

УДК 621.396.41

Н.А. Торхов, Л.И. Бабак, В.Г. Божков, А.Н. Разжувалов, А.С. Сальников

## Физическое моделирование GaN/AlGaN HEMT наногетероструктур и мощных СВЧ-транзисторов с использованием пакета Synopsys

Описаны и исследованы возможности программной системы Sentaurus TCAD Synopsys при физическом моделировании HEMT-наногетероструктур и СВЧ-транзисторов. Представлены результаты моделирования различных конструкций AlGaN/GaN HEMT-наногетероструктур с двумерным электронным газом, а также мощных СВЧ-транзисторов на основе этих гетероструктур. Показаны пути улучшения характеристик AlGaN/GaN HEMT-гетероструктур и приборов. Результаты моделирования подтверждены экспериментальным измерением параметров изготовленных тестовых GaN HEMT-транзисторов с длиной затвора 1 мкм.

**Ключевые слова:** GaN/AlGaN, HEMT-наногетероструктура, конструкция, СВЧ-характеристики, вольт-амперные характеристики, методы физического моделирования, Sentaurus TCAD Synopsys.

В настоящее время целый ряд крупных фирм – производителей электронной техники (Triquint, RFMD, Cree, Selex, UMS и др.) наладили промышленное производство приборов и монолитных интегральных схем (МИС) см-диапазона на базе GaN HEMT (High Electron Mobility Transistor) – технологий. При этом перечисленные фирмы предлагают на рынке услуги по изготовлению МИС на своей технологической базе по техническим проектам заказчика. Указанные проекты разрабатываются заказчиком с использованием САПР СВЧ-устройств (например, AWR Microwave Office, ADS) и представляемых производителем МИС библиотек моделей элементов для используемых HEMT-технологий.

Несмотря на доступность подобных библиотек, фирмы-производители МИС охраняют технологии их изготовления, к которым в первую очередь относятся процессы выращивания и конструкции используемых гетероэпитаксиальных структур. Это обстоятельство является одной из первых защитных мер, не разрешающих прямое копирование данных технологий. Поэтому более слабые компании для получения аналогичных HEMT в указанном диапазоне частот в большинстве случаев просто подбирают необходимую конструкцию гетероэпитаксиальной структуры, опираясь в основном на литературные данные.

Известно, что выбор конструкции полупроводниковой подложки (гетероструктуры) прежде всего определяет достижимые характеристики HEMT МИС. В настоящее время накоплен значительный опыт по использованию в СВЧ-технике см-диапазона различных конструкций полупроводниковых гетероструктур на базе широкозонных полупроводников (в частности, GaN), описаны способы и алгоритмы построения соответствующих HEMT-приборов. В то же время приборы и МИС Ka- и более высокочастотных диапазонов на основе GaN все еще не достигли широкого промышленного производства. Это объясняется не только технологическими трудностями, но и сложностью разработки необходимых конструкций гетероэпитаксиальных структур. Литературные данные в этой области еще достаточно ограничены, а поведение гетероструктуры при увеличении частоты не подчиняется тривиальным закономерностям.

В связи со сказанным при создании GaN МИС мм-диапазона в каждом конкретном случае необходимо проводить не просто выбор, а разработку конструкции гетероэпитаксиальной структуры с учетом топологии будущего полупроводникового прибора. Слабое использование отечественными производителями средств, позволяющих разрабатывать такие структуры, является одним из препятствий при продвижении в более высокочастотные диапазоны. Таким образом, освоение и развитие современных методов приборно-технологического моделирования представляет собой важный этап на пути разработки и создания новых перспективных твердотельных СВЧ-приборов и МИС на их основе.

В настоящей работе представлено краткое описание программной системы Sentaurus TCAD Synopsys (США) [1] и ее возможностей при физическом моделировании HEMT-наногетероструктур

и СВЧ-транзисторов. Представлены результаты моделирования различных конструкций AlGaIn/GaN НЕМТ-наногетероструктур с двумерным электронным газом (ДЭГ) и исследования их электрофизических характеристик. Выполнено также моделирование СВЧ-транзисторов на основе этих гетероструктур. Показаны пути улучшения характеристик AlGaIn/GaN НЕМТ-гетероструктур и приборов.

