

**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI  
“FEDERICO II”**

**FACOLTÀ DI INGEGNERIA**

**CORSO DI LAUREA IN INGEGNERIA ELETTRONICA  
DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA ELETTRONICA E  
DELLE TELECOMUNICAZIONI**

**TESI DI LAUREA  
IN MICROELETTRONICA**

**SIMULAZIONE 2D DELL’INTERAZIONE TRA UN  
IMPULSO LASER E UN CAMPIONE DI SILICIO A LIVELLI  
DI INIEZIONE ARBITRARI**

**Relatore  
Ch.mo Prof. Niccolò Rinaldi**

**Candidato:  
Antonio Adinolfi  
Matr. 15/16383**

**Co-Relatore  
Ing. Andrea Irace**

**ANNO ACCADEMICO 2000/2001**

# Indice

Introduzione.....	5
Sommario della tesi.....	11
<b>Capitolo 1:</b> Il processo di ricombinazione nel volume e in superficie.....	12
1.1    Introduzione.....	12
1.2    Meccanismi di ricombinazione nel volume.....	13
1.2.1    Ricombinazione diretta.....	13
1.2.2    Ricombinazione Auger.....	14
1.2.3    Ricombinazione indiretta.....	15
1.3    La teoria del processo di ricombinazione indiretta.....	16
1.3.1    La cattura ed emissione dei portatori liberi.....	16
1.3.2    Il modello SRH.....	19
1.4    Il processo di ricombinazione superficiale.....	20
1.4.1    Introduzione.....	20
1.4.2    L'interfaccia Si-SiO <sub>2</sub> .....	22
1.4.3    La struttura atomica.....	22
1.4.4    Gli stati all'interfaccia.....	23
1.4.5    Le cariche fisse nell'ossido.....	24
1.4.6    Le cariche mobili.....	25
1.4.7    Cariche intrappolate nell'ossido.....	26
1.4.8    Il diagramma delle bande di energia.....	26
1.4.9    La velocità di ricombinazione superficiale.....	28

<b>Capitolo 2:</b> Soluzione analitica dell'equazione della diffusione.....	29
2.1    Introduzione.....	29
2.2    Analisi del modello di Luke e Cheng.....	30
2.2.1    Caso monodimensionale.....	30
2.2.2    Caso bidimensionale.....	33
2.3    Validità del modello analitico.....	35
Appendice al Capitolo 2.....	36
A.2.1    Modello analitico della mobilità.....	36
<b>Capitolo 3:</b> Soluzione analitica dell'equazione della diffusione.....	38
3.1    Introduzione.....	38
3.2    Metodo delle differenze finite.....	40
3.2.1    Validità della soluzione numerica.....	44
3.2.2    Schema esplicito.....	47
3.2.3    Schema implicito.....	48
3.2.4    Condizioni al contorno.....	50
3.2.5    Analisi della stabilità.....	51
3.3    Equazione della diffusione.....	54
3.3.1    Caso monodimensionale.....	54
3.3.2    Caso bidimensionale.....	58
Appendice al capitolo 3.....	62
A.3.1    Diffusività ambipolare.....	62
A.3.2    Velocità di ricombinazione netta.....	65

<b>Capitolo 4: Confronto a bassi ed alti livelli di iniezione.....</b>	<b>66</b>
4.1    Introduzione.....	66
4.2    Confronto a bassi livelli di iniezione tra il modello di Ling e Ajmera e la rappresentazione alle differenze finite.....	66
4.2.1    Simulazione 1D.....	66
4.2.2    Simulazione 2D.....	92
4.3    Confronto con MEDICI ad alti livelli di iniezione .....	98
4.3.1    Simulazione 1D.....	98
4.4    Conclusioni.....	102
<b>Appendice A: Listati MatLab per l’equazione della diffusione col modello di Ling- Ajmera.....</b>	<b>104</b>
A.1    Listati MatLab per l’equazione 1D.....	104
A.2    Listati MatLab per l’equazione 2D.....	106
<b>Appendice B: Listati MatLab dei modelli utilizzati per risolvere l’equazione della diffusione .....</b>	<b>108</b>
<b>Appendice C: Listati MatLab per risolvere l’equazione della diffusione col metodo delle differenze finite.....</b>	<b>110</b>
C.1    Listati MatLab per l’equazione 1D.....	110
C.2    Listati MatLab per l’equazione 2D.....	112
<b>Indice delle figure.....</b>	<b>115</b>
<b>Indice delle tabelle.....</b>	<b>116</b>
<b>Bibliografia.....</b>	<b>117</b>

# Introduzione

Nel corso degli anni sono state sviluppate molteplici tecniche per misurare i parametri ricombinativi all'interno di un campione di silicio data l'importanza che questi rivestono nel migliorare le prestazioni di dispositivi elettronici quali ad esempio le celle solari, le RAM dinamiche, i sensori ottici [1]. Questo lavoro si inserisce proprio in questo filone, cercando di proporre una soluzione al problema della misura dei suddetti parametri, in regime di iniezione arbitrario. All'interno di questa dissertazione sono stati sviluppati strumenti software, in ambiente MatLab, in grado di simulare il processo di ricombinazione attraverso la soluzione numerica dell'equazione della diffusione con il metodo delle differenze finite sia nel caso monodimensionale che in quello bidimensionale. Una volta sviluppato tale simulatore, attraverso delle procedure di fitting, è possibile estrarre i parametri di interesse. Per considerare l'evolvere del processo, si è fatto uso di modelli aggiornati, per la velocità di ricombinazione e per la mobilità, dipendenti sia dal tempo che dalle coordinate spaziali. Tali modelli sono gli stessi utilizzati dal simulatore MEDICI. Per testare la validità del simulatore elaborato sia nel caso monodimensionale che in quello bidimensionale, si è usato il modello analitico proposto da Luke e Cheng di decadimento dei portatori minoritari iniettati attraverso l'utilizzo di un laser, ed esteso in seguito da Ling ed Ajmera al caso di velocità di ricombinazione superficiale diversa per le due superfici del wafer. Tale modello è senza dubbio valido per bassi livelli di iniezione, ma costituisce solo il punto di partenza della nostra analisi, dato che l'obbiettivo finale è quello dell'estrazione dei parametri ricombinativi a livelli di iniezione qualsiasi, e cioè proprio nelle condizioni in cui dispositivi quali ad esempio le celle solari sono chiamate a lavorare. Per questo motivo per testarne la validità ad alti livelli di iniezione, il simulatore numerico realizzato è stato confrontato anche con un simulatore commerciale di grande successo quale MEDICI, che

tuttavia essendo un simulatore “general purpose” non permette un’estrazione dei parametri semplice e veloce, per cui si sentiva l’esigenza di uno strumento più snello per l’estrapolazione dei parametri suddetti. I risultati raggiunti in questo lavoro, mostrano un buon accordo tra i diversi modelli sia per quanto riguarda i bassi livelli di iniezione che per gli alti livelli di iniezione.

In un materiale semiconduttore i parametri più importanti per la sua caratterizzazione sono, per quanto riguarda i bassi livelli di iniezione, il tempo di vita medio di ricombinazione nel bulk ( $\tau_B$ ) e la velocità di ricombinazione superficiale (in questa tesi sarà chiamata  $S$  o SRV). Più in generale e cioè a livelli di iniezione qualunque non potendo considerare più  $\tau_B$  come una costante, è necessario risolvere l’equazione della diffusione numericamente, ed estrarre i parametri ricombinativi di interesse, quali il tempo di vita medio dei portatori minoritari ( $\tau_{MIN}$ ), dei portatori maggioritari ( $\tau_{MAG}$ ) ed i parametri Auger. Tali parametri dipendono da una moltitudine di fattori quali: la tecnica di produzione del semiconduttore, il suo drogaggio, lo stato della sua superficie e la densità di portatori liberi iniettati. Nel recente passato sono stati fatti molti sforzi per sviluppare tecniche per la misurazione di questi parametri, tra tutte queste tecniche è stata data grande importanza a quelle tecniche che non richiedono nessun contatto con il campione di silicio. Tali tecniche, sviluppate prevalentemente per bassi livelli di iniezione, possono essere divise in due classi principali. La prima classe [2,3,4,5,6] si basa sulla determinazione dell’evoluzione di un eccesso di portatori iniettati nel campione attraverso tecniche laser. Tali metodi sono interessanti perché danno un’idea diretta della velocità di ricombinazione del processo. La seconda classe [7], si basa sulla risposta in frequenza di un semiconduttore quando è eccitato con un impulso laser modulabile. Le così dette tecniche armoniche richiedono un apparato sperimentale molto semplice, ma il risultato finale si ottiene solo dopo una complessa analisi numerica. In entrambi i casi il processo di ricombinazione può essere analizzato attraverso un impulso

laser, con energia minore della banda proibita del semiconduttore o mediante delle radiazioni a microonde, il meccanismo fisico che produce la modulazione del raggio sonda è lo scattering dei portatori liberi, legato alla variazione della costante dielettrica del materiale dovuta a sua volta all'iniezione dei portatori liberi. I principali problemi legati a queste tecniche sono la conoscenza del livello di iniezione e la separazione tra il contributo della superficie e quello del volume nel processo di ricombinazione totale. In tutti i lavori fino ad ora eseguiti, tali tecniche non permettono una valutazione esatta della densità di portatori liberi iniettati nel campione. In genere la conoscenza del livello di iniezione è affidata alla conoscenza delle caratteristiche dell'impulso laser. Tuttavia a causa del fatto che i parametri geometrici che caratterizzano l'impulso laser sono noti con grande incertezza, tali misure possono essere affette da un errore dell'ordine del 70% per quanto riguarda il livello di iniezione. Questo non è molto grave quando si lavora a bassi livelli di iniezione, ma è un grande problema quando si vuole caratterizzare il valore del tempo di vita medio in regime di iniezione arbitrario. Un altro problema che si incontra in questo tipo di misure è la separazione tra il contributo della superficie ed il contributo del volume. La separazione tra questi due contributi si può ottenere con la così detta tecnica della doppia pendenza[3,4,5,8]. Questa tecnica è basata sull'identificazione del cambio di pendenza nella curva di decadimento dei portatori in eccesso. Infatti per un dato campione di silicio, la curva di decadimento esibisce un'evidente differenza tra la pendenza iniziale immediatamente dopo l'impulso laser e la pendenza asintotica verso la fine del processo di decadimento, quando la SRV diventa abbastanza alta. Sfortunatamente l'identificazione corretta di entrambe le pendenze risulta molto difficile per via dell'inevitabile errore di misura e per la non perfetta linearità del sistema di misura. Inoltre questa tecnica non permette di sfruttare i vantaggi delle informazioni contenute nell'intera curva di decadimento. Oggi il più comune

metodo per la determinazione del tempo di vita medio dei portatori in un wafer di silicio cristallino è la tecnica PCD (contactless photoconductance decay)[7] , dove il decadimento dei portatori iniettati mediante un impulso laser è misurato mediante le microonde. Tuttavia visto il fatto che la ricombinazione non avviene solo nel volume del wafer di semiconduttore ma anche sulla sua superficie, come detto sopra, la costante di tempo che si ottiene facendo il fitting del decadimento asintotico e monoesponenziale dell'eccesso di portatori, non è il tempo di vita medio di ricombinazione dei portatori nel volume  $\tau_B$  ma un tempo di vita medio effettivo  $\tau_{eff}$ . La misura di  $\tau_{eff}$  è uguale a  $\tau_B$  solo per wafer di spessore infinito (ovvero per campioni il cui spessore è molto maggiore della lunghezza di diffusione dei portatori) o per wafer la cui superficie è stata perfettamente passivata (in modo da annullare la velocità di ricombinazione superficiale). Considerato il fatto che la lunghezza dei wafer di silicio normalmente in commercio è  $400 \mu m$ , la prima condizione è di solito violata è non rimane altro da fare che tentare di minimizzare la velocità di ricombinazione superficiale (SRV) al fine di misurare la vita media dei portatori nel volume. Tuttavia la condizione di annullamento completo della velocità di ricombinazione superficiale non può mai essere praticamente raggiunta, e per questo motivo, sperimentalmente si ha sempre che  $\tau_{eff} < \tau_B$ . Dal punto di vista pratico, il miglior modo di misurare  $\tau_B$  da una singola misura a microonde PCD è analizzare la parte asintotica della curva di decadimento e ridurre il più possibile SRV. Nel passato sono stati compiuti enormi sforzi al fine di sviluppare tecniche di passivazione della superficie, per realizzare un'effettiva misura del tempo di vita medio dei portatori minoritari nel volume di un wafer di silicio. Le sei condizioni generali richieste per una tecnica di passivazione sono:

1. Una SRV molto bassa e bassi livelli di iniezione
2. Stabilità temporale
3. Omogeneità spaziale

4. Facilità di applicazione
5. Riproducibilità
6. Processi eseguiti a basse temperature in genere sotto i 400°C in quanto per alte temperature si può degradare il tempo di vita medio nel volume.

Si riportano di seguito i più importanti schemi di passivazione usati nell'ultimo decennio per la determinazione del tempo di vita medio nel volume di un wafer di silicio. Lo schema che maggiormente è stato usato per la passivazione di un wafer di silicio che non tiene conto della resistività del wafer stesso, o del tipo di drogaggio e del livello di iniezione è una passivazione chimica della superficie con acido fluoridrico (HF) [6]. Durante una misura PCD il wafer è immerso in una soluzione concentrata o diluita di HF. La grande riduzione di SRV che un trattamento di HF riesce ad ottenere è attribuita alla drastica riduzione della densità di stati superficiale. Nonostante che con questa tecnica si raggiungono buoni risultati, ci sono due grandi problemi, il primo è che la qualità della passivazione è fortemente dipendente dal tempo violando il requisito 2, il secondo è che l'HF è tossico ed i suoi vapori possono corrodere gli apparati di misura violando il requisito 4. Durante gli ultimi anni, per via dei problemi legati all'uso dell'HF, tale tecnica è stata soppiantata in molti laboratori da un metodo di passivazione chimica che usa una soluzione alcolica di iodio, che per prima è stata usata da Horanyi [9]. Nonostante oggi tale tecnica sia una delle più usate, per la passivazione della superficie di un wafer, anche essa presenta diversi problemi, il più importante dei quali è che la qualità della passivazione degrada con il tempo, violando il requisito 2, inoltre la riproducibilità degli esperimenti risulta alquanto scarsa. Una versione modificata della passivazione con iodio è stata proposta da Arndt [10] che ha usato una sorta di vernice di alcool e iodio. Questa tecnica ha il grande vantaggio che il wafer sotto test non deve essere immerso in un liquido durante la misura. Tuttavia la

qualità della passivazione non è molto stabile nel tempo. Schöfthaler [11] ha usato un approccio completamente differente per la passivazione della superficie, usando delle cariche elettriche depositate su entrambe le superfici del wafer. Tale tecnica ha tuttavia il limite di non essere persistente nel tempo, e se si considera che per eseguire una misura PCD su un wafer di silicio con un'area estesa possono essere necessarie anche 10 ore e più, si capisce che questo non è un problema da poco. Inoltre la carica non era distribuita uniformemente per cui tale tecnica violava la regola 3, ed infine per eseguire le misure era necessaria una elevata temperatura, violando la regola 6. Un altro metodo per la passivazione della superficie è stato proposto da Katayama [12], che ha osservato un forte incremento del tempo di vita medio effettivo dei portatori in un wafer di silicio coperto con uno strato di ossido nativo durante un'illuminazione ultravioletta (UV). L'effetto di passivazione è dovuto al riempimento degli stati energetici all'interno dell'ossido nativo. Tale passivazione è altamente instabile e soggetta a rapida degradazione dopo pochi minuti dall'esposizione. Questo appena proposto non è che un piccolo sottoinsieme di un insieme molto vasto e variegato di esperimenti e teorie sviluppate per risolvere lo stesso problema, e cioè la determinazione dei parametri ricombinativi a bassi livelli di iniezione. Per quanto riguarda i livelli di iniezione arbitrari, è necessario operare in maniera diversa, in quanto come detto in precedenza non ha più senso parlare di  $\tau_B$  come di una costante da misurare, ma è necessario estrarre tutti i parametri da cui dipende il processo di ricombinazione, e cioè  $\tau_{MIN}$ ,  $\tau_{MAG}$ ,  $S$  ed i parametri Auger. La vastità e trasversalità degli studi effettuati sull'argomento testimonia l'attenzione che la comunità scientifica dà alla soluzione di questo problema che è la determinazione ed il controllo dei parametri che caratterizzano il processo di ricombinazione in regime di iniezione arbitrario.

## Sommario della tesi

Il **capitolo 1** tratta il processo di ricombinazione nella sua generalità, proponendo i modelli che storicamente sono tra i più usati e consolidati. Il **capitolo 2** considera da un punto di vista teorico l'interazione di un wafer di silicio con un impulso laser, mostrando il già citato modello di Luke e Cheng sia nel caso monodimensionale che in quello bidimensionale ed inoltre illustra i limiti di validità di detto modello. Nel **capitolo 3** viene sviluppata una possibile metodologia per ricavare la soluzione numerica dell'equazione della diffusione attraverso il metodo delle differenze finite sia nel caso 1D che in quello 2D, ottenendo una soluzione veloce e facilmente implementabile. Il **capitolo 4** riporta una serie di simulazioni eseguite sia a bassi livelli di iniezione, per testare la validità del simulatore realizzato rispetto ad un modello sicuro ed affidabile come quello analitico, sia ad alti livelli di iniezione, dove questa volta il simulatore d'elezione è MEDICI. Per concludere sono riportate tre **appendici**: la prima in cui si risolve in ambiente MatLab l'equazione del modello analitico di Luke e Cheng; la seconda in cui sono riportati i listati dei modelli utilizzati per valutare la diffusione, la mobilità e la velocità di ricombinazione netta; la terza in cui si risolve sempre in ambiente MatLab, l'equazione della diffusione con il metodo delle differenze finite.

# Capitolo 1

## Il processo di ricombinazione nel volume e in superficie.

### 1.1 Introduzione

Le proprietà di un materiale semiconduttore sono determinate e dalla struttura cristallina (*proprietà intrinseche*) e dalle imperfezioni e impurità del suo reticolo cristallino (*proprietà estrinseche*). Le proprietà *intrinseche* non possono essere controllate; quelle *estrinseche* invece si possono manipolare attraverso l'introduzione di impurità e difetti che interagiscono con i portatori di carica liberi (elettroni e lacune) caratterizzando, così, le prestazioni dei dispositivi elettronici. Le impurità e le imperfezioni presenti nel reticolo cristallino, creano dei livelli nella banda proibita del semiconduttore, questi livelli possono situarsi a ridosso della banda di conduzione o di valenza oppure a distanze intermedie, più vicino al centro della banda proibita; nel primo caso parliamo di livelli superficiali e nel secondo caso di livelli profondi. I livelli superficiali, a temperatura ambiente, sono completamente ionizzati, cioè o totalmente liberi o totalmente occupati, per cui non sono capaci di interagire con i portatori liberi; vengono di solito introdotti intenzionalmente, drogando il semiconduttore con atomi donatori ed accettori, allo scopo di controllare la conducibilità ed il tipo di portatori di maggioranza. I livelli profondi d'altra parte sono solo parzialmente ionizzati per cui essi danno scarso contributo alla conducibilità totale ma sono capaci di catturare i portatori liberi dando vita ad un processo che di volta in volta può essere di *ricombinazione*, di *generazione* o di *intrappolamento*. Un'alta concentrazione di livelli profondi ha come conseguenza un aumento della velocità di ricombinazione-generazione nel semiconduttore, influenzando significativamente le sue prestazioni ed il suo utilizzo per una determinata

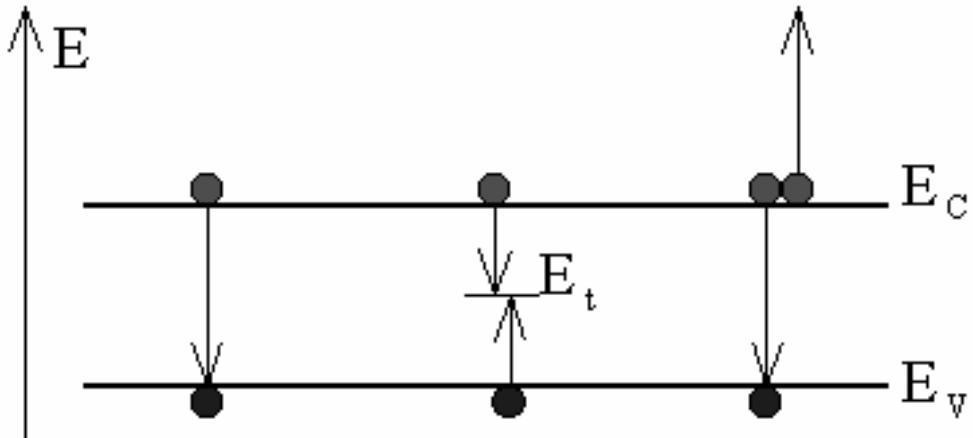


Fig 1.1

applicazione. Una bassa velocità incrementa l'efficienza di celle solari e sensori, riduce il refresh time nelle RAM e diminuisce il rumore e le correnti di dispersione nei diodi; nei dispositivi di potenza, invece un'elevata velocità è richiesta per migliorarne il comportamento di switching.

## 1.2 Meccanismi di ricombinazione nel volume

L'interazione tra i livelli profondi e i portatori di carica liberi nel volume può essere studiata attraverso modelli termodinamici e in particolare attraverso il modello di Shockley-Read-Hall (SRH). Quando un materiale semiconduttore assorbe energia, ad esempio per irraggiamento, e se l'energia fornita è tale da provocare la generazione di coppie elettroni-lacune, il semiconduttore stesso si trova in una configurazione energetica instabile e quindi cercherà di riportarsi ad un livello di energia minima, attraverso un processo inverso alla generazione, chiamato ricombinazione, che libererà l'energia in eccesso sotto diverse forme: per trasferimento ad un fotone (*ricombinazione diretta*), per trasferimento, sotto forma di energia cinetica, ad un altro portatore (*ricombinazione Auger*) oppure per trasferimento al reticolo sotto forma di fonone (*ricombinazione indiretta*). Vedi Fig 1.1.

### 1.2.1 Ricombinazione diretta

Il processo di ricombinazione diretta avviene prevalentemente in semiconduttori a banda proibita diretta, quali l'arseniuro di gallio (GaAs). In

questo processo un elettrone può ricombinarsi con una lacuna conservando il suo momento. Questo processo gioca un ruolo minore nei semiconduttori a banda proibita indiretta, quali il silicio, per cui non sarà approfondito in questa trattazione. Tuttavia, evidenze sperimentali mostrano che tale processo può essere descritto con la seguente relazione:

$$(1.1) \quad U_{dir} = C_{dir} (np - n_i^2)$$

dove  $U_{dir}$  è la velocità di ricombinazione diretta,  $n$  e  $p$  sono rispettivamente le concentrazioni libere di elettroni e lacune ed  $n_i$  è la concentrazione intrinseca del semiconduttore. La costante  $C_{dir}$  può essere determinata in base a considerazioni di meccanica quantistica e risulta direttamente proporzionale alla velocità di ricombinazione ottica all'equilibrio: ( $\sim G_r = 10^6 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  per il silicio a 300 °K)

$$(1.2) \quad G_r = \frac{8\pi n^2}{c^2} \int_0^{\infty} \frac{Kv^2}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1} dv$$

dove  $n$  è l'indice di rifrazione,  $h$  è la costante di Planck,  $k$  è la costante di Boltzmann,  $T$  è la temperatura assoluta e  $K$  è una costante che descrive l'interazione tra un fotone che genera una coppia elettrone-lacuna ed un solido. Senza entrare in ulteriori dettagli, ricordiamo che il tempo di vita medio per la ricombinazione diretta è inversamente proporzionale al droggaggio del campione, così come indicato dalle seguenti equazioni:

$$(1.3) \quad \begin{aligned} \tau_d &= \frac{n_i^2}{G_r N_d} , & \text{type-n} \\ \tau_d &= \frac{n_i^2}{G_r N_a} , & \text{type-p} \end{aligned}$$

dove  $N_d$  ed  $N_a$  sono le concentrazioni di donatori ed accettori.

### 1.2.2 Ricombinazione Auger

Il processo di ricombinazione Auger coinvolge o due elettroni e una lacuna oppure due lacune ed un elettrone. In questo processo l'energia ed il momento

perso, ad esempio, dall'elettrone che si ricombina con la lacuna viene trasferito al secondo elettrone.

Se definiamo con  $U_a$  la velocità totale di ricombinazione Auger abbiamo:

$$(1.4) \quad U_a = C_n(n^2 p - n_i^2 n_0) + C_p(p^2 n - n_i^2 p_0)$$

dove  $C_n$  e  $C_p$  sono i coefficienti di Auger rispettivamente per i processi elettrone-elettrone-lacuna e lacuna-lacuna-elettrone ( $\sim 1-3 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$  nel silicio). Senza entrare in ulteriori dettagli, riferendoci ai ref. [23-24] per una completa descrizione di questo processo, ricordiamo che il tempo di vita medio di Auger è dato da:

$$(1.5) \quad \tau_a = \frac{1}{C_n(n_0^2 + 2n_i^2) + C_p(p_0^2 + 2n_i^2)}$$

che può essere semplificato:

$$(1.6) \quad \begin{aligned} \text{n-type} \rightarrow \tau_a &= \frac{1}{C_n N_d^2} \\ \text{p-type} \rightarrow \tau_a &= \frac{1}{C_p N_a^2} \end{aligned}$$

Tale espressione è congruente con il fatto che il processo di ricombinazione Auger è quello dominante nei semiconduttori con drogaggio elevato. Il processo di ricombinazione di Auger nel caso del silicio pone un limite superiore al valore del tempo di vita medio dei portatori. Questo limite è chiamato “limite Auger” per la ricombinazione nel silicio.

### 1.2.3 Ricombinazione indiretta

In semiconduttori a banda proibita indiretta quali il silicio questo è il più importante processo di ricombinazione. Quando gli elettroni presenti in banda di conduzione nel minimo di energia e le lacune presenti in banda di valenza nel massimo di energia hanno un momento diverso è poco probabile che essi si ricombinino con una transizione diretta; tuttavia i livelli profondi in banda proibita possono catturare i portatori liberi ed assorbire la differenza di momento, permettendo così la transizione (*ricombinazione*). Qualche volta può anche succedere che la velocità di cattura delle lacune sia trascurabile

rispetto a quella degli elettroni; in questo caso poichè non ci sono abbastanza lacune per la ricombinazione, gli elettroni sono reimmessi in banda di conduzione (*intrappolamento*). Stessa cosa può accadere per le lacune. Shockley, Read ed Hall, nel 1952, descrissero il processo di cattura ed emissione dei portatori liberi da parte dei livelli profondi presenti in banda proibita; questo modello assume che la concentrazione di lacune ed elettroni in eccesso rimanga uguale durante l'intero processo di ricombinazione ( $\Delta n(t) = \Delta p(t)$ ) e che la ricombinazione sia delle lacune che degli elettroni avvenga con la stessa velocità. Nel prossimo paragrafo approfondiremo la teoria alla base del processo di ricombinazione indiretta data la notevole importanza che questo processo assume nel silicio semiconduttore che maggiormente viene usato nella moderna industria elettronica.

## 1.3 La teoria del processo di ricombinazione indiretta

### 1.3.1 La cattura ed emissione dei portatori liberi

Considereremo il fenomeno della cattura ed emissione da parte di un livello profondo discreto e monovalente con energia  $E_t$  e concentrazione  $N_t$ . La probabilità che questo livello all'equilibrio sia occupato è data dalla funzione di distribuzione di Fermi-Dirac:

$$(1.7) \quad f_e(E_t) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_t - E_f}{kT}}}$$

dove  $E_f$  è il livello di Fermi. La (1.4) può essere riscritta come:

$$(1.8) \quad f_e(E_t) = \frac{n_0}{n_0 + n_t} = \frac{P_0}{P_0 + p_t}$$

dove  $n_t$  e  $p_t$  sono le concentrazioni di elettroni e lacune quando il livello di Fermi e quello profondo coincidono; e sono date da:

$$(1.9) \quad n_t = n_i e^{\frac{E_i - E_t}{kT}}$$

$$p_t = n_i e^{\frac{E_t - E_i}{kT}}$$

dove  $E_i$  è il livello di Fermi intrinseco.

In condizioni di non equilibrio la funzione di distribuzione di Fermi-Dirac si modifica; infatti portando in conto la legge della neutralità della carica elettrica,abbiamo:

$$(1.10) \quad f_e(E_t) = \frac{n_0}{n_0 + n_t} + \frac{\Delta p - \Delta n}{N_t} = \frac{p_0}{p_0 + p_t} + \frac{\Delta p - \Delta n}{N_t}$$

Il processo di cattura di un elettrone (lacuna) è basato su due importanti condizioni: primo devono essere disponibili dei livelli profondi per la cattura, e secondo deve essere possibile trasferire un elettrone (lacuna) a questi livelli. L'assenza di una di queste due condizioni rende impossibile il processo, per cui la velocità di cattura è data dalla seguente espressione, per gli elettroni:

$$(1.11) \quad r_n = N_t f_h(E_t) \int_{E_c}^{\infty} c_n(E) f_e(E) g(E) dE$$

dove  $c_n$  è la probabilità che un elettrone dalla banda di conduzione con energia  $E$  sia catturato da un livello profondo vuoto in un tempo unitario,  $g(E)$  è la densità degli stati in banda di conduzione e  $f_h(E_t)$  è la probabilità che il livello con energia uguale ad  $E_t$  sia occupato da una lacuna.

Con l'introduzione del coefficiente di cattura media:

$$(1.12) \quad \langle c_n \rangle = \frac{\int_{E_c}^{\infty} c_n(E) f_e(E) g(E) dE}{\int_{E_c}^{\infty} f_e(E) g(E) d(E)}$$

possiamo riscrivere la velocità di cattura come:

$$(1.13) \quad r_n = n \langle c_n \rangle N_t f_h(E_t)$$

dove il coefficiente di cattura può anche essere espresso in termini della sezione di cattura  $\sigma_n$  e della velocità termica  $v_n$  di un elettrone:

$$(1.14) \quad \langle c_n \rangle = \sigma_n v_n$$

Allora possiamo introdurre il tempo di vita medio degli elettroni  $\tau_{n0}$ :

$$(1.15) \quad \tau_{n0} = \frac{1}{N_t \sigma_n v_n}$$

e quindi riscrivere la velocità di cattura degli elettroni come:

$$(1.16) \quad r_n = \frac{n f_h(E_t)}{\tau_{n0}}$$

Per le lacune vale lo stesso, e otteniamo:

$$(1.17) \quad r_p = \frac{p f_e(E_t)}{\tau_{p0}}$$

$$(1.18) \quad \tau_{p0} = \frac{1}{N_t \sigma_p v_p}$$

La velocità di emissione dipende dal numero di livelli profondi occupati e dalla probabilità di emissione:

$$(1.19) \quad \begin{aligned} g_n &= N_t f_e(E_t) e_n \\ g_p &= N_t f_h(E_t) e_p \end{aligned}$$

dove  $e_n$  e  $e_p$  sono la probabilità di emissione rispettivamente per gli elettroni e per le lacune. In accordo al principio dell'equilibrio dettagliato, all'equilibrio, il processo di cattura ed emissione degli elettroni e delle lacune si deve bilanciare non solo globalmente ma anche localmente, per cui  $r_{n_{eq}} = g_{n_{eq}}$  e  $r_{p_{eq}} = g_{p_{eq}}$  e quindi :

$$(1.20) \quad g_p = \frac{p_t f_h(E_t)}{\tau_{p0}}$$

$$(1.21) \quad g_n = \frac{n_t f_h(E_t)}{\tau_{n0}}$$

Quando non stiamo più in condizioni di equilibrio, i processi di cattura ed emissione non sono più bilanciati. La differenza  $U_n = r_n - g_n$  e  $U_p = r_p - g_p$  può essere definita come la velocità di ricombinazione rispettivamente per gli elettroni e per le lacune. Una differenza negativa è definita generazione.

Il processo di decadimento dell'eccesso di portatori può essere descritto da:

$$(1.22) \quad \begin{aligned} \frac{\partial \Delta n}{\partial t} &= -U_n + g \\ \frac{\partial \Delta p}{\partial t} &= -U_p + g \end{aligned}$$

dove  $g$  è la funzione di generazione. Le (1.22) possono essere usate per determinare le soluzioni a regime, il transitorio e il tempo di vita per gli elettroni e lacune per una qualsiasi funzione di generazione e per una qualsiasi concentrazione di livelli profondi.

### 1.3.2 Il modello SRH

A questo punto possiamo introdurre il modello SRH che per basse concentrazioni di livelli profondi si verifica quando i portatori minoritari sono catturati da quei livelli che in precedenza erano occupati dai portatori maggioritari. In questo caso l'eccesso di elettroni e lacune diminuisce con la stessa velocità ed il numero di elettroni e lacune in eccesso rimarrà invariato durante l'intero processo ( $\Delta n(t) = \Delta p(t)$ ). Così è sufficiente scrivere una sola equazione per uno solo dei tipi di portatori liberi:

$$(1.23) \quad U_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_{p0}(n + n_t) + \tau_{n0}(p + p_t)}$$

che in termini di concentrazione in eccesso diventa:

$$(1.24) \quad U_{SRH} = \frac{(n_0 + p_0)\Delta n + \Delta n^2}{\tau_{n0}(p_0 + p_t) + \tau_{p0}(n_0 + n_t) + (\tau_{n0} + \tau_{p0})\Delta n}$$

e il tempo di vita medio può essere determinato da:

$$(1.25) \quad \tau_{SRH} = \frac{\Delta n}{U_{SRH}}$$

La velocità di ricombinazione ed il tempo di vita medio possono essere determinate risolvendo numericamente queste equazioni. La soluzione può essere analiticamente approssimata per alti e bassi livelli di iniezione ricavando, rispettivamente:

$$(1.26) \quad U_{SRH} = \begin{cases} \frac{\Delta n}{\tau_{high}}, & \tau_{high} = \tau_{n0} + \tau_{p0} \\ \frac{\Delta n}{\tau_{low}}, & \tau_{low} = \frac{\tau_{p0}(n_0 + n_t) + \tau_{n0}(p_0 + p_t)}{n_0 + p_0}, \quad \Delta n = n_0 + p_0 \end{cases}, \quad \Delta n \neq n_0 + p_0$$

Il tempo di vita medio per bassi livelli di iniezione e per un semiconduttore estrinseco può essere approssimato da:

$$(1.27) \quad \tau_{low} = \begin{cases} \tau_{p0} & \text{n-type} \\ \tau_{n0} & \text{p-type} \end{cases}$$

Il valore di  $\tau_{SRH}$  per regioni intermedie dipende da  $\Delta n$  ed è dato da:

$$(1.28) \quad \tau_{SRH} = \frac{\tau_{low}(n_0 + p_0) + \tau_{high}\Delta n}{n_0 + p_0 + \Delta n}$$

Osservando l'equazione (1.26) si evince che il tempo di vita medio ad alti livelli non dipende dal drogaggio del semiconduttore ma solo dai parametri legati ai livelli energetici profondi. Il valore effettivo del tempo di vita per una qualsivoglia concentrazione in eccesso  $\Delta n$  varia tra  $\tau_{high}$  e  $\tau_{low}$ . Ne viene fuori che il tempo di vita medio aumenta solitamente coll'aumentare di  $\Delta n$  poiché  $\tau_{low} < \tau_{high}$ . Ciononostante il processo si inverte per regioni a basso drogaggio.

Teniamo comunque in mente che questa teoria (SRH) cessa di valere quando la concentrazione dei livelli energetici profondi eccede la concentrazione dei portatori maggioritari.

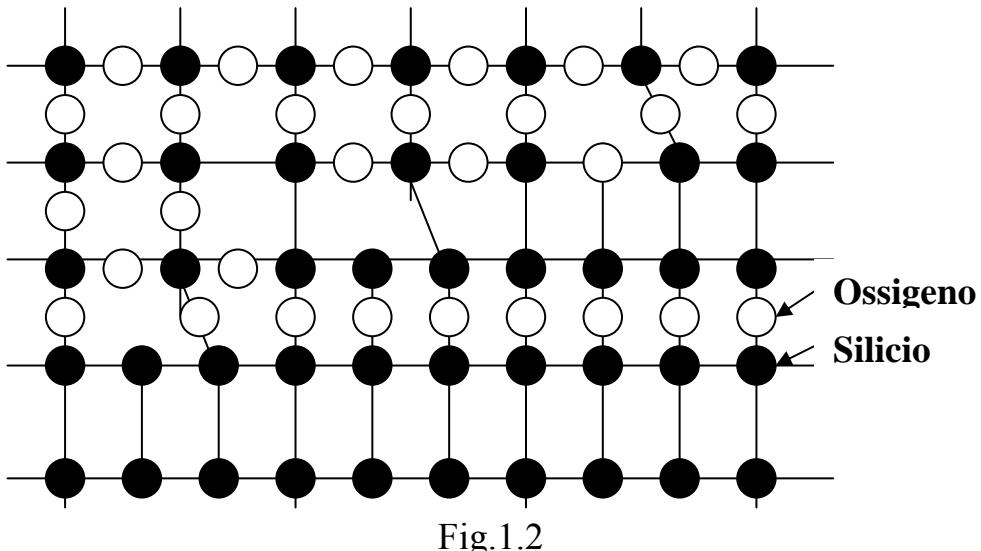
## 1.4 Il processo di ricombinazione superficiale

### 1.4.1 Introduzione

Il termine superficie è usato ogni volta che si deve identificare una regione tra due mezzi differenti. La superficie che separa due mezzi solidi, è di solito chiamata interfaccia, come ad esempio Si-SiO<sub>2</sub> oppure un'interfaccia metallo-semiconduttore; la superficie di separazione tra un semiconduttore ed il vuoto, un gas o un liquido, in genere è identificata come interfaccia libera. Nel corso di questa trattazione non considereremo questa differenza di definizione, specificando a che cosa facciamo riferimento quando occorre. Il

fatto che la struttura periodica del cristallo sia interrotta in superficie da vita a delle bande di energia, dette stati superficiali. L'esistenza di questi stati è stata proposta per primo da Tamm nel 1932, in linea con il suo approccio meccanico quantistico, che si basò sul modello monodimensionale di Kronig e Penney. Il suo lavoro fu in seguito esteso al caso di due e tre dimensioni, inoltre i risultati teorici sono stati avvalorati dai risultati sperimentali, in modo particolare per l'interfaccia Si-SiO<sub>2</sub>, che è stata oggetto di lunghi studi data la sua importanza nel funzionamento di dispositivi quali il Mosfet. È stato dimostrato che gli stati superficiali sono distribuiti sopra la banda proibita e sono classificati come stati accettori o donatori. Compatibilmente con il loro stato di occupazione, questi stati possono essere disponibili per il processo di ricombinazione, o aumentare o diminuire il potenziale lungo la superficie insieme alla carica indotta negli strati di ossido. Le cariche nello strato di ossido consistono delle cariche fisse, delle cariche mobili dovute alle contaminazioni ioniche e dalle cariche intrappolate all'interno dell'ossido.

Al fine di semplificare il modello i diversi tipi di cariche nell'ossido sono considerate come un'unica carica superficiale costante. Il processo di ricombinazione superficiale consiste di due sub-processi: lo stesso processo di ricombinazione, ed il trasporto di portatori liberi attraverso la regione di carica spaziale verso la superficie. Il processo si fermerà se viene a mancare uno dei due sub-processi. Irradiando il campione con dei fotoni ad energia maggiore della banda proibita, sposteremo lo pseudo livello di Fermi di elettroni e lacune cosicché cambierà il numero di stati disponibili per la ricombinazione ed in questo modo cambierà anche il potenziale elettrostatico in superficie ed il trasporto di portatori liberi verso la superficie. Nel prossimo sottoparagrafo descriveremo le proprietà dell'interfaccia Si-SiO<sub>2</sub> così come descriveremo il meccanismo ed il modo per determinare la velocità di ricombinazione superficiale totale.



#### 1.4.2 L'interfaccia silicio – biossido di silicio

Il motivo per cui il silicio assume una così grande importanza nelle tecnologie IC può essere attribuito in massima parte alle notevoli proprietà del sistema Si-SiO<sub>2</sub>. Le proprietà di semiconduttore ideale del silicio possono facilmente essere combinate con quelle di dielettrico ed isolante ideale dell'ossido accresciuto termicamente sul substrato di silicio. Le proprietà dell'interfaccia Si-SiO<sub>2</sub> sono fortemente condizionate dalla presenza degli stati superficiali, dalle cariche fisse, dalle cariche mobili e dalle cariche intrappolate presenti nell'ossido. Questi influenzano il processo di ricombinazione, ed il trasporto di portatori liberi verso la superficie del silicio. Al fine di descrivere il processo di ricombinazione totale, è stata data grande enfasi allo studio delle proprietà del sistema Si-SiO<sub>2</sub>.

#### 1.4.3 La struttura atomica

La figura 1.2 mostra una rappresentazione bidimensionale della struttura atomica dell'interfaccia Si-SiO<sub>2</sub>, nella quale si può chiaramente osservare la regione di transizione tra le due superfici. Il rapporto tra la lunghezza del legame Si-O-Si ed Si-Si è circa uguale a  $\sqrt{2}$ . Questo fa sì che non ci sia accoppiamento perfetto tra la struttura cristallina del silicio e l'ossido di silicio, che da vita ad una zona di transizione. Questo è inoltre permesso dalla flessibilità dell'angolo del legame Si-O-Si. Tuttavia come si può vedere dalla

figura, alcuni legami di silicio rimangono insoddisfatti. La densità di questi legami insoddisfatti è governata da processi quali la pulizia e la passivazione della superficie, dallo spessore dell'ossido e dai processi di annealing a cui è sottoposta la struttura. Durante i processi di passivazione e di annealing i legami insoddisfatti reagiscono con atomi diversi come l'idrogeno, in modo da ridurre l'attività chimica della superficie. E' stato mostrato che una pulizia della superficie con HF, limita il processo di ossidazione e la diffusione degli atomi di ossigeno nel substrato. Nella regione di transizione possiamo considerare una struttura atomica descritta come  $\text{SiO}_x$  con  $x < 2$ . In genere lo spessore di tale struttura è comunemente considerato di  $25 \text{ \AA}^\circ$ .

