

ΣΧΟΛΗ ΣΕΜΦΕ ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Προσομοίωση JFET καρβιδίου
πυριτίου με το TCAD εργαλείο της
SILVACO

Επιβλέπων:
Ζεργιώτη Ιωάννα,
Ζεκεντές Κωνσταντίνος

ΦΟΙΤΗΤΗΣ:
ΣΤΕΦΑΝΑΚΗΣ ΔΙΟΝΥΣΙΟΣ
2013

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	2
1.1	ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΚΗ ΔΟΜΗ ΚΑΙ ΠΟΛΥΤΥΠΑ ΤΟΥ SiC	3
1.2	ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΤΑ ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΤΟΥ SiC	4
1.3	SiC JFETs ΚΑΙ ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΕΣ	4
2	ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΔΙΑΤΑΞΕΩΝ ΜΕ FEA	6
2.1	ΦΥΣΙΚΗ ΕΝΝΟΙΑ	6
2.2	FEA - Η ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ.....	9
2.1	ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΤΗΣ ATLAS ΤΗΣ SILVACO	18
2.2	ΚΩΔΙΚΑΣ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ	21
2.3	ΜΟΝΤΕΛΑ.....	26
2.4	ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΙΔΙΚΗΣ ΤΙΜΗΣ.....	29
3	ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ 4H-SiC ΣΤΟ ATLAS.....	32
3.1	ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟ ΧΑΣΜΑ	32
3.2	ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΗ ΣΤΑΘΕΡΑ	36
3.3	ΕΝΕΡΓΗ ΜΑΖΑ	38
3.4	ΕΝΔΟΓΕΝΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗ ΦΟΡΕΩΝ.....	43
3.5	ΕΞΟΓΕΝΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗ ΦΟΡΕΩΝ – ΙΟΝΙΣΜΟΣ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ	44
3.6	ΕΥΚΙΝΗΣΙΑ ΦΟΡΕΩΝ.....	53
3.7	ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ-ΕΠΑΝΑΣΥΝΔΕΣΗ ΦΟΡΕΩΝ	69
3.8	ΙΟΝΙΣΜΟΣ ΠΡΟΣΚΡΟΥΣΗΣ	80
4	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	95
5	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	110
Παραρτήματα		
I.	ΣΥΝΟΛΙΚΟΣ ΚΩΔΙΚΑΣ SI ΔΙΟΔΟΣ.....	96
II.	ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ ΜΗΧΑΝΙΣΜΩΝ ΣΚΕΔΑΣΕΩΝ.....	99
III.	ΣΚΕΔΑΣΗ ΙΟΝΙΣΜΕΝΩΝ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ	104

1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ημιαγωγικές διατάξεις και κυκλώματα που αποτελούνται από καρβίδιο του πυριτίου (SiC) κατασκευάζονται για χρήση σε περιβάλλον εκτός των ορίων του πυριτίου, όπως σε περιβάλλον υψηλής θερμοκρασίας και υψηλής ραδιενέργειας. Σε ένα τέτοιο περιβάλλον το υλικό SiC, αντίθετα με το πυρίτιο, αποδίνει κανονικά χωρίς να λαμβάνονται μέτρα προστασίας όπως για παράδειγμα θερμική μόνωση, ψύξη και ακτινοβολική ασφάλεια. Το αναφερόμενο περιβάλλον είναι το περιβάλλον όπου εφαρμόζονται κατά κανόνα διατάξεις ισχύος. Στη εικόνα 1.1-1 φαίνεται το φάσμα εφαρμογών των διατάξεων ισχύος και τι ρόλο παίζουν αυτά σε ένα ολοκληρωμένο σχέδιο για αυτόματη αυτορυθμισμένη παραγωγή ηλεκτρισμού ρεύματος. Λόγο μεγάλης απώλειας ενέργειας σε διατάξεις που βασίζονται στην λειτουργία με φορείς μειονότητας, όπως τα MOSFET, προτιμούνται διατάξεις που



Εικόνα 1.1-1 Τομέας εφαρμογής διατάξεων ισχύος στο πλαίσιο παραγωγής ρεύματος

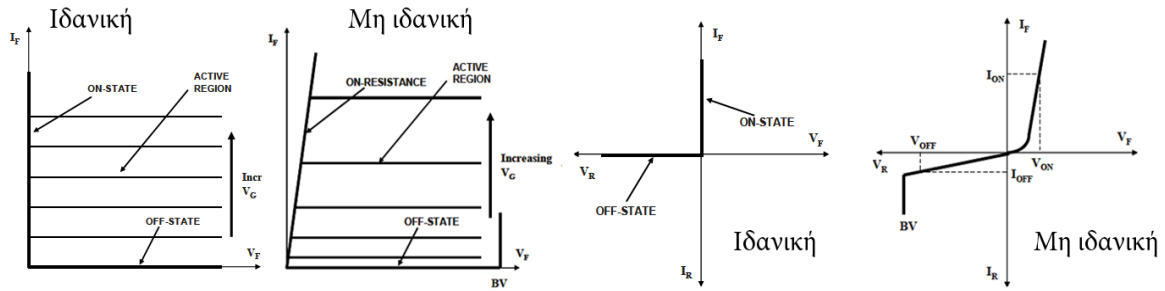
λειτουργούν με φορείς πλειονότητας (Unipolar). Στην τωρινή κατάσταση χρησιμοποιούνται μοναμμένες διατάξεις οι οποίες δύσκολα ενσωματώνονται σε ολοκληρωμένα κυκλώματα, κάτι αναγκαίο όπως φαίνεται και στην εικόνα 1.1-1. Γενικός στα ηλεκτρονικά κυκλώματα ισχύος χρειάζονται ανορθωτές για το έλεγχο της ροής του ρεύματος και διακόπτες ισχύος για το έλεγχο της διάρκειας του ροής ρεύματος. Ιδανικές διατάξεις για διακοπτικές εφαρμογές ισχύος θα πρέπει να αντέξουν υψηλές τάσεις ενώ βρίσκονται στη κατάσταση μη λειτουργίας (off-state) και να άγουν υψηλό ρεύμα με ελάχιστες απώλειες ισχύος στη κατάσταση λειτουργίας (on-state). Σε καμία περίπτωση καταναλώνουν οι ίδιες οι ιδανικές διατάξεις ισχύος, δηλαδή ποτέ μεταφέρουν τάσεις και ρεύμα την ίδια χρονική στιγμή. Όλες οι πραγματικές διατάξεις έχουν βέβαια μη

μηδενική αντίσταση σε κατάσταση λειτουργίας. Επίσης θα έχει μικρό ρεύμα στην κατάσταση μη λειτουργίας και σε αυτήν κατάσταση όταν εφαρμόζεται

μεγάλη τάση υπεισέρχεται το φαινόμενο κατάρρευσης σε μορφή χιονοστιβάδας (avalanche breakdown). Στην κατάρρευση σημαντικό στοιχείο είναι το πάχος και η συγκέντρωση νόθευσης της περιοχής ολίσθησης, όπου ο φορέας κινείται μέσω ηλεκτρικού πεδίου. Επομένως τα προαναφερόμενα μεγέθη καθορίζουν κατά σημαντικό παράγοντα την ποσότητα τάσεως που μπορεί η διάταξη να μπλοκάρει στην κατάσταση μη λειτουργίας. Τα παραπάνω συνοψίζονται στην εικόνα 1-2. Η αντίσταση της περιοχής ολίσθησης είναι ανάλογη της ικανότητας μπλοκαρίσματος της τάσεως. Μαθηματικά εκφράζεται αυτό [1]:

$$R_{on-ideal} = \frac{4BV^2}{\epsilon_s \mu_n E_c^3} = \frac{4BV^2}{Balliga FOM^*}$$

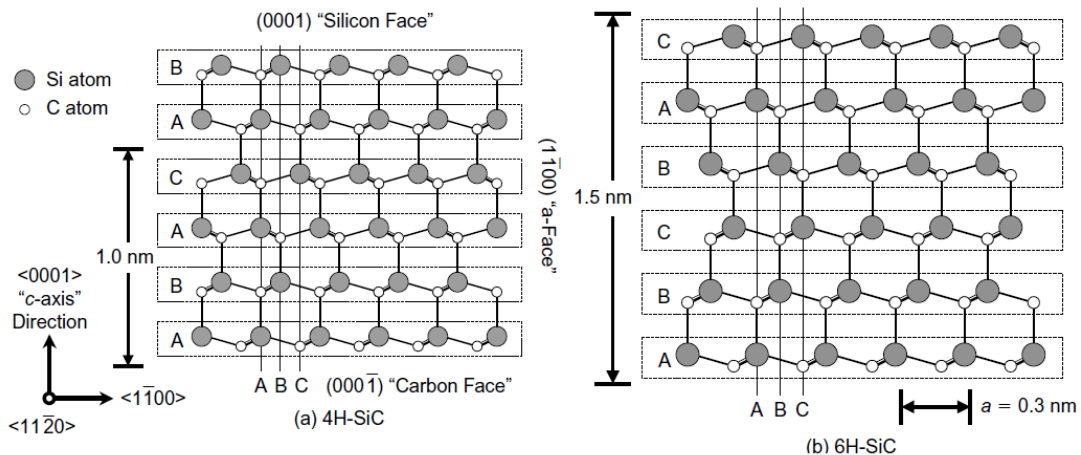
όπου *FOM (= Figure of merit) είναι ένας δείκτης επίδρασης των παραμέτρων του υλικού στην αντίσταση της περιοχής ολίσθησης. Η κυβική εξάρτηση του ηλεκτρικού πεδίου ευνοεί υλικά με μεγαλύτερο ενεργειακό χάσμα. Έτσι η τιμή της τάσεως κατάρρευσης στο SiC είναι υψηλή.



Εικόνα 1.1-2 [1]. Ιδανικές και μη ιδανικές καταστάσεις λειτουργίας μιας διακοπτικής διάταξης ισχύος.

1.1 ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΚΗ ΔΟΜΗ ΚΑΙ ΠΟΛΥΤΥΠΙΑ ΤΟΥ SiC

Η στοιχειομετρία του SiC αποτελείται από 50% καρβίδιο και 50% πυρίτιο, και τα δυο στοιχεία ανήκουν στη ομάδα IV του περιοδικού πίνακα. Για όλα τα πολύτυπα η απόσταση μεταξύ δυο ατομικών γειτονικών ατόμων πυριτίου, απόσταση a , είναι προσεγγιστικά 3.08 \AA . Το καρβίδιο βρίσκεται στο κέντρο μάζας της τετραγωνικής δομής και στις άκρες της δομής είναι τοποθετημένα τα τέσσερα γειτονικά άτομα πυριτίου. Η απόσταση μεταξύ κάθε ατόμου του καρβιδίου και του πυριτίου είναι προσεγγιστικά 2.52 \AA . Το ύψος της μοναδιαίας κυψελίδας, c , διαφέρει σε κάθε πολύτυπο. Υπάρχουν τρεις τρόποι στοιβάξης (A, B και C) του δεσμού Si-C (a απόσταση) ονόματι bilayer στη μοναδιαία κυψελίδα ώστε η προκύπτουσα δομή να διατηρεί την κρυσταλλική δομή. Οι τρόποι αυτοί καθορίζουν τους πολύτυπους. Επομένως ο λόγος c/a είναι διαφορετικός για κάθε πολύτυπο, συγκεκριμένα οι λόγοι 1.641, 3.271, και 4.908 αντιστοιχούν στα πολύτυπα 2H, 4H, και 6H-SiC. Οι δεσμοί μεταξύ γειτονικών bilayer καθορίζουν το κρυσταλλικό τύπο: Zinc-blende (κυβικός) ή Wurtzite (εξαγώνιος). Τι είδος θα προκύψει εξαρτάται από το σειρά στοιβάξης, για παράδειγμα η σειρά ABCABC... είναι τύπου 3C-SiC. Το σχήμα 1-3 a) δείχνει την σειρά στοιβάξης των bilayers που χρειάζεται για την δημιουργία ενός 4H-SiC πολύτυπο. Αποτελείται από τέσσερα bilayers Si-C σε μια μοναδιαία κυψελίδα που στοιβάζονται κατά τον c -άξονα (Miller δείκτη $\langle 0 \ 0 \ 1 \rangle$). Ανάλογα το 6H-SiC στο σχήμα 1-3 b) έχει σειρά στοιβάξης έξι bilayers που επαναλαμβάνονται στο κρύσταλλο κατά τον άξονα c . SiC είναι ένας διπολικός ημιαγωγός με την έννοια ότι κατά την διεύθυνση του c -άξονα η κάθετη επιφάνεια τερματίζεται με άτομα πυριτίου, ενώ η απέναντι κάθετη επιφάνεια τερματίζεται με άτομα καρβιδίου. Οι δύο επιφάνειες ονομάζονται αντίστοιχα "silicon face" και "carbon face". Επειδή η διεύθυνση του c -άξονα ονομάζεται συχνά και a -άξονας, οι επιφάνειες παράλληλα στον c -άξονα (επιφάνεια στα δεξιά και αριστερά άκρα) ονομάζονται και a -face('s). Για αυτόν τον λόγο το 3H-SiC ονομάζεται πολλές φορές και β -SiC και οι άλλοι μη κυβικοί πολύτυποι, παραπλανητικά, σαν α -SiC.



Εικόνα 1-3. Πολύτυποι και σειρά στοιβάξης τους

1.2 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΤΑ ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΤΟΥ SiC

Ο λόγος BV^2/R είναι σταθερός για έναν ημιαγωγό, όμως επιτυγχάνεται αύξηση όταν αλλάζει ο παρανομαστής, δηλαδή τα μεγέθη ϵ_s , μ_n και E_c^3 . Αυτά τα μεγέθη εξαρτώνται από το είδος του ημιαγωγού. Έτσι φαίνεται ότι σε μια πυρίτιο-κρατούμενη αγορά η αντικατάσταση του πυριτίου από το καρβίδιο του πυριτίου θα αύξανε την απόδοση (BFOM) των διατάξεων ισχύος. Η κυβική εξάρτηση του ηλεκτρικού πεδίου είναι χαρακτηριστικό των ημιαγωγών μεγάλου ενεργειακού χάσματος, και για αυτό τον λόγο έχουν συνήθως και μεγαλύτερο BFOM. Μια σύγκριση μεταξύ των παραμέτρων ημιαγωγών μεγάλου ενεργειακού χάσματος με αυτά του πυριτίου φαίνεται στο πίνακα 1.2-1. Σε αυτόν τον πίνακα οι τιμές είναι κοινωνικοποιημένες προς το πυρίτιο. Από τον πίνακα φαίνεται ότι για τις εφαρμογές ισχύος η απόδοση είναι τουλάχιστον 100 φορές καλύτερα από το πυρίτιο. Μόνο το διαμάντι υπερβαίνει τις αποδόσεις των SiC και GaN, και λόγω της δυσκολίας ανάπτυξης μονοκρυσταλλού και της ρηχίας δυνατότητας εμφύτευσης νοθεύσεων αποτρέπεται η εφαρμογή του σε ηλεκτρονικές διατάξεις. Υψηλές συγκεντρώσεις ελαττωμάτων στο υπόστρωμα του GaN οδηγούν πολλούς στη χρήση του SiC που στα τελευταία χρόνια ξεπέρασε το πρόβλημα με τις ρωγμές (microripes) στο υπόστρωμα του. Η πρωτοπόρος εταιρία Cree, όπως πολλές άλλες, συγκεντρώνονται στη κατασκευή του δημοφιλούς πολύτυπου 4H-SiC με μηδενική συγκέντρωση «microripes». Η επιλογή του 4H-SiC δεν είναι τυχαία, μια που παρέχει ανώτερες παραμέτρους από τα ξαδέλφια (2H-SiC, 3H-SiC και 6H-SiC) του. Μια παράμετρο που είναι σαφώς ανώτερα στο 4H-SiC είναι ο συντελεστής θερμοκρασιακής μεταφοράς, που είναι η αιτία που ο ημιαγωγός αντέχει σε μεγάλες θερμοκρασίες.

Υλικό	E_g	ϵ_r	μ_n	E_c	V_{sat}	λ	BFOM
Si	1.1	11.8	1350	0.3	1.0	1.5	1
4H-SiC	3.26	10	720	3.0	2.0	4.9	450
GaN	3.39	9.0	900	3.3	2.5	1.3	676
Διαμάντι	5.45	5.5	1900	5.6	2.7	20	4260

Πίνακας 1.2-1. Σύγκριση παραμέτρων ημιαγωγών μεγάλου χάσματος με αυτά του πυριτίου.

1.3 SiC JFETS ΚΑΙ ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΕΣ

Έντονη προσπάθεια γίνεται σήμερα στην βελτίωση και έρευνα στις διατάξεις ισχύος, ιδιαίτερο βάρος ρίχνεται στα διπολικά (BJTs), στα τρανζίστορ επίδρασης πεδίου μετάλλου-οξειδίου-ημιαγωγού (MOSFETs) και στα τρανζίστορ επίδρασης πεδίου διεπαφής (JFETs). Οι SiC διπολικές διατάξεις έχουν το πλεονέκτημα της διαμόρφωσης της αγωγιμότητας των φορείς μειονότητας στη κατάσταση λειτουργίας. Επίσης είναι πιο εύκολα η κατασκευή τους από τα αντίστοιχα FETs που περιέχουν διοξείδιο στη πύλη. Πολλές επιστημονικές ομάδες έχουν δημοσιεύσει BJTs με χαμηλή αντίσταση λειτουργίας και υψηλή τάση. Από την άλλη μεριά οι διατάξεις BJT είναι ελεγχόμενες από ρεύμα, και αυτό είναι το μεγάλο μειονέκτημα τους, διότι τα FETs είναι ελεγχόμενη από τάση και δεν χρειάζονται μεγάλο ρεύμα οδήγησης που είναι υπεύθυνο για απώλειες ισχύος. Οι απώλειες ισχύος ελαττώνονται με τη βοήθεια ενός εξωτερικού κυκλώματος οδήγησης που περιπλέκει και αυξάνει οικονομικά την κατασκευή. Επομένως επικεντρώνεται οι προσπάθειες των ομάδων στη αύξηση του κέρδους του ρεύματος του BJT. Τα FETs έχουν χαμηλού ρεύμα οδήγησης και για αυτό τον λόγο χρησιμοποιούνται πιο συχνά σαν ταχείς διακόπτες ισχύος. Το SiC είναι από τα ελάχιστα στοιχεία που παράγει θερμικά διοξείδιο του πυριτίου και είναι αυτή η ιδιότητα που επιθυμείται στα δημοφιλή SiC- MOSFET. Η χαμηλή ποιότητα του διοξειδίου του πυριτίου και η χαμηλή ευκινησία των ηλεκτρονίων στο στρώμα αναστροφής του MOSFET αποτρέπει την χρήση τους. Έτσι το JFET είναι η μόνη διάταξη που δεν περιέχει τους περιορισμούς των άλλων δυο διατάξεων. Η πρώτη διάταξη JFET σε κατάσταση λειτουργίας «ON» κατασκευαστικέ το 2000 [2]. Η θεωρητική απόδοση FOM (V_B^2 / R_{ON}) φθάνει το 4000 MW/cm² τα επιστημονικά δημοσιεύματα αναφέρουν FOM μέχρι και 900 MW/cm². Το

σημαντικό είναι ότι η απόδοση ήδη ξεπερνά αυτή του πυριτίου και βάση του θεωρητικού όριο υπάρχει χώρος για βελτίωση.

2 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΔΙΑΤΑΞΕΩΝ ΜΕ FEA

2.1 ΦΥΣΙΚΗ ΕΝΝΟΙΑ

2.1.1 Μαθητική διατύπωση του φυσικού προβλήματος

Οι περισσότερες φυσικές καταστάσεις ενός φυσικού φαινομένου μπορούν να εκφραστούν με διαφορικές εξισώσεις.

Οι δυο κατηγορίες διαφορετικών εξισώσεων που χρησιμοποιούνται συχνά είναι:

- Συνήθης διαφορετικές εξισώσεις (ODE). Αυτές περιγράφουν μια άγνωστη συνάρτηση μέσω των παραγώγων μιας μεταβλητής. Παράδειγμα $m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = F(x(t))$.
- Μερικές παραγωγίσιμες διαφορικές εξισώσεις (PDE). Αυτές περιγράφουν μια άγνωστη συνάρτηση μέσω των μερικών παραγώγων σε σχέση με πολλαπλές μεταβλητές. Παράδειγμα $\frac{\partial u(t,x)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial u(t,x)}{\partial x^2}$.

Οι μερικές παραγωγίσιμες διαφορικές εξισώσεις προτιμούνται διότι σε αυτές η διατήρηση των ποσοτήτων (μάζας, ορμής και ενέργειας) και ισορροπίας τα PDE προκύπτουν σχεδόν αυτόματα. Μερικές ιδιότητες τους είναι ότι υπάρχουν σε πολλές τάξεις (τάξη παραγωγίσιμης τους), είναι γραμμικές εφόσον η άγνωστη συνάρτηση $u(x)$ είναι γραμμική και οι παράγωγοι της u_x είναι γραμμικές. Διακρίνουμε δηλαδή δυο κατηγορίες:

Γραμμική	Μη Γραμμική
$u_t + c \cdot u_x = 0$	$u_t + u \cdot u_x = 0$

Εξίσωση μεταφοράς Εξίσωση Burger

Βέβαια οι συντελεστές μπορούν να είναι και μη γραμμικές. Για παράδειγμα $y^2 \cdot u_{yy} + x^2 \cdot u_{yy} = 0$.

Στη δισδιάστατη περίπτωση, η πιο συνηθισμένη περίπτωση, η PDE είναι η δεύτερης τάξεως, ειδικά η γραμμική μορφή που έχει τη μορφή [3]: $Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} = F(x, y, u, u_x, u_y)$.

Διακρίνονται οι περιπτώσεις:

Τύπος	Εφαρμογές	Ιδιότητες	Γενική Εξίσωση
Εάν $B^2 - AC > 0 \rightarrow$ Υπερβολική PDE	Εξίσωση κύματος, παλινδρόμηση, χορδές	Χρονοεξαρτημένες	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} c^2$ $u = \text{πλάτος κύματος}$ $c = \text{ταχύτητα φωτός}$
Εάν $B^2 - AC = 0 \rightarrow$ Παραβολική PDE	Εξίσωση θερμότητας, μοντέλο διάχυσης, θερμική αγωγιμότητα	Χρονοεξαρτημένες	$\frac{\partial^2 u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ $u = \text{θερμοκρασία}$ $\alpha = \text{θερμική διάχυση}$
Εάν $B^2 - AC < 0 \rightarrow$ Ελλειπτική PDE	Εξίσωση Laplace, Λύσεις ισορροπίας	Στατικά προβλήματα (ισορροπίας)	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

Για τον προσδιορισμό της μορφής της άγνωστης συνάρτησης $u(x,y)$ χρειάζονται αρχικές συνθήκες, αλλιώς οποιαδήποτε συνάρτηση $u(x)$ λύνει την PDE. Η συνάρτηση $u(x,y)$ ορίζεται σε μια περιοχή A και στα όρια δA της A ορίζονται συγκεκριμένες περιορισμούς, οι λεγόμενες αρχικές συνθήκες (boundary conditions). Εάν η συνθήκη στο όριο είναι $u(x,y) = \text{σταθερά}$ τότε λέγεται Dirichlet συνθήκη $u=\text{σταθερά}$, εάν η συνθήκη στο όριο περιγράφεται από παράγωγο λέγεται Neumann συνθήκη. Υπάρχει και ανάμεικτη συνθήκη (mixed or natural condition) που περιλαμβάνει τη Dirichlet συνθήκη και τη Neumann, δηλαδή θα έχει τη γενική μορφή:

$$k \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} + \beta u = \frac{\partial}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) \hat{a}_x + \frac{\partial}{\partial y} \left(a_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) \hat{a}_y + \beta u = q \quad (2.1.1)$$

όπου q και β είναι σταθερές, $k=(\alpha_x, \alpha_y)$ σταθερά που εξαρτάται από την εφαρμογή, (\hat{a}_x, \hat{a}_y) μοναδιαίες διανύσματα στα σημεία x και y αντίστοιχα και $u=u(x,y)$ είναι η αναζητούμενη ποσότητα και καλείται συχνά πρωταρχική μεταβλητή.

Η Poisson εξίσωση, μια παραλλαγή της Laplace, είναι η πιο χρησιμοποιημένη μορφή της μερικής διαφορετικής εξίσωσης διότι βρίσκει εφαρμογές σε πολλά πεδία. Η ακριβής μαθηματική διατύπωση στο δισδιάστατο χώρο είναι:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(a_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \beta u = g, \quad (2.1.2)$$

όπου $g=g(x,y)$, $u=u(x,y)$ και (α_x, α_y) είναι σταθερές που εξαρτώνται από πεδίο εφαρμογής. Ο πίνακας 1.3-1 περιέχει μια παρουσίαση μεταβλητών και οι χρήση τους σε διάφορα πεδία εφαρμογών, βλέπε [3] και [4].

Πεδίο Εφαρμογής	Πρωταρχική Μεταβλητή	Υλική Μεταβλητή	Μεταβλητή Πηγής	Δευτερεύουσα Μεταβλητή
	u	k	g	q, $\partial u/\partial x, \partial u/\partial y$
Μεταφορά θερμότητας	Θερμότητα T	Αγωγιμότητα k	Πηγή θερμότητας g	αγωγιμότητα $k\partial T/\partial n$, μεταγωγή $h(T-T_\infty)$
Ιδανική ροή ρευστού	Εξίσωση ροής $[\psi]$	Πυκνότητα $[\rho]$	Παραγωγή ροής $[\sigma]$	Ταχύτητες: $\partial\psi/\partial x = -v$, $\partial\psi/\partial y = u$,
	Ταχύτητα $[\varphi]$	Πυκνότητα $[\rho]$	Παραγωγή ροής $[\sigma]$	Ταχύτητες: $\partial\varphi/\partial x = u$, $\partial\varphi/\partial y = v$
Παραμόρφωση	Συνάρτηση ελαστικότητας $[\psi]$	$k=1$, G =μέτρο διατμήσεως	$g=2$, θ =γωνία ελαστικότητας	$G\theta \partial\psi/\partial x = -\sigma_{yz}$ $G\theta \partial\psi/\partial y = -\sigma_{xz}$
Ηλεκτροστατική	Δυναμικό $[\psi]$	Διηλεκτρική σταθερά $[\epsilon]$	Πυκνότητα φορτίου $[\rho]$	Πυκνότητα ροής μετατόπισης D_n
Μαγνητοστατική	Μαγνητικό Δυναμικό $[u]$	Διαπερατότητα $[\mu]$	Πυκνότητα φορτίου $[\rho]$	Πυκνότητα μαγνητικής ροής B_n
Μεμβράνες	Εγκάρσια απόκλιση $[u]$	Ένταση μεμβράνης T	Εγκάρσια διανεμημένη φορτίο	Κάθετη δύναμη q

Πίνακας 1.3-1. Εφαρμογές της Poisson εξίσωσης.

Η γενική ιδέα εύρεσης λύσεως μιας PDE είναι να βρεθεί η αναλυτική λύση που συμπεριλαμβάνει την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης με γνωστό σεν συναρτήσεων (closed form). Για παράδειγμα η αναλυτική λύση μονοδιάστατης Poisson εξίσωσης που περιγράφει την εφαρμογή τάσεως μεταξύ δύο φορτισμένων πλακών μπορεί να βρεθεί εύκολα. Στην μονοδιάστατη περίπτωση η εξίσωση Poisson έχει την μορφή $\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = g(x)$ με οριακές συνθήκες $V(0) = 1, V(x = 1) = 0$. Υπόθεση στο πρόβλημα είναι ότι το υλικό μεταξύ πλακών, στο χώρο $\Omega \in (0, x)$, είναι ομοιογενής, δηλαδή η διηλεκτρική σταθερά ϵ παραμένει αμετάβλητη. Τότε

$$\int_0^{\Omega} \int_0^{\Omega} \frac{d^2 V}{dx^2} = \int_0^{\Omega} \int_0^{\Omega} \frac{\rho_0}{\epsilon_r \epsilon_0} \Rightarrow V(x) = \frac{\rho_0}{2\epsilon_r \epsilon_0} x^2 + c_1 x + c_0 \quad (2.1.3)$$

όπου c_1 και c_0 είναι σταθερές που θα διευκρινιστούν με την εφαρμογή οριακών συνθηκών $V_0(x=0)=1$ και $V(x=1)=0$. Η τελική αναλυτική λύση είναι:

$$V(x) = \frac{\rho_0}{2\epsilon_r \epsilon_0} x^2 - \left(\frac{\rho_0 d}{2\epsilon_r \epsilon_0} + \frac{V_0}{d} \right) x + V_0 \quad (2.1.4)$$

$$\vec{E}(x) = -\nabla V = \hat{a}_x \left[\frac{V_0}{d} + \frac{\rho_0 d}{2\epsilon_r \epsilon_0} - \frac{\rho_0 x}{\epsilon_r \epsilon_0} \right] \quad (2.1.5)$$

Η άλλη μέθοδος είναι η αριθμητική μέθοδος που χρησιμοποιείται για πραγματικά προβλήματα, μια που τα κλειστής μορφής προβλήματα δεν μπορούν εύκολα να εφαρμοστούν σε υπολογιστές. Η πιο γνωστή μέθοδο από τους αριθμητικούς μεθόδους είναι η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων. Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων διαχωρίζει το χώρο Ω σε υποχώρους (στοιχεία) Ω_e . Η κατανομή της άγνωστης πρωταρχικής μεταβλητής u μέσα στο υποχώρο παράγεται με παρεμβολή βάση των τιμών στους επιλεγμένους κόμβους του υποχώρου ή βάση των πλευρών του υποχώρου. Οι παράγωγοι (interpolaters), που λέγονται συχνά και «οι συναρτήσεις σχηματισμού» πρέπει να αποτελούν ένα πλήρες σεν από πολυωνυμικές συναρτήσεις. Η ακρίβεια της λύσεως εξαρτάται από το βαθμό των πολυωνυμικών συναρτήσεων. Αυτό έπεται από το γεγονός ότι πολυωνυμικές συναρτήσεις ολοκληρώνονται εύκολα στον υπολογιστή. Η αριθμητική λύση αντιστοιχεί στις τιμές της άγνωστης πρωταρχικής μεταβλητής u στα κομβικά σημεία ή στις πλευρικές τιμές του διακριτοποιημένου υποχώρου. Η αριθμητική λύση προκύπτει μετά την λύση ενός γραμμικού αλγεβρικού σεν εξισώσεων. Για την δημιουργία του γραμμικού σεν εξισώσεων η μερική γραμμική εξίσωση και οι οριακές συνθήκες πρέπει να μετατραπούν σε ολοκληρώσιμες εξισώσεις και αυτό επιτυγχάνεται με το να ελαχιστοποιηθούν είτε με την μέθοδο υπολοίπου με βάρη (residual weighted function) είτε με την προσέγγιση Galerkin. Η ολοκληρώσιμη εξίσωση εφαρμόζεται σε ένα υπόχωρο (στοιχείο) και με τις κατάλληλες συναρτήσεις σχηματισμού προκύπτουν οι γραμμικές εξισώσεις. Η συναρμολόγηση όλων των υποχώρων οδηγεί σε ένα καθολικό πίνακα που περιέχει όλες τις γραμμικές εξισώσεις όλων των στοιχείων Ω_e , δηλαδή αντιπροσωπεύει ολόκληρο τον χώρο Ω . Η γενική διαδικασία FEA είναι:

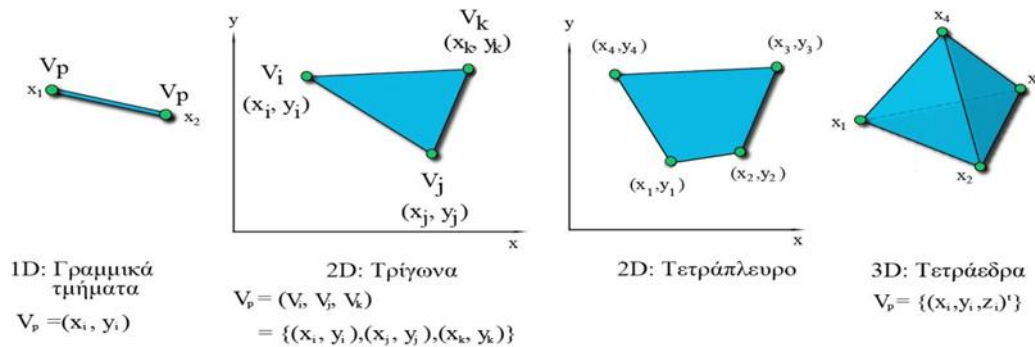
1. Γεωμετρική διακριτοποίηση του χώρου σε υπόχωρους.
2. Μετατροπή της διαφορική εξίσωσης από ισχυρή σε ασθενή μορφή, βάση οριακών συνθηκών.
3. Επιλογή κατάλληλων συναρτήσεων σχηματισμού.
4. Απόκτηση γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων για έναν υπόχωρο.
5. Συναρμολόγηση του καθολικού πίνακα από όλους τους υπόχωρους

6. Επιβολή οριακών συνθηκών.
7. Λύση του προκύπτων γραμμικού συστήματος με αλγεβρικές τεχνικές.

2.2 FEA - Η ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

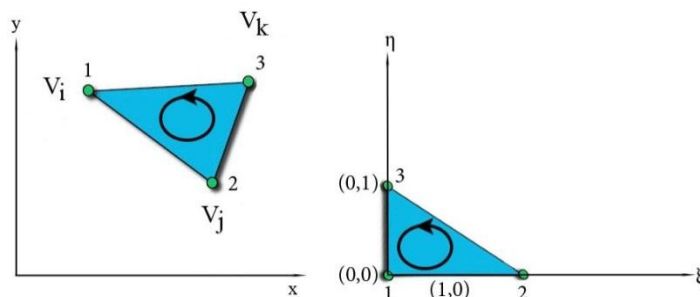
2.2.1 Συναρτήσεις σχηματισμού

Οι συναρτήσεις σχηματισμού πρέπει να εξασφαλίσουν την συνέχεια την άγνωστης πρωταρχικής μεταβλητής. Αποδεικνύεται ότι εάν η κυριαρχούσα μερική διαφορική συνάρτηση είναι n φορές παραγωγίσιμη τότε οι συναρτήσεις σχηματισμού πρέπει να είναι $n-1$ φορές παραγωγίσιμες. Τέλος οι συναρτήσεις σχηματισμού πρέπει να είναι πλήρες πολυώνυμα. Για την δισδιάστατη περίπτωση έχουμε οι συναρτήσεις σχηματισμού πρέπει να είναι μια φορά παραγωγίσιμη. Στην εικόνα φαίνονται οι πιθανοί υπόχωροι που χρησιμοποιούνται για κάθε διάσταση. Οι γραμμικές παρεμβολές για ένα υποχώρου ικανοποιούν την συνθήκη $N_i(V_p) = \delta_{ip}$, όπου V_p οι συντεταγμένες του κόμβου p . Οι συναρτήσεις σχηματισμού προσδιορίζονται πλήρως από την γεωμετρία του υποχώρου.



Εικόνα 1.3-1. Γεωμετρία γραμμικών απλών υποχώρων

Οι κόμβοι στο τρίγωνο στη εικόνα 1.3-1 αριθμούνται τοπικά κατά την αντίθετη φορά από αυτή των δεικτών του ρολογιού. Κάθε συνάρτηση σχηματισμού δεν εκφράζεται από το πραγματικές συντεταγμένες x και y αλλά από ξ και η . Στο σύστημα συντεταγμένων με άξονες τους η και ξ , οι μέγιστες και ελάχιστες τιμές που μπορούν να πάρουν οι κόμβοι είναι 1 και 0. Το σύστημα συντεταγμένων με άξονες η και ξ , λέγεται natural system και η μετατροπή από το ένα σύστημα στο άλλο λέγεται mapping. Η έκφραση του υποχώρου σε natural system έχει σαν σκοπό την ευκολότερη πράξη ολοκλήρωσης, που απαιτείται στο βήμα μετατροπής της μερικής διαφορικής εξίσωσης σε ασθενή μορφής εξίσωση.



Εικόνα 1.3-2. Το σύστημα συντεταγμένων του υποχώρου μετατρέπεται στο natural system. Υπογραμμίζεται ότι η αρίθμηση των κόμβων γίνεται αριστερόστροφα [3].

Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις για την αναπαράσταση της συνεχούς συνάρτησης $u(x,y)$ μέσα στο τρίγωνο. Η μια είναι η τιμή της $u(x,y)$ στους κόμβους και η άλλη είναι οι τιμές $u(x,y)$ μέσα στο τρίγωνο. Έτσι διακρίνονται δύο είδη συναρτήσεις σχηματισμού, το ένα είδος σχηματίζει μέσω τιμών κόμβων της συνάρτησης $u(x,y)$ και σχηματισμού $N_\psi(x,y)$ όλο το τρίγωνο ενώ το άλλο είδος μέσου της συνάρτησης $u(x,y)$ και σχηματισμού $N_\psi(x,y)$ στο εσωτερικό του τριγώνου. Σε κάθε περίπτωση ισχύει [3]:

$$u^e(x,y) = N_1(x,y)u_1 + N_2(x,y)u_2 + N_3(x,y)u_3 \quad (2.1.6)$$

Για την περίπτωση στους κόμβους οι συναρτήσεις σχηματισμού παίρνουν την έκφραση στο natural system ως εξής:

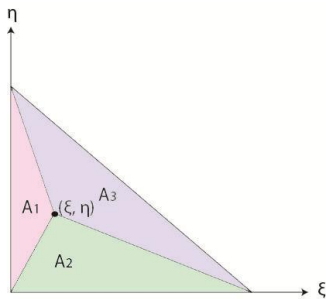
$$N_\psi(\xi,\eta) = c_1 + c_2\xi + c_3\eta \quad (2.1.7)$$

όπου ψ είναι ο αριθμός της συνάρτησης σχηματισμού σε κάθε κόμβο. Η $N_\psi(\xi,\eta)$ υπολογίζεται μέσω της (2.1.7) (βλέπε *Εικόνα 1.3-2*) σε:

1. $N_1(0,0)=1 \rightarrow N_1(0,0)=c_1=1$
2. $N_1(1,0)=0 \rightarrow N_1(1,0)=c_2=-1$
3. $N_1(0,1)=0 \rightarrow N_1(0,1)=c_3=-1$

άρα $N_1(\xi,\eta) = 1 - \xi - \eta$. Με παρόμοιο τρόπο μπορεί κανείς να βρει ότι $N_2(\xi,\eta) = \xi$ και $N_3(\xi,\eta) = \eta$.

Η άλλη προσέγγιση της συνάρτησης μετασχηματισμού είναι να χρησιμοποιείται ένας εσωτερικός κόμβος για την παραγωγή της $u(x,y)$, βλέπε *εικόνα 1.3-3* και να εκφράζονται οι συντεταγμένες των επιφανειών των τριών τριγώνων μέσω των συναρτήσεων σχηματισμού.



Εικόνα 1.3-3. Χρησιμοποίηση ενός εσωτερικού κόμβου.

Με τον εσωτερικό κόμβο στο τρίγωνο σχηματίζονται τρία νέα τρίγωνα που μπορούν να εκφραστούν με τις συναρτήσεις σχηματισμού με τον εξής τρόπο:

$$N_\psi = \frac{A_i}{A} \quad (2.1.8)$$

όπου A_i η επιφάνεια του τριγώνου i και A η συνολική επιφάνεια του τριγώνου. Στις δύο προσεγγίσεις ισχύει ότι έχουν την ιδιότητα:

$$N_\psi(\xi,\eta) = \delta_{\psi\zeta} \quad (\psi, \zeta = 1, 2, 3)$$

$$\sum_{\psi=1}^3 N_\psi = 1, \quad \sum_{\psi=1}^3 \frac{\partial N_\psi}{\partial \xi} = 0, \quad \sum_{\psi=1}^3 \frac{\partial N_\psi}{\partial \eta} = 0 \quad (2.1.9)$$

Για ισοπαραμετρικό υπόχωρο [4] αποδεικνύεται ότι οι μορφές συναρτήσεων σχηματισμού είναι ίδιες για την αναπαραγωγή του κανονικού χώρου x και y . Δηλαδή:

$$x = x_1^e N_1 + x_2^e N_2 + x_3^e N_3 = \sum_{i=1}^3 x_i^e N_i \quad (2.1.10)$$

$$y = y_1^e N_1 + y_2^e N_2 + y_3^e N_3 = \sum_{i=1}^3 y_i^e N_i \quad (2.1.11)$$

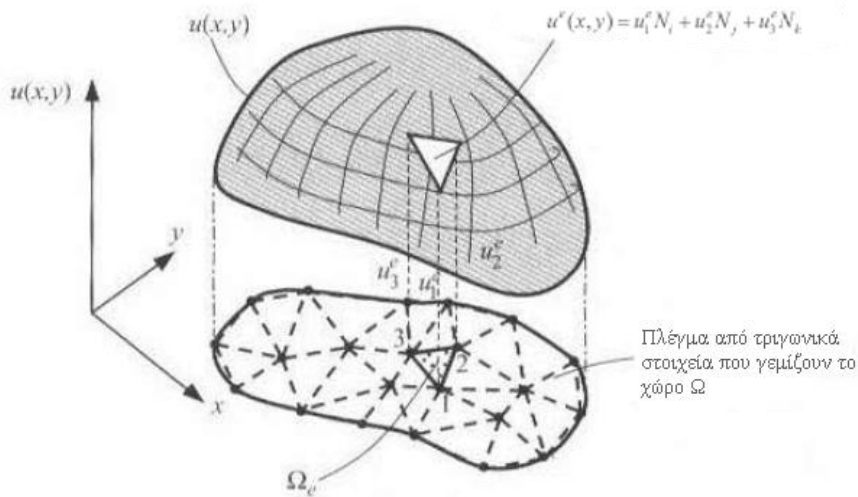
Για παράδειγμα εισάγοντας τις $N_1(\xi, \eta)$, $N_2(\xi, \eta)$, $N_3(\xi, \eta)$ στις (2.1.10) και (2.1.11) παίρνουμε:

$$\begin{aligned} x &= x_1^e + \hat{x}_{21}\xi + \hat{x}_{31}\eta \\ y &= y_1^e + \hat{y}_{21}\xi + \hat{y}_{31}\eta \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

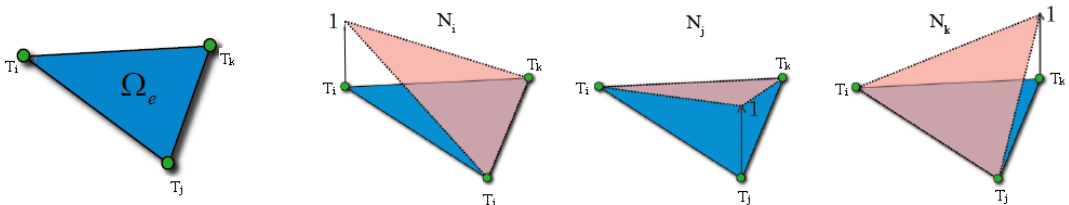
και

$$\hat{x}_{21} = x_2^e - x_1^e, \quad \hat{x}_{31} = x_3^e - x_1^e, \quad \hat{y}_{21} = y_2^e - y_1^e, \quad \hat{y}_{31} = y_3^e - y_1^e \quad (2.1.13)$$

Παρακάτω παριστάνεται γραφικά η προσέγγιση της λύσεως του στοιχείου $u^e(x,y)$, σε σχέση με την συνεχόμενη λύση $u(x,y)$. Φαίνεται από την εικόνα 1.3-4 ότι η $u^e(x,y)$ είναι μια κάθετη επιφάνεια που διέρχεται από τα σημεία (κόμβους) u_1, u_2 και u_3 .



Εικόνα 1.3-4. Εικόνα από [3]. Προσεγγιστική λύση της $u^e(x,y)$ σε σχέση με την πραγματική λύση $u(x,y)$.



Εικόνα 1.3-5. Εφαρμογή συναρτήσεων σχηματισμού στους κόμβους του τριγωνικού υπόχωρου.

2.2.2 Ασθενή μορφή και η προσέγγιση Galerkin

Για να προσεγγιστεί η μερική διαφορική εξίσωση πρέπει πρώτα να κατασκευαστεί η ασθενή μορφή. Αυτό επιτυγχάνεται με την μεταφορά του δεξιό μέλος του (2.1.2) στη αριστερά πλευρά και αναγνωρίζοντας ότι δεν είναι ίσο με το μηδέν διότι πρόκειται για διακριτοποίηση του χώρου και όχι για ιδανική περίπτωση. Έτσι για ένα υπόχωρο [5]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(a_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \beta u - g = r_e \quad (2.1.14)$$

Η ηδέα της ασθενής μορφής είναι η ελαχιστοποίηση της (2.1.14) με βάρη. Για αυτό το σκοπό πολλαπλασιάζεται η (2.1.14) με μια συνάρτηση βάρους w . Μετά ολοκληρώνεται πάνω επιφάνεια του υποχώρου και τέλος τίθεται το αποτέλεσμα ίσο με μηδέν.

$$\iint_{\Omega_e} w \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(a_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \beta u - g \right] dx dy = 0 \quad (2.1.15)$$

με την ιδιότητα

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(w a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) &= \frac{\partial w}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + w \frac{\partial}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Rightarrow \\ w \frac{\partial}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(w a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial w}{\partial x} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \boxed{\frac{\partial}{\partial x} \left(w a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) - a_x \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x}} \end{aligned}$$

η (2.1.15) γίνεται

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega_e} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(w a_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(w a_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] dx dy - \iint_{\Omega_e} \left[a_x \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + a_y \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} \right] dx dy \\ + \iint_{\Omega_e} w \beta u dx dy = \iint_{\Omega_e} w g dx dy \end{aligned} \quad (2.1.16)$$

Από το θεώρημα Green γνωρίζουμε ότι

$$\iint_{\Omega_e} (\nabla_t \vec{A}) dA = \oint_{\Gamma_e} \vec{A} \cdot \hat{a}_n dl \quad (2.1.17)$$

ή στην εναλλακτική μορφή του

$$\iint_{\Omega_e} \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} \right) dx dy = \oint_{\Gamma_e} (\hat{a}_x A_x + \hat{a}_y A_y) \cdot \hat{a}_n dl \quad (2.1.18)$$

όπου \hat{a}_n το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετα στην περιφέρεια του υποχώρου και αναλύεται σαν $\hat{a}_n = \hat{a}_x n_x + \hat{a}_y n_y$. Οι ομοιότητες της αριστερής πλευράς της (2.1.18) με το πρώτο ολοκληρώματος της αριστερή πλευρά της (2.1.15) φαίνεται ξεκάθαρα ότι

$$A_x = w a_x \frac{\partial u}{\partial x}, \quad A_y = w a_y \frac{\partial u}{\partial y} \quad (2.1.19)$$

Επομένως με αντικατάσταση με εισαγωγή της (2.1.19) στην (2.1.18) η (2.1.16) γίνεται:

$$\begin{aligned} - \iint_{\Omega_e} \left[a_x \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + a_y \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} \right] dx dy + \iint_{\Omega_e} w \beta u dx dy = \\ \iint_{\Omega_e} w g dx dy - \oint_{\Gamma_e} \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} n_x + a_y \frac{\partial u}{\partial x} n_y \right) dl \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

Οι συναρτήσεις σχηματισμού που προσεγγίζουν την $u(x,y)$, όπως είδαμε στη παράγραφο 2.2.1, εκφράζονται σαν $u = \sum_{\psi=1}^n u_{\psi} N_{\psi}$. Σύμφωνα με τη προσέγγιση Garlekin οι συναρτήσεις βάρους $w = \sum_{\zeta=1}^n w_{\zeta}$, με $\zeta=1$ μέχρι n (αριθμός κόμβων), τίθενται στο κάθε κόμβο ίσα με τις τιμές της συνάρτησης σχηματισμού σε αυτόν τον κόμβο, δηλαδή $w=N_{\zeta}$. Έτσι αντικαθιστώντας τα νέα δεδομένα για τα u και w γίνεται η (2.1.20):

$$\begin{aligned}
& -\iint_{\Omega_e} \left[a_x \left(\frac{\partial N_\zeta}{\partial x} \right) \left(\sum_{\psi=1}^n u_\psi^e \frac{\partial N_\psi}{\partial x} \right) + a_y \left(\frac{\partial N_\zeta}{\partial y} \right) \left(\sum_{\psi=1}^n u_\psi^e \frac{\partial N_\psi}{\partial y} \right) \right] dx dy \\
& + \iint_{\Omega_e} \beta N_\zeta \left(\sum_{\psi=1}^n u_\psi^e N_\psi \right) dx dy = \iint_{\Omega_e} N_\zeta g dx dy - \oint_{\Gamma_e} N_\zeta \left(a_x \frac{\partial u}{\partial x} n_x + a_y \frac{\partial u}{\partial y} n_y \right) dl
\end{aligned} \tag{2.1.21}$$

Η τελευταία εξίσωση μεταφράζεται σε πίνακες με τον εξής τρόπο:

$$\begin{bmatrix} M_{11}^e & M_{12}^e & \cdots & M_{1n}^e \\ M_{21}^e & M_{22}^e & \cdots & M_{2n}^e \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{n1}^e & M_{n2}^e & \cdots & M_{nn}^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^e \\ u_2^e \\ \vdots \\ u_n^e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} T_{11}^e & T_{12}^e & \cdots & T_{1n}^e \\ T_{21}^e & T_{22}^e & \cdots & T_{2n}^e \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1}^e & T_{n2}^e & \cdots & T_{nn}^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^e \\ u_2^e \\ \vdots \\ u_n^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1^e \\ f_2^e \\ \vdots \\ f_n^e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_1^e \\ p_2^e \\ \vdots \\ p_n^e \end{bmatrix} \tag{2.1.22}$$

ή σε πιο συμπαγή μορφή

$$\begin{bmatrix} K_{11}^e & K_{12}^e & \cdots & K_{1n}^e \\ K_{21}^e & K_{22}^e & \cdots & K_{2n}^e \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{n1}^e & K_{n2}^e & \cdots & K_{nn}^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^e \\ u_2^e \\ \vdots \\ u_n^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^e \\ b_2^e \\ \vdots \\ b_n^e \end{bmatrix} \tag{2.1.23}$$

Στους δυο πίνακες (2.1.22) και (2.1.23) ορίζεται

$$M_{\zeta\psi}^e = \iint_{\Omega_e} \left[a_x \left(\frac{\partial N_\zeta}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial N_\psi}{\partial y} \right) + a_y \left(\frac{\partial N_\zeta}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial N_\psi}{\partial x} \right) \right] dx dy \tag{2.1.24}$$

$$T_{\zeta\psi}^e = \iint_{\Omega_e} \beta N_\zeta N_\psi dx dy \tag{2.1.25}$$

$$f_\zeta^e = \iint_{\Omega_e} N_\zeta g dx dy \tag{2.1.26}$$

$$p_\zeta^e = -\oint_{\Gamma_e} N_\zeta \left(a_x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) n_x + a_y \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) n_y \right) dl \tag{2.1.27}$$

$$K_{\zeta\psi}^e = M_{\zeta\psi}^e + T_{\zeta\psi}^e, \quad b_\zeta^e = f_\zeta^e + p_\zeta^e \tag{2.1.28}$$

Στην (2.1.27) δεν έχει γίνει αντικατάσταση του u επειδή το ολοκλήρωμα είναι επικαμπύλιο ολοκλήρωμα και έτσι πρέπει να υπολογιστεί για κάθε υποχώρο και συνολικά για το χώρο Ω . Αυτό που παρατηρείται είναι ότι στο εσωτερικό κατά τον υπολογισμό έχουμε μηδενικό επικαμπύλιο ολοκλήρωμα και αυτό διότι η μια πλευρά είναι κοινή για δύο τρίγωνα. Έτσι λόγω ότι πάντα υπάρχουν δυο αντίθετες κάθετα μοναδιαίου διανύσματα για μια πλευρά σε εσωτερικό τρίγωνο, έχουμε ότι οι τιμές των επικαμπυλίων ολοκληρωμάτων αλληλοεξουδετερώνονται.

Αντίθετα εάν η πλευρά του τριγώνου βρίσκεται στη περιφέρεια τότε μόνο η μικτή συνθήκη συνυπολογίζεται, μια που η επιβολή Dirichlet συνθήκη με την παράγωγο μηδενίζεται. Έτσι η (2.1.27) υπολογίζεται στην περιφέρεια του χώρου Ω με αντικατάσταση της μικτής συνθήκης στην (2.1.1):

$$p_\zeta^e = -\oint_{\Gamma_e} N_\zeta (q - \gamma u) dl \tag{2.1.29}$$

2.2.1 Απόκτηση γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων για έναν υπόχωρο

Για την ανάλυση των πινάκων, βλέπε (2.1.22), πρέπει πρώτα να μετατραπούν οι μερικοί παράγωγοι των συναρτήσεων σχηματισμού από κανονικό σύστημα συντεταγμένων σε natural system. Για επιτευχθεί αυτό χρησιμοποιείται ο κανόνας αλληλουχίας για τις μερικές συναρτήσεις, δηλαδή:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial \xi} &= \frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N}{\partial \eta} &= \frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (2.1.30)$$

Έχοντας υπόψη την (2.1.12) ο 2x2 Jacobian πίνακας στην εξίσωση (2.1.30) γράφεται σαν

$$J = \begin{bmatrix} \bar{x}_{21} & \bar{y}_{21} \\ \bar{x}_{31} & \bar{y}_{31} \end{bmatrix} \quad (2.1.31)$$

και έχει ιδιότητες

$$|J| = \bar{x}_{21}\bar{y}_{31} - \bar{x}_{31}\bar{y}_{21} = 2A_e, \quad J^{-1} = \frac{1}{|J|} \begin{bmatrix} \bar{y}_{31} & -\bar{y}_{21} \\ -\bar{x}_{31} & \bar{x}_{21} \end{bmatrix} \quad (2.1.32)$$

Μια χρήσιμη ιδιότητα είναι η Jacobian ιδιότητα για διπλά ολοκληρώματα. Το διπλό ολοκλήρωμα ολοκληρώνεται με όριο πάνω στο υπόχωρο Ω_e , επομένως και τα όρια του ολοκληρώματος πρέπει να μετατραπούν. Αυτό γίνεται με την βοήθεια της Jacobian ιδιότητας

$$\iint_{\Omega_e} f(x, y) dx dy = \int_0^{1-\eta} \int_0^{\eta} f(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)) |J| d\xi d\eta \quad (2.1.33)$$

Μια άλλη εξίσου χρήσιμη ιδιότητα είναι η εμπειρική εξίσωση υπολογισμού διπλού ολοκληρώματος όταν διπλό ολοκλήρωμα έχει την μορφή:

$$\iint_{\Omega} A^d B^e C^f dx dy = \frac{A!B!C!}{(d+e+f+2)!} 2A_e \quad (2.1.34)$$

Στην συνέχεια θα αναλυθούν οι μέθοδοι υπολογισμών των πινάκων α) $M_{\zeta\psi}^e$ β) $T_{\zeta\psi}^e$ γ) f_{ζ}^e και δ) p_{ζ}^e .

α) Η (2.1.24) μέσω (2.1.30) και (2.1.32) υπολογίζονται τα στοιχεία του πίνακα $M_{\zeta\psi}^e$. Για παράδειγμα δίνονται τα πρώτα δύο στοιχεία του πίνακα $M_{\zeta\psi}^e$, όπου φαίνεται η εφαρμογή των ιδιοτήτων του Jacobi ολοκληρώματος και του Jacobi πίνακα.

$$\begin{aligned} M_{11}^e &= \int_0^{1-\eta} \int_0^{\eta} \left[a_x \frac{\hat{y}_{23}}{2A_e} \frac{\hat{y}_{23}}{2A_e} + a_y \frac{\hat{x}_{32}}{2A_e} \frac{\hat{x}_{32}}{2A_e} \right] 2A_e d\xi d\eta = - \left[a_x \frac{(\hat{y}_{23})^2}{4A_e} + a_y \frac{(\hat{x}_{32})^2}{4A_e} \right] \\ M_{12}^e &= M_{21}^e = - \left[a_x \frac{\hat{y}_{23}\hat{y}_{31}}{4A_e} + a_y \frac{\hat{x}_{32}\hat{x}_{13}}{4A_e} \right] \end{aligned} \quad (2.1.35)$$

Με παρόμοιο τρόπο γίνονται και τα άλλα στοιχεία του πίνακα $M_{\zeta\psi}^e$. Εφόσον ακολουθείται Garlekin προσέγγιση, όπου η συνάρτηση βάρους ισούται με τη συνάρτηση σχηματισμού ενώ περιέχει και τη συνάρτηση σχηματισμού, τα υπόλοιπα στοιχεία προς υπολογισμό εξαρτάται από την διάσταση του πίνακα. Πιο συγκεκριμένα

η διάσταση των πινάκων του αριστερού μέρους της (2.1.22), εκτός της στήλης u_ξ^e με τις άγνωστες ποσότητες προς αναζήτηση, θα είναι πάντα $\zeta \times \psi$. Για ένα τριγωνικό υποχώρο αυτό σημαίνει ότι ο $M_{\zeta\psi}^e$ θα είναι διάστασης 3×3 .

β) Το διπλό ολοκλήρωμα $T_{\zeta\psi}^e$ μπορεί να αναλυθεί με τους Jacobian ιδιότητες, όπως έγινε στο α), όμως πιο γρήγορα γίνεται ο υπολογισμός με την ιδιότητα (2.1.34):

$$T_{\zeta\psi}^e = \iint_{\Omega_e} \beta N_\zeta N_\psi dx dy \Rightarrow T_{11}^e = \iint_{\Omega} \beta (N_1)^2 dx dy = \frac{2!0!0!}{(2+0+0+2)!} 2A_e = \frac{\beta A_e}{6} \quad (2.1.36)$$

$$\gamma) f_\zeta = \iint_{\Omega_e} g \beta N_\zeta dx dy \Rightarrow f_1 = g \iint_{\Omega} N_1 dx dy = g \frac{1!0!0!}{(1+0+0+2)!} 2A_e = \frac{gA_e}{3} \quad (2.1.37)$$

δ) Το δύσκολο κομμάτι είναι ο υπολογισμός του ολοκληρώματος του p_ξ^e . Αυτό είναι διότι πρέπει να συνυπολογιστούν μόνο οι τιμές του επικαμπύλιων ολοκληρωμάτων των πλευρών που είναι πάνω στη περιφέρεια του υποχώρου Ω_e , οι εσωτερικές πλευρές λόγω αντίθετων τιμών επικαμπύλιων ολοκληρωμάτων με γειτονικά τρίγωνα μηδενίζονται. Έτσι το όριο του υποχώρου Ω_e αντικαθιστάται με το όριο που επικαλύπτεται με το όριο του χωρού Ω . Με τον όρο επικαλύπτεται εννοείται ότι είτε η συνολική πλευρά είτε οι κόμβοι είναι πάνω στη περιφέρεια του χώρου Ω . Το όριο που επικαλύπτεται τα συμβολίζουμε με L_b^e και αντικαθιστώντας στην (2.1.29) την έκφραση $u = \sum_{\psi=1}^n u_\psi N_\psi$ βρίσκεται ότι για ένα κόμβο i ισχύει:

$$p_i^e = - \int_{L_b^e} N_i \left(q - \gamma \sum_{j=1}^3 u_j^e N_j \right) dl = - \int_{L_b^e} N_i q dl + \int_{L_b^e} N_i \gamma (u_1^e N_1 + u_2^e N_2 + u_3^e N_3) dl \quad (2.1.38)$$

Η μετατροπή του dl σε natural system συντεταγμένες, εάν υποτίθεται το τμήμα του υποχώρου (κόμβος 1, κόμβος 2) είναι πάνω στο όριο, είναι $dl = \sqrt{d_x^2 + d_y^2} = l_{12} d\xi$. Το l_{12} είναι η πλευρά μεταξύ κόμβων 1 και 2 του τριγώνου στη *εικόνα 1.3-2*. Έτσι για τους τρεις κόμβους:

κόμβος (1):

$$p_1^e = - \int_0^1 N_1(\xi, 0) q l_{12} d\xi + \int_0^1 N_1(\xi, 0) \gamma [u_1^e N_1(\xi, 0) + u_2^e N_2(\xi, 0) + u_3^e N_3(\xi, 0)] l_{12} d\xi$$

κόμβος (2):

$$p_2^e = - \int_0^1 N_2(\xi, 0) q l_{12} d\xi + \int_0^1 N_2(\xi, 0) \gamma [u_1^e N_1(\xi, 0) + u_2^e N_2(\xi, 0) + u_3^e N_3(\xi, 0)] l_{12} d\xi$$

κόμβος (3):

$$p_3^e = - \int_0^1 N_3(\xi, 0) q l_{12} d\xi + \int_0^1 N_3(\xi, 0) \gamma [u_1^e N_1(\xi, 0) + u_2^e N_2(\xi, 0) + u_3^e N_3(\xi, 0)] l_{12} d\xi$$

Το συνολικό αποτέλεσμα της τιμής του p_ξ^e εκφράζεται γενικός σαν

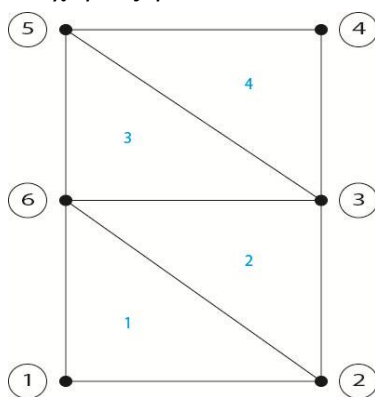
$$p^e = - \frac{q l_{12}}{2} \begin{bmatrix} p_1^e \\ p_2^e \\ p_3^e \end{bmatrix} \quad (2.1.40)$$

Όπου ο κόμβος $N_\psi(\xi, \eta)$ που δεν είναι πάνω στη περιφέρεια Ω μηδενίζει το αντίστοιχο p_ξ^e . Έτσι

$$p^e = -\frac{ql_{12}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.1.41)$$

2.2.2 Συναρμολόγηση του καθολικού πίνακα από όλους τους υποχώρους

Εφόσον στη προηγούμενη παράγραφο έχουμε υπολογίσει όλο τους πίνακες ενός υποχώρου έχουμε όλα τα απαραίτητα μέρη για τον υπολογισμό του συνολικού πίνακα, που λέγεται και συχνά και καθολικός πίνακας. Έτσι χρησιμοποιείται η πιο συνοπτική σχέση η (2.1.23). Σε αυτόν τον πίνακα όλες οι τιμές των υποπινάκων του κάθε στοιχείου αθροίζονται σε κάθε κόμβο του συνολικού χώρου. Για να αθροίζονται οι τιμές των υποπινάκων σωστά σε κάθε κόμβο πρέπει να μεταφραστούν όλοι οι πίνακες από τοπική αρίθμηση σε καθολική αρίθμηση. Αυτό επιτυγχάνεται με το πίνακα μετάφρασης (connectivity table), εκεί καταγράφονται οι αντιστοιχίες κόμβοι υποχώρου (τοπική κόμβοι) και (καθολικοί κόμβοι) κόμβοι του συνολικού πίνακα. Η άθροιση τιμών από όλους τους πίνακες υποχώρων στο καθολικό λέγεται συναρμολόγηση. Παρουσιάζεται η διαδικασία συναρμολόγησης καθολικού πίνακα στην περίπτωση όπου έχουμε τριγωνικούς πίνακες. Έστω ο χώρος Ω που διακριτοποιείται σε τέσσερα τριγωνικούς υποχώρους, βλέπε *εικόνα 1.3-6* ή και παραδείγματα στο κεφάλαιο 8 [3].



