

В.П. Сушков
Г.Д. Кузнецов
О.И. Рабинович

Конструирование компонентов и элементов микро- и нанoeлектроники

Компьютерное моделирование
оптоэлектронных приборов

Учебно-методическое пособие

Кафедра технологии материалов электроники

В.П. Сушков

Г.Д. Кузнецов

О.И. Рабинович

Конструирование компонентов и элементов микро- и нанoeлектроники

Компьютерное моделирование
оптоэлектронных приборов

Учебно-методическое пособие

Рекомендовано редакционно-издательским
советом университета

УДК 621.372.6.01
ББК 62.01.01
Сушков В.П.
Кузнецов Г.Д.
Рабинович О.И.
Конструирование компонентов
и элементов микро-
и нанoeлектроники.
Компьютерное моделирование
оптоэлектронных приборов.
Учебно-методическое пособие.
Москва: Издательский дом
«МИСИС», 2012.



ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ДОМ

Москва 2012

Рецензент
канд. физ.-мат. наук, доц. С.Ю. Юрчук

Сушков, В.П.

С89 Конструирование компонентов и элементов микро- и нано-электроники : компьютерное моделирование оптоэлектронных приборов : учеб.-метод. пособие / В.П. Сушков, Г.Д. Кузнецов, О.И. Рабинович. – М. : Изд. Дом МИСиС, 2012. – 128 с.
ISBN 978-5-87623-565-7

В пособии излагаются теоретические основы работы программы *SimWindows* 1.5, предназначенной для моделирования полупроводниковых приборов и элементов интегральных схем. Приводится информация о типах файлов программы, о формировании необходимых данных по параметрам, используемых при моделировании материалов, примеры записи файлов, описывающих свойства материалов и приборов на основе Si, AlGaInP, AlGaAs, нитридов элементов III группы и их твердых растворов. Рассматривается пример моделирования диода с *p-n*-переходом на основе гетероструктур AlGaAs и солнечных элементов. Приводятся основные физические сведения о программе *SimWindows*.

Пособие соответствует программе курса «Конструирование компонентов и элементов микроэлектроники».

Предназначено для студентов, обучающихся по направлению 210100 «Электроника и нанoeлектроника» в качестве бакалавров, магистров и инженеров, при выполнении домашних заданий, подготовке магистерских диссертаций и дипломных работ.

УДК 621.38

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	4
1. Документация для моделирования	6
1.1. Начальные сведения	6
1.1.1. Рабочий стол программы <i>SimWindows</i>	6
1.1.2. Загрузка прибора	7
1.1.3. Выполнение моделирования	9
1.1.4. Формирование выходных данных	10
1.2. Руководство пользователя	12
1.2.1. Типы файлов, с которыми может работать <i>SimWindows</i>	13
1.2.2. Функции пользователя	14
1.2.3. Файлы параметров материалов	16
1.2.4. Файлы приборов	28
1.2.5. Файлы состояния	34
1.2.6. Файлы данных	34
2. Примеры моделирования новых приборов	35
2.1. Файлы новых приборов	35
2.1.1. Приборный файл диода с Шоттки-барьером на основе Si	35
2.1.2. Приборный файл светодиода на основе гетероструктур AlGaInP	35
2.1.3. Приборный файл фототранзистора на основе гетероструктур AlGaAs	36
2.1.4. Приборный файл лазера с вертикальным резонатором	36
2.2. Файлы новых материалов	39
2.2.1. Файл для системы твердых растворов AlGaAs и GaAs	39
2.2.2. Файл для системы твердых растворов AlGaInP	43
2.2.3. Файл для системы твердых растворов AlGaInN; GaN, InN, AlN, AlGaIn, InGaIn	47
2.3. Моделирование диода с <i>p-n</i> -переходом на основе гетероструктур AlGaAs	55
2.4. Пример выполнения курсовой работы на тему «Моделирование солнечного элемента на основе гетероструктур AlGaAs»	62
2.4.1. Аналитический обзор	63
2.4.2. Моделирование солнечных элементов	81
3. Физические основы программы <i>SimWindows</i>	86
3.1. Переменные и константы, используемые в <i>SimWindows</i>	86
3.2. Заряд	91
3.3. Внешняя оптическая генерация	106
3.4. Энергия	109
3.5. Квантово-размерные ямы	124
Библиографический список	127

ВВЕДЕНИЕ

Современный уровень конструирования полупроводниковых приборов и компонентов интегральных схем требует использования средств их машинного моделирования. Системы уравнений, описывающих электрические, оптические и тепловые свойства и лежащих в основе принципа действия тех или иных приборов, имеют, как правило, весьма сложный вид. Грубые аналитические аппроксимации этих уравнений могут быть использованы для расчетов характеристик лишь самых простых приборов.

Использование средств компьютерного моделирования позволяет овладеть новым, намного более глубоким уровнем понимания физических процессов, происходящих в приборах, и на основе этих знаний осуществить оптимизацию их конструкций.

Существует большое количество средств моделирования полупроводниковых электронных приборов и интегральных схем. Перечень средств моделирования с краткими описаниями приведен на интернет-сайте [1]. Каждая программа имеет как свои преимущества, так и недостатки. При изучении курса «Конструирование компонентов и элементов микроэлектроники» на кафедре «Технология материалов электроники» НИТУ «МИСиС» оптимальную программу выбрали исходя из следующих соображений:

- обеспечение моделирования электрических, оптических и тепловых свойств приборов на основе систем точных исходных физических уравнений;
- возможность моделирования одних и тех же приборов на основе самых различных материалов: кремния, германия, соединений и твердых растворов типа $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$ и т.п.;
- возможность моделирования приборов со структурами, содержащими множество слоев, в том числе слоев с квантово-механическими свойствами (одиночные и множественные квантово-размерные ямы);
- разумное ограничение объемов вычислительных операций, позволяющих производить моделирование на персональных компьютерах с быстройдействием более 100 МГц;
- разумное ограничение номенклатуры моделируемых приборов в пользу приборов, характеристики которых в первую очередь зависят от свойств используемых материалов.

В качестве такой оптимальной программы была выбрана программа *SimWindows*, версия 1.5, разработанная в Центре оптоэлектронных систем при Колорадском университете в г. Боулдер, США.

Использование свободной версии этой программы не ограничено временем, разрешается изготовление любого количества копий программы и документации, а также распространение их в неизменном виде. Загрузить программу можно по ряду адресов, указанных в Интернете, например по адресу [2]. Пользователь может по необходимости создавать свои файлы для моделирования новых приборов на основе новых материалов.

Среди приборов, моделирование которых возможно, следует отметить диоды с *p-n*-переходом, диоды с Шоттки-барьером, фотодиоды, солнечные батареи, фототранзисторы, лазеры с вертикальным резонатором, светодиоды как на основе гомопереходов, так и на основе гетеропереходов.

1. ДОКУМЕНТАЦИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

1.1. Начальные сведения

Для запуска программы *SimWindows* (SW) необходимо дважды щелкнуть на ярлыке *SimWindows* в главном меню среды *Windows*. Это действие запускает файл «simwin32.exe». Существует вспомогательный файл, который должен быть в том же самом каталоге, что и файл «simwin32.exe». Этот файл является заданным по умолчанию файлом параметров материала («material.prm») для Si и Al_xGa_{1-x}As, который SW загружает при начале работы. Подробная информация относительно файлов параметров материалов рассмотрена в п. 1.2.3 и 2.2. В случае отсутствия этого файла SW выдаст сообщение об ошибке. Этот файл должен автоматически создаваться, если установка программы прошла успешно. SW отобразит предварительное диалоговое окно с последующим созданием ярлыка SW на рабочем столе экрана компьютера. Следующие разделы руководства для работы в программе SW начинаются с краткого описания основного интерфейса SW. Далее объясняется, как загрузить файл прибора, выполнить моделирование и организовать вывод данных.

1.1.1. Рабочий стол программы *SimWindows*

Рабочий стол программы SW – главное диалоговое окно, в котором будут открываться файлы, выполняться моделирование и проводиться исследования полученных результатов. Существуют четыре главных компонента рабочего стола: меню, панель инструментов, рабочая область окна, строка состояния. В п. 1.1 в общем описываются эти компоненты и дается краткое руководство по работе с программой SW.

При открытии программы на рабочем столе наблюдаются три рабочих состояния. Вначале большинство пунктов меню заблокировано, так как приборы еще «не загружены». Как только прибор «загружен», SW активизирует большинство пунктов меню. Меню функционально изменяется. Это означает, что в зависимости от того, какое окно является активным или какие команды меню выбраны, те или иные необходимые варианты меню будут активизированы. Однако File (файл), Environment (окружающая среда) и Help (справка) всегда доступны, так как они не зависят от типа прибора.

В табл. 1. Голосованы пункты меню и их основные функции.

Таблица 1.1

Список пунктов меню *SimWindows*

Пункт меню	Функция пункта меню
File – Файл	Команды операций
Edit – Редактирование	Редактирование и команды поиска файла
Environment – Окружающая среда	Изменение параметров окружающей среды
Device – Прибор	Изменение параметров прибора и моделирования
Plot – Графики	Построение и вывод графиков
Data – Данные	Ввод и вывод различных данных
Window – Рабочие окна	Настройка размещения окон
Help – Справка	Вывод справки о <i>SimWindows</i>

Второй момент заключается в том, что перемещение указателя «мыши» при нажатой левой кнопке вызывает в строке состояния *SW* подсказку, связанную с каждым пунктом меню. Строка состояния (внизу экрана) не только выводит текст подсказки, но также отображает текущее состояние клавиш [Num Lock] и [Cap Lock] на клавиатуре. При редактировании файла строка состояния также отображает номер строки курсора.

Третий момент, на который стоит обратить внимание, это панель инструментов (tool bar). Она содержит кнопки, которые выполняют те же функции, что и специализированные пункты меню, таким же образом, как и основное меню *SW* функционально обновляет меню панели инструментов. Когда команда меню доступна, кнопка, связанная с этим действием, активизирована. *SW* также выводит текст подсказки, когда указатель перемещается поверх кнопки в подменю «Tool bar».

1.1.2. Загрузка прибора

Первым шагом при работе с программой *SW* является выбор одного из двух вариантов: либо загрузить имеющийся файл, либо создать новый «device file» («файл прибора»). В *SW* есть ряд примеров «файлов приборов». Подкаталог examples→comments содержит файл «comalgpn.dev», который соответствует простому *p-n*-диоду на основе AlGaAs. Этот файл используется в качестве примера в данном пособии. Чтобы загрузить файл прибора, нужно выбрать File→Open (Файл→Открыть). Откроется диалоговое окно «Open file» («Открыть файл»). Стандартное расширение файлов приборов – dev. Далее следует переместиться в подкаталог examples→comments и открыть

файл «comalgn.dev». SW создаст окно, которое содержит текст файла прибора. Само окно называется «Device window» («Окно прибора») и является одним из трех видов окон, которые используются в SW.

Первая часть названия окна – «Device file» («Файл прибора») показывает, что в данном окне создают и редактируют файлы приборов. Файлы прибора – только файлы ASCII, которые содержат описание прибора. Они содержат такие параметры прибора, как материал, размеры и степень легирования. SW может редактировать одновременно несколько файлов приборов, а команды в меню «Редактирование» позволяют вырезать и вставлять выбранные части файла из одного в другой. Когда SW открывает файл, она определяет тип файла. Существует только один тип файла, называемый «state file» («файл состояния»), который может читать только SW. Если открываемый файл не является файлом состояния, то SW распознает его как текстовый файл и загружает его в окно прибора. Поэтому SW может редактировать любой вид текстового файла. После загрузки файла прибора опция меню Device→Generate (Прибор→Создать прибор) становится активной. Для начала процесса моделирования прибора «comalgn» необходимо выбрать Device→Generate. Если открыто несколько файлов прибора, то следует выбрать окно, содержащее «comalgn» («прибор»), и затем выбрать Device→Generate.

Когда SW создает прибор, то происходит ряд действий. Во-первых, SW сохраняет файл прибора на диске. Если файл – новый и еще без имени, то SW попросит ввести имя файла. Если файл уже имеет имя, то SW сохраняет файл, используя его текущее имя. Следует обратить внимание, что SW запишет его поверх предыдущего файла. Во-вторых, SW читает файл прибора, распределяет память и выполняет предварительные вычисления. Если имеется синтаксическая ошибка в файле прибора, то SW покажет номер строки с ошибкой и ее причину. В-третьих, SW сворачивает окно прибора и создает второе окно. Новое окно – окно состояния и является вторым из трех важных видов окон, которые использует SW. Окно состояния показывает состояние прибора. Наконец, SW активизирует большинство пунктов меню. Если все было выполнено успешно, то в окне состояния отобразится сообщение «Прибор успешно создан» («Device successfully created»). Окно состояния отображает информацию в процессе моделирования прибора. Теперь можно начинать моделирование. Свернутое окно устройства в дальнейшем не используется.

1.1.3. Выполнение моделирования

Важно помнить, что *SW* всегда полностью сохраняет существующее состояние прибора. Каждое новое моделирование начинается с того места, где закончилось предыдущее. *SW* может моделировать одновременно только один прибор. Можно также сохранять состояние прибора на диске. Это выполняется щелчком левой клавиши «мыши» на окне состояния и выбором опции **File→Save As** (Файл→Сохранить как). Если состояние не было предварительно сохранено, то *SW* попросит ввести имя файла. Заданное по умолчанию расширение для файлов состояния – **STA**. В файлах состояния записаны все результаты моделирования, чтобы потом пользователь мог обрабатывать их без повторного проведения моделирования. Чтобы открыть файл состояния, необходимо выбрать команду **File→Open** и выбрать название файла состояния.

В начальном состоянии «**comalgrp**» прибор не содержит зарядов в своих областях. Это – нематериальное состояние, которое *SW* использует как исходное состояние для выполнения моделирования прибора. Чтобы вернуться к исходному состоянию, нужно выбрать опцию **Device→Reset** (Прибор→Перезагрузка). Первое реальное (физическое) состояние, которое *SW* вычисляет, – тепловое равновесие. После выбора **Device→Start Simulation** (Прибор→Начать моделирование), *SW* начнет выполнять итерации. Окно состояния показывает текущие рабочие условия, номер итераций и соответствующую погрешность итерации. Так как для решения уравнения в состоянии термодинамического равновесия требуется только одна переменная – «**Potential**» («Потенциал»), то окно состояния отображает только одно значение погрешности. По умолчанию погрешность перед завершением итераций должна быть меньше, чем 10^{-8} . Итерации также остановятся, если номер итерации достигает по умолчанию значения 15. Моделирование также можно остановить в любой момент выбором **Device→Stop Simulation** (Прибор→Остановить моделирование). Погрешность, максимальное количество итераций, а также и другие параметры устанавливаются использованием последовательности вложенных меню **Environment→Preferences→Simulation** (Окружающая среда→Свойства→Моделирование). Когда вычисления закончены, окно состояния отобразит результат итераций (сходится или не сходится), состояние устройства на данный момент и затраченное время. По окончании вычисления доступны различные параметры прибора путем выбора **Device→Device Infor-**

mation (Прибор→Информация о приборе). Для построения графика нужно выбрать любой из параметров в подменю Plot.

В следующем п. 1.1.4 содержится подробная информация относительно организации вывода полученных данных. Для управления рабочими режимами прибора (приложенное напряжение смещения, оптическое воздействие и т.д.) имеется ряд команд меню. Основным эксплуатационный параметр – приложенное напряжение смещения. Чтобы приложить прямое напряжение 0,5 В, нужно выбрать опцию меню Device→Contacts. Так как это – *p-n*-диод (а не *n-p*-диод), то положительное напряжение на левом контакте будет означать прямое смещение на приборе. Далее необходимо ввести 0,5 в поле окна редактирования «Приложенное смещение (В)» («Applied Bias (V)») и затем нажать кнопку «ОК». Для моделирования устройства нужно выбрать Device→Start. SW начнет выполнять итерации, но на сей раз окно состояния отобразит три значения погрешности для потенциала, электронного квазиуровня Ферми и дырочного квазиуровня Ферми. Положительным фактором того, что SW всегда сохраняет текущее состояние прибора, является то, что если процесс не достигает сходимости до достижения максимального числа итераций, можно запустить моделирование снова. SW продолжит моделирование с того момента, когда было закончено предыдущее моделирование.

1.1.4. Формирование выходных данных

Plot (Окна графиков) – третий вид окон в SW. Меню построения графиков предоставляет перечень различных команд их построения. Большинство команд этого меню доступно только тогда, когда прибор загружен. Исключение – график «Внешний оптический спектр» («External Optical Spectra»), который SW активизирует, когда в среде включено оптическое воздействие. Нужно выбрать Plot→Band Diagram (График→Зонная диаграмма), чтобы увидеть зонную диаграмму «*conalgrp*» прибора. Чтобы изменить масштаб осей «*x*» и «*y*», необходимо либо дважды щелкнуть левой клавишей «мыши» на графике, либо выбрать опцию меню Plot→Scale (График→Масштаб). Это активизирует диалоговое окно Scale (Масштаб) для выбранного графика. С помощью этого диалогового окна можно ввести значения минимума и максимума параметров *x* и *y*, а также выбрать линейный или логарифмический масштабы. Также доступны три команды для оси «*y*» – операции выбора значений *y* – либо «никакие» («*none*»), либо «отрицательные» («*negative*»), либо «абсолютные» («*absolute*»)

значения. Эти команды помогают рассматривать значения y , которые могут изменяться на несколько порядков, но могут быть при этом как положительными, так и отрицательными. Лучший пример этого – скорость рекомбинации. Часто удобно рассматривать рекомбинацию на графике в логарифмическом масштабе, но это проблематично, так как скорость рекомбинации может быть положительной или отрицательной. По умолчанию на графиках не отображаются нулевые и отрицательные значения в логарифмическом масштабе осей графиков, но, выбрав значение « $-y$ » или абсолютное значение (« y ») в диалоговом окне масштаба, можно увидеть и эти значения.

Более простой способ устанавливать масштаб – использовать увеличение (zoom). Для этого нужно нажать и удерживать левую клавишу «мыши» на графике, затем увеличить на графике прямоугольную область. Выбранная в прямоугольнике область графика будет увеличена и представлена во всей области графика. Чтобы вернуться к автоматическому масштабу, необходимо выбрать пункт меню Plot→Auto-Scale (График→Автомасштаб) или нажать клавишу [ESC].

Графическое окно может также выводить фактические числовые данные двумя способами. Первый способ – определение координат точек. Вначале нужно выбрать график и затем выбрать опцию Plot→Show Trace Window (График→Окно определения координат точек), в результате отобразится диалоговое окно, связанное с выбранным графиком. Когда указатель «мыши» пересечет график, окно проекции отобразит значения x и y для самой близкой точки графика. Важно помнить, что каждый график имеет свое собственное окно определения координат точек. Если открыты два окна графиков, то существует свое отдельное окно определения координат точек для каждого графика.

Второй способ получить данные по графику состоит в том, чтобы выбрать график и выбрать опцию File→Save. SW попросит ввести имя файла и затем запишет значения x и y в этот файл. Формат записи данных в файл – это разграниченные колонки. Вследствие этого данные могут быть загружены в любые программы вида «электронные таблицы» для дальнейшего анализа. Когда графики видны и одновременно SW продолжает моделировать прибор, данные на графиках меняются автоматически для наглядности происходящих изменений. Чтобы исключить это, нужно выбрать Plot→Freeze Plot (График→Заморозить (зафиксировать) график). График теперь «замораживается» вместе с текущими данными. Эта функция очень полезна для отображения двух графиков разных состояний одного прибора,

например при подаче различных напряжений. Чтобы обновить «замороженный» график, следует щелкнуть левой клавишей «мыши» на графическом окне и выбрать Plot→Melt Plot (График→Разморозить замороженный (зафиксированный) график).

Выше были представлены основные функциональные возможности SW. Существует ряд моментов, которые надо иметь в виду при использовании этой программы:

1. Использовать SW следует с осторожностью. Если появляются проблемы при получении сходимости вычислений, то, возможно, проблемы связаны с программой или конструкцией прибора. Например, при использовании чересчур малого числа «Grid points» («Координатных точек») могут возникнуть проблемы сходимости. В этом случае можно попробовать «поиграть» с параметрами моделируемого прибора и прислать разработчикам программы отчет, если ничто другое не помогает.

2. В интерфейсе программы SW много особенностей, которые проясняются с опытом.

3. Необходимо быть внимательным при сохранении данных. Помните, что существует три типа диалоговых окон (окно прибора, окно состояния, и окно графика). Команды File→Save и File→Save As работают по-разному. Для окна прибора SW сохраняет файл прибора. Аналогично SW сохраняет файл состояния, когда окно состояния активно. SW сохранит графические данные, если графическое окно активно.

4. SW всегда сохраняет текущее состояние прибора. Новый этап моделирования можно начать в любое время, SW начнет его с конца предыдущего этапа. Чтобы запустить моделирование с самого начала, нужно выбрать опцию Device→Reset.

1.2. Руководство пользователя

SimWindows 1.5 – программа моделирования полупроводниковых приборов, пригодная для многих оптоэлектронных приборов при решении одномерных фундаментальных уравнений для полупроводников. Программа SW устанавливается только под оболочки *Microsoft Windows 95, 98, 2000, XP* или *NT*.

Существует несколько соглашений, которые особенно важны для данного руководства. Первое соглашение – метод описания вариантов меню. Символ «|» отделяет вложенные варианты меню.

Например: MENU|Option1|Option2

Это означает, что в «MENU1» надо выбрать подменю «Option1», которое отобразит другое меню, и выбрать «Option2».

Второе соглашение касается обозначения [] – использование дополнительных пунктов меню.

Например: Option1 Option2 [Option3]

Это означает, что следует выполнить «Option1» и «Option2», но «Option3» является дополнительным пунктом.

Третье соглашение относится к использованию ключевых слов в SW в командах ввода. Символ «i» означает, что за данным ключевым словом следует целое число, символ «n» обозначает числовое значение с плавающей запятой, «s» означает, что последует набор символов. Набор символов не может содержать пробелы. Символ «f» обозначает функцию пользователя. Список переменных для функции будет также следовать за символом «f». Например:

```
length=i  
Nd=n  
material=s  
conc=f(x,T)
```

Первый параметр означает, что за «length» (длина) должно следовать целое число. Второй параметр означает, что за «N_d» (концентрация примеси) должно следовать число с плавающей запятой (или целое число). Третий параметр означает, что за словом «material» (материал) должен следовать набор символов. Четвертый параметр означает, что «conc.» (концентрация) является функцией, зависящей от переменных x и T . Это руководство предполагает, что пользователь имеет достаточные знания о *Microsoft Windows* и знаком с терминами «опускающееся меню», «диалоговое окно», «перетащите» и т.д. Кроме того, пользователь должен иметь представление об основных файлах и структуре стандартных каталогов программы *MS DOS/Windows*, установленной на компьютере.

1.2.1. Типы файлов, с которыми может работать *SimWindows*

SW использует несколько типов файлов. Это – файлы параметров материалов (material parameter), файлы приборов (device), файлы состояний (state) и файлы данных (data). По умолчанию расширением для каждого файла является соответственно PRM, DEV, STA, и DAT, но SW может работать с файлами с любым расширением. Файлы параметров материалов, файлы приборов и файлы данных – это про-

стые текстовые файлы, а файл состояний является двоичным файлом, который может быть прочитан только программой SW. Ниже описывается, как использовать общие многоцелевые функции в SW.

1.2.2. Функции пользователя

Функции пользователя существенно увеличивают гибкость SW, допуская применение общих функций в файлах параметров материалов и приборов. Здесь описываются эти общие функции и способ их введения. В п. 1.2.3 описывается, как использовать общие функции в файлах параметров материалов, в п. 1.2.4 – как использовать общие функции в файлах приборов. Есть три типа функций пользователя: константа, полином и общая. Они все могут по-разному чередоваться в каждой функции данного типа и могут быть использованы, когда это необходимо.

Для того чтобы использовать любой из типов функций, важно определить для них переменные. В этом руководстве функции обозначены как $f(x,y,z)$, где x , y , и z – переменные функции f . В табл. 1.2 представлены девять различных переменных, которые используются в программе SW.

Таблица 1.2

Переменные, используемые в общих функциях

Символ переменной	Смысловое значение переменной	
	на английском языке	на русском языке
D	<i>Position</i>	Координата (местонахождение)
X	<i>Alloy percentage (0-1)</i>	Содержание элемента в твердом растворе (0...100 %)
T	<i>Lattice Temperature</i>	Температура решетки
C	<i>Carrier Temperature</i>	Температура носителей заряда
E	<i>Photon Energy</i>	Энергия фотонов
G	<i>Band Gap</i>	Ширина запрещенной зоны полупроводника
H	<i>Band Gap at 300 K</i>	Ширина запрещенной зоны при температуре 300 К
N	<i>Donor Concentration</i>	Концентрация доноров
A	<i>Acceptor Concentration</i>	Концентрация акцепторов

Функция, обозначенная как $f(x,G)$, представляет собой зависимость процентного содержания элемента в сплаве от ширины запрещенной зоны. Не имеет значения способ записи переменной: заглавная буква или строчная. Функция $f(x,t)$ – эквивалент $f(x,T)$. Запомните, что функция $f(x,t)$ не есть то же самое, что функция $f(t,x)$. Это различие важно только при использовании функций в виде полиномов

для того, чтобы точно задать функцию f . Далее Вы увидите, почему $f(x,t)$ не такая же функция, как $f(t,x)$. Опишем, как использовать каждый тип функций, чтобы задать функцию f .

Константы

Константа является самым простым типом используемых функций пользователя, но полезно представлять константу следующим образом:

$$f(x,y,z)=5 - \text{эквивалентно } 5+0x+0y+0z$$

Когда SW требуется эта функция, значения константы всегда достаточно.

Полиномы

Используемый полином представляет собой полином произвольного порядка. Синтаксис его следующий:

$$f(x,y,z) = 1,2,3 - \text{эквивалент для } 1+2x+3x^2+0y+0z.$$

SW может использовать столько членов полинома, разделенных запятыми, сколько необходимо. Чем больше членов, тем выше порядок полинома. При использовании полиномов следует делать различие между $f(x,y,z)$ и $f(y,x,z)$:

$$f(x,y,z)=1,2,3 - \text{эквивалент для } 1+2x+3x^2+0y+0z,$$

но

$$f(y,x,z)=1,2,3 - \text{эквивалент для } 1+2y+3y^2+0x+0z.$$

При использовании полиномов нужно помнить, какая переменная действительно используется в полиноме. Первая переменная в наборе переменных для функции и будет переменной для полинома. Если это сложно запомнить, то для ввода полинома используйте общую функцию (см. ниже). Причина использования полиномов наряду с общими функциями заключается в том, что SW рассчитывает полиномы значительно быстрее, чем общую функцию.

Общие функции

Часто использования констант и полиномов не достаточно для задания функции, но SW может интерпретировать и рассчитывать любую алгебраическую функцию. Например, функция

$$f(x,y,z)=(x+y)/z-y^2+2*x$$

относится к числу разрешенных функций.

В табл. 1.3 приведены математические операторы и функции, которые SW распознает. Чтобы использовать операторы «pi()» и «rnd()», следует поставить круглые скобки после этих функций:

$f(d)=0.5*\cos(2*pi*d/0.5)$ – неправильно, так как нет круглых скобок;

$f(d)=0.5*\cos(2*pi()*d/0.5)$ – правильно, круглые скобки поставлены.

Таблица 1.3

Операторы и функции, распознаваемые SimWindows

Оператор или функция	Смысловое значение функции	
	на английском языке	на русском языке
+	Add	Сложение
-	Subtract	Вычитание
*	Multiply	Умножение
/	Divide	Деление
^	Power	Возведение в степень
exp(x)	Exponential	Экспонента
ln(x)	Natural Logarithm	Натуральный логарифм
sin(x)	Sine	Синус (x в радианах)
cos(x)	Cosine	Косинус (x в радианах)
tan(x)	Tangent	Тангенс (x в радианах)
asin(x)	Arcsine	Арксинус (результат в радианах)
Acos(x)	Arcosine	Арккосинус (результат в радианах)
atan(x)	Arctangent	Арктангенс (результат в радианах)
Atan2(x,y)	Arctangent of x/y	Арктангенс от x/y (результат в радианах)
abs(x)	Absolute value	Значение по модулю
sqrt(x)	Square root	Квадратный корень
pi()	Returns pi	Число π
rnd()	Random number between -1 and 1	Произвольное число от -1 до 1

1.2.3. Файлы параметров материалов

Файлы параметров материалов обеспечивают SW параметрами, связанными с различными системами материалов. Эти файлы используют по умолчанию расширение PRM. По умолчанию файл параметров материалов, «material.prm», устанавливается вместе с SW и содержит параметры для Si и $Al_xGa_{1-x}As$. SW загружает этот файл в самом начале и отображает сообщение об ошибке, если этот файл отсутствует. Следует выбрать Environment→Preferences (Окружающая среда→Свойства), чтобы установить, какой файл парамет-

ров материалов загружается при запуске *SW*. Пока файл параметров материалов не загружен, *SW* не может моделировать прибор. В *SW* также можно добавлять новые материалы, либо изменяя существующий файл «material.prm», либо создавая новый файл параметров материала. Желательно использовать новый файл параметров материалов вместо изменения «material.prm». Новые будущие версии *SW* будут перезаписывать существующий файл «material.prm» и стирать введенные пользователем изменения. Необходимо иметь в виду, что файл «material.prm» расширяется по мере того, как *SW* использует новые параметры, и файлы параметров материала будут часто нуждаться в обновлении для новых версий *SW*.

Для того чтобы загрузить созданный пользователем файл параметров материалов в *SW* для моделирования прибора, следует использовать опцию меню Environment→Load Material Parameters (Окружающая среда→Загрузить параметр материала). При загрузке этого файла *SW* выдаст сообщение, если файл содержит ошибки. Файлы параметров являются простыми текстовыми файлами, поэтому их можно редактировать в *SW*, в качестве примера (в п. 1.2.4) показана часть файла «material.prm», соответствующего GaAs. Есть несколько общих правил, необходимых при изменении файла параметров:

1. Значок «#» в начале строки снабжает комментарием любой оператор (statement).
2. От написания буквы (заглавная или строчная) смысл оператора не зависит.
3. Не следует использовать пробелы перед или после знаков «=» или «,».
4. Каждый оператор должен начинаться с первого столбца.

В файле «material.prm» содержащемся в *SW*, имеются комментарии с дополнительной информацией о формате файлов параметров материалов.

Формат

Файл параметров материала состоит из произвольного количества групп материалов, каждой системе материалов соответствует одна группа. Внутри каждой группы материалов может содержаться произвольное количество групп сплавов. Следовательно, Si и GaAs должны находиться в различных группах материалов. Однако InGaAs и AlGaAs, хотя и должны находиться в одной группе материалов, содержатся в различных группах сплавов. Каждая группа сплавов имеет свой список значений для каждого параметра материала (табл. 1.4).

