

## Investigation of The Numerical Solution for One Dimensional Drift-Diffusion Model in Silicon in Steady State

Rozana Thabet Noor <sup>1</sup>, Mumtaz M. Hussien <sup>2\*</sup>

<sup>1,2</sup> Department of Physics, College of Education for Pure Sciences, University of Mosul, Mosul, Iraq

E-mail: <sup>1</sup> [rozanathabet92@gmail.com](mailto:rozanathabet92@gmail.com), <sup>2\*</sup> [momtaz\\_hussien@uomosul.edu.iq](mailto:momtaz_hussien@uomosul.edu.iq)

(Received May 06, 2020; Accepted August 31, 2020; Available online March 01, 2021)

DOI: [10.33899/edusj.2020.127055.1067](https://doi.org/10.33899/edusj.2020.127055.1067), © 2020, College of Education for Pure Science, University of Mosul.  
This is an open access article under the CC BY 4.0 license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

### Abstract

The drift-diffusion model is considered as one of the most important models which is used to describe the characteristics of semiconductor devices and can be applied to wide range of applications started from micro up to nano scale devices after applying the suitable correction on it. The Poisson, continuity, and current equations are considered as the basic equations for semiconductor devices, these equations are partial differential equations, used in the drift diffusion model. These equations described the semiclassical electron and hole transport in semiconductor in the presence of uniformly applied electric field. In this paper a numerical method (finite difference method) has been used to find the solution of these equations depending on Gummel method and Scharfetter-Gummel scheme, the drift diffusion model is applied after many approximation and suitable boundary condition which has been considered for the *pn* diode in both equilibrium and non-equilibrium cases at room temperature, from this simulation model a MATLAB program has been prepared to obtained diode parameters as a function of distance at the junction region, these parameters are (conduction band, carrier concentration, electric field and charge density) two diode model has been tested with different doping concentration the first with  $N_A = N_D$  and the second with  $N_A > N_D$  also the diode characteristic in the forward biased is obtained.

**Keyword:** simulation of *pn* diode, drift diffusion model, Gummel method.

استقصاء الحل العددي لنموذج الانجراف - الانتشار في ثنائي *pn* ذي بعد واحد في السليكون  
حالة الاستقرار

روزانا نوري ثابت<sup>1</sup> و ممتاز محمد صالح حسين<sup>2\*</sup>

<sup>1,2</sup> قسم الفيزياء، كلية التربية للعلوم الصرفة، جامعة الموصل، الموصل، العراق

### المخلص

يعد نموذج انجراف-انتشار من اهم النماذج المستخدمة لوصف خصائص نبائط اشباه الموصلات ويمكن تطبيقه على مدى واسع من التطبيقات تمتد من الابعاد الدقيقة (المايكروية) الى الابعاد النانوية بعد ادخال التصحيحات المناسبة لها. تعتبر معادلة بواسون، ومعادلة الاستمرارية ومعادلة التيار من المعادلات الاساسية في اشباه الموصلات وهي معادلات تفاضلية جزئية تستخدم في نموذج الانجراف - الانتشار. تصف هذه المعادلات الانتقال شبه الكلاسيكي للإلكترونات والفجوات في حال وجود مجال كهربائي خارجي منتظم. تم في هذا البحث تطبيق طريقة عددية (طريقة الفروق المحدودة) لإيجاد حلول لهذه المعادلات بالاعتماد على طريقة كومل

ومخطط شيرفتر - كومل. تم تطبيق نموذج الانجراف - الانتشار، بعد اجراء عدة تقريبات للحل وباستخدام شروط حدودية مناسبة على ثنائي  $pn$  في حالة التوازن وعدم التوازن عند درجة حرارة الغرفة. تم اجراء محاكاة بإعداد برنامج حاسوبي بلغة MATLAB والحصول على معلمات لثنائي السليكون  $pn$  كدالة للمسافة. اذ تم الحصول على كل من حزمة التوصيل، تركيز الحاملات، المجال الكهربائي وكثافة الشحنة كدالة للمسافة في حالة التوازن اي عندما  $N_A = N_D$  وفي حالة عدم التوازن اي عندما  $N_A > N_D$  وتمت المقارنة بين الحالتين.

**الكلمات الدالة:** محاكاة ثنائي  $pn$ ، نموذج انجراف - انتشار، طريقة كومل.

## المقدمة

تعد اشباه الموصلات ركيزة اساسية في التطورات التكنولوجية وثورة المعلومات ، ونتيجة للتطور الكبير والمستمر في نبائط اشباه الموصلات في جميع المجالات.. ظهرت الدراسات النظرية بموازاة الدراسات التجريبية اذ لعبت المحاكاة والطرق العددية والنمذجة الدور المهم في تطوير اداء نبائط اشباه الموصلات وذلك لتقليل الجهد والكلفة في الدراسات العملية [3-1]. وتعتمد المحاكاة في دراسات اشباه الموصلات بالأساس على الاسس النظرية في فيزياء اشباه الموصلات وطبيعة حركية حاملات الشحنة في اشباه الموصلات اضافة الى شكل الحزمة لشبه الموصل ونوع وكثافة الشوائب في شبه الموصل. منذ ثلاثة عقود ومع التطور الكبير في مجالات الحاسبات والطرائق العددية اصبحت المحاكاة العددية لنبائط اشباه الموصلات اداة عملية قوية للباحثين والعلماء [4]. اذ برزت تطورات من ناحية تقليص حجم النبائط الى حدود النانو مما أدخل المحاكاة في مجال ميكانيك الكم حيث ادخلت تعديلات عديدة على النظريات السائدة بإدخال التصحيح الكمي خاصة على معادلة بولتزمان شبه الكلاسيكية والنماذج الاخرى مثل نموذج الهيدروديناميك ونموذج انجراف-انتشار اذ تم ادخال التصحيحات الكمية عليها [5,6].

