

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 2D- 3D – ГЕТЕРОПЕРЕХОДАМИ

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

_____ Євген ХОДАЧОК
(підпис)

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

_____ Олег БОЦУЛА
(підпис)

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

_____ Валерій ЗОЗУЛЯ
(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**

_____ Ходачок Євген Серійович
(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи Планарні діоди з 2D- 3D – гетеропереходами

керівник роботи Боцула Олег Вікторович, канд. фіз.-мат. наук,
(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, пошук параметрів контактуючих 2D та 3D- матеріалів, приклади застосування в мікроелектроніці.

3.2. Розробка математичної моделі та програм розрахунку гібридних 3D-2D структур в умовах неоднорідного розподілу температури .

3.3. Вивчити можливий вплив 2D-шару на вихідні характеристики 3D структури та теплові процеси в них.

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 гібридної 3D-2D структури
4	Отримання вихідних характеристик, розподілів температури
5	Аналіз отриманих результатів
5	Оформлення звіту та тесту дипломної роботи

5. Дата видачі завдання 24.10.2024

Студент

підпис

Є.С. Ходачок

ініціали, прізвище

Керівник роботи



підпис

О.В. Боцула

ініціали, прізвище

АНОТАЦІЯ

Ходачок Є.С. Планарні діоди з 2D- 3D – гетеропереходами. Дипломна робота магістра. Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, Харків, 2024. 50 с., 23 рис., 33 джерел.

ДІОД, МОНОШАР h-BN, ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, ЕФЕКТ САМОНАГРІВАННЯ.

Об'єкт дослідження: планарні GaN-діоди з моношарами двовимірного гексагонального нітриду бора (h-BN).

Предмет дослідження: ефекти самонагрівання в гібридних 3D-2D гетероструктурах.

Мета роботи: дослідження можливості використання моношарів h-BN для контролю температури у субмікронних планарних структурах на основі GaN в умовах сильного електричного поля та ударної іонізації (II).

Методи дослідження: імітаційне моделювання кінетичних процесів методом Монте-Карло з урахуванням неоднорідного температурного розподілу.

Результати дослідження: на основі аналізу вихідних характеристик GaN – діодів розміром 1,28 мкм та 5,2 мкм та температурних розподілів в них встановлено вплив моношару гексагонального нітриду бору на величину температурної деградації характеристик та процеси охолодження діода. Показано, що навіть за незначної зміни в температурі діода вплив h-BN моношару є помітним.

Отримані результати, зокрема, програми моделювання роботи гібридних 3D-2D структур можуть бути використані для дослідження температурних ефектів в них.

ABSTRACT

Ходачок Є.С. Planar 2D- 3D heterojunction diodes. M Master Thesis. V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2024. P. 50, Fig 23, Ref. 33.

DIODE, h-BN MONOLAYER, THERMAL CONDUCTION, SELF-HEATING EFFECT

Object of study: planar GaN-based diodes with hexagonal boron nitride (h-BN) single layer.

Subject of study: self-heating effects in hybrid 3D- 2D heterostructures.

Purpose: study of the monolayer hexagonal boron nitride (h-BN) usage for temperature control in submicrometer GaN-based diodes under conditions of strong electric fields and impact ionization.

Study approach: Ensemble Monte Carlo simulation with consideration of non-uniform temperature distribution.

Findings: the effect of a monolayer hexagonal boron nitride on the temperature degradation of GaN-based diode of 1.28 μm and 5.2 μm and their cooling are determined. At the little temperature change, the factor of h-BN monolayer can be noticeable.

The obtained results, as a simulation program can be applied to study the temperature effects in hybrid 2D- 3D structures.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	7
1 ВЛАСТИВОСТІ НИЗЬКОРОЗМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ.....	8
1.1 Загальна характеристика низькорозмірних матеріалів.....	8
1.1.1 Графен.....	9
1.1.2 Гексагональний нітрид бору.....	12
1.1.3 Дихалькогеніти перехідних металів.....	14
1.2 Теплові властивості двовимірних матеріалів.....	15
1.3 Гібридні структури на основі гетеропереходів між 2D та 3D напівпровідниками.....	17
1.4 Моделювання двовимірних матеріалів.....	20
1.4.1 Квазікласичний підхід до моделювання руху частинок в напівпровідникових приладах.....	20
2 МОДЕЛЮВАННЯ РОБОТИ ПЛАНАРНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ 2D-hBN-3D-GaN.....	25
2.1 Передача тепла в системі 2D-hBN-3D-GaN.....	25
2.1.1 Модель переносу тепла в гібридних структурах 2D-hBN-3D- напівпровідник.....	25
2.1.2 Числове моделювання розподілу температури в планарній структурі на основі GaN з 2D-шаром h-BN.....	29
2.2 Планарний діод з h-BN шаром.....	34
2.2.1 Постановка задачі.....	34
2.2.2 Математична модель транспорту носіїв заряду в діоді.....	34
2.2.3 Результати моделювання.....	39
ВИСНОВКИ.....	46
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	47

ВСТУП

Двовимірні (2D) матеріали привертають велику увагу завдяки своїм відмінним властивостям [1-4]. Наприклад, відомо про надвисока теплопровідність графену за кімнатної температури, яка становить понад $2000 \text{ Вт}\cdot\text{м}^{-1} \text{ К}^{-1}$. Теоретичне та експериментальне дослідження показало, що це явище пов'язане з акустичними фононами і є наслідком інтенсивного процесу розсіювання в графені та його похідних [5]. Ці результати стимулювали великий інтерес до вивчення інших нових двовимірних матеріалів серед яких величезну увагу привертає моношаровий гексагональний нітрид бору (h-BN). На відміну від графену, який є провідником, він має ширину забороненої зони 5,8 еВ і може вважатися найкращим кандидатом на використання у якості діелектричного матеріалу для електронних пристроїв нового покоління. Теоретично та експериментально було встановлено, що планарна теплопровідність h-BN лежить у проміжку $550 - 800 \text{ Вт}\cdot\text{м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ за кімнатної температури [6]. А отже, якщо розмістити шар h-BN на поверхні приладу, то тепло, яке виділяється в результаті його роботи, може швидко поширюватися в різні боки на велику площу, унеможливаючи утворення локального перегріву пристрою. Очікується, що цей підхід буде ефективним насамперед у гетероструктурах, які складаються із різних двовимірних матеріалів. Проте, його також можна використовувати в поєднанні h-BN з 3D-матеріалом у так званих гібридних гетероструктурах зі змішаними розмірами. Вже практично реалізовано ряд таких гетероструктур: від світлодіодів до потужної електроніки [7]. Теоретичні дослідження таких гетероструктур є складними і не можуть безпосередньо використані для приладів довжиною порядку мікрометра. Проте за результатами експериментальних досліджень теплових параметрів h-BN можна зробити оцінки його можливого використання.

Метою даної роботи є розгляд можливостей використання моношарів h-BN- у планарних діодних структурах GaN в умовах сильного електричного поля та ударної іонізації (II) шляхом виникнення в них ефекту самонагріву.

1 ВЛАСТИВОСТІ НИЗЬКОРОЗМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ

1.1 Загальна характеристика низькорозмірних матеріалів

Матеріали низької розмірності (Low-Dimensional Materials, LDM) представляють собою кристали, що обмежені у певній кількості напрямків. У даній роботі розглядаються двовимірні матеріали, такі як графен, гексагональний нітрид бору (h-BN) тощо. LDM матеріали володіють унікальними структурними властивостями, що дозволяють зменшувати товщину до одиничних атомних шарів і спостерігати цікаві електронні, оптичні, механічні та теплові ефекти.

Незвичайні властивості LDM створюють перспективи подолання труднощів звичайної електроніки. Виробництво інтегральних схем наближається до технологічної межі, і все складніше задовольнити попит на мініатюризацію та щільність упаковки. У LDM можна регулювати розміри у необхідних напрямках, що дає можливість налаштовувати електронні, теплові і оптичні властивості з високим ступенем точності, що було обмежено у випадку тривимірних матеріалів. Окрім цього, низька розмірність робить матеріал дуже чутливим до впливу зовнішніх чинників, як: електромагнітні поля, деформація, температура тощо. Нові прилади з унікальними параметрами можливо одержати шляхом створення гетеструктур на основі складання шарів різних LDM матеріалів.

Окремою надзвичайно важливою характеристикою LDM структур є характер переносу тепла. Теплові властивості матеріалів низької розмірності значно відрізняються від подібних властивостей об'ємних речовин. Сильна анізотропія зумовлює різні характери переносу тепла у різних напрямках – у площині шару спостерігається підвищена теплопровідність у порівнянні із напрямком, нормальним до площини. У твердому тілі перенос тепла здійснюється електронами або іншими квазічастинками, що описують коливальні рухи кристалічної ґратки – фононами. У металах найбільший

внесок у теплопровідність вносять саме електрони через їхню велику густину, а у напівпровідниках та діелектриках – фонони. В LDM структурах перенесення тепла здійснюється в основному фононами.

Першим виділеним двовимірним матеріалом був графен у 2004 році [8]. Численні дослідження вчених з того часу розширили групу LDM до сотень зразків, і вона продовжує наповнюватися. Серед цих матеріалів виділяють, на зразок до об'ємних, метали (VOs_2), напівметали (C – графен, Si, Ge), діелектрики (h-BN), напівпровідники (GaTe, MoS₂, P). Усі вони володіють певними властивостями, які надають широкі можливості створювати нові електронні прилади.

1.1.1 Графен

Графен представляє собою двовимірну одношарову (single-layer graphene, SLG) структуру атомів вуглецю, розташованих у гексагональній комірчастій решітці. Постійна ґратки має значення $2,46 \text{ \AA}$, відстань між двома шарами графену становить $3,35 \text{ \AA}$. Структура графену представлена на рисунку 1.1.

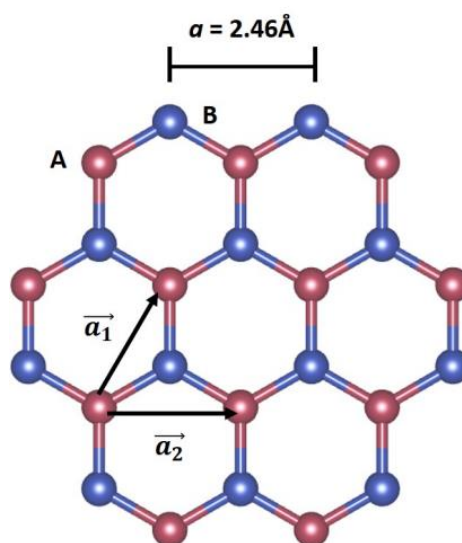


Рисунок 1.1 – Структура одношарового графену

Графенову решітку (рисунок 1.1) будують за допомогою базису з двох атомів (А і В) у трикутній решітці Браве, визначеній базисними векторами:

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad \vec{a}_2 = a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (1.1)$$

де a – постійна решітки.

Електронні властивості графену привертають значну увагу через дуже високу рухливість носіїв (до 600 000 см²/(В·с)). Перша зона Бріллюена (БЗ) та електронна зонна структура SLG вздовж напрямків високої симетрії показані на рисунку 1.2а та 1.2б, відповідно. Кути гексагональної БЗ визначають еквівалентні точки високої симетрії, К і К', навколо яких дисперсійна залежність є лінійною у хвильовому векторі. Із діаграм видно, що графен не має забороненої зони, бо зона провідності і валентна зона змикаються в кожній точці К і К' – точки Дірака. Ці ефекти призводять до дуже високих зареєстрованих рухливостей носіїв навколо таких точок. Однак застосування графену у приладах обмежене через відсутність забороненої зони. Через цей факт графеном складно керувати, як звичайним напівпровідником, бо неможливо ефективно його вимикати, використовуючи зовнішню напругу [9].

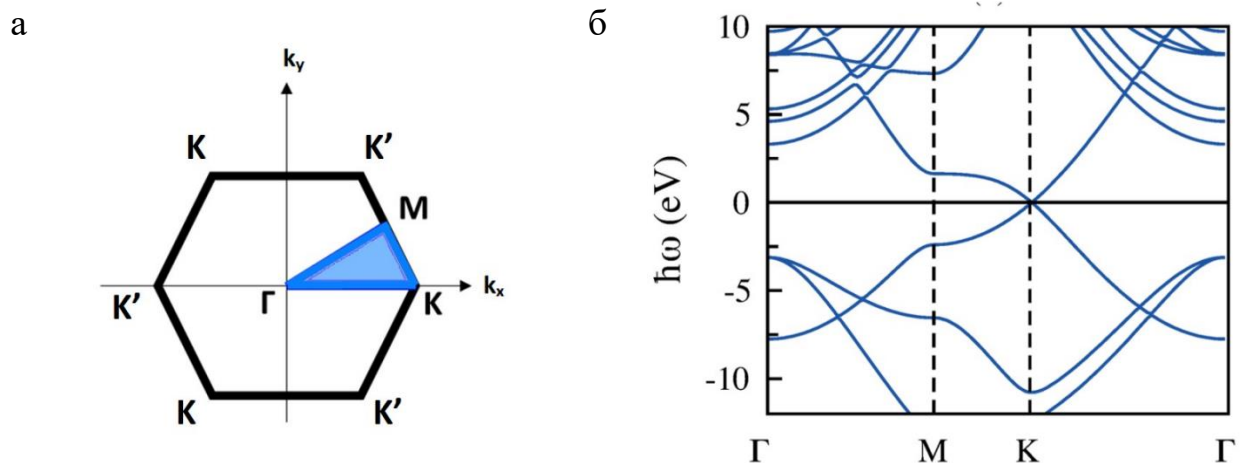


Рисунок 1.2 – Перша зона Бріллюена а) та зонна структура б) SLG

Рівень Фермі (E_F) у графені знаходиться у точці перетину зон, у яких густина станів дорівнює нулю. Через таку властивість графен не можна вважати металом, у яких густина станів при E_F дуже велика. Низька густина станів і поверхнева природа SLG зумовлюють високу чутливість матеріалу до зсувів E_F під впливом будь-яких зовнішніх збурень. При легуванні графена n- чи p-домішками рівень E_F буде зміщуватися у відповідний бік.

