

## ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ В ТОНКИХ И $\delta$ -ЛЕГИРОВАННЫХ СЛОЯХ GaAs

Квон З. Д., Погосов А. Г.

Предложен эффективный метод расчета энергетического спектра носителей заряда в тонких и  $\delta$ -легированных слоях полупроводников. Проведен численный расчет для  $\delta$ -слоев GaAs  $n$ -типа, который сравнивается с расчетами других авторов и с некоторыми экспериментальными данными. Показано, что форма потенциальной ямы вблизи  $\delta$ -слоя, полученная в приближении Томаса—Ферми, слабо отличается от найденной самосогласованным расчетом. Изучено влияние на спектр носителей заряда граничного электрического поля, вызванного закреплением уровня Ферми на поверхности GaAs.

За последние несколько лет тонкие и  $\delta$ -легированные слои полупроводников стали предметом активных исследований, интерес к которым обусловлен, с одной стороны, перспективами их практического применения, с другой — особенностями квазидвумерной системы, образованной свободными носителями заряда вблизи  $\delta$ -легированной области [1]. Эти носители экранируют неподвижный заряд легирующей примеси, формируя  $V$ -образный потенциал, движение в котором квантуется, превращая спектр свободных носителей в последовательность подзон размерного квантования. В отличие от слоев инверсии полупроводников  $\delta$ -слои характеризуются большей шириной и большим числом заполненных подзон. Таким образом, нахождение энергетического спектра носителей заряда в  $\delta$ -слоях представляет собой квантовую самосогласованную задачу, допускающую лишь численное решение. Результаты самосогласованных расчетов можно найти в ряде работ (см., например, [2, 3]). Однако в этих работах не содержится описания самой процедуры самосогласованного расчета, которая обладает рядом интересных особенностей, заслуживающих отдельного рассмотрения. Кроме того, в них не обсуждается применимость более простых численных методов.

В настоящей работе описывается эффективный алгоритм расчета спектра носителей заряда в тонких и  $\delta$ -легированных слоях полупроводников, приводятся результаты расчета для  $\delta$ -слоев GaAs  $n$ -типа, которые сравниваются с расчетами других авторов и с некоторыми экспериментальными данными. Показано также, что форма потенциальной ямы вблизи  $\delta$ -слоя, полученная в приближении Томаса—Ферми, слабо отличается от найденной самосогласованным расчетом.

### П р и б л и ж е н и е Т о м а с а — Ф е р м и

При самосогласованном численном решении уравнений Шредингера и Пуассона в ОПЗ очень важным является выбор начального потенциала. В данной работе в качестве него был использован потенциал, найденный в приближении Томаса—Ферми. Поэтому остановимся на нем подробнее.

Приближение Томаса—Ферми является эффективным средством относительно быстрого расчета формы потенциала для носителей в  $\delta$ -слое. Это делает возможным использование его в качестве хорошего нулевого приближения для последующей процедуры самосогласованного расчета. Суть этого приближения состоит в замене квантовой плотности состояний на квазиклассическую:

$$n(E) = \frac{(2mE)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}, \quad E = e\varphi(z) - E_F,$$

где  $n(E)$  — число состояний, отвечающих энергии, меньшей  $E$ ,  $\varphi(z)$  — потенциал  $\delta$ -слоя как функция координаты  $z$  поперек  $\delta$ -слоя.

Если отсчитывать потенциал от уровня Ферми  $E_F$ , то уравнение Пуассона запишется в виде

$$\Delta\varphi = \frac{e}{\epsilon_0\epsilon_s} \frac{(2me\varphi)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} = A\varphi^{3/2}.$$

Введя электрическое поле  $\mathcal{E} = -d\varphi/dz$ , получим

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = \frac{1}{2} \frac{d(\mathcal{E}^2)}{d\varphi} = A\varphi^{3/2}, \quad \mathcal{E} = -\frac{d\varphi}{dz} = \left(\frac{4}{5} A\varphi^{5/2} + \mathcal{E}_0^2\right)^{1/2},$$

где  $\mathcal{E}_0$  — граничное значение электрического поля при  $\varphi=0$ , т. е. на уровне Ферми; величина  $A$  для GaAs с эффективной массой  $m=0.067m_0$  равна  $1.23 \times 10^{17} \text{ В}^{-1/2} \cdot \text{м}^{-2}$ .

