

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A KOMUNIKAČNÍCH TECHNOLOGIÍ
ÚSTAV ELEKTROTECHNOLOGIE

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION
DEPARTMENT OF ELECTRICAL AND ELECTRONIC TECHNOLOGY

MODELOVÁNÍ FYZIKÁLNÍCH JEVŮ V POLOVODIČOVÝCH
MATERIÁLECH

DIPLOMOVÁ PRÁCE
MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

Bc. MÁRIO PÁLKA

BRNO 2011



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A KOMUNIKAČNÍCH
TECHNOLOGIÍ

ÚSTAV ELEKTROTECHNOLOGIE

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION
DEPARTMENT OF ELECTRICAL AND ELECTRONIC
TECHNOLOGY

MODELOVÁNÍ FYZIKÁLNÍCH JEVŮ V POLOVODIČOVÝCH MATERIÁLECH

MODELING OF PHYSICAL PHENOMENA IN SEMICONDUCTORS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. MÁRIO PÁLKA

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. ZDENKA ROZSÍVALOVÁ

BRNO 2011



VYSOKÉ UČENÍ
TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta elektrotechniky
a komunikačních technologií

Ústav elektrotechnologie

Diplomová práce

magisterský navazující studijní obor
Elektrotechnická výroba a management

Student: Bc. Mária Pálka

ID: 83312

Ročník: 2

Akademický rok: 2010/2011

NÁZEV TÉMATU:

Modelování fyzikálních jevů v polovodičových materiálech

POKYNY PRO VYPRACOVÁNÍ:

Podrobně prostudujte vlastnosti a fyzikální jevy, vyskytující se v polovodičových materiálech a strukturách včetně jejich matematického popisu. Zaměřte se na generačně rekombinační procesy ve stavu termodynamické nerovnováhy.

V libovolném programovacím jazyce vytvořte softwarovou aplikaci umožňující modelovat průběhy energetických hladin v pásových modelech vlastních a příměsových polovodičů v závislosti na typu polovodiče, koncentraci příměsí a teplotě. Zvažte i možnost stanovení energetických hladin v případě termodynamických nerovnovážných stavů.

Respektujte požadavek, aby byla aplikace spustitelná na libovolném počítači bez nutnosti počáteční instalace a využitelná ve výuce předmětů zaměřených na elektrotechnické materiály. K vytvořenému programu zpracujte teoretický rozbor dané problematiky a vytvořte zadání virtuální laboratorní úlohy aplikovatelné ve výukovém procesu.

DOPORUČENÁ LITERATURA:

Podle pokynů vedoucího diplomové práce.

Termín zadání: 7.2.2011

Termín odevzdání: 26.5.2011

Vedoucí práce: Ing. Zdenka Rozsivalová

prof. Ing. Jiří Kazelle, CSc.

Předseda oborové rady

UPOZORNĚNÍ:

Autor diplomové práce nesmí při vytváření diplomové práce porušit autorská práva třetích osob, zejména nesmí zasahovat nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a musí si být plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č.40/2009 Sb.

ABSTRAKT

Táto práca sa zaoberá vlastnosťami a fyzikálnymi javmi vyskytujúcimi sa v polovodičových materiáloch. Detailne sú popísané generačno - rekombinačné procesy v stave termodynamickej nerovnováhy. Výstupom z práce je softwarová aplikácia modelujúca priebehy energetických hladín v pásových modeloch vlastných a prímiesových polovodičov v závislosti na type polovodiča, koncentrácii prímiesí a teplote. Na záver je spracovaná virtuálna laboratórna úloha aplikovateľná vo výukovom procese.

KĹÚČOVÉ SLOVÁ

polovodič, pásový model, generácia, rekombinácia, termodynamická nerovnováha

ABSTRACT

This work deals with properties and physical phenomena occurring in semiconductor materials. In details are described generation - recombination processes in a state of thermodynamic disequilibrium. The output of work is a software application simulating waveforms of energy levels in the band's own models and impurity semiconductors, depending on the type of semiconductor, impurities concentration and temperature. Finally, the processed virtual lab experiment deliverable in the educational process.

KEYWORDS

semiconductor, band model, generation, recombination, thermodynamic imbalance

PÁLKA, Mário *Modelování fyzikálních jevu v polovodičových materiálech*: diplomová práce. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Ústav elektrotechnologie, 2011. 33 s. Vedoucí práce byl Ing. Zdenka Rozsivalová

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že svou diplomovou práci na téma „Modelování fyzikálních jevu v polovodičových materiálech“ jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Jako autor uvedené diplomové práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této diplomové práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení § 152 trestního zákona č. 140/1961 Sb.

Brno

.....

(podpis autora)

POĎAKOVANIE:

Veľmi ďakujem mojej vedúcej diplomovej práce Ing. Zdenke Rozsivalovej za vedenie a čas strávený pri konzultáciach. Ďalej by som rád poďakoval Ing. Martinovi Frkovi, Ph.D. za pripomienky a komentáre k vytvorenému programu a doc. Ing. Josefovi Jirákovvi, CSc. za informácie vedúce k ozrejmění teórie polovodičových materiálov.

OBSAH

Úvod	10
1 Teoretická časť	11
1.1 Teória pásových modelov vlastných a prímesových polovodičov	11
1.1.1 Energetické pásy	11
1.1.2 Nevlastný polovodič	12
1.2 Polovodiče v termodynamickej nerovnováhe	12
1.3 Generačno rekombinačné procesy v stave termodynamickej nerovnováhy	13
1.3.1 Doba života minoritných nosičov	13
1.3.2 Medzipásmová rekombinácia	14
1.3.3 Povrchová rekombinácia	14
1.3.4 Augerová rekombinácia	15
2 Praktická časť	16
2.1 Programové prostredie	16
2.1.1 Programovací jazyk JAVA	16
2.1.2 Programové prostredie NetBeans	16
2.2 Popis programu	16
2.2.1 Hlavné okno programu	17
2.2.2 Databáza materiálov	19
2.2.3 Simulácia polohy Fermiho hladiny vlastného a prímesového polovodiča	20
2.2.4 Teplotná závislosť polohy Fermiho hladiny vlastného polovodiča	21
2.2.5 Teplotná závislosť Fermiho energie prímesového polovodiča . .	22
2.2.6 Závislosť Fermiho energie na koncentrácii prímesí	23
2.2.7 Požiadavky na počítač	23
2.3 Štruktúra programu	24
2.3.1 Hlavné okno	24
2.3.2 Slovník fráz	24
2.3.3 Databáza materiálov	24
2.3.4 Pomocník	25
2.3.5 Rovnice	25
2.3.6 Výpočet polohy Fermiho hladiny	26
2.3.7 Výpočet teplotnej závislosti Fermiho energie vlastného polovodiča	26
2.3.8 Teplotná závislosť Fermiho energie prímesového polovodiča . .	27
2.3.9 Závislosť Fermiho energie na koncentrácii prímesí	27

3	Virtuálna laboratórna úloha	28
3.1	Porovnanie pásových modelov polovodičov	28
3.2	Modelovanie vplyvu teploty na Fermiho energiu prímiesového polovodiča	29
3.3	Modelovanie závislosti Fermiho energie na koncentrácii prímiesí	30
4	Záver	31
	Literatúra	32
	Zoznam symbolov, veličín a skratiek	33

ZOZNAM OBRÁZKOV

1.1	Redukované pásové modely pri teplote $T \rightarrow 0$ K.	11
1.2	Generácia a rekombinácia prostredníctvom lokálnych centier.	14
1.3	Povrchová rekombinácia	15
1.4	Princíp Augerovej rekombinácie	15
2.1	Hlavné okno programu	17
2.2	Zoznam dostupných materiálov	18
2.3	Ovládanie modelovania myšou	18
2.4	Databáza dostupných materiálov	19
2.5	Poloha Fermiho hladiny vlastného a prímesového polovodiča	20
2.6	Teplotná závislosť polohy Fermiho hladiny vlastného polovodiča	21
2.7	Teplotná závislosť Fermiho energie prímesového polovodiča	22
2.8	Závislosť Fermiho energie na koncentrácii prímesí	23
2.9	Príklad pomocníka pre informáciu o šírke zakázaného pásu	25
2.10	Príklad zobrazenia rovníc	25
3.1	Pásový model kremíku	28
3.2	Vplyv teploty na Fermiho energiu	29
3.3	Závislosti Fermiho energie na koncentrácii prímesí	30

ÚVOD

Polovodičové materiály sú dnes nesporne veľmi dôležitou súčasťou každodenného života vo forme elektrotechnických súčiastok a materiálov elektrických zariadení, ktoré nás obklopujú a bez ktorých si už nedokážeme predstaviť našu prácu. I napriek tomu je pojem polovodičových materiálov pre väčšinu spotrebiteľov elektroniky neznámy.