من المعادلات المهمة التي تصف نبائط اشباه الموصلات هي معادلات الاستمرارية للإلكترونات والفجوات ومعادلة بواسون Poisson Equation ومعادلات التيار التي تحوي معادلات الاتحاد والتوليد للإلكترونات والفجوات [7]. وهذه المعادلات هي معادلات تفاضلية جزئية غير خطية تكون فيها كثافة الالكترونات والفجوات والجهد الكهروستاتيكي مجهولة [3]، تطورت الطرائق العددية لحل هذه المعادلات الثلاثة نتيجة للتقدم في لغات الحاسوب والتطور الكبير بالطرائق والاساليب العددية ومن ابرز هذه الطرائق هي طريقة Gummel ومخطط Scharfetter-Gummel [8-10]. و نتيجة التطور الحاصل في تقليص أبعاد النبائط ظهرت مخاوف من عدم صحة نموذج انجراف-انتشار مع وجود المجالات الكهربائية العالية والتي تتغير مع المكان والزمان داخل هذه النبائط اذ تم تطوير طرق اخرى بإضافة حدود جديدة الى معادلة الانتقال لبولتزمان وظهور طرائق الهيدروديناميكية المصححة [11,12] و طرائق لحل معادلة الانتقال لبولتزمان بطريقة انجراف-انتشار ووضع التصحيحات الكمية عليها لغرض تطبيقها على نبائط اشباه الموصلات النانوية [14].

في هذا البحث قمنا باشتقاق معادلة بواسون ومعادلة الاستمرارية في حالتها التوازن وعدم التوازن ومن ثم تطبيق هذه المعادلات لحل نموذج انجراف-انتشار من خلال اعداد برنامج بلغة (MATLAB) وتم تطبيق النموذج في محاكاة الثنائي  $p-n$  junction لحالتي التوازن وعدم التوازن في البعد الواحد واستخدمنا مخطط شيرفتر - كومل (Scharfetter-Gummel scheme) الذي يعد مثاليا لتقدير اساسيات معادلات اشباه الموصلات لأنها تفترض ان المشتقة الجزئية للجهد هي ثابتة بين النقاط المنفصلة (العقد) ولكن بالنسبة لتركيز الحاملات تم اشتقاق معادلة الاستمرارية التي توضح انها تختلف بشكل كبير بين العقد.

نموذج الانجراف- الانتشار

يبين نموذج الانجراف- الانتشار في اشباه الموصلات على مجموعة من المعادلات تتضمن [13,15-17]: -

1- معادلة بواسون (Poisson equation)

$$\nabla \cdot \epsilon \nabla V = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (1)$$

اذ تمثل  $\epsilon$  النفوذية ،  $V$  الجهد الكهربائي،  $p$  و  $n$  كثافة الفجوات والالكترونات لوحدة الحجم،  $N_D^+$  كثافة التطعيم في النوع  $n$  و  $N_A^-$  كثافة التطعيم في النوع  $p$  .

2- معادلة الاستمرارية (Continuity equations)

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + U_n \quad (2)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + U_p \quad (3)$$

حيث ان  $q$  شحنة الالكترون،  $J_n$  كثافة تيار الالكترونات،  $J_p$  كثافة تيار الفجوات،  $U_n$  محصلة تولد-اتحاد للالكترونات و  $U_p$  محصلة اتحاد - تولد للفجوات (net generation-recombination rates)

3- معادلة التيار (Current equations)

$$J_n = qn\mu_n E + qD_n \nabla n \quad (4)$$

$$J_p = qp\mu_p E - qD_p \nabla p \quad (5)$$

اذ تمثل  $\mu_n$  ،  $\mu_p$  التحريرية للإلكترونات والفجوات على التوالي،  $E$  شدة المجال الكهربائي المسلط،  $D_n$  ،  $D_p$  معامل الانتشار للإلكترونات والفجوات،  $\nabla n$  و  $\nabla p$  انحدار تركيز الالكترونات والفجوات على التوالي.

تكون معادلة التيار في نموذج الانجراف- الانتشار من حدين أساسيين هما:

الحد الاول هو حد الانجراف وهذا الحد ناتج عن حركة جسيمات المشحونة استجابة لتطبيق المجال الكهربائي، عندما يتم تطبيق المجال الكهربائي عبر اشباه الموصلات تبدأ الحاملات بالحركة وتنتج عن ذلك تيار [18] .

$$J_n = qn\mu_n E \quad J_p = qp\mu_p E \quad (6)$$

كثافة تيار الانجراف للإلكترونات والفجوات تعتمد على اربع معاملات هي المجال الكهربائي  $E$  ، تركيز الحاملات  $n$  و  $p$ ، التحريرية  $\mu_n$  و  $\mu_p$ ، ومقدار الشحنة  $q$ .

اما الحد الثاني هو حد الانتشار وهذا الحد ناتج عن عملية توزيع حاملات الشحنة من المناطق ذات التركيز العالي الى مناطق ذات التركيز المنخفض اذا تركت هذه العملية دون عائق، فسيتم في النهاية توزيع موحد لحاملات الشحنة [18].

$$J_n = qD_n \nabla n \quad J_p = -qD_p \nabla p \quad (7)$$

نموذج الانجراف- الانتشار في البعد الواحد

يتم تطبيق نموذج الانتشار- الانجراف في بعد واحد وذلك باستخدام معادلة بواسون (1). اذ ترتبط كثافة الالكترونات  $n$  وكثافة الفجوات  $p$ ، بكل من الجهد الكهروستاتيكي  $V$ ، وجهد شبه-فيرمي (quasi-Fermi potential) للإلكترونات  $\phi_n$  والفجوات  $\phi_p$  كما موضح

بالمعادلات الاتية [3,15]

$$n = n_i \exp\left(\frac{q(V - \phi_n)}{k_B T}\right) \quad (8)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{q(\phi_p - V)}{k_B T}\right) \quad (9)$$

اذ تمثل المعادلات (8) و(9) تركيز الالكترونات والفجوات على التوالي في حالة عدم التوازن (الحالة غير المنحلة) يمكن وضع المعادلات (8) و(9) بدلالة مستوي فرمي  $E_F$  ومستوي فرمي عند شبه الموصل النقي  $E_i$  وكثافة الحاملات في الحالة النقية قبل التشويب  $n_i$

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right) = n_i \exp\left(\frac{V}{V_T}\right) \quad (10)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right) = n_i \exp\left(-\frac{V}{V_T}\right) \quad (11)$$

اذ يمثل  $V_T$  الجهد الحراري ويساوي  $V_T = k_B T / q$  وتكون المعادلة  $pn = n_i^2$  صحيحة في حالتي التوازن وعدم التوازن. استبدال متغيرات كثافة الالكترونات والفجوات (10) و (11) في معادلة بواسون (1) يتم تعويض المعادلات (10 و11) في معادلة بواسون ونحصل على :

$$\frac{d^2 V}{dx^2} = -\frac{qn_i}{\epsilon} \left( e^{-V/V_T} - e^{V/V_T} + \frac{C}{n_i} \right) \quad (12)$$

