

УДК 621.382.323–416

А.В. БОРЗДОВ

**ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АЛЮМИНИЯ В БАРЬЕРНОМ СЛОЕ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
НА ДРЕЙФОВУЮ СКОРОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ
НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$**

Electron transport in $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ gated quantum wire is studied by means of ensemble Monte-Carlo simulations at $T = 300$ K. The influence of alloy composition x on electron drift velocity is investigated for different values of longitudinal electric field and gate biases applied to the structure.

Современные технологии интегральной электроники позволяют создавать сложные полупроводниковые приборные микро- и наноструктуры, являющиеся активными элементами ультрабольших интегральных схем (УБИС). Одними из наиболее перспективных элементов УБИС на сегодняшний день являются GaAs -транзисторные структуры с одномерным электронным газом (1D ЭГ) [1, 2], к которым, в частности, относятся квантовые проволоки (КП) с двумя затворами [3, 4]. Большой интерес к таким структурам обусловлен возможностью получить высокое быстродействие при одновременном значительном уменьшении геометрических размеров активных элементов, что вызывает необходимость глубокого изучения влияния различных конструктивно-технологических факторов на рабочие характеристики такого рода приборов.

Известно, что такие технологические методы выращивания тонких слоев, как, например, молекулярно-лучевая эпитаксия, позволяют достаточно точно контролировать содержание доли алюминия x в барьерном слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Это дает возможность создавать приборные структуры с требуемыми характеристиками (см., например, [5]). Следует отметить, что в настоящее время в литературе отсутствуют данные о влиянии значения x на электрофизические свойства двухзатворных КП на основе гетероструктуры $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Целью данной работы явилось численное моделирование методом Монте-Карло [6] переноса электронов в двухзатворной КП при температуре $T = 300$ K и установление влияния состава барьерного слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на дрейфовую скорость электронов в ней при различных значениях продольного (в направлении переноса) и поперечного (между двумя электродами затвора) электрических полей. Поперечное сечение исследуемой КП с двумя алюминиевыми затворами представлено на рис. 1. Концентрация донорной примеси в легированных областях (на рисунке заштрихованы) составляет 10^{24} м⁻³. Перенос происходит в направлении, перпендикулярном плоскости YZ .

Определение электронных состояний в рассматриваемой КП требует самосогласованного решения системы уравнений Пуассона и Шредингера в поперечном сечении структуры [3, 4]. При этом перенос электронов будем рассматривать в электрическом квантовом пределе, когда все электроны находятся в основном квантовом состоянии, что является достаточно хорошим приближением для тонких КП и умеренных продольных электрических полей. В этом случае уравнение Шредингера для рассматриваемой КП имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(y, z)} \nabla \psi_0(y, z) \right) + V(y, z) \psi_0(y, z) = E_0 \psi_0(y, z),$$

