

CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN INGEGNERIA ELETTRONICA

**Studio e modellistica di transistori GaN con
materiali di barriera innovativi per applicazioni ad
alta tensione**

Candidato:

Simone Pellegrino

Matricola n°:

0001025238

Relatore:

Prof.ssa Susanna Reggiani

Correlatori:

Dott. Luigi Balestra

Dott. Giacomo Drudi

Anno Accademico

2024/2025

Sessione

V

*La curiosità non è un istinto, è un dovere morale
È un dovere morale perché in fondo è tutto scritto
E non abbiamo letto niente
Siamo fermi al capolettera di un firmamento amanuense.
Curiosity – Caparezza*

Indice

1	I Materiali ad Ampio Bandgap	3
1.1	Il GaN	4
1.2	Formazione del 2DEG	10
2	High electron mobility transistor - HEMT	12
2.1	Struttura	12
2.1.1	Dispositivi Normalmente Spenti	13
2.2	Da AlGa _N a AlSc _N	14
2.2.1	L'Interlayer	15
3	Sentaurus TCAD e Modelli Fisici	18
3.1	Sentaurus TCAD	18
3.2	I Parametri del Nuovo Materiale AlSc _N	19
3.3	Modelli Fisici	24
3.3.1	Giunzione Metallo-Semiconduttore	24
3.3.2	Modelli per la Mobilità	26
3.3.3	Massa di Tunneling e NLM	31
4	Risultati Finali	32
4.1	Struttura del Dispositivo	32
4.2	Caratterizzazione del Dispositivo	33
4.3	Setup TCAD	35
4.4	Risultati	36
	Conclusioni	40
	Bibliografia	41

Elenco delle figure

1.1	(a) Valori tabulati per vari semiconduttori. I parametri riportati sono il gap energetico (E_G), permittività dielettrica relativa (ϵ_r), mobilità elettronica (μ), campo elettrico critico (E_{crit}), velocità di saturazione degli elettroni (v_s) e conducibilità termica (κ_{th}). (b) Relazione tra il campo elettrico critico e il bandgap energetico nei materiali tabulati [1].	4
1.2	(a) Struttura cristallina della wurzite e (b) struttura atomica Ga-polare e N-polare nel GaN. Le frecce rappresentano la direzione del dipolo spontaneo [1].	5
1.3	Struttura a bande del GaN [2]. Si può osservare in corrispondenza dell'ascissa Γ sia il massimo della E_v che il minimo della E_c	6
1.4	Rappresentazione della polarizzazione netta nel tetraedro (ΔP_0) del GaN quando sottoposto a trazione (a) e compressione (b) [1].	7
1.5	Modello delle cariche in uno strato di GaN. La somma delle cariche di polarizzazione spontanea è pari a 0 nel corpo del materiale [3].	7
1.6	Rappresentazione schematica di una regione di GaN, bande di conduzione e profilo di carica in vari stadi di crescita e ipotesi. (a), (b) e (c) rappresentano i tre step della crescita nell'ipotesi di assenza di difetti superficiali. (d) e (e) rappresentano l'accrescimento in presenza di difetti superficiali. (f) Condizione finale della regione di GaN [3].	9
1.7	(a) Rappresentazione della banda di conduzione in un'interfaccia AlGaIn/GaN dove sono evidenziati i vari contributi di carica. (b) Formazione del 2DEG in funzione dello spessore dello strato di AlGaIn non drogato; in (1) lo spessore è troppo piccolo per ionizzare gli stati superficiale, mentre in (2) è sufficientemente spesso portando alla formazione del 2DEG [4].	11
2.1	Tipica struttura di un HEMT laterale GaN-on-Si [1].	12
2.2	Sono rappresentate varie soluzioni per ottenere dispositivo <i>normally-off</i> : (a) MOSFET in serie, (b) Recessed Gate, (c) impianto di ioni di fluoro e (d) aggiunta dello strato di pGaN. Digramma a bande del dispositivo senza (e) e con (f) il pGaN. Tutte le immagini sono prese da [1].	16

2.3	Confronto tra la polarizzazione spontanea del $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ e del $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ al variare della percentuale x di Ga/Sc nella lega. Si può osservare come il valore assoluto della polarizzazione spontanea nel AlScN sia più elevata rispetto alla controparte con il Ga. Le interpolazioni non lineari per ambo i materiali sono prese da [5].	17
2.4	Simulazioni dei vari campioni creati in [6]. Il dispositivo rappresentato in (a) è accresciuto a 1000 °C senza interlayer; si nota come il 2DEG si allarghi dentro lo strato di AlGa N graduato, diminuendo la concentrazione nel picco. In (b) è presente l'interlayer e il 2DEG è invece ben confinato.	17
3.1	Zoom dell'immagine 2.4 (b). La linea blu piena rappresenta il valore della banda di conduzione, quella nera tratteggiata è il livello di Fermi. È evidenziato in rosso il salto tra le due bande di conduzione.	20
3.2	La variazione del bandgap (a) e del passo reticolare (b) in funzione della percentuale di Sc nel AlScN [7].	21
3.3	Diagramma a bande dettagliato di una giunzione con strato di interfaccia nell'ordine delle distanze atomiche; non si considera l'abbassamento della barriera per le cariche immagine [8]	25
3.4	(a) andamento del modello Masetti 3.17 contro il drogaggio netto N . (b) effetti dell'introduzione del modello Masetti nella simulazione finale. La mobilità è presa a 2nm dall'interfaccia interlayer/canale dentro al canale tramite Sentaurus Visual.	28
3.5	Mobilità contro il campo normale con il Modello Lombardi modificato. μ_b è stata calcolata con il modello Masetti applicando $N = 1$; μ_{sr} è stato calcolato con $\delta = 10^9$, $A = 1.085$ e a una distanza $x = 2$ nm dall'interfaccia.	29
3.6	In (a) è visibile l'andamento tipico della velocità degli elettroni per materiali a bandgap diretto e indiretto al variare del campo elettrico [3]. In (b) è graficato il modello Caughey-Thomas applicato a μ_{lf} valutata con Masetti e Lombardi. Il campo normale $E_{\perp} = 708$ kV/cm è stato valutato nella simulazione finale del dispositivo, dentro al canale sotto al drain a 2 nm dall'interfaccia AlN/GaN. . .	30
4.1	Rappresentazione schematica del dispositivo, non in scala. Cappello e passivazione sono indicati con un unico blocco, essendo entrambi di SiN_x . Le linee rosse rappresentano i contatti di metallizzazione. Con "+" sono segnate le trappole donori all'interfaccia cappello/barriera, con "-" il 2DEG.	33
4.2	Caratteristica di trasferimento in scala logaritmica e lineare per ambo i dispositivi (a). Caratteristica di uscita per entrambi i dispositivi a vari punti quiescenti (b); nell'interesse di questa tesi rientra solo il punto quiescente (0 V, 0 V) [10].	34
4.3	Caratteristica di uscita $I_D V_D$: risultati simulati a confronto con quelli sperimentali.	37

4.4	Effetti nelle curve di uscita al variare dei parametri del Caughey-Thomas β (a) e v_{sat} (b).	38
4.5	Effetti nelle curve di uscita al variare dei parametri del Lombardi δ (a) e A (b)..	38
4.6	Caratteristica di trasferimento $I_D V_G$: risultati simulati a confronto con quelli sperimentali in scala lineare (a) e logaritmica (b).	39
4.7	Dettaglio dello spostamento della tensione di soglia in funzione della funzione lavoro del metallo WF (a). Corrente sotto soglia al variare della massa di tunneling m_t (b)..	39

Introduzione

La quasi totalità dell'elettronica moderna si basa sui semiconduttori, e con essa l'evoluzione tecnologica dell'ultimo secolo.

Un semiconduttore è definito, dal punto di vista della fisica dello stato solido, dalla sua struttura a bande. A differenza dei metalli, dove la banda di conduzione e quella di valenza si sovrappongono, e degli isolanti, dove invece la distanza tra le due è elevata, nei semiconduttori questa è di un valore medio (generalmente sotto i 4 eV)

Questa particolarità permette di controllarne la conducibilità elettrica esternamente. Allo zero assoluto (0 K), un semiconduttore intrinseco si comporta come un isolante perfetto. Tuttavia all'aumentare della temperatura alcuni elettroni riescono ad acquisire abbastanza energia da saltare dalla banda di valenza a quella di conduzione, quindi separandosi dal proprio atomo e diventando liberi; in questo processo viene lasciato vuoto il legame da cui l'elettrone proviene, formando una *lacuna*. Nell'analisi di questi materiali, le lacune vengono considerate come vere e proprie cariche positive anche se ovviamente non si muovono: quando un elettrone che si libera le riempie, quest'ultimo avrà lasciato dietro di sé un'altra lacuna e questo è assimilabile a una lacuna che si muova nel senso opposto a quello degli elettroni, e dunque con carica opposta.

Il vero potenziale dei semiconduttori risiede nella possibilità di alterare permanentemente e localmente la densità dei portatori di carica attraverso il processo di drogaggio, sbloccando la creazione di interi circuiti fatti del medesimo materiale, detti integrati. L'introduzione controllata di impurità che abbiano un elettrone in più o in meno nel reticolo cristallino (come il boro o il fosforo nel silicio) permette di spostare il livello di Fermi e creare semiconduttori di tipo p o n, abbattendo la resistività di diversi ordini di grandezza.

È proprio l'interazione tra regioni a diverso drogaggio che ha permesso lo sviluppo della giunzione p-n e, conseguentemente, del transistor (BJT e MOSFET). Questi dispositivi, capaci di operare come interruttori controllati o amplificatori di segnale, sono alla base dell'integrazione su vastissima scala.

Oggi, mentre il silicio rimane il materiale dominante per la logica digitale, la ricerca si sta spingendo verso nuovi orizzonti. Materiali composti (come GaAs, InP) e semiconduttori ad ampia banda proibita o Wide Bandgap (come SiC e GaN) stanno ridefinendo i limiti di efficienza, frequenza di commutazione e densità di potenza, aprendo la strada a nuove applicazioni nel campo dell'elettronica di potenza e delle comunicazioni ad alta frequenza. È proprio dei semiconduttori ad ampio bandgap che si occupa questa tesi.

Per la redazione di questa tesi sono stati utilizzati strumenti di intelligenza artificiale generativa (Google Gemini 3.1, versione marzo 2026) per supporto nella creazione e nella chiarezza di alcuni paragrafi. In particolar modo la creazione è stata usata per l'introduzione, mentre l'utilizzo con finalità di chiarezza dell'esposizione è trasversale lungo tutta la tesi.

Capitolo 1

I Materiali ad Ampio Bandgap

Vengono definiti semiconduttori ad ampio bandgap quei materiali che possiedono un differenziale energetico tra la banda di conduzione (E_c) e quella di valenza (E_v), chiamato *energy gap* (E_G), superiore a 2 eV. Questa proprietà consente ai dispositivi di funzionare a tensioni, frequenze e temperature molto più elevate rispetto ai semiconduttori convenzionali come il silicio, il cui E_G vale 1.12 eV. In Figura 1.1a è visibile una tabella con le principali caratteristiche fisiche di vari semiconduttori ad ampio bandgap insieme ai più comuni Si e arseniuro di gallio (GaAs).

In questi materiali la relazione fra il campo elettrico critico (E_{crit}) e il gap energetico è data da $E_{crit} \propto E_G^{2.3}$ [1], dunque risultano avere un campo elettrico critico che può essere dell'ordine di dieci volte quello dei semiconduttori convenzionali. In Figura 1.1b è rappresentata graficamente la relazione fra E_{crit} e E_G per alcuni semiconduttori.

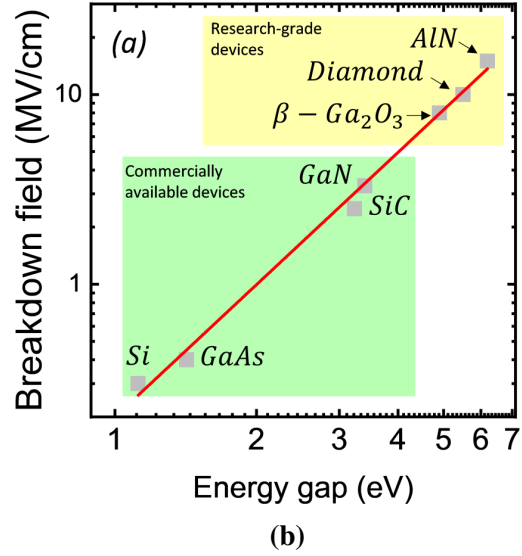
Una parte dei materiali con ampio bandgap vengono impiegati in etero-interfacce dove, grazie alla formazione di un gas bidimensionale di elettroni (*two-dimensional electron gas*, 2DEG), si raggiungono elevate velocità degli elettroni liberi permettendo di lavorare a velocità di commutazione più elevate, il che aumenta le loro prestazioni nelle applicazioni alle radio frequenze.

Grazie a una E_G più elevato, la quantità di portatori intrinseci, ovvero quelli presenti naturalmente grazie al contributo dell'energia termica, risulta ridotta rispetto al silicio per un finestra più ampia di temperature, si arriva ad operare senza perdere il controllo del dispositivo fino all'ordine di 300 °C contro i 125-185 °C tipici della tecnologia Si; questo permette a questi dispositivi di essere utilizzati a livelli di potenza molto più elevati con dissipatori ridotti, riducendo costi e volumi.

La combinazione di tali proprietà rende questi materiali particolarmente idonei all'impiego nelle tecnologie per la difesa, negli apparati a radiofrequenza e nei sistemi di conversione di potenza.

Material	Si	GaAs	4H-SiC	GaN	b-Ga ₂ O ₃	Diamond	AlN
E_G (eV)	1.12	1.42	3.23	3.4	4.9	5.5	6.2
ϵ_r	11.7	12.9	9.66	8.9	10	5.7	8.5
μ (cm ² /V s)	1440	9400	950	1400	250	4500	450
E_{crit} (MV/cm)	0.3	0.4	2.5	3.3	8 ^a	10 ^a	15 ^a
v_s ($\times 10^7$ cm/s)	1	0.9	2	2.4	1.1	2.3	1.4
κ_{th} (W/cm K)	1.3	0.55	3.7	2.5	0.1–0.3	23	2.85

(a)



(b)

Figura 1.1 – (a) Valori tabulati per vari semiconduttori. I parametri riportati sono il gap energetico (E_G), permittività dielettrica relativa (ϵ_r), mobilità elettronica (μ), campo elettrico critico (E_{crit}), velocità di saturazione degli elettroni (v_s) e conducibilità termica (κ_{th}). (b) Relazione tra il campo elettrico critico e il bandgap energetico nei materiali tabulati [1].

1.1 Il GaN

Come tipico nelle leghe III-N, la struttura cristallina del nitruro di gallio (GaN) è quella della wurzite visibile in Figura 1.2 (a). La forma è quella di un prisma a base esagonale. Il reticolo è definito dalla lunghezza dello spigolo dell'esagono alla base a_0 e dall'altezza del prisma c_0 ; nel caso del GaN si ha $a_0 = 3.189 \text{ \AA}$ e $c_0 = 5.185 \text{ \AA}$ [9]. Per studiare questa struttura si definiscono tre assi cristallografici alla base (a_1, a_2, a_3) e si crea un quarto asse cristallografico verticale nominato c , per il quale non esiste un piano di inversione perpendicolare. Come conseguenza si ha una polarizzazione spontanea: la faccia in direzione [0001] possiede solo atomi di azoto (N) o di gallio (Ga) e dato che N ha un elettronegatività maggiore rispetto al Ga, si crea un dipolo. L'orientazione della polarizzazione si definisce assumendo che la direzione positiva vada dall'atomo metallico (catione) al più vicino atomo di azoto (anione) [9]. Questo rende il GaN un materiale polare nella direzione [0001] la cui polarità è determinata dall'atomo nella faccia in superficie; si parla quindi di materiale Ga-polare o N-polare. Le conseguenze di questa polarizzazione spontanea saranno analizzate in seguito.

Il GaN è un materiale a *bandgap diretto*, il che significa che sia il minimo della banda di conduzione che il massimo della banda di valenza si trovano sopra il punto Γ , come visibile in Figura 1.3. Possiede un energy gap di 3.4 eV, da cui ne discende che il suo breakdown field è di 3.3 MV/cm, 11 volte superiore al silicio (0.3 MV/cm) [1]. Come in tutti i semiconduttori, il bandgap energetico diminuisce all'aumentare della temperatura seguendo la relazione di

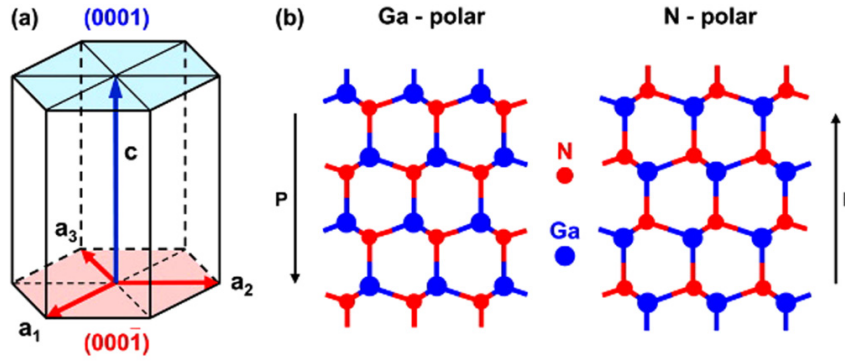


Figura 1.2 – (a) Struttura cristallina della wurzite e (b) struttura atomica Ga-polare e N-polare nel GaN. Le frecce rappresentano la direzione del dipolo spontaneo [1].

