

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ
 В РЕАЛЬНОМ ПРОСТРАНСТВЕ
 ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ GaAs/Al_xGa_{1-x}As
 (ДЛЯ МАЛЫХ И БОЛЬШИХ ЗНАЧЕНИЙ x)

Вагидов Н. З., Грибников З. С., Иващенко В. М.

Решена задача о транспорте горячих электронов вдоль многослойной селективно-легируемой гетероструктуры GaAs/Al_xGa_{1-x}As с резкими переходами в заданном продольном электрическом поле с учетом самосогласованного перераспределения электронов и электростатического потенциала между слоями и в пределах слоев. Расчеты выполнены не только для традиционных гетеропар с долей Al $x < 0.45$, но и для структур с $x=0.8$. В традиционном случае показано, что пиковые дрейфовые скорости электронов могут быть как выше таковых для чистого GaAs, так и ниже их (в зависимости от x и от толщин слоев). Отношение же пиковой скорости к минимальной в случае гетеропар всегда выше.

Особенно велико оно при больших значениях x , когда перенос в реальном пространстве становится также и междолинным ГХ-переносом на гетерогранице.

Исследована инерционность установления стационарных состояний.

1. Идея термоэлектрического переноса горячих электронов из высокоподвижных слоев гетероструктуры в низкоподвижные в целях реализации нового механизма N -ОДП изложена впервые в [1]. В работе [2] для указанного механизма было предложено название — перенос в реальном пространстве (которым мы и пользуемся), а также предложена гетеропара для его реализации — GaAs/Al_xGa_{1-x}As (при $x < 0.45$), которую здесь мы и исследуем (не только при $x < 0.45$, но и при $x=0.8$).

Корректное теоретическое исследование переноса в реальном пространстве (далее, RST — английская аббревиатура) включает самосогласованное решение кинетического уравнения (квантового или квазиклассического) и уравнения Пуассона в обоих слоях гетеропары с граничными условиями, обеспечивающими периодичность структуры и непрерывность потенциала, функций распределения и потоков. Реализовать эту задачу удается только на ЭВМ, причем для решения кинетической задачи обычно используют метод Монте-Карло, а для электростатической задачи — метод макрочастиц (см., например, то и другое в [3]). Здесь использована именно такая процедура, причем приводится решение только квазиклассического кинетического уравнения, так что результаты справедливы начиная с достаточно больших продольных (греющих) полей E (когда электронный газ весьма разогрет).

Впервые метод Монте-Карло для решения задачи о RST был использован в [4], где, однако, не решалась задача о перераспределении потенциала (приближение прямых зон), что, в частности, приводит к завышению обратного потока электронов из широкозонного материала в узкозонный, особенно ощутимому в случае выбранных в [4] толстых широкозонных слоев. Другим явным источником ошибок в [4] является полный неучет L -электронов в Al_xGa_{1-x}As. Этот недостаток исправлен в работе других авторов [5], где опять-таки не рассматривалось поперечное распределение потенциала. Последнее рассчитано в [6], но ценой отказа от строгого решения кинетического уравнения.

В работах [7, 8] выполнен необходимый полный самосогласованный расчет поперечного распределения электронов и потенциала. Однако в [7] использо-

ваны специфические граничные условия на внешнем контакте с широкозонным материалом, соответствующие прямо смещенному затвору, через который вытекает существенный поперечный ток, замыкающийся с помощью условной короткозамкнутой внешней цепи. Фактически в [7] идет речь о некотором одномерном расчетном аналоге RST-транзистора (для которого в настоящее время опубликованы более строгие двумерные расчеты, как численные [9], так и аналитические [10]).

В работе [8], как и у нас, самосогласованно рассчитана многослойная периодическая структура. Авторы выбрали два набора граничных условий (ГУ) на гетерогранице: 1) «разрешенный» набор, разрешающий граничные переходы из любой долины одного материала в любую долину другого с сохранением энергии; 2) «запрещенный» набор, допускающий только переходы в свои долины, т. е.

