

# Моделирование вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовыми ямами с помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона

© В.И. Зубков<sup>¶</sup>

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,  
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 15 февраля 2006 г. Принята к печати 6 марта 2006 г.)

Работа посвящена развитию методов расчета вольт-фарадных характеристик и определения профиля концентрации свободных носителей заряда в полупроводниковых легированных гетероструктурах, содержащих квантовую яму. Расчет вольт-фарадной характеристики гетероструктуры с квантовой ямой осуществляется с помощью численного самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера в рамках единого квантовомеханического подхода. Предложенный метод применен для моделирования и анализа экспериментальных вольт-фарадных характеристик гетероструктур с напряженными квантовыми ямами InGaAs/GaAs.

PACS: 73.21.Fg, 73.40.Cg

## 1. Введение

С широким внедрением в материаловедение численных расчетов моделирование вольт-фарадных характеристик полупроводниковых гетероструктур стало весьма эффективным инструментом для определения ключевых параметров гетероструктур — величины разрыва энергетических зон, геометрического положения гетероперехода, распределения свободных носителей заряда, уровней размерного квантования в ямах и т. д.

Традиционный подход к расчету вольт-фарадных характеристик гетероструктур ведет начало от известной работы Кремера и др. [1], в которой моделировался резкий изотипный  $n-n$ -гетеропереход. Величина разрыва зоны проводимости  $\Delta E_C$  на гетерогранице определялась из электростатического дипольного момента, связанного с небалансом заряда, определяемым расхождением между предположительно известным распределением концентрации легирующей примеси  $N(x)$  и найденным из экспериментальной вольт-фарадной зависимости „кажущимся“ профилем распределения основных носителей заряда  $n^*(x)$ , с использованием соотношения

$$\Delta E_C = \left( \frac{e^2}{\varepsilon} \right) \int_0^{\infty} [N(x) - n^*(x)](x - x_j) dx - kT \ln \left( \frac{n_2 N_{C1}}{n_1 N_{C2}} \right). \quad (1)$$

Здесь  $N(x)$  — распределение ионизованных доноров (считается известным),  $n_{1,2}$  — асимптотические величины легирования слева и справа вдали от гетероперехода,  $N_{C1}, N_{C2}$  — эффективная плотность состояний в соответствующей зоне проводимости,  $e$  — заряд электрона,  $T$  — температура,  $k$  — постоянная Больцмана,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость,  $x_j$  — положение гетероперехода. При расчете предполагалось однородное легирование по обеим сторонам с резким скачком легирования при  $x = x_j$ .

В работе [2] модифицированный анализ Кремера был применен для определения разрывов зон в одиночной квантовой яме (КЯ). Процедура определения  $\Delta E_C$  состояла из трех шагов: на первом шаге находилась высота потенциального барьера на гетеропереходе, на втором — средняя плотность электронов в яме, на третьем находилась величина  $\Delta E_C$  из стандартного трансцендентного уравнения для квантовомеханической задачи с прямоугольной ямой (формула (4) в [2]).

Такая процедура приводит к существенной погрешности в определении разрыва зон, поскольку в легированной гетероструктуре с концентрацией носителей заряда  $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$  и выше происходит сильная модификация электростатического потенциала вблизи квантовой ямы по сравнению с прямоугольным приближением, что, в свою очередь, вызывает сильное смещение энергетических уровней квантования и значительное перераспределение концентрации подвижных носителей заряда.

Выйти за приближение прямоугольной квантовой ямы при расчете вольт-фарадной характеристики легированной гетероструктуры с КЯ возможно с помощью самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера. При этом в результате процедуры самосогласования возможно определить как реальный вид потенциала, так и точный профиль концентрации подвижных носителей заряда в области квантовой ямы. Этот подход был применен в [3,4]. В этих работах отдельно рассматривались связанные в квантовой яме состояния и свободный трехмерный электронный газ над ямой с последующим суммированием полной концентрации электронов. Это справедливо для прямоугольного вида потенциальной энергии. Однако в легированной полупроводниковой наноструктуре имеет место значительный изгиб энергетических зон вблизи гетеропереходов из-за наличия сильного кулоновского отталкивания. Этот изгиб формирует дополнительные энергетические барьеры. Поэтому между связанными и свободными состояниями возника-

<sup>¶</sup> E-mail: VIZubkov@mail.eltech.ru

ет промежуточный класс квазирезонансных состояний, и простое суммирование двумерных (2D) и трехмерных (3D) электронов приводит к затруднениям в сшивке решений [3] и систематической погрешности в расчетах.

