

Сравнительный анализ гетероструктур с квантовыми ямами и дельта-слоями методами емкостной спектроскопии и численного моделирования

Я. В. Иванова¹, В. И. Зубков², С. В. Дубровский³

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

¹ivanova@unix-server.su, ²vzubkovspb@mail.ru, ³Mr.Sergey.Dubrovskiy@ieee.org

Аннотация — В настоящей работе представлены результаты комплексного анализа полупроводниковых наногетероструктур, содержащих квантовые ямы и дельта-легированные слои. Экспериментальное исследование методами емкостной спектроскопии с последующей математической обработкой и численным самосогласованным моделированием ключевых электрофизических параметров и энергетических характеристик дает полную информацию об эмиссионных свойствах системы. На основании данного метода изучено влияние положения дельта-слоя на уровни квантования и концентрацию носителей заряда в квантовой яме.

Ключевые слова: полупроводниковая гетероструктура; дельта-слой; самосогласованный расчет; уравнения Шредингера и Пуассона; численное моделирование; емкостная спектроскопия

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия в процессе интенсивного развития нанотехнологий были достигнуты впечатляющие результаты по усложнению дизайна квантово-размерных гетероструктур и изготовлению высокоэффективных приборов на их основе. Продолжающийся технологический прогресс в микроэлектронике требует создания современных методик глубокого анализа наноразмерных объектов, при этом роль численного моделирования неуклонно возрастает. В настоящей работе предлагается метод комплексной характеристики электронных свойств полупроводниковых приборов путем совместных измерений и моделирования с последующей подгонкой к эксперименту.

Измерение вольт-фарадных характеристик (C-V) является эффективным способом определения профилей концентрации носителей заряда в полупроводниковых структурах [1]. Когда гетероструктура содержит область квантового ограничения (квантовую яму, массив квантовых точек или дельта-легированный слой), соответствующий профиль концентрации свободных носителей становится довольно сложным, отражая неоднородное распределение электростатического

потенциала. Численное моделирование таких объектов должно включать самосогласованное решение нелинейных уравнений Пуассона и Шредингера для оценки распределения потенциала вдоль гетероструктуры и получения истинной концентрации носителей заряда в квантово-размерной области. Последующая подгонка моделируемых C-V-характеристик к экспериментальным позволяет определить основные параметры электронного спектра гетероструктур, в частности, разрыв зон на гетероинтерфейсе, энергии связанных уровней в квантовой яме и соответствующие им волновые функции.

II. САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА И МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛЬТ-ФАРАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Первым этапом расчета C-V-характеристик полупроводниковых гетероструктур, содержащих квантовую яму или другую квантово-размерную область, является самосогласованное решение уравнения Шредингера в приближении эффективной массы на неоднородной сетке [2, 3]

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi_i(z) \right) + V(z) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z) \quad (1)$$

и нелинейного уравнения Пуассона

$$\epsilon_0 \frac{d}{dz} \left(\epsilon(z) \frac{d\phi(z)}{dz} \right) = e \left[N_D^+(z) - n(z) \right]. \quad (2)$$

В уравнениях (1), (2) $N_D^+(z)$ — концентрация ионизованных доноров; $m^*(z)$ — зависящая от координаты эффективная масса электрона; $\epsilon(z)$ — относительная диэлектрическая проницаемость; E_i — энергия i -го связанного состояния; $\psi_i(z)$ — волновая функция

электрона на соответствующем уровне; $V(z)$ – профиль потенциальной энергии дна зоны проводимости.

Численное решение представляет собой итерационную процедуру «поле-частицы», в которой на каждом этапе решаются вышеуказанные дифференциальные уравнения для нахождения скорректированного распределения электростатического потенциала и концентрации носителей заряда [3, 4]. Требование к сходимости решения состоит в том, что максимальное изменение потенциала на последующей итерации не должно превышать заданного малого значения (10^{-8} В).

Уравнение Шредингера решалось в квантовом ящике, на его границах волновые функции приравниваются нулю в соответствии с красивыми условиями Дирихле [3]. Уравнение Пуассона, в котором учитываются подвижные носители заряда $n(z)$, сначала линеаризовалось, а затем решалось по алгоритму Ньютона относительно величины коррекции потенциала.

Плотность носителей заряда в соответствующих квантово-размерных 2D-подзонах получается с помощью двумерной статистики после определения собственных энергий и собственных волновых функций [3, 4]

$$n(z) = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \sum_i \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{kT} \right) \right] |\psi_i(z)|^2. \quad (3)$$

Положение уровня Ферми E_F при заданной температуре T определялось из решения уравнения электронейтральности. Далее для расчета вольт-фарадной характеристики использовался квазистатический подход [3, 4]. Барьерная емкость структуры определяется как отношение приращения заряда к шагу по напряжению

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta U}. \quad (4)$$

Согласно теореме Гаусса, суммарный заряд в замкнутой системе связан с электрическим полем F_S у барьера Шоттки для одномерных систем:

$$Q = \varepsilon \varepsilon_0 \oint F_S dS = S \varepsilon \varepsilon_0 F. \quad (5)$$

Таким образом, расчет C-V характеристик сводится к нахождению зависимости электрического поля на поверхности полупроводниковой структуры от внешнего приложенного напряжения. Далее, используя смоделированные C-V характеристики, мы рассчитывали профиль концентрации носителей заряда с помощью стандартной процедуры дифференцирования:

$$n(x) = 2 \left[\varepsilon \varepsilon_0 e \frac{d}{dU} \left(\frac{1}{C^2} \right) \right]^{-1}. \quad (6)$$

III. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ И ДЕЛЬТА-СЛОЕМ

Алгоритм самосогласованного моделирования мы использовали для исследования НЕМТ гетероструктур с $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ квантовыми ямами, содержащими близкорасположенные дельта-легированные слои, а также для структур с одиночной квантовой ямой. С целью моделирования вольт-фарадных характеристик процедура самосогласованного решения повторялась около 300 раз для изменяющегося смещения, приложенного к образцу. После формирования расчетной C-V характеристики она сравнивалась с измеренной экспериментально. При несовпадении расчетной и экспериментальной кривых расчет повторяется для другого значения разрыва зоны проводимости. В результате для составов твердого раствора полупроводника $0.06 < x < 0.3$ моделирования указывает на наличие одного уровня, связанного в яме. Этот факт является важным для изготовления высокоэффективных одномодовых лазеров.

При численном решении уравнения Шредингера в области квантового ящика связанные энергетические состояния вычисляются корректно, а непрерывный спектр состояний в свободной зоне над ямой заменяется набором дискретных уровней, расстояние между которыми определяется размером ящика. Чтобы рассчитать правильную концентрацию носителей в области КЯ, мы брали в рассмотрение 16–20 нижних уровней энергии в квантовом ящике. Расчеты показывают, что плотность носителей заряда в низшей подзоне квантования (соответствующей связанному уровню) составляет около 95% от общей плотности носителей в области КЯ, а 8-я подзона содержит не более 10^{-6} от общего количества носителей заряда. Этот факт свидетельствует о высокой степени пространственной локализации носителей заряда в квантовой яме.

Разработанный алгоритм самосогласованного решения уравнения Шредингера в квантовом ящике имеет преимущества перед часто используемым алгоритмом раздельного расчета 3D- и 2D-электронов в области квантовой ямы [2]. В частности, наш метод корректно учитывает квазирезонансный уровень, расположенный в области изгиба потенциала между связанными состояниями в КЯ и свободными состояниями с положительной энергией. Расчеты для квазирезонансного состояния показывают, что его квадрат волновой функции сосредоточен преимущественно в области КЯ.

Кроме того, разработанная методика моделирования и подгонки была применена для характеристики образцов, содержащих квантовую яму и дельта-слой. На рис. 1 приведены экспериментальные C-V-характеристики гетероструктуры с КЯ $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{As}/\text{GaAs}$ и дельта-слоем, легированным углеродом, в диапазоне температур 20 – 300 К. При понижении температуры на вольт-фарадных

зависимостях становятся различимы два горизонтальных участка, связанных с наличием в структуре областей с высокой концентрацией основных носителей заряда (область квантовой ямы и область дельта-слоя).

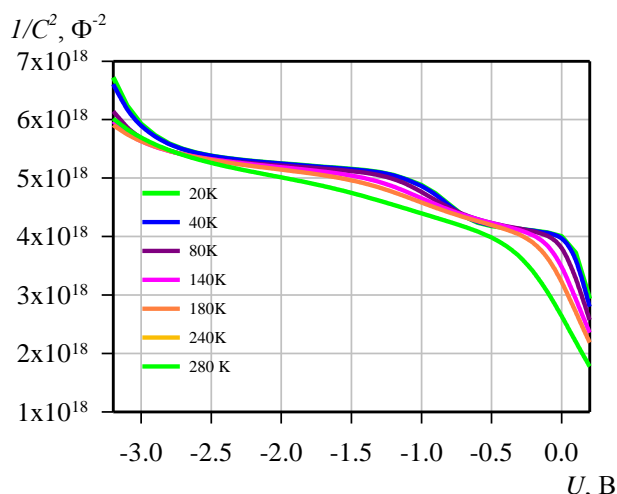


Рис. 1. C-V-характеристики структуры с КЯ $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{As}/\text{GaAs}$ и дельта-слоем углерода в диапазоне температур 20 – 300 К

По экспериментальным C-V-характеристикам были рассчитаны профили концентрации основных носителей заряда при соответствующих температурах, рис. 2. С понижением температуры наблюдается уменьшение ширины и увеличение интенсивности пика как от КЯ, так и от дельта-легированного слоя. Это наблюдалось нами ранее для структуры с одиночной квантовой ямой и структуры с одиночным дельта-слоем углерода и связано с усилением локализации носителей заряда в области КЯ и дельта-слоя при пониженных температурах.

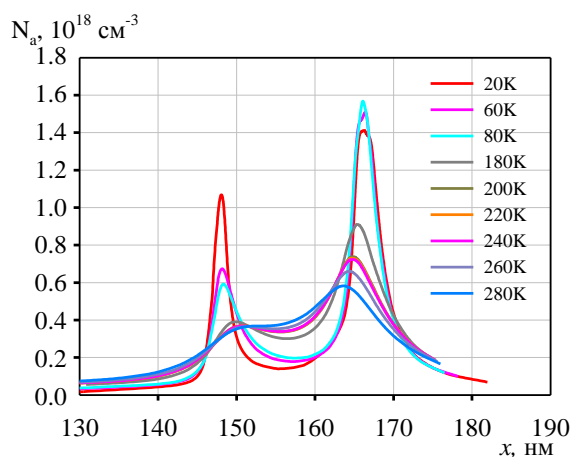


Рис. 2. Наблюдаемые профили концентрации носителей заряда для структуры с КЯ $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{As}/\text{GaAs}$ и дельта-слоем углерода в диапазоне температур 20 - 300 К

Для структуры с одиночной КЯ $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ увеличение температуры от 75 до 250 К приводит к

значительному (порядка 5 раз) уменьшению максимального значения пика концентрации основных носителей заряда, что связано с увеличением вероятности термоактивационного выброса носителей заряда из КЯ при повышении температуры. Для структуры же с КЯ и дельта-легированным слоем наблюдается более слабое (менее 2-х раз) уменьшение амплитуды наблюдаемой концентрации основных носителей заряда при повышении температуры от 75 до 250 К (рис. 2). Это может являться следствием того, что дельта-слой углерода, расположенный рядом с квантовой ямой, является эффективным эмиттером носителей заряда для КЯ. Это ослабляет температурную зависимость концентрации носителей заряда в КЯ, поскольку с повышением температуры наряду с увеличением вероятности термоактивированного выброса носителей из КЯ увеличивается вероятность захвата квантовой ямой носителей заряда из дельта-слоя в результате уменьшения степени локализации носителей заряда в области дельта-слоя.

Было проведено математическое моделирование наблюдаемого профиля концентрации носителей заряда для структуры с КЯ и дельта-слоем углерода для различных значений расстояния между КЯ и дельта-слоем. Было выявлено, что если дельта-слой находится на расстоянии 40 нм и более от квантовой ямы, он практически не оказывает влияния на распределение носителей заряда и вид потенциала в области КЯ. При достаточно близком расположении КЯ и дельта-легированного слоя проникающие из дельта-слоя подвижные носители заряда модифицируют электростатический потенциал, изменяя вид волновой функции связанного состояния и его энергию (рис. 3). Понижение температуры приводит к усилению этого взаимодействия.

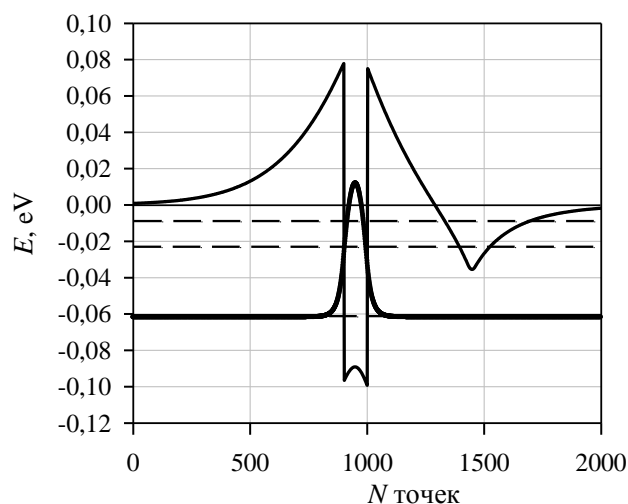


Рис. 3. Самосогласованный потенциал Хартри, полученный при моделировании гетероструктуры с КЯ и дельта-слоем

Наличие дельта-легированного слоя рядом с КЯ не только влияет на ее заполнение носителями заряда, но

также оказывает влияние на положение уровней квантования в КЯ. На рис. 4 представлена зависимость положения основного уровня квантования в КЯ от расстояния между квантовой ямой и дельта-легированным слоем, полученная при моделировании энергетического спектра гетероструктуры с КЯ $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{As}/\text{GaAs}$.

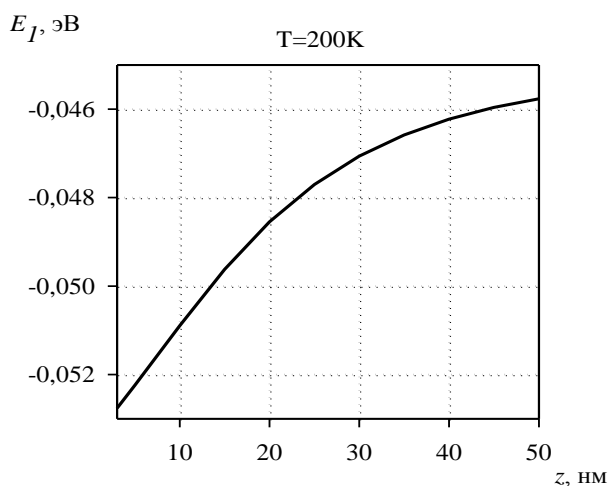


Рис. 4. Положение уровня квантования для структуры с квантовой ямой и дельта-слоем углерода в зависимости от расстояния между КЯ и дельта-слоем. Температура 200 К, ширина квантовой ямы 10 нм

Это объясняется тем, что чем ближе дельта-слой расположен к КЯ, тем интенсивней она захватывает из него носители заряда. Это приводит к более сильному

изгибу электростатического потенциала, что в свою очередь приводит к сдвигу положения уровней квантования в КЯ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан метод комплексной характеристики гетероструктур с квантово-размерными областями путем численного самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона с последующей подгонкой результатов к экспериментальным данным, полученным при вольт-фарадном профилировании. Методика успешно применена для исследования образцов как с одиночной квантовой ямой, так и в случае, когда в гетероструктуре одновременно присутствует квантовая яма и дельта-легированный слой. Сравнительный анализ позволил выявить влияние положения дельта-слоя на заполнение носителями заряда и другие электронные свойства квантовой ямы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Blood P., Orton J.W., The electrical characterization of semiconductors: majority carriers and electron states (Academic Press, London, 1992).
- [2] P.N. Brounkov, T. Benyattou, and G. Guillot, J. Appl. Phys. 80, 864 (1996).
- [3] V.I.Zubkov, M.A.Melnik, A.V.Solomonov, E.O.Tsvelev, F.Bugge, M.Weyers, G.Tränkle, Phys. Rev. B 70, 075312 (2004).
- [4] V.I.Zubkov. Semiconductors 40, 1204 (2006).