

Определение величины разрыва валентной зоны и ее температурной зависимости в изотипных гетеропереходах $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / p\text{-Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ из $C-V$ -измерений

© В.И. Зубков, М.А. Мельник, А.В. Соломонов, А.Н. Пихтин, Ф. Бугге*

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,
197376 Санкт-Петербург, Россия

* Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik,
Berlin, Deutschland

(Получена 18 января 1999 г. Принята к печати 20 января 1999 г.)

Изотипные гетеропереходы $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / p\text{-Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$, выращенные методом MOVPE на $n\text{-GaAs}$ подложках, исследовались вольт-емкостным методом при температурах от 300 до 100 К. Для определения величины разрыва валентной зоны ΔE_V и встроенного в гетеропереход заряда решалось численно уравнение Пуассона на неоднородной координатной сетке. При расчете учитывалась неполная ионизация акцепторов и различная величина диэлектрической проницаемости в разных слоях гетероструктуры. Обнаружено, что для гетероперехода $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As} / p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ ΔE_V составляет при комнатной температуре 39% (113 мэВ) от общей величины ΔE_g и монотонно уменьшается до 35% при $T = 120$ К.

1. Введение

Отношение величин разрыва валентной зоны и зоны проводимости является ключевым параметром, которое контролирует работу современных приборов на гетероструктурах, в частности лазерных гетеродиодов. Несмотря на большое количество имеющихся к настоящему времени публикаций по определению разрыва зон в гетеропереходах на основе твердых растворов AlGaAs и InGaAs (см. [1–3] и библиографию в них), до сих пор нет полной ясности о величинах разрыва зон в этих материалах, об их температурной зависимости и зависимости от состава. Как правило, в большинстве предыдущих публикаций рассматривались гетеропереходы $n-n$ -типа и не учитывался эффект неполной ионизации примеси. Кроме того, на результаты подгоночных расчетов энергетических параметров гетеропереходов оказывает существенное влияние профиль легирующей примеси вблизи гетерограницы.

Предметом данного исследования является аккуратное определение величины разрыва зон в гетероструктурах на основе AlGaAs и InGaAs . С этой целью были специально изготовлены гетеропереходы и квантовые ямы с активной областью как у лазерных диодных структур и контролируемой величиной концентрации легирующей примеси, а также одиночные квантовые ямы с постоянной концентрацией легирующей примеси и специально не легированные квантовые ямы. Настоящая статья представляет первую часть работы по изучению параметров изотипных гетеропереходов и моделированию их вольт-емкостных ($C-V$)-характеристик. Вторая часть будет посвящена профилированию примеси вблизи квантовых ям и самосогласованному решению уравнений Шредингера и Пуассона.

2. Экспериментальные результаты

Мы измеряли $C-V$ -характеристики лазерных гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, содержащих квантовую яму (QW). Структуры были выращены методом MOVPE на подложках $n\text{-GaAs}$ [4,5]. Последовательность выращенных слоев для одной из структур представлена на рис. 1.

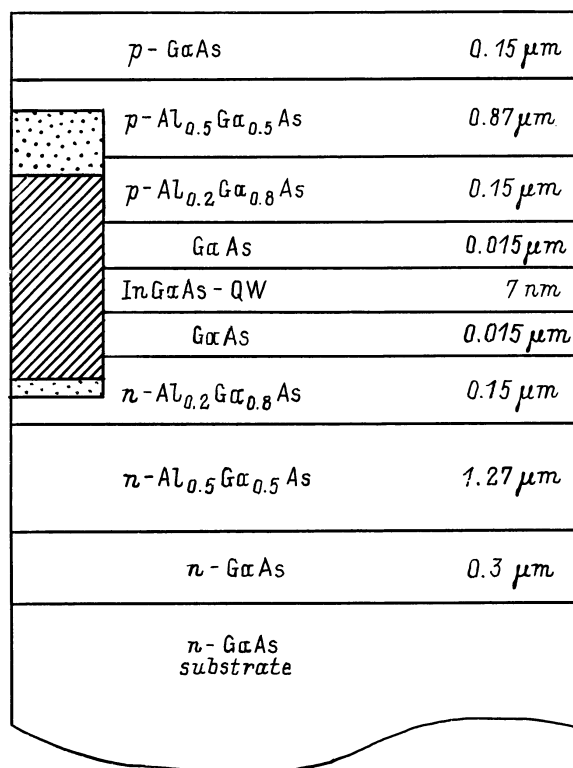


Рис. 1. Последовательность слоев выращенных гетероструктур (образец № 020100). Заштрихованы области пространственного заряда при $U_s = 0$ В (малой площади) и $U_s = -9$ В (большей площади).

