

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

ЗАТВЕРДЖУЮ

В. о. завідувача кафедри
док. фіз.-мат. наук, доцент
_____ Сергій БЕРДНИК
(підпис)

« ____ » _____ 2024 року

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
МАГІСТРА**

на тему: ПЛАНАРНІ ДІОДИ З БАР'ЄРОМ ШОТТКІ

Виконав студент II курсу магістратури, групи РЕ-61,
спеціальність: 176 Мікро- та наносистемна техніка
освітньо-професійна програма
«Фізична та біомедична електроніка»

_____ Денис БАБІЧ
(підпис)

Керівник
доктор філософії,
науковий співробітник кафедри фізичної і
біомедичної електроніки та комплексних
інформаційних технологій

_____ Валерій ЗОЗУЛЯ
(підпис)

Консультант
кандидат фізико-математичних наук,
доцент кафедри фізичної і біомедичної електроніки
та комплексних інформаційних технологій

_____ Олег БОЦУЛА
(підпис)

2024 рік

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 176 Мікро- та наносистемна техніка
Освітньо-професійна програма Фізична та біомедична електроніка
Рівень вищої освіти другий (магістерський)

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Сергій БЕРДНИК
підпис ініціали, прізвище

“ _____ ” _____ 2024_ року

**З А В Д А Н Н Я
НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ**Бабіч Денис Андрійович

(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи Планарні діоди з бар'єром Шотткі

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

затверджені наказом по університету від “ _____ ” _____ 20__ року № _____

2. Строк подання студентом роботи 03.12.2024

3. Перелік питань, які потрібно розробити:

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

3.2. Розробка математичної моделі та програм розрахунку діода з контактом метал-напівпровідник

3.3. Отримати характеристики діода з контактом метал – напівпровідник для випадку варізонного контактного шару.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Аналіз наукових публікації за предметом досліджень
2	Написання огляду літератури за проблемою досліджень
3	Розробка моделі та програми розрахунку контакту метал-напівпровідник.
4	Отримання вихідних характеристик діода
5	Аналіз отриманих результатів
5	Оформлення дипломної роботи

5. Дата видачі завдання 24.10.2024

Студент

підпис

Д.А. Бабич

ініціали, прізвище

Керівник роботи

підпис

В.О. Зозуля

ініціали, прізвище

АНОТАЦІЯ

Бабіч Д.С. Планарні діоди з бар'єром Шотткі. Дипломна робота магістра. Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, Харків, 2024. 50 с., 23 рис., 33 джерел.

ДІОД, БАР'ЄР ШОТТКІ, ТУНЕЛЮВАННЯ, ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, ЕФЕКТ САМОНАГРІВАННЯ.

Об'єкт дослідження: планарні варізонні діоди з бар'єром Шотткі.

Предмет дослідження: кінетичні процеси в діодах із складним варізонним катодом.

Мета роботи: створенні моделі контакту метал-напівпровідник та відповідної програми числового моделювання процесів в діодах із врахуванням ударної іонізації та температурних полів.

Методи дослідження: Числове моделювання з використання методів Монте-Карло.

Результати дослідження: Створено та програмно реалізовано модель розрахунку планарного GaN-діода, що має складний катод з бар'єром Шотткі з неоднорідним розподілом складу в шарі InGaN уздовж контакту. Отримано характеристики діода. Показано можливість формування енергетичних розподілів носіїв заряду.

Отримані результати можуть бути використані для аналізу роботи високочастотних приладів з ударною іонізацією з урахуванням теплових ефектів в них.

ABSTRACT

Babych D.A. Planar diodes with Schottky barrier. M Master Thesis. V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2024. P. 50, Fig 23, Ref. 33.

DIODE, SHOTTKY BARRIER, TUNNELING, THERMAL CONDUCTION, SELF- HEATING EFFECT

Object of study: planar graded diodes with a Schottky barrier.

The subject of research: kinetic processes in diodes with a complex graded cathode.

Purpose: Creation of metal-semiconductor contact model and a corresponding program for numerical simulation of processes in diodes taking into account impact ionization and temperature distribution.

Study approach: Numerical modeling by using Monte Carlo methods.

Findings: A simulation model of a planar GaN – based diode contained complex Schottky barrier cathode with a non-uniform distribution of the composition in the InGaN layer along the contact was created and implemented by software. Diode characteristics is obtained. The ability to form of energy distributions of charge carriers is shown.

The obtained results can be used to analyze the operation of high-frequency devices with impact ionization, taking into account thermal effects in them.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	7
1 ВЛАСТИВОСТІ НІТРИДНИХ СПОЛУК І БАР'ЄРІВ ШОТТКІ НА ЇХ ОСНОВІ.....	9
1.1 Нітридні сполуки і прилади на їх основі	9
1.2 Планарна та вертикальна концепція виготовлення діодів.....	10
1.3 Будова контактів метал-напівпровідник.....	12
1.4 Омичні контакти метал-напівпровідник.....	18
1.5 Контакти метал-напівпровідник у вигляді бар'єру Шотткі.....	20
1.6 Неметалеві контакти Шотткі до GaN.....	21
2 МОДЕЛЮВАННЯ ПЛАНАРНОГО ДІОДА З ВАРІЗОННИМ КАТОДОМ З БАР'ЄРОМ ШОТТКІ	22
2.1 Загальні підхід до моделювання високочастотних приладів.....	22
2.2 Основні ідеї використання методу Монте-Карло.....	23
2.3 Визначення розподілу електричного потенціалу та температури.....	26
2.4 Механізми розсіювання.....	30
2.5 Модель контакту.....	32
2.6 Результати розрахунку планарної структури з контактом Шотткі....	37
ВИСНОВКИ.....	48
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	49

ВСТУП

Контакт метал–напівпровідник з бар’єром Шотткі (БШ) є об’єктом, якому приділяють велику увагу в напівпровідниковій електроніці. Це пов'язано з його широким і різноманітним використанням починаючи з низькочастотних приладів, які включають елементи силової електроніки, закінчуючи різноманітною НВЧ – технікою. Особливі вимоги до нього обумовлені конкретними умовами застосування залучених в практику напівпровідникових матеріалів. В цьому сенсі заслуговує увагу його використання з нітридними сполуками елементів III групи, які є одними з найбільш перспективних з точки зору їх використання для створення потужних напівпровідникових елементів. Це зумовлено високими експлуатаційними параметрами приладів на основі нітридів, зокрема довговічністю, радіаційною і хімічною стійкістю, високою вихідною потужністю і робочою частотою, а також видатними термічними, механічними характеристиками. Використовуючи можливий арсенал нітридних сполук можна створювати різноманітні гетероструктури різного призначення, насамперед, потужні транзистори з високою рухливістю носіїв заряду, оптоелектронні пристрої видимого та ультрафіолетового діапазонів, силові елементи, різноманітні прилади нанoeлектроніки.

Заслуговує увагу можливість створення на їх основі активних елементів для генерації високочастотних коливань та шуму в широкому діапазоні частот, зокрема діодів Ганна, лавинно-пролітних діодів та ін. Одним з ефектів, які широко використовуються для цих цілей є ударна іонізація. Цей ефект пов'язаний формування областей з високою напруженістю електричного поля, що призводять до суттєвого збільшення концентрації носіїв заряду. Можливим способом керування ударною іонізацією є використання варізонних шарів.

Метою роботи стало дослідження можливості формування складного катодного контакту на основі поєднання бар’єру Шотткі з варізонним шаром InGaN для створення умови виникнення ударної іонізації і селекції носіїв

заряду і подальшому використанню в активних елементах для генерації електромагнітних і шумових коливань.

1 ВЛАСТИВОСТІ НІТРИДНИХ СПОЛУК І БАР'ЄРІВ ШОТТКІ НА ЇХ ОСНОВІ

1.1 Нітридні сполуки і прилади на їх основі

Нітриди III групи (GaN, InN, AlN) і потрійні сполуки на їхній основі формують групу широкозонних матеріалів з унікальними властивостями, що є перспективними для різного застосування під час виготовлення приладів як оптоелектроніки, так і суто електронного призначення. Це зумовлено насамперед меншою ймовірністю утворення дефектів у структурі нітридів, ніж у решітках арсенідів та фосфідів, у зв'язку з сильнішим зв'язком атомів металів з атомами азоту, ніж з атомами арсеніду та фосфору. Така ситуація сприяє підвищенню експлуатаційних параметрів приладів на основі нітридів: довговічності, вихідної потужності, робочої частоти, термічної, механічної, хімічної, радіаційної та хімічної стабільності, швидкодії та напруги живлення.

Розвиток технології та нові можливості, що відкриваються, зі створення субмікронних компонентів і інтегральних схем (ІС) на їхній основі передбачають удосконалення існуючих і створення нових компонентів, адаптованих до діапазонів надвисоких (УВЧ) і вкрай високих частот (КВЧ), які можуть досягати граничних значень до 500 ГГц.

За майже на порядок меншої рухливості, ніж для арсеніду галію, нітрид галію має більшу швидкість насичення, що дає змогу отримувати вищу щільність струму. А наявність істотно більшої критичної напруженості електричного поля зумовлює можливість створення приладів більшої потужності.

За кілька років нітрид галію (GaN) і пов'язані з ним нітридні сплави групи III стали критичними напівпровідниковими матеріалами для різних комутаційних пристроїв завдяки їхнім чудовим властивостям матеріалу, таким як широка і пряма заборонена зона, висока напруженість поля пробою та високий дрейф електронів. швидкість [1]. Зокрема, сплави InGaN широко

досліджуються для розробки сонячних перетворювачів, які отримують високоефективну фотоелектричну систему для підключення до мережі [2].

1.2 Планарна та вертикальна концепція виготовлення діодів

При виготовленні сучасних діодів існує дві концепції побудови електронного пристрою: планарна та вертикальна.

Вертикальна концепція побудови напівпровідникового пристрою характеризується вертикальним розташуванням шарів напівпровідникового матеріалу. У такій конструкції електричний струм протікає вертикально через ці шари, що зазвичай складаються з напівпровідників р-типу та n-типу.

Вертикальні діоди часто знаходять застосування в силовій електроніці та високочастотних застосуваннях. Їх здатність витримувати високі струми та напруги робить їх ідеальними для використання у випрямляючих, перетворювачах та інших силових схемах. У високочастотних додатках вертикальна структура допомагає мінімізувати паразитні ємності та індуктивності, покращуючи загальну продуктивність пристрою.

Багато поширених типів діодів, таких як наприклад діоди Шотткі, часто виготовляються з використанням вертикальної структури. Це дозволяє їм досягати високої продуктивності при компактних розмірах, що дуже важливо у сучасній електроніці, де мініатюризація відіграє ключову роль.

Процес виготовлення вертикальних діодів вимагає точного контролю за формуванням шарів напівпровідника і створенням контактів. Зазвичай використовуються методи епітаксійного зростання для формування шарів з необхідними електричними властивостями. Такий підхід дозволяє точно контролювати характеристики діода, оптимізуючи для конкретних застосувань.

В цілому, вертикальні діоди є важливим класом напівпровідникових пристроїв, що мають унікальні властивості, які роблять їх незамінними в широкому спектрі електронних додатків. Їхня здатність ефективно працювати

при високих струмах і частотах, у поєднанні з компактними розмірами, забезпечує їм важливе місце в сучасній електроніці.

Планарний діод - це напівпровідниковий прилад, у якому структура створюється на плоскій поверхні підкладки. Така конструкція пропонує ряд переваг, у тому числі підвищену ефективність виробництва, зменшений розмір та покращені експлуатаційні характеристик.

Однією з ключових переваг планарних діодів є їхня сумісність із процесами виробництва інтегральних схем. Це дозволяє інтегрувати діоди безпосередньо на одному кристалі разом з іншими компонентами, такими як транзистори та резистори, що значно підвищує щільність компонентів та зменшує розміри електронних пристроїв.

В галузі високочастотних застосувань планарні діоди також демонструють чудові характеристики. Їх малі розміри та низька паразитна ємність дозволяють їм працювати на дуже високих частотах, що робить їх ідеальними для використання в радіочастотних та мікрохвильових схемах. Планарні діоди часто використовуються в змішувачах, детекторах та перемикачах у телекомунікаційному обладнанні та радарних системах.

Незважаючи на багато переваг, планарні діоди мають деякі обмеження. Наприклад, вони зазвичай не можуть працювати з такими високими струмами та напругами, як вертикальні діоди, що обмежує їх застосування в силовій електроніці. Крім того, процес їх виробництва може бути складнішим і дорогим у порівнянні з вертикальними діодами.

Різниця в конструкції призводить до істотних відмінностей у характеристиках пристроїв. Вертикальні діоди зазвичай здатні витримувати вищі струми та напруги завдяки більшій площі p - n переходу та кращому тепловідводу. Це робить їх кращими для застосування в силовій електроніці, де потрібна робота з великими потужностями. Планарні діоди, навпаки, відрізняються меншими розмірами і краще підходять для інтеграції до мікросхем. Їхнє виробництво повністю сумісне з технологічними процесами виготовлення інтегральних схем, що дозволяє створювати компактні пристрої

з високою щільністю компонентів. Ця властивість робить планарні діоди незамінними у сучасній мікроелектроніці.

В області високочастотних застосувань планарні діоди часто мають перевагу через меншу паразитну ємність та індуктивність. Вони широко використовуються в радіочастотних та мікрохвильових схемах, де потрібне швидке перемикання та робота на високих частотах. Вертикальні діоди, хоч і можуть застосовуватися в деяких високочастотних додатках, зазвичай поступаються планарним у цій галузі.