اذ تمثل  $C = N_D - N_A$  . نستخدم صيغة الفروق المحددة (finite difference) لحل معادلة بواسون اذ يمكن إعطاء قيمة اولية للجهد  $V$  وحساب القيمة الجديدة لـ  $V$  باستخدام الصيغة الاتية:  $V^{new} = V^{old} + \delta$  هنا  $\delta$  تمثل الفرق بين القيمة الجديدة والقيمة السابقة لـ  $V$  ، تصح معادلة (12) على القيمة الجديدة  $V^{new}$  ويمكن تقسيم الجهد الى عقد منفصلة حيث تعطى المشتقة الثانية لـ  $V^{new}$  كما يلي:

$$\frac{d^2 V^{new}}{dx^2} = \frac{V_{j+1}^{new} - 2V_j^{new} + V_{j-1}^{new}}{h^2} \quad (13)$$

هنا  $z$  تمثل وسم و  $h$  هي المسافة بين قيمتين متتاليتين من المسافة  $x$  ، يمكن حل معادلة بواسون بعد تعويض معادلة (13) في المعادلة (12) وترتيب الحدود ونحصل على الصيغة الاتية:

$$\begin{aligned} V_{j+1}^{new} - \left[ 2 + \left( \frac{qn_i h^2}{\epsilon V_T} \right) \left( e^{-V_j^{old}/V_T} + e^{V_j^{old}/V_T} \right) \right] V_j^{new} + V_{j-1}^{new} \\ = -\frac{qn_i h^2}{\epsilon} \left( e^{-V_j^{old}/V_T} - e^{V_j^{old}/V_T} + \frac{C}{n_i} \right) \\ - \frac{qn_i h^2}{\epsilon V_T} \left( e^{-V_j^{old}/V_T} + e^{V_j^{old}/V_T} \right) V_j^{old} \end{aligned} \quad (14)$$

يمكن صياغة معادلة الاستمرارية (2) للالكترونات على افتراض ان كثافة الحاملات لا تتغير مع الزمن، حالة الاستقرار (steady state) في البعد الواحد حيث  $\frac{dn}{dt} = 0$  اي ان

$$\frac{dJ_{n_x}}{dx} = -qU_n \quad (15)$$

يتم استخدم طريقة الفروق المحددة لتمثيل المعادلة (15) لنحصل على الصيغة الاتية

$$\frac{J_{i+\frac{1}{2}}^n - J_{i-\frac{1}{2}}^n}{h} = -qU_n \quad (16)$$

يشير الترميز العلوي للدالة على النوع  $n$  او  $p$  اما الترميز السفلي للدالة فيشير الى العقد. يعتبر مخطط شيرفتر- كومل (Scharfetter- Gummel) طريقة مثالية لحل هذه المعادلات حيث يمكن الحصول على قيمة التيار [3,19,20].

$$J_{i-\frac{1}{2}}^n = \frac{qD_{i-\frac{1}{2}}^n}{h} \left[ n_i B \left( \frac{V_i - V_{i-1}}{V_T} \right) - n_{i-1} B \left( \frac{V_{i-1} - V_i}{V_T} \right) \right] \quad (17)$$

$$J_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{-qD_{i+\frac{1}{2}}^n}{h} \left[ n_{i+1} B \left( \frac{V_{i+1} - V_i}{V_T} \right) + n_i B \left( \frac{V_i - V_{i+1}}{V_T} \right) \right] \quad (18)$$

بتعويض قيم التيارات في معادلة الفروق (16) نحصل على معادلة الاستمرارية للإلكترونات.

$$\frac{qD_{i-\frac{1}{2}}^n}{h} B \left( \frac{V_{i-1} - V_i}{V_T} \right) n_{i-1} - \left[ \frac{qD_{i+\frac{1}{2}}^n}{h} B \left( \frac{V_i - V_{i+1}}{V_T} \right) + \frac{qD_{i-\frac{1}{2}}^n}{h} B \left( \frac{V_i - V_{i-1}}{V_T} \right) \right] n_i + \frac{qD_{i+\frac{1}{2}}^n}{h} B \left( \frac{V_{i+1} - V_i}{V_T} \right) n_{i+1} = U_i \quad (19)$$

وبنفس الطريقة يمكن الحصول على معادلة الاستمرارية للفجوات كما مبين في المعادلة الآتية:

$$\frac{qD_{i-\frac{1}{2}}^p}{h^2} B \left( \frac{V_i - V_{i-1}}{V_T} \right) p_{i-1} - \left[ \frac{qD_{i+\frac{1}{2}}^p}{h^2} B \left( \frac{V_{i+1} - V_i}{V_T} \right) + \frac{qD_{i-\frac{1}{2}}^p}{h^2} B \left( \frac{V_{i-1} - V_i}{V_T} \right) \right] p_i + \frac{qD_{i+\frac{1}{2}}^p}{h^2} B \left( \frac{V_i - V_{i+1}}{V_T} \right) p_{i+1} = U_i \quad (20)$$

اذ تمثل  $B(x)$  دالة برنولي Bernoulli function وتساوي [3]

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1} \quad (21)$$

تطبيق نموذج الانجراف-الانتشار على الثنائي  $pn$

في هذا البحث تم تطبيق نموذج الانجراف-الانتشار على الثنائي  $pn$  في حالة الاستقرار وفي حالتي التوازن وعدم التوازن. في حالة التوازن (equilibrium case) أي في حالة غياب الجهد الخارجي المسلط عند درجة حرارة معينة تكون محصلة تيار المفرق صفرا اي يلغي تيار الانجراف الناتج من المجال الكهربائي للحاجز تيار الانتشار الناتج من انحدار تركيز الحاملات لكلا النوعين من الحاملات أي أن:

$$J = J_e + J_h = 0 \quad (22)$$

لوصف خصائص الثنائي  $pn$  يجب معرفة عرض منطقة الاستنزاف وتوزيع الشحنة للإلكترونات والفجوات والمجال الكهربائي. عندما تكون محصلة تيار الإلكترونات والفجوات صفرا يكون مستوى فيرمي على امتداد الثنائي، أي ان ثبوت مستوى فيرمي لحالة التوازن تؤدي الى توزيع محدود لشحنة الحيز عند منطقة الاستنزاف ان هذا التوزيع للشحنة والجهد الكهروستاتيكي يخضع لعلاقة بواسون، اما في المناطق خارج منطقة الاستنزاف فان كثافة الشحنة تساوي صفر أي ان الشحنات تبقى متعادلة. هبوط الجهد خلال منطقة الاستنزاف في حالة التوازن يعرف ب جهد الحاجز والذي يعطى بالعلاقة الآتية:

$$V_{bi} = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} \quad (23)$$

اذ تمثل  $V_{bi}$  جهد الحاجز او الجهد الداخلي (build-in potential)، وان جهد الحاجز سيأخذ دائما الوضع او القيمة الذي يكفل التعادل بين تيارى التوصيل والانتشار عند عدم وجود فولتية مسلطة، حيث ان زيادة تيار الانتشار بسبب زيادة درجة الحرارة او الشوائب يؤدي الى زيادة عدد الايونات الموجبة والسالبة على طرفي منطقة الاستنزاف وبالتالي الى زيادة جهد الحاجز ويؤدي بالمقابل الى زيادة تيار التوصيل بالاتجاه المعاكس تركيز الحاملات في حالة التوازن معادلة (10) و (11).

$$n = n_i \exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) \quad p = n_i \exp\left(-\frac{qV}{k_B T}\right) \quad (24)$$

بعد التعويض عن قيم  $n$  و  $p$  المعادلة (24) وتبسيط المعادلة مروراً بالمعادلة (14) نحصل على صيغة بسيطة تشبه المعادلة (25) تكون بدلالة الجهد، باستبدال هذه القيم في معادلة بواسون الخطية وحل هذه المعادلة بطريقة تكرارية وحسب الشروط الحدودية للجهد وتركيز الحاملات نحصل على  $(V, n, p)$  نحصل على الحلول المطلوبة في جميع أنحاء النبيطة في حالة التوازن [21-23].  
 أما في حالة عدم التوازن (non-equilibrium case) فإن وجود طبقة الاستنزاف يرافقه نشوء جهد حاجز يعيق انتشار الحاملات الاكثرية ويعمل على اعادة حالة الاتزان. عند تسليط جهد خارجي يؤدي الى تخلخل حالة التوازن اي ان هذا الجهد اما يكون مشابها لجهد الحاجز ويسمى الانحياز العكسي او مخالفا له ويسمى الانحياز الامامي [3,21,24].

في حالة الانحياز الامامي يكون المجال الكهربائي الناتج باتجاه معاكس لمجال جهد الحاجز وبالتالي يقل الجهد في منطقة الاستنزاف  $V_{bi} - V_F$  اي ينخفض ارتفاعه ويزداد نتيجة لذلك تيار الانتشار ويقل عرض منطقة الاستنزاف اما تيار التوصيل لا يتغير لأنه يعتمد على الحاملات الاقلية بالتالي فان التيار خلال منطقة الاستنزاف لا يساوي صفرأ. في حالة الانحياز العكسي المجال الكهربائي الناتج من الانحياز العكسي يكون بنفس اتجاه مجال الجهد الحاجز لذا يزداد الجهد في منطقة الاستنزاف  $V_{bi} + V_R$  وبالتالي يزداد عرض منطقة الاستنزاف [21].

#### الخوارزمية المستخدمة لحل نموذج الانجراف الانتشار في حالة عدم التوازن

عند تسليط جهد خارجي (حالة عدم التوازن فان كثافة التيار للإلكترونات والفجوات لا تساوي صفر. حيث جميع المعلمات تعتمد على التحركية ومعدل اعادة الاتحاد والتوليد، وطريقة حل معادلات في حالة عدم التوازن حيث توفر طريقة (Gummel) اسلوباً تحليلياً في تحويل المعادلات غير الخطية الى معادلات خطية وكما يلي:

اولاً / نحل معادلة بواسون غير الخطية.

ثانياً / يتم استبدال الجهد الذي تم الحصول عليه من حل معادلة بواسون في معادلة الاستمرارية والتي اصبحت الان خطية باجراء التقريبات المناسبة باعتبار  $\delta$  صغيرة جداً، ويتم حلها مباشرة باستخدام الطريقة التكرارية.

ثالثاً / نتائج الجهد التي تم الحصول عليها تعتبر قيم اولية مرة اخرى لاجاد القيم الجديدة في معادلة بواسون ويتم عن طريق تكرار العملية الوصول الى الحل النهائي.

نظراً لان هذه المسألة في بعد واحد يتم استخدام تحليل (LU) lower and upper decomposition method لانه تم تطبيق نموذج الانجراف-الانتشار في بعد واحد.

$$A\phi = f \quad (25)$$

يمكن تشكيل المصفوفة  $A$  كحاصل ضرب المصفوفتين  $LU$ ، حيث  $U$  مصفوفة مثلثية علوية و  $L$  مصفوفة مثلثية سفلية على التوالي كما ان المصفوفة  $A$  هي بالاساس مصفوفة قطرية ثلاثية ويمكن تمثيلها كما يلي [3]:

$$LU = A \quad (26)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ y_2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & y_3 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & y_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & g_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & u_2 & g_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{n-1} & g_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

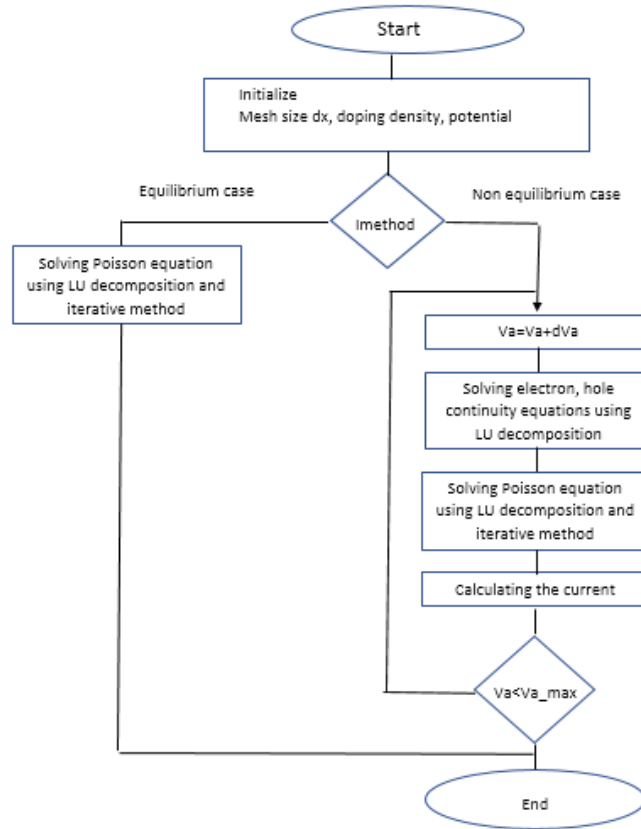
يمكن بأجراء الضرب المباشر لإيجاد قيم عناصر المصفوفتين  $L$  و  $U$  بدلالة عناصر المصفوفة  $A$  حيث يمكن إيجاد عناصر المصفوفة  $L$  والمصفوفة  $U$  من معرفة عناصر المصفوفة  $A$  التي تمثل بالمتجهات  $a_i$ ،  $b_i$ ،  $c_i$  ويتم تحديد المتجهات  $g_i$ ،  $u_i$ ،  $y_i$  التي تمثل المصفوفات  $L$  و  $U$  اذ ان:

$$g_i = c_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$u_1 = b_1, \quad y_2 = \frac{a_2}{u_1}$$

$$u_i = b_i - \frac{a_i}{u_{i-1}}c_i, \quad y_{i+1} = \frac{a_{i+1}}{u_i}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

من خلال ذلك يمكن حل معادلة بواسون بطريقة المصفوفات وبطريقة تكرارية للحصول على حل بأفضل تقارب، وكذلك حل مسائل الاستمرارية للإلكترونات والفجوات [3] وبين الشكل (1) مخطط خوارزمية الحل حيث يتم تحديد خطوة المسافة التي تحدد لتكون اقل من طول ديبياي وهذا الشرط مهم للحصول على التقارب المطلوب في الحل بالطريقة التكرارية، اما كثافة التطعيم في جهتي الثنائي تحدد بتحديد تركيز التشويب  $N_D$  و  $N_A$  حيث يتم تقسيم المسافة المحددة للثنائي الى قسمين الاول يمثل المنطقة  $p$  والقسم الثاني يمثل المنطقة  $n$ .



الشكل (1) مخطط خوارزمية الحل

## النتائج والمناقشة

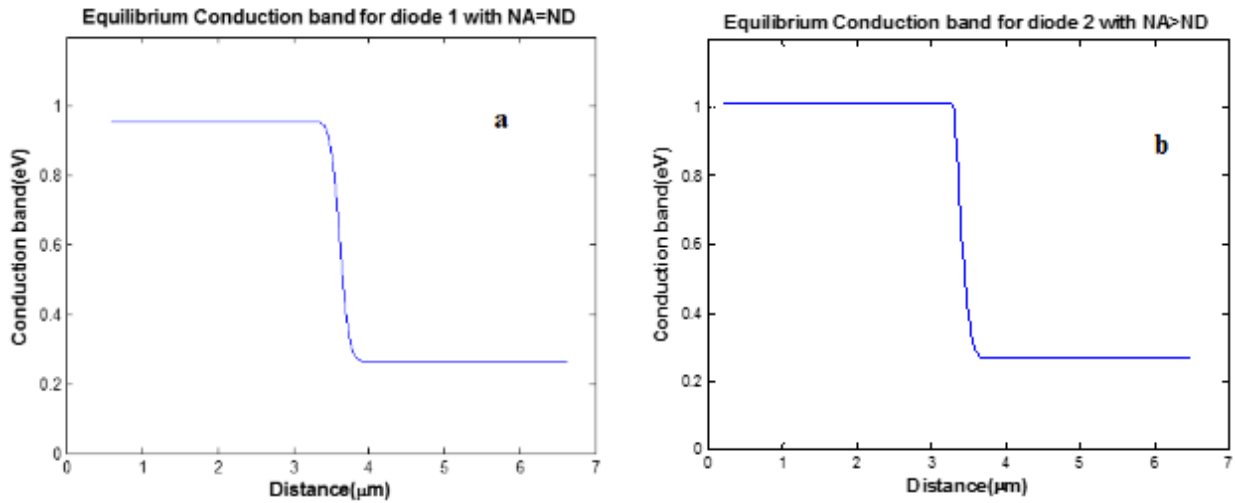
تم الحصول على العديد من المعلمات (مثل حزمة التوصيل، توزيع الشحنة، شدة المجال الكهربائي و كثافة الشحنة كدالة للمسافة) وذلك باستخدام المحاكاة لنموذج الانجراف-الانتشار. اذ تم اقتراح نموذجين من ثنائيات السليكون نوع  $pn$  وكما موضح في الجدول (1). تم دراسة حالتين تعتمد على نسبة التشويب لكل من القابلات والمانحات  $N_D$  و  $N_A$  على التوالي وهذه الحالات هي عندما تكون

نسبة التشويب متساوية أي  $N_A = N_D$  والحالة الثانية عندما يكون تركيز القابلات اكبر من تركيز المانحات  $N_A > N_D$  تم اعداد برنامج بلغة MATLAB وتطبيق نموذج المحاكاة على هاتين الحالتين عند درجة حرارة الغرفة في حالتي التوازن وعدم التوازن.

جدول (1) فيم تراكيز القابلات والمانحات المستخدمة في النموذجين من ثنائيات  $pn$ .

Diode No.	$N_A$ (cm <sup>-3</sup> )	$N_D$ (cm <sup>-3</sup> )
1	$10^{16}$	$10^{16}$
2	$1 \times 10^{17}$	$10^{16}$

في تم حساب حزمة التوصيل كدالة للمسافة للنموذجين قيد الدراسة ابتداءً من المنطقة  $p$  وباتجاه المنطقة  $n$  في حالة عدم وجود فولتية خارجية مسلطة على ثنائي  $pn$ . الشكل (2) ان منطقة الاستنزاف تكون صغيرة جداً، كما ان ارتفاع حزمة التوصيل من المنطقة  $p$  الواقعة الى اليسار والذي يقل باتجاه المنطقة  $n$  الواقعة الى اليمين شكل (2a). وتتأثر حزمة التوصيل حسب نسبة التشويب فعندما تكون  $N_A > N_D$  فهناك ارتفاع في حزمة التوصيل من جهة المنطقة  $p$ ، ويزداد هذا الارتفاع مع زيادة نسبة التشويب شكل (2b).

