

УРОВНИ ЭНЕРГИИ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ СЕЛЕКТИВНО ЛЕГИРОВАННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Каминский В. Э.

Теоретически исследованы зависимости вида волновых функций, энергетического спектра электронов и степени заполнения дискретных уровней энергии в потенциальной яме от температуры и величины поверхностной концентрации. Эти характеристики получены в результате численного решения уравнений Кона—Шама. Рассмотрено влияние граничных условий и учета обменно-корреляционного взаимодействия на результаты расчета. Показано, что при больших изменениях температуры количество дискретных уровней меняется (дискретно) и при ее увеличении растет. При изменении же поверхностной концентрации их число не меняется, а энергии практически линейно зависят от ее величины. Получено приближенное аналитическое решение указанных уравнений, которое при низких температурах достаточно точно описывает волновые функции двух нижних уровней энергии.

Селективно легированные гетероструктуры (ГСЛ) перспективны для создания на их основе полевых транзисторов с высокой подвижностью электронов, работающих как при комнатных, так и при низких температурах [1]. Поэтому квантовые размерные эффекты могут играть в таких приборах существенную роль, а вид волновых функций (ВФ) и характер энергетического спектра электронов имеют практическое значение при расчетах их характеристик.

В условиях равновесия характеристики электронов в потенциальной яме ГСЛ в поперечном к плоскости гетероперехода (ГП) направлении (z) достаточно точно могут быть описаны в рамках системы уравнений Кона—Шама [2]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} - e(\varphi + \varphi_{xc})\psi = \varepsilon\psi, \quad (1)$$

$$\kappa \frac{d^2\varphi}{dz^2} = e(n - N), \quad (2)$$

где ψ — волновая функция, описывающая движение электрона в поперечном направлении, φ — электростатический потенциал,

$$\varphi_{xc} \approx \frac{e}{4\pi\kappa} n^{1/2} \quad (3)$$

— потенциал обменно-корреляционного взаимодействия,

$$n = \int n_{s\varepsilon} |\psi|^2 d\varepsilon \quad (4)$$

— концентрация электронов, ε — энергия поперечного движения, κ — диэлектрическая проницаемость, $n_{s\varepsilon}$ — поверхностная концентрация электронов, занимающих уровень с энергией ε , N — концентрация легирующей примеси. В плоскости ГП движение электронов неограничено и ВФ представляют собой плоские волны. В (4) интегрирование производится как по дискретной, так и по непрерывной частям спектра энергий.

Спектр размерного квантования и ВФ достаточно подробно анализировались в ГСЛ с узкозонным материалом, легированным акцепторной примесью

[1, 3-9]. В отношении же изотипного ГП известна только работа [10], хотя этот случай имеет значительные отличия. Они связаны, в первую очередь, с тем, что обычно глубина потенциальной ямы (разность потенциалов на бесконечности и ГП) $\varphi_0 < \Delta\mathcal{E}_c$, где $\Delta\mathcal{E}_c$ — разрыв дна зоны проводимости на ГП. Для решения (1), (2) использовались либо вариационные [3-6, 9], либо прямые численные методы [1, 7, 8]. Вариационный метод позволяет получить аналитические выражения для ВФ, что обеспечивает достаточно простое их использование при дальнейших расчетах, например, параметров механизмов релаксации. Однако степень близости получаемых ВФ и реально имеющих место невысока [6, 7, 9]. Это связано, с одной стороны, с возможностью реально использовать в формальных выражениях для них небольшого числа (2-3) вариационных параметров [6], с другой стороны, с тем, что этим методом можно учесть в (1), (2) несколько (2-3) дискретных уровней в потенциальной яме [4, 5], число которых к тому же задается априорно. Этих недостатков лишены прямые численные методы.

Для удобства дальнейшего анализа (1), (2) перейдем к безразмерным переменным посредством соотношений

$$\varphi = \varphi_0 u, \quad \mathcal{E} = -e\varphi_0 a, \quad z = l_\varphi y, \quad (5)$$

$$\psi = v l_\varphi^{-1/2}, \quad l_\varphi^2 = \hbar^2 / 2m e \varphi_0.$$

Ограничимся далее рассмотрением ГСЛ с полубесконечным узкозонным слоем и случая, когда величина энергии Ферми на ГП $\mathcal{E}_F = e\varphi_0 + F > 0$, где F — уровень Ферми, отсчитываемый от положения дна зоны проводимости на бесконечности. В этих условиях величина суммарной поверхностной концентрации электронов в потенциальной яме n_s в основном определяется концентрацией электронов, занимающих дискретные уровни энергии. Поэтому для расчета концентрации электронов непрерывной части энергий можно воспользоваться квазиклассическими ВФ аналогично [10]. В итоге после интегрирования по непрерывной части спектра энергий получаем систему уравнений для ВФ дискретных уровней энергии

