УДК 621.3.049.77

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ОМИЧЕСКИХ КОНТАКТОВ К КВАНТОВЫМ ОБЛАСТЯМ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР

[1,2]Рындин Е.А., [3]Осовский А.В.

[1]ФГБУН «Южный научный центр Российской академии наук», Ростов-на-Дону, e-mail: rynenator@gmail.com;
[2]ФГАОУ ВПО «Южный федеральный университет», Таганрог;
[3]ФГОУ ВПО «Астраханский государственный университет», Астрахань, e-mail: a_osovskiy@mail.ru

Разработан ряд полупроводниковых приборов, характеризующихся быстродействием, не ограниченным временем пролета электронами активных областей (каналов) наноструктур. В основу функционирования приборов данного класса положен принцип управляемой электрическим полем передислокации максимума амплитуды волновых функций электронов в системе туннельно-связанных квантовых ям, разделенных туннельными гетеробарьерами. Разработана численная модель и пакет прикладных программ моделирования диффузии легирующих примесей в гетероструктурах GaAs/AlGaAs с целью предварительной оптимизации параметров технологического процесса формирования омических контактов к туннельно-связанным квантовым областям. Проведен анализ результатов численного моделирования. Получены оценки минимальных расстояний между нанесенными на поверхность туннельно-связанной наноструктуры локальными источниками легирующих примесей AuGe и AuZn в зависимости от времени и температуры формирования областей омических контактов.

Ключевые слова: омические контакты, туннельно-связанные квантовые области, GaAs/AlGaAs-наногетероструктуры

NUMERICAL MODEL OF TECHNOLOGICAL PROCESS OF OHMIC CONTACTS TO THE NANOHETEROSTRUCTURES QUANTUM WELLS

[1,2]Ryndin E.A., [3]Osovskiy A.V.

[1]Southern Scientific Center of Russian Academy of Sciences, Rostov-on-Don, e-mail: rynenator@gmail.com;
[2]Southern Federal University, Taganrog;
[3]Astrakhan State University, Astrakhan, e-mail: a_osovskiy@mail.ru

A number of semiconductor devices, characterized by speed, not limited to transit-time active regions (channels) nanostructures. The basis of the instrument based on the principle of the class managed relocation of the electric field amplitude maximum of the wave functions of the electrons in the system of tunnel-coupled quantum wells separated by a tunnel heterobarriers. A numerical model and a software of modeling of impurity diffusion in GaAs/AlGaAs heterostructures for the preliminary optimization of the parameters of technological process of ohmic contacts to the tunneling connected quantum wells of nanoheterostructures were developed. An analysis of the results of numerical modeling have been carried out. The estimations of minimal distances between local surface impurity sources AuGe and AuZn depending on time and temperature of ohmic contacts obtaining process were received.

Keywords: ohmic contacts, tunneling connected quantum wells, GaAs/AlGaAs-nanoheterostructures

Создание элементной базы интегральных схем на основе гетеропереходных квантовых областей является одним из основных направлений развития наноэлектроники. В рамках данного направления разработан ряд полупроводниковых приборов, характеризующихся быстродействием, не ограниченным временем пролета электронами активных областей (каналов) наноструктур. В основу функционирования приборов данного класса положен принцип управляемой электрическим полем передислокации максимума амплитуды волновых функций электронов в системе туннельно-связанных квантовых ям, разделенных туннельными гетеробарьерами [2, 3, 4, 7, 8].

Одной из особенностей метода построения наноструктур с управляемой передислокацией максимума амплитуды волновых функций носителей заряда является необходимость формирования раздельных омических контактов к квантовым областям шириной 15 – 40 нм, разделенных туннельным гетеробарьером шириной 2–5 нм, что представляет собой определенную конструктивно-технологическую проблему.

Учитывая данную особенность, а также тот факт, что основные характеристики наноструктур в значительной степени определяются качеством омических контактов, обеспечивающих связь и взаимодействие интегральных элементов на кристалле, для более эффективной оптимизации режимов технологического процесса формирования омических контактов целесообразно проводить предварительное моделирование процесса диффузии легирующих примесей.

