

Моделирование эффективного профиля концентрации в гетероструктурах InGaAs/GaAs с δ -легированными слоями

© С.В. Хазанова*[¶], В.Е. Дегтярев*, С.В. Тихов*, Н.В. Байдусь⁺

* Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

⁺ Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 23 мая 2014 г. Принята к печати 15 июня 2014 г.)

Теоретически и экспериментально исследованы гетероструктуры InGaAs/GaAs, содержащие квантовые ямы и δ -легированные слои. На основе процедуры самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона проведены численные расчеты дифференциальной емкости и эффективных профилей концентрации электронов в структурах с различным взаимным расположением квантовой ямы и δ -слоя. Проведено сравнение расчетов с результатами анализа измеренных вольт-фарадных характеристик вышеуказанных структур. Выявлены закономерности поведения профилей наблюдаемой концентрации и вида вольт-фарадных характеристик в зависимости от геометрии структуры, температуры, степени легирования.

1. Введение

Гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) на основе $A^{III}B^V$ широко используются в современной электронике для создания источников излучения среднего и дальнего ИК диапазона, транзисторов с высокой подвижностью носителей заряда (НЕМТ). δ и селективное легирование гетероструктур кремнием применяется с целью обеспечения необходимой концентрации электронов в двумерном канале без уменьшения подвижности носителей [1]. Электрофизические характеристики структур существенно зависят от технологии и геометрии выращенных образцов. В частности, взаимное расположение квантовой ямы и δ -слоя и расстояние между ними, так же как и уровень легирования, оказывают заметное влияние на распределение заряда и, вследствие этого, на рабочие характеристики приборов в целом. Таким образом, оптимизация параметров НЕМТ наногетероструктур и технологии их роста остается актуальной задачей [2,3].

Метод вольт-фарадного профилирования применяется для определения разрыва зон на гетерограницах, распределения носителей заряда в структурах, положения квантовых ям, концентрации легирующей примеси. Традиционно эффективные профили распределения заряда (apparent carrier distribution [4]) получаются из обработки вольт-фарадных характеристик, измеренных методами емкостной спектроскопии [5]. В то же время профили концентрации, полученные данным способом, могут содержать вклад от различных слоев структур, зависят от различных факторов роста и требуют дополнительного анализа. Численное моделирование вольт-фарадных характеристик позволяет более корректно интерпретировать результаты подобных измерений. В литературе известны работы [6,7], посвященные исследованию распределения заряда в структурах, содержащих КЯ,

но недостаточно изучен вопрос, связанный с анализом вклада встраиваемых δ -слоев.

В данной работе приведены результаты экспериментального и теоретического исследования профиля концентрации в гетероструктурах с различным взаимным расположением КЯ и δ -слоя кремния.

2. Методика эксперимента

Исследуемые структуры выращены методом МОС-гидридной эпитаксии при пониженном давлении на установке AIX 200RF на подложках полуизолирующего GaAs(100). Были изучены гетероструктуры с различным взаимным расположением КЯ $In_xGa_{1-x}As$ ($x = 0.17$, ширина 10 нм) и встроенного δ -слоя кремния. В одном случае δ -слой встраивался выше квантовой ямы на расстоянии 10 нм (δ -слой/КЯ), в другом — ниже, т.е. ближе к подложке, на том же расстоянии 10 нм (КЯ/ δ -слой). В обоих случаях КЯ и δ -слой были зарезаны покрывным слоем (ПС) GaAs толщиной $d_0 = 200$ нм. Слоевые значения концентрации δ -слоев соответствуют значениям $N_s = 1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2} - 1.9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ (см. таблицу). Концентрация фонового легирования порядка 10^{15} см^{-3} . На основе данных гетероструктур были изготовлены кольцевые диодные структуры Au/GaAs, которые могут быть использованы как тестовые структуры при производстве НЕМТ-транзисторов. Кольцевые диодные структуры (КДС) создавались с помощью фотолитографии по слою Au на поверхности GaAs. Площадь управляющего электрода в этой структуре $S = 2.46 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2$.

