

# Моделирование термической деградации AlGaAs гетероструктур

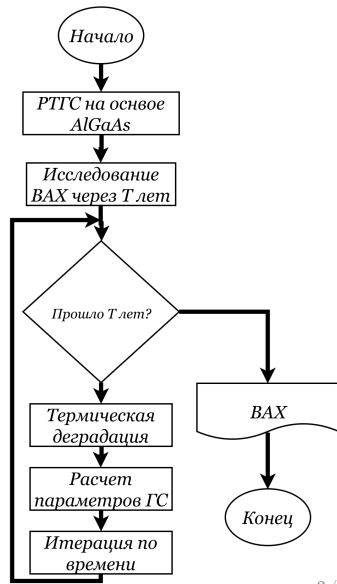
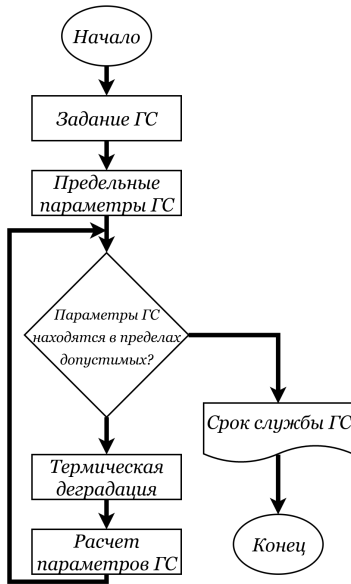
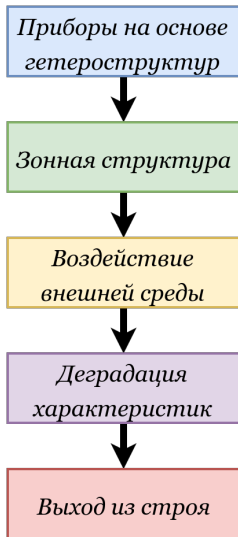
Выполнил: студент гр. РЛ6–82 Прохоров М.Д.

Руководитель: к.т.н. доц. Данилов И.И

МГТУ им. Н.Э.Баумана

Москва, 2017

# Постановка проблемы



# Цели и задачи

## Цель работы:

- ▶ Разработка алгоритма прогнозирования деградации приборов на основе GaAs гетероструктур.

## Задачи работы:

- ▶ Моделирование диффузионного размытия гетероструктур на основе GaAs под действием градиента концентрации при фиксированной температуре;
- ▶ Моделирование токопереноса через гетероструктуру на основе GaAs;
- ▶ Разработка алгоритма деградации резонансно-туннельной гетероструктуры на основе GaAs.

# Численное моделирование физических процессов

## Метод конечных разностей:

Аппроксимация первой производной:

$$\frac{d}{dx}S(x_0) = \frac{S(x_0 + \Delta x) - S(x_0)}{\Delta x};$$

Аппроксимация второй производной:

$$\frac{d^2}{dx^2}S(x_0) = \frac{S(x_0 + \Delta x) - 2S(x_0) + S(x_0 - \Delta x))}{\Delta x^2};$$

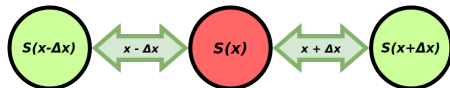
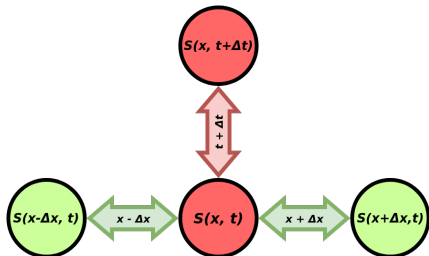
## Конечно-разностная схема

Уравнения диффузии:

$$\frac{\delta}{\delta t}C = \frac{\delta}{\delta x}D \frac{\delta}{\delta x}C;$$

Уравнение Шредингера:

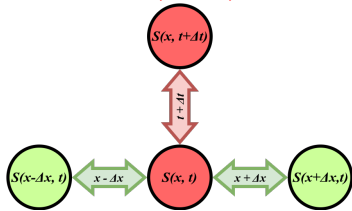
$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} \psi(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x);$$



# Численное моделирование диффузии

## Виды конечно-разностных схем:

### Явная схема (FTCS):



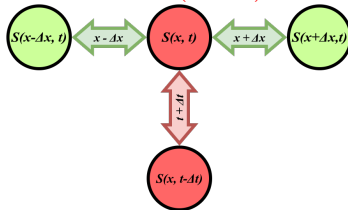
$$\frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = D \frac{C_{j-1}^i - 2C_j^i + C_{j+1}^i}{\Delta x^2}$$

Условие сходимости:  $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$ ;

### Проверка схем:

**ГУ:**  $C(0, t) = C(L, t) = 0$ ; **НУ:**  $C(x, 0) = \sin(\pi x/L)$ ; **Концентрация в момент t:**  $C(x, t) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{D\pi^2 t}{L^2}\right)$ ;

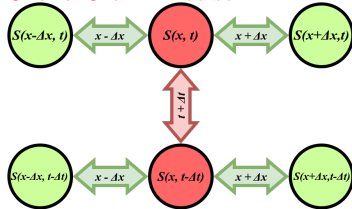
### Неявная схема (BTCS):



$$\frac{C_j^i - C_j^{i-1}}{\Delta t} = D \frac{C_{j-1}^i - 2C_j^i + C_{j+1}^i}{\Delta x^2}$$

Условие сходимости:  $\forall$

### Схема Crank-Nicolson:



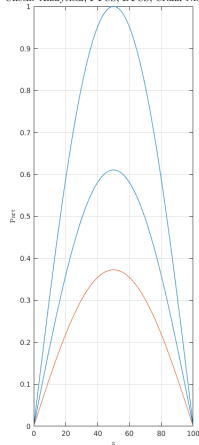
$$\frac{C_j^i - C_j^{i-1}}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left( \frac{C_{j-1}^i - 2C_j^i + C_{j+1}^i}{\Delta x^2} + \frac{C_{j-1}^{i-1} - 2C_j^{i-1} + C_{j+1}^{i-1}}{\Delta x^2} \right).$$

Условие сходимости:  $\forall$

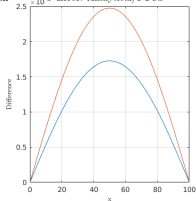
# Численное моделирование диффузии

## Проверка схем:

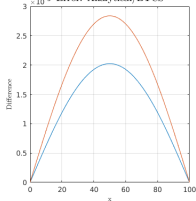
Check: Analytical, FTCS, BTCS, Crank-Nicolson



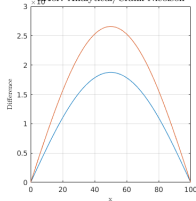
$\times 10^{-5}$  Error: Analytical/FTCS



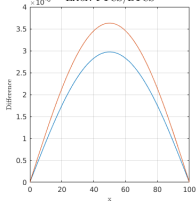
$\times 10^{-5}$  Error: Analytical/BTCS