Параметры материалов

Символ параметра и его синтаксис	Смысловое значение параметра		Единица измерения	Набор переменных
	на английском языке	на русском языке		
Band_Gap	Band Gap	Ширина запрещенной зоны	эВ (eV)	x, T
Electron_Affinity	Electron Affinity	Электронное сродство	эВ (eV)	x, T
Static_Permitivity	Electrostatic permittivity	Электростатическая диэлектрическая проницаемость	Нет	x
Refractive_Index	Refractive Index	Показатель преломления	Нет	x, T, E, G, H
Absorption	Optical absorption	Оптическое поглощение	см^{-1} (см^{-1})	x, T, E, G, H
Thermal_Conductivity	Thermal Conductivity	Теплопроводность	$\text{Вт} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ ($\text{W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)	x, T
Deriv_Thermal_Conduct	Thermal conductivity derivative wrt. temperature	Производная теплопроводности от температуры	$\text{Вт} \cdot \text{К}^{-2} \cdot \text{см}^{-1}$ ($\text{W} \cdot \text{K}^{-2} \cdot \text{cm}^{-1}$)	x, T
Electron_Mobility	Electron mobility	Подвижность электронов	$\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	x, T, C, N, A
Hole_Mobility	Hole mobility	Подвижность дырок	$\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	x, T, C, N, A
Electron_Dos_Mass	Electron density of states mass	Эффективная масса плотности состояний электронов	Нет	x
Hole_Dos_Mass	Hole density of states mass	Эффективная масса плотности состояний дырок	Нет	x
Electron_Conduct_Mass	Electron conductivity mass	Масса проводимости электронов	Нет	x
Hole_Conduct_Mass	Hole conductivity mass	Масса проводимости дырок	Нет	x
Electron_Shr_Lifetime	Electron SHR lifetime	Время жизни электронов (по модели Шокли-Холла-Рида (ШХР))	с (s)	x

Hole_Shr_Lifetime	Hole SHR lifetime	Время жизни дырок (по модели (ШХР))	с (s)	x
Rad_Recomb_Const	Radiative recombination constant	Постоянная излучательной рекомбинации	$\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ ($\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)	x
Electron_Energy_Lifetime	Electron energy relaxation lifetime	Время релаксации энергии электронов	с (s)	x
Hole_Energy_Lifetime	Hole energy relaxation lifetime	Время релаксации энергии дырок	с (s)	x
Qw_Rad_Recomb_Const	Radiative recombination constant when used in a QW	Постоянная излучательной рекомбинации в квантоворазмерных ямах	$\text{см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$, ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)	x
Electron_Collision_Factor	Electron scattering coefficient (-1/2, 0, 1/2, 3/2)	Коэффициент рассеяния электронов (-1/2, 0, 1/2, 3/2)	Нет	x
Hole_Collision_Factor	Hole scattering coefficient (-1/2, 0, 1/2, 3/2)	Коэффициент рассеяния дырок (-1/2, 0, 1/2, 3/2)	Нет	x
Electron_Auger_Coefficient	Electron coefficient for Auger recombination	Коэффициент для Оже-рекомбинации электронов	$\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$, ($\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$)	x
QW_Electron_Auger_Coefficient	Electron coefficient for Auger recombination inside QWs	Коэффициент для Оже-рекомбинации электронов внутри квантоворазмерных ям	$\text{см}^4 \cdot \text{с}^{-1}$, ($\text{cm}^4 \cdot \text{s}^{-1}$)	x
Hole_Auger_Coefficient	Hole coefficient for Auger recombination	Коэффициент для Оже-рекомбинации дырок	$\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$, ($\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$)	x
QW_Hole_Auger_Coefficient	Hole coefficient for Auger recombination inside QWs	Коэффициент для Оже-рекомбинации дырок внутри квантово-размерных ям	$\text{см}^4 \cdot \text{с}^{-1}$, ($\text{cm}^4 \cdot \text{s}^{-1}$)	x

Значения параметров могут быть либо простыми константами, либо общими функциями, либо задаваться на основе использования встроенной модели для данных параметров. Добавление новой группы материала или новой группы сплавов может расширить файл параметров материала. Не существует ограничений в типе материалов и, следовательно, программа *SW* способна обработать любую систему материалов.

Ниже описываются ключевые слова и синтаксис для файлов параметров материала.

Группа материалов

Material=s (материал = s)

Ключевое слово для материала начинает данную группу материалов. Файлы приборов будут выбирать материал, используя определенное название материала, «s». Название не должно содержать пробелов.

Группа сплавов

Alloy= default (твердый раствор = по умолчанию)

Alloy = s (твердый раствор = s)

Для того чтобы выбрать различные твердые растворы на основе данного материала, следует использовать ключевые слова для растворов. Файлы приборов выбирают твердый раствор, используя специальное имя раствора, «s». Как и с ключевыми словами для материалов, название твердых растворов не должно содержать пробелов. Если материал имеет параметры по умолчанию, которые являются приемлемыми, и если файл прибора не задает конкретный вид твердого раствора, то используется оператор «Alloy=default». Каждая группа материалов может содержать любое количество твердых растворов на основе этого материала. Файл параметров материала может повторно использовать имена твердых растворов, даже если они находятся в различных группах материалов.

Параметры материалов

В настоящее время существует 25 значений собственных параметров материала, которые файл параметров материала должен устанавливать для каждой комбинации «материал – сплав». В табл. 1.4 внесен список ключевых слов для каждого параметра материала. Каждый сплав в файле параметров материала должен использовать каждое ключевое слово, иначе будет получено сообщение об ошибке.

Каждое ключевое слово должно использовать функцию (постоянная величина, полином, общая функция), чтобы точно определить значение параметра материала. Каждая функция есть функция от определенного набора переменных, и эти переменные указаны в табл. 1.4.

С учетом того что каждый параметр материала есть функция определенного набора переменных, существует два способа задания значения параметра материала. Первый способ – задать одну единственную функцию, которая справедлива для всех значений переменных. Второй способ – задать различные функции, которые применимы для различных диапазонов значений вводимых переменных. Ниже описывается каждый из этих методов.

Единственная функция

Если единственная функция достаточна для того, чтобы точно установить параметр материала, то используется только одна строка для этого параметра. Ниже приведены примеры для параметра «ширина запрещенной зоны». Напоминаем, что ширина запрещенной зоны является функцией от состава твердого раствора (x) и температуры решетки (T).

$$(1) \text{BAND_GAP Value} = 1.424$$

При этом для ширины запрещенной зоны устанавливается величина, справедливая для всех значений x и T .

$$(2) \text{BAND_GAP Value} = 1.424, 1.247$$

В этом примере для задания ширины запрещенной зоны используется полином. Это эквивалентно следующей записи:

$$1.424 + 1.247 * x + 0 * T$$

Наконец, запись (3) является общей функцией для ширины запрещенной зоны, зависящей от x и T .

$$(3) \text{BAND_GAP Value} = 1.424 + 1.25 * x - 5.4e-4 * (T^2 / (T + 204) - 300^2 / (300 + 204)).$$

Кусочная функция

Кусочная функция может определять различные функции, которые справедливы в различных диапазонах значений переменных. Рассмотрим следующие примеры для параметра «ширина запрещенной зоны»:

BAND_GAP Segments = 2

Start_x=0.00 end_x=0.45 start_t=0 end_t=0 value=1.424, 1.247

Start_x=0.45 end_x=1.00 start_t=0 end_t=0 value=1.9, 0.125, 0.143

В строке 1 запись «Segments» устанавливает число различных функций, которые последуют вслед за этой записью. В строке 2 запись «value» устанавливает действующую функцию. «Start_x» и «end_x» устанавливают диапазон значений x , в котором справедлива эта функция. Так как ширина запрещенной зоны зависит также и от температуры T , то необходимо использовать записи «start_t» и «end_t» для установления диапазонов значений T . В данном случае «start_t» и «end_t» равны нулю и это означает, что значения функции верны для всех значений переменной T . Если строка не включает в себя значения переменной для начала (start) и конца диапазона температур (end), то SW считает, что функция верна при всех значениях этой переменной. Поэтому записи «start_t» и «end_t» в строке 2 не являются необходимыми. Итак, синтаксис строки 2 означает, что ширина запрещенной зоны имеет значение $1.424 + 1.247 \cdot x$ для $0.00 \leq x \leq 0.45$ и для всех значений T . Строка 3 означает то же самое, что и строка 2, за исключением того, что в ней другая функция для диапазона $0.45 \leq x \leq 1.00$.

Важной особенностью значений переменной для начала (start) и конца (end) является то, что эти значения могут быть не только числами, но и некоторыми функциями. Например, поскольку ширина запрещенной зоны есть функция от x и T , то значения переменных x и T для начала (start) и конца (end) могут быть функциями от x и T .

Рассмотрим пример для записи оптического поглощения в GaAs:

ABSORPTION Segment=2

Start_e=0 end_e=g value=0

Start_e=g end_e=100 value= $3.5 \cdot e^4 \cdot (e-g)^{0.5}$

Для энергий фотонов (e) между 0 и величиной ширины запрещенной зоны (g) коэффициент поглощения будет равен нулю. Для энергий фотонов между величиной, равной ширине запрещенной зоны (g), и 100, поглощение описывается как $3.5 \cdot e^4 \cdot (e-g)^{0.5}$.

«Встроенные» модели

В дополнение к общим функциям имеется несколько встроенных («built-in») моделей для параметров материалов. Встроенные модели – это функции определенного вида, в которых пользователь устанавли-

иет свои коэффициенты. Встроенные модели доступны для следующих параметров материала: электронное сродство, ширина запрещенной зоны, подвижность носителей заряда, теплопроводность, производная теплопроводности от температуры и коэффициент преломления. Модели применимы к ограниченному набору параметров материала, поэтому *SW* будет выдавать сообщение, когда модели неприменимы к какому-либо параметру материала. Синтаксис для встроенной модели имеет следующий вид:

MATERIAL_PARAM Model=model_name terms=a,b,c, d, e,

где «**MATERIAL_PARAM**» – имя параметра материала; «**model_name**» – имя модели; «a, b, c, d, e» – коэффициенты, которые *SW* использует в данной модели. Каждая модель использует различное количество коэффициентов, и *SW* выдаст сообщение, если вводится некорректное количество коэффициентов для этой модели. Далее описываются различные встроенные модели.

Ширина запрещенной зоны

Model name: Band_gap

function: $f(x,T)=a+bx+cx^2+d(T^2/(e+T)-300^2/(e+300))$ (функция)

Material Parameter: BAND_GAP, ELECTRON_AFFINITY (параметр материала)

Эта модель описывает изменение ширины запрещенной зоны в зависимости от температуры. При $T = 300$ К эта модель редуцируется к полиному второго порядка (выражение в скобках равно нулю) и устанавливает зависимость между составом твердого раствора (x) и его шириной запрещенной зоны. Эта модель применима также и к электронному сродству для контроля того, как сужение ширины запрещенной зоны подразделяется между зоной проводимости и валентной зоной.

Теплопроводность

Model name: Thermal_conduct

function: $f(x,T)=(a/(b+cx+dx^2))T^c$ (функция)

MaterialParameter: THERMAL_CONDUCTIVITY
DERIV_THERMAL_CONDUCT (параметр материала)

Эта модель описывает изменение теплопроводности в зависимости от состава твердого раствора и температуры решетки. Производная этой зависимости от температуры дается в такой же форме.

Подвижность

Model name: Mobility

function: $f(x, T, C, N, A) = (a + bx + cx^2)(C/d)^c + (f + gx + hx^2)(c^1 / (1 + (N + A)/j)(C/d)^k)$ (функция)

Material Parameter: ELECTRON_MOBILITY, HOLE_MOBILITY
(параметр материала)

Эта модель применима к подвижностям электронов и дырок для того, чтобы учитывать их изменения от состава твердого раствора (x), температуры решетки (T), температуры носителей заряда (C) и от концентраций легирующих примесей (N – доноры, A – акцепторы). Следует обратить внимание, что в модели не используется в явном виде температура решетки T , а используется температура носителей C . В большинстве случаев температура носителей заряда равна температуре решетки. Однако подвижности могут зависеть от температуры решетки, и может быть применена функция пользователя, в которой в качестве переменной используется T .

Поглощение

(1) Model name: Power_absorption

function: $f(x, T, E, G) = (a + bx + cx^2)(E - d)^c$ (функция)

Material Parameter: ABSORPTION (параметр материала)

(2) Model name: Exp_absorption

function: $f(x, T, E, G) = a \exp(b(E - c))$ (функция)

Material Parameter: ABSORPTION (параметр материала)

Эти две модели (1) и (2) являются аналитическими выражениями, которые устанавливают зависимости коэффициента поглощения от энергии фотонов. В этих моделях отсутствует зависимость оптического поглощения от температуры, но функция пользователя может включать и температуру.

(3) Model name: Power_band_gap_absorption

function: $f(x, T, E, G) = (a + bx + cx^2)(E - G - d)^c$

Material Parameter: ABSORPTION

(4) Model name: Exp_band_gap_absorption

function: $f(x, T, E, G) = a \exp(b(E - G - c))$

Material Parameter: ABSORPTION

Модели (3) и (4) те же самые, что и модели (1) и (2), за исключением того, что в них введены значения ширины запрещенной зоны. Поскольку ширина запрещенной зоны зависит от температуры, модели поглощения (3) и (4) будут учитывать зависимость поглощения от температуры.

Коэффициент преломления

Model name: Oscillator_refractive_index

function: встроенная (не требуется введения коэффициентов)

Material Parameter: REFRACTIVE_INDEX

Это специальная модель, которая не требует введения коэффициентов и применима только к твердым растворам $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Коэффициент преломления зависит от содержания алюминия в твердом растворе и от температуры (через зависимость ширины запрещенной зоны от температуры).

Пример записи файла параметров материала для группы материалов

Ниже следует описание группы материалов на основе GaAs, которые входят в состав файла «material.prm», устанавливаемого в SW по умолчанию. Из описания видно, как использовать различные ключевые слова, рассмотренные в предыдущих пунктах.

Material=GaAs

Let's first define the default parameters for GaAs. Note that defining
a default alloy is not required, but if you don't you will be required
to specify the alloy each time you use the material in your device file.

(# Давайте сначала определим параметры для GaAs по умолчанию.
Заметьте, что определение твердого раствора по умолчанию не
требуется, но если Вы не определите Alloy=Default, от Вас будет
требоваться определять твердый раствор каждый раз, когда этот
материал будет использоваться в вашем приборном файле.)

Alloy=Default

BAND_GAP Model=Band_gap terms=1.424,0,0,-5.405e-4,204

ELECTRON_AFFINITY Model=Band_gap terms=4.07,0,0,2.702e-4,204

STATIC_PERMITIVITY Value=13.18

REFRACTIVE_INDEX Model=oscillator_refractive_index

ABSORPTION Segments=6

start_e=0 end_e=g value=0

```

start_e=g end_e=g+1 value=
=2.698e3+8.047e4*(e-g)-6.241e4*(e-g)^2+7.326e4*(e-g)^3
start_e=g+1 end_e=g+1.4 value=
=-3.218e6+9.060e6*(e-g)-8.428e6*(e-g)^2+2.681e6*(e-g)^3
start_e=g+1.4 end_e=g+1.9 value=
=-1.615e7+2.600e7*(e-g)-1.338e7*(e-g)^2+2.303e6*(e-g)^3
start_e=g+1.9 end_e=g+2.6 value=
=8.383e5+2.442e5*(e-g)-3.226e5*(e-g)^2+8.482e4*(e-g)^3
start_e=g+2.6 end_e=g+4.0 value=7.83e5
THERMAL_CONDUCTIVITY Model=
=Thermal_Conduct terms=549.356,1,0,0,-1.25
DERIV_THERMAL_CONDUCT Model=Thermal_Conduct terms=
=-686.695,1,0,0,-2.25
ELECTRON_MOBILITY Value=8000
HOLE_MOBILITY Value=370
ELECTRON_DOS_MASS Value=0.067
HOLE_DOS_MASS Value=0.62
ELECTRON_COND_MASS Value=0.067
HOLE_COND_MASS Value=.62
ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=1e-8
HOLE_SHR_LIFETIME Value=1e-8
ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
RAD_RECOMB_CONST Value=1.5e-10
ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5
# Now we want to define the Al alloy. Since GaAs was the last
material you
# specified, you don't need to specify it again.
(#Теперь необходимо определить параметры Al-твёрдого раствора,
а так как GaAs был самым последним материалом, который был
записан, в дальнейшем не нужно записывать его данные снова.)
Alloy=Al
BAND_GAP Segments=2
Start_x=0.00 end_x=0.45 Model=Band_gap terms=

```

■1.424,1.247,0,-5.405e-4,204
 Start_x=0.45 end_x=1.00 Model=Band_gap terms=
 ■1.9,0.125,0.143,-5.405e-4,204
 ELECTRON_AFFINITY Segments=2
 Start_x=0.0 end_x=0.45 Model=Band_gap terms=
 ■4.07,-0.7482,0,2.702e-4,204
 Start_x=0.45 end_x=1.0 Model=Band_gap terms=
 ■3.594,0.3738,-0.143,2.702e-4,204
 STATIC_PERMITIVITY Value=13.18,-3.12
 REFRACTIVE_INDEX Model=oscillator_refractive_index
 ABSORPTION Segments=6
 start_e=0 end_e=g value=0
 start_e=g end_e=g+1 value=
 $2.698e3+8.047e4*(e-g)-6.241e4*(e-g)^2+7.326e4*(e-g)^3$
 start_e=g+1 end_e=g+1.4 value=
 $3.218e6+9.060e6*(e-g)-8.428e6*(e-g)^2+2.681e6*(e-g)^3$
 start_e=g+1.4 end_e=g+1.9 value=
 $1.615e7+2.600e7*(e-g)-1.338e7*(e-g)^2+2.303e6*(e-g)^3$
 start_e=g+1.9 end_e=g+2.6 value=
 $8.383e5+2.442e5*(e-g)-3.226e5*(e-g)^2+3.482e4*(e-g)^3$
 start_e=g+2.6 end_e=g+4.0 value=7.83e5
 THERMAL_CONDUCTIVITY Model=
 Thermal_Conduct terms=549.356,1,12.7,-13.22,-1.25
 DERIV_THERMAL_CONDUCT Model=Thermal_Conduct terms=
 686.695,1,12.7,-13.22,-2.25
 ELECTRON_MOBILITY Segments=2
 Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=8000,-2200,10000
 Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=-255,1160,-720
 HOLE_MOBILITY Value=370,-970,740
 ELECTRON_DOS_MASS Segments=2
 Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=0.067,0.083
 Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=0.85,-0.14
 HOLE_DOS_MASS Value=0.62,0.14
 ELECTRON_COND_MASS Segments=2
 Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=0.067,0.083
 Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=0.32,-0.06
 HOLE_COND_MASS Value=0.62,0.14
 ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=1e-8
 HOLE_SHR_LIFETIME Value=1e-8
 ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31

QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
RAD_RECOMB_CONST Value=1.5e-10
ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5

1.2.4. Файлы приборов

Файлы приборов описывают их технические характеристики. Они включают размеры прибора, тип материала и вид легирования. Файл прибора является ASCII файлом, который можно создавать и редактировать в программе *SimWindows*. По умолчанию файлы приборов имеют расширение *DEV*. Основные правила для файлов параметров материала применимы и к приборным файлам, а именно:

1. Значок «#» в начале строки выводит комментарии по какому-либо оператору, находящемуся в файле.
2. Любая запись не зависит от того, написана она заглавными буквами или строчными: «Grid» означает то же самое, что «grid».
3. Не следует использовать пробелы перед или после знаков «=» и «,».
4. Каждый оператор должен начинаться с первого столбца.

Чтобы описать прибор, имеется некоторое количество ключевых слов, которые программа *SW* интерпретирует из приборного файла. Каждое ключевое слово имеет некоторое количество доступных опций. Далее описывается каждое ключевое слово, которое *SW* распознает. Многие ключевые слова имеют некоторое число вариаций, которые один и тот же файл может объединять с другими вариациями. Многие операторы в приборном файле являются выборочными, но каждый приборный файл должен содержать по крайней мере один оператор по координатной сетке размеров, один оператор по структуре и один оператор по легированию прибора. Суммарные длины материала во всех операторах (размеры, структура, легирование) должны быть равны полной длине данного прибора. Порядок размещения операторов по данному параметру в приборном файле очень важен для операторов, использующих одно и то же ключевое слово. *SW* применяет их в том порядке, в котором они появляются в приборном файле. Например:

grid length=0.5 points=100
grid length=0.3 points=200

Этот порядок размещения операторов по координатной сетке (grid) означает, что в диапазоне размеров от 0 до 0,5 мкм *SW* должно быть использовано 100 точек, а в диапазоне от 0,5 до 0,8 мкм будет использовано 200 точек координатной сетки. Если запись имеет вид:

grid length=0.3 points=200
grid length=0.5 points=100,

то при таком порядке размещения операторов сетки программа *SW* должна использовать в диапазоне от 0 до 0,3 мкм 200 точек, а в диапазоне от 0,3 до 0,8 мкм 100 точек координатной сетки.

Ключевые слова

Координатная сетка (grid)

grid length=f points=i
grid length=f size=f

Ключевое слово «grid» означает или число координатных точек (первая форма записи), или расстояние (вторая форма записи) в пределах определенной длины прибора. Использование в приборном файле более одной grid-строки изменяет расстояния в координатной сетке в различных областях прибора. Следует иметь в виду, что сумма длин всех областей прибора, указанных в grid-операторах, должна равняться полной длине прибора.

Структура

structure material=s length=f [alloy=s conc=f(d) (структура материала)

Оператор «structure» («структура») определяет состав материала в пределах определенной области прибора. Файл параметров материала должен содержать определенное имя материала. Если материал имеет ассоциированное имя твердого раствора, то его имя определяет оператор «alloy». Опция «conc» может быть использована для описания изменения состава твердого раствора в пределах выбранной области прибора с помощью общей функции. Если в строке «structure» опущены опции «alloy» и «conc», то *SW* будет использовать параметры материала по умолчанию (если они есть) из файла параметров материала. Следует иметь в виду, что сумма длин всех областей прибора в операторах «structure» должна быть равна полной длине прибора.

Легирование

doping length= n [$N_D=f(d)$] [$N_A=f(d)$] [$N_{D_deg}=i$] [$N_{A_deg}=i$]
[$N_{D_level}=f(d)$] [$N_{A_level}=f(d)$]

Оператор «doping» («легирование») определяет различные области легирования в приборе. Параметр «length» определяет протяженность области. Параметры « N_D » и « N_A » определяют соответственно концентрации доноров и акцепторов. Эти параметры могут использовать общую функцию $f(d)$, описывающую изменение концентраций легирующих примесей в данной области. Если оператор не содержит концентраций обеих примесей, то используются характеристики собственного (нелегированного) материала. Параметры « N_{D_deg} » и « N_{A_deg} » определяют факторы вырождения для легирующих примесей. Факторы вырождения используются для не полностью ионизированных примесей, причем они равны 2 для доноров и 4 для акцепторов. Если оператор не включает в себя ни один из этих параметров, то *SW* использует по умолчанию значение «0», означающее полную ионизацию примесей.

Параметры « N_{D_level} » и « N_{A_level} » определяют энергетическое положение уровней легирующих примесей в электронвольтах. Положительные значения этих параметров означают, что примесные уровни расположены внутри запрещенной зоны (донорный уровень лежит ниже дна зоны проводимости, акцепторный уровень лежит выше потолка валентной зоны). Если оператор не включает в себя ни один из этих параметров, то *SW* использует по умолчанию значение «0». Суммарная протяженность легированных областей должна равняться полной длине прибора. Нужно отметить, что в каждом операторе легирования значение d начинается с нуля. Не следует учитывать в функции $f(d)$, в каком месте прибора на самом деле начинается структура.

Область (region)

[region bulk length= n]

[region qw length= n]

Оператор «region» («область») обозначает области прибора как его объемные области (bulk) или как его области квантово-размерных ям (КЯ). Если для файлов приборов не требуются операторов областей, то в этом случае прибор целиком будет состоять из объемных областей. Если же прибор содержит квантово-размерные ямы, то файл прибора должен содержать операторы как для объемных областей, так и для областей квантово-размерных ям.

Резонатор (cavity)

[cavity surface area=n length=n]

Оператор «cavity» («резонатор») определяет параметры резонатора лазера в пределах прибора пользователя совместно с операторами «mirror» («зеркало»). *SW* поддерживает только один тип резонатора – резонатор лазеров с поверхностным излучением. В лазерах этого типа направление потока излучения параллельно направлению протекающего тока. Оператор резонатора требует введения площади поверхности резонатора (перпендикулярной к потоку излучения) и эффективной длины резонатора. В файле прибора может быть лишь один оператор резонатора. Длина резонатора определяет потери в распределенном зеркале и выходную мощность излучения лазера.

Зеркало (mirror)

[mirror metal position=n ref=n]

Оператор «mirror» («зеркало») определяет параметры резонатора лазера в пределах прибора пользователя совместно с оператором «cavity» («резонатор»). *SW* поддерживает только один тип резонатора – резонатор лазеров с поверхностным излучением. В лазерах этого типа направление потока излучения параллельно направлению протекающего тока. Зеркала помещены в дискретных точках внутри прибора (обычно на концах прибора). Оператор требует только задания координат положения зеркал или отражательной способности зеркал. Файл прибора должен включать два оператора «mirror» («зеркало») для моделирования лазера. *SW* рассчитывает профиль электромагнитного поля излучения только между зеркалами.

Радиус (radius)

[radius=n]

Оператор «radius» («радиус») определяет радиус прибора пользователя. *SW* предполагает, что все приборы имеют цилиндрическую форму. Если в файле прибора отсутствует оператор радиуса, то по умолчанию радиус равен 1 мкм. В *SW* параметр «радиус» используется только в модели теплового потока в поперечном (боковом) направлении. Это необходимо только в том случае, когда эта модель используется при моделировании тепловых характеристик прибора.

Повторение (repeat)

[repeat start]

[repeat=n]

Оператор «repeat» («повторение») позволяет файлу прибора вводить в прибор периодические структуры. Следует использовать оператор «repeat start» перед какой-либо группой операторов, а затем использовать «repeat=n» после этой группы операторов. SW повторит эту группу заданное число раз (n раз).

Корректировка параметров материала

В дополнение к заданию определенной структуры прибора файл прибора может также содержать корректировку любого параметра материала. Это означает, что любой приборный файл может использовать новое значение для какого-либо параметра материала, а не использовать его значение по умолчанию, которое записано в файле параметров материала. Чтобы выполнить это, необходимо использовать тот же самый синтаксис, что и в файле параметров материала, со следующими дополнениями:

1. В первой строке для данного параметра материала следует включить опцию «length=n», где n – промежуток, для которого будет осуществлена корректировка. Для корректировки параметра материала в различных областях прибора необходимо использовать набор строк, но корректировать этот параметр следует по всей длине прибора.

2. В дополнение к обычным переменным для данного параметра материала общая функция может также использовать переменную «d» («координата») для данного параметра. Это дает возможность учесть зависимость данного параметра материала от координаты внутри прибора. Например, в файле параметров материала ширина запрещенной зоны записана в виде

BAND_GAP Value=f(x,T)

В файле прибора оператор ширины запрещенной зоны будет иметь вид

BAND_GAP length=n value=f(x,T,d)

Пример файлов прибора

Далее следует пример «файла прибора» («device file»), который включен в состав *SimWindows*. Это – простой AlGaAs p - n -диод. Файл содержит пять операторов «grid» («координатная сетка»), два операто-

ра «structure» («структура») для задания изменения содержания Al в областях прибора и два оператора «doping» («легирование») для задания координатной зависимости концентрации легирующей примеси.

Ниже приведен этот файл:

```
# The grid lines are used to specify the number of grid points in
# a particular region. Instead of using "points" you can also use
# "size=" to specify the spacing between grid points.
grid length=.450 points=25
grid length=.049 points=40
grid length=.002 points=40
grid length=.049 points=40
grid length=.450 points=25
# The structure lines are used to specify the material, alloy, and alloy
# composition.
# The names for material= and alloy= must correspond to names in the
# material parameters file. It is not necessary to specify an alloy.
# If no alloy is specified then the default material parameters
# (specified material.prm) are used.
structure material=gaas alloy=al length=0.50 conc=0.40
structure material=gaas alloy=al length=0.50 conc=0.00
# The doping lines are just used to specify the doping. If no doping is
# specified then the region is intrinsic.
doping length=.500000 Nd=1e+17-5e16/0.5*d
doping length=.500000 Nd=5e+16+5e16/0.5*d
```

В файле содержатся следующие три комментария:

1. Перед набором операторов «grid»:

«Строки операторов «grid» используются для задания количества точек в данной области прибора. Вместо использования «points» («точки») Вы можете использовать «size=» («размер») для того, чтобы задать расстояние между точками».

2. Перед операторами «structure»:

«Строки операторов «structure» используются для задания типа материала, твердого раствора или состава твердого раствора. Имена материалов («material=») или твердых растворов («alloy=») должны соответствовать именам в файле параметров материала. Нет необходимости задавать имя твердого раствора. Если не задается наличие твердого раствора («alloy»), то используются параметры материала по умолчанию (записанные в файле material.prm (файл параметров материала)).».

Перед операторами «doping»:

«Строки операторов «doping» используются для задания вида легирования. Если вид легирования в какой-либо области прибора не задан, то данная область рассматривается как область «собственно-го» полупроводника».

1.2.5. Файлы состояния

Так как моделирование прибора может занять достаточно много времени, то «файлы состояния» («state files») могут хранить результаты для более позднего использования и анализа. Файл состояния содержит все данные, которые находятся в памяти. В результате файлы состояния могут быть весьма большими в зависимости, прежде всего, от числа заданных точек координатной сетки в приборе. Файлы состояния – двоичные файлы, которые только SW может интерпретировать. Чтобы сохранить информацию в файле, следует щелкнуть левой клавишей «мыши» по окну состояния прибора и выбрать в меню File→Save As (Файл→Сохранить как). SW сделает запрос, нужно ли сохранить результаты для данного прибора. Если SW закрывает файл состояния успешно, то в окне состояния будет появляться сообщение «Device successfully created» («Устройство создано успешно»). Прибор будет оставаться точно в том состоянии, в каком его сохранила программа SW.

1.2.6. Файлы данных

Программа SW может также создавать «Data files» («Файлы данных»), которые содержат числовые значения любых необходимых данных. Графики создают файлы данных путем их вывода на экран при использовании опции File→Save As. После ввода имени файла SW поместит числовые данные в этот файл. Следует использовать также пункты меню под опускающимся меню «Data» («Данные»), чтобы выводить данные, не зависящие от координат, или чтобы создавать собственные наборы данных (наборы данных пользователя). Файлы данных записаны в формате ASCII, который может прочитать любой стандартный текстовый редактор или электронная таблица. Данные разграничены запятыми, которые затрудняют их чтение на экране. Однако достаточно просто загрузить эти данные в программу электронной таблицы, которая «принимает» и «понимает» текст, разграниченный запятыми. Такая электронная таблица будет проста для чтения и управления.

2. ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НОВЫХ ПРИБОРОВ

2.1. Файлы новых приборов

В этом разделе представлены типичные файлы новых приборов, отсутствующих в оригинальной версии программы SW.

