

**VILNIAUS UNIVERSITETAS**  
**FIZIKOS FAKULTETAS**  
**PUSLAIDININKIŲ FIZIKOS KATEDRA**

Martynas Kojelis

TERAHERCINIO JUTIKLIO MODELIAVIMAS TCAD PROGRAMA

Magistrantūros studijų kursinis darbas

(studijų programa – OPTOELEKTRONIKOS MEDŽIAGOS IR TECHNOLOGIJOS)

Studentas

Martynas Kojelis

Darbo vadovas

Dr. Ernestas Žąsinas

Recenzentas

Habil. Dr. Žilvinas Andrius Kancleris

Katedros vedėjas

Prof. Habil. Dr. Gintautas Tamulaitis

Vilnius 2016

# Turinys

<b>Įvadas</b> .....	3
<b>1. „Peteliškės“ formos jutikliai THz dažnių ruožui</b> .....	4
1.1 GaAs / AlGaAs asimetriniai jutikliai .....	4
1.2 InGaAs asimetriniai jutikliai .....	5
<b>2. Skaitmeninis detektoriaus modeliavimas</b> .....	7
2.1 Diskretizavimo metodas.....	7
2.2 Fizikinės lygtys .....	8
2.2.1 Elektrostatinis potencialas.....	8
2.2.2 Srovės tankio lygtys .....	9
2.2.3 Krūvininkų koncentracija.....	9
2.2.4 Rekombinacijos modeliai.....	10
2.2.5 Elektronų judris .....	11
<b>3. Modeliavimo metodika</b> .....	14
<b>4. Modeliavimo rezultatai ir jų aptarimas</b> .....	18
4.1 Kontaktų persiklojimo ir priemaišų koncentracijos įtaka.....	18
4.2 Paviršinio krūvio įtaka .....	21
4.3 Stipraus lauko įtaka.....	26
4.4 Trimatis modelis .....	29
<b>Išvados</b> .....	33
<b>Summary</b> .....	34
<b>Literatūra</b> .....	35

## Įvadas

Šiuo metu didelis dėmesys skiriamas mažiems, kambario temperatūroje galintiems veikti, terahercinės spinduliuotės jutikliams. Tokie detektoriai susilaukia didelio dėmesio dėl galimo panaudojimo spektroskopijoje bei realaus laiko atvaizdavime.

Susidomėjimą detektoriais, veikiančiais terahercinių dažnių ruože, paskatino jų galimas pritaikymas saugumo tikslams. Tokio dažnio spinduliuotės privalumas tas, kad ji skverbiasi kiaurai pro daugelį nepolinių, nemetalinių dielektrinių medžiagų ir gali prasiskverbti pro drabužius, batus, įvairius įpakavimus. THz spinduliuotės dėka tampa įmanoma pamatyti tai, kas, galimai pavojingo, yra paslėpta siuntinyje ar po žmogaus apranga.

Dar vienas terahercinės spinduliuotės privalumas, atveriantis kelią jos panaudojimui saugumo tikslais yra tas, kad daugelis pavojingų medžiagų (sprogmenų, narkotikų) turi tik tai medžiagai ar medžiagų grupei būdingus atspindžio ir sugerties spektrus, pagal kuriuos galima identifikuoti pavojingas medžiagas ir atskirti jas nuo kitų nepavojingų medžiagų (drabužių, monetų, žmogaus odos). Taip pat yra žinoma, kad mažos galios THz spinduliuotė nedaro jokios žalos žmogaus organizmui [1].

Pirmosios THz spektroskopijos ir vaizdavimo sistemos buvo kuriamos femtosekundinių lazerių pagrindu [2]. Tačiau, tokios sistemos sudėtingos, brangios ir užima daug vietos. Saugumo tikslams reikalingi kompaktiški, kambario temperatūroje veikiantys, jutikliai. Tokių detektorių pavyzdžiai – Šotky detektoriai [4], mikrobolometrų masyvai, tranzistoriai su nanometriniu užtūra [5] [3]. Šie jutikliai turi savų privalumų, tačiau jų gamyba ganėtinai sudėtinga ir brangi. Kita jutiklių grupė – tai asimetrinės formos diodai, kurie ir aptariami šiame darbe.

Siekiant sutaupyti brangaus laiko ir išteklių tokių detektorių savybėms tirti, naudinga pasitelkti skaitmeninę modeliavimo programinę įrangą. Šiame darbe modeliuojamas ir tyrinėjamas InGaAs pagrindu pagamintas „peteliškės“ formos diodas, kurį pristatė [6] straipsnio autoriai. Prietaiso modeliavimui naudojama „Synopsys TCAD“ (Technology Computer Aided Design) kompiuterinė modeliavimo įrangą.

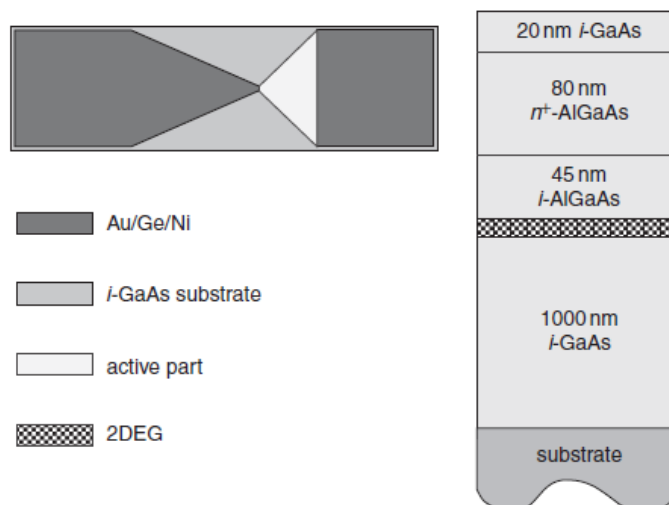
Šio darbo tikslas – kompiuterine modeliavimo įranga sumodeliuoti dvimatį ir trimatį InGaAs „peteliškės“ formos diodų modelius, įsigilinti į jų veikimą ir paaiškinti eksperimentų metu gautas voltamperines charakteristikas.

## 1. „Peteliškės“ formos jutikliai THz dažnių ruožui

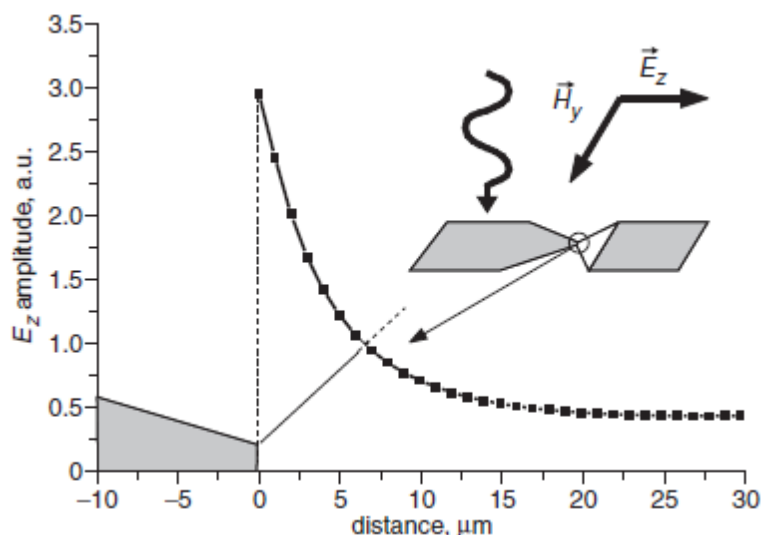
Naujausios puslaidininkinės nanotechnologijos leidžia kurti kompaktiškus terahercinės elektronikos prietaisus. Tačiau šių prietaisų veikimas paremtas elektronų šuoliais tarp diskretinių būsenų, todėl jų veikimui reikalingos žemos temperatūros. Siekiant pritaikyti jutiklius praktiniams tikslams reikėtų, kad jie stabiliai veiktų kambario temperatūroje. Tam reikia rasti būdų, kaip pagaminti kitais fizikiniais principais veikiančius detektorius, kurių veikimas nebūtų susijęs su krūvininkų šuoliais pajuostėse ir nereikalautų žemų temperatūrų. Vienas iš būdų detektuoti terahercinę spinduliuotę – panaudoti asimetrinius, „peteliškės“ formos diodus, kurie, dėl savo nesimetrinės formos, veikia kaip antenos. Tokie diodai yra ganėtinai nesudėtingos gamybos, paprastos formos, gali detektuoti plataus dažnių ruožo spinduliuotę, bei pasižymi mažais triukšmais, kadangi jiems nereikalingas išorinis įtampos šaltinis.

### 1.1 GaAs / AlGaAs asimetriniai jutikliai

Vieną iš tokių diodų pasiūlė [8] straipsnio autoriai. Jie sukūrė GaAs / AlGaAs jutiklį, kuriame panaudota „peteliškės“ formos antena su dvimačiu elektronų dujų (2DEG) sluoksniu. Jo schema pavaizduota 1 pav. Diodas nesimetris: viena jo pusė metalizuota, o kitoje yra tik dvimačių elektronų dujų sluoksnis po nemetalizuotu paviršiumi. Iš 2 pav., kuriame pavaizduotas elektrinio lauko pasiskirstymas dvimačių elektronų sluoksnyje, matome, kad laukas koncentruojamas į diodo „kaklelį“. Dėl to dvimačiai elektronai kaitinami netolygiai ir dėl jų persiskirstymo atsiranda karštų elektronų sąlygota įtampa tarp diodo elektrodų. Išmatavus įrenginio jautrio priklausomybę nuo dažnio kambario temperatūroje buvo nustatyta, kad intervale nuo 10 GHz iki 0,8 THz jautris siekia 0,3 V/W, tačiau aukštesniuose dažniuose jautris krinta ir pasiekia  $3 \cdot 10^{-3}$  V/W prie 2,5 THz. [8]



1 pav. „Peteliškės“ formos diodo schema (kairėje) ir aktyviosios dalies struktūra (dešinėje) [8]

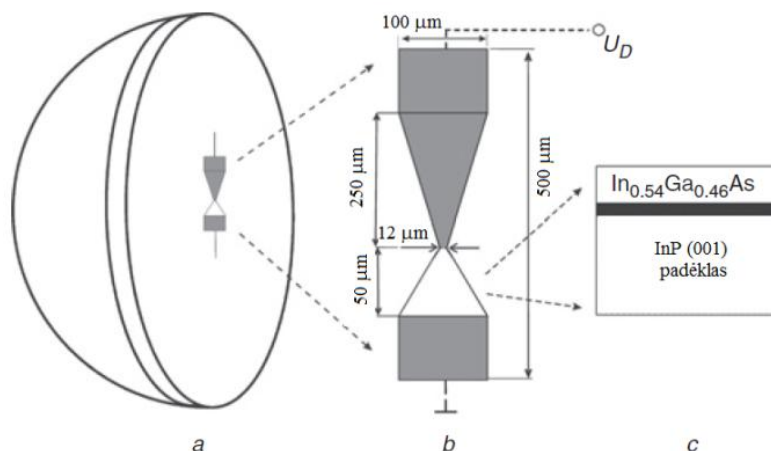


2 pav. Elektrinio lauko pasiskirstymas aktyviojoje diodo dalyje esant 0,75 THz dažnio spinduliutei [8]

## 1.2 InGaAs asimetriniai jutikliai

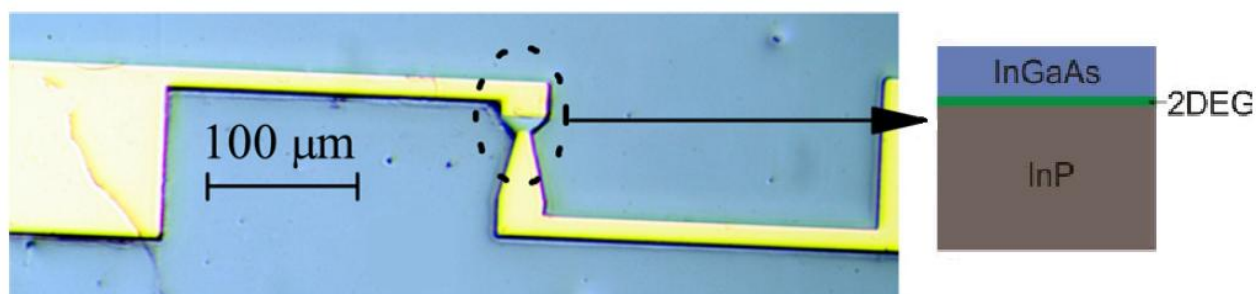
Norint padidinti jautrį [9] straipsnio autoriai pasiūlė aktyviojoje srityje panaudoti didesnę krūvininkų tankį ir judrį turintį InGaAs. Taip pat panaudotas silicio lęšis tam, kad spinduliute būtų efektyviau sukoncentruojama į aktyviają sritį (3 pav.). Pastarieji patobulinimai, dėl didesnio elektronų judrio aktyviojoje srityje, leido padidinti jautrį iki 5 V/W ties 0,584 – 0,763 THz dažnio spinduliute

kambario temperatūroje. Kaip ir GaAs detektorių [8] atveju, aukštuose dažniuose jautris mažėja ir krinta iki  $3 \cdot 10^{-2}$  V/W ties 1,4 THz.



3 pav. „Peteliškės“ formos detektoriaus schema. a – silicio lęšis, b – InGaAs pagrindo diodo schema (pilka spalva – metalizuotos dalys, balta – aktyvioji sritis),  $U_D$  – detektoriaus signalas, c – aktyviosios srities dizainas (juoda sritis – InAs monosluoksnis) [8]

Dar labiau „peteliškės“ formos detektorių patobulino [6] straipsnio autoriai, susiaurindami diodo „kaklelį“ ir sutrumpindami aktyviąją sritį (4 pav.). Tai leido padidinti jautrį iki 6 V/W ties 0,591 THz ir iki 10,3 V/W ties 0,76 THz. Šiame diode aktyvioji sritis sudaryta iš InGaAs ir InP heterosandūros, kurioje susidaro dvimačių elektronų dujų sluoksnis (2DEG). Šis sluoksnis susidaro dėl krūvininkų koncentracijos skirtumo tarp legiruoto InGaAs ir nelegiruoto InP padėklo. Elektronai iš InGaAs difunduoja į padėklą, o jo paviršiuje susidaro laidumo kanalas, kurio kvantinėje potencialo duobėje susidaro dvimatės elektronų dujos. [10] Pastarasis diodas ir yra modeliuojamas šiame darbe.



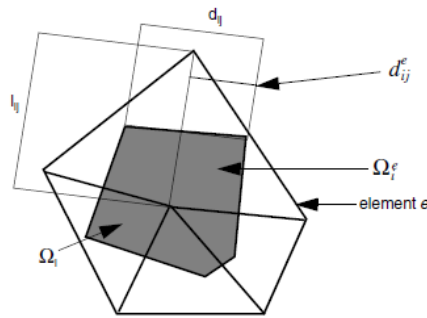
4 pav. Tiriamasis, InGaAs pagrindu pagamintas, „peteliškės“ formos diodas [10]

## 2. Skaitmeninis detektoriaus modeliavimas

Kompiuterinės programos, kurių dėka galima skaitmeniškai modeliuoti prietaisus, aiškintis jų veikimo principus bei tirti prietaisų veikimą įvairias atvejas, turi didelę reikšmę įvairių fizikinių vyksmų supratimui bei įrenginių tobulinimui. Tokių programų dėka stebėdami, kaip kinta įrenginio veikimas ir įvairios charakteristikos, keičiant tam tikrus parametrus, galime sutaupyti daug žmogiškųjų ir finansinių resursų.

