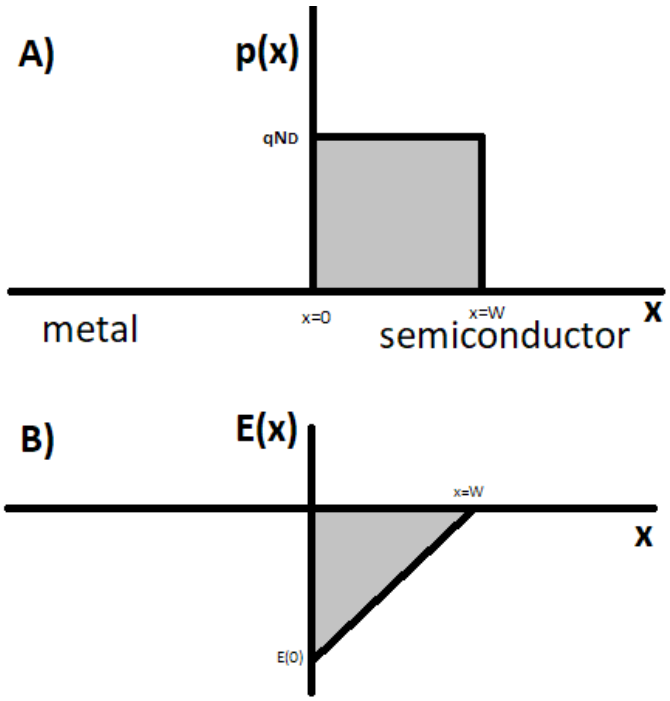
Σχήμα 2.3. Ενεργειακές καταστάσεις μετάλλου και ημιαγωγού στην A: ορθή και στην B: ανάστροφη πόλωση(Colinge 2002).

2.2 Περιοχή απογύμνωσης W

Η περιοχή απογύμνωσης ονομάζεται η θετικά φορτισμένη περιοχή που δημιουργούν τα ηλεκτρόνια καθώς φεύγουν από τον ημιαγωγό προς το μέταλλο. Μπορούμε να υπολογίσουμε την περιοχή αυτή ξεκινώντας από την εξίσωση Poisson:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_{sc}} = -\frac{qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0} \quad (2.3)$$

όπου $\rho = qN_d$ η πυκνότητα φορτίου του ημιαγωγού, ε_{sc} η διηλεκτρική σταθερά του και Φ(x) το δυναμικό του πεδίου E_x με $E_x = \frac{\Phi(x)}{dx}$.



Σχήμα 2.4. (Α)Κατανομή φορτίου και (Β) ηλεκτρικού πεδίου στη διεπιφάνεια μετάλλου ημιαγωγού.

Λαμβάνοντας υπόψη ότι οι οριακές συνθήκες στο x=W είναι:

$$d\Phi(W)/_{dx} = 0 \ \ ,\Phi(W) = 0$$

και ολοκληρώνοντας την σχέση (2.3) βρίσκω το ηλεκτρικό πεδίο και το δυναμικό.

Στην πρώτη ολοκλήρωση βρίσκω το ηλεκτρικό πεδίο:

$$d\Phi(x)/_{dx} = \frac{qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0}(W - x) \ (2.4)$$

Στη δεύτερη ολοκλήρωση βρίσκω το δυναμικό:

$$\Phi(x) = -\frac{qN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}(W - x)^2 \ (2.5)$$

Το δυναμικό στο x=0 θα ισούται με το φράγμα δυναμικού του ημιαγωγού, άρα μπορώ να αντικαταστήσω το Φ(x=0) με V_i-V_α. Τότε λύνοντας την εξίσωση (2.5) ως προς W έχω το πλάτος της περιοχής απογύμνωσης:

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{qN_d}(V_i - V_\alpha)} \ (2.6)$$

Αντίστοιχα για το ηλεκτρικό πεδίο στο x=0 από τη σχέση 2.4 έχω:

$$E(0) = -\sqrt{\frac{2qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0}(V_i - V_\alpha)} \ (2.7)$$

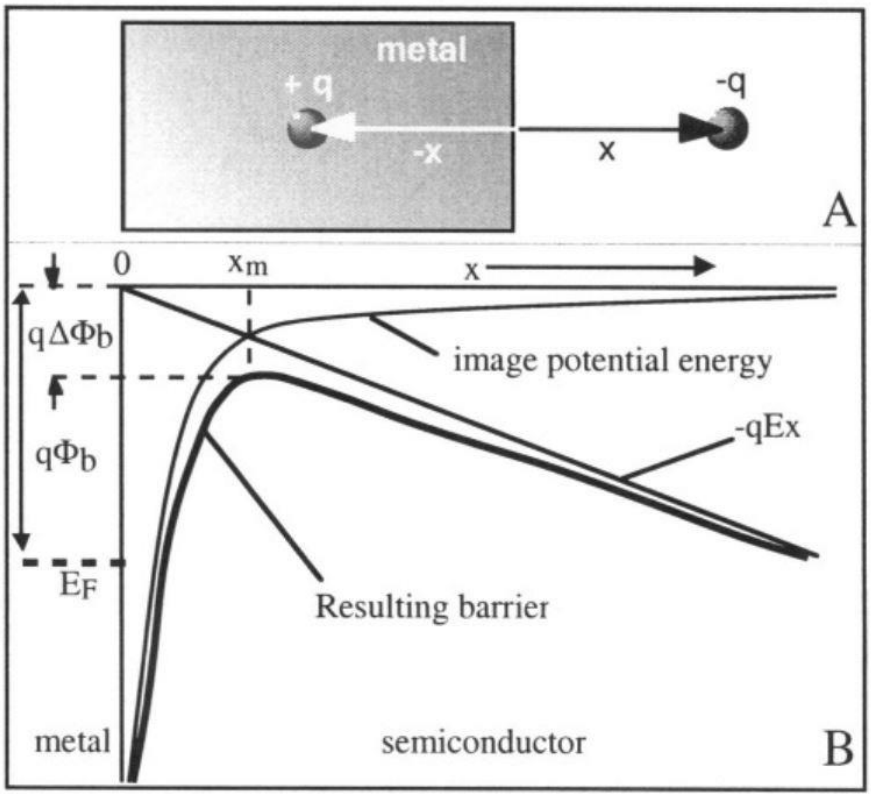
2.3 Φαινόμενο Schottky

Το ύψος του φράγματος Φ_b στην πλευρά του μετάλλου δεν είναι σταθερό, αλλά επηρεάζεται από την τάση V_α που εφαρμόζουμε. Σύμφωνα με την ηλεκτροστατική, όταν υπάρχει ένα φορτίο q κοντά σε έναν τέλειο αγωγό, όπως είναι το μέταλλο, μέσα στον αγωγό δημιουργείται ένα **φορτίο είδωλο** (σχήμα 2.5). Αυτό έχει σαν συνέπεια το φράγμα Φ_b να ελαττώνεται.

Η συνολική ενέργεια που δέχεται ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται σε βάθος x στον ημιαγωγό ισούται με:

$$U(x) = -\frac{q^2}{16\pi\varepsilon\varepsilon_0 x} - qE_x + E_c \ (2.8)$$

Όπου,ο πρώτος όρος $-\frac{q^2}{16\pi\varepsilon\varepsilon_0 x}$ αποτελεί τη δυναμική ενέργεια που οφείλεται στη δύναμη Coulomb μεταξύ φορτίου(q) και φορτίου ειδώλου (-q).



Σχήμα 2.5. (A) Φορτίο είδωλο, (B) το ιδανικό δυναμικό και το δυναμικό λόγω φορτίου ειδώλου(Colinge 2002).

Ο δύο επόμενοι όροι $-qE_x + E_c$ αποτελούν τη δυναμική ενέργεια που δέχεται το ηλεκτρόνιο μέσα στον ημιαγωγό και είναι το άθροισμα της ενέργειας που δέχεται στην περιοχή απογύμνωσης και της ενέργειας στη ζώνη αγωγιμότητας.

Το μέγιστο της ενέργειας είναι στο σημείο όπου:

$$\frac{dU(x)}{dx} = 0 \Longrightarrow 0 = \frac{q^2}{16\pi\varepsilon\varepsilon_0 x^2} - qE \Longrightarrow x = \sqrt{\frac{q}{16\pi\varepsilon\varepsilon_0 E}}$$

Άρα το μέγιστο είναι στο σημείο $x = x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\varepsilon\varepsilon_0 E}}$.

Στο σημείο $x = x_m$ η ενέργεια θα είναι $U(x_m) = -q\sqrt{\frac{qE}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0}}$ (2.9), οπότε το δυναμικό χαμηλώνει κατά $\Delta\Phi_b = \sqrt{\frac{qE}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0}}$ (2.10).

Αντικαθιστώντας το Ε από τη σχέση (2.7) έχω $\Delta\Phi_b = \sqrt[4]{\frac{q^3 N_d}{8\pi^2 \varepsilon_{sc}^3}(V_i - V_\alpha)}$ (2.11).

Επομένως, το τελικό φράγμα θα είναι $\Phi_b^{'} = \Phi_b - \Delta\Phi_b$ (2.12).

Όπως θα δούμε στη συνέχεια στην περίπτωση μια διόδου Schottky, αυτή η διόρθωση είναι σημαντική ιδίως σε ανάστροφη πόλωση και δεν μπορεί να αγνοηθεί.

2.3.1 Χαρακτηριστική τάσης-πυκνότητας ρεύματος

Όπως αναφέρθηκε και στην παράγραφο 2.1.1 στη θερμοδυναμική ισορροπία (χωρίς εξωτερική πόλωση V=0) το συνολικό ρεύμα που διαρρέει την επαφή είναι μηδενικό, διότι εξισορροπείται από δύο (2) αντίθετες ροές φορτίων. Το ίδιο ισχύει και στην πυκνότητα ρεύματος καθώς:

$$J = {}^{I}/_{A} \quad (2.13)$$

Σύμφωνα με τον Schottky για διόδους που λειτουργούν σε θερμοκρασία περιβάλλοντος ο κύριος μηχανισμός μεταφοράς φορτίου οφείλεται σε θερμιονική εκπομπή. Για να περάσει ένα ηλεκτρόνιο το φράγμα δυναμικού από τον ημιαγωγό προς το μέταλλο πρέπει να έχει ενέργεια μεγαλύτερη από το φραγμό $q\Phi_b$.

Στη θερμοδυναμική ισορροπία, η πυκνότητα φορτίου στην περιοχή απογύμνωσης είναι $n_{th} = N_c e^{-q\Phi_b/kT}$ (2.14) με N_c τη πυκνότητα καταστάσεων στη ζώνη αγωγιμότητας. Άρα, η πυκνότητα ρεύματος δίνεται από τη σχέση:

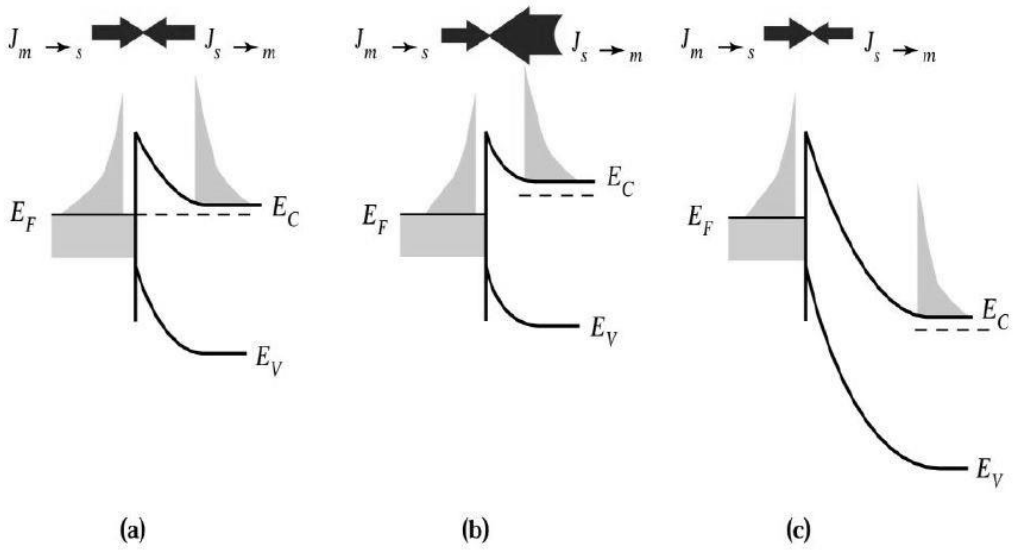
$$|J_{m\to s}| = |J_{s\to m}| = J_0 e^{-q\Phi_b/kT} (2.15)$$

Με $J_0 = eN_c u_{th} = R^* T^2 = \frac{4\pi e m k^2}{h^3} T^2$ (2.17) όπου e το φορτίο του ηλεκτρονίου, N_c η πυκνότητα καταστάσεων στη ζώνη αγωγιμότητας του ημιαγωγού, ισχύει $N_c = 2(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2})^{\frac{3}{2}}$, u_{th} θερμική ταχύτητα των ηλεκτρονίων που ισούται με $u_{th} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}}$, R* η σταθερά Richardson και T η θερμοκρασία.

Κατά την εφαρμογή τάσης V_α, στην ορθή πόλωση το ηλεκτροστατικό δυναμικό από την πλευρά του ημιαγωγού ελαττώνεται (σχήμα 2.6) και έχω $n_{th} = N_c e^{-q(\Phi_b' - V_a)/kT}$ (2.18). Έτσι η πυκνότητα $J_{s\to m}$ αυξάνει ενώ η $J_{m\to s}$ παραμένει σταθερή. Σύμφωνα με τα παραπάνω οι εξισώσεις της πυκνότητας ρεύματος στην ορθή πόλωση θα διαμορφωθούν ως εξής:

$$J_{tot} = J_{s\to m} - J_{m\to s} = J_0 e^{-q(\Phi_b' - V_a)/kT} - J_0 e^{-q\Phi_b'/kT} = J_0 e^{-q\Phi_b'/kT}\left(e^{qV_a/kT} - 1\right) \quad (2.19)$$

Αντίστοιχα αν θέσουμε V_α=- V_α θα έχουμε τις σχέσεις της ανάστροφης πόλωσης.



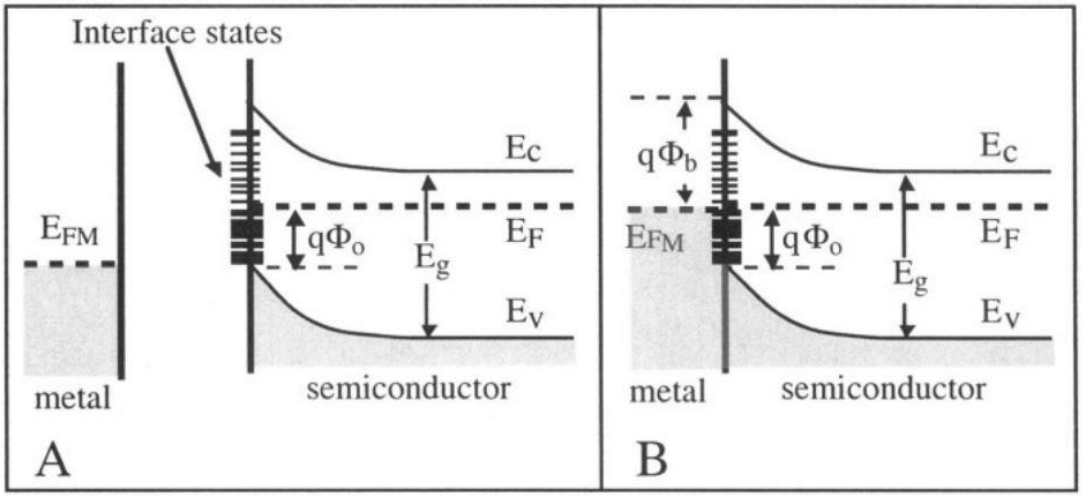
Σχήμα 2.6. Μεταφορά ρεύματος με διαδικασία θερμιονικής εκπομπής στην (α)θερμική ισορροπία, (β)ορθή πόλωση και (γ)ανάστροφη πόλωση.

2.3.2 Ενδιάμεσες καταστάσεις- Παγίδες

Οι παραπάνω εξισώσεις αφορούν μια ιδανική επαφή μετάλλου-ημιαγωγού, το οποίο σημαίνει πως ο ημιαγωγός δεν παρουσιάζει ατέλειες όταν σταματά η περιοδικότητά του και οι ιδιότητες του δεν επηρεάζονται από την επαφή με το μέταλλο. Στην πραγματικότητα, όμως λόγω της απότομης διακοπής της περιοδικότητας, ο ημιαγωγός έχει ατέλειες με συνέπεια να αυξάνει ο αριθμός των ενεργειακών καταστάσεων κοντά στη διεπαφή. Αυτές οι ενεργειακές καταστάσεις βρίσκονται μεταξύ E_v και E_c κατά συνέπεια, όταν αυτές βρίσκονται κάτω από την ενέργεια Fermi να παγιδεύονται εκεί ηλεκτρόνια, για αυτό ονομάζονται παγίδες.

Πριν τη δημιουργία διεπαφής, οι ενεργειακές καταστάσεις του ημιαγωγού που έχουν παγιδευμένα ηλεκτρόνια δημιουργούν μια περιοχή με αρνητικό φορτίο στην επιφάνεια του, αλλά και προκαλούν καμπύλωση των ενεργειακών ζωνών κατά $q\Phi_0$ (σχήμα 2.7 Α).

Όταν μέταλλο και ημιαγωγός έρθουν σε επαφή (σχήμα 2.7 Β), τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται στις ενεργειακές καταστάσεις πάνω από την E_F μεταβαίνουν στο μέταλλο για να γίνει η εξίσωση των επιπέδων Fermi, τα υπόλοιπα που βρίσκονται κάτω από E_F παραμένουν για αυτό και εμφανίζεται μια αμελητέα διαφορά στο δυναμικό $q\Phi_0$ που «βλέπουν» τα ηλεκτρόνια του μετάλλου κοιτάζοντας τον ημιαγωγό. Στην πραγματικότητα το δυναμικό αυτό θα είναι μεταξύ $q\Phi_b = E_g - q\Phi_0$ (2.20) και $q\Phi_b = q\Phi_m - qX$.



Σχήμα 2.7. Ενεργειακές καταστάσεις μετάλλου- ημιαγωγού με την παρουσία ενδιαμέσων καταστάσεων Α: πριν την επαφή, Β:μετα την επαφή μετάλλου- ημιαγωγού.

Εκτός από τις παγίδες, την εξίσωση του ρεύματος επηρεάζουν και μηχανισμοί δημιουργίας-επανασύνδεσης φορέων στην περιοχή απογύμνωσης. Εξαιτίας των παγίδων, αλλά και φαινομένων επανασύνδεσης φορέων η εξίσωση του ρεύματος γίνεται:

$$J_{tot} = J_0 e^{-q\Phi_b'/kT}\left(e^{qV_a/nkT} - 1\right) \quad (2.21)$$

Με $J_0 = eN_c u_{th} = R^* T^2$ και 1≤n≤2 το συντελεστή ιδανικότητας της διόδου, όπου η ιδανική δίοδος είναι για n =1.