Численная модель технологического процесса

Традиционно омические контакты к интегральным элементам на основе GaAs формируют посредством диффузии доноров (как правило, Ge) и акцепторов (чаще всего Zn) из нанесенных на поверхность структуры пленок AuGe и AuZn соответственно, при температуре 450–600 °C в течение 10–60 с.

Математическое моделирование процесса диффузии легирующих примесей выполняется с использованием уравнения диффузии [1]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} - \nabla\left(D\nabla N\right) = f, \qquad (1)$$

где N – концентрация легирующей примеси; D – коэффициент диффузии примеси; f – плотность источников (стоков) легирующей примеси; t – время; ∇ – оператор набла.

Поскольку в рассматриваемой задаче источники легирующих примесей локализованы на поверхности структуры, правая часть уравнения (1) может быть принята равной нулю:

$$\frac{\partial N}{\partial t} - \nabla\left(D\nabla N\right) = 0. \qquad (2)$$

На участках границы, соответствующих нанесенным на поверхность структуры источникам легирующих примесей, при допущении, что в рассматриваемом временном интервале 10–60 с поверхностный источник примеси может считаться неограниченным, задаются граничные условия первого рода:

$$N = N_{MAX}, \qquad (3)$$

где N_{MAX} – предел растворимости легирующей примеси при заданной температуре.

На остальных участках границы задаются граничные условия второго рода:

$$\frac{\partial N}{\partial n} = 0, \qquad (4)$$

где n – нормаль к границе.

Начальное условие определяется распределением легирующих примесей по координатам в начальный момент времени t_{MIN}:

$$N = N_0\big|_{t=t_{MIN}}, \qquad (5)$$

где N_0 – распределение легирующей примеси по координатам в начальный момент времени.

Численное решение системы уравнений (2)–(5) проводилось с использованием метода конечных разностей на координатной и временной сетках:

$$G_{xy} = \left\{(x_i, y_j) \mid i = \overline{1,I}; j = \overline{1,J}\right\};$$

$$G_t = \left\{t_k \mid k = \overline{1,K}\right\}, \qquad (6)$$

где G_{xy} – множество точек координатной сетки; G_t – множество точек временной сетки; i, j, k – индексы точек координатной и временной сеток; (x_i, y_j) – точки координатной сетки; t_k – точки временной сетки; I – число точек сетки по координате x; J – число точек сетки по координате y; K – число точек сетки по времени t.

В результате дискретизации системы (2)–(5) на сетках (6) получили следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$\frac{N_{i,j,k} - N_{i,j,k-1}}{\Delta t_{k-1}} - \frac{2}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}\left(D_{i,j,k}\frac{N_{i+1,j,k} - N_{i,j,k}}{\Delta x_i} - D_{i-1,j,k}\frac{N_{i,j,k} - N_{i-1,j,k}}{\Delta x_{i-1}}\right) - \\ - \frac{2}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}}\left(D_{i,j,k}\frac{N_{i,j+1,k} - N_{i,j,k}}{\Delta y_j} - D_{i,j-1,k}\frac{N_{i,j,k} - N_{i,j-1,k}}{\Delta y_{j-1}}\right) = 0; \qquad (7)$$

$$N_{i,j,k} = N_{MAXi,j,k}, \quad (x_i, y_j) \in \Omega_1, \quad t_k \in \{t_1, t_K\}; \qquad (8)$$

$$\frac{N_{i+1,j,k} - N_{i,j,k}}{\Delta x_i} = 0; \quad \frac{N_{i,j+1,k} - N_{i,j,k}}{\Delta y_j} = 0; \quad (x_i, y_j) \in \Omega_2, \quad t_k \in \{t_1, t_K\}; \qquad (9)$$

$$N_{i,j,1} = N_{0i,j}, \quad (x_i, y_j) \in \Theta, \qquad (10)$$

где Θ – область решения задачи, включая внутренние и граничные точки; Ω_1 – области границы, соответствующие нанесенным на поверхность структуры источникам легирующих примесей; Ω_2 – области границы, на которых источники легирующих примесей отсутствуют.