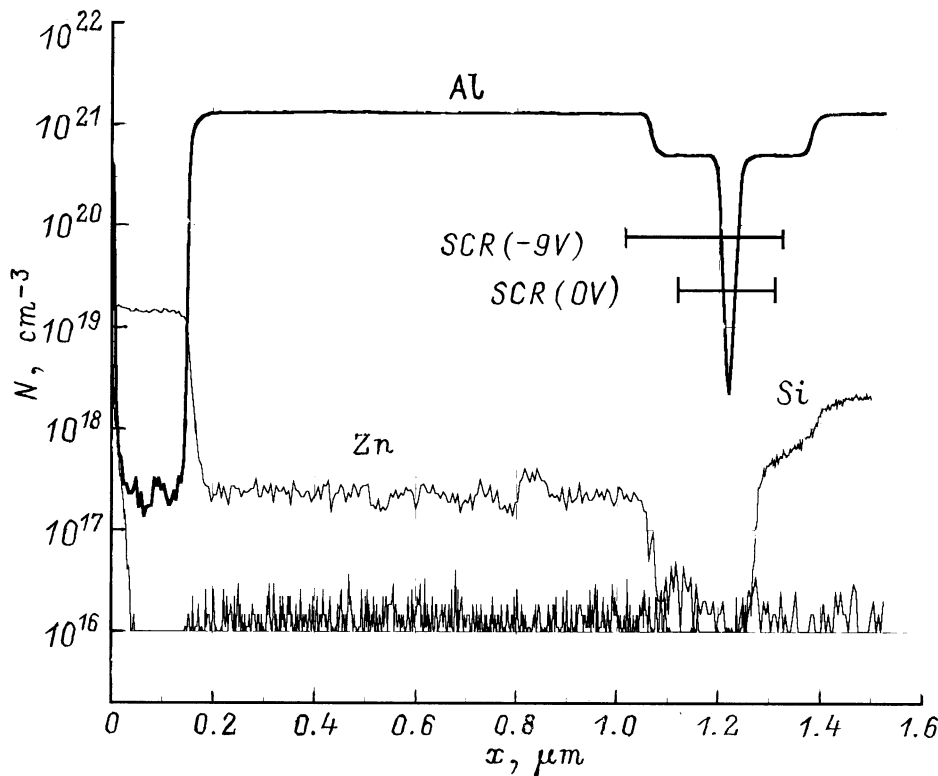


Рис. 2. Результаты измерений методом ВИМС состава и профиля легирующей примеси лазерной гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (образец № 020100). Показана ширина области пространственного заряда при обратных смещениях $U = 0$ и -9 В.

Ширина области пространственного заряда в асимметричных $p-n$ -структурах составляла $0.19-0.20$ мкм при нулевом смещении. Квантовая яма была глубоко внутри обедненной области, что подтверждается результатами измерений ВИМС [6] (рис. 2). С увеличением обратного смещения граница зоны пространственного заряда сдвигалась внутрь слабо легированной области $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ и пересекала изотипный гетеропереход $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As} / p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$.

Для определения величины разрыва валентной зоны ΔE_V и встроенного в гетеропереход заряда N_{ss} проводилось численное моделирование $C-V$ -характеристик путем решения одномерного уравнения Пуассона в пренебрежении вкладом неосновных носителей заряда

$$\epsilon_0 \epsilon \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = e [N_A^-(x) - p(x)] \quad (1)$$

с граничными условиями по потенциалу $\varphi(x)$. В соотношении (1) $p(x)$ — концентрация дырок, $N_A^-(x)$ — концентрация ионизированной части легирующей примеси.