### 2.1 Diskretizavimo metodas

Modeliavimo metu, programa turi išspręsti didelį kiekį lygčių. Tokių lygčių supaprastinimui sukurta daug metodų. Vienas iš jų – „dėžutės diskretizavimo“ (angl. *box discretization*) metodas, kuris ir yra naudojamas „Sentaurus Device“ programoje. Šiuo metodu dalinių išvestinių lygtys integruojamos pagal 1 pav. pavaizduotą tūrį.



5 pav. Viena trikampio dvimačio tinklelio dėžutė

Šiuo metodu kiekviena lygtis iš pavidalo  $\nabla \cdot \vec{J} + R = 0$  (1) diskretizuojama į:

$$\sum_{j \neq i} \kappa_{ij} \cdot J_{ij} + \mu(\Omega_i) \cdot r_i = 0 \quad (2)$$

Koeficientų vertės nurodytos 1-oje lentelėje.

1 lentelė. Koeficientai dalinių išvestinių diskretizavime.

Dimensija	$\kappa_{ij}$	$\mu(\Omega_i)$
1D	$1 / l_{ij}$	Dėžutės ilgis
2D	$d_{ij} / l_{ij}$	Dėžutės plotas
3D	$D_{ij} / l_{ij}$	Dėžutės tūris

Fizikinių parametru  $j_{ij}$  ir  $r_i$  vertės pateiktos 2-oje lentelėje, o  $B$  – Bernulio funkcija, kuri lygi:  $B(x) = x/(e^x - 1)$ .

2 lentelė. Lygtys ir jų parametrai

Lygtis	$j_{ij}$	$r_i$
Puasono	$\varepsilon(u_i - u_j)$	$-\rho_i$
Elektronų tolydumo	$\mu^n (n_i B(u_i - u_j) - n_j B(u_j - u_i))$	$R_i - G_i + \frac{d}{dt} n_i$
Skylių tolydumo	$\mu^p (p_j B(u_j - u_i) - p_i B(u_i - u_j))$	$R_i - G_i + \frac{d}{dt} p_i$
Temperatūra	$\kappa(T_i - T_j)$	$H_i - \frac{d}{dt} T_i n_i$

## 2.2 Fizikinės lygtys

Synopsys TCAD modeliavimo programa, kaip ir visos modeliavimo programinės įrangos modeliuojančios puslaidininkinius prietaisus, sprendžia pagrindines puslaidininkių fizikos lygtis ir, atsižvelgiant į modeliuojamo įtaiso architektūrą, prognozuoja jo elektrines savybes.

### 2.2.1 Elektrostatinis potencialas

Kiekvieno puslaidininkinio prietaiso modeliavimo metu, skaičiuojant elektrines įrenginio savybes, svarbu apskaičiuoti elektrostatinį potencialą. Tiek judrūs krūviai (skylės bei elektronai), tiek nejudantys krūviai (jonizuotos priemaišos, pagautieji krūvininkai) puslaidininkiniuose įrenginiuose atlieka svarbų vaidmenį. Krūviai nulemia elektrostatinio potencialo dydį ir tuo pačiu yra patys jo veikiami. Siekiant apskaičiuoti elektrostatinį potencialą sprendžiama Puasono lygtis. Jos sprendinys ir bus elektrostatinis potencialas:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi + \vec{P}) = -q_0(p - n + N_D - N_A) - \rho_{\text{trap}} \quad (3)$$

kur:  $\varepsilon$  - dielektrinė skvarba,  $\vec{P}$  - feroelektrinė poliarizacija,  $q_0$  – elementarusis elektrono krūvis,  $n$  ir  $p$  – elektronų ir skylių koncentracijos atitinkamai,  $N_d$  ir  $N_A$  – jonizuotų donorų ir akceptorų koncentracija atitinkamai,  $\rho_{\text{trap}}$  – nejudančių krūvių tankis.



### 2.2.2 Srovės tankio lygtys

Skaičiuojant ir analizuojant voltamperines charakteristikas puslaidininkiuose sprendžiamos srovės tankio lygtys:

$$\vec{J}_n = q_0 \mu_n n \vec{E} + kT \mu_n \nabla n \quad (4)$$

$$\vec{J}_p = q_0 \mu_p p \vec{E} + kT \mu_p \nabla p \quad (5)$$

kur:  $J$  – srovės tankis,  $\mu$  – krūvininkų judris,  $E$  – elektrinis laukas,  $n$  ir  $p$  – elektronų ir skylių koncentracijos,  $k$  – Bolcmano konstanta,  $T$  – gardelės temperatūra.

Kaip matome iš (4) ir (5) lygčių, srovės tankis susideda iš dviejų komponentų: dreifinės ir difuzinės. Pirmąją sąlygoja elektrinis laukas, antrąją – krūvininkų koncentracijos gradientas.

Šiame darbe, skaičiavimo tikslumui pagerinti, skaičiuojant srovės tankį, buvo naudojamas hidrodinaminis modelis. Šis modelis papildomai atsižvelgia į erdvinį elektrostatinio lauko nukrypimą, elektronų giminingumo energijas ir draudžiamą energijų tarpo dydį. Taip pat atsižvelgiama į koncentracijos gradiento, krūvininkų temperatūrų gradiento bei erdvinį efektinių masių nukrypimo įtaką. Hidrodinaminio modelio atveju srovės tankių išraiškos elektronams ir skylėms:

$$\vec{J}_n = \mu_n (n \nabla E_C + kT_n \nabla n - nkT_n \nabla \ln \gamma_n + \lambda_n f_n^{td} kn \nabla T_n - 1,5nkT_n \nabla \ln m_n) \quad (6)$$

$$\vec{J}_p = \mu_p (p \nabla E_V - kT_p \nabla p + pkT_p \nabla \ln \gamma_p + \lambda_p f_p^{td} kp \nabla T_p - 1,5pkT_p \nabla \ln m_p) \quad (7)$$

### 2.2.3 Krūvininkų koncentracija

Krūvininkų koncentracijai skaičiuoti, ypač didelio jų tankio srityse, naudojama Fermi-Dirako statistika. Elektronų ir skylių koncentracijai skaičiuoti yra naudojamos sekančios formulės:

$$n = N_C F_{1/2} \left( \frac{E_{F,n} - E_C}{kT} \right) \quad (8)$$

$$p = N_V F_{1/2} \left( \frac{E_V - E_{F,p}}{kT} \right) \quad (9)$$

Čia  $N_C$ ,  $N_V$  – laidumo ir valentinės juostų efektinės būsenų koncentracijos,  $F_{1/2}$  –  $1/2$  eilės Fermi integralas,  $E_{F,n}$  ir  $E_{F,p}$  – kvazi-Fermi lygmens energijos vertės elektronams ir skylėms,  $E_C$ ,  $E_V$  – laidumo ir valentinės juostų kraštų vertės.

Taip pat skaičiavimams naudojama tolydumo lygtis, kuri teigia, kad krūvininkų skaičiaus kitimas per laiko vienetą yra lygus generacijos ir rekombinacijos skirtumui tam tikrame tūryje ir srovės tankio gradiento sumai:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (10)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (11)$$

kur:  $G$  ir  $R$  – krūvininkų generacijos ir rekombinacijos spartos atitinkamai.

### 2.2.4 Rekombinacijos modeliai

Rekombinacijos procesas susideda iš kelių skirtingų modelių. Vienas iš jų – Ožė (*angl.* Auger) rekombinacija. Tai trijų dalelių rekombinacijos procesas, kurio metu, elektronas rekombinuodamas su skylė, savo kinetinę energiją atiduoda kitam elektronui. Modeliavimo programoje rekombinacijos sparta aprašoma formule:

$$R_{net}^A = (C_n n + C_p p)(np - n_{i,eff}^2) \quad (12)$$

Čia  $C_n$  ir  $C_p$  – temperatūriniai koeficientai išreiškiami (13) ir (14) formulėmis, o numatytieji koeficientai pateikti 3 lentelėje:

$$C_n(T) = \left( A_{A,n} + B_{A,n} \left( \frac{T}{T_0} \right) + C_{A,n} \left( \frac{T}{T_0} \right)^2 \right) \left[ 1 + H_n \exp \left( -\frac{n}{N_{0,n}} \right) \right] \quad (13)$$

$$C_p(T) = \left( A_{A,p} + B_{A,p} \left( \frac{T}{T_0} \right) + C_{A,p} \left( \frac{T}{T_0} \right)^2 \right) \left[ 1 + H_p \exp \left( -\frac{n}{N_{0,p}} \right) \right] \quad (14)$$

3 lentelė. Numatytieji koeficientai Ožė rekombinacijos modelyje

Parametras	$A_A$ [ cm <sup>6</sup> s <sup>-1</sup> ]	$B_A$ [ cm <sup>6</sup> s <sup>-1</sup> ]	$C_A$ [ cm <sup>6</sup> s <sup>-1</sup> ]	$H$ [1]	$N_0$ [ cm <sup>-3</sup> ]
Elektronams ( $n$ )	$6,7 \cdot 10^{-32}$	$2,45 \cdot 10^{-32}$	$-2,2 \cdot 10^{-32}$	3,46667	$1 \cdot 10^{18}$
Skylėms ( $p$ )	$7,2 \cdot 10^{-32}$	$4,5 \cdot 10^{-32}$	$2,63 \cdot 10^{-32}$	8,25688	$1 \cdot 10^{18}$

Skaičiavimo metu taip pat įskaitoma spindulinė rekombinacija. Programoje jos sparta aprašoma (15) formule.

$$R_{net} = C \cdot (np - n_{i,eff}^2), \quad (15)$$

kur koeficiento  $C$  vertė buvo pasirinkta iš žinytų:  $C = 2 \cdot 10^{-10}$  cm<sup>3</sup>s<sup>-1</sup>.

Trečioji įskaitoma rekombinacijos rūšis – SHR (Šoklio-Rido-Holo) rekombinacija. Ši rekombinacija pasireiškia, kai elektronas rekombinuoja per tarp laidumo ir valentinės juostų tarpe esančius defektinius lygmenis. Programoje šios rekombinacijos sparta aprašoma (16) formule:

$$R_{\text{net}}^{\text{SRH}} = \frac{np - n_{i,\text{eff}}^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (16)$$

Čia elektronų ir skylių gyvavimo trukmės ( $\tau_n$  ir  $\tau_p$ ) priklauso nuo legiravimo laipsnio, elektrinio lauko bei temperatūros ( $c = n$  – elektronams arba  $c = p$  – skylėms):

$$\tau_c = \tau_{\text{dop}} \frac{f(T)}{1 + g_c(F)} \quad (17) \quad n_1 = n_{i,\text{eff}} \exp\left(\frac{E_{\text{trap}}}{kT}\right) \quad (18) \quad p_1 = n_{i,\text{eff}} \exp\left(\frac{-E_{\text{trap}}}{kT}\right) \quad (19)$$

Čia  $E_{\text{trap}}$  – skirtumas tarp defektinio ir pagrindinio lygmens.

### 2.2.5 Elektronų judris

Elektronų judris nusako, kaip greitai elektronas gali judėti puslaidininkinėje ar metalinėje medžiagoje esant elektriniam laukui. Analogiškai apibrėžiamas ir skylių judris, tačiau, dėl gerokai didesnės pastarųjų krūvininkų efektinės masės, jų judris puslaidininkinėse medžiagose keliomis eilėmis mažesnis, tad šiame darbe buvo koncentruotasi į elektronų judrio ypatybes.

Judris – tai medžiagą charakterizuojantis dydis, nusakantis proporcingumą tarp elektronų dreifinio greičio ir elektrinio lauko. Pačiu paprasčiausiu atveju – elektronų judris yra pastovus dydis ir priklauso tik nuo temperatūros ir yra aprašomas formule:

$$\mu_{\text{max}} = \mu_0 \left(\frac{T}{300K}\right)^\gamma \quad (20)$$

Čia  $\mu_0$  – medžiagai būdingas judris,  $\gamma$  – dydis, nurodantis kaip greitai kinta judris priklausomai nuo temperatūros. Esant bet kokiai jos vertei, didesnei už absoliutųjį nulį, pasireiškia atomų šiluminiai virpesiai, vadinami fononais. Fononai taip pat laikomi dalelėmis, kurios gali sąveikauti su elektronais ir juos sklaidyti, taip stabdydami jų kryptingą judėjimą. Kuo didesnė temperatūra – tuo didesnis fononų skaičius ir krūvininkai sklaidomi stipriau, tad judris ima mažėti. [15]

Be sklaidos fononais, puslaidininkinėje medžiagoje judrį veikia ir daugiau sklaidos mechanizmų, vienas iš jų – jonizuotų priemaišų sklaida, vykstanti puslaidininkiuose, legiruotuose

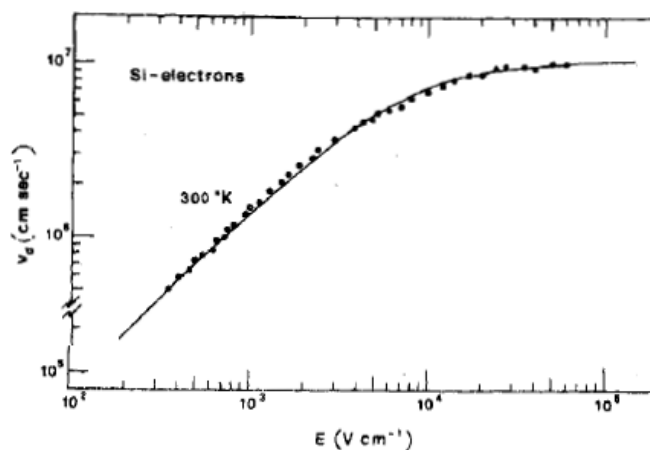
donorinėmis ar akceptorinėmis priemaišomis. Tikslią judrio priklausomybę nuo priemaišų koncentracijos aprašo įvairūs modeliai („Masetti“, „Arora“ ir kt.). Šios išraiškos gana sudėtingos, tačiau bendra tendencija tiek skylėms, tiek elektronams įvairiose medžiagose išlieka panaši – silpnai legiruotuose puslaidininkiuose priemaišų koncentracija didelės įtakos neturi, judrį labiausiai lemia tik sklaida fononais. Augant priemaišų koncentracijai judris ima mažėti, nes didėja tikimybė, kad krūvininkai savo kelyje susidurs su priemaišomis – bus sklaidomi. [15]

Įprastai krūvininkų dreifinis greitis yra proporcingas elektrinio lauko stipriui, kurio proporcingumo koeficientas ir yra vadinamas judriu. Tačiau, kai pasiekiami stiprūs elektriniai laukai, krūvininkai nebegali judėti greičiau – pasiekama dreifinio greičio soties vertė. Šis greitis yra svarbus medžiagos parametras. Silicio bei germanio atveju maksimalus elektronų dreifinis greitis siekia  $1 \cdot 10^7$  cm/s, GaAs –  $1,2 \cdot 10^7$  cm, o InGaAs gali siekti net  $2,8 \cdot 10^7$  cm/s vertes [12].

