

Programos GraphiXT priedas krūvio pernašai daugiasluoksnėse sistemose modeliuoti

v0.75

Vartotojo instrukcija

Andrius Poškus

(Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas)

2014-04-09

© Andrius Poškus, 2014

E-mail: andrius.poskus@live.com

Web: <http://www.graphixt.com>

Turiny

1. Modeliavimo metoas	1
2. Įvadas į vartotojo sąsają	3
3. Skaičiavimo algoritmo parametrai	5
4. Laisvųjų krūvininkų parametrai	11
5. Tūrinių gaudyklių parametrai	17
6. Paviršinių gaudyklių parametrai	20
7. Fotogeneracijos parametrai	24
8. Krūvininkų pernašos per skiriamuosius paviršius parametrai	27
9. Išoriniai parametrai	30
10. Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	33
11. Sluoksnio storis ir kiti parametrai	34
12. Modelio funkcijos	35

1. Modeliavimo metodas

Modeliuojant krūvininkų kinetiką, skaitiniu metodu sprendžiama tokio pavidalo diferencialinių lygčių sistema:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\frac{1}{q_i} \frac{\partial j_i}{\partial x} + \alpha_{i0} + \sum_{k \neq i} \alpha_{ik} c_k - n_i \sum_{k \neq i} \beta_{ik} p_k, \quad (1.1)$$

$$j_i(x, t) = |q_i| \mu_i n_i E - q_i D_i \frac{\partial n_i}{\partial x}, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho(x, t)}{\varepsilon_0 \varepsilon}. \quad (1.3)$$

Čia vartojami šie žymenys:

t – laikas,

x – koordinatė,

n_i – i -tosios rūšies krūvininkų koncentracija,

q_i – i -tosios rūšies krūvininkų elektros krūvis,

α_{i0} – i -tosios rūšies krūvininkų dvipolės generacijos (taip pat ir fotogeneracijos) sparta,

c_k – k -tosios rūšies „užimtų“ būsenų, iš kurių generuojami i -tosios rūšies krūvininkai, koncentracija,

α_{ik} – i -tosios rūšies krūvininkų generacijos iš k -tosios rūšies būsenų spartos koeficientas;

p_k – k -tosios rūšies „neužimtų“ būsenų, į kurias gali pereiti i -tosios rūšies krūvininkai, koncentracija,

β_{ik} – i -tosios rūšies krūvininkų pagavimo į k -tosios rūšies būsenas spartos koeficientas;

j_i – i -tosios rūšies krūvininkų laidumo srovės tankis,

μ_i – i -tosios rūšies krūvininkų judris,

D_i – i -tosios rūšies krūvininkų difuzijos koeficientas,

E – elektrinio lauko stipris,

ρ – pilnutinis erdvinio krūvio tankis,

ε – aukštadažnė dielektrinė skvarba,

ε_0 – elektrinė konstanta.

Kad būtų trumpiau, čia „krūvininkais“ vadinsime ne tik laisvuosius krūvininkus, bet ir tam tikro krūvio gaudykles. Programa gali modeliuoti ir paviršines gaudykles (kad (1.1) ir (1.2) lygtys būtų paprastesnės, jose nėra dėmenų, kurie atitinka paviršines gaudykles). Pagavimas į paviršines gaudykles ir išlaisvinimas iš jų pasireiškia papildomu dėmeniu krūvininkų srauto tankio išraiškoje prie duotojo paviršiaus, o to dėmens vertė priklauso nuo duotųjų laisvųjų krūvininkų koncentracijos prie duotojo paviršiaus ir nuo duotosios krūvinės būsenos gaudyklių paviršinio tankio.

Laisvųjų krūvininkų skaičius duotojoje erdvės srityje gali pasikeisti dėl jų pereigos pro tos srities kraštus, dvipolės generacijos ir rekombinacijos arba dėl jų virtimo kitos rūšies krūvininkais. Duotosios krūvinės būsenos tūrinių arba paviršinių gaudyklių skaičius gali kisti tik dėl laisvųjų krūvininkų pagavimo arba išlaisvinimo. Todėl lygtyse, kurios nusako kiekvienos krūvinės būsenos gaudyklių koncentracijų kitimą laike, nėra pirmųjų dviejų dėmenų, kurie yra (1.1) lygties dešiniojoje pusėje, ir yra sumuojama tik laisvųjų krūvininkų atžvilgiu.

Lygčių sistema (1.1) – (1.3) sprendžiama baigtinių skirtumų metodu. Kiekvieno sluoksnio x verčių intervalas yra suskaidomas į mažesnius intervalus (tų intervalų kraštus vadinsime „mazgais“). Tie intervalai nebūtinai turi būti vienodo pločio. Srovės tankio dalinė išvestinė koordinatės atžvilgiu, kuri įeina į (1.1) lygtį, k -tajame mazge skaičiuojama šitaip:

$$\left. \frac{\partial j}{\partial x} \right|_{x=x_k} \approx \frac{(j_{k+1} - j_k)r + (j_k - j_{k-1})\frac{1}{r}}{x_{k+1} - x_{k-1}}, \quad (1.4)$$

čia j_{k-1} , j_k ir j_{k+1} yra srovės tankio vertės trijuose gretimuose mazguose, x_{k-1} , x_k ir x_{k+1} yra tų mazgų koordinatės, o r yra dviejų gretimų koordinatės intervalų santykis:

$$r \equiv \frac{x_k - x_{k-1}}{x_{k+1} - x_k}.$$

Atskiru atveju, kai $r = 1$, t. y. kai abu gretimi intervalai yra vienodo pločio, (1.4) reiškinyms virsta tokiu reiškiniu:

$$\left. \frac{\partial j}{\partial x} \right|_{x=x_k} \approx \frac{j_{k+1} - j_{k-1}}{x_{k+1} - x_{k-1}}. \quad (1.5)$$

Taip pat skaičiuojama ir krūvininkų koncentracijos išvestinė, kuri įeina į laidumo srovės tankio išraišką (1.2). Išvestinės išraiška (1.4) arba (1.5) vadinama „dvipuse išvestine“, nes jos vertė k -tajame mazge priklauso nuo tos funkcijos verčių dviejuose gretimuose mazguose (su numeriais $k-1$ ir $k+1$). Sistemos kraštuose ir skirtingų sluoksnių skiriamuosiuose paviršiuose yra naudojamos „vienpusės“ išvestinės. Pvz., ant sluoksnio kairiojo krašto (kuris atitinka mažiausią x vertę, t. y. pirmąjį mazgą $x = x_1$) krūvininkų koncentracijos išvestinė skaičiuojama šitaip:

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=x_1} \approx \frac{n_2 - n_1}{x_2 - x_1}. \quad (1.6)$$

Lygčių sistema (1.1) – (1.3) sprendžiama taikant išreikštinį algoritmą. T. y. visų krūvininkų koncentracijų pokyčiai per vieną modeliavimo laiko žingsnį apskaičiuojami dauginant tų koncentracijų kitimo spartas iš laiko žingsnio trukmės Δt . Pvz., jeigu l -tuoju laiko momentu ($t = t_l$) duotosios rūšies krūvininkų koncentracija k -tajame mazge buvo lygi $n(x_k, t_l)$, tada po vieno modeliavimo laiko žingsnio (t. y. laiko momentu $t = t_{l+1} = t_l + \Delta t$) ta koncentracija bus lygi

$$n(x_k, t_{l+1}) = n(x_k, t_l) + \left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{x_k, t_l} \Delta t. \quad (1.7)$$

T. y. teigiama, kad laiko intervale nuo t_l iki $t_l + \Delta t$ visų krūvininkų koncentracijos visuose mazguose tiesiškai priklauso nuo laiko, ir to kitimo spartą lemia sistemos būseną laiko momentu t_l (nes, skaičiuojant (1.1) – (1.3) lygčių dešiniąsias puses, buvo naudojamos krūvininkų koncentracijų vertės laiko momentu t_l). Laiko žingsnis Δt apskaičiuojamas remiantis koncentracijų kitimo sparta (kuo greičiau kinta koncentracijos, tuo mažesnis Δt).

Mažinant intervalą tarp gretimų mazgų Δx , išvestinių koordinatės atžvilgiu skaičiavimo tikslumas didėja, tačiau tuo pačiu didėja ir mazgų skaičius, t. y. naudojamos kompiuterio atminties kiekis bei skaičiavimo trukmė. Δx gali priklausyti nuo koordinatės. Pvz., mazgų tankis gali būti didžiausias sluoksnio kraštuose ir mažiausias jo centre (ši nuostata užduodama parametru redaktoriaus kortelėje „Skaičiavimo algoritmo parametrai“). Tačiau dabartinėje modelio versijoje (v0.75) mazgų koordinatės nepriklauso nuo laiko, t. y. jos nekinta viso modeliavimo metu.

Kadangi išreikštinis algoritmas yra stabilus tik esant palyginti mažiems laiko žingsniams Δt , tai, jį taikant kai Δt yra didelis, laisvųjų krūvininkų koncentracijos turėtų būti periodiškai glodinamos. Laisvųjų krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės yra glodinama tada, kai toje priklausomybėje aptinkama „pjūklo“ pavidalo seka, kurioje perlinkio taškai pasikartoja periodiškai. Galima pasirinkti vieną iš dviejų glodinimo metodų – pagal tris taškus arba pagal penkis taškus. Pasirinkus glodinimą pagal tris taškus, glodinama bus tada, kai perlinkio taškai yra kiekviename mazge. Pasirinkus glodinimą pagal penkis taškus, glodinama bus dar ir tada, kai perlinkio taškai yra kas antrame mazge. Kitais atvejais funkcija nėra glodinama. Glodinama tik aptiktosios „pjūklinės“ sekos viduje ir tik tada, kai perlinkio taškų skaičius joje yra 2 arba didesnis. Glodinama taip, kad pilnutinis tos rūšies laisvųjų krūvininkų skaičius glodinimo srities viduje nepakistų. Vartotojas gali užduoti, kas kiek modeliavimo laiko žingsnių reikia tikrinti, ar nėra minėtųjų pjūklinių sekų (tai atliekama parametru redaktoriaus kortelėje „Skaičiavimo algoritmo parametrai“).

Krūvininkų atsiradimo ir išnykimo spartų koeficientai α_{ik} ir β_{ik} (žr. (1.1) lygtį) bei judriai ir difuzijos koeficientai gali būti arba pastovūs, arba apskaičiuojami pagal vartotojo pasirinktą modelį. Pvz., krūvininkų judris gali būti apskaičiuojamas pagal formulę $\mu = a \exp(b\sqrt{|E|})$ (tokią priklausomybę sąlygoja vadinamasis Pulo ir Frenkelio efektas).

Krūvininkų, gaudyklių rūšių ir krūvininkų virsmų skaičius, kurį galima modeliuoti naudojant programas CarrierFunc.dll ir CarrierParams.exe, yra praktiškai neribotas. Dabartinės versijos (v0.75) vienintelis apribojimas yra tas, kad pilnutinis vieno sluoksnio parametru skaičius negali viršyti 5000, o didžiausias leidžiamas sluoksnių skaičius yra 10.

2. Įvadas į vartotojo sąsają

Programos GraphiXT priedas daugiasluoksnių sistemų krūvininkų kinetikai modeliuoti yra sudarytas iš dviejų programų: funkcijų failo CarrierFunc.dll ir modelio parametrų redaktoriaus CarrierParms.exe. Jeigu yra įkelti į atmintį funkcijų failas ir parametrų redaktorius, tada parametrų redaktorių galima iškviešti naudojant GraphiXT meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Modelio parametrai...“, o norint pradėti (pratęsti) arba sustabdyti modeliavimo procesą, reikia įvykdyti GraphiXT meniu juostos komandą „Pradėti skaičiuoti“ arba „Baigti skaičiuoti“. Funkcijų failas įkeliamas į atmintį naudojant GraphiXT meniu juostos komandą „Modeliavimo nuostatos / Modelio funkcijų failas...“, o parametrų redaktorius įkeliamas į atmintį naudojant meniu komandą „Modeliavimo nuostatos / Parametrų redaktoriaus failas...“. Prieš pradėdant modeliuoti, reikia užduoti pradinį ir galutinį laikus (GraphiXT meniu komanda „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“). [Programos GraphiXT.exe aprašas yra kitame faile. Toliau aprašomas tik jos priedas krūvininkų kinetikai modeliuoti.]

Parametrų redaktoriaus lange visi modeliuojamos sistemos parametrai yra sugrupuoti pagal kategorijas. Kiekvieną kategoriją atitinka tam tikra parametrų redaktoriaus kortelė. Dabartinėje modelio versijoje (v0.75) yra 9 kortelės, kurių pavadinimai yra matomi 1 pav. Skirtingose kortelėse yra kelių rūšių įvesties laukai: teksto laukai, kuriuose įvedamos parametrų vertės bei parametrų rinkinių pavadinimai, sąrašų laukai, mygtukai ir žymimieji laukeliai.

Kiekvienas fizikinis medžiagos parametras (pvz., krūvininkų judris, gaudyklių koncentracija ir pan.) „priklauso“ kuriam nors vienam modeliuojamos sistemos sluoksniui. Visi medžiagos parametrai, kurie matomi kiekvienoje parametrų redaktoriaus kortelėje, atitinka tam tikrą sluoksnį – „einamąjį sluoksnį“. Einamąjį sluoksnį galima pasirinkti naudojant sąrašo lauką „Pasirinktasis sluoksnis“, kuris yra daugumos kortelių kairiajame krašte (žr. 1 pav.). Virš to lauko yra mygtukas „Įterpti arba pašalinti sluoksnį“. Spustelėjus tą mygtuką, atsidaro dialogo langas, kuriame galima pasirinkti vieną iš trijų veiksmų – naujo sluoksnio įterpimą „iš dešinės“, t. y. po sluoksnio, kurio x koordinatė yra didžiausia (tai yra numatytasis veiksmas), įterpimą prieš einamąjį sluoksnį ir einamojo sluoksnio pašalinimą. Sluoksnį galima pašalinti tik tada, kai sistemą sudaro daugiau negu vienas sluoksnis. Įterpus naują sluoksnį, jis yra „tuščias“, t. y. jame nėra jokių laisvųjų krūvininkų arba gaudyklių.

Jeigu yra galimi keli duotosios rūšies parametrų rinkiniai (pvz., kelių rūšių laisvieji krūvininkai), tada tos rūšies parametrų rinkinį galima įterpti arba pašalinti naudojant atitinkamą mygtuką. Pvz., 1 pav. yra matomi keturi tokie mygtukai. Po kiekvienu tokiu mygtuku yra atitinkamos rūšies parametrų rinkinio pasirinkimo sąrašas. Po tuo sąrašu yra parametrų, kurie priklauso pasirinktajam duotosios rūšies

1 pav. Parametrų redaktoriaus lango pavyzdys (atidaryta kortelė „Laisvųjų krūvininkų parametrai“)

parametrų rinkiniui, vertės. Taigi, jeigu egzistuoja keli duotosios rūšies parametrų rinkiniai, tada vienu metu yra matomi tik vieno iš jų parametrai.

Kai kurie parametrai nėra susieti su konkrečiais modeliuojamos daugiasluoksnės sistemos sluoksniais. Tai yra skaičiavimo algoritmo parametrai (pvz., parametrai, kurie valdo laiko žingsnį) ir išoriniai parametrai (pvz., temperatūra ir išorinio apšvietimo parametrai). **Pastaba:** Programoje tokie parametrai yra priskirti sluoksniui, kurio numeris yra 0. Šis „sluoksnis“ nėra įskaitomas pilnutiniame sluoksnių skaičiujame, kuris nurodytas virš mygtuko „Įterpti arba pašalinti sluoksnį“ (žr. 1 pav.). „Realieji“ sluoksniai, kurie sudaro modeliuojamą sistemą, yra numeruojami pradedant nuo 1 (tik tokius sluoksnius galima įterpti arba pašalinti).

Parametrų redaktorius lange šalia parametrų verčių yra nurodyti ir jų vienetai. Sluoksnių storiai ir sistemos taškų koordinatės išreiškiami mikronais (μm , „um“), išvestiniuose vienetuose ilgio vienetas yra centimetras („cm“), energijos vienetas yra elektronvoltas („eV“), masės vienetas yra elektrono rimties masė vakuume (m_0 , „m0“), elektros krūvio vienetas yra elementarusis elektros krūvis (e , „e“), kiti vienetai atitinka SI vienetų sistemą. Simbolis „^“ vienetų žymenyse reiškia kėlimą laipsniu.

Parametrų vertės turi būti įvedamos pagal tam tikras taisykles: reikšminių skaitmenų skaičius turi būti toks, kad jie visi matytųsi atitinkamame lauke, o dešimtainio laipsnio rodiklis turi būti nurodomas naudojant formatą „x.xxxxxe±y“ (pvz., skaičius $1,234 \cdot 10^9$ turėtų būti rašomas taip: „1.234e9“). **Pastaba:** Atvaizduojant anksčiau įvestas arba numatytąsias parametrų vertes su dešimtainio laipsnio rodikliu, programa naudoja standartinį C programavimo kalbos formatą, pagal kurį dešimtainio laipsnio rodiklis visada yra sudarytas iš trijų skaitmenų, prieš kuriuos yra ženklas „+“ arba „-“ (pvz., minėtąjį skaičių ji užrašytų šitaip: „1.234e+009“), tačiau įvestąjį skaičių programa „supranta“ ir tada, kai laipsnio rodiklio pradžioje nėra įterpti nuliai ir ženklas „+“.

Kai kurie teksto įvesties laukai yra skirti tam, kad užduoti tam tikrų krūvininkų, gaudyklių arba vyksmų pavadinimą. Kai kuriuose numatytuose pavadinimuose yra naudojami kitų objektų pavadinimai arba krūvių vertės. Pvz., elektronų pagavimo į gaudykles vyksmo pavadinimas galėtų būti toks: „don. (+1) <- el. pagav.“. Į šį pavadinimą įeina: 1) gaudyklių trumpasis pavadinimas „don.“ (nuo žodžio „donorai“), 2) gaudyklių pradinis krūvis, išreikštas elementariaisiais krūviais (+1), t. y. krūvis prieš pagaunant elektroną, 3) pagaunamų krūvininkų trumpasis pavadinimas „el.“ (nuo žodžio „elektronai“). Kadangi minėtuosius tris pavadinimo komponentus programa skaito iš kitų laukų, tai juos atitinka specialios simbolių sekos, kurios nurodo, į kurią pavadinimo vietą reikia įterpti duotąjį komponentą. Todėl, įvedant minėtąjį pavadinimą į atitinkamą įvesties lauką, reikia surinkti tokią simbolių seką: „%s (%+d) <- %s pagav.“. Tai yra C programavimo kalbos formato specifikacijų seka: „%s“ reiškia eilutę (bet kokią simbolių seką), o „%+d“ reiškia sveikąjį skaičių su ženklu „+“ arba „-“. Šis pavyzdys – tai vienas iš numatytųjų pavadinimų. Bet kurį pavadinimą galima pakeisti. Pvz., galima pašalinti vieną arba dvi paskutines formato specifikacijas. Minėtame pavyzdyje galima būtų palikti tik pirmąsias dvi specifikacijas („%s“ ir „%+d“) arba tik pirmąją („%s“). Pavadinimą galima surinkti ir be formato specifikacijų: galima tiesiog surinkti norimą tekstą (tada jis nepriklausys nuo jokių kitų programos laukų).

Pastaba: Kadangi formato specifikacijoje pavienis procento simbolis „%“ turi specialią prasmę (jis nurodo, kad toje vietoje turi būti įterpta tam tikro kintamojo vertė), tai, norint, kad galutiniame tekste matytųsi vienas procento simbolis, jį reikia surinkti du kartus: „%%“.

Krūvininkų atsiradimo ir išnykimo spartų koeficientai α_{ik} ir β_{ik} (žr. (1.1) lygtį) bei judriai ir difuzijos koeficientai gali būti arba pastovūs, arba skaičiuojami pagal vartotojo pasirinktą modelį. Pvz., 1 pav. atveju elektronų judris skaičiuojamas pagal formulę $\mu = a \exp(b\sqrt{|E|})$ (tokią priklausomybę sąlygoja vadinamasis Pulo ir Frenkelio efektas). Jeigu duotasis koeficientas skaičiuojamas pagal tam tikrą modelį, tada to modelio parametrų vertes galima pakeisti spustelėjus mygtuką „Modelio param.“, kuris yra šalia modelių sąrašo (žr. 1 pav.). Jeigu pasirinktasis modelis neturi parametrų, kuriuos vartotojas galėtų pakeisti, tada minėtojo mygtuko nėra. Pvz., taip atsitinka pasirinkus „Einšteino sąryšis“ difuzijos koeficiento modelių sąrašė, nes tada difuzijos koeficientas išreiškiamas judriu ir temperatūra, o pastaroji užduodama kortelėje „Išoriniai parametrai“.

Norint priimti parametrų pakeitimus, reikia spustelėti mygtuką „Gerai“ arba „Taikyti“. Kai kuriuos parametrus (pvz., kai kuriuos skaičiavimo algoritmo parametrus bei parametrus, kurie nusako išorinę įtampą) galima pakeisti nestabdant modeliavimo proceso. Įterpus arba pašalinus naują parametrų rinkinį arba pakeitus parametą, kuris naudojamas apibrėžiant pradinę sistemos būseną, modeliavimo procesas bus sustabdytas ir visi modelio duomenys bus ištrinti. Šiuo atveju, prieš taikant parametrų pakeitimus, pasirodo atitinkamas perspėjimas ir suteikiama galimybė atšaukti paskutinius parametrų pakeitimus.