У графені, незважаючи на те, що він є напівметалом за природою, теплопровідність відбувається завдяки фононам через дуже сильний характер ковалентних зв'язків sp^2 в латеральному напрямку. До дисперсійної залежності фононів графену і LDM матеріалів у цілому, окрім поперечних та поздовжніх (TA, LA, TO, LO), додаються згинальні гілки (ZA, ZO), які відіграють важливу роль у тепловому транспорті (рисунок 1.3).

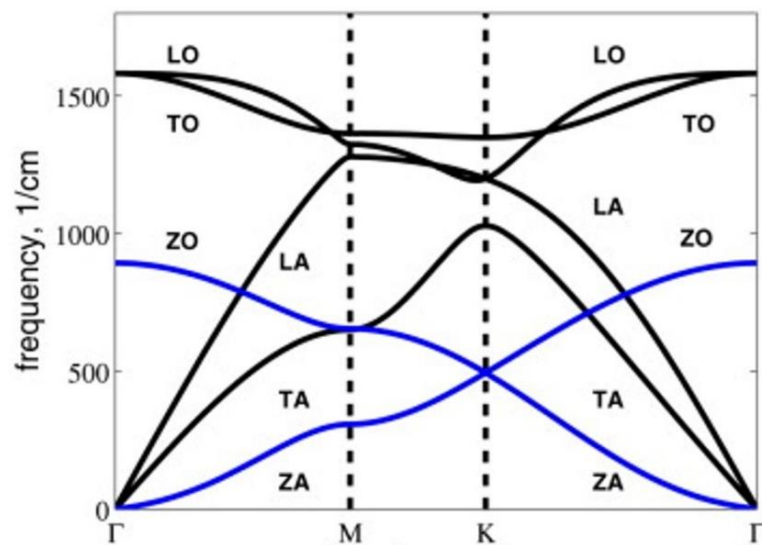


Рисунок 1.3 – Дисперсія фононів у графені

Теплопровідність одношарового графена, одержаного шляхом хімічного осадження з парової фази, за різними оцінками становить від 1800 до 5300 Вт/мК [6]. Більша частина тепла у графені переноситься за рахунок насамперед акустичних гілок через вищі групові швидкості фононів порівняно з оптичними модами. Серед акустичних мод внесок ZA гілки дисперсії фононів домінуючий (до 77%) у тепловому транспорті графену при

кімнатній температурі (рисунок 1.4) через велику густину ZA фононних мод і додаткове правило відбору трифононного розсіяння для вільно підвішених одношарових матеріалів [9].

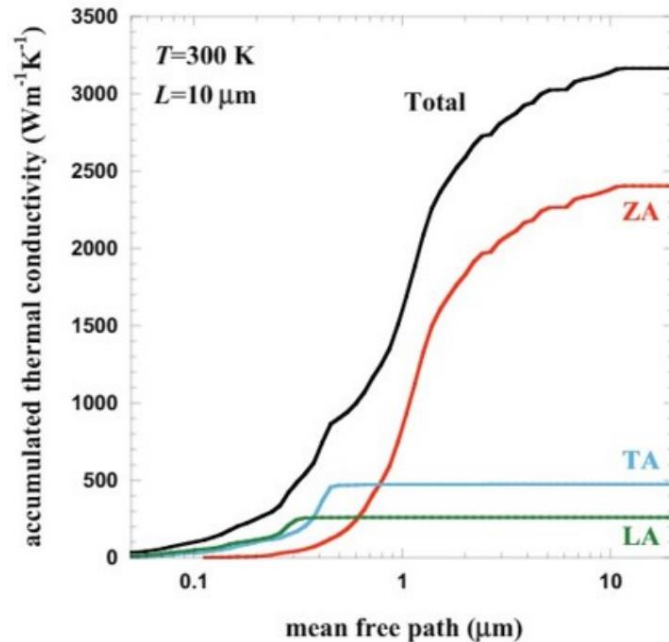


Рисунок 1.4 – Графік вкладу кожної фононної гілки у загальну теплопровідність графену як функція довжини вільного пробігу фонона

1.1.2 Гексагональний нітрид бору

Гексагональний нітрид бору (h-BN) за своєю будовою дуже схожий на графен. Матеріал складається із атомів бору та нітрогену, які розташовуються у гексагональній комірчастій решітці (рисунок 1.5). Постійна ґратки становить $2,50\text{\AA}$, міжшарова відстань h-BN складає 3.33\AA . Електронна зонна структура одношарового h-BN показана на рисунку 1.6. h-BN є діелектриком, з шириною забороненої зони приблизно 6eV [9], завдяки чому h-BN є альтернативним електроізолюючим матеріалом для нових електронних пристроїв. h-BN також володіє високою хімічною стабільністю, механічною міцністю, оптичною прозорістю, особливо у видимому діапазоні світла, хорошими термічними властивостями (термічна стабільність до 850C° на повітрі). Різні експериментальні дані з'ясували, що

теплопровідність об'ємного та декількашарового h-BN становить 360-400 Вт/мК [6, 10], розрахунки стверджують, що теплопровідність одношарового h-BN буде порядку 800 Вт/мК [11]. Основний внесок у явище перенесення тепла h-BN становлять, на зразок графену, акустичні фонони ZA гілки (до 86%). Однак наразі поки не розроблено ефективних методів отримання і обробки h-BN через його тугоплавкість – температура плавлення h-BN перевищує 2000° [9].

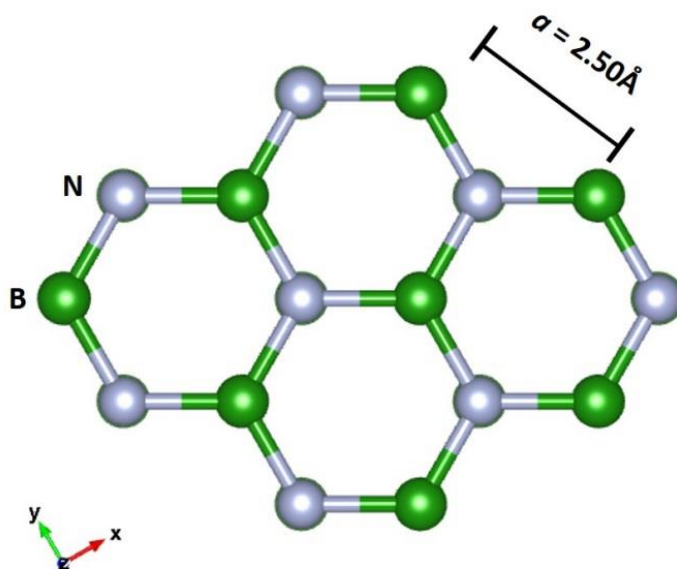


Рисунок 1.5 – Структура одношарового h-BN

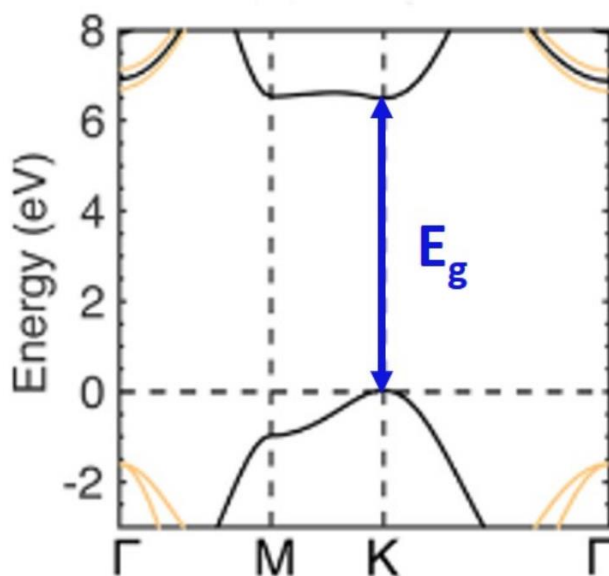


Рисунок 1.6 – Діаграма електронної зонної структури h-BN

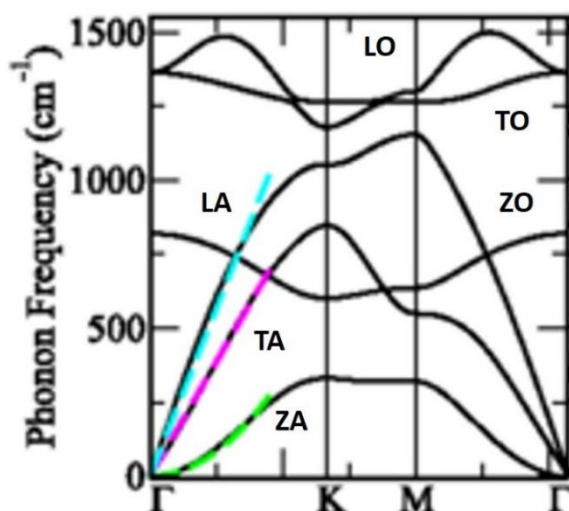


Рисунок 1.7 – Дисперсія фононів у h-BN

1.1.3 Дихалькогеніти перехідних металів

Дихалькогеніди перехідних металів (Transition Metal Dichalcogenides, TMD) представляють собою двовимірні структури, що складаються із атомів двох хімічних елементів, які описуються формулою MX_2 , де M – атом перехідного металу, X – атом халькогену. Шар перехідного металу оточений двома шарами атомів халькогенідів (рисунок 1.8).

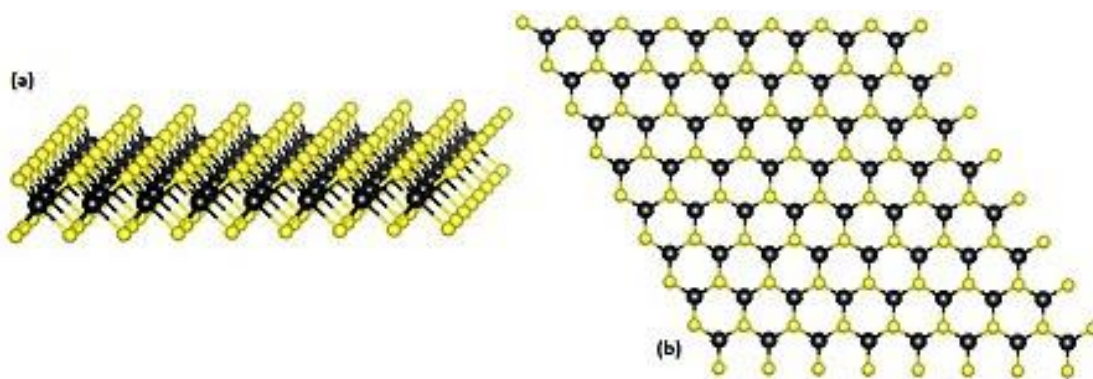


Рисунок 1.8 – Структура одношарового TMD

За електропровідними властивостями TMD є напівпровідниками через наявність забороненої зони, наприклад, для WS_2 і MoS_2 ширина забороненої

зони складає 2,01 і 1,85 eV відповідно. На відміну від графена перехідні метали і халькогени з'єднані слабкими зв'язками, внаслідок чого властивості теплового транспорту відмінні від властивостей графену. Через те, що TMD утворені атомами двох хімічних елементів, велика різниця їхніх мас зумовлює формування фононної щільності. Наприклад, фононна щільність в WS_2 становить 3,3 ТГц, через що у WS_2 спостерігається тривалий час релаксації фононів, а теплопровідність WS_2 сягає 142 Вт/мК [5].

Проводилися експериментальні вимірювання теплопроводностей певних TMD за допомогою оптичного методу Рамана, методу теплового моста тощо. Для одношарового, 4-го, 11-го MoS_2 значення теплопроводності за кімнатної температури змінювалось від 34,5 Вт/мК до 52 Вт/мК. Досліджувалась залежність теплопроводності від температури. Наприклад, теплопровідність MoS_2 становила 62,2 Вт/мК за температури 300 К, а при 450 К – 7,45 Вт/мК. Також виміряні значення теплопроводностей для одношарових WS_2 і $MoSe_2$ за кімнатної температури, і становлять 32 Вт/мК, 59 Вт/мК відповідно [5].

1.2 Теплові властивості двовимірних матеріалів

Двовимірні матеріали і гетероструктури на їхній основі володіють унікальними властивостями теплового транспорту. Теплопровідність має явний анізотропний характер через структуру LDM. Значення теплопроводності у площині набагато більше за значення у міжшаровому напрямку, тому що атоми у площині матеріалу з'єднані сильними ковалентними зв'язками на відміну від слабких ван-дер-Ваальсівських зв'язків між шарами. Як вже зазначалося, тепло у LDM в основному переноситься фононами. Через плоску структуру до поздовжніх та поперечних мод додаються позаплощинні згинальні моди, що вносять вагомий внесок у транспорт тепла. На характер теплопроводності в LDM та

гетероструктурах впливає багато факторів, розуміння яких дозволяє створювати прилади з необхідними властивостями.