#### **1.4.4 Gli stati all' interfaccia**

Come conseguenza della struttura atomica descritta nella sezione precedente, gli elettroni nei legami insoddisfatti di silicio, sono sottoposti ad un potenziale diverso che nella struttura cristallina periodica. Il legame insoddisfatto appartiene ad un atomo di silicio il quale è legato ad altri tre atomi di silicio, il così detto "threefold silicon atom", che crea stati di interfaccia o stati superficiali veloci nella banda proibita. E' stato mostrato che solo i legami insoddisfatti creano stati nella banda proibita, mentre la distorsione angolare dei legami induce semplicemente una coda nella banda di valenza e di conduzione vicino ai bordi delle stesse. Visto che gli stati di interfaccia sono direttamente contigui al substrato di silicio, ci può essere un trasferimento di portatori tra gli stati di interfaccia e il substrato stesso. Quando i legami insoddisfatti vengono saturati mediante passivazione della superficie ad esempio con HF, le bande di energia risultanti in superficie sono traslate nelle bande di conduzione o di valenza, in modo da ridurre la concentrazione di stati superficiali. La riduzione della concentrazione degli stati superficiali mediante la passivazione con HF è confermata con la tecnica dello "Scanning Tunneling Microscopy (STM)". In superficie stati donatori o accettori sono statisticamente distribuiti sopra la banda proibita. La

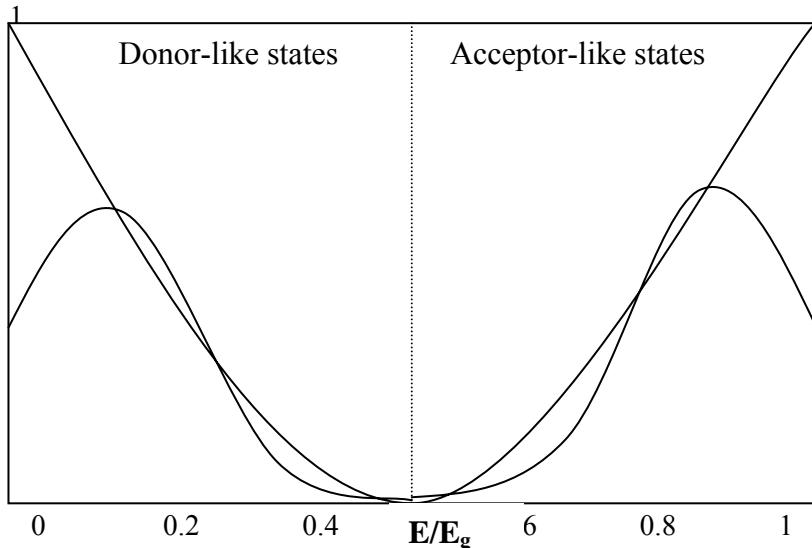


Fig. 1.3

distribuzione di questi stati energetici dipende dalla procedura di ossidazione e dal trattamento di pre-ossidazione così come dal droggaggio di substrato. Sono stati sviluppati diversi modelli per descrivere la distribuzione di questi stati, come ad esempio due gaussiane oppure una distribuzione ad U o parabolica. I due modelli proposti sono in buon accordo all'interno della banda, ma sono estremamente diversi quando ci si avvicina ai bordi della banda, come si può vedere dalla figura 1.3. La forte differenza in corrispondenza dei bordi non è molto importante in quanto tali stati danno un contributo trascurabile al processo di ricombinazione. E' stata sviluppata una grande varietà di metodi per misurare i parametri che caratterizzano gli stati di interfaccia come le misure di conduttanza di un condensatore MOS e molti altri ancora.

#### 1.4.5 Le cariche fisse nell'ossido

I legami insoddisfatti che appartengono all'atomo di silicio legato a sua volta con tre atomi di ossigeno nello strato di ossido di silicio creano una carica positiva chiamata appunto carica fissa nell'ossido (figura 1.2). Tale carica è caratterizzata dall'incapacità di scambiare la sua carica con il substrato di

silicio e dal fatto di essere stabile ed immobile anche se sottoposta a grandi campi elettrici o a forti temperature. La carica fissa è sempre positiva, indipendentemente dal tipo di drogaggio di substrato e dalla sua concentrazione, e la sua densità varia in un range di  $10^{10} \div 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , ed è localizzata a circa 25  $\text{\AA}$  dall'interfaccia, in una regione di transizione  $\text{SiO}_x$  non stechiometrica. Anche l'eccesso di ioni silicio presenti nell' $\text{SiO}_2$  dà vita ad una carica fissa nell'ossido. Durante l'ossidazione termica del silicio, gli atomi di ossigeno diffondono attraverso gli strati di  $\text{SiO}_2$  per raggiungere l'interfaccia e dare vita ad un nuovo strato di  $\text{SiO}_2$ . Allo stesso tempo un eccesso di atomi di silicio è presente vicino all'interfaccia al fine di reagire con l'ossigeno. Quando il processo di ossidazione termina gli atomi di silicio in eccesso rimangono bloccati in prossimità dell'interfaccia e danno vita ad una carica positiva. La concentrazione della carica fissa presente nell'ossido è fortemente legata al processo di ossidazione, alla temperatura, alle condizioni di raffreddamento ed all'orientazione dello strato superficiale del silicio. Questa carica positiva, attrae gli elettroni e respinge le lacune dalla superficie, così da provocare in corrispondenza della superficie un'accumulazione per un campione di silicio di tipo n ed uno svuotamento o inversione alla superficie di un campione di silicio di tipo p. Così come gli stati di interfaccia la carica fissa può essere eliminata con processi di annealing al fine di saturare i legami insoddisfatti con altri atomi.

#### **1.4.6 Le cariche mobili**

Tale carica è prevalentemente dovuta alla presenza di ioni alcalini di tipo  $\text{Na}^+$  e  $\text{K}^+$ , che sono intrappolati nell'ossido durante i processi che coinvolgono il campione. Una caratteristica di questi ioni è la loro elevata mobilità per cui possono migrare all'interno dell'ossido anche sotto l'azione di deboli campi elettrici, anche a temperatura ambiente. Una diminuzione della temperatura causa una diminuzione della mobilità degli ioni nell' $\text{SiO}_2$ . La mobilità degli

ioni  $\text{Na}^+$  e  $\text{K}^+$  nell' $\text{SiO}_2$  può essere approssimata attraverso la seguente espressione in un intervallo di temperatura compreso tra 300 e 450 °C:

$$(1.29) \quad \mu(T) = \frac{17.46}{T} e^{\frac{-1.09}{kT}}$$

dove  $\mu(T)$  è la mobilità, in funzione della temperatura assoluta, espressa in  $\text{cm}^2/\text{Vs}$ . Gli ioni mobili possono anche essere intrappolati da siti trappola locati in corrispondenza della superficie in particolare a circa 50  $\text{\AA}$ . Lo ione  $\text{K}^+$  mostra una maggiore propensione ad essere intrappolato rispetto allo ione  $\text{Na}^+$ . Questi ioni possono dare vita ad una carica superficiale equivalente ed avere effetti sul potenziale superficiale. Le cariche mobili possono essere minimizzate attraverso la pulizia dei forni con miscele  $\text{O}_2$  e  $\text{HCl}$ , attraverso la crescita degli ossidi in ambienti  $\text{O}_2 - \text{HCl}$  o mediante protezione del semiconduttore con strati dielettrici impermeabili agli ioni alcalini.

#### **1.4.7 Cariche intrappolate nell'ossido**

Queste cariche sono dovute a difetti nell'ossido come impurità o legami incompleti; e possono essere ridotte con processi di annealing simili a quelli utilizzati per ridurre gli stati all'interfaccia. Sebbene neutre, possono diventare cariche a causa di portatori energetici che superano la barriera di potenziale, oppure portatori generati da radiazione ionizzante.

#### **1.4.8 Il diagramma delle bande di energia in prossimità dell'interfaccia**

Nelle precedenti sezioni abbiamo discusso dei parametri più importanti dell'interfaccia Si-  $\text{SiO}_2$ . La carica totale per questo tipo di interfaccia può essere classificata in quattro categorie diverse: le cariche all'interfaccia, le cariche fisse nell'ossido, gli ioni mobili e le cariche intrappolate nell'ossido; ma solo le prime sono in contatto con il substrato e possono scambiare portatori di carica con esso.

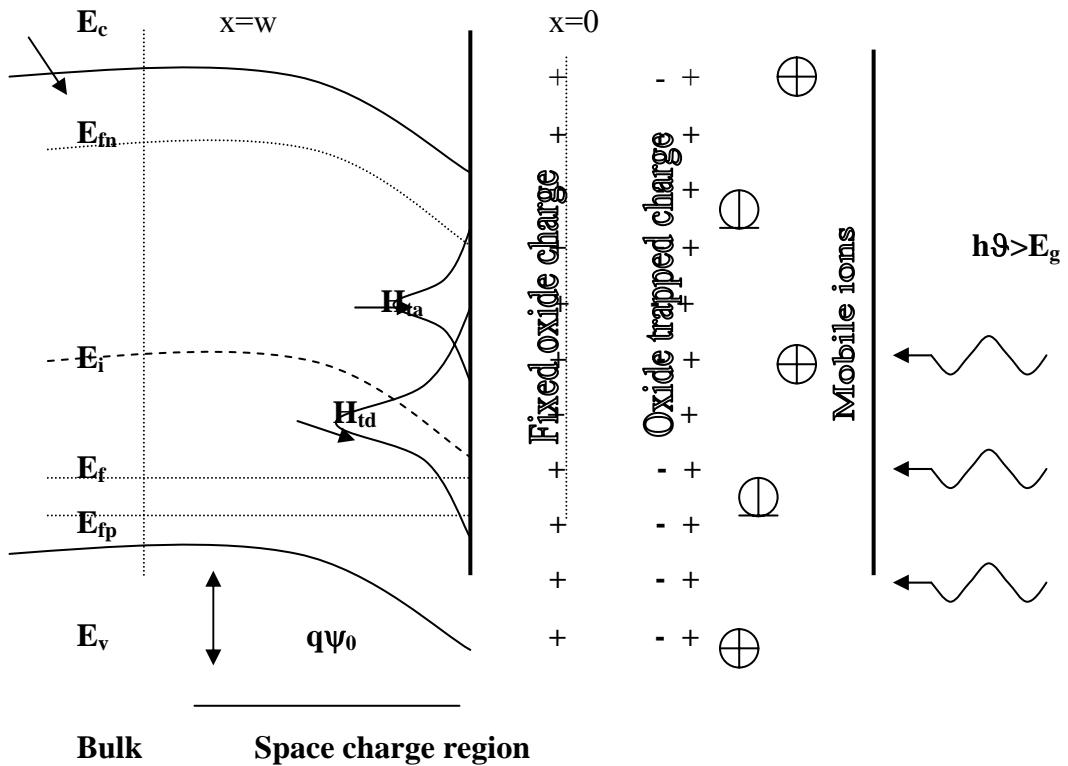


Fig. 1.4

La figura 1.3 mostra il diagramma delle bande di energia per un interfaccia Si- $\text{SiO}_2$  per un campione di silicio di tipo p sottoposto ad illuminazione ottica. Da tale figura è facilmente osservabile la distribuzione gaussiana degli stati accettori e donatori  $H_{ta}$  e  $H_{td}$ , le cariche fisse nell'ossido le cariche intrappolate nell'ossido e le contaminazioni di ioni. La curvatura della banda,  $\psi_0$  è causata in parte dalla ionizzazione degli stati di interfaccia dipendenti dalla concentrazione di elettroni e lacune, ed in parte dalla carica totale indotta nell'ossido. Livelli di illuminazione molto alti, appiattiscono le bande, qualsiasi sia la carica superficiale, a causa della presenza di un elevatissimo eccesso di portatori. In maniera approssimata possiamo dire che gli stati donatori e accettori ionizzati sono localizzati sopra e sotto lo pseudo livello di Fermi,  $E_{fn}$  ed  $E_{fp}$  rispettivamente per gli elettroni e per le lacune, il resto dei livelli sono non ionizzati e disponibili per la ricombinazione. La ricombinazione dei portatori in superficie è accompagnata da un eccesso di elettroni nel volume che vengono trasportati attraverso la regione di carica spaziale da correnti di diffusione e di trasporto quando non è presente un

contatto in superficie. In seguito all'illuminazione, il livello di Fermi di elettroni e lacune sarà separato ed lo pseudo livello di Fermi aumenterà. Il gradiente dello pseudo livello di Fermi per gli elettroni e le lacune nella regione di carica spaziale è proporzionale alla densità di corrente di elettroni e lacune. E' molto importante conoscere la variazione dello pseudo livello di Fermi nella regione di carica spaziale e specialmente la sua posizione in superficie, che determina il numero di stati di interfaccia ionizzati e quelli disponibili per la ricombinazione.

#### 1.4.9 La velocità di ricombinazione superficiale

Abbiamo visto come l'interruzione, in superficie, della struttura cristallina ideale, introduca ulteriori stati energetici in banda proibita, questi stati influenzano il processo di ricombinazione in un modo molto simile al modello di Shockley-Read-Hall per la ricombinazione nel substrato. In ogni modo poichè i portatori che si ricombinano in prossimità della superficie del campione di silicio possono essere considerati alla stregua di una corrente che fluisce all'esterno del campione stesso, è molto semplice modellare la presenza dei centri di ricombinazione vicino alla superficie con una condizione al contorno costante che lega il valore della concentrazione dei portatori ed il loro gradiente in corrispondenza della superficie. Questo parametro costante che è generalmente indicato con il nome di Surface Recombination Velocity o SRV è dato da:

$$(1.30) \quad SRV = D \left( \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \right) \Big|_{boundary}$$

nel caso in cui  $x$  è la coordinata spaziale e stiamo considerando un problema monodimensionale.

## Capitolo 2

# Soluzione analitica dell'equazione della diffusione in regime di bassa iniezione

### 2.1 Introduzione

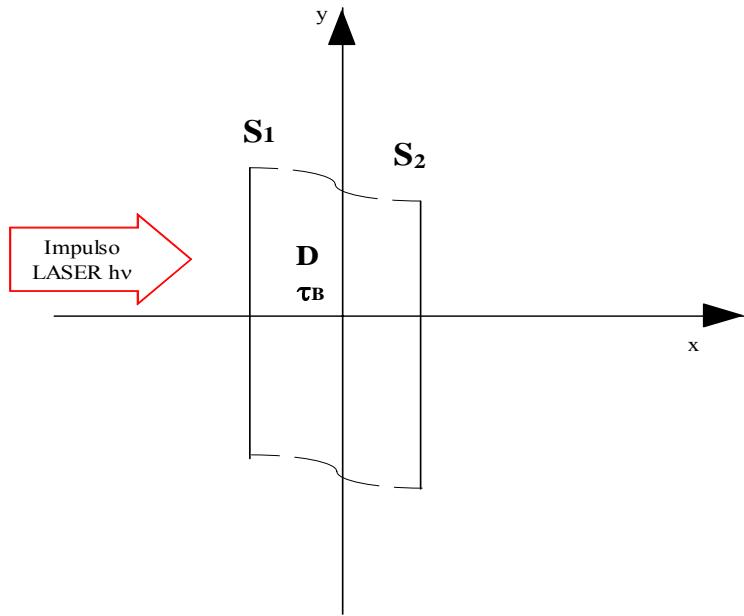


Fig 2. 1

Nel primo capitolo di questa tesi abbiamo spiegato i fondamenti teorici sia del processo di ricombinazione nel substrato sia di quello in superficie. In questo capitolo analizzeremo l'andamento dell'eccesso di portatori minoritari prodotto in un wafer di silicio da un impulso laser di energia maggiore della banda proibita che caratterizza il semiconduttore. L'obiettivo finale di quest'analisi è quello di determinare il tempo di vita medio nel substrato,  $\tau_B$ , e la velocità di ricombinazione superficiale SRV. Per fare questo considereremo il modello analitico di Luke e Cheng [8] esteso da Kousik, Ling ed Ajmera [4,5] al caso di velocità di ricombinazione superficiale diversa per le due facce del semiconduttore.

## 2.2 Analisi del modello di Luke e Cheng

L'obiettivo di quest' analisi è quello di risolvere l'equazione della diffusione nel caso di interazione di un impulso laser di forma arbitraria con un wafer di silicio di spessore  $d$ , uniformemente drogato e libero da campi elettrici. L'intensità del fascio laser è tenuta abbastanza bassa in modo da mantenere il campione di silicio in condizioni di bassi livelli di iniezione in ogni punto e durante l'intero processo di iniezione dei portatori liberi. In questo caso il tempo di vita medio dei portatori nel substrato,  $\tau_B$ , e la velocità di ricombinazione superficiale, SRV, possono essere considerati costanti durante l'intero processo di ricombinazione.

L'equazione della diffusione è:

$$(2.1) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 n - \frac{n}{\tau_B} + g$$

che può essere risolta insieme con le condizioni al contorno

$$(2.2) \quad D \nabla n \cdot \hat{n} \Big|_{\partial S} = S n \Big|_{\partial S}$$

dove  $n$  è la concentrazione dei portatori minoritari in eccesso funzione delle coordinate spaziali e del tempo,  $D$  è il coefficiente di diffusione dei portatori minoritari e  $S$  la velocità di ricombinazione superficiale (che può essere diversa per le diverse facce del dispositivo). Inoltre è nota la funzione di generazione,  $g(x, y, z, t)$  dei portatori minoritari in coordinate spaziali.

### 2.2.1 Caso monodimensionale

Nel caso monodimensionale, le (2.1),(2.2) diventano:

$$(2.3) \quad \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} - \frac{n(x, t)}{\tau_B} + g(x) \delta(t)$$

$$(2.4) \quad \begin{cases} D \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=\frac{-d}{2}} = S_0 n \left( \frac{-d}{2}, t \right) \\ -D \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=\frac{d}{2}} = S_1 n \left( \frac{d}{2}, t \right) \end{cases}$$

dove  $D$  è il coefficiente di diffusione dei minoritari,  $S_0$  è la velocità di ricombinazione sulla faccia anteriore del campione, dove impatta l'impulso laser, e  $S_1$  è la velocità di ricombinazione sulla faccia posteriore.

Per un wafer irradiato con luce monocromatica di lunghezza d'onda  $\lambda$ , e assumendo che ogni fotone assorbito crei una coppia elettrone-lacuna, la funzione di generazione dei portatori minoritari,  $g(x)$ , nell'equazione (2.3), che tenga conto degli effetti di riflessione multipla da parte di entrambe le superfici del campione è data dalla seguente espressione:

$$(2.5) \quad g(x) = N_0(1-R)\alpha \frac{e^{-\alpha\left(\frac{x+d}{2}\right)} + Re^{-\alpha d} e^{-\alpha\left(\frac{-x+d}{2}\right)}}{1-R^2 e^{-2\alpha d}}$$

dove  $R$  è il coefficiente di riflessione delle superfici,  $\alpha$  è il coefficiente di assorbimento ottico alla lunghezza d'onda dell'impulso laser<sup>1</sup> ed  $N_0$  è il numero di fotoni incidenti sulla superficie del campione per unità di area. Osserviamo che per  $R=0$  si ha assenza di riflessione mentre per  $R=1$  si ha riflessione totale.

### *Metodo di separazione delle variabili*

Assumiamo:

$$n(x,t) = A(x)B(t)$$

allora, sostituendo questa nell'equazione (2.4) e raccogliendo le variabili e separando otteniamo le seguenti due equazioni:

$$(2.6) \quad \begin{aligned} \frac{dB}{dt} + \left( a^2 D + \frac{1}{\tau_B} \right) B &= 0 \\ \frac{d^2 A}{dx^2} + a^2 A &= 0 \end{aligned}$$

Queste equazioni possono essere facilmente risolte in modo da ottenere la soluzione generale della (2.4):

---

<sup>1</sup> Considereremo i casi di alto coefficiente di assorbimento,  $\alpha = 292 \text{ cm}^{-1}$ , corrispondente ad una lunghezza d'onda di  $\lambda = 0.904 \mu\text{m}$  che è emesso da un laser di GaAs; ed il caso di basso coefficiente di assorbimento,  $\alpha = 10 \text{ cm}^{-1}$  che corrisponde ad una lunghezza d'onda di  $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$  di un laser Nd:Yag.

$$(2.7) \quad n(x,t) = e^{-\frac{t}{\tau_B}} \sum_k (A_k \cos a_k x + B_k \sin a_k x) e^{-a_k^2 D t}$$

dove  $A_k, B_k$  ed  $a_k$  sono costanti, e la sommatoria è necessaria per soddisfare la condizione iniziale.

Ora applicando le condizioni al contorno (2.5) otteniamo l'equazione caratteristica necessaria per determinare  $a_k$  :

$$(2.8) \quad a_k d = \tan^{-1} \left( \frac{S_0}{D a_k} \right) + \tan^{-1} \left( \frac{S_1}{D a_k} \right) + k \pi$$

con  $k$  intero. Se  $S_0 = S_1$  l'equazione (2.9) diventa:

$$(2.9) \quad a_k d = 2 \tan^{-1} \left( \frac{S_1}{D a_k} \right) + k \pi$$

Ponendo  $z_k = \frac{a_k d}{2}$ , possiamo scrivere  $A_k$  in termini di  $B_k$  come:

$$(2.10) \quad A_k = -\frac{D a_k \cos z_k + S_0 \sin z_k}{D a_k \sin z_k - S_0 \cos z_k} B_k = -b_k B_k$$

La soluzione generale diventa:

$$(2.11) \quad n(x,t) = e^{-\frac{t}{\tau_B}} \sum_k B_k (b_k \cos a_k x + \sin a_k x) e^{-a_k^2 D t}$$

In questo modo il coefficiente  $B_k$  è l'unico che deve essere determinato per ricavare completamente la soluzione  $n(x,t)$ .

È possibile dimostrare che i termini nella sommatoria che dipendono da  $x$  formano in insieme di funzioni ortogonali per il quale vale la seguente relazione :

$$(2.12) \quad \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} (b_k \cos a_k x + \sin a_k x) \times (b_{k'} \cos a_{k'} x + \sin a_{k'} x) dx = 0$$

per  $k \neq k'$ .

Applicando la condizione iniziale otteniamo:

$$(2.13) \quad n(x,0) \equiv \sum_k B_k (b_k \cos a_k x + \sin a_k x) = g(x)$$

e quindi tenendo conto dell'equazione (2.6) possiamo determinare  $B_k$

$$(2.14) \quad B_k = 4a_k g_0 \alpha e^{\frac{\alpha d}{2}} \left[ \frac{b_k \left( \cos z_k \sinh \frac{\alpha d}{2} + \frac{a_k}{\alpha} \sin z_k \cosh \frac{\alpha d}{2} \right) (1 + \operatorname{Re}^{-\alpha d}) + \left( \frac{a_k}{\alpha} \cos z_k \sinh \frac{\alpha d}{2} - \sin z_k \cosh \frac{\alpha d}{2} \right) (1 - \operatorname{Re}^{-\alpha d})}{\left[ b_k^2 (a_k d + \sin a_k d) + (a_k d - \sin a_k d) \right] (\alpha^2 + a_k^2)} \right]$$

dove

$$(2.15) \quad g_0 = \frac{N_0 (1 - R) \alpha}{1 - R^2 e^{-2\alpha d}}$$

Abbiamo così completamente determinato la concentrazione  $n(x, t)$ .

La densità media dei portatori in eccesso  $n_{avg}(t)$  nel campione è data da:

$$(2.16) \quad n_{avg}(t) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} n(x, t) dx$$

che risolto da:

$$(2.17) \quad n_{avg}(t) = \sum_k B_k b_k e^{\left[ -\left( \frac{1}{\tau_B} + a_k^2 D \right) t \right]} \frac{\sin z_k}{z_k}$$

Osserviamo che per  $t=0$ :

$$(2.18) \quad n_{avg}(0) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} n(x, 0) dx = \frac{N_0 (1 - R) (1 - e^{-\alpha d})}{d (1 - \operatorname{Re}^{-\alpha d})}$$

Trovata la densità media dei portatori in eccesso per una funzione impulsiva possiamo usare la tecnica della convoluzione per ottenere lo stesso risultato per una forma arbitraria dell'impulso laser  $G(t)$ :

$$(2.19) \quad n_g(t) = \int_0^t n_{avg}(\tau) G(t - \tau) d\tau$$

## 2.2.2 Caso bidimensionale

Nel caso bidimensionale, le (2.1), (2.2) diventano:

$$(2.20) \quad \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 n(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n(x, y, t)}{\partial y^2} \right) - \frac{n(x, y, t)}{\tau_B} + g(x, y) \delta(t)$$

$$(2.21) \quad \begin{aligned} D \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial x} \bigg|_{x=\frac{-d}{2}} &= S_0 n \left( \frac{-d}{2}, y, t \right) \\ - D \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial x} \bigg|_{x=\frac{d}{2}} &= S_1 n \left( \frac{d}{2}, y, t \right) \end{aligned}$$

dove  $D$  è il coefficiente di diffusione dei minoritari,  $S_0$  è la velocità di ricombinazione sulla faccia anteriore del campione lungo  $x$ , dove impatta l'impulso laser, e  $S_1$  è la velocità di ricombinazione sulla faccia posteriore lungo  $x$ . Inoltre assumeremo che le dimensioni laterali lungo  $y$  siano molto più grandi di quelle lungo  $x$ . Per un wafer irradiato con luce monocromatica di lunghezza d'onda  $\lambda$ , e assumendo che ogni fotone assorbito crei una coppia elettrone-lacuna, la funzione di generazione dei portatori minoritari,  $g(x, y)$ , nell'equazione (2.20), che tenga conto degli effetti di riflessione multipla da parte di entrambe le superfici del campione è data dalla seguente espressione:

$$(2.22) \quad g(x, y) = \left[ N_0(1-R)\alpha \frac{e^{-\alpha\left(\frac{x+d}{2}\right)} + Re^{-\alpha d} e^{-\alpha\left(\frac{-x+d}{2}\right)}}{1-R^2 e^{-2\alpha d}} \right] \delta(y)$$

dove  $R$  è il coefficiente di riflessione delle superfici,  $\alpha$  è il coefficiente di assorbimento ottico alla lunghezza d'onda dell'impulso laser ed  $N_0$  è il numero di fotoni incidenti sulla superficie del campione per unità di area.

### *Metodo di separazione delle variabili*

La linearità del problema permette di separare le variabili, per cui possiamo scrivere:

$$(2.23) \quad n(x, y, t) = n_x(x, t)n_y(y, t)$$

La soluzione per  $n_y$  può essere determinata facilmente in quanto le dimensioni laterali possono essere assunte infinite, per cui:

$$(2.24) \quad n_y = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}$$

Questa relazione corrisponde ad una funzione gaussiana a media nulla e varianza pari a  $\sqrt{2Dt}$ . La soluzione per  $n_x$  procede come nel caso monodimensionale ed è data dalla (2.11). La densità media dei portatori in eccesso  $n_{avg}(t)$  nel campione è data da:

$$(2.25) \quad n_{avg}(t) = \frac{1}{dh} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} n(x, y, t) dx dy$$

dove  $h$  è la dimensione del campione lungo y e  $d$  quella lungo x.

Trovata la densità media dei portatori in eccesso per una funzione impulsiva possiamo usare la tecnica della convoluzione per ottenere lo stesso risultato per una forma arbitraria dell'impulso laser.

### 2.3 Validità del modello analitico

Il modello di Luke e Cheng è valido in un semiconduttore in cui i parametri ricombinativi, cioè  $\tau_B$  e SRV sono costanti durante l'intero processo di ricombinazione. Questo vincolo per  $\tau_B$  è certamente soddisfatto quando ci troviamo in condizioni di bassi livelli d'iniezione, cioè quando la densità dei portatori iniettati è molto minore della densità dei portatori all'equilibrio nel materiale semiconduttore, cioè quando  $\Delta n = n_0$ . Per quanto riguarda la velocità di ricombinazione superficiale, SRV, all'interfaccia Si-SiO<sub>2</sub>, mentre essa per un semiconduttore di tipo-N non varia, cioè è costante, a bassi livelli d'iniezione; per un semiconduttore di tipo-P, essa varia significativamente anche a bassi livelli d'iniezione rendendo non valido il modello analitico descritto sopra. Inoltre il modello risulta non valido anche nel caso di semiconduttori ricoperti solo dall'ossido nativo, pochi angstroms, e nel caso di materiale ossidante diverso dal biossido di silicio. In questi casi riterremo comunque costante la SRV durante l'intero processo ricombinativo salvo poi testare la validità di quest'assunzione attraverso l'analisi dei risultati sperimentali. In appendice A sono riportati i listati delle funzioni MatLab che implementano l'algoritmo analitico di risoluzione dell'equazione della diffusione riportato in questo capitolo e poter così effettuare i confronti con l'algoritmo numerico di cui parleremo nel prossimo capitolo, al fine di testare la validità di quest'ultimo a bassi livelli di iniezione.

## Appendice al Capitolo 2

### A.2.1 Modello analitico della mobilità

Come alternativa ai valori tabellati in funzione della concentrazione a T=300K per il silicio, si può utilizzare un modello analitico elaborato da D.B.M. Klaassen [29] denominato “Philips Unified Mobility”, che è un modello in grado di descrivere la mobilità dei portatori maggioritari e minoritari, ed inoltre prende in considerazione i seguenti effetti:

- Scattering sia degli accettori che dei donatori
- Scattering tra portatore e portatore
- Screening

Tale modello è particolarmente adatto ai dispositivi bipolari. La mobilità degli elettroni è descritta dalle seguenti relazioni:

$$(2.26) \frac{1}{\mu_n} = \frac{1}{\mu_{latt,n}} + \frac{1}{\mu_{D+A+P}}$$

dove

$$(2.27) \begin{aligned} \mu_{latt,n} &= MMXN.UM \left( \frac{T}{300} \right)^{-TETN.UM} \\ \mu_{D+A+P} &= \mu_{N,n} \frac{N_{sc,n}}{N_{sc,eff,n}} \left( \frac{NRFN.UM}{N_{sc,n}} \right)^{ALPN.UM} + \mu_{c,n} \frac{n+p}{N_{sc,eff,n}} \end{aligned}$$

$\mu_{N,n}, \mu_{c,n}, N_{sc,n}, N_{sc,eff,n}$  sono date dalle seguenti espressioni

$$(2.28) \begin{aligned} \mu_{N,n} &= \frac{MMXN.UM^2}{MMXN.UM - MMNN.UM} \left( \frac{T}{300} \right)^{3(ALPN.UM)-1.5} \\ \mu_{c,n} &= \frac{MMXN.UM \cdot MMNN.UM}{MMXN.UM - MMNN.UM} \left( \frac{T}{300} \right)^{0.5} \\ N_{sc,n} &= N_D^* + N_A^* + p \\ N_{sc,eff,n} &= N_D^* + N_A^* G(P_n) + \frac{p}{F(P_n)} \end{aligned}$$

I livelli effettivi di impurità  $N_D^*$  ed  $N_A^*$  contemplano anche gli effetti di altissimi livelli di iniezione e sono definiti come:

$$(2.29) \quad \begin{aligned} N_D^* &= N_D \left[ 1 + \frac{1}{CRFD.UM + \left( \frac{NRFD.UM}{N_D} \right)^2} \right] \\ N_A^* &= N_A \left[ 1 + \frac{1}{CRFA.UM + \left( \frac{NRFA.UM}{N_A} \right)^2} \right] \end{aligned}$$

Le funzioni  $F(P_n)$  e  $G(P_n)$ , portano in conto la massa finita delle lacune coinvolte nello scattering ed il potenziale repulsivo degli accettori, sono espresse come:

$$(2.30) \quad \begin{aligned} F(P_n) &= \frac{0.7643P_n^{0.6478} + 2.2999 + 6.5502 \frac{m_e}{m_h}}{P_n^{0.6478} + 2.3670 - 0.8552 \frac{m_e}{m_h}} \\ G(P_n) &= 1 - \frac{0.89233}{\left[ 0.41372 + P_n \left( \frac{m_0}{m_e} \frac{T}{300} \right)^{0.28227} \right]^{0.19778}} + \frac{0.005978}{\left[ P_n \left( \frac{m_e}{m_0} \frac{300}{T} \right)^{0.72169} \right]^{1.80618}} \end{aligned}$$

Il parametro  $P_n$  che considera gli effetti di screening vale:

$$(2.31) \quad P_n = \left( \frac{2.459}{3.97 \times 10^{13} N_{sc,n}^{-2/3}} + \frac{3.828}{1.36 \times 10^{20} \left( \frac{m_e}{m_0} \right)^{n+p}} \right)^{-1} \left( \frac{T}{300} \right)^2$$

È possibile ottenere espressioni simili per le lacune. La massa effettiva per elettroni e lacune vale  $m_e = 1.0m_0$  ed  $m_h = 1.258m_0$  dove  $m_0$  è la massa di un elettrone libero.

## Capitolo 3

# Soluzione numerica dell'equazione della diffusione col metodo delle differenze finite in regime di iniezione arbitrario

### 3.1 Introduzione

Il calcolo numerico oggi viene usato in campi dove era virtualmente assente prima del 1950. L'alta velocità computazionale dei calcolatori, ha reso possibile la soluzione di problemi scientifici ed ingegneristici di grande complessità. Questa capacità ha in effetti stimolato molto la ricerca nell'analisi numerica rendendo possibile lo sviluppo di tecniche di analisi altrimenti irrealizzabili. Uno dei più importanti risultati dei metodi discreti è quello di ridurre un sistema continuo in un sistema discreto equivalente che è facilmente risolvibile attraverso l'utilizzo del computer. All'inizio si può certamente essere ingannati dal fatto che questa tecnica può apparire elementare, ma il suo uso indiscriminato può condurre facilmente in errore. L'approssimazione base è quella di considerare un dominio continuo  $D$  come costituito da una rete o una maschera di punti discreti all'interno di  $D$  stesso come mostrato in figura 3.1 nel caso di un dominio bidimensionale. Viene poi calcolata una soluzione per ogni punto della griglia. I valori intermedi oppure i valori di integrali, derivate ed altri operatori possono essere ottenuti da questa soluzione attraverso le tecniche di interpolazione. La discretizzazione delle equazioni e delle condizioni al contorno che governano un problema continuo, potrebbe essere compiuta *fisicamente*, ma molto più spesso è ottenuta *matematicamente*. Nell'approccio *fisico* il modello discreto è ottenuto mettendo insieme le caratteristiche fisiche del sistema continuo. Ad esempio

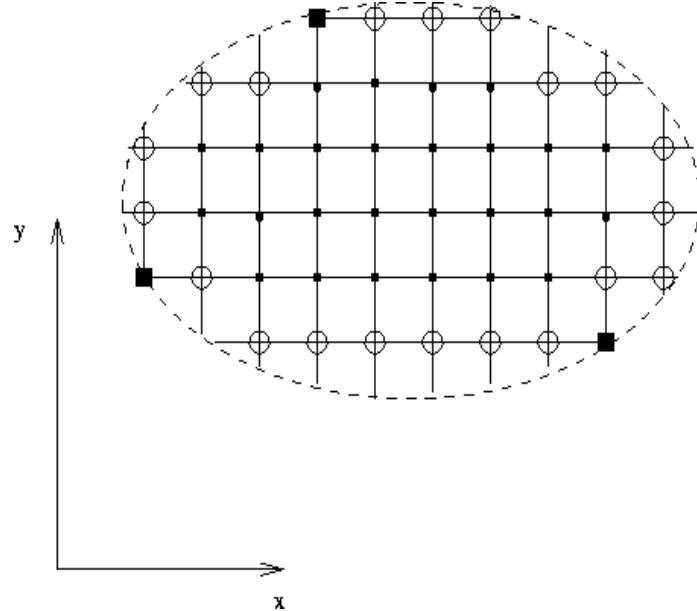


Fig 3. 1

una lastra per la conduzione del calore potrebbe essere considerata come una rete di barrette conduttrive. Le equazioni che governano il sistema continuo sono quindi sviluppate attraverso la diretta applicazione delle leggi fisiche al sistema discreto. Nell'approccio *matematico*, la formulazione continua è trasformata in una rappresentazione discreta attraverso l'uso delle derivate. Quando la formulazione del problema continuo è già disponibile questa procedura è molto semplice ed anche molto flessibile. Noi limiteremo la nostra attenzione all'approccio matematico.

Lo sviluppo delle approssimazioni discrete può essere ottenuto in diversi modi, noi ci occuperemo del metodo delle differenze finite.

### 3.2 Metodo delle differenze finite

In questo paragrafo noi esamineremo le idee fondamentali che stanno dietro la soluzione numerica diretta delle equazioni differenziali con il metodo delle differenze finite. Ci sono molti modi di ottenere la rappresentazione alle differenze finite delle derivate. Quello più semplice viene attraverso la stima delle derivate usando l'espansione in serie di Taylor:

$$(3.1) \quad f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} \Big|_{x_0} + \dots$$

e risolvendo in funzione di  $\frac{df}{dx} \Big|_{x_0}$  :

$$(3.2) \quad \frac{df}{dx} \Big|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_0} - \dots$$

oppure:

$$(3.3) \quad \frac{df}{dx} \Big|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

dove l'ultimo termine è chiamato “errore di troncamento”. In questo caso l'errore di troncamento è  $O(\Delta x)$ . Quando l'ordine dell'errore di troncamento è  $O(\Delta x)$ , l'approssimazione è “accurata al primo ordine”, e l'errore è direttamente proporzionale a  $\Delta x$ . Quest' approssimazione della derivata prima è nota come *differenza in avanti*, in quanto fa uso solo dell'informazione seguente  $x_0$ . Un'altra approssimazione della derivata, fa uso solo dell'informazione precedente al punto di interesse, ed è nota come *differenza all'indietro*:

$$(3.4) \quad f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_0} - \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} \Big|_{x_0} + \dots$$

oppure, risolvendo in funzione della derivata prima:

$$(3.5) \quad \frac{df}{dx} \Big|_{x_0} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

ed è ancora accurata al primo ordine.

In molti casi viene richiesta una rappresentazione alle differenze finite più accurata; ciò può essere ottenuto o diminuendo il passo  $\Delta x$ , oppure utilizzando una approssimazione della derivata con errore di troncamento  $O(\Delta x^2)$  in quest'ultimo modo l'accuratezza richiesta può essere ottenuta con meno punti griglia. Un' approssimazione al secondo ordine,  $O(\Delta x^2)$ , può essere ottenuta sottraendo le serie di Taylor precedenti:

$$(3.6) \quad f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x) = +2\Delta x \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^3}{3} \frac{d^3 f}{dx^3} \bigg|_{x_0} + \dots$$

Qui i termini di ordine  $O(\Delta x)$  si cancellano nella sottrazione. Quando poi dividiamo per  $2\Delta x$  e risolviamo mettendo in evidenza la derivata prima, otteniamo un' espressione con errore di troncamento  $O(\Delta x^2)$ . L'espressione che ne viene fuori per la derivata prima è:

$$(3.7) \quad \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2$$

Questa è la formula alle *differenze al centro* accurata al secondo ordine, in quanto l'informazione ci viene da entrambi i lati del punto d'interesse. In modo simile possiamo ottenere l'approssimazione alle differenze finite per la derivata seconda. Sommando le espressioni delle serie di Taylor per le espansioni in avanti e all'indietro, otteniamo la seguente espressione, dove i termini dispari si cancellano:

$$(3.8) \quad f(x_0 + \Delta x) + f(x_0 - \Delta x) = +2f(x_0) + (\Delta x)^2 \frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0} + O(\Delta x)^4$$

e quindi risolvendo in funzione di  $\frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0}$  :

$$(3.9) \quad \frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x)^2$$

Le formule date sopra son quelle più frequentemente utilizzate nell'approssimare le derivate usando il metodo delle differenze finite. Ulteriori espressioni possono essere derivate per il caso di punti distribuiti non

uniformemente. In generale l'errore di troncamento per il caso di punti spaziati in maniera non uniforme è peggiore del caso di punti spaziati uniformemente. In pratica, se la griglia è spaziata in maniera ragionevole ciò non rappresenta un grave problema. Quello di cui abbiamo bisogno è di ottenere una formula alle *differenze al centro* per la derivata prima, e un'espressione per la derivata seconda. Per prima cosa consideriamo le espansioni in serie di Taylor in avanti e all'indietro. Comunque, la distanza tra i punti sarà differente nelle due direzioni. Usando  $\Delta x^+$  e  $\Delta x^-$  per distinguere tra le due direzioni, possiamo riscrivere le (3.1),(3.4):

$$(3.10) \quad f(x_0 + \Delta x^+) = f(x_0) + \Delta x^+ \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} + \frac{(\Delta x^+)^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0} + \frac{(\Delta x^+)^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} \bigg|_{x_0} + \dots$$

$$(3.11) \quad f(x_0 - \Delta x^-) = f(x_0) - \Delta x^- \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} + \frac{(\Delta x^-)^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0} - \frac{(\Delta x^-)^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} \bigg|_{x_0} + \dots$$

Posto  $\Delta x^+ = \alpha \Delta x^-$ . Possiamo ottenere le espressioni desiderate, sostituendo  $\Delta x^+$  con  $\alpha \Delta x^-$  nella prima e moltiplicando per  $\alpha$  la seconda. Le espressioni risultanti sono:

$$(3.12) \quad f(x_0 + \Delta x^+) = f(x_0) + \alpha \Delta x^- \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} + \frac{(\alpha \Delta x^-)^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0} + \frac{(\alpha \Delta x^-)^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} \bigg|_{x_0} + \dots$$

$$(3.13) \quad \alpha f(x_0 - \Delta x^-) = \alpha f(x_0) - \alpha \Delta x^- \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} + \alpha \frac{(\Delta x^-)^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0} - \alpha \frac{(\Delta x^-)^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} \bigg|_{x_0} + \dots$$

Per ottenere l'espressione per la derivata prima, sottraiamo le equazioni precedenti:

$$(3.14) \quad f(x_0 + \Delta x^+) - \alpha f(x_0 - \Delta x^-) = f(x_0) - \alpha f(x_0) + 2\alpha \Delta x^- \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} + \left[ \frac{(\alpha \Delta x^-)^2}{2} - \alpha \frac{(\Delta x^-)^2}{2} \right] \frac{d^2 f}{dx^2} \bigg|_{x_0} + \dots$$

e risolvendo per  $\frac{df}{dx} \bigg|_{x_0}$ :

$$(3.15) \quad \frac{df}{dx} \bigg|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x^+) + (\alpha - 1)f(x_0) - \alpha f(x_0 - \Delta x^-)}{2\alpha \Delta x} + O(\Delta x^-)$$

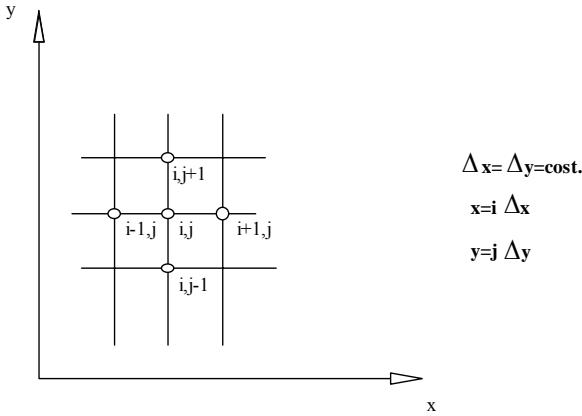


Fig 3. 2

Per ottenere l'espressione per la derivata seconda, sommiamo:

$$(3.16) \quad f(x_0 + \Delta x^+) + \alpha f(x_0 - \Delta x^-) = f(x_0) + \alpha f(x_0) + \left[ \frac{(\alpha \Delta x^-)^2}{2} + \alpha \frac{(\Delta x^-)^2}{2} \right] \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_0} + \dots$$

che risulta per  $\frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_0}$ :

$$(3.17) \quad \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x^+) - (1 + \alpha) f(x_0) + \alpha f(x_0 - \Delta x^-)}{\frac{\alpha}{2} (1 + \alpha) (\Delta x^-)^2} + O(\Delta x^-)$$

Notiamo che entrambe le equazioni per  $\alpha = 1$  si riducono alle espressioni date per una griglia spaziata uniformemente ( $\Delta x^- = \Delta x^+$ ).

