Исследование эффекта бистабильности токовых характеристик наноразмерных многослойных сильно легированных гетероструктур методами математического моделирования

© В.А. Гергель[¶], А.П. Зеленый, М.Н. Якупов^{¶¶}

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук, 125009 Москва, Россия

(Получена 6 июня 2006 г. Принята к печати 31 августа 2006 г.)

Исследована электропроводность наноразмерных слоистых гетероструктур в сильных электрических полях методами математического моделирования на основе уравнения энергетического баланса. Использовано квазигидродинамическое описание электронного дрейфа с учетом диффузионной и термодиффузионной компонент тока, дивергенции электронного теплового потока и температурной зависимости подвижности и времени энергетической релаксации. Получены вольт-амперные характеристики структур с высотой барьера 0.3 эВ и равной протяженностью узко- и широкозонных составляющих 50 нм. В зависимости от уровня легирования в диапазоне $(5-1) \cdot 10^{17}$ см⁻³ на характеристиках наблюдаются либо резкий пик дифференциальной проводимости, либо так называемая петля бистабильности, отвечающая термоинжекционной неустойчивости. Предложена фазическая модель, интерпретирующая форму расчетных характеристик кумулятивным действием электростатического снижения высоты барьеров и ростом электронной температуры в окрестности инжектирующих гетерограниц.

PACS: 73.21.Cd, 73.40.Kp, 73.50.Fq, 73.63.Hs, 85.35.Be

1. Введение

В предыдущей работе авторов [1] методами математического моделирования на основе уравнения энергетического баланса исследовалась электропроводность наноразмерных слоистых сильно легированных гетероструктур в сильных электрических полях. В ней было показано, что характерной особенностью характеристик является сильная нелинейность и пик дифференциальной проводимости при значениях токов порядка $j = (0.3 - 0.4) j_S$, где $j_S = q N v_S$, N — концентрация легирующей примеси, v_S — скорость насыщения. Абсолютная величина этого пика и его положение на оси напряжений оказались зависящими от высоты и крутизны барьеров, равно как и от уровня легирования. Предложенная нами в работе [1] физическая модель интерпретировала отмеченные особенности рассчитанных токовых характеристик кумулятивным действием электростатического снижения высоты барьеров. Такое воздействие возникает вследствие конечной протяженности области резкого изменения состава на гетерограницах и нарастания электронной температуры в окрестности инжектирующих гетерограниц с увеличением тока. Следует сказать, что указанные физические механизмы изначально заложены в расчетные процедуры работы [1] путем использования:

1) квазигидродинамического описания электронного дрейфа;

2) непрерывного представления пространственных изменений зонного квазипотенциала.

Учет этих механизмов в принципе должен обеспечивать возникновение бистабильных (S-образных) участков вольт-амперных характеристик, отвечающих, как мы ее будем называть в дальнейшем, термоинжекционной неустойчивости. Поскольку ожидаемая бистабильность вольт-амперных характеристик легированных сверхрешеток достаточно интересна как с чисто физической точки зрения, так и с точки зрения возможных технических применений, изучение соответствующих закономерностей методами численного моделирования и составило цель данной работы.

Отметим, что впервые предположение о принципиальной возможности существования S-образного участка вольт-амперных характеристик легированных сверхрешеток было высказано Сурисом и Федирко в известной работе [2], посвященной исследованию разогревной фотопроводимости и соответствующей чувствительности легированных сверхрешеток к мощности внешнего СВЧ излучения. Рассмотрим предварительно достаточно упрощенную ситуацию, отвечающую отсутствию легирующих примесей в широкозонных составляющих сверхрешетки. В этом случае удается получить аналитическое выражение для соответствующей S-образности, используя обычное, так называемое дрейфово-диффузионное приближение (ДДМ) [3]. Можно полагать, что такое сильно упрощенное рассмотрение облегчит понимание приведенных далее результатов численного моделирования, отвечающих строгой постановке задачи.