Varshni:

$$E_G(T) = E_{G,0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1.1)$$

dove $E_{G,0}$ è il valore del bandgap a 0 K, α [eV/K] e β [K] costanti specifiche del materiale tabulate; nella tabella 1.1 sono riportate per il GaN e per il nitruro di alluminio (AlN).

	$E_{G,0}$ (eV)	α ($\frac{\text{meV}}{\text{K}}$)	β (K)
GaN	3.507	0.909	830
AlN	6.23	1.799	1462

Tabella 1.1 – Bandgap a 0 K e coefficienti di Varshni per il GaN e il AlN [1].

L'effetto piezoelettrico o piezoelettricità è la generazione di cariche elettriche sulla superficie di un materiale non conduttore in risposta a una deformazione meccanica e viceversa. Nel GaN gli effetti piezoelettrici si possono intuire osservando la Figura 1.4: sapendo che l'elettronegatività dell'azoto è superiore a quella del gallio, gli elettroni sono accumulati intorno al primo. Se si immagina di trovarsi nel caso (a), ovvero di tirare la struttura, i tre atomi di azoto alla base tenderanno a mettersi in piano con quello di gallio, i loro dipoli cancelleranno i loro effetti a vicenda lasciando solo il dipolo verticale in direzione $[000\bar{1}]$ come componente dominante. Viceversa, nel caso (b), comprimere la struttura genererà un maggiore componente verticale nei tre atomi N alla base, sommando i loro effetti e dando un risultante complessiva in direzione $[0001]$.

Il drogaggio è una tecnica che consiste nel inserire impurità nel cristallo del semiconduttore allo scopo di modificare la densità dei portatori di carica, ovvero la conducibilità elettrica del materiale. Queste impurità sono di fatto atomi estranei inseriti nel reticolo cristallino che agiscono da trappole energetiche. I droganti si distinguono in donori e accettori: i primi hanno un elettrone di valenza in più rispetto al semiconduttore ospite, sono neutri da occupati e ionizzati positivamente quando si liberano dell'elettrone in più; i secondi hanno un elettrone di valenza in meno rispetto al semiconduttore ospite, sono neutri quando il loro stato energetico è libero e ionizzati negativamente quando questo è occupato da un elettrone. L'occupazione degli stati

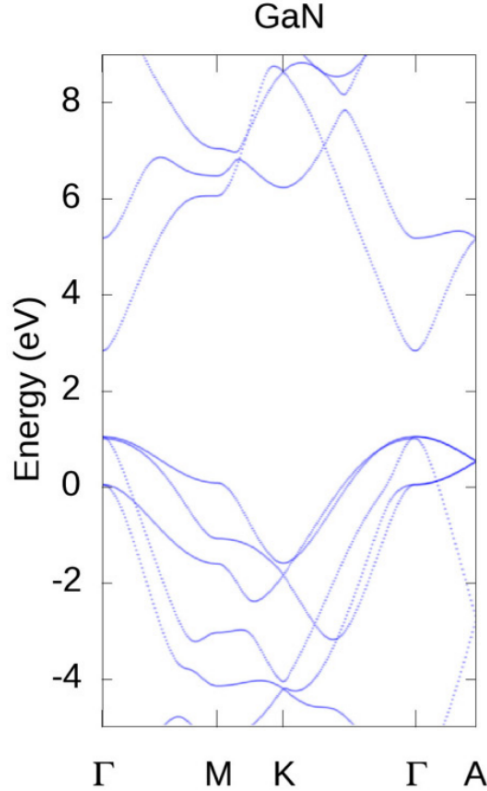


Figura 1.3 – Struttura a bande del GaN [2]. Si può osservare in corrispondenza dell'ascissa Γ sia il massimo della E_v che il minimo della E_c .

energetici dipende dal loro posizionamento energetico nella banda proibita, seguendo la statistica di Fermi:

$$P(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_b T}} + 1} \quad (1.2)$$

dove k_b è la costante di Boltzmann e E_F il livello di Fermi. In un semiconduttore non drogato, E_F si trova circa al centro della banda proibita e per quel livello energetico la probabilità di occupazione è del 50%, per un livello energetico più alto diminuisce esponenzialmente e viceversa per un livello energetico inferiore a E_F . Dunque minore è la distanza energetica tra le trappole e la banda di riferimento (donori con E_c e accettori con E_v) e più facilmente questi atomi si ionizzeranno, risultando migliore la qualità del drogante. Nel caso del GaN ci sono ottimi droganti tipo n (Si: $E_c - E_d = 0.015eV$), mentre risulta difficile il drogaggio tipo p (Mg: $E_a - E_v = 0.16eV$) [1]. Bisogna però notare che il GaN ha spesso una conducibilità di tipo n residua anche senza drogaggio, nel qual caso si parla di *unintentionally doped*. Questo fenomeno avviene per una combinazione di effetti tra la polarizzazione spontanea e i difetti superficiali di tipo donore.

Il GaN è accresciuto nella direzione cristallografica (0001) che come si è visto porta alla presenza di una polarizzazione spontanea. Gli effetti delle singole celle si annullano all'interno del corpo del cristallo (Figura 1.5), lasciando solo la carica superficiale $\pm Q_\pi$. Questa creerebbe un elevato campo elettrico dell'ordine dei MV/cm e indurrebbe a una situazione non fisica se

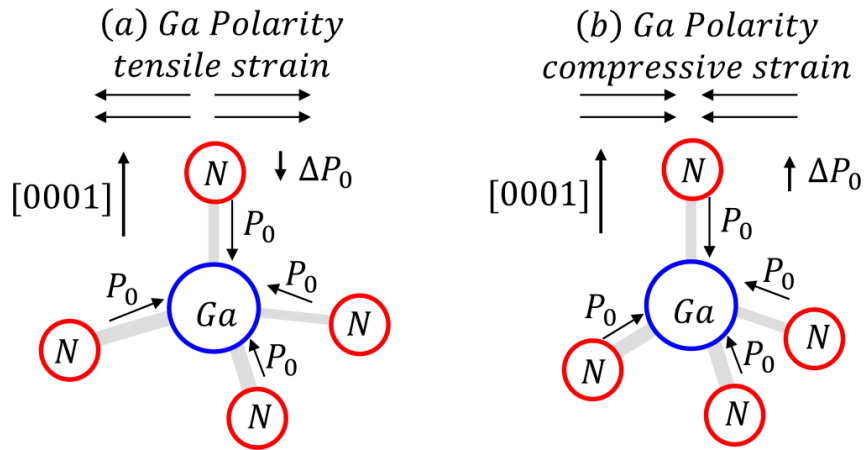


Figura 1.4 – Rappresentazione della polarizzazione netta nel tetraedro (ΔP_0) del GaN quando sottoposto a trazione (a) e compressione (b) [1].

non fosse schermata da cariche di screening Q_{src} , che quindi per la neutralità di carica devono esistere [3].

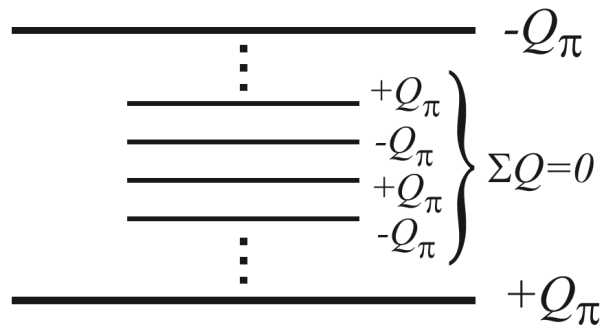


Figura 1.5 – Modello delle cariche in uno strato di GaN. La somma delle cariche di polarizzazione spontanea è pari a 0 nel corpo del materiale [3].

Si assuma in prima battuta l'assenza di difetti in una regione di GaN cresciuta epitassialmente. Senza trappole donori date dai difetti sulla superficie, il campo elettrico generato dalle cariche della polarizzazione spontanea piega le bande di conduzione e di valenza, come visibile in Figura 1.6a. Al crescere dello spessore si arriverà a una lunghezza critica d_{cr} dove la E_v raggiunge il livello di Fermi (Figura 1.6b): questo comporta generazione di coppie elettrone-lacuna alla superficie, ma gli elettroni si muovono verso l'eterointerfaccia per il fenomeno di deriva (Figura 1.6c). Questi accumuli di elettroni e di lacune portano alla schermatura della carica $\pm Q_\pi$.

Se ora consideriamo l'esistenza di difetti sotto forma di trappole donori (Figura 1.6d) sarà sufficiente un minore piegamento di bande perché questi difetti arrivino al livello di Fermi, ionizzandosi e rilasciando elettroni che si comportano come nel caso precedente. La differenza sta nel fatto che il ruolo prima giocato dalle lacune è ora ricoperto dagli atomi ionizzati dei difetti; si osserva, inoltre, un fenomeno di pinning del livello di Fermi indotto dalle trappole in funzione dell'incremento dello spessore dello strato. Si noti che a controbilanciare $-Q_\pi$ alla superficie contribuiscono anche gli ioni nella zona svuotata. La situazione finale sarà evidente-

mente quella in Figura 1.6f: simile a un drogaggio tipo n ma con le bande piegate verso l'alto alla superficie a causa della zona di carica spaziale.

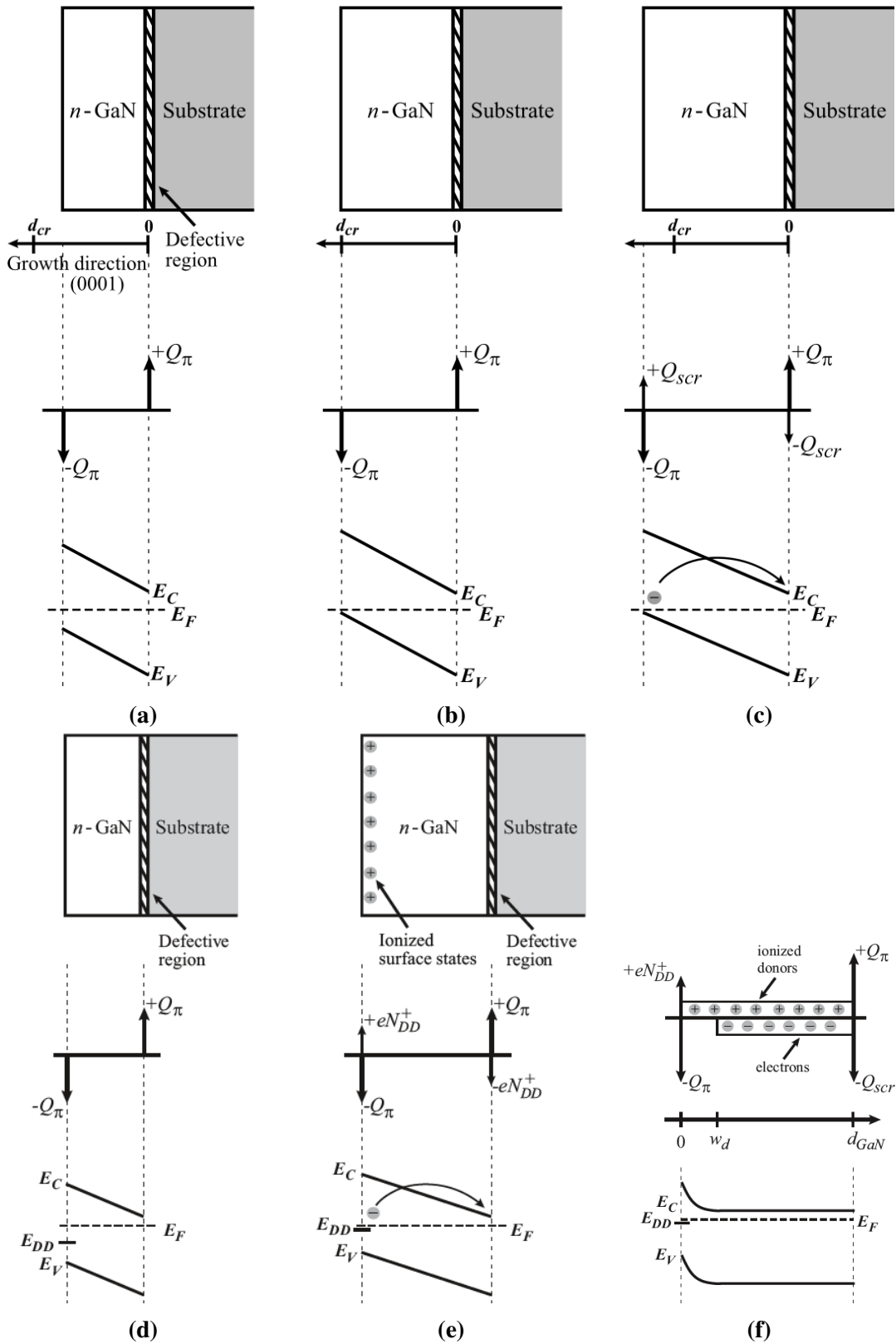


Figura 1.6 – Rappresentazione schematica di una regione di GaN, bande di conduzione e profilo di carica in vari stadi di crescita e ipotesi. (a), (b) e (c) rappresentano i tre step della crescita nell'ipotesi di assenza di difetti superficiali. (d) e (e) rappresentano l'accrescimento in presenza di difetti superficiali. (f) Condizione finale della regione di GaN [3].

1.2 Formazione del 2DEG

L'impiego del GaN che più interessa questo lavoro è quello nelle eterostrutture, come ad esempio nell'etero-interfaccia con il nitruro di alluminio-gallio (AlGaN). Proprio in queste interfacce viene a crearsi il *two-dimensional electron gas* (2DEG) elemento principale dei transistori ad elevata mobilità elettronica (HEMT). Il 2DEG è l'insieme di elettroni che viene a formarsi in una buca energetica triangolare. Per la forma della buca, gli elettroni sono liberi di muoversi nel piano del dispositivo ma confinati nella direzione di crescita dello stesso [3].

Si supponga di avere un interfaccia AlGaN/GaN. Si inizi notando che la lega di $Al_{1-x}Ga_xN$ ha sempre la forma di una wurzite e che questa segue la Legge di Vegard: i parametri del reticolo variano linearmente con la concentrazione di atomi di gallio che sostituiscono quelli di alluminio nella struttura. In particolare il parametro cristallino $a(x)$ (in Å) segue la relazione [5]:

$$a^{Al_{1-x}Ga_xN}(x) = 3.1095 + 0.0891x. \quad (1.3)$$

Questo mette in evidenza che il reticolo di AlGaN accresciuto sopra quello di GaN, avendo un passo reticolare minore, si trova sottoposto a una forza di trazione. Ciò risulta in una deformazione meccanica della regione di GaN sottostante portando dunque alla formazione di cariche piezoelettriche nel materiale.

Per proseguire l'analisi si assuma per ipotesi la presenza del 2DEG. È rappresentata nella Figura 1.7a la banda di conduzione di una tipica interfaccia AlGaN/GaN in uso nei transistori. Si distingue la buca energetica dove è presente il 2DEG con una concentrazione di elettroni pari ad n_S , le cariche dovute alla polarizzazione piezoelettrica e spontanea dell'AlGaN di valore $\pm\sigma_{PZ}$ localizzate all'interfaccia AlGaN/GaN e alla superficie, la carica dovuta al drogaggio dell'AlGaN (σ_{AlGaN}), la carica degli stati superficiali ionizzati ($\sigma_{Surface}$) ed infine l'eventuale carica nel corpo del GaN (buffer) data dai difetti (σ_{Buffer}); si può addurre che quest'ultima deve essere necessariamente negativa oppure non si avrebbe il confinamento elettronico del 2DEG, quindi non può esserne neanche la fonte in quanto degli elettroni provenienti dal buffer si lascerebbero dietro delle cariche positive.

Considerando che il dispositivo è globalmente neutro, la somma di tutte queste cariche deve essere nulla; inoltre si può aggiungere che in tale somma non contribuiscono $\pm\sigma_{PZ}$, il cui contributo si auto-annulla, né σ_{Buffer} che si può assumere trascurabile in un dispositivo ben progettato. Con quel che rimane otteniamo quindi:

$$\sigma_{Surface} + \sigma_{AlGaN} - qn_S = 0 \quad (1.4)$$

Questa equazione mette in rilievo qual è la fonte degli elettroni nel 2DEG: il drogaggio dell'AlGaN e gli stati superficiali.

