

ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ СЛОЯ ШОТКИ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ ОТ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

*Е. В. Бузанева, В. В. Левандовский, В. Г. Левандовский,
А. П. Ветров, С. М. Кузин, В. Н. Панасюк*

Исследованы электронные свойства области пространственного заряда в широкозонном полупроводнике с слоем узкозонного полупроводника толщиной $10-150 \text{ \AA}$ — с квантовой ямой (КЯ). Рассчитана модель КЯ конечной глубины и ширины с «деформированным дном» при воздействии электрического поля. Показано, что по характерным напряжениям U на экспериментальных зависимостях C^{-2} и dC^{-2}/dU от U может быть определен ряд параметров КЯ.

Развитие наноэлектроники с элементами на полупроводниковых структурах с квантовыми ямами требует детального анализа их поведения при изменении параметров внешнего воздействия, в частности напряжения, температуры. В настоящей работе теоретически исследованы электронные свойства области пространственного заряда в широкозонном полупроводнике с слоем узкозонного полупроводника толщиной $L \approx 10-150 \text{ \AA}$ — квантовой ямой (КЯ). Подобные задачи для двухслойной гетероструктуры с треугольной КЯ рассматривались в ряде работ [1, 2]. Нами анализируется модель КЯ конечной глубины и ширины с «деформированным дном» под воздействием электрического поля. Параметры, характеризующие такую трехслойную структуру, приведены на рис. 1.

При изменении напряжения U в структуре (рис. 1) будет изменяться разность уровней Ферми в полупроводнике и металле $eU = \mathcal{E}_S - \mathcal{E}_M$, высота потенциального барьера на границе с металлом $\varphi(0) = \varphi_0 - eU$, потенциалы $\varphi(l_1) = \varphi_1$ и $\varphi(l_2) = \varphi_2$, поле в КЯ F , поверхностная плотность уровней размерного квантования в КЯ n_s , положение уровней размерного квантования $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_i$ относительно «дна» КЯ конечной глубины U_0 и толщиной $L = l_2 = l_1$, положение уровня Ферми в полупроводнике относительно «дна» КЯ μ_v и максимум амплитуды волновой функции электронов в КЯ $\Psi_n(x_n)$.

Для определения энергетического положения уровней \mathcal{E}_i подзон размерного квантования в КЯ необходимо самосогласованное решение уравнения Шредингера с волновой функцией $\Psi(x)$ и уравнения Пуассона, определяющего потенциал $\varphi(x)$ «ямы», в которой находится электрон. Если задается конкретная модель потенциальной ямы (прямоугольная, треугольная), то уравнение Пуассона в области КЯ не решается. Для прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины U_0 задача аналитически не решается [3]. Уровни энергии \mathcal{E}_n определяются из системы уравнений

$$\mathcal{E}_n = 2\xi^2 \hbar^2 / m^* L^2, \quad (1)$$

где ξ определяется при нечетном n из

$$\cos \xi = \pm \gamma \xi, \quad \text{tg } \xi > 0, \quad (2)$$

а при четном n из

$$\sin \xi = \pm \gamma \xi, \quad \text{tg } \xi < 0. \quad (3)$$

Здесь $\gamma = (\hbar/L) (2/m^*U_0)^{1/2}$, m^* — эффективная масса. Волновая функция $\Psi_0(x)$ имеет максимум в точке $x = l_1 + L/2$, соответствующей середине КЯ. При наличии электрического поля напряженностью F «дно» КЯ искривляется и гамильтониан задачи принимает вид $H = H_0 + eF(x - l_1)$. Применение вариаци-

