

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н. Э. БАУМАНА

ФАКУЛЬТЕТ «РАДИОЭЛЕКТРОНИКА И ЛАЗЕРНАЯ ТЕХНИКА»
КАФЕДРА «ТЕХНОЛОГИИ ПРИБОРОСТРОЕНИЯ»



ВКР
НА ТЕМУ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕГРАДАЦИИ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Выполнил:

ПРОХОРОВ М. РЛ6-82

Руководитель:

к.т.н. доц. ДАНИЛОВ И.И.

Содержание

Введение	4
1 Теоретическая часть	5
1.1 Полупроводник	5
1.1.1 Зонная структура	5
1.1.2 Зонная диаграмма	6
1.1.3 Плотность состояний	7
1.1.4 Концентрация носителей заряда	8
1.1.4.1 Собственный полупроводник	9
1.1.4.2 Легированный полупроводник	10
1.2 Размерное квантование	12
1.2.1 Трёхмерное тело	13
1.2.2 Двухмерное тело	13
1.2.3 Одномерное тело	14
1.3 Гетероструктура	15
1.3.1 Зонная диаграмма гетероперехода	15
1.3.2 Резонансно–туннельная гетероструктура	16
1.3.3 Резонансно–туннельная гетероструктура на основе $Al_xGa_{1-x}As$	17
1.4 Деградация приборов на основе гетероструктур	18
1.5 Диффузия	18
1.5.1 Законы Фика	18
1.5.2 Механизмы диффузии	19
1.5.3 Коэффициент диффузии	19
1.6 Плотность тока через ГС	21
1.6.1 Уравнение Шредингера	22
1.6.2 Учёт распределения заряда	23
2 Математический аппарат для моделирования	26
2.1 Метод конечных разностей	26
2.2 Метод конечных разностей для решения одномерного нестационарного уравнения диффузии	28
2.2.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации	28
2.2.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации	36

2.3	Метод конечных разностей для расчета токоперенос через гетероструктуру	40
2.4	Метод конечных разностей для самосогласованного решение системы Шредингера–Пуассона	44
3	Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$	51
3.1	Исследование параметров ямы	51
3.1.1	Исследование глубины ямы	52
3.1.1.1	Прозрачность РТГС	52
3.1.1.2	ВАХ РТГС	53
3.1.2	Исследование ширины ямы	53
3.1.2.1	Прозрачность РТГС	54
3.1.2.2	ВАХ РТГС	55
3.1.3	Вывод	55
3.2	Исследование парметров барьеров	56
3.2.1	Исследование ширины барьеров	56
3.2.1.1	Прозрачность РТГС	56
3.2.1.2	ВАХ РТГС	56
3.2.2	Вывод	57
3.3	Исследование параметров спейсеров	58
3.3.1	Исследование влияния размеров спейсера	58
3.3.1.1	Прозрачность РТГС	58
3.3.1.2	ВАХ РТГС	59
3.3.1.3	Учет перераспределения зарядов	59
3.3.2	Вывод	60
4	Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$	61
4.1	Диффузионное расплытие активной области	62
4.1.1	Вывод	64
4.2	Диффузия легирующей примеси	65
	Заключение	67
	Список использованных источников	68
A	Диффизия в закрытой и открытой системе	70

Введение

Цель работы:

- а) Изучение приборов на основе гетероструктур;
- б) Изучение математического аппарата для моделирования физических процессов;
- в) Изучение процессов деградации гетероструктур.

Задача работы:

- а) Исследовать влияния основных параметров РТГС на ВАХ;
- б) Моделирование токопереноса;
- в) Моделирование диффузии;
- г) Получить модель описывающую процессы деградации в гетероструктурах.

1 Теоретическая часть

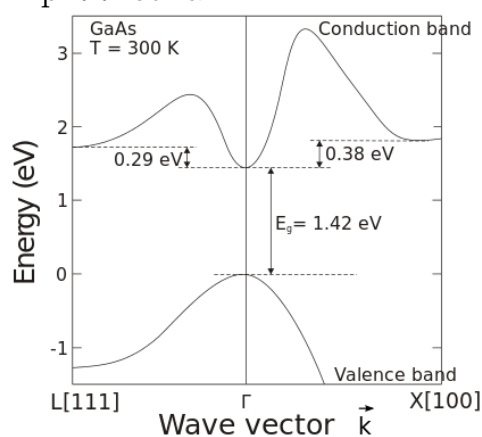
1.1 Полупроводник

Рассматривая полупроводники, мы будем говорить о кристаллических телах. Для анализа таких тел необходимо решить уравнение Шредингера для нахождения, к примеру, энергических уровней. В целях упрощения задачи и сохранения наиболее характерных черт системы в Зонной теории вводится ряд допущений [1]:

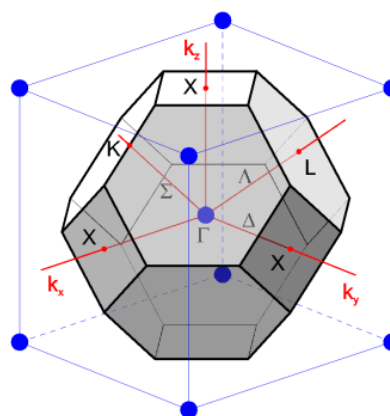
- а) Атомные ядра являются неподвижными источниками поля, действующего на электроны;
- б) Расположения атомных ядер в пространстве является строго периодичным: они располагаются в узлах идеальной кристаллической решетки;
- в) Взаимодействие электронов друг с другом заменяется некоторым внешним полем.

1.1.1 Зонная структура

В следствии симметрии и периодичности идеального кристалла по различным направлениям и теории Блоха, для описания дисперсии электронов используют зоны Бриллюэна. Так как закон дисперсии периодичен на всем кристалле, для его описания можно использовать только первую зону Бриллюэна.



а)



б)

Рисунок 1.1 — а) Зонная структура *GaAs*, б) Элементарная ячейка типа Цинковой обманки

1.1.2 Зонная диаграмма

Для наглядного представления и сравнения полупроводников и других материалов удобно использовать зонную диаграмму (рис. 1.2).

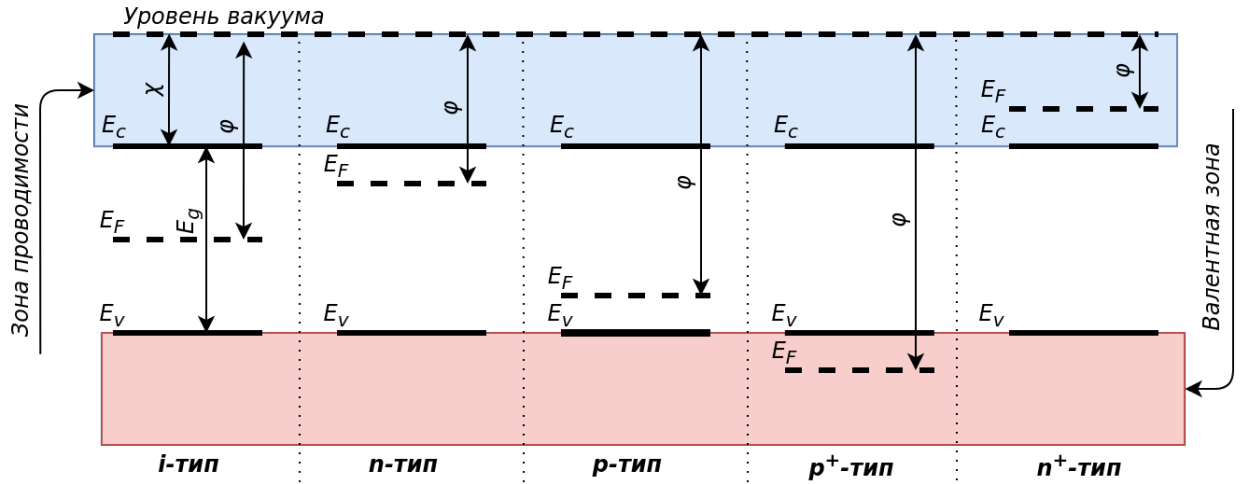


Рисунок 1.2 — Характерный вид зонной диаграммы для различных материалов

где E_c — дно зоны проводимости (ЗП);
 E_v — потолок валентной зоны (ВЗ);
 E_F — уровень (квазиуровень) Ферми;
 E_g — запрещенная зона (ЗЗ);
 χ — электронное сродство;
 φ — работа выхода.

Параметры зонной структуры $Al_xGa_{1-x}As$ приведены в табл. 1.1 [2].

Таблица 1.1 — Основные параметры $Al_xGa_{1-x}As$

Параметр	$Al_xGa_{1-x}As$
Кристаллическая структура	Типа цинковой обманки
Постоянная решетки $a[nm]$	$0.56533 + 0.00078x$
$E_g^{\Gamma}[eV], x < 0.45$	$1.424 + 1.247x$
$E_g^{\Gamma}[eV], x > 0.45$	$1.656 + 0.215x + 0.143x^2$
m_e^{Γ}	$0.067 + 0.083x$
m_{lh}	$0.082 + 0.071x$
$N_{atoms}[1/sm^{-3}]$	$(4.42 - 0.17x)10^{22}$

1.1.3 Плотность состояний

Для вычисления числа электронов в зоне проводимости (ЗП) необходимо знать количество разрешенных состояний в ЗП. Для этого рассмотрим фазовое пространство, в котором объем $V_{\text{фаз}}$ занимаемый одним электроном [3]:

$$V_{\text{фаз}} = V_{xyz} V_{p_x p_y p_z}; \quad (1.1)$$

$$V_{xyz} = xyz; \quad (1.2)$$

$$V_{p_x p_y p_z} = \frac{4}{3} \pi p^3; \quad (1.3)$$

$$p = \sqrt{2mE}, \quad (1.4)$$

где V_{xyz} — объем в координатном пространстве;

$V_{p_x p_y p_z}$ — объем в импульсном пространстве.

Согласно закону Гейзенберга:

$$\Delta p_x \Delta x \geq h, \quad (1.5)$$

где h — постоянная Планка.

Тогда для трехмерного движения неопределенность составит:

$$\Delta p_x \Delta x \Delta p_y \Delta y \Delta p_z \Delta z \geq h^3 \quad (1.6)$$

Из (1.1), (1.2), (1.3), (1.6) получим полное число электронов ($N(p)$) в единичном объеме:

$$N(p) = 2 * \frac{V_{\text{фаз}}}{V_{xyz} h^3} = \frac{8\pi p^3}{3h^3} \Rightarrow \quad (1.7)$$

$$\Rightarrow N(E) = \frac{8\pi(2mE)^{3/2}}{3h^3}. \quad (1.8)$$

Двойка появилась из-за того, что электрон имеет квантовое спиновое число равное $\pm 1/2$, и два электрона с разным спином могут занимать одно состояние.

Плотность разрешённых состояний ($g(E)$) — число электронов в единице объёма с энергией E , приходящихся на единичный интервал энергии. По определению:

$$g(E) = \frac{d}{dE} N(E) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^2} \sqrt{E}. \quad (1.9)$$

1.1.4 Концентрация носителей заряда

Так как электроны имеют полуцелый спин (фермионы) — они подчиняются статистике Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}}, \quad (1.10)$$

где E — энергия электрона;

E_F — уровень Ферми;

k_B — постоянная Больцмана;

T — температура;

$k_B T$ — «опорный» потенциал.

Физический смысл статистики Ферми-Дирака: вероятность электрона иметь энергию равную E .

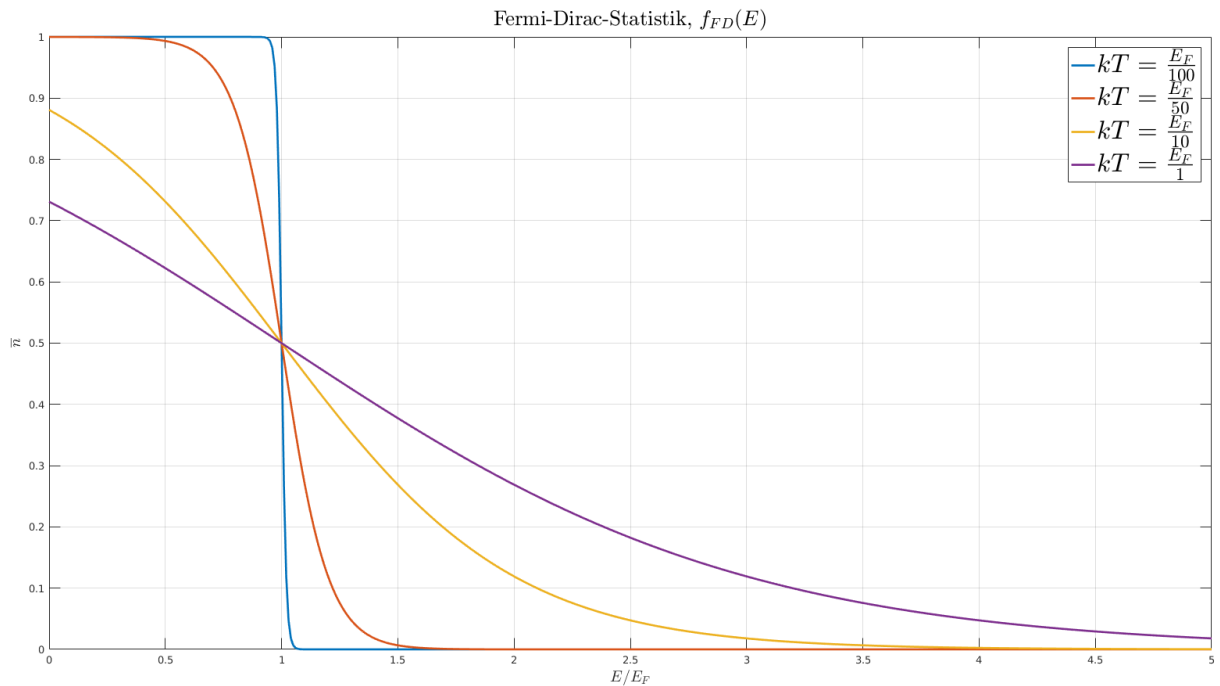


Рисунок 1.3 — Статистика Ферми-Дирака

Концентрацию электронов (n) зависит от плотности состояний ($g(E)$) в ЗП и функции распределения электронов по энергиям ($f(E)$):

$$n = \int_0^{+\infty} g(E) f(E) dE = \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{E}}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} dE, \quad (1.11)$$

где \hbar — постоянная Дирака.

1.1.4.1 Собственный полупроводник

В случае собственного проводника, когда уровень Ферми лежит в центре ЗЗ, и полупроводник является невырожденным расчет интеграла (1.11) упрощается в приближении идеального электронного газа (Максвелла-Больцмана):

$$\begin{aligned} n &= \int_0^{+\infty} g(E) f_{FD}(E) dE \approx \int_0^{+\infty} g(E) f_{MB}(E) dE = \\ &= \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}} \int_0^{+\infty} E^{1/2} e^{-E} dE = \frac{m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^{3/2} \hbar^3} e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}}; \end{aligned}$$

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}}; \quad (1.12)$$

$$N_c = 2 \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad (1.13)$$

где N_c — эффективная плотность состояний в ЗП;

E_c — энергия дна ЗП;

m — эффективная масса электрона в ЗП.

Проведя аналогичные рассуждения для дырок в ВЗ получим:

$$p = N_v e^{-\frac{E_F - E_v}{k_B T}}; \quad (1.14)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad (1.15)$$

где N_v — эффективная плотность состояний в ВЗ;
 E_v — энергия потолка ВЗ;
 m — эффективная масса дырки в ВЗ.

Так как в чистом (*intrinsic*) полупроводнике количество дырок равно количеству, перемножив обе части получим:

$$np = n_i^2 = N_c N_v e^{-\frac{E_F - E_v}{k_B T}} e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}} = N_c N_v e^{-\frac{E_c - E_v}{k_B T}}; \quad (1.16)$$

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}, \quad (1.17)$$

где n_i — концентрация собственных носителей заряда;
 E_g — ширина ЗЗ;
 N_v — эффективная плотность состояний в ВЗ;
 N_c — эффективная плотность состояний в ЗП.

Формула (1.16) называется «законом действующий масс».

1.1.4.2 Легированный полупроводник

При легировании полупроводника донорной или акцепторной примесью, уровень Ферми подымается к дну ЗП или опускается к потолку ВЗ соответственно.

Если разница между дном ЗП (потолком ВЗ) и уровнем Ферми превышает несколько энергий теплового колебания и уровень Ферми лежит в ЗЗ, то полупроводник невырожденный:

$$E_c - E_F > 3k_B T; \quad (1.18)$$

$$E_F - E_v > 3k_B T. \quad (1.19)$$

Тогда приближенное значение квазиуровня Ферми для невырожденного полупроводника можно рассчитать[3]:

$$E_F^n = E_F^i + k_B T \ln \frac{N_D}{n_i}; \quad (1.20)$$

$$E_F^p = E_F^i - k_B T \ln \frac{N_A}{n_i}, \quad (1.21)$$

где E_F^n — уровень Ферми невырожденного полупроводника n -типа;
 E_F^p — уровень Ферми невырожденного полупроводника p -типа;
 E_F^i — уровень Ферми невырожденного полупроводника i -типа;

Если полупроводник вырожден, положение уровня Ферми находится, как решение уравнения (1.11). Приближенное положение уровня Ферми можно найти[1]:

$$E_F^n = \frac{(3\pi^2 N_D)^{2/3} \hbar^2}{2m}; \quad (1.22)$$

$$E_F^p = \frac{(3\pi^2 N_A)^{2/3} \hbar^2}{2m}, \quad (1.23)$$

где E_F^n — уровень Ферми вырожденного полупроводника n -типа;
 E_F^p — уровень Ферми вырожденного полупроводника p -типа.

1.2 Размерное квантование

Квантоворазмерный эффект (квантовый размерный эффект) — изменение термодинамических и кинетических свойств кристалла, когда хотя бы один из его геометрических размеров становится соизмеримым с длиной волны де Бройля электронов. Этот эффект связан с квантованием энергии носителей заряда, движение которых ограничено в одном, двух или трёх направлениях.

Волны де Бройля — волны вероятности, определяющие плотность вероятности обнаружения объекта в заданной точке конфигурационного пространства. В соответствии с принятой терминологией говорят, что волны де Бройля связаны с любыми частицами и отражают их волновую природу.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\hbar k} = \frac{h}{mv}; \quad (1.24)$$

$$\psi(x, t) = A * e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = A * e^{i(kx - \omega t)}. \quad (1.25)$$

В зависимости от размерности пространства электронный газ имеет различный закон дисперсии, плотность состояний и эффективную плотность состояний, см табл. 1.2 [4].