Экспериментально были проведены измерения адмиттанса и вольт-фарадных характеристик данных образцов на частотах $f = 10^3 - 10^6$ Гц. Измерения проводились на установке Agilent 1500 при обратных смещениях до 10 В на управляющем электроде в интервале температур 77–460 К. Кроме того, были измерены эффект Холла в конфигурации Ван-дер-Пау (μ_n) и подвижность в динамическом эффекте поля (μ_F) на частоте 60 Гц [8], а также методом Эгрейна [9] в интервале частот 20–10⁶ Гц.

[¶] E-mail: khazanova@phys.unn.ru

Основные характеристики исследованных образцов

№	Тип структуры	$N_s, 10^{12} \text{ см}^{-2}$	$\mu_n, \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	$\mu_F, \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$
1	ПС/ δ -Si/GaAs/ <i>i</i> -GaAs	8.0	1815	612
2	ПС/ δ -Si/GaAs/ <i>i</i> -GaAs	1.9	2670	1920
3	ПС/ δ -Si/КЯ/GaAs/ <i>i</i> -GaAs	1.5	3660	1430
4	ПС/КЯ/ δ -Si/GaAs/ <i>i</i> -GaAs	1.6	4270	2800

3. Численный расчет

При выполнении численных расчетов и моделирования вольт-фарадных характеристик были использованы геометрические и технологические параметры реальных структур, в том числе и расстояния между КЯ и δ -слоем. Для моделирования вольт-фарадных характеристик проводится вычисление профиля потенциала зоны проводимости (E_c) в области квантовой ямы и δ -слоя как функции напряжения смещения, приложенного к структуре. С этой целью используется процедура самоогласованного решения уравнений Пуассона и Шрёдингера. Запишем стационарное одномерное одноэлектронное уравнение Шрёдингера в приближении эффективной массы для носителей заряда:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^*(x)} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E_n \Psi(x), \quad (1)$$

$$V(x) = -q\Psi(x) + \Delta E_c(x),$$

где $\Delta E_c(x)$ — профиль дна зоны проводимости, $\Phi(x)$ — электростатический потенциал, q — абсолютная величина заряда электрона, $m^*(x)$ — эффективная масса электрона в зависимости от координаты.

При определении электростатического потенциала в решении уравнения Пуассона учитываются все типы распределения заряда, как двумерного, сосредоточенного на уровнях размерного квантования, так и трехмерного пространственного заряда:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x) = -\frac{en(x)}{\epsilon\epsilon_0}, \quad (2)$$

где $N_D^+(x)$ — распределение заряда на ионизированной примеси, $n(x) = n_{3D}(x) + n_{2D}(x)$ — концентрация электронов в зоне проводимости. Для удобства расчетов и изображения эффективных профилей концентрации вдоль всей структуры были использованы объемные значения концентрации легирующей примеси в слоях $N_D = 0.8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$, что эквивалентно слоевым значениям $N_S = 0.8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2} - 10^{13} \text{ см}^{-2}$ соответственно. При решении уравнений Шрёдингера и Пуассона применялся матричный подход [10], основанный на методе конечных разностей. Все функции координаты задаются на дискретной сетке конечной длины (количество узлов ~ 1000). При проведении численных расчетов в данной работе модифицируется метод [11], основанный на переходе от непрерывного энергетического спектра

к дискретному путем введения переменного числа уровней. В качестве критерия остановки итерационного процесса использовано условие, при котором изменение вычисляемой поправки к электростатическому потенциалу становится ниже заданного уровня точности (10^{-6} эВ).

