

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н. Э. БАУМАНА

ФАКУЛЬТЕТ «РАДИОЭЛЕКТРОНИКА И ЛАЗЕРНАЯ ТЕХНИКА»

КАФЕДРА «ТЕХНОЛОГИИ ПРИБОРОСТРОЕНИЯ»



ДОКЛАД

НА ТЕМУ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ПРИМЕРЕ РТГС

Содержание

Введение	4
1 Теоретическая часть	5
1.1 Полупроводник	5
1.1.1 Зонная структура	5
1.1.2 Зонная диаграмма	6
1.1.3 Плотность состояний	7
1.1.4 Концентрация носителей заряда	7
1.1.4.1 Собственный полупроводник	7
1.1.4.2 Легированный полупроводник	7
1.2 Размерное квантование	8
1.3 Гетероструктура	11
1.3.1 Зонная диаграмма гетероперехода	11
1.3.2 Уравнение Пуассона-Больцмана	11
1.4 Деградация приборов на основе гетероструктур	12
1.5 Диффузия	12
1.5.1 Законы Фика	13
1.5.2 Механизмы диффузии	13
1.5.3 Коэффициент диффузии	13
1.6 Токоперенос через ГС	15
1.7 Метод конечных разностей для решения одномерного нестационарного уравнения диффузии	16
1.7.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации	16
1.7.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации	18
1.8 Метод конечных разностей для расчета токоперенос через гетероструктуру	19
2 Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$	20
2.1 Исследование параметров ямы	20
2.1.1 Исследование глубины ямы	20
2.1.1.1 ВАХ РТГС	20
2.1.1.2 Прозрачность РТГС	20
2.1.2 Исследование ширины ямы	20
2.1.2.1 ВАХ РТГС	20

2.1.2.2	Прозрачность РТГС	20
2.2	Исследование параметров барьеров	21
2.2.1	Исследование высоты барьеров	21
2.2.1.1	ВАХ РТГС	21
2.2.1.2	Прозрачность РТГС	21
2.2.2	Исследование ширины барьеров	21
2.2.2.1	ВАХ РТГС	21
2.2.2.2	Прозрачность РТГС	21
2.3	Исследование параметров спейсеров	22
2.3.1	Исследование влияния размеров спейсера	22
2.3.1.1	ВАХ РТГС	22
2.3.1.2	Прозрачность РТГС	22
2.3.1.3	Концентрация электронов в РТГС	22
3	Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$	23
3.1	Диффузионное расплытие активной области	23
3.2	Диффузия легирующей примеси	24

Введение

Цель работы:

- а) Изучение процессов деградации гетероструктур.

Задача работы:

- а) Получить модель описывающую процессы деградации в гетероструктурах.

1 Теоретическая часть

1.1 Полупроводник

Рассматривая полупроводники, мы будем говорить о кристаллических телах. Для анализа таких тел необходимо решить уравнение Шредингера для нахождения, к примеру, энергитеских уровней. В целях упрощения задачи и сохранения наиболее характерных черт системы в Зонной теории вводится ряд допущений [?]:

- а) Атомные ядра являются неподвижными источниками поля, действующего на электроны;
- б) Расположения атомных ядер в пространстве является строго переодичным: они располагаются в узлах идеальной кристаллической решетки;
- в) Взаимодействие электронов друг с другом заменяется некоторым внешним полем.

1.1.1 Зонная структура

В следствии симметрии и переодичности идеального кристалла по разлиным направлениям и теории Блоха, для описания дисперсии электронов используют зоны Бриллюэна. Так как закон дисперсии переодичен на всем кристалле, для его описания можно использовать только первую зону Бриллюэна.