Tuttavia esiste una dipendenza di n_S dallo spessore dello strato di AlGaN. Assumiamo ora

che l'AlGaN non sia drogato ($\sigma_{AlGaN} = 0$) e che lo spessore sia sufficientemente piccolo da non ionizzare gli stati superficiali posizionati a distanza $E_F - E_D$, allora il 2DEG sarà assente perché $\sigma_{Surface} = qn_S = 0$. Si ricordi che l'AlGaN è sottoposto a un campo elettrico generato dalle cariche di polarizzazione e che questo non è schermato, ne discende che le bande nel materiale sono piegate come in Figura 1.7b (1). All'aumentare dello spessore dell'AlGaN diminuirà $E_F - E_D$ fino al punto in cui gli stati superficiali inizieranno a ionizzarsi, diventando cariche positive e liberando elettroni che viaggeranno all'interfaccia con il GaN, dato che la banda di conduzione lì ha un livello energetico più basso, visibile in Figura 1.7b (2). Le trappole ionizzate inoltre inchiodano il livello di Fermi, sicché all'aumentare dello spessore, invece di far salire il livello delle trappole donori, sprofonda la buca di potenziale nel GaN, accumulando elettroni. Naturalmente il processo non va avanti *ab libitum*, superato un certo spessore la tensione meccanica nel AlGaN diminuisce ed il 2DEG torna a calare.

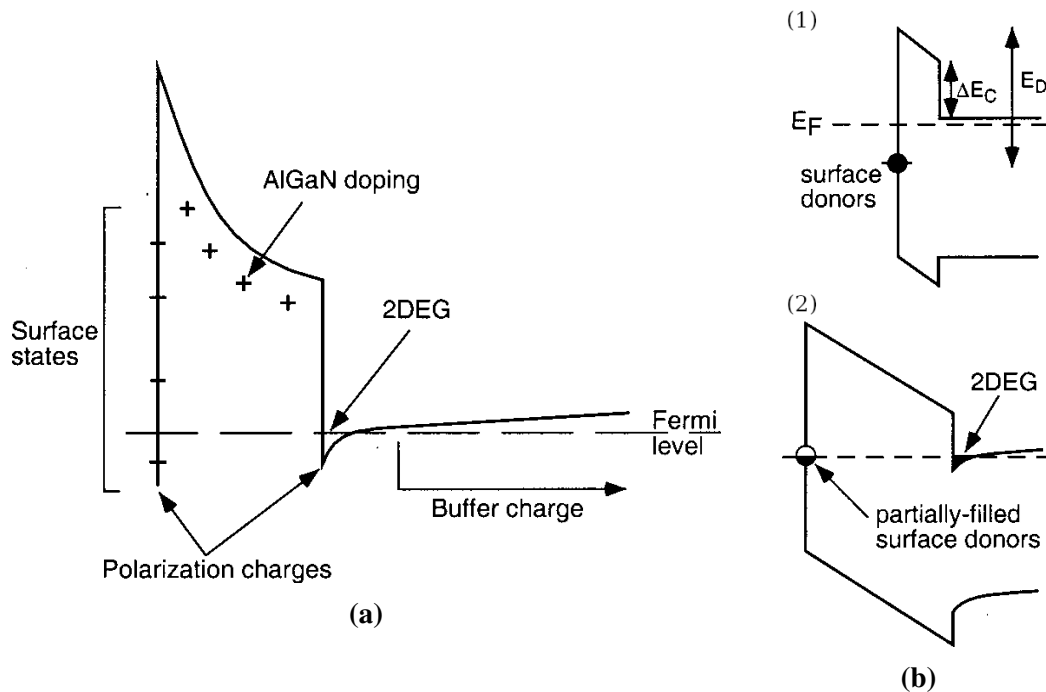


Figura 1.7 – (a) Rappresentazione della banda di conduzione in un'interfaccia Al-GaN/GaN dove sono evidenziati i vari contributi di carica. (b) Formazione del 2DEG in funzione dello spessore dello strato di AlGaN non drogato; in (1) lo spessore è troppo piccolo per ionizzare gli stati superficiali, mentre in (2) è sufficientemente spesso portando alla formazione del 2DEG [4].

Capitolo 2

High electron mobility transistor - HEMT

2.1 Struttura

In Figura 2.1 è rappresentato un tipico transistor a alta mobilità elettronica (HEMT); a seguire l'analisi delle varie parti e il loro scopo.

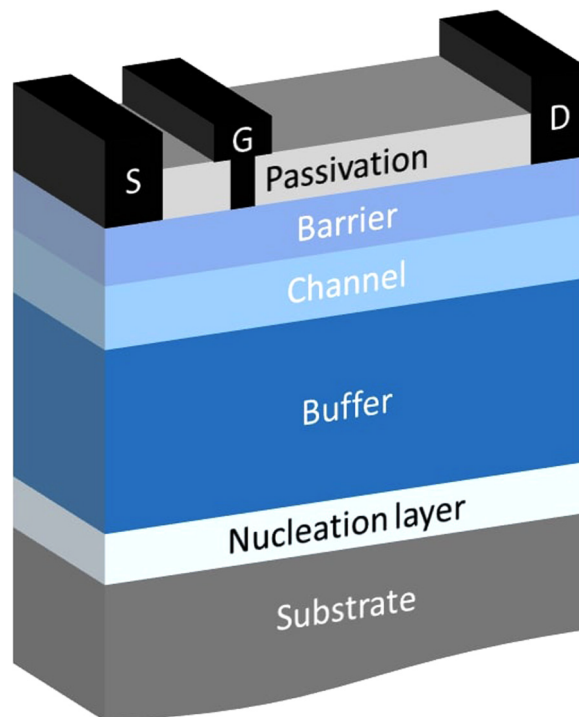


Figura 2.1 – Tipica struttura di un HEMT laterale GaN-on-Si [1].

Il substrato, comunemente di Si, zaffiro o SiC [1], è il supporto fisico su cui si costruisce il dispositivo. Non è possibile accrescere il nitruro di gallio direttamente su questo poiché la differenza tra i reticoli cristallini porterebbe ad accrescere il GaN sotto tensione meccanica e la mancata corrispondenza dei coefficienti di espansione termica causerebbe delle crepe. Per evitare queste incrinature è quindi necessario frapporre uno strato di transizione che tenga sotto controllo l'espansione termica: questo è il ruolo dello strato di *nucleazione*. Questo è solita-

mente composto di AlN, materiale la cui variazione del passo reticolare rispetto al GaN è del 2.5%; questa peculiare differenza genera una compressione che controbilancia quella traente durante il raffreddamento del reticolo [1].

Lo strato successivo è quello *tampone* o *buffer*, il suo ruolo è cruciale per accrescere un GaN di ottima qualità, confinare il 2DEG e quindi evitare perdite sotto soglia. Un approccio diffuso è quello del *graded AlGaN*: consiste nel realizzare vari strati di qualche micrometro di $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ con x decrescente per ogni deposito successivo, in modo da passare per "gradini" dal AlN al GaN. Questa tecnica permette di mitigare ulteriormente le discrepanze tra il reticoli e i coefficienti termici e di migliorare il confinamento dei portatori rispetto ad un buffer semplice. Un'altra tecnica molto usata è quella di fare il buffer direttamente in GaN ma di drogarlo con ferro o carbonio, per aumentarne la resistività [1].

Il *canale* di GaN e la *barriera* di AlGaN formano l'etero-struttura: a quest'interfaccia, appena dentro il canale, è presente il 2DEG. Questa struttura è stata analizzata precedentemente nella Sezione 1.2. Vale la pena notare che il trasporto delle cariche avviene nel 2DEG, dunque non è presente moto per le lacune.

Il *cappello* e la *passivazione* terminano l'opera. Il cappello è spesso fatto di GaN o SiN, con lo scopo di ridurre l'ossidazione dello strato sottostante di AlGaN, migliorando l'interfaccia. Questo è cruciale: dato che gli stati superficiali dell'AlGaN influenzano direttamente la formazione del 2DEG, la presenza di stati superficiali negativi potrebbe agire da "gate virtuale" svuotando localmente la buca di potenziale. La passivazione è normalmente fatta di SiN con lo scopo di isolare il dispositivo sottostante.

2.1.1 Dispositivi Normalmente Spenti

Il controllo del dispositivo è abbastanza intuitivo: andare ad applicare una tensione sufficientemente negativa sul gate repelle gli elettroni nel 2DEG sottostante, svuotandolo e spegnendo il dispositivo. Anche questa semplice spiegazione fa emergere quelli che sono i problemi di sicurezza in questi dispositivi: sono infatti normalmente accesi. Questo è particolarmente critico per le applicazioni di potenza dove in caso di malfunzionamento il transistor non si spegne in automatico ma, rimanendo acceso, fa scorrere un corrente che può danneggiare l'intero sistema. Non è neanche da sottovalutare la complicazione progettuale di dover avere generatori di tensione negativi.

Tuttavia esistono varie tecniche per rendere il dispositivo normalmente spento [1]. Una prima soluzione è mettere un MOSFET di Si in serie come in Figura 2.2a. Il MOSFET controlla l'accensione del HEMT: quando una tensione positiva viene applicata al MOSFET, la tensione V_{GS} del HEMT è circa zero, mentre quando il MOSFET è spento viene bloccata la corrente anche al HEMT. Il sistema risulta affidabile in quanto ogni aumento in tensione è gestito dal HEMT, ma la presenza del MOSFET mette un limite alla temperatura massima di lavoro.

Un'altra soluzione è avvicinare fisicamente il contatto di gate all'eterointerfaccia, come rappresentato in Figura 2.2b. Questo permette di avere alte tensioni di soglia, ma la scelta del dielettrico è estremamente importante in quanto influenza direttamente la mobilità nel canale, così come controllare i difetti della superficie scavata.

È anche possibile impiantare degli ioni di fluoro sotto al gate (Figura 2.2c): questi ioni negativi nella barriera cambiano il potenziale superficiale, svuotando localmente il 2DEG sottostante. Emerge però un problema di stabilità della tensione di soglia ad alte temperature e/o alte tensioni.

Un ultimo metodo molto usato è quello di aggiungere una regione di GaN tipo p (pGaN) sotto al gate, visibile in Figura 2.2d. La presenza del pGaN alza il livello energetico delle bande, cosicché il 2DEG sia svuotato anche in assenza di potenziali esterni. Il confronto tra le bande senza e con il pGaN è visibile in Figura 2.2e e 2.2f, rispettivamente. Tuttavia per poter svuotare bene il canale è necessario che la percentuale di Al nella barriera e l'altezza di questa non siano troppo elevate; inoltre la presenza del pGaN crea un diodo p-i-n nel gate, che accendendosi durante il funzionamento operativo del dispositivo può portare ad un aumento della corrente di perdita nel gate [1].

2.2 Da AlGa_N a AlSc_N

A differenza di quanto appena descritto, il dispositivo ricreato e simulato in questa tesi non utilizza una barriera di AlGa_N ma di nitrato di alluminio-scandio (AlSc_N). Come si è visto nella sezione 1.2, il 2DEG si forma come commistione tra gli effetti della polarizzazione spontanea e piezoelettrica nei materiali; l'AlSc_N possiede una maggiore polarizzazione spontanea e piezoelettrica rispetto al AlGa_N, permettendo un aumento della densità di carica del 2DEG anche quattro volte superiore a quello che si riesce ad ottenere in un dispositivo con barriera di AlGa_N [10]. In Figura 2.3 si possono vedere graficate le polarizzazioni spontanee del AlGa_N e del AlSc_N al variare della percentuale di Ga/Sc nella lega confrontate fra di loro. È da notare che per via della maggiore polarizzazione spontanea si ha un miglioramento nella densità di carica anche in interfacce con reticoli allineati (*lattice-matched*), quindi in assenza di effetti piezoelettrici come per l'AlSc_N. La condizione di reticolo allineato avviene per una lega con il 18% di Sc e permette di costruire strati di barriera più spessi, meno soggetti a difetti creati dallo stress e da crepe create dal rilassamento [6]. Le barriere più spesse sono interessanti anche per le applicazioni a radiofrequenza, perché diminuiscono le perdite nel gate ad alta frequenza.

Tuttavia l'accrescimento del AlSc_N può risultare problematico ed è necessario operare un cambiamento strutturale dal dispositivo precedentemente analizzato, come evidenziato nella prossima sezione.

2.2.1 L'Interlayer

Per poter permettere la produzione commerciale di questi dispositivi, gli strati vanno accresciuti tramite la deposizione di vapore chimico metallorganico (metal-organic chemical vapour deposition, MOCVD). Questa tecnica prevede l'iniezione di gas purissimi dentro a reattori a pressioni moderate e alte temperature. Per il AlScN i tempi di deposizione sono elevati a causa della bassa pressione a cui i precursori dello scandio vanno accresciuti ($0.05\mu\text{m/h}$) [6]; unito alle alte temperature (fino a 1200°C , [6]), l'elevato budget termico permette all'alluminio di diffondersi nel GaN sottostante, creando un nuovo strato graduato di AlGa_xN tra il canale e la barriera. L'introduzione di questa nuova regione determina una delocalizzazione spaziale degli elettroni, i quali tendono a distribuirsi anche nella regione di AlGa_xN. Questa transizione in una distribuzione di tipo 3D comporta una perdita di confinamento che, pur mantenendo il picco di densità all'eterointerfaccia, penalizza le proprietà di trasporto e degrada le prestazioni complessive del dispositivo.

Isabel Streicher et al. [6] hanno investigato questo fenomeno per migliorare la formazione dell'interfaccia. Hanno trovato come prima soluzione la riduzione della temperatura di crescita della barriera a 900°C . Una seconda soluzione proposta, più influente, è la presenza di uno strato intenzionale aggiuntivo di AlN, chiamato *interlayer*. Data la bassa mobilità superficiale degli atomi di Al durante l'accrescimento, la maggiore forza del legame Al-N rispetto a quello Ga-N e una velocità di accrescimento superiore rispetto al AlScN, questo interlayer stabilizza l'interfaccia e previene la retro-diffusione dell'alluminio durante l'accrescimento della barriera.

Risultati simulati e confermati sperimentalmente da Isabel Streicher et al. [6] sono visibili in Figura 2.4.

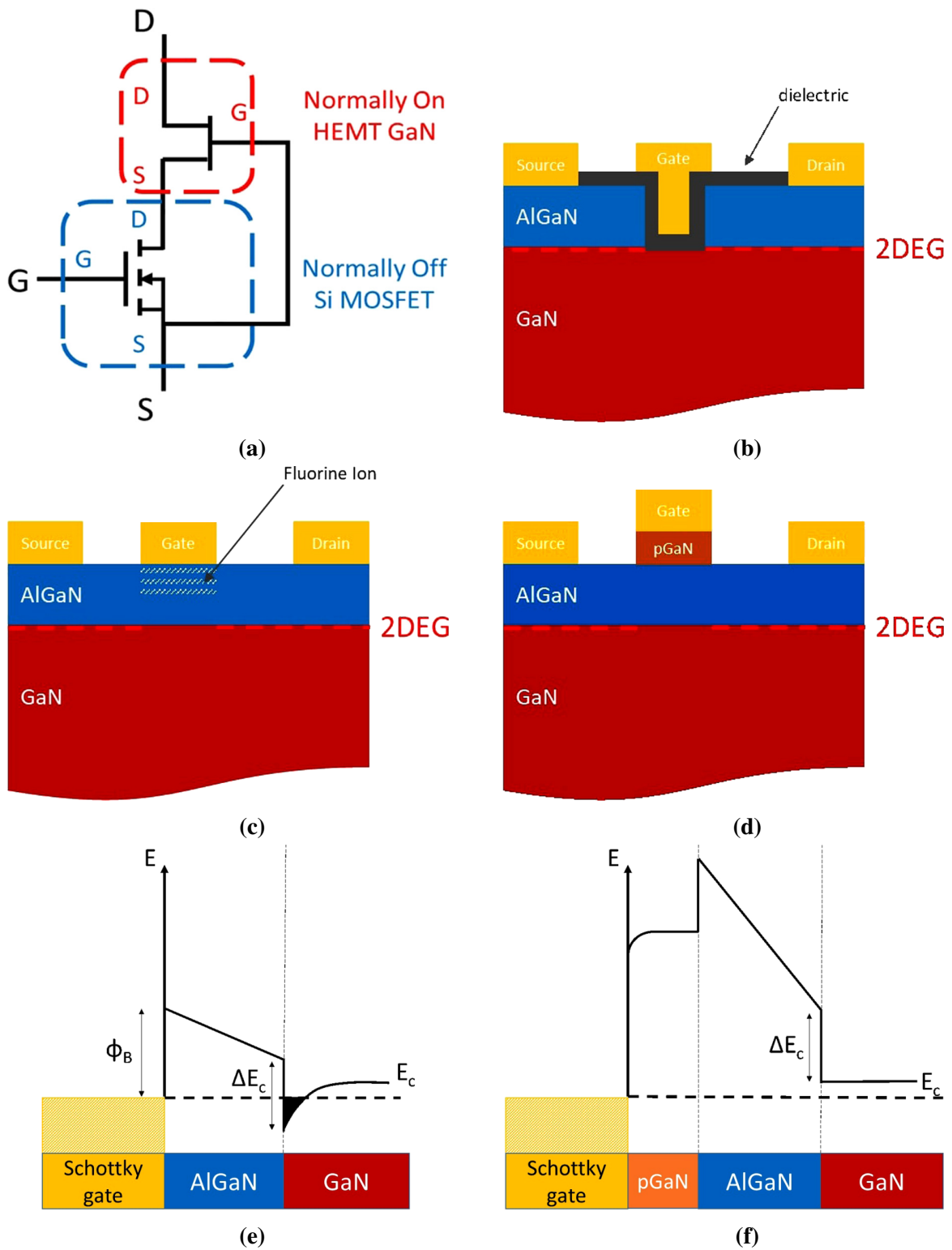


Figura 2.2 – Sono rappresentate varie soluzioni per ottenere dispositivo *normally-off*: (a) MOSFET in serie, (b) Recessed Gate, (c) impianto di ioni di fluoro e (d) aggiunta dello strato di pGaN. Digramma a bande del dispositivo senza (e) e con (f) il pGaN. Tutte le immagini sono prese da [1].