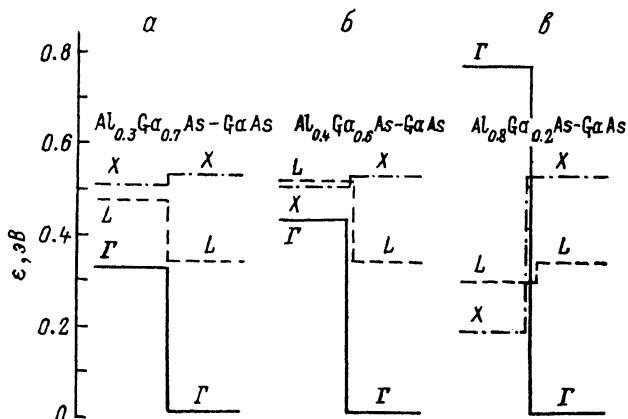


Рис. 1. Энергетические разрывы между Γ -, L - и X -зонами для рассматриваемых структур.

только $\Gamma\Gamma$ -, LL -, XX -переходы на гетерогранице. Обоснованием разрешенного набора, по-видимому, является гипотеза о сильно разупорядоченной границе с не только внутримолекулярной, но и междолинной незеркальностью. Многочисленные работы по токопрохождению в $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -структурах при $x=0.8\div 1.0$ (как теоретические, так и экспериментальные) не подтверждают справедливость этой гипотезы: граничные переходы между Γ -долиной в GaAs и X -долиной в AlAs или в $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$ весьма маловероятны и играют роль только в отсутствие других каналов токопереноса (см., в частности, [11] и цитированную там литературу). Поэтому, рассматривая далее гетеропары $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ и $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ (рис. 1, а, б) с одинаковой последовательностью легких и тяжелых долин по разные стороны гетерограницы, будем использовать то, что в [8] называется запрещенным набором ГУ. При рассмотрении же гетеропары $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$ (рис. 1, в) учитываем слабые ΓX -переходы на границе с помощью теоретической оценки [11].

2. Как и в предыдущей работе [12], в монте-карловской процедуре использована простейшая ΓLX -модель (по обе стороны гетерограницы), состоящая в учете трех типов электронов проводимости с изотропным энергетическим спектром, причем их эффективные массы совпадают с массами плотностей состояний (т. е. не делается различия между массой проводимости, используемой в урав-

Параметры материалов, составляющих гетероконтакт

Материал	№ образца	$d_2, \text{Å}$	$\frac{m_\Gamma}{m_0}$	$\frac{m_L}{m_0}$	$\frac{m_X}{m_0}$	ϵ_0	ϵ_∞	$\Delta_{\Gamma L}, \text{эВ}$	$\Delta_{\Gamma X}, \text{эВ}$	$\Delta E_c, \text{эВ}$
GaAs		400	0.063	0.222	0.58	12.9	10.92	0.33	0.522	—
$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	1	400	0.089	0.356	0.64	12.05	10.09	0.148	0.185	0.318
$\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$	2	400	0.098	0.401	0.66	11.76	9.81	0.088	0.073	0.424
	3	200								
$\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$	4	100	0.133	0.58	0.74	11.62	8.72	-0.468	-0.576	0.182

нениях движения, и массой, используемой при расчете вероятностей рассеяния). Естественно, учтено число L - и X -долин в зоне Бриллюэна. Во всех долинах учитывались рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов и на поляризационном — оптических (то и другое — в изотропном приближении), а также объемное междолинное рассеяние (LL , XX , ΓL , ΓX , LX). В таблице приведены эффективные массы, диэлектрические проницаемости и энергетические междолинные зазоры для всех материалов, образующих рассмотренные гетеропары, и разрывы зон проводимости ΔE_c для этих гетеропар. Все прочие параметры заимствованы из работ [13, 14], причем параметры междолинного рассеяния в тройных растворах взяты такими же, как в GaAs.

Недостаточность выбранной модели в рассматриваемом случае проявляется сильнее, чем для однородного материала, поскольку, во-первых, имеет место

