

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н. Э. БАУМАНА

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



ДОКЛАД
НА ТЕМУ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ПРИМЕРЕ РТГС

Содержание

| | |
|--|----|
| Введение | 4 |
| 1 Теоретическая часть | 5 |
| 1.1 Гетероструктура | 5 |
| 1.1.1 Зонная диаграмма гетероперехода | 5 |
| 1.1.2 Резонансно–туннельная гетероструктура | 7 |
| 1.1.3 Резонансно–туннельная гетероструктура на основе $Al_xGa_{1-x}As$ | 7 |
| 1.2 Деградация ГС | 9 |
| 1.3 Диффузия | 9 |
| 1.3.1 Законы Фика | 10 |
| 1.3.2 Механизмы диффузии | 10 |
| 1.3.3 Коэффициент диффузии | 10 |
| 1.3.4 Коэффициент диффузии Al , Si в $GaAs$ | 11 |
| 1.4 Метод конечных разностей для решения одномерного нестационарного уравнения диффузии | 12 |
| 1.4.1 Коэффициент диффузии не зависит от концентрации | 12 |
| 1.4.2 Коэффициент диффузии зависит от концентрации | 14 |
| 1.5 Токоперенос через ГС | 15 |
| 1.6 Метод конечных разностей для расчета токоперенос через ГС | 16 |
| 1.7 Влияние пространственного заряда | 17 |
| 1.8 Решение уравнение Шредингера-Пуассона | 18 |
| 2 Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ | 19 |
| 2.1 Исследование парметров ямы | 19 |
| 2.1.1 Исследование глубины ямы | 19 |
| 2.1.1.1 ВАХ РТГС | 19 |
| 2.1.1.2 Прозрачность РТГС | 19 |
| 2.1.2 Исследование ширины ямы | 19 |
| 2.1.2.1 ВАХ РТГС | 19 |
| 2.1.2.2 Прозрачность РТГС | 19 |
| 2.2 Исследование парметров барьеров | 20 |
| 2.2.1 Исследование высоты барьеров | 20 |

| | | |
|---------|--|----|
| 2.2.1.1 | ВАХ РТГС | 20 |
| 2.2.1.2 | Прозрачность РТГС | 20 |
| 2.2.2 | Исследование ширины барьеров | 20 |
| 2.2.2.1 | ВАХ РТГС | 20 |
| 2.2.2.2 | Прозрачность РТГС | 20 |
| 2.3 | Исследование параметров спейсеров | 21 |
| 2.3.1 | Исследование влияния размеров спейсера | 21 |
| 2.3.1.1 | ВАХ РТГС | 21 |
| 2.3.1.2 | Прозрачность РТГС | 21 |
| 2.3.1.3 | Концентрация электронов в РТГС | 21 |
| 3 | Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ | 22 |
| 3.1 | Диффузионное расплытие активной области | 22 |
| 3.2 | Диффузия легирующей примеси | 23 |

Введение

Цель работы:

- а) Изучение процессов деградации гетероструктур.

Задача работы:

- а) Получить модель описывающую процессы деградации в гетероструктурах.

1 Теоретическая часть

1.1 Гетероструктура

Гетероструктура — полупроводниковая структура с несколькими гетеропереходами (ГП).

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

Наиболее распространенные полупроводники для составления ГС:

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

1.1.1 Зонная диаграмма гетероперехода

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

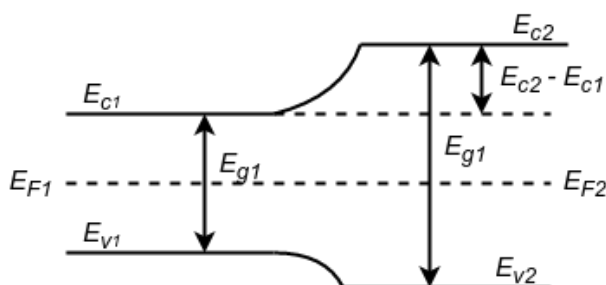


Рисунок 1.1 — Зонная диаграмма перехода между полупроводниками с различными E_g

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 непрямоугольной 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 $(E_{c2} - E_{c1}) U \approx 1.247 * x eV$.