2.1.1. Приборный файл диода с Шоттки-барьером на основе Si

```
#рекомендуемое имя файла: Si Shottky diode.dev
grid length=5.000 points=400
structure material=si length=5.0
doping length=3.0  $N_d=1.0e+16$ 
doping length=2.0  $N_d=1.0e+18$ 
```

2.1.2. Приборный файл светодиода на основе гетероструктур AlGaInP

Моделируются гетероструктуры, выращенные на подложках GaAs, красного цвета свечения с 5 квантово-размерными ямами в активной области *p*-типа проводимости. Ширина ямы равна 10 нм.

```
#рекомендуемое имя файла: светодиод красный AlGaInP 5 ям 10 нм.dev
grid length=0.780 points=50
grid length=0.10 points=250
grid length=0.780 points=50
structure material=gaas alloy=algainp length=0.780 conc=0.10
region bulk length=0.780
repeat start
structure material=gaas alloy=algainp length=0.010 conc=0.00
structure material=gaas alloy=algainp length=0.010 conc=0.10
region qw length=0.010
region bulk length=0.010
repeat=5
structure material=gaas alloy=algainp length=0.780 conc=0.10
region bulk length=0.780
doping length=0.780  $N_a=5e17$ 
doping length=0.050  $N_a=5e17$ 
```

doping length=0.050 $N_a=5e17$
doping length=0.780 $N_d=1e18$

2.1.3. Приборный файл фототранзистора на основе гетероструктур AlGaAs

Моделируются гетероструктуры, выращенные на подложках GaAs [3].

grid length=0.875 points=75
grid length=0.30 points=100
grid length=0.875 points=75
structure material=gaas alloy=al length=0.875 conc=0.4
structure material=gaas alloy=al length=0.30 conc=0.0
structure material=gaas alloy=al length=0.875 conc=0.4
doping length=0.875 $N_d=1e17$
doping length=0.30 $N_a=1e18$
doping length=0.875 $N_d=1e17$

2.1.4. Приборный файл лазера с вертикальным резонатором

Моделируются гетероструктуры AlGaAs, выращенные на подложках GaAs [4].

radius=3.5
ELECTRON_MOBILITY Segments=2 length=6.4243451
Start_x=0.0end_x=0.45Value=((8000-
22000*x+10000*x^2)*(300/C)^2.3)/(1+5.51e-17*(N+A))^0.233
Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=
=((-255+1160*x-720*x^2)*(300/C)^2.3)/(1+5.51e-17*(N+A))^0.233
HOLE_MOBILITY length=6.4243451value=
=((370-970*x+740*x^2)*(300/C)^2.7)/(1+3.17e-17*(N+A))^0.266
cavity surface area=38.484 length=1.707264
mirror metal position=0 ref=0.9975
mirror metal position=6.4243451 ref=0.999
Top DBR
structure material=gaas alloy=al length=.0044 conc=0.00
grid length=.0034 points=5
grid length=.0030 points=10
structure material=gaas alloy=al length=.0515 conc=0.16
grid length=.0445 points=10
structure material=gaas alloy=al length=

```

=.0099 conc=0.16+(0.84/.0099)*d
grid length=.0199 points=20
structure material=gaas alloy=al length=.0604 conc=1.00
grid length=.0504 points=10
doping length=0.1262 Na=2e19 Na_deg=4 Na_level=0.026
region length=0.1262 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=.0.1262 model=oscillator_refractive_index
repeat start
structure material=gaas alloy=al length=.0099 conc=
=.1.00-(0.84/.0099)*d
grid length=0.0199 points=20
structure material=gaas alloy=al length=.0515 conc=0.16
grid length=0.0415 points=10
structure material=gaas alloy=al length=
=.0099 conc=0.16+(0.84/.0099)*d
grid length=0.0199 points=20
structure material=gaas alloy=al length=.0604 conc=1.00
grid length=0.0504 points=10
doping length=.1317 Na=2e19 Na_deg=4 Na_level=0.026
region length=.1317 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=.0.1317 model=oscillator_refractive_index
repeat=3
repeat start
structure material=gaas alloy=al length=.0099 conc=
=.1.00-(0.84/.0099)*d
grid length=0.0199 points=20
doping length=.0099 Na=5e18 Na_deg=4 Na_level=0.026
structure material=gaas alloy=al length=.0515 conc=0.16
grid length=0.0415 points=10
doping length=.0515 Na=5e18 Na_deg=4 Na_level=0.026
structure material=gaas alloy=al length=
=.0099 conc=0.16+(0.84/.0099)*d
grid length=0.0199 points=20
doping length=.0099 Na=5e18 Na_deg=4 Na_level=0.026
structure material=gaas alloy=al length=.0604 conc=1.00
grid length=0.0504 points=10
doping length=.0604 Na=5e18 Na_deg=4 Na_level=0.026
region length=.1317 bulk

```

```

REFRACTIVE_INDEX length=
=0.1317 model=oscillator_refractive_index
repeat=14
# Active Region
grid length=0.005 points=20
grid length=0.0841 points=200
grid length=0.0600 points=600
#119
grid length=0.0841 points=200
grid length=.0047641 points=20
structure material=gaas alloy=al length=.0050 conc=
=1.00-(0.84/.0050)*d
structure material=gaas alloy=al length=.0891 conc=0.16
doping length=.0050 Na=3e18 Na_deg=4 Na_level=0.026
doping length=.0891 Na=1e17 Na_deg=4 Na_level=0.026
region length=.0941 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=0.0941 model=oscillator_refractive_index
structure material=gaas alloy=al length=.0080 conc=0.00
structure material=gaas alloy=al length=.0080 conc=0.16
structure material=gaas alloy=al length=.0080 conc=0.00
structure material=gaas alloy=al length=.0080 conc=0.16
structure material=gaas alloy=al length=.0080 conc=0.00
doping length=.04
region length=.0080 qw
REFRACTIVE_INDEX length=0.0080 value=5
region length=.0080 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=0.0080 model=oscillator_refractive_index
region length=.0080 qw
REFRACTIVE_INDEX length=0.0080 value=5
region length=.0080 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=0.0080 model=oscillator_refractive_index
region length=.0080 qw
REFRACTIVE_INDEX length=0.0080 value=5
structure material=gaas alloy=al length=.0891 conc=0.16
structure material=gaas alloy=al length=.0047641 conc=0.30
doping length=.0891
doping length=.0047641

```

```

region length=.0938641 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=.0938641 model=oscillator_refractive_index
# Bottom DBR
repeat start
structure material=gaas alloy=al length=.0604 conc=1.00
grid length=0.0504 points=10
structure material=gaas alloy=al length=.009433 conc=0.30
grid length=0.019433 points=20
structure material=gaas alloy=al length=.0515 conc=0.16
grid length=0.0415 points=10
structure material=gaas alloy=al length=.009433 conc=0.30
grid length=0.019433 points=20
doping length=.130766  $N_d=3e18$   $N_d\_deg=2$   $N_d\_level=0.005$ 
region length=.130766 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=.130766 model=oscillator_refractive_index
repeat=28
structure material=gaas alloy=al length=.0604 conc=1.00
#120
grid length=0.0504 points=10
structure material=gaas alloy=al length=.009433 conc=0.30
grid length=0.019433 points=20
structure material=gaas alloy=al length=.1000 conc=0.00
grid length=0.0950 points=40
doping length=.169833  $N_d=3e18$   $N_d\_deg=2$   $N_d\_level=0.005$ 
region length=.169833 bulk
REFRACTIVE_INDEX length=
=.169833 model=oscillator_refractive_index

```

2.2. Файлы новых материалов

2.2.1. Файл для системы твердых растворов AlGaAs и GaAs

В рассматриваемом файле, в отличие от оригинального файла программы SW, учтены зависимости подвижности электронов и дырок от температуры и концентрации легирующих примесей.

Рекомендуемое имя файла: material GaAs-AlGaAs.prm.

There are four important items to consider when editing this file or
any of the device files:

- # 1. Any line that begins with the '#' character is not translated.
- # 2. Everything is case insensitive.
- # 3. Do not use spaces before or after an '=' or a ','.
- # 4. EVERY statement must begin in the first column.

This file is the general material parameters file. This lets you define
arbitrary materials with arbitrary names. This file must be contained in
the same directory as the simwin.exe file. It is loaded as soon as the
program starts.

This file uses a combination of different general functions as well as
built-in models.

If you make a mistake, in most cases the computer will tell you what
line the error appears.

Here is how the file works.

First start off by defining a material name.

Then define an alloy name for the material that is currently defined.

A special alloy name called "default" is used when you just want to
define a pure semiconductor.

Alloy=Default

Now you have to put in the Values. Each of these Values must be
defined. The order in which they appear doesn't matter, but you have to
use the parameter name like it is typed here (rule 2 above applies).

Material=GaAs

Let's first define the default parameters for GaAs. Note that definin a
default alloy is not required, but if you don't you will be required to
specify the alloy each time you use the material in your device file.

Alloy=Default

BAND_GAP Model=Band_gap terms=1.424,0,0,-5.405e-4,204

ELECTRON_AFFINITY Model=Band_gap terms=4.07,0,0,2.702e-4,204

STATIC_PERMITIVITY Value=13.18

REFRACTIVE_INDEX Model=oscillator_refractive_index

ABSORPTION Segments=6

start_e=0 end_e=g value=0

start_e=g end_e=g+1 value=

$$=2.698e3+8.047e4*(e-g)-6.241e4*(e-g)^2+7.326e4*(e-g)^3$$

start_e=g+1 end_e=g+1.4 value=

$$=-3.218e6+9.060e6*(e-g)-8.428e6*(e-g)^2+2.681e6*(e-g)^3$$

start_e=g+1.4 end_e=g+1.9 value=

$$=-1.615e7+2.600e7*(e-g)-1.338e7*(e-g)^2+2.303e6*(e-g)^3$$

```

start_e=g+1.9 end_e=g+2.6 value=
=8.383e5+2.442e5*(e-g)-3.226e5*(e-g)^2-1.8482e4*(e-g)^3
start_e=g+2.6 end_e=g+4.0 value=7.83e5
THERMAL_CONDUCTIVITY Model=
=Thermal_Conduct terms=549.356,1,0,0,-1.25
DERIV_THERMAL_CONDUCT Model=Thermal_Conduct terms=
=-686.695,1,0,0,-2.25
ELECTRON_MOBILITY Value=8000
HOLE_MOBILITY Value=370
ELECTRON_DOS_MASS Value=0.067
HOLE_DOS_MASS Value=0.62
ELECTRON_COND_MASS Value=0.067
HOLE_COND_MASS Value=.62
ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=1e-8
HOLE_SHR_LIFETIME Value=1e-8
ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
RAD_RECOMB_CONST Value=1.5e-10
ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.5e-4
ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5
# Now we want to define the Al alloy. Since GaAs was the last
material you specified, you don't need to specify it again.
Alloy=Al
BAND_GAP Segments=2
Start_x=0.00 end_x=0.45 Model=Band_gap terms=
=1.424,1.247,0,-5.405e-4,204
Start_x=0.45 end_x=1.00 Model=Band_gap terms=
=1.9,0.125,0.143,-5.405e-4,204
ELECTRON_AFFINITY Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.45 Model=Band_gap terms=
=4.07,-0.7482,0,2.702e-4,204
Start_x=0.45 end_x=1.0 Model=Band_gap terms=
=3.594,0.3738,-0.143,2.702e-4,204
STATIC_PERMITIVITY Value=13.18,-3.12
REFRACTIVE_INDEX Model=oscillator-refractive_index

```

ABSORPTION Segments=6
 start_e=0 end_e=g value=0
 start_e=g end_e=g+1 value=
 $=2.698e3+8.047e4*(e-g)-6.241e4*(e-g)^2+7.326e4*(e-g)^3$
 start_e=g+1 end_e=g+1.4 value=
 $=-3.218e6+9.060e6*(e-g)-8.428e6*(e-g)^2+2.681e6*(e-g)^3$
 start_e=g+1.4 end_e=g+1.9 value=
 $=-1.615e7+2.600e7*(e-g)-1.338e7*(e-g)^2+2.303e6*(e-g)^3$
 start_e=g+1.9 end_e=g+2.6 value=
 $=8.383e5+2.442e5*(e-g)-3.226e5*(e-g)^2+8.482e4*(e-g)^3$
 start_e=g+2.6 end_e=g+4.0 value=7.83e5
 THERMAL_CONDUCTIVITY Model=
 =Thermal_Conduct terms=549.356,1,12.7,-13.22,-1.25
 DERIV_THERMAL_CONDUCT Model=Thermal_Conduct terms
 ==-686.695,1,12.7,-13.22,-2.25
 #ELECTRON_MOBILITY Segments=2
 #Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=8000,-22000,10000
 #Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=-255,1160,-720
 #ниже указаны значения подвижностей электронов и дырок
 с учетом их зависимостей от #температуры и концентрации
 легирующих примесей
 ELECTRON_MOBILITY Segments=2
 Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=
 $=((8000-22000*x+10000*x^2)*(300/C)^{2.3})/(1+5.51e-17*(N+A))^{0.233}$
 Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=
 $=((-255+1160*x-720*x^2)*(300/C)^{2.3})/(1+5.51e-17*(N+A))^{0.233}$
 HOLE_MOBILITY Value=
 $=((370-970*x+740*x^2)*(300/C)^{2.7})/(1+3.17e-17*(N+A))^{0.266}$
 #HOLE_MOBILITY Value=370,-970,740
 ELECTRON_DOS_MASS Segments=2
 Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=0.067,0.083
 Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=0.85,-0.14
 HOLE_DOS_MASS Value=0.62,0.14
 ELECTRON_COND_MASS Segments=2
 Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=0.067,0.083
 Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=0.32,-0.06
 HOLE_COND_MASS Value=0.62,0.14
 ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=1e-8
 HOLE_SHR_LIFETIME Value=1e-8
 ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31

QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 RAD_RECOMB_CONST Value=1.5e-10
 ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
 ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5

2.2.2. Файл для системы твердых растворов AlGaInP

Моделируемая структура представляет собой слой AlGaInP, выращенный на подложках GaAs. Содержание In фиксированно и равно 0,5.

Рекомендуемое имя файла: material AlGaInP.prm.

```

*****GaAs*****
Material=GaAs
# Let's first define the default parameters for GaAs. Note that defining
a default alloy is not required, but if you don't you will be required to
specify the alloy each time you use the material in your device file.
Alloy=Default
BAND_GAP Model=Band_gap terms=1.424,0,0,-5.405e-4,204
ELECTRON_AFFINITY Model=Band_gap terms=
=4.07,0,0,2.702e-4,204
STATIC_PERMITIVITY Value=13.18
REFRACTIVE_INDEX Model=oscillator_refractive_index
ABSORPTION Segments=6
start_e=0 end_e=g value=0
start_e=g end_e=g+1 value=
=2.698e3+8.047e4*(e-g)-6.241e4*(e-g)^2+7.326e4*(e-g)^3
start_e=g+1 end_e=g+1.4 value=
=-3.218e6+9.060e6*(e-g)-8.428e6*(e-g)^2+2.681e6*(e-g)^3
start_e=g+1.4 end_e=g+1.9 value=
=-1.615e7+2.600e7*(e-g)-1.338e7*(e-g)^2+2.303e6*(e-g)^3
start_e=g+1.9 end_e=g+2.6 value=
=8.383e5+2.442e5*(e-g)-3.226e5*(e-g)^2+8.482e4*(e-g)^3
start_e=g+2.6 end_e=g+4.0 value=7.83e5
THERMAL_CONDUCTIVITY Model=
=Thermal_Conduct terms=549.356,1,0,0,-1.25
  
```

DERIV_THERMAL_CONDUCT Model=Thermal_Conduct terms=
 =-686.695,1,0,0,-2.25
 ELECTRON_MOBILITY Value=8000
 HOLE_MOBILITY Value=370
 ELECTRON_DOS_MASS Value=0.067
 HOLE_DOS_MASS Value=0.62
 ELECTRON_COND_MASS Value=0.067
 HOLE_COND_MASS Value=.62
 ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=1e-8
 HOLE_SHR_LIFETIME Value=1e-8
 ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 RAD_RECOMB_CONST Value=1.5e-10
 ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
 ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5

#####Al_xGa_{1-x}As#####

Alloy=Al

BAND_GAP Segments=2

Start_x=0.00 end_x=0.45 Model=Band_gap terms=
 =1.424,1.247,0,-5.405e-4,204

Start_x=0.45 end_x=1.00 Model=Band_gap terms=
 =1.9,0.125,0.143,-5.405e-4,204

ELECTRON_AFFINITY Segments=2

Start_x=0.0 end_x=0.45 Model=Band_gap terms=
 =4.07,-0.7482,0,2.702e-4,204

Start_x=0.45 end_x=1.0 Model=Band_gap terms=
 =3.594,0.3738,-0.143,2.702e-4,204

STATIC_PERMITIVITY Value=13.18,-3.12

REFRACTIVE_INDEX Model=oscillator_refractive_index

ABSORPTION Segments=6

start_e=0 end_e=g value=0

start_e=g end_e=g+1 value=

=2.698e3+8.047e4*(e-g)-6.241e4*(e-g)^2+7.326e4*(e-g)^3

start_e=g+1 end_e=g+1.4 value=

```

=-3.218e6+9.060e6*(e-g)-8.428e6*(e-g)^2+2.681e6*(e-g)^3
start_e=g+1.4 end_e=g+1.9 value=
=-1.615e7+2.600e7*(e-g)-1.338e7*(e-g)^2+2.303e6*(e-g)^3
start_e=g+1.9 end_e=g+2.6 value=
=8.383e5+2.442e5*(e-g)-3.226e5*(e-g)^2+8.482e4*(e-g)^3
start_e=g+2.6 end_e=g+4.0 value=7.83e5
THERMAL_CONDUCTIVITY Model=
=Thermal_Conduct terms=549.356,1,12.7,-13.22,-1.25
DERIV_THERMAL_CONDUCT Model=Thermal_Conduct terms=
=-686.695,1,12.7,-13.22,-2.25
ELECTRON_MOBILITY Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=8000,-22000,10000
Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=-255,1160,-720
HOLE_MOBILITY Value=370,-970,740
ELECTRON_DOS_MASS Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=0.067,0.083
Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=0.85,-0.14
HOLE_DOS_MASS Value=0.62,0.14
ELECTRON_COND_MASS Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.45 Value=0.067,0.083
Start_x=0.45 end_x=1.0 Value=0.32,-0.06
HOLE_COND_MASS Value=0.62,0.14
ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=1e-8
HOLE_SHR_LIFETIME Value=1e-8
ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
RAD_RECOMB_CONST Value=1.5e-10
ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5

```

```

*****AlGaInP lattice matched to GaAs*****
Material=GaAs
Alloy=AlGaInP
# Here composition x is equal to the Al content Al(x)Ga(y)In(1-x-y)P
#BAND_GAP Segments=1

```

```

#Start_x=0.0 end_x=1 Model=Band_gap Terms=
=1.902,1.191,-0.552,3.63e-4,162
# temperture dependance taken to be same as that of InP
BAND_GAP Segments=2
Start_x=0.00 end_x=0.265 value=1.91,1.22
Start_x=0.265 end_x=0.5 value=2.23,0.17
ELECTRON_AFFINITY Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.265 value=3.788,-0.65
Start_x=0.265 end_x=0.5 value=3.533,0.314
#ELECTRON_AFFINITY Segments=1
#Start_x=0.0 end_x=1 value=3.788,-0.309
# assumes 42 % of delta-Eg is in cond band for In0.49Ga0.51P HJ
STATIC_PERMITIVITY Segments=1
Start_x=0.0 end_x=1.0 value=12.418,1.499
REFRACTIVE_INDEX Segments=1
Start_x=0.0 end_x=1.0 value=3.30,0.21
# this should depend on comp and wavelength
ABSORPTION Segments=2
start_e=0 end_e=g+0.00087 model=
=exp_band_gap_absorption terms=1,71,0.104
start_e=g+0.00087 end_e=100 model=
=power_band_gap_absorption terms=3.5e4,0,0,0,0.5
# absorption coefficient similar to GaAs, with change in Eg
THERMAL_CONDUCTIVITY Segments=1
# Start_x=0.0 end_x=1.0 Model=
=Thermal_conduct terms=1,1.428,60.339,-40.768,0
DERIV_THERMAL_CONDUCT value=0
ELECTRON_MOBILITY Segments=1
Start_x=0.0 end_x=1.0 value=2684,-86.11
HOLE_MOBILITY Segments=1
Start_x=0.0 end_x=1.0 value=142.2,-75
#ELECTRON_DOS_MASS Segments=1
#Start_x=0.0 end_x=1.0 value=0.166,-0.038
ELECTRON_DOS_MASS Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.265 Value=0.11,0.018
Start_x=0.265 end_x=0.5 Value=0.82
HOLE_DOS_MASS Segments=1
Start_x=0.0 end_x=0.5 value=0.636
ELECTRON_COND_MASS Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.265 Value=0.11,0.018

```

```

Start_x=0.265 end_x=0.5 Value=0.82
HOLE_COND_MASS Segments=1
Start_x=0.0 end_x=0.5 value=0.636
ELECTRON_SHR_LIFETIME Segments=1
Start_x=0.0 end_x=0.5 value=1e-8
HOLE_SHR_LIFETIME Segments=1
Start_x=0.0 end_x=0.5 value=1e-8
RAD_RECOMB_CONST Segments=2
Start_x=0.0 end_x=0.265 value=1.5e-10
Start_x=0.265 end_x=0.5 value=1e-14
# following are for GaAs:
ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5
ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

```

2.2.3. Файл для системы твердых растворов AlGaInNt, GaN, InN, AlN, AlGaIn, InGaIn

Рекомендуемое имя файла: materials GaN-AlN-InN-AlGaIn-InGaIn.prm.

```

*****GaN*****
Material=GaN
Alloy=Default
BAND_GAP Model=Band_gap Terms=3.40,0,0,-7.7e-4,600
ELECTRON_AFFINITY Value=4.100,0,0,3.85e-4,600
# при T=300 К Электронное сродство равно 4.1, при других
температурах используется модель с такими же коэффициентами,
как для Si и GaAs
STATIC_PERMITIVITY Value=8.9
# при T=300 К
REFRACTIVE_INDEX Value=2.53
#упрощенно во всем диапазоне энергий квантов света
#REFRACTIVE_INDEX Value=(1+4.93+0.057*E^2/(E-4.00)^2)^0.5,
эта модель, описанная в #руководстве, применима в интервале

```

энергий квантов $E_g=2.0-3.6$ eV. При этом необходим
 #нормировка $n=2.53$ при $E_g=3.0$ eV.
 ABSORPTION Segments=3
 start_E=0 end_E=g Value=0.0
 start_E=g end_E=g+0.1 Value= $9e4+9e5*(E-g-0.1)$
 start_E=g+0.1 end_E=g+1.6 Value= $2e5+7.3e4*(E-g-1.6)$
 #в диапазоне температур более 77 К, используется линейная
 аппроксимация зависимости #коэффициента поглощения от
 энергии квантов до максимального значения $E_g=5$ эВ.
 THERMAL_CONDUCTIVITY Value=1.300
 DERIV_THERMAL_CONDUCT value=0
 ELECTRON_MOBILITY Value=800
 #at $N_d=1e17$, at $N_d=7e17$ it is 400, T=300 K
 HOLE_MOBILITY Value=100
 #at $N_a=1e17$, at $N_a=1e18$ it is 10, T=300 K
 ELECTRON_DOS_MASS Value=0.200
 HOLE_DOS_MASS Value=1.50
 ELECTRON_COND_MASS Value=0.200
 HOLE_COND_MASS Value=1.00
 ELECTRON_SHR_LIFETIME Value= $2e-9$.
 HOLE_SHR_LIFETIME Value= $2e-9$
 RAD_RECOMB_CONST Value= $1e-10$
 #значения следующих параметров взяты такие же, как для GaAs.
 ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value= $1.e-12$
 HOLE_ENERGY_LIFETIME Value= $1.e-12$
 QW_RAD_RECOMB_CONST Value= $1.5e-4$
 ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value= $1.5e-31$
 QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value= $1.5e-19$
 HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value= $1.5e-31$
 QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value= $1.5e-19$
 # *****InN*****
 Material=InN
 Alloy=Default
 BAND_GAP Model=Band_gap Terms= $1.970,0,0,-2.45e-4,624$
 #при T=300 К, $E_g=1.970$ эВ, при других температурах, как и для
 GaN, применима модель, #описанная в руководстве пользователя.
 ELECTRON_AFFINITY Value= $5.230,0,0,1.23e-4,624$

при T=300 K электронное сродство равно 5.23 эВ, при других температурах используется #модель с такими же коэффициентами, как для Si, GaAs и GaN.

STATIC_PERMITIVITY Value=15.3

при T=300 K

REFRACTIVE_INDEX Value=2.90

#упрощенно во всем диапазоне энергий квантов света.

ABSORPTION Segments=3

start_E=0 end_E=g Value=0.0

start_E=g end_E=g+0.1 Value=9e4+9e5*(E-g)^{-0.1}

start_E=g+0.1 end_E=g+1.6 Value=2e5+7.3e⁴*(E-g-1.6)⁴

#применима при температурах более 77 K.

THERMAL_CONDUCTIVITY Value=0.75

DERIV_THERMAL_CONDUCT value=0

ELECTRON_MOBILITY Value=2000

#at N_d=8e16, T=300 K

HOLE_MOBILITY Value=100

#at N_a=1e17, T=300 K

ELECTRON_DOS_MASS Value=0.110

HOLE_DOS_MASS Value=1.65

ELECTRON_COND_MASS Value=0.110

HOLE_COND_MASS Value=1.63

ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=2e-9

HOLE_SHR_LIFETIME Value=2e-9

RAD_RECOMB_CONST Value=2e-10

#значения следующих параметров взяты такие же, как для GaAs.

ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12

HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12

QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4

ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5

HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5

ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31

QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31

QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

***** AIN *****

Material=AIN

Alloy=Default

BAND_GAP Model=Band_gap Terms=6.02⁶, 0.0, -1.8e-3, 1462

ELECTRON_AFFINITY Value=2.110,0,0,0.90e-3,1462
 # при T=300 K электронное сродство равно 2.11 эВ, при других температурах используется #модель с такими же коэффициентами, как для Si, GaAs и GaN.
 STATIC_PERMITIVITY Value=8.5
 # при T=300 K
 REFRACTIVE_INDEX Value=2.53
 #упрощенно во всем диапазоне энергий квантов E.
 #REFRACTIVE_INDEX Value=(1+a+b*E^2/(E-c)^2)^0.5, в диапазоне энергий квантов E_g=5-#7eV, необходимо задать значения коэффициентов a, b, c.
 ABSORPTION Segments=3
 start_E=0 end_E=g Value=0.0
 start_E=g end_E=g+0.1 Value=9e4+9e5*(E-g-0.1)
 start_E=g+0.1 end_E=g+1.6 Value=2e5+7.3e4*(E-g-1.6)
 #при температурах более 77 K, использована линейная зависимость коэффициента поглощения от энергии квантов до величины E_g=8.0 эВ.
 THERMAL_CONDUCTIVITY Value=2.85
 DERIV_THERMAL_CONDUCT value=0
 ELECTRON_MOBILITY Value=300
 #at N_d=1e17, T=300 K
 HOLE_MOBILITY Value=14
 ELECTRON_DOS_MASS Value=0.400
 HOLE_DOS_MASS Value=7.26
 ELECTRON_COND_MASS Value=0.400
 HOLE_COND_MASS Value=7.26
 ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=2e-9
 HOLE_SHR_LIFETIME Value=2e-9
 RAD_RECOMB_CONST Value=0.4e-10
 #значения следующих параметров взяты такие же, как для GaAs.
 ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
 ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

*****In_{0.35}Ga_{0.65}N*****

Material=In_{0.35}Ga_{0.65}N

Alloy=Default

BAND_GAP Model=Band_gap Terms=2.193,0,0,-4.28e-4,608

#E_g=2.193 eV при T=300 K

ELECTRON_AFFINITY Model=Band_gap Terms=
=4.826,0,0,2.14e-4,608

STATIC_PERMITIVITY Value=13.05

#при T=300 K

REFRACTIVE_INDEX Value=2.77

ABSORPTION Segments=3

start_E=0 end_E=g Value=0.0

start_E=g end_E=g+0.1 Value=9e4+9e5*(E-g-0.1)

start_E=g+0.1 end_E=g+1.6 Value=2e5+7.3e4*(E-g-1.6)

#при температурах более 77 K использована линейная
зависимость коэффициента поглощения от энергии квантов
до величины E_g=3.5 эВ.

THERMAL_CONDUCTIVITY Value=0.66

DERIV_THERMAL_CONDUCT Value=0

ELECTRON_MOBILITY Value=1500

HOLE_MOBILITY Value=100

ELECTRON_DOS_MASS Value=0.14

HOLE_DOS_MASS value=1.6

ELECTRON_COND_MASS Value=0.14

HOLE_COND_MASS Value=1.41

ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=2e-9

HOLE_SHR_LIFETIME Value=2e-9

RAD_RECOMB_CONST Value=1.35e-10

following are for GaAs:

ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12

HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12

QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4

ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5

HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5

ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31

QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31

QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

*****GaN*****

Material=GaN

Alloy=Default
 BAND_GAP Model=Band_gap Terms=3.40,0,0,-7.7e-4,600
 ELECTRON_AFFINITY Value=4.100,0,0,3.85e-4,600
 # при T=300 K Электронное сродство равно 4.1, при других температурах используется модель с такими же коэффициентами, как для Si и GaAs
 STATIC_PERMITIVITY Value=8.9
 # при T=300 K
 REFRACTIVE_INDEX Value=2.53
 #упрощенно во всем диапазоне энергий квантов света
 #REFRACTIVE_INDEX Value=(1+4.93+0.057*(E-4.00)^2/(E-4.00)^2)^0.5,
 эта модель, описанная в #руководстве, применима в интервале энергий квантов $E_g=2.0-3.6$ eV. При этом необходима
 #нормировка $n=2.53$ при $E_g=3.0$ eV.
 ABSORPTION Segments=3
 start_E=0 end_E=g Value=0.0
 start_E=g end_E=g+0.1 Value=9e4+9e5*(E-g-0.1)
 start_E=g+0.1 end_E=g+1.6 Value=2e5+7.3e4*(E-g-1.6)
 #в диапазоне температур более 77 K используется линейная аппроксимация зависимости #коэффициента поглощения от энергии квантов до максимального значения $E_g=5$ эВ.
 THERMAL_CONDUCTIVITY Value=1.300
 DERIV_THERMAL_CONDUCT value=0
 ELECTRON_MOBILITY Value=800
 #at $N_d=1e17$, at $N_d=7e17$ it is 400, T=300 K
 HOLE_MOBILITY Value=100 K
 #at $N_a=1e17$, at $N_a=1e18$ it is 10, T=300 K
 ELECTRON_DOS_MASS Value=0.200
 HOLE_DOS_MASS Value=1.50
 ELECTRON_COND_MASS Value=0.200
 HOLE_COND_MASS Value=1.00
 ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=2e-9
 HOLE_SHR_LIFETIME Value=2e-9
 RAD_RECOMB_CONST Value=1e-10
 #значения следующих параметров взяты такие же, как для GaAs.
 ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
 ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5

ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

*****In_xGa_{1-x}N*****

Alloy=In

Here composition x is equal to the In mole fraction in In_xGa_{1-x}N

Use conc=x in the device file

BAND_GAP Model=Band_gap Terms=3.40,-4.43,3.00,-4.28e-4,610

ELECTRON_AFFINITY Value=4.100,2.66,-1.8

#при T=300 К электронное сродство равно 4.10 эВ, при других температурах использованы #коэффициенты как для Si и GaAs

STATIC_PERMITIVITY Value=8.9,6.4

#при T=300 К

REFRACTIVE_INDEX Value=2.53,0.37

#упрощенно во всем диапазоне энергий квантов света.

#REFRACTIVE_INDEX Value=(1+a+b*E^2/(E-c)^2)^0.5,

необходимо задать значения энергий #квантов E и коэффициентов a, b, c.

ABSORPTION Segments=3

start_E=0 end_E=g Value=0.0

start_E=g end_E=g+0.1 Value=9e4+9e5*(E-g-0.1)

start_E=g+0.1 end_E=g+1.6 Value=2e5+7.3e4*(E-g-1.6)

#в диапазоне температур более 77 К используется линейная аппроксимация зависимости #коэффициента поглощения от энергии квантов до максимального значения E=5 эВ.

THERMAL_CONDUCTIVITY Value=1.300,-0.55

DERIV_THERMAL_CONDUCT value=0

ELECTRON_MOBILITY Value=800,1200

#at N_d=1e17, at N_d=7e17 it is 400, T=300 К

HOLE_MOBILITY Value=100

#at N_a=1e17, at N_a=1e18 it is 10, T=300 К

ELECTRON_DOS_MASS Value=0.200,-0.09

HOLE_DOS_MASS Value=1.50,0.15

ELECTRON_COND_MASS Value=0.200,0.09

HOLE_COND_MASS Value=1.50,0.15

ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=2e-9

HOLE_SHR_LIFETIME Value=2e-9

RAD_RECOMB_CONST Value=1e-10,1e-10

#значения следующих параметров взяты такие же, как для GaAs.

ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
 ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 *****Al_xGa_{1-x}N*****
 Material=GaN
 Alloy=Al
 # Here composition x is equal to the In mole fraction in Al_xGa_{1-x}N
 # Use conc=x in the device file
 BAND_GAP Value=3.40,1.83,0.8
 ELECTRON_AFFINITY Value=4.100,-1.39,-0.61
 #при T=300 K.
 STATIC_PERMITIVITY Value=8.9,-0.4
 #при T=300 K.
 REFRACTIVE_INDEX Value=2.53
 #упрощенно во всем диапазоне энергий квантов света.
 #REFRACTIVE_INDEX Value=(1+a+b*E^2/(E-c)^2)^0.5,
 необходимо задать диапазон энергий квантов и значения
 коэффициентов a, b, c.
 ABSORPTION Segments=3
 start_E=0 end_E=g Value=0.0
 start_E=g end_E=g+0.1 Value=9e4+9e5*(E-g-0.1)
 start_E=g+0.1 end_E=g+1.6 Value=2e5+7.3e4*(E-g-1.6)
 #в диапазоне температур более 77 K используется линейная
 аппроксимация зависимости #коэффициента поглощения
 от энергии квантов до максимального значения E=5 эВ.
 THERMAL_CONDUCTIVITY Value=1.300,1.55
 DERIV_THERMAL_CONDUCT value=0
 ELECTRON_MOBILITY Value=800,-500
 HOLE_MOBILITY Value=100,-86
 ELECTRON_DOS_MASS Value=0.200,0.200
 HOLE_DOS_MASS Value=1.50,5.76
 ELECTRON_COND_MASS Value=0.200,0.200
 HOLE_COND_MASS Value=1.50,5.76
 ELECTRON_SHR_LIFETIME Value=2e-9

HOLE_SHR_LIFETIME Value=2e-9
 RAD_RECOMB_CONST Value=1e-10,-0.6e-10
 ELECTRON_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 HOLE_ENERGY_LIFETIME Value=1.e-12
 QW_RAD_RECOMB_CONST Value=1.54e-4
 ELECTRON_COLLISION_FACTOR Value≈0.5
 HOLE_COLLISION_FACTOR Value=0.5
 ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_ELECTRON_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19
 HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-31
 QW_HOLE_AUGER_COEFFICIENT Value=1.5e-19

2.3. Моделирование диода с *p-n*-переходом на основе гетероструктур AlGaAs

Результатом моделирования является получение следующих зависимостей: распределение легирующих примесей, зонная энергетическая диаграмма, плотность тока через диод, распределение концентрации носителей заряда, полное распределение свободных и связанных зарядов, распределение напряженности электрического поля и полной скорости рекомбинации неравновесных носителей заряда при заданных параметрах материала.