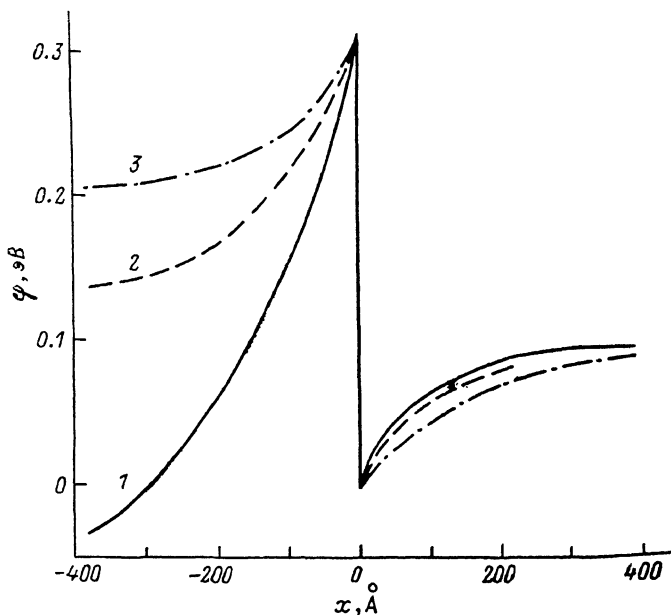


Рис. 2. Распределение самосогласованного потенциала по координате x в образце 1 для трех значений тянущего поля.

E , кВ/см: 1 — 0, 2 — 4, 3 — 20.

пространственная неоднородность в поперечном направлении, т. е. имеют место диффузионные процессы, посредственно описываемые в принятой модели, и, во-вторых, поперечное движение электронов частично или полностью ограничено, что приводит к добавочному перераспределению анизотропных L -электронов, полностью игнорируемому в принятой изотропной модели. Естественно также полное пренебрежение междолинной диффузией — диагональной (для X -электронов) и недиагональной (для L -электронов).

Для справки отметим, что масса проводимости L -электронов в GaAs меньше массы плотности состояний ровно в 2 (если использовать данные Аспнеса [15, 16]) соответственно $0.11m_0$ и $0.22m_0$ или примерно в 1.5 раза (если использовать данные работы [9], полученные из расчета по методу эмпирического псевдопотенциала, соответственно $0.17m_0$ и $0.28m_0$).

Гетерограницу пересекает всякий электрон, которому это позволяет законами сохранения энергии и продольного импульса, т. е. квантово-механическое отражение игнорируется. Исключение сделано только для ΓX -переноса, учтенного в переходе GaAs/Al_{0.8}Ga_{0.2}As; в этом случае классический перенос полностью запрещен и использованы данные квантового расчета.

На внешних границах $x=d_1$ и $x=-d_2$ (где d_1 — полутолщина слоя GaAs, а d_2 — полутолщина слоя тройного соединения) приняты условия зеркального отражения электронов; там же поперечное электрическое поле равно 0. Эти условия соответствуют периодической гетероструктуре [с периодом $2(d_1+d_2)$].

3. Приведем результаты расчетов по описанной выше процедуре для $T=300$ К и полной концентрации электронов на один полупериод структуры $N_s=10^{12}$ см $^{-2}$. Рассмотрены 4 различные гетероструктуры GaAs/Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As, называемые в дальнейшем «образцами». Их основные параметры, используемые при моделировании, приведены в таблице.

В отсутствие греющего поля ($E_y=E=0$) практически все электроны находились в слоях GaAs. Эти последние предполагались нелегированными, а полностью ионизированные доноры с концентрацией N_s/d_2 расположены в слоях тройного соединения. (Отметим, что рассеяние электронов на этих донорах, равно как и друг на друге, не учитывалось).

На рис. 2 представлено распределение потенциала для образца 1 при трех значениях тянущего поля E ; из рис. 2 видно, что по мере разогрева электронов ширина обедненного слоя в Al $_{0.3}$ Ga $_{0.7}$ As и падение потенциала на нем уменьшаются, что и соответствует RST. Качественно аналогичные распределения имеют место во всех образцах.

На рис. 3 построены полевые зависимости средней дрейфовой скорости электрона (т. е. средней плотности потока на один электрон) для исследуемых образцов в сравнении с $v_d(E)$ для однородного GaAs и в обогащенном слое (ОС) вблизи поверхности гетероперехода при бесконечной высоте барьера [12]. Под-