Настоящая работа посвящена развитию методов расчета вольт-фарадных характеристик и определения профиля концентрации свободных носителей заряда в полупроводниковых легированных гетероструктурах, содержащих квантовую яму. Расчет вольт-фарадной характеристики гетероструктуры с КЯ осуществляется с помощью численного самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера в рамках единого квантовомеханического подхода. Предложенный метод применен для моделирования экспериментальных вольт-фарадных характеристик гетероструктур с напряженными квантовыми ямами InGaAs/GaAs.

## 2. Концепция самосогласованного расчета

Расчет вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовой ямой базируется на численном самосогласованном решении одномерного уравнения Пуассона

$$\epsilon_0 \frac{d}{dx} \left[ \epsilon(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} \right] = e [N_D^+(x) - n(x)] \quad (2)$$

и одномерного уравнения Шредингера в приближении эффективной массы в форме БенДаниэла–Дюка [5]

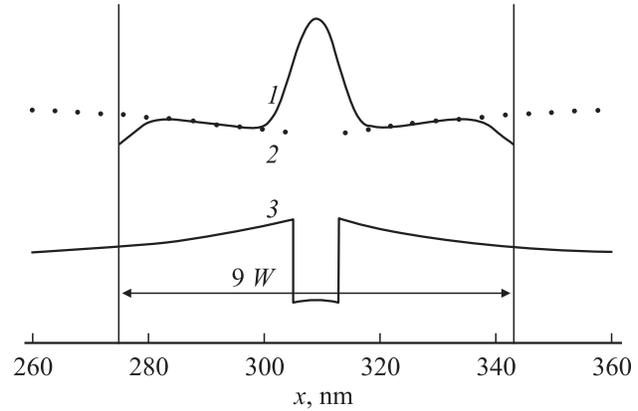
$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \psi_i(x) \right] + V(x)\psi_i(x) = E_i\psi_i(x). \quad (3)$$

В уравнениях (2), (3)  $N_D^+$  — концентрация ионизованных доноров,  $m^*(x)$  — зависящая от координаты эффективная масса электрона,  $E_i$  — энергия  $i$ -го уровня квантования,  $\psi_i(x)$  — волновая функция электрона на соответствующем уровне,  $V(x)$  — профиль потенциальной энергии, учитывающий величину разрыва зоны проводимости на гетеропереходе.

Численное решение представляет собой итерационную процедуру „поле–частицы“, на каждом этапе которой производится последовательное решение данных дифференциальных уравнений для нахождения уточненного распределения электростатического потенциала и профиля основных носителей заряда [6]. Критерием получения точного решения является достижение максимальной величины поправки к потенциалу на очередной итерации, не превышающей заданной малой величины ( $\sim 10^{-8}$  В).

## 3. Расчет концентрации носителей заряда

Для корректного расчета распределения связанных и свободных носителей заряда в реальном потенциале легированной полупроводниковой гетероструктуры с



**Рис. 1.** Модель квантового ящика для самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона: 1 — концентрация носителей заряда, рассчитанная из уравнения Шредингера; 2 — концентрация носителей заряда, рассчитанная в квазиклассическом приближении; 3 — профиль дна зоны проводимости в области квантовой ямы.  $9W$  — ширина квантового ящика ( $W$  — ширина ямы).

