

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))

ГЕНЕРАЦІЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ КОЛИВАНЬ ВАРІЗОННИМИ
АКТИВНИМИ ЕЛЕМЕНТАМИ
(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)

Андрій КОБА
(ім'я, прізвище)

Науковий керівник _____
(підпис)

Кирило ПРИХОДЬКО
(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, біофізика та комп'ютерні системи

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

_____ Коба Андрій Степанович _____
(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи Генерация електромагнітних коливань варізонними активними елементами.

керівник роботи Приходько Кирило Геннадійович, к. ф.-м.н. _____
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

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

2. Строк подання студентом роботи _____ 2025 року _____

3. Перелік питань, які потрібно розробити:

3.1 Провести обґрунтування роботи, вибору об'єкту та методів дослідження, визначити параметри напівпровідникових матеріалів, визначити структури діодів.

3.2 Дослідити особливості процесу ударної іонізації у розглянутих структурах та її вплив статичні характеристики діодів.

3.3 Дослідити частотні характеристики варізонних активних елементів.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Визначення проблематики дослідження, постановка задачі, ознайомлення з основними методами моделювання кінетичних процесів в напівпровідникових приладах
2	Складання плану роботи
3	Вивчення методу Монте-Карло. Визначення параметрів матеріалів.
4	Розробка математичної моделі активних елементів
5	Проведення розрахунків, визначення характеристик розглянутих приладів, аналіз отриманих результатів
6	Оформлення кваліфікаційної роботи
7	Підготовка до захисту

5. Дата видачі завдання 2025 року

Студент

підпис

А.С. Коба

ініціали, прізвище

Керівник роботи

підпис

К.Г. Приходько

ініціали, прізвище

РЕФЕРАТ

Коба А.С. Генерація електромагнітних коливань варізонними активними елементами. Дипломна робота магістра. Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна, 2025. 46 ст., 13 рис., 1 табл., 30 джерел.

ВАРІЗОННИЙ ШАР, МОЛЯРНА ЧАСТКА, УДАРНА ІОНІЗАЦІЯ, ЕФЕКТИВНІСТЬ ГЕНЕРАЦІЇ, НЕГАТИВНА ДИФЕРЕНЦІАЛЬНА ПРОВІДНІСТЬ, ЛЕГУВАННЯ

Об'єкт дослідження: активні напівпровідникові елементи з варізонними шарами.

Предмет дослідження: статичні, енергетичні та частотні характеристики діодів та вплив ударної іонізації.

Мета роботи: визначення впливу ударної іонізації на характеристики діодів з варізонними шарами, отримання оптимальних структур активних елементів для генерації електромагнітних коливань.

Методи дослідження: математичне моделювання процесів транспорту носіїв заряду та ударної іонізації в напівпровідниках методом Монте-Карло, ітераційний багатосітковий метод розв'язання рівняння Пуассона.

Результати дослідження: Результати вказують на залежність граничної частоти та максимального значення ефективності генерації від розподілу складу в активних елементах та їх легуванням. Встановлено оптимальні параметри діодів, які працюють в умовах виникнення ударної іонізації. Отримано граничну частоту генерації понад 300 ГГц для діодів довжиною 500 нм, зі збільшенням довжини гранична частота зменшується. Результати дослідження можуть бути використані для створення компактних активних елементів для генерації електромагнітних коливань.

ABSTRACT

Koba A.S. Electromagnetic oscillations generation using graded-gap active elements. Master's thesis. V.N. Karazin Kharkiv National University, 2025. 46 p., 13 fig., 1 table, 30 sources.

GRADED- GAP LAYER, MOLAR FRACTION, IMPACT IONIZATION, GENERATION EFFICIENCY, NEGATIVE DIFFERENTIAL RESISTANCE, DOPING.

Object of study: active semiconductor elements with graded-gap layers.

Subject of study: static, energy and frequency characteristics of diodes and the effect of impact ionization.

Purpose of the work: determining the influence of impact ionization on the characteristics of diodes with graded-gap layers, obtaining optimal structures of active elements for generation of electromagnetic oscillations.

Research methods: mathematical modeling of the charge carriers processes transport and impact ionization in semiconductors by the Monte Carlo method, iterative multigrid method for solving the Poisson equation.

Research results: The results indicate the dependence of the cutoff frequency and the maximum value of the generation efficiency on the distribution of the composition in the active elements and their doping. The optimal parameters of the diodes that work under the conditions of impact ionization have been defined. A cutoff frequency of more than 300 GHz was obtained for diodes with a length of 500 nm, with an increase in length, the cutoff frequency decreases. The research results can be used to create compact active elements for generating electromagnetic oscillations.

ЗМІСТ

Перелік скорочень, умовних познач, одиниць і термінів.....	7
Вступ.....	8
1 Огляд літератури.....	10
1.1 Генерація електромагнітних коливань активними елементами.....	10
1.1.1 Застосування та вимоги до генераторів.....	10
1.1.2 Принцип роботи варізонних активних елементів.....	15
1.2 Процедура моделювання методом Монте-Карло.....	17
2 Характеристики напівпровідникових активних елементів з варізонними шарами.....	28
2.1 Структура та математична модель діодів	28
2.2 Статичні характеристики варізонних активних елементів.....	33
2.3 Частотні характеристики.....	37
Висновки.....	42
Перелік джерел посилання.....	43

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАК, ОДИНИЦЬ І ТЕРМІНІВ

РТД - резонансно-тунельний діод

МПЕ - міжжолінне перенесення електронів

НДП – негативна диференціальна провідність

ЛПД - лавинно-протонний діод

РЧ — радіочастота

УІ – ударна іонізація

FMCSW - частотно-модульована безперервна хвиля

ККД – коефіцієнт корисної дії

ВСТУП

Сучасні технології, пов'язаних з можливістю генерації електромагнітних коливань, за останні десятиліття зазнали значний прогрес. Проте залишаються задачі, які потребують розвитку та окремої уваги. Розвиток інформаційних технологій потребує збільшення об'ємів інформації, яку необхідно обробляти та передавати, а це спонукає до підвищення частот понад 100 ГГц. Виникає необхідність створення компактних джерел довгохвильової частини терагерцового діапазону, в якому існуючі оптичні методи не є ефективними [1]. Можливими кандидатами для цього діапазону є резонансно-тунельні діоди (РТД), які також задовольняють потребу компактності, проте вони мають суттєвий недолік, а саме мала потужність [2,3]. Більшу потужність в цьому діапазоні мають квантово-каскадні лазери [4,5], але вони потребують додаткового охолодження. Перспективним підходом для вирішення проблеми є удосконалення традиційних джерел.

Класичними активними елементами є прилади з міджолінним перенесенням електронів (МПЕ) та лавинно-прольотні діоди (ЛПД), які широко використовуються в міліметровому діапазоні частот. Максимальні частоти таких приладів обмежені часом формування негативної диференційної провідності (НДП) [6]. Гранична частота роботи елементів з МПЕ обмежена часом набору кінетичної енергії та часом переходу з бічних долин в нижню. Основні напрямки досліджень для підвищення частоти були спрямовані на зменшення часу набору енергії, тобто розігріву носіїв заряду. Це забезпечується за рахунок удосконалення катодного контакту [7,8]. Дослідження діодів з МПЕ на основі GaAs встановили робочу частоту до 200 ГГц, та до 300 ГГц для діодів на основі InP [9]. Також варто звернути увагу на планарні конструкції діодів з використанням InGaAs [10], які показують граничну частоту близьку до 200 ГГц.

Таким чином можливим способом розширити частотний діапазон є зменшення часів, які визначають генерацію. Це можливо отримати використовуючи матеріали, в яких ці процеси протікають швидше, наприклад III-

нітриди [11]. Ці матеріали мають перевагу у порівнянні з традиційним GaAs у частотах розсіювання носіїв заряду. Теоретичні дослідження діодів з МПЕ на основі цих матеріалів демонструють граничні частоти генерації майже до 1 ТГц [12]. Але на сьогоднішній день в цьому напрямку мало експериментальних досліджень.

Другим шляхом покращення частотних характеристик є пришвидшення нагрівання носіїв заряду на катодному контакті і збільшення дрейфових швидкостей в активній області діодів. Для цього можливе використання гетеропереходів або варізонних шарів. Це рішення забезпечується розташуванням варізонного шару на катодному контакті [13] або в активній області [14]. Залишається проблема зменшення часу релаксації енергії електронів, тобто переходу з бічних долин в нижню. Цей час слабо залежить від енергії електронів та електричного поля. Зменшити цей час можливо використовуючи ударну іонізацію за певних умов.

1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1 Генерація електромагнітних коливань активними елементами.

1.1.1 Застосування та вимоги до генераторів.

Діод Ганна вже давно є пріоритетним твердотільним приладом для генерації когерентної потужності на частотах міліметрового діапазону. Його низький рівень фазового шуму та помірні рівні вихідної потужності роблять його ідеальним для багатьох радіолокаційних (RADAR) та візуалізаційних застосувань. Хоча відомо, що пристрої на основі фосфіду індію (InP) пропонують вищі радіочастотні (РЧ) потужності на міліметрових частотах порівняно з арсенідом галію (GaAs) [15], система матеріалів InP не підтримує використання інжекції гарячих електронів з варізонних шарів. Це означає, що вищі вихідні потужності та частоти, які пропонують пристрої InP, досягаються ціною температурної стабільності: фактора, який є важливим для багатьох застосувань.

Сучасні показники вихідної потужності та частот, було досягнуто в дослідницьких лабораторіях і вони покладаються на використання алмазного тепловідведення (яке продемонструвало збільшення вихідної потужності до 200% порівняно із золотом [16]), а також кварцових кільцевих або «відкритих» корпусів [17]. Використання цих методів у виробничому середовищі було б надзвичайно складним для впровадження при одночасному збереженні загального виходу придатної продукції, забезпеченні якості та можливості інтеграції пристроїв у практичні надійні реальні системи. Сучасні прилади, базуються на використанні інтегрального золотого тепловідведення та надійно упаковані з використанням корпусу з кільцем з оксиду алюмінію (алунди). Ця перевірена технологія пройшла суворі випробування на термін служби та надійність. Хоча з електричної точки зору кільця з плавленого кварцу пропонують кращу продуктивність завдяки нижчій ефективній діелектричній проникності (і, отже, паразитній ємності корпусу), кварц страждає від крихкості та великої невідповідності теплового розширення із позолоченою мідною основою (необхідною для тепловідведення),

що потенційно може призвести до механічної відмови та скорочення терміну експлуатації.

В останні роки поступово стали доступними альтернативні технології, що пропонують вищі рівні функціональності для генерації потужності на міліметрових частотах. Прикладами цього є SiGe MMIC з робочими частотами, що тепер сягають понад 77 ГГц [18], широкий спектр комерційно доступних GaAs MMIC до близько 100 ГГц, GaN MMIC W-діапазону, продемонстровані в лабораторії [19], та комерційно доступні пристрої InP до 325 ГГц. Однак, з точки зору вартості, потужності та простоти, діод Ганна на основі GaAs залишається привабливою альтернативою. Ще більш привабливою цю технологію робить недавня розробка в $e2v$ діодів та генераторів на 125 ГГц, які демонструють найвищу коли-небудь зареєстровану потужність у D-діапазоні для пристрою Ганна на GaAs [20]. Вихідна потужність цього пристрою на даний момент значно перевищує ту, що доступна при використанні готових MMIC, при цьому він також демонструє кращі характеристики фазового шуму.