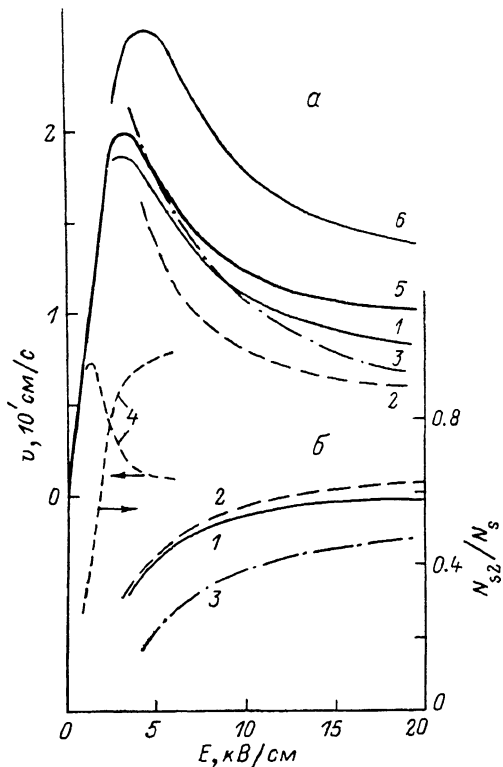


Рис. 3. Полевые зависимости дрейфовой скорости v_d и заселенности слоя AlGaAs N_{s2} для исследуемых образцов.

Здесь и далее цифры около кривых — номера образцов. Приведены также $v_d(E)$ для однородного GaAs (5) и обогащенного слоев (ОС) (6) [12].

черкнем, что начальное распределение электронов и потенциала (при $E=0$) во всех трех образцах точно такое же, как и в ОС. С разогревом из-за RST дрейфовые скорости во всех трех образцах оказываются ниже, чем в ОС, что тривиально. Нетривиальным, однако, оказывается соотношение этих скоростей в различных образцах: в образце 2 с более высоким гетеробарьером оно оказывается всегда ниже, чем в образце 1 с более низким.

Это связано с тем, что при переходе x от 0.3 к 0.4 имеют место приближение L - и X -долин к Γ -долине и инверсия расположения L - и X -долин в AlGaAs (рис. 1). Результатом такой эволюции является резкое снижение там дрейфовой скорости электронов, что приводит к более эффективному влиянию RST. Исследование долинного состава электронного газа показывает, что при значительных греющих полях (как и в случае ОС [12]) около гетероповерхности со стороны GaAs возникают избыток L -электронов и дефицит Γ -электронов (по сравнению со средними цифрами для стороны GaAs). При этом в образце 1 в AlGaAs вблизи гетерограницы возникают, наоборот, дефицит L -электронов и избыток Γ -электронов. В образцах 2 и 3 в AlGaAs наиболее преобладающими частицами на участке N -ОДП являются X -электроны, распределенные по координате x приблизительно однородно. Влияние именно снижения дрейфовой скорости в AlGaAs подтверждается изображенными на рис. 3, б полевыми зависимостями перезаселения электронов, практически одинаковыми в образцах 1 и 2.

Из рис. 3 видно, что дрейфовые скорости в слоистых структурах существенно зависят от соотношения толщин слоев d_1 и d_2 ; уменьшив в образце 3 вдвое тол-

дну d_2 по сравнению с образцом 2, удается значительно снизить количество переселившихся электронов и тем самым повысить среднюю по образцу дрейфовую скорость. В образце 3 наблюдается хотя и в меньшей мере тот же эффект, что в ОС — превышение пиковой скорости v_{peak} над ее значением в однородном GaAs. В этом же образце за счет сочетания этого эффекта с RST существенно увеличивается отношение пикового значения дрейфовой скорости к ее минимальному значению ($v_{\text{peak}}/v_{\text{valley}}$). По-видимому, при дальнейшем утоньшении слоя тройного соединения указанное отношение можно повысить сильнее.

Инерционность RST удобно описывать с помощью времен ухода τ_{12} электронов из GaAs в AlGaAs через гетеробарьер и времен обратного ухода τ_{21} . Они определяются как обратные отношения стационарного потока электронов j_s , пересекающих гетерограницу в одну сторону, к числу электронов, остающихся

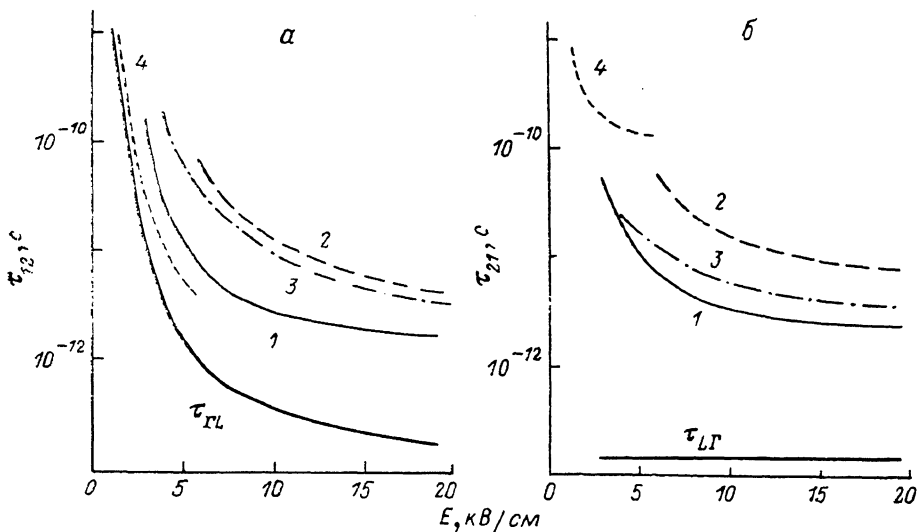


рис. 4. Полевые зависимости времен перехода из слоя GaAs в AlGaAs (τ_{12}) и обратно (τ_{21}). Приведены также зависимости междолинных времен τ_{GL} и τ_{LG} для однородного слоя GaAs.

в GaAs (N_{s1}) или перешедших в AlGaAs (N_{s2}). На рис. 4, а показаны полевые зависимости времен $\tau_{12} = (j_s/N_{s1})^{-1}$ прямого ухода из GaAs для образцов 1—4 по сравнению со временем ухода электронов τ_{GL} из Γ -долины в L -долину в однородном GaAs, а на рис. 4, б — времен обратного ухода τ_{21} и τ_{LG} .

Из рис. 4 видно, что RST — гораздо более инерционный процесс, чем междолинный переход. Уменьшение толщин слоев, равно как и уменьшение высот гетеробарьеров, способно повысить быстрдействие RST. При этом, однако, нужно практически перейти к рассмотрению параллельного транспорта в квантовой сверхрешетке, что находится вне рамок данной работы.

4. Как видно из рис. 1, в, в образце 4 достаточно рассмотреть транспорт электронов только в Γ - и L -долинах в GaAs и только в X - и L -долинах в AlGaAs. При этом в рамках описанного выше запрещенного набора ГУ актуальны только LL -переходы через гетерограницу. К ним добавляем маловероятные GX -переходы, обусловленные как непосредственным переносом с сохранением энергии и продольного импульса, так и приповерхностным междолинным расщеплением с испусканием или поглощением междолинного фонона в тонких приповерхностных слоях; для их описания использованы формулы, приведенные в [11].

Полевая зависимость дрейфовой скорости для образца 4 приведена на рис. 3. Обращают на себя внимание существенное уменьшение E_{peak} и v_{peak} по сравнению как с GaAs, так и с исследованными выше гетеропарами, а также сильное увеличение отношения $v_{\text{peak}}/v_{\text{valley}}$, достигающего ~ 10 . Эти эффекты, несомненно, связаны с RST непосредственно в «тяжелую» X -долину $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$ (что наглядно видно из приведенной на том же рис. 3 полевой зависимости переселения электронов). К сожалению, столь радикальное «улучшение» статической ВАХ сопровождается дальнейшим увеличением инерционности. На рис. 5 построены

переходные характеристики дрейфовой скорости и перезаселения электронов N_{s2}/N_s в образце 4 при включении—выключении тянущего поля 4 кВ/см, сильно превышающего E_{peak} . На рис. 4, а среди прочих приведены полевые зависимости времени ухода электронов из GaAs в образце 4.

Из всех рассматриваемых образцов с RST эти времена самые малые, поскольку гетеробарьеры здесь минимальны. Однако времена обратного ухода τ_d в образце 4 фантастически велики из-за малого разогрева тяжелых X-электронов, препятствующего достаточно эффективной работе обратного LL-канала. Рис. 6 подтверждает, что в составе обратного потока электронов, пересекающего гетерограницу, вклад LL-канала при всех значениях E почти совпадает со вкладом маловероятного ХГ-канала. Отметим, что суммарные потоки, пересекающие гетерограницу и, естественно, равные для обоих направлений, в образце 4 не превышают 10^8 А/см² и в десятки раз меньше таких же потоков в образцах I—3