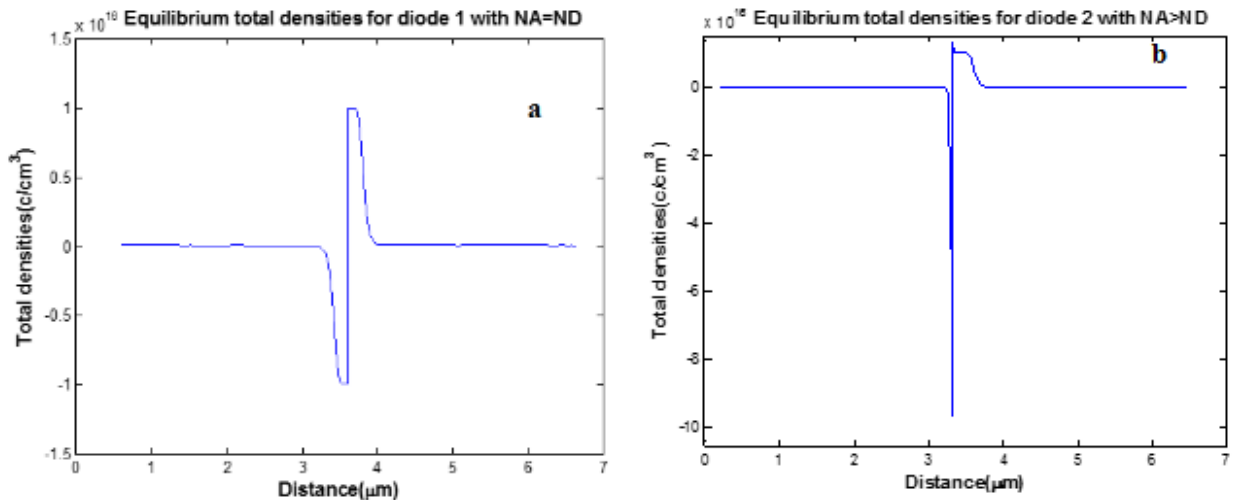


الشكل (2) محاكاة حزمة التوصيل كدالة للمسافة للثنائيات عندما (a)  $N_A = N_D$  ، (b)  $N_A > N_D$ .

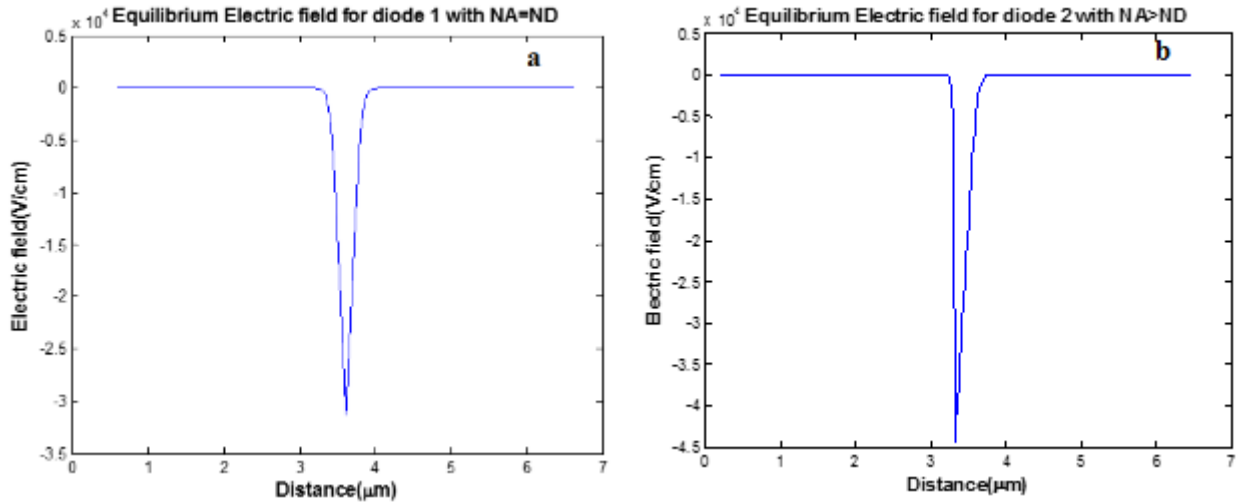
اما في المنطقة  $n$  فان القيمة تبقى كما هي وذلك لان التشويب في هذه المنطقة هو نفسه للنموذجين في هذه الدراسة. في حالة زيادة  $N_D$  فان هذا المستوي في المنطقة  $n$  ينخفض الى الاسفل ليعطي حاجزا اعلى في منطقة المفرق. يبين الشكل (3) توزيع الشحنة حول منطقة الاستنزاف في حالة عدم وجود فولتية خارجية مسلطة على الثنائي. ينشا نتيجة انتقال الالكترونات والفجوات عبر منطقة المفرق من مناطق التركيز العالي الى مناطق التركيز الواطئ أي لكل من الالكترونات في المنطقة  $n$  والتي تنتشر باتجاه المنطقة  $p$  والفجوات تنتقل من المنطقة  $p$  الى المنطقة  $n$  نتيجة لعملية الانتشار. وهذا يؤدي الى نشوء جهد المفرق، اذ تتجمع شحنات عن شحنات سالبة في المنطقة  $p$  وشحنات موجبة في المنطقة  $n$ . يبين الشكل (3) توزيع الشحنات كدالة للمسافة على طرفي المفرق وفي منطقة الاستنزاف والتي يطلق عليها ايضا بمنطقة فضاء الشحنة space charge region، اذ يظهر في منطقة الاستنزاف توزيع للشحنات السالبة في المنطقة  $p$  بالمقابل هنالك توزيع للشحنات الموجبة في المنطقة  $n$  اما خارج منطقة الاستنزاف فان توزيع الشحنات يساوي صفرا الشكل (3a). كما يمكن ملاحظة ان توزيع الشحنة يكون حالة الثنائي الاول عندما تكون  $N_A = N_D$  يكون



