

01;06

## **Расчет методом Монте-Карло низкотемпературной подвижности двумерных электронов в квантовой яме селективно-легированной гетероструктуры на основе GaAs**

© В.М. Борздов, С.Г. Мулярчик, А.В. Хомич

Белорусский государственный университет, Минск

Поступило в Редакцию 30 декабря 1996 г.

Показана возможность и предоставлены результаты расчета методом Монте-Карло подвижности двумерных электронов в прямоугольной квантовой яме гетероструктуры GaAs/AlGaAs в слабом электрическом поле с напряженностью  $E = 100$  V/m при температуре 42 и 77 К и зависимости подвижности от ширины потенциальной ямы и поверхностной концентрации носителей заряда.

Особенности переноса двумерных (2D) электронов в квантовых ямах селективно-легированных гетероструктур на основе GaAs исследуются уже достаточно давно и весьма интенсивно. Ввиду того что такие гетероструктуры в настоящее время находят широкое применение в современной интегральной электронике, эти исследования имеют, помимо чисто теоретического, важное практическое значение. Известно, что для диапазона температур и электрических полей, когда заселенными оказываются несколько нижних энергетических подзон, эффективным методом исследования процессов переноса в квазидвумерных полупроводниковых структурах является метод Монте-Карло (см., например, [1–5]). Вместе с тем в случае низких температур, слабых электрических полей и вырождения 2D электронного газа при заселении электронами только одной самой нижней подзоны, когда реализуется так называемый электрический квантовый предел, расчет подвижности электронов методом Монте-Карло, насколько нам известно, применительно к GaAs-гетероструктурам с селективным легированием не проводился.

В настоящей работе показана возможность и представлены результаты расчета этим методом подвижности  $\mu$  2D электронов в прямоуголь-

ной квантовой яме гетероструктуры GaAs/спейсерный слой/AlGaAs в слабом электрическом поле с напряженностью  $E = 100$  В/м при температурах 4.2 и 77 К и зависимости величины  $\mu$  от таких параметров, как ширина потенциальной ямы  $L$  и поверхностная концентрация носителей заряда  $N_s$ . При этом считалось, что все электроны проводимости находятся в самой нижней подзоне с энергией дна, равной  $E_0$  [6].

Средняя подвижность  $\mu$  рассчитывалась в предположении линейной зависимости между средней дрейфовой скоростью электронов  $v_{др}$  и напряженностью электрического поля  $E$  [7] с учетом рассеяния на фоновых и удаленных примесных центрах, а также на шероховатостях поверхности полупроводника.

Теоретическому рассмотрению примесного рассеяния двумерных электронов в квантовых ямах прямоугольной формы было посвящено несколько работ, среди которых особо следует отметить такие, как [8–10]. В данной статье расчет интенсивностей для примесного рассеяния проводился с учетом результатов, полученных в [10].

Интенсивность рассеяния двумерных электронов на ионизированной примеси в общем виде может быть записана следующим образом:

$$W_I = \frac{m^*}{\hbar^3 \pi} \int_0^\pi \frac{z^2 e^4 B(q)}{(2\varepsilon_0 \varepsilon_s)^2 [q + SH(q)]^2} d\theta, \quad (1)$$

где  $m^*$  — эффективная масса электрона, равная  $0.067 m_0$ ;  $m_0$  — масса свободного электрона;  $e$  — его заряд;  $\hbar$  — редуцированная постоянная Планка;  $\varepsilon_0$  — диэлектрическая постоянная,  $\varepsilon_s$  — диэлектрическая проницаемость среды (для системы GaAs/AlGaAs  $\varepsilon_s = 12.9$  [1]);  $ze$  — заряд иона;  $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ ,  $k$  — модуль волнового вектора электрона,  $\theta$  — угол рассеяния;  $S$  — параметр экранирования, имеющий вид [10]

$$S = \frac{e^2 m^*}{2\varepsilon_0 \varepsilon_s \pi \hbar^2} \frac{1}{1 + \exp[(E_0 - E_f)/k_b T]}. \quad (2)$$

В (2)  $k_b$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура. В настоящей работе полагалось, что  $E_0 = 0$  и энергия Ферми равна  $E_f = \pi \hbar^2 N_s / m^*$ . Явный вид форм-фактора  $H(q)$ , а также форм-факторов для фоновой  $B_{fb}$  и удаленной  $B_{fr}$  примесей с учетом неточности, допущенной в [8], дан в [10].