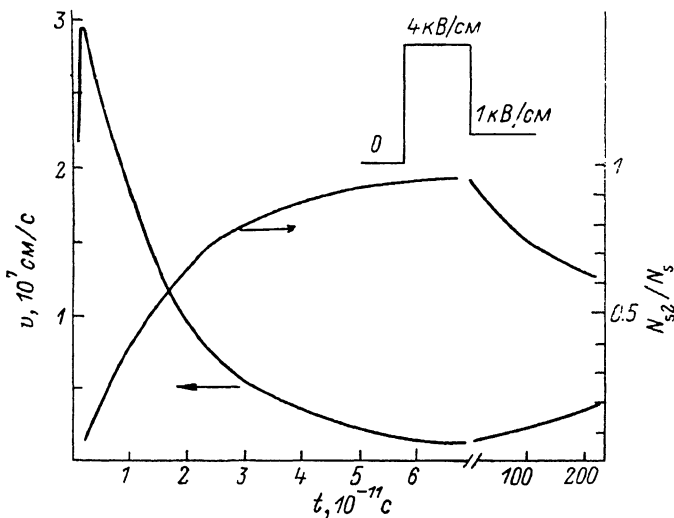


Рис. 5. Переходная характеристика v_d и N_{s2}/N_s в образце 4 при включении ($t=0$) и выключении ($t=10^{-10}$ с) тянущего поля.

(рис. 6). Малость величин этих потоков, поддерживающих равновесие на гетеропереходе, и является причиной большой инерционности образца 4. Существенный вклад обратного ХГ-канала демонстрирует необходимость учета слабых «запрещенных» переходов даже при 300 К. При 77 К (см. в [17]) эти переходы доминируют.

5. Сравним наши результаты с доступными нам результатами других расчетов и эксперимента. Как указывалось выше, в постановке, аналогичной нашей, выполнены расчеты [8]. Представленное там распределение концентрации электронов вдоль оси x подобно полученному у нас, однако приведенная в [8] полевая зависимость дрейфовой скорости для перехода GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As получена для разрешенного набора ГУ (нереалистического — по приведенным в п. 1 соображениям), тогда как все наши результаты отвечают запрещенному набору ГУ.

Экспериментальные полевые зависимости дрейфовой скорости на участке N-ОДП для селективно-легированных гетероструктур GaAs/Al_xGa_{1-x}As при $x=0.3$ и 0.5 получены недавно Масселинком с соавт. [18, 19]. Объектом исследования были одиночные гетеропереходы с $N_s=4.9 \cdot 10^{11}$ см⁻² для $x=0.3$ и $N_s=2.7 \cdot 10^{11}$ см⁻² для $x=0.5$ (при $T=300$ К), полученные с помощью МЛЭ. Чтобы воспрепятствовать доменообразованию, измерения проводились на частоте 35 ГГц. При 300 К дрейфовая скорость для $x=0.5$ во всем диапазоне полей E была ниже таковой для $x=0.3$, а та была ниже дрейфовой скорости в чистом GaAs ($c n=10^{15}$ см⁻³). Эта последовательность совпадает с полученной у нас. Пиковые значения дрейфовых скоростей были также близки к нашим расчетным результатам (рис. 3). Однако экспериментальные значения дифференциального со-

противления увеличивались с ростом x (от 0.3 до 0.5), тогда как у нас — понижались, а отмеченная нами тенденция роста $v_{\text{peak}}/v_{\text{valley}}$ с ростом x в эксперименте не наблюдалась. Одной из причин такого поведения может быть слишком большое значение частоты $f=35$ ГГц, для того чтобы экспериментальные зависимости $v(E)$ считать стационарными (рис. 4). Другой причиной могла бы оказаться неполная идентичность структур — экспериментальной и расчетной. На возможную нестационарность своих зависимостей указали сами авторы [18, 19].

Масселинк [20], а также ряд других авторов (в частности, [21]) приписывают снижение пиковых скоростей (и всего участка с N -ОДП) в гетероструктурах (по сравнению с однородными массивными образцами) эффекту квантования Γ -электронов в обогащенном слое селективно-легированного гетероперехода. Квантование по этой гипотезе уменьшает ΓL -зазор и, следовательно, убыстряет уход электронов в L -долину. По нашему мнению, роль этого эффекта мини-

