

УДК 621.315.592

ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

© 2016 г. К. К. Абгарян¹

¹Вычислительный центр им. А. А. Дородницына
Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия

Введение

Представлен новый подход, позволяющий решать задачи оптимизации наноразмерных полупроводниковых гетероструктур. Поставлена и решена задача, связанная с определением оптимального легирования барьерного слоя, состоящего из ряда подслоев, который обеспечивает заданную концентрацию электронов в канале проводимости в полупроводниковых гетероструктурах. Для решения поставленной задачи построены эффективные алгоритмы оптимизации, основанные на градиентных методах. В качестве примера рассмотрена гетероструктура $\text{Al}_{0,25}\text{GaN}/\text{GaN}$ с суммарной толщиной барьерного слоя 30 нм. Полученные в ходе вычислительного эксперимента результаты согласуются с современной тенденцией к переходу от одномерного профиля легирования к планарному δ -легированию в технологиях изготовления полевых транзисторов. Разработанные средства математического моделирования и оптимизации могут применяться в технологиях изготовления полевых транзисторов. Представленные в работе подходы создают условия для автоматизированного проектирования таких структур.

Ключевые слова: первопринципное моделирование, гетероструктура, подвижность, двумерный электронный газ, алгоритмы оптимизации, многомасштабное моделирование.

Выходные характеристики гетероструктурных полупроводниковых СВЧ-устройств определяются многообразием факторов, отражающих как конструктивные, так и технологические особенности изготовления гетероструктуры. При этом чрезвычайно важен выбор оптимальных параметров, определяющих основные электрофизические характеристики структуры — концентрацию и подвижность носителей заряда в каналах двумерного электронного газа (ДЭГ) [1].

Вопросам математического моделирования таких структур посвящены работы [2, 3]. Была реализована следующая схема многомасштабного моделирования. Выделены три характерных масштабных уровня. Описание системы на атомарном уровне осуществляется с использованием кристаллографической информации и квантово-механической модели, в основе которой лежит теория функционала электронной плотности [4, 5]. Полученная информация передается в модель наномасштабного уровня, где используется для расчета распределения носителей заряда в гетероструктуре. На данном уровне также используется квантово-механическое описание. Математическая модель представляет собой систему уравнений Шредингера и Пуассона [6]. Полу-

ченные в результате решения этих уравнений данные о волновых функциях и распределении плотности носителей заряда поперек слоистой структуры поступают в модель следующего масштабного уровня, где осуществляется расчет подвижности носителей заряда в продольном направлении. При этом учитывается широкий спектр механизмов рассеяния электронов: рассеяние на оптических и акустических фонах, шероховатостях гетерограницы, на заряженных центрах и дислокациях, пьезоэлектрическое рассеяние. В работе [7] рассмотрен механизм рассеяния на шероховатостях гетерограницы. Показано, что шероховатость гетерограницы изменяет ширину квантовой ямы, и, следовательно, положение энергетических уровней. Такая флуктуация потенциала обуславливает рассеяние носителей заряда. Вклад этого механизма рассеяния сильно зависит от технологического совершенства гетероструктур. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [7, 8] показало достаточно высокую точность моделирования для расчета концентрации носителей заряда в двумерном электронном газе и подвижности электронов. Разработанные методы и средства численного моделирования позволяют оперативно проводить многовариантный анализ многослойных наноразмерных полупроводнико-

вых структур. Это создает основу для решения ряда оптимизационных задач, актуальных для современной СВЧ-электроники.

В работе [9] представлены результаты многовариантного компьютерного анализа плотности и подвижности электронов в наноразмерных нитридных гетероструктурах AlGa_{0.3}N/GaN. Такие соединения имеют вюрцитную кристаллическую структуру. В результате спонтанной и пьезоэлектрической поляризации здесь появляются нескомпенсированные заряды на гетероинтерфейсах, играющие решающую роль в формировании каналов двумерного электронного газа [8]. В работе [9] использовали результаты первопринципного моделирования или, другими словами, квантово-механического моделирования на атомарном уровне. В этом случае вычисление позиций атомов (ядер) и распределения электронной плотности в межъядерном пространстве определяется из условия минимизации потенциальной энергии системы. Первопринципный расчет позволяет получить плотности зарядов на интерфейсах, которые в дальнейшем используют при расчете электронной плотности и подвижности электронов. Вычислительные эксперименты дали возможность определить зависимости концентрации и подвижности электронов от мольного содержания алюминия в барьерном слое, от толщины барьерного слоя, а также от ряда других характеристик. Во многих случаях построение таких зависимостей позволяет определить оптимальные с точки зрения концентрации и подвижности носителей заряда параметры гетероструктуры. Однако часто возникают задачи, когда необходимо применение аппарата теории оптимизации. К таким задачам относятся, в частности, обратные задачи по определению недоступных в прямом измерении характеристик выращенных гетероструктур на основе экспериментальных данных по концентрации и подвижности носителей в двумерном электронном газе. Другой класс задач связан с определением оптимального легирования барьерного слоя, состоящего из ряда подслоев. Такие задачи рассмотрены в настоящей работе.