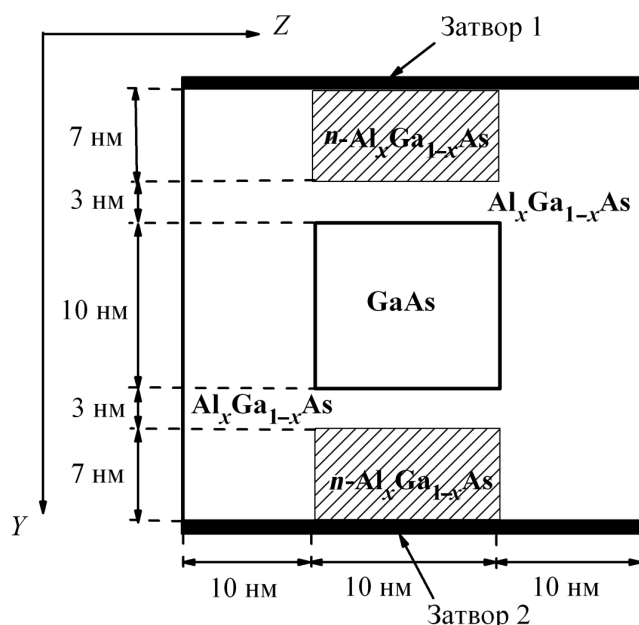


Рис. 1. Поперечное сечение квантовой проволоки

где $\hbar$ – редуцированная постоянная Планка; $m^*(y, z)$ – зависящая от координаты эффективная масса электрона; $\psi_0(y, z)$ – волновая функция основного состояния электрона; $V(y, z)$ – потенциальная энергия электрона, включающая величину разрыва зоны проводимости на границе раздела $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, электростатический потенциал и потенциал обменно-корреляционного взаимодействия; E_0 – энергия основного состояния электрона.

Уравнение Пуассона для расчета электростатического потенциала ϕ в структуре соответственно запишется:

$$\nabla (\epsilon(y, z) \nabla \phi(y, z)) = en_e(y, z) - \rho_i(y, z),$$

где $\epsilon(y, z)$ – зависящая от координаты диэлектрическая проницаемость; e – абсолютная величина заряда электрона; n_e – концентрация электронов, $\rho_i(y, z)$ – плотность заряда ионизованной примеси.

Кинетические параметры, характеризующие перенос электронов в таких структурах, определяются

интенсивностями рассеяния носителей заряда в 1D ЭГ. Поскольку для тонких нелегированных GaAs КП при комнатной температуре основными являются фоновые механизмы рассеяния [7–10], то ограничимся рассмотрением рассеяния электронов только на фононах. В условиях электрического квантового предела с учетом столкновительного уширения выражения для расчета интенсивностей рассеяния электронов на акустических фононах в упругом приближении $[W_{fb}]_A(E, \Gamma)$ и полярных оптических фононах $[W_{fb}^{e/a}]_{PO}(E, \Gamma)$ могут быть соответственно записаны [3, 4]:

$$[W_{fb}]_A(E, \Gamma) = \frac{B_{ac}^2 k_B T \sqrt{2m^*}}{2\hbar^2 v^2 \rho} D(E, \Gamma) \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} |\psi_0(y, z)|^4 dy dz, \quad (1)$$

$$D(E, \Gamma) = \Theta(E) \sqrt{\frac{\Gamma + \sqrt{E^2 + \Gamma^2}}{E^2 + \Gamma^2}},$$

где B_{ac} – деформационный потенциал для акустических фононов; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; m^* – эффективная масса электрона в GaAs; ρ – плотность GaAs; v – скорость звука в GaAs; E – кинетическая энергия электрона; Γ – параметр, характеризующий столкновительное уширение энергетического спектра электронов, обусловленное рассматриваемыми механизмами рассеяния; Θ – единичная ступенчатая функция. Индексы «f» и «b» обозначают рассеяние «вперед» и «назад» соответственно;

$$[W_{fb}^{e/a}]_{PO}(E, \Gamma) = \sum_{\alpha} \frac{e^2 \omega_{\alpha} \sqrt{2m_{\alpha}^*}}{\hbar L_y L_z} \left(\frac{1}{\epsilon_{\alpha}^{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{\alpha}} \right) \left(n_{\alpha} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) D(E \mp \hbar \omega_{\alpha}, \Gamma) \times$$

$$\times \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\left| \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} S_{\alpha}(y, z) |\psi_0(y, z)|^2 \sin(p\pi y/L_y) \sin(r\pi z/L_z) dydz \right|^2}{[q_{fb}^{e/a}]_{\alpha}^2 + (p\pi/L_y)^2 + (r\pi/L_z)^2}, \quad (2)$$

$$[q_f^{e/a}]_{\alpha} = \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* E}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* (E \mp \hbar\omega_{\alpha})}}{\hbar},$$

$$[q_b^{e/a}]_{\alpha} = \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* E}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* (E \mp \hbar\omega_{\alpha})}}{\hbar}.$$

Здесь ω – циклическая частота полярного оптического фонона; ε^{∞} и ε – оптическая и статическая диэлектрические проницаемости материалов соответственно; n – функция распределения Бозе – Эйнштейна; L_y и L_z – толщина и ширина структуры; α – индекс, характеризующий материал: $\alpha = \{\text{GaAs}, \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}\}$; S_{α} – функция, удовлетворяющая следующим условиям: для $\alpha = \text{GaAs}$ $S_{\alpha} = 1$ в GaAs и $S_{\alpha} = 0$ в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, для $\alpha = \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $S_{\alpha} = 0$ в GaAs и $S_{\alpha} = 1$ в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Верхний индекс «e/a» означает испускание/поглощение фонона.

