

АНОТАЦІЯ

Зозуля В. О. Активні напівпровідникові планарні елементи субміліметрового та терагерцового діапазонів. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали (Галузь знань 10 – Природничі науки). – Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, Харків, 2023.

Тема дисертації обумовлена розвитком технологій пов'язаних з використанням високочастотного випромінювання в області субміліметрових та терагерцових хвиль та розробкою терагерцових систем. Інтерес до таких систем постійно зростає, що обумовлено унікальними характеристиками терагерцового випромінювання. Серед найбільш цінних функцій, які ефективно можуть бути реалізовані в терагерцовому діапазоні, можна відзначити неінвазійний і безруйнівний контроль, військові системи, засоби безпеки, медицина та збереження здоров'я, матеріалознавство та обробку промисловість. Найбільший прогрес у використанні терагерцових хвиль передбачається в системах формування зображення та безпроводної передачі даних, зокрема ближнього радіусу дії, в яких завдяки використанню терагерцового випромінювання зростає об'єм інформації, що передається, та швидкість передачі даних. Практичне широке застосування таких систем в значній мірі пов'язане з потребою в мініатюрних (що можуть стати, наприклад, елементом мобільного телефону) джерел, випромінювачів та приймачів терагерцового діапазону.

Проблемою створення малогабаритних твердотілих активних елементів терагерцового діапазону стали фундаментальні обмеження, обумовлені природою переносу заряду в них, сукупність яких отримало назву “терагерцове провалля” через неефективність роботи приладів в цьому діапазоні. Одним з можливих напрямків просування в терагерцовий діапазон є використання традиційних твердотілих приладів на зразок діодів Ганна або лавино-

пролітних діодів шляхом розробки нових підходів до конструювання приладів та нових концепцій, що призводять до покращення їх частотних властивостей і створення на їх основі нових активних елементів терагерцового діапазону.

Метою проведення роботи стало дослідження фізичних процесів в твердотільних надвисокочастотних приладах, які реалізовані у вигляді планарних напівпровідникових діодних структур з активними елементами на бічній границі, визначення їх характеристик та пошук можливих шляхів підвищення ефективності та покращення частотних властивостей для роботи на частотах терагерцового та субтерагерцового діапазонів.

Основними завданнями дисертації є: розробка математичних моделей та методів числового моделювання фізичних процесів пов'язаних з переносом електричного заряду в напівпровідникових діодних планарних структурах, що мають складну геометрію та містять різноманітні за електричними властивостями області, з використанням багатосіткових алгоритмів розв'язання рівняння Пуассона для визначення розподілу потенціалу і електричного поля та багаточастинкового методу Монте-Карло для врахування високочастотних процесів електронного транспорту та розсіювання носіїв заряду; розробка програмного комплексу для 2D-моделювання надвисокочастотних напівпровідникових приладів, що враховує їх структуру та особливості перенесення заряду; проведення моделювання нестационарних процесів в планарних гомогенних та гетерогенних структурах, що містять бічні активні елементи різного типу, зокрема із суттєвими відмінностями їх властивостей від властивостей каналу, на зразок поєднання квазікласичних та квантових областей; отримання просторових розподілів напруженості електричних і квазіелектричних полів, дрейфової швидкості та енергії носіїв заряду з урахуванням складної структури зони провідності; отримання залежності струму, що протікає через вказані структури, для випадку постійних та змінних у часі напруг; встановлення особливостей формування нестійкостей струму, які виникають в діодних структурах, що досліджуються; отримання енергетичних характеристик діодів на змінному струмі; визначення

частотних властивостей діодних структур з активними бічними границями з точки зору отримання генерації ними електромагнітних коливань та можливостей їх використання на частотах терагерцового діапазону; визначення оптимальних параметрів приладів та відповідних конструктивних елементів з точки зору отримання максимальних частот.

Основним методом досліджень є числове моделювання, що базується на використанні багаточастинкового методу Монте-Карло, що дозволяє врахувати високочастотні властивості матеріалу та проаналізувати процеси переносу зарядів у розглянутих структурах на частотах терагерцового діапазону.