Элементарная модель неустойчивости

Схематически элементарное звено такой упрощенной селективно-легированной сверхрешетки изображено на вставке к рис. 1 и представляет собой комбинацию резистивного (узкозонного) элемента (0 < x < d) и широкозонного емкостного (d < x < 2d) элемента с "утечкой",

[¶] E-mail: vgergel@mail.ru

^{¶¶} E-mail: yamt@mail.ru

определяемой надбарьерной инжекцией [4]. Ясно, что соотношение значений электрических полей E_1 и E_2 в резистивной и емкостной областях при наличии внешнего напряжения V на рассматриваемой ячейке определяется равенством тока проводимости в узкозонной части и надбарьерного тока в широкозонную область

$$j = qN \frac{\mu E_1 v_S}{\sqrt{v_S^2 + (\mu E_1)^2}} = q \frac{v_T}{4} n_S e^{-\frac{w_0}{T}},$$
 (1)

где v_T — тепловая скорость, μ — подвижность, а

$$n_S = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{qT} \left(E_2 - E_1 \right)^2 \tag{2}$$

— максимальная концентрация электронов в обогащенном слое у гетерограницы, индуцирующем соответствующую разность полей в емкостном и резистивном элементах рассматриваемой структуры. Из левой части (1), представляющей собой простейшую форму описания эффекта насыщения дрейфовой скорости в предположении локальности разогрева электронного газа, когда электронная температура $T = q\mu\tau_c E^2$, находим

$$E_1 = \frac{v_s}{\mu} \frac{i}{\sqrt{1-i^2}}, \quad T = T_0 [1-i^2]^{-1},$$
 (3)

где $i = j/qNv_S$ — безразмерная плотность тока, а T_0 — равновесная температура. Теперь запишем правую часть (1) с учетом (2), (3) как

$$i = \frac{\delta}{4N} \frac{1}{\sqrt{TT_0}} \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{q} \left(\frac{V}{d} - 2E_1\right)^2 e^{-\frac{\varphi_0}{T}},\tag{4}$$

где $\delta = v_T(T_0)/v_S$ — численный коэффициент порядка единицы. В результате получим искомое аналитическое



Рис. 1. Расчет вольт-амперных характеристик для упрощенной селективно-легированной сверхрешетки при значениях параметра φ_0/T_0 : 1 - 2, 2 - 4, 3 - 6.

выражение для вольт-амперной характеристики:

$$V = \frac{i}{\sqrt{1-i^2}} \bigg\{ 2\frac{v_S}{\mu} \, d + \sqrt{\sqrt{i^{-2} - 1}} T_0 V_N \exp\left[\frac{\varphi_0}{T_0} (1-i^2)\right] \bigg\},\tag{5}$$

где

$$V_N = 4\delta \, \frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} \, N d^2$$

— характерное напряжение порядка вольта при $N = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $d = 5 \cdot 10^{-6} \text{ см}$. Отвечающие уравнению (5) вольт-амперные характеристики, приведенные на рис. 1 для значений параметра $\varphi_0/T_0 = 2$, 4 и 6, демонстрируют ожидаемую S-образность. Разумеется, приведенная выше крайне упрощенная аналитическая модель и графики на рис. 1 не претендуют на скольнибудь разумную количественную точноть описания рассматриваемого эффекта отрицательного дифференциального сопротивления, а предназначена лишь для облегчения понимания его природы, выявляя соответствующую положительную обратную связь, глубина которой определяется отношением высоты энергетического барьера φ_0 к равновесной тепловой энергии T_0 .

3. Строгая постановка задач моделирования

Приступим теперь к изложению результатов исследования рассматриваемого эффекта бистабильности на основе значительно более строгого, так называемого квазигидродинамического описания дрейфового процесса [1,5], где уравнения Пуассона и непрерывности

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(N_d - n\right), \quad \frac{dj}{dx} = 0 \tag{6}$$

дополнены уравнением энергетического баланса [5]

$$\frac{dj_T}{dx} = j \, \frac{d(\varphi + \varphi_C)}{dx} - n \, \frac{(T - T_0)}{\tau_e}.\tag{7}$$