Процедура самосогласованного расчета интенсивностей рассеяния, определяемых выражениями (1) и (2), аналогична описанной в [3, 4].

Зависимости эффективной массы электрона, статической и оптической относительных диэлектрических проницаемостей $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, а также энергии полярных оптических фононов E_{ph} от доли алюминия x определялись в соответствии с данными, приведенными в [11]:

$$m^*(x) = (0,067 + 0,083x)m_0,$$

где m_0 – масса свободного электрона;

$$\varepsilon(x) = 13,18 - 3,12x,$$

$$\varepsilon^{\infty}(x) = 10,89 - 2,73x,$$

$$E_{ph}(x) = 36,25 + 1,83x + 17,12x^2 - 5,11x^3, \text{ мэВ.}$$

При проведении расчетов полагалось также, что величина разрыва зоны проводимости на границе раздела $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ составляет 65 % от разности ширины запрещенной зоны в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs [12], а зависимость ширины запрещенной зоны $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ от доли алюминия $E_g(x)$ в соответствии с [11] является квадратичной. Величина разрыва зоны проводимости $\Delta E_c(x)$ на границе раздела двух материалов будет равна

$$\Delta E_c(x) = 0,65\Delta E_g(x), \quad (3)$$

где

$$\Delta E_g(x) = 1,155x + 0,37x^2, \text{ эВ.}$$

Зависимость высоты барьера Шоттки для системы $\text{Al} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ от x получена путем интерполяции экспериментальных данных из [13]. Моделирование переноса электронов проводилось с помощью многочастичного метода Монте-Карло с числом частиц в ансамбле, равном 10^6 .

На рис. 2 приведены результаты расчета установившейся дрейфовой скорости электронов от доли алюминия x после включения продольного электрического поля с напряженностью F , равной 10^4 , $5 \cdot 10^4$ и 10^5 В/м. Для моделирования влияния поперечного электрического поля на перенос электронов в структуре были рассмотрены случаи, когда на один из затворов структуры подавалось напряжение смещения V_G величиной 0, 0,5 и 1 В при постоянном нулевом смещении на

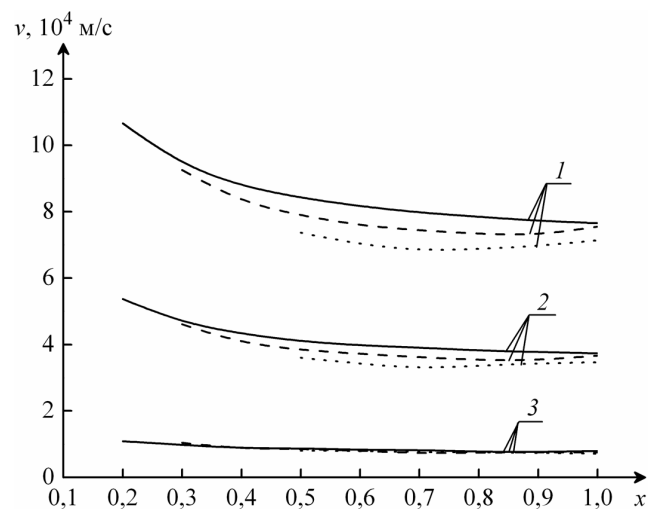


Рис. 2. Зависимость дрейфовой скорости электронов v от доли алюминия x при разных значениях F , В/м: 1 – 10^5 , 2 – $5 \cdot 10^4$, 3 – 10^4 ; V_G : сплошные кривые – 0, штриховые – 0,5, пунктирные – 1 В

втором затворе. При этом для значения $V_G = 0,5$ В результаты приведены только для доли алюминия $x \geq 0,3$, поскольку при меньших значениях x высота потенциального барьера на границе GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ оказывается недостаточной для удержания электронного газа в квантовой яме, вследствие чего электроны могут выходить из нее в область $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. По той же причине при $V_G = 1$ В результаты приводятся только для $x \geq 0,5$.