Vienas pirmųjų šį reiškinį siliciui 1975 metais matematiškai aprašė C. Canali. Jo vardu ir vadinamas vienas iš krūvininkų judrio modelių stipriuose elektriniuose laukuose. Jis, kartu su grupe, įvertinto eksperimentiškai gautus duomenis pavaizduotus 6 pav ir aprašė juos matematiškai:

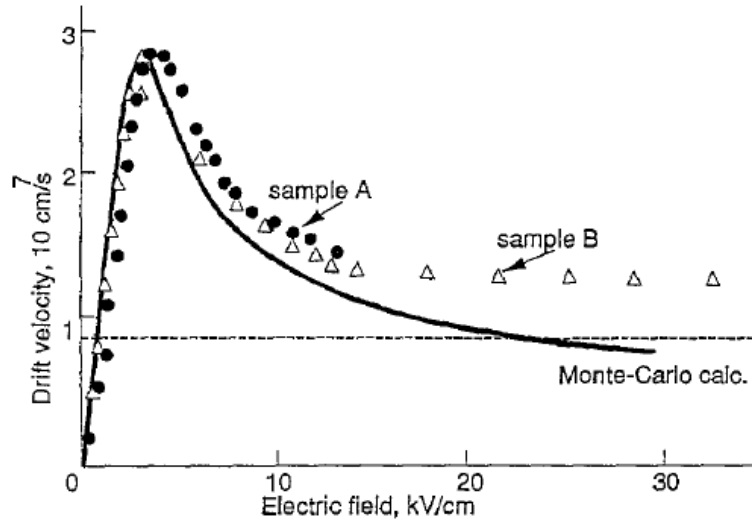
$$\mu(F) = \frac{(\alpha + 1)\mu_{low}}{\alpha + \left[1 + \left(\frac{(\alpha+1)\mu_{low} F_{hfs}}{v_{sat}}\right)^\beta\right]^{1/\beta}} \quad (20)$$

Čia  $\mu_{low}$  – judris, esant silpnam elektriniam laukui;  $v_{sat}$  – krūvininkų dreifinio greičio soties vertė;  $F_{hfs}$  – krūvininkus stumianti jėga, proporcinga elektrinio lauko stipriui;  $\beta$  – koeficientas, priklausantis nuo temperatūros.



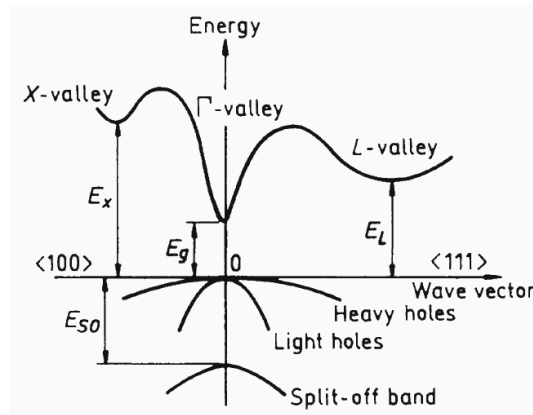
6 pav. Silicio elektronų dreifinio greičio  $v_d$  priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio [13]

Šiame darbe modeliuojamo prietaiso pagrindinė aktyvioji medžiaga yra InGaAs. Atliktų matavimų eigoje pastebėta, kad standartinis Canali modelis, gautas tiriant silicį, nevisiškai tinka indžio galio arsenido atveju. Iš 7 pav. pavaizduotų skaitmeniškai gautų [17] ir eksperimentiškai patvirtintų [12] rezultatų matyti, kad, skirtingai nei silicio atveju, čia elektronų dreifinis greitis neįsisotina, o, pasiekęs tam tikrą didžiausią vertę, ima mažėti.



7 pav. Elektronų dreifinio greičio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio  $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ . Ištinė linija – Monte-Carlo modeliavimo rezultatai, taškai ir trikampiai – eksperimento rezultatai [12]

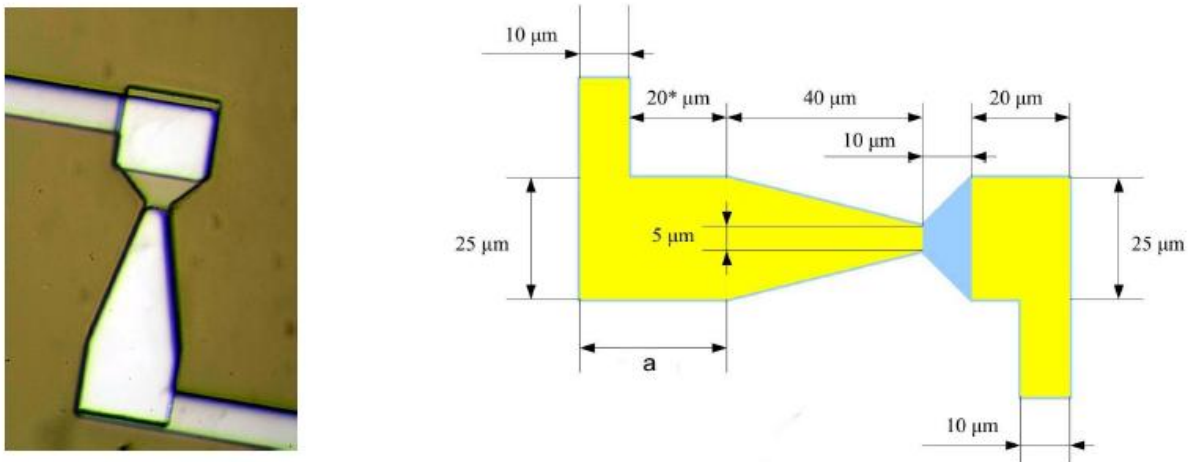
Šį skirtumą galima paaiškinti pasitelkdami InGaAs elektroninių lygmenų struktūrą (8pav.). Skirtingai nuo silicio, InGaAs be pagrindio slėnio  $\Gamma$  turi ir šoninius X bei L slėnius. Yprastai didžioji dalis elektronų susikaupę  $\Gamma$  slėnyje, tačiau, kai elektrinis laukas pakankamai stiprus, elektronai įgyja pakankamai energijos ir peršoka į šoninius slėnius, dėl ko ir sumažėja jų vidutinis dreifinis greitis.



8 pav. InGaAs elektroninių lygmenų struktūra [16]

### 3. Modeliavimo metodika

Vienas iš darbo tikslų buvo tinkamai sumodeliuoti asimetrinį InGaAs pagrindo detektorių, kurių pagamino [6] straipsnio autoriai. Prietaisas ir jo geometrija pavaizduoti 9 pav.

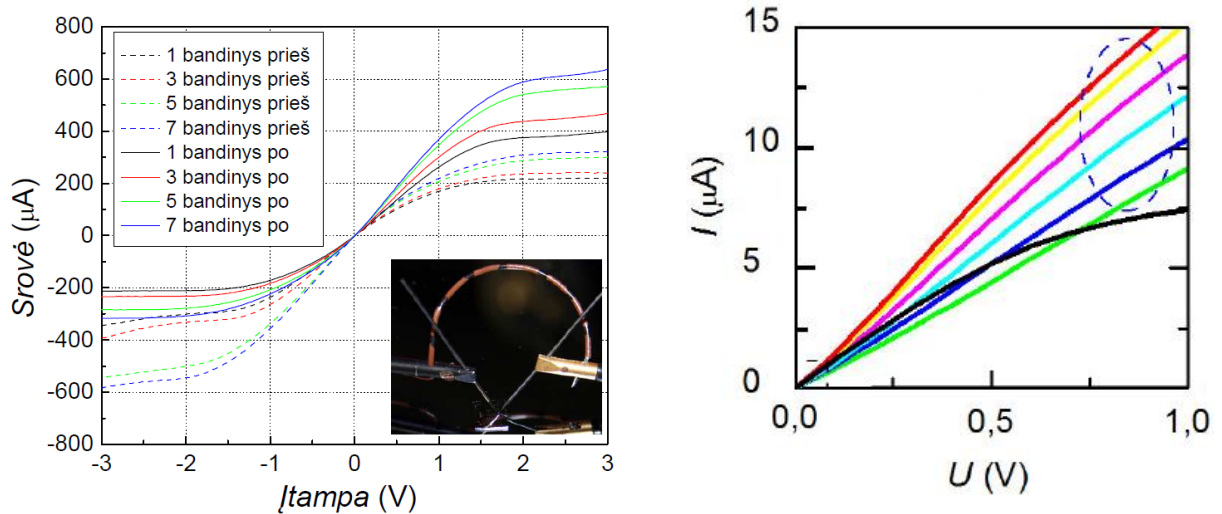


9 pav. „Peteliškės“ formos modeliuojamas detektorius (a) ir jo geometrija (b) [7]

Dėl ribotų kompiuterinių resursų, išsamesniems įrenginio tyrinėjimams buvo modeliuojamas dvimatis, simetrinis detektoriaus variantas (12 pav). Gautiems rezultatams patvirtinti ir labiau įsigilinti į prietaiso veikimą buvo atliekami trimačio modelio skaičiavimai (13 pav.).

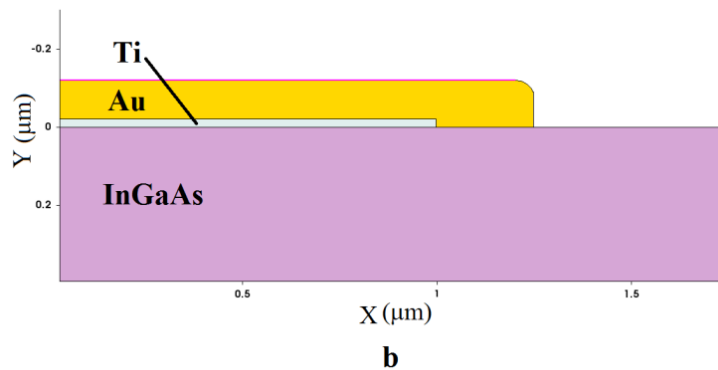
Modeliavimo metu, vienas iš tikslų buvo atkartoti eksperimentinius rezultatus ir išsiaiškinti galimus fizikinius veiksnius, lemiančius tokias netipiškas puslaidininkiniams diodams voltamperines charakteristikas. Eksperimentatorių gauti srovių stipriai tarpusavyje ženkliai skiriasi (10 pav.). Taip yra dėl to, kad buvo atlikta daugybė eksperimentų su vienodos geometrijos, tačiau skirtingos medžiagos kokybės (priemaišų tankio, defektų), bandiniais. Tokį skirtumą lemia skirtingos puslaidininkinių auginimo, kontaktų garinimo sąlygos.

Tačiau visais atvejais buvo stebima ta pati tendencija, kurios fizikinė priežastis nebuvo žinoma: esant pakankamai aukštai įtampai tarp kontaktų atsiranda srovės ribojimas ir voltamperinė charakteristika „užlinksta“. Tokios charakteristikos nėra tipiškos puslaidininkiniams diodams, tačiau būdingos lauko tranzistoriams, kurie taip pat gali būti naudojami terahercinei spinduliuotei detektuoti [18].



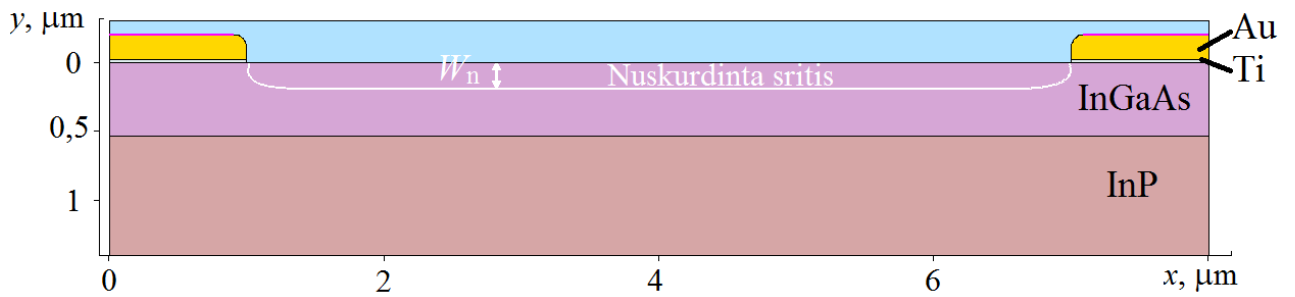
10 pav. Eksperimentiškai matuotos InGaAs „peteliškės“ formos diodų voltamperinė charakteristikos (kairėje – prieš ir po korpusavimo) [10] [20]

Šiame darbe buvo analizuojami du pagrindiniai faktoriai, kurie galėjo lemti tokių netipinių diodams voltamperinių charakteristikų susidarymą. Pirmasis iš jų – tai gamybos proceso metu galimai atsiradęs aukso kontakto persiklojimas su plonu titano sluoksniu, kaip parodyta 11 pav. Srityse, kur susidaro persiklojimas, Au sluoksnis tiesiogiai jungiasi su InGaAs sluoksniu. Kadangi aukso elektrono išlaisvinimo darbas didesnis (5 eV) negu titano (4,3 eV) susidaro Šotkio barjeras aplink titano sluoksnį, taip stabdydamas laisvą elektronų judėjimą esant išorinei įtampai tarp kontaktų.



11 pav. Aukso kontakto „užlipimas“ virš plono titano sluoksniu

Kita priežastis, galinti lemti srovės ribojimo atsiradimą, galėtų būti susidarantis paviršinis krūvis virš indžio galio arsenido sluoksniu (12 pav.). Neigiamas paviršinis krūvis nustumtų elektronus nuo InGaAs paviršiaus ir taip susidarytų nuskurdintoji sritis, o laidaus kanalo plotis susiaurėtų.



12 pav. Modeliuojamas diodas su paviršiniu krūviu oro ir InGaAs riboje

Modeliavimo metu medžiagų parametrai buvo parinkti remiantis „Sentaurus TCAD“ medžiagų duomenų bazės biblioteka. Darbo metu didelis dėmesys buvo skiriamas puslaidininkio parametru aprašymui. Buvo sukurtas  $\text{In}_{0,47}\text{Ga}_{0,53}\text{As}$  parametru failas, kaip nurodyta programinės įrangos instrukcijose [19]. Tuomet, remiantis įvairia literatūra, kiekvienu skirtingu atveju buvo modifikuojamas šis failas, nurodant  $\text{In}_{0,47}\text{Ga}_{0,53}\text{As}$  elektronų judrio vertes silpnuose elektriniuose laukuose. Šios vertės pateiktos 4-oje lentelėje.

Taip pat, vėlesniuose etapuose buvo atsižvelgta ir į elektronų judrį stipriuose elektriniuose laukuose remiantis 2.2.5 skyrelyje aprašytu Canali [13] judrio modeliu. Kiti InGaAs bei kitų medžiagų parametrai nebuvo modifikuojami.