Обидві концепції побудови напівпровідникових пристроїв використовуються й при побудові як діодів Ганна так і діодів Шотткі.

1.3 Будова контактів метал-напівпровідник

Межа розділу метал-напівпровідник є однією з найскладніших проблем у галузі теорії твердого тіла та фізики приладів. Це пов'язано з різноманітними фізичними ефектами, наприклад вплив міжфазних станів на висоту бар'єру, вплив міжфазних шарів (дипольних, оксидних або забруднених), непружне розсіювання, рекомбінація, вертикальні та латеральні флуктуації потенціалу, флуктуації висоти бар'єра, жорсткість поверхні розділу, змішування зонних станів, ефекти гарячих носіїв, реалістичні сили зображення та деякі інші, які роблять теоретичне моделювання складним завданням. Спрощені моделі контакту, наприклад, придатні для моделювання пристроїв, змушені нехтувати більшістю цих ефектів. Крок до більш фізичної моделі замість загальновживаних граничних умов для ідеальних омічних контактів (нейтральність, рівновага) та ідеальних випрямляючих контактів (Шотткі) (термоелектронна емісія, нехтуючи тунелюванням) яку зробив Шредер. Він розвинув добре відому формулу термоелектронної польової емісії (ТПЕ) до аналітичного виразу, використовуючи просту ймовірність переходу через параболічний потенційний бар'єр і відокремлюючи область контакту (емісії) від решти приладу, де струм визначається дрейфовою дифузією. Доповнена

відповідною граничною умовою для рівняння Пуассона, така модель здатна описати перехід від контактів Шотткі до омичних зі збільшенням рівня легування. Недоліком такого підходу є використання наближення ВКБ, яке руйнується, якщо довжина хвилі де Бройля стає порівнянною з шириною бар'єра (омичний контакт або сильний зворотний зсув) і/або якщо струм протікає переважно поблизу максимуму бар'єра (контакт Шотткі).

Структура і властивості контактів метал-напівпровідник залежать в першу чергу від взаємного розташування рівнів Фермі в тому й іншому шарі.

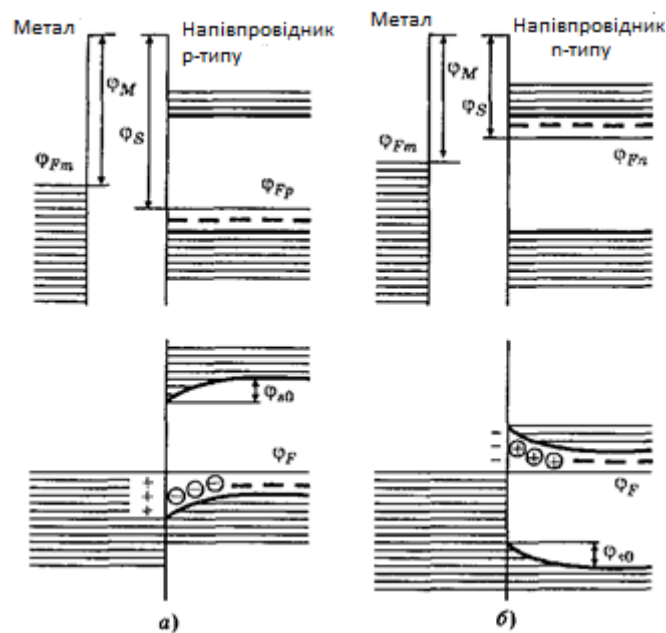


Рисунок 1.1. Зонні діаграми випрямляючих контактів металу з напівпровідником а) - контакт з напівпровідником *p*-типу, б) - контакт з напівпровідником *n*-типу

На рис. 1.1 а показані зонні діаграми для випадку, коли $j_{Fm} > j_{Fp}$. Таке співвідношення означає, що заповненість зони провідності в напівпровіднику менше, ніж заповненість такої ж енергетичної ділянки металу. Тому після «дотику» шарів частина електронів перейде з металу в напівпровідник *p*-типу. Поява додаткових електронів у приповерхневому шарі напівпровідника призводить до посиленої рекомбінації. Внаслідок цього зменшується кількість основних носіїв — дірок, і поблизу кордону з металом «оголюються» некомпенсовані негативні іони акцепторів. З'являється електричне поле, яке

перешкоджає подальшому припливу електронів. Енергетичні рівні виявляються викривленими "вниз".

На рис. 1.1 б показані зонні діаграми для випадку $j_{Fm} < j_{Fp}$, коли після дотику шарів електрони переходять з напівпровідника n-типу в метал. Відповідно поблизу кордону з металом "оголюються" некомпенсовані позитивні іони донорів, а зони викривляються "вгору". Контакти такого роду зараз створюються напиленням металу на напівпровідник у вакуумі.

Обмін електронами між металом та напівпровідником зазвичай характеризують не різницею «вихідних» рівнів Фермі, а різницею робіт виходу. Роботою виходу електрона з твердого тіла називають енергію, необхідну для вильоту за межі кристала. На зонних діаграмах робота виходу є енергетична «відстань» між рівнем вільного електрона поза твердим тілом і рівнем Фермі. На рис. 1.1 роботи виходу з металу і напівпровідника позначені відповідно через j_m і j_s . Різниця робіт виходу $j_{ms} = j_m - j_s$, виражену у вольтах, називають контактною різницею потенціалів. Залежно від співвідношення робіт виходу j_m і j_s , електрони переходять у той чи інший шар.

Ступінь викривлення енергетичних зон поблизу поверхні (рис. 1.1) характеризується величиною рівноважного поверхневого потенціалу j_{s0} . Якщо знехтувати роллю поверхневих станів, то величина j_{s0} дорівнюватиме контактної різниці потенціалів j_{ms} .

Обидва контакти, показані на рис. 1.1 характерні наявністю збіднених шарів в приконтактному шарі напівпровідника. Тут концентрація основних носіїв менша порівняно з рівноважною. Отже, такий приконтактний шар має підвищений питомий опір і тому визначає опір усієї системи.

Потенційний бар'єр у приконтактному шарі називають бар'єром Шотткі. Залежно від полярності прикладеної зовнішньої напруги потенціал і відповідно опір приконтактного шару змінюватиметься, то потенційний бар'єр

у контакті на рис 1.1, а підвищується. , напруга з цією полярністю є для цього контакту зворотною. Рис. 1.1 б при тій же полярності напруги потенційний бар'єр знижується, приконтактний шар збагачується основними носіями - електронами і його опір буде менше рівноважного. Таким чином, контакти, показані на рис. 1.1, мають випрямляючі властивості і можуть бути основою діодів.

Варіантом контактів, що випрямляють, є контакт, в якому поблизу контакту напівпровідника з металом утворюється інверсійний шар, тобто, шар із протилежним типом провідності.

Зонна діаграма контакту, що містить інверсійний p -шар, показана на рис. 1.2. Цей випадок характерний для сильного викривлення зон, тобто, для великих контактних різниць потенціалів, коли поблизу межі поділу рівень електростатичного потенціалу перетинає рівень Фермі.

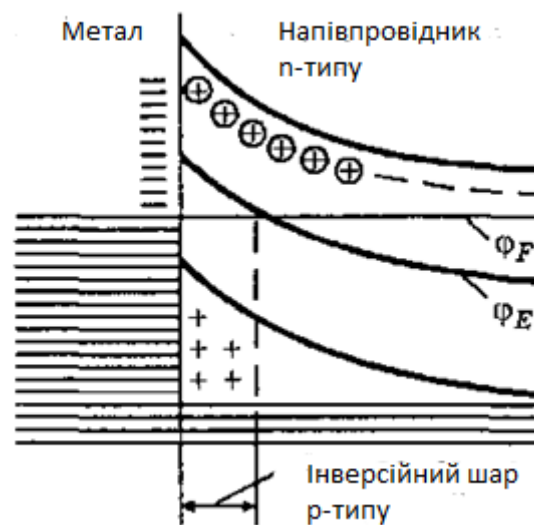


Рисунок 1.2. Зонна діаграма контакту, у якому утворюється інверсійний шар

Найважливішою особливістю діодів Шотткі у порівнянні з p - n -переходом є відсутність інжекції неосновних носіїв. Звідси випливає, що у діодів Шотткі відсутня дифузійна ємність, пов'язана з накопиченням та розсмоктуванням неосновних носіїв у основі. Відсутність дифузійної ємності істотно підвищує швидкодію діодів при змінах струмів і напруг, у тому числі при перемиканнях з прямого напрямку на зворотний і зворотний на прямий.

Час таких перемикачів визначається лише бар'єрною ємністю і у діодів з малою площею може становити десяті та соті частки наносекунди.

Не менш важливою особливістю діодів Шотткі є значно менша пряма напруга порівняно з напругою на p - n -переході. Це пояснюється тим, що у діодів Шотткі тепловий струм істотно більший, оскільки дифузійна швидкість D/L , характерна для p - n -переходу, у діода Шотткі замінюється на середню теплову швидкість носіїв J_T . Остання перевищує величину D/L приблизно на 3 порядки. У такому ж відношенні розрізняються теплові струми. Пряма напруга у діодів Шотткі буде приблизно на 0,2 В менше, ніж у p - n -переходу. Що стосується зворотних струмів, то вони можуть становити, залежно від площі, 10^{-11} - 10^{-12} А, тобто близькі до реальних зворотних струмів кремнієвих p - n -переходів, що визначаються термогенерацією. Ще одна особливість діодів Шотткі полягає в тому, що їх пряма гілка ВАХ суворо підкоряється експоненційному закону в дуже широкому діапазоні струмів, наприклад, від 10^{-12} до 10^{-14} А.

Якісні бар'єри Шотткі утворюються при контакті напівпровідників з такими металами, як молібден, ніхром, золото, платина, а також алюміній – основний матеріал для металізації в ІС.

Розглянемо випадок зображений на рис.1.3. Нехай для контакту металу з напівпровідником p -типу має місце нерівність ($j_{ms} > 0$), а для контакту з напівпровідником n -типу — нерівність ($j_{ms} < 0$). і зони скривляються «вгору», а в другому випадку електрони переходитимуть з металу в напівпровідник і зони скривляються "вниз".

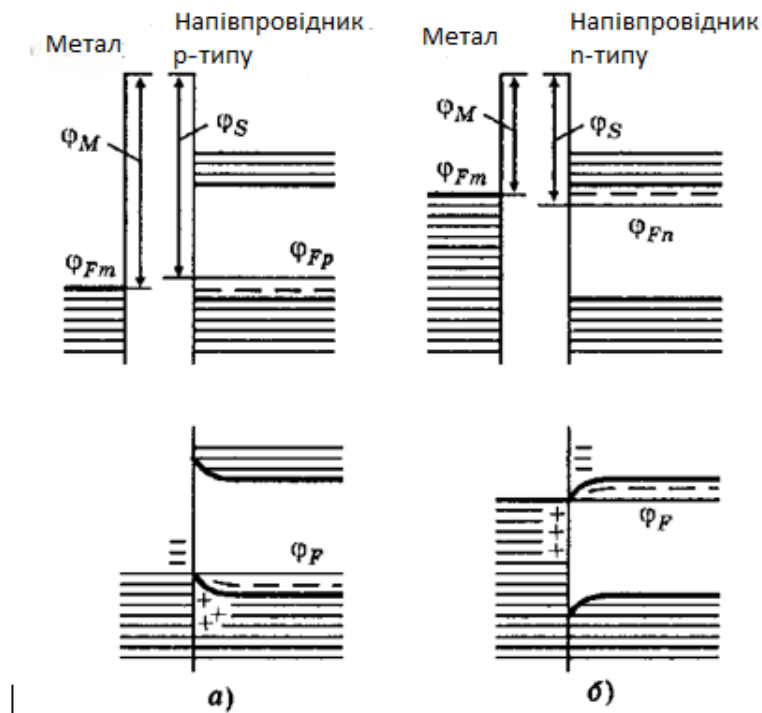


Рисунок 1.3. Зонні діаграми не випрямляючих контактів метал-напівпровідник: а — контакт з напівпровідником *p*-типу; б - контакт з напівпровідником *n*-типу

У таких контактах поблизу границі напівпровіднику накопичуються основні носії, тобто, виходять збагачені шари. Їх довжина становить соті частки мікрометра. Як видно із рис. 1.3, ми прийняли дуже невеликі контактні різниці потенціалів, тому викривлення зон незначне і напівпровідники залишаються не виродженими. Якщо прийняти значення $j_{ms} = 0,1-0,2$ і більше, то викривлення зон буде значно сильніше і поблизу границі поділу метал-напівпровідник рівень Фермі проходитиме через відповідну дозволону зону. На цій ділянці напівпровідник перетворюється на напівметал із малим питомим опором.

Наявність збагаченого шару означає, що опір системи в цілому визначається нейтральним шаром напівпровідника і, отже, не залежить від величини, ні від полярності прикладеної напруги. Такі комбінації металу, що не випрямляють, з напівпровідником називають омічними контактами.

Омічні контакти здійснюються у місцях приєднання висновків до напівпровідникових шарів. Отримання омічних контактів - завдання не менш важливе, ніж отримання контактів, що випрямляють. Крім двосторонньої провідності, важливою властивістю омічного контакту є мізерний час життя надлишкових носіїв у збагаченому шарі. Тому під час аналізу напівпровідникових приладів зазвичай вважають, що концентрації надлишкових носіїв на омічному контакті дорівнюють нулю.

