

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н. Э. БАУМАНА

ФАКУЛЬТЕТ «РАДИОЭЛЕКТРОНИКА И ЛАЗЕРНАЯ ТЕХНИКА»
КАФЕДРА «ТЕХНОЛОГИИ ПРИБОРОСТРОЕНИЯ»



ДОКЛАД
НА ТЕМУ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Содержание

Введение	3
1 Теоретическая часть	4
1.1 Деградация	4
1.2 Гетероструктура	5
1.2.1 Зонная диаграмма гетероперехода	5
1.3 Диффузия	7
1.3.1 Законы Фика	7
1.3.2 Механизмы диффузии	7
1.3.3 Коэффициент диффузии	8
1.3.4 Коэффициент диффузии Al , Si в $GaAs$	8
1.4 Метод конечных разностей. Решение одномерного нестационарного уравнения диффузии	9
1.4.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации (координаты)	9
1.4.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации (координаты)	11
2 Расчетная часть	12
2.1 Моделирование диффузионного размытия в «закрытой системе» $i-GaAs/i-Al_{45}Ga_{55}As$	12
2.2 Моделирование диффузионного размытия в «открытой системе» $i-GaAs/i-Al_{45}Ga_{55}As$	15
2.3 Моделирование диффузионного размытия $n^+-GaAs/i-GaAs/i-Al_{45}Ga_{55}As/n^+-GaAs$	17

Введение

Цель работы:

- а) Изучение процессов деградации гетероструктур.

Задача работы:

- а) Получить модель описывающую процессы деградации в гетероструктурах.

1 Теоретическая часть

1.1 Деградация

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

Изучая деградацию гетероструктур (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 ВАХ ГС — диффузионное размытие профиля дна зоны проводимости (E_c). Некоторые факторы, от которых зависит диффузионное размытие:

- Химический состав;
- Температура;
- Время.

Диффузионное размытие описывается с помощью законов Фика.

1.2 Гетероструктура

Гетероструктура — полупроводниковая структура с несколькими гетеропереходами (ГП).

ГС получили широкое распространение из-за возможности, изменяя на границах ГС ширину запрещённой зоны, управлять движением носителей заряда.

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

ГП может образоваться между полупроводниками с абсолютно одинаковыми постоянными решетки, образующими монокристалл, однородный в контакте, кристалл.

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

1.2.1 Зонная диаграмма гетероперехода

Для построения зонной диаграммы необходимо знать ширину запрещенной зоны (E_g) и положение уровня Ферми (E_F) для контактируемых полупроводников.

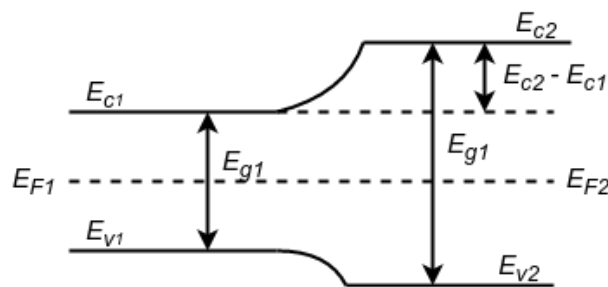


Рисунок 1.1 — Зонная диаграмма перехода между полупроводниками с различными E_g

Одна из самых распространенных ГС — это ГС на основе твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$, где x — это доля замещения. Основные характеристики $Al_xGa_{1-x}As$:

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}	$0.082 + 0.071x$
$N_{atoms}[1/sm^{-3}]$	$(4.42 - 0.17x)10^{22}$

Следует также принимать во внимание, что полупроводники могут иметь минимумы зоны проводимости в разных точках зоны Брюллиена. К примеру, минимум зоны проводимости $GaAs$ находится в точке Γ , в то время как наименьший минимум в $AlAs$ близок к точке X . Таким образом, природа низшего минимума зоны проводимости меняется при изменении доли Al в твердом растворе $Al_xGa_{1-x}As$. Низший минимум в $Al_xGa_{1-x}As$ изменяется от прямого расположения (минимум в Γ) зон до непрямой зонной структуры (минимум в X) при содержании $Al \approx 45\%$. Обычно твердый раствор $Al_xGa_{1-x}As$ получают с долей Al , меньше 0.45, чтобы получить прямое расположение зон.

Рассматривая ГП $i - GaAs / i - Al_xGa_{1-x}As$, при $x < 0.45$, получим высоту потенциальной ступеньки в зоне проводимости $(E_{c2} - E_{c1}) U \approx 1.247 * x eV$.

1.3 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.

1.3.1 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.

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

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

1.3.2 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.

1.3.3 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.

1.3.4 Коэффициент диффузии Al , Si в $GaAs$

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.

1.4 Метод конечных разностей. Решение одномерного нестационарного уравнения диффузии

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

1.4.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации (координаты)

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 (координаты).