Таблица 1.2 — Плотность состояний и эффективная плотность состояний
для низкоразмерных систем

Размерность	Закон дисперсии	$g(E)$	$G(E)$
3D, bulk	$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$	$\frac{2^{\frac{1}{2}}m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3}E^{\frac{1}{2}}$	$\frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3}E^{\frac{3}{2}}$
2D, well	$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2mL^2}$	$\frac{m}{\pi\hbar^2}$	$\frac{m}{\pi\hbar^2}E$
1D, wire	$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2) + \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2}\right)$	$\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}\pi\hbar}E^{-\frac{1}{2}}$	$\frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar}E^{\frac{1}{2}}$
0D, dot	$\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2}\right)$	$2\delta E$	2

1.2.1 Трехмерное тело

Рассмотрим 3D кристалл (bulk) на рис. 1.4:

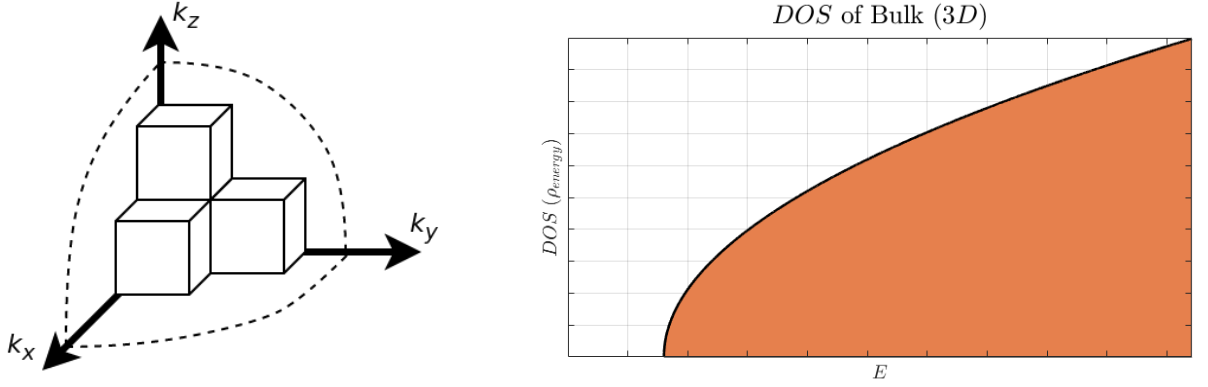


Рисунок 1.4 — k -пространство (шар)

Число состояний частицы $G(E)$ и плотность состояний $g(E)$, энергия которых не превышает некоторого фиксированного значения E , находятся из формул:

$$G(E) = \frac{V_{sphere}}{V_{single-state}} = J_z \frac{\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi k^3}{\frac{\pi^3}{V}} = \frac{k^3 V}{3\pi^2} = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V}{3\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{3}{2}};$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$g(E) = \frac{dG(E)}{dE} = \frac{(2E)^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} V.$$

1.2.2 Двухмерное тело

Рассмотрим 2D кристалл (well) на рис. 1.5.

$$G(E) = \frac{V_{circul}}{V_{single-state}} = J_z \frac{\frac{1}{4} \pi k^2}{\frac{\pi^2}{S}} = \frac{k^2}{2\pi} = \frac{mS}{\pi \hbar^2} E;$$

$$g(E) = \frac{dG(E)}{dE} = \frac{m}{\pi \hbar^2} S.$$

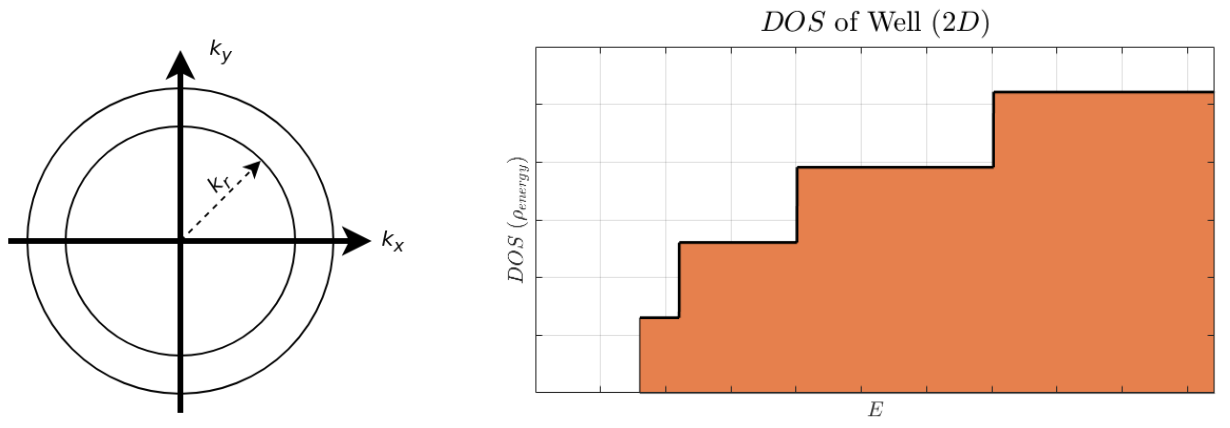


Рисунок 1.5 — k-пространство (круг)

1.2.3 Одномерное тело

Рассмотрим 1D кристалл (wire) на рис. 1.6:

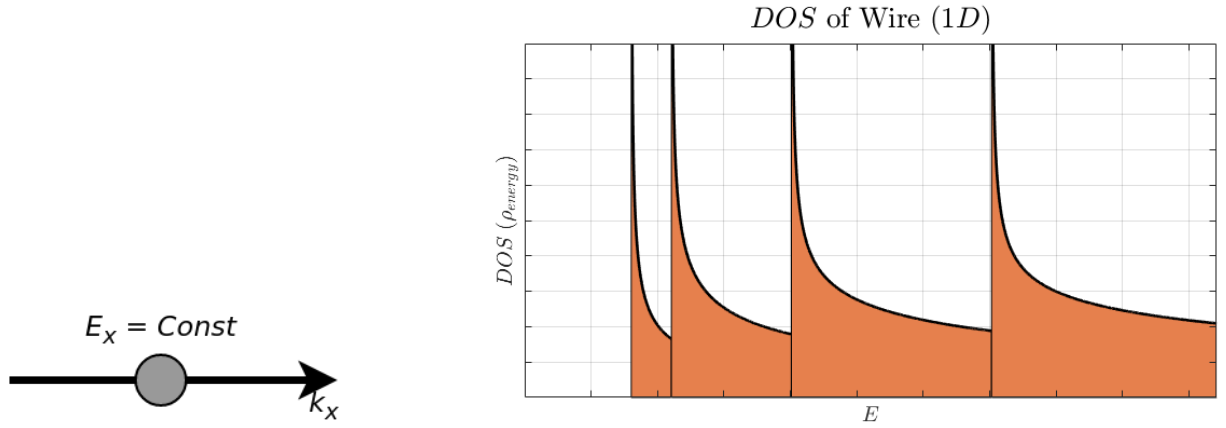


Рисунок 1.6 — k-пространство (линия)

$$G(E) = \frac{V_{line}}{V_{single-state}} = J_z \frac{k}{\frac{\pi}{L}} = \frac{kL}{\pi} = \frac{\sqrt{2mL}}{\pi\hbar} E^{\frac{1}{2}};$$

$$g(E) = \frac{dG(E)}{dE} = \frac{\sqrt{mL}}{\sqrt{2\pi}\hbar} E^{-\frac{1}{2}}.$$

J_z — определяет число состояний не связанных с перемещением частицы в пространстве (например, число возможных проекций спина). В нашем случае, для электрона $J_z = 2$.

1.3 Гетероструктура

Гетероструктура — полупроводниковая структура с несколькими гетеропереходами (ГП).

Гетеропереход — контакт двух различных по химическому составу монокристаллических или аморфных полупроводников.

Необходимое условие образования ГП — совпадающие постоянные кристаллических решетки, образующими монокристалл, однородный в контакте, кристалл. Наиболее распространенные полупроводники для построения ГС:

- а) $GaAs-AlAs$;
- б) $GaN-AlN$;
- в) $GaSb-AlSb-InAs$;
- г) $GaAs-Ge$.

1.3.1 Зонная диаграмма гетероперехода

Зонная диаграмма позволяет наглядно сравнивать два и более различных полупроводника и на основе правила Андерсона получать приближенный вид зонной структуры ГП и ГС. На рис. ?? показан вид двух различных полупроводников до и после контакта [5].

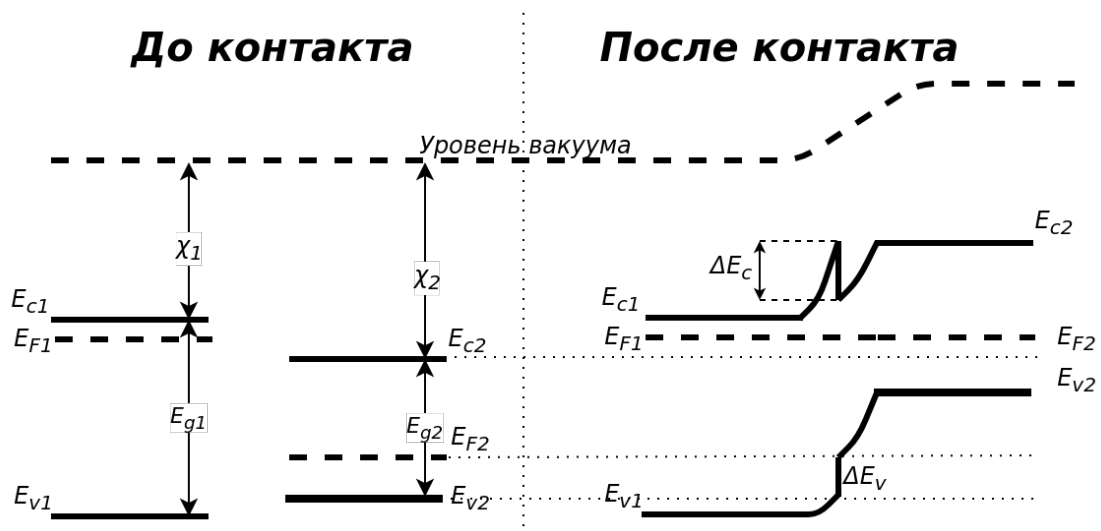


Рисунок 1.7 — Зонная диаграмма п/п до и после контакт

Правило Андресона: необходимо отсчитать в сторону уменьшения от нулевой энергии свободного электрона в вакууме интервалы энергии,

равные сродству соединяемых материалов к электрону, эти уровни дадут положения дна зоны проводимости.

Правило Андерсона является хорошим приближением. Для точного построения профиля зонной структуры необходимо совместное решение системы уравнений Шредингера-Пуассона.

1.3.2 Резонансно–туннельная гетероструктура

Резонансно–туннельная гетероструктура (РТГС) — это ГС, токоперенос в которой осуществляется благодаря эффекту резонансного туннелирования [5], [6].

РТГС является ярким примером прибора, использующего эффект размерного квантования. Барьеры и ямы на рис. 1.8 образуют потенциальную яму, в которой электронный газ имеет дискретные уровни энергии по одной координате, и как следствие становится 2D электронным газом.

Структурные части РТГС (рис. 1.8):

- а) Омический контакт;
- б) Приконтактная область;
- в) Барьер;
- г) Яма;
- д) Резервуар.

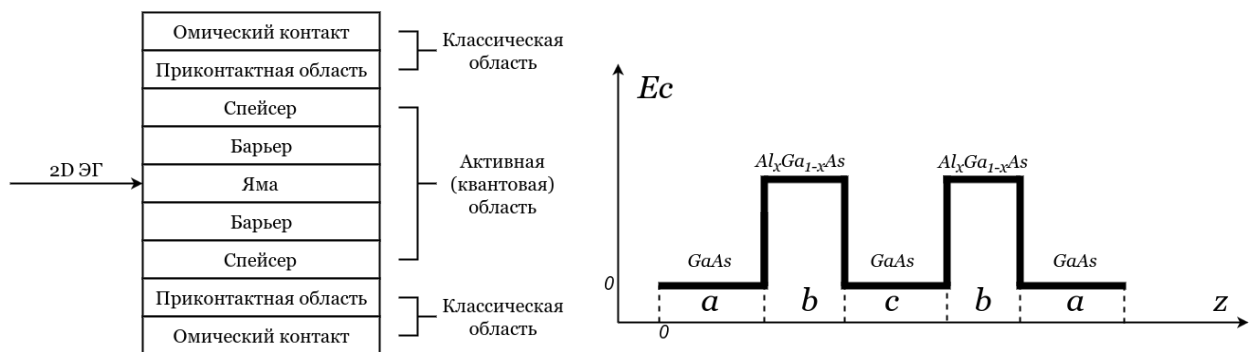


Рисунок 1.8 — Структурная схема устройства с РТГС

Омический контакт выполняет роль связи РТГС с электрической схемой. Величина сопротивления искажает форму ВАХ РТГС, чем оно меньше, тем лучше.

Приконтактная область снабжает РТГС основными носителями заряда. Область сильно легируется основными носителями заряда до вырожденного состояния. Размеры приконтактных областей подбираются так, чтобы концентрация основных носителей заряда приходила к равновесной на их концах.

Спейсеры изготавливаются из чистого полупроводника и предохраняют барьер и яму от проникновения туда легирующей примеси, так же спейсер препятствует накоплению заряда вблизи и внутри ямы.

Барьеры и яма формируют 2D ЭГ. Величина барьера и ямы влияют на положение резонансного уровня, прозрачность РТГС и т.д.

1.3.3 Резонансно–туннельная гетероструктура на основе $Al_xGa_{1-x}As$

РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ показана на рис.1.9. Роль барьеров в данной структуре выполняет твердый раствор Al в $GaAs$. $Al_xGa_{1-x}As$ и $GaAs$ имеют различные ширины ЗЗ и сродство к электрону (табл.1.1). Потенциальная яма образуется между барьерами $Al_xGa_{1-x}As$. В ней электроны имеют состояние 2D–свободного электронного газа. Именно за счет дискретных уровней в ПЯ будет происходить токоперенос.

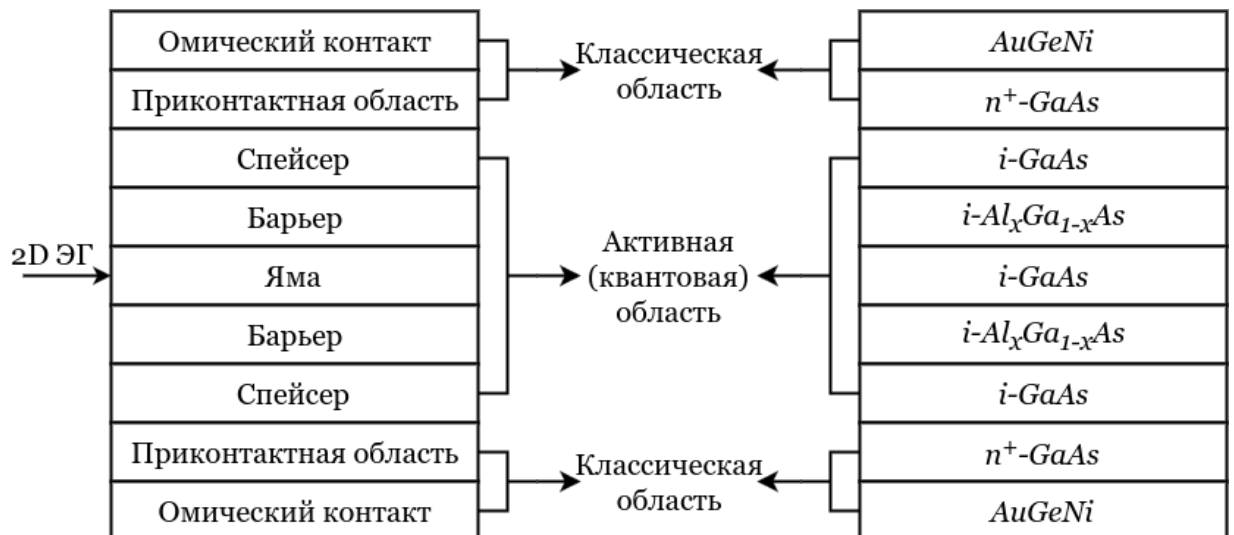


Рисунок 1.9 — Структурная схема устройства с РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

1.4 Деградация приборов на основе гетероструктур

Деградация — процесс ухудшения характеристик какого-либо объекта с течением времени.

Деградация параметров гетероструктуры во времени связана с диффузионным размытием ГП и ГС в целом. Зонная структура ГС определяет режим работы, а зонная структура ГС зависит от химического состава, поэтому диффузионное размытие изменяет зонную диаграмму и режимы работы прибора на основе ГС.

Факторы влияющие на диффузионное размытие:

- Градиент температуры;
- Градиент концентрации;
- Градиент давления;
- Наличие дефектов;
- и т.д...

Диффузионное размытие под действием градиента концентрации описывается с помощью законов Фика.

1.5 Диффузия

Диффузия — это обусловленный хаотическим тепловым движением перенос атомов, он может стать направленным под действием градиента концентрации или температуры.

Диффундировать могут как собственные атомы решетки, так и атомы растворенных в полупроводнике элементов, а также точечные дефекты структуры кристалла — междоузельные атомы и вакансии.

1.5.1 Законы Фика

Первый закон Фика говорит, что плотность потока вещества пропорциональна коэффициенту диффузии (D) и градиенту концентрации (C).

Является стационарным уравнением.

$$\bar{J} = -D\nabla C; \quad (1.26)$$

$$\bar{J}_x = -\bar{e}_x D_x \frac{\delta}{\delta x} C_x. \quad (1.27)$$

$$(1.28)$$

Второй закон Фика связывает пространственное и временное изменения концентрации.

$$\frac{\delta}{\delta t} C = -\nabla(D\nabla C); \quad (1.29)$$

$$\frac{\delta}{\delta t} C_x = -\frac{\delta}{\delta x} D_x \frac{\delta}{\delta x} C_x. \quad (1.30)$$

1.5.2 Механизмы диффузии

Вакансионный механизм диффузии — заключается в миграции атомов по кристаллической решётке при помощи вакансий.

Межузельный механизм диффузии — заключается в переносе вещества межузельными атомами.

Прямой обмен атомов местами — заключается в том, что два соседних атома одним прыжком обмениваются местами в решетке кристалла.

1.5.3 Коэффициент диффузии

Коэффициент диффузии (D) — макроскопическая величина, которая определяется экспериментально. Коэффициент диффузии зависит от температуры (T) по закону Аррениуса:

$$D = D_0 \exp \left[-\frac{E_a}{k_B T} \right], \quad (1.31)$$

где D_0 — предэкспоненциальный множитель.

Коэффициент (D_0) и энергия активации (E_a) не зависят от температуры.

Основным механизмом диффузии Al и Si в $GaAs$ является диффузия по вакансиям галлия (V_{Ga}). Это связано с тем, что атомы Al и Si имеют сходные массы и размеры.

