

Wyznaczanie własności azotkowych diod  
laserowych oraz diod elektroluminescencyjnych  
przez symulacje oparte o model  
dryfowo-dyfuzyjny przy wykorzystaniu  
Nieciągłej Metody Galerkina

*(autoreferat)*

Konrad Sakowski

25. kwietnia 2017

---

## Spis treści

Motywacja . . . . .	1
Cel pracy . . . . .	3
Wyniki pracy . . . . .	4
Literatura . . . . .	12
Publikacje związane z tematyką pracy doktorskiej . . . . .	14
Inne publikacje . . . . .	14

---

## Motywacja

Symulacje numeryczne są istotnym narzędziem pomocnym przy badaniach na urządzeniach półprzewodnikowymi[8]. Jako że współczesna elektronika jest oparta o takie urządzenia, występuje silne zapotrzebowanie na badania

naukowe w tej dziedzinie. Istnieją różne podejścia do symulacji struktur półprzewodnikowych, które różnią się precyzją, wydajnością i wielkością symulowanego elementu. Możemy mówić m. in. o metodach *ab initio*, które mogą być stosowane do symulacji fragmentów składających się z setek czy tysięcy atomów. Metody te wykorzystują fundamentalne prawa fizyki i ze względu na stopień komplikacji obliczeń potrzebują dni czy nawet tygodni na otrzymanie wyników przy symulacjach wykonywanych na klastrach obliczeniowych. Z drugiej strony mamy metody, które przybliżają złożone oddziaływania dużych grup zbliżonych do siebie obiektów za pomocą prostych statystycznych zależności. W tej klasie metod znajduje się model dryfowo-dyfuzyjny, który jest sformułowany dosyć elementarnie i pozwala na symulacje kompletnych elementów półprzewodnikowych na komputerach biurowych. Model ten opisuje zachowanie dwóch typów quasi-cząstek, elektronów i dziur, które poruszają się w materiale półprzewodnikowym pod wpływem pola elektrycznego.

Niniejsza praca dotyczy numerycznych symulacji urządzeń półprzewodnikowych wykorzystujących model dryfowo-dyfuzyjny. Model ten sprowadza się do trzech nieliniowych eliptycznych równań różniczkowych nazywanych równaniami van Roosbroecka [7]. Bierzemy pod uwagę dwa warianty dyskretyzacji tych równań przy użyciu złożonej Nieciągłej Metody Galerkina (por. [3]). W naszych symulacjach skupiamy się na urządzeniach emitujących światło opartych o azotek galu oraz jego związki. Zaproponowane dyskretyzacje uwzględniają niższą regularność rozwiązań na interfejsach rozgraniczających warstwy różnych materiałów.

Niech  $u^*$ ,  $v^*$ ,  $w^*$  będą szukanymi funkcjami. Układ van Roosbroecka można sformułować w następujący sposób:

$$-\nabla(\varepsilon\nabla u^*) + e^{u^*-v^*} - e^{w^*-u^*} = k_1, \quad (1)$$

$$-\nabla(\mu_n e^{u^*-v^*} \nabla v^*) - Q(u^*, v^*, w^*)(e^{w^*-v^*} - 1) = 0, \quad (2)$$

$$-\nabla(\mu_p e^{w^*-u^*} \nabla w^*) + Q(u^*, v^*, w^*)(e^{w^*-v^*} - 1) = 0. \quad (3)$$

Funkcje  $\varepsilon(x)$ ,  $\mu_n(x)$ ,  $\mu_p(x)$ ,  $k_1(x)$  są parametrami materiałowymi, natomiast  $Q(x, u, v, w)$  to operator, który także zależy od własności półprzewodnika. Równanie (1) jest nazywane równaniem Poissona. Jest to najprostsze równanie w tym układzie z punktu widzenia numeryki, gdyż nieliniowość w tym równaniu zawarta jest jedynie w jego prawej stronie.

Pozostałe dwa równania (2), (3), zwane równaniami ciągłości, mają dodatkowo nieliniowe współczynniki w części eliptycznej które wykazują eksponencjalny charakter. Z tej przyczyny numeryczne rozwiązanie tych równań i zarazem całego układu jest mocno utrudnione.

Równania (1)–(3) stanowią zaledwie jedno z kilku sformułowań układu van Roosbroecka. Sformułowanie to jest często używane do teoretycznej ana-

lize (zob. np. [4, 2]), ponieważ jest ono wolne od wielu parametrów fizycznych, które z założenia są uwzględnione wskutek użycia niestandardowych jednostek fizycznych, dopasowanych do konkretnego problemu. Inne sformułowania równań van Roosbroecka można znaleźć w pracy [5].