Имя приборного файла: ALGAASPN.DEV в исходной программе SW.
 Вид файла:

grid length=.450 points=25
 grid length=.049 points=40
 grid length=.002 points=40
 grid length=.049 points=40
 grid length=.450 points=25
 structure material=gaas alloy=al length=0.50 conc=0.40
 structure material=gaas alloy=al length=0.50 conc=0.00
 doping length=.500000 $N_a=1e+17-5e16/0.5*d$
 doping length=.500000 $N_d=5e+16+5e16/0.5*d$

На рис. 2.1–2.7 приведены зависимости основных параметров диода от координат прибора. Слева расположена *p*-область состава $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$, справа – *n*-область GaAs. К *p*-области диода приложено напряжение +1,20 В по отношению к *n*-области. Рисунки наглядно демонстрируют особенности характеристик диодов с гетеропереходами.

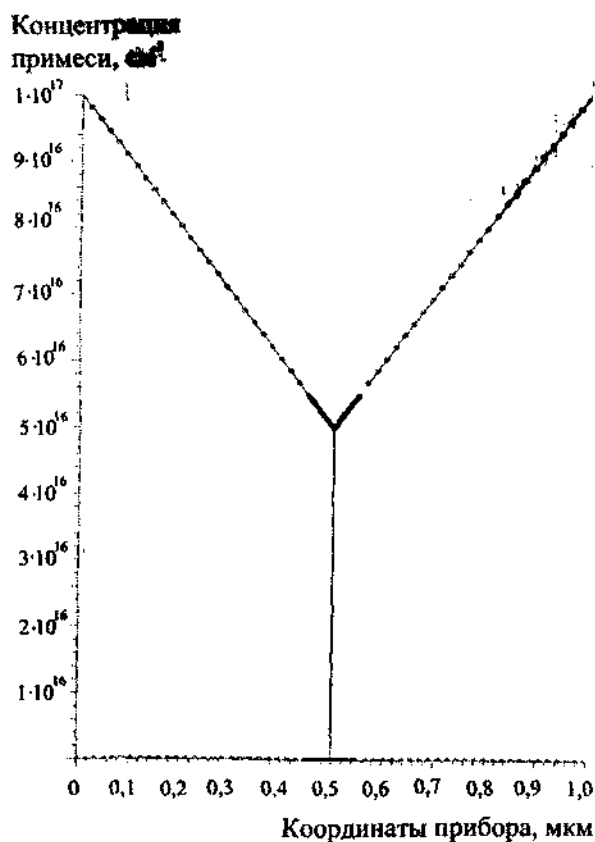


Рис. 2.1. Распределение легирующих примесей

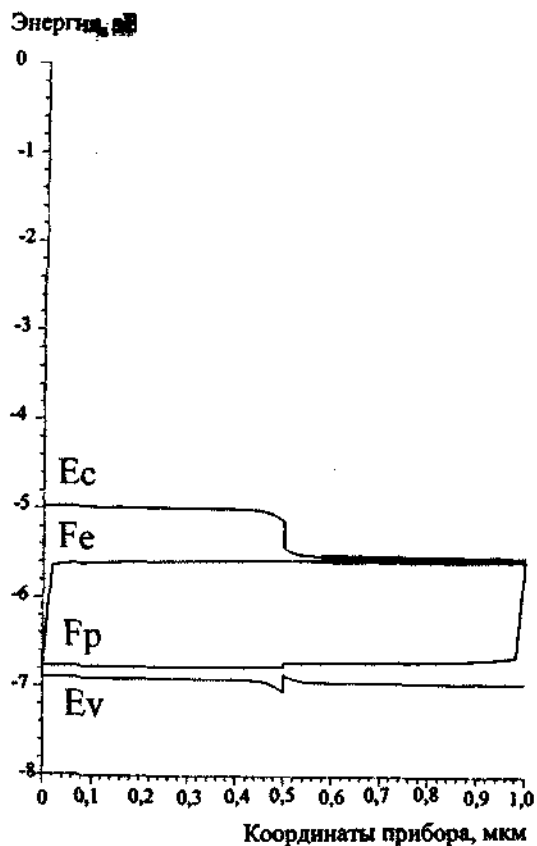


Рис. 2.2. Зонная энергетическая диаграмма: *Ec* – зона проводимости; *Fe* – уровень Ферми для электронов; *Fp* – уровень Ферми для дырок; *Ev* – валентная зона

Плотность тока, A/cm^2

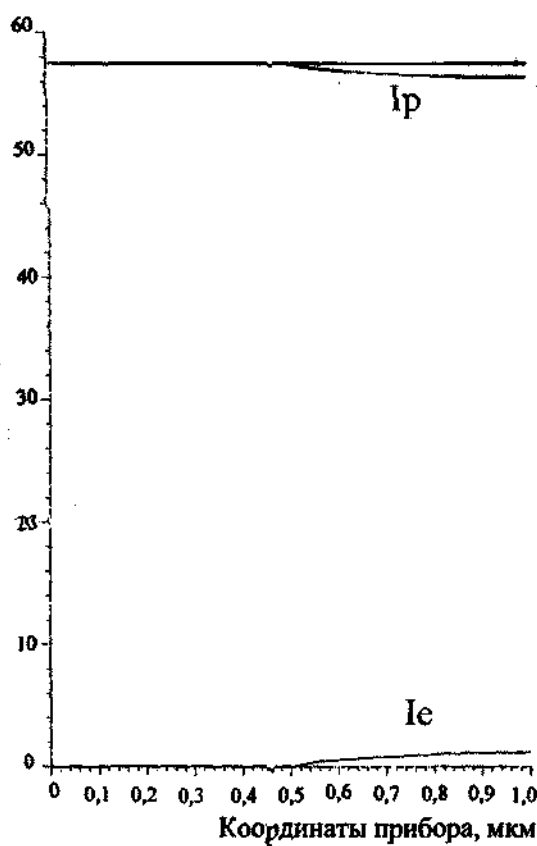


Рис. 2.3. Плотности токов электронов I_e и дырок I_p через диод

Концентрация
носителей заряда, см^3

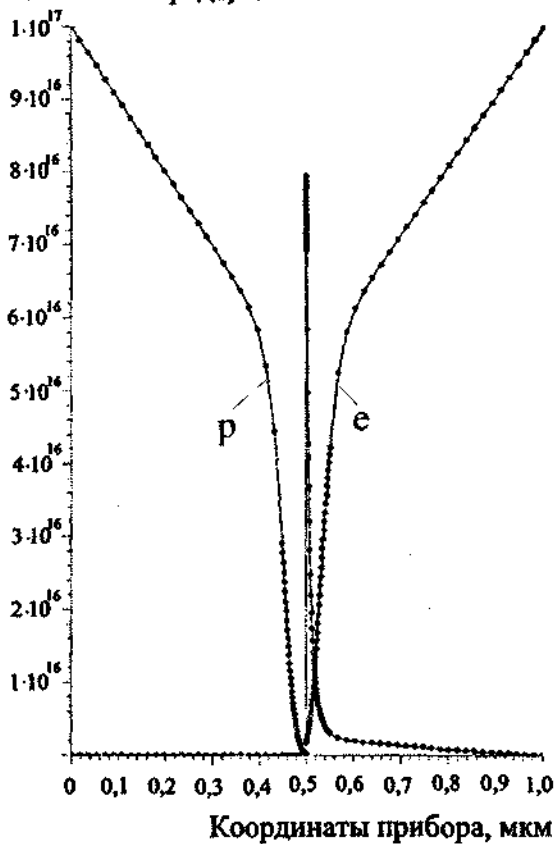


Рис. 2.4. Распределение концентраций носителей заряда

Общий заряд, Кл/см³

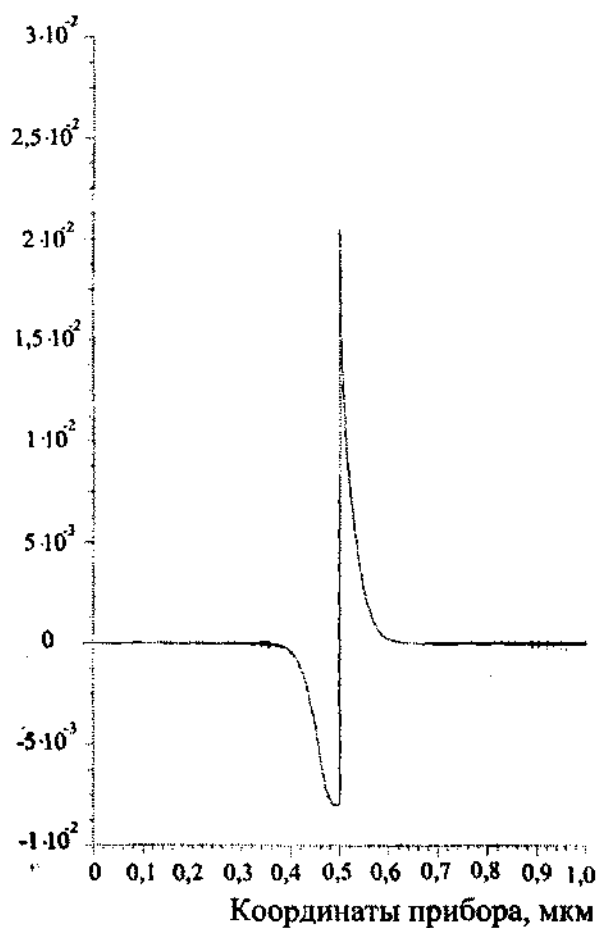


Рис. 2.5. Полное распределение свободных и связанных зарядов

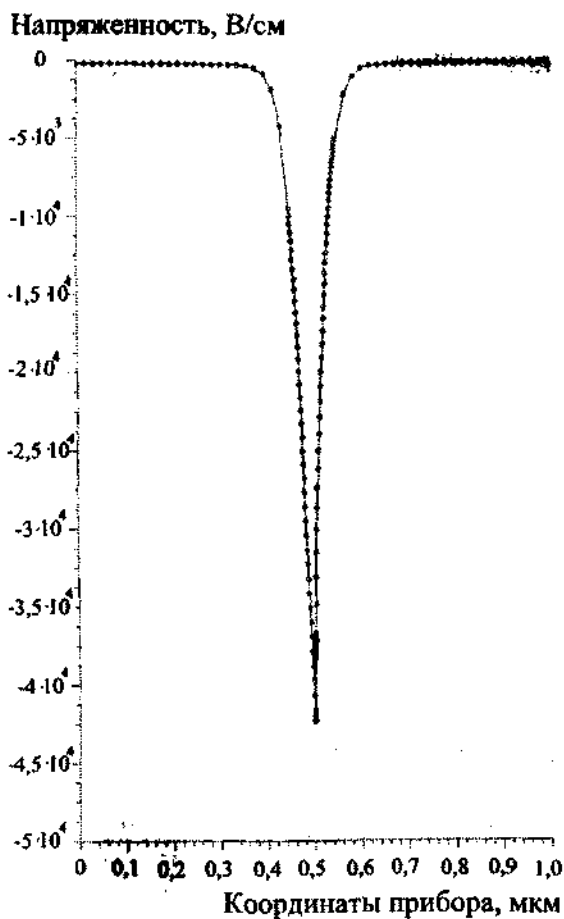


Рис. 2.6. Распределение напряженности электрического поля в диод.

Общая
рекомбинация, $1/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$

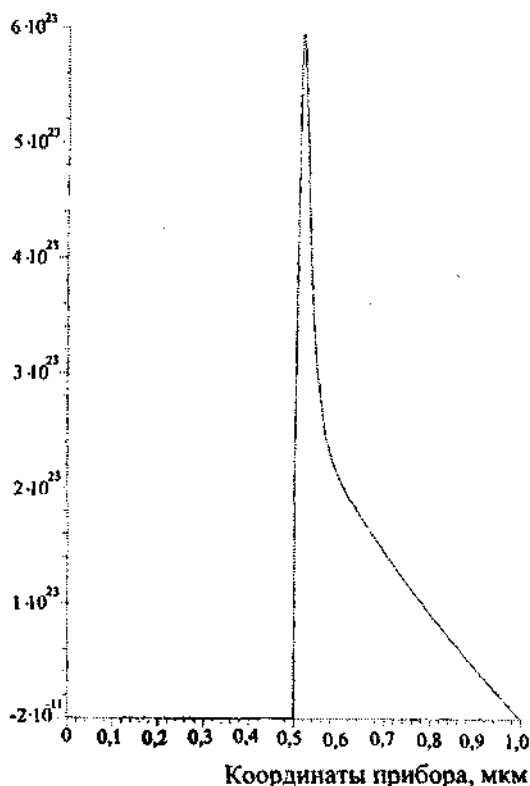


Рис. 2.7. Полная скорость рекомбинации неравновесных носителей заряда

2.4. Пример выполнения курсовой работы на тему «Моделирование солнечного элемента на основе гетероструктур AlGaAs»

Задание: Определить максимальную величину КПД солнечного элемента (СЭ) на основе гетероструктур AlGaAs при температуре 300 К в условиях стандартного солнечного освещения 1AM1,5 и при концентрации освещения до величины 1000AM1,5.

Исходные данные: Двойная гетероструктура состоит из слоя $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ n -типа проводимости, GaAs p -типа проводимости и $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ p -типа проводимости, концентрации акцепторов в слоях

GaAs p -типа проводимости и $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ p -типа проводимости и доноров в слое $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ n -типа проводимости составляет $5 \cdot 10^{17} \text{см}^{-3}$.

Аналитический обзор: Обзор должен содержать сведения о материалах, конструкциях и технологиях изготовления СЭ и их основных характеристиках.

2.4.1. Аналитический обзор

Обычно под термином «солнечный элемент» подразумевается несколько объединенных фотоэлектрических преобразователей – полупроводниковых устройств, прямо преобразующих солнечную энергию в постоянный электрический ток.

Самый первый в мире фотоэлемент появился в 1883 г. в лаборатории Чарльза Фриттса. Он был изготовлен из селена, покрытого золотом. Увы, но такой набор материалов показал невысокие результаты – около 1 % КПД.

Принцип работы фотоэлементов, из которых состоит солнечная батарея, основан на фотогальваническом эффекте. Этот эффект наблюдал еще Александр Эдмонд Беккерель в 1839 г. Впоследствии работы Альберта Эйнштейна в области фотоэффекта позволили описать явление количественно. Опыты А. Беккереля показали, что лучистую энергию солнца можно трансформировать в электричество с помощью специальных полупроводников, которые позже получили название «фотоэлементы». Революция в использовании фотоэлементов произошла тогда, когда в недрах лаборатории компании *Bell Telephone* был создан первый элемент на кремнии.

Преобразование энергии в СЭ основано на фотогальваническом эффекте, который возникает в неоднородных полупроводниковых структурах при воздействии на них солнечного излучения (рис. 2.8).

Принцип работы СЭ можно пояснить на примере преобразователей с p - n -переходом, которые широко применяются в современной солнечной и космической энергетике. Электронно-дырочный переход создается путем легирования пластинки монокристаллического полупроводникового материала с определенным типом проводимости (т.е. или p -, или n -типа) примесью, обеспечивающей создание поверхностного слоя с проводимостью противоположного типа. Концентрация легирующей примеси в этом слое должна быть значительно выше, чем концентрация примеси в базовом материале (первоначальном монокристалле), чтобы нейтрализовать имеющиеся там основные свободные носители заряда и создать проводимость противоположного знака.

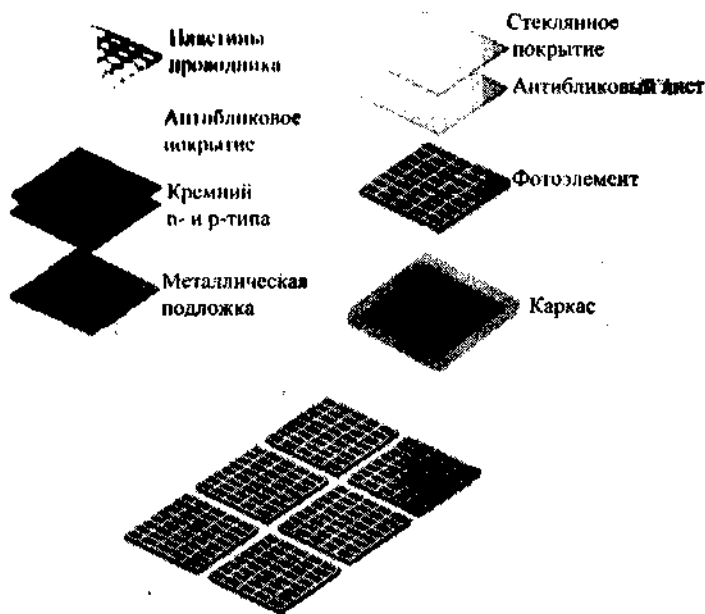


Рис. 2.8. Схематическое строение СЭ

У границы n - и p -слоев в результате перетекания зарядов образуются обедненные зоны с нескомпенсированным объемным положительным зарядом в n -слое и объемным отрицательным зарядом в p -слое. Эти зоны в совокупности и образуют p - n -переход.

Возникший на переходе потенциальный барьер (контактная разность потенциалов) препятствует прохождению основных носителей заряда, т.е. электронов со стороны p -слоя, но беспрепятственно пропускает неосновные носители в противоположных направлениях. Это свойство p - n -переходов и определяет возможность получения фото-ЭДС при облучении СЭ светом.

Созданные светом в обоих слоях СЭ неравновесные носители заряда (электронно-дырочные пары) разделяются на p - n -переходе: неосновные носители (т.е. электроны) свободно проходят через переход, а основные (дырки) задерживаются. Таким образом, под действием солнечного излучения через p - n -переход в обоих направлениях будет протекать ток неравновесных неосновных носителей заряда – фотоэлектронов и фотодырок, что как раз и нужно для работы СЭ. Если теперь замкнуть внешнюю цепь, то электроны из n -слоя, со-

вершив работу на нагрузке, будут возвращаться в p -слой и там рекомбинировать (объединяться) с дырками, движущимися внутри СЭ в противоположном направлении. Для сбора и отвода электронов во внешнюю цепь на поверхности полупроводниковой структуры СЭ имеется контактная система. На передней, освещенной поверхности преобразователя контакты выполняются в виде сетки или гребенки, а на тыльной могут быть сплошными.

Основной рабочей характеристикой СЭ является пиковая мощность, которую выражают в ваттах. Эта характеристика показывает выходную мощность СЭ в оптимальных условиях: солнечном излучении 1 кВт/м^2 , температуре окружающей среды 25°C , солнечном спектре шириной 45° (AM1,5). В обычных условиях достичь таких показателей удастся крайне редко, освещенность ниже, а модуль нагревается выше (до $60 \dots 70^\circ \text{C}$). Коэффициент воздушных масс обычно используется для характеристики производительности солнечных элементов в стандартных условиях. Для его обозначения часто используют сокращение «AM», а затем номер, например обозначение «AM1.5» является почти универсальным при характеристике наземных энергогенерирующих панелей.

Коэффициент воздушных масс определяет прямую длину оптического пути через атмосферу Земли, выраженную как отношение к длине пути вертикально вверх, т.е. в зените. Коэффициент массы воздуха может быть использован, чтобы помочь охарактеризовать солнечный спектр после прохождения солнечной радиации через атмосферу.

Соединяя СЭ последовательно можно увеличивать разность потенциалов, соединяя параллельно, – ток. Таким образом, комбинируя соединения, можно добиться требуемых параметров по току и напряжению, а следовательно, и по мощности. Кроме того, последовательно или параллельно можно соединять не только фотоэлементы в рамках одного СЭ, но и СЭ в целом.

Обычный СЭ (например, p - n -переход) имеет лишь одну характерную энергию – ширину запрещенной зоны E_g . Когда на элемент падает солнечный свет, фотоны с энергией, меньшей E_g , не дают вклада в выходную мощность элемента (в пренебрежении поглощением света, сопровождаемым возбуждением фононов). Каждый фотон с энергией, большей E_g , дает вклад, равный E_g , в выходную мощность, а остальная часть энергии фотона переходит в тепло. Для солнечного элемента, имеющего идеальную вольт-амперную характеристику (ВАХ), соответствующая эквивалентная цепь показана на рис. 2.9, где парал-

Веден источник постоянного тока I_L , описывающий возбуждение неравновесных носителей солнечным излучением. Ток насыщения диода I_s определяется нагрузочным сопротивлением.

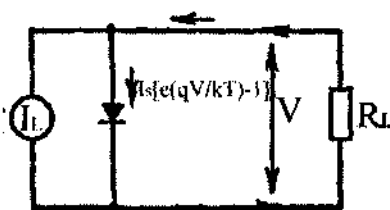
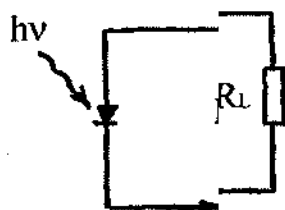


Рис. 2.9. Эквивалентная цепь СЭ.

Вольт-амперная характеристика такого прибора определяется следующими выражениями:

$$I = I_s \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) - I_L; \quad (2.1)$$

$$J_s = \frac{I_s}{A} = qN_c N_v \left(\frac{1}{N_A} \sqrt{\frac{D_n}{\tau_n}} + \frac{1}{N_D} \sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} e^{-\frac{E_g}{kT}} \right), \quad (2.2)$$

где I_s – ток насыщения диода; A – площадь прибора; I_L – источник постоянного тока, описывающий возбуждение неравновесных носителей солнечным излучением; N_c – концентрация носителей заряда в зоне проводимости; N_v – концентрация носителей заряда в валентной зоне; N_A – концентрация акцепторов; N_D – концентрация доноров; D_n – коэффициент диффузии электронов; D_p – коэффициент диффузии дырок; τ_n – время жизни электронов; τ_p – время жизни дырок.

Измерения эффективности, как правило, производят при условиях АМ1,5 солнечного излучения, имитирующих спектральное распределение солнечного света при данных атмосферных условиях. На рис. 2.10 показан АМ1,5 солнечный спектр, а также спектр значений запрещенной зоны для некоторых материалов.

Спектр представляет, для данной местности и атмосферных условий на Земле, интенсивность и спектральное распределение солнечного света. Наиболее эффективные СЭ с одним p - n -переходом имеют ширину запрещенной зоны между 1,1 и 1,4 эВ и включают Si, InP и GaAs.

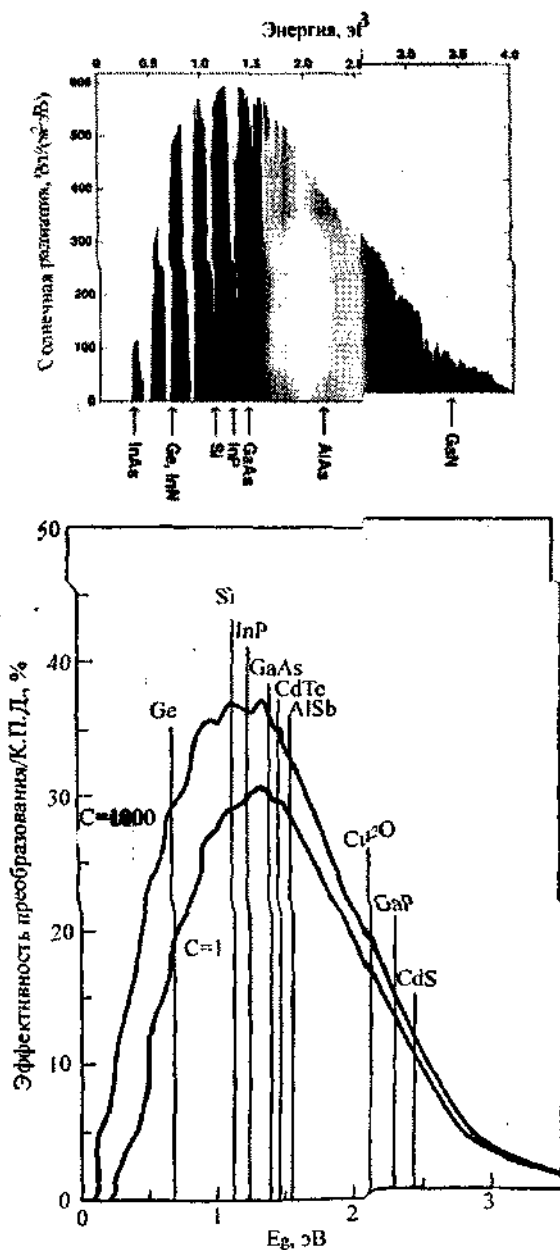


Рис. 2.10. AM1,5 спектр для определения эффективности СЭ

Наиболее важным параметром СЭ является эффективность преобразования η :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = FF \cdot U_{oc} \cdot J_{sc} / P_{in}, \quad (2.3)$$

где $P_m = I_m U_m$ – максимальная выходная мощность СЭ; P_{in} – общая солнечная энергия на внешней стороне СЭ; FF – фактор заполнения ВАХ; U_{oc} – напряжение открытия интегральной схемы; J_{sc} – плотность тока отсечки.

Основные необратимые потери энергии в СЭ связаны с:

- отражением солнечного излучения от поверхности преобразователя;
- прохождением части излучения через СЭ без поглощения в нем;
- рассеянием на тепловых колебаниях решетки избыточной энергии фотонов;
- рекомбинацией образовавшихся фотопар на поверхностях и в объеме СЭ;
- внутренним сопротивлением преобразователя;
- некоторыми другими физическими процессами.

Для уменьшения всех видов потерь энергии в СЭ следует применять:

- полупроводники с оптимальной для солнечного излучения шириной запрещенной зоны;
- направленное улучшение свойств полупроводниковой структуры путем ее оптимального легирования и создания встроенных электрических полей;
- переход от гомогенных к гетерогенным и варизонным полупроводниковым структурам;
- оптимизацию конструктивных параметров СЭ (глубины залегания p - n -перехода, толщины базового слоя, частоты контактной сетки и др.);
- многофункциональные оптические покрытия, обеспечивающие просветление, терморегулирование и защиту СЭ от космической радиации;
- разрабатываемые СЭ, прозрачные в длинноволновой области солнечного спектра за краем основной полосы поглощения;
- проектируемые каскадные СЭ из специально подобранных по ширине запрещенной зоны полупроводников, позволяющие преобра-

ювывать в каждом каскаде излучение, прошедшее через предыдущий каскад, и пр.

Существенного повышения КПД солнечных батарей удалось добиться путем создания преобразователей с двухсторонней чувствительностью (до +80 % к уже имеющемуся КПД одной стороны), применения люминесцентно переизлучающих структур, предварительного разложения солнечного спектра на две или более спектральные области с помощью многослойных пленочных светоделителей (дихроичных зеркал) с последующим преобразованием каждого участка спектра отдельным СЭ и т.д.

В системах преобразования энергии – солнечных электростанциях, в принципе, могут быть использованы любые созданные и разрабатываемые в настоящее время типы фотоэлектронных преобразователей различной структуры на базе разнообразных полупроводниковых материалов, однако не все они удовлетворяют комплексу требований к этим системам:

- высокая надежность при длительном ресурсе работы;
- доступность исходных материалов в достаточном для изготовления элементов системы преобразования количестве и возможность организации их массового производства;
- приемлемые с точки зрения сроков окупаемости энергозатраты на создание системы преобразования;
- минимальные расходы энергии и массы, связанные с управлением системой преобразования и передачи энергии в космосе, включая ориентацию и стабилизацию космической станции в целом;
- удобство техобслуживания.

Для создания солнечных элементов наиболее подходящими являются полупроводниковые материалы со значениями E_g в интервале 1...2 эВ. Это кремний, арсенид галлия, твердые растворы AlGaAs, фосфид индия, сульфид кадмия. Оптимальный диапазон степени концентрирования (K_q) для солнечных элементов на основе гетероструктур AlGaAs–GaAs приблизительно на порядок выше, чем для кремниевых СЭ, что объясняется меньшей величиной внутренних омических потерь в гетероСЭ и лучшей температурной стабильностью КПД. Это позволяет в концентраторных модулях на основе гетероСЭ использовать достаточно простые и дешевые системы охлаждения при электрической мощности, снимаемой с одного СЭ, более 10 Вт. Дополнительным преимуществом СЭ на основе арсенида галлия является их лучшая радиационная стойкость, что открывает пер-

спективы использования этих элементов в космических солнечных батареях с концентраторами (табл. 2.1).

Таблица 2.1

Максимальные значения эффективности фотоэлементов и модулей, достигнутые в лабораторных условиях

Тип материала	Коэффициент фотоэлектрического преобразования, %
<i>Кремниевые СЭ</i>	
Si (кристаллический)	24,7
Si (поликристаллический)	20,3
Si (тонкопленочная передача)	16,6
Si (тонкопленочный субмодуль)	10,4
<i>СЭ на основе материалов A^{III}B^V</i>	
GaAs (кристаллический)	25,1
GaAs (тонкопленочный)	24,5
GaAs (поликристаллический)	18,2
InP (кристаллический)	21,9
<i>Тонкие пленки халькогенидов</i>	
CIGS (фотоэлемент)	19,9
CIGS (субмодуль)	16,6
CdTe (фотоэлемент)	16,5
<i>Аморфный/нанокристаллический кремний</i>	
Si (аморфный)	9,5
Si (нанокристаллический)	10,1
<i>Фотохимические СЭ</i>	
На базе органических красителей	10,4
На базе органических красителей (субмодуль)	7,9
<i>Органические СЭ</i>	
Органический полимер	5,15
<i>Многослойные СЭ</i>	
GaInP/GaAs/Ge	32,0
GaInP/GaAs	30,3
GaAs/CIS (тонкопленочный)	25,8
a-Si/mc-Si (тонкий субмодуль)	11,7

Солнечные элементы на основе кремния

Солнечные элементы на основе монокристаллического кремния, работающие при неконцентрированном солнечном облучении, получили наибольшее распространение в наземной и космической солнечной энергетике. В последние годы выполнены также широкие исследования в области кремниевых фотоэлектрических преобразователей концентрированного солнечного излучения и достигнуты значения КПД более 30 % при AM1,5.

По конструктивному исполнению мощные кремниевые СЭ можно разделить на два основных типа: фотоэлементы с $p-n$ -переходом, расположенным параллельно облучаемой поверхности; многопереходные СЭ с несколькими $p-n$ -переходами, расположенными перпендикулярно или параллельно облучаемой поверхности. Первый тип – это «обычная» конструкция СЭ, оптимизированная для преобразования концентрированного солнечного излучения. Второй тип – «фотовольт», или «вертикальный» СЭ, – многопереходные солнечные элементы, разработанные специально для преобразования сильноконцентрированного солнечного излучения, так как в этих СЭ обеспечивается существенное снижение омических потерь.

Представленный на рис. 2.11 суммарный спектр фототовета характеризуется высоким значением коэффициента собирания СЭ Q в коротковолновой области вследствие низкого значения скорости поверхностной рекомбинации ($S = 10^4 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$) и малой толщины фронтального слоя ($W = 0,5 \text{ мкм}$), принятых в расчете.