4 Lentelė. InGaAs elektronų judris esant skirtingoms priemaišų tankio vertėms

Priemaišų tankis ( $\text{cm}^{-3}$ )	Elektronų judris ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	Literatūros šaltinis
$1 \times 10^{14}$	16000	TCAD biblioteka
$1 \times 10^{15}$	10000	[12]
$2,9 \times 10^{15}$	8500	[12]
$1 \times 10^{16}$	8000	[11]
$2,3 \times 10^{17}$	6000	[11]

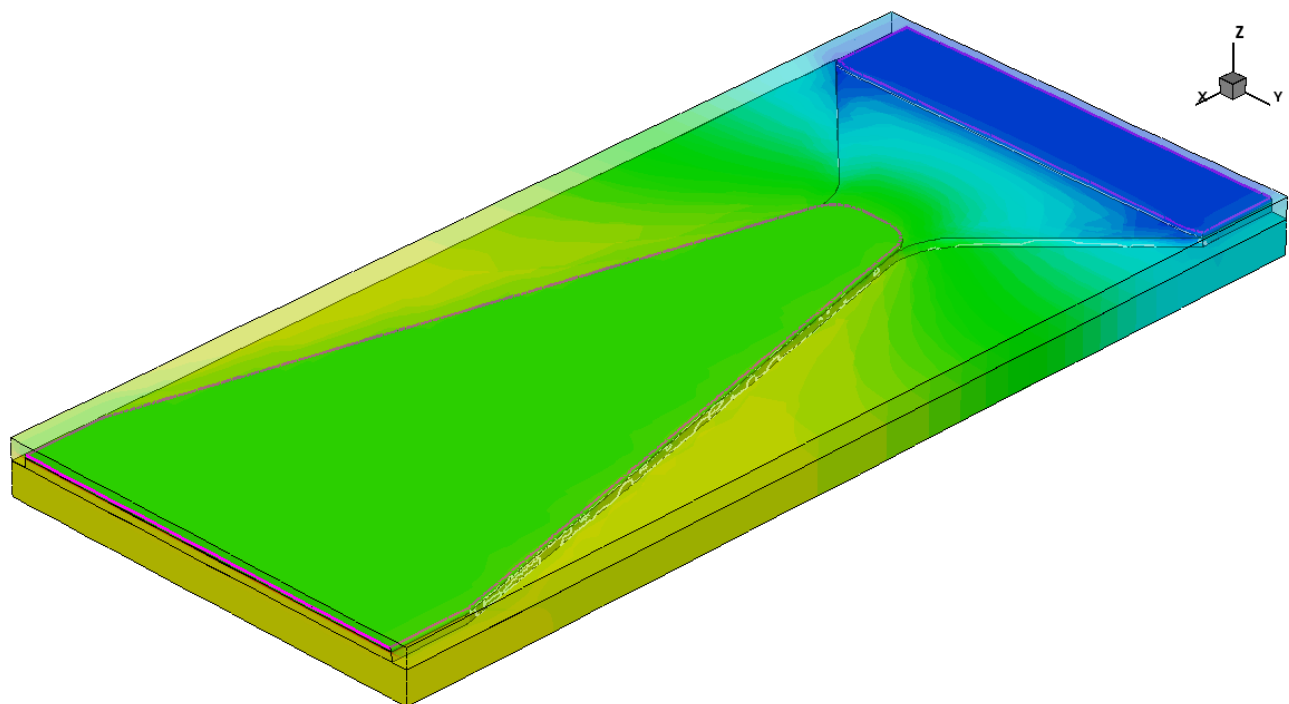
Skaičiavimai atlikti remiantis Fermio statistika kambario temperatūroje ( $T = 300 \text{ K}$ ). Naudotas hidrodinaminis elektronų ir skylių transporto modelis. Pasinaudota skirtingas judrio modeliais – atsižvelgiant į judrio mažėjimą stipriuose elektriniuose laukuose ir laikant judrį pastoviu dydžiu



nepriklausomai nuo elektrinio lauko. Atsižvelgta į Šoklio-Rido-Holo (SRH), spindulinę bei Ože rekombinacijas. Ti/InGaAs bei Au/InGaAs ribose buvo apibrėžtas Šotkio barjeras.

Aukso srities paviršiuje buvo nurodyti du kontaktai. Kraštinės sąlygos: 0 V įtampa viename kontakte ir kaitoma kitame. Prietaiso geometrija pavaizduota 12 pav. InP sluoksnio storis – 1  $\mu\text{m}$ , InGaAs – 0,536  $\mu\text{m}$ , Ti – 20 nm, Au – 180 nm. Taip pat buvo apibrėžtas pagalbinis 0,5  $\mu\text{m}$  oro sluoksnis, kurio pagalba buvo galima nurodyti paviršinių krūvį InGaAs ir oro sandūroje. Viso prietaiso ilgis – 8  $\mu\text{m}$ .

Taip buvo sukurtas trijų matmenų prietaiso modelis pavaizduotas 13 pav. Matmenys išlaikyti tokie patys, kaip ir dvimačio modelio. Bendras prietaiso ilgis – 40  $\mu\text{m}$ , plotis – 10  $\mu\text{m}$ . Atstumas tarp kontaktų – 10  $\mu\text{m}$ , diodo “kaklelio” plotis – 5  $\mu\text{m}$ . Siekiant išvengti stipraus krūvio susidarymo aštriuose kampuose, visų medžiagų paviršiai buvo užapvalinti.

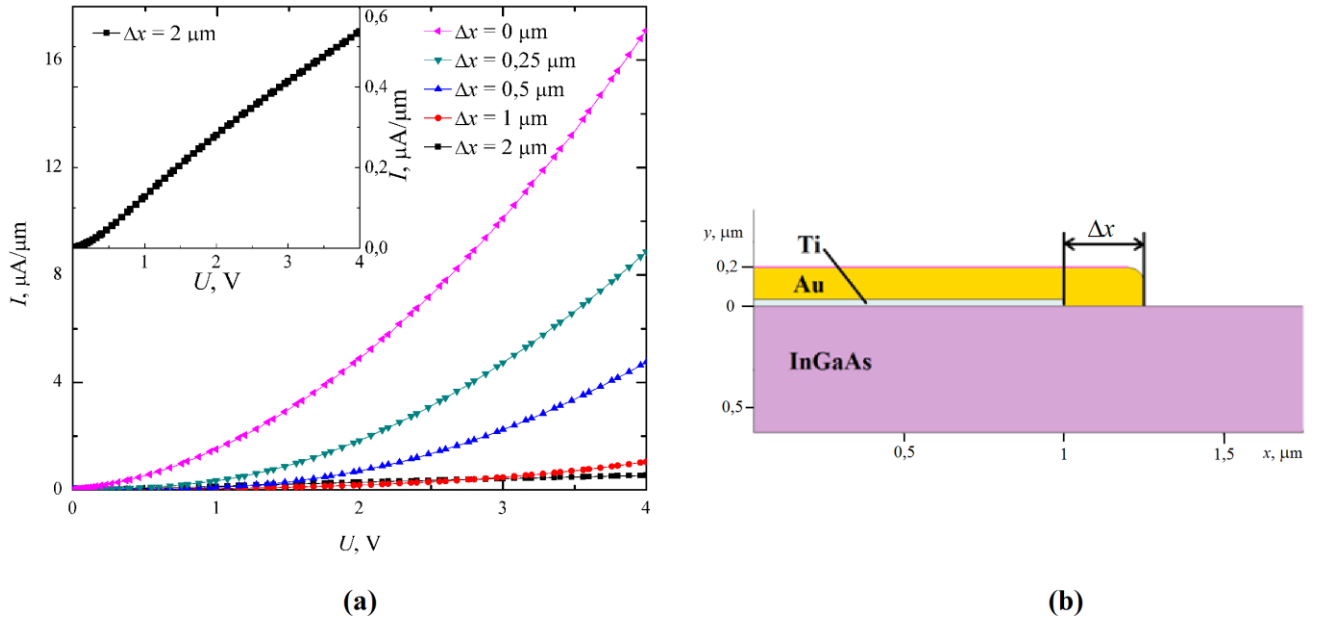


13 pav. Trimatis InGaAs „peteliškės“ formos diodo modelis

## 4. Modeliavimo rezultatai ir jų aptarimas

### 4.1 Kontaktų persiklojimo ir priemaišų koncentracijos įtaka.

Pirmiausia atlikti skaičiavimai varijuojant aukso ir titano persiklojimo dydžiu  $\Delta x$ , kaip pavaizduota 14 pav b.

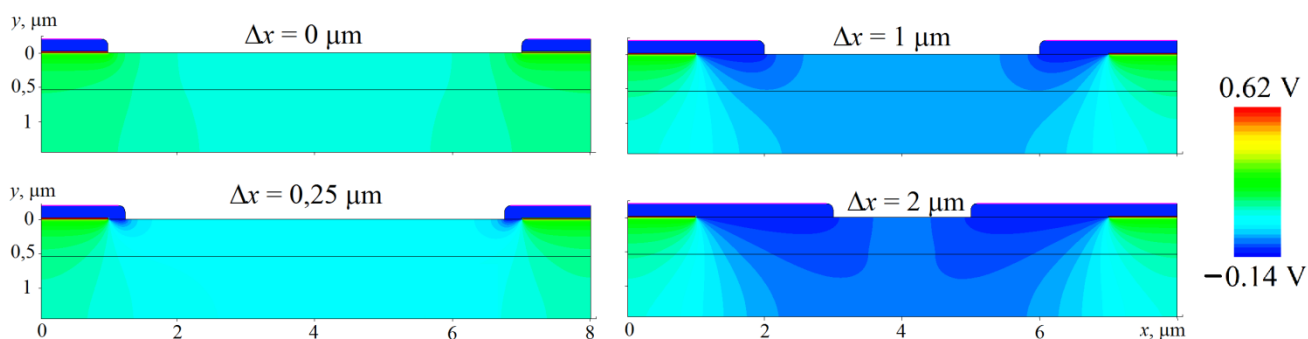


14 pav. Voltamperinės diodo charakteristikos esant skirtingiems persiklojimo dydžiams (a); kontaktų persiklojimo schema (b)

Iš 14 pav. a pavaizduotų kreivių matyti, kad voltamperinės charakteristikos gaunamos kaip įprasto diodo tiek su kontaktų persiklojimu tiek be jo, išskyrus, kai persiklojimas itin didelis ( $2 \mu\text{m}$ ), tuomet kylant įtampai atsiranda srovės ribojimas ir kreivė „užlinksta“ (pavaizduota 14 pav. a dalies intarpe). Taip pat matyti, kad didėjant persiklojimui, srovės mažėja. Tai paaiškinti galima remiantis 15 paveiksle pavaizduotu elektrostatinio lauko pasiskirstymu įvairiais atvejais.

Jei persiklojimo nėra, t.y. kai aukso kontakto ilgis sutampa su titano sluoksnio ilgiu (15 pav. kairėje viršuje), turime įprastus ominių kontaktus ir krūvininkai teka netrukdomi. Esant persiklojimui, dėl santykinai didelio aukso elektrono išlaisvinimo darbo, po užvirtusia aukso dalimi susidaro Šotkio barjeras. Dalis krūvininkai šio barjero neįveikia ir po užvirtusiais kontaktais susidaro nuskurdinta sritis, kurioje elektronų tankis mažas. Tam kad pasiektų kitą elektrodą, krūvininkai turi šią sritį „apeiti“.

Didinant persiklojimą, ši sritis plečiasi. Kai išsikišusi aukso dalis pasiekia  $\Delta x \sim 1,5 \mu\text{m}$  ir daugiau nuskurdintoji sritis išsiplečia per visą laidųjį InGaAs kanalą. Tokiu atveju didėjant įtampai atsiranda srovės ribojimas ir voltamperinės charakteristikos kreivė ima „užlinkti“ ir panašėti į eksperimentų metu gautąsias.

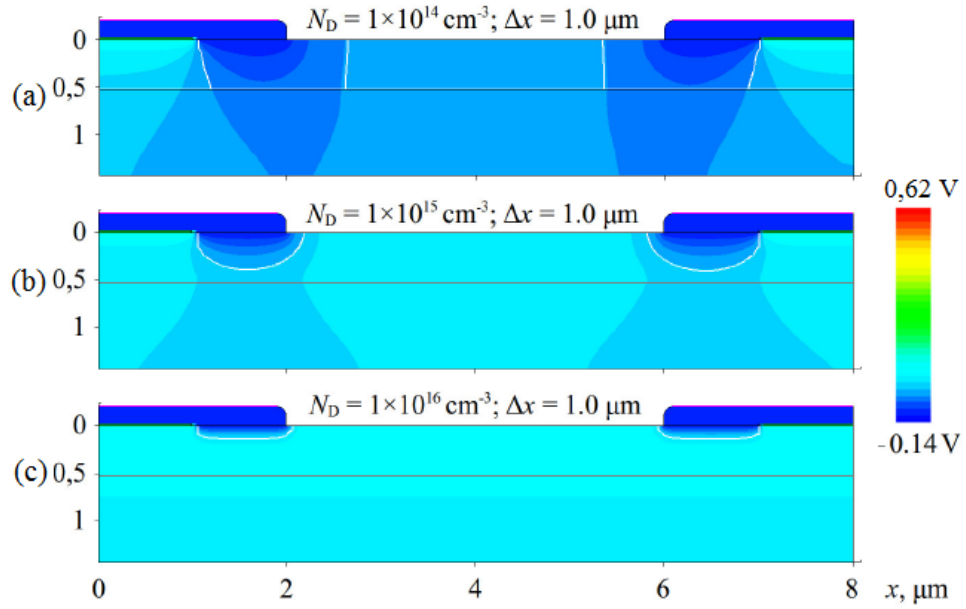


15 pav. Elektrostatinio lauko pasiskirstymas esant skirtingoms aukso kontaktų persiklojimo vertėms (įtampa tarp kontaktų lygi 0 V)

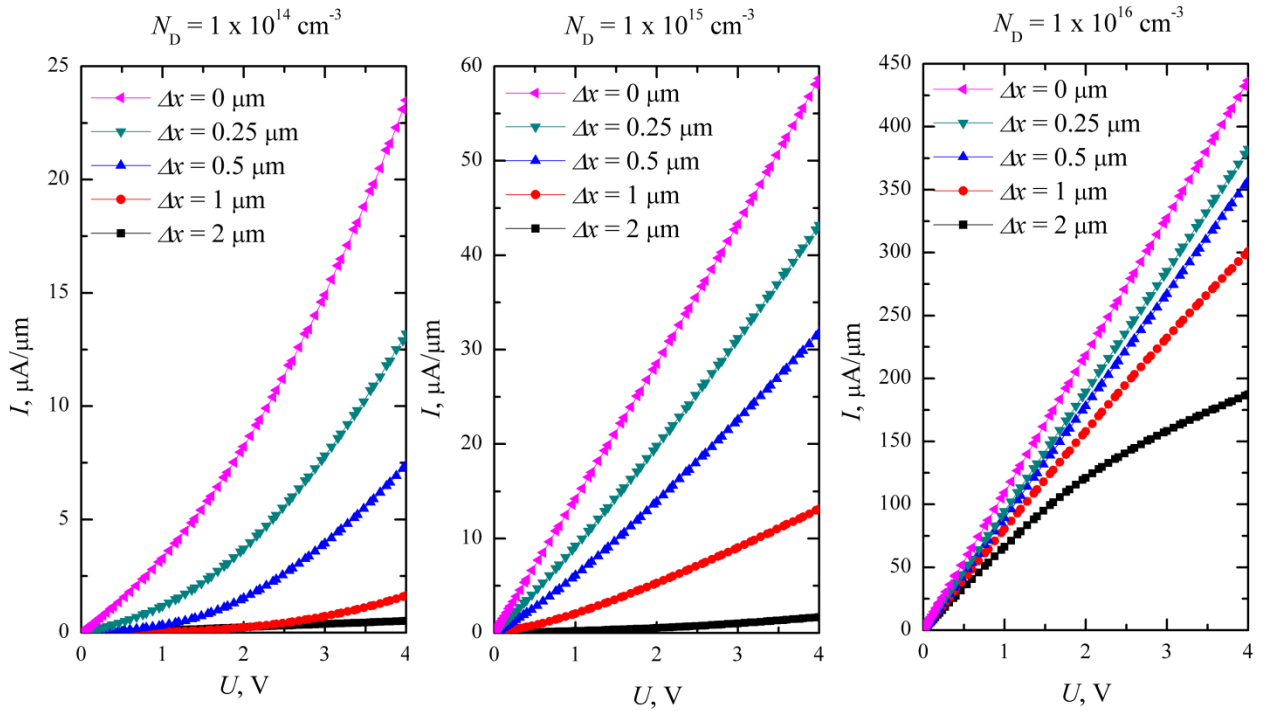
Tačiau toks didelis geometrinis prietaiso nukrypimas mažai tikėtinas, be to, tokiu gauti srovių stipriai siekia vos kelis šimtus nA. Dėl pastarųjų priežasčių buvo toliau ieškoma diodo parametrų, galinčių labiau įtakoti voltamperines charakteristikas.

Buvo nuspręsta, kad, detektoriaus gamybos metu, užaugintas InGaAs sluoksnis galimai nėra visiškai švarus ir dėl to reikėtų atsižvelgti į sluoksnyje esančių priemaišų koncentraciją. Buvo atlikti skaičiavimai esant skirtingoms donorinių priemaišų  $N_D$  koncentracijoms InGaAs sluoksnyje.

Kaip ir tikėtasi, iš 16 pav. matyti, kad didėjantis priemaišų tankis mažina nuskurdintąją sritį, kadangi dėl didesnio laisvųjų krūvininkų skaičiaus elektrostatinis laukas labiau ekranuojamas. Iš voltamperinių charakteristikų pavaizduotų 17 pav. matyti, kad srovės, esant didesniam legiravimo laipsniui, išauga, kadangi mažėja nuskurdinta sritis ir daugėja laisvųjų krūvininkų. Eksperimentinių rezultatų tai nepaaiškina, kadangi, kreivių „užlinkimui“ gauti vis tiek reikia itin didelių geometrinių nukrypimų, kurie mažai tikėtini. Tačiau analizuojant eksperimentines voltamperines charakteristikas galima numatyti, kad esant žemai įtampai prietaisas veikia kaip ominis kontaktas, o įtampai kylant gali susidaryti nuskurdintoji sritis, kuri apribotų srovės augimą, tad ir toliau buvo ieškoma kitų veiksmų, lemiančių nuskurdintosios srities plėtimąsi.



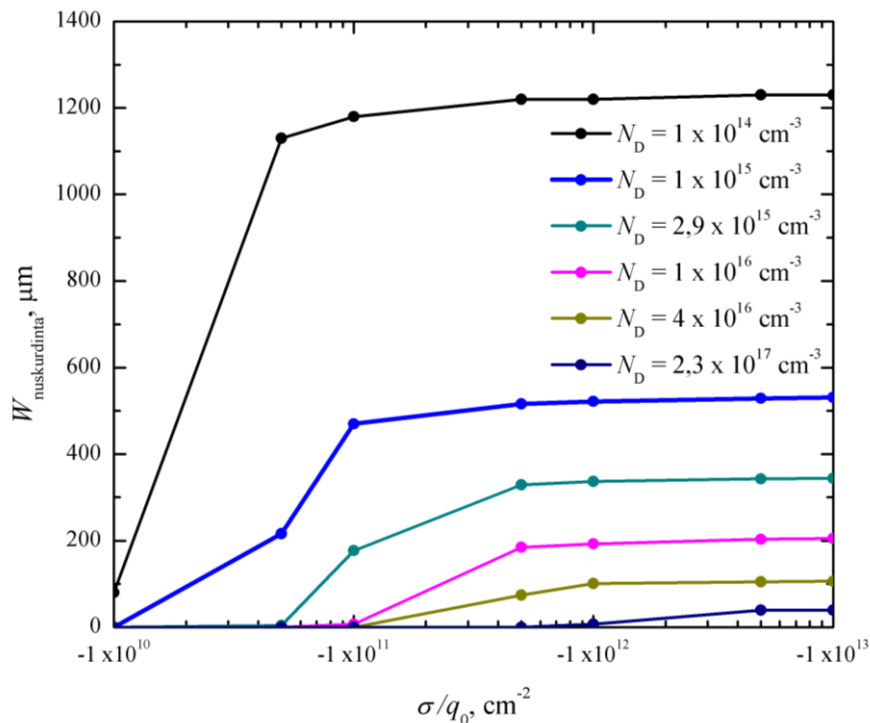
16 pav. Elektrostatinio lauko pasiskirstymas esant skirtingam priemaišų tankiui  $N_D$ , kai kontaktų persiklojimas  $\Delta x$  fiksuotas ir lyg 0,25 mm, išorinė įtampa lygi 0 V



17 pav. InGaAs „peteliškės“ formos diodo voltamperinės charakteristikos esant skirtingiems priemaišų tankiams  $N_D$  ir kontaktų persiklojimo  $\Delta x$  vertėms

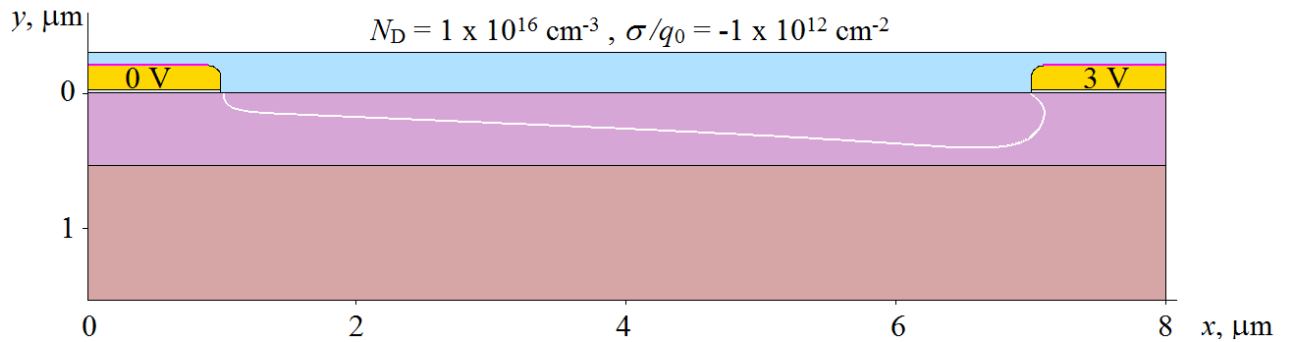
## 4.2 Paviršinio krūvio įtaka

Remiantis eksperimentinių matavimų metu gautais rezultatais buvo padaryta prielaida, kad puslaidininkio paviršiuje galėtų susidaryti neigiamas paviršinis krūvis, kuris praplėstų nuskurdintą sritį per visą InGaAs sluoksnį kaip parodyta 12 pav. Šios srities gylio  $W_n$  priklausomybė nuo priemaišų koncentracijos  $N_D$  ir paviršinio krūvio  $\sigma/q_0$  pavaizduota 18 pav. Programinė įranga sritį laiko nuskurdinta, jei joje pagrindinių krūvininkų tankis yra 5% ir mažesnis lyginant su tikrąja verte.



18 pav. Nuskurdintosios srities  $W_n$  gylio priklausomybė nuo paviršinio krūvio  $\sigma/q_0$  esant skirtingiems priemaišų tankiams  $N_D$

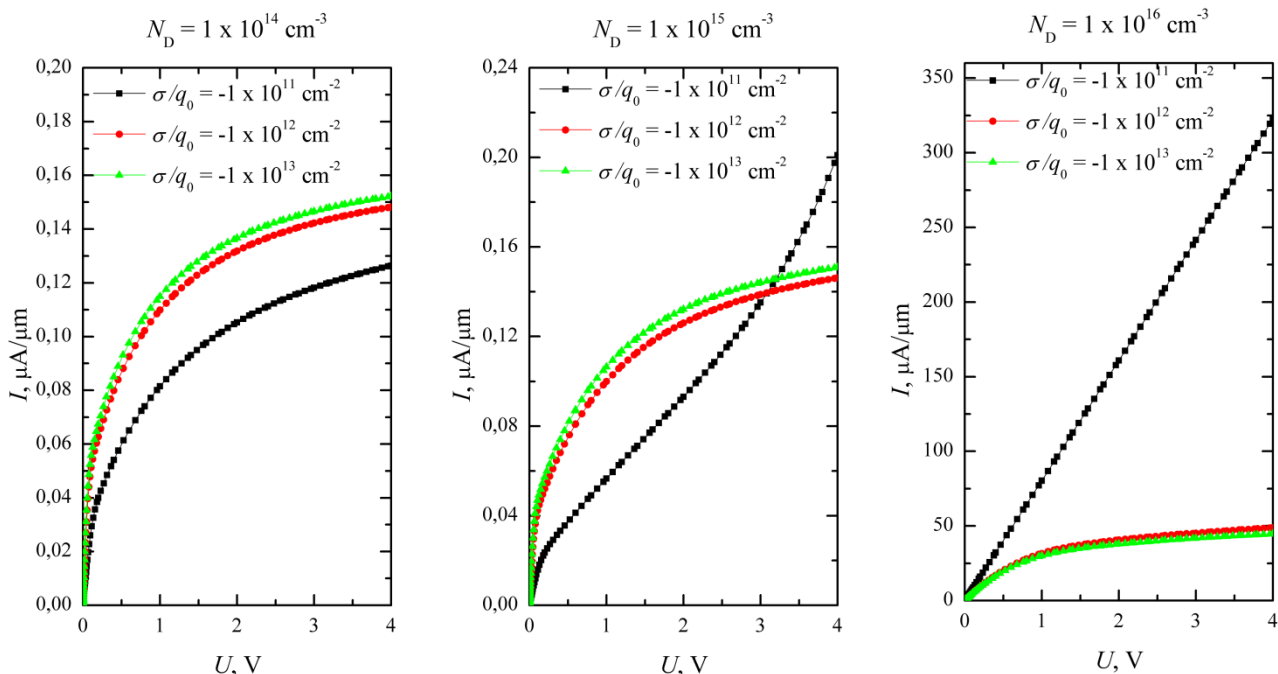
18-ame paveiksle pateiktas nuskurdintosios srities gylis, kai įtampa tarp elektrodų lygi 0. Tačiau svarbu paminėti, kad esant įtampai tarp elektrodų, elektronų nuskurdintoji sritis dar labiau plečiasi prie teigiamesnio elektrodo, kaip pavaizduota 19 pav.



19 pav. Modeliuojamo InGaAs diodo struktūra su pavaizduota susidarančia nuskurdinta sritimi, kai įtampų skirtumas tarp kontaktų 3V

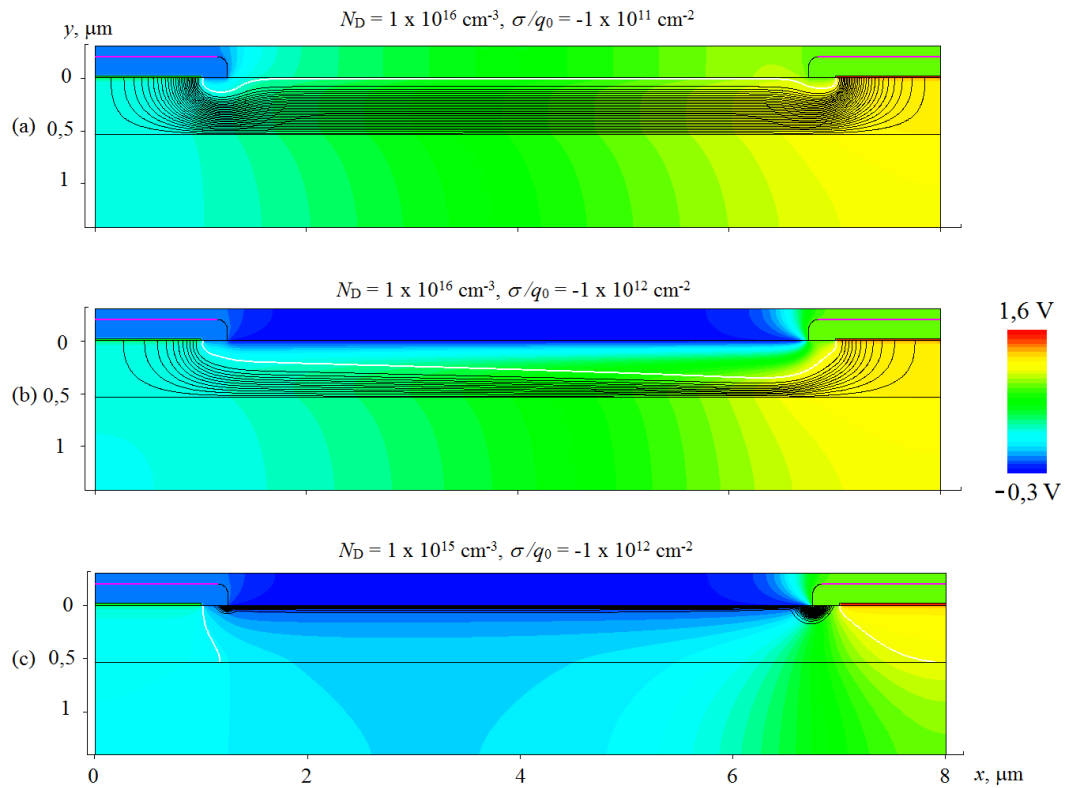
Pirminiuose skaičiavimuose laikyta, kad aukso persiklojimas  $\Delta x$ , aptartas 4.1 skyrelyje, yra lygus  $0,25 \mu\text{m}$ . Gautos voltamperinės charakteristikos esant skirtingam priemaišų tankiui  $N_D$  ir paviršiniam krūviui  $\sigma/q_0$  pavaizduotps 20 pav.

Iš charakteristikų, pavaizduotų 20 pav. dešinėje, matyti kad stipraus legiravimo atveju ( $N_D = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) ir esant silpnam paviršiniam krūviui ( $\sigma/q_0 = -1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ) srovė didėja proporcingai įtampai. Kadangi esant tokiai priemaišų koncentracijai Debajaus ekranavimo nuotolis InGaAs lygus vos  $0,05 \mu\text{m}$ ,  $-1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  paviršinis krūvis yra beveik visiškai ekranuojamas ir žymi nuskurdinta sritis nesusidaro, kaip ir buvo apskaičiuota anksčiau (18 pav. purpurinė kreivė). Tad šiuo atveju krūvininkai puslaidininkio laidžiu kanalu teka netrukdomi, kaip ir parodyta 21 pav. a dalyje. Tačiau esant stipresniam paviršiniam krūviui ( $\sigma/q_0 = -1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ir daugiau) išorinis laukas nėra visiškai ekranuojamas ir elektronai nustumiami nuo InGaAs paviršiaus. Tokiu būdu susidaro nuskurdintoji sritis, kurios plotis  $W_n$  siekia  $\sim 200 \mu\text{m}$ . Kaip matyti iš 21 pav b. dalies, tokiu atveju laidusis kanalas susiaurėja maždaug iki pusės InGaAs storio. Didinant įtampą tarp elektrodų prie vieno iš kontaktų nuskurdintoji sritis plečiasi dar labiau, laidusis kanalas užsidarinėja – atsiranda srovės ribojimas, o voltamperinėje charakteristikoje matome „užlinkimą“. Taigi tiriamasis diodas veikia lyg lauko tranzistorius, kurio užtūra – paviršinis krūvis.



20 pav. Diodo voltamperinės charakteristikos esant skirtingai priemaišų koncentracijai ir skirtingiems paviršiniams krūviams,  $\Delta x$  pastovus ir lygus  $0,25 \mu\text{m}$

Pastarieji paaiškinimai netinka, jei priemaišų koncentracija nedidelė (20 pav. kairėje ir viduryje), kadangi matyti, kad šiuo atveju srovių stipriai gauti keliomis eilėmis mažesni, o, priešingai nei anksčiau aptartu atveju, didėjant paviršiniam krūviui srovės išauga. Taip yra todėl, kad šiuo atveju Debajaus ekranavimo nuotolis didesnis ( $N_D = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  atveju –  $0,14 \mu\text{m}$ ) ir nuskurdintosios srities plotis  $W_n$  siekia  $\sim 500 \mu\text{m}$  (kai  $N_D = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) ir  $1200 \mu\text{m}$  (kai  $N_D = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) (18 pav. mėlyna ir juoda kreivės). Tai reiškia, kad nuskurdintoji sritis išplinta tiek, kad perdengia visą kanalą (21 pav. c). Puslaidininkyje elektronų ir skylių koncentracijų sandauga išlieka pastovi ( $np = n_i^2 = N_C N_V \exp\left(\frac{E_V - E_C}{kT}\right)$ ), tad mažėjant elektronų tankiui ties paviršiumi atitinkamai daugėja skylių. Kadangi šiuo atveju skylių koncentracija laidžiamame kanale didesnė apytiksliai net dešimčia eilių, srovę puslaidininkyje ir lemia pastarųjų krūvininkų judėjimas. Didėjant paviršiniam krūviui elektronai stumiami toliau nuo InGaAs sluoksnio paviršiaus, dėl to didėja skylių koncentracija laidžiamame kanale, tad didėja ir srovė. Tačiau skylių judris ženkliai mažesnis negu elektronų, todėl srovės gaunamos vos kelių šimtų  $\text{nA}/\mu\text{m}$  eilės.

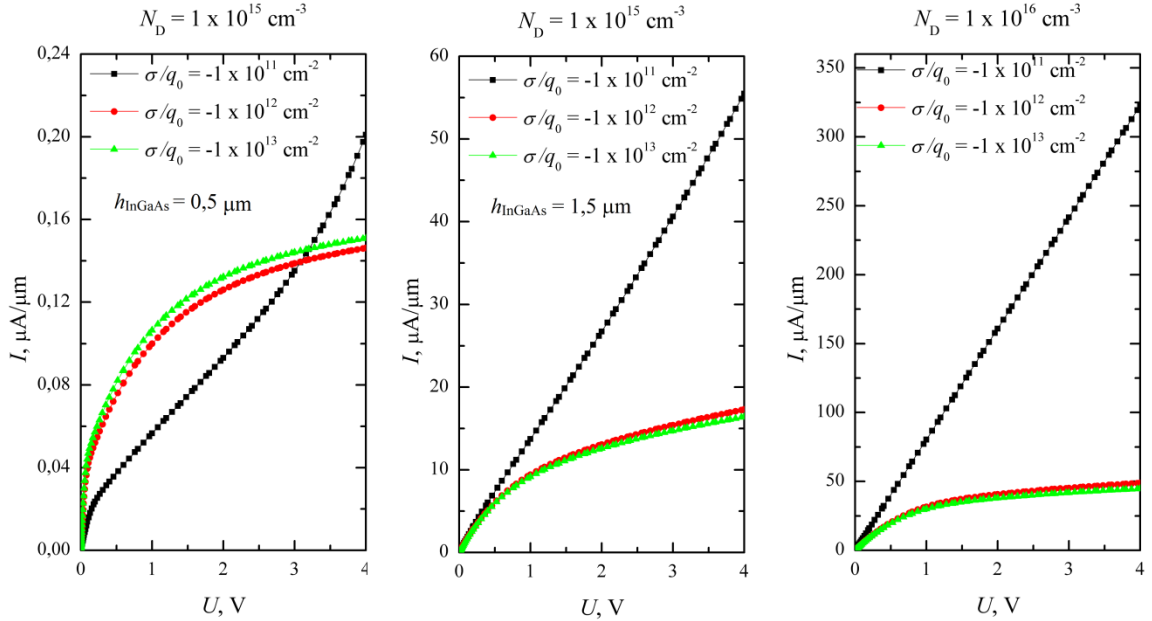


21 pav. Elektrostatinio lauko pasiskirstymas, kai išorinė įtampa lygi 1 V (a ir b dominuoja elektroninis laidumas, c – skylinis), juodos linijos žymi srovių tekėjimo sritis

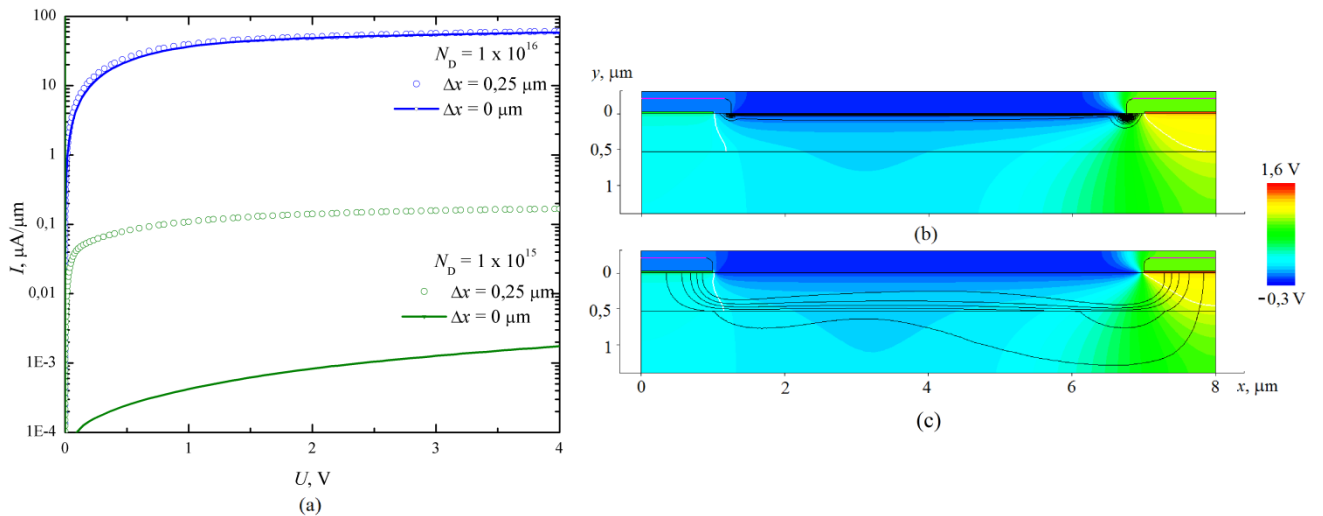
Pastarosioms prielaidoms patvirtinti, buvo atlikti matavimai, dirbtinai sumodeliaavus prietaisą, kuriame InGaAs sluoksnio storis  $h_{\text{InGaAs}}$  parinktas  $1,5 \mu\text{m}$  – toks, kad esant priemaišų koncentracijai  $N_D = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , nuskurdinta sritis neperdengtų viso laidaus kanalo. Kaip matyti iš 22 pav esant platesniam InGaAs kanalui voltamperinė charakteristika tapo panaši kaip ir  $N_D = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  atveju.

Siekiant išsiaiškinti, ar kontaktų persiklojimas yra būtinas norint paaiškinti voltamperinių charakteristikų pavidalą, atlikti papildomi skaičiavimai be aukso „užlipimo“ ( $\Delta x = 0 \mu\text{m}$ ). Rezultatai pateikti 23 paveiksle.





22 pav. Diodo voltamperinės charakteristikos esant skirtingai priemaišų koncentracijai ir InGaAs sluoksnio storiui



23 pav. Voltamperinės charakteristikos pusiau logaritminiame mastelyje su skirtingais  $N_D$  ir  $\Delta x$  parametrais (a), elektrostatinio lauko pasiskirstymas su kontaktų persiklojimu (b) ir be jo (c), kai išorinė įtampa = 1V,  $N_D = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\sigma/q_0 = -1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

Iš 23 pav. mėlynos kreivės matyti, kad, stipraus legiravimo atveju, kontaktų persiklojimas didelės įtakos nedaro, kadangi susidariusį barjerą elektronai apeina per likusį laidų kanalą, kurio plotis nuo kontaktų persiklojimo beveik nepriklauso. Tuo tarpu esant mažesnei priemaišų koncentracijai

puslaidininkyje, kai nuskurdinta sritis tiek išplitusi, jog perdengia visą InGaAs sluoksnį, ir dominuoja skylių srovė, kontaktų persiklojimo nebuvimas sumažina srovės stiprio vertes dar dviem eilėmis.

Tai paaiškina 23 pav b ir c dalys. Matyti, kad esant kontaktų persiklojimui skylės yra lengvai injektuojamos iš metalinio aukso kontakto į puslaidininkį ir juda elektronų nuskurdinta sritimi – InGaAs paviršiumi. Tačiau, kai metalų persiklojimo nėra, skylės negali įveikti Au/Ti barjero ir į laidų kanalą nepatenka. Tuo tarpu InGaAs sluoksnyje elektronų taip pat beveik nėra, todėl tik labai maža dalis jų pasiekia kitą elektrodą ir srovės dydis siekia vos kelis nA. Iš šių samprotavimų galima teigti, kad jei InGaAs priemaišų tankis nėra didelis ( $N_D = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  ir mažiau) ir (ar) paviršinis krūvis pakankamai žymus ( $\sigma / q_0 = -1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ir daugiau) prietaiso veikimui užtikrinti būtinas bent minimalus aukso kontakto sąlytis su Titano sluoksniu skylėms į laidų InGaAs kanalą injektuoti.

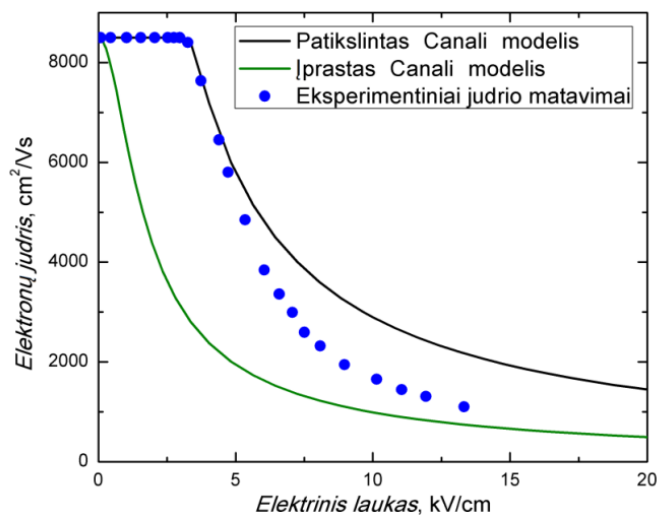
Kadangi eksperimentų metu gautiems rezultatams paaiškinti reikalingi didesni nei nA/ $\mu\text{m}$  eilės srovių stipriai, vėlesniuose skaičiavimuose nagrinėjami tie atvejai, kai dominuoja elektronų srovė, tad buvo laikyta, kad kontaktų persiklojimo nėra ( $\Delta x = 0 \mu\text{m}$ ).

### 4.3 Stipraus lauko įtaka

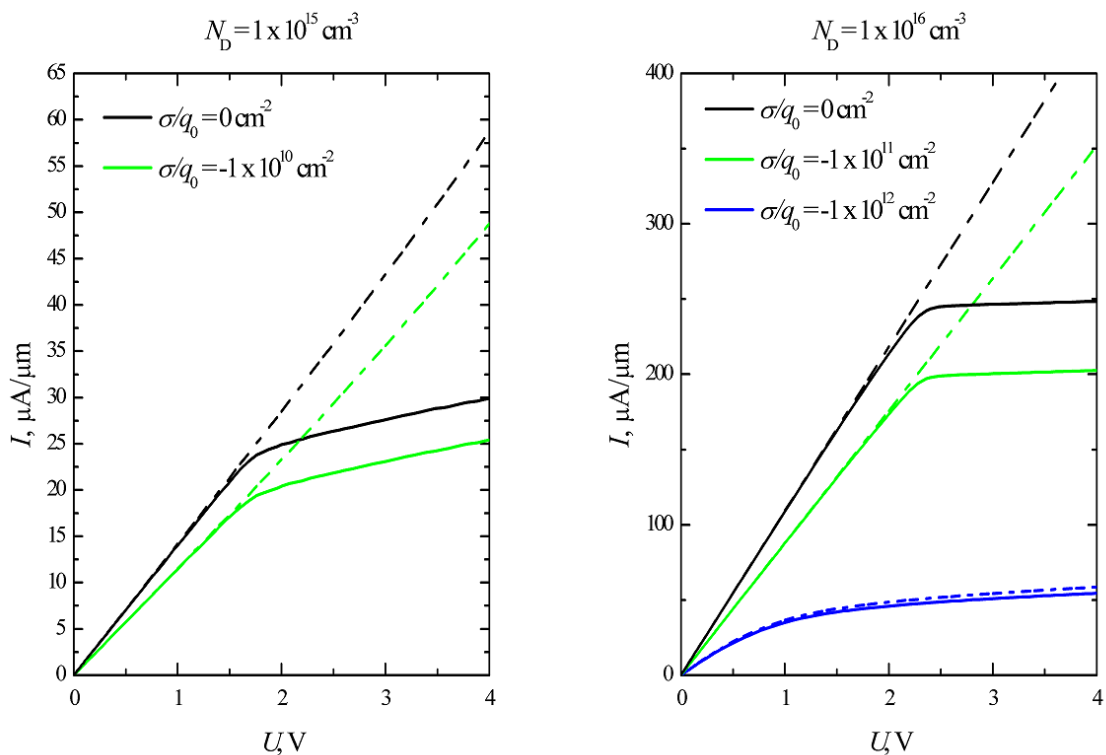
Kaip aprašyta 2.2.5 skirsnyje, puslaidininkiuose esant stipriems elektriniams laukams krūvininkų dreifinis greitis nėra proporcingas laukui – stebimas greičio įsisotinimas arba net mažėjimas (6, 7 pav.). Tuo pačiu ir elektronų judris tampa nevienodas skirtingo stiprio elektriniuose laukuose. Siekiant patikslinti gautus rezultatus, buvo atsižvelgta į stipraus lauko įtaką bandinyje remiantis Canali judrio modeliu.

Standartinis Canali modelis, įdiegtas į TCAD modeliavimo programinę įrangą, remiasi (20) formule ir yra pritaikytas siliciui. Kadangi tiriamasis prietaisais sudarytas iš InGaAs puslaidininkio, buvo būtina šį modelį redaguoti, nes, kaip buvo minėta 2.2.5 skirsnyje, InGaAs puslaidininkinis darinys ypatingas tuo, kad, be pagrindinio slėnio laidumo juostoje, turi ir papildomus šoninius slėnius (8 pav), tuo tarpu silicis – neturi. Dėl šios priežasties keičiasi ir modelio fizikinis veikimo principas.

Siekiant pritaikyti Canali judrio modelį InGaAs atvejui, keičiant (20) formulės koeficientus buvo bandoma rasti apytikslų modelį, atitinkantį [12] eksperimentinius rezultatus. Tolimesniuose skaičiavimuose naudotas modelis, kartu su eksperimentiniais [12] matavimais, pavaizduotas 24 pav.



24 pav. Naudoti Canali judrio modeliai ir eksperimentiniai matavimai pagal [12]

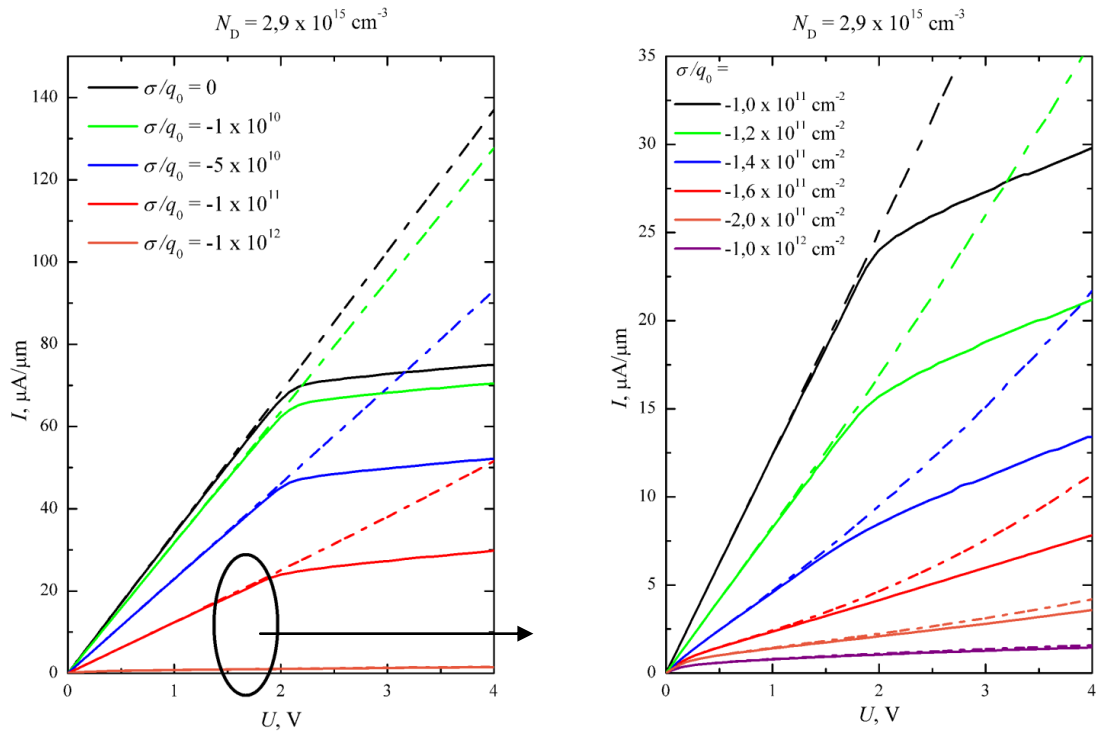


25 pav. Diodo voltamperinės charakteristikos esant skirtingiems priemaišų tankiams, kai skaičiavimui įskaitomas Canali judrio modelis, brūkšninė linija – netaikant Canali modelio

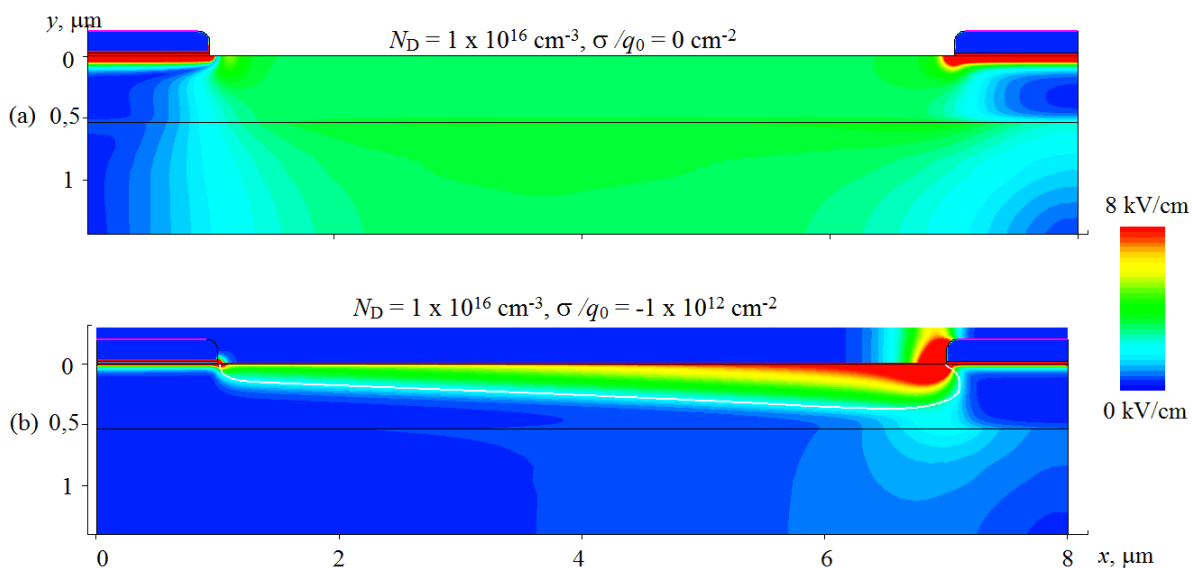
Iš 25 pav. rezultatų matyti, kad, atsižvelgus į elektronų judrio kitimą stipriuose elektriniuose laukuose, paviršinis krūvis nėra būtinas tam, kad voltamperinės charakteristikos kreivė „užlinktų“. Pagal Canali modelį (24 pav), elektronų judris pradeda mažėti pasiekus 4  $\text{kV}/\text{cm}$  elektrinio lauko stiprį.

Medialiaivimas parodė, kad toks elektrinis laukas susidaro, kai įtampa tarp kontaktų pasiekia  $\sim 1,5$  V, kai  $N_D = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , ir 2 V, kai  $N_D = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Iš elektrinio lauko pasiskirstymo esant 3V įtampai tarp kontaktų, pavaizduoto 27 paveiksle, matyti, kad stipriausias elektrinis laukas susidaro arti kontaktų. Taip pat matyti, kad pakankamai stiprus elektrinis laukas perdengia visą kanalą. Būtent stipraus elektrinio lauko sritys ir stabdo elektronus – dėl to ir matomas srovės ribojimas voltamperinėse charakteristikose. Išsamesnės voltamperinės charakteristikos esant  $N_D = 2,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  priemaišų tankiui pavaizduotos 26 pav.

Atsižvelgus ir į paviršinį krūvį InGaAs paviršiuje matyti ta pati tendencija kaip ir ankstenuose skaičiavimuose – kai laisvųjų krūvininkų, dėl didelės priemaišų koncentracijos, pakankamai daug ir dominuoja elektroninis laidumas krūvio spaudžiamas kanalas palaipsniui siaurėja ir gaunami srovių stipriai mažėja, o Canali modelio įskaitymas gautas srovės sumažina dar labiau, kai pasiekama reikalinga išorine įtampa stipriam elektriniam laukui sudaryti.



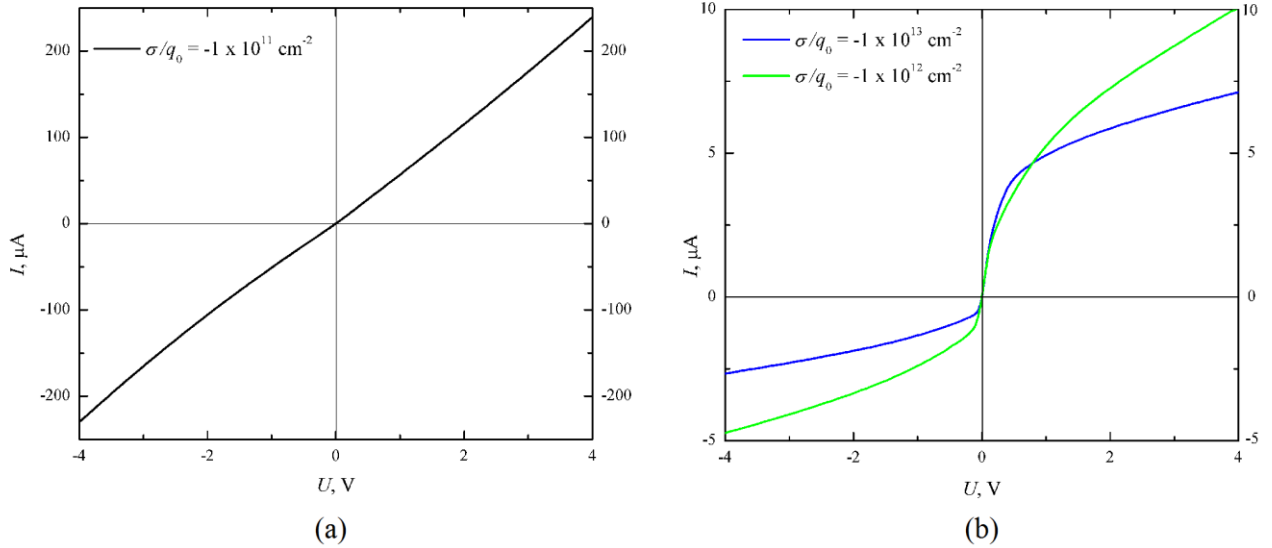
26 pav. Diodo voltamperinės charakteristikos naudojant Canali judrio modelį ir parenkant skirtingą paviršinį krūvį, kai priemaišų tankis fiksuotas ( $N_D = 2,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ), brūkšninė linija – netaikant Canali judrio modelio



27 pav. Elektrinio lauko pasiskirstymas, be paviršinio krūvio (a) ir kai paviršinis krūvis  $\sigma/q_0 = -1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (b) ( $N_D = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , įtampa lygi 3 V) (dėl aiškumo skalė dirbtinai parinkta iki 8 kV/cm – arti kontaktų (raudona sritis) elektrinis laukas dar stipresnis)

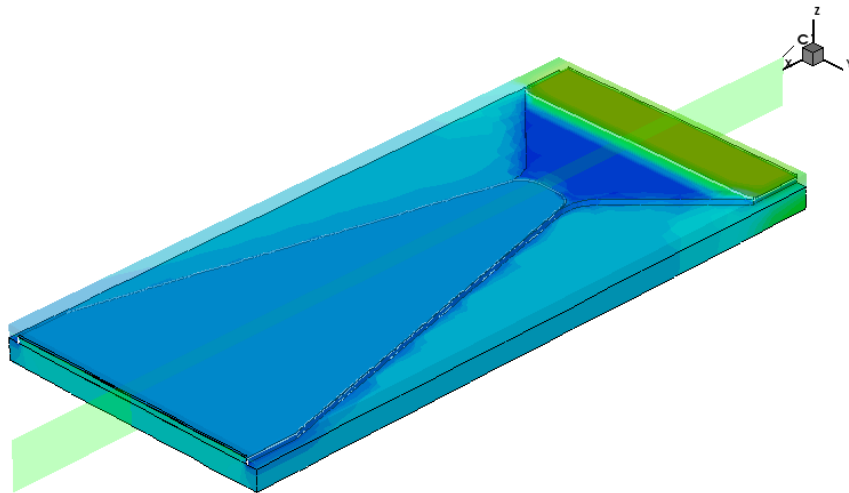
#### 4.4 Trimatis modelis

Eksperimentorių pageidavimu, trimačio modelio pagalba buvo siekiama išsiaiškinti, kokioms sąlygoms esant gaunamos panašaus srovės stiprio vertės, kaip pavaizduota 10 pav. dešinėje, t.y. kelių – keliasdešimt  $\mu\text{A}$  eilės. Remiantis dvimačio modelio rezultatais, norimoms srovės stiprių vertėms gauti, parinkti parametrai:  $N_D = 2,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\sigma/q_0 = 1 \times 10^{12-13} \text{ cm}^{-2}$ . Canali modelis nebuvo taikomas, kadangi skaičiavimai atsižvelgiant į šį modelį tampa dar sudėtingesni ir kompiuterinė įranga nesugeba susidoroti su užduotimi. Gauti rezultatai pavaizduoti 28 pav.



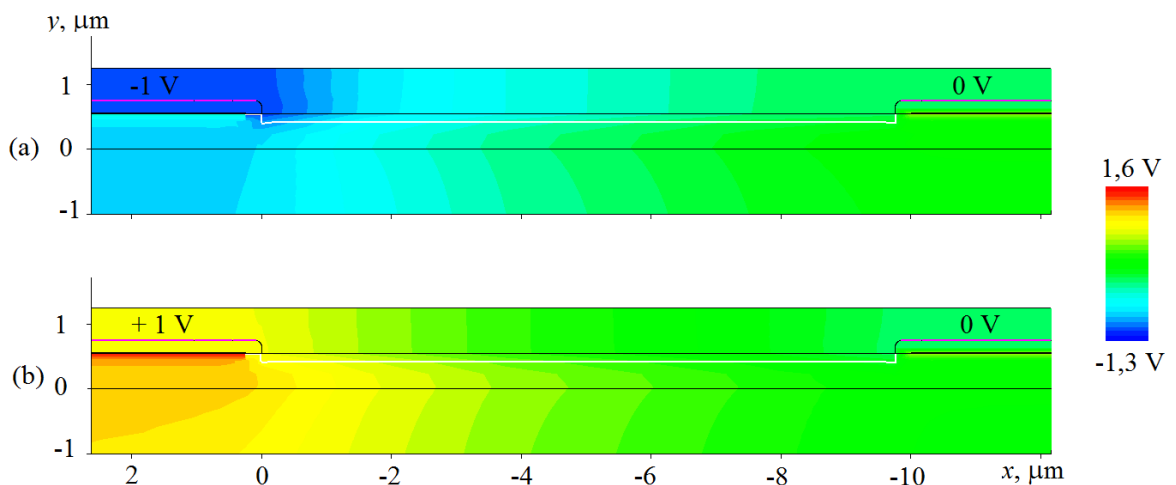
28 pav. Asimetrinio „peteliškės“ formos diodo trimačio modelio (pagal 13 pav.) voltamperinės charakteristikos, kai  $N_D = 2,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\Delta x = 0,25 \mu\text{m}$

Iš 28 paveikslo a dalies matyti, kad, kai paviršinis mažas, srovės stipris nuo įtampos priklauso tiesiškai, kaip ir buvo gauta analizuojant dvimatį modelį (25 pav). Taip pat matyti, kad sukeitus įtampos poliaringumus, charakteristika išlieka identiška, t.y. nėra jokios asimetrijos. Tuo tarpu, kai paviršinis pakankamai didelis (28 pav. b), matome asimetriją – srovės skiriasi 2 – 3 kartus. Eksperimentatoriai taip pat pastebėjo labai panašią asimetriją pavaizduotą 10 pav.



29 pav. Trimatis asimetrinio diodo modelis su pavaizduotu pjūviu

Tokius rezultatus galima paaiškinti atlikus trimačio modelio pjūvį Y ašimi, kaip pavaizduota 29 pav. ir atvaizdavus elektrostatinio lauko pasiskirstymą. 30 paveiksle pavaizduotas elektrostatinio lauko pasiskirstymas bandinyje dviem atvejais: a) kai smailiame kontakte įtampa  $-1\text{ V}$ , bukame  $-0\text{ V}$  ir b) kai smailiame  $+1\text{ V}$ , o bukame kontakte  $-0\text{ V}$ . Iš gautų rezultatų matyti, kad, esant mažam paviršiniam krūviui, susidariusi nuskurdinta sritis yra nežymi ir beveik visas InGaAs laidusis kanalas atviras elektronams tekėti tarp kontaktų, todėl srovės ribojimo nėra ir priklausomybė gaunama tiesinė. Ši elektronų nuskurdintoji sritis nepriklauso nuo įtampos poliaringumo, taigi nėra ir asimetrijos voltamperinėje prietaiso charakteristikoje.

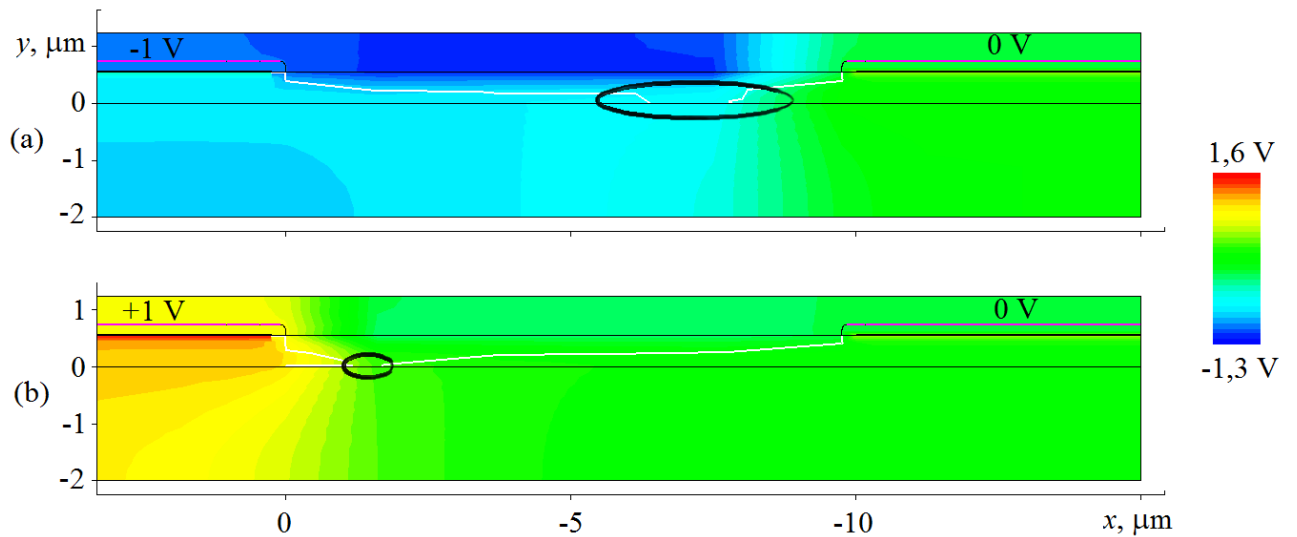


30 pav. Elektrostatinio lauko pasiskirstymas tiriamajame trimačiame modelyje išilgai Y ašies; paviršinis krūvis  $\sigma/q_0 = -1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , donorinių priemaišų tankis  $N_D = 2,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

Iš analogiško paveikslo stipresnių paviršinių krūvių atveju, pavaizduoto 31 pav., matyti, kad, kaip ir dvimačiu atveju, čia susidaro gilesnė nuskurdinta sritis, kuri kylant įtampai tarp kontaktų perdengia visą InGaAs laidųjį kanalą, dėl pastarosios priežasties ir gaunamas srovių ribojimas. Kaip ir buvo parodyta 19 paveiksle dvimačiu atveju, taip ir trimačiu atveju matyti, kad nuskurdinta sritis pasidaro plačiausia prie teigiamiesnio kontakto.

Įdomu tai, kad trimačio modelio atveju matyti, kad nuskurdintoji sritis plečiasi skirtingai – priklauso nuo pridėtos išorinės įtampos poliaringumo. Lyginant 31 paveikslo a ir b dalis galima nesunkiai pastebėti, kad, kai teigiamesnė įtampa yra bukame bandinio kontakte, nuskurdinta sritis išplinta labiau (juodai paryškintos sritys), kadangi ties šiuo kontaktu ir bandinio plotis X ašimi gerokai didesnis. Tuo tarpu, kai teigiamesnė įtampa užduota smailiame kontakte, susidaranti elektronų nuskurdintoji sritis gaunama mažesnė. Taip pat reikia turėti omenyje, kad trimačiu atveju šių sričių

tūrių skirtumas dar ryškesnis, todėl galima daryti prielaidą, kad būtent dėl šios priežasties ir atsiranda voltamperinių charakteristikų asimetrija, kuri buvo pastebėta ir eksperimentų metu.



31 pav. Elektrostatinio lauko pasiskirstymas tiriamajame trimačiame modelyje išilgai Y ašies;  
 paviršinis krūvis  $\sigma / q_0 = -1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , donorinių priemaišų tankis  $N_D = 2,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$



## Išvados

Šio darbo metu buvo įsisavinta „Synopsys TCAD“ programinė įranga skirta modeliuoti ir analizuoti dvimačius ir trimačius uždavinius. Sumodeliuotas dvimatis ir trimatis asimetrinis „peteliškės“ formos, InGaAs pagrindu pagamintas diodas, skirtas terahercinei spinduliuotei detektuoti.

Atlikus skaičiavimus esant skirtingiems aukso kontaktų geometriniais persiklojimams virš titano sluoksnio nustatyta, kad aukso kontaktų persiklojimas ir legiruotas InGaAs sluoksnis yra pakankama sąlyga eksperimentinių kreivių pavidalui gauti, tik tokiu atveju, kai geometrinis nukrypimas yra itin didelis ( $dx = 2 \mu\text{m}$  ir daugiau).

Modeliavimo pagalba nustatyta, kad didžiausią įtaką puslaidininkinio diodo voltamperinės charakteristikos pavidalui turi InGaAs ir oro riboje galintis susidaryti paviršinis krūvis, kurio dėka analizuojamas diodas veikia kaip lauko tranzistorius, kurio užtūra – paviršinis krūvis.

Nustatyta, kad InGaAs sluoksnis turi būti legiruotas  $1 \times 10^{15-16} \text{ cm}^{-3}$  eilės donorinėmis priemaišomis, o puslaidininkio paviršiuje turi susidaryti  $-1 \times 10^{12-13} \text{ cm}^{-2}$  eilės paviršinis krūvis, tam kad susidarytų pakankamo dydžio nuskurdinta sritis, trukdanti laisvam elektronų tekėjimui tarp kontaktų.

Pastebėta, kad paviršiniam krūviui  $\sigma/q_0$  viršijus  $-1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  vertę pagrindiniai krūvininkai išstumiami iš laidaus kanalo ir dominuoja šalutinių krūvininkų – skylių srovė, kuri yra trimis eilėmis mažesnė, kai yra aukso kontakto persiklojimas  $\Delta x$  ir dar trim eilėm mažesnė, kai persiklojimo nėra.

Nustatyta, kad tiriamajame diode susidaro stiprūs elektriniai laukai, kurie koreguoja elektronų judrį InGaAs puslaidininkyje – srovė dar labiau ribojama pasiekus  $\sim 2 \text{ V}$  ir didesnę įtampą tarp kontaktų, nepriklausomai nuo paviršinio krūvio susikūrimo.

Analizuojant asimetrinio „peteliškės“ formos diodo trimatį modelį gauta voltamperinių charakteristikų asimetrija, kurią lemia susidaranti skirtingo tūrio nuskurdintoji sritis priklausomai nuo įtampos poliaringumo.

## Summary

### MODELING AND SIMULATION OF TERAHERTZ DETECTOR WITH TCAD SOFTWARE

Compact terahertz (THz) sensors operating at room temperature are suitable for material inspection and security applications. However, more investigation is still needed in developing compact, at room temperature operating, THz frequency detectors. One of possible devices for THz detection is asymmetrically shaped InGaAs diodes (also called bow-tie diodes).

The purpose of this work was to find out reasons responsible for atypical experimentally measured diode's IV characteristics and their IV asymmetry.

Both 2D and 3D InGaAs diode models were considered. It was established that the negative surface charge on InGaAs layer, which works as a gate in a field-effect transistor, was the most possible reason for their atypical characteristics. Also it was noticed that electron mobility may be reduced due to the high electric field.

3 D model calculations clearly demonstrate that the dependence of the volume of depletion region on applied voltage polarity is a main reason of the observed experimentally asymmetry of the IV characteristics.

## Literatūra

- [1] John F Federici, Brian Schulkin, Feng Huang, Dale Gary, Robert Barat, Filipe Oliveira and David Zimdars, *THz imaging and sensing for security applications—explosives, weapons and drugs*, Semicond. Sci. Technol. **20** (7), 266–280 (2005).
- [2] B. B. Huand M. C. Nuss, *Imaging with terahertz waves*, Opt. Lett. **20**, 1716 (1995).
- [3] I. Kašalynas, R. Venkevičius, D. Seliuta, I. Grigelionis, and G. Valušis, *InGaAs-based bow-tie diode for spectroscopic terahertz imaging*, Journal of Applied Physics **110**, 114505 (2011).
- [4] T. Yasui, A. Nishimura, T. Suzuki, K. Nakayama, and S. Okajima, *Detection system operating at up to 7THz using quasioptics and Schottky barrier diodes* Rev. Sci. Instrum. **77**, 066102 (2006).
- [5] E. Ojefors, U. Pfeiffer, A. Lisauskas, and H. Roskos, IEEE J. Solid-State Circuits **44**, 1968 (2009).
- [6] L. Minkevičius, V. Tamošiūnas, I. Kašalynas, D. Seliuta, G. Valušis, A. Lisauskas, S. Boppler, H. G. Roskos, and K.Köhler, *Terahertz heterodyne imaging with InGaAs-based bow-tie diodes*, Applied Physics Letters **99**, 131101 (2011).
- [7] L. Minkevičius, M. Ragauskas, J. Matukas, V. Palenskis, S. Pralgauskaitė, D. Seliuta, I. Kašalynas, and G. Valušis, „*InGaAs Bow-tie Diodes for Terahertz Imaging: Low Frequency Noise Characterisation*“ Proc. SPIE Terahertz Emitters, Receivers, and Applications III, M. Razeghi, A. N. Baranov, H. O. Everitt, J. M. Zavada; T. Manzur, vol 8496, 2012.
- [8] D. Seliuta, I. Kašalynas, V. Tamošiūnas, S. Balakauskas, Z. Martūnas, S. Ašmontas, G. Valušis, A. Lisauskas, H. G. Roskosand K. Köhler, *Detection of terahertz/sub-terahertz radiation by asymetrically-shaped 2DEG layers*, Electron. Lett. **40** (10), 631-632 (2004).
- [9] D. Seliuta, I. Kašalynas, V. Tamošiūnas, S. Balakauskas, Z. Martūnas, S. Ašmontas, G. Valušis, A. Lisauskas, H. G. Roskosand K. Köhler, *Silicon lens-coupled bow-tie InGaAs-based broadband terahertz sensor operating at room temperature*, Electron. Lett. **40** (14), 825-827 (2006).
- [10] L. Minkevičius, *Asimetrinių InGaAs THz spinduliuotės jutiklių sukūrimas, charakterizavimas bei jų panaudojimas vaizdinimo sistemose*. Magistrinis darbas, 2011.
- [11] D.Chattopadhyay, S.K.Sutradhar, B.R.Nag, *Electron transport in direct-gap III–V ternary alloys*, J. Phys. C, **14**, no.6, pp. 891-908 (1981).
- [12] V. Balynas, A. Krotkus, A. Stalnionis, A.T. Gorelionok, N.M. Shmidt, J.A. Tellefsen, *Time-Resolved, Hot-Electron Conductivity Measurement Using an Electro-Optic Sampling Technique* , Appl. Phys.A, **51**, no.4, pp.357-360 (1990).

- [13] C. Canali, G. Majni, R. Minder, G. Ottaviani, *Electron and Hole Drift Velocity Measurements in Silicon and Their Empirical Relation to Electric Field and Temperature*, IEEE Transactions on Electron Devices, vol. ED-22, no. 11, pp. 1045-1047, 1975
- [14] C. Lombardi, S. Manzini, A. Saporito, *A Physically Based Mobility Model for Numerical Simulation of Nonplanar Devices*, IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. 7, no. 11, pp. 1164-1171, 1988
- [15] D. M. Caughey and R. E. Thomas, *Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field*, Proceedings of the IEEE, vol. 55, no. 12, pp. 2192-2193, 1967
- [16] Goldberg Yu. A. And N. M. Schmidt, *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, vol.2., M. Levinshten, S. Rumyantsev and M. Shur, ed., World Scientific, London, 1999, pp. 62-88
- [17] S.R. Ahmed, B.R. Nag, M. Deb Roy, *Hot-Electron Transport In  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$* , Solid State Electronics Vol. 28, No. 12, pp 1193-1197 (1985)
- [18] F. Teppe, W. Knap, D. Veksler, M.S. Shur, A. P. Dmitriev, V. Y. Kachorovskii, S. Rumyantsev, Applied Physics Letters 87(5), 052107 (2005)
- [19] Sentaurus device user guide, version k-2015.06, Mountain View, California: Synopsys, Inc., 2015; Chapter 2, section „Physical model parameters“
- [20] L. Minkevičius, V. Tamošiūnas, **M. Kojelis**, E. Žasinas, V. Bukauskas, A. Šetkus, I. Kašalynas, G. Valušis, *Influence of field effect on the performance of InGaAs-based terahertz radiation detectors*, <http://arxiv.org/abs/1605.00828>, Submitted on 3 May 2016