

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н. Э. БАУМАНА

ФАКУЛЬТЕТ «РАДИОЭЛЕКТРОНИКА И ЛАЗЕРНАЯ ТЕХНИКА»

КАФЕДРА «ТЕХНОЛОГИИ ПРИБОРОСТРОЕНИЯ»



ДОКЛАД

НА ТЕМУ

---

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ПРИМЕРЕ РТГС

---

# 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 . . . . .	14
1.2.3 Одномерное тело . . . . .	14
1.3 Гетероструктура . . . . .	16
1.3.1 Зонная диаграмма гетероперехода . . . . .	16
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 . . . . .	19
1.5 Диффузия . . . . .	19
1.5.1 Законы Фика . . . . .	20
1.5.2 Механизмы диффузии . . . . .	20
1.5.3 Коэффициент диффузии . . . . .	20
1.6 Токоперенос через ГС . . . . .	22
1.6.1 Уравнение Шредингера . . . . .	23
1.6.2 Учёт распределения заряда . . . . .	24
2 Математический аппарат для моделирования . . . . .	27
2.1 Метод конечных разностей . . . . .	27
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	29

2.3	Метод конечных разностей для расчета токоперенос через гетероструктуру . . . . .	31
2.4	Метод конечных разностей для самосогласованного решение системы Шредингера–Пуассона . . . . .	32
3	Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ . . . . .	34
3.1	Исследование параметров ямы . . . . .	34
3.1.1	Исследование глубины ямы . . . . .	34
3.1.1.1	Прозрачность РТГС . . . . .	35
3.1.1.2	ВАХ РТГС . . . . .	35
3.1.2	Исследование ширины ямы . . . . .	35
3.1.2.1	Прозрачность РТГС . . . . .	36
3.1.2.2	ВАХ РТГС . . . . .	36
3.2	Исследование парметров барьеров . . . . .	38
3.2.1	Исследование ширины барьеров . . . . .	38
3.2.1.1	Прозрачность РТГС . . . . .	38
3.2.1.2	ВАХ РТГС . . . . .	38
3.3	Исследование парметров спейсеров . . . . .	40
3.3.1	Исследование влияния размеров спейсера . . . . .	40
3.3.1.1	ВАХ РТГС . . . . .	40
3.3.1.2	Прозрачность РТГС . . . . .	40
3.3.1.3	Концентрация электронов в РТГС . . . . .	40
4	Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ . . . . .	41
4.1	Дуффузионное расплытие активной области . . . . .	41
4.2	Диффузия легирующей примесита . . . . .	45

## Введение

### **Цель работы:**

- а) Изучение процессов деградации гетероструктур.

### **Задача работы:**

- а) 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 [?]:

- 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.

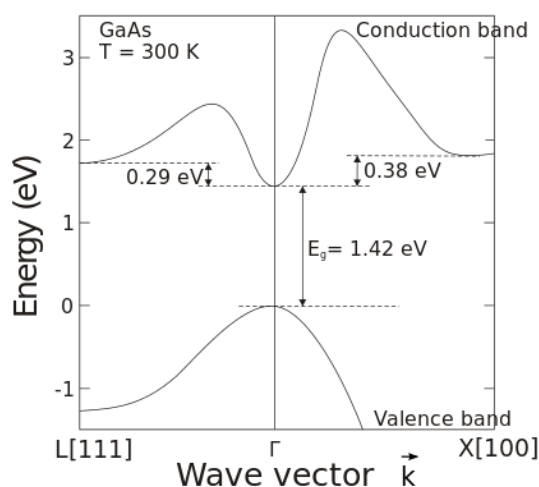


Рисунок 1.1 — Зонная структура *GaAs*

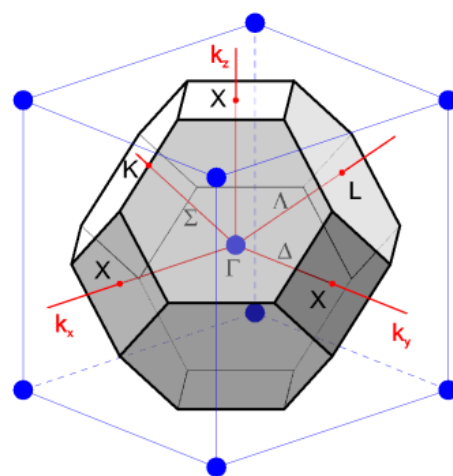


Рисунок 1.2 — Элементарная ячейка типа Цинковой обманки

### 1.1.2 Зонная диаграмма

Для наглядного представления и сравнения полупроводников и других материалов удобно использовать зонную диаграмму (рис. 1.3).

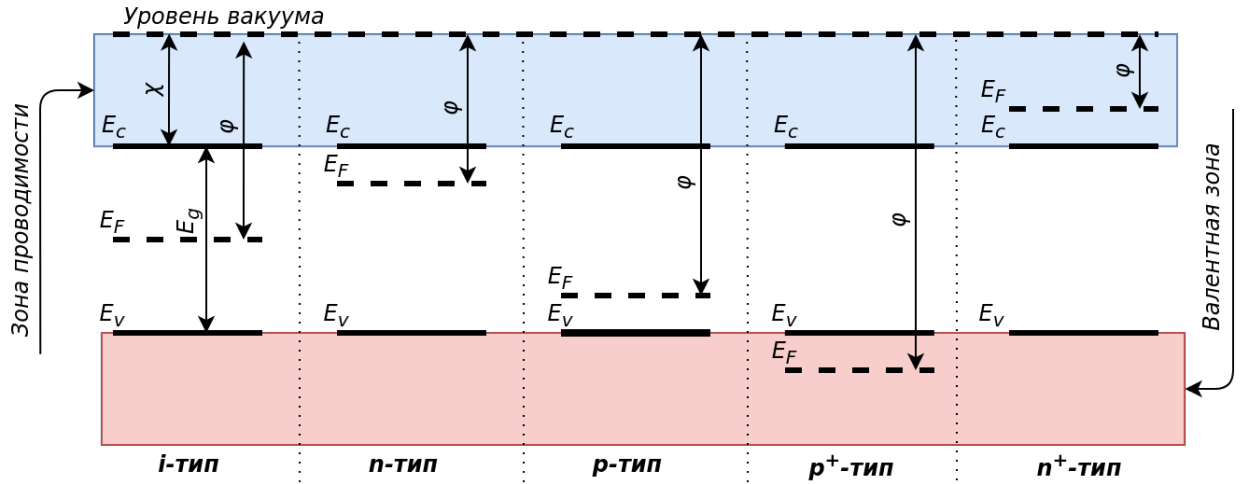


Рисунок 1.3 — Характерный вид зонной диаграммы для различных материалов

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

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

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

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

### 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:

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

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

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

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

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  $E$ .