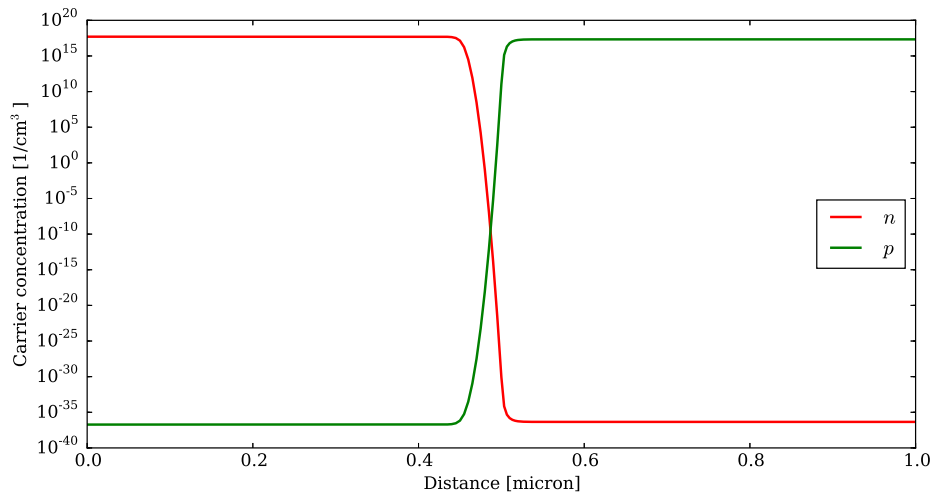
W naszych badaniach skupiamy się na symulacjach urządzeń półprzewodnikowych w kontekście niebieskiej i zielonej optoelektroniki. Jest to obecnie dosyć aktywny temat. Technologia diod elektroluminescencyjnych i diod laserowych opartych o azotki jest już na tyle zaawansowana, że takie urządzenia stały się powszechnie dostępne na rynku. Pomimo tego, wciąż pewne kwestie pozostają nierozwiązane. Na przykład czerwone czy niebieskie diody elektroluminescencyjne osiągają wydajność powyżej 30%, ale wydajność zielonych i żółtych diod nie przekracza 20%. Zamiast używać zielonych diod elektroluminescencyjnych, stosuje się niebieskie diody poprzedzone warstwami fosforescencyjnymi wydzielającymi światło zielone. Wydajność takiego rozwiązania to około 22%. Co więcej, diody elektroluminescencyjne oparte o azotek galu wykazują spadek wydajności przy wysokich prądach (tzw. ang. *efficiency droop*), zjawisko nieobecne w czerwonych diodach opartych o arsenek galu. Kluczowe jest zatem systematyczne rozwijanie metod symulacji własności elektrycznych urządzeń półprzewodnikowych oraz badanie zjawisk odpowiedzialnych za działanie tych urządzeń.

Istnieją też pewne problemy specyficzne dla symulacji niebieskich i zielonych urządzeń optoelektronicznych metodą dryfowo-dyfuzyjną. Azotek galu jest półprzewodnikiem o szerokiej przerwie energetycznej. To powoduje występowanie dużych różnic w koncentracjach nośników większościowych i mniejszościowych, przykładowo w zakresie  $10^{-40}$ – $10^{20}$  cm<sup>-3</sup> (por. Rysunek 1). Prowadzi to do problemów natury numerycznej, jako że współczynniki części eliptycznych równań ciągłości są proporcjonalne do koncentracji elektronów i dziur, które mają tego rodzaju eksponencjalnych charakter. Z drugiej strony domieszkowanie w tych urządzeniach jest dosyć wysokie, co dodatkowo zwiększa wzajemne zależności między składowymi równaniami układu van Roosbroecka. Jako że są to równania nieliniowe, potrzebna jest odpowiednia metoda linearyzacji.

## Cel pracy

Celem rozprawy doktorskiej jest:

- Skonstruowanie dyskretyzacji dla równań van Roosbroecka z wariantów złożonej Nieciągłej Metody Galerkina. Analiza teoretyczna wykorzystanych dyskretyzacji w przypadku równowagowym. Wykazanie że problemy dyskretne są dobrze postawione. Wyprowadzenie oszacowań



Rysunek 1: Koncentracja elektronów  $n$  i dziur  $p$  w złączu p-n w przypadku równowagowym.

na błąd rozwiązania dyskretnego. Weryfikacja otrzymanych oszacowań na podstawie symulacji numerycznych.

- Implementacja programu komputerowego służącego do symulacji własności elektrycznych dla świecących heterostruktur półprzewodnikowych przy użyciu modelu dryfowo-dyfuzyjnego. Kod programu powinien umożliwiać modyfikację zaimplementowanego modelu w rozsądnym zakresie, np. poprzez wprowadzanie dodatkowych mechanizmów rekombinacji. Opracowanie metody linearyzacji dla równań van Roosbroecka. Optymalizacja pracy aplikacji dla symulacji heterostruktur półprzewodnikowych opartych o azotek galu.
- Zastosowanie omawianych dyskretyzacji oraz metod numerycznych do symulacji rzeczywistych urządzeń półprzewodnikowych. Analiza i weryfikacja otrzymanych rezultatów. Przykłady modyfikacji użytego modelu matematycznego w celu uwzględnienia dodatkowych zjawisk fizycznych. Oszacowanie wpływu tych zjawisk na charakterystykę pracy rozważanych urządzeń.

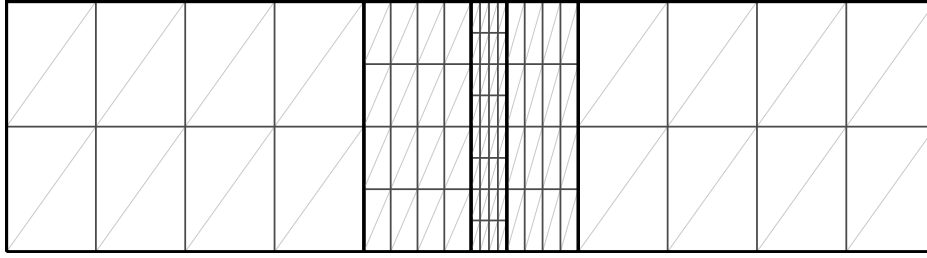
## Wyniki pracy

W niniejszej rozprawie doktorskiej przedstawiono dyskretyzację liniowych eliptycznych równań różniczkowych w  $\mathbb{R}^d$ ,  $d \in \{1, 2\}$  za pomocą dwóch wariantów złożonej Nieciągłej Metody Galerkin. Następnie obydwie warianty