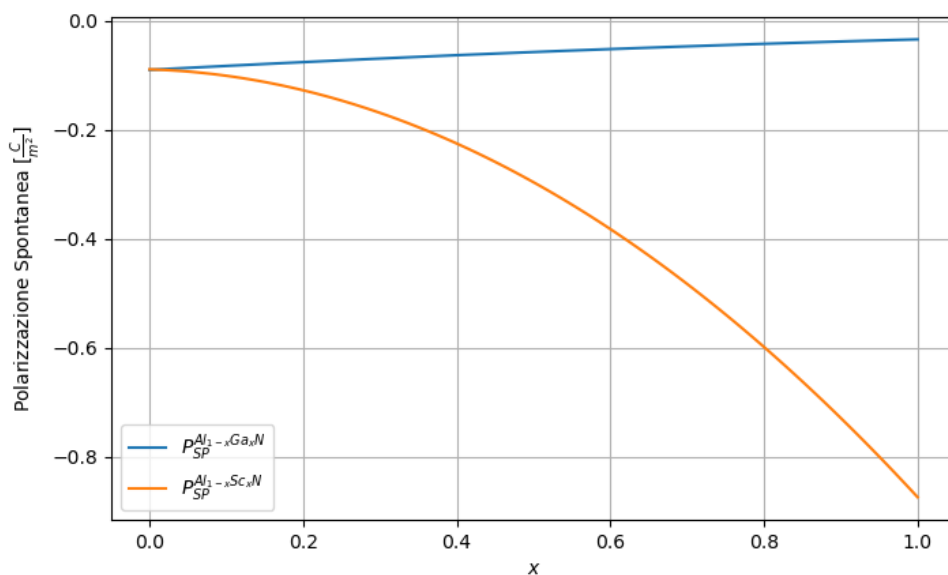


Figura 2.3 – Confronto tra la polarizzazione spontanea del $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ e del $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ al variare della percentuale x di Ga/Sc nella lega. Si può osservare come il valore assoluto della polarizzazione spontanea nel AlScN sia più elevata rispetto alla controparte con il Ga. Le interpolazioni non lineari per ambo i materiali sono prese da [5].

(a) No. A1, w/o AlN-IL, 1000°C (b) No. B, with AlN-IL, 1000°C

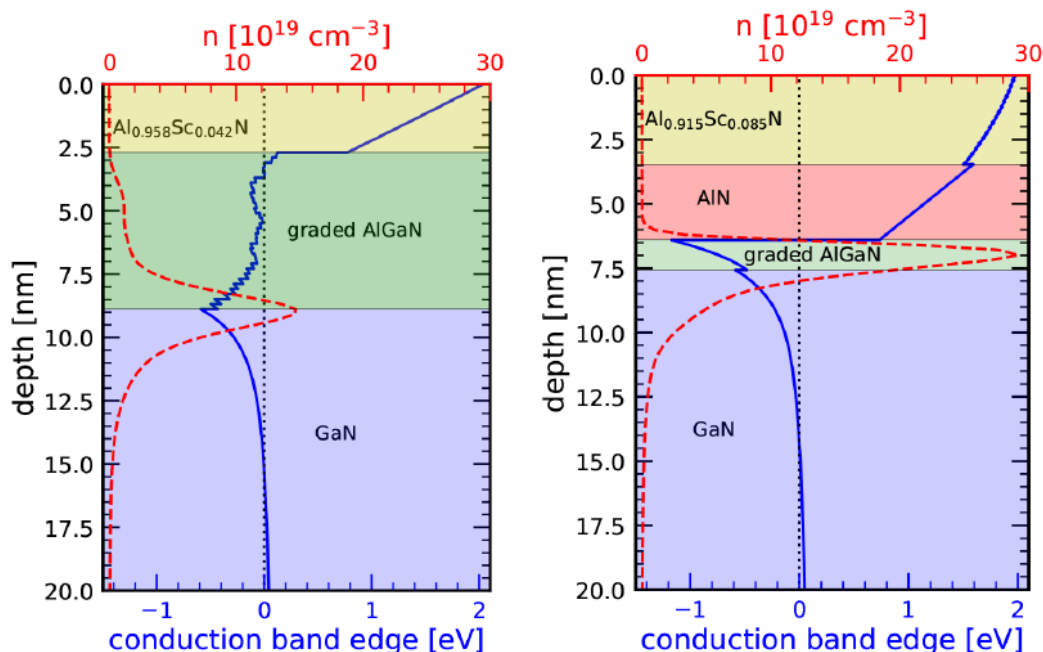


Figura 2.4 – Simulazioni dei vari campioni creati in [6]. Il dispositivo rappresentato in (a) è accresciuto a 1000 °C senza interlayer; si nota come il 2DEG si allarghi dentro lo strato di AlGaN graduato, diminuendo la concentrazione nel picco. In (b) è presente l’interlayer e il 2DEG è invece ben confinato.

Capitolo 3

Sentaurus TCAD e Modelli Fisici

3.1 Sentaurus TCAD

Gli strumenti di simulazione per il Technology Computer-Aided Design (TCAD) sono molto usati nella moderna industria dei semiconduttori, perché permettono di ridurre i costi e accelerare la ricerca.

Questi programmi sono dei software specifici che modellano la fabbricazione di semiconduttori e il funzionamento dei dispositivi a semiconduttore, risolvendo equazioni differenziali parziali, come le equazioni del trasporto di carica, in uno spazio geometrico discretizzato; partendo dalla fisica del problema, questi programmi TCAD hanno capacità predittive elevate.

In ambito TCAD, le simulazioni si dividono in due categorie in funzione dell'oggetto della modellazione: le simulazioni di processo e le simulazioni di dispositivo.

Le prime si occupano di modellare le varie fasi del processo di fabbricazione dei semiconduttori, come l'attacco chimico (etching), la deposizione e l'impianto ionico. I processi sono simulati a partire dalle equazioni fisiche che governano tali fenomeni su un dominio spaziale discretizzato (wafer).

Le seconde, invece, operano sulla geometria del componente finito. Dopo la discretizzazione della struttura in una mesh di nodi, vengono risolte numericamente le equazioni del trasporto per determinare localmente le grandezze di interesse, come la densità di corrente, il potenziale elettrostatico e il campo elettrico.

Il tipico flusso di lavoro nei TCAD comprende due passi: la creazione del dispositivo e la simulazione dello stesso.

Il TCAD usato nello svolgimento per questo lavoro è Sentaurus TCAD di Synopsys. Sentaurus contiene molti strumenti, ma in particolare si è utilizzato:

Sentaurus Workbench Sentaurus Workbench è il front-end grafico. Viene usato per organizzare e lanciare simulazioni, gestendo in automatico il flusso dei dati tra uno strumento e l'altro. Consente la definizione di parametri e variabili per lanciare simulazioni parametriche.

A ogni simulazione o parametro è associato un *nodo* e una sequenza completa di nodi è definita *esperimento*.

Sentaurus Structure Editor Questo strumento permette di creare dispositivi 2D e 3D. Ha tre diverse modalità di lavoro: creazione 2D, creazione 3D e simulazione dei processi 3D. Lo Structure Editor consente anche di mischiare fra loro creazioni geometriche e simulazione di processi. È in questo strumento che si definiscono i materiali, le interfacce, i drogaggi e i contatti.

Sentaurus Mesh Sentaurus Mesh permette la generazione automatica delle maglie (*mesh*) per la discretizzazione del dispositivo. Una maglia più stretta permette simulazioni più accurate aumentando però il tempo necessario alla computazione. Normalmente si usano maglie non uniformi discretizzando finemente solo le parti del dispositivo che più interessano, come le interfacce tra i materiali; la maglia può essere automaticamente adattata non solo alla geometria del dispositivo ma anche alla concentrazione del drogaggio.

Sentaurus Device Questo è lo strumento che simula le caratteristiche elettriche, termiche e ottiche dei dispositivi creati e discretizzati in precedenza. In particolar modo, risolve per ogni nodo della maglia del dispositivo l'equazione di Poisson e della continuità degli elettroni e delle lacune, ovvero il modello Deriva-Diffusione. In questo strumento si dichiarano i modelli fisici da usare globalmente e specificatamente nei materiali, nelle regioni e nelle interfacce del dispositivo; vengono dichiarati anche stimoli agli elettrodi e i modelli matematici da usare per la simulazione.

Sentaurus Visual Sentaurus Visual permette di visualizzare in modo interattivo i dati simulati. Consente di misurare e creare grafici, anche sezionando il dispositivo con delle cutline. Si noti che i processi di misura possono essere automatizzati e lanciati da Sentaurus Workbench, come un qualsiasi altro strumento.

3.2 I Parametri del Nuovo Materiale AlScN

In Sentaurus TCAD non è presente il file che descrive i parametri del AlScN, dato che si tratta di un materiale relativamente nuovo per il quale molti parametri non sono ancora noti. È stato dunque necessario ricavare i parametri del materiale in letteratura per poi inserirli nel TCAD.

Il dispositivo creato da S. Krause et al. [10] possiede una percentuale di scandio nella lega di AlScN molto bassa, circa del 5%. È quindi possibile assimilare il grosso del comportamento del materiale come simile al AlN (presente nel TCAD), operando delle opportune modifiche ai parametri fisici, quali: affinità elettronica, bandgap, passo reticolare, polarizzazione spontanea, coefficienti di polarizzazione piezoelettrica ed elastica e infine la massa efficace degli elettroni.

Affinità elettronica

L'affinità elettronica (χ_0) rappresenta la differenza energetica tra l'energia del vuoto (E_0) e il minimo della banda di conduzione (E_c) in un semiconduttore o in un isolante [3]. L'energia del vuoto è l'energia necessaria affinché un elettrone sia completamente libero, ovvero a distanza infinita dalla superficie del solido.

Come prima quantificazione si è trovato nell'articolo di I. Streicher et al [6] una figura nella quale viene valutato l'effetto dell'interlayer di AlN in un dispositivo HEMT con barrier in $\text{Al}_{0.915}\text{Sc}_{0.085}\text{N}$ in cui è rappresentata anche la banda di conduzione. Essendo AlN e AlScN a contatto, è facilmente osservabile il salto tra i due livelli energetici all'interfaccia $E_c^{\text{AlN}} - E_c^{\text{AlScN}}$ (Figura 3.1). Applicando la definizione di χ_0 , si può ricavare:

$$\chi_0^{\text{AlScN}} = E_0 - E_c^{\text{AlScN}} + (E_c^{\text{AlN}} - E_c^{\text{AlScN}}) = \chi_0^{\text{AlN}} + E_c^{\text{AlN}} - E_c^{\text{AlScN}} \quad (3.1)$$

Dove χ_0^{AlN} è noto nei file di Sentaurus e $E_c^{\text{AlN}} - E_c^{\text{AlScN}}$ è estraibile graficamente. Ovviamente questo χ_0 fa riferimento ad una lega con l'8.5% di scandio, mentre quella in esame ne possiede solo il 5%. Si utilizza dunque la funzione di interpolazione lineare in Sentaurus specificando come 0 i parametri del AlN e come 1 i parametri della lega $\text{Al}_{0.915}\text{Sc}_{0.085}\text{N}$, così estraendo il valore al 5%.

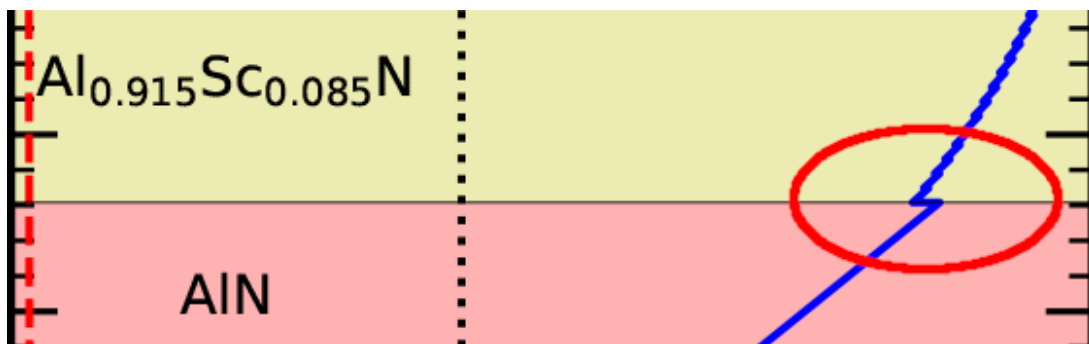


Figura 3.1 – Zoom dell'immagine 2.4 (b). La linea blu piena rappresenta il valore della banda di conduzione, quella nera tratteggiata è il livello di Fermi. È evidenziato in rosso il salto tra le due bande di conduzione.

Successivamente è stato trovato in [11], degli stessi autori del dispositivo sotto esame, che la differenza tra le bande di conduzione del AlScN e del GaN vale $\Delta E_c = 1.57\text{eV}$. Con lo stesso ragionamento eseguito precedentemente, si è quantificato che $\chi_0^{\text{AlScN}} = 2.35\text{eV}$ per una lega al 5%. Tuttavia nella prima stesura del file parametrico, precedente alla pubblicazione dell'articolo [11], tutti i coefficienti dipendenti dalla percentuale di scandio nella lega sono soggetti alla linearizzazione dallo 0% al 8.5%. Ne consegue che per implementare il nuovo dato trovato, è risultato più conveniente calcolare in 2.522 eV il valore equivalente da inserire nel TCAD affinché elabori correttamente l'affinità elettronica al 5%.

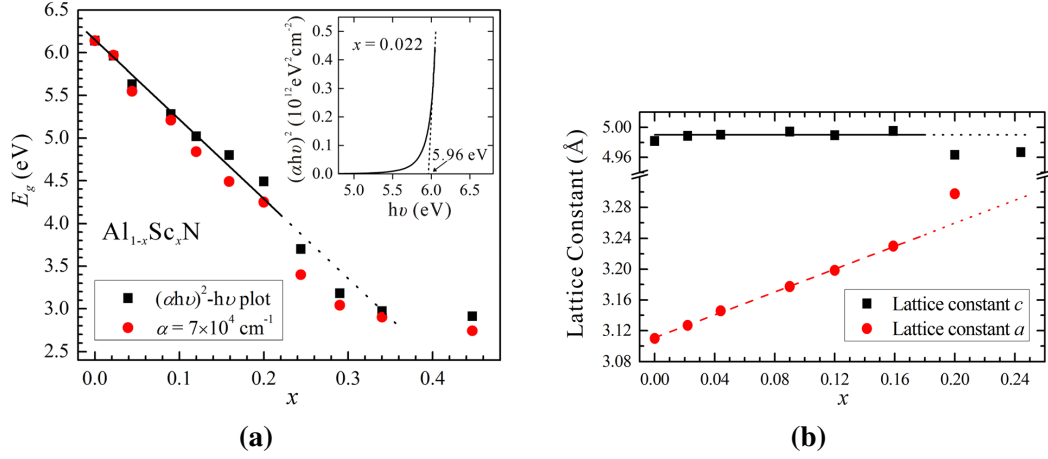


Figura 3.2 – La variazione del bandgap (a) e del passo reticolare (b) in funzione della percentuale di Sc nel AlScN [7].

Bandgap

Per la quantificazione del bandgap (E_g), è stato consultato "Bandgap in $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ " [7] dove vengono misurati E_g , il coefficiente di assorbimento ottico α e le costanti del reticolo a e c nel $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ in funzione della percentuale di scandio per $x \in [0, 0.45]$. Nell'intervallo $x \in [0, 0.2]$ viene fornita la relazione lineare:

$$E_g(x) = 6.51 - 9.32x \text{ eV.} \quad (3.2)$$

Tuttavia, prima di poter usare questa relazione è stato necessario assicurarsi che le misurazioni siano state fatte a 300 K, dato che non è specificato nell'articolo. A tale fine si è accertato che, conosciuti coefficienti α e β della relazione di Varshni per il AlN (tabella 1.1), sia verificata l'identità:

$$E_g^{\text{AlN}}(T = 300 \text{ K}) = E_g^{\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}}(x = 0) \quad (3.3)$$

e che quindi le rilevazioni sono state compiute a 300 K.

In continuità con il passaggio precedente, il valore del bandgap da inserire nel file dei parametri è stato valutato per una percentuale di 8.5 di scandio nella lega, lasciando che sia il software a linearizzare ed estrapolare il valore al 5%.