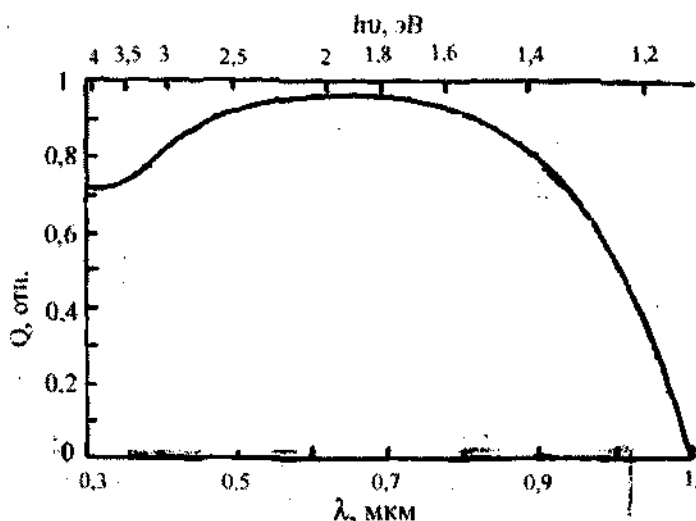


Рис. 2.11. Расчетные спектральные зависимости коэффициента собирания кремниевых СЭ

Большинство производимых в настоящее время кремниевых пластин для СЭ имеют толщину 210...240 мкм (лучшие показатели – 180 мкм) и диаметр пластин от 100 мм (4 дюйма) до 250 мм (10 дюймов). Согласно прогнозам, к 2013 г. толщина пластин уменьшится до 150 мкм, что

должно привести к снижению коэффициента расхода кремния до 6 г/Вт к 2013 г. и 3 г/Вт к 2020 г.

Многопереходные кремниевые солнечные элементы

Такой фотопреобразователь представляет собой твердотельную матрицу из последовательно скоммутированных микроэлементов с p - n -переходами, расположенными перпендикулярно или параллельно облучаемой поверхности. Аналогичные конструкции кремниевых СЭ были разработаны в США и получили название «элементы с вертикальными переходами», или «многопереходные СЭ». На рис. 2.12 показаны различные варианты многопереходных кремниевых СЭ: гибридная конструкция – сочетание планарного и вертикального СЭ (а); вертикальный СЭ с общей p -базой (б); СЭ с p -областями, разделенными вертикальными n^+ -областями (в); многопереходный СЭ с гребенчатыми n^+ - и p^+ -областями, вынесенными на тыльную поверхность, и текстурированной фронтальной поверхностью (г).

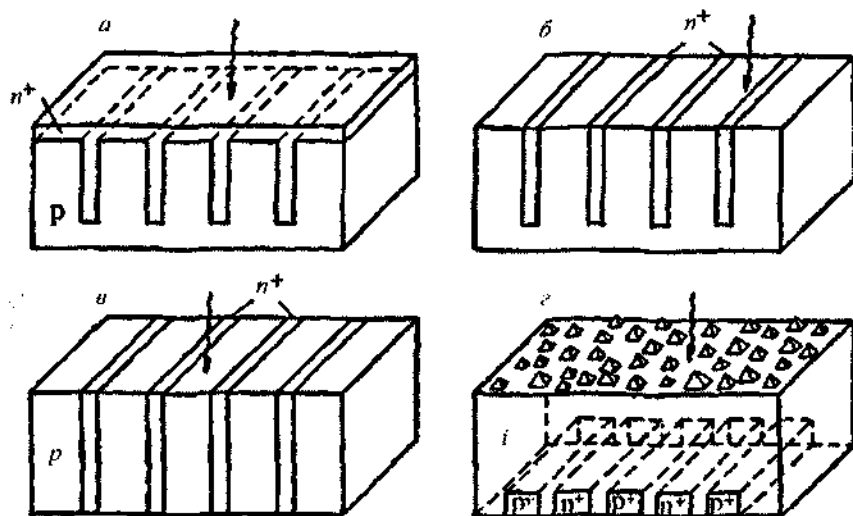


Рис. 2.12. Схематическое изображение различных конструкций СЭ с вертикальными p - n -переходами (а–в) и с гребенчатыми p^+ - и n^+ -областями, вынесенными на тыльную поверхность, и текстурированной фронтальной поверхностью (г); i – собственная проводимость

Солнечные элементы на основе соединений $A^{III}B^V$

Полупроводниковые материалы на основе соединений элементов группы III (Al, Ga, In) и группы V (N, P, As, Sb) известны с 1950 г., а в начале 1960-х гг. были созданы и первые фотоэлементы на основе арсенида галлия, которые тут же нашли применение в космических исследованиях благодаря устойчивости к космическому излучению и высокой эффективности фотопреобразования. Из всех соединений групп III–V наиболее широко применяются InP и GaAs, поскольку они имеют почти идеальную ширину запрещенной зоны в 1,4 эВ. Наибольшая эффективность СЭ с одним переходом была достигнута в тонкопленочных устройствах, сформированных методом газовой эпитаксии: 25,8 % для GaAs и 21,9 % для InP.

Солнечные элементы на основе гетероструктур «алюминий – галлий – мышьяк»

Одним из результатов проведенных исследований гетеропереходов AlAs – GaAs явилась практическая реализация идеи широкозонного окна для СЭ. Эта идея выдвигалась и ранее и имела целью защиту фотоактивной области СЭ от действия поверхностных состояний. В гетероструктурах «AlGaAs (широкозонное окно) – *p-n*-GaAs (фотоактивная область)» удалось сформировать бездефектную гетерограницу и обеспечить идеальные условия для фотогенерации электронно-дырочных пар и их собирания *p-n*-переходом. Поскольку гетерофотоэлементы с арсенид-галлиевой фотоактивной областью оказались еще и более радиационно-стойкими, они быстро нашли применение в космической технике, несмотря на значительно более высокую стоимость по сравнению с кремниевыми СЭ. Примером масштабного энергетического использования солнечных батарей на основе AlGaAs/GaAs явилось оснащение ими в 1986 г. советской космической орбитальной станции «Мир».

Технологии изготовления солнечных элементов

До середины 1980-х гг. совершенствование солнечных фотоэлементов на основе как кремния, так и арсенида галлия осуществлялось на базе относительно простых структур и простых технологий. Для кремниевых СЭ использовалась планарная структура с «мелким» *p-n*-переходом, получаемым методом диффузии. Для СЭ на основе арсенида галлия при выращивании широкозонного окна AlGaAs необходимо было применять эпитаксиальные методы. Использовался

сравнительно простой метод жидкофазной эпитаксии, разработанный ранее для получения структур гетеролазеров первого поколения. В случае фотоэлементов необходимо было выращивать всего один широкозонный слой $p\text{-AlGaAs}$, в то время как $p\text{-}n$ -переход получался в результате диффузии примеси p -типа из расплава в базовый материал $n\text{-GaAs}$ (рис. 2.13).

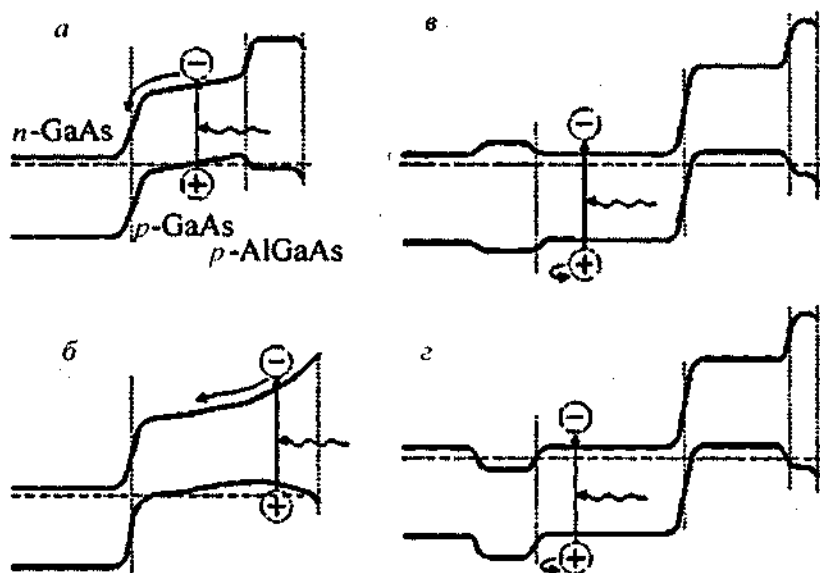
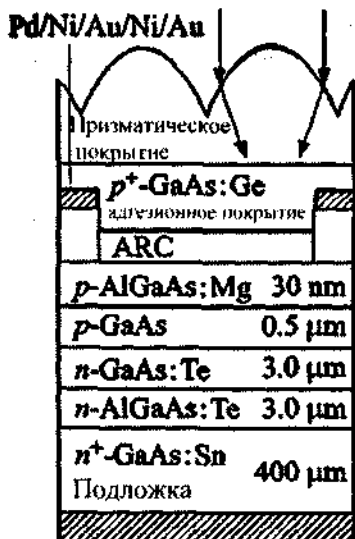


Рис. 2.13. Зонные диаграммы $p\text{-AlGaAs}/p\text{-}n\text{-GaAs}$ гетеропереходных СЭ:
 а – структура, в которой слой $p\text{-GaAs}$ со встроенным электрическим полем получен путем диффузии цинка в базу $n\text{-GaAs}$ во время роста широкозонного слоя $p\text{-AlGaAs}$; б – структура с сильным встроенным электрическим полем; в – структура с тыльным широкозонным слоем, создающим потенциальный барьер; г – структура с тыльным потенциальным барьером, сформированным высоколегированным слоем $n^+\text{-GaAs}$

С середины 1980-х гг. началось проникновение «высоких технологий» в сферу полупроводниковой солнечной фотоэлектронной энергетики. Были предложены усложненные структуры СЭ на основе кремния, позволяющие снизить в них как оптические, так и рекомбинационные потери. Было оптимизировано широкозонное окно AlGaAs , толщина которого стала сравнимой с толщиной наноразмерных активных областей в гетеролазерах. Слой AlGaAs стал выполнять также функцию третьей составляющей в трехслойном интерференционном антиотражающем покрытии фотоэлемента (ARC на рис. 2.14, а).

а



Au:Ge/Ni/Au

б

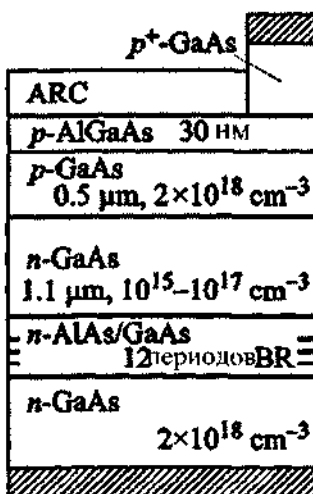


Рис. 2.14. Схематические диаграммы однопереходных многослойных

СЭ на основе AlGaAs/GaAs для космических приложений:

а – структура СЭ с тыльным потенциальным барьером и тонким широкозонным окном p -AlGaAs; б – структура СЭ со встроенным брэгговским отражателем (БО), выращенная методом МОС-гидридной эпитаксии

На таких элементах была получена рекордная для СЭ с одним переходом эффективность преобразования – 24,6 % для 100-кратно концентрированного «космического» солнечного излучения (AM0). Активная область состоит из 12 пар слоев (AlAs (72 нм))/(GaAs (59 нм)). СЭ настроен на длину волны $\lambda = 850$ нм и имеет коэффициент отражения 96 %. Вследствие этого достигается эффект двойного прохождения длинноволнового излучения через структуру СЭ, что позволяет снизить толщину базового слоя n -GaAs до 1...1,5 мкм. На таких элементах была достигнута высокая радиационная стабильность – «остаточная мощность» 84...86 % после облучения электронами с энергией 1 МэВ (плотность потока 10^{15} см $^{-2}$).

Поверх широкозонного слоя AlGaAs стали выращивать узкозонный сильно легированный контактный слой, удаляемый при постростовой обработке в промежутках между контактными полосками. Во-вторых, был введен тыльный (за p - n -переходом) широкозонный слой, обеспечивающий вместе с фронтальным широкозонным слоем

двухстороннее ограничение фотогенерированных носителей в пределах области поглощения света. Рекомбинационные потери носителей до их собирания *p-n*-переходом были снижены. При оптимизации гетероструктур AlGaAs/GaAs-CЭ с одним *p-n*-переходом вновь разработанный технологический метод МОС ГФЭ конкурировал с усовершенствованным методом низкотемпературной жидкофазной эпитаксии. Так, для подобного рода структур рекордное значение КПД = 27,6 % в условиях освещения концентрированным солнечным светом со спектром AM1,5 принадлежит СЭ, выращенным методом МОС ГФЭ (указанное значение КПД – это абсолютный рекорд для фотоэлементов с одним *p-n*-переходом), а фотоэлементам, выращенным методом жидкофазной эпитаксии, до сих пор принадлежит рекордное значение КПД = 24,6 % в условиях 100-кратного концентрирования солнечного излучения со спектром AM0.

В структурах AlGaAs/GaAs-фотоэлементов, выращенных методом МОС ГФЭ, одиночный широкозонный слой AlGaAs, формирующий тыльный потенциальный барьер, может быть заменен на систему чередующихся пар слоев AlAs/GaAs, образующих брегговское зеркало (рис. 2.14, б). Длина волны максимума в спектре отражения такого зеркала выбиралась вблизи края поглощения фотоактивной области, поэтому длинноволновое излучение, не поглотившееся в этой области за один проход, могло быть поглощено при втором проходе после отражения от зеркала. Одновременно широкозонные слои зеркала продолжали по-прежнему выполнять функцию тыльного барьера для фотогенерированных носителей. В этих условиях толщина фотоактивной области могла быть уменьшена в 2 раза без потери тока по сравнению со структурами без зеркала. Это существенно повышало радиационную стойкость фотоэлементов, поскольку количество вносимых при облучении высокоэнергетическими частицами дефектов, влияющих на деградацию диффузионных длин носителей, снижалось пропорционально снижению толщины фотоактивной области.

Каскадные солнечные элементы

Идея каскадных фотоэлементов обсуждалась с начала 1960-х гг. и рассматривалась как очевидная, но далекая перспектива для повышения КПД. Ситуация стала меняться в конце 1980-х гг., когда многие исследовательские группы сконцентрировали свои усилия на разработке различных типов двухкаскадных солнечных элементов (рис. 2.15 и 2.16).

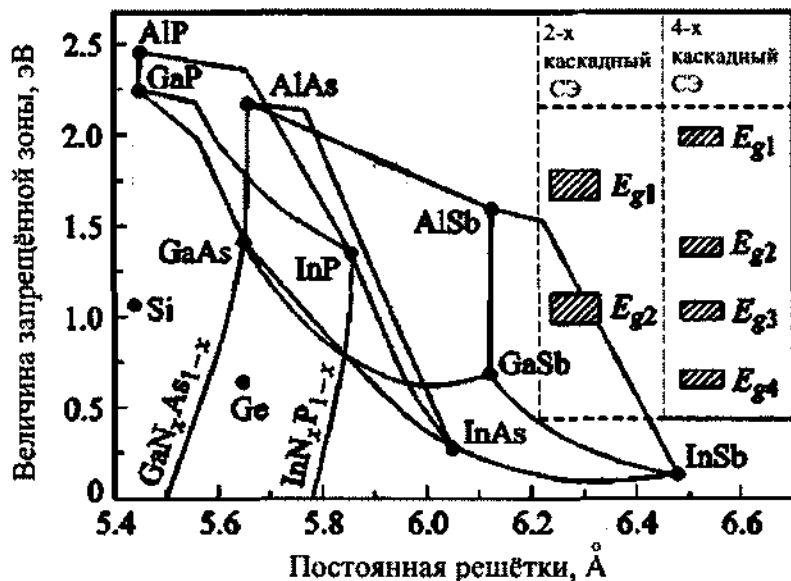


Рис. 2.15. Ширина запрещенной зоны E_g в зависимости от постоянной решетки для Si, Ge, соединений $A^{III}B^V$ и их твердых растворов; заштрихованные прямоугольники соответствуют интервалам E_g для различных материалов, обеспечивающих наивысшие эффективности в СЭ с 2 и 4 $p-n$ -переходами

К процессу фотоэлектрического преобразования был подключен и третий каскад с $p-n$ -переходом в германиевой подложке (рис. 2.17). В настоящее время трехкаскадные СЭ уже находятся в стадии практического использования при оснащении космических аппаратов.

Стоимость германия как подложечного материала ниже, чем используемого для этого арсенида галлия, не говоря уже о его технологических достоинствах (механическая устойчивость при постростовой обработке) и возможности быть включенным в процесс фотоэлектрического преобразования в каскадной структуре. Однако сегодня, оглядываясь на успехи, достигнутые в области технологий наногетероструктур, можно предположить, что германий как подложечный материал уже будет, возможно, вновь вытеснен кремнием как еще более дешевым и технологичным материалом. Работы в этом направлении уже ведутся.

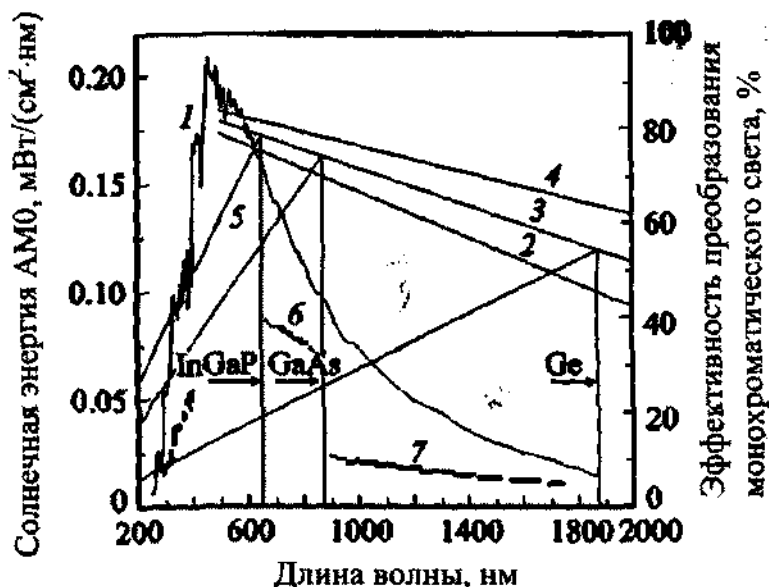
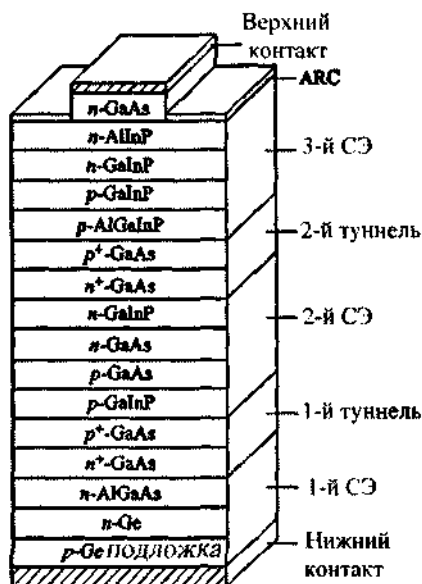


Рис. 2.16. Кривая 1 – энергетический спектр AM0 для неконцентрированного солнечного излучения; прямые 2, 3 и 4 – максимальные значения «мономатрической» эффективности идеализированного СЭ для плотностей фототока $j_{ph} = 0,1, 1,0$ и 10 A/cm^2 соответственно, которые зависят от граничной длины волны λ_g полупроводникового материала; наклонные линии слева – зависимости эффективности преобразования в идеализированных СЭ на основе материалов $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}$, GaAs и Ge при $j_{ph} = 1,0 \text{ A/cm}^2$; кривые 5, 6 и 7 показывают составляющие солнечной энергии, преобразуемые в электроэнергию в соответствующих каскадах, составляющих солнечный элемент с 3 p-n-переходами

Интересно отметить, что усложнение структуры фотоэлементов, а именно переход к многокаскадным структурам, ослабляет требования к объемным свойствам используемых материалов. Действительно, чем больше каскадов, тем тоньше фотоактивная область в каждом из них и тем меньше влияние на КПД такого параметра, как диффузионная длина неосновных носителей заряда. Метод компенсации недостаточно высоких объемных свойств материалов технологическим совершенством каскадной структуры начинает применяться и при создании новых типов тонкопленочных солнечных батарей.

Еще одним способом является идея использования «плавных» гетероструктур, в которых необходимо получить очень большой перепад значений запрещенной зоны при обеспечении высокой подвижности носителей заряда.

а



б

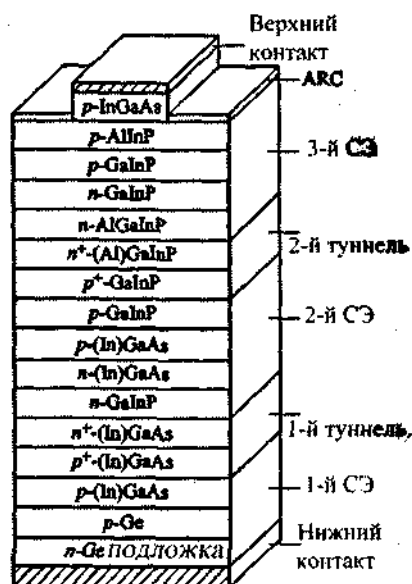


Рис. 2.17. Поперечные разрезы солнечных элементов с 3 p - n -переходами: а – гетероструктура (Al)GaInP/GaAs/Ge, в которой 2-й элемент, а также 1-й и 2-й туннельные переходы выполнены из GaAs; б – гетероструктура (Al)GaInP/(In)GaAs/Ge, в которой 1-й туннельный переход выполнен из InGaAs, в то время как 2-й элемент и 2-й туннельный переход выполнены из (Al)GaInP

Все эти предложения вызваны стремлением приблизить (вначале теоретически, а затем и практически) КПД солнечного фотоэлектрического преобразования к термодинамическому пределу в 93 %, определяемому циклом Карно.

Новыми материалами для эффективных солнечных элементов могут быть нитридные прямозонные полупроводники с различной шириной запрещенной зоны: InN ($E_g \sim 0,65$ эВ), GaN ($E_g \sim 3,4$ эВ), AlN ($E_g \sim 6,2$ эВ) и твердые растворы на их основе.

Даже для отдельных СЭ теоретически можно достичь КПД преобразования солнечной энергии в электрическую более чем 50 %, например, с помощью гетероструктуры InGaN с содержанием индия 40 %, выращенной на подложке кремния. Но, к сожалению, очень трудно вырастить высококачественный InGaN с высоким содержанием индия. Проблема заключается в том, что существует несоответст-

оянных решеток InN и GaN (~ 11 %). Слои с высоким содержанием индия, как правило, разделены на области с высоким и низким содержанием индия (расслоение). Несмотря на трудности, ученые по всему миру разрабатывают нитридные полупроводники для использования в солнечных элементах. В 2009 г. американская компания *RoseStreet Energy Labs Inc* объявила о создании о-кремниевое солнечного элемента.

Американские исследователи использовали 12-периодную структуру с множественными квантово-размерными ямами (МКЯ), состоящую из квантово-размерных ям (КЯ) и барьеров (InGaN/GaN) (3 нм/17 нм) с содержанием In в КЯ около 35 % (рис. 2.18). Слои были выращены с использованием МОС-гидридной технологии на сапфире. Длина волны электролюминесценции от структуры составила около 533 нм (зеленый цвет свечения).

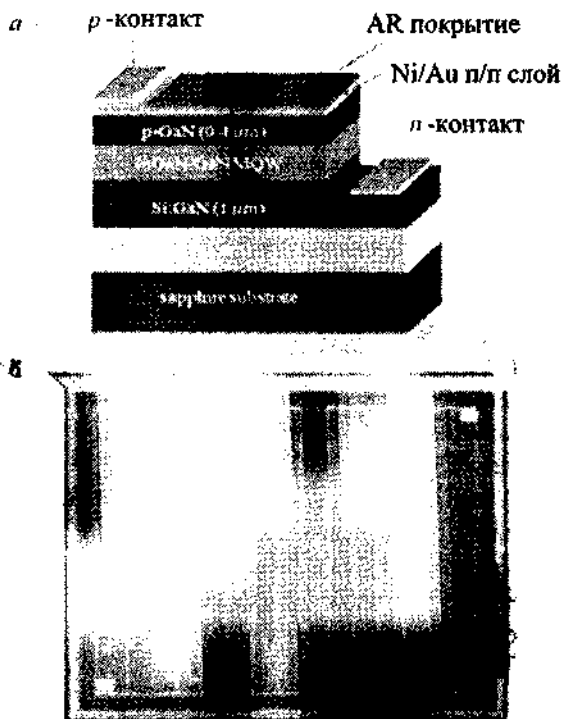


Рис. 2.18. Структура элемента InGaN/GaN с 12 периодами In_xGa_{1-x}N ($x \sim 0,35$) КЯ толщиной 3 нм и GaN барьеров толщиной 17 нм (a); изображение матрицы солнечных элементов с мезами размером $2,3 \times 2$ мм (b)

Матрица была протестирована в соответствии со стандартными условиями солнечного освещения AM1,5. При интенсивности 100 мВт/см^2 напряжение холостого хода составило 1,8 В, фактор заполнения был равен 64 %, плотность тока короткого замыкания была равна $2,56 \text{ мА/см}^2$, максимальная электрическая мощность составила $2,95 \text{ мВт/см}^2$. В итоге величина КПД составила 2,95 %. Эффективность преобразования энергии «не дотягивает» до теоретического максимума ($\sim 8 \%$) для области спектра AM1,5, потенциально поглощаемой матрицей данной конструкции. Улучшение связано с улучшением качества материала InGaN. Одной из причин все еще слишком низкого КПД является малая суммарная толщина КЯ ($12 \cdot 3 \text{ нм} = 36 \text{ нм}$). Для полного поглощения света требуется по крайней мере увеличение суммарной толщины КЯ до 200 нм (70 периодов МКЯ).

2.4.2. Моделирование солнечных элементов

Создание файла прибора

С учетом исходных данных на работу файл имеет следующий вид:

Файл солнечного элемента на основе двойной гетероструктуры AlGaAs.

grid length=0.7 points=75

grid length=1.000 points=100

grid length=0.7 points=75

structure material=gaas alloy=al length=0.7 conc=0.4

structure material=gaas alloy=al length=1.00 conc=0.0

structure material=gaas alloy=al length=0.7 conc=0.4

doping length=0.7 $N_d=5e17$

doping length=1.000 $N_d=5e17$

doping length=0.7 $N_d=5e17$

Для максимального поглощения света в *p*-GaAs базе СЭ ее толщина должна составлять 1 мкм.

Создание файла параметров материала

Файл для системы твердых растворов AlGaAs и GaAs описан в руководстве пользователя в п. 2.2.1. В данном файле, в отличие от оригинального файла программы SW, учтены зависимости подвижности электронов и дырок от температуры и концентрации легирующих примесей.

Рекомендуемое имя файла: material GaAs-AlGaAs.prm.

Порядок проведения процесса моделирования

Значение КПД СЭ определяется следующими выражениями:

$$\eta_i = FF \cdot (U_{xx} \cdot J_{кз}) / (1AM1,5); \quad (2.4)$$

$$\eta_{1000} = FF \cdot (U_{xx} \cdot J_{кз}) / (1000AM1,5); \quad (2.5)$$

$$FF = (U_m \cdot J_m) / (U_{xx} \cdot I_{кз}), \quad (2.6)$$

где U_{xx} – напряжение на СЭ в разомкнутой цепи; $I_{кз}$ – ток короткого замыкания через СЭ.

Эти параметры определяются из результатов моделирования вольт-амперных характеристик при мощности солнечного освещения $1AM1,5 = 84,4 \text{ мВт/см}^2$ или $1000AM1,5 = 84,4 \text{ Вт/см}^2$. Из результатов моделирования BAX можно определить параметры U_m и I_m , произведение которых равно максимальному значению электрической мощности P_m , генерируемой солнечным элементом.

Моделирование BAX данного СЭ осуществляется при следующих настройках программы:

1. Открыть файл прибора «ALGASPHD» и генерировать прибор. Получить извещение «Прибор успешно создан».

2. В окне Device → Electrical Models включить кнопки «Fermi-Dirac» и «Mobilities/Doping Dependent». Остальные параметры оставить без изменения.

3. В окне «Environment» по пути Optical Input → Spectrum → Example → Solar cell открыть файл солнечного освещения AM1,5. Затем поставить переключатель Optical Input в положение «On».

4. В главном окне программы включить кнопку «SIM» (моделирование). После успешного моделирования («Status...Converged») в окне «PLOT» просмотреть полученные результаты для режима короткого замыкания СЭ (внешнее напряжение на СЭ не подано). Промежуточные результаты представлены на рис. 2.19.

5. Для моделирования BAX в окне Device → Contacts → Left contact постепенно подается положительное напряжение и при заданной величине напряжения производится моделирование нажатием на кнопку «SIM» и определяется плотность тока J , А/см^2 . При увеличении прямого напряжения $U_{пр}$ абсолютная величина J будет уменьшаться вплоть до нуля, что соответствует напряжению U_{xx} . BAX при мощности освещения $1AM1,5$ показана на рис. 2.20. Данные для двух режимов освещения приведены в табл. 2.2. Режим солнечного освещения мощностью $1000AM1,5$ включается в окне «Environment» по пути Optical Input → Spectrum → Spectrum Multiplier → 1000.

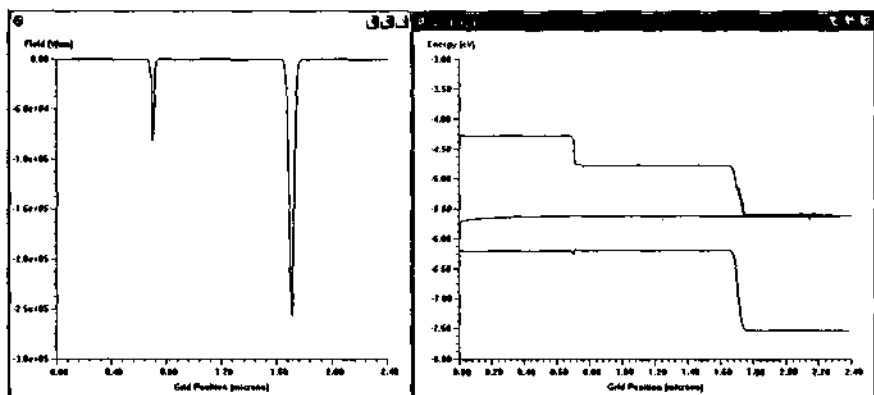


Рис. 2.19. Режим тока короткого замыкания в условиях солнечного освещения мощностью $1\text{AM}1,5 = 84,4 \text{ мВт/см}^2$

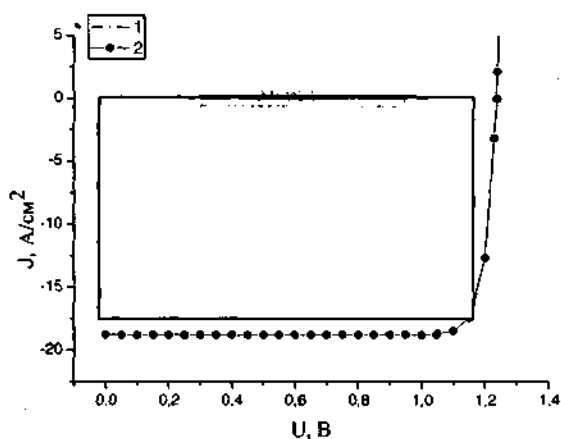


Рис. 2.20. ВАР при различной мощности освещения:
1 – $\text{AM}1,5$; 2 – $1000\text{AM}1,5$

еТаблица 2.2

Зависимость тока и мощности СЭ от напряжения

$U_{\text{пр}}, \text{В}$	$1\text{AM}1,5$		$1000\text{AM}1,5$	
	$J, \text{A/см}^2$	$P_{\text{эл}} = U_{\text{пр}} \cdot J \cdot 1\text{см}^2, \text{мВт}$	$J, \text{A/см}^2$	$P_{\text{эл}} = U_{\text{пр}} \cdot J \cdot 1\text{см}^2, \text{Вт}$
0	-1,88e-02	—	-18,8	—
0,05	-1,88e-02	—	-18,8	—
0,10	-1,88e-02	—	-18,8	—
0,15	-1,88e-02	—	-18,8	—
0,20	-1,88e-02	—	-18,8	—

$U_{пр}, В$	1AM1,5		1000AM1,5	
	$J, А/см^2$	$P_{эл} = U_{пр} \cdot J \cdot 1 см^2, мВт$	$J, А/см^2$	$P_{эл} = U_{пр} \cdot J \cdot 1 см^2, Вт$
0,25	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,30	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,35	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,40	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,45	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,50	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,55	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,60	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,65	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,70	-1,88e-02	-	-18,8	-
0,75	-1,88e-02	1,41e-02	-18,8	-
0,80	-1,87e-02	1,50e-02	-18,8	-
0,85	-1,86e-02	1,58e-02	-18,8	-
0,90	-1,83e-02	1,65e-02	-18,8	-
0,95	-1,75e-02	1,66e-02	-18,8	-
1,00	-1,42e-02	1,42e-02	-18,8	18,8
$U_{эл} = 1,047$	$J_{эл} = -1,25e-04$	0,013e-02	-18,8	19,62
1,05	+2,07e-03	-	-18,7	19,63
1,10	-	-	-18,5	20,35
1,15	-	-	-17,5	20,24
1,20	-	-	-12,7	15,24
1,23	-	-	-3,2	3,94
$U_{эл} = 1,236$	-	-	$J_{эл} = -0,06$	0,074
1,24	-	-	+2,1	-
1,25	-	-	+9,53	-

В табл. 2.2 приведены также данные для электрической мощности $P_{эл} = U_{пр} \cdot J \cdot 1 \text{ см}^2$, генерируемой солнечным элементом при различных значениях напряжения на СЭ. Видно, что при освещении 1AM1,5 максимальное значение мощности достигается при напряжении $U_{эл} = 0,95 \text{ В}$ и при токе $I_{эл} = 17,5 \text{ мА}$. При освещении 1000AM1,5 максимальное значение мощности достигается при $U_{эл} = 1,1 \text{ В}$ и при токе $I_{эл} = 18,5 \text{ А}$.