1.4. Омічні контакти метал-напівпровідник

Омічний контакт — це контакт метал-напівпровідник, у якому потенційний бар'єр на межі розділу відсутній або прозорий для тунелювання носіїв. Омічні контакти демонструють лінійні вольт-амперні характеристики (ВАХ) і є основними будівельними блоками будь-якого напівпровідникового пристрою, забезпечуючи передачу сигналу від пристроїв до зовнішньої схеми або навпаки. Контактний опір є важливим параметром, що характеризує межі розділу метал-напівпровідник. Це загальний опір переходу метал-напівпровідник отже, він залежить від площі контакту. Більш корисним фізичним параметром, що описує характеристики омічних контактів, є питомий контактний опір. Співвідношення між опором контакту та питомим опором контакту в контакті метал-напівпровідник можна розглядати аналогічно зв'язку між опором і питомим опором резистора.

Перші дослідження омічних контактів до GaN n-типу були зосереджені на металах з низькою робочою функцією, таких як титан (робота виходу - 4,33 еВ [3]) або алюміній (4,28 еВ [3]), і проводилися на дуже високолегованих матеріалах (з $N_D > 10^{18} \text{ см}^{-3}$) [4]. Крім того, крім того, що титан сам по собі є металом з низькою робочою функцією, він також надзвичайно реагує з GaN при відпалюванні, і може утворювати нітрид титану який забезпечує низьку роботу виходу на межі поділу контакт-напівпровідник.

Для отримання низькоомного омичного контакту після відпалу, контактний шар повинен мати низьку робочу функцію і незначний опір. Крім того, він повинен обмежувати дифузію верхніх металів на поверхню GaN. Як правило, в якості першого металевого шару використовують тугоплавкі метали (такі як, наприклад: Ti та Ta), оскільки реакція з GaN і утворення нітридних сполук (TiN, TaN) є термодинамічно сприятливою [5]. Утворення TiN призводить до кількох важливих переваг. Фактично, дифузія N-атомів з GaN призводить до утворення вакансій азоту, які діють як донори і збільшують концентрацію носіїв заряду на границі поділу контакт-напівпровідник.

Крім того, при відпалюванні контакт на основі титану має перевагу у зменшенні можливого власного оксиду (Ga_2O_3), що утворюється на поверхні GaN [6]. Другий металевий шар, який називається оверлейним, повинен бути здатним утворювати сполуки з низькою робочою функцією з іншими металами. Зазвичай використовується алюміній, оскільки він добре задовольняє цю вимогу. Третій шар (Ni, Ti, Pt, Pd, Mo, Re або Ir) називається бар'єрним. Він, як правило, має високу температуру плавлення ($> 1400^\circ\text{C}$), щоб стабілізувати багат шарову структуру під час відпалу, обмежуючи взаємодифузію перших двох шарів металу з верхнім четвертим шаром

Тим не менш, окремі металеві шари, такі як Ti або Al, зазвичай не підходять для формування низькоомних омичних контактів з GaN n-типу. Насправді, їх висока схильність до окислення робить ці прості контакти непридатними, особливо в силових пристроях, де потрібна робота при високих температурах [7]. Крім того, використання тільки Ti може також призвести до утворення пустот на межі розділу при відпалі, що призводить до поганого механічного контакту [8]. Отже, кращою альтернативою є використання бішару Ti/Al, де верхній шар Al дозволяє формувати стабільні шари з низькою робочою функцією з нижнім шаром Ti при відпалюванні. Проміжкові шари, що утворюються при відпалі бішару Ti/Al, також є більш стійкими до окислення.

Використання пристроїв на основі GaN обмежене декількома матеріалами та інженерними проблемами, включаючи труднощі у виготовленні термостійких омичних контактів з низьким опором, особливо для GaN *n*-типу. Одним із ключових питань при створенні таких контактів є їх погана відтворюваність при однакових рівнях металізації.

1.5. Контакти метал-напівпровідник у вигляді бар'єру Шотткі

У середині 1990-х років було виконано величезну роботу з вивчення контактів Шотткі з GaN, яка заклала міцний фундамент для подальшого розвитку вертикальних і латеральних діодів Шотткі на основі GaN. Вперше про контакт Шотткі з *n*-GaN повідомили у роботах [9] та [10]. Утворення контактів Шотткі для GaN структури за допомогою Ni, Pd і Pt широко вивчалось різними дослідницькими групами [11].

Фундаментальною проблемою для контактів Шотткі до нітридних напівпровідникових сполук є виникнення високих зворотних струмів витоку [12]. Для GaN та інших високоіонних напівпровідників висота бар'єру Шотткі контактів металу з III-нітридом сильно залежить від різниці між роботою виходу металу та спорідненістю до електрона напівпровідника [13].

Для виготовлення практичних сонячних перетворювачів, включаючи інші комутаційні пристрої, електричний контакт Шотткі з низьким питомим опором і істотною висотою бар'єру є найбільш фундаментальним питанням. Однак реалізація контакту Шотткі з InGaN все ще є складною через сильне закріплення рівня Фермі поблизу валентної зони в структурі метал/InGaN [14].

Термічна стабільність контакту Шотткі важлива для діодів Шоткі на основі GaN, оскільки для застосувань у системах з великими струмами бажана висока робоча температура. При підвищеній температурі метал контакту Шотткі реагує з GaN, поступово перетворюючи контакт на невикривляючий. Так у роботі [15] повідомляється, що контакт Шотткі з нікелю починає реагувати з GaN, утворюючи нітриди нікелю, при температурі вище 200 °C.

Для благородного металу Pd дифузія металу і GaN була виявлена при 300 °C [16].

Якщо стабільну температуру визначати як температуру, при якій контакт Шотткі все ще є випрямляючим контактом після 1 години відпалу, то найвища стабільна температура для Ni і Pt становила 500 °C [17] і 400 °C [18], відповідно.

Для покращення стабільності контакту Шотткі з GaN було застосовано кілька методів. Термічна стабільність силіциду металу зазвичай краща, ніж елементарного металу. Стабільна температура для NiSi [17] і PtSi [18] становить 600 °C, що на 100-200 °C вище, ніж для елементарних Ni і Pt. Багатошарова структура контакту з інертним металом з високою температурою плавлення в якості вставних або покривних шарів також може сприяти підвищенню термічної стабільності контакту Шотткі. Стабільна температура двошарового контакту Шотткі Ni/Ta становить 700 °C [19], що на 200 °C вище, ніж у чистого Ni.

1.6. Неметалеві контакти Шотткі до GaN

Також слід розглянути й неметалеві контакти які формують контакт Шотткі, а саме графенові контакти Шотткі до GaN, оскільки вони прозорі і мають потенційне застосування в оптоелектронних пристроях. Так у роботі [20] повідомили про графеновий і багатошаровий графеновий контакт Шотткі з висотою бар'єру 0,74 eV в осажденному стані і 0,70 eV після тривалого відпалу при ~600 °C. Великий фактор ідеальності (>2) вказує на високу неоднорідність контакту. Авторам у роботі [21] вдалось створити покращений графеновий контакт Шотткі з висотою бар'єру 0,9 eV і фактором ідеальності 1,32. .

2 МОДЕЛЮВАННЯ ПЛАНАРНОГО ДЮДА З ВАРІЗОННИМ КАТОДОМ З БАР'ЄРОМ ШОТТКІ

2.1 Загальні підхід до моделювання високочастотних приладів

З огляду на нерівноважність функції розподілу $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ носіїв заряду в напівпровідниках, пов'язану з ймовірностними процесами, розповсюдженням і точним методом моделювання транспорту носіїв заряду в напівпровідникових приладах є метод Монте-Карло.

Функція розподілу носіїв визначається за допомогою розрішення кінетичного рівняння Больцмана:

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

Рівняння (2.1) описує яким чином змінюється розподіл носіїв заряду з часом в залежності від характеру їх руху у прискорюючому, або сповільнюючому полі та врахуванні розсіювання. У рівнянні (2.1) складова правої - $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_E$ відповідає за вплив з боку зовнішніх сил, що діють на заряджені частинки (електричного чи магнітного полів), а друга складова - $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{3T}$ називається інтеграл зіткнень, яка відповідає за вплив розсіювання на розподіл частинок. Механізми розсіювання в напівпровідниках розділяються на взаємодію носіїв заряду між собою (електрон-електронна взаємодія), та взаємодію з кристалічною решіткою матеріалу. Таким чином друга складова може бути представлена наступним виразом:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{3T} = \mathcal{P}_k^{HK} f(\vec{k}, \vec{r}, t) + \mathcal{P}_k^{HH} f(\vec{k}, \vec{r}, t). \quad (2.2)$$

де $\mathcal{P}_k^{HK} f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ та $\mathcal{P}_k^{HH} f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ описують взаємодію носій-кристалічна гратка та носій-носій, відповідно.

Розглянемо детальніше першу складову, яка пов'язану з взаємодією носіїв з кристалічною ґраткою:

$$\dot{F}_{\vec{k}}^{HK} f(\vec{k}, \vec{r}, t) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int W_{\Sigma}(\vec{k}, \vec{k}') \left(f(\vec{k}, \vec{r}, t) - f(\vec{k}', \vec{r}, t) \right) d\vec{k}', \quad (2.3)$$

де V - об'єм кристала, $W_{\Sigma}(\vec{k}, \vec{k}')$ - сумарна ймовірність незалежних процесів розсіювання за одиницю часу для носія заряду при якій він переходить із стану з імпульсом $\vec{k}$ у стан з імпульсом $\vec{k}'$. Повна ймовірність буде залежати від положення в просторі $\vec{r}$, відповідно, визначається матеріалом приладу.

При моделюванні кінетичних процесів в малорозмірних приладах (суб- та мікронні) до носіїв заряду можна застосувати певні наближення, а саме, розглянути частину що має масу та заряд. В цьому наближенні рух частинок у фазовому просторі відбувається за траєкторіями, які описуються рівняннями:

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}), \quad (2.4)$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = e \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.5)$$

де $\vec{E}$ - напруженість електричного поля, e - заряд електрона, $E(\vec{k})$ - закон дисперсії, що визначає зв'язок кінетичної енергії з імпульсом.

В результаті функція розподілу носіїв заряду, яка стає відомою за допомогою рішення рівняння Больцмана, дозволяє визначити концентрації носіїв заряду в певній області простору в певний час. Крім того ця функція дає змогу визначити значення кінетичної енергії та дрейфової швидкості частинок, і, в подальшому визначити густину струму.

2.2 Основні ідеї використання методу Монте-Карло

Метод Монте-Карло дозволяє проводити аналіз напівпровідникових приладів. Метод полягає у розгляді руху носіїв заряду у зовнішніх полях та урахування випадкових процесів розсіювання, які відбуваються з ним та

спричиняють зміни у характері руху. В результаті стає можливим визначення параметрів кожної частинки, яка приймає участь у роботі приладу.

Основною перевагою методу Монте-Карло є його висока точність [22] яка відповідає точному розв'язку кінетичного рівняння Больцмана (2.1). Автори роботи [23] стверджують, що цей метод застосований до моделювання приладів з міждолинним перенесенням електронів дає змогу отримати найбільш точні результати. Крім того, універсальність даного методу полягає у здатності його застосування для моделювання приладів складної геометрії та нерівномірним розподілом матеріалу та легування, та урахування ударної іонізації.

На рис.2.1 продемонстровані основні етапи моделювання пристрою методом Монте-Карло.

Перший етап, ініціалізації, відповідає за визначення необхідних сталих, розмірів та геометрії розглянутих приладів, розподіл домішок та складу сполук, дискретизацію простору та часу і початкового розподілу частинок які моделюють носії заряду у приладі.

Визначення кроків дискретизації по часу та просторі є важливою задачею при моделюванні напівпровідникових приладів мікронного та субмікронного розмірів з огляду на швидкоплинність процесів які протікають у таких приладах. Час взаємодії електрона зі структурними дефектами кристалу становить близько 10^{-14} с, однак з іншого боку крок по часу повинен бути набагато меншим за плазмову частоту, яка у свою чергу пропорційна $\sqrt{n}$. У той час як крок для просторової дискретизації розподілу потенціалу, яка повинна бути меншою за найменшу довжину хвилі коливання заряду, яка у свою чергу приблизно дорівнює довжини хвилі Дебая. З іншого боку крок просторової дискретизації повинен бути більшим за довжину вільного пробігу частинки за крок дискретизації по часу

$$\Delta x \gg l_{\max} = u_{\max} \times \Delta t, \quad (2.6)$$

де $u_{\max}$ - максимальна швидкість носіїв заряду у напівпровіднику.