**1. Система приборно-технологического моделирования Sentaurus TCAD Synopsys.** Для физического моделирования гетероструктур и функциональных элементов микро- и нанoeлектронных устройств в настоящее время разработаны алгоритмы и специальные программные системы. Наиболее известной из них и подходящей для решения поставленных задач является система приборно-технологического моделирования Sentaurus TCAD Synopsys [1].

**Общее описание.** Моделирование электрофизических параметров полупроводниковых приборов с ДЭГ в системе Sentaurus TCAD Synopsys осуществляет программный модуль Sentaurus Device.

Поскольку ДЭГ возникает в случаях, когда движение носителей заряда ограничено в каком-то одном направлении, то актуальным становится расчет уровней размерного квантования и их волновых функций, возникающих в некоторой эффективной квантовой яме. По умолчанию модуль Sentaurus Device использует простую модель конечной квантовой ямы, в которой решается уравнение Шредингера. Параметры ямы определяются конструкцией гетероэпитаксиальной структуры, которая задается пользователем. При этом принимается допущение, что энергетические подзоны электронов, тяжелых и легких дырок не связаны между собой и могут быть найдены из решений соответствующих одномерных уравнений Шредингера для каждого носителя.

В целом общая методика моделирования полупроводникового прибора в программе Sentaurus Device состоит из нескольких шагов. До запуска программы приборного моделирования осуществляются формирование структуры прибора и настройка параметров материалов в других программах пакета Sentaurus TCAD Synopsys. Эти операции могут выполняться путем непосредственного задания слоёв и параметров материалов (модули Mdraw и Devise) либо при помощи моделирования технологического процесса (модуль Dios). На первом шаге в соответствии со структурой генерируется сетка для решения системы уравнений. На втором шаге описываются физические модели в пакете Dessis.

Отличительной особенностью пакета Dessis является возможность подключения на этапе физического моделирования требуемых библиотек материалов и математических моделей. Это позволяет легко адаптировать данную систему к отечественным технологиям с учетом новых исследованных процессов переноса электрических зарядов. Основным алгоритмом, используемым в ходе моделирования, является самосогласованное решение уравнения для электростатического потенциала (уравнение Пуассона) и уравнений непрерывности для электронов и дырок. Для повышения точности вычислений в пакет могут быть дополнительно включены различные модели подвижности носителей (например, модели, в которых учитываются зависимости подвижности от температуры и напряженности локального электрического поля, особенности формирования валентной зоны и зоны проводимости), модели генерации и рекомбинации заряда, включая эффекты лавинного пробоя, генерации заряда высокоэнергетическими частицами.

Высокочастотные приборы характеризуются временем отклика на входной сигнал. Помимо моделирования переходных процессов, модуль Sentaurus Device предлагает два пути расчета этого отклика: малосигнальный анализ (АС) и анализ в режиме гармонического баланса (НВ). В режиме АС-анализа предусмотрена функция визуализации: реакцию прибора и потоки тока/энергии можно непосредственно увидеть и произвести оптимизацию траектории малых токов для различных частот. В отличие от АС-анализа НВ-анализ может применяться для моделирования сигналов произвольной амплитуды. Модуль Sentaurus Device обладает специализированными средствами для решения очень больших линейных систем уравнений, что необходимо в НВ-анализе.

Таким образом, система Sentaurus TCAD Synopsys, как и некоторые другие известные программные продукты, обладает необходимыми функциональными возможностями для решения перечисленных ранее проблем.

Тем не менее осуществление точного физического моделирования гетероструктур и функциональных элементов микро- и нанoeлектронных устройств с помощью подобных систем не является тривиальной задачей. Помимо освоения этих современных инструментов, необходимы также исследования по формулировке задач моделирования, выбору алгоритмов моделирования, получению с требуемой точностью и полнотой достаточных исходных данных и т.д. Следует отметить, что проблемы получения исходных данных, а также физического моделирования гетероструктур и функ-

циональных элементов нанoeлектронных устройств с точностью, полезной для практики, пока не решены в полном объеме ни в России, ни в мире. В настоящей работе делается попытка решения этой задачи применительно к классу GaN/AlGaN HEMT наногетероструктур и приборов.

**Возможности системы Sentaurus TCAD Synopsys при проектировании СВЧ наногетероструктурных транзисторов и МИС.** Система приборно-технологического моделирования Sentaurus TCAD Synopsys позволяет проводить исследование и оптимизацию наногетероструктур, полупроводниковых приборов на их основе, а также технологических процессов производства. При этом с использованием дополнительных модулей система разрешает исследовать концепции новых квантово-размерных приборов, для которых еще не определены процессы производства. В качестве таких приборов могут выступать различные модификации HEMT-транзисторов на основе GaAs, InP, GaN, AlGaN и SiC квантовых гетероструктур с высокой подвижностью ДЭГ в области гетероперехода.

Имеющиеся в системе Sentaurus TCAD Synopsys возможности для расчета механических напряжений в гетероструктурах, возникающих за счет рассогласования параметров кристаллической решетки, позволяют производить оптимизацию толщины эпитаксиальных слоев с целью минимизации механических напряжений и получения качественных плоскопараллельных структур. Учет поляризации кристаллической решетки на интерфейсе позволяет учитывать влияние локализованного заряда на профиль квантовой ямы и, соответственно, на количество и положение энергетических уровней в ней. Полный набор реальных транспортных моделей для различного применения (дрейфово-диффузионная, термодинамическая, гидродинамическая, квантовая) позволяет проводить моделирование характеристик наногетероструктурных полупроводниковых приборов как по постоянному, так и по переменному току, а также исследовать различные высокочастотные и переходные процессы.

**2. Физическое моделирование AlGaN/GaN HEMT-наногетероструктур и транзисторов.** В настоящем разделе представлены результаты моделирования электрофизических характеристик различных конструкций AlGaN/GaN HEMT-наногетероструктур (энергетических диаграмм, концентрации подвижных носителей заряда в ДЭГ-канале, подвижности с учетом механических напряжений в структуре) с использованием системы Sentaurus TCAD Synopsys. Цель такого исследования заключается в выявлении и оптимизации конструктивных особенностей AlGaN/GaN HEMT-наногетероструктур, обеспечивающих улучшение их приборных характеристик (повышение рабочего диапазона частот, увеличение крутизны  $G_m$  и тока стока  $I_{dss}$ , пробивного напряжения, уменьшение утечек затвор-сток и др.). Выполнено также моделирование спроектированных на основе этих гетероструктур HEMT-транзисторов с длиной затвора  $L_g = 1$  мкм. Выбор значения  $L_g$  был обусловлен тем, что при такой длине затвора легко изготовить тестовые транзисторы и выполнить сравнение их экспериментальных характеристик с результатами моделирования.

Приведем порядок моделирования гетероструктур и транзисторов. Созданный с этой целью проект Sentaurus Workbench (рис. 1) распараллеливает вычисления и включает следующие основные этапы.

*Этап 1.* Задание состава и параметров гетероструктуры (инструмент Sentaurus Structure Editor).

Были заданы две изготовленные в ЗАО «Элма-Малахит» (г. Зеленоград) конструкции эпитаксиальных гетероструктур – структура (исходная) и структура с оптимизированной конструкцией слоев (рис. 2).

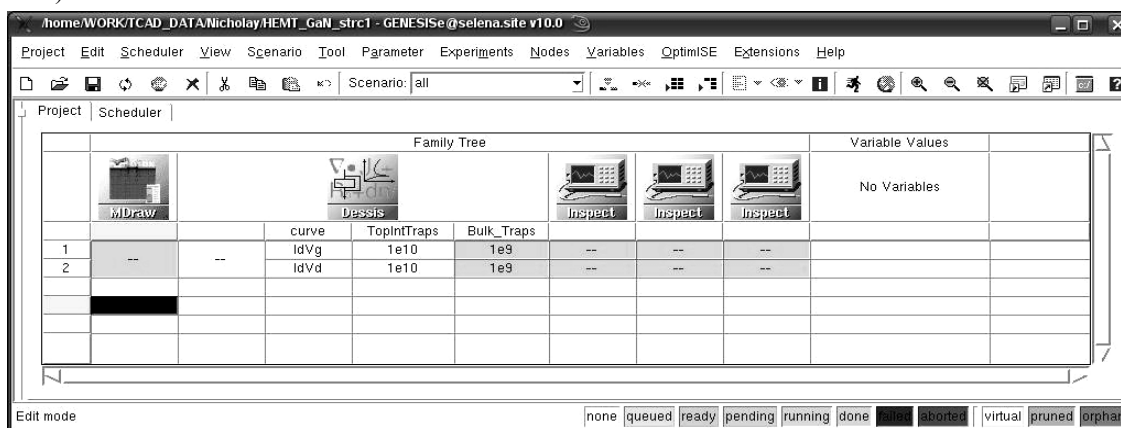


Рис. 1. Пример проекта Sentaurus Workbench

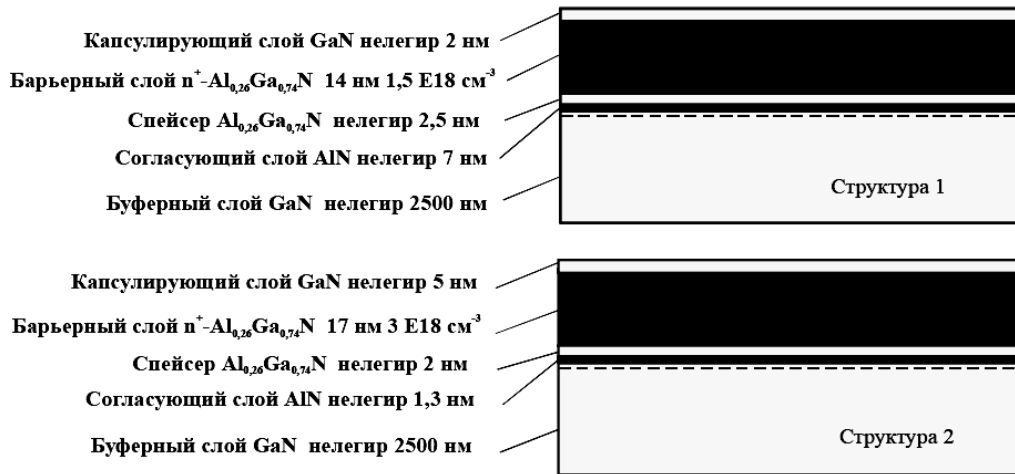
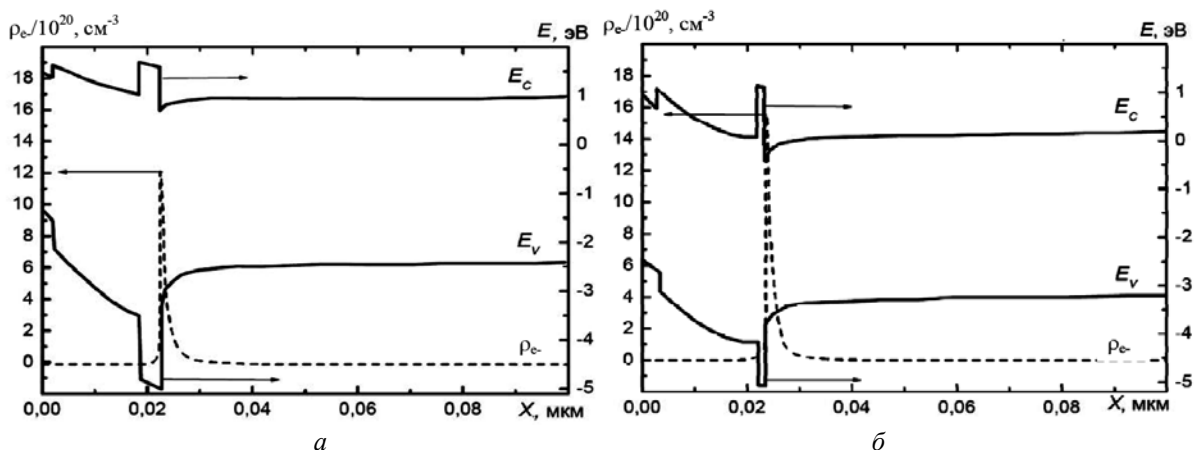


Рис. 2. Задание состава и параметров гетероструктур

*Этап 2.* Проектирование транзисторной структуры и генерация расчетной сетки (>15 тыс. узлов) для расчета в ее узлах соответствующих систем электрофизических уравнений (инструмент Sentaurus Mesh).

*Этап 3.* Расчет электрофизических характеристик и энергетических диаграмм транзисторной структуры (инструмент Sentaurus Device), визуализация параметров и графиков (инструмент Inspect). Было получено, что основной заряд в области канала сток–исток ( $D-S$ ) сосредоточен в области квантовой ямы ДЭГ-канала. На это же указывают и распределения электронной плотности от затвора ( $G$ ) вглубь образца (рис. 3, *a*). Видно, что максимум концентрации электронного газа приходится на область квантовой ямы, образованной гетеропереходом AlGaN/GaN. Рассчитанные значения концентрации ДЭГ-электронов –  $1,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  для исходной структуры 1 и  $1,55 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  для оптимизированной структуры 2 – практически соответствуют (с точностью ~27%) паспортным значениям концентрации ДЭГ-электронов на изготовленный в ЗАО «Элма-Малахит» материал. Из сравнения рис. 3, *a* и *б* видно, что уменьшение толщины согласующего слоя AlN в структуре 2 (с 7 до 1,3 нм) одновременно с утолщением (с 14 до 17 нм) и увеличением (с  $1,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  до  $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ) концентрации легирующей примеси в слое  $\text{Al}_{0,26}\text{Ga}_{0,74}\text{N}$  приводит к росту глубины квантовой ямы, что сопровождается увеличением концентрации (и, соответственно, увеличением проводимости) электронного газа в ДЭГ-канале.

Рис. 3. Энергетические диаграммы зоны проводимости  $E_c$  и валентной зоны  $E_v$ , а также распределение электронной плотности в области ДЭГ-канала: *a* – для структуры 1; *б* – для структуры 2

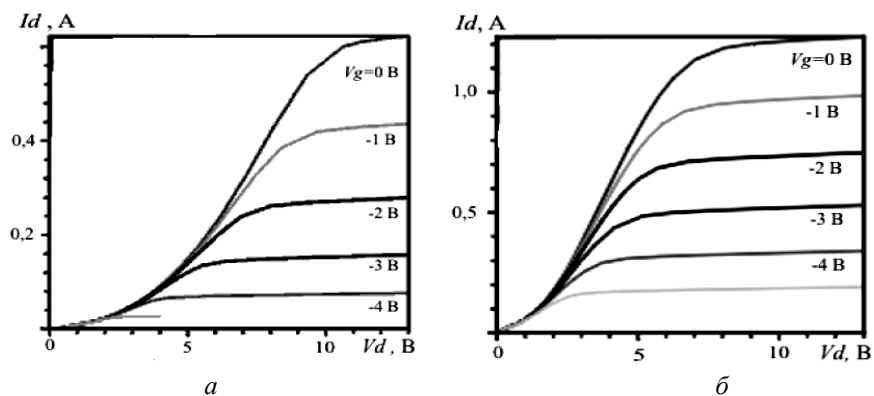
Кроме этого, подобные изменения конструкции структуры приводят, согласно рис. 3, *б*, к уменьшению поверхностного потенциала (работы выхода), понижению высоты барьера Шоттки, уменьшению электрического заряда ОПЗ, емкости затвор–сток  $C_{gd}$ , увеличению крутизны  $G_m$  и повышению рабочей частоты  $f_t$ . Наблюдаемое влияние конструкции гетероэпитаксиальных нанослоев на поведение электрофизических параметров структуры в электрическом поле не является триви-

альным. Далеко не очевидно, что утонение согласующего слоя и утолщение подбарьерного слоя  $Al_{0,26}Ga_{0,74}N$  может привести к увеличению глубины квантовой ямы и проводимости ДЭГ-канала. Также не является очевидным уменьшение потенциала поверхности в точке  $x = 0$ , уменьшение емкости  $C_{gd}$  и повышение частотного диапазона. Именно поэтому для исследования особенностей процессов токопереноса в зависимости от конструкции квантовых наногетероструктур необходимо проведение физического и приборного моделирования.

Этап 4. Расчет вольт-амперных характеристик (ВАХ) транзисторов (инструмент Sentaurus Device).

Результаты расчета статических выходных ВАХ AlGaN/GaN НЕМТ транзисторов с шириной затвора 1000 мкм для структур 1 и 2 представлены на рис. 4. Расчет показал, что увеличение электронной плотности ДЭГ приводит к уменьшению сопротивления сток-исток, увеличению тока насыщения и крутизны  $G_m$ .

Рис. 4. Рассчитанные статические ВАХ AlGaN/GaN НЕМТ-транзисторов с длиной затворов  $L_g=1$  мкм: а – для структуры 1; б – для структуры 2



Моделирование позволяет также оценить и частотные свойства исследуемых структур с помощью следующей формулы для граничной частоты транзистора по току  $f_t$ :

$$f_t = \frac{G_m}{2\pi C_{GS}}, \quad (1)$$

где  $C_{GS}$  – емкость затвор–исток. Рассчитанное значение емкости для структуры 2 ( $C_{GS} = 4,71$  пФ/мм) заметно меньше аналогичного значения для структуры 1 ( $C_{GS} = 5,20$  пФ/мм). Это указывает на то, что вторая структура, несмотря на одинаковую длину затвора (1 мкм), является и более высокочастотной. Рассчитанные с использованием выражения (1) значения предельной частоты усиления по току  $f_t$  составляют ~ 6 ГГц для структуры 1 и 8,5 ГГц – для структуры 2.

С целью оценки достоверности результатов моделирования на базе структуры 1 были изготовлены GaN НЕМТ с длиной затвора 1 мкм (рис. 5, а). Процесс изготовления, характеристики и особенности этих транзисторов были подробно описаны в [2–4]. Измеренные экспериментально частотные зависимости коэффициента передачи по току  $H_{21}(f)$  для транзисторов с длиной затвора 1 мкм и шириной 1000, 1500 и 1900 мкм показаны на рис. 7, б. Рассчитанное по формуле (1) значение  $f_t = 6$  ГГц для структуры 1 достаточно хорошо совпадает с экспериментальным значением  $f_t = 5–7$  ГГц (см. рис. 5, б). Согласно полученным результатам изготовление НЕМТ на второй оптимизированной структуре должно привести к увеличению крутизны, усиления и значений предельных частот.

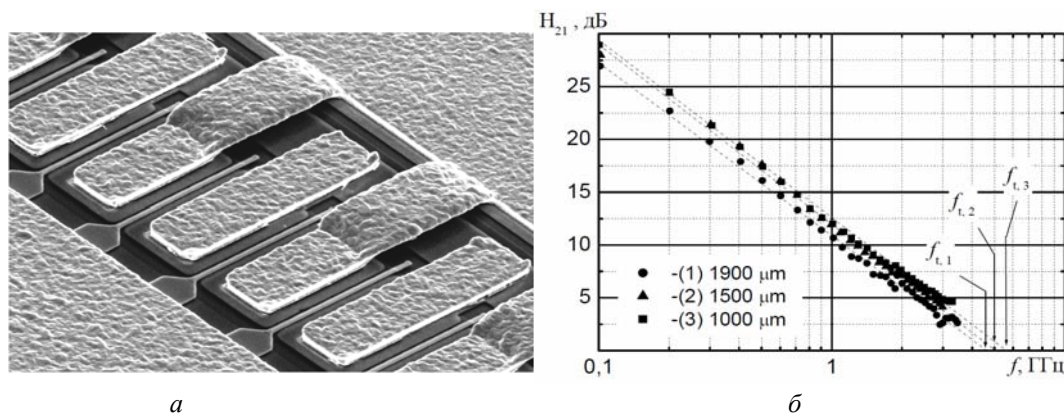


Рис. 5. Фотография (а) изготовленного AlGaN/GaN НЕМТ-транзистора и зависимость  $H_{21}(f)$  (б)

Таким образом, результаты эксперимента показали справедливость исходных предпосылок и подходов, использованных при приборно-технологическом моделировании AlGaIn/GaN НЕМТ-наногетероструктур и транзисторов. Это позволяет утверждать о достоверности сделанных выводов, касающихся путей улучшения параметров структур и приборов.

**Заключение.** В ходе выполненной работы получены следующие результаты:

1. Исследованы основные возможности программной системы Sentaurus TCAD Synopsys при физическом моделировании НЕМТ-наногетероструктур и транзисторов.

2. Представлены результаты моделирования различных конструкций AlGaIn/GaN НЕМТ-наногетероструктур с двумерным электронным газом и исследования их электрофизических характеристик: энергетических диаграмм, концентрации подвижных носителей заряда в ДЭГ-канале, подвижности с учетом механических напряжений в структуре. Как и следовало ожидать, практически всегда в области гетероперехода, образованного AlGaIn и более широкозонным полупроводником AlN, образуется резкий изгиб зоны проводимости – потенциальная яма, в которой происходит квантование электронов вдоль направления «0х» и формирование ДЭГ-канала. Данное обстоятельство является необходимым, но не достаточным условием высокой проводимости канала, обеспечиваемой высокой подвижностью ДЭГ-электронов и их концентрацией. Как показано в работе, концентрация ДЭГ-электронов сильно зависит от формы квантовой ямы, определяемой конструкцией гетероэпитаксиальных слоев.

3. Моделирование показало, что поведение в статических и СВЧ электрических полях НЕМТ-наногетероструктур, содержащих ДЭГ, не подчиняется тривиальным закономерностям. Было показано, что увеличение толщины и концентрации подбарьерного слоя AlGaIn одновременно с уменьшением толщины согласующего слоя AlN приводит к изменению формы потенциальной ямы, являющейся причиной увеличения проводимости ДЭГ-канала и уменьшения емкости затвора Шоттки; последнее, в свою очередь, увеличивает частотный предел работы структуры. Для описания поведения таких гетероструктур в статических и СВЧ электрических полях необходимо решение сложной многопараметрической задачи.

4. С помощью моделирования в программной среде Sentaurus TCAD Synopsys показано, что оптимизация конструкции GaN/AlGaIn НЕМТ-наногетероструктуры путем утонения полуизолирующего спэйсера AlN с 7 до 1,3 нм, утолщения подбарьерного слоя  $Al_{0,26}Ga_{0,74}N$  с 14 до 17 нм при одновременном увеличении концентрации в нем с  $1,5 \times 10^{18}$  до  $3 \times 10^{18}$   $см^{-3}$  приводит к увеличению крутизны, уменьшению утечек, уменьшению емкости и увеличению предельных частотных характеристик. Показано также, что подобная оптимизация гетероструктуры приводит к улучшению статических и СВЧ-характеристик проектируемых НЕМТ с длиной затвора 1 мкм.

5. Совпадение результатов моделирования и измерений параметров тестовых транзисторов показывает достоверность полученных данных и сделанных выводов.

6. Для уверенного продвижения GaN/AlGaIn НЕМТ-транзисторов и МИС в Ka- и более высокочастотные диапазоны необходимо проводить конструирование гетероэпитаксиальных слоев материала подложки с учетом топологии будущего полупроводникового прибора.

#### *Литература*

1. Сайт компании Synopsys [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.synopsys.com>, свободный (дата обращения: 01.09.2012).

2. Исследование фрактальной морфологии поверхности НЕМТ GaN-гетероструктур на чужеродных подложках / Н.А. Торхов, В.Г. Божков, В.А. Новиков и др. // 21-я Междунар. Крым. конф. «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии»: матер. конф. 12–16 сент. 2011 г. Севастополь, Крым, Украина. – Севастополь, 2011. – С. 682–683.

3. Торхов Н.А. Влияние линейных размеров AlGaIn/GaN 2D-канала сток–исток GaN полевого транзистора на его приборные характеристики. (Латеральный размерный эффект) / Н.А. Торхов, В.Г. Божков // 21-я Междунар. Крым. конф. «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии»: матер. конф. 12–16 сент. 2011 г. Севастополь, Крым, Украина. – Севастополь, 2011. – С. 157–158.

4. Торхов Н.А. Влияние ширины канала сток–исток на предельные частоты FT и FMAX AlGaIn/GaN НЕМТ / Н.А. Торхов, В.Г. Божков // 22-я Междунар. Крым. конф. «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии»: матер. конф. 10–14 сент. 2012 г. Севастополь, Крым, Украина. – Севастополь, 2012. – С. 76–77.

**Торхов Николай Анатольевич**

Канд. физ.-мат. наук, нач. технологической лаборатории отдела 4 ОАО НИИПП, г. Томск  
Тел.: +7-952-807-49-98  
Эл. почта: trkf@mail.ru

**Бабак Леонид Иванович**

Канд. техн. наук, зам. директора НОЦ «Нанотехнологии»,  
доцент каф. компьютерных систем в управлении и проектировании (КСУП) ТУСУРа  
Тел.: +7 (382-2) 41-47-17  
Эл. почта: leonid.babak@rambler.ru

**Божков Владимир Григорьевич**

Д-р техн. наук, начальник 4-го отдела ОАО НИИПП, г. Томск  
Тел.: +7 (382-2) 55-66-95  
Эл. почта: niipp4otdel@mail.ru

**Разжувалов Александр Николаевич**

Канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры теоретической и экспериментальной физики ФТИ ТПУ  
Тел.: +7-913-821-54-96  
Эл. почта: razzhualov@mail.ru

**Сальников Андрей Сергеевич**

Аспирант каф. КСУП, ассистент каф. физической электроники, ТУСУР  
Тел.: 8 (382-2) 41-47-17  
Эл. почта: ansalnikov@gmail.com

Torkhov N.A., Babak L.I., Bozhkov V.G., Razzhualov A.N., Salnikov A.S.

**Physical simulation of GaN/AlGaN HEMT-heterostructures and power microwave transistors using Synopsys software**

Possibilities of the software tool Sentaurus TCAD Synopsys for physical simulation of HEMT-nanoheterostructures and microwave transistors are described and investigated. Simulation results of various AlGaN/GaN HEMT-nanoheterostructure constructions with two-dimensional electron gas as well as high-power microwave transistors based on these heterostructures are presented. The ways for improving characteristics of AlGaN/GaN HEMT-heterostructures and devices are shown. The simulation results are confirmed by experimental measurement of produced test GaN HEMT-transistors with a gate length of 1 micron.

**Keywords:** GaN/AlGaN, HEMT-nanoheterostructure, construction, microwave characteristics, IV characteristics, physical simulation, Sentaurus TCAD Synopsys.