В табл. 2.3 приведены основные данные для вычисления факторов FF и КПД СЭ η и η_{1000} по формулам (2.4), (2.5) и (2.6).

Таблица 2.3

Параметры для вычисления фактора и КПД СЭ

1AM1,5 ($S = 1 \text{ см}^2$)						1000AM1,5 ($S = 1 \text{ см}^2$)					
$U_{хх}, В$	$I_{кз}, мА$	$U_{м}, В$	$I_{м}, мА$	FF , отн. ед.	η , %	$U_{хх}, В$	$I_{кз}, А$	$U_{м}, В$	$I_{м}, А$	FF , отн. ед.	η , %
1,047	18,8	0,95	17,5	0,844	19,68	1,236	18,8	1,10	18,5	0,875	23,62

Полученные значения КПД – 19,68 % при 1АМ1,5 и 23,62 % при 1000АМ1,5 – хорошо согласуются с экспериментальными данными для солнечных элементов на основе гетероструктур AlGaAs, представленными в п. 2.4.1 настоящей курсовой работы. В частности, в данном примере теоретически подтверждено преимущество использования этих элементов совместно с концентраторами солнечной энергии.

3. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОГРАММЫ *SIM WINDOWS*

Физические модели, на которых основывается программа *SW* версии 1.5, были разработаны в докторской диссертации D.W. Winston «Физическое моделирование оптоэлектронных полупроводниковых приборов» в 1996 г. [4]. Ниже приведен перевод сокращенного раздела «Физические модели» диссертации для лучшего понимания студентами физических основ настоящей программы.

3.1. Переменные и константы, используемые в *SimWindows*

В программе *SW* используется четыре типа переменных: фундаментальные, специальные, вычисляемые и константы. Полный перечень переменных приводится ниже.

Фундаментальные переменные:

$\varphi(x)$ – электростатический потенциал (В);

$\eta_c(x) = (E_{fc}(x) - E_c(x))/kT_n(x)$ – планковский потенциал электронов (безразмерный); $\eta_v(x) = (E_v(x) - E_{fv}(x))/kT_p(x)$ – планковский потенциал дырок (безразмерный);

S – полное количество фотонов в моде (безразмерный);

$T_L(x)$ – температура решетки (К);

$T_n(x)$ – температура электронов (К);

$T_p(x)$ – температура дырок (К).

Специальные переменные:

A_c – площадь резонатора лазера (см²);

B – постоянная спонтанной рекомбинации (см³ · с⁻¹);

B_{qw} – постоянная спонтанной рекомбинации в квантово-размерных ямах (см² · с⁻¹);

E_D, E_A – донорный и акцепторный энергетические уровни (эВ);

E_g – ширина запрещенной зоны (эВ);

g_D, g_A – факторы вырождения донорных и акцепторных уровней;

L – полная длина прибора (см);

L_c – длина резонатора лазера (см);

L_{qw} – длина квантово-размерной ямы (см);

m_n^*, m_p^* – эффективная масса плотности состояний электронов и дырок (кг);

m_{en}^*, m_{ep}^* – масса проводимости электронов и дырок (кг);

n_{real} – реальная часть показателя преломления;

N_D, N_A – полная концентрация доноров и акцепторов (см^{-3});

R_d – радиус прибора (см);

r_e – внешний радиус прибора (см);

R_b, R_r – коэффициент отражения левых и правых зеркал (безразмерный);

T_{env} – температура окружающей среды (К);

T_b, T_r – температура левых и правых поверхностей (К);

V_b, V_r – смещение на левом и правом контактах (В);

x – положение (см);

α – коэффициент поглощения (см^{-1});

α_s – рассеиваемые потери лазера (см^{-1});

β – доля спонтанных фотонов, испускаемых в генерированной моде (безразмерный);

ϵ – диэлектрическая проницаемость ($\Phi \cdot \text{см}^{-1}$);

k – удельная теплопроводность ($\text{А} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$);

k_l, k_r – удельная теплопроводность левых и правых поверхностей ($\text{А} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$);

μ_n, μ_p – подвижность электронов и дырок ($\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$);

v_n, v_p – зависимость энергии электрона и дырки от времени рекомбинации;

ν_{opt} – частота внешней оптической генерации (с^{-1});

τ_n, τ_p – время жизни электронов и дырок по модели ШХР (с);

τ_{ntr}, τ_{ptr} – время релаксации энергии электронов и дырок (с);

χ – электронное родство (эВ).

Вычисляемые переменные:

$A_{n,p}^*$ – постоянная Ричардсона электронов и дырок ($\text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-2}$);

D – электростатическое смещение ($\text{Кл} \cdot \text{см}^{-2}$);

ϵ – электростатическое поле ($\text{В} \cdot \text{см}^{-1}$);

ϵ_{stim} – нормализованное стимулированное электромагнитное поле ($\text{см}^{-3/2}$);

E_c, E_v – край зоны проводимости и валентной зоны (эВ);

$E_{c,tor}, E_{v,tor}$ – энергии зоны проводимости и валентной зоны наверху квантово-размерных ям (эВ);

E_{fn}, E_{fp} – квазиуровни Ферми электронов и дырок (эВ);

E_{sqw} – ширина запрещенной зоны в квантово-размерных ямах (равна ширине запрещенной зоны в объемном материале плюс энергии квантованных энергетических уровней электронов и дырок) (эВ);

E_j^+, E_j^- – прямо и обратно распространяющиеся электрические поля (безразмерные);

$E_{n,stim}, E_{p,stim}$ – энергия стимулированной эмиссии электронов и дырок (эВ);

E_{qwn}, E_{qwp} – квантованный уровень энергии электронов и дырок в квантово-размерных ямах (эВ);

g – локальный коэффициент усиления (см^{-1});

G_{opt} – полная скорость внешней оптической генерации ($\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);

$G_{v,opt}$ – внешняя скорость оптической генерации на определенной частоте ($\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);

J_n, J_p – плотность электронного и дырочного тока (см^{-2});

$J_{n,p}^{therm \rightarrow +}, J_{n,p}^{therm \rightarrow -}$ – ток электронов и дырок из-за термоэлектронной эмиссии, протекающий слева направо (от «-» к «+») и справа налево (от «+» к «-») ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2}$);

$J_{n,p}^{tun \rightarrow +}, J_{n,p}^{tun \rightarrow -}$ – ток электронов и дырок из-за туннелирования, протекающий слева направо (от «-» к «+») и справа налево (от «+» к «-») ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2}$);

k_0 – волновой вектор в свободном пространстве (см^{-1});

m_{qwn}^*, m_{qwp}^* – эффективная масса плотности состояний электронов и дырок в квантово-размерной яме (кг);

$m_{bulk n}^*, m_{bulk p}^*$ – эффективная масса плотности состояний электронов и дырок в объемном материале (кг);

n, p – полная концентрация электронов и дырок (см^{-3});

n_b, p_b – концентрация связанных электронов и дырок в квантово-размерной яме (см^{-3});

n_f, p_f – концентрация свободных электронов и дырок в квантово-размерной яме (см^{-3});

n_i – собственная концентрация носителей заряда (см^{-3});

$n_{i,2d}$ – концентрация носителей заряда в квантово-размерной яме (см^{-3});

n_j – комплексный показатель преломления в области j (безразмерный);

n_{2d}, p_{2d} – полная концентрация электронов и дырок в квантово-размерной яме (см^{-2});

N_c, N_v – эффективная плотность состояний в зоне проводимости и в валентной зоне (см^{-3});

N_{cqw}, N_{vqw} – эффективная плотность состояний в зоне проводимости и в валентной зоне в квантово-размерной яме (см^{-2});

N_D^+, N_A^- – концентрация ионизированных доноров и акцепторов (см^{-3});

$\vec{S}_j$ – полный вектор Пойтинга для распространяющегося электромагнитного поля ($\text{Вт} \cdot \text{см}^{-2}$);

$\vec{S}_j^+, \vec{S}_j^-$ – векторы Пойтинга, усредненные по времени, для прямого и обратного распространения электромагнитного поля ($\text{Вт} \cdot \text{см}^{-2}$);

$S_n^{\text{tot}}, S_p^{\text{tot}}$ – энергия полного потока энергии электронов и дырок ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$);

$S_{n,p}^{\text{therm}}$ – полная энергия потока электронов и дырок при термоэлектронной эмиссии ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-2}$);

$S_{n,p \rightarrow +}^{\text{therm}}, S_{n,p^+ \rightarrow -}^{\text{therm}}$ – полный ток кинетической энергии электронов и дырок при термоэлектронной эмиссии, протекающий слева направо (от «-» к «+») и справа налево (от «+» к «-») ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$);

$S_{n,p}^{\text{tun}}$ – полный поток энергии электронов и дырок из-за туннелирования ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$);

$S_{n,p \rightarrow +}^{\text{tun}}, S_{n,p^+ \rightarrow -}^{\text{tun}}$ – поток кинетической энергии электронов и дырок при термоэлектронной эмиссии, протекающий слева направо (от «-» к «+») и справа налево (от «+» к «-») ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$);

S_{lat} – поток энергии решетки ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$);

$U_{c-v-}, U_{c+,v+}$ – высота барьера в зоне проводимости и в валентной зоне, если смотреть слева (-) и справа (+) (эВ);

U_{tot} – полная скорость рекомбинации носителей заряда ($\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);

$U_{\text{stim}}, U_{b-b}, U_{\text{shr}}$ – скорость рекомбинации стимулированная, «зона-зона» (излучательная) и по модели SHR (Шокли – Холл – Рид) ($\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);

$\tilde{U}_{\text{stim}}, \tilde{U}_{b-b}$ – полная скорость стимулированной и спонтанной рекомбинации в резонаторе лазера (с^{-1});

u_n, u_p – полная плотность энергии электронов и дырок ($\text{А} \cdot \text{см}^{-3}$);

$u_{n,2d}, u_{p,2d}$ – полная плотность энергии электронов и дырок в квантово-размерных ямах ($\text{А} \cdot \text{см}^{-2}$);

V_{qwt}, V_{qwp} – высота зоны проводимости и валентной зоны в квантово-размерных ямах (эВ);

- V_{stim} – скорость эмиссии, стимулированной фотонами ($\text{см} \cdot \text{с}^{-1}$);
 W_n^{tot}, W_p^{tot} – полная скорость потерь энергии электронами и дырками ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);
 $W_{n,shr}^{tot}, W_{p,shr}^{tot}$ – полные потери энергии электронами и дырками по модели SHR ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);
 $W_{n,b-b}^{tot}, W_{p,b-b}^{tot}$ – полные потери энергии электронами и дырками при спонтанной рекомбинации ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);
 $W_{n,stim}^{tot}, W_{p,stim}^{tot}$ – полные потери энергии электронами и дырками при стимулированной рекомбинации ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);
 $W_{n,opt}^{tot}, W_{p,opt}^{tot}$ – полные потери энергии электронами и дырками при внешнем оптическом возбуждении ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);
 $W_{n,relax}^{tot}, W_{p,relax}^{tot}$ – полные потери энергии электронами и дырками при их релаксации ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);
 W_{lat}^{tot} – полные потери энергии решеткой ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$);
 Z_j – относительный комплексный импеданс в j -области (безразмерный);
 α_m – распределенные потери на зеркале (см^{-1});
 ϕ_0 – встроенный потенциал (В);
 η_{e0}, η_{h0} – значения планковского потенциала электронов и дырок для нейтрального зарядового состояния (эВ);
 k_e – эффективная теплопроводность окружающей среды ($\text{Дж} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$);
 ν_{stim} – частота стимулированной эмиссии (с^{-1});
 ρ – полный заряд ($\text{Кл} \cdot \text{см}^{-3}$);
 Ψ_n, Ψ_p – волновая функция электронов и дырок в квантово-размерной яме ($\text{см}^{-1/2}$);
 τ_{ph} – время жизни фотона (с).

Константы

- q – заряд электрона ($1,602 \cdot 10^{-19}$ Кл);
 k – константа Больцмана ($8,62 \cdot 10^{-5}$ эВ $\cdot \text{К}^{-1}$);
 h – постоянная Планка ($6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с);
 $\hbar$ – постоянная Планка/2 π ($1,0546 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с);
 i – $(-1)^{0,5}$;
 π – число Пи (3,141592654).

3.2. Заряд

При моделировании любого полупроводникового прибора необходимо решать уравнения, описывающие статистику и перенос заряда через прибор при равновесных и неравновесных состояниях. Необходимы три фундаментальные переменные для конкретного описания заряда в полупроводниковом приборе. Фундаментальные переменные – это переменные, один раз найденные, определяющие все другие неизвестные. Теоретически выбор переменных произволен, но целесообразно для расчетов взять такие переменные, которые не изменяются по длине прибора. В настоящей работе выбраны следующие переменные – электростатический потенциал $\phi(x)$, планковский потенциал электронов $\eta_c(x)$, и планковский потенциал дырок $\eta_v(x)$. Выражения, связывающие планковские потенциалы с квазиуровнями Ферми и краями зон, имеют следующий вид:

$$\eta_v(x) = (E_v(x) - E_{fp}(x)) / kT_p(x); \quad (3.1)$$

$$\eta_c(x) = (E_{fn}(x) - E_c(x)) / kT_n(x). \quad (3.2)$$

След.

Для нахождения трех фундаментальных переменных необходимо решить три уравнения. Уравнения изменяются в зависимости от типа моделирования – равновесное или неравновесное. В дополнение к равновесным и неравновесным состояниям в вычислениях используется третье состояние, с нейтральным зарядом. Это – нефизическое – состояние программа *SW* использует для нахождения равновесных и неравновесных состояний.

Есть несколько уравнений, которые являются общими для каждого из трех состояний в приборах: уравнения для эффективной плотности состояний, полной концентрации носителей заряда, концентрации ионизированных примесных атомов. В объемном материале они имеют следующий вид:

$$N_{c,v}(x) = \frac{1}{4\pi^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2m_{n,p}^*(x)kT_{n,p}(x)}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}; \quad (3.3)$$

$$n(x) = N_c F_{1/2}(\eta_c) \quad p(x) = N_v F_{1/2}(\eta_v); \quad (3.4)$$

$$N_D^+(\eta_c) = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\frac{E_D}{kT_n + \eta_c}}}; \quad N_A^-(\eta_v) = \frac{N_A}{1 + g_A e^{\frac{E_A}{kT_p + \eta_v}}}; \quad (3.5)$$

$$\rho(x) = q(p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x)), \quad (3.6)$$

где $F_j(x)$ – положение уровня Ферми в точке j .

Уравнения (3.3) и (3.4) для квантово-размерных ям другие из-за того, что плотности состояний в квантово-размерных ямах двумерны. SW использует модель для заряда в квантово-размерных ямах, которая включает как заряд связанных носителей заряда, так и заряд свободных носителей. Диаграмма плотности состояний схематически изображена на рис. 3.1, где показано различие между двумя типами заряда.

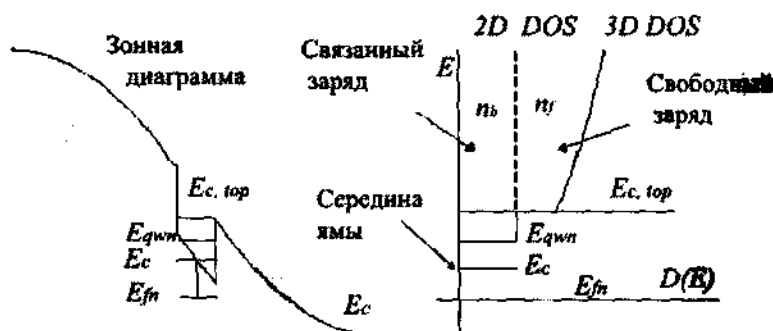


Рис. 3.1. Квантово-размерные ямы и соответствующие плотности состояний: 2D – двумерное состояние, 3D – плотность состояний в объемном материале

В уравнениях для заряда в квантово-размерных ямах используются несколько предположений:

1. Есть только одно связанное состояние ниже $E_{c, top}$, все состояния выше свободны.
2. Квантованный энергетический уровень E_{qw} постоянен относительно зоны проводимости и находится в середине квантово-размерной ямы;
3. Есть резкий переход между двумерными и трехмерными энергетическими плотностями состояний при энергии $E_{c, top}$.
4. Квазиуровень Ферми постоянен в квантово-размерной яме.
5. Свободный заряд может описываться статистикой Больцмана.

С использованием этих предположений уравнения для концентраций связанных носителей заряда примут следующий вид:

$$N_{c, qw} = \frac{m_{u, p}^* k T_{u, p}}{\pi \hbar^2}; \quad (3.7)$$

$$n_{2d} = N_{cqw} F_0 \left(\eta_c - \frac{E_{qwn}}{kT_n} \right); \quad p_{2d} = N_{vqw} F_0 \left(\eta_v - \frac{E_{qvp}}{kT_p} \right); \quad (3.8)$$

$$n_b(x) = |\Psi_n(x)|^2 n_{2d}; \quad p_b(x) = |\Psi_p(x)|^2 p_{2d}. \quad (3.9)$$

Уравнения для концентраций свободных носителей заряда имеют такой вид:

$$n_f(x) = e^{\eta_c} \left[N_{fc}^{\text{св}}(x) \left(1 - \frac{\gamma \left(\frac{3}{2}, \frac{E_{c, \text{св}}}{kT_n} \right)}{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} \right) - \frac{N_{cqw}}{L_{qw}} e^{-\frac{E_{c, \text{св}}}{kT_n}} \right]; \quad (3.10)$$

$$p_f(x) = e^{\eta_v} \left[N_{fv}(x) \left(1 - \frac{\gamma \left(\frac{3}{2}, \frac{E_{v, \text{св}}}{kT_p} \right)}{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} \right) - \frac{N_{vqw}}{L_{qw}} e^{-\frac{E_{v, \text{св}}}{kT_p}} \right], \quad (3.11)$$

где $\gamma \left(\frac{3}{2}, x \right)$ – неполный коэффициент функции Ферми порядка $\frac{3}{2}$.

Полная концентрация носителей заряда есть сумма концентрации связанных (уравнение (3.9)) и свободных носителей заряда (уравнения (3.10), (3.11)). Обратите внимание, что в этих уравнениях единица измерения концентрации связанных и свободных носителей заряда – $[\text{см}^{-3}]$, что необходимо для совместимости этих уравнений с уравнением (3.6) для полного заряда.

Уравнения для концентраций носителей заряда в квантовых ямах зависят от обоих факторов – квантовых энергетических уровней и волновых функций носителей заряда в квантово-размерных ямах. SW использует решение уравнения Шредингера для конечной прямоугольной ямы с целью нахождения энергетического уровня в яме и волновой функции. При этом используется приближение бесконечной прямоугольной квантово-размерной ямы:

$$\sqrt{\frac{2m_{qwn,p}^* E_{qwn,p}}{h^2}} \tan \left(\sqrt{\frac{2m_{qwn,p}^* E_{qwn,p}}{h^2}} \frac{L_{qw}}{2} \right) -$$

$$-\sqrt{\frac{2m_{\text{bulk},p}^*(V_{q\text{wn},p} - E_{q\text{wn},p})}{\hbar^2}} = 0; \quad (3.12)$$

$$\psi_{n,p}(x) = \sqrt{\frac{2}{L_{q\text{w}}}} \sin\left(\frac{\pi x}{L_{q\text{w}}}\right). \quad (3.13)$$

Нейтральный заряд

Нейтральность заряда – нефизическое состояние прибора, при котором нет никакого заряда в любой точке прибора. *SW* использует это состояние только как отправную точку для дальнейшего моделирования. В этом состоянии вычисляется электростатический потенциал, а также планковские потенциалы электронов и дырок, согласно предположению, что заряда нет. Все три главных уравнения являются простыми алгебраическими уравнениями, что делает их решение относительно простым. Главные уравнения для состояния нейтрального заряда:

$$p(-\eta_{c0} - E_g/kT_L) - n(\eta_{c0}) + N_D^+(\eta_{c0}) - N_A^-(\eta_{c0} - E_g/kT_L) = 0; \quad (3.14)$$

$$\phi(x) = -kT_L \eta_{c0}(0) + \chi(0) - \chi(x) + kT_L \eta_{c0}(x); \quad (3.15)$$

$$\eta_{v0}(x) = -\eta_{c0}(x) - E_g(x)/kT_L. \quad (3.16)$$

В большинстве общих случаев уравнение (3.14) не имеет аналитического решения для планковского потенциала электронов. Однако согласно предположению, что имеют место статистика Больцмана и полная ионизация примесей ($N_d^+ = N_d$ и $N_a^- = N_a$), существуют аналитические решения для η_{c0} , η_{v0} и ϕ . В зависимости от того, что нужно пользователю, *SW* решает уравнение (3.14) либо в цифровом, либо в аналитическом виде. Уравнения (3.14), (3.15), (3.16) также подразумевают, что электрон и дырка на квазиуровне Ферми имеют постоянную и одинаковую энергию.

После вычислений в состоянии нейтрального заряда *SW* вычисляет два других параметра, которые используются в дальнейших вычислениях. Первый – это потенциал, который *SW* находит, оценивая уравнение (3.15) в позиции, равняющейся полной длине устройства L :

$$j_0 = -kT_L \eta_{c0}(0) + \chi(0) - \chi(L) + kT_L \eta_{c0}(L). \quad (3.17)$$

Второй параметр – собственная концентрация носителей заряда, которая равна произведению концентраций электронов и дырок, когда материал находится в состоянии равновесия. Для объемного материала квадрат собственной концентрации носителей заряда составляет

$$n_i^2 = N_c(T_L)N_v(T_L)e^{-\frac{E_g}{kT_L}} \frac{F_{1/2}(\eta_{c0})}{e^{\eta_{c0}}} \frac{F_{1/2}(\eta_{v0})}{e^{\eta_{v0}}}. \quad (3.18)$$

Для квантово-размерных ям выражение для собственной концентрации носителей заряда имеет следующий вид:

$$n_{i,2d}^2 = N_{cqw}(T_L)N_{vqw}(T_L)e^{-\frac{E_{gqw}}{kT_L}} \frac{F_0\left(\eta_{c0} - \frac{E_{qwn}}{kT_L}\right)}{e^{\eta_{c0} - \frac{E_{qwn}}{kT_L}}} \frac{F_0\left(\eta_{v0} - \frac{E_{qvp}}{kT_L}\right)}{e^{\eta_{v0} - \frac{E_{qvp}}{kT_L}}}. \quad (3.19)$$

Равновесие

Равновесное состояние отличается от состояния без заряда тем, что заряд может быть в некоторой отдельной области прибора, но не в устройстве в целом. Квазиуровни Ферми электронов и дырок постоянны и равны. Три основных уравнения, которые SW решает в состоянии равновесия, имеют следующий вид:

$$\nabla \cdot D(x) - \rho(x) = 0; \quad (3.20)$$

$$\eta_c(x) = \frac{j(x) + \chi(x) - \chi(0)}{kT_L} + \eta_c(0); \quad (3.21)$$

$$\eta_v(x) = -\eta_c(x) - E_g(x)/kT_L. \quad (3.22)$$

Из этих трех уравнений только уравнение Пуассона (3.20) является дифференциальным уравнением. Поэтому решить эти уравнения труднее, чем уравнения при отсутствии заряда. С помощью числовых методов эти уравнения можно решить быстро. Для решения уравнения (3.20) также требуется запись выражения для электростатического смещения D :

$$D(x) = -\epsilon(x)\nabla\phi(x). \quad (3.23)$$

Неравновесные состояния

Главная характеристика неравновесия – то, что внешние воздействия, например приложенное напряжение или подающий свет, приводят к генерированию или уменьшению количества носителей заряда, которое зависит от скорости рекомбинации/генерации. При этом возникает ток. Это – наиболее общая и с практической точки зрения ситуация, но значительно более сложная, так как необходимо решить три дифференциальных уравнения для потенциала и планковских потенциалов электронов и дырок. Рассмотрим важные оценочные уравнения, уравнения для токов и различных процессов рекомбинации и генерации.

Для описания прибора в неравновесном состоянии требуется решение трех уравнений. Это – уравнение Пуассона (3.24) и два уравнения непрерывности (3.25, 3.26). *SW* осуществляет расчет (3.25) и (3.19) только для стационарного состояния, в случае когда производные по времени равны нулю:

$$\nabla \cdot D(x) - \rho(x) = 0; \quad (3.24)$$

$$\nabla \cdot (J_n(x)/q) - U_{tot}(x) = -\frac{\partial n}{\partial t}; \quad (3.25)$$

$$\nabla \cdot (J_p(x)/q) + U_{tot}(x) = -\frac{\partial p}{\partial t}. \quad (3.26)$$

Как и в случае равновесия, для решения уравнения Пуассона требуется решение уравнения (3.23) как вспомогательного. Два уравнения непрерывности требуются для формирования вспомогательных выражений для тока и скорости рекомбинации.

Ток есть не что иное, как поток носителей заряда из одного места в приборе в другое. Однако в зависимости от природы тока этот поток можно описывать различными выражениями. Фундаментальное выражение для определения электронного тока описывается следующим интегралом:

$$J_n = \frac{-q}{4\pi^3} \iiint v f dk_x dk_y dk_z. \quad (3.27)$$

Это уравнение описывает электронный ток через интеграл в зависимости от скорости носителей заряда v , умноженный на функцию распределения частиц по импульсу, по всем импульсам. Выражение для тока дырок то же самое, только вместо отрицательного заряда используют положительный заряд.

В *SW* используются три обычных вида тока: дрейфовый ток, ток термоэлектронной эмиссии и туннельный ток. Программа применяет выражение для дрейфового тока в приборах из материала одного состава или в приборах с плавным изменением состава материала. Выражение для тока термоэлектронной эмиссии используется в контактах квантово-размерных ям с объемными материалами. Ток термоэлектронной эмиссии и туннельный ток используются также при наличии резких границ между двумя объемными материалами. *SW* определяет различие между материалами с плавным изменением состава и резким гетеропереходом путем использования следующего критерия:

$$\frac{2kT_{n,p}l_g}{\Delta E_{c,v}} < l_m, \quad (3.28)$$

где l_g – длина области переменного состава; l_m – средняя длина свободного пробега носителей заряда; $\Delta E_{c,v}$ – изменение ширины запрещенной зоны.

Если область изменения состава достаточно велика и соответствует (3.28), то носители заряда не будут рассеиваться в слое переменного состава. В этом случае *SW* использует выражения для тока термоэлектронной эмиссии и для туннельного тока. Если область изменения состава не удовлетворяет (3.28), то используется выражение для тока дрейфа и диффузии.

Дрейфово-диффузионный ток является результатом воздействия внешней силы, приложенной к носителям заряда. Поэтому функция распределения носителей заряда по энергиям в уравнении (3.27) отличается от функции равновесного распределения Ферми – Дирака. Модель для тока дрейфа и диффузии предполагает, что неравновесное распределение носителей заряда есть сумма равновесного распределения и небольшого возмущения. Аппроксимация времени релаксации к статистике Больцмана дает уравнение для возмущения f_1 :

$$f_1 = -\tau \left(v \cdot \nabla_r \cdot f_0 + \frac{F}{h} \cdot \nabla_k \cdot f_0 \right), \quad (3.29)$$

где τ – время релаксации импульса; F – сила воздействия на носители заряда.

Время релаксации импульса зависит от энергии носителей заряда, зависимость определяется доминирующим механизмом рассеивания

носителей. Используя простой степенной закон для описания зависимости времени релаксации импульса от энергии, получаем:

$$\tau = \tau_0 (E - E_c)^{v_{np}}. \quad (3.30)$$

Пользователь может выбирать значение v_{np} в зависимости от доминирующего механизма рассеивания в материале. Подставляя (3.29) и (3.30) в уравнение (3.27) получаем:

$$J_n = \frac{q\tau_0}{4\pi^3} \iiint v(E - E_c)^{v_n} \left(v \left(\nabla_r \cdot f_0 + \frac{F}{h} \cdot \nabla_k \cdot f_0 \right) \right) dk_x dk_y dk_z. \quad (3.31)$$

Используя (3.24), получаем уравнения для дрейфово-диффузионного тока:

$$J_n = \mu_n n \left\{ (kT_n \cdot \nabla \cdot \eta_c + \nabla \cdot E_c) + \left(\frac{5}{2} + v_n \right) \frac{F_{3/2+v_n}(\eta_c)}{F_{1/2+v_n}(\eta_c)} \cdot \nabla \cdot kT_n \right\}; \quad (3.32)$$

$$J_p = -\mu_p p \left\{ (kT_p \cdot \nabla \cdot \eta_v - \nabla \cdot E_v) + \left(\frac{5}{2} + v_p \right) \frac{F_{3/2+v_p}(\eta_v)}{F_{1/2+v_p}(\eta_v)} \cdot \nabla \cdot kT_p \right\}. \quad (3.33)$$

Эти уравнения не стандартные, однако они содержат весь физический базис, необходимый для моделирования прибора. Они применимы к неизотермическим состояниям, а также включают статистику Ферми – Дирака и параметры материала с переменным составом. Пользователь может также выбирать значение для v_{np} , соответствующее доминирующему механизму рассеивания носителей заряда в материале. Используя соотношение

$$\nabla \eta_{c,v} = \frac{F_{1/2}(\eta_{c,v})}{F_{-1/2}(\eta_{c,v})} \left(\frac{1}{n, p} \nabla n, p - \frac{3}{2} \frac{1}{T_{n,p}} \nabla T_{n,p} - \frac{3}{2} \nabla \ln(m_{n,p}^*) \right) \quad (3.34)$$

и уравнения (3.32) и (3.33), получаем более типичные уравнения для дрейфа и диффузии:

$$J_n = \mu_n kT_n \frac{F_{1/2}(\eta_c)}{F_{-1/2}(\eta_c)} \nabla n + \mu_n n \nabla E_c - \frac{3kT_n}{2} \mu_n \frac{F_{1/2}(\eta_c)}{F_{-1/2}(\eta_c)} n \nabla \ln(m_n^*) + \\ + \mu_n n \left(\left(\frac{5}{2} + v_n \right) \frac{F_{3/2+v_n}(\eta_c)}{F_{1/2+v_n}(\eta_c)} - \frac{3}{2} \frac{F_{1/2}(\eta_c)}{F_{-1/2}(\eta_c)} \right) \nabla kT_n; \quad (3.35)$$

$$J_p = -\mu_p kT_p \frac{F_{1/2}(\eta_v)}{F_{-1/2}(\eta_v)} \nabla p + \mu_p p \nabla E_v + \frac{3kT_p}{2} \mu_p \frac{F_{1/2}(\eta_v)}{F_{-1/2}(\eta_v)} p \nabla \ln(\tilde{m}_n^*) - \\ - \mu_p p \left(\left(\frac{5}{2} + v_p \right) \frac{F_{3/2+v_p}(\eta_v)}{F_{1/2+v_p}(\eta_v)} - \frac{3}{2} \frac{F_{1/2}(\eta_v)}{F_{-1/2}(\eta_v)} \right) \nabla kT_p. \quad (3.36)$$

Эти уравнения связывают ток с градиентами концентраций носителей заряда, краем энергетической зоны, массой и температурой носителей заряда.

