

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)

« ____ » _____ 2025 р.

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

МОДЕЛЮВАННЯ КОНТАКТІВ МЕТАЛ-НАПІВПРОВІДНИК МЕТОДОМ
МОНТЕ-КАРЛО
(назва роботи)

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

Освітня програма «Радіофізика, біофізика та комп'ютерні системи»
(назва освітньої програми)

Виконавець _____
(підпис)

Сергій ДЕМЧЕНКО
(ім'я, прізвище)

Науковий керівник _____
(підпис)

Олег БОЦУЛА
(ім'я, прізвище)

Харків – 2025

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**

С.Л. Бердник
 підпис ініціали, прізвище

“ ” _____ 2025 року

З А В Д А Н Н Я НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ

Демченко Сергій Сергійович
 (прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи Моделювання контактів метал-напівпровідник методом Монте-Карло

керівник роботи Боцула Олег Вікторович, кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
 (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 3 грудня 2025 р.

3. Перелік питань, які потрібно розробити:

3.1. Аналіз науково-технічної інформації за предметом досліджень, формування огляду літератури за напрямом фізики контактів метал-напівпровідник, моделювання контактів та особливостей створення контактів до приладів на основі нітридів.

3.2. Створення числової моделі контакту метал – напівпровідник, адаптованої для моделювання приладу методом Монте-Карло.

3.3. Програмна реалізація моделі та отримання характеристик діодів, що містять контакт метал- напівпровідник

4. План роботи

№ з/П	Назви етапів роботи
1	Робота з науковою літературою за темою дипломної роботи.
2	Формування огляду наукових публікацій щодо фізичних принципів роботи, фізичних процесів та моделювання контактів метал-напівпровідник
3	Робота над створенням елементів фізико-математичної моделі контакту метал – напівпровідник.
4	Моделювання та апробація моделі. Отримання характеристик діодів
5	Аналіз та обробка отриманих результатів
6	Оформлення дипломної роботи

5. Дата видачі завдання 9 вересня 2025 року

Студент

підпис

С.С. Демченко

ініціали, прізвище

Керівник роботи

підпис

О.В. Боцула

ініціали, прізвище

АНОТАЦІЯ

Демченко С. С. Моделювання контактів метал-напівпровідник методом Монте-Карло. Дипломна робота магістра. Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, Харків, 2025. 53 с., 13 рис., 1 табл., 34 джерел.

Об'єкт дослідження: контакт метал-напівпровідник в діодах на основі нітридних сполук.

Предмет дослідження: процеси переносу заряду через потенціальний бар'єр на границі метал-напівпровідник.

Мета роботи: створення та експлуатація чисельної моделі омичного контакту метал-напівпровідник та контакту з бар'єром Шоттки з використанням методу великих частинок.

Методи дослідження: Моделювання методом частинок (метод Монте-Карло).

Результати дослідження: Розроблено модель контакту метал-напівпровідник, що враховує електричну взаємодію контактуючих середовищ, тунелювання та теплові властивості матеріалів. Програму застосовано до аналізу контакту метал-напівпровідник в планарному субмікронному GaN-діоді. Проаналізовано вплив структури контакту на характеристики діода та проведено розрахунок статичних характеристик такого контакту.

Отримані результати можна використати для моделювання приладів, що містять контакти метал-напівпровідник, використовуючи метод Монте-Карло.

Ключові слова: ДІОД З БАР'ЄРОМ ШОТТКІ, ПОТЕНЦІАЛЬНИЙ БАР'ЄР, ТУНЕЛЮВАННЯ, НІТРИД ГАЛІЮ, МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО, КОНТАКТ МЕТАЛ-НАПІВПРОВІДНИК, СИЛИ ДЗЕРКАЛЬНОГО ЗОБРАЖЕННЯ, САМОРОЗІГРІВ.

ABSTRACT

Demchenko S. S. Modeling of metal-semiconductor contacts by Monte Carlo method. Master Thesis. V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2025. P. 53, Fig. 11, 1 table, Ref. 34.

Object of study: metal-semiconductor contact in diodes based on nitride compounds.

The subject of research: charge transport processes through the potential barrier at the metal-semiconductor interface.

Purpose: Analysis of modern concepts regarding the metal-semiconductor contact structure and development of a contact model adapted for device simulation using the Monte Carlo method, as well as its implementation in the form of numerical model software code.

Study approach: Numerical modeling by using Monte Carlo methods.

Findings: A model of metal-semiconductor contact considering the electrical interaction of contacting media, tunneling, and thermal properties of materials was developed. The program was applied to analyze the metal-semiconductor contact in a planar submicron GaN diode. The influence of the contact structure on the diode characteristics was analyzed, and the calculation of the static characteristics of such a contact was performed.

The obtained results can be used to simulate devices containing metal-semiconductor contacts using the Monte Carlo method

Key word: SCHOTTKY BARRIER DIODE, POTENTIAL BARRIER, TUNNELING, GALLIUM NITRIDE, MONTE CARLO METHOD, METAL-SEMICONDUCTOR CONTACT, IMAGE FORCES, SELF-HEATING

ЗМІСТ

Перелік скорочень, умовних познач, одиниць і термінів.....	7
Вступ.....	8
1. Електричні властивості контакту метал-напівпровідник в діодах на основі нітридів та їх моделювання.....	10
1.1 Сучасні уявлення про контакт метал-напівпровідник.....	10
1.2 Поляризаційні ефекти при контакті середовищ.....	13
1.3 Бар'єр Шотткі для сполук на основі нітридів.....	17
1.4. Метод Монте-Карло.....	22
1.4.1. Загальна характеристика методу.....	22
1.4.2. Моделювання контактних явищ в методі Монте-Карло.....	24
2. Моделювання діода з бар'єром Шотткі.....	30
2.1 Моделювання транспорту носіїв заряду методом Монте-Карло.....	30
2.2 Розрахунок швидкості	34
2.3 Модель контакту	35
2.4 Результати моделювання характеристик діода.....	46
Висновки.....	50
Список використаних джерел.....	51

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАК, ОДИНИЦЬ І ТЕРМІНІВ

ВАХ — вольт-амперна характеристика

ГУ — граничні умови

ДБШ — діод з бар'єром Шотткі

ЗК — заторний (запірний) контакт

МДН — метал-діелектрик-напівпровідник

ММК — метод Монте-Карло

МОН — метал-оксид-напівпровідник

НВН — напівпровідник-вакуум-напівпровідник

ОК — омічний контакт

ОПЗ — область просторового заряду

ПЗЗ — прилад із зарядним зв'язком

ШТО — швидка термічна обробка

GaN — нітрид галію

HEMT — High Electron Mobility Transistor (транзистор з високою рухливістю електронів)

MIGS — Metal Induced Gap States (стани, індуковані металом)

ВСТУП

Інтенсивний прогрес у сфері сучасної електроніки нерозривно пов'язаний із впровадженням матеріалів із широкою забороненою зоною. Завдяки винятковим електрофізичним параметрам, нітрид галію (GaN) та його тверді розчини зайняли лідируючі позиції у створенні потужних НВЧ-приладів, демонструючи суттєві переваги над класичними кремнієвими або арсенід-галієвими аналогами. Визначальним компонентом архітектури нітридних пристроїв, зокрема НЕМТ-транзисторів, виступає контакт метал-напівпровідник (бар'єр Шотткі).

Одним із фундаментальних викликів, що лімітує ефективність подібних структур, є досить значний струм витоку затвора. Цей ефект негативно позначається на напрузі пробою та стає джерелом низькочастотних шумів, знижуючи надійність приладів у режимах високої потужності. Для пригнічення струмів витоку та підвищення ефективної висоти бар'єра перспективним вважається застосування металів з високою роботою виходу (Pt, Ni, Pd, Au), однак питання їхньої термічної стабільності потребують детальнішого вивчення.

Враховуючи тенденцію до мініатюризації елементної бази та переходу до нанометрових масштабів, класичні методи моделювання втрачають необхідну точність. Ефективним інструментом для аналізу електронних процесів на етапі проектування є статистичний метод Монте-Карло. Він дозволяє коректно описувати нерівноважний транспорт носіїв заряду, що є критично важливим для субмікронних структур.

Окремим важливим вектором розвитку сучасної нанoeлектроніки є дослідження гібридних структур змішаної розмірності. Такі системи поєднують класичні об'ємні (3D) матеріали з новітніми двовимірними (2D) шарами, такими як графен або дихалькогеніди перехідних металів (наприклад, MoS₂).

У подібних гетероструктурах, зокрема в системі 3D-GaN/2D-MoS₂, контактна область набуває складної архітектури, де атомарно тонкий моношар розташовується безпосередньо між металом та напівпровідником. Це створює нові виклики для моделювання, оскільки вимагає врахування специфіки

транспорту носіїв через такі багат шарові інтерфейси, що й зумовлює необхідність адаптації існуючих моделей контактів.

Метою роботи стало створення простої моделі металічного заторного контакту, яка в перспективі може використовуватися в тому числі для аналізу контактів в гібридних 2D-3D – структурах.

1. ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОНТАКТУ МЕТАЛ – НАПІВПРОВІДНИК В ДІОДАХ НА ОСНОВІ НІТРИДІВ ТА ЇХ МОДЕЛЮВАННЯ

1.1 Сучасні уявлення про контакт метал – напівпровідник

Фундаментальні моделі, що описують природу контакту метал-напівпровідник, спираються на зонну теорію твердих тіл та термодинамічний опис систем [8]. Утворення потенціального бар'єра розглядається як результат взаємодії двох середовищ: металу, який має неперервний енергетичний спектр, та напівпровідника із характерною забороненою зоною. Визначальними факторами цієї взаємодії є термодинамічна робота виходу електрона з обох матеріалів та електронна спорідненість напівпровідника.

Проаналізуємо механізм формування контакту для напівпровідника n-типу за умови, що робота виходу металу перевищує відповідний параметр напівпровідника. Ізольовані поверхні матеріалів емітують потоки електронів, інтенсивність яких залежить від температури та роботи виходу. При зближенні матеріалів до відстані, коли стає можливим електронний обмін, виникає дисбаланс зустрічних потоків. Це провокує появу контактної різниці потенціалів, електричне поле якої протидіє надлишковому перетоку носіїв, доки не встановиться динамічна рівновага.

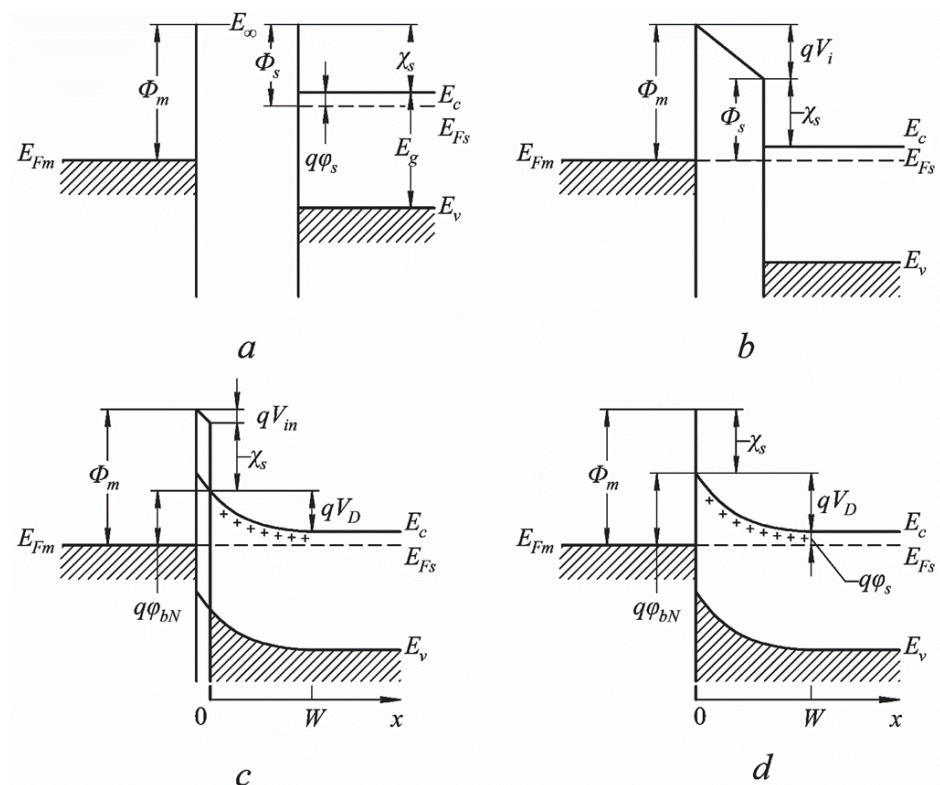


Рис. 1.1. Енергетичні діаграми формування контакту метал – напівпровідник n-типу (модель Шотткі-Мотта)

Умовою термодинамічної рівноваги системи є вирівнювання рівнів Фермі. У реальному тісному контакті перерозподіл заряду формує подвійний електричний шар. У металі, через високу концентрацію носіїв, надлишковий заряд локалізується у надтонкому шарі (близько $0,5 \text{ \AA}$). Натомість у напівпровіднику область просторового заряду (ОПЗ), утворена іонізованими донорами, простягається значно глибше. Через це практично вся контактна різниця потенціалів (дифузійний потенціал) припадає саме на приконтактну область напівпровідника [10].