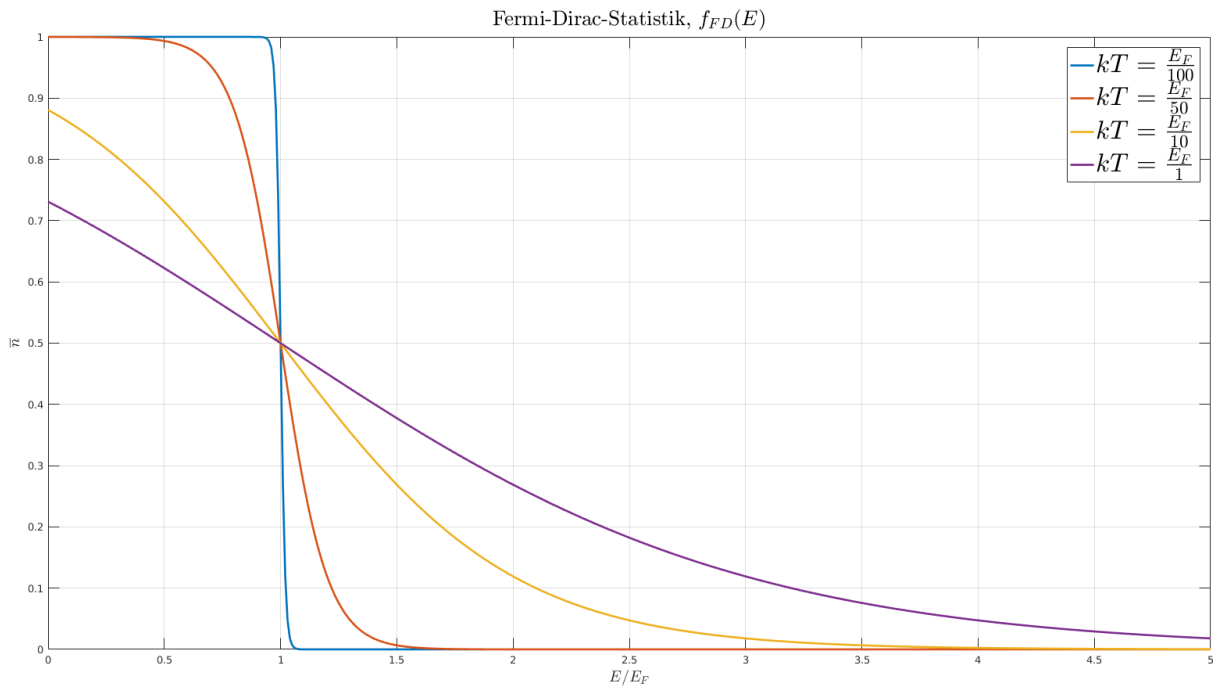


Рисунок 1.4 — Статистика Ферми-Дирака



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:

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

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

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:

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

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

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.

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

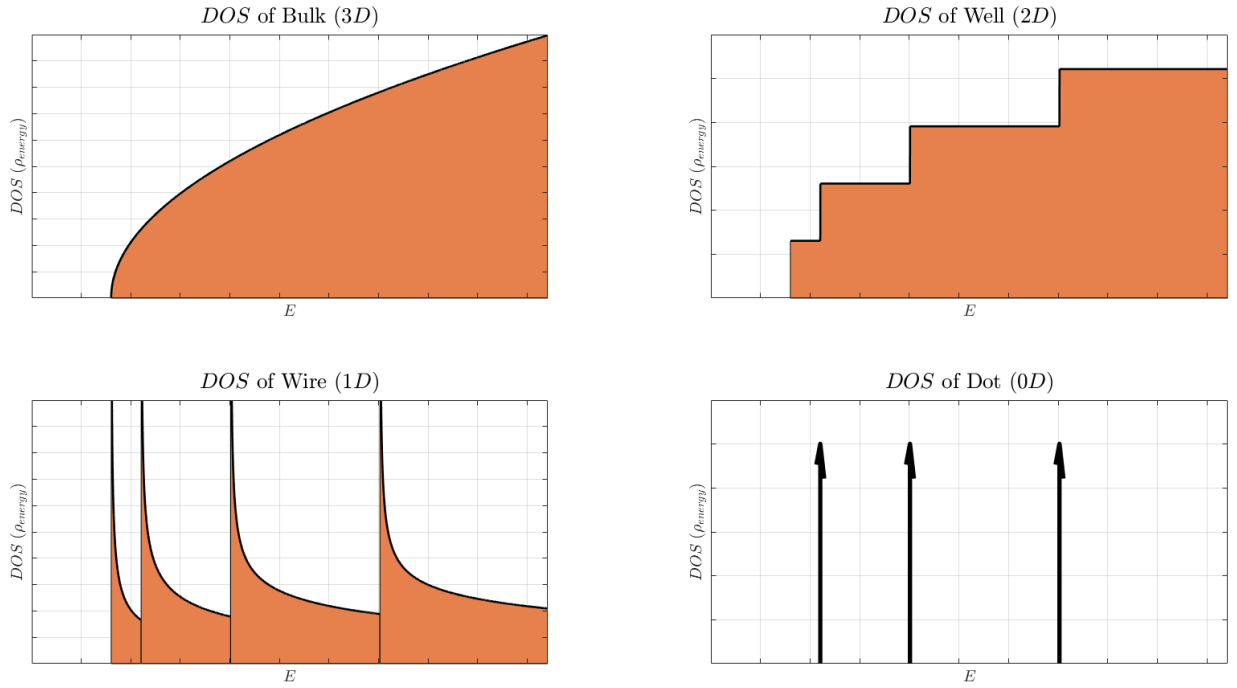


Рисунок 1.5 — Плотность состояний в 3D, 2D, 1D, 0D, где  $g(E) = \rho_{energy}$

### 1.2.1 Трехмерное тело

Рассмотрим 3D кристалл (bulk) на рис. 1.6:

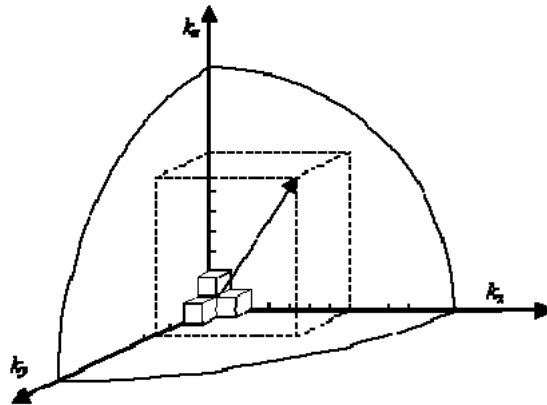


Рисунок 1.6 —  $k$ -пространство (шар)

Число состояний частицы  $G(E)$  и плотность состояний  $g(E)$ , энергия которых не превышает некоторого фиксированного значения  $E$ , нахо-

дятся 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. 1.7:

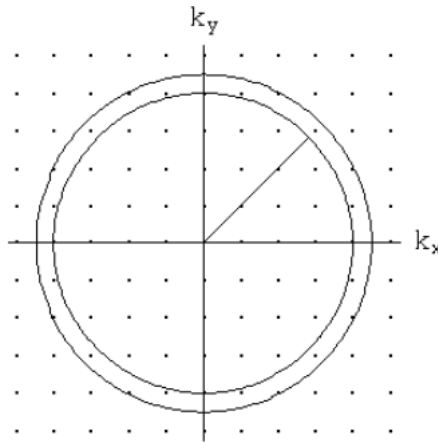


Рисунок 1.7 — k-пространство (круг)

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

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

### 1.2.3 Одномерное тело

Рассмотрим 1D кристалл (wire) на рис. 1.8:

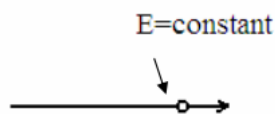


Рисунок 1.8 — k-пространство (линия)

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

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

$J_z$  — 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 образование ГП — совпадающие постоянные кристаллических решетки, образующими монокристалл, однородный в контакте, кристалл. Наиболее распространенные полупроводники для составления ГС:

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

#### 1.3.1 Зонная диаграмма гетероперехода

#### 1.3.2 Резонансно–туннельная гетероструктура

Резонансно–туннельная гетероструктура (РТГС) — это ГС, токоперенос в которой осуществляется благодаря резонансному туннелированию.

