

УДК 537 311.322

© 1991

РОЛЬ НЕЙТРАЛЬНЫХ ПРИМЕСЕЙ ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ ДВОЙНОЙ ГЕТЕРОПЕРЕХОД

В. И. Сугаков, С. А. Яцкевич

Рассмотрено рассеяние электронов, туннелирующих через двухбарьерный гетеропереход (ДБГП) на нейтральных примесях. Рассчитана плотность тока протуннелировавших носителей. При энергиях носителей, близких к энергии резонансного уровня, сечение рассеяния на примеси в ДБГП значительно превышает сечение рассеяния в объемном кристалле. Это связано с возрастанием амплитуды волновой функции в яме при этих энергиях. Уширение резонансного пика и уменьшение его максимума с ростом концентрации становятся заметными при относительной концентрации примесей порядка 10^{-6} — 10^{-5} . Эффект следует учитывать уже для стехиометрических дефектов, всегда присутствующих в бинарных соединениях. Численный счет проведен для ДБГП $Al_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As$.

Свойства двухбарьерных гетеропереходов (ДБГП) интенсивно исследуются в настоящее время в связи с перспективой их использования в микроэлектронике [1-3]. В энергетическом спектре прошедших через ДБГП электронов наблюдаются резкие пики, связанные с квантованием энергетических уровней электронов в яме. С точки зрения использования ДБГП, важное значение имеют высота и ширина этих пиков. Существенное влияние на эти параметры оказывают следующие факторы: размеры барьеров, рассеяние на фононах, примесях, дефектах решетки. Процесс рассеяния носителей на примеси в ДБГП вследствие квантования уровней и сложного характера волновой функции значительно отличается от соответствующих процессов в бесконечном кристалле. Квантование уровней обуславливает изменение возможных каналов рассеяния, а сложный характер волновой функции приводит к зависимости сечения рассеяния от положения примеси в яме. В отличие от [4], где рассматривалось туннелирование носителей через потенциальный барьер, обусловленное наличием примесных уровней, в данной работе рассматривается рассеяние на примесях, расположенных в яме, ограниченной потенциальными барьерами. Поэтому главную роль при туннелировании играют состояния непрерывного спектра носителей у примеси, а не связанные, как в [4].

1. Постановка задачи и метод решения

Рассмотрим ДБГП, составленный из различных полупроводников, зоны проводимости которых расположены, как показано на рис. 1. В потенциальной яме хаотически расположены нейтральные примеси с относительной концентрацией c .

Стандартным методом решения задач о туннелировании носителей является нахождение волновой функции в каждом слое с помощью метода эффективной массы, а затем сшивание решений на границах слоев.

Однако в окрестности дефекта, где в волновой функции присутствуют гармоники с $k \sim \pi/d$ (d — период решетки кристалла), метод эффективной массы неприменим. В этом случае волновую функцию следует искать в виде

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{m}} \Psi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{m}} \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{m}), \quad (1)$$

$\varphi(\mathbf{r}-\mathbf{m})$ — функция Ванье, центрированная на узле \mathbf{m} ; $\Psi(\mathbf{r})$ — удовлетворяет уравнению

$$\varepsilon(-i\nabla)\Psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{n})\Psi(\mathbf{r}) + V\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1a)$$

где $V=W$ при $0 \leq z \leq b$, $a+b \leq z \leq a+2b$ и $V=0$ при $z \leq 0$, $b \leq z \leq a+b$, $z \geq a+2b$. Для точечных дефектов можно положить $U(\mathbf{n}) = U_0 C_n$, где U_0 — сдвиг потенциальной энергии электрона при его расположении на примесном атоме, а $C_n=1$, если в узле \mathbf{n} находится дефект, и $C_n=0$, если узел \mathbf{n} занят атомом кристалла. Введем величину $\delta C_n = C_n - c$, где c — средняя концентрация дефектов. Тогда из (1) и (1a) следует

$$\Psi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{n}} = \psi_0(\mathbf{r}) + U_0 \sum_{\mathbf{m}} \delta C_{\mathbf{m}} G(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \Psi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{m}}, \quad (2)$$

$\psi_0(\mathbf{r})$ является решением уравнения (1) с $U(\mathbf{n})=cU_0$, т. е. соответствует волновой функции уравнения Шредингера с усредненным потенциалом.

