

САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ AlGaAs/GaAs

Известно, что в современной микроэлектронике основным полупроводниковым материалом является кремний. В то же время одним из наиболее перспективных материалов для производства интегральных микросхем считается GaAs. В качестве основной причины использования GaAs можно указать на гораздо меньшую величину эффективной массы электронов в GaAs, чем в Si и, как следствие, большую подвижность электронов в GaAs. А, как известно, чем выше подвижность носителей заряда, тем большим быстродействием обладает прибор (например, полевой транзистор). С этой точки зрения особый интерес представляют так называемые низкоразмерные системы, содержащие газ носителей заряда, в котором их движение ограничено потенциальными барьерами в одном или нескольких направлениях. Движение электрона можно считать ограниченным, если этот электрон локализован в области, ширина которой сравнима с его длиной волны де Бройля в данных условиях. В направлении, в котором движение носителя заряда ограничено, происходит квантование его энергии и, как следствие, уменьшение интенсивностей его рассеяния и увеличение подвижности.

Если движение электронов ограничено в одном измерении, а в двух других свободно, то такой электронный газ называется двухмерным. Двухмерный электронный газ образуется у границы раздела полупроводника и диэлектрика или на границе раздела двух полупроводников, т. е. в гетероструктуре. В рассматриваемом случае гетеропереход образуется при соединении таких материалов, как GaAs и Al_xGa_{1-x}As, причем свойства гетероперехода зависят от доли Al в слое Al_xGa_{1-x}As. В частности, от количества Al зависит величина разрыва зоны проводимости на границе гетероперехода, а также эффективная масса электрона и диэлектрическая проницаемость слоя Al_xGa_{1-x}As. Использование Al_xGa_{1-x}As обусловлено тем, что атомы Al, замещающие Ga, имеют почти такой же радиус, что и атомы Ga. Это обеспечивает высокое качество границы гетероперехода. Из-за разрыва дна зоны проводимости на границе гетероперехода для электронов со стороны GaAs образуется потенциальная яма, в которой и формируется двухмерный электронный газ.

В приближении эффективной массы движение электрона в таком газе можно описать волновой функцией

$$\Psi(z) = \psi_n(z) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (1)$$

где \vec{k} и \vec{r} – компоненты волнового вектора и радиуса-вектора в плоскости гетероперехода. Как видно из формулы (1), именно функция $\psi_n(z)$ определяет поведение функции $\Psi(z)$, а, следовательно, и величин интенсивностей рассеяния. Далее для краткости волновой функцией будем называть функцию $\psi_n(z)$.

Для расчета электронных состояний в данной квантовой системе, т. е. для нахождения волновых функций и энергий электронов, необходимо решать систему уравнений Шредингера и Пуассона [1]:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_z(z)} \frac{d\psi_n(z)}{dz} + (V(z) - E_n) \psi_n(z) = 0, \\ \frac{d}{dz} \epsilon_0 \epsilon(z) \frac{d\phi(z)}{dz} = e \sum_n N_n |\psi_n(z)|^2 - \rho_{\text{depl}}, \end{cases} \quad (2)$$

где

$$N_n = \frac{m_z k_b T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \frac{E_f - E_n}{k_b T} \right], \quad (3)$$

$$V(z) = -e\phi(z) + V_h(z) + V_{xc}(z) + V_{im}(z). \quad (4)$$

В формулах (2) – (4) m_z – эффективная масса электрона, k_b – постоянная Больцмана, e – абсолютная величина заряда электрона, N_n – заселенность n -й подзоны, T – абсолютная температура, ρ_{depl} – плотность заряда обедненной области, E_f – энергия Ферми, E_n – энергия n -й подзоны, ϕ – электростатический потенциал, V_h , V_{xc} , V_{im} – потенциалы гетероструктуры, обменно-корреляционный и отображения соответственно [1, 2].

В качестве граничного условия для волновой функции бралось ее равенство нулю в глубине слоев GaAs и Al_xGa_{1-x}As. Электростатический потенциал полагался равным нулю на границе гетероперехода, а в глубине слоев GaAs и Al_xGa_{1-x}As бралась равной нулю величина электрического поля.

Для решения этой системы уравнений использовался самосогласованный расчет. При этом, вследствие конечной высоты потенциального барьера со стороны Al_xGa_{1-x}As для электронов зоны проводимости GaAs, который согласно [3] при изменении x от 0.35 до 0.7 лежит в пределах (0.27÷0.59) эВ соответственно, необходимо учитывать проникновение электронов в слой Al_xGa_{1-x}As. Следовательно, решая систему (2) – (4), необходимо учитывать изменение эффективной массы электрона, величины разрыва зоны проводимости и значения диэлектрической проницаемости на границе гетероперехода. Зависимости эффективной массы электрона, диэлектрической проницаемости и величины разрыва дна зо-

ны проводимости от концентрации Al x в слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ определялись в соответствии с результатами, полученными в [3, 4].

Если доля алюминия составляет менее 0.35, то высота потенциального барьера для электронов невелика, и квантовые эффекты в такой потенциальной яме выражены слабо. Использование доли алюминия более 0.7 нецелесообразно с технологической точки зрения, так как изготовление такой гетероструктуры является достаточно сложным. Кроме того, при увеличении доли алюминия ухудшается качество границы гетероперехода, что отрицательно сказывается на рабочих характеристиках приборов.