У рамках моделі Шотткі-Мотта для ідеального контакту висота потенціального бар'єра з боку металу визначається різницею роботи виходу металу та електронної спорідненості напівпровідника [9]:

$$q\phi_b N = \Phi_m \chi_s, \quad (1.1)$$

де $q\phi_b N$ — висота бар'єра, Φ_m — робота виходу металу, χ_s — електронна спорідненість.

Для напівпровідника р-типу бар'єр виникає, якщо робота виходу металу менша за роботу виходу напівпровідника. При цьому сума бар'єрів для n- та р-типу з одним металом дорівнює ширині забороненої зони.

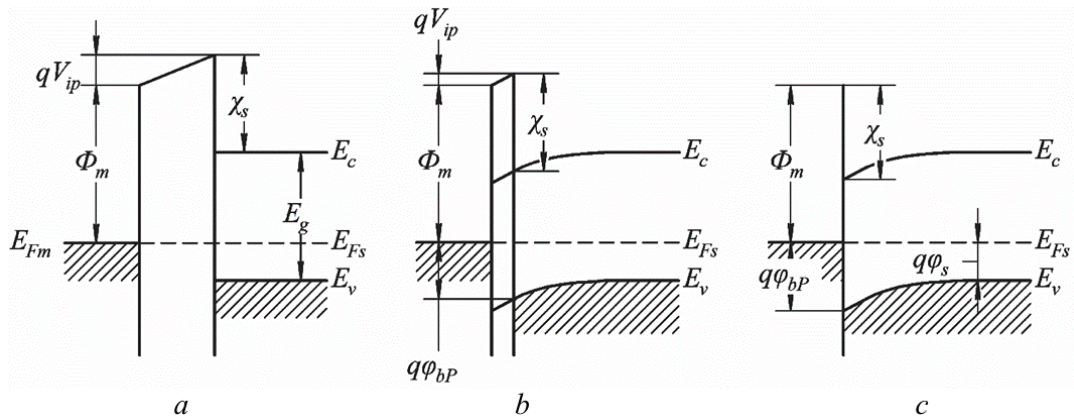


Рис. 1.2. Енергетичні діаграми формування контакту метал – напівпровідник р-типу

Специфічні властивості таких структур, відомих як діоди Шотткі, зумовлені особливостями ОПЗ: збідненням основними носіями, високим опором та сильним полем. Розподіл полів в ОПЗ підпорядковується рівнянню Пуассона. У наближенні повного збіднення, коли густиною рухомих носіїв у бар'єрі можна знехтувати, густина об'ємного заряду вважається рівною заряду домішок.

Інтегрування рівняння Пуассона показує, що напруженість електричного поля в бар'єрі змінюється за лінійним законом, досягаючи максимального значення безпосередньо на межі поділу метал-напівпровідник. Відповідно, потенціал змінюється квадратично, формуючи параболічний вигин енергетичних зон.

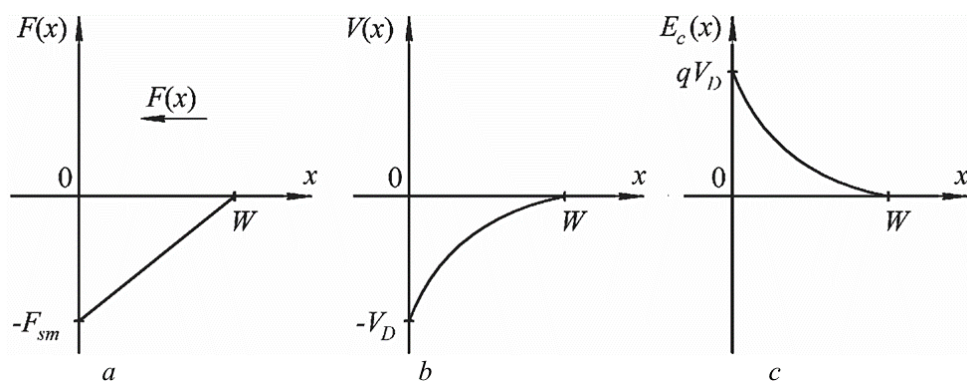


Рис. 1.3. Розподіл напруженості електричного поля, потенціалу та енергії електрона в збідненому шарі

Ширина області просторового заряду W та максимальна напруженість електричного поля F_{sm} залежать від вбудованого потенціалу та концентрації легуючої домішки N_D :

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s (V_D - V - kT / q)}{qN_D}} \quad (1.2)$$

$$F_{sm} = \sqrt{\frac{2qN_D (V_D - V - kT / q)}{\varepsilon_s}} \quad (1.3)$$

де ε_s — діелектрична проникність напівпровідника, V_D — дифузійний потенціал, V — прикладена зовнішня напруга, а доданок kT/q враховує вплив теплового руху носіїв. Зовнішня напруга модифікує бар'єр: пряме зміщення його знижує, а зворотне — підвищує, що забезпечує випрямні властивості.

Слід зауважити, що наведена форма запису з урахуванням доданка kT / q виконується за умови $V_D > 2,3kT / q$. Ця нерівність визначає межі застосовності класичного наближення Шотткі: якщо вигин зон суттєво перевищує теплову енергію, то впливом "хвоста" розподілу носіїв заряду на межі збідненої області можна знехтувати, ввівши лише ефективну поправку на тепловий потенціал. Саме це дозволяє використовувати прості аналітичні вирази для ширини бар'єра та поля без необхідності повного розв'язання рівняння Пуассона [11].

1.2 Поляризаційні ефекти при контакті середовищ

Фундаментальним фізичним явищем, що супроводжує емісію електронів із металу у вакуум чи діелектричне середовище, є дія сил дзеркального відображення, яка полегшує вихід носіїв. Цей механізм, відомий як ефект Шотткі, знайшов своє експериментальне підтвердження і для контактів метал-напівпровідник [12]. Хоча повні зонні діаграми таких структур наводяться рідко, відомо, що сили зображення спричиняють локальне звуження забороненої зони напівпровідника у приконтактній області. Варто зазначити, що класична теорія, яка оперує поняттям заряду зображення на відстанях порядку 0,2 нм (для кремнію), потребує уточнень.

Наведемо лише кілька прикладів, що показують, де ці ефекти можуть спостерігатися.

Розглянемо вплив цих ефектів на прикладі структури метал-діелектрик-напівпровідник (МДН) із товстими шарами матеріалів (рис. 1.4). У випадку, коли діелектрична проникність напівпровідника ε_s перевищує проникність ізолятора ε_i , наприклад $\varepsilon_i / \varepsilon_s = 1/3$, сили зображення модифікують ширину забороненої зони поблизу інтерфейсів. Зокрема, в ізоляторі зона звужується біля обох контактів, тоді як у напівпровіднику ширина забороненої зони E_g зростає поблизу діелектрика і зменшується біля металу. Подібна конфігурація характерна, наприклад, для системи Ti-SiO₂-Si-Ti.

Локальна зміна ширини забороненої зони впливає на концентрацію носіїв. Так, поблизу інтерфейсу SiO₂-Si зниження добутку $np = n_i^2$ вказує на сповільнення процесів генерації-рекомбінації під впливом сил зображення [12, 29].

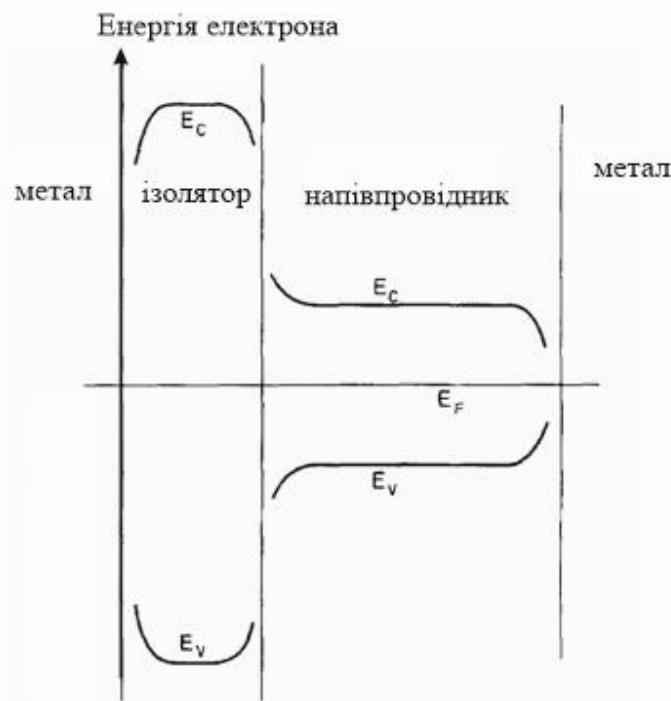


Рис. 1.4. Зонна діаграма системи метал-ізолятор-напівпровідник-метал за наявності вільних носіїв заряду (для випадку $\varepsilon_i < \varepsilon_s$).

Більш цікавий випадок виникає, коли електричне поле викликає вигин зон в обох матеріалах, що є типовим для МДН-транзисторів та ПЗЗ-матриць (рис. 1.5). У цьому випадку сили зображення відштовхують електрони напівпровідника від межі поділу, одночасно знижуючи потенціальний бар'єр в ізоляторі.

Екстремуми потенціальної енергії електронів зміщуються: мінімум у напівпровіднику локалізується на відстані x_{ms} , а максимум в ізоляторі — на x_{mi} . Ці координати залежать від напруженості полів E_s та E_i і визначаються співвідношеннями:

$$x_{ms} = \left(-\frac{q}{16\pi\epsilon_s E_s} \frac{\epsilon_i - \epsilon_s}{\epsilon_i + \epsilon_s} \right)^{1/2} \quad (1.4)$$

$$x_{mi} = -\left(\frac{q}{16\pi\epsilon_i E_i} \frac{\epsilon_s - \epsilon_i}{\epsilon_s + \epsilon_i} \right)^{1/2} \quad (1.5)$$

Величину зниження бар'єра в діелектрику можна оцінити як:

$$\Delta\varphi_i = 2E_i x_{mi} \quad (1.6)$$

Зі зростанням напруженості поля характерні відстані x_{ms} та x_{mi} скорочуються, тоді як редукція бар'єра $\Delta\varphi_i$ зростає. Для типових режимів роботи МОН-структур ці відстані варіюються в межах 1–10 нм, а енергетична корекція може сягати 50 меВ [13].

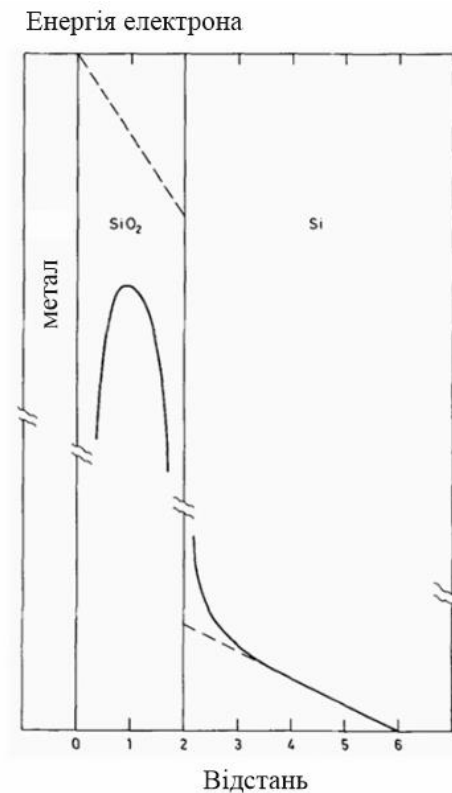


Рис. 1.5. Зона провідності в SiO₂ та Si поблизу інтерфейсу за наявності електричного поля. Пунктирна лінія — без урахування сил зображення, суцільна — з урахуванням.

Важливий висновок можна зробити з аналізу структури метал-SiO₂-Si з дуже тонким шаром оксиду (2 нм), що зустрічається в тунельних діодах (рис. 1.6). Розрахунки для полів $3 \cdot 10^7$ В/м в SiO₂ та $1 \cdot 10^7$ В/м у кремнії демонструють, що наявність навіть мінімального прошарку SiO₂ між металом і напівпровідником фактично нівелює ефект зниження бар'єра Шотткі всередині самого напівпровідника.

