

Моделирование термической деградации AlGaAs гетероструктур

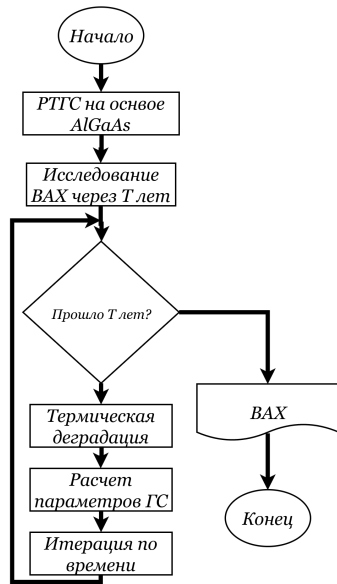
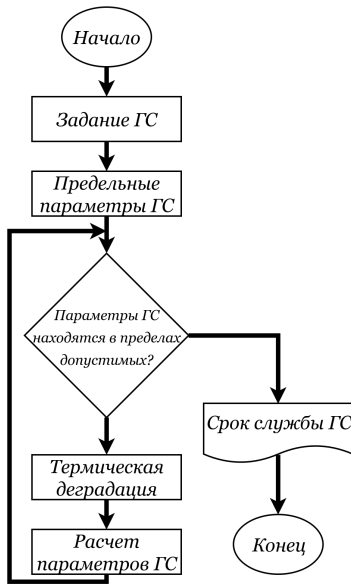
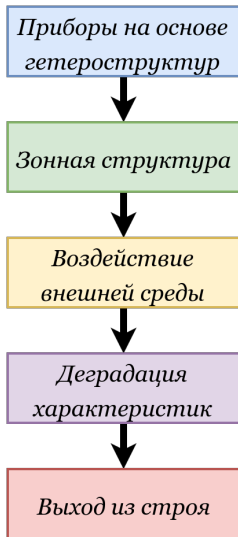
Выполнил: студент гр. РЛ6–82 Прохоров М.Д.

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 слоистых гетероструктур на основе GaAs.

Задачи работы:

- ▶ Моделирование диффузионного размытия гетероструктур на основе GaAs под действием градиента концентрации при фиксированной температуре;
- ▶ Моделирование токопереноса через гетероструктуру;
- ▶ Разработка алгоритма деградации ВАХ 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:

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

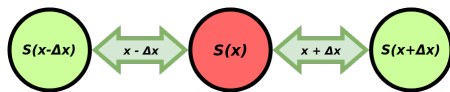
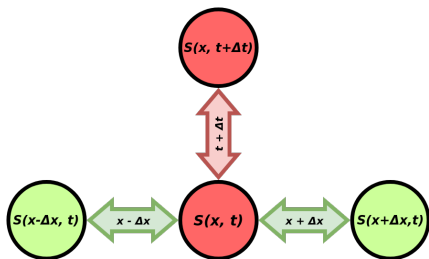
Конечно-разностная схема

Уравнения диффузии:

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

Уравнение Шредингера:

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

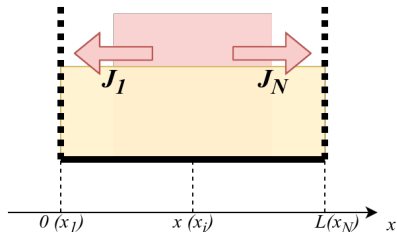


Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии постоянен:

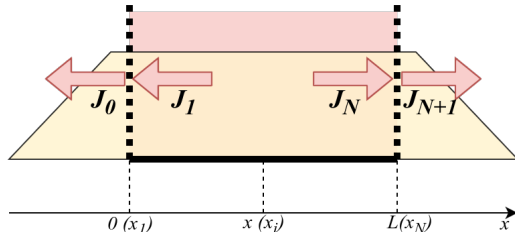
$$\left\{ \begin{array}{l} D = \text{Const}; \\ \frac{\delta}{\delta t} C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2} C; \end{array} \right. \Rightarrow \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}, \text{ где } C_j^i = C(x_j, t_i).$$