С учетом эффекта уровня Ферми коэффициент диффузии Al и Si в $GaAs$ получен в работах [7], [8], [9]:

$$D_{Al,Si} = D_{i-GaAs} \left(\frac{N_D}{n_i} \right)^3 = D_0 \exp \left[- \frac{3.5}{k_B T} \right] \left(\frac{n}{n_i} \right)^3, \quad (1.32)$$

где n — концентрация донорной примеси (Si);

n_i — концентрация собственных носителей заряда.

Концентрация собственных носителей заряда:

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp \left[- \frac{E_g}{2k_B T} \right]; \quad (1.33)$$

$$N_c = 2 \left[\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right]^{\frac{3}{2}}; \quad (1.34)$$

$$N_v = 2 \left[\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (1.35)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны (ЗЗ) п/п.

1.6 Плотность тока через ГС

Один из способов расчета плотности тока через гетероструктуру — это формула Цу–Есаки:

$$J(V) = \frac{2mek_BT}{(2\pi)^2\hbar^3} \int_0^\infty T(E)D(E)dE, \quad (1.36)$$

где $J(V)$ — плотность тока при приложенном напряжении V ;

$T(E)$ — прозрачность гетероструктуры;

$D(E)$ — функция снабжения электронами;

m — эффективная масса электрона;

e — заряд электрона;

T — температура;

\hbar — постоянная Дирака;

k_B — постоянная Больцмана.

$$D(E) = \ln \frac{1 + \exp \frac{E_F - E}{k_B T}}{1 + \exp \frac{E_F - E - eV}{k_B T}}, \quad (1.37)$$

где E_F — уровень Ферми;

V — приложенное напряжение.

Коэффициент прозрачности гетероструктуры определяется как отношение потока вероятности прошедших через структуру электронов в правом резервуаре к падающим на неё электронам в левом резервуаре. Поток вероятности находится из формулы:

$$\bar{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi), \quad (1.38)$$

где ψ — волновая функция электрона.

Будем рассматривать электроны, приходящие из левого контакта. Левому контакту соответствуют волновые функции ψ_L , а в правому — ψ_R .

$$\psi_L = \exp[ik_L z]; \quad (1.39)$$

$$\psi_R = T_L \psi_L = T_L \exp[ik_L z], \quad (1.40)$$

где T_L — Амплитуда прошедшей волновой функции;

k_L — волновой вектор в левом резервуаре.

Тогда коэффициент туннельной прозрачности:

$$T(E) = |T_L|^2 \frac{|k_R| m_L}{|k_L| m_R}, \quad (1.41)$$

где k_R — волновой вектор в правом резервуаре;

m_R — эффективная масса электрона в правом резервуаре;

m_L — эффективная масса электрона в левом резервуаре.

1.6.1 Уравнение Шредингера

Для нахождения волновых функций необходимо решить уравнение Шредингера. Для твердого тела уравнение Шредингера имеет вид:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{2} \left[\left(\frac{1}{m} \sum_i \Delta_i + \sum_i \frac{\Delta_i}{M_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{k_k |\bar{r}_i - \bar{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{Z_i Z_j e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{R}_j|} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{Z_i e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{r}_j|} \right] \psi = E \psi \end{aligned}$$

где M_i — масса атомного остова;

k_k — постоянная Кулона;

Z — атомное число;

$\frac{\Delta_i}{m}$ — кинетическая энергия i -ого электрона;

$\frac{\Delta_i}{M_i}$ — кинетическая энергия i -ого атомного остова;

$\frac{e^2}{k_k |\bar{r}_i - \bar{r}_j|}$ — потенциальное взаимодействие i и j электрона;

$\frac{Z_i Z_j e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{R}_j|}$ — потенциальное взаимодействие остовов;

$\frac{Z_i e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{r}_j|}$ — потенциальное взаимодействие остова и электрона.

Ряд приближений упрощает полное уравнение Шредингера для твердого тела:

а) Атомные остовы находятся в состоянии покоя;

б) Электрон движется, не взаимодействуя с другими электронами, в некотором эффективном поле, создаваемым остальными электронами;

в) Движение электрона в периодическом потенциале заменяется на эффективную массу.

Упрощенное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi, \quad (1.42)$$

где U — потенциальный профиль.

Одномерное ур. Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + U(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (1.43)$$

Для решения уравнения на границе гетероперехода рассматриваются условия непрерывности волновой функции и непрерывности потока плотности вероятности — эти условия так же называются условием Бастарда:

$$\begin{cases} \psi_I = \psi_{II}; \\ \frac{1}{m_I}\frac{d}{dz}\psi_I = \frac{1}{m_{II}}\frac{d}{dz}\psi_{II}, \end{cases} \quad (1.44)$$

где m_I — эффективная масса в I структуре;
 m_{II} — эффективная масса во II структуре;
 ψ_I — волновая функция в I структуре;
 ψ_{II} — волновая функция во II структуре.

Учтем эффективную массу в ур. 1.43:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m(z)}\frac{d}{dz}\psi(z) + U(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (1.45)$$

В случае произвольного потенциального рельефа для решения уравнения Шредингера применяются численные методы.

1.6.2 Учёт распределения заряда

Приближение Хартри сводит многоэлектронное уравнение Шредингера к одноэлектронному, в котором электрон движется в некотором эффективном поле, создаваемом другими электронами. Это поле называется

самосогласованным. Распределение заряда в структуре определяется с помощью уравнения Пуассона:

$$\frac{d}{dz}\varepsilon(z)\frac{d}{z}V_s = \frac{e}{\varepsilon_0}[n(z) - N_D(z)], \quad (1.46)$$

где ε — относительная электрическая проницаемость;

ε_0 — диэлектрическая постоянная;

V_s — самосогласованный потенциал;

e — заряд электрона;

n — концентрация электронов;

N_D — концентрация донорной примеси.

В приконтактных областях концентрация электронов (n_L, n_R) находится с помощью (1.11). Приконтактные области высоколегированны и уровень Ферми лежит выше дна ЗП. Положение уровня Ферми можно найти с помощью (1.22) или как корень уравнения (1.11).

Нахождение концентрации электронов в активной области производится с учетом плотности вероятности волновых функций [6]:

$$n = \iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\bar{k})|^2 N(\bar{k}) d\bar{k} = \iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\bar{k})|^2 g_{3D}(\bar{k}) f(\bar{k}) d\bar{k}, \quad (1.47)$$

где $N(\bar{k})$ — количество разрешенных состояний;

g_{3D} — плотность состояний в 3D;

$f(\bar{k})$ — .

Энергия электронов:

$$E(\bar{k}) = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar k_x^2}{2m} + \frac{\hbar k_y^2}{2m} + \frac{\hbar k_z^2}{2m} - eV; \quad (1.48)$$

где k_i — волновой вектор в направлении i ;

V — приложенное напряжение.

Так как волновую функцию $\psi(x, y, z)$ можно представить в виде:

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z), \quad (1.49)$$

а концентрацию электронов в активной области n разделить на попадающие из левого и правого резервуаров:

$$n = n_L + n_R; \quad (1.50)$$

$$n_{L(R)} = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{l(r)}}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E - U_{L(R)}}} \ln \left(1 + \exp \left[- \frac{E - E_F - U_{la(ra)}}{k_B T} \right] \right), \quad (1.51)$$

где $U_{l(r)}$ — потенциал на границе приконтактной и активной области;
 $U_{la(ra)}$ — потенциал на границе активной области.

Формулу (1.51) можно интерпретировать, как произведение локальной плотности состояний в активной области $g_{L(R)}^*(E)$ на распределение электронов по энергии ($f_{L(R)}(E)$):

$$g_{L(R)}^*(E) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} |\psi_{L(R)}|^2; \quad (1.52)$$

$$f_{L(R)}(E) = \frac{1}{\sqrt{E - U_{la(ra)}}} \ln \left(1 + \exp \left[- \frac{E - E_F - U_{L(R)}}{k_B T} \right] \right). \quad (1.53)$$

Таким образом, чтобы найти распределение электронов в активной области — необходимо решить систему Шредингера-Пуассона.

$$\begin{cases} \frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d}{dz} V_s = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_D(z)]; \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \psi(z) + U(z) \psi(z) = E \psi(z); \end{cases} \quad (1.54)$$

2 Математический аппарат для моделирования

2.1 Метод конечных разностей

Суть метода конечных разностей заключается в аппроксимации дифференциальных операторов отношением конечных разностей. Так например производную некоторой функции $y(x)$ в точке x_0 ($\dot{y}(x_0)$) можно представить [10]:

$$\dot{y}_+(x_0) = \frac{d}{dx}y(x_0) = \frac{y(x_0 + \Delta x) - y(x_0)}{\Delta x}; \quad (2.1)$$

$$\dot{y}_-(x_0) = \frac{d}{dx}y(x_0) = \frac{y(x_0) - y(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}; \quad (2.2)$$

$$\dot{y}_-(x_0) = \dot{y}_+(x_0) = \frac{d}{dx}y(x_0), \quad (2.3)$$

где \dot{y}_- — производная слева;

\dot{y}_+ — производная справа;

Δx — приращение аргумента (шаг сетки).

Δx — это шаг нашей конечно-разностной схемы (аппроксимации). Если шаг сетки постоянен, то говорят о регулярной сетке, иначе о нерегулярной. Мы будем рассматривать только регулярные сетки. Далее вместо Δx будет использовать Δ .

Из выше сказанного можно найти трехточечную аппроксимацию второй производной $y(x)$:

$$\frac{d^2}{dx^2}y(x_0) = \frac{\dot{y}_+ - \dot{y}_-}{\Delta} = \frac{y(x_0 + \Delta) - 2y(x_0) + y(x_0 - \Delta)}{\Delta^2}. \quad (2.4)$$

Для связи конечно-разностной схемы по времени и координате для нестационарного уравнения диффузии (1.29) воспользуемся аппроксимацией двухточечной аппроксимацией первой производной и по времени и трехточечной аппроксимации второй производной по координате:

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} = \frac{C_{i-1}^j - 2C_i^j + C_{i+1}^j}{\Delta^2}, \quad (2.5)$$

где C_i^j — значение функции в точке i , в момент времени j ;

Δt — шаг сетки по времени;

Δx — шаг сетки по координате.

Трехточечную аппроксимацию производной (конечно-разностную схему) (2.4) можно наглядно показать, как:

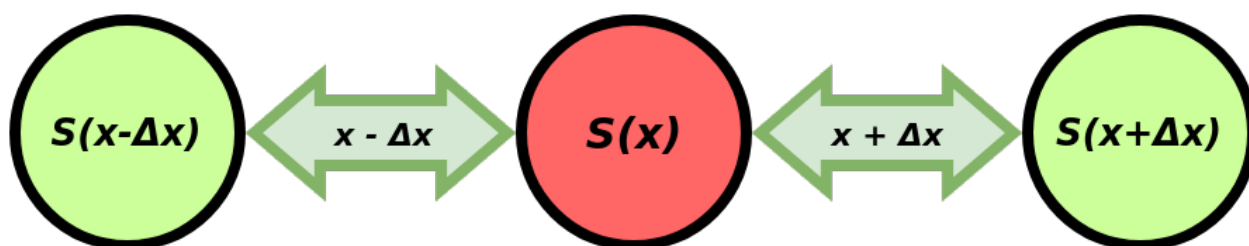


Рисунок 2.1 — Графическая схема для конечно-разностной схемы (2.4)

где $S(x)$ — состояние системы в точке x ;

Δx — шаг сетки (приращение аргумента).

Конечно разностную схему (2.5) наглядно можно представить так:

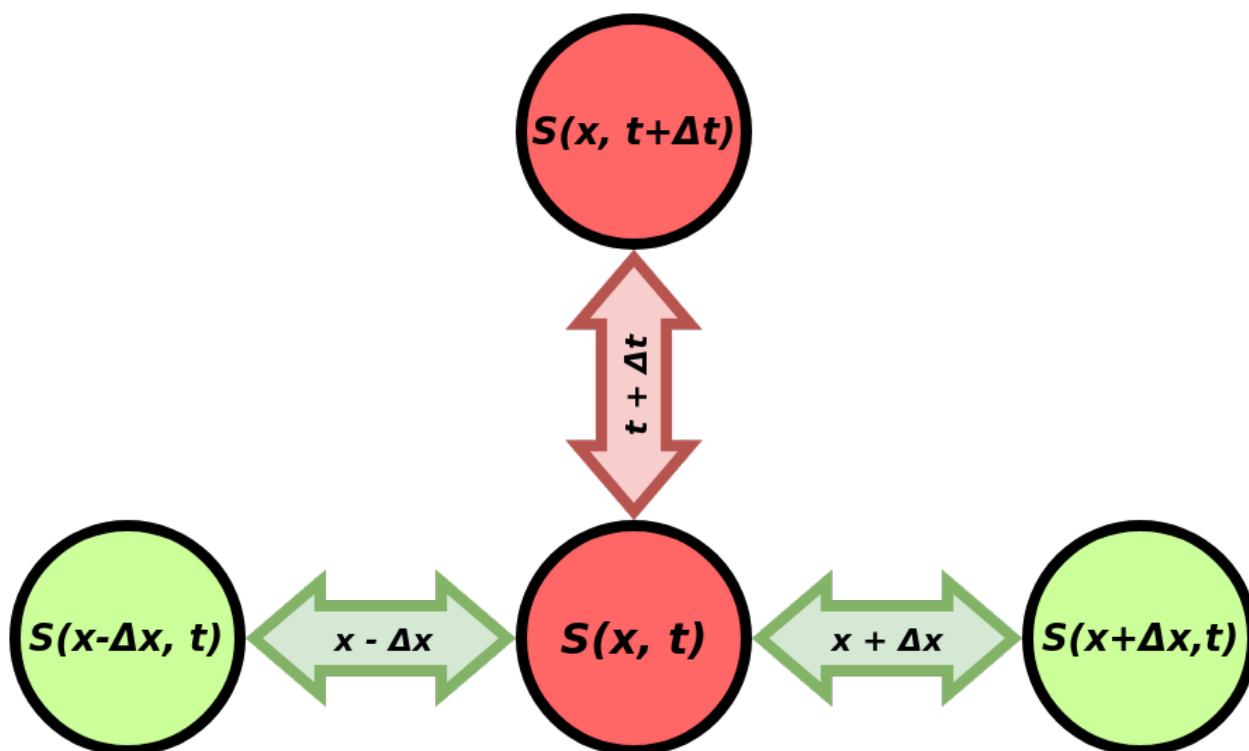


Рисунок 2.2 — Графическая схема для конечно-разностной схемы (2.5)

где $S(x, t)$ — состояние системы в момент t и точке x ;

Δx — приращение по координате;

Δt — приращение по времени.

2.2 Метод конечных разностей для решения одномерного нестационарного уравнения диффузии

2.2.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации

Одномерное нестационарное уравнение диффузии, соответствующее второму закону Фика имеет вид:

$$\frac{\delta}{\delta t}C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2}C; \quad (2.6)$$

Аппроксимация первой производной по времени в момент времени t_i концентрации $C_j(t_i) = C_j^i$ в точке j :

$$\frac{\delta}{\delta t}C_j^i = \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t}; \quad (2.7)$$

Аппроксимация первой производной по координате в момент времени t_i концентрации $C_j(t_i) = C_j^i$ в точке j :

$$J_j^i = \frac{\delta}{\delta x}C_j^i = \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x}; \quad (2.8)$$

Аппроксимация второй производной по координате в момент времени t_i концентрации $C_j(t_i) = C_j^i$ в точке j :

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2}{\delta x^2}C_j^i &= \frac{\delta}{\delta x} \left[\frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} \right] = \frac{\frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x} = \\ &= \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}; \end{aligned} \quad (2.9)$$

Подставляя в (2.6) аппроксимацию производных (2.7), (2.9), получим связь C_j^{i+1} с C_j^i , т.е. изменение концентрации через Δt :

$$C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, \quad (2.10)$$

где $\lambda = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ — связь коэффициента диффузии и шагов по сетке времени и координаты.

Уравнение (2.10) справедливо для всех не крайних точек конечно разностной схемы, при коэффициенте диффузии не зависящем от концентрации.

Выделим два граничных приближения для концентрации:

- а) «Закрытая система» — концентрация на границе не изменяется ($J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$), см. рис.2.3, а);
- б) «Открытая система» — поток частиц подходящий к границе равен потоку уходящих частиц ($J_0^i = J_1^i, J_N^i = J_{N+1}^i$), см. рис.2.3, б).

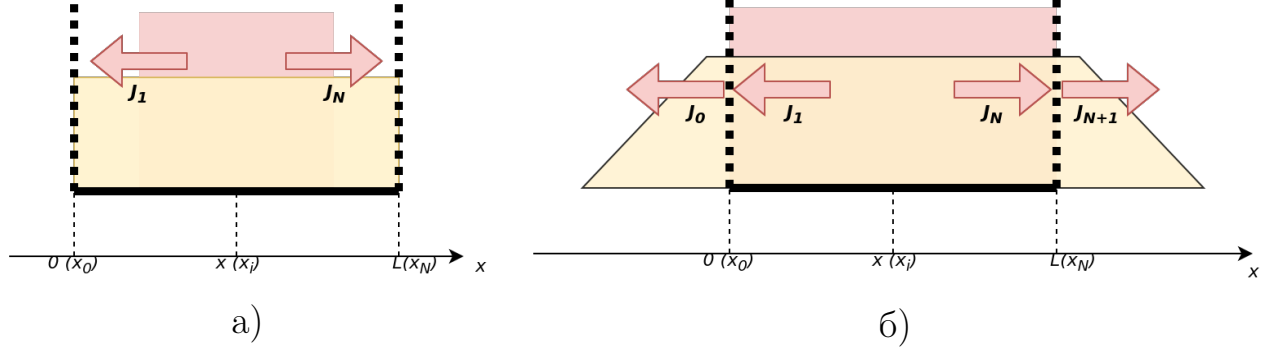


Рисунок 2.3 — а) «Закрытая», б) «Открытая» система диффузии

Для «закрывтой системы» должно выполняться условие $J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$. Рассмотрим (2.8), (2.10) для точки $j = 1$:

$$J_0^i = \frac{C_1^i - C_0^i}{\Delta x} = 0 \Rightarrow C_0^i = C_1^i;$$

$$C_1^{i+1} = \lambda C_0^i + (1 - 2\lambda)C_1^i + \lambda C_2^i = \lambda C_1^i + (1 - 2\lambda)C_1^i + \lambda C_2^i =$$

$$= (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i = C_1^{i+1};$$

Рассматривая точки $N-1, N, N+1$ аналогичным образом получим:

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N-1]; \\ C_N^{i+1} = (1 - \lambda)C_N^i + \lambda C_{N-1}^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases} \quad (2.11)$$

Для решения системы уравнений (2.11) в среде MATLAB была составлена функция `getDiffCloseAlGaAs` (лист. 2.1). С помощью данной функции мы сможем моделировать диффузионное распыление атомов Al в «закрывтой» гетероструктуре на основе $i-Al_xGa_{1-x}As$.