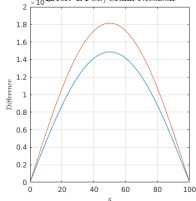
Error: Analytical/Crank-Nicolson



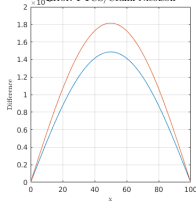
$\times 10^{-6}$  Error: FTCS/BTCS



$\times 10^{-6}$  Error: BTCS/Crank-Nicolson



$\times 10^{-6}$  Error: FTCS/Crank-Nicolson



## Ошибка схем:

**FTCS:**  
 $O(\Delta x^2) + O(\Delta t)$

**BTCS:**  
 $O(\Delta x^2) + O(\Delta t)$

**Crank-Nicolson:**  
 $O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2)$

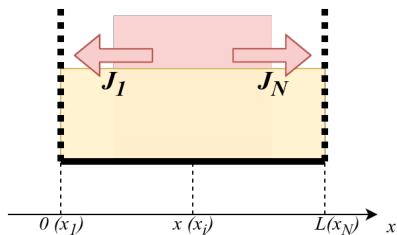
**Вывод:** Численное решение соответствует аналитическому. В качестве основной конечно-разностной схемы диффузии принимается BTCS.

# Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии постоянен:

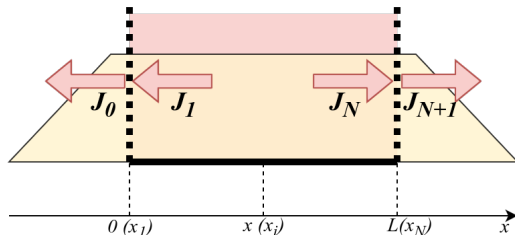
$$\begin{cases} D = \text{Const}; \\ \frac{\delta}{\delta t} C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2} C; \end{cases} \Rightarrow \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}, \text{ где } C_j^i = C(x_j, t_i).$$

«Закрытая» система:



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

«Открытая» система:



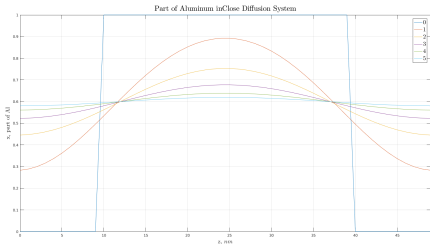
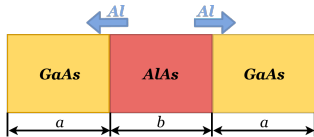
$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases}$$

# Численное моделирование диффузии

Диффузионное размытие  $i\text{-GaAs}/i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/i\text{-GaAs}$ :

$$D_{\text{Al}} = D_0 \exp \left[ - \frac{E_a}{k_B T} \right] = D_0 \exp \left[ - \frac{3.5}{k_B T} \right]$$

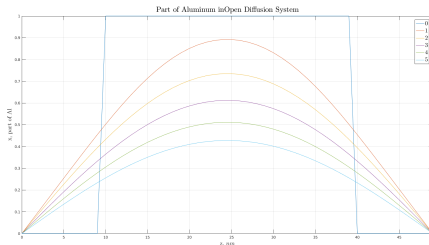
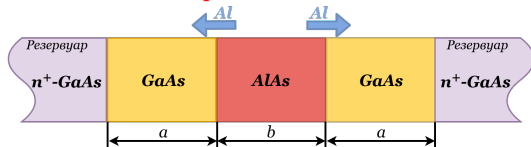
«Закрытая» система:



►  $a = 10$  нм;

►  $b = 30$  нм;

«Открытая» система:



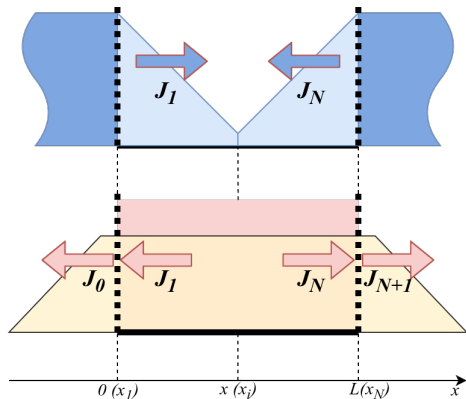


# Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии зависит от концентрации:

$$\begin{cases} D \neq \text{Const}; \\ \frac{\delta}{\delta t} C = \frac{\delta}{\delta x} D \frac{\delta}{\delta x} C; \end{cases} \Rightarrow \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{D_{j+1/2}^i \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - D_{j-1/2}^i \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x}, \text{ где } \begin{cases} D_{j\pm 1/2}^i = \frac{D_j^i + D_{j\pm 1}^i}{2} = D_{j\pm}^i; \\ C_j^i = C(x_j, t_i). \end{cases}$$