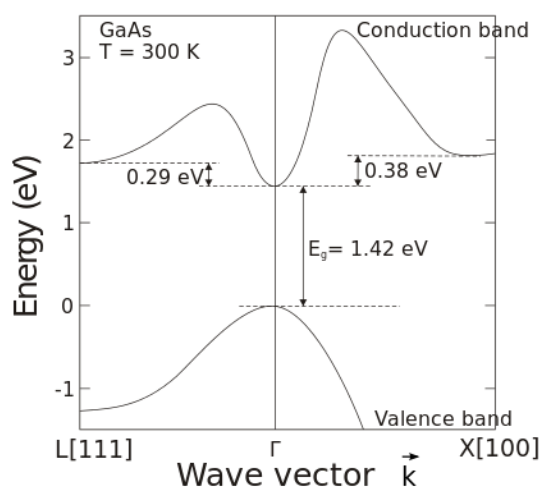


Рисунок 1.1 — Зонная структура *GaAs*

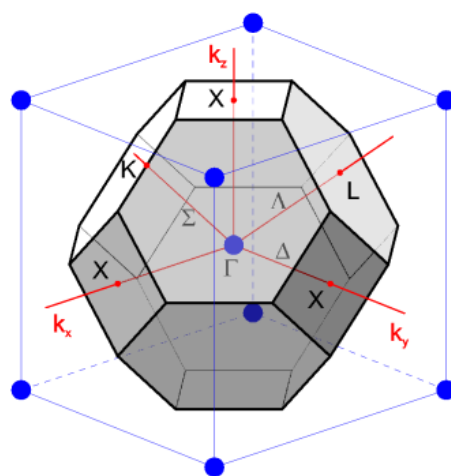


Рисунок 1.2 — Элементарная ячейка типа Цинковой обманки

1.1.2 Зонная диаграмма

Для наглядного представления и сравнения полупроводников и других материалов удобно использовать зонную диаграмму (рис. 1.3).

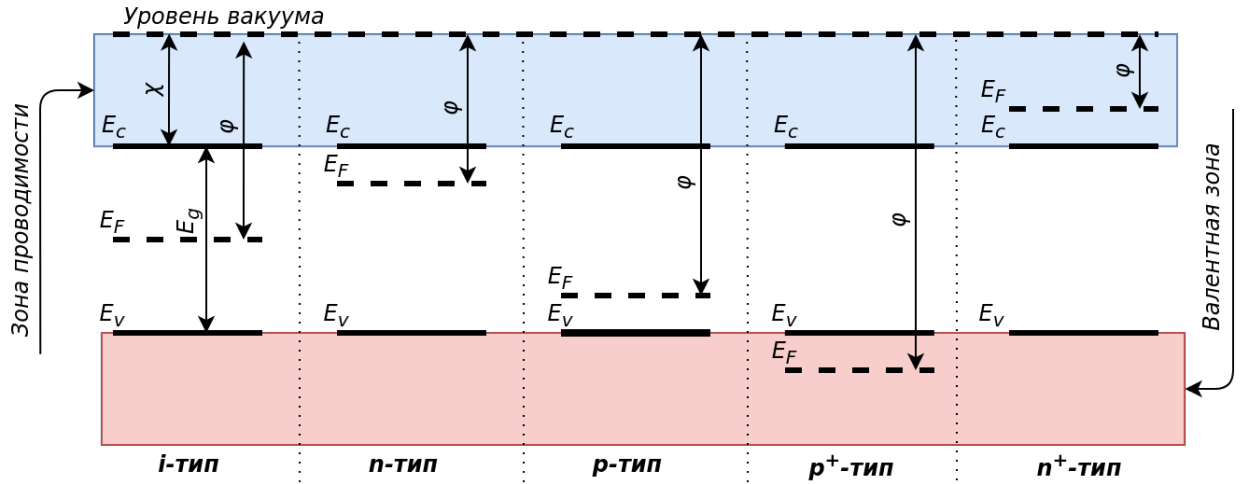


Рисунок 1.3 — Характерный вид зонной диаграммы для различных материалов

где E_c — дно зоны проводимости (ЗП);
 E_v — потолок валентной зоны (ВЗ);
 E_F — уровень (квазиуровень) Ферми;
 E_g — запрещенная зона (ЗЗ);
 χ — электронное сродство;
 φ — работа выхода.

Таблица 1.1 — Основные параметры $Al_xGa_{1-x}As$

Параметр	$Al_xGa_{1-x}As$
Кристаллическая структура	Типа цинковой обманки
Постоянная решетки $a[nm]$	$0.56533 + 0.00078x$
$E_g^\Gamma[eV], x < 0.45$	$1.424 + 1.247x$
$E_g^\Gamma[eV], x > 0.45$	$1.656 + 0.215x + 0.143x^2$
m_e^Γ	$0.067 + 0.083x$
m_{lh}	$0.082 + 0.071x$
$N_{atoms}[1/sm^{-3}]$	$(4.42 - 0.17x)10^{22}$

1.1.3 Плотность состояний

1.1.4 Концентрация носителей заряда

1.1.4.1 Собственный полупроводник

1.1.4.2 Легированный полупроводник

1.2 Размерное квантование

Квантоворазмерный эффект (квантовый размерный эффект) — изменение термодинамических и кинетических свойств кристалла, когда хотя бы один из его геометрических размеров становится соизмеримым с длиной волны де Бройля электронов. Этот эффект связан с квантованием энергии носителей заряда, движение которых ограничено в одном, двух или трёх направлениях.