Входные параметры функции: профиль доли содержания Al в $Al_xGa_{1-x}As$, массив времени, через которое необходимо получить профиль

деградированной структуры, шаг сетки и температура системы. Выходными данными являются: Профиль дна зоны проводимости, профиль эффективной массы элеткронов в зоне проводимости, профиль доли содержания Al в $i-Al_xGa_{1-x}As$.

```

1 function [Ec, meff, Alx] = getDiffCloseAlGaAs(x_Al, checkTime, dx, T)
2     e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3     nm = 1e-9; me = 9.1*1e-31;
4     hbar = 1.054*1e-34; k_B = 1.38e-23;
5
6     kT = T*k_B; % J
7
8     Time = max(checkTime)*12*30*24; % to hours
9
10    n_Atoms = 4.42*1e28; % number Atoms in GaAs ~ AlAs
11    n_Al = n_Atoms/2; % number atoms of Al in AlAs
12
13    dt = 1; % one hour
14    dtdx2 = dt*60*60/dx^2; % s/m^2
15
16    D_Al = 0.2*exp(-3.5/(kT*JtoEv))*1e-4; % m^2/s
17
18    C_Al = x_Al*n_Al;
19    len = length(x_Al);
20
21    d1 = D_Al*dtdx2*ones(1, len-1);
22    d2 = [ 1 - D_Al*dtdx2, 1 - 2*D_Al*dtdx2*ones(1, len-2), 1 - D_Al*dtdx2 ];
23    d3 = D_Al*dtdx2*ones(1, len-1);
24
25    Matrix_Al = diag(d1, -1) + diag(d2) + diag(d3, +1);
26
27    if (find(0 == checkTime))
28        [Ec(1, :), ~, meff(1, :), ~] = getBandPropAlGaAs(C_Al);
29        Alx(1, :) = C_Al./n_Al;
30    end
31
32    C_Al = C_Al';
33    for j = 0 : dt : Time
34        C_Al = Matrix_Al*C_Al;
35        ind = find(j == checkTime*12*30*24);
36        if (ind & j ~= 0)
37            [Ec(ind, :), ~, meff(ind, :), ~] = getBandPropAlGaAs(C_Al');
38            Alx(ind, :) = C_Al'./n_Al;
39        end
40    end
41 end

```

Листинг 2.1 — Функция расчета диффузионного распылтия Al в «закрытой» гетероструктуре на основе $i-Al_xGa_{1-x}As$

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 3 задаются константа перевода и метров в нано-

метры и масса покоя электрона. В строке 4 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана.

В строке 8 массив годов проверки переводится в массив часов. В строках 10, 11 задается количество частиц в кубическом сантиметре $GaAs$ и количество атомов Al в $AlAs$. Количество частиц в $AlAs$ и $GaAs$ практически одинаковое. В строках 13, 14 задается шаг сетки по времени, в данном случае 1 час, и задается величина $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ в СИ.

В строке 16 задается коэффициент диффузии. В строке 18 задаются начальные условия – концентрация атомов Al в $i-Al_xGa_{1-x}As$. В строке 22 задается конечно-разностная схема для внутренних точек гетероструктуры. В строках 21, 23 задаются граничные условия, в соответствии с (2.11). В строке 25 создается матрица, удовлетворяющая системе (2.11). В строках 33-40 рассчитывается диффузионное расплытие под действием градиента концентрации при фиксированной температуре.

С помощью лист. А.1 (см. прил. А) можно рассчитать процесс диффузии Al под действием градиента концентрации при фиксированной температуре из $i-AlAs$ в $i-GaAs$ в закрытой системе представленной на рис. 2.4.

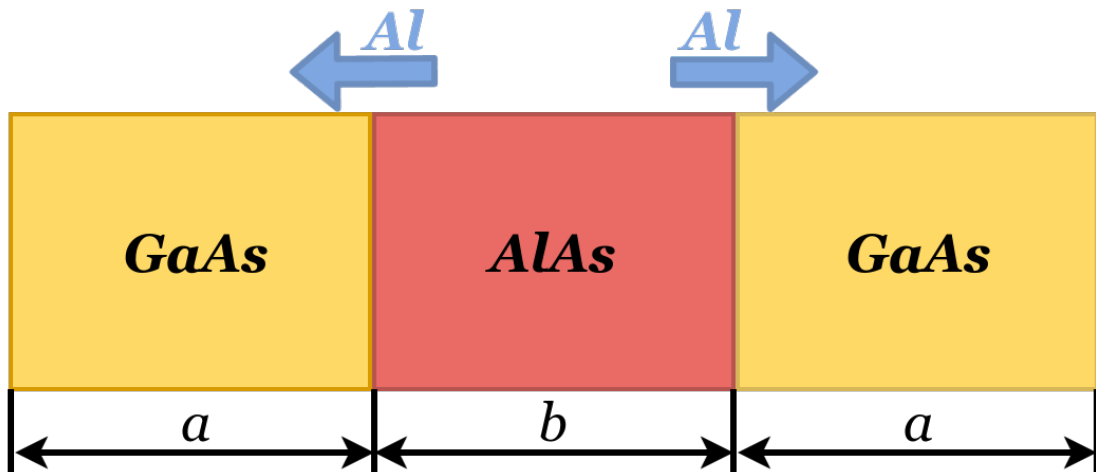


Рисунок 2.4 — Графическая схема «закрытой» гетероструктуры $GaAs/AlAs/GaAs$

В закрытой системе атомы Al не могут покинуть пределы системы, поэтому на краях гетероструктур со временем будут накапливаться атомы Al . Параметры исследуемой модели (см. рис. 2.4):

- $a = 10$ монослоев;
- $b = 30$ монослоев;
- Температура $T = 920\text{ K}$;
- Время деградации $[1, 2, 3, 4, 5]$ лет.

Результат моделирования представлена на рис. 2.5. Атомы Al не уходят за границу исследуемой гетероструктуры.

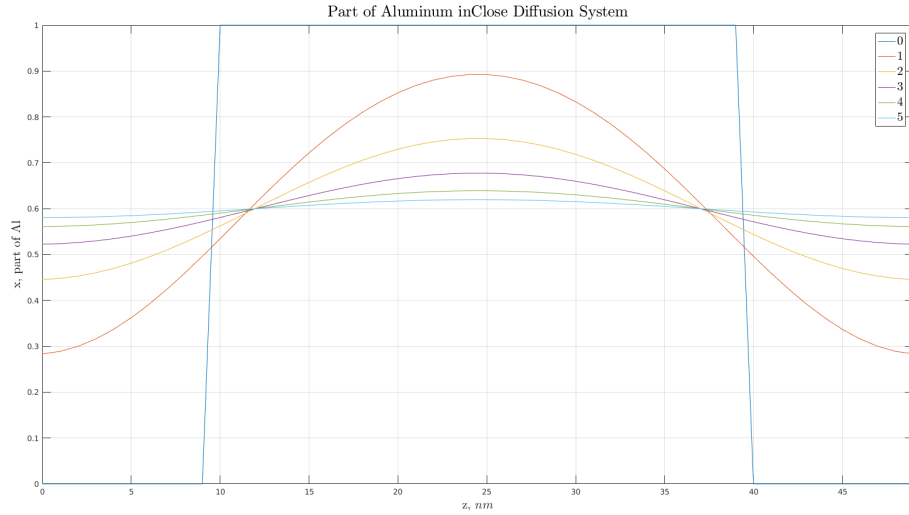


Рисунок 2.5 — Диффузионное расплытие «закрытой» гетероструктуры $i\text{-GaAs}/i\text{-AlAs}/i\text{-GaAs}$ при $T = 920\text{ K}$

Для «открытой» системы должно выполняться условие $J_0^i = J_1^i$, $J_N^i = J_{N+1}^i$. Рассмотрим (2.8), (2.9), (2.10) для точки $j = 1$:

$$\begin{aligned}
 J_0^i &= J_1^i \\
 \frac{C_1^{i+1} - C_1^i}{\Delta t} &= \frac{J_1^i - J_0^i}{\Delta x} = \frac{0}{\Delta x} = 0 \Rightarrow \\
 &\Rightarrow C_1^{i+1} = C_1^i;
 \end{aligned}$$

Рассматривая точки $N-1$, N , $N+1$ аналогичным образом получим:

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases} \quad (2.12)$$

Для решения системы уравнений (2.12) в среде MATLAB была составлена функция `getDiffOpenAlGaAs` (лист. 2.2). С помощью данной функции мы сможем моделировать диффузионное распыление атомов *Al* в «открытой» гетероструктуре на основе *i-Al_xGa_{1-x}As*.

Входные параметры функции: профиль доли содержания *Al* в *Al_xGa_{1-x}As*, массив времени, через которое необходимо получить профиль деградированной структуры, шаг сетки и температура системы. Выходными данными являются: Профиль дна зоны проводимости, профиль эффективной массы элеткронов в зоне проводимости, профиль доли доли содержания *Al* в *i-Al_xGa_{1-x}As*.

```

1 function [Ec, meff, Alx] = getDiffOpenAlGaAs(x_Al, checkTime, dx, T)
2     e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3     nm = 1e-9; me = 9.1*1e-31;
4     hbar = 1.054*1e-34; k_B = 1.38e-23;
5
6     kT = T*k_B; % J
7
8     Time = max(checkTime)*12*30*24; % to hours
9
10    n_Atoms = 4.42*1e28; % number Atoms in GaAs ~ AlAs
11    n_Al = n_Atoms/2; % number atoms of Al in AlAs
12
13    dt = 1; % one hour
14    dtdx2 = dt*60*60/dx^2; % s/m^2
15
16    D_Al = 0.2*exp(-3.5/(kT*JtoEv))*1e-4; % m^2/s
17
18    C_Al = x_Al*n_Al;
19    len = length(x_Al);
20
21    d1 = [D_Al*dtdx2*ones(1, len-2), 0];
22    d2 = [ 1, 1 - 2*D_Al*dtdx2*ones(1, len-2), 1 ];
23    d3 = [0, D_Al*dtdx2*ones(1, len-2)];
24
25    Matrix_Al = diag(d1, -1) + diag(d2) + diag(d3, +1);
26
27    if (find(0 == checkTime))
28        [Ec(1, :), ~, meff(1, :), ~] = getBandPropAlGaAs(C_Al);
29        Alx(1, :) = C_Al./n_Al;
30    end

```

```

31
32     C_Al = C_Al';
33     for j = 0 : dt : Time
34         C_Al = Matrix_Al*C_Al;
35         ind = find(j == checkTime*12*30*24);
36         if (ind & j ~= 0)
37             [Ec(ind, :), ~, meff(ind, :), ~] = getBandPropAlGaAs(C_Al');
38             Alx(ind, :) = C_Al'./n_Al;
39         end
40     end
41 end

```

Листинг 2.2 — Функция расчета диффузионного распытия атомов Al в «открытой» системе $i-Al_xGa_{1-x}As$

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 3 задаются константа перевода и метров в нанометры и масса покоя электрона. В строке 4 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана.

В строке 8 массив годов проверки переводится в массив часов. В строках 10, 11 задается количество частиц в кубическом сантиметре $GaAs$ и количество атомов Al в $AlAs$. Количество частиц в $AlAs$ и $GaAs$ практически одинаковое. В строках 13, 14 задается шаг сетки по времени, в данном случае 1 час, и задается величина $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ в СИ.

В строке 16 задается коэффициент диффузии. В строке 18 задаются начальные условия – концентрация атомов Al в $i-Al_xGa_{1-x}As$. В строке 22 задается конечно-разностная схема для внутренних точек гетероструктуры. В строках 21, 23 задаются граничные условия, в соответствии с (2.12). В строке 25 создается матрица, удовлетворяющая системе (2.12). В строках 33-40 рассчитывается диффузионное распытие под действием градиента концентрации при фиксированной температуре.

С помощью лист. А.1 (см. прил. А) можно рассчитать процесс диффузии Al под действием градиента концентрации при фиксированной температуре из $i-AlAs$ в $i-GaAs$ в открытой системе представленной на рис. 2.6.

Предположим, что в рассматриваемой системе (рис. 2.6) атомы Al , достигнув резервуаров покидают исследуемую гетероструктуру (не будем рассматривать резервуары, как часть исследуемой системы). Так же пред-

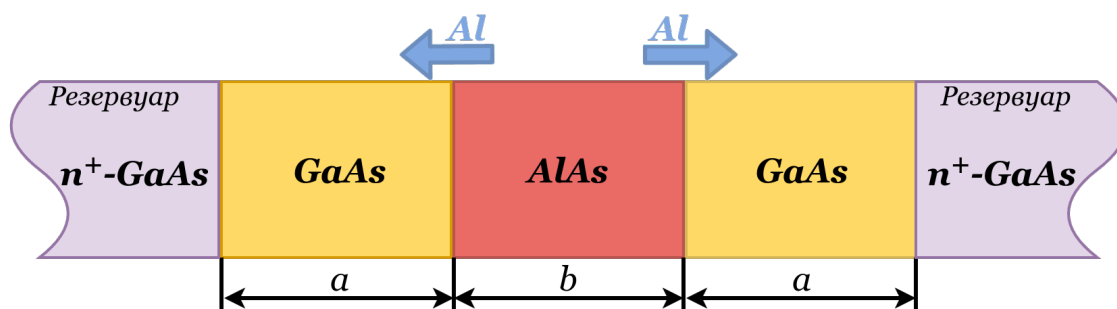


Рисунок 2.6 — Графическая схема «открытой» гетероструктуры $GaAs/AlAs/GaAs$

положим, что скорость ухода частиц Al быстрее, чем их подход. Параметры исследуемой модели (см. рис. 2.6):

- $a = 10$ монослоев;
- $b = 30$ монослоев;
- Температура $T = 920\text{ K}$;
- Время деградации $[1, 2, 3, 4, 5]$ лет.

Результат моделирования представлена на рис. 2.7. Атомы Al покидают исследуемую гетероструктуру и общая концентрация Al в гетероструктуре снижается.

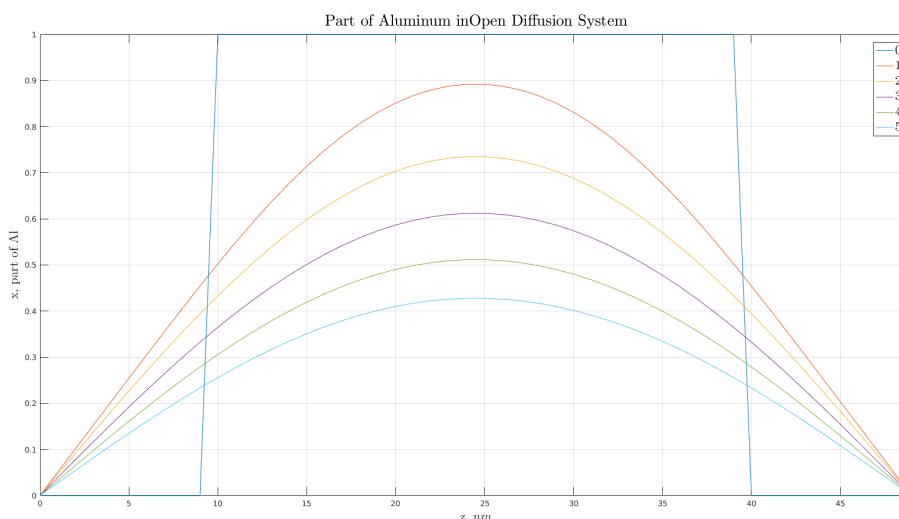


Рисунок 2.7 — Диффузионное расплытие «закрытой» гетероструктуры $i-GaAs/i-AlAs/i-GaAs$ при $T = 920\text{ K}$

2.2.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации

Если коэффициенте диффузии (D) зависит от концентрации, тогда уравнение диффузии принимает вид:

$$\frac{\delta}{\delta t}C = \frac{\delta}{\delta x}D\frac{\delta}{\delta x}C; \quad (2.13)$$

Тогда уравнение конечно-разностной схемы будет [11]:

$$\frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{D_{j+1/2}^i \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - D_{j-1/2}^i \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x}; \quad (2.14)$$

$$D_{j\pm 1/2}^i = \frac{D_j^i + D_{j\pm 1}^i}{2} = D_{j\pm}^i. \quad (2.15)$$

Проводя рассуждения аналогичные предыдущему параграфу получает конечно-разностную схему для открытой схемы:

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i)C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N-1]; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i; \\ \lambda_-^i = D_{j-\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i. \end{cases} \quad (2.16)$$

Для решения системы (2.16) в среде MATLAB была реализована функция `getDiffAlGaAs_Si` (лист.2.3). Данная функция рассчитывает диффузионное расплытие атомов Al в гетероструктуре на основе $Al_xGa_{1-x}As$ под действием градиента концентрации при фиксированной температуре, с учетом проникновения легирующей примеси Si .

Входы параметры функции: профиль доли содержания Al в $Al_xGa_{1-x}As$, массив времени, через которое необходимо получить профиль деградированной структуры, шаг сетки и температура системы, концентрация легирующей примеси на границе гетероструктуры. Выходными данными являются: Профиль дна зоны проводимости, профиль эффективной массы элеткронов в зоне проводимости, профиль доли содержания Al в $i-Al_xGa_{1-x}As$, доля содержания атомов примеси (Si) в гетероструктуре.

```

1 function [Ec, meff, Alx, Six] = getDiffAlGaAs_Si(x_Al, checkTime, dx, T, n_Si)
2     e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3     nm = 1e-9; me = 9.1*1e-31;
4     hbar = 1.054*1e-34; k_B = 1.38e-23;
5
6     kT = T*k_B; % J
7
8     Time = max(checkTime)*12*30*24; % to hours
9
10    n_Atoms = 4.42*1e28; % number Atoms in GaAs ~ AlAs
11    n_Al = n_Atoms/2; % number atoms of Al in AlAs
12
13    dt = 1; % one hour
14    dtdx2 = dt*60*60/dx^2; % s/m^2
15
16    Eg_GaAs = 1.519 - 5.405*1e-4*T^2/(T+204);
17    Nc = 2*(me*0.067*kT/pi/hbar^2/2)^(3/2);
18    Nv = 2*(me*0.51*kT/pi/hbar^2/2)^(3/2);
19    ni = sqrt(Nc*Nv)*exp(-Eg_GaAs/(2*kT*JtoEv));
20
21    C_Al = [0, x_Al, 0]*n_Al;
22    len = length(C_Al);
23
24    C_Si = [n_Si, ni*ones(size(x_Al)), n_Si];
25
26    if (find(0 == checkTime))
27        [Ec(1, :), ~, meff(1, :), ~] = getBandPropAlGaAs(C_Al(2:end-1));
28        Alx(1, :) = C_Al(2:end-1)./n_Al;
29        Six(1, :) = C_Si(2:end-1)./n_Si;
30    end
31
32    C_Al = C_Al';
33    C_Si = C_Si';
34    for j = 0 : dt : Time
35        D = 0.2*exp(-3.5/(kT*JtoEv))*(C_Si'./ni).^3*1e-4;
36
37        D_plus = (D(1:len-1) + D(2:len))./2;
38        D_minus = (D(2:len) + D(1:len-1))./2;
39
40        d1 = [D_minus(1:end-1)*dtdx2, 0];
41        d2 = [1, 1 - (D_plus(2:end) + D_minus(1:end-1))*dtdx2, 1];
42        d3 = [0, D_plus(2:end)*dtdx2];
43        Matrix = diag(d1, -1) + diag(d2) + diag(d3, +1);
44
45        C_Al = Matrix*C_Al;
46        C_Si = Matrix*C_Si;
47
48        ind = find(j == checkTime*12*30*24);
49        if (ind & j ~= 0)
50            [Ec(ind, :), ~, meff(ind, :), ~] = getBandPropAlGaAs(C_Al(2:end-1)');
51            Alx(ind, :) = C_Al(2:end-1)'./n_Al;
52            Six(ind, :) = C_Si(2:end-1)';
53        end
54    end
55 end

```

Листинг 2.3 — Функция расчета диффузионного расплытия атомов Al в «открытой» системе $i-Al_xGa_{1-x}As$ с учетом коэффициента диффузии, зависящего от концентрации легирующей примеси

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 3 задаются константа перевода и метров в нанометры и масса покоя электрона. В строке 4 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана.