1.1.2 Резонансно–туннельная гетероструктура

Резонансно–туннельная гетероструктура (РТГС) — это ГС, в которой области которой электронный газ (ЭГ) перестает быть трехмерным свободным ЭГ (3D ЭГ), а становится становится двумерным ЭГ (2D ЭГ).

Структурная схема РТГС представлена на рис.1.2

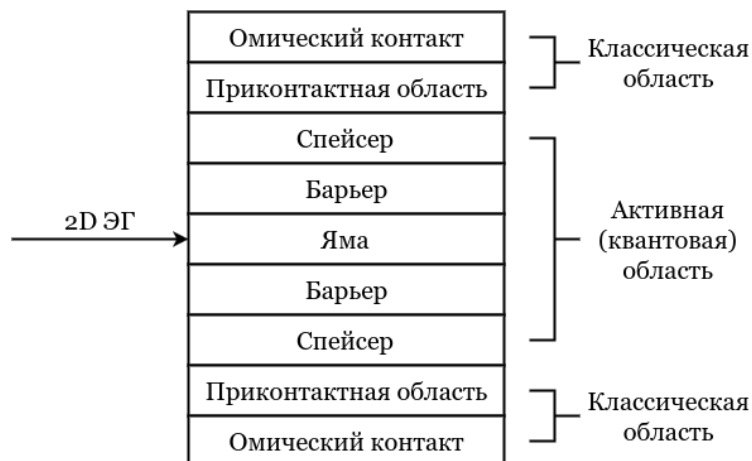


Рисунок 1.2 — Структурная схема устройства с РТГС

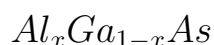
Омический контакт выполняет роль связи РТГС с электрической схемой. Величина сопротивления искажает форму ВАХ РТГС, чем оно меньше, тем лучше.

Приконтактная область снабжает РТГС основными носителями заряда. Область сильно легируется основными носителями заряда до вырожденного состояния. Размеры приконтактных областей подбираются так, чтобы концентрация основных носителей заряда приходила к равновесной на их концах.

Спейсеры изготавливаются из чистого полупроводника и предохраняют барьер и яму от проникновения туда легирующей примеси, так же спейсер препятствует накоплению заряда вблизи и внутри ямы.

Барьеры и яма формируют 2D ЭГ. Величина барьера и ямы влияют на положение резонансного уровня, прозрачность РТГС и т.д.

1.1.3 Резонансно-туннельная гетероструктура на основе



. РГТС на основе $Al_xGa_{1-x}As$ показана на рис.1.3

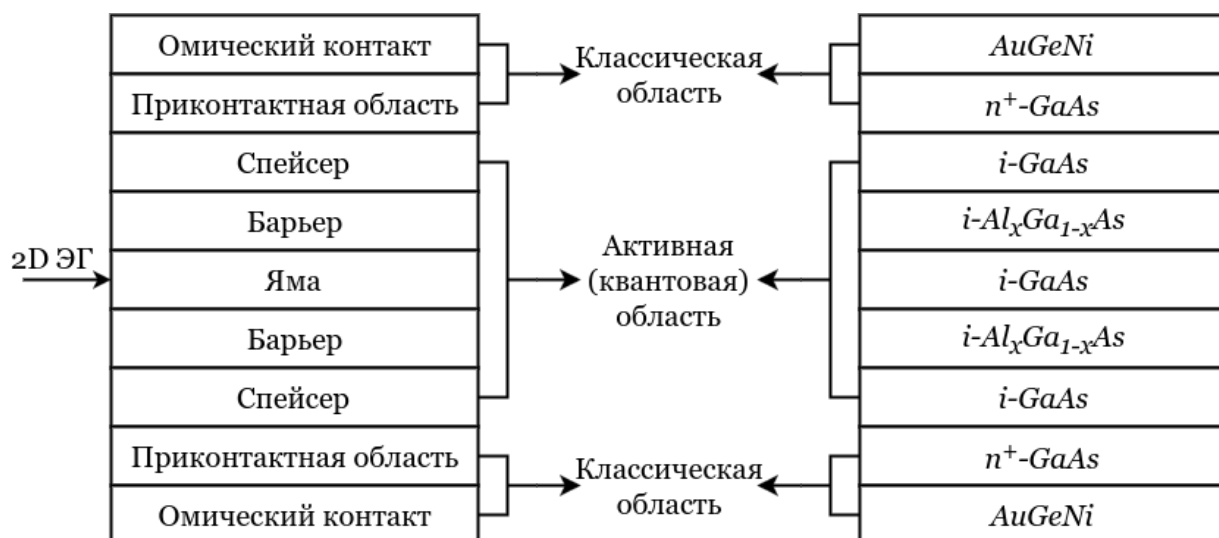


Рисунок 1.3 — Структурная схема устройства с РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

Зонная структура такой РТГС представлена на рис.1.4. Меняя процентное содержание Al в $Al_xGa_{1-x}As$, мы можем получать необходимую высоту барьеров.

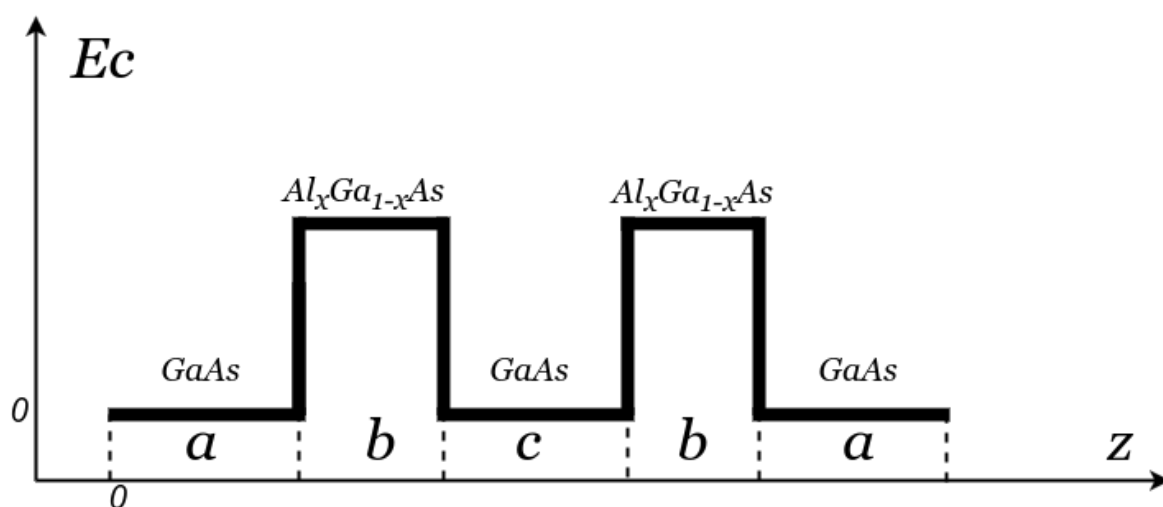


Рисунок 1.4 — Зонная структура РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

1.2 Деградация ГС

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

Изучая деградацию 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 ГС — диффузионное размытие ГП, вызванное:

- Градиентом температуры;
- Градиентом концентрации;
- Градиентом давления;
- и т.д...

Диффузионное размытие под действием градиента концентрации описывается с помощью законов Фика.

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 для решения 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

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.

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

Если коэффициенте диффузии (D) зависит от концентрации, 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:

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

1.5 Токоперенос через ГС

1.6 Метод конечных разностей для расчета токоперенос через ГС

1.7 Влияние пространственного заряда

1.8 Решение уравнение Шредингера-Пуассона

2 Исследование параметров РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

2.1 Исследование параметров ямы

2.1.1 Исследование глубины ямы

2.1.1.1 ВАХ РТГС

2.1.1.2 Прозрачность РТГС

2.1.2 Исследование ширины ямы

2.1.2.1 ВАХ РТГС

2.1.2.2 Прозрачность РТГС

2.2 Исследование параметров барьеров

2.2.1 Исследование высоты барьеров

2.2.1.1 ВАХ РТГС

2.2.1.2 Прозрачность РТГС

2.2.2 Исследование ширины барьеров

2.2.2.1 ВАХ РТГС

2.2.2.2 Прозрачность РТГС

2.3 Исследование параметров спейсеров

2.3.1 Исследование влияния размеров спейсера

2.3.1.1 ВАХ РТГС

2.3.1.2 Прозрачность РТГС

2.3.1.3 Концентрация электронов в РТГС

3 Моделирование деградации РТГС на основе $Al_xGa_{1-x}As$

3.1 Диффузионное расплытие активной области

3.2 Диффузия легирующей примеси