2.4 Συμμετοχή του φαινομένου της διάχυσης φορέων στην αγωγιμότητα

Σύμφωνα με τον Simmons(J.G.Simmons 1983) το μοντέλο του Schottky είναι σωστό μόνο όταν η μέση ελεύθερη διαδρομή των ηλεκτρονίων είναι μικρότερη από τη περιοχή απογύμνωσης, υπερισχύουν δηλαδή τα φαινόμενα σκέδασης. Το ρεύμα έχει δύο συνιστώσες, το ρεύμα **ολίσθησης** και το ρεύμα **διάχυσης (drift/diffusion).**

$$J_n = q\mu_n n_x E_x - qD_n \frac{dn_x}{dx} \quad (2.22)$$

αντικαθιστώντας $E_x = \frac{d\Phi_x}{dx}$ και $\frac{\mu_n}{D_n} = \beta$, αναδιατάσσοντας και χρησιμοποιώντας τον ολοκληρωτικό παράγοντα $e^{\beta\Phi_x}$ για να δημιουργηθεί το ολικό διαφορικό στο δεύτερο μέρος, κατέληξε:

$$\frac{J_n}{qD_n} = \beta n_x \frac{d\Phi_x}{dx} + \frac{dn_x}{dx} = \left(\beta n_\chi + \frac{dn_x}{d\Phi_x}\right) * \frac{d\Phi_x}{dx} = e^{-\beta\Phi_x} \frac{d(n_x e^{\beta\Phi_x})}{d\Phi_x} \frac{d\Phi_x}{dx} \quad (2.23)$$

2.4.1 Συνάρτηση πυκνότητας φορέων n_x στην περιοχή απογύμνωσης

Ολοκληρώνοντας τη σχέση 2.23 έχουμε στην πυκνότητα φορέων:

$$\int_{N_d}^{n_x e^{\beta\Phi_x}} d(n_x e^{\beta\Phi_x}) = \frac{J_n}{qD_n} \int_0^x e^{\beta\Phi_x} dx$$

$$n_x = N_d e^{-\beta\Phi_x} + \frac{J_n}{qD_n} e^{-\beta\Phi_x} \int_0^x e^{\beta\Phi_x} dx \quad (2.24)$$

Ο πρώτος όρος $N_d e^{-\beta\Phi_x}$, όταν J_n=0, αποτελεί την πυκνότητα φορτίου λόγω θερμιονικής εκπομπής στη θερμοδυναμική ισορροπία n_{th} , δηλαδή είναι η σχέση 2.14 που είδαμε παραπάνω. Ο δεύτερος είναι η απόκλιση της n_x από τη n_{th} όταν έχουμε ροή ρεύματος. Στην ορθή πόλωση (J_n<0), η πυκνότητα φορέων n_x είναι μικρότερη από τη n_{th}, ενώ στην ανάστροφη (J_n<0) η n_x είναι μεγαλύτερη από τη n_{th}.

Ο Simmons, όμως θεώρησε διαφορετικές οριακές συνθήκες από αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στην παράγραφο 2.2, καθώς θεώρησε πως x =w στη διεπιφάνεια. Έτσι, το δυναμικό θα είναι κατοπτρικό με το σχήμα 2.4 με οριακές συνθήκες θα είναι:

$$x = 0, {}^{d\Phi(0)}/_{dx} = 0 \ , \Phi(0) = 0$$

Επιλύοντας την εξίσωση Poisson (2.3) με τις παραπάνω συνθήκες, θα έχω αντίστοιχα το ηλεκτρικό πεδίο:

$$d\Phi(x)/_{dx} = -\frac{qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0}x (2.25)$$

και το δυναμικό:

$$\Phi(x) = \frac{qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0}x^2 \ (2.26).$$

2.4.2 Προσέγγιση του ολοκληρώματος διάχυσης

Ο Simmons (J.G.Simmons 1983) θεώρησε πως το ολοκλήρωμα του δεύτερου όρου της σχέσης 2.24 μπορεί να προσεγγιστεί ως εξής:

$$\int_0^x e^{\beta x^2/A} = xe^{\beta x^2/A} - \int_0^x \frac{2\beta x^2}{A} e^{\beta x^2/A}$$

Αλλιώς $\int_0^x (1 + \frac{2\beta x^2}{A}) e^{\beta x^2/A} = xe^{\beta x^2/A}$

Μέσα στο ολοκλήρωμα έχουμε εξάρτηση από το x τόσο του εκθετικού, όσο και του συντελεστή του, αλλά γνωρίζουμε ότι το ολοκλήρωμα έχει μεγαλύτερη εξάρτηση από το εκθετικό παρά από το συντελεστή. Άρα, μπορούμε να τον βγάλουμε από το ολοκλήρωμα και να καταλήξουμε:

$$\int_0^x e^{\beta x^2/A} \approx \frac{x}{1 + \frac{2\beta x^2}{A}} e^{\beta x^2/A} (2.27)$$

Αντικαθιστώντας το x^2 από τη σχέση (2.26) έχω:

$$\int_0^x e^{\beta x^2/A} \cong \frac{A^{\frac{1}{2}} e^{\beta\Phi_x}}{2qD_n\beta\Phi_x^{1/2}} \ (2.28), \qquad \Phi_x > \frac{1}{\beta}$$

Με αντικατάσταση της σχέσης 2.28 στη σχέση 2.24 έχω την πυκνότητα φορέων στην περιοχή απογύμνωσης:

$$n_x = N_d e^{-\beta\Phi_x} + \frac{J_n A^{1/2}}{2qD_n\beta\Phi_x^{1/2}} \quad (2.29)$$

Στη διεπαφή (x=w) και αντικαθιστώντας $\Phi_x = \Phi_s^* - V$ έχω:

$$n_w = N_d e^{-\beta(\Phi_s^* - V)} + \frac{J_n A^{1/2}}{2qD_n\beta(\Phi_s^* - V)^{1/2}} \quad (2.30)$$

Ορίζοντας επιπλέον ως $u_e = 2D_n\beta(\Phi_s^* - V)^{1/2}/A^{1/2}$ (2.31) μια παράμετρο που έχει μονάδες ταχύτητας (cm^2/sec) καταλήγουμε:

$$n_w = N_d e^{-\beta(\Phi_s^* - V)} + \frac{J_n}{qu_e} \quad (2.32)$$

2.4.3 Χαρακτηριστική τάσης-πυκνότητας ρεύματος

Γνωρίζοντας την πυκνότητα φορέων στη διεπαφή (σχέση 2.32) μπορούμε να υπολογίσουμε τη πυκνότητα ρεύματος, όπως στη σχέση 2.19 έχουμε:

$$J_n = J_{m\to s} - J_{s\to m} = qu_{th}(n_{th} - n_w) \quad (2.33)$$

Με αντικατάσταση 2.18, 2.32, $N_d = N_c e^{-(E_C - E_F)/kT}$ $\kappa\alpha\iota$ $\Phi_s^* = \Phi_c - (E_C - E_F)$ στη 2.33 έχω:

$$J_n = \frac{qu_{th}u_e(N_c e^{-q\Phi_c/kT} - N_d e^{-\beta(\Phi_s^* - V)})}{u_{th} + u_e} = \frac{qN_c e^{-\beta\Phi_c}(1 - e^{\beta V})}{\frac{1}{u_{th}} + \frac{1}{u_e}} \quad (2.34)$$

2.4.4 Μια καλύτερη προσέγγιση της εξίσωση διάχυσης-ολίσθησης

Η σχέση πυκνότητας φορέων (2.24) εκτός από το να προσεγγισθεί, όπως έκανε ο Simmons μπορεί και να επιλυθεί αναλυτικά με υπολογιστικό τρόπο, καθώς $e\mathrm{rf}\,(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}dt$, θέτοντας x'=ix καταλήγουμε στη σχέση $\mathrm{erfi}(-ix)\frac{\sqrt{\pi}}{2} = \int_0^x e^{-t^2}dt$.

Στη *Mathematica* γράφεται: $\frac{\sqrt{\pi}}{2}\mathrm{Erfi}[x] = \int_0^x e^{-t^2}dt$ (2.35)

Άρα, συμφώνα με τα παραπάνω η σχέση 2.24 μπορεί να γραφεί ως:

$$n_x = N_d e^{-\beta\Phi_x} + \frac{J_n}{qD_n} e^{-\beta\Phi_x} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \mathrm{Erf}i[x] \ (2.36)$$

Η παραπάνω έκφραση (2.36) ταυτίζεται για $\beta\Phi_x>10$ με αυτή του Simmons (σχέση 2.29) αν θεωρήσουμε πως έχουμε παραβολικό δυναμικό $x^2=A\Phi_x$, όπως θεώρησε και ο Simmons. Όμως, η σχέση του Simmons (σχέση 2.29) δεν ικανοποιεί ταυτόχρονα την εξίσωση Poisson (σχέση 2.3) καθώς έχει ασυνέχεια στο μηδέν, παρόλο που είναι προσέγγιση μιας γενικότερης σχέσης της 2.24. Επομένως, για να λύσουμε με επαναληπτικό τρόπο την εξίσωση Poisson, ώστε να βρούμε μια καλύτερη προσέγγιση από αυτή του Simmons θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση 2.36.

Για να παρακολουθήσουμε καλύτερα την διαδικασία για να βρούμε μια καλύτερη προσέγγιση της n_x θα πρέπει να προχωρήσουμε σε μια αδιασταστοποίηση των εξισώσεων, όπως αυτή φαίνεται στο παράρτημα Α. Στη συνέχεια, να βρούμε καλύτερη προσέγγιση ακολουθούμε τα βήματα που περιγράφονται παρακάτω:

Α) Αρχικά, θα κάνουμε μια λογική υπόθεση για τη μορφή του δυναμικού. Θα θεωρήσουμε το παραβολικό δυναμικό που θεώρησε και ο Simmons:

$$\mathrm{x}^2 = \mathrm{A}\Phi_\mathrm{x} \xRightarrow{\text{παρ. A}} \mathrm{u} = \mathrm{y}^2 \Rightarrow \frac{\mathrm{du}}{\mathrm{dy}} = 2\mathrm{y} = 2\sqrt{\mathrm{u}}.$$

Αυτή θα μας δώσει μια πρώτη προσέγγιση για τη n_0, οπότε:

$\tilde{n}_0 = e^{-u} + JRe^{-u} \int_0^u e^u \frac{dy}{du} du = e^{-u} + JRe^{-u} \int_0^u e^u \frac{du}{2\sqrt{u}} = e^{-u} + JRe^{-u} \mathrm{Erf}\, i\left(\sqrt{u}\right)$ (2.37) με $R = \frac{\sqrt{A/\beta}}{qN_d D_n}$

Β) Στη συνέχεια, χρειάζεται να λύσουμε την εξίσωση Poisson με τη νέα συνάρτηση $\tilde{n}_0$ και το παραβολικό δυναμικό. Άρα,

$$\frac{d^2u}{dy^2} = -2\left(1 - \tilde{n}(u)\right) \xRightarrow{*2\frac{du}{dy}} 2\frac{du}{dy}\frac{d^2u}{dy^2} = -2\left(2\frac{du}{dy}\right)\left(1 - \tilde{n}(u)\right) \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dy}\left(\frac{du}{dy}\right)^2 = -4\left(\frac{du}{dy}\right)\left(1 - \tilde{n}(u)\right) \Rightarrow$$

$$\frac{du}{dy} = 2\sqrt{\int_0^u \big(1 - \tilde{n}(u)\big)du} \quad (2.38)$$

Ως ñ(u) στη σχέση 2.38 θα χρησιμοποιήσουμε το πρώτο μέρος της σχέσης 2.37, δηλαδή $\tilde{n}(u) = e^{-u}$. Άρα, $\frac{du}{dy} = 2\sqrt{\int_0^u (1 - e^{-u})du} = 2\sqrt{u + e^{-u} - 1}$ (2.39).

Γ) Τέλος εξάγοντας το νέο δυναμικό που προκύπτει από την σχέση 2.39 το αντικαθιστούμε στην 2.37 και έχουμε μια προσέγγιση $\tilde{n}_1$.

$$\tilde{n}_1(u) = e^{-u} + J_n R e^{-u} \int_0^u e^u \frac{dy}{du} du = e^{-u} + J_n R e^{-u} \int_0^u e^u \frac{du}{2\sqrt{u + e^{-u} - 1}} \quad (2.40)$$

Η σχέση 2.40 δεν είναι αναλυτικά ολοκληρώσιμη, αλλά επειδή μας ενδιαφέρει η πυκνότητα στη διεπαφή (στο w) είναι αρκετή για να υπολογίσουμε την έκφραση του ρεύματος. Έτσι, όπως είδαμε και παραπάνω για $x = w \Longrightarrow u_w = \beta(\Phi_s^* - V)$

$$\text{Άρα,} \quad \tilde{n}_1(u_w) = e^{-u_w} + J_n R e^{-u_w} F(u_w) \ (2.41),$$

$$\mu\varepsilon\ F(u_w) = \int_0^{u_w} e^u \frac{du}{2\sqrt{u + e^{-u} - 1}}$$

$$(2.33) \xRightarrow{(2.41)} J_n = \frac{q u_{th}\left(N_c e^{-q\Phi_c/kT} - e^{-\beta(\Phi_s^* - V)}\right)}{1 + q u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{q D_n} e^{-u_w} F(u_w)} = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta\Phi_c}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} \quad (2.42)$$

Με το $1/\sqrt{N_d}$ αδιάστατο. Έτσι με αυτή τη σχέση ολοκληρώθηκε η διαδικασία για την εύρεση μια καλύτερης προσέγγισης της πυκνότητας n και του ρεύματος J_n.

2.4.5 Αναλυτική εξίσωση διάχυσης-ολίσθησης με φορτίο είδωλο

Σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν στην παράγραφο 2.3 έχουμε:

$$(2.42) \xRightarrow{(2.12)} J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta\Phi_b'}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta\Phi_b + \beta\Delta\Phi_b}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} \quad (2.43)$$

2.4.6 Ευκινησία με εξάρτηση από το ηλεκτρικό πεδίο

Μέχρι τώρα, αναφερόμενοι στην εξίσωση διάχυσης ολίσθησης, έχουμε θεωρήσει πως η ευκινησία μ_n παραμένει σταθερή, στην πραγματικότητα όμως η ευκινησία εξαρτάται από τρείς παράγοντες:

α)τη θερμοκρασία T,

β)την πυκνότητα των προσμίξεων N_d και

γ)την ένταση E του ηλεκτρικού πεδίου.

Συγκεκριμένα, η ευκινησία ορίζεται ως το πηλίκο της ταχύτητας ολίσθησης u_d με το ηλεκτρικό πεδίο E.

$$\mu_n = \frac{u_d}{E} \quad (2.44)$$

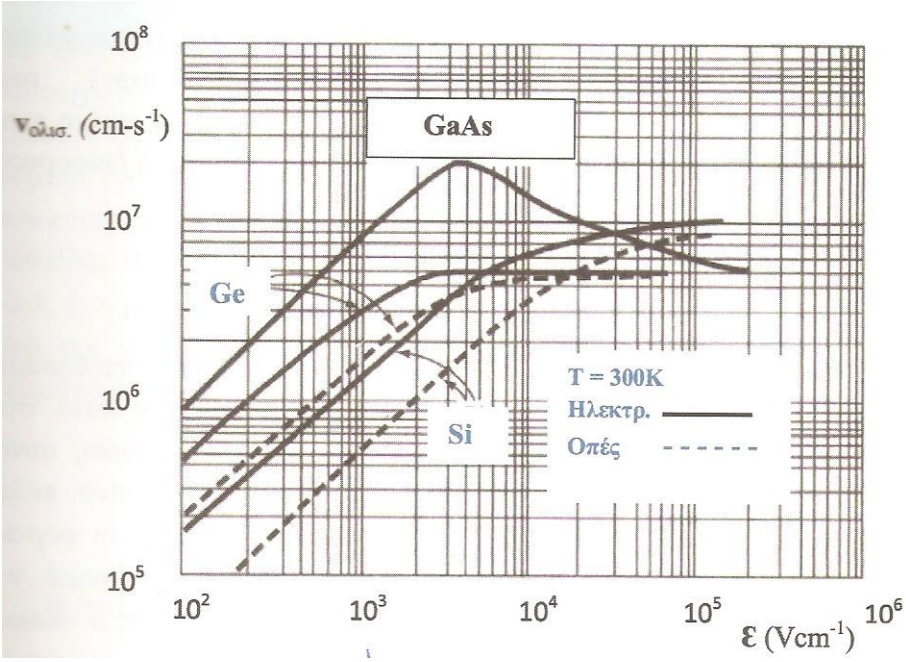
Έτσι η αύξηση της θερμοκρασίας (T↑) ελαττώνει τη ταχύτητα ολίσθησης (u_d ↓), διότι υπάρχουν περισσότερες σκεδάσεις λόγω της αύξησης της κινητικότητας των κέντρων σκέδασης. Ενώ, η αύξηση του N_d (N_d ↑)προκαλεί μείωση του (u_d ↓),διότι έχουμε αύξηση των κέντρων σκέδασης. Όμως, η ταχύτητα u_d δεν μπορεί να αυξάνεται απεριόριστα όσο αυξάνεται το πεδίο E η ταχύτητα ολίσθησης έχει μια οριακή τιμή που δεν μπορεί να ξεπεραστεί. Δηλαδή, αυτός ο μηχανισμός έχει σαν αποτέλεσμα τον κορεσμό της ταχύτητας αυξανόμενου του ηλεκτρικού πεδίου E, όπως αυτό φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Σύμφωνα με τον Selberherr (Selberherr 1984, 87) ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$\mu_0 = 88 + \frac{1252}{1 + \frac{N_d}{1.432 * 10^{17}}} \left(\frac{cm^2}{Vsec}\right)$$

Και για το Si στους 300K:

$$\mu(E) = \frac{2\mu_0}{1 + \sqrt{1 + \left(\frac{2\mu_0}{u_{sat}} E\right)^2}} \left(\frac{cm^2}{Vsec}\right)$$

με $u_{sat} \approx 1.1 * 10^7$cm/sec(Selberherr 1984, 97) και το μ_0 το βρίσκουμε από το σχήμα στο ίδιο βιβλίο (Selberherr 1984, 39) για τα διάφορα N_d.



Σχήμα 2.8. Η ταχύτητα ολίσθησης ως συνάρτηση του ηλεκτρικού πεδίου για Si, Ge και GaAs.