Результаты моделирования

Решение системы уравнений (7)–(10) выполнялось для фрагмента исследуемой наногетероструктуры, схематически

показанного на рис. 1 и представляющего собой окрестность двух омических контактов к туннельно-связанным квантовым ямам.

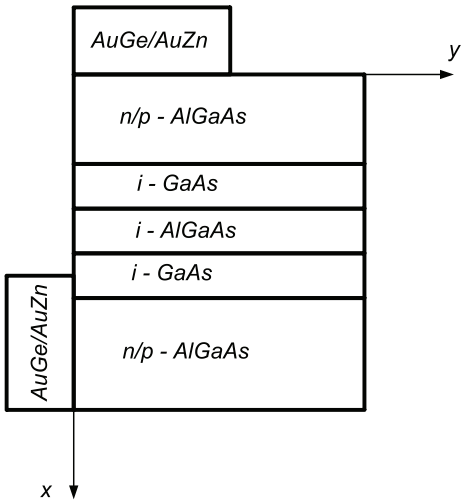


Рис. 1. Область моделирования

Рассматриваемая задача предполагает определение нестационарного распределения по координатам атомов Ge или Zn в полупроводниковой структуре на основе гетеропереходов GaAs/AlGaAs в процессе термодиффузии омических контактов из поверхностного источника AuGe или AuZn, соответственно, в диапазоне температур 450–600°C. В процессе численного моделирования учтен предел растворимости исследуемых примесей в GaAs в рассматриваемом диапазоне температур, а также исследован процесс разгонки исходных примесей Si и Be в GaAs/AlGaAs-гетероструктуре за время формирования омических контактов.

Система уравнений (7)–(10) решалась итерационно методом Гаусса–Зейделя на неравномерной координатной сетке, содержащей 36 точек по координате x и 41 точку по координате y. Временная сетка содержала 7 отсчетов. Общее число уравнений составило 10332. Разработанный пакет прикладных программ численного моделирования процесса формирования омических контактов использует методы вычислений с разреженными матрицами коэффициентов, что позволяет при необходимости увеличить размерность задачи, определяемую числом точек координатной и временной сеток, в десятки раз.

Температурная зависимость коэффициента диффузии легирующей примеси определялась на основе экспериментальных данных, приведенных в работах [5, 6].

На рис. 2, 3 приведены распределения суммарной концентрации атомов доноров (Ge, Si) и акцепторов (Zn, Be) по координатам в моменты времени 10 и 60 с при температуре диффузии 600 °C, полученные в результате численного решения системы уравнений (7) – (10) на координатной и временной сетках (6).