Passo reticolare

Nello stesso articolo, di cui è stata verificata la temperatura alla quale sono state attuate le misure, è presente anche relazione lineare che permette di valutare il passo reticolare:

$$a(x) = 3.111 + 0.744x \text{ \AA.} \quad (3.4)$$

Come nel punto precedente, si è valutato il valore per lo $\text{Al}_{0.915}\text{Sc}_{0.085}\text{N}$.

Polarizzazione

Il modello per la polarizzazione usata nel TCAD è il *simplified strain model*, che è sufficiente per descrivere gli effetti del primo ordine negli HEMT. Questo modello tiene conto sia della polarizzazione spontanea che di quella piezoelettrica; quest'ultima tramite i coefficienti della matrice elastica e i coefficienti piezoelettrici. I coefficienti della matrice elastica sono quelli che legano la deformazione ϵ_{kl} dovuta alle forze interne σ_{ij} tramite la legge di Hook [5]:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (3.5)$$

Utilizzando la notazione di Voigt, il tensore può essere ridotto a una matrice 6×6 , semplificando la legge di Hook a:

$$\sigma_i = \sum_{j} C_{ij} \epsilon_j, \quad (3.6)$$

dove la matrice delle costanti elastiche per la wurzite è data da:

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

Per calcolare il valore della polarizzazione piezoelettrica si usa la matrice dei moduli piezoelettrici d_{ij} , ma molto più spesso, e anche nel modello del TCAD, vengono usati i coefficienti piezoelettrici e_{ij} dati da:

$$e_{kl} = \sum_j d_{kj} C_{jl} \quad (3.8)$$

con $k = 1, 2, 3$ e $l, j = 1, \dots, 6$. I coefficienti sono organizzati nella matrice:

$$e_{kl} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Il *simplified strain model* è dunque espresso da:

$$\begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_x^{SP} \\ P_y^{SP} \\ P_z^{SP} + 2 \cdot \text{strain} \cdot (e_{31} - e_{33} \frac{c_{13}}{c_{33}}) \end{bmatrix}, \quad (3.10)$$

dove, data la direzione $i = x, y, z$, P_i è il valore della polarizzazione totale nella direzione i , P_i^{SP} è la polarizzazione spontanea, $2 \cdot \text{strain} \cdot (e_{31} - e_{33} \frac{c_{13}}{c_{33}})$ rappresenta l'effetto della polarizzazione

piezoelettrica e *strain* è definito dalla *formula 2* come:

$$\text{strain} := (1 - \text{relax}) \frac{a_0 - a}{a_0}, \quad (3.11)$$

con *relax* parametro di fitting.

La polarizzazione spontanea che meglio si accordava con il valore del AlN per una percentuale nulla di scandio è stata trovata nel lavoro di M. A. Caro et al. [12], dove viene proposta una formula di interpolazione quadratica al variare della percentuale di scandio:

$$P_{SP}(x) = -0.089(1 - x) - 0.874x + 0.741x(1 - x) \text{ C/m}^{-2}. \quad (3.12)$$

La polarizzazione avviene solo nella direzione cristallografica [0001], dunque P_x^{SP} e P_y^{SP} sono stati posti a zero.

Per permettere al TCAD di calcolare la polarizzazione piezoelettrica, è necessario trovare i coefficienti elastici e piezoelettrici del materiale. In [5], vengono fornite interpolazioni quadratiche per entrambi; sono state scelte queste rispetto a quelle fornite in [12] poiché meglio accordanti con i valori del AlN per $x = 0$, il che è critico per via delle basse dosi di scandio nella lega.

L'interpolazione dei coefficienti elastici (in GPa) è:

$$C_{11} = 285.12x + 396(1 - x) - 238.39x(1 - x), \quad (3.13a)$$

$$C_{12} = 180.57x + 137(1 - x) + 11.23x(1 - x), \quad (3.13b)$$

$$C_{13} = 141.70x + 108(1 - x) + 51.95x(1 - x), \quad (3.13c)$$

$$C_{33} = -155.17x + 373(1 - x) + 95.49x(1 - x), \quad (3.13d)$$

$$C_{44} = 176.44x + 116(1 - x) - 158.80x(1 - x); \quad (3.13e)$$

e per quelli piezoelettrici (in C/cm²):

$$e_{15} = 0.308x - 0.313(1 - x) - 0.528x(1 - x), \quad (3.14a)$$

$$e_{31} = -1.353x - 0.593(1 - x) + 0.576x(1 - x), \quad (3.14b)$$

$$e_{33} = 9.125x + 1.471(1 - x) - 6.625x(1 - x). \quad (3.14c)$$

Anche in questo caso la linearizzazione è fatta da Sentaurus, e quindi vengono valutate queste equazioni per 8.5% di scandio.

A seguito delle simulazioni si è notato che il 2DEG risultante era troppo elevato; è stata quindi disabilitata la polarizzazione nella simulazione e si è proceduto con l'inserimento di cariche fisse che la emulano. Dal punto di vista matematico i due approcci sono equivalenti.

Massa Efficace

La massa efficace degli elettroni deriva dal modello delle bande paraboliche. La semplificazione delle bande tramite la approssimazione di Taylor del secondo ordine permette di definire delle masse efficaci degli elettroni e delle lacune in base alla valle del ramo energetico in cui si trovano. Nel caso degli elettroni, le valli assumono una conformazione ellissoidale, andando a definire due tipi di masse efficaci, a seconda che la direzione del trasporto sia parallela o perpendicolare all'ellissoide, e una massa efficace di conduzione che ne media i valori. La massa efficace per gli elettroni è stata calcolata nello studio [2] pari a $0.3 m_0$.

3.3 Modelli Fisici

Le simulazioni sono state effettuate usando il modello del trasporto deriva-diffusione e il termoionico per le giunzioni Schottky. Per la ricombinazione sono stati usati i modelli Shockley-Read-Hall e radiativo. Per la mobilità sono stati usati i modelli Masetti e Lombardi a bassi campi e il modello Caughey-Thomas per gli alti campi. Per modellare le perdite è stato attivato il NonLocal Tunneling. Di seguito sono analizzati più nel dettaglio i modelli che sono stati calibrati maggiormente nello svolgimento del lavoro. Tutti i modelli sono riportati e descritti nel manuale del programma TCAD.

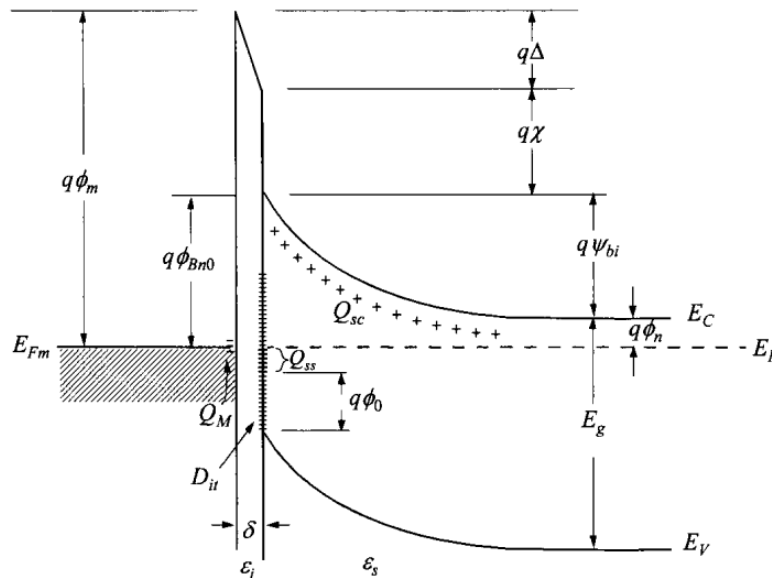
3.3.1 Giunzione Metallo-Semiconduttore

Se mettiamo in contatto un metallo e un semiconduttore i loro livelli di Fermi (E_{Fm} e E_{Fs} rispettivamente) si allineeranno all'equilibrio termodinamico. Supponiamo ora di prendere un semiconduttore drogato tipo n, date $\phi_m = E_0 - E_{Fm}$, la funzione lavoro del metallo, e $\phi_s = E_0 - E_{Fs}$, la funzione lavoro nel semiconduttore, se $\phi_m > \phi_s$ il livello di Fermi del semiconduttore all'interfaccia dovrà scendere per allinearsi, ovvero le bande del semiconduttore dovranno piegare verso l'alto, svuotandosi di elettroni e creando una zona di carica spaziale. Questo va a creare una barriera, detta di Schottky, il cui valore è $\phi_{Bn} = \phi_m - \chi_0$. Nella realtà la barriera non segue questa legge ideale per via di una distanza mai nulla (δ) tra il semiconduttore e il metallo, l'abbassamento della barriera per via della carica immagine (*image-force lowering*) e, soprattutto per i materiali composti III-V, il pinning del livello di Fermi al livello di neutralità di carica ϕ_0 a causa della grande quantità di difetti creati dalla deposizione del metallo, rendendo l'altezza della barriera meno sensibile a ϕ_m [8]. In Figura 3.3 è visibile una rappresentazione delle bande in una giunzione Schottky che tiene conto degli stati superficiali e della distanza di interfaccia non nulla. Il livello di neutralità di carica ϕ_0 è il livello energetico sopra il quale gli stati superficiali sono di tipo accettore e, viceversa, sotto al quale sono di tipo donore [8].

Nel caso opposto, ovvero se $\phi_m < \phi_s$ le bande piegano verso il basso, creando un accumulo di elettroni; la barriera al passaggio dei portatori è trascurabile e il contatto presenta una carat-

teristica I-V lineare, ovvero ohmica. Per ottenere questo tipo di contatto solitamente si droga pesantemente di tipo n la zona di interfaccia con il contatto metallico.

Nel simulatore è specificato il valore della funzione lavoro del metallo che contatta l'elettrodo di gate come variabile, nascondendo dentro questa variazione tutti i potenziali effetti che potrebbero di fatto modificare l'altezza della barriera finale.



- ϕ_m = Work function of metal
- ϕ_{Bn0} = Barrier height (without image-force lowering)
- ϕ_0 = Neutral level (above E_V) of interface states
- Δ = Potential across interfacial layer
- χ = Electron affinity of semiconductor
- ψ_{bi} = Built-in potential
- δ = Thickness of interfacial layer
- Q_{sc} = Space-charge density in semiconductor
- Q_{ss} = Interface-trap charge
- Q_M = Surface-charge density on metal
- D_{it} = Interface-trap density
- ϵ_i = Permittivity of interfacial layer (vacuum)
- ϵ_s = Permittivity of semiconductor

Figura 3.3 – Diagramma a bande dettagliato di una giunzione con strato di interfaccia nell'ordine delle distanze atomiche; non si considera l'abbassamento della barriera per le cariche immagine [8]

3.3.2 Modelli per la Mobilità

La mobilità μ rappresenta quanto facilmente un elettrone riesce a passare attraverso un reticolo cristallino. Viene definita nel modello Deriva-Diffusione come (nel caso degli elettroni e dualmente per le lacune):

$$\mu_n = q \frac{\tau_{p_n}}{m_n} \quad (3.15)$$

dove q è la carica dell'elettrone, m_n è la massa efficace degli elettroni e τ_{p_n} è il tempo di rilassamento, ovvero il tempo tra una collisione e l'altra. La mobilità non è costante e varia, per esempio, con la temperatura: ogni atomo nel reticolo può essere visto come vibrante intorno a un punto di riposo e l'ampiezza della vibrazione aumenta al crescere della temperatura, alzando quindi la probabilità di una collisione e riducendo la mobilità. Il caso della temperatura non riguarda questa tesi, dato che le simulazioni sono fatte a temperatura costante, ma ci sono altre casistiche di cui bisogna tenerne conto.

Per combinare tutti i diversi effetti delle collisioni si usa la regola di Matthiesen. Sotto l'ipotesi che le collisioni sono molto forti e brevi, dunque indipendenti fra loro, possiamo sommare le loro frequenze:

$$\frac{1}{\mu_{tot}} = \frac{m_n}{q} \left(\frac{1}{\tau_{p,1}} + \frac{1}{\tau_{p,2}} + \dots \right) = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \dots \quad (3.16)$$

dove $\tau_{p,i}$ rappresenta il tempo di rilassamento dovuto al fenomeno i -esimo.

Nei dispositivi HEMT il trasporto è dovuto solo agli elettroni, è dunque possibile ignorare o azzerare i parametri che riguardano la mobilità delle lacune.

Modello di Masetti

Nonostante i materiali in un HEMT vengano comunemente lasciati *unintentionally doped*, solitamente le aree di accesso di un dispositivo (source e drain) vengono fortemente drogate per avere un contatto ohmico. Tuttavia la mobilità dipende anche dal drogaggio. Drogando un semiconduttore si aggiungono degli atomi che, ionizzandosi, agiscono da centri Coulombiani, interagendo e deviando la carica in movimento. Per alti livelli di drogaggio ($\simeq 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) si usa il modello Masetti. L'implementazione in Sentaurus TCAD è data da:

$$\mu_{dop} = \mu_{min1} e^{-\frac{F_c}{N}} + \frac{\mu_{const} - \mu_{min2}}{1 + \left(\frac{N}{C_r}\right)^\alpha} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{C_s}{N}\right)^\beta}, \quad (3.17)$$

dove N rappresenta il drogaggio netto e μ_{const} è parte del modello Constant Mobility, il più semplice possibile dove la mobilità dipende solo dalla temperatura perché considera solo le vibrazioni con le collisioni atomiche. Molti di questi parametri sono ignoti per il $\text{Al}_{0.95}\text{Sc}_{0.05}\text{N}$, ma notando che la percentuale di Sc nella lega è molto bassa, si è scelto di usare i parametri noti per il AlN. Anche μ_{const} è lasciato pari a quello del AlN a $\mu_{const} = 300 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

Per evitare problemi di convergenza, il drogaggio netto fuori dalle aree di accesso è stato messo pari a $N = 1$ anziché 0.

In Figura 3.4a è riportato l'andamento dell'equazione (3.17) al variare del drogaggio netto N . In Figura 3.4b è visibile l'effetto di questo modello nella simulazione finale; la mobilità è stata valutata in un taglio orizzontale a 2 nm dall'interfaccia AlN/GaN dentro al canale. Sono distinguibili le regioni di accesso alle estremità del grafico (source a destra e drain a sinistra).

Modello di Lombardi

Durante le simulazioni è risultato evidente che per adattare le curve simulate a quelle sperimentalmente ricavate in [10] era necessario porre una mobilità costante a $300 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, tuttavia la mobilità bulk misurata tramite effetto Hall nel dispositivo è pari a $920 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$: deve dunque esistere un fenomeno che riduce la mobilità all'interfaccia. Il primo contributo è dato dal campo elettrico normale alla direzione di trasporto degli elettroni. Una seconda possibilità è fornita da un piccolissimo, ma comunque probabile, strato di AlGaIn graduato venutosi a formare in seguito alla deposizione dell'interlayer di AlN sul canale; l'AlGaIn ha una mobilità minore del GaN all'aumentare della percentuale di Al. In entrambi i casi la mobilità aumenta all'allontanarsi dall'interfaccia AlN/GaN. Dato che l'eventuale strato di AlGaIn graduato ha spessore ignoto ma sicuramente molto piccolo, l'implementazione diretta richiederebbe una mesh finissima allungando le simulazioni a tempi non accettabili; si è dunque scelto di inglobare l'effetto, se presente, dentro il modello che si occupa del campo elettrico normale E_{\perp} .

