

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н. Э. БАУМАНА

ФАКУЛЬТЕТ «РАДИОЭЛЕКТРОНИКА И ЛАЗЕРНАЯ ТЕХНИКА»

КАФЕДРА «ТЕХНОЛОГИИ ПРИБОРОСТРОЕНИЯ»



ПРЕДДИПЛОМНАЯ ПРАКТИКА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ПРИМЕРЕ РТГС

Выполнил:

ПРОХОРОВ М. РЛ6-82

Руководитель:

к.т.н. доц. ДАНИЛОВ И.И.

Содержание

Введение	4
1 Теоретическая часть	5
1.1 Деградация приборов на основе гетероструктур	5
1.2 Диффузия	5
1.2.1 Законы Фика	5
1.2.2 Механизмы диффузии	6
1.2.3 Коэффициент диффузии	6
1.3 Токоперенос через ГС	8
1.3.1 Уравнение Шредингера	9
2 Математический аппарат для моделирования	11
2.1 Метод конечных разностей	11
2.2 Метод конечных разностей для решения одномерного нестационарного уравнения диффузии	13
2.2.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации	13
2.2.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации	15
2.3 Метод конечных разностей для расчета токоперенос через гетероструктуру	16
3 Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$	17
3.1 Исследование параметров ямы	17
3.1.1 Исследование глубины ямы	18
3.1.1.1 Прозрачность РТГС	18
3.1.1.2 ВАХ РТГС	19
3.1.2 Исследование ширины ямы	19
3.1.2.1 Прозрачность РТГС	20
3.1.2.2 ВАХ РТГС	20
3.1.3 Вывод	21
3.2 Исследование параметров барьеров	22
3.2.1 Исследование ширины барьеров	22
3.2.1.1 Прозрачность РТГС	22
3.2.1.2 ВАХ РТГС	22
3.2.2 Вывод	23
3.3 Исследование параметров спейсеров	24

3.3.1	Исследование влияния размеров спейсера	24
3.3.1.1	Прозрачность РТГС	24
3.3.1.2	ВАХ РТГС	25
3.3.2	Вывод	25
4	Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$	26
4.1	Диффузионное расплытие активной области	27
4.1.1	Вывод	29
4.2	Диффузия легирующей примеси	30
	Заключение	32
	Список использованных источников	34

Введение

В отчете рассматривается процесс моделирования деградации гетероструктур под действием температуры средствами среды MATLAB. Моделирование термической деградации гетероструктур состоит из двух частей:

- а) Моделирование процессов структурной деградации гетероструктуры;
- б) Моделирование устройства на основе гетероструктуры.

Цель практики:

- а) Изучение математического аппарата для моделирования процесса термической деградации;
- б) Изучение процессов деградации гетероструктур.

Задача практики:

- а) Моделирование процессов термической диффузии;
- б) Моделирование токопереноса;
- в) Исследование влияния основных параметров РТГС на ВАХ;
- г) Моделирование термической деградации ВАХ РТГС на основе $AlGaAs$.

Индивидуальное задание: Разработка алгоритма и программы, позволяющей:

- а) Моделирование диффузии в твердых растворах в гетероструктурах;
- б) Моделирование диффузии в примеси;
- в) Моделирование расплыва потенциального рельефа гетероструктуры;
- г) Моделирование основных параметров РТГС на основе $AlGaAs$.

1 Теоретическая часть

1.1 Деградация приборов на основе гетероструктур

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

Деградация параметров гетероструктуры во времени связана с диффузионным размытием ГП и ГС в целом. Зонная структура ГС определяет режим работы, а зонная структура ГС зависит от химического состава, поэтому диффузионное размытие изменяет зонную диаграмму и режимы работы прибора на основе ГС.

Факторы влияющие на диффузионное размытие:

- Градиент температуры;
- Градиент концентрации;
- Градиент давления;
- Наличие дефектов;
- и т.д...

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

1.2 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.

1.2.1 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.

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

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

1.2.2 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.

1.2.3 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 [7], [8], [9]:

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

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.

1.3 Токоперенос через ГС

Один из способов расчета плотности тока через гетероструктуру — это формула Цу–Есаки:

$$J(V) = \frac{2mek_BT}{(2\pi)^2\hbar^3} \int_0^\infty T(E)D(E)dE, \quad (1.11)$$

где $J(V)$ — плотность тока при приложенном напряжении V ;

$T(E)$ — прозрачность гетероструктуры;

$D(E)$ — функция снабжения электронами;

m — эффективная масса электрона;

e — заряд электрона;

T — температура;

\hbar — постоянная Дирака;

k_B — постоянная Больцмана.

$$D(E) = \ln \frac{1 + \exp \frac{E_F - E}{k_B T}}{1 + \exp \frac{E_F - E - eV}{k_B T}}, \quad (1.12)$$

где E_F — уровень Ферми;

V — приложенное напряжение.

Коэффициент прозрачности гетероструктуры определяется как отношение потока вероятности прошедших через структуру электронов в правом резервуаре к падающим на неё электронам в левом резервуаре. Поток вероятности находится из формулы:

$$\bar{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (1.13)$$

где ψ — волновая функция электрона.

Будем рассматривать электроны, приходящие из левого контакта. Левому контакту соответствуют волновые функции ψ_L , а в правому — ψ_R .

$$\psi_L = \exp[ik_L z]; \quad (1.14)$$

$$\psi_R = T_L \psi_L = T_L \exp[ik_L z], \quad (1.15)$$

где T_L — Амплитуда прошедшей волновой функции;

k_L — волновой вектор в левом резервуаре.

Тогда коэффициент туннельной прозрачности:

$$T(E) = |T_L|^2 \frac{|k_R| m_L}{|k_L| m_R}, \quad (1.16)$$

где k_R — волновой вектор в правом резервуаре;

m_R — эффективная масса электрона в правом резервуаре;

m_L — эффективная масса электрона в левом резервуаре.

1.3.1 Уравнение Шредингера

Для нахождения волновых функций необходимо решить уравнение Шредингера. Для твердого тела уравнение Шредингера имеет вид:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{2} \left[\left(\frac{1}{m} \sum_i \Delta_i + \sum_i \frac{\Delta_i}{M_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{k_k |\bar{r}_i - \bar{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{Z_i Z_j e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{R}_j|} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{Z_i e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{r}_j|} \right] \psi = E \psi \end{aligned}$$

где M_i — масса атомного остова;

k_k — постоянная Кулона;

Z — атомное число;

$\frac{\Delta_i}{m}$ — кинетическая энергия i -ого электрона;

$\frac{\Delta_i}{M_i}$ — кинетическая энергия i -ого атомного остова;

$\frac{e^2}{k_k |\bar{r}_i - \bar{r}_j|}$ — потенциальное взаимодействие i и j электрона;

$\frac{Z_i Z_j e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{R}_j|}$ — потенциальное взаимодействие остовов;

$\frac{Z_i e^2}{k_k |\bar{R}_i - \bar{r}_j|}$ — потенциальное взаимодействие остова и электрона.

Ряд приближений упрощает полное уравнение Шредингера для твердого тела:

а) Атомные остовы находятся в состоянии покоя;

б) Электрон движется, не взаимодействуя с другими электронами, в некотором эффективном поле, создаваемым остальными электронами;

в) Движение электрона в периодическом потенциале заменяется на эффективную массу.

Упрощенное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi, \quad (1.17)$$

где U — потенциальный профиль.

Одномерное ур. Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + U(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (1.18)$$

Для решения уравнения на границе гетероперехода рассматриваются условия непрерывности волновой функции и непрерывности потока плотности вероятности — эти условия так же называются условием Бастарда:

$$\begin{cases} \psi_I = \psi_{II}; \\ \frac{1}{m_I}\frac{d}{dz}\psi_I = \frac{1}{m_{II}}\frac{d}{dz}\psi_{II}, \end{cases} \quad (1.19)$$

где m_I — эффективная масса в I структуре;
 m_{II} — эффективная масса во II структуре;
 ψ_I — волновая функция в I структуре;
 ψ_{II} — волновая функция во II структуре.