Второе слагаемое в (2) учитывает флуктуации в распределении примесей и соответствует волновой функции частицы, рассеянной флуктуациями дефектов.

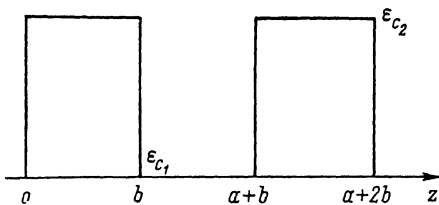


Рис. 1. Двухбарьерный гетеропереход.

ε_{c1} — дно зоны проводимости GaAs, ε_{c2} — $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $W = \varepsilon_{c2} - \varepsilon_{c1}$.

Уравнение для функции Грина $G(\mathbf{n}, \mathbf{m})$, где \mathbf{n} и \mathbf{m} пробегает по всем узлам решетки, может быть записано в виде

$$(\hbar^2 q^2 / 2m^*) G(\mathbf{n}, \mathbf{m}) - \varepsilon(-i\nabla) G(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}, \quad (3)$$

m^* — эффективная масса носителей, $q^2 = (2m^* / \hbar^2)(E - cU_0 - V)$, $\varepsilon(\mathbf{k})$ — закон дисперсии.

Поскольку $\psi_0(\mathbf{r})$ соответствует случаю однородного потенциала в каждой области, то в этом случае может быть применен метод эффективной массы. Решение для $\psi_0(\mathbf{r})$ представляется в стандартной форме суперпозиции падающих и отраженных волн в яме и выходящих волн за пределами ДБГП. При этом падающий поток направлен вдоль z и нормирован на $\hbar k / m^*$.

Определим плотность тока прошедших частиц. Поскольку при этом значения волновой функции определяются в области, далекой от дефекта, можно в функции Грина перейти от узельного приближения к континуальному, полагая $G(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \rightarrow G(\mathbf{r}, \mathbf{m})$. Тогда с учетом (2) плотность тока носителей в области $z \geq a+2b$ может быть записана в виде

$$\mathbf{j}(r) = \mathbf{j}_{00}(r) + \mathbf{j}_{10}(r) + \mathbf{j}_{01}(r) + \mathbf{j}_{11}(r) + \text{к. с.}, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{00} &= \frac{\hbar}{2m^*i} \psi_0^* \nabla \psi_0, & \mathbf{j}_{01} &= \frac{\hbar}{2m^*i} \psi_0^* \nabla U_0 \sum_{\mathbf{m}} \delta C_{\mathbf{m}} G(\mathbf{r}, \mathbf{m}) \Psi(\mathbf{m}), \\ \mathbf{j}_{10} &= \frac{\hbar}{2m^*i} (\nabla \psi_0) U_0 \sum_{\mathbf{m}} \delta C_{\mathbf{m}} G^*(\mathbf{r}, \mathbf{m}) \Psi^*(\mathbf{m}), \\ \mathbf{j}_{11} &= \frac{\hbar}{2m^*i} U_0^2 \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} \delta C_{\mathbf{m}} \delta C_{\mathbf{m}'} G^*(\mathbf{r}, \mathbf{m}) \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{m}') \Psi^*(\mathbf{m}) \Psi(\mathbf{m}'). \end{aligned}$$

Волновую функцию $\Psi(\mathbf{m})$ (см. (2)) можно представить в виде бесконечного ряда. Подставив этот ряд в (4), получаем следующее выражение для плотности тока:

$$g = \gamma_i(z_1) e^{-ik_{\perp}z}, \quad z \leq 0,$$

$$g = \alpha_1^+(z_i) e^{x_{\perp}z} + \alpha_1^-(z_i) e^{x_{\perp}z}, \quad 0 \leq z \leq b,$$

$$g = \beta^+(z_i) e^{iq_{\perp}z} + \beta^-(z_i) e^{-iq_{\perp}z} + ie^{iq_{\perp}|z-z_i|}/2q_{\perp}, \quad b \leq z \leq a+b,$$

$$g = \alpha_2^+(z_i) e^{x_{\perp}z} + \alpha_2^-(z_i) e^{-x_{\perp}z}, \quad a+b \leq z \leq a+2b,$$