Cieľom mojej práce je oboznámenie technickej verejnosti so základnými vlastnosťami polovodičových materiálov pomocou počítačovej simulácie pásových modelov.

Na úvod diplomovej práce som priblížil teóriu pásových modelov polovodičov. V ďalšej časti je vytvorený prehľad generačno rekombinačných procesov v stave termodynamickej nerovnováhy. Detailnejšie sú popísané pojmy energetických pásov a pásových modelov pre jednotlivé typy polovodičových materiálov, ktoré budú použité v počítačovej simulácii pásových modelov polovodičov.

V praktickej časti je popísaný návrh prostredia a základných funkcií programu. Detailne sú popísané všetky simulácie, ovládacie prvky programu a obsluha databáze programu. Na záver je vytvorené zadanie virtuálnej laboratórnej úlohy pre potreby výuky.

1 TEORETICKÁ ČASŤ

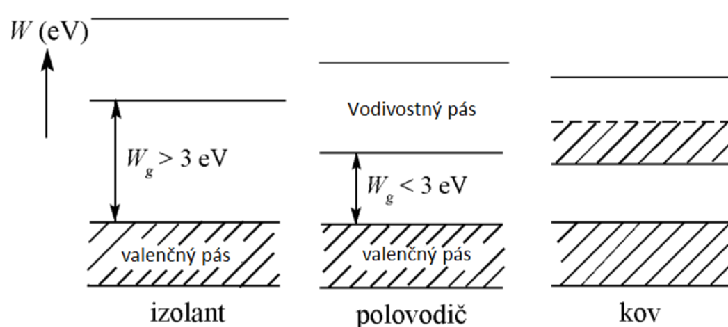
1.1 Teória pásových modelov vlastných a prímesových polovodičov

Polovodič je materiál, ktorý sa v čistej podobe zaraďuje elektrickou vodivosťou medzi vodiče i nevodiče. Jeho vodivosť sa silne mení s teplotou, dopadajúcim svetlom, usporiadaním kryštalickej mriežky a obsahom prímiesí. Polovodičové materiály poznáme ako kryštalické a amorfné látky. Táto práca je namierená na kryštalické polovodiče ako kremík a germánium.

1.1.1 Energetické pásy

Elektróny s najmenšou väzbovou energiou sa nazývajú valenčné elektróny. Ich väzbová energia vytvára v energetickom diagrame pás, nazývaný valenčný pás. Niektoré elektróny sú však schopné sa od jadra odtrhnúť a voľne sa pohybovať v látke (pods-tata elektrickej vodivosti látky). Tieto elektróny sú na látku viazané menej a tvoria tzv. vodivostný pás. Na odtrhnutie elektrónu od jeho jadra bolo potrebné vynaložiť energiu, ktorá v energetickom diagrame predstavuje medzeru medzi valenčným a vodivostným pásom, tzv. zakázaný pás.

Šírka zakázaného pásu (W_g) určuje aj pravdepodobnosť, že sa za danej teploty dokáže odtrhnúť dostatočné množstvo elektrónov, čiže priamo určuje elektrickú vodivosť danej látky. U vodičov je šírka zakázaného pásu nulová, valenčný a vodivostný pás sa prekrývajú (obr.1.1). U izolantov je šírka zakázaného pásu veľká, viac než 3 eV. U polovodičov je šírka zakázaného pásu medzi týmito hodnotami, typicky je okolo 1 eV.



Obr. 1.1: Redukované pásové modely pri teplote $T \rightarrow 0$ K.

1.1.2 Nevlastný polovodič

Množstvo voľných elektrónov v polovodiči je ovplyvnené množstvom nečistôt a prímiesí. I veľmi malé množstvo prímiesí môže spôsobiť dostatočne veľké zväčšenie vodivosti. Preto sa táto vodivosť nazýva nevlastnou vodivosťou a polovodič zase nevlastným polovodičom.

Nevlastný polovodič typu N

Pridaním do štvormocného prvku, ako je napríklad kremík Si, prvku päťmocného, napríklad fosforu, vznikne polovodič typu N. Prvok, ktorý má o jeden elektrón viac, sa nazýva donor.

Polovodič typu N obsahuje taktiež i diery, ale tie vznikajú ako produkt pôsobenia teploty. Ich množstvo je závislé na teplote polovodiča a s rastúcou teplotou rastie. Diery sú menšinovým nosičom náboja. Po pripojení elektrického pola sa budú majoritné nosiče náboja – voľné elektróny, pohybovať od záporného pólu ku kladnému.

Nevlastný polovodič typu P

Pokiaľ štvormocný prvok budeme dotovať trojmocnou prímiesou, vznikne nám polovodič typu P. Prímiesi majú o jeden elektrón menej – stávajú sa akceptorom. Pre vznik kovalentnej väzby chýba jeden elektrón a namiesto chýbajúceho elektrónu sa správa ako diera. Tieto diery potom vytvárajú dierovú vodivosť – nevlastná vodivosť typu P.

Priložením elektrického pola na polovodič typu P, začnú elektróny prestupovať do dier smerom od záporného ku kladnému pólu a diery sa budú pohybovať od kladného k zápornému pólu.

1.2 Polovodiče v termodynamickej nerovnováhe

Nerovnovážne stavy koncentrácie nosičov nespĺňujú podmienku termodynamickej rovnováhy

$$n \cdot p = n_i^2 \quad (1.1)$$

V prípade, že

$$n \cdot p > n_i^2 \quad (1.2)$$

sú dodávané nosiče z vonkajšieho zdroja, dochádza k injekcii nosičov, a ak

$$n \cdot p < n_i^2 \quad (1.3)$$

tak dochádza k extrakcii nosičov z polovodiča.

1.3 Generačno rekombinačné procesy v stave termodynamickkej nerovnováhy

Generačno rekombinačné procesy zahŕňajú niekoľko vlastností popisujúcich správanie polovodičových materiálov v stave termodynamickkej nerovnováhy. V tomto nerovnovážnom stave medzi koncentraciami nosičov náboja, zapríčinenom injekciou alebo extrakciou nosičov, dochádza k zmenám elektrických vlastností materiálu.

V termodynamickkej rovnováhe dochádza k termickej generácii voľných nosičov, za jednotku času je v jednotke objemu generovaných G nosičov. Spolu s generáciou prebieha opačný dej, obsadenie neviazaného stavu voľným nosičom - rekombinácia. Za jednotku času zrekombinuje v jednotke objemu R voľných nosičov a platí $G = R$, preto sa stredná koncentrácia nosičov náboja nezmení.

Pri vonkajšom pôsobení môžu vzniknúť ďalšie nosiče náboja pri narušení kovalentnej väzby vonkajšími vplyvmi, ako sú ožiarenie fotónmi alebo vplyv silného elektrického poľa. Pri interakcii s fotónmi o energii $h\nu$, každé absorbované kvantum žiarenia ($h\nu \leq W_g$) vedie k vzniku β párov voľný elektron - voľná diera ($\beta \geq 1$).