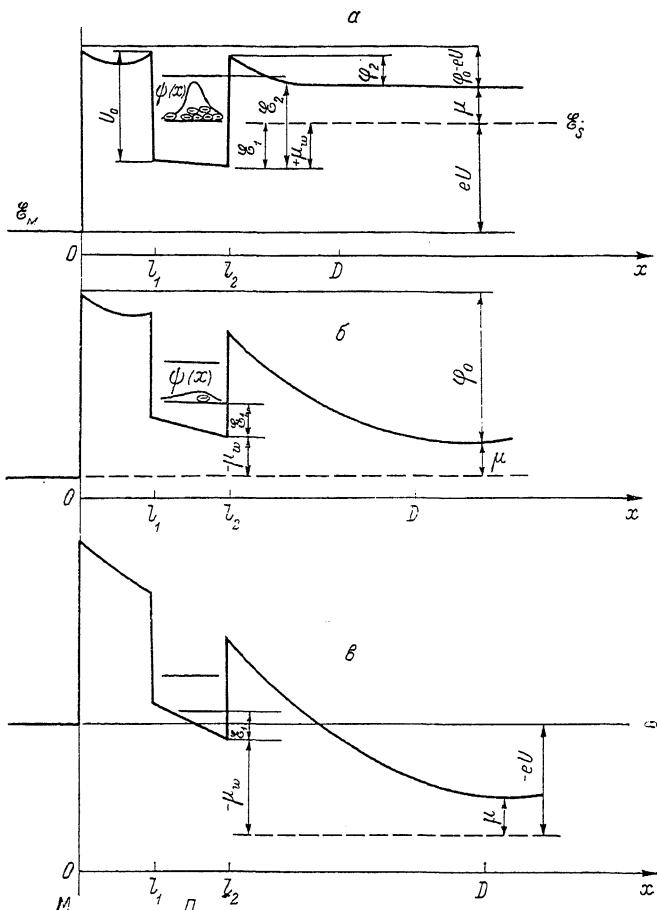


Рис. 1. Зонная модель структуры металл—полупроводник с квантовой ямой в слое Шоттки при различных напряжениях.

а — $U > 0$, б — $U = 0$, в — $U < 0$.

ционной процедуры [4], когда в виде пробной функции использовалась волновая функция

$$\Psi(x) = N(\beta) [1 + \beta(x - l_1)/L] \Psi_0(x), \quad (4)$$

где $\Psi_0(x)$ соответствует невозмущенной задаче при $F=0$ [3], β — вариационный параметр, N — постоянная нормировки, дает следующее выражение для величины сдвига уровня размерного квантования

$$\Delta\epsilon_{1,2} = [L^2/(L^2 + \beta^2 \langle x^2 \rangle_0)] [2e\beta F \langle x^2 \rangle_0/L + \hbar^2 \beta^2 / 2m^* L^2], \quad (5)$$

где

$$\beta = (-2eFm^*L/\hbar^2) \langle x^2 \rangle_0, \quad (6)$$

$$\langle x^2 \rangle_0 = \langle \Psi_0 | x^2 | \Psi_0 \rangle. \quad (7)$$

Выражения (5)—(6) справедливы при слабых полях, когда $\beta^2 \langle x^2 \rangle_0 \ll L^2$, что для случая $L=100 \text{ \AA}$, $U_0=0.4 \text{ эВ}$ соответствует $F \ll 10^7 \text{ В/м}$. Поля заряженных КЯ реальных полупроводниковых структур не превышают этой вели-

чны [5]. Кроме того, происходит сдвиг максимума волновой функции $\Psi(x_m)$, положению которого в случае слабых полей соответствует

$$x_m = (L/2)[1 + 2\beta/(1 + \beta/2) K_0^2 L^2] + l_1, \quad (8)$$

где

$$K_0^2 = (2m^*L^2/\hbar^2) \varepsilon_1.$$

Для дальнейшего анализа необходимо учесть, что поле F в конкретной структуре (рис. 1) зависит от приложенного напряжения U и связано с поверхностным зарядом на границе КЯ en_s . Величину n_s рассчитаем с помощью функции распределения Ферми, используя известное выражение для двумерной плотности состояний, соответствующей одному энергетическому уровню размерного квантования $g = m^*/\pi\hbar^2$ (учитывая, что спиновое вырождение равно 2)

$$n_s = gkT \ln [(1 + e^{(\mu_w - \varepsilon_1 - \Delta\varepsilon_1)/kT}) (1 + e^{(\mu_w - \varepsilon_2 - \Delta\varepsilon_2)/kT}) \dots]. \quad (9)$$

В результате анализа уравнения Пуассона для структуры на рис. 1 в случае области пространственного заряда (ОПЗ), образованной зарядом полностью