Волны де Бройля — волны вероятности, определяющие плотность вероятности обнаружения объекта в заданной точке конфигурационного пространства. В соответствии с принятой терминологией говорят, что волны де Бройля связаны с любыми частицами и отражают их волновую природу.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\hbar k} = \frac{h}{mv};$$
$$\psi(x, t) = A * e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = A * e^{i(kx - \omega t)}.$$

Чтобы лучше понимать размерное квантование определим количество квантовых состояний и плотность состояний.

Рассмотрим 3D кристалл (bulk):

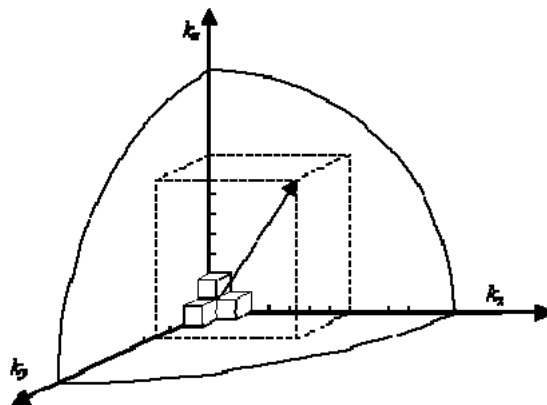


Рисунок 1.4 — k-пространство (шар)

Число состояний частицы $G(E)$ и плотность состояний $g(E)$, энергия которых не превышает некоторого фиксированного значения E , нахо-

дятся из формул:

$$G(E) = \frac{V_{sphere}}{V_{single-state}} = J_z \frac{\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi k^3}{\frac{\pi^3}{V}} = \frac{k^3 V}{3\pi^2} = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V}{3\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{3}{2}};$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$g(E) = \frac{dG(E)}{dE} = \frac{(2E)^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} V.$$

Рассмотрим 2D кристалл (well):

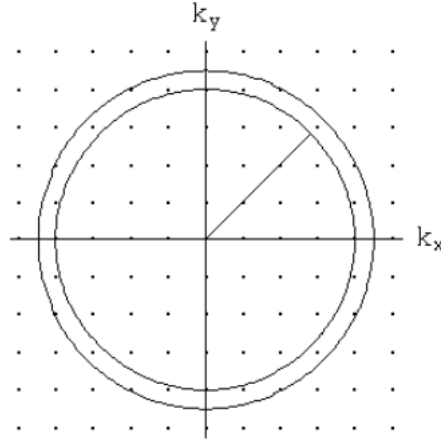


Рисунок 1.5 — k-пространство (круг)

$$G(E) = \frac{V_{circul}}{V_{single-state}} = J_z \frac{\frac{1}{4} \pi k^2}{\frac{\pi^2}{S}} = \frac{k^2}{2\pi} = \frac{mS}{\pi \hbar^2} E;$$

$$g(E) = \frac{dG(E)}{dE} = \frac{m}{\pi \hbar^2} S.$$

Рассмотрим 1D кристалл (wire):

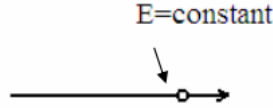


Рисунок 1.6 — k-пространство (линия)

$$G(E) = \frac{V_{line}}{V_{single-state}} = J_z \frac{k}{\frac{\pi}{L}} = \frac{kL}{\pi} = \frac{\sqrt{2m}L}{\pi \hbar} E^{\frac{1}{2}};$$

$$g(E) = \frac{dG(E)}{dE} = \frac{\sqrt{m}L}{\sqrt{2}\pi \hbar} E^{-\frac{1}{2}}.$$

J_z – определяет число состояний не связанных с перемещением частицы в пространстве (например, число возможных проекций спина). В нашем случае, для электрона $J_z = 2$.