3. Skaičiavimo algoritmo parametrai

Skaičiavimo algoritmo parametų kortelės pavyzdys yra pateiktas 2 pav. Toliau yra paaiškinti visi tos kortelės parametrai:

- Parametras „maxChange“ nusako didžiausią leidžiamą santykinį kiekvienos rūšies laisvųjų krūvininkų ir kiekvienos krūvinės būsenos tūrinių bei paviršinių gaudyklių koncentracijų pokytį per vieną modeliavimo laiko žingsnį. Pvz., jeigu parametro „maxChange“ vertė yra 0,001 (kaip 2 pav.), tada modeliavimo žingsnis Δt bus parinktas taip, kad jo metu nė vienos rūšies krūvininkų krūvio tankis nė viename sistemos taške nepasikeistų daugiau negu 0,1 %, skaičiuojant atžvilgiu krūvininkų arba gaudyklių, kurių krūvio tankis tame taške yra didžiausias arba kurių krūvio tankis tame taške sparčiausiai kinta laike (žr. toliau). Norint padidinti skaičiavimo tikslumą, reikia mažinti šio parametro vertę (tačiau tada padidėja modeliavimo trukmė). Galutinė Δt vertė priklauso dar ir nuo kitų parametų (žr. toliau). **Pastaba:** Įvedus nulinę parametro „maxChange“ vertę, jis nebus naudojamas modeliavimo metu, t. y. modeliavimo laiko žingsnis Δt bus apskaičiuojamas remiantis kitais parametrais.
- Parametras „dtMax“ nusako didžiausią modeliavimo laiko žingsnį Δt . Jeigu Δt vertė, apskaičiuota vien tik pagal anksčiau minėtą parametą „maxChange“, yra didesnė už parametą „dtMax“, tada Δt sumažinamas iki parametro „dtMax“ vertės. **Pastaba:** Įvedus nulinę parametro „dtMax“ vertę, jis nebus naudojamas modeliavimo metu, t. y. modeliavimo laiko žingsnis Δt bus apskaičiuojamas remiantis kitais parametrais.
- Parametras „minR“ nusako mažiausią laiko intervalo tarp apskaičiuotų funkcijų $f(t)$ verčių ir modeliavimo laiko žingsnio santykį. Didėjant šiam santykiui, didėja mažiausias modeliavimo žingsnių skaičius tarp gretimų laiko verčių, kurios atvaizduotos $f(t)$ funkcijų grafikuose. Jeigu nei „maxChange“, nei „dtMax“ nėra naudojamas, tada visų pirma apskaičiuojamas didžiausias grafiko laiko žingsnis, paskui jis dalijamas iš „minR“ ir taip gaunamas didžiausias modeliavimo laiko žingsnis Δt .
- Parametras „maxR“ nusako didžiausią laiko intervalo tarp apskaičiuotų funkcijų $f(t)$ verčių ir modeliavimo laiko žingsnio santykį. Jeigu yra naudojamas bent vienas iš anksčiau minėtų parametų „maxChange“ ir „dtMax“, tada visų pirma apskaičiuojamas modeliavimo laiko žingsnis Δt , paskui jis dauginamas iš „maxR“ ir taip gaunamas didžiausias grafiko laiko žingsnis (vėliau jis dar gali būti sumažintas remiantis kitais parametrais, kurie aprašyti toliau). Didėjant šiam santykiui, didėja didžiausias modeliavimo žingsnių skaičius tarp gretimų laiko verčių, kurios atvaizduotos $f(t)$ funkcijų grafikuose, t. y. tų kreivių taškai „retėja“. Norint sumažinti naudojamos atminties kiekį, šis santykį reikia padidinti. Galutinė intervalo tarp gretimų laiko t verčių grafikuose vertė priklauso dar ir nuo kito parametro (žr. toliau).

2 pav. Parametų redaktorius kortelė „Skaičiavimo algoritmo parametrai“

- Parametras „dtMax_graph“ nusako didžiausią laiko intervalą tarp apskaičiuotų funkcijų $f(t)$ verčių (t. y. tarp taškų laiko priklausomybių grafikuose). Jeigu to intervalo vertė, apskaičiuota naudojantis vien tik anksčiau minėtų parametrų vertėmis, yra didesnė už parametras „dtMax_graph“, tada ji sumažinama iki parametro „dtMax_graph“ vertės. Todėl, jeigu yra naudojamas parametras „maxChange“ arba „dtMax“ ir jeigu siekiama naudoti pastovų intervalą tarp laiko verčių, kurios atitinka apskaičiuotas funkcijų vertes, tada pageidaujama to intervalo vertę reikia priskirti parametru „dtMax_graph“, o parametras „maxR“ reikia parinkti kuo didesnį – tokį, kad pagal jį apskaičiuota to intervalo vertė visada būtų didesnė už reikalingąją vertę. **Pastaba:** Įvedus nulinę parametro „dtMax_graph“ vertę, jis nebus naudojamas modeliavimo metu, t. y. grafiko laiko žingsnis bus apskaičiuojamas remiantis kitais parametrais. Tačiau bent vienas iš parametrų „maxChange“, „dtMax“ ir „dtMax_graph“ būtinai turi būti naudojamas, t. y. nelygus nuliui.
- Parametras „minR_graph“ nusako mažiausią modeliuojamo proceso trukmės (T) ir grafiko laiko žingsnio santykį, t. y. mažiausią galutinį $f(t)$ kreivių taškų skaičių. Jeigu parametras „dtMax_graph“ nėra naudojamas (yra lygus nuliui) arba jeigu jis yra didesnis už santykį $T / \text{minR_graph}$, tada pastarasis santykis atlieka tą patį vaidmenį kaip dtMax_graph, t. y. apytiksliai nusako didžiausią laiko intervalą tarp apskaičiuotų funkcijų $f(t)$ verčių. Tada minR_graph yra apytiksliai lygus galutiniam $f(t)$ kreivių taškų skaičiui.

Dėmesio! Parametrus „maxR“ ir „dtMax_graph“ reikia pasirinkti atsargiai, vengiant pernelyg mažų verčių, nes priešingu atveju rizikuojama perpildyti kompiuterio atmintį skaičiuojant. Dėl tos pačios priežasties reikia vengti pernelyg didelių parametro „minR_graph“ verčių. Skaičiavimo metu galima patikrinti, kaip sparčiai auga naudojamos atminties kiekis (programos GraphiXT meniu juostos komanda „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis“). Jeigu yra naudojama „voltamperinės charakteristikos skaičiavimo veika“ (žr. toliau), tada minėtieji parametrai neturi įtakos naudojamos atminties kiekiui.

- Toliau esantys du žymieji laukeliai leidžia pasirinkti, kurių krūvininkų arba gaudyklių koncentracijos atžvilgiu yra apibrėžiamas didžiausias leidžiamas santykinis krūvininkų koncentracijos pokytis per vieną modeliavimo laiko žingsnį. Tą santykinį pokytį galima apibrėžti atžvilgiu krūvininkų arba gaudyklių, kurių koncentracija tame mazge yra didžiausia arba atžvilgiu krūvininkų, kurių koncentracija tame mazge greičiausiai kinta laike (t. y. jos laikinės išvestinės modulis yra didžiausias). Kiekviename sluoksniu mazge programa randa krūvininkus, kurių krūvio tankis kinta sparčiausiai (pvz., tai gali būti elektronai, skylės arba kokios nors rūšies gaudyklės). Pvz., tarkime, kad yra dviejų rūšių krūvininkai – elektronai ir skylės – ir elektronų koncentracija yra didesnė negu skylių, tačiau skylių koncentracijos laikinės išvestinės modulis yra didesnis negu elektronų. Jeigu parametro „maxChange“ vertė yra 0,001 ir jeigu yra pažymėtas laukelis „greičiausiai kinta laike“ (kaip 2 pav.), tada laiko žingsnis Δt bus apskaičiuojamas dauginant skylių krūvio tankį iš 0,001 ir dalijant iš skylių krūvio tankio laikinės išvestinės modulio. O jeigu būtų pažymėtas laukelis „yra didžiausias“, tada iš 0,001 būtų dauginamas elektronų krūvio tankio modulis ir paskui būtų dalijama iš skylių krūvio tankio laikinės išvestinės modulio. Taigi, ši pasirinktis lemia trupmenos skaitiklį (vardiklyje visada yra sparčiausiai kintančios krūvio tankio komponentės laikinės išvestinės modulis). Taip Δt vertė apskaičiuojama kiekvienam sistemos mazgui, o paskui pasirenkama mažiausioji iš visų Δt verčių (paviršiniuose mazguose yra atsižvelgiama ir į paviršinių krūvių bei jo kitimo spartą).

Optimali pasirinktis priklauso nuo modeliuojamos sistemos. Pvz., jeigu yra modeliuojamas paprasčiausias Šotkio diodas, tada yra vienos rūšies laisvieji krūvininkai – elektronai – ir vienos rūšies gaudyklės – teigiami donorų jonai. Šotkio diodo srovę lemia elektronų pereiga per ribą tarp metalo ir puslaidininkio. Toje vietoje elektronų yra daug mažiau negu jonų. Tačiau jonų koncentracija yra pastovi, – kinta tik elektronų koncentracija. Vadinasi, minėtos trupmenos vardiklyje būtų elektronų krūvio tankio laikinės išvestinės modulis. Šiuo atveju, apibrėžiant elektronų koncentracijos santykinį pokytį atžvilgiu krūvininkų, kurių yra daugiausia (t. y. atžvilgiu jonų), būtų galimos didelės paklaidos, nes tada modeliavimo laiko žingsnis būtų palyginti didelis ir, pvz., galėtų būti gauta neigiama elektronų koncentracija. Taigi, šiuo atveju labiau tinka pasirinktis „greičiausiai kinta laike“. Tačiau, jeigu didžiojoje modeliuojamos sistemos dalyje laidumo srovę lemia krūvininkai, kurių yra daugiausia (pvz., modeliuojant elektrofotografinio sluoksnio išsielektrinimą), tada ši pasirinktis neturi didelės įtakos tikslumui, todėl racionaliausia naudoti pasirinktį „yra didžiausias“, nes tada modeliavimo trukmė yra mažesnė.

- Kai kuriuose sistemos taškuose tam tikros rūšies krūvininkų koncentracija gali tapti tokia maža, kad beveik neturės įtakos modeliuojamiems fizikiniams vyksmams. Todėl tų krūvininkų koncentraciją

tuose taškuose būtų neracionalu naudoti skaičiuojant. Jų įtakai pašalinti naudojamas parametras „f“, kuris reikalingas apskaičiuojant vadinamąją „slenkstinę koncentraciją“. Tai yra koncentracijos vertė, žemiau kurios tariama, kad ta koncentracija yra lygi nuliui, ir ta koncentracija nėra naudojama skaičiuojant santykinę koncentracijų pokytį (žr. ankstesnį parametro „maxChange“ aprašymą). Slenkstinė koncentracija apskaičiuojama šitaip. Visų pirma apskaičiuojamas kiekvienos rūšies laisvųjų krūvininkų ir kiekvienos krūvinės būsenos gaudyklių vidutinis erdvinio krūvio tankis modeliuojamoje sistemoje (duotosios krūvinės būsenos paviršinių gaudyklių vidutinis erdvinio krūvio tankis apibrėžiamas kaip to krūvio gaudyklių paviršinio krūvio tankio ir sistemos pločio santykis). Nustatomas didžiausias iš visų tokiu būdu apskaičiuotų verčių modulių, įskaičius visus laisvuosius krūvininkus, visas tūrinių bei paviršinių gaudyklių krūvines būsenas, skiriamųjų paviršių „laisvuosius paviršinius krūvius“ (žr. 8 skyrių) ir elektrodų paviršinius krūvius. Paskui jis dauginamas iš daugiklio „f“, kuris įvedamas parametru redaktorius kortelėje „Skaičiavimo algoritmo parametrai“. Padalijus šią sandaugą iš duotosios rūšies krūvininkų krūvio modulio, gaunama tos rūšies krūvininkų slenkstinės koncentracijos vertė.

- Kitas parametras nusako laisvųjų krūvininkų koncentracijų priklausomybę nuo koordinatės glodinimo dažnį (žr. 1 skyrių „Modeliavimo metodas“). Kuo mažesnis šis parametras, tuo dažniau glodinamos tos priklausomybės. Kai modeliavimo laiko žingsnis yra pakankamai mažas, glodinimas yra nebūtinas. Kad išjungti glodinimą, reikia šiam parametru priskirti nulinę reikšmę.
- Kiti du žymimieji laukeliai leidžia pasirinkti vieną iš dviejų glodinimo metodų glodinant krūvininkų koncentracijas: pagal tris taškus arba pagal penkis taškus (žr. 1 skyrių „Modeliavimo metodas“; be to, glodinimas pagal tris taškus aprašytas programos GraphiXT aprašo skyriuje „Duomenų glodinimas“).
- Žymimasis laukelis „Glodinti koncentracijų laikinių išvestinių priklausomybes nuo laiko“ leidžia „įjungti“ arba „išjungti“ krūvininkų koncentracijų laikinių išvestinių eksponentinį glodinimą. Jo esmė yra ta, kad kiekvienos rūšies laisvųjų krūvininkų ir kiekvienos rūšies tūrinių bei paviršinių gaudyklių krūvinių būsenų koncentracijų laikinės išvestinės kiekviename mazge yra pakeičiamos glodintomis tų išvestinių vertėmis, kurios apskaičiuojamos pagal formulę $\bar{f}_{i+1} = \beta f_i + (1 - \beta)\bar{f}_i$, kur \bar{f}_i yra glodinta vertė laiko momentu t_i , \bar{f}_{i+1} yra glodinta vertė laiko momentu $t_{i+1} = t_i + \Delta t$, o f_i yra neglodinta vertė laiko momentu t_i . Glodinimo konstantos β reikšmė yra tarp 0 ir 1. Kai β yra artima 1, tada $\bar{f}_{i+1} \approx f_i$. Kai β yra artima 0, tada glodintoji vertė yra artima visų ankstesniųjų verčių aritmetiniam vidurkiui (t. y. silpnai priklauso nuo laiko). Glodinimo konstanta β yra vienoda visiems mazgams ir visų rūšių krūviams. Ši konstanta kiekviename modeliavimo laiko žingsnyje perskaičiuojama taip, kad glodintosios vertės kuo tiksliau atspindėtų kryptingą laikinių išvestinių kitimą (t. y. kryptingą didėjimą arba mažėjimą) ir turėtų kuo mažesnę atsitiktinę komponentę. [Panašiai yra apskaičiuojamos ir koncentracijų glodintosios vertės, kurios naudojamos tikrinant, ar sistemos būseną yra stacionari (žr. toliau).] Pasirinkus šią nuostatą, skaičiavimo trukmė dažniausiai sumažėja (ypač tada, kai yra modeliuojama stacionarioji veika, kuri aprašyta toliau).
- Kitas žymimasis laukelis naudojamas „įjungiant“ arba „išjungiant“ stacionariosios būsenos modeliavimo veiką. Šioje veikoje modeliavimas sustabdomas arba pasiekus didžiausią modeliuojamo proceso laiko vertę (jį užduodama naudojant programos GraphiXT.exe meniu juostos komandą „Modeliavimo nuostatos / Ribiniai laikai ir duomenų kiekis...“), arba pasiekus stacionarią būseną, t. y. tokią būseną, kai visi sistemos tūriniai ir paviršiniai krūviai nustoja priklausyti nuo laiko.
- Kai yra įjungtas stacionariosios būsenos modeliavimas, yra galimybė pakeisti būsenos stacionarumo kriterijų („alphaMin“). Stacionari būseną – tai tokia būseną, kai visų rūšių tūrinių bei paviršinių krūvių tankiai visuose sistemos taškuose nepriklauso nuo laiko. Stacionarumas gali būti tikslus arba apytikslis. Tiksliojo stacionarumo sąlygomis visų krūvių verčių pokyčiai yra mažesni už apvalinimo paklaidą (santykinė apvalinimo paklaida yra maždaug 10^{-15}), todėl programa, apskaičiavusi tuos pokyčius, gauna tiksliai nulines vertes. Apytikslio stacionarumo sąlygomis krūviai svyruoja laike, tačiau tie svyravimai yra atsitiktiniai, t. y. kelių paskutiniųjų verčių laikinis vidurkis yra apytiksliai pastovus. Apytikslis stacionarumas nustatomas šitaip. Visų rūšių laisvųjų krūvininkų, visų krūvių tūrinių ir paviršinių gaudyklių koncentracijų visuose mazguose bei visų laisvųjų paviršinių krūvių ir elektrodų paviršinių krūvių priklausomybės nuo laiko yra glodinamos adaptyvaus eksponentinio glodinimo metodu. Eksponentinio glodinimo apibrėžtis yra $\bar{f}_{i+1} = \alpha f_i + (1 - \alpha)\bar{f}_i$, kur \bar{f}_i yra glodinta vertė laiko momentu T_i , \bar{f}_{i+1} yra glodinta vertė laiko momentu T_{i+1} , o f_i yra neglodinta vertė laiko

momentu T_i . Glodinimo parametras α visada yra tarp 0 ir 1. Mažėjant α , glodinto dydžio \bar{f} priklausomybė nuo laiko darosi glodesnė. Tokiu būdu pašalinami atsitiktiniai glodinamo dydžio f svyravimai. Tačiau sumažėja ir neatsitiktiniai (kryptingi) pokyčiai. Adaptyvaus eksponentinio glodinimo esmė yra ta, kad α perskaičiuojamas kiekviename glodinimo žingsnyje, kad \bar{f} kuo tiksliau atspindėtų neatsitiktinius glodinamo dydžio f pokyčius. T. y., jeigu f pradeda kryptingiau priklausyti nuo laiko, tada α padidinamas, o jeigu f priklausomybė nuo laiko pasidaro labiau atsitiktinė, tada α sumažinamas (adaptyvusis glodinimas smulkiau paaiškintas programos GraphiXT aprašo skyriuje „Duomenų glodinimas“). Šitaip α vertės apskaičiuojamos kiekvienam mazgui ir kiekvienos rūšies krūviams. Paskui apskaičiuojamas visų α verčių vidurkis, kuris naudojamas kaip būsenos stacionarumo kriterijus. Modeliavimas sustabdomas, kai šis vidurkis tampa mažesnis už parametą „alphaMin“.

Pastabos: 1) Koncentracijų eksponentinis glodinimas yra taikomas tik patikrinant, ar būseną yra stacionari. Visos atvaizduojamos funkcijų vertės atitinka neglodintas koncentracijas (kitai negu anksčiau aprašyti glodinimas koordinatės atžvilgiu, kuris keičia laisvųjų krūvininkų koncentracijas, bei koncentracijų laikinių išvestinių eksponentinis glodinimas, kuris taip pat keičia tas laikines išvestines).

2) Atskirais atvejais, priartėjus prie stacionarios būsenos, krūvininkų koncentracijos pradeda osciliuoti laike. Jeigu tos osciliacijos yra palyginti „glodžios“, t. y. jeigu vienas jų periodas apima kelias glodinamas funkcijų vertes, tada adaptyvaus eksponentinio glodinimo parametras taip pat gali pradėti osciliuoti ir nustoti mažėti. Kad išvengti tokios situacijos, yra glodinamos ne visos koncentracijų vertės, o tik tos, kurios atitinka koncentracijos laikinės išvestinės ženklo pokytį, t. y. maksimumai ir minimumai. Tada glodinimo parametras mažėja ir esant minėtosioms osciliacijoms, todėl po tam tikro laiko jis tampa mažesnis už vartotojo įvestą ribinę vertę ir stacionariosios būsenos modeliavimas yra automatiškai sustabdomas.

3) Koncentracijų eksponentinis glodinimas skiriasi nuo anksčiau minėto laikinių išvestinių eksponentinio glodinimo tuo, kad α vertė bendruoju atveju yra skirtinga skirtingiems mazgams ir skirtingos rūšies krūvininkams, ir tuo, kad koncentracijos yra glodinamos ne kiekviename modeliavimo laiko žingsnyje, o kiekviename grafiko laiko žingsnyje (jį atitinka parametras „dtMax_graph“).

- Kitas žymimasis laukelis naudojamas įjungiant arba išjungiant „voltamperinės charakteristikos skaičiavimo veiklą“, tiksliau – tokią veiklą, kai programa apskaičiuoja stacionarių sistemos būsenų seką, atitinkančią kelias pastovias išorinių poveikių (išorinės įtampos ir apšvietimo) vertes. Šioje veikloje išorinė įtampa ir išorinis apšvietimas yra pastovūs, o jų vertės apskaičiuojamos naudojant atitinkamas laikines priklausomybes, kurios apibrėžiamos parametru redaktorius kortelėse „Išoriniai parametrai“ ir „Fotogeneracijos parametrai“. Taigi, šiuo atveju „modeliavimo laikas“ turi dvejopą prasmę: vienas laikas naudojamas skaičiuojant išorinių poveikių vertes, o kitas laikas, kaip ir anksčiau, reiškia tikrąją modeliuojamų vyksmų trukmę. Šie du laikai yra nepriklausomi vienas nuo kito. Skaičiuojamų laiko funkcijų argumento vaidmenį atlieka pirmasis iš minėtųjų laikų, t. y. išorinių poveikių parametras, o antrasis iš minėtųjų laikų rodomas skaičiavimo metu programos GraphiXT.exe dialogo lange „Ribiniai laikai ir duomenų kiekis“ (lauke „Einamasis modeliavimo laikas“). Duomenų rinkinys yra papildomas tik tada, kai pastarasis laikas pasiekia nurodytą didžiausią vertę (žr. parametro „maxTime“ aprašymą toliau) arba kai pasiekiamą stacionarioji būseną. Tada išorinių poveikių laikas padidinamas nurodytu dydžiu (žr. parametro „interval“ aprašymą toliau) ir pradeda skaičiuoti kita būseną (pradinė būseną atitinka ankstesniąją stacionariąją būseną). **Pastabos:** 1) Kad einamosios būsenos skaičiavimas būtų baigtas pasiekus stacionariąją būseną, turi būti įjungta stacionariosios būsenos modeliavimo veikla, kuri buvo aprašyta anksčiau. Šioje veikloje parametrai „minR“, „maxR“ ir „dtMax_graph“, kurie buvo aprašyti anksčiau, lemia krūvių tankių vertes, kurios yra eksponentiškai glodinamos. 2) Šioje veikloje, kol dar nepasiekta stacionarioji būseną, grafikuose yra atvaizduojami tarpiniai skaičiavimo rezultatai.
- Parametras „interval“ nusako intervalą tarp laiko verčių, kurios naudojamos skaičiuojant išorinių poveikių vertes pagal atitinkamas laikines priklausomybes. Pvz., jeigu kortelėje „Išoriniai parametrai“ yra nurodyta nulinė pradinė įtampa, o įtampos priklausomybė nuo laiko yra tiesinis didėjimas, kuris prasideda laiko momentu 0 ir kurio sparta 1 V/s, o parametras „interval“ yra 1 s, ir jeigu programos GraphiXT.exe dialogo lange „Ribiniai laikai ir duomenų kiekis“ yra užduoti „mažiausias vaizduojamas laikas“ = 0 ir „galutinis laikas“ = 10, tada programa apskaičiuos 11 stacionariųjų būsenų, kurios atitinka išorinės įtampos vertes 0 V, 1 V, 2 V, ..., 10 V. Atitinkami laikai (grafikuose atvaizduojamų $f(t)$ funkcijų argumento vertės) šiuo atveju būtų 0 s, 1 s, 2 s, ..., 10 s.

