

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Факультет (навчально-науковий інститут) Радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

Кафедра фізичної і біомедичної електроніки та комплексних інформаційних технологій

До захисту допущено

Кафедрою фізичної і біомедичної електроніки та комплексних інформаційних технологій протокол № _____ від _____

завідувач кафедри _____
(підпис)

Сергій БЕРДНИК
(ім'я, прізвище)

« ____ » _____ 202_ р.

Кваліфікаційна робота
здобувача другого (магістерського) рівня вищої освіти
(першого (бакалаврського) / другого (магістерського))

ПЛАНАРНИЙ АКТИВНИЙ ЕЛЕМЕНТ ІЗ МЕЗА-СТРУКТУРОЮ НА
ОСНОВІ ВАРИЗОННИХ ШАРІВ INGAN

(назва роботи)

Спеціальність (спеціалізація) 105 Прикладна фізика та наноматеріали
(код та найменування спеціальності; спеціалізації спеціальності - за наявності)

Освітня програма Радіофізика та електроніка
(назва освітньої програми)

Виконавець _____
(підпис) Євген ЛЮТІН
(ім'я, прізвище)

Науковий керівник _____
(підпис) Валерій ЗОЗУЛЯ
(ім'я, прізвище)

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

Факультет Радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем
Кафедра фізичної і біомедичної електроніки та комплексних інформаційних технологій

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Освітньо-професійна програма Радіофізика та електроніка

Рівень вищої освіти другий (магістерський)

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Сергій БЕРДНИК
підпис ініціали, прізвище

“ _____ ” _____ 2025_ року

З А В Д А Н Н Я НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ

_____ Лютін Євген Вікторович

(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи Планарний активний елемент із меза-структурою на основі варізонних шарів InGaN

керівник роботи Зозуля Валерій Олександрович, доктор філософії,
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від “24” жовтня 2025 року № 1401-5/3957

2. Строк подання студентом роботи 10 грудня 2025 р.

3. Перелік питань, які потрібно розробити:

3.1. Аналіз публікацій за предметом досліджень, огляд останніх досягнень у створенні контактів до нітридних сполук.

3.2. Виконання моделювання планарних елементів з варізонним катодом

3.3 Отримання статичних та шумових характеристик структури.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Аналіз наукових публікації за предметом досліджень
2	Написання огляду літератури за проблемою досліджень
3	Виконання моделювання планарних елементів з варізонним катодом
4	Отримання статичних та шумових характеристик структури
5	Аналіз отриманих результатів
5	Оформлення дипломної роботи

5. Дата видачі завдання 9 вересня 2025 р.

Студент

підпис

Євген ЛЮТІН

ініціали, прізвище

Керівник роботи

підпис

Валерій ЗОЗУЛЯ

ініціали, прізвище

АНОТАЦІЯ

Лютін Є.В. Планарний активний елемент із меза-структурою на основі варизонних шарів InGaN. Дипломна робота магістра. Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, Харків, 2025. 46 с., 19 рис., 28 джерел.

GAN, ВАРІЗОННИЙ ШАР, УДАРНА ІОНІЗАЦІЯ, ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, ЕФЕКТ САМОНАГРІВАННЯ.

Об'єкт дослідження: планарні варизонні діоди з меза-структурою.

Предмет дослідження: кінетичні процеси переносу носіїв заряду в планарних діодах із меза-структурою та складною просторовою геометрією..

Мета роботи: числове моделювання кінетичних процесів у планарних діодах із меза-структурою з урахуванням ударної іонізації та ефекту саморозігрівання

Методи дослідження: застосовано багаточастинковий метод Монте-Карло, самоузгоджений із числовим розв'язанням рівняння Пуассона для отримання просторового розподілу потенціалу, а також синхронізований із розв'язанням рівняння теплопровідності для врахування саморозігріву.

Результати дослідження: : розроблено та програмно реалізовано модель планарного GaN-діода з варизонним катодом, у якому вздовж контактної області задано неоднорідний розподіл складу InGaN. Катод реалізовано у вигляді меза-структури. Отримано статичні та шумові характеристики діода.

Отримані результати можуть бути використані під час проєктування перспективних шумових та генераторних діодів..

ABSTRACT

Liutin Y.V. Planar active element with a mesa structure based on graded-gap InGaN layers. Master Thesis. V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2025. P. 46, Fig 19, Ref. 28.

GAN, GRADED GAP LAYER, IMPACT IONIZATION, SELF-HEATING EFFECT

Object of research: planar graded-gap diodes with a mesa structure.

The subject of research: carrier transport kinetics in planar diodes with a mesa structure and complex spatial geometry.

Aim of the work: numerical modelling of carrier transport and kinetic processes in planar mesa-structured diodes, taking into account impact ionization and self-heating effects.

Research approach: ensemble Monte Carlo technique was employed, self-consistently coupled with the numerical solution of the Poisson equation to obtain the potential distribution, and synchronized with the solution of the heat-conduction equation to account for self-heating.

Research results: a computational model of a planar GaN diode with a graded-gap cathode was developed and implemented. The cathode features a non-uniform InGaN composition profile along the contact region and is realized as a mesa structure. Static and noise characteristics of the diode were obtained.

The results can be used for the design and prototyping of prospective noise or generator diodes.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	7
1. НІТРИДНІ НАПІВПРОВІДНИКИ ТА ПРИЛАДИ НА ЇХ ОСНОВІ.....	8
1.2 Загальні відомості про сполуки нітридів III групи та сфери їх застосування.....	10
1.3 Матеріали на основі InN та твердий розчин InGaN	11
1.4 Переваги та обмеження сполук нітридів III групи у напівпровідниковій електроніці.....	12
1.5 Підкладки та буферні шари.....	14
1.6 Технологічні основи формування структур.....	16
1.7 Керування тепловими процесами.....	18
2. МЕТОД МОДЕЛЮВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ПРИЛАДІВ З МІЖДОЛИННМ ПЕРЕНЕСЕННЯМ ЕЛЕКТРОНІВ.....	20
2.1 Обґрунтування математичного підходу та методу моделювання.....	21
2.2 Вибір параметрів варизонної напівпровідникової сполуки InGaN.....	24
2.3 Визначення розподілу електричного потенціалу та температури в структурі з варизонними шарами InGaN.....	27
3. МОДЕЛЮВАННЯ РОБОТИ ПЛАНАРНИХ СТРУКТУР З ВАРИЗОННОЮ МЕЗА-СТРУКТУРОЮ.....	31
3.1 Структура та геометрія планарного діода з варизонною меза- структурою.....	31
3.2.1 Зонна діаграма варизонної меза-структури.....	33
3.2.2 Розподіл напруженості електричного поля.....	35
3.2.3 Ефект саморозігрівання у структурі.....	36
3.2.4 Воль-амперна характеристика пристрою.....	38
3.2.5 Шумові характеристики діоду.....	39
ВИСНОВКИ.....	42
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	43

ВСТУП

Активні діодні елементи, що працюють на основі ефекту переносу електронів, привертають значну увагу дослідників завдяки своїй цікавій фізиці та здатності виконувати одразу кілька важливих функцій. По суті, це не просто напівпровідникові структури, а справжні універсальні елементи, які можуть і генерувати коливання, і слугувати підсилювачами, і забезпечувати різні режими модуляції, а в окремих випадках навіть виступати джерелом ультразвуку [1]. Така багатофункціональність робить їх дуже привабливими для широкого спектра сучасних високочастотних застосувань.

Втім, разом із цими перевагами існують і певні труднощі, які не можна ігнорувати. Зокрема, прилади переносу електронів (TED) демонструють досить помітне зменшення змінної складової потужності струму на тих частотах, що пов'язані з величиною, оберненою до часу міждолинного переносу носіїв.

Саме тому виникає потреба у створенні нових структур, які б могли поєднати в собі переваги класичних TED-пристроїв, але без їхніх ключових недоліків. У цьому контексті в роботі запропоновано активний елемент на основі GaN, орієнтований на роботу у широкому частотному діапазоні. Його структура побудована на основі провідного каналу та спеціально сформованого катода у вигляді меза-структури, що базується на варізонному шарі InGaN.

Одним із ключових питань, яке розглядається в дослідженні, є формування необхідного розподілу електричного поля в катодній області діода. Адже саме від цього залежить багато характеристик пристрою, включно зі здатністю працювати в генераторних та шумових режимах. У роботі детально показано, що за належного вибору профілю легування та параметрів варізонного шару можна досягти майже рівномірного поля в каналі, що є досить важливою умовою для стабільної та прогнозованої роботи приладу.

Щоб розібратися у поведінці діода більш глибоко, було проведено двовимірне числове моделювання методом Монте-Карло. Це дозволило врахувати такі складні фізичні процеси, як ударна іонізація та саморозігрівання, які особливо суттєво проявляються в GaN-структурах на високих напругах. У результаті моделювання вдалося отримати ВАХ діода та проаналізувати спектральну густину потужності шуму для різних варіантів легування меза-структури та каналу.

Проведений аналіз показує, що правильно підібрана структура може функціонувати як широкосмуговий генератор шумових сигналів так і генератор коливань на частотах, близьких до величини, оберненої часу прольоту носіїв через канал. Це відкриває можливість використання таких діодів у нових сферах, де потрібне високочастотне шумове або генераторне обладнання, і робить їх перспективними для подальших розробок у галузі сучасної електроніки.

1. НІТРИДНІ НАПІВПРОВІДНИКИ ТА ПРИЛАДИ НА ЇХ ОСНОВІ

1.1 Актуальність дослідження

Широкозонні сполуки III-нітридів, насамперед GaN та InN, поєднують високі критичні електричні поля, значні швидкості насичення носіїв і термостійкість, що робить їх базою для сучасної силової та ВЧ/СВЧ електроніки, а також короткохвильової оптоелектроніки.[2] У цих застосуваннях ключовими є підвищена щільність потужності, робота на більших частотах при меншій площі кристала та зниження втрат у ввімкненому стані порівняно з традиційними платформами. Твердий розчин $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ забезпечує керування шириною забороненої зони та пов'язаними електрофізичними параметрами без зміни системи, що відкриває можливість цілеспрямовано налаштовувати активні та функціональні шари приладових структур.[1]

Важливою є можливість поступово змінювати склад InGaN по товщині: такий профіль без різких меж дозволяє задати потрібний розподіл потенціалу й електричного поля.[6] Такий підхід узгоджується з вимогами до стабільності параметрів за підвищених напруг і струмів, а також з потребою у відтворюваних матеріальних константах для коректного моделювання та проектування. З огляду на підкладку сапфір, важливо враховувати невідповідність кристалічної решітки та різницю в коефіцієнтах теплового розширення – це слід закладати в проектування і технологію.[1]

Для сполук нітридів III групи із кристалічною решіткою типу вюрцит суттєвими є поляризаційні ефекти спонтанної та п'єзоелектричної природи. У градуйованих InGaN-шарах вони проявляються як об'ємні та інтерфейсні поляризаційні заряди, що впливають на вигин зон і транспорт носіїв. У рамках цієї роботи такі ефекти враховуються на рівні огляду як фактор, що визначає підходи до вибору складу та профілю шарів.