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:

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

1.4.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации (координаты)

Если коэффициенте диффузии (D) зависит от концентрации (координаты), 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:

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

2 Расчетная часть

2.1 Моделирование диффузионного размытия в «закрытой системе» $i-GaAs/i-Al_{45}Ga_{55}As$

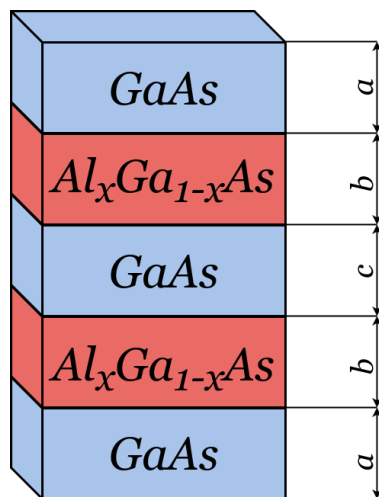


Рисунок 2.1 — Структура

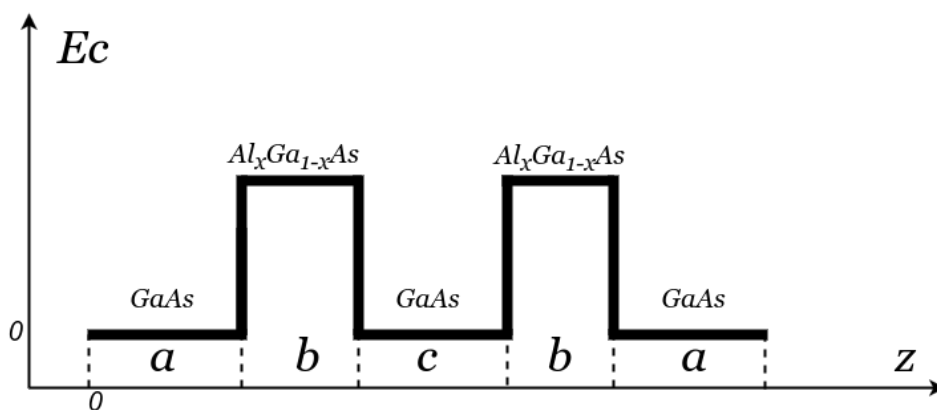


Рисунок 2.2 — Профиль дна зоны проводимости

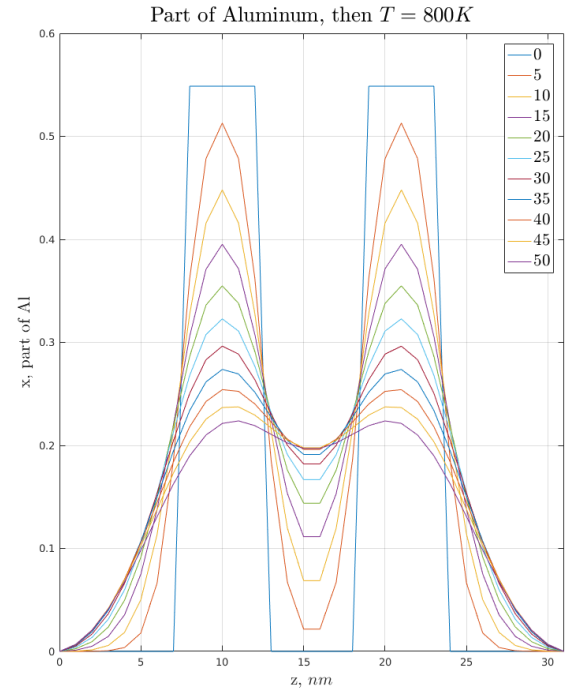
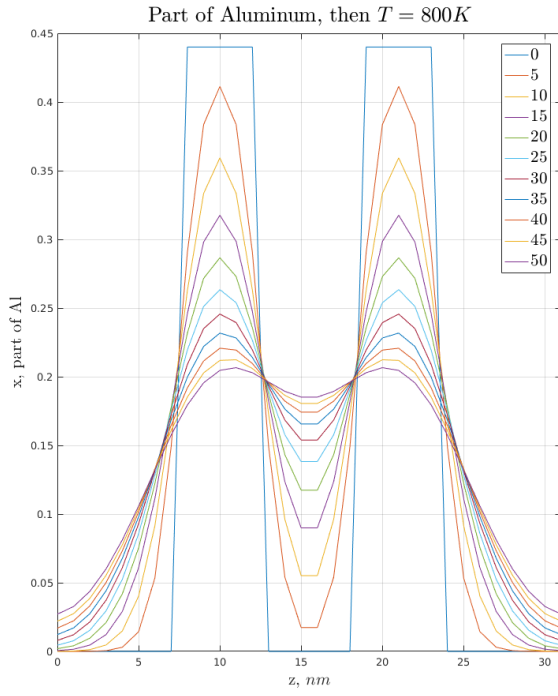