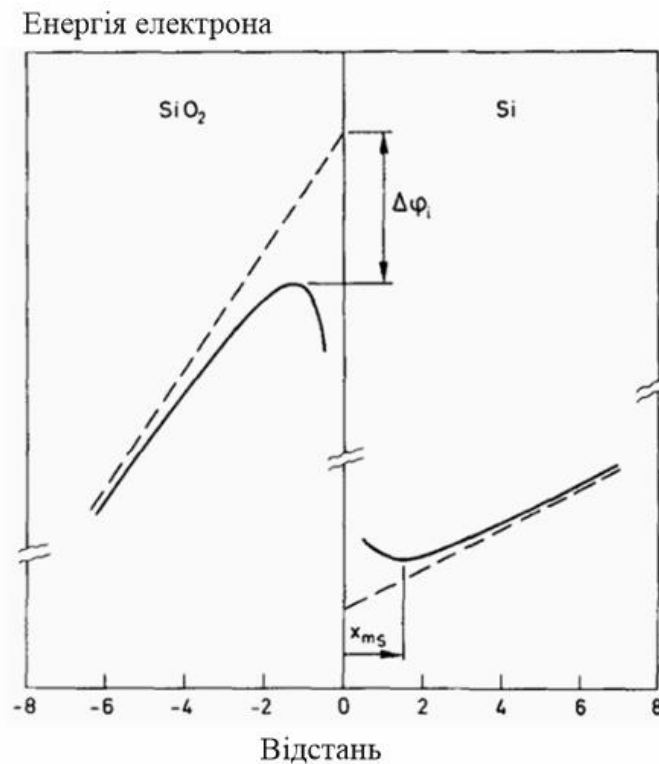


Рис. 1.6. Зона провідності в структурі метал-SiO₂-Si з шаром SiO₂ товщиною 2 нм. Пунктирна лінія — некорегована, суцільна — скорегована на силу зображення.

Це підкреслює необхідність точного врахування сил зображення при моделюванні реальних приладів зі складною діелектричною структурою.

1.3 Бар'єр Шотткі для сполук на основі нітридів

Унікальні властивості нітриду галію (GaN) та споріднених матеріалів зумовили їх широке застосування у високочастотній та силовій електроніці, де вони демонструють переваги над кремнієвими та арсенід-галієвими аналогами [1, 2]. Невід'ємною складовою таких приладів, зокрема HEMT-транзисторів на основі гетероструктур AlGaN/GaN, є бар'єр Шотткі. Однією з критичних проблем цих структур залишається високий струм витoku затвора, який не лише погіршує напругу пробою, але й генерує низькочастотний шум, обмежуючи надійність пристроїв у потужних режимах [3, 4].

Отже, необхідно знайти високоякісний контакт Шотткі до (Al)GaN. Для зменшення зворотного струму витoku в діодах Шотткі, застосування металу для формування бар'єру Шотткі з високою роботою виходу, такого як Pt, Ni, Pd або

Au, є поширеним методом максимізації ефективної висоти бар'єру Шоттки (ϕ_B) по відношенню до n-GaN або епішарових структур HEMT AlGaN/GaN [5].

Однак контакт Шоттки потребує подальшого вдосконалення, щоб зберегти високу термічну стабільність матеріалу GaN та забезпечити довгострокову цілісність пристроїв на його основі. Тому, також досліджувалися різні рідкісні метали, сплави та багатошарові системи, зокрема, встановлено, що термічне відпалювання діодів у деяких випадках є досить ефективним [6, 7].

Для глибшого розуміння фізичних причин такої поведінки та впливу природи металу на параметри діодів необхідно звернутися до фундаментальних механізмів формування бар'єра [28].

Теоретичний опис контактів до нітриду галію (GaN) найчастіше проводиться в межах моделі станів, індукованих металом (MIGS-модель) [14, 34]. Узагальнення експериментальних даних для контактів метал–n-GaN демонструє чітку лінійну залежність висоти потенціального бар'єра від різниці електронегативностей металу та напівпровідника. Така поведінка свідчить про те, що формування бар'єра значною мірою визначається фундаментальними властивостями матеріалів, а не лише поверхневими явищами.

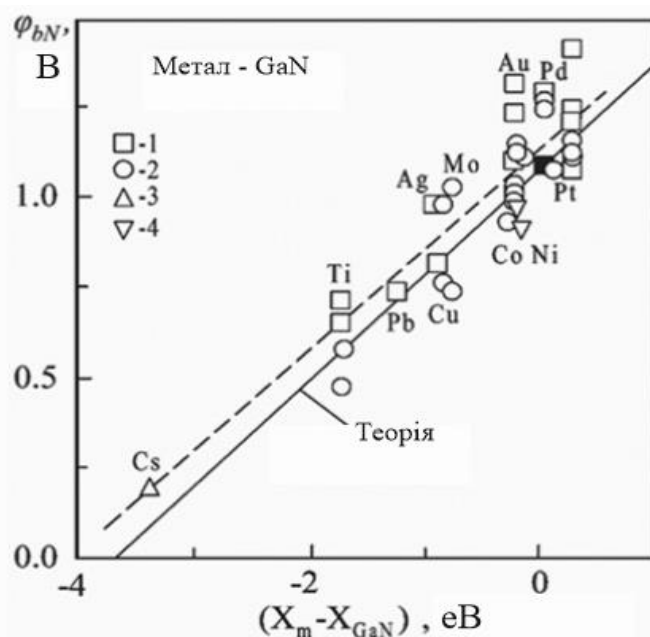


Рис. 1.7. Залежність висоти бар'єра контактів метал–n-GaN від різниці електронегативностей

Важливою характеристикою межі поділу в цій моделі є положення рівня зарядової нейтральності. Розрахунки показують, що для GaN цей рівень розташований на відстані близько 1,1 еВ від дна зони провідності. Характерно, що це значення залишається стабільним і майже збігається як для кубічної кристалічної ґратки, так і для структури вюрциту. Експериментально визначений параметр нахилу залежності висоти бар'єра від електронегативності становить близько 0,29, що добре узгоджується з теоретичними оцінками та вказує на часткове закріплення рівня Фермі на межі поділу [15, 32, 33].

Проте характеристики реальних структур можуть суттєво відхилятися від теоретичних передбачень через вплив технології виготовлення, зокрема методу підготовки поверхні нітриду галію перед нанесенням металу. Агресивні методи очищення, хоч і видаляють забруднення, часто створюють структурні дефекти у приповерхневому шарі, що призводить до зростання показника ідеальності діодів та ускладнює коректне визначення висоти бар'єра.

Порівняння контактів, створених різними методами, наприклад вакуумним напиленням та електрохімічним осадженням, виявляє значні розбіжності у ступені закріплення рівня Фермі. Це дає підстави вважати, що в реальних приладах на висоту бар'єра, окрім роботи виходу металу, критичний вплив мають дефекти структури та стан поверхні напівпровідника, що й зумовлює необхідність оптимізації технологічних процесів, таких як термічне відпалювання.

Як один із варіантів покращення характеристик, у роботі [6] розглядався підхід із введенням металу з високою роботою виходу в найбільш поширену систему діодів Шотткі Ni/Au на (Al)GaN та подальшою термічною обробкою діодів. Оскільки Ni має відносно високу роботу виходу як метал, а також хорошу адгезію до нітридів, він використовувався як проміжний шар для нового введення металу.

Метал з високою температурою плавлення або високою роботою виходу, такий як Pt, Pd, Au, Ir або Mo, осаджувався на тонкий шар Ni з подальшою термічною обробкою для отримання високоякісного контакту Шотткі, тобто

більшої висоти бар'єру Шотткі та вищої термічної стабільності при збереженні хорошої адгезії до GaN.

У проаналізованих літературних джерелах для експериментів використовувалися епітаксійні структури n-GaN, вирощені методом металорганічної газофазної епітаксії на підкладках із сапфіру (c-Al₂O₃) з використанням низькотемпературного буферного шару. За наведеними даними, товщина плівок складала приблизно 3 мкм, а концентрація носіїв заряду верифікувалася методом Холла.

Аналогічний технологічний підхід описується і для виготовлення гетероструктур AlGa_{0.2}N/GaN, призначених для транзисторів HEMT. Архітектура такої епіструктури мала наступну конфігурацію: i-AlGa_{0.2}N (3 нм) / n-AlGa_{0.2}N (15 нм) / i-AlGa_{0.2}N (7 нм) / i-GaN (3 мкм) / LT-GaN / Al₂O₃. При цьому вміст алюмінію в шарах AlGa_{0.2}N фіксувався на рівні 26%, а шар n-AlGa_{0.2}N був легований кремнієм до відповідної концентрації.

Згідно з описом технологічного маршруту, виготовлення діодів Шотткі розпочиналося з формування омічних контактів на основі системи Ti (25 нм)/Al (500 нм), які піддавалися швидкому термічному відпалу при 600 °C протягом 2 хвилин. Бар'єрні структури створювалися у вигляді круглих контактів діаметром 300 мкм зі складною металізацією Ni (10 нм)/x (30 нм)/Au (300 нм), де як проміжний метал "x" використовувалися Pt, Pd, Ir, Au або Mo. Геометрія електродів задавалася методами стандартної фотолітографії та вибухової літографії (lift-off).

Для осадження металевих плівок застосовувався метод електронно-променевого випаровування. Процес контролювався за швидкістю напилення: для золота вона становила 0,7 нм/хв, для інших металів — у межах 0,10–0,15 нм/хв. Підготовка зразків включала ультразвукову очистку в органічних розчинниках та травлення в розчині NH₄OH (1:10). Ключовим етапом була швидка термічна обробка (ШТО) готових структур у потоці азоту (1 л/хв) протягом 5 хвилин при заданих температурах зі швидкістю нагріву 25 °C/с.

Електрофізичні параметри (ВАХ та ВФХ) реєструвалися при кімнатній температурі за допомогою прецизійного обладнання (Agilent 4156C та YHP4280A).

Проведено порівняльний аналіз характеристик діодів Ni/x/Au на n-GaN до та після термічної обробки при 500 °C (рис. 1.8), що дозволило оцінити вплив природи проміжного металу на властивості контакту.

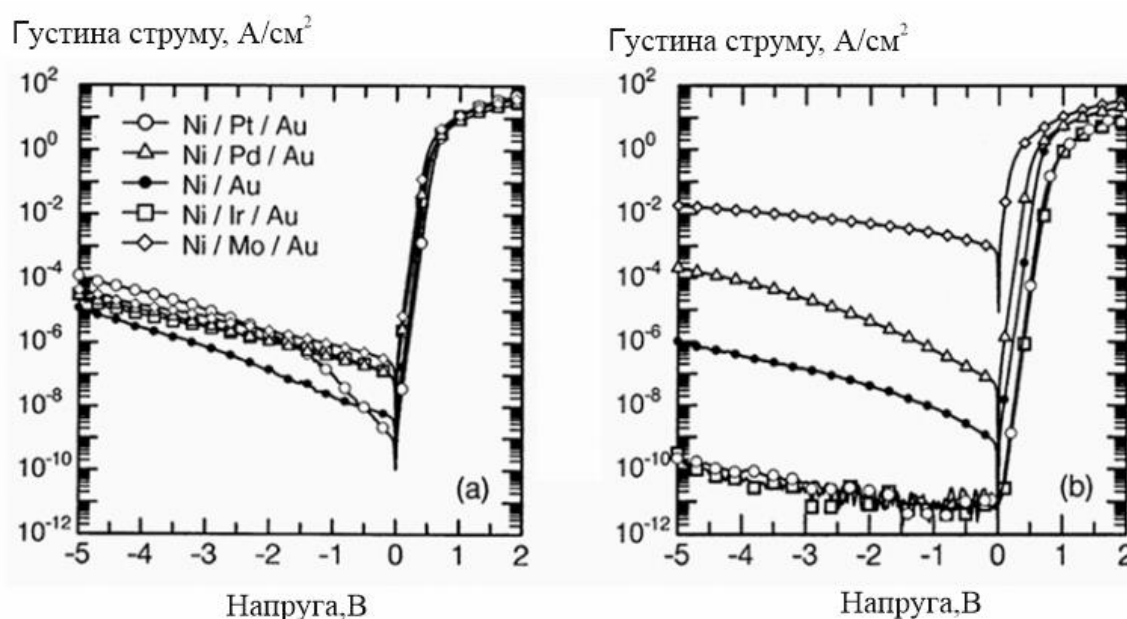


Рис. 1.8. Вольт-амперні характеристики діодів Шотткі Ni/x/Au: (a) після осадження та (b) після відпалювання при 500 °C протягом 5 хв.

Ефективну висоту бар'єру та ідеальний фактор отримували з прямолінійних ділянок прямих гілок ВАХ, апроксимуючи їх рівнянням струму термоелектронної емісії. Висоту бар'єру також визначали з графіків залежності C^{-2} -V.

Ці результати свідчать про те, що Ni перестає відігравати роль основного матеріалу на межі поділу з GaN після ШТО, і кожен введений метал дифундував до межі поділу метал-GaN. Крім того, з'ясувалося, що ефект відпалювання на зменшення струму витоку був більш вираженим у системах з металами, що мають вищу роботу виходу, як у випадку з Pt або Ir. Це можна пояснити тим, що в таких структурах мав реалізуватися вищий бар'єр Шотткі. Зокрема, вважалося, що робота виходу модифікованого приграничного металу, яким мав би бути дифундований введений метал та/або кожен сплав, що містить Ni, визначала

транспорт електронів після термічної обробки. Ефективна висота бар'єру та ідеальний фактор цих пристроїв були визначені та зведені в таблицю 1.

