

Численный расчёт концентрационных профилей в рНЕМТ гетероструктурах на основе GaAs с резко неоднородным профилем легирования

С.М. Соболев, Г.Е. Яковлев, В.И. Зубков

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

Аннотация: В данной работе представлены результаты численного расчёта самосогласованной системы уравнений Шрёдингера и Пуассона в образцах рНЕМТ гетероструктур на основе GaAs с резко неоднородным профилем легирования. Проведен анализ полученных в результате расчёта концентрационных профилей и их сравнение с данными ECV измерений. Выполнена оценка и рассмотрены факторы влияющие на плотность ДЭГ в канале рНЕМТ структур.

Ключевые слова: рНЕМТ, квантовая яма, InGaAs/GaAs, профиль концентрации, основные носители заряда, численный расчёт, ECV измерения

1. Введение

В настоящее время благодаря хорошо отработанной технологии полупроводниковые гетероструктуры на основе твёрдых растворов GaAs широко применяются в различных областях СВЧ-электроники. Хорошим примером такого использования являются транзисторы с высокой подвижностью электронов (НЕМТ). Исключительной особенностью НЕМТ приборов является формируемый в квантово-размерной области двумерный электронный газ (ДЭГ), плотность которого определяет такие важные рабочие параметры, как предельную частоту работы, рабочий ток и выходную мощность прибора [1, 2].

В связи с растущими требованиями по точности и воспроизводимости рабочих характеристик, а также постоянным усложнением современных полупроводниковых приборов важное внимание отводится тщательному соблюдению технологического маршрута изготовления лежащих в их основе гетероструктур. В особенности это касается диагностики таких технологических параметров, как последовательность и состав активных слоёв, их толщины и концентрации легирующей примеси. Последнее чрезвычайно важно, поскольку применение резко неоднородного распределения концентрации легирующей примеси позволяет значительно улучшить рабочие характеристики НЕМТ приборов [3].

К наиболее распространённым методам диагностики отмеченных электрофизических параметров, выращиваемых гетероструктур можно отнести вольт-фарадные (CV) измерения, в частности модификацию классического CV метода - электрохимическое вольт-фарадное профилирование (ECV). Следует заметить, что ввиду технических сложностей и потенциальных временных и материальных издержек, связанных с измерениями, оптимизация параметров гетероструктур исключительно за счёт диагностики не представляется целесообразной, поэтому параллельно этапам диагностики рабочих характеристик, предлагается проведение моделирования. Совместное использование результатов численных расчётов и данных ECV измерений позволяет получить необходимую информацию о распределении концентрации основных носителей заряда (ОНЗ) в исследуемых структурах, что позволяет спрогнозировать и оптимизировать рабочие характеристики приборов.

2. Исследуемые образцы и метод численного расчёта

В данной работе исследовались две группы псевдоморфных НЕМТ (рНЕМТ) структур с квантовой ямой (КЯ) GaAs/In_{0.22}Ga_{0.78}As/GaAs шириной от 12 до 14 нм. Исследуемые образцы были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии на полуизолирующих подложках GaAs в АО «Светлана-Рост», Санкт-Петербург.

Первая серия образцов представляла собой односторонне-легированные рНЕМТ гетероструктуры, предназначенные для работы в малошумящих усилителях частотного диапазона 4-18 ГГц. На рисунке 1 (образцы № 1, 2) схематически представлены последовательности слоёв исследуемых рНЕМТ образцов. Структуры отличались составом и толщинами активных слоёв, а также уровнем легирования донорных слоёв. Последние составляли соответственно $2.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и $3.8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