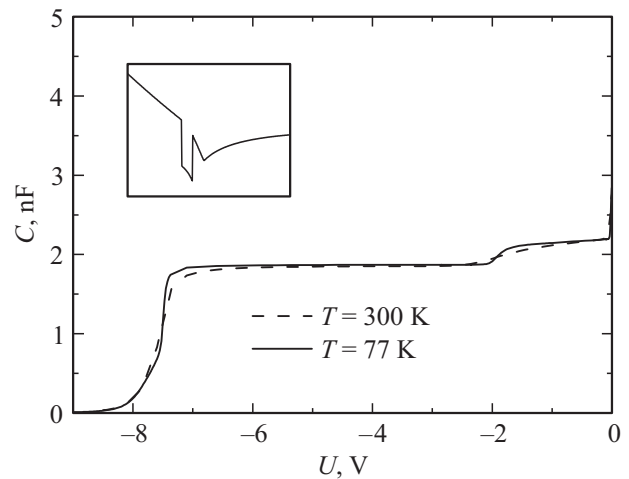


Рис. 1. Вольт-фарадные характеристики, полученные с помощью моделирования зонных диаграмм структуры КЯ/ δ -слоя для температур $T = 77, 300$ К. На вставке — профиль дна зоны проводимости в окрестности КЯ и δ -слоя.

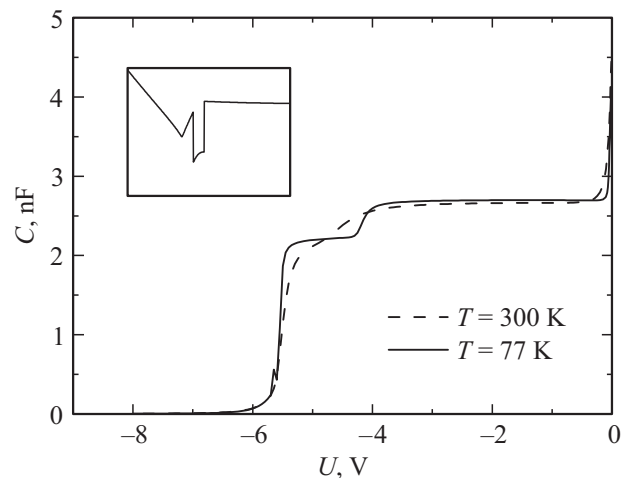


Рис. 2. Вольт-фарадные характеристики, полученные с помощью моделирования зонных диаграмм структуры δ -слоя/КЯ для температур $T = 77, 300$ К. На вставке — профиль дна зоны проводимости в окрестности КЯ и δ -слоя.

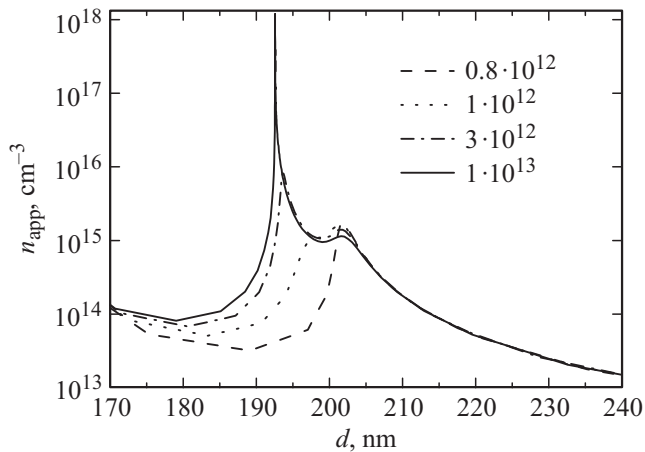


Рис. 3. Зависимости $n_{app}(d)$, полученные моделированием при различной степени легирования δ -слоя для температуры $T = 77\text{ K}$ (структура δ -слой/КЯ). $N_S = 0.8 \cdot 10^{12}$ (1), $1 \cdot 10^{12}$ (2), $3 \cdot 10^{12}$ (3), $1 \cdot 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ (4).