Εικόνα 1.3-6. Ο χώρος Ω διακριτοποιείται σε τέσσερα τριγωνικούς υποχώρους. Με μπλε γράμματα αριθμούνται οι υποχώροι, και σε κύκλους βρίσκεται ο αριθμός καθολικών κόμβων.

Ο πίνακας μετάφρασης γίνεται:

Αριθμός υποχώρου	Τοπικός αριθμός κόμβου (i#)		
e#	1	2	3
1	6	1	2
2	6	2	3
3	5	6	3
4	5	3	4

Πίνακας 1.3-2. Πίνακας μετάφρασης.

Από το παραπάνω πίνακας 1.3-2 φαίνεται ότι η μεταφραστική εξίσωση είναι $(e\#, i\#) = \text{καθολικός αριθμός κόμβος}$. Έτσι για κάθε υπόχωρο πρέπει να βρεθούν οι μεταφράσεις για κάθε κόμβο και αυτές να ανατεθούν στο καθολικό πίνακα. Για να γίνει αυτό ορίζεται πρώτα ο μηδενικός πίνακας τάξης $\zeta \times \psi$, δηλαδή σε αυτό το παράδειγμα είναι τάξης 6×6 . Έπειτα ανατίθενται οι τιμές των στοιχείων του καθολικού πίνακα με τον εξής τρόπο:

καθολικό στοιχείο =

αριθμός θέσης του καθολικού στοιχείου + τιμή των στοιχείων του τοπικού πίνακα. (2.1.42)

Λόγο διάστασης του υποχωρικού πίνακα K_{ij} ($i \times j = 3 \times 3$) πρέπει για το κάθε υπόχωρο να υπολογιστεί η τιμή της καθολικής με τον εξής αλγόριθμο [6]:

Για κάθε υπόχωρο εκτέλεσε τον υπολογισμό:

Από $i=1$ μέχρι 3

και από $j=1$ μέχρι 3

$$K_{\zeta\psi} = K_{(e\#,i),(e\#,i)} + K_{(i,j)} \quad (2.1.43)$$

Αντικαθιστώντας την $(e\#,i(j))$ του πίνακα 1.3-2 την αντίστοιχη τιμή που υποδηλώνει ο δείκτης i και j , στη (2.1.43), μπορεί να υπολογισθούν τα στοιχεία του καθολικού πίνακα που προκύπτει από το πρώτο υπόχωρο:

$$K_{66} = K_{6,6} + K_{(1,1)} \quad (2.1.44)$$

$$K_{61} = K_{6,1} + K_{(1,2)} \quad (2.1.45)$$

$$K_{62} = K_{6,2} + K_{(1,3)} \quad (2.1.46)$$

$$K_{16} = K_{1,6} + K_{(2,1)} \quad (2.1.47)$$

$$K_{11} = K_{1,1} + K_{(2,2)} \quad (2.1.48)$$

$$K_{12} = K_{1,2} + K_{(2,3)} \quad (2.1.49)$$

$$K_{26} = K_{2,6} + K_{(3,1)} \quad (2.1.50)$$

$$K_{21} = K_{2,1} + K_{(3,2)} \quad (2.1.51)$$

$$K_{22} = K_{2,2} + K_{(3,3)} \quad (2.1.52)$$

Συνεχίζοντας με παρόμοιο τρόπο με τους άλλους υπόχωρους προκύπτουν και τα άλλα στοιχεία του $K_{\zeta\psi}$

$$K_{\zeta\psi} = K_{66} = \begin{bmatrix} K_{22}^{(1)} & K_{23}^{(1)} & 0 & 0 & 0 & K_{21}^{(1)} \\ K_{31}^{(1)} & K_{22}^{(2)} + K_{33}^{(1)} & 0 & 0 & 0 & K_{31}^{(1)} + K_{21}^{(2)} \\ 0 & K_{32}^{(1)} & K_{33}^{(2)} + K_{33}^{(3)} + K_{22}^{(4)} & K_{23}^{(4)} & K_{31}^{(3)} & K_{31}^{(2)} + K_{32}^{(3)} + K_{21}^{(4)} \\ 0 & 0 & K_{32}^{(4)} & K_{33}^{(4)} & 0 & K_{31}^{(4)} \\ 0 & 0 & K_{13}^{(3)} & 0 & K_{11}^{(3)} + K_{11}^{(4)} & K_{12}^{(3)} + K_{31}^{(4)} \\ K_{12}^{(1)} & K_{13}^{(3)} + K_{12}^{(2)} & K_{13}^{(2)} + K_{23}^{(3)} & 0 & K_{21}^{(3)} & K_{11}^{(1)} + K_{11}^{(2)} + K_{22}^{(3)} \end{bmatrix} \quad (2.1.53)$$

όπου (αριθμός) στο δείκτη είναι ο αριθμός του υπόχωρου. Με την ίδια διαδικασία μπορεί να δημιουργηθεί το δεξιό μέλος (b) της (2.1.23). Γνωρίζοντας ότι η διάσταση του πίνακα b είναι 1×6 , η συναρμολόγηση γίνεται με τον αλγόριθμο [6]:

Για κάθε υπόχωρο εκτέλεσε τον υπολογισμό:

Από $j=1$ μέχρι 3

$$b_{\zeta} = b_{(e\#i)} + b_{(i)} \quad (2.1.54)$$

Το αποτέλεσμα είναι:

$$\begin{bmatrix} b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} + b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} + b_3^{(3)} + b_2^{(4)} \\ b_3^{(4)} \\ b_1^{(3)} + b_1^{(4)} \\ b_1^{(1)} + b_1^{(2)} + b_2^{(3)} \end{bmatrix} \quad (2.1.55)$$

2.2.3 Λύση του προκύπτων γραμμικού συστήματος με αλγεβρικές τεχνικές

Στην προηγούμενη παράγραφο έχουμε συναρμολογήσει τους καθολικούς πίνακες ώστε να είναι στη μορφή $Ku=b$. Πριν λυθεί το σύστημα αυτό πρέπει βέβαια να εφαρμοστούν οι οριακές συνθήκες. Επειδή οι οριακές συνθήκες εξαρτώνται από την εφαρμογή, δεν θα αναφερθούν εδώ. Όπως αναφέρθηκε, η εξίσωση Laplace είναι αυτή που εφαρμόζεται σε προβλήματα ηλεκτροστατικής και οι οριακές συνθήκες εφαρμόζονται στη περιφέρεια του χώρου και είναι τύπου Dirichlet. Έχοντας εφαρμόσει τις συνθήκες Dirichlet στο σύστημα $Ku=b$ προκύπτει ένα σύστημα που είναι πολύ αραιό, δηλαδή περιέχει πολλά μηδενικά στους πίνακες. Αν οι πίνακες έχουν μικρή διάσταση, τότε λύνεται εύκολα με την αριθμητική αλγεβρική μέθοδο LU. Σε πραγματικά προβλήματα όμως, οι κόμβοι είναι πολλοί και επομένως έχουμε μεγάλη διάσταση των πινάκων. Επομένως δεν φθάνουν οι απλές αριθμητικές αλγεβρικές μέθοδοι, για αυτό το λόγο χρησιμοποιούνται αλγεβρικές επαναληπτικές μέθοδοι, όπως η Gummel, η Newton, η conjugate gradient (CG), η biconjugate gradient (BiCG), generalized minimal residual (GMRES) και η quasi minimal residual (QMR) μέθοδο. Έχοντας βρει την λύση με όποια μέθοδο, πρέπει τα αποτελέσματα της άγνωστης στήλης u να μεταφραστούν πάλι στο κανονικό χώρο (x,y) , ώστε να αναπαράγουν η άγνωστη ποσότητα μέσα σε κάθε υπόχωρο. Η άγνωστη ποσότητα είναι η μοναδική ποσότητα που δεν έχει αναλυθεί σε natural system, οπότε ισχύει η σχέση [3] $u(x,y) = \sum_1^i u_i^e N_i(\xi,\eta)$ (2.1.56). Πολλοί συγγραφείς FEM ονομάζουν την διαδικασία μετατροπής συστημάτων συντεταγμένων «postprocessing», και συχνά έχει ειδικό αφιέρωμα. Για να μετατραπούν οι συντεταγμένες του natural σύστημα σε κανονικό σύστημα (x,y) χρησιμοποιείται μια ήδη υπάρχουσα πληροφορία. Συγκεκριμένα εννοείται η χρήση της (2.1.12). Γράφοντας την (2.1.12) σε μορφή πίνακα και λύνοντας ως προς ξ και η αποδεικνύεται η σχέση [6]:

$$\begin{bmatrix} \xi \\ \eta \end{bmatrix} = \frac{1}{\hat{x}_{21}\hat{y}_{31} - \hat{x}_{31}\hat{y}_{21}} \begin{bmatrix} \hat{y}_{31} & -\hat{x}_{31} \\ -\hat{y}_{21} & \hat{x}_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - x_1^e \\ y - y_1^e \end{bmatrix} \quad (2.1.57)$$

Έτσι η (2.1.56) με χρήση της (2.1.57) γίνεται $u(x,y) = \sum_1^i u_i^e N_i(x,y)$ (2.1.58).

2.1 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΤΗΣ ATLAS ΤΗΣ SILVACO

Σε αυτήν την αναφορά θα εξεταστεί η μεθοδολογία προσομοίωσης διατάξεων με λογισμικό πεπερασμένων στοιχείων silvaco. Το βάρος θα επικεντρωθεί στο κώδικα και στην επεξήγηση

του, ενώ μπορεί κάνεις να ανατρέξει στο manual του atlas για περισσότερες λεπτομέρειες. Σκοπός είναι η εκμάθηση της γενικής διαδικασίας προσομοίωσης οποιαδήποτε δομής/διάταξης και η γρήγορη εξοικείωση με το προσομοιωτή atlas. Για παράδειγμα θα δηχθεί η προσομοίωση μιας διόδου PN από Si

Ο κώδικας είναι κεντρικής σημασίας για τη προσομοίωση μιας διάταξης. Ο κώδικας προσομοίωσης χωρίζεται τουλάχιστον σε πέντε τμήματα, από τα οποία τα πρώτα δυο προσδιορίζουν τα χαρακτηριστικά της δομής. Τα τμήματα είναι :

1. Τα δεδομένα της δομής της διάταξης προς προσομοίωση
2. Τα μοντέλα φυσικών παραμέτρων που θα χρησιμοποιηθούν σε συνάφεια με το (α) υλικό (α) κατασκευής της διάταξης
3. Η μέθοδος επίλυσης
4. Η ειδική λύση
5. Η αναλυτική παρουσίαση αποτελεσμάτων.

Στον κώδικα χρησιμοποιούνται οι μεταβλητές (ή δηλώσεις) οι οποίες παραμετροποιούνται για καλύτερα αποτελέσματα.

Τα πρώτα δυο τμήματα είναι τα πιο σημαντικά τμήματα του κώδικα, διότι αποτελούνται από δηλώσεις μεταβλητών/σχέσεων, που καθορίζουν την φυσική υπόσταση της διάταξης. Έτσι είναι πολύ σημαντικό να τεθούν σωστά οι τιμές και οι σχέσεις που θα χρησιμοποιηθούν στη προσομοίωση. Οι πιο βασικές δηλώσεις μεταβλητών που πρέπει να υπάρχουν σε κάθε τμήμα, ώστε να υφίσταται η δομή, φαίνεται στο σχήμα 1-1. Πρέπει να τονισθεί ότι η καθολική μονάδα μήκους είναι το micron. Η σειρά του σχήματος 1-1 με την οποία δηλώνονται οι μεταβλητές είναι σημαντική, αλλιώς τερματίζεται ο προσομοιωτής. Για παράδειγμα όταν ανταλλάσει κάποιος την σειρά δήλωσης του MESH και του REGION, τότε παίρνει κανείς το εξής μήνυμα λάθος:

Error: Mesh not created.
Check autointerface feature of DECKBUILD.

Η τιμή μιας παραμέτρου συχνά παραλείπεται εννοώντας ότι παίρνει προκαθορισμένη τιμή. Για παράδειγμα το υλικό τίθεται με τη δήλωση MATERIAL, η οποία έχει παράμετροι, τα οποία καθορίζουν τα χαρακτηριστικά του υλικού. Έτσι μια παράμετρος, παραδείγματος χάριν, είναι η ενεργός συγκέντρωση N_c/N_v , Η τιμή της αλλάζεται μέσω μιας νέας ανάθεσης. Τότε η ήδη υπάρχουσα προκαθορισμένη (default) τιμή αντικαθίσταται από την νέα τεθειμένη.

Δήλωση	Παράμετρος	(Προκαθορισμένη) Τιμή	Μονάδα
Υλικό	NC300	2.80E19	cm-3
Υλικό	NV300	1.04E19	cm-3

Πίνακας 1.3-3. Προκαθορισμένες τιμές παραμέτρων.

Για άλλα χαρακτηριστικά υλικού, που επιθυμείται αλλαγή της προκαθορισμένης τιμής ανατρέχει κανείς το παρατήρημα B2 του οδηγού atlas.

Ομάδα	Τμήματα	Δηλώσεις
ΔΟΜ	1 Δεδομένα της δομής	MESH REGION* ELECTRODE DOPING
ΜΟΝΤΕΛ	2 Ο υλικός χαρακτηρισμός	MODELS MATERIAL* CONTACT INTERFACE
ΛΥΣΕΙΣ	3 Η μέθοδο επίλυσης	METHOD
ΛΥΣΕΙΣ	4 Η ειδική λύση	LOG SOLVE LOAD** SAVE
ΛΥΣΕΙΣ	5 Η αναλυτική παρουσίαση αποτελεσμάτων	EXTRACT*** TONYPLOT

Πίνακας 1.3-4. Υποδιαίρεση γενικού κώδικα σε ομάδες και τμήματα[7]. φαίνεται η “υποχρεωτική” σειρά δηλώσεων μεταβλητών.

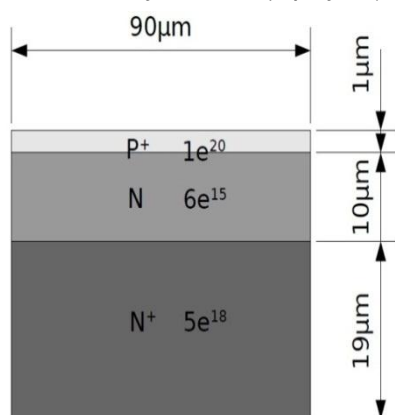
* Κάποιοι παράμετροι μιας δήλωσης μπορούν να ακυρώσουν μια άλλη δήλωση. Για παράδειγμα στην δήλωση REGION υπάρχει μια παράμετρος, η οποία δηλώνει το υλικό της περιοχής. Έτσι είναι δυνατόν να παραλείπεται η δήλωση MATERIAL στο τμήμα δυο του κώδικα.

** Φόρτιση προηγούμενων αποτελεσμάτων από ένα αρχείο. Χρησιμοποιείται για την παραμετροποίηση της ειδικής λύσεως.

*** Εξαγωγή στοιχείων κυκλώματος (R,C,V,I) από τη γραφική παράσταση αποτελεσμάτων (πολλών διατάξεων «Mixed Mode»)

Πέρα από τις υποχρεωτικές μεταβλητές του πίνακα 1.3-4 υπάρχει και μια πλειάδα άλλων κατ'επιλογή μεταβλητών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν (βλέπε Manual ATLAS).

Έχοντας εισάγει την γενικές έννοιες περί κώδικα, πρέπει κανείς να ορίσει την πραγματική δίοδο ώστε να γίνεται προσομοίωση της. Η δίοδος, όπως φαίνεται στην εικόνα 1.3-7, είναι μια P⁺NN⁺ δίοδος. Οι επιθυμητές συγκεντρώσεις και διαστάσεις αναγράφονται στο σχήμα.



Εικόνα 1.3-7. Γεωμετρία της διόδου Si [5]. Το στρώμα p+ σχηματίστηκε είτε από εμφύτευση είτε από διάχυση.

Τέλος πρέπει να σημειωθεί ότι είναι δυνατή η αλλαγή των τιμών των μεταβλητών μετά την αρχική δήλωση τους. Για την εξαγωγή διαφορετικών λύσεων είναι συνήθης πρακτική να επαναδηλωθούν μεταβλητές με διαφορετικές τιμές. Έτσι για παράδειγμα τα τμήματα 3,4 και 5 επαναλαμβάνονται δυο φορές, ώστε να εξάγει κανείς μια λύση για την εξαγωγή του «forward current» και μια λύση για το «reverse current» της διάταξης. Ένα άλλο παράδειγμα είναι να εξαχθεί η ειδική λύση, που μπορεί να είναι το «forward current», άλλα με διαφορετικό υλικό ηλεκτροδίου. Έτσι επαναδηλώνοντας την μεταβλητή Contact και τα τμήματα 3,4 και 5, εξάγονται δύο λύσεις, η μια με το αρχικό υλικό της πύλης και μια με ένα διαφορετικό υλικό πύλης.

2.2 ΚΩΔΙΚΑΣ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ

Από αυτήν την ενότητα και μετά δημιουργείται ο κώδικας στο ATLAS βήμα βήμα. Εξηγούνται, για την καλύτερη κατανόηση, οι παράμετροι και ενδεχόμενες θεωρίες σύγκλισης. Η δομή της παρουσίασης ακολουθεί αυτή των τμημάτων που παρουσιάστηκαν στο πίνακα 1.3-4.

2.2.1 Τα δεδομένα της δομής της διάταξης προς προσομοίωση (χαρακτηρισμός υλικού - structure specification)

2.2.1.1 Πλέγμα (Mesh)

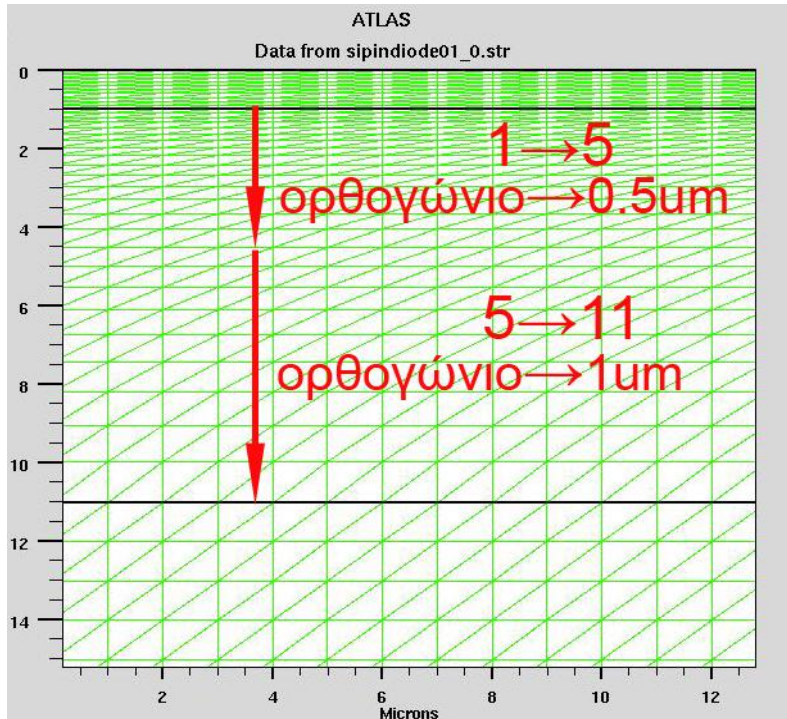
Το πρώτο τμήμα είναι το τμήμα όπου ορίζονται οι διαστάσεις των στρωμάτων της δομής της διάταξης, οι κόμβοι σύγκλισης και το προφίλ συγκέντρωσης. Αυτό το τμήμα είναι

ίσως το πιο σημαντικό, διότι αρχίζει από το mesh, που είναι κρίσιμο για τη ακριβή αλλά και ταυτόχρονα γρήγορη προσομοίωση. Το mesh είναι ένα δίκτυο από τριγωνοειδή σχήματα, όπου κάθε κορυφή του τριγώνου είναι ένας κόμβος «σημείο» σύγκλισης. Όσο πιο πυκνά είναι τα σημεία, τόσο ακριβέστερα αποτελέσματα εξάγονται, αλλά τόσο περισσότερο χρόνο διαρκεί ο υπολογισμός. Παρακάτω δίνεται ο κώδικας με τον οποίο ορίζεται το mesh το οποίο αναπαριστάται γραφικά στο επόμενο σχήμα 2-1. Στο κώδικα φαίνεται ότι χρησιμοποιείται πιο λεπτή διαχώριση του χώρου (mesh) στην τοποθεσία όπου υπάρχει το υλικό p++ (location=0 μέχρι location=1). Αυτό γίνεται συνήθως μεταξύ περιοχών όπου υπάρχει ηλεκτρόδιο ή είναι περιοχή όπου αλλάζει εύκολα το ηλεκτρικό πεδίο, βλέπε καρβίδιο του πυριτίου, και επομένως αλλάζουν οι τιμές σύγκλισης. Ορίζοντας λεπτό mesh εξασφαλίζεται καλή επίλυση/σύγκλιση των μεθόδων επίλυσης, κάτι που θα εξηγηθεί αργότερα.

Κώδικας	Σχόλια
go atlas	Εκκίνηση του προσομοιωτή ATLAS
mesh space.multi=1	Απόσταση μεταξύ δομικών στοιχείων
x.mesh loc=0.00 spac=1	Ορισμού του υπολογιστικού πλέγματος
x.mesh loc=90.0 spac=1	
y.mesh loc=0.00 spac=0.5	
y.mesh loc=1.00 spac=0.05	
y.mesh loc=2.00 spac=2	
y.mesh loc=8.00 spac=2	

Πίνακας 1.3-5. Mesh και οι μεταβαλλόμενες αποστάσεις του πλέγματος.

Μια μεγεθυντική ανάλυση του mesh δείχνει ότι τα μεγέθη ορθογωνίων δεν είναι αυτά που δηλώνονται, διότι λόγω μεγάλης διαφοράς μεγέθους ορθογωνίων μεταξύ γειτονικών περιοχών ενδέχεται να προσαρμόζεται το μέγεθος. Για παράδειγμα μεγιστοποιήθηκε (zoom) η περιοχή από 0 μέχρι 11 μm , βλέπε *Εικόνα 1.3-8*. Έτσι φαίνεται, ότι ενώ δηλώθηκε η περιοχή 1 μέχρι 5 μm να έχει ορθογώνια με $y=0.1 \mu\text{m}$ μέγεθος, η περιοχή τελικά περιέχει διάφορα μεγέθη ορθογωνίων που κινούνται μεταξύ μεγέθη 0.1 και 0.5 μm . Αυτό οφείλεται ότι η γειτονική περιοχή, η περιοχή παρακάτω δηλαδή (5→11), δηλώθηκε να περιέχει ορθογώνια με $y=0.5 \mu\text{m}$. Έτσι θα έπρεπε κανονικά να αλλάζει απότομα το μέγεθος του ορθογωνίου από 0.1 στα 0.5 μm όταν $y=5 \mu\text{m}$. Αυτό που συμβαίνει όμως είναι ότι προσαρμόζεται σταδιακά το μέγεθος όταν υπάρχουν μεγάλες διαφορές μεγέθους μεταξύ γειτονικών περιοχών. Φαίνεται στην *εικόνα 1.3-8*, ότι έχουμε σύγκλιση μεταξύ γραφικής και κώδικα στο βάθος $y=11 \mu\text{m}$. Επομένως οι περιοχές 1 μέχρι 11 μm μπορεί να θεωρηθούν σαν περιοχή προσαρμογής, όπου στη περιοχή 1→5 προσαρμόζεται το μέγεθος σε 0.5 μm , και από στη περιοχή 5→11 προσαρμόζεται το μέγεθος σε 1 μm . Είναι πολύ σημαντικό να συμπεριλαμβάνεται αυτό το γεγονός, διότι μη σύγκλισης συχνά οφείλεται σε μη καλό σχεδιασμένο mesh. Συχνά ορίζονται επιπλέον περιοχές από τις αναγκαίες περιοχές της δομής ώστε να υπάρχει μικρή περιοχή προσαρμογής. Το σημαντικότερο από όλα αυτά είναι οι επαφές να έχουν πυκνό πλέγμα. Αυτό συμβαίνει διότι εκεί αλλάζει η νόθευση, που παίζει καθοριστικό ρόλο στην πυκνότητα ρεύματος. Στις περιοχές με ομοιόμορφη νόθευση συνιστάται αραιό πλέγμα, ώστε να γίνονται γρήγορα οι υπολογισμοί.



Εικόνα 1.3-8. Παράδειγμα προσαρμογής μεγέθους ορθογωνίου του Mesh

2.2.1.2 Ηλεκτρόδια – οριακές συνθήκες I

Το ATLAS παρέχει τις εξής οριακές συνθήκες

- Ωμικές επαφές
- Schottky επαφές
- Οριακές συνθήκες μέσω ρεύματος
- Συγκεντρωμένα στοιχεία μεταξύ εφαρμοσμένων τάσεων και επαφών διατάξεις
- Κατανεμημένη αντίσταση επαφής για τον συνυπολογισμό της πεπερασμένης αντίστασης ημιαγωγών.

Ωμικές επαφές δηλώνονται με την εντολή electrode και ανατίθεται ένα όνομα για την διαχώριση επαφών. Τέλος παρέχεται η δυνατότητα ορισμού της τοποθεσίας τους με λέξεις κλειδιά, όπως bottom και top, ή με όρισμα περιοχής μέσω συντεταγμένων x.min μέχρι x.max και y.min μέχρι y.max.

2.2.1.3 Περιοχές

Σε αυτό το τμήμα του κώδικα διαχωρίζεται η διάταξη σε περιοχές ενδιαφέροντος, με ενδιαφέροντος εννοείται η διαχώριση περιοχών με ένα κριτήριο. Το συνηθισμένο κριτήριο είναι το κριτήριο της νόθευσης του υλικού. Επομένως σύμφωνα με την εικόνα 1.3-7 έχουμε τρεις περιοχές με διαφορετική νόθευση. Υπάρχουν δύο τρόποι ανάθεσης νόθευσης σε μια περιοχή. Η μια είναι να δημιουργούνται οι περιοχές μέσω νόθευσης και η άλλη είναι πρώτα να ορίζονται οι περιοχές και ανατεθούν η επιθυμητές νοθεύσεις. Σε κάθε περίπτωση τουλάχιστον μια περιοχή πρέπει να δηλωθεί και αυτό γίνεται με την δήλωση region. Οι περιοχές υποχρεωτικά αριθμούνται, ώστε να είναι διαχωρίσιμες. Με κάθε

δήλωση περιοχής δηλώνεται και το είδος του υλικού της περιοχής. Για να αποδεχθεί η δήλωση περιοχής πρέπει το υλικό να είναι υλικό που υπάρχει προδηλωμένο στο προσομοιωτή. Το υλικό δηλώνεται με μια παράμετρο της region. Η παράμετρος είναι η material. Αυτή δηλώνεται έπειτα από την δήλωση region και σε αυτήν ανατίθεται η ονομασία του υλικού. Εφόσον δηλώθηκε το υλικό πρέπει μέσω συντεταγμένων (x, y) να καθορισθεί η έκταση της περιοχής. Αυτό γίνεται μέσω παραμέτρων της region, που είναι βασικά οι x (x.max, x.min) και y (y.max, y.min) συντεταγμένες. Εάν πρόκειται για νέο υλικό πρέπει να αντί της δήλωσης material να δηλώνεται user.material. Για καινούριο υλικό η διαδικασία είναι να ορισθεί το όνομα του νέου υλικού μετά την δήλωση έκτασης της περιοχής και όχι όπως νωρίτερα έπειτα από την δήλωση region. Η δήλωση είναι user.material=όνομα_υλικού. Έτσι ο προσομοιωτής γνωρίζει ότι πρόκειται για νέο υλικό και ότι οι ιδιότητες του υλικού αυτού βρίσκονται σε άλλο τμήμα του κώδικα. Αυτό το τμήμα είναι το δεύτερο τμήμα (πίνακας 1.3-4) και η δήλωση ιδιοτήτων γίνεται με την δήλωση material. Στην συνέχεια η δήλωση material έχει σαν παραμέτρους το είδος του υλικού (αγωγός, μονωτής ή ημιαγωγός) και τις βασικές ιδιότητες του όπως διηλεκτρική σταθερά.

2.2.1.4 Νόθευση

Στη συνέχεια δηλώνονται οι νοθεύσεις των περιοχών. Η δήλωση της νόθευσης έχει γενικά την εξής μορφή:

Doping < είδος κατανομής >< συγκέντρωση σε cm^{-3} >< είδος νόθευσης >< συντεταγμένες δράσης της κατανομής >

όπου είδος κατανομής μπορεί να είναι ομοιόμορφη, γκαουσιανή ή συμπληρωματική συνάρτηση σφάλματος (Gauss error function) erfc. Το είδος νόθευσης είναι τύπου n.type ή τύπου p.type. Οι παράμετροι συντεταγμένων αναφέρονται στους περιορισμούς επέκτασης κατά x, y που μπορεί να έχει κάθε είδος κατανομής νόθευσης.

Ο πρώτος τρόπος είναι να δηλώνεται ομοιόμορφη νόθευση. Η δήλωση της περιέχει, το είδος νόθευσης (uniform), την περιοχή μέσω region=x ή μέσω ορισμού περιοχής νόθευσης (x συντεταγμένες), το είδος νόθευσης (p or n.type) και τη δόση της νόθευσης (concentration). Ο άλλος βασικός τρόπος είναι ο πιο αναλυτικός τρόπος και περιέχει εκτός από τη δήλωση του είδους (GAUSS, ERFC) και της περιοχής νόθευσης, και τις δηλώσεις παραμέτρων για το προφίλ της αντίστοιχης δηλωμένου κατανεμημένου είδους νόθευσης. Για να χρησιμοποιηθεί ο αναλυτικός τρόπος πρέπει πρώτα να υπάρχει μια ομοιόμορφη νόθευση. Εάν υπάρχει τότε με χρήση της αναλυτικής νόθευσης και με σωστή ρύθμιση των παραμέτρων της δημιουργείται μια νέα περιοχή νόθευσης μέσα στην ομοιόμορφη νόθευση και με προφίλ που καθορίζεται από τους παραμέτρους της νόθευσης. Οι παράμετροι της γκαουσιανής κατανομής είναι οι PEAK, JUNCTION, CHARACTERISTIC και η RATIO.LATERAL. Η PEAK καθορίζει σε ποιο σημείο κατά τον y-άξονα υπάρχει «μέγιστη συγκέντρωση», έπειτα δηλώνεται κατά ποιόν τρόπο η γκαουσιανή κατανομή μεταβάλλεται κατά τον y-άξονα. Για την ρύθμιση αυτής μεταβολής χρησιμοποιείται η παράμετρος JUNCTION ή η παράμετρος CHARACTERISTIC. Η JUNCTION δηλώνει σε ποία θέση (y διεύθυνση) η συνολική νόθευση μηδενίζεται, η CHARACTERISTIC είναι ο ρυθμός απόσβεσης της γκαουσιανής κατανομής (προφίλ νόθευσης) κατά την x κατεύθυνση. Τα χαρακτηριστικά της γκαουσιανής κατανομής καθορίζονται από τις συντεταγμένες δράσης και συγκεκριμένα ισχύει ότι μέσα στο διάστημα X.MIN και X.MAX έχει τυπική

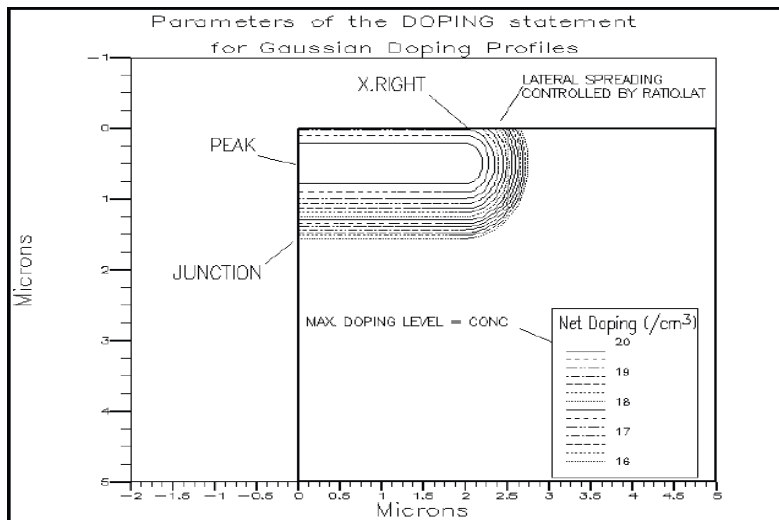
απόκλιση ίση με $0.05/\sqrt{2}$ μm ενώ έξω από το διάστημα η νόθευση έχει τυπική απόκλιση ίση με τιμή της $CHARACTERISTIC \times 0.7/\sqrt{2}$. Η γκαουσιανή κατανομή (προφίλ νόθευσης) κατά την y κατεύθυνση θεωρείται να έχει την ίδια μορφή με αυτή της x κατεύθυνσης πολλαπλασιασμένο κατά ένα παράγοντα $RATIO.LATERAL$. Η παράμετρος $RATIO.LATERAL$ έχει προκαθορισμένη τιμή (0.7) και αυτή είναι δυνατόν αλλαχθεί μέσω ανάθεσης νέας τιμής. Η δεύτερη κατανομή βασίζεται στη συμπληρωματική συνάρτηση σφάλματος:

$$erfc(c) = 2/\sqrt{\pi} \int_c^{\infty} \exp(-y^2) dy$$

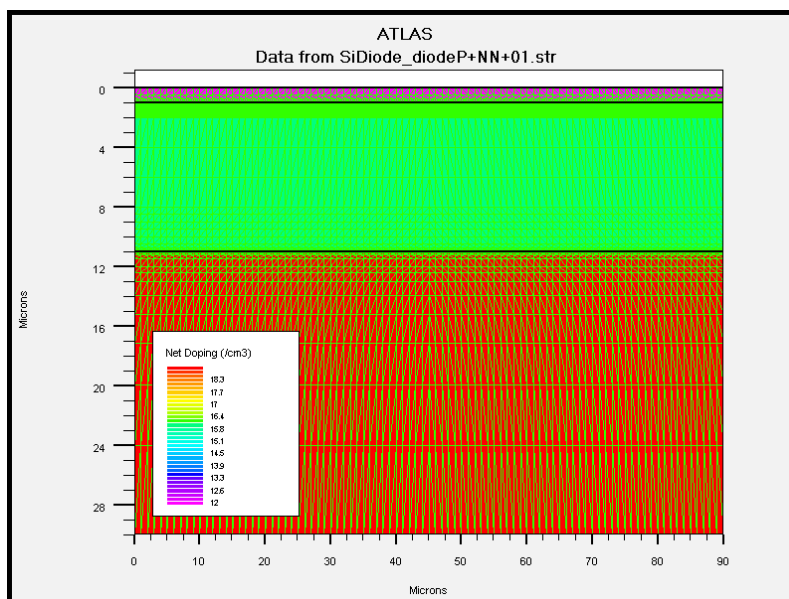
Η παράμετροι για το προφίλ νόθευσης για αυτό το είδος κατανομής είναι PEAK, JUNCTION, CHAR, ERFC.LAT και RATIO.LATERAL. Εκτός από τους ERFC.LAT και CHAR που είναι ειδικά για την ERFC, οι άλλες έχουν τις ίδιες λειτουργίες όπως και στην GAUSS νόθευση. Στην παραπάνω σχέση το c είναι η x-διάσταση κατά την οποία ισχύει η το προφίλ νόθευσης ERFC, και η CHAR είναι ο μεγεθυντικός παράγοντας, δηλαδή $c = c \times CHAR$. Η ERFC.LAT δηλώνει ότι πρέπει να χρησιμοποιείται κατά την y-διάσταση η ERFC κατανομή, και όχι η γκαουσιανή κατανομή, που είναι η προκαθορισμένη κατανομή κατά την y-διάσταση. Εάν τεθεί η ERFC.LAT τότε εάν $RATIO.LATERAL = x$, θα ισχύει ότι η συγκέντρωση μειώνεται κατά x^* ERFC.LAT. Ο σχετικός κώδικας και η αντίστοιχη δίνονται παρακάτω.

region num=1 material=silicon x.min=0. x.max=90 y.min=0. y.max=1	Περιοχές
region num=2 material=silicon x.min=0. x.max=90 y.min=1 y.max=11	
region num=3 material=silicon x.min=0. x.max=90 y.min=11 y.max=30	
electrode name=anode x.min=0 x.max=90	Ηλεκτρόδια
electrode name=cathode bottom	
# P+ doping	Προσμίξεις P
doping gauss conc=1e20 p.type char=0.05 rat=0.6 region=1	region=1 εναλλακτική δήλωση περιοχή δράσης
# N substrate doping	Προσμίξεις N
doping conc=6.e15 n.type uniform region=2	
# N+ substrate doping	Προσμίξεις N
doping conc=5.e18 n.type uniform region=3	
save outf=SiDiode_diodeP+NN+01.str	Αποθήκευση δομής
tonyplot SiDiode_diodeP+NN+01.str	Γραφική αναπράσταση δομής

Πίνακας 1.3-6. Κώδικας κατασκευής περιοχών και νόθευσης.



Εικόνα 1.3-9. Στο παραπάνω σχήμα [8] φαίνεται η νόθευση με κατανομή Gauss. Επίσης φαίνεται ότι η πλευρική έκταση (άξονας x) της καμπάνας Gauss καθορίζεται με την ανάθεση νέας τιμής στη μεταβλητή RATIO.LAT. η ανάθεση αντικαθιστά την προκαθορισμένη τιμή απόκλιση GAUSS, που ισούται με $70/\lambda^2$. έτσι αναθέτοντας νέες τιμές παίρνουμε νέα προφίλ νόθευσης. Το X.MIN και X.MAX δηλώνεται συχνά και με το ισοδύναμο τους X.LEFT και X.RIGHT.

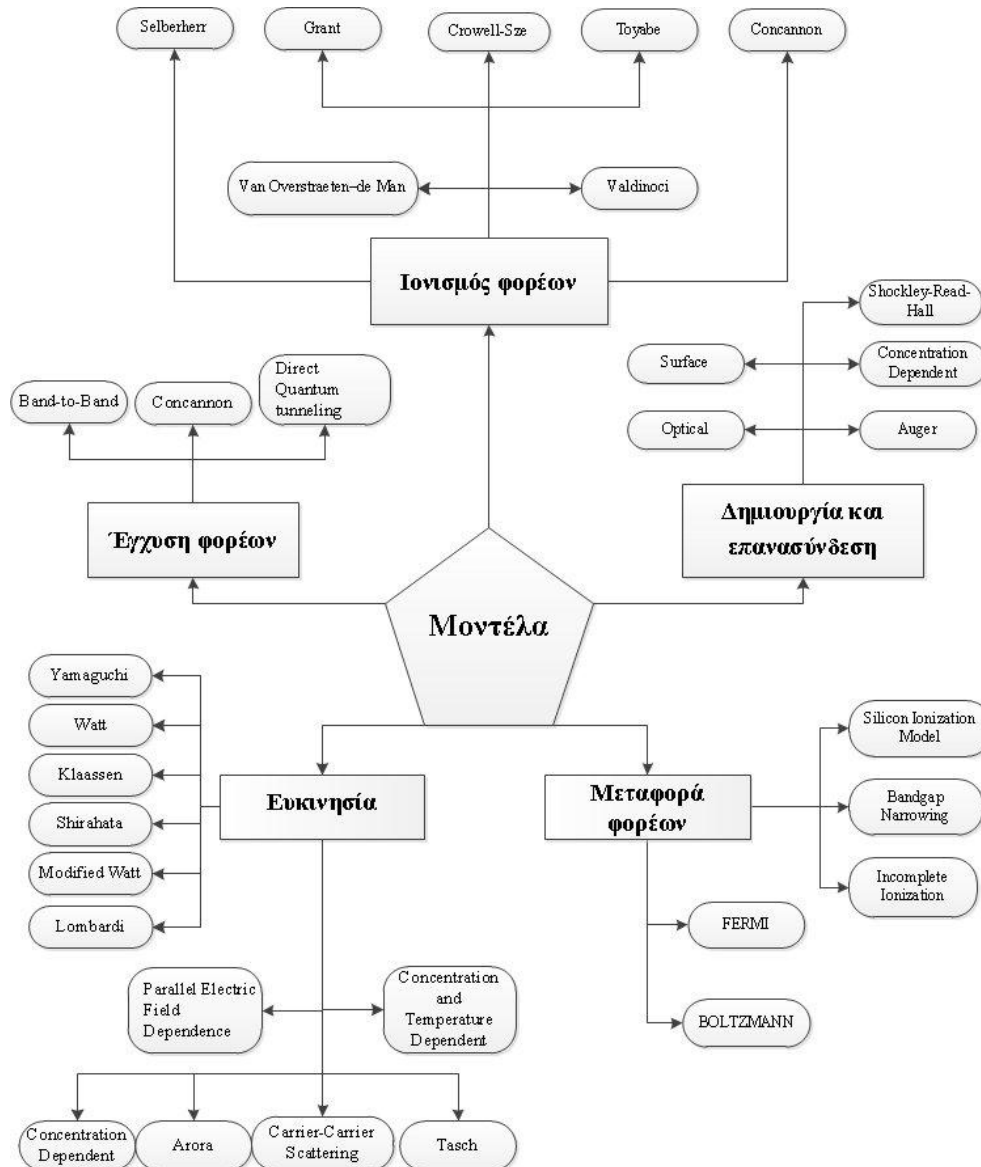


Εικόνα 1.3-10. Νόθευση και πλέγμα δίοδου που κατασκευάστηκε με κώδικα του πίνακα 1.3-6

2.3 ΜΟΝΤΕΛΑ

Στο τμήμα 2 του πίνακα 1.3-4 δηλώνονται τα διάφορα μοντέλα για τη μεταφορά φορέων, την ευκινησία, την επανασύνδεση, τον ιονισμό φορέων, το φαινόμενο σήραγγας και τέλος για τη έγχυση φορέων. Στην παρακάτω παρουσιάζονται τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται στο ATLAS. Η δήλωση MODELS έχει σαν παραμέτρους τα μοντέλα. Υπάρχουν παράμετροι που αντιπροσωπεύουν έναν συνδυασμό από παραμέτρους. Για παράδειγμα η δήλωση bipolar είναι ο συνδυασμός: conmob fldmob srh auger bgn. Μια επιπλέον σημαντική παράμετρος είναι η θερμοκρασία και δηλώνεται με TEMPERATURE, και κάτω από την οποία θα προσομοιωθεί το μοντέλο. Αν δεν τεθεί η θερμοκρασία, θα έχει προκαθορισμένη τιμή 300K.

Τέλος μια ασύνδετη με τα μοντέλα παράμετρος είναι η PRINT. Αυτή η παράμετρος εξασφαλίζει ότι τα χαρακτηριστικά θα εκτυπωθούν στην οθόνη κατά την εκτέλεση της προσομοίωσης.



Εικόνα 1.3-11. Επισκόπηση των μοντέλων που υποστηρίζονται στο ATLAS. Για αναλυτική ανάλυση των μοντέλων βλέπε τρίτο κεφάλαιο, ή στον οδηγό του ATLAS [8].

Ο αντίστοιχος κώδικας για την δίοδο του παραδείγματός μας είναι:

```
models analytic fldmob srh auger bgn print temperature=300
```

όπου το analytic είναι το μοντέλο ευκνησίας του Caughey-Schwarz (στην εικόνα 1.3-11 είναι σαν “Concentration and Temperature Dependent” μοντέλο καταχωρημένο).

2.3.1 Επαφές και διέπαφες

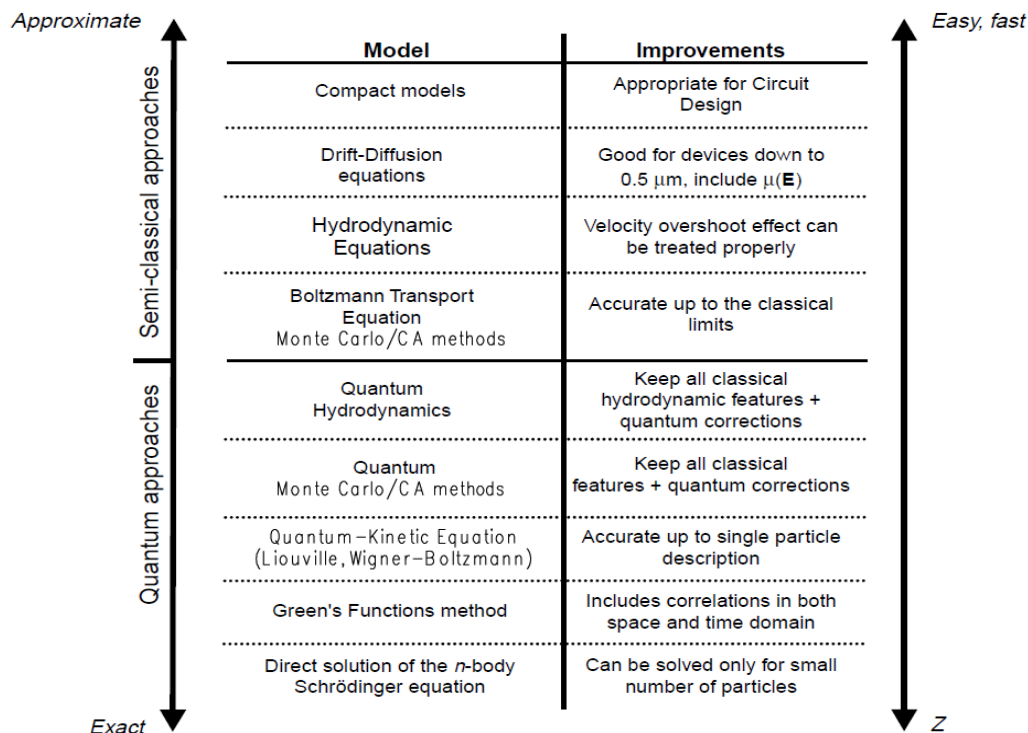
Μετά την δήλωση των μοντέλων έχουμε την δήλωση των ειδών των επαφών. Οι επαφές δηλώνονται με τον ίδιο τρόπο σαν τα ηλεκτρόδια αλλά με διαφορετικά χαρακτηριστικά. Τα ηλεκτρόδια μπορούν να είναι διαφορετικών μετάλλων και το έργο εξόδου, που προσθέτεται σαν παράμετρος, δηλώνει τι μέταλλο είναι η επαφή. Άλλη παράμετρος είναι

η τοποθεσία του ηλεκτροδίου. Συνήθως χρησιμοποιούνται συντομεύσεις σαν top και bottom, όμως καθορίζεται και επακριβώς μέσω συντεταγμένων. Επίσης για διαχωρισμό των ηλεκτροδίων χρησιμοποιείται η παράμετρος «όνομα ηλεκτροδίου» (anode, cathode,...). Η δήλωση interface χρησιμοποιείται όταν συνδέονται πολλές συσκευές, κάτι το οποίο δεν μας απασχολεί εδώ. Ο επόμενος κώδικας δείχνει την μετατροπή του ηλεκτροδίου στη θέση anode σε αγωγό. Συγκεκριμένα δίνεται το ηλεκτρόδιο να έχει ένα έργο εξαγωγής ίσο με 4.97 eV.

```
contact name=anode workf=4.97
```

2.3.2 Επιλογή της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης

Η προσομοίωση οποιαδήποτε διάταξης στηρίζεται στο φαινόμενο μεταφοράς φορέων. Αυτό το φαινόμενο δεν είναι καθολικής φύσεως, εξαρτάται από την διάσταση του χώρου, στο οποίο κινούνται οι φορείς. Έτσι για διαστάσεις αρκετές μεγάλες, που δεν χρειάζεται η ενσωμάτωση του κβαντικού φαινομένου, μπορούν να χρησιμοποιηθούν γνωστά μοντέλα υπολογισμού, τα οποία περιγράφουν την μεταφορά σαν μεταφορά πολλών σωματιδίων. Αυτά τα μοντέλα περιγράφονται από Compact, D-D, Υδροδυναμικές και Boltzmann (ή και ισοδύναμα Monte Carlo) εξισώσεις (Βλέπε σχήμα 2-4). Για κβαντικά φαινόμενα, όπου οι διαστάσεις του χώρου προσεγγίζουν την διάσταση του ατόμου, χρησιμοποιούνται μοντέλα/εξισώσεις περιγραφής του φαινομένου μεταφοράς, όπως οι Liouville, Wigner-Boltzmann εξισώσεις, που περιγράφουν για παράδειγμα την βαλλιστική μεταφορά ηλεκτρονίου σε ένα SET.



Εικόνα 1.3-12. Περιθώρια ισχύος της κάθε μεθόδου [7].

Οι διαστάσεις της διόδου του σχήματος 1-2 προτρέπουν στη χρήση του μοντέλου, το οποίο χρησιμοποιεί τις βασικές εξισώσεις ολίσθησης και διάχυσης (το Drift-Diffusion μοντέλο). Υπάρχουν δύο αριθμητικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται, η Gummel και η Newton. Για λύσεις, των οποίων το εύρος τάσεων ή ρευμάτων είναι μικρό, χρησιμοποιείται η Gummel, διότι λύνει με προοδευτικό σειριακό τρόπο τις εξισώσεις D-D

και έτσι συγκλίνει πιο γρήγορα από την Newton. Ενώ για λύσεις μεγάλου εύρους τάσεων συγκλίνει πιο γρήγορα η Newton, η οποία λύνει ταυτόχρονα τις εξισώσεις D-D. Ειδικά η Newton μέθοδο χρησιμοποιείται κυρίως σε 2D προσομοιώσεις λόγου όγκου του πινάκων του συστήματος που προκύπτουν από την FEA. Η επιλογή της μεθόδου γίνεται στο ATLAS με τον ορισμό της πρώτης παράμετρο στην δήλωση method. Οι άλλοι παράμετροι της method ρυθμίζουν την λειτουργία της επιλεγμένης μέθοδο. Οι τιμές αυτών των παραμέτρων είναι για την καλύτερη σύγκλιση της επιλεγμένης μέθοδο και έχουν προκαθορισμένες τιμές, που είναι δυνατόν να αλλαχθούν. Έτσι δηλώνεται για παράδειγμα:

```
method newton <...>
```

όπου <...> είναι οι παράμετροι για την ρύθμιση της καλύτερης σύγκλισης της μέθοδο Newton. Οι πιο χρησιμοποιημένοι παράμετροι <...> για την ρύθμιση της Newton μέθοδο είναι:

Παράμετρος <...>	Προκαθορισμένη τιμή	Περιγραφή
CARRIERS	2	Λύση της εξίσωση συνέχειας για συγκεντρώσεις n ή p (Carriers = 1) ή και των δυο.
CLIMIT	1.00E+04	Παράγοντας για την CLIM.DD
CLIM.DD	CLIMIT * $^4n_c n_v$ (Για Si $4.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$)	Χρήση ελάχιστης τιμής συγκεντρώσεως στον αλγόριθμο. Χρησιμοποιείται συχνά για αποφυγή μεγάλων ανάστροφων ρευμάτων.
ITLIMIT	25	Καθορίζει τον μέγιστο αριθμό επανλήψεων
DVMAX	2.5	Θέτει την μέγιστη τάση του αλγορίθμου Newton.
TRAP	True	Εντολή που μειώνει την την εφαρμοσμένη τάση σε κάθε αποκλίνουσα λύση του επαναληπτικού βήματος.
ATRAP	0.5	Παράμετρος της Trap (TRAP ATRAP) και καθορίζει το πόσο της εφαρμοσμένης τάσης σε περίπτωση μη σύγκλισης στον αλγόριθμο.
MAXTRAPS	4	Παράμετρος που καθορίζει τον αριθμό βημάτων προσπάθειας επίλυσης σε περίπτωση μη σύγκλισης στον αλγόριθμο.

Πίνακας 1.3-7. Οι πιο σημαντικοί παράμετροι της METHOD.

2.4 ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΙΔΙΚΗΣ ΤΙΜΗΣ

Σε αυτό το τμήμα υπολογίζεται μια συγκεκριμένη λύση της διάταξης. Για όλες τις αναλύσεις χρησιμοποιούνται οι πύλες της διάταξης. Αποδεκτή είναι τάση ή και ρεύμα. Επίσης γίνονται και πολλαπλές δηλώσεις τάσεων και ρευμάτων. Για την καλύτερη ανάλυση των αποτελεσμάτων, προτείνεται πολλαπλές δηλώσεις, ώστε να μπορούν να αποθηκευτούν και να αναπαριστούν γραφικά. Για παράδειγμα στο κώδικα γίνεται dc ανάλυση του «forward» ρεύματος της διόδου. Σημειώνεται ότι πριν κάθε ειδικής λύσης πρέπει να οριστεί αρχείο αποθήκευσης των δεδομένων. Έτσι αν θελήσει κανείς να προσομοιώσει περισσότερες ειδικές λύσεις, καλό θα ήταν να δηλώσει πολλαπλά αρχεία πριν της κάθε λύσης. Παράμετροι της

solve δήλωσης είναι αρχική (vanode), τελική τιμή της τάσεως/ρεύματος (vfinal), το μέγεθος της βηματικής προσέγγισης (vstep) και το ηλεκτρόδιο/επαφή, όπου εφαρμόζεται η τάση (anode).

```
solve vanode=0.0 vstep=0.5 vfinal=5 name=anode
```

Για την περίπτωση του ανάστροφου ρεύματος μπορεί να εφαρμοσθεί η παραπάνω δήλωση με αντίστροφα πρόσημα στις τιμές. Λόγο ότι το ρεύμα κατάρρευσης σε πολλές περιπτώσεις έχει απότομη κλίση δεν ανιχνεύεται καλά με το παραπάνω σειριακό τρόπο αύξησης της τάσεως ή του ρεύματος. Έτσι προτείνεται η χρήση της CURVETRACE δήλωσης με την οποία ανιχνεύονται οι μεταβολές σε μια καμπύλη I-V. Η ιδέα πίσω από την CURVETRACE είναι ότι σε μεγάλες μεταβολές του ρεύματος ο αλγόριθμος αλλάζει από εφαρμογής τάσεως στην διάταξη σε εφαρμογή ρεύματος. Αυτή η αλλαγή από εφαρμογή τάσεως σε ρεύμα επιτυγχάνεται με την εικονική εφαρμογή μιας αντίστασης στην επαφή της διάταξης. Οι παράμετροι της CURVETRACE ρυθμίζουν την λειτουργία της. Έτσι η CURVETRACE ξεκινά με την οριοθέτηση της αρχικής τάσεως από όπου ξεκινά η σταδιακή αύξησης της τάσεως στην διάταξη. Αυτό γίνεται μέσω της παράμετρος CONTR.NAME. Η αρχική ποσότητα της τάσεως καθορίζεται από την παράμετρο STEP.INIT. Η τιμή της STEP.INIT θα είναι η πρώτη τάση για την οποία θα επιδιώκεται να λυθεί το σύστημα. Η επόμενη τάση για να βρεθεί το ανάστροφο ρεύμα, βρίσκεται μέσω του συνδυασμού των παραμέτρων STEP.INIT και NEXTST.RATIO, δηλαδή με τον εξής τρόπο:

$$V_{\text{εφαρμογή}} = V_{\text{προηγούμενη}} + STEP.INIT \times NEXTST.RATIO$$

Στην αρχή η $V_{\text{προηγούμενη}} = 0 \text{ V}$. Εάν για παράδειγμα $STEP.INIT = -0.5$ και $NEXTST.RATIO = 1$ οι τιμές των $V_{\text{εφαρμογή}}$ για τα πρώτα τρία βήματα του αλγόριθμου CURVETRACE γίνονται:

1. $V_{\text{εφαρμογής}} = 0 + -0.5 \times 1 = -0.5 \text{ V}$
2. $V_{\text{εφαρμογής}} = -0.5 + -0.5 \times 1 = -1 \text{ V}$
3. $V_{\text{εφαρμογής}} = -1 + -0.5 \times 1 = -1.5 \text{ V}$

Για κάθε $V_{\text{εφαρμογής}}$ βρίσκεται μια λύση των εξισώσεων διάχυσης (Drift-Diffusion model) και το αποτέλεσμα είναι εύρεση της πυκνότητας ρεύματος που αντιστοιχεί στην κάθε $V_{\text{εφαρμογής}}$. Έτσι αυξάνοντας την $V_{\text{εφαρμογής}}$ με την μέθοδο CURVETRACE, λαμβάνονται πυκνότητα αναστροφών ρευμάτων μέχρι μια τιμή που καθορίζεται από την παράμετρο END.VAL. Επιπρόσθετα η END.VAL μπορεί να είναι ρεύμα ή τάση και αυτό δηλώνεται με την παράμετρο VOLT.CONT (τάση) ή CURR.CONT (ρεύμα) της CURVETRACE. Η πιο σημαντική παράμετρος είναι η MIN.CURR που δηλώνει το σημείο αλλαγής εφαρμογής τάσεως σε ρεύμα. Αυτό που γίνεται είναι ότι ο αλγόριθμος συνεχίζει να βρίσκει λύσεις με εφαρμογή τάσεως, όμως για να αποφευχθούν λύσεις που έχουν ίδιες τάσεις εφαρμογής (για παράδειγμα σε σημείο καμπής μιας καμπύλης) χρησιμοποιείται η τομή της κάθετης στην εφαπτομένη στο σημείο V με τον άξονα V σαν τάση εφαρμογής. Επομένως για πολλές τάσεις εφαρμογής που αντιστοιχούνε στην ίδια τάση στη καμπύλη μπορεί να βρεθούν τώρα διαφορετικά ρεύματα. Έτσι είναι σαν να ακολουθούντα τα σημεία πάνω στην καμπύλη και για αυτό τον λόγο λέγεται η μέθοδος CUREVTRACE «καμπύλο-ίχνηλάτηση». Το ρεύμα από την λύση της εφαρμοσμένης τάσεως συγκρίνεται με την τιμή της παράμετρος MIN.CURR, και τότε ανάλογα εάν είναι μικρότερη ή μεγαλύτερη από αυτήν εφαρμόζεται η κατάλληλη μέθοδος ορισμού νέας τάσης εφαρμογής. Δηλαδή

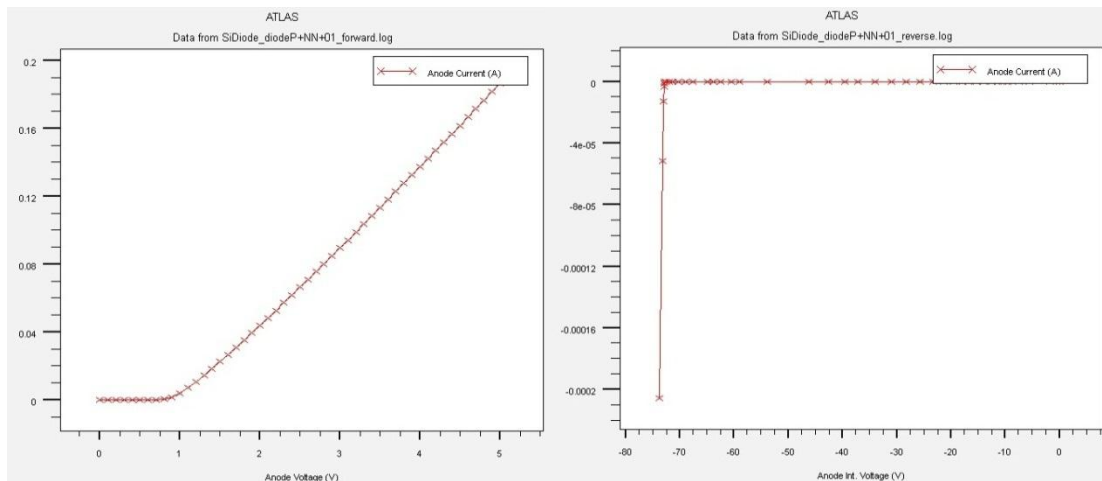
$$\boxed{J_{\text{λύση}} > TIMH_{MIN.CURR}} \Rightarrow V_{\text{εφαρμογή}} = V_{Tangent}$$

$$J_{\lambda\upsilon\sigma\eta} < TIMH_{MIN.CURR} \Rightarrow V_{\epsilon\phi\alpha\rho\mu\omicron\gamma\eta} = V_{\pi\rho\omicron\eta\gamma\omicron\upsilon\mu\epsilon\nu\eta} + STEP.INIT \times NEXTST.RATIO$$

Έτσι για να πάρει κανείς καλά αποτελέσματα με την CURVETRACE πρέπει ο χρήστης να καθορίζει την MIN.CURR με τέτοιο τρόπο ώστε η τιμή του MIN.CURR να ορισθεί μικρότερη από τις τιμές ταλάντωσης του ανάστροφου ρεύματος διάχυσης. Το ρεύμα διάχυσης συχνά έχει μεγάλες ταλαντώσεις που μπορούν εσφαλμένα να αντιληφθούν σαν σημείο αλλαγής για την CURVETRACE, και έτσι θα υπάρχει πρόωρη «ιχνηλάτηση», δηλαδή ανίχνευσης του σημείου κατάρρευσης της διάταξης. Ο κώδικας για την υλοποίηση της CURVETRACE για την Si δίοδο είναι:

```
curvetrace curr.cont.end.val=-1e-4 contr.name=anode \
mincur=-5e-15 nextst.ratio=1 step.init=-0.5
solve curvetrace
```

Παρατίθενται και οι γραφικές από τις προσομοιώσεις του κώδικα που αναπτύχθηκε σε αυτό το κεφάλαιο και μπορεί να βρεθεί ολόκληρος στο παράρτημα X.