Ak je α koeficient absorpcie pre danú vlnovú dĺžku dopadajúceho svetla, generáciu nosičov vo vzdialenosti x od povrchu polovodiča je možno vyjadriť vzťahom

$$G = \left(\frac{d\Delta n}{dt}\right)_{gen} = \alpha \cdot \beta \cdot \phi_\lambda \cdot \exp^{-\alpha \cdot x}, \quad (1.4)$$

kde ϕ_λ je intenzita dopadajúceho žiarenia s vlnovou dĺžkou λ vstupujúceho do polovodiča. Ku zvýšeniu koncentrácie nosičov môže dôjsť i vplyvom injekcie nosičov, nárazovou ionizáciou apod.

Pokiaľ prestanú vonkajšie vplyvy pôsobiť, koncentrácia nerovnovážnych nosičov klesá vplyvom rekombinácie. K popisu rekombinačných javov sa používa vzťah

$$R = \left(\frac{d\Delta n}{dt}\right)_{rek} = -\frac{\Delta n}{\tau}, \quad (1.5)$$

kde τ je tzv. doba života nerovnovážnych nosičov.

1.3.1 Doba života minoritných nosičov

Medzi základnú vlastnosť polovodičových materiálov v termodynamickkej nerovnováhe patrí doba života minoritných nosičov. Je to čas, za ktorý klesne nerovnovážna koncentrácia nosičov náboja e -krát, kde e je základ prirodzeného logaritmu. Doba života je daná rekombináciou nosičov náboja.

Ak je koncentrácia rekombinačných centier N_t , tak doba života nerovnovážnych nosičov je rovná

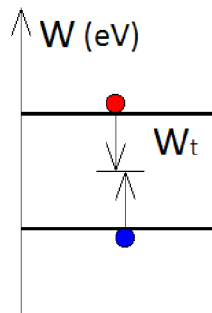
$$\tau = \frac{C_t}{N_t}, \quad (1.6)$$

kde C_t je koeficient rekombinácie, ktorý závisí na druhu rekombinačných centier, teplote a úrovni injekcie nerovnovážnych nosičov. Závislosť τ na úrovni injekcie je rozdielna u rôznych rekombinačných centier a závisí na vzájomnej polohe hladiny centra a Fermiho hladiny.

1.3.2 Medzipásmová rekombinácia

Rekombinácia nerovnovážnych nosičov je relatívne zložitý proces. Aby došlo k rekombinácii voľného nosiča, musí dôjsť ku zrážke s opačne nabitým centrom. Ak dôjde ku zrážke elektrónu s voľnou dierou (elektrón prejde do valenčného pásu), ide o medzipásmovú rekombináciu. Pokiaľ rekombinácia prebieha prostredníctvom prímiesových centier, hovoríme o rekombinácii na lokálnych centrách.

Mechanizmus medzipásmovej rekombinácie je znázornený na obr.1.2. Elektrón z vodivostného pásu sa zachytí na lokálnej hladine o energii W_t a potom prejde do valenčného pásu, čím dôjde k rekombinácii páru elektrón - diera.

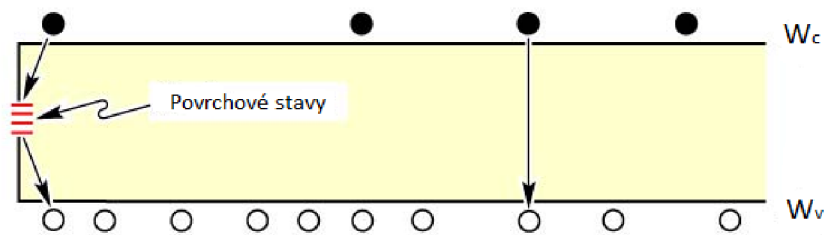


Obr. 1.2: Generácia a rekombinácia prostredníctvom lokálnych centier.

1.3.3 Povrchová rekombinácia

Povrch kremíkového substrátu predstavuje významné narušenie štruktúry a znamená výskyt veľkého množstva voľných väzieb, čo znamená zvýšenú hustotu porúch, ktoré vytvárajú prechodové hladiny vo vnútri zakázaného pásu.

Tieto poruchy však nevznikajú na akomkoľvek rozhraní. Pokiaľ na povrchu kremíkového substrátu narastie nativný oxid, spôsobí rozdielna štruktúra väzieb Si-O napätie a vznik porúch a prechodových hladín pre rekombináciu. V skutočnosti



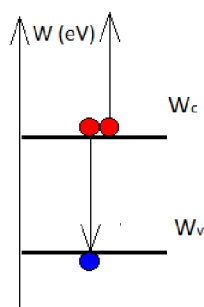
Obr. 1.3: Povrchová rekombinácia

je, ale týchto porúch obrovské množstvo a sú rovnomerne rozmiestnené po celej šírke zakázaného pásu.

"Povrchová rekombinácia má významný podiel na výslednej efektívnej dobe života minoritných nosičov v polovodičovej štruktúre. Minimalizáciu povrchovej rekombinácie možno dosiahnuť optimalizáciou povrchu kremíkového substrátu, čo znamená hlavne zníženie počtu voľných kremíkových väzieb. Naviazaním atómu vodíka, kyslíka alebo dusíka na tieto voľné väzby, znížime počet povrchových energetických stavov a vznikne dielektrická vrstva, ktorá je nazývaná pasivačná." [1]

1.3.4 Augerová rekombinácia

Augerová rekombinácia je dôležitá pre vysoko dotované hladiny. Energia z rekombinácie páru elektrón - diera sa prenesie na iný elektrón ve vodivostnom pásu obr.1.4. Táto rekombinácia vyžaduje prítomnosť troch častíc na rovnakom mieste, preto se jej pravdepodobnosť zvyšuje s rastúcou koncentráciou nosičov.



Obr. 1.4: Princíp Augerovej rekombinácie

2 PRAKTICKÁ ČASŤ

2.1 Programové prostredie

Na začiatku práce bolo treba zvoliť vhodné programové prostredie a programovací jazyk tak, aby konečný program splňoval súčasné kritéria na funkčnosť, bol plne podporovaný po technologickej stránke a v neposlednom rade splnil zadanie práce. Aplikácia má byť spustiteľná na akomkoľvek počítači bez nutnosti inštalácie. Po zvážení bol ako programovací jazyk zvolený jazyk Java a programové prostredie NetBeans.

2.1.1 Programovací jazyk JAVA

Jazyk Java, vyvinutý firmou Sun Microsystems, je objektovo orientovaný programovací jazyk a patrí medzi najpoužívanejšie programovacie jazyky na svete. Vyniká hlavne svojou prenositeľnosťou na rôzne zariadenia, od počítačov cez mobilné telefóny až po rôzne systémy.

Java umožňuje písať prehľadný a robustný kód, ktorým možno zaručiť rýchlejší vývoj aplikácií. Vývoj je podporovaný množstvom prostredí na vysokej úrovni a samozrejme obrovskou podporou užívateľov na celom svete. Tento jazyk splňuje požiadavku spustiteľnosti na ľubovoľnom počítači. Java je v dnešnej dobe distribuovaná na veľkom množstve počítačov bez rozdielu platformy, či už Windows, Linux alebo iné, preto nie je rozdiel, pre akú platformu je vytvorený a vždy sa správa rovnako.

2.1.2 Programové prostredie NetBeans

Pred voľbou programového prostredia bolo treba zvážiť ponúkané funkcie prostredia, jeho výkon a podporu pre vývojárov tak, aby vývoj programu nebol zdržovaný a nemuseli vznikať kompromisy pri programovaní aplikácie. Preto bolo vybrané prostredie NetBeans, s rozsiahlou užívateľskou komunitou a sponzorované firmou Sun Microsystems. Jedná sa o software s otvoreným kódom - tzv. open source.