Гетероструктури на основі LDM представляють особливо великий інтерес для електроніки, бо будь-який LDM представник має набір унікальних особливостей, які неодмінно впливають на іншу компоненту гетероструктури при їхньому поєднанні. Найбільш дослідженою є комбінація графену і h-BN. За результатами чисельних моделювань було виявлено, що h-BN не значно впливає на теплопровідність графену. Наприклад, h-BN зменшує теплопровідність графена на 23% [5], а при підтримці SiO₂/Si теплопровідність графена знижується до 600 Вт/мК при номінальному значенні 2000 Вт/мК [9]. Це явище пояснюється наявністю сильних і невеликих за розмірами міжшарових зв'язків графен/h-BN, що мінімізують флуктуації внутрішнього напруження графену. Теплопровідність системи графену/h-BN становить 96% від значення теплопровідності графена при кімнатній температурі і значно зменшується з її пониженням. Стабільність структури графену/h-BN забезпечується узгодженістю кристалічних решіток. Сильний міжшаровий зв'язок також забезпечує високу міжшарову теплову провідність (Interfacial thermal conductance, ІТС). У результаті розрахунків значення ІТС становит 4,5 МВт/м²К, а вимірне значення за Раманівської спектроскопії складає 7,4 МВт/м²К. Збільшення ступеня зв'язку між фононами у графен/h-BN можливе за рахунок гідрування. При цьому ІТС гетероструктури збільшується на 70% [5].

Окрім гетероструктури графен/h-BN, були досліджені інші з'єднання. Фосфорен є двовимірною алотропічною формою фосфору. Фосфорен є напівпровідником із шириною забороненої зони 1,5 еВ, що відкриває перспективи його використання у наноелектроніці. Тришарова структура графен/фосфорен/графен має підвищені термічну стабільність і теплопровідність у порівнянні із чистим фосфореном. Сильні міжшарові зв'язки посилюють фонони. Поєднання графена із MoS₂ призводить до

зменшення теплопровідності у площині графена, але майже не впливає на шар MoS_2 [5].

Невідповідність кристалічних решіток змінює силові поля атомів, викликаючи деформацію двовимірних кристалічних структур і зміну фононних спектрів. Процес вирощування гетероструктур супроводжується появою дефектів поблизу гетеропереходів, таких як одна вакансія (SV), стоун-вейли (SW). Моделювання кінетичних процесів у таких структурах доводить, що дефекти впливають на тепловий транспорт. За результатами моделювання відомо, що ІТС зменшується при збільшенні концентрації SV, SW на межі розділу. Дефекти SV призводять до регресії плоских мод фононів, внаслідок чого зменшується теплопровідність. Інструмент штучного введення поверхневих дефектів SW дозволяє управляти напрямком теплового транспорту у LDM [5].

Таким чином, ІТС та теплопровідність LDM та гетероструктурах можуть модулюватися контактним тиском, температурою, гідруванням і дефектами кристалічних решіток. Знання теплових властивостей LDM і ефективне управління ними за допомогою зовнішніх маніпуляцій створюють можливість для широкого спектра застосувань двовимірних матеріалів і гетероструктур на їхній основі для побудови електронних приладів.

1.3 Гібридні структури на основі гетеропереходів між 2D та 3D напівпровідниками

В останні десятиліття значно виріс інтерес до використання в електроніці композиційних матеріалів типу 3D-2D через унікальні властивості LDM, такі як: висока теплопровідність, висока рухливість носіїв заряду, температурна і хімічна стабільність, механічна гнучкість, простота маніпулювання [5].

Автори [8] обговорюють основні аспекти використання графену у переході Шотткі. Структура діода Шотткі із графеном представлена на

рисунку 1.9. На напівпровідник нанесений шар ізолятора SiO_2 для створення контакту із металом. Графен наноситься на одному рівні із діелектриком на напівпровідник, створюючи перехід графен-напівпровідник (graphene-semiconductor junction, GSJ), і частина графену покриває сам ізолятор. Поверх графена над оксидним шаром наноситься шар металу.

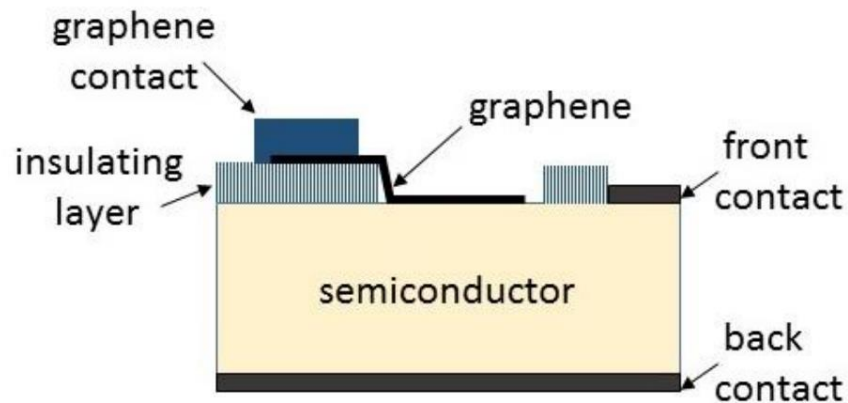


Рисунок 1.9 – Структура діода Шотткі із графеном

Досліди продемонстрували, що GSJ є випрямляючим [12], а рух носіїв заряду через перехід добре описується рівнянням термоелектронної емісії. Висота бар'єра Шотткі у діапазоні температур від 250 до 300 К становить 0,4 еВ для Si, 0,6 еВ для GaAs. Автори [13] нанесли шар графену на гетероструктуру $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Cr}/\text{Au}$ (рисунок 1.10). Вимір параметрів знову показав, що кремній із графеном утворюють випрямляючий контакт із контактним опором $74 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}^2$, а контакт золото-графен виявився омичним із контактним опором $212 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}^2$.

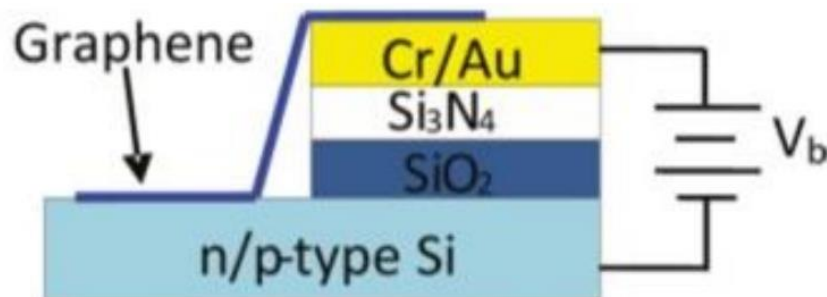


Рисунок 1.10 – Гетероструктура $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Cr}/\text{Au}$ із графеном

Дослідники [14] створили світлодіод ближнього ультрафіолета (near-ultraviolet-LED, NUV-LED) на основі нітриду галію, який був вирощений за допомогою метода епітаксії на h-BN підкладці. Кристалічність GaN на h-BN відрізняється від кристалічності стандартно вирощеного GaN на сапфірі, через що новий матеріал володіє відмінними властивостями. Розміри кристалів визначалися за значенням ширини на піввисоті (Full width at half maximum, FWHM). Для площини (002) для GaN на h-BN і шару GaN на сапфірі FWHM становить 308 і 268 кутових секунд відповідно, а для площини (102) – 824 та 573 кутових секунд. Наведені значення FWHM демонструють, що кристалічність GaN на h-BN нижча за GaN на сапфірі. Структура GaN на h-BN порушена наявністю крайових дислокацій. Були порівняні вольт-амперні характеристики світлодіодів. Пряма напруга NUV-LED на h-BN (3,37 В) вища за напругу NUV-LED на сапфірі, що пояснюється присутністю більшого числа структурних дефектів шару GaN, вирощеного на h-BN. Використовуючи фотолюмінесцентну спектроскопію, були вивчені оптичні характеристики GaN на h-BN. На спектрі ФЛ помітен сильний пік на 362 нм для обох зразків. Інтенсивність піку для GaN на h-BN приблизно на 8% нижча за інтенсивність GaN на сапфірі. На значення піку GaN на h-BN вплинула більша щільність дефектів і внутрішня деформація зразка. На електролюмінесцентних спектрах інтенсивність випромінювання NUV-LED на h-BN знову нижча приблизно на 30% за інтенсивність NUV-LED на сапфіривій підкладці. Дослідження властивостей і параметрів приладів з GaN на h-BN продемонструвало потенційну застосованість h-BN у якості підкладки для вирощування інших кристалів. Автори [14] припускають, що для покращення характеристик зразків, вирощених на h-BN потрібне застосування методів активного навчання та бічного епітаксійного нарощування.

1.4 Моделювання двовимірних матеріалів

1.4.1 Квазікласичний підхід до моделювання руху частинок в напівпровідникових приладах

Основним параметром, що визначає властивості електронного газу у твердотілих приладах, є функція розподілу електронів за імпульсом $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$, яка залежить від електромагнітного поля всередині приладу, і у загальному випадку не є рівноважною. Функцію розподілу носіїв заряду для будь-якого часу спостереження знаходять шляхом розв'язання розв'язання кінетичного рівняння Больцмана [15]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_E + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{3T}. \quad (1.2)$$

У рівнянні (1.2) $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_E = -(\vec{u} \nabla_{\vec{r}} f + \vec{k} \nabla_{\vec{k}} f)$ відповідний за рух частинок під дією зовнішнього поля, і, відповідно, називається польовим членом, а $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{3T}$ – за процеси розсіяння частинок на фононах, і отримав назву інтеграл зіткнень [15]:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{3T} = \mathcal{F}_k^{EK} f(\vec{k}, \vec{r}, t) + \mathcal{F}_k^{EE} f(\vec{k}, \vec{r}, t), \quad (1.3)$$

де $\mathcal{F}_k^{EK} f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ – взаємодія електронів з фононами і дефектами решітки, а $\mathcal{F}_k^{EE} f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ – взаємодія електрона з іншим електроном.

$$\mathcal{F}_k^{EK} f(\vec{k}, \vec{r}, t) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int W(\vec{k}, \vec{k}') (f(\vec{k}, \vec{r}, t) - f(\vec{k}', \vec{r}, t)) d\vec{k}' \quad (1.4)$$

де $W(\vec{k}, \vec{k}')$ – сумарна ймовірність переходу електрона в одиницю часу зі стану з імпульсом \vec{k} у стан з імпульсом \vec{k}' , V – об'єм кристала. $W(\vec{k}, \vec{k}')$

залежить від координати \vec{r} частинки через концентрацію центрів розсіювання. Імовірність $W(\vec{k}, \vec{k}')$ є сумою ймовірностей розсіювання в одиницю часу незалежних процесів розсіювання які притаманні матеріалу, який розглядається. Величина $W(\vec{k}, \vec{k}')$ є квантово-механічною імовірністю переходу носіїв заряду між станами в кристалі.

Приймається, що електрони і дірки є частинками із заданою масою і зарядом. Тоді можна вважати, що рух носіїв заряду у фазовому просторі відбувається по траєкторіях, які визначаються згідно з рівняннями руху:

$$\dot{r} = \vec{u} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}), \quad (1.5)$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = e\vec{E}(\vec{r}, t), \quad (1.6)$$

де \vec{u} – швидкість частинки, \vec{E} – напруженість електричного поля, e – заряд електрона, $E(\vec{k})$ – закон дисперсії, який встановлює зв'язок між кінетичною енергією та імпульсом для певного напівпровідника. Імовірність розсіяння $W(\vec{k}, \vec{k}')$ визначається, використовуючи квантово-механічний опис. Виходячи з відомої функції розподілу, можна знайти концентрацію носіїв заряду $dn(\vec{k}, \vec{r}, t)$ у будь-якому елементі фазового простору $d\vec{k}d\vec{r}$, а також середні значення величин, що характеризують електронний газ: енергію $E(\vec{r}, t)$ та дрейфову швидкість $u_d(\vec{r}, t)$:

$$dn(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k}d\vec{r}, \quad (1.7)$$

$$n(\vec{r}, t) = \int_{\Omega(\vec{k})} g(\vec{k}) n(f(\vec{k}, \vec{r}, t)) d\vec{k}, \quad (1.8)$$

$$E(\vec{r}, t) = \int_{\Omega(\vec{k})} g(\vec{k}) \frac{E(\vec{k}, \vec{r}, t)}{n(\vec{k}, \vec{r}, t)} f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k}, \quad (1.9)$$

$$u_d(\vec{r}, t) = \int_{\Omega(\vec{k})} g(\vec{k}) \frac{\vec{u}}{n(\vec{r}, t)} f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k}. \quad (1.10)$$

де $g(\vec{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3}$ – густина розподілу електронних станів у k – просторі.

Інтеграл (1.7-1.9) беруться по всім \vec{k} в межах виділеної частини фазового простору. В результаті отримуємо густина струму, що протікає в розглянутій частині фазового простору [15]:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -en(\vec{r}, t)u_d(\vec{r}, t). \quad (1.11)$$

Типове значення теплової швидкості електрона у напівпровіднику при температурі 300 К становить близько 10^7 см/с, а час взаємодії електрона із дефектами і коливанням у кристалі складає близько 10^{-14} с. Отже, за такого малого проміжку часу взаємодії не можна отримати значної зміни координати частинки, однак можна суттєво вплинути на швидкість та значення квазіімпульсу електрона. В результаті зіткнення відбувається зміна напрямку руху носіїв заряду, або процес розсіяння.

Під час моделювання пристроїв перш за все твердотілої електроніки потрібно вибрати метод розв'язання кінетичного рівняння Больцмана, який має відповідати вимогам: точність, відповідність реальним даним, узгодженням з результатами експерименту, в також універсальність – розробка приладів з розмірами як декілька сотень мкм, так і ~ 1 мкм. Якщо мова йде про моделювання швидкоплинних процесів в надвисокочастотних приладах, то важливо мати змогу врахувати інерційні властивості носіїв заряду, що пов'язані з характерними проміжками часу розсіяння та переходу носіїв заряду між елементами фазового простору. Ці критерії в повній мірі можна задовольнити, використовуючи метод частинок (метод Монте-Карло) [16]. Застосування його до аналізу електронно-діркової системи за умови її квазікласичності дає змогу отримати точні результати [17]. Метод Монте можна використовувати для моделювання суттєво коротких приладів за умови, що характерна довжина приладу L_H значно перевищує довжина хвилі

Де-Бройля $\lambda_e : L_{II} \gg \lambda_e$, що, насправді, збігається із умовою квазікласичності електронних процесів у ньому.