1.3-13 Χαρακτηριστική ρεύματος ορθής φοράς (Forward current) στη αριστερή εικόνα και χαρακτηριστική ανάστροφου ρεύματος (reverse current) στη δεξιά. Προσέξτε την λεζάντα του ανάστροφου ρεύματος, για την προβολή του σωστού αποτελέσματος χρησιμοποιείται την εσωτερική τάση αντί την κανονική. Αυτό είναι λόγω της εικονικής αντίστασης της CURVETRACE.

3 ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ 4H-SiC ΣΤΟ ATLAS

Σε αυτό το κεφάλαιο δίνεται η πλήρη περιγραφή των φυσικών παραμέτρων και τις πιο σημαντικές μεταβολές που μπορούν να προκύψουν σε αυτούς με την αλλαγή ιδιοτήτων όπως θερμοκρασία, ηλεκτρικό πεδίο κτλ. Η μεθοδολογία μας αποτελείται από τρία βήματα, το πρώτο βήμα είναι η δημιουργία μια λεπτομερής βιβλιογραφία θεωρητικών υπολογισμών και πειραματικών μετρήσεων που χρησιμοποιούνται για 4H-SiC στο TCAD. Το δεύτερο βήμα είναι να δημιουργηθεί μια λεπτομερής βιβλιογραφία από 4H-SiC TCAD προσομοιώσεις και να ελεγχθεί κατά πόσο αντιστοιχούν οι θεωρητικές και πειραματικές τιμές στους χρησιμοποιημένους παραμέτρους του TCAD. Το τρίτο βήμα αποτελείται από την σύγκριση των δυο σετ τιμών (βήμα ένα και δυο) και βάση σύγκρισης εξάγονται οι καλύτερες τιμές παραμέτρων προσομοίωσης.

Επίσης παρουσιάζονται οι συνδέσεις μεταξύ θεωρητικού συμβολισμού και του αντίστοιχου συμβολισμού στο SILVACO [8] (γλώσσα προγραμματισμού SILVACO).

3.1 ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟ ΧΑΣΜΑ

Το ενεργειακό χάσμα E_g είναι μια βασική ιδιότητα του υλικού, που καθορίζει κατά μεγάλο μέρος τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά ενός ημιαγωγού. Για πρακτικούς σκοπούς, όπως στην πραγματική λειτουργία ολοκληρωμάτων, οι μεταβολές του ενεργειακού χάσματος που προκύπτουν λόγω μεταβολής της θερμοκρασίας και λόγου βαθμού των προσμίξεων πρέπει να είναι γνωστές.

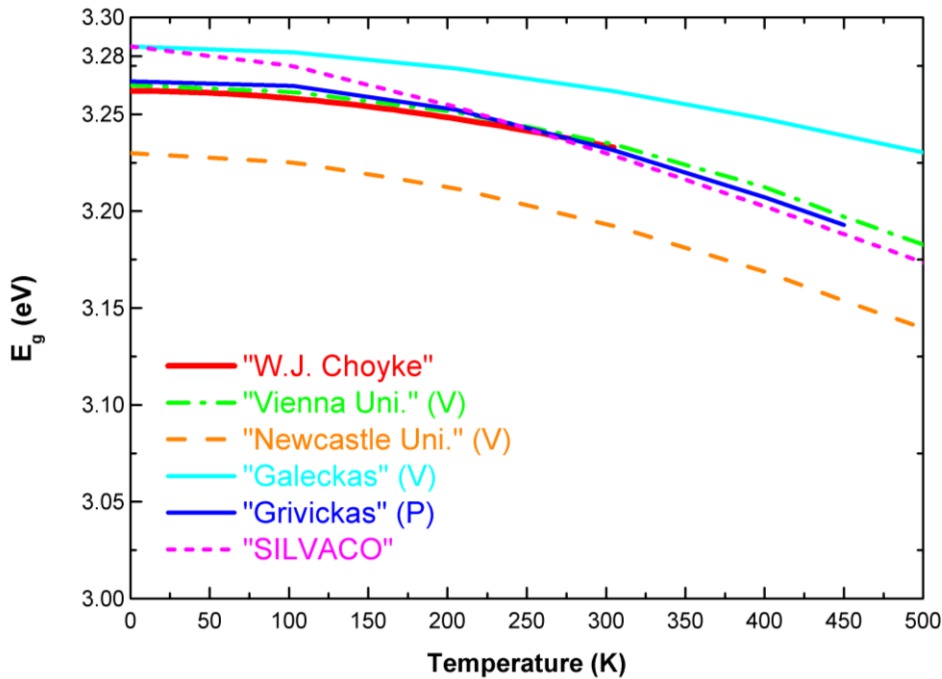
3.1.1 E_g μεταβολές με θερμοκρασία

Εικόνα 3.1-1 δείχνει την μεταβολή του ενεργειακού χάσματος του 4H-SiC με θερμοκρασία. Στην εικόνα συμπεριλαμβάνονται οι ελάχιστες μελέτες πειραματικών μετρήσεων μεταβολών του E_g με θερμοκρασία [9], [10] και [11] και οι μετρήσεις αποτελεσμάτων των μοντέλων του προσομοιωτή [12] και [13]. Επιπλέον και στις δυο περιπτώσεις, η μεταβολή του ενεργειακού χάσματος προσαρμόζεται μέσω της εμπειρικής σχέσης του Varshni [14] ή μέσω της εξίσωσης Passler [15].

Το Varshni μοντέλο αποτυπώνεται παρακάτω:

$$E_g(T_L) = E_g(300) + \alpha \left[\frac{300^2}{(300 + \beta)} - \frac{T_L^2}{(T_L + \beta)} \right] \quad (3.1.1)$$

Όπου αναφέρεται α ($\text{eV} \cdot \text{K}^{-1}$), β (K) και $E_g(300)$ πρόκειται για συντελεστές προσαρμογής του μοντέλου, το οποίο συχνά ονομάζεται και καθολικό μοντέλο “global model”.



Εικόνα 3.1-1. Συρρίκνωση του ενεργειακού χάσματος με αύξηση της θερμοκρασίας. Η συμπαγής γραμμή αντιπροσωπεύει τις προσαρμοσμένες πραγματικές μετρήσεις (εξίτηνιο του ενεργειακού χάσματος) ενώ η μη συμπαγές γραμμές είναι εκτιμήσεις του ενεργειακού χάσματος στις TCAD προσομοιώσεις. Σημειώστε της σημασιολογία στις παρενθέσεις (V) και (P) αντιπροσωπεύουν το Varshni μοντέλο και το Passler μοντέλο αντίστοιχα.

Το μοντέλο Passler που βασίζεται στον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων του ηλεκτρονίου και του φωνωνίου προτείνει ένα απλό και ληττό μοντέλο διασποράς του φωνωνίου:

$$E_G(T_L) = E_G(0) - \frac{\alpha \Theta_p}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T_L}{\Theta_p} \right)^p} - 1 \right] \quad (3.1.2)$$

όπου αναφέρονται ($E_G(0)$, Θ_p , α , Δ) πρόκειται για συντελεστές προσαρμογής. Το Δ αντιπροσωπεύει το βαθμό ελευθερίας διασποράς του φωνωνίου, Θ_p είναι ο μέσος όρος θερμοκρασίας του φωνωνίου και το α είναι η εντροπία. Ο εκθέτης p , δίνεται από την σχέση $p \approx \sqrt{1 + (\Delta)^{-2}}$. Οι τέσσερις συντελεστές της (3.1.2) δίνονται για κάθε είδος υλικού.

Ο πίνακας 3.1-1 και ο πίνακας 3.1-2 περιέχουν τις τιμές των συντελεστών που αντιστοιχούν στο Varshni και Passler μοντέλο που φαίνονται στην εικόνα 3.1-1.

Πηγές	α ($10^{-4} \cdot \text{eV/K}^{-1}$)	β (K)	E_g (eV)
"Vienna Uni."	330	100000	3.265 (300K)
"SILVACO ATLAS"	3.3	240	3.285 (0K)
"Newcastle Uni"	6.5	1300	3.23 (300K)
"Galeckas "	3.5	1100	3.26 (300K)

Πίνακας 3.1-1. Τιμές του global μοντέλου SiC-bandgap. Οι αναφορές στη στήλη πηγές A, B, C, D, M και P αντιστοιχούν σε are [12],[8],[13] and [16].

Παράμετρο	Τιμή	Μονάδες
$E_{g(0)}$	3.27	eV
Θ_p	450.00	K
Δ	0.29	-
ε	3.00E-04	eV/K

Πίνακας 3.1-2. Συντελεστές για το Passler μοντέλο, σύμφωνα με την επιστημονική ομάδα [10].

Δυστηχώς υπάρχουν λίγες μελέτες TCAD που συνυπολογίζουν τη μεταβολή θερμοκρασίας του ενεργειακού χάσματος. Συνήθως, για τον εν λόγω υπολογισμό λαμβάνετε υπόψη μια σταθερή τιμή του ενεργειακού χάσματος. Αναφέρεται επίσης, ότι και στην περίπτωση του SILVACO ATLAS, έως το 2011, λήφθηκε για το ενεργειακό χάσμα μια σταθερή τιμή. Η έκδοση του 2012 περιέχει πλέον το καθολικό μοντέλο (global model) (βλέπε πίνακας 3.1-2). Παρότι που χρησιμοποιείται το καθολικό μοντέλο για το 4H-SiC δεν χρησιμοποιείται στους τύπους 6H και 3C στο πρόγραμμα ATLAS.

Από την Εικόνα 3.1-1 φαίνεται ότι οι συντελεστές της επιστημονικής ομάδας «Vienna University» [12] είναι πιο κοντά στις πειραματικές μετρήσεις και για αυτό τον λόγο θεωρούνται οι συντελεστές τους $\alpha(=0.033 \text{ eV}\cdot\text{K}^{-1})$, $\beta(=105\text{K})$ και $E_g(=3.265\text{eV})$ οι πιο σωστές για προσομοίωση με θερμοκρασίες $T > 100\text{K}$. Προφανώς η χρήση του Passler μοντέλο για τις προτινόμενες θερμοκρασίες δεν προσθέτει καμία βελτίωση σε σχέση με το καθολικό μοντέλο («global method»).

3.1.2 Μεταβολή E_g με νόθευση

Στην περίπτωση ισχυρής νόθευσης μεγαλύτερης της 10^{-17} cm^{-3} η ζώνη του ηλεκτρονίου και της αυτής της οπής μετατοπίζονται κατά ίσες αποστάσεις προς το κέντρο του ενεργειακού χάσματος. Αυτό το φαινόμενο οδηγεί σε μια μείωση της τιμής του ενεργειακού χάσματος και έτσι επηρεάζονται και οι παράμετροι που εξαρτώνται από το ενεργειακό χάσμα. Δύο μοντέλα χρησιμοποιούνται για να συνυπολογιστεί η μεταβολή του ενεργειακού χάσματος με την μεταβολή της συγκέντρωσης της νόθευσης. Ένα από τα πρώτα μοντέλα είναι αυτό του Slotboom και Graaf [17] που κατασκευάστηκε για το Si και βασίζεται σε πειραματικές μετρήσεις της ποσότητας $\mu_{n,p2i}$ σε nρη τρανζίστορ.

$$\Delta E_g(N) = \Delta V_{g0}(N) = V_1 \left(\ln \left(\frac{N}{N_0} \right) + \sqrt{\ln^2 \left(\frac{N}{N_0} + C \right)} \right) \quad (3.1.3)$$

όπου V_1 , N_0 και C είναι συντελεστές προσαρμογής. Οι τιμές για Si είναι $V_1 = 9mV$, $N_0 = 1 \times 10^{17}$, και $C = 0.5$ και πρότινος γινόταν χρήση των τιμών Si σε προσομοιώσεις TCAD για SiC διατάξεις [18].

Ένα άλλο μοντέλο που χρησιμοποιείται στην συρρίκνωση του ενεργειακού χάσματος είναι αυτού του υπολογισμού της μετατόπισης των ζωνών του Lindefelt [19]. Βασίζεται στην αλλαγή του ενεργειακού χάσματος που προκαλείται από την αλληλεπίδραση των μονομένων φορέων με τους φορείς των ζωνών αγωγιμότητας/σθένος και των ιονισμένων ιοντων. Η συρρίκνωση του ενεργειακού χάσματος ΔE_g ορίζεται $\Delta E_g = -\Delta E_c + \Delta E_v$. Η μετατόπιση για τύπου n τρανζίστορ είναι:

$$\Delta E_c = A_{nc} \left(\frac{N_d^+}{10^{18}} \right)^{1/2} + B_{nc} \left(\frac{N_d^+}{10^{18}} \right)^{1/2} \quad \Delta E_v = A_{nv} \left(\frac{N_d^-}{10^{18}} \right)^{1/2} + B_{nv} \left(\frac{N_d^-}{10^{18}} \right)^{1/2} \quad (3.1.4)$$

για τύπου p τρανζίστορ είναι:

$$\Delta E_c = A_{pc} \left(\frac{N_d^+}{10^{18}} \right)^{1/2} + B_{pc} \left(\frac{N_d^+}{10^{18}} \right)^{1/2} \quad \Delta E_v = A_{pv} \left(\frac{N_d^-}{10^{18}} \right)^{1/2} + B_{pv} \left(\frac{N_d^-}{10^{18}} \right)^{1/2} \quad (3.1.5)$$

όπου οι συντελεστές $A_{n(p),c}$, $B_{n(p),c}$, $A_{n(p),v}$, $B_{n(p),v}$ είναι σε eV.

Για 4H-SiC οι συντελεστές είναι:

$$\text{n-type: } A_{nc} = -1.50 \cdot 10^{-2}, B_{nc} = -2.93 \cdot 10^{-3}, A_{nv} = 1.90 \cdot 10^{-2}, B_{nv} = 8.74 \cdot 10^{-3}$$

$$\text{p-type: } A_{pc} = -1.57 \cdot 10^{-2}, B_{pc} = -3.87 \cdot 10^{-4}, A_{pv} = 1.30 \cdot 10^{-2}, B_{pv} = 1.15 \cdot 10^{-3}$$

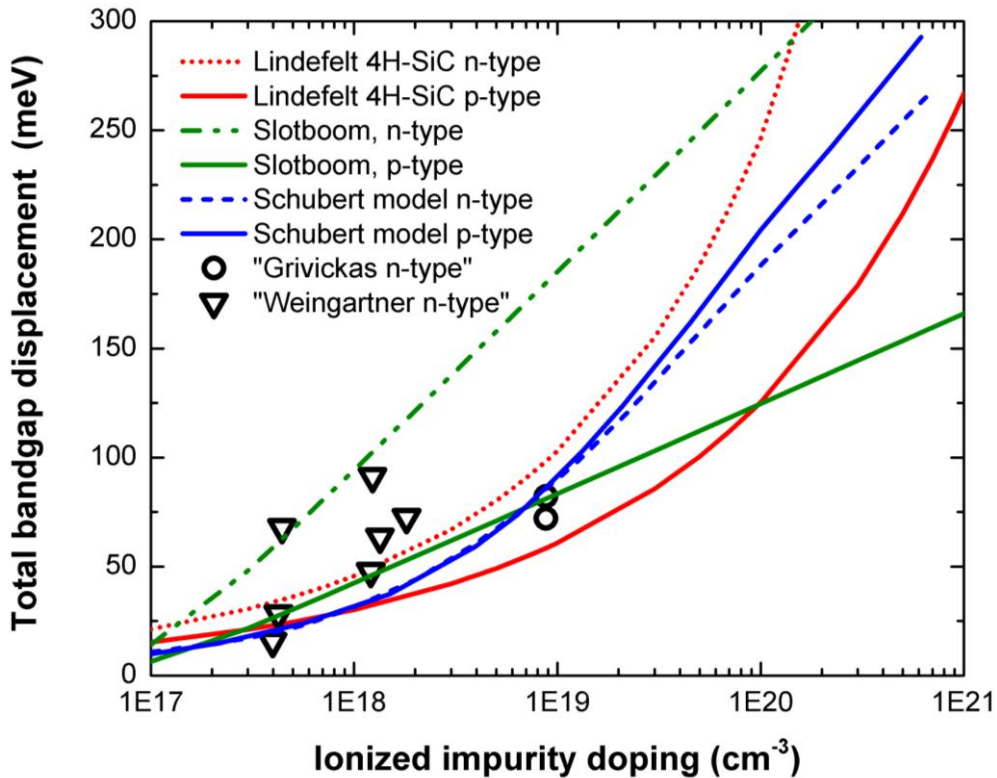
Επιπρόσθετα το μοντέλο αυτό έχει προσαρμοστεί στην έκφραση Slotboom, εξίσωση (3.1.3), για 4H-SiC και 6H-SiC από τον Lades [20]. Οι συντελεστές είναι διαφορετική ανάλογα με το είδος του υλικού, δηλαδή εάν είναι τύπου n type ($V_1 = 2 \cdot 10^{-2}$ eV, $N_0 = 1 \cdot 10^{17}$ cm⁻³ και $C=0.5$) ή τύπου p ($V_1 = 2 \cdot 10^{-2}$ eV, $N_0 = 1 \cdot 10^{17}$ cm⁻³ and $C=0.5$). Σημειώνεται ότι παραπάνω αναφερόμενα μοντέλα είναι διαθέσιμα στη τελευταία έκδοση του ATLAS [8].

Τέλος εναλλακτικό ένα μοντέλο είναι αυτό του Schubert [21], που είναι ένα καθαρά φυσικό μοντέλο όπου η συρρίκνωση του ενεργειακού χάσματος είναι το αποτέλεσμα των αλληλεπιδράσεων πολλών σωμάτων και δίνεται ως

$$\Delta E_g = \frac{-q^2 \beta}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \quad (3.1.6)$$

αναφέρεται β είναι το αντίστροφο μήκος του Thomas-Fermi.

Στην εικόνα 3.1-2 παρουσιάζονται τα αντίστοιχα τα γραφήματα των Slotboom, Lindefelt και Schubert μοντέλα για 4H-SiC και τις πειραματικές μετρημένες τιμές της συρρίκνωσης του ενεργειακού χάσματος για διαφορετικές συγκεντρώσεις προσμίξεων, βλέπε [22] και [23].



Εικόνα 3.1-2. Γραφικές αναπαραστάσεις των Slotboom και Lindefelt μοντέλων της συρρίκνωσης ενεργειακού χάσματος. Οι πειραματικές μετρήσεις αναπαριστούνται με σύμβολα (κύκλοι [22] και τρίγωνα [23]).

Η δυσκολία που συναντάτε εδώ είναι ότι ελάχιστες συστηματικές θεωρητικές όσο και πειραματικές μελέτες της συρρίκνωσης του ενεργειακού χάσματος του 4H-SiC με μεταβολή της θερμοκρασίας και με μεταβολή της συγκεντρώσεως της νόθευσης υπάρχουν και για αυτό τον λόγο δεν μπορούν να επιλεγθούν οι καλύτερες συντελεστές. Πάραυτα για

συγκεντρώσεις μέχρι 10^{19} cm^{-3} , με εξαίρεση του μοντέλου Slotboom για η τύπο υλικό, δεν υπάρχουν μεγάλες διαφορές μεταξύ των μοντέλων.

3.2 ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΗ ΣΤΑΘΕΡΑ

Η διηλεκτρική σταθερά μπορεί να είναι γραμμική $P = \epsilon_0 \chi_0 E$, όπου χ_0 η διηλεκτρική επιδεκτικότητα (αδιάστατη ποσότητα) και ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά του κενού. Μια εναλλακτική μορφή έκφρασης είναι η $D \equiv \epsilon E + P$ as $D \equiv \epsilon E$, όπου $\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi_0)$ η επιδεκτικότητα, και $\epsilon_r = \epsilon/\epsilon_0$ είναι σχετική διηλεκτρική σταθερά. Όταν η διηλεκτρική σταθερά είναι μη γραμμική αλλά ισοτροπική η σχέση $\epsilon = \epsilon(|E|)$ είναι μια συνάρτηση του μέγεθος του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου. Σε ανισοτροπικό πεδίο, P και E δεν είναι απαραίτητα παράλληλα και οι P και E είναι τανυστές. Η διηλεκτρική σταθερά, ένας τανυστής δεύτερης τάξεως, σχετίζει το ηλεκτρικό πεδίο E με την μετατόπιση D μέσω της σχέσης:

$$\begin{bmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{bmatrix} = \epsilon_0 \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} \quad (3.2.1)$$

Στη ισοτροπική περίπτωση, τα μη διαγώνια στοιχεία είναι μηδέν και τα διαγώνια στοιχεία έχουν τις ίδιες τιμές. Στη ανισοτροπική περίπτωση, πάντα υπάρχει τρόπος μηδενισμού των μη διαγώνιων στοιχείων με κατάλληλη επιλογή συντεταγμένων. Συχνά παρουσιάζονται τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα σαν $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3)$, όπου $\epsilon_1 = \epsilon_{xx}$, $\epsilon_2 = \epsilon_{yy}$, $\epsilon_3 = \epsilon_{zz}$.

Από τις συμμετρίες του κρύσταλλου εξάγεται ότι το καρβίδιο του πυριτίου (SiC) είναι εξαγωνικός κρύσταλλος. Επομένως στο SiC $\epsilon_1 = \epsilon_2 \neq \epsilon_3$, και επομένως έχει δύο δείκτες διαθλάσεως \tilde{n}_1 και \tilde{n}_3 , και δυο κύριοι διηλεκτρικές σταθερές, ϵ_1 και ϵ_3 . Υλικά με αυτήν την ιδιότητα λέγονται μη αξονικές (uniaxial) ο μοναδικός κρυσταλλογραφικός άξονας είναι ο c άξονας, που ονομάζεται και οπτικός άξονας. Μια μέθοδο καθορισμού των δύο τιμών των διηλεκτρικών σταθερών είναι να ορισθεί ο προσανατολισμός του ηλεκτρικού πεδίου σε σχέση με τον οπτικό άξονα. Η διηλεκτρική σταθερά για την περίπτωση $E \perp c$ είναι ϵ_1 . Αυτή η περίπτωση καλείται και συνηθισμένη ακτίνα (ordinary ray), και αντίστοιχος συμβολισμός για τους δείκτες διάθλασης είναι \tilde{n}_1 ή \tilde{n}_\perp ή \tilde{n}_o . Η διηλεκτρική σταθερά για την περίπτωση $E \parallel c$ είναι ϵ_3 . Αυτή η περίπτωση καλείται και ασυνήθης ακτίνα (extraordinary ray), και αντίστοιχος συμβολισμός για τους δείκτες διάθλασης είναι \tilde{n}_3 ή \tilde{n}_\parallel ή \tilde{n}_e . Η διηλεκτρική σταθερά εξαρτάται βέβαια και από τη συχνότητα. Το διηλεκτρική σταθερά μετρήθηκε σε χαμηλές συχνότητες την δεκαετία του 70. Συγκεκριμένα μετρήθηκαν από τους Patrick et al. [24] η διασπορά φωνονίων (Raman σκέδαση) και οι δείκτες διάθλασης. Ο λόγος ανισοτροπίας στο [24] βρέθηκε να είναι $\epsilon_1/\epsilon_3 = 0.96$ με $\epsilon_1 = 9.66$ και $\epsilon_3 = 10.03$. Στο 1994 οι S. Ninoyima και S. Adachi έχουν μετρήσει μέσω φασματοσκοπικής ελλειψομετρίας σε χαμηλές και σε υψηλές συχνότητες την διηλεκτρική σταθερά του 6H-SiC. Το αποτέλεσμα της έρευνας αυτής είναι η εύρεση της στατικής σταθεράς σε χαμηλές να είναι $\epsilon_1 = 9.76$ και $\epsilon_3 = 9.98$ ενώ για υψηλές συχνότητες οι αντίστοιχες τιμές είναι $\epsilon_1 = 6.59$ and $\epsilon_3 = 6.67$. Αντίστοιχες μετρήσεις για 4H-SiC δεν υπάρχουν προς το παρόν. Επομένως λόγω ομοιότητας μεταξύ του 6H- και 4H-SiC, με την καθοριστική διαφορά μεταξύ του 6H-SiC και του 4H-SiC το 4H-SiC να έχει μεγαλύτερο ενεργειακό χάσμα. Έτσι υιοθετείται η άποψη ότι η διηλεκτρική σταθερά πρέπει στο 4H-SiC να είναι μικρότερη από ότι στο 6H-SiC [25]. Επίσης ο λόγος της ανισοτροπίας του 4H-SiC είναι ελαφρώς μικρότερος από αυτόν του 6H-SiC.

Στο ATLAS της SILVACO είναι δυνατόν να προσδιοριστεί με μια απλή διαδικασία η τιμή της διηλεκτρικής σταθεράς ή μέσω ενός τανυστή. Στην απλή διαδικασία τίθεται η τιμή της παράμετρος PERMITTIVITY της δήλωσης MATERIAL σε μια τιμή. Στην περίπτωση του τανυστή, που είναι ένας 3x3 πίνακας, πρέπει τα διαγώνια στοιχεία του, που εκφράζονται μέσω των μεταβλητών $(\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz})$, να τεθούν σε τιμές. Τα μη διαγώνια στοιχεία, εάν δεν τίθενται σε τιμές, αυτομάτως ισοδυναμούν με μηδέν. Εναλλακτικός τρόπος για να ορισθεί μια τιμή στη διηλεκτρική σταθερά είναι να ορισθούν οι τιμές των διαγώνιων στοιχείων του τανυστή. Για ανισοτροπικά υλικά όπου τα διαγώνια στοιχεία του τανυστή έχουν μηδενικές

τιμές ενώ τα διαγώνια στοιχεία διαφέρουν μεταξύ τους. Δίνεται η δυνατότητα στο χρήστη να τεθούν τα διαγώνια στοιχεία μέσω της παράμετρος PERM.ANISO της δήλωσης MATERIAL. Διακρίνονται η περίπτωση της 2D και της 3D προσομοίωσης. Στην 2D προσομοίωση μόνο οι ϵ_{xx} , ϵ_{yy} τίθενται. Για παράδειγμα στη περίπτωση του 4H-SiC ισχύει $\epsilon_1 = \epsilon_2$ και για αυτό μόνο μια τιμή χρειάζεται να τεθεί το ATLAS αυτόματα εξάγει τις τιμές από τις μεταβλητές ϵ_1, ϵ_2 και ϵ_{yy} στο τανυστή. Η μεταβλητή ϵ_3 ($\epsilon_3 = \epsilon_{zz}$) χρησιμοποιείται σαν προκαθορισμένη τιμή όταν πρόκειται για 3D προσομοίωση, στην 2D περίπτωση χρησιμοποιείται η τιμή του ϵ_2 σαν προκαθορισμένη τιμή. Η εξήγηση είναι ότι η διεύθυνση της ϵ_3 συμπίπτει με τον άξονα z (c-άξονα). Προσδιορίζοντας YDIR.ANISO ή ^ZDIR.ANISO στη δήλωση MATERIAL καθορίζει την τιμή της παράμετρος PERM.ANISO κατά την Y διεύθυνση αντί κατά της Z διεύθυνσης. Έτσι έχοντας αλλάξει την διεύθυνση σε Y πρέπει να τεθούν σε μια 2D προσομοίωση οι ϵ_{zz} και ϵ_{xx} μεταβλητές. Ο ανισοτροπικός διηλεκτρικός τανυστής καθορίζεται στη δήλωση MATERIAL με τον ορισμό της παράμετρο E.FULL.ANISO και των τιμών του τανυστή. Στη χρήση ανισοτροπικού διηλεκτρικού τανυστή χρησιμοποιούνται περισσότεροι πόροι του υπολογιστή και η προσομοίωση μπορεί να είναι πολύ αργή. Ο τανυστής αρχικοποιείται σαν 3x3 μοναδιαίος πίνακας και πρόσβαση στις τιμές του δίνεται μέσω των στηλών του:

Κανονικός συμβολισμός στοιχείου πίνακα	Συμβολισμός στοιχείου πίνακα στο ATLAS	Προκαθορισμένες τιμές
$(\epsilon_{11} \epsilon_{12} \epsilon_{13})$	(X.X X.Y X.Z)	(1.0 0.0 0.0)
$(\epsilon_{21} \epsilon_{22} \epsilon_{23})$	(Y.X Y.Y Y.Z)	(0.0 1.0 0.0)
$(\epsilon_{31} \epsilon_{32} \epsilon_{33})$	(Z.X Z.Y Z.Z)	(0.0 0.0 1.0)

Πίνακας 3.2-1. Αρχικός ανισοτροπικός πίνακας (τανυστής).

Ο μοναδιαίος πίνακας επιδέχεται αλλαγές όταν τα στοιχεία του τεθούν διαφορετικά.

Παράδειγμα αλλαγής μοναδιαίου πίνακα
X.X=0.0 X.Y=1.0 X.Z=0.0
Y.X=0.0 Y.Y=0.0 Y.Z=1.0
Z.X=1.0 Z.Y=0.0 Z.Z=0.0

Η γενική διαδικασία είναι να τεθεί πρώτα το υλικό, το είδος του διηλεκτρικού και τέλος οι τιμές του διηλεκτρικού τανυστή. Ακολουθούν τρία παραδείγματα για α) σταθερό διηλεκτρικό b) 2D ανισοτροπικό διηλεκτρικό c) 3D ανισοτροπικό διηλεκτρικό και d) 3D πλήρες ανισοτροπικό διηλεκτρικό.

- MATERIAL=4H-SiC PERM=9.76
- MATERIAL=4H-SiC PERM.ANISO Y.Y=9.76
- MATERIAL=4H-SiC PERM.ANISO Y.Y=9.76 Z.Z=10.03
- MATERIAL=4H-SiC PERM.ANISO X.X=9.76 X.Y=9.6 X.Z=9.5 Y.X=9.7 Y.Y=9.76 Y.Z=9.5 Z.X=10.00 Z.Y=10.01 Z.Z=10.03

Ο ακόλουθος πίνακας παρουσιάζει τις τιμές του διηλεκτρικού πίνακα που χρησιμοποιούνται από πολλές ή αρκετές επιστημονικοί ομάδες.

Scientific Group	Relative dielectric constant ϵ_{\perp}
C "Uni.of Newcastle"	9.7
D "Uni.of Reggio Calabria"	9.66
F "J. Stęszewski et al."	9.66

Πίνακας 3.2-2. Διηλεκτρικές σταθερές που χρησιμοποιούνται στις 4H-SiC TCAD προσομοιώσεις. Σημειώστε ότι οι περισσότεροι ομάδες χρησιμοποιούν την χαμηλής συχνότητας διηλεκτρική σταθερά του Patrick et al. για 6H-SiC. C, D και F αναφέρονται στις αναφορές [26], [27] και [28]. Στο ATLAS η διηλεκτρική σταθερά για 4H-SiC ορίζεται ως [29]. Η η πλήρη ανισοτροπία της διηλεκτρικής σταθεράς αγνοείται από τις περισσότερες επιστημονικές ομάδες.

Ο πίνακας 3.2-2 αναδεικνύει ότι οι περισσότεροι επιστημονικές ομάδες χρησιμοποιούν 2D προσομοιώσεις και τιμή την 9.66, η οποία διαφέρει από την προκαθορισμένη τιμή 4H-SiC του ATLAS, που είναι 9.7.

3.3 ΕΝΕΡΓΗ ΜΑΖΑ

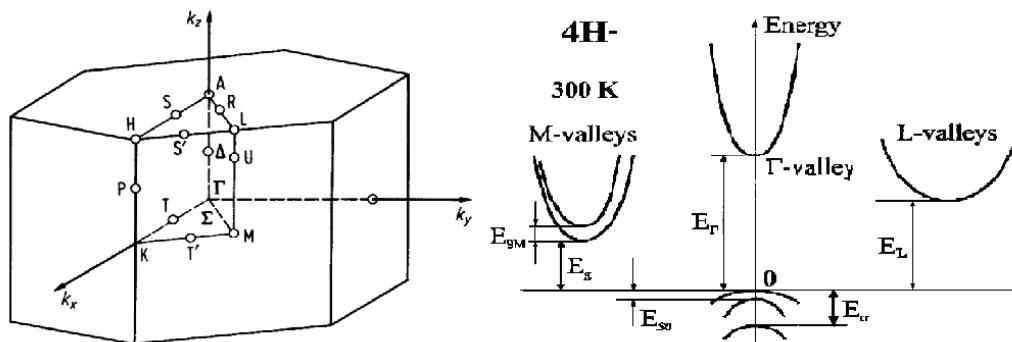
Η κίνηση του ηλεκτρονίου, σε αντίθεση με την κίνηση του στο ελεύθερο χώρο, εμποδίζεται από τις δυνάμεις των ατόμων του κρύσταλλου. Επομένως, οι δυνάμεις που δρουν πάνω στο ηλεκτρόνιο δεν μπορούν να αναλυθούν με τον δεύτερο νόμο του Newton. Για το λόγο αυτό η μάζα αντικαταστατεί με μια μάζα με την οποία είναι δυνατόν να εφαρμοσθεί ο δεύτερος νόμος Newton.

$$F = m^* \frac{dv_g}{dt}, \text{ where } \alpha = \frac{dv_g}{dt} \quad (3.3.1)$$

που οδηγεί στην σχέση

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (3.3.2)$$

Η παραπάνω σχέση είναι η ενεργή μάζα και ορίζεται μέσω κβαντικής μηχανικής. Ο κυριότερος παράγοντας είναι η μορφή της διασποράς $\mathcal{E}(k)$. Για ένα ελεύθερο σωματίδιο, η σχέση διασποράς είναι τετραγωνικής μορφής και σε αυτήν την περίπτωση η μάζα του σωματιδίου θα ήταν σταθερή και ίση με την πραγματική μάζα. Σε ένα κρύσταλλο η κατάσταση είναι πιο περίπλοκη. Η σχέση διασποράς στο κρύσταλλο δεν προσεγγίζεται τετραγωνικά, παρά μόνο γύρω στις περιοχές όπου υπάρχουν ελάχιστα τιμές διασποράς. Ο υπολογισμός της πυκνότητας καταστάσεων της ενεργής μάζας στο 4H-SiC βασίζεται στην γεωμετρία της ζώνης Brillouin, από όπου φαίνεται ότι το ελάχιστο βρίσκεται στο σημείο συμμετρίας M. Το 4H-SiC, όπως και το πυρίτιο, έχει έξι σταθερές επιφάνειες ενέργειας από τις οποίες οι μισές βρίσκονται στη πρώτη ζώνη Brillouin. Η ενεργή μάζα στα ελάχιστα σημεία χαρακτηρίζεται από την διαμήκη ενεργή μάζα (m_{\perp}^*) κατά μήκος της $\langle 0001 \rangle$ διεύθυνσης, με σύμβολο m_{ML} , και δύο εγκάρσιες μάζες (m_{\parallel}^*) κάθετα στην $\langle 0001 \rangle$ και φέρνουν τα σύμβολα $m_{\Gamma M}$ και m_{MK} (βλέπε εικόνα 3.1-1). Από την άλλη η μέγιστη τιμή της ζώνης σθένους στους περισσότερους ημιαγωγούς SiC, βρίσκεται το σημείο συμμετρίας Γ και στην περίπτωση των SiC έχει τριπλό εκφυλισμό.



Εικόνα 3.3-1. Η πρώτη ζώνη Brillouin (αριστερά) και δομή των ζωνών [26] και [25] (δεξιά) για 4H-SiC. Η εξαγωνική διεύθυνση $[0001]$ συμπίπτει με το k_z άξονα

Η πυκνότητα καταστάσεων της ενεργής μάζας για το ελάχιστο σε μια κοιλάδα (ελάχιστο σε μια ζώνη) δίνεται με τη σχέση:

$$m_{n,DOS}^* = (m_{\Gamma M} \cdot m_{MK} \cdot m_{ML})^{1/3} \quad (3.3.3)$$

Για την ενεργή μάζα για το συνολικό ημιαγωγό, όλα τα ισοδύναμα ελάχιστα στην πρώτη ζώνη Brillouin πρέπει να συνυπολογιστούν. Για αυτό το λόγο πολλαπλασιάζεται ο αριθμός των ίσων ελαχίστων M_c , που είναι τρία για το 4H-SiC:

$$m_{n,DOS}^* = M_c^{2/3} (m_{M\Gamma} \cdot m_{MK} \cdot m_{ML})^{1/3} \quad (3.3.4)$$

Η πυκνότητα καταστάσεων της ενεργής μάζας για οπές είναι σύμφωνα το [25] η πυκνότητα της καταστάσεως της ενεργής μάζας στο σημείο Γ (βλέπε εικόνα 3.1-1). Για τις ζώνες η πυκνότητα καταστάσεων βρίσκονται με τις σχέσεις:

$$1^{st} \text{ band: } m_{v1,DOS} = (m_{M\Gamma1} \cdot m_{MK1} \cdot m_{ML1})^{1/3} \quad (3.3.5)$$

$$2^{nd} \text{ band: } m_{v2,DOS} = (m_{M\Gamma2} \cdot m_{MK2} \cdot m_{ML2})^{1/3} \quad (3.3.6)$$

$$3^{rd} \text{ band: } m_{v3,DOS} = (m_{M\Gamma3} \cdot m_{MK3} \cdot m_{ML3})^{1/3} \quad (3.3.7)$$

Στην περίπτωση υπό-ζωνών που έχουν ελάχιστα μικρότερα από το ελάχιστο της πρώτης ζώνης (ισχύει και στην περίπτωση της 4H-SiC), η συνολική πυκνότητα καταστάσεων της ενεργής μάζας των οπών δίνεται:

$$m_{v,DOS}(T) = \left[m_{v1,DOS}^{3/2} + m_{v2,DOS}^{3/2} \exp\left(-\frac{E_{v2}}{k_B T}\right) + m_{v3,DOS}^{3/2} \exp\left(-\frac{E_{v3}}{k_B T}\right) \right]^{2/3} \quad (3.3.8)$$

Θεωρητικά η ενεργή μάζα μπορεί να εξαχτεί από τους μεθόδους υπολογισμού δομής των ζωνών. Στο ακόλουθο πίνακα παρουσιάζονται τα θεωρητικά ευρήματα:

Αναφορά	Μέθοδος	$m_{M\Gamma}^* m_0$	$m_{MK}^* m_0$	$m_{ML}^* m_0$
"J.Dong"	LDA	0.53	0.27	0.3
"R.Watanabe"	Band calc.	0.58	0.29	0.34
"P. Käckell"	LDA	0.58	0.29	0.34

Πίνακας 3.3-1. Πυκνότητα καταστάσεων των ενεργών μαζών με θεωρητικούς μεθόδους. Βιβλιογραφία είναι "J.Dong" [30], "R.Watanabe" [31] και "P. Käckell" [32].

	Μάζα				DOS Μάζα
Valence Band	$m_{M\Gamma}^* m_0$	$m_{MK}^* m_0$	$m_{ML}^* m_0$	M_v	$m_{v1,dos}$
1fst band					
I "J.Dong"	1.58	1.32	0.21		0.76
2nd band				Δ_{so} (eV)	$m_{v2,dos}$
I "J.Dong"	0.86	0.55	1.13	0.0085	0.81
3rd band				Δ_{cf} (eV)	$m_{v3,dos}$
I "J.Dong"	0.95	0.52	1.3	0.0595	0.86
At 300 K					$m_{v,dos}(300)$
I "J.Dong"					1.17

Πίνακας 3.3-2. Θεωρητικός υπολογισμός πυκνότητα καταστάσεων ενεργής μάζας για οπές.

Ως παράδειγμα εφαρμογής χρησιμοποιούνται οι τιμές των J.Dong et al. [30], που βρέθηκαν μέσω της LDA μέθοδος.

Από (3.3.3) η ενεργή μάζα του ηλεκτρονίου είναι:

$$m_{n,DOS}^* = (m_{M\Gamma} \cdot m_{MK} \cdot m_{ML})^{1/3} \approx 0.39$$

Από (3.3.5), (3.3.6) και (3.3.7) η ενεργή μάζα για οπές είναι:

$$m_{v1,DOS} = (1.58 \cdot 1.32 \cdot 0.21)^{1/3} = 0.76, m_{v2,DOS} = 0.81, m_{v3,DOS} = 0.86$$

Η συνολική ενεργή μάζα για τις οπές θα είναι:

$$m_{v,DOS}(T) = \left[0.76^{3/2} + 0.81^{3/2} \exp\left(-\frac{0.0085}{k_B T}\right) + 0.86^{3/2} \exp\left(-\frac{0.0595}{k_B T}\right) \right]^{2/3}$$

Για 300 Kelvin $m_{dv}(300\text{ K})=1.17$.

Η ενεργή μάζα, ανάλογα με τη χρήση της, μπορεί να έχει δύο μορφές δράσης: Στην πυκνότητα καταστάσεως, οπότε εκεί ονομάζεται ενεργή μάζα πυκνότητα καταστάσεως και στην αγωγιμότητα, όπου ονομάζεται ενεργή μάζα αγωγιμότητας.

3.3.1 Ενεργή μάζα πυκνότητα καταστάσεων

Πειραματικά, η πυκνότητα των καταστάσεων της 4H-SiC καθορίζεται συνήθως μέσω οπτικής ανίχνευσης της απήχησης του κύκλωτρου (optically detected cyclotron resonance-ODCR), που είναι μια μέθοδος κατά την οποία η απορρόφηση μικροκυμάτων σε ένα ημιαγωγό μέσα σε ένα μαγνητικό πεδίο γίνεται μέγιστη όταν η συχνότητα του μικροκύματος $\omega_c = eB/m^*$ ισούται με την συχνότητα του κύκλωτρου. Η ενεργή μάζα εξάγεται και από την μέθοδο angle-resolved photo emission (ARPES) ή απευθείας από το φαινόμενο Haas-van Alphen. Οι αναφερόμενοι μέθοδοι ανήκουν σε μεθόδους υπολογισμούς της δομής των ζωνών.

Ο πίνακας 3.3-3 παρουσιάζει τις διαφορετικές μετρημένες ενεργές μάζες από διαφορετικές επιστημονικές ομάδες.

References	Method	$m_{MG}^*m_0$	$m_{MK}^*m_0$	$m_{ML}^*m_0$
"D. Volm"	ODCR	0.58	0.28	0.31
"W. M. Chen"	ODCR	0.58±0.01	0.31±0.01	0.33±0.01
"N. T. Son"	ODCR	0.42	0.29	0.29

Πίνακας 3.3-3. Ενεργή μάζα ηλεκτρονίων από διαφορετικούς επιστημονικούς ομάδες. m_t και m_l αντιστοιχούν σε m_{MG} και m_{MK} και m_{ML} αντίστοιχα. Η βιβλιογραφία είναι "D. Volm" [33], "W.M.Chen" [34] και "N.T.Son" [34].

Τιμές πειραματικών ενεργών μαζών οι οποίες είναι δύσκολα να βρεθούν στην βιβλιογραφία και για αυτό το λόγο παρουσιάζεται μόνο αυτή της [35]:

	Μάζες				DOS μάζας
Ζώνη σθένος	$m_{MG}^*m_0$	$m_{MK}^*m_0$	$m_{ML}^*m_0$	M_V	$m_{v1,dos}$
1st band					
	0.61	0.61	1.6	1	0.84
2nd band				Δ_{so} (eV)	$m_{v2,dos}$
	NA	NA	NA	0.009	0.79
3rd band				Δ_{cf} (eV)	$m_{v3,dos}$
	NA	NA	NA	0.073	0.78
At 300 K					$m_{v,dos}(300)$
					1.20

Πίνακας 3.3-4. Τιμές ενεργής μάζας των οπών για 4H-SiC [35].

Η πυκνότητα καταστάσεων της ενεργής μάζας των ηλεκτρονίων είναι καλύτερη μελετημένη από την ενεργή μάζα οπών. Έτσι αποτελέσματα για την ενεργή μάζα των οπών δεν είναι δυνατόν να ληφθούν. Λαμβάνοντας τα αποτελέσματα από τους C.Persson et al. [35] και J.Dong et al. [36] προτείνονται οι τιμές:

$$m_{n,DOS}^* = 0.39 \quad m_{v,DOS}^* = 1.20 \quad (3.3.9)$$

Η πυκνότητα της ενεργής μάζας χρησιμοποιείται για τον ορισμό της ενεργής πυκνότητας καταστάσεων.

3.3.1.1 Ενεργή πυκνότητα καταστάσεων

Η ανισοτροπία της ενεργής πυκνότητα καταστάσεων δημιουργεί ανισοτροπία στις διαθέσιμες ενεργειακές καταστάσεις, οδηγώντας έτσι στην ενεργή πυκνότητα καταστάσεων που ορίζονται ως:

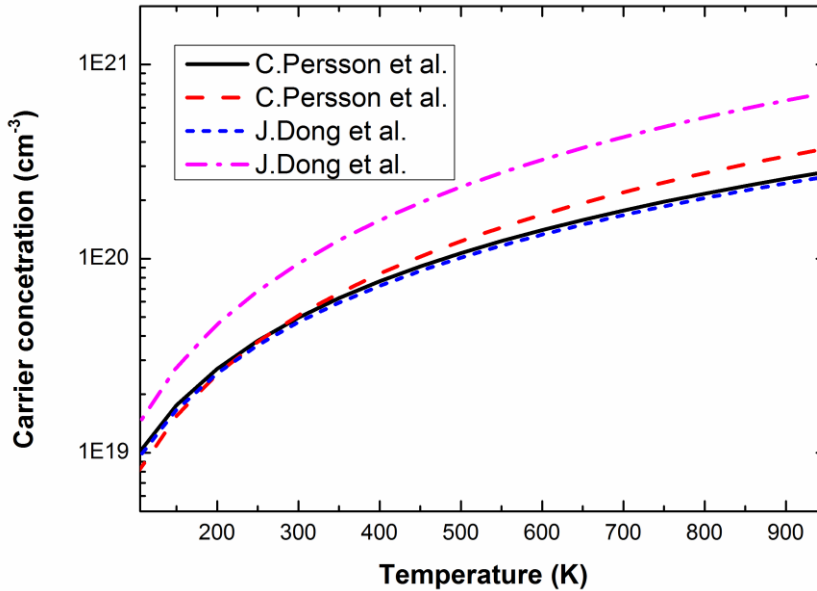
$$N_c = 2M_c \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \approx 2M_c 7.5 \times 10^{15} (m_{n,DOS}^*)^{3/2} (T_L)^{3/2} \quad (3.3.10),$$

$$N_v = M_v \left(\frac{2\pi m_h^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \approx 7.5 \times 10^{15} (m_{p,DOS}^*)^{3/2} (T_L)^{3/2} \quad (3.3.11)$$

όπου M_c και M_v είναι οι εκφυλισμοί της ζώνης αγωγιμότητας και της ζώνης σθένος αντίστοιχα.

Στο ATLAS δεν υπάρχει δυνατότητα να τεθεί απευθείας τις ενεργές μάζες πυκνότητας, εκτός από τον έμμεσο τρόπο που είναι να ανατεθούν νέες τιμές στη πυκνότητα καταστάσεων.

Στο ATLAS οι προκαθορισμένες τιμές για τις πυκνότητες καταστάσεων στα 300 K, αναλογούν στις τιμές $m_{n,DOS}=0.36$ και $m_{p,DOS}=1.20$. Ο πίνακας 3.3-3 και ο πίνακας 3.3-4 αποδεικνύει ότι οι τιμές αυτές συμφωνούν με τις τιμές του



Εικόνα 3.3-2. Ενεργή πυκνότητα καταστάσεων στο 4H-SiC που υπολογίστηκε από τις ενεργές πυκνότητας μαζών από [37] και [30] αντίστοιχα.

Στο ATLAS οι εξισώσεις (3.3.10) και (3.3.11) γράφονται στη μορφή:

$$N_c = 2M_c \left(\frac{2\pi m_n^* kT_L}{h^2} \right)^{3/2} = \left(\frac{T_L}{300} \right)^{NC.F} NC300 \quad (3.3.12)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* kT_L}{h^2} \right)^{3/2} = \left(\frac{T_L}{300} \right)^{NV.F} NV300 \quad (3.3.13)$$

όπου οι εκθέτες NC.F και NV.F είναι συντελεστές θερμοκρασίας. Το αποτέλεσμα του πολλαπλασιασμού του θερμοκρασιακό συντελεστή με την πυκνότητα καταστάσεων στους 300 K, που συμβολίζεται με NV300 ή με NC300, εκτιμάει την τιμή της πυκνότητας καταστάσεων σε οποιαδήποτε θερμοκρασία. Οι προκαθορισμένες τιμές των NC.F, NV.F, NC300 και NV300, που έχουν τιμές πυριτίου, μπορούν να αλλαχθούν από τον χρήστη στη δήλωση MATERIAL.

Parameter	Si	4H-SiC
NC300	2.80E19 cm ⁻³	1.66E19 cm ⁻³
NV300	1.04E19 cm ⁻³	3.30E19 cm ⁻³
NC.F	1.5	1.5
NV.F	1.5	1.5

Πίνακας 3.3-5. Προκαθορισμένες τιμές Si και 4H-SiC για την ενεργή πυκνότητα καταστάσεων στους 300 K.

3.3.2 Ενεργής μάζας αγωγιμότητα

Για τον υπολογισμό της ευκινησίας, της σταθεράς διάχυσης και των ρηχών επιπέδων των προσμίξεων χρησιμοποιείται η ενεργή μάζα της αγωγιμότητας. Η αγωγιμότητα ενός υλικού είναι αντίστροφα ανάλογα της ενεργής μάζας. Λόγο πολλαπλών μεγίστων και ελάχιστων η αγωγιμότητα είναι ανάλογη της άθροισης των αντιστρόφων λόγων κάθε μάζας, και αυτό πολλαπλασιάζεται επί την πυκνότητα της κάθε ζώνης, μια που κάθε μέγιστο και ελάχιστο μιας ζώνης συμβάλλει στη συνολική αγωγιμότητα. Η ενεργή μάζα για ζώνες που έχουν σταθερές επιφανειακές ενέργειες ελλειπτικής μορφής ισχύει:

$$m_{e,cond}^* = \frac{3}{\frac{1}{m_l} + \frac{1}{m_l} + \frac{1}{m_l}} \quad (3.3.14)$$

και η παράσταση της $m_{v,cond}^*$ μπορεί να βρεθεί στην [37].

Οι αναφερόμενες τιμές των $m_{v,cond}^*$ και $m_{e,cond}^*$ στις δημοσιεύσεις των C.Persson et al. [35] είναι: $m_{e,cond}^* = 0.77$ και $m_{v,cond}^* = 1.2$. Η αγωγιμότητα της ενεργής μάζας επηρεάζει την ευκινησία μέσω της σχέσης που έχει η ευκινησία με τη θερμική ταχύτητα:

$$\mu = (q/kT)D, \quad D = (\pi/8)\lambda^2 u_m = (1/2)\lambda u_{th} \quad D = (\pi/8)\lambda^2 u_m = (1/2)\lambda u_{th}$$

$$D = (\pi/8)\lambda^2 u_m = (1/2)\lambda u_{th} \quad D = (\pi/8)\lambda^2 u_m = (1/2)\lambda u_{th} \quad \text{όπου } u_{th} \text{ είναι η θερμική ταχύτητα που ορίζεται στην μεθεπόμενη παράγραφο. Όπως φαίνεται από τις σχέσεις, η θερμική ταχύτητα εξαρτάται από την ενεργή μάζα αγωγιμότητας.}$$

Όλες οι δημοσιεύσεις TCAD για προσομοιώσεις 4H-SiC δεν αναφέρονται σε ενεργές μάζες, μια που το ATLAS ορίζει σωστά τις τιμές της θερμικής ταχύτητας και της ενεργής πυκνότητας.

3.3.2.1 Θερμική ταχύτητα

Η θερμική ταχύτητα είναι η τυπική ταχύτητα της θερμικής κίνησης σωματιδίων του αέριου, του ρευστού κτλ. Έτσι, η θερμική κίνηση είναι έμμεση μέτρηση της θερμοκρασίας. Τεχνικά είναι η μέτρηση του μήκους του μέγιστου σημείου της κατανομής Maxwell-Boltzmann. Για τρισδιάστατο χώρο ισχύει:

$$v_{th(n,p)} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_{n,p}^*}} \quad (3.3.15)$$

Μέχρι στιγμής δεν υπάρχουν πειραματικές μετρήσεις για την θερμική ταχύτητα στο 4H-SiC.

3.3.2.1.1 Αγωγιμότητα της ενεργής μάζας στο ATLAS

Στο ATLAS η τιμή αγωγιμότητας της ενεργής μάζας ανατίθεται μέσω μιας συγκεκριμένης παράμετρος: M.VTHN (M.VTHP). Η ανάθεση τιμών στους παραμέτρους M.VTHN and M.VTHP γίνεται στη δήλωση MATERIAL. Από τις τιμές αυτές εξάγεται η θερμική ταχύτητα και η σταθερά Richardson. Προφανώς αυτές οι τιμές δεν επηρεάζουν τις τιμές των ενεργών πυκνοτήτων (N_C or N_V).

Στο ATLAS για το 4H-SiC η αγωγιμότητα της ενεργής πυκνότητας μάζας ορίζεται σαν $m_{n,Cond}=0.76$ και $m_{v,Cond}=1.20$.

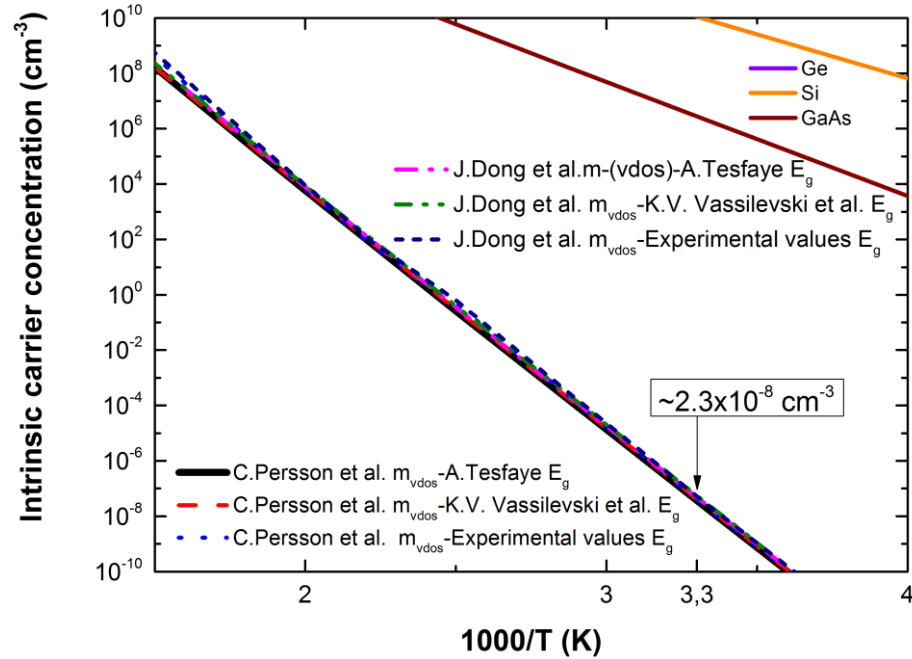
3.4 ΕΝΔΟΓΕΝΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗ ΦΟΡΕΩΝ

Για ένα ενδογενή ημιαγωγό η συγκέντρωση φορέων ορίζεται από το γινόμενο της πυκνότητας των επιτρεπτών ενεργειών ανά μοναδιαίο όγκο $N(E)$ και της πιθανότητας το ηλεκτρόνιο να έχει καλύψει την ενέργεια στον όγκο αυτόν $F(E)$ (Fermi-Dirac distribution). Η ηλεκτρονική πυκνότητα n βρίσκεται με ολοκλήρωση όλων των πιθανών καταστάσεων στην ζώνη αγωγιμότητας. Η πυκνότητα οπής p βρίσκεται με παρόμοιο τρόπο. Στη θερμοκή ισορροπία η στάθμη Fermi E_f βρίσκεται στο ενδιάμεσο του ενεργειακού χάσματος η εξαρτημένη από θερμοκρασία ενδογενής πυκνότητα φορέων n_i καθορίζεται από το θεμελιώδη ενεργειακό χάσμα E_g και από την ενεργή πυκνότητα καταστάσεων. Από το νόμο δράσης των μαζών είναι γνωστό ότι $np=n_i^2$ και τότε, βάση [1], η ενδογενής πυκνότητα συγκέντρωση μπορεί να εξαχθεί από τη σχέση:

$$n_{ie} = n_i^2 \exp\left(\frac{\Delta E_g}{kT}\right)$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (3.4.1)$$

όπου n_{ie} η ενεργή πυκνότητα καταστάσεων για ηλεκτρόνια και οπές



Εικόνα 3.4-1. Σύγκριση της ενδογενούς πυκνότητας συγκεντρώσεως. Σημειώστε ότι για 4H-SiC παρουσιάζονται διαφορετικοί n_i . Οι πολλαπλοί 4H-SiC ενδογενής πυκνότητες συγκεντρώσεις προέρχονται από το γεγονός ότι η ενδογενής πυκνότητας συγκεντρώσεως παραμετροποιήθηκε με διαφορετικές θερμοκρασίες του ενεργειακού χάσματος. Βλέπε λεζάντα της Εικόνα 3.4-1.

Στο ATLAS ο ορισμός της ενδογενής πυκνότητας συγκεντρώσεως εξαρτάται από την ενεργή πυκνότητα καταστάσεων και από το τύπο της στατιστικής των φορέων (Fermi or Boltzmann). Δίνεται η δυνατότητα να ορισθεί η ενδογενή πυκνότητα συγκέντρωση από τη στατιστική Boltzmann χρησιμοποιώντας την σχέση (3.4.1) ή χρησιμοποιώντας την συγκέντρωση ηλεκτρονίων ή οπών που μπορούν να εκφραστούν σε στατιστική Fermi-Dirac:

$$n = N_C F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_C}{kT_L}\right) \quad (3.4.2)$$

$$p = N_v F_{1/2} \left(\frac{E_v - E_F}{kT_L} \right) \quad (3.4.3)$$

Για να χρησιμοποιηθεί η στατιστική Fermi-Dirac καθορίζεται η παράμετρο NI.FERMI στη δήλωση MODELS.

Οι περισσότερες επιστημονικές ομάδες δεν μεταβάλουν την ενδογενή πυκνότητα συγκέντρωσης για την περίπτωση του 4H-SiC. Αυτό συμβαίνει διότι η τιμή της ενδογενούς πυκνότητας συγκέντρωσης βρίσκεται να είναι $1.73 \times 10^{-8} \text{ cm}^{-3}$ στα 300 K στο παράθυρο εκτέλεσης του προσομοιωτή ATLAS.

3.5 ΕΞΩΓΕΝΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗ ΦΟΡΕΩΝ – ΙΟΝΙΣΜΟΣ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ

Ιονισμός προσμίξεων σημαίνει ότι τα άτομα των προσμίξεων έχουν δωρίσει ή έχουν αποδεχτεί ένα ηλεκτρόνιο, και αυτό είναι ο λόγος για την αύξηση φορέων σε ένα ημιαγωγό. Γενικά η ενέργεια ιονισμού βρίσκεται μέσω της τροποποίησης της σχέσης που περιγράφει την ενέργεια ηλεκτρονίου σε ένα άτομο υδρογόνου. Για παράδειγμα η απομάκρυνση ενός ηλεκτρονίου από ένα δότη μπορεί να προσεγγιστεί με ένα μοντέλο παρόμοιο με αυτό του μοντέλου του υδρογόνου. Η διαφορά με το μοντέλο υδρογόνου είναι ότι η μέση απόσταση, r , μεταξύ του ηλεκτρονίου και του ιονισμένου δότη, είναι πολύ μεγαλύτερη μια που το ηλεκτρόνιο εντοπίζεται στην εξωτερική στοιβάδα.

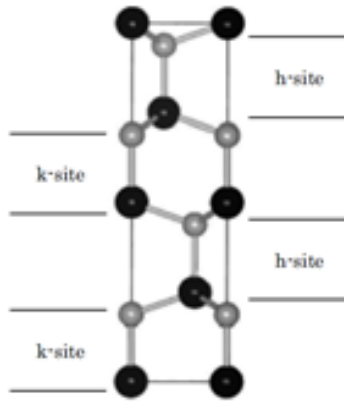
$$E_c - E_d = 13.6 \frac{m_{cond}^*}{m_0 \epsilon_r^2} \text{ eV} \quad (3.5.1)$$

όπου m_{cond}^* είναι η ενεργή μάζα για υπολογισμούς αγωγιμότητας. Η ενέργεια ιονισμού υπολογίζεται σαν την διαφορά μεταξύ της ενέργειας του ελεύθερου ηλεκτρονίου και της πιθανής ελάχιστης ενέργειας ηλεκτρονίου.

