

## КОНЦЕНТРАЦИЯ ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В СЕЛЕКТИВНО ЛЕГИРОВАННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ПРИ РАВНОВЕСНОМ И НЕРАВНОВЕСНОМ ЗАПОЛНЕНИИ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ

© С.Г.Дмитриев, О.Г.Шагимуратов

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,  
141120 Фрязино, Россия  
(Получена 30 января 1995 г. Принята к печати 23 февраля 1995 г.)

Проведен расчет концентрации двумерного электронного газа  $n_s$  в селективно легированных гетероструктурах в рамках модели  $U^-$ -центра для атомов легирующей примеси. Рассмотрены случаи равновесного заполнения уровней примеси и неравновесного — в условиях полной ионизации примесных центров и при опустошенных глубоких уровнях. Показано, что возбуждение глубоких центров может приводить к заметному, до величин  $\sim 30\%$ , увеличению  $n_s$ .

В современных селективно легированных гетероструктурах (СЛГС) на базе гетероперехода AlGaAs/GaAs и транзисторах (HEMT) на их основе концентрация электронов в канале  $n_s$  достигает значений  $\sim 10^{12}$  см $^{-2}$  при довольно высоких уровнях легирования AlGaAs —  $N_d \sim 10^{18}$  см $^{-3}$ . Однако повышение степени легирования до значения концентрации  $10^{17} \div 10^{18}$  см $^{-3}$  сопровождается появлением глубоких ловушек (так называемых DX-центров), захват электронов на которые приводит к целому ряду нежелательных (с точки зрения транзисторов) явлений [1] (см. также [2]). Такой захват происходит, в частности, в сильных электрических полях,  $\sim 1$  кВ/см, характерных для рабочих режимов высокочастотных транзисторов и необходимых для достижения высоких дрейфовых скоростей,  $\sim 10^7$  см/с.

Таким образом, реализация изначально больших значений низкотемпературной (и низковольтной) подвижности хотя и служит характеристикой высокого качества структуры, но вовсе не является гарантией полного успеха при создании транзистора — необходима работа по устранению влияния ловушек. Усилия в этом направлении, по-видимому, не завершились успехом — скорее, наоборот, возник вопрос о том, возможно ли вообще устранение ловушек традиционными технологическими методами или же их появление с повышением  $N_d$  принципиально обусловлено самой природой используемых систем [1].

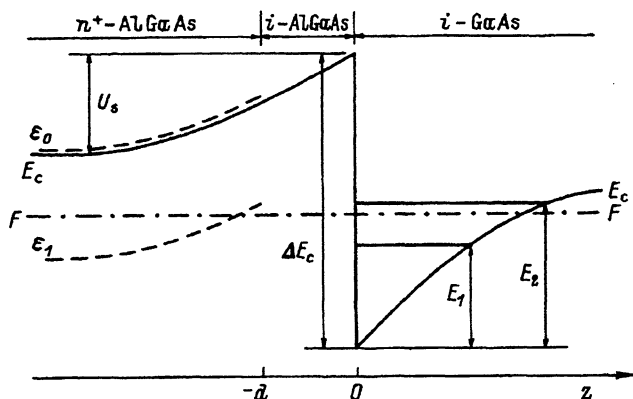


Рис. 1. Энергетическая диаграмма селективно легированной гетероструктуры с  $U^-$ -центрами в качестве легирующей примеси.  $E_c$  — край зоны проводимости,  $F$  — уровень Ферми,  $\Delta E_c$  — разрыв зоны проводимости на гетерогранице,  $d$  — толщина спейсера,  $E_{1,2}$  — уровни размерного квантования двумерного электронного газа,  $U_s$  — изгиб зоны проводимости AlGaAs на гетерогранице,  $\epsilon_{0,1}$  — уровни энергии примесного центра.

В связи с этой представляет интерес модель многозарядного  $U^-$ -центра (т.е. центра с отрицательной корреляционной энергией) для атомов легирующей примеси [3,4]. Отличительной чертой этой модели как раз и является обязательное, не связанное с технологией, наличие глубоких ловушек, появляющихся здесь в виде одного из зарядовых состояний многозарядного центра. Причем эффективное количество ловушек зависит от параметров системы и становится заметным при превышении  $N_d$  некоторого критического значения, зависящего от температуры [5].