«Открытая» система с проникновением примеси из границ исследуемой области:



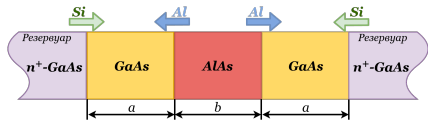
$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i) C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}; \\ \lambda_-^i = D_{j-}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases}$$

# Численное моделирование диффузии

Диффузионное размытие  $n^+$ -GaAs/i-GaAs/i-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/i-GaAs/ $n^+$ -GaAs:

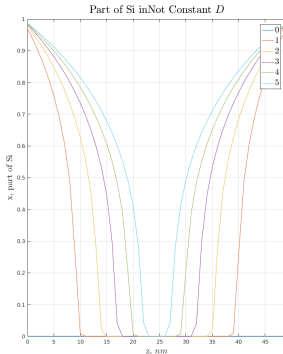
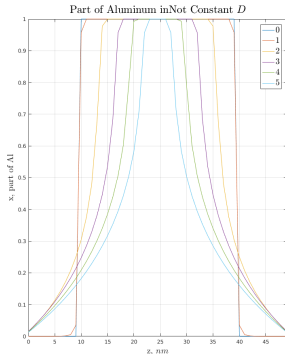
$$D_{Al,Si} = D_0 \exp \left[ - \frac{E_a}{k_B T} \right] \left( \frac{N_D}{n_i} \right)^3 = D_0 \exp \left[ - \frac{3.5}{k_B T} \right] \left( \frac{N_D}{n_i} \right)^3$$

«Открытая» система с проникновением частиц из границ исследуемой области:



►  $a = 10$  нм;

►  $b = 30$  нм;



# Численное моделирование токопереноса

Формула Цу-Есаки:

$$J(V) = \frac{2mek_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E) D(E) dE;$$

Функция снабжения:

$$D(E) = \ln \frac{1 + \exp \frac{E_F - E}{k_B T}}{1 + \exp \frac{E_F - E - eV}{k_B T}};$$

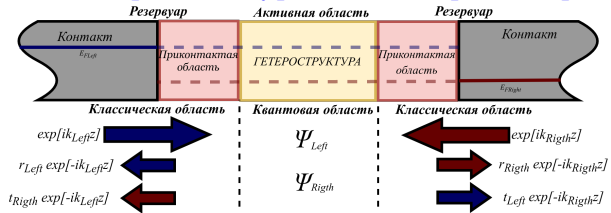
Прозрачность ГС:

$$T(E) = |T_L|^2 \frac{|k_R| m_L}{|k_L| m_R};$$

$$\psi_L = \exp[ik_L z];$$

$$\psi_R = T_L \psi_L = T_L \exp[ik_L z];$$

Численное решение уравнение Шредингера:



Конечно-разностная схема для внутренних точек:

$$\psi_{i-1} \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} + \psi_i \left( \frac{2\Delta^2 m_{i+1}^*}{\hbar^2} (E - U_i) - \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} - 1 \right) + \psi_{i+1} = 0,$$

Конечно-разностная схема для граничных точек:

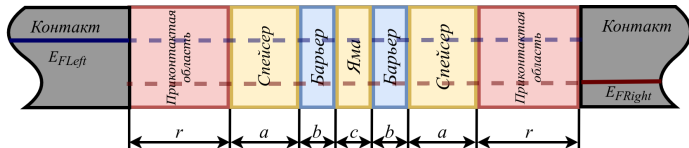
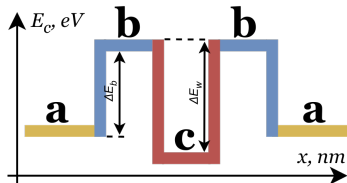
$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases} \quad \begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 0\Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 2ik_R \Delta; \end{cases}$$