РТГС является ярким примером размерного квантования. Барьеры и ямы на рис. 1.9 образуют потенциальную яму, в которой электронный газ имеет дискретные уровни энергии по одной координате и становится 2D электронным газом.

Структурные части РТГС (рис. 1.9):

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

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





Рисунок 1.9 — Структурная схема устройства с РТГС

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.1.10

Зонная структура такой РТГС представлена на рис.1.11. Меняя процентное содержание  $Al$  в  $Al_xGa_{1-x}As$ , мы можем получать необходимую высоту барьеров.

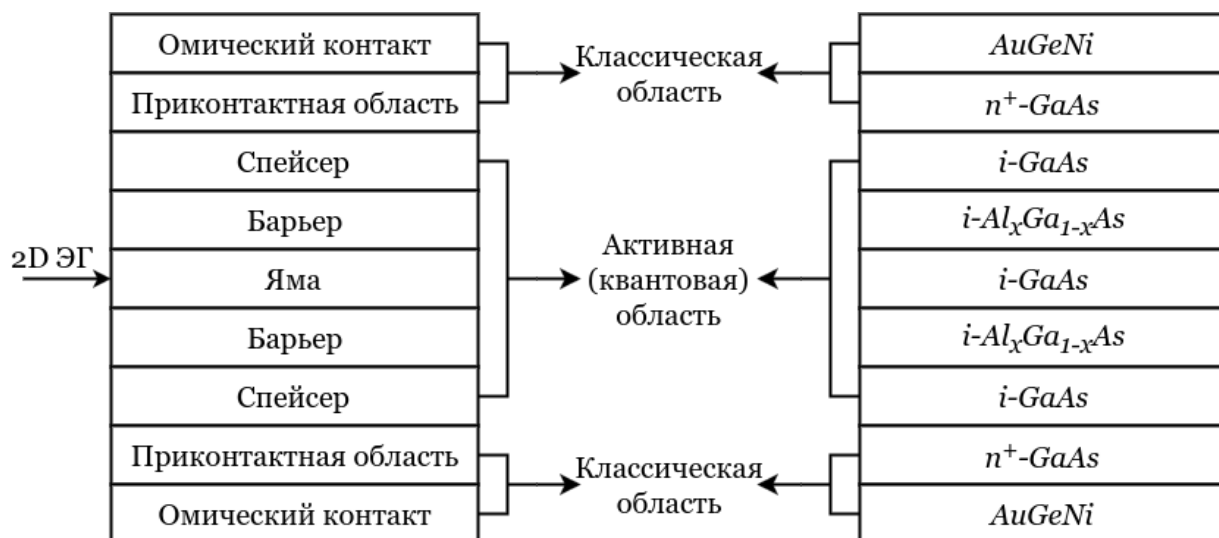


Рисунок 1.10 — Структурная схема устройства с РТГС на основе  $Al_xGa_{1-x}As$

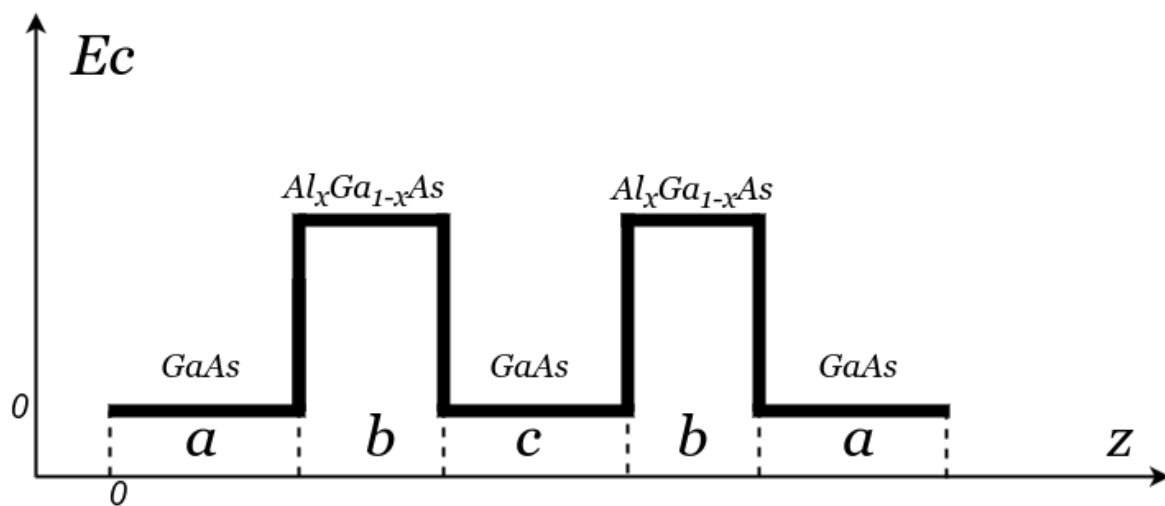


Рисунок 1.11 — Зонная структура РТГС на основе  $Al_xGa_{1-x}As$

## 1.4 Деградация приборов на основе гетероструктур

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

Изучая деградацию ГС рассматривают следующие параметры:

- Вольт-амперная характеристика (ВАХ);
- Высота потенциального барьера (ПБ);
- Ширина потенциального барьера;
- Ширина потенциальной ямы (ПЯ);
- Т.д...

ГС используют для построения резонансно-туннельный диод (РТД), квантовых точек (КТ), транзисторов с высокой подвижностью электронов (НЕМТ) и так далее.

Химический состав ГС определяет ее зонную структуру, из чего вытекают особенности работы тех или иных устройств на ГС.

Одна из причин деградации ГС — диффузионное размытие ГП, вызванное:

- Градиентом температуры;
- Градиентом концентрации;
- Градиентом давления;
- 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 [?], [?], [?], [?]:

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

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 (33) п/п.

## 1.6 Токоперенос 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:

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

где  $\psi$  — волновая функция электрона.

Будем рассматривать электроны, приходящие из левого контакта. Левому контакту соответствуют волновые функции  $\psi_L$ , а в правому —  $\psi_R$ .

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

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

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;  
 $\psi_I$  — волновая функция в  $I$  структуре;  
 $\psi_{II}$  — 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  $\varepsilon$  — относительная электрическая проницаемость;

$\varepsilon_0$  — 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 [?]:

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

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:

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

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

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

где  $\dot{y}_-$  — производная слева;

$\dot{y}_+$  — производная справа;

$\Delta x$  — приращение аргумента (шаг сетки).

$\Delta x$  — 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  $\Delta x$  будет использовать  $\Delta$ .

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

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

## 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:

$$\frac{\delta}{\delta t}C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2}C; \quad (2.5)$$

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

$$\frac{\delta}{\delta t}C_j^i = \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t}; \quad (2.6)$$

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

$$J_j^i = \frac{\delta}{\delta x}C_j^i = \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x}; \quad (2.7)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2}{\delta x^2}C_j^i &= \frac{\delta}{\delta x} \left[ \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} \right] = \frac{\frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x} = \\ &= \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}; \end{aligned} \quad (2.8)$$

Подставляя в (2.5) аппроксимацию производных (2.6), (2.8), получим связь  $C_j^{i+1}$  с  $C_j^i$ , т.е. изменение концентрации через  $\Delta t$ :

$$C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, \quad (2.9)$$

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

Уравнение (2.9) 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 ( $J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$ );
- б) «Открытая система» — поток частиц подходящий к границе равен потоку уходящих частиц ( $J_0^i = J_1^i, J_N^i = J_{N+1}^i$ ).