Поскольку вблизи гетероперехода изгиб зон часто приводит к тому, что уровень, соответствующий краю зоны, пересекает уровень Ферми, необходим учет эффекта вырождения. Кроме того, при моделировании следует учитывать возможность неполной ионизации примеси, так как во многих твердых растворах глубина залегания легирующей примеси составляет заметную величину (около 40 МэВ для цинка в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [7]) и

примесные центры полностью ионизованы даже при комнатной температуре. С учетом этих обстоятельств расчет подвижных носителей заряда и ионизированной части примеси производился по формулам

$$p(x) = N_V \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(\frac{E_V - E_F - e\varphi(x)}{kT} \right), \quad (2)$$

$$N_A^-(x) = \frac{N_A}{1 + g_A \exp \left(\frac{E_A - e\varphi(x)}{kT} \right)}, \quad (3)$$

где $F_{1/2}$ — интеграл Ферми–Дирака с индексом $1/2$ [8], g_A — фактор вырождения акцепторного уровня с энергией E_A , остальные обозначения общепринятые.

Далее проводилась линейаризация уравнения (1), для чего потенциал представлялся в виде суммы

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) + \Delta\varphi(x), \quad (4)$$

где φ_0 — начальное приближение, $\Delta\varphi$ — поправка ($\Delta\varphi \ll \varphi_0$). Начальное приближение, как обычно, получалось из решения уравнения Пуассона в приближении резких границ области пространственного заряда.

Разлагая интеграл Ферми–Дирака в ряд и отбрасывая нелинейные слагаемые, уравнение Пуассона можно пе-

реписать в следующем виде:

$$\varepsilon_0 \varepsilon \left[\frac{d^2 \varphi_0(x)}{dx^2} + \frac{d^2 \Delta \varphi(x)}{dx^2} \right] = e \left\{ N_A^-(x) - p(x) \left[1 + \frac{\Delta \varphi(x) e}{kT} \right] \right\}. \quad (5)$$

Полученное линейное уравнение относительно поправки $\Delta \varphi$ решалось методом конечных разностей на неравномерной координационной сетке. Необходимость введения неравномерной сетки обусловлена практически экспоненциальной зависимостью концентрации носителей заряда от потенциала в выражении (2).

Дискретизация линеаризованного уравнения Пуассона приводит к системе линейных уравнений с трехдиагональной матрицей, решение которой проводилось методом прогонки. Итерации повторялись до тех пор, пока поправка $\Delta \varphi(x)$ не станет сравнимой с машинной точностью ($\approx 10^{-10}$ В). Построенный по формуле (4) итерационный процесс обладает сверхлинейной сходимостью вблизи решения, поэтому для нахождения распределения потенциала оказывается достаточно 4–5 итераций.

Для получения распределения потенциала в структуре, содержащей гетеропереходы, необходимо решить уравнение Пуассона (5) для каждого слоя материала и обеспечить на гетеропереходе выполнение граничных условий, имеющих вид

$$e \varphi_l(x_j) = e \varphi_{\text{sub}}(x_j) + \Delta E_i, \quad (6)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_l \frac{d \varphi_l(x_j)}{dx} = \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{sub}} \frac{d \varphi_{\text{sub}}(x_j)}{dx} + \sigma. \quad (7)$$

Здесь ΔE_i — полная величина разности ширин запрещенных зон слоев, σ — встроенная поверхностная плотность зарядов. Индексы "l" относятся к одному слою, "sub" — к другому. Таким образом, итерационный процесс заключается в решении уравнения Пуассона для каждого слоя полупроводника с учетом граничных условий по потенциалу и последующей корректировке решения для обеспечения выполнения граничных условий по первой производной потенциала.