Таблиця 1. Електричні параметри діодів Шотткі Ni/x/Au на n-GaN

Метал Шотткі	Після осадження		Після ШТО (500 °C, 5 хв)	
	ϕ_B (eV)	n	ϕ_B (eV)	n
Ni/Mo/Au	0,74	1,13	0,54	1,02
Ni/Pd/Au	0,78	1,14	0,78	1,14
Ni/Au	0,85	1,06	0,88	1,18
Ni/Ir/Au	0,77	1,20	1,05	1,13
Ni/Pt/Au	1,10	0,89	1,09	1,12

Отримані результати показали, що висота бар'єру залежить від роботи виходу введеного металу в діодах Шотткі на n-GaN після термічного відпалу. Крім того, використання Pt або Ir як електрода Шотткі разом з тонким шаром Ni на межі поділу метал-нітрид виявилося ефективнішим, ніж без Ni, і діоди були термічно стабільними [16]. Нарешті, відпалена структура Ni/Pt/Au була використана як електрод затвора HEMT AlGaN/GaN, і струм витоку затвора був успішно зменшений аж на чотири порядки величини порівняно з пристроєм до відпалювання, не викликаючи жодної деградації характеристик транзистора.

1.4 Метод Монте-Карло

1.4.1 Загальна характеристика методу

Чисельне моделювання є невід'ємним етапом проектування сучасної напівпровідникової елементної бази. Зі зменшенням розмірів приладів до субмікронних та нанометрових масштабів, а також із використанням складних гетероструктур, традиційні дрейфово-дифузійні моделі втрачають свою точність[19]. У таких умовах, де процеси переносу носіїв заряду мають суттєво нерівноважний характер, найбільш адекватним підходом є використання статистичних методів.

Метод Монте-Карло (ММК) у фізиці напівпровідників — це чисельний метод розв'язання кінетичного рівняння Больцмана, який базується на

безпосередньому моделюванні стохастичного руху ансамблю носіїв заряду (електронів або дірок) у просторі та часі. Сутність методу полягає у відстеженні траєкторій великої кількості модельних частинок під дією зовнішніх електричних полів та процесів розсіювання[17, 18].

Ключовими перевагами методу Монте-Карло у контексті моделювання нанорозмірних структур є можливість коректного опису суттєво нерівноважних кінетичних явищ, таких як балістичний транспорт та ефект сплеску швидкості (velocity overshoot), що стають визначальними для приладів із субмікронною довжиною каналу. На відміну від гідродинамічних підходів, даний метод дозволяє детально врахувати мікроскопічні механізми розсіювання носіїв на фонах і домішках, а також процеси ударної іонізації та міжзонні переходи. Окрім цього, сучасні алгоритми забезпечують високу точність завдяки використанню реалістичних моделей зонної структури — від врахування непараболічності до використання повної зонної структури, розрахованої методом псевдопотенціалів, що дозволяє уникнути похибок спрощених параболічних наближень.

Історично метод еволюціонував від простих одночастинкових моделей до складного самоузгодженого ансамблевого моделювання. На початкових етапах часто припускалося, що функція розподілу носіїв є максвеллівською або зміщеною максвеллівською. Проте в сильних електричних полях функція розподілу суттєво відхиляється від рівноважної, що вимагає прямого розв'язку задачі переносу без апріорних припущень про форму розподілу.

Сучасні реалізації методу Монте-Карло є самоузгодженими: рух носіїв розраховується паралельно з розв'язанням рівняння Пуассона, що дозволяє коректно описувати перерозподіл електричного поля внаслідок зміни густини просторового заряду. Це критично важливо для моделювання діодів Шотткі та польових транзисторів, де поле є неоднорідним.

Важливим аспектом є оптимізація обчислювальних витрат. Оскільки моделювання рідкісних подій або проходження частинок через області з низькою концентрацією вимагає значного процесорного часу, використовуються методи

множення частинок (particle splitting) та оптимізації вибору механізмів розсіювання [24].

Для задач даної роботи, де досліджуються контакти метал-напівпровідник, метод Монте-Карло є оптимальним вибором. Він дозволяє детально проаналізувати процеси інжекції носіїв через потенціальний бар'єр, врахувати тунельні ефекти та дослідити релаксацію енергії електронів у приконтактній області, що неможливо зробити в рамках спрощених гідродинамічних моделей. У подальшому моделюванні в даній роботі буде використано аналітичний опис зонної структури, що забезпечує баланс між фізичною точністю та обчислювальною ефективністю.

1.4.2 Моделювання контактних явищ в методі Монте-Карло

Традиційно контакти до діодів можна розбити на дві великі групи: омичні (ОК) та заторні (ЗК) [20, 21]. В обох випадках при моделюванні контактів задачею є створення моделі інжекції, яка відображає його властивості.

ОК є область приладу, яка характеризується локальною зарядовою нейтральністю та тепловою рівновагою. Цю поведінку можна відтворити застосувавши кілька схем інжекції.

У випадку одновимірних симуляцій, коли активна область приладу знаходиться далеко від контактів і очікується зарядова нейтральність усієї структури, можна застосувати періодичні ГУ: носії, що досягають контакту, повторно інжектуються в протилежний кінець з тією ж енергією та хвильовим вектором (або зі станом, випадковим чином вибраним з теплового розподілу) [22].

Ця модель особливо підходить для приладів типу n^+nn^+ структур, де носії досягають контактів приладу в ситуації, близькій до теплової рівноваги, і високолеговані n^+ області значно зменшують вплив інжекції носіїв на робочі характеристики приладу. Ця техніка, хоча й дає хороші результати, має обмежену застосовність. Її не можна використовувати при моделюванні двовимірних приладів з більш ніж двома контактами або у випадку приладів, які не очікують

бути зарядово-нейтральними. Це стосується ДБШ, які ніколи не є зарядово-нейтральними, за винятком умов плоских зон, і їхня поведінка визначається правильною кількістю носіїв усередині приладу.

Деякі модифіковані періодичні ГУ можуть використовуватися для моделювання ДБШ, але завжди з дуже обмеженим застосуванням. Тому необхідно розробити альтернативні схеми, що дозволяють кількості носіїв усередині приладу флукутувати під час моделювання. З цією метою була створена модель, у якій зарядова нейтральність підтримується в області поблизу контакту шляхом періодичної інжекції (зазвичай на кожному кроці оновлення поля) кількості теплових електронів, необхідної для вирівнювання концентрації вільних носіїв з густиною домішок. Крім того, будь-який носій, що досягає контакту, залишає прилад. Це звичайний опис того, що називається ОК у моделюванні методом Монте-Карло.

Однак, щоб коректно описати процес інжекції носіїв, необхідно уточнити низку додаткових деталей, а саме: спосіб визначення кількості носіїв, що інжектуються на кожному часовому кроці, момент їх входження у прилад, початкові координати, а також функцію розподілу швидкостей, з якої випадковим чином вибирається стан нових частинок.

Приймається, що зарядова нейтральність зберігається лише в комірці, що прилягає до омічної границі. Протягом кожного часового кроку тривалістю Δt концентрація вільних носіїв у цій комірці, n_c , розраховується відповідно до виразу:

$$n_c = \frac{1}{A\Delta x} \sum_{i=1}^{M_c} \frac{\delta t_i}{\Delta t} \quad (1.4)$$

де A — площа поперечного перерізу приладу, Δx — довжина комірки, M_c — кількість носіїв, присутніх у комірці протягом часового кроку, а Δt_i — час, який кожен з них проводить усередині неї. Δt_i може збігатися з Δt (носій залишається в комірці весь часовий крок) або бути лише часткою Δt (носій залишає або входить у комірку протягом часового кроку).

В кінці часового кроку n_c порівнюється зі значенням густини легування в комірці, N_c . Якщо $n_c > N_c$, носії не інжектуються: очікується, що накопичення заряду зникне за рахунок дифузії. Якщо $n_c < N_c$, відбувається інжекція носіїв. Перший носій інжектуються з початковою позицією $x=0$ (що відповідає краю комірки, прилеглого до ОК), і його динаміка всередині приладу симулюється протягом часу $r\Delta t$, де r — випадкове число, рівномірно розподілене між 0 і 1.

Концентрація вільних носіїв у комірці, прилеглій до контакту n_c , оновлюється з урахуванням присутності цієї нової частинки. Умова $n_c < N_c$ перевіряється знову. Якщо n_c залишається меншим за N_c , новий носій інжектуються таким самим чином. Ця процедура триває доти, доки вимога $n_c = N_c$ не буде досягнута з різницею 0.01%. Перед інжекцією кожного носія перевіряється наступна умова:

$$r\Delta t < t_{rest} = (N_c - n_c)A\Delta x\Delta t, \quad (1.5)$$

де t_{rest} — час, що залишився для досягнення зарядової нейтральності в комірці (шляхом введення окремих носіїв). Якщо $r\Delta t > t_{rest}$, час, який симулюється для інжектованого носія, становить t_{rest} , оскільки, якщо носій залишається всередині комірки, зарядова нейтральність досягається точно.

З цією схемою інжекції носіїв відтворюється два важливих фізичних аспекти на контакті: електрони перетинають межу між ОК і приладом (позиція $x=0$) у випадкові моменти часу протягом часового кроку (а не обов'язково на початку або в кінці), і належна динаміка інжектованих носіїв у комірці, прилеглій до контакту, визначає кількість частинок, які необхідно ввести (залежно від носіїв, що залишають комірку або залишаються в ній).

Звичайна кількість частинок, інжектованих іншими методами, є найближчим цілим числом до $(N_c - n_c) / A\Delta x\Delta t$, неявно припускаючи, що електрони входять у прилад на початку часового кроку і залишаються всередині першої комірки.

Отже, інжектуючи носії у випадкові моменти часу протягом часового кроку та симулюючи їхню динаміку, зазвичай вводиться більша (і більш реалістична) кількість частинок. У межах цієї схеми існує кілька моделей, які відрізняються функцією розподілу швидкостей, з якої випадковим чином вибирається стан нових частинок. Оскільки носії спочатку розміщуються в позиції $x=0$, швидкість частинки повинна бути спрямована в прилад. Таким чином, швидкість (компонента, перпендикулярна до поверхні контакту) вибирається лише з позитивної частини розподілів.

Перший випадок передбачає невідроджений матеріал та розподіл Максвелла носіїв, які інжектуються відповідно:

$$f(v) \propto e^{-\frac{m^* v^2}{2K_B T}}, \quad (1.6)$$

де m^* — ефективна маса електронів у напівпровіднику, K_B — стала Больцмана, а v — швидкість носія. Передбачається, що ця модель дає нульовий струм на границі. Більш загальний випадок відповідає зміщеному розподілу Максвелла:

$$f(v) \propto e^{-\frac{m^* (v-v_d)^2}{2K_B T}} \quad (1.7)$$

де v_d — середня швидкість, яку повинні мати носії в комірці, прилеглій до контакту, відповідно до густини струму, що протікає через прилад, J :

$$v_d = \frac{J}{qN_c} \quad (1.8)$$

Значення v_d визначається на кожному часовому кроці з густини струму, розрахованої на попередньому кроці. Цей розподіл застосовується лише для компоненти швидкості, перпендикулярної до поверхні контакту; паралельні компоненти визначаються відповідно до розподілу Максвелла. Згідно з побудовою, ця модель забезпечує виконання закону збереження струму на границі.

Третя можлива модель основана на використанні зваженого за швидкістю розподілу Максвелла. Вона враховує вищу ймовірність входу в прилад частинок з великою швидкістю, розподіл Максвелла повинен бути зважений за перпендикулярною швидкістю. Ця модель розглядає ОК як тепловий газ, що торкається межі приладу, а його електрони вилітають у комірку, прилеглу до контакту. У цьому випадку:

$$f(v) \propto v e^{-\frac{m^* v^2}{2K_B T}} \quad (1.9)$$

Це розподіл носіїв, що перетинають задану позицію в напівпровіднику при тепловій рівновазі. Зауважимо, що носії з нульовою/низькою швидкістю мають нульову/дуже малу ймовірність перетину межі. Знову ж таки, цей розподіл застосовується лише для компоненти швидкості, перпендикулярної до поверхні контакту, а паралельні компоненти визначаються відповідно до розподілу Максвелла.

Зважений розподіл Максвелла також може бути зміщений відповідно до середньої швидкості, яку повинні мати носії для збереження струму:

$$f(v) \propto v e^{-\frac{m^* (v - v_d)^2}{2K_B T}} \quad (1.10)$$

Втім, отримані результати свідчать про те, що врахування зміщення швидкості не має суттєвого впливу на характеристики контакту. Розподіл рівняння (1.9) вже дає дуже задовільні результати.

Окремо можна відзначити модель, яка отримала назву метод резервуара [23]. Ця модель досить відрізняється від попередніх. В ній відповідний використовується розподіл носіїв у області резервуара, який прилягає до напівпровідника, так що динаміка носіїв у цьому резервуарі визначає інжекцію в прилад. Резервуар діє як джерело носіїв. Ця модель схематично зображена на рис. 1.9.

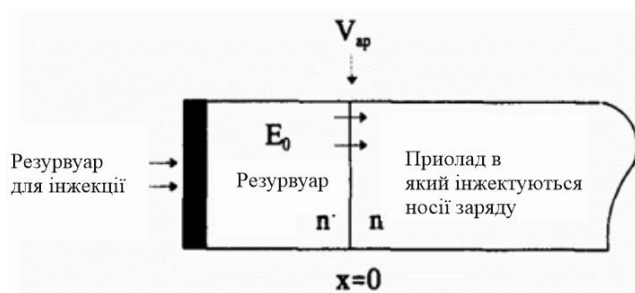


Рис. 1.9. Схематичне представлення моделі резервуара для омичного контакту

Розглядається невелика область (зазвичай кілька комірок), прилегла до пристрою в позиції контакту (резервуар), з тим самим легуванням, що й прилеглий напівпровідник. Потенціал зміщення прикладається до вузла між резервуаром і пристроєм. Інжекція носіїв у резервуар відбувається в першій комірці протилежного боку, дотримуючись моделі максвелівської інжекції.