Согласно существующим представлениям [4], глубокому уровню с энергией  $\epsilon_1$  в  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  соответствует (при  $x > 0.22$ ) отрицательно заряженное состояние атома примеси, при этом захват электрона на уровень  $DX$ -центра происходит через промежуточное нейтральное состояние и сопровождается сильной решеточной релаксацией. Как известно, при повышении  $N_d$  примесная зона мелких нейтральных центров сливается с зоной проводимости (переход Мотта) [6]. При этом рассматриваемые уровни оказываются метастабильными (или, как иногда говорят, «погружаются» в зону проводимости). Именно такая ситуация и приводит к явлению замороженной фотопроводимости [1].

Наиболее простая модель, учитывающая указанные обстоятельства, изображена на рис. 1, где уровень нейтрального центра  $\epsilon_0$  расположен в зоне проводимости. Это представление имеет модельный характер, и на самом деле следовало бы учитывать энергетическое распределение метастабильных состояний, связанное с влиянием кулоновского взаимодействия и химическими сдвигами. Однако можно ожидать, что при небольшом разбросе энергий ( $\lesssim 10$  мэВ) влияние этого эффекта на концентрацию двумерного электронного газа (ДЭГ) будет мало.

В данной работе проведен расчет концентрации ДЭГ в СЛГС с  $U^-$ -центрами в качестве легирующей примеси для равновесного заполнения уровней примесных центров и неравновесного — когда опустошены глубокие ловушки (случай, соответствующий замороженной фотопроводимости) и когда все атомы примеси ионизованы (случай, соответствующий сильному фотовозбуждению).

Рассматриваемая структура (рис. 1) представляет собой последовательно расположенные слои легированного с концентрацией  $N_d$   $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , нелегированного  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (спейсера) толщиной  $d$  и нелегированного  $\text{GaAs}$ . Концентрацию ДЭГ можно найти из условия постоянства уровня Ферми (квазиуровня — в неравновесном состоянии), которое запишем в виде

$$U_s - F_1 + F_2 = \Delta E_c, \quad (1)$$

где  $U_s$  — поверхностный изгиб зоны проводимости в  $\text{AlGaAs}$  на гетерогранице;  $F_1, F_2$  — положения уровня Ферми в объеме  $\text{AlGaAs}$  относительно дна зоны проводимости и ДЭГ относительно края дна зоны проводимости на гетерогранице соответственно;  $\Delta E_c$  — разрыв зоны проводимости.

Равновесное заполнение зарядовых состояний в объеме  $\text{AlGaAs}$  определяется соотношениями, которые следуют из распределения Гиббса для многозарядных центров [7] и связывают концентрации нейтральных ( $N^0$ ), положительно ( $N^+$ ) и отрицательно ( $N^-$ ) заряженных центров,

$$\frac{N^0}{N^+} = \frac{g^0}{g^+} \exp\left(\frac{F_1 - \varepsilon_0}{kT}\right), \quad \frac{N^-}{N^0} = \frac{g^-}{g^0} \exp\left(\frac{F_1 - \varepsilon_1}{kT}\right), \quad (2)$$

$$N_d = N^0 + N^+ + N^-. \quad (3)$$

Значение  $F_1$  определяется из уравнения электронейтральности:

$$n_0 + N^- = N^+, \quad n_0 = N_c \Phi_{1/2}(\varphi_1), \quad (4)$$

$$\varphi_1 = \frac{F_1}{kT}, \quad \Phi_{1/2}(\varphi) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} \frac{t^{1/2}}{1 + \exp(t - \varphi)} dt,$$

где  $n_0$  — корреляция электронов в зоне проводимости,  $N_c$  — соответствующая плотность состояний;  $g^0, g^+, g^-$  — кратности вырождения рассматриваемых зарядовых состояний (индексы соответствуют заряду центра);  $T$  — температура,  $k$  — постоянная Больцмана.