В строке 8 массив годов проверки переводится в массив часов. В строках 10, 11 задается количество частиц в кубическом сантиметре $GaAs$ и количество атомов Al в $AlAs$. Количество частиц в $AlAs$ и $GaAs$ практически одинаковое. В строках 13, 14 задается шаг сетки по времени, в данном случае 1 час, и задается величина $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ в СИ.

В строках 16-19 рассчитывается концентрация собственных носителей заряда и в случае чистого полупроводника приравнивается к концентрации донорной примеси. В строках 21, 24 задаются начальные условия – профиль концентрации Al и Si . Строки 32, 33 преобразуют строку в столбец, для преобразования.

В строках 24-34 рассчитывается диффузионное расплытие гетероструктуры. Цикл выполняется с шагом сетки по времени. В строке 35 каждый цикл пересчитывается коэффициент диффузии, так как изменяется концентрация Al и Si . В строках 37, 38 рассчитываются средние значения коэффициента диффузии, в соответствии с конечно-разностной схемой (2.16). В строке 41 объявляется конечно-разностная схема для внутренних точек гетероструктуры. В строках 40, 42 объявляются граничные условия. В строках 43, 45, 46 объявляется матрица преобразования и происходит расчет диффузии атомов Al и Si в гетероструктуре.

С помощью лист. А.1 (см. прил. А) можно рассчитать процесс диффузии Al под действием градиента концентрации при фиксированной температуре из $i-AlAs$ в $i-GaAs$ с учетом диффузии легирующей примеси из резервуаров на схеме представленной на рис. 2.8.

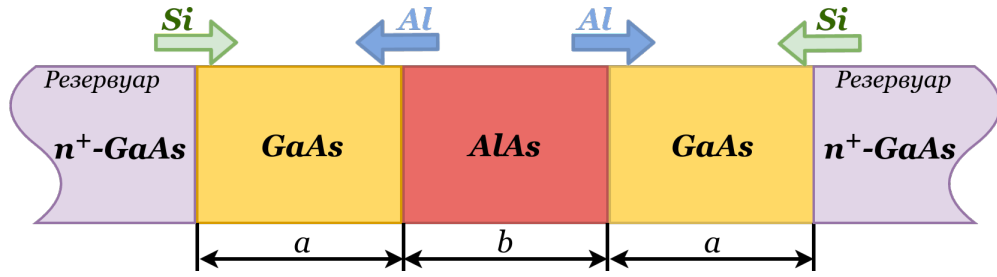


Рисунок 2.8 — Графическая схема гетероструктуры $GaAs/AlAs/GaAs$ с диффундирующими атомами Al и Si

Проникновение легирующей примеси увеличивает коэффициент диффузии и скорость термической деградации гетероструктуры в соответствии с (1.32). Параметры исследуемой модели (см. рис. 2.8):

- $a = 10$ монослоев;
- $b = 30$ монослоев;
- Концентрация донорной примеси $N_D = 10^{24} m^{-3}$;
- Температура $T = 430 K$;
- Время деградации $[1, 2, 3, 4, 5]$ лет.

Результат моделирования представлена на рис. 2.9. С уменьшением температуры факторов, влияющим на диффузию атомов Al стала глубина проникновения атомов легирующей примеси (Si) из резервуаров.

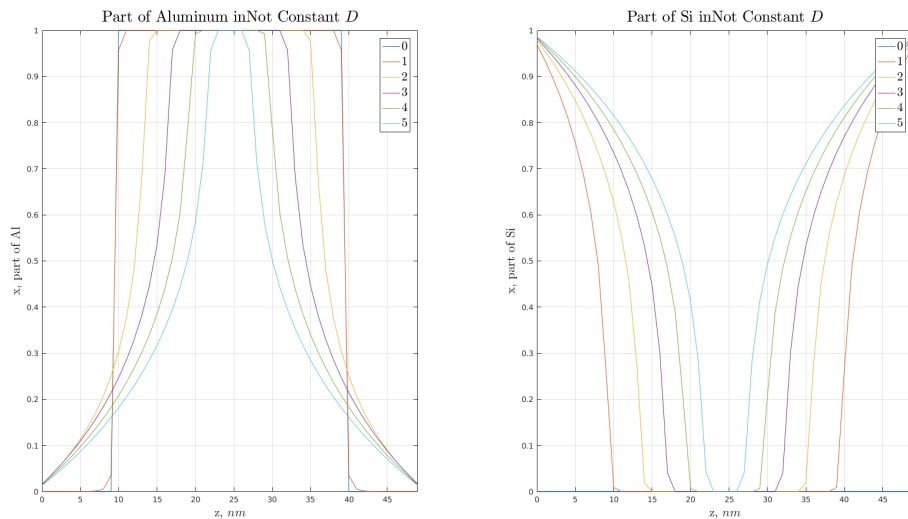


Рисунок 2.9 — Диффузионное расплытие гетероструктуры $i-GaAs/i-AlAs/i-GaAs$ при $T = 430 K$

2.3 Метод конечных разностей для расчета токопереноса через гетероструктуру

Конечно-разностная схема уравнения Шредингера (1.45) для ГС на рис.2.10 [6]:

$$\psi_{i-1} \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} + \psi_i \left(\frac{2\Delta^2 m_{i+1}^*}{\hbar^2} (E - U_i) - \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} - 1 \right) + \psi_{i+1} = 0, \quad (2.17)$$

где m_i^* — эффективная масса в точке i ;

ψ_i — волновая функция в точке i ;

E — энергия электрона;

U_i — потенциальная энергия в точке i ;

Δ — шаг сетки.

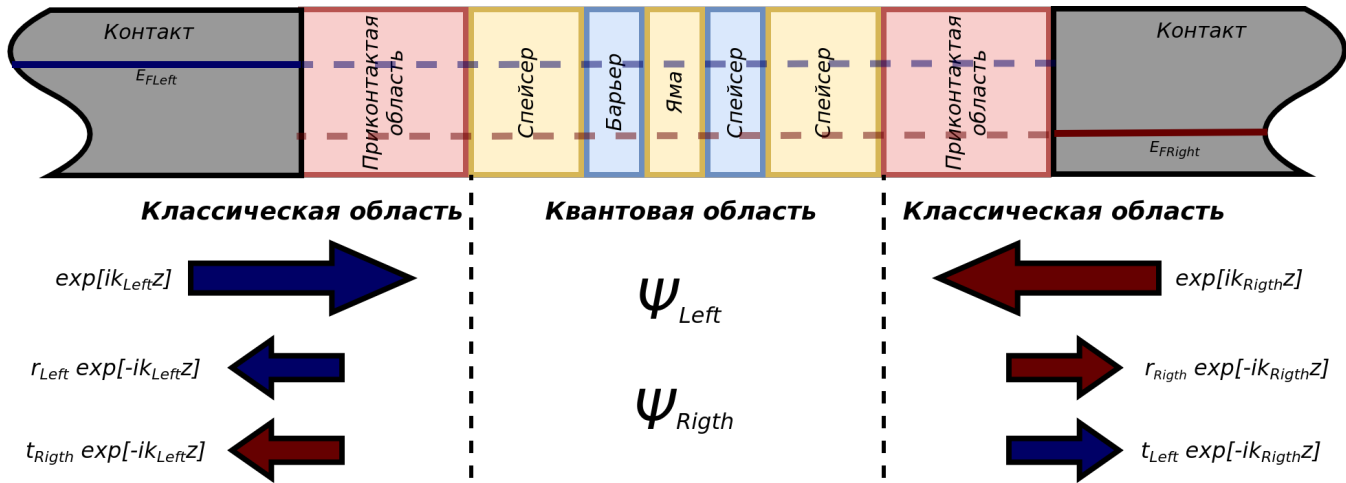


Рисунок 2.10 — Схема модели РТГС

Данная схема подходит для любой внутренней точки гетероструктуры, но не подходит для граничных точек. Граничные условия, для «левых» и «правых» электронов получаются из граничного условия Бастарда и вида волновых функций в резервуарах:

$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L\Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R\Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L\Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R\Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases} \quad (2.19)$$

где $k_{L(R)}$ — волновые функции в левом (правом) резервуаре.

Для решения конечно-разностной схемы (2.17), (2.18) уравнения Шредингера и получения волновых функций в среде MATLAB была реализована функция `getWaveFunction` (лист. 2.4), которая находит решение уравнения Шредингера для электронов из левого и правого резервуара.

Входными данными для данной функции являются: шаг сетки, сетка эффективной массы, сетка потенциального профиля, энергия электронов, для которой необходимо решить уравнение Шредингера.

Выходными данными являются значения волновых функций с заданными энергиями в точках сетки.

```
1 function [waveLeft, waveRigth] = getWaveFunction(delta, meff, U, Ez)
2     hbar = 1.0551*1e-34;
3
4     EzLen = length(Ez);
5     ULen = length(U);
6
7     waveLeft = zeros(EzLen, ULen);
8     waveRigth = zeros(EzLen, ULen);
9
10    for j = 1 : EzLen
11        kLeft = sqrt( 2*meff(1)*(Ez(j) - U(1)) )/hbar;
12        kRight = sqrt( 2*meff(end)*(Ez(j) - U(end)) )/hbar;
13
14        d1 = ones(ULen-1, 1);
15        d2 = 2*delta^2*meff(2:end-1).*( Ez(j)-U(2:end-1) ) ./ hbar^2 -
            meff(2:end-1)./ meff(3:end) - 1;
16        d2 = [1i*kLeft*delta - 1, d2, 1i*kRight*delta - 1];
17        d3 = [1, meff(2:end-1)./ meff(3:end)];
18
19        H = diag(d1, -1) + diag(d2) + diag(d3, +1);
20
21        fLeft = [2*1i*kLeft*delta; zeros(ULen-1, 1)];
22        fRight = [zeros(ULen-1, 1); 2*1i*kRight*delta];
23
24        waveLeft(j, :) = (inv(H)*fLeft)';
25        waveRigth(j, :) = (inv(H)*fRight)';
26    end
27
28 end
```

Листинг 2.4 — Решение уравнения Шредингера

В строке 2 вводится постоянная Дирака. В строках 4, 5 получают длину массива рассчитываемых энергий электрона и длина потенциального профиля. В строках 10-26 цикл расчета волновых функций. В строках 7, 8 рассчитываются волновые вектора на «левой» и «правой» границах

активная область – резервуары. В строках 14-17 задается конечно-разностная (2.17), (2.18). В строке 19 создается матрица, соответствующая (2.17), (2.18). В строках 21, 22 задаются граничные условия для «левых» и «правых» электронов. В строках 24, 25 решается уравнение Шредингера для «левых» и «правых» электронов.

Для расчета плотности тока через ГС с помощью формулы Цу-Есаки (1.36) в среде MATLAB была реализована функция `getJ` (лист. 2.5).

Входные данные: шаг сетки, сетка эффективной массы электрона, профиль дна зоны проводимости, прикладываемое к РТГС напряжение смещения, уровень Ферми в резервуарах.

Выходные данные: Массив плотности тока через гетеро структуру при соответствующем смещении напряжения.

```

1 function J = getJ(dx, meff, Ec, dU, EFermi)
2     e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3     hbar = 1.054*1e-34; k_B = 1.38e-23;
4
5     T = 300;
6     kT = T*k_B;
7
8     k = ((2*meff(1)*e*kT)/(4*pi^2*hbar^3));
9     J = k*ones(1, length(dU));
10
11     for j = 1:length(dU)
12         Uj = Ec - linspace( 0, dU(j), length(Ec) );
13         dTEz = @(Ez) TDEz(dx, meff, Uj, Ez, EFermi);
14         J(j) = J(j)*integral(dTEz, 0, max(Uj), 'AbsTol', 1e-35);
15     end
16 end

```

Листинг 2.5 — Расчет плотности тока по формуле Цу-Есаки

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 3 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана. В строках 5, 6 задаются температура системы и энергия тепловых колебаний. В строке 8 задается прединтегральный множитель формулы Цу-Есаки (1.36). В строках 11-15 расположен цикл расчета плотности тока при некотором смещении напряжения из массива входных данных. В строке 12 задается линейное падение напряжения на гетероструктуре. В строке 13 задаются входные данные функции `TDEz` (лист. 2.6) для дальнейшего численного интегрирования. В строке 15 производится численное

интегрирование по энергиям от 0 до максимального значения потенциальной энергии.

Для расчета численного расчета интеграла из формулы Цу-Есаки (1.36) в среде MATLAB была реализована функция `TDEz` (лист. 2.6).

Входные данные: шаг сетки, сетка эффективной массы электрона в зоне проводимости, сетка потенциальной энергии электрона, энергия электрона, для которой необходимо провести расчет, уровень Ферми в резервуарах.

Выходные данные: Функция возвращает подинтегральное выражение, которое затем стандартная функция в MATLAB `integral` суммирует и получает численное решение интеграла.

```

1 function val = TDEz(delta, meff, U, Ez, EFermi)
2     hbar = 1.0551*1e-34; k_B = 1.38e-23;
3
4     T = 300;
5     kT = T*k_B;
6
7     kLeft = abs( sqrt( 2*meff(1)*(Ez-U(1)) )/hbar );
8     kRight = abs( sqrt( 2*meff(end)*(Ez-U(end)) )/hbar );
9
10    [waveLeft, ~] = getWaveFunction(delta, meff, U, Ez);
11
12    T = (kRight./kLeft).*(meff(1)/meff(end)).*(abs(waveLeft(:, end)).^2)';
13    D = log( ( 1 + exp( (EFermi + U(1) - Ez)/kT ) ) ./ ( 1 + exp( (EFermi + U(end) - Ez)/kT ) ) );
14
15    val = T.*D;
16 end

```

Листинг 2.6 — Подынтегральное выражение формулы Цу-Есаки (1.36)

В строке 2 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана. В строках 4, 5 задаются температура системы и энергия тепловых колебаний. В строках 7, 8 рассчитываются модули волновых векторов электрона на «левой» и «правой» границе активная область резервуары электронов. В строке 10 рассчитываются волновые функции «левых» электрона, так как правыми можно пренебречь в случае «опускания» потенциального рельефа справа. В строке 12 рассчитывается коэффициент прозрачности гетероструктуры, в соответствии с (1.41). В строке 13 рассчитывается функция снабжения электронами в соответствии с (1.37). В строке 15 происходит поэлементное умножение рассчитанных значений.

2.4 Метод конечных разностей для самосогласованного решение системы Шредингера–Пуассона

Для решения системы Шредингера-Пуассона (1.54) применяют метод Гумеля. Метод Гумеля заключается в учете характера зависимости концентрации электронов от самосогласованного потенциала (V_S):

$$n(z) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \exp \frac{E_F - E_c + eV_s(z)}{k_B T} = n_0 \exp \frac{V_S(z)}{V_{ref}}; \quad (2.20)$$

$$n_0 = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \exp \frac{E_F - E_c}{k_B T}; \quad (2.21)$$

$$V_{ref} = \frac{k_B T}{e}, \quad (2.22)$$

где V_s — самосогласованный потенциал;

V_{ref} — опорный потенциал;

m — эффективная масса электрона.

Тогда связь «старого» и «нового» потенциала:

$$\begin{cases} n_{old} = n_0 \exp \frac{V_{old}}{V_{ref}}; \\ n_{new} = n_0 \exp \frac{V_{new}}{V_{ref}}; \end{cases} \quad (2.23)$$

$$n_{new} = n_{old} \exp \frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}}; \quad (2.24)$$

Подставляя (2.24) в (1.54):

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d}{z} V_{new} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_{old} \exp \left(\frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}} \right) - N_D(z) \right]; \quad (2.25)$$

Так как $\frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}}$ мало, используя разложение в ряд Маклорена $\exp(x) \approx 1 + x$, получим:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d}{z} V_{new} - n_{old} \frac{e V_{new}}{\varepsilon_0 V_{ref}} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_{old} \left(1 - \frac{V_{old}}{V_{ref}} \right) - N_D(z) \right]; \quad (2.26)$$

Применяя метод конечных разностей, получим:

$$\begin{cases} a^i V_{new}^{i-1} + b^i V_{new}^i + c^i V_{new}^{i+1} = \frac{e \Delta^2}{\varepsilon_0 \varepsilon^i} \left(n_{old}^i \left(1 - \frac{V_{old}^i}{V_{ref}} \right) - N_D^i \right); \\ a^i = 1; \\ b^i = -1 - \frac{\varepsilon^{i+1}}{\varepsilon^i} - \frac{e \Delta^2 n_{old}^i}{\varepsilon_0 V_{ref} \varepsilon^i}; \\ c^i = \frac{\varepsilon^{i+1}}{\varepsilon^i}; \end{cases} \quad (2.27)$$

Граничные условия:

$$V_{new}^1 = 0; V_{new}^N = V; \quad (2.28)$$

И продолжаем рассчитывать эту систему до достижения максимальной погрешности ϵ_V , если выполняется условие:

$$\max(|V_{new}^i - V_{old}^i|) < \epsilon_V, \quad (2.29)$$

процесс итерации останавливается.