Учтем эффективную массу в ур. 1.18:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m(z)}\frac{d}{dz}\psi(z) + U(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (1.20)$$

В случае произвольного потенциального рельефа для решения уравнения Шредингера применяются численные методы.

2 Математический аппарат для моделирования

2.1 Метод конечных разностей

Суть метода конечных разностей заключается в аппроксимации дифференциальных операторов отношением конечных разностей. Так например производную некоторой функции $y(x)$ в точке x_0 ($\dot{y}(x_0)$) можно представить [10]:

$$\dot{y}_+(x_0) = \frac{d}{dx}y(x_0) = \frac{y(x_0 + \Delta x) - y(x_0)}{\Delta x}; \quad (2.1)$$

$$\dot{y}_-(x_0) = \frac{d}{dx}y(x_0) = \frac{y(x_0) - y(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}; \quad (2.2)$$

$$\dot{y}_-(x_0) = \dot{y}_+(x_0) = \frac{d}{dx}y(x_0), \quad (2.3)$$

где \dot{y}_- — производная слева;

\dot{y}_+ — производная справа;

Δx — приращение аргумента (шаг сетки).

Δx — это шаг нашей конечно-разностной схемы (аппроксимации). Если шаг сетки постоянен, то говорят о регулярной сетке, иначе о нерегулярной. Мы будем рассматривать только регулярные сетки. Далее вместо Δx будет использовать Δ .

Из выше сказанного можно найти трехточечную аппроксимацию второй производной $y(x)$:

$$\frac{d^2}{dx^2}y(x_0) = \frac{\dot{y}_+ - \dot{y}_-}{\Delta} = \frac{y(x_0 + \Delta) - 2y(x_0) + y(x_0 - \Delta)}{\Delta^2}. \quad (2.4)$$

Для связи конечно-разностной схемы по времени и координате для нестационарного уравнения диффузии (1.4) воспользуемся двухточечной аппроксимацией первой производной по времени и трехточечной аппроксимации второй производной по координате:

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} = \frac{C_{i-1}^j - 2C_i^j + C_{i+1}^j}{\Delta^2}, \quad (2.5)$$

где C_i^j — значение функции в точке i , в момент времени j ;

Δt — шаг сетки по времени;

Δx — шаг сетки по координате.

Конечно разностную схему (2.5) наглядно можно представить так:
 где $S(x, t)$ — состояние системы в момент t и точке x ;
 Δx — приращение по координате;
 Δt — приращение по времени.

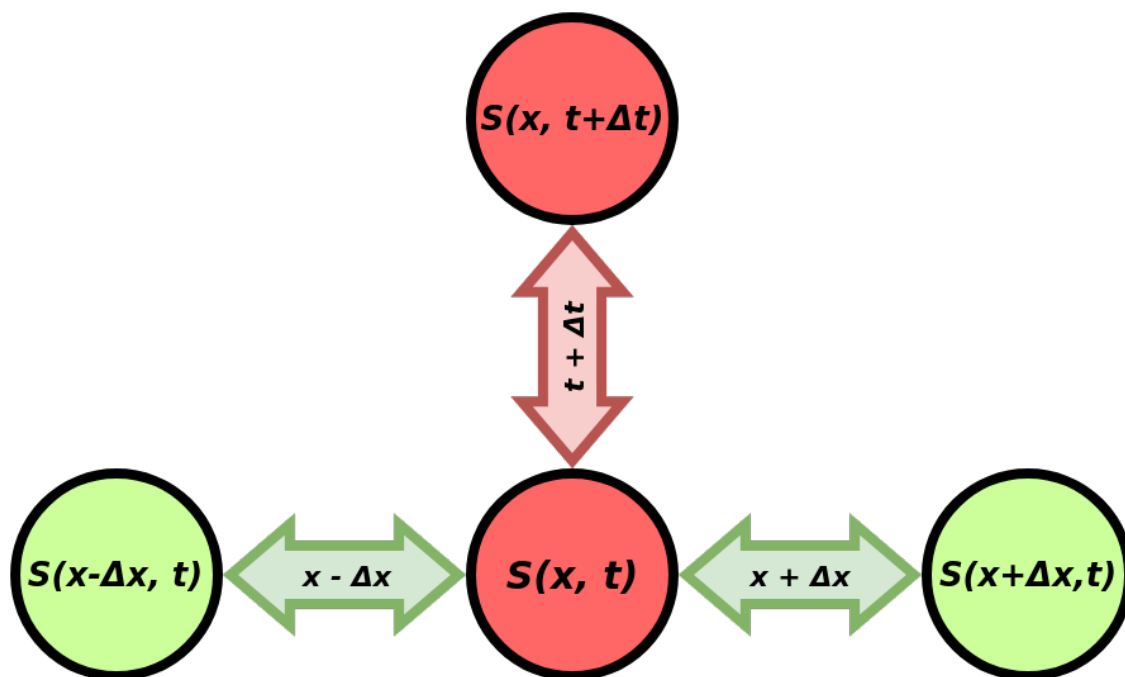


Рисунок 2.1 — Графическая схема для конечно-разностной схемы (2.5)

2.2 Метод конечных разностей для решения одномерного нестационарного уравнения диффузии

2.2.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации

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

$$\frac{\delta}{\delta t}C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2}C; \quad (2.6)$$

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

$$\frac{\delta}{\delta t}C_j^i = \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t}; \quad (2.7)$$

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

$$J_j^i = \frac{\delta}{\delta x}C_j^i = \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x}; \quad (2.8)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2}{\delta x^2}C_j^i &= \frac{\delta}{\delta x} \left[\frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} \right] = \frac{\frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x} = \\ &= \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}; \end{aligned} \quad (2.9)$$

Подставляя в (2.6) аппроксимацию производных (2.7), (2.9), получим связь C_j^{i+1} с C_j^i , т.е. изменение концентрации через Δt :

$$C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, \quad (2.10)$$

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

Уравнение (2.10) 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 ($J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$), см. рис.2.2, а);
- б) «Открытая система» — поток частиц подходящий к границе равен потоку уходящих частиц ($J_0^i = J_1^i, J_N^i = J_{N+1}^i$), см. рис.2.2, б).

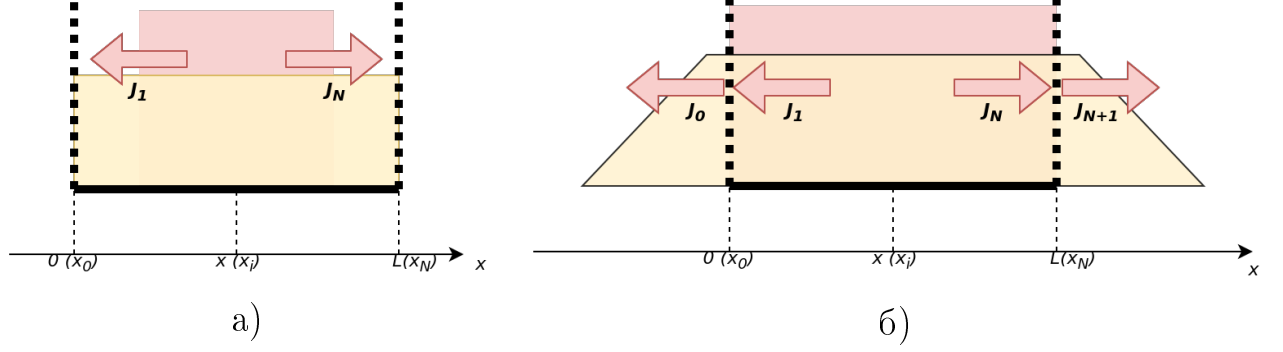


Рисунок 2.2 — а) «Закрытая», б) «Открытая» система диффузии

Для «закрывтой системы» должно выполняться условие $J_0^i = 0, J_{N+1}^i = 0$. Рассмотрим (2.8), (2.10) для точки $j = 1$:

$$J_0^i = \frac{C_1^i - C_0^i}{\Delta x} = 0 \Rightarrow C_0^i = C_1^i;$$

$$C_1^{i+1} = \lambda C_0^i + (1 - 2\lambda)C_1^i + \lambda C_2^i = \lambda C_1^i + (1 - 2\lambda)C_1^i + \lambda C_2^i =$$

$$= (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i = C_1^{i+1};$$

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

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = (1 - \lambda)C_N^i + \lambda C_{N-1}^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases} \quad (2.11)$$