$$\frac{d^2 v_i}{dy^2} + (u + u_{so} - a_i) v_i = 0 \quad (6)$$

и потенциала

$$\frac{d^2 u}{dy^2} = \sum_i g_i v_i^2 + \lambda(u), \quad (7)$$

$$g_i = \frac{e l_\varphi}{\kappa \varphi_0} n_{si},$$

где

$$n_{si} = \frac{mkT}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{F + e\varphi_0 a_i}{kT} \right) \right], \quad (8)$$

а $\lambda(u)$ описывает суммарную концентрацию ионизированной примеси и электронов непрерывной части спектра энергий. Для узкозонного слоя ГСЛ

$$\lambda = \frac{e l_\varphi^2}{\kappa \varphi_0} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} N^+(0) \{ e^{\eta u} \int_{\sqrt{\eta u}}^{\infty} e^{-t^2} dt - N^+(u) \} \right],$$

где $\eta = e\varphi_0 / kT$,

$$N^+(u) = N \left[1 + g \exp \left(\frac{e\varphi_0 u + \mathcal{E}_D + F}{kT} \right) \right]^{-1},$$

$g=2$ — фактор вырождения донорного уровня, \mathcal{E}_D — его энергия. Здесь учтено, что обычно этот слой специально не легирован и электронный газ вдали от ГП невырожденный. Аналогичное выражение можно получить для широкозонного слоя.

Независимые граничные условия для (6), (7) в узкозонном слое на бесконечности имеют вид

$$v_i(\infty) = u'(\infty) = u(\infty) = 0. \quad (9)$$

Граничные условия в широкозонном слое зависят от его структуры и параметров (толщины, концентрации легирующей примеси и т. п.), которые определяются назначением ГСЛ. Поэтому, чтобы не ограничивать общность анализа, выберем в качестве независимого параметра величину n_s и ограничимся рассмотрением, кроме ВФ дискретных уровней, узкозонного слоя. Величина n_s в зависимости от параметров широкозонного слоя и значения $\Delta\mathcal{E}$, может быть рассчитана, например, в соответствии с [11, 12]. Если принять, что толщина широкозонного слоя много больше длины проникновения ВФ дискретного

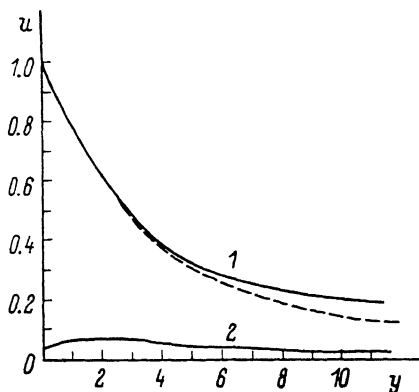


Рис. 1. Зависимости электростатического (1) и обменно-корреляционного (2) потенциалов от нормированной координаты.

Штриховой линией показана зависимость, рассчитанная из (12). $T=80$ К, $\varphi_0=130$ мВ, $l_\varphi=2.08$ нм.

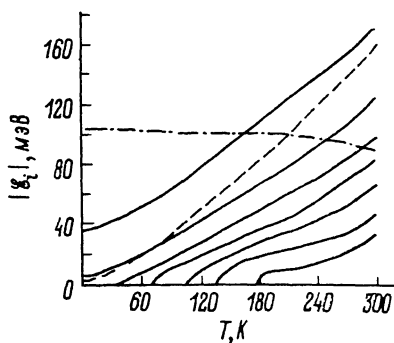


Рис. 2. Зависимости энергий дискретных уровней, положения уровня Ферми F (штриховая линия) и величины \mathcal{E}_F (штрихпунктирная) от температуры.

спектра под барьер разрыва дна зоны проводимости на ГП (что практически всегда выполняется с большим запасом), то в широкозонном слое можно положить

$$v_i(-\infty) = 0. \quad (10)$$

Кроме того, исходя из определения (5), получаем, что

$$u(0) = 1, \quad (11)$$

а v_i нормированы на единицу.