Κάνοντας παρόμοια διαδικασία με τον Simmons ξεκινώντας δηλαδή από τη σχέση 2.23 και χρησιμοποιώντας και τις σχέσεις $\frac{\mu_n}{D_n} = \beta$, $E_x = -\frac{d\Phi_x}{dx}$ καταλήγουμε:

$$-\frac{J_n\beta}{q\mu_n} = e^{-\beta\Phi_x}\frac{d(n_x e^{\beta\Phi_x})}{dx} \quad (2.45)$$

με τη χρήση των συνοριακών συνθηκών που είδαμε και παραπάνω x=0, Φ(0)=0, E(0)=0, n(0)=N_d και στη διεπιφάνεια x=w, Φ(w)=Φ_b-V ολοκληρώνουμε από 0 έως x καταλήγοντας:

$$n_x = N_d e^{-\beta\Phi_x} - \frac{J_n}{qD_n}e^{-\beta\Phi_x}\int_0^x (\frac{\mu_0}{\mu})e^{\beta\Phi_x}dx \quad (2.46)$$

Με $\mu_0 = \beta D$ και $\mu_0 = 88 + \frac{1252}{1+\frac{N_d}{1.432*10^{17}}}(\frac{cm^2}{Vsec})$ σύμφωνα με τον Selberherr(Selberherr 1984, 87).

Κάνοντας την αδιαστατοποίηση, όπως στο παράτημα Α:

$$\tilde{n} = e^{-u} - \frac{J_n}{qD}\sqrt{\frac{A}{B}}e^{-u}\int_0^y \left(\frac{\mu_0}{\mu}\right)e^u\frac{dy}{du}du \quad (2.47)$$

έστω ότι $\frac{dy}{du} = -\frac{1}{E(u)}$, οπότε καταλήγουμε

$$\tilde{n} = e^{-u} + \frac{J_n}{qD}\sqrt{\frac{A}{B}}e^{-u}\int_0^u (\frac{\mu_0}{\mu})e^u \frac{1}{|E(u)|}du \ (2.48)$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση του Selberherr(Selberherr 1984) για το Si στους 300 ℃ και αντικαθιστώντας σε αυτή το παραβολικό δυναμικό καταλήγουμε:

$$\mu = \mu_0 \frac{2}{1+\sqrt{1+(\frac{2\mu_0}{u_{sat}}E)^2}} = \mu_0 \frac{2}{1+\sqrt{1+4\theta^2 u}} \ (2.49), \mu\varepsilon\ \theta = \frac{\mu_0}{u_{sat}}\frac{1}{\sqrt{A\beta}}\ \kappa\alpha\iota\ E = 2\sqrt{u}$$

Άρα, η σχέση 2.48 γίνεται

$$\tilde{n} = e^{-u} + \frac{J_n}{qD}\sqrt{\frac{A}{B}}e^{-u}\int_0^{u'} (\frac{\mu_0}{\mu})e^{u'}\frac{1+\sqrt{1+4\theta^2 u'}}{4\sqrt{u'}}du' \ (2.50)$$

Παρατηρήσεις:

- *Θέτοντας στην παραπάνω σχέση θ=0, έχουμε καταλήγουμε στην περίπτωση με σταθερή ευκινησία.*
- *Στην περίπτωση ενός ισχυρού πεδίου η ταχύτητα των φορέων φτάνει στον κόρο* u_{sat} *και* $\frac{1+\sqrt{1+4\theta^2 u'}}{4\sqrt{u'}} \rightarrow \frac{\sqrt{4\theta^2 u'}}{4\sqrt{u'}} = \theta/2$*, οπότε η πυκνότητα θα είναι ανεξάρτητη του u και θα ισούται με:*

$$\tilde{n} = e^{-u} + \frac{J_n}{qD}\sqrt{\frac{A}{B}}\frac{\theta}{2} \ (2.51)$$

Ακολούθως κάνοντας την ίδια διαδικασία με παραπάνω και χρησιμοποιώντας τη σχέση 2.33 η πυκνότητα ρεύματος γίνεται:

$$(2.33) \xRightarrow{(2.18,\ 2.51)} J_n = \frac{qu_{th}N_c e^{-\beta\Phi_c}\left(1-e^{\beta V}\right)}{1+u_{th}\frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n}\frac{\theta}{2}}$$

2.5 Φαινόμενα δημιουργίας-επανασύνδεσης φορέων

Η επανασύνδεση φορέων ορίζεται ως μια διαδικασία συμφώνα με την οποία ηλεκτρόνια και οπές εξαϋλώνονται ή καταστρέφονται, ενώ κατά τη δημιουργία, δημιουργούνται οπές και ηλεκτρόνια. Όταν ένας ημιαγωγός διαρρέεται από ρεύμα δεν βρίσκεται σε κατάσταση ισορροπίας, δηλαδή υπάρχει μια μεταβολή του αριθμού των φορέων του και τα φαινόμενα επανασύνδεσης-δημιουργίας είναι ο φυσικός μηχανισμός επαναφοράς της τάξης. Έτσι, σε συνθήκες μη ισορροπίας η διαδικασία επανασύνδεσης-δημιουργίας παίζει σημαντικό ρόλο.

2.5.1 Διαδικασίες επανασύνδεσης-δημιουργίας

Οι κυριότερες διαδικασίες επανασύνδεσης είναι οι εξής:

Α) Επανασύνδεση από ζώνη σε ζώνη.

Β) Επανασύνδεση μέσω κέντρου επανασύνδεσης- δημιουργίας.

Γ) Επανασύνδεση μέσω ρηχών επιπέδων.

Δ) Επανασύνδεση μέσω εξιτονίων.

Ε) Επανασύνδεση Auger.

Κάποιες από τις παραπάνω διαδικασίες επανασύνδεσης έχουν μικρότερη πιθανότητα να πραγματοποιηθούν σε θερμοκρασία δωματίου, ενώ κατά την πραγματοποίηση τους έχουμε απελευθέρωση φωτονίου ή θερμότητας (φωνονίων) ή φωτός, γι αυτό και είναι σημαντικές στις οπτικές εφαρμογές. Καθεμία από τις προηγούμενες διαδικασίες επανασύνδεσης (εκτός από την επανασύνδεση Auger, στην οποία ουσιαστικά οι διαδικασίες Α και Β γίνονται ταυτόχρονα) μπορεί να αντιστραφεί και να δημιουργήσει φορείς. Για να πραγματοποιηθούν οι παρακάτω διαδικασίες δημιουργίας απαιτείται συνήθως θερμική ενέργεια ή φως.

Οι διαδικασίες δημιουργίας είναι:

Α) Δημιουργία από ζώνη σε ζώνη.

Β) Δημιουργία μέσω κέντρου επανασύνδεσης- δημιουργίας.

Γ) Φωτοεκπομπή μέσω κέντρων στο χάσμα.

Δ) Δημιουργία μέσω ιονισμού.

Το κρίσιμο ζήτημα όμως το οποίο πρέπει να μας απασχολεί δεν είναι το αν συμβαίνουν αυτές οι διαδικασίες, αλλά οι ρυθμοί με τους συμβαίνουν. Τυπικά, χρειάζεται κανείς να ενδιαφερθεί για την κυρίαρχη διαδικασία, αυτή δηλαδή που γίνεται με ταχύτερο ρυθμό. Επειδή, όπως είδαμε κάποιες από τις διαδικασίες δημιουργίας- επανασύνδεσης είναι λιγότερο πιθανές να συμβούν και επειδή γνωρίζουμε ότι ο ημιαγωγός της διεπαφής έχει ατέλειες- παγίδες που δημιουργούν επιπλέον ενεργειακά επίπεδα μεταξύ ζώνης αγωγιμότητας και ζώνης σθένους, συμπεραίνουμε πως ο κυρίαρχος μηχανισμός είναι η επανασύνδεση-δημιουργία μέσω κέντρου επανασύνδεσης-δημιουργίας.

2.5.2 Χαρακτηριστικός χρόνος ζωής των φορέων μειονότητας-παγίδων

Ο μηχανισμός λειτουργίας μιας παγίδας συνδέεται με ένα χαρακτηριστικό χρόνο που υπολογίζεται με τον παρακάτω συλλογισμό. Έστω ένα ηλεκτρόνιο που περνάει μια επιφάνεια διατομής S γεμάτη παγίδες που έχουν ενεργό διατομή σ. Τότε η πιθανότητα σύλληψης του ηλεκτρονίου από την παγίδα θα είναι σ/S και καθώς κινείται με ταχύτητα U_{th} για χρονικό διάστημα dt θα συναντήσει στο δρόμο του $N_t S dx$ παγίδες με N_t την πυκνότητά τους. Τότε, η συνολική πιθανότητα σύγκρουσης σε χρόνο τ είναι:

$$\frac{dt}{\tau} = N_t S dx \frac{\sigma}{S}$$

Οπότε: $\tau = \frac{1}{N_t \sigma U_{th}}$ (2.52)

Ο χαρακτηριστικός αυτός χρόνος είναι σημαντικός διότι είναι ένα μέτρο επιστροφής θερμοδυναμική ισορροπία.

2.5.3 Ρυθμός δημιουργίας- επανασύνδεσης φορέων

Ξεκινώντας από τη συνάρτηση πιθανότητας Fermi- Dirac: $f(E) = \frac{1}{1+e^{(E-\mu)/kT}}$, μπορούμε να υπολογίσουμε τη πιθανότητα μια παγίδα με ενέργεια E_τ να είναι κατειλημμένη από ηλεκτρόνιο:

$$f(E_\tau) = \frac{1}{1 + e^{(E_\tau - \mu)/kT}}$$

και τη πιθανότητα να είναι διαθέσιμη: $1 - f(E_\tau) = \frac{e^{(E_\tau - \mu)/kT}}{1+e^{(E_\tau - \mu)/kT}}$.

Ορίζοντας ως $C_n(E)$ τη πιθανότητα σύλληψης ηλεκτρονίου από την παγίδα, $e_n(E)$ τη πιθανότητα εκπομπής ηλεκτρονίου από την παγίδα και N_τ την πυκνότητα των παγίδων, ο ρυθμός δημιουργίας- επανασύνδεσης ηλεκτρονίων γράφεται ως:

$$dU = \big(1 - f(E_\tau)\big)\mathrm{C}_n(\mathrm{E})f(E)N(E)dE * N_\tau - f(E_\tau)e_n(E)\big(1 - f(E)\big)N(E)dE * N_\tau \quad (2.53)$$

Όπου ο πρώτος όρος της διαφοράς αφορά την σύλληψη ηλεκτρονίου και ο δεύτερος την εκπομπή.

$$dU = 0 \Longrightarrow \frac{\mathrm{e_n(E)}}{\mathrm{C}_n(\mathrm{E})} = \frac{f(E)\big(1 - f(E_\tau)\big)}{\big(1 - f(E)\big)f(E_\tau)} = \cdots = e^{\frac{E_\tau - \mu}{kT} - (E-\mu)/kT} = e^{(E_\tau - E)/kT}$$

Άρα, καταλήγουμε πως: $\frac{\mathrm{e_n(E)}}{\mathrm{C}_n(\mathrm{E})} = e^{\frac{E_\tau - E}{kT}}$ (2.54)

Μπορούμε να μειώσουμε τους αγνώστους της σχέσης (2.53) με αντικατάσταση σε αυτή της σχέσης (2.54) και ολοκλήρωση στο διάστημα Ec ως $+\infty$ καταλήγοντας:

$$\frac{dU}{N_\tau} = \left(\big(1 - f(E_\tau)\big)f(E) - f(E_\tau)\,\frac{\mathrm{e_n(E)}}{\mathrm{C}_n(\mathrm{E})}\big(1 - f(E)\big)\right)\mathrm{C}_n(\mathrm{E})N(E)dE \xRightarrow{2.54,\int_{E_c}^{+\infty} dU}$$

$$\int_{E_c}^{+\infty} dU = (1 - e^{(E_\tau - \mu)/kT})(1 - f(E_\tau))N_\tau \int_{E_c}^{+\infty} C(E)f(E)N(E)dE$$

Όπου καταλήγω:

$$U_n = \left((1 - e^{(E_\tau - \mu)/kT})(1 - f(E_\tau))n\mathbb{C}_n\right) \quad (2.55)$$

Με $\mathbb{C}_n = N_\tau \frac{\int_{E_c}^{+\infty} C(E)f(E)N(E)dE}{n}$ $\kappa\alpha\iota\ n = N_C e^{-(\mu - E_{C)/kT}}$

Η αντίστοιχη σχέση για τις οπές είναι:

$$U_p = \left((1 - e^{(E_\tau - \mu)/kT})f(E_\tau)p\mathbb{C}_p\right)$$

Με $\mathbb{C}_p = N_\tau \frac{\int_{+\infty}^{E_V} C(E)f(E)N(E)dE}{p}$ $\kappa\alpha\iota\ p = N_V e^{-(\mu - E_V)/kT}$.

Στην περίπτωση που το επίπεδο Fermi πέσει στη στάθμη με ενέργεια E_τ τότε για τις πυκνότητες των ηλεκτρονίων και των οπών θα ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$n_1 = N_C e^{(E_\tau - E_C)/kT} = n_i e^{(E_\tau - E_i)/kT}\ \kappa\alpha\iota\ \ p_1 = N_V e^{-(E_\tau - E_V)/kT} = n_i e^{-(E_\tau - E_i)/kT}\ ,$$

όπου $E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{1}{2}kT \ln \frac{N_V}{N_C}$ το ενδογενές χημικό δυναμικό.

Η εξίσωση ισορροπίας για τους δύο φορείς στη στάσιμη κατάσταση (steady-state) λαμβάνοντας υπόψη και την ύπαρξη παγίδων στο ενεργειακό επίπεδο E_τ γίνεται:

$$U_n = U_p \ \Longrightarrow C_n\big(1 - f(E_\tau)\big)n - C_n f(E_\tau)n_1 = C_p f(E_\tau)p - C_p\big(1 - f(E_\tau)\big)p_1 \ (2.57)$$

Λύνοντας ως προς $f(E_\tau)\ \kappa\alpha\iota\ 1 - f(E_\tau)$:

$$(2.57) \Longrightarrow \big(1 - f(E_\tau)\big)\big(C_n n + C_p p_1\big) = f(E_\tau)\big(C_p p + C_n n_1\big)$$

$$\Longrightarrow \begin{aligned} f(E_\tau) &= \frac{C_n n + C_p p_1}{C_n(n + n_1) + C_p(p + p_1)} \\ 1 - f(E_\tau) &= \frac{C_p p + C_n n_1}{C_n(n + n_1) + C_p(p + p_1)} \end{aligned}$$

με αντικατάσταση στη σχέση 2.56 ή 2.55 αντίστοιχα έχω:

$$\begin{aligned} U &= \left((1 - e^{(E_\tau - \mu)/kT})f(E_\tau)p\mathbb{C}_p\right) = C_p f(E_\tau)p - C_p\big(1 - f(E_\tau)\big)p_1 \\ &= C_p \frac{C_n n + C_p p_1}{C_n(n + n_1) + C_p(p + p_1)} p - C_p \left(\frac{C_p p + C_n n_1}{C_n(n + n_1) + C_p(p + p_1)}\right) p_1 \\ &= \frac{C_n n C_p p + C_p p C_p p_1 - \big(C_n n_1 C_p p_1 + C_p p C_p p_1\big)}{C_n(n + n_1) + C_p(p + p_1)} \\ &= \frac{C_n C_p (pn - p_1 n_1)}{C_n(n + n_1) + C_p(p + p_1)} \ (2.57) \end{aligned}$$

Γνωρίζοντας πως το γινόμενο $n_1 p_1$ παραμένει ανεξάρτητο της στάθμης των παγίδων, διότι $n_1 p_1 = N_C N_V e^{(E_V - E_C)/kT} = N_C N_V e^{-E_g/2} = n_i^2$ και από τη σχέση 2.52 έχω $\tau_p = \frac{1}{C_p}, \tau_n = \frac{1}{C_n}$

που είναι οι χαρακτηριστικοί χρόνοι σύλληψης οπής ή ηλεκτρονίου από την παγίδα, αντίστοιχα. Έτσι η σχέση 2.57 μετασχηματίζεται σε:

$$U = \frac{(pn - p_1 n_1)}{\frac{C_n(n+n_1) + C_p(p+p_1)}{C_n C_p}} = \frac{np - n_i^2}{\frac{1}{C_p}(n+n_1) + \frac{1}{C_n}(p+p_1)}$$

$$= \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n+n_1) + \tau_n(p+p_1)} \quad (2.58)$$

2.5.4 Εξισώσεις Racko- Donoval

Ξεκινώντας από τις εξισώσεις συνέχειας στη στάσιμη κατάσταση $\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t} = 0$ (2.59), οι Racko-Donoval (Racko et al. 1992) θεώρησαν ότι η δημιουργία νέου ηλεκτρονίου συνεπάγεται και τη δημιουργία μιας νέας οπής, δηλαδή $U = G_n - U_n = G_p - U_p$ (2.60). Άρα, οι εξισώσεις συνέχειας μετασχηματίζονται στις σχέσεις Racko-Donoval όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\frac{\partial p}{\partial t} - \frac{1}{q}\frac{\partial J_n}{\partial x} = G_n - U_n \xRightarrow{(2.59,\ 2.60)} \frac{\partial J_n}{\partial x} = qU \ (2.61)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q}\frac{\partial J_p}{\partial x} = G_p - U_p \xRightarrow{(2.59,\ 2.60)} \frac{\partial J_p}{\partial x} = -qU \ (2.62)$$

Η ολοκλήρωση των σχέσεων των Racko-Donoval χρησιμοποιώντας των φορμαλισμό του Simmons, δηλαδή το σημείο διεπαφής είναι το x=w, θα μας δώσει το ρεύμα των φορέων πλειονότητας και μειονότητας:

$$(2.61) \xRightarrow{\int_x^w dx} J_n(x) = -q\int_x^w U(x)dx + J_n(w) \ (2.63)$$

$$(2.62) \xRightarrow{\int_x^w dx} J_p(x) = -q\int_x^w U(x)dx + J_p(w)$$

2.5.5 Πυκνότητα φορέων με εξάρτηση από το ρυθμό δημιουργίας- επανασύνδεσης φορέων

Ξεκινώντας από την εξίσωση συνέχειας των ηλεκτρονίων με τα ρεύματα σε πραγματική φορά:

$$J_n = -q\mu_n n_x E_x + qD_n \frac{dn_x}{dx}$$

Εξάγουμε την εξίσωση της πυκνότητας φορέων εφαρμόζοντας την διαδικασία που κάναμε και στην παράγραφο 2.4 διαφορίζοντας την ποσότητα $\frac{d}{dx}(n_x e^{-\beta\Phi_x})$:

$$\frac{d}{dx}(n_x e^{-\beta\Phi_x}) = -\beta n_x e^{-\beta\Phi_x}\frac{d\Phi_x}{dx} + \frac{dn_x}{dx}e^{-\beta\Phi_x} = \left(\frac{dn_x}{d\Phi_x} - \beta n_\chi\right)e^{-\beta\Phi_x} = \frac{J_n(x)}{qD_n}e^{-\beta\Phi_x}$$

$$\Longrightarrow n_x e^{-\beta\Phi_x} = n_0 e^{-\beta\Phi_0} + \int_0^x \frac{J_n(x)}{qD_n}e^{-\beta\Phi_x}dx$$

Συμφώνα με τις οριακές συνθήκες του Simmons Φ(0)=0, n(0)=N_d, άρα:

$$n_x = N_d e^{\beta\Phi_x} + \frac{1}{qD_n}e^{\beta\Phi_x}\int_0^x J_n(x)e^{-\beta\Phi_x}dx \quad (2.64)$$