Для «закрытой системы» должно выполняться условие  $J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$ . Рассмотрим (2.7), (2.9) 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:

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = (1 - \lambda)C_N^i + \lambda C_{N-1}^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases} \quad (2.10)$$

Для «открытой» системы должно выполняться условие  $J_0^i = J_1^i, J_N^i = J_{N+1}^i$ . Рассмотрим (2.7), (2.8), (2.9) для точки  $j = 1$ :

$$J_0^i = J_1^i$$

$$\frac{C_1^{i+1} - C_1^i}{\Delta t} = \frac{J_1^i - J_0^i}{\Delta x} = \frac{0}{\Delta x} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow C_1^{i+1} = C_1^i;$$

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

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

### 2.2.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации

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

$$\frac{\delta}{\delta t}C = \frac{\delta}{\delta x}D\frac{\delta}{\delta x}C; \quad (2.12)$$

Тогда уравнение конечно-разностной схемы будет [?]:

$$\frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{D_{j+1/2}^i \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - D_{j-1/2}^i \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x}; \quad (2.13)$$

$$D_{j\pm 1/2}^i = \frac{D_j^i + D_{j\pm 1}^i}{2} = D_{j\pm}^i. \quad (2.14)$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i) C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N-1]; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i; \\ \lambda_-^i = D_{j-\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i. \end{array} \right. \quad (2.15)$$

### 2.3 Метод конечных разностей для расчета токопереноса через гетероструктуру

Конечно-разностная схема для уравнения Шредингера (1.45) [?]:

$$\psi_{i-1} \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} + \psi_i \left( \frac{2\Delta^2 m_{i+1}^*}{\hbar^2} (E - U_i) - \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} - 1 \right) + \psi_{i+1} = 0, \quad (2.16)$$

где  $m_i^*$  — эффективная масса в точке  $i$ ;

$\psi_i$  — волновая функция в точке  $i$ ;

$E$  — энергия электрона;

$U_i$  — потенциальная энергия в точке  $i$ ;

$\Delta$  — шаг сетки.

Данная схема подходит для любой внутренней точки гетероструктуры, но не подходит для граничных точек. Граничные условия, для «левых» и «правых» электронов:

$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L\Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R\Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases} \quad (2.17)$$

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

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

## 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 ( $V_S$ ):

$$n(z) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \exp \frac{E_F - E_c + eV_s(z)}{k_B T} = n_0 \exp \frac{V_S(z)}{V_{ref}}; \quad (2.19)$$

$$n_0 = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \exp \frac{E_F - E_c}{k_B T}; \quad (2.20)$$

$$V_{ref} = \frac{k_B T}{e}, \quad (2.21)$$

где  $V_s$  — самосогласованный потенциал;

$V_{ref}$  — опорный потенциал;

$m$  — эффективная масса электрона.

Тогда связь «старого» и «нового» потенциала:

$$\begin{cases} n_{old} = n_0 \exp \frac{V_{old}}{V_{ref}}; \\ n_{new} = n_0 \exp \frac{V_{new}}{V_{ref}}; \end{cases} \quad (2.22)$$

$$n_{new} = n_{old} \exp \frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}}; \quad (2.23)$$

Подставляя (2.23) в (1.54):

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d}{z} V_{new} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[ n_{old} \exp \left( \frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}} \right) - N_D(z) \right]; \quad (2.24)$$

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

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d}{z} V_{new} - n_{old} \frac{e V_{new}}{\varepsilon_0 V_{ref}} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[ n_{old} \left( 1 - \frac{V_{old}}{V_{ref}} \right) - N_D(z) \right]; \quad (2.25)$$

Применяя метод конечных разностей, получим:

$$\begin{cases} a^i V_{new}^{i-1} + b^i V_{new}^i + c^i V_{new}^{i+1} = \frac{e \Delta^2}{\varepsilon_0 \varepsilon^i} \left( n_{old}^i \left( 1 - \frac{V_{old}^i}{V_{ref}} \right) - N_D^i \right); \\ a^i = 1; \\ b^i = -1 - \frac{\varepsilon^{i+1}}{\varepsilon^i} - \frac{e \Delta^2 n_{old}^i}{\varepsilon_0 V_{ref} \varepsilon^i}; \\ c^i = \frac{\varepsilon^{i+1}}{\varepsilon^i}; \end{cases} \quad (2.26)$$



Граничные условия:

$$V_{new}^1 = 0; V_{new}^N = V; \quad (2.27)$$

И продолжаем рассчитывать эту систему до достижения максимальной погрешности  $\epsilon_V$ , если выполняется условие:

$$\max(|V_{new}^i - V_{old}^i|) < \epsilon_V, \quad (2.28)$$

процесс итерации останавливается.

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

#### 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 случае 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

Варьируя 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 РТГС (рис. 1.9) с высотой потенциальных барьеров:

- а)  $1.0\text{eV}$ ;
- б)  $0.7\text{eV}$ ;
- в)  $0.5\text{eV}$ ;
- г)  $0.3\text{eV}$ .

### 3.1.1.1 Прозрачность РТГС

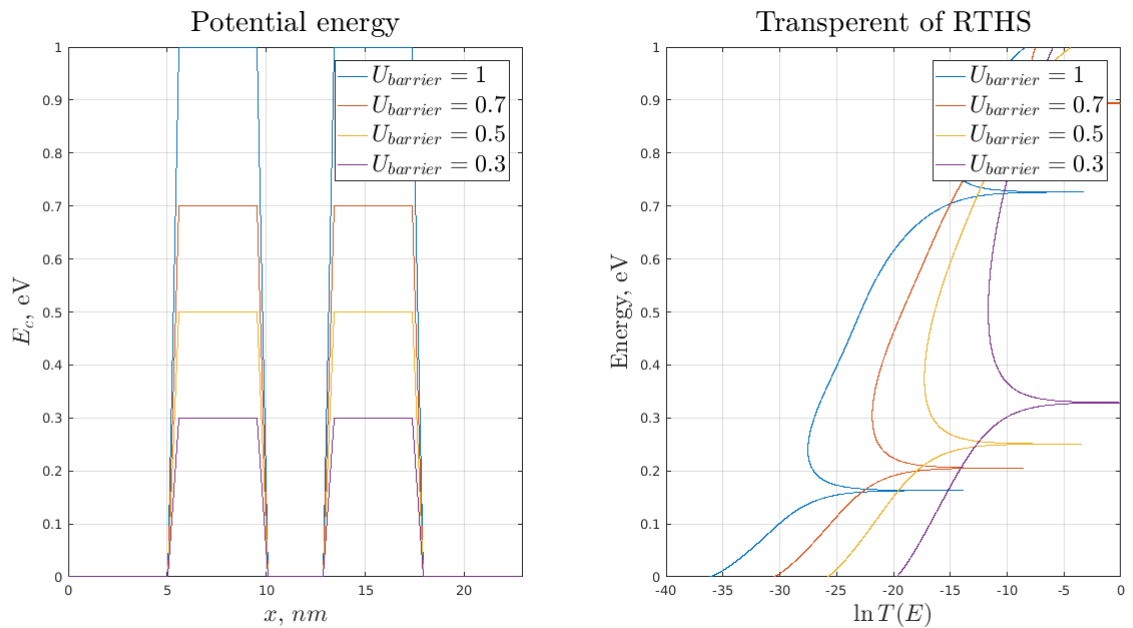


Рисунок 3.1 — Прозрачность РТГС при различных высотах потенциального барьера

### 3.1.1.2 ВАХ РТГС

### 3.1.2 Исследование ширины ямы

Уменьшая или увеличивая количество монослоев, мы варьируем ширину ямы в РТГС. Для примера рассмотрим РТГС:

- а) 10 монослоев;
- б) 7 монослоев;
- в) 5 монослоев;