Незважаючи на значний прогрес матеріалознавства та епітаксії, зберігаються обмеження, пов'язані з дефектно-пастковими станами,

варіабельністю питомого опору контактів і складністю реалізації стабільного р-типу, що впливають на надійність і відтворюваність параметрів.

1.2 Загальні відомості про сполуки нітридів III групи та сфери їх застосування

Сполуки нітридів III групи (AlN, GaN, InN та їх тверді розчини) належать до широкозонних напівпровідників. Високе критичне електричне поле, швидка насичувана дрейфова швидкість і термостійкість зумовлюють придатність до високих напруг і частот. Для кількісної оцінки використовують відомі показники якості силової та високочастотної електроніки (критерії Keyes, Johnson, Baliga), які дозволяють коректно порівнювати платформи між собою.

У мікрохвильовій техніці гетероструктури на GaN демонструють підвищені вихідні потужності та щільності потужності порівняно з традиційними матеріалами.[2] Вирішальну роль відіграє формування двовимірного електронного газу на межі гетерошарів, що забезпечує низький опір у ввімкненому стані разом із високою пробивною напругою. Типові діапазони площинної концентрації носіїв та рухливості наведено у відповідних оглядах і експериментальних роботах.

В оптоелектроніці прямий міжзонний перехід у GaN, AlGaN та AlN забезпечує ефективне випромінювання і прийом у короткохвильовій області. Регулювання складу твердих розчинів, зокрема $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, дозволяє налаштовувати спектр випромінювання та чутливість без зміни кристалічної хімії системи.

Важливою перевагою є робота за підвищених температур навколишнього середовища, де кремнієві рішення швидко втрачають ефективність. Це відкриває ніші у силових перетворювачах і високотемпературних вузлах радіоелектроніки, а також у компактних високочастотних модулях з підвищеним ККД.

З огляду на ці властивості, сполуки нітридів III групи посідають провідні позиції у силовій електроніці, РЧ/СВЧ підсиленні та короткохвильовій оптоелектроніці. Подальші підрозділи подають короткі довідки щодо окремих матеріалів, їх переваг та обмежень, а також технологічні аспекти формування структур і контактів.

1.3 Матеріали на основі InN та твердий розчин InGaN

Нітрид індію (InN) та тверді розчини $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ застосовують для керування шириною забороненої зони і пов'язаними електрофізичними параметрами. Енергія міжзонного переходу в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ змінюється зі складом з вираженою кривиною залежності, що лежить в основі спектрального налаштування матеріалу для короткохвильових приладів.[1]

Для більшості матеріальних констант $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ у діапазоні $0 \leq x \lesssim 0.3$ відхилення від значень GaN не перевищує приблизно 10–15 %. Виняток становлять ширина забороненої зони E_g та ефективна маса електрона m^* , для яких складова залежність суттєвіша. Зведені числові залежності наведено в таблиці параметрів нижче.

Параметр	Символ (одиниці)	InN	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$
Параметри решітки	$a[\text{\AA}]$	3.548	
	$c[\text{\AA}]$	5.760	
Електронна ефективність	m_c^*/m_0	0.115	0.22–0.105x
Маса в точці Г			
Потенціал акустичної деформації	$E_{ac}[\text{eV}]$	7.1	9.2-2.1x

Діелектрична проникність:			
Низька частота	ϵ_s	15.3	$10.4+4.9x$
Висока частота	ϵ_∞	8.4	$5.7+2.93x$

Формування шарів з In потребує температурного компромісу через нестійкість InN за типових температур осадження GaN. Перші плівки $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ з часткою In близько 23% отримували приблизно за 800 °C; подальші роботи показали діапазон $x \approx 0.07\text{--}0.33$ за 720–850 °C із регулюванням потоків реагентів. Тобто режими температури і часу росту критично впливають на збереження складу та уникнення втрат індію.

Зі збільшенням вмісту індію зростає невідповідність кристалічних решіток $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ і GaN. Це вимагає контролю механічних напружень і щільності структурних дефектів. Оптимізація початкових буферних шарів і умов повторного нарощування дає змогу знижувати щільність дислокацій. Для структур на сапфірових підкладках після коалесценції островців досягають рівнів приблизно $\sim 10^7\text{--}10^8 \text{ см}^{-2}$, що показує: якість шарів залежить від правильно вибраних буферних шарів і режимів росту.

Електричні та оптичні характеристики $\text{InN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ істотно залежать від складу і напруженого стану. Саме E_g і m^* переважно визначають придатність шарів до цільових функцій приладу. У розрахунках транспорту за невеликих x часто припускають близькість більшості параметрів до значень GaN, тому в моделях за малих x зазвичай коригують лише E_g та m^* , а решту параметрів беруть як у GaN.

У багат шарових системах склад $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ можна змінювати поступово по товщині. Такий плавний профіль без різких меж дозволяє задати потрібний розподіл потенціалу та електричного поля в структурі.[6]

1.4 Переваги та обмеження сполук нітридів III групи у напівпровідниковій електроніці

Сполуки нітридів III групи (AlN, GaN, InN та їх тверді розчини) працюють на високих напругах і струмах та придатні до радіо- і мікрохвильових режимів.[1] Це пояснюється високим критичним електричним полем, високою максимальною швидкістю руху носіїв у сильному електричному полі і термостійкістю, що дає низькі втрати у ввімкненому стані разом із високою пробивною напругою і підвищеною щільністю вихідної потужності.

Разом із перевагами існують обмеження. Пасткові стани біля поверхні та на інтерфейсах зменшують ефективну концентрацію носіїв у каналі, викликають гістерезис і дрейф порога.[1] Це вимагає контролю чистоти поверхні, обробки поверхні та способу створення межі між шарами. Важливо враховувати самонагрівання активної області: тепловиділення при великих струмах і напругах обмежує тривалу роботу на граничних режимах, тому матеріали підкладки і діелектричних покриттів добирають з урахуванням теплового шляху відведення тепла.

Контакт вважають омичним, коли перехід електронів через межу метал-напівпровідник майже не гальмується: бар'єр настільки малий, що носії проходять тунелюванням або завдяки полю. Це досягають сильним n-легуванням тонкого приповерхневого шару, що звужує збіднену область, і добором металу та чистої, стабільної межі з малою ефективною висотою бар'єра. Для вюрцитних нітридів додаються поляризаційні заряди на межах шарів; вони змінюють вигин зон біля контакту і можуть як зменшити, так і збільшити опір залежно від складу та напружень у шарі. На практиці це вирішують тонким налаштуванням легування та обробки поверхні перед металізацією - так зменшують контактний опір і підвищують відтворюваність результатів.

Матеріалознавчі чинники також важливі – невідповідність кристалічних решіток, механічні напруження та дефектність впливають на рухливість і кількість носіїв у спокійному стані. Тому потрібні узгоджені умови епітаксії та виважений вибір буферних шарів і режимів росту.

1.5 Підкладки та буферні шари

Вибір підкладки та інженерія буферних шарів визначають структурну якість і стабільність параметрів гетероструктур на основі сполук нітридів III групи. Технологічний прогрес у конструюванні реакторів металоорганічної та молекулярно-променевої епітаксії, поєднаний з оптимізацією ростових процесів, забезпечив можливість реалізації буферних шарів для нівелювання невідповідності параметрів кристалічних решіток епітаксійного матеріалу та підкладки, зокрема підкреслюється зменшення швидкостей росту і робочих товщин, що супроводжувало перехід до високоякісних шарів GaN.

Сапфір (Al_2O_3) - Для GaN на сапфірі застосування тонкого низькотемпературного буфера (AlN або GaN) істотно зменшує дефектність і покращує морфологію: показано зниження фонові концентрації електронів, зростання рухливості, збільшення інтенсивності міжзонної фотолюмінесценції та зниження напівширини піків на рентгенодифракційних профілях, описано перехід від острівцевого до переважно двовимірного росту за наявності AlN-буфера. Оптимальні параметри буфера наведено для GaN на сапфірі: типові товщини порядку ~ 200 Å та температури росту $\sim 450\text{--}600$ °C. Додатково попередня обробка поверхні сапфіру (нітридування NH_3 або надтонкий шар SiN_x перед буфером) зменшує щільність дислокацій епішарів приблизно на два порядки, із забезпеченням зрошування епітаксійних острівців у суцільні шари з густиною дислокацій $\sim 10^7\text{--}10^8$ cm^{-2} .

SiC та інші підкладки - Для структур AlGaIn/GaN на SiC відзначають покращення мікроструктурних показників у підкладках і нижчу дефектність у

плівках, що є підґрунтям для високочастотних режимів роботи, водночас експерименти з HEMT на шаблонах AlN/SiC і на сапфірі демонструють неоднакову зовнішню крутизну вольт-амперних характеристик і відмінний внесок пасткових станів за умови порівнянних пробивних напруг у приладах з малими значеннями довжини затворного електрода. Прикладові теплові та теплотехнічні моделі показують важливість урахування послідовних шарів «GaN — перехідний шар — SiC/діамант — тепловідвідна структура» для мінімізації сумарного термоопору та забезпечення високих щільностей відведення тепла.

Інтерфейсний термічний опір R описує, наскільки важко теплу проходити через межу двох шарів. Це величина, яка характеризує саме контакт між матеріалами, а не їх об'ємні властивості. Зручно пов'язувати R із теплопровідністю межі G через просте співвідношення $R = 1/G$. [3] Одиниці вимірювання різні: R подається в $\text{м}^2 \cdot \text{К} \cdot \text{Вт}^{-1}$, тоді як G вимірюється у $\text{Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$.

Для базової конфігурації цієї роботи було прийнято довідкові параметри для пари GaN–сапфір. Значення теплопровідності межі складає приблизно $G \approx 1 \cdot 10^7 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$, що відповідає опору $R \approx 1 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2 \cdot \text{К} \cdot \text{Вт}^{-1}$. Саме ці числа і використовуються далі як вихідні при теплових оцінках.

Окремо враховано тепловий контакт у зонах металізації, тобто на межі метал–GaN. Для цієї межі у розрахунках узято $G \approx 2 \cdot 10^8 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$, звідки випливає значно менший опір $R \approx 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К} \cdot \text{Вт}^{-1}$. [4] Це природно, адже суцільний метал краще відводить тепло від локально нагрітих ділянок, зокрема під контактними площадками.

Щоб показати масштаб відмінностей, наведено також орієнтир для пари GaN–алмаз. Для цього випадку в літературі подають ще вищі значення G та відповідно нижчі R . Тобто тепловідвід через таку межу є ефективнішим, ніж у системі на сапфірі, що й пояснює зацікавленість у композитних рішеннях з алмазом. [4]

Підкладки SiC загалом характеризуються кращою теплопровідністю, ніж сапфір, однак у межах цієї роботи базовою платформою обрано саме сапфір. Тому всі числові значення R у подальших розрахунках наведено для конфігурації GaN–сапфір, а порівняння з іншими підкладками використовується лише як довідковий контраст.