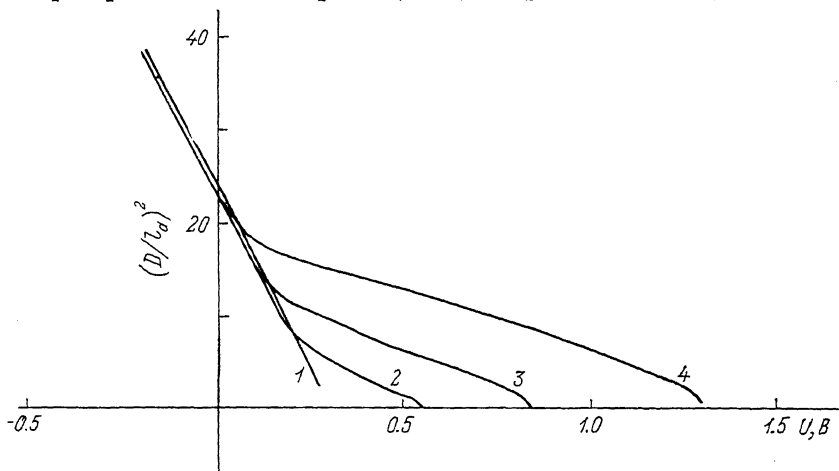


Рис. 2. Зависимость D^2/l_d^2 от U для структур с КЯ при $U_0 = 0.4$ эВ и различных L . L , Å; 1 — 10, 2 — 30, 3 — 50, 4 — 100.

ионизированных доноров с концентрацией N_d и зарядом электронов области КЯ с концентрацией $n_w = n_s/L$, получим следующие выражения для первого и второго интегралов:

$$F_{x=0} = F_0 = (-1/e) d\varphi/dx|_{x=0} = (kT/e) [(D - L)/l_d - n_w L/N_d l_d^2], \quad (10)$$

$$\varphi(l_1) = \varphi_1 = kT [(D - l_2)^2/2l_d^2 + (D - l_2)L/l_d^2 - n_w L^2/2N_d l_d^2], \quad (11)$$

$$\varphi_2 = (D - l_2)^2 kT/2l_d^2, \quad (12)$$

$$\varphi_0 - eU = kT [D^2/2l_d^2 - L(n_w - N_d)(l_1 + l_2)/2N_d l_d^2], \quad (13)$$

$l_d = (\varepsilon_0 \varepsilon kT/e^2 N_d)^{1/2}$ — длина Дебая в полупроводнике; $\varepsilon_0, \varepsilon$ — диэлектрические проницаемости вакуума и полупроводника.

Напряженность поля в КЯ рассчитывается по формуле

$$F = (\varphi_1 - \varphi_2)/L = (kT/e l_d) [(D - l_2)/l_d - n_w L/2N_d l_d^2]. \quad (14)$$

Кроме того, из рис. 1 видно, что

$$\mu_w = U_0 - \mu - \varphi_2, \quad (15)$$

где μ — положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости в объеме полупроводника.

Уравнения (9), (12)–(15) являются системой уравнений для определения параметров μ_w , F , D , φ_2 , n_s в зависимости от приложенного напряжения U . Величина $\Delta\mathcal{E}_i$ в (9) также зависит от напряжения, согласно (5). Эта система уравнений решалась численными методами с использованием ЭВМ.

Для анализа изменений параметров слоя Шоттки с КЯ при приложении напряжения U исследовались зависимости $D^2/l_d^2 = f(U)$ (D^2/l_d^2 пропорционально $1/C^2$, C — высокочастотная емкость слоя Шоттки) и $y = (-kT/e) d(D^2/l_d^2)/dU = \Psi(U)$ для обратных и прямых смещений. Эти зависимости для параметров КЯ $U_0 = 0.4$ эВ, $L = 10$ – 100 А приведены на рис. 2, 3. Аналитический вид зависимости $y = \Psi(U)$ можно получить, взяв производную по напряжению от правой

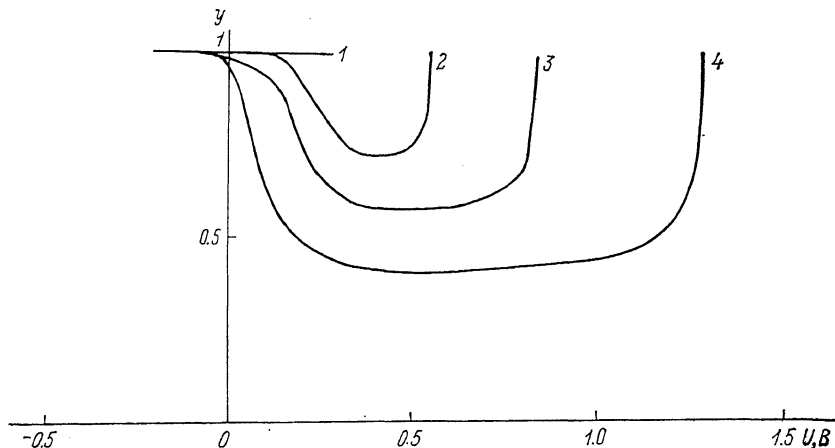


Рис. 3. Зависимость y от U для структур с КЯ при $U_0 = 0.4$ эВ и различных L .
1–4 — то же, что и на рис. 2.