Волновая функция электрона  $\psi(z)$  для направления  $z$  от границы раздела гетероперехода вглубь слоя GaAs запишется

$$\psi(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right), \quad 0 \leq z \leq L, \quad (3)$$

где  $L$  — ширина прямоугольной потенциальной ямы.

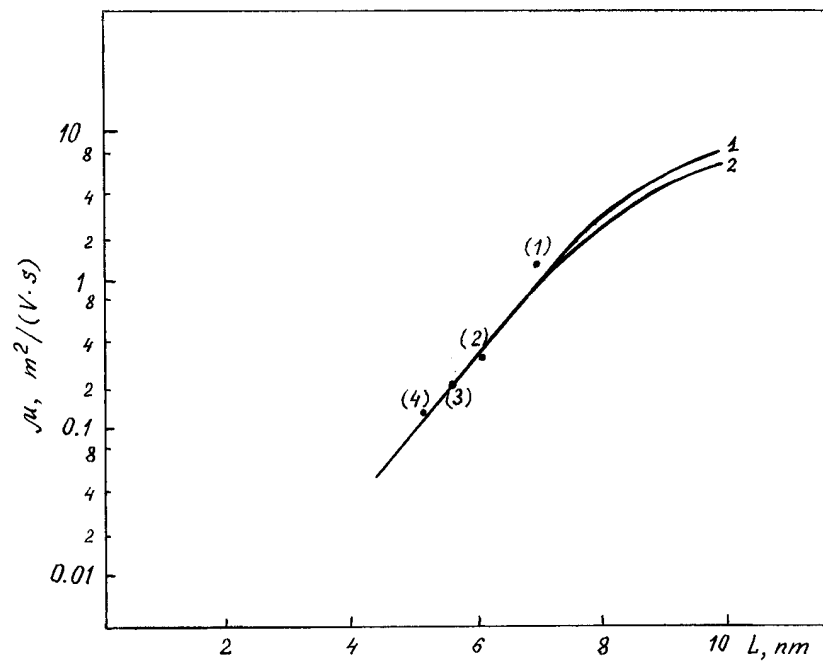
Величина интенсивности рассеяния на шероховатостях поверхности рассчитывалась по формуле [9,11]

$$W_{sr} = \frac{\pi^4 \hbar \Delta^2 \Lambda^2}{2m^* L^6} \int_0^{2\pi} \frac{\exp(-q^2 \Lambda^2 / 4)}{[1 + SH(q)/q]^2} d\theta, \quad (4)$$

где  $\Delta$  — средняя высота шероховатостей, а  $\Lambda$  — среднее расстояние между ними.

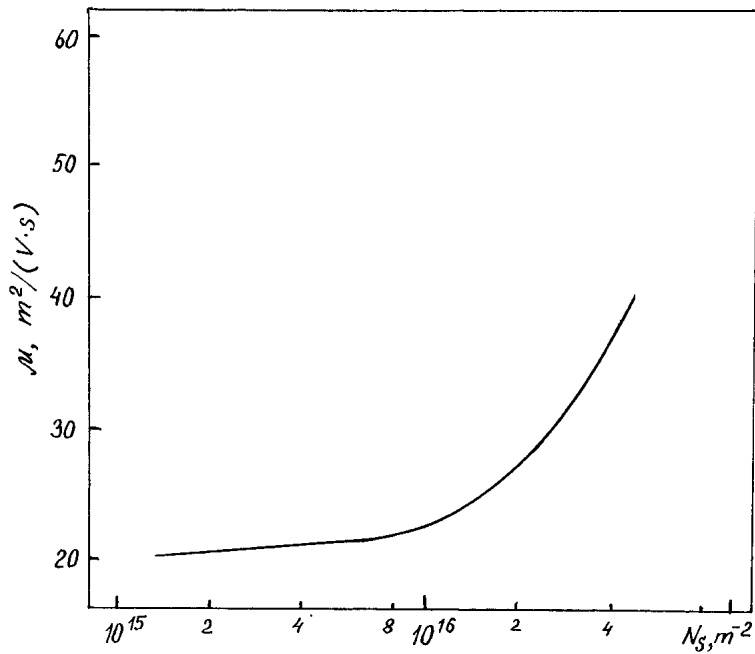
Для определения текущих значений угла рассеяния  $\theta$ , который при каждом акте рассеяния должен выбираться случайно из распределений  $P(\theta)d\theta \propto B(q)d\theta/[q + SH(q)]^2$  и  $P(\theta)d\theta \propto \exp(-q^2 \Lambda^2 / 4)d\theta/[1 + SH(q)/q]^2$ , был использован метод отбора [12]. При выборе конечных состояний учитывался тот факт, что как примесное, так и рассеяние на шероховатостях являются упругими механизмами рассеяния.