Буфер зменшує напруження, пов'язані з невідповідністю решітки та коефіцієнтів термічного розширення, і впливає на транспортні властивості підканальних областей. Окремо підкреслюється, що оптимізація буфера/підкладки корелює з показниками рухливості та фонові провідності ненавмисно легovanого GaN, а також із рівнем протікань через буфер, які можуть посилюватись через особливості омічних контактів і мінімізуватись технологічними прийомами (екрануванням, легуванням).

Узагальнюючи, у випадку сапфірових підкладок застосування тонких низькотемпературних буферних шарів (AlN/GaN) у поєднанні з попередньою підготовкою поверхні забезпечує істотне зменшення густини дислокацій та поліпшення морфологічних характеристик. Для підкладок SiC додатковими перевагами є висока теплопровідність матеріалу та редукція низькочастотних шумових компонент, проте технологічні параметри формування контактних систем і буферних шарів залишаються визначальними чинниками стабільності експлуатаційних характеристик. Показники, отримані на різних підкладках і шаблонах (AlN/SiC vs сапфір), узгоджено трактуються через відмінності дефектної підсистеми та теплових шляхів відведення.

1.6 Технологічні основи формування структур

Епітаксійні гетероструктури сполук нітридів III групи формують з урахуванням керування напруженнями, складу бар'єрних і активних шарів та мінімізації дефектів біля поверхні. Після росту застосовують планарні процеси ізоляції, фотолітографії, травлення, пасивації та металізації. Така

послідовність забезпечує відтворювані високочастотні показники та роботу при підвищених напругах [5].

Стабільність електричних характеристик чутлива до діелектричного прошарку над каналом. У MIS-архітектурах використовують SiO_2 , SiN або TiO_2 : ці шари зменшують витік через затвор і підвищують напругу пробою. За збільшення відстані «затвор-стік» пробій зростає нелінійно; з практики відзначають вищі рівні пробою для TiO_2 за прийнятного опору увімкненого стану, тоді як SiN часто дає збалансований компроміс для силових режимів. У тонкобар'єрних структурах каталітично осаджений SiN підвищує площинну концентрацію носіїв і зменшує листовий опір каналу, що важливо для ВЧ/СВЧ-роботи.

Позитивну напругу порогу (E-mode) отримують локальною модифікацією області під затвором. Застосовують обробку фторовмісною плазмою з подальшим швидкісним відпалом за температурами нижче 500°C . Це дозволяє зберегти керованість струмом і низькі витоки у вимкненому стані без помітного погіршення частотних показників.

Омічні контакти до n-типу в системах $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ формують багатошаровими стековими металізаціями на основі Ti/Al з бар'єрними та покривними шарами, типово $\text{Ti}/\text{Al}/\text{Ti}/\text{Au}$ або $\text{Ti}/\text{Al}/\text{Mo}/\text{Au}$. Після оптимізованого відпалу отримують низький контактний опір на сапфірі. Водночас спостерігається чутливість до типу підкладки та мікроструктури межі: локальні провідні зони, пов'язані з дислокаціями, створюють дискретні струмові шляхи й знижують довговічність під навантаженням. Це підкреслює необхідність контролю температурно-часових режимів відпалу і складу металів.

Для приладів з пробивною напругою нижче приблизно 1 кВ внесок контактного опору є визначальним у повному опорі увімкненого стану. За більших пробивних напруг домінує опір активного каналу. Сплавні контактні системи можуть посилювати витоки через буферні шари, їх зменшують

екрануванням легуванням Si або за рахунок наявного двовимірного електронного газу під каналом.

Для n-InGaN застосовують ті самі підходи, що й для n-GaN, з підбором режимів відпалу з урахуванням складу In та напруженого стану шару; низькі значення контактного опору досяжні за високого поверхневого n-легування й чистої межі метал-напівпровідник.[1] Для p-InGaN в оптоелектронних структурах поширені прозорі провідні оксиди (ITO) як контактний шар, що зменшує серійний опір і зберігає пропускання, або багат шарові Ni/Au з подальшою оптимізацією оптичних та електричних параметрів.

Вольт-амперні характеристики контактів чутливі до стану інтерфейсу і поляризаційних ефектів у вюрцитних нітридах: фіксація рівня Фермі та спонтанна з п'єзоелектричною поляризації змінюють вигин зон і впливають на висоту ефективного бар'єра. Коректний облік цих чинників потрібний для стабільного порогу і малих витоків через затвор.

Технологічний маршрут для структур AlGaIn/GaN та InGaIn підсумовується так: контроль складу й товщини бар'єрних шарів, введення діелектричної пасивації для зменшення витоків і підвищення пробою, локальна інженерія області затвора для E-mode, омічні контакти з оптимізованими стековими системами і керованим відпалом, а також підтримання чистої, стабільної межі метал-напівпровідник з урахуванням поляризаційних ефектів. Сукупно це зменшує опір увімкненого стану та підтримує високі пробивні напруги без втрати частотних властивостей.

1.7 Керування тепловими процесами

Самонагрівання виникає через перетворення електричної потужності в теплову енергію, що виділяється в наслідок джоулевого розсіювання у активних шарах. Температура в структурі визначається сумою теплових опорів на шляху від каналу до тепловідводу: канал → діелектрик і металізація → підкладка → тепловідвідна структура [3].

На рівні матеріалів основними важелями є вибір підкладки та буферних шарів, які визначають як об'ємну теплопровідність, так і R на межі з GaN. Для сапфіру ефективність тепловідведення підвищують за рахунок чистої поверхні перед буфером, коректних режимів росту тонкого низькотемпературного буфера AlN або GaN та контролю залишкових напружень у наступних шарах. Зменшення дефектності й оптимальна мікроструктура знижують локальні теплові «гарячі точки» та небажані витоки через буфер.

На рівні тонкоплівкових шарів ізоляційні захисні покриття впливають на тепловий шлях. SiN і SiO₂ мають нижчу теплопровідність порівняно з металом, тому їх товщину і положення відносно активної області добирають так, щоб не погіршувати відведення тепла. Для зон під контактними площадками ключовим є малий R на межі метал–GaN та достатня товщина металізації, що зменшує тепловий опір поширення в площині.

На рівні геометрії важливо знизити локальну щільність тепловиділення. Це досягають вибором ширини мези, відстаней між меза-областями і розмірів контактних площадок, щоб теплові потоки мали коротший шлях до металу і підкладки. Із збільшенням розмірів керуючих електродів самонагрівання посилюється, тому приладні топології проектують з урахуванням максимальних локальних температур і допустимих перепадів температури на малій відстані.

Оцінювання температури виконують оптичними і електричними методами. Використовують тепловізор для загальних карт температури, мікрораманові вимірювання щоб побачити температуру в дуже малих ділянках, а також електричні датчики, що фіксують зміну опору чи ВАХ під час нагріву. Дані таких вимірювань використовують для підбору R і G у теплових моделях і для валідації розрахунків.

З урахуванням наведеного у подальших розрахунках приймаються сталі R для меж GaN–сапфір та метал–GaN, а також геометричні параметри, що обмежують кількість тепла на одиницю площі в конкретному місці. Це

дозволяє кількісно оцінювати максимально допустимі робочі режими без виходу за температурні межі матеріалів.

2. МЕТОД МОДЕЛЮВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ПРИБАДІВ З МІЖДОЛИННМ ПЕРЕНЕСЕННЯМ ЕЛЕКТРОНІВ

2.1 Обґрунтування математичного підходу та методу моделювання

Процеси, що визначають роботу твердотільних надвисокочастотних приладів, відбуваються на часових інтервалах, співставних із часом релаксації електронів в імпульсному просторі. За таких масштабів часу стан електронного газу описується суттєво нерівноважною функцією розподілу $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$, яка чутливо реагує на зміну електромагнітного поля всередині приладу. Для аналізу кінетичних характеристик діода Ганна на основі варизонних шарів InGaN необхідно мати змогу відтворювати цю функцію в кожний момент часу.

Зміна функції розподілу задається кінетичним рівнянням Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_E + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{3T} \quad (2.1)$$

де перший доданок описує зміну стану носіїв під дією зовнішнього поля, а другий враховує дію процесів розсіяння. Польовий член

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_E = -(\vec{v} \nabla_{\vec{r}} f + \vec{k} \nabla_{\vec{k}} f)$$

характеризує переміщення електронів у нерівномірному полі, тоді як інтеграл зіткнень записують у вигляді

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{3T} = \hat{I}_{\vec{k}}^{EK} f(\vec{k}, \vec{r}, t) + \hat{I}_{\vec{k}}^{EE} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \quad (2.2)$$

Для приладів, що працюють у довгохвильовій області терагерцового діапазону, приймають квазікласичний опис: електрон розглядається як частинка з ефективною масою, зарядом та хвильовим вектором. Тоді траєкторія носія у фазовому просторі визначається системою

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \quad (2.3)$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = e \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

У випадку InGaN враховується непараболічна форма зони провідності, що змінює співвідношення між квазіімпульсом і швидкістю, проте сам вигляд рівнянь (2.3), (2.4) залишається незмінним.

Функція розподілу використовується для переходу від опису окремих частинок до макроскопічних параметрів середовища. Кількість носіїв у малому елементі фазового простору

$$dn(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k} d\vec{r} \quad (2.5)$$

Звідси отримують вирази для густини концентрації

$$n(\vec{r}, t) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k} \quad (2.6)$$

дрейфової швидкості

$$\vec{v}_d(\vec{r}, t) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} \frac{\vec{v}}{n(\vec{r}, t)} f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k} \quad (2.7)$$

та середньої кінетичної енергії

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} \frac{E(\vec{k}, \vec{r}, t)}{n(\vec{k}, \vec{r}, t)} f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k} \quad (2.8)$$

Тоді густина струму, що створюється носіями заряду, має вигляд

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -en(\vec{r}, t)\vec{v}_d(\vec{r}, t) \quad (2.9)$$

де знак «мінус» враховує негативний заряд електрона.

У реальних напівпровідниках час між двома послідовними актами розсіяння електрона зазвичай лежить у діапазоні 10^{-13} - 10^{-14} с, що істотно

більше від тривалості самої взаємодії з фононом чи структурною неоднорідністю кристалу. Тому за один вільний пробіг координата носія змінюється незначно, тоді як швидкість та квазіімпульс можуть зазнавати відчутних змін. У моделюванні такі короткі взаємодії трактують як миттєві зіткнення, а проміжки між ними – як вільний рух під дією зовнішнього поля.

Для опису швидкоплинних процесів у надвисокочастотних структурах, зокрема в діодах Ганна з переходами між долинами зони провідності, доцільно використовувати метод частинок, або метод Монте-Карло. Він є чисельною реалізацією рівняння Больцмана, еквівалентною точному розв'язку, але суттєво зручнішою для гетероструктур з варизонними шарами та складною зонною діаграмою, оскільки природно враховує зміну параметрів матеріалу з координатою.