Τύπου n στο 4H-SiC δημιουργούνται με προσμίξεις που εμφυτεύονται μέσω ατόμων αζώτου (N) ή φωσφόρου (P). Για την δημιουργία τύπου p ημιαγωγού χρησιμοποιούνται άτομα αλουμινίου (Al) και βόριο (B). Αυτές οι προσμίξεις εντοπίζονται βαθιά στον ημιαγωγό.

Οι προσμίξεις κατατάσσονται σε ρηχές και σε βαθιές. Οι ρηχές απαιτούν λίγη ενέργεια, τυπικά η θερμική ενέργεια kT ή και λιγότερη από αυτήν αρκεί για ιονισμό της πρόσμιξης. Οι βαθιές προσμίξεις απαιτούν ενέργειες πολύ περισσότερες από τη θερμική ενέργεια που θα ιόνισε μόνο ένα μέρος των προσμίξεων του ημιαγωγού. Η κατάταξη σε ρηχές και βαθιές είναι μια αυθαίρετη έννοια και οι ρηχές προσμίξεις θεωρούνται αυτές που χρειάζονται ενέργεια ιονισμού $E_i < 0.1 \text{ eV}$ και βαθιές προσμίξεις αυτές που χρειάζονται ενέργειες ιονισμού $E_i > 0.1 \text{ eV}$. Για πυρίτιο αυτή η διαχώριση σε ρηχές και βαθιές είναι πιο αυθαίρετη, μια που η θεμελιώδες καταστάσεις του δότη και του αποδέκτη έχουν ενέργειες μικρότερες από $E_i \geq 0.1 \text{ eV}$ (βλέπε [38] και πίνακας 3.5-1). Οι βαθιές προσμίξεις λόγω ότι απέχουν από τις ζώνες ενεργειακά τουλάχιστον $5kT$, δεν ιονίζονται εύκολα.

Το SiC είναι ένα δυαδικό σύνθετο στοιχείο, όπου τα στοιχεία προέρχονται από την IV στήλη του περιοδικού πίνακα. Έτσι μπορεί να νοθευτεί με στοιχεία από τη στήλη III και V. Το συνηθισμένο είδος πρόσμιξης για την δημιουργία τύπου n είναι άτομα N και P, ενώ για τύπου p είναι Al και B.



Εικόνα 3.5-1 από [39]. Εξαγωνικοί και κυβικοί πλευρές του 4H-SiC.

Οι προσμίξεις των 4H-SiC εντοπίζονται είτε στη πλευρά του πυριτίου Si είτε στη πλευρά του άνθρακα C. Το στοιχείο της πρόσμιξης έχει την τάση να αντικαταστατά άτομα του πλέγματος που έχουν παρόμοια ακτίνα ώστε να μειωθεί η παραμόρφωση του κρύσταλλου, βλέπε πίνακας 3.5-1

	πλευρά Si			πλευρά C		
	αρχικό	πρόσμιξη-p	dopant-n	αρχικό	πρόσμιξη-n	πρόσμιξη-p
Στοιχείο	Si	Al	P	C	N	B
Ατομική ακτίνα	1.17	1.26	1.1	0.77	0.74	0.82

Πίνακας 3.5-1. Ατομική ακτίνα θεμελιωδών προσμίξεων.

Οι N και P εισάγονται στις πλευρές όπου υπάρχουν άνθρακες ενώ Al προτιμάει τη πλευρά πυριτίου στο SiC. Ωστόσο το στοιχείο B ενδέχεται να αντικαταστατά στοιχεία των δυο πλευρών και δημιουργεί μια ρηχή ενέργεια που συνδέεται με τη πλευρά πυριτίου. Μια κενή θέση που δημιουργείται από το υποκατάστατο B άτομο που καταλαμβάνει τη πλευρά του πυριτίου C είναι υπεύθυνο για την προέλευση του ενεργειακού κέντρου D [40]. Μη ισότιμες πλευρές του 4H-SiC, C (ή Si) πλευρών με κυβικό (k) περιβάλλον ή με εξαγωνικό περιβάλλον (h) προκαλούν πλευρικές εξαρτήσεις των ενεργειακών επιπέδων των προσμίξεων. Οι προσμίξεις που αντικαταστούν τέτοιες πλευρές «αισθάνονται» διαφορετικό περιβάλλον και αποδίνουν έτσι διαφορετική ενέργεια ιονισμού.

Επομένως υπάρχουν δυο επίπεδα ιονισμού για το κυβική πλευρά και μια για την εξαγωνική πλευρά και η (3.5.1) γίνεται:

$$\Delta E_{dh} = E_c - E_{dh} \quad \text{και} \quad \Delta E_{dk} = E_c - E_{dk} \quad (3.5.2)$$

όπου E_c συμβολίζει την ελάχιστη ενέργεια στη ζώνης αγωγιμότητας, $E_{dk, dh}$ συμβολίζει το θεμελιώδες ενεργειακό επίπεδο του εξαγωνικό ή κυβικού δότη.

Στο δημοσίευμα των Ikeda et al.[41] η ενέργεια ιονισμού της κυβικής πλευράς (k-type) είναι μεγαλύτερη από αυτήν στις εξαγωγικής πλευράς (h-type). Αυτό το φαινόμενο ισχύει ιδιαίτερα για δότες όπως N και P.

Εάν θεωρηθεί ότι μπορεί να αγνοηθεί η δυναμική συμπεριφορά του μη πλήρες ιονισμού, τότε μπορούν τα διαφορετικά επίπεδα ενέργειας των δοτών να συγχωνευτούν σε ένα ενεργό επίπεδο:

$$\Delta E_d = E_c - E_d \quad (3.5.3)$$

Αποδέκτες όπως και δότες πρέπει στη θεωρία λόγω του μη ισότοπων πλευρών να παρουσιάζουν δυο διαφορετικά επίπεδα ενέργειας. Στη πράξη όμως η διαφορά ενέργειας σε νοθευμένο SiC με Al είναι τόσο μικρή που δεν είναι δυνατόν να μετρηθεί [40] και για αυτό τον λόγο υπάρχει κοινή συναίνεση στο να χρησιμοποιηθεί ένα επίπεδο ενέργειας. Έτσι η ενέργεια ιονισμού δίνεται σαν:

$$\Delta E_\alpha = E_\alpha - E_v \quad (3.5.4)$$

όπου E_α συμβολίζει την ελάχιστη ενέργεια στη αγωγιμότητα σθένους και E_α είναι η θεμελιώδες επίπεδο ενέργειας του αποδέκτη.

Παρόμοια με τη περίπτωση του πυριτίου η γενική ανάλυση είναι ότι υπάρχει μηδενικό συνολικό φορτίο στον ημιαγωγό (ουδετερότητα φορτίων). Αυτό επίσης σημαίνει ότι η συνολική πυκνότητα των θετικών φορτισμένων σωματιδίων (οπές και ιονισμένες δότες) πρέπει να ισούται με την συνολική πυκνότητα των αρνητικών φορτισμένων σωματιδίων (ηλεκτρόνια και ιονισμένες αποδέκτες). Με αυτή την διαδικασία αποκτιούνται οι πυκνότητες των ηλεκτρονίων και των οπών.

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad (3.5.5)$$

όπου n και p είναι ηλεκτρόνια και οπές στην συνθήκη ουδετερότητας σε τύπου n και σε τύπου p ημιαγωγού [1] αντίστοιχα:

$$n = \frac{1}{2} \left[N_D^+ - N_A^- + \sqrt{(N_D^+ + N_A^-)^2 - 4n_i^2} \right] \quad (3.5.6)$$

$$p = \frac{1}{2} \left[N_A^- - N_D^+ + \sqrt{(N_D^+ + N_A^-)^2 - 4n_i^2} \right] \quad (3.5.7)$$

Χρησιμοποιώντας την κατανομή Gibbs υπολογίζονται οι συγκεντρώσεις των εμφυτευμένων προσμίξεων, δηλαδή τις συγκεντρώσεις των ιονισμένων [42]:

$$N_D^+ = N_D \left[1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp\left(\frac{E_d - E_f}{kT}\right)} \right] \quad (3.5.8)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g_A \exp\left(\frac{E_a - E_f}{kT}\right)} \quad (3.5.9)$$

όπου g_D και g_A είναι ο αριθμός εκφυλισμού. Στην περίπτωση του 4H-SiC $g_D=2$ και $g_A=4$. Για τις τιμές εκφυλισμού βλέπε [18].

Ο βαθμός ιονισμού χρησιμοποιείται συχνά στην περίπτωση των μερικώς ιονισμένων προσμίξεων (υψηλή ενέργεια ιονισμού). Για την περίπτωση των δοτών, ο βαθμός ιονισμού εξάγεται χρησιμοποιώντας τις (3.5.3), (3.5.5) και (3.5.6):

$$\xi_D = \frac{N_D^+}{N_D} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp\left(\frac{\Delta E_d}{kT_L}\right)} \quad (3.5.10)$$

Similarly for p-type:

$$\xi_A = \frac{N_A^-}{N_A} = \frac{1}{1 + g_A \exp\left(\frac{\Delta E_\alpha}{kT_L}\right)} \quad (3.5.11)$$

Είναι χρήσιμο να επισημάνετε τι επιπτώσεις η συγκέντρωση ιονισμένων ατόμων έχει στην αντίσταση. Από τον ορισμό

$$\rho_{n(p)} = \frac{1}{q\mu_n N_D^+ (N_A^-)} \quad (3.5.12)$$

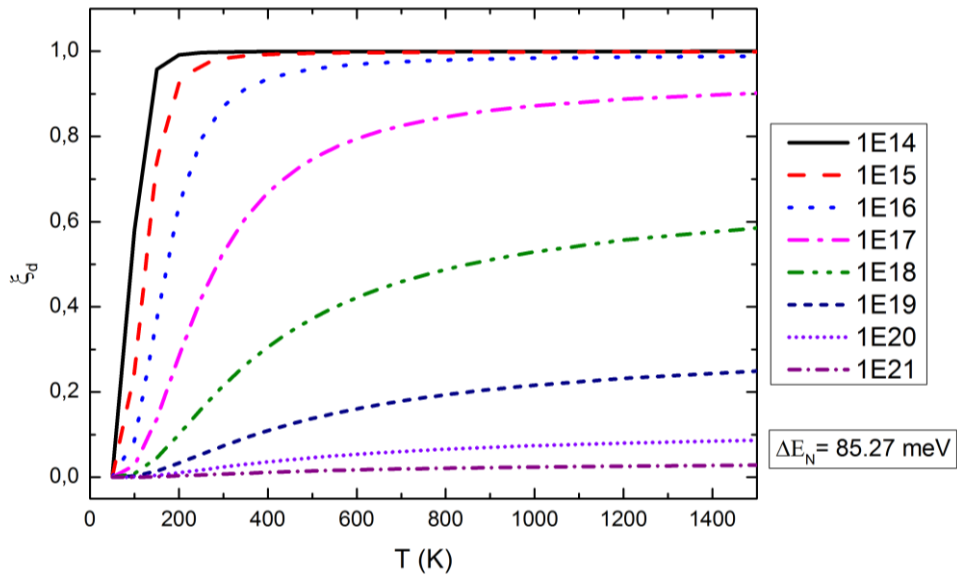
Φαίνεται ότι με σταθερή θερμοκρασία, η αντίσταση στο 4H-SiC p ημιαγωγό είναι υψηλότερη από στο 4H-SiC n ημιαγωγό λόγω των πιο βαθιών καταστάσεων ενεργειών των προσμίξεων τύπου p.

Λόγο της μεγάλης απόκλισης των πειραματικών μετρήσεων μεταξύ επιστημονικών ομάδων ο μέσος όρος της ενέργειας ιονισμού για κάθε είδος πρόσμιξης λαμβάνεται υπόψη, βλέπε πίνακας 3.5-2. Για την περίπτωση των δοτών N γίνεται χρήση του μέσου όρου για την κυβική και για την εξαγωνική πλευρά, που είναι 85.27 meV. Παρόμοια για τους δότες P η μέση ενέργεια ιονισμού είναι 74.66 meV. Ο μέσος όρος για την κυβική και εξαγωνική πλευρά είναι δικαιολογημένος διότι στο 4H-SiC ο αριθμός των κυβικών πλευρών ισούται με τον αριθμό των εξαγωνικών πλευρών.

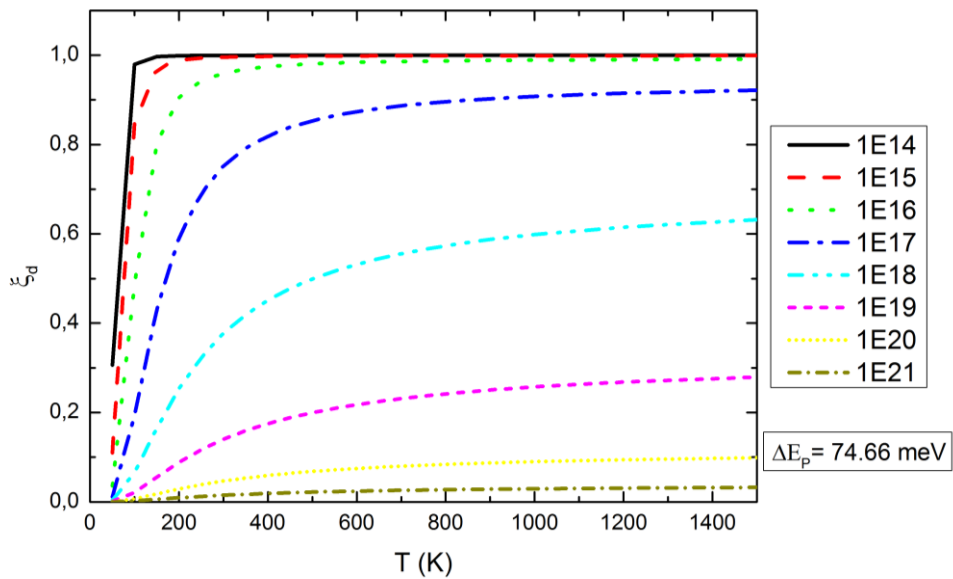
Βιβλιογραφία	Μέθοδος	Al *	B *	N _h *		N _k *		P _h *		P _k *	
"Suzuki"	PL			80							
"Ikeda"	PL	191	647	66							
"Gotz"	IR			52.1							
"Kuznetsov"	DTLS	229	300			126.5					
"Kimoto"	PL			55	+/-10	91.8					
"Evwaraye"	TAS			53		100					
"Troffer"	Hall	183	285			115	+/-10				
"Chen"	IR/PTI			60.2		130					
"Capano"	Hall							53		93	
"Laube"	Hall							45	+/-5	95	+/-5
"Ivanov1"	IR/PTI			61.4	+/-0.6	77					
"Ivanov2"	PL	201.3		61.4		125.5					
"Rao"	Hall							53		109	
"Average"		201.08	308	61.14		109.40		50.33		99.00	

Πίνακας 3.5-2. Πειραματικές τιμές ενεργειών ιονισμού για συγκεντρώσεις δοτών (N και P) και αποδεκτών (Al και B) από διαφορετικούς επιστημονικούς ομάδες. Οι πλευρικές εξαρτήσεις των N και P συμπεριλαμβάνονται. Οι μέθοδοι μέτρησης των ενεργειών ιονισμού είναι photothermal ionization (PTI), infrared absorption (IR), Hall-effect, photoluminescence (PL), thermal/optical admittance spectroscopy (TAS) και deep-level transient spectroscopy (DTLS). *Όλες οι τιμές δίνονται σε meV. Η βιβλιογραφία είναι "Suzuki"[43], "Ikeda [44]", "Gotz" [45], "Kuznetsov" [46], "Kimoto" [47], "Evwaraye" [48], "Troffer" [49], "Chen" [50], "Capano" [51], "Laube" [52], "Ivanov1" [53], "Ivanov2" [54] και "Rao" [55].

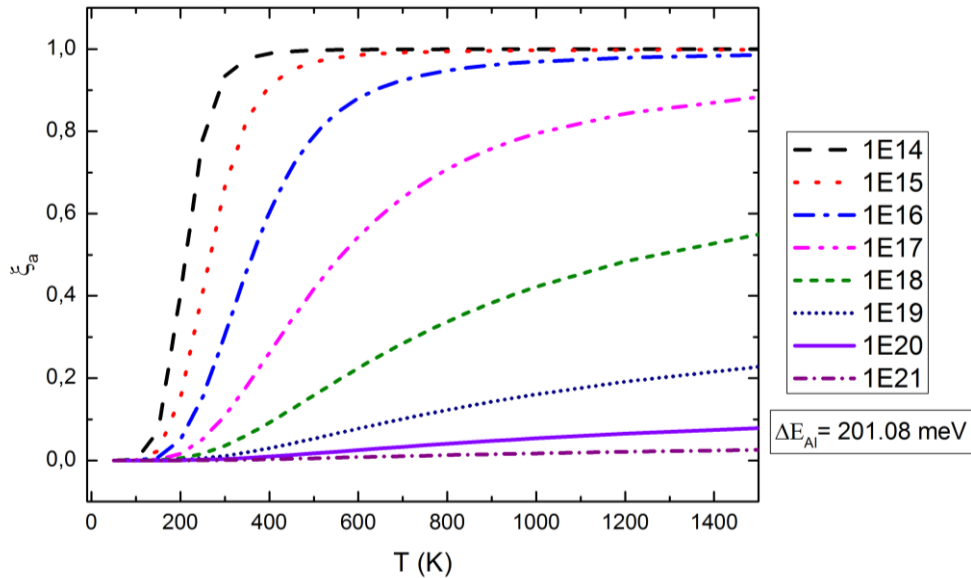
Οι ακόλουθη γραφικές παραστάσεις παρουσιάζουν διαφορετικούς βαθμούς ιονισμού του 4H-SiC, όπου χρησιμοποιήθηκαν οι θεωρητικές εξισώσεις (3.5.10) και (3.5.11) με τις πειραματικές τιμές του πίνακα 3.5-2.



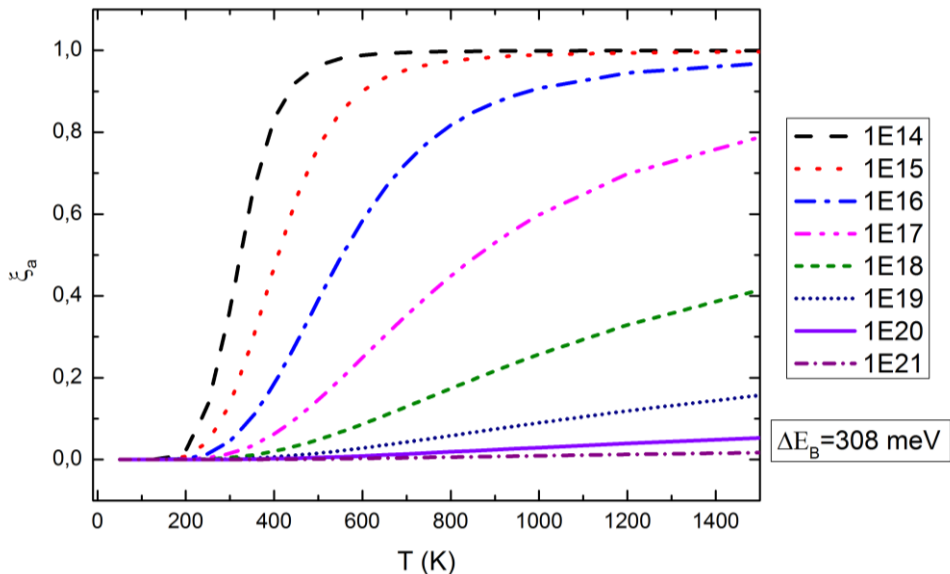
Εικόνα 3.5-2. Βαθμός ιονισμού του N στο 4H-SiC σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία.



Εικόνα 3.5-3. Βαθμός ιονισμού του P στο 4H-SiC σε συνάρτηση με συγκεντρώσεις προσμίξεων για διαφορετικές θερμοκρασίες.



Εικόνα 3.5-4. Βαθμός ιονισμού του Al στο 4H-SiC σε συνάρτηση με την θερμοκρασία και για διαφορετικές συγκεντρώσεις νόθευσης.



Εικόνα 3.5-5. Βαθμός ιονισμού του B στο 4H-SiC σε συνάρτηση με την θερμοκρασία και για διαφορετικές συγκεντρώσεις νόθευσης.

Από τις παραπάνω γραφικές παραστάσεις είναι φανερό ότι ο μη πλήρης ιονισμός του N γίνεται μόνο σημαντικός σε χαμηλές θερμοκρασίες και σε υψηλά επίπεδα συγκέντρωσης. Γενικός για θερμοκρασίες πάνω των 250 K και για $N_D < 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ παραπάνω από 90% των N είναι ιονισμένες. Στην περίπτωση υψηλότερη συγκέντρωσης $N_D > 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ πρέπει να συμπεριληφθεί και ο μη πλήρης ιονισμός των προσμίξεων N στους υπολογισμούς για συγκεντρώσεις των ηλεκτρονίων (ελεύθερα ηλεκτρόνια).

3.5.1 Πλευρικός εξαρτημένος ιονισμός

Λαμβάνοντας υπόψη τη πλευρική εξάρτηση για τις προσμίξεις η θεώρηση του μονού επίπεδο ενέργειας ΔE_d δεν μπορεί να ισχύει πλέον. Έτσι υπολογίζεται η συγκέντρωση ηλεκτρονίων από την συνθήκη ουδετερότητας:

$$n = \sum_{i=1}^x N_{Dh_i}^+ + \sum_{j=1}^y N_{Dk_j}^+, \quad (3.5.13)$$

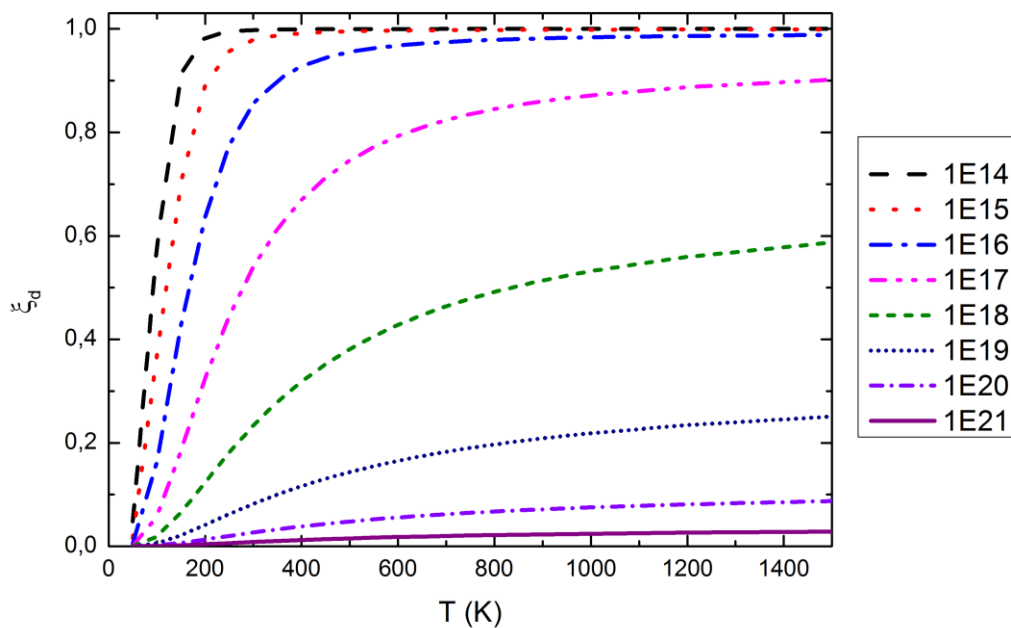
όπου x και y είναι ο αριθμός των ισότιμων εξαγωνικών και κυβικών πλευρών στο 4H-SiC αντίστοιχα. Στο 4H-SiC οι εξαγωνικές και οι κυβικές πλευρές είναι ίσες, δηλαδή $x=y=1$. Συμπεριλαμβάνοντας στην εξίσωση (3.5.8) τα επίπεδα ενέργειας από εξαγωνικές και οι κυβικές πλευρές:

$$N_D^+ = \frac{1}{2} N_D \left[\left(1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp\left(\frac{\Delta E_{dh}}{kT}\right)} \right) + \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp\left(\frac{\Delta E_{dk}}{kT}\right)} \right) \right] \quad (3.5.14)$$

Χρησιμοποιώντας (3.5.14) και (3.5.13) εξάγεται ο βαθμός ιονισμού ενός μονωμένου δότη:

$$\xi_D = \frac{N_D^+}{N_D} = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp\left(\frac{\Delta E_{dh}}{kT}\right)} \right) + \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp\left(\frac{\Delta E_{dk}}{kT}\right)} \right) \right] \quad (3.5.15)$$

Μετά την ανάλυση του βαθμού ιονισμού της κυβικού μορφής πρόσμιξης N, παρουσιάζονται οι βαθμοί ιονισμού των πλευρικών εξαρτημένων προσμίξεων N και P σε συνάρτηση με συγκέντρωση και θερμοκρασία.:



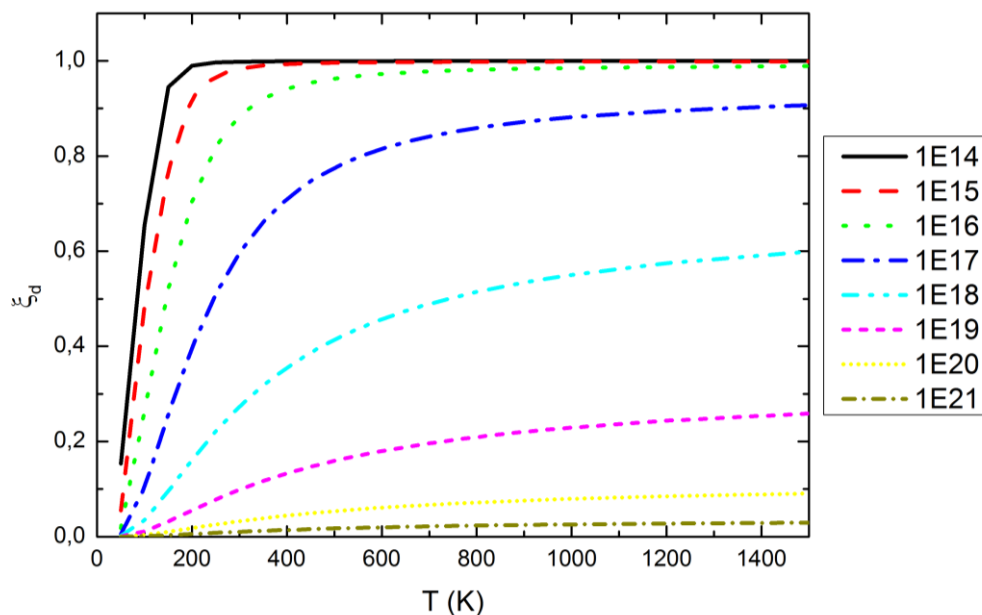
Εικόνα 3.5-6. Βαθμός ιονισμού της πλευρικής εξαρτημένης πρόσμιξης N στο 4H-SiC σε συνάρτηση με την θερμοκρασία και για διαφορετικές συγκεντρώσεις νόθευσης.

Μια σύγκριση μεταξύ των εικόνων (εικόνα 3.5-2 και εικόνα 3.5-3) αποκαλύπτει ότι η διαφορά στον βαθμό ιονισμού είναι μικρή στη περιοχή όπου ο ημιαγωγός είναι στη θερμοκρασία μεταξύ 300 K με 400 K και έχει βαθμό νόθευσης $N_D < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Για ίδιες θερμοκρασίας αλλά με βαθμό νόθευσης $N_D > 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ η διαφορά βαθμών ιονισμού είναι μεγάλη. Πιο αναλυτικούς υπολογισμούς για τις διαφορές στον βαθμό ιονισμού με διάφορες συγκεντρώσεις (10^{14} , 10^{15} , 10^{16} , 10^{19} και 10^{21} cm^{-3}) της πλευρικής εξαρτημένης και της μη πλευρικής εξαρτημένης πρόσμιξης δίνεται στο παρακάτω πίνακα.

N_{Site-dependent}	1.00E+14	1.00E+15	1.00E+16	1.00E+19	1.00E+21
ξ_d	0.997	0.978	0.855	0.008	0.009
N_{Non-Site-dependent}					
ξ_d	0.871	0.983	0.998	0.008	0.015
Απόλυτη διαφορά σε %	12.6	0.5	14.3	6.7	42.3

Πίνακας 3.5-3. Παράδειγμα διαφορών στους βαθμούς ιονισμών που έχουν η πλευρική εξαρτημένη και η μη πλευρική εξαρτημένη πρόσμιξη N. Η θερμοκρασία για όλες τις τιμές είναι 300 K.

Ο πίνακας 3.5-3 αναδεικνύει ότι για μεγάλες τιμές συγκεντρώσεων προσμίξεων οι διαφορές στον βαθμό ιονισμού μεταξύ της πλευρικής εξαρτημένης και της μη πλευρικής εξαρτημένης πρόσμιξης μεγαλώνουν. Μια διακύμανση από 0.5 % μέχρι 14.3% μπορεί να παρατηρηθεί για συγκεντρώσεις νόθευσης που προκαλούν σε θερμοκρασία 300 K βαθμό ιονισμού μεγαλύτερο από 80%.



Εικόνα 3.5-7. Βαθμός ιονισμού της πλευρικής εξαρτημένης πρόσμιξης P στο 4H-SiC σε συνάρτηση με την θερμοκρασία και για διαφορετικές συγκεντρώσεις νόθευσης.

Παρόμοιες διαφορές υπάρχουν στο βαθμό ιονισμού μεταξύ της πλευρικής εξαρτημένης και της μη πλευρικής εξαρτημένης πρόσμιξης P, βλέπε εικόνα 3.5-3 και εικόνα 3.5-7. Πιο αναλυτικούς υπολογισμούς για τις διαφορές στον βαθμό ιονισμού με διάφορες συγκεντρώσεις (10^{14} , 10^{15} , 10^{16} , 10^{19} και 10^{21} cm⁻³) της πλευρικής εξαρτημένης και της μη πλευρικής εξαρτημένης πρόσμιξης P δίνεται στο παρακάτω πίνακα.

P_{Site-dependent}	1.00E+14	1.00E+15	1.00E+16	1.00E+19	1.00E+21
ξ_d	0.998	0.984	0.885	0.098	0.150
P_{Non-Site-dependent}					
ξ_d	0.999	0.999	0.999	0.140	0.100
Απόλυτη διαφορά σε %	0.1	1.5	11.4	30.0	33.3

Πίνακας 3.5-4. Παράδειγμα διαφορών στους βαθμούς ιονισμού που έχουν η πλευρική εξαρτημένη και η μη πλευρική εξαρτημένη πρόσμιξη N. Η θερμοκρασία για όλες τις τιμές είναι 300 K.

Ο πίνακας 3.5-4 αναδεικνύει τις διαφορές στον βαθμό ιονισμού μεταξύ της πλευρικής εξαρτημένης και της μη πλευρικής εξαρτημένης πρόσμιξης γίνονται σημαντικές. Μια διακύμανση από 0.1 % μέχρι 11.4% μπορεί να παρατηρηθεί για συγκεντρώσεις νόθευσης που προκαλούν σε θερμοκρασία 300 K βαθμό ιονισμού μεγαλύτερο από 80%. Ο βαθμός ιονισμού για υψηλότερες συγκεντρώσεις είναι υψηλός όμως καλύτερος σε σχέση με την περίπτωση της N πρόσμιξης. Επίσης το φώσφορο είναι γνωστό ότι προκαλεί χαμηλότερη

επιφανειακή αντίσταση σε υψηλές συγκεντρώσεις που έχει σχέση με την μείωση της ενέργειας ιονισμού με αυξημένη της συγκέντρωσης νόθευση [56].

Η παραπάνω σύγκριση επισημάνει την βαρύτητα που έχει η σωστή μοντελοποίηση της ενέργειας ιονισμού στο 4H-SiC, δηλαδή η σωστή απόδοση τιμών ενεργειών ιονισμού.

Το ATLAS υιοθετεί την άποψη ότι εάν δεν δηλώνεται μη πλήρες ιονισμός τότε ιονίζονται πλήρως οι προσμίξεις ($N_D^+ = N_{D,\text{total}}$ και $N_A^- = N_{A,\text{total}}$). Εάν ο χρήστης ορίσει την παράμετρο INCOMPLETE στη δήλωση MODELS ενεργοποιείται αυτόματα ο μη πλήρες ιονισμός σύμφωνα με [57]:

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + GCB \exp\left(\frac{\varepsilon_{F_n} - (E_C - EDB)}{kT_L}\right)} \quad (3.5.16)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + GVB \exp\left(\frac{E_V + EAB - \varepsilon_{F_p}}{kT_L}\right)} \quad (3.5.17)$$

όπου EDB και EAB είναι οι ενέργειες ενεργοποίησης και N_D και N_A είναι αντισταθμιζόμενες συγκεντρώσεις τύπου n και τύπου p. Οι παράμετροι GVB και GCB στην (3.5.16) και (3.5.17) είναι ο βαθμός εκφυλισμός των αποδεκτών g_A και δοτών g_D αντίστοιχα, αυτές ορίζονται εσωτερικά στο προσομοιωτή και παίρνουν τιμές ανάλογα με το δηλωμένο υλικό στο πρόγραμμα. Στην περίπτωση του 4H-SiC το ATLAS αναθέτει αυτόματα τις σωστές τιμές που είναι $g_A=2$ (GVB=2) και $g_D=4$ (GCB=4). Έτσι δεν είναι ανάγκη να ανατεθούν τιμές στις παραμέτρους GVB και GCB. Σε αντίθετη περίπτωση εάν ο χρήστης επιθυμεί να τεθούν νέες τιμές πρέπει να τις ορίσει σαν παράμετροι της δήλωσης MATERIAL:

Δήλωση	Παράμετρος (eV)
MATERIAL	GCB
MATERIAL	EDB
MATERIAL	GVB
MATERIAL	EAB

Πίνακας 3.5-5. Επιλογές παραμέτρων για τον καθορισμό του μη πλήρες ιονισμού (με συνδυασμό της ενεργοποίησης του μη πλήρες ιονισμού με την παράμετρο INCOMPLETE).

Το ATLAS δεν είναι ικανό να συμπεριλαμβάνει το φαινόμενο του μη πλήρες ιονισμού εξαρτημένης πλευράς και για αυτό τον λόγο πρέπει να χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση του ενός επίπεδο ενέργειας ιονισμού, βλέπε (3.5.3) και (3.5.4). Τέλος το ATLAS δεν υποστηρίζει την δημιουργία προγράμματος C-Interpreter Functions (βλέπε [29]), όπου ο χρήστης του δίνεται η δυνατότητα να ενσωματώσει το δικό του μοντέλο ιονισμού ενέργειας των προσμίξεων.

Οι περισσότερες επιστημονικές ομάδες χρησιμοποιούν για τους προσμίξεις (N και Al) τη προσέγγιση του ενός επίπεδο ενέργειας ιονισμού.

Βιβλιογραφία	EDB (meV)	EAB (meV)
"Vienna Uni."	100	200
"SILVACO ATLAS"	45	44
"Reggio Calabria Uni"	50	230
"M. Nawaz"	100	200

Πίνακας 3.5-6. Επιστημονικές ομάδες και οι τιμές που χρησιμοποιούνται για τις ενέργειες ιονισμού των δοτών και αποδεκτών. Η βιβλιογραφία είναι "Vienna Uni" [12], "SILVACO ATLAS" [8], "Reggio Calabria Uni" [58] και "M.Nawaz" [59].

3.6 ΕΥΚΙΝΗΣΙΑ ΦΟΡΕΩΝ

Στους ημιαγωγούς οι φορείς επιτυγχάνονται με την παρουσία του ηλεκτρικού πεδίου όπου επιτυγχάνουν μια μέση ταχύτητα που καθορίζεται από τις σκεδάσεις φορέων. Η ευκινησία φορέων δείχνει πόσο γρήγορα ένας φορέας κινείται μέσα σε έναν ημιαγωγό όταν εφαρμοσθεί ένα οριζόντιο ηλεκτρικό πεδίο.

Στο εσωτερικό του ημιαγωγού οι σκεδάσεις γίνονται λόγω των αλληλεπιδράσεων με το πλέγμα ή με τους ιονισμένες δότες ή αποδέκτες. Επομένως η ευκινησία εξαρτάται από την θερμοκρασία του πλέγματος και από τη συγκέντρωση των ιονισμένων προσμίξεων. Όταν οι ελεύθεροι φορείς μεταφέρονται κοντά στην επιφάνεια του αγωγού, παρατηρείται επιπρόσθετη σκέδαση, που μειώνει την ευκινησία κάτω από τη μέση τιμή της ευκινησίας του εσωτερικού του ημιαγωγού. Σε χαμηλά ηλεκτρικά πεδία η ευκινησία (μ) είναι η σταθερά συσχέτισης μεταξύ μέσο ταχύτητας φορέων (v_D) με το ηλεκτρικό πεδίο (E):

$$v_D = \mu E \quad (3.6.1)$$

Όταν το ηλεκτρικό πεδίο είναι μεγαλύτερο μιας κρίσιμης τιμής (10^5 V cm^{-1} για Si) η ταχύτητα δεν αυξάνει όσο αυξάνεται το ηλεκτρικό πεδίο. Στην ουσία αυτό που γίνεται είναι ότι με την αύξηση του ηλεκτρικού πεδίου οι φορείς αποκτάνε παραπάνω ενέργεια από τη κανονική περιβαλλοντική θερμική ενέργεια και αυτή την επιπρόσθετη ενέργεια μεταδίδεται στο πλέγμα μέσω εκπομπών οπτικών φωνονίων. Αυτό το φαινόμενο είναι ο λόγος γιατί η ταχύτητα αποκτά μια σταθερή τιμή, και τότε η ταχύτητα λέγεται κορεσμός της ταχύτητας διάχυσης. Η εξάρτηση της ευκινησίας στο ηλεκτρικό πεδίο πρέπει να συνυπολογισθεί κατά την ανάλυση ηλεκτρικών χαρακτηριστικών μιας διάταξης. Επομένως έχουμε τρεις περιοχές όπου τα μοντέλα ευκινησίας πρέπει να έχουν ισχύ: Σε χαμηλό πεδίο, σε υψηλό πεδίο και σε περιοχές αναστροφής (ειδική περίπτωση).

Γενικά η μεταβολή των μοντέλων ευκινησίας με θερμοκρασία και συγκέντρωση κατατάσσονται σε κατηγορίες ανάλογα με τον τρόπο εξαγωγής τιμών ευκινησίας. Υπάρχουν τρεις τρόποι εξαγωγής: 1. Βάσει φυσικών μοντέλων 2. βάσει ημιεμπειρικών μοντέλων και 3. εμπειρικών μοντέλων. Τα φυσικά μοντέλα δημιουργήθηκαν βάση πρώτων υπολογισμών, δηλαδή οι συντελεστές και οι δυνάμεις αποκτούνται βάση θεμελιωδών συναρτήσεων. Αυτές οι συναρτήσεις περιέχουν εκθέτες και συντελεστές. Για να είναι οι θεμελιώδεις συναρτήσεις γνωστές γίνονται προσεγγίσεις και απλοποιήσεις και έτσι σπάνια συμφωνούν τα φυσικά μοντέλα με τα πειραματικά δεδομένα. Ένας τρόπος προσέγγισης στα πραγματικά δεδομένα είναι να ρυθμιστούν οι συντελεστές του φυσικού μοντέλου ώστε να υπάρχει ταύτιση των τιμών από τη ρύθμιση με αυτά των πειραματικών δεδομένων. Αυτός ο τρόπος εύρεση τιμών ευκινησίας δημιουργεί τα ημιεμπειρικά μοντέλα. Στα εμπειρικά μοντέλα επιτρέπονται, εκτός από τους συντελεστές και εκθέτες να μεταβάλλονται.

Όπως είναι γνωστό η ενεργή μάζα προσεγγίζεται στο k χώρο σαν με μια παραβολική καμπύλη. Αυτό ισχύει για το 4H-SiC. Στον πραγματικό χώρο, και με αυτό εννοώντας το τρισδιάστατο χώρο, η μορφή της καμπύλης του ελάχιστου στο διάγραμμα διασποράς ($E-k$ γράφημα) της ενεργή μάζας διαφέρει από την θεωρία και είναι ελλειπτική μορφής. Εξ' αιτίας αυτού, οι τιμές ευκινησίας διαφέρουν ανάλογα κατά ποια διεύθυνση υπολογίζεται η ευκινησία. Αυτό ονομάζεται ανισοτροπία ευκινησίας.

3.6.1 Σκέδαση φορέων και ευκινησία

Μια μεταβολή του κύματος Bloch για ηλεκτρόνια θεωρείται να είναι σκέδαση. Υπάρχοντες προσμίξεις όπως και διαταραχές κραμάτων στο κρύσταλλο ή και φωνωνία επιφέρουν μεταβολές στο κύμα Bloch. Κάθε λόγος μεταβολής του κύματος Bloch περιγράφεται από ένα μηχανισμό σκέδασης. Οι μηχανισμοί σκέδασης κατατάσσονται σε πολλές ομάδες.

Μια ομάδα σκέδασης είναι λόγω των διαταραχών στο δυναμικό που εισάγεται με τις ιονισμένες προσμίξεις. Αυτό το είδος είναι γνωστό σαν σκέδασης ιονισμένων προσμίξεων που είναι βασικά σκέδαση Coulomb. Σε χαμηλές θερμοκρασίες, η θερμική ταχύτητα είναι μικρή και ο φορέας εντοπίζεται κοντά στην πρόσμιξη, αυξάνοντας έτσι την δράση της σκέδασης. Έτσι η σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός στις

χαμηλές θερμοκρασίες. Ουδέτερες προσμίξεις μπορούν να προκαλέσουν ένα άλλο είδος σκέδασης, την σκέδαση ουδέτερης πρόσμιξης. Το μέγεθος της ουδέτερης πρόσμιξης είναι διαφορετικό από το μέγεθος του ατόμου του κρυστάλλου και αυτή η διαφορά προκαλεί τέντωμα του πλέγματος. Αυτό στην συνέχεια δημιουργεί ένα κενό στο δυναμικό κοντά στο άτομο της πρόσμιξης, και το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται λόγω αυτού του γεγονότος σκεδάζει τον φορέα όταν αυτός πλησιάζει κοντά στο άτομο της πρόσμιξης. Σκέδαση ουδέτερης πρόσμιξης στους ημιαγωγούς είναι δευτερεύουσας σημασίας λόγω της μικρής συγκέντρωσης που γενικά έχουν τέτοιες προσμίξεις.

Μια άλλη ομάδα σκέδασης είναι σκέδασης πλέγματος ή και σκέδαση φωνονίων και προκαλείται από δονήσεις στο πλέγμα. Ένα φωνόνιο μπορεί να συγκρουστεί με ένα ηλεκτρόνιο (ή οπή) και να το σκεδάσει. Σε υψηλότερες θερμοκρασίες υπάρχουν περισσότερα φωνόνια και για αυτό το λόγο αυξημένη σκέδαση μειώνει την ευκινησία. Έτσι σκέδαση φωνονίων είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός σε υψηλές θερμοκρασίες. Σκέδαση ακουστικών φωνονίων ή αλλιώς σκέδαση παραμόρφωσης δυναμικού προέρχεται από το φαινόμενο ότι διαμήκη δονήσεις πλεγμάτων παράγουν μια σειρά από συστολές και διαστολές και είναι η κυρίαρχος μηχανισμός σκέδασης σε ανόθευτους ομοιοπολικούς κρυστάλλους όπως για παράδειγμα είναι τα Si και Ge. Πιεζοηλεκτρική σκέδαση είναι μια άλλη μορφή σκέδασης ακουστικού φωνονίου. Αυτό το είδος σκέδασης εντοπίζεται στους ημιαγωγούς από III-V και II-VI στήλη που έχουν zinc blende ή wurtzite δομή. Η απουσία συμμετρίας αντιστροφής σε αυτούς τους ημιαγωγούς δημιουργεί μικροσκοπικές ηλεκτρικές διαταραχές που οδηγούν σε πιεζοηλεκτρική σκέδαση που απορροφά ή εκπέμπει ακουστικά φωνόνια. Σκέδαση οπτικών φωνονίων είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός σε υψηλές θερμοκρασίες ή σε υψηλές ηλεκτρικά πεδία. Η αιτία της σκέδασης αυτής είναι τα πολικά και τα μη πολικά φωνόνια, που αντιμετωπίζονται σαν σκέδαση διαταραχής δυναμικού. Η μη πολική σκέδαση λόγω μη πολικών φωνονίων προέρχεται από τις σκεδάσεις των ενδιάμεσων κοιλάδων και είναι σημαντική σε μη πολικούς ημιαγωγούς όπως Si και Ge. Η πολική σκέδαση είναι η κυρίαρχος μηχανισμός σκέδασης σε θερμοκρασία δωματίου για ιονικούς και πολικούς κρυστάλλους που ανήκουν στους ημιαγωγούς με στοιχεία από τους στήλες II-VI και III-V. Η πολική σκέδαση συσχετίζεται με τις πλώσεις που δημιουργούνται με τις μετατοπίσεις που προκαλούνται από τα οπτικά φωνόνια.

Άλλοι μηχανισμοί σκέδασης όπως σκέδαση κραμάτων και σκέδαση τραχύτητας επιφάνειας επηρεάζουν σε ελάχιστο βαθμό την ευκινησία, όμως σε κατάλληλες συνθήκες είναι δυνατόν να συμβάλλουν αρκετά στη συνολική σκέδαση.

Σκέδαση φορέα-φορέα σε έναν ημιαγωγό ονομάζεται η εκτροπή των οπών και των ηλεκτρονίων κατά τη κίνηση τους μέσα στο κρύσταλλο και είναι σημαντικός σε ένα ημιαγωγό. Οι συγκρούσεις μεταξύ ομοίων φορέων είναι μη σημαντικές για τη μεταφορά του ρεύματος επειδή το ρεύμα είναι ανάλογο με το άθροισμα όλων των ορμών των φορέων. Εάν ένας φορέας συγκρουστεί με τον άλλο, υπάρχει μια ανταλλαγή ορμών μεταξύ των δυο φορέων, αλλά η συνολική ορμή των δυο παραμένει αμετάβλητη.

Όταν πολλοί μηχανισμοί συμβάλλουν στη σκέδαση φορέων ταυτόχρονα, κάθε μηχανισμός μπορεί να θεωρηθεί ανεξάρτητος. Για να υπολογισθεί ο ρυθμός κατά τον οποίο οι φορείς (ηλεκτρόνια και οπές) σκεδάζονται από μια κατάσταση σε μια άλλη, χρησιμοποιείται ο χρυσός κανόνας Fermi. Ο χρυσός κανόνας Fermi δίνει τον ρυθμό μετάβασης των φορέων. Αθροίζοντας για κάθε πιθανή τελική κατάσταση του φορέα και χρησιμοποιώντας την προσέγγιση Born για κυματοσυναρτήσεις, αποκτάται η αντίστροφη σταθερά χαλάρωσης τ_w^{-1} για έναν μηχανισμό σκέδασης.

Η σχέση μεταξύ ωμικής ευκινησίας και του χρόνου χαλάρωσης είναι

$$\mu_w = \frac{q \langle \tau_w \rangle}{m^*} \quad (3.6.2)$$

όπου m^* είναι η ενεργή μάζα. Εάν ο χρόνος χαλάρωσης για διαφορετικοί μηχανισμοί θεωρείται ανεξάρτητος τότε είναι δυνατόν να εφαρμοσθεί ο κανόνας Matthiesen για να αποκτηθεί ο συνολικός χρόνος χαλάρωσης:

$$\frac{1}{\tau_{total}} = \sum_w \frac{1}{\tau_w} \quad (3.6.3),$$

ή ισοδύναμα

$$\frac{1}{\mu_{total}} = \sum_w \frac{1}{\mu_w} \quad (3.6.4)$$

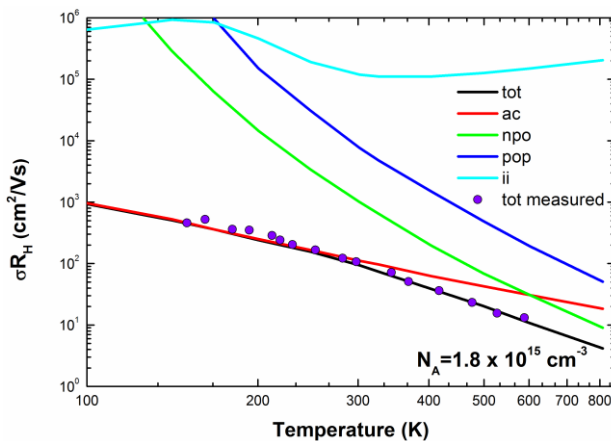
Για το 4H-SiC, όλοι οι μηχανισμοί σκεδάσεων εξετάζονται μέσω των χρόνων χαλάρωσης τους. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με τους [60] και [61] που υποστηρίζουν ότι σκέδαση ακουστικών φωνονίων και σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων μαζί με πιεζοηλεκτρική σκέδαση είναι οι πιο σχετικοί μηχανισμοί σε χαμηλό ηλεκτρικό πεδίο. Στο παράρτημα II ο αναγνώστης μπορεί να βρει μια επισκόπηση των μηχανισμών σκέδασης με τις τιμές των αντίστοιχων χρόνων χαλάρωσης. Οι χρόνοι χαλάρωσης χρησιμοποιούνται για την εξαγωγή της συνολικής ευκινησίας για τύπου n και τύπου p 4H-SiC, βλέπε [62] and [63].

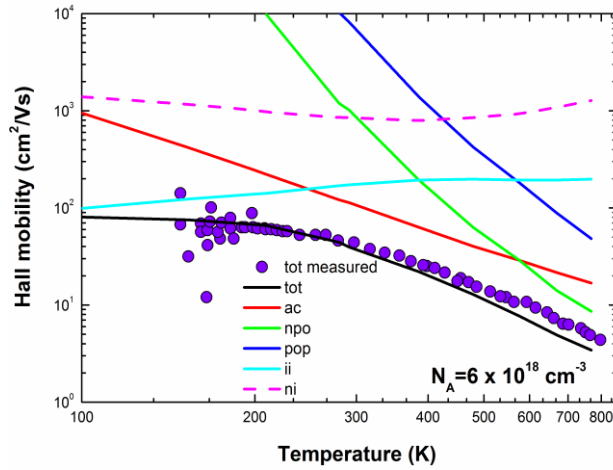
Παράμετροι του υλικού που υπάρχουν στη σταθερά χρόνο χαλάρωσης δεν μπορούν να μετρηθούν απευθείας και για αυτό υπολογίζονται με προσομοιώσεις Monte Carlo. Έτσι προσομοιώσεις της ευκινησίας χρησιμοποιούν τις εξισώσεις (3.6.3) και (3.6.2). Για μετρήσεις ευκινησίας χρησιμοποιείται το φαινόμενο Hall. Δυο βασικοί παράγοντες μεταξύ των μετρήσεων ευκινησίας με Hall και των μετρήσεων ευκινησίας με Monte Carlo υπάρχουν: η ευκινησία Hall μ_H και η παράγοντας σκέδασης Hall r_H . Απαξ ορισθούν αυτοί οι δυο βασικοί παράγοντες μια σύγκριση μεταξύ των μετρημένης και των προσομοιωμένης ευκινησίας ευσταθεί.

Εικόνα 3.6-1, εικόνα 3.6-2, εικόνα 3.6-3 και εικόνα 3.6-4 δείχνουν την ευκινησία Hall (κύκλοι) και την Monte Carlo προσομοιώσεις (γραμμές) για το 4H-SiC τύπου n (Αζώτου) και 4H-SiC τύπου p (Αλουμινίου), όπως αναφέρεται στις δημοσιεύσεις [62] και [63].

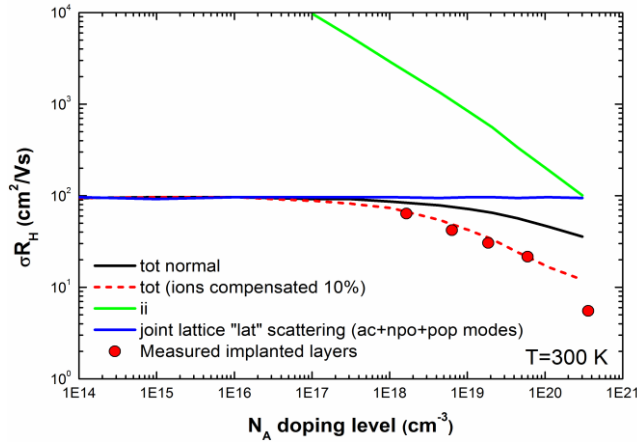
Οι επόμενες εικόνες παρουσιάζουν αποτελέσματα Monte Carlo προσομοιώσεων των μηχανισμών σκεδάσεων στα στρώματα 4H-SiC τύπου n και στα στρώματα 4H-SiC τύπου p. Αυτές οι εικόνες περιέχουν επίσης επαληθευμένες πειραματικές μετρήσεις της ευκινησίας. Τα δεδομένα των εικόνων λήφθηκαν από τις δημοσιεύσεις [63] και [62], όπου μπορούν να βρεθούν τα περισσότερα δεδομένα και με περισσότερα δείγματα.

4H-SiC τύπου p:



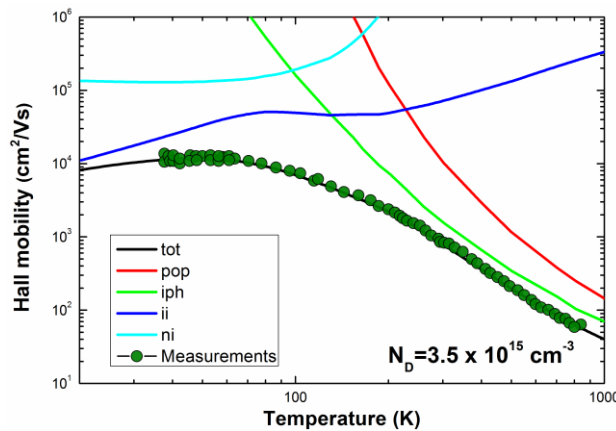


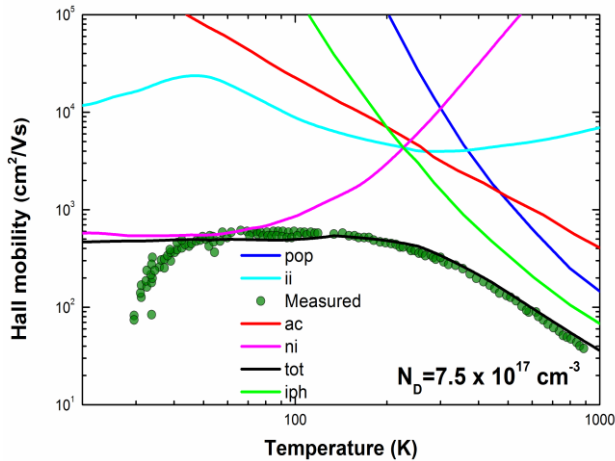
Εικόνα 3.6-1. Η εικόνα στο πάνω μέρος αναπαράχθηκε από [63](fig.1). Η εικόνα στο κάτω μέρος αναπαράχθηκε από [63] (fig.2). Στη περιγραφή μέσα στην εικόνα tot=συνολική σκέδαση, ac=ακουστική σκέδαση, npo=μη πολική σκέδαση, ii=σκέδαση ιονισμένης πρόσμιξης, ni=σκέδαση ουδέτερης πρόσμιξης και tot measured=συνολική μετρημένη σκέδαση. Παρουσιάζεται η σκέδαση και η θερμοκρασιακή εξάρτηση για δύο διαφορετικές συγκεντρώσεις προσμίξεων με Al. Προσέξτε ότι συμφωνούν οι προσομοιωμένες με τις πειραματικές μετρήσεις της συνολικής ευκινησίας.



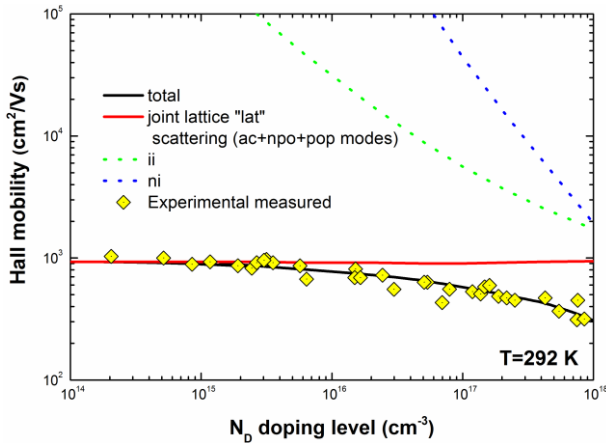
Εικόνα 3.6-2. Μέρος τις εικόνας αναπαράχθηκε από [63]. Μηχανισμοί σκέδασης και η εξάρτησή τους από τη συγκέντρωση πρόσμιξης στους 300 Kelvin. Μια αντιστάθμιση ιονισμού ίση με 10% έπρεπε να ληφθεί ώστε οι πειραματικές τιμές συνάδουν με τις προσομοιωμένες τιμές της συνολικής ευκινησίας.

4H-SiC τύπου n:





Εικόνα 3.6-3. Η εικόνα στο πάνω μέρος αναπαράχθηκε από [62]. (fig.3). Η εικόνα στο κάτω μέρος αναπαράχθηκε από [62]. Στην περιγραφή μέσα στην εικόνα tot=συνολική σκέδαση, ac=ακουστική σκέδαση, nro=μη πολική σκέδαση, ii=σκέδαση ιονισμένης πρόσμιξης, ni=σκέδαση ουδέτερης πρόσμιξης και tot measured=συνολική μετρημένη σκέδαση. Παρουσιάζεται η σκέδαση και η θερμοκρασιακή εξάρτηση για δύο διαφορετικές συγκεντρώσεις προσμίξεων με N_D . Προσέξτε ότι οι προσομοιωμένες τιμές με τις πειραματικές μετρήσεις της συνολικής ευκινησίας δεν συμφωνούν.



Εικόνα 3.6-4. Η εικόνα μέρος αναπαράχθηκε από [62] (fig.9). Μηχανισμοί σκέδασης και η εξάρτηση τους από συγκέντρωση στα 292 Kelvin. Φαίνεται οι προσομοιώσεις να συμφωνούν με τις πειραματικές μετρημένες τιμές.

Το συμπέρασμα των παραπάνω αποτελεσμάτων των γραφικών παραστάσεων είναι ότι και στους τύπους 4H-SiC (τύπου n και τύπου p) η συνολική τιμή ευκινησίας για συγκεντρώσεις μικρότερης από 10^{15} cm^{-3} επηρεάζεται κυρίως από την σκέδαση πολικών φωνονίων και από τη σκέδαση πλέγματος ενώ για συγκεντρώσεις μεγαλύτερες από 10^{15} cm^{-3} η συνολική τιμή ευκινησίας επηρεάζεται κυρίως από την σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων και από τη σκέδαση ουδέτερων προσμίξεων. Έτσι η συνολική τιμή ευκινησίας είναι δυνατόν να μοντελοποιείται με ένα εμπειρικό μοντέλο που θα ενσωμάτωνε τις θερμοκρασιακές εξαρτήσεις και τις εξαρτήσεις μεταβολών στην συγκέντρωση. Ένα τέτοιο εμπειρικό μοντέλο ήδη υπάρχει και λέγεται Caughey-Thomas model.

3.6.2 Σκέδαση στο ATLAS

Η σκέδαση υποστηρίζεται στο ATLAS μόνο εν μέρει. Τα δυο μοντέλα Conwell-Weisskopf και Brooks-Herring περιγράφουν τη σκέδαση ιονισμένης πρόσμιξης. Το μοντέλο Dorkel και Leturcq συμπεριλαμβάνει σκέδαση πλέγματος και σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων. Όλα τα μοντέλα σκέδασης στο ATLAS, δηλαδή τα

1. Το Conwell-Weisskopf Model

2. To Brooks-Herring Model
3. To Dorkel and Leturcq Model

βασίζονται στη φόρμουλα του S.C Choo [64] :

$$\mu_c^{cc} = \frac{D \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{3/2}}{\sqrt{n \cdot p}} \left[\ln \left(1 + F \cdot \left(\frac{T_L}{300K} \right)^2 \cdot (p \cdot n) \right)^{1/3} \right] \quad (3.6.5)$$

όπου F και D είναι παράμετροι προσαρμογής. Η μορφή της εξίσωσης (3.6.5) τροποποιείται σύμφωνα με ποία προσέγγιση υιοθετείται. Μια πιο αναλυτική ανάλυση για τα μοντέλα σκέδασης ιονισμένων προσμίξεων βρίσκεται στο παράρτημα III.

3.6.3 Μοντελοποίηση ευκινησίας χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου

Στις χαμηλές συγκεντρώσεις σκεδάσεις ιονισμένων προσμίξεων δεν υφίστανται και για αυτό το λόγο υπερισχύουν οι σκεδάσεις των ελεύθερων φορέων. Σε υψηλές συγκεντρώσεις η σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων υπερισχύουν. Σε χαμηλό ηλεκτρικό πεδίο οι φορείς είναι σχεδόν σε ισορροπία με το πλέγμα και η ευκινησία έχει μια χαρακτηριστική τιμή που συμβολίζεται με $\mu_{n0,p0}$. Συγκέντρωση και θερμοκρασία παίζουν σημαντικό ρόλο στον καθορισμό της τιμής αυτής και για αυτό το λόγο παρουσιάζονται τα κύρια μοντέλα χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου ευκινησίας στο ATLAS.

Χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου ευκινησίας και Caughey-Thomas μοντέλο

Οι μεταβολές της ευκινησίας με θερμοκρασία και συγκέντρωση προσμίξεων πρέπει να μοντελοποιηθούν σωστά. Η μια προσέγγιση είναι η προσέγγιση από φυσικής πλευράς, δηλαδή να προσαρμοστούν οι πειραματικές μετρήσεις λαμβάνοντας υπόψη τους μηχανισμούς σκεδάσεων μέσω του κανόνα Mathiessen (βλέπε [62]). Ωστόσο οι περισσότερες TCAD εφαρμογές χρησιμοποιούν εμπειρικά μοντέλα ώστε να αποκτιούνται γρήγορα τα αποτελέσματα. Το μοντέλο που χρησιμοποιείται συχνά είναι αυτό του Caughey Thomas [65], [66]:

$$\mu_{n,p} = \mu_{n,p}^{\min} + \frac{\mu_{n,p}^{\max} - \mu_{n,p}^{\min}}{1 + \left(\frac{N_i}{N_{n,p}^{crit}} \right)^{\delta_{n,p}}} \quad (3.6.6)$$

όπου $N_i = NA + ND$ [cm^{-3}] είναι η συνολική συγκέντρωση των ιονισμένων συγκεντρώσεων των ιονισμένων και $\mu_{\min,n,p}$, $\mu_{\max,n,p}$, $\delta_{n,p}$ και $N_{n,p}^{Cr}$ είναι συντελεστές προσαρμογής. Η φυσική έννοια των συντελεστών αυτών είναι:

$\mu_{\min,n,p}$ [$\text{cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$] αντιπροσωπεύει την χαμηλότερη ευκινησία που αντιστοιχεί στην υψηλότερη τιμή N_i όπου κυριαρχεί η σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων.

$\mu_{\max,n,p}$ [$\text{cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$] αντιπροσωπεύει την υψηλότερη ευκινησία που αντιστοιχεί στην χαμηλότερη τιμή N_i όπου κυριαρχεί η σκέδαση πλέγματος.

Η εξάρτηση της θερμοκρασίας για την ευκινησία χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου μπορούν να μοντελοποιηθούν μετατρέποντας τις τέσσερις παραμέτρους της (3.6.6) σύμφωνα με

$$\xi_{n,p} = \xi_{n,p}^0 \left(\frac{T}{300K} \right)^{\epsilon_{n,p}} \quad (3.6.7)$$

όπου $\xi_{n,p}$ είναι οι παράμετροι ενδιαφέροντος ($\mu_{\min,n,p}$, $\mu_{\max,n,p}$, $N_{n,p}^{Cr}$, $\delta_{n,p}$), T η θερμοκρασία και $\xi_{0n,p}$ είναι η τιμή της παράμετρο στη θερμοκρασία 300K.

Ο εκθέτης $\delta_{n,p}$ (3.6.6) θεωρείται ότι δεν εξαρτάται στη θερμοκρασία και η εξίσωση (3.6.6) γίνεται:

$$\mu_{n,p} = \mu_{n,p}^{\min,0} \left(\frac{T}{300K} \right)^{\alpha_{n,p}} + \frac{\mu_{n,p}^{\max,0} \left(\frac{T}{300K} \right)^{\beta_{n,p}} - \mu_{n,p}^{\min,0} \left(\frac{T}{300K} \right)^{\alpha_{n,p}}}{1 + \left(\frac{T}{300K} \right)^{\gamma_{n,p}} \left(\frac{N_i}{N_{n,p}^{0,crit}} \right)^{\delta_{n,p}}} \quad (3.6.8)$$

όπου $\gamma_{n,p}$ είναι ο εκθέτης “ $\varepsilon_{n,p}$ ” της εξίσωσης (3.6.7) που καθορίζει τη επιρροή της κρίσιμης συγκέντρωσης $N_{n,p}^{Cr}$. Η θεώρηση ότι ο $\delta_{n,p}$ είναι ανεξάρτητη της θερμοκρασίας επιβεβαιώθηκε με προσαρμογές σε μετρημένες μεταβολές ευκινησίας με θερμοκρασία [66].

4H-SiC ευκινησία φορέων

Στις ακόλουθες αναλύσεις η ανισοτροπία της ευκινησίας δεν λαμβάνεται υπόψη εφόσον θεωρείται μόνο η κίνηση του ηλεκτρονίου κάθετα στον άξονα c (basal επίπεδο). Οι περισσότερες πειραματικές μετρήσεις της ευκινησίας φορέων έχουν πραγματοποιηθεί με τη μέθοδο Hall [45, 67-74]. Τα αποτελέσματα των μετρήσεων παρουσιάζονται στις παρακάτω εικόνες και συγκρίνονται με τις καμπύλες Caughey-Thomas (CT) που προκύπτουν από διαφορετικές μελέτες προσομοιώσεων [8, 12, 13, 16, 18, 59, 75]. Παρατηρείται ότι πολλές πειραματικές μελέτες της ευκινησίας φορέων του SiC [69, 71, 73] χρησιμοποιούν την CT εξίσωση για την προσαρμογή των αποτελεσμάτων τους.

Στην εικόνα 3.6-5 φαίνεται η ευκινησία ηλεκτρονίων έναντι συγκεντρώσεων προσμίξεων ενώ ο πίνακας 3.6-3 περιέχει τις προσαρμοσμένες παραμέτρους (συντελεστές) της Caughey-Thomas εξίσωση όπως καταγράφεται από διάφορες επιστημονικές ομάδες. Όλες οι επιστημονικές ομάδες χρησιμοποιούν την εξίσωση (3.6.8) και για αυτό τον λόγο θεωρούν ότι το $\delta_{n,p}$ δεν αλλάζει με θερμοκρασία. Οι διάφοροι επιστημονικές ομάδες και τα αποτελέσματα τους παριστάνονται με μια σημειογραφία (όνομα του συγγραφέα) και κάθε μια αντιστοιχεί στη βιβλιογραφία της. Για την εικόνα 3.6-6 οι σημειογραφίες “Vienna Uni. [5], “Reggio Calabria Uni.” [30], “SILVACO-ATLAS” [1], “Pernot1” [17], “Kinoshita” [24], “Schaffer” [20], “Burk” [22], “Goetz” [23], “Hatakeyama” [25], “Terziyska” [26], “Bakowski” [12] και “Nawaz” [31].

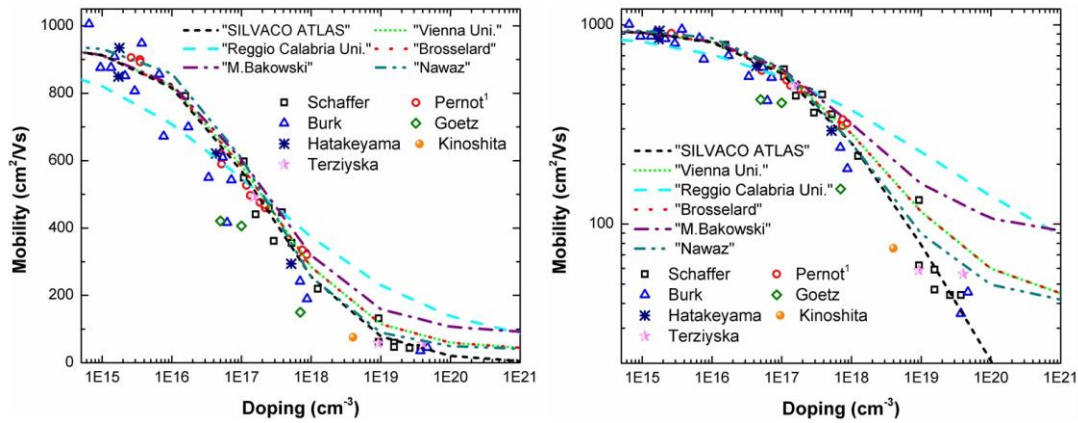
4H- και 6H-SiC πειραματικές μετρήσεις

Ημι-εμπειρικά μοντέλα χρησιμοποιούνται για να προσαρμοστούν οι εξαρτήσεις των πειραματικών μετρήσεων ευκινησίας για τα υλικά 4H-, 6H-SiC. Οι περισσότερες επιστημονικές ομάδες βασίζονται στις 100 Hall μετρήσεις που πραγματοποιήθηκαν σε επιταξιακά υποστρώματα 4H-, 6H-SiC από τους Schaffer et al. [73]. Schaffer et al. [73] επίσης απέδειξαν ότι οι μετρήσεις εξαρτώνται από την ποιότητα του υλικού και ότι λόγω ανισοτροπίας του υλικού οι θερμοκρασιακές συνθήκες υπό τις οποίες λαμβάνονται οι μετρήσεις, επηρεάζουν κατά πολύ την ποιότητα των μετρήσεων. Οι ανισοτροπικές μετρήσεις ευκινησίας στο 4H-SiC που έγιναν από το Schadt et al. [76] αποδεικνύουν ότι οι ευκινησίες παράλληλα ή κάθετα στον άξονα c έχουν λίγες διαφορές μεταξύ τους. Συγκεκριμένα έχουμε ότι λόγοι ευκινησίας έχουν τις εξής τιμές:

$$\frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = 5 \text{ για } 6\text{H-SiC}, \text{ και } \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = 0.8 \text{ για } 4\text{H-SiC}.$$

Επίσης διαπιστώθηκε ότι οι παραπάνω λόγοι ευκινησίας ισχύουν μόνο για τις θερμοκρασίες μεταξύ $100 \text{ K} < T < 600 \text{ K}$. Μετρήσεις της ευκινησίας χρησιμοποιώντας τις ενεργές μάζες αντί της μέθοδο Hall έχουν διεξαχθεί από H. Iwata και K.M. Itoha [25].

Παρακάτω είναι μετρήσεις ευκινησίας έναντι συγκεντρώσεις προσμίξεων (4H-SiC τύπου n και τύπου p). Οι καμπύλες δείχνουν τα αποτελέσματα χρήσης διαφορετικών σετ παραμέτρων για το Caughey-Thomas μοντέλο.



Εικόνα 3.6-5. Ευκινησία ηλεκτρονίου έναντι 4H-SiC συγκέντρωσης τύπου n στους 300 K. Πειραματικές μετρήσεις παρουσιάζονται με σύμβολα ενώ με γραμμές είναι οι καμπύλες CT που δημιουργήθηκαν με διαφορετικές επιλογές των παραμέτρων (συντελεστές) CT, βλέπε πίνακας 3.6-1.

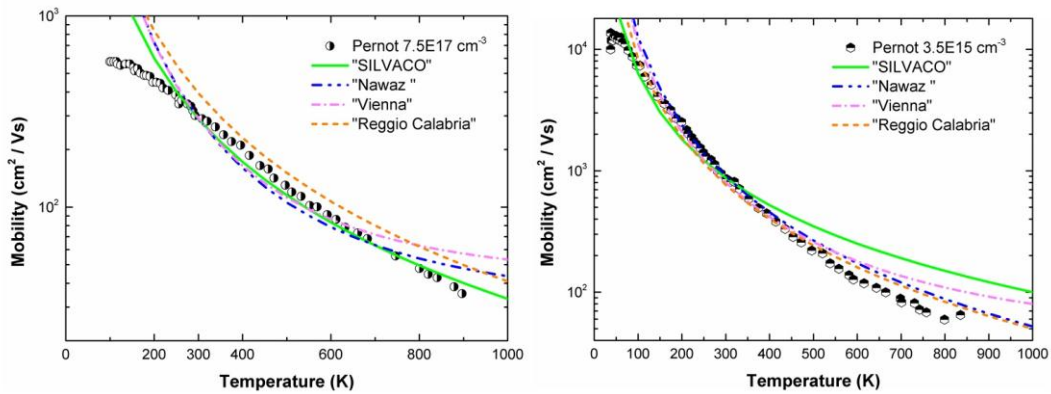
Οι παράμετροι του μοντέλου Caughey-Thomas προσαρμοσμένα για 4H-SiC τύπου n:

Βιβλιογραφία	$\mu_{n,0}^{max}$	$\mu_{n,0}^{min}$	$N_n^{0,crit}$	α_n	β_n	γ_n	δ_n
"Vienna Uni."	950.00	40.00	1.9E+17	-0.50	-2.40	0.00	0.61
"SILVACO-ATLAS "	950.00	27.87	1.9E+17	0.00	-1.80	0.00	0.61
"Reggio Calabria Uni."	950.00	40.00	2E+17	-0.50	-2.40	-0.76	0.34
"Brosselard"	947.00	0.00	1.9E+17	0.00	-2.15	0.00	0.61
"Bakowski"	947.00	88.00	1.9E+17	0.00	-2.15	0.00	0.61
"Nawaz"	950.00	40.00	2E+17	0.00	-2.40	0.73	0.34

Πίνακας 3.6-1. Παράμετροι Caughey-Thomas για 4H-SiC τύπου n που χρησιμοποιούν διάφοροι επιστημονικοί ομάδες.

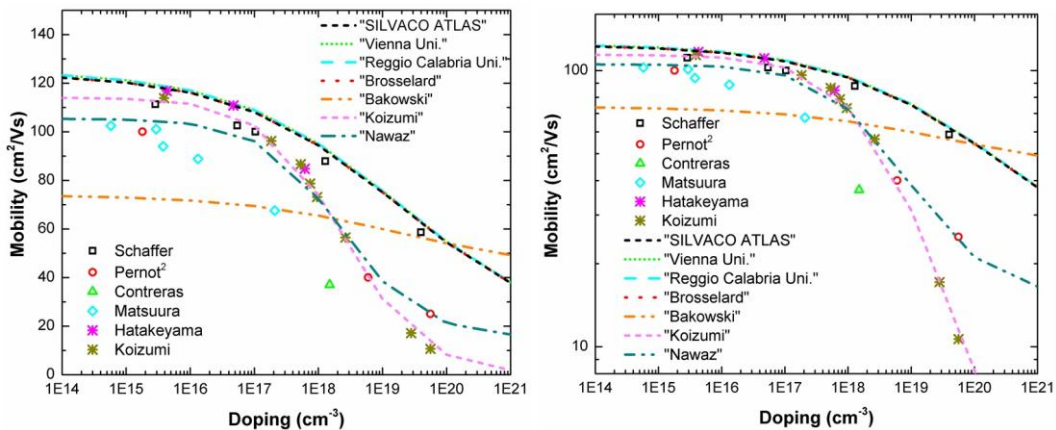
Η εικόνα 3.6-5 έχει δεδομένα που είναι σε log-log άξονες και αυτό για καλύτερη αναπαράσταση, ενώ οι περισσότερες πηγές [20, 66, 73] αναπαριστούν τα αποτελέσματα τους σε semi-log άξονες. Οι καλύτερες τιμές παραμέτρων για μοντελοποίηση της ευκινησίας για χαμηλό ηλεκτρικό πεδίο σε 4H-SiC τύπου n ημιαγωγό είναι αυτές του "SILVACO-ATLAS" ενώ αυτές του "Nawaz" είναι οριακά αποδεκτές.

Εφόσον επιλέχθηκαν οι καλύτερες τιμές για τους παραμέτρους του μοντέλου Caughey-Thomas μια παρόμοια διαδικασία ακολουθήθηκε για την μεταβολή της ευκινησίας ηλεκτρονίων με θερμοκρασία (βλέπε εικόνα 3.6-6). Μια δυσκολία που συναντάτε στη μελέτη της ευκινησίας με μεταβολή της θερμοκρασίας είναι ότι υπάρχει διαθέσιμη μόνο μια πειραματική τιμή της συγκέντρωσης και μια σύγκριση με άλλες μελέτες δεν είναι εφικτή. Τα αποτελέσματα που φαίνονται στη εικόνα 3.6-6 δείχνουν την μεταβολή της ευκινησίας με θερμοκρασία για δυο τιμές συγκεντρώσεων, και η καλύτερη συμπεριφορά παρατηρείται ότι είναι αυτή των παραμέτρων του "Nawaz" [59]. Για υψηλές συγκεντρώσεις οι παράμετροι του "SILVACO-ATLAS" έχουν αποδεκτή θερμοκρασιακή συμπεριφορά.



Εικόνα 3.6-6. Ευκινησία ηλεκτρονίου έναντι θερμοκρασίας για δύο τιμές συγκεντρώσεων. Πειραματικές μετρήσεις παρουσιάζονται με σύμβολα ενώ οι γραμμές αντιπροσωπεύουν τις καμπύλες CT που δημιουργήθηκαν με επιλογή διαφορετικών σετ παραμέτρων του CT μοντέλου (βλέπε πίνακας 3.6-1).

Η παρακάτω εικόνα αναδεικνύει την μεταβολή της ευκινησίας της οπής με συγκέντρωση ενώ ο πίνακας 3.6-2 περιέχει τους παραμέτρους προσαρμογής διαφόρων επιστημονικών ομάδων του Caughey-Thomas μοντέλο



Εικόνα 3.6-7. Ευκινησία οπών έναντι 4H-SiC τύπου p με συγκεντρώσεις στους 300 K. Πειραματικές μετρήσεις παρουσιάζονται με σύμβολα ενώ οι γραμμές αντιπροσωπεύουν τα διάφορα σετ παραμέτρων CT (βλέπε πίνακας 3.6-2) που χρησιμοποιούνται από τους επιστημονικές ομάδες (“Vienna Uni.” [12], “Reggio Calabria Uni.” [16], “SILVACO ATLAS” [8], “Pernot” [63], “Contreras” [68], “Schaffer” [73], “Koizumi” [71], “Matsuura” [77], “Hatakeyama” [69], “Bakowski” [18]).

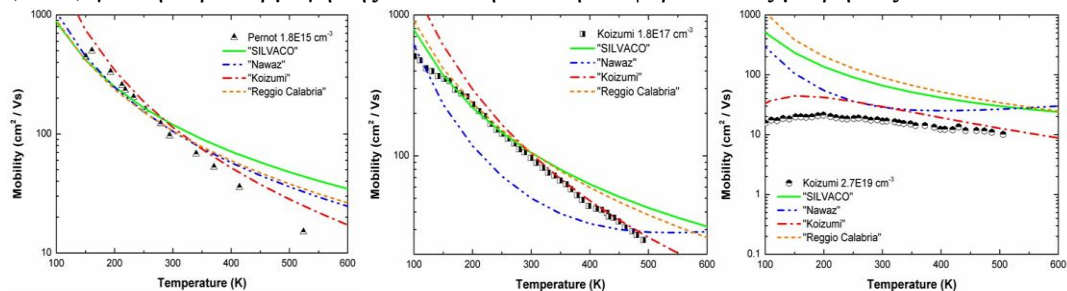
Οι καλύτερες τιμές παραμέτρων για μοντελοποίηση της ευκινησίας για χαμηλό ηλεκτρικό πεδίο σε 4H-SiC τύπου p ημιαγωγό είναι αυτές του “Koizumi” διότι προβλέπει σωστά τις τιμές σε υψηλές συγκεντρώσεις. Οι περισσότεροι παράμετροι βασίζονται στις μετρήσεις του “Schaffer” [73], πού είναι παλιές μετρήσεις, και για αυτό πολλές επιστημονικές ομάδες υπερεκτιμάνε την ευκινησία οπών σε υψηλές συγκεντρώσεις.

Βιβλιογραφία	$\mu_p^{max,0}$	$\mu_p^{min,0}$	$N_p^{0,crit}$	α_p	β_p	γ_p
"Vienna Uni."	125.00	15.90	1.8E+19	-0.5	-2.15	0.00
"SILVACO ATLAS"	124.00	15.90	1.8E+19	0	-1.80	0.00
"Reggio Calabria Uni."	125.00	15.90	1.8E+19	-0.5	-2.15	-0.76
"Brosselard"	124.00	15.90	1.8E+19	0	-2.15	0.00
"Bakowski"	74.00	43.00	1.8E+19	0	-2.15	0.00
"Koizumi"	114.10	0.00	5.4E+18	0	-2.72	2.44
"Nawaz"	105.4	15.3	2.2E+18	0	-2.1	0

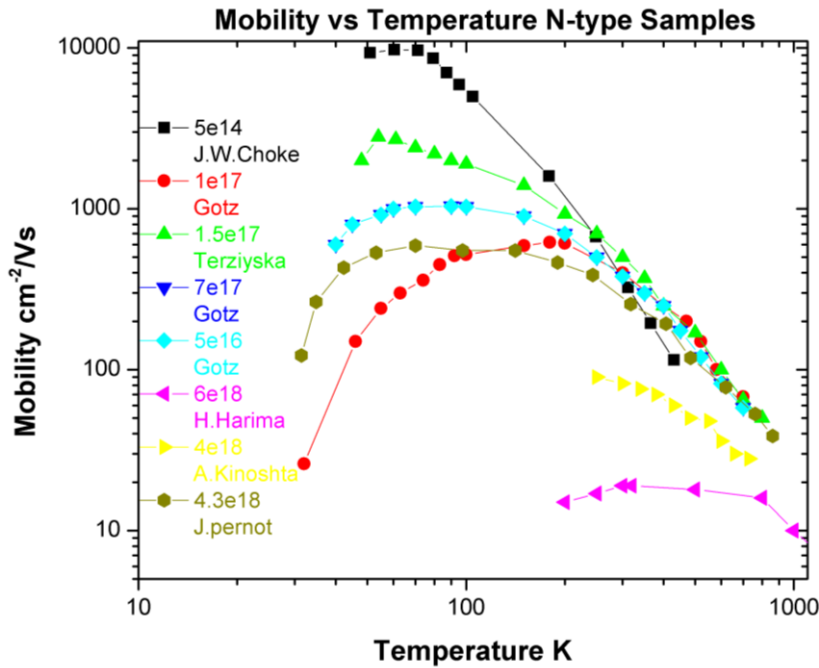
Πίνακας 3.6-2. Παράμετροι Caughey-Thomas για 4H-SiC τύπου p που χρησιμοποιούν διάφοροι επιστημονικοί ομάδες.

Όπως στη περίπτωση της ευκινησίας ηλεκτρονίου εξετάζεται η συμπεριφορά των παραμέτρων CT για τις μεταβολές ευκινησίας οπών με θερμοκρασία. Διαπλέχθηκαν τρεις διαφορετικές συγκεντρώσεις και μεταβάλλεται η θερμοκρασία στους παραμέτρους που περιγράφονται στην γενική εξίσωση (3.6.7). Τα αποτελέσματα αυτή της ανάλυσης φαίνονται στην εικόνα 3.6-8 όπου η καλύτερη σύγκλιση μεταξύ των πειραματικών μετρήσεων και των καμπύλων CT έχουν οι παράμετροι των "Koizumi" και αποδεκτή καμπύλη CT είναι αυτή των "Nawaz".

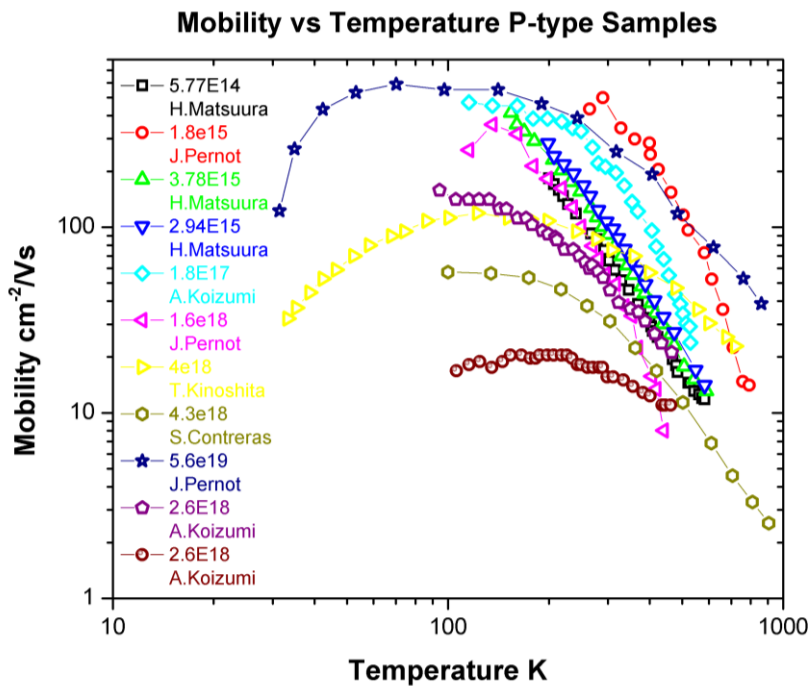
Όλες οι επιστημονικές ομάδες χρησιμοποιούν την εξίσωση (3.6.8) και μόνο η δημοσίευση του Koizumi et al. [71] διαφέρει. Η δημοσίευση αναλύει την εξάρτηση θερμοκρασίας του $\delta_{n,p}$, την θερμοκρασιακή εξάρτηση της παράμετρος μ_p^{max} , που είναι της μορφής (3.6.7), την θερμοκρασιακή εξάρτηση των παραμέτρων $N_p^{n,p}$ και $\delta_{n,p}$ στη Koizumi et al. [71] προσεγγίζεται με την (3.6.7). Τέλος Koizumi et al. [71] χρησιμοποιούν την εξίσωση (3.6.6) για την προσαρμογή της συνολική ευκινησία φορέων στις μετρήσεις.



Εικόνα 3.6-8. Ευκινησία οπών έναντι θερμοκρασίας για δύο τιμές συγκεντρώσεων τύπου p. Πειραματικές μετρήσεις παρουσιάζονται με σύμβολα ενώ οι γραμμές αντιπροσωπεύουν τις καμπύλες CT που δημιουργήθηκαν με επιλογή διαφορετικών σετ παραμέτρων του CT μοντέλου.



Εικόνα 3.6-9. Μεταβολή ευκινησίας με θερμοκρασία για διαφορετικούς συγκεντρώσεις 4H-SiC τύπου n.



Εικόνα 3.6-10. Μεταβολή ευκινησίας με θερμοκρασία για διαφορετικούς συγκεντρώσεις 4H-SiC τύπου p.

Από την εικόνα 3.6-9 και εικόνα 3.6-10 προκύπτει ότι στην περιοχή μεταξύ 0 και 300 K οι καμπύλες έχουν την τυπική μορφή «καμπάνας», που υποδεικνύει μια μεταβολή της ευκινησίας. Στα δείγματα τύπου n η ύψιστη ευκινησία είναι ύψιστη μεταξύ 0 και 300 K, ενώ στα δείγματα τύπου p η ύψιστη ευκινησία είναι μεταξύ 100 και 200 K. Από την εξίσωση (3.6.6) και από τις μετρήσεις ευκινησίας παρατηρείται ότι για χαμηλές συγκεντρώσεις η ευκινησία θα πρέπει να είναι μέγιστη. Συγκρίνοντας τις παραπάνω εικόνες φαίνεται ότι αυτή η παρατήρηση δεν ισχύει. Για παράδειγμα οι τιμές ευκινησίας ηλεκτρονίων των Terziyska και Choyke στην εικόνα 3.6-9 είναι πολύ κοντά, και κανονικά θα έπρεπε η τιμή της ευκινησίας του Goetz να είναι κοντά σε αυτή του Choyke. Ανάλογες παρατηρήσεις

ισχύουν και στην περίπτωση στην εικόνα 3.6-10. Χρειάζονται καλύτερα δείγματα για να γίνεται μια καλή σύγκριση.

Caughey-Thomas μοντέλο στο ATLAS

Στο ATLAS η εξίσωση (3.6.8) εκφράζεται σαν:

$$\mu_{n0} = MU1N.CAUG \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAN.CAUG} + \frac{\left(MU2N.CAUG \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{BETAN.CAUG} \right) - \left(MU1N.CAUG \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAN.CAUG} \right)}{1 + \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{GAMMAN.CAUG} \left(\frac{N}{(NCRITN.CAUG)} \right)^{DELTAN.CAUG}} \quad (3.6.9)$$

$$\mu_{p0} = MU1P.CAUG \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAP.CAUG} + \frac{\left(MU2P.CAUG \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{BETAP.CAUG} \right) - \left(MU1P.CAUG \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{ALPHAP.CAUG} \right)}{1 + \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{GAMMAP.CAUG} \left(\frac{N}{(NCRITN.CAUG)} \right)^{DELTAP.CAUG}}$$

Οι τιμές των παραμέτρων εξαρτώνται από την χρήση των συγκεντρώσεων των προσμίξεων και από τη θερμοκρασία. Το μοντέλο Caughey-Thomas ενεργοποιείται στο ATLAS στη δήλωση MODELS. Το μοντέλο του Caughey-Thomas δεν είναι το μοναδικό μοντέλο στο ATLAS, άλλα μοντέλα χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου ευκινησίας όπως το Aurora και το Masseti μοντέλο περιγράφονται στον οδηγό του ATLAS [8]. Τα άλλα μοντέλα δυστυχώς έχουν τιμές για Si και δεν έχουν ρυθμισθεί για SiC.

3.6.4 Ευκινησία υψηλού ηλεκτρικού πεδίου

Το καρβίδιο του πυριτίου SiC έχει παρόμοια χαρακτηριστικά με το Si και Ge, αναφορικά με την ευκινησία υψηλού ηλεκτρικού πεδίου και τον κορεσμό ταχύτητας. Επομένως υποστηρίζεται ότι για το SiC, ότι η ευκινησία υψηλού ηλεκτρικού πεδίου για μέτριες εντάσεις του ηλεκτρικού πεδίου εμπλέκει συχνές σκεδάσεις ακουστικών φωνωνίων. Έτσι η ταχύτητα του φορέα δεν είναι πλέον ανάλογη του ηλεκτρικού πεδίου, που είναι η περίπτωση ευκινησίας χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου, αλλά έχει συμπεριφορά όμοια με μια συνάρτηση τετραγωνικής ρίζας. Σε υψηλά ηλεκτρικά πεδία ο φορέας αποκτά επιπρόσθετες ενέργειες που χάνονται στο πλέγμα μέσω του μηχανισμού σκέδασης πλέγματος, και για αυτό το λόγο η ταχύτητα του φορέα δεν ξεπερνά μια μέγιστη ταχύτητα, που ονομάζεται ταχύτητα κορεσμού.

Για να περιγραφτούν οι τρεις περιοχές (χαμηλό, μεσαίο, υψηλό πεδίο) χρησιμοποιείται μια εμπειρική σχέση που περιγράφει όλο το φάσμα του ηλεκτρικού πεδίου. Η σχέση που χρησιμοποιείται λέγεται Caughey και Thomas [65] και δίνεται:

$$u_d(F) = u_{sat} \frac{\frac{F}{F_c}}{\left[1 + \left(\frac{F}{F_c} \right)^{\beta_{n,p}} \right]^{\frac{1}{\beta_{n,p}}}} \quad (3.6.10)$$

όπου

- F [$V.cm^{-1}$]: Το ηλεκτρικό πεδίο
- F_c [$V.cm^{-1}$]: Το κρίσιμο πεδίο
- β : Συντελεστής μορφής της καμπύλης. Στην περίπτωση του Si υπάρχουν προσεγγιστικές τιμές του β , που είναι 1 για ηλεκτρόνια και 2 οπές.
- u_{sat} : Η τιμή της ταχύτητας κορεσμού.

Η ταχύτητα κορεσμού συνδέεται με την ευκινησία χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου (σταθερή ευκινησία) μέσω της σχέσης

$$\mu_{n,p}^{low} = \frac{U_{sat}}{F_c} \quad (3.6.11)$$

που δίνει μια φυσική ερμηνεία του κρίσιμου ηλεκτρικού πεδίου F_c . Πράγματι, θεωρώντας το μοντέλο των δυο περιοχών [78], η F_c ισούται με την τιμή του ηλεκτρικού πεδίου που διαχωρίζει την περιοχή από σταθερή ευκινησία σε σταθερή ταχύτητα.

Η σχέση (3.6.10) γίνεται μέσω της (3.6.11):

$$u_{n,p}(F) = \frac{\mu_{0n,p} F}{\left[1 + \left(\frac{\mu_{0n,p} F}{U_{n,p}^{sat}} \right)^{\beta_{n,p}} \right]^{1/\beta_{n,p}}} \quad (3.6.12)$$

ή

$$\mu_{n,p}(F) = \frac{\mu_{0n,p}}{\left[1 + \left(\mu_{0n,p} F / U_{n,p}^{sat} \right)^{\beta_{n,p}} \right]^{1/\beta_{n,p}}} \quad (3.6.13)$$

Η επιρροή της θερμοκρασίας στην ταχύτητα κορεσμού ενσωματώνεται στους παραμέτρους u_m και β , που μοντελοποιείται (ιδιαίτερα στην περίπτωση Si) σύμφωνα με [79] και [80]:

$$u_{n,p}^{sat} = u_{n,p300}^{sat} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{\delta_{n,p}} \quad (3.6.14)$$

$$\beta_{n,p} = \beta_{n,p}^{300} \left(\frac{T_L}{300K} \right)^{\gamma_{n,p}} \quad (3.6.15)$$

όπου $\delta_{n,p}$, $\gamma_{n,p}$, $u_{n,p300}^{sat}$ και $\beta_{n,p}^{300}$ είναι συντελεστές προσαρμογής. Γενικός υπάρχει μια ωμική γραμμική απόκριση σε χαμηλά ηλεκτρικά πεδία όταν η θερμοκρασία μειώνεται.

Οι ίδιοι συγγραφείς [79] πρότειναν μια φαινομενική εξίσωση για την μεταβολή της ταχύτητας κορεσμού με θερμοκρασία:

$$u_{sat}(T_L) = \frac{u^*}{1 + C \exp\left(\frac{T_L}{\Theta}\right)} \quad (3.6.16)$$

όπου, u^* , C και Θ είναι συντελεστές προσαρμογής.

Οι μεταβολές της ταχύτητας διάχυσης με συγκεντρώσεις των προσμίξεων μπορεί να ενσωματωθεί συνδυάζοντας την εικόνα (3.6.13) με (3.6.8). Πάραυτα οι Scharfetter και GummeI [81] δημιούργησαν μια φαινομενική έκφραση για την ταχύτητα διάχυσης στο Si. Αυτή η έκφραση είναι συνάρτηση της συγκέντρωσης της πρόσμιξης και του ηλεκτρικού πεδίου και ισχύει σε θερμοκρασία δωματίου:

$$u_d = \frac{\mu_0 E}{\left\{ 1 + \frac{N}{N/S + N_{ref}} + \frac{(E/A)^2}{E/A + F} + \left(\frac{E}{B} \right)^2 \right\}^{1/2}} \quad (3.6.17)$$

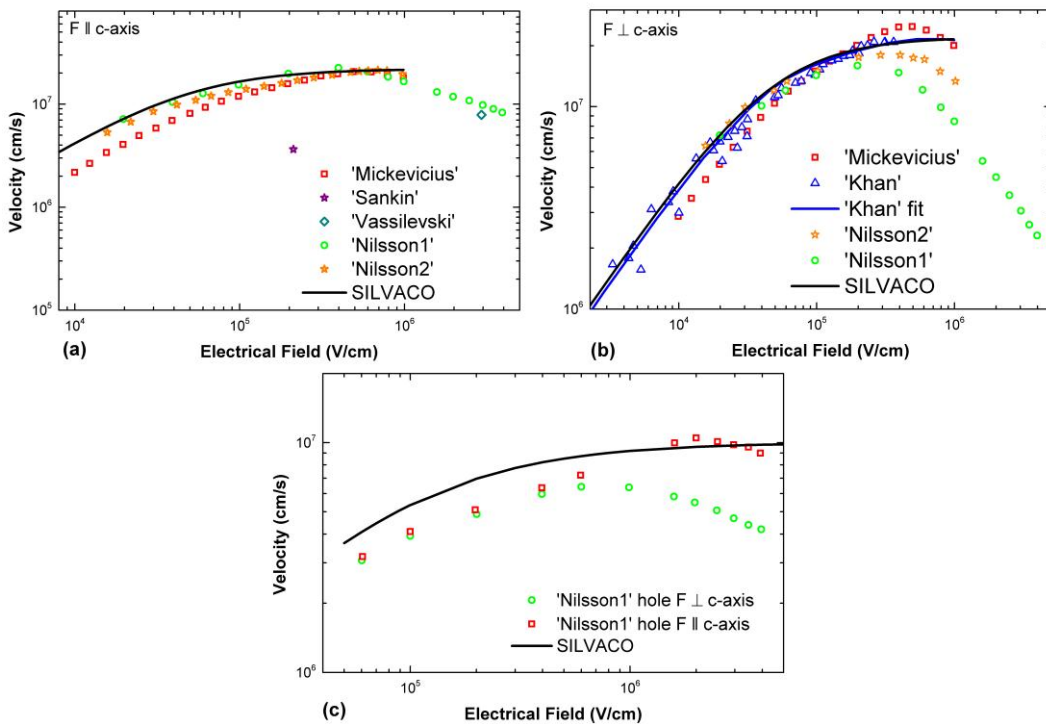
με S , A , F , B και μ_0 και N_{ref} (εάν δεν χρησιμοποιηθούν τυπικές τιμές μετρήσεων) συντελεστές προσαρμογής.

3.6.4.1 Ταχύτητα διάχυσης στο 4H-SiC: Μεταβολές με ηλεκτρικό πεδίο

Υπάρχουν λίγοι πειραματικές μετρήσεις [82], [83], [84] και θεωρητικές [85], [86], [87] μελέτες της ταχύτητας ηλεκτρονίου του 4H-SiC.

Αναμένεται μια διαφορετική τιμή της ταχύτητας διάχυσης κάθετα και παράλληλα του c -άξονα λόγω ανισοτροπίας. Οι περισσότερες θεωρητικές μελέτες βασίζονται στις προσομοιώσεις Monte Carlo, που υπολογίζουν την ταχύτητα σε δυο κατευθύνσεις. Από τις πειραματικές μελέτες υπάρχει μόνο μια που υπολογίζει την ταχύτητα κάθετα στον c -άξονα [84], οι άλλες δυο πειραματικές μελέτες αναλύουν την ταχύτητα (μεταφορά φορέων) παράλληλα του c -άξονα [82] και [83]. Οι Monte Carlo προσομοιώσεις έδειξαν ότι οι τιμές της ταχύτητας του φορέα, της θερμοκρασίας του φορέα και των συντελεστών ιονισμού σε ηλεκτρικό πεδίο παράλληλα του c -άξονα είναι πολύ μικρότερες από αυτές του ηλεκτρικού πεδίου κάθετα στον c -άξονα.

Hatakeyame [88] εκτίμησε μέσω υπολογισμών του ιονισμού προσκρούσεων ότι η ταχύτητα κορεσμού των ηλεκτρονίων όταν η κατεύθυνση είναι παράλληλη στον c -άξονα να είναι περίπου 60% της ταχύτητα κορεσμού των ηλεκτρονίων όταν η κατεύθυνση είναι κάθετα στον c -άξονα (παράλληλα στον a -άξονα). Η ταχύτητα κορεσμού των οπών βρέθηκε στον c -άξονα να είναι 80% σε σχέση με αυτής στο κάθετο c -άξονα.



Εικόνα 3.6-11. Αποτελέσματα στους 300 K των θεωρητικών υπολογισμών Monte Carlo (“Mickevicius” [86], “Nilsson1” [89], “Nilsson2” [87]) και των πειραματικών μετρήσεων (“Sankin” [82], “Vassilevski” [83], “Khan” [84]) για την περίπτωση (a) ταχύτητα κορεσμού ηλεκτρονίων παράλληλα στον c -άξονα, (b) ταχύτητα κορεσμού ηλεκτρονίων κάθετα στον c -άξονα, και τέλος (c) ταχύτητα κορεσμού οπών παράλληλα και κάθετα στον c -άξονα. Συμπεριλαμβάνονται επίσης οι προσομοιώσεις της ταχύτητας κορεσμού όπως χρησιμοποιείται στο ATLAS.

Η εικόνα 3.6-11 αναδείκνυε το γεγονός ότι συμπεράσματα για την μεταβολή της ταχύτητας διάχυσης με το ηλεκτρικό πεδίο δεν μπορούν να εξαχθούν λόγω έλλειψης πειραματικών σημείων. Πράγματι, για την περίπτωση των οπών δεν υπάρχουν πειραματικά αποτελέσματα. Για ταχύτητες διάχυσης ηλεκτρονίων στις κατευθύνσεις παράλληλα με το c -άξονα υπάρχουν μόνο δύο μετρήσεις από διαφορετικές επιστημονικές ομάδες. Το σημείο του “Vassilevski” [83] είναι κοντά στην θεωρητική καμπύλη του “Nilsson1”, που θεωρεί ότι δεν υπάρχει κορεσμός της ταχύτητας διάχυσης αλλά ότι έχει μορφή καμπάνας. Αυτή η μορφή καμπάνας της καμπύλης δεν δικαιολογείται από φυσικής άποψης και περαιτέρω πειραματικές σημεία είναι αναγκαία. Μόνο στη περίπτωση της

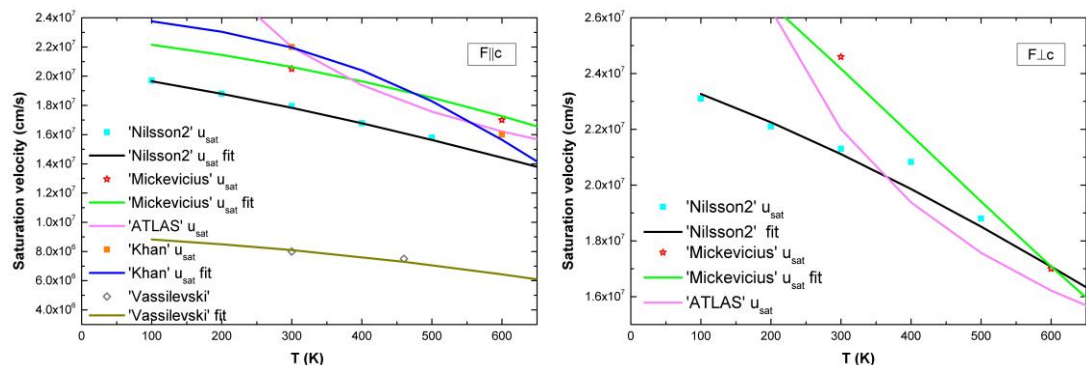
ταχύτητας διάχυσης κάθετα στον άξονα c υπάρχει μια συστηματική μελέτη για ηλεκτρικά πεδία (“Khan” [84]) μέχρι $5 \cdot 10^5$ V/cm και ανάγκη για περισσότερη μελέτη για υψηλότερα πεδία είναι αναγκαία. Οι ίδιοι συγγραφείς έχουν προσαρμόσει τα αποτελέσματα τους σύμφωνα με την εξίσωση (3.6.12) και οι παράμετροι αυτής της προσαρμογής φαίνονται στο πίνακα 3.6-3. Οι παράμετροι και οι καμπύλη της ταχύτητας διάχυσης που προκύπτει συμπίπτουν με την καμπύλη και τους παραμέτρους που χρησιμοποιείται από το ATLAS, οπότε θα χρησιμοποιηθούν οι τιμές $u_{\text{sat}}=2.2 \cdot 10^7$ cm/s, $\beta^{300}=1.2$ και $\mu_{\text{low},n}=400$ cm²/(Vs).

3.6.4.2 Μεταβολές της ταχύτητα κορεσμού στο 4H-SiC με συγκέντρωση

Δεν υπάρχουν συστηματικές ή πειραματικές μελέτες για την διεξαγωγή συμπερασμάτων. Για αυτό το λόγο υιοθετείται για το SiC η συμπεριφορά της μεταβολής της ταχύτητας κορεσμού με συγκέντρωση που παρατηρείται στο Si, δηλαδή υιοθετείται η άποψη ότι υπάρχουν μικρές διαφορές στη ταχύτητα κορεσμού για όλες τις πιθανές συγκεντρώσεις [89].

3.6.4.3 Μεταβολές της ταχύτητα κορεσμού στο 4H-SiC με θερμοκρασία

Όπως και στην περίπτωση της παραγράφου 3.6.4.2 δεν υπάρχουν συστηματικές ή πειραματικές μελέτες για την διεξαγωγή συμπερασμάτων. Υπάρχουν λίγες πειραματικές μετρήσεις (βλέπε εικόνα 3.6-12) πάνω στην μεταφορά ηλεκτρονίων. Μοντελοποιήσαμε τις μεταβολές της ταχύτητας διάχυσης χρησιμοποιώντας την εξίσωση (3.6.14), ενώ η χρήση της (3.6.16) δεν είναι δυνατόν, μια που δεν είναι προφανές εάν η ταχύτητα ηλεκτρονίου θα κορεστεί. Για τις τιμές ταχύτητες κορεσμού θεωρήθηκαν οι τιμές στην εικόνα 3.6-11. Για να είμαστε συνεπής για τον υπολογισμό της ταχύτητα διάχυσης θεωρήθηκε η σταθερή τιμή του ηλεκτρικού πεδίου να είναι $2 \cdot 10^5$ V/cm. Η προσαρμογή της (3.6.14) παρουσιάζεται στην εικόνα 3.6-12 και οι αντίστοιχους παραμέτρους στον πίνακα 3.6-3.



Εικόνα 3.6-12. Ταχύτητες διάχυσης σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Στις εικόνες φαίνονται οι πειραματικές και θεωρητικές τιμές, πηγές αυτών των τιμών είναι “Nilsson2”[87], “Mickevicius”[86], “ATLAS” [8] και “Khan”[84], και τέλος φαίνεται και η δική μας προσαρμογή στα δεδομένα. Οι δύο περιπτώσεις όπου η ταχύτητα διεύθυνση είναι κατά της διεύθυνσης παράλληλα και κάθετα στον άξονα c αναλύονται σε ξεχωριστές εικόνες ($F \parallel c$ και $F \perp c$).

Τέλος παρουσιάζεται ο πίνακας με τις απαραίτητες τιμές για την μοντελοποίηση της μεταβολές της ταχύτητας διάχυσης με θερμοκρασία:

Βιβλιογραφία	μ_{lown}/μ_{lowp} (cm ² /Vs)	N (cm ⁻³)	$u_{nsat300}$ (cm/s)	$\beta^{300}_{n,p}$	$\gamma_{n,p}$	δ_n^{sat}	C	u^* (cm/s)	Θ (K)
"Nilsson1" E c	468.98/ 24.40	NA	2.13E+07	NA	NA	-0.123	-	-	-
"Nilsson2" E c	168.26/ 23.03	NA	1.79E+07	NA	NA	-0.062	-	-	-
"Mickevicius" E c	264.61/ NA	1.5E17 (N _p)	2.46E+07	NA	NA	-0.53	-	-	-
"Mickevicius" E c	208.11/ NA	1.5E17 (N _p)	2.02E+07	NA	NA	-0.27	-	-	-
"Khan" E c	387.76/ NA	1E17 (N _d)	2.20E+07	1.2	0.88	-0.446	-	-	-
"Vassilevski"	NA	1E17 (N _d)	NA	NA	NA	NA	-	-	-
"Sankin"	NA	1E17 (N _d)	NA	NA	NA	NA	-	-	-
ATLAS 4H-SiC n-type E c & E c	470	1E17 (N _d)	2.20E+07	1*/1.2	1	-0.44	-	-	-
ATLAS 4H-SiC p-type E c & E c	115	1E17 (N _a)	1.00E+07	2*/1.2	NA	-0.44	-	-	-

Πίνακας 3.6-3. Παράμετροι για την μοντελοποίηση της μεταβολής της ταχύτητας διάχυσης με θερμοκρασία. Σημειώστε ότι χρησιμοποιούνται δυο τιμές για την παράμετρο β ανάλογα εάν χρησιμοποιείται για τη β η τροποποίηση Canali ή μια σταθερή τιμή. Επίσης στο ATLAS δεν λαμβάνεται υπόψη η κατεύθυνση της ταχύτητας διάχυσης. Οι βιβλιογραφίες, εκτός από τις "Vassilevski" [83] και "Sankin" [82], είναι ίδιες με αυτές που διατυπώνονται στη εικόνα 3.6-12.

3.6.4.4 Διατύπωση του ATLAS της ταχύτητας διάχυσης σε υψηλό ηλεκτρικό πεδίο

Η ευκινησία εξαρτάται από το ηλεκτρικό πεδίο και ως εκ τούτου στην ταχύτητα κορεσμού όπως περιγράφεται από την εξίσωση (3.6.13), και αυτό περιγράφεται στο ATLAS ως

$$\mu_n(E) = \mu_{n0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{n0} E}{VSATN} \right)^{BETAN}} \right]^{\frac{1}{BETAN}}, \quad \mu_p(E) = \mu_{p0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{p0} E}{VSATP} \right)^{BETAP}} \right]^{\frac{1}{BETAP}} \quad (3.6.18)$$

όπου

- $\mu_{n,p0}$ [cm².v⁻¹.s⁻¹] : Ευκινησία χαμηλού πεδίου
- E [V.cm⁻¹] : Ηλεκτρικό πεδίο
- VSATN/VSATP : Ταχύτητες κορεσμού των ηλεκτρονίων και οπών
- BETAN/BETAP : Συντελεστής μορφής της καμπύλης

Στο ATLAS οι παράμετροι BETAN και BETAP είναι οι παράμετροι $\beta_{n,p}$ στην (3.6.15). Αυτοί οι παράμετροι μπορούν να έχουν δυο τιμές, είτε σταθερές τιμές είτε τιμές που προέρχονται από μοντέλο Caughey-Thomas και τότε έχουν τιμές BETAN=1 και BETAP=2. Ο άλλος τρόπος είναι να ορισθεί η παράμετρος $\beta_{n,p}$ (BETAN, BETAP) με την ονομαζόμενη τροποποίηση Canali, βλέπε εξίσωση (3.6.15):

$$BETAN = N.BETA0 * \left(\frac{T_L}{300} \right)^{(N.BETAEXP)}, \quad BETAP = P.BETA0 * \left(\frac{T_L}{300} \right)^{(P.BETAEXP)} \quad (3.6.19)$$

Για να ενεργοποιηθεί η τροποποίηση Canali της παράμετρος $\beta_{n,p}$ πρέπει να ορισθούν η παράμετρος P.CANALI για BETAP και η παράμετρος για N.CANALI για BETAN στην δήλωση MOBILITY. Σημειώστε ότι η τροποποίηση Canali δεν εφαρμόζεται εάν δεν ορισθεί πρώτα. Ο πίνακας 3.6-3 περιέχει τις προκαθορισμένες τιμές για τις παραμέτρους των εξισώσεων (3.6.18) και (3.6.19).

Η προσέγγιση του ATLAS για την μοντελοποίηση το κορεσμού της ταχύτητας διάχυσης γίνεται σύμφωνα με την εξίσωση (3.6.16):

$$VSATN = \frac{ALPHAN.FLD}{1 + THETAN.FLD \exp\left(\frac{T_L}{TNOMN.FLD}\right)} \quad (3.6.20)$$

$$VSATP = \frac{ALPHAP.FLD}{1 + THETAP.FLD \exp\left(\frac{T_L}{TNOMP.FLD}\right)} \quad (3.6.21)$$

Οι παράμετροι των εξισώσεων (3.6.20) και (3.6.21) έχουν προκαθορισμένες τιμές που είναι ίδιες με αυτές που ισχύουν στην περίπτωση του Si [29]. Εάν επιθυμείται αλλαγή των τιμών τότε πρέπει να ορισθούν στους παραμέτρους των (3.6.20) και (3.6.21) νέες τιμές. Οι εξισώσεις (3.6.20) και (3.6.21) δεν ισχύουν για το 4H-SiC. Η ταχύτητα κορεσμού μοντελοποιείται σύμφωνα με τη σχέση (3.6.22) όπου συμπεριλαμβάνεται οι μεταβολή της ταχύτητας διάχυσης με τη θερμοκρασία. Έτσι χρησιμοποιείται η

$$u_n = ALPHAN.FLD \left(\frac{T_L}{TNOM.FLD}\right)^{DELTAN.FLD} \quad (3.6.22)$$

αντί των σχέσεων (3.6.20) και (3.6.21). Η (3.6.22) έχει παραμέτρους που παρουσιάζονται στο παρακάτω πίνακα

ALPHAN.FLD	TNOMN.FLD	DELTAN.FLD	N.BETA0	N.BETAEXP
$u_{nsat300}$	Θ	$\delta_{n,p}$	$\beta_{n,p}^{300}$	$\gamma_{n,p}$

Πίνακας 3.6-4. Συμβολισμοί για τους παραμέτρους στο ATLAS που μοντελοποιούν την μεταβολή της ταχύτητας κορεσμού για 4H-SiC. Εδώ δίνονται οι αντιστοιχίες μεταξύ των συμβόλων στο ATLAS και των συμβολισμών που χρησιμοποιούνται στο πίνακα 3.6-3.

Εναλλακτικά ο κορεσμός της ταχύτητας διάχυσης μπορεί να τεθεί απευθείας χωρίς την χρήση των εξισώσεων (3.6.20), (3.6.21) ή (3.6.22). Επιλέγοντας την απευθείας ανάθεση ο κορεσμός της ταχύτητας διάχυσης είναι σταθερά και δεν αλλάζει με θερμοκρασία. Η απευθείας ανάθεση γίνεται με τον ορισμό των παραμέτρων VSATN και VSATP στην δήλωση MOBILITY.

3.7 Δημιουργία-επανασύνδεση φορέων

Η δημιουργία και επανασύνδεση φορέων προκαλούνται από το γεγονός ότι οι φορείς αποκτούν ή εκπέμπουν ενέργεια μέσω απορρόφησης θερμικής ενέργειας ή μέσω αλληλεπιδράσεων σωματιδίων. Έτσι διαταράσσεται η ισορροπία και μέσω κάποιων μηχανισμών επαναφέρεται η ισορροπία. Η διάκριση μεταξύ των διάφορων μηχανισμών γίνεται μέσω του τρόπου κατανάλωσης ή μεταφοράς της ενέργειας. Υπάρχουν τέσσερις μηχανισμοί: Shockley-Read-Hall διαδικασία, εκπομπή φωτονίων, επανασύνδεση Auger, επιφανειακή δημιουργία και επανασύνδεση φορέων. Κάθε μηχανισμός μετατρέπει την ενέργεια με τον δικό του τρόπο:

3.7.1 Shockley-Read-Hall διαδικασία (δημιουργία και επανασύνδεση φορέων)

Για ημιαγωγούς έμμεσου χάσματος, όπως το 4H-SiC, μια άμεση επανασύνδεση είναι μια απίθανη διαδικασία, επειδή τα ηλεκτρόνια στο κάτω μέρος της ζώνης αγωγιμότητας έχουν μη μηδενική ορμή σε σχέση με τις οπές στο πάνω μέρος της ζώνης σθένους. Μια άμεση μετάβαση του φορέα με διατήρηση της ενέργειας και της ορμής δεν είναι δυνατόν χωρίς την ταυτόχρονη αλληλεπίδραση με το πλέγμα. Επομένως η κυρίαρχη διαδικασία

επανασύνδεσης σε ημιαγωγούς έμμεσου χάσματος γίνεται μέσω τοπικών ενεργειακών καταστάσεων στη απαγορευμένη ζώνη του ενεργειακού χάσματος. Οι ενεργειακές καταστάσεις λειτουργούν σαν εφελτήριο μεταξύ της ζώνης αγωγιμότητας και της ζώνης σθένος. Η πιθανότητα μετάβασης εξαρτάται από τις ενεργειακές διαφορές μεταξύ του εφελτηρίου και των ζωνών. Οι ενδιάμεσες ενεργειακές καταστάσεις (το εφελτήριο), που είναι κατά ουσία παγίδες, που δημιουργήθηκαν από προσμίξεις, ατέλειες κτλ., ονομάζονται κέντρα δημιουργίας και επανασύνδεσης, ή απλά παγίδες.

Εάν, όπως αναφέρθηκε παραπάνω, το σύστημα είναι εκτός ισορροπίας ($n_i \neq pn$) η επανασύνδεση φορέων λειτουργεί ανασταλτικά, δηλαδή καταστρέφει φορείς που δημιουργήθηκαν μέσω οπτικών ή θερμικών διαδικασιών. Αυτό επιτυγχάνεται με την παγίδευση φορέων στα κέντρα δημιουργίας και επανασύνδεσης. Η διαδικασία αυτή χρειάζεται έναν συγκεκριμένο χρόνο που ονομάζεται χρόνος επανασύνδεσης. Ο χρόνος επανασύνδεσης είναι ακόμη υπό έρευνα, βλέπε [90] και [91]. Είναι σημαντικό να ελέγχεται ο χρόνος ζωής επανασύνδεσης (τ_r) ώστε να υπάρχουν ομοίμορφα ηλεκτρονικά χαρακτηριστικά στην διάταξη. Οι Klein et al. αποδείξαν ότι οι ενδογενής ατέλειες $Z_{1/2}$ περιορίζουν το χρόνο επανασύνδεσης [92]. Άλλες δημοσίευσεις προτείνουν ότι δυο ατέλειες $Z_{1/2}$ και $E_{H6/7}$ περιορίζουν το χρόνο επανασύνδεσης, βλέπε [91], [93] και [94].

Η δημιουργία φορέων είναι η διαδικασία αναπλήρωσης φορέων στην ζώνη αγωγιμότητας και σθένος, και αυτό παρατηρείται ιδιαίτερα στη περιοχή απογύμνωσης μιας ανάστροφης πολωμένης δίοδος. Η δημιουργία των φορέων γίνεται στα κέντρα (παγίδες) δημιουργίας και επανασύνδεσης, όπου εκπέμπονται στις ζώνες. Η διαδικασία αυτή χρειάζεται έναν συγκεκριμένο χρόνο, το χρόνο δημιουργίας τ_g .

Τα χαρακτηριστικά των κέντρων δημιουργίας και επανασύνδεσης εξαρτώνται από την εκάστοτε διαθέσιμη τεχνολογία και για αυτό το λόγο συχνά συνδυάζονται οι χρόνοι δημιουργίας και επανασύνδεσης ηλεκτρονίων και οπών σε έναν ενεργό ρυθμό δημιουργίας και επανασύνδεσης, που λέγεται SRH ρυθμός. Ο παρακάτω ρυθμός δημιουργίας και επανασύνδεσης σε κατάσταση ισορροπίας είναι μια παραλλαγή της κανονικής μορφής του ρυθμού SRH [95]:

$$\tau_{SRH} = R_{SRH} = -G_{SRH} = \frac{(np - n_{ie}^2)}{[t_p(n + n_0) + t_n(p + p_0)]} \quad (3.7.1)$$

όπου:

- n, p η συγκέντρωση ηλεκτρονίων και οπών,
- n_0, p_0 και n_i , οι ενδογενής συγκέντρωση ηλεκτρονίων και οπών, που περιγράφονται συχνά ως $n_0(p_0) = n_{ie} \exp(E_{TRAP}/k_B T_L)$ όπου $E_{TRAP} = (-)(E_T - E_{C(V)})$, η θέση της ενέργειας παγίδευσης σχετικά με την ενέργεια στο ενδιάμεσο του ενεργειακού χάσματος E_i .
- t_n είναι ο χρόνος ζωής ηλεκτρονίων όταν όλα τα κέντρα είναι άδεια,

$$\tau_n = \frac{1}{\sigma_n v_{th(n)} N_T} \quad (3.7.2)$$

- t_p είναι ο χρόνος ζωής οπών όταν όλα τα κέντρα είναι καταλυμένα από ηλεκτρόνια,

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_p v_{th(p)} N_T} \quad (3.7.3)$$

όπου τ_n και τ_p :

- $\sigma_{n,p}$ η διατομή της παγίδας για ηλεκτρόνια και οπές

- $v_{th(n,p)} = 3k_B T_L / m_{n,p}$ (3.7.4): Η τρισδιάστατη θερμική ταχύτητα των ηλεκτρονίων και οπών
- N_T = συγκέντρωση της παγίδας (trap)

Χρόνος επανασύνδεσης

Ο χρόνος επανασύνδεσης μπορεί να μετρηθεί οπτικά ή ηλεκτρικά. Οι πιο χρησιμοποιημένες μέθοδοι είναι οι οπτικές μετρήσεις: Photoconductance Decay (PCD), Quasi-Steady-State Photoconductance (QSSPC), Short-Circuit Current/Open-Circuit Voltage Decay (SCCD/ OCVD), time-resolved photoluminescence (TRPL), Photoluminescence Decay (PLD), Surface Photo-voltage (SPV), Steady-State Short-Circuit Current (SSSCC), transient free carrier absorption (TFCA) και Electron Beam Induced Current (EBIC).

Ηλεκτρικές μετρήσεις είναι οι Diode Current-Voltage, Re-verse Recovery (RR), Open-Circuit Voltage Decay (OCVD) και Pulsed MOS Capacitor.

Εφόσον ο SiC ημιαγωγός έμμεσου χάσματος, μεγάλους χρόνους ζωής παρατηρούνται σε σχέση με εκείνους που υπάρχουν στο Si. Ο πίνακας 3.7-1 περιέχει τους πειραματικούς μετρημένους χρόνους επανασύνδεσης από διαφορετικούς επιστημονικούς ομάδες.

Βιβλιογραφία	Μέθοδος	i-Εύρος (μm)	i-Συγκέντρωση (cm^{-3})	τ_{SRH} (μs)
"Ichikawa"	μ -PCD	220.0	n-type	33.2
"Sundaresan"	OCVD	90.0–95.0	n-type, $3E14$	2.0
"Kimoto"	μ -PCD	148.0	n-type	9.5
"Klein"	PLD, TFCA, TRPL	40.0, 100.0, 160.0	n-type	50.0
"Chung"	μ -PCD	30.0	$2E+15$	0.4-5
"Kato"	μ -PCD	–	p-type	1.0
"Jenny"	MPCD	350.0	n-type, $1E15$	1.0–2.0
"Jawad-ul-Hassan"	Optical	20.0–110.0	n-, p-type	0.6–1.0
"Huh"	PLD	9.0–104.0	n-type	0.4–1.8
"Danno"	μ -PCD	50.0	n-type	2.0
"Grivickas"	FCA	90.0	n-type	1.9–2.2
"Kordina"	PL	45.0	n-type	2.1

Πίνακας 3.7-1 Πειραματικές μετρημένους χρόνους επανασύνδεσης από διαφορετικούς επιστημονικές ομάδες. Οι βιβλιογραφίες στο πίνακα είναι "Ichikawa"[96], "Sundaresan"[97], "Kimoto"[98], "Klein"[92], "Chung"[99], "Kato"[100], "Jenny"[101], "Jawad-ul-Hassan"[102], "Huh"[94], "Danno"[103], "Grivickas"[104] και "Kordina" [105].