zostały dostosowane do dyskretyzacji nieliniowego równania Poissona (1). Tym sposobem otrzymane zostały dwa nieliniowe problemy eliptyczne. Zostało wykazane, iż wzmiankowane problemy dyskretne są dobrze postawione. Wykonane zostało oszacowanie błędu dla obydwu dyskretyzacji. Omówiony został także błąd interpolacji w stosowanych przestrzeniach. Następnie rozważone zostały symulacje urządzeń półprzewodnikowych. Przedstawiony został model dryfowo-dyfuzyjny oraz podstawowe własności azotku galu i pokrewnych materiałów. Zostały także zaprezentowane wyniki symulacji. Symulacje zostały wykonane przy użyciu oprogramowania rozwijanego w ramach pracy nad niniejszą rozprawą doktorską. Symulacje zaczynają się od uproszczonych urządzeń: złącza p-n, złącza p-i-n, studni kwantowych. Następnie przedstawione są symulacje diod elektroluminescencyjnych oraz diod laserowych, a także symulacje struktur pobudzanych optycznie. W końcowej części pracy omówiona jest metoda linearyzacji wykorzystywana w przedstawionych symulacjach. Przedstawiona jest także analiza błędu w oparciu o eksperymenty numeryczne, która jest wykonana zarówno dla nieliniowego równania Poissona (przypadek równowagowy) jak i dla całego układu van Roosbroecka (przypadek nierównowagowy).

Naszą analizę rozpoczynamy od dyskretyzacji równań van Roosbroecka. Rozważane są dwie wersje złożonej Nieciągłej Metody Galerkina, oparte na Nieciągłej Metodzie Galerkina z symetrycznymi wyrazami kary (ang. *Symmetric Interior Penalty Galerkin method* [6]) oraz na Nieciągłej Metodzie Galerkina z podwyższonymi wyrazami kary (ang. *Weakly Over-Penalized Symmetric Interior Penalty method* [1]). Zgodnie z naszą wiedzą, złożona wersja drugiej z omawianych metod nie została wcześniej wprowadzona. Złożona Nieciągła Metoda Galerkina charakteryzuje się dwoma siatkami, grubą i gęstą. Gęsta siatka jest zagęszczana wraz z parametrem  $h$  dążącym do 0, natomiast rzadka siatka się nie zmienia. Na elementach grubej siatki, które oznaczamy  $\{\Omega_i\}$ , stosowana jest ciągła Metoda Elementu Skończonego. Następnie w celu powiązania funkcji z różnych elementów  $\Omega_i$  na interfejsach między tymi elementami stosowana jest Nieciągła Metoda Galerkina. W ogólnej sytuacji siatki na poszczególnych zbiorach  $\Omega_i$  nie muszą być powiązane ze sobą (por. Rysunek 2). Takie podejście pozwala na stosunkowo mało problematyczne zagęszczanie siatki tylko w określonych warstwach urządzenia, gdzie potrzebna jest wyższa precyzja.

Tego rodzaju podejście jest korzystne z następujących względów. Heterostruktury półprzewodnikowe cechują się względnie prostą geometrią (por. Rysunek 3). Składają się z płaskich, kolejno ułożonych warstw, które wyznaczają naturalny podział dziedziny na warstwy, przy czym nieciągłości współczynników w równaniach van Roosbroecka wypadają na interfejsach pomiędzy warstwami. Co więcej, fizyczne przeznaczenie warstw stanowi pewną



Rysunek 2: Siatka użyta w symulacjach numerycznych dla studni kwantowej. Studnia kwantowa jest położona pośrodku, tam gdzie siatka jest najgęstsza. Czarne grube linie wyznaczają grubą siatkę, natomiast szare linie wyznaczają gęstą siatkę.

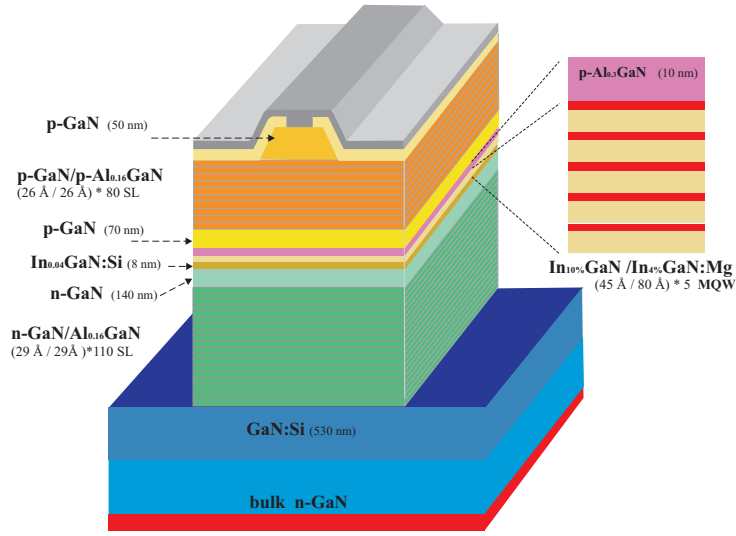
sugestię, jak gęstą siatkę należy na danej warstwie stosować. Zastosowane dyskretyzacje pozwalają wybierać siatki niezgodne na interfejsach, także wybór gęstości siatki w poszczególnych zbiorach  $\Omega_i$  może się odbywać w zasadzie niezależnie. Ponadto dyskretyzacja przy użyciu złożonej Nieciągłej Metody Galerkiną prowadzi do mniejszego zużycia pamięci w porównaniu do standardowej Nieciągłej Metody Galerkiną, jako że wielokrotne wartości dla tego samego punktu muszą być składowane jedynie na interfejsach, tam gdzie dopuszczalne są nieciągłości, a nie w całej dziedzinie. Należy także wziąć pod uwagę, że warstwy urządzenia półprzewodnikowego mogą różnić się szerokością o rzędy wielkości, przykładowo w zakresie 1 nm–10  $\mu\text{m}$ , przy czym region aktywny urządzenia, w którym generowane jest światło, jest często złożony z wąskich warstw (studnie kwantowe).