Математическая модель

Типичная схема наноразмерной полупроводниковой гетероструктуры представлена на рис. 1 [7]. На рис. 1 показана гетероструктура, выращенная в Институте физики полупроводников СО РАН на основе нитрида галлия и тройных растворов.

Наличие слоев, выращенных из полупроводниковых материалов с различной шириной запрещенной зоны, в сочетании с поляризационными эффектами обеспечивает создание в окрестности гетерограницы в слое с меньшей шириной запрещенной зоны (GaN) квантово-размерной ямы для электронов шириной порядка нескольких нанометров. Движение электронов в направлении, нормальном к гетеро-

границе, ограничено, энергетические уровни квантованы. Электроны на этих уровнях могут свободно двигаться в плоскости гетерограницы. Образуется двумерный электронный газ (схематично область образования двумерного электронного газа показана точками на рис. 1).

Математическая модель, описывающая распределение электронов в таких структурах, представляет собой систему уравнений Шредингера и Пуассона:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi}{dz} \right) + V(z)\psi(z) = E\psi(z); \tag{1}$$

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon(z) \frac{d\phi}{dz} \right) = -e[u(z) - n(z)] + \sum_{l=1}^M \sigma_l \delta(z - z_l); \tag{2}$$

$$V(z) = -e\phi(z) + \Delta E_c(z); \tag{3}$$

$$n(z) = \sum_{i=1}^I (\psi_i(z))^2 n_i(z); \tag{4}$$

$$n_i(z) = k_B T \frac{m^*(z)}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right], \tag{5}$$

где E_i и $\psi_i(z)$ — энергетические уровни и соответствующие им волновые функции, $\int_0^I \psi_i^2(z) dz = 1$; I — число

значимых с точки зрения вклада в сумму (4) энергетических уровней; $n(z)$ — электронная плотность; \hbar — постоянная Планка; e — заряд электрона; m^* — эффективная масса электрона; E_F — положение уровня Ферми; $\phi(z)$ — электростатический потенциал; σ_l — плотности зарядов на интерфейсах (границах раздела); δ — дельта-функция; z_l — местоположения интерфейсов; M — число гетероинтерфейсов с наличием нескомпенсированного заряда; ϵ — диэлектрическая постоянная материала; ΔE_c — сдвиг зоны проводимости материала; k_B — постоянная

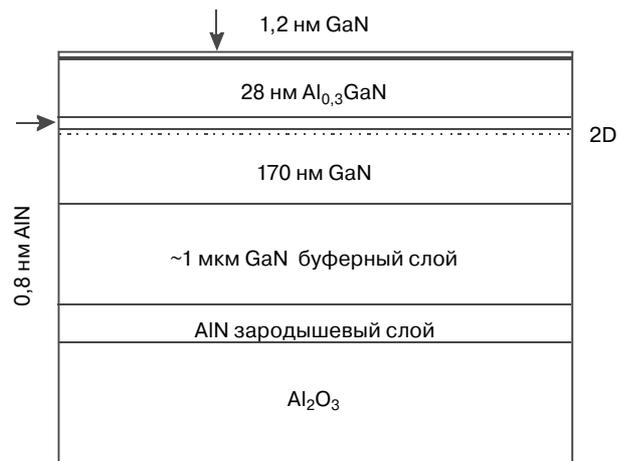


Рис. 1. Многослойная полупроводниковая гетероструктура [7]
Fig. 1. Multilayer semiconductor heterostructure [7]

Больцмана; T — температура. Функция $u(z)$ описывает распределение легирующих примесей в системе

$$u(z) = N_d(z) - N_A(z),$$

где $N_d(z)$, $N_A(z)$ — концентрации донорной и акцепторной примесей соответственно. Эта функция в дальнейшем будет рассматриваться как функция управления. В модели (1)—(5) отражен тот факт, что значения m^* , ε и ΔE_c могут меняться от слоя к слою, т. е. функции $m^*(z)$, $\varepsilon(z)$, $\Delta E_c(z)$ принадлежат классу кусочно-постоянных функций. При этом температура в гетероструктуре предполагается постоянной.