$$g = \gamma_2(z_i) e^{ik_{\perp}z}, \quad z \geq a+2b, \quad (9)$$

где

$$k_{\perp} = \sqrt{\frac{2m_a^* E}{\hbar^2} - k_x^2 - k_y^2}, \quad x_{\perp} = \sqrt{\frac{2m_b^* (W - E)}{\hbar^2} + k_x^2 + k_y^2},$$

$$q_{\perp} = \sqrt{\frac{2m_a^*}{\hbar^2} (E - cU_0) - k_x^2 - k_y^2}.$$

Коэффициенты α_i^{\pm} , β_i^{\pm} , γ находятся из условий непрерывности функции Грина и ее производной по z на границах раздела слоев. При вычислении $G(\mathbf{m}, \mathbf{m})$ основной вклад в сумму по \mathbf{k} дают слагаемые с $|\mathbf{k}| \sim \sim \pi/d$. В этом случае для точек \mathbf{m} , расстояние от которых до границ раздела превышает период решетки, можно положить

$$G(\mathbf{m}, \mathbf{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - cU_0 - \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (10)$$

Вычисление $G(\mathbf{m}, \mathbf{m})$ было выполнено при косинусоидальном законе дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2M(\cos k_x d + \cos k_y d + \cos k_z d). \quad (11)$$

Таким образом, окончательно получаем следующую формулу для плотности тока:

$$\langle j \rangle = (\hbar k/m^*) \{ |\gamma_2|^2 (1 + \alpha(U_0, E)) + \beta(U_0, E) \}. \quad (12)$$

Здесь

$$\gamma_2 = -16 (sx)^2 k q e^{-ik(a+2b)} / \Delta(k, q, x),$$

$$\Delta(k, q, x) = -2i \{ (f_2^2 - q^2 f_1^2) \sin qa + 2q f_1 f_2 \cos qa \},$$

$$f_1 = 2 \{ ik \operatorname{sh} xb - (sx) \operatorname{ch} xb \}, \quad f_2 = 2sx \{ ik \operatorname{ch} xb - (sx) \operatorname{sh} xb \},$$

$$\alpha(U_0, E) = \frac{U_0^2 G(0) ca}{(1 - U_0 G(0)) 2sxkq} \operatorname{Im} \left\{ \left(s_1 \frac{e^{iqa} \sin qa}{qa} + s_2 \right) e^{iqb} \beta^+ + \right. \\ \left. + \left(s_2 \frac{e^{-iqa} \sin qa}{qa} + s_1 \right) e^{-iqb} \beta^- \right\},$$

$$s_1 = \frac{qf_1 - if_2}{2}, \quad s_2 = \frac{qf_1 + if_2}{2}, \quad [s = \frac{m_a^*}{m_b^*}, \quad G(0) = G(\mathbf{m}, \mathbf{m})],$$

$$\beta(U_0, E) = 8 \left(\frac{U_0}{\pi E} \right)^2 k^4 a d^3 \int \frac{[dk_x dk_y x_{\perp}^2 k_{\perp} R(k_{\perp}, x_{\perp})]}{|\Delta(k_{\perp}, q_{\perp}, x_{\perp})|^2},$$

где $\Delta(k_{\perp}, q_{\perp}, x_{\perp})$ получается из $\Delta(k, q, x)$ заменой $k \rightarrow k_{\perp}$, $q \rightarrow q_{\perp}$, $x \rightarrow x_{\perp}$

$$R(k_{\perp}, x_{\perp}) = \{ |s_1(k_{\perp})|^2 + |s_2(k_{\perp})|^2 \} \frac{\sin ka}{ka} \operatorname{Re}(\beta^+ (\beta^-)^* e^{2ikb + ika}) + \\ + \{ |\beta^+|^2 + |\beta^-|^2 \} \frac{\sin q_{\perp} a}{q_{\perp} a} \operatorname{Re}(s_1 s_2^* e^{iq_{\perp} a}) + \\ + \frac{\sin(k + q_{\perp}) a}{(k + q_{\perp}) a} \operatorname{Re}(s_1 \beta^- (\beta^+ s_2)^* e^{2ikb + i(k + q_{\perp}) a}) +$$

$$+ \frac{\sin(k-q_1)a}{(k-q_1)a} \operatorname{Re} \left\{ s_1 s_2^{-1} (\beta^+ s_2)^* e^{-2i\lambda b - i(k-q_1)a} \right\},$$

$$\beta^+ = \frac{8i k s x e^{i k(a+2b) - i q a}}{\Delta(k, q, x)} \{ s x i (k+q) \operatorname{ch} x b - (s^2 x^2 - k q) \operatorname{sh} x b \},$$

$$\beta^- = \frac{8i k s x e^{i k(a+2b) + i q a}}{\Delta(k, q, x)} \{ s x i (q-k) \operatorname{ch} x b + (s^2 x^2 + k q) \operatorname{sh} x b \}.$$

Формула (12) позволяет рассчитать поток носителей, выходящих из ДБГП, в зависимости от концентрации и потенциала примеси.