Рівняння Пуассона розв'язується лише всередині пристрою, але не в резервуарі, тому поле у всіх комірках резервуара набуває того самого значення, що й у першій комірці всередині пристрою. Це гарантує, що на межі резервуар-прилад зберігається струм. Будь-який аномальний небажаний ефект, пов'язаний з інжекцією носіїв у резервуар, знаходиться далеко від краю пристрою, і частинки мають достатньо часу (і простору), щоб стабілізувати свій стан відповідно до електричного поля перед входом у пристрій, так що на межі ми отримуємо адекватний розподіл.

Реальна інжекція носіїв у пристрій відбувається, коли частинки природним чином перетинають межу резервуар-прилад. Варто підкреслити, що чотири моделі контактів дають прийнятні (і схожі) результати у випадку довгих пристроїв, де можливі ефекти, пов'язані з контактами, не є вирішальними для їхньої поведінки. Однак у випадку коротких пристроїв ці ефекти можуть бути дуже важливими для їхньої ефективності, і в цьому полягає інтерес до пошуку моделі ОК з ідеальною поведінкою. Розглянуті моделі інжекції адаптовано для одновимірного випадку, проте їх розширення на 2D-структури не потребує зміни фізичних принципів.

2. МОДЕЛЮВАННЯ ДІОДА З БАР'ЄРОМ ШОТТКІ

2.1 Моделювання транспорту носіїв заряду методом Монте-Карло

Ансамблевий метод Монте-Карло, використаний у цій роботі, заздалегідь обирає кілька десятків тисяч суперчастинок, щоб представляти мобільні носії всередині пристроїв. Ця кількість обмежена обчислювальними потужностями, але хороших результатів моделювання можна досягти, якщо кількість суперчастинок і час моделювання є достатньо великими. Частинки ініціалізуються з тепловими енергетичними розподілами за виразом $3k_B T / 2 \times r$, де r — випадкове число, рівномірно розподілене між 0 і 1, і з випадково орієнтованим хвильовим вектором. Коли моделювання починається, частинкам дозволяється дрейфувати протягом короткого часу вільного пробігу (τ), який є меншим за середній час між зіткненнями, після чого обирається один процес розсіювання.

Вибір механізму розсіювання може бути зроблений таким чином, що швидкість розсіювання порівнюється із сумою всіх швидкостей розсіювання Γ . Момент часу, коли відбувається розсіювання (τ) кожної частинки може бути визначений відповідно через сумарну швидкість розсіювання (Γ) та рівномірно розподілене випадкове число (r_1) як:

$$\int_0^t W_{\Sigma}(\mathcal{E}(t))dt > -\ln r_1 \quad (2.1)$$

Після визначення часу вільного пробігу (τ) можна розрахувати процес дрейфу на основі рівнянь руху:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}(t)}{m^* \sqrt{1 + \frac{2\alpha}{m^*} p^2(t)}} \quad (2.2)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = e\vec{E}(\vec{r}, t) \quad (2.3)$$

Носій дрейфує під впливом електричних полів під час свого вільного пробігу. Механізм розсіювання обирається пропорційно до швидкості кожного

процесу розсіювання. Обирається інше випадкове число r_2 між 0 і 1. Потім це випадкове число r_2 порівнюється з повною швидкістю кожного розсіювання, яка була попередньо розрахована на початку моделювання. Якщо випадкове число r_2 менше за швидкість одного з процесів розсіювання, даний механізм розсіювання вибирається, і запускається процес розсіювання носія, який включає розрахунок нової енергії та імпульсу. Після завершення процесу розсіювання починається новий випадковий час вільного пробігу. Всі частинки в системі пристрою повторюють цю процедуру.

У випадку реалістичного моделювання пристрою рівняння Пуассона має бути розв'язане на кожному часовому кроці для самоузгодженого оновлення електричних полів. Коли рівняння Пуассона розв'язується, суперчастинки розглядаються як хмари заряду. Під час їхнього вільного пробігу, суперчастинки розглядаються як окремі носії. Метод "хмара-в-комірці" найчастіше використовується для приписування заряду суперчастинки вузлам сітки перед розв'язанням рівняння Пуассона. Розв'язання рівняння Пуассона вимагає набагато суворішої вимоги до часових кроків моделювання, щоб уникнути зарядового дисбалансу. Якщо пристрій має області з високим рівнем легування, де $N_I = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, необхідний короткий крок моделювання, менший за 1 фс.

Щільність носіїв має оновлюватися в кінці кожного часового кроку на контактах пристрою. Нейтральність щільності носіїв на контактах витоку та стоку забезпечується видаленням або інжекцією носіїв у вузлах сітки поблизу контактів. Отже, кількість суперчастинок оновлюється на кожному часовому кроці до досягнення цільової точності.

Метод Монте-Карло представляє найбільш фізично всебічний підхід до моделювання переносу заряду в напівпровідниках.

Передбачається, що потенціальна енергія носіїв повільно змінюється як функція положення, і відповідно, процес дрейфу носіїв у напівпровідникових пристроях розглядатися напівкласично.

Таким чином, носії можна розглядати як вільні частинки з ефективною масою. На основі рівнянь руху для носіїв:

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \nabla H, \quad (2.4)$$

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \nabla_k H. \quad (2.5)$$

Зміна хвильового вектора під час вільного пробігу τ визначається шляхом інтегрування рівняння руху за часом:

$$\Delta k = -\frac{eE}{\hbar} \tau. \quad (2.6)$$

У процесі розсіювання спочатку визначається, який саме механізм розсіювання має відбутися з носієм, а потім визначається стан носія після розсіювання. Вибір механізму розсіювання може бути зроблений за допомогою функцій $\Lambda_n(\mathcal{E}_k)$, визначених як:

$$\Lambda_n(\mathcal{E}_k) = \frac{\sum_{j=1}^n W_j(\mathcal{E}_k)}{\Gamma} \quad (2.7)$$

для $n=1,2,\dots,N$, які є послідовними сумами швидкостей розсіювання, нормованими на максимум суми всіх швидкостей розсіювання Γ . Параметр Γ ідентичний тому, що визначений формулою:

$$\Gamma = \text{Max}(\sum_{j=0}^n W_j(\mathcal{E}_k)) \quad (2.8)$$

де n — загальна кількість механізмів розсіювання. Механізм розсіювання для носіїв з енергією $\mathcal{E}_k$ вибирається шляхом генерації випадкового числа r_2 в діапазоні від 0 до 1 та порівняння r_2 з $\Lambda_n(\mathcal{E}_k)$; якщо функції $\Lambda_n(\mathcal{E}_k)$ задовольняють умові:

$$\Lambda_{n-1}(\mathcal{E}_k) < r_2 < \Lambda_n(\mathcal{E}_k) \text{ для } n=1,2,\dots,N \quad (2.9)$$

обирається n-й механізм розсіювання. Принцип заборони Паулі не враховується в рівнянні (2.9), оскільки заповнення кінцевих станів носіями ігнорується.

Якщо в моделюванні враховуються внутрішньодолинне акустичне фононне, міждолинне фононне, розсіювання на іонізованих домішках та ударна іонізація, то швидкості обраного механізму розсіювання позначаються як $W_1 \mathcal{E}_k$, $W_2 \mathcal{E}_k$, $W_3 \mathcal{E}_k$ та $W_4 \mathcal{E}_k$ відповідно до енергії носія $\mathcal{E}_k$. Константи швидкостей розсіювання Γ можна обчислити за формулою:

$$\Gamma = \text{Max}(W_1(E_k) + (W_2(E_k) + (W_3(E_k))), \quad (2.10)$$

де $\mathcal{E}_k = 0, 0.001, 0.002, \dots, \mathcal{E}_k \text{ (eV)}$.

Потім визначають, який механізм розсіювання відбудеться, шляхом порівняння випадкового числа r_i з $\Lambda_n \mathcal{E}_k$ в моделюванні.

Алгоритм вибору розсіювання в моделюванні:

якщо $r_2 < \Lambda_1(\mathcal{E}_k) = \frac{W_1(\mathcal{E}_k)}{\Gamma}$ Акустичне розсіювання,

якщо $r_2 < \Lambda_2(\mathcal{E}_k) = \frac{W_2(\mathcal{E}_k) + W_1(\mathcal{E}_k)}{\Gamma}$ Міждолинне розсіювання,

якщо $r_2 < \Lambda_3(\mathcal{E}_k) = \frac{W_3(\mathcal{E}_k) + W_2(\mathcal{E}_k) + W_1(\mathcal{E}_k)}{\Gamma}$ Розсіювання на домішках,

якщо $r_2 < \Lambda_4(\mathcal{E}_k) = \frac{W_4(\mathcal{E}_k) + W_3(\mathcal{E}_k) + W_2(\mathcal{E}_k) + W_1(\mathcal{E}_k)}{\Gamma}$ Ударне розсіювання,

інакше — Без розсіювання.

2.2 Розрахунок швидкості

При моделюванні напівпровідникових приладів Монте-Карло моделювання еквівалентне розв'язанню транспортного рівняння Больцмана. Функцію розподілу можна обчислити через середню швидкість носіїв, а енергію можна обчислити, коли час вільного пробігу носіїв у кожному елементі об'єму k -простору накопичується.

Цей процес вимагає великого обсягу пам'яті для накопичення даних у k -просторі. Однак у цьому немає необхідності, оскільки середні значення швидкості носія та енергії носія можна обчислити безпосередньо, відстежуючи кожен вільний пробіг носія та потім усереднюючи за всіма дрейфами. Миттєва швидкість носія має вигляд:

$$v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \mathcal{E}_k \quad (2.11)$$

отже, середня швидкість носія під час вільного пробігу τ має вигляд

$$\langle v \rangle_\tau = \frac{1}{\hbar} \frac{\nabla \mathcal{E}_k}{\nabla k} \quad (2.12)$$

де $\nabla \mathcal{E}_k$ та ∇k — це малі прирости енергії носія та хвильового вектора носія відповідно під час вільного пробігу τ . Підставляючи рівняння (2.6) у (2.12), отримуємо:

$$\langle v \rangle_\tau = -\frac{\nabla \mathcal{E}_k}{eE\tau} \quad (2.13)$$

Використовуючи середню швидкість носія під час вільного пробігу τ , задану рівнянням (2.13), середня швидкість носіїв за загальний час моделювання T задається як

$$\langle v \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle v \rangle_\tau \tau = \frac{1}{eET} \sum (\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i) \quad (2.14)$$

де $\mathcal{E}_f$ — енергія носія в кінці вільного пробігу, а $\mathcal{E}_i$ — енергія носія на початку вільного пробігу. Підсумовування має бути виконане для всіх вільних пробігів. Рівняння (2.14) показує приріст енергії за час кожного вільного пробігу.

Аналогічні міркування приводять до того, що середня енергія носія задається так

$$\langle \mathcal{E} \rangle_T = \frac{1}{T} \sum \langle \mathcal{E} \rangle_r \tau \quad (2.15)$$

де $\langle \mathcal{E} \rangle$ з хорошою точністю визначається як

$$\langle \mathcal{E} \rangle_r = \frac{\mathcal{E}_i + \mathcal{E}_f}{2} \quad (2.16)$$

Для оцінки середньої енергії носія $\langle \mathcal{E} \rangle$ та середньої швидкості носія $\langle v \rangle$, до процесу дрейфу потрібно додати розрахунок $\langle v \rangle_r$ та $\langle \mathcal{E} \rangle_r$.

2.3 Модель контакту

Фундаментом для побудови моделі контакту обрано наближення вільних електронів Томаса-Фермі, яке застосовується для опису металів. Оскільки сферична топологія поверхні Фермі притаманна лише обмеженому колу матеріалів, у роботі основну увагу зосереджено на контактах із використанням платини (Pt), для якої дане наближення є цілком коректним.

Відповідну енергетичну діаграму контактної структури наведено на рис. 2.1

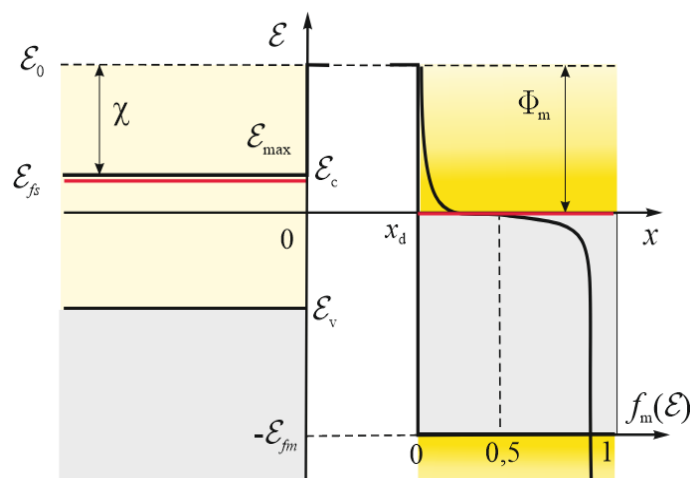


Рис. 2.1. Енергетична діаграма контакту метал – напівпровідник (до встановлення рівноваги)

У моделі передбачено можливість наявності проміжного зазору між металом та напівпровідником. Цей простір може бути заповнений, наприклад, шаром двовимірного (2D) матеріалу або адсорбованими молекулами.

Зокрема, експериментальні дослідження гетероструктур типу 3D-GaN/2D-MoS₂-метал свідчать, що моношар дисульфиду молібдену може локалізуватися на відстані порядку 3 Å від поверхні нітриду галію[26]. Така конфігурація суттєво впливає на формування потенціального бар'єра, що необхідно враховувати при побудові моделі.

У такій конфігурації на межі поділу метал–напівпровідник формується потенціальний бар'єр, висота якого визначається співвідношенням роботи виходу електрона з металу та електронної спорідненості напівпровідникового матеріалу.

Відомо, що емісія електрона з металу супроводжується формуванням обмінно-кореляційної дірки. Зі збільшенням відстані між електроном і поверхнею металу цей ефект трансформується у класичний заряд зображення [29]. Водночас на електрон, що знаходиться в напівпровіднику, діє додаткова сила притягання з боку металу. Вплив цих сил враховується шляхом введення потенціалу сил зображення як адитивної добавки до основного електростатичного потенціалу.

Варто зазначити, що класичне наближення потенціалу сил зображення для системи метал–діелектрик–напівпровідник втрачає фізичну коректність у безпосередній близькості до меж поділу середовищ. Часткове розв'язання цієї проблеми досягається шляхом врахування ефектів екранування в рамках квазікласичної теорії Томаса-Фермі [27].

Тунелювання електронів через перехід часто розглядається в наближенні незалежних електронів, що рухаються в ефективному потенціалі. Відомо, що сили зображення значно модифікують його. Розрахунки, що ґрунтуються на класичній електростатиці, наприклад, показують, що дія сил зображення змінює форму потенціального бар'єру, знижуючи його максимальну висоту та дещо звужуючи його ширину.

Більш реалістичні квантово-механічні розрахунки, що використовують формалізм функціоналу густини, вказують на те, що корекція найнижчого

порядку до цієї класичної картини полягає у зміщенні ефективної площини зображення на кілька десятих ангстрема, разом з плавним узгодженням вакуумного потенціалу поза поверхнею з мінімумом зони провідності всередині металу. Отримана висота потенціального бар'єра тоді залежить від відстані між двома провідними матеріалами, і її можна легко апроксимувати.

Якщо один з матеріалів є напівпровідник, то з'являється якісно інше явище, оскільки тунельні електрони відчують додаткову силу зображення всередині напівпровідника через скінченну поляризованість цього середовища. У класичному аналізі множинних зображень планарного контакту метал-вакуум-напівпровідник або переходу напівпровідник-вакуум-напівпровідник (НВН) цей внутрішній потенціал зображення визначається виразом

$$V_s(z) = \frac{q^2}{16\pi\epsilon_s} \sum_{n=0}^{\infty} (\beta\beta')^n \left(\frac{\beta}{ns - z} - \frac{\beta'}{(n+1)s - z} \right) \quad (2.17)$$

для додаткового точкового заряду q , розташованого при $z < 0$, де $z = 0$ — положення інтерфейсу напівпровідник-вакуум, і $z = s$ — положення інтерфейсу вакуум-метал. Тут ϵ_s — статична діелектрична проникність напівпровідника і

$$\beta = \frac{\epsilon_s - \epsilon_0}{\epsilon_s + \epsilon_0} \quad (2.18)$$

де ϵ_0 — проникність вакууму; відповідний вираз визначає β' . Для МВН переходу $\beta' = 1$. Внутрішній потенціал зображення (2.17) призводить до ефективного збільшення ширини забороненої зони напівпровідника поблизу ідеального інтерфейсу напівпровідник-вакуум, оскільки носії заряду відштовхуються від поверхні розділу з вакуумом, що призводить до підвищення енергії електронів та підвищення енергії дірок, внаслідок чого ширина забороненої зони ефективно збільшується. Ситуація є прямо протилежною на ідеальному інтерфейсі напівпровідник-метал, де заборонена зона ефективно зменшується, явище, яке вже очікувалося з квантової багаточастинкової точки зору.

Щоб явно показати функціональну залежність від відстані проміжку, Рівняння (2.17) можна записати в масштабованій формі

$$V_s(z) = \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 s} U_s(\beta, \beta', \xi) \quad (2.19)$$

де $\xi = z / s$ і U_s — безрозмірна функція, незалежна від s . У МВН переході V_s змінює знак у положенні $z_0 = s\xi_0(\beta)$, оскільки внесок від поляризаційного заряду на інтерфейсі метал-вакуум зрештою домінує над внеском від інтерфейсу напівпровідник-вакуум глибоко всередині напівпровідника. Таким чином, електрон зони провідності, що наближається до поверхні, зазнаватиме впливу сил зображення, які спочатку мають характер притягання, а потім — відштовхування,

з

$$\begin{aligned} U_s < 0, \xi < \xi_0(\beta) \\ U_s = 0, \xi = \xi_0(\beta) \\ U_s > 0, \xi > \xi_0(\beta). \end{aligned} \quad (2.20).$$

Бар'єр для тунелювання, індукований зображенням у напівпровіднику, буде залежати від відстані між електродами.

Класичний вираз для потенціалу сил зображення є непридатним для розрахунків тунелювання методом матриць переносу, оскільки він має розбіжність на межах поділу, що призводить до появи нефізичних зв'язаних станів. Запропоновано просту напівкласичну теорію для переходу метал–вакуум–напівпровідник, яка усуває ці сингулярності, проте вимагає плавної інтерполяції загального ефективного потенціалу поблизу межі поділу. Попередні розрахунки на основі цієї теорії показали, що у граничному випадку нульового електричного поля між металом і напівпровідником внесок сил зображення у напівпровіднику в загальний потенціал бар'єра є незначним. Цю нечутливість до додаткової корекції можна пояснити короткодійним характером індукованого бар'єра в напівпровіднику, внаслідок чого він виявляється фактично прозорим для тунелювання.

Збільшення відстані між металом і зразком експоненціально пригнічує тунелювання через вакуумний бар'єр, аналогічно до класичного випадку, але тепер також експоненціально збільшує кількість електронів, що досягають

поверхні напівпровідника. Через ці конкуруючі фактори, спостережувана зміна густини струму є меншою за очікувану; тоді це інтерпретується як менша висота бар'єра. Якщо потенціал, індукований зображенням (2.19), накладається на потенціал просторового заряду, він також буде змінюватися зі зміною відстані між металом і напівпровідником.

Розрахунки проводяться за припущення, що система складається з незалежних електронів, що рухаються в ефективному одновимірному потенціалі. Об'ємний метал розглядається як фермі-газ вільних електронів, що характеризується енергією Фермі $\mathcal{E}_F$ та роботою виходу Φ . Напівпровідник моделюється в однозонному наближенні ефективної маси, із врахуванням непараболічності. В метал- вакуум- напівпровідник переході, інтерфейси напівпровідник-вакуум та вакуум-метал збурюють ці об'ємні ефективні потенціали; поправки, які ми розглядаємо, вносяться взаємодією множинних зображень та просторовими зарядами, індукованими зондом. Модифікації, спричинені поверхневими станами або колективними поверхневими збудженнями, ігноруються.

Вирази для класичного потенціалу зображення в ідеальному переході метал-ізолятор-напівпровідник розходяться на інтерфейсах напівпровідник-вакуум та вакуум-метал. Цих нефізичних розбіжностей можна уникнути, використовуючи ефективну теорію діелектричного екранування Томаса-Фермі для виведення напівкласичного виразу для потенціалу зображення, який відчуває тунельний електрон. Зокрема, діелектрична функція Томаса-Фермі в об'ємному металі є

$$\varepsilon_m(k) / \varepsilon_0 = 1 + \gamma_m^2 / k^2, \quad (2.21)$$

де γ_m — відповідний хвильовий вектор Томаса-Фермі. У тому ж наближенні, реакція екранування власного об'ємного напівпровідника може бути змодельована діелектричною функцією

$$\frac{\varepsilon_s(k)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{(\varepsilon_s / \varepsilon_0) - 1}{1 + (\varepsilon_s / \varepsilon_0)(k^2 / \gamma_s^2)}, \quad (2.22)$$

де $(\varepsilon_s / \varepsilon_0)$ — довгохвильова статична діелектрична стала, а γ_s — ефективний хвильовий вектор Томаса-Фермі. Цей параметр визначається із залежності рівноважної концентрації носіїв заряду в напівпровіднику від хімічного потенціалу, яка розраховується відповідно до вибраного закону дисперсії:

$$n(\mu) = N_c \int_0^\infty \frac{(1 + \alpha k T x) \sqrt{x(1 + \alpha x)}}{1 + \exp(x - \mu / kT)} dx \quad (2.23)$$

де N_c — ефективна густина станів в зоні провідності, k — стала Больцмана, T — температура. Параметр α описує непараболічність дисперсії кінетичної енергії електрона в зоні провідності:

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*_0(1 + \alpha \mathcal{E})} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(\mathcal{E})} \quad (2.24)$$

Такий підхід дозволяє коректно врахувати особливості зонної структури при розрахунку екранування.

Напівкласичний вираз для потенціалу зображення, який відчуває точковий заряд q , розташований у положенні $z < 0$ в напівпровіднику:

$$V_s(z) = \frac{q^2}{8\pi e_s} \int_0^\infty F_k^s e^{kz} + A_k^s \exp[(k^2 + \gamma_s^2)^{1/2} z] dk, \quad (2.25)$$

де

$$F_k^s = -\frac{e^{-2ks} - \beta}{1 - \beta e^{-2ks}} e^{kz} \quad (2.26)$$

збігається з класичним розв'язком і

$$A_k^s = -\frac{\left\{ \frac{2\alpha_s}{1 + \alpha_s} \right\} \eta_m e^{-k(2s-z)} + F_k^s + \left\{ \frac{2\beta}{1 - \beta} \right\} \eta_m e^{-2ks} - \eta_s \exp[(k^2 \gamma_s^2)^{1/2} z]}{1 - \eta_s \eta_m e^{-2ks}}, \quad (2.27)$$

представляє додаткову реакцію, що виникає внаслідок близькодійючого екранування в напівпровіднику. Тут ми визначаємо, на додаток до β , визначеного у виразі (2.18),

$$\alpha_m(k) = \frac{k}{(k^2 + \gamma_m^2)^{1/2}}, \quad (2.28)$$

$$\alpha_s(k) = \frac{k}{(k^2 + \gamma_s^2)^{1/2}}, \quad (2.29)$$

$$\eta_m(k) = \frac{1 - \alpha_m(k)}{1 + \alpha_m(k)}, \quad (2.30)$$

$$\eta_s(k) = \frac{1 - \alpha_s(k)}{1 + \alpha_s(k)}. \quad (2.31)$$

Коли q знаходиться у вакуумній області $0 < z < s$, відповідний вираз для напівкласичного потенціалу зображення стає

$$V_v(z) = \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0} \int_0^\infty B_k^v e^{kz} + C_k^v e^{-kz} dk, \quad (2.32)$$

де

$$\begin{aligned} B_k &= -\eta_m e^{k(z-s)} \frac{\eta_s(1-\beta) \frac{e^{k(s-z)} - e^{-k(s-z)}}{1 - \beta e^{-2ks}} - \eta_s e^{k(s-z)} + e^{k(s+z)}}{e^{2ks} - \eta_s \eta_m} = \\ &= -\eta_m e^{k(z-2s)} \frac{\eta_s(1-\beta)(e^{-kz} - e^{k(z-2s)}) + (-\eta_s e^{-kz} + e^{kz})(1 - \beta e^{-2ks})}{(1 - \eta_s \eta_m e^{-2ks})(1 - \beta e^{-2ks})} = \\ &= -\eta_m e^{2k(z-s)} \frac{\eta_s(1-\beta)(e^{-2kz} - e^{-2ks}) + (1 - \eta_s e^{-2kz})(1 - \beta e^{-2ks})}{(1 - \eta_s \eta_m e^{-2ks})(1 - \beta e^{-2ks})} \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} C_k &= \eta_s e^{ks} \frac{(1-\beta) \frac{e^{k(s-z)} - e^{-k(s-z)}}{1 - \beta e^{-2ks}} - e^{k(s-z)} + \eta_m e^{-k(s-z)}}{e^{2ks} - \eta_s \eta_m} = \\ &= \eta_s e^{ks} \frac{(1-\beta)(e^{k(s-z)} - e^{-k(s-z)}) + (-e^{k(s-z)} + \eta_m e^{-k(s-z)})(1 - \beta e^{-2ks})}{(e^{2ks} - \eta_s \eta_m)(1 - \beta e^{-2ks})} = \\ &= \eta_s \frac{(1-\beta)(e^{-kz} - e^{-k(2s-z)}) + (-e^{-kz} + \eta_m e^{-k(2s-z)})(1 - \beta e^{-2ks})}{(1 - \eta_s \eta_m e^{-2ks})(1 - \beta e^{-2ks})} = \\ &= \eta_s \frac{(1-\beta)(e^{-2kz} - e^{-2ks}) + (-e^{-2kz} + \eta_m e^{-2ks})(1 - \beta e^{-2ks})}{(1 - \eta_s \eta_m e^{-2ks})(1 - \beta e^{-2ks})} = \\ &= \eta_s \frac{(1-\beta)(e^{-2kz} - e^{-2ks}) + (-e^{-2kz} + \eta_m e^{-2ks})(1 - \beta e^{-2ks})}{(1 - \eta_s \eta_m e^{-2ks})(1 - \beta e^{-2ks})} \end{aligned} \quad (2.34)$$

i

$$F_k^v = (1 + \beta) \frac{e^{k(s-z)} - e^{-k(s-z)}}{1 - \beta e^{-2ks}} \quad (2.35)$$

Нарешті, для q в металі ($z > s$) знаходимо

$$V_m(z) = \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \exp\left[(k^2 + \gamma_m^2)^{1/2}(s-z)\right] D_k^m dk \quad (2.36)$$

3

$$D_k^m = \frac{\eta_m - \eta_s e^{-2ks}}{1 - \eta_s \eta_m e^{-2ks}} \exp\left[(k^2 + \gamma_m^2)^{1/2}(s-z)\right], \quad (2.37)$$

що представляє ефект близькодіючого екранування. Формули для $V_s(z)$, $V_v(z)$ та $V_m(z)$, відтворюють очікувані класичні результати в межах $\gamma_{s,m} \rightarrow \infty$ і що $V_m(z)$, зокрема, зникає.

