

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ GaAs/Al_xGa_{1-x}As С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

В. Н. Мищенко

Белорусский государственный университет информатики и
радиоэлектроники, Минск
E-mail: mishchenko@bsuir.by

Исследование свойств полупроводниковой структуры типа GaAs/Al_xGa_{1-x}As, которое приводит к формированию двумерного электронного газа с высокой подвижностью электронов, вызывает особый интерес, связанный с использованием таких структур в изделиях оптоэлектроники, приборах диапазонов СВЧ и КВЧ и ряде других приложений. Для анализа свойств и характеристик гетероструктурных приборов обычно используется процедура решения уравнения Шредингера совместно с решением уравнения Пуассона [1, 2]. Применяя метод Монте-Карло, можно исследовать процессы переноса электронов в различных областях полупроводниковой структуры [1–3].

Известно, что если на поверхности нелегированного GaAs вырастить слой легированного Al_xGa_{1-x}As, у границы их раздела вследствие разницы величин электронного сродства материалов формируется двухмерный 2D-электронный газ [1–4]. Движение электронов 2D-газа квантовано в направлении, перпендикулярном плоскости гетероперехода, и при этом возникают размерные энергетические уровни или подзоны электронов, характеризующие потенциальную яму.

Волновая функция ψ_i вдоль поперечной оси z удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_i}{dz^2} + [E_i - U(z)]\psi_i = 0, \quad (1)$$

где m – эффективная масса электрона в зоне проводимости, E_i – квантованная энергия электрона на дне i -й размерной подзоны, \hbar – постоянная Планка, а $U(z)$ – потенциальная энергия, соответствующая изгибу зоны у границы раздела [1, 2]. Потенциальную энергию находят из решения уравнения Пуассона

$$\frac{d^2U}{dz^2} = \rho(z)/\varepsilon, \quad (2)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость материала, ρ – распределение заряда электронов. Для интегрирования уравнения Шредингера был использован метод Нумерова [2]. Опираясь на этот метод, разработана программа моделирования процессов переноса электронов в

полупроводниковом приборе, имеющего соединения материалов GaAs/Al_xGa_{1-x}As, на основе решения уравнений Шредингера и Пуассона. Основной особенностью этой программы является наличие итерационной процедуры совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона для потенциальной ямы гетероструктуры. Если разность значений между предыдущим и последующим значениями потенциальной энергии не достигает установленного значения, то заново решается уравнение Шредингера с новым значением потенциальной энергии, найденным на предыдущем шаге. При достижении заданной разности между предыдущим и последующим величинами потенциальной энергиями формируется выход из итерационной процедуры и фиксация результатов расчета. При расчете потенциальной энергии вблизи гетероперехода учитывались значения обменно-корреляционного потенциала, потенциала отображения и потенциала, описывающего характер разрыва зоны проводимости на границе материалов GaAs и Al_xGa_{1-x}As.

С использованием метода Монте-Карло были исследованы свойства гетероструктуры, образованной соединением материалов GaAs/Al_xGa_{1-x}As при величине молярной доли алюминия $x = 0,3$ и температуре $T = 300$ К. Значения параметров моделирования были выбраны следующими: длина структуры вдоль оси x (продольная координата) – 0,3 мкм, длина структуры вдоль оси z (поперечная координата) – 0,1 мкм. Длина затвора, стока и истока составила величину 0,06 мкм. Затвор располагался на расстоянии 0,12 мкм от истока. Толщина слоя Al_xGa_{1-x}As составила 0,02 мкм, толщина слоя GaAs – 0,08 мкм, концентрация электронов в нелегированных слоях – $1 \cdot 10^{15}$ см⁻³. Выполнено моделирование описанной полупроводниковой структуры при различных значениях напряжений на затворе и стоке. Определены основные параметры и характеристики процессов переноса электронов – зависимости средней скорости, распределения энергии, подвижности носителей заряда, как для всей полупроводниковой структуры, так и для выделенных областей в области границы раздела двух материалов.

1. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия: пер. с англ. М.: Мир, 1991. 632 с.
2. Yokoyama K., Hess K. // Physical Review B. 1986. V. 33, №.8. P. 5595–5606.
3. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц: пер с английск. М.: Мир, 1987. 640 с.
4. Sakamoto R., Akai K., Inoue M. // IEEE Trans. On Electron Devices. 1989. V. 36, № 10, P. 2344–2352.
5. Walukiewicz W., Ruda H.E., Lagowski J., Gatos H. C. // Physical Rev. 1984. V. 30, № 8, P. 4571–4582. 5.