

**САМОСОГЛАСОВАННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ  
ШРЕДИНГЕРА И ПУАССОНА  
В ДВУМЕРНОМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ  
ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ALGAAS/GAAS**

**А. В. Борздов, В. В. Жавнерчик**

С уменьшением размеров элементов интегральных схем большое влияние на работу приборов оказывают различные квантовые эффекты. Такие эффекты наблюдаются, например, в двумерном электронном газе (2D-газе), заключенном в области вблизи границ раздела различных полупроводников, а также полупроводника и диэлектрика, т. е. в объектах, которые в широком смысле слова можно назвать гетероструктурами. Двумерной называют систему электронов или дырок, движение которых свободно только в двух пространственных измерениях, а их движению в третьем измерении соответствует дискретный энергетический спектр. Для выполнения последнего условия необходимо, чтобы характерный размер области по этому третьему измерению был порядка длины волны де Бройля электрона или дырки. Следует отметить, что такие системы не являются двумерными в строгом смысле, поскольку волновые функции носителей заряда зависят от трех координат, а электромагнитные поля распространяются в трехмерном пространстве [1].

Как известно, такая важнейшая рабочая характеристика прибора, как его быстродействие, определяется именно скоростью процесса переноса носителей вблизи поверхности полупроводника. С этой точки зрения полевые транзисторы на гетероструктурах с селективным легированием представляют особый интерес, поскольку являются одними из наиболее быстродействующих приборов вследствие высокой подвижности двумерного электронного газа, формирующегося у границы раздела двух полупроводниковых материалов. Гетеропереход образуется при соединении полупроводников различного химического состава, т. е. материалов с разной шириной запрещенной зоны, например AlGaAs и GaAs [2]. При этом происходит разрыв зоны проводимости и валентной зоны на их границе. В соответствии с моделью Андерсона величина разрыва зоны проводимости определяется разностью электронного сродства двух полупроводников. Если на поверхности нелегированного GaAs вырастить легированный AlGaAs, то у

границы их раздела вследствие разности величин электронного сродства материалов формируется двумерный электронный газ. В данном случае AlGaAs легируется донорной примесью, а GaAs не легируется вообще или легируется акцепторной примесью. При этом на GaAs сначала выращивается тонкий слой нелегированного AlGaAs, называемый спейсерным слоем. Этот слой служит для пространственного разделения двумерного электронного газа в GaAs и донорной примеси в AlGaAs, что уменьшает кулоновское рассеяние электронов на примеси, увеличивая тем самым подвижность носителей в газе.

Движение электронов 2D-газа квантовано в направлении, перпендикулярном границе гетероперехода, поскольку длина волны де Бройля превышает ширину потенциальной ямы. В приближении эффективной массы движение электрона в таком газе можно описать волновой функцией (1). Экспонента описывает свободное движение в плоскости границы гетероперехода, а  $\psi(z)$  – движение перпендикулярно границе,  $j = \sqrt{-1}$ ,  $\vec{k}$  – двумерный волновой вектор,  $\vec{r}$  – двумерный радиус-вектор в плоскости гетероперехода .

$$\Psi(x, y, z) = \psi(z) \exp(j\vec{k}\vec{r}) , \quad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{d^2\psi_i(z)}{dz^2} + [-e\varphi(z) - E_i] \psi_i(z) = 0 , \quad (2)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon \frac{d^2\varphi}{dz^2} = e \sum_i N_i |\psi_i(z)|^2 - \rho_{depl} , \quad (3)$$

$$\psi(0) = \psi(\infty) = 0 , \quad (4)$$

$$\varphi(0) = \varphi'(\infty) = 0 , \quad (5)$$

$$N_i = \frac{m_z k_b T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp \frac{E_f - E_i}{k_b T} \right] . \quad (6)$$

Для аналитической оценки значений энергий подзон обычно используют приближение треугольной потенциальной ямы. Получаемые при этом значения энергий являются достаточно приближенными, но результаты позволяют сделать некоторые важные выводы. Например, для треугольной потенциальной ямы показано, что значения энергий подзон  $E_i$  и расстояния между соседними энергетическими уровнями обратно пропорциональны корню кубическому из эффективной мас-

сы. Следовательно, в гетероструктуре AlGaAs/GaAs из-за меньшей эффективной массы электронов в GaAs, чем в Si, эффект квантования выражен более ярко, чем в МОП-структурах. Считается, что в хорошей гетероструктуре AlGaAs/GaAs потенциальная яма у границы раздела содержит обычно лишь две почти полностью заполненные энергетические подзоны. Уровень Ферми у такой структуры проходит через потенциальную яму, что определяет необходимость использования в расчетах функции распределения Ферми-Дирака.

