

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

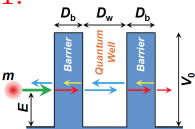
Москва, 2017

Постановка проблемы

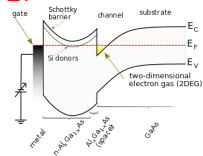
Гетероструктуры на основе GaAs:

1. Резонансно-туннельный гетероструктуры (РТГС);
2. Транзистор с высокой подвижностью электронов (HEMT);
3. Flash на основе QD.

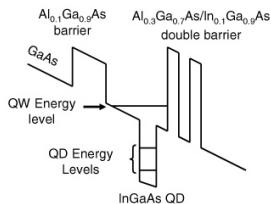
1.



2.



3.



Приборы на основе
гетероструктур

Зонная структура

Воздействие
внешней среды

Деградация

Выход из строя

Начало

РТГС на основе
AlGaAs

Исследование
ВАХ через T лет

Прошло T лет?

Термическая
деградация

Расчет
параметров ГС

Итерация по
времени

ВАХ

Конец

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:

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

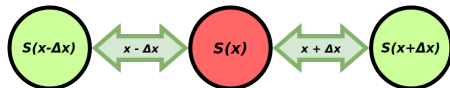
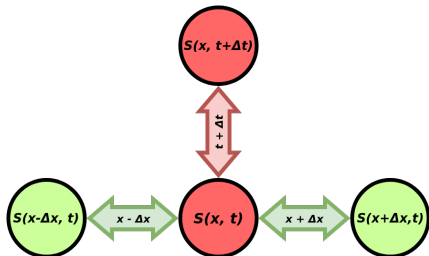
Конечно-разностная схема

Уравнения диффузии:

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

Уравнение Шредингера:

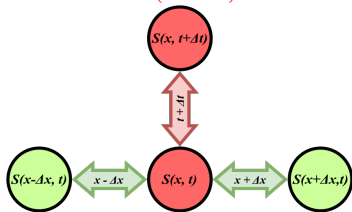
$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} \psi(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x);$$



Численное моделирование диффузии

Виды конечно-разностных схем:

Явная схема (FTCS):



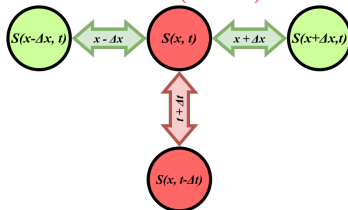
$$\frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = D \frac{C_{j-1}^i - 2C_j^i + C_{j+1}^i}{\Delta x^2}$$

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 : $C(x, t) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{D\pi^2 t}{L^2}\right)$;

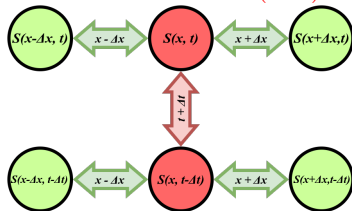
Неявная схема (BTCS):



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

Условие сходимости: \forall

Схема Crank-Nicolson (C-N):



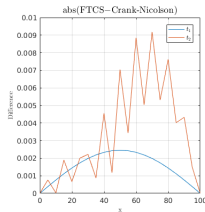
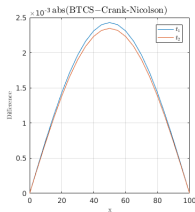
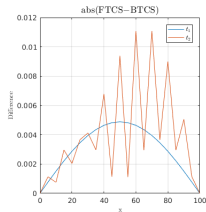
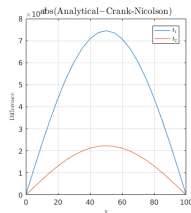
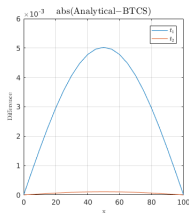
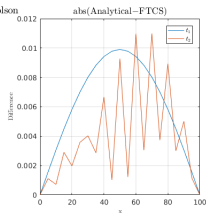
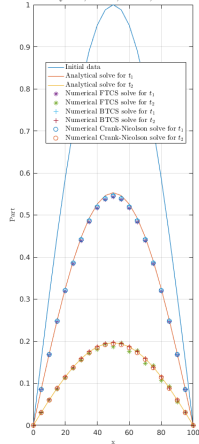
$$\frac{C_j^i - C_j^{i-1}}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left(\frac{C_{j-1}^i - 2C_j^i + C_{j+1}^i}{\Delta x^2} + \frac{C_{j-1}^{i-1} - 2C_j^{i-1} + C_{j+1}^{i-1}}{\Delta x^2} \right).$$

Условие сходимости: \forall

Численное моделирование диффузии

Проверка схем:

Check: Analytical, FTCS, BTCS, Crank-Nicolson



Ошибка схем:

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

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

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

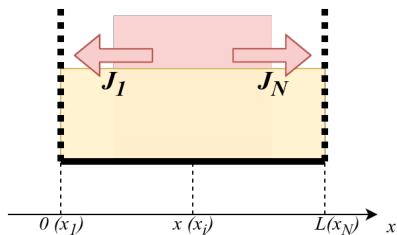
Вывод: FTCS – расходится. BTCS и C-N соответствуют соответствующему аналитическому решению. В качестве основной конечно-разностной схемы диффузии принимается BTCS из-за ее простоты и сходимости при любых условиях.

Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии постоянен:

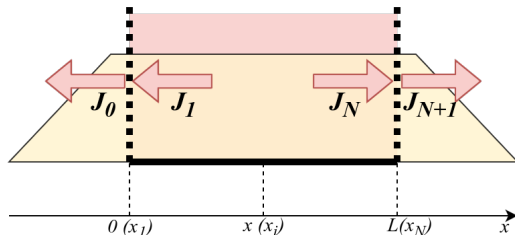
$$\begin{cases} D = \text{Const}; \\ \frac{\delta}{\delta t} C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2} C; \end{cases} \Rightarrow \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}, \text{ где } C_j^i = C(x_j, t_i).$$

«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:



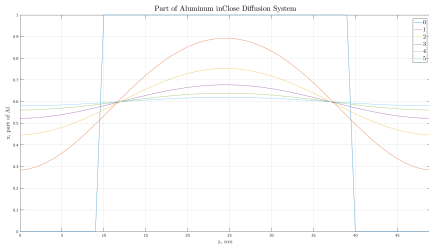
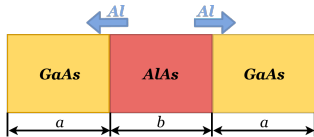
$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases}$$

Численное моделирование диффузии

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

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

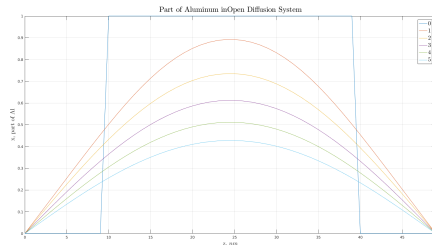
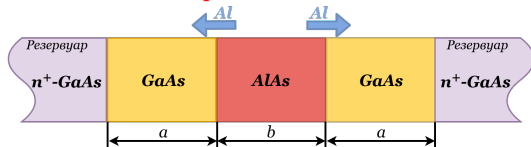
«Закрытая» система:



► $a = 10$ нм;

► $b = 30$ нм;

«Открытая» система:

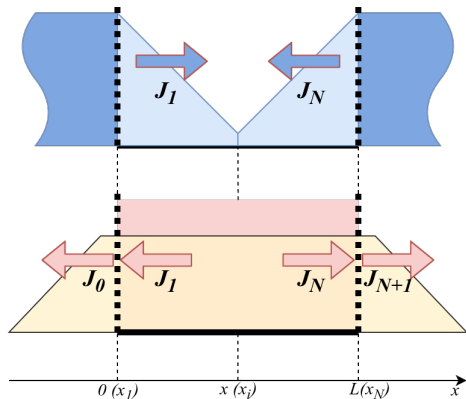


Численное моделирование диффузии

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:



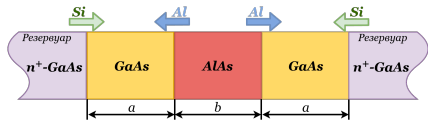
$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i) C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}; \\ \lambda_-^i = D_{j-}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases}$$

Численное моделирование диффузии

Диффузионное размытие n^+ -GaAs/i-GaAs/i-Al_xGa_{1-x}As/i-GaAs/ n^+ -GaAs:

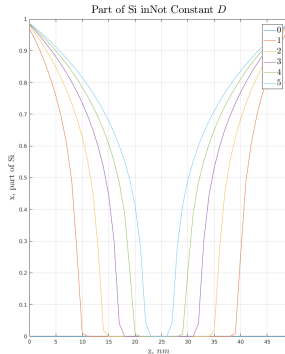
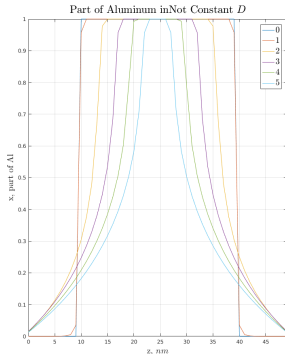
$$D_{Al,Si} = D_0 \exp \left[- \frac{E_a}{k_B T} \right] \left(\frac{N_D}{n_i} \right)^3 = D_0 \exp \left[- \frac{3.5}{k_B T} \right] \left(\frac{N_D}{n_i} \right)^3$$

«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:

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

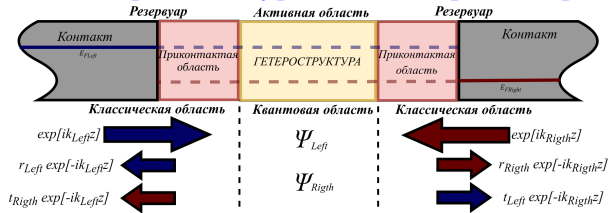
Прозрачность ГС:

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

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

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

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:

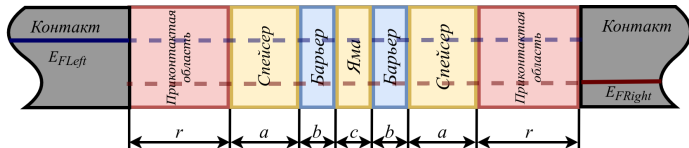
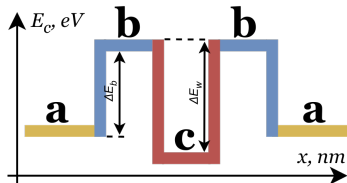
$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases} \quad \begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 0\Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 2ik_R \Delta; \end{cases}$$

Учет самосогласованного потенциала:

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

Исследование влияния параметров РТГС на ВАХ

Исследуемая модель:



Параметры ямы:

- ▶ Ширина ямы (« c »):
 - ▶ 10 монослоев;
 - ▶ 7 монослоев;
 - ▶ 5 монослоев;
 - ▶ 3 монослоев;
- ▶ Глубина ямы (« ΔE_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 (« ΔE_b »):
 - ▶ 0.3 eV;
 - ▶ 0.5 eV;
 - ▶ 0.7 eV;
 - ▶ 1 eV;

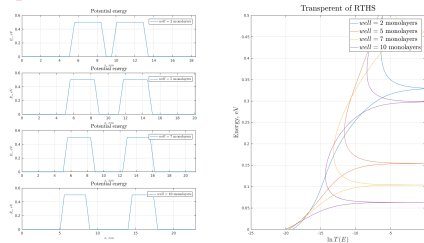
Параметры спейсеров:

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

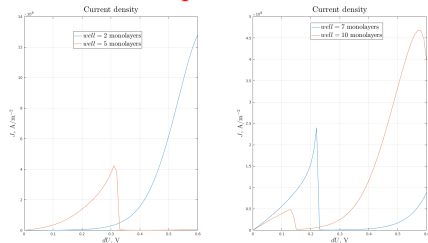
Исследование влияния параметров ямы РТГС на ВАХ

Ширина ямы:

Прозрачность РТГС:

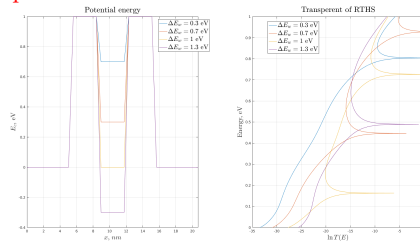


Плотность тока через РТГС:

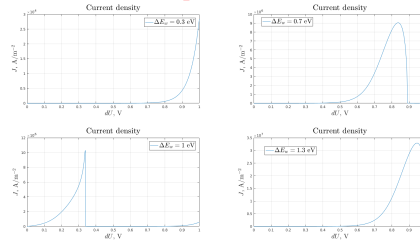


Глубина ямы:

Прозрачность РТГС:



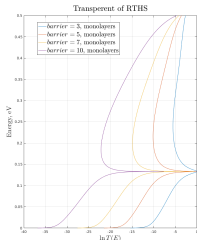
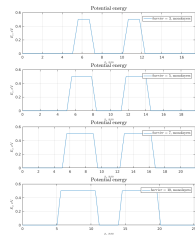
Плотность тока через РТГС:



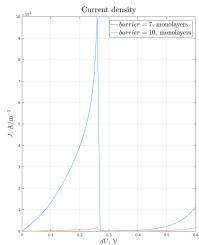
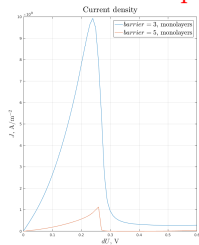
Исследование влияния параметров барьеров РТГС на ВАХ

Ширина барьеров:

Прозрачность РТГС:

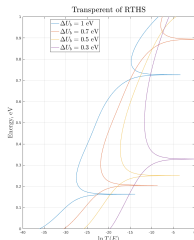
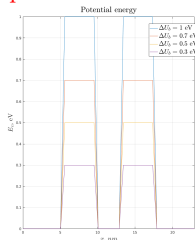


Плотность тока через РТГС:

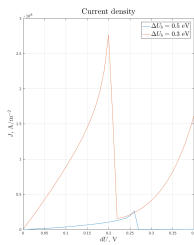
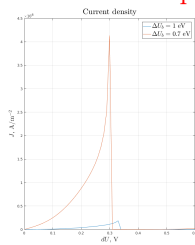


Высота барьеров:

Прозрачность РТГС:



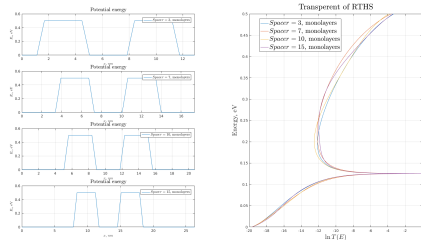
Плотность тока через РТГС:



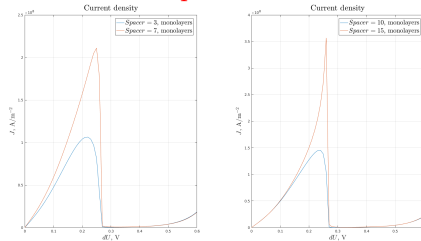
Исследование влияния параметров спейсера РТГС на ВАХ

Ширина спейсера:

Прозрачность РТГС:

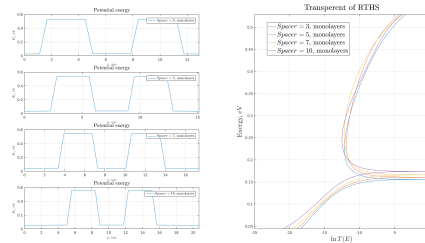


Плотность тока через РТГС:

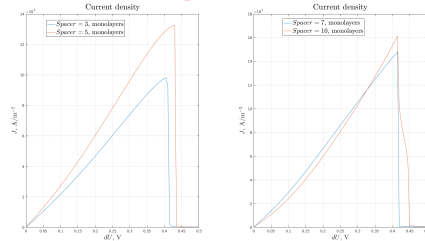


Ширина спейсера с учетом ССП:

Прозрачность РТГС:



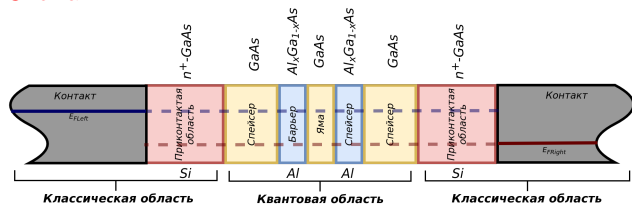
Плотность тока через РТГС:



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:

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

Параметры модели:

Размеры:

$a = 10$ монослоев;

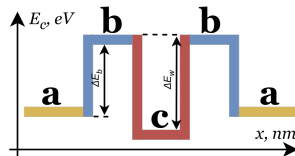
$b = 6$ монослоев;