Таким образом, непосредственным численным моделированием получены профили зоны проводимости, вольт-фарадные характеристики (рис. 1, 2) и эффективный профиль концентрации электронов в окрестности квантовой ямы и δ -слоя (рис. 3). Исследованы образцы с различным взаимным расположением ямы и слоя, расстоянием между ними и разной степенью легирования δ -слоя. Путем дифференцирования емкостных зависимостей получены эффективные профили концентрации электронов в зависимости от координаты вдоль структуры [7]:

$$n_{app}(d) = \frac{2}{e\epsilon\epsilon_0 S^2} \left(\frac{d}{dU} \left(\frac{1}{C} \right)^2 \right)^{-1}, \quad d = S\epsilon\epsilon_0 \frac{1}{C}. \quad (3)$$

4. Экспериментальные результаты и обсуждение

На рис. 1–4 изображены вольт-фарадные характеристики и эффективные профили концентрации носителей, полученные численным моделированием, для различной взаимной конфигурации КЯ и δ -слоя. На вольт-фарадных характеристиках наблюдаются ярко выраженные „ступеньки“, соответствующие поочередному опустошению электронных подзон КЯ и δ -слоя с увеличением приложенного напряжения. При этом резкость ступенек повышается с уменьшением температуры. Анализируя представленные на рис. 3, 4 профили концентрации электронов, можно сделать вывод, что при низком уровне легирования максимум концентрации носителей соответствует положению КЯ. При плавном увеличении уровня легирования δ -слоя происходит раздвоение пика, что также наблюдается на экспериментальных зависимостях (рис. 5). Легко видеть, что более высокий и узкий пик соответствует положению δ -слоя, при этом положения пиков от ямы и слоя соответствуют реальным

расстояниям в структуре. При обратном расположении δ -слоя относительно КЯ соответствующий более узкий пик наблюдается с другой стороны от пика КЯ (рис. 3, 4).

На рис. 5 показаны профили распределения концентрации $n_{app}(d)$ в различных структурах с δ -слоем, полученные из вольт-фарадных характеристик, измеренных экспериментально. В структуре, где δ -слой располагался под КЯ [12], наблюдалось раздвоение пика (кривая 1), обусловленное перераспределением электронов между КЯ и δ -слоем. Для образца с обратным расположением слоя наблюдается лишь один пик, который при этом смещается в противоположную сторону от положения КЯ, что подтверждается и модельными расчетами. Значения слоевой концентрации носителей в области δ -слоя хорошо согласуются с результатами измерений эффекта Холла [13], а также с соответствующими результатами численного моделирования (рис. 4, 5).

Результаты измерения подвижности носителей в эффекте поля приведены на рис. 6. Очевидно, что зна-

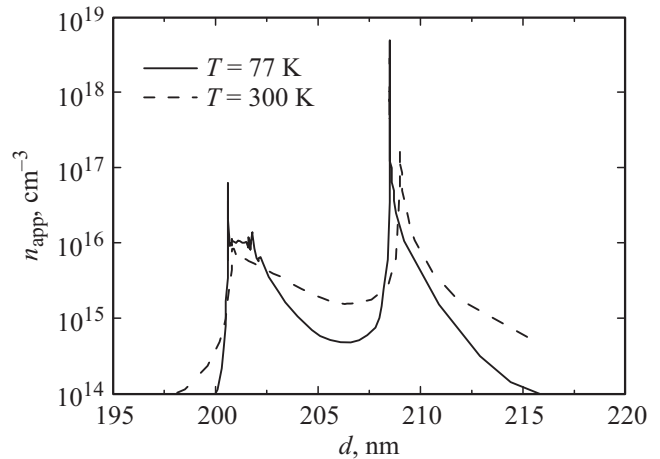


Рис. 4. Зависимости $n_{app}(d)$, полученные моделированием при различной температуре для структуры КЯ/ δ -слой ($N_S = 3 \cdot 10^{12}\text{ cm}^{-2}$); $T = 300$ (1), 77 K (2).