У межах методу Монте-Карло електронний газ моделюється набором макрочастинок, кожна з яких представляє групу реальних електронів. Для кожного з них чергуються етапи вільного руху та миттєвих актів розсіяння. Вільний пробіг описується рівняннями (2.3), (2.4) із заданим законом дисперсії. Після такого пробігу необхідно визначити момент, коли відбудеться наступне розсіяння, та обрати відповідний тип розсіяння.

Час τ , у який реалізується акт розсіяння, знаходять із співвідношення

$$\int_0^t W_{\Sigma}(E(\tau)) dt = -\ln z, \quad (2.10)$$

де $W_{\Sigma}(E)$ – сумарна ймовірність усіх процесів розсіяння за даної енергії E , а z – випадкова величина, рівномірно розподілена на проміжку $[0;1]$. Це рівняння забезпечує правильний статистичний розподіл інтервалів часу між зіткненнями.

Після визначення моменту розсіяння потрібно ідентифікувати його тип. Для цього застосовують схему відбору за методом Неймана. Генерують ще одне випадкове число z з того ж інтервалу $[0;1]$ і порівнюють його з послідовними сумарними ймовірностями

$$\sum_{i=1}^{m-1} \frac{W_i(E)}{W_{\Sigma}(E)} < z < \sum_{i=1}^m \frac{W_i(E)}{W_{\Sigma}(E)} \quad (2.11)$$

де $m=1,2,3,\dots,m_{\max}$, $m_{\max}$ – кількість урахованих механізмів розсіяння; $W_i(E)$ – ймовірність конкретного типу. Якщо нерівність виконується для певного значення m , вважається, що частинка розсіюється саме за цим типом.

Отже, у підрозділі 2.1 обґрунтовується використання квазікласичного опису та методу Монте-Карло для моделювання діода Ганна на основі варизонних шарів InGaN: рівняння Больцмана задає загальну кінетичну модель, співвідношення (2.3), (2.4) описують вільний рух частинок, формули (2.5)–(2.9) пов'язують мікроскопічні та макроскопічні характеристики, а вирази (2.10), (2.11) задають стохастичні параметри процесів розсіяння.

2.2 Вибір параметрів варизонної напівпровідникової сполуки InGaN

У моделюванні розглядається потрійна сполука типу $A_zB_{1-z}C$, яку отримують на основі двох бінарних матеріалів AC та BC з різним вмістом компонентів A і B. До такого класу належить і варизонний нітрид $In_zGa_{1-z}N$, що утворює канал діода Ганна. Уздовж каналу молярна частка індію z змінюється, тому всі матеріальні характеристики потрійної сполуки необхідно задавати як функцію координати або, еквівалентно, як функцію від z .

Коефіцієнт непараболічності зони провідності для потрійної сполуки $A_zB_{1-z}C$ визначається за правилом Вегарда

$$\alpha_{A_zB_{1-z}C} = z\alpha_{AC} + (1-z)\alpha_{BC} \quad (2.12)$$

де α_{AC} та α_{BC} – коефіцієнти непараболічності відповідних бінарних сполук. Для $In_zGa_{1-z}N$ це дає змогу плавно перейти від параметрів InN до параметрів GaN при зміні складу.

Ефективна маса електрона в мінімумі долини для довільного значення молярної частки задається виразом

$$\frac{1}{m^*(z)} = \frac{z}{m_{AC}^*} + \frac{1-z}{m_{BC}^*} \quad (2.13)$$

Таким чином, зміна складу варизонного шару безпосередньо впливає на кривизну зони провідності і, відповідно, на швидкості носіїв, які використовуються у методі Монте-Карло.

Енергетичний зазор (ширина забороненої зони) потрійної сполуки як функція молярної частки описується квадратичним співвідношенням

$$E_{g,A_zB_{1-z}C} = zE_{g,AC} + (1-z)E_{g,BC} + z(1-z)C_{\text{виг}} \quad (2.14)$$

де $E_{g,AC}$ та $E_{g,BC}$ – енергетичні зазори бінарних матеріалів, а $C_{\text{виг}}$ – параметр вигину для системи $A_zB_{1-z}C$. Для InGaN значення $C_{\text{виг}}$ підбирають за експериментальними даними, щоб крива $E_g(z)$ відтворювала виміряні значення. Формула (2.14) задає локальне значення енергетичного зазору в кожній точці варизонного шару $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{N}$.

Вплив температури на енергетичний зазор враховується з використанням емпіричної залежності Варшні

$$E_g(T) = E_g(T=0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (2.15)$$

де α і β – температурні коефіцієнти, визначені для даної сполуки. У чисельних розрахунках ця формула застосовується до величини E_g , отриманої з (2.14), тому енергетичний зазор розглядається як функція і складу z , і температури T .

Окрім параметрів, що визначають зонну структуру, необхідно задати структурні та діелектричні характеристики потрійної сполуки. Величини для $A_zB_{1-z}C$ обчислюються за відомими параметрами бінарних сполук AC та BC за правилами змішування. Параметр кристалічної решітки потрійної сполуки описується залежністю

$$a_{A_zB_{1-z}C}(x) = za_{AC} + (1-z)a_{BC} \quad (2.16)$$

У варизонному шарі $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{N}$ ця формула описує зміну параметра решітки вздовж координати, де змінюється склад $z(x)$.

Густина потрійної сполуки задають як

$$\rho_{A_zB_{1-z}C}(x) = \frac{z\rho_{AC}a_{AC}^3 + (1-z)\rho_{BC}a_{BC}^3}{a_{A_zB_{1-z}C}^3} \quad (2.17)$$

де ρ_{AC} та ρ_{BC} – густини відповідних бінарних сполук. Такий запис дозволяє коректно врахувати зміну об'єму елементарної комірки при зміні складу потрійної сполуки.

Статичну та високочастотну діелектричні сталі потрійної сполуки обчислюють через допоміжну величину $F_{A_zB_{1-z}C}$:

$$\varepsilon_{A_zB_{1-z}C} = \frac{1 + 2F_{A_zB_{1-z}C}}{1 - F_{A_zB_{1-z}C}}, \quad F_{A_zB_{1-z}C} = zF_{AC} - (1-z)F_{BC} \quad (2.18)$$

$$\text{де: } F_{AC} = \frac{\varepsilon_{AC} - 1}{\varepsilon_{AC} + 2}; \quad F_{BC} = \frac{\varepsilon_{BC} - 1}{\varepsilon_{BC} + 2},$$

а ε_{AC} та ε_{BC} – діелектричні сталі бінарних сполук. Отримане таким чином значення $\varepsilon_{A_zB_{1-z}C}$ для $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{N}$ у кожній точці варизонного шару надалі використовується в дискретизованому рівнянні Пуассона.

У підсумку, для варизонного нітриду $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{N}$ у кожному вузлі розрахункової сітки задаються такі локальні параметри: коефіцієнт непараболічності, ефективна маса, енергетичний зазор, параметр решітки, густина та діелектрична стала. Сукупність цих величин використовується як вхідні дані для моделювання транспорту носіїв методом Монте-Карло, а також для розв'язання рівнянь Пуассона і теплопровідності в структурі діода Ганна.

2.3 Визначення розподілу електричного потенціалу та температури в структурі з варизонними шарами InGaN

Щоб коректно описати рух електронів у діоді Ганна на основі варизонних шарів InGaN, потрібно знати напруженість електричного поля в кожній точці області розрахунку. Поле пов'язане з електростатичним потенціалом ϕ співвідношенням $E = -\nabla\phi$, тому насамперед необхідно знайти розподіл $\phi(r,t)$, який задається просторовим розподілом заряду і змінюється у часі в процесі моделювання.

Спочатку неперервний простір заміняють на прямокутну розрахункову сітку. У вузлах цієї сітки зберігаються значення потенціалу, діелектричної сталої та об'ємної густини заряду. Координати електронів, що рухаються в методі Монте-Карло безперервно, при побудові поля проєктуються на сітку: заряд кожної макрочастинки «розмазується» між сусідніми вузлами за заданим правилом. У такому неоднорідному середовищі рівняння Пуассона для потенціалу ϕ набуває вигляду

$$\nabla[\epsilon \nabla \phi] = L\phi = -q[N_D(x,y) - N_A(x,y) - n(x,y) + p(x,y)] \quad (2.19)$$

де всі величини є функціями координат: ϵ - діелектрична стала, яка у варизонних шарах $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{N}$ додатково залежить від профілю складу та легування, $N_D(x,y)$ та $N_A(x,y)$ - концентрації донорних і акцепторних домішок, $n(x,y)$ та $p(x,y)$ - концентрації електронів і дірок.

Для переходу до чисельного розв'язання використовують метод скінченних різниць. У двовимірному випадку на нерівномірній сітці застосовують п'ятиточковий шаблон. Для вузла з індексами (i,j) дискретизоване рівняння запишеться як

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_x} \left(\left(\varepsilon_{i,j} \frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{h_x} \right) - \left(\varepsilon_{i+1,j} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{h_x} \right) \right) + \\ & \frac{1}{h_y} \left(\left(\varepsilon_{i,j} \frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{h_y} \right) - \left(\varepsilon_{i,j+1} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{h_y} \right) \right) = f_{i,j} \end{aligned} \quad (2.20)$$

де h_x та h_y - кроки сітки за координатами, а $f_{i,j}$ - дискретне значення правої частини рівняння Пуассона.

Якщо сітка рівномірна, $h_x=h_y=h$, вираз (2.20) можна подати у компактнішій формі

$$\begin{aligned} L\varphi = & \left(\left(\varepsilon_{i,j} (\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}) \right) - \left(\varepsilon_{i+1,j} (\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}) \right) \right) + \\ & \left(\left(\varepsilon_{i,j} (\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}) \right) - \left(\varepsilon_{i,j+1} (\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}) \right) \right) = h^2 f_{i,j} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Таким чином, задача зводиться до розв'язання системи лінійних алгебричних рівнянь відносно значень потенціалу $\varphi_{i,j}$ у вузлах сітки.

Для цієї системи в роботі застосовується багатосітковий алгоритм. Його обчислювальні витрати масштабуються як $O(N)$, де N - число невідомих, що істотно менше, ніж для звичайного ітераційного методу Гаусса-Зейделя з оцінкою $O(N^2)$. Ідея багатосіткового підходу полягає в тому, що помилка розв'язку послідовно згладжується на кількох сітках із різними кроками дискретизації.