На границах системы ($z = 0$, $z = L$, где L — общая толщина слоистой структуры) должны выполняться условия равенства нулю волновых функций:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L) = 0. \quad (6)$$

На левой границе ($z = 0$), задается потенциальный барьер ϕ_b , образующийся в приконтактном слое полупроводника, граничащего с металлом (барьер Шотки). Кроме того, возможно задание смещения ϕ_s вследствие приложенного напряжения. На правой границе ($z = L$) естественным условием является отсутствие электрического поля. Таким образом, граничные условия для уравнения Пуассона имеют вид

$$\phi(0) = \phi_b + \phi_s, \quad \phi'(L) = 0. \quad (7)$$

Решение спектральной задачи (1) (уравнение Шредингера), определения собственных значений и собственных функций/векторов дифференциального/матричного оператора зависит от электростатического потенциала ϕ , распределение которого в структуре $\phi(z)$ определяется уравнением Пуассона (2).

При этом в правую часть уравнения Пуассона входит электронная плотность $n(z)$, которая, в свою очередь, определяется энергетическими уровнями E_i и волновыми функциями $\psi_i(z)$, согласно статистике Ферми—Дирака (см. уравнения (4)—(5)). Самосогласованное решение этой системы дает искомые энергетические уровни E_i и соответствующие им волновые функции $\psi_i(z)$, профиль потенциальной ямы $V(z)$, а также распределение электронной плотности в гетероструктуре $n(z)$.

Используемые автором алгоритмы решения задачи (1)—(7) подробно изложены в работе [3]. Отметим, что основные вычислительные сложности связаны со сходимостью глобальных итераций, необходимых для согласования решений уравнений Шредингера и Пуассона. С целью ускорения вычислительного процесса был реализован подход, основанный на аппроксимации нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала в сочетании с линеаризацией уравнения Пуассона. Построение эффективного алгоритма решения прямой зада-

чи (1)—(7) является важной основой для решения оптимизационных задач.

Перейдем к формулировке задачи оптимизации. Наиболее важным показателем эффективности гетероструктуры является концентрация электронов

$$N = \int_0^L n(z) dz.$$

Как показано в работе [9], эта величина во многом является определяющей и для подвижности электронов. Хотя с ее увеличением подвижность, как правило, падает, произведение концентрации и подвижности (проводимость) возрастает, что определяет стремление к повышению N . Необходимо отметить, что излишнее повышение концентрации может сопровождаться и негативными эффектами [1]. Поэтому разумным компромиссом обычно является задание желаемого уровня концентрации электронов N^* . Основным управляющим фактором, воздействующим на величину N^* , является концентрация доноров в барьерном слое. Барьерный слой представляет область, расположенную слева от канала двумерного электронного газа (см. рис. 1), $0 \leq z \leq z_b$, где z_b — толщина барьерного слоя, $z_b < L$.

Средний уровень легирования (или суммарную ионизацию) барьерного слоя желательно уменьшить. Это поможет избежать излишнего рассеяния электронов на удаленных заряженных центрах. Таким образом, минимизируемый функционал можно записать в виде

$$J(u) = \left[\int n(z) dz - N^* \right]^2 + w \left[\int u(z) dz \right]^2, \quad (8)$$

где w — весовой параметр. Здесь и далее пределы интегрирования опущены, так как всегда подразумевается интегрирование по всей области.