Систему (6), (7) раскрывают формулы для электронного потока

$$j = \mu n \left[\frac{d(\varphi + \varphi_C)}{dx} - (1 - \alpha) \frac{dT}{dx} \right] - \mu T \frac{dn}{dx}$$
(8)

и потока электронной температуры

$$j_T = \left(\frac{5}{2} - \alpha\right) \left(-\mu nT \frac{dT}{dx} + jT\right),\tag{9}$$

выписанные при упрощающем предположении о степенном характере зависимостей подвижности и времени энергетической релаксации от температуры:

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\alpha}, \quad \tau_e = \tau_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1-\alpha}, \quad 0.5 \le \alpha \le 1, \quad (10)$$

Физика и техника полупроводников, 2007, том 41, вып. 3

где μ_0 — низкополевая подвижность, а значение

$$\tau_0 = \frac{\mu_0 T_0}{v_S^2}$$

согласовано с величиной так называемой скорости насыщения v_S . Далее, ориентируясь на гетероструктуры на основе GaAs, для постоянных μ_0 , v_S и τ_0 мы будем использовать численные значения $\mu_0 = 8 \cdot 10^3 \text{ B/(cm}^2 \cdot \text{c})$, $v_S = 10^7 \text{ см/c}$, $\tau_0 = 2 \cdot 10^{-12} \text{ c}$. Отметим, что, как и в [1], в уравнениях (6)–(9) фигурирует описывающий энергетические барьеры так называемый зонный квазипотенциал

$$\varphi_C = -\frac{E_C(x)}{q},$$

где $E_C(x)$ — край зоны проводимости, изменяющийся с координатой в соответствии с изменениями состава. При этом, однако, для простоты мы будем пренебрегать возможной зависимостью подвижности μ_0 от состава. В качестве шага сверхрешетки выберем довольно большую величину (50 + 50) нм, исключающую существенные проявления туннельных явлений. Что же касается концентрации доноров N_d , мы будем предполагать ее однородной. Отметим также, что для представления периодически изменяющегося зонного квазипотенциала φ_C , вместо обычно применяемых кусочно-линейных аппроксимаций, мы сконструировали на основе известной функции Ферми удобную вспомогательную функцию

$$\varphi_C(x) = \varphi_0 \left[1 + \exp\left\{ \gamma \cos\frac{2\pi x}{L} \right\} \right]^{-1} - \varphi_0 [1 + \exp\gamma]^{-1},$$
(11)

которая с ростом γ из постоянной $\varphi_C(x) \equiv 0$ при $\gamma = 0$ превращается в сколь угодно резкий меандр с амплитудой φ_0 и максимальной производной на гетерограницах

$$\left|\frac{d\varphi_C}{dx}\right| = \frac{\pi}{2} \gamma \frac{\varphi_0}{L}$$

при соответствующем значении этого параметра.

Распределение (11) непрерывно сшивается с постоянными $\varphi_C = \{\varphi_0, 0\}$, что позволяет сформировать соответствующие контактные области после требуемого числа периодов изменения φ_C . Главное же достоинство этого распределения состоит в том, что оно позволяет сконструировать эффективный итерационный процесс вычислений, стартуя от соответствующих распределений концентраций, потенциала и температуры при требуемом значении приложенного напряжения V в однородной структуре $\gamma = 0$, а затем последовательно наращивать величину параметра у до его конечного значения у₀, определяемого актуальной резкостью краев гетероструктуры. Типичный график использованного представления $\phi_C(x)$ с параметрами $\phi_0 = -0.3 \,\mathrm{B}$ и $\gamma = 20$ приведен на рис. 2. Ясно, что в ситуациях с определенным уровнем легирования широкозонных областей сверхрешетки, в ее отдельных звеньях происходит соответствующее перераспределение электронной



Рис. 2. Пространственное распределение зонного квазипотенциала $\varphi_C(I)$ и действующего потенциала $\varphi - \varphi_C(2)$ при нулевом приложенном напряжении.