Οι ατέλειες που επηρεάζουν τον χρόνο επανασύνδεσης μελετήθηκαν από διαφορετικές επιστημονικές ομάδες [93], [92] και [94]. Πρόσφατα περισσότερες ομάδες υιοθετούν την άποψη ότι οι παγίδες $Z_{1/2}$ είναι πιο σημαντικές για το χρόνο επανασύνδεσης αντί των παγίδες EH6/7. Ειδικότερα οι Klein et al. [106] συμπεραίνουν ότι οι παγίδες $Z_{1/2}$ επηρεάζουν τον συνολικό χρόνο ζωής και ότι ελέγχεται από βαθιά κέντρα επανασύνδεσης. Σε υψηλές συγκεντρώσεις έγχυσης, ο συνολικός χρόνος ζωής θα είναι μεγαλύτερος για τύπου n δείγματα, λόγω των παγίδων ηλεκτρονίων που υπάρχουν στο πάνω μέρος του ενεργειακού χάσματος. Εάν όμως η επιφανειακή επανασύνδεση ελέγχει το συνολικό χρόνο ζωής, υψηλές συγκεντρώσεις έγχυσης είναι πιθανόν μειώσουν το συνολικό χρόνο ζωής, και αυτό λόγω ότι το επιφανειακό φράγμα, που δημιουργείται από κύρτωση του δυναμικού κοντά στη επιφάνεια, μειώνει τη επιφανειακή επανασύνδεση. Στο δημοσίευμα [106] δηλώνεται ότι εάν οι συγκεντρώσεις είναι λιγότερο από 10^{18} cm^{-3} , η επιφανειακή επανασύνδεση κυριαρχεί, ενώ στην αντίθετη περίπτωση ($\Delta N > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) η Auger επανασύνδεση κυριαρχεί.

Χρόνος δημιουργίας

Ελάχιστα δημοσιεύματα για το χρόνο ζωής δημιουργίας υπάρχουν. Τα ακόλουθα συμπεράσματα για τις τιμές του χρόνου ζωής δημιουργίας βασίζονται σε δυο πηγές, την [107] και την [108]. Σύμφωνα με την [108] ο χρόνος επανασύνδεσης είναι:

$$\tau_r = \tau_p + \tau_n \quad (3.7.5)$$

όπου τ_r είναι ο χρόνος επανασύνδεσης και εξαρτάται από το βαθμό έγχυσης των φορέων.

Σε υψηλό βαθμό έγχυσης:

$$\tau_r = \tau_p + \tau_n \quad (3.7.6)$$

Σε χαμηλό βαθμό έγχυσης:

$$\tau_r = \tau_n \quad \text{n-τύπος}, \quad \tau_r = \tau_p \quad \text{p-τύπος} \quad (3.7.7)$$

Από [108] ο χρόνος δημιουργίας περιγράφεται ως:

$$\tau_g = \tau_p \exp\left(\frac{E_T - E_i}{kT}\right) + \tau_n \exp\left(-\frac{E_T - E_i}{kT}\right) \quad (3.7.8)$$

το οποίο γράφεται και στην μορφή:

$$\tau_g \approx 2\tau_r \sqrt{\frac{\sigma_n}{\sigma_p}} \cosh\left(\frac{E_T - E_i}{kT}\right) \xrightarrow{\text{if } \sigma_n = \sigma_p} \tau_g \approx \tau_r \exp\left(\frac{|E_T - E_i|}{kT}\right) \quad (3.7.9)$$

Η εξίσωση (3.7.9) δηλώνει ότι η διατομή των οπών και ηλεκτρονίων είναι ίσα, ο λόγος των χρόνων δημιουργίας καθορίζεται κυρίως από $|E_T - E_i|$, και εξαρτάται από το χρόνο επανασύνδεσης τ_r . Γενικά εάν το ηλεκτρικό πεδίο είναι ισχυρό, ο ρυθμός επανασύνδεσης και δημιουργίας (SRH) θα αυξηθεί σημαντικά. Τα περισσότερα δημοσιεύματα αγνοούν το γεγονός του υψηλού ηλεκτρικού πεδίου και συγκεντρώνονται στο χρόνο επανασύνδεσης.

Οι χρόνοι ζωής στα υποστρώματα 4H-SiC μετρήθηκαν πειραματικά από [108] και είναι μεταξύ 1 μέχρι 1000 ns. Όπως προτάθηκε από [108], οι τιμές των χρόνων δημιουργίας και επανασύνδεσης στο 4H-SiC επηρεάζονται από διαφορετικά ελαττώματα. Για μια πλήρη περιγραφή των χρόνων δημιουργίας απαιτούνται περισσότερες πειραματικές μετρήσεις.

Μοντέλο ρυθμού SRH εξαρτώμενος από συγκέντρωση

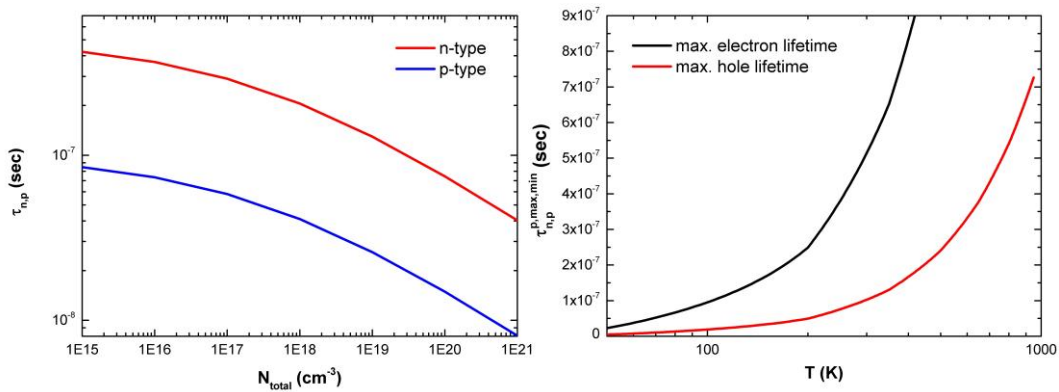
Το μοντέλο αυτό υπολογίζει το χρόνο ζωής SRH βάση του βαθμού συγκέντρωσης προσμίξεων. Το μοντέλο είναι ένα ημι-εμπειρικό μοντέλο, που δημιουργήθηκε βάση πειραματικών παρατηρήσεων στο Si, βλέπε [109] και [110]. Αυτό το ημι-εμπειρικό μοντέλο ονομάζεται Scharfetter μοντέλο:

$$\tau_{n,p}(N, T_L) = \tau_{n,p}^{\min}(T_L) + \frac{\tau_{n,p}^{\max}(T_L) - \tau_{n,p}^{\min}(T_L)}{1 + \left(\frac{N_D + N_A}{N_{n,p}^{SRH}}\right)^{\gamma_{n,p}^{SRH}}} \quad (3.7.10)$$

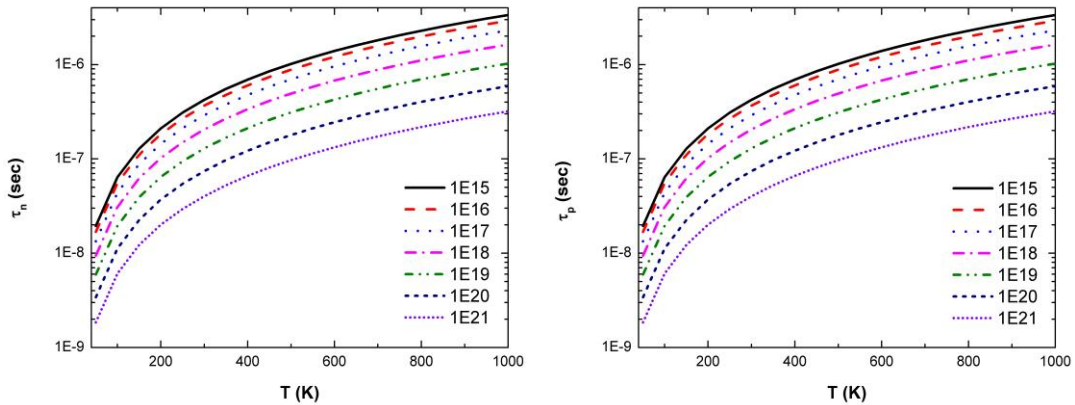
όπου ο ελάχιστος χρόνος ζωής για τους περισσότερους ημιαγωγούς ορίζεται στο 0 και ο μέγιστος χρόνος ζωής εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Αυτό μοντελοποιείται με συνάρτηση που περιέχει την θερμοκρασία σε δύναμη που τροποποιεί μια σταθερή αναφορά του χρόνου ζωής στους 300 K:

$$\tau_{n,p}^{\max}(T_L) = \tau_{n,p}(300) \left(\frac{T_L}{300K}\right)^{\alpha_{n,p}^{SRH}} \quad (3.7.11)$$

όπου $\alpha_{n,p}^{SRH}$ και $\gamma_{n,p}^{SRH}$ είναι παράμετροι προσαρμογής που εξαρτώνται από παράγοντες κατά την διεργασία του υλικού. Για 4H-SiC οι αναφερόμενοι παράγοντες ορίζονται στο [111] για $\alpha_{n,p}^{SRH} = 1.72$ και $\gamma_{n,p}^{SRH} = 0.3$ με $N_{n,p}^{SRH} = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Σύμφωνα με [111], $\tau_{n,p}(300)$ ορίζονται να είναι $\tau_n(300) = 5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ και $\tau_p(300) = 1 \cdot 10^{-7} \text{ s}$.



Εικόνα 3.7-1. Το Scharfetter μοντέλο. Στην αριστερή εικόνα απεικονίζεται η εξάρτηση του χρόνου ζωής από συγκεντρώσεις προσμίξεων τύπου n και p. Στην δεξιά εικόνα απεικονίζονται οι μεταβολές του μέγιστου και ελάχιστου χρόνου ζωής με την θερμοκρασία.



Εικόνα 3.7-2. Μεταβολές στο Scharfetter μοντέλο των χρόνων ζωής τ_n και τ_p με θερμοκρασία και με συγκέντρωση.

3.7.2 Εκπομπές φωτονίων (οπτική επανασύνδεση)

Κατά την οπτική επανασύνδεση διασπάτε ένα δίπολο, που αποτελείται από ένα ηλεκτρόνιο και μιας οπής, και αυτό οδηγεί στη εκπομπή ενός φωτονίου με ενέργεια κοντά σε αυτό του ενεργειακού χάσματος. Εάν οι φορείς έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από το ενεργειακό χάσμα, η πλεονάζουσα ενέργεια απελευθερώνεται σαν θερμική ενέργεια στο πλέγμα. Ο ρυθμός οπτικής επανασύνδεσης εξαρτάται από την διαθεσιμότητα των φορέων και δίνεται ως:

$$U_{RAD} = \beta(np - n_i^2) \quad (3.7.12)$$

όπου β είναι ο συντελεστής οπτικής επανασύνδεσης.

Ο χρόνος ζωής της οπτικής επανασύνδεσης είναι σταθερά σε χαμηλό βαθμό έγχυσης, ενώ είναι αντίστροφα ανάλογα με την πλεονάζουσα πυκνότητα φορέων που υπάρχει σε υψηλά επίπεδα συγκεντρώσεων. Συνδυάζοντας την (3.7.12) με την έκφραση:

$$n = n_0 + \Delta_n \approx N_D + \Delta_n \quad (3.7.13)$$

$$p = p_0 + \Delta p \approx N_A + \Delta_p \quad (3.7.14)$$

όπου n_0 , p_0 είναι οι συγκεντρώσεις των ηλεκτρονίων και οπών σε κατάσταση ισορροπίας, N_D , N_A είναι οι συγκεντρώσεις των δοτών και αποδεκτών, και Δ_n , Δ_p η πλεονάζουσα συγκέντρωση ηλεκτρονίων και οπών ανά όγκο.

Οι χρόνοι ζωής της οπτικής επανασύνδεσης ορίζονται ως:

$$\tau_{RAD}^{low} = \frac{1}{\beta N_{D,A}} \quad (3.7.15)$$

$$\tau_{RAD}^{high} = \frac{1}{\beta \Delta n} \quad (3.7.16)$$

Εφόσον SiC είναι έμμεσου χάσματος, όπως το Si, η διαδικασία οπτικής επανασύνδεσης πρέπει να εμπλέκει ένα φωτόνιο και ένα φωνόνιο για μη παραβιάζεται η διατήρηση της ορμής και ενέργειας. Έτσι η οπτική διαδικασία είναι μια πολύ απίθανη στο SiC, και για αυτό αγνοείται στις περισσότερες περιπτώσεις.

3.7.3 Επανασύνδεση Auger

Ο βαθμός επανασύνδεσης Auger σε κατάσταση ισορροπίας γράφεται:

$$R_a = G_0 = C_n n_0^2 p_0 + C_p p_0^2 n_0 \quad (3.7.17)$$

Σε διαταραχή της ισορροπίας, ο ρυθμός επανασύνδεσης Auger είναι:

$$r_A = C_n n^2 p + C_p p^2 n \quad (3.7.18)$$

Ο συνολικός ρυθμός επανασύνδεσης σε κατάσταση ισορροπίας αποκτιέται από τις εξισώσεις (6.42) και (6.43):

$$U_A = r_A - G_0 = C_n (n^2 p - n_0^2 p_0) + C_p (p^2 n - p_0^2 n_0) \quad (3.7.19)$$

όπου C_n και C_p οι συντελεστές πιθανότητας κατάληψης τρίτου φορέα (ηλεκτρόνιο ή οπή). Και οι δυο συντελεστές C_n και C_p υπολογίζονται από την αντίστροφη διαδικασία τους που λέγεται ιονισμός πρόσκρουσης. Σε θερμική ισορροπία, ο ρυθμός στον οποίο οι φορείς «καταστρέφονται» μέσω Auger επανασύνδεσης είναι ίσος με το ρυθμό δημιουργίας, που είναι ο μέσος όρος της κατανομής Boltzmann μέσα στην οποία δημιουργούνται τα δίπολα (ζευγάρι από ηλεκτρόνιο-οπή) μέσω ιονισμού πρόσκρουσης. Έτσι

$$C_n n_0^2 = \int_0^{\infty} P(E) (dn / dE) dE \quad (3.7.20)$$

όπου $P(E)$ είναι η πιθανότητα ανά μονάδα χρόνου, στον οποίο ένα ηλεκτρόνιο με ενέργεια E προκαλεί ιονισμό, και περιγράφεται από:

$$P(E) = (mq^4 / 2h^3) V (E/E_t - 1)^d \quad (3.7.21)$$

όπου $V < 1$ είναι μια παράμετρος, που είναι μια περίπλοκη συνάρτηση δομής των ζωνών του ημιαγωγού. Ο εκθέτης d είναι ένας ακέραιος αριθμός, που προέρχεται από τη συμμετρία του κρύσταλλου στο χώρο της ορμής που σε αυτήν την κατάσταση έχει μια ενέργεια κατωφλίου E_t . Η τιμή της E_t για ιονισμό πρόσκρουσης είναι γύρω στους $1.5E_g$, όπου E_g είναι η ενέργεια χάσματος του ημιαγωγού. Με αντικατάσταση της εξίσωσης (6.46) στη εξίσωση (6.45) λαμβάνεται το αποτέλεσμα:

$$n_i^2 C_n = \left(\frac{d}{\sqrt{(\pi)}} \right) \left(\frac{mq^4}{h^3} \right) V \left(\frac{k_B T}{E_t} \right)^{(d-1/2)} \exp(-E_t / k_B T) \quad (3.7.22)$$

Η εξίσωση (3.7.22) επιδεικνύει ότι ο συντελεστής κατάληψης Auger C_n για ηλεκτρόνια εξαρτάται εκθετικά από την θερμοκρασία και από το ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγού. Ο χρόνος ζωής Auger εξάγεται από την εξίσωση (3.7.19):

$$\tau_A = \frac{\Delta n}{U_A} = \frac{1}{n^2 C_n + 2n_i^2 (C_n + C_p) + p^2 C_p} \quad (3.7.23)$$

Υποθέτοντας ότι $C_n = C_p$ και $n = p = n_i$, τότε η εξίσωση (3.7.23) δείχνει ότι τ_A έχει μια μέγιστη τιμή $\tau_i = 1/6n_i C_n$ που ισχύει για τους ενδογενείς ημιαγωγούς. Για εξωγενείς ημιαγωγούς, τ_A είναι αντιστρόφως ανάλογα του τετραγώνου της πυκνότητας συγκέντρωσης των φορέων.

$$\tau_{AUG}^{low} = \frac{1}{C_{n,p} N_{D,A}^2} \quad (3.7.24)$$

Για την ενδογενή περίπτωση, ο χρόνος ζωής εξάγεται από τις εξισώσεις (3.7.22) και (3.7.23) με $d = 2$ και $C_n \neq C_p$, που αποδίνει την εξής εξίσωση:

$$\tau_{AUG}^{int} = \frac{1}{3n_i^2 (C_n + C_p)} = 3.6 \times 10^{-17} (E_i/k_B T)^{3/2} \exp(E_i/k_B T) \quad (3.7.25)$$

Η εξίσωση (3.7.25) αναδεικνύει ότι η χρόνος ζωής Auger της ενδογενούς περίπτωσης είναι μια εκθετική συνάρτηση της θερμοκρασίας με ενέργεια ($E_i \sim 1.5E_g$). Η θερμοκρασιακή εξάρτηση είναι πιο ισχυρή στην εξωγενή περίπτωση παρά στην ενδογενή περίπτωση. Πάραυτα ο χρόνος ζωής της Auger μπορεί να εξαχθεί από μετρήσεις του συνολικού χρόνου ζωής σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία. Για υψηλές συγκεντρώσεις η εξίσωση (3.7.23) προβλέπει ότι ο χρόνος ζωής Auger είναι αντιστρόφως ανάλογος του τετραγώνου της πυκνότητας συγκέντρωσης των φορέων πλειονότητας. Τιμές για τους συντελεστές για Si και Ge είναι $C_n = 2.8 \times 10^{-31}$ και $C_p = 10^{-31}$ cm⁶/sec για Si, $C_n = 8 \times 10^{-32}$ και για Ge $C_p = 2.8 \times 10^{-31}$ cm⁶/sec. Λόγω των χαμηλών τιμών η επανασύνδεση Auger είναι μια απίθανη διαδικασία σε ενδογενούς ημιαγωγούς, εκτός από την περίπτωση εάν το ενεργειακό χάσμα είναι μικρό όπως στο InSb. Παρατηρείται ότι ο χρόνος ζωής Auger στο Si για υψηλή συγκέντρωση τύπου n γύρω στους 10^{19} cm⁻³ μειώνεται δραστικά σε 10^{-8} sec. Σε υψηλή έγχυση (δηλαδή $n_o, p_o \ll \Delta n = \Delta p$) η επανασύνδεση Auger είναι δυνατόν να γίνει ο κυρίαρχος μηχανισμός επανασύνδεσης και τότε θα ισχύει:

$$\tau_{AUG}^{high} = \frac{1}{\Delta n^2 (C_n + C_p)} = \left(\frac{3n_i^2}{\Delta n^2} \right) \tau_{AUG}^{int} \quad (3.7.26)$$

όπου τ_{AUG}^{int} είναι η ενδογενής χρόνος ζωής Auger, βλέπε εξίσωση (3.7.25). Για παράδειγμα σε ένα δείγμα γερμάνιο εάν η πυκνότητα συγκέντρωσης των εγχεόμενων φορέων είναι $\Delta n = 10^{18}$ cm⁻³ και $E_i = 1.0$ eV, ο χρόνος ζωής Auger τ_{AUG}^{int} υπολογίζεται από την εξίσωση (3.7.26), και βρίσκεται να είναι ίσο με 1 μsec. Για ημιαγωγούς με μικρό ενεργειακό χάσμα μικρές πυκνότητες συγκεντρώσεων καταστούν την επανασύνδεση Auger τον κυρίαρχο μηχανισμό επανασύνδεσης.

Το 1998 Galeckas et al. [112] έχουν διεξάγει τον ρυθμό επανασύνδεσης Auger σε 4H-SiC τύπου n. Αυτό το πετύχανε χρησιμοποιώντας προσαρμογές σε πειραματικές μετρήσεις που διεξήχθησαν μέσω της FCA μέθοδο. Η προσαρμογή βασίζεται στην εξίσωση που περιγράφει τον ρυθμό των φορέων του στιγμιαίο χρόνου ζωής, που δημιουργείται με οπτικά μέσα:

$$\frac{\partial N(z,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} - \gamma_1 N - \gamma_2 N^2 - \gamma_3 N^3 + G(z,t)$$

όπου οι συντελεστές $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ είναι ο ρυθμός SRH, ο ρυθμός διμοριακής επανασύνδεσης και Auger επανασύνδεσης αντίστοιχα. Μια παρόμοια προσέγγιση με αυτήν των Galeckas et al. έχει διεξαχθεί από Jarasiunas et al. [113] το 2010, αλλά με διαφορετικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται στο πίνακα 3.7-2.

Υλικό	Βιβλιογραφία	Οπτική παράμετροι	Auger παράμετροι	
		cm^3/s	cm^6/s	cm^6/s
		β	C_n	C_p
Si		2.00E-15	2.80E-31	1.00E-31
Ge		5.20E-14	8.00E-32	2.80E-31
GaAs		1.70E-10	1.60E-29	4.60E-31
4H-SiC	"SiCros"	1.50E-12	7E-31 / (5±1)E-31	2.00E-31
	"Jarasiunas"	1.50E-12	(7±4)E-31	2.00E-31

Πίνακας 3.7-2. Διαφορετικές τιμές παραμέτρων για οπτικές και Auger επανασυνδέσεις. Αριθμοί με κόκκινα γράμματα αντιστοιχούν σε υψηλή συγκέντρωση τύπου n ($N_D > 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Η βιβλιογραφία στο πίνακα είναι "SiCros" [114] και "Jarasiunas" [113].

3.7.4 Επανασύνδεση στην επιφάνεια

Οι ελεύθεροι δεσμοί, όπως συμβαίνει συχνά μεταξύ δυο διαφορετικών περιοχών, προκαλούν ανάλογες ενεργειακές συνθήκες όπως στις περιπτώσεις SRH. Για αναλυτική ανάλυση βλέπε [1]. Η διαφορά είναι ότι ο ρυθμός της επιφανειακής επανασύνδεσης εκφράζεται και προστίθεται στο ρυθμό SRH σαν ταχύτητα, βλέπε (3.7.2) και (3.7.3).

$$t_{SRH_{n,p}} = \frac{1}{\sigma_{T_{n,p}} N_T u_{n,p300} + \frac{S_{n,p}}{y}} \quad (3.7.27)$$

Τα αποτελέσματα των [115] αναδεικνύουν ότι στα τελευταία χρόνια τα υποστρώματα 4H-SiC έχουν λιγότερα ελαττώματα στο εσωτερικό τους και γι αυτό τον λόγο η επιφανειακή επανασύνδεση μπορεί υπό προϋποθέσεις να υπερισχύει τις επανασυνδέσεις που πραγματοποιούνται στο εσωτερικό ενός 4H-SiC ημιαγωγού.

Βιβλιογραφίες	Μέθοδο	i-Εύρος	i-Συγκέντρωση	τ_s (cm/s)
Units		(μm)	(cm^{-3})	(cm/s)x1E3
"Klein"	PLD, TFCA, TRPL	40.0, 100.0, 160.0	n-type	2.0
"Huh"	PLD	9.0–104.0	n-type	2.5
"Grivickas"	FCA	90.0	n-type	11049.0

Πίνακας 3.7-3. Πειραματικές μετρήσεις χρόνου επανασύνδεσης. Η βιβλιογραφίες είναι "Klein" [90], "Huh" [94] και "Grivickas" [104].

Στο εσωτερικό ενός υλικού οι φορείς επανασυνδέονται είτε μέσω οπτικής είτε μέσω (διμοριακή) επανασύνδεσης είτε μέσω Auger επανασύνδεσης (γνωστό και σαν band-to-band επανασύνδεση) είτε μέσω δημιουργίας-επανασύνδεσης (Shockley-Read-Hall). Ο συνολικός χρόνος ζωής στο εσωτερικό του υλικού είναι το άθροισμα των χρόνων ζωής των επί μέρους μηχανισμών (οπτικής τ_{rad} , Auger τ_{Aug} και SRH τ_{SRH}). Ανάλογα με την γεωμετρία και την συγκέντρωση που έχει μια διάταξη ο κάθε μηχανισμός συμβάλλει διαφορετικά. Αυτό εκφράζεται μέσω του συνολικού χρόνου ζωής:

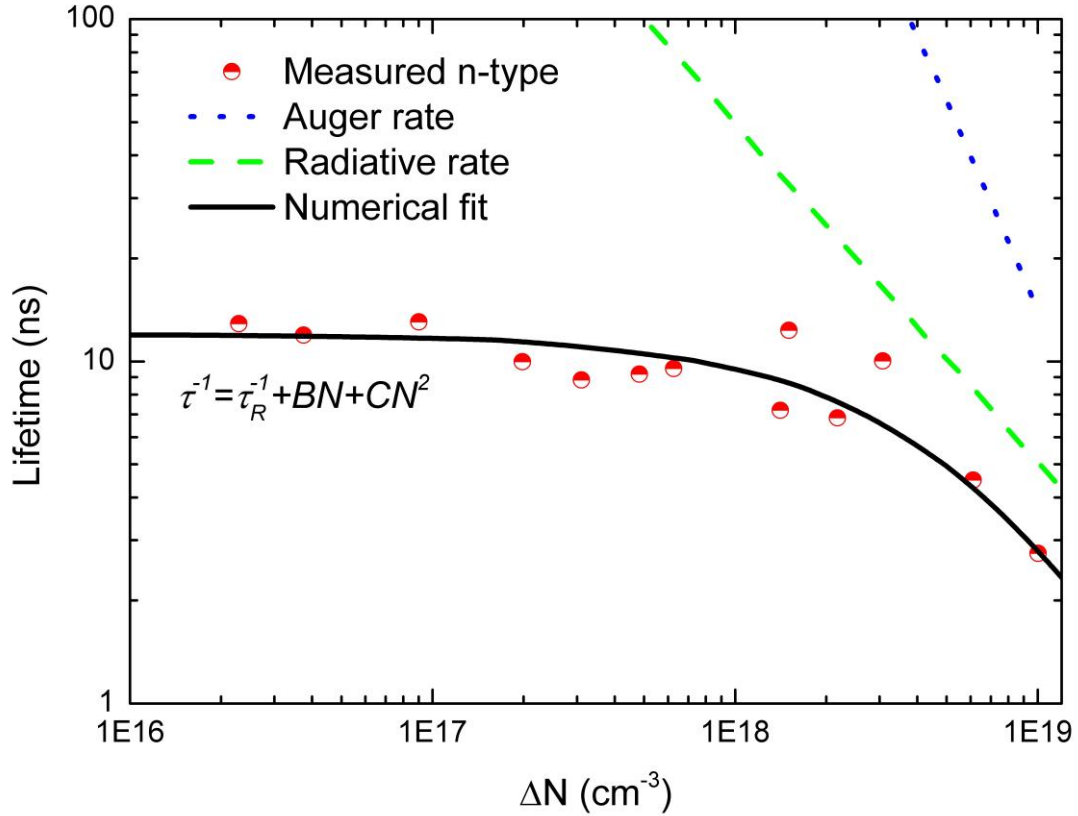
$$\tau_{\text{Bulk}} = \tau_{\text{eff}} = \frac{1}{\tau_{\text{SRH}}^{-1} + \tau_{\text{RAD}}^{-1} + \tau_{\text{AUG}}^{-1}} \quad (3.7.28)$$

Όπως προαναφέρθηκε παραπάνω η οπτική επανασύνδεση στο 4H-SiC είναι μικρή και δεν λαμβάνεται υπόψη. Η συνολικός χρόνος ζωής στο εσωτερικό του ημιαγωγού είναι σημαντικός για διατάξεις ισχύος, ιδιαίτερα στην περιοχή απογύμνωσης. Οι περισσότερες

επιστημονικές ομάδες έχουν μελετήσει είτε χαμηλό είτε υψηλό βαθμό έγχυσης φορέων. Για χαμηλό βαθμό έγχυσης φορέων οι περισσότερες επιστημονικές ομάδες συμφωνούν ότι ο μηχανισμός επανασύνδεσης SRH είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός. Στο δημοσίευμα [116] παρουσιάζεται το γεγονός ο συνολικός χρόνος ζωής είναι αντιστρόφως αναλόγως των ελαττωμάτων τύπου $Z_{1/2}$ ($Z_{1/2}$ centers). Οι συγκεντρώσεις των ελαττωμάτων $Z_{1/2}$ και EH6/7 μειώνονται δραστικά, σύμφωνα με [117], αυξάνοντας το λόγο C/Si κατά την επίταξη. Αυτό το γεγονός επιβεβαιώνεται και από μελέτες πάνω σε έλεγχο του συνολικού χρόνου ζωής με ακτινοβολίες ηλεκτρονίου [114, 118]. Προτάσεις για αύξηση του συνολικού χρόνου ζωής είναι με εμφύτευση C+ ατόμων με άμεση ανόπτηση [87], με άμεση παθητικοποίηση της επιφάνειας [90], ή με θερμική οξειδωση [113, 114]. Ένας άλλος τρόπος επέκτασης του συνολικού χρόνου ζωής είναι να αναπτύσσονται υποστρώματα με CVD χλωροσιλανίου [99].

Σε χαμηλό επίπεδο έγχυσης οι Klein et al. [106] απέδειξαν ότι στα άκρα του εσωτερικού αναπτύσσεται μια περιοχή απογύμνωσης και ο χρόνος ζωής επιφανειακής επανασύνδεσης (SRV) σε αυτά τα άκρα είναι ελάχιστος. Επίσης στα άκρα αυτά ο SRV καθορίζεται από το χρόνο ζωής της διάχυσης των φορέων, προκαλώντας έτσι μη ομοιόμορφο συνολικό χρόνο ζωής. Για να εξασφαλιστεί ένας ομοιόμορφος χρόνος ζωής προτιμάτε χοντρό πάχος του στρώματος και προσοχή κατά την δημιουργία των διεπαφών.

Για τις διατάξεις ισχύος, που λειτουργούν με υψηλή έγχυση των φορέων, είναι σημαντικό να επικεντρωθεί το ενδιαφέρον στη καλή διαχείριση της διαμόρφωσης της βάσης, που είναι αναγκαία για καλές επιδόσεις στην διαμόρφωση της αγωγιμότητας. Αυτό απαιτεί μεγάλους χρόνους ζωής, ιδιαίτερα για τους οπές μειονότητας, μια που οι παγίδες έχουν καταληφθεί από φορείς πλειονότητας. Μεγάλος χρόνος ζωής των φορέων μειωρηφιών έχει ιδιαίτερη σημασία στα BJT τρανζίστορ, όπου υπάρχει το φαινόμενο της υποβάθμισης τάσεως σε μέγιστη λειτουργία (excessive forward voltage drop degrades). Για υψηλή έγχυση φορέων χρησιμοποιείται η εξίσωση που περιγράφει τον ρυθμό των φορέων και αυτή η εξίσωση δίνει τον ενεργό χρόνο ζωής. K. Neimontas et al. [119] μοντελοποίησαν τις μετρήσεις τους από δείγματα 4H-SiC τύπου n με αριθμητικές προσαρμογές, βλέπε εικόνα 3.7-3. Δυστυχώς δεν υπάρχουν δημοσιεύσεις για ενεργό χρόνο ζωής σε δείγματα 4H-SiC τύπου p.



Εικόνα 3.7-3. Χρόνος ζωής 4H-SiC τύπου n για υψηλές εγχύσεις φορέων. Στην εξίσωση στην εικόνα η B είναι ο διμοριακός (οπτικός) ρυθμός, η C ο ρυθμός Auger και η τ_R ο ρυθμός επανασύνδεσης SRH. Η εικόνα επαναδιατυπώθηκε από K.Neimontas et al. [119].

Στην εικόνα 3.7-3 φαίνεται καθαρά, ότι ο χρόνος μειώνεται μετά από $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Επομένως για υψηλή έγχυση και για συγκέντρωση άνω των $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, ο ρυθμός Auger επανασύνδεσης επικρατεί όλων των ρυθμών επανασυνδέσεων.

Στο ATLAS υπάρχουν λίγα μοντέλα διαθέσιμα. Αυτά τα μοντέλα είναι:

- Βασικό SRH
- SRH εξαρτημένο από συγκέντρωση
- Klaasen SRH (εξαρτημένο από συγκέντρωση και θερμοκρασία)
- Scharfetter SRH (εξαρτημένο από συγκέντρωση και μόνο)
- Συνδυαστικό μοντέλο ελαττωμάτων

Οι περισσότερες επιστημονικές ομάδες για 4H-SiC χρησιμοποιούν το βασικό SRH μοντέλο ή το Scharfetter SRH μοντέλο.

Το βασικό SRH μοντέλο στο ATLAS είναι ορίζεται ως εξής:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{TAUP0 \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{ETRAP}{k_B T_L}\right) \right] + TAUN0 \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-ETRAP}{k_B T_L}\right) \right]} \quad (3.7.29)$$

όπου TAUN0, TAUP0, ETRAP είναι τα αντίστοιχα μεγέθη τ_n , τ_p και E_{TRAP} στην εξίσωση (3.7.1) και οι παράμετροι αυτοί μεταβάλλονται από τον χρήστη. Αυτό το μοντέλο ενεργοποιείται ορίζοντας την παράμετρο SRH στη δήλωση MODELS.

Βιβλιογραφία	τ_{n0} (ns)	τ_{p0} (ns)
"Bhatnagar"	9-500	9-500
"Della Corte"	15	15
"Nawaz"	1200	1000
"SILVACO"	100	100

Πίνακας 3.7-4. Τιμές παραμέτρων για το χρόνο ζωής που χρησιμοποιούνται από διαφορετικούς επιστημονικές ομάδες. Οι βιβλιογραφία είναι "Bhatnagar" [13], "Della Corte" [58], "Nawaz" [59] και "SILVACO" [8].

Το μοντέλο Scharfetter στο ATLAS είναι:

$$\tau_n(N) = N.SCH.MIN + \frac{(N.SCH.MAX - N.SCH.MIN)}{1 + \left(\frac{N}{N.SCH.NREF}\right)^{N.SCH.GAMMA}} \quad (3.7.30)$$

$$\tau_p(N) = P.SCH.MIN + \frac{(P.SCH.MAX - P.SCH.MIN)}{1 + \left(\frac{N}{P.SCH.NREF}\right)^{P.SCH.GAMMA}} \quad (3.7.31)$$

όπου P.SCH.NREF, N.SCH.NREF, P.SCH.MIN και N.SCH.MAX αντιπροσωπεύουν την συγκέντρωση τύπου p, την συγκέντρωση τύπου n, ο ελάχιστος χρόνος ζωής και ο μέγιστος χρόνος ζωής αντίστοιχα. Στο ATLAS ο ελάχιστος χρόνος ζωής και ο μέγιστος χρόνος ζωής έχουν σταθερές τιμές και δεν μοντελοποιούνται σύμφωνα με την εξίσωση (3.7.11). Για αυτό τον λόγο προτείνεται η χρήση των τιμών για τους παραμέτρους P.SCH.MIN και N.SCH.MAX από την εικόνα 3.7-1, όπου $N_{n,p}^{SRH} = P.SCH.NREF = N.SCH.NREF = 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ και $\gamma_{n,p}^{SRH} = P.SCH.GAMMA = N.SCH.GAMMA = 0.3$.

Η επανασύνδεση Auger μοντελοποιείται με πολλαπλά μοντέλα στο ATLAS:

- Βασικό Auger
- Klaasen's Auger
- Auger μοντέλο για υλικά με μικρό ενεργειακό χάσμα
- Auger μοντέλο για χαμηλές και υψηλές εγχύσεις φορέων
- Auger μοντέλο με συντελεστές εξαρτημένους από θερμοκρασία και συγκέντρωση

Το πιο χρησιμοποιημένο μοντέλο είναι το βασικό μοντέλο που μεταφράζεται στο ATLAS ως:

$$R_{Auger} = AUGN(pn^2 - nn_{ie}^2) + AUGP(np^2 - pn_{ie}^2) \quad (3.7.32)$$

όπου οι τιμές των παραμέτρων AUGN και AUGP ορίζονται από τον χρήστη. Ο πίνακας 3.7-2 περιέχει τιμές για τους δυο παραμέτρους. Ο ακόλουθος πίνακας 3.7-5 παρουσιάζει τις τιμές των επιστημονικών ομάδων.

Βιβλιογραφία	$C_n \times E-31 \text{ (cm}^6/\text{s)}$	$C_p \times E-31 \text{ (cm}^6/\text{s)}$
"Pezzimenti"	5	2
"SILVACO"	500	0.99
"Nawaz"	5	2

Πίνακας 3.7-5. Τιμές παραμέτρων Auger που χρησιμοποιείται από το ATLAS. Σημειώστε ότι το ATLAS χρησιμοποιεί τιμές για Si. Έτσι είναι απαραίτητο να ορίζονται οι τιμές για 4H-SiC. Η βιβλιογραφία είναι "Pezzimenti" [120], "Nawaz" [59] και "SILVACO" [8].

Για την επανασύνδεση επιφάνειας η βασική προσέγγιση του ATLAS είναι να ενσωματωθεί ο ρυθμός της επανασύνδεσης της επιφάνειας στον ρυθμό SRH:

$$R_{surf} = \frac{\rho n - n_{ie}^2}{\tau_p^{eff} \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{ETRAP}{k_B T_L}\right) \right] + \tau_n^{eff} \left[p + n_{ie} \exp\left(\frac{-ETRAP}{k_B T_L}\right) \right]} \quad (3.7.33)$$

όπου

$$\frac{1}{\tau_n^{eff}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S.N \quad \frac{1}{\tau_p^{eff}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S.P \quad (3.7.34)$$

τ_n^i είναι ο χρόνος ζωής στο εσωτερικό του υλικό και υπολογίζεται στο κόμβο i της διεπαφής. Οι παράμετροι d_i και A_i είναι το μήκος και εμβαδό της διεπαφής στο κόμβο i . Οι παράμετροι $S.N$ και $S.P$ είναι ταχύτητες επανασύνδεσης για ηλεκτρόνια και οπές αντίστοιχα, και επιπλέον ορίζονται από τον χρήστη στη δήλωση INTERFACE. Οι παράμετροι $X.MIN$, $X.MAX$, $Y.MIN$ και $Y.MAX$ ορίζουν την περιοχή της διεπαφής και ορίζονται επίσης στη δήλωση INTEFACE. Αυτό το μοντέλο ενεργοποιείται με το όρισμα της δήλωσης INTERFACE και των παραμέτρων που αναλύθηκαν παραπάνω. Τέλος δεν υπάρχει επιστημονική ομάδα που χρησιμοποιεί το μοντέλο επιφανειακής επανασύνδεσης στο ATLAS.

3.8 ΙΟΝΙΣΜΟΣ ΠΡΟΣΚΡΟΥΣΗΣ

3.8.1 Γενικά περί ιονισμός πρόσκρουσης

Η τάση κατάρρευσης είναι ένα από το πιο σημαντικά χαρακτηριστικά μιας διάταξης ισχύος. Εξίσου σημαντικό χαρακτηριστικό είναι η ικανότητα διαχείρισης του ρεύματος.

Η βασική ιδέα του ιονισμού, της κατάρρευσης και του φαινομένου «χιονοστιβάδας» είναι ο ίδιος ο ιονισμός. Για παράδειγμα θεωρείται η περίπτωση του ημιαγωγού όπου ένα ελεύθερο σωματίδιο (ηλεκτρόνιο ή οπή) προσκρούει σε ένα άτομο. Εάν η ενέργεια σωματιδίου είναι μεγάλη τότε θα απελευθερωθεί ένα ηλεκτρόνιο από την ζώνη σθένους και αυτό το ηλεκτρόνιο θα μεταβεί στη ζώνη αγωγιμότητας. Επομένως το αποτέλεσμα είναι ότι δημιουργούνται νέοι φορείς και αυτό ονομάζεται ιονισμός πρόσκρουσης.

Οι ελεύθερες φορείς είναι δυνατόν να αποκτήσουν ενέργεια κατωφλίου (E_i) σε συγκεκριμένη τιμή (F_i) του ηλεκτρικού πεδίου. Με άλλα λόγια όταν το ηλεκτρικό πεδίο αυξάνεται πέραν μιας συγκεκριμένης τιμής πεδίου, οι φορείς αποκτούν αρκετή ενέργεια ώστε για να διεγερθεί ένα δίπολο (οπής - ηλεκτρόνιο) με τον ιονισμό πρόσκρουσης.

Τα δίπολα που δημιουργούνται με τον ιονισμό πρόσκρουσης επιταχύνονται με το ηλεκτρικό πεδίο και προκαλούν την δημιουργία άλλων δίπολων. Επομένως ο ιονισμός πρόσκρουσης είναι μια επαναλαμβανόμενη διαδικασία δημιουργίας φορέων και συχνά ονομάζεται και «φαινόμενο χιονοστιβάδας» (avalanche multiplication) αντί ιονισμός πρόσκρουσης. Το φαινόμενο «χιονοστιβάδας» χαρακτηρίζεται από έναν ρυθμό ιονισμός ή από συντελεστή ιονισμού α , που ορίζεται να είναι ο αριθμός νέων δίπολων που δημιουργήθηκαν από έναν φορέα που διανύει μια μοναδιαία απόσταση. Έτσι ο ρυθμός ιονισμός, που ορίζεται για ηλεκτρόνια και για οπές, εκφράζεται σε cm^{-1} .

Οι ρυθμοί ιονισμού α_p και α_n εξαρτώνται ισχυρά από το ηλεκτρικό πεδίο. Αυξάνοντας το ηλεκτρικό πεδίο αυξάνεται η ταχύτητα των φορέων, δηλαδή αυξάνεται η κινητική ενέργεια τους και αυτό σημαίνει αύξηση της πιθανότητας δημιουργίας δίπολων. Η αύξηση της εφαρμοσμένης ανάστροφης τάσης στην επαφή p-n (ή n-p) μιας διάταξης επίσης θα αυξάνει την πιθανότητα δημιουργίας δίπολων, μιας που με την επέκταση της ζώνης απογύμνωσης θα υπάρχουν περισσότερα άτομα διαθέσιμα και επομένως περισσότερα δίπολα.

Ο ρυθμός δημιουργίας για μια τοποθεσία οπουδήποτε στη διάταξη είναι:

$$G = \frac{dn}{dt} = \frac{dp}{dt} = \alpha_n n v_n + \alpha_p p v_p \quad (3.8.1)$$

Η παραπάνω εξίσωση δεν εφαρμόζεται καλά στο μοντέλο διάχυσης-ολίσθησης, και αυτό επειδή το μοντέλο αυτό επικεντρώνεται στη ταχύτητα των φορέων. Εφόσον ο ιονισμός

πρόσκρουσης συμβαίνει σε υψηλά ηλεκτρονικά πεδία, όπου κυριαρχεί η ολίσθηση, ο Selberherr [80] πρότεινε την χρήση J/q αντί των όρου n_n . Έτσι:

$$G = \frac{\alpha_n J_n}{q} + \frac{\alpha_p J_p}{q} \quad (3.8.2)$$

Για αυξημένες ανάστροφες τάσεις μεγαλύτερες του σημείου κατάρρευσης ο ιονισμός πρόσκρουσης αυξάνεται ραγδαία. Μια διάταξη θεωρείται ότι έχει κατάρρευση σε μορφή «χιονοστιβάδας» εάν ο ρυθμός ιονισμός πρόσκρουσης τείνει στο άπειρο. Η κατάρρευση σε μορφή «χιονοστιβάδας» εμφανίζεται εάν το ηλεκτρικό πεδίο είναι μεγαλύτερο από μια χαρακτηριστική τιμή του ηλεκτρονικού πεδίου. Έτσι οι ρυθμοί των ιονισμών προσκρούσεων (για ηλεκτρόνια και οπές) θεωρούνται να είναι σε συνάρτηση με το ηλεκτρονικό πεδίο F , κάτι το οποίο δεν ισχύει στην πραγματικότητα.

Ο παράγοντας πολλαπλασιασμού M , είναι ο συνολικός αριθμός των δίπολων που δημιουργήθηκαν στην περιοχή απογύμνωσης από το πρωταρχικό δίπολο στη θέση x . Ισοδύναμα ο παράγοντας πολλαπλασιασμού M είναι ο λόγος των ρευμάτων των φορέων (ρεύμα από ηλεκτρόνια προς ρεύμα από οπές) στα όρια της περιοχής απογύμνωσης. Για παράδειγμα οπές, που είναι θετικά φορτισμένα, εισέρχονται στη περιοχή απογύμνωσης στο σημείο $x=0$ και εξέρχονται στο σημείο $x=L$, και τότε ο παράγοντας πολλαπλασιασμού ορίζεται να είναι:

$$M_p \equiv \frac{I_p(L)}{I_p(0)} \quad (3.8.3)$$

Αποδεικνύεται από [42] ότι ο παράγοντας πολλαπλασιασμού εκφράζεται σε ρυθμούς ιονισμών προσκρούσεων με την ακόλουθη σχέση:

$$M_n = \frac{1}{1 - \int_0^L \alpha_n \exp \left[- \int_0^x (\alpha_n - \alpha_p) dx' \right] dx} \quad (3.8.4)$$

παρόμοια για οπές,

$$M_p = \frac{1}{1 - \int_0^L \alpha_p \exp \left[- \int_0^x (\alpha_n - \alpha_p) dx' \right] dx} \quad (3.8.5)$$

Η προϋπόθεση κατάρρευσης δίνεται από το ολοκλήρωμα

$$\int_0^L \alpha_p \exp \left[\int_0^L -(\alpha_p - \alpha_n) dx' \right] dx = 1 \quad (3.8.6)$$

Εάν η προϋπόθεση κατάρρευσης εκπληρώνεται από τα ηλεκτρόνια αντί από τις οπές, το ολοκλήρωμα ιονισμού είναι:

$$\int_0^L \alpha_n \exp \left[\int_x^L -(\alpha_n - \alpha_p) dx' \right] dx = 1 \quad (3.8.7)$$

Οι εξισώσεις (3.8.6) και (3.8.7) είναι ισοδύναμες, δηλαδή το φαινόμενο «χιονοστιβάδας» εξαρτάται μόνο από τι γίνεται μέσα στην περιοχή απογύμνωσης και όχι από τους ίδιους τους φορείς που προκαλούνε το φαινόμενο «χιονοστιβάδας». Στην περίπτωση που δύο αντίθετες φορείς θεωρούνται ότι προκαλούν την κατάρρευση, οι εξισώσεις (3.8.6) και (3.8.7) εφαρμόζονται χωρίς τροποποίηση.

Για ημιαγωγό που έχουν ίσους ρυθμούς ιονισμών προσκρούσεων ($\alpha_n = \alpha_p = \alpha$) όπως ισχύει στο GaP, οι εξισώσεις (3.8.6) και (3.8.7) συνδυάζονται στην απλή έκφραση:

$$\int_0^{w_c} \alpha dx = 1 \quad (3.8.8)$$

3.8.2 Μεταβολές στους ρυθμούς ιονισμούς ή στους συντελεστές ιονισμού με ηλεκτρικό πεδίο

Ο υπολογισμός του ολοκληρώματος ιονισμού όπως και του ρυθμό δημιουργίας απαιτεί την γνώση των συντελεστών ιονισμών των ηλεκτρονίων και οπών, που εξαρτάται από το ηλεκτρικό πεδίο E .

Υπάρχουν διαφορετικά μοντέλα που περιγράφουν την σχέση μεταξύ συντελεστές ιονισμών και ηλεκτρικού πεδίου. Τα περισσότερα μοντέλα είναι τοπικά μοντέλα, που σημαίνει ότι οι ρυθμοί ιονισμού θεωρούνται να είναι στιγμιαίες συναρτήσεις του ηλεκτρικού πεδίου F . Αυτή είναι μια προσέγγιση που δεν ισχύει στην πραγματικότητα, διότι το ηλεκτρόνιο ή η οπή χρειάζεται χρόνο να αποκτήσει την απαραίτητη ενέργεια E από ένα πεδίο $F=0$ σε ένα πεδίο $F=F_1$. Ισοδύναμα είναι δυνατόν να θεωρηθούν αποστάσεις αντί χρόνο, τότε θα υπάρχει ένας «νεκρός» χώρος που αντιστοιχεί στην απόσταση που διανύει ο φορέας για να αποκτήσει την απαραίτητη ενέργεια ιονισμού. Η προσέγγιση των στιγμιαίων ρυθμών ιονισμών είναι η πιο δημοφιλής προσέγγιση και ισχύει για το Si για μια περιοχή μεταξύ $f < 400-500 \text{ GHz}$, $L \geq 0.1 \mu\text{m}$ και $N \leq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Μη τοπικά μοντέλα θεωρούν την θερμοκρασία σαν κύρια παράμετρο για ιονισμό. Αυτό δικαιολογείτε μια που στις πραγματικές διατάξεις, το ηλεκτρικό πεδίο δεν είναι ομοιόμορφο σε όλο το μήκος. Επομένως μη τοπικά μοντέλα ρυθμών ιονισμών προσκρούσεων θεωρούν σταθερό ηλεκτρικό πεδίο, και υπερεκτιμούν τις τιμές των ρυθμών ιονισμών προσκρούσεων. Πολλές φορές χρησιμοποιείται το μοντέλο ενεργειακής ισορροπίας (energy balance transport model) για την βελτίωση του ιονισμού πρόσκρουσης, διότι σε αυτό το μοντέλο η κύρια συνιστώσα είναι η θερμοκρασία για την μοντελοποίηση των κινήσεων των φορέων. Σήμερα υπάρχουν πολλά μη τοπικά μοντέλα και αυτά κατατάσσονται σε δύο διαφορετικά είδη μοντέλων: σε μοντέλα ιονισμού πρόσκρουσης βάση κλασικών τοπικών μοντέλων (Chynoweth, Crowell) όπου τροποποιούνται ώστε να συμπεριλαμβάνουν την θερμοκρασία του φορέα, και σε μοντέλα προχωρημένα μη Maxwellian μοντέλα που βασίζονται σε θερμοκρασία του φορέα. Για το 4H-SiC δεν υπάρχει δημοσίευση για προχωρημένα μη τοπικά μοντέλα.

Τα περισσότερα μοντέλα για TCAD προσομοιώσεις ιονισμού πρόσκρουσης βασίζονται σε δεδομένα για Si. Έτσι δίνεται μια μικρή ιστορική αναφορά για τα μοντέλα του Si που λόγω «συγγένειας» με το SiC βοηθάνε στην κατανόηση των μοντέλων για 4H-SiC.

Το πρώτο μοντέλο ήταν αυτό του Wolf [121] που βασίζεται στην μεταφορά που περιγράφεται από την εξίσωση Boltzmann σε υψηλά ηλεκτρικά πεδία. Η υπόθεση ήταν ότι η ενέργεια που χάνεται κατά την σύγκρουση των φορέων με φωνόνια είναι λιγότερη από την ενέργεια που αποκτήθηκε από το ηλεκτρικό πεδίο σε απόσταση ίση της «mean free path» απόστασης. Αυτή η θεώρηση είναι ισοδύναμα με τη θεώρηση ότι όλοι οι φορείς θα αποκτήσουν την απαραίτητη ενέργεια για ιονισμό πρόσκρουσης, οπότε όλοι οι φορείς θα συμμετέχουν στη διαδικασία ιονισμού. Σύμφωνα με αυτό το μοντέλο η εξάρτηση των συντελεστών ιονισμών προσκρούσεων, $\alpha_{n,p}$, με το ηλεκτρικό πεδίο F είναι:

$$\alpha = a \exp\left(-\frac{b}{F^2}\right) \quad (3.8.9)$$

$$\alpha = a \exp\left(-\frac{b}{F^2}\right) \quad (3.8.10)$$

Ο Chynoweth [122] έχει μετρήσει τις εξαρτήσεις των συντελεστών ιονισμών προσκρούσεων με το ηλεκτρικό πεδίο για την περίπτωση του Si, και προσάρμοσε τα αποτελέσματα με τις εξής εξώσεις:

$$\alpha_n = a_n \exp\left(-\frac{b_n}{F}\right) \quad (3.8.11)$$

$$\alpha_p = a_p \exp\left(-\frac{b_p}{F}\right)$$

Ο **Schockley** [123] έδωσε στους παραμέτρους a και b μια φυσική υπόσταση στο μοντέλο «οι τυχεροί φορείς», στο οποίο

$$a = \frac{qF/\lambda}{E_p/\lambda} \quad b = F_i = \frac{E_i}{q/\lambda} \quad (3.8.12)$$

όπου q είναι το φορτίο, λ είναι η μέση απόσταση «mean free path» μεταξύ δυο συγκρούσεων, E_p είναι η ενέργεια φωνονίων Raman και $F_i(E_i)$ είναι το κρίσιμο ηλεκτρικό πεδίο (ενέργεια κατωφλίου) για τον ιονισμό πρόσκρουσης. Η παράμετρος E_p καθορίζεται θεωρητικά ή πειραματικά, ενώ οι υπόλοιποι παράμετροι καθορίζονται με προσαρμογές στις πειραματικές μετρήσεις.

Ο Shockley υπέθεσε ότι μόνο μέρος των φορέων αποκτούν την ενέργεια ιονισμού πρόσκρουσης («οι τυχεροί φορείς») και για αυτό τον λόγο θεωρείται ότι το ηλεκτρικό πεδίο είναι χαμηλό.

Συνήθως οι παραπάνω εξισώσεις ισχύουν για συγκεκριμένη περιοχή του ηλεκτρικού πεδίου. Για την ισχύει των παραπάνω εξισώσεων σε όλο το συνολικό ηλεκτρικό πεδίο ο **Baraff** πρότεινε το δικό του μοντέλο, λύνοντας την εξαρτημένη εξίσωση μεταφοράς Boltzmann [124]. Έτσι τα μοντέλα Wolf και Schockley είναι περιοριστικές περιπτώσεις του μοντέλου Baraff, δηλαδή για το Baraff μοντέλο ισχύει ότι $qF\lambda > E_p$ και $qF\lambda < E_p$.

Λόγο νέων πειραματικών μετρήσεων σε Si πολλά νέα μοντέλα υπάρχουν και το πιο χρησιμοποιημένο για προσομοιώσεις TCAD είναι το **Selberherr's** μοντέλο [80]. Ο στιγμιαίος ρυθμός ιονισμού πρόσκρουσης ηλεκτρονίων $\alpha_n(F)$ και οπών $\alpha_p(F)$ ¹ στο Selberherr μοντέλο έχουν την μορφή:

$$\alpha_n = a_n \exp\left(-\frac{b_n}{F}\right)^{c_n} \quad (3.8.13)$$

$$\alpha_p = a_p \exp\left(-\frac{b_p}{F}\right)^{c_p}$$

Το μοντέλο του **Grant** [125] χρησιμοποιεί τις Chynoweth εξισώσεις (3.8.11) και προτείνει τρία σετ παραμέτρων για χαμηλό, μεσαίο, και υψηλής έντασης ηλεκτρικού πεδίου. Το μοντέλο έχει τιμές για τους παραμέτρους που είναι για Si και μόνο. Σε αυτό το μοντέλο θερμοκρασιακές εξαρτήσεις δεν λαμβάνονται υπόψη.

Για να ξεπεραστούν οι αδυναμίες του Grant μοντέλου οι **Okuto και Crowell** [126] ανέπτυξαν μια έκφραση για α_n και α_p που ισχύει για σε μεγάλο φάσμα τιμών του ηλεκτρικού πεδίου.

$$\alpha_{n,p}(E) = \alpha_{300(n,p)} \{1 + c_{(n,p)}(T - 300)\} E \exp\left(-\frac{b_{300(n,p)} \{1 + d_{(n,p)}(T - 300)\}}{E}\right)^2 \quad (3.8.14)$$

όπου $\alpha_{300(n,p)} \{1 + c_{(n,p)}(T - 300)\}$, $\beta_{300(n,p)} \{1 + d_{(n,p)}(T - 300)\}$ είναι γραμμικές συναρτήσεις της θερμοκρασία πλέγματος ίσο με 300 K. Το μοντέλο Okuto και Crowell είναι μια γραμμική προσέγγιση των ρυθμών ιονισμών προσκρούσεων, και για μια συγκεκριμένη περιοχή έχει η προσέγγιση σχήμα παρόμοια με αυτή της συνάρτησης βήματος. Το μοντέλο αυτό έχει το πλεονέκτημα ότι ρυθμίζεται μέσω προσαρμογών των

¹ Πολλές μελέτες χρησιμοποιούν αντί α_n και α_p τα σύμβολα α και β για τους συντελεστές ιονισμών προσκρούσεων.

παραμέτρων του στις πραγματικές μετρημένες τιμές, και έτσι εύκολα μεταφέρεται η ισχύς του σε οποιοδήποτε ηλεκτρικό πεδίο. Οι παράμετροι της εξίσωσης (3.8.14) ισχύουν με ικανοποιητικά για υλικά Si, Ge, GaAs και GaP, βλέπε [126].

Το μοντέλο **Lackner** [127] είναι ένα μοντέλο που διορθώνει τους συντελεστές ιονισμών πρόσκρουσης που δίνονται μέσω των εκφράσεων Chynoweth. Οι συντελεστές ιονισμών συγκρίνονται με τους συντελεστές ιονισμών που εξάγονται από τον πολλαπλασιαστικό παράγοντα $M(x)$. Η διόρθωση βασίζεται στο ότι οι συντελεστές ιονισμών που διεξήχθησαν από $M(x)$ εκφράζονται μέσω της πιθανότητας Markov, και σε αυτήν δεν υπάρχει η υπόθεση του υπολογισμού του συντελεστή ιονισμού από μια αρχική θέση x . Αντί μιας θέσης x χρησιμοποιείται μια απόσταση $d_{n,p}$ που χρειάζεται ο φορέας για να αποκτήσει την ενέργεια κατωφλίου $U_c^{n,p}$. Θεωρείται ότι το ηλεκτρικό πεδίο, μέχρι ο φορέας να αποκτήσει την ενέργεια κατωφλίου, μεταβάλλεται ελάχιστα και ισούται με $F = U_c^{n,p}/qd_{n,p}$. Επίσης θεωρείται ότι $M(x)$ έχει μικρές μεταβολές και για αυτό χρησιμοποιείται μια προσεγγιστική $M(x)$. Το μοντέλο εκφράζεται μέσω:

$$a_{n,p} = \frac{a_{n,p}}{z(x)} \exp\left(-\frac{b_s}{F}\right) \quad (3.8.15)$$

όπου

$$z(x) = 1 + \frac{b_n}{F} \exp\left(-\frac{b_n}{F}\right) + \frac{b_p}{F} \exp\left(-\frac{b_p}{F}\right) \quad (3.8.16)$$

$$\alpha_{n,p} = \gamma_{n,p} = \frac{1}{\lambda_{n,p}}, \quad b_s = \frac{E_{th}^{n,p} \gamma_{n,p}}{q} \quad (3.8.17)$$

όπου $a_{n,p}$, $b_{n,p}$, $\gamma_{n,p}$ και b_s είναι παράγοντες προσαρμογής. Υπάρχουν τρεις τρόποι χρησιμοποίησης του μοντέλου Lackner.

- α) Εάν $z=1$ τότε (3.8.15) είναι η φόρμουλα Chynoweth.
- β) Εξισώσεις (3.8.15) και (3.8.16) χρησιμοποιούνται για διορθώσεις (σε υπάρχοντα μοντέλα όπως το Van Overstraeten–De Man μοντέλο) στο ηλεκτρικό πεδίο όπου το νέο πεδίο είναι $F = U_c^{n,p}/qd_{n,p}$. Έτσι πρέπει να είναι γνωστές οι συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης του μοντέλου προς διόρθωση. Επίσης γνωστά πρέπει να είναι η $d_{n,p}$ και η F .
- γ) Όταν όλοι οι παράμετροι του μοντέλου Lackner είναι γνωστά τότε ορίζεται πλήρως το μοντέλο. Για παράδειγμα από [42] είναι γνωστό ότι $L_n = 0.55 \times 10^{-6} \text{ cm}$, $L_p = 0.76 \times 10^{-6} \text{ cm}$ and $U_c^{n,p}/q = 1.12 \text{ V}$. Έτσι με αντικατάσταση (3.8.17):

$$\begin{aligned} a_n &= 1.316 \times 10^6 \text{ cm}^{-1} & a_p &= 1.818 \times 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ b_n &= 1.474 \times 10^6 \text{ cm}^{-1} & b_p &= 2.036 \times 10^6 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

Το Lackner μοντέλο έχει επιβεβαιωθεί σε Si και ισχύει σε περιοχές ηλεκτρικού πεδίου: $2 \times 10^5 \text{ s} < F < 6 \times 10^5 \text{ s V/cm}$.