Для згладжування на кожній сітці використовують ітераційний метод Гаусса-Зейделя разом зі схемою Red-Black. У цій схемі вузли сітки ділять на дві групи за принципом «шахової дошки» (умовно червоні та чорні) і оновлюють їх по чергові, що зменшує зв'язність між рівняннями. Такий підхід прискорює збіжність і зручний для реалізації на багатоядерних обчислювальних системах. Помилку розв'язку на поточній ітерації обчислюють як різницю між двома послідовними наближеннями

$$\mathcal{G}_h^i = u_h^{i+1} - u_h^i \quad (2.22)$$

Нев'язку визначають як різницю між правою частиною рівняння Пуассона та результатом дії дискретного оператора на поточний розв'язок

$$r_h^i = -f_h - L_h u_h^i \quad (2.23)$$

тоді виконується співвідношення

$$L(u_h^{i-1} - u_h^i) = L g_h^i = r_h^i \quad (2.24)$$

З виразу (2.24) знаходять поправку до розв'язку, після чого переносять її на грубішу сітку, коригують там та потім знову інтерполюють на детальнішу. У результаті високочастотні складові помилки швидко пригнічуються на дрібній сітці, а низькочастотні - на грубій.

Обмін інформацією між сітками відбувається за допомогою операцій обмеження й інтерполяції. Для перенесення значень з детальної сітки на грубу використовують схему з повними вагами, а для зворотного переходу - дволінійну інтерполяцію. Такий самий підхід застосовується як для розв'язання рівняння Пуассона з координатно-залежною діелектричною сталою $\varepsilon(x,y)$ у варизонних шарах InGaN, так і для задачі пошуку температурного поля.

Розподіл температури в структурі діода Ганна задається рівнянням теплопровідності

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q(x, y, t, T) \quad (2.25)$$

де ρ , c , λ - густина, питома теплоємність і теплопровідність матеріалу; $Q(x,y,t,T)$ - питома потужність внутрішніх джерел тепла. Для варизонного InGaN всі ці коефіцієнти залежать від координат через профіль складу та легування, визначений у підрозділі 2.2.

Після дискретизації за часом із кроком τ та переходу до сіткових функцій отримуємо рівняння

$$\rho c \frac{T_h^i - T_h^{i-1}}{\tau} = \nabla \left(\lambda_h^i \nabla T_h^i \right) + Q_h^i \quad (2.26)$$

Переносячи всі невідомі в ліву частину, маємо

$$\tilde{L}T_h^i = \nabla(\lambda_h^i \nabla T_h^i) - \frac{\rho c}{\tau} T_h^i = -\left(\frac{\rho c}{\tau} T_h^{i-1} + Q_h^i\right) = f_h \quad (2.27)$$

Структура рівняння (2.27) подібна до (2.21), відмінність полягає лише в тому, що оператор діє на температуру, а не на потенціал. Тому для його розв'язання зручно застосовувати той самий багатосітковий алгоритм з аналогічними операціями згладжування та перенесення між сітками.

Окремо задається потужність внутрішніх джерел теплоти, які пов'язані з енергетичними втратами при розсіянні носіїв заряду. У роботі ця величина визначається за результатами моделювання методом Монте-Карло за формулою

$$Q = \frac{n}{N_\psi \tau} \sum (\hbar \omega_{\text{випр}} - \hbar \omega_{\text{погл}}) \quad (2.28)$$

де n - густина електронів, N_ψ - кількість макрочастинок, що моделюються, τ - крок за часом, $\hbar \omega_{\text{випр}}$ та $\hbar \omega_{\text{погл}}$ - енергія, випромінена або поглинута під час актів розсіяння. Для варизонного InGaN у суму включаються всі релевантні механізми розсіяння з урахуванням локальних параметрів матеріалу.

Отже, в моделі діода Ганна на основі варизонних шарів InGaN розподіли електричного потенціалу, електричного поля та температури знаходяться узгоджено між собою: на кожному часовому кроці результати Монте-Карло визначають праві частини рівнянь Пуассона і теплопровідності, ці рівняння розв'язують багатосітковим методом, а отримані поля надалі використовуються для обчислення траєкторій частинок.

3 МОДЕЛЮВАННЯ РОБОТИ ПЛАНАРНИХ СТРУКТУР З ВАРІЗОННОЮ МЕЗА-СТРУКТУРОЮ

3.1 Структура та геометрія планарного діода з варізонною меза-структурою

Поперечний переріз структури наведено на рис. 1. Вона складається з підкладки з сапфіру на якій вирощений шар GaN, товщиною $L_x = 0,32$ мкм, що виконує роль каналу пристрою. По краях розташовані більш високолеговані області n^+ , з концентрацією легуючої домішки $N_d = 5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ позначені як області 3 і 4, які забезпечують низький омичний опір під металевими контактами 5 і 6, що вважаються виготовленими з золота шириною 0,16 мкм. Також на рисунку відображена варізонна структура на основі InGaN яка формує варізонний катод довжиною $w_m = 0,16$ мкм та товщиною $l_m = 0,32$ мкм. Таким чином загальна товщина приладу становить 1,92 мкм, а активна довжина приблизно 1,3 мкм.

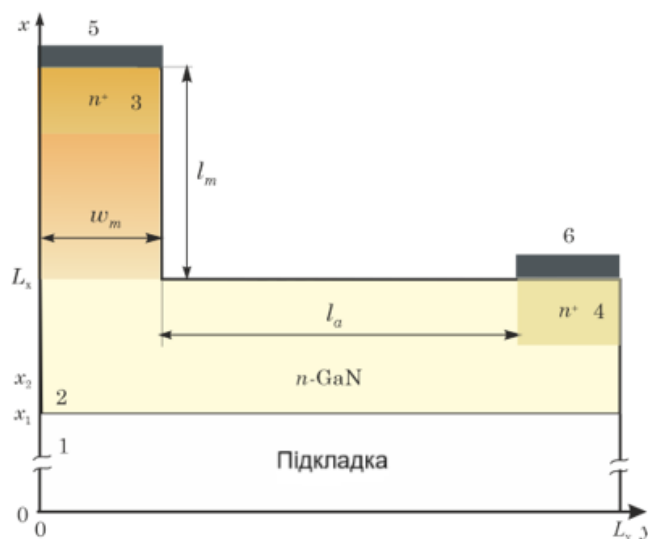


Рис. 1. Структура діода.

На рис. 2. показані профілі легування $N_d(x)$ уздовж координати x для декількох варіантів структури та розподіл складу. Суцільні та пунктирні криві відповідають різним довжинам легованої області L_n з концентрацією легуючої

домішки $N_{n^-} = 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Варіант «без n^- » відповідає менш різкому переходу між високолегованою та слаболегованою частиною. Зміна довжини L_n дозволяє згладити профіль домішки, вплинути на розподіл електричного поля, зменшити локальні максимуми напруженості та, відповідно, впливати на напругу пробую й рівень витоків.

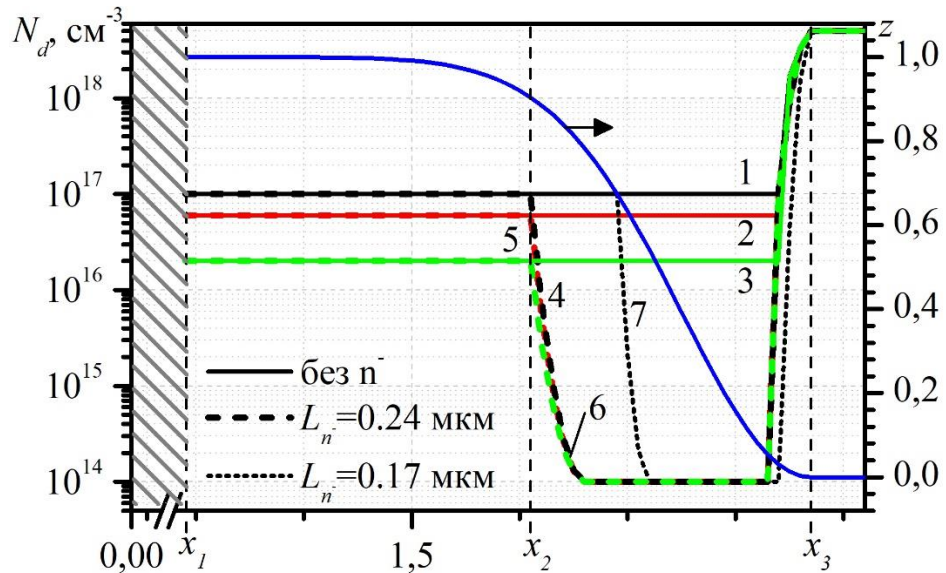


Рис. 2. Профілі легування та склад $\text{In}_{1-z}\text{Ga}_z\text{N}$ залежно від координати x .

Така структура приладу була обрана для не уможливлення виникнення високочастотної генерації такої як, наприклад коливання Ганна. Тоді в структурі може виникати шумовий струм.

Загалом існує декілька способів стабілізації приладів з междолинним перенесенням електронів, як на приклад: створення у діоді області з високим питомим опором завдяки локальній низькій концентрації легуючої домішки поблизу катодної області або використання бар'єру Шоткі у якості катода.

Зміна параметрів варизонного шару таких як діелектрична проникність, коефіцієнти ударної іонізації, параметрів розсіювання та теплових параметрів детально наведено у Розділі 2.

3.2 Результати моделювання

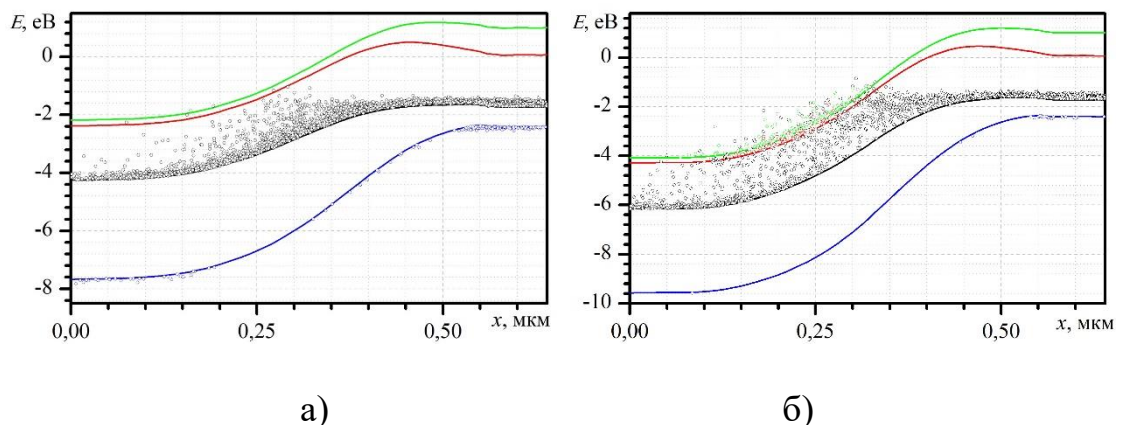
Для отримання залежностей, наприклад залежності струму через прилад, близької до реального у випадку нерівноважного переносу зарядів було змодельовано прилад за допомогою багаточастиночкового методу Монте-Карло самоузгодженого з розв'язком рівняння Пуасона та синхронізованого з розв'язком рівняння теплопровідності. Ефект самонагрівання в діоді було враховано аналогічно до моделі [22,23] а для розв'язку диференціальних рівнянь було використано повний багатосітковий метод [24].