Για να μεταφέρουμε την παρακάτω εξίσωση στο φορμαλισμό του Simmons πρέπει να πάρουμε το δυναμικό όπως το βλέπουν τα ηλεκτρόνια δηλαδή $\varphi \rightarrow -\varphi$ έτσι θα καταλήξουμε πάλι στη σχέση (2.24):

$$n_x = N_d e^{-\beta\Phi_x} + \frac{1}{qD_n}e^{-\beta\Phi_x}\int_0^x J_n(x)e^{\beta\Phi_x}dx$$

Στη συνέχεια κάνουμε αντικατάσταση την ολοκληρωμένη σχέση (2.63) των Racko-Donoval καταλήγοντας:

$$n_x = N_d e^{-\beta\Phi_x} + \frac{J_n}{qD_n}e^{-\beta\Phi_x}\int_0^x e^{\beta\Phi_x}dx + \frac{e^{-\beta\Phi_x}}{qD_n}\int_0^x -q(\int_{x'}^w U(x')dx)e^{\beta\Phi_x}dx \quad (2.65)$$

Για x=w γίνεται

$$n_w = N_d e^{-\beta\Phi_w} + \frac{J_n}{qD_n}e^{-\beta\Phi_w}\int_0^w e^{\beta\Phi_x}dx - \frac{e^{-\beta\Phi_w}}{qD_n}\int_0^w (q\int_{x'}^w U(x')dx)e^{\beta\Phi_x}dx \quad (2.66)$$

Όπου το οι δύο πρώτοι όροι είναι οι ίδιοι που συναντάμε στη σχέση του Simmons (2.24) και ο τρίτος είναι ο όρος δημιουργίας- επανασύνδεσης. Ο όρος $q\int_{x'}^w U(x')dx$ όπως φαίνεται από τη σχέση 2.61 έχει διαστάσεις πυκνότητας ρεύματος (A/cm^2) και επειδή το ρεύμα J_n υπάρχει μόνο στο δεύτερο όρο η (2.66) μπορεί να πιο απλά:

$$n_w = N_d e^{-\beta\Phi_w}[1 - G(w)] + J_n F(w) \ (2.67)$$

Όπου $G(w) = \frac{1}{N_d D_n}\int_0^w (\int_{x'}^w U(x')dx) e^{\beta\Phi_x} dx (2.68)$

και $F(w) = \frac{1}{qD_n} e^{-\beta\Phi_w} \int_0^w e^{\beta\Phi_x} dx \ (2.69)$

2.5.6 Σχέση πυκνότητας ρεύματος-τάσης

Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία με αυτή των παραγράφων 2.4.2, 2.4.3 και γνωρίζοντας ότι στη διεπαφή (x=w) ισχύει $\Phi_x = \Phi_w = \Phi_s^* - V$ και κάνω χρήση των σχέσεων $\Phi_s^* = \Phi_c - \frac{E_C - E_m}{q}$, $N_d = N_C e^{-(E_C - E_m)/kT}$ οπότε έχω:

$$N_d e^{-\beta\Phi_w} = N_d e^{-\beta(\Phi_s^* - V)} = N_C e^{-(E_C - E_m)/kT} * e^{\beta V} * e^{-\beta(\Phi_c - \frac{E_C - E_m}{q})} = N_C e^{-\beta(\Phi_c - V)}$$

$$(2.67) \Longrightarrow n_w = N_d e^{-\beta(\Phi_s^* - V)}[1 - G(w)] + J_n F(w) \ (2.70)$$

$$(2.33) \xRightarrow{2.18,2.70} J_n = q u_{th}\left(N_c e^{-\beta\Phi_c} - N_c e^{-\beta(\Phi_c - V)}[1 - G(w)] - J_n F(w)\right) \Longrightarrow$$

$$J_n = \frac{q N_c u_{th}\, e^{-\beta\Phi_c}(1 - e^{\beta V}(1 - G(w)))}{1 + q u_{th}\, F(w)} \ (2.71)$$

Με G(w) και F(w) να δίνονται από τις παραπάνω σχέσεις (2.68), (2.69) αντίστοιχα. Η G(w) που τη βλέπουμε πρώτη φορά αποτελεί τη διόρθωση του ρεύματος λόγω των φαινομένων επανασύνδεσης- δημιουργίας, ενώ ο όρος F(w)που συναντήσαμε και στις σχέσεις των προηγούμενων κεφαλαίων αφορά τη διάχυση.

Στη συνέχεια, για την εξαγωγή της κατάλληλης σχέσης που θα χρησιμοποιηθεί από τη *Mathematica* θα πρέπει να προχωρήσουμε κάνοντας την κατάλληλη αδιαστατοποίηση των μεταβλητών, όπως στο παράρτημα Α. θα θεωρήσουμε, όπως και προηγουμένως το παραβολικό δυναμικό $\frac{\mathrm{du}}{\mathrm{dy}} = 2\mathrm{y} = 2\sqrt{\mathrm{u}}$.

Γνωρίζοντας από το παράρτημα Α ότι:

$$y = \sqrt{\frac{\beta}{A}}x \Longrightarrow dy = \sqrt{\frac{\beta}{A}}dx = \frac{\mathrm{du}}{2\sqrt{\mathrm{u}}}$$

Έτσι, η σχέση (2.68) γίνεται:

$$(2.68) \xRightarrow{\Pi\alpha\rho.A} G(w) = \frac{1}{N_d D_n}\left(\sqrt{A/_{\beta}}\right)^2 \int_0^{u_w} \frac{du}{2\sqrt{u}} \left\{\int_u^{u_w} U(u') \frac{du'}{2\sqrt{u'}}\right\} e^u \quad (2.72)$$

όπως είδαμε και παραπάνω για x=w⟹ u_w=β(Φ_S-V) και U(u')είναι ο ρυθμός μεταβολής πυκνότητας όπως αυτός προκύπτει από τις εξισώσεις Racko-Donoval (Racko et al. 1992). Αντίστοιχα, ακολουθώντας τη λογική παραγράφου 2.4.4 και τη σχέση (2.35) καταλήγω:

$$(2.69) \xRightarrow{\Pi.A} F(w) = \frac{1}{qD_n}\sqrt{A/_{\beta}}\, e^{-u_w} \int_0^{u_w} e^u \frac{du}{2\sqrt{u}}$$

$$\xRightarrow{(2.35)} F(w) = \frac{1}{qD_n}\sqrt{A/_{\beta}}\frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-u_w} Erfi\left(\sqrt{u_w}\right) \quad (2.73)$$

Επομένως, αφού αδιαστατοποιήσαμε τις σχέσεις μένει να βγάλουμε ένα συμπέρασμα για την επίδραση των φαινομένων δημιουργίας- επανασύνδεσης στη πυκνότητα ρεύματος των φορέων πλειονότητας ή μειονότητας, για να γίνει αυτό πρέπει να θεωρήσουμε έναν ρυθμό μεταβολής U.

2.5.6.1 Σχέση τάσης πυκνότητας ρεύματος για συγκεκριμένο U

Θεωρώντας έναν ρυθμό μεταβολής $U = \frac{p-p_0}{\tau_{p_0}}$ (2.74) σε έναν n-τύπου ημιαγωγό πλήρως ιονισμένο ($n_0 \approx N_d$).

Στην ισορροπία ισχύει: $n_0 p_0 = n_i \xRightarrow{n_0 \approx N_d} p_0 \approx \frac{n_i^2}{N_d}$ (2.75).

Όταν είμαστε μακριά από την ισορροπία (V≠0): $n = N_d e^{\beta V}$ (2.76)

και $np = n_i \Rightarrow p = \frac{n_i^2}{N_d} e^{-\beta V}$ (2.77).

Επομένως, ο ρυθμός μεταβολής γίνεται: $(2.74) \xRightarrow{(2.75,2.77)} U = \frac{n_i^2}{N_d \tau_{p_0}}(e^{-\beta V} - 1)$ (2.78).

Τώρα που γνωρίζουμε το ρυθμό (σχέση 2.78) με αντικατάσταση στον όρο της επανασύνδεσης-δημιουργίας G(w) (σχέση 2.72) θα λάβουμε μια πιο σαφή εικόνα για αυτόν:

$$(2.72) \xRightarrow{(2.78)} G(w) = \frac{1}{N_d D_n} A/_{\beta} \int_0^{u_w} \frac{du}{2\sqrt{u}} \left\{ \int_u^{u_w} \frac{n_i^2}{N_{\mathrm{d}} \tau_{p_0}} (e^{-\beta V} - 1) \frac{du'}{2\sqrt{u'}} \right\} e^u \Rightarrow$$

$$G(w) = \frac{1}{\tau_{p_0} D_n} \frac{n_i^2}{{N_{\mathrm{d}}}^2} A/_{\beta} (e^{-\beta V} - 1) \int_0^{u_w} \frac{du}{2\sqrt{u}} \left\{ \int_u^{u_w} \frac{du'}{2\sqrt{u'}} \right\} e^u \Rightarrow$$

$$G(w) = \frac{1}{\tau_{p_0} D_n} \frac{n_i^2}{{N_{\mathrm{d}}}^2} A/_{\beta} (e^{-\beta V} - 1) \int_0^{u_w} \frac{du}{2\sqrt{u}} \{\sqrt{u_w} - \sqrt{u}\} e^u \Rightarrow$$

$$G(w) = \frac{1}{\tau_{p_0} D_n} \frac{n_i^2}{{N_{\mathrm{d}}}^2} A/_{\beta} (e^{-\beta V} - 1) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{u_w} Erfi[\sqrt{u_w}] - \frac{1}{2} (e^{u_w} - 1) \right) \text{ ή αλλιώς}$$

$$G(w) = \frac{1}{\tau_{p_0} D_n} \frac{n_i^2}{{N_{\mathrm{d}}}^2} A/_{\beta} (e^{-\beta V} - 1)(g(u_w))$$

$$\text{θέτοντας } g(u_w) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{u_w} Erfi[\sqrt{u_w}] - \frac{1}{2} (e^{u_w} - 1) \text{ ή αλλιώς}$$

$$G(w) = a(V)(e^{-\beta V} - 1) \ (2.78)$$

$$\text{με } a(V) = \frac{1}{\tau_{p_0} D_n} \frac{n_i^2}{{N_{\mathrm{d}}}^2} A/_{\beta} \left(g \left(\sqrt{\beta(\Phi_s^* - V)} \right) \right) \text{ και}$$

$$u_w = \beta(\Phi_s^* - V)$$

Αντικαθιστώντας το νέο G(w) στη σχέση της πυκνότητας ρεύματος (σχέση 2.71) καταλήγουμε σε πιο απλό μοντέλο της πυκνότητας:

$$J_n = \frac{q N_c u_{th} \, e^{-\beta \Phi_c} ((1 + a(V))(1 - e^{\beta V}) \,)}{1 + q u_{th} \, F(w)} \ (2.79)$$

Παρατηρήσεις:

- *Αρκεί να μελετηθεί ο παράγοντας α(V) για να δούμε την επίδρασή του στο ρεύμα των δύο περιοχών καθώς αυτός είναι ο παράγοντας που επηρεάζει την επανασύνδεση- δημιουργία ηλεκτρονίων.*
- *Η παραπάνω σχέση αποτελεί το απλό μοντέλο της σχέσης πυκνότητας ρεύματος-τάσης, καθώς όπως είδαμε στην παράγραφο 2.3.2 πειραματικά το μοντέλο περιέχει παράγοντα* $e^{\beta V/n}$ *με n>1.*
- *Αντίστοιχα μπορεί να μελετηθεί και το ρεύμα* J_p *των φορέων μειονότητας.*

Κεφάλαιο 3: Αποτελέσματα

3.1 Μελέτη χαρακτηριστικής J-V της διόδου Schottky και σύγκριση μοντέλων Simmons-Schottky.

Για να τη γραφική αναπαράσταση της χαρακτηριστικής καμπύλης J-V θα χρησιμοποιηθεί η *Mathematica* και για τη μελέτη θα συγκριθούν οι σχέσεις:

$$J_{tot} = J_0 e^{-q\Phi_b'/kT}\left(e^{qV_a/kT} - 1\right) \quad (2.19)$$

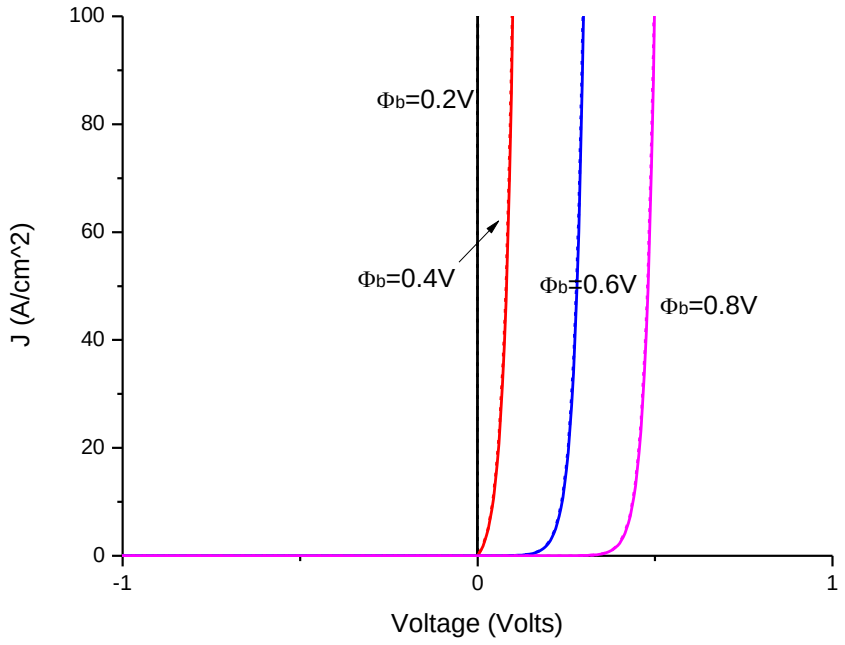
με $J_0 = eN_c u_{th} = R^* T^2$ (2.17)

και

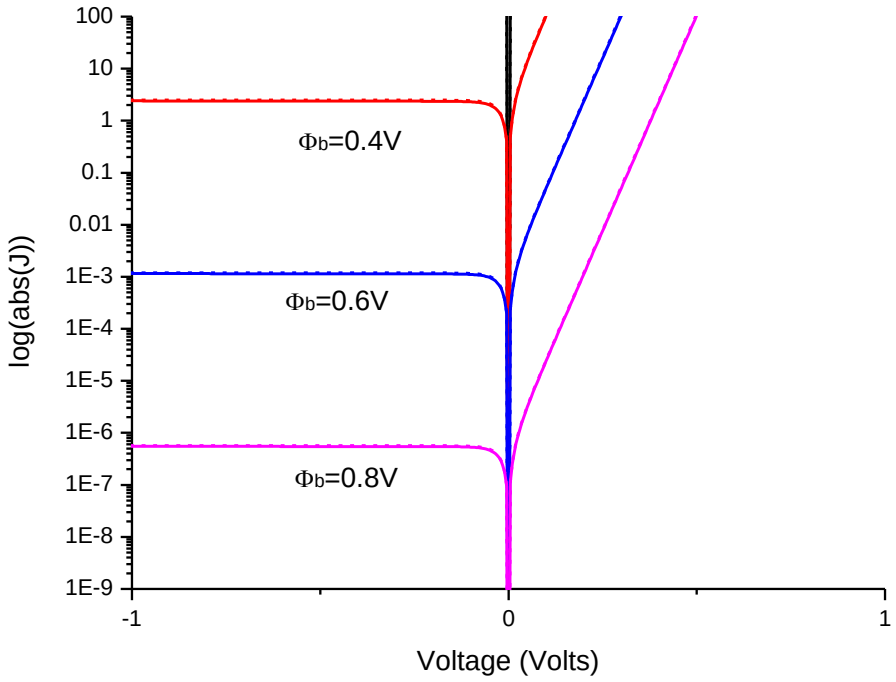
$$J_n = \frac{qN_c e^{-\beta\Phi_c}(1 - e^{\beta V})}{\frac{1}{u_{th}} + \frac{1}{u_e}} \quad (2.34)$$

που αποτελούν όπως είδαμε και στο κεφάλαιο 2 τις σχέσεις Schottky και Simmons αντίστοιχα. Οι γραφικές παραστάσεις μπορούν να πραγματοποιηθούν για ημιαγωγούς με διαφορετική πυκνότητα φορέων N_d και διαφορετικό φράγμα δυναμικού Φ_b, ενώ θεωρήσαμε $N_C=2{,}5*10^{19}$ cm^{-3}. Έτσι μπορεί να μελετηθεί καλύτερα η συμπεριφορά της πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει της τάσης μεταβάλλοντας τη N_d και το Φ_b, αλλά και να παρατηρηθεί η απόκριση των δύο μοντέλων σε διαφορετικές N_d.

Εξάγοντας μια γραφική παράσταση J-V, όπως στο σχήμα 3.1, παρατηρούμε πως η γενική μορφή της αποτελείται από δύο μέρη στο ένα είναι εκθετική και στο άλλο σχεδόν σταθερή. Πιο συγκεκριμένα, στην ορθή πόλωση $V_\alpha>0$ η μορφή είναι εκθετική, ενώ στην ανάστροφη $V_\alpha<0$, έχουμε την εμφάνιση μιας μικρής σχεδόν σταθερής πυκνότητας ρεύματος πράγμα που φαίνεται καλύτερα στη λογαριθμική κλίμακα σχήμα 3.2. Επιπλέον, παρατηρούμε πως όσο μικρότερο είναι το φράγμα δυναμικού Φ_b του ημιαγωγού, τόσο πιο πολύ μεγαλώνει το ρεύμα με την αύξηση της τάσης.

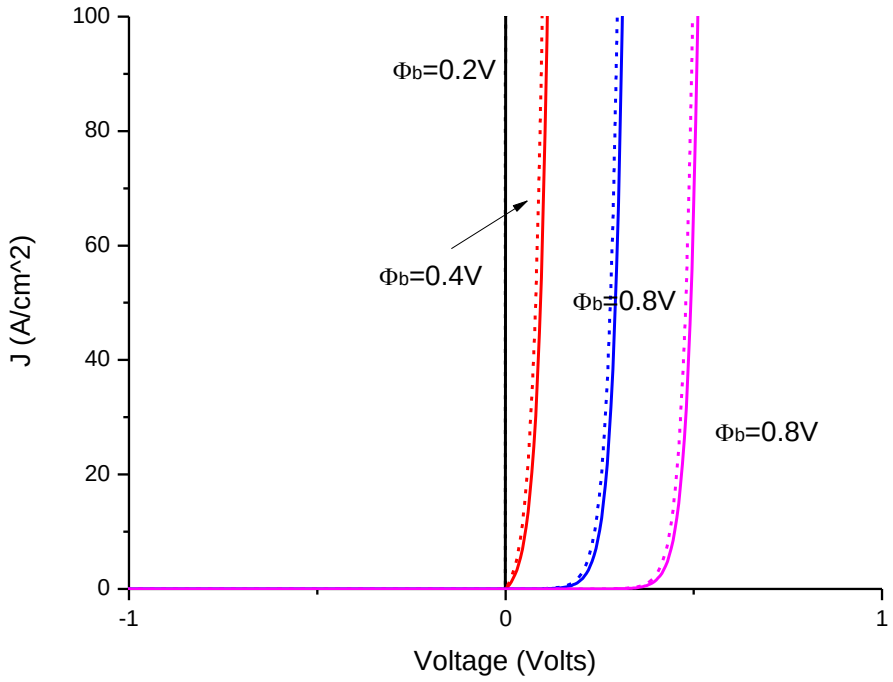


Σχήμα 3.1. Σύγκριση χαρακτηριστικής πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Simmons (συνεχής γραμμή) και κατά Schottky (διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{16}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Παρατηρούμε πως στην ορθή πόλωση $V_\alpha>0$ η εξάρτηση είναι εκθετική, αλλά και ότι οι γραφικές παραστάσεις J-V ταυτίζονται στις μεγάλες πυκνότητες.