Podczas gdy rozważane przez nas dyskretyzacje są dosyć ogólne, nasza analiza teoretyczna skupia się na dyskretyzacji nieliniowego równania Poissona(1) w  $\mathbb{R}^d$ ,  $d \in \{1, 2\}$ . Fizycznie odpowiada to stanowi równowagowemu.

W pierwszej kolejności wprowadzamy obydwie rozważane przez nas dyskretyzacje w kontekście liniowych eliptycznych równań różniczkowych. Na zbiorach  $\Omega_i$  stosujemy triangulacje oraz oparte o nie ciągłe kawałkami-liniowe przestrzenie Metody Elementu Skończonego.

Zakładamy, że każdy zbiór  $\Omega_i$  odpowiada warstwie złożonej z pojedynczego materiału. Wobec tego współczynniki równań van Roosbroecką mogą być nieciągłe wyłącznie na interfejsach  $\partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j$ .

Złożona Nieciągła Metoda Galerkiną charakteryzuje się obecnością dodatkowych wyrazów obecnych w słabym sformułowaniu problemu dyskretnego związanych z brzegiem oraz z interfejsami między elementami grubej siatki. Te wyrazy powstają w konsekwencji użycia wzorów Greena, które nie mogą być wykorzystane na całej dziedzinie  $\Omega$  ze względu na zbyt niską regularność funkcji z przestrzeni dyskretnych. Jednakże mogą być one stosowane



Rysunek 3: Przykład półprzewodnikowej struktury laserowej opartej o azotek galu. Urządzenie jest wykonane z płaskich warstw złożonych z różnych materiałów półprzewodnikowych. Szerokości warstw są podane w angstrmach:  $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$ .

z osobna dla zbiorów  $\Omega_i$ . Prowadzi to do powstania wzmiankowanych wyrazów. Co więcej, wprowadza się dodatkowe tzw. wyrazy kary, które służą do kontrolowania nieciągłości na interfejsach, które są nieobecne w rozwiązaniach oryginalnego zadania różniczkowego. Służą one także do wprowadzania warunków brzegowych typu Dirichleta.

W Nieciągłej Metodzie Galerkina z podwyższonymi wyrazami kary wyrazy związane ze wzorami Greena są usunięte, ale zamiast tego stosowane są wyższe współczynniki kary. Tym sposobem dyskretyzacja jest prostsza zarówno w implementacji jak i w analizie, ale pogarsza to własności numeryczne otrzymanych równań algebraicznych.

Pierwszym z problemów, z którymi mierzymy się w analizie teoretycznej jest fakt, że rozwiązania oryginalnego problemu różniczkowego są w przestrzeni Sobolewa  $H^1(\Omega)$ , podczas gdy rozwiązania dyskretne do tej przestrzeni nie należą. Wobec tego aby oszacować normę błędu rozwiązania dyskretnego, należy osadzić rozwiązania dyskretne i rozwiązania różniczkowe w większej przestrzeni, zawierającej zarazem obie te klasy rozwiązań. Tutaj naszym wyborem są tzw. łamane przestrzenie Sobolewa: podprzestrzenie  $L_2(\Omega)$ , ze zwiększoną regularnością na zbiorach  $\Omega_i$ , na przykład  $H^1(\Omega_i)$ . Normy w takich przestrzeniach, zwane normami łamanymi, są często używane do analizy Nieciągłej Metody Galerkina. Normy takie mogą być powiązane ze słabym sformułowaniem problemu różniczkowego. W takiej sytuacji podstawowym

krokiem jest ustanowienie alternatywnego sformułowania problemu różniczkowego, który zezwala na użycie funkcji próbnych z łamanymi przestrzeniami Sobolewa. W tym sformułowaniu są także dołączone wyrazy związane z interfejsami oraz brzegiem dziedziny. Sformułowany problem alternatywny nie jest co prawda równoważny oryginalnemu problemowi różniczkowemu, ale oba problemy staną się zgodne po nałożeniu dodatkowych założeń dotyczących regularności rozwiązania.

Mając powyższe wyniki jesteśmy gotowi do przejścia do sformułowań dyskretnych nieliniowego równania Poissona. Zaczynamy od adaptacji wprowadzonych liniowych problemów dyskretnych do wzmiankowanego problemu nieliniowego. Dowodzimy następnie, że otrzymane problemy dyskretny są dobrze postawione. Dowód jednoznaczności jest elementarny i jest oparty na doprowadzeniu do sprzeczności. Istnienie jest natomiast wykazane przy wykorzystaniu odmiany twierdzenia Brouwera. Twierdzenie to może być tutaj użyte ze względu na to, że przestrzeń dyskretna jest skończonego wymiaru.