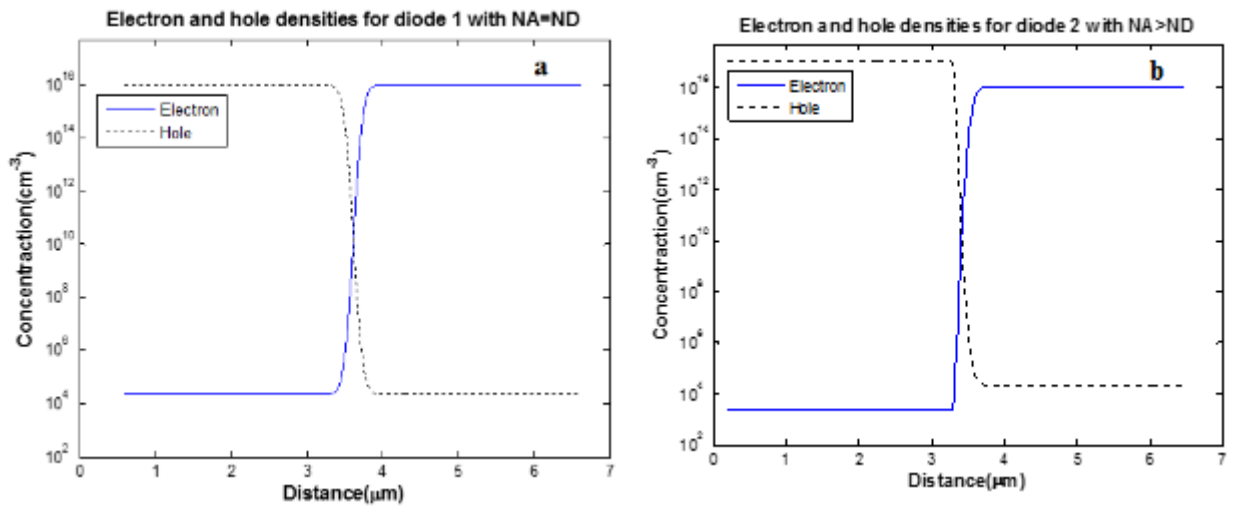
التوزيع متمائل وبإشارة مختلفة عندما  $N_A = N_D$ . أما في الحالة الأخرى  $N_A > N_D$  يزداد قيمة توزيع الشحنة عبر المرفق بنسبة تتناسب مع زيادة التشويب، الشكل (3b) مما يعطي توزيع غير متمائل للشحنات في منطقة المرفق. ينتج عن تراكم الشحنات في منطقة الاستنزاف مجال كهربائي في منطقة الاستنزاف والذي بدوره يولد قوة تعاكس انتشار الشحنات وهذا المجال يتغير مع المسافة خلال الثنائي  $pn$  إذ يتلاشى المجال كلما ابتعدنا عن منطقة الاستنزاف. يبين الشكل (4) شدة المجال الكهربائي في منطقة المرفق كدالة للمسافة للثنائيات المستخدمة في الدراسة، إذ يمكن ملاحظة (بغض النظر عن الإشارة السالبة لقيمة المجال الكهربائي والتي تشير إلى الاتجاه) أن أقصى قيمة للمجال في منطقة المرفق وتدرج الشدة بالارتفاع من الجهة  $p$  وصولاً إلى القيمة القصوى للمجال ثم تدرج بالانخفاض في الجهة  $n$  وصولاً إلى الصفر ويكون هذا السلوك متجانساً في حالة الثنائي الأول حيث  $N_A = N_D$  الشكل (4a) ، وغير متجانس في حالة الثنائي الثاني حيث  $N_A > N_D$ ، يمكن ملاحظة أن قيمة ذروة المجال تزداد مع زيادة نسبة التشويب عند عدم وجود فولتية خارجية، في حين تزداد قيمة ذروة المجال بالاتجاه السالب بشكل حاد مع زيادة نسبة التشويب في منطقة المرفق، الشكل (4b). من المعلمات الأخرى التي يمكن حسابه هي كثافة توزيع الحاملات على طرفي المرفق، إذ يبين الشكل (5) شكل التوزيع لكل من الفجوات واللاكترونات في الثنائي كدالة للمسافة عبر منطقة المرفق ويمكن ملاحظة أن تركيز الفجوات في المنطقة  $p$  تأخذ قيمة الأكثرية في هذه المنطقة وتهبط هذه القيمة إلى القيمة الدنيا تركيز الأقلية في المنطقة  $n$  ويبين الشكل (5) شكل التغير من قيمة الأكثرية إلى قيمة الأقلية بالنسبة للفجوات، أما تركيز اللاكترونات فيبدأ من المنطقة  $n$  بقيمة الأكثرية ويتحول عبر المرفق إلى تركيز الأقلية في منطقة  $p$ ، ويمكن ملاحظة هبوط تركيز الحاملات سواء اللاكترونات أو الفجوات إلى القيمة الدنيا في منطقة المرفق وسبب ذلك عمليات إعادة الاتحاد بين الفجوات واللاكترونات في منطقة الاستنزاف [21]، ويبين الشكل (5a) توزيع المتجانس عبر المرفق في حالة الثنائي الأول، الشكل (5a) في حين يكون التوزيع غير المتجانس في حالة الثنائي الثاني، الشكل (5b). عند تسليط فولتية خارجية في حالة الانحياز الأمامي على الثنائي، قمنا بحساب كثافة التيار كدالة للفولتية الخارجية المسطحة وبين الشكل (6) خصائص الثنائي في حالتي  $N_A = N_D$  و  $N_A > N_D$  حيث نلاحظ السلوك المعروف للثنائي في حالة الانحياز الأمامي وهذه الحسابات تمت عن طريق حل نموذج الانتشار-الانجراف وبدون استخدام معادلة تجريبية حيث تعتمد هذه المعادلة على اختيار منحني مناسب بطريقة المربعات الصغرى غير الخطية لتمثيل سلوك الثنائي.



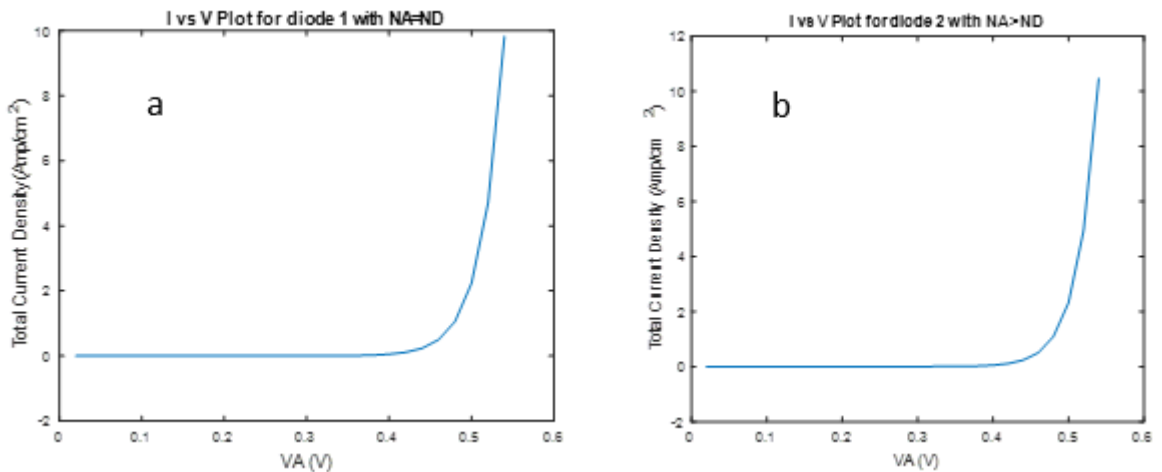
الشكل (3) توزيع الشحنة مع للثنائي  $pn$  عندما (a)  $N_A = N_D$ ، (b)  $N_A > N_D$ .