- Parametras „maxTime“ nusako didžiausią modeliujamo proceso trukmę modeliujant vieną stacionarią būseną.
- Parametrai, kurie yra grupėje „Koordinatės intervalų tarp gretimų mazgų apskaičiavimo nuostatos“, nusako, kaip turi būti apskaičiuojamos mazgų koordinatės kiekviename modeliujamame sluoksnyje. Jeigu visi koordinatės intervalai tarp gretimų mazgų būtų vienodi, tada užtektų tik nurodyti mazgų skaičių kiekviename sluoksnyje (pirmasis ir paskutinis mazgai yra priešinguose sluoksnio kraštuose). Atitinkamas parametras žymimas „nX“ (žr. 2 pav.). Tačiau šioje programoje yra numatyta galimybė naudoti koordinatės intervalus, kurie tolygiai didėja arba mažėja didėjant atstumui iki sluoksnio krašto. Pvz., intervalas gali būti didžiausias prie vieno krašto ir mažiausias prie kito krašto, arba mažiausias sluoksnio centre ir didžiausias jo kraštuose, arba didžiausias sluoksnio centre ir mažiausias jo kraštuose. Likusieji šios parametru grupės parametrai nusako, kaip apskaičiuoti intervalus, kai jie nėra visur vienodi. Parametras „dxR“ nusako didžiausio ir mažiausio intervalų santykį (vienodų intervalų atveju jis turėtų būti lygus 1). 2 pav. atveju didžiausioji koordinatės intervalo vertė yra 50 kartų didesnė už mažiausią intervalo vertę. Žemiau esantys keturi žymimieji laukeliai nusako, kuriose sluoksnio vietose intervalas yra didžiausias, o kuriose – mažiausias. Pvz., 2 pav. atveju didžiausias intervalas yra tarp mazgo, kuris yra dešiniajame sluoksnio krašte, ir gretimo mazgo iš kairės, o mažiausias intervalas yra tarp mazgo, kuris yra kairiajame sluoksnio krašte, ir gretimo mazgo iš dešinės. Jeigu būtų nurodyta, kad intervalas yra mažiausias abiejuose sluoksnio kraštuose, tada didžiausias intervalas būtų tarp centrinių mazgų (ten jis būtų 50 kartų didesnis negu prie sluoksnio paviršiaus).

Dėmesio! Parametras „nX“, kaip ir anksčiau minėti parametrai „maxR“, „dtMax_graph“ ir „minR_graph“, turi didelę įtaką naudojamam kompiuterio atminties kiekiui. Reikia vengti pernelyg didelių šio parametro verčių, nes priešingu atveju galima perpildyti kompiuterio atmintį skaičiuojant.

- Parametrai, kurie yra grupėje „Daugelio gijų veikos nuostatos“, valdo daugelio gijų veiką (angl. *multithreading*). Daugelio gijų veikos esmė yra ta, kad operacijos, kurias atlieka programa, yra suskaidomos į nepriklausomus segmentus, kurių kiekvieną atitinka atskira gija. Visos gijos apdoroja duomenis vienu metu. „Windows“ operacinė sistema paskirsto kompiuterio resursus kiekvienai gijai po lygiai. Jeigu kompiuteryje yra daugiau negu vienas procesorius ir jeigu gijų skaičius neviršija procesorių skaičiaus, tada kiekviena gija, kuri nėra laukimo būsenos, pilnai išnaudoja vieną procesorių (čia ir toliau terminas „procesorius“ vartojamas ta pačia prasme, kaip terminas „procesoriaus branduolys“, jeigu yra naudojamas procesorius su keliais branduoliais). Vadinasi, jeigu, pvz., kompiuteryje 4 procesoriai, o modeliavimui naudojama tik viena gija, tada modeliujant bus naudojami tik 25 % sistemos pajėgumų, o jeigu modeliujant būtų naudojamos 4 gijos, tada sistemos pajėgumai būtų panaudojami pilnai ir modeliavimo trukmė galėtų sumažėti 3 – 4 kartus. Tačiau taip būtų tik idealioju atveju, kai skirtingos gijos gali ilgą laiką veikti nepriklausomai viena nuo kitos (t. y. be tarpusavio sinchronizavimo) ir kai absoliučiai visos operacijos, kurias atlieka programa, yra po lygiai paskirstytos tarp tų gijų. Šia prasme krūvininkų kinetikos modeliavimas nėra palankus daugelio gijų veikai, nes kiekvieno laiko žingsnio metu skirtingos gijos turi būti kelis kartus sinchronizuojamos. Be to, kai kuriuos modeliavimo etapus atlieka tik viena gija. Gijų sinchronizavimas pasireiškia tuo, kad gijos, kurios baigė einamąjį skaičiavimo etapą, tikrina, ar kitos gijos taip pat jį baigė, ir, jeigu ne, sustoja ir laukia, kol visos kitos gijos baigs savo darbo dalį. Gijų sustabdymui ir startavimui naudojami specialūs operacinės sistemos „signalai“. Minėtasis periodinis tikrinimas bei gijų reakcija į minėtuosius signalus užtrunka tam tikrą laiką. Todėl, kai gijų sinchronizavimas (t. y. einamojo skaičiavimo etapo užbaigtumo tikrinimas bei gijų sustabdymas ir startavimas) yra labai dažnas, tada daugelio gijų veiką gali tapti lėtesnė negu vienos gijos veiką. Taip būna tada, kai vieno modeliavimo laiko žingsnio apdorojimo trukmė yra labai maža, t. y. kai modeliujama labai paprasta sistema (kurios mazgų ir vyksmų skaičius yra mažas) arba kai naudojamas labai greitaeigis kompiuteris. Kuo sudėtingesnė sistema yra modeliujama ir kuo lėtesni procesoriai yra naudojami, tuo didesnė nauda iš daugelio gijų veikos. **Pastaba:** Kita priežastis, dėl kurios daugelio gijų veiką gali tapti lėtesnė negu vienos gijos veiką, yra kitos programos, kurias gali vykdyti operacinė sistema modeliavimo metu. Kiekvieną vykdomą programą atitinka mažiausiai viena gija. Jeigu pilnutinis gijų, kurios intensyviai naudoja kompiuterio resursus, skaičius yra didesnis už procesorių skaičių, tada sistemos veikimas gali sulėtėti.

Kiekviena gija apdoroja tam tikrą sistemos mazgų dalį. Pvz., jeigu yra aktyvios dvi gijos, tada viena gija operuoja duomenimis, kurie atitinka lyginius mazgų numerius, o kita gija – duomenimis, kurie atitinka nelyginius mazgų numerius. Jeigu naudojamos trys gijos, tada kiekviena jų apdoroja kas trečią mazgą, ir t. t. Todėl, net jeigu modeliujamoji sistema yra asimetrinė, visų gijų „apkrovimas“ yra apytiksliai vienodas. Įjungus daugelio gijų veiką, programa gali naudoti arba pastovų gijų skaičių,

kurį užduoda vartotojas (2 pav. – žymimasis laukelis „Naudoti pastovų modeliavimo gijų skaičių“ bei atitinkamas teksto įvesties laukas „Modeliavimo gijų skaičius“), arba parinkti optimalų gijų skaičių modeliavimo metu, remiantis skaičiavimo sparta (2 pav. – žymimasis laukelis „Optimizuoti modeliavimo gijų skaičių“). Pastaruoju atveju pasirenkamas toks gijų skaičius, kad skaičiavimo sparta būtų didžiausia, t. y. kad vidutinė vieno laiko žingsnio modeliavimo trukmė būtų mažiausia. Tai daroma šitaip. Aktyviųjų gijų skaičius yra periodiškai – kas 5000 modeliavimo laiko žingsnių – padidinamas arba sumažinamas vienetu, atliekama 100 laiko žingsnių, apskaičiuojama vidutinė vieno laiko žingsnio skaičiavimo trukmė ir pagal tai nusprendžiama, ar toliau skaičiuoti naudojant naują gijų skaičių, ar grįžti prie senojo. Kai yra įjungtas modeliavimo gijų skaičiaus optimizavimas, gijų skaičius negali tapti didesnis už procesorių skaičių kompiuteryje.

4. Laisvųjų krūvininkų parametrai

Parametrų redaktoriaus kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“ užduodami kiekvienos rūšies laisvųjų krūvininkų parametrai bei laisvųjų krūvininkų dvipolės rekombinacijos ir generacijos parametrai. Šios kortelės pavyzdys pateiktas 3 pav. Toliau yra paaiškinti visi tos kortelės parametrai ir valdymo elementai:

- Spustelėjus mygtuką „Įterpti arba pašalinti krūvininkus“, atsidaro dialogo langas, kuriame galima pasirinkti vieną iš trijų veiksmų – naujos rūšies krūvininkų įterpimą krūvininkų sąrašo gale (tai yra numatytasis veiksmas), įterpimą prieš einamuosius krūvininkus ir einamųjų krūvininkų pašalinimą.
- Sąrašo laukas „Pasirinktieji krūvininkai“ naudojamas pasirenkant krūvininkus (kai krūvininkų rūšių skaičius yra didesnis negu 1). Visi parametrai, kurie atvaizduojami kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“, atitinka tik pasirinktuosius laisvuosius krūvininkus.
- Po sąrašo lauku „Pasirinktieji krūvininkai“ yra du teksto laukai, kurių pirmajame reikia surinkti pilnąjį krūvininkų pavadinimą, o kitame – trumpąjį pavadinimą (jis naudojamas kaip vyksmų, kuriuose dalyvauja tie krūvininkai, numatytųjų pavadinimų komponentė).
- Po krūvininkų pavadinimų įvesties laukais yra du teksto įvesties laukai, kurių viename įvedamas krūvininkų elektros krūvis (elementariojo krūvio vienetais), o kitame – efektinė masė (elektrono rimties masės vakuume vienetais). **Pastaba:** Dabartinėje programos versijoje (v0.75) krūvininkų efektinė masė yra naudojama tik šiais atvejais: a) apskaičiuojant viršbarjerinės injekcijos srautą, kai skiriamajame paviršiuje yra potencialo barjeras (žr. 8 skyrių); b) apskaičiuojant vidutinį krūvininkų šiluminio judėjimo greitį (jis reikalingas skaičiuojant dvipolės rekombinacijos arba pagavimo į gaudykles spartą, kai yra žinomas šio vyksmo skerspjūvis); c) apskaičiuojant laisvųjų krūvininkų būsenų tankį, kai yra taikomas laisvųjų dalelių artinys.

3 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Laisvųjų krūvininkų parametrai“

- Sąrašo lauke „Judris“ galima pasirinkti duotųjų krūvininkų judrio apskaičiavimo taisyklę. Yra galimos šios pasirinktos:

- 1) konstanta,
- 2) eksponentinė priklausomybė nuo kvadratinės šaknies iš lauko:

$$\mu = a \exp(b\sqrt{|E|}), \quad (4.1)$$

- 3) silicio elektronų dvipolio judrio modelis,
- 4) silicio skylių dvipolio judrio modelis.

Silicio elektronų dvipolio judrio modelis apibūdinamas dviem formulėmis:

$$\mu_{S,n}(N) = \mu_n^{\min} + \frac{\mu_n^{\max} \left(\frac{T}{300}\right)^{\nu_n} - \mu_n^{\min}}{1 + \left(\frac{T}{300}\right)^{\xi_n} \left(\frac{N}{N_{\text{ref},n}}\right)^{\alpha_n}}, \quad \mu_n(N, E) = \mu_{S,n}(N) \left[1 + \left(\frac{\mu_{S,n} |E|}{v_{\text{sat},n}}\right)^{\beta_n} \right]^{-\frac{1}{\beta_n}} \quad (4.2)$$

Šiose formulėse N yra pilnutinė priemaišų (donorų ir akceptorų) koncentracija (matavimo vienetas cm^{-3}), T yra absoliučioji temperatūra (išreikšta kelvinais), o E yra elektrinio lauko stipris (V/cm). Analogiškai apibūrinamas ir silicio skylių dvipolio judrio modelis (skylių atveju vietoj apatinio indekso „ n “ reikia naudoti „ p “). Dvipolio judrio modelio parametrų vertės yra pateiktos 4.1 lentelėje (duomenys iš programų paketo **MicroTec** vartotojo instrukcijos „*MicroTec Software Package for Two-Dimensional Process and Device Simulation. Version 4.0 for Windows. User's Manual. – Siborg Systems Inc. – 1998*“).

4.1 lentelė. Silicio elektronų ir skylių dvipolio judrio modelio parametrai

Simbolis	Vertė	Vienetai	Prasmė
μ_n^{\min}	55,2	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	Mažiausias elektronų judris
μ_n^{\max}	1430	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	Didžiausias elektronų judris
$N_{\text{ref},n}$	$1,07 \cdot 10^{17}$	cm^{-3}	Atraminė priemaišų koncentracija elektronams
$v_{\text{sat},n}$	$1,07 \cdot 10^7$	cm/s	Elektronų dreifo greičio soties vertė
ν_n	-2,3	–	Normuotos temperatūros laipsnio rodiklis skaitiklyje elektronams
ξ_n	-3,8	–	Normuotos temperatūros laipsnio rodiklis vardiklyje elektronams
α_n	0,733	–	Priemaišų koncentracijos laipsnio rodiklis elektronams
β_n	2,0	–	Elektrinio lauko stiprio laipsnio rodiklis elektronams
μ_p^{\min}	49,7	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	Mažiausias skylių judris
μ_p^{\max}	479	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	Didžiausias skylių judris
$N_{\text{ref},p}$	$1,6 \cdot 10^{17}$	cm^{-3}	Atraminė priemaišų koncentracija skylėms
$v_{\text{sat},p}$	$1,06 \cdot 10^7$	cm/s	Skylių dreifo greičio soties vertė
ν_p	-2,2	–	Normuotos temperatūros laipsnio rodiklis skaitiklyje skylėms
ξ_p	-3,7	–	Normuotos temperatūros laipsnio rodiklis vardiklyje skylėms
α_p	0,7	–	Priemaišų koncentracijos laipsnio rodiklis skylėms
β_p	1,0	–	Elektrinio lauko stiprio laipsnio rodiklis skylėms

- Sąrašo lauke „Difuzijos koeficientas“ galima pasirinkti duotųjų krūvininkų difuzijos koeficiento apskaičiavimo taisyklę. Yra galimos šios pasirinktys:
 - 1) konstanta,
 - 2) Einšteino sąryšis, pagal kurį difuzijos koeficientas (D) yra tiesiog proporcingas krūvininkų judriui (μ):

$$D = \frac{kT}{|q|} \mu, \quad (4.3)$$

čia k yra Bolcmano konstanta, T yra absoliučioji temperatūra, o q yra krūvininkų elektros krūvis.

- Sąrašo lauke „Būsenų tankis“ galima pasirinkti duotųjų laisvųjų krūvininkų būsenų tankio apskaičiavimo taisyklę. Yra galimos šios pasirinktys:
 - 1) konstanta,
 - 2) laisvų dalelių artinys. Pagal šį artinį laisvųjų krūvininkų būsenų tankis yra lygus

$$N_c = \left(\frac{2\pi kTm^*}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (4.4)$$

čia k yra Bolcmano konstanta, T yra absoliučioji temperatūra, m^* yra krūvininko efektinė masė, o h yra Planko konstanta. Jeigu krūvininko sukinytis yra $1/2$, tada tikrasis būsenų tankis yra didesnis 2 kartus (tai yra vadinamasis sukininis faktorius), nes kiekvieną kvantinę erdvinio judėjimo būseną atitinka dvi galimos krūvininko sukinių kryptys. Tačiau, pasirinkus „Laisvų dalelių artinys“, sukininis faktorius nenaudojamas, nes būsenų tankis yra reikalingas tik skaičiuojant išlaisvinimo iš gaudyklių spartą pagal Shockley-Read-Hall modelį (ši pasirinktis yra kortelėse „Tūrinių gaudyklių parametrai“ ir „Paviršinių gaudyklių parametrai“), o krūvininko išlaisvinimo iš gaudyklės metu jo sukinių kryptis nekinta.

- Parametrų grupėje „Dvipolės rekombinacijos parametrai“ nurodomi dvipolės rekombinacijos vyksmų pavadinimai ir atitinkami rekombinacijos skerspjūviai. Rekombinacijos vyksmus galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti vyksmą“. Apibrėžiant naują rekombinacijos vyksmą, sąrašo lauke „Priešingo krūvio krūvininkai“ reikia nurodyti krūvininkus, kurių krūvis yra priešingas „pirminių“ krūvininkų (nurodytų sąrašo lauke „Pasirinktieji krūvininkai“) krūviui.

Pastaba: Apibrėžiant dvipolę rekombinaciją, krūvininkai, kurie nurodyti sąrašo lauke „Pasirinktieji krūvininkai“, yra laikomi „pirminiais“, o krūvininkai, kurie nurodyti sąrašo lauke „Priešingo krūvio krūvininkai“, yra laikomi „antriniais“. Tačiau, kadangi abu rekombinuojantys krūvininkai yra lygiaverčiai, krūvininkų skirstymas į „pirminius“ ir „antrinius“ yra sąlyginis, todėl tokį vyksmą galima apibrėžti sukeitus pirminius ir antrinius krūvininkus vietomis. Bet kuriuo atveju dvipolės rekombinacijos vyksmas turi būti apibrėžtas *tik vieną kartą*. Pvz., jeigu rekombinacijos vyksmas apibrėžtas, kai pirminiai krūvininkai yra elektronai (kaip 1 ir 3 pav.), tada, sąrašo lauke „Pasirinktieji krūvininkai“ pasirinkus skyles, nereikia dar kartą apibrėžti rekombinacijos vyksmo (priešingu atveju būtų du visiškai vienodi vyksmai ir pilnutinė rekombinacijos sparta padidėtų du kartus). Ši pastaba galioja ir apibrėžiant dvipolės generacijos bei fotogeneracijos vyksmus.

- Sąrašo lauke „Rekombinacijos skerspjūvis“ reikia pasirinkti rekombinacijos skerspjūvio skaičiavimo taisyklę. Rekombinacijos skerspjūvis σ_r įeina į rekombinacijos spartos R išraišką:

$$R = \sigma_r v_{rel} n_1 n_2, \quad (4.5)$$

čia n_1 ir n_2 yra rekombinuojančių krūvininkų koncentracijos, o v_{rel} yra vidutinis reliatyvusis rekombinuojančių krūvininkų greitis (t. y. greičio vienas kito atžvilgiu modulio vidurkis). Jeigu galioja Maksvelo greičių skirstinys, tada

$$v_{rel} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_r}}, \quad (4.6)$$

kur m_r yra krūvininkų redukuotoji masė:

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (4.7)$$

čia m_1 ir m_2 yra abiejų krūvininkų efektinės masės. Kartais rekombinacijos sparta išreiškiama naudojant rekombinacijos koeficientą β_r :

$$R = \beta_r n_1 n_2. \quad (4.8)$$

Palyginus (4.5) ir (4.8), akivaizdu, kad

$$\beta_r = \sigma_r v_{rel}. \quad (4.9)$$

Sąrašo lauke „Rekombinacijos skerspjūvis“ yra galimos keturios pasirinktys:

1) konstanta,

2) Lanževano rekombinacijos modelis. Pagal šį modelį rekombinacijos koeficientą lemia rekombinuojančių krūvininkų judriai μ_1 ir μ_2 :

$$\beta_r = \frac{|q|(\mu_1 + \mu_2)}{\varepsilon_0 \varepsilon}, \quad (4.10)$$

čia $|q|$ yra krūvininkų krūvio modulis, ε_0 yra elektrinė konstanta, o ε yra dielektrinė skvarba.

3) Žinomas rekombinacijos koeficientas. Šiuo atveju yra užduodamas ne rekombinacijos skerspjūvis σ_r , o rekombinacijos koeficientas β_r , ir programa rekombinacijos spartą apskaičiuoja pagal (4.8).

4) Shockley-Read-Hall rekombinacija. Tai yra laisvųjų krūvininkų rekombinacija per gaudykles – vadinamuosius rekombinacijos centrus. Kiekvieną SRH rekombinacijos vyksmą atitinka keturi pagavimo ir išlaisvinimo vyksmai:

- a) pirminių krūvininkų pagavimas į krūvinės būsenos B tūrines gaudykles, susidarant krūvinei būsenai A,
- b) pirminių krūvininkų išlaisvinimas iš krūvinės būsenos A gaudyklių, susidarant krūvinei būsenai B;
- c) antrinių krūvininkų pagavimas į krūvinės būsenos A gaudykles, susidarant krūvinei būsenai B;
- d) antrinių krūvininkų išlaisvinimas iš krūvinės būsenos B gaudyklių, susidarant krūvinei būsenai A.

Kadangi tie keturi vyksmai yra apibrėžiami kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“ (žr. 5 skyrių), tai SRH rekombinacijos parametrų dialogo lange užtenka tik nurodyti pirminių krūvininkų pagavimo vyksmą. Programa pati suras kitus tris vyksmus, o jeigu tinkamų vyksmų nėra arba jeigu jų yra per daug, tada atvaizduos pranešimą apie klaidą (to pranešimo tekste yra išvardytos visos sąlygos, kurias turi atitikti krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo vyksmai, kad jų pagrindu būtų galima apibrėžti SRH rekombinacijos vyksmą). Apibrėžus SRH rekombinacijos vyksmą, atitinkamų gaudyklių užpildos pokytis yra skaičiuojamas ne įprastiniu – tiksluoju – būdu (dauginant koncentracijos laikinę išvestinę

iš laiko žingsnio), o remiantis reikalavimu, kad pirminių krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo spartų skirtumas būtų lygus antrinių krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo spartų skirtumui. Iš šios sąlygos išplaukia tokia krūvinės būsenos A gaudyklių koncentracijos išraiška:

$$n_A = N \frac{v_{\text{šil},1} \sigma_1 n_1 + v_{\text{šil},2} \sigma_2 N_2 \exp\left(-\frac{E_2}{kT}\right)}{v_{\text{šil},1} \sigma_1 \left[n_1 + N_1 \exp\left(-\frac{E_1}{kT}\right) \right] + v_{\text{šil},2} \sigma_2 \left[n_2 + N_2 \exp\left(-\frac{E_2}{kT}\right) \right]}, \quad (4.11)$$

čia N yra gaudyklių koncentracija ($N = n_A + n_B$), n_1 ir n_2 yra atitinkamai pirminių ir antrinių laisvųjų krūvininkų koncentracijos, $v_{\text{šil},1}$ ir $v_{\text{šil},2}$ yra atitinkamai pirminių ir antrinių krūvininkų vidutiniai šiluminio judėjimo greičiai, kurie Maksvelo skirstinio atveju apskaičiuojami pagal formulę

$$v_{\text{šil}} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m^*}}, \quad (4.12)$$

σ_1 ir σ_2 yra atitinkamai pirminių ir antrinių krūvininkų pagavimo į gaudykles skerspjūviai, N_1 ir N_2 yra atitinkamai pirminių ir antrinių laisvųjų krūvininkų būsenų tankiai, E_1 ir E_2 yra atitinkamai pirminių ir antrinių krūvininkų išlaisvinimo iš gaudyklių darbai. Pvz., jeigu yra modeliuojamas puslaidininkis, kuriame yra dviejų rūšių krūvininkai – elektronai ir skylės, o pirminiai krūvininkai yra elektronai, tada E_1 yra laidumo juostos apatinio krašto ir gaudyklių energijos lygmens skirtumas, o E_2 yra gaudyklių energijos lygmens ir valentinės juostos viršutinio krašto skirtumas (t. y. išlaisvinimo darbų suma $E_1 + E_2$ yra lygi puslaidininkio draustinės energijos juostos pločiui). Rekombinacijos centrų energijos lygmenį įprasta pasirinkti puslaidininkio draustinės juostos viduryje. Tada $E_1 = E_2 = E_g / 2$, kur E_g yra draustinės juostos plotis.