$c = 6$ монослоев;

Зонная структура:

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

Зонная структура:



Параметры диффузии:

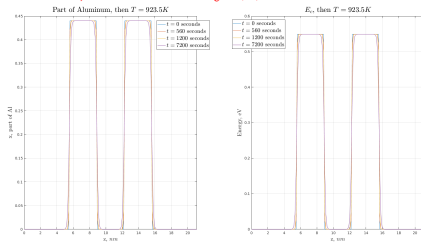
$$D_{\text{Al, Si}} = D_0 \exp \left[- \frac{E_a}{k_B T} \right] \left(\frac{N_D}{n_i} \right)^3;$$

$E_a = 3.5 \text{ эВ}$ – 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.

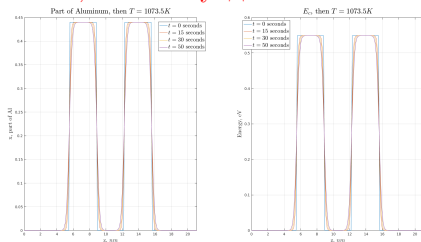
Моделирование термической деградации квантовой области МЛЭ:

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



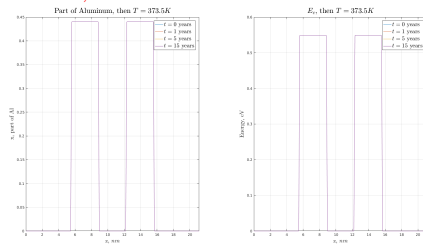
Отжиг:

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



Эксплуатация:

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

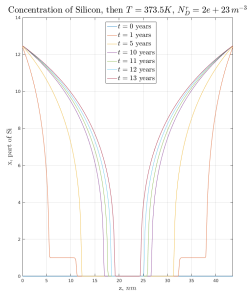
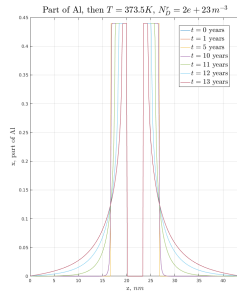
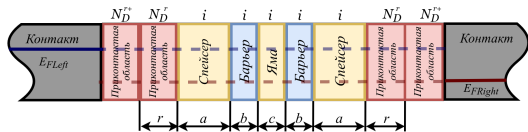


Вывод: Наибольшее влияние на состав гетероструктуры оказывает кратковременный отжиг. МЛЭ практически не влияет на гетероструктуру. Эксплуатация в течении долгого времени не оказывает никаких влияний на состав.

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:

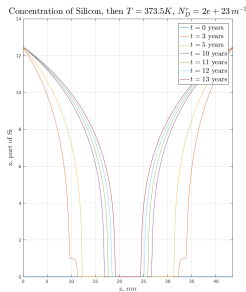
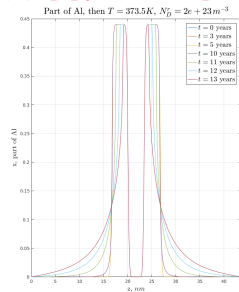
Основная причина термической деградации — диффузия донорной примеси из сильнолегированных (N_D^{r+}) приконтактных областей. Спейсеры предохраняют активную область от проникновения легирующей примеси. Деградацию ВАХ РТГС необходимо рассматривать при $t \geq 10$ лет.

Моделирование термической деградации РТГС

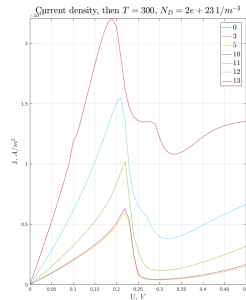
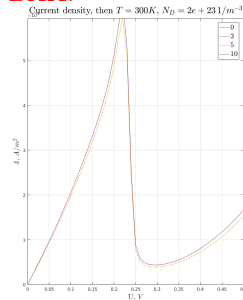
n^{++} -GaAs/ n^{+} -GaAs/i-GaAs/i-Al_{0.4}Ga_{0.6}As/i-GaAs/i-Al_{0.4}Ga_{0.6}As/i-GaAs/ n^{+} -GaAs/ n^{++} -GaAs

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 расплытие:



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!