

Рассеяние электронов в транзисторной структуре GaAs/AlAs

© А.В. Борздов, Д.В. Поздняков

Белорусский государственный университет,
220030 Минск, Белоруссия

E-mail: pozdnyakov@bsu.by

(Поступила в Редакцию 17 июля 2006 г.)

Представлены результаты самосогласованного расчета интенсивностей рассеяния электронов на шероховатостях поверхности, акустических и полярных оптических фононах в транзисторной структуре на основе квантовой проволоки GaAs в матрице AlAs при $T = 77$ и 300 К. Интенсивности рассеяния рассчитывались в приближении электрического квантового предела с учетом столкновительного уширения энергетического спектра электронов и принципа Паули. Исследовалось также влияние напряжения на затворе на величины этих интенсивностей. Волновая функция электронов и уровень энергии их основного квантового состояния находились путем самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера.

PACS: 72.10.Di, 72.10.Fk, 73.21.Nb

Современные технологии микро- и наноэлектроники позволяют создавать различные полупроводниковые приборные структуры очень малых размеров различной геометрии. В настоящее время, в частности, успешно изготавливаются и исследуются высокоскоростные полевые транзисторы на основе GaAs с одномерным электронным газом (1DЭГ) или, другими словами, транзисторы на основе квантовых проволок [1,2]. Среди различных конструкций таких приборов одними из наиболее перспективных с точки зрения создания нового поколения высокоскоростных сверхбольших интегральных схем считаются двухзатворные гетероструктурные полевые транзисторы ввиду ряда преимуществ по сравнению с обычными однозатворными транзисторами [3].

Известно, что эффективное проектирование новых приборов на основе структур такого рода представляет собой достаточно сложную задачу, связанную с необходимостью предварительного численного расчета электрических характеристик разрабатываемых приборов. В этом отношении одним из наиболее перспективных численных методов является метод Монте-Карло [4]. Однако корректное применение последнего возможно только в том случае, когда используются достаточно строгие выражения для расчета интенсивностей рассеяния электронов для всех доминирующих механизмов в рассматриваемых структурах. В этой связи необходимо отметить, что рассеяния электронов на шероховатостях поверхности (РЭШП), акустических фононах (РЭАФ) и полярных оптических фононах (РЭПОФ) являются наиболее важными механизмами рассеяния в тонких нелегированных квантовых проволоках GaAs с 1DЭГ [5–11].

Несколько недавних работ было посвящено расчету интенсивностей РЭАФ и РЭПОФ в квантовых проволоках. В частности, в работах [6,8] были предложены выражения для вычисления в первом приближении величин интенсивностей РЭАФ и РЭПОФ в квантовых проволоках прямоугольного поперечного сечения с учетом неопределенности энергии электронов или, что то

же самое, с учетом столкновительного уширения их энергетического спектра. Было показано, что зависимости интенсивностей РЭАФ и РЭПОФ от кинетической энергии заряженных частиц в этом случае не имеют особых точек с разрывами второго рода. Последнее обстоятельство особенно важно при непосредственном применении полученных результатов в методе Монте-Карло или других методах расчета электрических характеристик рассматриваемых структур, поскольку оно естественным образом исключает разрывы второго рода в особых точках. Кроме того, строгое рассмотрение процессов рассеяния при моделировании переноса электронов методом Монте-Карло требует точного знания электронных волновых функций и уровней энергии подзон размерного квантования, так как значения этих величин непосредственно входят в выражения для расчета интенсивностей рассеяния. В связи с этим уровни энергии и волновые функции в реальной приборной структуре с произвольной квантовой ямой должны находиться посредством численного самосогласованного решения системы уравнений Шредингера и Пуассона.

Целью настоящей работы является расчет интенсивностей РЭШП, РЭАФ и РЭПОФ в транзисторной структуре на основе квантовой проволоки GaAs с учетом принципа Паули и столкновительного уширения, обусловленного процессами рассеяния, а также исследование влияния смещения на затворе прибора на эти интенсивности.