Процедура численного решения (6), (7) изложена в [7, 8, 10] и относительно проста. Однако независимая переменная y в (6), (7) меняется в бесконечных пределах, в то время как процедура численного решения может быть реализована только на конечном интервале. Поэтому в [8, 10] неизбежно пришлось вводить длину обрезания l_z и определять граничные условия при $z = \pm l_z$, которые, вообще говоря, не являются самосогласованными. И хотя в большинстве случаев введение l_z не ведет к значительным ошибкам, этого можно избежать, если учесть, что в широком диапазоне значений φ_0 , F и N потенциал u является однозначной функцией y и в узкозонном слое меняется в интервале $[0, 1]$. Переход в (6), (7) к u в качестве независимой переменной позволяет при численном решении использовать непосредственно граничные условия (9)—(11).

Очевидно, что ВФ дискретных уровней энергии должны быть взаимно ортогональны. Как известно, аналитическое решение уравнения Шредингера с потенциальной энергией достаточно произвольного вида для невырожденных уровней автоматически удовлетворяет этому требованию. Итерационная процедура численного интегрирования (6), (7) представляет собой последовательное интегрирование (6) с фиксированным видом потенциальной энергии, а затем (7) с полученными ВФ, решение которого снова подставляется в (6). Поэтому,

если исходить из свойств решений уравнения Шредингера, то ортогональность получаемых в результате ВФ выполняется с той же точностью, что и остальные результаты расчета, и определяется ошибкой замены производных конечными разностями.

На рис. 1—5 приведены результаты численного решения системы уравнений (6)—(11). Они получены при следующих значениях не указанных на ри-

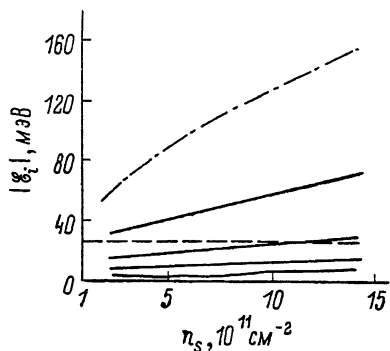


Рис. 3. Зависимости энергий дискретных уровней и глубины потенциальной ямы φ_0 (штрихпунктир) от величины поверхностной концентрации.

Штриховой линией показано положение уровня Ферми.

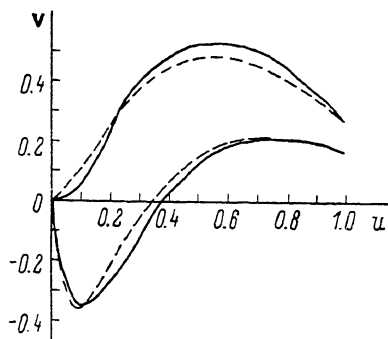


Рис. 4. Волновые функции двух нижних уровней энергии ($|\varepsilon_1|=39.4$, $|\varepsilon_2|=9.8$ мэВ), рассчитанные численно и из (14) (штриховые линии) как функции потенциала.

$T=25$ К, $\varphi_0=110$ мВ, $a=1.2$, $b=0.08$.

сунках параметров: $\Delta\varepsilon_c=0.3$ эВ, $n_s=1 \cdot 10^{12}$ см $^{-2}$, $N=1 \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$, $\varepsilon_D=6$ мэВ. Материальные константы взяты для арсенида галлия. Как показали расчеты, в случае изотипного ГП обменно-корреляционное взаимодействие мало по сравнению с электростатическим и в широком диапазоне параметров $u_{cx} \ll u$. Такое же соотношение имеет место и для узкозонного материала, легированного акцепторной примесью [4]. Однако для изотипного ГП его учет более существен, так как $u_{cx} \sim \varphi_0^{-1/3}$, а величина φ_0 в несколько раз меньше. Типичным является соотношение $u_{cx} \approx 0.1u$ (рис. 1). Соответственно учет обменно-корреляционного взаимодействия ведет к поправкам такого же порядка для энергий дискретных уровней ε_i в потенциальной яме при фиксированной ее глубине.

При фиксированной величине n_s изменения энергий и числа дискретных уровней

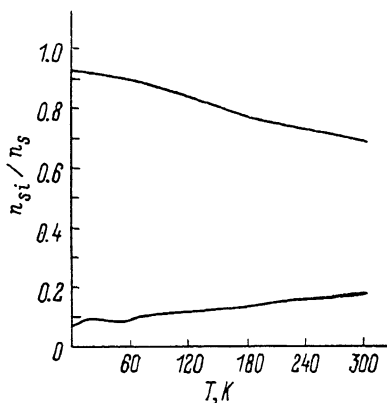


Рис. 5. Зависимости степени заполнения двух нижних уровней энергии от температуры.