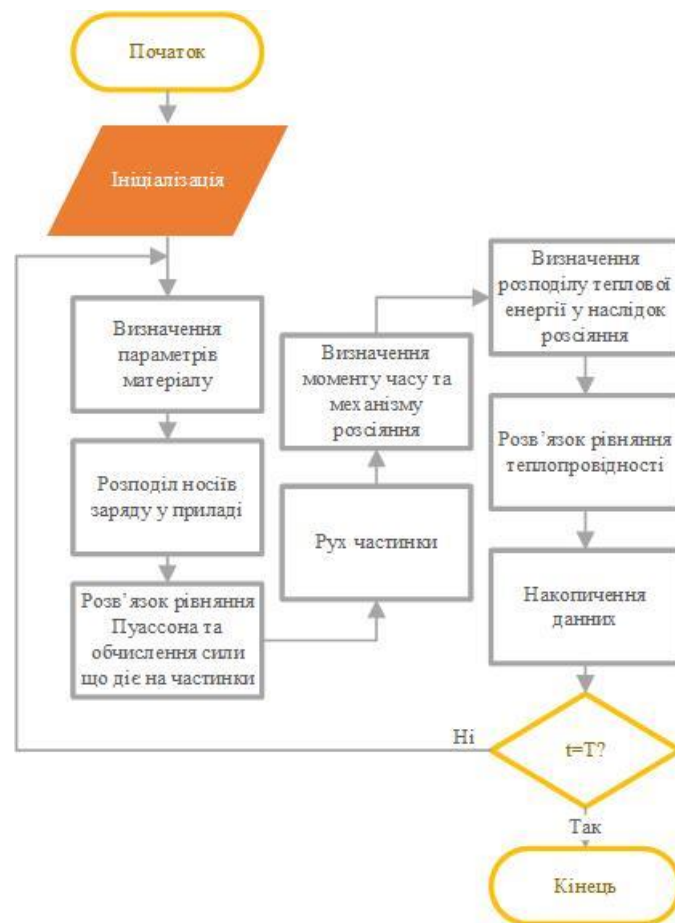


Рисунок 2.1 - Загальна процедура моделювання пристрою напівпровідникової електроніки методом Монте-Карло.

Таке обмеження пов'язано з можливістю суттєвої зміни щільності заряду за достатньо великий часовий Δt , як наслідок, виникнення та накопичення похибки у визначенні функції розподілу та розрахунку сил, що діють на носії.

Аналогічно до кінетичного рівняння Больцмана рух частинок можна визначити двома компонентами: перше це вільний пробіг під дією електричного поля та зміну стану після розсіювання.

При моделюванні, рух частинки в електричному полі розглядається як рух класичної частинки, що відповідає другому закону Ньютона:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d(m\vec{u})}{dt} = e\vec{E}. \quad (2.7)$$

де $\vec{u}(\vec{p}) = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E$, E - енергія частинки.

Напівпровідниковим сполукам відповідає непараболічна дисперсія швидкості від енергії, що необхідно враховувати під час моделювання:

$$\vec{u}(\vec{p}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}}{m^* \sqrt{1 + 2\alpha p^2 / m^*}}. \quad (2.8)$$

У зв'язку з неможливістю аналітичного розв'язку (2.8), для його рішення необхідно використовувати числове інтегрування. В цьому випадку використовується наближення, що вплив зовнішніх сил на носій залишається сталим протягом малого інтервалу часу.

Після завершення вільного прольоту носія заряду випадковим чином обирається момент часу τ та певний механізм розсіювання. Момент τ визначається рівнянням:

$$\int_0^t W_{\Sigma}(E(\tau)) dt = -\ln z, \quad (2.9)$$

де z - випадкове число рівномірно розподілене в інтервалі $[0..1]$.

Вибір механізму розсіювання відбувається за допомогою методу Неймана. На першому етапі генерується випадкове, рівномірно розподілене в інтервалі від 0 до 1, число та порівнюється з випадковими сумами:

$$\sum_{i=1}^{m-1} \frac{W_i(E)}{W_{\Sigma}(E)} < z < \sum_{i=1}^m \frac{W_i(E)}{W_{\Sigma}(E)}, \quad (2.10)$$

де $m = 1, 2, 3 \dots m_{\max}$, $m_{\max}$ - число врахованих механізмів розсіювання, $W_i(E)$ - ймовірність конкретного механізму розсіювання, $W_{\Sigma}(E)$ - сума ймовірностей усіх механізмів розсіювання. Тобто у випадку виконання нерівності частинка розсіюється з процесом розсіювання за номером m .

2.3 Визначення розподілу електричного потенціалу та температури

Для визначення руху частинок треба знати силу, яка діє на неї, а, значить, розподіл електричного поля в просторі, де вона знаходиться. Електричне поле знаходиться диференціюванням електростатичного

потенціалу, що формується просторовим розподілом заряду і повинен бути визначеним у кожен момент часу протягом моделювання. При цьому, зважаючи на малі розміри просторової дискретизації його треба знати як можна точніше, що передбачає розв'язання рівняння Пуассона на кожному кроку по часу, і мати ефективний алгоритм його знаходження.

На першому кроці робиться заміна безперервного простору на його дискретний аналог і в ньому знаходиться точковий розподіл потенціалу. На практиці, положення носіїв заряду є безперервною і його також необхідно дискретизувати. Ця процедура отримала назву роздавання заряду і реалізується в вигляді схеми розподілу заряду – «хмара» в комірці [24]. У неонорідному просторі рівняння Пуассона для потенціалу φ має вигляд:

$$\nabla[\varepsilon \nabla \varphi] = L\varphi = -q[N_D(x, y) - N_A(x, y) - n(x, y) + p(x, y)]. \quad (2.11)$$

де всі величини залежать від координат: ε - діелектрична стала, $N_D(x, y)$ - донорна домішка, $N_A(x, y)$ - акцепторна домішка, $n(x, y)$ та $p(x, y)$ - концентрації носіїв заряду(електронів та дірок відповідно).

Стандартний підхід для дискретизації - метод скінченних різниць. Стосовно рівняння Пуассону у двовимірному випадку застосовують найчастіше 5-ти точковий шаблон:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_x} \left(\left(\varepsilon_{i,j} \frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{h_x} \right) - \left(\varepsilon_{i+1,j} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{h_x} \right) \right) + \\ & \frac{1}{h_y} \left(\left(\varepsilon_{i,j} \frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{h_y} \right) - \left(\varepsilon_{i,j+1} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{h_y} \right) \right) = f_{i,j} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Для рівномірної сітки отримуємо:

$$\begin{aligned} L\varphi = & \left(\left(\varepsilon_{i,j} (\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}) \right) - \left(\varepsilon_{i+1,j} (\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}) \right) \right) + \\ & \left(\left(\varepsilon_{i,j} (\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}) \right) - \left(\varepsilon_{i,j+1} (\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}) \right) \right) = h^2 f_{i,j} \end{aligned} \quad (2.13)$$

(2.13) являє собою систему лінійних алгебраїчних рівнянь, пошук розв'язків якої виконується з використанням ітераційних методів, які. дозволяють знайти точний розв'язок послідовним його уточненням.

В роботі застосовано багатосітковий алгоритм розв'язання. Він має обчислювальну складність $O(N)$, де N - розмірність системи лінійних рівнянь, що мало у порівнянні з тим же прямим методом Гаусса-Зейделя - $O(N^2)$, [25,26]. Ідея багатосіткового методу - релаксація похибки розв'язку на сітках, які мають більший крок просторової дискретизації.

Багатосітковий метод включає процедури: інтерполяції, обмеження, пошуки нев'язки до розв'язку та згладжування.

Для згладжування використовується метод Гаусса-Зейделя та швидкий алгоритм Red-Black [27].

Похибка розв'язку знаходиться як різниця розв'язками двох послідовних ітерацій:

$$\mathcal{G}_h^i = u_h^{i+1} - u_h^i. \quad (2.14)$$

Нев'язка є різниця між правою частиною рівняння Пуассона та результатом дії оператора на розв'язок:

$$r_h^i = -f_h - L_h u_h^i. \quad (2.15)$$

Тоді:

$$L(u_h^{i+1} - u_h^i) = L\mathcal{G}_h^i = r_h^i. \quad (2.16)$$

З (2.16) можна знайти похибку і провести корекцію розв'язку.

Головна перевага багатосіткового методу є необов'язкість пошуку точного розв'язку. Достатньо наближене значення нев'язки перенести на більш грубу сітку і відкоригувати. В результаті на детальній сітці зменшуються високочастотні компоненти похибки, а на грубій - низькочастотні, оскільки на ній вони стають високочастотними.

Для перенесення розв'язку та нев'язки між сітками використовується процедура обмеження та інтерполяції: для перенесення значень сіткової функції з більш детальної на грубу сітку, використовується схема з повними вагами, для перенесення значень з грубої на детальну - бікубічна інтерполяція [26].

В подібний спосіб знаходиться розподіл температури в приладі. Для цього потрібно розв'язати рівняння теплопровідності, яке дозволяє отримати розподіл температури у пристрої:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q(x, y, t, T), \quad (2.17)$$

Де ρ, c, λ - густина, питома теплоємність, теплопровідність речовини відповідно, $Q(x, y, t, T)$ - питома потужність внутрішніх джерел. Рівняння 2.17 можна переписати у такому вигляді:

$$\rho c \frac{T_h^i - T_h^{i-1}}{\tau} = \nabla \left(\lambda_h^i \nabla T_h^i \right) + Q_h^i, \quad (2.18)$$

де T_h^i - розподіл температури на поточній ітерації по часу, T_h^{i-1} - відомий розподіл температури на попередній ітерації по часу, τ - крок по часу. Зосереджуємо всі невідомі в лівій частини рівняння, а відомі в правій:

$$\tilde{L} T_h^i = \nabla \left(\lambda_h^i \nabla T_h^i \right) - \frac{\rho c}{\tau} T_h^i = - \left(\frac{\rho c}{\tau} T_h^{i-1} + Q_h^i \right) = f_h. \quad (2.19)$$

Вираз (2.19) подібний до виразу (2.13), відміна полягає лише в різницевому операторі який діє на температуру, але оператор залишається лінійним, а отже стає можливим використати для знаходження рішення рівняння теплопровідності багатосітковим методом.

Окремим питанням є знаходження розподілу внутрішніх джерел. У роботі [28] детально описано процес моделювання термічних явищ у приладах напівпровідникової електроніки. З цієї роботи питома потужність внутрішніх джерел тепла за рахунок розсіювання носіїв заряду обчислюється наступним чином (на прикладі електронів):

$$Q = \frac{n}{N_q \tau} \sum \left(\hbar \omega_{\text{випр}} - \hbar \omega_{\text{погл}} \right), \quad (2.20)$$

де n - густина електронів, N_q - кількість частинок що моделюється, τ - крок по часу, $\hbar \omega_{\text{випр}}$, $\hbar \omega_{\text{погл}}$ - випромінювана або поглинена енергія у результаті процесів розсіювання.

2.4 Механізми розсіювання

Метод Монте-Карло передбачає обчислення моменту розсіяння частинки та механізму, який спричинив це розсіювання. Відповідно потрібні всі ймовірності діючих механізмів розсіювання.

Ймовірність розсіяння на деформаційному потенціалі акустичних фононів для нераболічного закону дисперсії визначається виразом:

$$W_{дА}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{\Xi_d^2 m^*}{4\pi \rho s_l \hbar^2 k} \int \left(N_{\vec{q}b} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\eta} \left[(\eta + \alpha \hbar \omega_{\vec{q}b})^2 - \frac{\alpha \hbar^2 q^2}{2m} \right] q^2 dq, \quad (2.21)$$

Знаки $\pm$ відповідають поглинанню і випромінюванню відповідно, ρ - густина; q - величина хвильового вектору фонона; s_l - швидкість повздовжніх акустичних хвиль; Ξ_d - постійна деформаційного потенціалу у повздовжньому напрямку; $N_{\vec{q}b}$ - число фононів:

$$N_{\vec{q}b} = (\exp(\hbar \omega_{\vec{q}b} / kT) - 1)^{-1}, \quad (2.22)$$

Кут розсіяння:

$$-1 \leq \cos \theta = \frac{2q_s \eta - q(1 - 2\alpha m^* s_l^2)}{2k} \leq 1, \quad (2.23)$$

де: $q_s = m^* s_l / \hbar$.

Якщо частинка розсіюється на деформаційному потенціалі оптичних фононів, то враховуючи дисперсію оптичного фонону, маємо:

$$W_{до}^{\pm}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{D_0^2 m_d^{*3/2}}{\rho \omega \hbar^3 k} \left(N_{\omega_0} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \sqrt{E + \hbar \omega} \Theta(E \pm \hbar \omega) K^{\pm}, \quad (2.24)$$

Тут $K^{\pm} = 0,5 \sqrt{1 + \alpha(E \pm \hbar \omega)(1 + 2\alpha E + \alpha \hbar \omega + 1/(1 + 2\alpha E))}$ - постійна.

D_0 - величина деформаційного потенціалу; ω - частота коливань фононів; де: m_d^* - ефективна маса густини станів;

Кут розсіяння :

$$-1 \leq \cos \theta = \frac{2m^* \hbar \omega_0 (1 + 2\alpha E_i \pm \alpha \hbar \omega_0) / q \mp q}{2k} \leq 1. \quad (2.25)$$

Для полярних напівпровідників треба також полярне оптичне розсіювання. Його імовірність:

$$W_{\text{по}}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{e^2 \omega m^*}{\hbar^2 k \eta} \left(\frac{1}{\chi_{\infty}} - \frac{1}{\chi_{\text{ст}}} \right) \left(N_{\omega} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \left((\eta \pm \alpha \hbar \omega)^2 \ln \frac{q_{\text{max}}^{\pm}}{q_{\text{min}}^{\pm}} - \frac{\alpha \hbar^2 k k^{\pm}}{m^*} \right), \quad (2.26)$$

де $k^{\pm} = \sqrt{2m_d^*(E \pm \hbar \omega)(1 + \alpha(E \pm \hbar \omega))} / \hbar$; $q_{\text{max}}^{\pm} = k + k^{\pm}$; $q_{\text{min}}^{\pm} = \pm(k^{\pm} - k)$.