Могут существовать технологические ограничения по легированию отдельных слоев при выращивании гетероструктуры, что отражается в ограничениях на функцию управления:

$$0 \leq u(z) \leq \xi(z). \quad (9)$$

Здесь ограничение $u(z) \geq 0$ означает, что рассматривается только донорное легирование. Это связано с тем, что именно такое легирование способствует повышению концентрации электронов в двумерном электронном газе. Кроме того, при стремлении к достижению максимально высокой концентрации электронов (высокое значение N^*) может стать существенным ограничение на состояние системы:

$$V(z) - E_F \geq 0; \quad z \leq z_b. \quad (10)$$

Данное ограничение позволяет избежать образования параллельного канала проводимости в барьерном слое ($z \leq z_b$).

Таким образом, задача нахождения распределения легирующей примеси в барьерном слое, обеспечивающего заданную концентрацию электронов в канале ДЭГ (проводимости), поставлена. Во многих случаях решение такой задачи не является единственным: заданной концентрации электронов могут соответствовать различные варианты легирования. В этом случае проектировщику гетероструктуры предоставляются на выбор различные варианты. При этом выбор существенно сужается за счет введенных ограничений и влияния второго слагаемого функционала.

Для решения задачи (1)–(10) эффективными являются градиентные методы.

Остановимся на вопросе определения градиента функционала. Здесь принципиальным моментом является установленная ранее связь между приращениями электронной плотности и потенциала [3, 10]. Используем обозначение $R(z)$ для сокращения записи соотношения, выражающего зависимость приращения электронной плотности от приращения потенциала:

$$\delta n(z) = R(z)\delta\varphi(z);$$

$$R(z) = \frac{m^*(z)e}{\pi\hbar^2} \sum_i \Psi_i^2(z) \frac{\exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right)}. \quad (11)$$

Вывод формулы подробно приведен в работе [3].

Применение выражения (11) существенно упрощает процедуру определения градиента функционала.

Следуя традиционной схеме вариационного исчисления [11], домножим уравнение (2) на множитель Лагранжа $p(z)$, проинтегрируем результат по толщине гетероструктуры и прибавим к функционалу (8):

$$J(u) = \left[\int n(z) dz - N^* \right]^2 + w \left[\int u(z) dz \right]^2 + \int p(z) \left[\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d\varphi}{dz} \right) + e(u(z) - n(z)) - \sum_l \sigma_l \delta(z - z_l) \right] dz. \quad (12)$$

Вариация функционала (12) выглядит следующим образом:

$$\delta J = 2(N - N^*) \int \delta n(z) dz + 2wU \int \delta u(z) dz + \int p(z) \left[\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d\delta\varphi}{dz} \right) + e(\delta u(z) - \delta n(z)) \right] dz, \quad (13)$$

где $U = \int u(z) dz$.

Проинтегрируем дважды по частям слагаемое

$$\int p(z) \left[\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d\delta\varphi}{dz} \right) \right] dz. \text{ С учетом граничных условий (7), получим}$$

$$\begin{aligned} & \int p(z) \left[\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d\delta\varphi}{dz} \right) \right] dz = \\ & = \int \frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{dp}{dz} \right) \delta\varphi dz - p(0)\varepsilon(0) \frac{d\delta\varphi}{dz}(0) - \\ & - \frac{dp}{dz}(L)\varepsilon(L)\delta\varphi(L). \end{aligned}$$

Тогда уравнение (13) примет вид

$$\begin{aligned} \delta J &= 2(N - N^*) \int R(z)\delta\varphi(z) dz + 2wU \int \delta u(z) dz + \\ & + \int \frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{dp}{dz} \right) \delta\varphi + p(z)e(\delta u(z) - R(z)\delta\varphi(z)) dz - \\ & - p(0)\varepsilon(0) \frac{d\delta\varphi}{dz}(0) - \frac{dp}{dz}(L)\varepsilon(L)\delta\varphi(L). \end{aligned}$$

или с учетом выражения (11)

$$\begin{aligned} \delta J &= 2(N - N^*) \int \delta n(z) dz + 2wU \int \delta u(z) dz + \\ & + \int \frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{dp}{dz} \right) \delta\varphi + p(z)e(\delta u(z) - \delta n(z)) dz - \\ & - p(0)\varepsilon(0) \frac{d\delta\varphi}{dz}(0) - \frac{dp}{dz}(L)\varepsilon(L)\delta\varphi(L), \end{aligned}$$