Багато застосувань висувають вимоги до таких характеристик, як потужність, частота, фазовий шум, напруга вмикання, температурний дрейф (як РЧ потужності, так і частоти) та характеристики налаштування генератора. Розглянемо деякі типові застосування генератора на діоді Ганна у зв'язку з вимогами до продуктивності самого діода.

Особливий інтерес на даний час становить використання генераторів на діодах Ганна як джерел високої потужності, високої частоти та низького фазового шуму для використання в пасивних системах візуалізації міліметрового діапазону. Тут генератор на діоді Ганна часто використовується для забезпечення потужності гетеродина (LO) для змішувача, коли застосовується гетеродинне детектування. РЧ вихід діода може подаватися безпосередньо на порт гетеродина змішувача, або іноді використовуватися як накачка для каскаду множення частоти. Тут вимоги до самого діода Ганна є відносно простими і фактично схожі на вимоги до простих доплерівських вимірювачів швидкості, що

використовуються правоохоронними органами. У цьому випадку для коректної роботи системи потрібні лише достатня вихідна РЧ потужність на фіксованій частоті, температурна стабільність та задовільний фазовий шум.

Концептуально складнішим класом систем є радар FMCW (частотно-модульована безперервна хвиля) міліметрового діапазону. Це наразі одне з основних застосувань для діодів Ганна на GaAs, які використовуються в широкому спектрі систем FMCW радарів для таких застосувань, як автомобільні радары, наведення ракет, «розумні» боєприпаси, радары безпеки та радары виявлення сторонніх предметів (FOD) на злітно-посадкових смугах. Залежно від архітектури системи FMCW, діод Ганна може використовуватися декількома способами. Найпростіші вимоги до продуктивності генератора на діоді Ганна висуваються при його використанні для генерації несучого сигналу, на який перетворюється модульований сигнал. Приклад такої системи показаний на рис. 1.1. У цьому випадку, як і в системах з фіксованою частотою гетеродина та доплерівських системах, від діода Ганна вимагається лише забезпечення постійної потужності на фіксованій частоті.

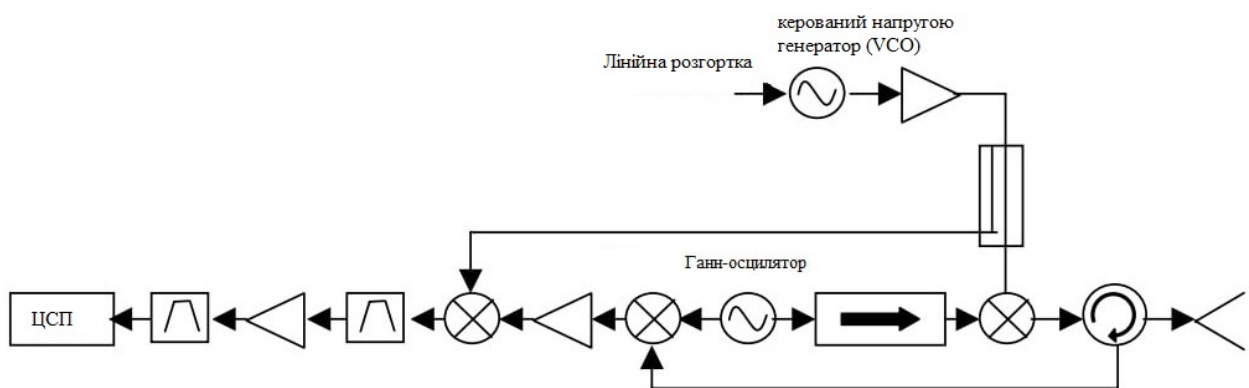


Рисунок 1.1 - Датчик візуалізації радара FMCW на 94 ГГц з використанням перетворення вгору модульованого сигналу до несучої 91 ГГц [21].

Частіше в системі FMCW генератор Ганна діє як генератор, керований напругою (VCO), з виходом, що безпосередньо модулюється або через

використання зміщення напруги (пряме налаштування), або через використання варакторного налаштування. Пряме налаштування зазвичай дозволяє досягти смуги модуляції близько 600 МГц у V- та W-діапазонах, тоді як варакторне налаштування може досягти більшої смуги понад 1000 МГц за рахунок вихідної потужності (зазвичай на 50% менше, ніж при прямому налаштуванні). Варто зазначити, що хоча діоди Ганна вважаються за своєю природою широкосмуговими пристроями [22], резонансні контури, на яких зазвичай базуються модулі генераторів, обмежують загальну смугу пропускання.

У випадку генератора на діоді Ганна, що діє як VCO з прямою модуляцією, генератор повинен не лише забезпечувати достатню потужність у заданому діапазоні частот та температури навколишнього середовища, але й його характеристики налаштування напругою повинні залишатися постійними при зміні температури, щоб уникнути введення нелінійності в FMCW-імпульс та подальшого погіршення роздільної здатності радара по дальності. Приклад цього наведено на рис. 1.2, де показані типові відгуки оптимізованих та неоптимізованих епітаксійних структур діода Ганна з інжекторами гарячих електронів. У оптимізованому випадку відстань між окремими кривими (які представляють постійну напругу зміщення) залишається постійною з температурою, тому пристрій показує мінімальну зміну характеристики налаштування (df/dV) з температурою. Варіація частоти коливань з температурою в пристроях Ганна на GaAs, що використовують інжекцію гарячих електронів, становить близько 1/10 від порівнянного пристрою InP без інжекції гарячих електронів [23].

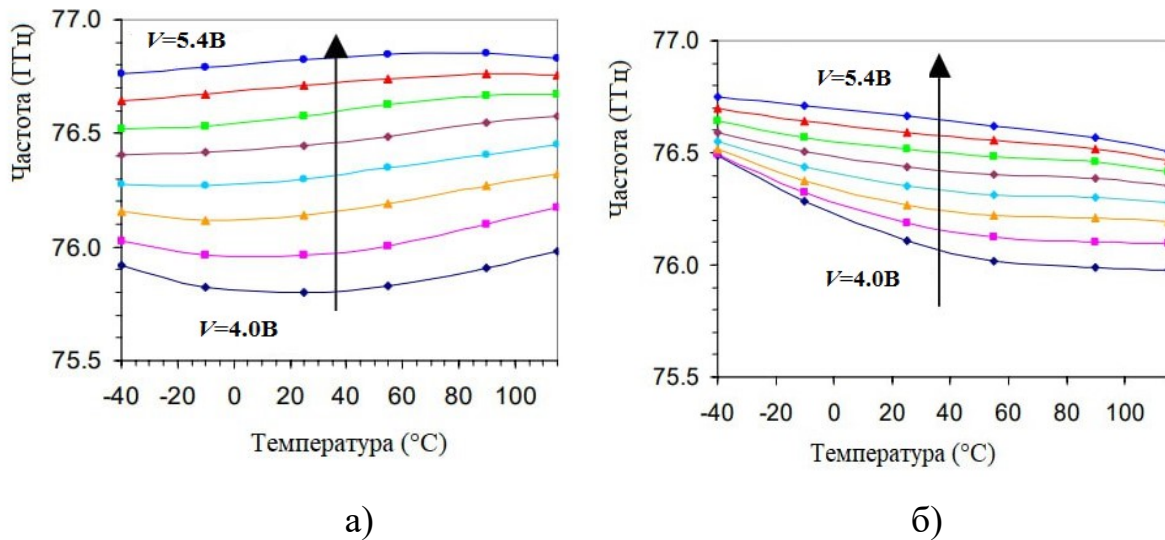


Рисунок 1.2 - Виміряні характеристики налаштування частоти в залежності від температури для (а) оптимізованого діода Ганна на GaAs з варізонним інжектором гарячих електронів AlGaAs, та (б) подібного діода з неоптимізованою епітаксійною структурою [24].

У всіх вищезазначених застосуваннях продуктивність в залежності від температури, фазовий шум та напруга вмикання виявилися ключовими характеристиками для генератора на діоді Ганна. Для покращення характеристик традиційних діодів Ганна наприкінці 1980-х років у GEC було досліджено та розроблено використання інжекції гарячих електронів.

Крім відповідності експлуатаційним вимогам даної системи, діод Ганна також часто повинен відповідати суворим автомобільним або військовим вимогам надійності. Загалом розподіл терміну служби будь-якого напівпровідникового пристрою зазвичай слідує логнормальному закону, де спочатку частота відмов швидко зростає через ранні відмови, що виникають внаслідок дефектів у самому напівпровідниковому матеріалі або проблем з корпусуванням. Після врахування цих ранніх відмов частота відмов падає, і будь-яка подальша деградація продуктивності або відмова пристрою, як правило, спричинена інтерметалічними ефектами в омичних контактах, дифузією легуючої домішки в самому

напівпровіднику або відмовою корпусу. Усі ці механізми відмов різною мірою пов'язані з тепловими ефектами всередині самого напівпровідникового пристрою.

1.1.2 Принцип роботи варізонних активних елементів.

Діод Ганна, у своїй основі, можна розглядати як перетворювач постійного струму в РЧ: коли прикладена напруга зміщення перевищує певний поріг, виникають коливання, частота яких залежить від властивостей матеріалу та геометрії самого пристрою. Це відбувається завдяки ефекту переносу електронів, який демонструють певні бінарні та тернарні складні напівпровідники.

Коротке пояснення ефекту переносу електронів може полягати в тому, що коли електрон прискорюється через матеріал електричним полем, він накопичує енергію, і тому ймовірність його розсіювання з центральної долини зони провідності до найближчої (за енергією та імпульсом) бічної долини зростає. Ця ймовірність різко зростає, коли електричне поле досягає певного порогового значення. Оскільки ефективна маса електрона в бічній долині більша, ніж у центральній, швидкість електрона зменшується, що призводить до утворення домену сильного поля.

Опис того, як ефект перенесення електронів призводить до коливань: ефективна маса електронів (пов'язана з параболічністю профілю зони провідності) більша в бічній долині, ніж у центральній долині. Це означає, що швидкість електронів у бічній долині під дією електричного поля нижча, ніж у центральній долині. Наслідком цього є «скупчення» електронів під час їх руху вздовж пристрою, причому електрони в бічній долині рухаються повільніше, ніж електрони в центральній долині. Це призводить до появи збідненої області, за якою слідує область накопичення (відомі разом як область високого поля), що створює внутрішнє електричне поле, протилежне зовнішньому. Результатом цього є постійне зменшення електричного поля в пристрої, яке триває до тих пір, поки не буде перевищено порогове електричне поле. У цей момент область високого поля припиняє розширюватися і поширюється з постійною швидкістю

через пристрій, поки не досягне анодного контактного шару, де вона руйнується, а електричне поле через пристрій знову збільшується. Коливальні процеси спостерігаються в струмі та напрузі на виводах пристрою, коли область утворюється на катоді, розширюється, поширюється і руйнується на аноді, перш ніж інша область зароджується на катоді.

Фундаментальна фізика роботи звичайного пристрою Ганна дуже зосереджена на енергії електронів, температурі решітки та випадкових процесах розсіювання. Це призводить до наступних властивих обмежень звичайних пристроїв Ганна:

Початок коливань (напруга включення) в пристрої Ганна сильно залежить від температури навколишнього середовища

Частота коливань сильно залежить від температури, оскільки вона визначається (частково) довжиною області, в якій поширюється домен (транзитна область). Невелика частина (яка називається «мертвою зоною») цієї області необхідна для прискорення електронів до точки, в якій вони мають достатню енергію для переходу в бічну долину. Довжина мертвої зони, а отже, і ефективна довжина транзитної області та частота коливань також залежать від температури.