Как видно из рис. 2, с ростом доли алюминия в окружающем слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ наблюдается значительное уменьшение дрейфовой скорости электронов, что обусловливается достаточно сильной зависимостью величины разрыва зоны проводимости (3) на границе раздела $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs от x и, как следствие, зависимостью волновой функции электронов ψ_0 от этого параметра, приводящей в соответствии с (1) и (2) к росту интенсивностей рассеяния электронов с ростом доли алюминия в барьерном слое. На этом же рисунке видно, что проявляется некоторое снижение дрейфовой скорости при увеличении смещения на затворе структуры. Последнее можно объяснить ростом интенсивностей рассеяния электронов с увеличением затворного напряжения [4]. Необходимо также отметить, что при фиксированном напряжении $V_G > 0$ наблюдается минимум значения дрейфовой скорости при $x \approx 0,7 \dots 0,9$. Такое немонотонное поведение дрейфовой скорости в зависимости от x можно связать с немонотонностью зависимости высоты барьера Шоттки от x , а следовательно, и концентрации электронов в канале от этого параметра.

Таким образом, результаты моделирования показали, что в исследуемых КП наибольшая величина дрейфовой скорости электронов наблюдается при малых значениях доли алюминия x . Однако при этом уменьшается рабочий диапазон приложенных к затвору напряжений, поскольку уменьшение x ведет к снижению высоты потенциального барьера на границе раздела $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs, что приводит к выходу электронов из области квантовой ямы в GaAs и образованию проводящего канала в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Последнее является нежелательным с точки зрения быстродействия полевого транзистора, так как дрейфовая скорость электронов в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ уменьшается за счет их рассеяния на ионизованной примеси и ряда особенностей переноса носителей заряда в этом материале по сравнению с GaAs [14].

1. Islam S. K., Jain F. C. // Solid-State Electron. 1996. Vol. 39. P. 615.
2. Son S. H., Cho K. H., Hwang S. W. et al. // J. Appl. Phys. 2004. Vol. 96. № 1. P. 704.
3. Borzdov A. V., Pozdnyakov D. V., Galenchik V. O. et al. // phys. stat. sol. (b). 2005. Vol. 242. № 15. P. R134.
4. Борздов А. В., Поздняков Д. В. // ФТТ. 2007. Т. 49. Вып. 5. С. 913.
5. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры: Пер. с англ. / Под ред. Л. Ченга и К. Плога. М., 1989.
6. Борздов В. М., Жевняк О. Г., Комаров Ф. Ф., Галенчик В. О. Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники. Мн., 2007.
7. Mickevicius R., Mitin V. // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48. № 23. P. 17194.
8. Kim K. W., Stroscio M. A., Bhatt A. et al. // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 70. № 1. P. 319.
9. Jiang W., Leburton J. P. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. № 3. P. 2097.
10. Pozdnyakov D. V., Galenchik V. O., Borzdov A. V. // Phys. Low-Dim. Struct. 2006. № 2. P. 87.
11. Adachi S. // J. Appl. Phys. 1985. Vol. 58. № 3. P. R1.
12. Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R. // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89. № 11. P. 5815.
13. Revva P., Langer J. M., Missous M. et al. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. № 1. P. 416.
14. Nava S., Auslender M. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 73. № 11. P. 7431.

Поступила в редакцию 08.12.07.

Андрей Владимирович Борздов – младший научный сотрудник НИИ материалов и приборных структур микро- и наноэлектроники.