Per simulare questo effetto è utile avere una mobilità che vari in modo sufficientemente articolato da E_{\perp} . In prima battuta si è usato il modello UniBo, ma siccome portava a risultati non consistenti si è passati al modello *Enhanced Lombardi*. Questo modello è espresso da:

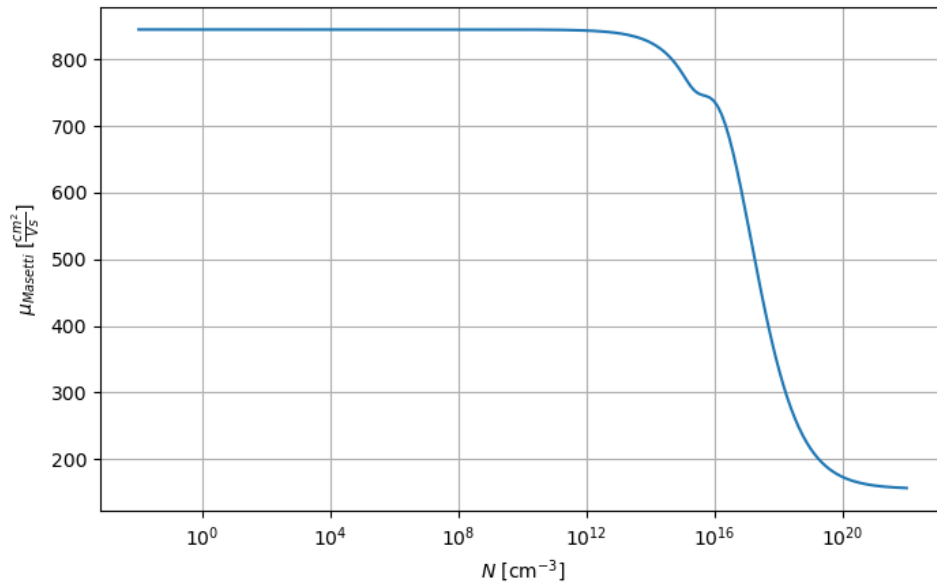
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_b} + \frac{D}{\mu_{ac}} + \frac{D}{\mu_{sr}}, \quad (3.18)$$

$$\mu_{ac} = \frac{B}{E_{\perp}} + \frac{C \left(\frac{N+N_2}{N_0} \right)^{\lambda}}{E_{\perp}^{\frac{1}{3}} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^k}, \quad (3.19)$$

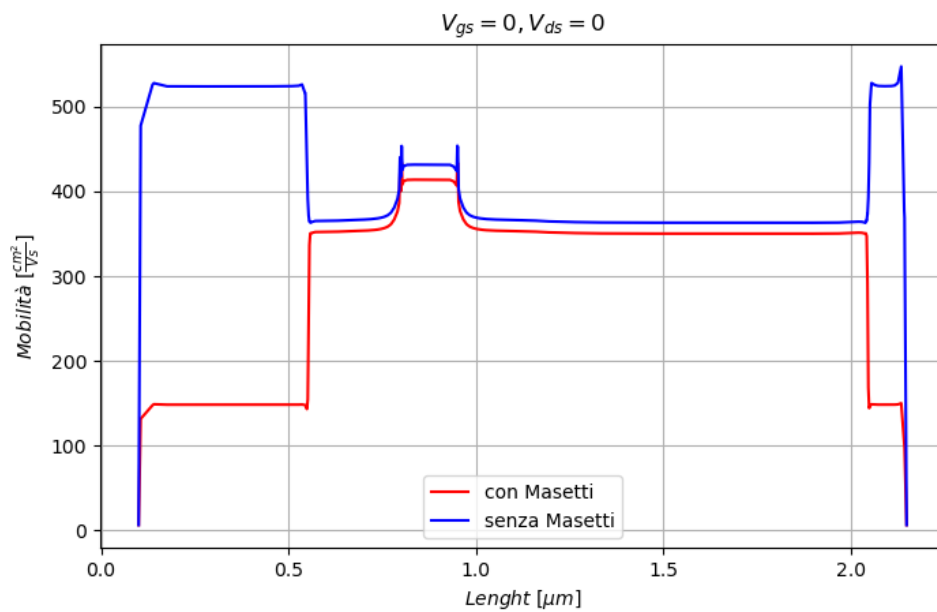
$$\mu_{sr} = \left(\frac{E_{\perp}^{A+\alpha \frac{n}{(N+N_1)^{\nu}}}}{\delta} + \frac{E_{\perp}^3}{\eta} \right)^{-1}, \quad (3.20)$$

dove μ_b è la mobilità di bulk ottenuta tramite il modello Masetti precedentemente analizzato, μ_{ac} modella il contributo dato dallo scattering acustico dei fononi alla superficie, μ_{sr} il contributo della rugosità superficiale e $D = e^{-x/l_{crit}}$ è un termine di smorzamento che disattiva μ_{ac} e μ_{sr} lontano dalla superficie, con x distanza dall'interfaccia e $l_{crit} = 10 \text{ nm}$ un parametro di fitting.

Per ottenere la dipendenza da E_{\perp} più diretta, indipendentemente dal significato fisico di questi parametri, si procede a rendere trascurabile μ_{ac} e modificare μ_{sr} . Essendo μ espresso dalla (3.18), un addendo è trascurabile quando il suo reciproco tende all'infinito. Si pone dunque



(a)



(b)

Figura 3.4 – (a) andamento del modello Masetti 3.17 contro il drogaggio netto N . (b) effetti dell'introduzione del modello Masetti nella simulazione finale. La mobilità è presa a 2nm dall'interfaccia interlayer/canale dentro al canale tramite Sentaurus Visual.

$B \rightarrow \infty$ e $C = 0$ per rendere μ_{ac} trascurabile. Se ora si pone $\eta \rightarrow \infty$ e $\alpha = 0$ rimangono:

$$\begin{cases} \frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_b} + \frac{D}{\mu_{sr}}, \\ \frac{1}{\mu_{sr}} = \frac{\delta}{E_{\perp}^A}. \end{cases} \quad (3.21)$$

Operativamente porre B e η a ∞ si traduce nell'inserire un valore arbitrario dell'ordine di grandezza di 10^{30} . I rimanenti parametri possono essere lasciati ai loro valori di default.

L'effetto del modello Lombardi sulla mobilità è visibile in Figura 3.5. La μ_b è stata calcolata con il modello Masetti nel corpo del dispositivo ($N = 1$); μ_{sr} è stato calcolato con $\delta = 10^9$, $A = 1.085$ e D con $x = 2$ nm.

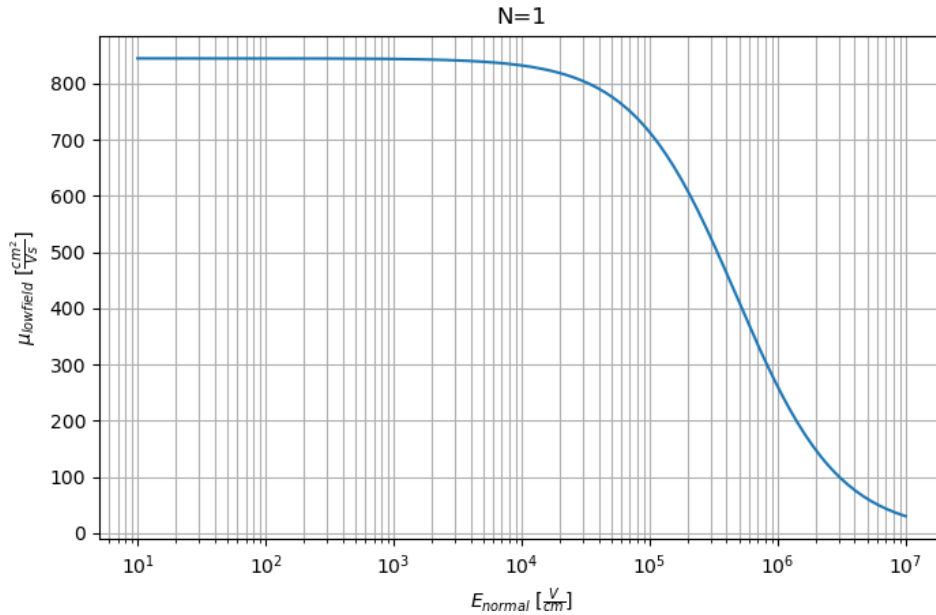


Figura 3.5 – Mobilità contro il campo normale con il Modello Lombardi modificato. μ_b è stata calcolata con il modello Masetti applicando $N = 1$; μ_{sr} è stato calcolato con $\delta = 10^9$, $A = 1.085$ e a una distanza $x = 2$ nm dall'interfaccia.

Modello di Caughey-Thomas

La velocità degli elettroni è proporzionale al campo elettrico E tramite la mobilità: $v = \mu E$. Tuttavia, all'aumentare di E la velocità degli elettroni satura, e dunque la mobilità diminuisce.

A bassi campi la dispersione degli elettroni (scattering) è data da fononi acustici, impurità ionizzate e assorbimento di fononi ottici; ad alti campi invece l'emissione di fononi ottici domina, data l'elevata energia cinetica dell'elettrone [3]. Il fenomeno presenta delle differenze a seconda che il semiconduttore sia a gap indiretto oppure diretto, visibile in Figura 3.6a. Nel secondo caso l'elettrone ha abbastanza energia per superare il massimo locale e trasferirsi dalla

valle diretta a una adiacente più ampia, dunque con una massa efficace maggiore, riducendo la velocità.

Per includere questo fenomeno si è usato il modello TCAD Extended Canali, il quale, rimossa la dipendenza dalla temperatura, ricade nel Caughey-Thomas. Non è la soluzione più accurata perché il GaN è un semiconduttore a bandgap diretto e il Caughey-Thomas non riproduce il massimo locale presente nella relazione $v = \mu E$ di questi materiali, tuttavia il modello più adatto (*Transferred Electron Model 2*), che è specifico per i materiali III-N, presentava molti problemi di convergenza. Extended Canali è espresso da:

$$\begin{cases} \mu(E) = \frac{(\alpha + 1)\mu_{lf}}{\alpha + \left[1 + \left(\frac{(\alpha+1)\mu_{lf}E}{v_{sat}}\right)^\beta\right]^{1/\beta}} \\ \beta = \beta_0 \left(\frac{T}{300 \text{ K}}\right)^{\beta_{exp}} \end{cases} \quad (3.22)$$

dove μ_{lf} è la mobilità a bassi campi calcolata con il modello Masetti e Lombardi, α e β parametri di fitting; anche v_{sat} è usato come parametro di fitting. Siccome si simula ad una temperatura di 300 K, $\beta = \beta_0$. Per semplificare il modello possiamo porre $\alpha = 0$ e ridurre $\mu(E)$ a:

$$\mu(E) = \frac{\mu_{lf}}{\left[1 + \left(\frac{\mu_{lf}E}{v_{sat}}\right)^\beta\right]^{1/\beta}} \quad (3.23)$$

L'effetto di questo modello sulla mobilità al variare del campo elettrico è visibile in Figura 3.6b.

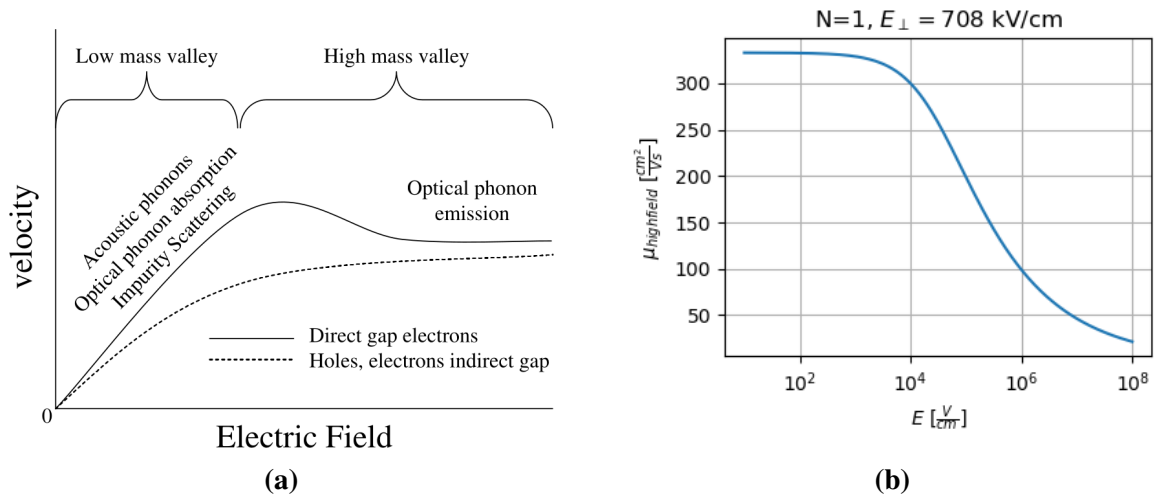


Figura 3.6 – In (a) è visibile l'andamento tipico della velocità degli elettroni per materiali a bandgap diretto e indiretto al variare del campo elettrico [3]. In (b) è graficato il modello Caughey-Thomas applicato a μ_{lf} valutata con Masetti e Lombardi. Il campo normale $E_{\perp} = 708 \text{ kV/cm}$ è stato valutato nella simulazione finale del dispositivo, dentro al canale sotto al drain a 2 nm dall'interfaccia AlN/GaN.

3.3.3 Massa di Tunneling e NLM

A causa delle ridotte dimensioni della barriera (8.5 nm), il tunneling degli elettroni diventa un contributo non trascurabile delle correnti di perdita del dispositivo. Per via del dualismo onda-particella degli elettroni, quando questo incontra una barriera di potenziale, sussiste una probabilità non nulla di attraversamento della stessa; questa probabilità aumenta esponenzialmente al diminuire dello spessore fisico della barriera.

Per modellare l'effetto tunnel si è usato il NonLocal Tunneling. Il primo passo di questo modello consiste nella creazione di una mesh non locale (NonLocal Mesh, NLM) che rappresenta i possibili percorsi degli elettroni; nel caso del gate questa è costruita verticalmente e diagonalmente mentre nel source e nel drain questa è stata definita orizzontalmente.

La probabilità di attraversamento è governata dal parametro della massa efficace di tunneling (m_t) normalizzato rispetto alla massa a riposo dell'elettrone (m_0). Un incremento della massa di tunneling determina una riduzione della trasparenza della barriera; di conseguenza, a parità di probabilità di tunneling, è necessario un campo elettrico più intenso.

Capitolo 4

Risultati Finali

4.1 Struttura del Dispositivo

Il dispositivo soggetto del lavoro di tesi è stato realizzato da S. Krause et al. in [10]. In questo lavoro vengono riportate le prestazioni DC e RF di due HEMT accresciuti con MOCVD, uno AlGaIn/GaN e l'altro, quello da ricreare, AlScN/GaN. È stato preso come punto di partenza il dispositivo AlGaIn/GaN dello stesso lavoro ricreato in Sentaurus Structure Editor da F. Ercolano in [13], in quanto lo stack di base dei due dispositivi è il medesimo.

Il transistor in esame è composto da un substrato di 4H-SiC su cui viene accresciuto un strato di AlN come nucleazione. Sopra di questo, il buffer è realizzato in GaN drogato Fe per migliorare l'isolamento elettrico e il canale è di GaN non intenzionalmente drogato. Il buffer e il canale hanno una concentrazione di accettori di $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ rispettivamente. Sopra il canale è presente un interlayer di AlN dello spessore di 0.7 nm, su questo viene accresciuta la barriera di 8.5 nm di AlScN con una percentuale di scandio pari al 5%. È presente un cappello dello spessore di 8 nm realizzato in SiN_x . La lunghezza del gate è di $0.15 \mu\text{m}$ e le distanze gate-source e gate-drain sono rispettivamente di $0.7 \mu\text{m}$ e $1.2 \mu\text{m}$. L'elettrodo di gate è esteso sopra la passivazione (*field plate*) con lo scopo di ridistribuire il profilo del potenziale elettrostatico ed evitare picchi di campo elettrico. I contatti tipo Schottky sono fatti in Pt-Au. Una rappresentazione schematica del dispositivo è riportata in Figura 4.1.

Per creare un contatto ohmico, le zone di source e drain sono pesantemente drogate tipo n con una concentrazione di $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. L'estensione della zona drogata del drain è molto minore rispetto a quella del source, in questo modo, considerando anche la distanza maggiore tra gate e drain, si permette di distribuire su una lunghezza maggiore il campo elettrico quando il dispositivo si trova a dover bloccare alte tensioni. Il valore delle funzioni lavoro del metallo nelle giunzioni di source e drain è di 4.3 eV.

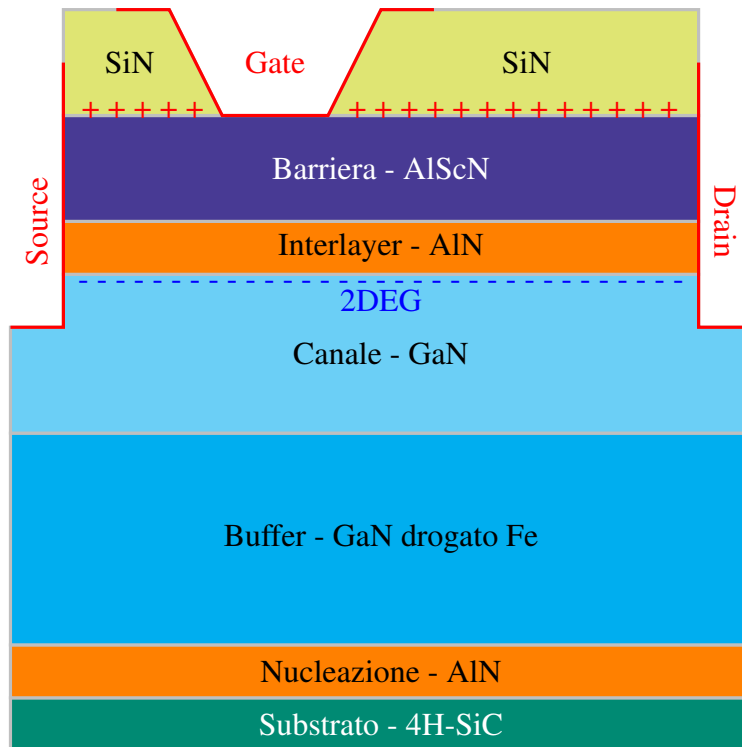


Figura 4.1 – Rappresentazione schematica del dispositivo, non in scala. Cappello e passivazione sono indicati con un unico blocco, essendo entrambi di SiN_x . Le linee rosse rappresentano i contatti di metallizzazione. Con "+" sono segnate le trappole donori all'interfaccia cappello/barriera, con "-" il 2DEG.

4.2 Caratterizzazione del Dispositivo

Le misure effettuate tramite l'effetto Hall hanno riportato una densità di elettroni nel 2DEG pari a $n_s = 1.50 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ e una mobilità del valore di $\mu = 920 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ [10].