Випадковий характер механізмів розсіювання, що сприяють утворенню доменів, призводить до невеликих коливань точки, в якій відбувається утворення доменів. Це ефективно змінює довжину транзитної області від циклу до циклу, що призводить до фазового шуму на виході.

Для вирішення цих проблем було запропоновано використання структури інжекції гарячих електронів. Ідея полягала в тому, щоб підняти енергію електронів достатньо для значного збільшення ймовірності їх прямого входу в бічну долину зони провідності при надходженні в область прольоту. Інжекттовані електрони мають більшу енергію, ніж ті, що перебувають у рівновазі з решіткою області прольоту, і тому називаються «гарячими». Оскільки більшість інжекттованих електронів безпосередньо потрапляють у бічну долину, «мертва зона» ефективно усувається разом із температурною залежністю частоти коливань

та напруги вмикання. Крім того, підвищується загальна ефективність перетворення, а фазовий шум зменшується.

1.2 Процедура моделювання методом Монте-Карло

Метод Монте-Карло — це ймовірнісний метод, оснований на вибірці розподілів параметрів задачі переносу в напівпровіднику за допомогою випадкової (псевдовипадкової) величини. Параметри задачі керуються ймовірнісними розподілами. Чи зазнає носій розсіювання на решітках чи на дефектах, і, в розширеному вигляді, який саме тип такого розсіювання відбудеться, залежить від можливого настання цих подій, представлених їхніми ймовірностями. Отже, якщо для моделювання цих подій у задачі переносу використовувати випадковий розподіл і зібрати достатню статистику, то можна отримати реалістичні розподіли параметрів. Прикладами таких параметрів можуть бути розподіл носіїв за енергією, імпульсом і положенням у зразку, тобто функція f у кінетичному рівнянні Больцмана. Загалом ця функція не обов'язково має бути розподілом Максвелла–Больцмана або зсунутою версією такого розподілу за енергією, і підхід Монте-Карло може визначити, якою вона є. Крім того, значення методів Монте-Карло виходить за межі цього. Аналіз малих сигналів, виведений із дрейфово-дифузійного рівняння (самого по собі спрощення кінетичного рівняння Больцмана), використовує суперпозицію у лінійному диференційному рівнянні. Це ще одне наближення як для перехідних, так і для великих аналогових сигналів. Монте-Карло, як статистичний метод, підходить для отримання розв'язків таких задач. Як і в будь-якому методі, якщо задача описана неповно, можуть бути отримані неточні рішення. Проте цей метод дуже об'ємний чисельно; вимагає великих обчислювальних ресурсів; значного накопичення даних по енергії, імпульсу, простору та часу; і, як у інших методах, належного опису граничних умов.

Метод передбачає оцінку траєкторій достатньої кількості носіїв усередині напівпровідника, щоб отримати статистично коректний опис переносу. Ці траєкторії відбуваються під впливом зовнішніх та внутрішніх сил у напівпровіднику та внаслідок розсіювання; всі вони можуть призводити до зміни енергії та імпульсу носія. Прикладами прикладених і внутрішніх сил є ті, що виникають через зовнішнє або внутрішнє електричне поле p – n переходу; прикладами розсіювання є механізми дефектного та решіткового розсіювання. Метод оцінює як саму подію розсіювання, так і час між подіями розсіювання — період, під час якого носій рухається балістично. Ці події враховуються стохастично відповідно до відносної ймовірності їхнього настання.

Розглянемо цей підхід для оцінки часу між подіями розсіювання. Нехай $p(\varphi)$ — щільність ймовірності настання випадкової величини φ (наприклад, енергії носія), а $p(\eta)$ — щільність ймовірності для випадкової величини в псевдовипадковому розподілі (наприклад, рівномірний розподіл). Тоді:

$$\int_0^{\varphi} p(\varphi') d\varphi' = \int_0^{\eta} p(\eta') d\eta'. \quad (1.1)$$

Для рівномірного розподілу це означає

$$\eta = \int_0^{\varphi} p(\varphi') d\varphi'. \quad (1.2)$$

Інверсія цього рівняння дає випадкове значення φ як функцію випадкового числа η . Як приклад, розглянемо розсіювання з постійною повною частотою розсіювання $S=1/\tau$. Ймовірність того, що подія розсіювання відбудеться після проміжку часу t , після попереднього розсіювання в момент $t=0$, є експоненційною функцією $p(t) = S e^{-S t}$ і, інтегруючи, маємо

$$\eta = 1 - e^{-S t}, \quad (1.3)$$

що при інверсії дає відповідний час між розсіюваннями

$$t = -\frac{1}{S} \ln(1 - \eta) \equiv t = -\frac{1}{S} \ln(\eta), \quad (1.4)$$

оскільки η має рівномірний розподіл. Отже, фізично, процес вибору часу при постійному темпі розсіювання полягає в обчисленні кумулятивної функції ймовірності за часом, а потім у використанні генератора рівномірних випадкових чисел для вибору відповідного часу. Це обчислення і зіставлення треба виконати для всіх процесів, що враховуються. Сюди входять додаткові ускладнення, наприклад необхідно врахувати кут руху носія після розсіювання, оскільки він визначає новий напрям руху частинки. Вибір цього кута вимагає додаткової процедури, пов'язаної з відповідним розподілом ймовірності.

Визначення часу, протягом якого відбувається вільний політ, насправді є досить складною задачею в загальному випадку. Для частинки з хвильовим вектором k , що відповідає імпульсу p , ймовірність того, що розсіювання відбудеться в інтервалі часу dt в момент t , дорівнює $p[k(t)] dt$. Тому ймовірність відсутності розсіювання в інтервалі часу від 0 до t , після розсіювання в момент $t=0$, визначається виразом:

$$\exp\left(-\int_0^t p[k(\tau)] d\tau\right). \quad (1.5)$$

Отже, ймовірність того, що частинка, яка не зазнала розсіювання в інтервалі 0 до t , зазнає розсіювання під час інтервалу dt в момент t , дорівнює

$$P(t)dt = p[k(t)] \exp\left(-\int_0^t p[k(\tau)] d\tau\right) dt. \quad (1.6)$$

Це не є простим у загальній задачі, де $p(\varphi)$ не є сталим. У таких випадках обчислення значно спрощуються шляхом введення додаткового процесу розсіювання, якого насправді немає — віртуального процесу розсіювання — що залишає частинку в тому самому стані, в якому вона була до цього, але робить $p(\varphi)$ сталою і рівною її максимальному значенню, дозволяючи продовжити описану процедуру. Цей уявний процес називають «саморозсіюванням». Тепер, коли $p(\varphi)$ є сталою, можна використовувати рівномірні випадкові числа, а подію «саморозсіювання» трактувати як таку, що залишає стан частинки незмінним.

Підсумовуючи, процедура полягає в наступному: починаючи з випадкового положення, дозволяємо носію вільно летіти (так званий балістичний політ) допоки не буде виявлено процес розсіювання за процедурою Монте-Карло. Окрім визначення енергії, визначення імпульсу вимагає додаткової процедури Монте-Карло для оцінки кута, після чого носій знову продовжує вільний політ. Після кількох таких подій розсіювання кінцеві параметри носія втрачають залежність від початкових умов.

Для стаціонарної однорідної задачі поведінка частинки в границі великої кількості подій розсіювання буде репрезентативною для поведінки газу частинок. Цей висновок також впливає з ергодичності.

Рівняння руху частинки впливає з опису руху частинок. Імпульс частинки $\hbar k$, а її енергія для простого вільного набігу частинки $\hbar^2 k^2 / 2m^*$. Під впливом електричного поля ε рівняння руху частинки має вигляд

$$\frac{\partial(\hbar k)}{\partial t} = -q\varepsilon. \quad (1.7)$$

Якщо її початковий імпульс відповідає хвильовому вектору k_i , то імпульс у момент часу t під час вільного польоту відповідає значенню k , де

$$k(t) = k_i - \frac{q\varepsilon}{\hbar} t. \quad (1.8)$$

Оскільки рух є дрейфовим, імпульс змінюється тільки в напрямі електричного поля, тобто в напрямі x .

Для перехідної задачі, коли цікавлять поведінка газу частинок на часовій шкалі, під час якої відбувається замало подій розсіювання, а також для просторово неоднорідних задач (наприклад, переносу в каналі транзистора з коротким довжиною затвора або в області простору заряду база–колектор біполярного транзистора), необхідно розглядати значно більше частинок під впливом сил, що існують у каналі або в області просторового заряду, щоб отримати коректні результати. Перевірка останнього полягає у визначенні стандартного відхилення параметрів для оцінки його невизначеності. Це тест зазвичай виконують, ділячи

накопичену інформацію на достатньо великі, рівні, часові інтервали й обчислюючи параметри (наприклад, швидкість).

Реальні задачі напівпровідників зазвичай значно складніші. Рівняння Пуассона, яке пов'язує густину заряду та вектор зміщення, повинно задовольнятися разом із внесками носіїв заряду, коли вони рухаються у зразку скінченного розміру.

Додаткова складність виникає через зміну ефективної маси, численні процеси розсіювання, лавинні процеси, що створюють додаткові електрони та дірки, квантування імпульсу в двовимірних структурах, множинні зони та долини реальних зонних структур та значне відхилення цих зон від параболічного наближення. Для електронів у багатьох складних напівпровідниках, наприклад, принаймні дві Γ та L - долини слід розглядати для задач, пов'язаних зі значним нагріванням носіїв заряду. Досить часто також слід розглядати X , і ні X , ні L долини не можна апроксимувати як параболічні для більш ніж кількох часток eV . Можна внести деякі корективи, ввівши коефіцієнт непараболічності α , який пов'язує енергію та імпульс через

$$E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (1.9)$$

таким чином енергія E

$$E(k) = \frac{1}{2\alpha} \left[-1 + \left(1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right)^{1/2} \right]. \quad (1.10)$$

Швидкість частинки $v(k)$

$$v(E) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m^* (1 + 2\alpha E)}, \quad (1.11)$$

а ефективна маса провідності m_c виражається як

$$m_c = m^* (1 + 2\alpha E) \quad (1.12)$$

Ці наближення дозволяють розширити метод з використанням рівнянь для опису деяких параметрів задачі. Однак для напівпровідників з малою

забороненою зоною, які непараболічні й мають помітні нерівноважні ефекти, ця неточність аналітичного опису стає серйозним обмеженням. До того ж часто задачі пов'язані з гетероструктурами та з варізонними сполуками, отже, просторово-залежною зоною. Для таких задач інформацію іноді зберігають у вигляді таблиць пошуку. Отже, методи Монте-Карло стають як чисельно, так і за обсягом збереження даних об'ємними.

Крім того на поведінку системи впливає границя. Тому граничні умови мають ідеально відображати реальну поведінку границі, а якщо це неможливо — обиратися так, щоб кінцевий результат, який цікавить, інтуїтивно не залежав від них. Таким чином, початкове положення частинки має бути неістотним для кінцевого результату (наприклад, швидкості). Це початково-крайова задача.