الشكل (4) توزيع شدة المجال الكهربائي في منطقة الاستنزاف للتنائي  $pn$  كدالة للمسافة عندما  $N_A = N_D$  (a)،  $N_A > N_D$  (b).



الشكل (5) توزيع كثافة الشحنة في منطقة المفرد كدالة للمسافة  $N_A = N_D$  (a)،  $N_A > N_D$  (b).



الشكل (6) كثافة التيار كدالة للفولتية المسلطة في حالة الانحياز الامامي للتثائيات (a) التثائي  $N_A = N_D$  (b) التثائي  $N_A > N_D$ .

## الاستنتاجات

تم الحصول على محاكاة لنماذج من الثنائيات  $pn$  للسليكون في حالة التوازن وعدم التوازن تم التوصل الى معلمات الثنائيات والعلاقة بين كثافة التيار والفولطية المسلطة في حالة الانحياز الامامي وذلك باستخدام نموذج انجراف- انتشار وحسب طريقة (Gummel) و شيرفتر- كومل (Scharfetter- Gummel) وذلك لان توزيع الشحنة بين نقاط الشبكة يكون اسيا لذا فهذه الطريقة هي طريقة مثالية لحل مثل هذا السلوك الاسي اما الجهد المسلط فيمكن تقريبه من خلال السلوك الخطي مع مجال ثابت والنتائج التي تم الحصول عليها تتوافق مع النتائج المعروضة من قبل البحوث السابقة [25-26] والمصادر التي تتناول نبائط اشباه الموصلات [3,18,21] اذ تبين أن نتائج نموذج انجراف- انتشار ذي البعد الواحد يمكن ان تعطي نتائج مقارنة للنتائج العملية والحسابات النظرية في الابعاد الثلاثة.

## شكر و تقدير

يتقدم الباحثان بالشكر والتقدير لعمادة كلية التربية للعلوم الصرفة وقسم الفيزياء على دعم البحث وكذلك جزيل الشكر والعرفان للدكتور على عباس من قسم الفيزياء كلية التربية للعلوم الصرفة جامعة الموصل للملاحظات القيمة التي اغنت البحث.

## المصادر

- 1- Shapo, B., C. Ball, I. Kizilyalli, and Umberto Ravaioli, *Superlattices and Microstructures* 4, no. 1: 39-43 (1988).
- 2- Akura, Mise, Geoffrey Dunn, Mohammed Missous, and J. Sexton, *IEEE Electron Device Letters* 38, no. 4: 438-440 (2017).
- 3- Vasileska, Dragica, Stephen M. Goodnick, and Gerhard Klimeck. *Computational Electronics: semiclassical and quantum device modeling and simulation*. CRC press, 2016.
- 4- Shakouri, Ali. *Annual review of materials research* 41 (2011).
- 5- Odanaka, Shinji. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* 23, no. 6: 837-842 (2004).
- 6- de Falco, Carlo, Joseph W. Jerome, and Riccardo Sacco. *Journal of Computational Physics* 228, no. 5: 1770-1789 (2009).
- 7- Lundstrom, Mark. In *2015 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, pp. 1-3. IEEE, (2015).
- 8- Miller, J. J. H., and Song Wang. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 28, no. 2: 123-140 (1994).
- 9- Koprucki, Thomas, Nella Rotundo, Patricio Farrell, Duy Hai Doan, and Jürgen Fuhrmann. *Optical and Quantum Electronics* 47, no. 6: 1327-1332 (2015).
- 10- Gummel, Hermann K., *IEEE Transactions on electron devices* 11, no. 10: 455-465 (1964).
- 11- Gyi, Myo Thein, and Ansgar Jüngel., *Advances in Differential Equations* 5, no. 4-6: 773-800 (2000).
- 12- Zhang, Bo, and Joseph W. Jerome., *Nonlinear analysis* 26, no. 4: 845-856 (1996).

- 13- Moglestue, C. *Monte Carlo simulation of semiconductor devices*. Springer Science & Business Media, (2013).
- 14- Chen, Ren-Chuen, and Jinn-Liang Liu *Journal of Computational Physics* 204, no. 1: 131-156 (2005).
- 15- Peter Fischer, Z. I. T. I. "Numerical solution of space charge density and field in arbitrarily doped diode structures." (2014).
- 16- Noda, Yoshikatsu. "On iterative schemes for a stationary problem to a quantum drift diffusion model." *Journal of Computational Electronics* 11, no. 4: 385-396 (2012).
- 17- Dalle, C., and P. A. Rolland., *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields* 2, no. 2: 61-73 (1989).
- 18- Neamen, Donald A. *Semiconductor physics and devices: basic principles*. New York, NY: McGraw-Hill, (2012).
- 19- Selberherr, Siegfried. *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Springer Science & Business Media, (2012).
- 20- Hulbert, Robert. "Designing a Simulator for an Electrically-Pumped Organic Laser Diode." (2019).
- 21- Sze, Simon M., and Kwok K. Ng. *Physics of semiconductor devices*. John Wiley & sons, (2006).
- 22- Van Zeghbroeck, Bart. "Principles of electronic devices." *University of Colorado* (2011).
- 23- Pierret, Robert F., and Gerold W. Neudeck. *Advanced semiconductor fundamentals*. Vol. 6. Reading, MA: Addison-Wesley, (1987).
- 24- Farrell, Patricio, Nella Rotundo, Duy Hai Doan, Markus Kantner, Jürgen Fuhrmann, and Thomas Koprucki. "Numerical methods for drift-diffusion models." (2016).
- 25- Khorasani, Sina, *Solid-State Electronics* 122: 37-44, (2016).
- 26- Mazhari, Baquer, and Aditya Mahajan, *IEEE Transactions on Education* 48, no. 1: 60-62, (2005).