Queste formule possono anche essere usate per rappresentare le derivate parziali. Per semplificare la notazione, introdurremo una griglia e una notazione ampiamente usata nella descrizione del metodo delle differenze finite. La figura 3.2 illustra questa notazione per ( $\Delta x = \Delta y = cost$ ). In questa notazione le approssimazioni alle differenze finite per le derivate diventano:

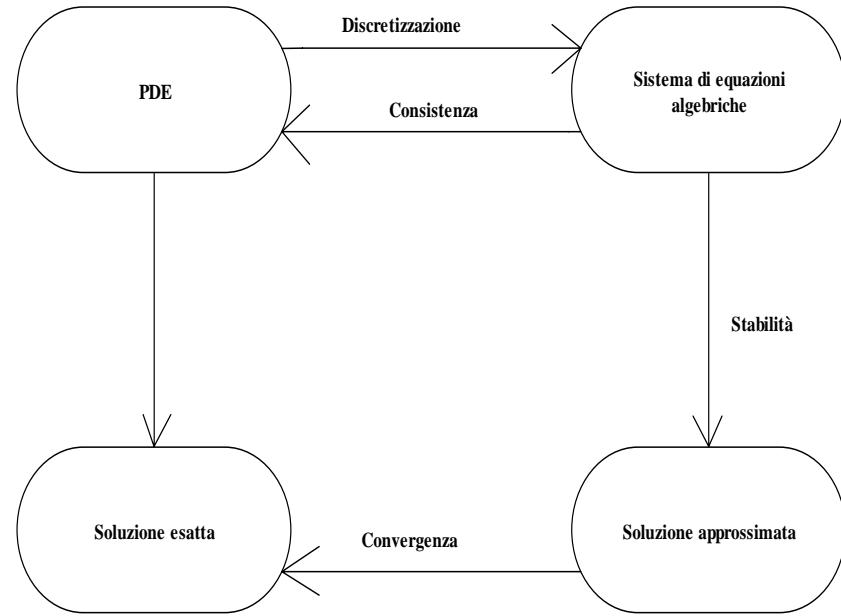


Fig 3. 3

$$\begin{aligned}
 (3.18) \quad & \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) & \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{\Delta y} + O(\Delta y) \\
 & \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) & \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f_{i,j} - f_{i,j-1}}{\Delta y} + O(\Delta y) \\
 & \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2 & \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2\Delta y} + O(\Delta y)^2 \\
 & \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x)^2 & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{\Delta y^2} + O(\Delta y)^2
 \end{aligned}$$

### 3.2.1 Validità della soluzione numerica

La figura 3.3 fornisce uno schema dei passi richiesti, e alcuni dei termini chiave usati per assicurarci che i risultati ottenuti siano in effetti la soluzione dell'equazione alle derivate parziali originale.

I termini introdotti richiedono un'ulteriore definizione e discussione:

- discretizzazione
- consistenza
- stabilità
- convergenza

Prima di definire questi termini, consideriamo come esempio la semplice equazione differenziale lineare parabolica<sup>2</sup> seguente:

$$(3.19) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Discretizziamo l'equazione utilizzando le approssimazioni (3.18):

$$(3.20) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} - \frac{\alpha}{\Delta x^2} (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k) + \left[ -\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_i \frac{\Delta t}{2} + \alpha \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_i \frac{\Delta x^2}{12} + \dots \right] = 0$$

dove usiamo l'indice in alto per denotare il tempo e quello in basso per denotare la posizione spaziale. Nella (3.20) l'equazione alle derivate parziali (PDE) è convertita in un'equazione alle differenze finite (FDE). L'errore di troncamento è  $O(\Delta t) + O(\Delta x)^2$ . Da questa semplice equazione, possiamo definire i termini anzidetti:

*discretizzazione*

Questo è il processo di sostituire le derivate con le approssimazioni alle differenze finite. Sostituendo le derivate continue con un' approssimazione in un insieme discreto di punti (la griglia), si introduce un errore dovuto al troncamento che nasce dall'approssimazione alle differenze finite e dal modo di trattare le condizioni al contorno. Riesaminando la rappresentazione in serie di Taylor, ad esempio della derivata parziale prima:

$$(3.21) \quad \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$$

possiamo notare che l'errore di troncamento dipende localmente dalla soluzione<sup>3</sup>. Nella maggior parte dei casi ci aspettiamo che l'errore di discretizzazione sia più grande dell'errore di arrotondamento<sup>4</sup>.

---

<sup>2</sup> La diffusione o la conduzione di calore in un mezzo isotropico, il flusso di un fluido attraverso un mezzo poroso, la persistenza della radiazione solare, ed altre situazioni ancora possono essere modellate attraverso l'equazione parabolica  $\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla u)$  dove  $\alpha$  può essere costante, una funzione delle coordinate spaziali o ancora una funzione di  $u$  o  $\nabla u$  o entrambe. I problemi fisici che possono essere modellati con l'equazione parabolica sono molto diffusi.

### consistenza

Una rappresentazione alle differenze finite di una PDE è *consistente* se la differenza tra la PDE e la sua rappresentazione alle differenze FDE si annulla quando la griglia è resa più fine:

$$(3.22) \quad \lim_{griglia \rightarrow 0} (PDE - FDE) = 0$$

Ad esempio se l'errore di troncamento è  $O(\frac{\Delta t}{\Delta x})$ . In questo caso dobbiamo far si che la griglia va a zero proprio come:

$$(3.23) \quad \lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \left( \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) = 0$$

### stabilità

Uno schema è stabile numericamente se gli errori non crescono dopo ogni iterazione, così:

crescita dell' errore      -> instabilità

diminuzione dell' errore    -> stabilità

La stabilità spesso determina il passo della griglia di discretizzazione.

### convergenza

La soluzione della FDE dovrebbe tendere alla soluzione della PDE quando la griglia viene resa più fine. Nel caso di un'equazione lineare c'è un teorema che dimostra che la soluzione numerica alla FDE è in effetti la soluzione dell'equazione differenziale alle derivate parziali originale.

**Teorema di equivalenza Lax-Richtmyer:** *per un problema lineare a valore iniziale, ben posto<sup>5</sup>, con una rappresentazione alle differenze finite consistente, la stabilità è condizione necessaria e sufficiente per la convergenza.*

<sup>3</sup> Per  $\Delta x \rightarrow 0$  l'errore va a zero, ma quando  $\Delta x$  assume un valore finito,  $\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$  può assumere valori grandi nei punti in cui la soluzione varia rapidamente

<sup>4</sup> C'è un limite inferiore alla misura del passo  $\Delta x$  dovuto all'uso dell'aritmetica a lunghezza finita; al di sotto l'errore di arrotondamento diventa importante. Nella maggior parte dei casi il passo utilizzato nei calcoli alle differenze finite è più grande del limite imposto dall'errore di arrotondamento.

<sup>5</sup> Possiamo asserire che un problema fisico è ben posto se la sua soluzione esiste, è unica e dipende in maniera continua dai suoi dati ausiliari, cioè dalle condizioni al contorno.

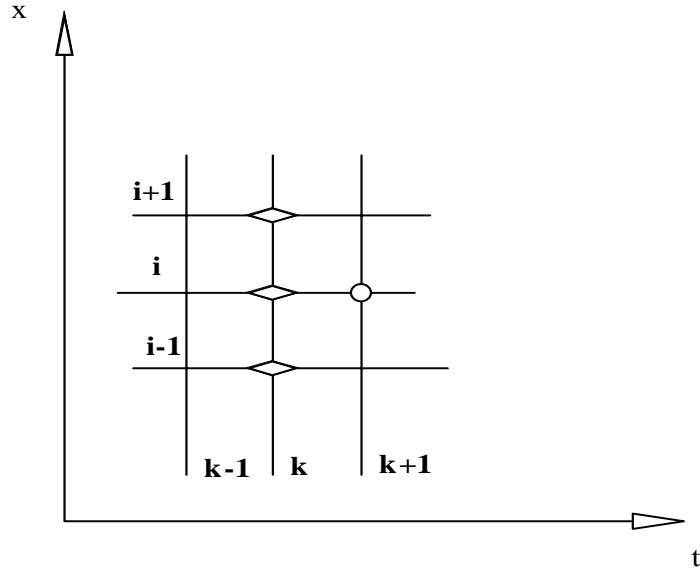


Fig 3. 4

In pratica, è necessario condurre esperimenti numerici per determinare se la soluzione sia convergente in funzione del passo della griglia.

Fin qui abbiamo rappresentato la PDE attraverso una FDE nei punti  $i, n$ . La PDE è ora un insieme di equazioni algebriche scritte per ogni punto della griglia. Nelle tre dimensioni la griglia è definita da  $IMAXx JMAX x ZMAX$  punti. Vediamo ora come possiamo ottenere la soluzione per ogni punto della griglia.

### 3.2.2 Schema esplicito

Usando la notazione di figura 3.4, scriviamo la FDE della (3.19) come:

$$(3.24) \quad \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = \frac{\alpha}{\Delta x^2} (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k)$$

dove la soluzione al passo  $k$  è nota. All'istante  $k+1$  c'è solo un incognita.

Risolvendo :

$$(3.25) \quad u_i^{k+1} = u_i^k + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k)$$

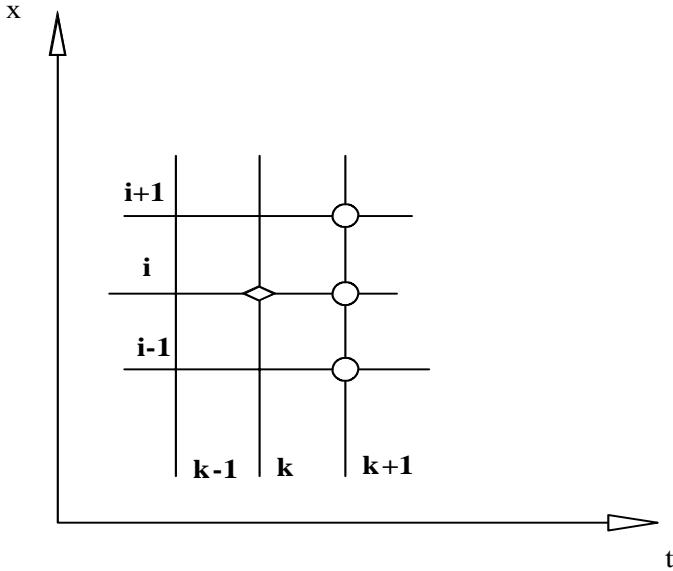


Fig 3. 5

e così per ogni  $i$  possiamo ricavare algebricamente  $u_i^{k+1}$ , per sostituzione.

L'inconveniente di questo schema, particolarmente semplice, è che per essere stabile richiede un passo molto piccolo.

### 3.2.3 Schema implicito

Usando la notazione di figura 3.5, scriviamo la rappresentazione alle differenze finite della (3.19) come:

$$(3.26) \quad \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = \frac{\alpha}{\Delta x^2} (u_{i+1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i-1}^{k+1})$$

dove stiamo usando le derivate spaziali calcolate all' istante  $k+1$ .

In questo modo otteniamo un sistema dove in ogni punto  $i$ ,  $u_i^{k+1}$  dipende da tutti i valori all'istante  $k+1$ . Questo conduce ad un sistema di equazioni che deve essere risolto.

Definendo

$$(3.27) \quad r = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

possiamo riscrivere l'equazione (3.26) come:

$$(3.28) \quad -ru_{i-1}^{k+1} + (1 + 2r)u_i^{k+1} - ru_{i+1}^{k+1} = u_i^k \quad \text{per } i = 1, \dots, N.$$

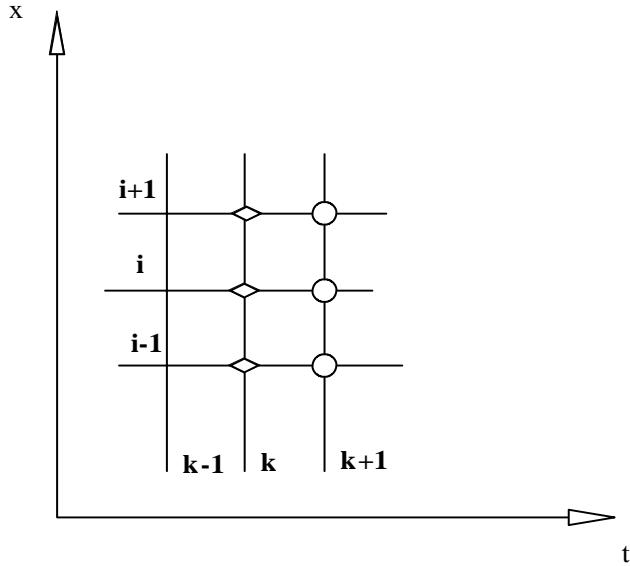


Fig 3. 6

Questa può essere messa in una forma matriciale particolarmente semplice, nota come forma *tridiagonale*.

Lo schema implicito richiede la soluzione di un sistema di equazioni ad ogni passo ma la stabilità permette di scegliere un passo di griglia più grande. È anche possibile usare una media delle approssimazioni alle linee  $k$  e  $k+1$ , figura 3.6, invece dell'equazione (3.28). Tuttavia un'espressione più generale può essere ricavata attraverso l'introduzione di un fattore di "carica"  $\lambda$ , utilizzando il quale l'equazione (3.28) diventa:

$$(3.29) \quad -r\lambda u_{i-1}^{k+1} + (1+2r\lambda)u_i^{k+1} - r\lambda u_{i+1}^{k+1} = r(1-\lambda)u_{i-1}^k + [1-2r(1-\lambda)]u_i^k + r(1-\lambda)u_{i+1}^k \quad \text{per } i=1, \dots, N.$$

È interessante osservare che per  $\lambda=0$  riotteniamo la formula esplicita, per  $\lambda=1$  la formula puramente implicita, mentre nel caso in cui  $\lambda=0.5$  si ottiene la formula di Crank-Nicholson.

Una forma di questo tipo, si presta in maniera quasi naturale ad essere implementata attraverso programmi MatLab, come mostrato in Appendice C, inoltre pone interessanti possibilità di studio della stabilità della soluzione ottenuta con l'approssimazione alle differenze finite usando il metodo implicito, attraverso lo studio delle matrici, anche se al crescere degli

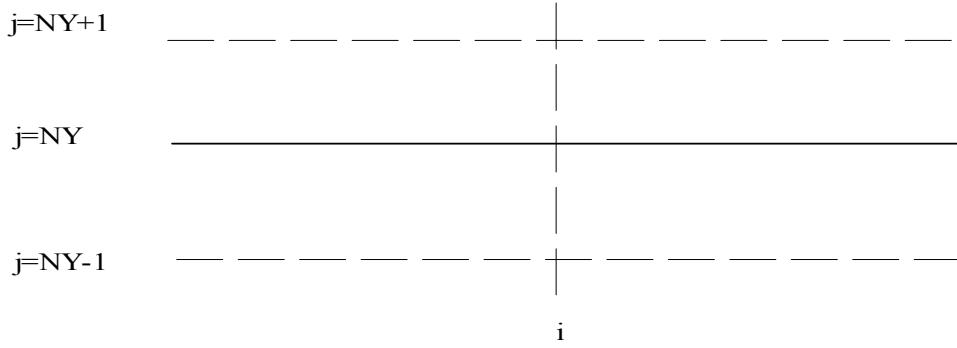


Fig 3. 7

elementi, tali matrici possono diventare molto grandi e quindi richiedere tempi di calcolo eccessivi.

### 3.2.4 Condizioni al contorno

Finora abbiamo ottenuto le espressioni per i punti interni della griglia, comunque dobbiamo ancora analizzare col metodo delle differenze finite le condizioni al contorno. Consideriamo che normalmente ci sono due tipi di condizioni al contorno: 1) il problema di Dirichlet, dove  $u$  viene specificata sul contorno, e 2) il problema di Neumann, dove viene specificato il gradiente normale alla superficie,  $\frac{\partial u}{\partial n}$ . Per il problema di Dirichlet, i valori che la funzione deve avere sul contorno sono specificati direttamente e nessuna formula speciale viene richiesta. Per il problema di Neumann, il modo più semplice per implementare le condizioni al contorno è di aggiungere dei nodi immaginari ai lati della griglia. Osservando la fig 3.7 vediamo che il contorno è alla linea  $j=NY$ . Assumendo di aggiungere un'altra riga in  $j=NY+1$ , la condizione al contorno in  $j=NY$  è :

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 = \frac{\phi_{i,NY+1} - \phi_{i,NY-1}}{Y_{NY+1} - Y_{NY-1}} + O(\Delta Y)^2$$

e per assicurarsi che la condizione al contorno sia soddisfatta, definiamo:

$$\phi_{i,NY+1} \equiv \phi_{i,NY-1}$$

Le equazioni sono poi risolte per  $Y_{NY}$  e quando necessitiamo di  $\phi$  in  $NY+1$ , semplicemente usiamo il valore in  $NY-1$ .

### 3.2.5 Analisi della stabilità

L'analisi finora presentata per risolvere i problemi governati da equazioni differenziali appare decisamente semplice. In molti casi non riusciamo ad ottenere una soluzione. Frequentemente la ragione di ciò è da additare nella scelta di un algoritmo numerico intrinsecamente instabile. In questa sezione presentiamo uno degli approcci classici alla determinazione dei criteri di stabilità: *l'analisi di stabilità di Von Neumann*. L'approccio di Von Neumann alla stabilità si basa sull'analisi di Fourier e quindi è generalmente limitata a PDE lineari e a coefficienti costanti<sup>6</sup>.

Consideriamo l'equazione (3.19) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

ed esaminiamo la stabilità della rappresentazione esplicita data dall'equazione (3.24) e qui riscritta come:

$$(3.30) \quad \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} = \frac{\alpha}{\Delta x^2} (u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t))$$

Assumiamo che all'istante  $t=0$ , venga introdotto un errore della forma:

$$(3.31) \quad u(x, t) = \psi(t) e^{j\beta x}$$

dove  $\beta$  è una costante reale.

Sostituendo la (3.31) nella (3.30) e risolvendo per  $\psi(t + \Delta t)$ :

$$(3.32) \quad \begin{aligned} \frac{\psi(t + \Delta t) e^{j\beta x} - \psi(t) e^{j\beta x}}{\Delta t} &= \alpha \frac{\psi(t)}{\Delta x^2} \{ e^{j\beta(x + \Delta x)} - 2e^{j\beta x} + e^{j\beta(x - \Delta x)} \} \\ \psi(t + \Delta t) e^{j\beta x} &= \psi(t) e^{j\beta x} + \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \psi(t) e^{j\beta x} \{ e^{j\beta \Delta x} - 2 + e^{-j\beta \Delta x} \} \end{aligned}$$

notiamo che i termini  $e^{j\beta x}$  si cancellano, e l'equazione precedente può essere riscritta come:

$$(3.33) \quad \begin{aligned} \psi(t + \Delta t) &= \psi(t) \left[ 1 + \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (-2 + 2 \cos \beta \Delta x) \right] = \psi(t) \left[ 1 - 2\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos \beta \Delta x) \right] \\ \psi(t + \Delta t) &= \psi(t) \left[ 1 - 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{\beta \Delta x}{2} \right] \end{aligned}$$

---

<sup>6</sup> Osserviamo che l'analisi di Von Neumann non include l'effetto dei contorni spaziali, che possono influire sulla stabilità effettiva.

definendo un fattore di amplificazione  $G$ , come rapporto di  $\psi(t + \Delta t)$  su  $\psi(t)$ , abbiamo:

$$(3.34) \quad G = \frac{\psi(t + \Delta t)}{\psi(t)} = \left[ 1 - 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \beta \frac{\Delta x}{2} \right].$$

La stabilità richiede che :

$$|G| < 1$$

così che l'errore sia decrescente.

Essendo  $\beta$  arbitrario e osservando che il valore massimo del seno è uno, la condizione di stabilità diventa:

$$(3.35) \quad \left| 1 - 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right| < 1$$

e in definitiva questo significa che:

$$(3.36) \quad r = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$$

Ciò pone le condizioni su  $\Delta t$  e  $\Delta x$  perchè l'equazioni del modello siano stabili.

Un analisi analoga della rappresentazione implicita ,eq.(3.26), dimostra che essa è incondizionatamente stabile:

$$(3.37) \quad |G| = \left| \frac{\psi(t + \Delta t)}{\psi(t)} \right| = \left| \frac{1}{1 + 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \beta \frac{\Delta x}{2}} \right| \leq 1$$

e per l'arbitrarietà di  $\beta$  possiamo porre  $\sin^2 \beta \frac{\Delta x}{2} = 1$  per cui abbiamo:

$$(3.38) \quad |G| = \left| \frac{\psi(t + \Delta t)}{\psi(t)} \right| = \left| \frac{1}{1 + 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}} \right| < 1 \quad \text{Sempre!}$$

Analogamente si ottiene la stabilità per lo schema generale della (3.29):

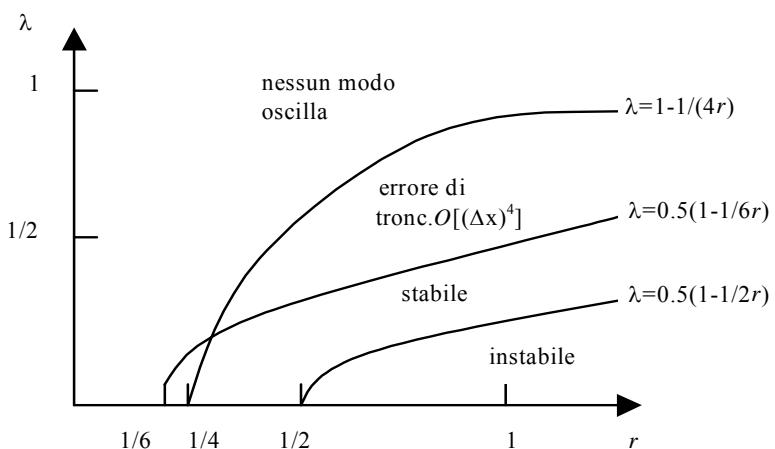
$$(3.39) \quad |G| = \left| \frac{\psi(t + \Delta t)}{\psi(t)} \right| = \left| 1 - \frac{4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \beta \frac{\Delta x}{2}}{1 + 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \lambda \sin^2 \beta \frac{\Delta x}{2}} \right| \leq 1$$

osserviamo che per  $\lambda = 0$  ritroviamo la condizione di stabilità vista prima per lo schema esplicito. Se poi poniamo  $\sin^2 \beta \frac{\Delta x}{2} = 1$ , abbiamo la condizione di stabilità:

$$(3.40) \quad \lambda \geq \left( \frac{1}{2} - \frac{\Delta^2 x}{4\alpha\Delta t} \right)$$

da cui risulta che sia il metodo completamente implicito,  $\lambda = 1$ , che quello di Crank-Nicholson,  $\lambda = 0.5$ , sono stabili. In pratica un qualsiasi valore di  $\lambda$  nell'intervallo  $[0.5, 1]$  ci garantisce la stabilità incondizionata<sup>7</sup>.

Tuttavia noi, per lo studio della stabilità ci rifaremo alle osservazioni effettuate da Crandall che ha riassunto i suoi studi in un unico grafico che



racchiude la stabilità, la possibilità di oscillazione e l'errore di troncamento dell'equazione (3.19). Per quanto detto fino a questo punto sembra che il metodo implicito sia di gran lunga migliore del metodo esplicito, ma come vedremo il metodo implicito da vita a notevoli problemi di convergenza verso la soluzione esatta.

<sup>7</sup> Naturalmente, la stabilità da sola non ci garantisce che l'evoluzione del fenomeno fisico sia correttamente simulata, e il passo temporale dovrebbe essere scelto in modo da non eccedere i vincoli temporali caratteristici del fenomeno osservato.

### 3.3 Equazione della diffusione

Applichiamo ora quanto ottenuto nel caso generale di un'equazione differenziale lineare del tipo parabolico all'equazione di nostro interesse, e cioè:

$$(3.41) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot \{D_a(n) \nabla n\} - U(n) + g$$

(dove abbiamo sottinteso la dipendenza dalle incognite  $x, y, z, t$ ), con le seguenti condizioni al contorno (di Neumann)

$$(3.42) \quad (D_a \nabla n) \cdot \vec{n} \Big|_{\partial S} = S n \Big|_{\partial S}$$

dove  $D_a(n)$  è il coefficiente di diffusività ambipolare, e dove  $U(n)$  è la velocità di ricombinazione nel volume; in appendice al capitolo sono presentati i modelli usati per esprimere la loro dipendenza da  $n$ . Inoltre è nota la funzione,  $g(x, y, z, t)$ , di generazione dei portatori minoritari nelle coordinate spaziali.

Allo scopo di approssimare la (3.39) con uno schema alle differenze finite osserviamo che:

$$(3.43) \quad \nabla \cdot \{D_a \nabla n\} = D_a \nabla^2 n + \nabla D_a \cdot \nabla n$$

per cui:

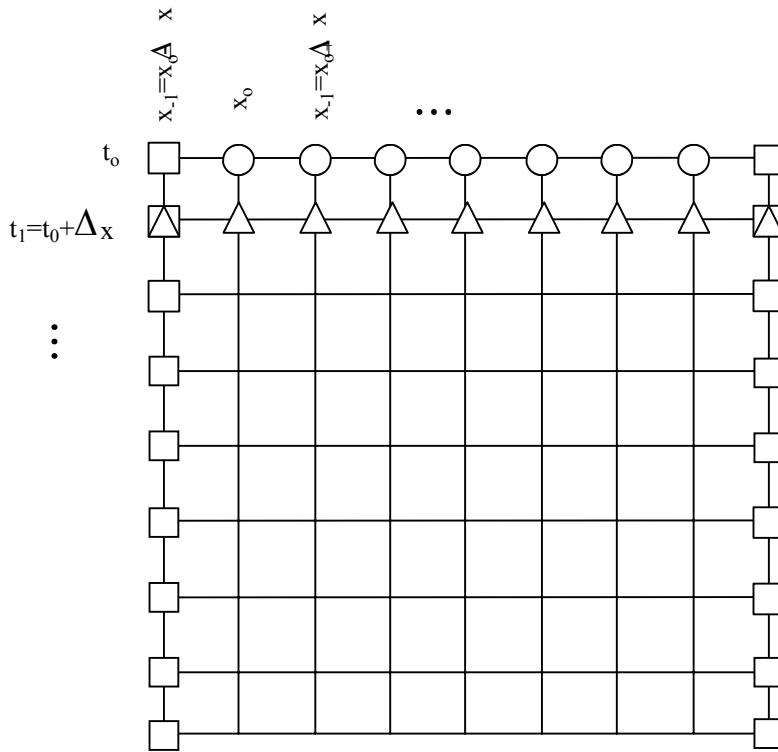
$$(3.44) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = D_a(n) \nabla^2 n + \nabla D_a(n) \cdot \nabla n - U(n) + g$$

#### 3.3.1 Caso monodimensionale

Iniziamo a risolvere col metodo delle differenze finite nel caso monodimensionale, estenderemo poi le considerazioni al caso bidimensionale.

La nostra PDE diventa nel caso di una dimensione spaziale:

$$(3.45) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = D_a(n) \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial D_a(n)}{\partial x} \cdot \frac{\partial n}{\partial x} - U(n) + g(x) \delta(t)$$



**nodo dove la concentrazione è nota per le condizioni iniziali**



**nodo immaginario necessario per trattare le condizioni al contorno di Neumann**



**nodo dove la concentrazione è incognita**

Fig 3. 8

Ciò che faremo è di dividere la nostra lunghezza  $d$  in  $m$  incrementi spaziali uguali, ognuno di ampiezza  $\frac{d}{m}$  (griglia uniforme). Se, quindi, siamo interessati ad osservare la concentrazione dall'istante  $t_o$  a  $t_f$ , allora possiamo dividere l'intervallo temporale in  $p$  incrementi uguali, ognuno di ampiezza  $\frac{t_f - t_o}{p}$ . Vedi figura 3.9. Al passo 1, conosciamo tutti i valori della funzione,  $n$ , all'istante  $t_o$ , in quanto dati dalla condizione iniziale:

$$(3.46) \quad g(x) = \left( N_0(1-R)\alpha \frac{e^{-\alpha\left(\frac{x+d}{2}\right)} + \operatorname{Re}^{-\alpha d} e^{-\alpha\left(\frac{-x+d}{2}\right)}}{1-R^2 e^{-2\alpha d}} \right)$$

dove  $R$  è il coefficiente di riflessione delle superfici laterali,  $\alpha$  è il coefficiente di assorbimento ottico alla lunghezza d'onda dell'impulso laser<sup>8</sup> ed  $N_0$  è il numero di fotoni incidenti sulla superficie del campione per unità di area. Ai passi successivi tutto ciò che vogliamo è di ottenere  $n(\{x\}, t_{k+1})$  da  $n(\{x\}, t_k)$  sui nodi interni e  $n(x_o, t), n(x_m, t)$  sul contorno<sup>9</sup>.

### Discretizzazione

Scriviamo le approssimazioni alle differenze finite per le derivate temporali e spaziali:

$$(3.47) \quad \left( \frac{\partial n}{\partial t} \right)_i \approx \frac{n_i^{k+1} - n_i^k}{\Delta t} \quad \forall i$$

$$(3.48) \quad \begin{aligned} \left( \frac{\partial n}{\partial x} \right)_i^k &\approx \frac{n_{i+1}^k - n_{i-1}^k}{2\Delta x} & \forall k \\ \left( \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \right)_i^k &\approx \frac{n_{i-1}^k - 2n_i^k + n_{i+1}^k}{\Delta x^2} & \forall k \end{aligned}$$

sostituendo nella (3.43)<sup>10</sup>

$$(3.49) \quad \begin{aligned} \frac{n_i^{k+1} - n_i^k}{\Delta t} &= \lambda \left[ D_{ai}^{k+1} \frac{n_{i-1}^{k+1} - 2n_i^{k+1} + n_{i+1}^{k+1}}{\Delta x^2} + \left( \frac{\partial D_a}{\partial x} \right)_i^{k+1} \frac{n_{i+1}^{k+1} - n_{i-1}^{k+1}}{2\Delta x} - U_i^{k+1} \right] + \\ &+ (1-\lambda) \left[ D_{ai}^k \frac{n_{i-1}^k - 2n_i^k + n_{i+1}^k}{\Delta x^2} + \left( \frac{\partial D_a}{\partial x} \right)_i^k \frac{n_{i+1}^k - n_{i-1}^k}{2\Delta x} - U_i^k \right] \end{aligned}$$

e riordinando

$$(3.50) \quad \begin{aligned} n_i^{k+1} &= n_i^k + \Delta t \lambda \left[ D_{ai}^{k+1} \frac{n_{i-1}^{k+1} - 2n_i^{k+1} + n_{i+1}^{k+1}}{\Delta x^2} + \left( \frac{\partial D_a}{\partial x} \right)_i^{k+1} \frac{n_{i+1}^{k+1} - n_{i-1}^{k+1}}{2\Delta x} - U_i^{k+1} \right] + \\ &+ \Delta t (1-\lambda) \left[ D_{ai}^k \frac{n_{i-1}^k - 2n_i^k + n_{i+1}^k}{\Delta x^2} + \left( \frac{\partial D_a}{\partial x} \right)_i^k \frac{n_{i+1}^k - n_{i-1}^k}{2\Delta x} - U_i^k \right] \end{aligned}$$

---

<sup>8</sup> Considereremo i casi di alto coefficiente di assorbimento,  $\alpha = 292 \text{ cm}^{-1}$ , corrispondente ad una lunghezza d'onda di  $\lambda = 0.904 \mu\text{m}$  che è emesso da un laser di GaAs; ed il caso di basso coefficiente di assorbimento,  $\alpha = 10 \text{ cm}^{-1}$  che corrisponde ad una lunghezza d'onda di  $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$  di un laser Nd:Yag.

<sup>9</sup> D'ora in poi scriveremo  $n_i^k$  al posto di  $n(x_i, t_k)$  così che:

i sottoscritto designa l'incremento spaziale  
k soprascritto designa l'incremento temporale

<sup>10</sup> Osserviamo che per  $\lambda = 0$  riotteniamo il metodo esplicito e per  $\lambda = 1$  il metodo implicito; a  $\lambda = \frac{1}{2}$  corrisponde il metodo di Crank-Nicholson.

posto  $C_x = \frac{\Delta t D_a}{\Delta x^2}, B_x = \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{\partial D_a}{\partial x}$  e raggruppando, ponendo tutte le incognite

(all'istante  $k+1$ ) a destra e quelle (all'istante  $k$ ) note a sinistra :

$$(3.51) \quad \begin{aligned} -\lambda(C_{xi}^{k+1} - B_{xi}^{k+1})n_{i-1}^{k+1} + (1+2C_{xi}^{k+1}\lambda)n_i^{k+1} - \lambda(C_{xi}^{k+1} + B_{xi}^{k+1})n_{i+1}^{k+1} = \\ (1-\lambda)(C_{xi}^k - B_{xi}^k)n_{i-1}^k + [1-2C_{xi}^k(1-\lambda)]n_i^k + (1-\lambda)(C_{xi}^k + B_{xi}^k)n_{i+1}^k - \Delta t \lambda U_i^{k+1} - \Delta t(1-\lambda)U_i^k \end{aligned}$$

se definiamo

$$\begin{aligned} J_{diag} &= (1+2C_x\lambda), J_{lx} = -(C_x + B_x)\lambda, J_{hx} = -(C_x + B_x)\lambda \\ R_{diag} &= [1-2C_x(1-\lambda)], R_{lx} = (C_x - B_x)(1-\lambda), R_{hx} = (C_x + B_x)(1-\lambda) \end{aligned}$$

possiamo riscrivere l'equazione (3.48) come

$$(3.52) \quad J_{lx_i}^{k+1}n_{i-1}^{k+1} + J_{diag_i}^{k+1}n_i^{k+1} + J_{hx_i}^{k+1}n_{i+1}^{k+1} = R_{lx_i}^k n_{i-1}^k + R_{diag_i}^k n_i^k + R_{hx_i}^k n_{i+1}^k - \Delta t \lambda U_i^{k+1} - \Delta t(1-\lambda)U_i^k$$

Queste equazioni valgono per tutti i nodi interni.<sup>11</sup>

Per ogni  $i$ , la (3.52) ci dà un sistema di equazioni algebriche lineari; che possiamo risolvere con le regole dell'algebra lineare. Infatti, il sistema dato dalle equazioni (3.52), per ogni  $i$ , può essere riscritto come:

$$(3.53) \quad Jn^{k+1} = R$$

la cui soluzione per  $J \neq 0$  è:

$$(3.54) \quad n^{k+1} = J^{-1}R$$

La matrice  $J$  è chiamata anche jacobiano<sup>12</sup>, e il vettore  $R$  residuo.

*Condizioni al contorno*

Considereremo ora le condizioni al contorno (tipo Neumann) nella loro forma più generale monodimensionale:

$$(3.55) \quad D_a \frac{\partial n}{\partial x} = \pm S n$$

utilizzando l'approssimazione alle *differenze al centro*, per la derivata spaziale abbiamo all'istante  $k+1$ :

---

<sup>11</sup> Quando abbiamo condizioni al contorno di Dirichlet, un nodo interno è un qualsiasi nodo tranne quelli sul contorno stesso. Quando abbiamo condizioni al contorno di Neumann, siamo forzati ad aggiungere un nodo immaginario ai lati estremi; così un nodo interno è un qualsiasi nodo tranne quei due nodi immaginari (e quindi in questo caso dobbiamo includere nei nodi interni anche i nodi che si trovano sul contorno nel caso di condizioni di Dirichlet).

<sup>12</sup> Osserviamo che per  $m$  intervalli spaziali, ci sono  $m+1$  nodi. Per condizioni al contorno di Dirichlet, se ci sono  $m+1$  nodi allora ci sono  $m-1$  nodi interni e quindi  $m-1$  incognite. La matrice  $J$  è una matrice di dimensioni  $m-1 \times m-1$ . Per condizioni al contorno di Neumann, ci sono  $m+3$  nodi spaziali (a causa dei nodi immaginari ai lati), e quindi  $m+3$  incognite. La matrice  $J$  ha dimensioni  $m+3 \times m+3$ .

$$(3.56) \quad D_{ai}^{k+1} \left( \frac{n_{i+1}^{k+1} - n_{i-1}^{k+1}}{2\Delta x} \right) = \pm S_i^{k+1} n_i^{k+1}$$

riordiniamo, come fatto per la PDE, mettendo tutte le incognite all'istante  $k+1$  sul lato sinistro e il resto sul lato destro

$$(3.57) \quad - \left( \frac{D_{ai}^{k+1}}{2\Delta x} \right) n_{i-1}^{k+1} \text{m} S_i^{k+1} n_i^{k+1} + \left( \frac{D_{ai}^{k+1}}{2\Delta x} \right) n_{i+1}^{k+1} = 0$$

Quest'equazione verrà usata per tutti i nodi immaginari creati per trattare le condizioni al contorno di Neumann.