Просторово розміри пристроїв та області, які аналізуються, обмежені, і межі повинні бути відповідно описані. У поверхнево-орієнтованому пристрої носії заряду, що падають на поверхню, або відбиваються, або рекомбінуються. Якщо це пристрій з основними носіями, то другий варіант (рекомбінація) неістотний, коли концентрація неосновних носіїв мала. Це може бути неістотним і для пристрою з неосновними носіями, якщо інші ефекти в системі переважають. У будь-якому випадку слід ретельно розглянути, що відбувається з носієм при відбитті від поверхні. Рухливість електронів на поверхні кремнію майже вдвічі менша, ніж у об'ємі при подібних концентраціях носіїв. Це зниження рухливості повинно виникати через часткову рандомізацію імпульсу носіїв, що падають на поверхню. Цей ефект можна врахувати, вважаючи розсіяння на поверхні частково випадковим. У гетероструктурах, де зберігається кристалічність між напівпровідниками (наприклад, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$), відсутність поверхневих станів і відсутність не-планарності зберігають низьку кількість поверхневих станів. Якщо ці стани відсутні, виникають деякі потенціальні збурення і, отже, розсіяння. Тому в гетероструктурі з низькою щільністю поверхневих станів і планарним інтерфейсом рухливість зберігається й відбувається відбиття. Носії, що падають з GaAs у $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ на поверхні, внаслідок відбиття зазнають лише зміни знаку

компоненти імпульсу нормальної до поверхні. Частинка не завжди має відбиватись; вона може мати потрібні імпульс і енергію, щоб перейти в $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Процедура Монте-Карло має перевіряти і дозволяти таку подію.

Дві межі, які часто мають важливе практичне значення - це омічний контакт і метал-напівпровідниковий випрямляючий контакт. Ідеальний омічний контакт, якщо він навмисно не є частиною внутрішнього пристрою для зміни його роботи, має лише подавати носії в напівпровідник без падіння напруги на контакті. Процедура Монте-Карло може симулювати це, підтримуючи густину частинок на контакті на рівні її рівноважного значення згідно з розподілом Фермі-Дірака. Втрачений носій може бути замінений носієм, імпульс якого вибрано випадково відповідно до розподілу Фермі-Дірака. Метал-напівпровідниковий випрямляючий контакт є значно складнішим. Частинки, що не мають достатнього імпульсу або енергії для переходу в метал, відбиваються і, через непланарність та поверхневі стани, можуть термалізовуватись. Носії, що мають достатній імпульс та енергію, перейдуть у метал. Оскільки для випрямляючих метал-напівпровідникових контактів бар'єр для інжекції з металу в напівпровідник дуже великий, а довжини розсіювання дуже малі, дуже мало носіїв переходить з металу в напівпровідник, і їх часто можна ігнорувати в процедурі.

Коли носії проходять область зі значним градієнтом електричного поля, вони зазнають збільшення швидкості (просторовий overshoot ефект) в частинах області. Просторовий «overshoot» означає, що локальна швидкість v у локальному полі ϵ стає вищою, ніж та, яку вона досягла б для повільно змінного поля тієї ж величини. Виникає локальний поза-рівноважний стан. Це відбувається тому, що енергія носія і локальне електричне поле вже не перебувають у взаємній рівновазі. Прикладом локальної рівноваги за високих полів є існування насичення швидкості. Рухливість носіїв є функцією енергії. Через паралель між енергією і електричним полем рухливість можна записати як функцію від поля. Коли поле велике, енергія носіїв зростає. Вища енергія носіїв призводить до більшого ступеня розсіювання, що знижує рухливість. Таким чином, швидкість, яка є

добутком рухливості та електричного поля при зворотній залежності рухливості від поля, стає майже сталою. Коли існує великий градієнт електричного поля, носій не одержує негайно ту енергію, яка відповідає локальному полю, якщо поле змінюється швидко. Насправді він має нижчу енергію і тому зазнає меншого розсіювання, і при цьому його прискорює високе поле. Тому кажуть, що у носія відбувається просторовий «overshoot». Ця висока швидкість виникає незважаючи на нижчу енергію. Іншими словами, релаксація імпульсу відбувається швидше, ніж релаксація енергії.

Другий приклад стосується розподілів, які можна визначити методом Монте-Карло. Дуже інформативною проблемою є перенесення через $p-n$ перехід. Дифузійно-дрейфова теорія включає рухливість і коефіцієнт дифузії, який пропорційний рухливості, обидва з яких залежать від локального електричного поля. У приближенні сталої рухливості ця залежність від поля ігнорується, і знаходиться рішення, наприклад, рівняння для польового транзистора. У $p-n$ переході та багатьох інших переходах великі внутрішні поля виникають через внутрішні напруги. Локальне електричне поле є великим. Частинки, наприклад дірки й електрони в $p-n$ переході, дифундують проти локального поля. Поле не може збільшити енергію цих частинок так, як це відбувається, коли частинка прискорюється полем під час дрейфу. Зауважимо, що дифузія в цій задачі, як і в інших, зумовлена розсіюванням, що надає напрямок у бік областей з меншою концентрацією носіїв. Дрейф, навпаки, змушує частинки рухатися від переходу. Всюди повинні існувати термодинамічно рівноважні розподіли, тобто функція розподілу має бути розподілом Фермі–Дірака, а в не виродженому випадку це спрощується до розподілу Максвелла–Больцмана. Тепер, якщо до переходу прикласти пряме зміщення, локальне поле порушується. Електрони і дірки в процесі перенесення струму одержують надлишкову енергію між розсіюваннями від прискорення у локальному полі.

Метод Монте-Карло дає змогу аналізувати розподіл електронів, їхню енергію і, якщо це розподіл типу Максвелла–Больцмана, їхню температуру, оскільки може змодельовати всі необхідні процеси, що ведуть до переносу.

Також корисно розглянути цю задачу в рамках підходу кінетичного рівняння Больцмана. Розглянемо задачу з внутрішнім полем $\varepsilon_{\text{вн}}$ через градієнт домішок. Якщо f_0 — функція розподілу в термодинамічній рівновазі для цього стану, то з кінетичного рівняння Больцмана випливає

$$q\varepsilon_{\text{вн}} \cdot \nabla_p f_0 + v \cdot \nabla_r f_0 = 0. \quad (1.13)$$

При полі $\varepsilon_{\text{вн}} + \Delta\varepsilon$ функція розподілу змінюється на $f_0 + \Delta f$, і кінетичне рівняння Больцмана дає

$$q\varepsilon_{\text{вн}} \cdot \nabla_p f_0 + v \cdot \nabla_r f_0 + q\Delta\varepsilon \cdot \nabla_p \Delta f + v \cdot \nabla_r \Delta f + q\varepsilon_{\text{вн}} \cdot \nabla_p \Delta f + q\Delta\varepsilon \cdot \nabla_p f_0 + \left. \frac{\partial(f_0 + \Delta f)}{\partial t} \right|_{\text{роз}} = 0. \quad (1.14)$$

Остання складова характеризує вплив розсіяння і є причиною дифузії; передостанній термін є неістотним; а перші два терміни мають нульову суму згідно з кінетичним рівнянням Больцмана в термодинамічній рівновазі. Закон збереження струму вимагає, щоб

$$\nabla_r \cdot \int v \Delta f d^3 p = 0. \quad (1.15)$$

Розглянемо лише випадок, коли електричне поле $\varepsilon_{\text{вн}} + \Delta\varepsilon$ не змінюється з координатою, отже $\nabla_r \Delta f$ не змінюється з координатою. Тоді кінетичне рівняння Больцмана можна записати як

$$q\varepsilon_{\text{вн}} \cdot \nabla_p \Delta f + \left. \frac{\partial(f_0 + \Delta f)}{\partial t} \right|_{\text{роз}} = -q\Delta\varepsilon \cdot \nabla_p f_0. \quad (1.16)$$

Для внутрішнього поля величиною ε_0 це дає

$$q\varepsilon_0 \cdot \nabla_p \Delta f + \left. \frac{\partial(f_0 + \Delta f)}{\partial t} \right|_{\text{роз}} = -q\Delta\varepsilon \cdot \nabla_p f_0. \quad (1.17)$$

Щоб зрозуміти різницю між ефектами внутрішніх і прикладених полів, розглянемо випадок напівпровідника з постійним легуванням і ідентичною

функцією розподілу f_0 будь-якій точці, обраній у попередній ситуації. Якщо поле $\varepsilon_{\text{зов}} = \varepsilon_{\text{вн}} = \varepsilon_0$ застосовується до нього зовнішніми засобами, то зміна в функції розподілу $\Delta f'$ задовольняє

$$q\varepsilon_0 \cdot \nabla_p \Delta f' + \left. \frac{\partial (f_0 + \Delta f')}{\partial t} \right|_{\text{роз}} = -q\varepsilon_0 \cdot \nabla_p f_0. \quad (1.18)$$

Якщо ймовірність переходу є лінійною і не залежить від функції розподілу (що означає незначні ефекти розсіювання та збурення, спричинені носієм), тоді, використовуючи S як коефіцієнт розсіювання, отримуємо для випадків внутрішнього та прикладеного поля

$$\begin{aligned} q\varepsilon_0 \cdot \nabla_p \Delta f + S\Delta f &= -q\Delta\varepsilon_0 \cdot \nabla_p f_0, \\ q\varepsilon_0 \cdot \nabla_p \Delta f' + S\Delta f' &= -q\Delta\varepsilon_0 \cdot \nabla_p f_0. \end{aligned} \quad (1.19)$$

При зміні електричного поля $\Delta\varepsilon$ спів спрямованою з ε_0 функції розподілу в двох випадках пов'язані співвідношенням:

$$\Delta f = \frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon_0} \Delta f'. \quad (1.20)$$

Для змін зміщення від теплової рівноваги для неоднорідного напівпровідника з внутрішнім полем зміна функції розподілу є добутком частки, що дорівнює відносному збуренню поля, помноженої на те, якою була б зміна функції розподілу, якби внутрішнє поле було зовнішнім полем. Вплив полів у випадку внутрішнього поля є незначним, а в тепловій рівновазі він відсутній. Розрахунки методом Монте-Карло підтверджують це, як впливає з функцій розподілу.

Оскільки дрейфова швидкість визначається як

$$\langle v \rangle = \frac{\int v f dp}{\int f dp}, \quad (1.21)$$

отримуємо за наявності збурення $\Delta\varepsilon$ швидкості в двох випадках v_d і v_d' , які пов'язані однаковими співвідношеннями:

$$v_d = \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_0} v_d'. \quad (1.22)$$

Таким чином, ефективна рухливість також масштабується цим фактором. Це зроблено з кількома спрощеннями: напівпровідник вважався невиродженим і ізотропним, і знехтувано впливом розсіяння. Процедура Монте-Карло може явно врахувати ці фактори.

2. ХАРАКТЕРИСТИКИ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ АКТИВНИХ ЕЛЕМЕНТІ З ВАРІЗОННИМИ ШАРАМИ

2.1 Структура та математична модель діодів

Основним чинником, який впливає не лише на статичні, а і на частотні характеристики є ударна іонізація. Це процес в наслідок якого носій заряду, який має достатню енергію, при взаємодії з атомом здатен утворити електрон-діркову пару. Зазвичай це явище негативно впливає на роботу приладів, оскільки спричиняє збільшення концентрації вільних носіїв заряду, і, в неконтрольованому випадку здатен призвести до пробоя. Необхідною умовою для виникнення ударної іонізації є велика кінетична енергія носіїв заряду. В приладах з міждолинним переносом електронів, ударна іонізація виникає внаслідок прискорення носіїв заряду сильним електричним полем. Підвищення концентрації носіїв заряду призводить до збільшення провідності, що негативно впливає на здатність генерації. Крім того, для приладів з МПЕ, основними носіями заряду є електрони. Неосновні носії – дірки, які утворились в наслідок УІ, під дією електричного поля рухаються в протилежному до електронів напрямку (в бік катоду). Через свою невелику рухливість здатні накопичуватись в прольотній області.