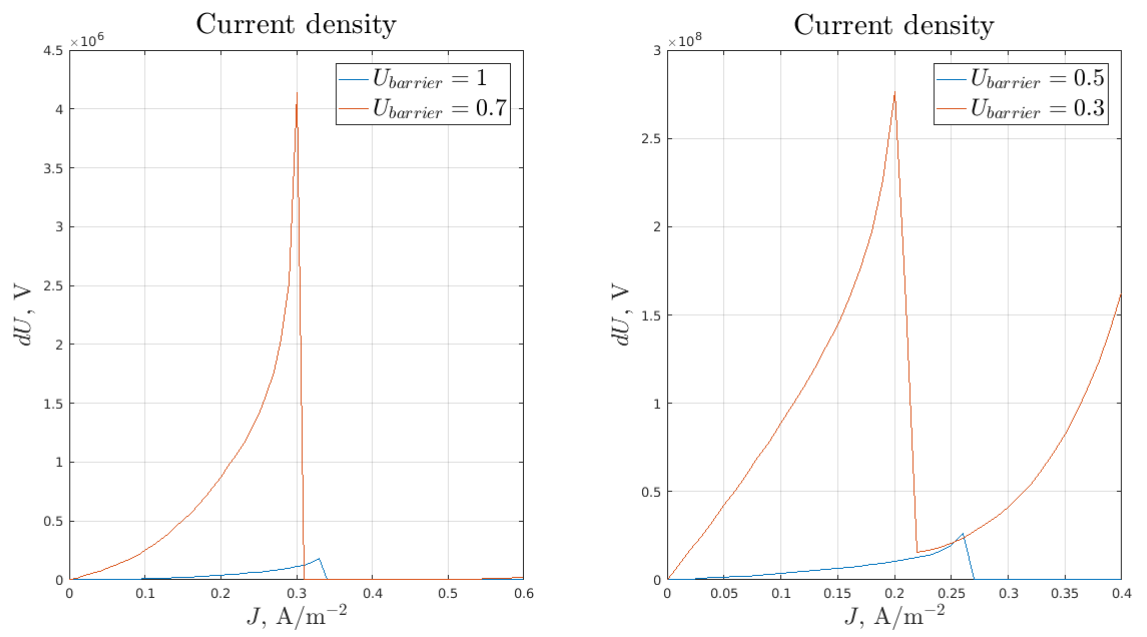


Рисунок 3.2 — Плотность тока через РТГС при различных высотах потенциального барьера

г) 3 монослоев.