Для «открытой» системы должно выполняться условие $J_0^i = J_1^i, J_N^i = J_{N+1}^i$. Рассмотрим (2.8), (2.9), (2.10) для точки $j = 1$:

$$J_0^i = J_1^i$$

$$\frac{C_1^{i+1} - C_1^i}{\Delta t} = \frac{J_1^i - J_0^i}{\Delta x} = \frac{0}{\Delta x} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow C_1^{i+1} = C_1^i;$$

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

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases} \quad (2.12)$$

2.2.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации

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

$$\frac{\delta}{\delta t} C = \frac{\delta}{\delta x} D \frac{\delta}{\delta x} C; \quad (2.13)$$

Тогда уравнение конечно-разностной схемы будет [11]:

$$\frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{D_{j+1/2}^i \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta x} - D_{j-1/2}^i \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x}}{\Delta x}; \quad (2.14)$$

$$D_{j\pm 1/2}^i = \frac{D_j^i + D_{j\pm 1}^i}{2} = D_{j\pm}^i. \quad (2.15)$$

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

$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i)C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i, j \in [2, \dots, N - 1]; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i; \\ \lambda_-^i = D_{j-\frac{\Delta t}{\Delta x^2}}^i. \end{cases} \quad (2.16)$$

2.3 Метод конечных разностей для расчета токопереноса через гетероструктуру

Конечно-разностная схема уравнения Шредингера (1.20) для ГС на рис.2.3 [6]:

$$\psi_{i-1} \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} + \psi_i \left(\frac{2\Delta^2 m_{i+1}^*}{\hbar^2} (E - U_i) - \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} - 1 \right) + \psi_{i+1} = 0, \quad (2.17)$$

где m_i^* — эффективная масса в точке i ;

ψ_i — волновая функция в точке i ;

E — энергия электрона;

U_i — потенциальная энергия в точке i ;

Δ — шаг сетки.

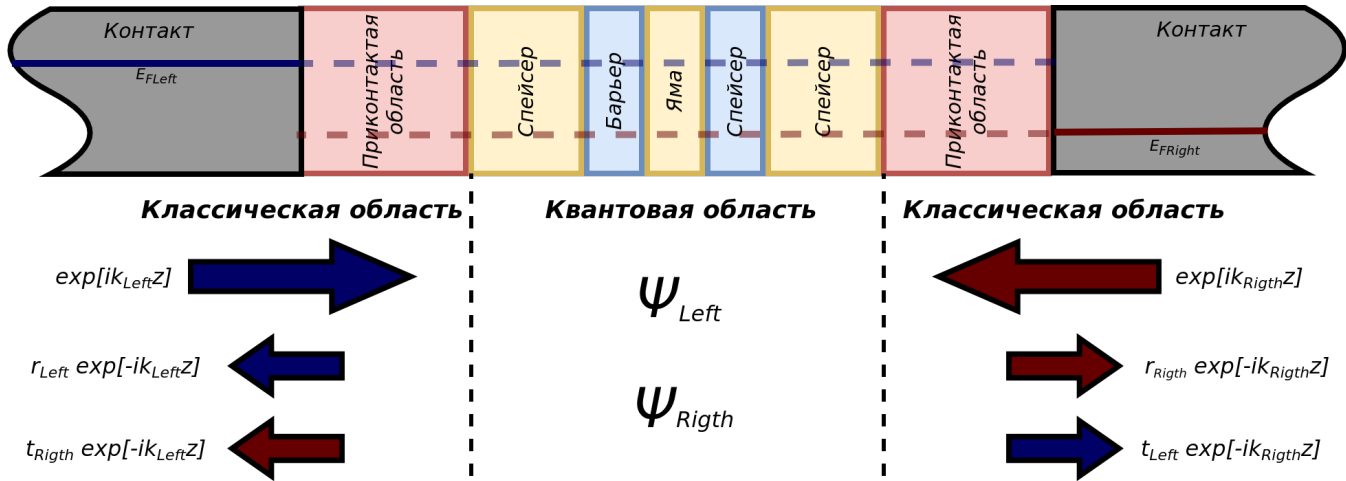


Рисунок 2.3 — Схема модели РТГС

Данная схема подходит для любой внутренней точки гетероструктуры, но не подходит для граничных точек. Граничные условия, для «левых» и «правых» электронов получаются из граничного условия Бастарда и вида волновых функций в резервуарах:

$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L\Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R\Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L\Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R\Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases} \quad (2.19)$$

3 Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

Вольт-амперная характеристика РТГС зависит от ее конструктивных и физических параметров:

- Ширина потенциальной ямы (ПЯ);
- Глубина ПЯ;
- Ширина потенциальных барьеров (ПБ);
- Ширина спейсеров.

В работе [12] исследована деградация отдельных параметров ГС. Каждый фактор влияет на ВАХ по-разному, рассмотрим их подробнее.

3.1 Исследование параметров ямы

Энергетический спектр в бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}; \quad (3.1)$$

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (2n + 1); \quad (3.2)$$

$$\Delta E_1 = \min(\Delta E_n) = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad (3.3)$$

где E_n — энергия n -ого связанного состояния;

\hbar — постоянная Дирака;

n — номер $(1, 2, \dots)$ связанного состояния;

L — ширина ямы.

Из зависимостей 3.1, 3.3 видно, что с увеличением ширины ямы, энергия основного состояния уменьшается ($n = 1$), так же, как и минимальное расстояние, между энергетическими уровнями. Условие размерного квантования для потенциальной ямы:

$$\Delta E_1 \gg 3k_B T. \quad (3.4)$$

В случаи ямы с конечной высотой, энергия основного и остальных состояний понижается, при этом минимальная высота барьера ограничи-

вает состояние с максимальной энергией. В потенциальной яме конечной высоты всегда будет хотя бы одно связанное состояние.

3.1.1 Исследование глубины ямы

Варьируя процентное содержание Al в $Al_xGa_{1-x}As$, можно изменять высоту барьеров и глубину ямы соответственно. Рассмотрим вольт-амперную характеристику и прозрачность резонансно-туннельной структуры.

Так как в ходе деградации ГС высота барьеров будет уменьшаться, так как атомы Al будут диффундировать в структуру из барьеров, рассмотрим РГТС (рис. ??) с высотой потенциальных барьеров:

- а) $1.0eV$;
- б) $0.7eV$;
- в) $0.5eV$;
- г) $0.3eV$.

3.1.1.1 Прозрачность РТГС

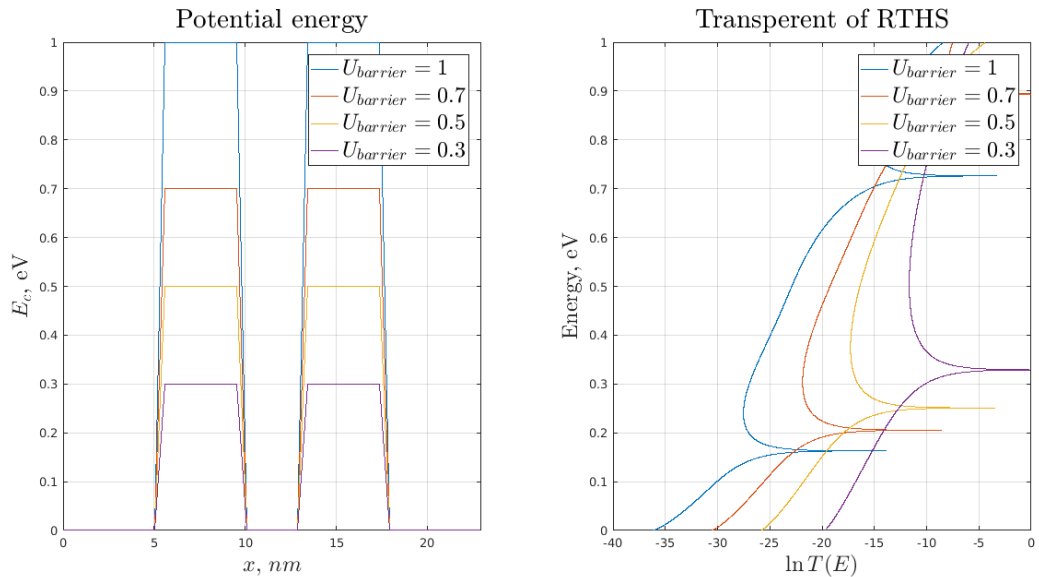


Рисунок 3.1 — Прозрачность РТГС при различных высотах потенциального барьера

Как видно из рис. 3.1 уменьшение высоты барьеров ведет к повышению резонансного уровня и увеличению коэффициента прозрачности исследуемой РТГС.

3.1.1.2 ВАХ РТГС

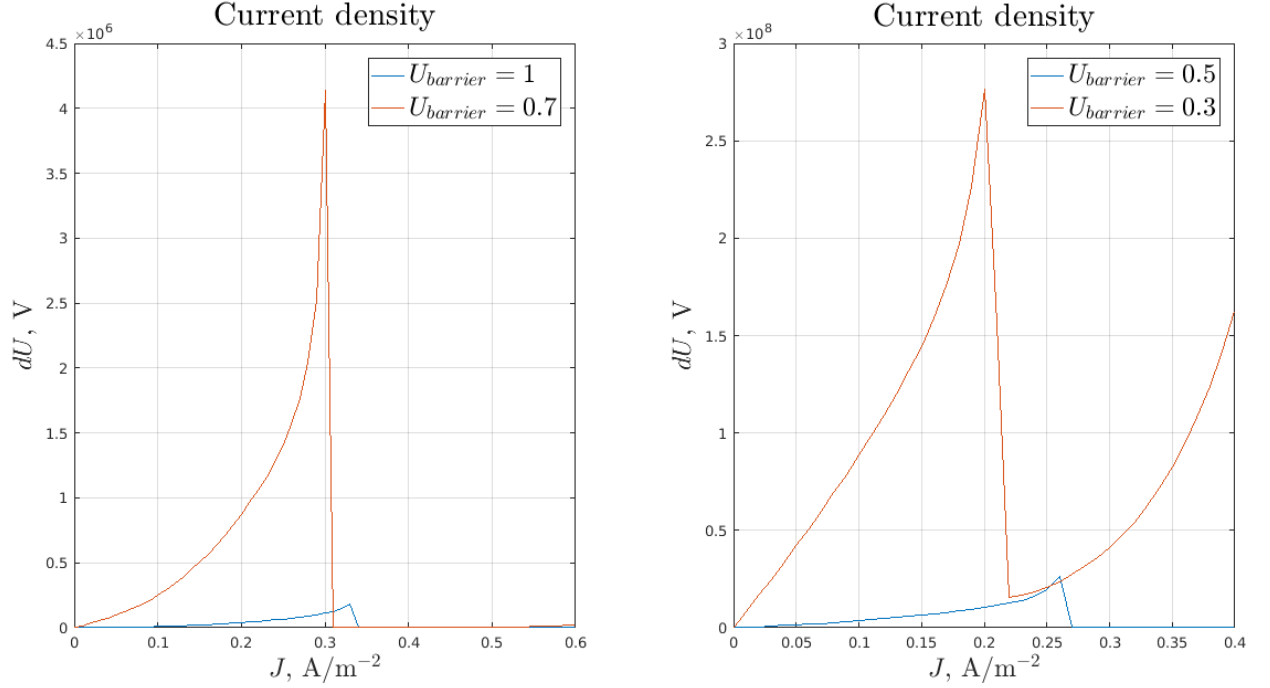


Рисунок 3.2 — Плотность тока через РТГС при различных высотах потенциального барьера

Поднятие резонансного уровня на рис. 3.1 увеличило напряжение, при котором достигается пиковое значение тока. Увеличение коэффициента прозрачности повысило пиковое значение тока на один порядок с изменением высоты барьеров на 0.2эВ (рис. 3.2).

3.1.2 Исследование ширины ямы

Уменьшая или увеличивая количество монослоев, мы варьируем ширину ямы в РТГС. Минимальная разница между соседними уровнями и энергия этих уровней уменьшаются с увеличением ширины ямы (см. (3.1) – (3.3)).

Для исследования влияния ширины ямы, рассмотрим следующий ряд ширины ям:

- а) 10 монослоев;
- б) 7 монослоев;
- в) 5 монослоев;
- г) 3 монослоев.

3.1.2.1 Прозрачность РТГС

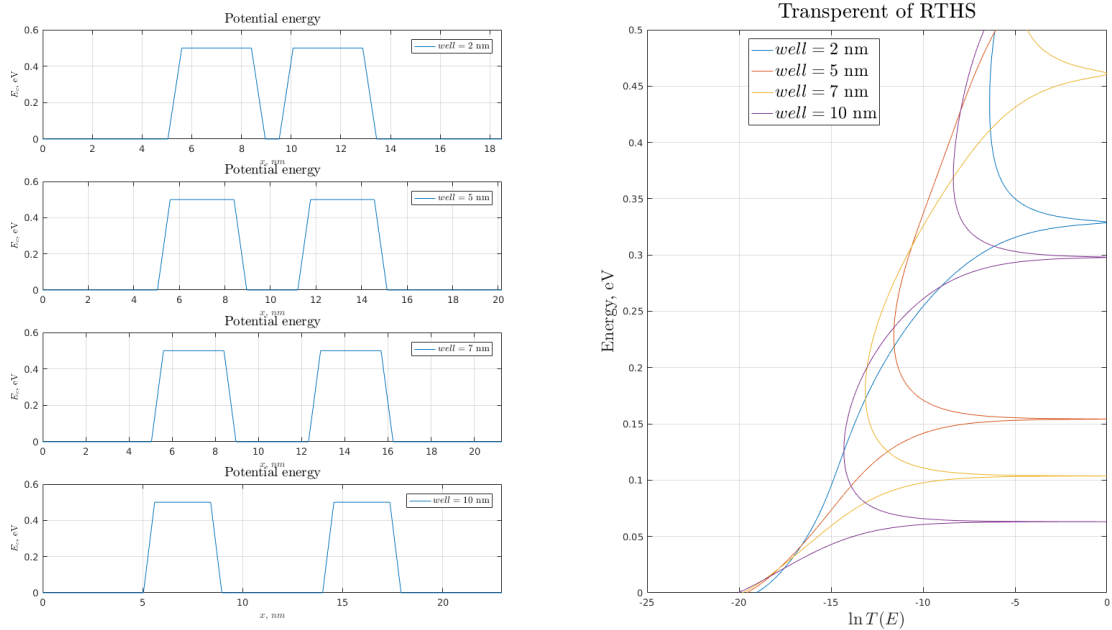


Рисунок 3.3 — Прозрачность РТГС при различных ширинах потенциальной ямы

С уменьшением ширины ямы высота резонансного уровня подымается, при этом прозрачность ГС остается прежней. Резонансный уровень при ширине 2 нм и второй резонансный уровень при ширине ПЯ в 10 нм практически совпадают.

3.1.2.2 ВАХ РТГС

Увеличение ширины ямы уменьшает напряжение достижения пикового тока, при этом значение величина тока не изменяет порядок его величины (рис. 3.4).