Проте, існують шляхи зменшити негативний вплив ударної іонізації та використати переваги цього механізму. Відомо, що швидкість ударної іонізації, яка обумовлена електрона перевищує швидкість іонізації дірок [25]. Основною перевагою цього механізму є релаксація енергії носіїв, тобто зменшення енергії електронів нижньої долини, або перехід електронів з бічних долин до нижньої. Для цього необхідно контролювати цей процес як за інтенсивністю, так і в просторі. Щоб позбутися накопичення дірок в активній зоні їх необхідно вивести з приладу, це можливо реалізувати шляхом просторового обмеження ударної іонізації поблизу анодного контакту, та створення умов для їх виходу.

Забезпечення виходу дірок до анодного контакту можливе за рахунок створення такого розподілу енергії стелі валентної зони, щоб утворився нахил зони в бік аноду. Це можливо реалізувати використовуючи варі зонні напівпровідникові шари, в яких область біля аноду буде представлена напівпровідником з меншою шириною забороненої зони і її збільшення в бік катоду. Крім того, таке рішення дозволяє обмежити VI , за рахунок меншої порогової енергії, поблизу анода. Матеріалом для такого шару може слугувати потрійна сполука GaInAs .

Для проведення досліджень було обрано діоди загальною довжина L яких складає 500-1280 нм. Варізонний шар представлений сполукою $\text{Ga}_z\text{In}_{1-z}\text{As}$ вміст Ga (молярна частка z) змінюється відповідно до нормального розподілу таким чином, щоб ширина забороненої зони зменшувалась в бік анодного контакту і складала різні значення $z(L)$, вміст Ga на катодному контакті є постійним і складає $z(0)=1$. Відповідний розподіл представлено на рис. 2.1. Розглянута залежність розподілу складу створює умови для швидкого набору енергії електронами та переходу в бічні долини зони провідності.

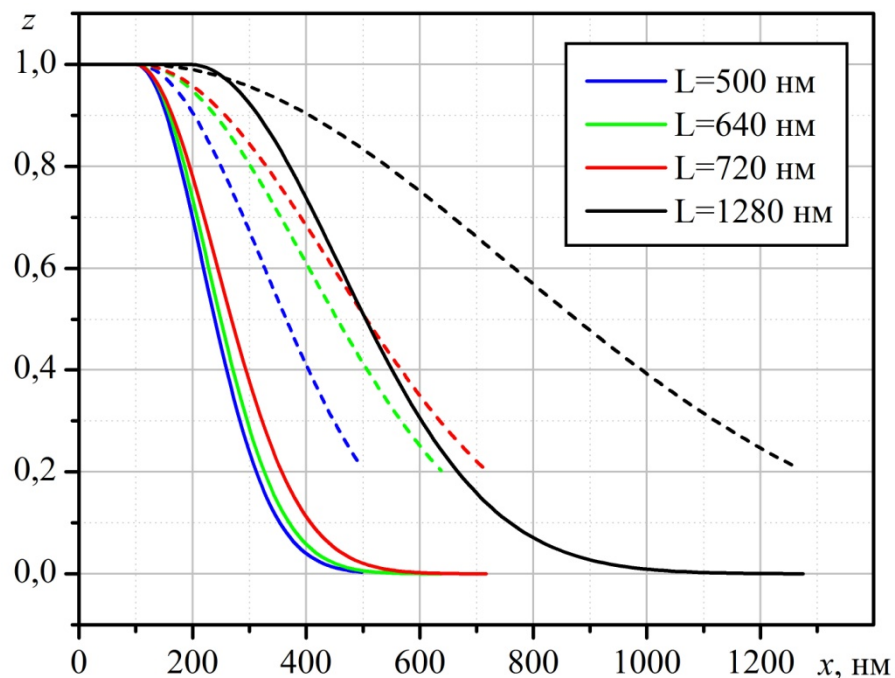


Рисунок 2.1 – Розподіл молярної частки Ga від координати $z(x)$.

Легування діодів представлено структурою n^+-n-n^+ , де n^+ - високолеговані контактні області з концентраціями домішок $N_{d1}=N_{d3}= 10^{23}\text{-}5\cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ та n - активна область, в якій концентрація домішок для діодів довжиною 500-720 нм складає $N_{d2}= 5\cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, а для діодів довжиною 1280 нм змінювалась в межах $2\cdot 10^{22}\text{-}6\cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$. Розподіл домішки від легування для діодів довжиною 1280 нм показано на рис. 2.2, діоди іншої довжини мають подібний профіль.

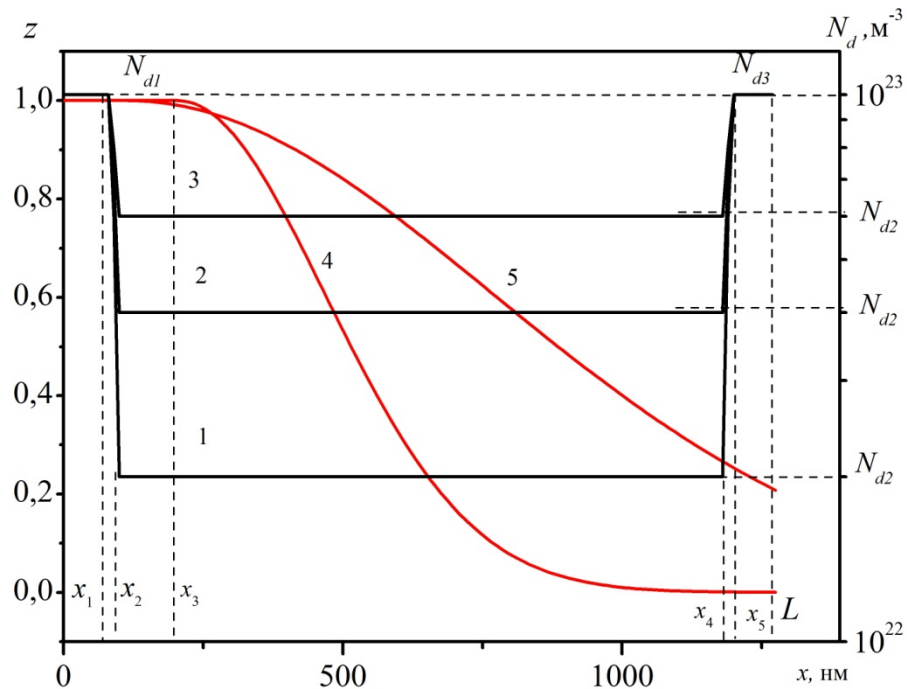


Рисунок 2.2 – Розподіл профілів легування та частки Ga в $\text{Ga}_z\text{In}_{1-z}\text{As}$: 1-3 – розглянуті профілі легування, 4, 5 – частка Ga в залежності від координати.

Дослідження варізонних активних елементів проводилось за допомогою математичного моделювання транспорту носіїв заряду з використанням багаточастинкового методу Монте-Карло. Для цього діод представляє собою двовимірну модель. Перевагою використаного методу є те, що він дає змогу враховувати високочастотні та швидкоплинні випадкові процеси розсіювання та вільного прольоту у структурах розмірів порядку декількох довжин вільного прольоту.

При моделюванні використовувались параметри матеріалів представлені в [26,27], та наведені в таблиці 2.1. Зона провідності представлена нижньою Γ -долиною, та бічними L та X- долинами.

Таблиця 2.1 Параметри сполуки $\text{Ga}_z\text{In}_{1-z}\text{As}$.

Ефективна маса, m_e/m^*	Γ	$1/(0.023+0.037z+0.003z^2)$
	L m_l (m_l)	$0,758-0,232z$ ($3,571+9,692z$)
	X m_l (m_l)	$0,28+0,489z$ ($8,333-3,985z$)
Енергетичні мінімуми долин, eV	Γ	$0,356+0,581z+0,502z^2$
	L	$1,08-0,129z+0,818z^2$
	X	$1,37-0,684z+1,275z^2$
Коефіцієнт непараболічності, eV^{-1}	Γ	$(1-m_\Gamma^*)^2/\epsilon_\Gamma$
	L	$0,65z+0,54(z-1)$
	X	$0,36z+0,9(z-1)$

Закон дисперсії для електронів у всіх долинах враховує непараболічність описується співвідношенням:

$$E_e \left(1 + \alpha E_e\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.1)$$

де α — коефіцієнт непараболічності, k — модуль хвильового вектора електрона.

Для опису дірок використовується зона важких дірок. Це обумовлено в першу чергу тим, що дірки виникають і швидко виходять в анодний контакт, не встигаючи набрати енергію для переходу у інші зони або спричинити УІ. Крім того, зони важких дірок достатньо для визначення порогової енергії УІ. Закон дисперсії цієї зони описується співвідношенням (2.1) за умови $\alpha=0$.

В запропонованій моделі область розрахунку розбивається на сітку з комірками, розмір яких залежить від розмірів розглянутих діодів. Параметри сполуки, які використовуються для руху і розсіювання носіїв, лишаються незмінними в межах комірки. Враховувались основні механізми розсіювання для розглянутої сполуки, а саме: розсіювання на деформаційному потенціалі

(акустичних та оптичних фононах), полярних оптичних фононах, міждолинне розсіювання, сплавне та розсіювання іонізованими домішками. Визначення часу вільного прольоту відбувається відповідно до методу, описаного в розділі 1.

Розподіл потенціалу $\varphi(x, y)$ в розглянутих діодах визначався розв'язком двовимірного рівняння Пуассона, в якому враховувалась анізотропія матеріалу:

$$\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\varepsilon(q_i) \frac{\partial \varphi}{\partial q_i} \right) = L\varphi = \frac{\rho}{\varepsilon_0}. \quad (2.2)$$

Цей розв'язок було отримано за допомогою повного багатосіткового методу, який зарекомендував себе як найбільш швидкий та точний [28]. Розподіл потенціалу для діода довжиною 640 нм представлено на рис.2.3.

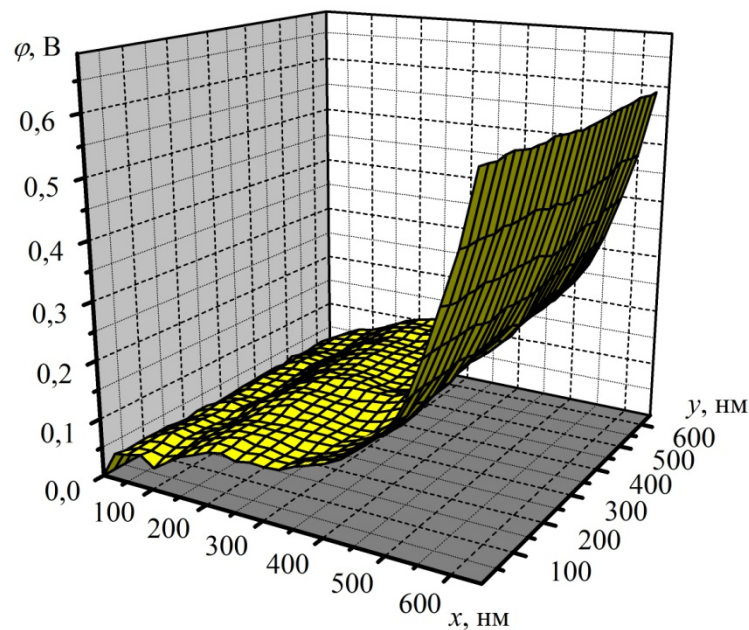


Рисунок 2.3 – Розподіл потенціалу в діоді довжиною 640 нм з $z(L)=0.2$ при напрузі живлення $U=1.3$ В.φ

Вважається, що ударна іонізація обумовлена лише електронами Г- та Х-долин у зв'язку з особливостями зонної структури розглянутої напівпровідникової сполуки, а її порогова енергія залежить від ширини забороненої зони та визначається виразом [29]:

$$E_{th} = \frac{(1+\gamma)}{2\alpha} \left[1 \pm \sqrt{1 - 4\alpha E_g (2+\gamma) / (1+\gamma)^2} \right], \quad (2.3)$$

де $\gamma = m_e^* / m_o^*$ (m_o^* - ефективна маса дірки).