Також існують інші моделі, які можна використати для розрахунку процесів в напівпровідникових приладах. Наприклад, метод, що використовує зміщену функцію розподілу, в якому базові рівняння отримуються шляхом її усереднення по концентрації, імпульсу та енергії для кожної електронної підсистеми, як приклад для кожної із долин зони провідності, відповідно, отримуються різні характерні значення електронної температури в них. З цієї причини такі моделі також називають температурними. Вони є трудомісткими, мають досить високу точність і їх можна використовувати для інженерних розрахунків, в тому числі для аналізу приладів, що працюють в міліметровому діапазоні. Можна зауважити, що критерієм застосовування температурних моделей є мала величина середнього часу між електрон-електронними зіткненнями у порівнянні з часом релаксації по імпульсу. Якщо стан електронного газу є суттєвого нерівноважним, то цю умову забезпечити у приладах, що мають малі розміри (субмікронна область), практично неможливо, що підтверджується експериментально, як і у випадках, коли електронні процеси у приладі визначаються декількома механізмами розсіяння [18].

Для задачі, що розв'язується в роботі, потрібно врахувати декілька факторів: дослідити нерівноважні процеси, що відбувається в 3D- областях, де виконуються умови квазікласичності, а також врахувати властивості 2D- матеріалів, для яких на сьогоднішній день найефективнішим методом опису є використання функціонала електронної густини (ФЕГ), що передбачає їх аналіз з точки зору квантово-механічних підходів. Однак, особливо, коли мова йде про прилади з розмірами більшими за довжину вільного пробігу електрона, доцільно застосувати гібридні методи аналізу, взявши за основу квазікласичний опис. З цієї точки зору метод Монте-Карло є найбільш вдалим варіантом вибору, оскільки дає змогу частково врахувати квантово-механічні ефекти, наприклад, завдяки квантовій корекції.

Метод Монте-Карло передбачає стохастичне розв'язання транспортного рівняння Больцмана. Для цього моделюється рух носіїв заряду у фазовому просторі з урахування зовнішніх сил та процесів розсіяння, шляхом визначення локальних параметрів окремої частинки. Слід зазначити, що функція розподілу, яку можна отримати в результаті цієї процедури, як було показано у роботі [19], повністю відповідає точному розв'язку рівняння Больцмана. Ще однією, важливою перевагою методу є додаткова інформація, яку можна отримати за результатами моделювання, що яку неможливо отримати знаючи функцію розподілу.

Такий підхід суттєво спрощує аналіз приладів, що містять різномірні шари напівпровідників, і, його можна застосувати для аналізу гібридних 3D-2D гетероструктур. Також важливою перевагою є можливість моделювання еволюції руху частинок при довільному законі дисперсії, особливо у випадку їх динамічного розподілу у фазовому та енергетичному просторах. Серед іншого стає можливим розглянути такі процеси як ударна іонізація та тунелювання, а також детально врахувати контакти.

2 МОДЕЛЮВАННЯ РОБОТИ ПЛАНАРНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ 2D-hBN-3D-GaN

2.1 Передача тепла в системі 2D-hBN-3D-GaN

2.1.1 Модель переносу тепла в гібридних структурах 2D-hBN-3D-напівпровідник

Розглянемо найпростішу гібридну 2D/3D-структуру, яка являє собою планарний діод, який містить моношар h-BN на поверхні. Повздовжній переріз 2D/3D гетероструктурного діода показано на рисунку 2.1.

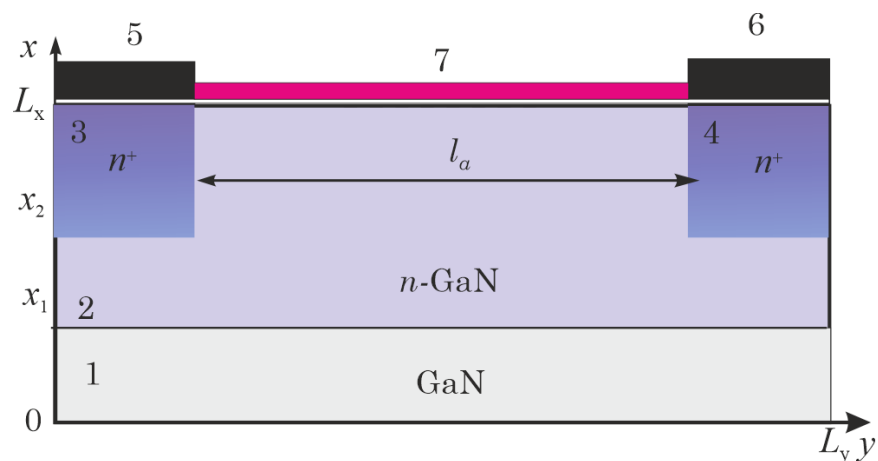


Рисунок 2.1 – Структура діода

Для аналізу розглянуто двовимірну модель діода. Були враховані термічні властивості h-BN з використанням класичного визначення з урахуванням експериментальних даних, розглядаючи обмежену товщину моношару [6]. Ефективність теплового потоку через h-BN-GaN перехід була описана теплопровідністю межі (ТВС) h_B відповідно до [20].

Розглянемо одношаровий елемент, що має площу ΔS та товщину d , що перебуває в умовах нестационарного стану. З постійною температурою в

об'ємі ΔV енергетичний баланс для елемента протягом інтервалу часу τ має вигляд

$$(h_B(T_{GaN} - T) - h_S(T_S - T))\Delta S\tau = C\Delta V\Delta T, \quad (2.1)$$

де C – об'ємна теплоємність [C] = Дж/(м³·К), T_S , T_{GaN} , T – температура всередині h-BN, GaN та поза h-BN відповідно. Таким чином, теплопровідність h-BN була отримана з оцінок теплових властивостей h-BN, як на етапі отримання було проведено і визначено з використанням класичних міркувань з урахуванням експериментальних даних [6]. Таким чином, теплопровідність h-BN була отримана з розгляду обмеженої товщини моношару h-BN, яка вважалася відомою.

Навколишня плівка h-BN діє як дифузний поглинач фононів і забезпечує граничний стан, який нагадує розсіювання фононів на межах GaN з шорсткістю. З цієї причини передбачається існування термічного граничного опору h_B між GaN і h-BN. Довжина вільного прольоту, пов'язана з розсіюванням фононів у нітридних сполуках, на практиці становить менше 100 нм. Цей факт дозволив знехтувати ефектом масштабу, пов'язаним з нагріванням, і розрахувати розподіл температури в GaN за допомогою рівняння теплопровідності:

$$c \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} = -\nabla \cdot [k\nabla T(r,t)] + F(r,t), \quad (2.2)$$

де k – теплопровідність, c – теплоємність решітки, $F(r,t)$ визначається у вигляді [21]

$$F = F_0 \sum (\hbar\omega_{ems} - \hbar\omega_{abs} + \Delta E_{II}), \quad (2.3)$$

де $\hbar\omega_{ems}$, $\hbar\omega_{abs}$ – енергія фононів при випромінюванні та поглинанні фононів відповідно, ΔE_{II} – поглинена енергія решіткою при II процесі, F_0 – константа, що залежить від параметра чисельної моделі та легування пристрою.

Для знаходження розподілу температури в шарі h-BN застосовано одновимірне рівняння теплопровідності:

$$C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left[k_s \frac{d}{dy} \right] + a_B (T_s - T) - a_A (T_s)(T_s - T_A), \quad (2.4)$$

де C_s – теплоємність h-BN; k_s – коефіцієнт теплопровідності h-BN; $a_B = \frac{h_B}{d}$; d – товщина шару h-BN; T_s – температура h-BN; T_A – температура навколишнього середовища; $a_A = \frac{(h_s + \varepsilon \Phi(T_s))}{d}$; h_s – коефіцієнт конвективної теплопередачі між моношаром і навколишнім середовищем; ε – коефіцієнт випромінювальної здатності h-BN.

Температурна залежність теплопровідності визначається згідно [22, 23]:

$$k(T) = k_{300K} \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^n. \quad (2.5)$$

Вважається, що теплоємність решітки не залежить від температури.

Рівняння (2.4) дискретизується в прямокутній області з використанням кінцем-різничевої опроксимації похідних (рисунок 2.2).

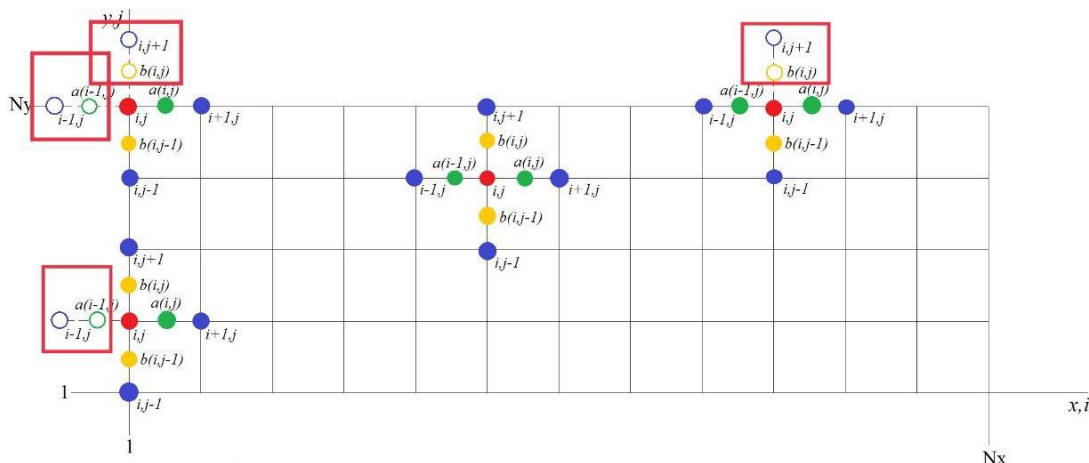


Рисунок 2.2 – Область розрахунку та основні вузлові точки кінцево-різничевої апроксимації

Для отримання розподілу температури рівняння (2.2) та (2.4) розв'язувалися самоузгоджено методом кінцевих різниць на прямокутній

сітковій області, що відповідала геометрії діода. Дискретизовані рівняння з урахуванням граничних умов, для вузлів, що відмічено на рисунку 2.2 мають вигляд:

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\left(\frac{\lambda_{i,j}}{h_x^2} T_{i+1,j}^{n+1} + \frac{\lambda_{i-1,j}}{h_x^2} T_{i-1,j}^{n+1} + \frac{\lambda_{i,j}}{h_y^2} T_{i,j+1}^{n+1} + \frac{\lambda_{i,j-1}}{h_y^2} T_{i,j-1}^{n+1} + Q + \frac{c\rho}{\tau} T_{i,j}^n \right)}{\left(\frac{c\rho}{\tau} + \frac{\lambda_{i,j}}{h_x^2} + \frac{\lambda_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{\lambda_{i,j}}{h_y^2} + \frac{\lambda_{i,j-1}}{h_y^2} \right)} \quad (2.6)$$

і, відповідно, (2.6) змінюється залежно від вузла сітки. Наприклад, для лівої бічної сторони сіткової області за умови її адіабатичності $\left(\frac{\partial T}{\partial n} = 0 \right)$ отримуємо:

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\left(\frac{\lambda_{i,j}}{h_x^2} T_{i+1,j}^{n+1} + \frac{\lambda_{i,j}}{h_y^2} T_{i,j+1}^{n+1} + \frac{\lambda_{i,j-1}}{h_y^2} T_{i,j-1}^{n+1} + Q + \frac{c\rho}{\tau} T_{i,j}^n \right)}{\left(\frac{c\rho}{\tau} + \frac{\lambda_{i,j}}{h_x^2} + \frac{\lambda_{i,j}}{h_y^2} + \frac{\lambda_{i,j-1}}{h_y^2} \right)} \quad (2.7)$$

В результаті було отримано кінцево-різницеve рівняння з оператором L_h

$$L_h u_h = -f_h, \quad (2.8)$$

а значення температури знаходилося у вигляді дискретної функції $u_{i,j} = u_h$.

Для цього застосовано повний геометричний багатосітковий метод (FMG method) [24].

Ідея цього методу полягає в тому, що похибки розв'язку розглядаються як гармоніки сіткових функцій. Звичайними ітераційними методами завжди можна придушити високочастотні складові похибки. Відповідно переходячи до грубої сітки низькі частоти відносно в ній стають високими, а отже стає можливим їх придушення стандартними методами.

Основним ітераційним процесом, який використовується у багатосітковому методі є методом Гаусса-Зейделя. Для прискорення

обчислення у процедурі, що використовується для згладжування, використовується алгоритм Red-Black [25].

2.1.2 Числове моделювання розподілу температури в планарній структурі на основі GaN з 2D-шаром h-BN

Для попередньої оцінки можливого впливу моношару на процеси перерозподілу температури в діоді була розглянута модельна задача по розповсюдженню тепла в області з однорідного GaN, яка містила два металічні контакти у відповідності до рисунка 2.1. Приймалося, що в початковий момент часу в ній існує локалізована область з підвищеною температурою (рисунок 2.3).