«Закрытая» система:



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

«Открытая» система:



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

Численное моделирование диффузии

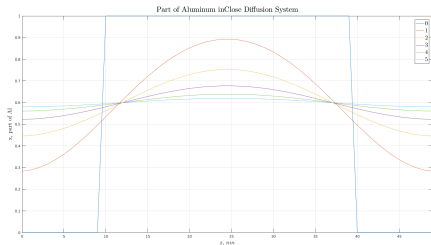
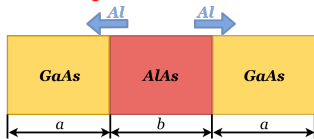
Диффузионное размытие $i\text{-GaAs}/i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/i\text{-GaAs}$:

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

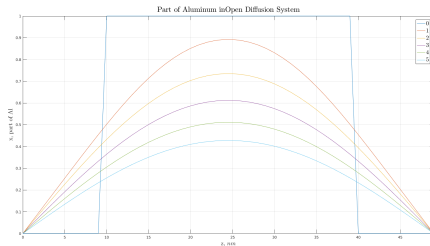
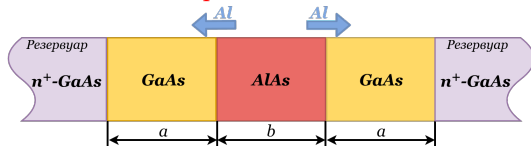
► $a = 10$ нм;

► $b = 30$ нм;

«Закрыва́тая» система:



«Откры́тая» система:

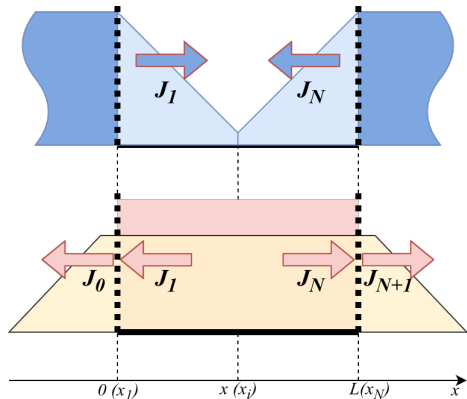


Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии зависит от концентрации:

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

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



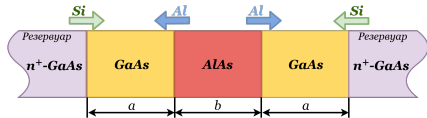
$$\left\{ \begin{array}{l} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i) C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}; \\ \lambda_-^i = D_{j-}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{array} \right.$$

Численное моделирование диффузии

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

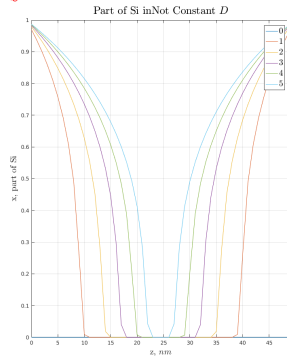
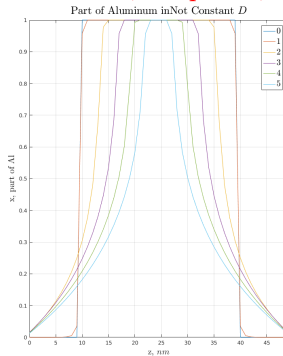
$$D_{Al,Si} = D_0 \exp \left[- \frac{E_a}{k_B T} \right] \left(\frac{N_D}{n_i} \right)^3 = D_0 \exp \left[- \frac{3.5}{k_B T} \right] \left(\frac{N_D}{n_i} \right)^3$$

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



► $a = 10$ нм;

► $b = 30$ нм;



Численное моделирование токопереноса

Формула Цу-Есаки:

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

Функция снабжения:

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

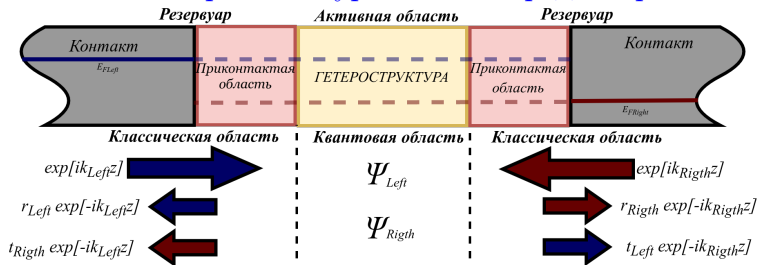
Прозрачность ГС:

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

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

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

Численное решение уравнение Шредингера:



Конечно-разностная схема для внутренних точек:

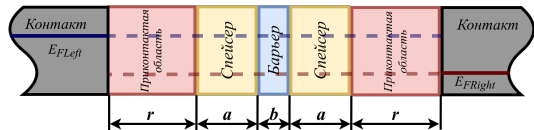
$$\psi_{i-1} \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} + \psi_i \left(\frac{2\Delta^2 m_{i+1}^*}{\hbar^2} (E - U_i) - \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} - 1 \right) + \psi_{i+1} = 0,$$

Конечно-разностная схема для граничных точек:

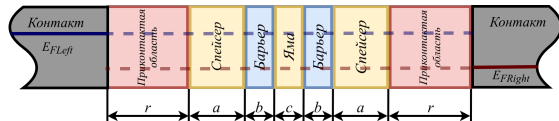
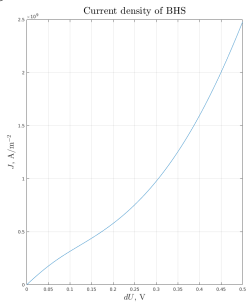
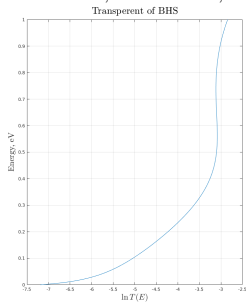
$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases}$$

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

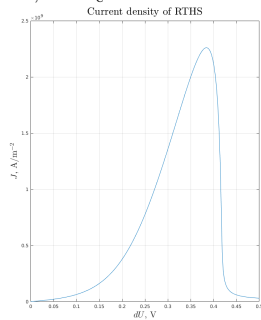
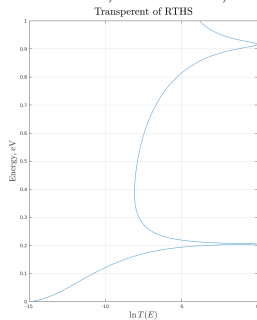
Численное моделирование токопереноса



- $a = 5$ нм; • $b = 5$ нм; • $\Delta E_c = 1$ эВ.



- $a = 5$ нм; • $b = 5$ нм; • $c = 5$ нм; • $\Delta E_c = 1$ эВ.



Учет самосогласованного потенциала

Уравнение Пуассона:

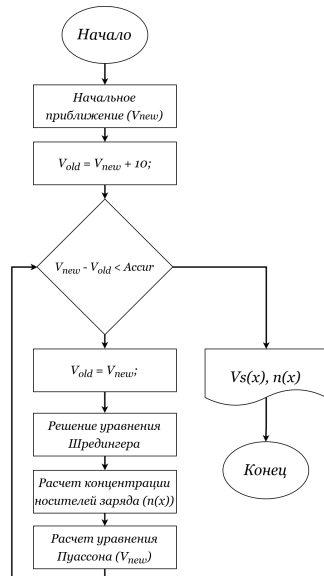
$$\frac{d}{dx} \varepsilon(x) \frac{d}{dx} V_s = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(x) - N_D(x)];$$

Метод Гумеля:

$$n(x) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \exp \frac{E_F(x) - E_c(x) + eV_s(x)}{k_B T} = n_0(x) \exp \frac{V_s(x)}{V_{\text{ref}}};$$
$$V_{\text{ref}} = \frac{k_B T}{e}; n_0(x) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \exp \frac{E_F(x) - E_c(x)}{k_B T};$$
$$n_{\text{new}} = n_{\text{old}} \exp \frac{V_{\text{new}} - V_{\text{old}}}{V_{\text{ref}}};$$

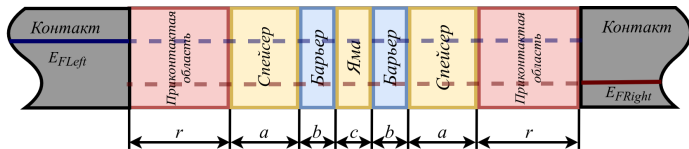
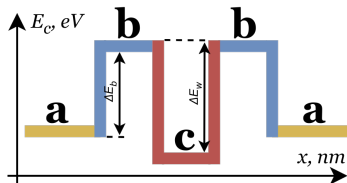
Конечно-разностная схема:

$$\frac{d}{dx} \varepsilon(x) \frac{d}{dx} V_{\text{new}} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_{\text{old}} \exp \left(\frac{V_{\text{new}} - V_{\text{old}}}{V_{\text{ref}}} \right) - N_D(x) \right];$$
$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d}{dz} V_{\text{new}} - n_{\text{old}} \frac{eV_{\text{new}}}{\varepsilon_0 V_{\text{ref}}} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_{\text{old}} \left(1 - \frac{V_{\text{old}}}{V_{\text{ref}}} \right) - N_D(z) \right];$$



Исследование влияния параметров РТГС на ВАХ

Исследуемая модель:



Параметры ямы:

- ▶ Ширина ямы («с»):
 - ▶ 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;

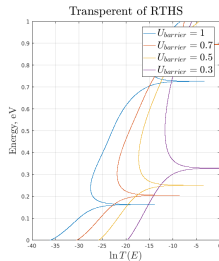
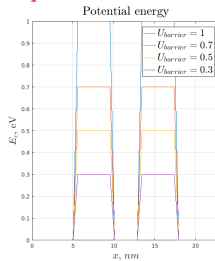
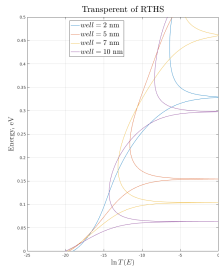
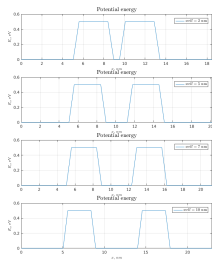
Исследование влияния параметров ямы РТГС на ВАХ

Ширина ямы:

Прозрачность РТГС:

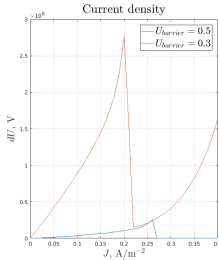
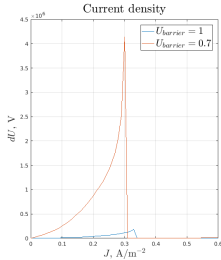
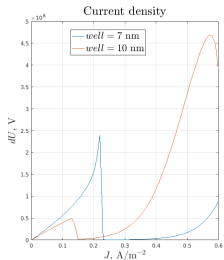
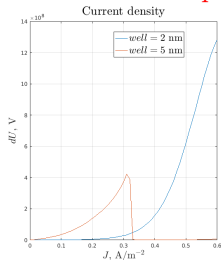
Глубина ямы:

Прозрачность РТГС:



Плотность тока через РТГС:

Плотность тока через РТГС:



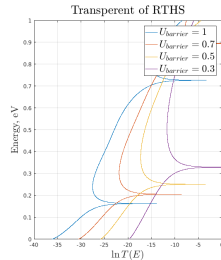
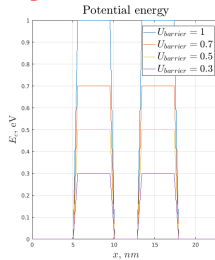
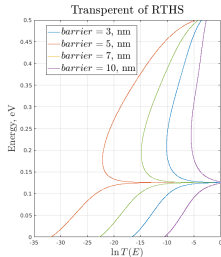
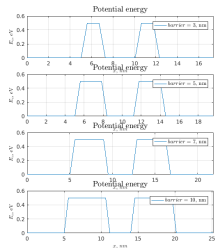
Исследование влияния параметров барьеров РТГС на ВАХ