Крок по часу становив 5×10^{-16} с а по простору приладу $h = 10^{-2}$ мкм, що узгоджується з вимогами для моделювання субмікронних приладів які наведено у розділі 2.

Було використано тридолинну модель зони провідності, представлену нижньою Г-долиною та верхньою Г₁- і М-Л-долинами. Розглядається початкова стадія ударної іонізації, що відбулася внаслідок сильного електричного поля. З цієї причини іонізація, як передбачається, відбувається за допомогою одного типу носіїв (електронів), і закони збереження енергії та імпульсу були застосовані точно. Деталі моделювання розсіювання носіїв наведені в [18]. Параметри матеріалу обрані відповідно до [18-21].

3.2.1 Зонна діаграма варізонної меза-структури

На рис. 3 показано, як змінюється зонна діаграма в катодній області діода при напрузі 25 В та при різних концентраціях легуючої домішки в каналі.



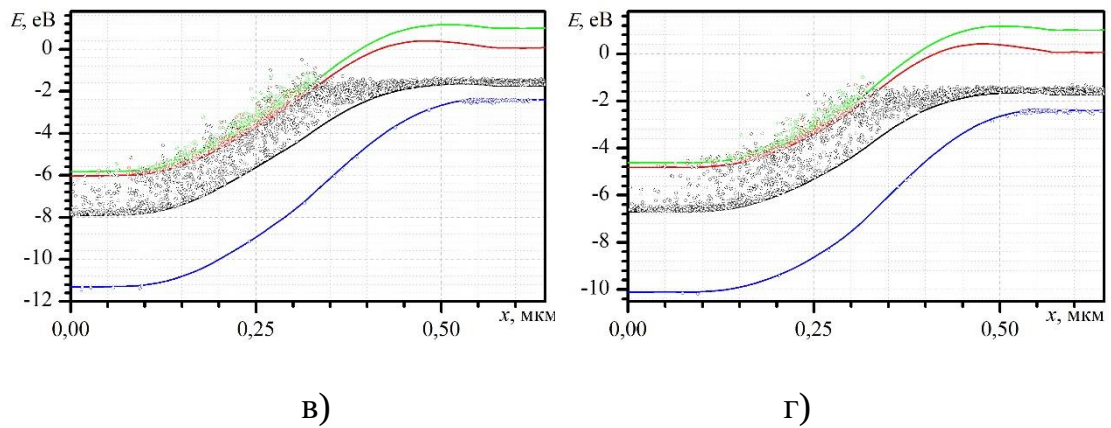


Рис. 3. Зонна діаграма катода діода при $U = 25$ В за $N_{Dn} = 10^{14}$ см $^{-3}$ та $N_{Dn} = 6 \times 10^{16}$ см $^{-3}$ (а, б) та $N_{Dn} = 1 \times 10^{17}$ см $^{-3}$ (в, г): а, в – без n - області; б, г - з n - областтю.

Зліва, на рис. 3 а), ми бачимо випадок без додаткової n -області. Підйом дна зони провідності від катода до каналу відносно плавний, напруженість поля поблизу контакту порівняно невелика, тому розігрів електронів починається вже глибше в каналі. Точки на діаграмі відповідають енергіям окремих електронів у відповідних долинах зони провідності та валентної зони, суцільні криві: синьою лінією позначено валентну зону, чорною Γ -долину зони провідності, червоною М-Л долину зони провідності та зеленою – Γ_1 . Слід зазначити що дірки у приладі з'явилися лише як наслідок ударної іонізації.

Справа, на рисунку б), показано випадок з n -областю біля катода. Тут згинання зон різкіше, формується більш крутий потенційний схил. Це означає вищу локальну напруженість електричного поля, більш інтенсивне початкове прискорення електронів та зміщення області гарячих носіїв ближче до катода та ініційованих у наслідок ударної іонізації дірок. Через високу концентрацію електронів в області n^+ , електричні поля в мезі майже не змінюються.

Таким чином, за рахунок легування катодної ділянки та введення n - області ми можемо цілеспрямовано формувати зонну діаграму, а отже впливати на розподіл енергій електронів, умови генерації й шумові характеристики діода.

3.2.2 Розподіл напруженості електричного поля

На рис. 5 показано, як виглядає розподіл напруженості електричного поля всередині діода що було знайдено шляхом диференціювання уздовж вісі x та y розподілу потенціалу для різних концентрацій домішки в каналі. Криві з номерами 1–5 відповідають різним прикладеним напругам U_0 : 10, 15, 20, 25 та 30 В.

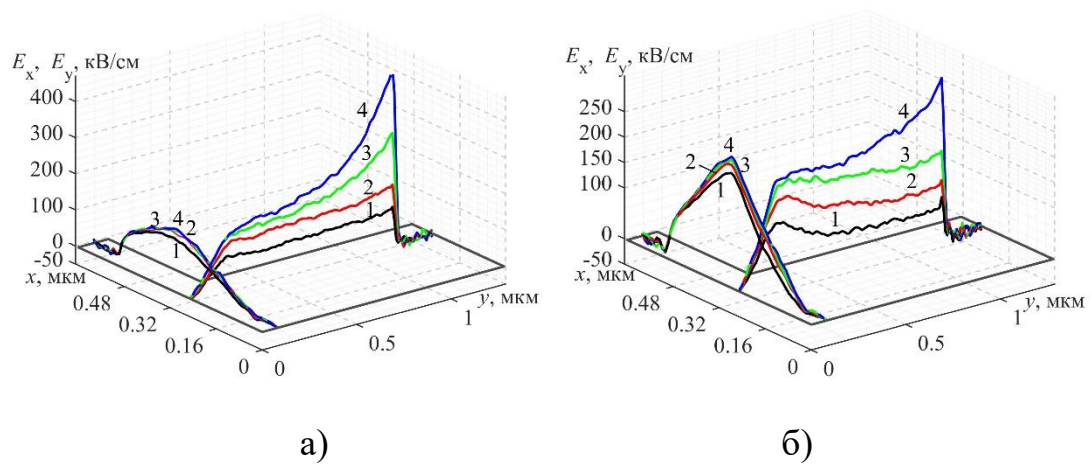


Рис. 5. Розподіл компоненти E_y електричного поля в поперечному перерізі діода при $x = 0,24$ мкм та компоненти E_x в перерізі $y = 0,08$ мкм для діода без виїмки (а) та з виїмкою (б) за концентрації легування в каналі $6 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Зліва, на графіку а), зображений діод без виїмки. Тут максимум поля зростає з напругою, але розподіл досить розтягнутий по довжині каналу, тобто електрони прискорюються більш рівномірно, без різко виділеної активної області, що сприятиме виникненню саме шумової генерації струму.

Справа, на графіку б), показаний діод з виїмкою в області катода. В цьому випадку видно, що зі збільшенням напруги пік напруженості поля стає значно вищим і більш локалізованим біля виїмки. Іншими словами, ми штучно концентруємо електричне поле в потрібному місці структури.

Такий перерозподіл поля важливий для приладу типу діода Ганна. Сильний локальний максимум поблизу катода забезпечує інтенсивне

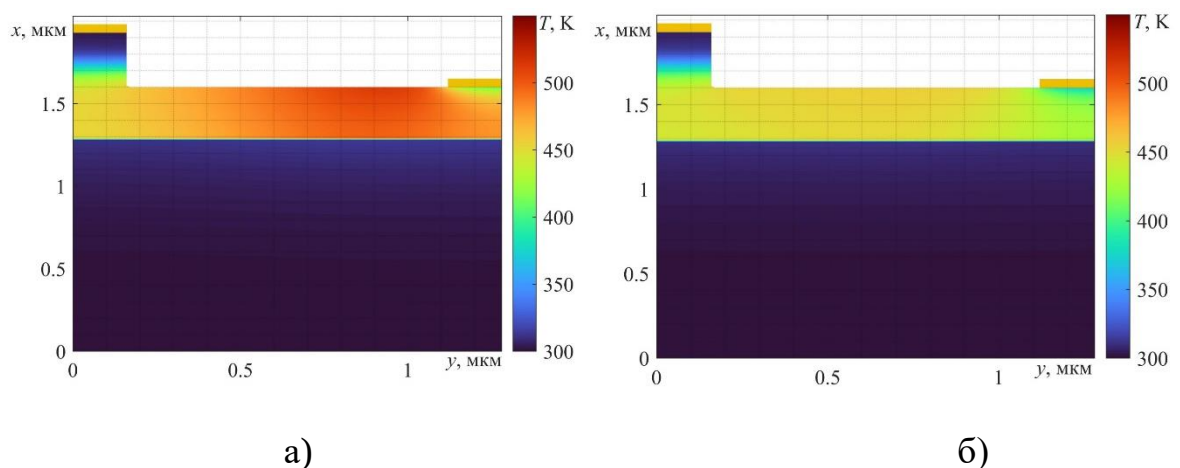
прискорення електронів, формування гарячих носіїв та, в підсумку, кращі умови для виникнення й підтримання НВЧ генерації в діоді з виїмкою порівняно зі звичайною структурою.

3.2.3 Ефект саморозігрівання у структурі

Температура нижньої сапфірової поверхні прийнята рівною 300 К, так само як і температура на верхній поверхні металевого контакту. На інших границях приладу підтримується адіабатичні граничні умови.

Залежність теплових параметрів InGaN від температури взята з [25]. Омічний контакт пропонується виконати із золота з адгезійним шаром титану. Теплова провідність на межі розділу метал–InN і метал–GaN прийнята однаковою і становить $2 \cdot 10^8$ Вт/(К·м²) [26]. Теплова провідність на межі розділу GaN і сапфірової підкладки прийнята рівною 10^7 Вт/(К·м²) [27]. Самонагрівання було застосовано до результату через фоони та зменшення порогової енергії для ударної іонізації.

Ефект самонагрівання в діоді визначається нагріванням області діода поблизу межі між каналом і мезою, рис. 6. Джерелом тепла є переважно ударна іонізація.