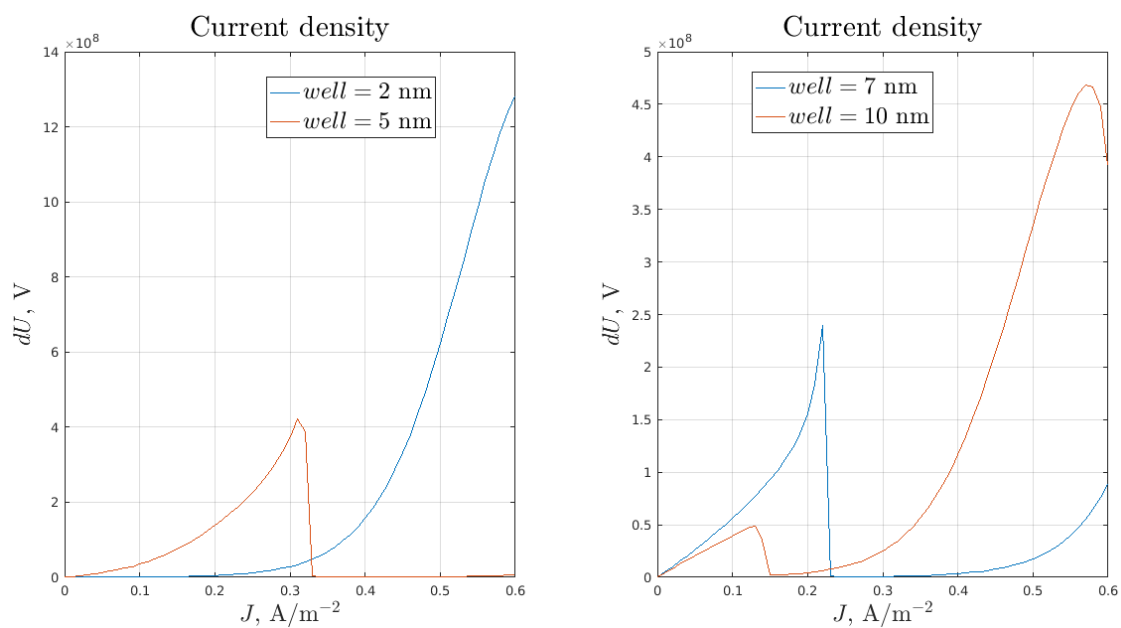


Рисунок 3.4 — Плотность тока через РТГС при различных ширинах потенциальной ямы

3.1.3 Вывод

Глубина ямы влияет на величину тока, причем пиковое напряжение изменяется не значительно. Значительное влияние на смещение пикового напряжения оказывает изменение ширины ПЯ.

3.2 Исследование параметров барьеров

3.2.1 Исследование ширины барьеров

Ширина барьеров уменьшает вероятность прохождения электрона сквозь барьер и величину тока соответственно.

Рассмотрим РТГС с шириной барьеров:

- а) 10 монослоев;
- б) 7 монослоев;
- в) 5 монослоев;
- г) 3 монослоев.

3.2.1.1 Прозрачность РТГС

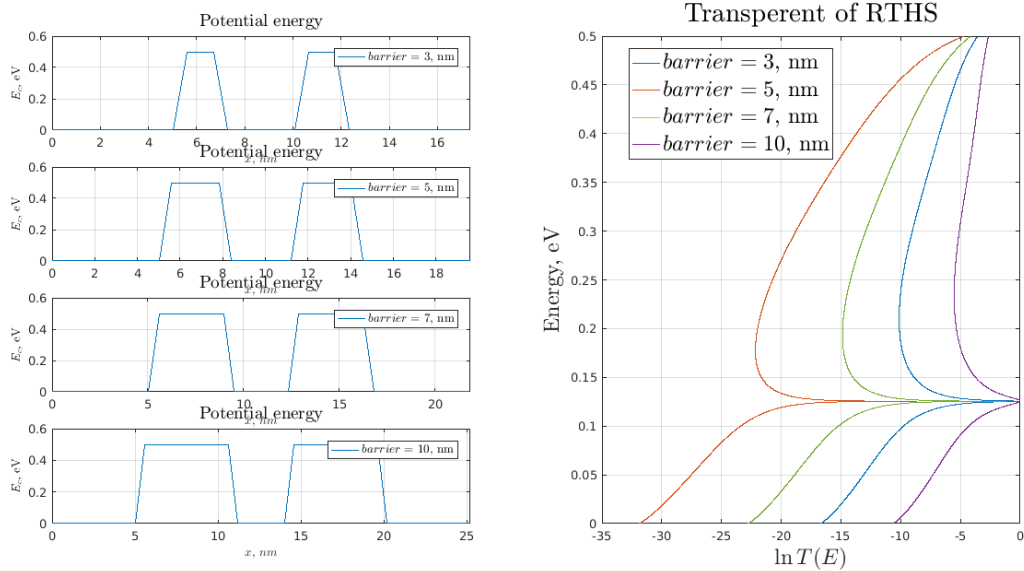


Рисунок 3.5 — Прозрачность РТГС при различных ширинах потенциальных барьеров

Как видно на рис. 3.5 изменение ширины барьеров не сказывается на высоту резонансного уровня, а влияет только на прозрачность ГС. Увеличение ширины уменьшает прозрачность РТГС.

3.2.1.2 ВАХ РТГС

Пиковое значения тока изменяется значительно при изменении ширины потенциальных барьеров.

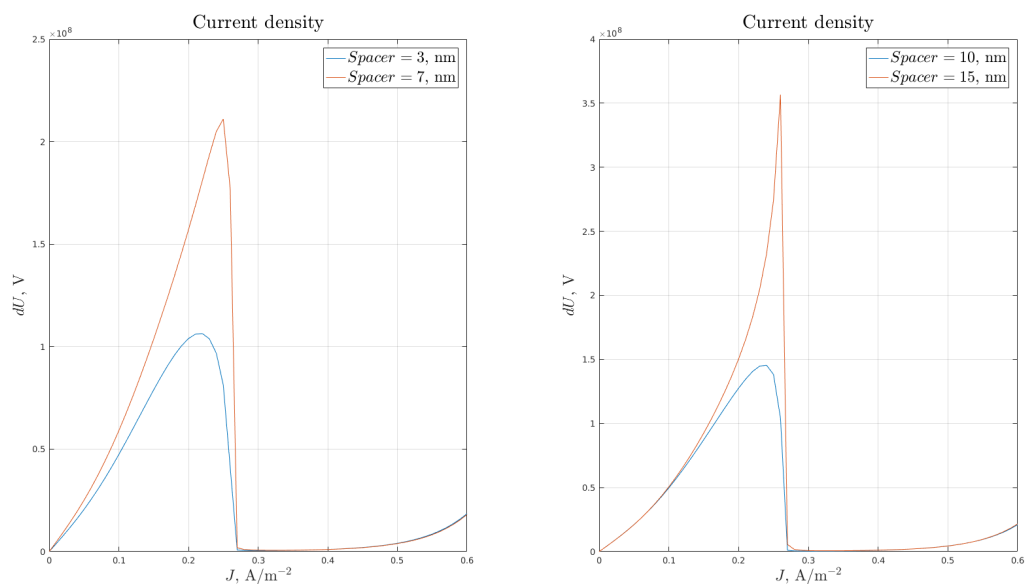


Рисунок 3.6 — Плотность тока через РТГС при различных ширинах потенциальных барьеров

3.2.2 Вывод

Уменьшение ширины барьеров увеличивает пиковое значение тока, причем изменение ширины барьера на 2нм уменьшает величину тока на порядок.

3.3 Исследование параметров спейсеров

Спейсер предназначен для отделения высоколегированной области вырожденного полупроводника от активной. Диффундируя донорная примесь изменяла бы зонную структуру активной (квантовой) области. Так же спейсер препятствует накоплению заряда вблизи барьеров, что влияет на пиковое напряжение и ток.