У першому розділі дисертації робиться аналіз стану розробки твердотілих високочастотних приладів, можливі шляхи та напрямки покращення їх , фізичні явища, що можуть бути використанні для покращення частотних властивостей приладів.

У другому розділу наведено детальний опис математичної моделі та особливості реалізації методу Монте-Карло для аналізу високочастотних процесів перенесення заряду в планарних структурах з активною бічною границею, яка враховує наявність носіїв заряду обох типів (електронів і дірок), процесів ударної іонізації та неоднорідного розподілу складу напівпровідникового матеріалу. Також наводяться основні співвідношення, що описують процеси розсіяння носіїв заряду, та процедури вибору кінцевих станів.

Описано особливості отримання розподілу електричного поля в діоді та алгоритми числової реалізації повного багатосіткового геометричного методу розв'язання рівняння Пуассона з врахуванням особливостей формування бічної активної границі в діоді. Описано особливості реалізації варізонної концепції та її числової реалізації при моделюванні електронного транспорту у варізонних структурах. Для базових матеріалів, що використовуються в напівпровідникових приладах, приводяться результати розрахунку їх

основних кінетичних характеристик та проводиться порівняння їх із розрахунками, отриманими іншими авторами, та результатами експериментів.

У третьому розділі розглянуто концепцію створення планарних діодних структур, що містять активні напівпровідникові елементи, розміщені на бічній поверхні діода та електрично з'єднані з анодом. Ці активні елементи формують активну бічну границю діода, яка впливає на процеси генерації електромагнітних коливань, що пов'язані з ефектом міждолинного перенесення електронів та пролітними явищами характерними для субмікронних напівпровідникових структур. Досліджується особливості процесів переносу заряду в запропонованих діодах та залежність генерації і частотних властивостей діодів від електрофізичних параметрів активної границі та структури бічного активного елемента.

Проводиться пошук конфігурації приладів з точки зору підвищення граничних частот генерації. Досліджено формування нестійкостей струму в планарних, гомогенних за складом діодах на основі GaAs та InP з відповідними активними границями на основі напівпровідників GaAs, InP та в діодах з активними гетероструктурами GaAs/InGaAs та InP/InGaAs. Аналізуються високочастотні характеристики, проводиться оптимізація їх за ефективністю та визначаються граничні частотні межі їх роботи. Всі діоди розглядаються в контексті можливості виникнення ударної іонізації в них та з урахуванням можливих обмежень їх робочих параметрів.

У четвертому розділі розглянуто можливість використання в якості бічного активного елемента варізонної структури, що утворена напівпровідниковим матеріалом, який має залежний від координати склад. В якості об'єкта дослідження розглянуто планарну діодну структуру з каналом на основі GaAs та бічним активним елементом на основі варізонного шару InGaAs склад якого змінюється від GaAs в області катоду, що граничить з каналом, до InGaAs з малими вмістом галію на аноді. Аналіз діодів проводиться з врахуванням процесів ударної іонізації в них та електронно-діркового транспорту. Отримано статичні та динамічні характеристики діодів,

а також енергетичні та частотні характеристики. Досліджується вплив ударної іонізації на виникнення нестійкостей струму та частотну межу роботи діодів.

У п'ятому розділі концепція планарних діодних структур з активними напівпровідниковими елементами поширюється на структури, в яких бічний елемент являє собою резонансно-тунельну структуру (РТС). Розглянуто діоди з каналом на основі GaAs та бічним активним елементом з РТС зі структурою GaAs/AlGaAs/GaAs. Визначено статичні та динамічні характеристики діодних структур та їх залежність від електрофізичних параметрів та параметрів структури РТС. Зокрема, досліджено вплив концентрації, положення РТС та параметрів бар'єрів та квантової ями в РТС. Отримано енергетичні та частотні характеристики діодів як генераторів електромагнітних коливань терагерцового діапазону. Встановлено частотні межі їх роботи та фактори, які на них впливають.

На результати роботи отримано 2 свідоцтва на винаходи.

Наукова новизна результатів роботи полягає в наступному:

Вперше показано, що введення додаткових елементів, електрично з'єднаних з анодним контактом, призводить до розширення діапазону частот діода в бік високих частот навіть за умови співпадіння параметрів матеріалів в основній частині діодної структури і бічному активному елементі.

Вперше показана можливість отримання широкополосної генерації структурами з активними бічними границями на основі GaAs від 100 до 300 ГГц з використання традиційних матеріалів з максимальною ефективністю до 3%, за умови обмеження напруги живлення величинами меншими 2,5 В.

Вперше показано, що використання гетероструктури GaAs - $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{As}$ в діоді з GaAs каналом дозволяє підвищити ефективність генерації більш ніж в 4 рази з використанням гомогенного матеріалу. Вперше продемонстровано можливість отримання широкополосної генерації структурами з активними бічними границями на основі InP на частотах до 350 ГГц при роботі на основній частоті з максимальною ефективністю генерації до 2,5%.

Досліджено генерацію електромагнітних коливань діодами, що містять варізонні шари $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{As}$, в яких можливе виникнення ударної іонізації та встановлені частотні межі їх роботи. Показано, що у вказаних діодах можлива генерація коливань на частотах до 400 ГГц. Вперше запропоновано планарну конструкцію діода, що містить розміщений на бічній поверхні діода активний елемент на основі варізонного напівпровідника $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{As}$, в якому створені умови для виникнення ударної іонізації, та показано вплив такого елемента на зміну частотного діапазону роботи діоду. Встановлено, що частота, відповідає максимальній ефективності, в такому елементі мало залежить від впливу ударної іонізації, проте максимальні частоти генерації більші ніж в звичайних планарних діодах на основі GaAs. Частотна межа його роботи досягає частоти більшої 300 ГГц, а частотний діапазон має значну ширину (від десятків гігагерц до 300 ГГц) у безперервному режимі генерації.

Вперше показано можливість отримання генерації електромагнітних коливань терагерцового діапазону діодами на основі GaAs з активними бічними границями у вигляді резонансно-тунельної структури. Встановлено, що верхня частотна межа таких діодів може перевищувати 500 ГГц. Максимальна ефективність коливань досягала 10% і відповідала частоті близько 110 ГГц, що знаходиться у відповідності до часу перенесення електронів через канал діода. Частотний діапазон роботи діодів має значну ширину (від десятків гігагерц до 300 ГГц) у безперервному режимі генерації

Ключові слова: планарна діодна структура, бічний активний елемент, нестійкості струму, напруженість електричного поля, ефективність генерації, резонансно-тунельна структура, варізонний шар, ударна іонізація, розсіяння, мікрохвилі, наноструктури, терагерцовий діапазон, моделювання, ефект міждолинного переносу електронів, резонатор.

ABSTRACT

Zozulia V. O. Active semiconductor planar elements of submillimeter and terahertz ranges. Qualification scholarly paper: a manuscript.

Thesis submitted for obtaining the Doctor of Philosophy degree in Natural Sciences, Speciality 105 – Applied Physics and Nanomaterials. – V. N. Karazin Kharkiv National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Kharkiv, 2023.

The aim of the dissertation is due to the development of technologies related to the use of high-frequency radiation in the field of submillimeter and terahertz waves and the development of terahertz systems. Interest in such systems is constantly growing due to the unique properties of terahertz radiation. Among the most valuable functions that can be effectively implemented in the terahertz range are non-invasive and non-destructive control, military and security systems, medicine and healthcare, materials science, and defense systems. The greatest progress in the use of terahertz waves is expected in imaging and wireless data transmission systems, in particular, short-range systems, where the use of terahertz radiation increases the amount of transmitted information and data transmission rate. The practical widespread use of such systems is largely due to the need for miniature transmitters (for example, a cell phone element) and receivers that can operate in the terahertz range.