GaAs	85Å	GaAs	80Å	GaAs	85Å
Al _{0.9} Ga _{0.1} As	20Å	Al _{0.7} Ga _{0.3} As	25Å	Al _{0.9} Ga _{0.1} As	25Å
GaAs	50Å	GaAs	50Å	GaAs	50Å
Al _{0.22} Ga _{0.78} As	220Å	Al _{0.22} Ga _{0.78} As	100Å	Al _{0.22} Ga _{0.78} As	220Å
Al _{0.22} Ga _{0.78} As	130Å	Al _{0.22} Ga _{0.78} As	125Å	Al _{0.22} Ga _{0.78} As	130Å
Al _{0.22} Ga _{0.78} As	20Å	Al _{0.22} Ga _{0.78} As	30Å	Al _{0.22} Ga _{0.78} As	20Å
GaAs	15Å	In _{0.22} Ga _{0.78} As	140Å	GaAs	15Å
In _{0.22} Ga _{0.78} As	120Å	GaAs	8000Å	In _{0.22} Ga _{0.78} As	120Å
GaAs	8000Å	GaAs подложка		GaAs	30Å
GaAs подложка				Al _{0.22} Ga _{0.78} As	20Å
Образец № 1		Образец № 2		Al _{0.22} Ga _{0.78} As	60Å
				Al _{0.22} Ga _{0.78} As	1000Å
				Al _{0.22} Ga _{0.78} As/GaAs	20/20Å
				GaAs	8000Å
				GaAs подложка	
				Образец № 3	

Рисунок 1. Схематическое изображение последовательности слоёв образцов односторонне- и двусторонне-легированных рНЕМТ гетероструктур

Образец второй группы представлен двусторонне-легированной рНЕМТ гетероструктурой (образец № 3), предназначенной для мощных транзисторных ключей. Концентрация легирующей примеси в донорных слоях образца составляла $3.1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и $1.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Для расчёта концентрационных профилей в данной работе использовался алгоритм самосогласованного решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона, описанный в [4]. Для реализации алгоритма численного решения данной системы уравнений нами был применён программный пакет «1D Poisson», который предназначен для численного расчёта системы уравнений (1) и (2) в «квантовом ящике» с помощью метода конечных разностей (МКР) в матричном виде [5].

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \right) \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\varepsilon(x) \frac{d}{dx} \right) \varphi(x) = \frac{-q[N_D(x) - n(x)]}{\varepsilon_0} \quad (2)$$

В МКР производится разбиение одномерного пространства, содержащего последовательность активных слоёв структуры, на ряд узлов сетки с определённым шагом дискретизации, а производные заменяются разностными отношениями. Ввиду наличия в исследуемых структурах гетеропереходов целесообразно применять разбиение пространства на сетку с переменным шагом. При таком разбиении области, содержащие гетеропереходы имеют более густую сетку, по сравнению с другими областями структуры, что позволяет эффективно распределить вычислительную

мощность алгоритма численного расчёта.

3. Результаты численного расчёта и их сравнение с экспериментальными данными

На рисунке 3 представлено сравнение рассчитанных концентрационных профилей с данными ECV измерений для односторонне-легированных рНЕМТ образцов. Подробное описание техники ECV измерений неоднородно легированных рНЕМТ структур представлено в [6]. Как видно из рисунка результаты моделирования находятся в хорошей корреляции с данными ECV измерений. Отличие экспериментальных данных от численного расчёта объясняется двумя основными причинами. Во-первых, численный расчёт проводился в соответствии со спецификацией образцов, тогда как их действительные технологические параметры заранее неизвестны и определяются совокупностью технологических процессов роста гетроструктур. Во-вторых, ECV измерения проводятся при обратном напряжении на образце в отличие от численного расчёта, где система представлена в состоянии термодинамического равновесия ($U_{\text{внешн.}} = 0$).