Рисунок 2.3 — Диффузионное размытие

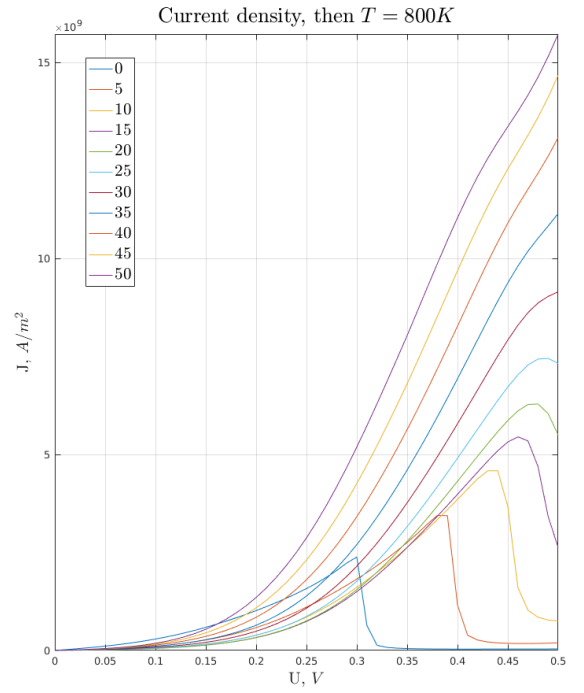
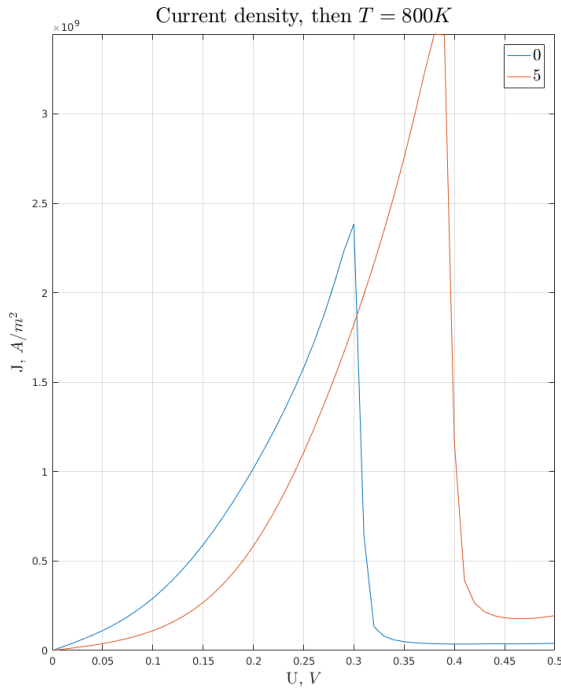


Рисунок 2.4 — Деградация ВАХ

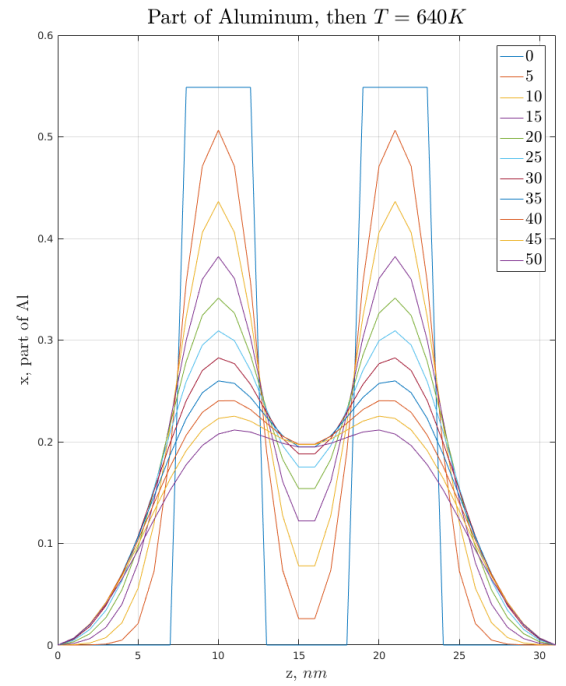
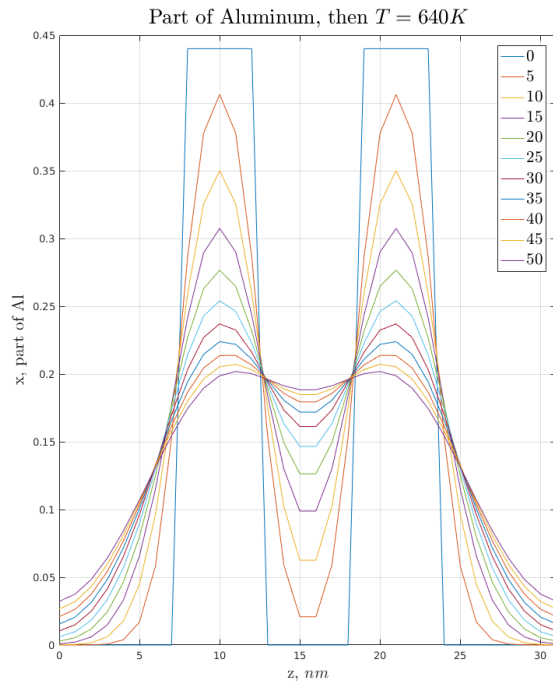


Рисунок 2.5 — Диффузионное размытие с учетом примеси,
 $Nd = 5 * 10^{15} sm^{-3}$

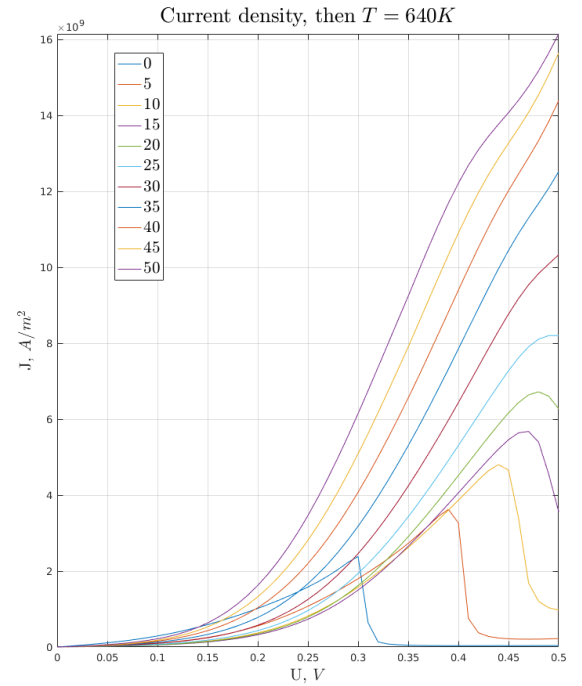
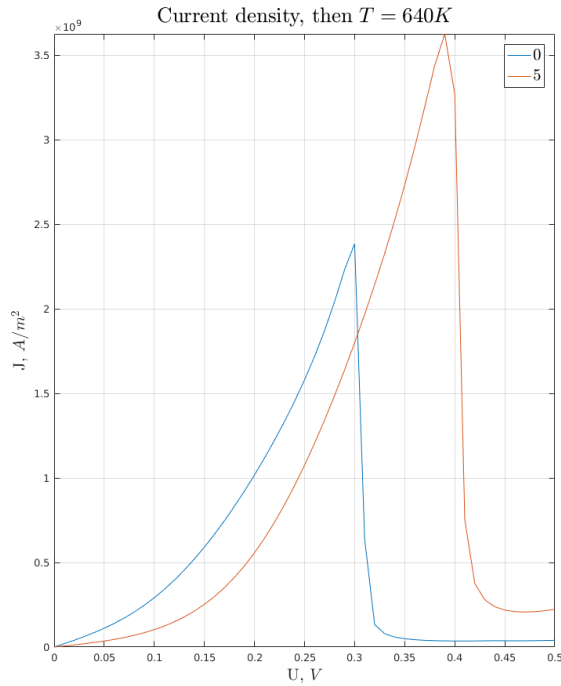


Рисунок 2.6 — Деградация ВАХ с учетом примеси, $Nd = 5 * 10^{15} sm^{-3}$

2.2 Моделирование диффузионного размытия в «открытой системе» $i-GaAs/i-Al_{45}Ga_{55}As$

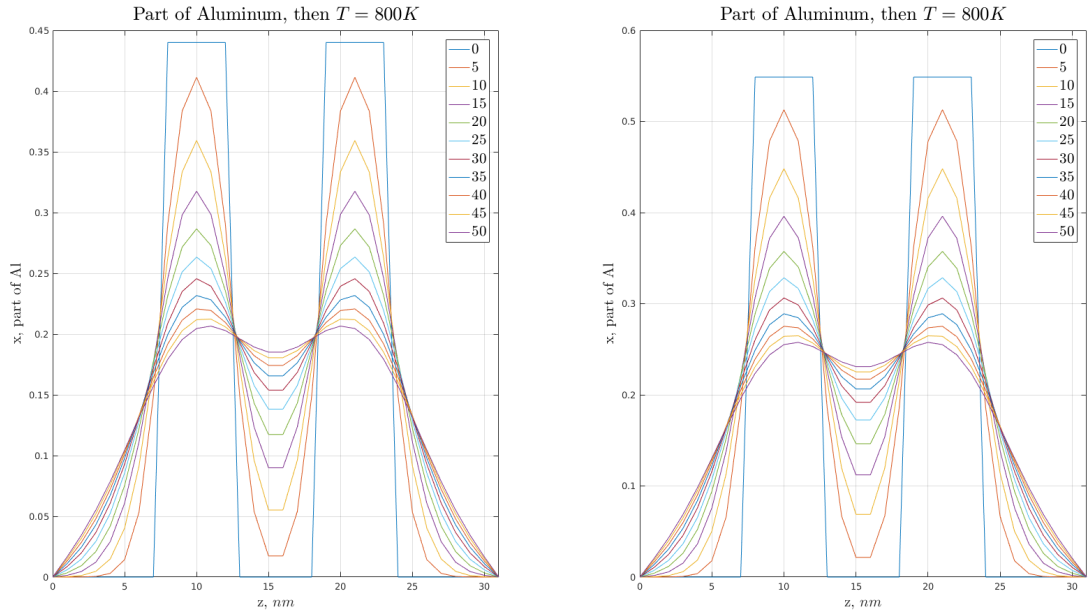


Рисунок 2.7 — Диффузионное размытие

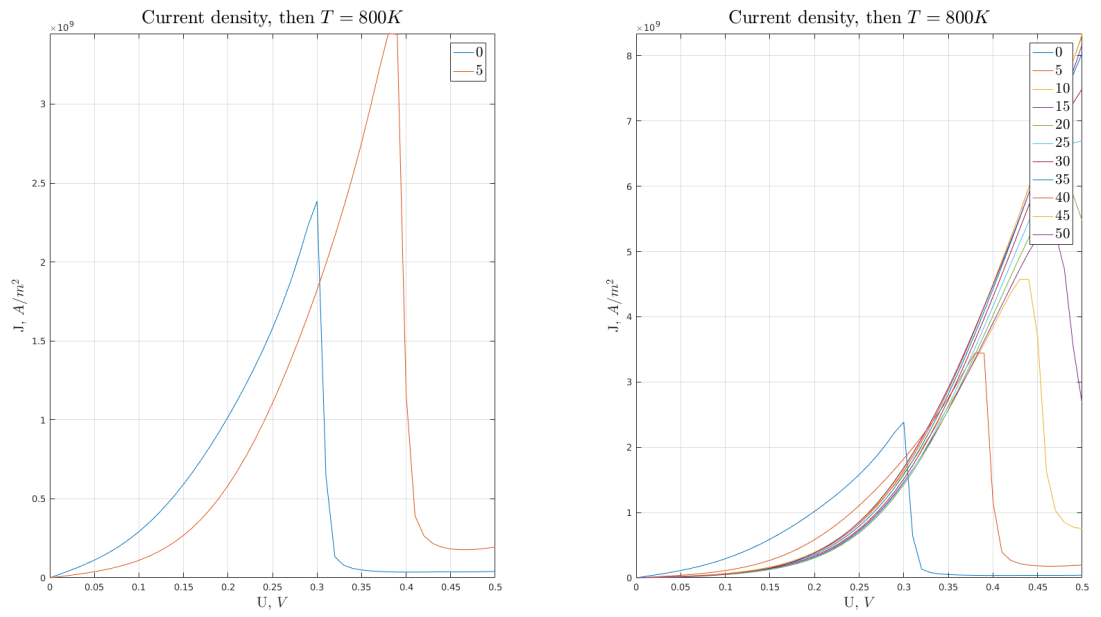


Рисунок 2.8 — Деградация ВАХ

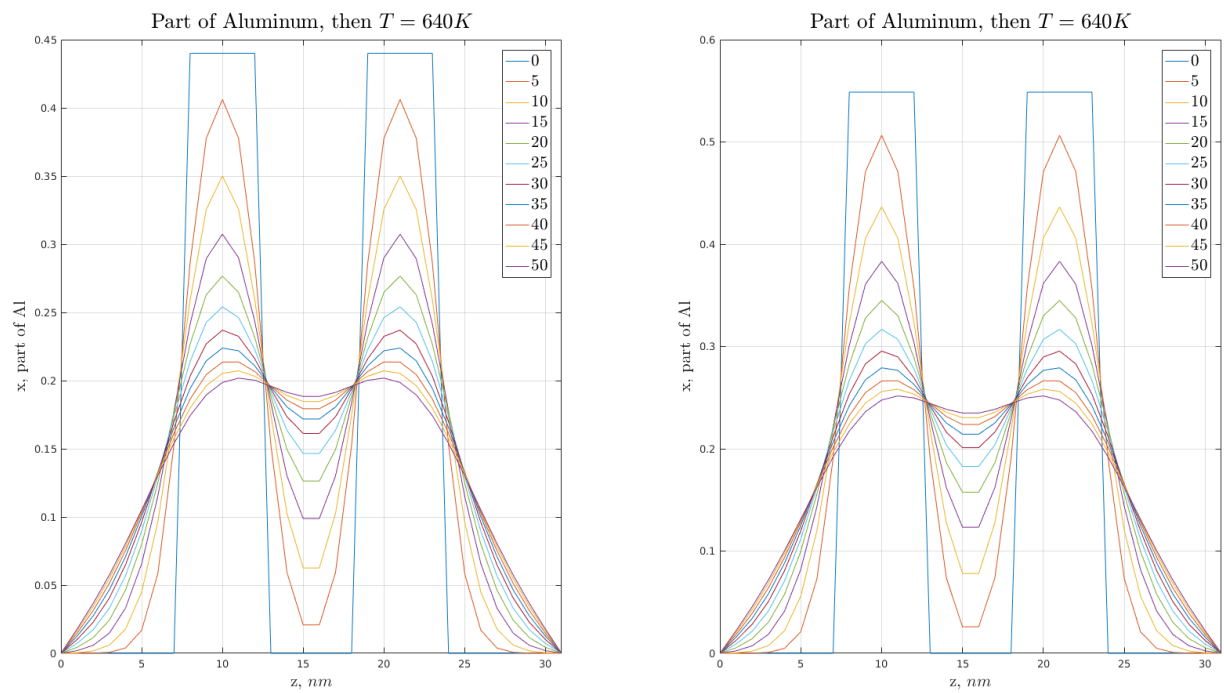


Рисунок 2.9 — Диффузионное размытие с учетом примеси,
 $Nd = 5 * 10^{15} sm^{-3}$

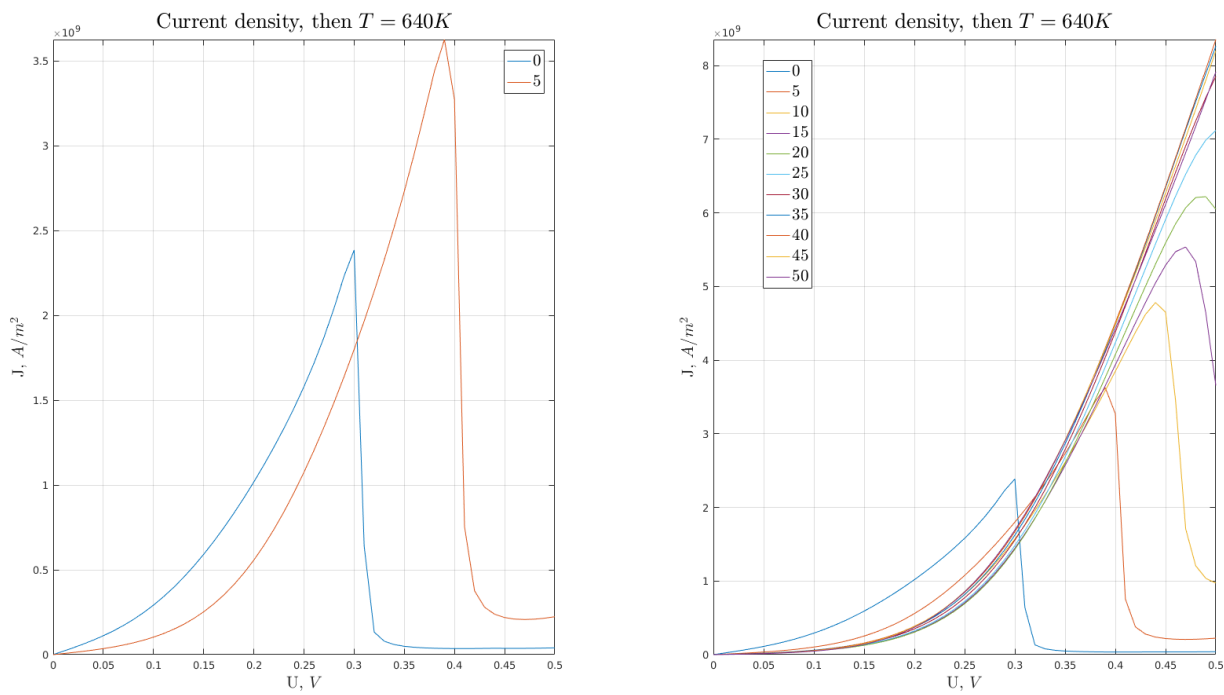


Рисунок 2.10 — Деградация ВАХ с учетом примеси, $Nd = 5 * 10^{15} sm^{-3}$

2.3 Моделирование диффузионного размытия $n^+ - GaAs/i - GaAs/i - Al_{45}Ga_{55}As/n^+ - GaAs$