Для упрощения вычислений будем полагать, что реализуется электрический квантовый предел, когда все электроны в квантовой яме заселяют только одну нижайшую подзону (основное квантовое состояние), что в принципе является хорошим приближением для тонких квантовых проволок GaAs [10]. На основании результатов работ [10,11] можно записать следующие выражения для интенсивности РЭАФ в упругом приближении (возможность такого приближения для квантовых проволок

обоснована в [9]):

$$[W_{f,b}]_A(E, \Gamma) = \frac{B_{ac}^2 k_B T \sqrt{2m^*}}{2\hbar^2 v^2 \rho} (1 - f(E)) D(E, \Gamma) \times \iint |\psi_0(x, y)|^4 dx dy, \quad (1)$$

$$D(E, \Gamma) = \Theta(E) \sqrt{\frac{\Gamma + \sqrt{E^2 + \Gamma^2}}{E^2 + \Gamma^2}},$$

где B_{ac} — деформационный потенциал для акустических фононов; k_B — постоянная Больцмана; T — температура; m^* — эффективная масса электрона в GaAs; \hbar — постоянная Планка; ρ — плотность GaAs; v — скорость звука в GaAs; E — кинетическая энергия электрона; $\psi_0(x, y)$ — волновая функция для электронов в основном квантовом состоянии; Γ — величина, характеризующая столкновительное уширение энергетического спектра заряженных частиц, обусловленное всеми рассматриваемыми механизмами рассеяния; Θ — единичная ступенчатая функция; f — функция распределения Ферми–Дирака.

Согласно [10,11], интенсивность РЭПОФ может быть рассчитана с помощью следующих равенств:

$$[W_{f,b}^{e/a}]_{PO}(E, \Gamma) = \sum_{\alpha} \frac{e^2 \omega_{\alpha} \sqrt{2m_{\alpha}^*}}{\hbar L_x L_y} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\alpha}^{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_{\alpha}} \right) \times \left(n_{\alpha} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) (1 - f(E \mp \hbar \omega_{\alpha})) D(E \mp \hbar \omega_{\alpha}, \Gamma) \times \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\left| \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} S_{\alpha}(x, y) |\psi_0(x, y)|^2 \times \sin(p\pi x/L_x) \sin(r\pi y/L_y) dx dy \right|^2}{[q_{f,b}^{e/a}]_{\alpha}^2 + (p\pi/L_x)^2 + (r\pi/L_y)^2}, \quad (2)$$

$$[q_f^{e/a}]_{\alpha} = \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* E}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* (E \mp \hbar \omega_{\alpha})}}{\hbar},$$

$$[q_b^{e/a}]_{\alpha} = \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* E}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2m_{\alpha}^* (E \mp \hbar \omega_{\alpha})}}{\hbar},$$

где e — абсолютная величина заряда электрона; ω — циклическая частота поляронного оптического фонона; ε^{∞} и ε — оптическая и статическая диэлектрическая проницаемость материалов соответственно; n — функция распределения Бозе–Эйнштейна; L_x и L_y — высота и ширина проводящего канала транзисторной структуры; α — индекс, описывающий материал, т.е. $\alpha = \{\text{GaAs}, \text{AlAs}\}$; S — функция, удовлетворяющая следующим условиям: S_{GaAs} равна единице в GaAs и нулю в AlAs; S_{AlAs} равна нулю в GaAs и единице в AlAs. Верхний индекс e/a обозначает эмиссию/абсорбцию фонона, а индексы f и b — рассеяние „вперед“ и „назад“ соответственно.

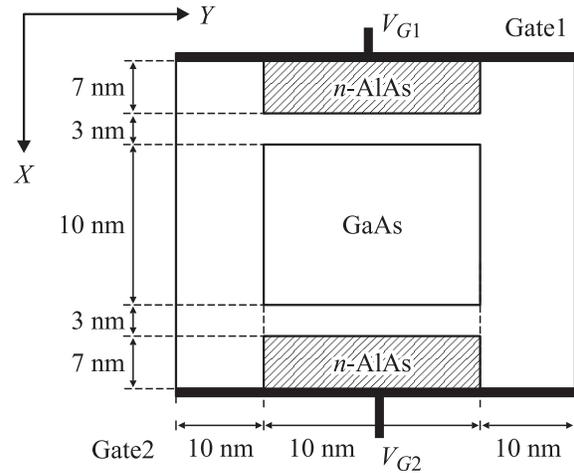


Рис. 1. Поперечное сечение GaAs-транзисторной структуры с 1DЭГ.