### 3.3.2 Caso bidimensionale

L'estensione al caso bidimensionale è chiara. La PDE parabolica diventa nel caso di due dimensioni spaziali

$$(3.58) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = D_a(n) \left[ \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial D_a(n)}{\partial x} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{\partial D_a(n)}{\partial y} \frac{\partial n}{\partial y} - U(n) + g(x, y) \delta(t)$$

Ciò che faremo è di dividere la nostra dimensione spaziale  $x$  in  $m_x$  incrementi,

ognuno di ampiezza  $\frac{L_x}{m_x}$ . In modo simile, divideremo la nostra dimensione

spaziale  $y$  in  $m_y$  incrementi, di ampiezza  $\frac{L_y}{m_y}$ . Se, poi, siamo interessati ad

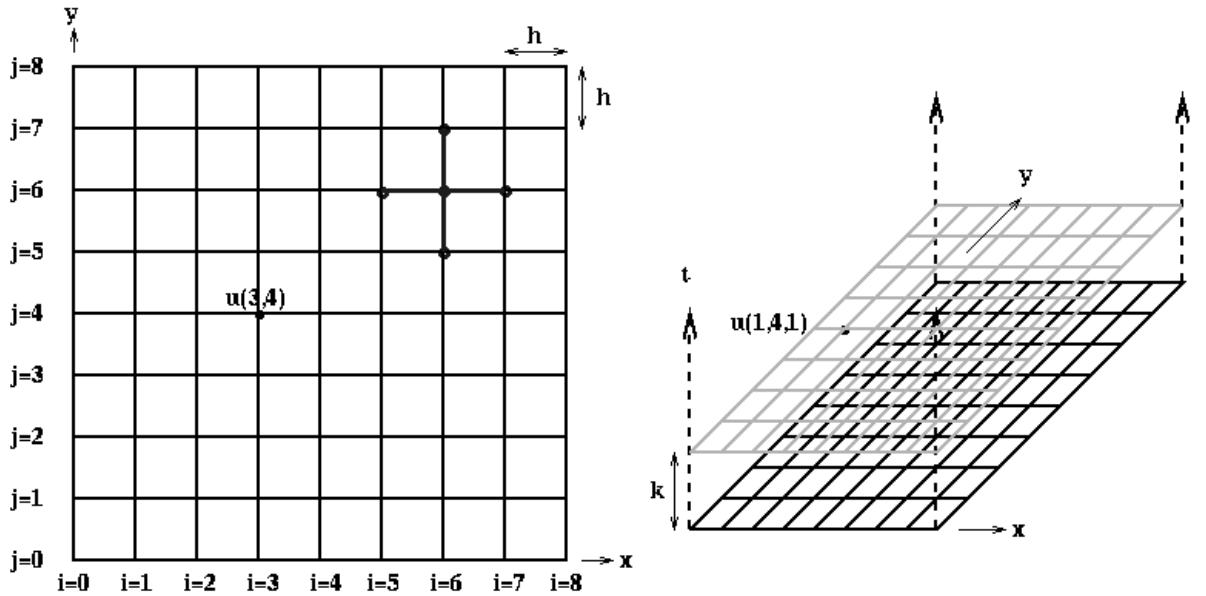
osservare la concentrazione dall'istante  $t_o$  a  $t_f$ , allora possiamo dividere

l'intervallo temporale in  $p$  incrementi uguali, ognuno di ampiezza  $\frac{t_f - t_o}{p}$ . Vedi

fig.3.9. Al passo 1, conosciamo tutti i valori della funzione,  $n$ , all'istante  $t_o$ ,

perchè questi sono dati dalla condizione iniziale:

$$(3.59) \quad g(x, y) = \left\{ N_0 (1 - R) \alpha \frac{e^{-\alpha \left( \frac{x+d}{2} \right)} + \text{Re}^{-\alpha d} e^{-\alpha \left( -x+\frac{d}{2} \right)}}{1 - R^2 e^{-2\alpha d}} \right\} \delta(y)$$



**Fig 3. 9**

In generale quello che vogliamo è ottenere  $n(\{x, y\}, t_{k+1})$  da  $n(\{x, y\}, t_k)$  e  $n(\{x_o, y_o\}, t)$  e  $n(\{x_m, y_m\}, t)$ .<sup>13</sup>

### Discretizzazione

Scriviamo le approssimazioni alle differenze finite per le derivate temporali e spaziali:

$$(3.60) \quad \left( \frac{\partial n}{\partial t} \right)_{i,j} \approx \frac{n_{i,j}^{k+1} - n_{i,j}^k}{\Delta t} \quad \forall i,j$$

$$(3.61) \quad \begin{aligned} \left( \frac{\partial n}{\partial x} \right)_{i,j}^k &\approx \frac{n_{i+1,j}^k - n_{i-1,j}^k}{2\Delta x} & \forall k,j \\ \left( \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \right)_{i,j}^k &\approx \frac{n_{i-1,j}^k - 2n_{i,j}^k + n_{i+1,j}^k}{\Delta x^2} & \forall k,j \end{aligned}$$

$$(3.62) \quad \begin{aligned} \left( \frac{\partial n}{\partial y} \right)_{i,j}^k &\approx \frac{n_{i,j+1}^k - n_{i,j-1}^k}{2\Delta y} & \forall k,i \\ \left( \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} \right)_{i,j}^k &\approx \frac{n_{i,j-1}^k - 2n_{i,j}^k + n_{i,j+1}^k}{\Delta y^2} & \forall k,i \end{aligned}$$

sostituendo nella (3.54)

<sup>13</sup> D'ora in poi scriveremo  $n_{i,j}^k$  al posto di  $n(x_i, y_j, t_k)$  così che:

i sottoscritto designa l'incremento spaziale lungo la coordinata x  
j sottoscritto designa l'incremento spaziale lungo la coordinata y  
k soprascritto designa l'incremento temporale

$$\begin{aligned}
(3.63) \quad n_{i,j}^{k+1} = & n_{i,j}^k + \Delta t \lambda \left\{ D_{a,j}^{k+1} \left[ \frac{n_{i+1,j}^{k+1} - 2n_{i,j}^{k+1} + n_{i-1,j}^{k+1}}{\Delta x^2} + \frac{n_{i,j+1}^{k+1} - 2n_{i,j}^{k+1} + n_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta y^2} \right] + \left( \frac{\partial D_a}{\partial x} \right)_{i,j}^{k+1} \frac{n_{i+1,j}^{k+1} - n_{i-1,j}^{k+1}}{2\Delta x} + \left( \frac{\partial D_a}{\partial y} \right)_{i,j}^{k+1} \frac{n_{i,j+1}^{k+1} - n_{i,j-1}^{k+1}}{2\Delta y} - U_{i,j}^{k+1} \right\} + \\
& + \Delta t (1-\lambda) \left\{ D_{a,j}^k \left[ \frac{n_{i+1,j}^k - 2n_{i,j}^k + n_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + \frac{n_{i,j+1}^k - 2n_{i,j}^k + n_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} \right] + \left( \frac{\partial D_a}{\partial x} \right)_{i,j}^k \frac{n_{i+1,j}^k - n_{i-1,j}^k}{2\Delta x} + \left( \frac{\partial D_a}{\partial y} \right)_{i,j}^k \frac{n_{i,j+1}^k - n_{i,j-1}^k}{2\Delta y} - U_{i,j}^k \right\}
\end{aligned}$$

posto  $C_x = \frac{\Delta t D_a}{\Delta x^2}$ ,  $B_x = \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{\partial D_a}{\partial x}$ ,  $C_y = \frac{\Delta t D_a}{\Delta y^2}$ ,  $B_y = \frac{\Delta t}{2\Delta y} \frac{\partial D_a}{\partial y}$  e raggruppando, ponendo

tutte le incognite (all'istante  $k+1$ ) a destra e quelle (all'istante  $k$ ) note a sinistra:

$$\begin{aligned}
(3.64) \quad & - (C_{i,j}^{k+1} - B_{i,j}^{k+1}) \lambda n_{i-1,j}^{k+1} - (C_{i,j}^{k+1} - B_{i,j}^{k+1}) \lambda n_{i,j+1}^{k+1} + (1 + 2C_{i,j}^{k+1}\lambda + 2C_{i,j}^{k+1}\lambda) n_{i,j}^{k+1} - (C_{i,j}^{k+1} + B_{i,j}^{k+1}) \lambda n_{i+1,j}^{k+1} - (C_{i,j}^{k+1} + B_{i,j}^{k+1}) \lambda n_{i,j-1}^{k+1} = \\
& = (C_{i,j}^k - B_{i,j}^k) (1-\lambda) n_{i-1,j}^k + (C_{i,j}^k - B_{i,j}^k) (1-\lambda) n_{i,j+1}^k + [1 - 2C_{i,j}^k (1-\lambda) - 2C_{i,j}^k (1-\lambda)] n_{i,j}^k + (C_{i,j}^k + B_{i,j}^k) (1-\lambda) n_{i+1,j}^k + \\
& + (C_{i,j}^k + B_{i,j}^k) (1-\lambda) n_{i,j-1}^k - \Delta t \lambda U_{i,j}^{k+1} - \Delta t (1-\lambda) U_{i,j}^k
\end{aligned}$$

se definiamo

$$\begin{aligned}
J_{diag} &= (1 + 2C_x \lambda + 2C_y \lambda), J_{hx} = -(C_x + B_x) \lambda, J_{hy} = -(C_y + B_y) \lambda, \\
J_{lx} &= -(C_x - B_x) \lambda, J_{ly} = -(C_y - B_y) \lambda, R_{diag} = [1 - 2C_x (1-\lambda) + 2C_y (1-\lambda)], \\
R_{hx} &= (C_x + B_x) (1-\lambda), R_{hy} = (C_y + B_y) (1-\lambda), R_{lx} = (C_x - B_x) (1-\lambda), R_{ly} = (C_y - B_y) (1-\lambda)
\end{aligned}$$

possiamo riscrivere l'equazione (3.59) come

$$\begin{aligned}
(3.65) \quad & J_{lyi,j}^{k+1} n_{i,j-1}^{k+1} + J_{lxi,j}^{k+1} n_{i-1,j}^{k+1} + J_{diagi,j}^{k+1} n_{i,j}^{k+1} + J_{hx,i,j}^{k+1} n_{i+1,j}^{k+1} + J_{hyi,j}^{k+1} n_{i,j+1}^{k+1} = \\
& = R_{lyi,j}^k n_{i,j-1}^k + R_{lxi,j}^k n_{i-1,j}^k + R_{diagi,j}^k n_{i,j}^k + R_{hx,i,j}^k n_{i+1,j}^k + R_{hyi,j}^k n_{i,j+1}^k - \Delta t \lambda U_{i,j}^{k+1} - \Delta t (1-\lambda) U_{i,j}^k
\end{aligned}$$

Queste equazioni valgono per tutti i nodi interni alla griglia.<sup>14</sup>

Ancora abbiamo un sistema di equazioni algebriche lineari, la cui soluzione in termini matriciali può essere scritta, per  $J \neq 0$  come:

$$(3.66) \quad n^{k+1} = J^{-1} R$$

dove la matrice  $J$  è lo Jacobiano,<sup>15</sup> e il vettore  $R$  è il residuo.

<sup>14</sup> Vedi nota 5.

<sup>15</sup> Se ci sono  $m_x$  intervalli spaziali nella direzione x, ci sono  $m_x + 1$  nodi nella direzione x. Se ci sono  $m_y$  intervalli spaziali nella direzione y, ci sono  $m_y + 1$  nodi nella direzione y. Per condizioni al contorno di tipo Neumann, se ci sono  $(m_x + 1)(m_y + 1)$  nodi nella griglia allora ci saranno  $m_u = (m_x + 3)(m_y + 3)$  incognite. La matrice  $J$  è una matrice di dimensioni  $m_u \times m_u$ .

### Condizioni al contorno

Considereremo ora le condizioni al contorno (tipo Neumann) nella loro forma più generale bidimensionale lungo la direzione x:

$$(3.67) \quad D_a \frac{\partial n}{\partial x} = \pm S n$$

utilizzando l'approssimazione alle *differenze al centro*, per la derivata spaziale abbiamo all'istante  $k+1$ :

$$(3.68) \quad D_{ai,j}^{k+1} \left( \frac{n_{i+1,j}^{k+1} - n_{i-1,j}^{k+1}}{2\Delta x} \right) = \pm S_{i,j}^{k+1} n_{i,j}^{k+1}$$

riordiniamo, come fatto per la PDE, mettendo tutte le incognite all'istante  $k+1$  sul lato sinistro e il resto sul lato destro

$$(3.69) \quad - \left( \frac{D_{ai,j}^{k+1}}{2\Delta x} \right) n_{i-1,j}^{k+1} m S_{i,j}^{k+1} n_{i,j}^{k+1} + \left( \frac{D_{ai,j}^{k+1}}{2\Delta x} \right) n_{i+1,j}^{k+1} = 0$$

Quest'equazione verrà usata per tutti i nodi immaginari creati per trattare le condizioni al contorno di Neumann.

## Appendice al Capitolo 3

### A.3.1 Diffusività ambipolare

Al fine di poter lavorare anche ad alti livelli di iniezione in luogo del coefficiente di diffusività ricavato dall'equazione di Einstein, si è usato la diffusività ambipolare  $D_a$  [25] data dalla seguente espressione:

$$(3.70) \quad D_a = \frac{D_n D_p (n + p)}{D_n n + D_p p}$$

che, a bassi livelli di iniezione si riduce alla diffusività dei portatori minoritari  $D_n$  per un semiconduttore di tipo  $p$  oppure  $D_p$  per un semiconduttore di tipo  $n$ .

Inoltre come è possibile notare osservando l'equazione (3.41), si è trascurato il contributo del campo elettrico dovuto alla differenza di mobilità tra elettroni e lacune. Si può dimostrare che data la densità di corrente per elettroni e lacune, (per semplicità ci limiteremo alla trattazione nel caso monodimensionale):

$$(3.71) \quad \begin{cases} J_p = q\mu_p pE - qD_p \frac{\partial p}{\partial x} = \sigma_p^g E - qD_p^g p \\ J_n = q\mu_n nE + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} = \sigma_n^g E + qD_n^g n \end{cases}$$

e considerando l'equazione di continuità per elettroni e lacune, posto il termine di generazione uguale a zero, abbiamo:

$$(3.72) \quad \delta_n \equiv \delta_p \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} = -U - \frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} \\ \frac{\partial n}{\partial t} = -U + \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} \end{cases}$$

se ora eseguiamo la derivata spaziale dell'equazione (3.71):

$$(3.73) \quad \frac{\partial n}{\partial x} \equiv \frac{\partial p}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \equiv \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial J_p}{\partial x} = \sigma_p^g E + q\mu_p^g p E - qD_p^g p \\ \frac{\partial J_n}{\partial x} = \sigma_n^g E + q\mu_n^g p E + qD_n^g p \end{cases}$$

e sostituiamo il valore di  $\frac{\partial J}{\partial x}$  nell'equazione (3.72) otteniamo:

$$(3.74) \quad \begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} = -U - \frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} = -U - \frac{1}{q} \left\{ \sigma_p \overset{g}{E} + q \mu_p \overset{g}{p} E - q D_p \overset{g}{p} \right\} \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -U + \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} = -U + \frac{1}{q} \left\{ \sigma_n \overset{g}{E} + q \mu_n \overset{g}{p} E + q D_n \overset{g}{p} \right\} \end{cases}$$

Moltiplichiamo ambo i membri dell'espressione (3.74) per, rispettivamente,

$\sigma_n$  e  $\sigma_p$  ottenendo:

$$(3.75) \quad \begin{cases} \sigma_n \frac{\partial p}{\partial t} = -\sigma_n U - \frac{1}{q} \left\{ \sigma_n \sigma_p \overset{g}{E} + \sigma_n q \mu_p \overset{g}{p} E - \sigma_n q D_p \overset{g}{p} \right\} \\ \sigma_p \frac{\partial p}{\partial t} = -\sigma_p U + \frac{1}{q} \left\{ \sigma_n \sigma_p \overset{g}{E} + \sigma_p q \mu_n \overset{g}{p} E + \sigma_p q D_n \overset{g}{p} \right\} \end{cases}$$

$$(3.76) \quad \sigma \frac{\partial p}{\partial t} = -\sigma U + \frac{1}{q} \left\{ -\sigma_n q \mu_p \overset{g}{p} E + \sigma_p q \mu_n \overset{g}{p} E + \sigma_n q D_p \overset{g}{p} + \sigma_p q D_n \overset{g}{p} \right\} =$$

dove  $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$ ,

$$(3.77) \quad = -\sigma U + \frac{1}{q} \left\{ -\sigma_n \sigma_p \frac{p}{p} \overset{g}{E} + \sigma_p \sigma_n \frac{p}{n} \overset{g}{E} + qp (\sigma_n D_p + \sigma_p D_n) \right\} =$$

$$(3.78) \quad = -\sigma U + \frac{1}{q} \left\{ \sigma_n \sigma_p \overset{g}{p} E \left( -\frac{1}{p} + \frac{1}{n} \right) + qp (\sigma_n D_p + \sigma_p D_n) \right\} =$$

$$(3.79) \quad = -\sigma U + \left\{ p \overset{g}{E} (-\sigma_n \mu_p + \sigma_p \mu_n) + p (\sigma_n D_p + \sigma_p D_n) \right\} =$$

$$(3.80) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -U - \left\{ p \overset{g}{E} \left[ \frac{\sigma_n \mu_p - \sigma_p \mu_n}{\sigma} \right] - p \left( \frac{\sigma_n D_p + \sigma_p D_n}{\sigma} \right) \right\}$$

Arrivati a questo punto se scriviamo:

$$(3.81) \quad \frac{\sigma_n \mu_p - \sigma_p \mu_n}{\sigma} = \mu_n \mu_p \frac{(n-p)}{n \mu_n + p \mu_p} \equiv \mu_n \mu_p \frac{N_D}{n \mu_n + p \mu_p}$$

$$(3.82) \quad \frac{\sigma_n D_p + \sigma_p D_n}{\sigma} = \frac{\mu_n n D_p + \mu_p p D_n}{\mu_n n + \mu_p p} = \frac{D_n D_p (n+p)}{D_n n + D_p p} \equiv D_a$$

Inoltre se esprimiamo il campo elettrico  $E$  nel seguente modo:

$$(3.83) \quad \begin{cases} J_p = \sigma_p E - q D_p \overset{g}{p} \\ J_n = \sigma_n E + q D_n \overset{g}{n} \end{cases} \Rightarrow J = 0 = J_n + J_p = \sigma E + q (D_n - D_p) \overset{g}{p} \Rightarrow E = -q \frac{\partial p}{\partial x} \frac{D_n - D_p}{\sigma_n + \sigma_p}$$

tralasciando il termine  $-\frac{J}{\sigma_n + \sigma_p}$ , possiamo scrivere:

$$(3.84) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -U + q \left( \frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 \frac{D_n - D_p}{\sigma_n + \sigma_p} \frac{\mu_n \mu_p N_D}{n \mu_n + p \mu_p} + D_a \frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{L_p}$$

Nel caso statico, cioè quando  $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$ , considerando prima il caso di *bassi livelli di iniezione*, tralasciamo il secondo termine a destra nell'equazione (3.84), e ponendo  $D_a = D_p$ , otteniamo:

$$(3.85) \quad 0 = -\frac{\Delta p}{\tau_p} + D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} \Rightarrow \Delta p(x) = \Delta p(0) e^{-\frac{x}{L_p}} \Rightarrow \frac{d \Delta p}{dx} = -\frac{\Delta p(x)}{L_p}$$

a questo punto il terzo termine a destra dell'equazione (3.84) vale

$$D_p \frac{\Delta p}{L_p^2} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad \text{mentre} \quad \text{il} \quad \text{secondo} \quad \text{termine} \quad \text{vale}$$

$$q \left( \frac{\Delta p}{L_p} \right)^2 \frac{D_n - D_p}{q \mu_n N_D} \frac{\mu_n \mu_p N_D}{N_D \mu_n} = D_p \frac{\Delta p}{L_p^2} \left[ \frac{\left( \frac{D_n}{D_p} - 1 \right) \mu_p}{\mu_n} \frac{\Delta p}{N_D} \right] = D_p \frac{\Delta p}{L_p^2}, \quad \text{visto che risulta}$$

$$\frac{\Delta p}{N_D} = 1.$$

Consideriamo ora il caso di *alti livelli di iniezione*, per cui vale che  $n \approx p \approx N_D$  ed in tal caso si ha:

$$(3.86) \quad 0 = -\frac{\Delta p}{\tau_a} + D_a \frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{L_a} \text{ con } D_a = \frac{2 D_n D_p}{D_n + D_p} \Rightarrow \Delta p(x) = \Delta p(0) e^{-\frac{x}{L_a}} \text{ dove } L_a = \sqrt{\tau_a D_a}$$

Analogamente a quanto fatto in precedenza possiamo osservare che il terzo termine a destra dell'equazione (3.84) vale  $D_a \frac{\Delta p}{L_a^2} = D_a \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$ , mentre il secondo termine della stessa equazione vale:

$$q \left( \frac{\Delta p}{L_a} \right)^2 \frac{D_n - D_p}{q(\mu_n + \mu_p) \Delta p} \frac{\mu_n \mu_p N_D}{(\mu_n + \mu_p) \Delta p} = D_a \frac{\Delta p}{L_a^2} \left[ \frac{D_n - D_p}{D_a} \frac{\mu_n \mu_p}{(\mu_n + \mu_p)^2} \frac{N_D}{\Delta p} \right] = D_a \frac{\Delta p}{L_a^2}$$

Alla luce di quanto dimostrato si vede che l'approssimazione di considerare il campo elettrico trascurabile nell'equazione (3.41) è lecita.

### A.3.2 Velocità di ricombinazione netta

Il simulatore per quanto riguarda la velocità di ricombinazione è in grado di supportare una relazione del tipo:

$$(3.87) \quad U = U_{SRH} + U_{Auger} + U_{dir}$$

dove i termini presenti nell'equazione (3.88) sono dati da:

$$(3.88) \quad U_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_p \left[ n + n_{ie} \exp\left(\frac{Etrap}{kT}\right) \right] + \tau_n \left[ p + n_{ie} \exp\left(\frac{-Etrap}{kT}\right) \right]}$$

$$(3.89) \quad U_{Auger} = Augn(pn^2 - nn_{ie}^2) + Augp(np^2 - pn_{ie}^2)$$

$$(3.90) \quad U_{dir} = C_{direct}(np - n_{ie}^2)$$

I listati MatLab che implementano la diffusività ambipolare, la mobilità analitica e la velocità di ricombinazione netta descritti sopra sono riportati in appendice B .

# Capitolo 4

## Confronto a bassi ed alti livelli di iniezione

### 4.1 Introduzione

In questo capitolo sarà effettuato il confronto tra il simulatore realizzato attraverso la soluzione numerica dell'equazione della diffusione con il metodo delle differenze finite, ed il modello analitico per il caso dei bassi livelli di iniezione ed un simulatore commerciale molto affermato quale il simulatore MEDICI per il caso di alti livelli di iniezione. I confronti saranno effettuati sia per il caso monodimensionale che per quello bidimensionale.

### 4.2 Confronto a bassi livelli di iniezione tra il modello di Ling e Ajmera e la rappresentazione alle differenze finite

#### 4.2.1 Simulazione 1D

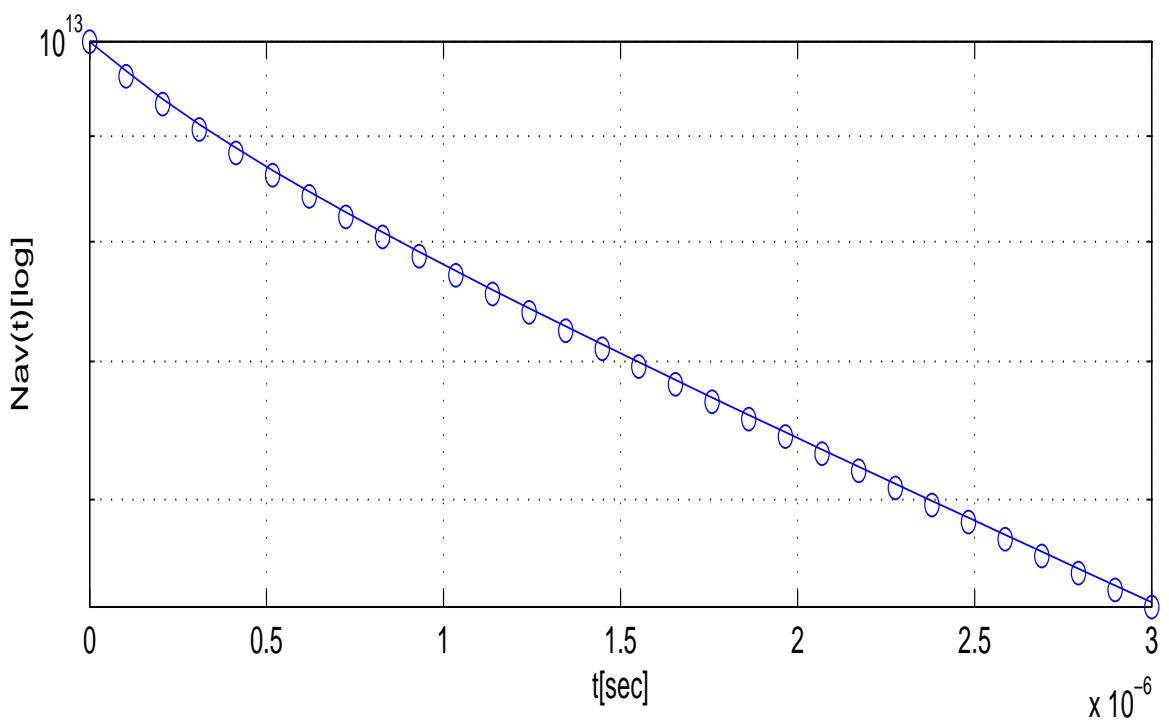
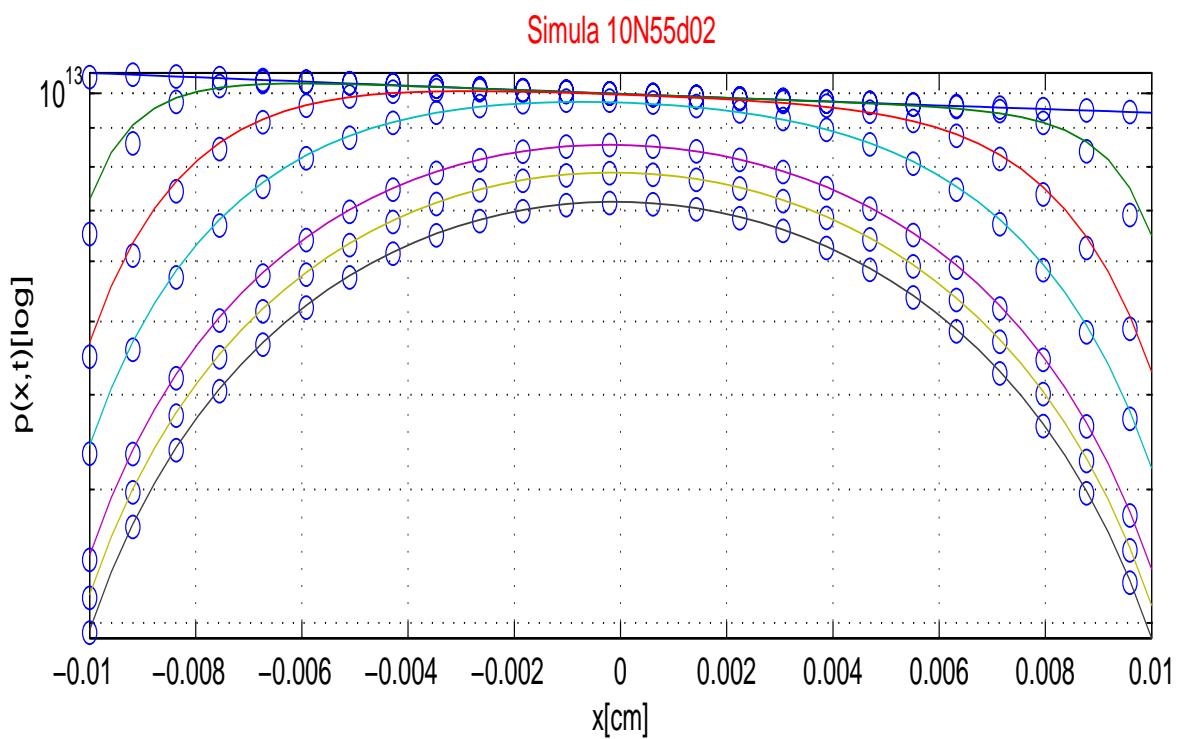
In questo paragrafo riportiamo una serie di confronti tra i risultati ottenuti con il modello di Ling e Ajmera nel caso monodimensionale visto nel capitolo 2 e quello ottenuto attraverso il metodo numerico delle differenze finite 1D visto nel capitolo precedente. Le simulazioni riportate sono effettuate in regimi di bassi livelli di iniezione e su campioni di diverso spessore, e precisamente si è considerato campioni di celle solari sottili (200  $\mu\text{m}$ ), normali (1 mm) e spesse (3 mm), facendo riferimento allo spessore delle celle solari che normalmente è possibile trovare in commercio. Si sono considerati inoltre sia campioni di tipo p che di tipo n ed infine abbiamo considerato impulsi laser di diversa lunghezza d'onda. Nelle simulazioni riportate in questo paragrafo si è indicato il risultato ottenuto con il metodo delle differenze finite con una curva a tratto continuo, mentre il risultato ottenuto con il modello di Ling e Ajmera è

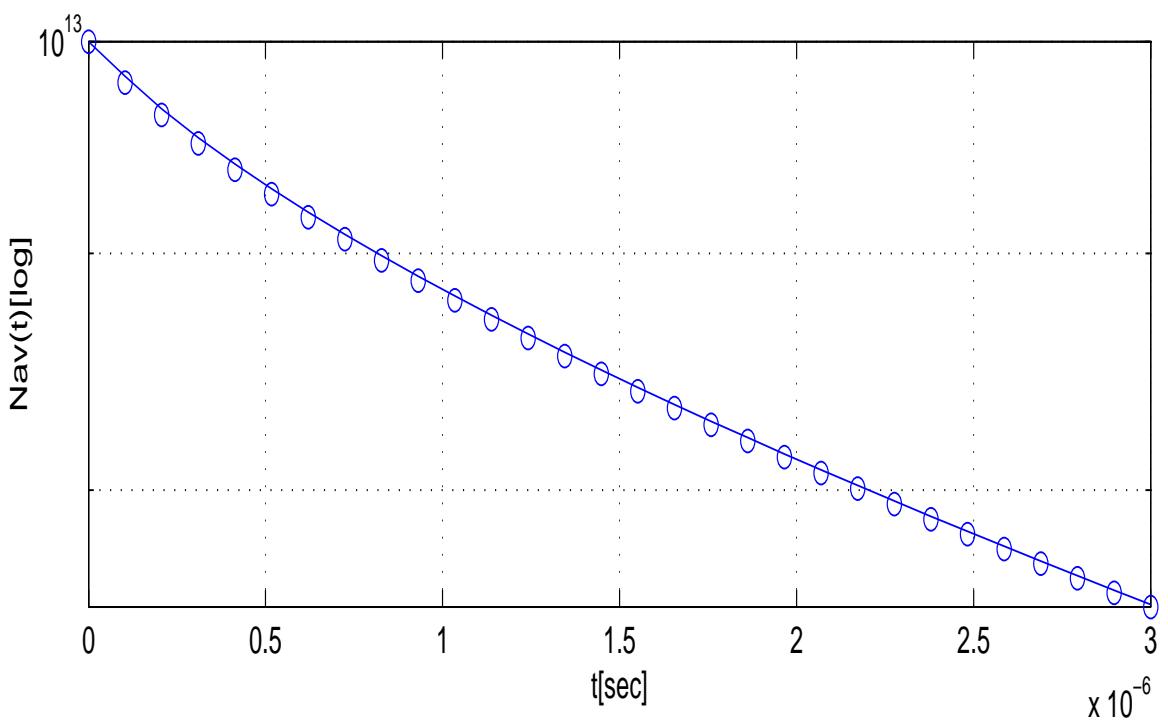
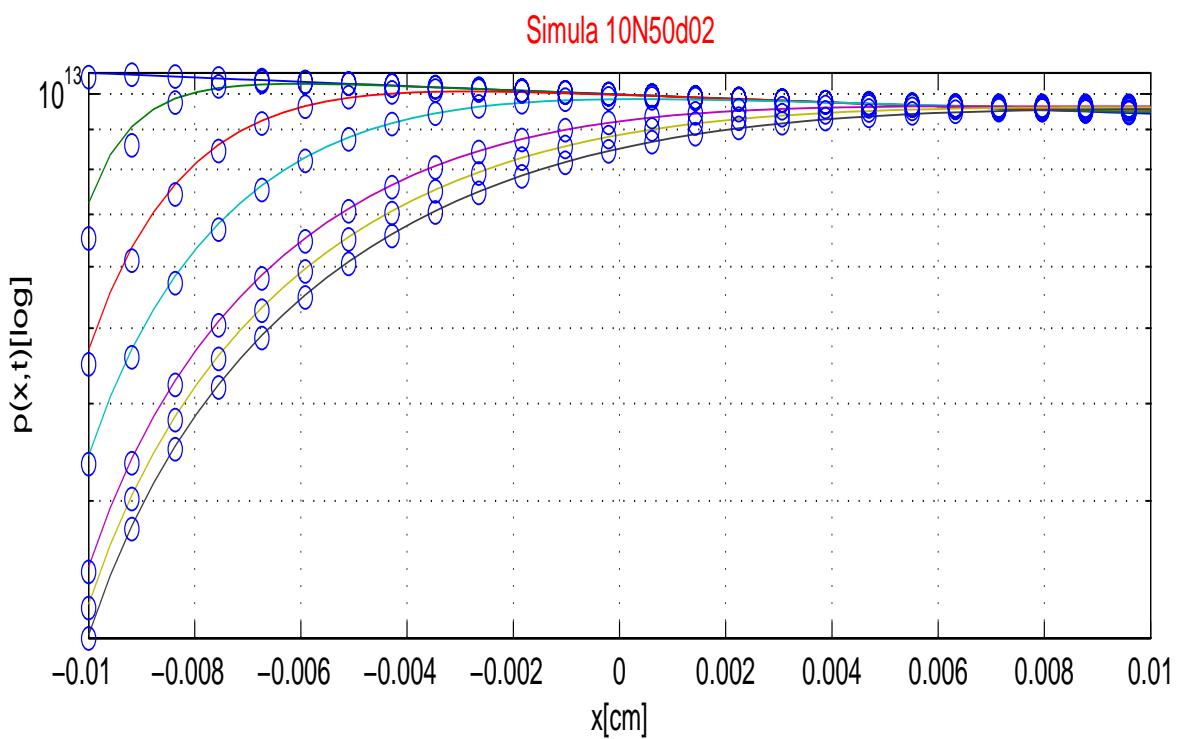
indicato con dei cerchi. Per le stesse simulazioni si sono considerati istanti di tempo diversi, presi con passo di  $5\mu\text{s}$ , in modo da considerare lo stesso processo al trascorrere del tempo. Si riporta inoltre il valore di  $N_{av}(t)$ , densità media dei portatori in eccesso di cui si è detto nel capitolo 2. Tutti i grafici sono in scala semilogaritmica, salvo avviso contrario.

Di seguito si riportano le tabelle contenenti il resoconto di tutte le simulazioni eseguite, ed i relativi grafici.

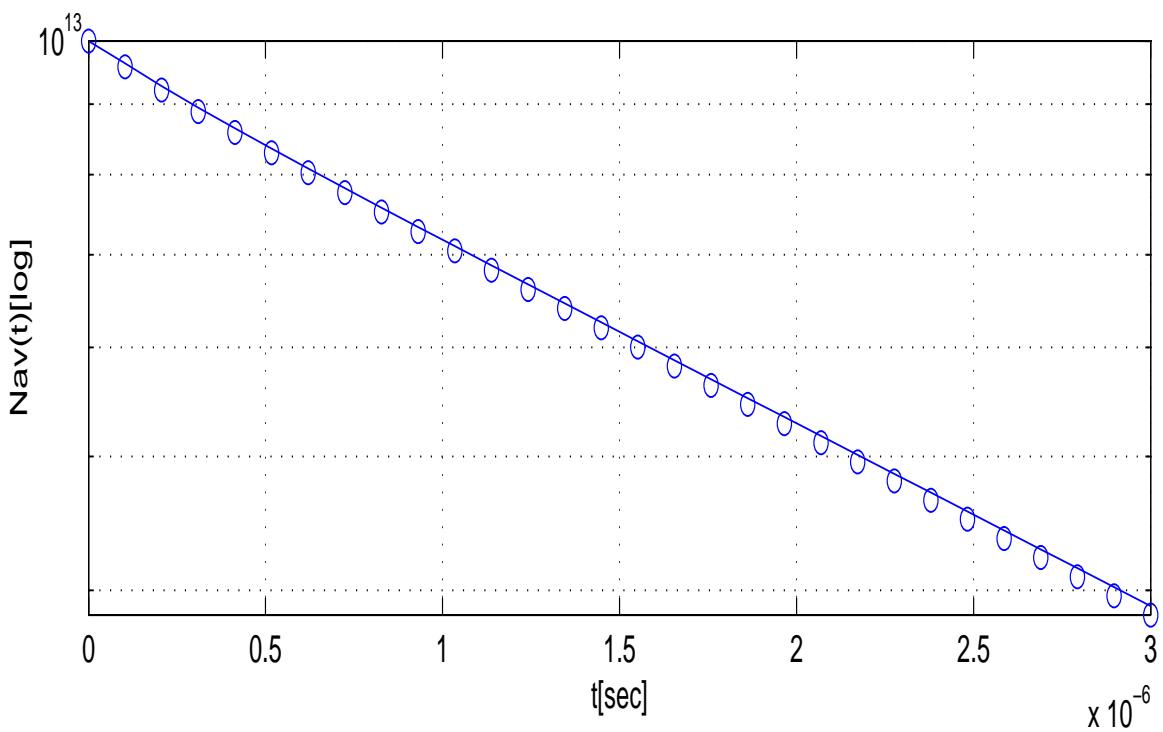
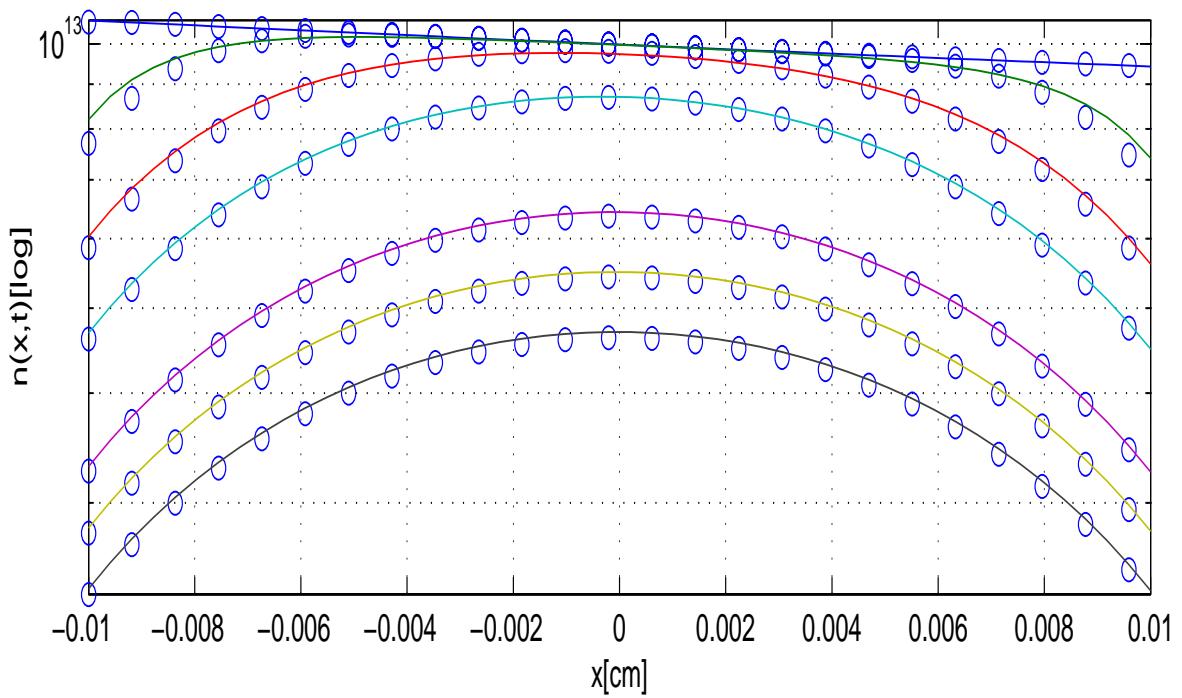
**Tabella 1( $\alpha=10$ )**

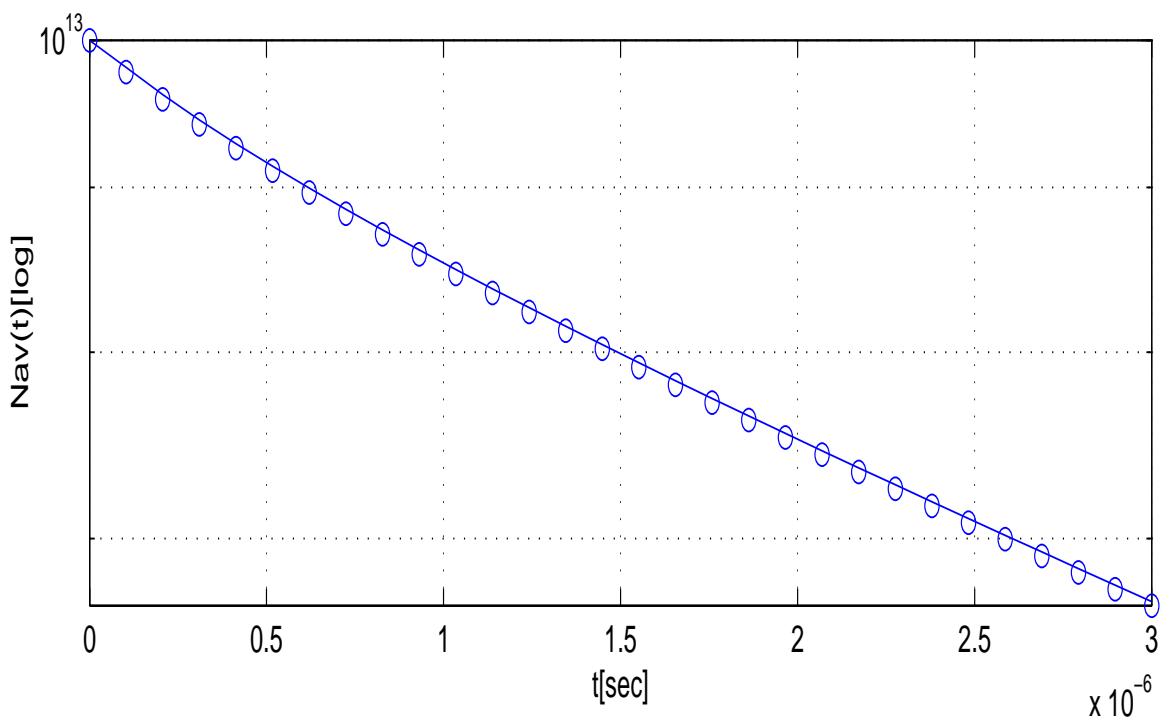
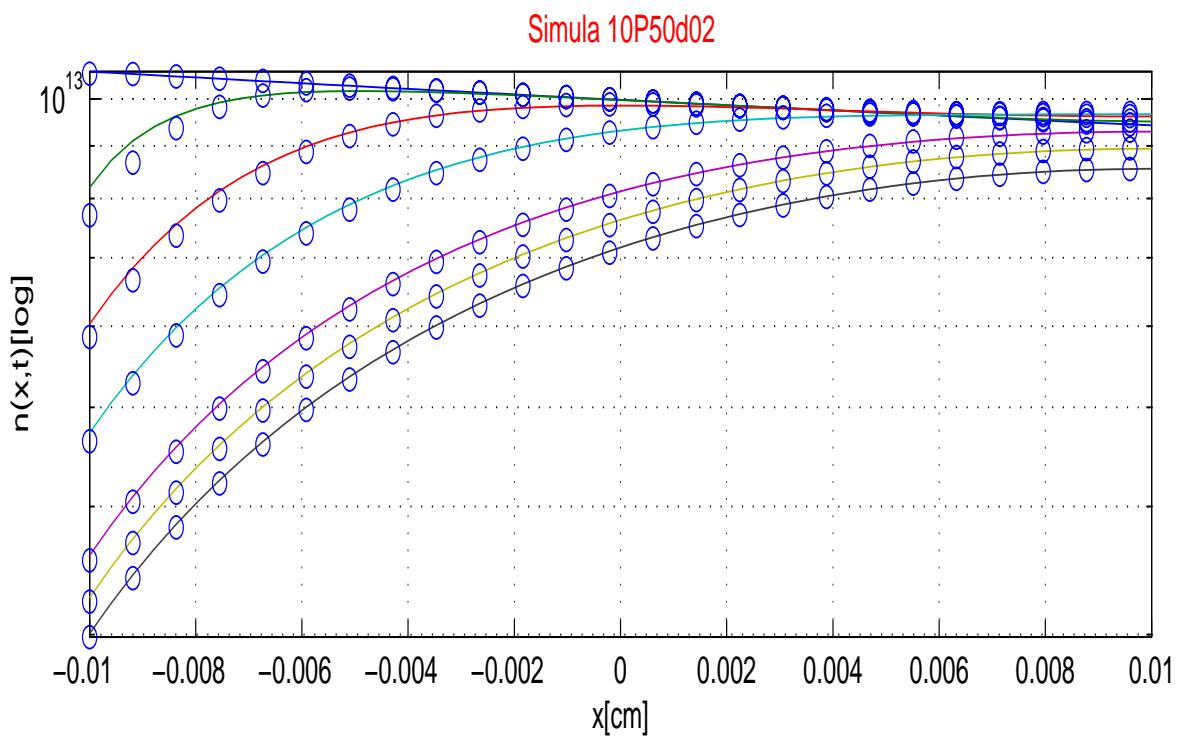
<b>Simula 10N55d02</b> Type N $d=200\mu\text{m}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula10N50d02</b> Type N $d=200\mu\text{m}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10P55d02</b> Type P $d=200\mu\text{m}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10P50d02</b> Type P $d=200\mu\text{m}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$
<b>Simula 10N55d1</b> Type N $d=1\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10N50d1</b> Type N $d=1\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10P55d1</b> Type P $d=1\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10P50d1</b> Type P $d=1\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$
<b>Simula 10N55d3</b> Type N $d=3\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10N50d3</b> Type N $d=3\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10P55d3</b> Type P $d=3\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$	<b>Simula 10P50d3</b> Type P $d=3\text{mm}$ $N=1e16\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S1=5000\text{cm/s}$ $S2=000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau b=500\mu\text{s}$



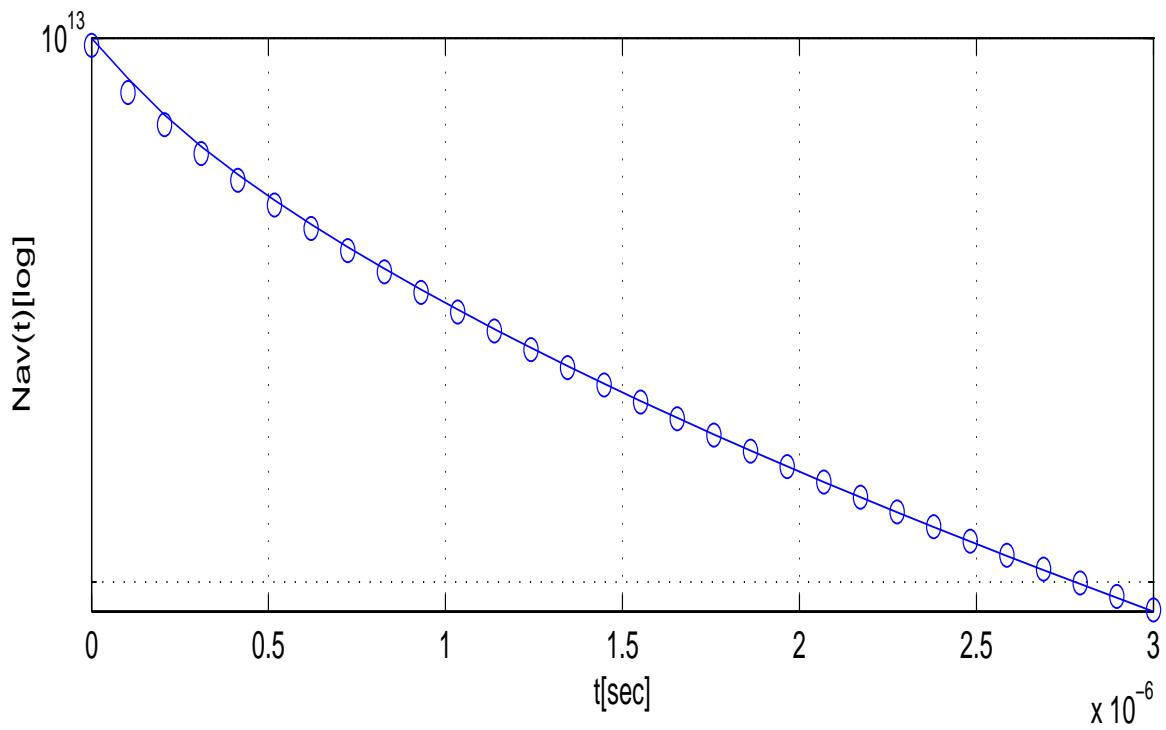
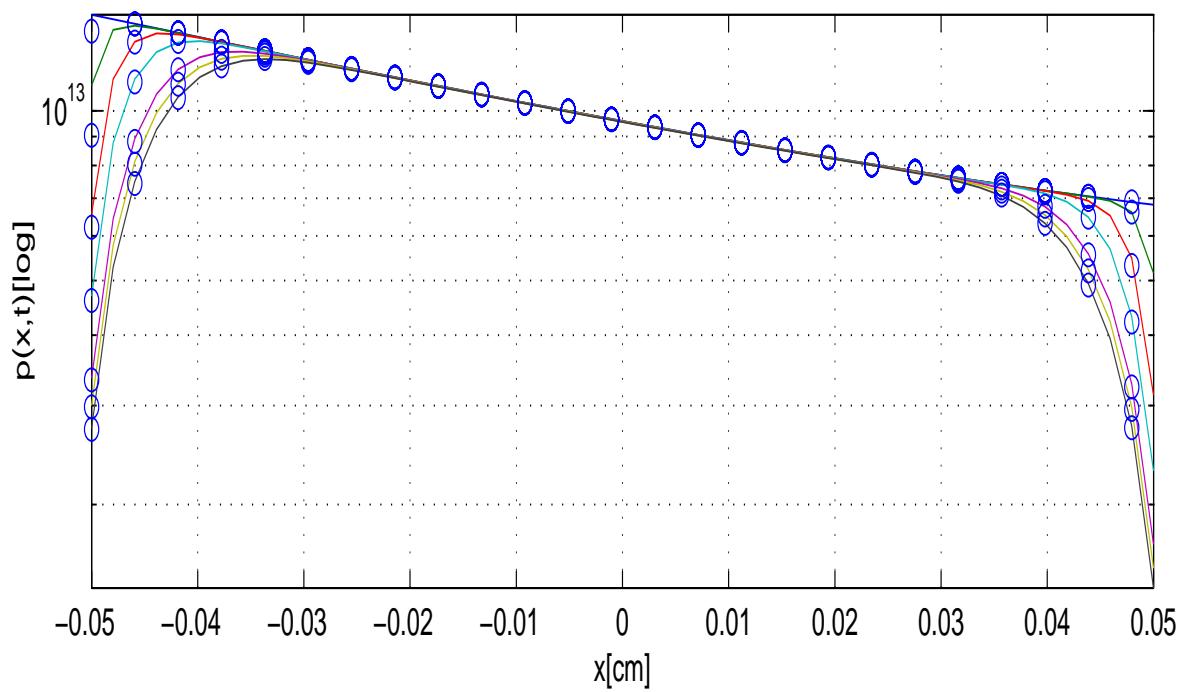


Slmula 10P55d02

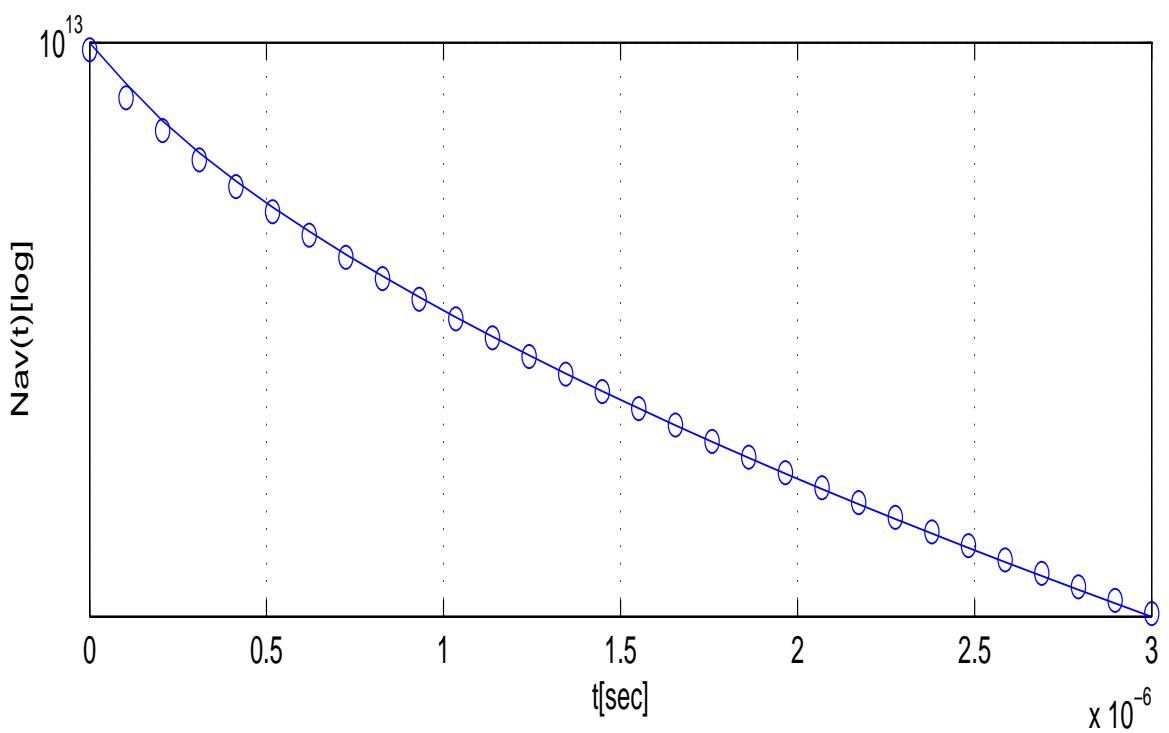
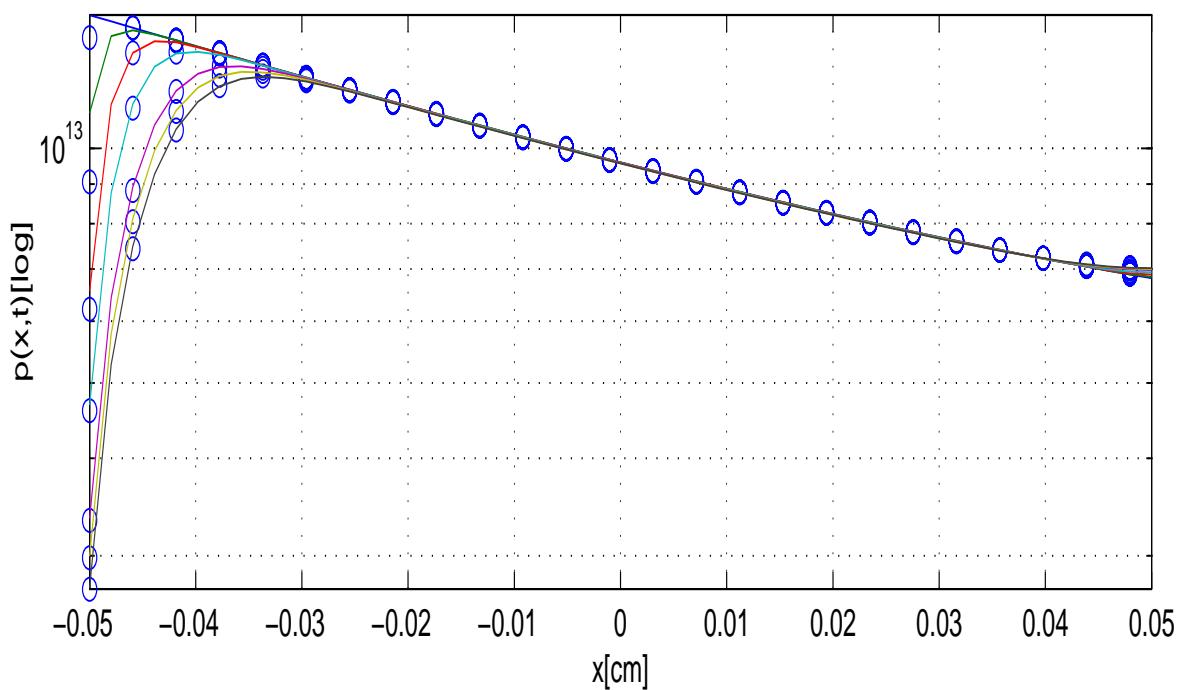




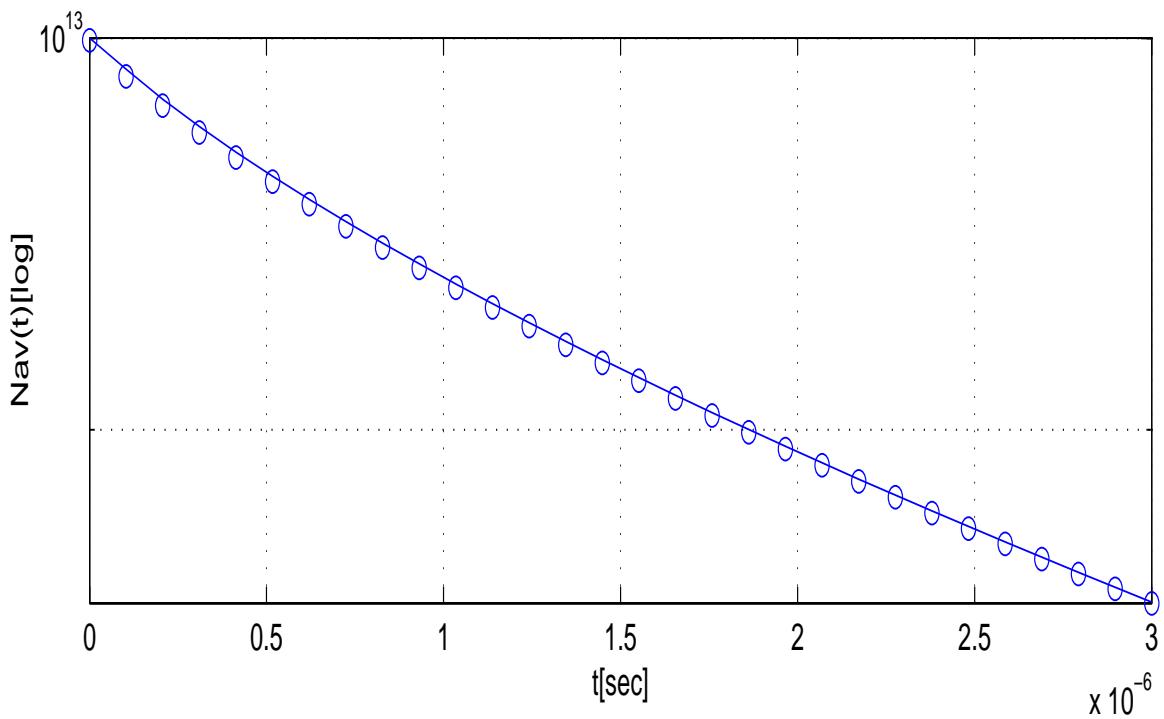
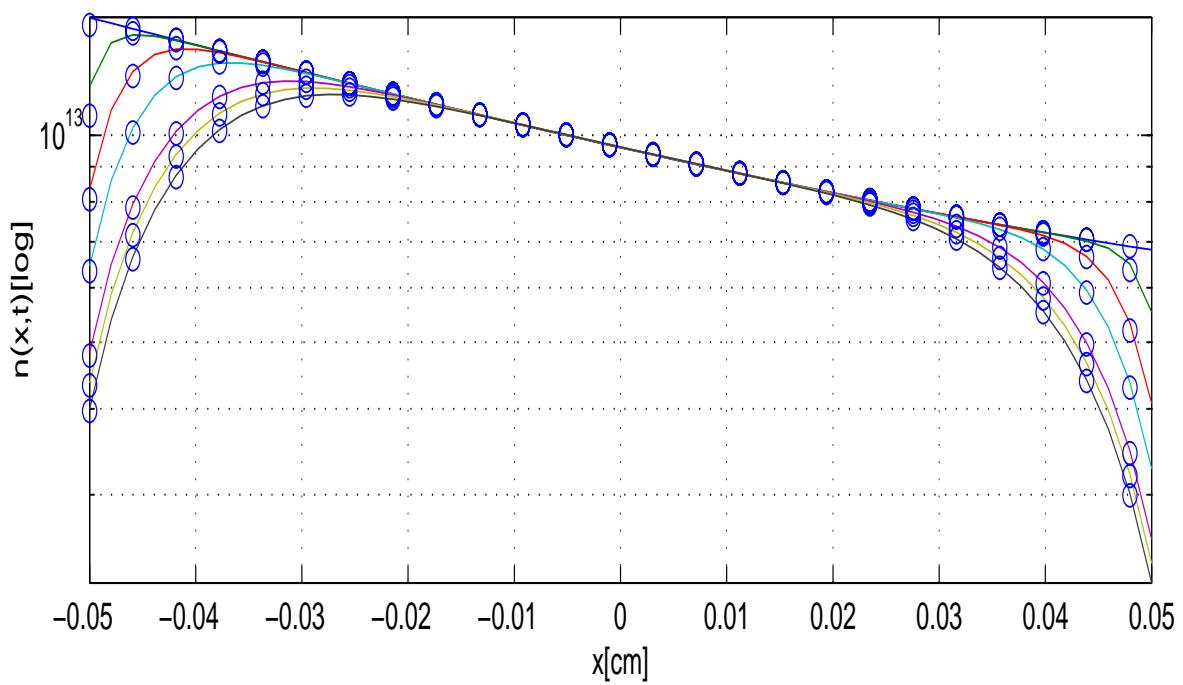
Simula 10N55d1



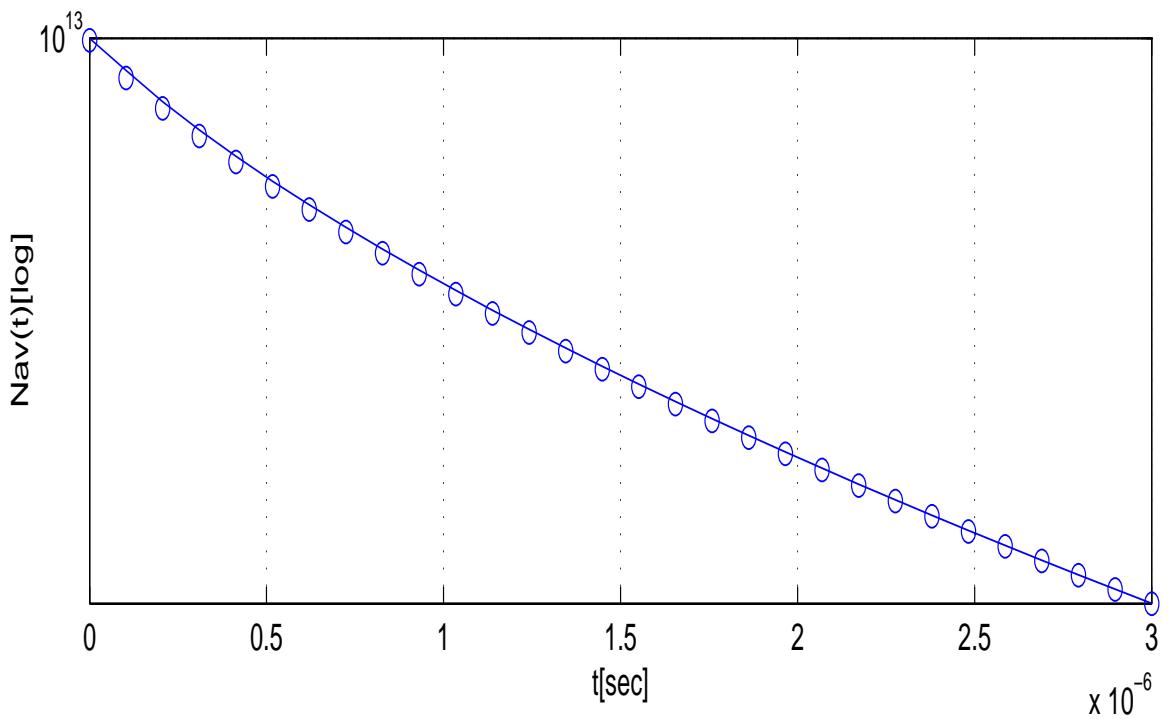
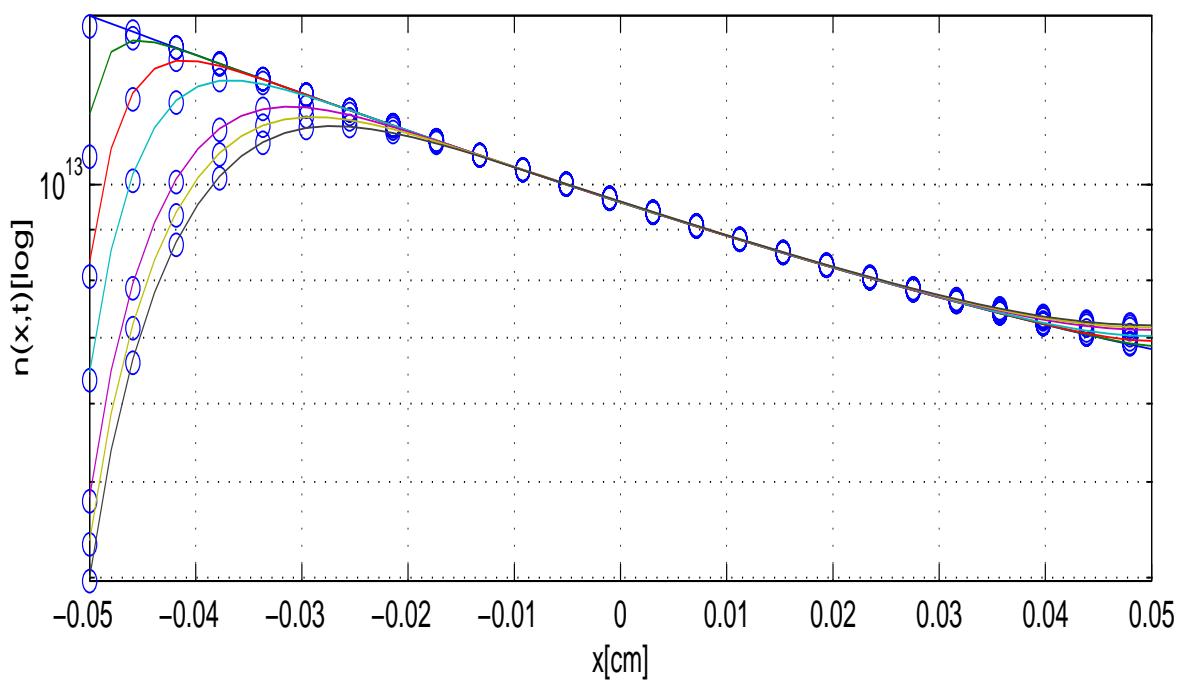
Simula 10N50d1



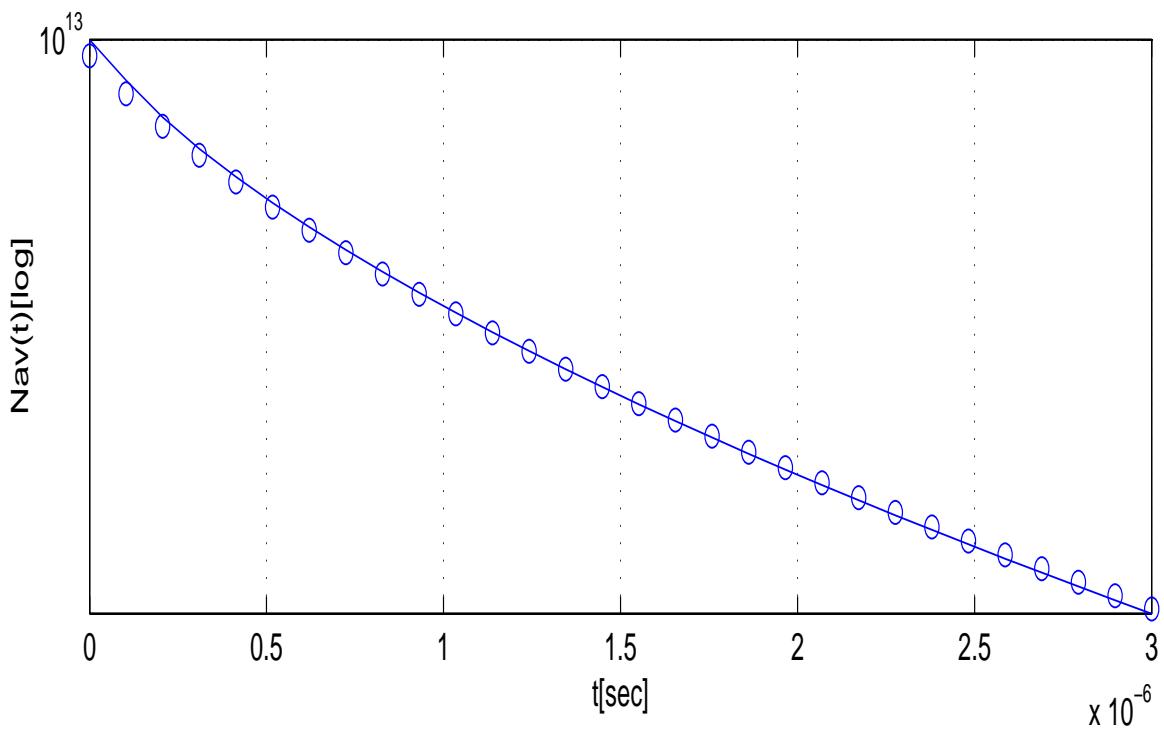
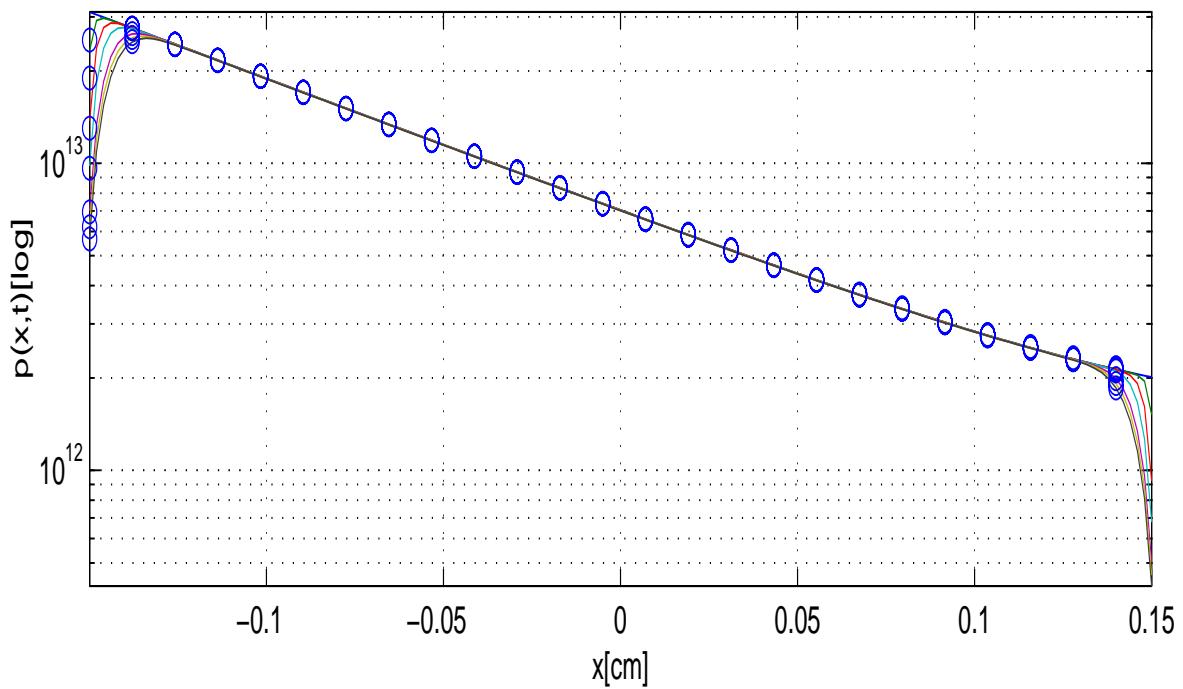
Simula 10P55d1



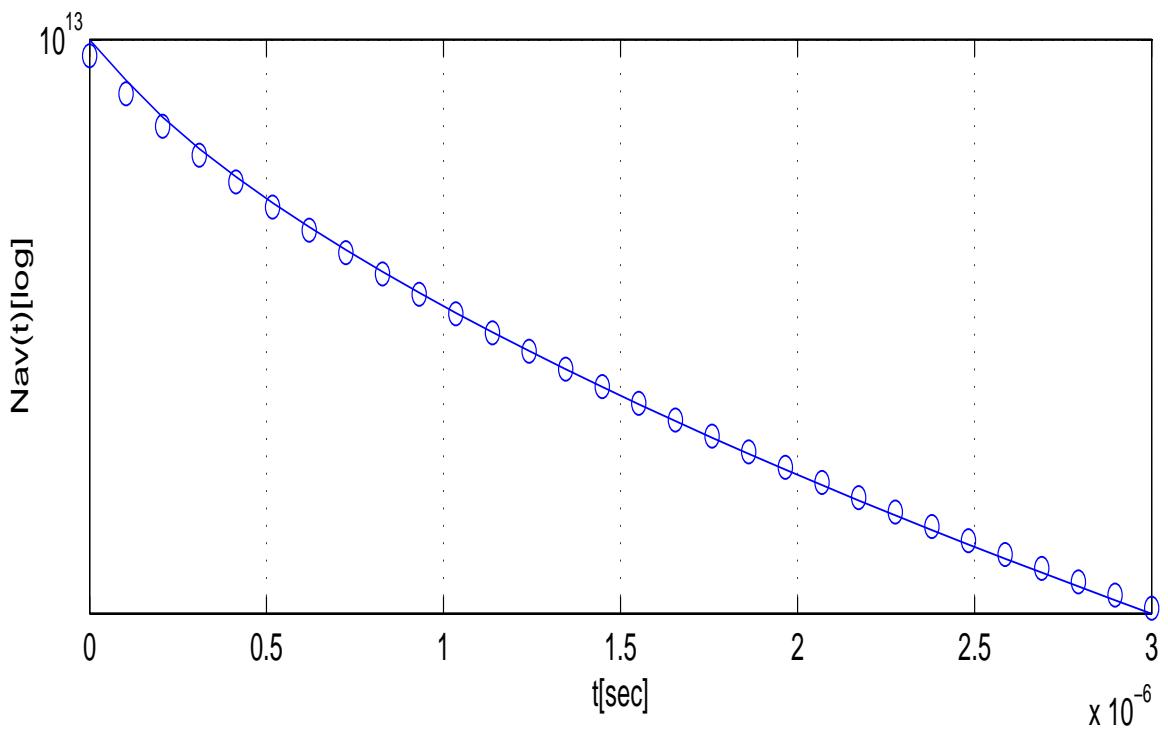
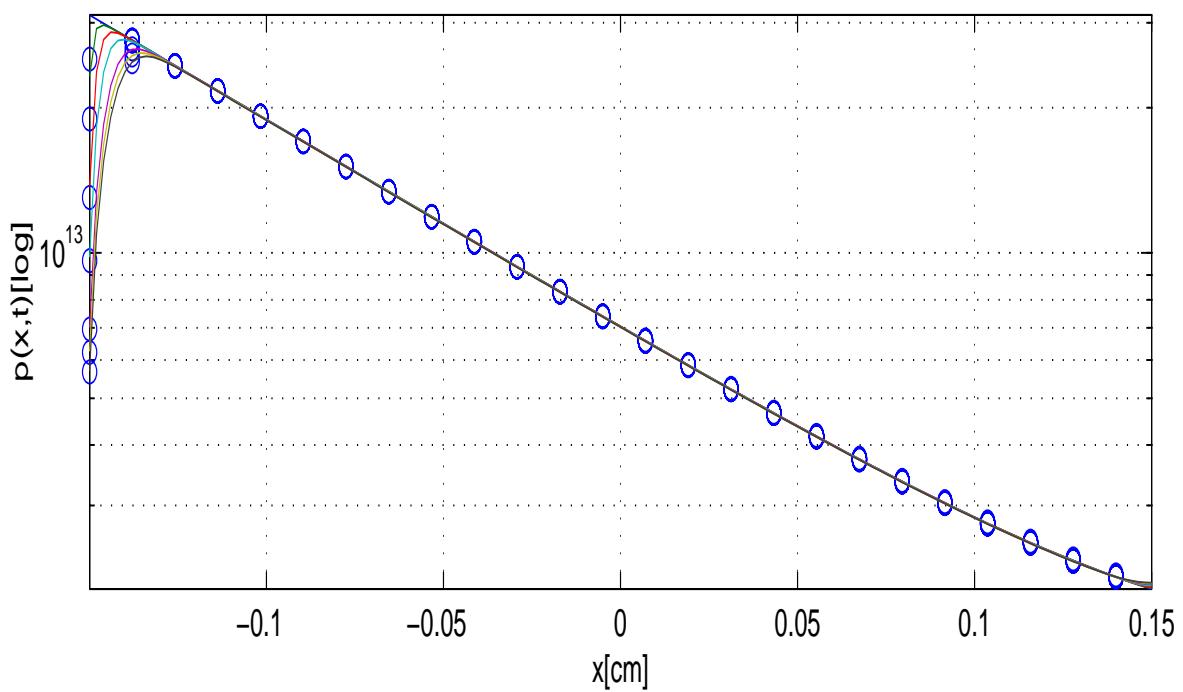
Simula 10P50d1



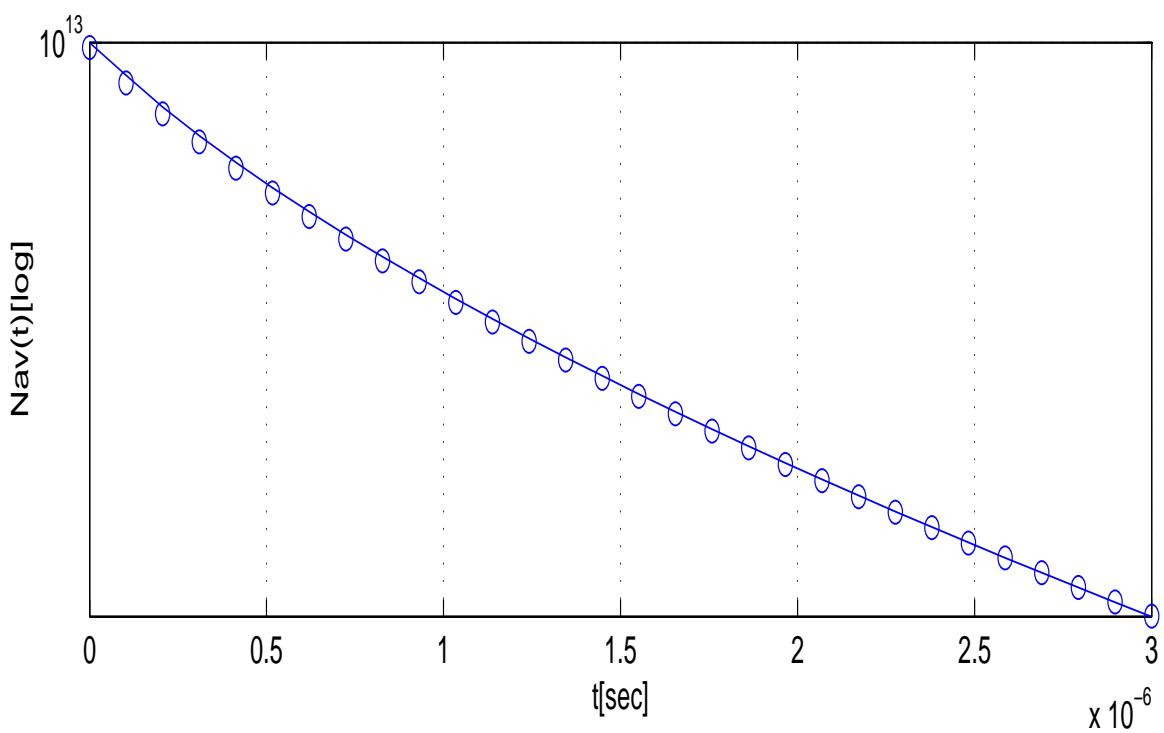
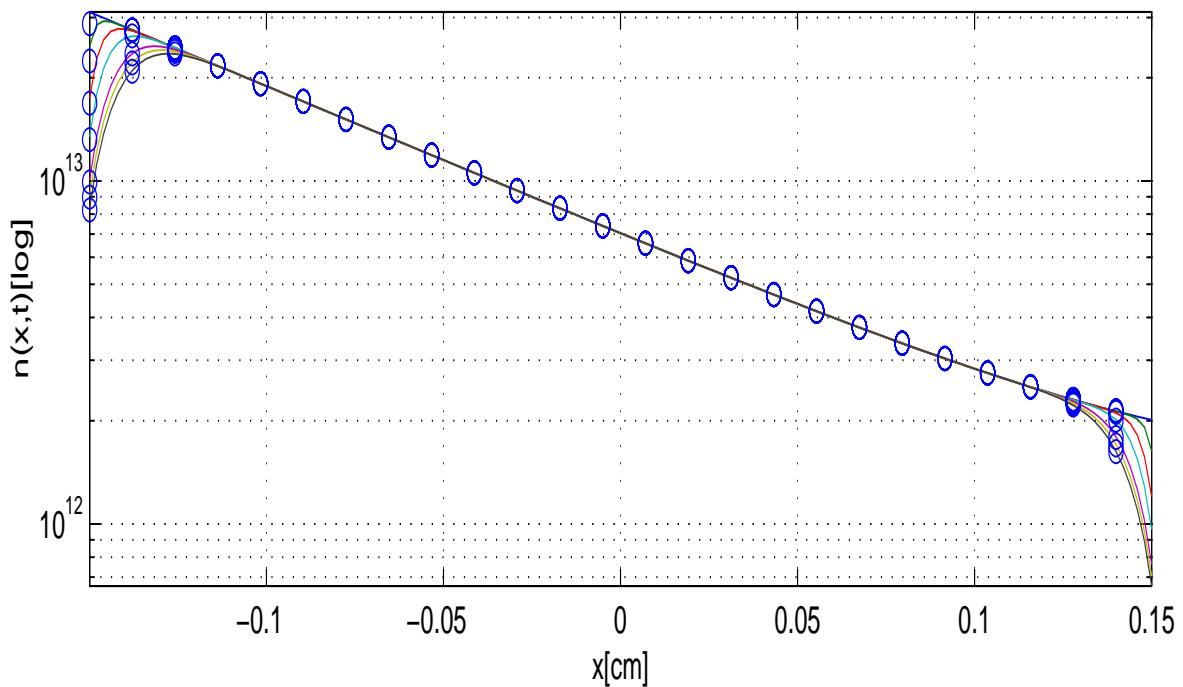
Simula 10N55d3



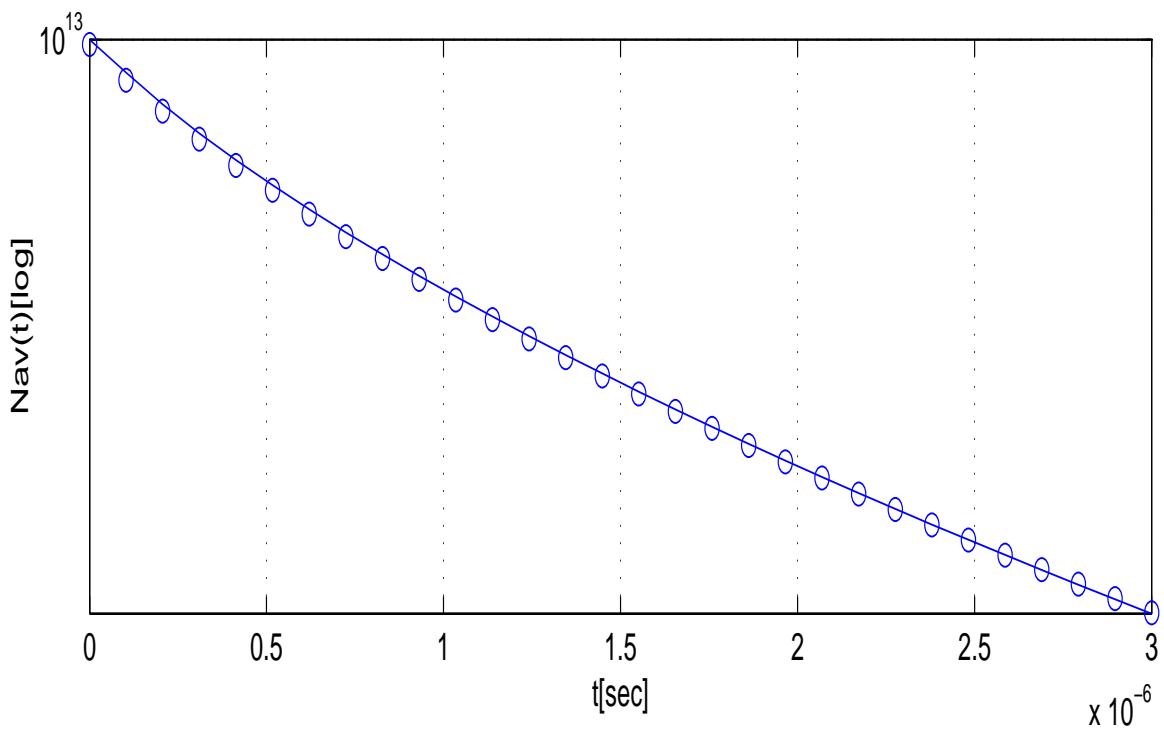
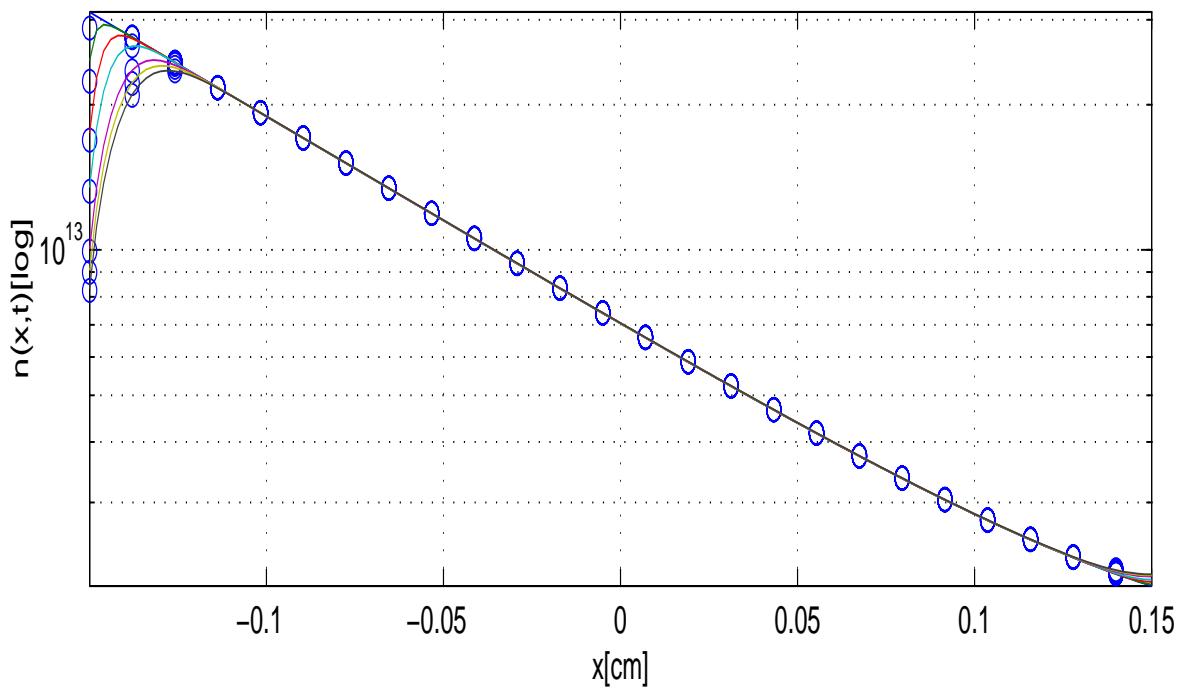
Simula 10N50d3