3.3.1 Исследование влияния размеров спейсера

Рассмотрим спейсеры:

- 3 монослоя;
- 7 монослоя;
- 10 монослоя;
- 15 монослоя.

3.3.1.1 Прозрачность РТГС

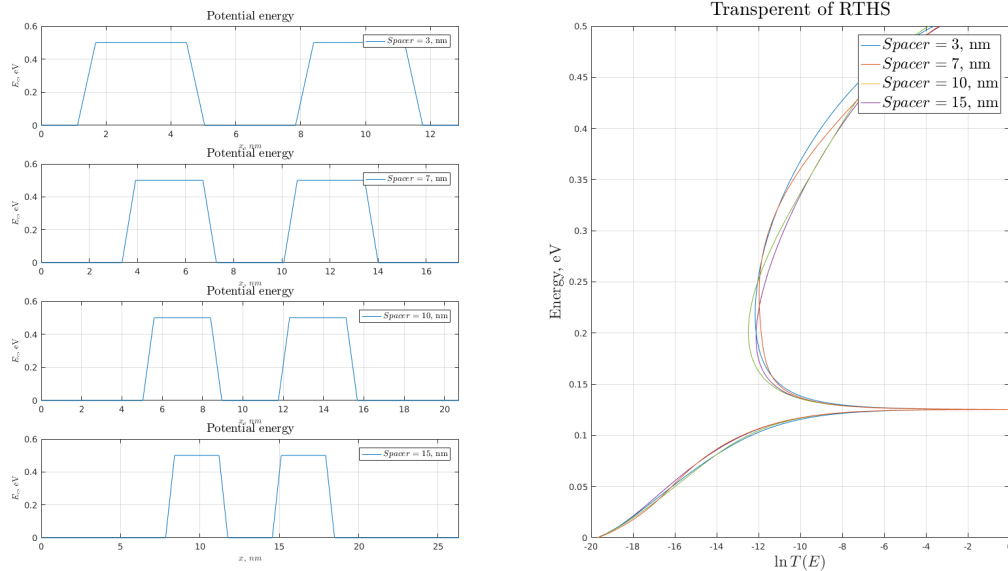


Рисунок 3.7 — Прозрачность РТГС при различной ширине спейсеров

Прозрачность гетероструктуры изменяется незначительно.

3.3.1.2 ВАХ РТГС

Увеличение размеров спейсера ведет к незначительному (порядок не изменяется), а пиковое напряжение не смещается.

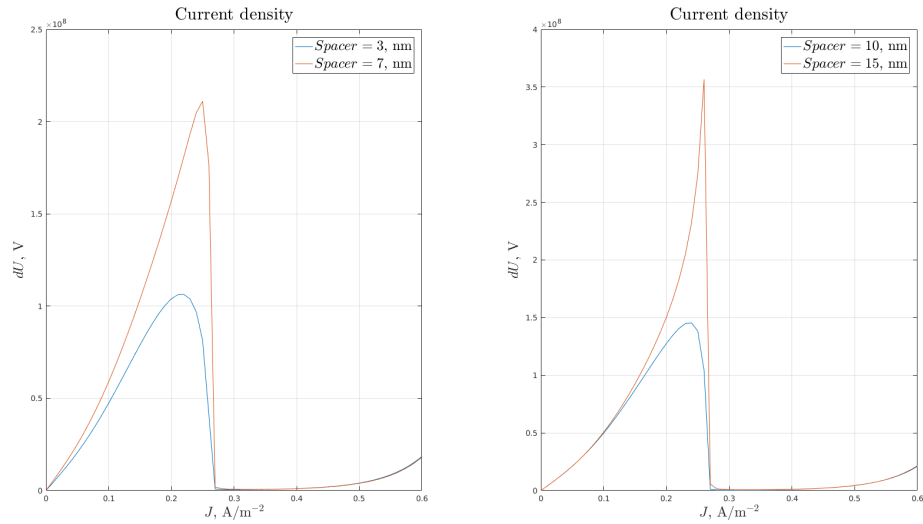


Рисунок 3.8 — ВАХ РТГС при различной ширине спейсеров

3.3.2 Вывод

Уменьшение длины спейсера приводит к увеличению величины пикового тока, при этом пиковое напряжение не смещается и остается постоянным.

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

На основе выше исследованных параметров и полученных моделей получим модель деградации РТГС на основе $AlGaAs$.

В схема исследуемой на диффузионное расплытие модели приведена на рис.4.1

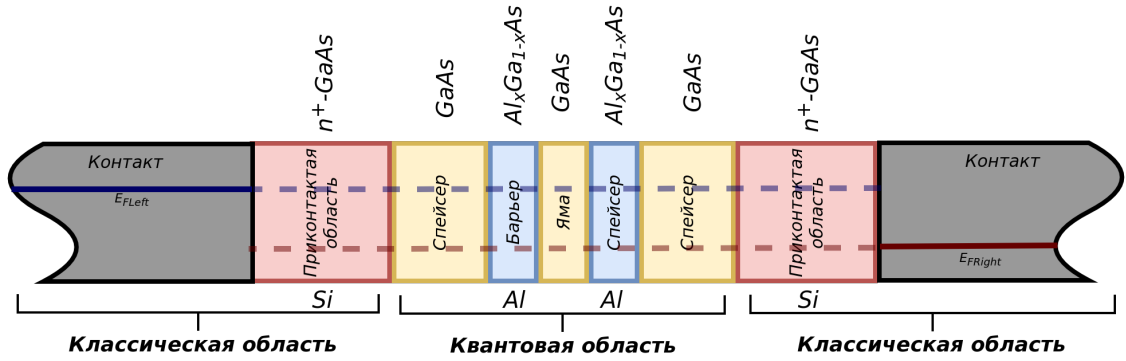


Рисунок 4.1 — Структура РТГС для моделирования диффузии

В данной модели возможны:

- Диффузия Al из барьеров в яму;
- Диффузия Si из приконтактных областей в активную область.

Рассмотрим диффузионное расплытие активной области и проникновение легирующей примеси отдельно.

Размеры нашей модели:

- Спейсер: $a = 10$ монослоев;
- Барьер: $b = 6$ монослоев;
- Яма: $c = 6$ монослоев;

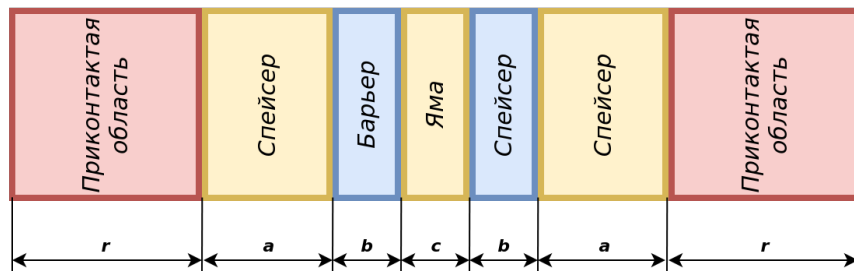


Рисунок 4.2 — Размеры РТГС

4.1 Диффузионное расплытие активной области

Диффузионное расплытие активной области в случае чистых полупроводников подчиняется (1.6). Коэффициент диффузии постоянен и скорость ухода части Al с границ активной области равен скорости их прихода – это соответствует конечно-разностной схеме (2.12).

Температуру ГС (T) выберем равной 800 K . Время воздействия: 1, 5, 10 лет.