В настоящей работе была разработана процедура самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона в гетероструктуре $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, с помощью которой были рассчитаны электронные состояния в квантовой яме гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ для некоторых значений x , лежащих в диапазоне 0.35–0.7. Зависимости уровней энергии пяти нижайших подзон и заселенностей этих подзон от концентрации Al представлены на рис. 1 и 2.

Расчеты были проведены для температуры 300 К, концентрации акцепторов в слое GaAs и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $1 \cdot 10^{21}$ и $1 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-3}$ соответственно, концентрации доноров в слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, поверхностной кон-

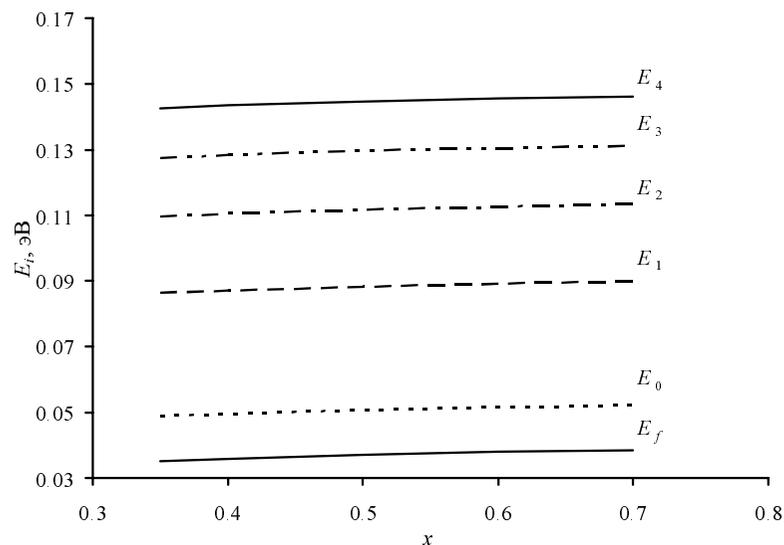


Рис. 1. Зависимости энергий пяти подзон и уровня Ферми от доли алюминия x

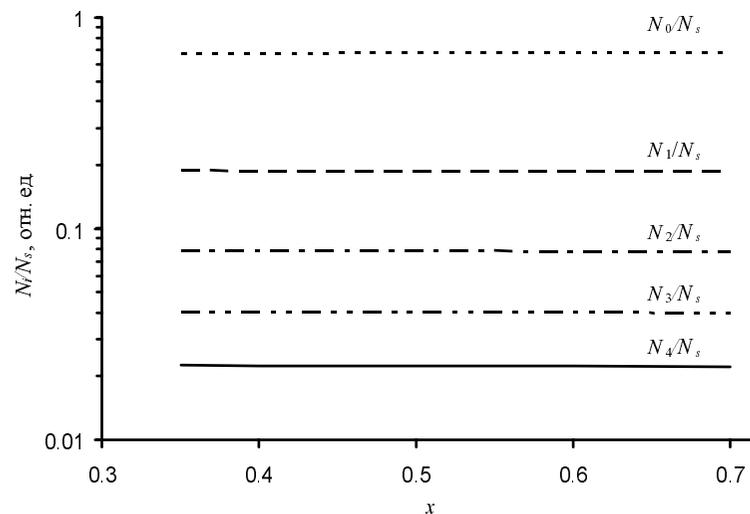


Рис. 2. Зависимости относительных заселенностей подзон от доли алюминия x . N_s – поверхностная концентрация электронов двухмерного газа

центрации электронов двухмерного газа $5 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$ и толщины спейсера 10 нм. Результаты этих расчетов, в частности, показали, что изменение доли алюминия в указанном выше диапазоне относительно слабо влияет на уровни энергии и заселенности подзон. Как видно из рис. 1, величина самого высокого, а, следовательно, самого слабозаселенного уровня равна примерно 140 мэВ, в то время как глубина ямы, определяемая долей Al, составляет примерно 270–570 мэВ. Это означает, что уровни с высокой заселенностью лежат значительно ниже края потенциальной ямы гетероструктуры, и, следовательно, величины энергетических уровней и их заселенности слабо зависят от глубины ямы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Stern F., Das Sarma S. Electron energy levels in GaAs– $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ heterojunctions // Phys. Rev. 1984. Vol. 30B, № 2. P. 840–847.
2. Yokoyama K., Hess K. Monte Carlo study of electronic transport in $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ single-well heterostructures // Phys. Rev. 1986. Vol. 33B, № 8. P. 5595–5606.
3. Ping E. X., Jiang H. X. Resonant tunneling of double-barrier quantum wells affected by interface roughness // Phys. Rev. 1989. Vol. 40B, № 17. P. 11792–11798.
4. Influence of impurity and phonon scattering effects in resonant tunneling structures / Y. Fu, Q. Chen, M. Willander, H. Brugger, U. Meiners // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74, № 3. P. 1874–1878.