Для вычисления  $U_s$  было проинтегрировано соответствующее уравнение Пуассона в  $\text{AlGaAs}$ ,

$$\frac{d^2 U}{dz^2} = \frac{4\pi}{\kappa} q^2 [N^+(z) - N^-(z) - n(z)], \quad (5)$$

где  $U$  — изгиб зоны проводимости,  $q$  — элементарный заряд,  $\kappa$  — диэлектрическая проницаемость,  $z$  — координата по нормали к плоскости гетерограницы. Используя безразмерные переменные  $y$  и  $v$  —  $y = z/L_d$ ,  $L_d = (\kappa kT/4\pi q^2 N_d)^{1/2}$  и  $v = U/kT$  — переищем уравнение (5) в виде

$$\frac{d^2 v}{dy^2} = 1 - \frac{\theta e^{-v} + \vartheta e^{-2v}}{1 + \theta e^{-v} + \vartheta e^{-2v}} - \delta \Phi_{1/2}(\varphi_1 - v), \quad z < -d; \quad (6)$$

$$\frac{d^2 v}{dy^2} = -\delta \Phi_{1/2}(\varphi_1 - v), \quad -d < z < 0; \quad (7)$$

$$\delta = \frac{n_0}{N_d}, \quad \theta = \frac{g^0}{g^+} \exp\left(\frac{F_1 - \varepsilon_0}{kT}\right), \quad \vartheta = \frac{g^-}{g^+} \exp\left(\frac{2F_1 - \varepsilon_0 - \varepsilon_1}{kT}\right).$$

После интегрирования правой и левой частей уравнений (6) и (7) по  $dv$  получим связь между  $E = dv/dy$  и  $v$  на обеих границах спейсера:

$$\frac{1}{2} E_i^2 = v_i + \ln \left[ \frac{1 + \theta \exp(-v_i) + \vartheta \exp(-2v_i)}{1 + \theta + \vartheta} \right] - \delta \Phi(v_i), \quad (8)$$

$$\frac{1}{2} E_s^2 = \frac{1}{2} E_i^2 - \delta [\Phi(v_s) - \Phi(v_i)], \quad (9)$$

$$v_s - v_i = E_s \frac{d}{L_d} - \Delta v, \quad (10)$$

$$\Delta v = \int_{v_i}^{v_s} \left\{ 1 - \left[ 1 - \gamma (\Phi(v) - \Phi(v_s)) \right]^{-1/2} \right\} dv, \quad \gamma = \frac{2\delta}{E_s^2},$$

$$\Phi(v) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} t^{1/2} \ln \left[ \frac{1 + \exp(t - \varphi_1)}{\exp(-v) + \exp(t - \varphi_1)} \right] dt.$$

Здесь индекс  $t$  относится к левой границе спейсера ( $z = -d$ ),  $s$  — к правой ( $z = 0$ ).

Выражение для определения  $F_2$  с учетом заполнения двух подзон размерного квантования с энергиями  $E_1$  и  $E_2$  имеет вид [8]

$$n_s = DkT \sum_{i=1}^2 \ln \left[ 1 + \exp\left(\frac{F_2 - E_i}{kT}\right) \right], \quad (11)$$

где  $E_1 \approx 116 (n_s/10^{12})^{2/3}$  мэВ,  $E_2 \approx 149 (n_s/10^{12})^{2/3}$  мэВ [9];  $D$  — двумерная плотность состояний в GaAs.

Последнее соотношение, замыкающее полученную систему уравнений, устанавливает связь между  $n_s$  и полем на гетерогранице. Оно, очевидно, имеет вид

$$E_s \left( \frac{kT}{qL_d} \right) = \frac{4\pi}{\varkappa} qn_s. \quad (12)$$

Решение полученной системы уравнений (1)–(12) проводилось численно. Результаты расчетов изображены на рис. 2, 3. Равновесным значениям  $n_s$  соответствуют кривые 1. Расчеты  $n_s$  для возбужденных состояний атомов примеси проводились аналогично. При этом положение квазиуровня Ферми  $F_1$  определялось из уравнений (2)–(4) при  $N^- = 0$  (опустошены глубокие уровни) и  $N^0 = N^- = 0$  (все атомы примеси ионизованы). При этих же условиях определялись значения  $U_s$ . Результатам этих вычислений соответствуют кривые 2 и 3.