Ένα μοντέλο που προτάθηκε από Thornber [128] είναι ένα μη τοπικό μοντέλο που θεωρεί τον αριθμό των ιονισμένων φορέων ανά μονάδα χρόνου και ανά μονάδα όγκου. Οι συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης είναι κανονικοποιημένη ως προς τη ροή εισερχόμενων φορέων:

$$\alpha(F) = \left(\frac{qF}{E_I}\right) \exp\left[-\frac{F_I}{F(1+F/F_p)+F_T}\right] \quad (3.8.18)$$

όπου E_I είναι η ενέργεια κατωφλίου υψηλού πεδίου, και F_T , F_p και F_I είναι οι δυνάμεις που προκύπτουν από θερμική σκέδαση, οπτική σκέδαση και από σκέδαση ιονισμού. Αυτές

οι σκεδάσεις αποτρέπουν τον φορέα να αποκτήσει περεταίρω ενέργεια. Για Si, η τιμή της E_I είναι 3.6 eV για ηλεκτρόνια και 5.0 eV για οπές. Για περιοχές ηλεκτρικού πεδίου που είναι από 1.75×10^5 μέχρι 6×10^5 το μοντέλο αποδίνει ικανοποιητικά.

$$\alpha(F) = \left(\frac{qF}{E_I} \right) \exp \left[-\frac{F_I}{F} \right] \quad \text{if } F_T < F < F_P \quad (3.8.19)$$

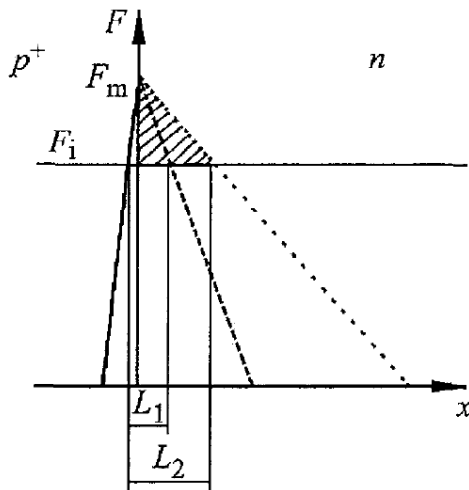
ή

$$\alpha(F) = \left(\frac{qF}{E_I} \right) \exp \left[-\frac{F_I F_P}{F^2} \right] \quad \text{έαν } F_P < F \text{ και } \sqrt{F_P F_T} < F \quad (3.8.20)$$

3.8.3 Εξάρτηση ιονισμού πρόσκρουσης από συγκέντρωση προσμίξεων

Από την παρακάτω εικόνα φαίνεται ότι υπάρχει μια εξάρτηση της πυκνότητας συγκέντρωσης με το πολλαπλασιαστικό παράγοντα M.

Η μορφή του ολοκληρώματος στην περιοχή κατάρρευσης «χιονοστιβάδας» είναι σημαντικό. Από την εικόνα 3.8-1 είναι φανερό ότι όσο πιο χαμηλότερη είναι η πυκνότητα συγκέντρωσης, τόσο ευρύτερο είναι το ηλεκτρικό πεδίο. Η διαφορά είναι ότι η τιμή του ολοκληρώματος, βλέπε εξίσωση (3.8.8), πρέπει να είναι ίδια και στις δυο περιπτώσεις, δηλαδή ίδια για υψηλή όσο και για χαμηλή πυκνότητα συγκέντρωσης.



Εικόνα 3.8-1[129]. Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου στην περιοχή απογύμνωσης μιας ανάστροφης πολωμένης p+n επαφή. Οι διακεκομμένες γραμμές είναι η περίπτωση υψηλής πυκνότητας συγκέντρωσης με περιοχή απογύμνωσης L_1 ενώ η πιο ελαφρής διακεκομμένη γραμμή είναι η περίπτωση της χαμηλής πυκνότητας συγκέντρωσης, που έχει ευρύτερο ηλεκτρικό πεδίο.

Η τάση κατάρρευσης δίνεται από

$$V_i = \frac{F_i W_i}{2} = \frac{\epsilon \epsilon_0 F_i^2}{2eN} \quad (3.8.21)$$

όπου N η πυκνότητα συγκέντρωσης της περιοχής απογύμνωσης. Η χαρακτηριστική τιμή του ηλεκτρικού πεδίου στο σημείο κατάρρευσης F_i εξαρτάται σε όλους τους ημιαγωγούς από το βαθμό πυκνότητα συγκέντρωσης και από την θερμοκρασία. Η εξάρτηση της χαρακτηριστικής τιμής του ηλεκτρικού πεδίου από το βαθμό πυκνότητα συγκέντρωσης στο Si είναι μεταξύ 2×10^5 V/cm και 6×10^5 V/cm για συγκεντρώσεις 10^{14} cm⁻³ μέχρι 10^{17} cm⁻³. Ανάλογες τιμές για το F_i υπάρχουν και σε άλλους τύπους ημιαγωγούς.

Για την εύρεση της επιρροής της πυκνότητας συγκέντρωσης ή ισοδύναμα του πλάτους W στους ρυθμούς ιονισμών χρησιμοποιείται ο ενεργός ρυθμός ιονισμός πρόσκρουσης. Ο ενεργός ρυθμός ιονισμός πρόσκρουσης έχει τις εξής ισοδύναμες εκφράσεις:

$$\alpha_{eff} = \frac{\alpha_n - \alpha_p}{\ln(\alpha_n/\alpha_p)} \quad (3.8.22)$$

ή:

$$\alpha_{eff} = \exp(-b_{eff}/E) \quad (3.8.23)$$

ή κατά προσέγγιση με δυνάμεις [130]

$$\alpha_{eff} = C \left(\frac{F}{F_i} \right) \quad (3.8.24)$$

όπου

$$C = a_{eff} \exp(-n) \quad (3.8.25)$$

ή

$$\alpha_{eff} = B \cdot F^n \quad (3.8.26)$$

Εάν ο λόγος α_n/α_p στην (3.8.22) είναι ανεξάρτητος της F ισχύει:

$$\int_0^W \alpha_{eff}(E) = 1 \quad (3.8.27)$$

Εισάγοντας $F = qNx/\varepsilon \Rightarrow dx = \varepsilon/(qN) dF = W/F_c dF$ στην (3.8.27) προκύπτει σύμφωνα με [131]:

$$E_c = \left(\frac{n+1}{BW} \right)^{\frac{1}{n}} = \left(\frac{q(n+1)N}{B\varepsilon} \right)^{\frac{1}{n+1}} \quad (3.8.28)$$

Το κρίσιμο ηλεκτρικό πεδίο E_c^2 μειώνεται με αύξηση του πλάτους W. Εισάγοντας (3.8.28) στην (3.8.21) η τάση κατάρρευσης σαν συνάρτηση της πυκνότητας συγκέντρωσης είναι:

$$V_B = \frac{\varepsilon}{2qN} \left(\frac{q(n+1)N}{B\varepsilon} \right)^{\frac{2}{n+1}} = \frac{1}{2} \left(\frac{n+1}{B} \right)^{\frac{2}{n+1}} \left(\frac{\varepsilon}{qN} \right)^{\frac{n-1}{n+1}} \quad (3.8.29)$$

Από (3.8.21) και (3.8.29) :

$$V_B = \frac{1}{2} \left(\frac{n+1}{B} W^{n-1} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (3.8.30)$$

Το πλάτος W της περιοχής απογύμνωσης σαν συνάρτηση της πυκνότητας συγκέντρωσης N στη τάση κατάρρευσης είναι:

$$W = \left(\frac{n+1}{B} \right)^{\frac{1}{n+1}} \left(\frac{\varepsilon}{qN} \right)^{\frac{n}{n+1}} \quad (3.8.31)$$

Έτσι η μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου με την αύξηση του V_B είναι έμμεση με την μεταβολή της W και της $1/N$. Για να προσαρμοστεί η (3.8.26) στη μορφή Chynoweth, οι σταθερές n και B διαλέγονται από τις εξισώσεις (3.8.25), (3.8.24) και (3.8.26). Με αριθμητικούς υπολογισμούς υπολογίστηκαν οι σταθερές n και B για το Si στους 300 K να είναι:

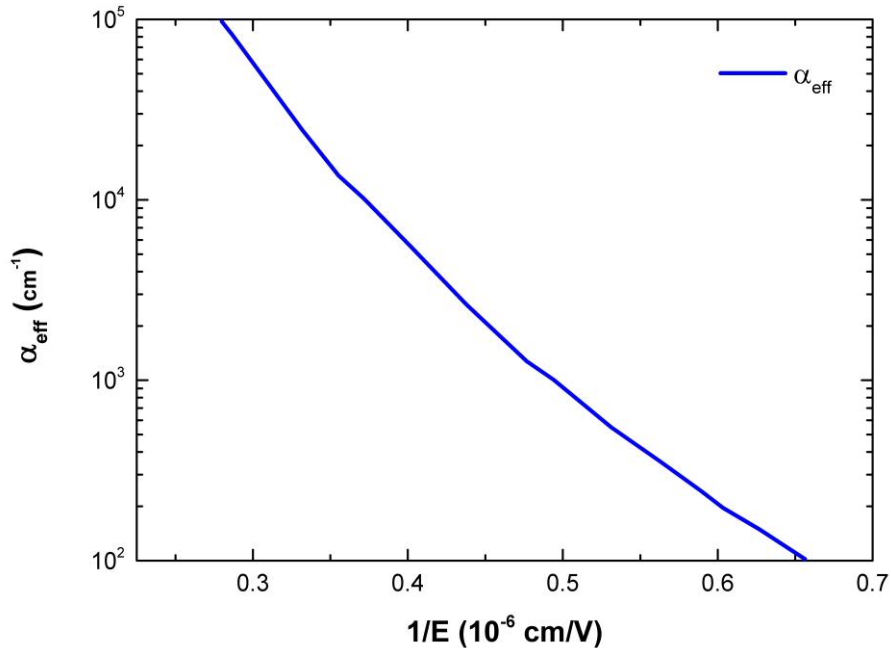
$$n = \frac{1.68 \times 10^6 / cm}{F_i}, \quad B = \frac{1.06 \times 10^6 V / cm}{F_i^n \exp(n)} \quad (3.8.32)$$

² Πολλές φορές εναλλάσσονται τα σύμβολα E και F, που είναι το σύμβολο για το ηλεκτρικό πεδίο.

Έτσι με επιλογή του κρίσιμου πεδίου F_i αποκτιούνται οι τιμές για τις εξισώσεις (3.8.32). Οι περισσότερες επιστημονικές ομάδες χρησιμοποιούν $n = 7$ και $B = 2.107 \times 10^{-35} \text{ cm}^6/\text{V}^7$ και $F_i = 2.4 \times 10^5 \text{ V/cm}$.

Για 4H-SiC οι τιμές των σταθερών είναι σύμφωνα με [132] στους 300 K: $n = 8.03$ και $B = 2.179 \times 10^{-48} \text{ cm}^6/\text{V}^7$ και $F_i = 2.09 \times 10^6 \text{ V/cm}$.

Από τις παραπάνω τιμές για τις σταθερές συμπεραίνεται ότι στο 4H-SiC οι ρυθμοί ιονισμών προσκρούσεων εξαρτώνται περισσότερο από το ηλεκτρικό πεδίο, ενώ αυτό δεν ισχύει στην περίπτωση του Si.



Εικόνα 3.8-2. Μεταβολή του ενεργός ρυθμού ιονισμού πρόσκρουσης.

Μέχρι στιγμής δεν υπάρχουν δημοσιεύματα που λαμβάνουν υπόψη τους την εξάρτηση των ρυθμών ιονισμών προσκρούσεων από την πυκνότητα συγκέντρωσης.

3.8.4 Εξάρτηση ιονισμού πρόσκρουσης από θερμοκρασία

Σε χαμηλά ηλεκτρικά πεδία ο ρυθμός ιονισμού πρόσκρουσης εξαρτάται από τη θερμοκρασία επειδή οι απελευθερωμένοι φορείς κινούνται χωρίς κρούση και διανύουν πολλαπλές αποστάσεις « λ ». Σε υψηλά ηλεκτρικά πεδία ένα μεγαλύτερο μέρος των φορέων προκαλούν ιονισμό πρόσκρουσης και οι απώλειες ανά διανυσμένης μοναδιαίας απόστασης γίνονται σημαντικές και αυτό το φαινόμενο δεν εξαρτάται από την θερμοκρασία.

Για να συμπεριληφθεί η εξάρτηση του ρυθμού ιονισμού με την θερμοκρασία παραμετροποιούνται οι εξισώσεις (3.8.11) και (3.8.10).

Ένα παράδειγμα είναι η παραμετροποίηση του μοντέλου Schockley model

$$b_{n,p} = F_i = \frac{E_i(T)}{q / n_{n,p}(T)} \quad (3.8.33)$$

Σύμφωνα με [133] λ γράφεται:

$$\lambda_{n,p} = \lambda_0 \tanh\left(\frac{\hbar\omega_{op}}{2k_B T}\right) \quad (3.8.34)$$

όπου λ_0 το ο μέσος όρος μήκος κύματος στους 0 K. Εάν αυξάνεται η θερμοκρασία, ο μέσος όρος μήκος κύματος μειώνεται. Αυτό σημαίνει ότι οι φορείς χάνουν ενέργεια διότι

το κέρδος ενέργειας από το ηλεκτρικό πεδίο (eFl) μειώνεται. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την μείωση του ιονισμού πρόσκρουσης και συνεπώς η τιμή της τάσης κατάρρευσης αυξάνεται με αύξηση της θερμοκρασίας.

Όλα τα μοντέλα τροποποιούν την έκφραση του Chynoweth μοντέλου [122] ή το μοντέλο του Selberherr και προσαρμόζουν τους παραμέτρους στις πειραματικές μετρήσεις υπό διαφορετικές θερμοκρασίες.

Το **Crowell-Sze** μοντέλο [133] εισάγει έναν συντελεστή θερμοκρασίας στις καμπύλες Baraff. Αυτό γίνεται εισάγοντας το μέσο όρος της ενέργειας που χάνεται σε μια σύγκρουση $\langle \epsilon_r \rangle$. Οι καμπύλες Baraff προσεγγίζονται τότε με την εξής σχέση:

$$\alpha = \frac{1}{\lambda} \exp \left(\frac{\left((11.5r^2 - 1.17r + 3.9 \times 10^{-4}) x^2 \right)}{\left(46r^2 - 11.9r + 1.75 \times 10^{-2} \right) x} \right) \quad (3.8.35)$$

$$\frac{-757r^2 + 75.5r - 1.92}{}$$

όπου $r = \frac{\langle \epsilon_r \rangle}{E_p} = \frac{\text{μέσος όρος της ενέργειας που χάνεται σε μια σύγκρουση}}{\text{Οπτική ενέργεια φωνονίου Raman}}$,

$x = \frac{E_p}{eE\lambda} = \frac{\text{Οπτική ενέργεια φωνονίου Raman}}{\text{φορτίο} \times \text{ηλεκτρικό πεδίο} \times \text{μέσος όρος μήκος κύματος}}$,

και $\lambda = \lambda_0 \tanh \frac{E_p}{2k_b T}$

Το μοντέλο **Van Overstraeten-De Man** είναι ένα εμπειρικό μοντέλο που συμπεριλαμβάνει την εξάρτηση της θερμοκρασίας [134]:

$$\alpha = \alpha_e \gamma \exp \left(-\frac{b_e \gamma}{F} \right) \quad (3.8.36)$$

με

$$\gamma = \frac{\tanh \left(\frac{\hbar \omega_{op}}{2k_B T_0} \right)}{\text{anh} \left(\frac{\hbar \omega_{op}}{2k_B T} \right)} \quad (3.8.37)$$

Όπου ο παράγοντας γ με την οπτική ενέργεια φωνονίου $\hbar \omega_{op}$ εκφράζει την θερμοκρασιακή εξάρτηση του αέριου φωνονίων στο οποίο επιταχύνονται οι φορείς. Έτσι ο παράγοντας γ εισάγει μια θερμοκρασιακή εξάρτηση των συντελεστών ιονισμένων προσκρούσεων $a_{n,p}$ και $b_{n,p}$ που μπορεί να εφαρμοστεί στα μοντέλα που βασίζονται στη Chynoweth ή Selberherr εξίσωση.

Οι περισσότεροι προσομοιωτές TCAD εισάγουν όμως την θερμοκρασιακή εξάρτηση μέσω των συντελεστών $a_{n,p}$, $b_{n,p}$ του Selberherr μοντέλου, σύμφωνα με τις σχέσεις [80]:

$$\begin{aligned} a_n(T) &= a_{n,300} \left(1 + A_{NT} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{ma_n} - 1 \right] \right) \\ a_p(T) &= a_{p,300} \left(1 + A_{PT} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{ma_p} - 1 \right] \right) \\ b_n(T) &= b_{n,300} \left(1 + B_{NT} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{mb_n} - 1 \right] \right) \\ b_p(T) &= b_{p,300} \left(1 + B_{PT} \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{mb_p} - 1 \right] \right) \end{aligned} \quad (3.8.38)$$

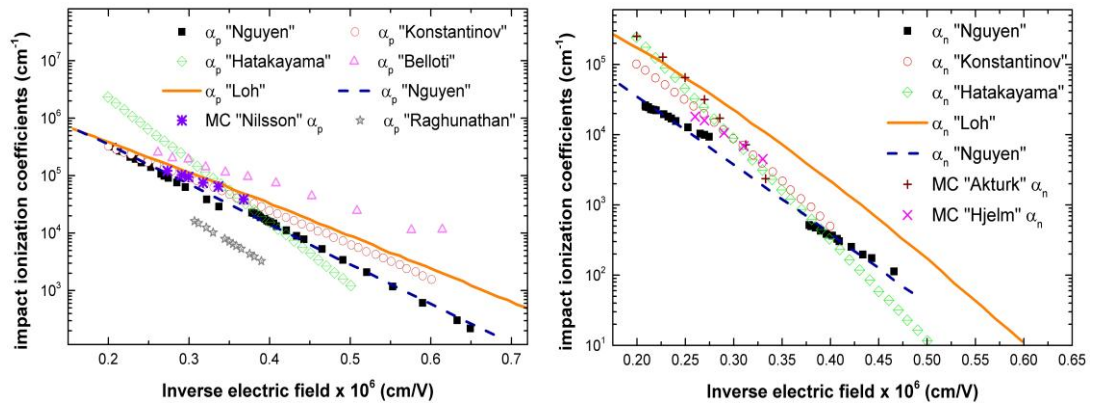
όπου $a_{n,300}$, $a_{p,300}$, $b_{n,300}$, $b_{p,300}$, είναι οι αντίστοιχες τιμές στους 300 K, βλέπε εξίσωση (3.8.9).

3.8.5 Ανισοτροπία στους συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης

Για κάποιους ημιαγωγούς όπως το GaAs και το SiC, ο ιονισμός πρόσκρουσης εξαρτάται από τον προσανατολισμό του κρυστάλλου. Ανισοτροπία στις δομές του 4H-SiC, που δημιουργούνται κατά τον c άξονα του κρυστάλλου 4H-SiC, δημιουργούν σε υψηλά ηλεκτρικά πεδία, άνιση ευκινήσια που επηρεάζει τελικά τις συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης.

3.8.6 Βιβλιογραφικά 4H-SiC ευρήματα για τους συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης

Για το 4H-SiC μια σειρά πειραματικών μετρήσεων [135], [136], [137], [88], [138], [139] και θεωρητικών υπολογισμών [140], [89] έχουν διεξαχθεί για να προσδιοριστούν οι ρυθμοί ιονισμών πρόσκρουσης. Οι περισσότεροι από αυτούς αντιμετωπίζουν την μεταφορά φορέων κατά τον άξονα c .



Εικόνα 3.8-3 περιέχει τα δεδομένα της βιβλιογραφίας για τους συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης κατά τον c άξονα με μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου σε θερμοκρασία 300 K. Η δεξιά εικόνα είναι για ηλεκτρόνια ενώ η αριστερή εικόνα είναι για οπές. Η βιβλιογραφία είναι "Nguyen" [136], "Konstantinov" [135], "Hatakayama" [88], "Loh" [137], "Nillson" [141], "Akturk" [142], "Hjelm" [140] και "Raghunathan" [143].

Όλες οι μελέτες αναφέρουν την μεταβολή του ιονισμού πρόσκρουσης κατά τον c άξονα με το ηλεκτρικό πεδίο σε 300 K. Λίγες ομάδες είναι αυτές που δείχνουν τη μεταβολή του ιονισμού πρόσκρουσης σε διαφορετικές θερμοκρασίες [135], [136] και [137] και ελάχιστες ομάδες που δείχνουν τη μεταβολή του ιονισμού πρόσκρουσης σε διαφορετική κατεύθυνση του κρυστάλλου [88], [89] και [144].

Οι περισσότεροι συγγραφείς χρησιμοποιούν το Chynoweth μοντέλο, βλέπε [139], [88] και [136] ή την σχέση Selberherr, βλέπε [137], για την προσαρμογή του ηλεκτρικού πεδίου στους συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης.

Κάποιες επιστημονικές ομάδες ([135] και [145]) χρησιμοποιούν παρόμοιο μοντέλο όπως ο Thornber:

$$\alpha_p = \left(\frac{qF}{E_i^h} \right) \exp \left[- \frac{E_i^h}{\frac{(qF\lambda_h)^2}{3E_p} + qF\lambda_h} \right] \quad (3.8.39)$$

$$\alpha_n = \left(\frac{qF}{E_i^e} \right) \exp \left[- \frac{E_i^e 3E_p}{(qF\lambda_e)^2} \right] \quad (3.8.40)$$

όπου $\lambda_e(\lambda_h)$ και $E_i^e(E_i^h)$ είναι μέσος όρος μήκος κύματος για ηλεκτρόνια και οπές και η ενέργεια ιονισμού για ηλεκτρόνια αντίστοιχα. E_p είναι η οπτική ενέργεια φωνονίου. Οι

τιμές των παραμέτρων βρίσκονται στις αναφορές [135], [133] και [146] και οι τιμές είναι $E_i^e=10\text{eV}$, $E_i^h=7\text{eV}$, $E_p=0.12\text{eV}$, $\lambda_h = 3.25 \text{ nm}$ και $\lambda_e = 2.99 \text{ nm}$.

Οι τιμές και το μοντέλο επαλειφθήκαν με χρήση του μοντέλου σε προσομοιώσεις μιας (APD) δίοδο από τους Akturk et al. [145].

Μοντέλο για ανισοτροπία των συντελεστών ιονισμού πρόσκρουσης στο SiC δημιουργήθηκε από Hatakeyama [147]. Στο νέο μοντέλο αυτό, το ηλεκτρικό πεδίο είναι ένα διάνυσμα που παίρνει δύο κύριοι κατευθύνσεις στο κρύσταλλο. Το ηλεκτρικό πεδίο κατά το c-άξονα και το ηλεκτρικό πεδίο κατά το a-άξονα: $\mathbf{F}=(F_{a\text{-axis}}, F_{c\text{-axis}})$ και $F = |\mathbf{F}| = \sqrt{F_a^2 + F_c^2}$. Μια αναλυτική έκφραση της ανισοτροπίας των συντελεστών σε οποιαδήποτε κατεύθυνση έχει μελετηθεί στο δημοσίευμα [88]. Οι συντελεστές ιονισμών πρόσκρουσης περιγράφονται από τη σχέση:

$$\alpha_{n,p}(F) = a_{n,p} \exp\left(-\frac{b_{n,p}}{F} \sqrt{1 - A^2 \left(\frac{b_{n,p} F_c F_a}{F b_c b_a}\right)}\right) \quad (3.8.41)$$

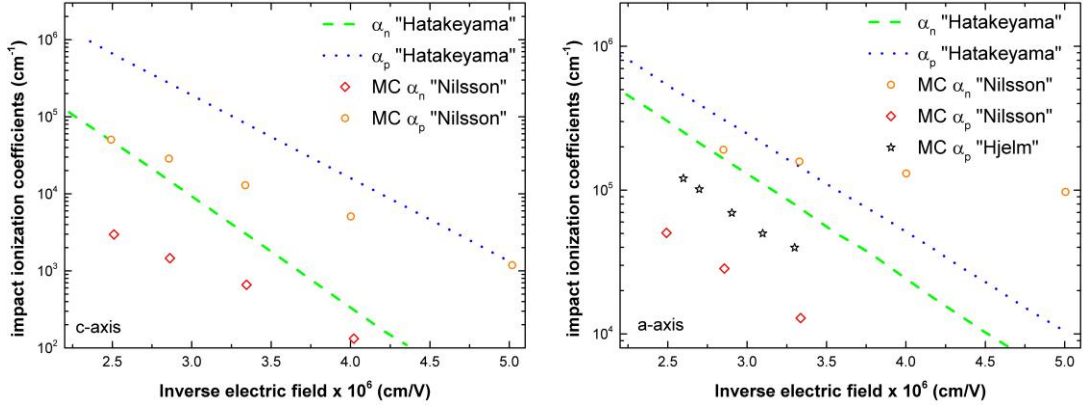
όπου b, a και A ορίζονται με τις σχέσεις:

$$\frac{F^2}{b_{n,p}^2} = \frac{F_a^2}{(b_a^2)_{n,p}} + \frac{F_c^2}{(b_c^2)_{n,p}}, \quad (3.8.42)$$

$$a_{n,p} = a_\alpha \left(\frac{(b_{n,p}^2 F_a^2)}{((b_a^2)_{n,p} F^2)} \right) a_c \left(\frac{(b_{n,p}^2 F_c^2)}{((b_c^2)_{n,p} F^2)} \right), \quad (3.8.43)$$

$$A = \ln\left(\frac{a_c}{a_a}\right) \quad (3.8.44)$$

Οι ίδιοι συγγραφείς [88] έχουν προσδιορίσει τον όρο $E_p - \hbar\omega_{op}$ και είναι 0.19 eV για το 4H-SiC που διαφέρει με την τιμή που βρέθηκε μέσω οπτικών μετρήσεων (0.12 eV).

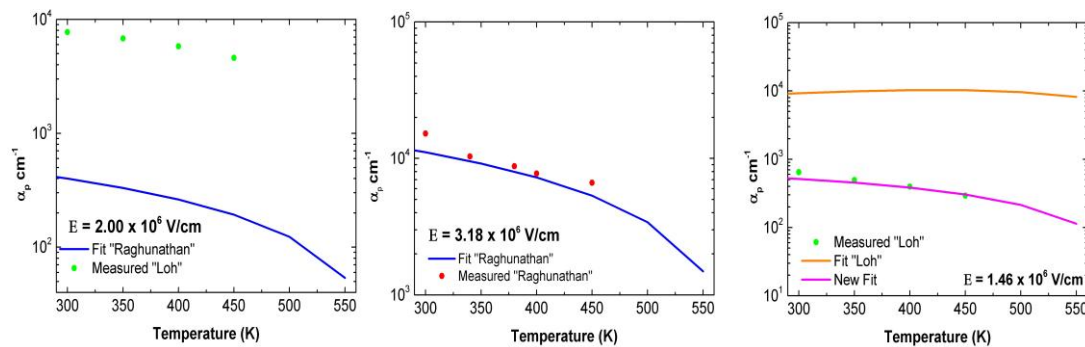


Εικόνα 3.8-4. 3.8-5 περιέχει τα δεδομένα της βιβλιογραφίας για τους συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης κατά τον c άξονα και a άξονα με μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου σε θερμοκρασία 300 K. Η δεξιά εικόνα είναι για ηλεκτρόνια ενώ η αριστερή εικόνα είναι για οπές. Η βιβλιογραφία για τις τιμές είναι [148], [140] and [89].

Πολλές προσομοιώσεις TCAD χρησιμοποιούν τα δεδομένα του Ruff et al (1994) [149] που είναι για 6H-SiC. Ο πίνακας 3.8-1 περιέχει όλες τις παραμέτρους για το μοντέλο ιονισμού πρόσκρουσης.

Βιβλιογραφία	Selberherr παράμετροι		c_p	a_n (10^7 cm^{-1})	b_n (10^7 Vcm^{-1})	c_n	E^{-1} region (MV/cm)
	a_p (10^7 cm^{-1})	b_p (10^7 Vcm^{-1})					
"Nguyen"	0.85	1.597	1.00	0.336	2.600	1.00	1.50 - 4.80
"Hatakeyama" (0001)	34.1	2.500	1.00	17.600	3.300	1.00	2.00 - 5.00
"Hatakeyama" (11-20)	34.1	2.500	1.00	17.600	3.300	1.00	2.00 - 5.01
"Raghunathan"	0.35	1.70	1.00	-	-	1.00	3.20 - 3.85
"Loh"	0.35	1.03	1.09	0.28	1.05	1.37	0.83 - 3.33
"Shah"	0.35	1.03	1.00	0.28	1.05	1.00	0.90 - 5.00
"ATLAS"	0.58	1.40	1.00	0.17	1.273	1.00	-

Πίνακας 3.8-1. 4H-SiC συντελεστές για τους ρυθμούς ιονισμών πρόσκρουσεων. Γενικός, ο ρυθμός ιονισμού πρόσκρουσης για ηλεκτρόνια είναι αρκετά μικρότερος από αυτόν των οπών. Η βιβλιογραφία είναι "Nguyen" [136], "Konstatinon" [135], "Hatakayama" [88], "Loh" [137], "Nilsson" [141], "Akturk" [142], "Hjelm" [140] και "Raghunathan" [143].



Εικόνα 3.8-6 περιέχει την βιβλιογραφία για τους συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης με μεταβολή της θερμοκρασίας σε σταθερό ηλεκτρικό πεδίο. Ο εξαρτημένος από θερμοκρασία συντελεστής ιονισμού πρόσκρουσης της οπής έχει διεξαχθεί από τους W.S. Loh et al.[144] και R.Raghunathan et al. [143].

Για συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης οπών που μεταβάλλονται με θερμοκρασία έγινε η παραδοχή, βλέπε "Raghunathan" [143] και "Loh"[144], ότι οι συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης ηλεκτρονίων δεν μεταβάλλονται με θερμοκρασία.

Parameters	a_p "Raghunathan"	a_p "Loh"
ma_p	1.0	1.0
mb_p	1.0	1.0
A_p	3.09×10^6	3.321×10^6
A_{pT}	-1.03	-0.833
B_p	1.07×10^7	7.413×10^6
B_{pT}	0	-0.2

Πίνακας 3.8-2. Μετατροπή των συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης εξαρτημένες από τη θερμοκρασία ("Raghunathan" [143] and "Loh"[144]) σε συντελεστές για το μοντέλο Selberherr.

3.8.7 Προσομοίωση ιονισμού πρόσκρουσης 4H-SiC στο ATLAS

Το ATLAS περιέχει τοπικά και μη τοπικά μοντέλα και είναι τα εξής:

- Selberherr
- Selberherr tabular model
Ο σκοπός του μοντέλου αυτού είναι η διεξαγωγή των συντελεστών ιονισμού πρόσκρουσης για το Selberherr μοντέλο από πειραματικά δεδομένα.
- Van Overstraeten–De Man

- Valdinoci
- Grant
- Crowell-Sze
- Okuto-Crowell
- Lackner

Μη τοπικά μοντέλα:

- Toyabe
- Concannon Impact Ionization Model

Η δήλωση IMPACT πρέπει να ορισθεί στο κώδικα του ATLAS ώστε να ενεργοποιηθεί ο ιονισμός πρόσκρουση.

Το Grant μοντέλο είναι το προκαθορισμένο μοντέλο για Si, το μοντέλο Selberherr χρησιμοποιείται για το υλικό SiC και αντιπροσωπεύεται στο ATLAS ως εξής:

$$\alpha_n = AN_{1,2} \exp \left[- \left(\frac{BN_{1,2}}{E} \right)^{BETAN} \right] \quad (3.8.45)$$

$$\alpha_p = AP_{1,2} \exp \left[- \left(\frac{BP_{1,2}}{E} \right)^{BETAP} \right] \quad (3.8.46)$$

όπου E είναι το ηλεκτρικό πεδίο. Οι παράμετροι AN, AP, BN, BP, BETAN, και BETAP ορίζονται στη δήλωση του IMPACT και έχουν προκαθορισμένες τιμές για 4H-SiC, βλέπε πίνακας 3.8-1. Οι παράμετροι AN, AP, BN, και BP παίρνουν διαφορετικές τιμές ανάλογα με την δήλωση του EGRAN V/cm. Έτσι Οι παράμετροι AN, AP, BN, και BP παίρνουν ένα σετ τιμών για ηλεκτρικά πεδία μεγαλύτερα της τιμής EGRAN V/cm (AN1, BN1, AP1, BP1, AP1 και BP1), και ένα σετ τιμών για τιμές του ηλεκτρικού πεδίου μικρότερες από την τιμή EGRAN (AN2, BP2, AN2, BN2, AP2 και BP2).

Σημειώστε ότι το ATLAS χρησιμοποιεί προκαθορισμένες τιμές για τους παραπάνω αναφερόμενες συντελεστές που ισχύουν για το υλικό 6H-SiC, βλέπε πίνακας 3.8-1.

Οι μεταβολές των συντελεστών $a_{n,p}$ και $b_{n,p}$ με θερμοκρασία (ή ισοδύναμα AN, AP, BN και BP στο ATLAS) μοντελοποιούνται με την εξίσωση (3.8.19) και γράφονται ως εξής :

$$AN = AN_{1,2} \left(1 + A.NT \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M.ANT} - 1 \right] \right) \quad (3.8.47)$$

$$AP = AP_{1,2} \left(1 + A.PT \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M.ANP} - 1 \right] \right) \quad (3.8.48)$$

$$BN = BN_{1,2} \left(1 + B.NT \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M.BNT} - 1 \right] \right) \quad (3.8.49)$$

$$BP = BP_{1,2} \left(1 + B.PT \left[\left(\frac{T_L}{300} \right)^{M.BPT} - 1 \right] \right) \quad (3.8.50)$$

Εναλλακτικό μοντέλο την μοντελοποίηση της εξάρτησης των συντελεστών από τη θερμοκρασία δίνεται παρακάτω:

$$AN = AN_{1,2} + CN2 \times T + DN2 \times T^2 \quad (3.8.51)$$

$$AP = AP_{1,2} + CP2 \times T + DP2 \times T^2 \quad (3.8.52)$$

όπου T είναι η θερμοκρασία και οι παράμετροι CN2, CP2, DN2, και DP2 της δήλωσης IMPACT. Όταν δεν ορίζονται οι παράμετροι CN2, CP2, DN2 και DP2 έχουν μηδενική τιμή και χρησιμοποιείται σαν μοντέλο για μοντελοποίηση της εξάρτησης των συντελεστών από τη θερμοκρασία οι εξισώσεις (3.8.47) και (3.8.48).

Σημειώνεται ότι δεν υπάρχει μελέτη για το 4H-SiC που περιγράφει τις σχέσεις (3.8.49) και (3.8.50).

Όπως περιγράφηκε νωρίτερα οι παραπάνω τιμές των παραμέτρων χωρίζονται σε δυο σετ. Το ένα σετ παραμέτρων ισχύει για ηλεκτρικό πεδίο μεγαλύτερο του 0 Volt, όπου οι παράμετροι έχουν στην ονομασία τους ένα «1». Το άλλο σετ παραμέτρων ισχύει για ηλεκτρικό πεδίο μικρότερο του 0 Volt όπου οι παράμετροι έχουν στην ονομασία τους ένα «2». Ο πίνακας 3.8-1 περιέχει τα σετ των παραμέτρων και οι τιμές των παραμέτρων βασίζονται σε τιμές 6H-SiC, βλέπε [150]. Επομένως για την σωστή προσομοίωση του ιονισμού πρόσκρουσης προτείνονται για το Selberherr μοντέλο οι πιο πρόσφατες πειραματικές μετρημένες τιμές συντελεστών ιονισμού πρόσκρουσης από τους D. M. Nguyen et al. [136].

Παράμετρος	Τιμή	Μονάδες
EGRAN	2.7	MV/cm
BETAN	1.0	
BETAP	1.0	
AN1	0.46×10^6	cm^{-1}
AN2	0.68×10^6	cm^{-1}
BN1	1.78×10^7	Vcm^{-1}
BN2	1.56×10^7	Vcm^{-1}
AP1	1.56×10^7	cm^{-1}
AP2	1.52×10^7	cm^{-1}
BP1	1.72×10^7	Vcm^{-1}
BP2	1.86×10^7	Vcm^{-1}

Πίνακας 3.8-3. Προτεινόμενες 4H-SiC τιμές παραμέτρων για το Selberherr μοντέλο.

Ανισοτροπία μοντελοποιείται στο ATLAS σύμφωνα με τους συντελεστές ιονισμού πρόσκρουσης που περιγράφονται από τις σχέσεις «Hatakeyama». Η διαφορά είναι ότι οι εξισώσεις (3.8.41), (3.8.42), (3.8.43) και (3.8.44) συνδυάζονται σε μια εξίσωση:

$$\alpha_{n,p}(E_x E_y) = a_{n,p} \exp \left(-c_{n,p} \sqrt{1 - A^2 c_{n,p}^2 \left(\frac{E_x E_y}{(b_x b_y)_{n,p}} \right)^2} \right) \quad (3.8.53)$$

όπου b, a και A ορίζονται με τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$c_{n,p} = \frac{b_{n,p}}{E} = \left(\frac{E_x^2}{(b_x^2)_{n,p}} + \frac{E_y^2}{(b_y^2)_{n,p}} \right)^{-1/2}, \quad (3.8.54)$$

$$a_{n,p} = a_x \left(\frac{(c_{n,p}^2 E_x^2)}{(b_x^2)_{n,p}} \right) a_y \left(\frac{(c_{n,p}^2 E_y^2)}{(b_y^2)_{n,p}} \right), \quad (3.8.55)$$

$$A = \ln \left(\frac{(a_y)_{n,p}}{(a_x)_{n,p}} \right) \quad (3.8.56)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις E_x and E_y είναι τα μεγέθη των ηλεκτρικών πεδίων στη x και y κατεύθυνση. Οι τιμές των παραμέτρων a_x , a_y , b_x , και b_y εξαρτώνται από τον προσανατολισμό του κρυστάλλου. Για να ορισθεί η ανισοτροπία δηλώνεται η παράμετρος ANISO στη δήλωση IMPACT. Ο προσανατολισμός του κρυστάλλου καθορίζεται και είναι δυνατόν να είναι (0001) ή (1120). Ο προσανατολισμός καθορίζεται στο ATLAS με τους παραμέτρους SIC4H0001 και SIC4H1120 στη δήλωση IMPACT. Προκαθορισμένος προσανατολισμός είναι (0001). Ο πίνακας 3.8-4 παρουσιάζει τις προκαθορισμένες τιμές για τους παραμέτρους των παραπάνω εξισώσεων: a_x , b_x , a_y , και b_y , όπου AE^* και BE^* είναι για ηλεκτρόνια ενώ AH^* και BH^* είναι για οπές. Για παράδειγμα η εντολή IMPACT ANISO SIC4H1120 θα καθόρισε έναν προσανατολισμό (1120). Όταν επιλέχθηκε ο προσανατολισμός οι παράμετροι των (3.8.55) και (3.8.54), δηλαδή a_y , a_x , b_x και b_y χωρίζονται σε δύο ομάδες: a_y και b_y θα περιέχουν τις τιμές ηλεκτρονίων και οπών του επιλεγμένου προσανατολισμού, ενώ οι τιμές a_x και b_x παίρνουν τις τιμές ηλεκτρονίων και οπών της μη επιλεγμένου προσανατολισμού.

Παράμετρος	Σύμβολο	Δήλωση	Τιμές
AE0001	a_{yn}	IMPACT	1.76×10^8
BE0001	b_{yn}	IMPACT	3.30×10^7
AH0001	a_{yp}	IMPACT	3.41×10^8
BH0001	b_{yp}	IMPACT	2.50×10^7
AE1120	a_{xn}	IMPACT	2.10×10^7
BE1120	b_{xn}	IMPACT	1.70×10^7
AH1120	a_{xp}	IMPACT	2.96×10^7
BH1120	b_{xp}	IMPACT	1.60×10^7

Πίνακας 3.8-4. Προκαθορισμένοι παράμετροι ATLAS για ανισοτροπικό ιονισμό πρόσκρουσης. Στην στήλη «Σύμβολο» παρουσιάζεται το σύμβολο που χρησιμοποιείται στις εξισώσεις (3.8.53) μέχρι (3.8.56), όταν επιλέγεται ο προσανατολισμός κρυστάλλου (0001).

Καμία επιστημονική ομάδα TCAD αναφέρει χρήση της ανισοτροπίας ιονισμού πρόσκρουσης.

4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Το θέμα της διπλωματικής είναι προσομοίωση JFET καρβιδίου πυριτίου με το TCAD εργαλείο της SILVACO. Όπως κάθε προσομοιωτής TCAD χρησιμοποιεί την μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων (FEA) έτσι και το SILVACO ATLAS. Η ουσία της FEA είναι να «αποτυπωθεί» η διάταξη με μαθηματικές εκφράσεις. Αυτές οι εκφράσεις στην συνέχεια είναι εκφράζονται με ένα απλό σύστημα πινάκων ώστε να είναι δυνατόν η εφαρμογή εξωτερικών δυνάμεων στο σύστημα όπως είναι η εφαρμογή τάσεως ή η εφαρμογή ρεύματος. Με αυτό τον τρόπο λαμβάνονται μεγέθη όπως ηλεκτρικά πεδία, ταχύτητες φορέων και άλλων επιθυμητών μεγεθών. Στο κεφάλαιο 2 η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων έχει αναλυθεί και χρήση της ή παρόμοιων μεθόδων που απορρέουν από αυτήν, είναι απαραίτητη προϋπόθεση για την κατανόηση των σφαλμάτων κατά την διάρκεια μιας προσομοίωσης. Οι περισσότεροι προσομοιωτές απαιτούν από τον χρήστη να έχει τουλάχιστον μια γενική γνώση των μεθόδων FEA που χρησιμοποιούνται.

Τα μεγέθη εξαρτώνται από το είδος μοντέλου που εφαρμόζεται στη διάταξη. Παρουσιάστηκε ένα παράδειγμα υλοποίησης κώδικα σε ATLAS, όπου κάθε βήμα αναλύεται και επεξηγείται. Έτσι ο αναγνώστης εξοικειώνεται με τη δομή του ATLAS και με τις έννοιες της.

Τα προβλήματα με την προσομοίωση ημιαγωγών εμφανίζονται όταν ο ημιαγωγός είναι διαφορετικού τύπου από ότι συνηθίζεται να χρησιμοποιείται στα TCAD. Ένα τέτοιο «εξωτικό» υλικό είναι και το 4H-SiC. Έχουν γίνει πολλές αποτυχημένες προσομοιώσεις διατάξεων p-i-n και JFET ώστε να κατανοηθεί το γεγονός ότι χρειάζεται μια πλήρη επανεξέταση των φυσικών παραμέτρων του 4H-SiC στον προσομοιωτή. Έτσι παρουσιάζεται για κάθε φυσική παράμετρο η θεωρία, οι πειραματικές μετρήσεις και συγκρίσεις μεταξύ επιστημονικών ομάδων TCAD. Με αυτό τον τρόπο εξάγονται οι καλύτεροι παράμετροι για την κάθε παράμετρο. Σημαντικές αποκλίσεις με τις προκαθορισμένες τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιεί το ATLAS βρέθηκαν στις εξής φυσικούς παραμέτρους:

- Ευκινησία φορέων (μοντέλο Caughey-Thomas)
- Χρόνος ζωής των φορέων (ελλιπώς προσδιορισμός)
- Ιονισμός πρόσκρουσης (μη κατάλληλες τιμές για τους ρυθμούς των συντελεστών πρόσκρουσης)

Οι παραπάνω αποκλίσεις είναι ύψιστης σημασίας για την σωστή λειτουργία μιας διάταξης ισχύος. Επομένως δεν είναι εφικτή η προσομοίωση οποιαδήποτε διάταξης εάν δεν γίνεται πρώτα μια ανάλυση των αποκλίσεων των φυσικών παραμέτρων προσομοίωσης, κάτι που πραγματοποιήθηκε επιτυχώς σε αυτήν την διπλωματική εργασία.

I. ΣΥΝΟΛΙΚΟΣ ΚΩΔΙΚΑΣ ΣΙ ΔΙΟΔΟΣ

go atlas	ΕΝΑΡΞΗ
# Το σύμβολο # είναι εντολή για αγνοήση εκτέλεσης της γραμμής #####	
#ΔΟΜΗ # #####	
# ΠΛΕΓΜΑ #####	
mesh space.mult=1.0 x.mesh loc=0.00 spac=1 x.mesh loc=90.0 spac=1	
y.mesh loc=0.00 spac=0.5 y.mesh loc=1.00 spac=0.05 y.mesh loc=2.00 spac=2 y.mesh loc=8.00 spac=2 y.mesh loc=10.00 spac=0.5 y.mesh loc=11.00 spac=0.05 y.mesh loc=12.00 spac=0.5 y.mesh loc=30.00 spac=6	
# ΠΕΡΙΟΧΕΣ #####	
region num=1 material=silicon x.min=0. x.max=90 y.min=0. y.max=1 region num=2 material=silicon x.min=0. x.max=90 y.min=1 y.max=11 region num=3 material=silicon x.min=0. x.max=90 y.min=11 y.max=30	
# ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΑ #####	
electrode name=anode x.min=0 x.max=90 electrode name=cathode bottom	
# ΝΟΘΕΥΣΗ #####	
# P+ νόθευση doping gauss conc=1e20 p.type char=0.05 rat=0.6 region=1 # N νόθευση υποστρώματος doping conc=6.e15 n.type uniform region=2 # N+ νόθευση υποστρώματος doping conc=5.e18 n.type uniform region=3	
# Saving structure & plot structure save outf=SiDiode_diodeP+NN+01.str #tonyplot SiDiode_diodeP+NN+01.str	

Δ
Ο
Μ
Η

#####	MONTELA
# MONTELA #	
#####	
models analytic fldmob srh auger bgn print temperature=300	
impact selb	
# ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΗΚΑ ΥΛΙΚΟΥ	
# material ...	
# ΔΙΕΠΑΦΕΣ	
contact name=anode workf=4.97	
# ΜΕΘΟΔΟΙ	
method newton	ΛΥΣΕΙΣ
#carriers=2 clim.dd=1e-30 clim.eb=1e-30	
method trap atrap=0.5 maxtraps=3	
#####	
# ΛΥΣΕΙΣ #	
#####	
# ΑΡΧΗΚΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗΔΕΝΙΚΗΣ ΛΥΣΕΩΣ	
solve init	
solve vanode=0.01	
# ΡΕΥΜΑ ΔΙΑΧΥΣΗΣ (ΟΡΘΗΣ ΠΟΛΩΣΗΣ)	
#####	
# Ορισμός αρχείου για αποθηκεύση δεδομένων αποτελεσμάτων προσομοίωσης	
log outfile=SiDiode_diodeP+NN+01_forward.log	
solve vanode=0 vstep=0.5 vfinal=5 name=anode	
tonyplot SiDiode_diodeP+NN+01_forward.log	
go atlas	ΕΝΑΡΞΗ
mesh inf=SiDiode_diodeP+NN+01.str	ΔΟΜΗ
#####	MONTELA
# MONTELA #	
#####	
models analytic fldmob srh auger bgn print temperature=300	
# Επαφές	
contact name=anode workf=4.97	
impact selb	
# ΜΕΘΟΔΟΙ	
method newton	
#carriers=2 clim.dd=1e-30 clim.eb=1e-30	
method trap atrap=0.5 maxtraps=3	

```
#####  
# ΛΥΣΕΙΣ #  
#####  
  
solve init  
solve vanode=0.01  
  
# ΧΑΡΑΚΤΗΤΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΣΤΡΑΦΟΥ ΡΕΥΜΑΤΟΣ  
#####  
  
log outfile=SiDiode_diodeP+NN+01_reverse.log  
#solve vanode=0.0 vstep=-1 vfinal=-1000 name=anode  
  
curvetrace curr.cont end.val=-1e-4 contr.name=anode \  
mincur=-5e-15 nextst.ratio=1 step.init=-0.5  
solve curvetrace  
  
# ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ  
tonyplot SiDiode_diodeP+NN+01_reverse.log  
quit
```



II. ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ ΜΗΧΑΝΙΣΜΩΝ ΣΚΕΔΑΣΕΩΝ

Σε βιβλία ημιαγωγών λαμβάνεται μόνο οι μηχανισμοί σκεδάσεων υπόψη, η ευκινησία λόγω σκέδασης φωνονίων (σκέδαση ακουστικών φωνονίων) [151] και η ευκινησία λόγω σκέδασης ιονισμένων προσμίξεων [152].

Σκέδαση ακουστικών φωνονίων (σκέδαση πλέγματος)

$$\mu_{interaction} = \frac{\sqrt{8\pi} q \hbar^4 C}{3E_{ds} m^{*5/2} (kT)^{3/2}} \sim (m^*)^{-5/2} T^{-3/2} \quad (\text{III.H.57})$$

όπου C είναι η μέση διαμήκη ελαστική σταθερά ενός ημιαγωγού και είναι ίση με την πυκνότητα ρ επί την ταχύτητα u,

E_{ds} είναι η μετατόπιση των άκρων των ζωνών ανά μοναδιαία διαστολή του πλέγματος και m^* η ενεργή μάζα.

Σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων

Η ευκινησία αναμένεται να μειώνεται με θερμοκρασία με αλλαγή της ενεργής μάζας.

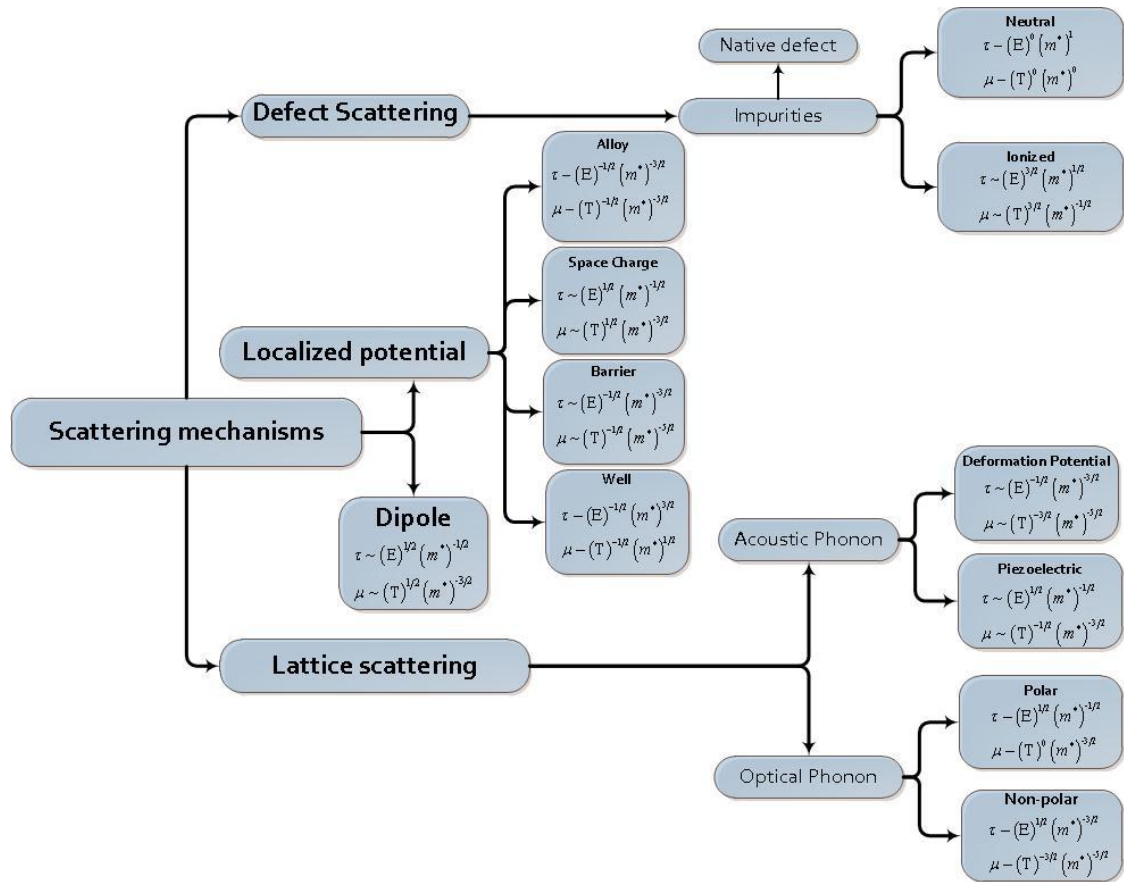
$$\mu_i = \frac{64\sqrt{\pi} \varepsilon_s^2 (2kT)^{3/2}}{N_I q^3 m^{*1/2} (kT)^{3/2}} \sim (m^*)^{-1/2} N_I^{-1} T^{3/2} \quad (\text{III.H.58})$$

όπου N_I είναι η ιονισμένη συγκέντρωση προσμίξεων και ε_s και την διηλεκτρική σταθερά.

Η ευκινησία λόγω σκέδασης ιονισμένων προσμίξεων αυξάνεται με θερμοκρασία και συγκέντρωση προσμίξεων, οπότε η ευκινησία μειώνεται. Οι εξισώσεις (III.H.59) και (III.H.58) έχουν αθροιστεί μέσω του κανόνα Matthiessen, που δίνει τη συνολική ευκινησία για τους δυο μηχανισμούς σκεδάσεων:

$$\mu_{total} = \left(\frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_l} \right)^{-1} \quad (\text{III.H.60})$$

Για να συμπεριληφθούν όλοι οι υπάρχοντες μηχανισμοί μια πιο αναλυτική ανάλυση πρέπει να διεξαχθεί. Αυτή η ανάλυση έχει εκτελεστεί από O.Manesreh [153], τα αποτελέσματα των οποίων αναπαριστάνονται γραφικά στην



Εικόνα 3.8-1. Επισκόπηση των μηχανισμών σκέδασης. Για κάθε μηχανισμό σκέδασης φαίνεται ο χρόνος χαλάρωσης όπως και η προσεγγιστική ευκινησία.

Για το 4H-SiC, όλοι μηχανισμοί σκέδασης υπολογίζονται μέσω των χρόνων χαλάρωσης. Σύμφωνα με [60] και [61] οι μηχανισμοί σκέδασης των ακουστικών φωνονίων, ιονισμένων προσμίξεων και πιεζοηλεκτρισμού φαινομένου είναι οι πιο σημαντικοί σε χαμηλό ηλεκτρικό πεδίο. Στο υπόλοιπο τμήμα έπονται οι περιγραφές των μηχανισμών σκεδάσεων με τους αντίστοιχους χρόνους χαλάρωσης τους για 4H-SiC τύπος n και τύπος p, βλέπε επίσης για πλήρη περιγραφή [62] και [63].

Σκέδαση παραμόρφωσης δυναμικού (Σκέδαση ακουστικών φωνονίων)

Οι ακουστικοί τρόποι ταλάντωσης τροποποιούν τις ενδοατομικές αποστάσεις και επειδή η δομή των ζωνών είναι πολύ ευαίσθητη, η τροποποίηση των ενδοατομικών αποστάσεων έχει σαν συνέπεια την μεταβολή των θέσεων των άκρων των ζωνών αγωγιμότητας και σθένος, όπως επίσης και την μεταβολή του ενεργειακού χάσματος. Η μεταβολή των άκρων των ζωνών αγωγιμότητας και σθένος προέρχεται από έναν μηχανισμό παραμόρφωσης του δυναμικού που σκεδάζει τους φορείς. Οι ενέργειες που εμπλέκονται στη σκέδαση ακουστικών φωνονίων είναι της τάξης από μηδέν μέχρι $2\hbar v k$, όπου, v είναι η ταχύτητα ήχου. Η διατήρηση της ορμής περιορίζει την περιοχή δράσης του κυματοδιανύσματος μεταξύ μηδέν και $2k$, όπου k είναι το κυματοδιάνυσμα ηλεκτρονίου. Τυπικά ο μέσος όρος του k είναι της τάξης 10^7 cm^{-1} και η ταχύτητα ήχου στο μέσο είναι της τάξεως 10^5 cm sec^{-1} . Έτσι $2\hbar v k \sim 1 \text{ meV}$ που είναι μικρή ενέργεια σε σχέση με τη θερμική ενέργεια σε συνθήκες δωματίου. Επομένως η παραμόρφωση του δυναμικού, εκτός από την περίπτωση χαμηλών θερμοκρασιών, μπορεί θεωρηθεί σαν ελαστική κρούση.

$$\left(\frac{1}{\tau_{ac}} \right)_n = \frac{\sqrt{2} m_d^{*3/2} C_a^2 k_b T}{\pi \hbar^4 \rho u_{||}^2} \varepsilon^{1/2}, \quad \left(\frac{1}{\tau_{ac}} \right)_p = \frac{\sqrt{2} (m_h^{*3/2} + m_l^{*3/2}) C_a^2 k_b T}{\pi \hbar^4 \rho u_{||}^2} \varepsilon^{1/2} \quad (\text{III.H.61})$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα μάζας στο κρύσταλλο, $u_{||}$ είναι η διαμήκη ταχύτητα ακουστικών φωνονίων, και C_a είναι το δυναμικό παραμόρφωσης.

Παρατηρείται από την εξίσωση (III.H.61) ότι η ευκινησία εξαρτάται κυρίως από την θερμοκρασία και την ενεργή μάζα. Έτσι η σκέδαση λόγω ακουστικών παραμορφώσεων είναι σημαντική σε υψηλές θερμοκρασίες. Είναι σε υψηλές θερμοκρασίες ο κυρίαρχος μηχανισμός σκέδασης για μη πολικούς ημιαγωγούς, όπως είναι οι Ge και Si.

Σκέδαση μη πολικών φωνονίων

Σκέδαση μη πολικών φωνονίων είναι παρόμοια με τη σκέδαση παραμόρφωσης δυναμικού. Η παραμόρφωση του πλέγματος προέρχεται από διαταραχή του δυναμικού, όμως σε αυτό το είδος σκέδασης η διαταραχή είναι οπτικής φύσεως. Συγκεκριμένα η διαταραχή πλέγματος προέρχεται από οπτικές δονήσεις του πλέγματος. Η σκέδαση φορέων λόγω αυτό του φαινόμενο εκτελείται είτε μέσα στις ζώνες (intraband) είτε μεταξύ φωνονίων στη κοιλάδα της ζώνης (interband). Επίσης παρατηρείται για 4H-SiC μόνο σε τύπου p. Η συνδυασμένη τιμή των χρόνων χαλάρωσης των intraband και interband σκεδάσεων μη πολικών φωνονίων εκφράζεται μέσω του σύμβολου τ_{np0} :

$$\frac{1}{\tau_{np0}} = \frac{1}{\tau_{np0,ii}} + \frac{1}{\tau_{np0,ij}} = \frac{(D_{ii} + D_{ij})^2 (m_h + m_l)^{3/2}}{\sqrt{2\pi\rho\hbar^3\omega_0}} \times \left[N(\omega_0)(\varepsilon + \hbar\omega_0)^{1/2} + [N(\omega_0) + 1](\varepsilon - \hbar\omega_0)^{1/2} \right]$$

(III.H.62)

όπου $N(\omega_0) = 1/\{\exp[\hbar\omega_0/(k_B T)] - 1\}$ είναι ο αριθμός κατάληψης φωνονίων και $\tau_{np0,ii}$, $\tau_{np0,ij}$ είναι οι χρόνοι χαλάρωσης οπτικών φωνονίων. Οι εκπομπές φωνονίων, που αντιπροσωπεύεται από τον όρο $N(\omega_0) + 1$, συμβάλουν μόνο για $\varepsilon \gg \hbar\omega_0$, αλλιώς μηδενίζονται.

Σκέδαση πολικών φωνονίων

Το διπολικό ηλεκτρικό πεδίο που προκαλείται από αντίθετα φορτισμένα άτομα δημιουργεί μια σύζευξη μεταξύ ηλεκτρονίων και πλέγματος, το οποίο στην συνέχεια προκαλεί σκέδαση.

$$\left(\frac{1}{\tau_{rop}} \right)_n = \frac{e^2 \omega_{op}}{4\pi\varepsilon_p \hbar (2\varepsilon/m_d^*)^{1/2}} \left[\begin{aligned} & N(\omega_{op}) \left(1 + \left(\frac{\hbar\omega_{op}}{\varepsilon} \right)^{1/2} \right) + \{N(\omega_{op}) + 1\} \left(1 - \left(\frac{\hbar\omega_{op}}{\varepsilon} \right)^{1/2} \right) + \\ & \frac{\hbar\omega_{op}}{\varepsilon} \left(-N(\omega_{op}) \sinh^{-1} \left(\frac{\varepsilon}{\hbar\omega_{op}} \right)^{1/2} + \{N(\omega_{op}) + 1\} \sinh^{-1} \left(\frac{\varepsilon}{\hbar\omega_{op}} - 1 \right)^{1/2} \right) \end{aligned} \right] \quad (\text{III.H.63})$$

$$\text{και} \left(\frac{1}{\tau_{rop}} \right)_n = \left(\frac{1}{\tau_{rop}} \right)_p$$

όπου $\hbar\omega_{op}$ είναι η οπτική ενέργεια, $N(\hbar\omega_{op}) = 1/(\exp(\hbar\omega_{op}/k_B T) - 1)$ ο αριθμός κατάληψης φωνονίων και οι εκπομπές φωνονίων, που αντιπροσωπεύεται από τον όρο $N(\omega_0) + 1$, συμβάλουν μόνο για $\varepsilon \gg \hbar\omega_0$, αλλιώς μηδενίζονται.

Σκέδαση πολλών κοιλάδων (σκέδαση φωνονίων στη κοιλάδα)

Όταν σε μια διάταξη με πολλές κοιλάδες στην ζώνη αγωγιμότητας της, όπως Ge, Si και SiC, εμπλέκονται φωνόνια με μεγάλα κυματοδιανύσματα τότε παρατηρείται ότι τα ηλεκτρόνια «πηδάνε» μεταξύ των κοιλάδων. Αυτό λέγεται σκέδαση πολλών κοιλάδων. Ο χρόνος χαλάρωσης για αυτόν τον μηχανισμό σκέδασης συνήθως ενσωματώνεται στη σκέδαση φωνονίων ή στην σκέδαση μη πολικών φωνονίων.