Zanim przejdziemy do oszacowania błędu, musimy jeszcze oszacować błąd interpolacji w normie łamanej. Generalnie dla złożonej Nieciągłej Metody Galerkina z symetrycznymi wyrazami kary wynik ten jest znany. Jednakże potrzebowaliśmy wyprowadzić analogiczny wynik dla drugiej z rozważanych przez nas dyskretyzacji. Jako że główna część dowodów obydwu oszacowań jest taka sama, przedstawiamy oba wyprowadzenia. Ze względu na podwyższone wyrazy kary, oszacowanie błędu interpolacji dla złożonej Nieciągłej Metody Galerkina z podwyższonymi wyrazami kary nie jest optymalne. W oryginalnej metodzie ten problem został rozwiązany przez odpowiedni wybór operatora interpolacji. Jednakże ta metoda nie uogólnia się na przypadek siatek niezgodnych.

W tym momencie możemy przejść do wyprowadzenia oszacowań błędu rozwiązania dyskretnego w obydwu rozważanych przypadkach. Wyprowadzenie tych oszacowań opiera się na fakcie, że łamane normy związane z tymi problemami są z nimi ściśle związane, przez co związane są także ze sformułowaniem alternatywnym problemu różniczkowego. Polega ono na odjęciu od siebie słabych form problemu różniczkowego i danego problemu dyskretnego po wstawieniu odpowiednich funkcji próbnych. Najpierw szacowana jest norma różnicy pomiędzy rozwiązaniem dyskretnym a interpolantem rozwiązania problemu różniczkowego. Ta część wyprowadzenia opiera się o własności problemu różniczkowego i jego rozwiązań. Podstawowym narzędziem jest tutaj nierówność Schwarzera. Ważna jest także nierówność typu Poincare dla normy łamanej, jako że część oszacowań jest otrzymywana początkowo w normie  $L_2(\Omega)$ . Zwykła równoważność norm w przestrzeniach dyskretnych w tym przypadku nie wystarcza, gdyż wówczas oszacowanie zależy w niekontrolowany sposób od parametru siatki  $h$ . Mając zasadniczą część, dowodzimy



oszacowań błędu wykorzystując omawiany wcześniej błąd interpolacji.

W uzupełnieniu do omawianych aspektów teoretycznych, opracowaliśmy także program komputerowy rozwiązujący równania van Roosbroecka. Program ten wykorzystuje omawiane w pracy dyskretyzacje. Pozwala on zarówno na wykonanie analizy zbieżności tych dyskretyzacji jak i na numeryczne symulacje urządzeń półprzewodnikowych. Zaimplementowane zostało rozwiązywanie całego układu van Roosbroecka, wobec czego symulacje można wykonywać zarówno dla przypadku równowagowego jak i dla przypadku nierównowagowego.

Nasz program, który został nazwany `pmicro`, posiada dwa warianty: jednowymiarowy i dwuwymiarowy. Zaczniemy od omówienia wariantu jednowymiarowego. Został on napisany w językach Octave/Matlab oraz C/C++. Aspekty logiczne są napisane w języku Octave/Matlab, podczas gdy kluczowe fragmenty obliczeń zostały napisane w C/C++ celem przyspieszenia działania aplikacji, wliczając w to dyskretyzację. Tym sposobem osiągnęliśmy pewien kompromis pomiędzy szybkością symulacji a złożonością kodu. Możliwie prosty kod pozwala na łatwiejsze wprowadzanie poprawek, co w szczególności pozwala efektywnie modyfikować zaimplementowany model. Ten wariant programu jest naszym zasadniczym narzędziem służącym do symulacji świecących urządzeń półprzewodnikowych opartych na azotku galu. Tego typu urządzenia posiadają dwa kontakty, położone z reguły na przeciwległych częściach struktury, wobec czego model jednowymiarowy dosyć dobrze oddaje zjawiska w nich zachodzące. W tym przypadku zaimplementowane zostało sformułowanie równań van Roosbroecka, które uwzględnia parametry materiałowe oraz parametry fizyczne. W trakcie badań wielokrotnie wprowadzaliśmy modyfikacje do modelu, tak aby uwzględnić dodatkowe zjawiska fizyczne, np. rekombinację promienistą i niepromienistą, tunelowanie na poziomy pułapkowe, ładunki polaryzacyjne, generację optyczne. Poza charakterystyką prądowo-napięciową, która jest liczona na podstawie symulowanych własności elektrycznych, program potrafi także szacować emisję światła na podstawie szybkości rekombinacji promienistej, co pozwala także na oszacowanie mocy optycznej oraz wydajności urządzenia.

Dwuwymiarowy wariant programu `pmicro` był wykorzystywany w dużej mierze do analizy zbieżności omawianych dyskretyzacji w dwóch wymiarach. Kod aplikacji został napisany w większości w języku C/C++ z wykorzystaniem biblioteki PETSc do zadań związanych z numeryczną algebrą liniową. Z racji tego, że złożona Nieciągła Metoda Galerkina nie jest standardowo obsługiwana przez popularne biblioteki obsługujące Metody Elementu Skończonego, napisaliśmy własną bibliotekę dla rozwiązań przez nas dyskretyzacji. Dwuwymiarowy wariant naszego programu pozwala zarówno na obliczenia wykorzystujące sformułowanie równań van Roosbroecka uwzględniające pa-

rametry fizyczne, jak i na uproszczone sformułowanie używane przez nas do analizy teoretycznej. Zakres zjawisk fizycznych uwzględnionych w aspekcie dwuwymiarowym jest jednakże uboższy niż uwzględniony w wersji jednowymiarowej.