Для получения более точного значения энергий и волновых функций необходимо решать систему из уравнений Шредингера (2) и Пуассона (3) с учетом граничных условий (4) и (5). В уравнениях (2) и (3)  $m_z$  – эффективная масса электрона в направлении, перпендикулярном границе гетероперехода,  $\psi_i$  – волновая функция электрона в  $i$ -й подзоне;  $E_i$  – величина энергии дна подзоны;  $E_f$  – энергия Ферми;  $N_i$  – заселенность  $i$ -й подзоны;  $N_s$  – поверхностная концентрация электронов;  $\rho_{depl}$  – плотность заряда обедненной области;  $e$  – абсолютная величина заряда электрона;  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная;  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость GaAs,  $k_b$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура.

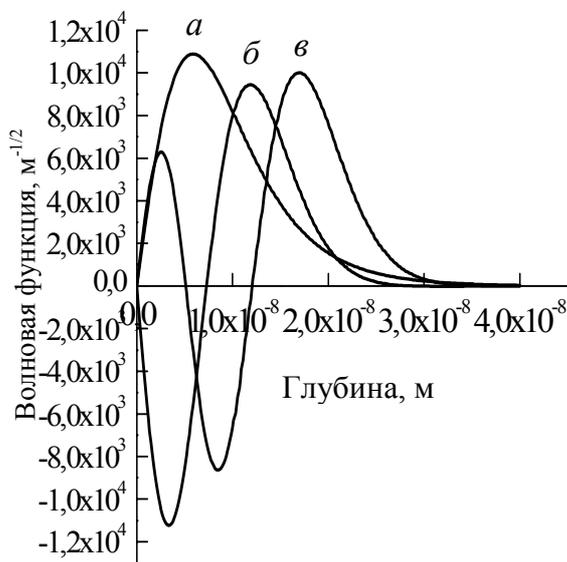


Рис. 1. Волновые функции, соответствующие трем нижайшим подзонам: кривая  $a$  соответствует подзоне с энергией  $E_0$ ,  $б$  – с энергией  $E_1$ ,  $в$  – с энергией  $E_2$

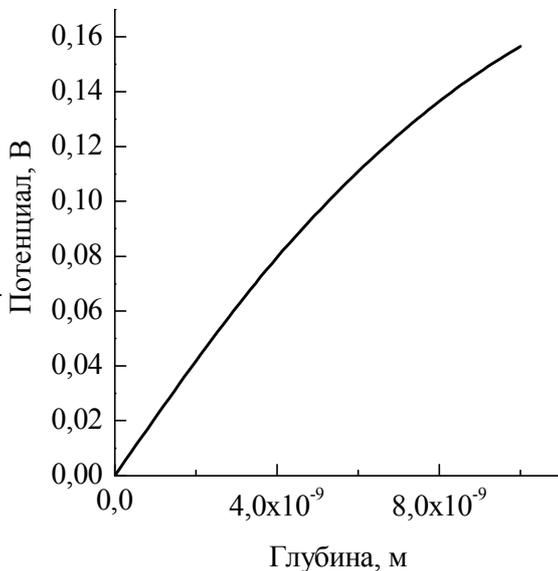


Рис. 2. Потенциал, соответствующий величине изгиба дна зоны проводимости GaAs у границы гетероперехода

Система уравнений (2) и (3) не решается аналитически, поэтому для ее решения применяется численный самосогласованный расчет [3]. С этой целью нами был разработан алгоритм такого самосогласованного решения этих уравнений. Это позволило нам определить значения энергий и волновые функции для трех нижайших энергетических подзон (рис.1) в предположении бесконечно большого потенциального барьера на границе раздела AlGaAs/GaAs и заселенности электронами только Г-долины в GaAs. В качестве начальных приближений для самосогласованного расчета использовались результаты (энергии и волновые функции), полученные аналитически для приближения треугольной потенциальной ямы. Потенциал, соответствующий изгибу дна зоны проводимости GaAs у границы гетероперехода, представлен на рис. 2. Все вычисления были проведены для  $N_s = 1,4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  и  $T = 300 \text{ К}$ .

#### Литература

1. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем / М.: Мир, 1985. 415 с.
2. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия / М.:Мир, 1991. 632 с.
3. Jovanovic D., Leburton J.-P. Self-consistent analysis of single-electron charging effects in quantum-dot nanostructures // Phys.Rev.B. Vol. 49. 1994. № 11. P. 7474–7483.