Сшивка решений в отдельных слоях проводилась модифицированным методом Ньютона. Численные эксперименты показывают, что при задании начального приближения потенциала на гетеропереходе равным значению в объеме полупроводника U_0 итерационный процесс устойчиво сходится. Для начала итераций решались уравнения Пуассона для обоих слоев с разницей в значениях потенциала на гетеропереходе kT/e :

$$\varphi_{\text{iter}=1} = U_0, \quad \varphi_{\text{iter}=2} = \varphi_{\text{iter}=1} + kT/e. \quad (8)$$

При проведении численных расчетов, как и ранее, производная заменялась разностным отношением, вычисленным на основе результатов двух предшествующих

итераций:

$$\frac{d}{d \varphi} \left[\frac{d \varphi(x)}{dx} \right] = \frac{\varepsilon_l \left(\frac{d \varphi_{i-1}}{dx} \right) - \varepsilon_s \left(\frac{d \varphi_{i-1}}{dx} \right) - \varepsilon_l \left(\frac{d \varphi_i}{dx} \right) + \varepsilon_s \left(\frac{d \varphi_i}{dx} \right)}{\varphi_{i-1} - \varphi_i}. \quad (9)$$

Для построения координатной сетки использовался логарифмический шаг. Это позволило существенно сэкономить время и повысить точность вычислений. Обычно мы брали шаг по напряжению 0.1 В и 200 точек по координате. Соответствующие величины прямого и непрямого энергетических зазоров и другие параметры твердых растворов $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, необходимые для вычислений, получены из работ [1,7]. Расчеты показали, что неполная ионизация акцепторов (Zn) в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, особенно вблизи гетерограницы, приводит к уменьшению областей обеднения и обогащения у гетероперехода. По этой причине определение величины разрыва валентной зоны без учета данного эффекта дает завышенную величину ΔE_V . Следует отметить, что мы наблюдали некоторую зависимость указанного явления от отношения эффективных масс дырок m_{lh} и m_{hh} . Было подробно промоделировано влияние величин ΔE_V и N_{ss} на наблюдаемый профиль носителей. Оказалось, что влияние этих двух величин принципиально различно, слабо коррелирует друг с другом. Это позволило нам отдельно определить вклад каждого параметра.

Экспериментально наблюдаемый ("apparent") профиль основных носителей заряда (дырок) вблизи ге-

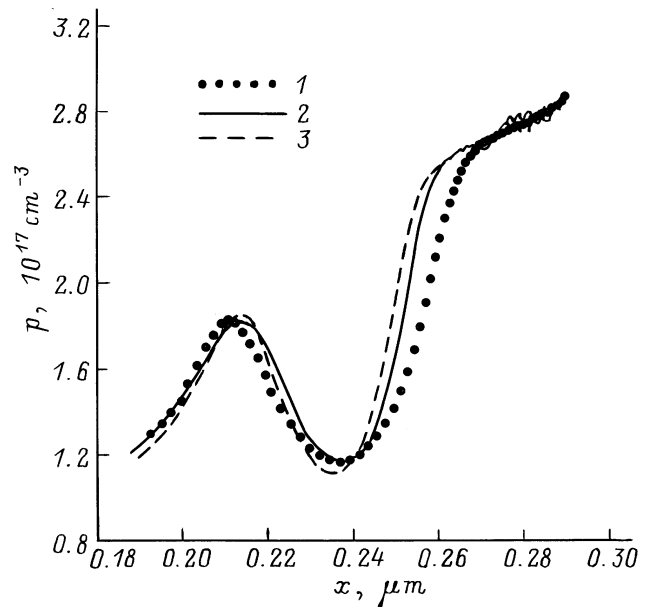


Рис. 3. Измеренные и рассчитанные профили концентрации дырок вблизи гетероперехода $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$: 1 — эксперимент при $T = 300$ К, 2 — расчет при $\Delta E_{\text{Zn}} = 40$ мэВ и частичной ионизации, 3 — расчет при полной ионизации.