Już w początkowej fazie symulacji zetknęliśmy się z problemem wyboru właściwej linearyzacji. Początkowo podjęliśmy próby wykorzystania metody Banacha/Picarda, w której oryginalny nieliniowy układ został zastąpiony przez układ trzech liniowych równań różniczkowych, gdzie szukane funkcje w nieliniowych wyrazach zostały zastąpione przez przybliżenia z poprzedniego kroku iteracyjnego. Niestety ilość iteracji tej metody zależna od długości urządzenia oraz od parametrów materiałowych, przy czym wahała się w zakresie od setek do milionów iteracji. Próbowaliśmy także wykorzystać tzw. metodę Gummela, która jest podobna, ale składa się z rozdzielonych nieliniowych równań. Niestety dla wielu symulowanych przez nas urządzeń ta metoda także nie przyniosła zadowalających rezultatów, ze względu na silne zależności między równaniami van Roosbroecka w przypadku świecących urządzeń opartych o azotek galu, z racji wysokiego domieszkowania oraz silnej rekombinacji. W końcu zwróciliśmy się ku metodzie Newtona, zastosowanej do całego układu, która dała zadowalające efekty. W szczególności ilość iteracji metody nie zależy istotnie od parametrów materiałowych. Jednakże dla poprawy zbieżności opracowaliśmy wariant skalowania kroku metody Newtona oraz warunki stopu korzystające ze wzmiankowanej wcześniej metody Banacha. To podejście w wielu przypadkach zmniejsza ilość iteracji metody Newtona, potrzebnej do wykonania symulacji, a także w wielu przypadkach zapobiega przed rozbieganiem iteracji.

Ważnym aspektem tej pracy są symulacje azotkowych urządzeń półprzewodnikowych. Do tych symulacji używaliśmy wariantu jednowymiarowego naszej aplikacji, tak jak zostało już nadmienione. Symulacje rozpoczynamy od złączy p-n. Są to proste struktury, które stanowią podstawę, na której można oprzeć skomplikowane urządzenia, takie jak diody elektroluminescencyjne czy diody laserowe. Te symulacje służą nie tylko do wyrobienia podstawowych intuicji w kwestii symulacji diod p-n, ale także do dopracowania oprogramowania, jako że rozwój programu `pmicro` wykonywany był stopniowo, wraz z symulacją coraz bardziej skomplikowanych przypadków. Struktury azotkowe cechują się silnym domieszkowaniem. W szczególności domieszkowanie magnezem w regionie typu p może osiągnąć koncentracje rzędu  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Stanowi to problem numeryczny, poprzez zwiększanie zależności między składowymi równaniami. Z drugiej strony azotek galu jest półprzewodnikiem o szerokiej przerwie energetycznej. Z związku z tym koncentracje nośników mniejszościowych są bardzo niskie, zwłaszcza w stanie równowagowym. Obie te własności prowadzą do olbrzymiej różnicy w koncentracjach elektronów i

dziur pomiędzy częściami typu p i typu n. Jest to istotny problem, jako że wówczas współczynniki równań ciągłości zmieniają się o wiele rzędów wielkości w obrębie jednego równania. Jest zatem jasne, że nawet symulacje tak prostych urządzeń prowadzą do problemów numerycznych, które mogą się tylko pogorszyć wraz ze stopniem komplikacji urządzeń.

Jako że model dryfowo-dyfuzyjny pozwala na symulacje własności elektrycznych, nasze początkowe symulacje dotyczą diagramów prądowo-napięciowych. Dla złącz p-n, obserwujemy trzy przypadki: gdy złącze jest spolaryzowane w kierunku zaporowym, natężenie jest mniej więcej stałe w funkcji napięcia, dla niskich napięć w kierunku przewodzenia zależność natężenia od napięcia jest eksponencjalna, dla wysokich napięć natomiast zależność ta przechodzi w funkcję liniową. Sytuacje komplikują się w przypadku wprowadzania dodatkowych warstw, np. warstwy niedomieszkowanej czy studni kwantowej pomiędzy warstwy typu n i typu p. Także uwzględnienie dodatkowych mechanizmów rekombinacji może zaburzyć ten obraz. Dominujący kanał rekombinacji może zmieniać się wraz z przyłożonym napięciem, co wpływa na charakterystykę prądowo-napięciową. W tym aspekcie przyjrzymy się bliżej rekombinacji przez poziomy pułapkowe, tzw. rekombinacji Shockleya-Reada-Halla. Zjawisko to ma dwa aspekty: wkład do całkowitej rekombinacji oraz dodatkowy ładunek związany z zapełnieniem poziomów pułapkowych. Nasze symulacje wskazują, że to ostatnie zjawisko nie ma istotnego wpływu na właściwości elektryczne urządzenia. Z drugiej strony szybkość rekombinacji Shockleya-Reada-Halla może być duża. Ten kanał rekombinacji dominuje często przy niskich napięciach, w szczególności gdy weźmiemy pod uwagę zjawisko tunelowania na poziomy pułapkowe. Jak już wspomniano, w diodach azotkowych domieszkowanie jest dosyć wysokie i w związku z tym warstwa zubożona jest wąska, co prowadzi do dużego pola elektrycznego występującego przy niewyprostowanym złączu, co dodatkowo zwiększa ilość nośników tunelujących na poziomy pułapkowe. Jak wykazały nasze symulacje, uwzględnienie tego zjawiska w modelu prowadzi do lepszej zgodności między wynikami symulacji i wynikami eksperymentalnymi, zwłaszcza dla niskich napięć.