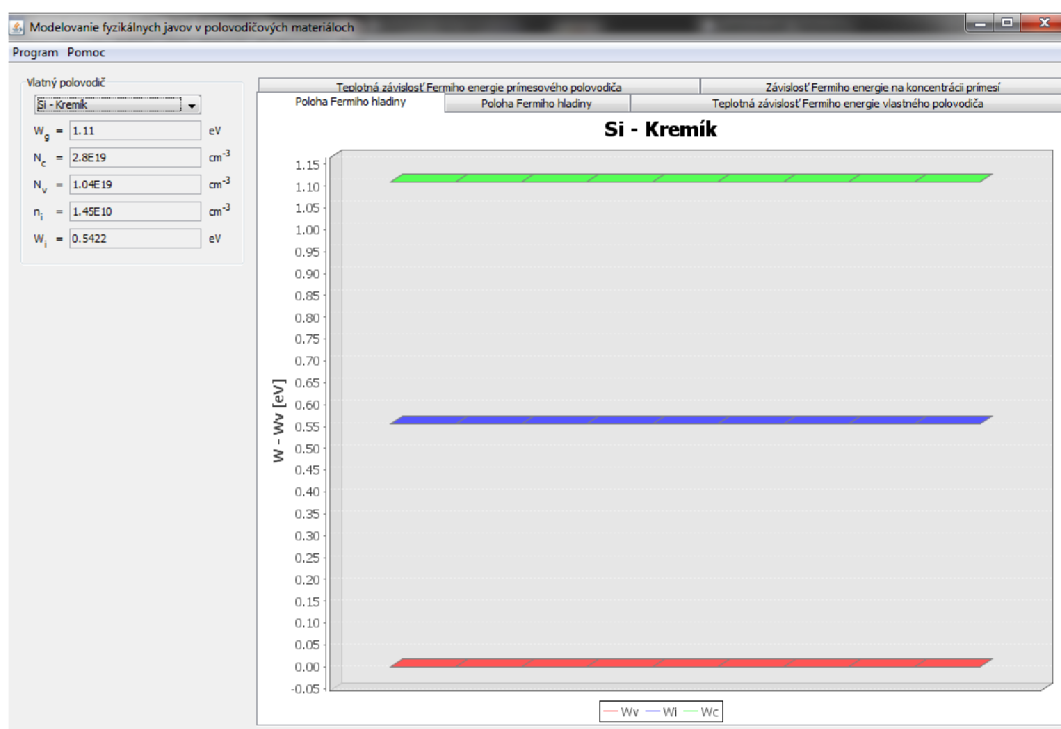
2.2 Popis programu

Samotný program pozostáva z viacerých prvkov, ktoré majú za účel intuitívne ovládanie a jednoduché pochopenie problematiky. Cieľom aplikácie je umožniť jednoduchým klikaním upravovať vstupné parametre, sledovať a modelovať priebehy energetických hladín v pásových modeloch vlastných a prímesových polovodičov

v závislosti na type polovodiča, koncentrácii prímiesí a teplote. Program nabáda užívateľa skúšať meniť hodnoty parametrov a porovnávať rôzne polovodičové materiály, čo je prispôbené tak, aby k pozorovaniu zmien dochádzalo v reálnom čase. V nasledujúcich kapitolách sú všetky prvky bližšie popísané.

2.2.1 Hlavné okno programu

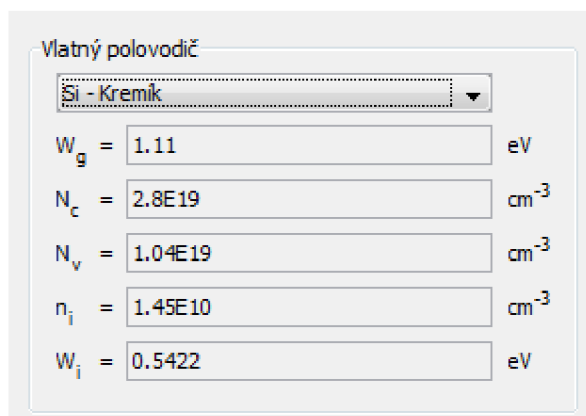
Po spustení sa otvorí hlavné okno programu, v ktorom sú umiestnené ostané ovládacie prvky a grafické okná. Okno má nasledujúcu podobu:



Obr. 2.1: Hlavné okno programu

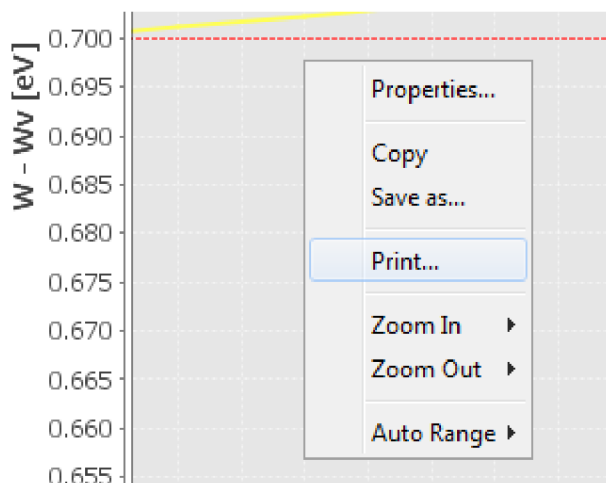
V hornej časti sa nachádza menu s položkami *Program* a *Pomoc*. V ponuke *Program* sa nachádza položka *Databáza materiálov* a *Ukončiť* program. *Databáza* obsahuje správu polovodičových materiálov, ktorá bude popísaná v nasledujúcej kapitole. V ponuke *Pomoc* sa nachádza okno pre informáciu o programe.

V ľavej časti okna sa nachádza ovládanie celého programu obr. 2.2. Súčasti tohoto ovládania sa objavujú podľa aktuálnej simulácie a podľa potreby tak, aby nerušili prácu s programom. V každej simulácii je dostupný blok *Vlastný polovodič*. V tomto bloku sa nachádza zoznam dostupných materiálov pre modelovanie spolu s výpisom základných parametrov daného polovodiča. Zmenou materiálu sa okamžite aktualizujú tieto informácie vrátane prepočítania grafických závislostí.



Obr. 2.2: Zoznam dostupných materiálov

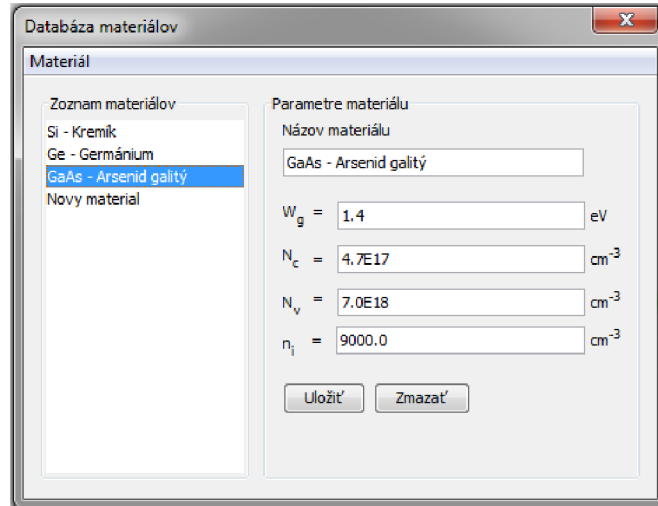
V pravej časti programu sa nachádzajú modely generované programom. Každý z nich umožňuje niekoľko akcií ovládaných myšou obr. 2.3. Užívateľ môže priebehy približovať a oddalovať, meniť rozsah osí, meniť vlastnosti vykreslenia a v neposlednom rade priebeh zkopírovať alebo vytlačiť.



Obr. 2.3: Ovládanie modelovania myšou

2.2.2 Databáza materiálov

Databáza materiálov je dostupná z horného menu. Samotná databáza pozostáva z okna obr. 2.4, v ktorom sa nachádza zoznam dostupných materiálov.