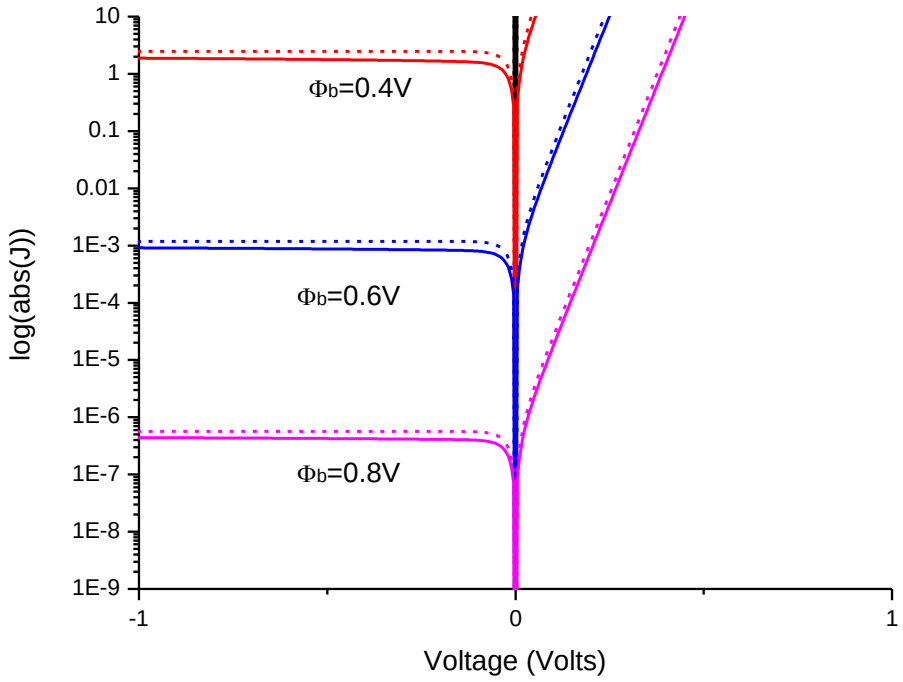


Σχήμα 3.2. Απόλυτη τιμή της πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει της τάσης σε λογαριθμική κλίμακα κατά Simmons (συνεχής γραμμή) και κατά Schottky (διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{16}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Για $V_\alpha<0$, έχουμε σταθερή πυκνότητας ρεύματος.

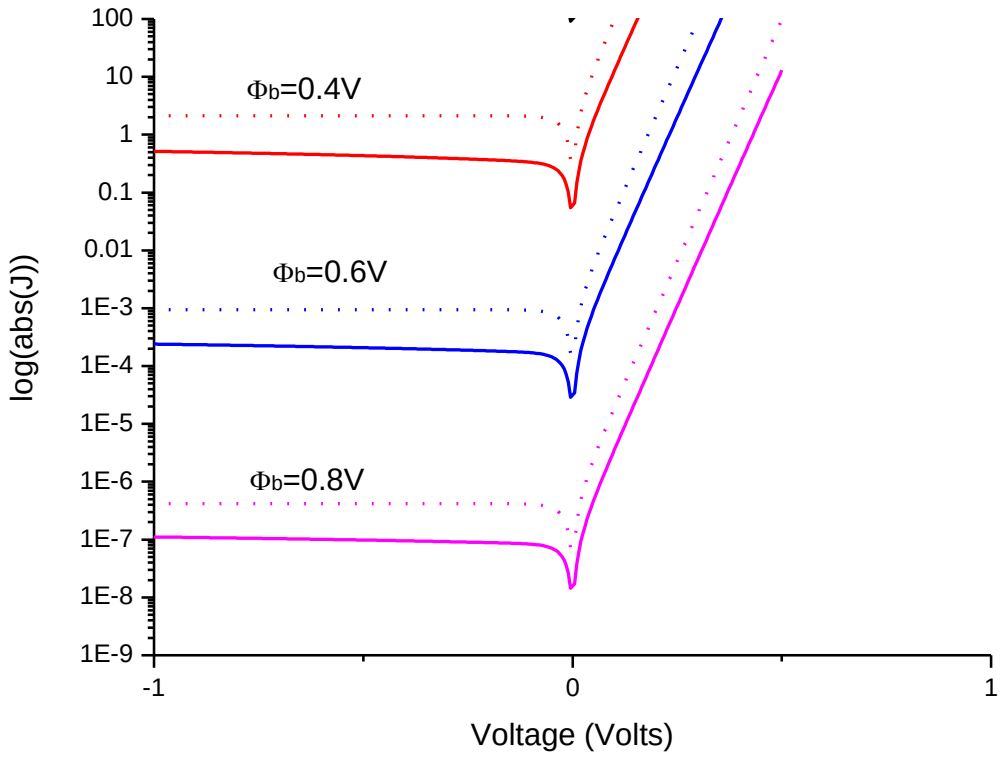
Συγκρίνοντας τα διαγράμματα διαφορετικών πυκνοτήτων ρεύματος για διαφορετικά φράγματα δυναμικού Φ_b, παρατηρούμε στις μεγαλύτερες πυκνότητες $N_d=10^{16}$ cm^{-3} πως οι γραφικές παραστάσεις των δύο σχέσεων ταυτίζονται καθώς ο ημιαγωγός είναι αρκετά νοθευμένος με προσμίξεις, έτσι η προσέγγιση του Schottky είναι ορθή όταν έχουμε πολλές σκεδάσεις. Όσο όμως, η μέση ελεύθερη διαδρομή των ηλεκτρονίων στην περιοχή απογύμνωσης αυξάνεται, δηλαδή η πυκνότητα των δοτών ελαττώνεται ($N_d=10^{14}$ cm^{-3}), βλέπουμε την απόκλιση των δύο μοντέλων (σχήματα 3.3, 3.4), πράγμα που είναι ακόμα πιο προφανές όταν η πυκνότητα των δοτών είναι $N_d=10^{12}$ cm^{-3} στο σχήμα 3.5. Οπότε, το μοντέλο του Simmons είναι πιο γενικό και δουλεύει τόσο σε μεγάλη, όσο και σε μικρή ελεύθερη διαδρομή.



Σχήμα 3.3. Σύγκριση χαρακτηριστικής πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Simmons (συνεχής γραμμή) και κατά Schottky (διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{14}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Παρατηρούμε την απόκλιση μεταξύ J_{vel} και J_{thermv}.



Σχήμα 3.4. Απόλυτη τιμή της πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει της τάσης σε λογαριθμική κλίμακα κατά Simmons (συνεχής γραμμή) και κατά Schottky (διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{14}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Παρατηρούμε τη σταθερή πυκνότητας ρεύματος για $V_\alpha<0$.



Σχήμα 3.5. Απόλυτη τιμή της πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει της τάσης σε λογαριθμική κλίμακα κατά Simmons (συνεχής γραμμή) και κατά Schottky (διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{12}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Παρατηρούμε τη σταθερή πυκνότητας ρεύματος για $V_\alpha<0$.

3.2 Σύγκριση προσέγγισης Simmons και αναλυτικής εξίσωσης

Συγκρίνοντας τώρα την προσέγγιση που βρήκαμε για το παραβολικό δυναμικό:

$$J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta\Phi_c}\left(1-e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th}\frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n}F(u_w)} \quad (2.42)$$

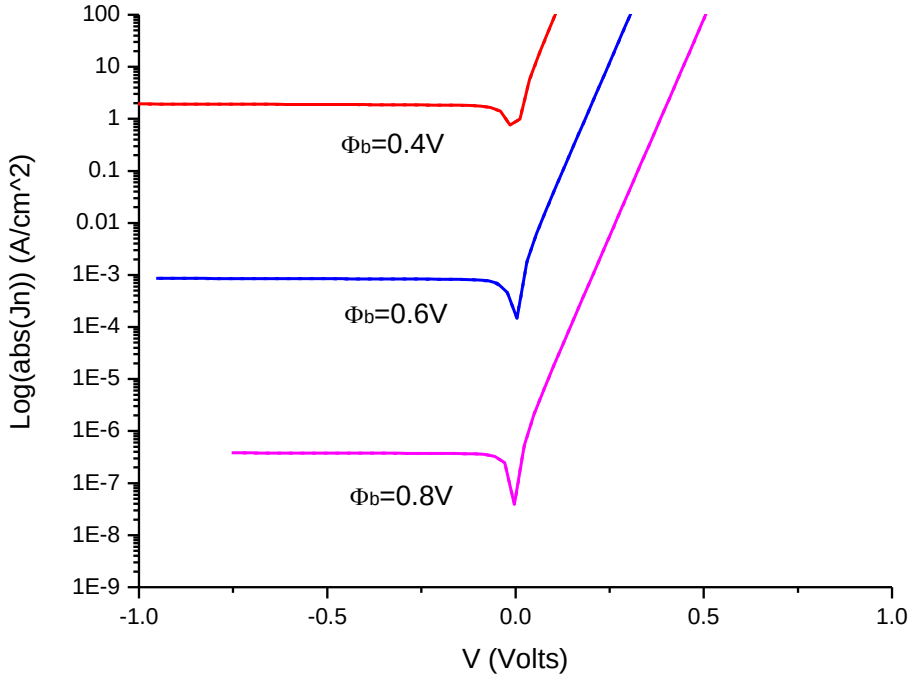
όπου $F(u_w) = J_n R e^{-u_w}\int_0^{u_w} e^u \frac{du}{2\sqrt{u+e^{-u}-1}}$

με αυτή του Simmons:

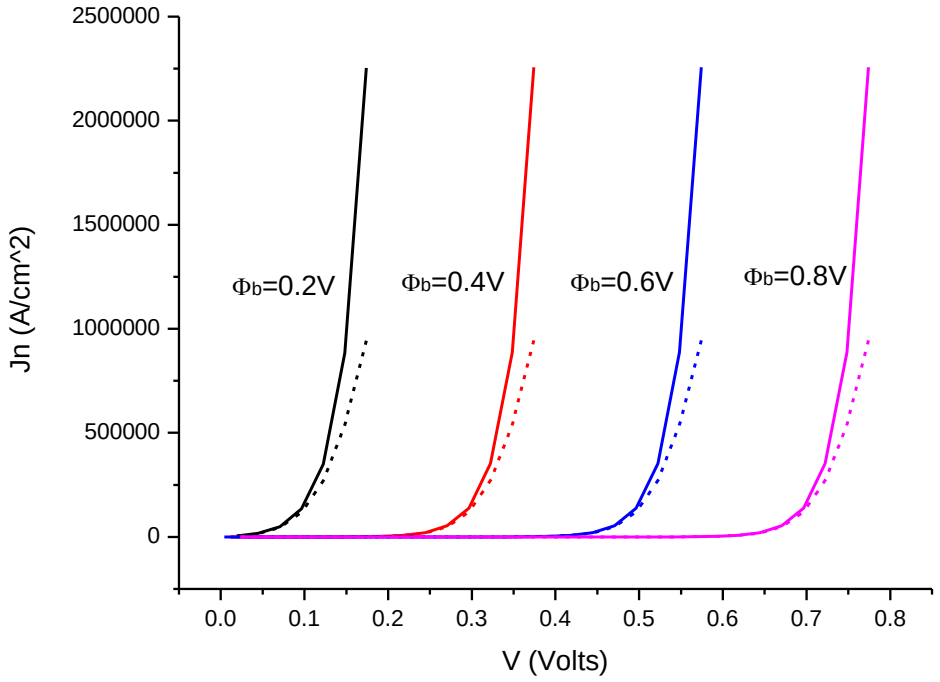
$$J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta \Phi_c}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} \quad (2.42)$$

όπου $F(u_w) = e^{-u_w} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \mathrm{Erfi}[\sqrt{u_w}]$

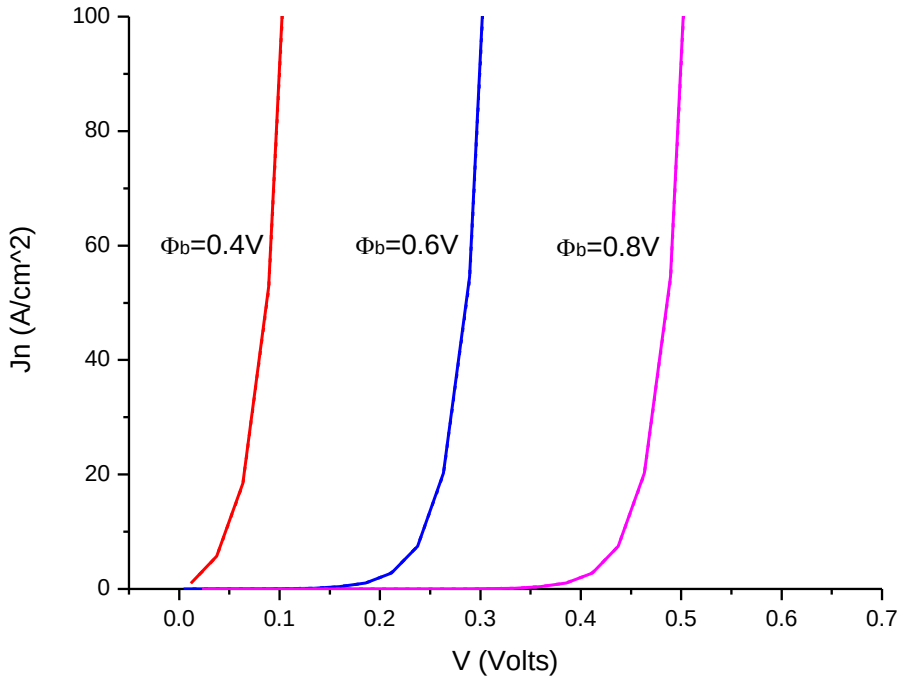
παρατηρούμε πως οι γραφικές τους παραστάσεις σχεδόν συμπίπτουν, τόσο κατά τη σύγκριση ορθής και ανάστροφης πόλωσης όσο και στην λογαριθμική κλίμακα. Πράγμα που σημαίνει πως η προσέγγιση είναι αρκετά καλή ιδιαίτερα στην ανάστροφη πόλωση της επαφής. Στην ορθή πόλωση, τα δύο μοντέλα παρουσιάζουν διαφορές όσο η V αυξάνεται, αλλά πυκνότητες ρεύματος πάνω από 100 A/cm^2 δεν είναι ρεαλιστικές.



Σχήμα 3.6. Απόλυτη τιμή της πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει της τάσης σε λογαριθμική κλίμακα κατά Simmons (συνεχής γραμμή) και σύμφωνα με την αναλυτική προσέγγιση που κάναμε (διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{15}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Παρατηρούμε ότι οι γραφικές τους συμπίπτουν.



Σχήμα 3.7. Σύγκριση χαρακτηριστικής πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Simmons (συνεχής γραμμή) και κατά την αναλυτική προσέγγιση που κάναμε (διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{15}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Παρατηρούμε την απόκλιση για μεγάλες πυκνότητες ρεύματος.



Σχήμα 3.8. Σύγκριση χαρακτηριστικής πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Simmons (J_{n0}-συνεχής γραμμή) και κατά την αναλυτική προσέγγιση που κάναμε(J_{n1}-διακεκομμένη γραμμή) για $N_d=10^{15}$ cm^{-3} και για Φ_b=0.2V,0.4V, 0.6V, 0.8V. Παρατηρούμε πως J_{n0} και J_{n1} για J_{nX} <100 A/cm^2 συμπίπτουν.