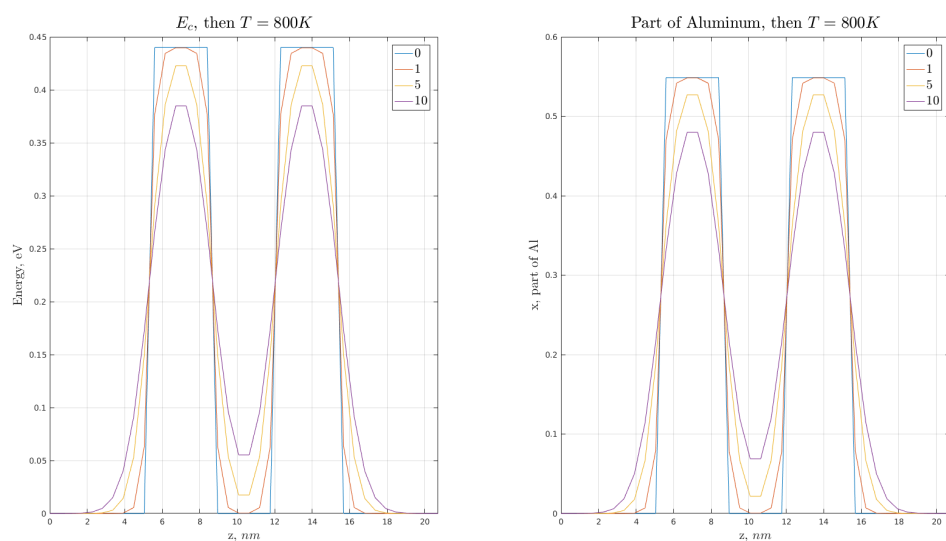


Рисунок 4.3 — Расплытие потенциального рельефа чистого $Al_xGa_{1-x}As$

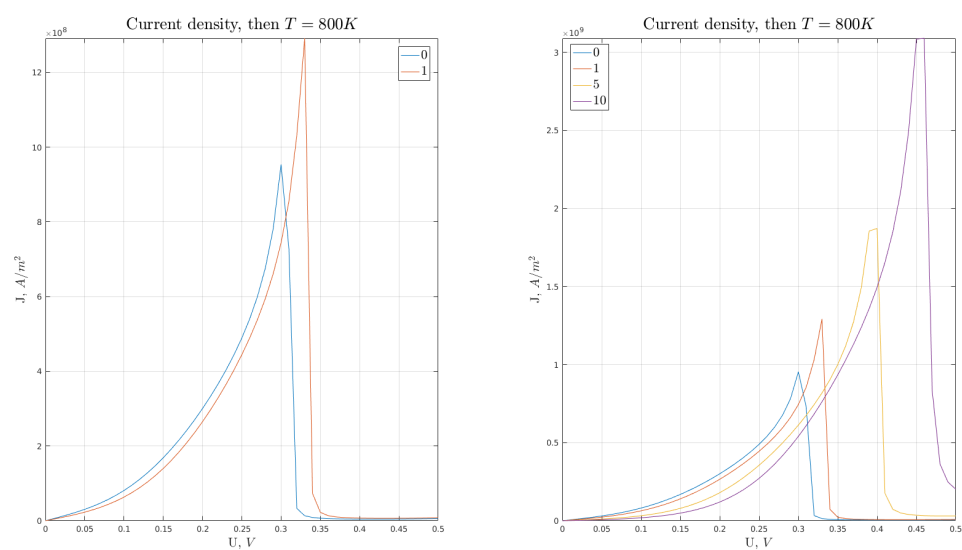


Рисунок 4.4 — Деградация тока через РГТС на основе чистого $Al_xGa_{1-x}As$

В процессе деградации ГС уменьшается ширина и глубина ПЯ (рис. 4.3).

Как видно из рис. 4.4 в результате деградации увеличивается пиковое напряжение и величина пикового тока, что соответствует ранее полученным результатам.

Так как невозможно получить чистый полупроводник, в нем всегда присутствует донорная примесь, которая увеличивает скорость диффузии, что соответствует (1.7).

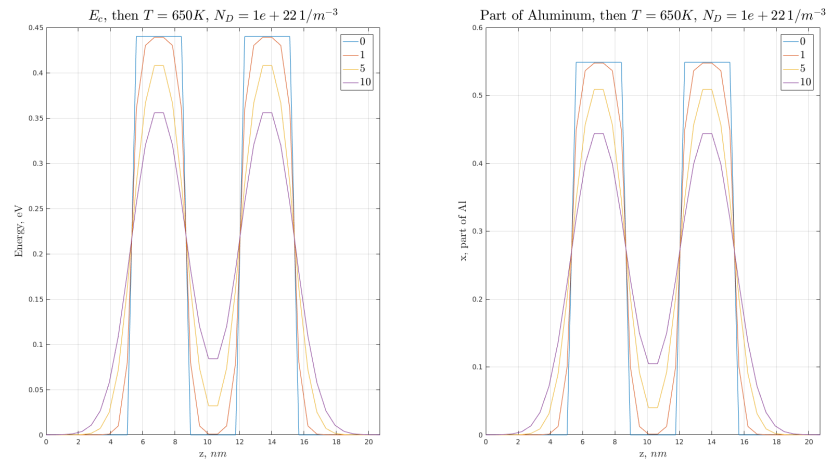


Рисунок 4.5 — Расплывте потенциального рельефа $Al_xGa_{1-x}As$ при наличии донорной примеси $N_D = 10^{22} \text{ 1/m}^3$

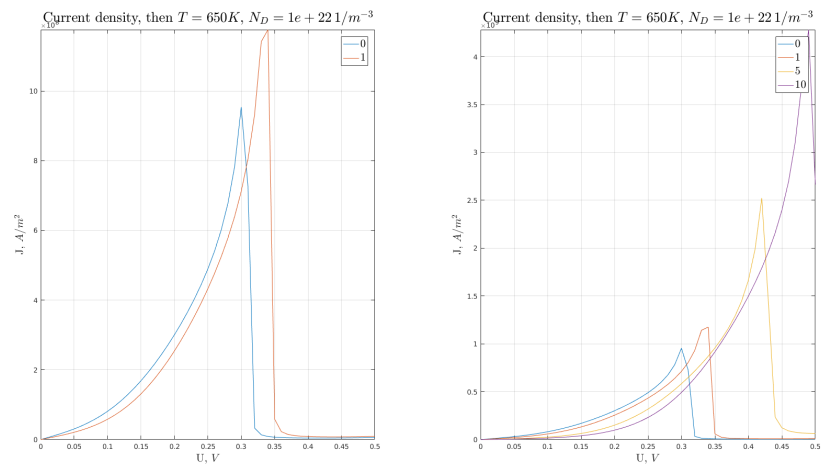


Рисунок 4.6 — Деградация тока через РГТС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ при наличии донорной примеси $N_D = 10^{22} \text{ 1/m}^3$

Аналогичный результат деградации (рис. 4.5) был получен при меньшей температуре $T = 650K$ и концентрации донорной примеси (N_D) 10^{22} 1/m^3 .

4.1.1 Вывод

В процессе деградации преобладающими факторами деградации ВАХ РТГС являются: уменьшение глубины и ширины ПЯ, которые увеличивают пиковое напряжение и пиковый ток.

Наличие донорной примеси ускоряет процесс деградации ГС. При это из-за сильно экспоненциальной зависимости коэффициента диффузии скорость диффузии при комнатных температурах не существенна ($T = 300K$).

4.2 Диффузия легирующей примеси

Приконтактные области выполняют роль резервуаров электронов. Они сильно легированы. Концентрация донорной примеси в них $N_D = 10^{24} \text{ m}^{-3}$. В случае РТГС, представленной на рис. 2.3 на основе $AlGaAs$ в роли донорной примеси выступает Si .