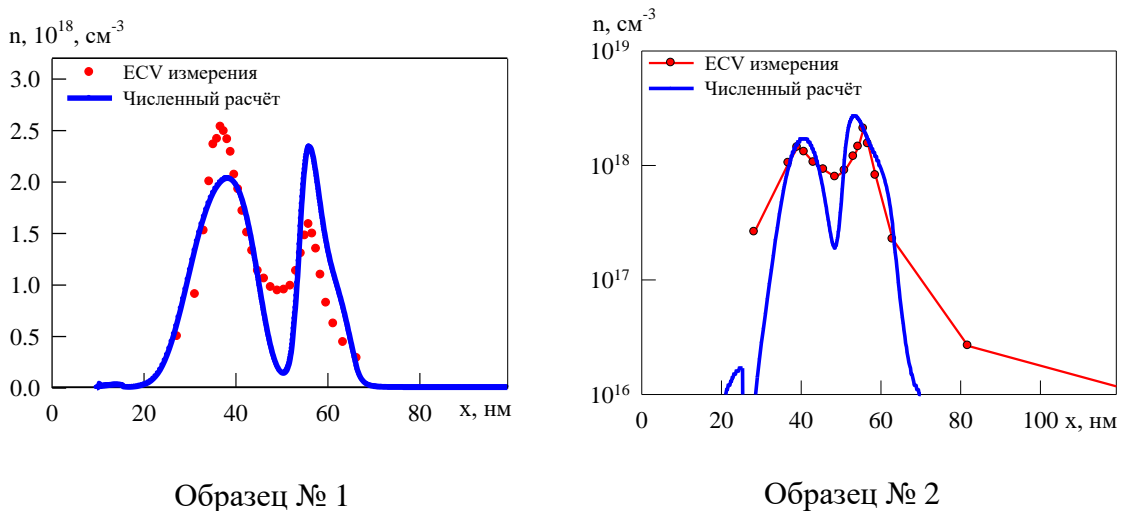


Рисунок 2. Профили распределения концентрации ОНЗ односторонне-легированных образцов рНЕМТ структур

На концентрационном профиле двусторонне-легированного рНЕМТ образца (рисунок 3(а)) наблюдается раздвоение максимума концентрации от КЯ в виду наличия двух донорных слоёв в образце, приводящих к изгибу профиля потенциала КЯ. Ранее полученные результаты ECV измерений для данной структуры показали, что указанное раздвоение носит исключительно расчётный характер и ввиду дебаевского размытия не наблюдается в экспериментальном профиле. Максимальное значение плотности двумерного электронного газа (ДЭГ) в канале образца составило $3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

Для оптимизации дизайна двусторонне-легированной рНЕМТ структуры, направленного на увеличение плотности ДЭГ в канале, была предложена идея уменьшения толщины верхних слоёв и последующего расчёта полученной структуры, изложенная в [6]. На рисунке 4(б) представлены результаты численного расчёта профилей распределения концентрации для структуры с различной толщиной верхних слоёв. В отличие от данных ECV измерений [6], где имеет место экстремум на зависимости плотности ДЭГ в канале от величины утонения верхних слоёв, расчет показывает, что последовательное уменьшение толщины градиентно-легированного AlGaAs слоя приводит к постепенному снижению интенсивности концентрационных пиков от донорного слоя и КЯ.