### 3.1.2.1 Прозрачность РТГС

### 3.1.2.2 ВАХ РТГС

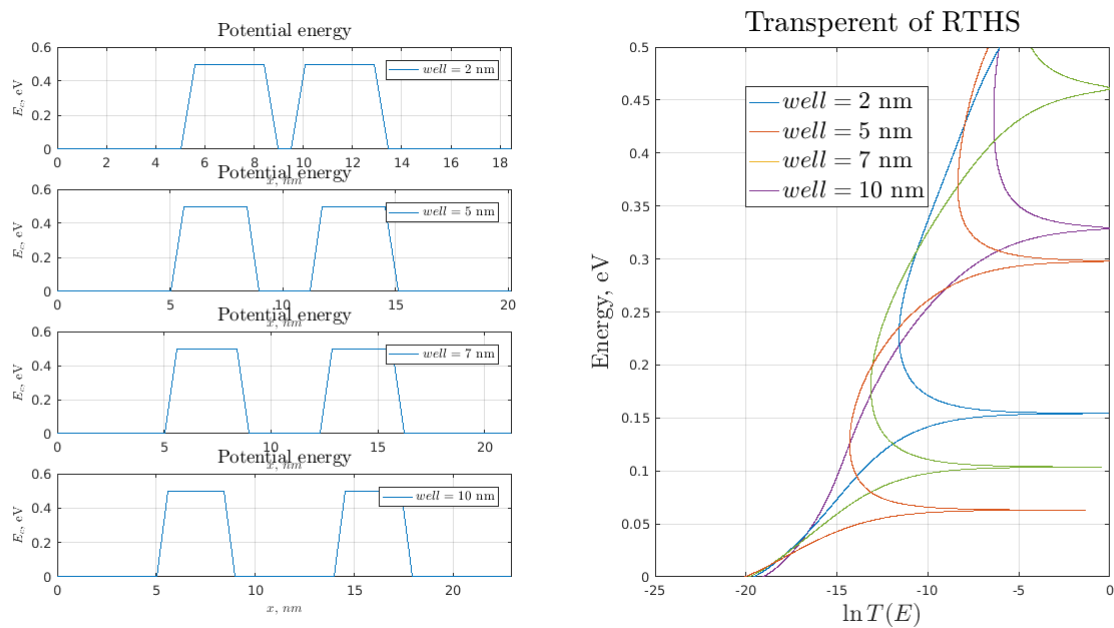


Рисунок 3.3 — Прозрачность РТГС при различных ширинах потенциальной ямы

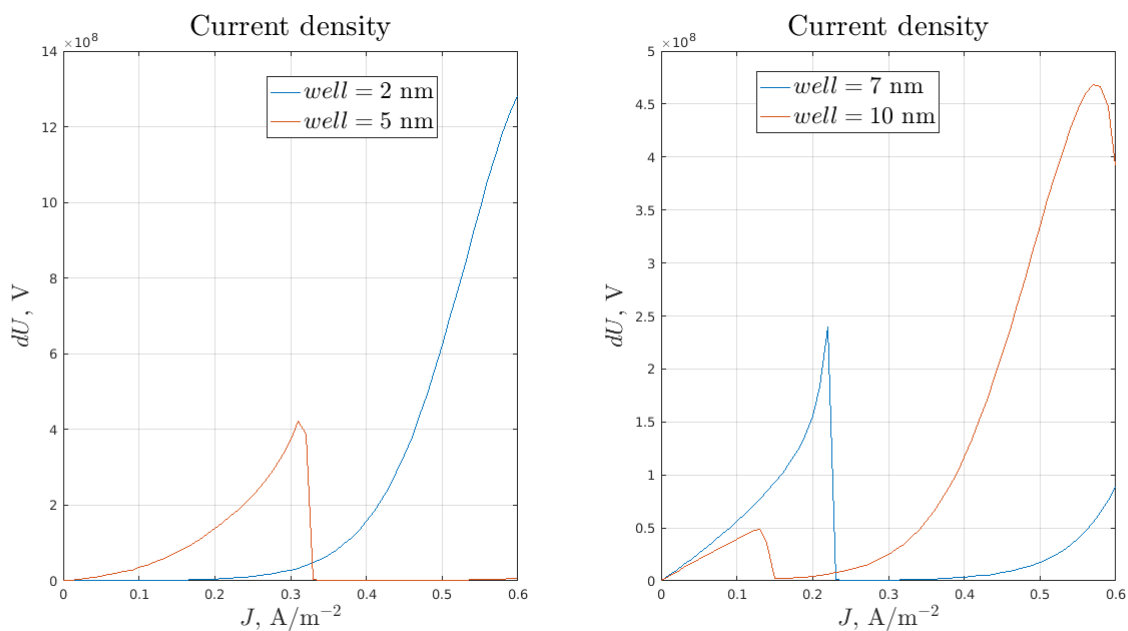


Рисунок 3.4 — Плотность тока через РТГС при различных ширинах потенциальной ямы

## 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:

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

#### 3.2.1.1 Прозрачность РТГС

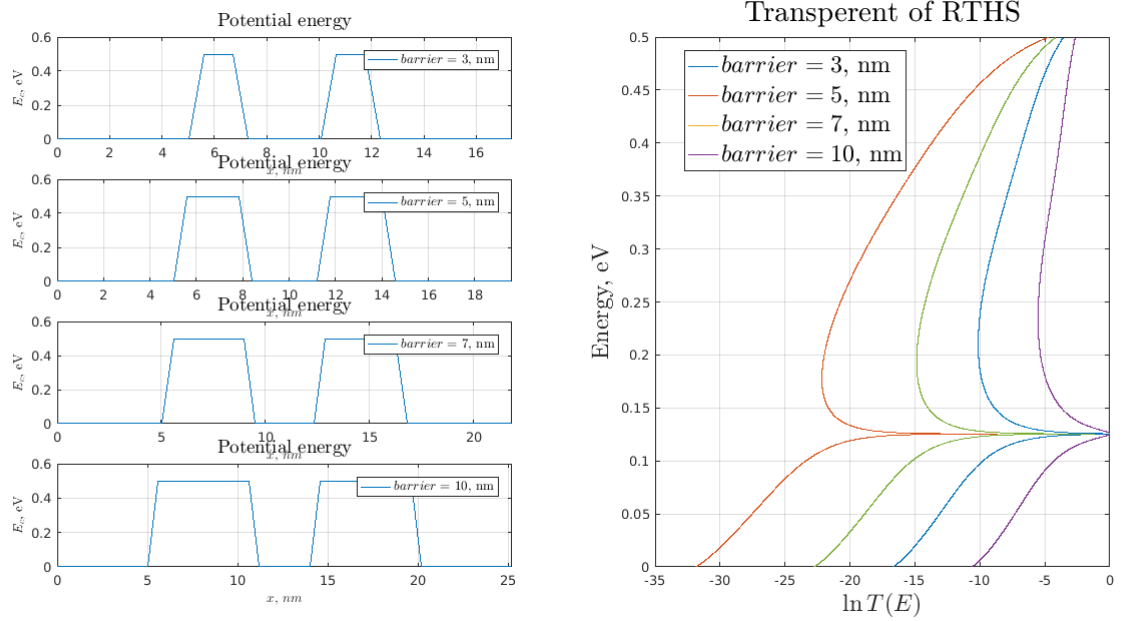


Рисунок 3.5 — Прозрачность РТГС при различных ширинах потенциальных барьеров

#### 3.2.1.2 ВАХ РТГС

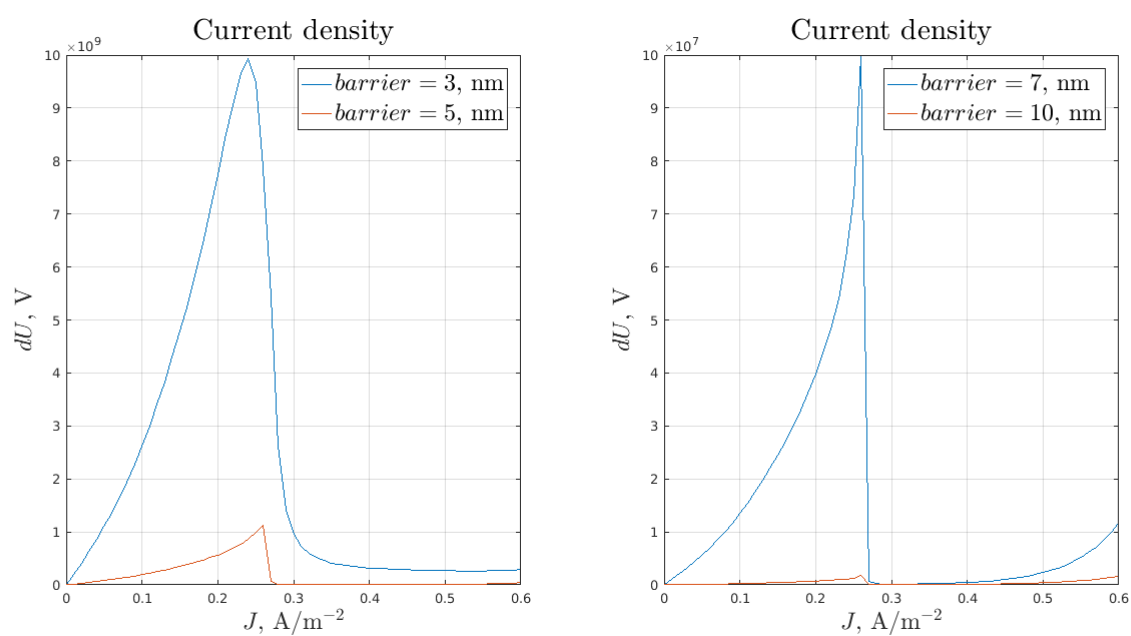


Рисунок 3.6 — Плотность тока через РТГС при различных ширинах потенциальных барьеров