SRH rekombinacijos sparta apibrėžiama sąryšiu

$$R_{\text{SRH}} = R_1 - G_1 = R_2 - G_2, \quad (4.13)$$

čia R_1 ir R_2 yra atitinkamai pirminių ir antrinių krūvininkų pagavimo į gaudykles spartos, o G_1 ir G_2 yra pirminių ir antrinių krūvininkų išlaisvinimo iš gaudyklių spartos. Taigi, R_{SRH} gali būti ir teigiama, ir neigiama: teigiama vertė reiškia, kad vyrauja krūvininkų pagavimas į gaudykles (rekombinacija), o neigiama vertė reiškia, kad vyrauja krūvininkų išlaisvinimas iš gaudyklių (generacija).

Modeliuojant sistemos būsenos kitimą laike, SRH rekombinacijos modelis prieštarauja krūvio tvermės dėsnui: jeigu pirminių krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo spartų skirtumas iš tikrųjų būtų lygus antrinių krūvininkų pagavimo ir išlaisvinimo spartų skirtumui, tada gaudyklių užpilda nesikeistų, tačiau jos vertė, apskaičiuota pagal SRH rekombinacijos modelį (žr. (4.11)), keičiasi, nes ji išreiškia laisvųjų krūvininkų koncentracijomis n_1 ir n_2 , kurios nėra pastovios. Tačiau, jeigu rekombinacijos centrų koncentracija yra keliomis eilėmis mažesnė už kitų rūšių gaudyklių ir laisvųjų krūvininkų koncentracijas, tada rekombinacijos centrų erdvinio krūvio įtaka elektrinio lauko stipriui yra maža, todėl ir paklaidos, kurios atsiranda dėl minėtojo prieštaravimo, yra nežymios. Dialogo lange „Shockley-Read-Hall rekombinacijos parametrai“ galima pasirinkti, ar reikia atsižvelgti į rekombinacijos centrų erdvinį krūvį apskaičiuojant elektrinį lauką, ar ne. Jeigu į rekombinacijos centrų krūvį yra atsižvelgiama, tada to krūvio kitimo laike nekompensuoja sistemoje esančių kitos rūšies krūvių kitimas, t. y. rekombinacijos centrų krūvis atsiranda „iš niekur“, o tai prieštarauja krūvio tvermės dėsnui. Jeigu į rekombinacijos centrų krūvį neatsižvelgiama, tada efektas toks pats, lyg jų krūvis būtų visą laiką lygus nuliui, t. y. nelieta minėtojo prieštaravimo krūvio tvermės dėsnui. Todėl pastaroji pasirinktis yra numatytoji (nors iš tikrųjų rekombinacijos centrai turi tam tikrą krūvį).

Pastabos: 1. Jeigu rekombinacijos centrų koncentracija yra palyginti maža, tada modeliavimo rezultatai beveik nepriklauso nuo to, ar SRH rekombinacija yra įjungta, ar ne (skiriasi tik rekombinacijos centrų užpildos apskaičiavimo metodas). Be to, (4.11) formulė yra tiksli, jeigu sistemos būsena yra stacionari. Todėl, jeigu modeliavimo tikslas yra stacionarios būsenos apskaičiavimas (o ne sistemos perėjimo į tą būseną kinetika), tada patartina įjungti SRH rekombinaciją, nes tada programa greičiau „pasieks“ stacionarią būseną. Modeliuojant sistemos būsenos kitimą laike, tikslesni rezultatai gaunami išjungus SRH rekombinaciją.

2. Kad išjungti SRH rekombinaciją, pakanka užduoti nulį rekombinacijos skerspjūvį, t. y. rekombinacijos modelių sąrašė vietoj „Shockley-Read-Hall rekombinacija“ pasirinkti „Konstanta“ ir gretimame lauke įvesti nulį. Galima ir visiškai pašalinti rekombinacijos vyksmą, tačiau tada bus prarasti visi ankstesnio modeliavimo rezultatai.

- Parametrų grupėje „Dvipolės generacijos parametrai“ nurodomi dvipolės generacijos vyksmų pavadinimai ir atitinkamos generacijos spartos. Generacijos vyksmus galima įterpti arba pašalinti

naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti vyksmą“. Apibrėžiant naują generacijos vyksmą, sąrašo lauke „Priešingo krūvio krūvininkai“ reikia nurodyti krūvininkus, kurių krūvis yra priešingas „pirminių“ krūvininkų (nurodytų sąrašo lauke „Pasirinktieji krūvininkai“) krūviui.

- Sąrašo lauke „Generacijos sparta“ reikia pasirinkti dvipolės generacijos spartos skaičiavimo taisyklę. Yra galimos dvi pasirinktys:

1) konstanta,

2) smūginė jonizacija. Smūginės jonizacijos, kurią sukelia i -tosios rūšies krūvininkai, sparta (t. y. generuojamų krūvininkų porų skaičius tūrio vienetą per laiko vienetą) taške x yra skaičiuojama šitaip:

$$G_{sj}(x) = c_i \exp\left(-\frac{d_i}{|E(x)|}\right) \left| \frac{j_i(x)}{q_i} \right|, \quad (4.14)$$

čia c_i ir d_i yra tam tikros teigiamos konstantos (modelio parametrai), E yra elektrinio lauko stipris, j_i yra i -tosios rūšies krūvininkų srovės tankis, o q_i yra tų krūvininkų krūvis. Smūginė jonizacija yra vienintelis „asimetrinis“ dvipolės generacijos-rekombinacijos vyksmas, t. y. vyksmas, kai pirminiai ir antriniai krūvininkai nėra lygiaverčiai. Apibrėžiant smūginės jonizacijos vyksmą, pirminiai krūvininkai yra tie krūvininkai, kurie sukuria dviejų naujų krūvininkų porą, t. y. smūginės jonizacijos spartos išraiškoje (4.14) daugiklis j_i yra *pirminių* krūvininkų srovės tankis. Vadinasi, jeigu smūginę jonizaciją gali sukelti dviejų rūšių krūvininkai, tada reikia apibrėžti mažiausiai du smūginės jonizacijos vyksmus. Bendruoju atveju c_i ir d_i gali priklausyti nuo elektrinio lauko stiprio. Šią savybę galima modeliuoti naudojant kelias c_i ir d_i verčių poras, kurių kiekviena atitinka tam tikrą elektrinio lauko verčių intervalą. Kitaip sakant, galima apibrėžti kelis smūginės jonizacijos vyksmus, kurių kiekvienas pasireiškia tik tam tikrame elektrinio lauko verčių intervale. Todėl, pilnai apibūdinant smūginės jonizacijos vyksmą, reikia nurodyti 4 parametrus: didžiausią ir mažiausią elektrinio lauko vertes (jos nusako duotojo vyksmo „veikimo“ intervalą) ir atitinkamas koeficientų c_i ir d_i vertes. Paskutiniojo elektrinių laukų intervalo didžiausioji vertė yra ∞ . Šiuo atveju, apibrėžiant elektrinio lauko verčių intervalą, vietoj didžiausio elektrinio lauko stiprio reikia įvesti labai didelį skaičių – tokį, kad jis visada būtų didesnis už tikrąjį elektrinio lauko stiprį. Pvz., galima įvesti skaičių 10^{20} .

Elektrinio lauko intervalai ir atitinkamos c ir d vertės, apibrėžiant silicio elektronų ir skylių smūginės jonizacijos vyksmus, yra pateikti 4.2 lentelėje (duomenys iš programų paketo **MicroTec** vartotojo instrukcijos „*MicroTec Software Package for Two-Dimensional Process and Device Simulation. Version 4.0 for Windows. User’s Manual. – Siborg Systems Inc. – 1998*“).

4.2 lentelė. Silicio elektronų ir skylių smūginės jonizacijos modelio parametrai

Symbolis	Vertė	Vienetai	Pasmė
$E_{\min,n}$	0	V/cm	Mažiausias elektrinis laukas elektronams
$E_{\max,n}$	∞	V/cm	Didžiausias elektrinis laukas elektronams
d_n	$1,4 \cdot 10^6$	V/cm	Eksponentės rodiklio koeficientas elektronams
c_n	$7 \cdot 10^5$	1/cm	Daugiklis prieš eksponentinę funkciją elektronams
$E_{\min1,p}$	0	V/cm	Pirmojo elektrinio lauko verčių intervalo mažiausioji vertė skylėms
$E_{\max1,p}$	$6,07 \cdot 10^5$	V/cm	Pirmojo elektrinio lauko verčių intervalo didžiausioji vertė skylėms
$d_{1,p}$	$2,09 \cdot 10^6$	V/cm	Eksponentės rodiklio koeficientas pirmajame elektrinio lauko verčių intervale skylėms
$c_{1,p}$	$1,3 \cdot 10^6$	1/cm	Daugiklis prieš eksponentinę funkciją pirmajame elektrinio lauko verčių intervale skylėms
$E_{\min2,p}$	$6,07 \cdot 10^5$	V/cm	Antrojo elektrinio lauko verčių intervalo mažiausioji vertė skylėms
$E_{\max2,p}$	∞	V/cm	Antrojo elektrinio lauko verčių intervalo didžiausioji vertė skylėms
$d_{2,p}$	$1,4 \cdot 10^6$	V/cm	Eksponentės rodiklio koeficientas antrajame elektrinio lauko verčių intervale skylėms
$c_{2,p}$	$4,4 \cdot 10^5$	1/cm	Daugiklis prieš eksponentinę funkciją antrajame elektrinio lauko verčių intervale skylėms

- Parametrų grupėje „Krūvininkų virsmų parametrai“ nurodomi laisvųjų krūvininkų virsmų pavadinimai ir atitinkami virsmų spartos koeficientai. Kiekvienos rūšies krūvininkų virsmas pasireiškia tuo, kad laisvasis krūvininkas virsta kitos rūšies laisvuoju krūvininku, kurios elektros krūvis yra toks pats. Taigi, krūvininkų virsmai yra galimi tik tada, kai duotajame sluoksnyje egzistuoja kelių rūšių vienodo elektros krūvio laisvieji krūvininkai. Krūvininkų virsmus galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti virsmą“. Apibrėžiant naują virsmą, sąrašo lauke „Antriniai

krūvininkai“ reikia nurodyti laisvuosius krūvininkus, kurie atsiranda dėl duotojo virsmo. „Pirminiai“ krūvininkai (t. y. krūvininkai, kurie išnyksta duotojo virsmo metu) – tai tie patys krūvininkai, kurie nurodyti sąrašo lauke „Pasirinktieji krūvininkai“.

- Sąrašo lauke „Virsmo koeficientas“ galima pasirinkti duotosios rūšies virsmo spartos apskaičiavimo taisyklę. Dabartinėje modelio versijoje (0.75) yra galima tik viena pasirinktis – „Konstanta“, kuri atitinka pastovų virsmo spartos koeficientą (jo vertė įvedama gretimame įvesties lauke). Virsmo spartos koeficientas γ įeina į virsmo spartos V išraišką:

$$V = \gamma n, \quad (4.15)$$

čia n yra pirminių krūvininkų koncentracija. Virsmo sparta V – tai elementariųjų virsmo įvykių skaičius tūrio vienetė per laiko vienetą.

5. Tūrinių gaudyklių parametrai

Parametrų redaktoriaus kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“ užduodami kiekvienos rūšies tūrinių gaudyklių parametrai bei laisvųjų krūvininkų pagavimo į tūrines gaudykles ir išlaisvinimo iš tūrinių gaudyklių vyksmų parametrai. Šios kortelės pavyzdys pateiktas 4 pav. Toliau yra paaiškinti visi tos kortelės parametrai ir valdymo elementai:

- Spustelėjus mygtuką „Įterpti arba pašalinti tūrines gaudykles“, atsidaro dialogo langas, kuriame galima pasirinkti vieną iš trijų veiksmų – naujos rūšies tūrinių gaudyklių įterpimą gaudyklių sąrašo gale (tai yra numatytasis veiksmas), įterpimą prieš einamąsias gaudykles ir einamųjų gaudyklių pašalinimą.
- Sąrašo laukas „Pasirinktosios gaudyklės“ naudojamas pasirenkant tūrines gaudykles (kai tūrinių gaudyklių rūšių skaičius yra didesnis negu 1). Visi parametrai, kurie atvaizduojami kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“, atitinka tik pasirinktąsias tūrines gaudykles.
- Po sąrašo lauku „Pasirinktosios gaudyklės“ yra du teksto laukai, kurių pirmajame reikia surinkti pilnąjį tūrinių gaudyklių pavadinimą, o kitame – trumpąjį pavadinimą (jis naudojamas kaip laisvųjų krūvininkų pagavimo į tas gaudykles ir išlaisvinimo iš jų vyksmų numatytųjų pavadinimų komponentė).
- Sąrašo lauke „Gaudyklių koncentracija“ galima pasirinkti duotųjų tūrinių gaudyklių koncentracijos apskaičiavimo taisyklę. Dabartinėje modelio versijoje (0.75) yra galima tik viena pasirinktis – „Konstanta“, kuri atitinka pastovią gaudyklių koncentraciją (jos vertė įvedama gretimame įvesties lauke). Tačiau bendruoju atveju investoji koncentracijos vertė nusako ne pilnutinę tūrinių gaudyklių koncentraciją, o tik pastovų dėmenį pilnutinės koncentracijos išraiškoje (žr. toliau).
- Parametrų grupė „Tūrinių gaudyklių sričių parametrai“ naudojama tada, kai siekiama užduoti netolygų gaudyklių pasiskirstymą sluoksnyje. Tai pasiekama apibrėžiant vadinamąsias „tūrinių gaudyklių sritis“. Kiekviena sritis atitinka vieną priklausančią nuo koordinatės dėmenį pilnutinės duotųjų gaudyklių koncentracijos priklausomybėje nuo koordinatės x :

$$N(x) = N_0 + \sum_{i=1}^I f_i(x), \quad (5.1)$$

čia N_0 yra pastovus dėmuo (jis buvo paaiškintas anksčiau), $f_i(x)$ yra priklausantis nuo koordinatės dėmuo, kuris atitinka i -tąją gaudyklių sritį, o I yra pilnutinis sričių skaičius. Gaudyklių sritį sudaro trys dalys: kairioji kraštinė sritis, pastovios koncentracijos sritis ir dešinioji kraštinė sritis. Kairiojoje kraštinėje srityje, didėjant koordinatei x , $f_i(x)$ vertė monotoniškai auga nuo 0 iki didžiausios vertės

4 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Tūrinių gaudyklių parametrai“

$N_{\max,i}$. Pastovios koncentracijos srityje f_i nepriklauso nuo x ir yra lygi $N_{\max,i}$. Dešiniojoje kraštinėje srityje, didėjant koordinatei x , $f_i(x)$ vertė monotoniškai mažėja nuo $N_{\max,i}$ iki 0. Koncentracijos didėjimas ir mažėjimas kraštinėse srityse yra Gauso funkcijos pavidalo. Taigi, bendroji dėmens $f_i(x)$, atitinkančio i -tąją tūrinių gaudyklių sritį, išraiška yra šitokia:

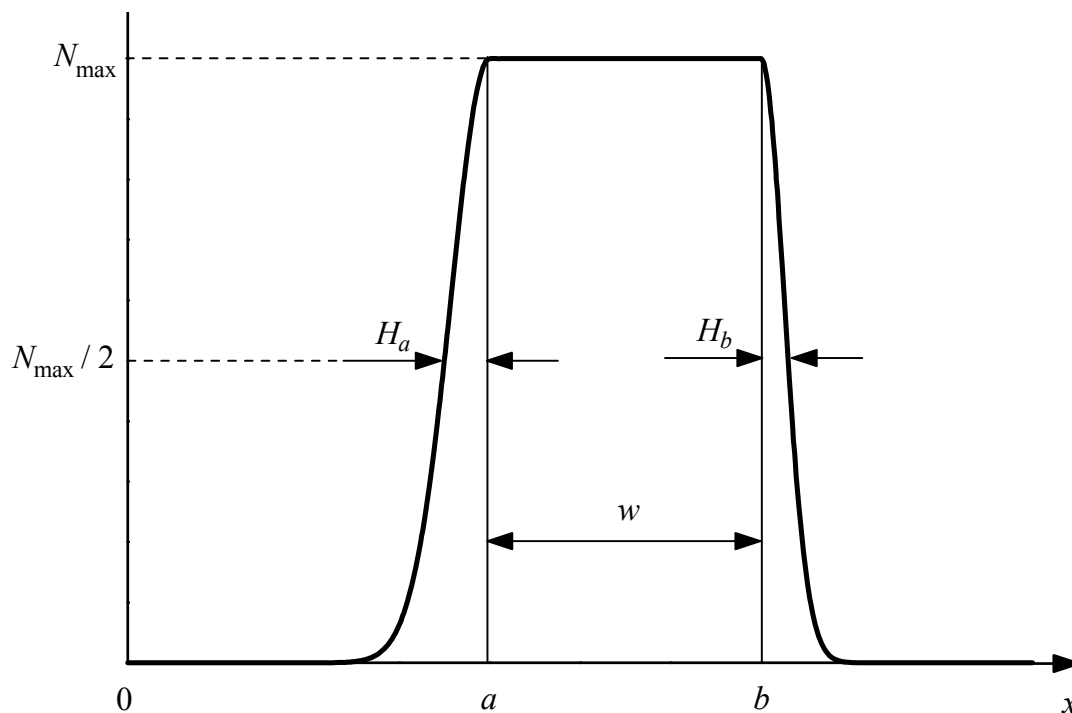
$$f(x) = \begin{cases} N_{\max} \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{(H_a^2/\ln 2)}\right] \equiv N_{\max} 2^{-(x-a)^2/H_a^2}, & \text{kai } x < a; \\ N_{\max}, & \text{kai } a \leq x \leq b; \\ N_{\max} \exp\left[-\frac{(x-b)^2}{(H_b^2/\ln 2)}\right] \equiv N_{\max} 2^{-(x-b)^2/H_b^2}, & \text{kai } x > b. \end{cases} \quad (5.2)$$

Toliau „gaudyklių srities kraštais“ vadinsime koordinatės vertes, kurios atitinka pastovios koncentracijos srities kraštus, t. y. parametrus a ir b (5.2) formulėje. H_a yra kairysis pusėjimo nuotolis, t. y. atstumas tarp gaudyklių srities kairiojo krašto (a) ir taško, kuris atitinka sąlygą $x < a$ ir kuriame $f(x) = N_{\max} / 2$ (žr. 5 pav.). H_b yra dešinysis pusėjimo nuotolis, t. y. atstumas tarp gaudyklių srities dešiniojo krašto (b) ir taško, kuris atitinka sąlygą $x > b$ ir kuriame $f(x) = N_{\max} / 2$ (žr. 5 pav.).

Kad apibrėžti naują tūrinių gaudyklių sritį, reikia spustelėti mygtuką „Įterpti arba pašalinti sritį“, paskui atsidariusiame dialogo lange spustelėti mygtuką „Gerai“ ir įvesti srities parametrus penkiuose teksto įvesties laukuose, kurie yra po sąrašo lauku „Pasirinktoji sritis“ (žr. 4 pav.). Tie parametrai yra:

- gaudyklių srities plotis, kuris yra lygus $b - a$ (5 pav. jis pažymėtas w);
- atstumas tarp gaudyklių srities kairiojo krašto ir sluoksnio (posluoksnio), kuriam priklauso tos gaudyklės, kairiojo krašto (kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“ šis parametras vadinamas „Srities poslinkis“; 5 pav. jis pažymėtas a);
- didžiausioji gaudyklių koncentracija N_{\max} (kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“ šis parametras vadinamas „Didžiausia koncentracija“);
- kairysis pusėjimo nuotolis H_a ;
- dešinysis pusėjimo nuotolis H_b .

Norint suformuoti Gauso funkcijos pavidalo sritį, reikia užduoti $w = 0$ ir $H_a = H_b$. Šiuo atveju parametras a nusakytų atstumą nuo duotojo sluoksnio kairiojo krašto iki Gauso funkcijos maksimumo taško.



5 pav. Tūrinių gaudyklių koncentracijos priklausomybė nuo koordinatės vienoje gaudyklių srityje ir srities parametrų aiškinimas

- Parametrų grupėje „Krūvininkų pagavimo į tūrinės gaudykles parametrai“ nurodomi pagavimo į tūrinės gaudykles vyksmų pavadinimai ir atitinkami pagavimo skerspjūviai. Pagavimo vyksmus galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti vyksmą“. Apibrėžiant naują pagavimo vyksmą, sąrašo lauke „Pagaunami krūvininkai“ reikia pasirinkti krūvininkus, kurie pagaunami į gaudykles, o teksto įvesties lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ reikia įvesti gaudyklės krūvį prieš pagaunant tos rūšies krūvininką (krūvio vienetas – elementarusis krūvis e).
- Sąrašo lauke „Pagavimo skerspjūvis“ reikia pasirinkti laisvųjų krūvininkų pagavimo į tūrinės gaudykles skerspjūvio apskaičiavimo taisyklę. Pagavimo skerspjūvis σ įeina į pagavimo spartos R_n išraišką:

$$R_n = \sigma v_{\text{šil}} n p_t, \quad (5.3)$$

čia $v_{\text{šil}}$ yra pagaunamų laisvųjų krūvininkų vidutinis šiluminio judėjimo greitis (jis apskaičiuojamas pagal (4.12) formulę), n yra jų koncentracija, o p_t yra juos pagaunančių tūrinių gaudyklių (t. y. gaudyklių, kurių krūvinė būsena atitinka krūvio vertę, nurodytą lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“) koncentracija. Daugiklis $\sigma v_{\text{šil}}$ kartais vadinamas „pagavimo koeficientu“. Dabartinėje modelio versijoje (v0.75) sąrašo lauke „Pagavimo skerspjūvis“ galima pasirinkti pastovų pagavimo skerspjūvį (pasirinktis „Konstanta“) arba pastovų pagavimo koeficientą (pasirinktis „Žinomas pagavimo koeficientas“).