при изменении температуры T (рис. 2) в основном определяются изменениями F и соответственно φ_0 . Такой вывод следует из того, что при заданной величине F зависимости $\varepsilon_i(T)$ очень слабые, а число дискретных уровней не меняется [7, 13]. Такое же постоянство их числа наблюдается при заданной температуре и изменении величины поверхностной концентрации n_s (рис. 3). Причем при низких температурах ($T \leq 100$ К) количество дискретных уровней сохраняется в широком диапазоне значений $n_s=(1 \div 20) \cdot 10^{11}$ см $^{-2}$. При более высоких температурах это, вообще говоря, не так, но изменения числа уровней невелики (1—2). Последнее связано с тем, что при высоких температурах форма потенциальной ямы определяется не только электронами, занимающими дискретные уровни энергии, но и распределением заряда (ионизированной примеси и электронов непрерывного спектра) в буферном слое.

Полученные выше результаты, как и другие численные расчеты, имеют частный характер, и при других наборах параметров ГСЛ их необходимо проводить заново. Кроме того, ими достаточно сложно воспользоваться для независимых расчетов, например, переноса. И хотя эти недостатки не имеют принципиального характера, преимущества аналитических решений несомненны. Очевидно, что точное аналитическое решение (6), (7) получить нельзя и можно говорить о том или ином приближенном решении.

Обработка и анализ результатов численного решения (6), (7), полученных при различных соотношениях параметров, показали, что при низких температурах и $n_s \geq 1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ поведение потенциала в узкозонном слое ($y > 0$) достаточно точно описывается уравнением

$$\frac{du}{dy} = -puQ(u), \quad (12)$$

где

$$p \equiv - \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} = \frac{eI_\phi}{\chi\varphi_0} n_s, \quad (13)$$

$$Q \approx 1 + (u_m + 2\alpha_1)(1 - u_m)^2 - (u_m + 2\alpha_1)(u - u_m)^2, \quad u_m = (\alpha_1 + \alpha_2/4)^{1/2}.$$

Типичное соотношение между зависимостями $u(y)$, полученными в результате численного решения (6), (7) и из (12), представлено на рис. 1. В области низких температур $Q(u)$ и $u_{xc}(u)$ — слабо меняющиеся функции, и для приближенных расчетов их можно заменить значениями в какой-либо из точек интервала изменения u — a и b соответственно. Тогда, подставляя эти величины и (12) в (6), получаем уравнение, решением которого для граничных условий (9) являются функции Бесселя порядка ν ,

$$v = AJ_\nu(\gamma\sqrt{v}), \quad (14)$$

где A — константа интегрирования, $\gamma = 2/ap$, $v = \gamma\sqrt{a-b}$. Сравнение (14) с точными численными решениями показало, что оптимальными для a и b являются значения соответствующих функций, рассчитанные при $u = u_m$. Отметим здесь, что для реальных значений параметров $1 \leq a \leq 1.3$.

В широкозонном слое вблизи ГП концентрация электронов значительно меньше N , и решение (7) практически точно описывается параболической зависимостью (при наличии нелегированного спейсер-слоя — линейно). Однако ВФ проникают под барьер не глубоко, и в нашем случае можно в (6) заменить $u(y)$ его значением на ГП. Тогда, используя (10), получаем ($y < 0$)

$$v = v_0 \exp(\beta y), \quad (15)$$

где $\beta^2 = \Delta\epsilon_c/\epsilon\varphi_0 - 1 + \alpha - b_1$, а b_1 — значение u_{xc} на ГП. Из условий непрерывности ВФ и их первых производных на ГП из (14), (15) получаем уравнение для определения собственных значений энергии дискретных уровней

$$\frac{\nu}{\gamma} - \frac{J_{\nu-1}(\gamma)}{J_\nu(\gamma)} = a^3, \quad (16)$$

а константы интегрирования в (14), (15) определяются из условий нормировки. Следует иметь в виду, что параметр ν может быть мнимым ($a < b$). Например, это имеет место для второго уровня энергии при $T \leq 10 \text{ К}$ (рис. 2). В этом случае (16) имеет несколько иной вид.

Очевидно, что ВФ (14), (15) для различных уровней энергии в отличие от численного решения строго взаимно ортогональны, так как они являются точными решениями уравнения Шредингера в потенциальной яме, вид которой определяется из (12).