Ширина барьеров:

Прозрачность РТГС:

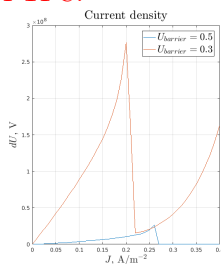
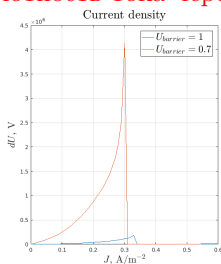
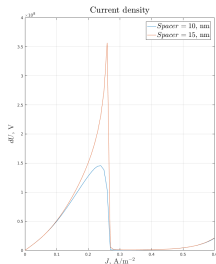
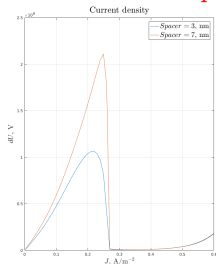
Высота барьеров:

Прозрачность РТГС:



Плотность тока через РТГС:

Плотность тока через РТГС:



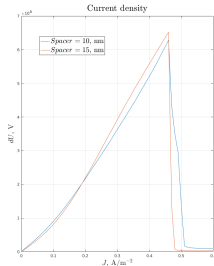
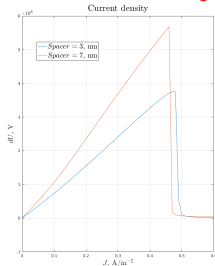
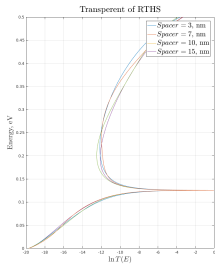
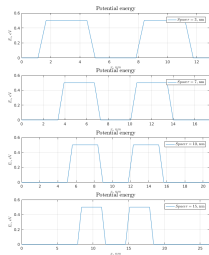
Исследование влияния параметров спейсера РТГС на ВАХ

Ширина спейсера:

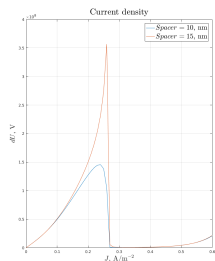
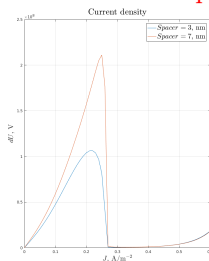
Прозрачность РТГС:

Ширина спейсера с учетом ССП:

Плотность тока через РТГС:



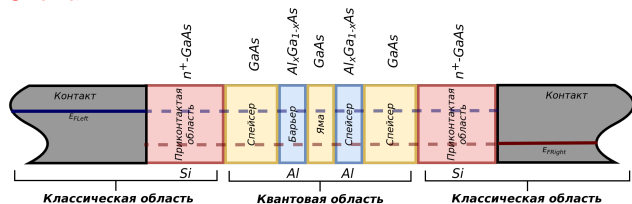
Плотность тока через РТГС:



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):

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

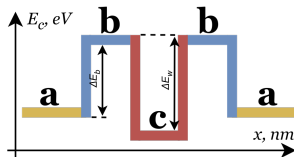
Эффективная масса в ЗП:

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

Число атомов:

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

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;

$T = 360 \text{ K}$ – температура системы;

$D_0 = 0.2$ – предэкспоненциальный множитель;

N_D – концентрация донорной примеси;

n_i – концентрация собственных носителей заряда.