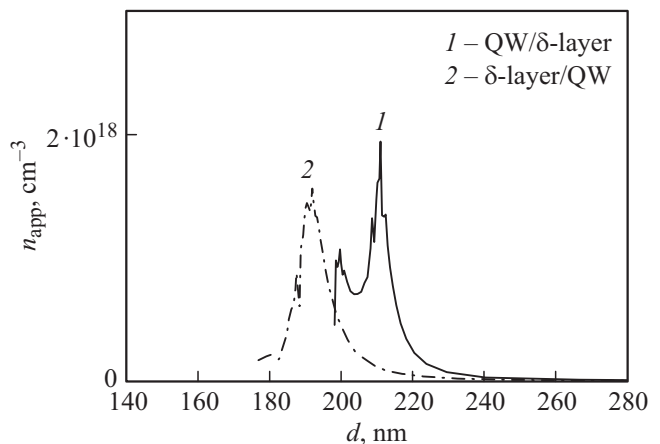


Рис. 5. Эффективные профили концентрации $n_{app}(d)$, полученные экспериментально для δ -легированных структур с различным положением δ -слоя. 1 — КЯ/ δ -слой, 2 — δ -слой/КЯ; $T = 77\text{ K}$.

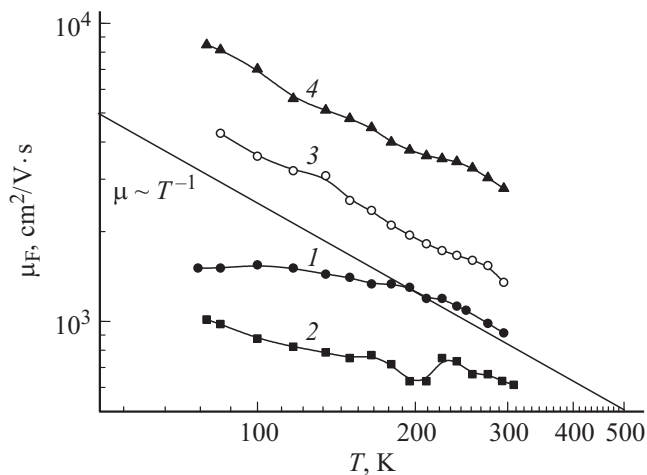


Рис. 6. Зависимости подвижности от температуры для структур с одиночным δ -Si с разной концентрацией ($8 \cdot 10^{12}$ (1), $1,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ (2)), структуры δ -слой/КЯ (3) и структуры КЯ/ δ -слой (4).

чения подвижности значительно выше для структур, содержащих сочетания КЯ и δ -слоя, причем наибольшее значение достигается при конфигурации „КЯ/ δ -слой“. По характеру температурной зависимости можно сказать, что в образцах с КЯ подвижность растет с понижением температуры ($\mu_F \propto T^{-1}$) (рис. 6). Данное поведение характерно для температурной зависимости подвижности в КЯ [14], что позволяет говорить о том, что транспорт носителей в этих структурах происходит преимущественно по подзонам размерного квантования электронов в КЯ.

Таким образом, экспериментальные исследования данных структур (см. таблицу) показывают, что структуры с δ -слоем, расположенным ниже квантовой ямы, демонстрируют лучшие электрофизические свойства. Можно сделать вывод, что наличие δ -слоя между управляющим электродом и КЯ ухудшает возможность управления двумерным газом в проводящем канале вследствие экранирования. Следует заметить, что взаимное расположение слоев влияет и на электролюминесценцию в подобных диодных структурах, так как δ -слой создает барьер для неосновных носителей заряда, препятствующий их диффузии по направлению к КЯ [15].

5. Заключение

Таким образом, проведен подробный анализ гетероструктур InGaAs/GaAs с разным положением δ -слоя при различных технологических параметрах. Данная методика может быть полезна при диагностике уже выращенных структур для точного определения положения δ -слоя и его уровня легирования. Результаты численного моделирования хорошо согласуются с результатами эксперимента и демонстрируют заметную зависимость от геометрии структуры и степени легирования δ -слоя. Кроме того, расчеты позволяют интерпретировать некоторые особенности на вольт-фарадных характеристиках