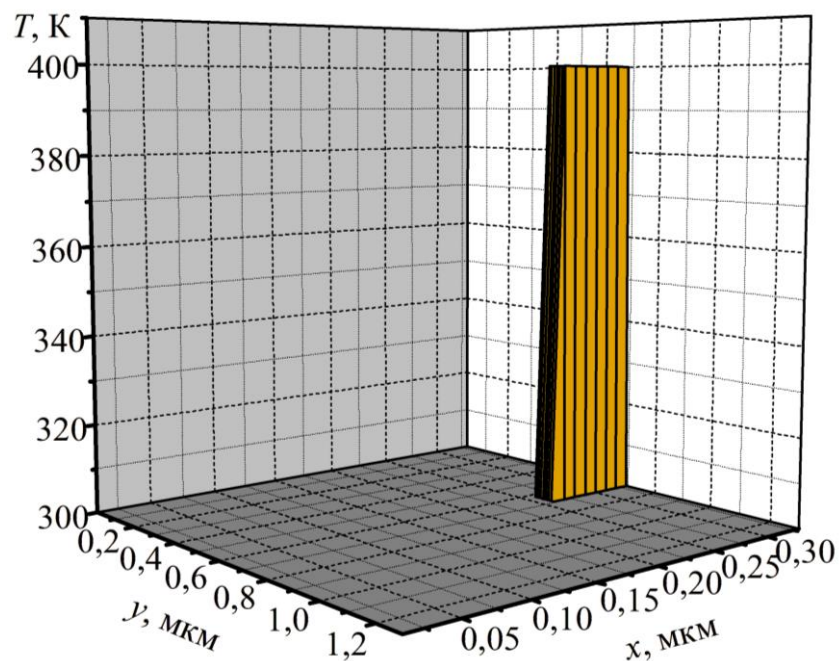


Рисунок 2.3 – Початковий розподіл температур у модельній структурі діода на основі GaN та GaN структурі, яка містить шар h-BN

Було розглянуто декілька варіантів таких структур, які відрізнялися за розмірами та матеріалами, що входили до їх складу.

Відомо, що коефіцієнт теплопровідності матеріалу у випадку зменшення його товщини також знижується, що є наслідком зменшення інтенсивності збудження фононних мод в матеріалі і зниження інтенсивності розсіяння електронів насамперед на деформаційному потенціалі акустичних фононів (вплив оптичних фононів на перенесення тепла зазвичай є значно меншим).

Це також стосується і GaN, в якому коефіцієнт теплопровідності у масивному кристалі перевищує 200 Вт/(м К), однак суттєво знижується при зменшенні товщини плівки (рисунок 2.4). На цьому рисунку також наведений відповідний коефіцієнт теплопровідності для AlGaN. Можна відмітити, що за цим параметром GaN є набагато кращим матеріалом ніж AlGaN, однак, наприклад, для побудови уніполярних транзисторів AlGaN використовується завдяки можливості створення поляризаційного заряду на межі GaN-AlGaN.

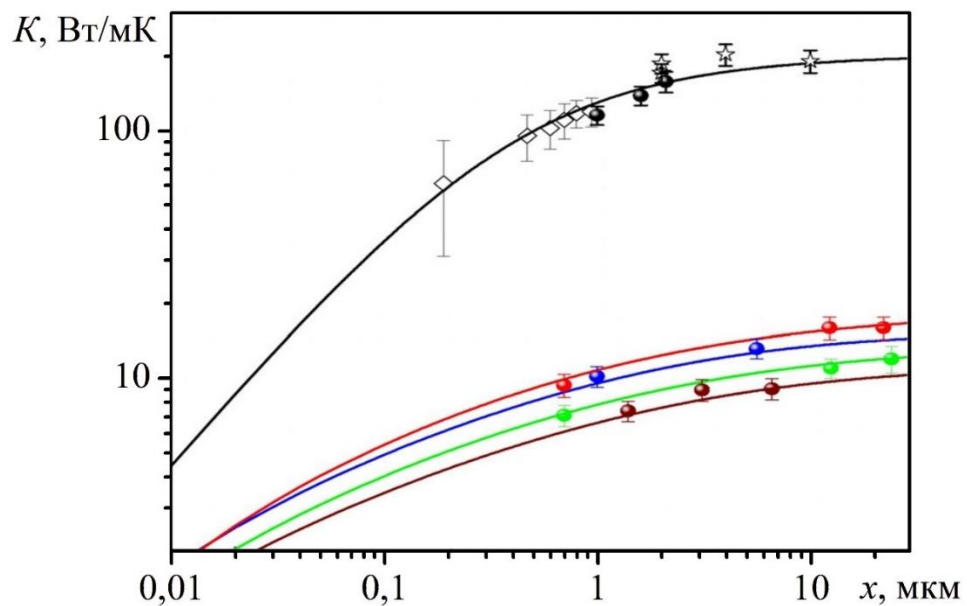


Рисунок 2.4 – Залежність коефіцієнта теплопровідності GaN та $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ від товщини плівки, де крива ● для GaN роботи [26], ◇ для GaN роботи [27], ☆ для GaN роботи [28], ● для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x=0,13-0,16$), ● для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x=0,26-0,30$), ● для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x=0,43-0,60$), ● для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x=0,88-0,89$). Адаптоване з [26].

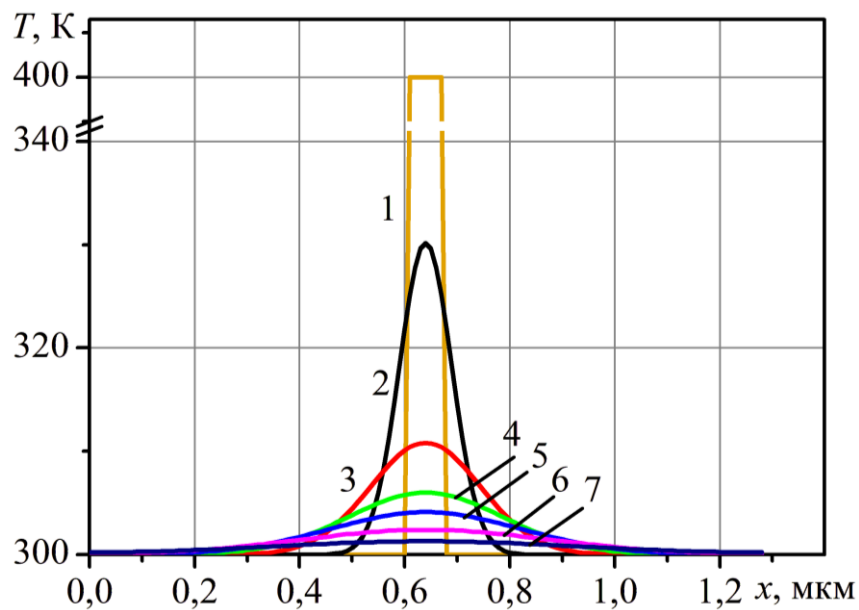
Дані експерименту, які наведені на рисунку 2.4 були використані для врахування залежності коефіцієнту теплопровідності від ширини каналу.

Приймалося, що на нижній частині підкладки виконується ізотермічна гранична умова, і температура була рівною 300 К, що відповідає ідеальному тепловідводу. Адіабатичні термічні граничні умови застосовуються на інших сторонах пристрою за виключенням металічних контактів, які є верхньою межею, що контактувала з шаром h-BN, яка описувалася з використанням граничного теплового опору (граничної теплової провідності), що відповідало граничній умові [20]:

$$q_s = h_B(T - T_s), \quad (2.9)$$

де q_s – величина теплового потоку на межі поділу двох контактуючих матеріалів. Фізична картина, що відповідає цій ситуації, передбачає відмінність температур контактуючих середовищ, і спостігається практично у випадку теплового контакту різнорідних середовищ.

Результати моделювання у вигляді розподілів температури кристалічної решітки для різних моментів часу для структури, яка мала розміри 0,32x1,28 мкм, наведені на рисунку 2.5.



a)

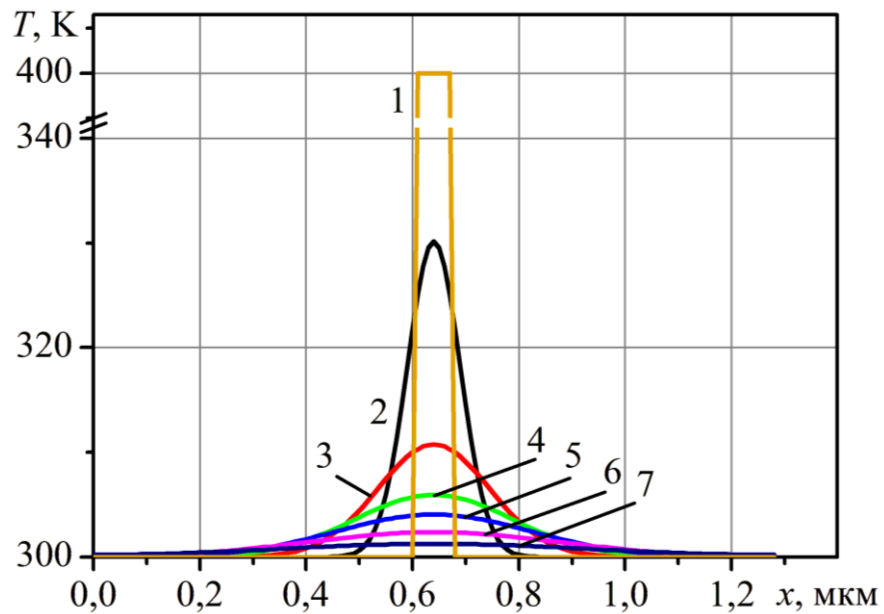


Рисунок 2.5 – Розподіл температури в модельній структурі з розмірами $0,32 \times 1,28$ мкм у шарі $y = 0,27$ мкм для різних моментів часу від початку охолодження, а) GaN- діод, б) GaN – діод з ТВС = 800 Вт/мК: 1 – $t = 0$ пс; 2 – $t = 25$ пс; 3 – $t = 125$ пс; 4 – $t = 250$ пс; 5 – $t = 375$ пс; 6 – $t = 625$ пс; 7 – $t = 1000$ пс

Результати отримано для випадку GaN без розміщення на ньому шарі h-BN і для двох випадків використання GaN з h-BN, відповідно за умови, що значення теплопровідності приймають граничні межі для h-BN, які обговорюються у науковій літературі (400 Вт/(мК) та 800 Вт/(мК) відповідно). Можна відмітити, що розподіли температур в цілому дуже схожі. Відмінність в температурі складає менше $0,3$ К. Це пояснюється великим впливом підкладки на процеси втрати тепла у розглянутій системі. Для уточнення впливу цього фактора на дисипацію енергії в системі було проаналізовано зміну в часі середньої теплової енергії для областей, які мали різну товщину: $0,32$ мкм, $0,64$ мкм та $1,28$ мкм. У всіх випадках враховувалося, що коефіцієнт теплопровідності змінюється в залежності від товщини шару GaN відповідно до рисунка 2.4. Залежності нормованої теплової енергії η від часу для структур різної товщини, отриманих для GaN та GaN, який містить плівку h-BN наведено на рисунку 2.6.

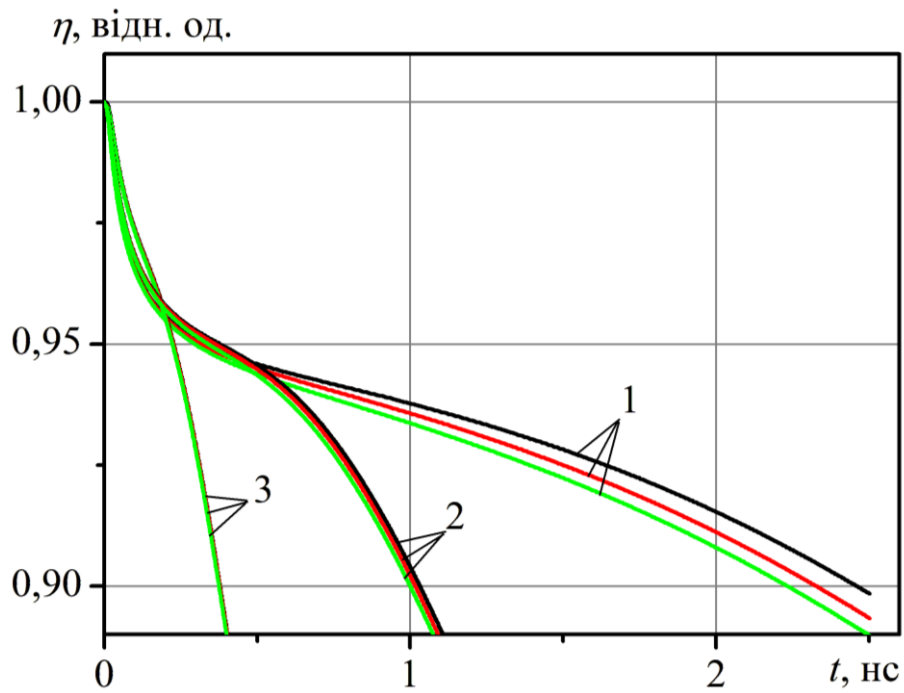


Рисунок 2.6 – Залежність середньої нормованої теплової енергії, накопиченої в структурі від часу для структур різного розміру: 1 – $1,28 \times 1,28$ мкм; 2 – $1,28 \times 0,64$ мкм; 3 – $1,28 \times 0,32$ мкм (чорний – без h-BN; червоний – з h-BN, $K = 400$ Вт/мК; зелений – з h-BN, з $K = 800$ Вт/мК)

З отриманих залежностей видно, що на великих проміжках часу в діодах, які мають товсту підкладку, відмінність в енергії стає помітною. Тому можна говорити, що зростання ролі h-BN, як елемента, що сприяє дисипації енергії через контактні області. Зазвичай, наприклад, в структурах типу НЕМТ частка розсіяння тепла через контакти складає 20-30%, в той час як через підкладку розсіюється до 80% теплоти. Отже, є підстави говорити про шар h-BN, як про фактор, який призводить до зміни вказаних співвідношень в бік контактів.

2.2 Планарний діод з h-BN шаром

2.2.1 Постановка задачі

Для оцінки використання h-BN в якості елемента приладу був розглянутий діод, структура якого відповідає рисунку 2.1.

Діод являє собою структуру n⁺-n-n⁺-типу на основі GaN шириною 1,2 мкм. Концентрація в активній n-області становила $6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Области n⁺- є сильно легованими ділянками поблизу контактів з концентрацією донорів 10^{19} см^{-3} . Шар h-BN розміщений на верхній частині діодного каналу між контактами і з'єднаний з ними.

Щоб виправити оцінку ефекту нагрівання пристрою, що включає точний нерівноважний транспорт заряду, був використаний підхід синхронного ансамблю Монте-Карло самоузгоджено з рівнянням Пуассона. Дискретизація руху частинок реалізується на дуже малому інтервалі часу $\Delta t = 2\text{Ч}0^{-16} \text{ с}$. Зонна модель включає три нижні долини зони провідності (долини Г, Г1 і М-L). Розглянуто непараболічність законів дисперсії носіїв заряду. Враховано розсіювання носіїв заряду на потенціалах деформації неполярних акустичних та оптичних фононів, полярних оптичних фононів та розсіювання на іонізованих домішках. Розглянуто також такі механізми розсіювання для GaN, як п'єзоелектричне розсіювання та розсіювання на сплаві. Вважається, що прикладена напруга недостатня для пробою. Через велику різницю між швидкостями іонізації електронів і дірок можна вважати, що П є носієм заряду, який ініціює процес (за рахунок електронів). Таким чином, беручи величину порогового поля П, валентна зона представлена лише зоною важких дірок, а також використовується хвильова векторна залежність порогу П. Моделювання транспорту носіїв заряду враховує квазіелектричні поля, пов'язані як з градієнтами мінімумів енергії, так і з властивостями матеріалу як ефективну масу та фактор непараболічності. Деталі математичної моделі та параметри матеріалу відповідають [24, 29, 30].

Вплив температури на роботу діода було враховано через температурні залежності ймовірності усіх розглянутих механізмів розсіювання та величину забороненої зони GaN, відповідно за формулою Варшні $E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / (\beta + T)$ [31, 32]. яка впливає на значення порогової енергії ударної іонізації.

2.2.2 Математична модель транспорту носіїв заряду в діоді

Для моделювання нерівноважного переносу заряду був використаний багаточастикновий метод Монте-Карло, в якому моменти розсіювання визначалися шляхом числового інтегрування загальної імовірності розсіювання за часом.

Як і у випадку будь-якого моделювання часової області, для стабільного моделювання пристрою для методу Монте-Карло необхідно вибрати відповідний крок часу Δt , і просторові розміри сітки (Δx , Δy , Δz). Крок часу і розмір сітки можуть корелювати один з одним, що зумовлено критеріями числової стабільності: крок часу Δt повинен бути пов'язаний з частотою плазми, значення Δt має бути набагато меншим, ніж зворотна частота плазми. Так як зворотна частота плазми пропорційна \sqrt{n} , то найбільша щільність носіїв, яка використовується у структурі пристрою, що моделюється, відповідає найменшому проміжку часу, який і може бути вибраним для оцінки величини Δt . Якщо матеріал являє собою багатодолинний напівпровідник, то для оцінки використовується найменше значення ефективної маси, яку можуть мати носії заряду. Як правило воно відповідає Γ -долині зони провідності для переважної більшості напівпровідникових матеріалів, зокрема, для всіх матеріалів, які розглянуто в роботі.

Розмір комірки для просторового розподілу потенціалу визначається просторовою зміною заряду. Отже, потрібно вибрати розмір комірки менше, ніж найменша довжина хвилі коливань заряду. Ця величина приблизно

дорівнює дебаєвській довжині (для вироджених напівпровідників відповідна довжина – довжина хвилі Томаса-Фермі).

У підсумку, крок часу (Δt) і розмір комірки (Δx , Δy , i , або Δz) вибираються незалежно на основі наведених вище фізичних аргументів. Проте існують і кількісні обмеження, пов'язані з ними: відношення Δt до розміру сітки також має бути перевірено шляхом обчислення відстані l_{\max} , визначеного як

$$l_{\max} = u_{\max} \times \Delta t, \quad (2.10)$$

де u_{\max} – максимальна швидкість носія, яка може бути апроксимована максимальною груповою швидкістю електронів в напівпровіднику (близько 10^8 см/с). Відстань l_{\max} – це максимальна відстань, на яку носії можуть поширюватися за час Δt . Тому крок часу вибирається настільки малим, що l_{\max} менше, ніж обраний розмір просторової комірки. Це обмеження виникає через те, що при занадто великому інтервалі часу Δt може відбутися істотна зміна розподілу заряду, тоді як розподіл поля при моделюванні оновлюється тільки через час Δt , що призводить до неприпустимих похибок в силі, що діє на частинку: нестійкість виникає, якщо інтервалу часу більше, ніж зворотна плазмова частота та, коли відстань між сітками більша, ніж довжина Дебая. Також інтервал можливих швидкостей додатково обмежує можливі значення інтервалу часу.

Моделювання Монте-Карло складається з двох етапів. Під час першого етапу частинка рухається у полі зовнішніх сил упродовж часу вільного пробігу, при цьому визначаються імпульс та координата електрона. Час вільного пробігу задається із наступного рівняння

$$\int_0^t W_s(e(t)) dt = -\ln z, \quad (2.11)$$

де t – час вільного пробігу, $W_s(e(t)) = W(k, k')$, z – рівномірно розподілене випадкове число, яке приймає значення $z \in [0, 1]$.

Другим етапом моделювання є акт розсіяння, механізм якого обирається випадковим чином за наступною формулою

$$\mathbf{e} \prod_{i=1}^{n-1} \frac{W_i(e)}{W_S(e)} < z < \mathbf{e} \prod_{i=1}^n \frac{W_i(e)}{W_S(e)} \quad (2.12)$$

де n – натуральне число, порядковий номер механізму розсіяння, z – рівномірно розподілене випадкове число, яке приймає значення $z \in [0,1]$, $W_S(e) = W_S(e(t))$, $W_i(e)$ – ймовірність переходу електрона зі стану з імпульсом $\hbar\vec{k}$ у стан з імпульсом $\hbar\vec{k}'$ при i -му механізмі розсіяння.

При виконанні нерівності (2.9) обирається n -ий механізм розсіяння.

Розсіяння на фононах відбувається через наявність деформаційного потенціалу, який виникає при відхиленні атому від стану рівноваги. Розсіяння на фононах розглядається у довгохвильовому наближенні, тобто при $q \rightarrow 0$. За цієї умови електрон внаслідок розсіяння залишається у тій же долині, що і до розсіяння.

Ймовірність розсіяння на акустичних фононах визначається формулою

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

де знак “+” у ступені ймовірності відповідний за ймовірність поглинання фонона, а знак “-” – за випромінювання; Ξ_d – ефективна константа деформаційного потенціалу; s_l – швидкість поздовжніх акустичних хвиль; ρ – густина кристалу; N_{qb} – кількість термодинамічно рівноважних фононів; $\frac{1}{\eta} \left[(\eta + \alpha \hbar \omega_{qb})^2 - \frac{\alpha \hbar^2 q^2}{2m^*} \right] = I_0^{\pm} A^{\pm}$; I_0^{\pm} – співмножник інтегралу перекриття; A^{\pm} – описання непараболічності закону дисперсії [33].

Ймовірність розсіяння на оптичних фононах визначається формулою

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

де D_0 – константа деформаційного потенціалу оптичних фононів; m_d^* – ефективна маса густини станів; ω – частота коливань оптичних фононів;

$K^\pm = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \alpha(\varepsilon \pm \hbar\omega_0)} \left[1 + 2\alpha\varepsilon + \alpha\hbar\omega_0 + \frac{1}{1 + 2\alpha\varepsilon} \right]$ – постійна, що описує вплив непараболічності [33].

Напівпровідники типу $A_{III}B_V$ є полярними. Коливання протилежно заряджених атомів таких матеріалів призводять до появи далекодіючих макроскопічних електричних полів. Ймовірність польового розсіяння визначається формулою

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

$$\text{де } k^\pm = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_d^* (\varepsilon \pm \hbar\omega_0) (1 + \alpha(\varepsilon \pm \omega_0))}, \quad q_{\max}^\pm = k + k^\pm, \quad q_{\min}^\pm = \pm(k^\pm - k),$$

χ_∞, χ_{CT} – електродинамічні характеристики кристалу [33].

Міждолинне розсіяння відбувається за умови $q > 0$. При цьому електрон змінює свій стан з переходом з однієї долини в іншу. Ймовірність міждолинного розсіяння визначається формулою

$$W_{МД}^\pm(\varepsilon_i) = \frac{Z_j D_{ij}^2 m_{di}^{*\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi\rho\hbar^2\hbar\omega}} \left(N_\omega + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{(1 + \alpha_i \varepsilon_i)(1 + \alpha_j \varepsilon_j)}{1 + 2\alpha_i \varepsilon_i} \sqrt{\varepsilon_j (1 + \alpha_j \varepsilon_j)},$$

де Z_j – число рівнозначних долин у зоні Брілюена за винятком вихідної; D_{ij} – константа взаємодії із фононом; ε_i – енергія електрона до розсіяння; $\varepsilon_j = \varepsilon_i - \Delta_{ij} \pm \hbar\omega_{ij}$ – енергія електрона після розсіяння; Δ_{ij} – різниця енергій мінімумів долин i та j . Через присутність факту міждолинного переходу електрон поглинає чи випромінює фотон великої енергії. Тому міждолинне розсіяння домінує над іншими типами розсіяння при наявності декількох механізмів одночасно [33].

Ймовірність домішкового розсіяння визначається формулою

$$W_{ДР}(\vec{k}) = \frac{\nu(\vec{k})}{2b_m} \left(1 - \exp \left(- \frac{2b_m W_{ВН}(\vec{k})}{\nu(\vec{k})} \right) \right),$$

де $v(\vec{k})$ – швидкість електрона; $b_m = \frac{1}{2} N^{-\frac{1}{3}}$; N – концентрація домішок;

$W_{BH}(\vec{k})$ – ймовірність домішкового розсіяння за приближенням Брукса-Херрінга [33].

2.2.3 Результати моделювання

Для оцінки впливу температури та визначення фактору наявності моношару на поверхні діода враховувалися два параметри: максимальна температура та величина середнього струму, що протікає через структуру.

Складність аналізу пов'язана з тривалим часом нагрівання, який неможливо синхронізувати з розрахунками методом Монте-Карло через його велику обчислювальну складність. Тому висновки щодо впливу температури робляться на основі обмеженого часу і носять прогностичний характер, виходячи з характеристик приладу без нагріву. Залежність густини струму для розглянутих діодів без врахування зміни температури в ньому наведено на рисунку 2.7.

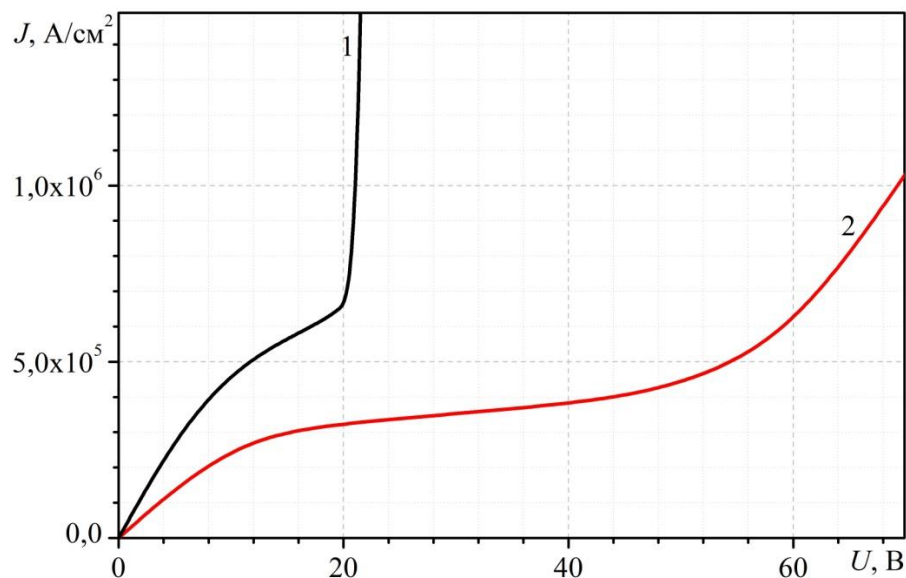


Рисунок 2.7 – Залежність густини струму від прикладеної напруги для розглянутих діодів: 1 – 1,28 мкм; 2 – 5 мкм

Як видно з характеристик, додаткову складність становить ударна іонізація, яка виникає в діоді за великих значень напруги, швидкість розвитку якої є набагато більшою за швидкість нагрівання. Через це розглядаються обмежені інтервали напруг, які вибираються так, щоб з одного боку прикласти високу напругу і спровокувати нагрівання приладу, а з іншого боку не потрапити в область, де ударна іонізація призведе до неконтрольованого зростання струму. Відповідно, такою областю для діода довжиною 1,28 мкм є інтервал напруг 10-20 В, та 40-50 В для діода довжиною 5 мкм.

Типовий розподіл температури, який формується в діоді, показаний на рисунку 2.8.