The problem of fabrication of small-sized solid-state active elements in the terahertz range is the fundamental limitations due to the processes of charge transfer in such devices, the totality of which is called the "terahertz gap", due to the inefficiency of conventional devices for generation waves in this range. One of the possible ways advancement into the terahertz range is to use traditional solid-state devices such as Gunn diodes or IMPATT diodes by developing new approaches to device design and new concepts that lead to the improvement of their frequency properties and the development of new active elements based on them that can operate in the terahertz range.

The work aimed to investigate physical processes in solid-state ultra-high-frequency devices, which are implemented in the form of planar semiconductor diode structures with active side boundary elements, to determine their characteristics and to search possible opportunities to increase efficiency and improve frequency properties for operation at terahertz and sub-terahertz frequencies.

The main tasks of the thesis are: development of mathematical models and methods of numerical simulation of physical processes of the transport of charge carriers in semiconductor planar diode structures with complex geometry and containing regions with heterogeneous electrical properties, using multigrid algorithms for solving the Poisson equation to determine the distribution of potential and electric field and the multiparticle Monte-Carlo method to take into account for high-frequency processes of transport and scattering for charge carriers; development of a software package for 2D modeling of ultra-high-frequency semiconductor devices, taking into account their structure and charge transport features; to model non-stationary processes in planar homogeneous and heterogeneous structures containing active side elements of different types, in particular with significant differences in their characteristics from those of the channel, such as a combination of quasi-classical and quantum regions; to obtain spatial distributions of electric and quasi-electric field intensity, drift velocity and energy of charge carriers, taking into account, the complex structure of the conduction band; to obtain the dependences of the current flowing through these structures for the case of constant and time-varying voltages; to establish the peculiarities of the formation of current instabilities arising in the diode structures under study; to obtain the energy characteristics of diodes on alternating current; to determine the frequency characteristics of diode structures with active side boundaries in terms of obtaining the generation of electromagnetic oscillations and the possibility of their use at terahertz frequencies; determine the optimal parameters of the devices and the corresponding structural elements in terms of obtaining maximum frequencies.

The main research method is numerical modeling based on the multiparticle Monte Carlo method, which takes into account the high-frequency properties of the material and analyzes the processes of charge transfer in the structures under consideration at terahertz frequencies.

The first chapter of the thesis analyzes the state of development of solid-state high-frequency devices, possible ways and opportunities for improving their characteristics, and physical phenomena that can be used to improve the frequency properties of devices.

The second chapter provides a detailed description of the mathematical model and features of the Monte Carlo method for analyzing high-frequency charge transfer processes in planar structures with an active side boundary, which takes into account the presence of both types of charge carriers (electrons and holes), impact ionization processes, and the inhomogeneous distribution of the semiconductor material composition. The basic relations describing the processes of charge carrier scattering and the procedures for selecting final states are also presented.

The peculiarities of obtaining the electric field distribution in a diode and algorithms for numerical implementation of the full multigrid geometric method for solving the Poisson equation with consideration of the peculiarities of forming the active side boundary in a diode are described. The peculiarities of the implementation of the graded band gap concept and its numerical realization in modeling the transport of charge carriers in graded band gap structures are described.

The results of calculating the main kinetic characteristics of the basic materials used in semiconductor devices are presented and compared with the calculations obtained by other authors and experimental results.

The third chapter discusses the concept of creating planar diode structures containing active semiconductor elements placed on the active region of the diode and electrically connected to the anode. These active elements form the active side boundary of the diode, which affects the processes of generating electromagnetic oscillations associated with the effect of intervalley electron transfer and span phenomena characteristic of submicron semiconductor structures. The peculiarities

of charge transfer processes in the proposed diodes and the dependence of diodes' generation and frequency properties by the electrophysical parameters and the structure of the active side element are investigated.

The optimal device configurations are searched for to increase the cut frequency operating. The formation of current instabilities in planar homogeneous diodes based on GaAs and InP with corresponding active boundaries based on GaAs and InP semiconductors and in diodes with active heterostructures of GaAs/InGaAs and InP/InGaAs is investigated. The high-frequency characteristics are analyzed, and optimized for efficiency, and the cut frequencies of their operation are determined. All diodes are considered in the context of the possibility of impact ionization in them and taking into account possible limitations of their operating parameters.