Для расчета плотности тока через ГС с помощью формулы Цу-Есаки (1.36) с учетом самосогласованного потенциала в среде MATLAB была реализована функция **getJ** (лист. 2.7) – аналогичная (лист. 2.5), но с учетом самосогласованного распределения электронов.

Входные данные: шаг сетки, сетка эффективной массы электрона, профиль дна зоны проводимости, прикладываемое к РТГС напряжение смещения, уровень Ферми в резервуарах, размер резервуаров, размер спейсера, размер барьера, размер ямы.

Выходные данные: Массив плотности тока через гетеро структуру при соответствующем смещении напряжения.

```

1  function J = getJ(dx, meff, Ec, dU, EFermi, r, a, b, c)
2      e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3      hbar = 1.054*1e-34; k_B = 1.38e-23;
4
5      T = 300;
6      kT = T*k_B;
7
8      k = ((2*meff(1)*e*kT)/(4*pi^2*hbar^3));
9      J = k*ones(1, length(dU));
10
11     ni = 1e12;
12     Nd = 1e24;
13
14     Ni = [Nd*ones(1, r), ni*ones(size(Ec)), Nd*ones(1, r)];
15
16     eps = 13.18 - 3.12*[zeros(1, r), zeros(1, a), ones(1, b), zeros(1, c), ones(1, b),
17                          zeros(1, a), zeros(1, r)];
18
19     for j = 1:length(dU)
20         [V, n] = getConcentrationElectrons(0.001,...
21             [Ec(1)*ones(1, r), Ec, Ec(end)*ones(1, r)],...
22             [meff(1)*ones(1, r), meff, meff(end)*ones(1, r)],...
23             Ni,...
24             eps,...
25             dx,...
26             dU(j),...
27             r + 1,...
28             r + length(Ec)...
```

```

28     );
29     Uj = Ec - V(r+1:length(Ec)+r)*eVtoJ;
30     dTEz = @(Ez) TDEz(dx, meff, Uj, Ez, EFermi);
31     J(j) = J(j)*integral(dTEz, 0, max(Uj), 'AbsTol', 1e-200);
32 end
33 end

```

Листинг 2.7 — Расчет плотности тока по формуле Цу-Есаки (1.36) с
учетом самосогласованного потенциала

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 3 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана. В строках 5, 6 задаются температура системы и энергия тепловых колебаний. В строке 8 задается прединтегральный множитель формулы Цу-Есаки (1.36). В строках 11, 12 задается концентрация донорной примеси и концентрация собственных носителей заряда. В строке 14 создается сетка концентрации электронов. В строке 16 создается сетка относительных диэлектрических проницаемостей.

В строках 18-32 расположен цикл расчета плотности тока при некотором смещении напряжения из массива входных данных. В строках 19-28 вызывается функция `getConcentrationElectrons` (лист. 2.8), которая для каждого напряжения смещения рассчитывает свой самосогласованный потенциал и концентрацию электронов вдоль структуры. В строке 29 задается линейное падение напряжения на гетероструктуре с учетом самосогласованного потенциала. В строке 29 задаются входные данные функции `TDEz` (лист. 2.6) для дальнейшего численного интегрирования. В строке 30 производится численное интегрирование по энергиям от 0 до максимального значения потенциальной энергии.

Для самосогласованного решения конечно-разностной схемы (2.27), (2.28) для системы Шредингера-Пуассона (1.54) с помощью метода Гумеля в среде MATLAB была реализована функция `getConcentrationElectrons` (лист. 2.8).

Входные данные: заданная точность решения, сетка потенциального профиля дна зоны проводимости, сетка эффективной массы электрона в зоне проводимости, сетка концентрации электронов, сетка относительной диэлектрической проницаемости, шаг сетки, напряжение смещения, «левая» и «правая» граница (индексы).

Выходные данные: сетка профиля самосогласованного потенциала, сетка концентрации электронов вдоль структуры.

```
1 function [Vnew,nold] = getConcentrationElectrons(accur, Ec, meff, Ni, eps, dx, dV, boundL,
    boundR)
2     e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3
4     lenEc = length(Ec);
5
6     Vnew = [zeros(1, boundL-1), linspace(0, dV*JtoEv, boundR - boundL + 1),
        dV*JtoEv*ones(1, lenEc - boundR)];
7     Vold = Vnew + 10;
8
9     while ( max(abs(Vnew - Vold)) > accur )
10         Vold = Vnew;
11         Ui = Ec - Vold*eVtoJ;
12
13         nold = getNz(Ui, meff, dx, boundL, boundR);
14
15         Vnew = solvePoissonEq(dV, Vold, nold, eps, Ni, dx);
16     end
17     Ui = Ec - Vnew*eVtoJ;
18     nold = getNz(Ui, meff, dx, boundL, boundR);
19 end
```

Листинг 2.8 — Самосогласованное решение уравнения Шредингера-Пуассона

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 6 задается первое приближение самосогласованного потенциала: резервар – эквипотенциальная поверхность, в доль активной области напряжение падает линейно. В строке 7 задается инициализирующее отклонение.

В строках 9-16 располагается цикл итеративного согласованного решения уравнения Шредингера-Пуассона. В строке 11 задается потенциальный профиль с учетом самосогласованного потенциала. В строке 13 с помощью функции `getNz` (лист. 2.9) рассчитывается концентрация электронов вдоль структуры. В строке 14, для полученного ранее приближения концентрации, рассчитывается самосогласованный потенциал с помощью уравнения Пуассона, реализованного функцией `solvePoissonEq` (лист. 2.10). Цикл повторяется пока разница между рассчитанными значениями текущей и предыдущей итерации не будет превышать заданной точности, что соответствует (2.29).

Для расчета концентрации электронов в гетероструктуре с учетом того, что в активной области электронный газ перестает быть свободным 3D газом, в среде MATLAB была реализована функция `getNz` (лист. 2.9).

Входные данные: сетка профиля потенциальной энергии дна зоны проводимости, сетка эффективной массы электронов в зоне проводимости вдоль структуры, шаг сетки, «левая» и «права» границы активной области – резервуаров.

Выходные данные: концентрация электронов вдоль гетероструктуры.

```

1 function nz = getNz(Ui, meff, dx, boundL, boundR)
2     e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3     hbar = 1.0551e-34; k_B = 1.38e-23;
4
5     T=300;
6
7     EFermi=1.51e-20;
8
9     Nc3D = 4*pi*(2*meff(1)/(2*pi*hbar)^2)^(3/2);
10    Nc3DActive = sqrt(2)*meff(end)^(3/2)*k_B*T/((2*pi)^2*hbar^3);
11
12    function res = NEz(Ui, meff, dx, Ez, U1, Un)
13        [waveL, waveR] = getWaveFunction(dx, meff, Ui, Ez);
14
15        waveL = abs(waveL).^2;
16        waveR = abs(waveR).^2;
17
18        Ez = repmat(Ez', 1, length(Ui));
19
20        waveL = Nc3DActive*(waveL)./sqrt(Ez - Ui(1)).*log(1 + exp((EFermi + U1 -
21            Ez)/(k_B*T)));
22        waveL(Ez <= Ui(1)) = 0;
23
24        waveR = Nc3DActive*waveR./sqrt(Ez - Ui(end)).*log(1 + exp((EFermi + Un -
25            Ez)/(k_B*T)));
26        waveR(Ez <= Ui(end)) = 0;
27
28        res = waveL + waveR;
29    end
30
31    foo = @(Ez) NEz( Ui(boundL: boundR), meff(boundL: boundR), dx, Ez, Ui(1), Ui(end) );
32    nzA = integral(foo, Ui(end), 2*e, 'AbsTol', 1E-100, 'ArrayValued', true);
33
34    U1 = Ui(1: boundL-1);
35    U2 = Ui(boundR + 1: end);
36
37    nzL = zeros(1, length(U1));
38    nzR = zeros(1, length(U2));
39
40    for j = 1 : length(U1)
41        foo = @(Ez) sqrt(Ez - U1(j))./(1 + exp((Ez - (EFermi + U1(1)))/(k_B*T)));
42        nzL(j) = Nc3D*integral(foo, U1(j), 2*e, 'AbsTol', 1e-100);
43    end

```



```

42
43     for j = 1 : length(U2)
44         foo = @(Ez) sqrt(Ez - U2(j))./(1 + exp((Ez - (EFermi + Ui(end)))/(k_B*T)));
45         nzR(j) = Nc3D*integral(foo, U2(j), 2*e, 'AbsTol', 1e-100);
46     end
47
48     nz = [nzL, nzA, nzR];
49 end

```

Листинг 2.9 — Расчет концентрации электронов в резервуарах и активной области

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 3 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана. В строке 5 задается температура системы. В строке 7 задается уровень Ферми в резервуарах. В строке 9, 10 заданы плотности состояний в резервуарах (классических областях) и активной области (квантовой области).

В строках 12-27 объявлена функция `Nez` для дальнейшего интегрирования и расчета концентрации электронов в активной области. В строке 13 с помощью функции `getWaveFunction` (лист. 2.4) рассчитываются волновые функции «левых» и «правых» волновых функций. В строках 15, 16 рассчитывается плотность вероятности «левых» и «правых» электронов. В строках 20, 21, 23, 24, 26 рассчитывается концентрация «левых» и «правых» электронов. В строках 29, 30 производится инициализация подинтегральной функции и дальнейшее численное интегрирование.

В строках 32, 33 задается потенциал в левом и правом резервуаре. В строках 35, 36 инициализируется концентрация электронов в левом и правом резервуаре. В строках 38-41 и 43-46 расположены циклы, рассчитывающие концентрацию электронов в левом и правом резервуарах.

В строке 48 формируется массив концентрации вдоль всей гетероструктуры.

Для решения уравнения Пуассона (1.46) в среде MATLAB была реализована функция `solvePoissonEq` (лист. 2.10).

Входные данные: напряжение смещения, сетка самосогласованного потенциала, сетка концентрации электронов вдоль гетероструктуры, сетка относительной диэлектрической проницаемости, сетка концентрация ионизированной донорной примеси, шаг сетки.

Выходные данные: сетка приближения самосогласованного потенциала.

```

1 function Vnew = solvePoissonEq(dU, Vold, nold, eps, Ni, dx)
2     e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
3     k_B = 1.38e-23; eps0 = 8.85e-12;
4
5     T = 300;
6     Vref = k_B*T*JtoEv;
7
8     lenV = length(Vold);
9
10    d1 = [ones(1, lenV-2), 0];
11
12    d2 = ...
13        -1 ...
14        -(eps(1:end-2)./eps(3:end)) ...
15        -e*dx^2/(eps0*Vref)./eps(3:end).*nold(2:end-1);
16    d2 = [1, d2, 1];
17
18    d3 = eps(1:end-2)./eps(3:end);
19    d3 = [0, d3];
20
21    dfree = ...
22        e/eps0*dx^2 ...
23        ./eps(1:end-2) ...
24        .*(nold(2:end-1).*(1-Vold(2:end-1)/Vref)-Ni(2:end-1));
25    dfree = [0, dfree, dU*JtoEv]';
26
27    Matrix = diag(d1, -1) + diag(d2) + diag(d3, 1);
28    Vnew = (Matrix\dfree)';
29 end

```

Листинг 2.10 — Решение уравнения Пуассона

В строке 2 задаются: заряд электрона и константы перевода из эВ в Дж и наоборот. В строке 3 задаются постоянная Дирака и константа Больцмана. В строке 5 задается температура системы. В строке 9 записывается размер сетки.

В строках 10-25 формируется конечно-разностная схема (2.27), (2.28), которая соответствует самосогласованному решению системы Шредингера-Пуассона (1.54). В строках 27, 28 инициализируется матрица соответствующая конечно-разностной схеме (2.27), (2.28) и находится новое приближение самосогласованного потенциала.

3 Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

Вольт-амперная характеристика РТГС зависит от ее конструктивных и физических параметров:

- Ширина («с») потенциальной ямы (ПЯ) ;
- Глубина ПЯ;
- Ширина («b») потенциальных барьеров (ПБ);
- Ширина («с») спейсеров.

Далее будет рассмотрена РТГС, изображенная на рис. 3.1. После изучения влияния изменения основных параметров РТГС на ее ВАХ, причины и доминирующие факторы будет легче трактовать.

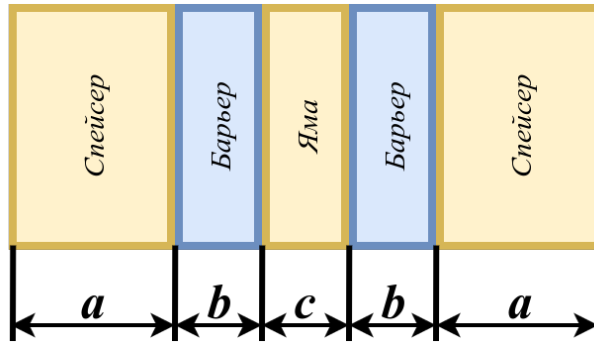


Рисунок 3.1 — Модель РТГС

В работе [12] так же исследована деградация отдельных параметров РТГС. Каждый фактор влияет на ВАХ по-разному.

3.1 Исследование параметров ямы

Энергетический спектр в бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}; \quad (3.1)$$

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (2n + 1); \quad (3.2)$$

$$\Delta E_1 = \min(\Delta E_n) = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad (3.3)$$

где E_n — энергия n -ого связанного состояния;
 \hbar — постоянная Дирака;
 n — номер $(1, 2, \dots)$ связанного состояния;
 L — ширина ямы.

Из зависимостей 3.1, 3.3 видно, что с увеличением ширины ямы, энергия основного состояния уменьшается ($n = 1$), так же, как и минимальное расстояние, между энергетическими уровнями. Условие размерного квантования для потенциальной ямы:

$$\Delta E_1 \gg 3k_B T. \quad (3.4)$$

В случаи ямы с конечной высотой, энергия основного и остальных состояний понижается, при этом минимальная высота барьера ограничивает состояние с максимальной энергией. В потенциальной яме конечной высоты всегда будет хотя бы одно связанное состояние.

3.1.1 Исследование глубины ямы

Варьирую процентное содержание Al в $Al_xGa_{1-x}As$, можно изменять высоту барьеров и глубину ямы соответственно. Рассмотрим вольт-амперную характеристику и прозрачность резонансно-туннельной структуры.

Так как в ходе деградации ГС высота барьеров будет уменьшаться, так как атомы Al будут диффундировать в структуру из барьеров, рассмотрим РГТС (рис. 1.8) с высотой потенциальных барьеров:

- а) $1.0eV$;
- б) $0.7eV$;
- в) $0.5eV$;
- г) $0.3eV$.

3.1.1.1 Прозрачность РГТС

Как видно из рис. 3.2 уменьшение высоты барьеров ведет к повышению резонансного уровня и увеличению коэффициента прозрачности исследуемой РГТС.

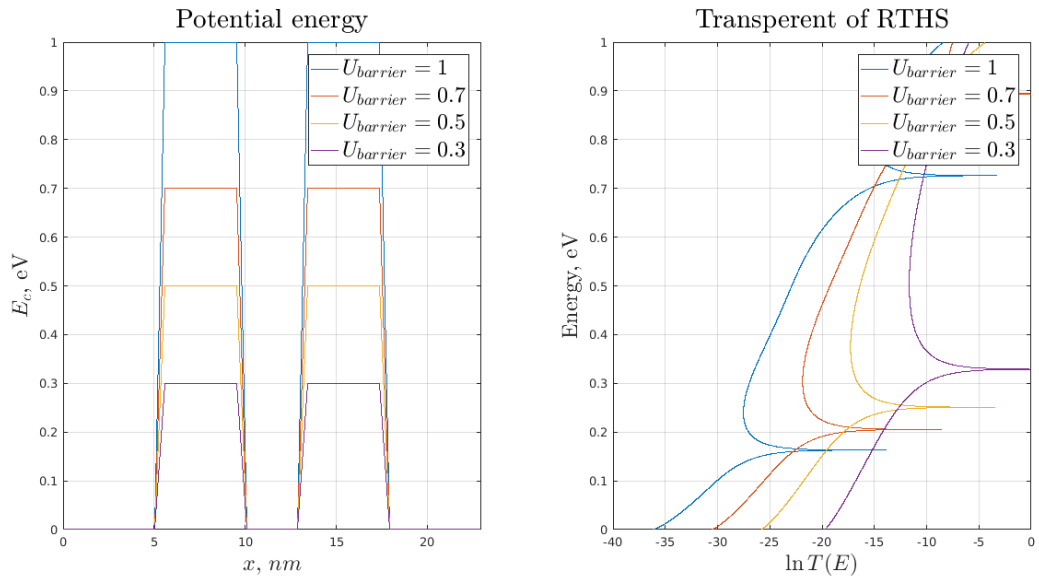


Рисунок 3.2 — Прозрачность РТГС при различных высотах потенциального барьера

3.1.1.2 ВАХ РТГС

Поднятие резонансного уровня на рис. 3.2 увеличило напряжение, при котором достигается пиковое значение тока. Увеличение коэффициента прозрачности повысило пиковое значение тока на один порядок с изменением высоты барьеров на 0.2эВ (рис. 3.3).

3.1.2 Исследование ширины ямы

Уменьшая или увеличивая количество монослоев, мы варьируем ширину ямы в РТГС. Минимальная разница между соседними уровнями и энергия этих уровней уменьшаются с увеличением ширины ямы (см. (3.1) – (3.3)).

Для исследования влияния ширины ямы, рассмотрим следующий ряд ширины ям «с»:

- а) 10 монослоев;
- б) 7 монослоев;
- в) 5 монослоев;
- г) 3 монослоев.