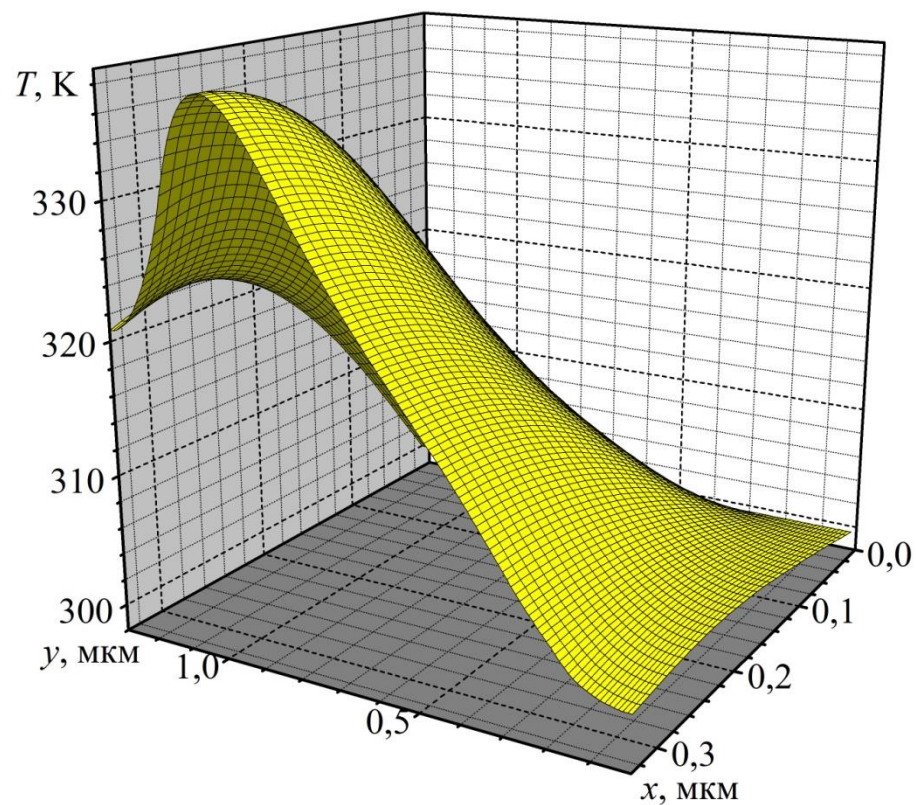
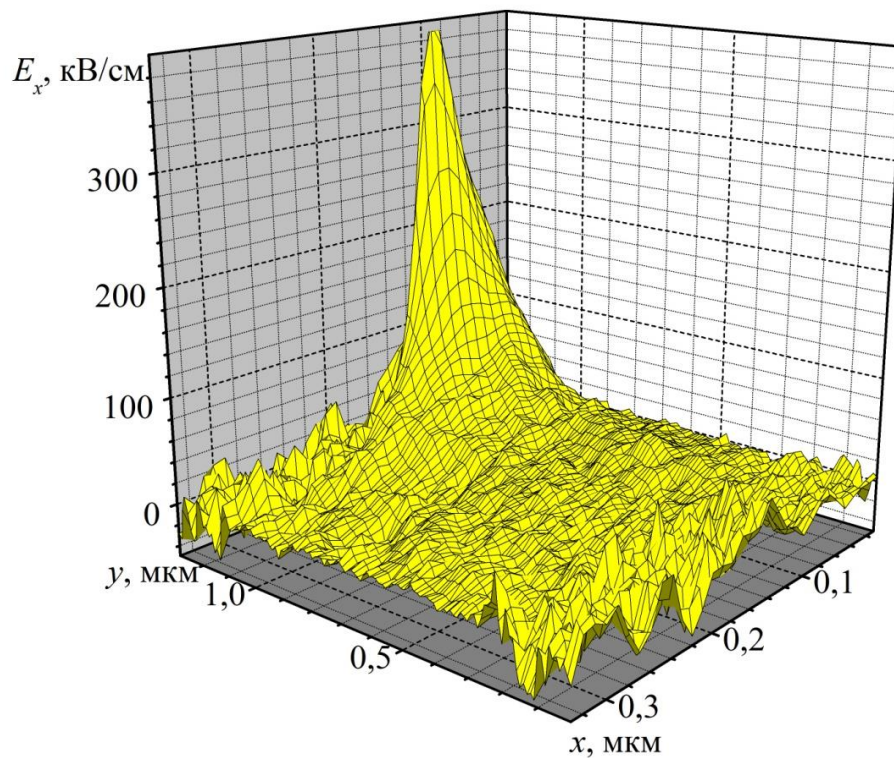
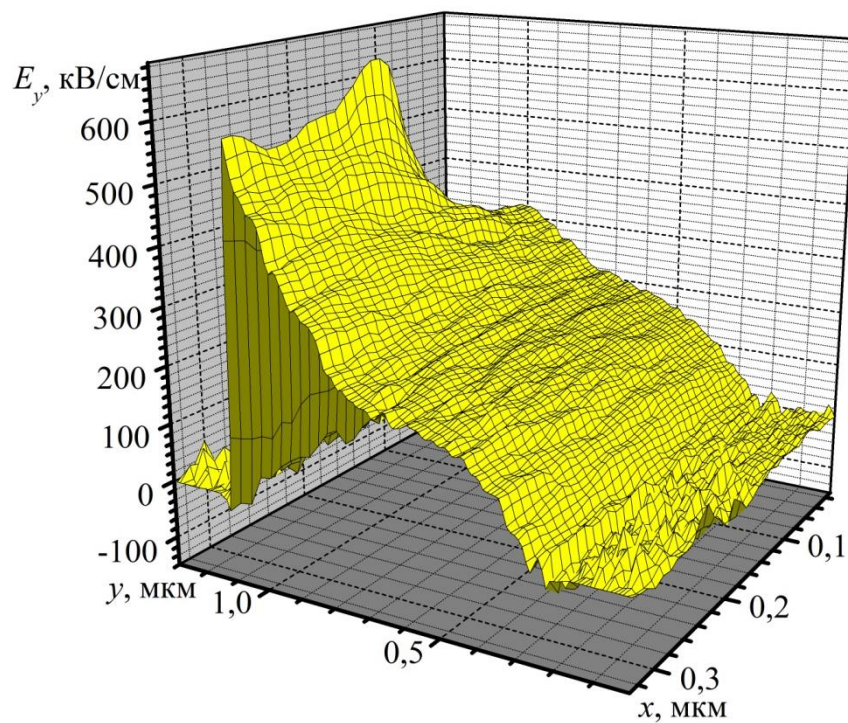


Рисунок 2.8 – Розподіл температури в GaN-діоді (час моделювання 3 нс)

Він є наслідком відповідного розподілу напруженості електричного поля в діоді (рисунки 2.9).



а)



б)

Рисунок 2.9 – Розподіл напруженості електричного поля в GaN-діоді: а) x-компонента поля; б) y-компонента поля

Відповідно, збільшення енергії електронів в сильному електричному полі і, відповідно, збільшення імовірності розсіяння, призводить до розігріву області аноду.

Однак, як і у випадку, коли аналізувався процес охолодження локально нагрітої ділянки можна говорити про сильний вплив підкладки на процес теплопередачі і встановлення рівноважного розподілу температури. Результатом є не досить суттєве для GaN підвищення температури, яке не перевищує 340 К. Очевидно, що в такій ситуації вплив розігріву на характеристики діодів буде незначним.

На рисунку 2.10 показані розподіли температури у поверхневому шарі GaN для випадку наявності, крива 1, і відсутності, крива 2, моношару h-BN на поверхні, а також різниця температури у цих шарах відносно випадку присутності моношару, крива 4 та розподіл температури в h-BN – крива 3.

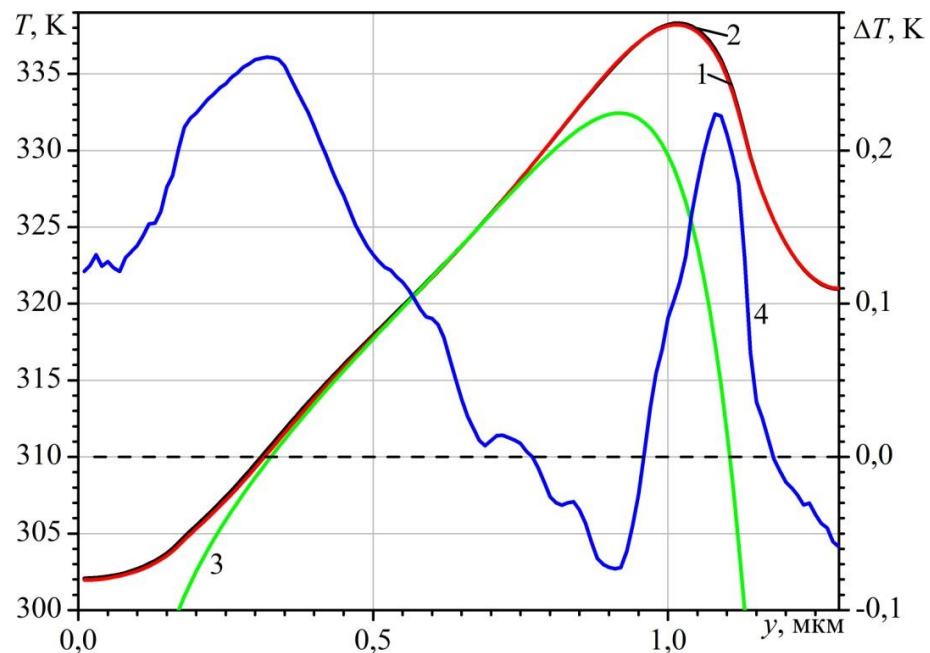


Рисунок 2.10 – Розподіли температури у поверхневому шарі GaN та моношарі h-BN : 1 – GaN-діод без моношару; 2 – GaN-діод з моношаром; 3 – h-BN; 4 – різниця температур у поверхневому шарі GaN

Можна відзначити, що розглянутій системі вплив моношару виявився слабким, що пояснюється, насамперед, слабким розігрівом діода.

Видно, що саме в області, де існують найбільш високі значення температури формується найбільша різниця між розподілами температури в об'ємі діода і моношарі, що сприяє збільшенню ефективності передачі тепла між ними. Підтверджується початкова гіпотезу про можливість перерозподілу температури в кристалі зв'язки наявності h-BN на поверхні, що проявляється в асиметрії різниці температури в шарах GaN при відсутності і наявності моношару і початковим розподілом температури в діоді. Відповідні прояви спостерігаються у зміні величини струму, що протікає через діод (рисунок 2.11).

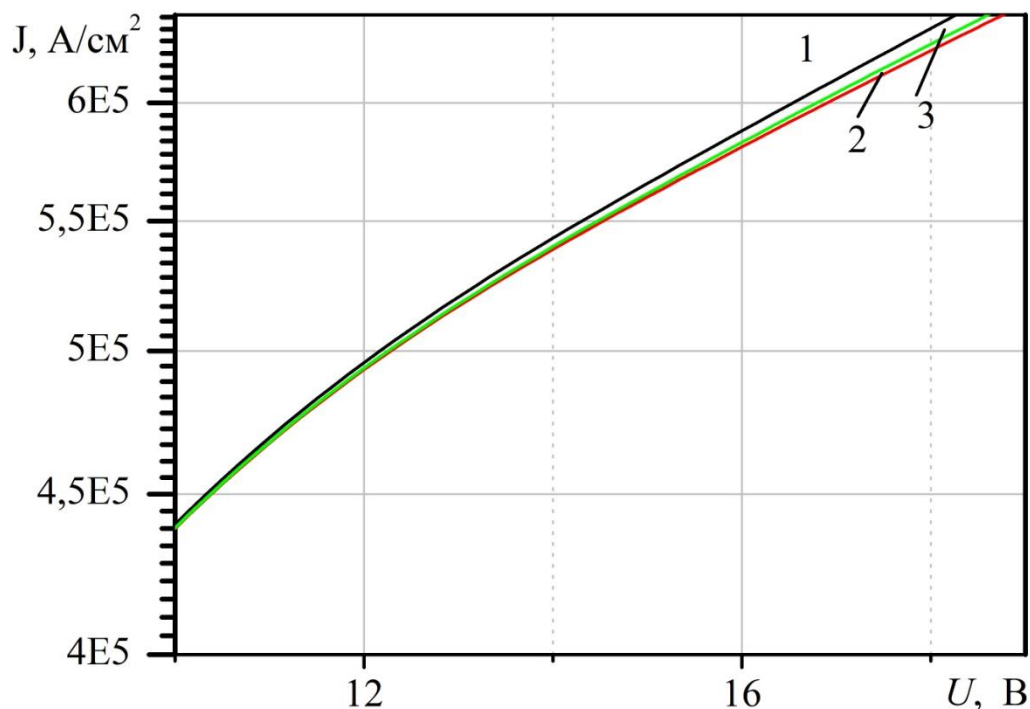


Рисунок 2.11 – Залежність густини струму від прикладеної постійної напруги для діода довжиною 1,28 мкм

Видно, що основні закономірності щодо впливу моношару на роботу діода прослідковуються. Можна насамперед відмітити малу зміну величини густини струму при врахуванні ефекту самонагрівання, що є наслідком

факторів, які були обговорені вище. Ми бачимо, що при збільшенні напруги вплив цього явища на вихідні характеристики зростає, що проявляється у зниженні величини струму (деградація характеристик). Однак, навіть на фоні такої незначної зміни величини струму присутність моношару призводить до зменшення впливу ефекту розігрівання.

Подібна ситуація спостерігається і у довгому діоді, однак існує певна відмінність, яка пов'язана з особливостями формування розподілу електричного поля в ньому (рисунок 2.12).