квантовой ямой нами предлагается использовать модель „квантового ящика“ с идеально твердыми стенками, на которых волновая функция обращается в нуль [7] (рис. 1). В рамках данной модели концентрация носителей заряда рассчитывается следующим образом: в центральной части ящика, содержащей квантовую яму, где эффективно проявляется размерное квантование, используется непосредственный численный расчет уравнения Шредингера (3), а в приграничных областях ящика и вне его используется квазиклассический подход с расчетом концентрации свободных носителей заряда из интеграла Ферми с учетом изгиба зон как

$$n(x) = N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left( -\frac{E_C - E_F - e\varphi(x)}{kT} \right), \quad (4)$$

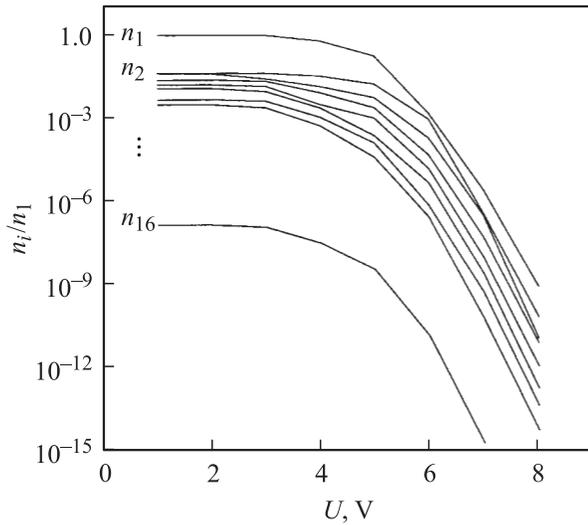
где  $N_C$  — эффективная плотность состояний в зоне проводимости,  $E_F$  — энергия уровня Ферми. Размеры квантового ящика выбирались обычно в 9 раз больше ширины КЯ, при этом сама КЯ помещалась в центр квантового ящика.

Для численного решения стационарного уравнения Шредингера (3) был выбран метод „стрельбы“ (shooting method). Он существенно экономит время вычислений, поскольку позволяет выбирать отдельные собственные значения, легко работает на неравномерной сетке и прост в реализации. На границах расчетной области (на краях ящика) волновой функции задавались граничные условия по Дирихле

$$\psi_0 = 0, \quad \psi_N = 0.$$

По окончании расчета полученные волновые функции нормировались.

Решение одномерного уравнения Шредингера (3) дает дискретные уровни энергии  $E_i$  в перпендикулярном



**Рис. 2.** Концентрация электронов в первой подзоне ( $n_1$ ) и нижних 15 подзонах размерного квантования ( $n_i$ ) в относительных единицах в зависимости от обратного смещения  $U$ .  $T = 300$  К.

плоскости слоев направлении. Для расчета концентрации носителей заряда в области ямы необходимо принять во внимание, что в двух других направлениях в плоскости ямы электроны движутся как свободные, формируя подзоны размерного квантования [8]. Концентрация подвижных носителей заряда находится интегрированием по состояниям подзоны с учетом распределения Ферми–Дирака. Таким образом, согласно [4,8], локальная концентрация основных носителей заряда (электронов) в области ямы пропорциональна квадрату волновой функции и находится из выражения

$$n(x) = \frac{m^*kT}{\pi\hbar^2} \sum_i \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{kT} \right) \right] |\psi_i(x)|^2, \quad (5)$$

причем суммирование проводится по всем подзонам размерного квантования. Согласно [7], если размеры ящика велики по сравнению с характерными для данной задачи размерами (шириной КЯ), то собственные значения, которые в отсутствие ящика были дискретными, практически не изменяются, так как до введения стенок волновые функции в этих местах были чрезвычайно малы. Что же касается собственных значений, которые при отсутствии ящика были распределены непрерывно, они становятся дискретными, очень близко расположенными друг к другу, и их волновые функции можно нормировать в области конечного объема. С увеличением номера уровня  $i$  концентрация электронов в соответствующей подзоне резко падает. Для уверенной сходимости решения всего в расчете достаточно было учитывать 16 нижних уровней квантового ящика (рис. 2). Как видно, концентрация носителей во второй подзоне на полтора порядка меньше концентрации в первой подзоне, а ее относительная величина в 16-й подзоне составляет всего  $10^{-7}$ .

Сопоставление точности метода „стрельбы“ с известным аналитическим решением уравнения Шредингера для прямоугольной квантовой ямы [9] показало, что при величине шага координатной сетки, равной  $1 \text{ \AA}$ , значение положения уровня квантования определяется с погрешностью, не превышающей  $1 \text{ мэВ}$ .