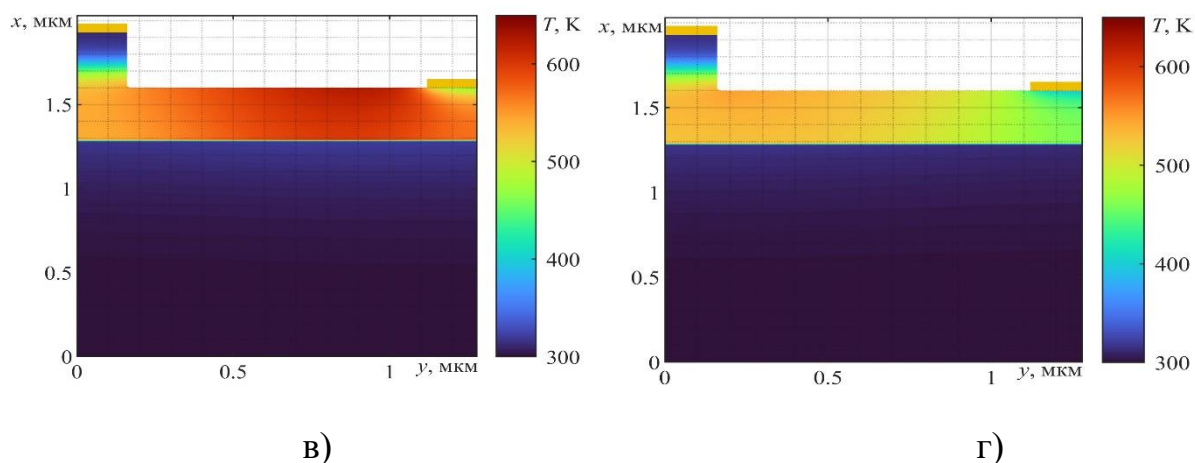


Рис. 6. Розподіл температури в діоді типу з концентрацією легування при $U = 25$ В; $t_{\text{sim}} = 12,8$ нс а, б - $N_{Dn} = 6 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ та, в, г - $N_{Dn} = 1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$: а, в – без n^- - області; б, г - з n^- - областю.

На рис. 6 наведено розподіл температури при $U = 25$ В за час моделювання близько 12,8 нс. По вертикалі відкладена координата x , по горизонталі - y , кольором показана температура в кельвінах. Максимуми температури у діоді становили: для діодів без області з низьким легуванням 512 К (рис. 5, а) та 622 К (рис. 5, в) для концентрацій $N_{Dn} = 6 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ та $N_{Dn} = 1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, відповідно, а для діодів з областю – 457 К (рис. 5, б) та 546 К (рис. 5, г).

Ліворуч, на рис. 6, варіанти а) та в) це діоди без n^- області. Бачимо широку гарячу зону в районі каналу: температура там піднімається з 300 К майже до 500 К і вище. Тобто значна частина активної області працює в режимі підвищеного теплового навантаження, що потенційно обмежує надійність та максимальну вихідну потужність.

Праворуч, на рис. 6, варіанти б) та г) , той самий діод, але з введеною n^- областю. Тут зона максимального нагріву стає більш локалізованою і трохи зсувається, а розігрів в інших частинах каналу слабшає.

Така поведінка температури безпосередньо пов'язана з розподілом електричного поля наведеного на рис. 5 та розподілом та інтенсивністю ударної іонізації в приладі:

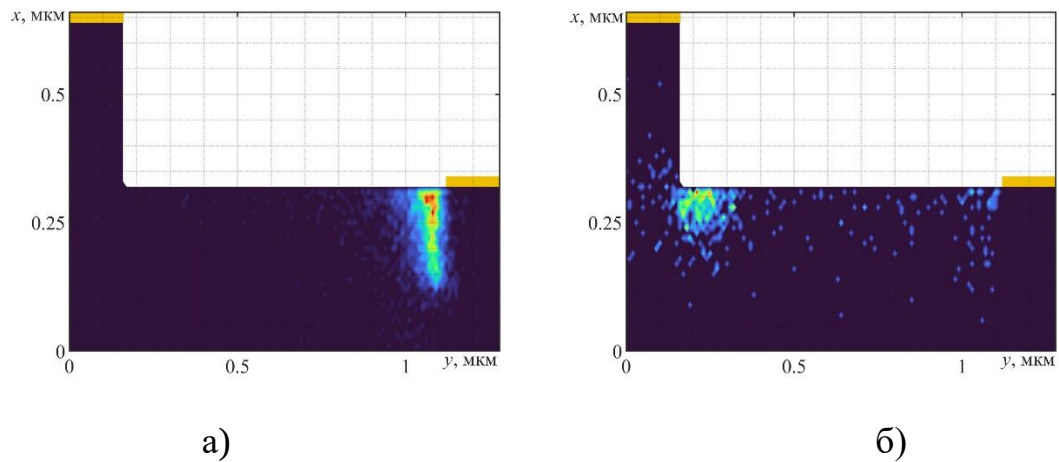


Рис. 7. Розподіл активів ударної іонізації у приладі за $U = 25$ В; $t_{\text{sim}} = 12,8$ нс та $N_{Dn} = 1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$: а, – без n^- - області; б - з n^- - областю.

Як видно з рис. 7 у випадку наявності низьколегованої області акти ударної іонізації локалізуються переважно ближче до катоду та і в цілому інтенсивність значно нижча за структуру без n^- області. У випадку рівномірного легування спостерігається висока інтенсивність ударної іонізації майже в анодному контакті.

3.2.4 Воль-амперна характеристика пристрою

На рис. 8 показані вольт-амперні характеристики пристрою, тобто залежності густини струму від прикладеної напруги з урахуванням саморозігрівання за $t_{\text{sim}} = 12,8$ нс. По осі абсцис відкладено напругу зміщення, по осі ординат – густину струму в каналі діода.

Суцільні лінії з номерами 1-3, 4 відповідають діодам без слабологованої n^- області біля катода. Штрихові криві 1'–4' та 1'' відповідають варіантам з n^- областю різної довжини та концентрації. Окремі набори кривих відрізняються концентрацією легування основного n -каналу – від 6×10^{16} до $2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, а також довжиною каналу L_y .

Добре видно, що введення n^- області зміщує різкий підйом струму в бік менших напруг і робить ділянку ВАХ крутішою. Тобто при тій самій напрузі

діод з виїмкою забезпечує вищу густину струму, відповідно сильніший нагрів і кращі умови для генерації НВЧ коливань.

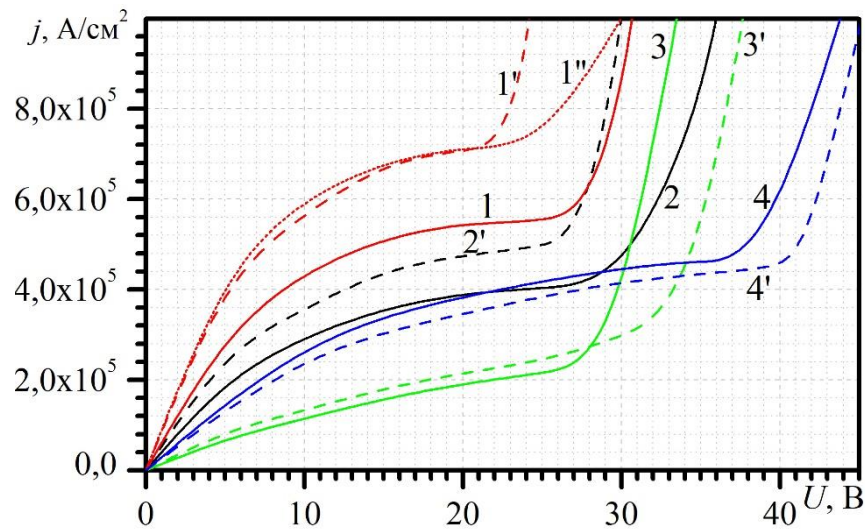
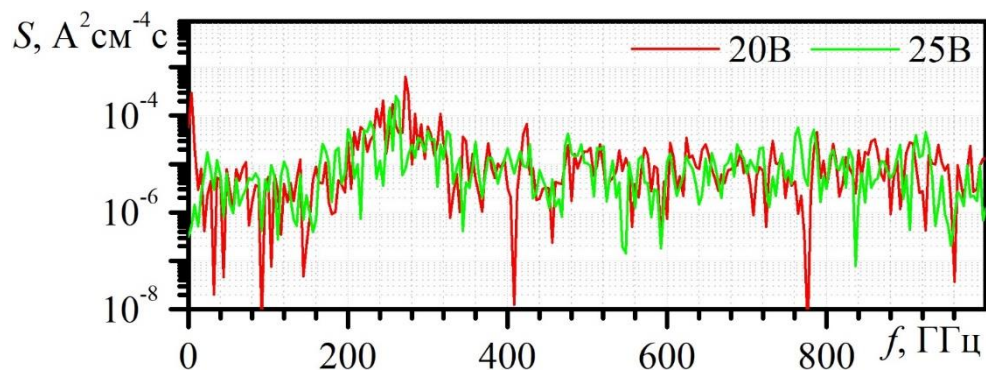


Рис. 8. Залежності густини струму від прикладеної напруги зміщення для діодів з виїмкою та без неї (1-3 – без "n-"; 1'-4', 1'' – з "n-"): 1, 1', 1'' – $N_{Dn} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$; 2, 4, 2', 4' – $N_{Dn} = 6 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 3, 3' – $N_{Dn} = 2 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 1'-3' – $N_{Dn-} = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $L_{n-} = 0,24 \text{ мкм}$; 1'' – $N_{Dn-} = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $L_{n-} = 0,17 \text{ мкм}$; 1-3, 1'-3' – $L_y = 1,28 \text{ мкм}$; 4, 4' – $L_y = 2,56 \text{ мкм}$.

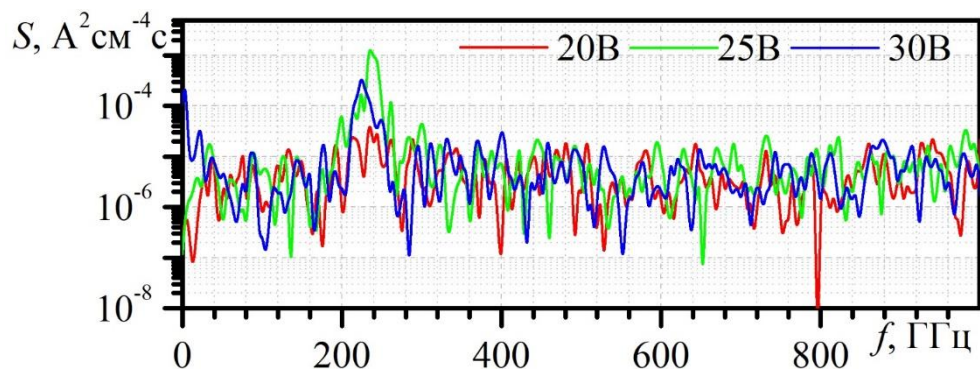
Зміна легування каналу N_{Dn} та довжини L_y дозволяє додатково налаштовувати робочу область: при більшому легуванні або коротшому каналі характеристика зсувається ліворуч, генераційний режим досягається за нижчих напруг; при меншому легуванні чи довшому каналі потрібні вищі напруги.