Następnie przechodzimy do symulacji diod elektroluminescencyjnych i diod laserowych. W tym kontekście istotne są dwa dodatkowe aspekty. Po pierwsze są to ładunki polaryzacyjne, obecne w heterostrukturach azotkowych. Aby uwzględnić to zjawisko, konieczna była modyfikacja wykorzystywanych dyskretyzacji w celu wprowadzenia ładunków polaryzacyjnych na interfejsach pomiędzy różnymi materiałami. Z drugiej strony dla tych urządzeń jest istotnym, aby oszacować moc optyczną, wydajność urządzenia czy też straty. W ogólności moc optyczna jest proporcjonalna do szybkości rekombinacji promienistej w studniach kwantowych. Ta wartość jest otrzymywana z

modelu dryfowo-dyfuzyjnego jako wielkość pochodna. Inne kanały rekombinacji z kolei przyczyniają się do strat energii, zatem oszacowanie ich wielkości jest również kluczowe.

Symulacje zaczynamy od problemu zawartości glinu w warstwie blokującej elektrony (ang. *electron blocking layer*). Warstwa ta jest zwykle umieszczana pomiędzy regionem aktywnym (zawierającym studnie kwantowe) i warstwą typu p. Warstwa blokująca elektrony jest rodzajem bariery, która zapobiega opuszczeniu przez elektrony regionu aktywnego. Jednakże blokuje one też do pewnego stopnia dziury, które zmierzają od kontaktu w kierunku studni kwantowych. W związku z tym ustanowienie zbyt wysokiej bariery nie jest korzystne. Nasze symulacje pokazują, że wydajność takich urządzeń rośnie wraz z zawartością glinu do osiągnięcia pewnego poziomu. Dalsze zwiększanie zawartości glinu nie zwiększa wydajności, a jedynie opór urządzenia, co przekłada się na mniejszą moc optyczną. Następnie przechodzimy do problemu zawartości magnezu w warstwie typu p. Pokazujemy, że zbyt mała zawartość magnezu prowadzi do zwiększenia oporu tej części urządzenia wynikającego z niedostatecznego ekranowania ładunków polaryzacyjnych. Analizujemy także wpływ ilości studni kwantowych na działanie diody laserowej.

Układ van Roosbroecka może także modelować pobudzenie optyczne nośników. Prezentujemy tego rodzaju symulację w kontekście warstwy wykonanej ze związku poczwórnego AlInGaN. Pokazujemy jak pobudzenie optyczne wpływa na diagram pasmowy oraz inne aspekty rozwiązanych struktur.

## Literatura

- [1] S. C. Brenner, L. Owens, L.-Y. Sung. A weakly over-penalized symmetric interior penalty method. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 30:107–127, 2008.
- [2] R. K. Coomer, I. G. Graham. Massively Parallel Methods for Semiconductor Device Modelling. *Computing*, 56:1–27, 1996.
- [3] Maksymilian Dryja. On Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems with Discontinuous Coefficients. *Computational Methods in Applied Mathematics*, 3(1):76–85, 2003.
- [4] Joseph W. Jerome. The Role of Semiconductor Device Diameter and Energy-Band Bending in Convergence of Picard Iteration for Gummel’s Map. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 32:2045–2051, 1985.

- [5] S. J. Polak, C. den Heijer, W. H. A. Schilders, P. Markowich. Semiconductor device modelling from the numerical point of view. *Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24:763–838, 1987.
- [6] Beatrice Riviere. *Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations: theory and implementation*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2008.
- [7] W. V. Van Roosbroeck. Theory of Flow of Electrons and Holes in Germanium and Other Semiconductors. *The Bell System Technical Journal*, 29:560–607, 1950.
- [8] Siegfried Selberherr. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Springer-Verlag, Wien, 1984.

## Publikacje związane z tematyką pracy doktorskiej

- [A1] Konrad Sakowski, Leszek Marcinkowski, Stanislaw Krukowski, Szymon Grzanka, Elzbieta Litwin-Staszewska. Simulation of trap-assisted tunneling effect on characteristics of gallium nitride diodes. *Journal of Applied Physics*, 111(12):123115, 2012.
- [A2] Konrad Sakowski, Leszek Marcinkowski, Stanislaw Krukowski. Modification of the Newton's method for the simulations of gallium nitride semiconductor devices. *Lecture Notes in Computer Science*, 8385:551–560, 2014.
- [A3] Konrad Sakowski, Leszek Marcinkowski, Pawel Strak, Pawel Kempisty, Stanislaw Krukowski. Discretization of the drift-diffusion equations with the Composite Discontinuous Galerkin Method. *Lecture Notes in Computer Science*, 9574:391–400, 2016.
- [A4] Konrad Sakowski, Pawel Strak, Stanislaw Krukowski, Leszek Marcinkowski. Optimization of InGaN laser diodes based on numerical simulations. *Acta Physica Polonica A*, 129:33–35, 2016.
- [A5] J. Borysiuk, K. Sakowski, P. Drózdź, K. P. Korona, K. Sobczak, G. Muziol, C. Skierbiszewski, A. Kaminska, S. Krukowski. Electric field dynamics in nitride structures containing quaternary alloy (Al, In, Ga)N. *Journal of Applied Physics*, 120:015702, 2016.
- [A6] Pawel Strak, Pawel Kempisty, Konrad Sakowski, Agata Kaminska, Dawid Jankowski, Krzysztof P. Korona, Kamil Sobczak, Jolanta Borysiuk, Mark Beeler, Ewa Grzanka, Eva Monroy, Stanislaw Krukowski. Ab initio and experimental studies of polarization and polarization related fields in nitrides and nitride structures. *AIP Advances*, 7(1):015027, 2017.
- [A7] Konrad Sakowski, Leszek Marcinkowski, Pawel Strak, Pawel Kempisty, Stanislaw Krukowski. On Composite Discontinuous Galerkin Method for simulations of electric properties of semiconductor devices. Submitted for publication.