и левой частей (13) и подставив в (13) производные dn_s/dU , $d\mu_w/dU$, полученные из (9), (15) с учетом (12)–(14). Окончательно получим

$$y = \left\{ 1 + \frac{\frac{D-l_2}{2D} (r_1 + r_2 + 2r_1 r_2) - \frac{F}{D} [p_1 r_1 (1+r_2) + p_2 r_2 (1+r_1)]}{\frac{N_d l_d^2}{gkTL} (1+r_1+r_2+r_1 r_2) + \frac{F}{L} [p_1 r_1 (1+r_2) + p_2 r_2 (1+r_1)]} \right\}^{-1}, \quad (16)$$

где

$$p_1 = -\Delta\mathcal{E}_1/F^2, \quad p_2 = -\Delta\mathcal{E}_2/F^2, \\ r_1 = \exp\left(\frac{\mu_w - \mathcal{E}_1 - \Delta\mathcal{E}_1}{kT}\right), \quad r_2 = \exp\left(\frac{\mu_w - \mathcal{E}_2 - \Delta\mathcal{E}_2}{kT}\right). \quad (17)$$

Проанализируем ход зависимостей $y = \Psi(U)$ и $D^2/l_d^2 = f(U)$ (16) для структуры с одним энергетическим уровнем ($r_2 = 0$, $p_2 = 0$) на различных участках. Тогда (16) примет вид

$$y = \left[1 + \frac{r_1 \frac{D-l_2}{2D} - \frac{F}{D} p_1 r_1}{\frac{N_d l_d^2}{gkTL} (1+r_1) + \frac{F}{L} p_1 r_1} \right]^{-1}. \quad (18)$$

При обратных напряжениях ($U < 0$), когда уровень Ферми полупроводника \mathcal{E}_s находится намного ниже дна КЯ ($|\mu_w| < 0$) (рис. 1), $r_1 \rightarrow 0$, $n_s \rightarrow 0$. Следовательно, $y=1$ (рис. 3), а зависимость $f(U)$ на рис. 2 имеет вид прямой, отсечка которой на оси напряжений, согласно (13), дает величину $U_s = \varphi_0 - kTL(l_1 + l_2)/2el_d^2$. При увеличении напряжения уровень Ферми в полупроводнике \mathcal{E}_s приближается к уровню размерного квантования в КЯ. При этом r_1 уже не мало. Следовательно, изменение n_s дает вклад в изменение D (13) и y (18). При увеличении U возрастает r_1 и уменьшается D , но r_1 растет быстрее. Поэтому y умень-

шается (рис. 3), зависимость $f(U)$ (рис. 2) становится более пологой. При напряжении $U \approx U_1$, когда уровень Ферми \mathcal{E}_s проходит через уровень \mathcal{E}_1 в КЯ ($\mu_w \approx \mathcal{E}_1$), если $\Delta\mathcal{E}_1 \ll \mathcal{E}_1$ (малые поля F), величина r_1 становится порядка 1. В этом случае y стремится к минимальному значению и незначительно изменяется с напряжением, так как увеличению r_1 соответствует уменьшение D , причем изменения r_1 и D также малы. Наконец, при $U \approx U_2$, $r_1 \gg 1$ и y перестает зависеть от r_1 . Тогда при увеличении U y начинает возрастать по закону

$$y \approx [1 + (D - l_2) gkTL / 2DN_d l_d^2]^{-1}. \quad (19)$$

При напряжении $U = U_1$ можно оценить ряд параметров структуры из соотношений, полученных на основе (9), (13), (15), (19), если известны величины y_1 , D_1 при $U = U_1$ в результате, например, обработки экспериментальных данных

$$\mu_{w1} \approx \mathcal{E}_1, \quad (20)$$

$$n_{s1} \approx gkT \ln 2, \quad (9a)$$

$$\varphi_0 - eU_1 \approx kT \left(\frac{D_1^2}{2l_d^2} + \frac{N_d - n_{s1}/L}{2N_d} \frac{(l_1 + l_2)L}{l_d^2} \right), \quad (13a)$$

$$\mu_{w1} = U_0 - \mu - (D_1 - l_2)^2 kT / 2l_d^2, \quad (15a)$$

$$y_1 \approx \left[1 + \frac{(D_1 - l_2) gkTL}{2D_1 N_d l_d^2} \right]^{-1}. \quad (19a)$$

В системе уравнений (20), (13a), (15a), (19a) неизвестны L , l_1 , μ_{w1} . Величины U_0 , φ_0 , l_d , N_d , μ должны быть определены независимо.