Что касается интенсивности РЭШП, то применительно к транзисторной структуре на основе GaAs можно получить формулу вида [10]

$$[W_{f,b}]_{SR}(E, \Gamma) = \left(\left(\frac{\partial E_0}{\partial w_x} \right)_1^2 + \left(\frac{\partial E_0}{\partial w_x} \right)_2^2 + \left(\frac{\partial E_0}{\partial w_y} \right)_1^2 + \left(\frac{\partial E_0}{\partial w_y} \right)_2^2 \right) \frac{\sqrt{\pi} \delta^2 \Lambda \sqrt{2m^*}}{2\hbar^2} \times \frac{(1 - f(E)) D(E, \Gamma)}{1 + \pi \Lambda^2 k^2 ((E \mp E + \Gamma)/2)}, \quad (3)$$

где E_0 — уровень энергии основного квантового состояния; δ — среднеквадратичное отклонение шероховатостей поверхности квантовой проволоки от плоскости; Λ — длина корреляции шероховатостей; $k(E) = \sqrt{2m^* E}/\hbar$. Значения величин δ и Λ в расчетах полагались для определенности равными 1.415 и 60 Å соответственно (см., например, [10]).

Частные производные E_0 по поперечным размерам области GaAs w_x и w_y определяют вариацию энергии при отклонении каждой стенки квантовой ямы от плоскости (заметим, что в данной структуре четыре рассеивающие поверхности) и рассчитываются численно в процессе самосогласованного решения системы уравнений Шредингера и Пуассона, которая будет рассмотрена далее.

Поперечное сечение рассматриваемой транзисторной структуры в плоскости XY схематически показано на рис. 1. Данная структура представляет собой нелегированную квантовую проволоку GaAs, окруженную селективно легированным AlAs (на рисунке легированные области заштрихованы) с двумя алюминиевыми затворами. При этом полагалось, что концентрация донорной примеси в легированном AlAs составляет 10^{24} м^{-3} . Также предполагалось, что управляющее напряжение V_{G1} прикладывается к первому затвору (Gate 1) относительно

второго затвора (Gate 2), напряжение на котором V_{G2} равно нулю.

Волновая функция электронов и энергия их основного квантового состояния определялись путем решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(x, y)} \nabla \psi_0(x, y) \right) + V(x, y) \psi_0(x, y) = E_0 \psi_0(x, y), \quad (4)$$

где потенциальная энергия V может быть записана как [12–14]

$$V(x, y) = V_h(x, y) + V_{xc}(x, y) - e\varphi(x, y). \quad (5)$$

В (5) φ — электростатический потенциал самосогласованного поля; V_h — потенциал гетероструктуры, описывающий разрыв дна зоны проводимости на границе раздела GaAs/AlAs; V_{xc} — потенциал обменно-корреляционного взаимодействия. Потенциалы V_h и V_{xc} рассматривались по аналогии с работой [14]. Электростатический потенциал φ может быть найден из уравнения Пуассона [1,12,13]

$$\nabla(\varepsilon(x, y) \nabla \varphi(x, y)) = en_e(x, y) - \rho_{\text{depl}}(x, y), \quad (6)$$

где n_e — концентрация электронов в 1DЭГ [12]; ρ_{depl} — плотность заряда ионизованных примесей. Уравнения (4) и (6) решались путем численного самосогласованного расчета. Детальное описание алгоритма последнего для структур с 1DЭГ можно найти, например, в работах [12,13].