#### 4. Расчет распределения электростатического потенциала

Поскольку в уравнении Пуассона (2) концентрация свободных носителей заряда  $n(x)$  является функцией от  $\varphi(x)$ , его необходимо предварительно линеаризовать, т.е. представить электростатический потенциал  $\varphi(x)$  в виде начального приближения и поправки:  $\varphi(x) = \varphi_0(x) + \Delta\varphi(x)$ . Первое начальное приближение берется в виде потенциала обедненного слоя Шоттки (с приложенным обратным смещением  $U$ )

$$\varphi_0(x) = U \left( 1 - \frac{x}{w} \right)^2 \quad (6)$$

во всей расчетной области. Здесь  $w = \sqrt{2\varepsilon\varepsilon_0(U - U_{bi})/qN_D^+}$  — ширина области объемного заряда в приближении резкой границы [10], а  $U_{bi}$  — встроенный потенциал на барьере Шоттки ( $\sim 0.7 \text{ В}$  для GaAs).

Решение уравнения Пуассона проводилось численно методом Ньютона относительно поправки  $\Delta\varphi(x)$ . При решении уравнения учитывались концентрации свободных электронов и ионизованных доноров. На концах расчетной области были заданы граничные условия

$$\varphi(0) = U + U_{bi}, \quad \varphi(L) = 0. \quad (7)$$

На обоих гетеропереходах выполнялось условие сшивки электростатического потенциала

$$\varepsilon_b \frac{d\varphi_b}{dx} = \varepsilon_w \frac{d\varphi_w}{dx}, \quad (8)$$

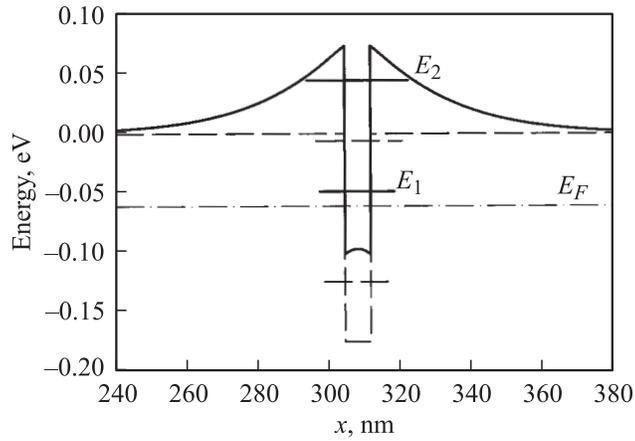
где индексы  $b$  и  $w$  относятся к барьеру и яме.

В результате дискретизации уравнения Пуассона была получена система линейных уравнений с трехдиагональной матрицей, которая решалась методом одномерной прогонки относительно поправки к потенциалу.

Уровень Ферми в структуре с квантовой ямой фактически определяется свойствами широкозонного материала (барьера), и квантовая яма на его положение не оказывает существенного влияния. В широкозонном материале  $n$ -типа проводимости положение уровня Ферми определялось из уравнения электронейтральности

$$N_d^+ = n. \quad (9)$$

В уравнении (9) не учитываются дырки, так как при выбранной температуре ( $T = 300 \text{ К}$ ) их вклад в электропроводность ничтожен. Концентрация электронов рассчитывалась из интеграла Ферми (4).



**Рис. 3.** Дно зоны проводимости и уровни квантования в изотипной  $n-n$ -гетероструктуре  $\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{As}/\text{GaAs}$  с квантовой ямой шириной 7.5 нм: штриховая линия — расчет для прямоугольной КЯ, сплошная — расчет для КЯ с самосогласованным потенциалом. Штрихпунктирная линия — положение уровня Ферми  $E_F$ .

Как видно из рис. 1, вне квантовой ямы наблюдаются протяженные области, в пределах которых имеется совпадение величин концентрации свободных носителей, полученных на основе квазиклассического и квантово-механического расчетов (кривые 1 и 2), что свидетельствует о согласии этих моделей. Очевидно, в этих областях связанные в квантовой яме состояния играют уже незначительную роль и достаточно пользоваться выражением (4).