Для високих енергій актуальним є ймовірність міждолинного розсіювання, між долинами зони провідності. Його імовірність -

$$W_{\text{мд}}^{\pm}(E_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{Z_j D_{ij}^2 m_{di}^{\frac{3}{2}}}{\rho \hbar^2 \hbar \omega} \left(N_{\omega} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \quad (2.27)$$

$$\cdot (1 + \alpha_i E_i)(1 + \alpha_j E_j)(1 + 2\alpha_j E_j)^{-1} \sqrt{E_j(1 + \alpha_j E_j)}$$

де: Δ_{ij} - різниця енергій між мінімумами долин між яким відбувається перехід;

Z_j - кількість еквівалентних долин у зоні Брілюена.

Для легованого напівпровідника актуальним розсіювання на є домішках. Для імовірності можна використати метод Рідлі [29].

Якщо маємо справу з напівпровідниковими сполуками, наприклад потрійними сполуками виду $A_x B_{1-x} C$, то невпорядкованість у розташуванні атомів у вузлах кристалічної решітки призводить до порушення періодичності і, відповідно, є фактором розсіювання. Цей механізм характеризується сплавним потенціалом, а його імовірність можна знайти відповідно до моделі Мотта [28,31]:

$$W_{\text{сп}}(E) = \left(\frac{x(1-x)r_0^3}{\pi} \right) \left(\frac{U_{\text{сп}}^2 d}{\hbar^4} \right) m^* (1 + 2\alpha E) \sqrt{2m^* E (1 + \alpha E)}, \quad (2.28)$$

де $U_{\text{сп}}$ - потенціал розсіювання, d - невпорядкованість кристалічної решітки ($0 \leq d \leq 1$), α - коефіцієнт непараболічності, r_0 - радіус комірки Вігнера-Зейтца,

2.5 Модель контакту

Більшість теоретичних робіт, що описують інжекцію гарячих електронів метал-напівпровідник через емісію через тунельний перехід.

Електрони з емітера повинні перейти у стани у шарі напівпровідника. Розрахунок тунельного струму включає встановлення зв'язку одного стану імпульсу з іншим за допомогою принципів збереження енергії та паралельної складової імпульсу в наближенні плоскості поверхні.

Метод Монте-Карло замінює чисельні методи розв'язування неперервних інтегралів із випадковою вибіркою складної області інтегрування фазового простору. Перевага методу Монте-Карло в цьому випадку очевидна в тому факті, що для обчислення значень із довільною точністю потрібні лише геометрія простору k і знання коефіцієнтів зв'язку. Це забезпечує інструмент для зміни моделі просто для спеціальних доповнень, які в іншому випадку вимагали б суттєвого перегляду алгоритму.

Для моделювання інжекції гарячих електронів у переході нам потрібно лише відібрати простір початкових станів (від емітера), які сприяють тунелюванню і знайти сумму їх внесків у загальний струм для кожної ітерації вибірки.

Найпростішою моделлю для металу є газ із вільними електронами, модель, яка враховує лише квадратичне співвідношення дисперсії та принцип Паулі. Це означає, що можливі стани з яких відбувається переходи у напівпровідник знаходяться з умови:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) < E_F \quad (2.29)$$

При нулі температури ці стани зайняті в утворюють сферу в просторі k , радіус якої визначається найвищою заповненою енергією E_F (енергією Фермі).

При ненульовій температурі T край цієї кулі спотворюється тепловим збудженням відповідно до функції розподілу Фермі-Дірака:

$$P_o(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-E_F)} + 1} \quad (2.30)$$

де P_o - це ймовірність того, що електрон займає стан з енергією E ,

$\beta = 1/(k_B T)$, де k_B - постійна Больцмана.

Першим кроком до методу Монте-Карло є вибірка стану серед усіх, які мають ненульову ймовірність заселення. При нульовій температурі це стосується лише станів усередині сфери, але при ненульовій температурі є частково заповнені стани в кожній точці простору k . Однак стани, далекі від енергії Фермі, мають дуже низьку ймовірність заселення і тому, з дуже хорошим наближенням, можна проігнорувати. Подальші розрахунки використовують обмеження $8k_B T$ після E_F .

У просторі k це відповідає сфері радіусом:

$$k_{high}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_F + 8/\beta) = \frac{2mE_F}{\hbar^2} \left(1 + \frac{8}{E_F \beta} \right), \quad (2.31)$$

$$k_{high} = \sqrt{\frac{2mE_F}{\hbar^2}} \sqrt{1 + \frac{8}{E_F \beta}} \approx k_F \left(1 + \frac{4}{E_F \beta} \right). \quad (2.32)$$

де k_F - хвильовий вектор Фермі.

Метод вибору стану електрона полягає у випадковому виборі точки в межах куба зі стороною $2k_{high}$ з центром $|\vec{k}|=0$ до тих пір, поки вона не потрапить усередину описаної сфери радіуса k_{high} (метод Неймана). Потім ми спочатку знаходимо внесок цього стану до загального струму, що протікає через контакт, формуючи добутки ймовірностей у такий спосіб:

1. Ймовірність теплового заповнення початкового (емітерного) стану.
2. Ймовірність теплової вакансії кінцевого (базового) стану.
3. Падаючий потік заряду на межі метал-вакуум.
4. Ймовірність тунелювання.

Оскільки сума ймовірностей того що стан зайнятий і ймовірність порожнього стану повинна дорівнювати 1, ймовірність порожнього стану у напівпровіднику визначається як:

$$P_{occupation}(E) = 1 - \frac{1}{e^{\beta(E-E_F+eV)} + 1}, \quad (2.33)$$

де E — кінетична енергія в емітері, а eV - різниця потенціальної енергії між металом і напівпровідником.

Потік електронів пропорційний проекції швидкості електронів у напрямку нормалі до межі розділу ($\hbar k_{\perp} / m$); електрони, що рухаються швидше, частіше стикаються з поверхнею розділу і, таким чином, мають більшу ймовірність внести свій внесок у тунельний струм. Ми відразу бачимо, що вихідний сферичний фазовий простір, який ми хочемо взяти, можна звести до півсфери, оскільки електрони зі швидкостями, що мають негативні компоненти в напрямку поверхні напівпровідника (перпендикулярному до поверхні поділу), можуть бути виключені; вони не падають на поверхню розділу метал-вакуум і тому не роблять внеску в струм.

Константа пропорційності, що зв'язує потік заряду з перпендикулярною компонентною швидкості, є об'ємом фазового простору в емітері(металі), помноженим на заряд електрона e . Щоб обчислити цю величину $e\Delta^3k$, ми повинні знати, скільки станів є у сфері Фермі. Це визначається умовою нормування в умовах нульової температури:

$$n = \int_{|k| < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (2.34)$$

Електронна густина n у реальному просторі є емпірично вимірюваною величиною. Монте-Карло еквівалент цього інтеграла:

$$\sum \Delta^3k = 2N\Delta^3k \quad (2.35)$$

де N – кількість вибірки. Коефіцієнт 2 необхідний, тому що, хоча інтеграл по всій сфері вибірки, наша вибірка методом Монте-Карло обмежена лише півкулею, спрямованою вперед. Отже, $\Delta^3k = n / 2N$. Для ненульової температури ми замінюємо N на суму ймовірностей заселення,

$$N_{thermal} = \sum \frac{1}{e^{\beta(E-E_F)} + 1} \quad (2.36)$$

тому що ми беремо вибірку в об'ємі, який має меншу густину порівняно з електронними станами.

Повна енергія частинки, яка тунелює представляється у вигляді суми поперечних паралельних компонент:

$$\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} = (E_{k_{\perp}} + E_{k_{\parallel}})(1 + \alpha E_k), \quad (2.36)$$

де $k_{\parallel}$ - хвильовий вектор, який лежить у площині паралельній межі поділу метал- напівпровідник, E_k - кінетична енергія електронів, перпендикулярна до структури. В області розрахунку формується дискретна просторова сітка $j = 1 \dots N$, з вузлами, що мають координати z_j .

З умови безперервності хвильової функції і її відповідної нормованої похідної $(1/m)\partial\phi/\partial z$ на межі, яка розділяє окремі кроки j і $j+1$ та отримаємо матрицю-формулу, яка пов'язує послідовні коефіцієнти A і B плоскої хвилі:

$$\begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} = M_j \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix}, \quad (2.37)$$

де:

$$M_j = \begin{bmatrix} (1 + \rho_j)e^{k_j\alpha} & (1 - \rho_j)e^{-k_j\alpha} \\ (1 - \rho_j)e^{k_j\alpha} & (1 + \rho_j)e^{-k_j\alpha} \end{bmatrix}, \quad (2.38)$$

Результуюча матриця передачі отримується перемноженням матриць M_j і пов'язує коефіцієнти плоских хвиль A_0 і B_0 в лівій частини і коефіцієнти A_{N+1} , B_{N+1} у правій частини структури:

$$\begin{bmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{bmatrix} = M_{tot} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}, \quad (2.38)$$

Зі співвідношення $|M_{tot}| = \frac{k_0}{k_{N+1}}$ при $A_0=1$ і $B_0=0$ знаходиться проста формула

для передачі амплітуди A_{N+1} .

$$A_{N+1} \frac{k_0}{k_{N+1}} \left[\frac{1}{M_{2z}} \right], \quad (2.39)$$

Імовірність переходу електрона T визначається виразом:

$$T(E, V) = \frac{|k_{N+1}|}{|k_0|} |A_{N+1}|^2, \quad (2.40)$$

Таким способом можна врахувати зміну форми бар'єру відповідно до зміни у розподілі потенціальної енергії та врахувати внесок кожного окремого шару напівпровідника. Якщо енергія тунелювання набагато нижча від висота бар'єру, то можливо використати імовірність у вигляді

$$P^{WKB} = e^{-2\gamma}, \quad (2.41)$$

де

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx, \quad (2.42)$$

а межі інтегрування a і b є межами бар'єру.

Струм, який ми обчислюємо, насправді є густиною струму. Наше обчислення тепер полягає в простому обчисленні для станів у сфері вибірки суми в межах ширини комірки інжекції $S = \Delta x L_z$:

$$I_{base} = eS \frac{\hbar}{m} \frac{n}{2N} \sum k_{\perp} P_{occupation}(E) \times P_{vacancy}(E + eV) P(k_{\perp}) \quad (2.43)$$

Ще більше спрощення можна зробити якщо обмежити наш простір вибірки, ігноруючи початкові стани емітера з енергією, нижчою за величину енергії відсічення E_{low} , яка визначається дном зони провідності і брати до уваги лише ті початкові стани енергія яких більше за

$$E_{low} = E_F - eV - 8 / \beta \quad (2.44)$$

що призводить до хвильового вектора відсічки:

$$k_{low}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_F - eV - 8 / \beta) \quad (2.45)$$

Зменшуючи об'єм фазового простору вибірових точок, наша щільність вибірки збільшується. Це значно покращує точність розрахунку, оскільки ефект дискретизації фазового простору мінімізується при наближенні до межі безперервної вибірки. Однак наш розрахунок повинен відображати це

обмеження дискретизації фазового простору; $\Delta^3 k$ тепер має бути обчислений за допомогою ефективної вибірки

$$N' = N_{thermal} + \frac{N}{V_{shell}} V_{sphere} \quad (2.46)$$

Перший член – це внесок від електронів, які формують струм, з $E_{low} < E < E_{high}$. Ці електрони знаходяться в станах, які утворюють сферичну оболонку в просторі k . Другий член враховує решту електронів із відсіканням $E_{low} > E$, що є сферою. Ці стани мають ймовірність заповнення, дуже близьку до одиниці, і, отже, нам потрібно лише порахувати, скільки з них ми б відібрали без відсічення, використовуючи щільність, визначену N , числом вибірки.

2.6 Результати розрахунку планарної структури з контактом Шотткі

Розглядається планарний діод, двовимірний модель якого показана на рис. 2.2

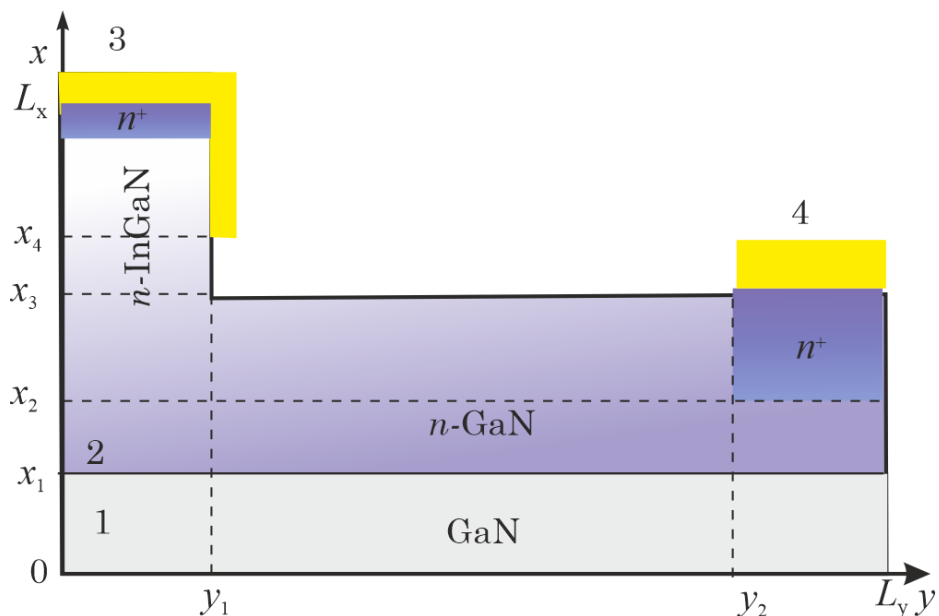


Рисунок 2.2 Двовимірний модель діода з бар'єром Шотткі

Переріз діода має Г- подібну форму з відокремленим катодом, який містить бар'єр Шотткі, розташований збоку катоду.

Координати x_1 - x_4 и y_1, y_2 визначають межі областей діода, які мають різні властивості, як за складом, так за рівнем легування. Область в межах $x_4 - L_x$ являє собою варізонний шар InGaN, в якому склад змінюється від GaN в точці x_2 до InN в L_x , рис .2.3

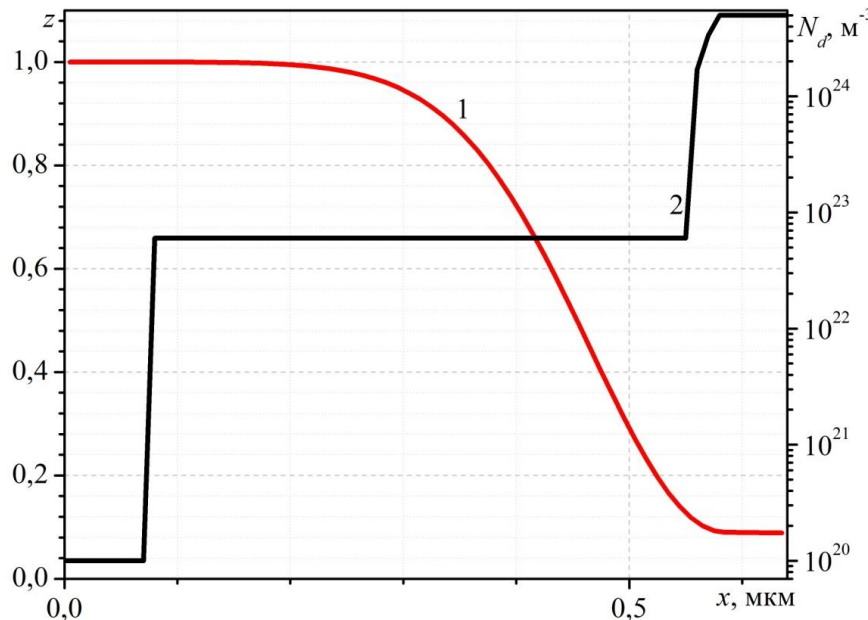


Рисунок 2.3 Розподіл складу та профіля легування в перерізі $y = y_1 / 2$ для $y_1 = 0,16$ мкм

Самосуміщені контакти 3 та 4 до n^+ - областям вважаються омичними.

Розмір діода, згідно загальної концепції даної діодної структури складає близько 1,28 мкм і вона може бути ефективно проаналізована в квазікласичному наближенні з використанням методу Монте – Карло, деталі якого наведено в розділах 2.1 та 2.6 .

Розглядалися два типи діодів, які відрізнялися шириною катоду.

Було використано трьохдолинну модель зони провідності GaN, в якій враховано непараболічність закону дисперсії.

Нами розглядалися такі розсіяння: 1) на деформаційному потенціалі акустичних фононів; 2) розсіяння на іонізованих домішках; 3) на деформаційному потенціалі оптичних фононів; 4) міждолинне розсіяння; 5) полярне оптичне розсіяння; 6) розсіяння на іонізованих домішках.

Ідея використання довгого металічного катоду полягає у можливості збирання ним дірок, які виникають в наслідок ударної іонізації у варізонному шарі. Відповідно, висота потенціального бар'єру в межах шару змінюється із зміною складу матеріалу:

$$e\varphi = \chi_M - \chi_S(z) = \chi_M - \chi_S(z) \quad (2.47)$$

Розподіл домішки в діоді показний на рис. 2.4. Концентрація в приконтактних областях взята 10^{18} cm^{-3} , в активній області діода $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

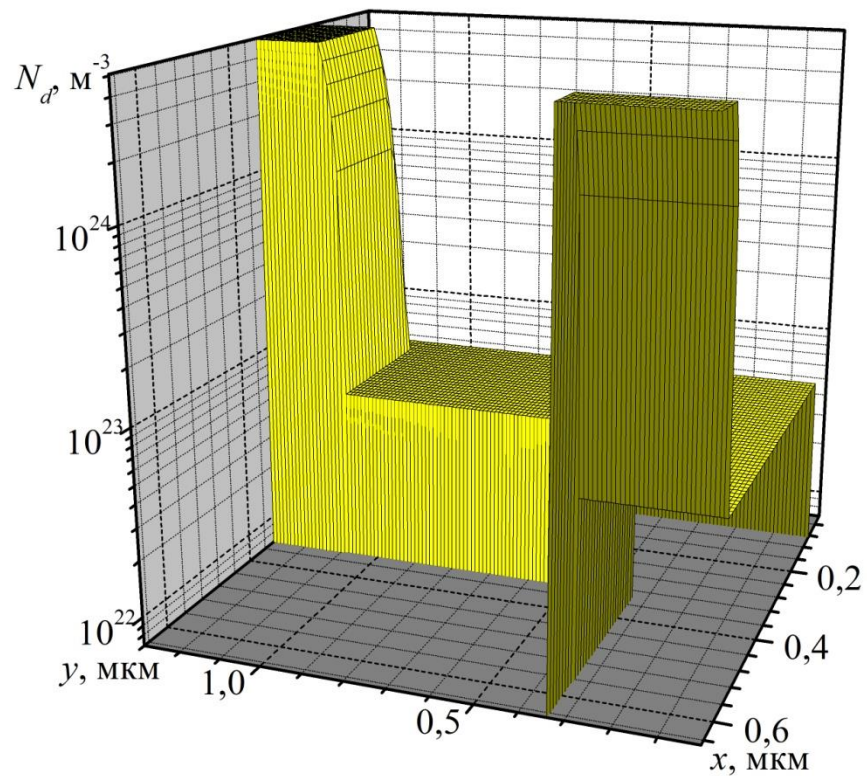
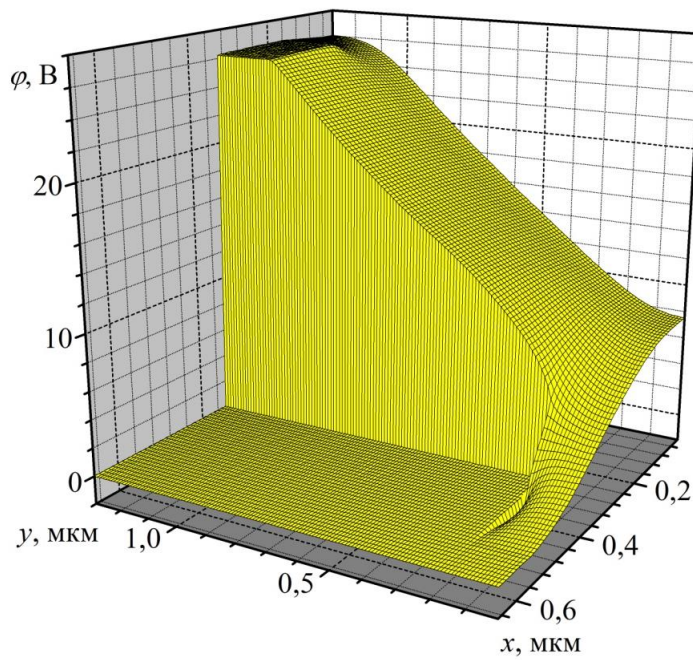
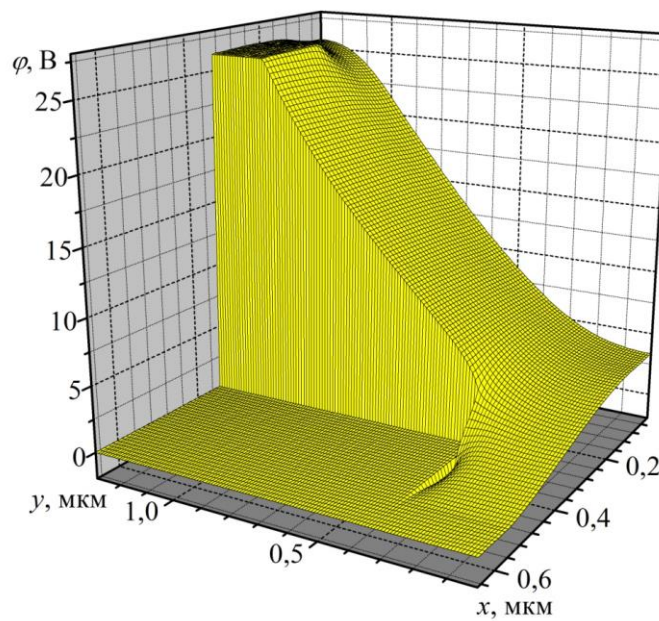


Рисунок 2.4. Розподіл домішок в діоді

Результати моделювання діода методом Монте Карло, який використовується самоузгодженого з рівняннями Пуассона та теплопровідності показані на рис. 2.5.



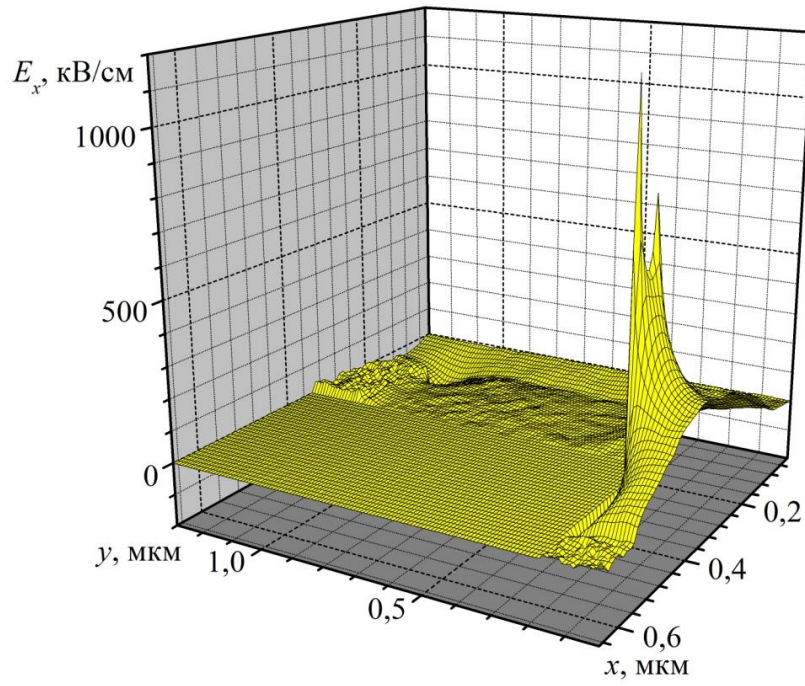
а)



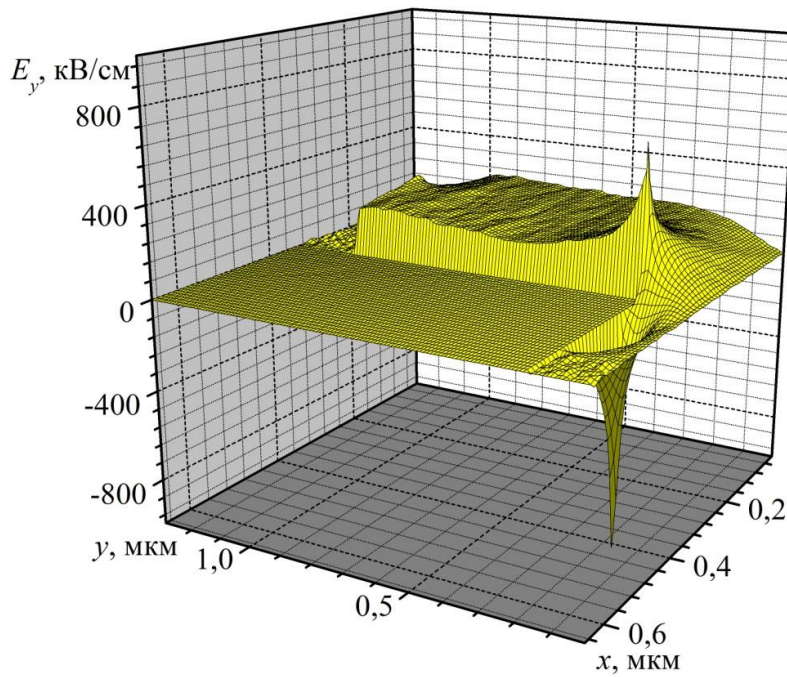
б)

Рисунок 2.5. Розподіл електростатичного потенціалу: а) – $L_{cath} = 0,16$ мкм; б) – $L_{cath} = 0,32$ мкм

Відповідні розподіли напруженості електричного поля показані на рис. 2.6 для діода з шириною катоду 0,16 мкм, та на рис. 2.7 з шириною катоду 0,32 мкм.