3.3 Επίδραση του φορτίου ειδώλου στην ηλεκτρική χαρακτηριστική

Στη συνέχεια αναπαριστώντας γραφικά τις πυκνότητες ρεύματος με και χωρίς τη διόρθωση του φραγμού δυναμικού κατά την αναλυτική επίλυση Simmons:

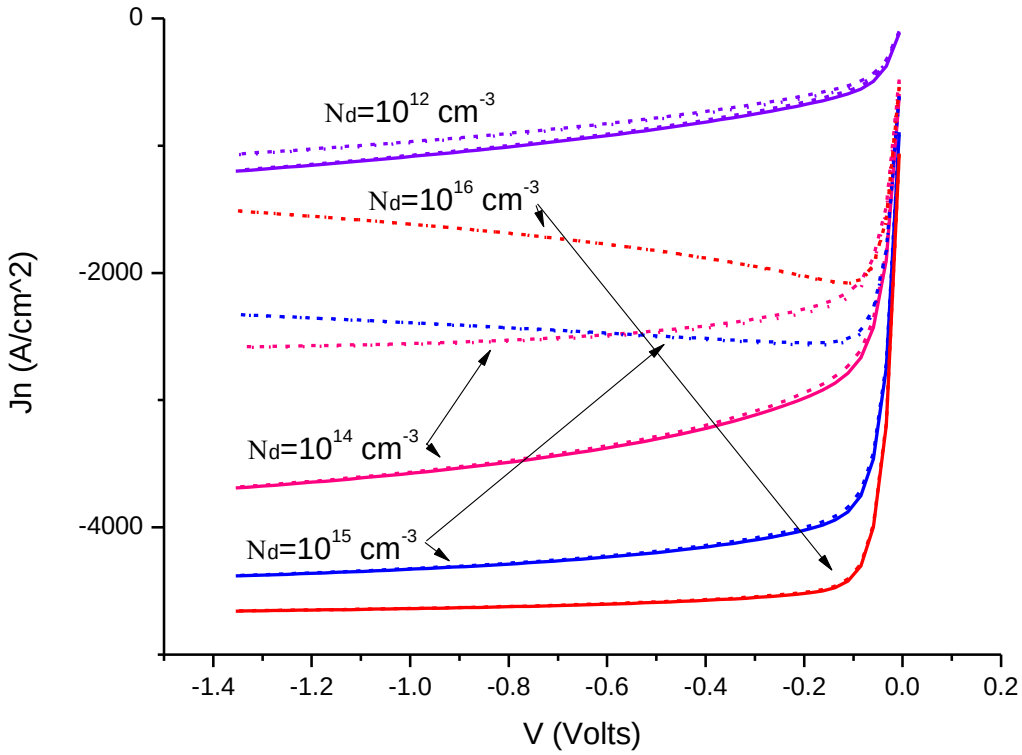
$$J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta\Phi_b + \beta\Delta\Phi_b}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th}\frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} \quad (2.43)$$

$$F(u_w) = e^{-u_w}\,\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\mathrm{Erfi}\left[\sqrt{u_w}\right]$$

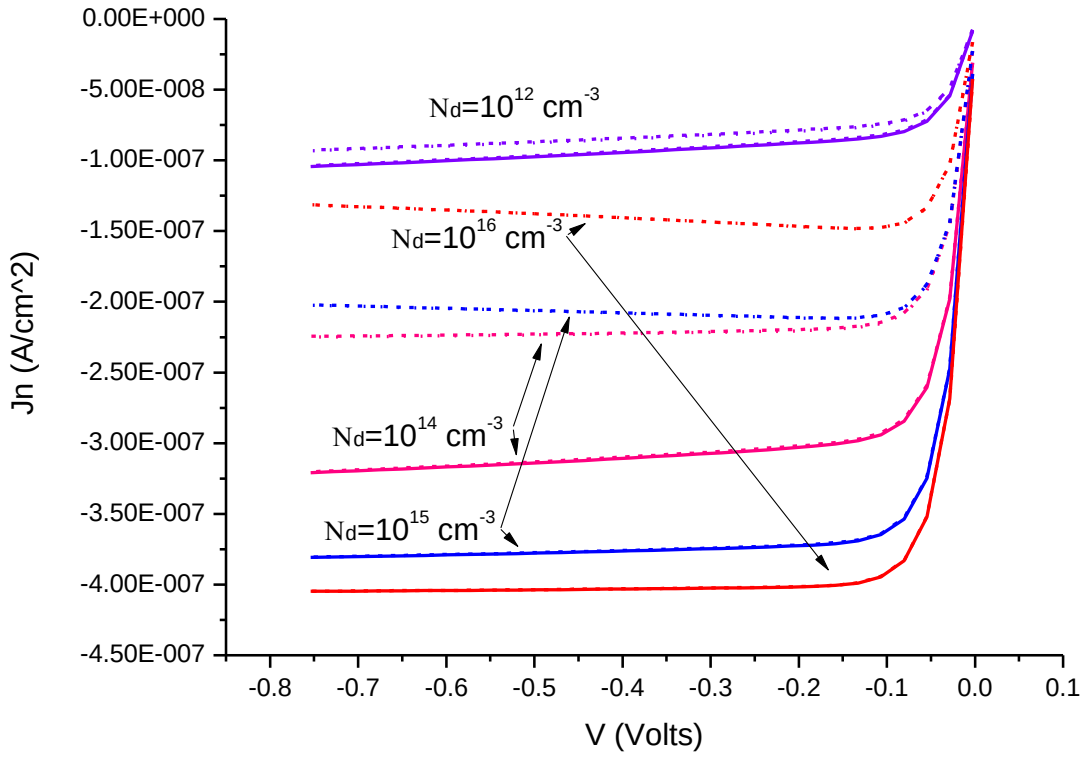
και με χωρίς τη διόρθωση:

$$J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta \Phi_c}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} \quad (2.42)$$

Παρατηρούμε πως στην ορθή πόλωση η προσθήκη του όρου της διόρθωσης του δυναμικού έχει μικρή επίδραση στο αποτέλεσμα. Στην ανάστροφή πόλωση όμως όρος αυτός συνεισφέρει στο ρεύμα και αυτό γραφικά έχει ως συνέπεια το ανάστροφο ρεύμα κόρου να είναι μικρότερο καθώς το φράγμα δυναμικού είναι μικρότερο, αλλά και να μην είναι παράλληλο με τον άξονα της τάσης στις μεγαλύτερες πυκνότητες καταστάσεων N_d.



Σχήμα 3.9. Σύγκριση πυκνοτήτων ρεύματος χωρίς (συνεχής γραμμή) και με τη διόρθωση (διακεκομμένη γραμμή) του φραγμού δυναμικού λόγω του φορτίου ειδώλου για Φ_b=0.2 V.



Σχήμα 3.10. Σύγκριση πυκνοτήτων ρεύματος χωρίς (συνεχής γραμμή) και με τη διόρθωση του φραγμού(διακεκομμένη γραμμή) δυναμικού λόγω του φορτίου ειδώλου για Φ_b=0.8 V.

3.4 Σύγκριση πυκνοτήτων ρεύματος με ευκινησία σταθερή και με εξάρτηση από το ηλεκτρικό πεδίο

Συγκρίνοντας τις δύο ακραίες περιπτώσεις, δηλαδή θ=0, όπου το μ=μ_0

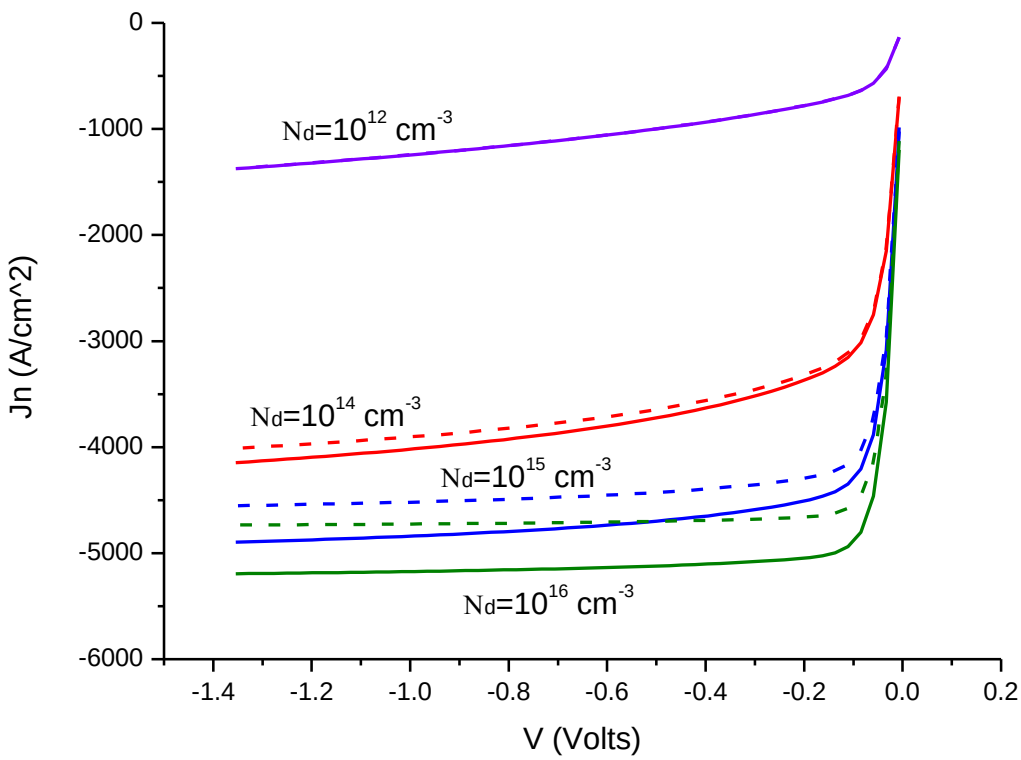
$$J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta\Phi_b + \beta\Delta\Phi_b}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th}\frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} \quad (2.43)$$

με $F(u_w) = e^{-u_w}\,\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\mathrm{Erfi}\left[\sqrt{u_w}\right]$

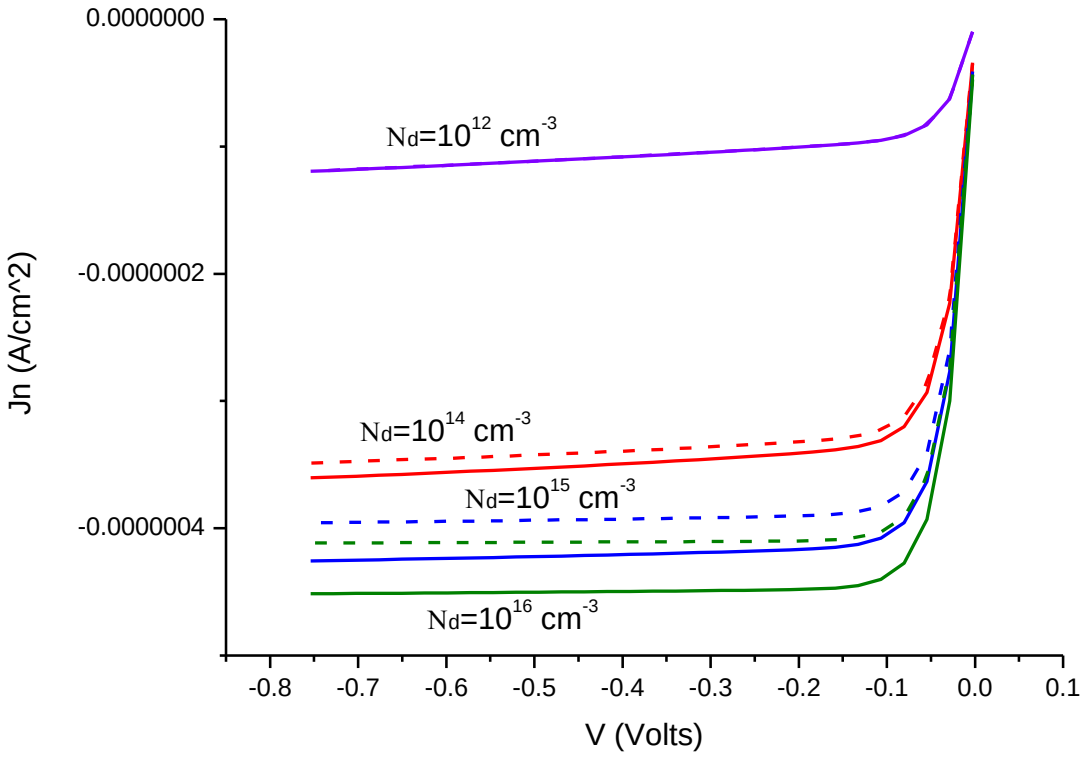
και με $F(u_w) = e^{-u_w} \int_0^{u'} \left(\frac{\mu_0}{\mu}\right) e^{u' \frac{1+\sqrt{1+4\theta^2 u'}}{4\sqrt{u'}}} du'$ όπου για ισχυρό πεδίο ($u_{o\rho}=u_{sat}$=1,1*10^7 cm/sec) ισχύει $\frac{1+\sqrt{1+4\theta^2 u'}}{4\sqrt{u'}} = \frac{\theta}{2}$ και καταλήγουμε στη σχέση:

$$J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta \Phi_c}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} \frac{\theta}{2}}$$

Παρατηρούμε πως το ισχυρό πεδίο επηρεάζει τη κινητικότητα των φορέων με συνέπεια να εμφανίζονται μικρότερα ρεύματα. Πράγμα που φαίνεται καλύτερα όταν έχουμε ημιαγωγό αρκετά νοθευμένο ($N_d=10^{16}$), γιατί προφανώς υπάρχουν περισσότεροι φορείς που επηρεάζεται η κινητικότητα τους. Επιπλέον, μεγαλύτερη διαφορά στη πυκνότητα ρεύματος μεταξύ σταθερής και μεταβλητής ευκινησίας έχουμε για Φ=0.2V, διότι τα ρεύματα που αναπτύσσονται είναι μεγαλύτερα.



Σχήμα 3.11. Συγκριτικό διάγραμμα πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης για σταθερή ευκινησία (J_{n0}- συνεχής γραμμή) και μεταβλητή ευκινησία (J_{n1}- διακεκομμένη γραμμή) για Φ=0,2V. Παρατηρούμε πως J_{n0}< J_{n1} και ότι η διαφορά J_{n1}- J_{n0} είναι μεγαλύτερη όταν $N_d=10^{16}$.



Σχήμα 3.12. Συγκριτικό διάγραμμα πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης για σταθερή ευκινησία (J_{n0}- συνεχής γραμμή) και μεταβλητή ευκινησία (J_{n1}- διακεκομμένη γραμμή) για Φ=0,8V. Παρατηρούμε πως J_{n0}< J_{n1} και ότι η διαφορά J_{n1}- J_{n0} είναι μεγαλύτερη όταν $N_d=10^{16}$.

3.5 Σύγκριση πυκνοτήτων ρεύματος-τάσης λαμβάνοντας υπόψη τους μηχανισμούς επανασύνδεσης-δημιουργίας

Η τελευταία σύγκριση που παρουσιάζεται είναι μεταξύ των χαρακτηριστικών πυκνοτήτων ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Schottky σύμφωνα με τη συνάρτηση:

$$J_{tot} = J_0 e^{-q\Phi_b'/kT}\left(e^{qV_a/kT} - 1\right) \quad (2.19)$$

με $J_0 = eN_c u_{th} = R^* T^2$ (2.17)

λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα διάχυσης:

$$J_n = \frac{q u_{th} N_c e^{-\beta \Phi_c}\left(1 - e^{\beta V}\right)}{1 + u_{th} \frac{\sqrt{A/\beta}}{D_n} F(u_w)} \quad (2.42)$$

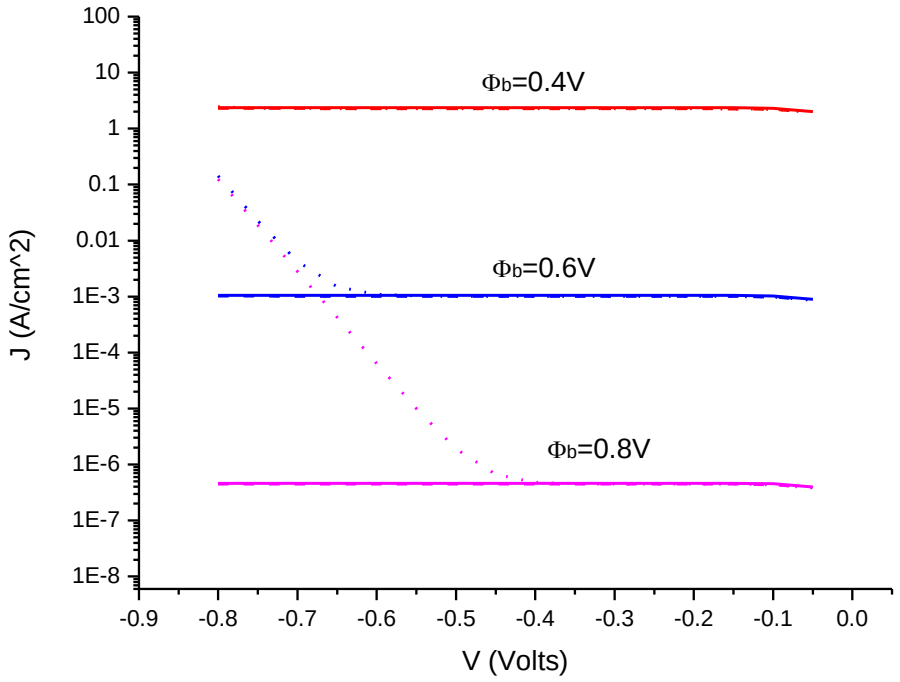
όπου $F(u_w) = e^{-u_w} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \mathrm{Erfi}[\sqrt{u_w}]$

και λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα επανασύνδεσης δημιουργίας:

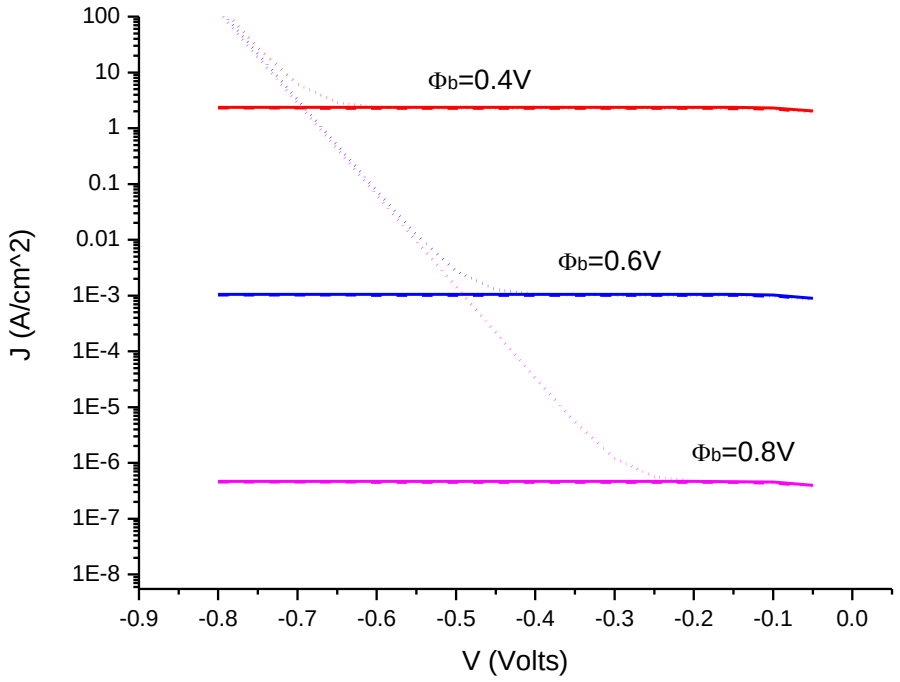
$$J_n = \frac{q N_c u_{th}\, e^{-\beta \Phi_c}((1 + a(V))(1 - e^{\beta V}))}{1 + q u_{th}\, F(w)} \quad (2.79)$$

με $a(V) = \frac{1}{\tau_{p_0} D_n} \frac{n_i^2}{N_d{}^2} A/\beta \left(g\left(\sqrt{\beta(\Phi_s^* - V)}\right)\right)$

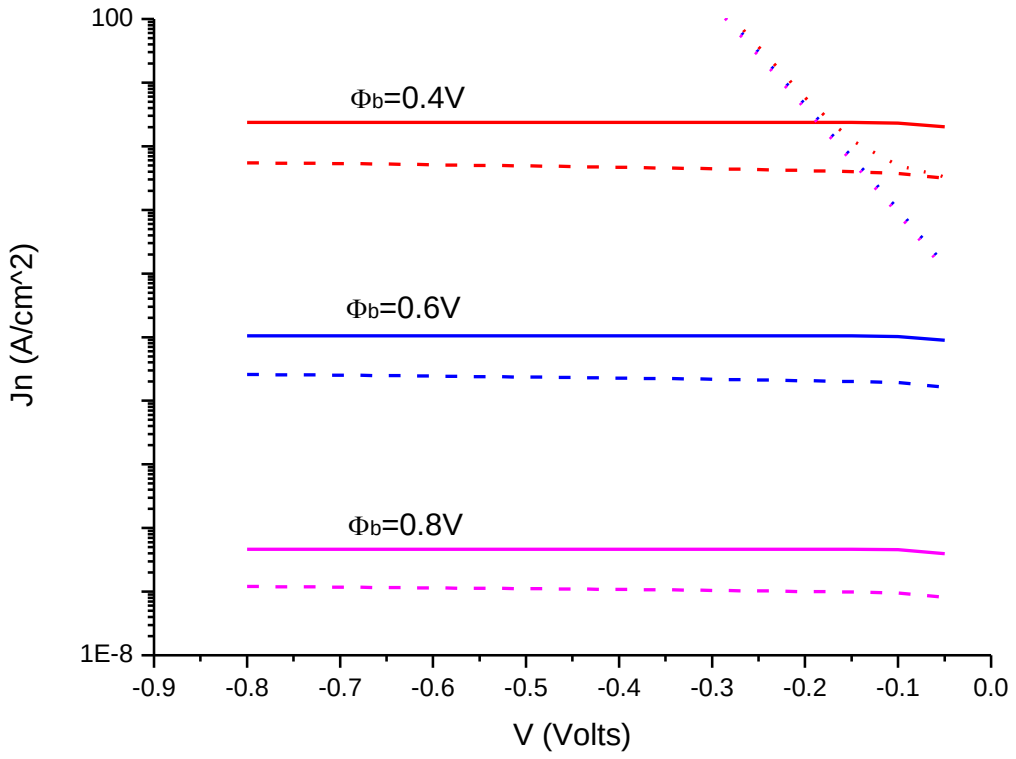
Όπως αναφέρθηκε και στη θεωρία (παράγραφος 2.5.2) ο χαρακτηριστικός χρόνος ζωής των φορέων μειονότητας διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στην επιστροφή στη θερμοδυναμική ισορροπία. Έτσι, παρατηρούμε συγκρίνοντας τα διαγράμματα για τ_P=10^-3 sec (σχήμα 3.13) και τ_P=10^-6 sec (σχήμα 3.14) έχουμε πιο γρήγορη πτώση της τιμής του ρεύματος στο πρώτο σε σχέση με το δεύτερο και αυτό είναι λογικό διότι στη σχέση 2.79 η εξάρτηση από το τ_P βρίσκεται μόνο στο παρονομαστή του α. Επιπλέον και στις δύο περιπτώσεις βλέπουμε πως η πτώση του ρεύματος συντελείται πιο γρήγορα στα μικρά φράγματα Φ_b λόγω μεγαλύτερων ρευμάτων, άρα και περισσότερων φορέων πλειονότητας. Στην περίπτωση $N_d=10^{12}$, παρατηρούμε πως τα φαινόμενα δημιουργίας- επανασύνδεσης επηρεάζουν πιο έντονα την πυκνότητα ρεύματος, διότι το α(V) μεγαλώνει καθώς ο παρονομαστής του είναι μικρότερος κατά 8 τάξεις μεγέθους σε σχέση με το $N_d=10^{16}$, έτσι με την αύξηση της ανάστροφης τάσης το ρεύμα αυξάνεται πολύ γρήγορα.