плотности, вырабатывается специфический встроенный потенциал и возникает соответствующее чередование обедненных и обогащенных слоев, отвечающих классическим представлениям Андерсона и Чанга [6,7] об электростатике гетеробарьеров. Соответствующий результирующий энергетический профиль однородно легированной сверхрешетки с $N_d = 5 \cdot 10^{17}$ см⁻³ представлен кривой 2 на рис. 2. Важно отметить, что в рассматриваемых ситуациях гетеробарьеров конечной крутизны истинная высота барьера, складывающаяся в противоборстве электрического поля обедненного слоя и исходного квазиполя реальной гетерограницы, оказывается существенно меньше исходного значения φ_0 . В представленном на рис. 2 примере с $\phi_0 = -0.3$ В, $\gamma = 20$ и $N_d = 5 \cdot 10^{17} \, \text{см}^{-3}$ такое уменьшение составляет 0.12 В. С ростом N оно будет увеличиваться, а с ростом крутизны — уменьшаться.

Моделирование электроразогревного процесса в элементарном звене сверхрешетки

Численные эксперименты применительно к достаточно протяженным сверхрешеткам начнем с изучения электроразогревного процесса в каком-либо ее типичном элементарном звене, в качестве которого оказалось удобным выбрать широкозонный слой в окружении двух половинок соответствующих узкозонных слоев (жирная линия на рис. 2, 0.1 < x < 0.2 мкм). Ясно, что граничными условиями такой задачи являются условия "сшивки" соответствующих распределений температуры



Рис. 3. Вольт-амперные характеристики элементарной ячейки при различных уровнях легирования сверхрешетки N_d , 10^{17} см⁻³: I = 9, 2 = 6, 3 = 3, 4 = 1.

и концентраций на границах элементарных ячеек

$$n(0) = n(L), \quad \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=L}$$
(12)

И

$$T(0) = T(L), \quad \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=L}.$$
 (13)

При этом для потенциала, как обычно, имеем

$$\varphi(0) = 0 \quad и \quad \varphi(L) = V, \tag{14}$$

где V — удельное напряжение на ячейку, поскольку необходимое равенство производных

$$\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=L}$$

автоматически вытекает из электронейтральности ячейки, обеспечиваемой граничными условиями на концентрацию (12).

Относительно особенностей численного моделирования системы базисных уравнений (6), (7) следует сказать, что для ее дискретизации использовались модифицированный метод Шарфеттера–Гумеля [8] и стандартный метод Ньютона, обеспечивающие построение соответствующих решений при фиксированном V и произвольных (но равных друг другу) значениях граничных концентраций и температур. Затем в действие вступает итерационный процесс изменения этих граничных значений, обеспечивающий минимизацию разности соответствующих производных, т.е. выполнения квазициклических граничных условий (12), (13).

Типичный пример расчетных вольт-амперных характеристик рассматриваемых элементарных ячеек, отличающихся лишь уровнем легирования, приведен на рис. 3 в относительных координатах $v/v_s = f(V)$, где $v/v_{s} = j/qN_{d}v_{s}$. Первые две кривые, отвечающие сравнительно высоким концентрациям $N_d = 6 \cdot 10^{17}$, $9 \cdot 10^{\bar{17}} \, \text{см}^{-3}$ и соответственно более низким значениям результирующей высоты энергетических барьеров, демонстрируют ожидаемый довольно резкий (но непрерывный) переход от сравнительно малых значений тока к существенно большим, где скорость электронного дрейфа близка к скорости насыщения. Иными словами, кривые 1,2 демонстрируют резкий пик дифференциальной проводимости, обусловленный "включением" термоинжекции, который с понижением уровня легирования — кривые 3 и 4, отвечающие значениям $N_d = 3 \cdot 10^{17}, 10^{17} \,\mathrm{cm}^{-3}$ (более высокие барьеры), — переходит в искомую петлю бистабильности. Заметим, что, строго говоря, кривые 3, 4 состоят из двух отдельных переключающихся участков, отвечающих сравнительно большим и сравнительно малым значениям тока. Нижние кривые получены с использованием стандартного алгоритма численного моделирования вольт-амперных характеристик (ВАХ). В этом случае итерационный процесс отыскания тока в следующей точке оси напряжений $V_{i+1} = V_i + \delta V$, где δV — соответствующий шаг дискретизации, стартует от уже известных распределений температуры и концентрации, отвечающих предыдущему значению напряжения. Достигнув точки потери устойчивости V = V1, программа делает сравнительно большой шаг вперед по напряжению $\Delta V \gg \delta V$, а затем, используя дополнительную итерационную процедуру по у, выходит в соответствующую точку сильнотокового участка ВАХ, который восстанавливает, двигаясь по оси напряжений вниз ($V_{i+1} = V_i - \delta V$), до точки $V_2 < V_1$, где итерационный процесс снова перестает сходиться. Имея в виду полученный ранее аналитический результат для упрощенной модели (формула (5), рис. 1), не вызывает сомнения, что в области $V_2 < V < V_1$ в принципе должен существовать и соответствующий неустойчивый участок ВАХ с отрицательным сопротивлением, который однако не может быть выявлен нашими итерационными методами.