Simula 10P55d3

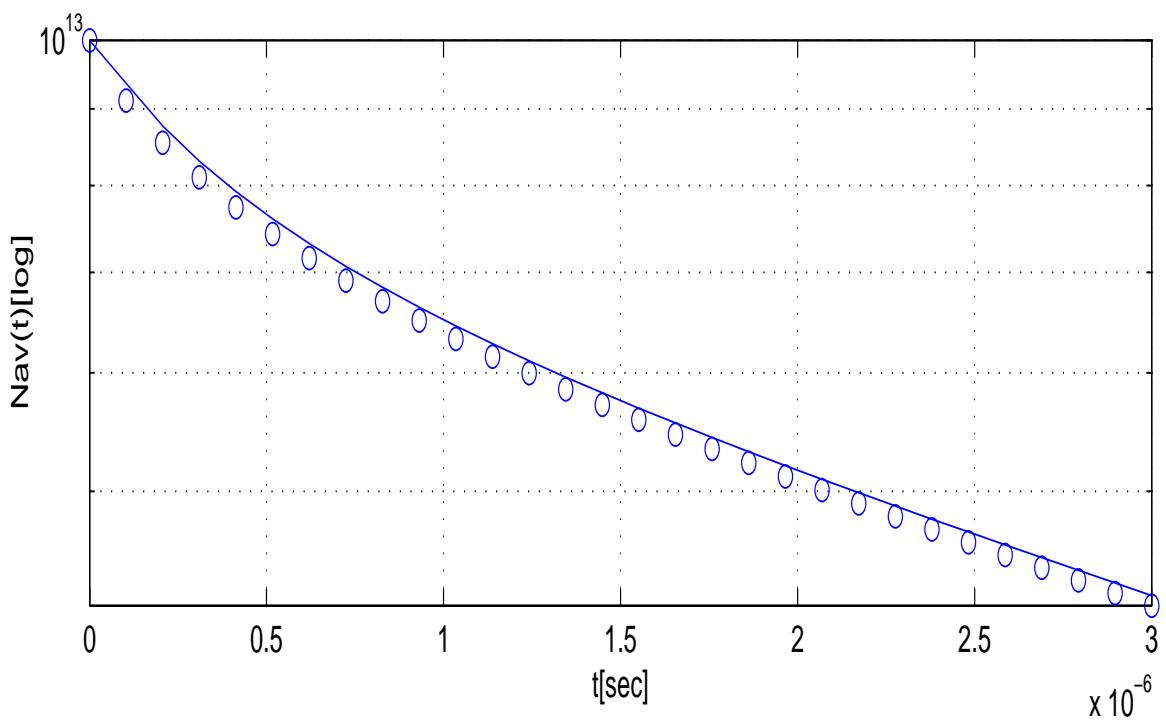
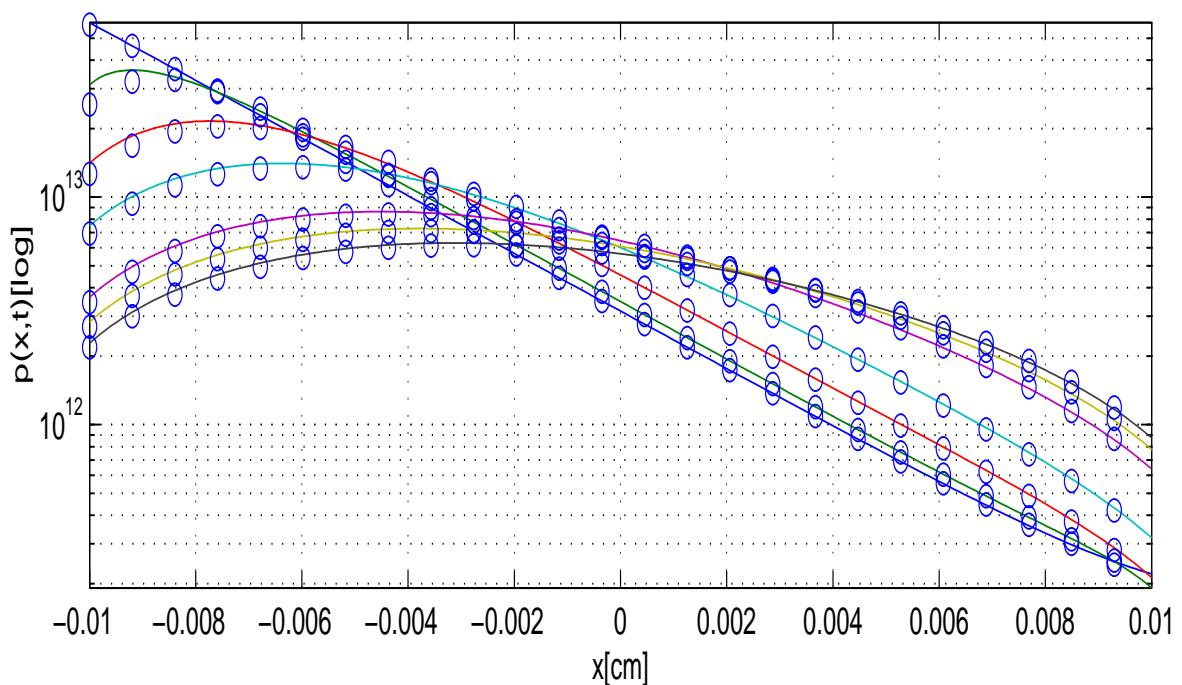


Simula 10P50d3

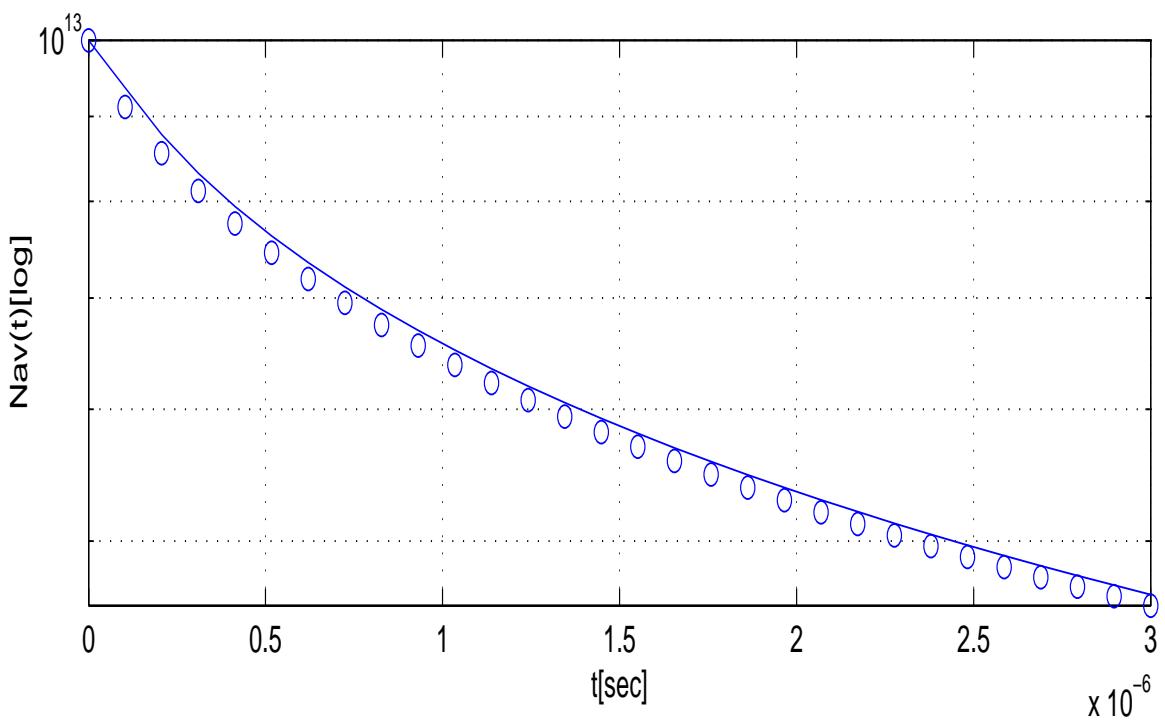
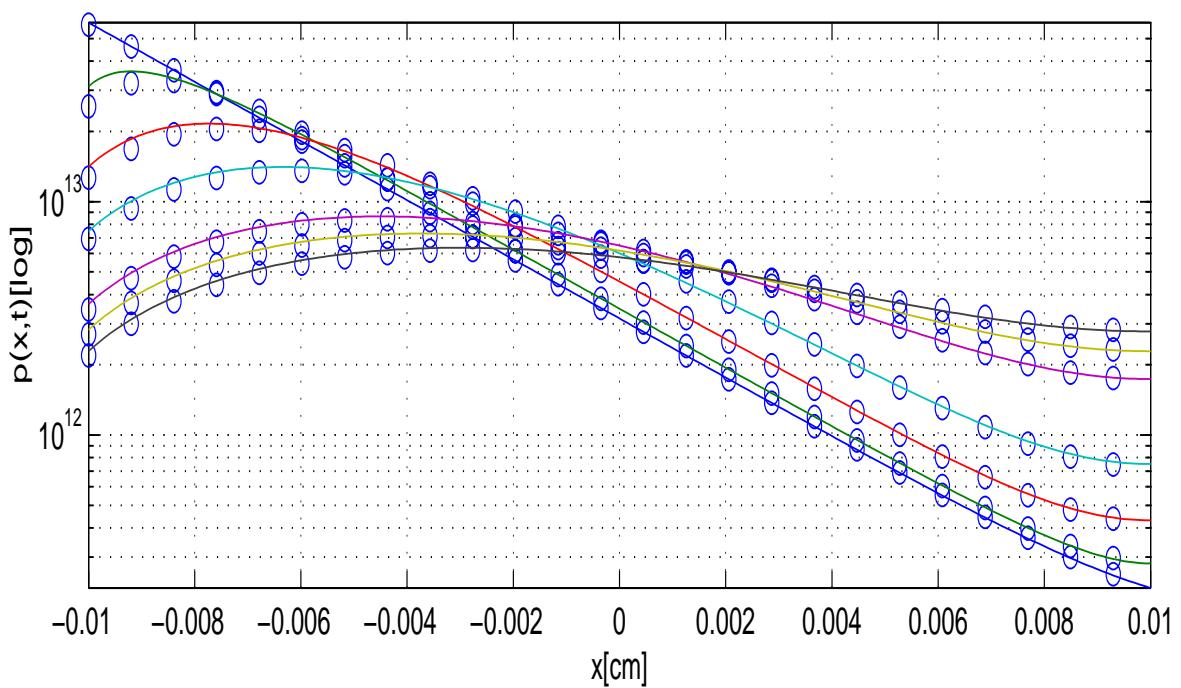


**Tabella 2( $\alpha=292$ )**

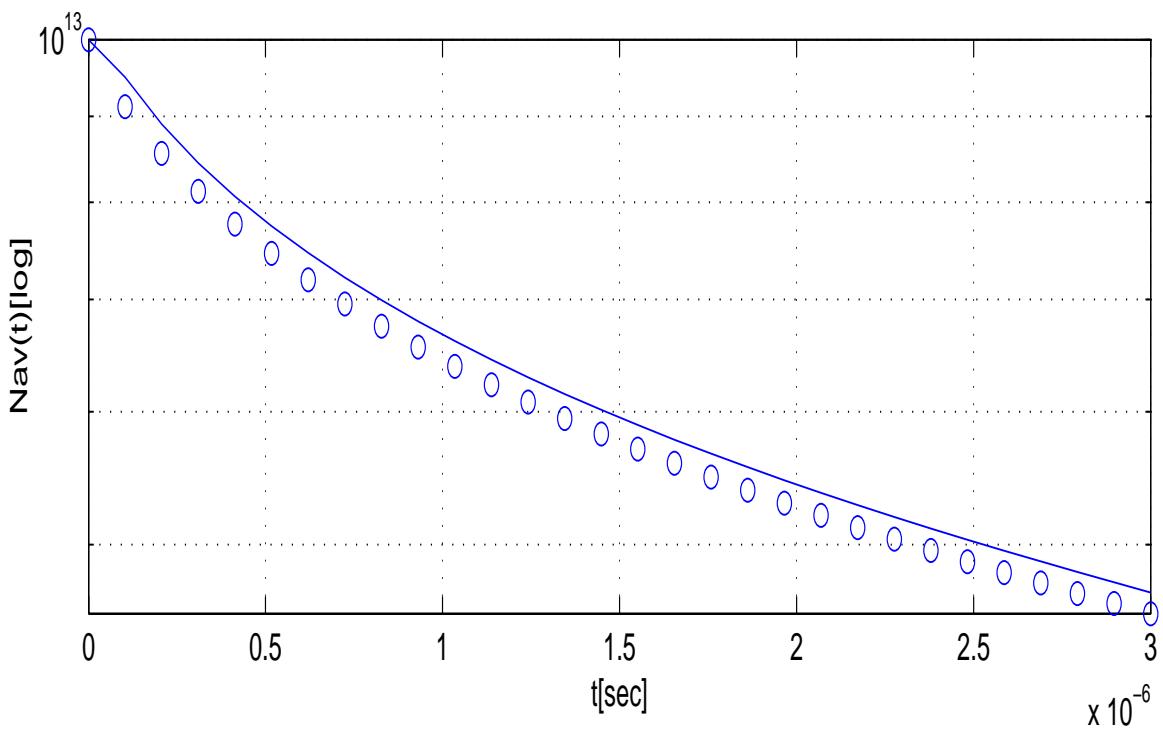
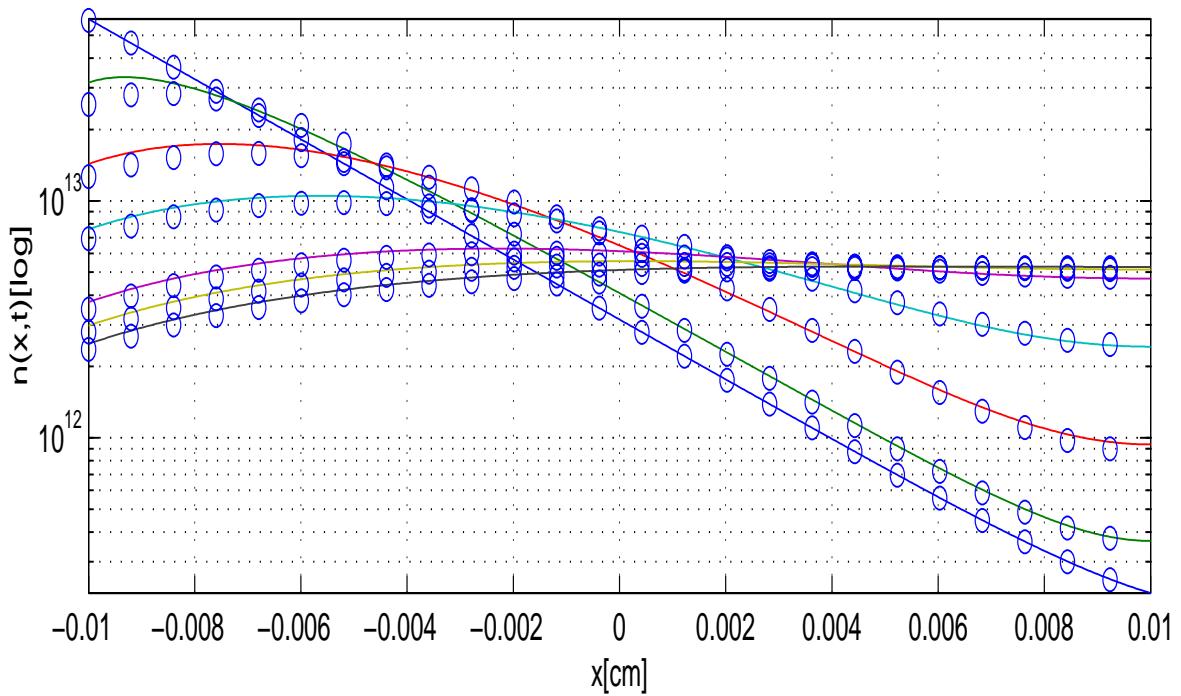
Simula 292N55d02



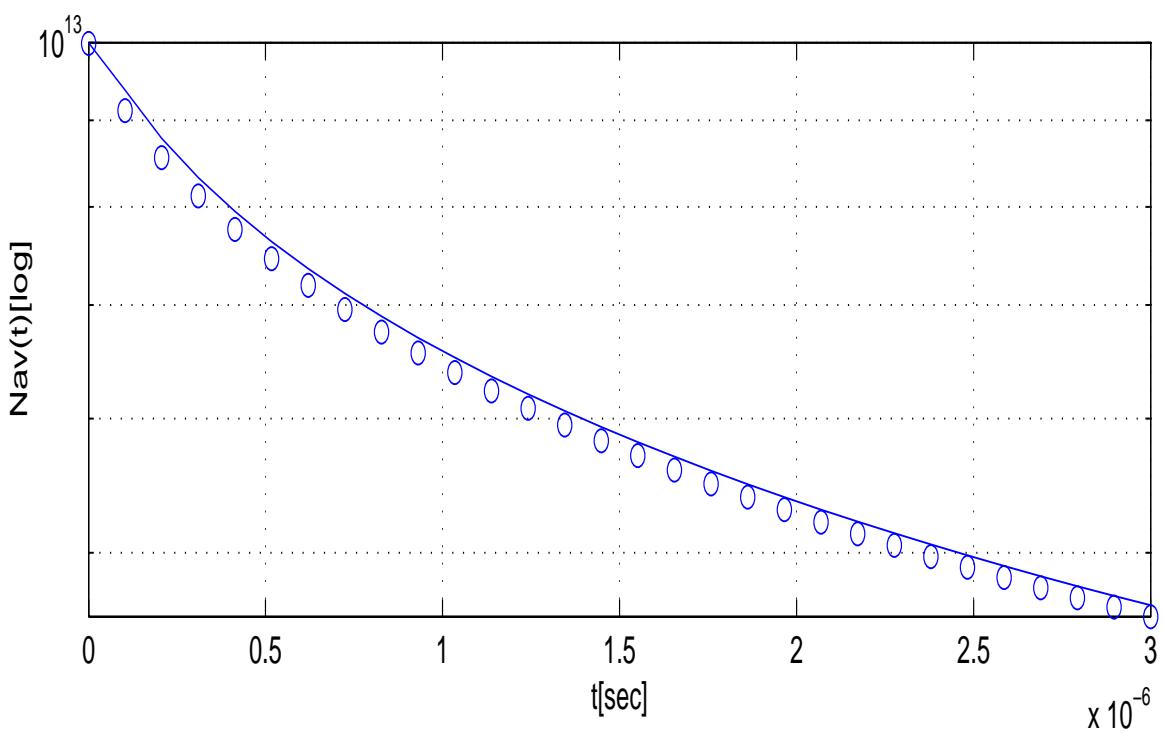
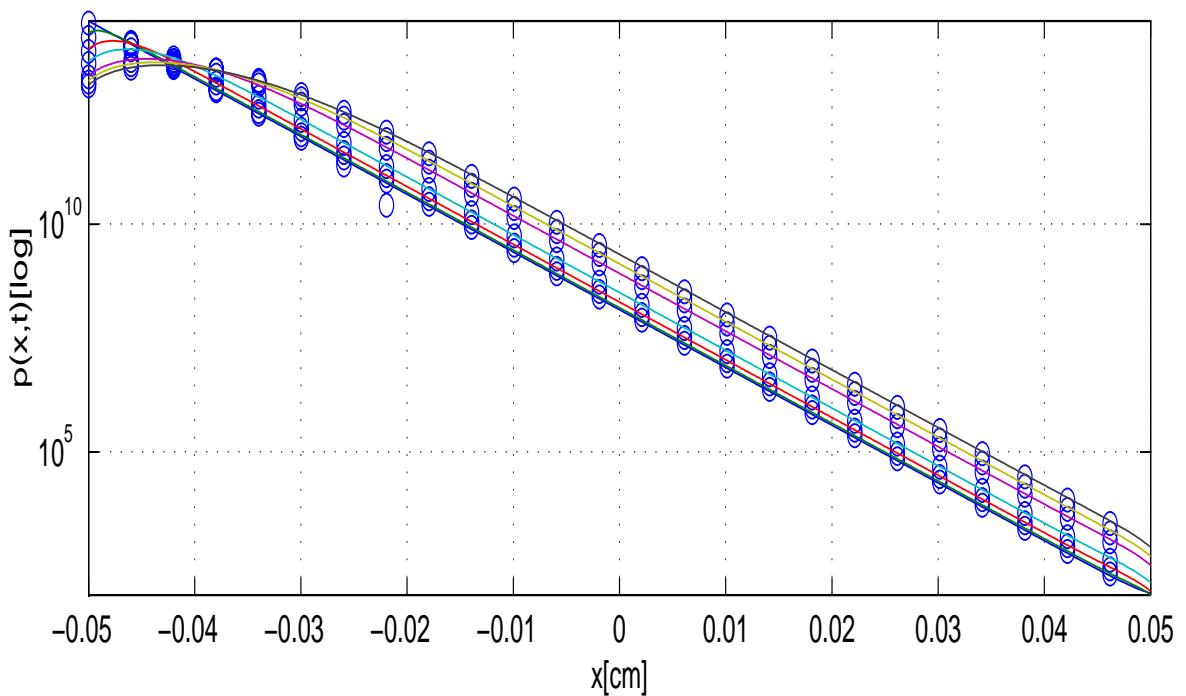
Simula 292N50d02



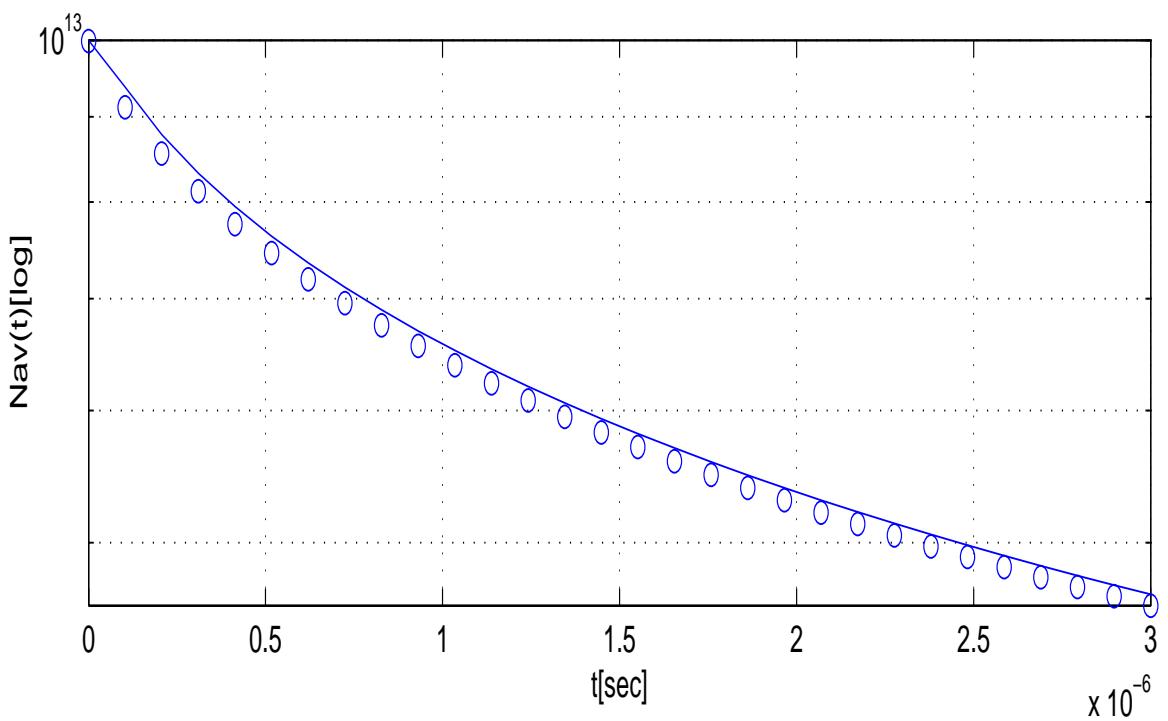
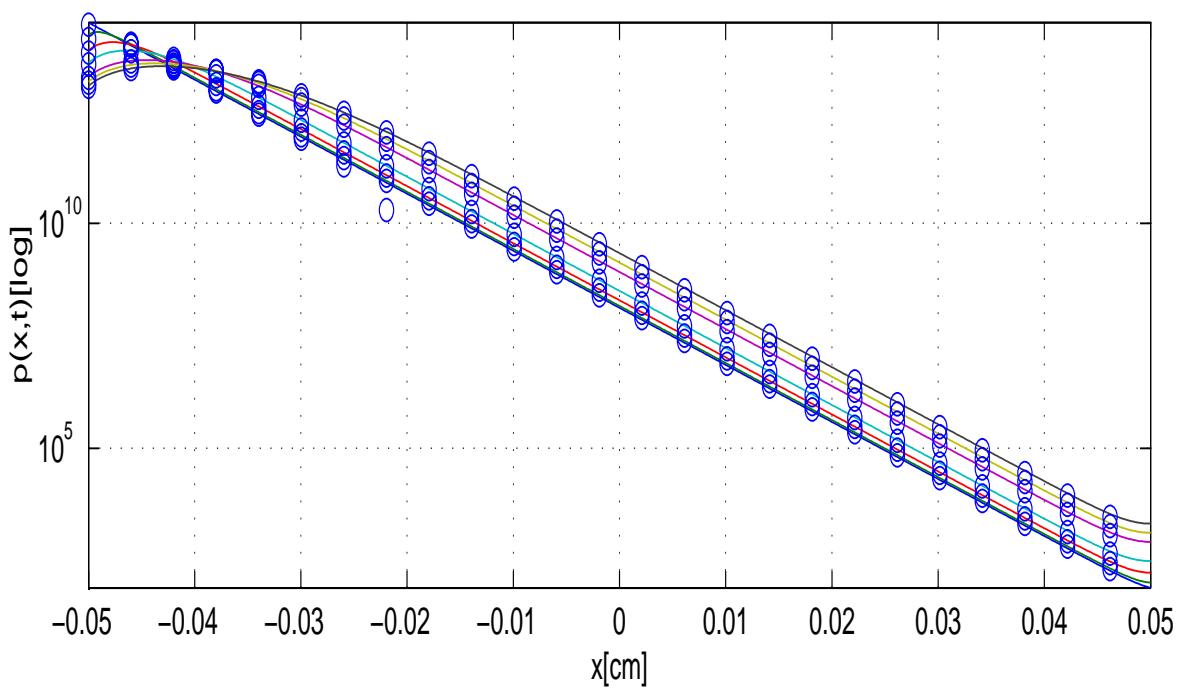
Simula 292P50d02



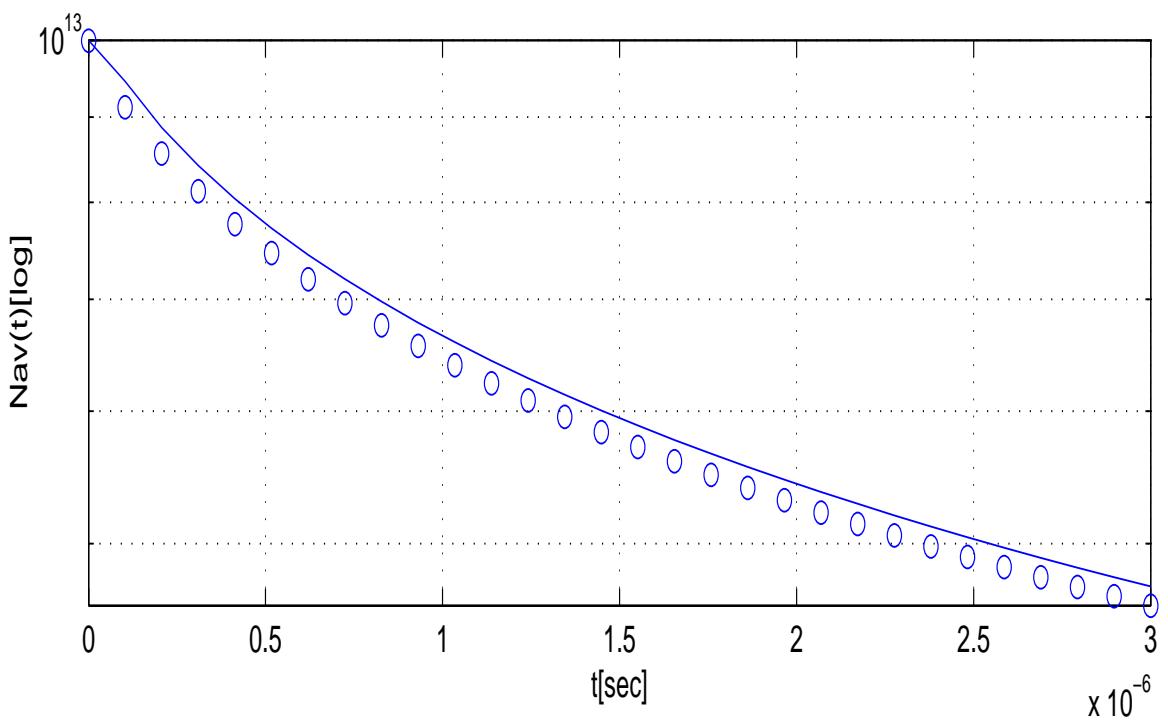
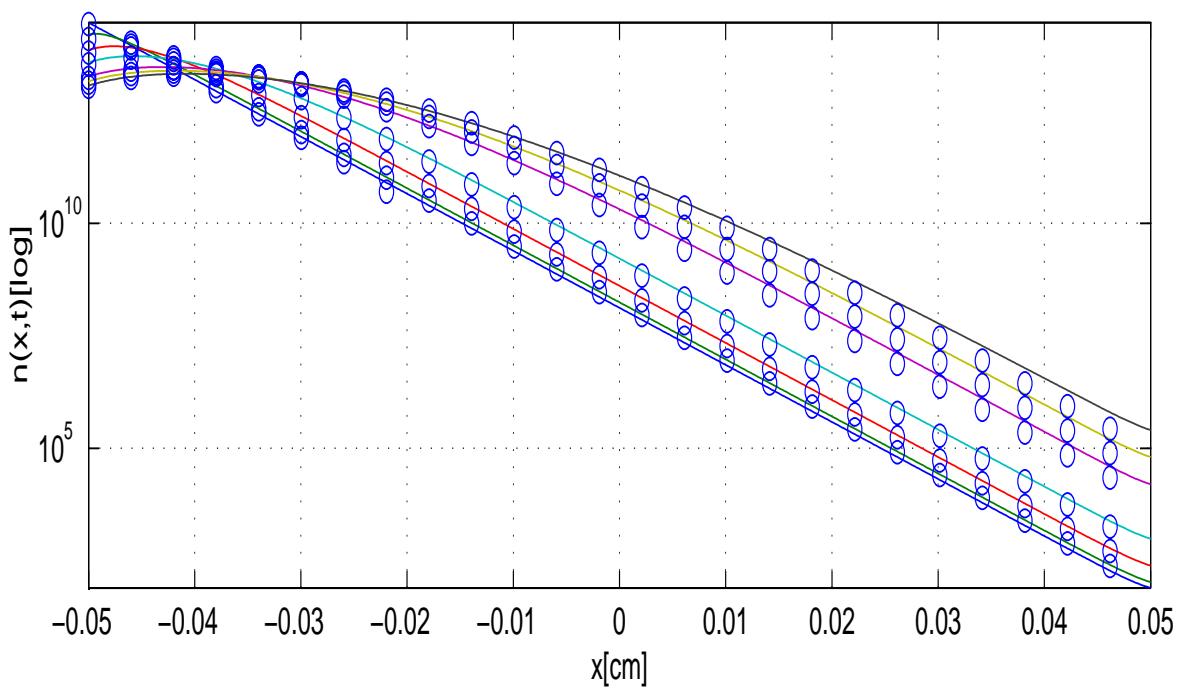
Simula 292N55d1



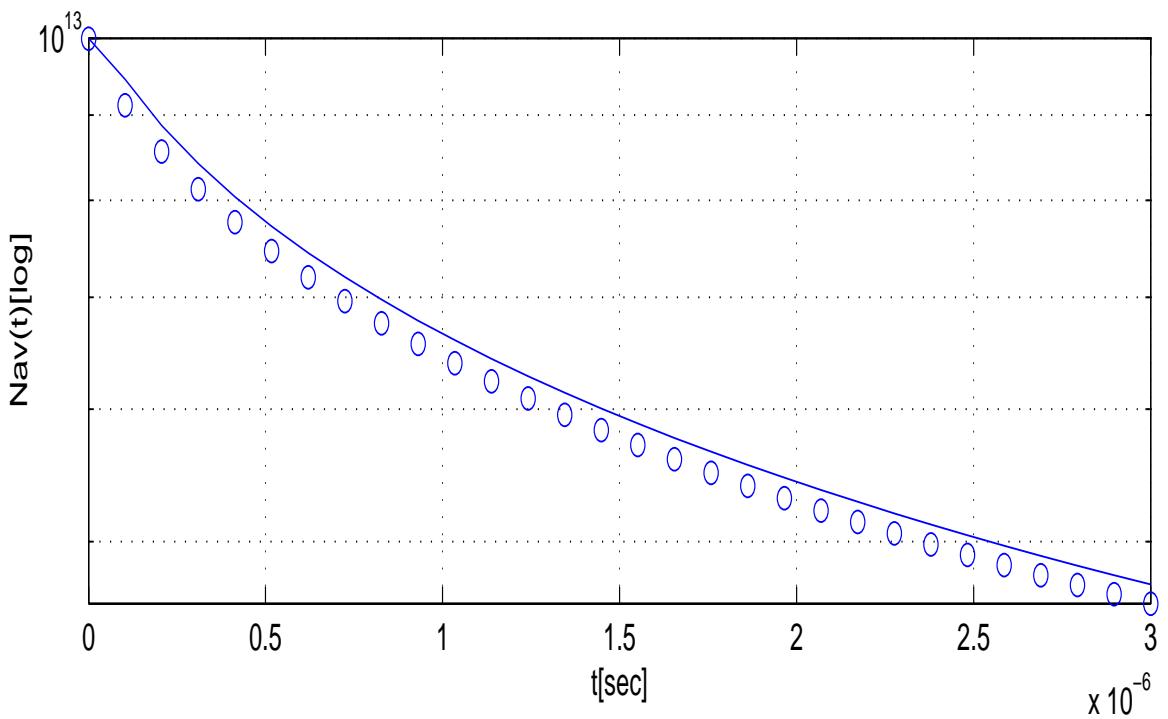
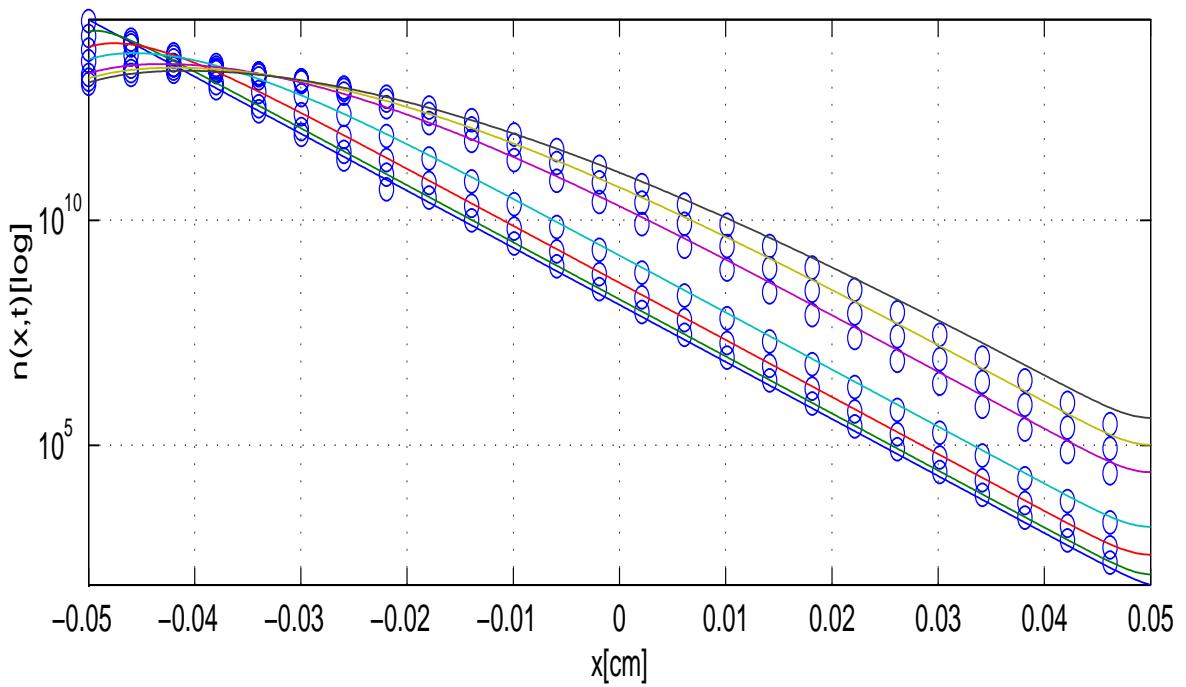
Simula 292N50d1

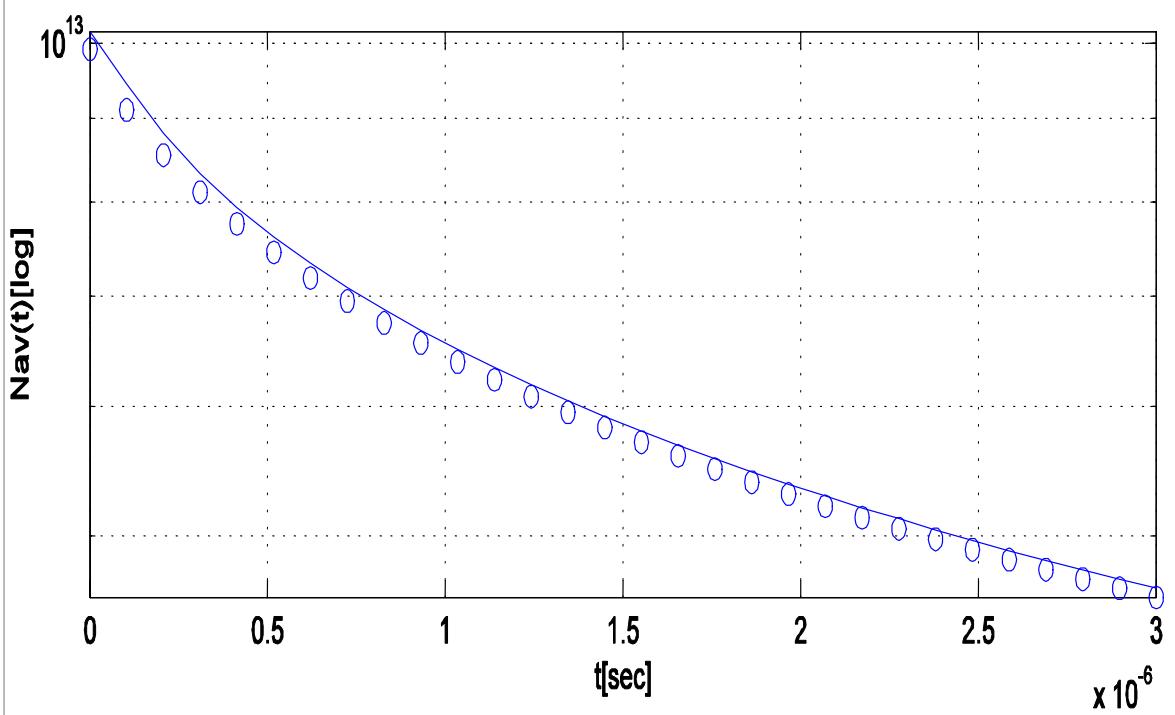
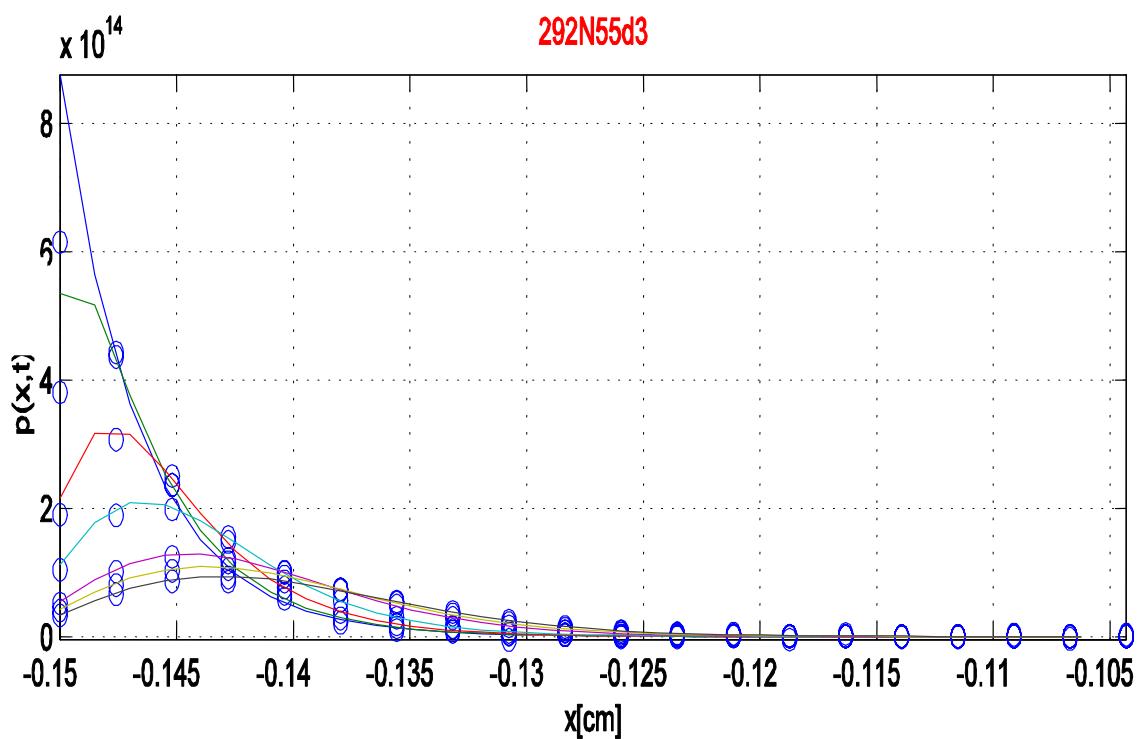