2.2 Статичні характеристики варізонних активних елементів.

Статичні характеристики розглянутих діодів використовуються для аналізу УІ та її впливу на провідність. З цією метою розглядались залежності густини струму від прикладеної напруги. Обмеження виникнення ударної іонізації в прианодній області дозволяє збільшити частотні межі приладів. Проте створення необхідних умов є складною задачею. По-перше за невеликих часток Ga в GaInAs значно зменшується ширина забороненої зони, що призводить до зменшення порогової енергії ударної іонізації. Таким чином ця енергія може бути співрозмірною з енергією міждолинного переходу, що обмежує перехід електронів в бічні долини поблизу анодного контакту. По-друге варто забезпечити міждолинний перехід у бічні долини. Для цього проміжки між мінімумами долин мають бути незначними, і електрони мають набрати достатню енергію. Цю умову можливо реалізувати використовуючи матеріал з високим вмістом галію в сполуці GaInAs поблизу катодного контакту. По-третє варто відзначити обмеження по довжині приладів.

Залежності густини струму від прикладеної напруги для розглянутих діодів показано на рис. 2.4.

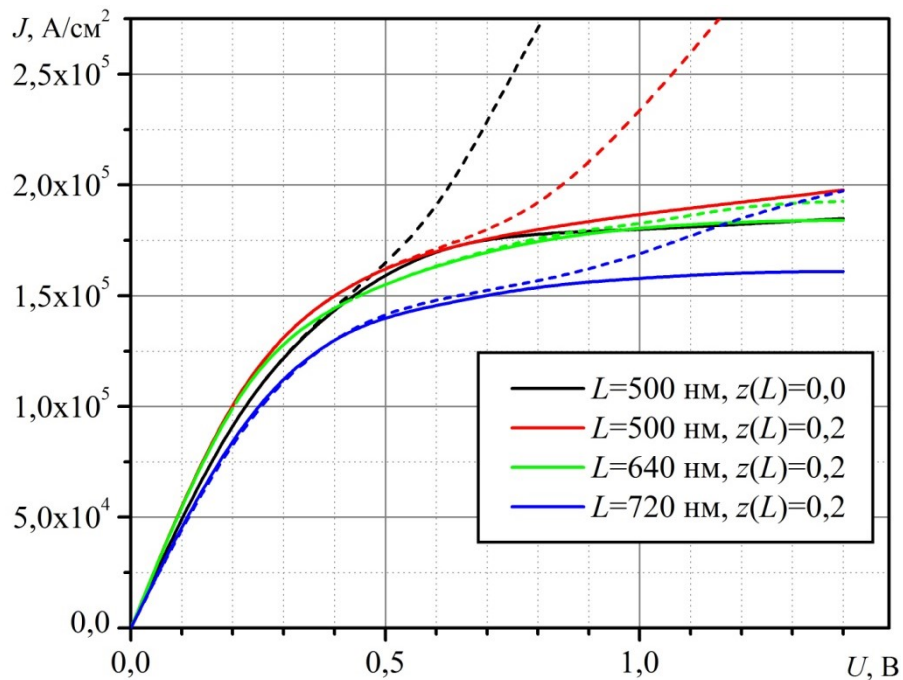


Рисунок 2.4 – Залежність густини струму від прикладеної напруги для діодів різної довжини. Суцільні криві – без урахування ударної іонізації, пунктирні криві – з урахуванням ударної іонізації.

Як видно з наведених на рис. 2.4 характеристик густина струму для діодів з урахуванням ударної іонізації суттєво відрізняється від характеристик без урахування. Особливо це проявляється за високих прикладених напруг., обумовлене меншим порогом УІ, і, як наслідок, її більшою інтенсивністю. Зі збільшенням довжини діодів спостерігається зменшення густини струму.

На рис. 2.5 показані енергетичні діаграми та кількість актів ударної іонізації N , діодів довжиною 500 нм з молярною часткою Ga на анодному контакті $z(L)=0$ при різних напругах зміщення.

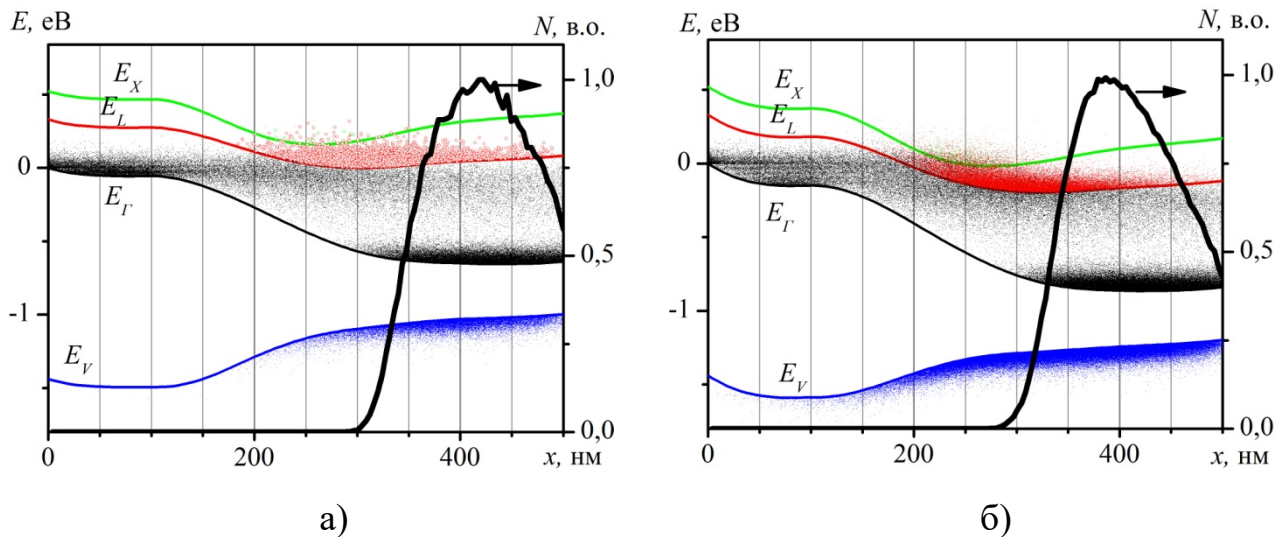


Рисунок 2.5 – Енергетичні діаграми та розподіл умовної кількості актів ударної іонізації діодів довжиною 500 нм з $z(L)=0$ при різних прикладених напругах: а) $U=0.6\text{В}$; б) $U=0.6\text{В}$.

Як видно з наведених на рис. 2.5 розподілів, підвищення напруги призводить до збільшення кількості електронів в Х- долині та зміщенню максимуму ударної іонізації в бік катодного контакту. Енергетичні діаграми при різних розподілах частки $z(x)$ та кількість актів ударної іонізації показано для діодів довжиною 720 нм при напрузі живлення $U=1.3\text{В}$ на рис. 2.6.

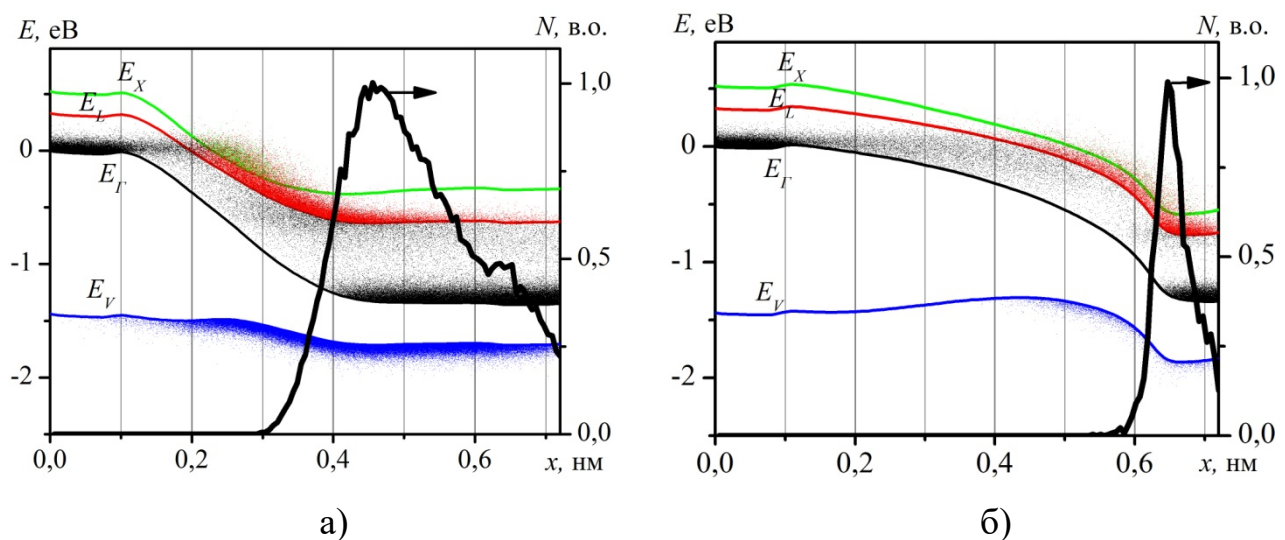


Рисунок 2.6 – Енергетичні діаграми та розподіл умовної кількості актів ударної іонізації діодів довжиною 720 нм при напрузі живлення $U=1.3\text{В}$ зірним розподілом складу: а) $z(L)=0$; б) $z(L)=0.2$.

З рис. 2.6 а) видно, що ударна іонізація виникає в активній області діода, що свідчить про незадовільну умову. Це пояснюється тим, що електрони занадто швидко набирають енергію достатню для ударної іонізації з Γ - долини, проте вони не встигають набрати енергію достатню для виникнення УІ в X - долині. Можливим шляхом покращити умови є більш поступове зменшення вмісту Ga в бік аноду. Це реалізується шляхом перерозподілу складу $z(x)$ відповідно до зображеного на рис 2.1 (пунктирні криві), тобто збільшення вмісту галію поблизу анодного контакту. Енергетична діаграма діода з таким розподілом зображена на рис. 2.6 б). Також варто звернути увагу квазіелектричне поле, що діє на дірки. Відповідно до енергетичної діаграми зображеної на рис. 2.6 а) це поле сприяє накопиченню дірок в активній області і не задовольняє умові для забезпечення виходу дірок через контакт. Розподіл складу, якому відповідає енергетична діаграма рис. 2.6 б) частково задовольняє цій умові, проте не є достатнім. Можливим шляхом покращення є збільшення вмісту Ga в GaInAs поблизу контакту, або збільшення довжини приладу. Енергетичні характеристики діодів довжиною 1280 нм з молярною часткою Ga на анодному контакті $z(L)=0.2$ при напрузі живлення $U=1.3\text{В}$ показані на рис. 2.7.