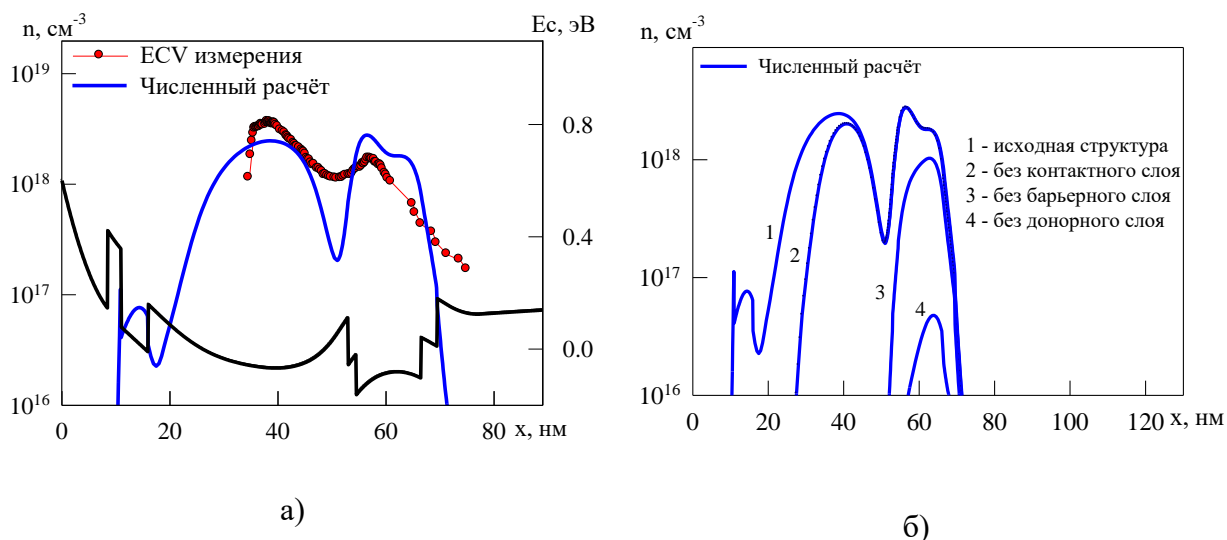


Рисунок 4. Профили распределения концентрации ОНЗ двусторонне-легированного образца рНЕМТ структуры

4. Заключение

Численный расчёт самосогласованной системы уравнений Шрёдингера и Пуассона использован для получения профилей распределения концентрации ОНЗ в образцах рНЕМТ структур.

В односторонне-легированных рНЕМТ образцах положение концентрационных пиков согласуются с результатами ECV профилирования, а имеющееся несовпадение по величине пиков в первом образце объясняется в основном отличием спецификационных данных по уровню легирования активных слоёв от реальных параметров структуры, а также не учитываемыми в алгоритме расчёта отклонениями от термодинамического равновесия, в частности за счёт диффузии и прикладываемого обратного смещения к структуре.

Предложенная идея утонения верхних слоёв двусторонне-легированного рНЕМТ образца и последующего численного расчёта полученной структуры частично совпадает с результатами ECV измерений. В отличие от данных ECV, где имеет место экстремум на зависимости плотности ДЭГ в канале от величины утонения верхних слоёв, расчет показывает, что последовательное уменьшение толщины градиентно-легированного AlGaAs слоя приводит к постепенному снижению интенсивности концентрационных пиков от донорного слоя и КЯ.

На основании полученных результатов можно сделать вывод о том, что метод ECV профилирования совместно с численным расчётом системы уравнений Шрёдингера и Пуассона является эффективным методом диагностики и позволяет получить необходимую информацию о распределении концентрации ОНЗ в рНЕМТ гетероструктурах на GaAs.

Список литературы

1. Mimura T. Development of High Electron Mobility Transistor // Japanese Journal of Applied Physics. — 2005. — Vol. 44. — P. 8263–8268
2. Баранов, И.А. Характеристики деградации монолитно-интегральных схем на GaAs-гетероструктурах при высоких температурах канала рНЕМТ / И.А. Баранов, [и др.] // СВЧ-техника. — 2010. — Т. 1, № 1. — С. 44–53

3. Фролов, Д.С. Техника электрохимического вольт-фарадного профилирования сильно легированных структур с резким профилем распределения примеси / Д.С. Фролов, [и др.] // ФТП. — 2019. — Т. 53, № 2. — С. 281–286
4. Зубков В.И. Диагностика гетероструктур с квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ методом вольт-фарадных характеристик: разрывы зон, уровни квантования, волновые функции // ФТП. — 2007. — Т. 41, № 3. — С. 331–337.
5. Snider, G. L. A self-consistent solution of Schrodinger-Poisson equations using a nonuniform mesh / G. L. Snider, [at al.] // J. Appl. Phys. — 1990. — Vol. 68 — № 8. — P. 4071-4076
6. Яковлев, Г. Е. Особенности электрохимического вольт-фарадного профилирования арсенид-галлиевых светоизлучающих и рНЕМТ-структур с квантово-размерными областями / Г.Е. Яковлев, [и др.] // ФТП. — 2018. — Т. 52, № 8. — С. 873–880