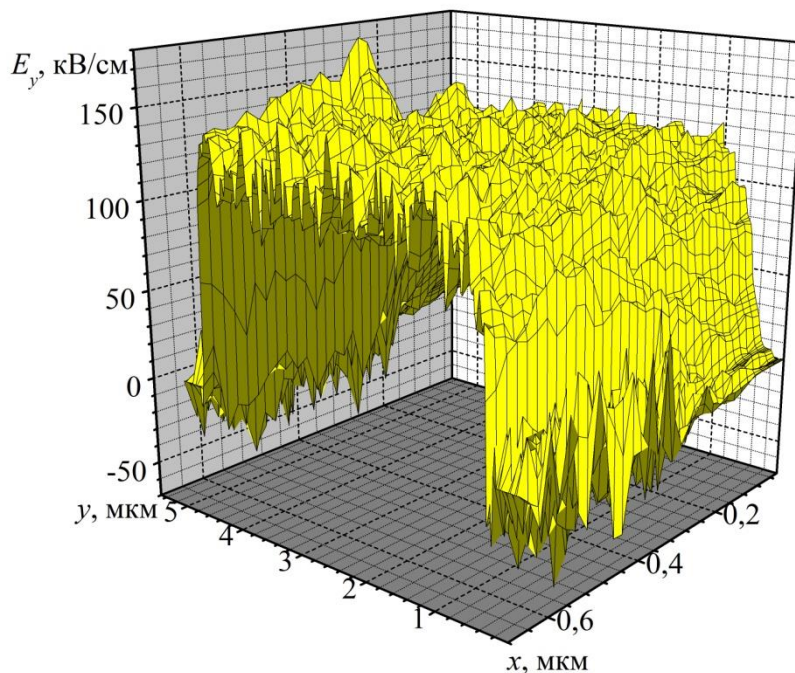


Рисунок 2.12 – Розподіл у-компоненти напруженості електричного поля в GaN-діоді довжиною 5,12 мкм

Електричне поле в довгому діоді має майже однорідний розподіл по довжині. Очевидно, що за таких умов процес набору енергії електронами, які рухаються в каналі діода є менш інтенсивним у порівнянні з коротким діодом. Це, безумовно, позначається на інтенсивності розсіяння процесі і, відповідно, на нагріванні зразка. Розподіл температури, що формується в діоді фактично повторює розподіл електричного поля в ньому (рисунок 2.13).

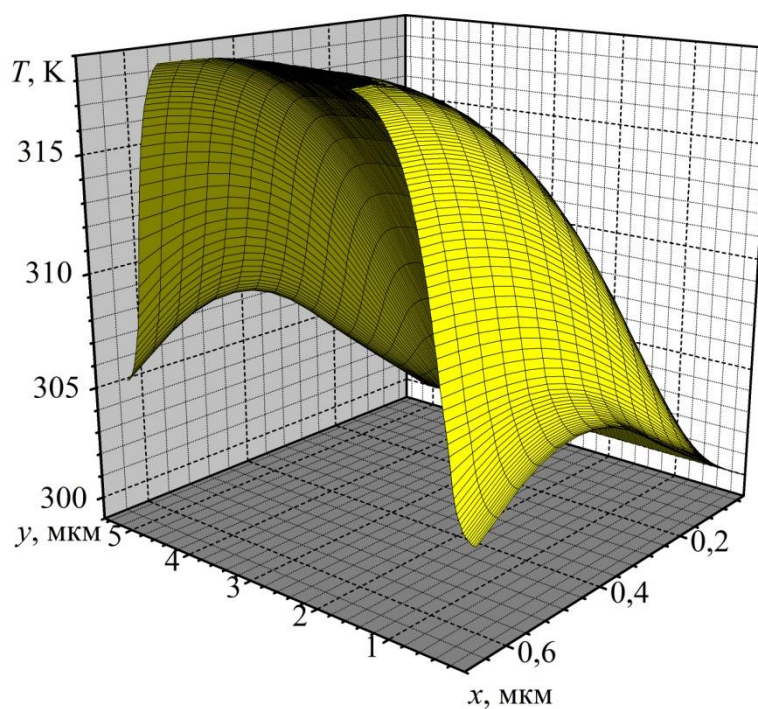


Рисунок 2.13 – Розподіл температури в GaN-діоді (час моделювання 2,5 нс)

В отриманій ситуації температура не перевищила 320 К. Однак, характерний вплив моношару на залежність струму від напруги спостерігається і в цьому випадку.

ВИСНОВКИ

В ході виконання роботи було розроблено та реалізовано у вигляді програмного продукту математичну модель, яка визначає розподіл температурних полів в діодних структурах з врахуванням можливості розміщення на них моношарів та теплового обміну між ними і є адаптованою до використання сумісно з методом Монте-Карло.

Виходячи з аналізу наукової літератури, зокрема фізичних процесів, пов'язаних з розповсюдженням тепла між різнорідними системами, в тому числі змішаної розмірності, проведений аналіз впливу моношару гексагонального нітриду бору на перерозподіл температури в GaN та діодах на його основі.

Основні результати зводяться до наступного:

1. Вплив моношарів h-BN на характеристики планарної структури на основі GaN визначається їх розмірами та наявністю охолодження. Для товстих структур вплив поверхневого розсіювання тепла за рахунок використання моношарів h-BN зростає.

2. Наявність моношару h-BN призводить як до перерозподілу тепла, так і до збільшення швидкості його охолодження.

3. В аналізованих планарних GaN-структурах товщиною 0,32 мкм, які мають підкладку, що знаходиться на ідеальному охолоджувачі, ефект самонагрівання є незначним і призводить до локального підвищення температури до величини близько 40° С.

4. Показано, що навіть за умови, що внаслідок слабкого розігріву деградація струму діода є незначною, наявність моношару h-BN на поверхні все одно призводить до вирівнювання характеристик діода.

Отримані результати показують, що в реальних тонких структурах за умови сильного розігріву, наприклад, як це спостерігається в польових транзисторах з високою рухливістю, розглянутий метод буде більш ефективним, як і у випадку використання напівпровідникових шарів з меншою теплопровідністю, або товстих підкладок.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Geim, A. K., & Novoselov, K. S. (2007). The rise of graphene. *Nature Materials*, 6(3), 183–191. <https://doi.org/10.1038/nmat1849>
2. Lemme, M. C., Akinwande, D., Huyghebaert, C., & Stampfer, C. (2022). 2D materials for future heterogeneous electronics. *Nature Communications*, 13(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-022-29001-4>
3. Wang, M., & Yang, E. (2017b). THz applications of 2D materials: Graphene and beyond. *Nano-Structures & Nano-Objects*, 15, 107–113. <https://doi.org/10.1016/j.nanoso.2017.08.011>
4. Zhu, X., Lei, S., Tsai, S., Zhang, X., Liu, J., Yin, G., Tang, M., Torres, C. M., Navabi, A., Jin, Z., Tsai, S., Qasem, H., Wang, Y., Vajtai, R., Lake, R. K., Ajayan, P. M., & Wang, K. L. (2018b). A Study of Vertical Transport through Graphene toward Control of Quantum Tunneling. *Nano Letters*, 18(2), 682–688. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b03221>
5. Chen, X., Zeng, Y., & Chen, K. (2020). Thermal transport in Two-Dimensional heterostructures. *Frontiers in Materials*, 7. <https://doi.org/10.3389/fmats.2020.578791>
6. Cai, Q., Scullion, D., Gan, W., Falin, A., Zhang, S., Watanabe, K., Taniguchi, T., Chen, Y., Santos, E. J. G., & Li, L. H. (2019). High thermal conductivity of high-quality monolayer boron nitride and its thermal expansion. *Science Advances*, 5(6). <https://doi.org/10.1126/sciadv.aav0129>
7. Wang, J., Li, Z., Chen, H., Deng, G., & Niu, X. (2019). Recent Advances in 2D Lateral Heterostructures. *Nano-Micro Letters*, 11(1). <https://doi.org/10.1007/s40820-019-0276-y>
8. Di Bartolomeo, Antonio. (2015). Graphene Schottky diodes: An experimental review of the rectifying graphene/semiconductor heterojunction. *Physics Reports*, 606, 1–58. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2015.10.003>
9. Mercado, E. (2021). *Optimisation of Low-dimensional Materials for Thermal Management Applications and Novel Passivation Layers in Devices*. (PhD dissertation). University of Bristol, Bristol, United Kingdom.

10. Sharma, V., Kagdada, H. L., Jha, P. K., Śpiewak, P., & Kurzydłowski, K. J. (2019). Thermal transport properties of boron nitride based materials: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 120, 109622. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109622>
11. Lindsay, L., & Broido, D. A. (2012). Theory of thermal transport in multilayer hexagonal boron nitride and nanotubes. *Physical Review B*, 85(3). <https://doi.org/10.1103/physrevb.85.035436>
12. Tongay, S., Schumann, T., & Hebard, A. F. (2009). Graphite based Schottky diodes formed on Si, GaAs, and 4H-SiC substrates. *Applied Physics Letters*, 95(22). <https://doi.org/10.1063/1.3268788>
13. Chen, C., Aykol, M., Chang, C., Levi, A. F. J., & Cronin, S. B. (2011). Graphene-Silicon Schottky Diodes. *Nano Letters*, 11(5), 1863–1867. <https://doi.org/10.1021/nl104364c>
14. Park, A., & Seo, T. (2023). Hexagonal Boron Nitride as an Intermediate Layer for Gallium Nitride Epitaxial Growth in Near-Ultraviolet Light-Emitting Diodes. *Materials*, 16(22), 7216. <https://doi.org/10.3390/ma16227216>
15. Зозуля, В. О. (2023). *Активні напівпровідникові планарні елементи субміліметрового та терагерцового діапазонів* Дис. д-р. філос., Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна.
16. Jacoboni, C., Reggiani, L. (1983). The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials. *Reviews of Modern Physics*, 55(3), 645–705. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.55.645>
17. Harrison, J. W., Hauser, J. R. (1976). Alloy scattering in ternary III-V compounds. *Physical Review*, 13(12), 5347–5350. <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5347>
18. Nederveen, K. (1989). Ensemble Monte Carlo simulation of electron transport in AlGaAs/GaAs heterostructures. *PhDT*. <https://doi.org/10.6100/ir318607>

19. Willardson, R. K., Beer, A. C. (1967). *Semiconductors and Semimetals*. Elsevier Gezondheidszorg
20. Foss, C., & Aksamija, Z. (2021). Thermal boundary conductance of monolayer beyond-graphene two-dimensional materials on SiO₂ and GaN. *Nanotechnology*, 32(40), 405206. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ac0d7d>
21. Levinshtein, M. E., Kostamovaara, J., & Vainshtein, S. (2004). Breakdown phenomena in semiconductors and semiconductor devices. *International Journal of High Speed Electronics and Systems*, 14(04), 921–1128. <https://doi.org/10.1142/s012915640400306x>
22. Vurgaftman, I., Meyer, J. R., Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11), 5815–5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
23. Brennan, K. F., & Mansour, N. S. (1991). Monte Carlo calculation of electron impact ionization in bulk InAs and HgCdTe. *Journal of Applied Physics*, 69(11), 7844–7847. <https://doi.org/10.1063/1.347516>
24. Joppich, W., Mijalković, S. (1995). Multigrid methods for process simulation. *Microelectronics Journal*, 26(2–3), xxvii–xxviii. [https://doi.org/10.1016/0026-2692\(95\)90020-9](https://doi.org/10.1016/0026-2692(95)90020-9)
25. Parter, S. V. (1988). Estimates for multigrid methods based on redblack Gauss-Seidel smoothings. *Numerische Mathematik*, 52(6), 701–723. <https://doi.org/10.1007/bf01395819>
26. Tran, D. Q., Delgado-Carrascon, R., Muth, J. F., Paskova, T., Nawaz, M., Darakchieva, V., & Paskov, P. P. (2020). Phonon-boundary scattering and thermal transport in Al_xGa_{1-x}N: Effect of layer thickness. *Applied Physics Letters*, 117(25). <https://doi.org/10.1063/5.0031404>
27. Ziade, E., Yang, J., Brummer, G., Nothorn, D., Moustakas, T., & Schmidt, A. J. (2017). Thickness dependent thermal conductivity of gallium nitride. *Applied Physics Letters*, 110(3). <https://doi.org/10.1063/1.4974321>
28. Carrascon, R. D., Tran, D. Q., Sukkaew, P., Mock, A., Ciecchonski, R., Ohlsson, J., Zhu, Y., Hultin, O., Monemar, B., Paskov, P. P., Samuelson, L., &

Darakchieva, V. (2019). Optimization of GaN Nanowires Reformation Process by Metalorganic Chemical Vapor Deposition for Device-Quality GaN Templates. *Physica Status Solidi (B)*, 257(4). <https://doi.org/10.1002/pssb.201900581>

29. E.D. Prokhorov, O.V. Botsula, A.V. Dyadchenko, I.A. Gorbunov. “Monte Carlo simulation of diode with cathode static domain,” Proceedings 23rd Int. Crimean Conference “Microwave & Telecommunication Technology” (CriMiCo’2013), Sevastopol, Crimea, Ukraine, pp. 139–140, 2013.

30. Botsula, O. V., & Prykhodko, K. H. (2017). Heterostructure-based diode with cathode static domain. *Telecommunications and Radio Engineering*, 76(10), 891–901. <https://doi.org/10.1615/telecomradeng.v76.i10.60>

31. Teisseyre, H., Perlin, P., Suski, T., Grzegory, I., Porowski, S., Jun, J., Pietraszko, A., & Moustakas, T. D. (1994). Temperature dependence of the energy gap in GaN bulk single crystals and epitaxial layer. *Journal of Applied Physics*, 76(4), 2429–2434. <https://doi.org/10.1063/1.357592>

32. Adachi, S. (2005). *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. <https://doi.org/10.1002/0470090340>

33. Іващенко, В. М., Мітін, В. В. (1990). Моделювання кінетичних явищ у напівпровідниках. Метод Монте-Карло.