После решения системы уравнений (4) и (6) можно рассчитать интенсивности рассеяния электронов с помощью формул (1)–(3), используя следующее уравнение [10,11]:

$$\Gamma = \frac{\hbar}{2\tau_\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\eta=f,b} \left([W_\eta]_A + [W_\eta]_{SR} + [W_\eta^e]_{PO} + [W_\eta^a]_{PO} \right). \quad (7)$$

Данное уравнение необходимо решать численно для всех значений E из рассматриваемого интервала энергий.

На рис. 2 и 3 в качестве примера представлены результаты расчетов зависимостей интенсивностей РЭПОФ, РЭАФ и РЭШП от кинетической энергии носителей заряда при $V_{G1} = 0$ и 1 В. С целью подтверждения необходимости самосогласованных вычислений эти результаты сравнивались с интенсивностями, рассчитанными без учета принципа Паули при использовании приближения бесконечно глубокой прямоугольной квантовой ямы для уровня энергии и волновой функции основного состояния электронов (квантовая проволока GaAs в вакууме).

Из представленных рисунков видно, что напряжение на затворе в значительной степени влияет на интенсивность РЭШП и в меньшей степени на интенсивности

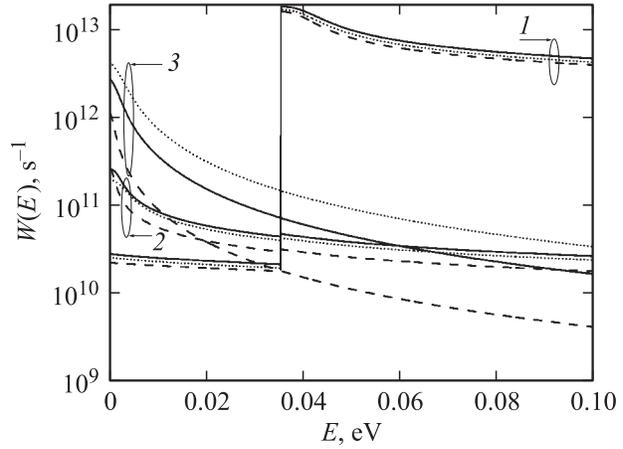


Рис. 2. Зависимости интенсивностей рассеяния электронов от кинетической энергии носителей заряда, рассчитанные при $T = 77$ К. 1 — РЭПОФ, 2 — РЭАФ (только рассеяние „назад“), 3 — РЭШП (только рассеяние „назад“). Сплошные кривые — приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы, штриховые — результаты самосогласованного расчета при $V_{G1} = 0$ В, пунктирные — результаты самосогласованного расчета при $V_{G1} = 1$ В.

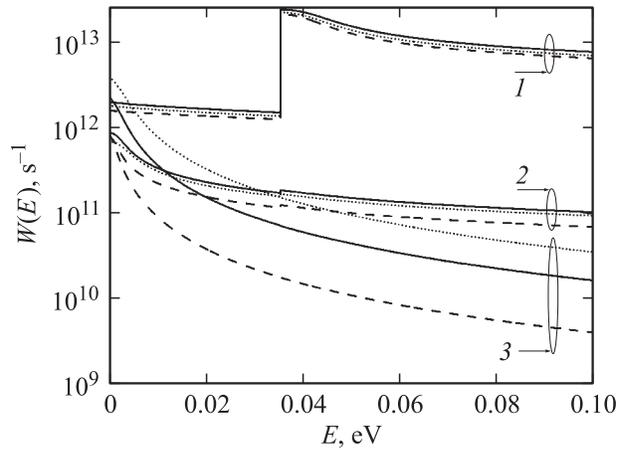


Рис. 3. Зависимости интенсивностей рассеяния электронов от кинетической энергии носителей заряда, рассчитанные при $T = 300$ К. Обозначение кривых то же, что и на рис. 2.