Учет самосогласованного потенциала:

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{z} V_{new} - n_{old} \frac{eV_{new}}{\epsilon_0 V_{ref}} = \frac{e}{\epsilon_0} \left[ n_{old} \left( 1 - \frac{V_{old}}{V_{ref}} \right) - N_D(z) \right];$$

# Исследование влияния параметров РТГС на ВАХ

Исследуемая модель:



Параметры ямы:

- ▶ Ширина ямы («с»):
  - ▶ 10 монослоев;
  - ▶ 7 монослоев;
  - ▶ 5 монослоев;
  - ▶ 3 монослоев;
- ▶ Глубина ямы (« $\Delta E_w$ »):
  - ▶ 0.3 eV;
  - ▶ 0.7 eV;
  - ▶ 1 eV;
  - ▶ 1.3 eV;

Параметры барьеров:

- ▶ Ширина барьеров («b»):
  - ▶ 10 монослоев;
  - ▶ 7 монослоев;
  - ▶ 5 монослоев;
  - ▶ 3 монослоев;
- ▶ Высота барьера (« $\Delta E_b$ »):
  - ▶ 0.3 eV;
  - ▶ 0.5 eV;
  - ▶ 0.7 eV;
  - ▶ 1 eV;

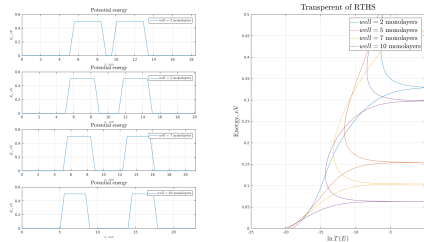
Параметры спейсеров:

- ▶ Ширина спейсера («a»):
  - ▶ 10 монослоев;
  - ▶ 7 монослоев;
  - ▶ 5 монослоев;
  - ▶ 3 монослоев;
- ▶ Ширина спейсера с ССП:
  - ▶ 10 монослоев;
  - ▶ 7 монослоев;
  - ▶ 5 монослоев;
  - ▶ 3 монослоев;

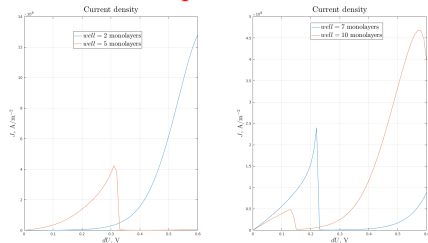
# Исследование влияния параметров ямы РТГС на ВАХ

Ширина ямы:

Прозрачность РТГС:

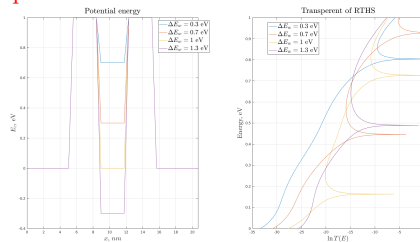


Плотность тока через РТГС:

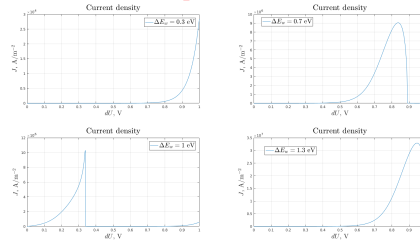


Глубина ямы:

Прозрачность РТГС:



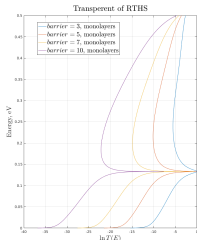
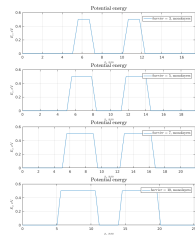
Плотность тока через РТГС:



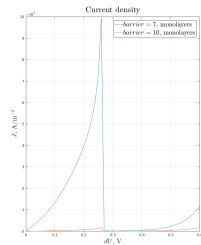
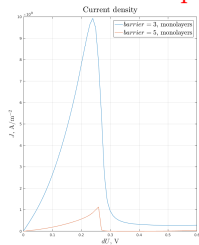
# Исследование влияния параметров барьеров РТГС на ВАХ

Ширина барьеров:

Прозрачность РТГС:

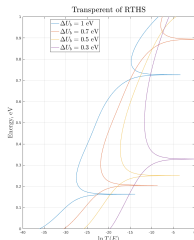
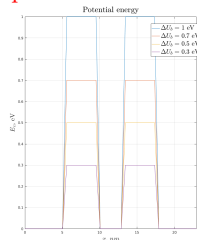


Плотность тока через РТГС:

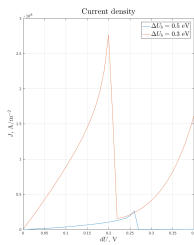
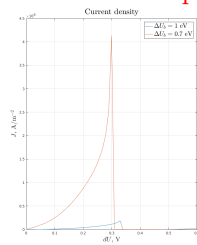


Высота барьеров:

Прозрачность РТГС:



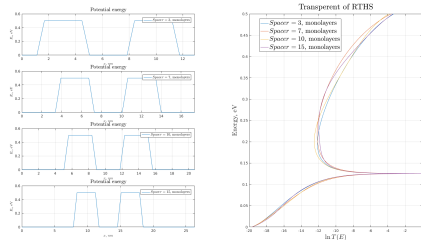
Плотность тока через РТГС:



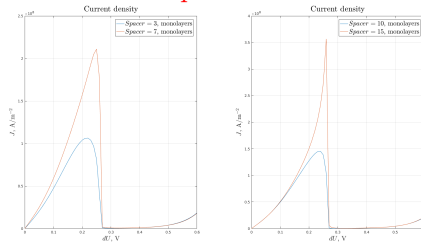
# Исследование влияния параметров спейсера РТГС на ВАХ

Ширина спейсера:

Прозрачность РТГС:

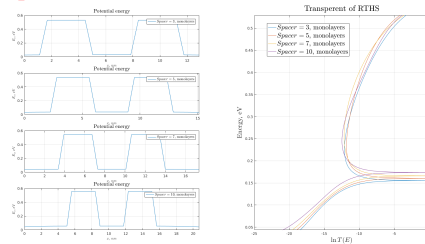


Плотность тока через РТГС:

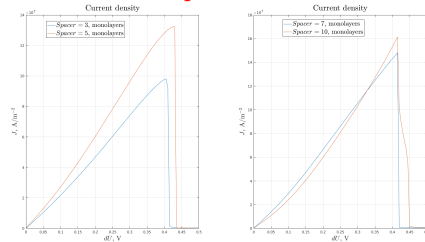


Ширина спейсера с учетом ССП:

Прозрачность РТГС:



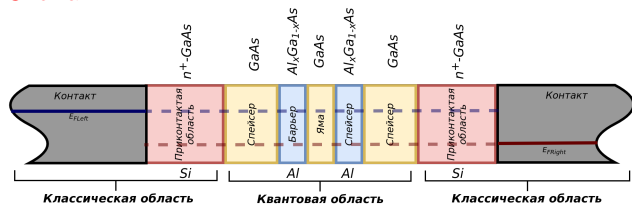
Плотность тока через РТГС:



# Моделирование термической деградации ВАХ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ РТГС

Исследуемая модель:

Схема:



Структура:  $n^+-\text{GaAs}/i\text{-GaAs}/i\text{-Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/i\text{-GaAs}/i\text{-Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/i\text{-GaAs}/n^+-\text{GaAs}$

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ :

Период решетки (нм):

$$\Delta x = 0.56533 + 0.00078x \approx 0.57;$$

Ширина запрещенной зоны (эВ):

$$E_g^r = \begin{cases} 1.424 + 1.247x, & x < 0.45; \\ 1.656 + 0.215x + 0.143x^2, & x \geq 0.45; \end{cases}$$

Эффективная масса в ЗП:

$$m_{\text{eff}}^r = 0.067 + 0.083x \text{ массы электрона};$$

Число атомов:

$$N = (4.42 - 0.17x)10^{22} \text{ см}^{-3} \approx 4.2 * 10^{28} \text{ м}^{-3}$$

Параметры модели:

Размеры:

$a = 10$  монослоев;

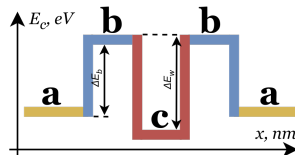
$b = 6$  монослоев;

$c = 6$  монослоев;

Зонная структура:

$$\Delta E_c = \Delta E_w = 0.6235x \text{ эВ};$$

Зонная структура:



Параметры диффузии:

$$D_{\text{Al, Si}} = D_0 \exp \left[ - \frac{E_a}{k_B T} \right] \left( \frac{N_D}{n_i} \right)^3;$$

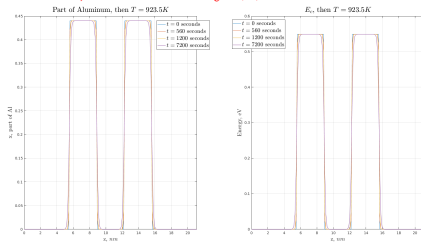
$E_a = 3.5 \text{ эВ}$  – энергия активации;  
 $D_0 = 0.2$  – предэкспоненциальный множитель;  
 $N_D$  – концентрация донорной примеси;  
 $n_i$  – концентрация собственных носителей заряда.

Воздействие: Производство (МЛЭ  $\Rightarrow$  Отжиг  $\Rightarrow$  Метал.контакты)  $\Rightarrow$  Эксплуатация.



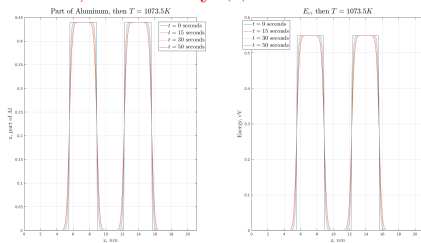
# Моделирование термической деградации квантовой области МЛЭ:

$T = 650^{\circ}\text{C}$ ,  $t \approx 560$  секунд:



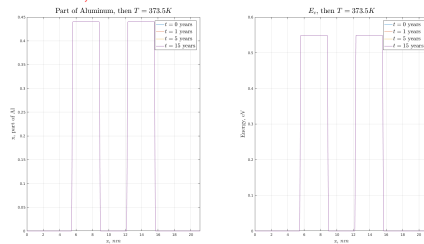
Отжиг:

$T = 800^{\circ}\text{C}$ ,  $t \approx 30$  секунд:



Эксплуатация:

$T = 100^{\circ}\text{C}$ ,  $t \approx 15$  лет:

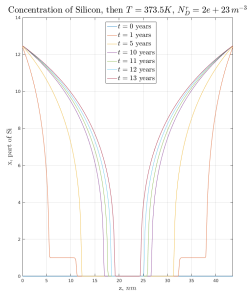
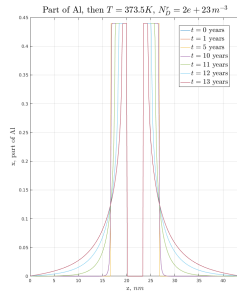
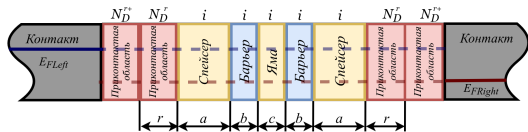


**Вывод:** Наибольшее влияние на состав гетероструктуры оказывает кратковременный отжиг. МЛЭ практически не влияет на гетероструктуру. Эксплуатация в течении долгого времени не оказывает никаких влияний на состав.