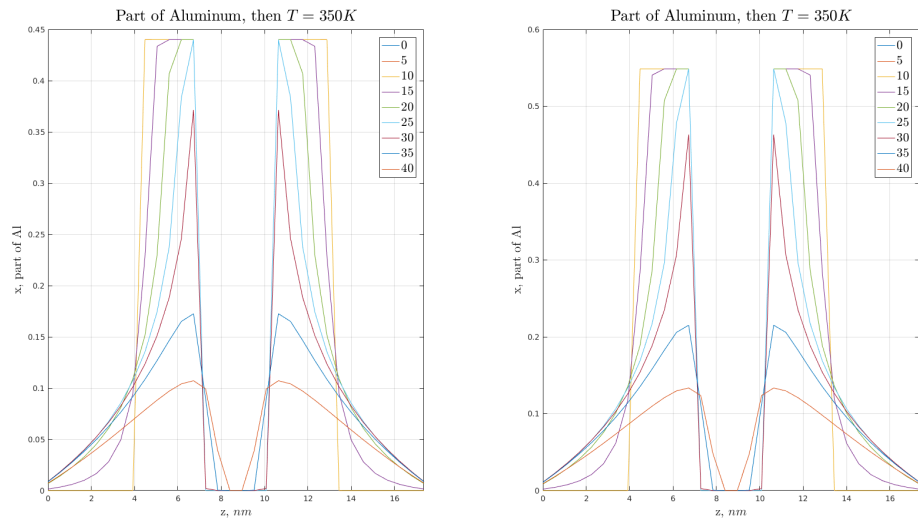


Рисунок 2.11 — Диффузионное размытие

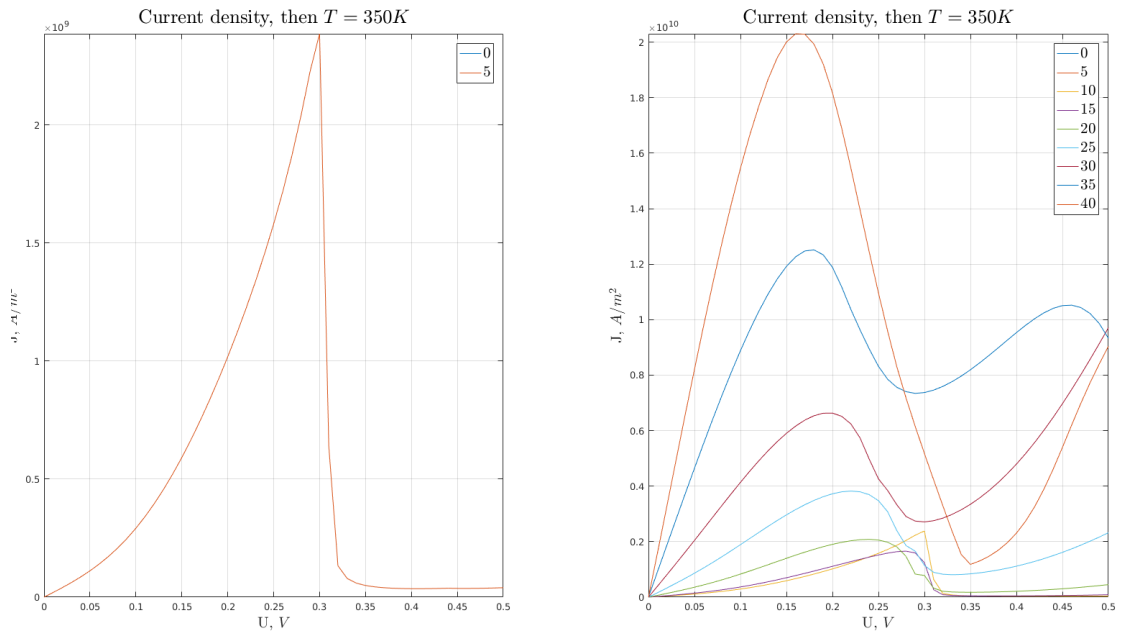


Рисунок 2.12 — Деградация ВАХ

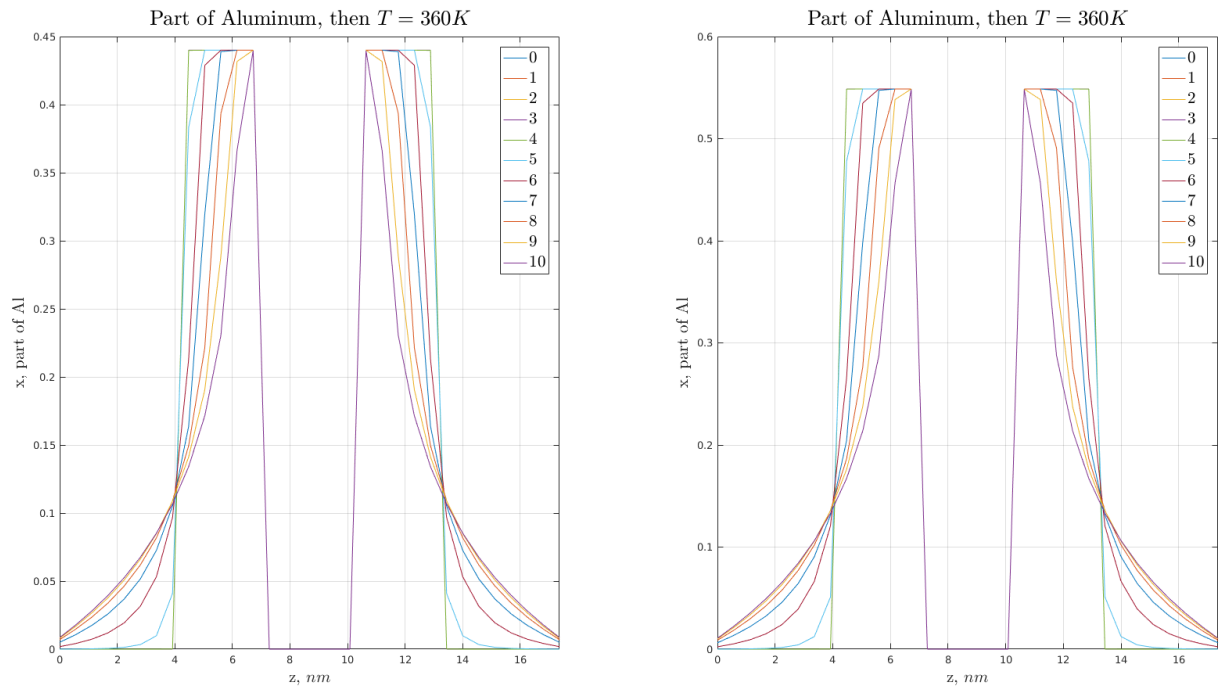


Рисунок 2.13 — Диффузионное размытие при повышении температуры

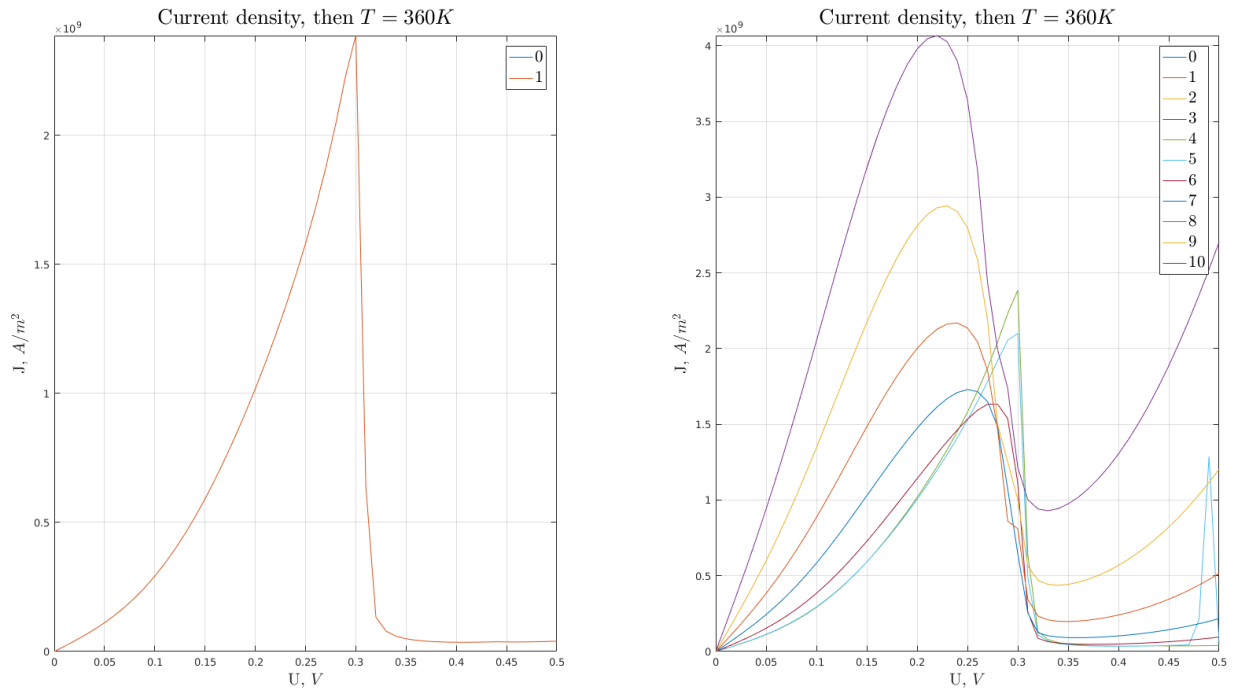


Рисунок 2.14 — Деградация ВАХ при повышении температуры