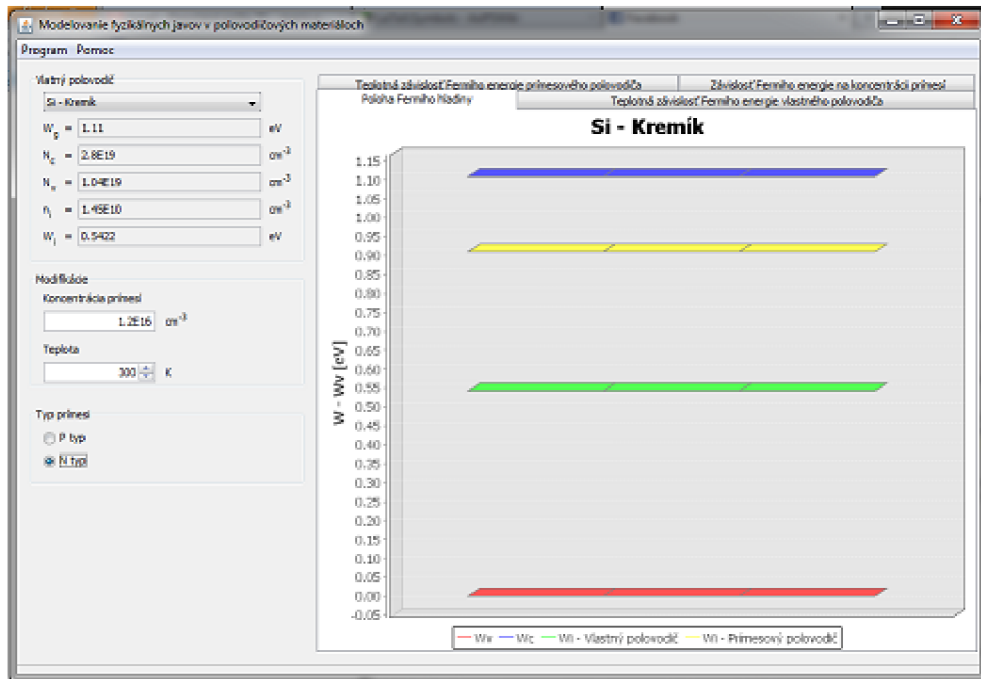
Obr. 2.4: Databáza dostupných materiálov

Po kliknutí na názov materiálu v zozname sa načítajú informácie do formulára v pravej časti. Tento formulár umožňuje editovať, poprípade zmazať materiál. Formulár je ošetrený proti vloženiu nesprávnych, resp. prázdnych údajov.

Nový materiál možno vložiť kliknutím na položku *Materiál* v hornom menu databázového okna a následne *Nový*. Je možné použiť i klávesovú skratku *Ctrl + N*. Po úprave databázy a zavretí okna nastane aktualizácia zoznamu materiálov v ovládacom bloku a aktualizujú sa simulácie.

2.2.3 Simulácia polohy Fermiho hladiny vlastného a prímiesového polovodiča

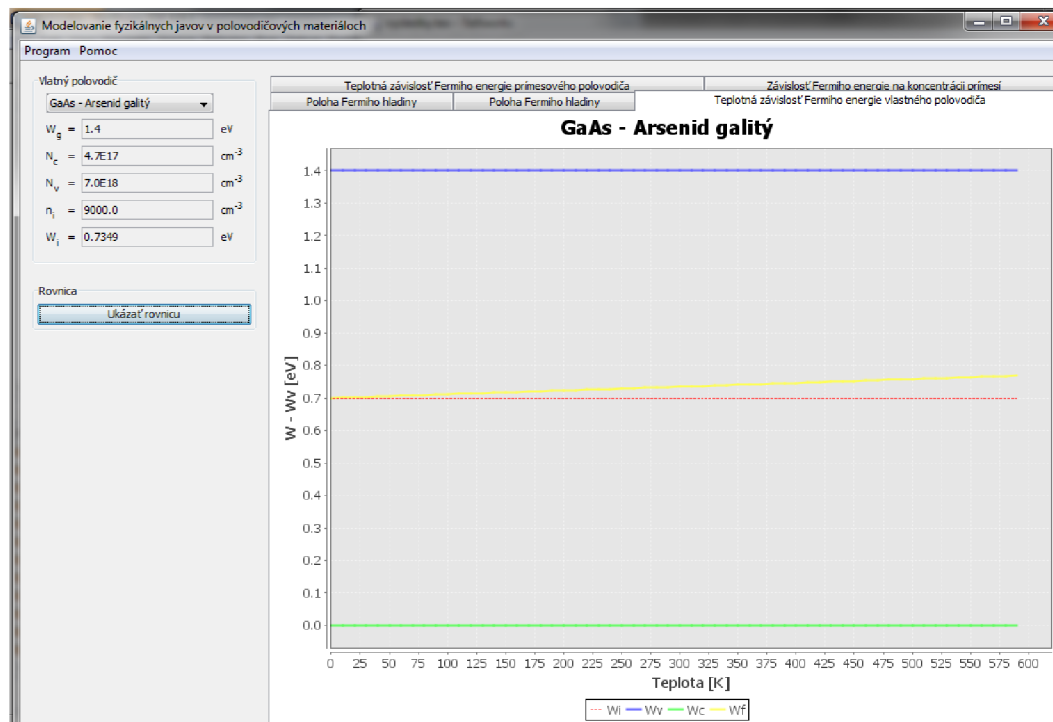
V tejto simulácii je zahrnutý model polohy Fermiho hladiny vlastného polovodiča spolu s modelom prímiesového polovodiča. Užívateľ programu má preto možnosť porovnať vlastný polovodič s prímiesovým na základe pásových modelov. Polohu Fermiho hladiny prímiesového polovodiča je možné upravovať zmenou vstupných parametrov ako je teplota, koncentrácia prímiesí a typ prímiesí.



Obr. 2.5: Poloha Fermiho hladiny vlastného a prímiesového polovodiča

2.2.4 Teplotná závislosť polohy Fermiho hladiny vlastného polovodiča

Modelovanie teplotnej závislosti polohy Fermiho hladiny vlastného polovodiča generuje pásový model materiálu, zdola ohraničený pásom valenčnej energie, zhora vodivostným pásom. Červená čiarkovaná čiara vyznačuje úroveň Fermiho hladiny pre 0 K. Žltá krivka je samotný priebeh závislý na zmene teploty od 0 do 600 K obr. 2.6. Do tejto simuláciu vstupujú len definované parametre polovodičového materiálu.

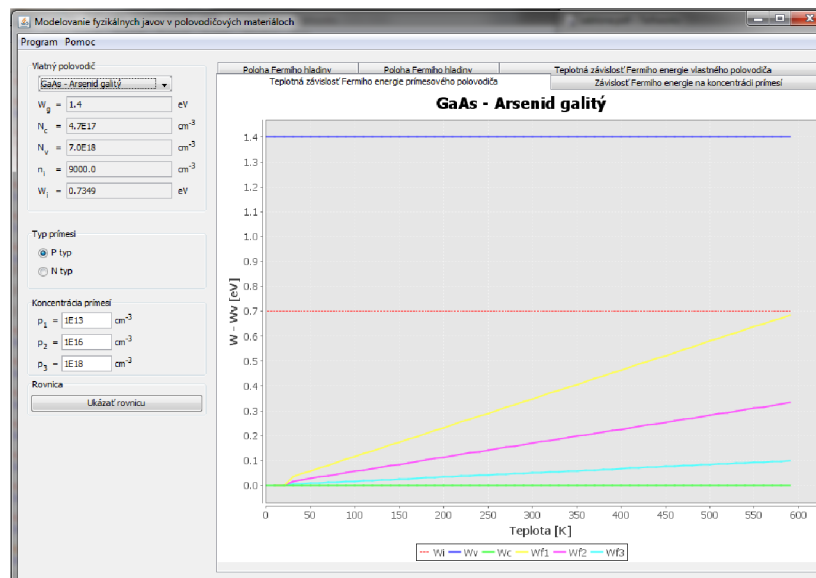


Obr. 2.6: Teplotná závislosť polohy Fermiho hladiny vlastného polovodiča

2.2.5 Teplotná závislosť Fermiho energie prímiesového polovodiča

Model teplotnej závislosti Fermiho energie v prímiesovom polovodiči obr. 2.7 je tvorený základným pásovým modelom polovodiča ohraničeným pásmi valenčnej a vodivostnej energie a červenou čiarou - polohou Fermiho hladiny pre 0 K.