Ефективний одноелектронний потенціал отримується по всьому переходу шляхом додавання відповідного локального розв'язку для напівкласичного потенціалу зображення до потенціальної енергії електрона. Обираючи дно зони провідності напівпровідника як енергетичний нуль, одноелектронний потенціал тоді визначається $V_s(z)$ в напівпровіднику, $V_v(z) + \chi$ у вакуумному проміжку, і $V_m(z) + \chi - \Phi + \mathcal{E}_F$ в металі. Ця функція, хоч і скінченна, все ще є розривною на межах напівпровідник-вакуум та вакуум-метал.

Існує низка причин цієї розривності, яка походить від недосконалості напівкласичного розгляду на відстанях в межах довжини екранування від інтерфейсів. По-перше, розгляд припускає об'ємні значення для параметрів екранування в кожному середовищі. По-друге, правильна поведінка загального ефективного потенціалу (або власної енергії), який відчуває електрон, що рухається зсередини поляризованого середовища до області безпосередньо поза ним, може бути виведена лише шляхом повного врахування багаточастинкових ефектів. Нарешті, не існує апіорного зв'язку між ефективним вигином зон, спричиненим ефектами зображення в безпосередній близькості від інтерфейсу, та

одноелектронним потенціалом, що використовується для моделювання зонної структури, який гарантує, що внесок від поверхневих дипольних шарів, разом з обмінними та кореляційними ефектами, створить плавно змінний загальний потенціал через інтерфейси.

Для усунення цих розривів та забезпечення фізичної коректності моделі на межі поділу метал–напівпровідник апроксимація потенціалу здійснюється за допомогою полінома третього ступеня:

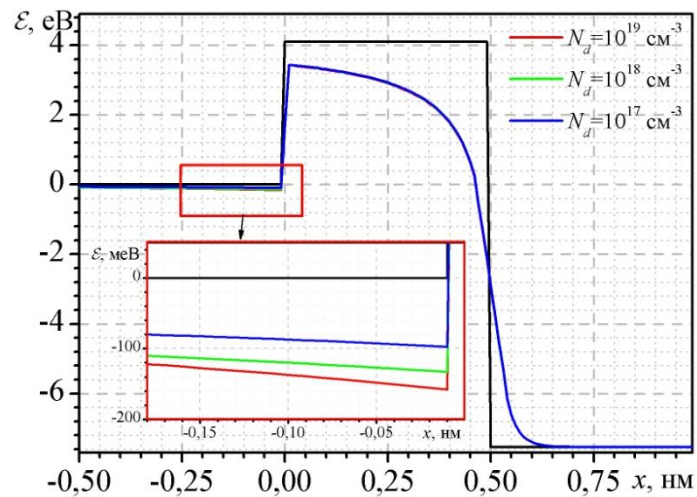
$$V(z) = V_0 + V_1(z - z_0) + V_3(z - z_0)^3 \quad (2.38)$$

де z_0 — точка, яка відповідає межі розділу метал – напівпровідник, що діє змогу сформувати плавне з'єднання розрахованого потенціалу та його похідної в точках на відстані $\gamma_{(s,m)}^{(-1)}$ по обидва боки від меж напівпровідник-вакуум та вакуум-метал. Для знаходження коефіцієнтів в (2.38) розв'язується система рівнянь, що впливає з умов неперервності потенціалу та його похідної на межах інтервалу.

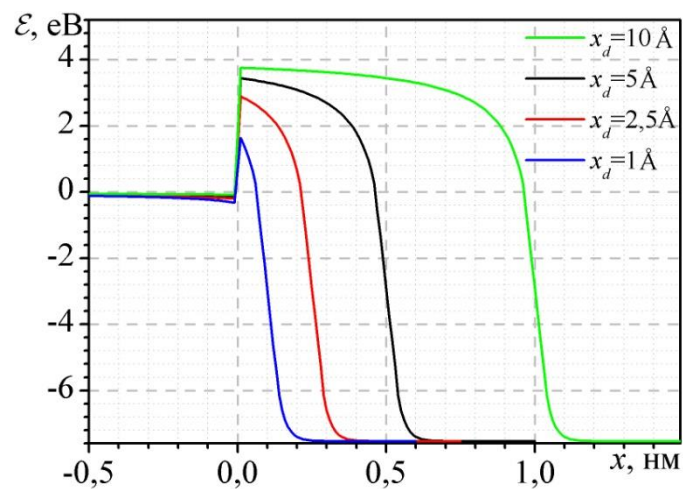
Використання зазначеної методики дозволяє отримати необхідні параметри, застосувавши мінімальну корекцію для точок, що локалізовані безпосередньо на межі поділу метал–напівпровідник. На рис. 2.2 проілюстровано розраховані профілі потенціальних бар'єрів для умов плоских зон (за рівності хімічних потенціалів у металі та напівпровіднику). Для порівняння наведено залежності як з урахуванням впливу сил дзеркального відображення, так і без них.

Рух електронів крізь контактну зону описується дрейфовим наближенням, згідно з яким носії долають бар'єр вільно, не зазнаючи зіткнень. Результуючий потенціальний профіль для електрона формується як суперпозиція електростатичного бар'єра, зумовленого просторовим зарядом у приконтактній області, та потенціальної енергії, викликані дією сил дзеркального зображення.

Модель враховує механізми як підбар'єрного (тунельного), так і надбар'єрного проходження електронів. Для розрахунку коефіцієнта прозорості бар'єра застосовано метод трансфер-матриць (матриці передачі).



а)



б)

Рис.2.2 Потенціальні бар'єри при $U=0$: а) без урахування сили дзеркального зображення та з урахування сил дзеркального зображення та різної рівноважної концентрації в напівпровіднику; б) з урахування сил дзеркального зображення та різної товщини діелектричного шару.

Складний профіль бар'єра апроксимується послідовністю прямокутних потенціальних сходинок різної товщини Δx . Дискретизація здійснюється в межах діелектричного проміжку між металом і напівпровідником, у приконтактному шарі напівпровідника (товщиною 0,25 нм), а також на відстані до 2,5 нм від інтерфейсу.

У глибині напівпровідника електрон розглядається як квазікласична частинка. Її динаміка — зміна координат та імпульсу — описується рівняннями

руху, а акти розсіювання відбуваються у випадкові моменти часу згідно з імовірностями, що відповідають актуальним механізмам розсіювання для матеріалу GaN.

Рішення про перехід частинки в контакт приймається імовірнісним методом: для кожної частинки, що досягла бар'єра, генерується випадкове число, яке порівнюється з розрахованою ймовірністю проходження.

Для коректного врахування інжекції електронів з металу в напівпровідник на осі повної енергії виокремлюється енергетичний діапазон $\mathcal{E}_{\min}, \mathcal{E}_{\max}$, що відповідає енергіям електронів з максимальною ймовірністю переходу. Верхня межа інтегрування $\mathcal{E}_{\max}$ (див. рис. 2.1) є умовною і обирається виходячи з компромісу між точністю моделювання та обчислювальними витратами. Зазвичай вона встановлюється на рівні, де ймовірність заповнення станів стає нехтувано малою. Нижня межа $\mathcal{E}_{\min}$ визначається мінімумом положення дна зони провідності за умови, що його координата знаходиться не далі певної характерної довжини (у розрахунках це значення обрано рівним 20 нм).

Визначений таким чином енергетичний інтервал дискретизується на ряд підінтервалів $\Delta\mathcal{E}$, які відповідають областям к-простору, укладеним між двома сусідніми ізоенергетичними поверхнями з енергіями $\mathcal{E}$ та $\mathcal{E} + \Delta\mathcal{E}$.

Для визначення макроскопічних характеристик приладу необхідно розрахувати сумарний струм, що протікає через контакт. Потік електронів з металу в напівпровідник, повна кінетична енергія яких знаходиться в інтервалі енергій $(\mathcal{E}_n, \mathcal{E}_n + \Delta\mathcal{E})$, можна описати наступним співвідношенням для потоку частинок:

$$I_n(y_j, \mathcal{E}_n) = \frac{2\pi m^*}{h^3} \int_0^{\mathcal{E}_n + \Delta\mathcal{E}} \int_{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{\parallel}}^{\mathcal{E}_n + \Delta\mathcal{E} - \mathcal{E}_{\parallel}} p(\mathcal{E}_{\parallel}, \mathcal{E}_{\perp}, y_j) d\mathcal{E}_{\perp} d\mathcal{E}_{\parallel}, \quad (2.39)$$

де підінтегральна функція $p(\mathcal{E}_{\parallel}, \mathcal{E}_{\perp}, y_j)$ визначає густину розподілу електронів при переході з металу в напівпровідник і має вигляд:

$$p(\mathcal{E}_{\parallel}, \mathcal{E}_{\perp}, y_j) = \frac{|D(\mathcal{E}_{\parallel}, \mathcal{E}_{\perp}, y_j)|^2}{1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp} - \Phi_m}{kT}\right)} f_m(\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) [1 - f_s(\mathcal{E}_{nf})]. \quad (2.40)$$

У наведеному виразі враховано роботу виходу Φ_m та функції розподілу електронів у металі (f_m) і напівпровіднику (f_s). Величина $|D|^2$ відповідає коефіцієнту прозорості бар'єра, розрахованому методом матриць передачі.

Саме ці співвідношення покладено в основу процедури інжекції в методі Монте-Карло. Інтегрування виразу (2.39) дозволяє отримати повну ймовірність переходу частинки за одиницю часу.

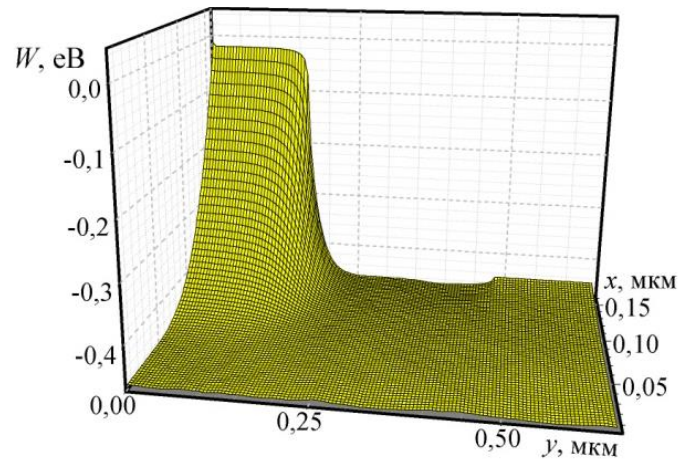
Алгоритм реалізовано наступним чином: за допомогою генератора рівномірно розподілених випадкових чисел (від 0 до 1) визначається момент інжекції, а також номер просторової комірки та енергетичний інтервал для нового електрона. Безпосередні значення складових енергії ($\mathcal{E}_{\parallel}$, $\mathcal{E}_{\perp}$) розраховуються методом Неймана згідно з розподілом (2.40).