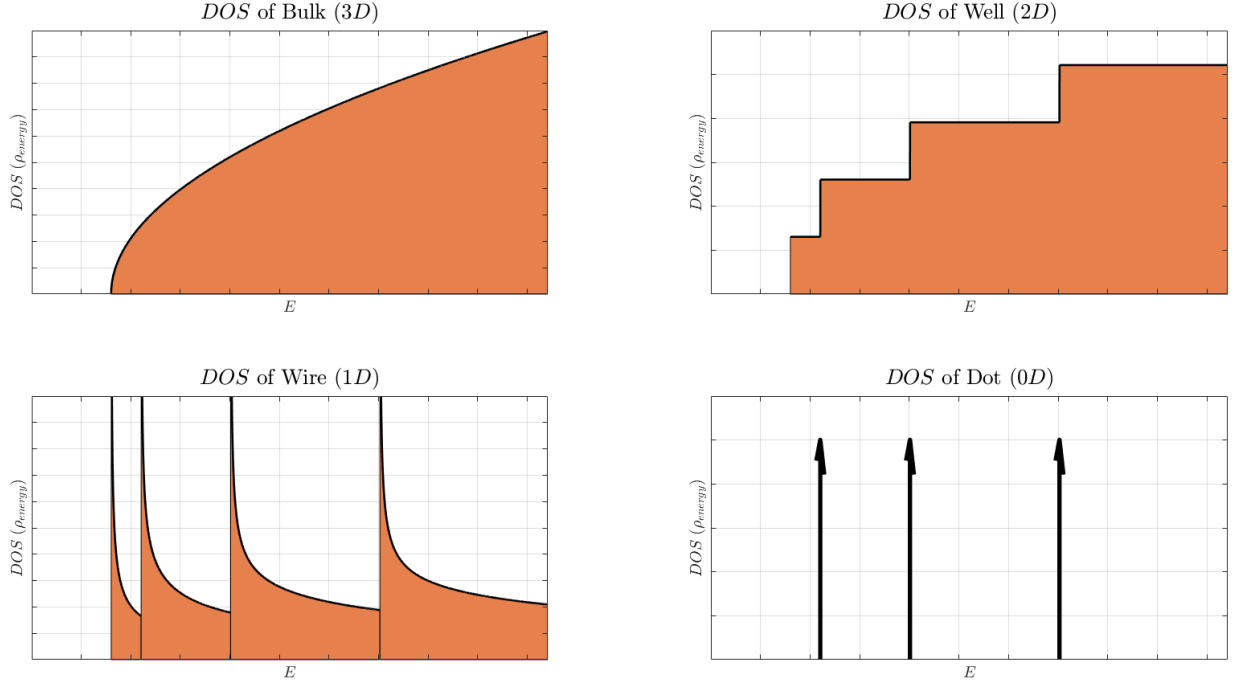


Рисунок 1.7 — Плотность состояний в 3D, 2D, 1D, 0D, где $g(E) = \rho_{energy}$

Таблица 1.2 — Основные параметры $Al_xGa_{1-x}As$

Degrees of freedom	Dispersion (kinetic energy)	Density of state	Effective density
3D, bulk	$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$	$\frac{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{1}{2}}$	$\frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{3}{2}}$
2D, well	$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}$	$\frac{m}{\pi \hbar^2}$	$\frac{m}{\pi \hbar^2} E$
1D, wire	$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2) + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} \right)$	$\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}\pi \hbar} E^{-\frac{1}{2}}$	$\frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} E^{\frac{1}{2}}$
0D, dot	$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right)$	$2\delta E$	2

1.3 Гетероструктура

Гетероструктура — полупроводниковая структура с несколькими гетеропереходами (ГП).

Гетеропереход — контакт двух различных по химическому составу монокристаллических или аморфных полупроводников.

Наиболее распространенные полупроводники для составления ГС:

- а) $GaAs-AlAs$;
- б) $GaN-AlN$;
- в) $GaSb-AlSb-InAs$;
- г) $GaAs-Ge$.

1.3.1 Зонная диаграмма гетероперехода

1.3.2 Уравнение Пуассона-Больцмана

1.4 Деградация приборов на основе гетероструктур

Деградация — процесс ухудшения характеристик какого-либо объекта с течением времени.

Изучая деградацию ГС рассматривают следующие параметры:

- Вольт-амперная характеристика (ВАХ);
- Высота потенциального барьера (ПБ);
- Ширина потенциального барьера;
- Ширина потенциальной ямы (ПЯ);
- Т.д...