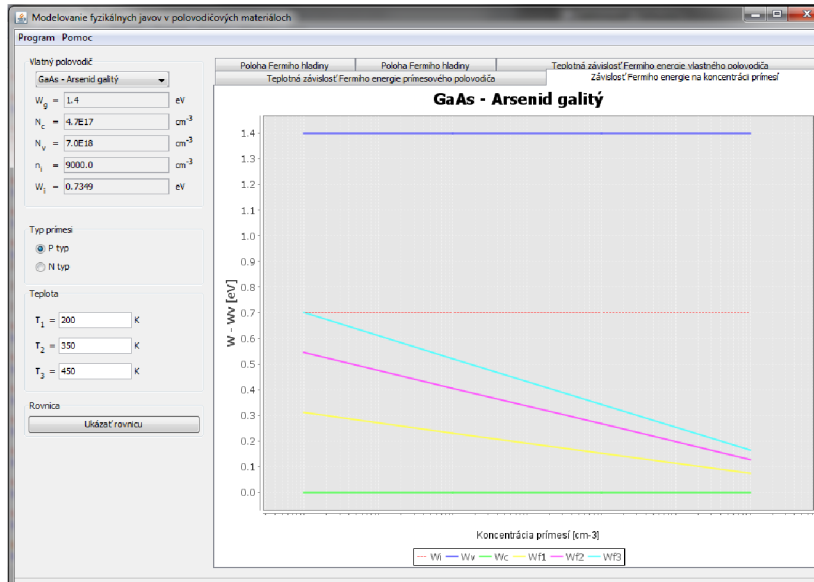
Táto časť modelácie umožňuje upraviť a zmeniť parametre prímiesí v materiále. Prvým parametrom je voľba typu prímiesí - P typ alebo N typ. Ďalej umožňuje rôzne upravovať tri koncentrácie prímiesí. Pre každú koncentráciu existuje grafický model označený W_{f1} , W_{f2} , W_{f3} s vlastným farebným rozlíšením. Každá koncentrácia je ošetrená tak, aby užívateľ nemohol vložiť koncentráciu nižšiu, ako je intrinzičná koncentrácia n_i , čo by nedávalo zmysel.



Obr. 2.7: Teplotná závislosť Fermiho energie prímiesového polovodiča

2.2.6 Závislosť Fermiho energie na koncentrácii prímiesí

Tento model poskytuje užívateľovi simulovať závislosť Fermiho energie na koncentrácii prímiesí s možnosťou volby typu prímiesí a editáciu teploty pre tri závislosti vyznačené v grafe.



Obr. 2.8: Závislosť Fermiho energie na koncentrácii prímiesí

2.2.7 Požiadavky na počítač

Požiadavky na počítač nie sú špecifické. Pre spustenie programu stačí bežný personálny počítač, poprípade notebook. Pre najlepšie využitie programu sa doporučuje minimálne 15" monitor s vysokým rozlíšením.

Program je vytvorený tak, aby bol spustiteľný z akejkoľvek platformy a architektúry operačného systému. Avšak, je nutné, aby bol na počítači nainštalovaný tzv. *virtuálny stroj Javy* - JVM, verzie 1.6 a vyššej.

2.3 Štruktúra programu

Celý program bol vyvinutý v NetBeans IDE 6.9.1 a obsahuje 3232 riadkov kódu. Program zahrňuje niekoľko prvkov - tried v jazyku Java, ktoré budú popísané v nasledujúcich podkapitolách.

2.3.1 Hlavné okno

Hlavné okno tvorí trieda *DiplomkaView.java*. Pozostáva zo zoznamu materiálov, ovládacích prvkov a grafických okien. Každý ovládací prvok má definované metódy - akcie, ktoré po zavolaní vyvolajú reakciu, či už zmenu materiálu alebo zmenu priebehu simulovaného programom.

2.3.2 Slovník fráz

Do programu bola od začiatku vývoja zahrnutá vlastnosť viacjazyčnej podpory. Tá funguje na princípe externého súboru, ktorý sa nachádza v podzložke programu *data/slovník.txt*. V tomto súbore je na každom riadku určitá fráza, použitá v programe.

Pokiaľ by sa vlastník programu rozhodol zmeniť jazykovú variantu, stačilo by mu preložiť tento súbor. Pri spustení programu sa v konštruktore hlavnej triedy programu inicializuje objekt triedy *Dictionary.java*, a tým je možné z tohoto objektu vyvolávať frázy v programe.

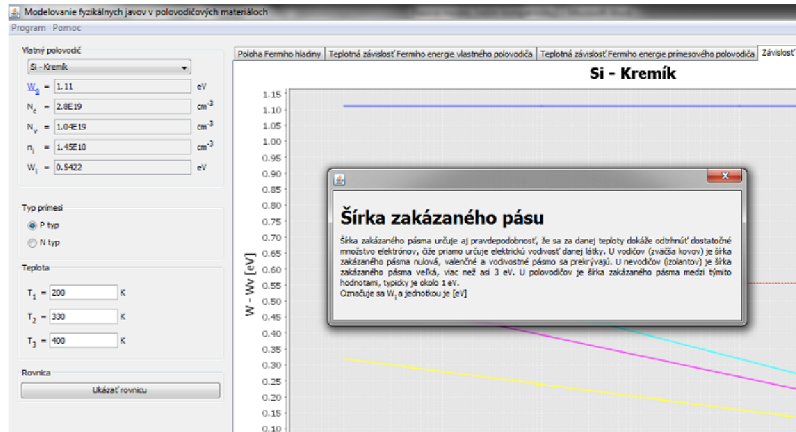
2.3.3 Databáza materiálov

Databáza materiálov je naprogramovaná v triede *Database.java*. Jedná sa o okno, ktorým je možno editovať zoznam materiálov dostupných v aplikácii pre modelovanie. Databáza materiálov je uložená v externom textovom súbore *data/materialy.txt*.

Dátová štruktúra zoznamu materiálov je trieda *MaterialList.java*, definovaná ako pole jednotiek - materiálov. Jednotka materiál je definovaná v triede *Material.java*.

2.3.4 Pomocník

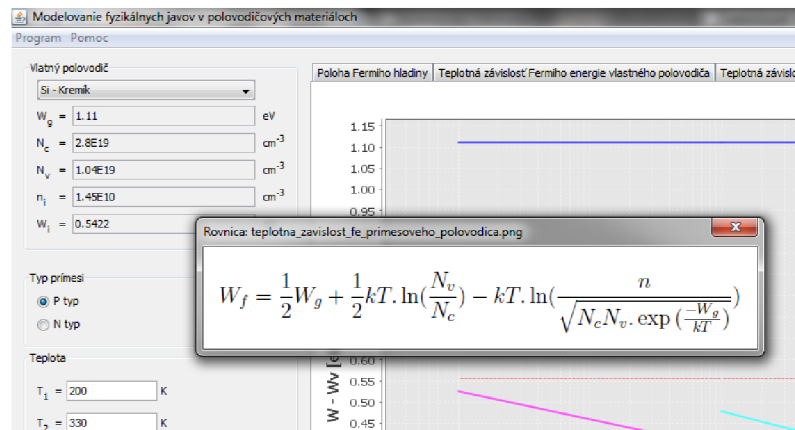
V programe je zakomponovaný tzv. *Pomocník*. Jedná sa o objekt, definovaný triedou *Helper.java*. Táto trieda pri inicializácii preberá ako parameter názov súboru, kde je text pomocníka. Následne vytvorí jednoduché okno s týmto textom obr. 2.9. Tieto texty sa nachádzajú v zložke *data/helper*.



Obr. 2.9: Príklad pomocníka pre informáciu o šírke zakázaného pásu

2.3.5 Rovnice

Ďalšou funkciou programu je okno pre zobrazenie rovnice obr. 2.10, podľa ktorej algoritmus modeluje simuláciu. Rovnice sú spravované triedou *Equation.java*. Objekt pri inicializácii preberá parameter názvu rovnice, ktoré su uložené v podzložke *data/images*.



Obr. 2.10: Príklad zobrazenia rovníc

2.3.6 Výpočet polohy Fermiho hladiny

Výpočet polohy Fermiho hladiny je pre porovnanie spoločný pre vlastný i prímesový polovodič. Pre vlastný polovodič sa poloha Fermiho hladiny nachádza len mierne posunutá od stredu šírky zakázaného pásu a vypočíta sa podľa vzťahu

$$W_i = W_v + \frac{W_g}{2} + \frac{k \cdot T}{2} \cdot \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right) \quad (2.1)$$

Poloha Fermiho hladiny pre prímesový polovodič je už silne závislá na teplote a koncentrácii prímesí a jej výpočet možno získať zo vzťahu

$$W_F = W_v + \frac{W_g}{2} + \frac{k \cdot T}{2} \cdot \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right) - k \cdot T \cdot \ln\left(\frac{n}{n_i}\right), \quad (2.2)$$

kde n_i sa vypočíta podľa vzťahu

$$n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v \cdot \exp\left(\frac{-W_g}{k \cdot T}\right)} \quad (2.3)$$

Efektívne koncentrácie hustoty stavov vo vodivostnom páse N_c resp. valenčnom páse N_v sú závislé na teplote, preto pre teplotu rôznu ako 300 K je nutný prepočet zo známych hodnôt pre 300 K:

$$N_v = N_{v300} \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{\frac{3}{2}}, \quad (2.4)$$

$$N_c = N_{c300} \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{\frac{3}{2}}, \quad (2.5)$$

2.3.7 Výpočet teplotnej závislosti Fermiho energie vlastného polovodiča

Závislosť Fermiho energie vlastného polovodiča na teplote je, ako už bolo uvedené 2.1, mierne odchýlené od polovice šírky zakázaného pásu a s teplotou odchylka ďalej narastá.

2.3.8 Výpočet teplotnej závislosti Fermiho energie prímesového polovodiča

V modelácii teplotnej závislosti Fermiho energie prímesového polovodiča 2.2, sú v programe vytvorené tri parametre pre úpravu koncentrácie prímesí. V modely potom tieto vystupujú ako tri nezávislé priebehy, ktoré možno vyhodnotiť a navzájom porovnať.

2.3.9 Závislosť Fermiho energie na koncentrácii prímesí

Pre model Fermiho energie závislej na koncentrácii prímesí 2.2 sú v aplikácii vytvorené tri parametre pre úpravu teploty. V modely potom tieto vystupujú ako tri nezávislé priebehy, ktoré možno vyhodnotiť a navzájom porovnať.

3 VIRTUÁLNA LABORATÓRNA ÚLOHA

V tejto časti je popísaný príklad virtuálnej laboratórnej úlohy, použiteľnej v cvičeniach. Študenti by mali k zvládnutiu úlohy využiť pripravený počítačový program, modelovať pásové modely polovodičových materiálov a spočítať zadané príklady.

3.1 Porovnanie pásových modelov polovodičov

Vypočítajte polohu Fermiho hladiny vo vlastnom polovodiči pri teplote 300 K. Porovnajete polohu Fermiho hladiny vlastného polovodiča s polovodičom prímiesovým s koncentráciou prímiesí $n = 5 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$. Polohu Fermiho hladiny zobrazte a zobrazenú závislosť uložte kliknutím pravým tlačidlom na graf a potom "Save as...".

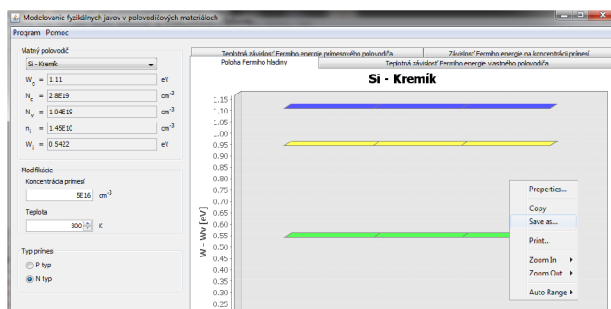
Postup výpočtu

Šírka zakázaného pásu pre kremík je $W_g = 1,11 \text{ eV}$. Pre 300 K je efektívna hustota stavov vo vodivostnom páse $N_c = 2,8 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$, efektívna hustota stavov vo valenčnom páse $N_v = 1,04 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$. Intrinzická koncentrácia v kremíku je $n_i = 1,45 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$.

$$W_i = W_v + \frac{W_g}{2} + \frac{k \cdot T}{2} \cdot \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right), \quad (3.1)$$

$$W_i = W_v + \frac{1,11}{2} + \frac{8,62 \cdot 10^{-5} \cdot 300}{2} \cdot \ln\left(\frac{1,04 \cdot 10^{19}}{2,8 \cdot 10^{19}}\right) = W_v + 0,542 \text{ eV} \quad (3.2)$$

Výsledný model vyzerá nasledovne:



Obr. 3.1: Pásový model kremíku

3.2 Modelovanie vplyvu teploty na Fermiho energiu prímiesového polovodiča

Vypočítajte polohu Fermiho hladiny v kremíku dotovovanom 10^{14} , 10^{16} a 10^{18} cm^{-3} akceptormi pri teplotách 200 K, 300 K a 600 K. Polohu Fermiho hladiny vyneste do grafu. Zobrazenú závislosť uložte (kliknutím pravým tlačidlom na graf a potom "Save as...").

Postup výpočtu

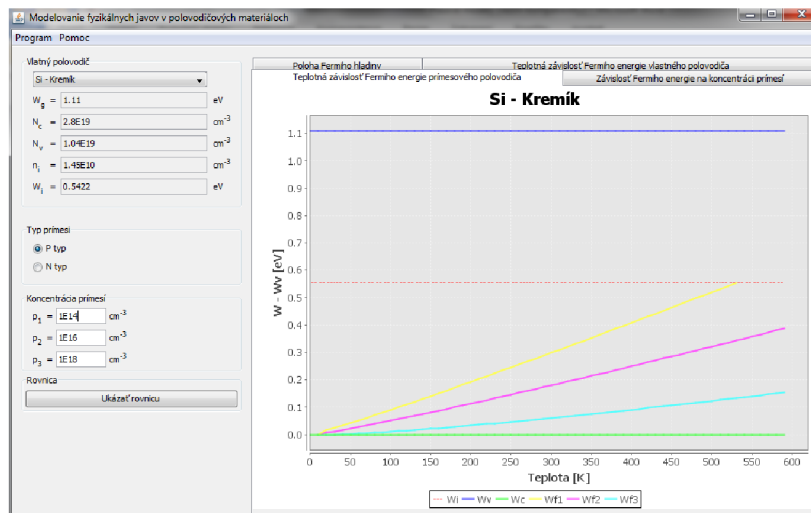
Pre vzorový výpočet použijeme teplotu 300 K a koncentráciu prímiesí 10^{16} cm^{-3} . Pre polovodič typu P platí:

$$W_F = W_i - k \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p}{\sqrt{N_c \cdot N_v} \cdot \exp\left(\frac{-W_g}{k \cdot T}\right)}\right), \quad (3.3)$$

$$W_F = W_i - 8,62 \cdot 10^{-5} \cdot 300 \cdot \ln\left(\frac{1,04 \cdot 10^{19}}{2,8 \cdot 10^{19}}\right) - 8,62 \cdot 10^{-5} \cdot 300 \cdot \ln\left(\frac{10^{16}}{8,159 \cdot 10^9}\right) \quad (3.4)$$

$$= W_v + 0,179 \text{ eV} \quad (3.5)$$

Výsledný model vyzerá nasledovne:

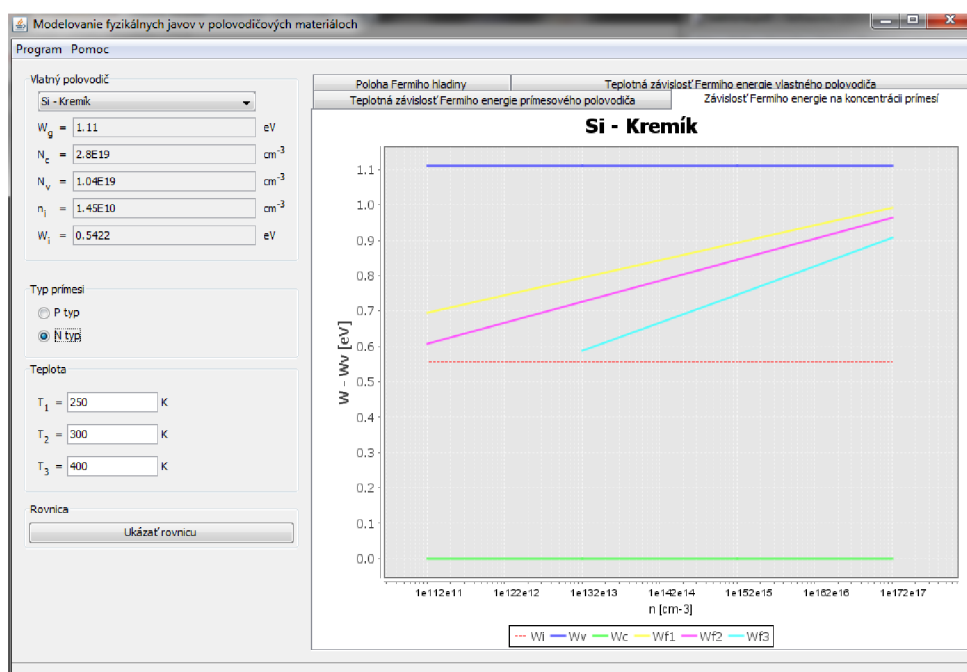


Obr. 3.2: Vplyv teploty na Fermiho energiu

3.3 Modelovanie závislosti Fermiho energie na koncentrácii prímiesí

Tri vzorky prímiesového polovodiča kremíku typu N sú dotované 10^{20} , 10^{22} a 10^{24} m^{-3} atómami fosforu v 1 m^3 . Vypočítajte polohu Fermiho energetickej hladiny pre tri dostupné polovodičové materiály. Zobrazené závislosti na koncentrácii donorov pre $T_1 = 250 \text{ K}$, $T_2 = 300 \text{ K}$ a $T_3 = 400 \text{ K}$ uložte (kliknutím pravým tlačidlom na graf a potom "Save as..."). Pre jednoduchosť uvažujte koncentráciu majoritných nosičov rovnú koncentrácii prímiesí pri všetkých teplotách. Úlohu spracujte i pre polovodič typu P.

Výsledný model vyzerá nasledovne:



Obr. 3.3: Závislosti Fermiho energie na koncentrácii prímiesí

Postup výpočtu

Pre vzorový výpočet použijeme teplotu 300 K a $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Pre polovodič typu N platí rovnica 3.3 a po dosadení:

$$W_F = W_i + 8,62 \cdot 10^{-5} \cdot 300 \cdot \ln\left(\frac{10^{16}}{8,159 \cdot 10^9}\right) = W_v + 0,905 \text{ eV} \quad (3.6)$$

4 ZÁVER

Cieľom diplomovej práce bolo preštudovať vlastnosti a fyzikálne javy, vyskytujúce sa v polovodičových materiáloch. Práca je zameraná na generačno rekombinačné procesy v stave termodynamickej nerovnováhy a výsledky štúdie sú popísané v teoretickej časti práce.

V ďalšej časti je popísaný podrobný návod softwarovej aplikácie modelujúcej priebehy energetických hladín v pásových modeloch vlastných a prímesových polovodičov v závislosti na type polovodiča, koncentrácii prímesí a teplote.

Softwarová aplikácia je navrhnutá tak, aby bola nezávislá na platforme počítača a preto je možné aplikáciu prenášať a používať bez nutnosti investícií do ďalších programov, nutných k bežnej prevádzke. Jedinou podmienkou je, aby bola na počítači verzia virtuálneho stroja jazyka Java 1.6 a vyššia.

Hlavný prínos programu tkvie v objasnení základných vlastností materiálov a možnosť vyskúšať a porovnať rôzne polovodiče z hľadiska pásových modelov. Jedná sa o virtuálny nástroj bez nutnosti obmedzovania sa na nákladné meracie prístroje a prenositeľnosť zariadenia.

Aplikácia je navrhnutá k využitiu vo výukovom procese bakalárskeho i magisterského študijného programu a pomáha k pochopeniu princípov a teórie pásových modelov polovodičových materiálov. Aplikáciu možno jednoducho preložiť, preto sa môže uplatniť vo výuke pre zahraničných študentov, poprípade môže byť distribuovaná i na iných univerzitách a tým robiť dobré meno ústavu elektrotechnológie.

Pre mňa osobne má táto práca veľký význam z hľadiska lepšieho pochopenia polovodičových materiálov a získania nových znalostí a skúseností v programovaní v jazyku Java, ktorému by som sa chcel venovať i v budúcnosti.

LITERATÚRA

- [1] MACHÁČEK, M. *Měření doby života nosičů proudu ve strukturách křemíkových solárních článků*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií. Diplomová práce, 2009. 72 s.
- [2] JIRÁK, J., LIEDERMANN, K., SEDLAŘÍKOVÁ, M., AUTRATA, R., ROZSÍVALOVÁ, Z. *Materiály v elektrotechnice* [Elektronické texty ETE004]. Brno 2002.
- [3] BRZOBOHATÝ, J., MUSIL, V., BAJER, A., BOUŠEK, J. *Elektronické součástky* [Elektronické texty]. Brno 2002.
- [4] SEEGER, K. *Semiconductor physics: an introduction* Springer, 2004. 537 s. ISBN 3540219579, 9783540219576
- [5] HEROUT, P. *Učebnice jazyka Java*. České Budějovice: Kopp, 2001. 344 s. ISBN 80-7232-115-3
- [6] BONDREAU, T. *NetBeans: the definitive guide*. O'Reilly Media, Inc., 2002. 646 s. ISBN 0596002807, 9780596002800
- [7] FRIESEN, J. *Beginning Java Standard Edition 6 platform: from novice to professional*. Apress, 2007. 485 s. ISBN 159059830X, 9781590598306
- [8] HOLZNER, S. *Eclipse*. O'Reilly Media, Inc., 2004. 317 s. ISBN 0596006411, 9780596006419
- [9] PECINOVSKÝ, R. *Myslíme objektově v jazyku Java: kompletní učebnice pro začátečníky*. Grada Publishing a.s., 2009. 570 s. ISBN 802472653X, 9788024726533
- [10] SCHILDT, H. *Java 2: the complete reference*. McGraw-Hill/Osborne, 2002. 1154 s. ISBN 0072224207, 9780072224207

ZOZNAM SYMBOLOV, VELIČÍN A SKRATIEK

W_g	(eV) šírka zakázaného pásma
W_i	(eV) poloha Fermiho hladiny
W_F	(eV) Fermiho energia
W_v	(eV) horný okraj valenčného pásu
W_c	(eV) dolný okraj vodivostného pásu
n_i	(m^{-3}) vlastná (intrinzická) koncentrácia nosičov v polovodiči
n	(m^{-3}) koncentrácia elektrónov v polovodiči
p	(m^{-3}) koncentrácia dier v polovodiči
N_c	(m^{-3}) efektívna hustota stavov vo vodivostnom páse
N_v	(m^{-3}) efektívna hustota stavov vo valenčnom páse
N_{c300}	(m^{-3}) efektívna hustota stavov vo vodivostnom páse pre teplotu 300 K
N_{v300}	(m^{-3}) efektívna hustota stavov vo valenčnom páse pre teplotu 300 K
k	($J \cdot K^{-1}$) Boltzmanová konštanta, jej hodnota je $k = (1,380658 \pm 0,000012) \cdot 10^{-23} J \cdot K^{-1}$
N_t	(m^{-3}) koncentrácia rekombinačných centier
C_t	($m^{-3} \cdot s^{-1}$) koeficient rekombinácie
α	(–) koeficient absorpcie
β	(m^{-3}) počet párov elektrón-diera
ϕ_λ	(W) intenzita dopadajúceho žiarenia
h_ν	(J) absorbované kvantum žiarenia $\geq W_g$
τ	(s) doba života minoritných nosičov
JVM	Java Virtual Machine