### **3.3 Исследование параметров спейсеров**

#### **3.3.1 Исследование влияния размеров спейсера**

##### **3.3.1.1 ВАХ РТГС**

##### **3.3.1.2 Прозрачность РТГС**

##### **3.3.1.3 Концентрация электронов в РТГС**



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

### 4.1 Диффузионное расплытие активной области

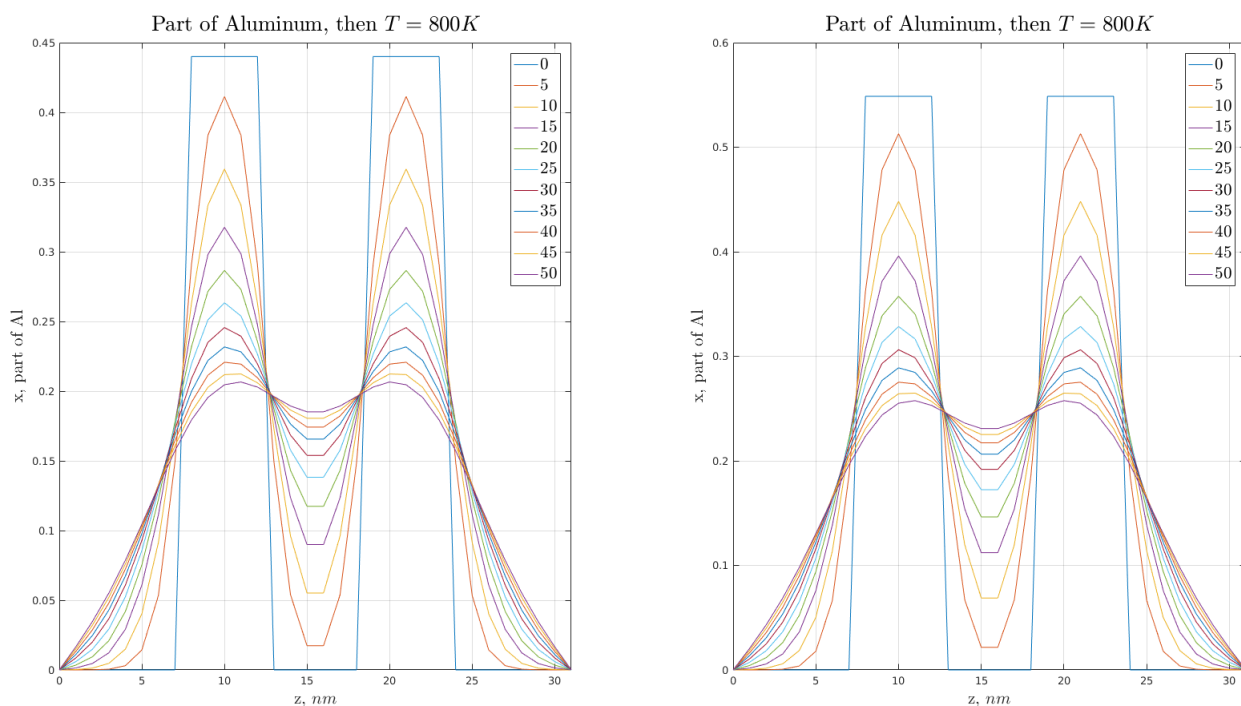


Рисунок 4.1 — Расплывание потенциального рельефа чистого  $Al_xGa_{1-x}As$

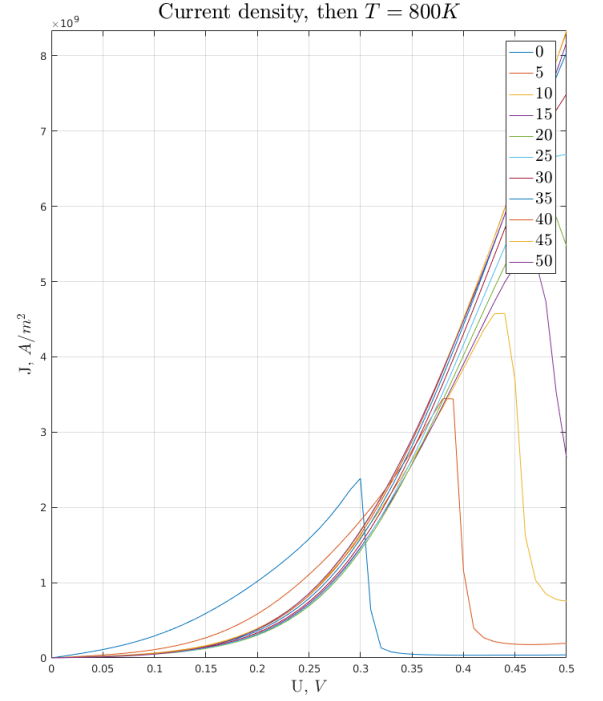
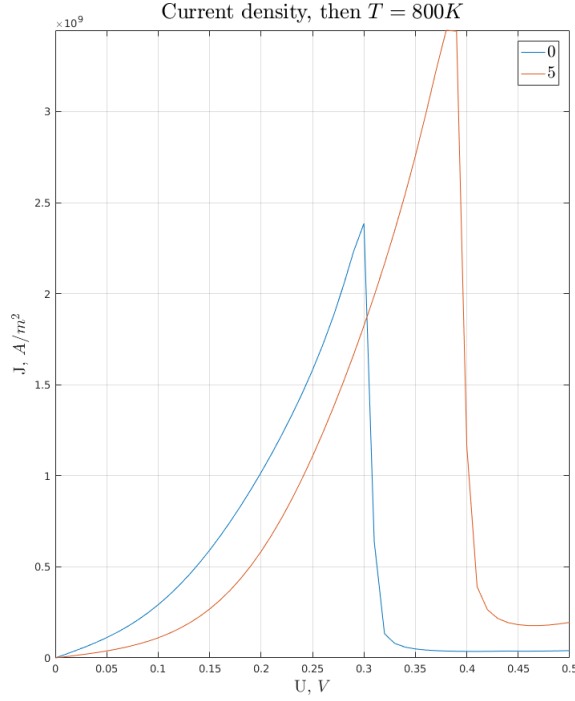


Рисунок 4.2 — Деградация тока через РГТС на основе чистого  $Al_xGa_{1-x}As$

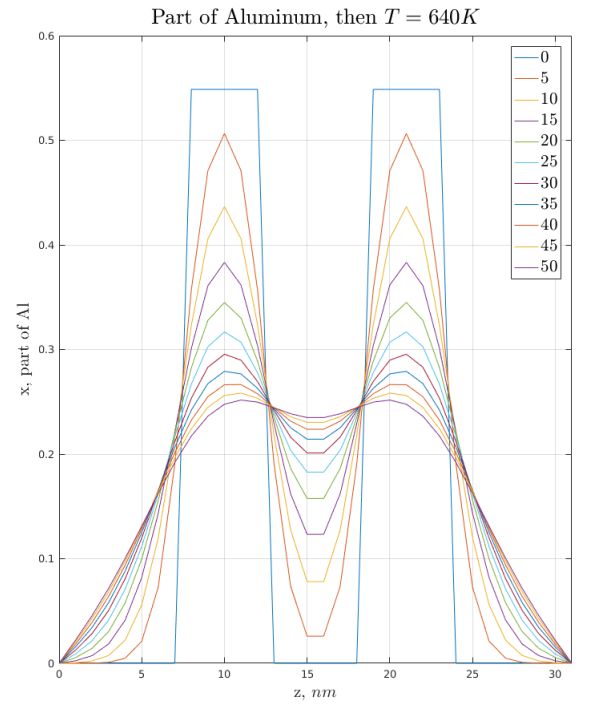
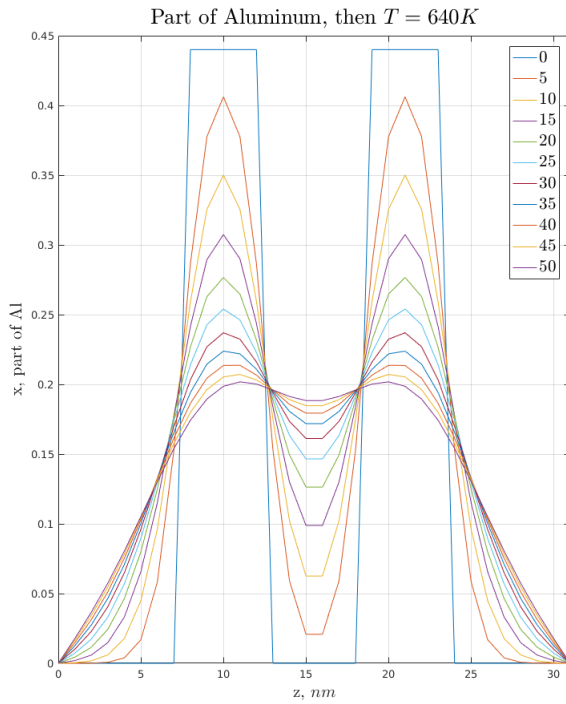


Рисунок 4.3 — Расплывание потенциального рельефа  $Al_xGa_{1-x}As$  от диффузии легирующей примеси