РЭАФ и РЭПОФ. Увеличение интенсивности РЭШП связано с ростом абсолютного значения частной производной E_0 для поперечных размеров области GaAs, определяемой границей раздела AlAs/GaAs, которая прилегает к области первого затвора (граница раздела, перпендикулярная направлению X). В то же время изменение волновой функции, вызванное приложенным напряжением, не настолько велико, чтобы значительно изменить интенсивности РЭАФ и РЭПОФ. Кроме того, хотя интенсивность РЭШП и не зависит явно от температуры, тем не менее температура оказывает на нее влияние через параметр Γ так же, как и все механизмы влияют друг на друга через этот параметр.

Следовательно, для более строгого описания процессов переноса электронов в такого рода приборных структурах необходимо вычислять интенсивности рассеяния электронов с использованием самосогласованно рассчитанных волновых функций и энергетических уровней электронных подзон размерного квантования, а также учитывать столкновительное уширение энергетического спектра носителей заряда.

Исходя из рис. 2 и 3 можно также сделать выводы о том, что интенсивность РЭШП сравнима или даже больше величин интенсивностей РЭАФ и РЭПОФ для малых значений кинетической энергии электронов как при 77 К, так и при 300 К. В результате ввиду сильной зависимости РЭШП от напряжения на затворе следует ожидать не менее сильной зависимости подвижности электронов в проводящем канале транзистора от этого напряжения.

В заключение следует отметить тот факт, что в электрическом квантовом пределе процессы рассеяния по сути являются внутриволновыми. Если же необходимо учесть более одной подзоны (например, для квантовых проволок с большим поперечным сечением, когда актуальны межподзональные переходы), то придется пользоваться более сложными формулами для расчета интенсивностей РЭАФ и РЭПОФ (см., например, [11]). В таком случае следует ожидать и более сложного влияния напряжения на затворе на эти интенсивности [11].

Таким образом, в настоящей работе самосогласованно рассчитаны интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях поверхности, акустических и полярных оптических фононах в транзисторной структуре на основе квантовой проволоки GaAs, расположенной в матрице AlAs. Расчеты выполнены в приближении электрического квантового предела с учетом неопределенности энергии электронов и принципа Паули. Установлен характер влияния напряжения на затворе на величины этих интенсивностей. Волновая функция электронов и уровень энергии их основного квантового состояния определялись путем решения системы уравнений Пуассона и Шредингера.

Список литературы

- [1] D. Jovanovic, J.-P. Leburton. IEEE Electron Dev. Lett. **14**, 7 (1993).
- [2] S.K. Islam, F.C. Jain. Solid State Electron. **39**, 615 (1996).
- [3] N. Wichmann, I. Duszynski, X. Wallart, S. Bollaert, A. Cappy. IEEE Electron Dev. Lett. **25**, 354 (2004).
- [4] V.M. Borzdov, F.F. Komarov, A.V. Homich, O.G. Zhevnyak. Phys. Low-Dim. Struct. **10**, 63 (1997).
- [5] R. Mickevicius, V. Mitin. Phys. Rev. B **48**, 17 194 (1993).
- [6] V.M. Borzdov, V.O. Galenchik, F.F. Komarov, D.V. Pozdnyakov, O.G. Zhevnyak. Phys. Lett. A **319**, 379 (2003).
- [7] R. Mickevicius, V.V. Mitin, K.W. Kim, M.A. Stroscio, G.J. Iafrate. J. Phys.: Cond. Matter **4**, 4959 (1992).
- [8] Д.В. Поздняков, В.М. Борздов. ФТТ **45**, 2238 (2003).
- [9] D. Calecki. J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 4315 (1986).

- [10] D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, A.V. Borzdov. Phys. Low-Dim. Struct. **2**, 87 (2006).
- [11] A.V. Borzdov, D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, V.M. Borzdov, F.F. Komarov. Phys. Stat. Sol. (b) **242**, R 134 (2005).
- [12] A. Trellakis, A.T. Galick, A. Pacelli, U. Ravaioli. J. Appl. Phys. **81**, 7880 (1997).
- [13] D. Jovanovic, J.-P. Leburton. Phys. Rev. B **49**, 7474 (1994).
- [14] F. Stern, S. Das Sarma. Phys. Rev. B **30**, 840 (1984).