Задача нахождения формы потенциальной ямы сводится теперь к простому численному интегрированию последнего соотношения. Для нахождения энергий и заселенностей квантовых подзон необходимо решить уравнение Шредингера для найденного потенциала  $\varphi(z)$ .

### А л г о р и т м с а м о с о г л а с о в а н н о г о р а с ч е т а

Нахождение параметров области пространственного заряда вокруг  $\delta$ -слоя сводится к совместному решению уравнений Шредингера и Пуассона. Для электронов в  $\delta$ -слое в приближении эффективной массы эти уравнения можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi_j(z) + e\varphi(z) \psi_j(z) = E_j \psi_j(z), \quad (1)$$

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} = \frac{\rho_n(z)}{\epsilon_0\epsilon_s},$$

где

$$\rho_n(z) = e \sum_j \Gamma_{n,j} \psi_j^2(z) = \frac{em_d^*}{\pi\hbar^2} |E_j| \sum_j \psi_j^2(z). \quad (2)$$

Здесь  $\psi_j(z)$ ,  $E_j$  — огибающая волновой функции электрона и энергия  $j$ -й квантовой подзоны;  $\varphi(z)$  — потенциал  $\delta$ -слоя, отсчитываемый от уровня Ферми;  $m_x^*$  — эффективная масса электрона для движения перпендикулярно плоскости  $\delta$ -слоя;  $m_d^*$  — эффективная масса плотности состояний.

Граничные условия в нашем случае выбирались следующим образом:

$$\psi_j|_{z=\infty} = \psi_j|_{z=-\infty} = 0, \quad \frac{d\varphi}{dz} \Big|_{z=0} = \frac{eN_d}{2\epsilon_0\epsilon_s}, \quad (3)$$

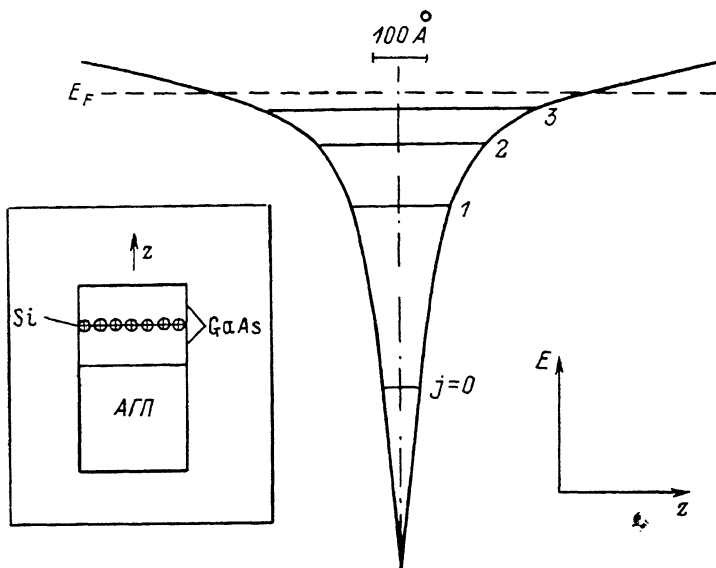
$$\frac{d\varphi}{dz} \Big|_{z=a} = -\frac{d\varphi}{dz} \Big|_{z=-a} = \mathcal{E}_0. \quad (4)$$

Здесь  $N_d$  — концентрация доноров на  $\text{см}^2$  в плоскости  $\delta$ -слоя;  $z=0$  соответствует центру потенциальной ямы;  $a$  — достаточно большое ( $\sim 500 \text{ \AA}$ ) расстояние от  $\delta$ -слоя.