и профилях концентрации, полученных экспериментально. Основываясь на полученных результатах, можно сделать вывод, что различие в расположении δ -слоя относительно КЯ влияет на распределение заряда в данной окрестности и может привести к различию в рабочих характеристиках готовых приборов, таких, например, как подвижность. В частности, наличие встроенного δ -слоя между поверхностью и КЯ может ухудшать возможность управления двумерным каналом при использовании рассматриваемых структур в качестве транзисторных. Необходимо отметить, что поведение эффективного профиля концентрации в значительной степени зависит от уровня легирования δ -слоя. Все вышеизложенное позволяет сделать предположение, что для управления зарядом в двумерном канале более выгодно является конфигурация КЯ- δ -слой. Однако окончательный вывод о влиянии положения δ -слоя на подвижность носителей в двумерном канале требует дополнительных экспериментальных и теоретических исследований.

Авторы выражают благодарность А.А. Бирюкову за выращивание структур.

Работа поддержана грантом (соглашение от 27 августа 2013 г. № 02.В.49.21.0003 между МОН РФ и ННГУ).

Список литературы

- [1] И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, В.Г. Мокеров и др. ФТП, **42** (9), 1102 (2008).
- [2] Р.А. Хабибуллин, И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, Д.С. Пономарев, В.П. Гладков, В.А. Кульбачинский, А.Н. Клочков, Н.А. Юзева. ФТП, **45** (5), 666 (2011).
- [3] П.Н. Брунков, А.А. Гуткин и др. ФТП, **45** (6), 829 (2011).
- [4] H. Kroemer, Wu-Yi Chien, J.S. Harris, jr., D.D. Edwall. Appl. Phys. Lett., **36** (4), 295 (1980).
- [5] А.Н. Петровская, В.И. Зубков. ФТП, **43** (10), 1368 (2009).
- [6] О.А. Солтанович, Н.М. Шмидт, Е.Б. Якимов. ФТП, **45** (2), 226 (2011).
- [7] V.I. Zubkov, M.A. Melnik, A.V. Solomonov, E.O. Tsvelev. Phys. Rev. B, **70**, 075 312 (2004).
- [8] И.А. Карпович, С.В. Тихов, Л.А. Истомин и др. Вестн. Нижегород. ун-та им. Н.И. Лобачевского, **1**, 25 (2008).
- [9] Г.П. Пека. Физика поверхности полупроводников (Киев, КГУ, 1967).
- [10] P.N. Brunkov, T. Benyattou, G. Guilot. J. Appl. Phys., **80** (2), 864 (1996).
- [11] A. Abou-Elnour, K. Schunemann, J. Appl. Phys., **74** (5), 3273 (1993).
- [12] С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, А.А. Бирюков, С.В. Хазанова. ФТП, **46** (12), 1532 (2012).
- [13] С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, А.А. Бирюков, В.Е. Дегтярев. ФТП, **46** (12), 1561 (2012).
- [14] С.В. Тихов, Н.В. Байдусь, А.А. Бирюков, Б.Н. Звонков, Ю.А. Дроздов, Д.С. Смотриин, В.Г. Тестов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **12**, 19 (2012).
- [15] Н.С. Волкова, С.В. Тихов, А.П. Горшков, Н.В. Байдусь, В.Е. Дегтярев. Тр. XVII Междунар. симп. „Нанофизика и наноэлектроника“ (2014) т. 2.

Редактор Т.А. Полянская

Modeling of apparent concentration profile of InGaAs/GaAs heterostructures containing δ -doping layers

S.V. Khazanova*, V.E. Degtyarev*, S.V. Tikhov*,
N.V. Baidus⁺

* Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

⁺ Physicotechnical Research Institute of Lobachevsky
Nizhny Novgorod State University,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The properties of InGaAs/GaAs heterostructures containing quantum wells and δ -doping layers are investigated by theoretical and experimental methods. Numerical calculations of capacitance and carrier concentrations are performed using self-consistent solution of Poisson and Schrödinger equations. The cases of different geometrical arrangement of δ -doping layer and quantum well are considered. The numerical results and experimental capacitance–voltage measurement analysis are compared. The trends of apparent concentration profiles and capacitance–voltage characteristics in dependence of structure geometry, temperature and doping level were found.