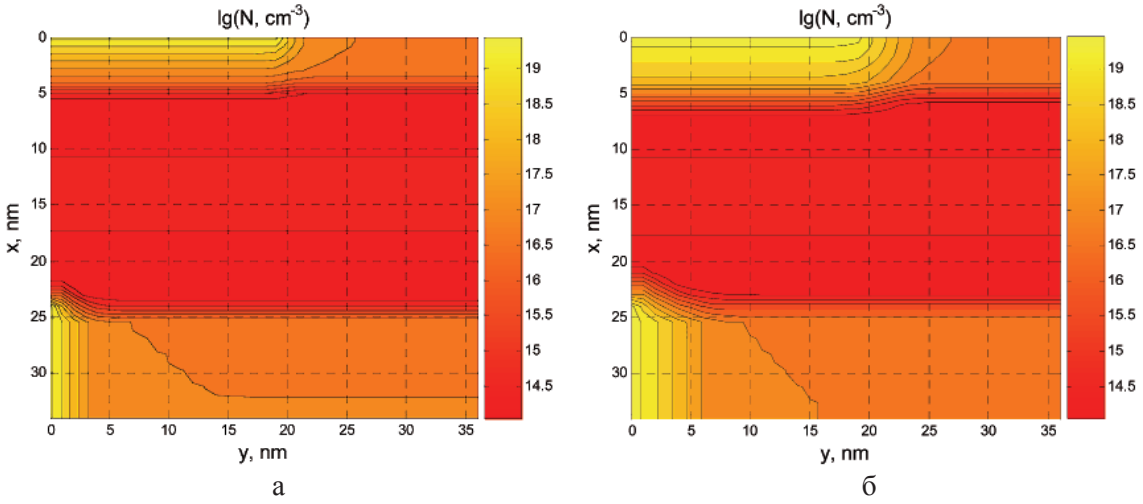


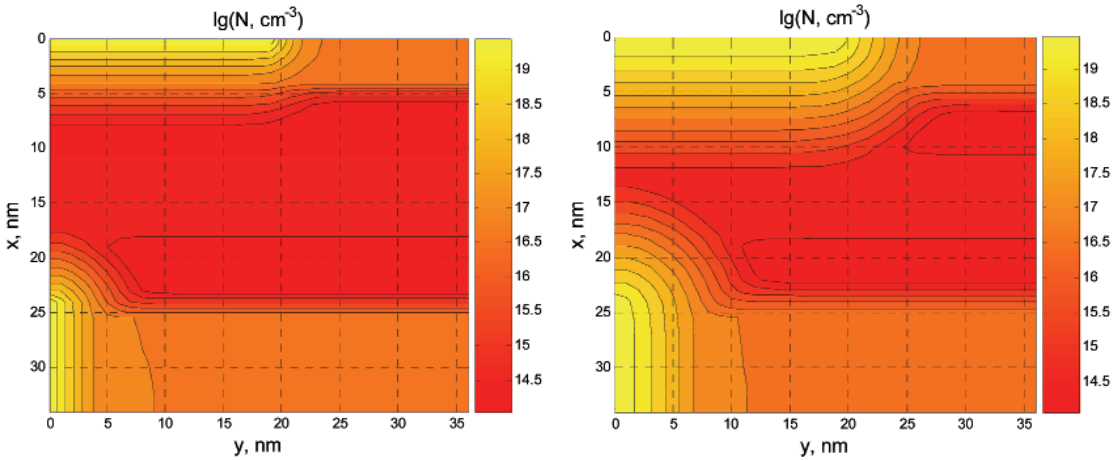
Рис. 2. Распределения концентрации доноров по координатам в моменты времени 10 с (а) и 60 с (б) при температуре 600°C

Анализ полученных в работе результатов численного моделирования показал, что при температуре процесса вжигания до 600 °C и времени вжигания до 60 с возможно формирование раздельных омических контактов к туннельно-связанным квантовым областям с электронной проводимостью при минимальном расстоянии между нанесенными на поверхность наноструктуры областями AuGe до 20 нм. Для формирования контактов к туннельно-связанным квантовым областям с дырочной проводимостью расстояние между областями AuZn должно быть увеличено до 30 нм. При этом разгонка исходных легирующих примесей Si и Be в слоях наногетероструктуры наблюдается в пределах 2–3 нм.

При снижении температуры процесса вжигания до 470–500 °C мини-

мальное расстояние между областями AuGe/AuZn может быть уменьшено до 10–15 нм.

Приведенные выше выводы справедливы лишь для наноструктур с достаточно малой плотностью дефектов в приповерхностных областях. Увеличение плотности дефектов приводит к значительному (на 1–2 порядка) росту коэффициентов диффузии и, таким образом, требует предварительной экспериментальной оценки данных коэффициентов для конкретной партии образцов.



а б

Рис. 3. Распределения концентрации акцепторов по координатам в моменты времени 10 с (а) и 60 с (б) при температуре 600 °С

Заключение

Разработанная модель и пакет прикладных программ численного моделирования технологического процесса термодиффузии омических контактов к квантовым областям наногетероструктур позволяют получить нестационарные распределения по координатам концентраций различных легирующих примесей в широком диапазоне температур и времени с целью предварительной оптимизации параметров исследуемого технологического процесса, а также в качестве исходных данных для последующего численного анализа вольт-амперных характеристик наноструктур с учетом сопротивлений областей омических контактов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Гос. контракт № 16.740.11.0425 от 03.12.2010, гос. соглашение № 14.A18.21.0126) в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

Список литературы

1. Бубенников А.Н., Садовников А.Д. Физико-технологическое проектирование биполярных элементов кремниевых БИС. – М.: Радио и связь, 1991. – 288 с.