Граничные условия (4) обычно выбираются в виде  $\varphi|_{z=\pm\infty} = \varphi_0$ , где  $\varphi_0$  — фактическое положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости на границе материала, которая обычно расположена на значительном расстоянии от  $\delta$ -слоя. Однако распространять расчет на всю эту область было бы не эффективно, поскольку от границы материала вплоть до некоторого  $z=a$  потенциал меняется практически линейно, так как в этой области нет свободных носителей заряда. В связи с этим предпочтительнее выбрать граничные условия (4), задавая граничное поле  $\mathcal{E}_0$  на некотором расстоянии  $z=a$  от центра ямы (величину

$a$  можно взять примерно равной ширине ямы на уровне Ферми). В нашем случае расчеты проводились для  $\delta$ -слоя в GaAs. Предполагалось, что  $\delta$ -слой расположен между слоями нелегированного GaAs с толщиной  $d$ . Поскольку, как известно, уровень Ферми на поверхности GaAs закрепляется в середине запрещенной зоны, электрическое поле в области  $|z| > a$  равно  $\mathcal{E}_0 \approx E_g/2d$ , где  $E_g$  — ширина запрещенной зоны GaAs.

Решение системы уравнений Шредингера и Пуассона с граничными условиями (3), (4) находилось методом последовательных приближений. В качестве начального (нулевого) приближения в уравнение (1) подставлялся потенциал  $\varphi^{(0)}(z)$ , рассчитанный по методу Томаса—Ферми. При этом уравнение Шредингера (1) заменялось разностной схемой, что сводило задачу нахождения  $\varphi_j(z)$



Самосогласованный потенциал  $\delta$ -слоя, рассчитанный для концентрации свободных носителей  $N_a = 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ .

и  $E_j$  к нахождению собственных значений и собственных векторов трехдиагональной матрицы. Подставляя найденные  $\varphi_j(z)$  и  $E_j$  в уравнение (2), можно найти плотность заряда  $\rho_n$ , а затем, 2 раза численно проинтегрировав уравнение Пуассона, найти новое значение потенциала  $\varphi_{\text{new}}(z)$ . Итерационный процесс в дальнейшем проводился по формуле

$$\varphi^{(n+1)} = (1 - \alpha) \varphi^{(n)} + \alpha \varphi_{\text{new}} \quad (n = 0, 1, \dots),$$

где  $\alpha$  — параметр, который выбирался из соображений быстрой сходимости итераций. Процесс прекращался при выполнении условия  $|1 - \varphi_{\text{new}}(0)/\varphi^{(n)}(0)| < 0.001$ . Для достижения этой точности обычно необходимо 5—10 итераций.

Как отмечается в литературе (см., например, [2]), примесь в  $\delta$ -слое не всегда распределена вдоль одного монослоя, а может быть размыта. При концентрации свободных носителей  $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  ширина профиля легирования  $\Delta$  достигает величин  $100 \div 200 \text{ \AA}$ . Описанную процедуру расчета можно обобщить на случай размытого профиля легирования, если в качестве плотности заряда  $\rho_n$ , входящей в уравнение Пуассона, подставить величину  $\bar{\rho}_n = \rho_n + eN_a/\Delta$ , а граничное условие (3) заменить на  $d\varphi/dz|_{z=0} = 0$ .

Эффективность такой процедуры расчета трудно сравнить с аналогичными алгоритмами, описанными в литературе, так как скорость счета сильно зависит от модели ЭВМ и в статьях, как правило, не приводится. Что же касается эффективности предлагаемого алгоритма, то она во многом определяется выбором в качестве нулевого приближения для итерационного процесса потенциала, рассчитанного методом Томаса—Ферми, который обеспечивает высокую ( $\sim 2\%$ ) точность.