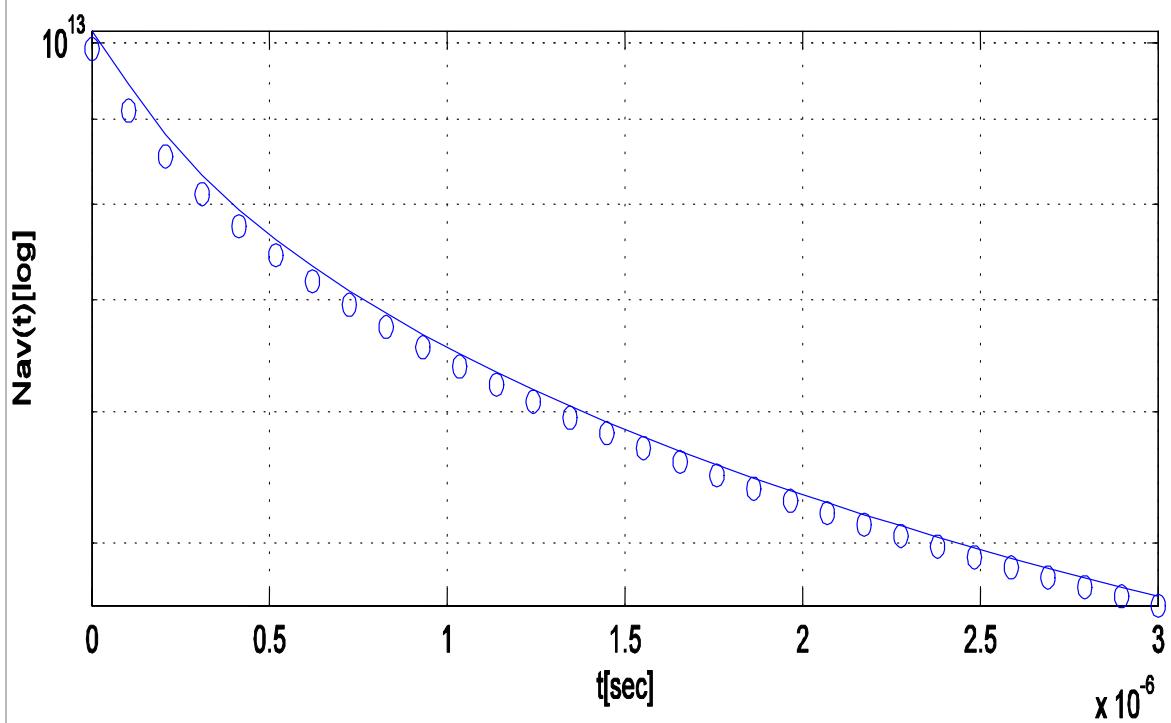
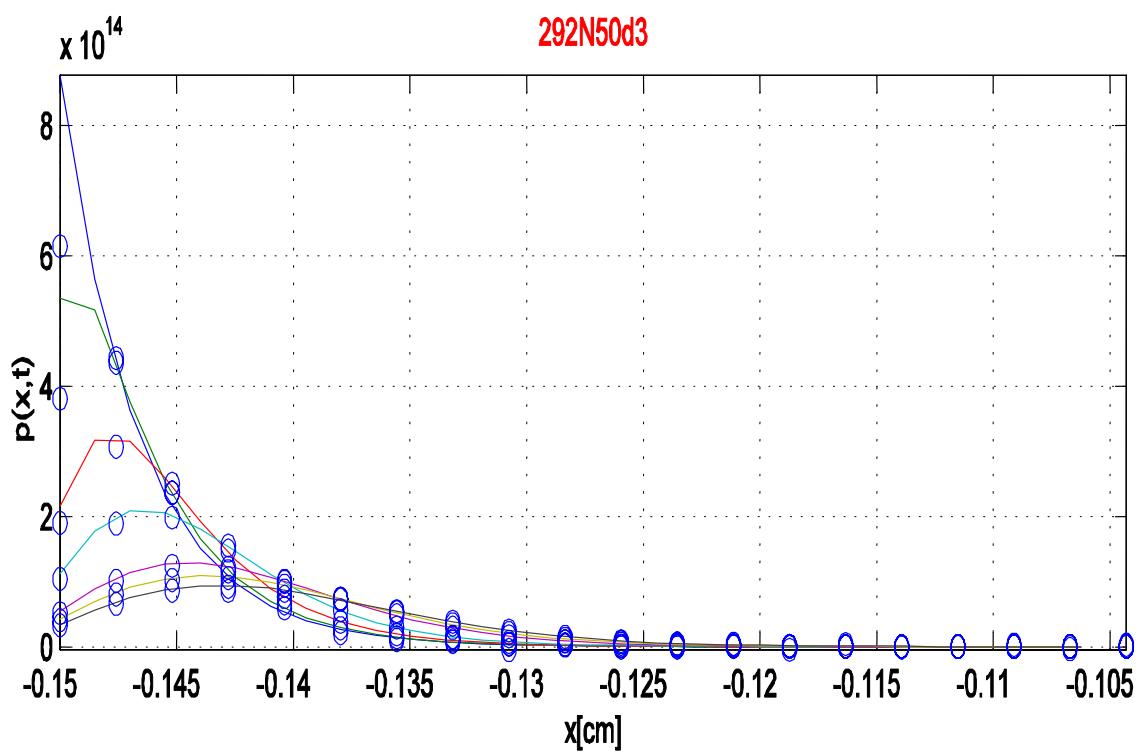
Simula 292P55d1

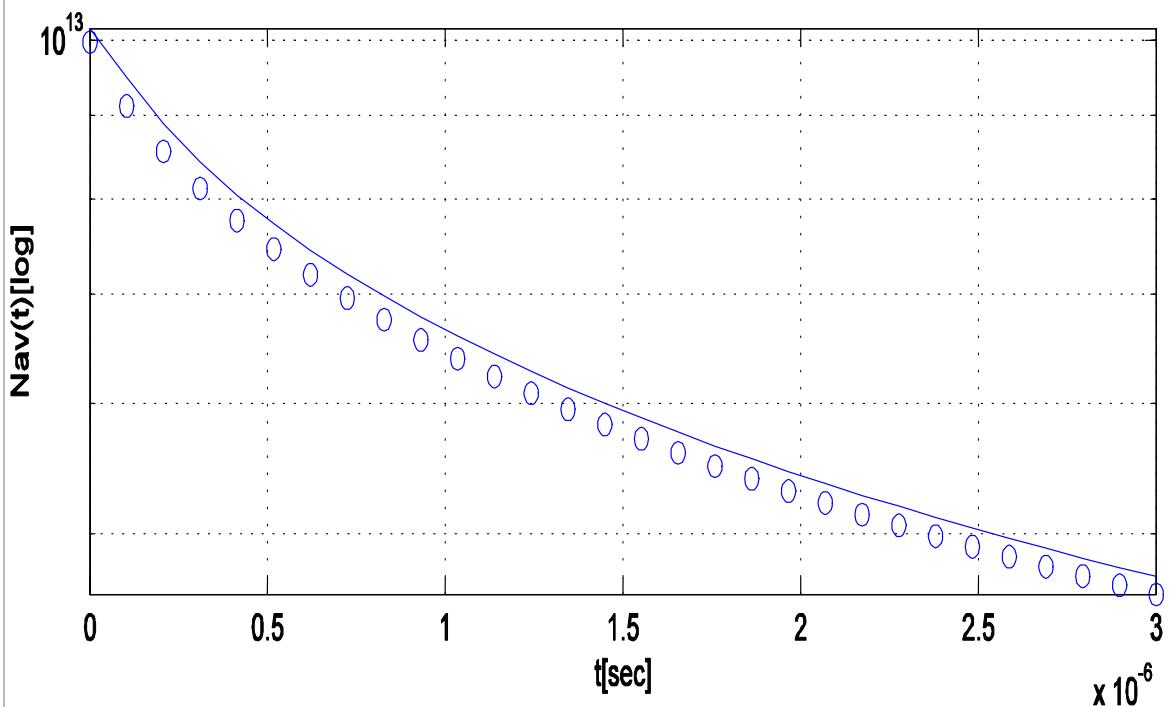
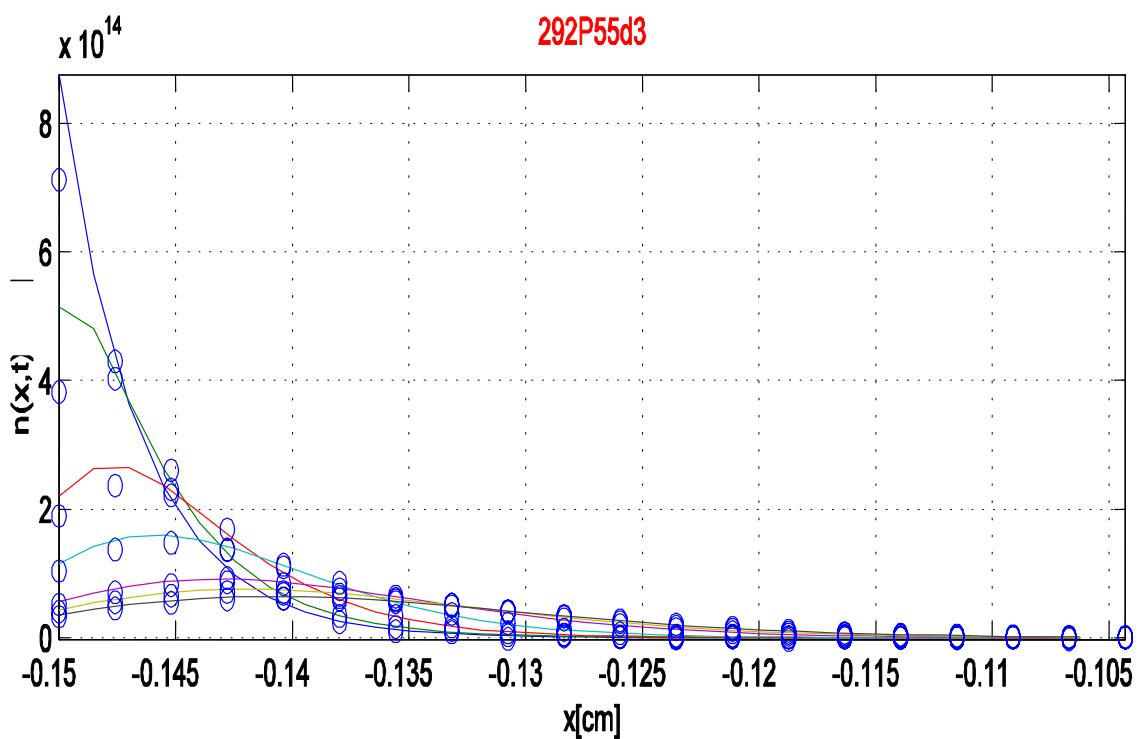


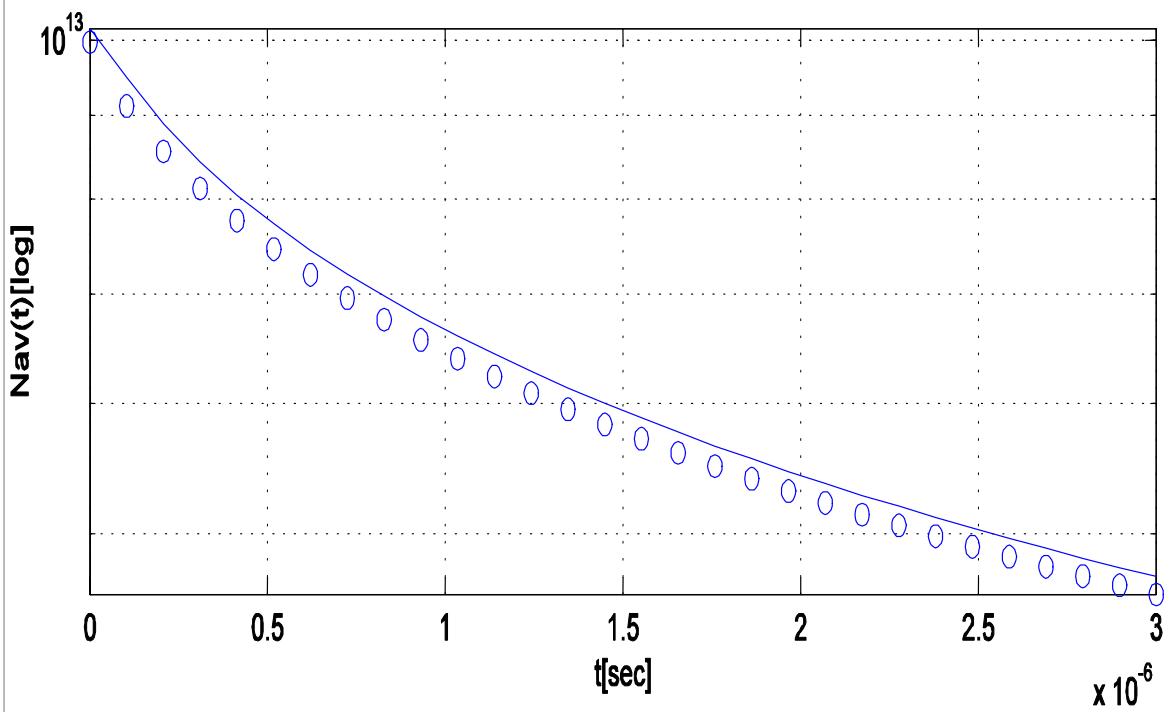
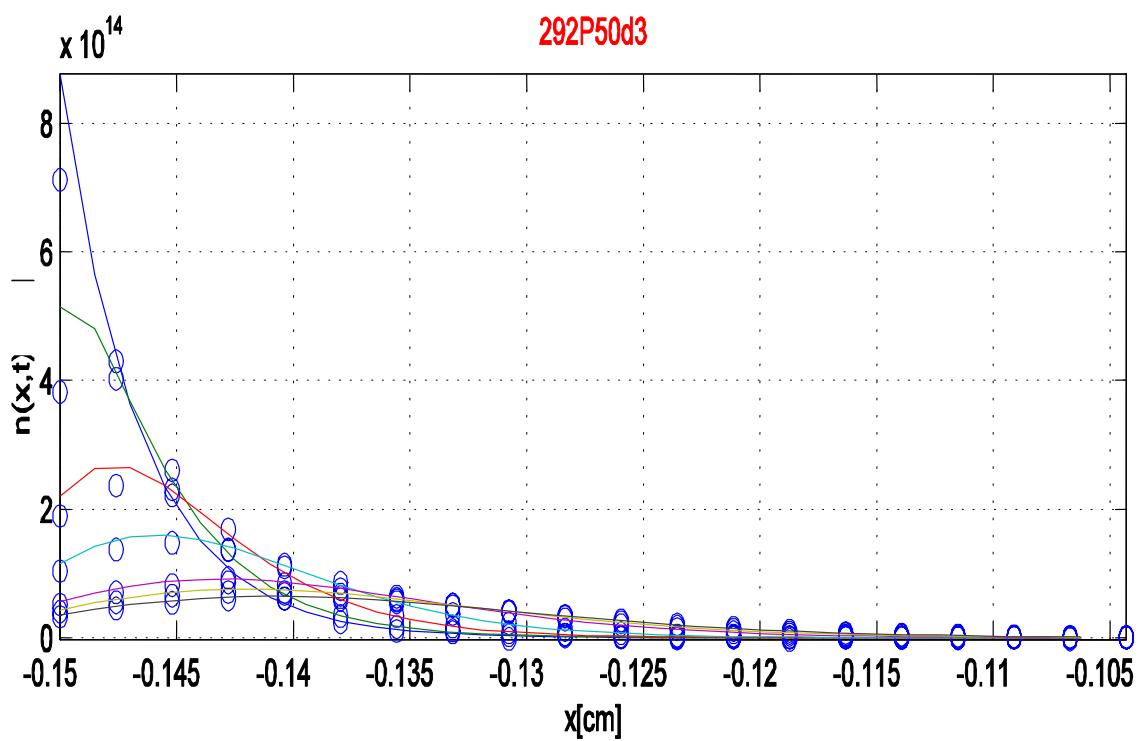
Simula 292P50d1











#### 4.2.2 Simulazione 2D

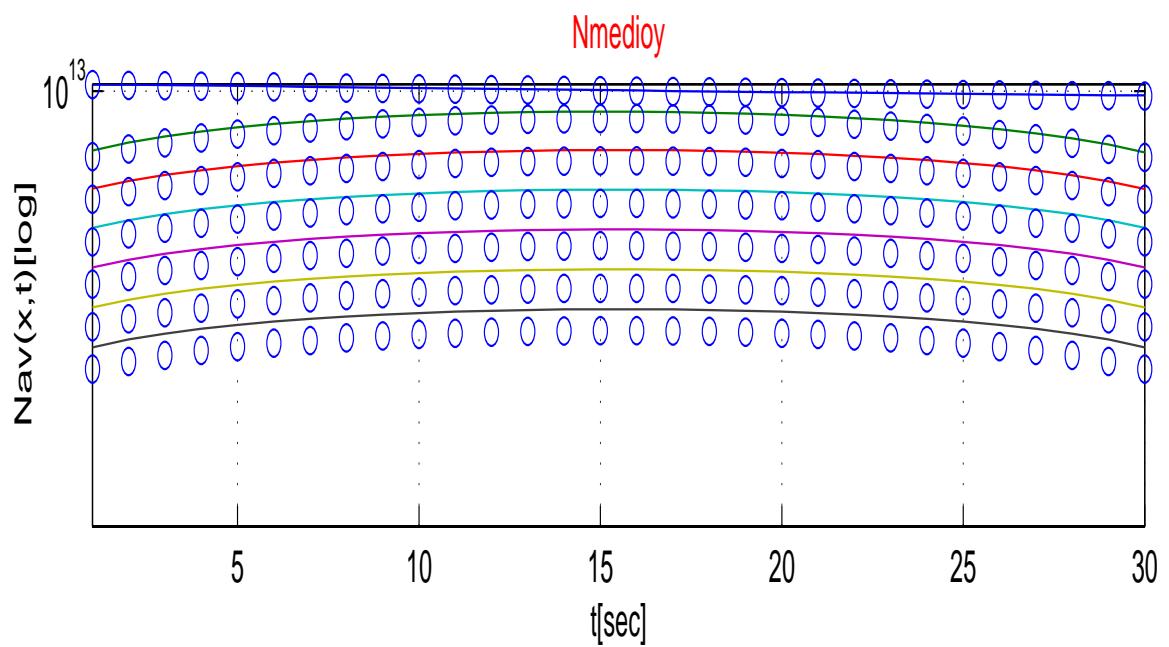
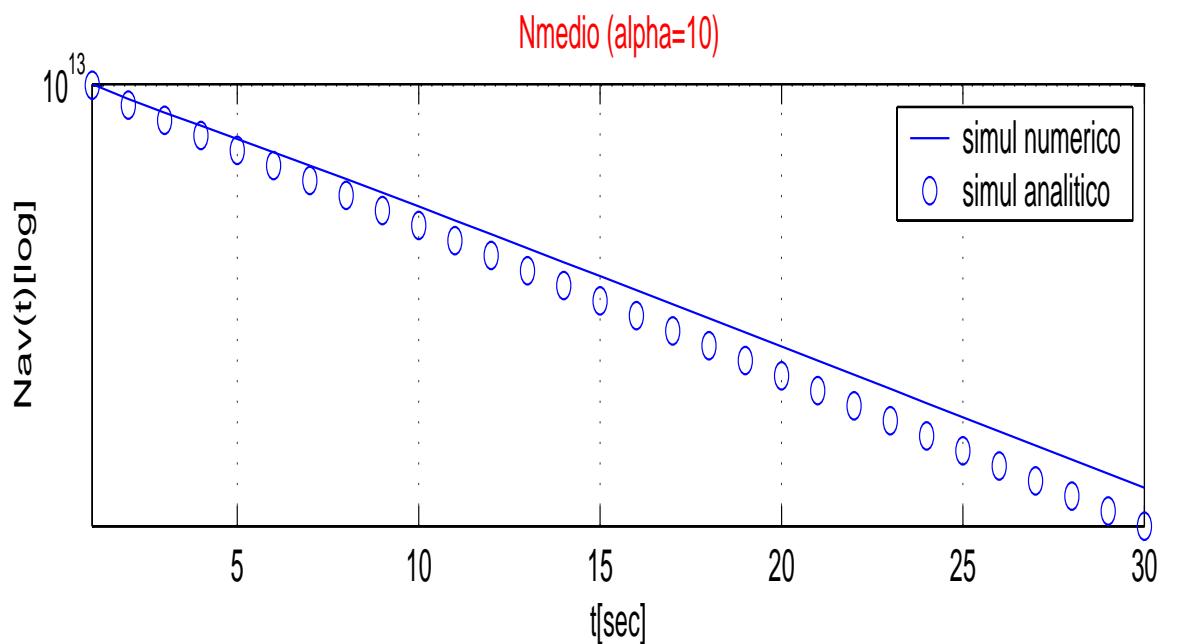
In questo paragrafo riportiamo una serie di confronti tra i risultati ottenuti con il modello di Ling e Ajmera nel caso bidimensionale visto nel capitolo 2 e quello ottenuto attraverso il metodo numerico delle differenze finite 2D visto nel capitolo precedente. Le simulazioni riportate sono effettuate in regimi di bassi livelli di iniezione e su un campione di tipo P di dimensioni ( $d=0.525\text{cm}$ ,  $h=1\text{cm}$ ). Si sono considerati inoltre impulsi laser di diversa lunghezza d'onda. Nelle simulazioni riportate in questo paragrafo si è indicato il risultato ottenuto con il metodo delle differenze finite con una curva a tratto continuo, mentre il risultato ottenuto con il modello di Ling e Ajmera è indicato con dei cerchi. Per le stesse simulazioni si sono considerati istanti di tempo diversi, presi con passo di  $5\mu\text{s}$ , in modo da considerare lo stesso processo al trascorrere del tempo. Nei grafici per comodità di visualizzazione, si riportano solo i valori di  $N_{av}(t)$ , densità media dei portatori in eccesso su tutto il dominio bidimensionale e  $N_{av}(x,t)$ , densità media lungo x. Tutti i grafici sono in scala semilogaritmica, salvo avviso contrario.

Di seguito si riportano le tabelle contenenti il resoconto di tutte le simulazioni eseguite, ed i relativi grafici.

**Tabella 3**

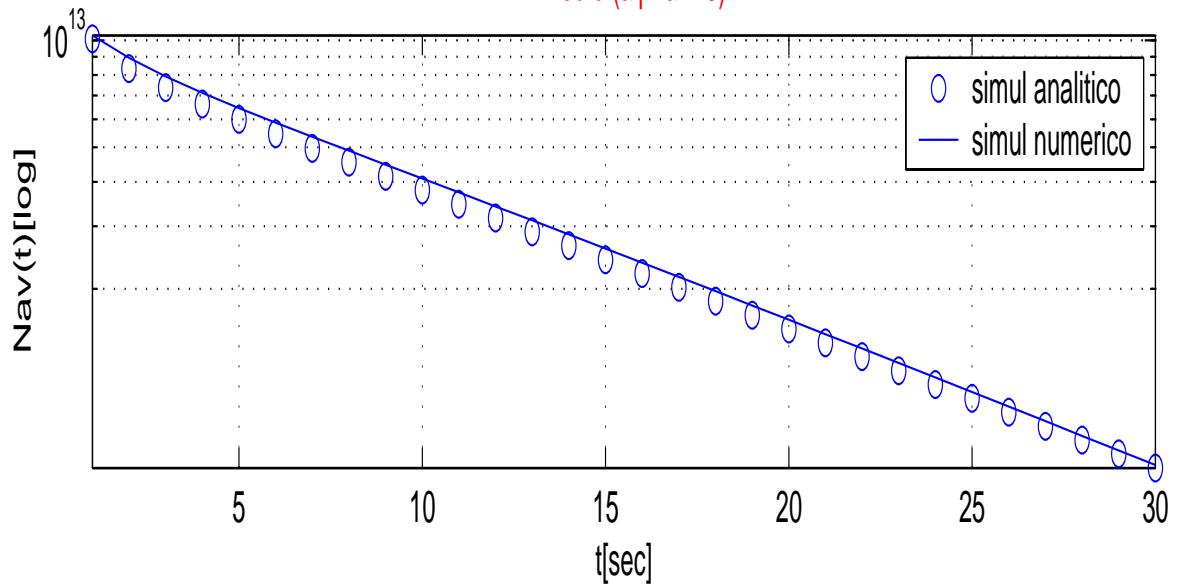
<b>Simula 10P552D</b> Type P $d=525\mu\text{m}$ $h=10000\mu\text{m}$ $N=3e15\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S_1=5000\text{cm/s}$ $S_2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau_b=300\mu\text{s}$	<b>Simula 10P502D</b> Type P $d=525\mu\text{m}$ $h=10000\mu\text{m}$ $N=3e15\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S_1=5000\text{cm/s}$ $S_2=000\text{cm/s}$ $\alpha=10\text{cm}^{-1}$ $\tau_b=300\mu\text{s}$
<b>Simula 292P552D</b> Type P $d=525\mu\text{m}$ $h=10000\mu\text{m}$ $N=3e15\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S_1=5000\text{cm/s}$ $S_2=5000\text{cm/s}$ $\alpha=292\text{cm}^{-1}$ $\tau_b=300\mu\text{s}$	<b>Simula 292P502D</b> Type P $d=525\mu\text{m}$ $h=10000\mu\text{m}$ $N=3e15\text{cm}^{-3}$ $\text{N}_{\text{avg}}=1e13\text{cm}^{-3}$ $S_1=5000\text{cm/s}$ $S_2=000\text{cm/s}$ $\alpha=292\text{cm}^{-1}$ $\tau_b=300\mu\text{s}$

10P552D

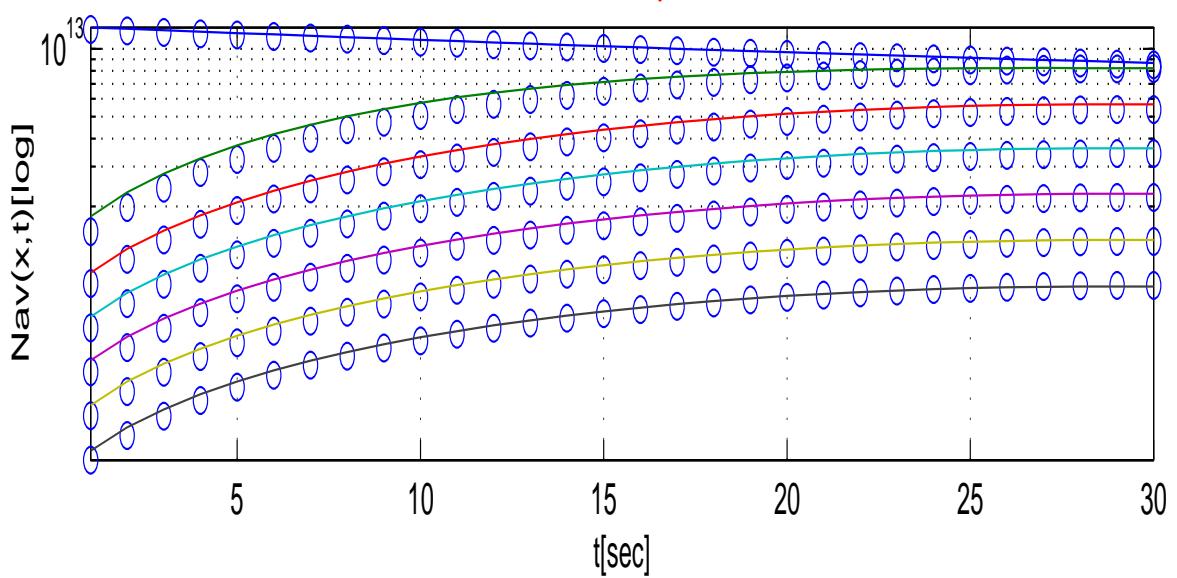


10P502D

Nmedio ( $\alpha=10$ )

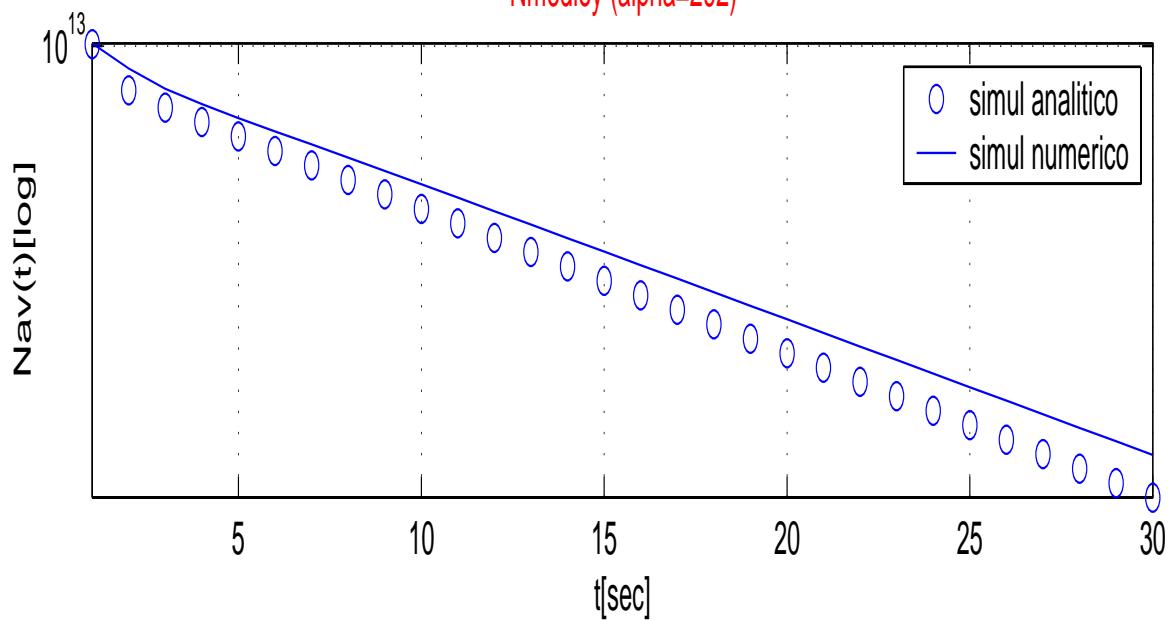


Nmedioy

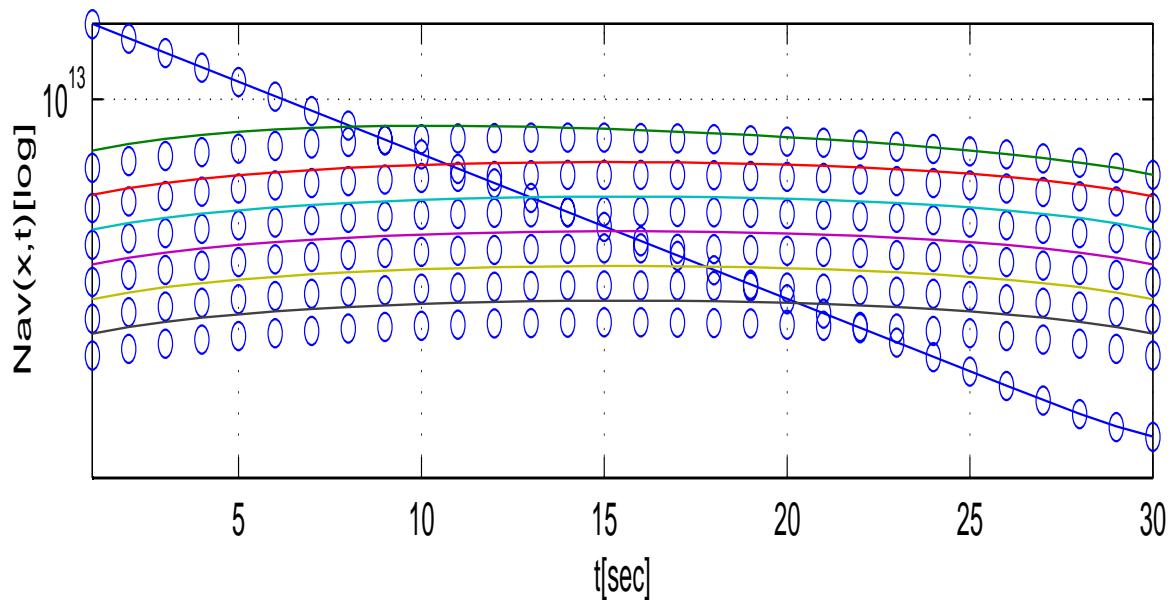


292P552D

Nmedioy (alpha=292)

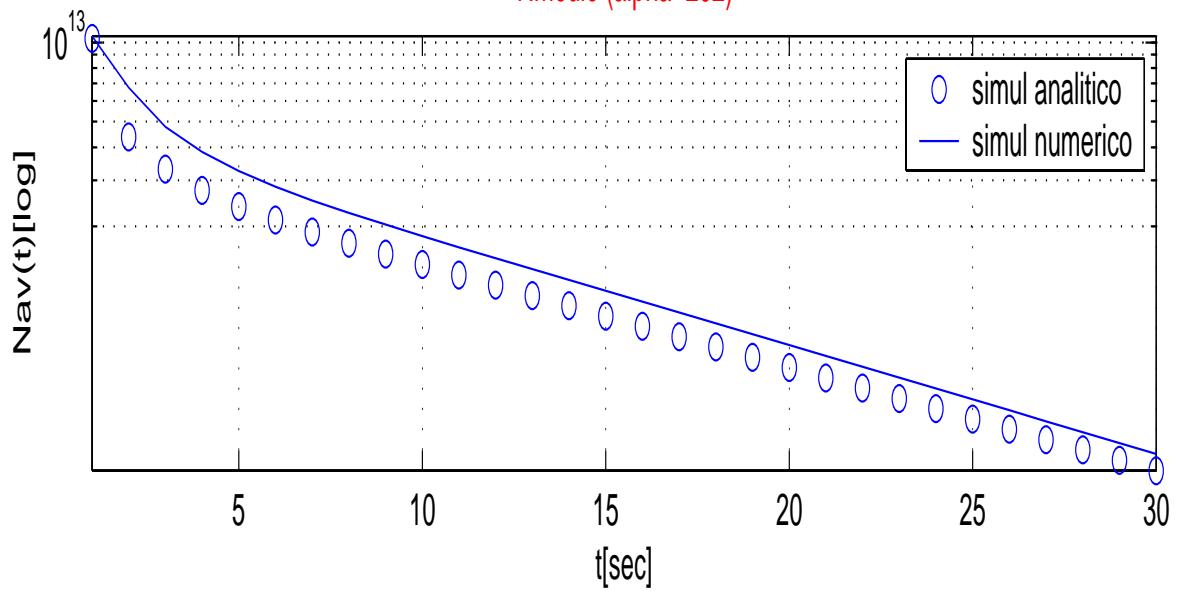


Nmedioy

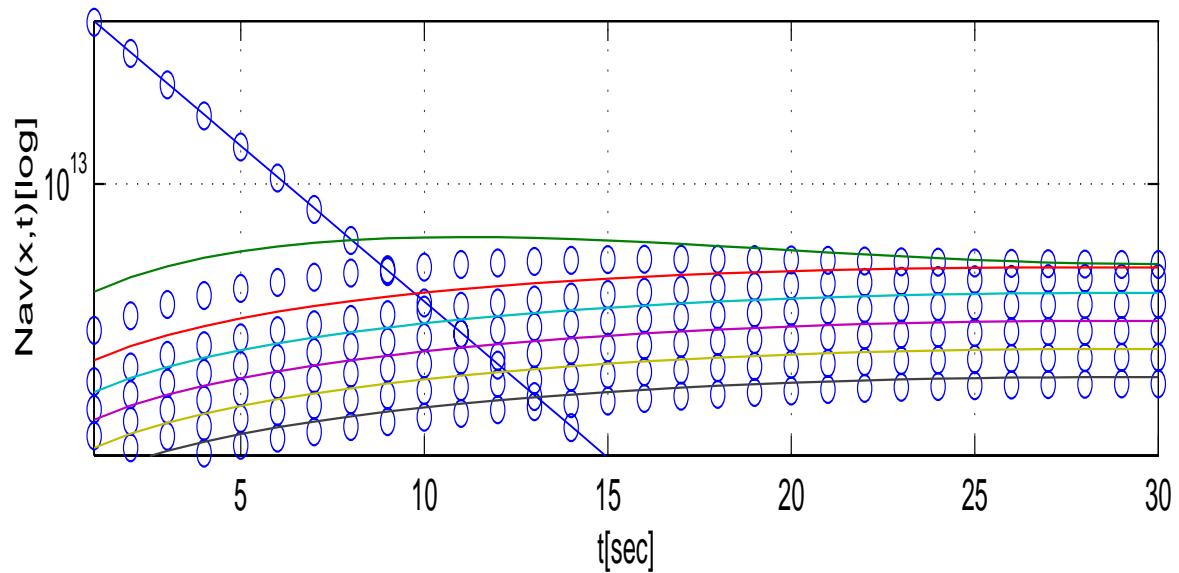


292P502D

Nmedio (alpha=292)



Nmedioy



## 4.3 Confronto con MEDICI ad alti livelli di iniezione

### 4.3.1 Simulazione 1D

La simulazione che è stata effettuata per testare la validità del simulatore realizzato ad alti livelli di iniezione, è stata eseguita su un campione dalle seguenti caratteristiche:

- campione di tipo n/tipo p;
- spessore  $d=5000 \mu\text{m}$ ;
- drogaggio del campione pari a  $2\text{e}12 \text{ cm}^{-3}$ ;
- $\tau_{n0} = 300 \mu\text{s}$ ,  $\tau_{p0} = 30 \mu\text{s}$ ;
- coefficiente di assorbimento  $\alpha = 10 \text{ cm}^{-1}$ ;
- densità media  $N_{\text{avg}} = 1\text{e}15$ ;
- velocità di ricombinazione superficiale  $S_1 = S_2 = 5000 \text{ cm/s}$ ;
- coefficienti Auger  $C_n = C_p = 0$ ;
- Intervallo temporale osservato:  $[0,1\text{ms}]$ ;

La simulazione è effettuata su un campione dalle caratteristiche appena descritte, su cui impatta un impulso laser del tipo  $N_0 * \delta(t-t_0)$ , con  $t_0 = 1\text{e}-12\text{s}$ , su un'opportuna interfaccia. Di seguito è riportato il confronto tra l'andamento delle lacune,  $p(x, t_0)$ , in cui si è indicato il risultato di MEDICI con dei cerchi, ed il risultato del simulatore numerico con una curva a tratto pieno, ed inoltre

è riportato l'andamento di  $p(t) = \int_{\frac{-d}{2}}^{\frac{d}{2}} p(x, t) dx$  in cui la curva a tratto pieno è il

risultato del simulatore numerico descritto al capitolo precedente. I grafici sono tutti in scala semilogaritmica. Per quanto riguarda i listati Matlab utilizzati per eseguire la suddetta simulazione, sono quelli riportati in appendice C, nel caso di soluzione dell'equazione della diffusione con metodo implicito, ma con parametro  $R$ , e cioè il coefficiente che tiene in conto le riflessioni multiple che si hanno sulle interfacce del campione di silicio, uguale a zero, in quanto MEDICI non permette di considerare il caso in cui ci

sia riflessione. Un'altra modifica apportata al simulatore è quella che permette di considerare la condizione iniziale, che MEDICI impone essere:

$$\text{condizione\_iniziale} = N_0 e^{-\alpha \cdot x}$$

Infine sono stati modificati i seguenti parametri:

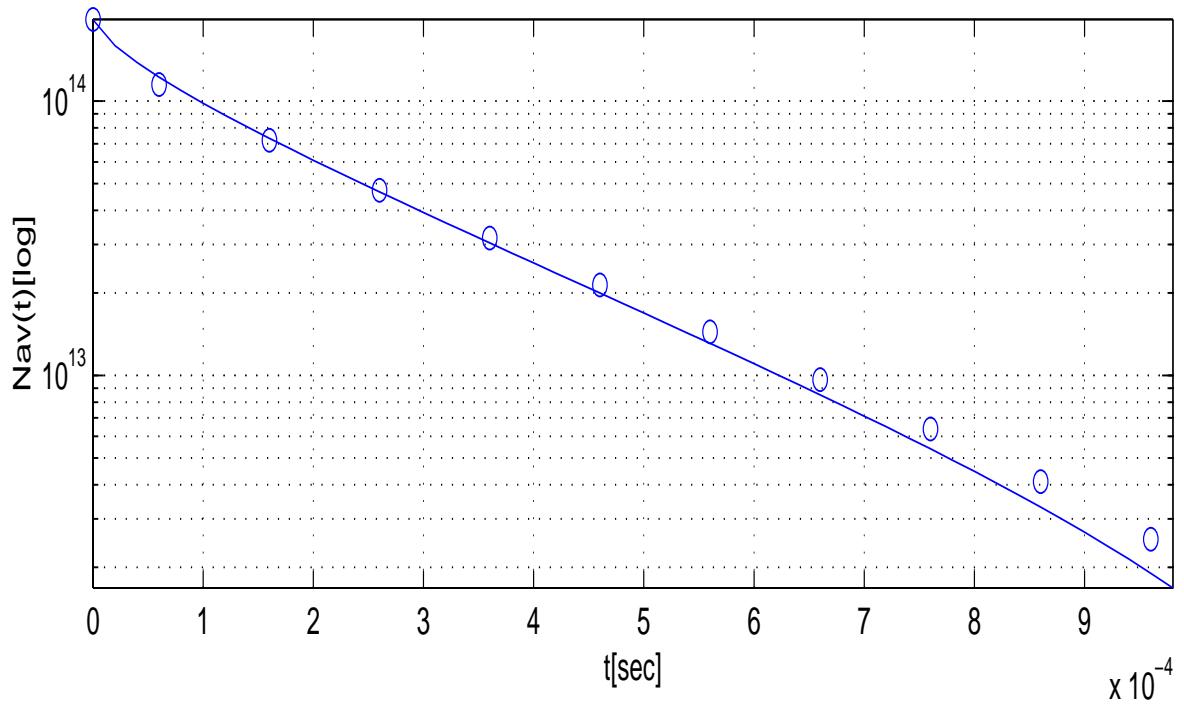
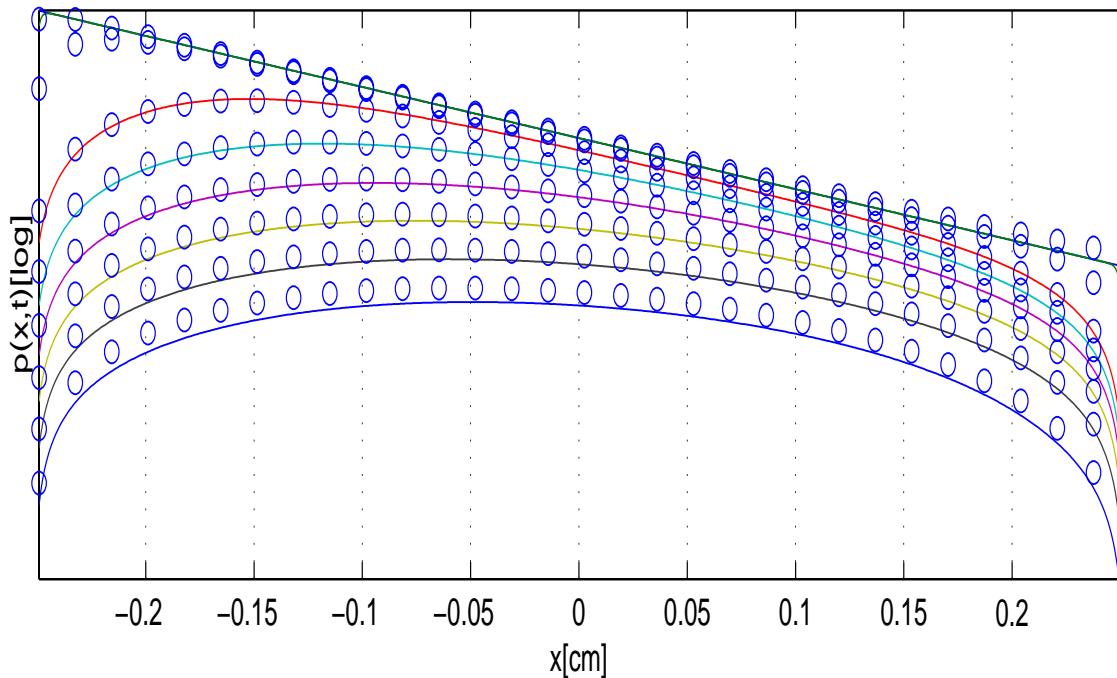
- Nsrhn=4.14e16;
- Nsrhp=1e16;
- Augn=0;
- Augp=0;
- Cdirect=1e-15;

Di seguito si riportano le tabelle contenenti il resoconto di tutte le simulazioni eseguite, ed i relativi grafici.