ГС используют для построения резонансно-туннельный диод (РТД), квантовых точек (КТ), транзисторов с высокой подвижностью электронов (НЕМТ) и так далее.

Химический состав ГС определяет ее зонную структуру, из чего вытекают особенности работы тех или иных устройств на ГС.

Одна из причин деградации ГС — диффузионное размытие ГП, вызванное:

- Градиентом температуры;
- Градиентом концентрации;
- Градиентом давления;
- и т.д...

Диффузионное размытие под действием градиента концентрации описывается с помощью законов Фика.

1.5 Диффузия

Диффузия — это обусловленный хаотическим тепловым движением перенос атомов, он может стать направленным под действием градиента концентрации или температуры.

Диффундировать могут как собственные атомы решетки, так и атомы растворенных в полупроводнике элементов, а также точечные дефекты структуры кристалла — междоузельные атомы и вакансии.

1.5.1 Законы Фика

Первый закон Фика говорит, что плотность потока вещества пропорциональна коэффициенту диффузии (D) и градиенту концентрации (C). Является стационарным уравнением.

$$\bar{J} = -D\nabla C; \quad (1.1)$$

$$\bar{J}_x = -\bar{e}_x D_x \frac{\delta}{\delta x} C_x. \quad (1.2)$$

$$(1.3)$$

Второй закон Фика связывает пространственное и временное изменения концентрации.

$$\frac{\delta}{\delta t} C = -\nabla(D\nabla C); \quad (1.4)$$

$$\frac{\delta}{\delta t} C_x = -\frac{\delta}{\delta x} D_x \frac{\delta}{\delta x} C_x. \quad (1.5)$$

1.5.2 Механизмы диффузии

Вакансионный механизм диффузии — заключается в миграции атомов по кристаллической решётке при помощи вакансий.

Межузельный механизм диффузии — заключается в переносе вещества межузельными атомами.

Прямой обмен атомов местами — заключается в том, что два соседних атома одним прыжком обмениваются местами в решетке кристалла.

1.5.3 Коэффициент диффузии

Коэффициент диффузии (D) — макроскопическая величина, которая определяется экспериментально. Коэффициент диффузии зависит от температуры (T) по закону Аррениуса:

$$D = D_0 \exp \left[-\frac{E_a}{k_B T} \right], \quad (1.6)$$

где D_0 — предэкспоненциальный множитель.

Коэффициент (D_0) и энергия активации (E_a) не зависят от температуры.

Основным механизмом диффузии Al и Si в $GaAs$ является диффузия по вакансиям галлия (V_{Ga}). Это связано с тем, что атомы Al и Si имеют сходные массы и размеры.

С учетом эффекта уровня Ферми коэффициент диффузии Al и Si в $GaAs$ получен в работах [?], [?], [?], [?]:

$$D_{Al, Si} = D_{i-GaAs} \left(\frac{N_D}{n_i} \right)^3 = D_0 \exp \left[- \frac{3.5}{k_B T} \right] \left(\frac{n}{n_i} \right)^3, \quad (1.7)$$

где n — концентрация донорной примеси (Si);

n_i — концентрация собственных носителей заряда.

Концентрация собственных носителей заряда [?]:

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp \left[- \frac{E_g}{2k_B T} \right]; \quad (1.8)$$

$$N_c = 2 \left[\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right]^{\frac{3}{2}}; \quad (1.9)$$

$$N_v = 2 \left[\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (1.10)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны (ЗЗ) п/п.

1.6 Токоперенос через ГС

1.7 Метод конечных разностей для решения одномерного нестационарного уравнения диффузии

Суть метода конечных разностей заключается в аппроксимации дифференциальных операторов отношением конечных разностей.

1.7.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации

Одномерное нестационарное уравнение диффузии, соответствующее второму закону Фика имеет вид:

$$\frac{\delta}{\delta t}C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2}C; \quad (1.11)$$

Аппроксимация первой производной по времени в момент времени t_i концентрации $C_j(t_i) = C_j^i$ в точке j :

$$\frac{\delta}{\delta t}C_j^i = \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t}; \quad (1.12)$$

Аппроксимация первой производной по координате в момент времени t_i концентрации $C_j(t_i) = C_j^i$ в точке j :

$$J_j^i = \frac{\delta}{\delta x}C_j^i = \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x}; \quad (1.13)$$

Аппроксимация второй производной по координате в момент времени t_i концентрации $C_j(t_i) = C_j^i$ в точке j :

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2}{\delta x^2}C_j^i &= \frac{\delta}{\delta x} \left[\frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} \right] = \frac{\frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x} = \\ &= \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}; \end{aligned} \quad (1.14)$$

Подставляя в (1.11) аппроксимацию производных (1.12), (1.14), получим связь C_j^{i+1} с C_j^i , т.е. изменение концентрации через Δt :

$$C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, \quad (1.15)$$

где $\lambda = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ — связь коэффициента диффузии и шагов по сетке времени и координаты.