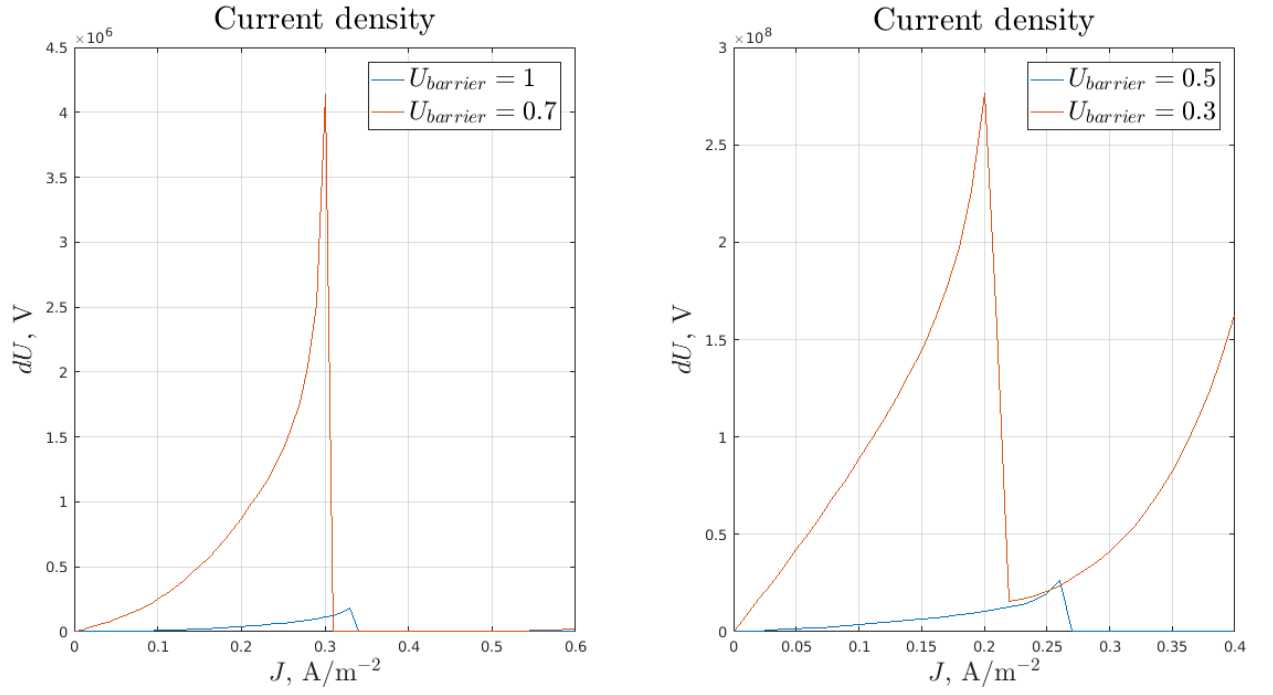


Рисунок 3.3 — Плотность тока через РТГС при различных высотах потенциального барьера

3.1.2.1 Прозрачность РТГС

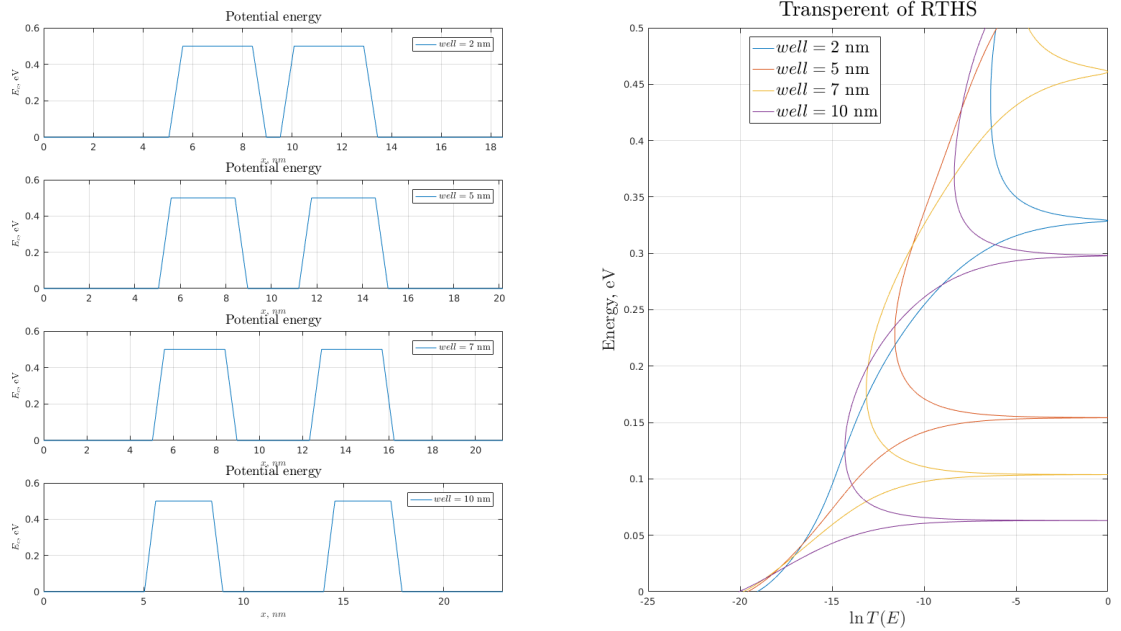


Рисунок 3.4 — Прозрачность РТГС при различных ширинах потенциальной ямы

С уменьшением ширины ямы высота резонансного уровня подымается, при этом прозрачность ГС остается прежней. Резонансный уровень

при ширине 2 нм и второй резонансный уровень при ширине ПЯ в 10 нм практически совпадают.

3.1.2.2 ВАХ РТГС

Увеличение ширины ямы уменьшает напряжение достижения пикового тока, при этом значение величина тока не изменяет порядок его величины (рис. 3.5).

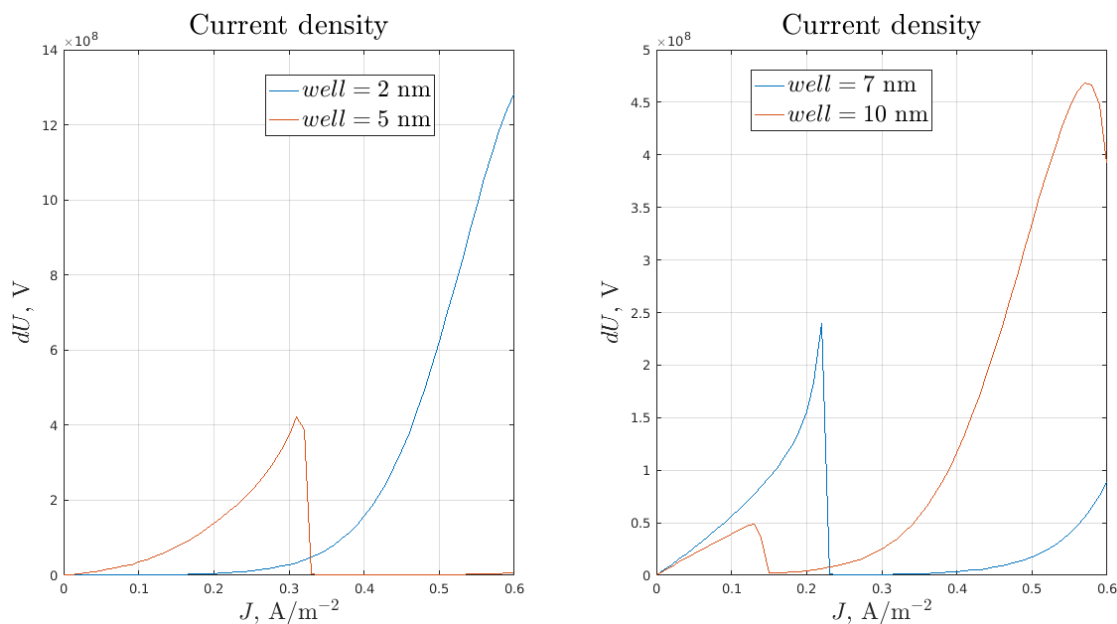


Рисунок 3.5 — Плотность тока через РТГС при различных ширинах потенциальной ямы

3.1.3 Вывод

Глубина ямы влияет на величину тока, причем пиковое напряжение изменяется не значительно. Значительное влияние на смещение пикового напряжения оказывает изменение ширины ПЯ.

3.2 Исследование параметров барьеров

3.2.1 Исследование ширины барьеров

Ширина барьеров уменьшает вероятность прохождения электрона сквозь барьер и величину тока соответственно.

Рассмотрим РТГС с шириной барьеров «b»:

- а) 10 монослоев;
- б) 7 монослоев;
- в) 5 монослоев;
- г) 3 монослоев.

3.2.1.1 Прозрачность РТГС

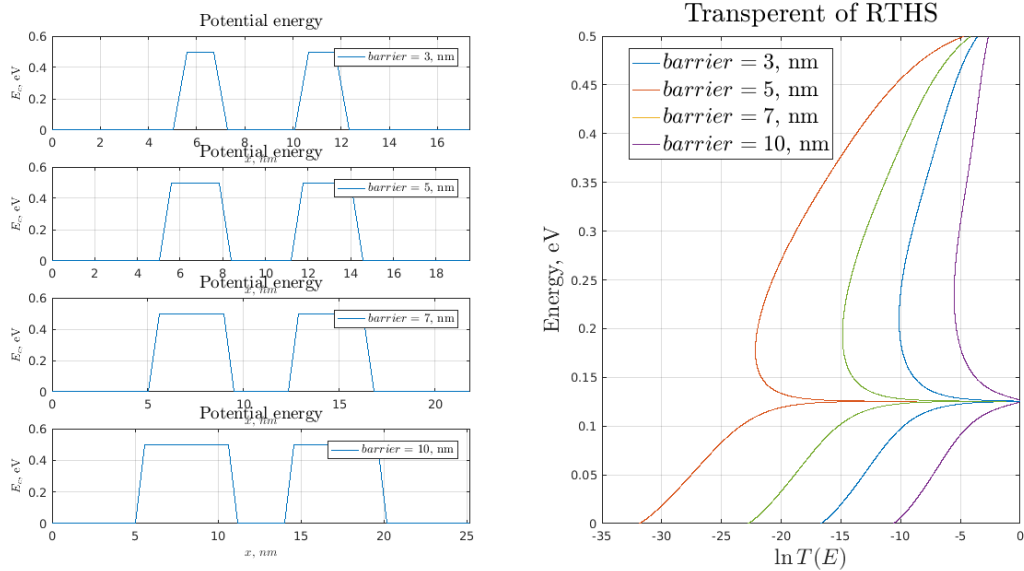


Рисунок 3.6 — Прозрачность РТГС при различных ширинах потенциальных барьеров

Как видно на рис. 3.6 изменение ширины барьеров не сказывается на высоту резонансного уровня, а влияет только на прозрачность ГС. Увеличение ширины уменьшает прозрачность РТГС.

3.2.1.2 ВАХ РТГС

Пиковое значения тока изменяется значительно при изменении ширины потенциальных барьеров.

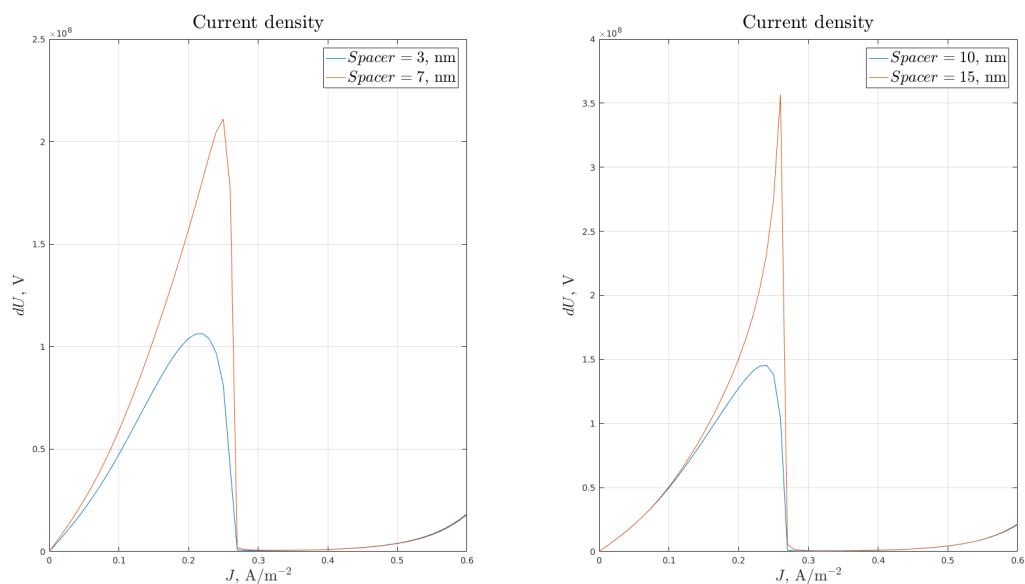


Рисунок 3.7 — Плотность тока через РТГС при различных ширинах потенциальных барьеров

3.2.2 Вывод

Уменьшение ширины барьеров увеличивает пиковое значение тока, причем изменение ширины барьера на 2 нм уменьшает величину тока на порядок.

3.3 Исследование параметров спейсеров

Спейсер предназначен для отделения высоколегированной области вырожденного полупроводника от активной. Диффундируя донорная примесь изменяла бы зонную структуру активной (квантовой) области. Так же спейсер препятствует накоплению заряда вблизи барьеров, что влияет на пиковое напряжение и ток.

3.3.1 Исследование влияния размеров спейсера

Рассмотрим спейсеры «а»:

- 3 монослоя;
- 7 монослоя;
- 10 монослоя;
- 15 монослоя.

3.3.1.1 Прозрачность РТГС

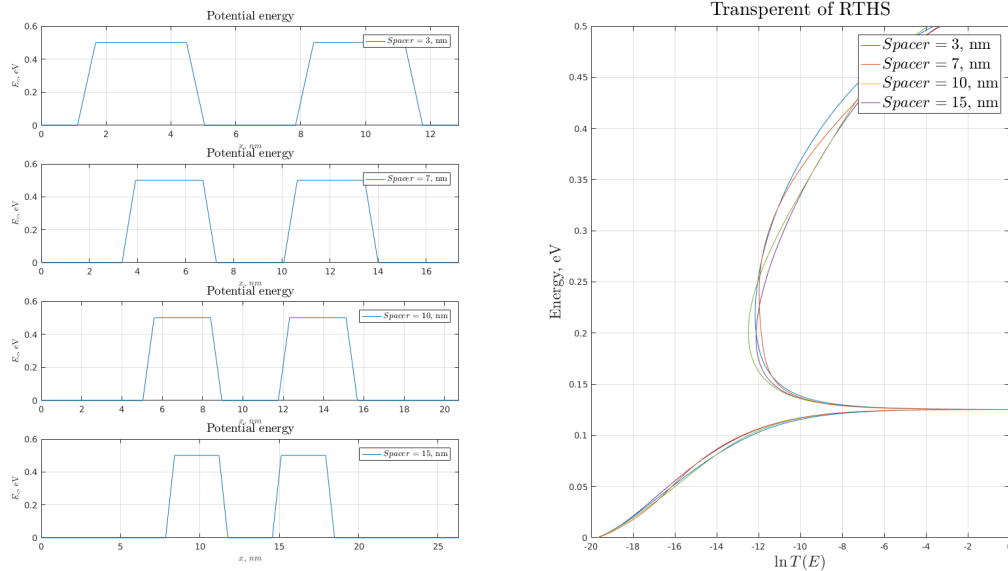


Рисунок 3.8 — Прозрачность РТГС при различной ширине спейсеров

Прозрачность гетероструктуры изменяется незначительно.

3.3.1.2 ВАХ РТГС

Увеличение размеров спейсера ведет к незначительному (порядок не изменяется), а пиковое напряжение не смещается.

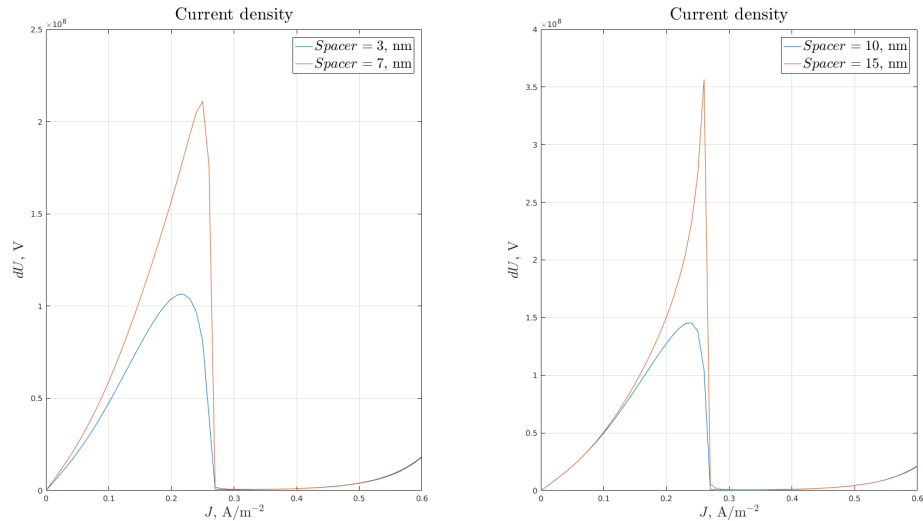


Рисунок 3.9 — ВАХ РТГС при различной ширине спейсеров

3.3.1.3 Учет перераспределения зарядов

Величина спейсера влияет на накопление заряда вблизи барьеров. Данный эффект сдвигает пиковое напряжение и увеличивает его.

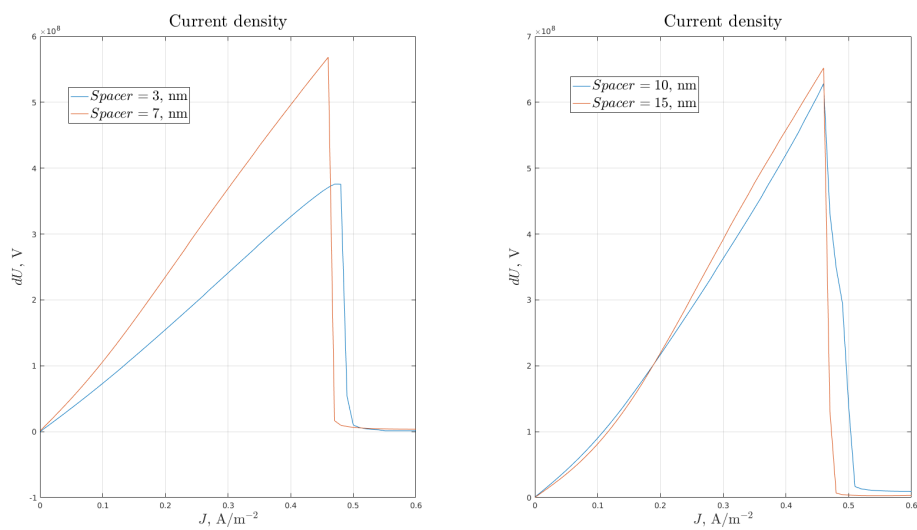


Рисунок 3.10 — ВАХ РТГС при различной ширине спейсеров с учетом перераспределения заряда

3.3.2 Вывод

Из полученных зависимостей видно, что размеры спейсера с учетом перераспределения заряда влияют на ВАХ РТГС при размера менее, чем несколько монослоев. При больших размерах ток через РТГС уменьшается незначительно, так же, как и пиковое напряжение.

4 Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

На основе выше исследованных параметров и полученных моделей получим модель деградации РТГС на основе $AlGaAs$.