2.4 Результати моделювання характеристик діода

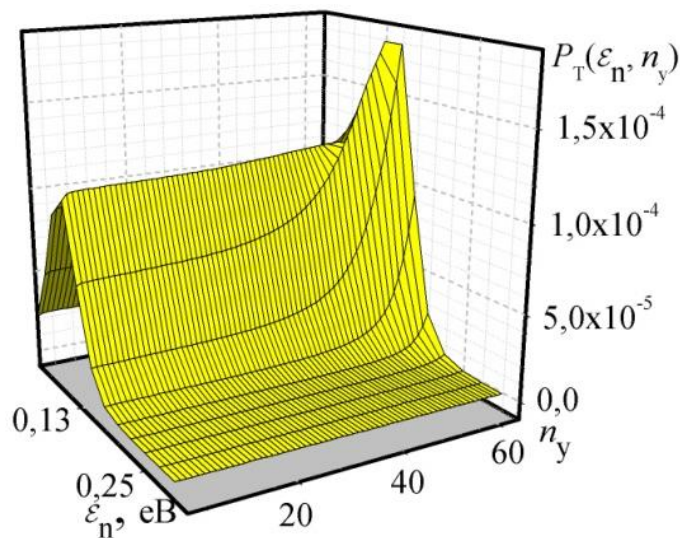
Об'єктом моделювання обрано структуру планарного діода на сапфіровій підкладці. Досліджувалася структура довжиною 0,64 мкм та товщиною 0,16 мкм. Ширина металевго контакту дорівнювала 0,16 мкм, при цьому враховувалася наявність діелектричного проміжку товщиною 0,25 нм. Розрахунок розподілу електростатичного потенціалу виконувався самоузгоджено з використанням ітераційного методу на прямокутній сітці. Для підвищення точності обчислень у тонкому діелектричному шарі застосовувалася сітка зі зменшеним у 50 разів кроком порівняно з основною областю діода.

Для ілюстрації фізичних процесів у розглянутій структурі було розраховано просторовий розподіл потенціальної енергії. На рис. 2.3 наведено отриману 3D-діаграму розподілу потенціалу в активній області діода, а також відповідний розподіл функції інжекції для рівня легування $5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ при прикладеній напрузі 0,5 В. Цей графік наочно демонструє формування області сильного електричного

поля поблизу катодного контакту, що є критичним для коректного моделювання транспорту носіїв.



а)



б)

Рис. 2.3 Розраховані характеристики контактної області: а) просторовий розподіл потенціальної енергії W в активній зоні діода; б) розподіл функції інжекції $P_T(\mathcal{E}_n, n_y)$ залежно від енергії електрона $\mathcal{E}$ та координати на контакті n_y (при $N_D = 5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $U = 0,5 \text{ В}$).

Розроблена модель контакту була імплементована в загальну схему методу Монте-Карло для аналізу роботи планарного діода з бар'єром Шотткі. Досліджувана структура включала металічний катодний контакт на основі

платини (Pt) та активну область на основі GaN. Контактна різниця потенціалів для розглянутому випадку склала 1,55 еВ.

Залежності густини струму від прикладеної напруги, отримані з використання описаної вище моделі, для діодів з різною концентрацією донорної домішки в діодів показані на рис. 2.4

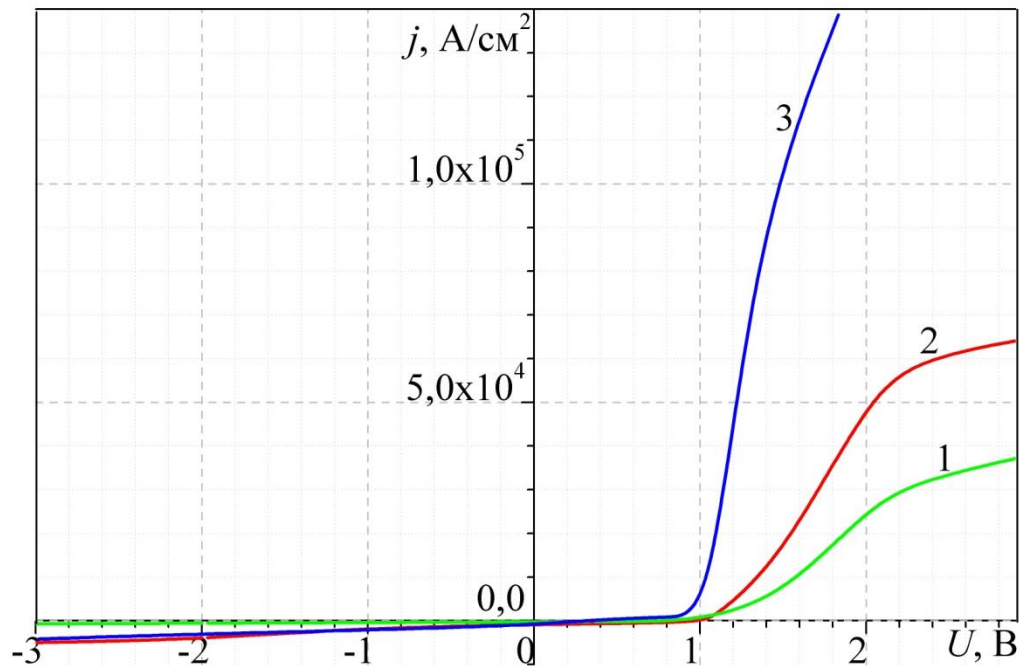


Рис.2.4 Залежності густини струму від прикладеної напруги для діодів з різною концентрацією домішок в каналі: 1 – $N_D = 10^{22} \text{ м}^{-3}$; 2 – $N_D = 5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$; 3 – $N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$.

Як видно з отриманих характеристик діодів, вони якісно співпадають з відомими в літературі характеристиками діодів з бар'єром Шотткі для GaN: мають характерний для діодів з бар'єром Шотткі ділянку з різким зростанням струму за прямого зміщення та ділянку із слабким зростанням струму при напрузі, що відповідає зворотному зміщенні. Можна помітити, що при найбільшій концентрації є незначне зменшення напруги ввімкнення, яка в цілому відповідає даним, щодо експериментальних діодів.

Більші величини отриманих струмів обумовлено:

1) Аналізом ідеального матеріалу діода, в якому рухливість носіїв заряду досягає $1000 \text{ см}/(\text{В} \cdot \text{с})$. Реальний GaN є досить дефектним, і містить велику

кількість дислокацій, переважна більшість яких зосереджена на поверхні. Рухливість таких матеріалів становить близько $50 \text{ см}(\text{В}\cdot\text{с})$.

2) В реальному контакті через велику напруженість електричного поля відбувається розігрів кристалічної решітки, що є фактором додаткового зниження рухливості носіїв заряду. Супутнім фактором у цьому випадку є кінцевий граничний тепловий опір контакту, і, відповідно, температура контакту може суттєво підвищитися, як з боку металу так і з боку напівпровідника.

3) Типовий реальний контакт не є суцільним, через що ефективна площа контакту насправді є меншою, ніж дані отримані із візуального спостереження, що створює невідповідність між експериментальними даними для діодів з однаковою площею контактів;

ВИСНОВКИ

В роботі розглянуто проблему створення простої моделі контакту метал – напівпровідник.

Реалізована базова числова модель контакту, яка враховує наявність діелектричного проміжку між металом і напівпровідником та враховує діелектричне екранування оточуючого контакт середовища.

Проведена апробація реалізованої моделі на задачі по отриманню характеристик планарного діода на основі GaN з металічним контактом на основі платини.

Отримані розрахунки демонструють хороше якісне узгодження отриманих характеристик з відомими характеристиками металічних контактів до GaN

Незважаючи на кількісні відмінності, які обумовлені ідеальністю модельного матеріалу та неврахуванням декількох важливих факторів, що притаманні реальним контактам, дана модель може розглядатися як основа для реалістичного моделювання контактних явищ в електронних приладах.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Keller S., Wu Y. F., Parish G. Gallium nitride based high power heterojunction field effect transistors: process development and present status at UCSB // *IEEE Trans Electron Dev.* – 2001. – Vol. 48, No. 3. – P. 552–559.
2. Pearton S. J., Zolper J. C., Shul R. J., Ren F. GaN: Processing, defects, and devices // *J. Appl. Phys.* – 1999. – Vol. 86. – P. 1–56.
3. Tan W. S., Houston P. A., Parbrook P. J. Gate leakage effects and breakdown voltage in metalorganic vapor phase epitaxy AlGaIn/GaN heterostructure field-effect transistors // *Appl. Phys. Lett.* – 2002. – Vol. 80, No. 17. – P. 3207–3209.
4. Rumyantsev S. L., Pala N., Shur M. S. Effect of gate leakage current on noise properties of AlGaIn/GaN field effect transistors // *J. Appl. Phys.* – 2000. – Vol. 88, No. 11. – P. 6726–6730.
5. Arulkumaran S., Egawa T., Ishikawa H., Umeno M. Effects of annealing on Ti, Pd, and Ni/n-AlGaIn Schottky diodes // *IEEE Trans. Electron Dev.* – 2001. – Vol. 48, No. 3. – P. 573–580.
6. Miura N., Nanjo T., Suita M. Thermal annealing effects on Ni/Au based Schottky contacts on n-GaN and AlGaIn/GaN with insertion of high work function metal // *Solid-State Electronics.* – 2004. – Vol. 48. – P. 689–695.
7. Monroy E., Calle F., Ranchal R. Thermal stability of Pt- and Ni-based Schottky contacts on GaN // *Semicond. Sci. Technol.* – 2002. – Vol. 17. – P. L47–L54.
8. Rhoderick E. H., Williams R. H. Metal-semiconductor contacts. – 2nd ed. – Oxford: Clarendon Press, 1988. – 252 p.
9. Schottky W. Halbleitertheorie der Sperrschicht // *Naturwissenschaften.* – 1938. – Vol. 26. – P. 843.
10. Sze S. M. Physics of Semiconductor Devices. – 2nd ed. – New York: Wiley, 1981. – 868 p.
11. Crowell C. R., Sze S. M. Current transport in metal-semiconductor barriers // *Solid-State Electronics.* – 1966. – Vol. 9. – P. 1035.

12. Kleefstra M., Herman G. C. Influence of the image force on the band gap in semiconductors and insulators // *J. Appl. Phys.* – 1980. – Vol. 51, No. 9. – P. 4923–4926.
13. Williams R. Image force interactions at the interface between an insulator and a semiconductor // *J. Appl. Phys.* – 1974. – Vol. 45. – P. 1239.
14. Mönch W. Electronic properties of semiconductor interfaces. – Berlin: Springer, 2004. – 412 p.
15. Kampen T. U., Mönch W. Barrier heights of GaN Schottky contacts // *Applied Surface Science.* – 1997. – Vol. 117/118. – P. 388.
16. Phark S. H., Kim H., Song K. M. Current transport in Pt Schottky contacts to a-plane n-type GaN // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2010. – Vol. 43. – P. 165102.
17. Jacoboni C., Reggiani L. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials // *Rev. Mod. Phys.* – 1983. – Vol. 55. – P. 645–705.
18. Hockney R. W., Eastwood J. W. Computer Simulation Using Particles. – New York: McGraw-Hill, 1981. – 540 p.
19. Moglestue C. Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices. – London: Chapman & Hall, 1993. – 325 p.
20. Kelimu. Monte Carlo Method for Devices Simulation // *Modeling of Nanoscale Devices.* – 2015. – Chapter 4. – P. 42–59.
21. González T., Pardo D. Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation // *Solid-State Electronics.* – 1996. – Vol. 39, No. 4. – P. 555–562.
22. Varani L., Reggiani L., Kuhn T. Microscopic simulation of electronic noise in semiconductor materials and devices // *IEEE Trans. Electron Devices.* – 1994. – Vol. 41. – P. 1916.
23. Woolard D. L., Tian H., Littlejohn M. A. Hydrodynamic electron-transport model for Schottky-diode // *IEEE Trans. Electron Devices.* – 1994. – Vol. 41. – P. 601.
24. Tomizawa K. Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices. – Boston: Artech House, 1993. – 350 p.

25. Huang Z.-H., Weimer M., Allen R. E. Internal image potential in semiconductors: Effect on scanning tunneling microscopy // *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol. 48, No. 20. – P. 15068–15076.
26. Sze S. M., Ng K. K. *Physics of Semiconductor Devices.* – 3rd Edition. – Hoboken: Wiley-Interscience, 2006. – 832 p.
27. Inkson J. C. Many-body effect at metal-semiconductor junctions // *J. Phys. C.* – 1971. – Vol. 4. – P. 591.
28. Tung R. T. The physics and chemistry of the Schottky barrier height // *Applied Physics Reviews.* – 2014. – Vol. 1. – P. 011304.
29. News D. M. Dielectric response of a semi-infinite metal // *J. Chem. Phys.* – 1969. – Vol. 50. – P. 4572.
30. Littlejohn M. A., Hauser J. R., Glisson T. H. Velocity-field characteristics of GaN with conduction band ordering // *Appl. Phys. Lett.* – 1975. – Vol. 26. – P. 625.
31. Bhapkar U. V., Shur M. S. Monte Carlo calculation of velocity-field characteristics of wurtzite GaN // *J. Appl. Phys.* – 1997. – Vol. 82. – P. 1649.
32. Bardeen J. Surface states and rectification at a metal semi-conductor contact // *Phys. Rev.* – 1947. – Vol. 71. – P. 717.
33. Cowley A. M., Sze S. M. Surface states and barrier height of metal-semiconductor systems // *J. Appl. Phys.* – 1965. – Vol. 36. – P. 3212.
34. Tersoff J. Schottky barrier heights and the continuum of gap states // *Phys. Rev. Lett.* – 1984. – Vol. 52. – P. 465.