Токи термоэлектронной эмиссии и туннелирования применяются в случае, когда есть резкое изменение положения края зоны проводимости или края валентной зоны, которое формирует барьер для тока носителей заряда. Допущение для тока термоэлектронной эмиссии состоит в том, что все носители заряда с энергией больше высоты барьера вносят вклад в ток. Подобное допущение для тока туннелирования состоит в том, что только некоторое число носителей заряда с энергией ниже высоты барьера может туннелировать через барьер и вносить вклад в ток. На рис. 3.2 показан типичный барьер в структуре брэгговского рефлектора (DBR) n -типа, в которой используется тонкий слой AlGaAs между слоями GaAs и AlAs. На рис. 3.2 также показаны носители заряда, которые вносят вклад в ток.

Оценка следующего интеграла дает величину электронного тока, вызванного движением электронов от левой до правой стороны барьера:

$$J_{n \rightarrow +} = -q \int_0^{\infty} v_x T_n(E) g(E) f(E) dE, \quad (3.37)$$

где v_x – скорость носителей заряда в области барьера; $T_n(E)$ – вероятность прохода над барьером или через него; $g(E)$ – плотность состояний; $f(E)$ – функция распределения.

Подобный интеграл применим и к носителям заряда на другой стороне барьера, при этом полный ток есть разность между двумя интегралами. Уравнение (3.37) может быть разбито на два интеграла, для термоэлектронной эмиссии и для туннелирования:

$$J_{n \rightarrow +} = \underbrace{-q \int_U^{\infty} v_x g(E) f(E) dE}_{\text{термоэлектронная эмиссия}} - \underbrace{q \int_0^U v_x T_n(E) g(E) f(E) dE}_{\text{туннелирование}}. \quad (3.38)$$

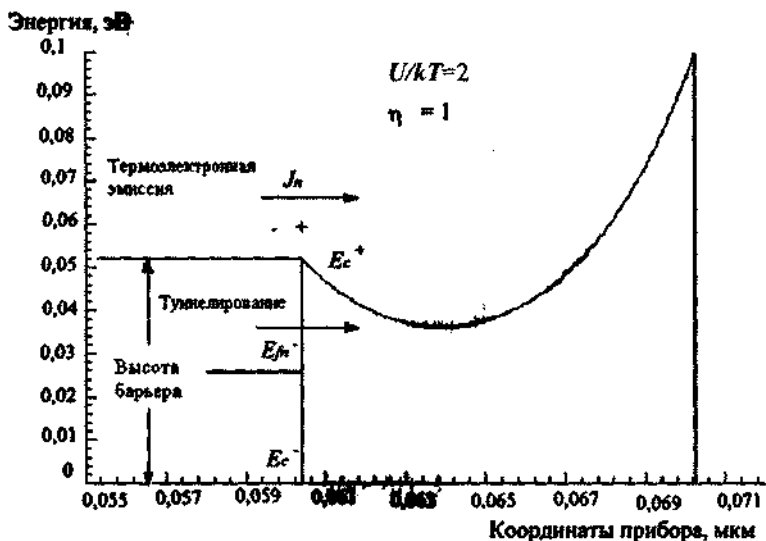


Рис. 3.2. Диаграмма термоэлектронной эмиссии

В этом уравнении предполагается, что вероятность перехода равна единице для всех термоэлектронно-эмитированных носителей заряда. Это не совсем точно, так как по квантово-механическим вычислениям вероятность перехода меньше единицы для носителей заряда как выше так и ниже вершины барьера. Для оценки вероятности перехода носителей заряда с энергией меньшей, чем высота барьера, *SW* использует WKB аппроксимацию:

$$T_n(E) = e^{-\frac{2\pi}{h} \int_0^{L(E)} \sqrt{2m^*(E_c - E)} dx} \quad (3.39)$$

На рис. 3.3 показана зависимость вероятности перехода заряда от энергии носителей для барьера, изображенного на рис. 3.2. Вертикальные линии обозначают положения квазиуровня Ферми для электронов и края зоны проводимости. На рис. 3.3 они показаны при тех же энергиях, что и на рис. 3.2. Неравномерность в вероятности перехода при значении энергии 1,4 эВ есть следствие наличия локального минимума в зоне проводимости при координате 0,064 мкм на рис. 3.2. Для энергий ниже этого минимума вероятность туннелирования резко уменьшается из-за большей длины туннелирования.

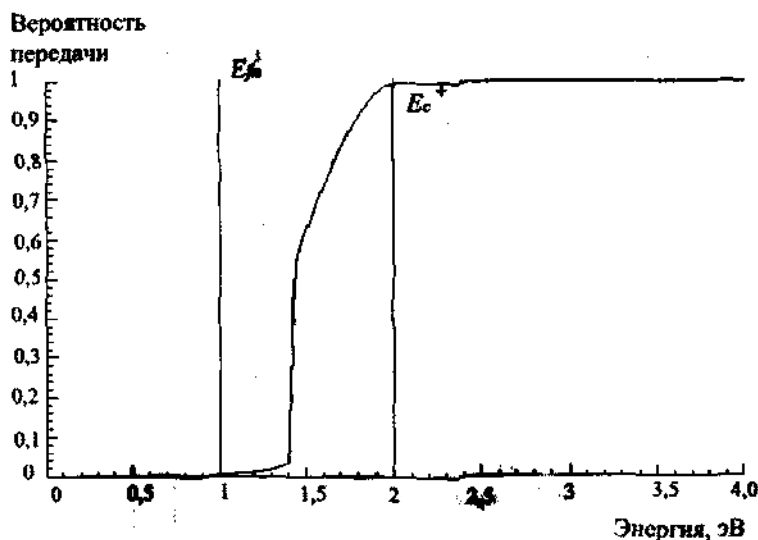


Рис. 3.3. Вероятность передачи носителей заряда для барьера, изображенного на рис. 3.2

Первый шаг в оценке (3.38) состоит в разделении энергии на параллельную (yz) и перпендикулярную (x) компоненты кинетической энергии. Параллельная компонента соответствует движению носителей заряда параллельно границе барьера, а перпендикулярная компонента соответствует движению перпендикулярно барьеру. Перпендикулярная компонента вносит вклад в ток. Разделение энергии преобразует уравнение (3.38) в двойной интеграл, состоящий из параллельной и перпендикулярной компонент:

$$J_{n \rightarrow +} = -q \int_{U_c}^{\infty} \int_0^{\infty} v_x g(E) f(E) dE_{yz} dE_x - \\ - q \int_0^{U_c} \int_0^{\infty} v_x T_n(E) g(E) f(E) dE_{yz} dE_x. \quad (3.40)$$

Интегрируя (3.40) по энергии E_{yz} и используя статистику Ферми-Дирака, получаем:

$$J_{n \rightarrow p} = -A_n^* \frac{T_n}{k} \left\{ \underbrace{\int_{U_c^-}^{\infty} \ln(1 + e^{n_c - E_x / kT_n}) dE_x}_{\text{термоэлектронная эмиссия}} + \underbrace{\int_0^{U_c^-} T_n(E_x) \ln(1 + e^{n_c - E_x / kT_n}) dE_x}_{\text{тунелирование}} \right\}, \quad (3.41)$$

где A_n^* – константа Ричардсона:

$$A_n^* = \frac{qm_n^* k^2}{2\pi^2 \hbar^3}. \quad (3.42)$$

Уравнение (3.41) описывает только те носители заряда, которые перемещаются слева направо. Подобное выражение используется и для носителей заряда, перемещающихся справа налево. В состоянии равновесия эти два тока должны быть равны. Уравнение (3.41) предполагает, что истинны следующие два условия. Во-первых, в константе Ричардсона используется более «легкая» масса электрона в одном из двух материалов. Это объясняется возможным полным внутренним отражением носителей заряда при движении от материала с более «тяжелой» массой электрона к материалу с более легкой массой.

В этом случае вероятность перехода равна вероятности пересечения потенциального барьера носителями заряда, которые не подвергаются полному внутреннему отражению. Во-вторых, вероятность перехода для носителей заряда, перемещающихся слева направо, та же по величине, что и для частиц, перемещающихся справа налево. При этих двух условиях полный ток будет равен нулю, когда квазиуровни Ферми постоянны в зоне неоднородности материалов.

На рис. 3.4 приведен график подынтегрального выражения (3.41) для барьера, показанного на рис. 3.2, при использовании статистик Больцмана и Ферми – Дирака. Площади под этими кривыми соответствуют току носителей заряда, протекающему слева направо. Как и ожидается, статистика Больцмана аппроксимирует статистику Ферми – Дирака при более высоких энергиях. Обычно при обсуждении тока

термоэлектронной эмиссии используют статистику Больцмана, при этом первый член в уравнении (3.41) упрощается до простой экспоненты. Этот интеграл имеет аналитическое решение даже при использовании статистики Ферми – Дирака. Второй интеграл в (3.41) вообще не имеет аналитического решения из-за прямой зависимости вероятности перехода от положения краев зон. SW использует аналитическое выражение (3.43), представленное ниже, для тока термоэлектронной эмиссии, а также использует численный интеграл для тока туннелирования.

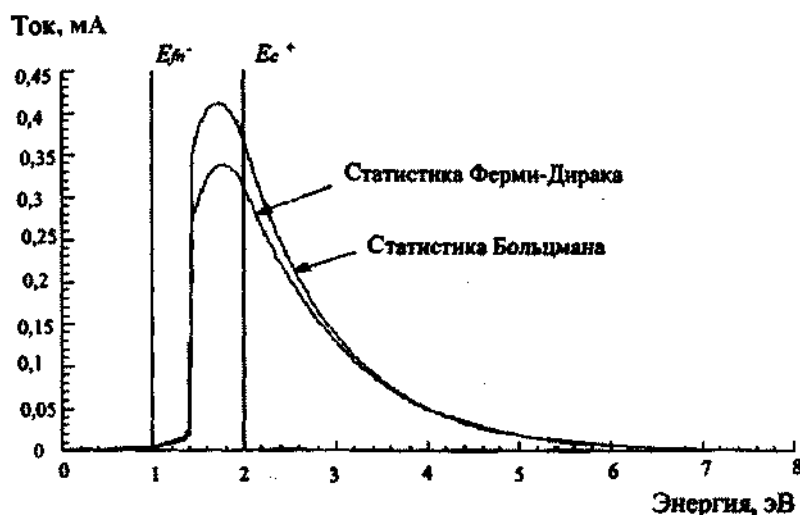


Рис. 3.4. Ток в зависимости от энергии для барьера, изображенного на рис. 3.2

Весьма просто оценить интеграл термоэлектронной эмиссии в случае функции распределения Больцмана:

$$J_{n \rightarrow +}^{therm} = -A_n^* T_n^2 e^{\eta_c - \frac{U_c - 1}{kT_n}} \quad (3.43)$$

При моделировании прибора невозможно предсказать, что приближение Больцмана будет справедливо всегда. Эквивалентное выражение для тока с применением функции распределения Ферми – Дирака гарантировало бы, что SW использует выражение, которое возможно использовать всегда. Аналитическое выражение для тока термоэлектронной эмиссии при использовании статистики Ферми – Дирака имеет вид

$$J_{therm} = -A_n^* T_n^2 \left\{ Li_2 \left(\frac{1}{1 + e^{-(\eta_c - U_c - kT_n)}} \right) + \frac{1}{2} \left[\ln(1 + e^{(\eta_c - U_c - kT_n)}) \right]^2 \right\}, \quad (3.44)$$

где Li_2 – дилогарифмическая функция.

Уравнение (3.44) труднее поддается интуитивной интерпретации по сравнению с уравнением (3.43). Уравнение (3.43) приближается к уравнению (3.44), когда квазиуровень Ферми лежит намного ниже вершины барьера. На рис. 3.5 это иллюстрируется путем нормализованной зависимости величины тока от высоты барьера для квазиуровня Ферми электронов, лежащего на kT выше края зоны проводимости. Так как (3.43) и (3.44) являются только функциями разницы энергий между квазиуровнем Ферми и вершиной барьера, то учет энергетических уровней внизу барьера не важен при определении величины тока.

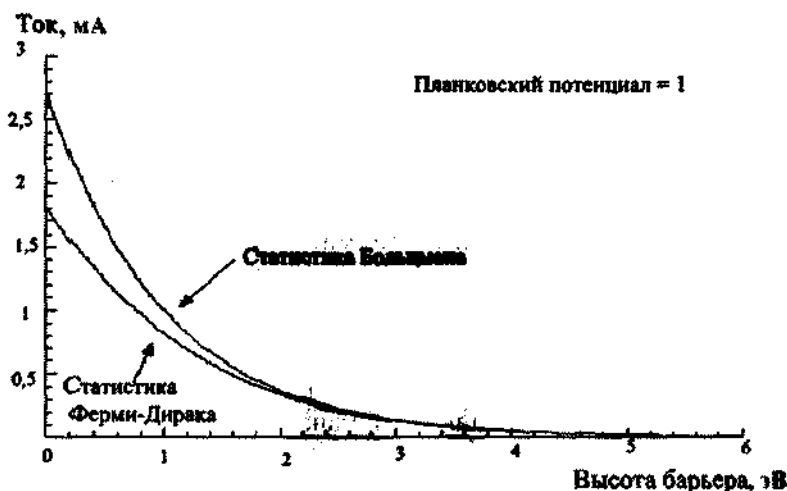


Рис. 3.5. Ток термоэлектронной эмиссии в зависимости от высоты барьера

Рекомбинация и генерация

SW включает четыре механизма рекомбинации и генерации, такие, как излучательная рекомбинация «зона–зона», рекомбина-

ция по модели Шокли – Холла – Рида (ШХР), внешняя оптическая генерация и стимулированное излучение. Выражения для спонтанной и ШХР рекомбинации для объемных материалов имеют вид:

$$U_{b-b} = B(n \cdot p - n_i^2) \quad (3.45)$$

$$U_{shr} = \frac{n \cdot p - n_i^2}{(p + n_i)\tau_{n0} + (n + n_i)\tau_{p0}}. \quad (3.46)$$

Выражение для ШХР рекомбинации (3.46) всегда предполагает, что уровень ловушек располагается на уровне, свойственном данному материалу с собственной проводимостью.

Для областей с квантово-размерными ямами выражения для рекомбинации отличаются из-за двумерной природы носителей заряда и их волновых функций:

$$U_{b-b} = \frac{1}{L_{qw}} \left| \int_0^{L_{qw}} \psi_n(x) \psi_p(x) dx \right|^2 B_{qw}(n_{2d} p_{2d} - n_{i,2d}^2); \quad (3.47)$$

$$U_{shr} = \frac{1}{L_{qw}} \left| \int_0^{L_{qw}} \psi_n(x) \psi_p(x) dx \right|^2 \frac{n_{2d} p_{2d} - n_{i,2d}^2}{(p_{2d} + n_{i,2d})\tau_{n0} + (n_{2d} + n_{i,2d})\tau_{p0}}. \quad (3.48)$$

Эти выражения заменяют выражения для рекомбинации в объемном материале, заменяя трехмерные концентрации носителей заряда в уравнениях (3.45) и (3.46) двумерными концентрациями носителей заряда в квантовых ямах.

Граничные условия

Завершая обсуждение электрической модели прибора, необходимо привести граничные условия для трех фундаментальных переменных. *SW* использует только омические граничные состояния. Предполагается, что нет никакого падения напряжения на контактах и скорость поверхностной рекомбинации на контактах бесконечно велика. Это справедливо для всех эксплуатационных режимов прибора, при этом потенциал на левом контакте прибора равен приложенному напряжению на левом контакте. Потенциал на правом контакте прибора равен приложенному напряжению на правом контакте с добавлением величины встроенного потенциала. Так как скорость

рекомбинации на контакте очень велика, потенциалы Планка электронов и дырок сохраняют свои равновесные значения. Выражения (3.49)–(3.51) представляют эти граничные условия:

$$\varphi(0) = V_i; \quad \varphi(L) = \varphi_0 + V_r; \quad (3.49)$$

$$\eta_c(0) = \eta_{c0}(0); \quad \eta_c(L) = \eta_{c0}(L); \quad (3.50)$$

$$\eta_v(0) = \eta_{v0}(0); \quad \eta_v(L) = \eta_{v0}(L). \quad (3.51)$$

Эти граничные условия достаточны для всех приборов, представленных в данном пособии.

3.3. Внешняя оптическая генерация

При моделировании фотодетекторов или солнечных батарей программа *SW* должна использовать рассчитанные электромагнитные поля, а также входную оптическую мощность для того, чтобы вычислить скорость генерации носителей заряда. Уравнения непрерывности объединяют скорость генерации с рекомбинационными процессами. Так как оптическая мощность является измеряемой величиной, при вычислении скорости оптической генерации сначала вычисляется значение вектора Пойтинга, усредненное по времени. Этот вектор в каждой области прибора составляет

$$\bar{S}_j = \frac{1}{2} [E_j \times H_j^*]. \quad (3.52)$$

Используя поля в выражениях (3.42) и (3.43), получаем усредненное по времени значение вектора Пойтинга:

$$\bar{S}_j = \bar{S}_j^+ - \bar{S}_j^- + \Re \left[\frac{i \Im \left(E_j^- E_j^{+*} e^{i(2k_j \Re(n_j)(x-x_j))} \right)}{Z_j^*} \right], \quad (3.53)$$

где векторы Пойтинга для отдельных волн есть

$$\bar{S}_j^+ = \frac{1}{2} |E_j^+|^2 e^{-\alpha(x-x_j)} \Re(1/Z_j^*); \quad \bar{S}_j^- = \frac{1}{2} |E_j^-|^2 e^{\alpha(x-x_j)} \Re(1/Z_j^*). \quad (3.54)$$

В уравнениях (3.53) и (3.54) « $\Re$ » и « $\Im$ » – реальные и мнимые компоненты соответственно. Полное значение вектора Пойтинга

(единица измерения – $[\text{Вт} \cdot \text{см}^{-2}]$) есть мера полного количества оптической энергии, пересекающей плоскость в единицу времени. Уравнение (3.53) равно нулю, когда в среде с совершенным отражателем, который отражает всю падающую энергию, нет потерь. Когда нет отражения, то поле для прямого или обратного распространения равно нулю в зависимости от направления падающего света. В этих условиях третий член в (3.53) равен нулю и полное значение вектора Пойтинга равно вектору Пойтинга для единственной распространяющейся волны.

До этого момента векторы поля и векторы Пойтинга были записаны в относительных произвольных единицах. Теперь нужно привести значение полей к единице и к нулю. Сначала пользователь определяет падающую оптическую мощность, затем масштабирует значения векторов Пойтинга в соответствии с данной падающей мощностью. Умножение векторов Пойтинга во всех областях прибора на одну и ту же величину приведет масштабирование вектора Пойтинга падающего излучения к данной мощности падающего излучения. Уравнения (3.54) позволяют повторно рассчитать значения полей, соответствующих падающему вектору Пойтинга. Теперь из уравнения (3.53) можно правильно вычислить полное значение вектора Пойтинга.

Заключительным шагом является вычисление оптической мощности, поглощаемой полупроводником при генерации носителей заряда. Дифференцируя уравнение (3.53) по x , получаем изменение мощности, переносимой электромагнитной волной:

$$\left. \frac{d\bar{S}_j}{dx} \right|_{x=x_j} = -\alpha \bar{S}_j^+ - \alpha \bar{S}_j^- + k_0 \Re(n_j) \Re \left[\frac{2i \Re(E_j^- E_j^{+*})}{Z^*} \right] \quad (3.55)$$

Уравнение (3.55) описывает изменение мощности электромагнитной волны, отрицательное значение изменения мощности означает, что эта мощность поставляется полупроводнику. Деление мощности на энергию фотона дает число носителей заряда, генерированных в единице объема за единицу времени. В SW можно также задать спектр падающих фотонов. Описанный выше расчет можно провести для каждого значения энергии фотона в спектре. Итоговым результатом определения скорости оптической генерации является сумма скоростей оптического поглощения для каждого значения энергии фотона:

$$G_{opt}(x) = \sum_{h\nu_{opt}} G_{v,opt}(x) = \sum_{h\nu_{opt}} \left(\frac{\alpha \overline{S}_j^+ + \alpha \overline{S}_j^- - k_0 \Re(n_j) \Re \left[\frac{2i \Re(E_j^- E_j^{*+})}{Z^*} \right]}{h\nu_{opt}} \right) \quad (3.56)$$

На рис. 3.6 показана равновесная зонная диаграмма $Al_{0,4}Ga_{0,6}As$ солнечной батареи с десятью GaAs квантово-размерными ямами в области прибора с собственной проводимостью.

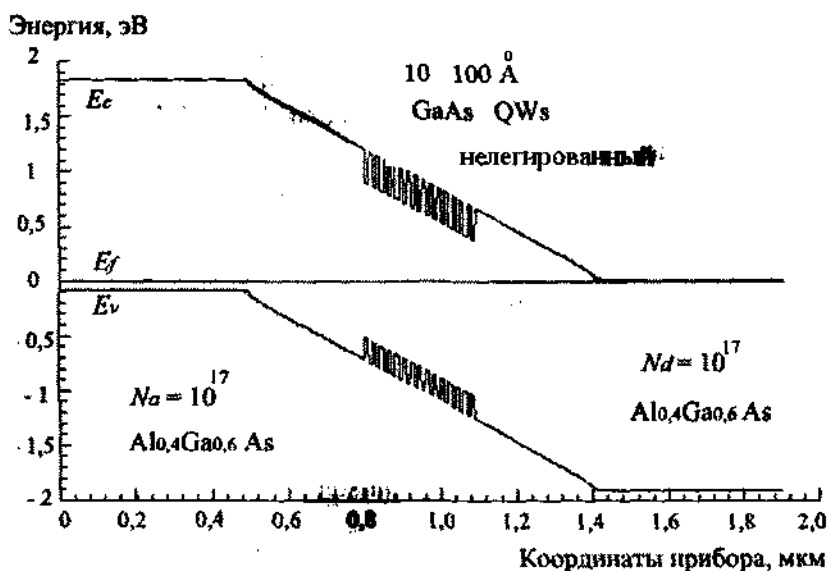


Рис. 3.6. Равновесная зонная диаграмма солнечной батареи с 10 квантово-размерными ямами

На рис. 3.7 показана скорость оптической генерации для падающего солнечного спектра типа AM1,5 с отражением на границах и без него. Так как отражение на границах включает отражение на внешних поверхностях прибора, то на рис. 3.7 показано также полное уменьшение скорости оптической генерации при отражении на фронтальной поверхности, а также периодичность скорости генерации из-за большого количества границ внутри прибора, возникающих из-за наличия квантово-размерных ям в приборе.

Скорость генерации, $\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$



Рис. 3.7. Скорость оптической генерации в структуре, изображенной на рис. 3.6

3.4. Энергия

Электрические и оптические модели, представленные выше, достаточны, если тепловые свойства прибора несущественны для его описания. В настоящее время многие приборы, включая лазеры с поверхностным выводом излучения (VCSEL), обнаруживают некоторые свойства, которые могут быть объяснены только на основе учета тепловых эффектов. Поэтому *SW* включает уравнения, которые управляют температурой прибора.

При рассмотрении температуры прибора анализируются четыре системы: электроны, дырки, решетка и окружающая среда. Ключевое предположение состоит в том, что новые частицы, которые добавляются к любой из систем, немедленно термализуются с частицами, уже имеющимися в этой системе. Их энергия перераспределяется по всей совокупности частиц так, что равновесное распределение всегда описывает энергию частиц в данной системе. Так как системы обмениваются между собой энергией, то, как и в стационарном состоянии, их температуры выравниваются и каждая система приобретает такое же количество энергии, какое она теряет. В результате температура системы равна средней энергии всех частиц в этой сис-

теме. Окружающая среда – специальная система, которая действует как бесконечный резервуар энергии. Температура окружающей среды известна и используется как граничное условие. Далее полезно рассмотреть окружающую среду и ее взаимодействие с другими системами.

Ниже рассматриваются различные тепловые модели, которые используются при моделировании полупроводникового прибора.

Модель «трех температур» (МТР)

МТР – самая общая модель, согласно которой электроны, дырки и решетка имеют свои температуры. Уравнения, которые определяют три температуры, схожи с электрическими уравнениями за исключением того, что эти уравнения управляют энергией вместо тока. Здесь вначале представлены уравнения для скорости изменения энергии электронов, дырок, и решетки. Эти «скоростные» уравнения представляют собой баланс между потоком энергии и потерями энергии в приборе. Далее представлены уравнения для потока энергии и соотношения для потерь энергии.

Решения уравнения для трех фундаментальных температур требует трех «скоростных» уравнений (3.57)–(3.59) – для энергий электронов, дырок и решетки. SW использует эти уравнения только для стационарного состояния:

$$\nabla \cdot S_n^{tot}(x) + W_n^{tot}(x) = \frac{\partial u_n}{\partial t}; \quad (3.57)$$

$$\nabla \cdot S_p^{tot}(x) + W_p^{tot}(x) = \frac{\partial u_p}{\partial t}; \quad (3.58)$$

$$\nabla \cdot S_{lat}(x) - W_{lat}(x) = \frac{\partial u_{lat}}{\partial t}; \quad (3.59)$$

где S – полный поток энергии, Дж · см⁻² · с⁻¹; W – полные потери энергии в объеме, Дж · см⁻³ · с⁻¹.

Так как параметры в этих уравнениях представляют полную, а не только кинетическую энергию, уравнения (3.57) и (3.58) в явном виде не включают члены джоулева нагрева, а также теплоту $J_{np} \cdot E_{cv}$. Согласно определениям S и W , которые представлены ниже, эти уравнения математически эквивалентны уравнениям для кинетической энергии и неявно включают член джоулева нагрева.

Для решения уравнений (3.57)–(3.59) требуется запись выражений для потока энергии S . Описание потока энергии носителей заряда подобно описанию тока.

Первоначальное выражение для определения потока:

$$S^{tot} = \frac{1}{4\pi^3} \iiint v E f dk_x dk_y dk_z. \quad (3.60)$$

Это выражение похоже на уравнение (3.29) для тока за исключением того, что полная энергия носителей заряда заменяет ток.

Так как полная энергия есть сумма кинетической и потенциальной энергии, уравнение (3.60) может быть разбито на два.

Для электронов полный поток энергии составляет

$$S_n^{tot} = \frac{1}{4\pi^3} \iiint v (E - E_c) f dk_x dk_y dk_z + \frac{E_c}{4\pi^3} \iiint v f dk_x dk_y dk_z. \quad (3.61)$$

Первый интеграл – поток кинетической энергии, где $(E - E_c)$ – кинетическая энергия каждого электрона. Второй интеграл – поток потенциальной энергии, где край зоны проводимости E_c есть потенциальная энергия каждого электрона. Второй интеграл связан с током, поэтому уравнение (3.61) приобретает следующий вид:

$$S_n^{tot} = \frac{1}{4\pi^3} \iiint v (E - E_c) f dk_x dk_y dk_z + \frac{E_c J_n}{-q}. \quad (3.62)$$

Те же самые методы, которые были использованы при получении выражений для тока, позволяют решить уравнения (3.62) и получить выражения, описывающие потоки энергии электронов для случаев дрейфа и диффузии, термоэлектронной эмиссии и туннелирования.

Применяя то же самое приближение Больцмана к уравнениям переноса для диффузионно-дрейфового тока, получаем уравнения для диффузионно-дрейфовых потоков энергии электронов и дырок:

$$S_n^{tot} = -\mu_n n \frac{kT_n}{q} \left\{ (kT_n \nabla \eta_c + \nabla E_c) \left(\frac{5}{2} + v_n \right) \frac{F_{3/2+v_n}(\eta_c)}{F_{1/2+v_n}(\eta_c)} \right. \\ \left. + \nabla kT_n \left(\frac{7}{2} + v_n \right) \left(\frac{5}{2} + v_n \right) \frac{F_{5/2+v_n}(\eta_c)}{F_{1/2+v_n}(\eta_c)} \right\} + \frac{E_c J_n}{-q}; \quad (3.63)$$

$$S_p^{tot} = -\mu_p p \frac{kT_p}{q} \left\{ (kT_p \nabla \eta_v - \nabla E_v) \left(\frac{5}{2} + v_p \right) \frac{F_{3/2+v_p}(\eta_v)}{F_{1/2+v_p}(\eta_v)} + \nabla kT_p \left(\frac{7}{2} + v_p \right) \left(\frac{5}{2} + v_p \right) \frac{F_{5/2+v_p}(\eta_v)}{F_{1/2+v_p}(\eta_v)} \right\} - \frac{E_v J_p}{q}. \quad (3.64)$$

Эти уравнения похожи на уравнения (3.34) и (3.35) для тока. Снова применяя уравнение (3.36) для градиента потенциала Планка, приводим уравнения (3.63) и (3.64) к стандартным обобщенным диффузионно-дрейфовым уравнениям:

$$S_n^{tot} = -\left(\frac{5}{2} + v_n \right) \frac{F_{3/2+v_n}(\eta_c)}{F_{1/2+v_n}(\eta_c)} \mu_n \frac{kT_n}{q} \times \left\{ kT_n \frac{F_{1/2}(\eta_c)}{F_{-1/2}(\eta_c)} \nabla n + n \nabla E_c - \right. \\ \times \left. - \frac{3}{2} kT_n n \frac{F_{1/2}(\eta_c)}{F_{-1/2}(\eta_c)} \nabla \ln(m_n^*) + \right. \\ \left. + n \left(\left(\frac{7}{2} + v_n \right) \frac{F_{5/2+v_n}(\eta_c)}{F_{3/2+v_n}(\eta_c)} - \frac{3}{2} \frac{F_{1/2}(\eta_c)}{F_{-1/2}(\eta_c)} \right) \nabla kT_n \right\} + \frac{E_c J_n}{-q}; \quad (3.65)$$

$$S_p^{tot} = -\left(\frac{5}{2} + v_p \right) \frac{F_{3/2+v_p}(\eta_v)}{F_{1/2+v_p}(\eta_v)} \mu_p \frac{kT_p}{q} \times \left\{ kT_p \frac{F_{1/2}(\eta_v)}{F_{-1/2}(\eta_v)} \nabla p - p \nabla E_v - \right. \\ \left. - \frac{3}{2} kT_p p \frac{F_{1/2}(\eta_v)}{F_{-1/2}(\eta_v)} \nabla \ln(m_p^*) + \right. \\ \left. + p \left(\left(\frac{7}{2} + v_p \right) \frac{F_{5/2+v_p}(\eta_v)}{F_{3/2+v_p}(\eta_v)} - \frac{3}{2} \frac{F_{1/2}(\eta_v)}{F_{-1/2}(\eta_v)} \right) \nabla kT_p \right\} - \frac{E_v J_p}{q}. \quad (3.66)$$

Уравнения для потоков энергии носителей заряда при термоэлектронной эмиссии и туннелировании получаем тем же способом, что и уравнения для тока термоэлектронной эмиссии и тока туннели-

рования. Полный поток энергии связан с током термоэлектронной эмиссией и током туннелирования так:

$$S_{n \rightarrow +}^{tot} = \underbrace{\int_{U_c^-}^{\infty} v_x(E - E_c) g(E) f(E) dE}_{\text{термоэлектронная эмиссия}} + \underbrace{\int_0^{U_c^-} v_x T_n(E) (E - E_c) g(E) f(E) dE}_{\text{туннелирование}} + \frac{E_c - J_{n \rightarrow +}}{-q}. \quad (3.67)$$

Разделив энергию на параллельную и перпендикулярную компоненты и интегрируя их по параллельным членам энергии (термоэлектронной эмиссии и туннелированию), получим выражение для первого интеграла в уравнении (3.65) для статистики Больцмана:

$$S_{n \rightarrow +}^{therm} = \frac{A_n^* T_n^2}{q} \int_{U_c^-}^{\infty} \left(1 + \frac{E_x}{kT_n}\right) e^{\eta_c - E_x/kT_n} dE_x. \quad (3.68)$$

Соответствующий интеграл для статистики Ферми – Дирака:

$$S_{n \rightarrow +}^{therm} = \frac{A_n^* T_n^2}{q} \times \int_{U_c^-}^{\infty} \left\{ \begin{aligned} &(\eta_c - \ln(1 + e^{\eta_c - E_x/kT_n})) \ln(1 + e^{\eta_c - E_x/kT_n}) + Li_2\left(\frac{1}{1 + e^{\eta_c - E_x/kT_n}}\right) + \\ &+ \ln\left(\frac{1}{1 + e^{\eta_c - E_x/kT_n}}\right) \ln\left(\frac{1}{1 + e^{\eta_c - E_x/kT_n}}\right) \end{aligned} \right\} dE_x. \quad (3.69)$$

где Li_2 – дилогарифмическая функция.