В схема исследуемой на диффузионное расплытие модели приведена на рис.4.1

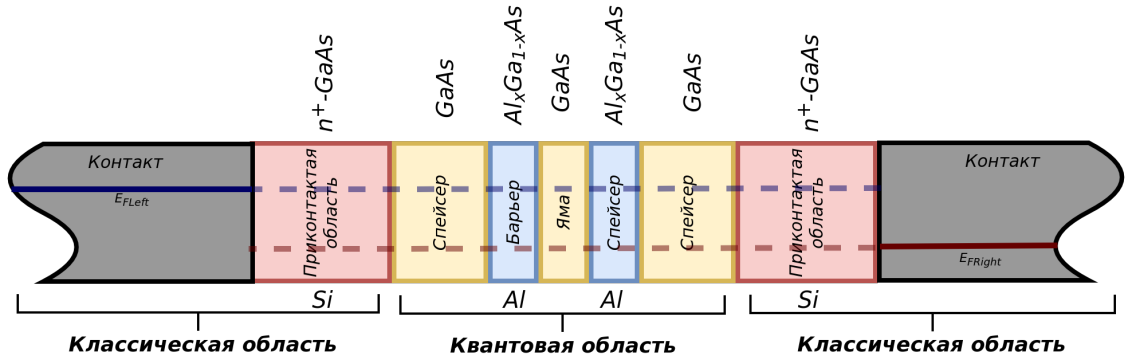


Рисунок 4.1 — Структура РТГС для моделирования диффузии

В данной модели возможны:

- Диффузия Al из барьеров в яму;
- Диффузия Si из приконтактных областей в активную область.

Рассмотрим диффузионное расплытие активной области и проникновение легирующей примеси отдельно.

Размеры нашей модели:

- Спейсер: $a = 10$ монослоев;
- Барьер: $b = 6$ монослоев;
- Яма: $c = 6$ монослоев;

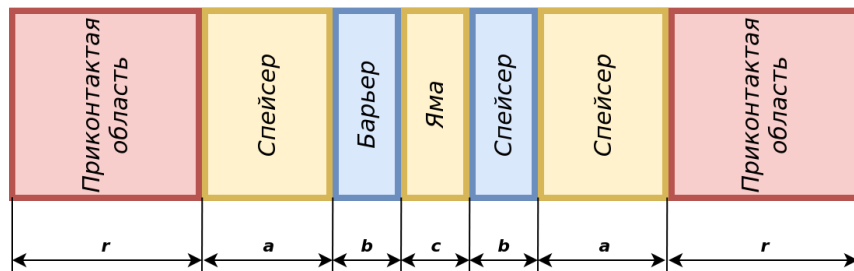


Рисунок 4.2 — Размеры РТГС

4.1 Диффузионное расплытие активной области

Диффузионное расплытие активной области в случае чистых полупроводников подчиняется (1.31). Коэффициент диффузии постоянен и скорость ухода части Al с границ активной области равен скорости их прихода – это соответствует конечно-разностной схеме (2.12).

Температуру ГС (T) выберем равной 800 K . Время воздействия: 1, 5, 10 лет.

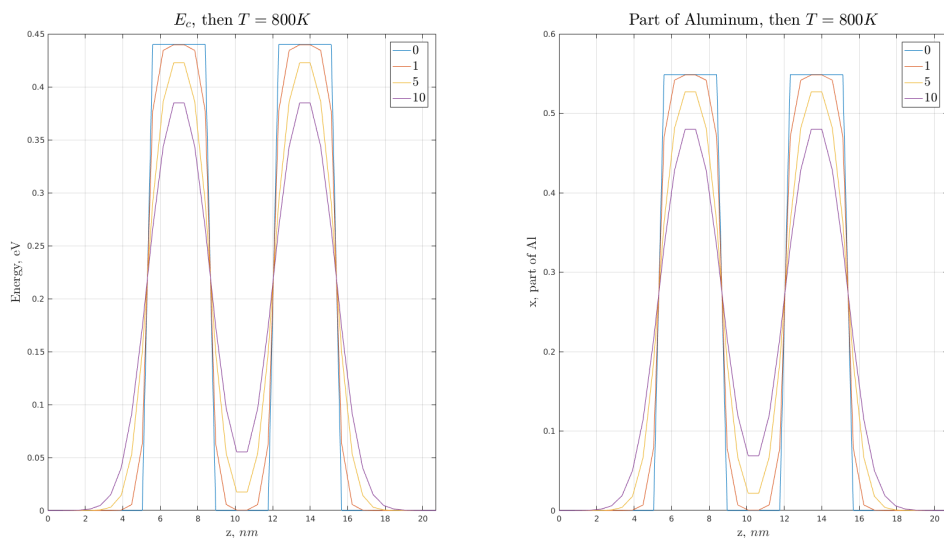


Рисунок 4.3 — Расплытие потенциального рельефа чистого $Al_xGa_{1-x}As$

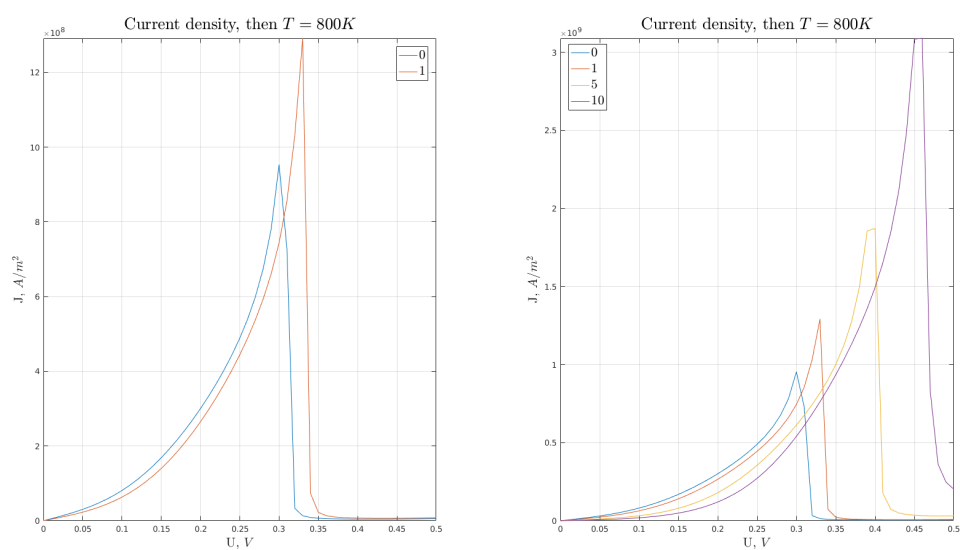


Рисунок 4.4 — Деградация тока через РГТС на основе чистого $Al_xGa_{1-x}As$

В процессе деградации ГС уменьшается ширина и глубина ПЯ (рис. 4.3).

Как видно из рис. 4.4 в результате деградации увеличивается пиковое напряжение и величина пикового тока, что соответствует ранее полученным результатам.

Так как невозможно получить чистый полупроводник, в нем всегда присутствует донорная примесь, которая увеличивает скорость диффузии, что соответствует (1.32).

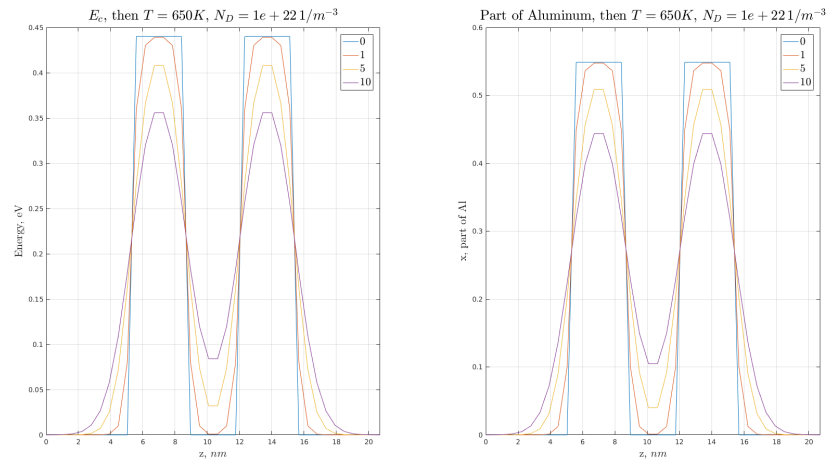


Рисунок 4.5 — Расплывание потенциального рельефа $Al_xGa_{1-x}As$ при наличии донорной примеси $N_D = 10^{22} \text{ 1/m}^3$

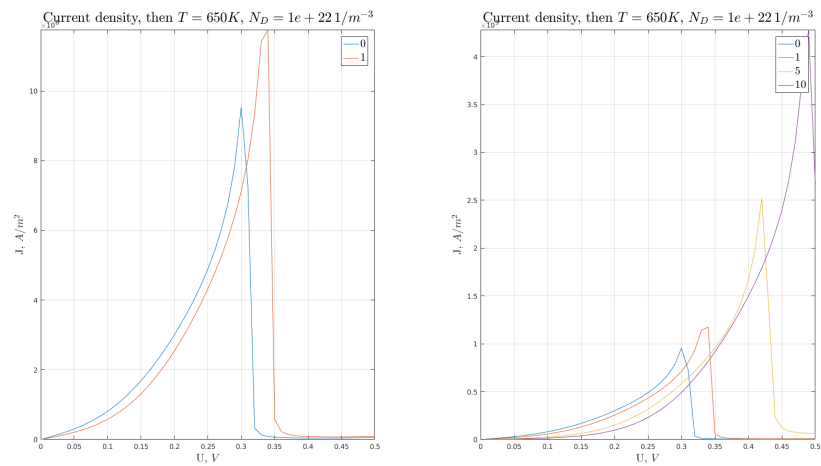


Рисунок 4.6 — Деградация тока через РГТС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ при наличии донорной примеси $N_D = 10^{22} \text{ 1/m}^3$

Аналогичный результат деградации (рис. 4.5) был получен при меньшей температуре $T = 650K$ и концентрации донорной примеси (N_D) 10^{22} 1/m^3 .

4.1.1 Вывод

В процессе деградации преобладающими факторами деградации ВАХ РТГС являются: уменьшение глубины и ширины ПЯ, которые увеличивают пиковое напряжение и пиковый ток.

Наличие донорной примеси ускоряет процесс деградации ГС. При это из-за сильно экспоненциальной зависимости коэффициента диффузии скорость диффузии при комнатных температурах не существенна ($T = 300K$).

4.2 Диффузия легирующей примеси

Приконтактные области выполняют роль резервуаров электронов. Они сильно легированы. Концентрация донорной примеси в них $N_D = 10^{24} \text{ m}^{-3}$. В случае РТГС, представленной на рис. 2.10 на основе AlGaAs в роли донорной примеси выступает Si .

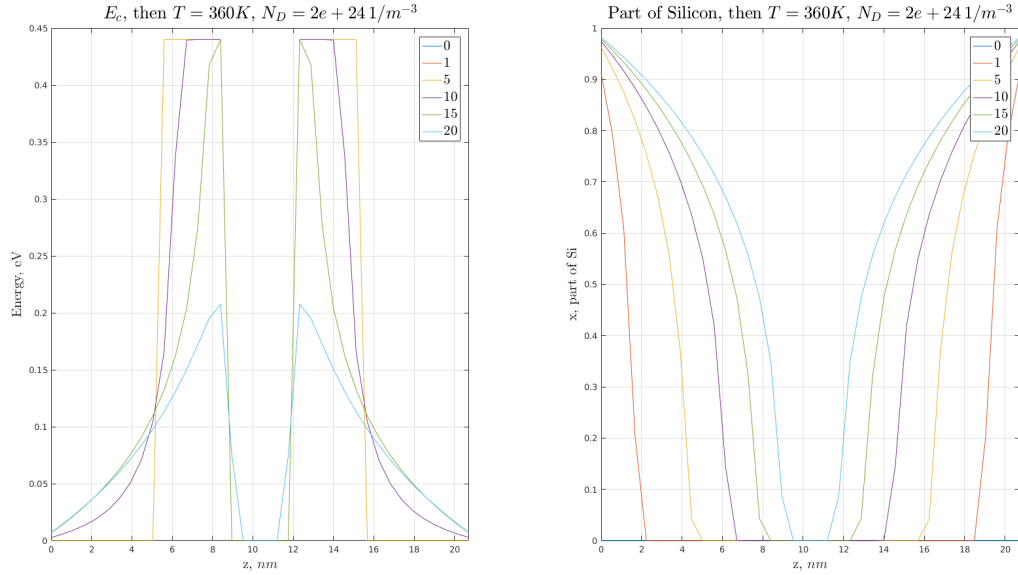


Рисунок 4.7 — Расплывание потенциального рельефа $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и Si из приконтактных областей

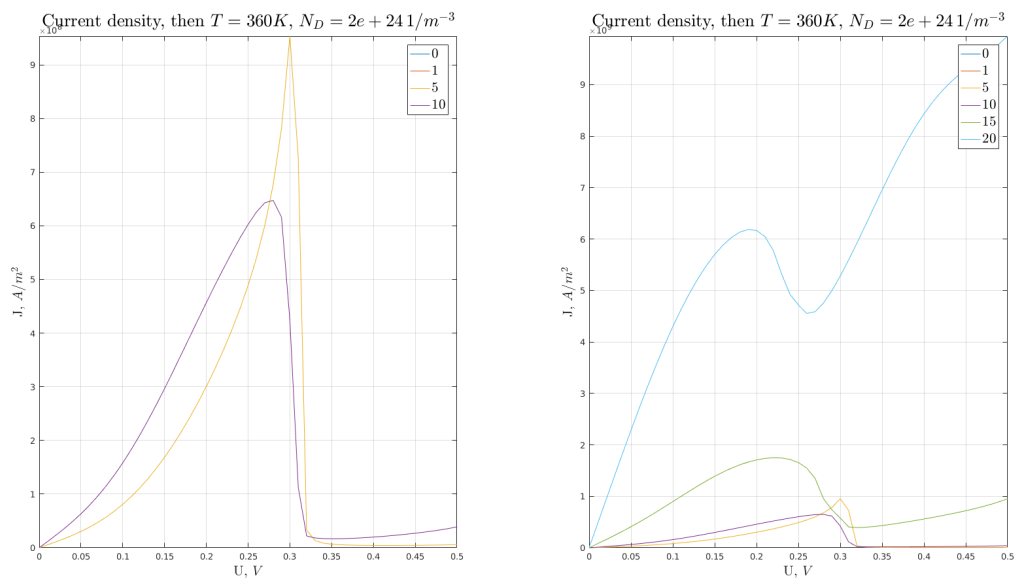


Рисунок 4.8 — Деградация тока через РТГС

Повышение температуры на 60 приводит к значительной деградации, причем в первые 5 лет деградации подвержены спейсеры, которые предохраняют РТГС от деградации ВАХ, в соответствии с результатами полученными ранее.

Заключение

В работе был рассмотрен математический аппарат для моделирования различных физических процессов, в том числе:

- Токоперенос;
- Самосогласованное решение уравнение Пуассона-Шредингера;
- Не стационарное уравнение диффузии.

Была рассмотрена РТГС на основе $AlGaAs$ и исследованы влияния ее основных параметров на ВАХ:

- Глубина ПЯ;
- Ширина ПЯ;
- Ширина ПБ;
- Ширина спейсеров.

На основе полученных данных была исследована деградация РТГС и выявлено, что доминирующим фактором, влияющим на деградацию ВАХ РТГС является диффузия донорной примеси из приконтактных областей.

Список использованных источников

1. *Бонч-Бруевич, В. Л.* Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. — М.: Мир, 1977. — 678 с.
2. *Шиляев, П.А.* Полупроводниковые гетероструктуры — гетеропереход: учебно-методическое пособие / П.А. Шиляев, Д.А. Павлов. — Н.Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2009. — 18 с.
3. *Шинкаренко, В. Г.* Электрические свойства полупроводников: учебно-методическое пособие / В. Г. Шинкаренко. — М.: МФТИ, 2012. — 80 с.
4. *Harrison, W. A.* Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond / W. A. Harrison. — Massachusetts: Courier Corporation, 2012. — 582 pp.
5. *Усанов, Д. А.* Физические основы нанoeлектроники / Д. А. Усанов, А. В. Скрипаль. — Саратов: ил. Электронное издание, 2013. — 128 с.
6. *Москалюк, В. А.* Сверхбыстродействующие приборы электроники / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев, А. В. Федяй. — К.: НТУУ «КПИ», 2012. — 479 с.
7. *Макеев, М.О.* Оценка стойкости к диффузионной деструкции наноразмерных AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктур методом ИК-спектральной эллипсометрии / М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков // *Физика и техника полупроводников*. — 2016.
8. *Макеев, Мстислав Олегович.* Разработка конструкторско-технологических методов и средств повышения надёжности смесителей радиосигналов на основе резонансно-туннельных диодов: автореф. дис. канд. техн. наук : 05.11.14 / Мстислав Олегович Макеев. — М., 2014. — 17 с.
9. Diffusion in GaAs and Related Compounds: Recent Developments / U. Gosele, T. Y. Tan, M. Schultz et al. // *Defect and Diffusion Forum*. — 1997. — Pp. 143–147.
10. *Самарский, А. А.* Введение в численные методы / А. А. Самарский. — М.: Наука, 1987. — 288 с.

11. *Becker, T. W.* Numerical Modeling of Earth Systems / Т. W. Becker, J. P. Kaus. — California: USC, 2016. — 222 pp.
12. *Ветрова, Н. А.* Определение управляемых параметров для конструкторско-технологической оптимизации СВЧ смесителей радиосигналов на резонансно-туннельных диодах по критерию их надежности / Н. А. Ветрова, В. Д. Шашурин, Н. В. Назаров // *Наука и образование.* — 2011.

Приложение А Диффизия в закрытой и откры- той системе

```
1 clear; clc;
2
3 e = 1.6e-19; eVtoJ = e; JtoEv = e^(-1);
4 me = 9.11*1e-31; nm = 1e-9;
5
6 checkTime = 0 : 5; %years
7
8 dx = 1; %nm
9
10 a = 10; % monolayers
11 b = 30;
12
13 sizeHS = a + b + a;
14
15 grid_x_Al = [
16     zeros(1, a), ...
17     ones(1, b), ...
18     zeros(1, a)
19 ];
20
21 nSi = 1e24;
22
23 [~, ~, grids_C_Al] = getDiffCloseAlGaAs( grid_x_Al, checkTime, dx*nm, 920 );
24 showResult(dx, sizeHS, grids_C_Al, 'Close Diffusion System', checkTime); %img 2.5
25
26 [~, ~, grids_C_Al] = getDiffOpenAlGaAs( grid_x_Al, checkTime, dx*nm, 920 );
27 showResult(dx, sizeHS, grids_C_Al, 'Open Diffusion System', checkTime); %img 2.7
28
29 [~, ~, grids_C_Al, grids_C_Si] = getDiffAlGaAs_Si(grid_x_Al, checkTime, dx*nm, 430, nSi);
30 showResultSi(dx, sizeHS, grids_C_Al, grids_C_Si, 'Not Constant $D$', checkTime); %img 2.9
```

Листинг А.1 — Функция расчета диффузионного распытия атомов Al в
«открытой» системе $i-Al_xGa_{1-x}As$