Проведенный анализ тенденций изменения характера пространственных зависимостей потенциала, концентрации и электронной температуры вдоль ячейки с изменением напряжения позволяет уточнить качественную физическую картину рассматриваемого дрейфового процесса. При сравнительно малых напряжениях, отвечающих начальному участку ВАХ, большая часть внешнего напряжения оказывается приложенной к обедненной широкозонной области, где происходит соответствующий разогрев электронов. Попав в узкозонный слой, электроны остывают практически почти полностью до равновесной температуры Т₀. При этом определяющим механизмом формирования тока является надбарьерная термоинжекция, которая увеличивается с ростом напряжения за счет увеличения концентрации в обогащенном слое на гетерогранице и электростатического снижения энергетического барьера. С дальнейшим ростом напряжения разогрев электронов в широкозонной части

усиливается, а охлаждение в узкозонной — ослабевает, температура на гетерогранице растет, инжекционный ток увеличивается и структура резко или "скачком" переходит в сильнотоковое состояние, где тепловая энергия близка к значениям высоты барьера, а величина тока лимитируется обычным эффектом насыщения дрейфовой скорости.

5. Сверхрешетки с конечным числом барьеров

Обратимся к изучению более приближенной к реальной ситуации модели легированной сверхрешетки конечных размеров с четырьмя (для определенности) барьерами. Ясно, что при этом следует использовать стандартный тип граничных условий $n(0) = n(L) = N_d$ и $T(0) = T(L) = T_0$ на ее внешних границах с контактными областями вместо квазициклических (12), (13). Результаты соответствующего численного эксперимента по расчету ВАХ такой четырехбарьерной структуры при значениях концентрации $N_d = 5 \cdot 10^{17}$, $3 \cdot 10^{17}$, 10^{17} см⁻³ продемонстрировали существенно более плавные кривые по сравнению с характеристиками "типичной" ячейки, приведенными на рис. 3, а главное — полное отсутствие ожидаемой бистабильности. Конкретная форма этих зависимостей практически полностью эквивалентна характеристикам, рассчитанным нами для аналогичной структуры в предыдущей раборте ([1], рис. 3), и поэтому из "экономии" здесь не приводится. Вместо этого на следующем рис. 4 приведены пространственные распределения действующего потенциала $\varphi + \varphi_C(x)$ при типичных значениях внешнего напряжения, приложенного к такой четырехбарьерной структуре. Эти графики, равно как и соответствующие распределения температур и концентраций, демонстрируют специфическую



Рис. 4. Пространственное распределение действующего потенциала $\phi + \phi_C$ в четырехбарьерной структуре при приложенном напряжении V, B: 1 - 0, 2 - 1.

Физика и техника полупроводников, 2007, том 41, вып. 3



Рис. 5. Вольт-амперные характеристики четырехбарьерной структуры при пониженной высоте первого барьера "1 + 3" при значениях N_d , 10^{17} см⁻³: 1 - 5, 2 - 3, 3 - 1.