2. Квантовые приборы на основе передислокации волновых функций в гетероструктурах / А.А. Горбацевич, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев, В.Я. Кремлев // Микроэлектроника. – 1994. – Т. 23, № 5. – С. 17–26.

3. Коноплев Б.Г., Рындин Е.А. Элементная база нанокомпьютеров на основе связанных квантовых областей // Вестник Южного научного центра РАН. – 2005. – Т. 1, № 3. – С. 22– 28.

4. Рындин Е.А. Сверхбыстродействующие электронные коммутаторы на основе управляемой передислокации максимума волновой функции носителей заряда // Вестник Южного научного центра РАН. – 2006. – Т. 2, № 2. – С. 8–16.

5. Farley C.W., Kim T.S., Lester S.D., Streetman B.G., Anthony J.M. Ge Diffusion in GaAs // Journal of the Electrochemical Society. – 1987. – Vol. 134, № 11. – P. 2888–2892.

6. Fisher D.J. Diffusion in GaAs and other III-V Semiconductors. 10 Years of Research // Defect and Diffusion Forum. – 1998. – Vol. 157–159. – 520 p.

7. Konoplev B.G., Ryndin E.A. A Study of the Transport of Charge Carriers in Coupled Quantum Regions // Semiconductors. – 2008. – Vol. 42, № 13. – P. 1462–1468.

8. Sakaki H. Velocity-modulation transistor (VMT) – a new field-effect transistor concept // Jpn. J. Appl. Phys. – 1982. – Vol. 21, № 6. – P. L381–L383.

References

1. Bubennikov A.N., Sadovnikov A.D. Fiziko-tehnologicheskoe proektirovanie bipoljarnyh jelementov kremnievyh BIS. M.: Radio i svjaz’, 1991. 288 p.

2. Gorbacevich A.A., Kapaev V.V., Kopaev Ju.V., Kremlev V.Ja. Kvantovye pribory na osnove peredislokacii volnovyh funkcij v geterostrukturah // Mikrojelektronika. 1994. T. 23, no. 5. pp. 17–26.

3. Konoplev B.G., Ryndin E.A. Jelementnaja baza nanokomp’juterov na osnove svjazannyh kvantovyh oblastej // Vestnik Juzhnogo nauchnogo centra RAN. 2005. T. 1, no. 3. pp. 22–28.

4. Ryndin E.A. Sverhbystrodejstvujuwie jelektronnye kommutatory na osnove upravljaemoj peredislokacii maksimuma volnovoj funkcii nositelej zarjada // Vestnik Juzhnogo nauchnogo centra RAN. 2006. T. 2, no. 2. pp. 8–16.

5. Farley C.W., Kim T.S., Lester S.D., Streetman B.G., Anthony J.M. Ge Diffusion in GaAs // Journal of the Electrochemical Society. 1987. Vol. 134, no. 11. pp. 2888–2892.

6. Fisher D.J. Diffusion in GaAs and other III-V Semiconductors. 10 Years of Research // Defect and Diffusion Forum. 1998. Vol. 157–159. 520 p.

7. Konoplev B.G., Ryndin E.A. A Study of the Transport of Charge Carriers in Coupled Quantum Regions // Semiconductors. 2008. Vol. 42, no. 13. pp. 1462–1468.

8. Sakaki H. Velocity-modulation transistor (VMT) – a new field-effect transistor concept // Jpn. J. Appl. Phys. 1982. Vol. 21, no. 6. pp. L381–L383.

Рецензенты:

Агеев О.А., д.т.н., профессор, директор НОЦ «Нанотехнологии»;

Жорник А.И., д.ф.-м.н., профессор кафедры теоретической, общей физики и технологии ФГБОУ ВПО ТГПИ.

Работа поступила в редакцию 26.10.2012.