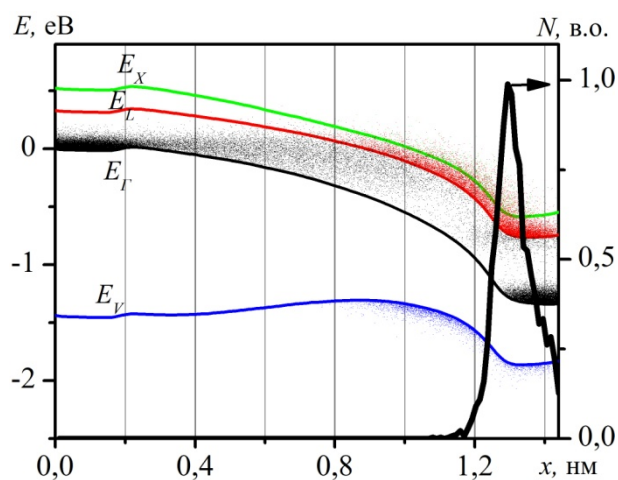


Рисунок 2.7 – Енергетичні діаграми та розподіл умовної кількості активів ударної іонізації діодів довжиною 1280 нм при напрузі живлення $U=1.3\text{В}$, $z(L)=0.2$.

Розгляд роботи діодів протягом достатньо довгого часу, який перевищує період поливань за певних умов демонструє утворення стаціонарного стану. В першу чергу це обумовлено виходом дірок, оскільки час життя носіїв заряду складає $4,5 \cdot 10^{-4}$ с [30], що значно перевищує час моделювання приладів. При збільшенні напруги збільшується інтенсивність ударної іонізації, і як наслідок концентрація носіїв заряду. В такому випадку створюються умови для накопичення дірок в активній області діода, що суттєво впливає на його характеристики. Необхідно дотримуватись умову, коли прикладеної напруги достатньо для міждолинного переходу носіїв заряду, проте ударна іонізація залишається на початковій стадії і не спричиняє значного збільшення концентрації носіїв.

2.3 Частотні характеристики

Для дослідження роботи діода в режимах коливань розглядається робота діода в резонаторі. Вплив резонатора враховується шляхом подачі на діод відповідної напруги у вигляді:

$$U(t) = U_0 + U_1 \sin \omega t, \quad (2.4)$$

де U_0 – напруга зміщення, U_1 – амплітуда змінної напруги (напруга першої гармоніки), що визначається резонатором, ω – частота резонатора. Ефективність визначалася коефіцієнтом корисної дії за формулою:

$$\eta = \frac{P_{\sim}}{P_0} \cdot 100\%, \quad (2.5)$$

де $P_{\sim}$ – потужність, що генерується діодом на частоті резонатора, P – потужність постійного струму. Максимальний коефіцієнт корисної дії генерації досягається оптимізацією значень напруги зміщення та амплітуди першої гармоніки. Для встановлення стаціонарного стану робота діода моделювалась протягом часу, який складав декілька періодів коливань. Для визначення коефіцієнту корисної дії обирались значення на останньому періоді. Отримані залежності ефективності

генерації від частоти для діодів різної довжини з легуванням контактних областей $N_{d1}=N_{d3}=5\cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ активної області $N_{d2}=5\cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ та молярною часткою галію на анодному контакті $z(L)=0.2$ показані на рис. 2.8.

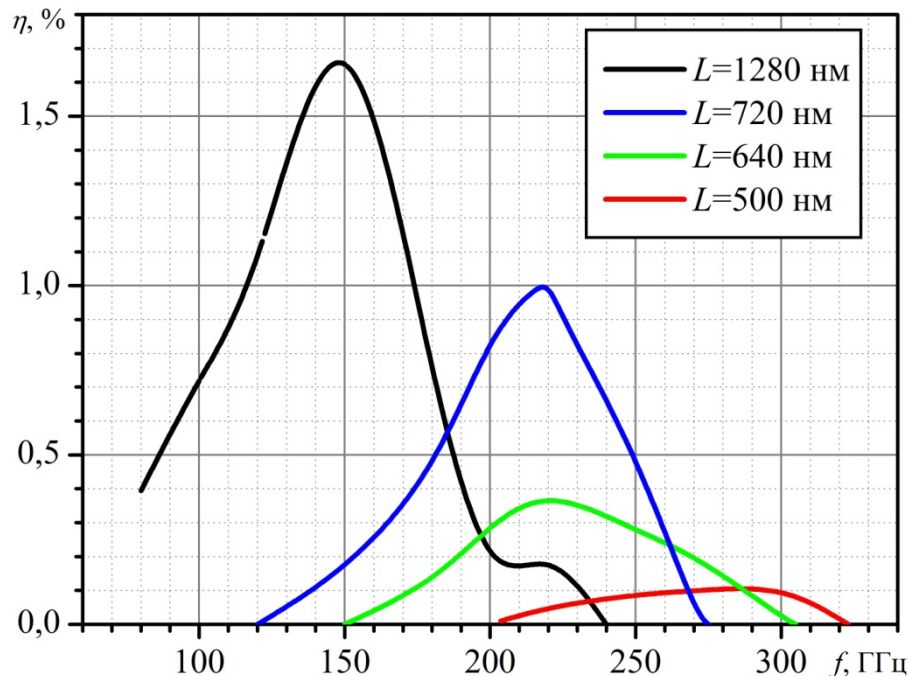


Рисунок 2.8 – Залежність ефективності генерації від частоти для діодів різної довжини з урахуванням ударної іонізації з молярною часткою Ga на анодному контакті $z(L)=0.2$.

В коротких діодах (<720 нм), які мають молярну частку галію $z(L)=0.0$ спостерігається зростання кількості носіїв в наслідок інтенсивної ударної іонізації, і накопичення дірок в активній області. Таким чином в подібних діодах не спостерігається встановлення стаціонарного стану, і, відповідно, ударна іонізація є руйнівним фактором. Представлені на рис. 2.8 характеристики відповідають діодам з розподілом молярної частки галію відповідно до рис. 2.1 (пунктирні криві). Більшість оптимальних значень ефективності генерації було отримано за значень напруг U_0 (2.4) 1.1-1.5 В. За цих значень спостерігається рівновага між накопиченими носіями, та тими, що вийшли. Максимальне значення ККД відповідає діодам довжиною 1280 нм і складає 1.6% на частоті 145

ГГц, максимальна частота відповідає діоду довжиною 500 нм і складає близько 320 ГГц.

Залежності ефективності генерації від частоти для діодів довжиною 1280 нм показані на рис. 2.9. Представлені характеристики для діодів з різним розподілом молярної частки $z(x)$ та рівнем легування контактних областей $N_{d1}=N_{d3}=5\cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ активної області $N_{d2}=5\cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$

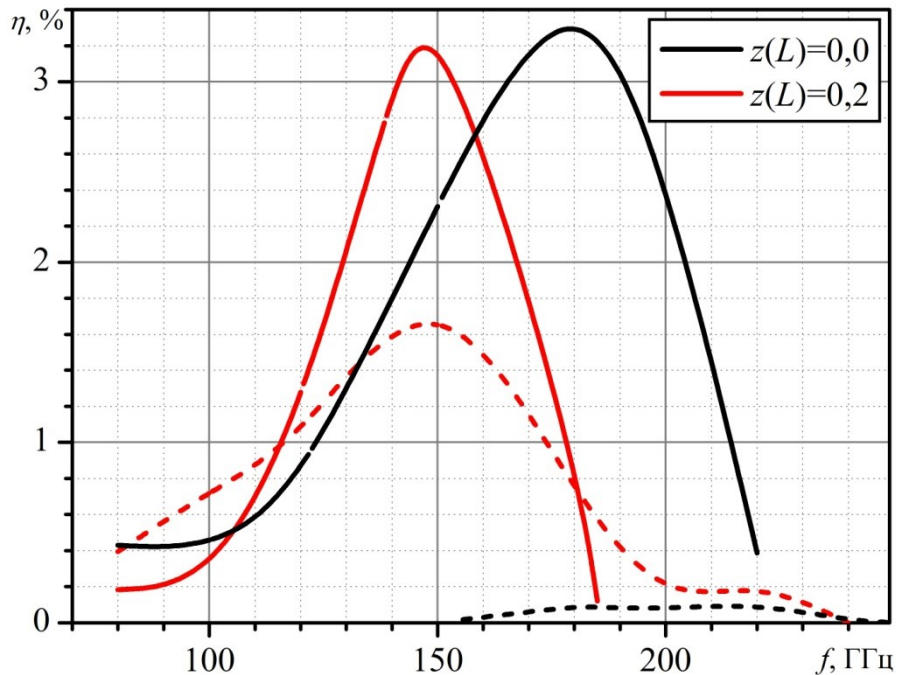


Рисунок 2.9 – Залежність ефективності генерації від частоти для діодів довжиною 1280 нм з різним розподілом матеріалу з урахуванням (пунктирні криві), і без урахування (суцільні криві) ударної іонізації.

З рис 2.9 видно, що у розглянутому діоді ударна іонізація поблизу анодного контакту призводить до розширення частотного діапазону діода. Максимальна частота зміщується в бік вищих. Для розглянутих діодів довжиною 1280 нм зменшення вмісту галію біля анодного контакту підвищує максимальну частоту генерації. Вплив рівня легування областей для діодів довжиною 1280 нм з $z(L)=0.0$ представлено на рис.2.10.

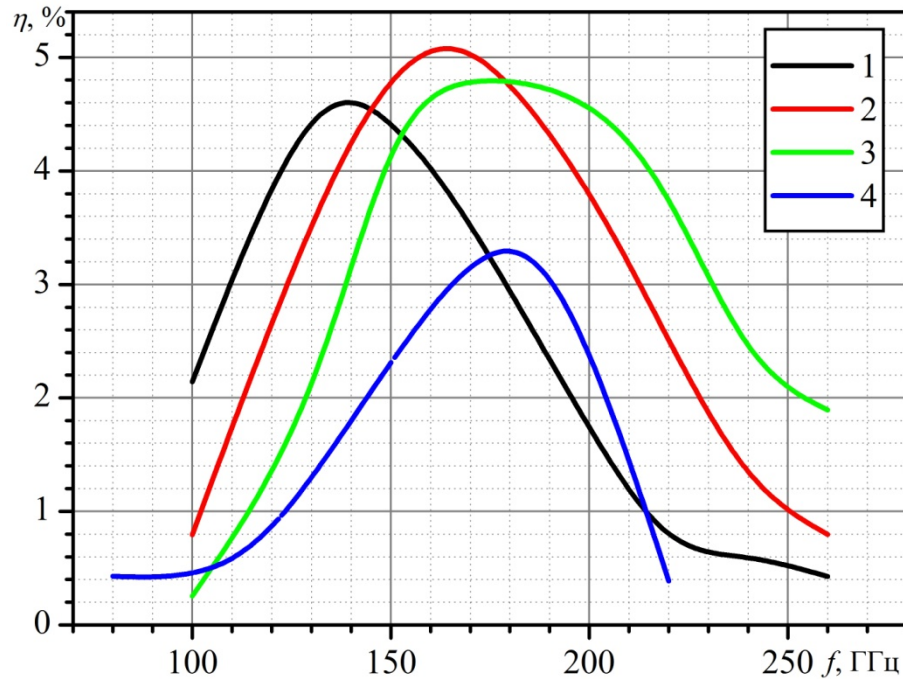


Рисунок 2.10 – Залежність ефективності генерації від частоти для діодів довжиною 1280 нм $z(L)=0$ з урахуванням ударної іонізації та різним легуванням: 1 - $N_{d1}=N_{d3}=10^{23} \text{ м}^{-3}$, $N_{d2}=2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$; 2 - $N_{d1}=N_{d3}=10^{23} \text{ м}^{-3}$, $N_{d2}=4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$; 3 - $N_{d1}=N_{d3}=10^{23} \text{ м}^{-3}$, $N_{d2}=6 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$; 4 - $N_{d1}=N_{d3}=5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, $N_{d2}=5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$.

