

# Моделирование термической деградации AlGaAs гетероструктур

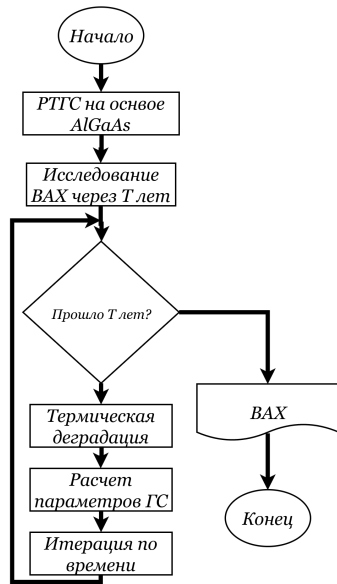
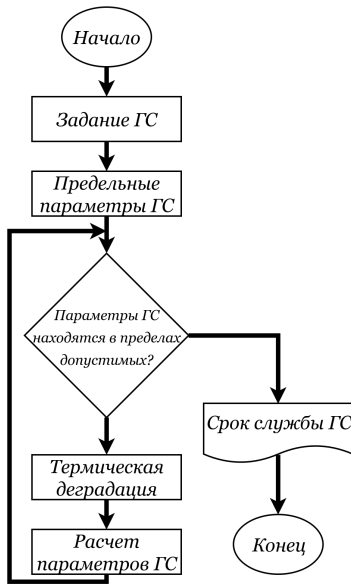
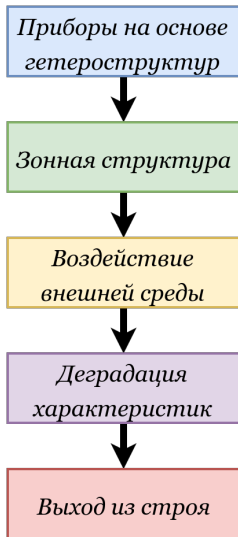
Выполнил: студент гр. РЛ6–82 Прохоров М.Д.

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:

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

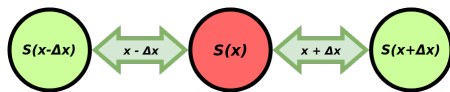
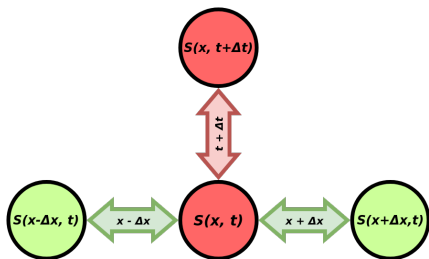
Конечно-разностная схема

Уравнения диффузии:

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

Уравнение Шредингера:

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

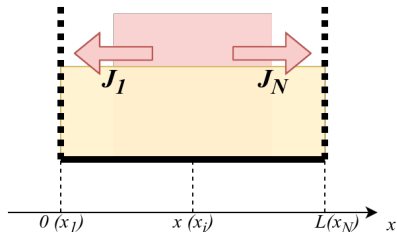


# Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии постоянен:

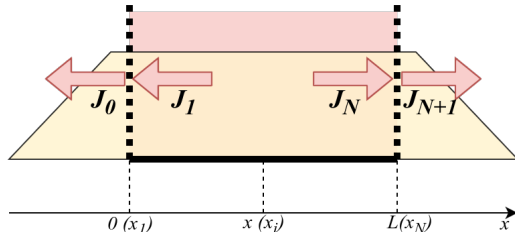
$$\left\{ \begin{array}{l} D = \text{Const}; \\ \frac{\delta}{\delta t} C = D \frac{\delta^2}{\delta x^2} C; \end{array} \right. \Rightarrow \frac{C_j^{i+1} - C_j^i}{\Delta t} = \frac{C_{j+1}^i - 2C_j^i + C_{j-1}^i}{\Delta x^2}, \text{ где } C_j^i = C(x_j, t_i).$$

«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

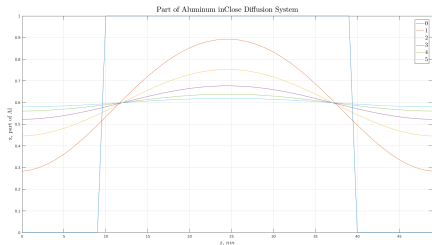
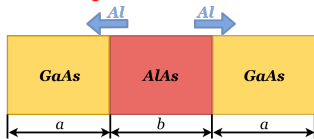
Диффузионное размытие  $i\text{-GaAs}/i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/i\text{-GaAs}$ :

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

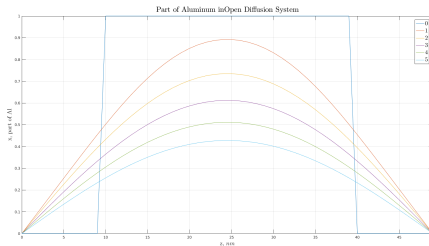
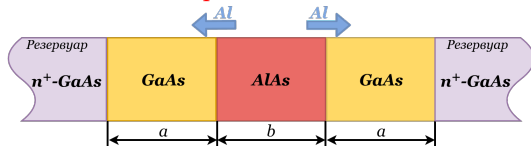
►  $a = 10$  нм;

►  $b = 30$  нм;

«Закрытая» система:



«Открытая» система:

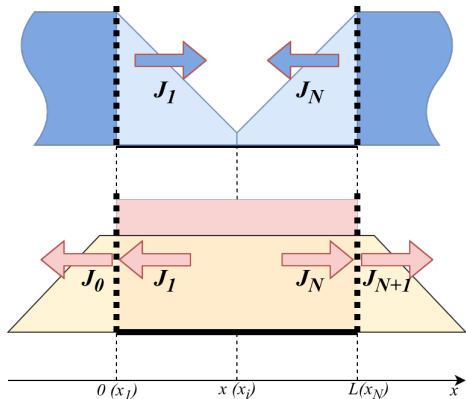


# Численное моделирование диффузии

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:



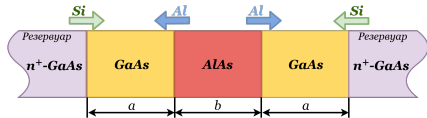
$$\left\{ \begin{array}{l} C_1^{i+1} = C_1^i; \\ C_j^{i+1} = \lambda_-^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i) C_j^i + \lambda_+^i C_{j+1}^i; \\ C_N^{i+1} = C_N^i; \\ \lambda_+^i = D_{j+}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}; \\ \lambda_-^i = D_{j-}^i \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \end{array} \right.$$

# Численное моделирование диффузии

Диффузионное размытие  $n^+$ -GaAs/i-GaAs/i-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/i-GaAs/ $n^+$ -GaAs:

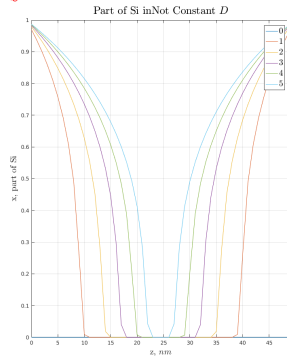
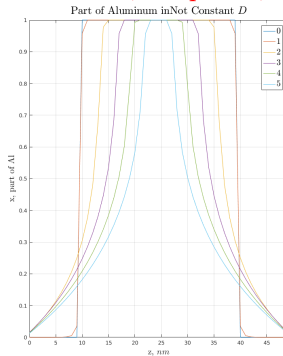
$$D_{Al,Si} = D_0 \exp \left[ - \frac{E_a}{k_B T} \right] \left( \frac{N_D}{n_i} \right)^3 = D_0 \exp \left[ - \frac{3.5}{k_B T} \right] \left( \frac{N_D}{n_i} \right)^3$$

«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:

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

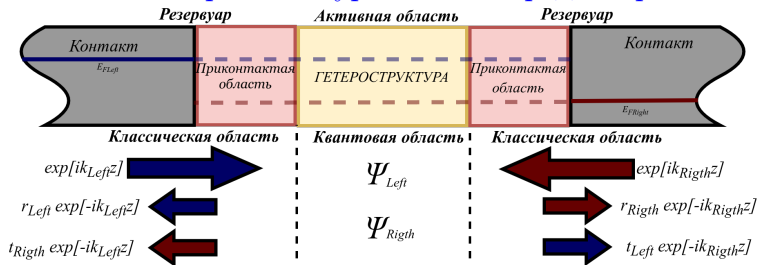
## Прозрачность ГС:

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

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

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

## Численное решение уравнение Шредингера:



## Конечно-разностная схема для внутренних точек:

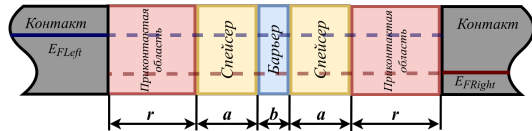
$$\psi_{i-1} \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} + \psi_i \left( \frac{2\Delta^2 m_{i+1}^*}{\hbar^2} (E - U_i) - \frac{m_{i+1}^*}{m_{i-1}^*} - 1 \right) + \psi_{i+1} = 0,$$

## Конечно-разностная схема для граничных точек:

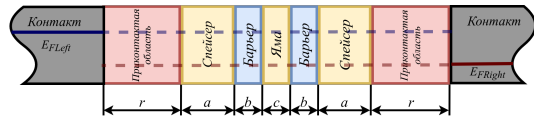
$$\begin{cases} (ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta; \\ \psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 0; \end{cases}$$

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

# Численное моделирование токопереноса



- $a = 5$  нм;
- $b = 5$  нм;
- $\Delta E_c = 1 \text{ эВ}$ .



- $a = 5$  нм;
- $b = 5$  нм;
- $c = 5$  нм;
- $\Delta E_c = 1 \text{ эВ}$ .

# Учет самосогласованного потенциала

Уравнение Пуассона:

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

Концентрация электронов в ГС:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{L,R} \int_{U_L(R)}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E - U_L(R)}} \ln \left( 1 + \exp \left[ - \frac{E - E_F - U_{la(ra)}}{k_B T} \right] \right); \\ N^{3D} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{E}}{e^{\frac{E - \mu}{k_B T}} + 1} dE; \end{array} \right.$$
$$N^A = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3};$$
$$N^{3D} = \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3};$$

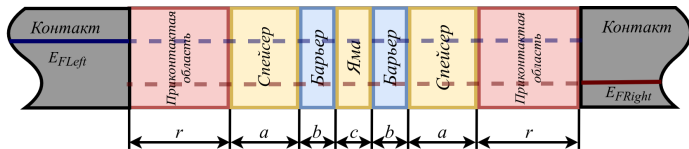
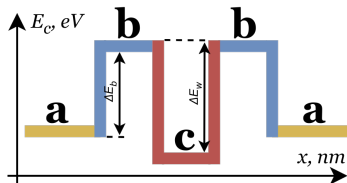
Конечно-разностная схема. Метод Гулеля:

$$n(z) = n_0 \exp \frac{V_S(z)}{V_{ref}}; \quad n_0 = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \exp \frac{E_F - E_c}{k_B T}; \quad V_{ref} = \frac{k_B T}{e};$$
$$n_{new} = n_{old} \exp \frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}}$$

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

# Исследование влияния параметров РТГС на ВАХ

Исследуемая модель:



Параметры ямы:

- ▶ Ширина ямы («с»):
  - ▶ 10 монослоев;
  - ▶ 7 монослоев;
  - ▶ 5 монослоев;
  - ▶ 3 монослоев;
- ▶ Глубина ямы («ΔE<sub>w</sub>»):
  - ▶ 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<sub>b</sub>»):
  - ▶ 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;

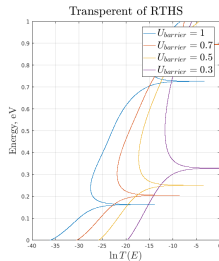
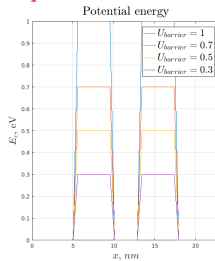
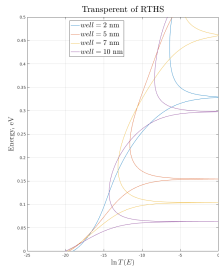
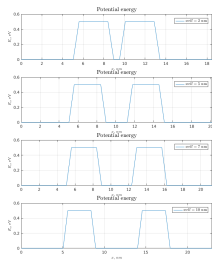
# Исследование влияния параметров ямы РТГС на ВАХ

Ширина ямы:

Прозрачность РТГС:

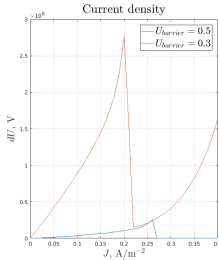
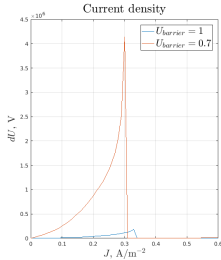
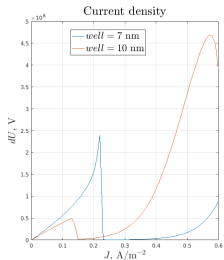
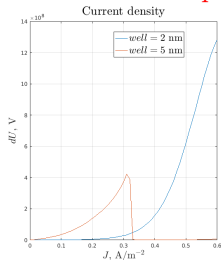
Глубина ямы:

Прозрачность РТГС:



Плотность тока через РТГС:

Плотность тока через РТГС:



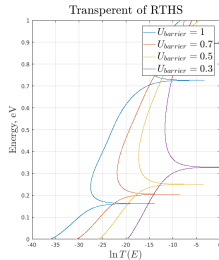
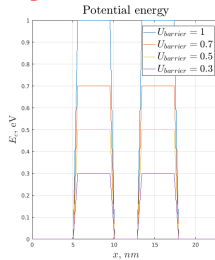
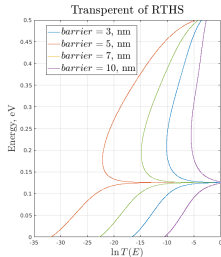
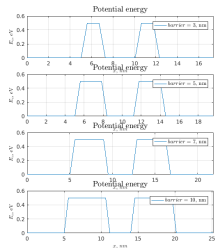
# Исследование влияния параметров барьеров РТГС на ВАХ

Ширина барьеров:

Прозрачность РТГС:

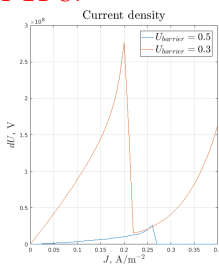
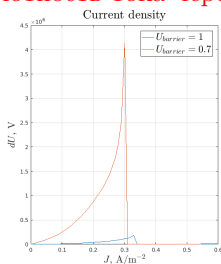
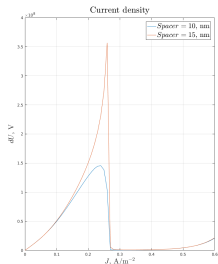
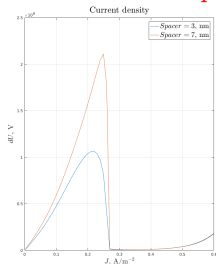
Высота барьеров:

Прозрачность РТГС:



Плотность тока через РТГС:

Плотность тока через РТГС:



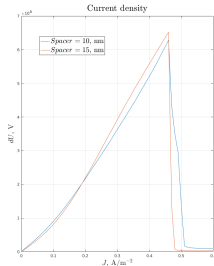
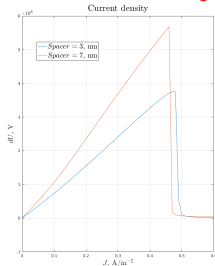
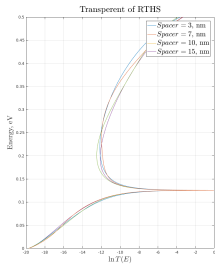
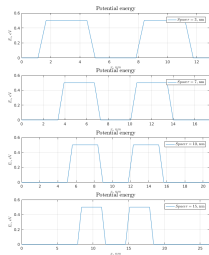
# Исследование влияния параметров спейсера РТГС на ВАХ

Ширина спейсера:

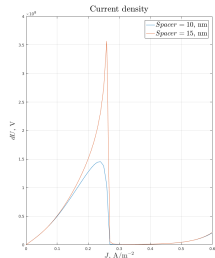
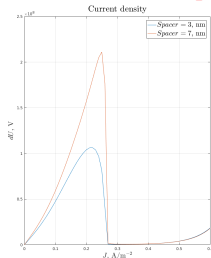
Прозрачность РТГС:

Ширина спейсера с учетом ССП:

Плотность тока через РТГС:



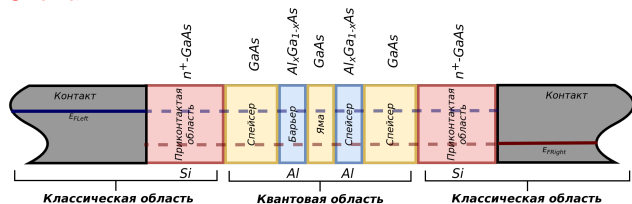
Плотность тока через РТГС:



# 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:

$p = 0.56$  нм;

Ширина запрещенной зоны:

$p = 0.56$  нм;

Эффективная масса в ЗП:

$p = 0.56$  нм;

Число атомов:

$p = 0.56$  нм;

Параметры модели:

Размеры:

$p = 0.56$  монослоев;

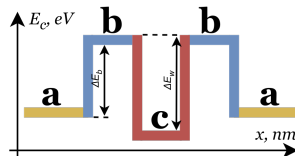
$p = 0.56$  монослоев;

$p = 0.56$  монослоев;

Зонная структура:

$\Delta E_c = \Delta E_w = 123x$ ;

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;

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

$D_0 = 0.2$  – предэкспоненциальный множитель;

$N_D$  – концентрация донорной примеси;

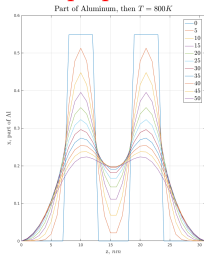
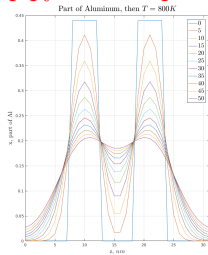
$n_i$  – концентрация собственных носителей заряда.



# Моделирование термической деградации квантовой области

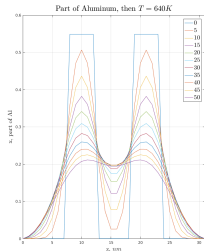
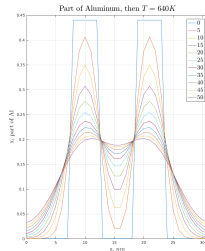
$N_D = n_i = 10^{12} \text{ м}^{-3}$ ,  $T = 800\text{K}$ :

Диффузионное расплытие профиля:

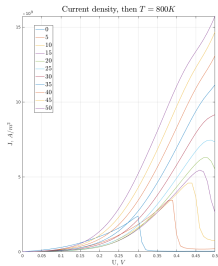
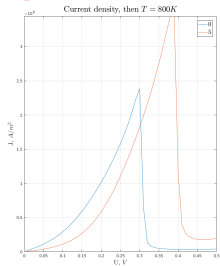


$N_D = 10^{18}$ ;  $n_i = 10^{12} \text{ м}^{-3}$ ;  $T = 650\text{K}$ :

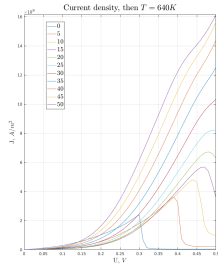
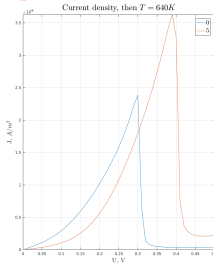
Диффузионное расплытие профиля:



Деградация ВАХ:



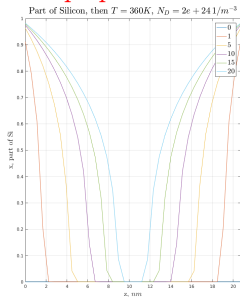
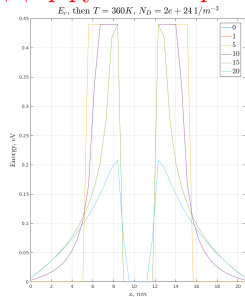
Деградация ВАХ:



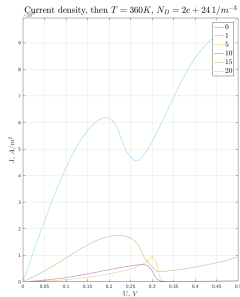
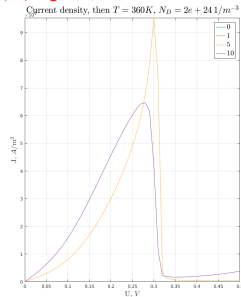
# Моделирование термической деградации квантовой области с учетом приконтактных областей

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

Диффузионное расплытие профиля:



Деградация ВАХ:



Вывод:

# Заклучение

Спасибо за внимание!