3.2.5 Шумові характеристики діоду

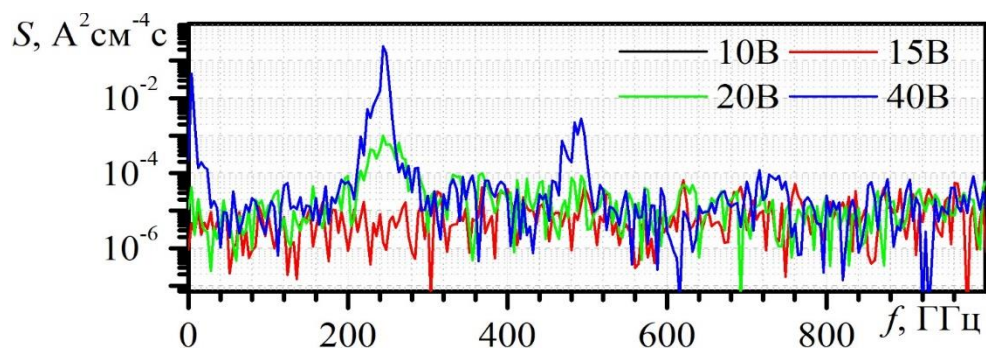
Для оцінки можливого використання діодів для генераторів шуму було оцінено спектральну щільність потужності струму діода. Було проаналізовано тимчасові зразки діода. Чисельний алгоритм відповідає [28]. Спектральну густину потужності оцінювали за допомогою функції автокореляції часових залежностей струму:



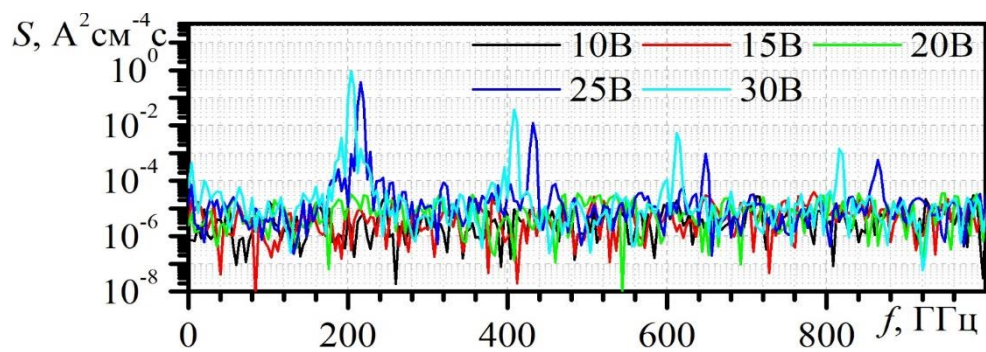
а)



б)



в)



г)

Рис. 9. Спектральна густина потужності для діодів без виїмки (а, в) та з виїмкою (б, г) за концентрації легування в каналі $6 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (а, б) та 10^{17} см^{-3} (в, г) при $L_y = 1,28 \text{ мкм}$.

Зростання СГП при відповідній напрузі зміщення корелювало з початком ударної іонізації в діоді в діапазоні частот 160–360 ГГц. Частотний діапазон СГП є широким. Як видно з рис. 9а, ширший частотний діапазон спостерігається у діода першого типу. У діодах другого типу смуга частот, де відбувається зростання СГП, є вузькою.

На деяких залежностях (в, г) можна побачити яскраво виражені максимуми СГП, що може бути ознакою генерації на частотах близьких до прольотної частоти. Особливо така ситуація характерна для діодів з концентрацією легуючої домішки у каналі 10^{17} см^{-3} . Слід також зазначити що п- область загалом сприяє генерації коливань Ганна, що можна побачити й у випадку зображеному на рис 9б.

ВИСНОВКИ

Таким чином у роботі показано що стабілізація електричного поля можлива в меза-структурі на основі InGaN з варізонною катодною областю, і це підтверджено чисельним моделюванням методом Монте-Карло.

По-друге, продемонстровано збільшення спектральної густини потужності шуму більш ніж на один порядок при зростанні напруги зміщення для діода з диференційним профілем легування мези, що підтверджує сильну залежність СГП від прикладеного електричного поля.

І нарешті, налаштування частоти. Максимальна робоча частота, як було показано, корелює з часом проходження носія через канал і може бути ефективно відрегульована шляхом модифікації параметрів каналу, тобто геометрії та профілю легування.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Buniatyan V. V., Aroutiounian V. M. Wide gap semiconductor microwave devices. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2007. Vol. 40, no. 20. P. 6355–6385. URL: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/40/20/s18>.
2. Botsula O. V., Zozulia V. O. Generation of THz Oscillations by Diodes with Resonant Tunneling Boundaries. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2020. Vol. 12, no. 6. P. 06037–1–06037–4. URL: [https://doi.org/10.21272/jnep.12\(6\).06037](https://doi.org/10.21272/jnep.12(6).06037).
3. Thickness dependent thermal conductivity of gallium nitride / E. Ziade et al. *Applied Physics Letters*. 2017. Vol. 110, no. 3. P. 031903. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4974321>.
4. Improved Thermal Interfaces of GaN–Diamond Composite Substrates for HEMT Applications / J. Cho et al. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*. 2013. Vol. 3, no. 1. P. 79–85. URL: <https://doi.org/10.1109/tcpmt.2012.2223818>.
5. Botsula O. V., Prykhodko K. H., Zozulia V. O. Diodes with Lateral n⁺-n -Border. 2019 IEEE 2nd Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON), Lviv, Ukraine, 2–6 July 2019. 2019. URL: <https://doi.org/10.1109/ukrcon.2019.8879884>.
6. Storozhenko I. Advanced Gunn Diode on Based Graded GaPAs - GaInAs as High Power Source of Millimeter Wave. 2021 IEEE Microwave Theory and Techniques in Wireless Communications (MTTW), Riga, Latvia, 7–8 October 2021. 2021. URL: <https://doi.org/10.1109/mttw53539.2021.9607065>.
7. Storozhenko I. P., Kaydash M. V. Gunn Diodes Based on Graded InGaP-InPAs. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2018. Vol. 10, no. 4. P. 04014–1–04014–6. URL: [https://doi.org/10.21272/jnep.10\(4\).04014](https://doi.org/10.21272/jnep.10(4).04014) (date of access: 05.12.2025).

8. Storozhenko I. Gunn Diodes Based on Graded-gap GaInPAs. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2020. Vol. 12, no. 1. P. 01015–1–01015–9. URL: [https://doi.org/10.21272/jnep.12\(1\).01015](https://doi.org/10.21272/jnep.12(1).01015).
9. Botsula O. V., Prykhodko K. H., Zozulia V. A. InGaAs-based Graded Gap Active Elements with Static Cathode Domain for Terahertz Range. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2019. Vol. 11, no. 1. P. 01006–1–01006–5. URL: [https://doi.org/10.21272/jnep.11\(1\).01006](https://doi.org/10.21272/jnep.11(1).01006).
10. Стороженко І. П., Кайдаш М. В. Діоди Ганна на основі варизонних сполук III-V: розрахунок частотних характеристик // *Радіофізика та радіоастрономія*. – 2013. – Т. 18, № 4. – С. 330–341.
11. Vasileska D., Goodnick S. M., Klimeck G. *Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation*. Taylor & Francis Group, 2017. 782 p.
12. Jacoboni C., Lugli P. *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Vienna : Springer Vienna, 1989. URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-7091-6963-6>.
13. 3-D TCAD Monte Carlo Device Simulator: State-of-the-art FinFET Simulation / G. Firpo Furtado et al. *Journal of Integrated Circuits and Systems*. 2021. Vol. 16, no. 2. P. 1–11. URL: <https://doi.org/10.29292/jics.v16i2.476>.
14. Karantaidis G., Kotropoulos C. Blackman–Tukey spectral estimation and electric network frequency matching from power mains and speech recordings. *IET Signal Processing*. 2021. Vol. 15, no. 6. P. 396–409. URL: <https://doi.org/10.1049/sil2.12039>.
15. Blackman R. B., Tukey J. W. The measurement of power spectra from the point of view of communications engineering – Part I. *The Bell System Technical Journal*. 1958. Vol. 37, no. 1. P. 185–282. URL: <https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1958.tb03874.x>.
16. John V. *Multigrid methods // Lecture notes*. – Weierstrass Institute, Berlin, 2011. – 64 p. – Режим доступу: <https://www.wias-berlin.de/people/john/LEHRE/MULTIGRID/multigrid.pdf>.

17. Multigrid method for electronic structure calculations / M. Heiskanen et al. *Physical Review B*. 2001. Vol. 63, no. 24. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.63.245106>.
18. Botsula O. V., Prykhodko K. H. Graded Band InGaN- Based Diode for Noise Generation in Terahertz Range. 2020 IEEE Ukrainian Microwave Week (UkrMW), Kharkiv, Ukraine, 21–25 September 2020. 2020. URL: <https://doi.org/10.1109/ukrmw49653.2020.9252763>.
19. Adachi S. Properties of semiconductor alloys: Group-IV, III-V and II-VI semiconductors. Chichester, West Sussex, U.K : Wiley, 2009.
20. Morkoç H. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, GaN-Based Optical and Electronic Devices. Wiley & Sons, Incorporated, John, 2009. 902 p.
21. A 2015 perspective on the nature of the steady-state and transient electron transport within the wurtzite phases of gallium nitride, aluminum nitride, indium nitride, and zinc oxide: a critical and retrospective review / P. Siddiqua et al. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2015. Vol. 26, no. 7. P. 4475–4512. URL: <https://doi.org/10.1007/s10854-015-3055-7>.
22. Self-Heating Effect in Planar GaN Diode with 2D- h-BN - Layer / V. O. Zozulia et al. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2024. Vol. 16, no. 6. P. 06034–1–06034–5. URL: [https://doi.org/10.21272/jnep.16\(6\).06034](https://doi.org/10.21272/jnep.16(6).06034).
23. Jacoboni C., Reggiani L. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials. *Reviews of Modern Physics*. 1983. Vol. 55, no. 3. P. 645–705. URL: <https://doi.org/10.1103/revmodphys.55.645>.
24. Joppich W., Mijalković S. Multigrid Methods for Process Simulation. Vienna : Springer Vienna, 1993. URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-7091-9253-5>.
25. Impact of Temperature on Graded Gap InGaN-based Diode Characteristics / K. Prykhodko et al. 2024 IEEE 17th International Conference on Advanced Trends in Radioelectronics, Telecommunications and Computer

Engineering (TCSET), Lviv, Ukraine, 8–12 October 2024. 2024. P. 01–04. URL: <https://doi.org/10.1109/tcset64720.2024.10755943>.

26. Thermal Boundary Resistance Between GaN and Substrate in AlGaN/GaN Electronic Devices / A. Sarua et al. IEEE Transactions on Electron Devices. 2007. Vol. 54, no. 12. P. 3152–3158. URL: <https://doi.org/10.1109/ted.2007.908874>.

27. Thermal boundary conductance across metal-gallium nitride interfaces from 80 to 450 K / B. F. Donovan et al. Applied Physics Letters. 2014. Vol. 105, no. 20. P. 203502. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4902233>.

28. Moses R. L., Stoica P. Spectral Analysis of Signals. Prentice Hall, 2005. 480 p.