Составим систему уравнений для определения $p(z)$ так, чтобы обнулить все слагаемые, не содержащие δu :

$$\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{dp}{dz} \right) - eR(z)p(z) + 2R(z)(N - N^*) = 0; \quad (14)$$

$$p(0) = 0; \quad \frac{dp}{dz} \Big|_{z=L} = 0. \quad (15)$$

В результате получим следующее выражение для вариации функционала:

$$\begin{aligned} \delta J &= \int p(z)e\delta u(z) dz + 2wU \int \delta u(z) dz = \\ & = \int (p(z)e + 2wU)\delta u(z) dz. \end{aligned} \quad (16)$$

Теперь можем определить искомым градиент функционала:

$$J' = p(z)e + 2wU. \quad (17)$$

Отметим, что такой подход позволил построить сравнительно простую задачу (14)–(15) для определения функции $p(z)$. Таким образом, при определении градиента функционала удастся избежать решения наиболее вычислительно затратной спектральной задачи. Это позволяет построить эффективные алгоритмы оптимизации, основанные на градиентных методах, в которых направление движения к точке минимума на каждом шаге совпадает с направлением, противоположным вектору градиента минимизируемой функции.

В частности, результаты, представленные в следующем разделе, были получены с использованием простейшего метода градиентного спуска. Учет ограничений в настоящей работе проводили с использованием проекции решения на каждой итерации на подпространство ограничений.

Результаты расчетов

В качестве примера рассмотрим гетероструктуру $\text{Al}_{0,25}\text{GaN}/\text{GaN}$ с суммарной толщиной барьерного слоя $\text{Al}_{0,25}\text{GaN}$ 30 нм. Для иллюстрации влияния легирующих добавок приведем варианты нелегированного и равномерно легированного донорной примесью барьерного слоя. Исходные данные для расчетов следующие.

Эффективные массы электрона принимали равными $0,228m_0$ для обоих материалов (m_0 — масса покоя электрона). Плотность заряда на гетероинтерфейсе $\text{Al}_{0,25}\text{GaN}/\text{GaN}$, определенная из квантово-механического расчета на атомарном уровне, составляет $1,08 \cdot 10^{13} \text{ е Кл/см}^2$. Отметим, что здесь рассматривается задача с одним каналом двумерного электронного газа или, иными словами, с одним гетероинтерфейсом, на котором образуется нескомпенсированный заряд ($M = 1$). Остальные данные определяли по аппроксимационным зависимостям [5]:

$$\epsilon_{\text{AlGa}}(x) = (0,03x + 10,28)\epsilon_0;$$

$$\Delta E_c(x) = 0,7(E_g(x) - E_g(0)); E_g(x) = 6,13x + 3,42(1 - x);$$

$$-e\phi_b = 1,3x + 0,84,$$

где ϵ_0 — электрическая постоянная; x — мольная доля алюминия в сплаве AlGa . Использовали граничное условие для потенциала $\phi(0) = \phi_b$.

Результаты расчетов приведены на рис. 2. На рис. 2 показаны распределения по толщине гетероструктуры потенциальной энергии и электронной плотности. Штриховые кривые соответствуют нелегированному барьерному слою, сплошные — легированному донорами с постоянной концентрацией $2,61 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Отметим, что это максимально допустимая концентрация, при которой удовлетворяется ограничение (10). Из рис. 2 видно, что во втором случае профиль потенциальной энергии приобретает характерный изгиб и повышается электронная плотность. В результате слоевая концентрация электронов в двумерном электронном газе N возрастает с $8,3 \cdot 10^{12}$ до $1,27 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

Перейдем к результатам решения задач оптимизации. Пусть требуется обеспечить концентрацию электронов в ДЭГ $N^* = 1,1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Решение будем искать в классе кусочно-постоянных функций, что соответствует технологии изготовления слоистых структур. Рассмотрим барьерный слой, состоящий, например, из пяти подслоев. В модели не ограничи-