Параметры модели:

Размеры:

$a = 10$ монослоев;

$b = 6$ монослоев;

$c = 6$ монослоев;

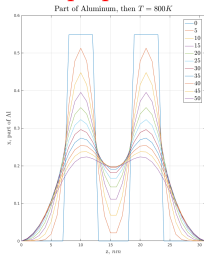
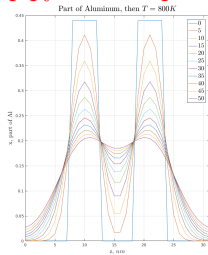
Зонная структура:

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

Моделирование термической деградации квантовой области

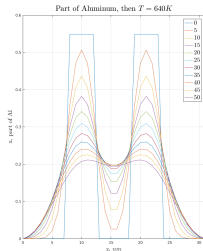
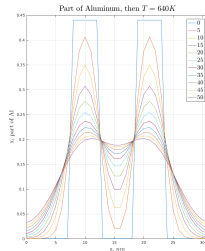
$N_D = n_i = 10^{12} \text{ м}^{-3}$, $T = 800\text{K}$:

Диффузионное расплытие профиля:

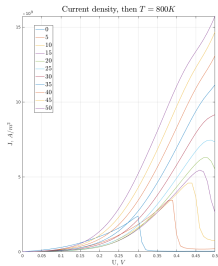
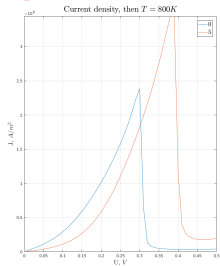


$N_D = 10^{18}$; $n_i = 10^{12} \text{ м}^{-3}$; $T = 650\text{K}$:

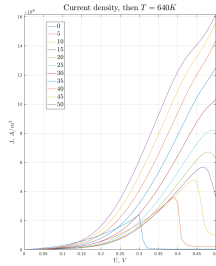
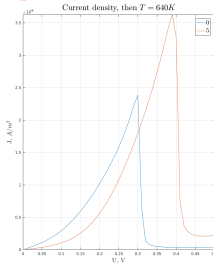
Диффузионное расплытие профиля:



Деградация ВАХ:



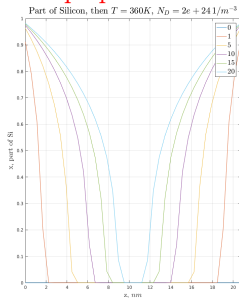
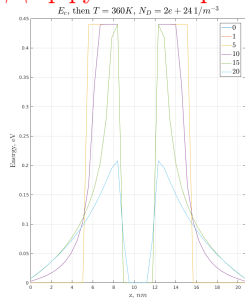
Деградация ВАХ:



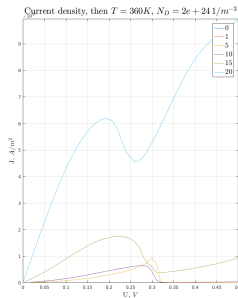
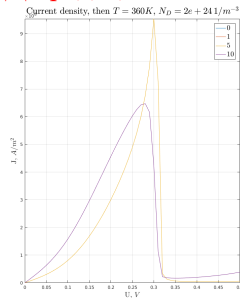
Моделирование термической деградации квантовой области с учетом приконтактных областей

$$N_D^{\text{Reserve}} = 10^{24} \text{ m}^{-3}; N_D = n_i = 10^{12} \text{ m}^{-3}, T = 800 \text{ K:}$$

Диффузионное расплытие профиля:



Деградация ВАХ:



Вывод:

Основная причина термической деградации ВАХ РТГС – диффузия донорной примеси из приконтактных областей.

Заключение

В ходе работы были:

- ▶ Исследована модель токопереноса через гетероструктуру с учетом самосогласованного потенциала;
- ▶ Исследовано влияние основных параметров РТГС на ВАХ;
- ▶ Исследована модель диффузионного распытия гетероструктур на основе GaAs под действием градиента концентрации при постоянной температуре;
- ▶ Исследованы различные граничные условия для дальнейшего моделирования диффузионного распытия систем;
- ▶ Получен алгоритм моделирования термической деградации ВАХ гетероструктур.

Спасибо за внимание!