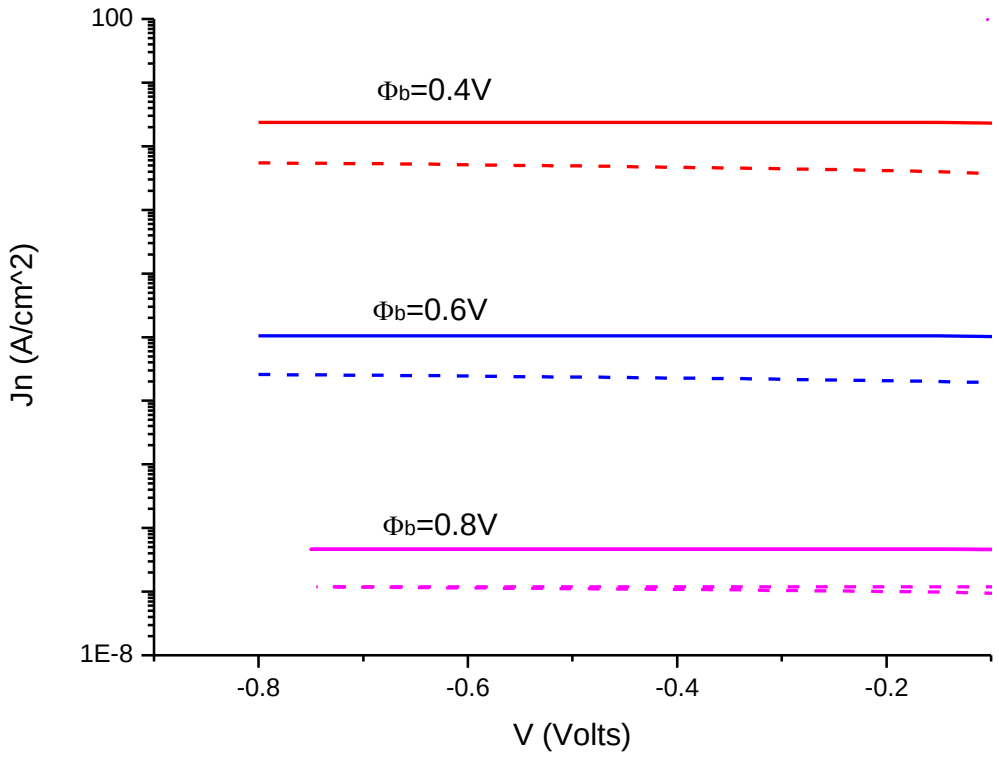
Σχήμα 3.13. Συγκριτικό διάγραμμα πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Schottky (συνεχής γραμμή), λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα διάχυσης (διακεκομμένη γραμμή) και λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα επανασύνδεσης δημιουργίας για $N_d=10^{16}$ cm^{-3} και τ_P=10^-3 sec (τελείες).



Σχήμα 3.14. Συγκριτικό διάγραμμα πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Schottky (συνεχής γραμμή), λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα διάχυσης (διακεκομμένη γραμμή) και λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα επανασύνδεσης δημιουργίας για $N_d=10^{16}$ cm^{-3} και τ_P=10^-6 sec (τελείες).



Σχήμα 3.15. Συγκριτικό διάγραμμα πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Schottky (συνεχής γραμμή), λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα διάχυσης (διακεκομμένη γραμμή) και λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα επανασύνδεσης δημιουργίας για $N_d=10^{12}$ cm^{-3} και τ_P=10^-3 sec (τελείες).



Σχήμα 3.16. Συγκριτικό διάγραμμα πυκνότητας ρεύματος συναρτήσει τάσης κατά Schottky (συνεχής γραμμή), λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα διάχυσης (διακεκομμένη γραμμή) και λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα επανασύνδεσης δημιουργίας για $N_d=10^{12}$ cm^{-3} και τ_P=10^-6 sec (τελείες).

Κεφάλαιο 4: Συμπεράσματα

Τα συμπεράσματα που μπορούμε να εξάγουμε από τη μελέτη που έγινε και τα μοντέλα που παρατηρήθηκαν είναι τα εξής:

- Το μοντέλο του Simmons είναι πιο γενικό, άρα και πιο ακριβές σε σχέση με αυτό του Schottky, διότι λαμβάνει υπόψη του τόσο τη διάχυση όσο και την ολίσθηση. Όταν έχουμε πολλές σκεδάσεις, δηλαδή αρκετά νοθευμένο ημιαγωγό τα δύο μοντέλα ταυτίζονται.
- Ο Simmons έχει κάνει μια πολύ καλή προσέγγιση για το παραβολικό δυναμικό, παρόλο που η συγκέντρωση φορέων που δεν ικανοποιεί την εξίσωση Poisson.
- Λαμβάνοντας υπόψη το φορτίο είδωλο που προκαλεί χαμήλωμα του δυναμικού έχουμε την εμφάνιση μικρότερου ανάστροφου ρεύματος κόρου που δεν είναι παράλληλο με τον άξονα της τάσης.
- Κατά την σύγκριση των ρευμάτων με σταθερή ευκινησία και στον κόρο, παρατηρούμε πως στον κόρο εμφανίζονται μικρότερα ρεύματα λόγω ότι το πεδίο επηρεάζει την κινητικότητα των φορέων, πράγμα που είναι ακόμη πιο αισθητό όταν έχουμε αρκετά νοθευμένο ημιαγωγό.
- Οι μηχανισμοί επανασύνδεσης δημιουργίας εξαρτώνται από έναν χαρακτηριστικό χρόνο επιστροφής στη θερμοδυναμική ισορροπία, όσο πιο μικρός είναι τόσο πιο γρήγορη είναι η επιστροφή στη θερμοδυναμική ισορροπία, πράγμα περισσότερο αισθητό στα μικρότερα ρεύματα.

Βιβλιογραφία – Αναφορές

Barbosa, Jonei Cerqueira. 2003. 'What Is Mathematical Modelling?' *Mathematical Modelling: A Way of Life*: 227–34.

Colinge. 2002. Physics of Semiconductor Devices *Physics of Semiconductor Devices*. Boston: Kluwer Academic Publishers. http://link.springer.com/10.1007/b117561.

Filatzikioti, A. et al. 2019. 'Carbon Nanotube Schottky Type Photodetectors for UV Applications'. *Solid-State Electronics* 151: 27–35. https://doi.org/10.1016/j.sse.2018.10.018.

J.G.Simmons, G.W.Taylor. 1983. 'Theory of Conduction Schottky Barriers'. *Solid State Electronics* 26(7): 705–9.

Neamen, D. 2003. *Semiconductors Physics and Devices*.

Racko, J. et al. 1992. 'Revised Theory of Current Transport through the Schottky Structure'. *Solid State Electronics* 35(7): 913–19.

Selberherr, Siegfried. 1984. 44 Analysis and Simulation of Semiconductor Devices *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Vienna: Springer Vienna. https://doi.org/10.1007/978-3-7091-8752-4.

Semenov, Alexei et al. 2010. 'Application of Zero-Bias Quasi-Optical Schottky-Diode Detectors for Monitoring Short-Pulse and Weak Terahertz Radiation'. *IEEE Electron Device Letters* 31(7): 674–76.

Sze, S.M., and Kwok K. Ng. 2006. *Physics of Semiconductor Devices*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc. http://doi.wiley.com/10.1002/0470068329.

Παράρτημα Α

Αδιαστατοποίηση είναι η διαδικασία κατά την οποία οι εξισώσεις μετασχηματίζονται έτσι ώστε οι μεταβλητές που περιέχουν να μην έχουνε διαστάσεις. Αυτή η διαδικασία μας βοηθάει ώστε να παρακολουθούμε τις μεταβολές των μεγεθών καλύτερα και απλοποιεί τις εξισώσεις. Ουσιαστικά, στις εξισώσεις που εξάγουμε αντικαθιστούμε τις μεταβλητές με τις αδιάστατες. Το βασικό σχήμα τις αδιαστατοποίησης φαίνεται στον πίνακα παρακάτω:

ΜΕΓΕΘΗ ΜΕ ΔΙΑΣΤΑΣΕΙΣ	***ΜΕΓΕΘΗ ΧΩΡΙΣ ΔΙΑΣΤΑΣΕΙΣ***	***ΔΙΑΣΤΑΣΕΙΣ***
Απόσταση x [cm]	$y = \sqrt{\frac{\beta}{A}}x$	*[1]=sqr(t[1/V][V/cm^2])[cm]*
Δυναμικό Φ [V]	$u = \beta\Phi$	*[1]=[1/V][V]*
Πυκνότητα n [1/cm^3]	$\tilde{n} = \frac{n}{N_D}$	*[1]=[1/cm^3]/[1/cm^3]*
Πεδίο E [V/cm]	$\mathscr{E} = \sqrt{A\beta}E$	*[1]=(sqrt[1/V][cm^2/V])[V/cm]*

Για παράδειγμα, η σχέση 2.24

$$n_x = N_d e^{-\beta\Phi_x} + \frac{J_n}{qD_n} e^{-\beta\Phi_x} \int_0^x e^{\beta\Phi_x} dx$$

Κάνοντας αντικατάσταση $u = \beta\Phi$, $\tilde{n} = \frac{n}{N_D}$ και αλλάζοντας μεταβλητή στον ολοκληρωτικό όρο έχω:

$$\tilde{n} = e^{-u} + \frac{J}{qN_D D_n}\sqrt{\frac{A}{\beta}} e^{-u} \int_0^y e^u dy \ \ (A.1)$$

Και από τη σχέση 2.35 έχω:

$$\tilde{n} = e^{-u} + \frac{J}{qN_D D_n}\sqrt{\frac{A}{\beta}}\frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-u} \mathrm{Erf}\, i\left(\sqrt{\frac{\beta}{A}}x\right) (A.2)$$

Με την ίδια διαδικασία μπορούν να μετασχηματιστούν και οι υπόλοιπες σχέσεις.Η εξίσωση Poisson (2.3) γράφεται $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_{sc}} \Longrightarrow \frac{1}{\beta}\frac{d^2u}{dy^2}\sqrt{\frac{\beta}{A}} = -\frac{2}{A}\tilde{\rho}$

Παράρτημα Β

Στο παράρτημα αυτό δίνονται οι λίστες των προγραμμάτων που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτή τη διπλωματική. Το πρώτο πρόγραμμα υπολογίζει τη πυκνότητα ρεύματος σύμφωνα με το Schottky και τη συγκρίνει με το μοντέλο διάχυσης του Simmons. Το δεύτερο υπολογίζει την πυκνότητα σύμφωνα με το αναλυτικό μοντέλο διάχυσης του Simmons συγκρίνοντας την με την προσέγγιση που κάναμε και το τρίτο την επίδραση του φορτίου ειδώλου συγκρίνοντας την με το μοντέλο διάχυσης του Simmons. Στο τέταρτο υπολογίζεται η πυκνότητα ρεύματος με μεταβλητή ευκινησία συγκρίνοντας τη με αυτή της σταθερής ευκινησίας και στο πέμπτο συγκρίνεται το μοντέλο επανασύνδεσης- δημιουργίας με αυτό του Simmons. Σε όλα τα προγράμματα έχουμε την ευχέρεια να αλλάζουμε μεταβλητές όπως το N_d , Φ_bκαι τ_P, έτσι ώστε να παρατηρούμε καλύτερα πως αυτές επηρεάζουν κάθε μοντέλο.

Πρόγραμμα 1

Schottky + Diffusion

Generalized Theory of Conduction in Schottky Barriers

Simmons and Taylor, Solid State Electronics 26,705-709, 1983

1. Definition of basic parameters

```
eps0=8.84*10^(-14)  (* units Coulomb/Volt/cm *)

eps=11.75 (* dielectric constantof Silicon *)

miel=1300.0    (* units: cm^2/Volt/sec , electron mobility in Silicon *)

Del=34.0 (* units cm^2/sec electron diffusion contant *)

q=1.6*10^-19 (* electron charge in Cb *)

bi =miel/Del  (*  D=(kT/q)*mi Einstein's relation ,

  bi=q/kT for room temperature conditions in Volt^-1 *)

Temp=300 (* temperature in Kelvin *)
```

2. Depletion Length ,Doping Concentration and Schottky barrier

```
L=0.0001 (* 1micrometer , depletion length in cm *)

Nd=1.0*10^14(* doping concentration in cm^-3 *)

phi=0.2(* Schottky barrier in Volt *)
```

3.Useful Functions

Following the paper the boundary conditions are

F(0)=0, V(0)=0 at x=0 , x=1 is the metal/semiconductor contact

```
MaxField0 =q*Nd*L/eps/eps0  (* in Volt/cm*)

MaxPot0=q*Nd*L^2/2.0/eps/eps0  (* in Volt *)

SquareField0[x_]:=x*MaxField0

SquarePotential0[x_]:=MaxPot0*x^2

Plot[SquareField0[x],{x,0,1}]

Plot [SquarePotential0[x],{x,0,1}]
```

4. Carrier concentration (relation (4))

```
J=1.0*10^(+2); (*

  current density in A/cm^2 positive sign \[Rule] reverse bias ,

  see comment after eq. 4 *)

Ratio[J_]:=J/Nd/q/Del/bi /2 (* parameter for the calculation of density *)

Ratio[J]
```

5. Quasi Equilibrium Density in the depletion region in units of Nd (first term in rel. 10)

```
Density0[x_]:= Exp[-bi*SquarePotential0[x]]   (*

  Quasi Equilibrioum Density * relation 4, Simmons in units of Nd *)

Plot[Density0[x],{x,0,0.2},PlotRange\[Rule] {0,1.2},

  PlotLabel \[Rule]FontForm ["Quasi Equilibrium Density",{"Arial",16}],

  AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","DEN/Nd"}]
```

6. Simmons Density as a function of position and current in units of Nd (relation 10)

```
   In the convention of Simmons :

   Forward bias , J<0 density smaller than the QE Density

   Reverse bias J>0 density larger than the QE Density

A=L^2/MaxPot0

SimmonsDensity[x_,J_]:=

  Density0[x]+Ratio[J]*Sqrt[A]/Sqrt[SquarePotential0[x]]

(* J positive reverse bias *)

Plot[Evaluate[Table[SimmonsDensity[x,10^n],{n,-8,3,1}],{x,0,0.2},

   PlotLabel \[Rule]FontForm ["Simmons Density, Reverse Bias",{"Arial",16}],

   AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","DEN/Nd"}]]

(* J negative forward bias *)

Plot[Evaluate[Table[SimmonsDensity[x,-10^n],{n,-8,3,1}],{x,0,0.2},

   PlotLabel \[Rule]FontForm ["Simmons Density, Forward Bias",{"Arial",16}],

   AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","DEN/Nd"}]]
```

7. Evaluation of the thermal and diffusion velocities

```
u_th=Sqrt[kT/(2pi*me)], me=0.510eV/c^2, c=3*10^10 cm/sec, kT=0.026eV

(* thermal velocity in cm/sec *)

thermvel=Sqrt[1/0.510/bi/2/Pi]*3.0*10^7

(* usefull constants for the calculation of the diffusion velocity *)

alpha=2*eps*eps0/q/Nd (* in cm^2/sec *)


diffvel[z_]:=2.0*Del*bi*Sqrt[(phi-z)]/Sqrt[alpha] (* in cm/sec *)

velocity[z_]:=1/(1/thermvel+1/diffvel[z]) (* reduced velocity *)

Plot[diffvel[x],{x,-10,phi},

  PlotLabel \[Rule]FontForm ["Diffusion Velocity in cm/sec",{"Arial",16}],

  AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","DIFFVEL"}]

Plot[velocity[x]/thermvel,{x,-10,phi},

  PlotLabel \[Rule]FontForm ["velocity ratio",{"Arial",16}],

  AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","vdiff/vtherrm"}]


(* print results *)


outfile=OpenWrite[

   "C:\\Users\\karak\\OneDrive\\Desktop\\results\\difvel_velratio_result_14_\

0.2.dat",FormatType\[Rule]OutputForm]
```

```
For[xx=-10,xx\[LessEqual]phi,xx+=0.005,
  Write[outfile,xx," , ",diffvel[xx]," , ",velocity[xx]/thermvel]]
Close[outfile]
```