Наведені на рис. 2.10 залежності свідчать про існування оптимальної концентрації як для максимальної ефективності, так і для діапазону частот. Максимальна ефективність перевищує 5% і відповідає кривій 2. Збільшення концентрації електронів в активній області призводить до збільшення максимального значення частоти. Таким чином залежності показують вплив концентрації домішок в анодному контакті на ефективність генерації. За високих концентрацій цієї області анодний контакт подібний до омичного, і, відповідно квазіелектричне поле, яке діє на дірки не сприяє їх виходу. Розподіл відносної кількості актів іонізації ударів у діоді та розподіл відносної концентрації електронів у L – долинах показано на рис. 2.11.

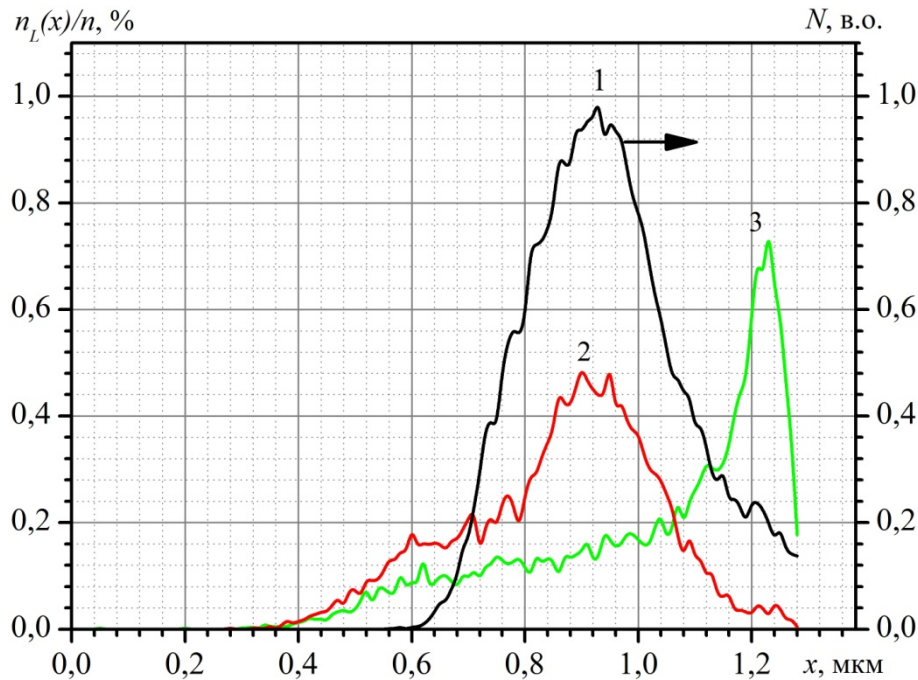


Рисунок 2.11 – Розподіл відносної кількості актив ударної іонізації в діоді – 1, відносної кількості електронів у бічній долині – 2, 3: 2 – без ударної іонізації; 3 – з ударною іонізацією, при $U_0=1,5$ В, $U_1=0,6$ В.

Залежність відносної концентрації електронів у L-долинах від координати наведена також для випадку без ударної іонізації. Як видно, збільшення кількості актив ударної іонізації повністю корелює зі зменшенням кількості електронів у верхніх L-долинах. Всі ці результати підтверджують аргумент, що ударна іонізація може сильно впливати на процеси релаксації в діоді. Причому цей вплив відбувається як безпосередньо (релаксація в X-долинах), так і опосередковано (релаксація в L-долинах) через високу інтенсивність міждолинного розсіювання.

ВИСНОВКИ

Визначено актуальну проблему створення компактних генераторів електромагнітних коливань. Було проаналізовано сучасні дослідження та розробки в цьому напрямку. Встановлено, що підвищення граничних частот та коефіцієнту корисної дії можливо за рахунок модифікації класичних приладів, робота яких оснований на міждолинному переносі електронів, за рахунок їх модифікації (матеріалів, профілю легування, розподілу матеріалу, розмірів, тощо).

Для дослідження було розроблено математичну модель активних елементів, які містять області зі змінним складом матеріалу - варізонні шари. Ця модель основана на використанні багаточастинкового методу Монте-Карло, який себе добре зарекомендував для задач, пов'язаних із моделюванням кінетичні процесів в напівпровідниках. Було враховано всі актуальні механізми розсіювання.

Для дослідження роботи діода в режимах коливань розглядалась робота діода в резонаторі. Отримані залежності ефективності генерація для діодів з різним профілем легування.

Показано перспективність використання варізонних діодів з МПЕ для роботи в ТГц діапазоні до 300 ГГц.

Досліджено вплив УІ на ефективність генерації діодів різної довжини і різної структури. УІ може призвести до збільшення граничних частот за рахунок релаксації енергії електронів бічних долин. Проте для коротких зразків, ударна іонізація в більшості випадках показує деструктивний вплив.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Köhler R., Tredicucci A., Beltram F., Beere H., Linfield E., Davies A. et al. Terahertz semiconductor-heterostructure laser. *Nature*. 2002. Vol. 417. P. 156–159.
2. Suzuki S., Asada M., Teranishi A., Sugiyama H., Yokoyama H. Fundamental oscillation of resonant tunneling diodes above 1 THz at room temperature. *Applied Physics Letters*. 2010. Vol. 97, No. 24. P. 242102-1–242102-3.
3. Izumi R., Suzuki S., Asada M. 1.98 THz resonant-tunneling-diode oscillator with reduced conduction loss by thick antenna electrode. In: 2017 42nd International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. Cancun, Mexico, 2017. P. 788–791.
4. Lyakh A., Maulini R., Tsekoun A., Go R., Pflug C., Diehl L. et al. 3 W continuous-wave room temperature single-facet emission from quantum cascade lasers based on nonresonant extraction design approach. *Applied Physics Letters*. 2009. Vol. 95, No. 14. P. 141113-1–141113-3.
5. Zhang S.Y., Revin D.G., Cockburn J.W., Kennedy K., Krysa A.B., Hopkinson M. $\lambda \sim 3.1$ mm room temperature InGaAs/AlAsSb/InP quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*. 2009. Vol. 94, No. 3. P. 031106-1–031106-3.
6. H.-J. Song, T. Nagatsuma, “Handbook of Terahertz Technologies: Devices and Applications,” Pan Stanford USA, Apr. 15, 2015.
7. Eisele H., Naftaly M., Fletcher J.R., Steenson D.P., Stone M.R. The Study of Harmonic-Mode Operation of GaAs TUNNETT Diodes and InP Gunn Devices Using a Versatile Terahertz Interferometer. In: Proceedings of the 15th International Symposium on Space Terahertz. Northampton, United States, 2004. P. 336–400.
8. Eisele H. Third-Harmonic Power Extraction From InP Gunn Devices up to 455 GHz. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*. 2009. Vol. 19, No. 6. P. 416–418.

9. García S., Pérez S., Íñiguez-De-La-Torre I., Mateos J., González T. Comparative Monte Carlo analysis of InP- and GaN-based Gunn diodes. *Journal of Applied Physics*. 2014. Vol. 115, No. 4. P. 44510-1–44510-7.
10. Papageorgiou V., Khalid A., Li C., Cumming D.R.S. Cofabrication of Planar Gunn Diode and HEMT on InP Substrate. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2014. Vol. 61, No. 8. P. 2779–2784.
11. H. Morkoc, “Handbook of Nitride Semiconductors and Devices,” Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2009, 1311p.
12. Barry E.A., Sokolov V.N., Kim K.W., Trew R.J. Terahertz generation in GaN diodes in the limited space-charge accumulation mode. *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103, No. 12. P. 126101-1–126101-3.
13. Arkusha Yu.V., Prokhorov E.D., Storozhenko I.P. In_xGa_{1-x}As/GaAs GaAs heterocathode in a GaAs millimeter-wave-range gunn diode. *Radiotekhnika i Elektronika*. 2000. Vol. 45, No. 4. P. 508–510.
14. Prykhodko K.H., Zozulia V.O., Botsula O.V. Graded Band Gap InGaAs Diodes for Terahertz Applications. In: *Proceedings 2017 IEEE International Young Scientists Forum on Applied Physics and Engineering (YSF–2017)*. Lviv, Ukraine, 2017. P. 291–294.
15. Ridley B.K. Anatomy of the transferred-electron effect in III-V semiconductors. *Journal of Applied Physics*. 1995. Vol. 48, No. 2. P. 754–764.
16. Eisele H., Haddad G.I. High-performance InP Gunn devices for fundamental-mode operation in D-band. *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*. 1995. Vol. 5, No. 11. P. 385–387.
17. Eisele H., Kamoua R. Submillimeter-wave InP Gunn devices. *IEEE Transactions on Microwave Theory Tech*. 2004. Vol. 52, No. 10. P. 2371–2378.
18. Infineon SiGe IC used in Bosch automotive radar system. *Semiconductor Today*, 2nd Dec. 2008.
19. Micovic et al. W-Band GaN MMIC with 842 mW Output Power at 88 GHz. In: *IEEE Int. Microwave Symposium Dig., IMS 2010*. CA, May 2010.

20. Farrington N., Norton P., Carr M., Sly J., Missous M. A ruggedly packaged D-Band GaAs Gunn diode with hot electron injection suitable for volume manufacture. In: IEEE Int. Microwave Symposium Dig., IMS 2008. Atlanta, June 2008. P. 281–284.
21. Chang Y-W., Johnson M. Portable concealed weapon detection using millimetre-wave FMCW radar imaging. Final report for the National institute of justice office of science and technology, 2001.
22. Dyadchenko A.V., Mishnyov A.A., Polyanski N.E. Broadband GaAs-oscillators of mm-range [utilizing Gunn diodes]. In: The Fifth International Kharkov Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter, and Submillimeter Waves. Kharkov, Ukraine, 2004. Vol. 2. P. 543–545.
23. Farrington N., Norton P., Carr M., Sly J., Missous M. A ruggedly packaged D-Band GaAs Gunn diode with hot electron injection suitable for volume manufacture. In: IEEE Int. Microwave Symposium Dig., IMS 2008. Atlanta, June 2008. P. 281–284.
24. Priestley N., Farrington N. Millimetre wave Gunn diode technology and applications. In: ARMMS 2010 Conference.
25. Kaneda T., Takanashi H. Avalanche Built-Up Time of the Germanium Avalanche Photodiode. Japanese Journal of Applied Physic. 1973. Vol. 12, No. 7. P. 1091–1092.
26. Adachi S. Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors // Chichester: Wiley, 2009. 424 p.
27. Fischetti M.V. Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures-Part I: Homogeneous Transport. IEEE Transactions on Electron Devices. 1991. Vol. 38, No. 3. P. 634–649.
28. Botsula O.V., Prykhodko K.H., Zozulia V.O. Monte Carlo Modeling of the Diodes with Lateral Resonant Tunneling Border. In: Proceedings of the 9-th International Conference on Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals (UWBUSIS-2018). Odessa, Ukraine, 2018. P. 256–259.

29. Brennan K., Mansour N. Monte Carlo calculation of electron impact ionization in bulk InAs and HgCdTe. *Journal of Applied Physics*. 1991. Vol. 69, No. 11. P. 7844–7847.

30. M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M.S. Shur, *Elementary Semiconductors and A₃B₅ Compounds: Si, Ge, C, GaAs, Gap, GaSb, InAs, InP, InSb*, in Handbook Series of Semiconductor Parameters, vol. 1, Singapore: World Scientific, 1996, 232 p.