Расчет низкотемпературной подвижности 2D электронного газа проводился одночастичным методом Монте-Карло, поскольку величина интенсивностей рассеяния и характер их угловых распределений таковы, что при достаточно большом числе столкновений  $N$  ( $N > 10^5$ ) имела место устойчивая сходимость энергии электрона к определенному значению при заданной напряженности электрического поля  $E$ . Необходимость обеспечения большого объема выборки  $N$  обусловлена тем, что, как известно, с уменьшением температуры точность метода Монте-Карло падает, поскольку дрейфовая скорость электронов становится малой по сравнению с их тепловой скоростью [12]. Кроме того, так как в рассматриваемых условиях электронный газ является вырожденным, то с целью учета принципа Паули в общий алгоритм моделирования была включена процедура проверки занятости электронного состояния после каждого розыгрыша акта рассеяния, предложенная в [13] для вырожденных полупроводников.



**Рис. 1.** Зависимость подвижности  $\mu$  от ширины квантовой ямы  $L$ : 1 —  $T = 4.2$  К, 2 —  $T = 77$  К. Значения остальных использованных при расчете параметров приведены в тексте. Точки — экспериментальные данные [11].

С использованием разработанного алгоритма в данной работе были рассчитаны зависимости подвижности  $\mu$  от параметра  $L$  и  $N_s$  для квантовой ямы со структурой GaAs/AlAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. На рис. 1 приведены результаты расчета зависимости  $\mu(L)$  при температурах  $T = 4.2$  К и  $T = 77$  К и напряженности электрического поля  $E = 100$  В/м. При этом поверхностная концентрация электронов  $N_s$  была взята равной  $N_s = 3 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$ , объемные концентрации фоновой и удаленной примесей составляли соответственно  $N_{Ib} = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  и  $N_{Ir} = 10^{24} \text{ м}^{-3}$ , толщины спейсерного и легированного слоев  $l_{sp} = 6$  нм и  $l_d = 80$  нм, параметры  $\Delta = 0.4$  нм и  $\Lambda = 11$  нм. Для сравнения на этом же рисунке представлены экспериментальные данные, взятые из работы [11]



**Рис. 2.** Зависимость подвижности  $\mu$  от поверхностной концентрации электронов  $N_s$ . Значения использованных при расчете параметров приведены в тексте.

и полученные путем измерения холловской подвижности при  $T = 4.2 \text{ K}$  и тех же параметрах  $N_{Ir}$ ,  $l_{sp}$  и  $l_d$  в четырех точках с  $N_{s1} = 4.3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$  (точка 1),  $N_{s2} = 1.9 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$  (2),  $N_{s3} = 3.2 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$  (3) и  $N_{s4} = 3.1 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$  (4) для квантовой ямы с той же структурой. Как видно из рисунка, хорошее совпадение экспериментальных данных с рассчитанной кривой при выбранных параметрах  $\Delta$  и  $\Lambda$  свидетельствует об адекватности разработанной численной модели реальным процессам переноса в рассматриваемой квантовой яме. Незначительное снижение подвижности при увеличении температуры от 4.2 до 77 K связано с некоторым уменьшением экранирующего параметра  $S$  согласно формуле (2) и соответствующим увеличением общей интенсивности рассеяния 2D электронов согласно формулам (1) и (4).