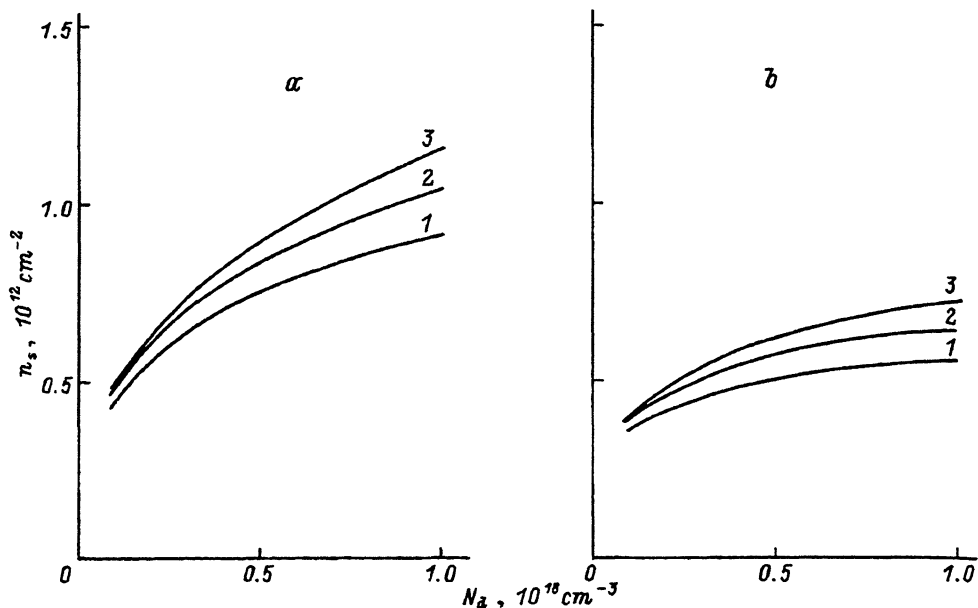


Рис. 2. Концентрация двумерного электронного газа  $n_s$  в зависимости от концентрации легирующей примеси  $N_d$  в  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  при  $x = 0.25$  и толщине слейсера  $d$ , Å:  $a - 0$ ,  $b - 100$ . 1 — равновесное заполнение уровней примеси; 2 — опустошены глубокие уровни; 3 — полная ионизация примесных центров.  $T = 77$  К.

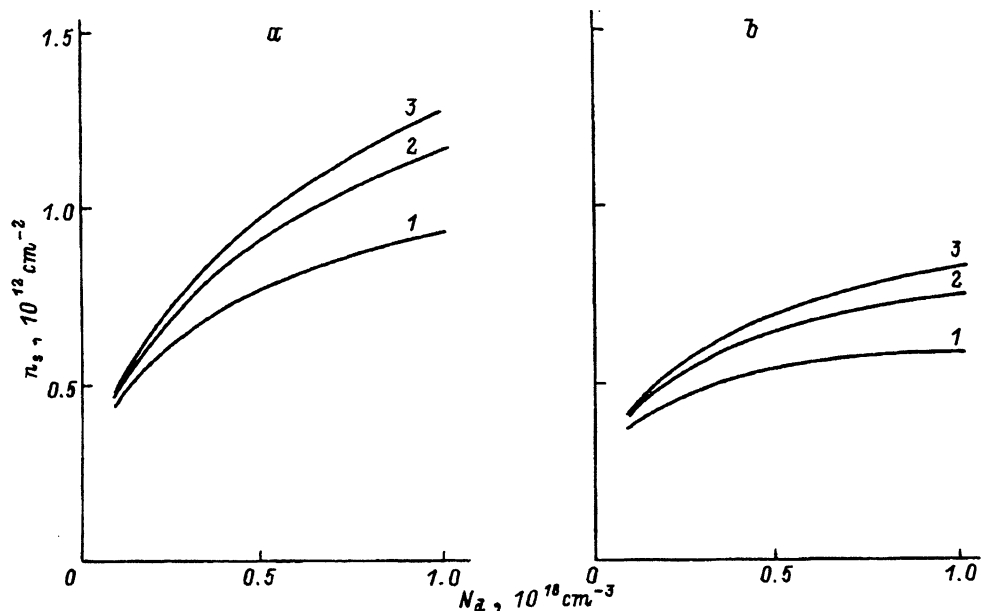


Рис. 3. Концентрация двумерного электронного газа  $n_s$  в зависимости от концентрации легирующей примеси  $N_d$  в  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  при  $x = 0.3$  и толщине слейсера  $d$ , Å:  $a - 0$ ,  $b - 100$ . Обозначения те же, что и на рис. 2.  $T = 77$  К.

Расчеты проводились при следующих значениях параметров:  $\Delta E_c = 0.88x$  эВ [10];  $\varepsilon_1 = -2(0.7 - 0.15x)$  эВ,  $g^+ = 1$ ,  $g^0 = 2$ ,  $g^- = 4$ , [4] (параметры соответствуют AlGaAs:Si);  $\varepsilon_0 = 5$  мэВ;  $D = 2.83 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup> × × эВ<sup>-1</sup>,  $\kappa = 13.18 - 3.12x$  [11] ( $x$  — доля Al в Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As);  $T = 77$  К.

Из приведенных графиков видно, что  $n_s$  заметно увеличивается в структурах с возбужденными примесными центрами. Относительное изменение  $n_s$  (по отношению к равновесным значениям) может составлять ~ 50% при полной ионизации примесей и ~ 30% при опустошении глубоких уровней, что качественно соответствует экспериментальным данным (см., например, [12]).

Более подробный анализ (см., например, [5]) показывает, что эффекты экранирования поля в области пространственного заряда AlGaAs свободными электронами в структурах с возбужденными центрами (когда электронный газ вырожден) хотя и заметны, но незначительно влияют на величину  $n_s$ . Кроме того, имеет место очень слабая зависимость  $n_s$  от температуры и величины параметра  $\varepsilon_0$  при  $\varepsilon_0 \lesssim 10$  мэВ. Это явление во многом аналогично эффекту пиннинга на барьере Шоттки [13] (в данном случае роль поверхностных состояний играет ДЭГ) и является наиболее существенным фактором, ограничивающим  $n_s$  значениями  $\lesssim 10^{12}$  см<sup>-2</sup> [5].

Это же обстоятельство приводит к тому, что результаты расчетов  $n_s$  с использованием другой популярной (и конкурирующей) модели — однозарядного центра с двумя уровнями энергии  $\varepsilon_0$  и  $\varepsilon_1$  будут близки к полученным значениям (причем для возбужденных состояний — будут совпадать). Однако в рамках такой модели концентрация заряженных центров в объеме AlGaAs будет существенно отличаться, что должно приводить к отличиям в протекании неравновесных процессов, связанных с перезарядкой атомов примеси.

### Список литературы

- [1] P.M. Mooney. J. Appl. Phys., **67**, R1 (1990).
- [2] В.И. Борисов, С.Г. Дмитриев, В.Е. Любченко, Б.К. Медведев, В.Г. Мокеров, К.И. Спиридонов. ФТП, **28**, 1199 (1994).
- [3] P.M. Mooney. Semicond. Sci. Techn., **6**, B1 (1991).
- [4] D.J. Chadi, K.J. Chang. Phys. Rev. B, **39**, 10063 (1989).
- [5] С.Г. Дмитриев, Б.К. Медведев, В.Г. Мокеров, О.Г. Шагмуратов. ФТП, **29**, 1906 (1995).
- [6] В.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [7] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990).
- [8] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [9] D. Delagebefndeu, N.T. Ling. IEEE Trans. Electron Dev. **ED-29**, 955 (1982).
- [10] S.R. Smith, F. Szmulovich, G.J. Brown. J. Appl. Phys., **75**, 1010 (1994).
- [11] S. Adachi. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).
- [12] Ж.И. Алферов, С.В. Иванов, П.С. Копьев, Б.Я. Мельцер, Т.А. Полянская, И.Г. Савельев, В.М. Устинов, Ю.В. Шмарцев. ФТП, **19**, 1199 (1985).
- [13] Э.Х. Родерик. *Контакты металл-полупроводник* (М., Радио и связь, 1982).

# Concentration of a two-dimensional electron gas in selective doped heterostructures under equilibrium and nonequilibrium filling of impurity centers

*S.G. Dmitriev, O.G. Shagimuratov*

Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Science,  
141120 Fryazino, Russia

Concentration of a two-dimensional electron gas ( $n_s$ ) in selective doped heterostructures has been calculated using the  $U^-$ -center model for doping impurities. The cases of equilibrium and nonequilibrium (for empty deep levels and for full impurity ionization) filling of impurity centers were considered. Excitation of deep centers can lead to an increase in  $n_s$  up to 30 per cent.

---