тероперехода $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ для образца № 020100, определенный из $C-V$ -измерений, представлен на рис. 3. При построении профиля $p(x)$ мы учитывали различное значение диэлектрической постоянной ϵ по обе стороны гетероперехода [9]. Рассчитанный на основе решения уравнения Пуассона профиль концентрации дырок показан также на рис. 3. Подгоночными параметрами служили относительная величина разрыва зон и амплитуда встроенного на гетерогранице заряда. Величина разрыва валентной зоны ΔE_V при $T = 300$ К оказалась равной 113 мэВ (39% от ΔE_g). Мы оценили величину встроенного на гетерогранице заряда как $\leq 10^{11}$ см $^{-2}$. Образцы имели относительно высокую концентрацию дырок ($> 10^{17}$ см $^{-3}$). Поэтому вычисления показали, что величина N_{ss} , меньшая 10^{11} см $^{-2}$, не влияет на профиль носителей вблизи гетероперехода, а

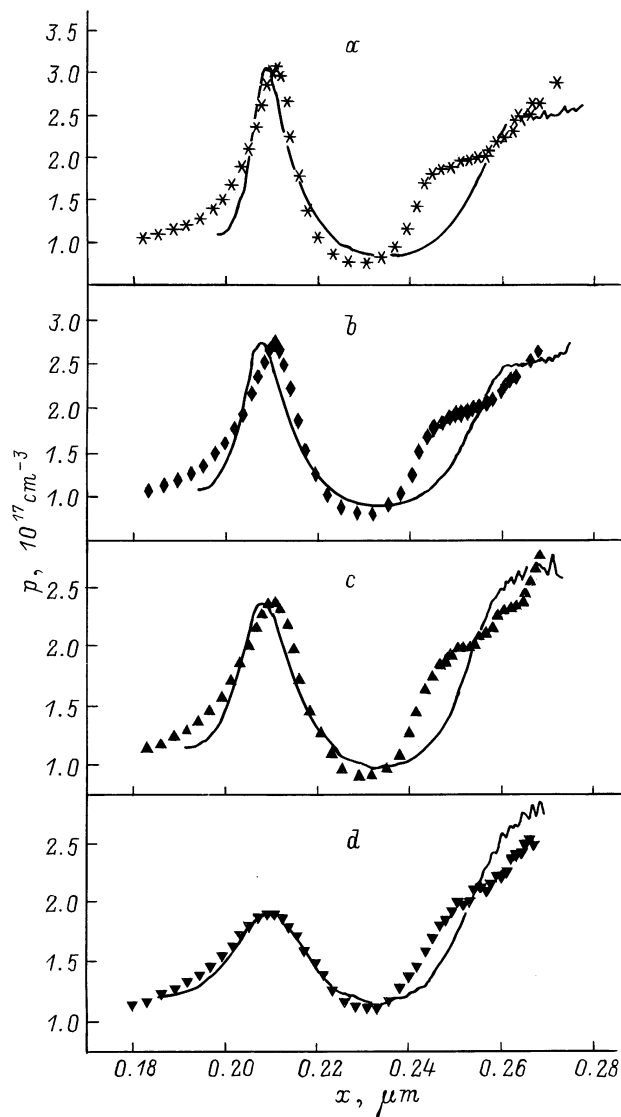


Рис. 4. Экспериментальные профили распределения дырок в гетеропереходе $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/p\text{-Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ (точки) и расчетные зависимости (сплошные линии) при температурах T , К: $a - 120$, $b - 150$, $c - 190$, $d - 290$.

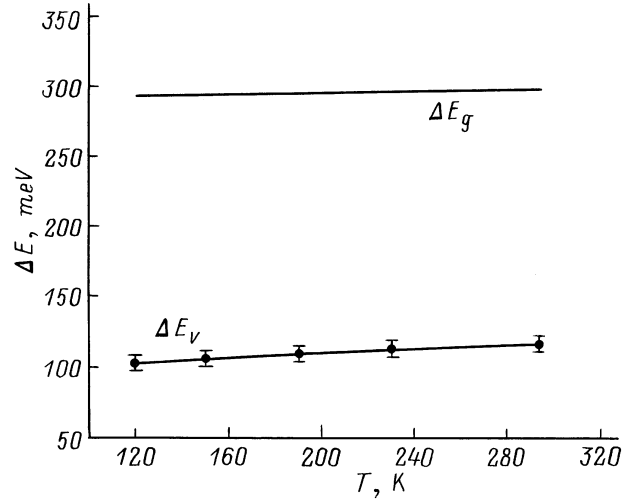


Рис. 5. Температурная зависимость разрыва валентной ΔE_V и полная величина разрыва зон ΔE_g гетероперехода $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$.