а)



б)

Рисунок 2.6 – Розподіл напруженості електричного поля в діоді: а) x -компонента поля; б) y -компонента

Можна побачити, що в області катодного контакту поле має суттєву величину і скалдний розподіл, який обумвдено одночасном впливом геометрії

діода і наявністю бар'єру Шотткі. Наведені залежності відповідають постійній напрузі 20 В

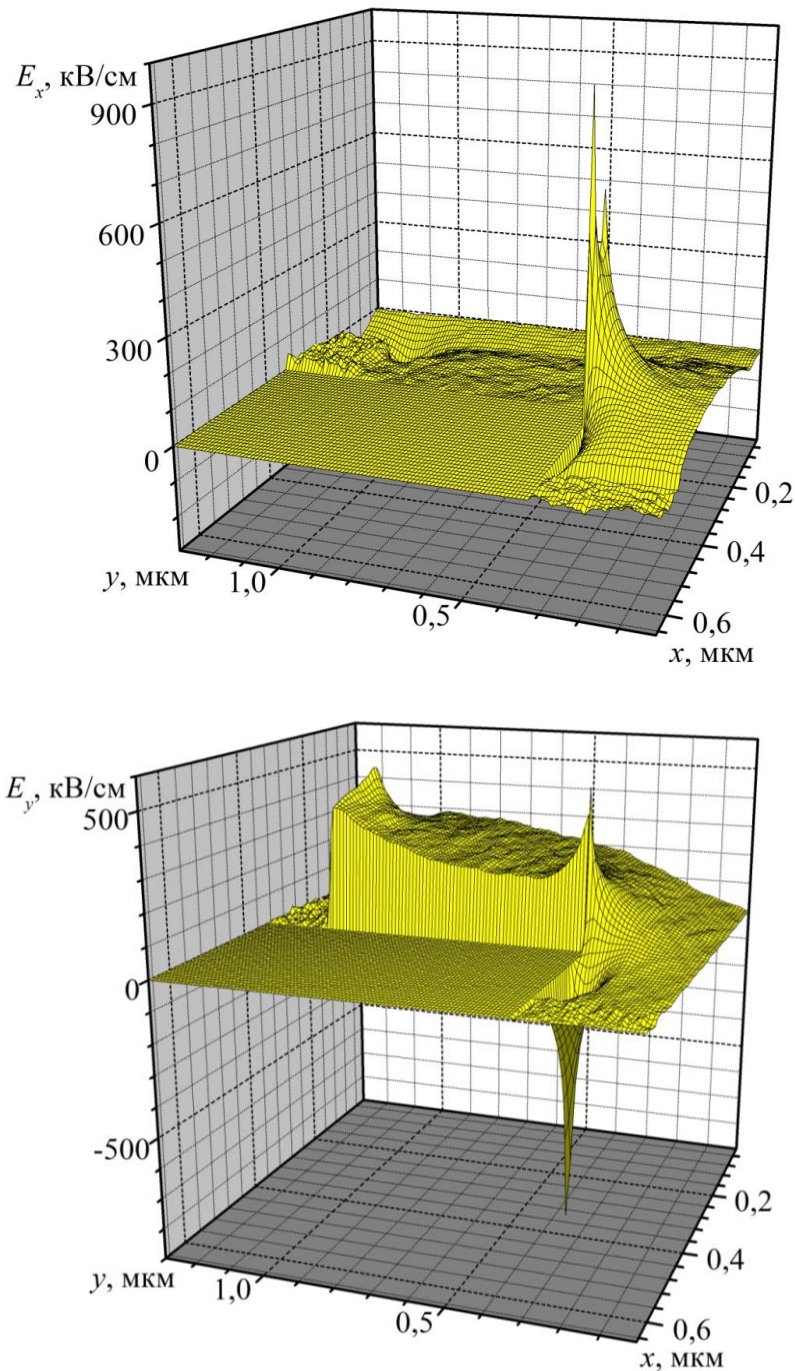
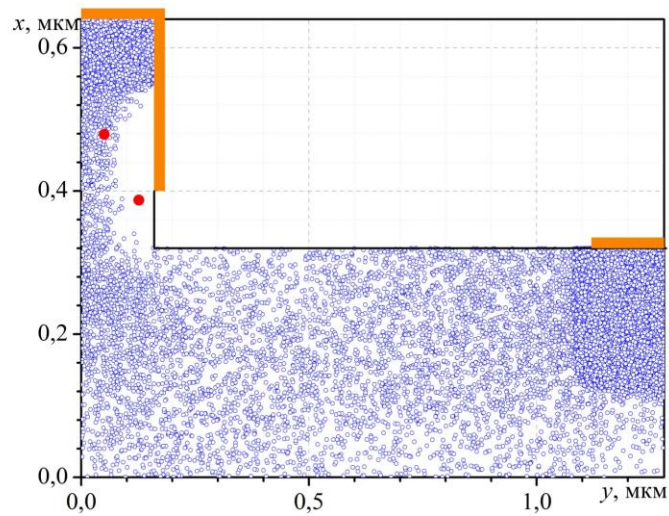


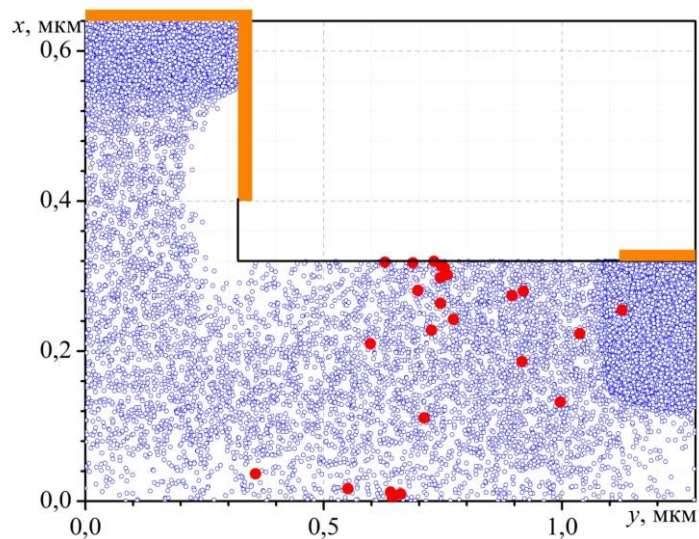
Рисунок 2.7 – Розподіл напруженості електричного поля в діоді: а) x -компонента поля; б) y -компонента

Однак, навіть за такої напруги величина поля є близькою до 1 МВ/см, що відповідає початку ударної іонізації в діоді. Як видно з розподілів, величина напруженості поля в катоді шириною 0,16 мкм суттєво більша, що призводить до збільшення енергії носіїв заряду. Просторовий розподіл носіїв

заряду, що формується під впливом електричних полів в діоді показаний на рис. 2.8.



а)



б)

Рисунок 2.8. Просторовий розподіл кінетичної енергії макрочастинок в області діода (червоним позначені дірки) : а) – $L_{cath} = 0,16$ мкм; б) – $L_{cath} = 0,32$ мкм

Внаслідок використання варізонного шару зростання напруженості поля в області бар'єру Шотткі відбувається поступово, як і формування області просторового заряду.

На рис. 2.9 показано розподіли кінетичної енергії носіїв заряду в області діода, які відповідають вказаному розподілу мікрочастинок.

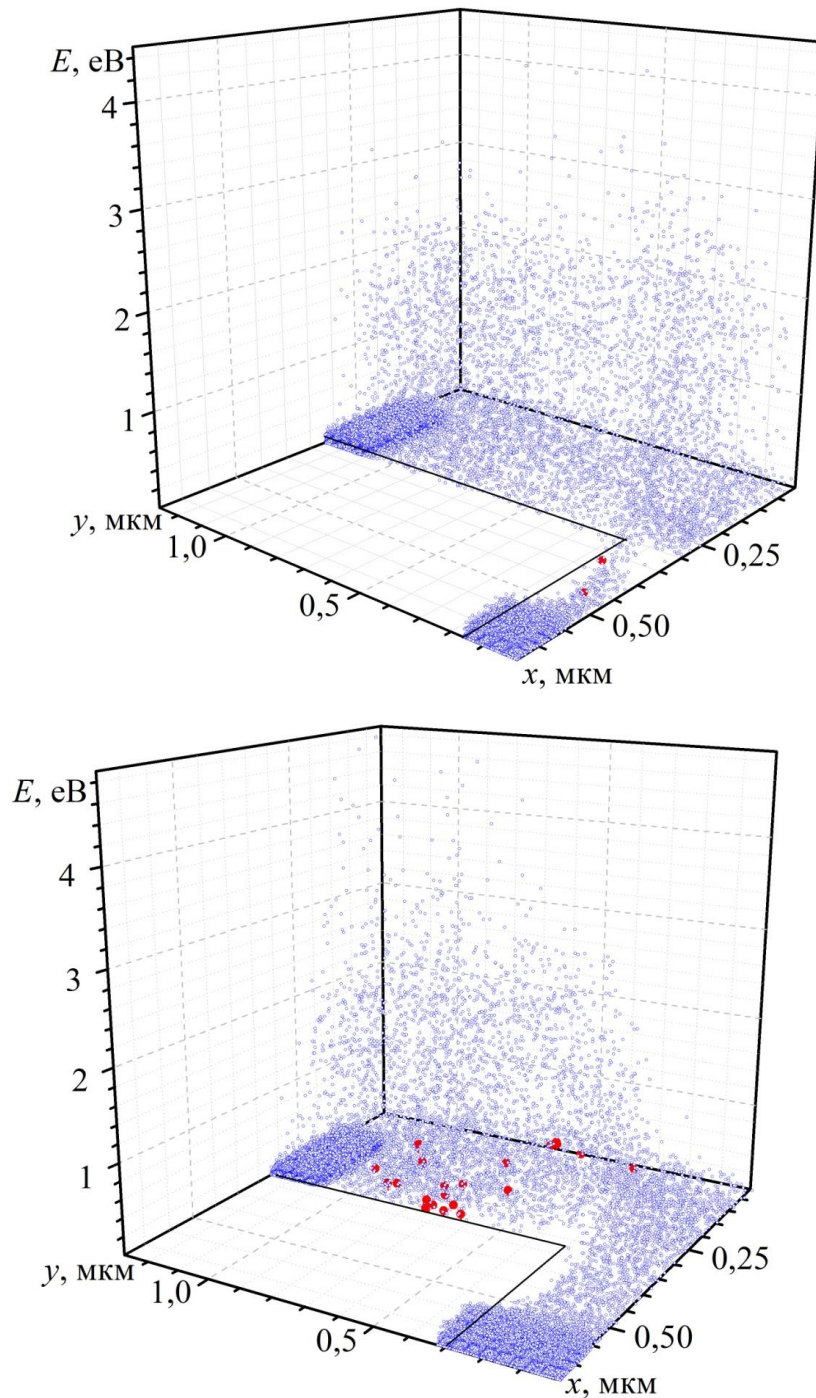
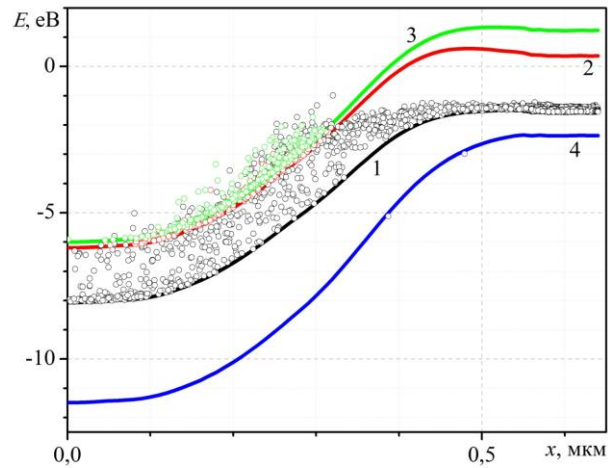


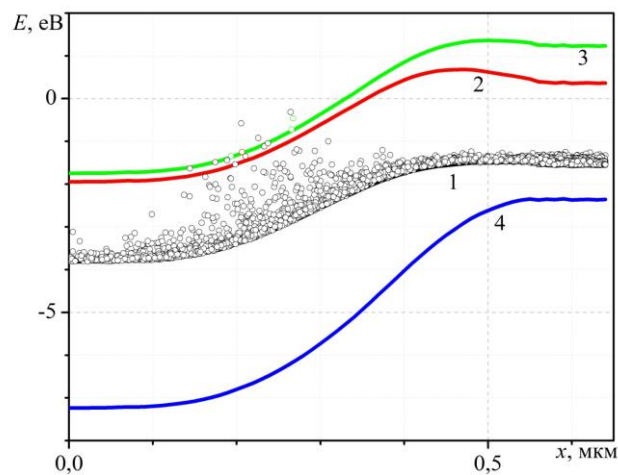
Рисунок 2.9. Розподіл кінетичної енергії макрочастинок в області діода (червоним позначені дірки) : а) – $L_{cath} = 0,16$ мкм; б) – $L_{cath} = 0,32$ мкм

Маємо два кардинально різні випадки що зміни енергії частинок. У випадку вузького катода електричне поле в контакті сприяє збільшенню енергії електронів, і відповідно ударна іонізація виникає вже в області

варізонного шару, що сприяє швидкому виводу дірок через металевий контакт назовні. У випадку широкого катоду процес розігріву носіїв відбувається вже в каналі діода. Це можна побачити і на енергетичних діаграмах діодів в області катоду, рис. 2.10.