В качестве примера рассмотрим теоретические зависимости, приведенные на рис. 2 и 3 для структуры с $\varphi_0 = 0.3$ эВ, $\mu = 0.132$ эВ, $N_d = 1 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, $l_1 = 50 \text{ \AA}$, $U_0 = 0.4$ эВ и с различной шириной КЯ $L = 10, 30, 50, 100 \text{ \AA}$. В КЯ имеется один уровень размерного квантования. Оценим ряд параметров структуры с $L = 50 \text{ \AA}$ описанным методом. Из зависимостей на рис. 2 видно, что $U_s \approx 0.29 U$. Это дает значение $(2l_1 + L) \approx 7000 \text{ \AA}^2$.

Из рис. 3 получим $U_1 \approx 0.25$ В, что соответствует $\mu_{w1} \approx 0.12$ эВ и, следовательно, $\mathcal{E}_1 \approx 0.12$ эВ. При этом из рис. 3 видно, что $(D_1/l_d)|_{U=U_1} \approx 3.3$. Решая систему (13a), (15a), (19a) при $U_0 = 0.4$ эВ и найдя n_{s1} из (9a), получим значения $l_1 \approx 47 \text{ \AA}$ и $L \approx 56 \text{ \AA}$. При таких l_1 и L определяем $L(2l_1 + L) \approx 8400 \text{ \AA}^2$, что соответствует значению, полученному по отсечке U_s . Вспомним, что точные значения $\mathcal{E}_1 = 0.1$ эВ, $l_1 = 50 \text{ \AA}$ и $L = 50 \text{ \AA}$.

Таким образом, исследование зависимостей $1/C^2 = f(U)$ и $dC^{-2}/dU = \Psi(U)$ для структуры с квантовой ямой в слое Шоттки позволяет оценить ряд параметров КЯ по характерным напряжениям на этих зависимостях. Кроме того, моделирование поведения структуры с КЯ, проведенное в настоящей работе, позволяет прогнозировать характеристики гетероструктуры в конкретных полупроводниковых приборах, что необходимо для создания гетеропереходов с заданными свойствами.

В заключение отметим особенности решения поставленной задачи по сравнению с аналогичной задачей для гетероструктуры с треугольной КЯ [1, 2]. В этом случае уравнение Шредингера для модельного потенциала треугольной формы бесконечной глубины решается точно. В результате получена аналитическая зависимость значения энергии уровня размерного квантования \mathcal{E}_i от поля F на границе гетероперехода. Для дальнейшего анализа авторы [1, 2] использовали решение уравнения Пуассона в области обеднения в широкозонном полупроводнике слева от КЯ и в области обогащения в узкозонном полупроводнике справа от КЯ. Сшивая электрическую индукцию и потенциал на границе гетероперехода, получили выражения для распределения поля и потенциала в структуре и емкость структуры.

Для рассмотренной нами модели КЯ конечной глубины и ширины с «деформированным дном» под воздействием электрического поля (рис. 1) даже без учета

влияния поля решение уравнения Шредингера можно получить только численно. Кроме того, при решении уравнения Пуассона необходимо шивать индукцию и потенциал на границах двух гетеропереходов трехслойной структуры. Все это в значительной мере усложнило решение поставленной задачи.

Список литературы

- [1] *Leпадегераеиuf D., Linh N. T.* // IEEE Trans. Electron. Dev. 1982. Vol. Ed-29. N 6. P. 955—960.
- [2] *Lee K., Shur M., Drummond T. J., Morkoc N.* // J. Appl. Phys. 1983. Vol. 54. N 4. P. 2093—2102.
- [3] *Ландау П. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989. 90 с.
- [4] *Bastard L., Mendez E. E., Chang L. I., Esaki L.* // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 28. N 6. P. 3241—3245.
- [5] *Бузанева Е. В.* Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь, 1990. 317 с.

Научно-исследовательский институт
молекулярной электроники

Москва

Киевский государственный университет
им. Т. Г. Шевченко

Институт химии поверхности АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
17 сентября 1990 г.