In the fourth chapter, the possibility of using a graded band gap structure formed by a semiconductor material with a coordinate-dependent composition as an active side element. A planar diode structure with a GaAs-based channel and an active side element based on an InGaAs graded layer, the composition of which varies from GaAs in the cathode region bordering the channel to InGaAs with a small gallium mole fraction on the anode, is considered as the object of investigation. The diodes are analyzed taking into account the processes of impact ionization in them and the transport features of charge carriers. The static and dynamic characteristics of the diodes, as well as the energy and frequency characteristics, are obtained. The influence of impact ionization on the occurrence of current instabilities and the cut frequency of diodes is investigated.

In the fifth chapter, the concept of planar diode structures with active semiconductor elements is extended to structures in which the active side element is a resonant tunnel structure (RTS). Diodes with a GaAs-based channel and an active side element with the RTS structure based on GaAs/AlGaAs/GaAs are considered. The static and dynamic characteristics of the diode structures and their dependence on the electrophysical parameters and the RTS structure are determined. In particular, the effect of the concentration, the dependence of generation efficiency

on the position of the RTS, and the dependence of static characteristics on the parameters of the barriers and quantum well in the RTS are investigated. The energy and frequency characteristics of diodes as generators of electromagnetic oscillations in the terahertz range are obtained. The cut frequencies of their operation and the factors that influence on it are determined.

Two certificates of invention were obtained for the results of the work.

In particular, the following scientific results are obtained in this thesis:

For the first time, it is shown that the addition of elements electrically connected to the anode contact leads to an expansion of the diode frequency range towards high frequencies, even under the condition the material parameters in the main part of the diode structure and the active side border.

The possibility of broadband generation by structures with active side borders based on GaAs from 100 to 300 GHz using traditional materials with a maximum efficiency of up to 3%, provided that the supply voltage is limited to values less than 2,5 V demonstrated.

For the first time, the use of GaAs- $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{As}$ heterostructure in a diode with a GaAs channel allows to increase the generation efficiency by more than 4 times compared to the use of a homogeneous material. For the first time, the possibility of broadband generation by structures with active side borders based on InP at frequencies up to 350 GHz when operating at the fundamental frequency with a maximum generation efficiency of up to 2,5% is demonstrated.

The generation of electromagnetic diodes containing graded band gap $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{As}$, in which impact ionization is possible, is investigated and the cut frequencies of their operation are established. It is shown that these diodes can generate oscillations at frequencies up to 400 GHz. For the first time, a planar diode design containing an active element based on the graded band gap $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{As}$ semiconductor formed on the active region of the diode, in which conditions for the occurrence of impact ionization are formed, is proposed, and the effect of such an element on changing the frequency range of the diode is shown. It is found that the frequency corresponding to the maximum efficiency in such an element is not much

affected by the influence of impact ionization, but the maximum generation frequencies are higher than in conventional planar diodes based on GaAs. The cut frequency of its operation reaches a frequency of more than 300 GHz, and the frequency range has a significant bandwidth (from 50 to 300 GHz) in the continuous generation mode.

For the first time, the possibility of generating electromagnetic oscillations in the terahertz range by GaAs-based diodes with active side boundaries based on resonant tunnel structure at frequencies above 500 GHz was shown. The maximum efficiency of oscillations was up to 10% and was obtained at a frequency of about 110 GHz, which corresponds to the time of electron transfer through the diode channel with a length of approximately 1 micron. The frequency range of the diodes has a considerable bandwidth (from 50 to 500 GHz) in the continuous generation mode.

Keywords: planar diode structure, lateral active element, current instabilities, electric field strength, generation efficiency, resonant tunnel structure, graded layer, impact ionization, scattering, microwave, nanostructures, terahertz range, simulation, transfer electron effect, resonator.