Le curve d'interesse sono la caratteristica di uscita $I_D V_D$ e di trasferimento $I_D V_G$ del dispositivo, ricavate graficamente dalle figure nell'articolo riportate in Figura 4.2.

Per misurare sperimentalmente la caratteristica di output è stato usato il metodo *pulsed DC* con impulsi di $1 \mu\text{s}$ e un duty cycle di 0.1%; le curve che vengono considerate in questo lavoro sono state fatte al punto quiescente ($V_{GS,Q} = 0, V_{DS,Q} = 0$) V. Questa tecnica viene utilizzata per due motivi principali. In primo luogo, in una misura DC classica il dispositivo rimane in conduzione per lunghi periodi di tempo, scaldandosi e riducendo sia la mobilità che la velocità di saturazione degli elettroni, degradando quindi la corrente di drain. L'utilizzo di impulsi brevi permette di estrarre caratteristiche isoterme, impedendo al dispositivo di scaldarsi. L'altro punto riguarda la dinamica delle trappole: usando impulsi sufficientemente veloci si può ignorare la dinamica dei livelli energetici, impedendo loro di svuotarsi; concettualmente si "fotografa" il loro stato. La scelta del punto quiescente ($V_{DS,Q}, V_{GS,Q}$) permette di preparare le trappole superficiali e nel buffer; successivamente il confronto tra le curve ottenute a differenti punti quiescenti permette di studiare quanto il degrado della corrente di drain dipenda dalle trappole superficiali (*gate-lag*) o di buffer (*drain-lag*). Per effettuare queste misure si polarizza il dispo-

sitivo nel punto di quiescenza e lo si mantiene in questa condizione per un tempo sufficiente a stabilizzare l'occupazione delle trappole. Passato il tempo necessario, si polarizza il dispositivo al punto di prova tramite un impulso e si misura la corrente di drain verso la fine dello stesso, per evitare effetti capacitativi e di *ringing*. Il dispositivo ritorna immediatamente al punto di quiescenza, preparando così lo stato delle trappole prima della nuova misura.

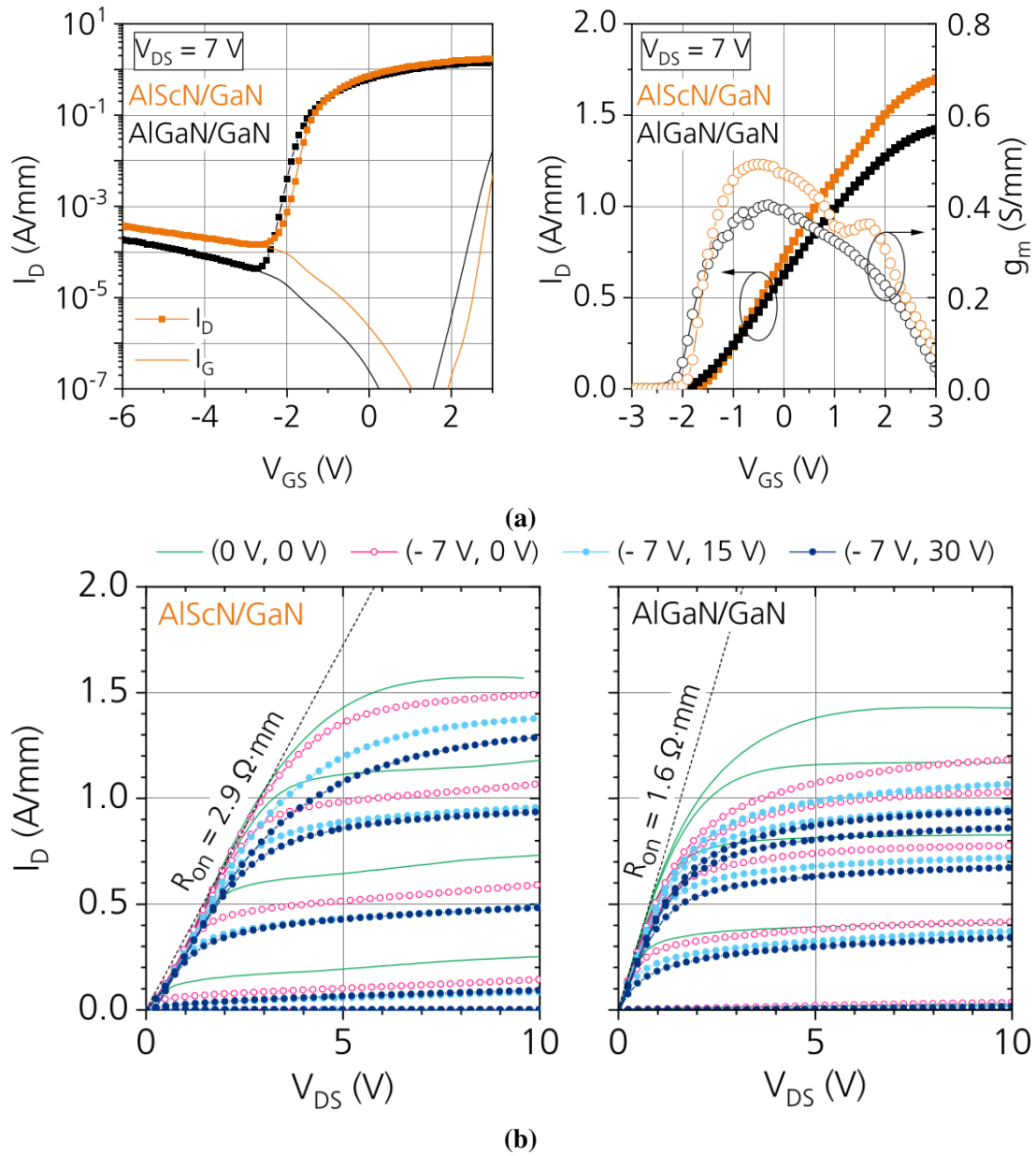


Figura 4.2 – Caratteristica di trasferimento in scala logaritmica e lineare per ambo i dispositivi (a). Caratteristica di uscita per entrambi i dispositivi a vari punti quiescenti (b); nell'interesse di questa tesi rientra solo il punto quiescente (0 V, 0 V) [10].

4.3 Setup TCAD

Durante la creazione del dispositivo è stata data particolare attenzione al rendere la mesh sufficientemente fina in direzione verticale nell'interlayer, valutando come gli effetti della discretizzazione variassero i risultati della simulazione. Difatti, se aumentare il numero di elementi modifica il risultato allora significa che la mesh è troppo grossolana. A tal fine è stato creato un parametro in Sentaurus Workbench con lo scopo di modificare agevolmente il numero di nodi dentro all'interlayer.

L'obiettivo successivo è stato quello di ottenere la concentrazione di 2DEG misurata sperimentalmente nel dispositivo simulato. Come accennato nella sotto-sezione 3.2, si è cercato di ottenere la formazione del 2DEG tramite il modello TCAD *simplified strain model*. Questo approccio forniva dei risultati troppo elevati, e si è dunque sostituito la computazione automatica della carica di polarizzazione con una carica fissa *ad hoc* (`fixedCharge`). Concettualmente la carica fissa è quella che si verrebbe a creare per via della polarizzazione e dal punto di vista matematico le due soluzioni sono equivalenti.

La simulazione è così strutturata: tutte le polarizzazioni sono disattivate, sono presenti delle trappole donori all'interfaccia cappello/barriera con una densità pari a N_D e con un livello energetico E_t , sono presenti una carica elettrica fissa alla stessa interfaccia con una concentrazione di $Q_{cap,barr}$ e una carica fissa all'interfaccia interlayer/canale con una concentrazione di $Q_{inter,chan}$; queste ultime due sostituiscono la polarizzazione e sono di segno opposto tra di loro. La combinazione di questi tre fattori forma il 2DEG.

Per misurare il 2DEG si seziona verticalmente il dispositivo e si integra la densità di elettroni nel canale. La misurazione è effettuata sia sotto al gate ($2DEG_{gate}$) che tra il gate e il drain (2DEG), quest'ultimo è quello che deve divenire pari alla misura sperimentale. Il $2DEG_{gate}$ è utile per capire il comportamento del dispositivo: il canale può essere visto come una serie di tre resistenze R_D , R_G e R_S ; il valore di queste resistenze è inversamente proporzionale alla densità di carica nel 2DEG. R_D e R_S hanno quindi un valore costante, fissato il 2DEG, e R_G è variabile tramite la tensione di gate, che svuota o forma il $2DEG_{gate}$. In questo modello, la saturazione avviene perché R_G diminuisce talmente tanto da essere confrontabile con altre due e, viceversa, lo spegnimento è dovuto a un aumento della R_G tale che sia il contributo dominante nella serie. Le misurazioni sono state automatizzate a mezzo di uno script tcl per Sentaurus Visual, valutando l'integrale nella condizione $V_{GS} = V_{DS} = 0$ V.

A parità di tensione di gate V_G e della funzione lavoro del metallo (WF_{gate}), la carica $Q_{inter,chan}$ tra l'interlayer e il canale è l'unica che determina il $2DEG_{gate}$, dato che il cappello è completamente scavato sopra a questo contatto. Come si è visto poco sopra, fissare il $2DEG_{gate}$ vuol dire fissare la tensione di soglia e, a parità dei modelli che degradano la mobilità, fissare la tensione a cui satura il dispositivo. Per ottenere i valori di concentrazione N_D e posizione E_t delle trappole donori si è partiti dalla metodologia proposta in [14]: questo articolo fornisce un'ipotesi iniziale di concentrazione e del livello energetico delle trappole, andando poi a

validare il valore sulla base del campo superficiale vicino all'interfaccia cappello/barriera. La concentrazione esatta e il loro posizionamento preciso sarà valutabile solo dopo lo studio del degrado, che esula dal lavoro svolto in questa tesi. Come ultima incognita rimane la carica negativa tra cappello e barriera $Q_{cap,barr}$; il suo scopo può essere interpretato come attivatrice dei donori, in quanto questa carica piega le bande e avvicina il livello energetico delle trappole superficiali al livello di Fermi, ionizzandole, in coerenza con quanto visto nella Sezione 1.2. Insieme, N_D e $Q_{cap,barr}$, permettono di ottenere un 2DEG pari a quello sperimentale.

Per tracciare le curve di uscita Sentaurus Device esegue uno *sweep* a temperatura fissa partendo dal punto $V_G = V_D = 0$ V per ottenere la soluzione iniziale; successivamente porta linearmente la tensione di gate al valore specificato a seconda della curva che si vuole tracciare. Infine la simulazione prosegue facendo variare linearmente V_D da 0 V a 10 V. I tempi delle variazioni sono lenti per simulare variazioni quasi-stazionarie.

Per la caratteristica di trasferimento si è modificato lo script precedente: sempre partendo dalla stessa condizione iniziale, si porta gradualmente il dispositivo in zona di saturazione ponendo $V_D = 7$ V e $V_G = -3$ V; da qui inizia il tracciamento della curva, dove V_G viene portato a 3.5 V. Anche in questo caso le variazioni sono lente col fine di simulare evoluzioni quasi-stazionarie. Seguendo quanto detto, si è arrivati a determinare $N_D = 3 \times 10^{13}$ cm⁻² con $E_t = E_c - 1.5$ eV, $Q_{cap,barr} = -3.55 \times 10^{13}$ C/cm⁻² e $Q_{inter,channel} = 2.15 \times 10^{13}$ C/cm⁻².

4.4 Risultati

Fissata l'elettrostatica del dispositivo, si è potuto procedere alla ricerca dei parametri del trasporto. I gradi di libertà sono espressi da δ e A per il modello Enhanced Lombardi (equazione 3.21), β e v_{sat} per il modello Caughey-Thomas (equazione 3.23). La variazione di β permette di controllare principalmente la pendenza nella zona lineare della caratteristica di uscita e la variazione di v_{sat} controlla il valore a cui le stesse curve saturano. I parametri δ e A permettono di comprimere le curve fra di loro, specialmente quelle a V_G più alta (+1 V e +2 V) a causa del maggiore campo elettrico normale.

Si è proceduto trovando una configurazione di questi ultimi due parametri che permettesse di trascurare momentaneamente l'effetto del modello Lombardi, per osservare meglio gli effetti di β e v_{sat} ; β in particolare viene impostato sufficientemente alto da controbilanciare preventivamente lo schiacciamento del modello Lombardi. Trovato un β eligibile, si fissa δ a un valore arbitrario e si procede ad modificare gradualmente il valore di A finquando il modello Lombardi si riattiva. Tramite questa procedura empirica sono stati fissati i parametri $\beta = 3$, $v_{sat} = 0.9 \times 10^7$ cm/s, $\delta = 1.05 \times 10^9$ cm²/(V·s) e $A = 1.09$.

In ultimo, osservando la curva di trasferimento $I_D V_G$, si modella la tensione di soglia ponendo la funzione lavoro nel gate $WF_{gate} = 5.1$ eV e la corrente di perdita per effetto tunnel tramite $m_t = 0.0045 m_0$.

In Figura 4.3 sono visibili le curve della caratteristica di uscita. In Figura 4.4a e 4.4b sono rappresentate le caratteristiche di uscita al variare di un singolo parametro del modello Caughey-Thomas per grafico rispetto alla simulazione finale. Nella 4.4a si può osservare come β modifichi il valore della corrente di saturazione e il punto dove la caratteristica satura; mentre nella 4.4b variare v_{sat} modifica solo la corrente di saturazione senza spostare la tensione alla quale la curva satura. Dualmente in Figura 4.5a e 4.5b sono rappresentate le variazioni rispetto alla simulazione finale dei parametri del modello Lombardi; è possibile osservare la diminuzione della distanza fra le curve simulate e le misure, specialmente quelle a V_G più alta, a causa del maggiore campo elettrico normale. La caratteristica di trasferimento confrontata con i dati sperimentali è visibile in Figura 4.6a in scala lineare e nella 4.6b in scala logaritmica per osservare meglio la corrente sotto soglia. Gli effetti della variazione della funzione lavoro e della massa di tunneling sono riportati in Figura 4.7a e 4.7b, rispettivamente. Si noti come il primo parametro, diminuendo la barriera Schottky, permetta di accendere prima il dispositivo, mentre il secondo si dimostra essere un contributo fondamentale alla corrente sotto soglia, diminuendola di più di un'ordine di grandezza al variare della massa di tunneling di un fattore 2.

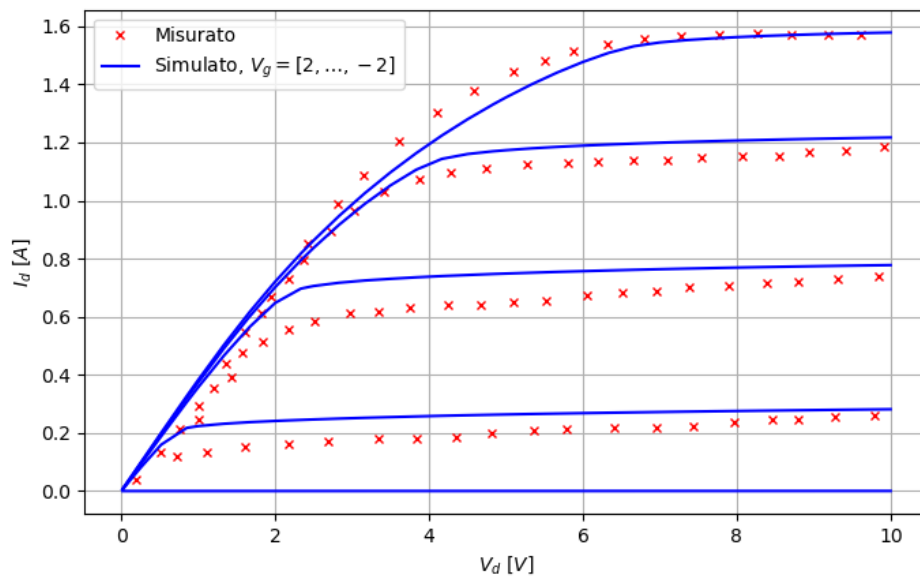
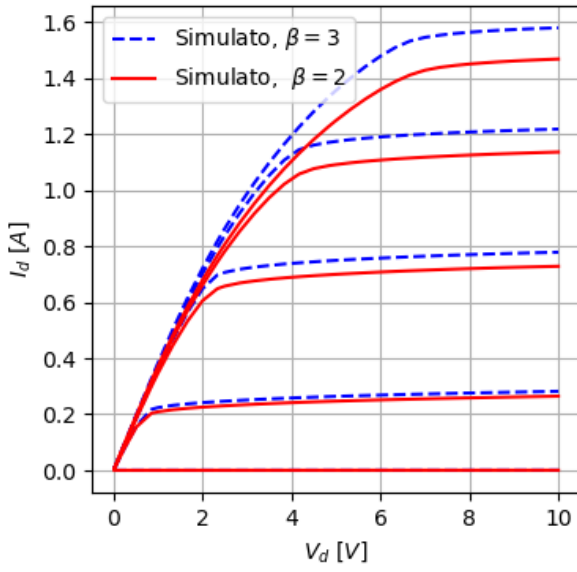
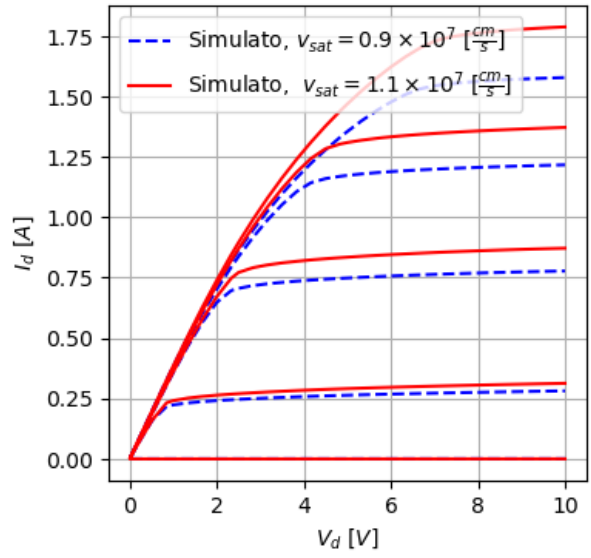


Figura 4.3 – Caratteristica di uscita $I_D V_D$: risultati simulati a confronto con quelli sperimentali.

