

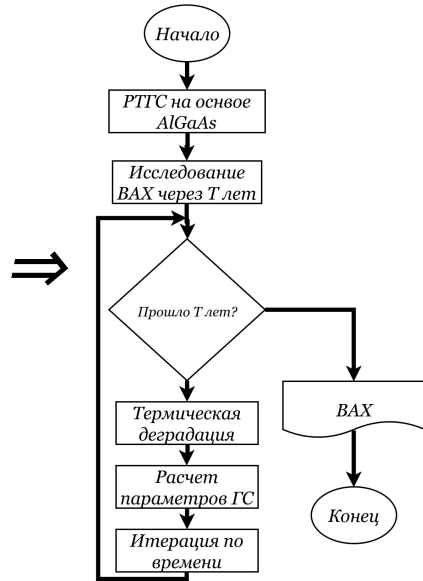
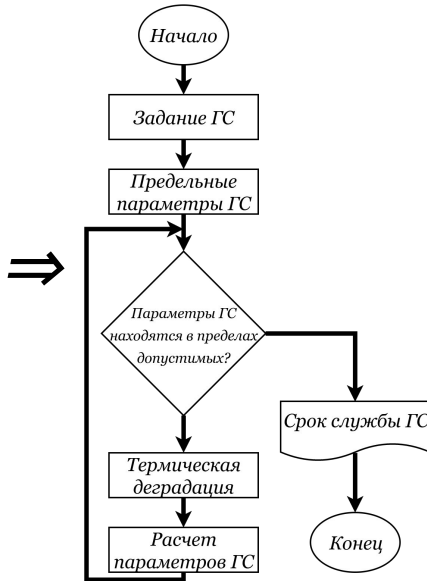
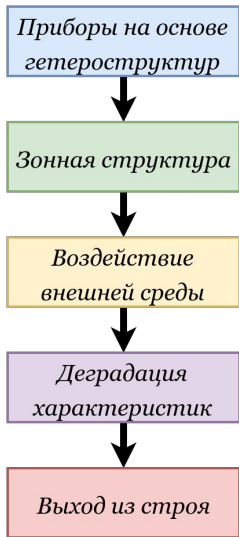
# Моделирование термической деградации AlGaAs гетероструктур

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:      Аппроксимация второй производной:

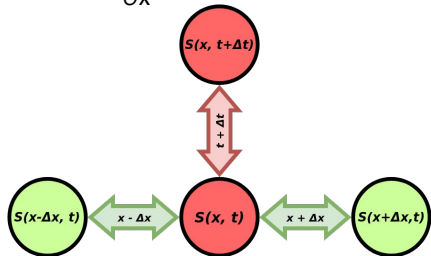
$$\frac{d}{dx} S(x_0) \approx \frac{S(x_0 + \Delta x) - S(x_0)}{\Delta x};$$

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

Конечно-разностная схема

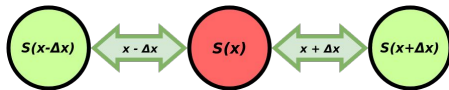
Уравнения диффузии:

$$\frac{\delta C}{\delta t} = D \frac{\delta^2 C}{\delta x^2};$$



Уравнение Шредингера:

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



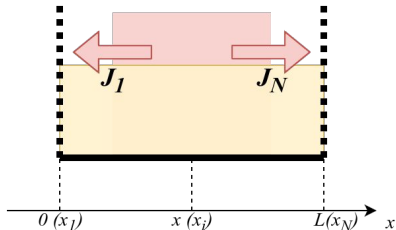
# Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии

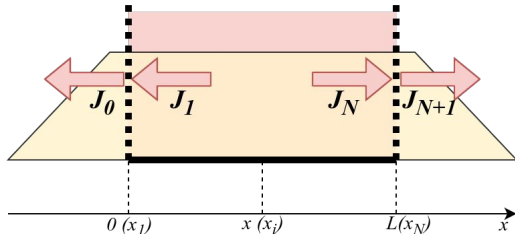
постоянен:

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

«Закрыва́тая» система:



«Откры́тая» система:



$$\begin{aligned} \square C_1^{i+1} &= (1 - \lambda)C_1^i + \lambda C_2^i \\ \square C_j^{i+1} &= \lambda C_{j-1}^i + (1 - 2\lambda)C_j^i + \lambda C_{j+1}^i \\ \square C_N^{i+1} &= (1 - \lambda)C_N^i + \lambda C_{N-1}^i \\ \square \lambda &= D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

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

# Численное моделирование диффузии

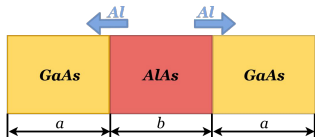
Диффузионное размытие  $i\text{-GaAs} / i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / i\text{-GaAs}$ :

$$D_{\text{Al}} = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) = D_0 \exp\left(-\frac{3.5}{kT}\right)$$

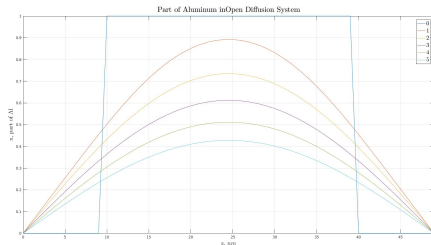
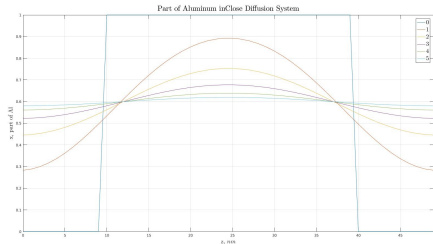
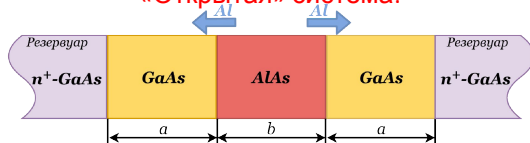
)  $a = 10$  нм;

)  $b = 30$  нм;

«Закрытая» система:



«Открытая» система:



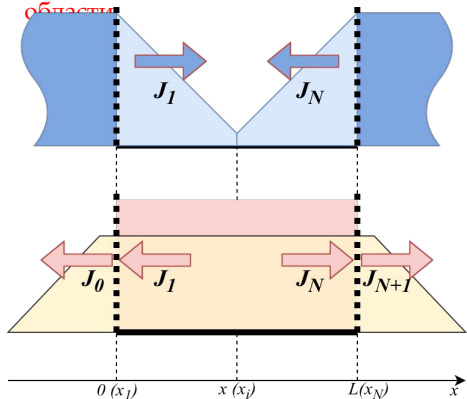
# Численное моделирование диффузии

Коэффициент диффузии зависит от концентрации:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \text{const} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}; \quad \Rightarrow \frac{C_{j+1}^i - C_j^i}{\Delta t} = \frac{D_{j+1/2}^i \frac{C_j^i - C_{j-1}^i}{\Delta x} - D_{j-1/2}^i \frac{C_j^i - C_{j+1}^i}{\Delta x}}{\Delta x}$$

$$D_{j+1/2}^i = \frac{D_{j+1}^i + D_j^i}{2} = D_j^i; \quad C_j^i = C(x_j, t_i)$$

«Открытая» система с проникновением примеси из границ исследуемой области



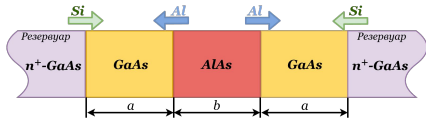
$$\begin{aligned} & C_{i+1}^i = C_i^i; \\ & C_j^{i+1} = \lambda_+^i C_{j-1}^i + (1 - \lambda_+^i - \lambda_-^i) C_j^i + \lambda_-^i C_{j+1}^i; \\ & C_N^{i+1} = C_N^i; \\ & \lambda_+^i = \frac{D_{j+1/2}^i \Delta t}{x^2}; \\ & \lambda_-^i = \frac{D_{j-1/2}^i \Delta t}{x^2}. \end{aligned}$$

# Численное моделирование диффузии

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

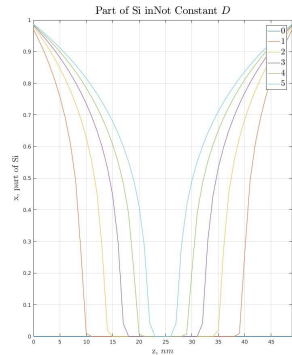
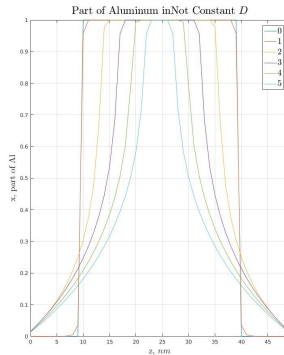
$$D_{Al,Si} = D_0 \exp \left( - \frac{E_a}{k_B T} - \frac{N_D}{n_i} \right)^3 = D_0 \exp \left( - \frac{3.5}{k_B T} - \frac{N_D}{n_i} \right)^3$$

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



)  $a = 10$  нм;

)  $b = 30$  нм;





# Численное моделирование токопереноса

## Формула Цу-Есаки:

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

## Функция снабжения:

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

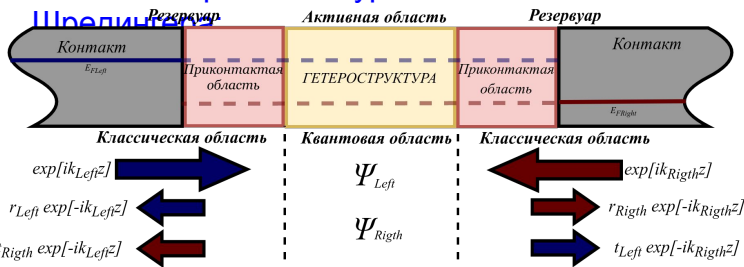
## Прозрачность ГС:

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

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

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

## Численное решение уравнение Шредингера



## Конечно-разностная схема для внутренних точек:

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

## Конечно-разностная схема для граничных точек:

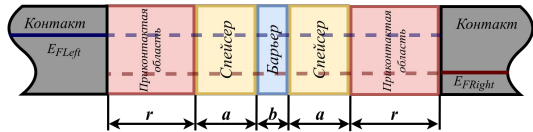
$$(ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta;$$

$$\psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 0;$$

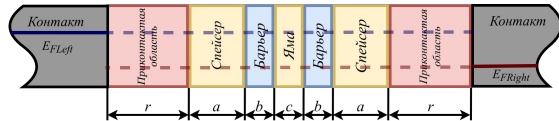
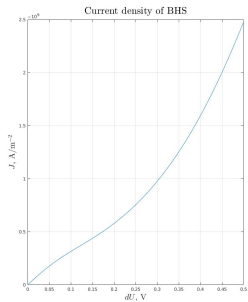
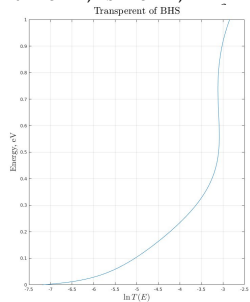
$$(ik_L - 1)\psi_1 + \psi_2 = 0\Delta;$$

$$\psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 2ik_R \Delta;$$

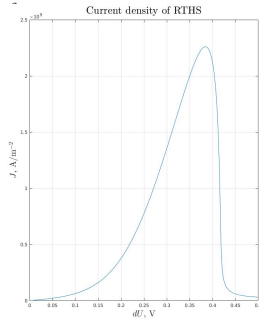
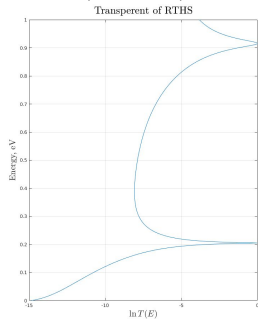
# Численное моделирование токопереноса



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



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



# Учет самосогласованного потенциала

Уравнение  
Пуассона:

$$\frac{d}{dx} \epsilon(x) \Psi_s = \frac{d}{dx} \frac{e}{\epsilon_0} [n(x) - N_D(x)];$$

Метод Гумеля:

$$n(x) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 k^3} \exp \frac{E_F(x) - E_c(x) + eV_s(x)}{k_B T} = n_0(x) \exp \frac{V_s(x)}{V_{ref}}$$

$$V_{ref} = \frac{k_B T e}{\epsilon_0}; n_0(x) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 k^3} \exp \frac{E_F(x) - E_c(x)}{k_B T};$$

$$n_{new} = n_{old} \exp \frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}};$$

Конечно-разностная  
схема:

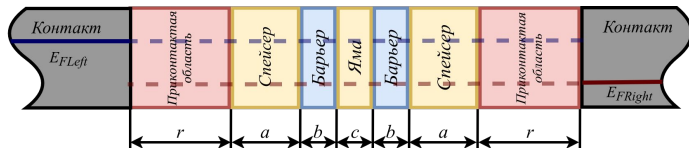
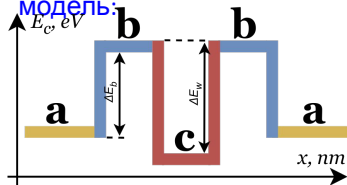
$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \Psi_{new} = \frac{e}{\epsilon_0} n_{old} \exp \frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}} - N_D(z);$$

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \Psi_{new} - n_{old} = \frac{e}{\epsilon_0} \frac{V_{new} - V_{old}}{V_{ref}} - N_D(z);$$



# Исследование влияния параметров РТГС на ВАХ

Исследуемая  
модель:



## Параметры ямы:

) Ширина ямы («с»):

- ) 10 монослоев;
- ) 7 монослоев;
- ) 5 монослоев;
- ) 3 монослоев;

) Глубина ямы (« $\Delta E_w$ »):

- ) 0.3 eV;
- ) 0.7 eV;
- ) 1 eV;

## Параметры барьеров:

) Ширина барьеров («b»):

- ) 10 монослоев;
- ) 7 монослоев;
- ) 5 монослоев;
- ) 3 монослоев;

) Высота барьера (« $\Delta E_b$ »):

- ) 0.3 eV;
- ) 0.5 eV;

## Параметры спейсеров:

) Ширина спейсера («a»):

- ) 10 монослоев;
- ) 7 монослоев;
- ) 5 монослоев;
- ) 3 монослоев;

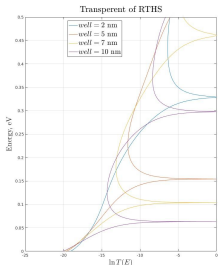
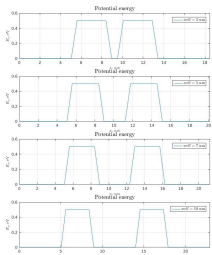
) Ширина спейсера с ССП:

- ) 10 монослоев;
- ) 7 монослоев;
- ) 5 монослоев;

# Исследование влияния параметров ямы РТГС на ВАХ

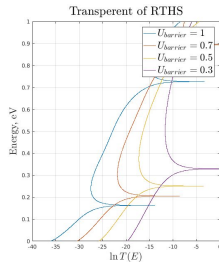
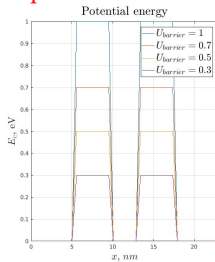
Ширина ямы:

Прозрачность РТГС:

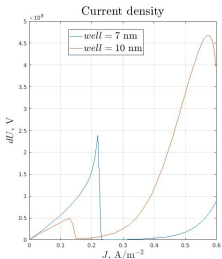
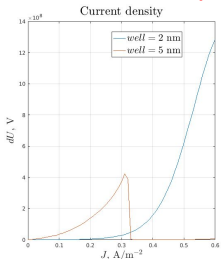


Глубина ямы:

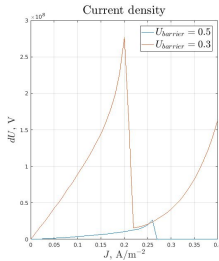
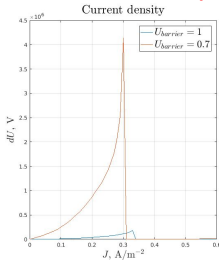
Прозрачность РТГС:



Плотность тока через РТГС:



Плотность тока через РТГС:



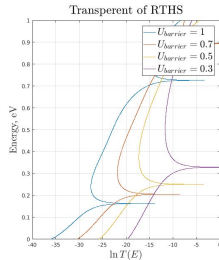
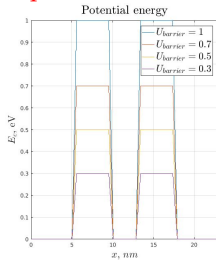
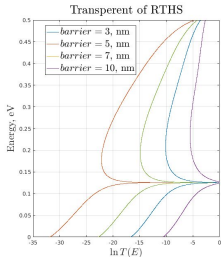
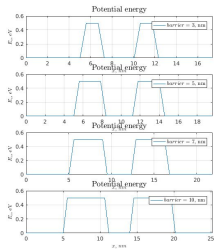
# Исследование влияния параметров барьеров РТГС на ВАХ

Ширина барьеров:

Прозрачность РТГС:

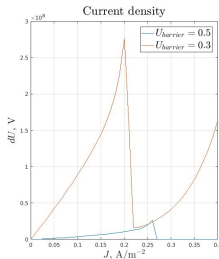
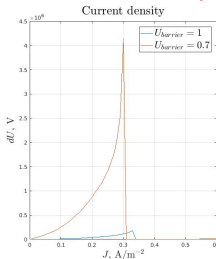
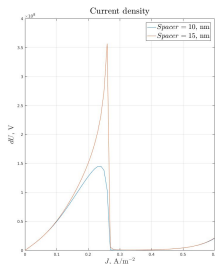
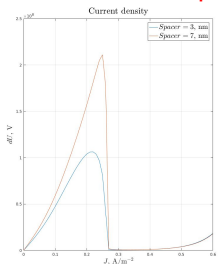
Высота барьеров:

Прозрачность РТГС:



Плотность тока через РТГС:

Плотность тока через РТГС:



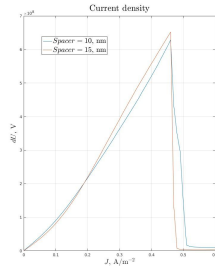
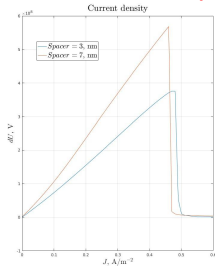
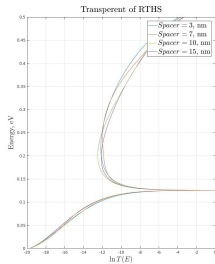
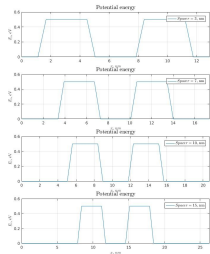
# Исследование влияния параметров спейсера РТГС на ВАХ

Ширина спейсера:

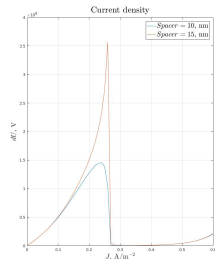
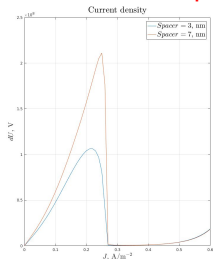
Прозрачность РТГС:

Ширина спейсера с учетом ССП:

Плотность тока через РТГС:



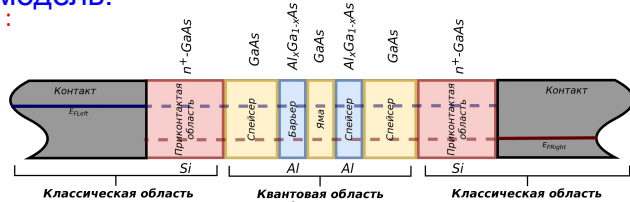
Плотность тока через РТГС:



# Моделирование термической деградации ВАХ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ РТГС

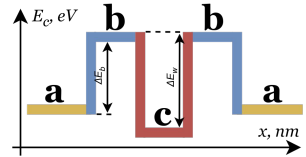
Исследуемая

Схема  
модель:



Структура:  $n^+\text{-GaAs}/i\text{-GaAs}/i\text{-Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/i\text{-GaAs}/i\text{-Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/i\text{-GaAs}/n^+\text{-GaAs}$

Зонная структура:



Параметры диффузии:

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ :

Период решетки (нм):

$$\Delta x = 0.56533 + 0.00078x \approx 0.57;$$

Ширина запрещенной зоны (эВ):

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

Эффективная масса в ЗП:

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

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:

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

$$D_{\text{Al,Si}} = D_0 \exp \left( - \frac{E_a}{k_B T} \right) \cdot N_D$$

$E_a = 3.5 \text{ эВ}$  - 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.

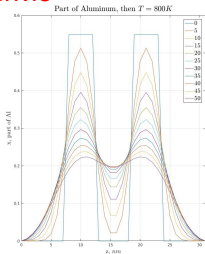
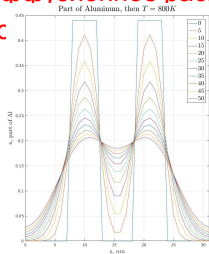


# Моделирование термической деградации квантовой области

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

Диффузионное расплытие

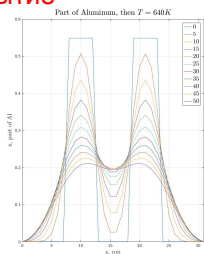
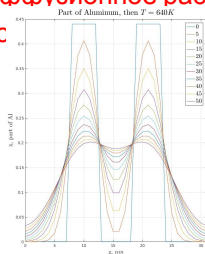
прс



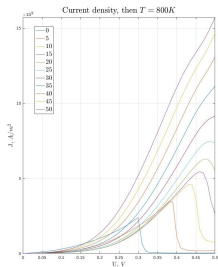
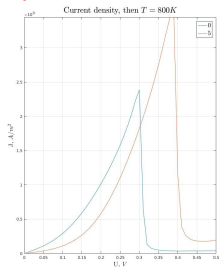
$N_D = 10^{18}$ ;  $n_i = 10^{12} \text{m}^{-3}$ ;  $T = 650\text{K}$ :

Диффузионное расплытие

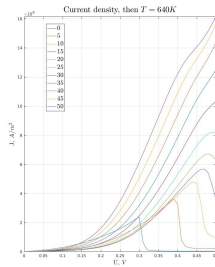
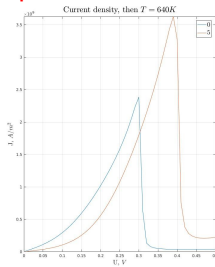
прс



Деградация ВАХ:

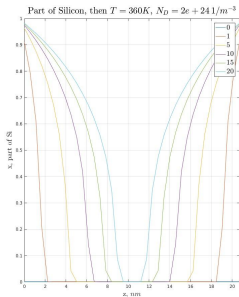
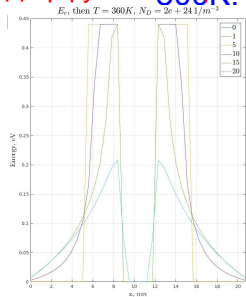


Деградация ВАХ:

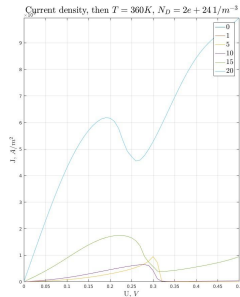
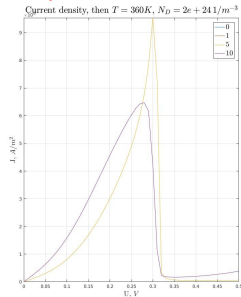


# Моделирование термической деградации квантовой области с учетом приконтактных областей

$N_{\text{Reserve}} = 10^{24} \text{ m}^{-3}$ ;  $N_D = 10^{12} \text{ m}^{-3}$ ;  $n_i = 10^{10} \text{ m}^{-3}$ ,  $T = 300\text{K}$ .  
 Диффузия и распыление



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 расплыва гетероструктур на основе GaAs под действием градиента концентрации при постоянной температуре;
- ) Исследованы различные граничные условия для дальнейшего моделирования диффузионного расплыва систем;
- ) Получен алгоритм моделирования термической деградации ВАХ гетероструктур.

Спасибо за внимание!