На рисунке показана зонная диаграмма  $\delta$ -слоя с концентрацией свободных носителей  $N_s = 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ , полученная в результате численного расчета по описанному алгоритму. На вставке — примерный вид структуры, выращенной на полуизолирующем GaAs (АГП):  $\delta$ -слой образован атомами кремния, которые расположены между буферными слоями GaAs. Значение граничного электрического поля выбиралось равным  $5 \cdot 10^3 \text{ В/см}$ , что соответствует толщине буфер-

Таблица 1

Расчетные значения энергетических положений  
квантовых подзон  $E_j$  (в мэВ) в  $\delta$ -слое  
с концентрацией  $N_s = 5.0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ,  
 $\epsilon_0 = 5 \cdot 10^3 \text{ В/см}$

$j$	$E_j, \text{ мэВ}$		
	самосогласованный расчет	расчет в потенциале Томаса—Ферми	данные из работы [2]
0	110.4	110.3	111
1	42.9	43.1	43
2	19.2	19.3	19
3	6.1	5.9	6

Таблица 2

Значения заселенностей квантовых подзон для размытого до  $\Delta = 195 \text{ \AA}$   $\delta$ -слоя с концентрацией носителей  $N_s = 9.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$

$j$	$N_j, 10^{12} \text{ см}^{-2}$	
	расчет	эксперимент [2]
0	3.76	3.83
1	2.78	2.78
2	1.75	1.71
3	0.90	0.82
4	0.39	0.38

ных слоев 1 мкм. Видно заполнение четырех подзон размерного квантования. Значения энергий подзон  $E_j$  приведены в табл. 1, где для сравнения представлены энергетические положения подзон, найденные в потенциале, рассчитанном в приближении Томаса—Ферми, а также данные из работы [2]. Наблюдается хорошее согласие всех приведенных данных. Кроме того, следует отметить, что энергетические положения квантовых подзон, найденные в потенциале Томаса—Ферми, слабо отличаются от энергетического спектра, полученного самосогласованным расчетом.

В табл. 2 приведены результаты численного расчета для случая  $\delta$ -слоя с большой концентрацией  $N_s = 9.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  и размытым до  $195 \text{ \AA}$  профилем легирования. Для сравнения представлены экспериментальные результаты, взятые из работы [2]. Видно, что и в этом случае описанный алгоритм позволяет найти решение, удовлетворительно описывающее эксперимент.

Влияние граничного электрического поля  $\epsilon_0$  на расчетные значения заселенностей квантовых подзон показано в табл. 3, где приведены результаты расчета для различных значений  $\epsilon_0$ . Из табл. 3 видно, что существенное влияние на спектр носителей заряда и на значения заселенностей квантовых подзон оказывает граничное электрическое поле  $\epsilon_0 > 10^4 \text{ В/см}$ , что соответствует толщине буферных слоев  $d < 0.5 \text{ мкм}$ .

Таким образом, предложенный алгоритм позволяет эффективно рассчитывать параметры тонких и  $\delta$ -легированных слоев. Показано, что закрепление уровня Ферми на поверхности структуры может быть учтено заданием в качестве граничного условия электрического поля на некотором расстоянии от  $\delta$ -слоя, что позволяет не распространять расчет на всю область буферного слоя. Установлено, что потенциал, рассчитанный в приближении Томаса—Ферми, обеспечивает высокую ( $\sim 2\%$ ) точность, что позволяет использовать его в качестве

Таблица 3

Заселенности квантовых подзон  $\delta$ -слоя с концентрацией  $N_s = 6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ , рассчитанные для различных значений граничного электрического поля  $\epsilon_0$

$j$	$N_j, 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $\epsilon_0, \text{ В/см}$		
	$10^3$	$10^4$	$10^5$
0	3.60	3.67	4.19
1	1.43	1.46	1.51
2	0.66	0.67	0.30
3	0.24	0.21	—
4	0.07	—	—

приближенного метода расчета периодических структур с  $\delta$ -слоями, таких как  $\delta$ -*nini* или  $\delta$ -*nipi* сверхрешеток [1], а также в качестве эффективного нулевого приближения для последующей процедуры самосогласованного расчета.

#### Список литературы

- [1] Ploog K. // J. Cryst. Growth. 1987. V. 81. P. 304—314.
- [2] Zrenner A., Koch F., Ploog K. // Surf. Sci. 1988. V. 196. P. 671—676.
- [3] Schubert E. F., Stark J. B., Ullrich B., Cunningham J. E. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 18. P. 1508—1510.

Институт физики полупроводников СО АН СССР  
Новосибирск

Получена 27.06.1990  
Принята к печати 11.09.1990

---