2. Результаты расчетов и обсуждение

Расчеты были выполнены для гетероструктуры $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$. Параметры ДБГП были взяты следующие [6]: $m_a^*/m=0.067$, $m_b^*/m=0.1$, $W=0.424$ эВ (рис. 3, 4).

Расчет показал, что с увеличением концентрации примесей максимум, соответствующий энергии резонансного уровня, смещается и уменьшается по величине, причем как сдвиг, так и уменьшение максимума зависят

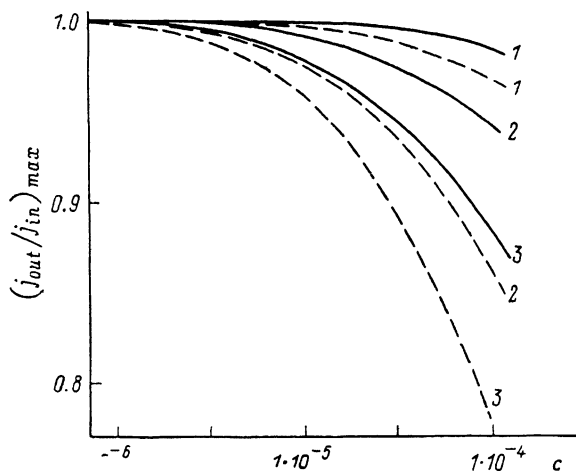


Рис. 3. Зависимость $(j_{\text{out}}/j_{\text{in}})_{\text{max}}$ от концентрации и потенциала примеси.

Сплошные линии — $U_0=0.15$, штриховые — 0.25 эВ. $b=50$ Å, $a=40$ (1), 60 (2), 80 Å (3).

от концентрации, величины и знака потенциала примеси. Более подробно зависимость максимального значения отношения $j_{\text{out}}/j_{\text{in}}$ (j_{out} — выходящий поток, j_{in} — падающий) от параметров ДБГП, концентрации и величины потенциала примеси представлена на рис. 3, откуда видно, что отношение $j_{\text{out}}/j_{\text{in}}$ зависит также от ширины ямы, причем это отношение при постоянных U_0 и c убывает с ростом ширины ямы. Объясняется это тем, что с увеличением ширины ямы понижается значение резонансной энергии и связанное с этим возрастание амплитуды волновой функции в яме приводит к тому, что эффекты, связанные с рассеянием, возрастают с увеличением ширины ямы.

Наряду с уменьшением отношения $j_{\text{out}}/j_{\text{in}}$ рассеяние (рис. 4) приводит к уширению резонансного пика. Более того, это уширение является несимметричным — пик «затянут» в сторону более высоких энергий. Понять это можно из следующих соображений: при бесконечно высоких барьерах в яме при $E > E_{\text{пов}}$ существуют двумерные зоны с волновым вектором, параллельным границе раздела слоев. При туннелировании происходит рассеяние электронов на примесях из начального состояния в эти состояния.

Из полученных результатов можно также оценить роль отдельной примеси при рассеянии носителей, туннелирующих через гетеропереход. В качестве грубой оценки можно воспользоваться следующей формулой:

$$\sigma \sim \frac{j_0 - j_s}{j_{in}} \frac{1}{Na},$$

где j_0 — плотность тока носителей, протуннелировавших через ДБГП, в отсутствие рассеяния; j_s — плотность тока протуннелировавших носителей при учете рассеяния в яме; N — концентрация примесей; a — ширина ямы. Отсюда при $E = E_{рез}$, $N = 10^{16}$ см⁻³ получаем (рис. 4) $\sigma \sim 7 \cdot 10^4$ Å². Однако полученная таким образом величина быстро убывает с ростом $|E - E_{рез}|$ и может даже менять знак.