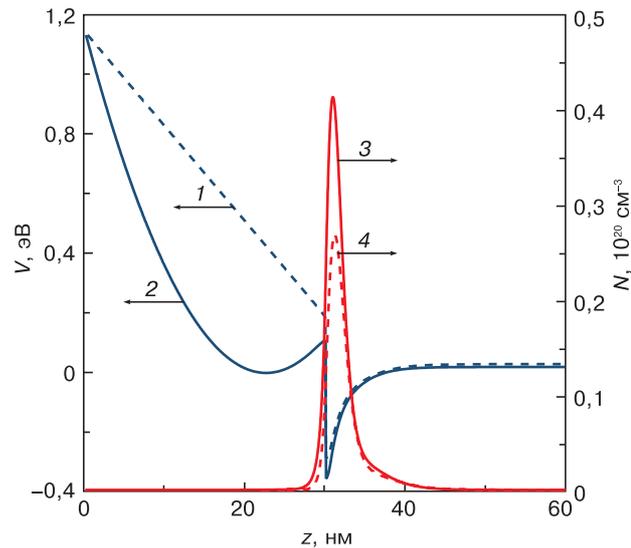


Рис. 2. Распределение потенциальной энергии (1, 2) и электронной плотности N (3, 4) по толщине гетероструктуры z для случаев нелегированного (1, 3) и легированного (2, 4) барьерного слоя

Fig. 2. The distribution of the potential energy (left scale) and electron density (right scale) across the heterostructure for cases of undoped (dashed curves) and doped (solid curves) of the barrier layer

вается возможное число подслоев. Для наглядности все свойства слоев, за исключением легирования, будем считать одинаковыми, включая их толщины. Наложим следующие ограничения:

$$0 \leq u_m \leq 2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}; m = 1, \dots, 4; u_5 = 0.$$

Последнее ограничение означает запрет на легирование непосредственно прилегающего к каналу ДЭГ слоя. Это довольно распространенное ограни-

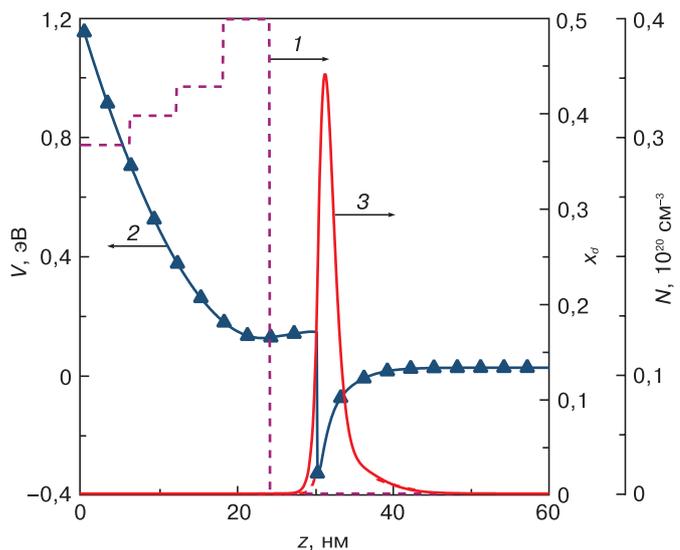


Рис. 3. Распределение оптимальной концентрации доноров x_d (1), потенциальной энергии V (2) и электронной плотности N (3) по толщине гетероструктуры z

Fig. 3. The distribution of the optimal donor concentration (dashed curve 1, right scale 1), potential energy (marked curve 2, left scale) and electron density (solid curve 3, right scale 2) across the heterostructure

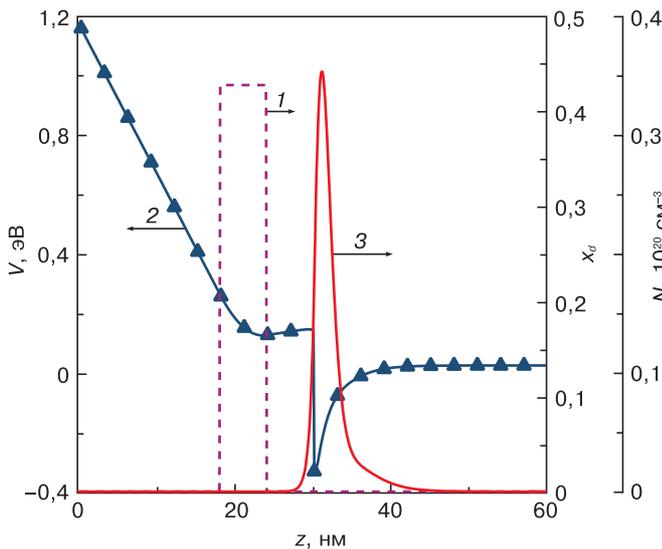


Рис. 4. Распределение оптимальной концентрации доноров x_d (1), потенциальной энергии V (2) и электронной плотности N (3) по толщине гетероструктуры z

Fig. 4. The distribution of the optimal donor concentration (dashed curve 1, right scale 1), potential energy (marked curve 2, left scale) and electron density (solid curve 3, right scale 2) across the heterostructure

чение, которое диктуется необходимостью уменьшить рассеяние на неоднородностях сплава. Такие подслои обычно называются спейсерами. Значение $2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ взято для примера, оно может быть и выше. При этом модель применима к произвольным вариантам легирования.