Подобные интегралы были бы применимы и для потока энергии при туннелировании носителей заряда, за исключением необходимости учета вероятности перехода и других пределов интегрирования. На рис. 3.8 показан нормализованный поток энергии в зависимости от энергии барьера, изображенного на рис. 3.2. Как и прежде, выражение Ферми – Дирака аппроксимируется к больцмановскому выражению при более высоких энергиях.

Кинетическая
энергия, эВ

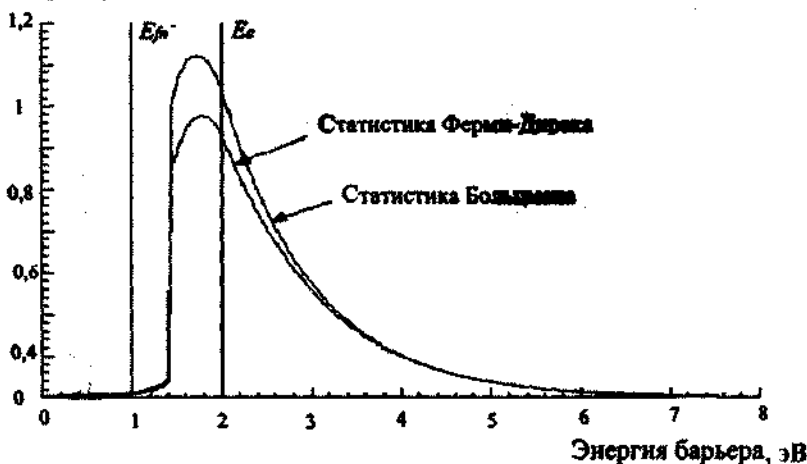


Рис. 3.8. Поток кинетической энергии в зависимости от энергии для барьера, изображенного на рис. 3.2

Из-за необходимости учета вероятности перехода SW вычисляет интеграл туннелирования в числовом виде. Для потока энергии при термоэлектронной эмиссии существуют аналитические решения при использовании как статистики Больцмана, так и статистики Ферми – Дирака. Для статистики Больцмана имеем:

$$S_{n \rightarrow +}^{therm} = \frac{A_n^* k T_n^3}{q} \left(2 + \frac{U_{c-}}{k T_n} \right) e^{e\phi_{c-} - U_{c-}/k T_n}. \quad (3.70)$$

Из этого выражения видно, что кинетическая энергия, которую несут термически эмитированные электроны, на $2kT$ больше высоты барьера. Этот результат отличен от «интуитивного» результата «на $3/2kT$ выше высоты барьера», который был бы конечным результатом, если бы поток энергии определялся электронами со средней скоростью. Результат при использовании статистики Ферми – Дирака имеет следующий вид:

$$S_{n \rightarrow +}^{down} = \frac{A_n^* T_n^3}{q} \left[\begin{aligned} & 2 \left\{ Li_3 \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{U_{c-}}{kT_n} - \eta_{c-}}} \right) + Li_3 \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{\eta_{c-} U_{c-}}{kT_n}}} \right) - Li_3(1) \right\} + \\ & + \left(\frac{U_{c-}}{kT_n} \right) Li_2 \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{U_{c-}}{kT_n} - \eta_{c-}}} \right) + \\ & + \frac{1}{3} \eta_{c-} (\eta_{c-}^2 + \pi^2) - \left(\frac{U_{c-}}{kT_n} \right) \left(\frac{\eta_{c-}^2}{2} + \frac{\pi^2}{3} \right) + \frac{1}{6} \left(\frac{U_{c-}}{kT_n} \right)^3 - \\ & - \ln(1 + e^{\frac{U_{c-}}{kT_n} - \eta_{c-}}) \left\{ \frac{2}{3} \ln^2(1 + e^{\frac{U_{c-}}{kT_n} - \eta_{c-}}) \right. \\ & \left. - \left(\frac{3}{2} \frac{U_{c-}}{kT_n} - \eta_{c-} \right) \ln(1 + e^{\frac{U_{c-}}{kT_n} - \eta_{c-}}) \right. \\ & \left. + \left(\frac{U_{c-}}{kT_n} \right) \left(\frac{U_{c-}}{kT_n} - \eta_{c-} \right) - \frac{\pi^2}{3} \right\} \end{aligned} \right], \quad (3.71)$$

где Li_3 – трилогарифмическая функция.

Величина в квадратных скобках безразмерна, и только функция потенциала Планка и высота барьера делятся на температуру. Уравнение (3.71) сводится к (3.70), если работает статистика Больцмана. На рис. 3.9 показано, что уравнение (3.71) приближается к (3.70) при больших высотах барьера. На этом рисунке показан нормализованный поток энергии электронов в зависимости от высоты барьера при положении квазиуровня Ферми на $1kT$ выше дна зоны проводимости.

Если сравнить рис. 3.9 и рис. 3.5, то видна разница между зависимостями для тока и потока энергии от высоты барьера. Для тока расхождение между кривыми Больцмана и Ферми – Дирака больше, так как носители заряда с низкой энергией имеют тот же самый заряд, что и носители заряда с высокой энергией, но энергия, которую несут частицы с низкой энергией, меньше, чем энергия, переносимая частицами с высокой энергией.

В программе *SW* уточнена модель для описания потока энергии решетки с целью учета потерь энергии на боковой поверхности приборов. Хотя *SW* решает полупроводниковые уравнения в одномерном приближении, уточненная модель моделирует поток энергии с учетом боковых сторон приборов. Было необходимо создать уточненную энергетическую модель еще и потому, что повышение температуры при моделировании VCSEL-лазерных структур слишком велико, если использовать стандартную модель.

**Нормализованный
поток энергии, отн. ед.**

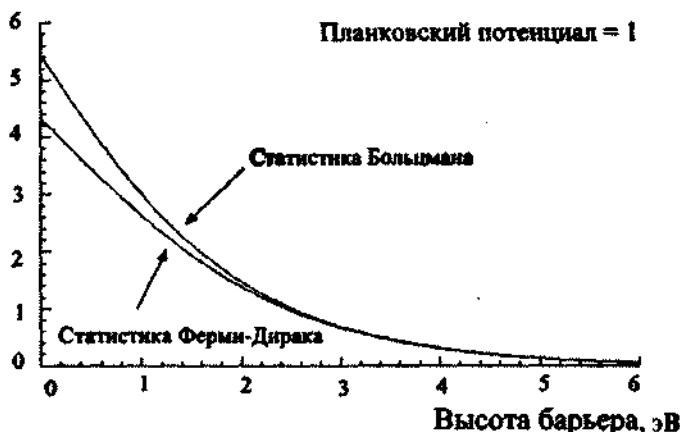


Рис. 3.9. Нормализованный поток энергии в зависимости от высоты барьера

Уточненная модель потока энергии решетки имеет вид

$$S_{lat} = -k(x) \nabla T_L \mathcal{E} + \frac{\Delta x}{\pi r_d^2} k_e(x) (T_L(x) - T_{env}) \mathcal{E}, \quad (3.72)$$

где $k(x)$ — теплопроводность материала, $\text{Вт} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$; $k_e(x)$ — эффективная теплопроводность окружающей среды на единицу длины устройства, $\text{Вт} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$; r_d — радиус прибора.

Первый член уравнения — стандартное выражение для потока энергии решетки, второй член — дополнительный боковой поток энергии, который зависит от локальной температуры решетки и температуры окружающей среды.

При вычислении $k_e(x)$ SW предполагает, что прибор является цилиндром с радиусом r_d и окружен тепловым радиатором с радиусом r_e и температурой T_{env} (рис. 3.10).

При такой геометрии прибора есть аналитическое решение для температуры, в зависимости от радиусов прибора и окружающей среды. Уравнение для температуры как функции радиуса:

$$T_{env}(x, r) = T_{env} - \frac{T_L(x) - T_{env}}{\ln \left(\frac{r_{env}}{r_d} \right)} \ln \left(\frac{r}{r_d} \right). \quad (3.73)$$

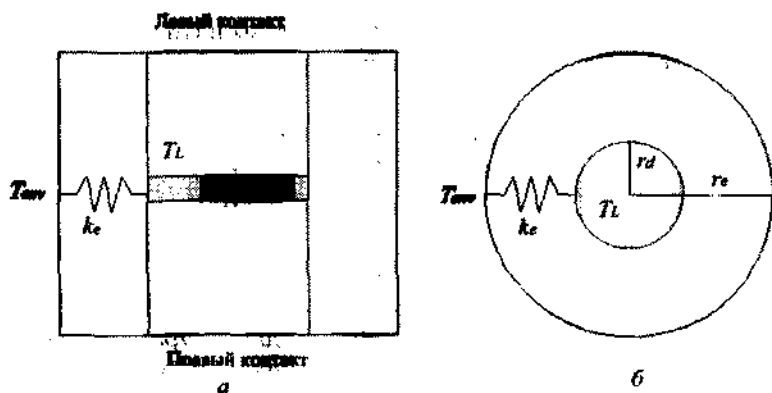


Рис. 3.10. Геометрия теплоотвода: а – вид сбоку; б – вид сверху

Расчет по этому уравнению начинают с интегрирования нормального компонента по потоку на теплоотводе, располагающемся вокруг прибора. Результат интегрирования в пределах от величины радиуса прибора до радиуса окружающей среды приводит к уравнению (3.73). На рис. 3.11 показана эта зависимость для случая, когда внутренняя температура прибора равна 300 и 500 К. В обоих случаях внешняя температура окружающей среды равна 400 К, радиус устройства 3,5 мкм и внешний радиус прибора (радиус окружающей среды) 100 мкм.

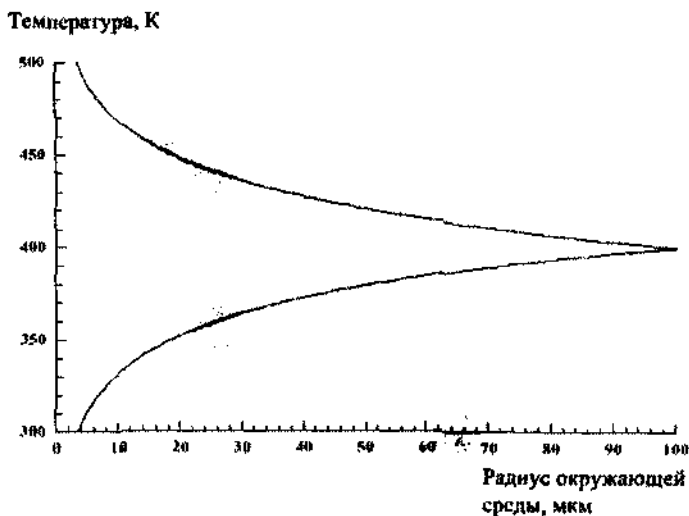


Рис. 3.11. Температура окружающей среды в зависимости от радиуса

Используя следующее уравнение, можно вычислить эффективную теплопроводность между прибором и окружающей средой:

$$k_e(x, T_L(x), T_{env}) = \frac{2\pi}{\int_{r_d}^{r_e} \frac{dr}{rk(x, T(x, r))}}. \quad (3.74)$$

Из-за того что k зависит от температуры, при выводе (3.73) и (3.74) необходимо использовать температурную зависимость k . Так как пользователь задает общую функцию для k , уравнения (3.73) и (3.74) обычно не имеют аналитических решений. Для типичных полупроводниковых материалов есть решение этой проблемы без численной оценки (3.73) и (3.74). Предполагая, что k не зависит от температуры, из (3.74) получаем:

$$k_e(x, T_L(x), T_{env}) = k(x) \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{r_e}{r_d}\right)}. \quad (3.75)$$

Далее, используя температурную зависимость k , оценивают (3.75). При этом есть два подхода к решению. Первый подход состоит в предположении, что k_e зависит только от локальной температуры решетки. Второй подход предполагает, что k_e зависит от средней величины температуры решетки и температуры окружающей среды. Эти два подхода описываются следующими отношениями:

$$k_e(x, T_L(x), T_{env}) = k(x, T_L(x)) \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{r_e}{r_d}\right)}; \quad (3.76a)$$

$$k_e(x, T_L(x), T_{env}) = k\left(x, \frac{T_L(x) + T_{env}}{2}\right) \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{r_e}{r_d}\right)}. \quad (3.76b)$$

На рис. 3.12 показана зависимость k_e от внутренней температуры решетки для обоих выражений (3.76a, 3.76b) при температуре внешней среды 400 К.

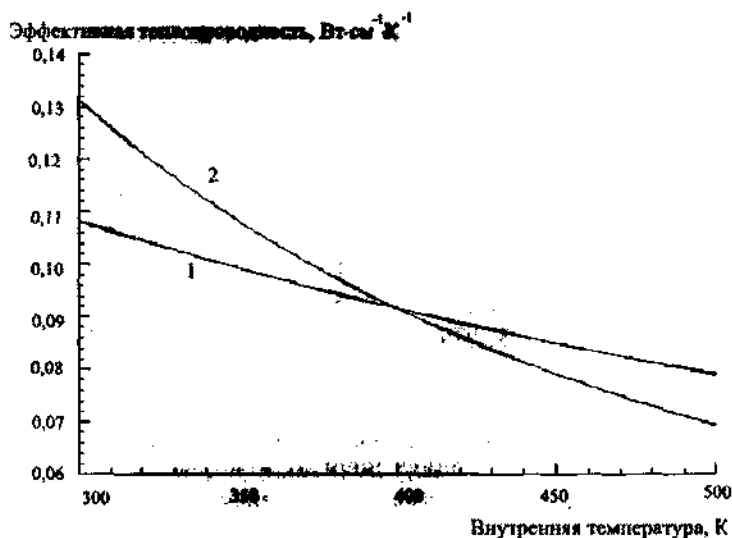


Рис. 3.12. Эффективная теплопроводность в зависимости от внутренней температуры: 1 — изменение теплопроводности в зависимости от средней температуры; 2 — изменение теплопроводности в зависимости от внутренней температуры

На рис. 3.12 также показаны результаты вычислений (3.76а), 3.76б), при этом используется температурная зависимость теплопроводности для GaAs. Очевидно предположение, что k_e изменяется в зависимости от средней величины внутренней температуры и температуры окружающей среды. Для диапазона значений внутренней температуры, показанного на рис. 3.10, разница между числовыми и аппроксимированными результатами меньше, чем 0,1 %. Из рис. 3.12 также следует, что использование только внутренней температуры для нахождения k_e некорректно. Результаты, при получении которых используются средняя температура, внутренняя температура прибора и численная оценка, идентичны, когда внутренняя температура прибора равна внешней температуре. В этом случае теплопроводность «прибор — окружающая среда» постоянна.

Чтобы завершить модель «трех температур», необходимо рассмотреть изменение энергии в результате рекомбинации носителей заряда. Поток энергии должен изменяться при изменении энергии из-за рекомбинации носителей заряда и релаксации энергии. В «скоростных» уравнениях для энергии (3.57)–(3.59) используется сумма всех механизмов потерь энергии. Выражения для полных потерь энергии:

$$W_n^{tot} = W_{n,shr}^{tot} + W_{n,b-b}^{tot} + W_{n,stim}^{tot} - W_{n,opt}^{tot} + W_{n,relax}; \quad (3.77)$$

$$W_p^{tot} = W_{p,shr}^{tot} + W_{p,b-b}^{tot} + W_{p,stim}^{tot} - W_{p,opt}^{tot} + W_{p,relax}; \quad (3.78)$$

$$W_{lat}^{tot} = W_{n,shr}^{tot} + W_{p,shr}^{tot} + W_{n,relax} + W_{p,relax}. \quad (3.79)$$

Уравнения (3.77) и (3.78) выражают полную потерю энергии носителями заряда как сумму потерь энергии от ШХР рекомбинации, спонтанного излучения, стимулированного излучения, внешней оптической генерации и релаксации энергии носителей заряда. Эти уравнения предполагают, что нет никакой прямой передачи энергии между электронами и дырками. Уравнение (3.79) выражает только те механизмы потерь энергии носителями заряда, которые вносят вклад в энергию решетки.

Единственные составляющие энергии, которые взаимодействуют с решеткой, — это ШХР рекомбинация и релаксация энергии носителей заряда.

Так как большинство составляющих потерь энергии в уравнениях (3.77)–(3.79) зависит от полной плотности энергии носителей заряда, удобно сначала представить выражения для полной плотности энергии.

Вывод этих выражений подобен выводу для концентрации носителей заряда. Для объемных материалов плотность энергии для электронов и дырок:

$$u_n = n \left(\frac{3}{2} kT_n \frac{F_{3/2}(\eta_c)}{F_{1/2}(\eta_c)} + E_c \right); \quad u_p = p \left(\frac{3}{2} kT_p \frac{F_{3/2}(\eta_v)}{F_{1/2}(\eta_v)} - E_v \right). \quad (3.80)$$

Плотность энергии для электронов и дырок в квантово-размерных ямах:

$$u_{n,2d} = n_{2d} \left\{ kT_n \frac{F_1 \left(\eta_c - \frac{E_{nqw}}{kT_n} \right)}{F_0 \left(\eta_c - \frac{E_{nqw}}{kT_n} \right)} + E_{nqw} + E_c \right\}; \quad (3.81)$$

$$u_{p,2d} = p_{2d} \left\{ kT_p \frac{F_1 \left(\eta_v - \frac{E_{pqw}}{kT_p} \right)}{F_0 \left(\eta_v - \frac{E_{pqw}}{kT_p} \right)} + E_{pqw} - E_v \right\}$$

$$u_n(x) = |\Psi_n(x)|^2 u_{n,2d}; \quad u_p(x) = |\Psi_p(x)|^2 u_{p,2d}. \quad (3.82)$$

Эти энергетические плотности представляют собой суммы кинетической и потенциальной энергии, что соответствует предыдущим определениям потока энергии и «скоростным» уравнениям для энергии.

Средняя энергия носителей заряда – это полная энергия, разделенная на число носителей заряда. В (3.80)–(3.82) средняя энергия равна $3/2kT$ плюс положение края зоны для объемных материалов и равна $2kT$ плюс энергия квантованного уровня и плюс энергия края зоны для квантово-размерных ям в остальных случаях.

Это следует из концепции, предполагающей, что каждой степени свободы носителей заряда соответствует $1/2kT$ кинетической энергии.

Для составляющих потерь энергии можно теперь использовать выражения для полной плотности энергии носителей заряда.

Для носителей заряда в объемном материале потери энергии из-за каждого рекомбинационного процесса составляют:

$$W_{n,shr}^{tot} = \left(\frac{u_n}{n} \right) U_{shr}; \quad W_{p,shr}^{tot} = \left(\frac{u_p}{p} \right) U_{shr}; \quad (3.83)$$

$$W_{n,b-b}^{tot} = \left(\frac{u_n}{n} \right) U_{b-b}; \quad W_{p,b-b}^{tot} = \left(\frac{u_p}{p} \right) U_{b-b}; \quad (3.84)$$

$$W_{n,stim}^{tot} = E_{n,stim} U_{stim}; \quad W_{p,stim}^{tot} = E_{p,stim} U_{stim}, \quad (3.85)$$

$$W_{n,opt}^{tot} = \sum_{h\nu_{opt}} \left(\frac{m_p^*}{m_n^* + m_p^*} (h\nu_{opt} - E_g) G_{v,opt} \right) + E_c G_{opt}; \quad (3.86)$$

$$W_{p,opt}^{tot} = \sum_{h\nu_{opt}} \left(\frac{m_n^*}{m_n^* + m_p^*} (h\nu_{opt} - E_g) G_{v,opt} \right) - E_v G_{opt}; \quad (3.87)$$

$$W_{n,relax} = \frac{u_n(T_n) - u_n(T_{lat})}{\tau_{wn}}; \quad W_{p,relax} = \frac{u_p(T_p) - u_p(T_{lat})}{\tau_{wp}}. \quad (3.88)$$

Влияние квантово-размерных ям изменяет только уравнения (3.86), (3.87). Уравнения для квантово-размерных ям:

$$W_{n,opt}^{tot} = \sum_{h\nu_{opt}} \left(\frac{m_p^*}{m_n^* + m_p^*} (h\nu_{opt} - E_{gqw}) G_{v,opt} \right) + (E_{gqw} + E_c) G_{opt} \quad (3.89a)$$

$$W_{p,opt}^{tot} = \sum_{h\nu_{opt}} \left(\frac{m_n^*}{m_n^* + m_p^*} (h\nu_{opt} - E_{gqw}) G_{v,opt} \right) + (E_{gqw} - E_v) G_{opt} \quad (3.89b)$$

При решении уравнений для энергетических потерь используются различные допущения. В выражениях и для ШХР, и для спонтанной рекомбинации принимается, что в среднем рекомбинирует электрон со средней энергией. Для стимулированной эмиссии считается, что рекомбинирует электрон с энергией, равной энергии фотона. Это также верно для внешней оптической генерации, когда энергия фотона определяет энергию генерированных электронов и дырок. Процесс релаксации энергии предполагает, что это время релаксации существующей плотности энергии до плотности энергии в состоянии равновесия с решеткой равно времени жизни носителей заряда.

Граничные условия для модели «трех температур» несколько отличны от граничных условий для уравнений, описывающих электрический ток. Для температуры электронов и дырок в *SW* предполагается, что на внешних контактах прибора имеет место бесконечно большая скорость релаксации энергии. При этом температуры электронов и дырок равны температуре решетки на контактах прибора:

$$T_n(0) = T_L(0); \quad T_n(L) = T_L(L); \quad (3.90)$$

$$T_p(0) = T_L(0); \quad T_p(L) = T_L(L). \quad (3.91)$$

Граничное условие для температуры решетки более сложно. *SW* использует общие граничные условия, в которых указаны эффективные теплопроводности и внешние температуры теплоотводов, управляющие потоками энергии в контактах. Выражения для потоков энергии на контактах прибора:

$$S_{lat}(0) = -k_l(T_L(0) - T_l); \quad S_{lat}(L) = k_r(T_L(L) - T_r), \quad (3.92)$$

где k_l и k_r – эффективные теплопроводности «левых» и «правых» поверхностей; T_l и T_r – температуры «левых» и «правых» теплоотводов соответственно.

Эти выражения описывают взаимодействие прибора с идеальными теплоотводами с помощью эффективных теплопроводностей. Используя уравнение (3.72) для потока энергии решетки и предполагая, что боковой поток энергии в контакте равен нулю, из выражения (3.93) получаем:

$$\begin{aligned} -k(0)\nabla T_L\big|_{x=0} + k_l T_L(0) &= k_l T_l; \\ k(L)\nabla T_L\big|_{x=L} + k_r T_L(L) &= k_r T_r. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Эти выражения показывают, что данное граничное условие – фактически смешанное граничное условие, включающее в себя и обе температуры и производную температуры от расстояния на контакте. Есть два ограничения для этого граничного условия. В случае когда k_l или k_r бесконечны, а у контакта идеальный теплоотвод, температура контакта будет равна температуре теплоотвода. В случае когда k_l или k_r равны нулю, можно рассматривать контакт прибора как идеальный изолятор без потока энергии, и производная температуры в контакте будет равна нулю.

В программе SW применяются еще два предположения и получаются еще две независимые модели, которые берутся на вооружение: модель «единственной температуры» и модель «горячих электронов».

Модель «единственной температуры» (MET)

Первое предположение в MET состоит в том, что энергетический обмен между электронами, дырками, и решеткой мгновенен. Это вынуждает электроны, дырки и решетку находиться в равновесии друг с другом, и средняя энергия всех частиц в каждой системе описывается одной температурой. Эта модель рассматривает электроны, дырки и решетку как одну систему, описываемую единственной температурой. Однако, если эти три системы не находятся в равновесии с окружающей средой, то температуры электронов, дырок и решетки изменяются в пределах прибора.

Те же самые уравнения, описывающие модель «трех температур», моделируют и объединенную систему электронов, дырок и решетки. Ключевое различие состоит в том, что «скоростные» уравнения для объединенной системы является суммой «скоростных» уравнений для трех независимых систем. В устойчивом состоянии, складывая уравнения (3.59)–(3.61), получаем:

$$\nabla \cdot (S_{lar}(x) + S_n(x) + S_p(x)) + W_n^{tot} + W_p^{tot} - W_{lar}^{tot} = 0. \quad (3.94)$$

Складывая уравнения (3.77) и (3.78) и вычитая уравнение (3.79), получаем выражение для полных энергетических потерь:

$$W_n^{tot} + W_p^{tot} - W_{lat}^{tot} = \left(\frac{3}{2} kT_n \frac{F_{3/2}(\eta_c)}{F_{1/2}(\eta_c)} + \frac{3}{2} kT_p \frac{F_{3/2}(\eta_v)}{F_{1/2}(\eta_v)} + E_g \right) U_{b-b} + \\ + h\nu_{stim} U_{stim} - h\nu_{opt} G_{opt}. \quad (3.95)$$

Для квантово-размерных ям справедливо уравнение

$$W_n^{tot} + W_p^{tot} - W_{lat}^{tot} = \left(kT_n \frac{F_1(\eta_c - \frac{E_{nqw}}{kT_n})}{F_0(\eta_c - \frac{E_{nqw}}{kT_n})} + kT_p \frac{F_1(\eta_v - \frac{E_{pqw}}{kT_p})}{F_0(\eta_v - \frac{E_{pqw}}{kT_p})} + E_{qw} \right) U_{b-b} + \\ + h\nu_{stim} U_{stim} - h\nu_{opt} G_{opt}. \quad (3.96)$$

Эти результаты имеют физический смысл. Электроны, дырки и решетка теперь являются одной системой, которая может терять или получать энергию только через генерацию или поглощение фотонов. Каждый из параметров правой или левой части уравнений (3.95) и (3.96) представляет собой потерю или приобретение энергии при взаимодействии с фотонами.

Модель «горячих электронов» (МГЭ)

Второе новое предположение состоит в том, что обмен энергией между электронами и двумя другими системами недостаточно быстрый, чтобы удерживать электроны в тепловом равновесии, а дырки и решетка находятся в равновесии с окружающей средой. Температура электронов может изменяться в пределах прибора, но температура дырок и решетки равна температуре окружающей среды. Решетка и дырки действуют как бесконечный бассейн, где температура остается постоянной. В этом случае *SW* использует выражение для потока энергии электронов и выражения для потерь энергии, чтобы решить «скоростное» уравнение энергии (3.61).

3.5. Квантово-размерные ямы

Квантово-размерные ямы – важный элемент прибора, который моделирует программа *SW*. Это позволяет *SW* моделировать много видов оптоэлектронных приборов, основанных на квантово-

размерных ямах, и было бы желательно включить в программу модель квантово-размерных ям, совместимую со стандартной моделью дрейфа. Ниже детализируется влияние квантово-размерных ям на стандартные уравнения и описываются ограничения при моделировании квантово-размерных ям, а также объясняются особенности более детального моделирования квантово-размерных ям (табл. 3.1).

Таблица 3.1

**Сравнение трактовки квантово-размерных ям в SW
и их более детальных трактовок**

Параметр	Трактовка в программе SW	Детальная трактовка
Энергетические уровни	Единственный уровень. Конечный размер квантово-размерной ямы	Множество уровней. Уравнение Шредингера
Волновые функции	Бесконечная глубокая квантово-размерная яма	Уравнение Шредингера
Заряд	2D и 3D плотности состояний	2D и 3D плотности состояний
Ток	Термоэлектронная эмиссия. Туннелирование	Термоэлектронная эмиссия. Туннелирование
Скорость рекомбинации	Электрон на первом уровне и дырка на первом уровне	Все разрешенные переходы
Коэффициенты преломления и поглощения	Такие же, как для объемного материала	Численное решение

Программа SW вычисляет уровни энергии в квантово-размерных ямах, используя аналитические выражения для конечных размеров квантово-размерных ям. Также используются лишь самые низкие уровни энергии для электронов и дырок. Это – разумное приближение для электронов, так как обычно только один, самое большее два уровня существуют в квантово-размерной яме типичного размера (8...10 нм). Это приближение менее справедливо для дырок из-за существования уровней как легких, так и тяжелых дырок.

Второе следствие использования приближения ям конечного размера состоит в том, что SW не может учитывать изменение энергии квантовых уровней при приложении внешнего поля. SW сохраняет одну и ту же величину энергии уровня в середине ям относительно края зоны. В первом приближении эта аппроксимация хорошо применима для слабых полей и к приборам, работающим без смещения или при прямом смещении напряжения.

Приближение «бесконечных» квантово-размерных ям для волновых функций разумно, потому что приборы, рассматриваемые в данном пособии, работают или без смещения, или при прямом смещении.

Это приближение игнорирует проникновение волновых функций носителей заряда в барьеры, при этом проникновение является наименьшим для квантовых уровней с самыми низкими энергиями. Из-за этих приближений программа *SW* не способна моделировать приборы, основанные на электрооптическом эффекте (SEED), которые управляются наложением волновых функций электронов и дырок с помощью внешнего электрического поля. Для более полного и точного моделирования квантово-размерных ям нужно решить уравнение Шредингера в численном виде, используя выражения для значений энергии дна зоны проводимости и потолка валентной зоны из уравнений Пуассона. Это позволило бы *SW* моделировать устройства типа SEED.

Программа *SW* рассматривает направление тока в ямы и из квантово-размерных ям, используя выражения для тока термоэлектронной эмиссии. Это допустимо в случае, когда много квантово-размерных ям находятся достаточно далеко друг от друга, чтобы можно было пренебречь туннелированием. Приборы, которые включают суперрешетки, требуют для моделирования решения уравнений Шредингера для того, чтобы вычислить минизоны и вероятность туннелирования между квантово-размерными ямами. В *SW* используются самые низкие квантовые уровни энергии электронов и дырок, спонтанные и ШХР скорости рекомбинации в квантово-размерных ямах между этими двумя состояниями. В *SW* используются выражения для скоростей рекомбинации, подобные выражениям для объемных областей.

Более точный метод состоит в том, чтобы использовать квантовомеханический подход, вычисляя скорость перехода между каждым электронным и дырочным уровнями. Полная скорость рекомбинации есть сумма скоростей рекомбинации между каждым электронным и дырочным уровнями. Коэффициенты преломления и поглощения света в квантово-размерных ямах, по умолчанию, основываются на параметрах для объемного материала. Так как пользователи определяют эти параметры, они могут выбрать любое значение. Более точный подход повлек бы за собой вычисление матричных элементов, связанных с переходами электронов с уровня на уровень и экситонными переходами. Эти вычисления могут привести к получению коэффициентов поглощения и преломления другого вида для квантово-размерных ям произвольной формы.

В программе *SW* также не моделируются другие эффекты, типа сужения ширины запрещенной зоны при изменении концентрации носителей заряда. Несмотря на ограничения, описанные выше, квантово-размерные ямы моделируются достаточно хорошо.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Semiconductor software: [http://www.engineering.ucsb.edu/~piprek / software.htm](http://www.engineering.ucsb.edu/~piprek/software.htm)
2. http://www.wemif.pwr.wroc.pl/zpp/laboratoria/labo_opto/labo_opto.php
3. Зу С. Физика полупроводниковых приборов: В 2 кн. – М.: Мир, 1984. Кн. 2.
4. *Winston D.W.* Physical simulation of optoelectronic semiconductor devices. The thesis for the Doctor of Philosophy degree. Department of Electrical and Computer Engineering of the University of Colorado, 1996.

Учебное издание

Сушков Валерий Петрович
Кузнецов Геннадий Дмитриевич
Рабинович Олег Игоревич

КОНСТРУИРОВАНИЕ КОМПОНЕНТОВ И ЭЛЕМЕНТОВ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Компьютерное моделирование оптоэлектронных приборов

Учебно-методическое пособие

Редактор *Т.А. Кравченко*

Компьютерная верстка *М.А. Шамариной*

Подписано в печать **03.09.12** Бумага офсетная

Формат 60 × 90 ¹/₁₆ Печать офсетная Уч.-изд. л. 8

Рег. № 295 Тираж 120 экз. Заказ 3677

Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»,
119049, Москва, Ленинский пр-т, 4

Издательский Дом МИСиС,
119049, Москва, Ленинский пр-т, 4
Тел. (495) 638-45-22

Отпечатано в типографии Издательского Дома МИСиС
119049, Москва, Ленинский пр-т, 4
Тел. (499) 236-76-17, тел./факс (499) 236-76-35