Сечение рассеяния, вычисленное при тех же параметрах для объемного кристалла по формуле

$$\sigma = U_0^2 m^{*2} / \pi \hbar^4 [1 - U_0 G(0)]^2, \quad (13)$$

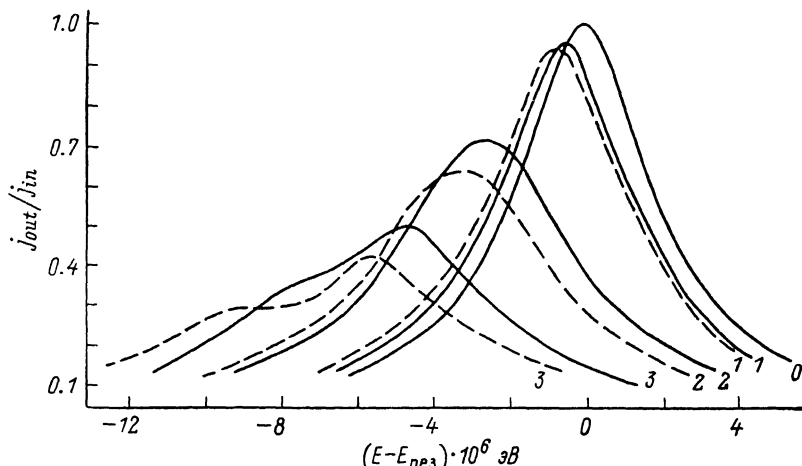


Рис. 4. Зависимость j_{out}/j_{in} от $E - E_{рез}$ для различных значений концентрации и потенциала примеси.

Сплошные линии — $U_0 = 0.8$, штриховые — 1.0 эВ. $c = 0$ (0), $1 \cdot 10^{-5}$ (1), $5 \cdot 10^{-6}$ (2), $1 \cdot 10^{-6}$ (3). $b = 50$, $a = 70$ Å.

где U_0 — потенциал примеси, m^* — эффективная масса электрона, дает $\sigma = 2.27 \cdot 10^{-1}$ Å². Это намного меньше сечения рассеяния в гетеропереходе при резонансе. Такое различие может быть объяснено возрастанием волновой функции носителей в квантовой яме при резонансном туннелировании в области энергий $E \sim E_{рез}$.

В бинарных соединениях всегда присутствуют стехиометрические дефекты. По данным [7], концентрация таких дефектов составляет $10^{16} - 10^{17}$ см⁻³ ($c \sim 10^{-6} - 10^{-5}$). Согласно проведенным расчетам (рис. 4), при таких концентрациях наличие примесей должно учитываться при рассмотрении туннелирования через ДБГП. Наличие примесей приводит к изменению ВАХ приборов на основе ДБГП. Если воспользоваться формулой для максимального значения крутизны ВАХ ($g_- = \partial I / \partial U$), соответствующей участку с отрицательной дифференциальной проводимостью, приведенной в [8]

$$|g_-| \approx \frac{e^2 m^*}{4\pi \hbar^3} \epsilon_F \frac{\Gamma_0^2}{\Gamma^2}, \quad (14)$$

где ϵ_F — энергия Ферми, Γ_0 — ширина резонансного пика в отсутствие рассеяния, Γ — ширина резонансного пика при учете рассеяния, то из наших данных можно получить, что рассеяние приводит к уменьшению g_- в 1.5—2 раза даже при учете только стехиометрических дефектов.

Список литературы

- [1] Ricco B., Azbel M. Ya. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. N 4. P. 1970—1981.
- [2] Liu H. C., Coon D. D. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 50. N 18. P. 1987—1990.
- [3] Jonson M., Grincwaig A. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 24. P. 1729—1732.
- [4] Лифшиц И. М., Кирпиченков В. Я. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 3. С. 989—1002.
- [5] Сураков В. И. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 10. С. 2995—3004.
- [6] Malliot C., Yia-Chung Chang, McGill P. C. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. N 8. P. 4449—4457.
- [7] Lombos B. A., Lawrence M. F., Dodelet J. P., Côté D., Averous M. // Phys. St. Sol. (a), 1986. V. 96, N 2. P. 663—675.
- [8] Coon D. D., Li H. C. // Appl. Phys. Lett. 1984. V. 49. N 2. P. 94—97.

Институт ядерных исследований АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
14 августа 1990 г.