8. Current expression (relation 16)

```
J=velocity[V]*(Exp[bi(phi-V)]-1)
(* Nc in cm^(-3) , checked value at 300 oK is 2.5*10^(19) *)
Nc=2*(9.10938\[Times]10\^-31*
          Temp*1.38065\[Times]10\^-23/2/
            Pi)^1.5/(1.05457\[Times]10\^-34)^3*10^(-6)


  current[V_]:=q*Nc*velocity[V]*Exp[-bi*phi]*(Exp[bi*V]-1.0)
  current0[V_]:=q*Nc*thermvel*Exp[-bi*phi]*(Exp[bi*V]-1.0)


  Plot[current[x],{x,-5.0,phi-0.2*phi},
    PlotLabel \[Rule]FontForm ["Current in A/cm^2 ",{"Arial",16}],
    AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","J"}]


  Plot[current0[x],{x,-5.0,phi-0.2*phi},
    PlotLabel \[Rule]FontForm ["Current in A/cm^2 ",{"Arial",16}],
    AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","J"}]


  Plot[Log[10,Abs[current[x]]],{x,-5.0,0.2},PlotRange\[Rule] {-10,5},
```

```
  PlotLabel \[Rule]FontForm ["Log10(Abs(J))",{"Arial",16}],
  AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","Log10AbsJ"}]

 Plot[Log[10,Abs[current0[x]]],{x,-5.0,0.2},PlotRange\[Rule] {-10,5},
  PlotLabel \[Rule]FontForm ["Log10(Abs(J))",{"Arial",16}],
  AxesLabel \[Rule]{ "VOLTAGE","Log10AbsJ"}]

 (* test values for positive and negative biases *)
 current[-0.2]
 current0[-0.2]
 current[0.2]
 current0[0.2]
```

Πρόγραμμα 2

Schottky + Diffusion II

Generalized Theory of Conduction in Schottky Barriers

Simmons and Taylor, Solid State Electronics 26,705-709, 1983

II. Refinement of the density function

1. Definition of basic parameters

```
Nd=1.0*10^16(* doping concentration in cm^-3 *)

phi=0.8  (* Schottky barrier in Volt *)


eps0=8.84*10^(-14)  (* units Coulomb/Volt/cm *)

eps=11.75 (* dielectric constantof Silicon *)



miel=1300.0    (* units: cm^2/Volt/sec , electron mobility in Silicon *)

Del=34.0 (* units cm^2/sec electron diffusion contant *)

q=1.6*10^-19 (* electron charge in Cb *)



Temp=300 (* temperature in Kelvin *)

bi =300/Temp/0.0259  (*  D=(kT/q)*mi Einstein's relation ,

  bi=q/kT for room temperature conditions in Volt^-1 *)

Alpha=2*eps*eps0/q/Nd (* cm^2/Volt *)

Sqrt[Alpha/bi] (* scaling parameter for length in cm *)

2. Depletion Length as a function of  barrier and voltage

DepLen[u_]:=Sqrt[2.0*eps*eps0*(phi-u)/q/Nd] (* depletion length in cm ,

  u in Volts *)

DepLen[0.0]
```

```
DepLen[-10.0]
```

3. The initial parabolic potential

Following the paper the boundary conditions are

Field(0)=0, Phi(0)=0 at x=0 , x=1 is the metal/semiconductor contact

```
V=0

L=DepLen[V]

MaxField0 =q*Nd/eps/eps0  (* in Volt/cm*)

MaxPot0=q*Nd/2.0/eps/eps0  (* in Volt/cm^2 *)

(* x in cm *)

SquareField0[x_]:=-x*MaxField0

SquarePotential0[x_]:=MaxPot0*x^2

Plot[SquareField0[x],{x,0,L}]

Plot [SquarePotential0[x],{x,0,L}]
```

4. Quasi Equilibrium Density in units of Nd (first term in rel. 10)

```
Density0[x_]:= Exp[-bi*SquarePotential0[x]]   (*

  Quasi Equilibrioum Density * relation 4, Simmons in units of Nd *)

Plot[Density0[x],{x,0,0.00002},PlotRange\[Rule] {0,1.0},

  PlotLabel \[Rule]FontForm ["Quasi Equilibrium Density",{"Arial",16}],

  AxesLabel \[Rule]{ "X (CM)","DEN/Nd"}]
```

5. Simmons Density as a function of position and current in units of Nd (relation 10)

In the convention of Simmons :

Forward bias , J<0 density smaller than the QE Density

Reverse bias J>0 density larger than the QE Density

```
dicoe= Sqrt[Alpha]/Nd/q/Del/bi/2.0

SimmonsDensity[x_,J_]:= Density0[x]+dicoe*J/x

(* J positive reverse bias *)

V=-2.0

L=DepLen[V]

Plot[Evaluate[Table[SimmonsDensity[x,10^n],{n,-10,-2,1}],{x,0.000001,0.00003},

   PlotRange \[Rule] {0,1},

   PlotLabel \[Rule]FontForm ["Simmons Density, Reverse Bias",{"Arial",16}],

   AxesLabel \[Rule]{ "X (CM)","DEN/Nd"}]]


(* J negative forward bias *)

V=0.2

L=DepLen[V]

Plot[Evaluate[Table[SimmonsDensity[x,-10^n],{n,-10,0,1}],{x,0.000001,0.00003},

   PlotRange \[Rule] {0,1},

   PlotLabel \[Rule]FontForm ["Simmons Density, Forward Bias",{"Arial",16}],

   AxesLabel \[Rule]{ "X (CM)","DEN/Nd"}]]
```

Scaling the solution with potential as a variable

6.Diffusion Part of the density contribution and comparison to Simmon's large u approximation, u=b*phi (x) dimensionless

```
DF[u_]:=Exp[-u]*Erfi[Sqrt[u]]*Sqrt[Pi]/2.0

p1=Plot[DF[u],{u,0,20}]

p2=Plot[1/Sqrt[u]/2.0,{u,0,20}]

Show[p1,p2]
```

7. Simmons Density scaled to Nd as a function of the scaled variable u=bi*phi

```
Ratio=Sqrt[Alpha/bi]/q/Nd/Del (*

  ratio in units of inverse current density cm^2/A *)

ScaledDen[u_,J_]:=Exp[-u]+J*Ratio*DF[u]



p1=Plot[ScaledDen[u,0.0],{u,0,10},PlotRange \[Rule] {0,1}]

p2=Plot[ScaledDen[u,100.0],{u,0,10},PlotRange \[Rule] {0,1}]

Show[p1,p2]



(* Indicative values to show the contribution of the diffusion term

    Even for small current densities there may be a significant difference *)
\




ScaledDen[20,0.0]

ScaledDen[20,10^-3]
```

8. Current Voltage relation (see notes on the article)

Comparison of the improved Simmons solution to the case of no diffusion coeff=1

```
Vth=2.7*10^6 (* thermal velocity in cm/sec *)

a=Sqrt[Alpha/bi]*Vth/Del


Plot[DF[x],{x,0,10}]


(* The coefficients of the exponential part are compared.

        The voltage range is such that phi-v\[GreaterEqual]0  *)


coeff[v_]:=1/(1+a*DF[bi*(phi-v)])




Plot[coeff[z],{z,-1,0.4}, PlotRange \[Rule]{0,1}]
```

9. Correction of the electric field taking into account the actual density (see personal notes)

```
E=2*Sqrt[u+Exp[-u]-1]


den[u_]:=1-Exp[-u]

Field=2*Sqrt[Integrate[1-Exp[-z],{z,0,u}]]

E1[u_]:=2*Sqrt[u+Exp[-u]-1]

E0[u_]:=2*Sqrt[u]
```

```
Plot[{E0[u],E1[u]},{u,0,10}]
```

10. Evaluation of the diffusion part of the new density

```
u=1
FN0=Evaluate[Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E0[z],{z,0.001,u}]]
FN1=Evaluate[Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E1[z],{z,0.001,u}]]
ff0=Array[fn0,20]
ff1=Array[fn1,20]
For[u=1,u<21,{fn0[u]=Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E0[z],{z,0.01,u}],
   fn1[u]=Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E1[z],{z,0.01,u}]};u++]
p1=ListPlot[ff0,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.6]]
p2=ListPlot[ff1,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.8]]
Show[p1,p2]
p3=Plot[DF[u],{u,0,20}]
p4=Plot[1/Sqrt[u]/2.0,{u,0,20}]
Show[p1,p2,p3,p4]
```

11. Evaluation of current Jn[u]=q*thermvel*Nc*Exp[-bi*phi]*(Exp[phi*bi-u]-1.0)/(1+a*fn0[u]) 0<u<61

```
thermvel=Sqrt[1/0.510/bi/2/Pi]*3.0*10^7   (* thermal velocity cm/sec *)
  Nc=2*(9.10938\[Times]10\^-31*
            Temp*1.38065\[Times]10\^-23/2/
              Pi)^1.5/(1.05457\[Times]10\^-34)^3*10^(-6)  (* cm^(-3) *)
  a=thermvel*Sqrt[Alpha/bi] /Del  (* cm/sec *)
  theta=q*thermvel*Nc*Exp[-bi*phi]
```

```
  u=1

  fn0[u]=Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E0[z],{z,0.001,u}]

  fn1[u]=Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E1[z],{z,0.001,u}]

  JN0=Evaluate[theta*(Exp[phi*bi-u]-1.0)/(1+a*fn0[u])] (* A/cm^2 *)

  JN1=Evaluate[theta*(Exp[phi*bi-u]-1.0)/(1+a*fn1[u])] (* A/cm^2 *)

ff2=Array[fn0,60]

ff3=Array[fn1,60]

For[u=1,u<61,{fn0[u]=Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E0[z],{z,0.001,u}],

   fn1[u]=Exp[-u]*NIntegrate[Exp[z]/E1[z],{z,0.001,u}]};u++]


ff4=Array[jn0,60]

ff5=Array[jn1,60]

For[u=1,u<61,{jn0[u]=theta*(Exp[phi*bi-u]-1.0)/(1+a*fn0[u]),

   jn1[u]=theta*(Exp[phi*bi-u]-1.0)/(1+a*fn1[u])};u++]


p5=ListPlot[ff4,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.8]]

p6=ListPlot[ff5,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.9]]

Show[p5,p6]
```

Πρόγραμμα 3

Schottky + Diffusion III

Extended Thermionic Diffusion Model

Racko SSE 1995

I-V Characteristic

Correction of the Barrier (image charge)

1. Definition of basic parameters

```
Nd=1.0*10^15(* doping concentration in cm^-3 *)

Phi=0.6   (* Schottky barrier in Volt *)

eps0=8.84*10^(-14)  (* units Coulomb/Volt/cm *)

eps=11.75 (* dielectric constantof Silicon *)

q=1.6*10^-19 (* electron charge in Cb *)

Temp=300 (* temperature in Kelvin *)

bi =300/Temp/0.0259  (*  D=(kT/q)*mi Einstein's relation ,

  bi=q/kT for room temperature conditions in Volt^-1 *)

Nc=2.9*10^19 (* value for Si in cm^-3 *)

Vth=2.6*10^6 (* thermal velocity in cm/sec *)

COE=q*Nc*Vth*Exp[-bi*Phi] (* current coefficient in A/cm^2 *)
```

2. Correction of the barrier in the presence of voltage

```
DeltaPhi[v_]=((Phi-v)*q^3*Nd/(eps*eps0)^3/8/(Pi)^2)^0.25   (*

  correction in Volt *)

DeltaPhi[-0.5]

DeltaPhi[-10]

Plot[Exp[bi*DeltaPhi[x]]-1,{x,-5,Phi}]
```

3. J-V characteristics including/non including the voltage dependent barrier correction

```
a=1.0 (* ratio of the Richardson Constants *)

Current[v_]:=COE*(Exp[bi*(v+DeltaPhi[v])]-1-a*(Exp[bi*DeltaPhi[v]]-1))

Current0[v_]:=COE*(Exp[bi*v]-1)

Plot[{Current[v], Current0[v]},{v,-5,0}]
```

Πρόγραμμα 4

Schottky + Diffusion   III

Extended Thermionic Diffusion Model

references: Racko SSE 1995

Selberherr, Simulation of Semicondictor Devices

Walley,IEEE Trans. Elec. Dev. 30,1 1983

ELECTRIC FIELD DEPENDENT MOBILITY

1. Definition of basic parameters

```
Nd=1.0*10^16(* doping concentration in cm^-3 *)

Phi=0.8   (* Schottky barrier in Volt *)


eps0=8.84*10^(-14)  (* units Coulomb/Volt/cm *)

eps=11.75 (* dielectric constantof Silicon *)


q=1.6*10^-19 (* electron charge in Cb *)

Del=34.0 (* diffusion constant for electrons cm^2/sec *)


Temp=300 (* temperature in Kelvin *)

bi =300/Temp/0.0259  (*  D=(kT/q)*mi Einstein's relation ,

  bi=q/kT for room temperature conditions in Volt^-1 *)


Alpha=2*eps0*eps/q/Nd (* Poisson equation parameter in cm^2/Volt *)


Nc=2.9*10^19 (* value for Si in cm^-3 *)

Vth=2.6*10^6 (* thermal velocity in cm/sec *)

CurrentCoe=q*Nc*Vth*Exp[-bi*Phi] (* current coefficient in A/cm^2 *)

DiffCoe=Vth*Sqrt[Alpha/bi]/Del
```

2. Mobiity as a function of doping and electric field

```
 mi=2*mi0/(1+Sqrt[1+(2*mi0*E)/Vsat)^2])  reference Seberherr relation 4.1-56
```

```
vsat=1.1*10^7 (* saturation velocity in cm/sec, reference  Walley,

    IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES,VOL.ED-30,NO.1,JANUARY 1983 *)

mi0[dop_]:=88+1252/(1+dop*10^(-17)/1.432) (* Selberherr, relation 4.1-24 *)

mi0[Nd]

Plot[mi0[x],{x,10^14,10^17}]

Mobility[f_,dop_]:=2*mi0[dop]/(1+Sqrt[1+(2*mi0[dop]*f/vsat)^2])

Plot[Mobility[f,Nd],{f,10^2,10^4}]

Plot[f*Mobility[f,Nd],{f,10^2,10^4}]
```

3. Definition of the mobility parameter Theta

```
Nd

mi0[Nd]

Alpha

Theta=mi0[Nd]/vsat/Sqrt[Alpha*bi]
```

4. Evaluation of the Diffusion Function entering the J-V characteristic

It is demonstrated that the effect of a field dependent mobility results in lower current values

since velosity is saturated at higher fields.

```
DF[u_,aa_]:=

  Exp[-u]*Integrate[Exp[up]*(1+Sqrt[1+4*aa^2*up])/4/Sqrt[up], {up,0,u}]

Integrate[Exp[up]/2/Sqrt[up], {up,0,u}]

Integrate[Exp[up]*(1+Sqrt[1+aa^2*up])/4/Sqrt[up], {up,0,u}]   (*

  Mathematica does not find an analytical expression *)

p1=Plot[Evaluate[DF[u,0]],{u,0,40}]
```

```
p2=Plot[Evaluate[DF[u,Theta]],{u,0,40},PlotStyle \[Rule] Hue[0.6]]

Show[p1,p2]
```

5. Storing the DF function in an array 0<u<61

```
DF0=Array[diffusion0,60]

DF1=Array[diffusion1,60]

For[u=1,u<61,{diffusion0[u]=N[DF[u,0]],diffusion1[u]=N[DF[u,Theta]]};u++]

p1=ListPlot[DF0,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.0]]

p2=ListPlot[DF1,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.5]]

Show[p1,p2]
```

6. Evaluation of the Current

```
c0=Array[jn0,60]

c1=Array[jn1,60]

For[u=1,u<61,{jn0[u]=CurrentCoe*(Exp[Phi*bi-u]-1.0)/(1+DiffCoe*diffusion0[u]),

   jn1[u]=CurrentCoe*(Exp[Phi*bi-u]-1.0)/(1+DiffCoe*diffusion1[u])};u++]


p3=ListPlot[c0,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.5]]

p4=ListPlot[c1,PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.9]]

Show[p3,p4]


p5=ListPlot[Log[10,Abs[c0]],PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.5]]

p6=ListPlot[Log[10,Abs[c1]],PlotJoined\[Rule]True,PlotStyle\[Rule]Hue[.9]]

Show[p5,p6]
```

Πρόγραμμα 5

Schottky + Diffusion V

Extended Thermionic Diffusion Model

Racko SSE 1995

I-V Characteristic

Correction of the Barrier (image charge)

and inclusion of the Generation - Recombination Mechanism

1. Definition of basic parameters

```
Nd=1.0*10^16(* doping concentration in cm^-3 *)

Phi=0.8 (* Schottky barrier in Volt *)

tp=10^(-6)  (* recombination time for minority carriers in sec *)

ni=10^11 (* intrinsinc concentration in cm^-3 *)


eps0=8.84*10^(-14)  (* units Coulomb/Volt/cm *)

eps=11.75 (* dielectric constantof Silicon *)


q=1.6*10^-19 (* electron charge in Cb *)

Dn=34 (* diffusion parameter in cm^2/sec *)
```

```
Temp=300 (* temperature in Kelvin *)

bi =300/Temp/0.0259  (*  D=(kT/q)*mi Einstein's relation ,

  bi=q/kT for room temperature conditions in Volt^-1 *)


Alpha=2*eps*eps0/q/Nd


Nc=2.9*10^19 (* value for Si in cm^-3 *)

Vth=2.6*10^6 (* thermal velocity in cm/sec *)


CurrCoe=q*Nc*Vth*Exp[-bi*Phi] (* current coefficient in A/cm^2 *)

DiffCoe=Sqrt[Alpha/bi]*Vth/Dn

GenCoe=(ni/Nd)^2*(Alpha/bi)/Dn/tp
```

2. Evaluation of the diffusion contribution

```
Integrate[Exp[up]/2/Sqrt[up],{up,0,u}]

F[u_]:=Exp[-u]*(1/2)*Sqrt[Pi]*

   Erfi[Sqrt[u]] (*

     dimensionless diffusion function function in ther denominator of the \

current *)

Plot [F[u],{u,0,100}]
```

3. J-V characteristics with the diffusion correction

```
Current0[v_]:=
```

```
  CurrCoe*(1-Exp[bi*v]) (* current without diffusion correction *)

p0=Plot[Log[Current0[v]],{v,-0.8,0}]

Current1[v_]:=

  CurrCoe*(1-Exp[bi*v]) /(1+ DiffCoe*F[bi*(Phi-v)])(*

     current with diffusion correction *)

p1=Plot[Log[Current1[v]],{v,-0.8,0}]

Show[p0,p1]
```

4. Generation - Recombination Function

```
aa[u_] := GenCoe*((1 - Exp[u])/2 + Sqrt[u]*(1/2)*Sqrt[Pi]*Erfi[Sqrt[u]])

Plot[aa[u],{u,0,40}]
```

5. Correction of the current for generation recombination effects

```
Current2[v_]:=

  CurrCoe*(1-Exp[bi*v])*(1+aa[bi*(Phi-v)]) /(1+ DiffCoe*F[bi*(Phi-v)])

p2=Plot[Log[Current2[v]],{v,-0.8,0}]

Show[p0,p1,p2]
```