особенность термоинжекции на первом гетеробарьере, где электронная температура, в существенной степени наследуя равновесную температуру контактной области, оказывается значительно меньше, чем на последующих гетерограницах. Поэтому доля внешнего напряжения на первом звене сверхрешетки оказалась значительно превышающей падение напряжения на ее последующих звеньях, что и блокировало реализацию искомых неустойчивостей.

Отмеченная доминирующая роль первого звена сверхрешетки в формировании ВАХ представляет, на наш взгляд, широкий спектр возможностей управлять формой ВАХ посредством внешних электрических и радиационных воздействий, а также разнообразных структурных модификаций "входного" звена. Возможности такого рода специализированных структурных модификаций демонстрируют графики на рис. 5, полученные для структуры, отличающейся от предыдущей лишь пониженной высотой первого гетеробарьера (0.2 вместо 0.3 эВ). Они показывают, что соответствующее облегчение термоинжекции и последующий электроразогрев в этом пониженном гетеробарьере с успехом выявляют главную особенность электрических свойств, присущую последующим звеньям сверхрешетки, а именно искомую неустойчивость и соответствующую бистабильность ВАХ.

6. Заключение

В итоге, учитывая сравнительную технологическую простоту изготовления такого рода гетероструктур с бистабильными вольт-амперными характеристиками, можно предположить перспективность их использования для построения устройств регистрации и генерации



Рис. 6. Вольт-амперные характеристики гетероструктур с различным числом основных гетеробарьеров: $1 - ,, 1 + 2^{\circ}, 2 - ,, 1 + 3^{\circ}, 3 - ,, 1 + 4^{\circ}.$

СВЧ излучения терагерцового диапазона. В этой связи приведем также расчетные ВАХ гетероструктур с $N_d = 10^{17}$ см⁻³, в которых за первым разогревающим барьером (0.2 эВ) следует некоторое число основных барьеров по 0.3 эВ (рис. 6).

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность чл.-кор. РАН Р.А. Сурису за интерес к этой работе и плодотворные дискуссии, а также Российскому фонду фундаментальных исследований, при поддержке которого настоящая работа выполнена (проект № 04-02-17681).

Список литературы

- В.А. Гергель, В.А. Курбатов, М.Н. Якупов. ФТП, 40 (4), 446 (2006).
- [2] Р.А. Сурис, В.А. Федирко. ФТП, 12 (6), 1060 (1978).
- [3] С.М. Зи. Физика полупроводниковых приборов (М., Мир, 1984) т. 1, с. 54.
- [4] Г.Е. Пикус. Основы теории полупроводниковых приборов (М., Наука, 1965) с. 72.
- [5] R. Stratton. Phys. Rev., **126** (6), 2002 (1962).
- [6] R.L. Anderson. Sol. St. Electron., 5, 341 (1962).
- [7] L.L. Chang. Sol. St. Electron., 8, 821 (1965).
- [8] A. Forghieri, R. Guerrieri, P. Ciampolini, A. Gnudi, M. Rudan. IEEE Trans. on CAD, 7 (2), 231 (1988).

Редактор Т.А. Полянская

A study of the bistability effect of the current characteristics of the above mentioned many-layer (stratifield) strongly doped heterostructures by methods of mathematical modelling

V.A. Gergel, A.P. Zeleny, M.N. Jakupov

The Institute for Radiotechnology and Electronics, Russian Academy of Sciences, 125009 Moscow, Russia

Abstract Mathematical methods based on the energy balance equation are used to study conductivity of nanodimensional layered heterostructures in hight electric fields. Used is a quasihydrodynamic description of the electron drift with the account of the diffusion and thermodiffusion terms of current, divergence of electron thermal flow, and the mobility and energy relaxation time depence on the electron temperature. Current voltage characteristics are obtained for the layered heterostructure with the gap mismatch of 0.3 eV and the same length of both narrow and wide bands 50 nm layers show thus showing a sharp peak of differential conductivity or a loop of bistability depending on the doping level $(5-1) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. An instability thermoinjection is the key of the bistability loop. Suggested is a physical model for the interpretation of calculated current voltage characteristics by a collective action of electstatic lowering heterobarrie's height and the increasing of electron temperatures at injected heteroboundaries.