

УДК 621.382

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХБАРЬЕРНОЙ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ GaAs/AlAs С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМБИНИРОВАННОЙ ДВУХЗОННОЙ МОДЕЛИ

И.И. АБРАМОВ, И.А. ГОНЧАРЕНКО, Н.В. КОЛОМЕЙЦЕВА

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь**Поступила в редакцию 23 марта 2004*

В данной работе проведено исследование влияния Г-Х рассеяния и температуры на вольт-амперные характеристики (ВАХ) двухбарьерной резонансно-туннельной структуры (РТС) на основе GaAs/AlAs с протяженными областями с использованием разработанной комбинированной двухзонной модели. Предложенная модель основана на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона и включена в систему моделирования нанозлектронных приборов NANODEV. С использованием двухзонной модели показано, что учет Г-Х рассеяния существенно влияет на электрические характеристики прибора.

Ключевые слова: резонансно-туннельная структура, двухзонная модель, пиковый ток.

Введение

Одним из наиболее перспективных направлений нанозлектроники является разработка приборов и элементов ИС на основе гетероструктур. Физика и моделирование их чрезвычайно сложны. В частности, физические процессы на гетерограницах этих структур недостаточно изучены. Как показано в ряде работ, например [1, 2], в гетероструктурах имеет место междолинное Г-Х рассеяние, которое может оказывать существенное влияние на транспорт носителей заряда. Кроме того, отметим, что в реальных структурах помимо активных областей присутствуют достаточно протяженные (макроскопические или классические) области. Поэтому при моделировании реальных РТС необходимо учитывать и взаимодействие между всеми областями прибора.

Целью данной работы является исследование влияния Г-Х рассеяния и температуры на ВАХ двухбарьерной РТС с протяженными областями на основе GaAs/AlAs с использованием предложенной модели.

Модель

Анализ двухбарьерной РТС на GaAs/AlAs проводился с использованием комбинированной двухзонной модели, базирующейся на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. Модель разработана на основе однозонной комбинированной модели [3] и двухзонной модели [1]. Ее главная особенность — возможность учета взаимодействия различных классических и квантовомеханических областей исследуемого прибора при одновременном учете междолинного Г-Х рассеяния.

Рассмотрим сущность предложенной модели. Важно отметить, что в модели структура представлена в виде трех областей: контакты, приконтактные области и активная область. К активной области относятся потенциальные барьеры и расположенная между ними квантовая яма.

Влияние контактов учитывалось с помощью контактной разности потенциалов [4]. В приконтактных областях вместо обычно используемого приближения Томаса–Ферми для подвижных носителей заряда [1, 5] применяется более простая больцмановская аппроксимация статистики Ферми–Дирака, в которой учтено влияние эффектов сильного легирования [4], а именно:

$$n = n_{ie} \exp\left(\frac{(\Phi - F_n)q}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где n_{ie} — эффективная собственная концентрация, Φ — электростатический потенциал, F_n — квазипотенциал Ферми электронов, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, q — величина заряда электрона.

Предложенная численная модель реализуется в виде двух этапов. На первом этапе самосогласованно решаются уравнения Шредингера в активной области прибора для основной зоны и уравнение Пуассона в более протяженной области прибора между контактами следующего вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) + V \psi = E \psi, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_s \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = -q(N_D - n), \quad (3)$$

где \hbar — приведенная постоянная Планка, m^* — эффективная масса электрона, ψ — волновая функция, E — энергия электрона, V — потенциальная энергия электрона, ε_s — относительная диэлектрическая проницаемость среды, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, N_D — концентрация ионизированных доноров.

В активной области концентрация электронов n вычисляется с использованием волновых функций $\psi(E_k)$ и концентрации электронов для каждого из состояний k по известной формуле [5], которая в нашем случае принимает вид

$$n = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_k |\psi(E_k)|^2 \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_k + \Delta E_C - q(\Phi - F_n)}{k_B T} \right) \right), \quad (4)$$

где ΔE_C — разрыв основной зоны проводимости барьера относительно квантовой ямы.

Начальное приближение для потенциала Φ задается исходя из предположений: электронейтральности и справедливости для подвижных носителей заряда больцмановской аппроксимации (1) для всего прибора; постоянства квазипотенциала Ферми в приконтактных областях и его линейного изменения в активной области. Последнее предположение применяется и далее в процессе самосогласованного расчета.

Для вычисления заряда в активной области решается уравнение Шредингера (2) в виде задачи переноса [3]. В ряде же известных моделей самосогласованный потенциал рассчитывается для задачи с фиксированными значениями волновых функций на границах активной области, что приводит к определенным погрешностям [5].

После решения уравнения Шредингера проводится нормировка волновых функций. Затем решается линеаризованное уравнение Пуассона относительно поправки $\delta\Phi$ для всего при-

бора (приконтактные и активная области). Итерационный процесс продолжается до полной сходимости. Таким образом, уравнение Шредингера для основной зоны и уравнение Пуассона совместно решаются с помощью системного метода последовательной концепции [3, 4]. Отметим, что при этом учитывается нелинейная зависимость заряда от электростатического потенциала как в классических (приконтактных), так и в квантовомеханических областях с помощью производной $\partial n(\Phi)/\partial\Phi$. Определение последней осуществляется на основе формул (1) и (4) соответственно. Эти действия позволяют повысить надежность и улучшить сходимость итераций.

Для того чтобы учесть влияние междолинного Г-Х рассеяния, в модели на втором этапе решаются два связанных уравнения Шредингера [5], которые в нашем случае принимают вид

$$\begin{bmatrix} V^{\bar{A}} - q\Phi(x) - E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^{\bar{A}}} & \alpha\delta(x) \\ \alpha\delta(x) & V^X - q\Phi(x) - E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^X} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^{\bar{A}} \\ \Psi^X \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^{\bar{A}}} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^X} \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^{\bar{A}} \\ \Psi^X \end{bmatrix} = 0, \quad (5)$$

где $m^{\bar{A}}$ и $m^{\hat{O}}$ — эффективные массы для Г- и Х-зон в соответствующем слое материала, $\Psi^{\bar{A}}$ и $\Psi^{\hat{O}}$ — волновые функции Г- и Х-зон, k_{\parallel} — поперечный волновой вектор, $V^{\bar{A}}$ — высота барьера в Г-зоне, V^X — высота барьера в Х-зоне, α — константа взаимодействия между зонами, δ — функция Дирака, $\Phi(x)$ — электростатический потенциал, вычисленный на первом этапе.

Конечно-разностная аппроксимация для уравнений Шредингера и Пуассона осуществлялась с использованием интегро-интерполяционного подхода Тихонова–Самарского [3, 4].

В результате конечно-разностной аппроксимации два связанных уравнения Шредингера (5) сводятся к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$A\Psi = f, \quad (6)$$

где A — пятидиагональная матрица (несимметричная), Ψ — вектор-столбец, включающий значения волновой функции ψ в узлах сетки пространственной дискретизации для двух зон, f — вектор-столбец правых частей. СЛАУ (6) решается с помощью прямого численного метода, учитывающего вид матрицы коэффициентов.

Конечно-разностная аппроксимация для уравнения Пуассона проводилась с учетом поверхностного заряда на границе раздела двух сред [3]. Узлы сетки пространственной дискретизации приходятся на границы раздела двух сред, так же как и для уравнений Шредингера.

На основе полученных волновых функций рассчитывается коэффициент прозрачности и затем определяется плотность тока [3].

Разработанная комбинированная модель характеризуется повышенной эффективностью вследствие того, что решение двух связанных уравнений Шредингера осуществляется только один раз, что уменьшает время расчета на ЭВМ. Программа, реализующая предложенную модель, была включена в систему моделирования наноэлектронных приборов NANODEV [6], предназначенную для персональных ЭВМ.

Результаты моделирования

В работе была исследована двухбарьерная РТС с протяженными областями, изготовленная на основе GaAs/AlAs. Барьеры AlAs с ширинами 20 Å с расположенной между ними квантовой ямой GaAs шириной 40 Å находятся между спейсерными слоями GaAs с ширинами 100 Å, к которым прилегают протяженные приконтактные области с ширинами 500 Å, т.е. структура симметрична. Приконтактные области (эмиттер и коллектор) легированы донорной примесью 10^{18}см^{-3} , а спейсеры — 10^{14}см^{-3} . Поверхностные состояния на границе раздела двух сред в данных исследованиях не учитывались.

При вычислениях использовались следующие значения параметров [1]: высоты барьеров для Г-зон (основная) и X-зон в GaAs и AlAs $V_{\text{GaAs}}^{\text{Г}} = 0$ эВ, $V_{\text{AlAs}}^{\text{Г}} = 1,0$ эВ, $V_{\text{GaAs}}^{\text{X}} = 0,48$ эВ, $V_{\text{AlAs}}^{\text{X}} = 0,15$ эВ; эффективные массы для Г- и X-зон в GaAs и AlAs $m_{\text{GaAs}}^{\text{Г}} = 0,067 m_0$, $m_{\text{AlAs}}^{\text{Г}} = 0,15 m_0$, $m_{\text{GaAs}}^{\text{X}} = 1,30 m_0$, $m_{\text{AlAs}}^{\text{X}} = 1,10 m_0$, где m_0 — масса покоя электрона; относительные диэлектрические проницаемости областей для GaAs и AlAs $\epsilon_s = 12,91$ и $\epsilon_s = 10,06$; константа взаимодействия $\alpha = 0,175$ эВ·Å, поперечный волновой вектор $k_{\parallel} = 0$ м⁻¹.

Согласно известным экспериментальным данным [7, 8], в структурах на данных материалах проявляется эффект междолинного Г-X рассеяния. Учитывать его позволяет предложенная двухзонная численная модель. Несмотря на то что однозонная модель является более эффективной, чем двухзонная, проведенные результаты показали необходимость учета междолинного Г-X рассеяния. На рис. 1 приведены результаты расчета ВАХ прибора, полученные с помощью однозонной (кривая 1) и двухзонной (кривая 2) моделей при температуре 200 К. Из рисунка следует, что при учете влияния междолинного Г-X рассеяния пиковый ток значительно уменьшается с $1,61 \cdot 10^6$ А/м² (кривая 1) до $3,48 \cdot 10^3$ А/м² (кривая 2). Это объясняется тем, что междолинное Г-X рассеяние приводит к снижению вероятности туннелирования электронов через резонансные уровни. Таким образом, сравнение результатов моделирования по однозонной (кривая 1) и двухзонной (кривая 2) моделям доказывают необходимость учета Г-X рассеяния, по крайней мере, при расчете пиковых токов в РТС с протяженными областями.

В связи с изложенным далее проводились исследования только с помощью двухзонной модели. На рис. 2 приведены результаты расчетов ВАХ РТС для различных температур: 1 — $T=77$ К, 2 — $T=200$ К, 3 — $T=250$ К, 4 — $T=300$ К. Как видно из рисунка, с ростом температуры наблюдается снижение пикового тока и увеличение тока долины на ВАХ РТС, что подтверждается известными экспериментальными данными, например [10]. Появление же незначительных дополнительных пиков в области низких напряжений можно объяснить влиянием эффекта Г-X рассеяния, что согласуется с теоретическими результатами для двухбарьерной структуры, полученными, однако, с использованием трехзонной модели [9]. В то же время исследования влияния температуры, представленные в работе [9], позволили установить, что с ростом температуры наблюдается увеличение пикового тока, что противоречит экспериментальным данным [10] и более поздним результатам этих же авторов [2].

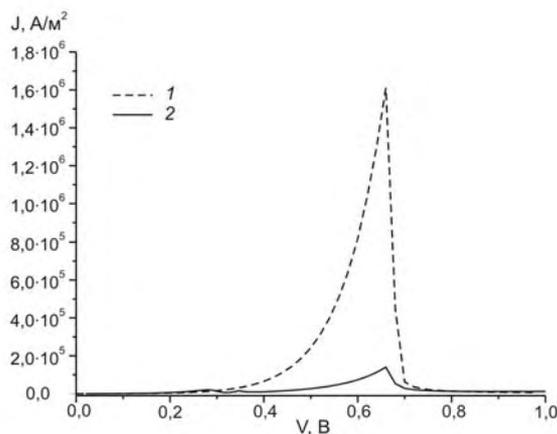


Рис. 1. ВАХ двухбарьерной РТС, рассчитанные с использованием однозонной (1) и двухзонной (2) моделей

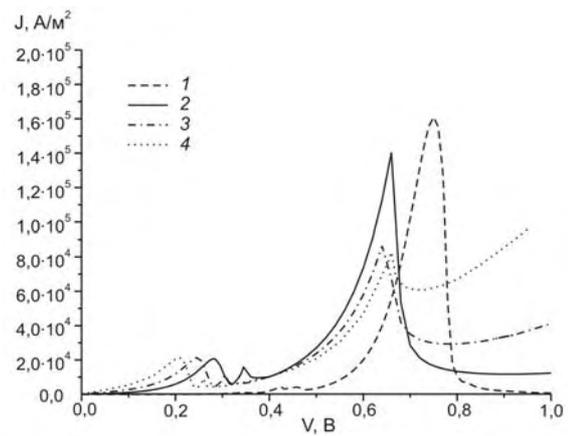


Рис. 2. ВАХ двухбарьерной РТС для различных температур, рассчитанные с использованием двухзонной модели

Заключение

Разработана численная комбинированная двухзонная модель, основанная на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. В работе проведено сравнение результатов моделирования однозонной и двухзонной моделей и показана необходимость учета влияния эффекта междолинного Γ -X рассеяния при расчете ВАХ РТС с протяженными областями на основе GaAs/AlAs. С использованием предложенной двухзонной модели проведено исследование влияния Γ -X рассеяния и температуры на ВАХ прибора. Расчеты ВАХ РТС на основе двухзонной модели позволили установить, что с ростом температуры наблюдается снижение пикового тока и увеличение тока долины. Полученные результаты согласуются с известными экспериментальными данными по пиковым токам. Кроме того, наличие незначительных дополнительных пиков тока в области низких напряжений соответствует известным теоретическим исследованиям на основе трехзонной модели.

INVESTIGATION OF GaAs/AlAs DOUBLE-BARRIER RESONANT TUNNEL STRUCTURE WITH THE USE OF COMBINED TWO-BAND MODEL

I.I. ABRAMOV, I.A. GONCHARENKO, N.V. KOLOMEJTSEVA

Abstract

In the paper the influence of Γ -X intervalley scattering and temperature on I-V characteristics of GaAs/AlAs double-barrier resonant tunnel structure with expanded regions with the use of developed combined two-band model was investigated. The proposed model based on self-consistent solution of Schrödinger's and Poisson's equations. The model was included in the nanoelectronic device simulation system NANODEV. It was shown that Γ -X intervalley scattering may cause a significant effect on electrical characteristics of device.

Литература

1. Sun J.P., Mains R.K., Yang K., Haddad G.I. // J.Appl.Phys. 1993. Vol. 74. P. 5053.
2. Караваев Г.Ф., Воронков А.А. // Изв. вузов. Физика. 2003. № 1. С. 78.
3. Абрамов И.И., Гончаренко И.А. // Электромагнитные волны и электронные системы. 2002. Т. 7, № 3. С. 54.
4. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн., 1999.
5. Sun J.P. Modeling of semiconductor quantum devices and its applications. Ph.D. Thesis, Dep. of EECS, Univ. of Michigan, Ann Arbor. 1993.
6. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Игнатенко С.А., Королев А.В., Новик Е.Г., Рогачев А.И. // Микроэлектроника. 2003. Т. 32, № 2. С. 124.
7. Ханин Ю.Н., Вдовин Е.Е., Дубровский Ю.В. // ФТП. 2004. Т. 38, № 4. С. 436.
8. Osochan T., Chin V.W., Tansley T.L. // Phys. Review. B. 1996. Vol. 54. P. 2059.
9. Караваев Г.Ф., Воронков А.А. // Известия вузов. Физика. 2000. № 10. С. 3.
10. Kan S.C., Morkoc H., Yariv A. // Appl. Phys. Lett. 1988. Vol. 52. P. 2250.