Σκέδαση πιεζοηλεκτρισμού φαινομένου

Ο δεύτερος τρόπος σκέδασης ηλεκτρονίων μέσω ακουστικών φωνονίων πραγματοποιείται όταν οι μετατοπίσεις των ατόμων δημιουργούν ένα ηλεκτρικό πεδίο, το λεγόμενο πιεζοηλεκτρικό φαινόμενο. Σε ισχυρούς ιονικούς κρυστάλλους, όπως για παράδειγμα είναι οι ημιαγωγοί II-VI, η σκέδαση πιεζοηλεκτρικού φαινομένου κυριαρχεί σε σχέση με τη σκέδαση παραμόρφωσης δυναμικού. Προσέξτε ότι το SiC υλικά έχουν μεγάλη πιεζοηλεκτρική σταθερά. Ο ρυθμός σκέδασης πιεζοηλεκτρισμού φαινομένου σε ισοτροπικό και παραβολικής μορφής ζώνης υλικού συζητήθηκε από Ridley [154].

$$\mu_{pz} = \frac{16\sqrt{2\pi}}{3} \frac{\hbar \epsilon_0 \epsilon_r}{m^{*3/2} e K^2} \left(\frac{1}{kT} \right)^{1/2} \quad (\text{III.H.64})$$

με $K = \frac{e_p^2/c_1}{\epsilon_0 \epsilon_r + e_p^2/c_1}$, ο πιεζοηλεκτρικός συντελεστής.

Οι περισσότεροι επιστημονικές ομάδες συμπεριλαμβάνουν τον χρόνο χαλάρωσης της σκέδασης πιεζοηλεκτρισμού φαινομένου στο χρόνο χαλάρωσης στη σκέδαση πλέγματος, βλέπε εικόνα 3.8-1, και επομένως σπάνια αναλύεται σαν ξεχωριστή σκέδαση.

Σκέδαση ουδέτερων προσμίξεων

Αυτό το είδος σκέδασης είναι λόγω των μη πλήρων ιονισμένων ρηχών προσμίξεων (δότες ή αποδέκτες), και συμβάλλει σημαντικά στον συνολικό ρυθμό σκέδασης όταν η συγκέντρωση είναι υψηλή και η θερμοκρασία χαμηλή.

$$\left(\frac{1}{\tau_{ni}} \right)_n = \frac{A(\omega) N_{n(n)} 4\pi \epsilon_s \epsilon_0 \hbar^3}{m_d^{*2} q^2}, \quad \left(\frac{1}{\tau_{ni}} \right)_p = \frac{20 N_{n(p)} 4\pi \epsilon_s \epsilon_0 \hbar^3}{m_d^{*2} q^2} \quad (\text{III.H.65})$$

όπου $N_{n(n)} = N_d - N_a - n$, $N_{n(p)} = N_a - N_d - p$ είναι ο αριθμός των ουδέτερων προσμίξεων και

$$A(\omega) = \frac{35.2}{\omega^{1/2}} \frac{(1 + e^{-50\omega})(1 + 80.6\omega + 23.7\omega^2)}{1 + 41.3\omega + 133\omega^2} \times \left[\frac{1}{\omega} \ln(1 + \omega) - \frac{1 + \frac{1}{2}\omega - \frac{1}{6}\omega^2}{(1 + \omega)^3} \right]$$

όπου $\omega_d = \epsilon/E_D = (ka_B^*)^2$ με a_B^* η ακτίνα του Bohr και ϵ μετριέται από την άκρη της ζώνης.

Ο χρόνος χαλάρωσης εξαρτάται από την a_B^* , που σχετίζεται με την ενέργεια δεσμών των δοτών $E_D = q^2/(2\epsilon_s \epsilon_0 a_B^*)$.

Σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων

Η σκέδαση αυτή υπάρχει λόγω της παρουσίας των προσμίξεων σε ένα ημιαγωγό. Η αντικατάσταση ενός ατόμου σε μια πλευρά του κρυστάλλου θα διαταράξει το περιοδικό δυναμικό του πλέγματος του και προκαλεί έτσι σκέδαση ηλεκτρονίων. Εφόσον η μάζα της πρόσμιξης είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτήν του ηλεκτρονίου και η πρόσμιξη είναι σθένη συνδεδεμένη με τις γειτονικά άτομα, η σκέδαση αυτή θεωρείται σχεδόν ελαστική. Η σκέδαση πρόσμιξης κυριαρχεί σε χαμηλές θερμοκρασίες λόγω καθώς η θερμική ταχύτητα των ηλεκτρονίων μειώνεται, η δράση των αλληλεπιδράσεων Coulomb αυξάνονται.

$$\left(\frac{1}{\tau_{ii}} \right)_n = \frac{N_i e^4}{16\sqrt{2\pi} (\epsilon_s \epsilon_0)^2 m_d^{*1/2}} F_{ii} \epsilon^{-3/2}, \quad \left(\frac{1}{\tau_{ii}} \right)_p = \frac{2}{3} \frac{N_i e^4}{16\sqrt{2\pi} (\epsilon_s \epsilon_0)^2 m_i^{*1/2}} F_{jj} \epsilon^{-3/2} \quad (\text{III.H.66})$$

όπου $N_i = n + 2N_a$, $N_i = n + 2N_D$ είναι η πυκνότητα των ιονισμένων προσμίξεων σε τύπο n ή τύπο p υλικό αντίστοιχα, και

$$F_{ii} = F_{jj} = \ln(\xi + 1) - \frac{\xi}{\xi + 1}$$

όπου $\xi = (2κλ)^2$ και σε αυτήν την έκφραση το $λ$ είναι το μήκος θωράκισης.

III. ΣΚΕΔΑΣΗ ΙΟΝΙΣΜΕΝΩΝ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ

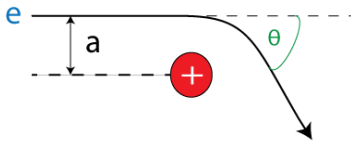
Για υψηλούς νοθευμένους ημιαγωγούς η σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων είναι ένας πολύ σημαντικός μηχανισμός. Το μοντέλο σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων των Conwell και Weisskopf [1] είναι το πιο παλιό μοντέλο της σκέδασης ιονισμένων προσμίξεων. Σε αυτό το μοντέλο προσεγγίζεται η εξίσωση μεταφοράς του Boltzmann με επαναληπτικά τρόπο, χρησιμοποιώντας την διατομή σκέδασης ενός ηλεκτρονίου στο πεδίο Coloumb μιας ιονισμένης πρόσμιξης. Από τους υπολογισμούς τους βρέθηκε η κατανομή της ταχύτητας που χρησιμοποιείται στον υπολογισμό της εξάρτησης της πυκνότητας ρεύματος από το ηλεκτρικό πεδίο.

Σκέδαση σε δυναμικό Coulomb

Η παρακάτω εικόνα επεξηγεί τη σκέδαση στο δυναμικό Coulomb για ένα σημειακό φορτίο. Αυτό που παρατηρείται είναι η σταδιακή απόκλιση της τροχιάς του φορτίου μέσω αλληλεπίδρασης Coulomb με την ιονισμένη πρόσμιξη. Ήταν οι μελέτες του Rutherford που όρισαν πρώτα τις σχέσεις σκέδασης για ένα φορτίο στο δυναμικό Coulomb, σε αυτές τις μελέτες καθορίστηκε μια σχέση για την πιθανότητα σκέδασης υπό γωνία θ , που ονομάζεται και διαφορική διατομή (differential cross section):

$$\sigma(\theta) = \frac{Ze^4}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad [\text{III.H.67}]$$

όπου Z αναφέρεται στο φορτίο του κέντρου σκέδασης και E είναι η ενέργεια του σκεδασμένου σωματιδίου. Η απόσταση μεταξύ του άξονα του προσπίπτοντα ηλεκτρονίου, που εισέρχεται υπό γωνία θ , και του κέντρου σκέδασης, λέγεται παράμετρος πρόσκρουσης a .



Εικόνα 3.8-2. Σκέδαση Rutherford.

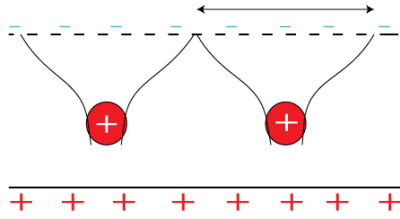
Η σκέδαση είναι συμμετρική γύρω από το άξονα πρόσκρουσης, επομένως το αποτέλεσμα σκέδασης είναι το ίδιο εάν μεταφερθεί το φορτίο σε συμμετρικό σημείο με το αρχικό. Επίσης η σκέδαση είναι ανεξάρτητη του φορτίου του κέντρου σκέδασης, και αυτή η ιδιότητα είναι σημαντική για αντισταθμισμένους ημιαγωγούς, μια που οι φορείς είναι σκεδασμένοι σε όλες τις ιονισμένες προσμίξεις ο αριθμός των κέντρων σκεδάσεων είναι πιθανόν να είναι πολύ μεγαλύτερος από τη συνολική πυκνότητα φορέων.

Το ολοκλήρωμα σκέδασης

Το ολοκλήρωμα πάνω στη διατομή των διαφορετικών διατομών κέντρων σκεδάσεων Rutherford αποκλίνουν λόγω της μεγάλης εμβέλειας που έχει το δυναμικό Coulomb.

Αντικατάσταση δυναμικού

Για να λυθεί το πρόβλημα της απόκλισης οι Conwell και Weisskopf πρότειναν να αντικατασταθεί το δυναμικό σε μια τιμή που αντιστοιχεί στη τιμή στο ενδιάμεσο της απόστασης μεταξύ δυο προσμίξεων. Η προσέγγιση αυτή έχει σαν λογική ότι η απόκλιση από την ευθύς τροχιάς πρόσκρουσης προκαλείται από τις κοντινές προσμίξεις, και όχι από τις μακρινές. Η μέση απόσταση μεταξύ δυο αποστάσεων είναι η κυβική ρίζα της συγκέντρωσης της πρόσμιξης, και η μισή τιμή αυτής της τιμής ορίζεται σαν τιμή της μέγιστης τιμής της παραμέτρου a . Τέλος οι γωνίες πρόσκρουσης ορίζονται σαν όρια ολοκλήρωσης, όπου το κάτω όριο έχει μια ελάχιστη γωνία θ_{\min} , που δεν μπορεί να αλλαχθεί.



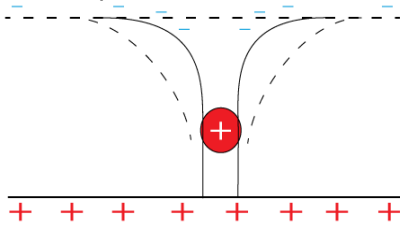
Εικόνα 3.8-3. Ορισμού δυναμικού στο ενδιάμεσο της απόστασης μεταξύ δυο προσμίξεων.

Θωράκιση

Μια διαφορετική προσέγγιση εκτελέστηκε από τους Brooks και Herring [2], όπου γίνεται λόγος για το φαινόμενο που υφίστανται φορείς μέσα σε πλάσμα. Στο πλάσμα οι ελεύθεροι φορείς συσσωρεύονται κοντά στους ελκυστικούς φορείς ή απομακρύνονται από τους αποκρουστικούς. Έτσι μετά από χρόνο η πυκνότητα των φορέων ανακατανέμονται με τέτοιο τρόπο ώστε οι φορείς μέσα στην νέα κατανομή πυκνοτήτων οι φορείς να μην επηρεάζονται από εξωτερικά δυναμικά. Αυτό λέγεται θωράκιση φορέων, και η περιγραφή του ισχύοντος δυναμικού περιγράφεται από το γνωστό δυναμικό Yukawa που περιλαμβάνει το μήκος της ακτίνας θωράκισης r_s .

$$\Phi = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \exp\left(-\frac{r}{r_s}\right) \quad [\text{III.H.68}]$$

Για μη πυκνά αέρια η μη εκφυλισμένες ημιαγωγούς το μήκος της ακτίνας θωράκισης δίνεται από τις εκφράσεις Debye και Hückel. Για ημιαγωγούς υψηλής νόθευσης η ανάλυση των Thomas και Fermi πρέπει να λαμβάνεται υπόψη.



Εικόνα 3.8-4. Θωράκιση του δυναμικού.

Το ολοκλήρωμα πυκνότητας ρεύματος

Μετά του υπολογισμού του ολοκληρώματος πρόσκρουσης ακολουθείται ο υπολογισμός της πυκνότητας ρεύματος. Λόγο συντομίας οι εκφράσεις του ολοκληρώματος δεν παριστάνονται εδώ. Για βαθύτερη ανάλυση βλέπε [155]. Η δυσκολία του υπολογισμού του ολοκληρώματος της πυκνότητας ρεύματος εγγυάται στο λογαριθμικό όρο του παρανομαστή στο ολοκλήρωμα. Έτσι, κατά τον υπολογισμό του ολοκληρώματος λαμβάνεται υπόψη μόνο τα μέγιστα σημεία του λογαριθμικού όρου και αυτό επειδή αυτός ο όρος μεταβάλλεται αργά σε σχέση με τα υπόλοιπα στοιχεία στο ολοκλήρωμα. Από τα αποτελέσματα του υπολογισμού του ολοκληρώματος εξάγεται η ευκινήσια που εξαρτάται από έναν θερμοκρασιακό όρο με εκθέτη ίσο με 3/2. Παρακάτω παριστάνονται τα αποτελέσματα του υπολογισμού του ολοκληρώματος πυκνότητας ρεύματος από τον οποίο εξάγεται η ευκινήσια μ για τους ημιαγωγούς.

Μη εκφυλισμένος ημιαγωγός

$$\mu_{\text{non-deg}} = \frac{128\sqrt{2\pi} (\epsilon\epsilon_0)^2 (kT)^{3/2}}{\sqrt{m^*} Z^2 e^3 N_i} \quad [\text{III.H.69}]$$

Στην περίπτωση της προσέγγισης των Conwell και Weisskopf η εξίσωση [III.H.69] πολλαπλασιάζεται με τον αντικαταστημένο δυναμικό:

$$\left\{ \ln \left[1 + \left(\frac{12\pi\epsilon\epsilon_0 kT}{Ze^3 N_i^{1/3}} \right)^2 \right] \right\}^{-1} \quad [\text{III.H.70}]$$

ή στην περίπτωση της προσέγγισης Brooks και Herring με το παράγοντα θωράκισης

$$\left\{ \ln(1+\xi) - \frac{\xi}{1+\xi} \right\}^{-1} \quad \text{[III.H.71]}$$

όπου ξ είναι:

$$\xi = \frac{96\pi^2 \varepsilon \varepsilon_0 m^* (kT)^2}{N_i (he)} \quad \text{[III.H.72]}$$

Εκφυλισμένος ημιαγωγός

Διαφορετικές τιμές προκύπτουν όταν εκτελείται η αντικατάσταση του δυναμικού [156] και η προσέγγιση του θωρακισμένου δυναμικού [157] και εφαρμόζεται σε εκφυλισμένο ημιαγωγό. Η σημαντική διάφορα με την μη εκφυλισμένη περίπτωση είναι ότι τα αποτελέσματα είναι ανεξάρτητη της θερμοκρασίας.

$$\mu_{\text{deg}} = \frac{3(\varepsilon \varepsilon_0)^2 h^3 n}{\sqrt{m^* Z^2 e^3 N_i}} \quad \text{[III.H.73]}$$

που πολλαπλασιάζεται με την αντικατάσταση δυναμικού:

$$\left\{ \ln \left[1 + \left(\frac{3^{2/3} \pi^{1/3} (\varepsilon \varepsilon_0)^2 h^2 n^{1/3}}{2m^* e^2} \right)^2 \right] \right\}^{-1} \quad \text{[III.H.74]}$$

Για την περίπτωση του παράγοντα θωράκισης:

$$\xi = (3\pi^2)^{1/3} \frac{\varepsilon \varepsilon_0 h^2 n^{1/3}}{m^* e^2} \quad \text{[III.H.75]}$$

Μια ανάλυση πιθανών διαφορών στις τιμές των παραπάνω εκφράσεων γίνεται από το Dingle [157]. Τέλος μια προσπάθεια επεξήγησης της σκέδασης ιονισμένων προσμίξεων με την θεωρία πολλών σωμάτων προτάθηκε από το Ridley [155].

ΣΚΕΛΑΣΗ ΙΟΝΙΣΜΕΝΩΝ ΠΡΟΣΜΗΞΕΩΝ ΣΤΟ ATLAS

Το μοντέλο Conwell-Weisskopf

Αυτό το μοντέλο βασίζεται στη εξίσωση του S.C. Choo [158], που προέρχεται από την μη τροποποιημένη προσέγγιση Conwell-Weisskopf, η οποία ισχύει για συγκεντρώσεις μέχρι 10^{17} cm^{-3} .

Η εξίσωση 3.6.5 του τρίτου κεφαλαίου εκφράζεται στο ATLAS ως:

$$\mu_{\text{ccs}} = \frac{D.\text{CONWELL} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}}{\sqrt{pn} \left(\ln \left(1 + \frac{F.\text{CONWELL} \left(\frac{T}{300} \right)^2}{(pn)^{(1/3)}} \right) \right)} \quad \text{[III.H.76]}$$

όπου T είναι η θερμοκρασία σε Kelvin, n είναι συγκέντρωση ηλεκτρονίων, και p είναι η συγκέντρωση οπών. Οι προκαθορισμένες τιμές του ATLAS για τους παραμέτρους προσαρμογής D.CONWELL και F.CONWELL για το υλικό 4H-SiC, ενσωματώθηκαν στον προσομοιωτή το 2012, και παίρνουν τιμές σύμφωνα με [155]:

Δήλωση	Παράμετρος	Τιμή	Μονάδες
MOBILITY	D.CONWELL	6.90E+20	1/cmVs
MOBILITY	F.CONWELL	7.45E+13	cm ⁻²

Πίνακας 0-1. Τιμές παραμέτρων του Conwell-Weisskopf μοντέλου στο ATLAS.

όπου D και F είναι οι συμβολισμοί D.CONWELL και F.CONWELL είναι ίσο με τις συντελεστές D και F της εξίσωσης του S.C. Choo. Έτσι έχουμε μια πλήρη περιγραφή του μοντέλου Conwell-Weisskopf. Το Conwell-Weisskopf μοντέλο συνδυάζεται με άλλα μοντέλα χαμηλού πεδίου ευκινησίας ($\mu_{p0,n0}$) και χρησιμοποιώντας τον κανόνα Matthiessen βρίσκεται η συνολική ευκινησία με το εξής τρόπο:

$$\frac{1}{\mu_n} = \frac{1}{\mu_{n0}} + \frac{1}{\mu_{ccs}}, \quad \frac{1}{\mu_p} = \frac{1}{\mu_{p0}} + \frac{1}{\mu_{ccs}} \quad [\text{III.H.77}]$$

Για την ενεργοποίηση του μοντέλου για ηλεκτρόνια και οπές δηλώνεται η παράμετρο CONWELL στο δήλωση MODELS. Εναλλακτικά η δήλωση της παράμετρος N.CONWELL στη δήλωση MOBILITY ενεργοποιεί το Conwell-Weisskopf μοντέλο για ηλεκτρόνια. Παρομοίως δηλώνοντας την P.CONWELL στη δήλωση MOBILITY ενεργοποιεί το Conwell-Weisskopf μοντέλο για οπές.

Από τις επιστημονικές ομάδες TCAD μόνο ο Tesfaye Ayalew [12] χρησιμοποιεί το μοντέλο Conwell-Weisskopf.

Το μοντέλο Brooks-Herring

Στο ATLAS υπάρχει για σκέδαση ιονισμένων προσμίξεων το Brooks-Herring μοντέλο. Είναι η εναλλακτική του Conwell-Weisskopf μοντέλου. Το μοντέλο μπορεί να βρεθεί στο βιβλίο Brooks [159] και μεταφράζεται στο ATLAS [29] ως:

$$\mu_{ccs} = \frac{A.BROOKS \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}}{\sqrt{pn} \varphi(\eta)} \quad [\text{III.H.78}]$$

όπου $\varphi(\eta) = \log(1 + \eta) - \eta/(1 + \eta)$ και

$$\eta(T) = \frac{B.BROOKS \left(\frac{T}{300} \right)^2}{N_c F_{-1/2} \left(\frac{n}{N_c} \right) + N_v F_{-1/2} \left(\frac{p}{N_v} \right)} \quad [\text{III.H.79}].$$

Στην [III.H.79] $F_{-1/2}$ αναφέρεται στη Fermi-Dirac συνάρτηση τάξης $-1/2$, οι N_c και N_v αναφέρονται στις ενεργές πυκνότητες στη ζώνη αγωγιμότητας και σθένος αντίστοιχα, η αναφέρεται στη συγκέντρωση ηλεκτρονίων, p αναφέρεται στη συγκέντρωση οπών και T αναφέρεται στη θερμοκρασία.

Οι τιμές των παραμέτρων του Brooks-Herring της εξίσωσης [III.H.79] έχουν σαν προκαθορισμένες τιμές τις τιμές του Si. Οι τιμές Si παρουσιάζονται παρακάτω:

A.BROOKS	1.56×10^{21}	$(\text{cm V s})^{-1}$
B.BROOKS	7.63×10^{19}	cm^{-3}
N.BROOKS	FALSE	
P.BROOKS	FALSE	

Πίνακας 0-2. Τιμές παραμέτρων του Brooks-Herring μοντέλου στο ATLAS. Οι τιμές είναι για Si υλικό.

Για την ενεργοποίηση του μοντέλου για ηλεκτρόνια και οπές δηλώνεται η BROOKS στη δήλωση MODELS. Εναλλακτικά η δήλωση της παράμετρος N.BROOKS στη MOBILITY ενεργοποιεί το Conwell-Weisskopf μοντέλο για ηλεκτρόνια. Παρομοίως δηλώνοντας την P.BROOKS στη MOBILITY ενεργοποιεί το Conwell-Weisskopf μοντέλο για οπές.

Το Dorkel-Leturcq μοντέλο

Αυτό το μοντέλο αντιμετωπίζει συλλογικές σκεδάσεις φορέων. Η πυκνότητα των ηλεκτρονίων εάν προσπεράσουν θετικό άτομο στη ζώνη αγωγιμότητας διακυμαίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να δημιουργείται ένα ηλεκτρικό πεδίο μεταξύ των ηλεκτρονίων. Τότε, σαν μέτρο αντιστάθμισης (συνθήκη ουδετερότητας), δημιουργείται ένα ηλεκτρικό πεδίο ίσης έντασης. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται ταλαντώσεις πλάσματος. Οι Dorkel-Leturcq έχουν τροποποίηση την εξίσωση S.C.Choo και υποθέτουν όταν οι φορείς είναι άφθονοι τότε οι ταλαντώσεις πλάσματος είναι σε αναλογία με το βαθμό έγχυσης των φορέων. Σε αυτήν την περίπτωση η ευκινησία λόγω σκέδασης φορέων είναι:

$$\mu_{ccs} = \frac{2 \cdot 10^{17} T^{3/2}}{\sqrt{pn}} \left[\ln \left\{ 1 + 8.28 \cdot 10^8 T^2 (pn)^{-1/3} \right\} \right]^{-1} \quad [\text{III.H.80}]$$

Επειδή ο χρόνος χαλάρωσης του μηχανισμού σκέδασης ιονισμένων φορέων είναι της ίδιας τάξης με το μηχανισμό σκέδασης φορέων, συνδυάζονται οι δυο μηχανισμοί σε μια ευκινησία:

$$\mu_{ics} = \left(\frac{1}{\mu_l} + \frac{1}{\mu_{ccs}} \right)^{-1} \quad [\text{III.H.81}]$$

Η επιρροή της σκέδασης ιονισμένων προσμίξεων, που συμβολίζεται με μ_i , δίνεται σαν:

$$\mu_i = \frac{AT^{3/2}}{N} \left[\ln \left(1 + \frac{BT^2}{N} \right) - \frac{BT^2}{N + BT^2} \right]^{-1} \quad [\text{III.H.82}]$$

όπου A και B είναι παράμετροι προσαρμογής και N η συγκέντρωση φορέων. Τέλος συμπεριλαμβάνοντας τη σκέδαση πλέγματος και χρησιμοποιώντας την έκφραση Debye και Conwell για την συνολική ευκινησία, λαμβάνεται η έκφραση:

$$\mu = \mu_L f(X) \quad [\text{III.H.83}]$$

όπου X είναι η παράμετρος της συνάρτησης f και συμπεριλαμβάνει περίπλοκους όρους και τις ευκινησίες μ_L και μ_{ics} . Η πραγματική συνεισφορά των Dorkel και Leturcq ήταν η απλοποίηση της παραμέτρου X και η απλοποίηση της μορφής της σκέδασης πλέγματος μ_L :

$$\mu_L = \mu_{L_0} \left(\frac{T}{300} \right)^{-\alpha} \quad [\text{III.H.84}]$$

Το συνολικό αποτέλεσμα είναι μια έκφραση που συμπεριλαμβάνει όλες τους παραπάνω μηχανισμούς σκέδασης για την περιγραφή της συνολικής ευκινησίας στο Si [160]:

$$\mu = \mu_L \left[\frac{1.025}{1 + \left(\frac{X}{1.68} \right)^{1.43}} - 0.025 \right] \quad \text{with} \quad X = \sqrt{\left(\frac{6\mu_L(\mu_l + \mu_{ccs})}{\mu_l \mu_{ccs}} \right)} \quad [\text{III.H.85}]$$

Στο ATLAS η εξίσωση [III.H.85] γράφεται στη μορφή

$$\mu_{n0,p0} = \mu_{n,p}^L \left[\left(\frac{1.025}{1 + \left[2.126 \left(\frac{\mu_{n,p}^L}{\mu_{n,p}^{IC}} \right) \right]^{0.715}} \right) - 0.025 \right] \quad [\text{III.H.86}]$$

όπου

$$\mu_{n,p}^{iC} = \left[\frac{1}{\mu^C} + \frac{1}{\mu_{n,p}^I} \right] \quad [\text{III.H.87}]$$

$$\mu^C = \frac{1.04 \cdot 10^{21} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{3/2}}{\sqrt{np} \ln \left[1 + 7.45 \cdot 10^{13} \left(\frac{T_L}{300} \right)^2 (np)^{-1/3} \right]} \quad [\text{III.H.88}]$$

$$\mu_n^I = \frac{AN.CCS(T_L)^{3/2}}{N_T} f \left[\frac{BN.CCS(T_L)^2}{n+p} \right] \quad [\text{III.H.89}]$$

$$\mu_p^I = \frac{AP.CCS(T_L)^{3/2}}{N_T} f \left[\frac{BP.CCS(T_L)^2}{n+p} \right] \quad [\text{III.H.90}]$$

Στην τελευταίες εξισώσεις N_T είναι η συνολική συγκέντρωση και T_L είναι η θερμοκρασία σε Kelvin, n,p είναι οι συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων και οπών και f ορίζεται ως:

$$f(x) = \left[\ln(1+x) - \frac{x}{1+x} \right]^{-1} \quad [\text{III.H.91}]$$

Οι προκαθορισμένες τιμές Si για τους παραμέτρους AN.CCS, AP.CCS, BN.CCS και BP.CCS είναι $4.61 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1.52 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ και $6.25 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ αντίστοιχα.

Η μοναδική επιστημονική ομάδα TCAD που χρησιμοποιεί, κατά την προσομοίωση τους, σκέδαση φορέων για 4H-SiC είναι η ομάδα P. Bhatnagar et al. [26]. Μια πιο αναλυτική ματιά αποκαλύπτει ότι οι παράμετροι που χρησιμοποιούνται από την ομάδα αυτή, είναι τιμές παραμέτρων για το υλικό Si. Έτσι τιμές παραμέτρων για το μοντέλο Dorkel-Leturcq, και συγκεκριμένα για υλικό 4H-SiC, δεν έχουν καθοριστεί ακόμα.

References

- [1] S.M.Sze, *Semiconductor Devices-Physics and Technology*: John Wiley & Sons, 1985.
- [2] B. J. Baliga, *Fundamentals of power semiconductor devices*. Berlin: Springer, 2008.
- [3] J. N. Reddy, *An introduction to the finite element method*. New York: McGraw-Hill, 1984.
- [4] G. R. Buchanan, *Schaum's outline of theory and problems of finite element analysis*. New York: McGraw-Hill, 1994.
- [5] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor, *The finite element method*. London; New York: McGraw-Hill, 1989.
- [6] A. C. Polycarpou. (2006). *Introduction to the finite element method in electromagnetics*.
- [7] D. Vasileska and S. M. Goodnick. (2006). *Computational electronics*.
- [8] SILVACO, "ATLAS User's Manual," in *DEVICE SIMULATION SOFTWARE*, ed. Santa Clara, CA 95054: SILVACO, Inc., 2012.
- [9] W. J. Choyke, "Optical properties of SiC: Interband absorption, and luminescence of nitrogen-exciton complexes," *Matter.Res.Bull*, vol. 4, 1969.
- [10] V. G. P.Grivickas, J.Linnros, A.Galeckos, "Fundamental band edge absorption in nominally undoped and doped 4H-SiC," *J.Appl.Phys.*, vol. 101, p. 123521, 2007.
- [11] A. Galeckas, P. Grivickas, V. Grivickas, V. Bikbajevs, and J. Linnros, "Temperature Dependence of the Absorption Coefficient in 4H- and 6H-Silicon Carbide at 355 nm Laser Pumping Wavelength," *physica status solidi (a)*, vol. 191, pp. 613-620, 2002.
- [12] A. Tesfaye, "SiC Semiconductor Devices Technology- Modeling, and Simulation," Doctor, Technical University of Vienna, Austria, 2004.
- [13] P. Bhatnagar, A. B. Horsfall, N. G. Wright, C. M. Johnson, K. V. Vassilevski, and A. G. O'Neill, "Optimisation of a 4H-SiC enhancement mode power JFET for high temperature operation," *Solid-State Electronics*, vol. 49, pp. 453-458, 2005.
- [14] Y. P. Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors," *Physica*, vol. 34, pp. 149-154, 1967.
- [15] R. Pässler, "Parameter Sets Due to Fittings of the Temperature Dependencies of Fundamental Bandgaps in Semiconductors," *physica status solidi (b)*, vol. 216, pp. 975-1007, 1999.
- [16] F. Pezzimenti and F. G. Della Corte, "Title," unpublished|.
- [17] J. W. Slotboom and H. C. de Graaff, "Measurements of bandgap narrowing in Si bipolar transistors," *Solid-State Electronics*, vol. 19, pp. 857-862, 1976.
- [18] M. Bakowski, U. Gustafsson, and U. Lindefelt, "Simulation of SiC High Power Devices," *physica status solidi (a)*, vol. 162, pp. 421-440, 1997.
- [19] U. Lindefelt, "Doping-induced band edge displacements and band gap narrowing in 3C--, 4H--, 6H--SiC, and Si," *Journal of Applied Physics*, vol. 84, pp. 2628-2637, 1998.
- [20] M. Lades, "Modeling and simulation of wide bandgap semiconductor devices [Elektronische Ressource] : 4H/6H-SiC," Techn. Universität, München, 2000.
- [21] E. F. Schubert, *Doping in III-V semiconductors*. Cambridge [England]; New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1993.

- [22] P. Grivickas, V. Grivickas, J. Linnros, and A. Galeckas, "Fundamental band edge absorption in nominally undoped and doped 4H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 101, pp. 123521-10, 2007.
- [23] R. Weingartner, P. J. Wellmann, M. Bickermann, D. Hofmann, T. L. Straubinger, and A. Winnacker, "Determination of charge carrier concentration in n- and p-doped SiC based on optical absorption measurements," *Applied Physics Letters*, vol. 80, pp. 70-72, 2002.
- [24] D. R. H. L. Patrick, W. J. Choyke, "Growth, Luminescence, Selection Rules, and Lattice Sums of SiC with Wurtzite Structure," *Phys. Rev.*, vol. 143, pp. 526-536, 1966.
- [25] U. G. M. Bakowski, U. Lindefelt, "Simulation of SiC High Power Devices," *phys. stat. sol., (a)* vol. 162, pp. 421-440, 1997.
- [26] A. B. H. P. Bhatnagar, N.G. Wright, C.M. Johnson, K.V. Vassilevski, A. "Optimization of a 4HSiC Enhancement Mode Power JFET for High Temperature," *Solid-State Electronics*, vol. 49, pp. 453-458, 2005.
- [27] F. G. D. C. F. Pezzimenti, R. Nipoti, "Experimental characterization and numerical analysis of the 4H-SiC p-i-n diodes static and transient behaviour," *Microelectronics Journal*, vol. 39, pp. 1594-1599, Dec 2008.
- [28] A. J. J. Sęszewski, M. L. Korwin-Pawlowski, "Comparison of 4H-SiC and 6H-SiC MOSFET I-V characteristics simulated with Silvaco Atlas and Crosslight Apsys," *Journal of telecommunications and information technology*, March 2007.
- [29] I. SILVACO. (2011). *ATLAS User's Manual*.
- [30] J. Dong and A. B. Chen, "Fundamental Properties of SiC: Crystal Structure Bonding Energy and Structure and Lattice Vibrations," in *SiC Power Materials: Devices and Applications*, Z. C. Feng, Ed., ed. Heidelberg: Springer, 2004, pp. 63-83.
- [31] Y. K. R. Watanabe, "Empirical Pseudopotential Calculations of Two-dimensional Electronic States in 4H-SiC Inversion layers," *SISPAD*, 5-7, 9, 2012 2012.
- [32] P. Käckell, B. Wenzien, and F. Bechstedt, "Influence of atomic relaxations on the structural properties of SiC polytypes from ab initio calculations," *Physical Review B*, vol. 50, pp. 17037-17046, 12/15/ 1994.
- [33] D. Volm, B. K. Meyer, D. M. Hofmann, W. M. Chen, N. T. Son, C. Persson, *et al.*, "Determination of the electron effective-mass tensor in 4H SiC," *Physical Review B*, vol. 53, pp. 15409-15412, 1996.
- [34] N. T. Son, W. M. Chen, O. Kordina, A. O. Konstantinov, B. Monemar, E. Janzen, *et al.*, "Electron effective masses in 4H SiC," *Applied Physics Letters*, vol. 66, pp. 1074-1076, 02/27/ 1995.
- [35] C. Persson and U. Lindefelt, "Detailed band structure for 3C-, 2H-, 4H-, 6H-SiC, and Si around the fundamental band gap," *Physical Review B*, vol. 54, pp. 10257-10260, 1996.
- [36] Z. C. Feng, *SiC Power Materials: Devices and Applications*: Springer, 2004.
- [37] C. Persson and U. Lindefelt, "Dependence of energy gaps and effective masses on atomic positions in hexagonal SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 86, pp. 5036-5039, 1999.
- [38] L. S. B. a. A. A. Lebedev, "Capacitance Spectroscopy of Deep Centers in Semiconductors," ed. Leningrad, 1981.
- [39] M. Miyata, Y. Higashiguchi, and Y. Hayafuji, "Ab initio study of substitutional impurity atoms in 4H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 104, p. 123702, 2008.
- [40] M. S. T. Troffer, T. Frank, H. Itoh, G. Pensl, J. Heindl, H. P. Strunk, M. Maier, "Doping of SiC by Implantation of Boron and Aluminum," *Phys. stat. sol. (a)*, vol. 162, pp. 277-298, 1997.
- [41] H. M. M. Ikeda, T. Tanaka, "Site effect on the impurity levels in 4H, 6H, and 15R-SiC," *Phys. Rev. B*, vol. 22, pp. 2842-2854, 1980.

- [42] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*. New York: Wiley, 1981.
- [43] K. Izunome, H. Shirai, K. Kashima, J. Yoshikawa, and A. Hojo, "Comment on "The Effect of Hydrogen Annealing on Oxygen Precipitation Behavior and Gate Oxide Integrity in Czochralski Si Wafers" [H. Abe, I. Suzuki, and H. Koya (pp. 306–311, Vol. 144, No. 1, 1997)]," *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 144, pp. 3695-3695, 1997.
- [44] M. Ikeda, H. Matsunami, and T. Tanaka, "Site effect on the impurity levels in 4H, 6H, and 15R SiC," *Physical Review B*, vol. 22, pp. 2842-2854, 1980.
- [45] W. Gotz, A. Schoner, G. Pensl, W. Suttrop, W. J. Choyke, R. Stein, *et al.*, "Nitrogen donors in 4H-silicon carbide," *Journal of Applied Physics*, vol. 73, pp. 3332-3338, 1993.
- [46] N. I. Kuznetsov and A. S. Zubrilov, "Deep centers and electroluminescence in 4H-SiC diodes with a p-type base region," *Materials Science and Engineering: B*, vol. 29, pp. 181-184, 1// 1995.
- [47] T. Kimoto, A. Itoh, and H. Matsunami, "Incorporation mechanism of N, Al, and B impurities in chemical vapor deposition of SiC," *Applied Physics Letters*, vol. 67, pp. 2385-2387, 10/16/ 1995.
- [48] A. O. Ewvaraye, S. R. Smith, and W. C. Mitchel, "Shallow and deep levels in n-type 4H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 79, pp. 7726-7730, 05/15/ 1996.
- [49] T. Troffer, M. Schadt, T. Frank, H. Itoh, G. Pensl, J. Heindl, *et al.*, "Doping of SiC by Implantation of Boron and Aluminum," *physica status solidi (a)*, vol. 162, pp. 277-298, 1997.
- [50] C. Q. Chen, J. Zeman, F. Engelbrecht, C. Peppermuller, R. Helbig, Z. H. Chen, *et al.*, "Photothermal ionization spectroscopy of shallow nitrogen donor states in 4H--SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 87, pp. 3800-3805, 04/15/ 2000.
- [51] M. A. Capano, J. J. A. Cooper, M. R. Melloch, A. Saxler, and W. C. Mitchel, "Ionization energies and electron mobilities in phosphorus- and nitrogen-implanted 4H-silicon carbide," *Journal of Applied Physics*, vol. 87, pp. 8773-8777, 06/15/ 2000.
- [52] M. Laube, F. Schmid, G. Pensl, G. Wagner, M. Linnarsson, and M. Maier, "Electrical activation of high concentrations of N⁺ and P⁺ ions implanted into 4H--SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 92, pp. 549-554, 07/01/ 2002.
- [53] I. G. Ivanov, B. Magnusson, and E. Janzén, "Optical selection rules for shallow donors in 4H-SiC and ionization energy of the nitrogen donor at the hexagonal site," *Physical Review B*, vol. 67, p. 165212, 04/30/ 2003.
- [54] I. G. Ivanov, A. Henry, and E. Janzén, "Ionization energies of phosphorus and nitrogen donors and aluminum acceptors in 4H silicon carbide from the donor-acceptor pair emission," *Physical Review B*, vol. 71, p. 241201, 2005.
- [55] S. Rao, T. P. Chow, and I. Bhat, "Dependence of the Ionization Energy of Phosphorus Donor in 4H-. SiC on Doping Concentration," *Materials Science Forum*, vol. 527 - 529, pp. 597-600, 2006.
- [56] T. P. C. S.Rao, I.Bhat, "Dependence of the ionization energy of Phosphorous Donor in 4H-SiC on Doping Concentration," *Mat.Sci.Forum*, vol. 527-529, pp. 597-600, 2006.
- [57] how the gd ga come to the form of ATLAS
- [58] F. G. Della Corte, F. Pezzimenti, and R. Nipoti, "Simulation and experimental results on the forward J–V characteristic of Al implanted 4H–SiC p–i–n diodes," *Microelectronics Journal*, vol. 38, pp. 1273-1279, 2007.
- [59] M. Nawaz, "On the assessment of few design proposals for 4H-SiC BJTs," *Microelectronics Journal*, vol. 41, pp. 801-808, 2010.
- [60] M. R. a. F. Schweirz, "Electron Mobility Models for 4H, 6H, and 3C SiC," *IEEE Trans.Electron Devices*, vol. 48, pp. 1442-1447, 2001.

- [61] M. E. L. T. T. Mnatsakanov, L. I. Pomortseva, and S. N. T. Yurkov, "Carrier Mobility Model for Simulation of SiC-Based Electronic Devices," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 17, pp. 974-977, 2002.
- [62] W. Z. J. Pernot, S. Contreras, J. L. Robert, E. Neyret, L. Di Cioccio, "Electrical transport in n-type 4H silicon carbide," *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, vol. 90, 2001.
- [63] S. C. J. Pernot, and J. Camassel, "Electrical transport properties of aluminum-implanted 4H-SiC," *J. Appl. Phys.*, vol. 98, 20 July 2005.
- [64] S.C. Choo, "Theory of a Forward-Biased Diffused-Junction PiN Rectifier. Part I: Exact Numerical Solutions," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 19, pp. 954-966, 1972.
- [65] D. M. Caughey and R. E. Thomas, "Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field," *Proceedings of the IEEE*, vol. 55, pp. 2192-2193, 1967.
- [66] M. Roschke and F. Schwierz, "Electron mobility models for 4H, 6H, and 3C SiC [MESFETs]," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 48, pp. 1442-1447, 2001.
- [67] A. A. Burk Jr, M. J. O'Loughlin, R. R. Siergiej, A. K. Agarwal, S. Sriram, R. C. Clarke, *et al.*, "SiC and GaN wide bandgap semiconductor materials and devices," *Solid-State Electronics*, vol. 43, pp. 1459-1464, 1999.
- [68] S. Contreras, M. Zielinski, L. Konczewicz, C. Blanc, S. Juillaguet, R. Müller, *et al.*, "Results of SIMS, LTPL and Temperature-Dependent Hall Effect Measurements Performed on Al-Doped α -SiC Substrates Grown by the M-PVT Method," *Materials Science Forum* vol. 527 - 529, pp. 633-636, 2006.
- [69] T. Hatakeyama, T. Watanabe, M. Kushibe, K. Kojima, S. Imai, T. Suzuki, *et al.*, "Measurement of Hall Mobility in 4H-SiC for Improvement of the Accuracy of the Mobility Model in Device Simulation," *Materials Science Forum* vol. 433 - 436, pp. 443-446, 2003.
- [70] T. Kinoshita, K. M. Itoh, J. Muto, M. Schadt, G. Pensl, and K. Takeda, "Calculation of the anisotropy of the hall mobility in n-type 4H- and 6H-SiC," *Materials Science Forum*, vol. 264-268, pp. 295-298, 1998.
- [71] A. Koizumi, J. Suda, and T. Kimoto, "Temperature and doping dependencies of electrical properties in Al-doped 4H-SiC epitaxial layers," *Journal of Applied Physics*, vol. 106, pp. 013716-8, 2009.
- [72] J. Pernot, S. Contreras, and J. Camassel, "Electrical transport properties of aluminum-implanted 4H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 98, pp. 023706-9, 2005.
- [73] W. J. Schaffer, G. H. Negley, K. G. Irvine, and J. W. Palmour, "Conductivity Anisotropy in Epitaxial 6H and 4H SiC," *MRS Online Proceedings Library*, vol. 339, pp. null-null, 1994.
- [74] P. Terziyska, C. Blanc, J. Pernot, H. Peyre, S. Contreras, G. Bastide, *et al.*, "Evaluation of MESFET structures from temperature-dependent Hall effect measurements," *physica status solidi (a)*, vol. 195, pp. 243-247, 2003.
- [75] P. Brosselard, "Conception, Réalisation et Caractérisation d'interrupteurs (thyristors et JFETs) haute tension (5kV) en carbure de silicium," doctor, L'institut national des sciences appliquées de Lyon, INSA de Lyon, Lyon, 2004.
- [76] M. Schadt, G. Pensl, R. P. Devaty, W. J. Choyke, R. Stein, and D. Stephani, "Anisotropy of the electron Hall mobility in 4H, 6H, and 15R silicon carbide," *Applied Physics Letters*, vol. 65, pp. 3120-3122, 1994.
- [77] H. Matsuura, M. Komeda, S. Kagamihara, H. Iwata, R. Ishihara, T. Hatakeyama, *et al.*, "Dependence of acceptor levels and hole mobility on acceptor density and temperature in Al-doped p-type 4H-SiC epilayers," *Journal of Applied Physics*, vol. 96, pp. 2708-2715, 2004.

- [78] V. Rodriguez and M. A. Nicolet, "Drift Velocity of Electrons in Silicon at High Electric Fields from 4.2[degree] to 300[degree]K," *Journal of Applied Physics*, vol. 40, pp. 496-498, 02/00/ 1969.
- [79] C. Canali, G. Majni, R. Minder, and G. Ottaviani, "Electron and hole drift velocity measurements in silicon and their empirical relation to electric field and temperature," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 22, pp. 1045-1047, 1975.
- [80] S. Selberherr, *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Wien, Austria; New York: Springer-Verlag, 1984.
- [81] D. L. Scharfetter and H. K. Gummel, "Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 16, pp. 64-77, 1969.
- [82] A. A. Lepneva and V. I. Sankin, "A. A. Lepneva V.I. Sankin," *Materials Science Forum*, vol. 338 - 342, pp. 769-772, 1999.
- [83] K. V. Vassilevski, K. Zekentes, A. V. Zorenko, and L. P. Romanov, "Experimental determination of electron drift velocity in 4H-SiC p/sup +/-n-n/sup +/- avalanche diodes," *Electron Device Letters, IEEE*, vol. 21, pp. 485-487, 2000.
- [84] I. A. Khan and J. A. Cooper, Jr., "Measurement of high-field electron transport in silicon carbide," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 47, pp. 269-273, 2000.
- [85] H. E. Nilsson, U. Englund, M. Hjelm, E. Bellotti, and K. Brennan, "Full band Monte Carlo study of high field transport in cubic phase silicon carbide," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, pp. 3389-3394, 2003.
- [86] R. Mickevicius and J. H. Zhao, "Monte Carlo study of electron transport in SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 83, pp. 3161-3167, 1998.
- [87] H.-E. Nilsson, U. Sannemo, and C. S. Petersson, "Monte Carlo simulation of electron transport in 4H--SiC using a two-band model with multiple minima," *Journal of Applied Physics*, vol. 80, pp. 3365-3369, 1996.
- [88] T. Hatakeyama, "Measurements of impact ionization coefficients of electrons and holes in 4H-SiC and their application to device simulation," *physica status solidi (a)*, vol. 206, pp. 2284-2294, 2009.
- [89] H. E. Nilsson, E. Bellotti, K. F. Brennan, and M. Hjelm, "A Full Band Monte Carlo Study of High Field Carrier Transport in 4H-SiC," *Materials Science Forum*, vol. 338-342, pp. 765-768, 2000.
- [90] P. B. Klein, "Carrier lifetime measurement in n[sup -] 4H-SiC epilayers," *Journal of Applied Physics*, vol. 103, pp. 033702-14, 2008.
- [91] J. Zhang, L. Storasta, J. P. Bergman, N. T. Son, and E. Janzen, "Electrically active defects in n-type 4H--silicon carbide grown in a vertical hot-wall reactor," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, pp. 4708-4714, 2003.
- [92] P. B. Klein, "Identification of defects limiting the carrier lifetime in n-epitaxial layers of 4H-SiC," *Materials Science Forum*, vol. 645-648, pp. 193-198, 2010.
- [93] L. Storasta and H. Tsuchida, "Reduction of Traps and Improvement of Carrier Lifetime in SiC Epilayer by Ion Implantation," *Materials Science Forum*, vol. 556 - 557, pp. 603-606, 2007.
- [94] S. W. Huh, J. J. Sumakeris, A. Y. Polyakov, M. Skowronski, P. B. Klein, B. V. Shanabrook, *et al.*, "Deep Traps and Charge Carrier Lifetimes in 4H-SiC Epilayers," *Materials Science Forum*, vol. 527-529, pp. 493-496, 2006.
- [95] R. N. Hall, "Electron-Hole Recombination in Germanium," *Phys. Rev.*, vol. 87, pp. 387-387, 1952.
- [96] S. Ichikawa, K. Kawahara, J. Suda, and T. Kimoto, "Carrier recombination in n-type 4H-SiC epilayers with long carrier lifetimes," *Applied Physics Express*, vol. 5, 2012.

- [97] S. G. Sundaresan, C. Sturdevant, M. Marris-Pelly, E. Lieser, and R. Singh, "12.9 kV SiC PiN Diodes with Low On-State Drops and High Carrier Lifetimes," *Materials Science Forum*, vol. 717 - 720, pp. 949-952, 2012.
- [98] T. Kimoto, T. Hiyoshi, T. Hayashi, and J. Suda, "Impacts of recombination at the surface and in the substrate on carrier lifetimes of n-type 4H-SiC epilayers," *Journal of Applied Physics*, vol. 108, pp. 083721-7, 2010.
- [99] G. Y. Chung, M. J. Loboda, M. F. MacMillan, J. W. Wan, and D. M. Hansen, "Carrier Lifetime Analysis by Microwave Photoconductive Decay (μ -PCD) for 4H SiC Epitaxial Wafers," *Materials Science Forum*, vol. 556 - 557, pp. 323-326, 2007.
- [100] M. Kawai, T. Mori, M. Kato, M. Ichimura, S. Sumie, and H. Hashizume, "Excess carrier lifetimes in a bulk p-type SiC wafer measured by the microwave photoconductivity decay method," vol. 556-557, ed. Newcastle upon Tyne, 2007, pp. 359-362.
- [101] J. R. Jenny, D. P. Malta, V. F. Tsvetkov, M. K. Das, H. M. Hobgood, J. C. H. Carter, *et al.*, "Effects of annealing on carrier lifetime in 4H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 100, pp. 113710-6, 2006.
- [102] H. Jawad ul, C. Hallin, J. P. Bergman, and E. Janzén, "Properties of thick n- and p-type epitaxial layers of 4H-SiC grown by Hot-Wall CVD on off- and on-axis substrates," vol. 527-529, ed. Pittsburgh, PA, 2006, pp. 183-186.
- [103] K. Danno, K. Hashimoto, H. Saitoh, T. Kimoto, and H. Matsunami, "Low-Concentration Deep Traps in 4H-SiC Grown with High Growth Rate by Chemical Vapor Deposition," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 43, p. L969, 2004.
- [104] V. Grivickas, J. Linnros, P. Grivickas, and A. Galeckas, "Band edge absorption, carrier recombination and transport measurements in 4H-SiC epilayers," *Materials Science and Engineering: B*, vol. 61-62, pp. 197-201, 1999.
- [105] O. Kordina, J. P. Bergman, C. Hallin, and E. Janzen, "The minority carrier lifetime of n-type 4H- and 6H-SiC epitaxial layers," *Applied Physics Letters*, vol. 69, pp. 679-681, 1996.
- [106] P. B. Klein, R. Myers-Ward, K. K. Lew, B. L. VanMil, J. C. R. Eddy, D. K. Gaskill, *et al.*, "Recombination processes controlling the carrier lifetime in n^[sup -]4H-SiC epilayers with low Z_[sub 1/2] concentrations," *Journal of Applied Physics*, vol. 108, pp. 033713-11, 2010.
- [107] G. Y. Chung, M. J. Loboda, M. J. Marinella, D. K. Schroder, T. Tamara Isaacs-Smith, and J. R. Williams, "Deep Traps and Charge Carrier Lifetimes in 4H-SiC Epilayers," *Materials Science Forum*, vol. 615 - 617, pp. 283-286, 2009.
- [108] M. J. Marinella, D. K. Schroder, C. Gilyong, M. J. Loboda, T. Isaacs-Smith, and J. R. Williams, "Carrier Generation Lifetimes in 4H-SiC MOS Capacitors," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 57, pp. 1910-1923, 2010.
- [109] D. S. L. J. G. Fossum, "A Physical Model for the Dependence of Carrier Lifetime on Doping Density in Nondegenerate Silicon," *A Physical Model for the Dependence of Carrier Lifetime on Doping Density in Nondegenerate Silicon*, vol. 25, pp. 741-747, 1982.
- [110] R. P. M. J. G. Fossum, D. S. Lee, J. F. Nijs, "Carrier Recombination and Lifetime in Highly Doped Silicon," *Solid-State Electron.*, vol. 26, pp. 569-576, 1983.
- [111] X. Li, Y. Luo, L. Fursin, J. H. Zhao, M. Pan, P. Alexandrov, *et al.*, "On the temperature coefficient of 4H-SiC BJT current gain," *Solid-State Electronics*, vol. 47, pp. 233-239, 2003.
- [112] A. Galeckas, J. Linnros, V. Grivickas, U. Lindefelt, and C. Hallin, "Evaluation of Auger Recombination Rate in 4H-SiC," *Materials Science Forum*, vol. 264 - 268, pp. 533-536, 1998.
- [113] K. Jarašiūnas, P. Ščajev, V. Gudelis, P. B. Klein, and M. Kato, "Nonequilibrium Carrier Recombination in Highly Excited Bulk SiC Crystals," *Materials Science Forum*, vol. 645 - 648, pp. 215-218, 2010.

- [114] K. Danno and T. Kimoto, "Investigation of deep levels in n-type 4H-SiC epilayers irradiated with low-energy electrons," *Journal of Applied Physics*, vol. 100, pp. 113728-6, 2006.
- [115] P. B. Klein, R. L. Myers-Ward, K. K. Lew, B. L. VanMil, C. R. Eddy, D. K. Gaskill, *et al.*, "Temperature Dependence of the Carrier Lifetime in 4H-SiC Epilayers," *Materials Science Forum*, vol. 645 - 648, pp. 203-206, 2010.
- [116] P. B. Klein, B. V. Shanabrook, S. W. Huh, A. Y. Polyakov, M. Skowronski, J. J. Sumakeris, *et al.*, "Lifetime-limiting defects in n[⁻] 4H-SiC epilayers," *Applied Physics Letters*, vol. 88, pp. 052110-3, 2006.
- [117] T. Kimoto, K. Hashimoto, and H. Matsunami, "Effects of C/Si Ratio in Chemical Vapor Deposition of 4H-SiC(1120) and (0338)," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 42, p. 7294.
- [118] L. Storasta, J. P. Bergman, E. Janzen, A. Henry, and J. Lu, "Deep levels created by low energy electron irradiation in 4H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 96, pp. 4909-4915, 2004.
- [119] K. Neimontas, T. Malinauskas, R. Aleksiejūnas, M. Sūdžius, K. Jarašiūnas, L. Storasta, *et al.*, "The determination of high-density carrier plasma parameters in epitaxial layers, semi-insulating and heavily doped crystals of 4H-SiC by a picosecond four-wave mixing technique," *Semiconductor Science and Technology*, vol. 21, p. 952, 2006.
- [120] F. Pezzimenti, F. G. Della Corte, and R. Nipoti, "Experimental characterization and numerical analysis of the 4H-SiC p-i-n diodes static and transient behaviour," *Microelectronics Journal*, vol. 39, pp. 1594-1599, 2008.
- [121] P. A. Wolff, "Theory of Electron Multiplication in Silicon and Germanium," *Physical Review*, vol. 95, pp. 1415-1420, 09/15/ 1954.
- [122] A. G. Chynoweth, "Ionization rates for electrons and holes in silicon," *Physical Review*, vol. 109, pp. 1537-1540, 1958.
- [123] W. Shockley, "Problems related to p-n junctions in silicon," *Solid-State Electronics*, vol. 2, pp. 35-67, 1961.
- [124] G. A. Baraff, "Distribution Functions and Ionization Rates for Hot Electrons in Semiconductors," *Physical Review*, vol. 128, pp. 2507-2517, 1962.
- [125] W. N. Grant, "Electron and hole ionization rates in epitaxial silicon at high electric fields," *Solid-State Electronics*, vol. 16, pp. 1189-1203, 1973.
- [126] Y. Okuto and C. R. Crowell, "Threshold energy effect on avalanche breakdown voltage in semiconductor junctions," *Solid-State Electronics*, vol. 18, pp. 161-168, 1975.
- [127] T. Lackner, "Avalanche multiplication in semiconductors: A modification of Chynoweth's law," *Solid-State Electronics*, vol. 34, pp. 33-42, 1991.
- [128] K. K. Thornber, "Applications of scaling to problems in high-field electronic transport," *Journal of Applied Physics*, vol. 52, pp. 279-290, 1981.
- [129] M. E. Levinshtein, J. Kostamovaara, and S. Vainshtein. (2005). *Breakdown phenomena in semiconductors and semiconductor devices*. Available: <http://www.books24x7.com/marc.asp?bookid=18661>
- [130] W. Fulop, "Calculation of avalanche breakdown voltages of silicon p-n junctions," *Solid-State Electronics*, vol. 10, pp. 39-43, 1967.
- [131] Josef Lutz, Heinrich Schlangenotto, Uwe Scheuermann, and R. D. Doncker. (2011). *Semiconductor Power Devices*.
- [132] W. Bartsch, R. Schoerner, and K. O. Dohnke, "Optimization of Bipolar SiC-Diodes by Analysis of Avalanche Breakdown Performance," *Materials Science Forum* vol. 645-648, pp. 909-912, May 2010.

- [133] C. R. Crowell and S. M. Sze, "TEMPERATURE DEPENDENCE OF AVALANCHE MULTIPLICATION IN SEMICONDUCTORS," *Applied Physics Letters*, vol. 9, pp. 242-244, 1966.
- [134] R. Van Overstraeten and H. De Man, "Measurement of the ionization rates in diffused silicon p-n junctions," *Solid-State Electronics*, vol. 13, pp. 583-608, 1970.
- [135] A. O. Konstantinov, Q. Wahab, N. Nordell, and U. Lindefelt, "Ionization rates and critical fields in 4H silicon carbide," *Applied Physics Letters*, vol. 71, pp. 90-92, 1997.
- [136] D. M. Nguyen, C. Raynaud, M. Lazar, G. Pâques, S. Scharnholz, N. Dheilily, *et al.*, "OBIC measurements on avalanche diodes in 4H-SiC for the determination of impact ionization coefficients," *Materials Science Forum* vol. 717-720, pp. 545-548, May 2012.
- [137] W. S. Loh, B. K. Ng, J. S. Ng, S. I. Soloviev, C. Ho-Young, P. M. Sandvik, *et al.*, "Impact Ionization Coefficients in 4H-SiC," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 55, pp. 1984-1990, 2008.
- [138] B. K. Ng, J. P. R. David, R. C. Tozer, G. J. Rees, Y. Feng, J. H. Zhao, *et al.*, "Nonlocal effects in thin 4H-SiC UV avalanche photodiodes," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 50, pp. 1724-1732, 2003.
- [139] R. Raghunathan and B. J. Baliga, "Measurement of electron and hole impact ionization coefficients for SiC," in *Power Semiconductor Devices and IC's, 1997. ISPSD '97., 1997 IEEE International Symposium on*, 1997, pp. 173-176.
- [140] M. Hjelm, H. E. Nilsson, A. Martinez, K. F. Brennan, and E. Bellotti, "Monte Carlo study of high-field carrier transport in 4H-SiC including band-to-band tunneling," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, pp. 1099-1107, 2003.
- [141] H. E. Nilsson, A. Martinez, U. Sannemo, M. Hjelm, E. Bellotti, and K. Brennan, "Monte Carlo simulation of high field hole transport in 4H-SiC including band to band tunneling and optical interband transitions," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 314, pp. 68-71, 3// 2002.
- [142] A. Akturk, N. Goldsman, S. Potbhare, and A. Lelis, "High field density-functional-theory based Monte Carlo: 4H-SiC impact ionization and velocity saturation," *Journal of Applied Physics*, vol. 105, pp. 033703-7, 2009.
- [143] R. Raghunathan and B. J. Baliga, "Temperature dependence of hole impact ionization coefficients in 4H and 6H-SiC," *Solid-State Electronics*, vol. 43, pp. 199-211, 1999.
- [144] W. S. Loh, J.P.R. David, B.K. Ng, Stanislav I. Soloviev, Peter M. Sandvik, J.S. Ng, *et al.*, "Temperature Dependence of Hole Impact Ionization Coefficient in 4H-SiC Photodiodes," *Materials Science Forum*, vol. 615 - 617, pp. 311-314, March 2009.
- [145] A. Akturk, N. Goldsman, S. Aslam, J. Sigwarth, and F. Herrero, "Comparison of 4H-SiC impact ionization models using experiments and self-consistent simulations," *Journal of Applied Physics*, vol. 104, pp. 026101-3, 2008.
- [146] M. Ershov and V. Ryzhii, "Temperature dependence of the electron impact ionization coefficient in silicon," *Semiconductor Science and Technology*, vol. 10, p. 138, 1995.
- [147] T. Hatakeyama, J. Nishio, C. Ota, and T. Shinohe, "Physical Modeling and Scaling Properties of 4H-SiC Power Devices," in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices, 2005. SISPAD 2005. International Conference on*, 2005, pp. 171-174.
- [148] T. Hatakeyama, T. Watanabe, T. Shinohe, K. Kojima, K. Arai, and N. Sano, "Impact ionization coefficients of 4H silicon carbide," *Applied Physics Letters*, vol. 85, pp. 1380-1382, 2004.
- [149] M. Ruff, H. Mitlehner, and R. Helbig, "SiC devices: physics and numerical simulation," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 41, pp. 1040-1054, 1994.

- [150] D.-S. Byeon, M.-K. Han, and Y.-I. Choi, "Analytical solution of the breakdown voltage for 6H-silicon carbide p⁺n junction," *Journal of Applied Physics*, vol. 79, pp. 2796-2797, 1996.
- [151] W. S. J. Bardeen, "Deformation potentials and mobilities in nonpolar crystals," *Phys. Rev.*, vol. 80, 1950.
- [152] V. F. W. E. Conwell, "Theory of impurity Scattering in Semiconductors," *Physical review*, vol. 77, Feb 1950.
- [153] M. Omar, *Semiconductor Heterojunctions and Nanostructures*: McGraw Hill, 2005.
- [154] B. K. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors*: Oxford Science, 1999.
- [155] B. K. Ridley, "Reconciliation of the Conwell-Weisskopf and Brooks-Herring formulae for charged-impurity scattering in semiconductors: Third-body interference," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 10, p. 1589, 1977.
- [156] W. Shockley, *Electrons and holes in semiconductors : with applications to transistor electronics*. New York: Van Nostrand, 1950.
- [157] R. B. Dingle and *Phil. Mag.*, vol. 46, p. 831, 1955.
- [158] C. Seok Cheow, "Theory of a forward-biased diffused-junction P-L-N rectifier"; Part I: Exact numerical solutions," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 19, pp. 954-966, 1972.
- [159] H. Brooks, "Advances in Electronics and Electron Physics," vol. 7, ed. New York: Academic, 1955, p. 85.
- [160] P. L. J. M. Dorkel, "Carrier mobilities in silicon semi-empirically related to temperature, doping and injection level," *Solid-State Electronics*, vol. 24, 1979.