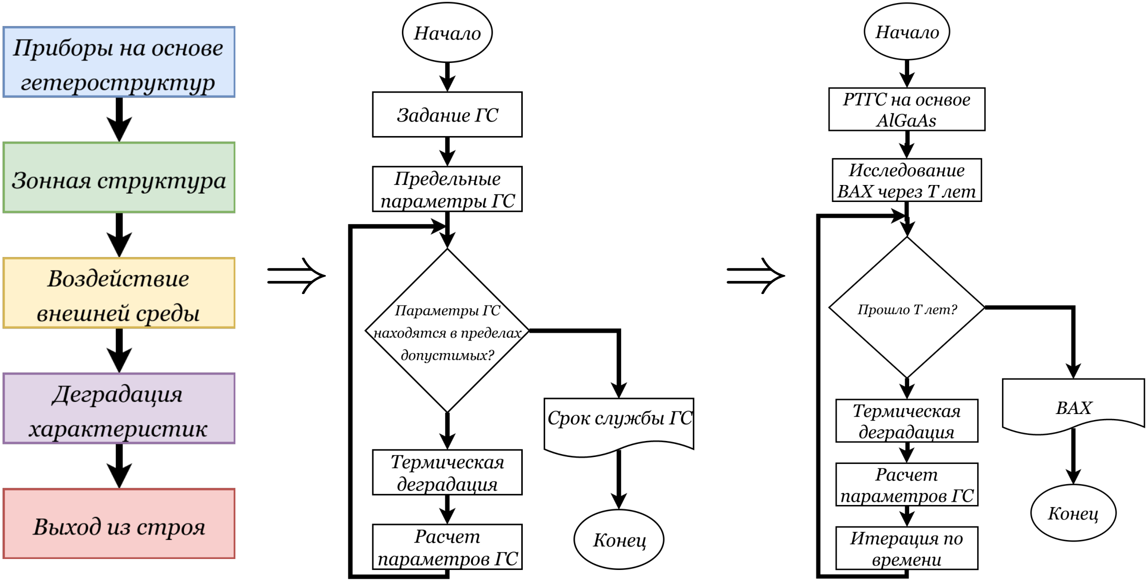
Моделирование термической деградации AlGaAs гетероструктур

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 модели термической деградации слоистых гетероструктур на основе GaAs для интеграции в методику обеспечения заданного уровня надёжности устройства на их основе.

Задачи работы:

- Исследование математического аппарата для моделирования диффузионного размытия гетероструктур под действием градиента концентрации при фиксированной температуре системы;
- Исследование математического аппарата для моделирования токопереноса через гетероструктуру;
- Разработка алгоритма термической деградации гетероструктуры на основе GaAs.

Численное моделирование физических процессов

Метод конечных разностей:

Аппроксимация первой производной:

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

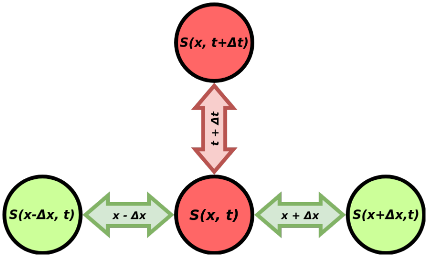
Аппроксимация второй производной:

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

Конечно-разностная схема

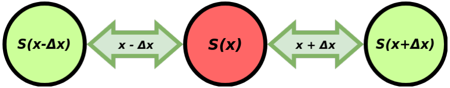
Уравнения диффузии:

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



Уравнение Шредингера:

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

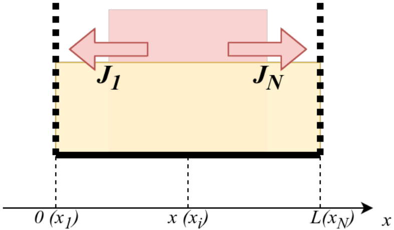


Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии постоянен:

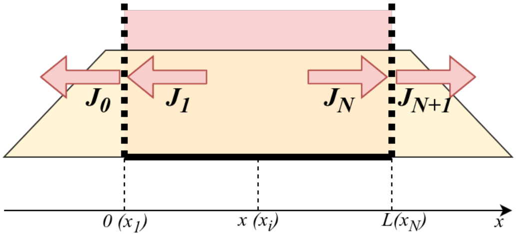
$$\begin{cases} D = \mathrm{Const}; \\ \frac{\delta}{\delta t} C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2} C; \end{cases} \Rightarrow \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}, \text{ где } C_j^i = C(x_j, t_i).$$

«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:



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

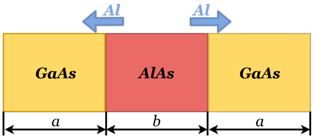
Численное моделирование диффузии

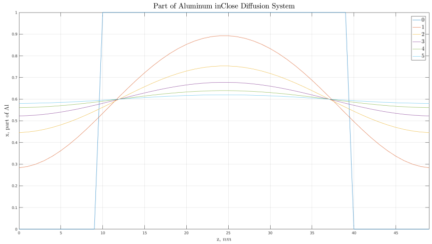
Диффузионное размытие $i\text{-}GaAs/i\text{-}Al_xGa_{1-x}As/i\text{-}GaAs$:

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

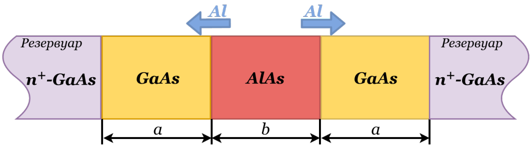
- a = 10 нм;
- b = 30 нм;

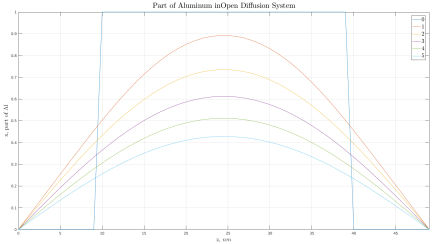
«Закрытая» система:





«Открытая» система:



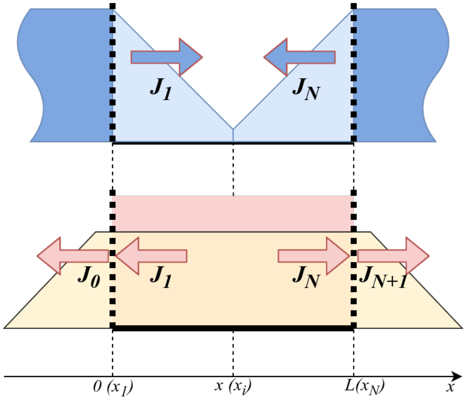


Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии зависит от концентрации:

$$\begin{cases} D \neq \mathrm{Const}; \\ \frac{\delta}{\delta t}C = \frac{\delta}{\delta x}D\frac{\delta}{\delta x}C; \end{cases} \Rightarrow \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{D^i_{j+1/2}\frac{C^i_{j+1}-C^i_j}{\Delta x} - D^i_{j-1/2}\frac{C^i_j - C^i_{j-1}}{\Delta x}}{\Delta x}, \text{ где } \begin{cases} D^i_{j\pm1/2} = \frac{D^i_j + D^i_{j\pm1}}{2} = D^i_{j\pm}; \\ C^i_j = C(x_j, t_i). \end{cases}$$

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



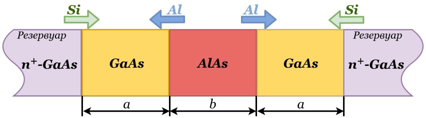
$$\begin{cases} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda^i_- C^i_{j-1} + (1 - \lambda^i_+ - \lambda^i_-)C^i_j + \lambda^i_+ C^i_{j+1}; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda^i_+ = D^i_{j+}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}; \\ \lambda^i_- = D^i_{j-}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{cases}$$

Численное моделирование диффузии

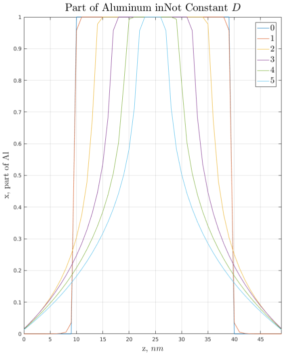
Диффузионное размытие n^{+}-GaAs/i-GaAs/i-$Al_xGa_{1-x}As$/i-GaAs/n^{+}-GaAs:

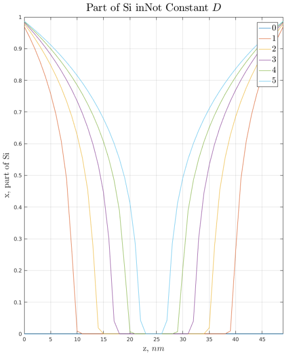
$$D_{Al,Si} = D_0 \exp\left[-\frac{E_a}{k_B T}\right]\left(\frac{N_D}{n_i}\right)^3 = D_0 \exp\left[-\frac{3.5}{k_B T}\right]\left(\frac{N_D}{n_i}\right)^3$$

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



- a = 10 нм;
- b = 30 нм;





Численное моделирование токопереноса

Формула Цу-Есаки:

$$J(V) = \frac{2mek_BT}{(2\pi)^2\hbar^3}\int\limits_0^{\infty} T(E)D(E)dE;$$

Функция снабжения:

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

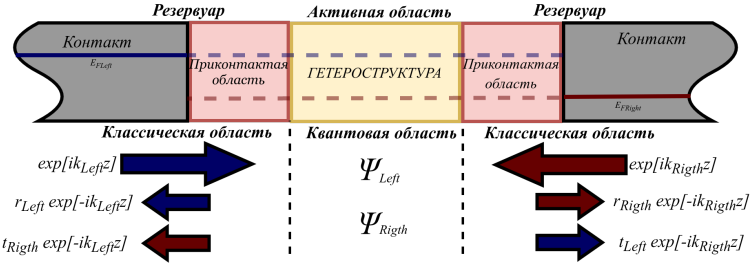
Прозрачность ГС:

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

$$\psi_L = \exp[ik_Lz];$$

$$\psi_R = T_L\psi_L = T_L\exp[ik_Lz];$$

Численное решение уравнение Шредингера:



Конечно-разностная схема для внутренних точек:

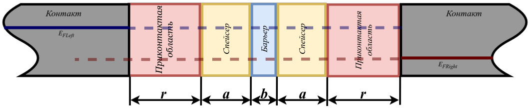
$$\psi_{i-1}\frac{m^*_{i+1}}{m^*_{i-1}} + \psi_i\left(\frac{2\Delta^2 m^*_{i+1}}{\hbar^2}(E-U_i) - \frac{m^*_{i+1}}{m^*_{i-1}} - 1\right) + \psi_{i+1} = 0,$$

Конечно-разностная схема для граничных точек:

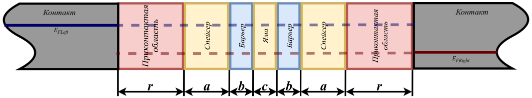
$$\begin{cases}(ik_L-1)\psi_1+\psi_2 = 2ik_L\Delta;\\ \psi_{N-1}+(ik_R\Delta-1)\psi_N = 0;\end{cases}$$

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

Численное моделирование токопереноса



- a = 5 нм; • b = 5 нм; • ΔE_c = 1эВ.



- a = 5 нм; • b = 5 нм; • c = 5 нм; • ΔE_c = 1эВ.

Учет самосогласованного потенциала

Уравнеие Пуассона:

$$\frac{d}{dz}\varepsilon(z)\frac{d}{z}V_s = \frac{e}{\varepsilon_0}[n(z) - N_D(z)];$$

Концентрация электронов в ГС:

$$n(z) = \begin{cases} \sum\limits_{L,R} \int\limits_{U_{l(r)}}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E-U_{L(R)}}} \ln\left(1 + \exp\left[-\frac{E-E_F-U_{la(ra)}}{k_B T}\right]\right); \\ N^{3D} \int\limits_{0}^{+\infty} \frac{\sqrt{E}}{e^{\frac{E-\mu}{kT}}+1} dE; \end{cases}$$

$$N^A = \frac{2^{1/2}m^{3/2}k_B T}{(2\pi)^2\hbar^3};$$

$$N^{3D} = \frac{2^{1/2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3};$$