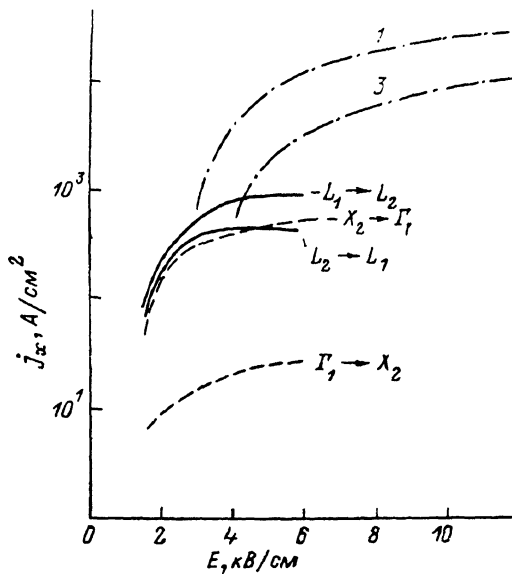


Рис. 6. Полевые зависимости парциальных потоков электронов через гетеробарьер в образце 4.

Индексы 1 и 2 означают принадлежность долин слоям GaAs и AlGaAs соответственно. Для сравнения приведен суммарный поток в образцах 1 и 3.

мальна, поскольку, во-первых, наряду с Γ -электронами в квазитреугольной яме слоя квантуются и L -электроны, чья «масса квантования» благодаря их сильной анизотропии сравнительно невелика, и, во-вторых, по мере разогрева из-за RST происходит существенное уширение ямы (рис. 2), понижающее подзоны квантования. Далее, согласно нашим расчетам [12], существует механизм замедления ухода электронов в L -долину, компенсирующий влияние квантования. Поэтому определяющую роль в снижении $v(E)$ для гетероструктур может играть только RST.

Для больших значений x , таких как $x=0.8$, отсутствуют как экспериментальные, так и расчетные данные, исключая модельный расчет в [17]. Полученные там значения E_{peak} и v_{peak} находятся в хорошем согласии с нашими результатами (рис. 3).

Список литературы

- [1] Грибников З. С. // ФТП. 1972. Т. 6. В. 7. С. 1380—1382.
- [2] Hess K., Morkoc H., Shichijo H., Streetman B. G. // Appl. Phys. Lett. 1979. V. 35. N 6. P. 469—471.
- [3] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., 1987. 638 с.
- [4] Glisson T. H., Hauser J. R., Littlejohn M. A., Hess K., Streetman B. A., Shichijo H. // J. Appl. Phys. 1980. V. 51. N 10. P. 5445—5449.
- [5] Горфинкель В. Б., Кальфа А. А., Солодкая Т. И., Тагер А. С., Шофман С. Г. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 5. С. 881—885.
- [6] Горфинкель В. Б., Шофман С. Г. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 5. С. 793—798.
- [7] Nederveen K., Van der Roer T. G. // Sol. St. Electron. 1988. V. 31. N 3/4. P. 375—377.
- [8] Cho J., Sakamoto R., Inoue M. // Sol. St. Electron. 1988. V. 31. N 3/4. P. 325—328.
- [9] Kizilyalli I. C., Hess K. // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. N 5. P. 2005—2013.
- [10] Grinberg A., Kastalsky A. // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. N 2. P. 821—830.
- [11] Грибников З. С., Райчев О. Э. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 12. С. 2171—2178.
- [12] Вагидов Н. З., Грибников З. С., Иващенко В. М. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 2. С. 304—311.
- [13] Littlejohn M. A., Hauser J. R., Glisson T. H. // J. Appl. Phys. 1977. V. 48. N 11. P. 4587—4590.
- [14] Adachi S. // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. N 3. P. R1—R29.
- [15] Aspnes D. E., Studna A. A. // Phys. Rev. 1973. V. B7. N 10. P. 4605—4625.

- [16] Aspnes D. E. // Phys. Rev. 1976. V. B14. N 12. P. 5331—5343.
- [17] Грибников Э. С., Райчев О. Э. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 2. С. 346—352.
- [18] Masselink W. T., Braslau N., Wang W. I., Wright S. L. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 19. P. 1533—1535.
- [19] Masselink W. T., Braslau N., La Tulipe D., Wang W. I., Wright S. L. // Sol. St. Electron. 1988. V. 31. N 3/4. P. 337—340.
- [20] Masselink W. T. // Semicond. Sci. Techn. 1989. V. 4. N 7. P. 503—512.
- [21] Каминский В. Э. // Тез. докл. 14 Всес. (Пекаровского) совещ. по теории полупроводников. Донецк, 1989. С. 139.

Институт полупроводников АН УССР
Киев

Получена 25.01.1990
Принята к печати 14.02.1990