Отметим, что в работе [11] экспериментальные точки 1, 2, 3 и 4 сглаживались прямыми линиями с соответствующими параметрами  $\Delta = 0.283 \text{ nm}$ ,  $\Lambda_1 = 5 \text{ nm}$  и  $\Lambda_2 = 7 \text{ nm}$  в предположении того, что основным доминирующим механизмом рассеяния в рассматриваемой яме является рассеяние на шероховатостях от одной границы раздела. Однако, как отмечают сами авторы этой работы, такое приближение справедливо лишь для достаточно узкой ямы с размером  $L < 6 \text{ nm}$ . В силу того, что в настоящей работе помимо рассеяния на шероховатостях учитывалось также и рассеяние на примесях, аппроксимирующие линии 1 и 2 на рис. 1 заметно отличаются от прямых для значений  $L > 6 \text{ nm}$ , а подгоночный параметр  $\Lambda$  оказывается большим тех, которые были использованы в [11].

На рис. 2 в качестве второго примера приведены зависимости  $\mu(N_s)$ , рассчитанные для ямы GaAs/нелегированный AlGaAs/AlGaAs при температуре  $T = 4.2 \text{ K}$ ,  $E = 100 \text{ V/m}$  и параметрах  $L = 10 \text{ nm}$ ,  $N_{Ib} = 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ,  $N_{Ir} = 2 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ ,  $l_{sp} = 10 \text{ nm}$ ,  $l_d = 50 \text{ nm}$ ,  $\Delta = 0.3 \text{ nm}$  и  $\Lambda = 6 \text{ nm}$ . Монотонное увеличение подвижности с ростом  $N_s$  можно объяснить соответствующим увеличением энергии Ферми  $E_f$ , а следовательно, и параметра экранирования  $S$ , что, в конечном счете, приводит к снижению интенсивности рассеяния электронов и росту их подвижности.

Таким образом, в данной работе была продемонстрирована возможность эффективного использования метода Монте-Карло для расчета подвижности вырожденного 2D электронного газа, находящегося при низкой температуре в квантовой яме гетероструктуры с селективным легированием на основе GaAs в условиях электрического квантового предела. Основное преимущество данного подхода состоит в возможности включения в общий алгоритм моделирования любого числа значимых процессов рассеяния и, независимо от сложности их модельного описания, получения численных оценок подвижности и других кинетических параметров, характеризующих перенос 2D электронов в этих условиях.

## Список литературы

- [1] Yokoyama K., Hess K. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 8. P. 5595–5606.
- [2] MAR Al-Mudares, Ridley B.K. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1986. V. 19. N 17. P. 3179–3192.

- [3] Вагидов Н.З., Иващенко В.М. // Укр. физ. журн. 1992. Т. 37. № 5. С. 781–787.
- [4] Fischetti M.V., Laux S.E. // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. N 4. P. 2244–2274.
- [5] Борздов В.М., Врубель М.М., Жевняк О.Г., Комаров Ф.Ф. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 7. С. 69–73.
- [6] Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия. М.: Мир, 1991. 632 с.
- [7] Basu P.K. // Appl. Phys. 1977. V. 48. N 1. P. 350–353.
- [8] Lee J., Spector H.N., Arora V.K. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N 12. P. 6995–7004.
- [9] Gold A. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 2. P. 723–733.
- [10] Thobel J.L., Baudry L., Dessenne F., Charef M., Fauquembergue R. // J. Appl. Phys. 1993. V. 73. N 1. P. 233–238.
- [11] Sakaki H., Noda T., Hirakawa M., Tanaka M., Matsusue T. // Appl. phys. Lett. 1987. V. 51. N 23. P. 1934–1936.
- [12] Jacoboni C., Reggiani L. // Rev. Mod. Phys. 1983. V. 55. P. 645–705.
- [13] Bosi S., Jacoboni C. // J. Phys. C.: Solid State Phys. 1976. V. 9. N 2. P. 315–319.