- Parametrų grupėje „Krūvininkų išlaisvinimo iš tūrinių gaudyklių parametrai“ nurodomi išlaisvinimo iš tūrinių gaudyklių vyksmų pavadinimai ir atitinkami išlaisvinimo koeficientai. Išlaisvinimo vyksmus galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti vyksmą“. Apibrėžiant naują išlaisvinimo vyksmą, sąrašo lauke „Išlaisvinami krūvininkai“ reikia pasirinkti krūvininkus, kurie išlaisvinami iš gaudyklių, o teksto įvesties lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ reikia įvesti gaudyklės krūvį prieš išlaisvinant tos rūšies krūvininką (krūvio vienetas – elementarusis krūvis e).
- Sąrašo lauke „Išlaisvinimo koeficientas“ reikia pasirinkti laisvųjų krūvininkų išlaisvinimo iš tūrinių gaudyklių koeficiento apskaičiavimo taisyklę. Išlaisvinimo koeficientas α įeina į išlaisvinimo spartos G_n išraišką:

$$G_n = \alpha n_t, \quad (5.4)$$

čia n_t yra tūrinių gaudyklių, iš kurių išlaisvinami duotieji krūvininkai (t. y. gaudyklių, kurių krūvinė būsena atitinka krūvio vertę, nurodytą lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“), koncentracija. Sąrašo lauke „Išlaisvinimo koeficientas“ yra galimos trys pasirinktys:

1) konstanta;

2) Shockley-Read-Hall modelis. Pagal šį modelį išlaisvinimo koeficientas α yra proporcingas atvirkštinio vyksmo – pagavimo – koeficientui $\sigma v_{\text{šil}}$, kur σ yra pagavimo skerspjūvis, o $v_{\text{šil}}$ yra laisvųjų krūvininkų vidutinis šiluminio judėjimo greitis:

$$\alpha = \sigma v_{\text{šil}} N_c \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (5.5)$$

čia N_c yra laisvų krūvininkų būsenų tankis, o E_a yra išlaisvinimo darbas (modelio parametras). Pvz., jeigu yra modeliuojamas elektronų išlaisvinimas iš donorų atomų puslaidininkyje, tada N_c yra efektinis laidumo juostos būsenų tankis, o E_a yra laidumo juostos apatinio krašto ir gaudyklių (donorų) energijos lygmens skirtumas. Daugiklis N_c , kuris įeina į (5.5) formulę, yra apskaičiuojamas remiantis pasirinktimi „Būsenų tankis“, kuri yra parametrų redaktorius kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“ (žr. 4 skyrių).

Iš (5.5) išplaukia, kad Shockley-Read-Hall modelį galima rinktis tik tada, kai egzistuoja atvirkštinis – krūvininkų pagavimo – vyksmas. Jeigu tokio vyksmo nėra, tada pradėjus modeliuoti pasirodys atitinkamas perspėjimas. Jeigu duotosios gaudyklės atlieka rekombinacijos centrų vaidmenį, tada turi būti du pagavimo į jas vyksmai ir du išlaisvinimo vyksmai, kuriuose dalyvauja dviejų rūšių krūvininkai (t. p. žr. 4 skyriaus dalį, kurioje rašoma apie Shockley-Read-Hall rekombinaciją).

3) SRH modelis su modifikuotu būsenų tankiu skiriasi nuo anksčiau aprašyto modelio tik tuo, kad (5.5) formulėje daugiklis N_c nebūtinai turi būti lygus laisvųjų krūvininkų būsenų tankiui, kuris nurodytas kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“. Šiuo atveju tą daugiklį galima pasirinkti laisvai.

6. Paviršinių gaudyklių parametrai

Parametrų redaktoriaus kortelėje „Paviršinių gaudyklių parametrai“ užduodami kiekvienos rūšies paviršinių gaudyklių parametrai bei laisvųjų krūvininkų pagavimo į paviršines gaudykles ir išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių vyksmų parametrai. Šios kortelės pavyzdžiai pateikti 6 pav. ir 7 pav. Toliau yra paaiškinti visi tos kortelės parametrai ir valdymo elementai:

- Spustelėjus mygtuką „Įterpti arba pašalinti paviršines gaudykles“, atsidaro dialogo langas, kuriame galima pasirinkti vieną iš trijų veiksmų – naujos rūšies paviršinių gaudyklių įterpimą gaudyklių sąrašo gale (tai yra numatytasis veiksmas), įterpimą prieš einamąsias paviršines gaudykles ir einamųjų paviršinių gaudyklių pašalinimą. Pasirinkus naujų gaudyklių įterpimo veiksmą, reikia nurodyti jų padėtį: einamojo sluoksnio kairysis kraštas, dešinysis kraštas arba abu kraštai (žr. 8 pav.). Pasirinkus „abiejuose kraštuose“, tų gaudyklių paviršinis tankis bus vienodas abiejuose sluoksnio kraštuose. Jeigu gretimame modeliuojamos sistemos sluoksnyje jau yra apibrėžtos paviršinės gaudyklės, tada galima nurodyti, kad tos pačios gaudyklės pagauna arba išlaisvina ir einamojo sluoksnio krūvininkus. Šiuo atveju pasirodo pranešimas, kuris pavaizduotas 9 pav. (šis pranešimas pasirodo prieš anksčiau minėtą gaudyklių padėties dialogo langą). Spustelėjus mygtuką „Taip“, atsidaro dialogo langas, kurio pavyzdys pateiktas 10 pav. Tame lange reikia pasirinkti anksčiau apibrėžtas paviršines gaudykles, kurios turėtų „sutapti“ su naujomis paviršinėmis gaudyklėmis. Pastaroji pasirinktis reikalinga tada, kai paviršinės gaudyklės „tarpininkauja“ krūvininkų pernašoje iš vieno sluoksnio į kitą. Šiuo atveju negalima teigti, kad gaudyklės priklauso kuriam nors iš tų sluoksnių: jos priklauso abiem sluoksniams (tiksliau, jos apibūdina abiejų sluoksnių skiriamąjį paviršių, o ne kuri nors vieną sluoksnį). Kadangi šioje programoje kiekvienas parametrų rinkinys turi priklausyti kuriam nors vienam sluoksniui, tai yra naudojamos „sutampančios“ paviršinės gaudyklės (kai paviršinės gaudyklės, kurios priklauso vienam sluoksniui, „sutampa“ su paviršinėmis gaudyklėmis, kurios priklauso gretimam sluoksniui).
- Sąrašo laukas „Pasirinktosios gaudyklės“ naudojamas pasirenkant paviršines gaudykles (kai paviršinių gaudyklių rūšių skaičius yra didesnis negu 1). Visi parametrai, kurie atvaizduojami kortelėje „Paviršinių gaudyklių parametrai“, atitinka tik pasirinktąsias paviršines gaudykles.
- Po sąrašo lauku „Pasirinktosios gaudyklės“ yra du teksto laukai, kurių pirmajame reikia surinkti pilnąjį paviršinių gaudyklių pavadinimą, o kitame – trumpąjį pavadinimą (jis naudojamas kaip laisvųjų krūvininkų pagavimo į tas gaudykles ir išlaisvinimo iš jų vyksmų numatytųjų pavadinimų komponentė).
- Sąrašo lauke „Gaudyklių paviršinis tankis“ galima pasirinkti duotųjų paviršinių gaudyklių paviršinio tankio apskaičiavimo taisyklę. Dabartinėje modelio versijoje (0.75) yra galima tik viena pasirinktis – „Konstanta“, kuri atitinka pastovų gaudyklių paviršinį tankį (jo vertė įvedama gretimame įvesties lauke). Jeigu pasirinktosios gaudyklės sutampa su gretimo sluoksnio paviršinėmis gaudyklėmis, tada sąrašo laukas „Gaudyklių paviršinis tankis“ nėra matomas. Vietoj jo yra du statiniai teksto laukai, kuriuose nurodyti gretimo sluoksnio pavadinimas ir to sluoksnio paviršinių gaudyklių, su kuriomis sutampa pasirinktosios einamojo sluoksnio gaudyklės, pavadinimas (žr. 7 pav.).
- Parametrų grupėje „Krūvininkų pagavimo į paviršines gaudykles parametrai“ nurodomi pagavimo į paviršines gaudykles vyksmų pavadinimai ir atitinkami pagavimo skerspjūviai. Pagavimo vyksmus galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti vyksmą“. Apibrėžiant naują pagavimo vyksmą, sąrašo lauke „Pagaunami krūvininkai“ reikia pasirinkti krūvininkus, kurie pagaunami į gaudykles, o teksto įvesties lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ reikia įvesti gaudyklės krūvį prieš pagaunant tos rūšies krūvininką (krūvio vienetas – elementarusis krūvis e).
- Sąrašo lauke „Pagavimo skerspjūvis“ reikia pasirinkti laisvųjų krūvininkų pagavimo į paviršines gaudykles skerspjūvio apskaičiavimo taisyklę. Pagavimo skerspjūvis σ įeina į pagavimo spartos $R_{s,n}$ išraišką:

$$R_{s,n} = \sigma v_{sil} n p_s, \quad (6.1)$$

čia v_{sil} yra pagaunamų laisvųjų krūvininkų vidutinis šiluminio judėjimo greitis (jis apskaičiuojamas pagal (4.12) formulę), n yra jų koncentracija, o p_s yra juos pagaunančių paviršinių gaudyklių (t. y. gaudyklių, kurių krūvinė būseną atitinka krūvio vertė, nurodytą lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“) paviršinis tankis. $R_{s,n}$ yra į paviršines gaudyklės pagaunamų krūvininkų skaičius ploto vienetą per laiko vienetą. Daugiklis σv_{sil} kartais vadinamas „pagavimo koeficientu“. Dabartinėje modelio versijoje (v0.75) sąrašo lauke „Pagavimo skerspjūvis“ galima pasirinkti pastovų pagavimo skerspjūvį (pasirinktis „Konstanta“) arba pastovų pagavimo koeficientą (pasirinktis „Žinomas pagavimo koeficientas“).

Modelio parametrai

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaičiavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai	Fotogeneracijos parametrai
Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinių gaudyklių parametrai
			Paviršinių gaudyklių parametrai

Sluoksnių skaičius: 2

Pasirinktas sluoksnis: 1

Sluoksnio pavadinimas: 01

Įterpti prieš funkcijos pavadinimą
 Įterpti po funkcijos pavadinimo

Paviršinių gaudyklių rūšių skaičius: 1

Pasirinktosios gaudyklės: 1

Paviršinių gaudyklių pavadinimas: Paviršinės gaudyklės
(gaudyklės yra dešiniajame sluoksnio krašte)

Trumpas pavadinimas: jon.

Gaudyklių paviršinis tankis (Ns_{1_1}): Konstanta 1e+012 1/cm²

Krūvininkų pagavimo į paviršines gaudyklės parametrai

Vyksmų skaičius: 1

Pasirinktas vyksmas: 1

Pagavimo vyksmo pavadinimas: jon. (+1) < el. pagav.

Pagaunami krūvininkai: el. (krūvis: -1)

Pradinis gaudyklių krūvis (qcs_{1_1}): 1 *e

Pagavimo skerspjūvis (cs_{1_1}): Žinomas pagavimo koeficientas

Krūvininkų išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių parametrai

Vyksmų skaičius: 1

Pasirinktas vyksmas: 1

Išlaisvinimo vyksmo pavadinimas: jon. (+0) -> el. išlaisv.

Išlaisvinami krūvininkai: el. (krūvis: -1)

Pradinis gaudyklių krūvis (qgs_{1_1}): 0 *e

Išlaisvinimo koeficientas (gs_{1_1}): Shockley-Read-Hall modelis

6 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Paviršinių gaudyklių parametrai“

Modelio parametrai

Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaičiavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai	Fotogeneracijos parametrai
Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinių gaudyklių parametrai
			Paviršinių gaudyklių parametrai

Sluoksnių skaičius: 2

Pasirinktas sluoksnis: 2

Sluoksnio pavadinimas: 02

Įterpti prieš funkcijos pavadinimą
 Įterpti po funkcijos pavadinimo

Paviršinių gaudyklių rūšių skaičius: 1

Pasirinktosios gaudyklės: 1

Paviršinių gaudyklių pavadinimas: Paviršinės gaudyklės Nr. 1

Trumpas pavadinimas: jon.

Gaudyklės sutampa su šiomis gretimam sluoksnio gaudyklėmis:

Sluoksnis: 01

Gaudyklės: Paviršinės gaudyklės

Krūvininkų pagavimo į paviršines gaudyklės parametrai

Vyksmų skaičius: 1

Pasirinktas vyksmas: 1

Pagavimo vyksmo pavadinimas: jon. (+1) < el. pagav.

Pagaunami krūvininkai: el. (krūvis: -1)

Pradinis gaudyklių krūvis (qcs_{2_1}): 1 *e

Pagavimo skerspjūvis (cs_{2_1}): Konstanta 1e-010 cm²

Krūvininkų išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių parametrai

Vyksmų skaičius: 1

Pasirinktas vyksmas: 1

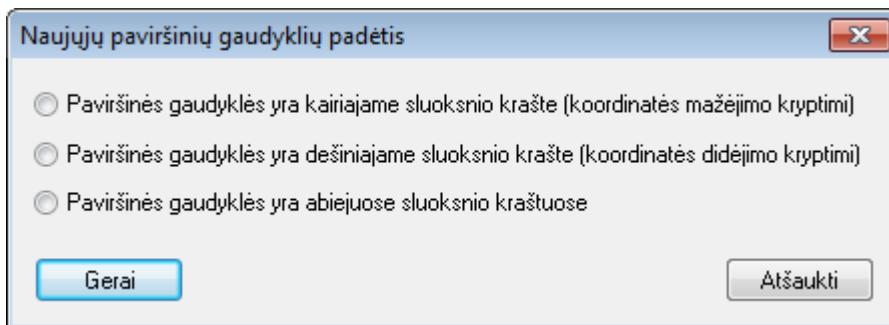
Išlaisvinimo vyksmo pavadinimas: jon. (+0) -> el. išlaisv.

Išlaisvinami krūvininkai: el. (krūvis: -1)

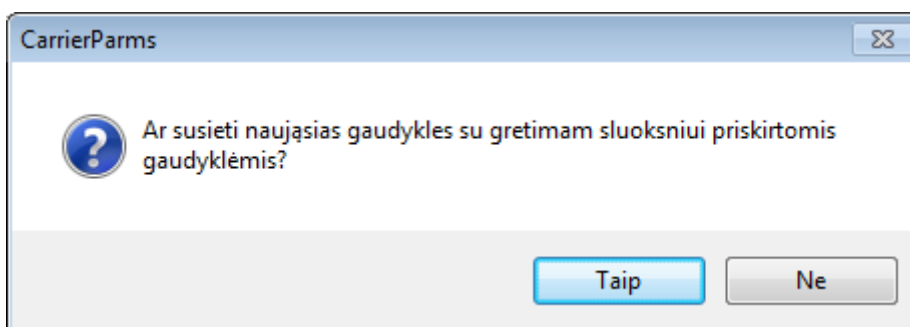
Pradinis gaudyklių krūvis (qgs_{2_1}): 0 *e

Išlaisvinimo koeficientas (gs_{2_1}): Shockley-Read-Hall modelis

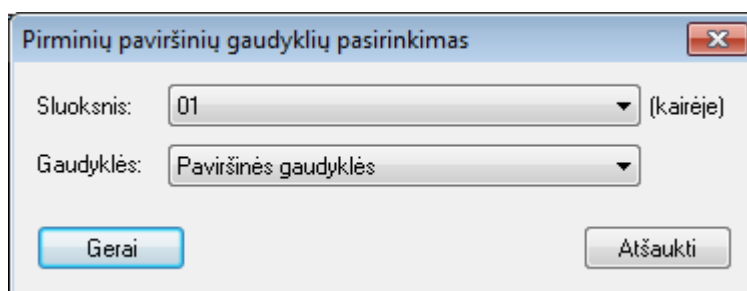
7 pav. Parametrų redaktoriaus kortelės „Paviršinių gaudyklių parametrai“ pavyzdys, kai pasirinktosios paviršinės gaudyklės „sutampa“ su paviršinėmis gaudyklėmis, kurios priskirtos gretimam sluoksniui



8 pav. Dialogo langas, kuriame nurodoma naujų paviršinių gaudyklių padėtis



9 pav. Pranešimo langas, kuris atsidaro, kai yra kuriamos naujos paviršinės gaudyklės ir gretimame sluoksnyje jau yra apibrėžtos paviršinės gaudyklės



10 pav. Dialogo lango, kuriame pasirenkamos anksčiau apibrėžtos gretimo sluoksnio gaudyklės, kurios turi „sutapti“ su naujosiomis einamojo sluoksnio paviršinėmis gaudyklėmis, pavyzdys

- Parametrų grupėje „Krūvininkų išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių parametrai“ nurodomi išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių vyksmų pavadinimai ir atitinkami išlaisvinimo koeficientai. Išlaisvinimo vyksmus galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti vyksmą“. Apibrėžiant naują išlaisvinimo vyksmą, sąrašo lauke „Išlaisvinami krūvininkai“ reikia pasirinkti krūvininkus, kurie išlaisvinami iš gaudyklių, o teksto įvesties lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“ reikia įvesti gaudyklės krūvį prieš išlaisvinant tos rūšies krūvininką (krūvio vienetas – elementarusis krūvis e).
- Sąrašo lauke „Išlaisvinimo koeficientas“ reikia pasirinkti laisvųjų krūvininkų išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių koeficiento skaičiavimo taisyklę. Išlaisvinimo koeficientas α įeina į išlaisvinimo spartos $G_{s,n}$ išraišką:

$$G_{s,n} = \alpha n_s, \quad (6.2)$$

čia n_s yra paviršinių gaudyklių, iš kurių išlaisvinami duotieji krūvininkai (t. y. gaudyklių, kurių krūvinė būseną atitinka krūvio vertė, nurodytą lauke „Pradinis gaudyklių krūvis“), paviršinis tankis. $G_{s,n}$ yra iš paviršinių gaudyklių išlaisvinamų krūvininkų skaičius ploto vienetą per laiko vienetą. Sąrašo lauke „Išlaisvinimo koeficientas“ yra galimos trys pasirinktys:

1) konstanta;

2) Shockley-Read-Hall modelis. Pagal šį modelį išlaisvinimo koeficientas α yra proporcingas atvirkštinio vyksmo – pagavimo – koeficientui σv_{sil} , kur σ yra pagavimo skerspjūvis, o v_{sil} yra laisvųjų krūvininkų vidutinis šiluminio judėjimo greitis:

$$\alpha = \sigma v_{\text{sil}} N_c \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (6.3)$$

čia N_c yra laisvų krūvininkų būsenų tankis, o E_a yra išlaisvinimo darbas (modelio parametras). Daugiklis N_c , kuris įeina į (6.3) formulę, yra apskaičiuojamas remiantis pasirinktimi „Būsenų tankis“, kuri yra parametru redaktorius kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“ (žr. 4 skyrių).

Iš (6.3) išplaukia, kad Shockley-Read-Hall modelį galima rinktis tik tada, kai egzistuoja atvirkštinis – krūvininkų pagavimo – vyksmas. Jeigu tokio vyksmo nėra, tada pradėjus modeliuoti pasirodys atitinkamas perspėjimas.

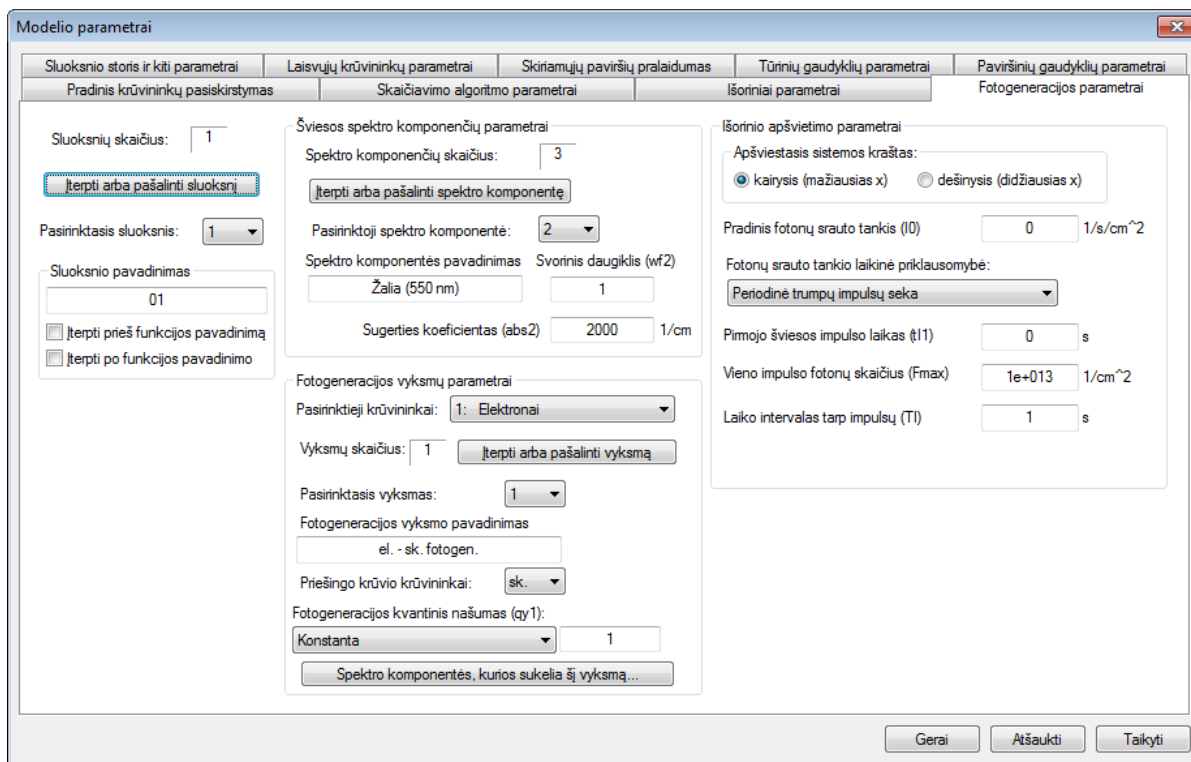
3) SRH modelis su modifikuotu būsenų tankiu skiriasi nuo anksčiau aprašyto modelio tik tuo, kad (6.3) formulėje daugiklis N_c nebūtinai turi būti lygus laisvųjų krūvininkų būsenų tankiui, kuris nurodytas kortelėje „Laisvųjų krūvininkų parametrai“. Šiuo atveju tą daugiklį galima pasirinkti laisvai.

7. Fotogeneracijos parametrai

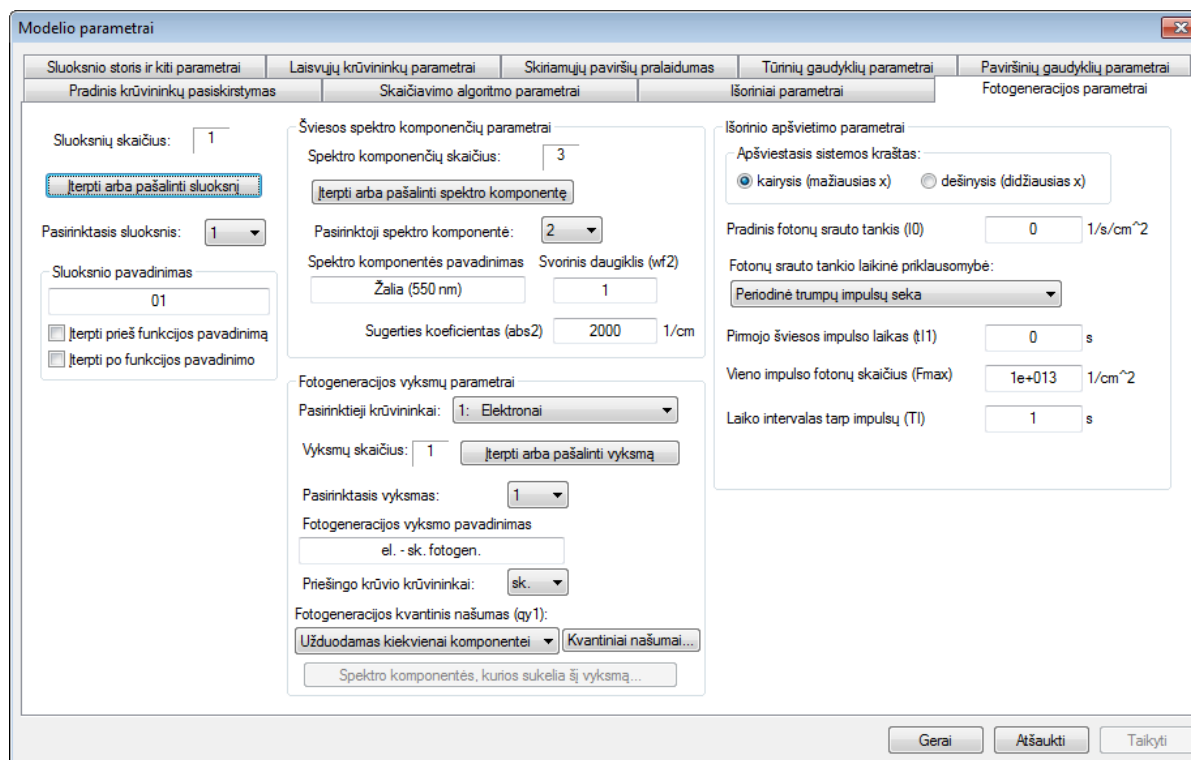
Fotogeneracijos parametų kortelės pavyzdžiai yra pateikti 11 pav. Toliau yra paaiškinti visi tos kortelės parametrai:

- Parametų grupėje „Šviesos spektro komponentių parametrai“ yra trys parametrai – šviesos spektro komponentės pavadinimas, jos fotonų srauto svorinis daugiklis ir sugerties koeficientas pasirinktajame sluoksnyje (sluoksnio pasirinkimo sąrašas yra kortelės kairiajame krašte). Spektro komponentės galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti spektro komponentę“ (didžiausias leidžiamas spektro komponentių skaičius yra 100). Programa CarrierFunc.dll, prieš pradėdama modeliavimą, normuoja visus svorinius daugiklius į vienetą, t. y. padalija kiekvieną svorinį daugiklį iš visų spektro komponentių svorinių daugiklių sumos. Šitaip normuoto svorinio daugiklio fizikinė prasmė yra santykinė fotonų dalis, kuri atitinka duotąją spektro komponentę (pilnutinis fotonų srautas užduodamas parametų grupėje „Išorinio apšvietimo parametrai“, kuri aprašyta toliau). Todėl yra svarbios tik svorinių daugiklių santykių vertės, bet ne tų daugiklių absoliutinės vertės. Pvz., jeigu iš viso yra trys spektro komponentės, kurių svoriniai daugikliai yra 1, 2 ir 3, tada tie patys skaičiavimo rezultatai būtų gauti ir naudojant svorinius daugiklius 50, 100 ir 150.
- Parametų grupėje „Fotogeneracijos vyksmų parametrai“ nurodomi fotogeneracijos vyksmų pavadinimai ir jų kvantiniai našumai. Fotogeneracijos vyksmus galima įterpti arba pašalinti naudojant mygtuką „Įterpti arba pašalinti vyksmą“. Generuojami krūvininkai nurodomi sąrašo laukuose „Pasirinktieji krūvininkai“ ir „Priešingo krūvio krūvininkai“. Fotogeneracijos kvantinis našumas – tai sukurtų priešingo krūvio krūvininkų porų skaičius, kuris atitinka vieną sugertą fotoną. Sąrašo lauke „Fotogeneracijos kvantinis našumas“ reikia pasirinkti kvantinio našumo skaičiavimo taisyklę. Galimos dvi pasirinktys: „Konstanta“ ir „Užduodamas kiekvienai komponentei“:
 - a) Pasirinkus „Konstanta“, visų spektro komponentių kvantiniai našumai bus vienodi ir lygūs vertei, kuri įvesta teksto įvesties lauke, esančiame šalia sąrašo lauko „Fotogeneracijos kvantinis našumas“ (žr. 11a pav.). Be to, šiuo atveju galima „išjungti“ kai kurias spektro komponentes, t. y. jų kvantinį našumą prilyginti nuliui. Tam reikia spustelėti mygtuką „Spektro komponentės, kurios sukelia šį vyksmą“. Tada atsidaro dialogo langas, kurio pavyzdžiai yra pateikti 12 pav. Kad „įjungti“ arba „išjungti“ spektro komponentę, reikia spustelėti kairįjį pelės mygtuką ant tos komponentės pavadinimo.
 - b) Pasirinkus „Užduodamas kiekvienai komponentei“, vietoj teksto įvesties lauko atsiras mygtukas „Kvantiniai našumai...“ (žr. 11b pav.). Spustelėjus tą mygtuką, atsidaro dialogo langas, kuriame nurodytos visų spektro komponentių fotogeneracijos kvantinio našumo vertės (žr. 13a pav.). Kad pakeisti kurį nors kvantinį našumą, reikia spustelėti kairįjį pelės mygtuką ant atitinkamos sąrašo eilutės ir paskui spustelėti mygtuką „Pakeisti pasirinktąjį kvantinį našumą“, arba spustelėti dešinįjį pelės mygtuką ant atitinkamos sąrašo eilutės ir paskui pasirinkti komandą „Pakeisti kvantinį našumą“ iš kontekstinio meniu, arba dukart spustelėti kairįjį pelės mygtuką ant atitinkamos sąrašo eilutės. Visais atvejais atsidaro dialogo langas „Kvantinis našumas“, kuriame reikia įvesti naująją kvantinio našumo vertę (žr. 13b pav.).
- Parametų grupėje „Išorinio apšvietimo parametrai“ yra parametrai, kurie nusako išorinio apšvietimo intensyvumą ir jo priklausomybę nuo laiko. Du žymieji laukeliai, kurie yra grupėje „Apšviestasis sistemos kraštas“, naudojami nurodant, kurioje sluoksnio pusėje yra šviesos šaltinis (kairėje ar dešinėje). Įvesties laukas „Pradinis fotonų srauto tankis (I0)“ užduoda pastovų dėmenį išorinio šviesos šaltinio fotonų srauto tankio išraiškoje (fotonų srauto tankis – tai fotonų skaičius, kuris krinta per vieną sekundę į vieną sluoksnio paviršiaus kvadratinį centimetrą). Sąrašo laukas „Fotonų srauto tankio laikinė priklausomybė“ naudojamas pasirenkant vieną iš kelių standartinių laikinių priklausomybių. Ši priklausomybė – tai fotonų srauto tankio nuokrypis nuo anksčiau nurodytos pradinės vertės. T. y. pilnutinio fotonų srauto tankio momentinė vertė yra lygi anksčiau nurodytos pradinės vertės ir pasirinktosios priklausomybės sumai. Dabartinė modelio versija (v0.75) leidžia pasirinkti vieną iš keturių funkcijų: „Pastovus apšviestumas“, „Periodinė stačiakampių impulsų seka“, „Periodinė trumpų impulsų seka“ ir „Tiesinis kitimas“. Kiti įvesties laukai nusako pasirinktosios laikinės priklausomybės parametrus (pvz., periodą, amplitudę ir pan.). Jeigu visi laikinės priklausomybės parametrai yra lygūs nuliui, tada atitinkama laikinė priklausomybė taip pat yra tapaciai lygi nuliui. Jeigu bent vienas parametras yra nenulinis, tada parametų redaktorius tikrina, ar parametų vertės turi prasmę duotajame modelyje, ir, jeigu ne, praneša apie klaidą. Pvz., jeigu naudojama periodinė stačiakampių impulsų seka, tada jos periodas turi būti didesnis už vieno impulso trukmę ir pan.

Pastaba: Pasirinkus eilutę „Periodinė trumpų impulsų seka“, impulso trukmė bus laikoma lygia nuliui. T. y. šiuo atveju impulso momentu akimirksniu sukuriamą tam tikrą fotogeneruotų krūvininkų koncentraciją. Ji priklauso nuo impulso fotonų skaičiaus, t. y. nuo impulso fotonų srauto tankio integralo laiko atžvilgiu, kurio režiai atitinka impulso pradžią ir pabaigą. Atitinkamai šiuo atveju reikia nurodyti ne impulso fotonų srauto tankį, o pilnutinį impulso fotonų skaičių (ploto vienetui).

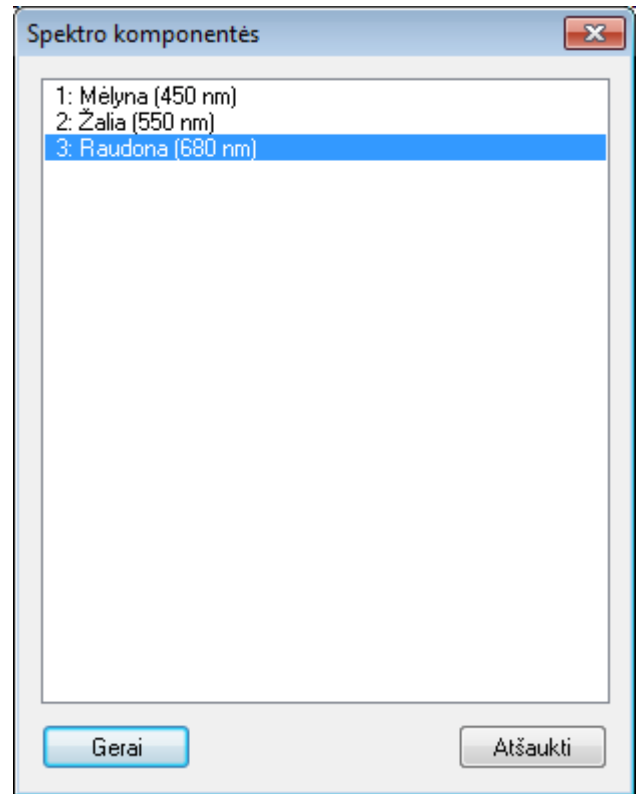
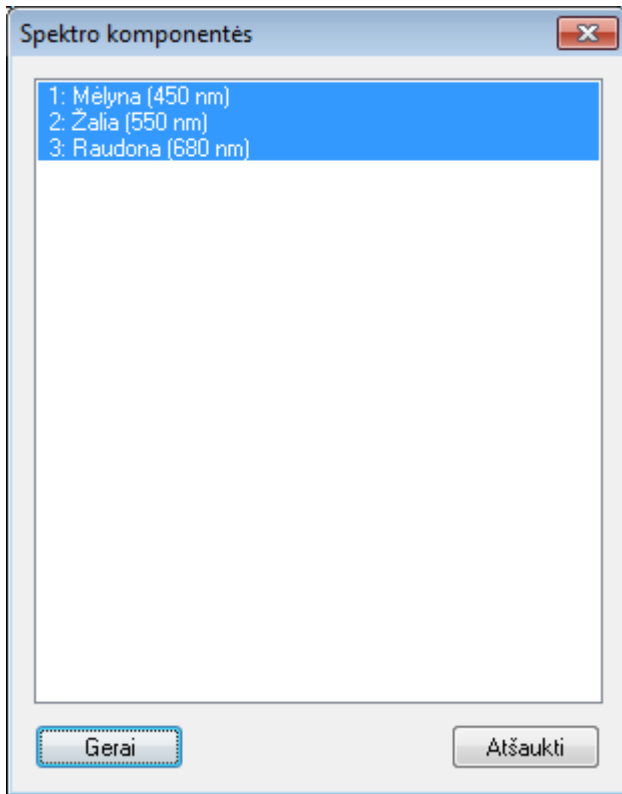


a)

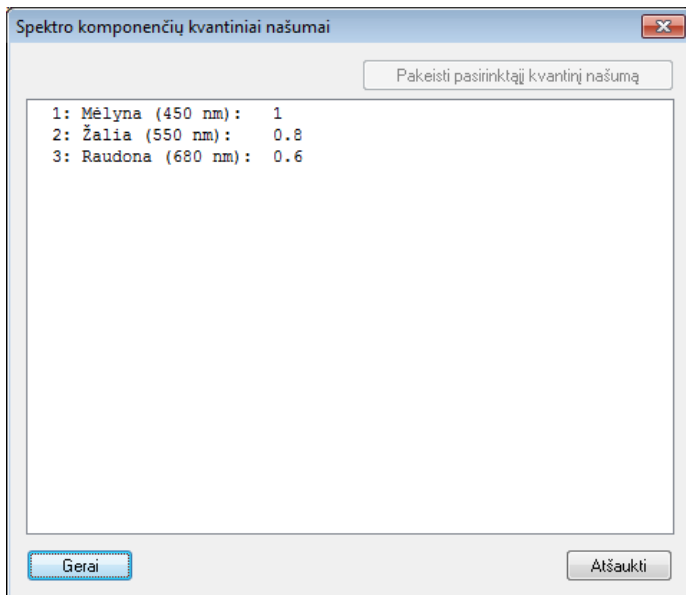


b)

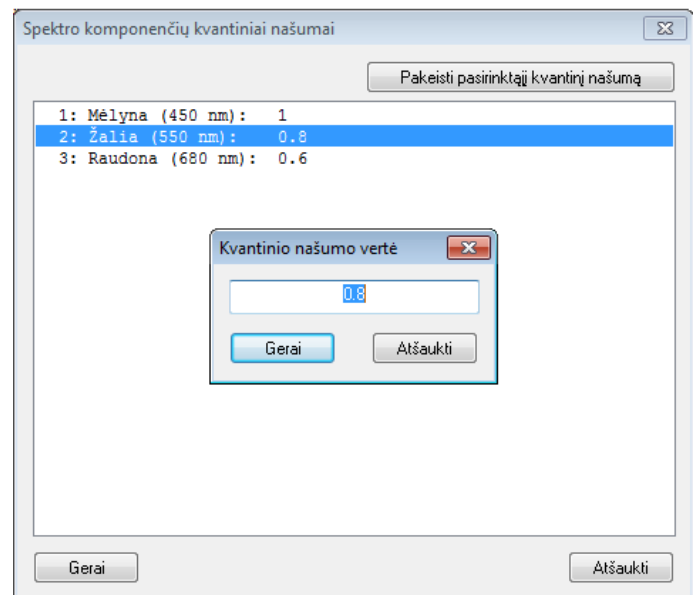
11 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Fotogeneracijos parametrai“: a) visų šviesos spektro komponentių fotogeneracijos kvantinis našumas yra vienodas; b) kvantinis našumas užduodamas kiekvienai spektro komponentei atskirai.



12 pav. „Aktyviųjų“ šviesos spektro komponentių pasirinkimo dialogo langų pavyzdžiai, kai yra naudojamas pastovus fotogeneracijos kvantinis našumas. Kairiajame pavyzdyje visos trys spektro komponentės yra „įjungtos“. Dešiniajame pavyzdyje tik trečioji spektro komponentė yra „įjungta“ (aktyvi), o pirmosios dvi spektro komponentės yra „išjungtos“ (neaktyvios), t. y. jų fotogeneracijos kvantiniai našumai yra lygūs nuliui



a)



b)

13 pav. Šviesos spektro komponentių fotogeneracijos kvantinių našumų redagavimo dialogo lango pavyzdys. a) pradinis lango pavidalas; b) pasirinkus spektro komponentę ir atidarius atitinkamą teksto įvesties lauką

8. Krūvininkų pernašos per skiriamuosius paviršius parametrai

Parametrų redaktoriaus kortelėje „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“ (žr. 14 pav.) galima užduoti kiekvienos rūšies krūvininkų pernašos per skiriamuosius paviršius sąlygas (krūvininkai pasirenkami sąraše „Pasirinktieji krūvininkai“). Matematiškai šios sąlygos pasireiškia kaip sprendžiamos diferencialinių lygčių sistemos kraštinės sąlygos. Bendroju atveju galimos 4 pasirinktys, kurios matomos 14 pav.

- Pasirinkus „Skiriamasis paviršius nėra pralaidus šios rūšies krūvininkams“, tos rūšies krūvininkų laidumo srovė ant to paviršiaus visada bus lygi nuliui.
- Pasirinkus „Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu“, srovės vertė ant to paviršiaus skaičiuojama taip pat kaip ir tūryje, t. y. pagal (1.2) formulę (tačiau, kaip minėta 1 skyriuje, šiuo atveju laisvųjų krūvininkų koncentracijos dalinė išvestinė koordinatės atžvilgiu, kuri įeina į (1.2) formulę, yra vienpusė). Šios pasirinkties įtaka krūvio pasiskirstymui priklauso nuo to, ar kitoje duotojo paviršiaus pusėje yra elektroda. Jeigu šis paviršius yra laisvasis arba jeigu jis skiria du modeliuojamus sluoksnius, tada srovė, kuri įteka arba išteka per tą paviršių, sąlygoja kintamą paviršinių krūvių. Taigi, tada krūvininkai nekerta skiriamąjo paviršiaus, o kaupiasi ant jo, kaip paviršinis krūvis (funkcijų pavadinimuose šis krūvis vadinamas „laisvuju paviršiniu krūviu“). Jeigu duotasis paviršius skiria sluoksnį ir elektrodą, tada per jį tekanti elektros srovė nesukuria jokio paviršinio krūvio. Be to, pasirinkus „Skiriamasis paviršius elgiasi kaip ominis kontaktas šios rūšies krūvininkų atžvilgiu“, atsiranda galimybė užduoti pastovią duotųjų laisvųjų krūvininkų koncentracijos vertę ant to paviršiaus. Ši pasirinktis gali sumažinti modeliavimo trukmę, pvz., modeliuojant nusistovėjusią srovę, kuri teka metalo ir puslaidininkio ominių kontaktu (prie tokio kontakto puslaidininkio krūvininkų koncentracijos visą laiką yra lygios savo pusiausvirosioms vertėms, kurios atitinka termodinaminę pusiausvyrą). Kad duotųjų krūvininkų koncentracija ant to paviršiaus nesikeistų, paviršiniame mazge yra „išjungiami“ visi krūvininkų atsiradimo ir išnykimo vyksmai, kuriuose atsiranda arba išnyksta tie krūvininkai, o pagal (1.2) formulę apskaičiuotos tų krūvininkų laidumo srovės tankio vertės paviršiniame mazge ir gretimame to sluoksnio mazge yra pakeičiamos tų verčių aritmetiniu vidurkiu (to reikia, kad srovės tankio dalinė išvestinė koordinatės atžvilgiu paviršiniame mazge būtų lygi nuliui).
- Pasirinkus „Skiriamasis paviršius yra skaidrus šios rūšies krūvininkams“, krūvininkų koncentracijos abiejose paviršiaus pusėse skaičiuojamos remiantis laidumo srovės ir jos išvestinės tolydumo sąlygomis. Kad ši pasirinktis būtų galima, reikia pasirinkti gretimo sluoksnio krūvininkus, kurie atitinka pasirinktuosius einamojo sluoksnio krūvininkus. 14 pav. nėra matomas gretimo sluoksnio krūvininkų pasirinkimo sąrašas, nes jis atsiranda tik tada, kai sistemą sudaro daugiau negu vienas sluoksnis ir kai duo-

14 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Skiriamųjų paviršių pralaidumas“

tasis skiriamasis paviršius nėra sistemos kraštas (t. y. kai jis skiria du modeliuojamus sluoksnius). Krūvininkų pasirinkimo sąraše yra išvardyti gretimo sluoksnio krūvininkai, kurių krūvis yra lygus arba priešingas einamojo sluoksnio pasirinktųjų krūvininkų krūviui. Taigi, krūvininkai, kurie pereina per „skaidrų“ paviršių, gali virsti gretimo sluoksnio krūvininkais, kurių krūvis yra toks pats (pvz., vieno sluoksnio elektronai virsta kito sluoksnio elektronais) arba rekombinuoti arba būti generuojami kartu su priešingo krūvio krūvininkais (pvz., vienoje pusėje – elektronai, o kitoje pusėje – skylės). Kad laidumo srovė ir jos išvestinė būtų tolydžios ant skiriamąjo paviršiaus, yra atliekama laidumo srovės priklausomybės nuo koordinatės tiesinė aproksimacija pagal keturis taškus: duotojo tipo krūvininkų laidumo srovės vertės duotojo sluoksnio paviršiniame mazge ir gretimame mazge, ir atitinkamų gretimo sluoksnio krūvininkų laidumo srovės vertės analogiškuose dviejuose gretimo sluoksnio mazguose. Paskui minėtosios keturios srovės vertės yra pakeičiamos vertėmis, kurios apskaičiuotos pagal tiesės lygtį (dvi vidurinės vertės yra vienodos, nes gretimų sluoksnių paviršiniai mazgai sutampa).

- Pasirinkus „Paviršiuje yra potencialo barjeras, per kurį šie krūvininkai injektuojami į gretimą sluoksnį“, srovės išraiškoje (1.2) atsiranda dar vienas dėmuo, kuris atspindi skirtumą tarp abiejų krypčių viršbarjerinės injekcijos srautų ant skiriamąjo paviršiaus. Šių dviejų srautų apskaičiavimo taisyklė turi būti nurodyta dviejuose sąrašo laukuose, kurie yra šios kortelės apačioje. Tuose sąrašuose pirmosios dvi pasirinktys yra „Konstanta“ ir „Laisvos dalelės, Maksvelo skirstinys“. Jeigu duotasis sluoksnis yra elektrodas, tada, pasirinkus „Konstanta“, gretimame įvesties lauke reikia įvesti injekcijos iš to elektrodo į modeliuojamą sluoksnį srovės tankio modulį. Jeigu duotasis sluoksnis nėra elektrodas (kitaip sakant, yra vienas iš modeliuojamų sluoksnių), tada, pasirinkus „Konstanta“, gretimame įvesties lauke reikia įvesti injekcijos srauto tankio ir krūvininkų koncentracijos paviršiniame mazge santykį (jo matavimo vienetas yra cm/s). Pastaruoju atveju, pasirinkus „Konstanta“, duotosios rūšies krūvininkų injekcijos iš duotojo sluoksnio į gretimą sluoksnį (arba elektrodą) srauto tankis bus apskaičiuojamas dauginant tą konstantą iš tos rūšies krūvininkų koncentracijos paviršiniame mazge (injekcijos srovės tankis – tai krūvininkų srauto tankio ir krūvininkų krūvio sandauga). Kadangi, pasirinkus „Konstanta“, krūvininkų injekcijos srautas apskaičiuojamas nenaudojant potencialo barjero aukščio, tai šiuo atveju teksto įvesties laukas „Potencialo barjero aukštis“ yra neaktyvus. Pasirinkus „Laisvos dalelės, Maksvelo skirstinys“, krūvininkų injekcijos srauto tankis bus apskaičiuotas remiantis prielaida, kad krūvininkų greičiai pasiskirstę pagal Maksvelo skirstinį, o į gretimą sluoksnį pereina krūvininkai, kurių kinetinė energija didesnė už potencialo barjero aukštį ir kurių greitis nukreiptas į sluoksnio išorę (t. y. link skiriamąjo paviršiaus). Pastaruoju atveju potencialo barjero aukštis turi būti įvestas teksto įvesties lauke „Potencialo barjero aukštis“. Tada srovės tankio komponentė, kuri atitinka duotųjų krūvininkų pereigą iš to sluoksnio į gretimą sluoksnį, bus apskaičiuojama pagal formulę

$$j = \frac{qn}{\sqrt{2\pi kTm^*}} (\Phi_b + kT) \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right), \quad (8.1)$$

čia q yra krūvininkų krūvis, n yra jų koncentracija prie skiriamąjo paviršiaus, m^* yra krūvininkų efektinė masė, Φ_b yra potencialo barjero aukštis, k yra Bolcmano konstanta, o T yra absoliučioji temperatūra. Jeigu duotasis sluoksnis yra elektrodas, minėtame sąrašo lauke atsiranda dar dvi pasirinktys „Elementarioji Ričardsono lygtis“ ir „Ričardsono lygtis su papildomu daugikliu“. Pasirinkus „Elementarioji Ričardsono lygtis“, krūvininkų termoelektroninės emisijos iš to elektrodo srovės tankis bus apskaičiuotas pagal Ričardsono lygtį

$$j = AT^2 \exp\left(-\frac{\Phi_b}{kT}\right), \quad (8.2)$$

čia A yra Ričardsono konstanta ($A = 1,20173 \cdot 10^6 \text{ A} \cdot \text{m}^{-2} \text{K}^{-2}$). Tačiau, modeliuojant termoelektroninę krūvininkų emisiją iš metalo į puslaidininkį arba dielektriką, vietoj „elementariosios“ Ričardsono konstantos A reikia naudoti „efektinę“ Ričardsono konstantą $A^* = (m_t / m_0) \cdot A$, kur m_t yra krūvininko efektinė masė puslaidininkyje statmena paviršiumi kryptimi (izotropinio puslaidininkio modelyje m_t yra lygi krūvininko būsenų tankio efektinei masei m^*). Tada reikia pasirinkti „Ričardsono lygtis su papildomu daugikliu“ ir įvesti santykio m_t / m_0 vertę kaip papildomą daugiklį.

Kai elektrodo krūvininkų potencialo barjero aukštis Φ_b yra nelygus nuliui, tada galima nurodyti, kad, modeliuojant krūvininkų injekciją iš elektrodo į sluoksnį, reikia atsižvelgti į Šotkio efektą (taip yra vadinamas potencialo barjero sumažėjimas, kai egzistuoja išorinis laukas, kuris veikia krūvininką jėga, nukreipta nuo elektrodo į modeliuojamo sluoksnio turį). Tam reikia pažymėti žymimąjį laukelį „Atsižvelgti į Šotkio efektą“, kuris yra šalia teksto įvesties lauko „Potencialo barjero aukštis“. Tada, modeliuojant viršbarjerinę krūvininkų injekciją iš metalo į puslaidininkį arba dielektriką, (8.1) ir (8.2)

formulėse vietoj duotojo potencialo barjero aukščio Φ_b bus naudojamas sumažintas barjero aukštis $\Phi_b - \Delta\Phi_b$, kur $\Delta\Phi_b$ yra barjero aukščio sumažėjimas dėl Šotkio efekto:

$$\Delta\Phi_b = e \sqrt{\frac{|qE|}{4\pi\epsilon_0\epsilon}}, \quad (8.3)$$

čia E yra elektrinis laukas prie skiriamąjo paviršiaus modeliuojamame sluoksnyje (puslaidininkyje arba dielektrike), ϵ yra to sluoksnio dielektrinė skvarba, e yra elementarusis krūvis, q yra krūvininko krūvis, o ϵ_0 yra elektrinė konstanta.

Likusioji srovės tankio komponentė, kuri susijusi su krūvininkų dreifu ir difuzija, yra prilyginama (1.2) reiškinio aritmetiniam vidurkiui gretimų sluoksnių paviršiniuose mazguose (tų dviejų mazgų koordinatės sutampa, nes jie abu priklauso tam pačiam skiriamajam paviršiui). Taigi, šiuo atveju laidumo srovė yra tolydi, tačiau jos išvestinė bendruoju atveju turi trūkį, nes, apskaičiuojant laidumo srovės vertę paviršiniame mazge, neatsižvelgiama į srovės vertę gretimame to paties sluoksnio mazge.

9. Išoriniai parametrai

Išoriniai parametrai – tai aplinkos temperatūra, elektrodų konfigūracija (du elektrodai arba vienas elektrodas), o dviejų elektrodų konfigūracijoje – išorinės įtampos priklausomybė nuo laiko ir išorinės grandinės komponentų vertės (varža ir talpa). Išorinė įtampa ir išorinė grandinė egzistuoja tik dviejų elektrodų konfigūracijoje. Jeigu yra tik vienas elektrodas, tada to elektrodo potencialas visada yra lygus nuliui, o pilnutinė srovė (laidumo ir slinkties srovių suma) yra taip pat lygi nuliui. Prieš aprašant atskirus išorinius parametrus, toliau yra pateiktos lygtys, kurios susieja skirtingų grandinės taškų potencialus ir modeliuojamos sistemos srovę dviejų elektrodų konfigūracijoje.

Priklausomai nuo to, kurio elektrodo potencialas yra keičiamas (dešiniojo ar kairiojo), yra galimos dvi sujungimo schemas, kurios matomos 15a pav. ir 15b pav. Jose naudojami tokie žymėjimai:

U_0 – modeliuojamos sistemos kairiojo elektrodo potencialas,

U_1 – modeliuojamos sistemos dešiniojo elektrodo potencialas,

U_2 – išorinio įtampos šaltinio poliaus, kuris per rezistorių R jungiasi prie vieno elektrodo (to, kurio potencialas yra kintamas), potencialas,

R – išorinės grandinės varža,

C – išorinės grandinės talpa,

i – pilnutinė modeliuojamos sistemos srovė.

Jeigu modeliuojant keičiamas dešiniojo elektrodo potencialas (kaip 15a pav.), tada to potencialo priklausomybė nuo laiko atitinka šią diferencialinę lygtį:

$$\frac{dU_1}{dt} = \frac{U_2 - U_1}{RC} + \frac{i}{C}. \quad (9.1a)$$

Jeigu modeliuojant keičiamas kairiojo elektrodo potencialas (kaip 15b pav.), tada to potencialo priklausomybė nuo laiko atitinka šią diferencialinę lygtį:

$$\frac{dU_0}{dt} = \frac{U_2 - U_0}{RC} - \frac{i}{C}. \quad (9.1b)$$

Pilnutinė srovė i apibrėžiama šitaip:

$$i = S(j + j_{sl}) = S\left(j + \varepsilon_0 \varepsilon \frac{dE}{dt}\right), \quad (9.2)$$

čia S yra elektrodo plotas, j yra laidumo srovės tankis (t. y. (1.2) pavidalo reiškinių, atitinkančių visus laisvuosius krūvininkus duotajame taške, suma), j_{sl} yra slinkties srovės tankis, ε_0 yra elektrinė konstanta, ε yra dielektrinė skvarba, o dE/dt yra elektrinio lauko stiprio išvestinė laiko atžvilgiu (ε ir dE/dt vertės atitinka tą patį sistemos tašką, kaip ir j vertė). Pilnutinė srovė (9.2) nepriklauso nuo koordinatės, nors atskiri jos dėmenys (laidumo srovė ir slinkties srovė) bendruoju atveju priklauso nuo koordinatės. Pilnutinė srovė (9.2) gali priklausyti tik nuo laiko. Kad išvesti galutinę lygtį U_1 arba U_0 atžvilgiu reikia pilnutinę srovę i išreikšti atitinkamai išvestine dU_1/dt arba išvestine dU_0/dt . Ta išraiška yra šitokia:

jeigu keičiamas dešiniojo elektrodo potencialas:

$$i = S\left(j_{ef} - \frac{\varepsilon_0}{w_{ef}} \frac{dU_1}{dt}\right); \quad (9.3a)$$

jeigu keičiamas kairiojo elektrodo potencialas:

$$i = S\left(j_{ef} + \frac{\varepsilon_0}{w_{ef}} \frac{dU_0}{dt}\right), \quad (9.3b)$$

čia w_{ef} yra visų sistemą sudarančių sluoksnių storių tiesinis darinys, kurį vadinsime „efektiniu sistemos storiu“:

$$w_{ef} \equiv \sum_{k=1}^L \frac{w_k}{\varepsilon_k}, \quad (9.4)$$

kur L yra sluoksnių skaičius (neįskaitant elektrodų), k yra sluoksnio numeris, w_k yra k -tojo sluoksnio storis, ε_k yra k -tojo sluoksnio dielektrinė skvarba, o j_{ef} yra laidumo srovės tankio integralų kiekvieno sistemą sudarančio sluoksnio storiu tiesinis darinys, kurį vadinsime „efektiniu laidumo srovės tankiu“:

$$j_{ef} \equiv \frac{1}{w_{ef}} \sum_{k=1}^L \frac{1}{\varepsilon_k} \int_{x_{k-1}}^{x_k} j(x) dx, \quad (9.5)$$

kur x_k yra k -tojo sluoksnio dešiniojo krašto koordinatė (x_0 atitinka kairiąją sistemos kraštą). Įrašius (9.3a) ir (9.3b) atitinkamai į (9.1a) ir (9.1b) ir išreiškus atitinkamai dU_1/dt ir dU_0/dt , gaunamos tokios dvi diferencialinės lygtys:

jeigu keičiamas dešiniojo elektrodo potencialas:

$$\frac{dU_1}{dt} = \frac{1}{C + (\epsilon_0 S / w_{ef})} \left(\frac{U_2 - U_1}{R} + S j_{ef} \right); \quad (9.6a)$$

jeigu keičiamas kairiojo elektrodo potencialas:

$$\frac{dU_0}{dt} = \frac{1}{C + (\epsilon_0 S / w_{ef})} \left(\frac{U_2 - U_0}{R} - S j_{ef} \right). \quad (9.6b)$$

Modelio parametrai

Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinį gaudyklių parametrai	Paviršinių gaudyklių parametrai
Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaičiavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai		Fotogeneracijos parametrai
Temperatūra (T) <input type="text" value="300"/> K	Kairiojo elektrodo pradinis potencialas (U0) <input type="text" value="0"/> V	Dešiniojo elektrodo pradinis potencialas (U1) <input type="text" value="1"/> V		
Elektrodo skaičius ir padėtis <input checked="" type="radio"/> Du elektrodai <input type="radio"/> Vienas elektrodas kairiajame krašte <input type="radio"/> Vienas elektrodas dešiniajame krašte	Keičiamas šio elektrodo potencialas: <input type="radio"/> kairiojo <input checked="" type="radio"/> dešiniojo	Išorinio įtampos šaltinio pradinis potencialas (U2) <input checked="" type="radio"/> U2 = U1 <input type="radio"/> U2 = <input type="text"/> V		
<input checked="" type="radio"/> Sistemos kairiojo krašto koordinatė (x0) <input type="text" value="0"/> um <input type="radio"/> Sistemos dešiniojo krašto koordinatė (x1) <input type="text" value="0.2"/> um	Elektrodo plotas (S) <input type="text" value="1"/> cm ²	Išorinės grandinės varža (R) <input type="text" value="0"/> Om	Išorinės grandinės talpa (C) <input type="text" value="0"/> F	
	Išorinio įtampos šaltinio potencialo laikinė priklausomybė: Tiesinis kitimas	Tiesinio kitimo pradžios laikas (tU1) <input type="text" value="0"/> s	Potencialo kitimo sparta (dU/dt) <input type="text" value="1"/> V/s	
		Tiesinio kitimo pabaigos laikas (tU2) <input type="text" value="1"/> s		
<input type="button" value="Geri"/> <input type="button" value="Atšaukti"/> <input type="button" value="Taisyti"/>				

a)

Modelio parametrai

Sluoksnio storis ir kiti parametrai	Laisvųjų krūvininkų parametrai	Skiriamųjų paviršių pralaidumas	Tūrinį gaudyklių parametrai	Paviršinių gaudyklių parametrai
Pradinis krūvininkų pasiskirstymas	Skaičiavimo algoritmo parametrai	Išoriniai parametrai		Fotogeneracijos parametrai
Temperatūra (T) <input type="text" value="300"/> K	Kairiojo elektrodo pradinis potencialas (U0) <input type="text" value="0"/> V	Dešiniojo elektrodo pradinis potencialas (U1) <input type="text" value="1"/> V		
Elektrodo skaičius ir padėtis <input checked="" type="radio"/> Du elektrodai <input type="radio"/> Vienas elektrodas kairiajame krašte <input type="radio"/> Vienas elektrodas dešiniajame krašte	Keičiamas šio elektrodo potencialas: <input checked="" type="radio"/> kairiojo <input type="radio"/> dešiniojo	Išorinio įtampos šaltinio pradinis potencialas (U2) <input checked="" type="radio"/> U2 = U0 <input type="radio"/> U2 = <input type="text"/> V		
<input checked="" type="radio"/> Sistemos kairiojo krašto koordinatė (x0) <input type="text" value="0"/> um <input type="radio"/> Sistemos dešiniojo krašto koordinatė (x1) <input type="text" value="0.2"/> um	Elektrodo plotas (S) <input type="text" value="1"/> cm ²	Išorinės grandinės varža (R) <input type="text" value="0"/> Om	Išorinės grandinės talpa (C) <input type="text" value="0"/> F	
	Išorinio įtampos šaltinio potencialo laikinė priklausomybė: Tiesinis kitimas	Tiesinio kitimo pradžios laikas (tU1) <input type="text" value="0"/> s	Potencialo kitimo sparta (dU/dt) <input type="text" value="1"/> V/s	
		Tiesinio kitimo pabaigos laikas (tU2) <input type="text" value="1"/> s		
<input type="button" value="Geri"/> <input type="button" value="Atšaukti"/> <input type="button" value="Taisyti"/>				

b)

15 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Išoriniai parametrai“: a) keičiamas dešiniojo elektrodo potencialas; b) keičiamas kairiojo elektrodo potencialas

Kadangi duotuoju laiko momentu ($t = t_l$) yra žinomi visi dydžiai, kurie yra (9.6a) ir (9.6b) lygčių dešiniuosiose pusėse, tai potencialo U_1 arba U_0 vertę vėlesniuoju laiko momentu ($t_{l+1} = t_l + \Delta t$) galima apskaičiuoti taip pat, kaip krūvininkų koncentracijas, t. y. taikant išreikštinį algoritmą (žr. (1.7) formulę):

jeigu keičiamas dešiniojo elektrodo potencialas:

$$U_1(t_{l+1}) = U_1(t_l) + \left. \frac{dU_1}{dt} \right|_{t_l} \Delta t; \quad (9.7a)$$

jeigu keičiamas kairiojo elektrodo potencialas:

$$U_0(t_{l+1}) = U_0(t_l) + \left. \frac{dU_0}{dt} \right|_{t_l} \Delta t. \quad (9.7b)$$

Išorinių parametrų kortelės pavyzdžiai yra pateikti 15a ir 15b pav. Toliau yra paaiškinti visi tos kortelės parametrai:

- Parametras „Temperatūra (T)“ – tai aplinkos absoliučioji temperatūra (matavimo vienetas – kelvinas).
- Trys žymimieji laukeliai, kurie yra grupėje „Elektrodų skaičius ir padėtis“, nusako, ar yra naudojama elektrografinė veika (kai yra tik vienas elektrodas), ar ne (kai yra du elektrodai). Jeigu yra tik vienas elektrodas, tada reikia pasirinkti jo padėtį – kairiajame ar dešiniajame sistemos krašte.
- Du įvesties laukai „Sistemos kairiojo krašto koordinatė (x_0)“ ir „Sistemos dešiniojo krašto koordinatė (x_1)“ nusako sluoksnio padėtį ant X ašies. Kadangi sistemos plotis užduodamas kitoje kortelėje („Sluoksnio storis ir kiti parametrai“), tai minėtosios dvi koordinatės nėra nepriklausomos (jų skirtumas turi būti lygus sluoksnio storiui). Todėl minėtieji du įvesties laukai negali būti aktyvūs vienu metu. Šalia jų esantys žymimieji laukeliai naudojami užduodant, kuris iš tų dviejų įvesties laukų yra aktyvus. Pakeitus tame lauke esantį skaičių ir spustelėjus kairįjį pelės mygtuką ties bet kuriuo kitu šios kortelės įvesties lauku, automatiškai bus pakeista ir kito krašto koordinatė – taip, kad abiejų kraštų koordinatžių skirtumas būtų lygus sistemos pločiui.
- Visi kiti šios kortelės laukai naudojami užduodant pradinis elektrodų potencialus bei jų kitimą laike. Tie laukai tampa aktyvūs tik dviejų elektrodų veikoje. Du viršutiniai įvesties laukai naudojami užduodant pradinis kairiojo ir dešiniojo elektrodų potencialus (atitinkamai U_0 ir U_1).
- Žemiau esantys du žymimieji laukeliai naudojami užduodant, kurio elektrodo potencialas yra kintamas – kairiojo ar dešiniojo. Nuo šios pasirinkties priklauso modeliuojamos elektrinės grandinės schema, kuri pavaizduota šios kortelės viršutiniame dešiniajame kampe (plg. 15a pav. ir 15b pav.).
- Du žymimieji laukeliai ir teksto įvesties laukas, kurie yra grupėje „Išorinio įtampos šaltinio pradinis potencialas (U_2)“, yra naudojami užduodant šaltinio poliaus, kuris per rezistorių R sujungtas su anksčiau nurodytu elektrodu, pradinį potencialą (U_2). Jeigu yra nurodyta nenulinė to rezistoriaus varža (žr. toliau), tada šis potencialas gali nebūti lygus to elektrodo potencialui. Tų dviejų potencialų skirtumas yra lygus įtampos kritimui rezistoriuje R . Šiuo atveju reikia pažymėti žymimąjį laukelį „ $U_2 =$ “ ir surinkti pradinę U_2 vertę šalia jo esančiame įvesties lauke. Laukelis „ $U_2 =$ “ yra aktyvus tik tada, kai $R \neq 0$. Kitas išorinio įtampos šaltinio polius tiesiogiai jungiasi prie kito elektrodo, todėl to poliaus potencialas yra pastovus ir lygus to elektrodo potencialui (kuris nurodytas anksčiau). Jeigu pradinis įtampos kritimas rezistoriuje R yra lygus nuliui (t. y. pradinė išorinio įtampos šaltinio srovė lygi nuliui arba $R = 0$), tada reikia pažymėti kitą šios grupės žymimąjį laukelį. Priklausomai nuo to, kurio elektrodo potencialas yra kintamas, šalia to laukelio yra užrašas „ $U_2 = U_1$ “ arba „ $U_2 = U_0$ “.
- Įvesties lauke „Elektrodo plotas (S)“ įvedamas modeliuojamo sluoksnio elektrodo plotas. Šis plotas reikalingas skaičiuojant pilnutinę sluoksnio srovę $i = S j_{pilin}$ (čia j_{pilin} yra pilnutinės srovės tankis).
- Lauke „Išorinės grandinės varža (R)“ įvedama rezistoriaus, per kurį išorinis įtampos šaltinis jungiasi prie anksčiau nurodyto elektrodo, varža.
- Lauke „Išorinės grandinės talpa (C)“ įvedama kondensatoriaus, kuris prijungtas lygiagrečiai su sluoksniu, talpa.
- Sąrašo laukas „Išorinio įtampos šaltinio potencialo laikinė priklausomybė“ naudojamas pasirenkant vieną iš keturių standartinių laikinių priklausomybių: „Nuolatinė įtampa“, „Periodinė stačiakampių impulsų seka“, „Tiesinis kitimas“ arba „Sinusoidė“. Šaltinio poliaus, kuris per rezistorių R sujungtas su anksčiau nurodytu sluoksnio elektrodu, potencialo (U_2) momentinė vertė yra lygi anksčiau nurodytos pradinės vertės ir pasirinktosios laikinės priklausomybės sumai.
- Kiti įvesties laukai nusako pasirinktosios laikinės priklausomybės parametrus (pvz., periodą, amplitudę ir pan.). Jeigu visi tie parametrai yra lygūs nuliui, tada atitinkama laikinė priklausomybė taip pat yra tapačiai lygi nuliui. Jeigu bent vienas parametras yra nenulinis, tada programa tikrina, ar parametrų vertės turi prasmę, ir, jeigu ne, praneša apie klaidą. Pvz., jeigu naudojama periodinė stačiakampių impulsų seka, tada jos periodas turi būti didesnis už vieno impulso trukmę ir pan.

10. Pradinis krūvininkų pasiskirstymas

Kortelėje „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“ užduodamos pradinės laisvųjų krūvininkų koncentracijų priklausomybės nuo koordinatės ir tūrinių bei paviršinių gaudyklių pradinės krūvinės būsenos. Šios kortelės pavyzdys pateiktas 16 pav. Toliau yra paaiškinti tos kortelės valdymo elementai:

- Valdymo elementai, kurie yra grupėje „Laisvųjų krūvininkų pradinė koncentracija“, naudojami apibrėžiant pradinę laisvųjų krūvininkų koncentracijų priklausomybę nuo koordinatės. Pasirinkus krūvininkų rūšį sąrašo lauke „Pasirinktieji krūvininkai“, reikia nurodyti, kaip apskaičiuoti jų pradinę koncentraciją. Tam naudojamas sąrašo laukas „Pradinė krūvininkų koncentracija“. Jame yra dvi pasirinktys:
 - 1) Pastovi koncentracija. Šiuo atveju koncentracijos vertę reikia įvesti gretimame teksto įvesties lauke.
 - 2) Koncentracijos vertė proporcinga vienos rūšies tūrinių gaudyklių koncentracijai. Pasirinkus šią nuostatą, minėto teksto lauko dešinėje atsiranda dar vienas sąrašo laukas, kuriame yra visų tam pačiam sluoksniui priklausančių tūrinių gaudyklių vardai. Minėtąsias gaudyklės (kurių atžvilgiu yra apibrėžiama pasirinktųjų laisvųjų krūvininkų pradinė koncentracija) reikia pasirinkti tame sąrašo lauke, o proporcingumo koeficientą reikia įvesti minėtame teksto įvesties lauke (žr. 16 pav.).
- Valdymo elementai, kurie yra grupėje „Tūrinių gaudyklių pradinis užpildymas“, naudojami apibrėžiant tūrinių gaudyklių pradinę krūvinę būseną. Pasirinkus gaudyklių rūšį sąrašo lauke „Pasirinktosios tūrinės gaudyklės“, reikia nurodyti, kaip turi būti apskaičiuota jų pradinė krūvinė būseną. Žemiau esantys du žymieji laukeliai yra naudojami nurodant ar visų duotosios rūšies gaudyklių pradinė krūvinė būseną turi būti vienoda, ar yra galimos dvi krūvinės būsenos. Pastaruoju atveju reikia nurodyti tų dviejų krūvinių būsenų santykinės dalies pilnutinėje gaudyklių koncentracijoje apskaičiavimo būdą. Kadangi abiejų krūvinių būsenų koncentracijų suma yra lygi pilnutinei tos rūšies tūrinių gaudyklių koncentracijai, kuri apibrėžta kortelėje „Tūrinių gaudyklių parametrai“, tai užtenka apibrėžti tik vienos krūvinės būsenos pradinės koncentracijos apskaičiavimo būdą (kitos krūvinės būsenos koncentracija bus apskaičiuota atimant pirmosios krūvinės būsenos koncentraciją iš pilnutinės tos rūšies tūrinių gaudyklių koncentracijos). Ta krūvinė būseną nurodoma naudojant kitus du žymimuosius laukelius, kurie yra po teksto įvesties laukais, kuriuose įvedamos tos dvi krūvių vertės. Koncentracijos apskaičiavimo būdas pasirenkamas sąrašo lauke „Gaudyklių, kurių krūvis nurodytas, koncentracija“. Tame sąrašo yra dvi pasirinktys: pastovi koncentracija („Konstanta“) arba pastovi santykinė dalis visų tos rūšies gaudyklių atžvilgiu. Tą pastovią koncentraciją arba santykinę dalį reikia įvesti gretimame įvesties lauke.
- Valdymo elementai, kurie yra grupėje „Paviršinių gaudyklių pradinis užpildymas“, naudojami apibrėžiant visų rūšių paviršinių gaudyklių pradinę krūvinę būseną. Šie valdymo elementai yra tokie patys kaip tie, kurie yra grupėje „Tūrinių gaudyklių pradinis užpildymas“ (vienintelis skirtumas yra tas, kad vietoj tūrinės koncentracijos naudojamas paviršinis tankis).

16 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Pradinis krūvininkų pasiskirstymas“

11. Sluoksnio storis ir kiti parametrai

Parametrų redaktoriaus kortelėje „Sluoksnio storis ir kiti parametrai“ yra įvedami kiekvieno modeliuojamos daugiasluoksnės sistemos sluoksnio storis ir visi parametrai, kurių negalima priskirti nė vienai iš anksčiau minėtų kategorijų. Dabartinėje modelio versijoje (v0.75) šioje kortelėje yra tik du teksto įvesties laukai. Viename iš jų įvedamas sluoksnio storis (mikronais), o kitame – aukštadažnė dielektrinė skvarba (žr. 17 pav.).

The image shows a software window titled "Modelio parametrai" with a close button in the top right corner. The window contains several tabs: "Pradinis krūvininkų pasiskirstymas", "Skaičiavimo algoritmo parametrai", "Išoriniai parametrai", and "Fotogeneracijos parametrai". The "Skaičiavimo algoritmo parametrai" tab is active and contains sub-tabs: "Laisvųjų krūvininkų parametrai", "Skiriamųjų paviršių pralaidumas", "Tūrinių gaudyklių parametrai", and "Paviršinių gaudyklių parametrai". The "Sluoksnio storis ir kiti parametrai" sub-tab is selected. It features a text input field for "Sluoksnio storis (w)" with the value "1" and the unit "um". Below it is another text input field for "Aukštadažnė dielektrinė skvarba (eps_{shf})" with the value "11.8". On the left side, there is a "Sluoksnio skaičius:" field with "1", a button "Įterpti arba pašalinti sluoksnį", a "Pasirinktas sluoksnis:" dropdown menu with "1", and a "Sluoksnio pavadinimas" field with "01". Below the name field are two checkboxes: "Įterpti prieš funkcijos pavadinimą" and "Įterpti po funkcijos pavadinimo". At the bottom right of the window are three buttons: "Gera", "Atšaukti", and "Taikyti".

17 pav. Parametrų redaktoriaus kortelė „Sluoksnio storis ir kiti parametrai“

12. Modelio funkcijos

„Modelio funkcijos“ – tai dydžiai, kuriuos apskaičiuoja GraphiXT priedas ir kuriuos programa GraphiXT saugo kompiuterio atmintyje. Didžioji dalis tų dydžių nusako modeliuojamos fizikinės sistemos būseną. Kai kurie iš tų dydžių apibūdina patį modeliavimo procesą. Modelio funkcijas galima suskirstyti į dvi grupes pagal jų argumentus: $f(t)$ funkcijos, kurių vienintelis argumentas yra laikas t , ir $f(x, t)$ funkcijos, kurios priklauso nuo dviejų argumentų – koordinatės x ir laiko t . Toliau $f(t)$ funkcijos bus vadinamos „laiko funkcijomis“, o $f(x, t)$ funkcijos bus vadinamos „koordinatės funkcijomis“.

Be to, visas funkcijas galima suskirstyti į tris grupes pagal kitą požymį:

- 1) „globalinės“ funkcijos, kurios skaičiuojamos visada, nepriklausomai nuo modeliuojamos sistemos ypatybių („globalinių“ koordinatės funkcijų argumento vertės yra visų sistemą sudarančių sluoksnių mazgų koordinatės);
- 2) „sluoksnių“ funkcijos, kurios skaičiuojamos kiekvienam sluoksniui – net ir tuštiems sluoksniams („sluoksnių“ koordinatės funkcijų argumento vertės – tai to sluoksnių mazgų koordinatės);
- 3) „objektų“ funkcijos, kurios yra susietos su konkrečiais parametru rinkiniais, pvz., su konkrečios rūšies laisvaisiais krūvininkais (kadangi kiekvienas „objektas“ priklauso konkrečiam sluoksniui, tai „objekto“ koordinatės funkcijų argumento vertės yra to sluoksnių mazgų koordinatės).

Toliau yra pateikti visų funkcijų numatytieji pavadinimai. Tuose pavadinimuose yra nurodyti ir atitinkamų dydžių matavimo vienetai. Funkcijų matavimo vienetai užrašomi pagal tas pačias taisykles, kaip ir modelio parametru vienetai (žr. 2 skyrių „Įvadas į vartotojo sąsają“).

1) Globalinės funkcijos:

1a) Globalinės koordinatės funkcijos:

Pavadinimas	Prasmė
Erdv. kr. tankis (e/cm^3)	Erdvinio elektros krūvio tankis
El. laukas (V/cm)	Elektrinio lauko stipris (neigiama vertė atitinka elektrinį lauką, kuris nukreiptas koordinatės x mažėjimo kryptimi)
Potencialas (V)	Elektrostatinis potencialas
Laidumo srovės tankis (A/cm^2)	Visų rūšių laisvųjų krūvininkų dreifo ir difuzijos srovių tankių suma

1b) Globalinės laiko funkcijos:

Pavadinimas	Prasmė
Sluoksnių elektros krūvis (e/cm^2)	Visos sistemos elektros krūvis (t. y. erdvinio krūvio tankio integralo visos sistemos pločiu ir visų paviršinių krūvių tankių, išskyrus elektrodų krūvius, suma)
Pilnutinės elektros srovės tankis (A/cm^2)	Laidumo ir slinkties srovių tankių suma
Pilnutinė sluoksnių elektros srovė (A)	Pilnutinės srovės tankio ir elektrodo ploto sandauga
Išorinio įtampos šaltinio srovė (A)	Srovė i_R , kuri teka rezistoriumi R (žr. 15a ir 15b pav.)
Išorinės grandinės talpos srovė (A)	Srovė i_C , kuri teka kondensatoriumi C (žr. 15a ir 15b pav.)
Išorinio fotonų srauto tankis ($1/cm^2/s$)	Išorinio šviesos šaltinio fotonų skaičius ploto vienetui per laiko vienetą
Modeliavimo laiko žingsnis (s)	Paskutiniojo laiko žingsnio Δt vertė
Mod. laiko žingsnio skaič. trukmė (s)	Skaičiavimo trukmė, atitinkanti paskutinį modeliavimo laiko žingsnį
Modeliavimo gijų skaičius	Aktyvių modeliavimo gijų skaičius
Pilnutinė skaičiavimo trukmė (s)	Pilnutinė skaičiavimo trukmė
Pilnutinis modeliavimo laiko žingsnių skaičius	Pilnutinis modeliavimo laiko žingsnių skaičius
Kairiojo el.-do pavirš. kr. tankis (e/cm^2)	Kairiojo elektrodo paviršinio krūvio tankis
Dešiniojo el.-do pavirš. kr. tankis (e/cm^2)	Dešiniojo elektrodo paviršinio krūvio tankis
Išorinio įtampos šaltinio potencialas (V)	Potencialas U_2 (žr. 15a ir 15b pav.)
Įtampos kritimas išorinės grandinės varžoje (V)	Jeigu keičiamas dešiniojo elektrodo potencialas, tada potencialų skirtumas $U_1 - U_2$ (žr. 15a pav.) o jeigu keičiamas kairiojo elektrodo potencialas, tada $U_2 - U_0$ (žr. 15b pav.)
Sistemos kairiojo krašto potencialas (V)	Taško, kuris atitinka mažiausią koordinatės x vertę, potencialas (15a ir 15b pav. jis pažymėtas U_0)
Kairiojo krašto pav. kr. tankis (e/cm^2)	Pilnutinis sistemos kairiojo krašto paviršinio krūvio tankis (į jį įeina gaudyklų paviršinis krūvis ir „laisvasis“ paviršinis krūvis, kuris apibrėžtas 8 skyriuje)
Kairiojo krašto laisvojo pav. kr. tankis (e/cm^2)	Sistemos kairiojo krašto laisvojo paviršinio krūvio tankis

2) Sluoksnių funkcijos:

2a) Sluoksnių koordinatės funkcijos:

Pavadinimas	Prasmė
Intervalas tarp mazgų (μm)	Atstumas tarp mazgo, kuris yra duotajame taške, ir gretimo mazgo iš kairės (μm)

2b) Sluoksnių laiko funkcijos:

Pavadinimas	Prasmė
Mazgų skaičius sluoksnyje	Mazgų skaičius sluoksnyje (pirmasis ir paskutinis mazgai yra ant priešingų to sluoksnio kraštų)
Dešiniojo krašto pav. kr. tankis (e/cm^2)	Duotojo sluoksnio dešiniojo krašto paviršinio krūvio tankis (jį sudaro gaudyklių paviršinis krūvis ir „laisvasis“ paviršinis krūvis, kuris apibrėžtas 8 skyriuje). Jeigu šis kraštas atitinka dviejų modeliuojamų sluoksnių kontakto plokštumą (t. y. jeigu jis nėra visos sistemos dešinysis kraštas), tada yra įskaitomi abiejų sluoksnių paviršiniai krūviai toje plokštumoje. <i>Pastaba:</i> Į šį krūvį neįeina poliarizacinis paviršinis krūvis, kuris atsiranda dėl sluoksnių aukštadažnių dielektrinių skvarbų skirtumo.
Dešiniojo krašto laisvojo pav. kr. tankis (e/cm^2)	Duotojo sluoksnio dešiniojo krašto laisvojo paviršinio krūvio tankis. Jeigu šis kraštas atitinka dviejų modeliuojamų sluoksnių kontakto plokštumą, tada yra įskaitomi abiejų sluoksnių laisvieji paviršiniai krūviai toje plokštumoje.
Vid. erdv. kr. tankis (e/cm^3)	Vidutinis erdvinio krūvio tankis
Vid. el. laukas (V/cm)	Vidutinis elektrinio lauko stipris
Dešiniojo krašto potencialas (V)	Duotojo sluoksnio dešiniojo krašto potencialas
Deš. ir kair. kraštų potencialų skirtumas (V)	Duotojo sluoksnio dešiniojo ir kairiojo kraštų potencialų skirtumas
Vid. laidumo srovės tankis (A/cm^2)	Vidutinis laidumo srovės tankis, apskaičiuotas įskaitant visus to sluoksnio laisvuosius krūvininkus

3) Objektų funkcijos:

3a) Objektų koordinatės funkcijos:

Laisvuosius krūvininkus atitinkančios funkcijos (šioje lentelėje „A“ žymi krūvininkų pavadinimą, kurį užduoda vartotojas):

Pavadinimas	Prasmė
A: konc. ($1/\text{cm}^3$)	Krūvininkų „A“ koncentracija
A: sr. tankis (A/cm^2)	Krūvininkų „A“ laidumo srovės tankis, t. y. dreifo ir difuzijos srovių tankių suma, kurią nusako (1.2) formulė
A: dr. sr. tankis (A/cm^2)	Krūvininkų „A“ dreifo srovės tankis, t. y. (1.2) formulės pirmasis dėmuo
A: dif. sr. tankis (A/cm^2)	Krūvininkų „A“ difuzijos srovės tankis, t. y. (1.2) formulės antrasis dėmuo
A: judris ($\text{cm}^2/\text{V}/\text{s}$)	Krūvininkų „A“ judris
A: konc. gradientas ($1/\text{cm}^4$)	Krūvininkų „A“ koncentracijos išvestinė koordinatės atžvilgiu

Funkcijos, kurios atitinka laisvųjų krūvininkų dipolės rekombinacijos bei generacijos vyksmus ir virsmus, kurių metu pasikeičia krūvininko rūšis, bet nekinta jo krūvis. Šios funkcijos nusako duotojo vyksmo spartą, t. y. įvykių skaičių tūrio vienetą per laiko vienetą. Šių funkcijų numatytasis pavadinimas yra „V sparta ($1/\text{s}/\text{cm}^3$)“, kur „V“ yra duotojo vyksmo pavadinimas. Vyksmo pavadinimą užduoda vartotojas (t. p. žr. 2 skyrių „Įvadas į vartotojo sąsają“). Naudojant numatytuosius vyksmų pavadinimus, funkcijų pavadinimai yra tokie kaip lentelėje (šioje lentelėje „A“ ir „B“ žymi pirminių ir antrinių krūvininkų trumpuosius pavadinimus, kuriuos užduoda vartotojas):

Pavadinimas	Prasmė
A-B rekomb. sparta ($1/s/cm^3$)	Dvipolės rekombinacijos sparta
A-B gen. sparta ($1/s/cm^3$)	Dvipolės generacijos sparta
A → B sparta ($1/s/cm^3$)	Laisvųjų krūvininkų „A“ virtimo to paties krūvio laisvaisiais krūvininkais „B“ sparta
A-B fotogen. sparta ($1/s/cm^3$)	Fotogeneracijos sparta

Tūrines gaudykles atitinkančios funkcijos (šioje lentelėje „A“ žymi tūrinių gaudyklių pavadinimą, kurį užduoda vartotojas):

Pavadinimas	Prasmė
A: konc. ($1/cm^3$)	Tūrinių gaudyklių „A“ koncentracija
A: kr. tankis (e/cm^3)	Tūrinių gaudyklių „A“ erdvinio krūvio tankis, apskaičiuotas įskaitant visas tų gaudyklių krūvines būsenas

Tūrinių gaudyklių krūvines būsenas atitinkančios funkcijos (šioje lentelėje „A“ žymi tūrinių gaudyklių pavadinimą, kurį užduoda vartotojas, o „Q“ nusako tų gaudyklių krūvinę būseną):

Pavadinimas	Prasmė
A (Q): konc. ($1/cm^3$)	Tūrinių gaudyklių „A“, kurių krūvis yra lygus Q elementariųjų krūvių, koncentracija

Pagavimo į tūrines gaudykles ir išlaisvinimo iš jų vyksmus atitinkančios funkcijos. Šios funkcijos nusako duotojo vyksmo spartą, t. y. įvykių skaičių tūrio vienetė per laiko vienetą. Šių funkcijų numatytasis pavadinimas yra „V sparta ($1/s/cm^3$)“, kur „V“ yra duotojo vyksmo pavadinimas. Vyksmo pavadinimą užduoda vartotojas (t. p. žr. 2 skyrių „Įvadas į vartotojo sąsają“). Naudojant numatytuosius vyksmų pavadinimus, funkcijų pavadinimai yra tokie kaip lentelėje (šioje lentelėje „A“ ir „B“ žymi atitinkamai tūrinių gaudyklių ir laisvųjų krūvininkų trumpuosius pavadinimus, kuriuos užduoda vartotojas, o Q nusako tų gaudyklių pradinę krūvinę būseną):

Pavadinimas	Prasmė
A (Q) ← B pagav. sparta ($1/s/cm^3$)	Laisvųjų krūvininkų „B“ pagavimo į tūrines gaudykles „A“, kurių krūvis yra lygus Q elementariųjų krūvių, sparta (čia Q nusako gaudyklės krūvį prieš pagaunant krūvininką)
A (Q) → B išlaisv. sparta ($1/s/cm^3$)	Laisvųjų krūvininkų „B“ išlaisvinimo iš tūrinių gaudyklių „A“, kurių krūvis yra lygus Q elementariųjų krūvių, sparta (čia Q nusako gaudyklės krūvį prieš išlaisvinant krūvininką)

3b) Objektų laiko funkcijos:

Paviršines gaudykles atitinkančios funkcijos (šioje lentelėje „A“ žymi paviršinių gaudyklių pavadinimą, kurį užduoda vartotojas):

Pavadinimas	Prasmė
A: konc. ($1/cm^2$)	Paviršinių gaudyklių „A“ paviršinis tankis
A: kr. tankis (e/cm^2)	Paviršinių gaudyklių „A“ paviršinio krūvio tankis

Paviršinių gaudyklių krūvines būsenas atitinkančios funkcijos (šioje lentelėje „A“ žymi paviršinių gaudyklių pavadinimą, kurį užduoda vartotojas, o „Q“ nusako tų gaudyklių krūvinę būseną):

Pavadinimas	Prasmė
A (Q): konc. ($1/cm^2$)	Paviršinių gaudyklių „A“, kurių krūvis yra lygus Q elementariųjų krūvių, paviršinis tankis

Pagavimo į paviršines gaudykles ir išlaisvinimo iš jų vyksmus atitinkančios funkcijos. Šios funkcijos nusako duotojo vyksmo spartą, t. y. įvykių skaičių ploto vienetė per laiko vienetą. Šių funkcijų numatytasis pavadinimas yra „V sparta ($1/s/cm^2$)“, kur „V“ yra duotojo vyksmo pavadinimas. Vyksmo pavadinimą užduoda vartotojas (t. p. žr. 2 skyrių „Įvadas į vartotojo sąsają“). Naudojant numatytuosius vyksmų pavadinimus, funkcijų pavadinimai yra tokie kaip lentelėje (šioje lentelėje „A“ ir „B“ žymi atitinkamai paviršinių gaudyklių ir laisvųjų krūvininkų trumpuosius pavadinimus, kuriuos užduoda vartotojas, o Q nusako tų gaudyklių pradinę krūvinę būseną):

Pavadinimas	Prasmė
A (Q) <- B pagav. sparta (1/s/cm ²)	Laisvųjų krūvininkų „B“ pagavimo į paviršines gaudyklės „A“, kurių krūvis yra lygus Q elementariųjų krūvių, sparta (čia Q nusako gaudyklės krūvį prieš pagaunant krūvininką)
A (Q) -> B išlaisv. sparta (1/s/cm ²)	Laisvųjų krūvininkų „B“ išlaisvinimo iš paviršinių gaudyklių „A“, kurių krūvis yra lygus Q elementariųjų krūvių, sparta (čia Q nusako gaudyklės krūvį prieš išlaisvinant krūvininką)

Pastaba: Jeigu duotosios paviršinės gaudyklės yra abiejuose sluoksnio kraštuose, tada vietoj kiekvienos iš penkių pastarųjų funkcijų yra dvi funkcijos: po vieną funkciją kiekvienam duotojo sluoksnio kraštui. Funkcijos, kuri atitinka kairinį sluoksnio kraštą, pavadinimo pabaigoje yra simbolis „|<|“, o funkcijos, kuri atitinka dešinįjį sluoksnio kraštą, pavadinimo pabaigoje yra simbolis „|>|“.

Be to, kiekvieną „objekto“ koordinatės funkciją atitinka laiko funkcija, kurios vertė yra lygi tos koordinatės funkcijos vidutinei vertei tame sluoksnyje. Tos laiko funkcijos pavadinimas skiriasi nuo atitinkamos koordinatės funkcijos pavadinimo tik tuo, kad į jį įterpta santrumpa „vid.“ (pvz., „A: vid. konc. (1/cm³)“).

Į „sluoksnių“ ir „objektų“ funkcijų pavadinimus galima įterpti atitinkamo sluoksnio pavadinimą. Tam naudojami žymimieji laukeliai „Įterpti prieš funkcijos pavadinimą“ ir „Įterpti po funkcijos pavadinimo“, kurie matomi kai kurių parametro redaktoriaus kortelių kairiajame krašte, žemiau sluoksnio pavadinimo (pvz., žr. 1 pav.). Ši pasirinktis gali būti naudinga, pvz., jeigu sistemą sudaro daugiau negu vienas sluoksnis ir skirtinguose sluoksniuose yra vienaarūšių krūvininkų, kurių pavadinimai yra vienodi. Pvz., jeigu yra du sluoksniai ir kiekviename iš jų yra krūvininkai, kurių pavadinimas „Elektronai“, tada modelio funkcijų sąrašė, kuris atsidero įvykdžius GraphiXT meniu komandą „Pasirinkti f(x, t=const) funkcijas...“, yra dvi funkcijos vienodu pavadinimu „Elektronai: konc. (1/cm³)“. Jeigu atitinkamų sluoksnių pavadinimai yra skirtingi, tada, įterpus sluoksnio pavadinimus į funkcijų pavadinimus, visų funkcijų pavadinimai irgi taps skirtingi, todėl bus lengviau atskirti vieną nuo kitos funkcijas, kurios atitinka skirtingus sluoksnius. Numatytasis sluoksnio pavadinimas yra sluoksnio numeris, t. y. C formato specifikacija „%02d“. Toks užrašas reiškia sveikąjį skaičių, kurį sudaro mažiausiai 2 skaitmenys, o jeigu tas skaičius yra mažesnis už 10, tada jo pirmasis skaitmuo yra 0 (apie formato specifikacijas rašoma 2 skyriuje „Įvadas į vartotojo sąsają“). Tada, pažymėjus laukelį „Įterpti prieš funkcijos pavadinimą“, minėtųjų dviejų funkcijų pavadinimai taptų „01: Elektronai: konc. (1/cm³)“ ir „02: Elektronai: konc. (1/cm³)“. Pažymėti užtenka tik vienoje kortelėje.

Pastabos: Pakeitus žymimojo laukelio „Įterpti prieš funkcijos pavadinimą“ arba „Įterpti po funkcijos pavadinimo“ būseną, visų atitinkamo sluoksnio funkcijų pavadinimai tampa lygūs numatytiesiems pavadinimams. T. y. prarandami funkcijų pavadinimų pakeitimai, kurie buvo padaryti programoje GraphiXT.exe (išlieka tik funkcijų pavadinimų pakeitimai, kurie buvo padaryti parametų redaktoriuje).

Pakeitus parametų rinkinio pavadinimą, tą rinkinį atitinkančių funkcijų pavadinimai taip pat tampa lygūs numatytiesiems pavadinimams.

Pasikeitus modelio funkcijų skaičiui arba funkcijų prasmėms (pvz., įterpus arba pašalinus sluoksnį arba parametų rinkinį), visų sluoksnių funkcijų pavadinimai tampa lygūs numatytiesiems pavadinimams.