Уравнение (1.15) справедливо для всех не крайних точек конечно разностной схемы, при коэффициенте диффузии не зависящем от концентрации.

Выделим два граничных приближения для концентрации:

а) «Закрытая система» — концентрация на границе не изменяется ($J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$);

б) «Открытая система» — поток частиц подходящий к границе равен потоку уходящих частиц ($J_0^i = J_1^i, J_N^i = J_{N+1}^i$).

Для «закрытой системы» должно выполняться условие $J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$. Рассмотрим (1.13), (1.15) для точки $j = 1$:

$$\begin{aligned} J_0^i &= \frac{C_1^i - C_0^i}{\Delta x} = 0 \Rightarrow C_0^i = C_1^i; \\ C_1^{i+1} &= \lambda C_0^i + (1 - 2\lambda)C_1^i + \lambda C_2^i = \lambda C_1^i + (1 - 2\lambda)C_1^i + \lambda C_2^i = \\ &= (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i = C_1^{i+1}; \end{aligned}$$

Рассматривая точки $N - 1, N, N + 1$ аналогичным образом получим:

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = (1 - \lambda)C_N^i + \lambda C_{N-1}^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases} \quad (1.16)$$

Для «открытой» системы должно выполняться условие $J_0^i = J_1^i, J_N^i = J_{N+1}^i$. Рассмотрим (1.13), (1.14), (1.15) для точки $j = 1$:

$$\begin{aligned} J_0^i &= J_1^i \\ \frac{C_1^{i+1} - C_1^i}{\Delta t} &= \frac{J_1^i - J_0^i}{\Delta x} = \frac{0}{\Delta x} = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow C_1^{i+1} = C_1^i; \end{aligned}$$

Рассматривая точки $N - 1, N, N + 1$ аналогичным образом получим:

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases} \quad (1.17)$$

1.7.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации

Если коэффициенте диффузии (D) зависит от концентрации, тогда уравнение диффузии принимает вид:

$$\frac{\delta}{\delta t} C = \frac{\delta}{\delta x} D \frac{\delta}{\delta x} C; \quad (1.18)$$

Тогда уравнение конечно-разностной схемы будет [?]:

$$\frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{D_{j+1/2}^i \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - D_{j-1/2}^i \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x}; \quad (1.19)$$

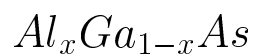
$$D_{j\pm 1/2}^i = \frac{D_j^i + D_{j\pm 1}^i}{2} = D_{j\pm}^i. \quad (1.20)$$

Проводя рассуждения аналогичные предыдущему параграфу получит конечно-разностную схему для открытой схемы:

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i)C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i; \\ \lambda_-^i = D_{j-\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i. \end{cases} \quad (1.21)$$

1.8 Метод конечных разностей для расчета токоперенос через гетероструктуру

2 Исследование параметров РТГС на основе



2.1 Исследование параметров ямы

2.1.1 Исследование глубины ямы

2.1.1.1 ВАХ РТГС

2.1.1.2 Прозрачность РТГС

2.1.2 Исследование ширины ямы

2.1.2.1 ВАХ РТГС

2.1.2.2 Прозрачность РТГС

2.2 Исследование параметров барьеров

2.2.1 Исследование высоты барьеров

2.2.1.1 ВАХ РТГС

2.2.1.2 Прозрачность РТГС

2.2.2 Исследование ширины барьеров

2.2.2.1 ВАХ РТГС

2.2.2.2 Прозрачность РТГС

2.3 Исследование параметров спейсеров

2.3.1 Исследование влияния размеров спейсера

2.3.1.1 ВАХ РТГС

2.3.1.2 Прозрачность РТГС

2.3.1.3 Концентрация электронов в РТГС

3 Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

3.1 Диффузионное расплытие активной области

3.2 Диффузия легирующей примеси