В результате самосогласованного решения получается видоизмененный одночастичный потенциал с учетом кулоновского потенциала электронов в яме и профиль концентрации электронов в гетероструктуре. В качестве примера на рис. 3 приведены распределение потенциала и уровни размерного квантования для исходной прямоугольной КЯ и квантовой ямы с самосогласованным потенциалом (расчет проводился для изотипной  $n-n$ -гетероструктуры с КЯ  $\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{As}/\text{GaAs}$  шириной 7.5 нм).

Видно, что учет поправки Хартри путем самосогласования приводит к существенному изменению потенциала легированной гетероструктуры с КЯ по сравнению с прямоугольным. Из-за изменения вида потенциала вследствие кулоновского отталкивания происходит сильный сдвиг энергетических уровней квантования вверх. Самый нижний связанный уровень поднимается примерно на 75 мэВ относительно нулевого приближения (124 мэВ). Второй уровень квантования, будучи в прямоугольном потенциале связанным, в результате оказывается квазирезонансным, находясь под барьером, но выше дна зоны проводимости объемного материала (GaAs).

Приложение внешнего обратного смещения к барьеру Шоттки существенно меняет распределение электроста-

тического потенциала в структуре. При смыкании областей пространственного заряда под барьером Шоттки и вблизи гетероперехода уровни размерного квантования начинают постепенно выталкиваться в область квазирезонансов. При больших обратных смещениях ( $|U| > 4$  В) все уровни оказываются в области континуума.

## 5. Построение вольт-фарядной характеристики

Для расчета вольт-фарядной характеристики применен квазистатический подход [11]. Значение емкости определялось как отношение приращения заряда к приращению напряжения:

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta U}. \quad (10)$$

Количество заряда в замкнутой системе, согласно теореме Гаусса, связано с напряженностью электрического поля на поверхности (на барьере Шоттки)  $F_s$  соотношением

$$\varepsilon \varepsilon_0 \oint F_s dS = Q. \quad (11)$$

Напряженность электрического поля в области электронейтральности (на противоположной границе расчета) равняется нулю.

Тогда для одномерной системы выражение (11) преобразуется к виду

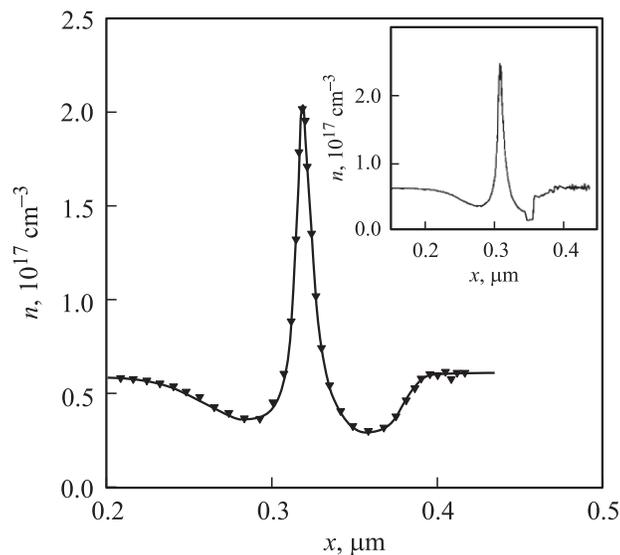
$$Q = S \varepsilon \varepsilon_0 F_s. \quad (12)$$

Таким образом, задачу расчета вольт-фарядной характеристики можно свести к определению величины напряженности электрического поля на поверхности полупроводниковой структуры в зависимости от внешнего приложенного напряжения.

На основе предложенной модели разработана программа расчета вольт-фарядных характеристик легированных полупроводниковых гетероструктур с одиночной квантовой ямой. Интерфейс пользователя создан на базе графического объектно-ориентированного языка программирования LabVIEW. Вычислительное ядро программы реализовано на языке C и включено в LabVIEW в качестве динамической библиотеки.