Решая систему (3), (13)—(16) совместно с условиями сшивки и нормировки ВФ, можно получить все характеристики электронов, занимающих дискретные уровни энергии. Очевидно, что эта система уравнений также может быть решена только итерационным методом, но реализация этой процедуры значительно проще в силу алгебраичности полученных соотношений. Кроме того,

ее можно значительно упростить, если для расчета n_s вместо (8) воспользоваться выражением

$$n_s = \frac{m\delta_F}{\pi h^2 e} \left(\frac{8\pi\hbar}{15} \right)^{1/2} \left(\frac{\delta_F}{m} \right)^{1/4},$$

которое в области низких температур дает значение поверхностной концентрации с точностью не хуже 10 % и меньше величины, получаемой из классического расчета в приближении сильного вырождения, в $2^{1/4}$ раза.

Полученные выражения (14)–(16) позволяют наглядно оценить роль некоторых допущений, используемых при решении (1), (2). Так, граничные условия на ГП $\psi_i = 0$ [5, 9, 10] эквивалентны условию бесконечного значения β_i . Для реальных же значений параметров β_i обычно не превышает нескольких единиц. Соответственно, исходя из свойств функций Бесселя, получаем, что использование таких граничных условий систематически занижает величины $|\mathcal{E}_i|$. Роль этого эффекта растет с ростом $|F|$ или n_s и соответственно φ_0 . К таким же качественным изменениям энергетического спектра ведет исключение в (1) обменно-корреляционного взаимодействия. При заданной величине φ_0 использование этих допущений занижает величину поверхностной концентрации [см. (8)], и наоборот.

При низких температурах (14) достаточно точно описывает вид ВФ первого и второго уровней энергии (рис. 4). Это обусловлено тем, что электроны практически заполняют только эти уровни (рис. 5), а их энергии сравнимы с величиной F . Кроме того, степень ионизации донорной примеси в узкозонном слое мала.

В области высоких температур зависимости (14), за исключением нижнего уровня, очень не точно описывают реально имеющие место ВФ. Это, в первую очередь, связано с тем, что (12) описывает только начальный участок зависимости $u(y)$, и обусловлено необходимостью учета заряда ионизированной примеси и электронов непрерывного спектра энергий [второй член в (7)]. Но так как даже при 300 К большая часть (~ 70 %; рис. 5) электронов занимает нижний уровень энергии, то (14) является достаточно хорошим начальным приближением для решения (6), (7) или нахождения $u'(y)$ методом последовательных приближений. Для начального расчета p и нахождения α_1 в этом случае можно воспользоваться точным классическим выражением для n_s .

В заключение остановимся на характере дискретного спектра. Так как при больших значениях координаты y потенциальная энергия, как следует из (12), спадает быстрее, чем $1/y^2$, то общее число дискретных уровней K конечно. Его можно оценить, если в (14) для $u=1$ положить ВФ равными нулю и воспользоваться разложением функций Бесселя. В итоге получаем соотношение $K < (\gamma-1)/2$, которое, как следует из сравнения с результатами численных расчетов, практически всегда дает точное число дискретных уровней в яме.

Л и т е р а т у р а

- [1] Vinter B. // Appl. Phys. Lett. 1984. V. 44. N 3. P. 307–309.
- [2] Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лудквиста, Н. Марча. М., 1987. 400 с.
- [3] Ehlers D. H., Mills D. L. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 6. P. 3939–3947.
- [4] Grinberg A. A. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. N 6. P. 4028–4032.
- [5] Polonovski J.-P., Tomizawa K. // Japan. J. Appl. Phys. 1985. V. 24. N 12. P. 1611–1618.
- [6] Singh J. // Appl. Phys. Lett. 1986. V. 48. N 6. P. 434–436.
- [7] Stern F., Das Sarma S. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N 2. P. 840–848.
- [8] Hurkx G. A. M., van Haeringen W. // J. Phys. C. 1985. V. 18. N 29. P. 5617–5627.
- [9] Hirakawa K., Sakaki H., Yoshino J. // Appl. Phys. Lett. 1984. V. 45. N 3. P. 253–255.
- [10] Мезрин О. А., Трошков С. И. // Письма ЖТФ. 1987. Т. 13. В. 1. С. 14–19.
- [11] Lee K., Shur M., Drummond T. J. et al. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N 4. P. 2093–2096.
- [12] Каминский В. Э. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 1. С. 105–109.
- [13] Каминский В. Э. // IX Всес. симп. «Электронные процессы на поверхности и в тонких слоях полупроводников». Новосибирск, 1988. Ч. 2. С. 6–7.

Получена 1.08.1988
Принята к печати 20.12.1988