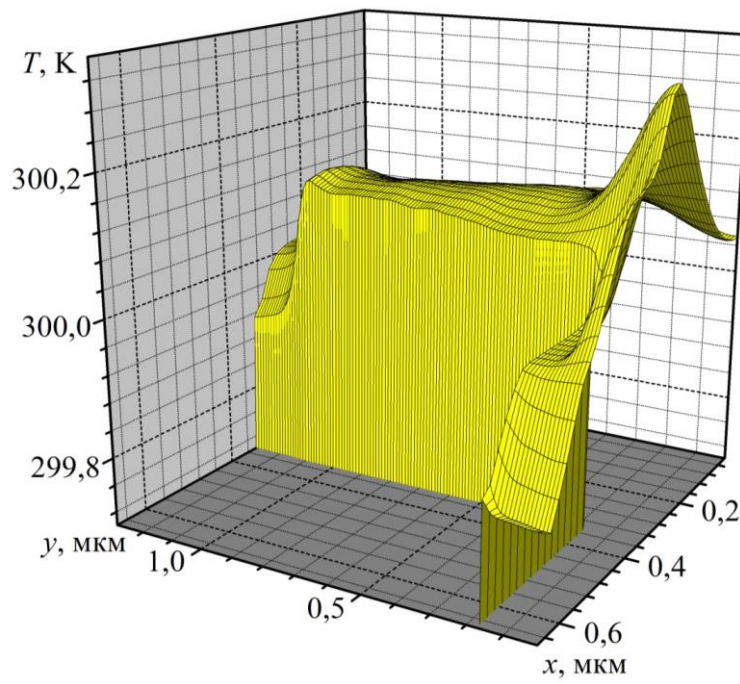
а)



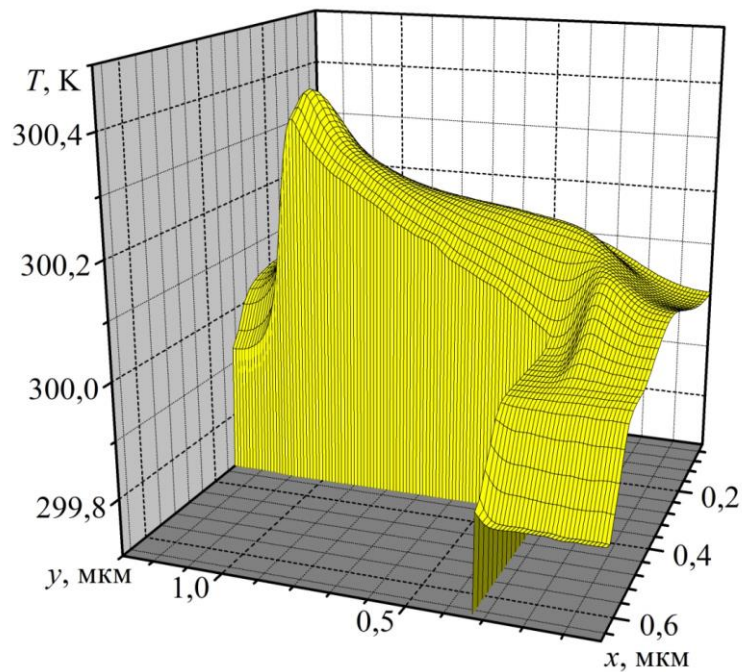
б)

Рисунок 2.10 Енергетична диграма катодної області діода: а) – $L_{cath} = 0,16$ мкм; б) – $L_{cath} = 0,32$ мкм

Така відмінність позначається на розподілі температури в діоді, який формується під впливом розсіяння носіїв заряду і ударної іонізації, рис. 2.11.



а)



б)

Рисунок 2.11 – Розподіл температури в діоді: а) – $L_{cath} = 0,16$ мкм; б) – $L_{cath} = 0,32$ мкм

Максимум температури в діоді з вузьким катодом формується в прикатодній області каналу діода, в той час як діоди, який має широкий катод – в анодній частині каналу.

Залежність густини струму від напруги показана на рис.2.12. Вони демонструють типові діодні залежності, характерні для контакту Шотткі.

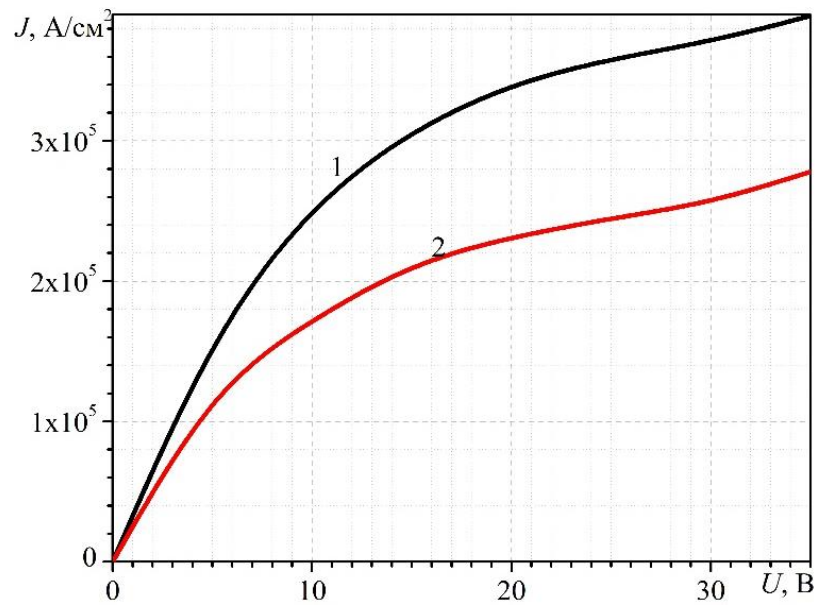


Рисунок 2.12 Залежність густини струму від напруги для діода з: 1 – $L_{cath} = 0,16 \text{ мкм}$; 2 – $L_{cath} = 0,32 \text{ мкм}$.

ВИСНОВКИ

В роботі розглянуто планарний діод з бар'єром Шотткі, який формується у варізонному шарі, який відокремлений від каналу діода і утворює складний катод кінцевої ширини.

Метод Монте-Карло використовується як для визначення кінетичних характеристик діода, пов'язаних з рухом і розсіянням частинок та для створення інжекційної моделі контакту.

Створено програму числового моделювання транспорту в діодах, що містять металічні елементи з урахування теплових процесів в них.

Показано, енергетичний розподіл носіїв заряду, який формує катод суттєво залежить від його ширини, в отже існує можливість для формування заданого енергетичного профілю в діоді.

Отримані результати показують можливість подібного катоду для створення умов для ударної іонізації і швидкого виведення повільних носіїв заряду (дірок) через металічний електрод, що може знайти застосування для створення потужних генераторів шумових та електромагнітних коливань.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. High performance AlGaIn/GaN power switch with HfO₂ insulation / J. Shi et al. *Applied Physics Letters*. 2009. Vol. 95, no. 4. P. 042103. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3190506>.
2. Grid-Connected GaN Solar Microinverter / S. K. Mazumder et al. 2018 IEEE 7th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC) (A Joint Conference of 45th IEEE PVSC, 28th PVSEC & 34th EU PVSEC), Waikoloa Village, HI, 10–15 June 2018. 2018. URL: <https://doi.org/10.1109/pvsc.2018.8548020>.
3. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 83rd Edition Edited by David R. Lide (National Institute of Standards and Technology). CRC Press: Boca Raton. 2002. + 2664 pp. ISBN 0-8493-0483-0. *Journal of the American Chemical Society*. 2002. Vol. 124, no. 47. P. 14280. URL: <https://doi.org/10.1021/ja025295q>.
4. Low resistance ohmic contact to n-GaN with a separate layer method / Y. F. Wu et al. *Solid-State Electronics*. 1997. Vol. 41, no. 2. P. 165–168. URL: [https://doi.org/10.1016/s0038-1101\(96\)00151-7](https://doi.org/10.1016/s0038-1101(96)00151-7).
5. Structural and electrical characterization of AuPdAlTi ohmic contacts to AlGaIn/GaN with varying Ti content / M. W. Fay et al. *Journal of Applied Physics*. 2004. Vol. 96, no. 10. P. 5588–5595. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1796514>.
6. Electrical, thermal, and microstructural characteristics of Ti/Al/Ti/Au multilayer Ohmic contacts to n-type GaN / A. Motayed et al. *Journal of Applied Physics*. 2003. Vol. 93, no. 2. P. 1087–1094. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1528294>.
7. Liu Q. Z., Lau S. S. A review of the metal–GaN contact technology. *Solid-State Electronics*. 1998. Vol. 42, no. 5. P. 677–691. URL: [https://doi.org/10.1016/s0038-1101\(98\)00099-9](https://doi.org/10.1016/s0038-1101(98)00099-9).
8. Interfacial reactions of Ti/n-GaN contacts at elevated temperature / C. J. Lu et al. *Journal of Applied Physics*. 2003. Vol. 94, no. 1. P. 245–253. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1579128>.

9. Schottky barrier on n-type GaN grown by hydride vapor phase epitaxy / P. Hacke et al. *Applied Physics Letters*. 1993. Vol. 63, no. 19. P. 2676–2678. URL: <https://doi.org/10.1063/1.110417>.
10. The barrier height and interface effect of Au-n-GaN Schottky diode / M. R. H. Khan et al. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1995. Vol. 28, no. 6. P. 1169–1174. URL: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/28/6/021>.
11. Study of Schottky barriers on n-type GaN grown by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition / J. D. Guo et al. *Applied Physics Letters*. 1995. Vol. 67, no. 18. P. 2657–2659. URL: <https://doi.org/10.1063/1.114327>.
12. Microstructure of Ti/Al and Ti/Al/Ni/Au Ohmic contacts for n-GaN / S. Ruvimov et al. *Applied Physics Letters*. 1996. Vol. 69, no. 11. P. 1556–1558. URL: <https://doi.org/10.1063/1.117060>.
13. Foresi J. S., Moustakas T. D. Metal contacts to gallium nitride. *Applied Physics Letters*. 1993. Vol. 62, no. 22. P. 2859–2861. URL: <https://doi.org/10.1063/1.109207>.
14. Interfacial reaction and Fermi level movement induced by sequentially deposited metals on GaN: Au/Ni/GaN / M.-H. Kim et al. *Physical Review B*. 2000. Vol. 61, no. 16. P. 10966–10971. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.61.10966>.
15. Schottky contact and the thermal stability of Ni on n-type GaN / J. D. Guo et al. *Journal of Applied Physics*. 1996. Vol. 80, no. 3. P. 1623–1627. URL: <https://doi.org/10.1063/1.363822>.
16. High temperature characteristics of Pd Schottky contacts on n-type GaN / A. C. Schmitz et al. *Electronics Letters*. 1996. Vol. 32, no. 19. P. 1832. URL: <https://doi.org/10.1049/el:19961191>.
17. Ni and Ni silicide Schottky contacts on n-GaN / Q. Z. Liu et al. *Journal of Applied Physics*. 1998. Vol. 84, no. 2. P. 881–886. URL: <https://doi.org/10.1063/1.368151>.
18. Thermally stable PtSi Schottky contact on n-GaN / Q. Z. Liu et al. *Applied Physics Letters*. 1997. Vol. 70, no. 10. P. 1275–1277. URL: <https://doi.org/10.1063/1.118551>.

19. Thermal stability study of Ni/Ta n-GaN Schottky contacts / G. L. Chen et al. *Applied Physics Letters*. 2002. Vol. 80, no. 4. P. 595–597. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1425455>.
20. Graphene/GaN Schottky diodes: Stability at elevated temperatures / S. Tongay et al. *Applied Physics Letters*. 2011. Vol. 99, no. 10. P. 102102. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3628315>.
21. Graphene-GaN Schottky diodes / S. Kim et al. *Nano Research*. 2014. Vol. 8, no. 4. P. 1327–1338. URL: <https://doi.org/10.1007/s12274-014-0624-7>.
22. Lundstrom, M. (2000). Fundamentals of Carrier Transport. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511618611>.
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. Birdsall C. K., Fuss D. Clouds-in-clouds, clouds-in-cells physics for many-body plasma simulation. *Journal of Computational Physics*. 1969. Vol. 3, no. 4. P. 494–511. URL: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(69\)90058-8](https://doi.org/10.1016/0021-9991(69)90058-8).
25. Joppich W., Mijalković S. Multigrid Methods for Process Simulation. Vienna : Springer Vienna, 1993. URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-7091-9253-5>.
26. Briggs W. L. A multigrid tutorial. 2nd ed. Philadelphia, PA : *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 2000. 193 p.
27. Parter S. V. Estimates for multigrid methods based on red-black Gauss-Seidel smoothings. *Numerische Mathematik*. 1988. Vol. 52, no. 6. P. 701–723. URL: <https://doi.org/10.1007/bf01395819>.
28. Vasileska D., Goodnick S. M., Klimeck G. Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation. Taylor & Francis Group, 2017. 782 p.
29. Hockney, R., Eastwood, J. (1988). *Computer simulation using particles*. CRC Press.
30. Alloy scattering and high field transport in ternary and quaternary III–

V semiconductors / M. A. Littlejohn et al. *Solid-State Electronics*. 1978. Vol. 21, no. 1. P. 107–114. URL: [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(78\)90123-5](https://doi.org/10.1016/0038-1101(78)90123-5).

31. Harrison J. W., Hauser J. R. Alloy scattering in ternary III-V compounds. *Physical Review B*. 1976. Vol. 13, no. 12. P. 5347–5350. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5347>.