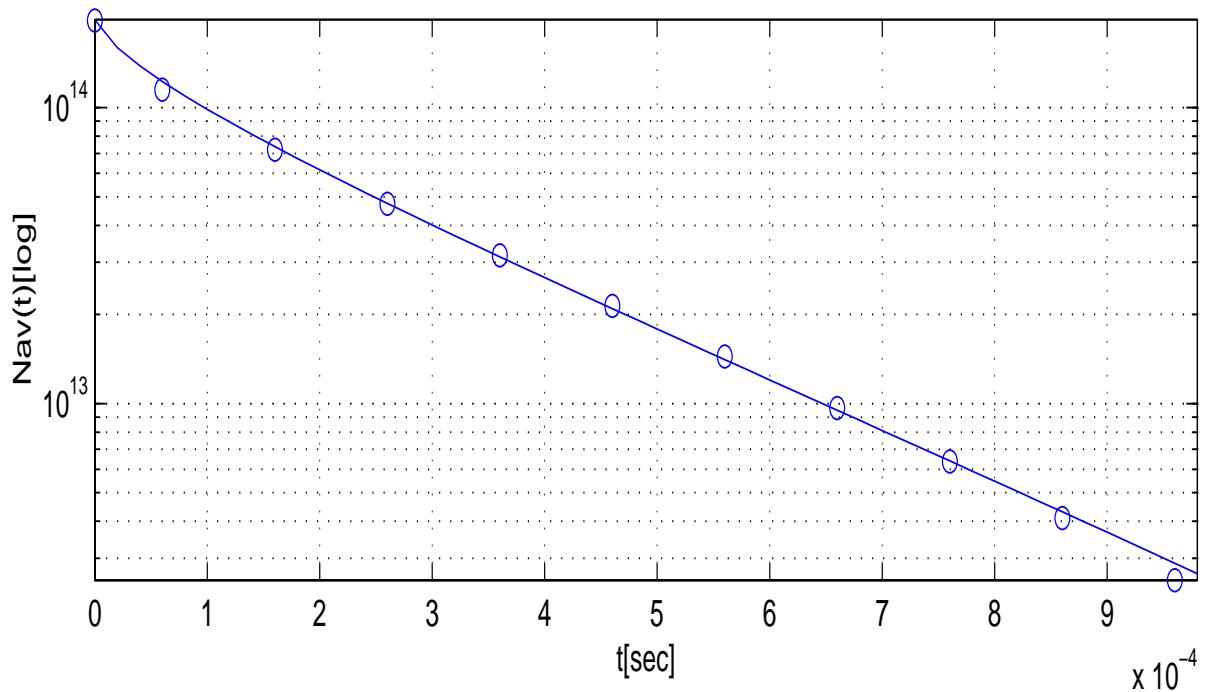
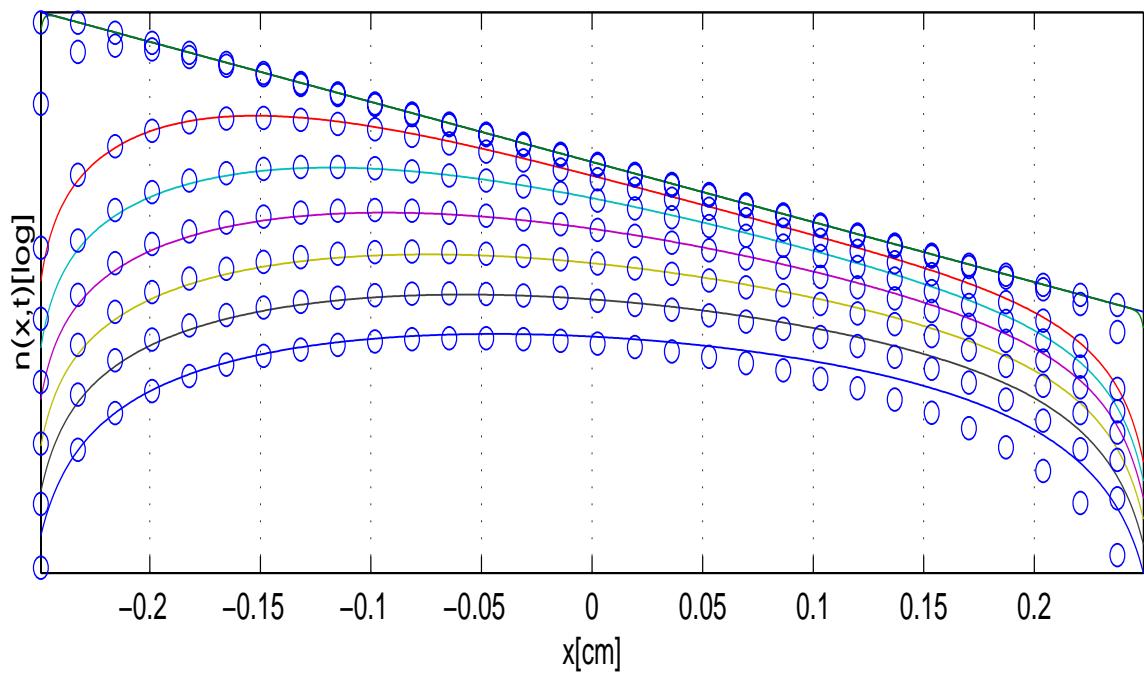
**Tabella4**

<b>Med10N</b> <b>Type N</b> <b>d=5000<math>\mu</math>m</b> <b>N=2e12cm<sup>-3</sup></b> <b>Navg=1e15cm<sup>-3</sup></b> <b>S1=5000cm/s</b> <b>S2=5000cm/s</b> <b><math>\alpha</math>=10cm<sup>-1</sup></b> <b><math>\tau_{no}</math>=300<math>\mu</math>s</b> <b><math>\tau_{p0}</math>=30<math>\mu</math>s</b>	<b>Med10P</b> <b>Type P</b> <b>d=5000<math>\mu</math>m</b> <b>N=2e12cm<sup>-3</sup></b> <b>Navg=1e15cm<sup>-3</sup></b> <b>S1=5000cm/s</b> <b>S2=5000cm/s</b> <b><math>\alpha</math>=10cm<sup>-1</sup></b> <b><math>\tau_{no}</math>=300<math>\mu</math>s</b> <b><math>\tau_{p0}</math>=30<math>\mu</math>s</b>
--	--

### Med10N



### MED10P



#### 4.4 Conclusioni

Da quanto è possibile osservare, e cioè dai confronti effettuati tra il simulatore realizzato attraverso la soluzione numerica dell'equazione della diffusione ed il simulatore MEDICI, si può concludere che c'è un sostanziale buon accordo tra i due. Per cui possiamo senz'altro dire che il simulatore realizzato è attendibile sia per bassi livelli di iniezione che per alti livelli di iniezione, e cioè abbiamo raggiunto lo scopo propostoci all'inizio di questo lavoro di tesi. Inoltre data la sua semplicità è senza dubbio più veloce di un simulatore "general purpose" quale è il simulatore MEDICI, per cui l'estrazione dei parametri di interesse risulta certamente più semplice e veloce. Un'altra prerogativa dell'utilizzo di tale simulatore e della relativa procedura di estrazione dei parametri, è che si può prescindere dai parametri stessi che è necessario estrarre, infatti come già detto prima i parametri estratti possono essere tutti quelli da cui dipende il processo, ad esempio tra le prime estrazioni effettuate c'è stato proprio il valore di  $N_{avg}$  in modo da essere sicuri della quantità di drogante iniettato. Si può inoltre osservare che la semplicità di tale simulatore lo rende anche molto elastico e flessibile, infatti è davvero semplice modificarlo in modo da mettere in risalto un aspetto anziché un altro del processo di ricombinazione ad esempio, nelle ultime simulazioni eseguite la velocità di ricombinazione è stata modificata aggiungendo anche la componente di velocità di ricombinazione dovuta alla ricombinazione diretta che inizialmente era stata non considerata dato che, per livelli di iniezione bassi e medi, il suo peso è senza dubbio trascurabile essendo il silicio un semiconduttore indiretto, ma data la scarsità di teorie disponibili per quanto riguarda gli alti livelli di iniezione non è da escludere che tale componente di velocità possa avere un peso maggiore di quanto non abbia a livelli di iniezione bassi, almeno per quei campioni particolarmente puri che presentano pochi centri di ricombinazione in banda proibita.

Questi sono solo alcuni delle possibilità che tale simulatore offre, infatti è altresì semplice vedere come variano i parametri variando le condizioni iniziali, ed allora sarebbe possibile individuare eventuali dipendenze tra i parametri stessi, ma soprattutto sarebbe possibile capire come controllare i parametri da cui dipende il processo di ricombinazione, permettendo così la costruzione, ad esempio, di celle solari più efficienti così come riportato nell'introduzione.

# Appendice A

## Listati Matlab utilizzati per risolvere l'equazione della diffusione 1D/2D con tecnica analitica per bassi livelli di iniezione

### A.1 Listati Matlab per l'equazione 1D

```
function
[u,Nmedio]=xling1D(x,t,d,S0,S1,taub,alpha,Navg,Nd,Na,nmodi,R)
;
% Questo programma calcola il profilo n(x,t) o p(x,t) secondo
% il modello di Ling e Ajmera.
% x      : coordinata x [cm]
% t      : coordinata t [s]
% d      : lunghezza del campione [cm]
% S0     : SRV alla superficie dove comincia la generazione
% [cm/s]
% S1     : SRV alla superficie opposta [cm/s]
% taub   : valore del lifetime di bulk [s]
% alpha: coefficiente di assorbimento
% Navg  : densità media dei portatori in eccesso [cm^-3]
% Nd    : donatori [cm^-3]
% Na    : accettori [cm^-3]
% nmodi: numero di modi della serie da tenere in
% considerazione
% R     : coefficiente di riflessione agli spigoli
N0=(Navg*d*(1-R*exp(-alpha*d)))/((1-R)*(1-exp(-alpha*d)));
if Nd>Na
    [mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(Nd+N0,N0,Nd,Na);
else
    [mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(N0,N0+Na,Nd,Na);
end;
[XX,TT]=meshgrid(x,t);XX=XX';TT=TT';
u=zeros(size(XX));
%condizione iniziale
a=exp(-alpha*(x'+d/2))+R*exp(-alpha*d)*exp(-alpha*(-x'+d/2));
b=1-R^2*exp(-2*alpha*d);
u(:,1)=((N0*(1-R)*alpha)/b)*a;
%transitorio
for k=1:nmodi,
```

```

modo=xmodoling1D(XX,TT,d,S0,S1,taub,alpha,D,k-1,N0,R);
u(:,2:end)=u(:,2:end)+modo(:,2:end);
end;
Nmedio=1/d*trapz(XX(:,1),u);

function modo=xmodoling1D(x,t,d1,S0,S1,taub,alfa,D,k,N0,R);
% Questa funzione calcola il singolo modo del modello di Ling
e Ajmera.
% x      : coordinata x [cm]
% t      : coordinata t [s]
% d1    : lunghezza del campione [cm]
% S0    : SRV alla superficie dove comincia la generazione
[cm/s]
% S1    : SRV alla superficie opposta [cm/s]
% taub : valore del lifetime di bulk [s]
% alfa : coefficiente di assorbimento (funzione di 1 del
laser)
% D      : Diffusione [cm^2/s]
% k      : singolo modo della serie da tenere in considerazione
% N0    : livello di iniezione dei portatori [cm^-2]
% R      : coefficiente di riflessione agli spigoli
g0=N0*(1-R)*alfa/(1-R^2*exp(-2*alfa*d1));
ak=fzero('funcling1D',[1000],optimset('disp','off'),S0,S1,d1,
D,k);
zk=ak*d1/2;
bk=-(D*ak*cos(zk)+S0*sin(zk))/(D*ak*sin(zk)-S0*cos(zk));
den=(bk^2*(ak*d1+sin(ak*d1))+(ak*d1-
sin(ak*d1)))*(ak^2+alfa^2);
num1=(1+R*exp(-
alfa*d1))*bk*(cos(zk)*sinh(alfa*d1/2)+ak/alfa*sin(zk)*cosh(al
fa*d1/2));
num2=(1-R*exp(-alfa*d1))*(ak/alfa*cos(zk)*sinh(alfa*d1/2)-
sin(zk)*cosh(alfa*d1/2));
Bk=4*ak*g0*alfa*exp(-alfa*d1/2)*(num1+num2)/den;
modo=Bk.* (bk.*cos(ak.*x)+sin(ak.*x)).*exp(-
(1/taub+ak.^2.*D).* (t-t(1)));

function e=funcling1D(ak,S0,S1,d1,D,k);
% In questa funzione si trova l'equazione trascendente di
Ling e Ajmera
% ak    : zero della funzione
% S0    : SRV alla superficie dove comincia la generazione
[cm/s]
% S1    : SRV alla superficie opposta [cm/s]
% d1    : lunghezza del campione [cm]
% D      : diffusione [cm^2/s]
% k      : ordine del modo
if S0==S1,
    e=ak*d1-k*pi-2*atan(S0./(D*ak));
else
    e=ak*d1-k*pi-atan(S0./(D*ak))-atan(S1./(D*ak));
end;

```

## A.2 Listati Matlab per l'equazione 2D

```
function
[u1,Nmedio,Nmediox,Nmedioy]=xling2D(x,y,t,d,h,s0,s1,taub,alph
a,Navg,Nd,Na,nmodi,R);
% Questo programma calcola il profilo n(x,y,t) o p(x,y,t)
semplice
% il modello di Ling e Ajmera.
% x      : coordinata x [cm]
% y      : coordinata y [cm]
% t      : coordinata t [s]
% d      : spessore del campione lungo x [cm]
% h      : spessore del campione lungo y [cm]
% s0     : SRV alla superficie dove comincia la generazione
[cm/s]
% s1     : SRV alla superficie opposta [cm/s]
% taub  : valore del lifetime di bulk [s]
% alpha: coefficiente di assorbimento (funzione della
lunghezza d'onda del laser)
% Navg : densità media dei portatori in eccesso [cm^-3]
% Nd    : donatori [cm^-3]
% Na    : accettori [cm^-3]
% nmodi: numero di modi della serie da tenere in
considerazione
% R    : coefficiente di riflessione della superficie
N0=(Navg*d*h*(1-R*exp(-alpha*d)))/((1-R)*(1-exp(-alpha*d)));
if Nd>Na
    [mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(Nd+N0,N0,Nd,Na);
else
    [mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(N0,N0+Na,Nd,Na);
end;
[XX,YY]=meshgrid(x,y);
XXX=meshgrid(XX,1)';
YYY=meshgrid(YY,1)';
u=zeros(length(x),length(y),length(t));
nx=zeros(length(XXX),length(t));
ny=zeros(length(YYY),length(t));
%condizione iniziale
a=exp(-alpha*(XXX+d/2))+R*exp(-alpha*d)*exp(-alpha*(
XXX+d/2));
b=1-R^2*exp(-2*alpha*d);
nx(:,1)=((N0*(1-R)*alpha)/b).*a;
A=zeros(length(x),length(y));
A(:,ceil(length(y)/2))=1;
A=reshape(A',length(x)*length(y),1);
YYM=YYY.*A;
ny(:,1)=(length(y)/h).*exp(-((YYY-YYM).^2)./1e-13);
%transitorio
for k=1:nmodi,
```

```

modo=xmodoling2D(XXX,t,d,S0,S1,taub,alpha,D,k-1,N0,R);
nx(:,2:end)=nx(:,2:end)+modo(:,2:end);
end;
ny(:,2:end)=(ones(size(YYY))*(1./(2.*sqrt(pi.*D.^(t(2:end)-
t(1))))).*(exp(-((YYY-YYM).^2)*(1./(4.*D.^(t(2:end)-
t(1))))));
u=nx.*ny;
u1=reshape(u,length(y),length(x),length(t));
Nmedio=squeeze(trapz(x,trapz(y,u1(:,:, :, :)))./(d*h));
Nmedioy=squeeze(trapz(y,u1(:,:, :, :))./h);
Nmediox=squeeze(trapz(x,u1(:,:, :, :),2)./d);

function modo=xmodoling2D(XX,t,d1,S0,S1,taub,alfa,D,k,N0,R);
% Questa funzione calcola il singolo modo delmodello di Ling
e Ajmera.
% XX : nodi della griglia x-y [cm]
% t : coordinata t [s]
% d1 : spessore del campione lungo x [cm]
% S0 : SRV alla superficie dove comincia la generazione
[cm/s]
% S1 : SRV alla superficie opposta [cm/s]
% taub : valore del lifetime di bulk [s]
% alfa: coefficiente di assorbimento
% D : diffusione [cm^2/s]
% k : singolo modo della serie
% N0 : livello di iniezione dei portatori [cm^-2]
% R : coefficiente di riflessione della superficie
g0=N0*(1-R)*alfa/(1-R^2*exp(-2*alfa*d1));
ak=fzero('funcling2D',[3000],optimset('disp','off'),S0,S1,d1,
D,k);
zk=ak*d1/2;
bk=-(D*ak*cos(zk)+S0*sin(zk))/(D*ak*sin(zk)-S0*cos(zk));
den=(bk^2*(ak*d1+sin(ak*d1))+(ak*d1-
sin(ak*d1))*(ak^2+alfa^2));
num1=(1+R*exp(-
alfa*d1))*bk*(cos(zk)*sinh(alfa*d1/2)+ak/alfa*sin(zk)*cosh(al
fa*d1/2));
num2=(1-R*exp(-alfa*d1))*(ak/alfa*cos(zk)*sinh(alfa*d1/2)-
sin(zk)*cosh(alfa*d1/2));
Bk=4*ak*g0*alfa*exp(-alfa*d1/2)*(num1+num2)/den;
modo=Bk.* (bk.*cos(ak.*XX)+sin(ak.*XX))*exp(-
(1/taub+ak.^2.*D).*(t-t(1)));

function e=funcling2D(ak,S0,S1,d1,D,k);
% In questa funzione si trova l'equazione trascendente di
Ling e Ajmera
% ak : zero della funzione
% d1 : spessore del campione lungo x [cm]
% k : ordine del modo
if S0==S1,
    e=ak*d1-k*pi-2*atan(S1./(D*ak));
else
    e=ak*d1-k*pi-atan(S0./(D*ak))-atan(S1./(D*ak));
end;

```

## Appendice B

### Listati Matlab dei modelli utilizzati per risolvere l'equazione della diffusione.

#### B.1 Listati Matlab

```
function [mu0n,mu0p,Dn,Dp,Damb]=mobility2(n,p,Nd,Na)
%Calcolo della mobilità secondo il modello di Philips
k=1.38e-23;
q=1.602e-19;
T=300;
MMNN_UM=5.22e1;
MMXN_UM=1.417e3;
NRFN_UM=9.68e16;
ALPN_UM=6.8e-1;
TETN_UM=2.285;
NRFD_UM=4e20;
CRFD_UM=2.1e-1;
MMNP_UM=4.49e1;
MMXP_UM=4.705e2;
NRFP_UM=2.23e17;
ALPP_UM=7.19e-1;
TETP_UM=2.247;
NRFA_UM=7.2e20;
CRFA_UM=5e-1;
m0=9.11e-31;%Massa elettrone espressa in Kg
me=m0; mh=1.258*m0;
Ndast=Nd*(1+1/(CRFD_UM+(NRFD_UM/Nd)^2));
Naast=Na*(1+1/(CRFA_UM+(NRFA_UM/Na)^2));
mu_latt_n=MMXN_UM*((T/300)^(-TETN_UM));%mobilità elettroni
Nsc_n=Ndast+Naast+p;
a=2.459./(3.97e13.*Nsc_n.^(-2/3));
Pn=(((3.828./(1.36e20./(n+p))).*(m0/me))+a).^(-1)*(T/300)^2;
GPn=1-
(0.89233./(0.41372+Pn.*(((m0/me)*(T/300))^0.28227)).^0.19778)
+(0.005978./(Pn.*(((me/m0)*(300/T))^0.72169)).^1.80618);
FPn=(0.7643.*Pn.^0.6478+2.2999+6.5502*(me/mh))./(Pn.^0.6478+2
.3670-0.8552*(me/mh));
Nsc_eff_n=Ndast+(Naast.*GPn)+p./FPn;
muN_n=(MMXN_UM^2/(MMXN_UM-MMNN_UM))*(T/300)^(3*ALPN_UM-1.5);
muc_n=((MMXN_UM*MMNN_UM)/(MMXN_UM-MMNN_UM))*(300/T)^0.5;
muD_A_p=(muN_n.* (Nsc_n./Nsc_eff_n)).*((NRFN_UM./Nsc_n).^ALPN_
UM)+muc_n.*((n+p)./Nsc_eff_n);
mu1n=mu_latt_n.^-1+muD_A_p.^-1;
```

```

mu_latt_p=MMXP_UM*((T/300)^(-TETP_UM));%Mobilità lacune
Nsc_p=Ndast+Naast+n;
a1=2.459./(3.97e13.*Nsc_p.^(-2/3));
Pp=((3.828./(1.36e20./(n+p))).*(m0/mh))+a1).^(-1)*(T/300)^2;
GPP=1-
(0.89233./(0.41372+Pp.*((m0/mh)*(T/300))^0.28227).^0.19778)+(
0.005978./(Pp.*(((mh/m0)*(300/T))^0.72169)).^1.80618);
FPp=(0.7643.*Pp.^0.6478+2.2999+6.5502*(mh/me))./(Pn.^0.6478+2
.3670-0.8552*(mh/me));
Nsc_eff_p=Naast+Ndast.*GPP+n./FPp;
muN_p=(MMXP_UM^2/(MMXP_UM-MMNP_UM))*(T/300)^(3*ALPP_UM-1.5);
muc_p=(MMXP_UM*MMNP_UM)/(MMXP_UM-MMNP_UM))*(300/T)^0.5;
muD_A_n=(muN_p.*Nsc_p./Nsc_eff_p).*((NRFP_UM./Nsc_p).^ALPP_
UM)+muc_p.*((n+p)./Nsc_eff_p);
mu1p=mu_latt_p.^-1+muD_A_n.^-1;
mu0n=mu1n.^-1;
mu0p=mu1p.^-1;
Dn=(k*T./q).*mu0n;
Dp=(k*T./q).*mu0p;
Damb=(k*T./q).*((n+p)./(n./mu0p+p./mu0n));

function Usrh=srh_time(n,p,taun0,taup0,etrap,Nd,Na);
% Calcolo della U di SRH ed Auger
% p : lacune iniettate [cm-3]
% n : elettroni iniettati [cm-3]
% taun0 : lifetime degli elettroni [s]
% taup0 : lifetime delle lacune [s]
% etrap : distanza del centro di ricombinazione dal livello
di
% Fermi intrinseco
nsrhn=1e17;
nsrhp=1e17;
augn=1e-31;
augp=1e-31;
Cdirect=1e-15;
nie=1.45e10;
q=1.602e-19;
k=1.38e-23;
T=300;
ntot=Nd+Na;
taun=taun0./(1+ntot/nsrhn);
taup=taup0./(1+ntot/nsrhp);
c=(p.*n-nie.^2);
a=taup.*((n+nie.*exp(q*etrap/(k*T))));
b=taun.*((p+nie.*exp(-q*etrap/(k*T))));
Uauger=augn*(p.*n.^2-n.*nie.^2)+augp*(n.*p.^2-p.*nie.^2);
Udir=Cdirect*(n.*p-nie.^2);
Usrh=c./(a+b)+Uauger+Udir;

```

# Appendice C

## Listati Matlab per la soluzione dell'equazione della diffusione 1D/2D col metodo delle differenze finite per livelli di iniezione arbitrari

### C.1 Listati Matlab per l'equazione 1D

```
function
[u1,Nmedio]=implicito1_D(x,t,d,s0,s1,taun0,taup0,alpha,Navg,N
d,Na,R,metodo,livello);
% x      : nodi della griglia
% t      : vettore dei tempi [s]
% d      : spessore del campione [cm]
% s0     : velocità di ricombinazione superficiale sulla 1
faccia [cm/s]
% s1     : velocità di ricombinazione superficiale sulla 2
faccia [cm/s]
% taun0  : tempo di vita medio di ricombinazione degli
elettroni [s]
% taup0  : tempo di vita medio di ricombinazione delle lacune
[s]
% alpha  : coefficiente di assorbimento alla lunghezza d'onda
della pompa [cm-1]
% Navg   : densità media dei portatori in eccesso [cm-3]
% Nd     : donatori [cm-3]
% Na     : drogaggio accettori [cm-3]
% R      : coefficiente di riflessione agli spigoli
% metodo : 0/esplicito, 1/puramente implicito, 0.5/Crank-
Nicolson, altro/semi-implicito
% livello: 0/bassi livelli d'iniezione, 1/alti livelli di
iniezione
N0=(Navg*d*(1-R*exp(-alpha*d)))/((1-R)*(1-exp(-alpha*d)));
etrap=0;
nie=1.45e10;
%Campione TYPE N
if Nd>Na
```

```

[mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(Nd+N0,N0,Nd,Na);
n1=Nd;p1=0;n2=Nd;p2=nie^2/Nd;
else
%Campione TYPE P
[mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(N0,N0+Na,Nd,Na);
n1=0;p1=Na;n2=nie^2/Na;p2=Na;
end;
dx=x(2)-x(1);
x=[x(1)-dx,x,x(end)+dx];
Nx=length(x);
Nt=length(t);
u1=zeros(Nx,Nt);
a=exp(-alpha*(x+d/2))+R*exp(-alpha*d)*exp(-alpha*(-x+d/2));
b=1-R^2*exp(-2*alpha*d);
cond_ini=((N0*(1-R)*alpha)/b)*a;
u1(:,1)=cond_ini'; %condizione iniziale
lambda=metodo; %Parametro che definisce il metodo implicito
for j=1:length(t)-1,
U=srh_time(u1(:,j)+n1,u1(:,j)+p1,taun0,taup0,etrap,Nd,Na);

[mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(u1(:,j)+n2,p2+u1(:,j),Nd,Na);
Grad_D=Gradient(D,x);
dt=t(j+1)-t(j);
Cx=dt.*D./(dx.^2);
Bx=livello*dt*Grad_D/2*dx;
% creazione delle due matrici tridiagonali a blocchi
Jdiag=diag(1+2*Cx(1:Nx).*lambda,0);
Jlx=diag(-(Cx(1:Nx-1)-Bx(1:Nx-1)).*lambda,-1);
Jhx=diag(-(Cx(2:Nx)+Bx(2:Nx)).*lambda,1);
Rdiag=diag(1-2*Cx(1:Nx).*(1-lambda),0);
Rlx=diag((Cx(1:Nx-1)-Bx(1:Nx-1)).*(1-lambda),-1);
Rhx=diag((Cx(2:Nx)+Bx(2:Nx)).*(1-lambda),1);
%matrice che moltiplica U(i,j+1)
J=Jlx+Jdiag+Jhx;
% matrice che moltiplica U(i,j)
R=Rlx+Rdiag+Rhx;
Res=R*u1(:,j)-U*dt;
%Condizioni al contorno tipo Neumann
J(1,:)=[(-D(2)/(2*dx)), -S0, (D(2)/(2*dx)), zeros(1,Nx-3)];
J(Nx,:)=[zeros(1,Nx-3), (-D(Nx-1)/(2*dx)), S1, (D(Nx-1)/(2*dx))];
Res(1)=0;
Res(Nx)=0;
%Calcolo della matrice delle concentrazioni per j+1
u1(:,j+1)=J\Res;
end;
u1=u1(2:end-1,:);
Nmedio=1/d*trapz(x(2:end-1),u1);

```

## C.2 Listati Matlab per l'equazione 2D

```

function
[B,Nmedio,Nmediox,Nmedioy]=implicito2D(x,y,t,d,h,s0,s1,taun0,
taup0,alpha,Navg,Nd,Na,R,metodo,livello);
% x      : nodi della griglia lungo x
% y      : nodo della griglia lungo y
% t      : vettore dei tempi [s]
% d      : spessore del campione lungo x[cm]
% h      : spessore del campione lungo y[cm]
% S0     : velocità di ricombinazione superficiale sulla 1
faccia [cm/s]
% S1     : velocità di ricombinazione superficiale sulla 2
faccia [cm/s]
% taun0  : tempo di vita medio di ricombinazione degli
elettroni [s]
% taup0  : tempo di vita medio di ricombinazione delle lacune
[s]
% alpha  : coefficiente di assorbimento alla lunghezza d'onda
del laser [cm-1]
% Navg   : densità media dei portatori in eccesso [cm-3]
% Nd     : drogaggio di donatori [cm-3]
% Na     : drogaggio di accettori [cm-3]
% R      : coefficiente di riflessione delle superfici
% metodo :0/esplicito,1/puramente implicito,0.5/Crank-
Nicolson,altro/semi-implicito
% livello:0/bassi livelli d'iniezione,1/alti livelli di
iniezione
N0=(Navg*d*h*(1-R*exp(-alpha*d)))/((1-R)*(1-exp(-alpha*d)));
etrap=0;
nie=1.45e10;
if Nd>Na
    %Campione TYPE N
    [mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(Nd+N0,N0,Nd,Na);
    n1=Nd;p1=0;n2=Nd;p2=nie^2/Nd;
else
    %Campione TYPE P
    [mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(N0,N0+Na,Nd,Na);
    n1=0;p1=Na;n2=nie^2/Na;p2=Na;
end;
dx=x(2)-x(1);
dy=y(2)-y(1);
Nx=length(x)+2;
Ny=length(y);
M=length(t);
P=Nx*Ny;
ul=zeros(P,M);
ula=zeros(Nx,Ny);
[XX,YY]=meshgrid(x,y);
YYM=zeros(size(YY));

```

```

YYM(fix(Ny/2)+1,:)=YY(fix(Ny/2)+1,:);
a=exp(-alpha*(XX+d/2))+R*exp(-alpha*d)*exp(-alpha*(-XX+d/2));
b=1-R^2*exp(-2*alpha*d);
cond_ini=((N0*(1-R)*alpha)/b).*a;
cond_ini=cond_ini.*((length(y)/h).*exp(-((YY-YYM).^2)./1e-13));
ula(2:Nx-1,1:Ny)=cond_ini';
ula(1,:)=ula(2,:);
ula(Nx,:)=ula(Nx-1,:);
u1(:,1)=reshape(ula,P,1);%condizione iniziale
clear ula;
clear YYM;
lambda=metodo;%Parametro che definisce il metodo implicito
for j=1:M-1,
    U=srh_time(u1(:,j)+n1,u1(:,j)+p1,taun0,taup0,etrap,Nd,Na);

[mu0n,mu0p,Dn,Dp,D]=mobility2(u1(:,j)+n2,p2+u1(:,j),Nd,Na);
GD=D;
GD=reshape(GD,Nx,Ny);
[GDx,GDy]=gradient(GD);
Gradx_D=reshape(GDx,P,1);
Grady_D=reshape(GDy,P,1);
dt=t(j+1)-t(j);
Cx=dt*D./dx.^2;
Cy=dt*D./dy.^2;
Bx=(dt*Gradx_D./2.*dx).*livello;
By=(dt*Grady_D./2.*dy).*livello;
% creazione delle due matrici tridiagonali a blocchi
Jdiag=diag(1+2*Cx(1:P).*lambda+2*Cy(1:P).*lambda,0);
Jlx=diag(-(Cx(1:P-1)-Bx(1:P-1)).*lambda,-1);
Jhx=diag(-(Cx(2:P)+Bx(2:P)).*lambda,1);
Jhy=diag(-(Cy(2:P-2)+By(2:P-2)).*lambda,3);
Jly=diag(-(Cy(1:P-3)-By(1:P-3)).*lambda,-3);
Rdiag=diag(1-2*Cx(1:P).*(1-lambda)-2*Cy(1:P).*(1-lambda),0);
Rlx=diag((Cx(1:P-1)-Bx(1:P-1)).*(1-lambda),-1);
Rhx=diag((Cx(2:P)+Bx(2:P)).*(1-lambda),1);
Rhy=diag((Cy(2:P-2)+By(2:P-2)).*(1-lambda),3);
Rly=diag((Cy(1:P-3)-By(1:P-3)).*(1-lambda),-3);
%matrice che moltiplica U(i,j+1)
J=Jlx+Jly+Jdiag+Jhx+Jhy;
% matrice che moltiplica U(i,j)
R=Rlx+Rly+Rdiag+Rhx+Rhy;
Res=R*u1(:,j)-U*dt;
%Condizioni al contorno tipo Neumann
for i=1:Nx:(Nx*(Ny-1))+1,
    J(i,:)=[zeros(1,i-1),(-D(i)./(2.*dx)),-
S0,(D(i)./(2.*dx)),zeros(1,P-(i+2))];
    end;
    for i=Nx:Nx:Nx*Ny,
        J(i,:)=[zeros(1,i-3),(-
D(i)./(2.*dx)),S1,(D(i)./(2.*dx)),zeros(1,P-i)];
        end;

```

```

for i=1:Nx:(Nx*(Ny-1))+1 ,
    Res(i)=0;
end;
for i=Nx:Nx:Nx*Ny ,
    Res(i)=0;
end;
%Calcolo della matrice delle concentrazioni per j+1
u1(:,j+1)=J\Res;
end;
for j=1:M,
    A(:, :, j)=reshape(u1(:, j), Nx, Ny);
    B(:, :, j)=A(2:Nx-1, 1:Ny, j);
end;
Nmedio=squeeze(trapz(y,trapz(x,B(:, :, :)))./(d*h));
Nmedioy=squeeze(trapz(y,B(:, :, :, 2)./h));
Nmediox=squeeze(trapz(x,B(:, :, :))./d);

```

# Indice delle figure

1.1. Processi di ricombinazione in un semiconduttore.....	13
1.2. Struttura atomica dell'interfaccia Si-SiO <sub>2</sub> .....	22
1.3. Modelli di distribuzione degli stati all'interfaccia.....	24
1.4. Diagramma delle bande di energia.....	27
2.1. Interazione di un impulso laser con un wafer di Si.....	29
3.1. Discretizzazione di un dominio bidimensionale.....	39
3.2. Notazione alle differenze finite.....	43
3.3. Schema di validità della soluzione numerica.....	44
3.4. Schema esplicito.....	47
3.5. Schema implicito.....	48
3.6. Schema di Crank-Nicholson.....	49
3.7. Condizioni al contorno.....	50
3.8. Griglia nel caso monodimensionale.....	55
3.9. Griglia nel caso bidimensionale.....	59

# Indice delle Tabelle

4.1. Tabella 1: resoconto di tutte le simulazioni eseguite nel caso monodimensionale per $\alpha=10$ .....	67
4.2. Tabella 2: resoconto di tutte le simulazioni eseguite nel caso monodimensionale per $\alpha=292$ .....	80
4.3. Tabella 3: resoconto di tutte le simulazioni eseguite nel caso bidimensionale.....	93
4.4. Tabella 4: simulazioni effettuate per il confronto con MEDICI.....	99

## Bibliografia

- [1] A. Irace, *Optical characterization of the recombination process in silicon wafer and devices*. Tesi di dottorato, Università degli studi di Napoli “Federico II”, 1999.
- [2] J. Waldmeyer, “*A contactless method for determination of carrier lifetime, surface recombination velocity, and diffusion constant in semiconductors*”, *J. Appl. Phys.*, vol. 63, no.6, pp.1977 ÷ 1983, 1988.
- [3] Z. Ling, P. Ajmera and G. Kousik, “*Simultaneous extraction of bulk lifetime and surface recombination velocities from free carrier absorption transients*”, *J. Appl. Phys.*, vol.75, no. 5, pp. 2718, 1994.
- [4] G. Kousik, Z. Ling and P. K. Ajmera, “*Nondestructive technique to measure bulk lifetime and surface recombination velocities at the two surfaces by infrared absorption due to pulsed optical excitation*”, *J. Appl. Phys.* , vol. 72, no. 1, pp. 141 ÷ 146, 1992.
- [5] Z. Ling and P. K. Ajmera, “*Measurement of bulk lifetime and surface recombination velocity by infrared absorption due to pulsed optical excitation*”, *J. App. Phys.*, vol. 69 1991
- [6] J. Schmidt and A. G. Aberle, “*Accurate method for the determination of bulk minority carrier lifetimes of mono- and multicrystalline silicon wafers*”, *J. App. Phys.*, vol.

81, no. 9, pp. 6186 ÷ 6199, 1997.

- [7] T. Otaredian, “*Separate contactless measurement of the bulk lifetime and the surface recombination velocity by the harmonic optical generation of the excess carriers*”, *Solid State Electronics*, vol. 36, no. 2, pp. 153 ÷ 162, 1993.
- [8] K. L. Luke and L. Cheng, “*Analysis of the interactions of a laser pulse with a silicon wafer: Determination of bulk lifetime and surface recombination velocity*”, *Journal Applied Physics*, vol. 61, no. 6, pp. 2282 ÷ 2293, 1987.
- [9] T. S. Horanyi, T. Pavelka and P. Tüttö, *Appl. Surf. Sci.* 63 (1993).
- [10] W. Arndt, K. Graff and P. Heim, *Electrochem. Soc. Proc.* 95 (1995).
- [11] M. Schöfthaler, R. Brendel, G. Langguth and J. H. Werner, *Proceeding of the first world conference on photovoltaic energy conversion*, Hawaii (IEEE, New York, 1994).
- [12] K. Katayama, Y. Kirino, K. Iba and F. Shimura, *Jpn. J. Appl. Phys.* 30, 1907 (1991).
- [13] TMA Associates, *PISCES IIB, User Manual*.
- [14] P. A. Basore D. T. Rover and A. W. Smith, “*PC-1D VERSION 2: Enhanced numerical solar cell modeling*”, Conf. Rec. Of the 20<sup>th</sup> IEEE Photovoltaic Specialists Conf., pp. 389 ÷ 396, Settembre 1988.
- [15] P.A. Basore, “*Numerical modelling of textured silicon solar cells using PC-1D*”, *IEEE Transactions on electron devices*, vol. 37, no. 2, pp. 337 ÷ 343, Febbraio 1990.
- [16] P. A. Basore, “*PC-1D VERSION 3: Improved speed and convergence*”, IEEE, 1991, pp. 299 ÷ 302.
- [17] M. S. Obrecht, M. I. Elmasry and L. Heasell, “*TRASIM: Compact*

*and efficient two-dimensional transient simulator for arbitrary planar semiconductor device”, IEEE transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems, vol. 14, no. 4, pp. 447÷458, Aprile 1995.*

- [18] C. Ringhofer and C. Schmeiser, “*A Modified Gummel method for basic semiconductor device equations*”, IEEE transactions on computer-aided, vol. 7, no. 2, Febbraio 1988.
- [19] T.Y.Wong, M.C. Poon, J.K.O. Sin, M.Wong, T.C. Lo and H. Wong, “*Fast numerical method for semiconductor device simulation*”, IEEE 1995, pp. 218÷221.
- [20] G. Soncini, *Tecnologie microelettroniche*. Boringhieri.
- [21] T. Otaredian, *Contactless Microwave Lifetime Measurement*. PhD thesis, Delft University of technology, 1992.
- [22] S. M. Sze, *Dispositivi a semiconduttore*, Hoepli, 1985.
- [23] P.T. Landsberg, “*The band-band Auger effect in semiconductors*”, *Solid-State Electronics*, vol. 30, no. 11, pp. 1107 ÷1115, 1987.
- [24] J. Dziewior and W. Schmid, “*Auger coefficients for highly doped and highly excited silicon*”, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 31, no. 5, pp. 346 ÷348, 1977.
- [25] S. K. Ghandhi, *Semiconductor power devices: Physics of operation and fabrication technology*. John Wiley and Sons, New York 1977.
- [26] W. F. Ames, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Thomas Nelson and Sons, Iowa City 1977.

- [27] R. W. Hamming, *Numerical Methods for Scientists and Engineers*.  
McGraw-Hill, New York, 1962.
- [28] A. Friedman, *Partial Differential Equations of Parabolic Type*.  
Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1964.
- [29] D.B.M. Klaassen, “A unified mobility for device simulation”,  
IEDM 90, pp. 357÷360, 1990.