Результаты решения этой задачи представлены на рис. 3. На рис. 3 приведены полученные в результате оптимизации распределение легирующей примеси по подслоям барьерного слоя $x_d(z) = n_d(z)/\bar{n}_d$ (концентрация примеси отнесена к значению $\bar{n}_d = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$), профиль потенциальной энергии x , а также распределение электронной плотности N в гетероструктуре (плотность отнесена к значению 10^{20} см^{-3}).

Далее рассмотрим несколько видоизмененную задачу. Снимем ограничения на подслои 1—4, но при этом усилим влияние второго слагаемого в минимизируемом функционале. То есть попытаемся достигнуть заданной концентрации электронов при минимальной суммарной ионизации барьерного слоя. Результаты решения показаны на рис. 4. Из рис. 4 видно, что наиболее выгодным оказывается максимальное легирование слоя 3. При этом суммарная ионизация барьерного слоя U во втором варианте расчета оказывается существенно ниже, чем при относительно равномерном легировании. Этот результат

согласуется с современной тенденцией к переходу от однородного профиля легирования к планарному δ -легированию в технологиях изготовления полевых транзисторов [1, 12].

Заключение

Разработаны средства математического моделирования и оптимизации, которые могут применяться в технологиях изготовления полевых транзисторов. Представлены подходы, с помощью которых могут быть созданы условия для автоматизированного проектирования таких структур.

Библиографический список

1. Лукашин, В. М. Перспективы развития мощных полевых транзисторов на гетероструктурах с донорно-акцепторным легированием / В. М. Лукашин, А. Б. Пашковский, К. С. Журавлев, А. И. Торопов, В. Г. Лапин, Е. И. Голант, А. А. Капралова // Физика и техника полупроводников. – 2014. – Т. 48, № 5. – С. 684—692.
2. Abgaryan, K. K. Computational model of 2DEG mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures / K. K. Abgaryan, I. V. Mutigullin, D. L. Reviznikov // Physica status solidi (c). – 2015. – V. 12, N 4–5. P. 460—465. DOI: 10.1002/pssc.201400200
3. Абгарян, К. К. Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов / К. К. Абгарян, Д. Л. Ревизников // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2016. – Т. 56, № 1. С. 155—166. DOI: 10.7868/S004446691601004X
4. Kohn, W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev. – 1965. – V. 140. – P. A1133—A1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133
5. Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54, N 16. – P. 11169—11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
6. Vasileska, D. Computational electronics: semiclassical and quantum device modeling and simulation / D. Vasileska, S. M. Goodnick, S. Goodnick. – CRC Press, 2010. – 782 p.
7. Протасов, Д. Ю. Рассеяние электронов в гетероструктурах AlGaIn/GaN с двумерным электронным газом / Д. Ю. Протасов, Т. В. Малин, А. В. Тихонов, А. Ф. Пацульников, К. С. Журавлев // Физика и техника полупроводников. – 2013. – Т. 47, № 1. – С. 36—47.
8. Ambacher, O. Pyroelectric properties of Al(In)GaIn/GaN hetero- and quantum well structures / O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, L. F. Eastman // J. Phys.: Condens. Matter. – 2002. – V. 14. – P. 3399—3434.
9. Abgaryan, K. K. Theoretical investigation of 2DEG concentration and mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures with various Al concentrations / K. K. Abgaryan, I. V. Mutigullin, D. L. Reviznikov // Physica status solidi (c). – 2015. – V. 12, N 12. – P. 1376—1382. DOI: 10.1002/pssc.201510159
10. Trellakis, A. Iteration scheme for solution of the two-dimensional schrodinger-poisson equations in quantum structures / A. Trellakis, A. T. Galick, A. Pacelli, U. Ravaoli // J. Appl. Phys. 1997. – V. 81, N 12. – P. 7880—7884. DOI: 10.1063/1.365396
11. Евтушенко, Ю. Г. Оптимизация и быстрое дифференцирование / Ю. Г. Евтушенко. — М.: Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН, 2013. – 144 с.
12. Борисенко, В. Е. Нанозлектроника / В. Е. Борисенко, А. И. Воробьева, Е. А. Уткина. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. – 223 с.