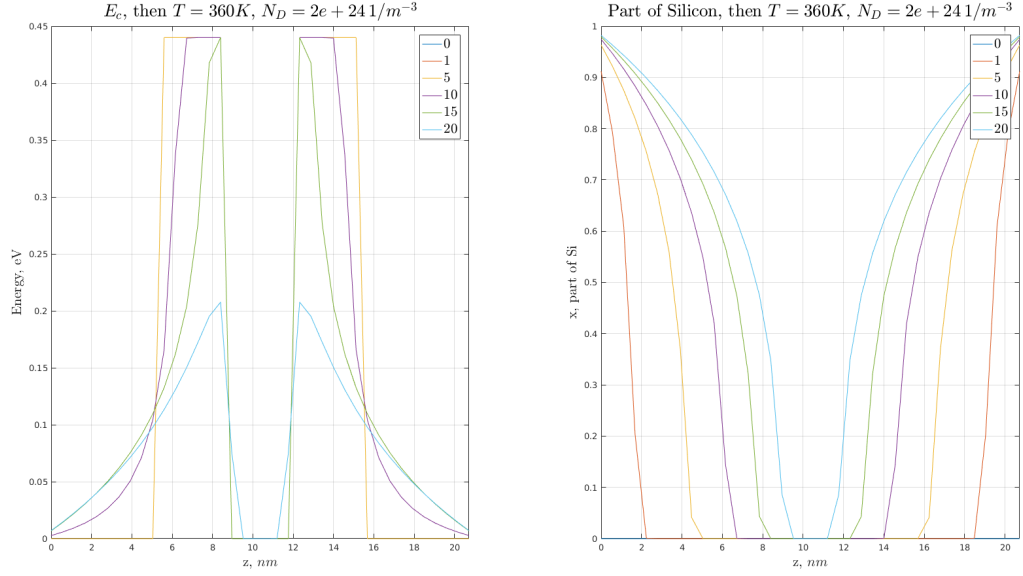


Рисунок 4.7 — Расплывание потенциального рельефа $Al_xGa_{1-x}As$ и Si из приконтактных областей

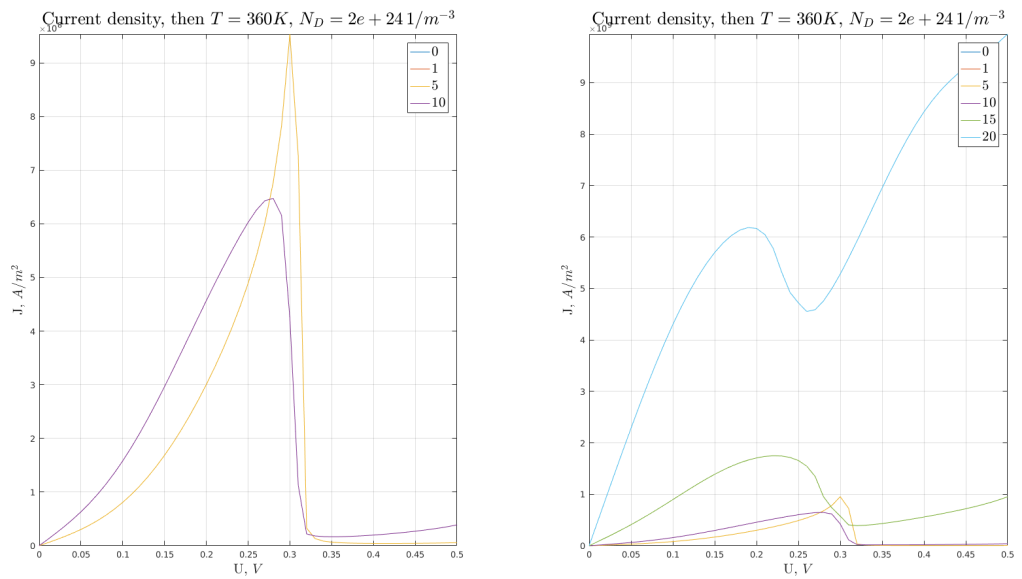


Рисунок 4.8 — Деградация тока через РТГС

Повышение температуры на 60 приводит к значительной деградации, причем в первые 5 лет деградации подвержены спейсеры, которые предохраняют РТГС от деградации ВАХ, в соответствии с результатами полученными ранее.

Заключение

В отчете рассматривается процесс моделирования деградации гетероструктур под действием температуры средствами среды MATLAB. Моделирование термической деградации гетероструктур состоит из двух частей:

- а) Моделирование процессов структурной деградации гетероструктуры;
- б) Моделирование устройства на основе гетероструктуры.

Цель практики:

- а) Изучение математического аппарата для моделирования процесса термической деградации;
- б) Изучение процессов деградации гетероструктур.

Задача практики:

- а) Моделирование процессов термической диффузии;
- б) Моделирование токопереноса;
- в) Исследование влияния основных параметров РТГС на ВАХ;
- г) Моделирование термической деградации ВАХ РТГС на основе $AlGaAs$.

Индивидуальное задание: Разработка алгоритма и программы, позволяющей:

- а) Моделирование диффузии в твердых растворах в гетероструктурах;
- б) Моделирование диффузии в примеси;
- в) Моделирование расплыва потенциального рельефа гетероструктуры;
- г) Моделирование основных параметров РТГС на основе $AlGaAs$.

В работе был рассмотрен математический аппарат для моделирования:

- Токопереноса;
- Не стационарного уравнения диффузии.

Так же были написаны программы, которые рассчитывали ВАХ через РТГС и моделировали диффузию атомов Al и Si в ГС на основе $AlGaAs$.

Была рассмотрена РТГС на основе $AlGaAs$ и исследованы влияния ее основных параметров на ВАХ:

- Глубина ПЯ;
- Ширина ПЯ;
- Ширина ПБ;
- Ширина спейсеров.

На основе полученных данных была исследована термическая деградация РТГС и выявлено, что доминирующим фактором, влияющим на деградацию ВАХ РТГС является диффузия донорной примеси из приконтактных областей.

Список использованных источников

1. *Бонч-Бруевич, В. Л.* Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. — М.: Мир, 1977. — 678 с.
2. *Шиляев, П.А.* Полупроводниковые гетероструктуры — гетеропереход: учебно-методическое пособие / П.А. Шиляев, Д.А. Павлов. — Н.Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2009. — 18 с.
3. *Шинкаренко, В. Г.* Электрические свойства полупроводников: учебно-методическое пособие / В. Г. Шинкаренко. — М.: МФТИ, 2012. — 80 с.
4. *Harrison, W. A.* Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond / W. A. Harrison. — Massachusetts: Courier Corporation, 2012. — 582 pp.
5. *Усанов, Д. А.* Физические основы нанoeлектроники / Д. А. Усанов, А. В. Скрипаль. — Саратов: ил. Электронное издание, 2013. — 128 с.
6. *Москалюк, В. А.* Сверхбыстродействующие приборы электроники / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев, А. В. Федяй. — К.: НТУУ «КПИ», 2012. — 479 с.
7. *Макеев, М.О.* Оценка стойкости к диффузионной деструкции наноразмерных AlAs/GaAs резонансно-туннельных гетероструктур методом ИК-спектральной эллипсометрии / М.О. Макеев, Ю.А. Иванов, С.А. Мешков // *Физика и техника полупроводников*. — 2016.
8. *Макеев, Мстислав Олегович.* Разработка конструкторско-технологических методов и средств повышения надёжности смесителей радиосигналов на основе резонансно-туннельных диодов: автореф. дис. канд. техн. наук : 05.11.14 / Мстислав Олегович Макеев. — М., 2014. — 17 с.
9. Diffusion in GaAs and Related Compounds: Recent Developments / U. Gosele, T. Y. Tan, M. Schultz et al. // *Defect and Diffusion Forum*. — 1997. — Pp. 143–147.
10. *Самарский, А. А.* Введение в численные методы / А. А. Самарский. — М.: Наука, 1987. — 288 с.

11. *Becker, T. W.* Numerical Modeling of Earth Systems / Т. W. Becker, J. P. Kaus. — California: USC, 2016. — 222 pp.
12. *Ветрова, Н. А.* Определение управляемых параметров для конструкторско-технологической оптимизации СВЧ смесителей радиосигналов на резонансно-туннельных диодах по критерию их надежности / Н. А. Ветрова, В. Д. Шашурин, Н. В. Назаров // *Наука и образование.* — 2011.