## Inne publikacje

- [B1] Paweł Kempisty, Stanisław Krukowski, Paweł Strak, Konrad Sakowski. Ab initio studies of electronic properties of bare GaN(0001) surface. *Journal of Applied Physics*, 106(5):054901, 2009.
- [B2] Zbigniew Romanowski, Paweł Kempisty, Konrad Sakowski, Paweł Strak, Stanisław Krukowski. Density Functional Theory (DFT) Simulations and Polarization Analysis of the Electric Field in InN/GaN Multiple Quantum Wells (MQWs). *Journal of Physical Chemistry C*, 114(34):14410–14416, 2010.
- [B3] Paweł Strak, Zbigniew R. Zytewicz, Konrad Sakowski, Stanisław Krukowski. Numerical analysis of growth kinetics of bulk III-V crystals grown by liquid phase electroepitaxy. *Crystal Research and Technology*, 45(12):1290–1294, 2010.
- [B4] Paweł Kempisty, Paweł Strak, Stanisław Krukowski, Konrad Sakowski. Erratum: “Ab initio studies of electronic properties of bare GaN(0001) surface” [J. Appl. Phys. 106, 054901 (2009)]. *Journal of Applied Physics*, 111(10):109905, 2012.
- [B5] Paweł Strak, Paweł Kempisty, Konrad Sakowski, Stanisław Krukowski. Doping effects in InN/GaN short-period quantum well structures - Theoretical studies based on density functional methods. *Journal of Crystal Growth*, 401:652–656, 2014.
- [B6] Paweł Kempisty, Paweł Strak, Konrad Sakowski, Stanisław Krukowski. Adsorption of gallium on GaN(0001) surface in ammonia-rich conditions: A new effect associated with the Fermi level position. *Journal of Crystal Growth*, 401:78–81, 2014.
- [B7] Paweł Kempisty, Paweł Strak, Konrad Sakowski, Stanisław Krukowski. Adsorption of ammonia on hydrogen covered GaN(0001) surface - Density Functional Theory study. *Journal of Crystal Growth*, 401:514–517, 2014.
- [B8] Paweł Kempisty, Paweł Strak, Konrad Sakowski, Stanisław Krukowski. General aspects of the vapor growth of semiconductor crystals - A study based on DFT simulations of the NH<sub>3</sub>/NH<sub>2</sub> covered GaN(0001) surface in hydrogen ambient. *Journal of Crystal Growth*, 390:71–79, 2014.
- [B9] Stanisław Krukowski, Paweł Kempisty, Paweł Strak, Konrad Sakowski. Fermi level pinning and the charge transfer contribution to the energy

- of adsorption at semiconducting surfaces. *Journal of Applied Physics*, 115(4):043529, 2014.
- [B10] Pawel Kempisty, Pawel Strak, Konrad Sakowski, Stanislaw Krukowski. DFT study of ammonia desorption from the GaN(0001) surface covered with a NH<sub>3</sub>/NH<sub>2</sub> mixture. *Journal of Crystal Growth*, 403:105–109, 2014.
- [B11] Pawel Strak, Konrad Sakowski, Pawel Kempisty, Stanislaw Krukowski. Structural and electronic properties of AlN(0001) surface under partial N coverage as determined by ab initio approach. *Journal of Applied Physics*, 118(9):095705, 2015.
- [B12] A. Kaminska, D. Jankowski, P. Strak, K. P. Korona, M. Beeler, K. Sakowski, E. Grzanka, J. Borysiuk, K. Sobczak, E. Monroy, S. Krukowski. High pressure and time resolved studies of optical properties of n-type doped GaN/AlN multi-quantum wells: Experimental and theoretical analysis. *Journal of Applied Physics*, 120(9):095705, 2016.
- [B13] P. Strak, K. Sakowski, A. Kaminska, S. Krukowski. Influence of pressure on the properties of GaN/AlN multi-quantum wells - Ab initio study. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 93:100–117, 2016.
- [B14] A. Kaminska, P. Strak, J. Borysiuk, K. Sobczak, J. Z. Domagala, M. Beeler, E. Grzanka, K. Sakowski, S. Krukowski, E. Monroy. Correlation of optical and structural properties of GaN/AlN multi-quantum wells - Ab initio and experimental study. *Journal of Applied Physics*, 119(1):015703, 2016.
- [B15] Pawel Kempisty, Pawel Strak, Konrad Sakowski, Stanislaw Krukowski. Thermodynamics of GaN(s)-NH<sub>3</sub>(v)+N<sub>2</sub>(v)+H<sub>2</sub>(v) system – Electronic aspects of the processes at GaN(0001) surface. *Surface Science*, 662:12–33, 2017.
- [B16] Pawel Strak, Pawel Kempisty, Konrad Sakowski, Stanislaw Krukowski. Ab initio determination of electron affinity of polar nitride surfaces, clean and under Cs coverage. *Journal of Vacuum Science and Technology A*, 35(2):021406, 2017.