Optimization problems of nanoscale semiconductor heterostructures

K. K. Abgaryan^{1,*})¹ Dorodnitsyn Computing Center of the Russian Academy of Sciences,
40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia

Abstract. In the paper a new approach to solve the optimization problem of nanoscale semiconductor heterostructures is presented. In this paper the authors formulated and solved The problem of the barrier layer optimal doping is formulated for the case of multilayer barrier. The problem is solved using the effective optimization algorithms based on gradient methods. As an example, is considered heterostructure Al_{0.25}GaN/GaN with the total thickness of the barrier layer 30 nm. Obtained in the computational experiment results are consistent with the modern trend to move from homogeneous doping profile to a planar-doping in the technology of manufacturing field-effect transistors. The developed tools of mathematical modeling and optimization can be used in the engineering of field effect transistors. The proposed approach creates the conditions for computer-aided design of such structures.

Keywords: *ab initio* modeling, heterostructure, mobility of charge carriers, two-dimensional electron gas, optimization algorithms, multiscale modeling

References

1. Lukashin V. M., Pashkovskij A. B., Zhuravlev K. S., Toropov A. I., Lapin V. G., Golant E. I., Kapralova A. A. Prospects for the development of powerful field transistors on heterostructures with donor-acceptor doping. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductors*, 2014, vol. 48, no. 5, pp. 684–692.
2. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Reviznikov D. L. Computational model of 2DEG mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures. *Physica Status Solidi (c)*, 2015, vol. 12, no. 4–5, pp. 460–465. DOI: 10.1002/pssc.201400200
3. Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. Numerical modeling of the distribution of charge carriers in nanoscale semiconductor heterostructures taking into account polarization effects. *Zhurnal vychislitel'noj matematiki i matematicheskoy fiziki*, 2016, vol. 56, no. 1, pp. 155–166. DOI: 10.7868/S004446691601004X
4. Kohn W., J. Sham L. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 1965, vol. 140, pp. A1133–A1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133
5. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 1996, vol. 54, no. 16, pp. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
6. Vasileska D., Goodnick S. M., Goodnick S. Computational electronics: semiclassical and quantum device modeling and simulation. *CRC Press*, 2010. 782 p.
7. Protasov D. Y., Malin T. V., Tikhonov A. V., Zhuravlev K. S., Tsatsulnikov A. F., Electron scattering in AlGaIn/GaN heterostructures with a two-dimensional electron gas. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductors*, 2013, vol. 47, no. 1, pp. 33–44.
8. Ambacher O., Majewski J., Miskys C., Link A., Hermann M., Eickhoff M., Stutzmann M., Bernardini F., Fiorentini V., Tilak V., Schaff B., Eastman L. F. Pyroelectric properties of Al(In)GaIn/GaN hetero- and quantum well structures. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2002, vol. 14, pp. 3399–3434.
9. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Reviznikov D. L. Theoretical investigation of 2DEG concentration and mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures with various Al concentrations. *Physica status solidi (c)*, 2015, vol. 12, no. 12, pp. 1376–1382. DOI: 10.1002/pssc.201510159
10. Trellakis A., Galick A. T., Pacelli A., Ravaoli U. Iteration scheme for solution of the two-dimensional Schrödinger-Poisson equations in quantum structures. *J. Appl. Phys.*, 1997, vol. 81, no. 12. DOI: 10.1063/1.365396
11. Evtushenko Yu. G. *Optimizatsiya i bystroe differentsirovanie* [Optimization and fast differentiation]. Moscow: Dorodnitsyn Computing Centre of RAS, 2013. 144 p. (In Russ.)
12. Borisenko V. E., Vorob'eva A. I., Utkina E.A. *Nanoelektronika* [Nanoelectronics]. Moscow: Binom. Laboratoriya znanii, 2009. 223 p. (In Russ.)

Acknowledgments. This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Grant No. 16–08–01178).

* * *