# Моделирование термической деградации квантовой области с учетом приконтактных областей

Эксплуатация:

$N_D^{r+} = 2.5 * 10^{24} \text{ м}^{-3}$ ,  $N_D^r = 2 * 10^{23} \text{ м}^{-3}$ ,  $r = 20$  монослоев,  $T = 100^\circ \text{C}$ :



Вывод:

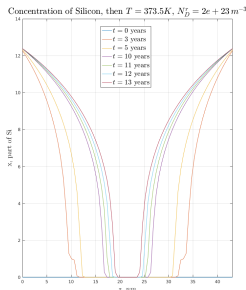
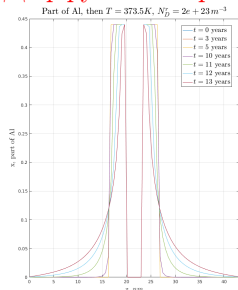
Основная причина термической деградации — диффузия донорной примеси из сильнолегированных ( $N_D^{r+}$ ) приконтактных областей. Спейсеры предохраняют активную область от проникновения легирующей примеси. Деградацию ВАХ РТГС необходимо рассматривать при  $t \geq 10$  лет.

# Моделирование термической деградации РТГС

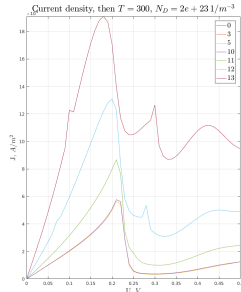
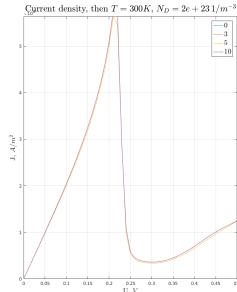
$n^{++}$ -GaAs/ $n^{+}$ -GaAs/ $i$ -GaAs/ $i$ -Al<sub>0.4</sub>Ga<sub>0.6</sub>As/ $i$ -GaAs/ $i$ -Al<sub>0.4</sub>Ga<sub>0.6</sub>As/ $i$ -GaAs/ $n^{+}$ -GaAs/ $n^{++}$ -GaAs

**Воздействие:** Производство (Отжиг:  $T = 800^{\circ}\text{C}$ ,  $t \approx 30$  секунд)  $\Rightarrow$  Эксплуатация ( $N_D^{r+} = 2.5 \cdot 10^{24} \text{m}^{-3}$ ,  $N_D^r = 2 \cdot 10^{23} \text{m}^{-3}$ ,  $r = 20$  монослоев,  $T = 100^{\circ}\text{C}$ ).

**Диффузионное распыление:**



**ВАХ:**



**Вывод:** ВАХ исследуемой РТГС в первые 10 лет эксплуатации при  $T = 100^{\circ}\text{C}$  зависит от деградации после отжига. После 10 лет доминирующим фактором является проникновение легирующей примеси и размытие потенциальных барьеров.

# Заключение

В ходе работы были:

- ▶ Исследована модель токопереноса через гетероструктуру с учетом самосогласованного потенциала и влияние основных параметров РТГС на ВАХ;
- ▶ Исследована модель диффузионного размытия гетероструктур на основе GaAs под действием градиента концентрации при постоянной температуре;
- ▶ Исследованы конечно-разносные схемы для решения нестационарного уравнения диффузии. Метод BTCS сходится при любом шаге временной сетки в отличие от FTCS и проще, чем метод Crank-Nicolson'a;
- ▶ Исследованы граничные условия для дальнейшего моделирования диффузионного размытия различных систем;
- ▶ Получен алгоритм моделирования термической деградации РТГС на основе GaAs.

Спасибо за внимание!