при $N_{ss} > 10^{11}$ см $^{-2}$ рассчитанный спектр начинал существенно отличаться от экспериментального. Величина электрического поля на гетеропереходе была примерно 50 кВ/см при нулевом смещении.

Изотипный гетеропереход $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ был детально изучен в диапазоне температур 300–120 К. Распределение дырок вблизи гетероперехода, определенное из $C-V$ -измерений при различных температурах, показано на рис. 4. Амплитуда сигнала обогащенного слоя увеличивалась на 60% при изменении температуры от 290 до 120 К. Результаты подгонки расчетных зависимостей к экспериментальным для четырех температур также показаны на рис. 4. Мы нашли, что относительная величина разрыва валентной зоны в $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ была температурно-зависимой. Величина ΔE_V монотонно изменялась от 39 до 35% (от величины ΔE_g) при уменьшении температуры от 300 до 120 К. На основе данных [7] были определены абсолютные величины разрыва валентной зоны, как показано на рис. 5. Кроме того, на рис. 5 представлена температурная зависимость величины общего разрыва зон ΔE_g .

3. Заключение

На специально изготовленных гетероструктурах были детально изучены и промоделированы вольт-фарадные характеристики. Приведены результаты $C-V$ -измерений на гетеропереходах $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ в диапазоне температур 120–300 К. Представлены результаты вычислений с учетом неполной ионизации акцепторов и различной величины диэлектрической проницаемости в слоях. Найдено, что относительная величина разрыва валентной зоны при 300 К составляет 39% от ΔE_g и монотонно уменьшается до 35% при 120 К.

Список литературы

- [1] *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Ed. by Landolt-Börnstein, 22a (1986).
- [2] *Properties of lattice-matched and strained Indium Gallium Arsenide*, ed. by P. Bhattacharya. EMIS Datareviews Series (INSPEC, 1993).
- [3] *Properties of Aluminium Gallium Arsenide. EMIS Datareviews Series* (INSPEC, 1993).
- [4] F. Bugge, G. Erbert, S. Gramlich, I. Rechenberg, U. Zeimer, M. Weyers. *Inst. Phys. Conf. Ser.*, № 145, 167 (1996).
- [5] F. Bugge, U. Zeimer, M. Sato, M. Weyers, G. Tränkle. *J. Cryst. Growth*, **183**, 511 (1998).
- [6] M.A. Melnik, A.N. Pikhtin, A.V. Solomonov, V.I. Zubkov, F. Bugge. *Proc. Int. Symp. "Nanostructures: Physics and technology"* (St. Petersburg, Russia, 1997) p. 263.
- [7] S. Adachi. *J. Appl. Phys.*, **54**, 1844 (1983).
- [8] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984).
- [9] В.И. Зубков, М.А. Мельник, А.В. Соломонов. *ФТП*, **32**, 61 (1998).

Редактор Т.А. Полянская

Determination of valence-band offset and its temperature dependence in isotype $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / p\text{-Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ heterojunctions from $C-V$ -measurements

V.I. Zubkov, M.A. Melnik, A.V. Solomonov,
A.N. Pikhtin, F. Bugge*

St. Petersburg State Electrotechnical University,
197376 St. Petersburg, Russia

* Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik,
Berlin

Abstract The isotype $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / p\text{-Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ heterojunctions grown by MOVPE on $n\text{-GaAs}$ substrates were investigated by $C-V$ -technique in the temperature range from 300 to 100 K. For determination of valence-band discontinuity ΔE_V and interface charge the Poisson equation was solved numerically on a non-uniform co-ordinate net. An incomplete ionization of acceptors as well as different values the dielectric constant in different layers were taken into consideration. It is found that for the $p\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As} / p\text{-Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ heterojunction ΔE_V at room temperature is equal to 39% (113 meV) of the total band-gap difference and decreases monotonously down to 35% at $T = 120$ K.

Fax: (812)-234-30-16

E-mail: zubkov@fvleff.etu.spb.ru