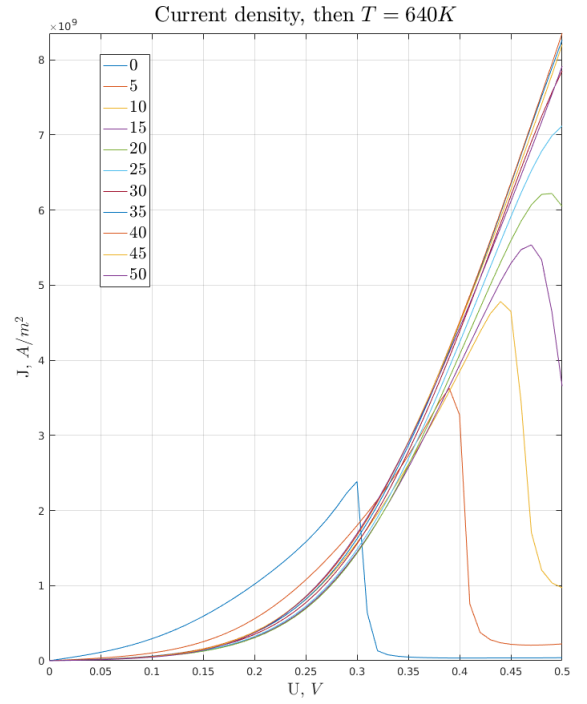
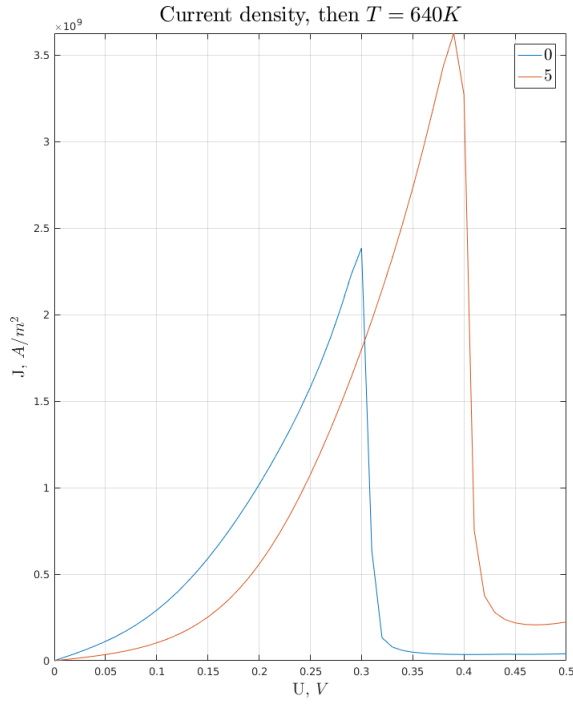


Рисунок 4.4 — Деградация тока через РГТС на основе  $Al_xGa_{1-x}As$  от диффузии легирующей примеси

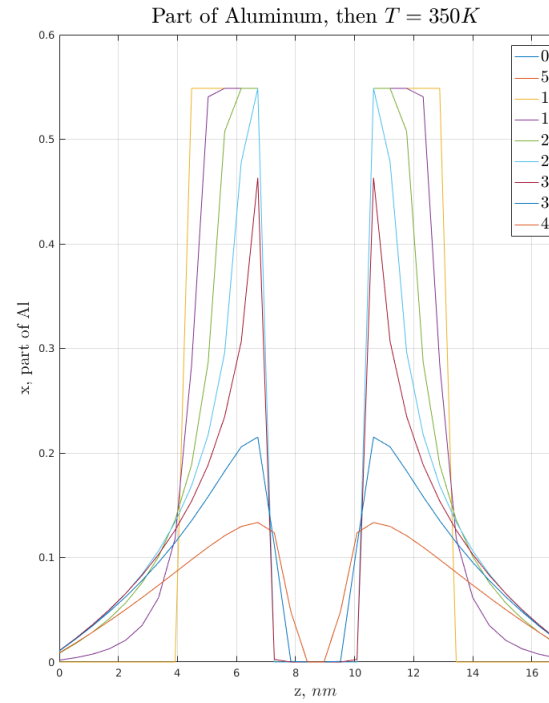
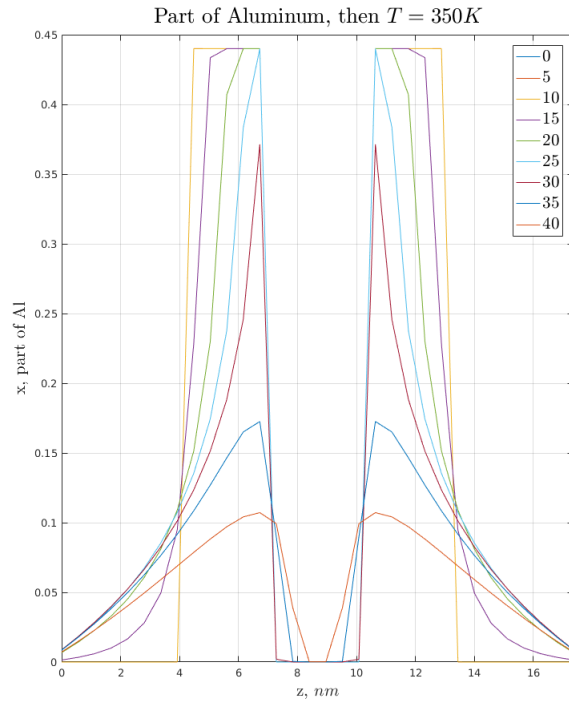


Рисунок 4.5 — Расплывание потенциального рельефа  $Al_xGa_{1-x}As$  при наличии донорной примеси

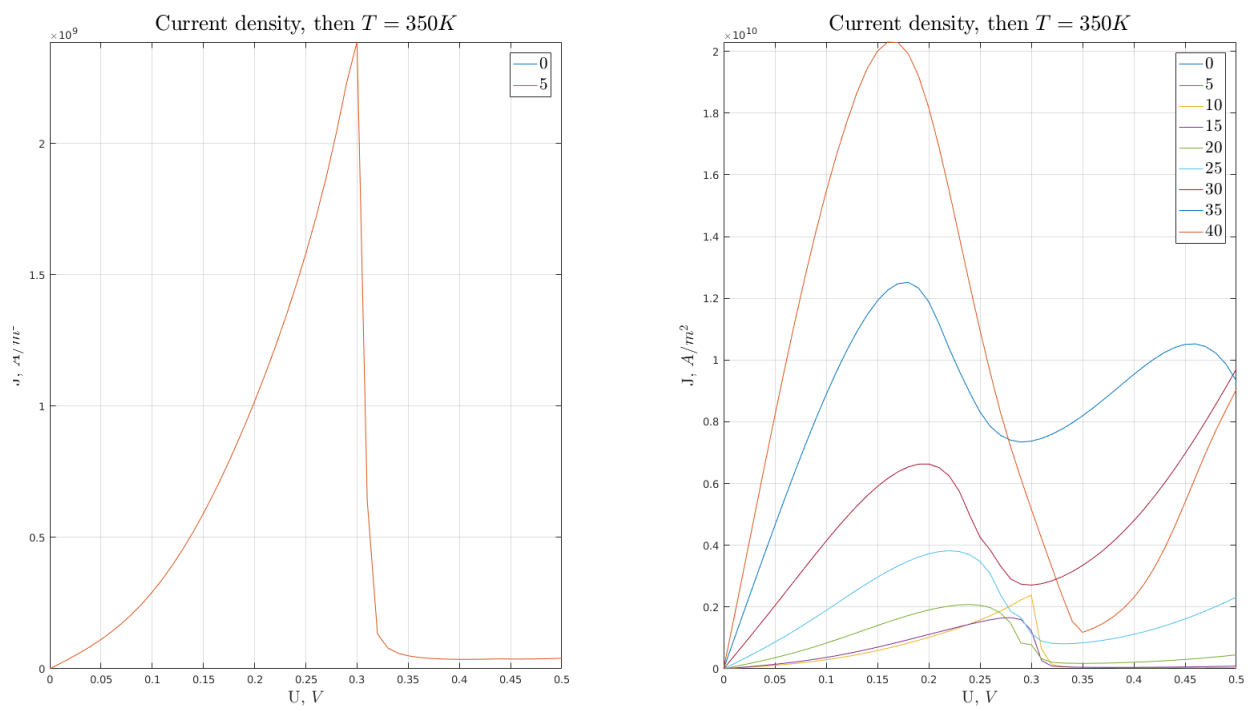


Рисунок 4.6 — Дegrаdация тока через PГТС на основе  $Al_xGa_{1-x}As$  при наличии донорной примеси

## 4.2 Диффузия легирующей примеси