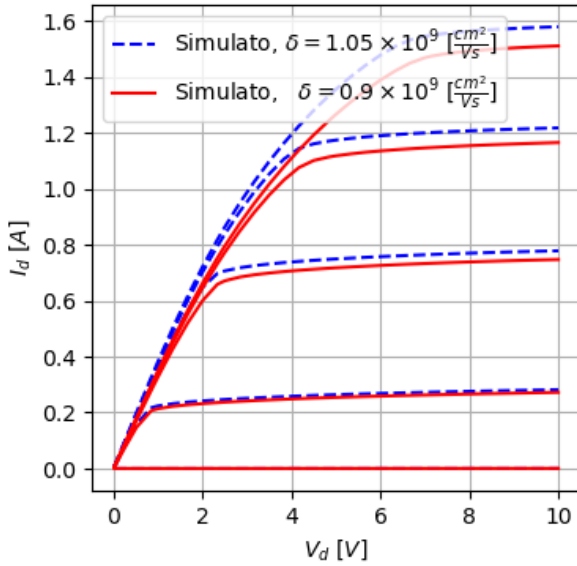


(a)

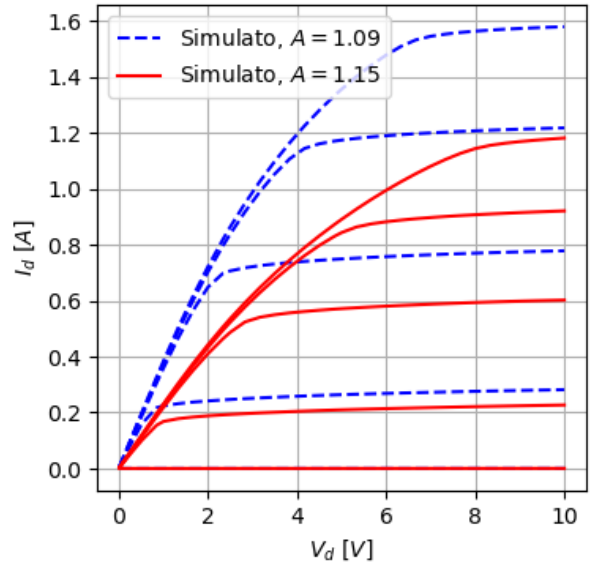


(b)

Figura 4.4 – Effetti nelle curve di uscita al variare dei parametri del Caughey-Thomas β (a) e v_{sat} (b).



(a)



(b)

Figura 4.5 – Effetti nelle curve di uscita al variare dei parametri del Lombardi δ (a) e A (b).

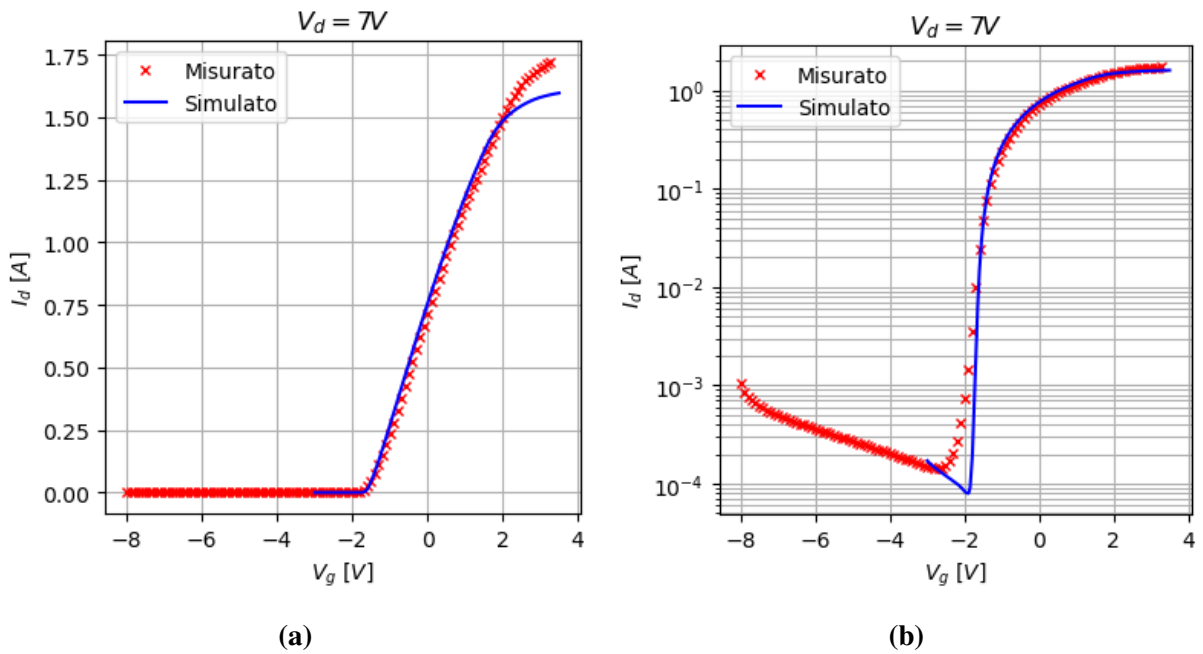


Figura 4.6 – Caratteristica di trasferimento $I_D V_G$: risultati simulati a confronto con quelli sperimentali in scala lineare (a) e logaritmica (b).

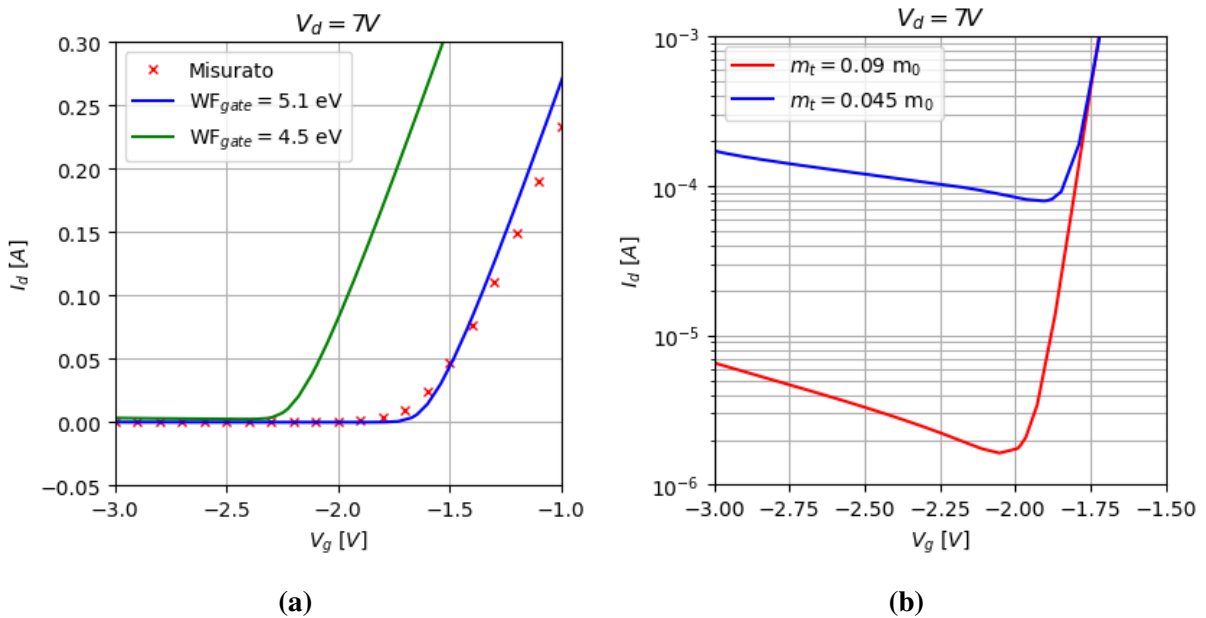


Figura 4.7 – Dettaglio dello spostamento della tensione di soglia in funzione della funzione lavoro del metallo WF (a). Corrente sotto soglia al variare della massa di tunneling m_t (b).

Conclusioni

In questa tesi si è studiato il funzionamento dei dispositivi HEMT e le ragioni dietro la scelta di materiali di barriera innovativi, quale l'AlScN. La trattazione, partita dalla creazione del dispositivo, è passata per lo studio e l'estrapolazione dei parametri dell'AlScN e l'implementazione di questo materiale nel TCAD.

Il lavoro di modellistica svolto in questa tesi ha permesso di definire un primo setup per la simulazione di transistori HEMT basati su eterostrutture AlScN. La definizione di questo setup ha richiesto un'attenta calibrazione dei modelli fisici di trasporto, allo scopo di costruire un punto di partenza solido per le successive analisi di affidabilità.

Durante l'ottimizzazione dei parametri, si sono evidenziate alcune discrepanze tra i valori tipici trovati in letteratura e quelli qui riportati. In particolare i parametri del modello Caughey-Thomas, β e la velocità di saturazione elettronica v_{sat} , hanno mostrato dei valori che si pongono al limite dei range convenzionali. Tra le cause sono da annoverare la mancanza di informazioni sugli stati trappola nel dispositivo e la semplificazione attuata ai modelli utilizzati. Non essendo questo set di parametri un punto di arrivo ma un punto di partenza per gli studi successivi, è ragionevole attendersi un riadattamento di questi valori con l'avanzare della ricerca.

Le basi poste in questa trattazione hanno trovato sviluppo e approfondimento nel lavoro di F. Ercolano [13].

Bibliografia

- [1] M. Meneghini, C. De Santi, I. Abid, M. Buffolo, M. Cioni, R. A. Khadar, L. Nela, N. Zagni, A. Chini, F. Medjdoub, G. Meneghesso, G. Verzellesi, E. Zanoni, and E. Matio-li, “Gan-based power devices: Physics, reliability, and perspectives,” *Journal of Applied Physics*, vol. 130, p. 181101, 11 2021.
- [2] L. Balestra, E. Gnani, and S. Reggiani, “Electron effective masses of scxal1-xn and alxgal-xn from first-principles calculations of unfolded band structure,” *Journal of Applied Physics*, vol. 132, p. 215108, 12 2022.
- [3] U. Mishra and J. Singh, *Semiconductor Device Physics and Design*. Springer Netherlands, 2007.
- [4] J. P. Ibbetson, P. T. Fini, K. D. Ness, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and U. K. Mishra, “Polarization effects, surface states, and the source of electrons in algan/gan heterostructure field effect transistors,” *Applied Physics Letters*, vol. 77, pp. 250–252, 07 2000.
- [5] O. Ambacher, B. Christian, N. Feil, D. F. Urban, C. Elsässer, M. Prescher, and L. Kirste, “Wurtzite scaln, inaln, and gaaln crystals, a comparison of structural, elastic, dielectric, and piezoelectric properties,” *Journal of Applied Physics*, vol. 130, p. 045102, 07 2021.
- [6] I. Streicher, S. Leone, C. Manz, L. Kirste, M. Prescher, P. Waltereit, M. Mikulla, R. Quay, and O. Ambacher, “Effect of aln and algan interlayers on alsxn/gan heterostructures grown by metal–organic chemical vapor deposition,” *Crystal Growth & Design*, vol. 23, no. 2, pp. 782–791, 2023.
- [7] R. Deng, S. R. Evans, and D. Gall, “Bandgap in al1-xscxn,” *Applied Physics Letters*, vol. 102, p. 112103, 03 2013.
- [8] S. M. Sze and K. K. NG, *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley and Sons, 2007.
- [9] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A. J. Sierakowski, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, A. Mitchell, and M. Stutzmann, “Two dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped algan/gan heterostructures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 87, pp. 334–344, 01 2000.

- [10] S. Krause, I. Streicher, P. Waltereit, L. Kirste, P. Brückner, and S. Leone, "Alscn/gan hemts grown by metal-organic chemical vapor deposition with 8.4 w/mm output power and 48 % power-added efficiency at 30 ghz," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 44, pp. 17–20, Jan 2023.
- [11] P. Döring, S. Krause, P. Waltereit, P. Brückner, S. Leone, I. Streicher, M. Mikulla, and R. Quay, "Voltage-margin limiting mechanisms of als-cn-based hemts," *Applied Physics Letters*, vol. 123, p. 032101, 07 2023.
- [12] M. A. Caro, S. Zhang, T. Riekkinen, M. Ylilammi, M. A. Moram, O. Lopez-Acevedo, J. Molarius, and T. Laurila, "Piezoelectric coefficients and spontaneous polarization of scaln," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 27, p. 245901, may 2015.
- [13] F. Ercolano, *Advanced TCAD Modeling of Charge Trapping Phenomena in AlGaN/GaN and AlScN/GaN HEMTs*. PhD thesis, Alma Mater Studiorum - Università di Bologna, 2025.
- [14] K. Mukherjee, F. Darracq, A. Curutchet, N. Malbert, and N. Labat, "Tcad simulation capabilities towards gate leakage current analysis of advanced algan/gan hemt devices," *Microelectronics Reliability*, vol. 76-77, pp. 350–356, 2017.

Ringraziamenti

Questa è forse la sezione più difficile da scrivere, direi l'unica peggio della giunzione Schottky. Devo anche fare ammenda per aver completamente omesso i ringraziamenti nella triennale, quindi diamoci una mossa. Sapete quanto questi ultimi due anni e mezzo siano stati particolarmente duri per me, e mi commuove profondamente notare come *materialmente* non avrei mai ottenuto questo risultato senza tutti voi. Nessuna esagerazione. È anche un bello schiaffo in faccia alla retorica del superomismo che permea i nostri giorni, cosa che apprezzo particolarmente. Avrò bisogno di qualche fazzoletto, non fateci caso.

Prima di tutto vorrei ringraziare la Prof.ssa Susanna Reggiani i correlatori Luigi Balestra e Giacomo Drudi, per la possibilità di svolgere il tirocinio in un ambiente accogliente e perché hanno aspettato quasi tre anni prima che questo lavoro venisse alla luce. Non posso poi ignorare il dott. Franco con cui ho passato molti pomeriggi in quel laboratorio.

Passiamo poi ai miei genitori, Lorella e Adriano. Voi che mi avete dato la luce e voi che, all'università come nel resto della vita, avete assorbito il costo dei miei errori e mi avete dato amore in cambio. Non posso dimenticare nemmeno l'amore e il sostegno delle mie sorelle, Gloria e Sara.

Voglio ringraziare Federico (*alias* Funky Flucchy), Daniel (*alias* Goffredo) e Marco (*alias* Top Capitalist) che mi avete accettato nella vostra casa e nella vostra vita quando letteralmente non avevo un posto dove stare, e per avermi insegnato a studiare. Non avrei mai conseguito la triennale in tempo se non fossi stato con voi.

Simone (*alias* Brudo) per tutte le cose che mi ha insegnato, troppe per elencarle, e Sara con la quale ho potuto confidarmi nei momenti più difficili.

Giacomo (*alias* Fuga) e Andrea (*alias* l'umbro) come compagni di lezioni e di risate. Non sarei mai sopravvissuto a lezione senza di voi.

È imperativo ringraziare Linda per la compagnia e tutti i gran discorsi a mensa. Ma soprattutto per gli appunti, senza i quali non avrei potuto studiare questi due anni e mezzo. Poffarbarco, hai fatto letteralmente sei ore di treno per portarmeli.

Scendendo in terra natia, è doveroso ringraziare Andrea (*alias* Facocero) per le passeggiate e per la magia insita nel suo cappello.

Federico (*alias* Ciao Federì) che c'è sempre stato e in particolare per tutte le ore di spiegazioni non sollecitate nei momenti più assurdi.

Andrea (*alias* pap) e Michela (*alias* Micky), quasi pionieri in questa vita. Non ho parole per esternare l'ammirazione che provo per voi.

Martina. Cosa farei senza di te? Probabilmente mi sarebbe già fluttuata via la testa se non ci fossi tu riattaccarla ogni tanto al corpo. Grazie a te che hai condiviso e vissuto con me ogni singolo momento di disperazione e di gioia.

Grazie dal profondo del mio cuore a tutti voi.

Simone

*When I thought that I fought this war alone
You were there by my side on the frontline.
War – Poets of the Fall.*