Далее, из смоделированных вольт-фарядных характеристик рассчитывается „наблюдаемый“ профиль концентрации носителей заряда с использованием стандартной процедуры дифференцирования [10],

$$n(x) = 2 \left[ \varepsilon \varepsilon_0 e \frac{d}{dU} \left( \frac{1}{C^2} \right) \right]^{-1}. \quad (13)$$



**Рис. 4.** „Наблюдаемый“ профиль концентрации носителей заряда в изотипной  $n-n$ -гетероструктуре  $\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{As}/\text{GaAs}$  с квантовой ямой шириной 7.5 нм: точки — результат обработки эксперимента, сплошная линия — модельный расчет. На вставке — расчет с помощью программы Снейдера [3].

## 6. Результаты расчетов и подгонки

С помощью экспериментального вольт-фарадного профилирования концентрации основных носителей заряда и последующей подгонки расчета к эксперименту анализировались гетероструктуры с КЯ  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  с  $x = 0-0.3$  и различной шириной квантовой ямы [12]. Результат моделирования профиля концентрации одной из исследованных структур представлен на рис. 4. В результате численной подгонки на базе предложенной процедуры самосогласования удается достичь практически идеального соответствия между экспериментальными и теоретически рассчитанными профилями концентрации носителей заряда. При этом в качестве подгоночного параметра использовалась только величина разрыва зоны проводимости на гетерогранице, которая и являлась искомой величиной. Для сравнения приведен результат подгонки с помощью известной программы Снейдера для расчета вольт-фарадных характеристик квантовых ям [3]. Этот подход, использующий суммирование 2D и 3D электронов, приводит к принципиальной погрешности в расчетах, поскольку не учитывает наличие квазирезонансных состояний.

## 7. Заключение

В работе представлен оригинальный метод расчета вольт-фарадных характеристик полупроводниковых гетероструктур с одиночной квантовой ямой путем численного самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Совместное решение уравнений производится для квантового ящика, что позволяет

корректно учитывать связанные, квазирезонансные и свободные носители заряда в области квантовой ямы. При подгонке расчетных вольт-фарадных характеристик к экспериментальным кривым в качестве подгоночного параметра выступает величина разрыва зоны проводимости на гетерогранице.

## Список литературы

- [1] H. Kroemer, Wu-Yi Chien, J.S. Harris, jr., D.D. Edwall. *Appl. Phys. Lett.*, **36**, 295 (1980).
- [2] S. Subramanian, B.M. Arora, A.K. Srivastava, G. Fernandes, S. Banerjee. *J. Appl. Phys.*, **74**, 7618 (1993).
- [3] I.-H. Tan, G.L. Snider, L.D. Chang, E.L. Hu. *J. Appl. Phys.*, **68**, 4071 (1990).
- [4] P.N. Brounkov, T. Benyattou, G. Guillot. *J. Appl. Phys.*, **80**, 864 (1996).
- [5] D.J. BenDaniel, C.B. Duke. *Phys. Rev.*, **152**, 683 (1966).
- [6] F. Stern, S. Das Sarma. *Phys. Rev. B*, **30**, 840 (1984).
- [7] Л. Шифф. *Квантовая механика* (М., Изд-во иностр. лит., 1959).
- [8] А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков. *Физика низкоразмерных систем* (СПб., Наука, 2001).
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1989).
- [10] P. Blood, J.W. Orton. *The electrical characterization of semiconductors: majority carriers and electron states* (Academic Press, London, 1992) ch. 6.
- [11] W.C. Johnson, P.T. Panousis. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-18**, 965 (1971).
- [12] V.I. Zubkov, M.A. Melnik, A.V. Solomonov, E.O. Tsvelev, F. Bugge, M. Weyers, G. Tränkle. *Phys. Rev. B*, **70** (7), 075 312 (2004).

Редактор Л.В. Шаронова

## Modeling capacitance–voltage characteristics of heterostructures with quantum wells using self-consistent solution of Schrödinger and Poisson equations

V.I. Zubkov

St. Petersburg State Electrotechnical University „LETI“,  
197376 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Method for simulation capacitance–voltage characteristics of heterostructures with quantum wells based on a complete quantum-mechanical approach is proposed. The principal fitting parameter during self-consistent numerical solution of Schrödinger and Poisson equations is the value of band offset on the heterojunction. The suggested method is applied for modeling and fitting experimental capacitance–voltage characteristics of quantum well heterostructures  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ .