

PACS numbers: 68.65.Fg, 71.15.Dx, 71.15.Nc, 73.20.At, 73.21.Fg, 81.07.St

Полуаналитический метод самосогласованного расчета структуры с одиночной квантовой ямой

Я. Г. Беличенко, В. Г. Белых, В. Н. Тулупенко, В. Н. Порошин*

*Донбасская государственная машиностроительная академия,
ул. Шкадинова, 72,
84313 Краматорск, Украина
*Институт физики НАН Украины,
просп. Науки, 46
03650 Киев, Украина*

В настоящей работе предложен полуаналитический самосогласованный метод расчета полупроводниковой гетероструктуры, содержащей одиночную квантовую яму с однородно легированными барьерами. В методе использованы приближения, которые позволили заменить численное решение уравнения Пуассона аналитическим и добиться быстрой сходимости процедуры счета. Предложенный подход позволяет получить вид энергетического профиля структуры, энергию уровней размерного квантования, положение уровня Ферми, концентрацию носителей заряда в яме, а также длину слоя обедненного заряда в барьерах.

У даній роботі запропоновано напіваналітичну самоузгоджену методу розрахунків напівпровідникової гетероструктури, що містить одну квантову яму з однорідно легованими бар'єрами. У методі використано наближення, які дозволили замінити числовий розв'язок Пуассонового рівняння аналітичним і добитися швидкої збіжності процедури обчислення. Запропонований підхід дозволяє одержати вид енергетичного профілю структури, енергію рівнів розмірного квантування, положення Фермієвого рівня, концентрацію носіїв заряду в ямі, а також довжину шару збідненого заряду в бар'єрах.

In this work, a semi-analytical self-consistent method of calculation for semiconductor heterostructure, which consists of a single quantum well with uniformly doped barriers, is proposed. Used approximations permit the substitution of numerical solution of Poisson equation by an analytical one. This approach made possible an obtaining of fast convergence of the calculation procedure. Suggested method allows obtaining energy-band profile, size-quantization energy levels, Fermi level position, concentration of carriers in quantum well, and length of depletion-charge layer in barriers.

Ключевые слова: самосогласованный расчет, квантовая яма, обедненный слой.

(Получено 8 апреля 2008 г.; окончат. версия — 24 марта 2009 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Низкоразмерные структуры являются основой для создания новых типов полупроводниковых приборов опто- и наноэлектроники. Проектирование таких приборов требует знания основных параметров структур, таких, как величина разрыва энергетических зон, положение уровней размерного квантования, концентрация свободных носителей заряда и их пространственное распределение. Поэтому важной практической задачей является разработка экспериментальных и теоретических методов характеристики гетероструктур.

Теоретическое описание оптических и транспортных свойств полупроводниковых структур требует самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Такая система разрешима с использованием либо вариационных методов [1], либо прямых численных методов [1, 2]. Последние представляют собой итерационную процедуру, на каждом шаге которой производится численное решение уравнений Шредингера и Пуассона для нахождения уточненного вида электростатического потенциала, энергетических уровней и волновых функций (ВФ) носителей. Следует отметить большую трудоёмкость численного счёта для такого рода задач, что связано с необходимостью проверки сходимости процедуры на каждом шаге [1] и необходимостью расчёта как связанных, так и де локализованных состояний носителей в гетероструктуре [3].

В настоящей работе предложен полуаналитический метод самосогласованного расчета одиночной квантовой ямы (КЯ), находящейся в однородно легированной матрице. В рамках предлагаемого метода расчета пространственное распределение ионизированных примесей описывается в приближении обедненного слоя [1], а для описания пространственного распределения свободных носителей заряда используется приближенная волновая функция, подобная ВФ носителей в прямоугольной квантовой яме. Эти приближения позволили уйти от проблемы численного решения нелинейного уравнения Пуассона и выписать аналитическое выражение для электростатического потенциала гетероструктуры.

В ходе итераций уравнение Шредингера решается численно и полученное значение энергии уровня размерного квантования используется для уточнения энергетического профиля гетероструктуры. В результате имеем быстро сходящуюся процедуру, которая позволяет рассчитать энергетический профиль КЯ, значение энергии первого уровня размерного квантования и поверхностную кон-

центрацию носителей в КЯ с приемлемой точностью вычислений.

2. ОПИСАНИЕ МЕТОДА РАСЧЕТА

Рассмотрим КЯ шириной d , ограниченную протяженными барьерами. Предполагаем, что барьеры изготовлены из одного и того же материала и одинаково легированы с концентрацией легирующей примеси N_d . В условии термодинамического равновесия уровень химического потенциала μ имеет постоянное значение для всей структуры. Это достигается за счет перераспределения зарядов: происходит ионизация примесных центров в барьерах и переход электронов в КЯ. Потенциал, созданный пространственно разделенными зарядами, искривляет край зоны проводимости вблизи квантовой ямы, за счет чего и обеспечивается постоянство химического потенциала. Схематически зонная диаграмма рассматриваемой структуры показана на рис. 1.

Начало отсчета энергии мы совместили с уровнем химического потенциала. На рисунке 1 μ — расстояние по энергетической шкале от уровня химического потенциала до края зоны проводимости в барьере, E_1 — расстояние по энергетической шкале от дна квантовой ямы до первой подзоны размерного квантования, E_F — расстояние от дна первой подзоны до уровня химического потенциала.

Энергетический профиль структуры и значение энергии первого уровня размерного квантования находятся из совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона:

$$-\frac{1}{m_{1,2}^*} \frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (U(x) + e\phi(x))\psi(x) = E\psi(x), \quad (1)$$

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = -\frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_{1,2}} (N_D^+(x) - n_s |\psi(x)|^2). \quad (2)$$

В уравнениях (1), (2) $U(x)$ — потенциал прямоугольной кванто-

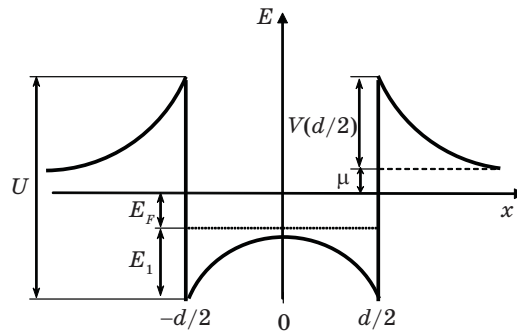


Рис. 1. Схематический вид края зоны проводимости исследуемой структуры.

вой ямы, который равен нулю в области $x \leq \left| \frac{d}{2} \right|$, и U для $x \geq \left| \frac{d}{2} \right|$;

m_i^* — эффективная масса электрона, $\phi(x)$ — электростатический потенциал, $\psi(x)$ — волновая функция первого уровня размерного квантования, e — заряд электрона, ε_0 — электрическая постоянная, ε_i — относительная диэлектрическая проницаемость материала, $N_D^+(x)$ — концентрация ионизированной примеси в барьерах, n_s — $2D$ -концентрация свободных носителей в КЯ. Индексы 1 и 2 относятся, соответственно, к материалам квантовой ямы и барьеров. Здесь и далее мы используем систему СИ. При записи уравнения (2) мы предполагали, что заполнена только первая подзона размерного квантования, что всегда выполняется для умеренно легированных структур с достаточно узкими квантовыми ямами. Функции $\phi(x)$ и $\psi(x)$ удовлетворяют следующим граничным условиям:

$$\psi_1 \left(\pm \frac{d}{2} \right) = \psi_2 \left(\pm \frac{d}{2} \right), \quad \frac{1}{m_1^*} \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=\pm d/2} = \frac{1}{m_2^*} \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=\pm d/2}, \quad (3)$$

$$\phi_1 \left(\pm \frac{d}{2} \right) = \phi_2 \left(\pm \frac{d}{2} \right), \quad \varepsilon_1 \frac{d\phi_1}{dx} \Big|_{x=\pm d/2} = \varepsilon_2 \frac{d\phi_2}{dx} \Big|_{x=\pm d/2}. \quad (4)$$

При низких температурах ($kT < E_D$, E_D — энергия ионизации примеси) малое уменьшение электростатического потенциала в области $|x| > \frac{d}{2}$ увеличивает потенциальную энергию электронов $-e\phi$, что приводит к полной ионизации доноров вблизи КЯ. Функция распределения $N_D^+(x)$ в приближении обедненного слоя может быть представлена в виде:

$$N_D^+(x) = \begin{cases} N_D, & |x| \in \left[\frac{d}{2}, l + \frac{d}{2} \right], \\ 0, & |x| \notin \left[\frac{d}{2}, l + \frac{d}{2} \right], \end{cases} \quad (5)$$

где l — длина обедненного слоя. Использование распределения (5) подразумевает, что при $|x| > l + d/2$ влияние электрических полей зарядов в квантовой яме и слоях обедненного заряда уже не существенно, и положение уровня химического потенциала определяется свойствами широкозонного материала. Поскольку структура электрически нейтральна, должно выполняться условие:

$$2N_D l = n_s \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = n_s. \quad (6)$$

На первом шаге итерационного процесса уравнение (1) решается для прямоугольной потенциальной ямы глубиной U , а $\varphi(x) = 0$. Волновая функция имеет вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos kx & |x| \leq d/2, \\ B \exp(\pm \kappa x) & |x| > d/2, \end{cases} \quad (7)$$

где

$$k = \frac{\sqrt{2m_1^* E_1}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m_2^*(U - E_1)}}{\hbar}, \quad B = A \cos \frac{\kappa d}{2} \exp\left(\frac{\kappa d}{2}\right),$$

$$A^2 = \frac{2k\kappa}{k\kappa + \frac{\kappa \sin \kappa d}{d} + \frac{2k \cos^2(\kappa d/2)}{d}}.$$

В формуле (7) верхний знак отвечает области $x < -d/2$, а нижний — $x > d/2$.

На втором шаге итераций при известных E_1 и волновой функции (7) вычисляется потенциал $\varphi(x)$. Для функций $N_D^+(x)$ и $\psi(x)$, определяемых формулами (5, 7), уравнение (2) имеет аналитическое решение, записанное в безразмерных координатах $\xi = \frac{x}{d}$:

$$V(\xi) = V_0 \begin{cases} \frac{\xi_0 A^2}{2\varepsilon_1} \left\{ \left(\frac{1}{4} - \xi^2 \right) + \frac{\cos^2 \tilde{k}\xi - \cos^2 \tilde{k}/2}{\tilde{k}^2} \right\} + \\ + \frac{\xi_0 A^2 \cos^2 \tilde{k}/2}{2\tilde{\kappa}^2 \varepsilon_2} (\exp(-2\tilde{\kappa}\xi_0) - 1) + \frac{\xi_0^2}{2\varepsilon_2}, & |\xi| \leq \frac{1}{2}; \\ \frac{\xi_0 A^2 \cos^2 \tilde{k}/2}{2\tilde{\kappa}^2 \varepsilon_2} (\exp(-2\tilde{\kappa}\xi_0) - \exp(\tilde{\kappa}(1 \pm 2\xi))) + \\ + \frac{1}{2e_2} \left(\xi \pm \xi_0 \pm \frac{1}{2} \right)^2, & \frac{1}{2} \leq |\xi| \leq \frac{1}{2} + \xi_0; \\ 0, & |\xi| > \frac{1}{2} + \xi_0. \end{cases} \quad (8)$$

Здесь верхний знак соответствует области $-1/2 - \xi_0 \leq \xi < -1/2$, а нижний — $1/2 < \xi \leq 1/2 + \xi_0$. В формулах (8) $V(\xi) = e\phi(\xi)$,

$V_0 = \frac{N_D^+ e^2 d^2}{\epsilon_0}$ и введены безразмерные величины: $\tilde{k} = kd$, $\tilde{\kappa} = \kappa d$ —

волновые числа; $\xi_0 = l/d$ — безразмерная длина обедненного слоя. Решение (8) удовлетворяет граничным условиям (4), но имеет экспоненциально малый разрыв производной в точках $\xi = \pm(1/2 + \xi_0)$ ($\partial V / \partial \xi \propto \exp(-2\kappa\xi_0)$), которым можно пренебречь. Поэтому можно считать, что решение (8) дает правильное распределение электрических полей во всей структуре.

Формулы (8) содержат неизвестный параметр ζ_0 , для нахождения которого, пользуясь рис. 1, можно составить уравнение [5]:

$$\mu + V\left(\frac{d}{2}\right) + E_1 + E_F = U. \quad (9)$$

При записи (9) начало отсчета энергии совмещено с положением химического потенциала в барьерах.

Для вырожденного электронного газа с изотропным квадратичным законом дисперсии соотношение, связывающее $2D$ -концентрацию носителей заряда и энергию Ферми E_F , имеет вид [1]:

$$n_s = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} E_F.$$

Используя уравнение (6), E_F можно представить в виде

$$E_F = \frac{\pi\hbar^2}{m^*} n_s = \frac{\pi\hbar^2}{m^*} 2N_D d\xi_0,$$

и уравнение (9) содержит только одну неизвестную ζ_0 (величины U и N_D мы считаем известными, химический потенциал для материала барьера μ рассчитывается из условия электронейтральности объемного полупроводника). Численно решив уравнение (9), можно рассчитать возмущающий потенциал $V(\zeta)$ и уточнить значение E_1 .

В ходе дальнейших итераций для потенциальной энергии $V(\xi)$ также используется выражение (8), но с новыми \tilde{k} , $\tilde{\kappa}$ и новым значением длины обедненного слоя ζ_0 , которые уточняются по значению энергии E_1 , полученному на предыдущем шаге итерационной процедуры. Новые волновые числа k и κ пересчитываются по формулам:

$$k_n = \frac{\sqrt{2m_1^* E_{1,n-1}}}{\hbar}, \quad \kappa_n = \frac{\sqrt{2m_2^* [(U - V(d/2))_{n-1}] - E_{1,n-1}}}{\hbar},$$

где n — номер итерации. Иными словами, при решении уравнения Пуассона численное решение для волновой функции $\psi(x)$ аппроксимируется выражением (7). Величина $U - V(d/2)$ играет роль эф-

фективной глубины квантовой ямы. Такая аппроксимация оправдана при $l > d$, так как слагаемое $n_s |\psi(x)|^2$ дает вклад в потенциал $V(\zeta)$ только в области КЯ.

В результате сделанных приближений мы имеем быстро сходящуюся итерационную процедуру, в ходе которой численно решается уравнение Шредингера и уравнение (9). Для решения уравнения Шредингера применялся модифицированный метод стрельбы [1]. Построение решения начиналось на эффективной бесконечности, что подразумевает несколько значений ширины ямы. Значения производной волновой функции в точках $x = \pm d/2$, в соответствии с граничными условиями (3), пересчитывались для нахождения решения внутри КЯ. В случае симметричной квантовой ямы уравнение для собственных значений можно составить на основании свойств симметрии волновых функций. Например, симметричные волновые функции в центре квантовой ямы имеют равную нулю производную. Соответственно, условие $\partial\psi(x)/\partial x = 0$ при $x = 0$ позволяет найти значения энергии уровней размерного квантования для состояний с $n = 1, 3, 5, \dots$. Сравнение результатов расчета энергий для прямоугольной квантовой ямы, полученных таким методом и путем решения трансцендентного уравнения, получающегося из граничных условий (3), показало полное совпадение результатов.

3. ПРИМЕР РАСЧЕТА

Нами был проведен расчет по предложенному полуаналитическому методу для проверки соответствия результатам других авторов, а также для определения сходимости итерационной процедуры счета. В качестве расчётной была принята структура GaAs/In_{0.23}Ga_{0.77}As/GaAs с глубиной квантовой ямы $U = 176$ мэВ и шириной $d = 7,5$ нм. Ширины барьеров были выбраны таким образом, чтобы уровень химического потенциала в них на некотором расстоянии от КЯ выходил на положение уровня химического потенциала в объемном полупроводнике (в нашем расчете ширина барьера составляла $10d$). Концентрация легирующей примеси в барьере $N_D = 5 \cdot 10^{16}$ см⁻³. Квантовая яма — не легирующая. Все расчёты были выполнены для температуры $T = 10$ К.

На рисунке 2 приведен расчетный энергетический профиль структуры и положение первого уровня размерного квантования для прямоугольной и расчетной КЯ.

В прямоугольной КЯ (первый шаг итераций) имеем один уровень размерного квантования и сплошной спектр выше КЯ. В ходе решения получаем новый профиль потенциала. В таблице приведено значение энергии уровня размерного квантования на каждом шаге итерационной процедуры. Как видим, уже на пятом шаге величина

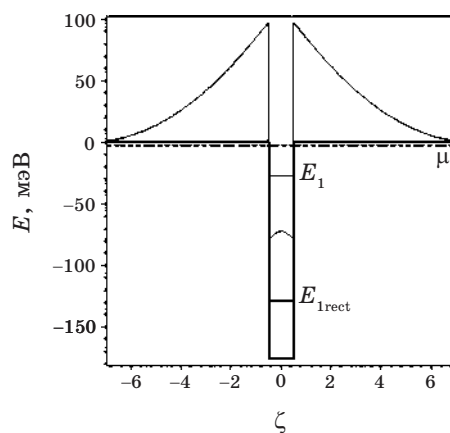


Рис. 2. Дно зоны проводимости и уровень энергии в структуре GaAs/In_{0.23}Ga_{0.77}As/GaAs; жирная линия — прямоугольная КЯ, тонкая линия — КЯ после перераспределения заряда, $E_{1\text{rect}}$ — энергия первого уровня размерного квантования для прямоугольной КЯ, E_1 — энергия уровня размерного квантования для расчетной КЯ.

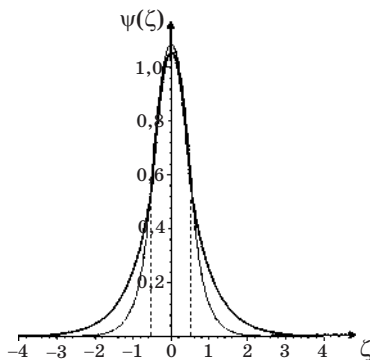


Рис. 3. Волновые функции носителей заряда первого уровня размерного квантования: тонкая линия — расчет по [3], толстая линия — расчет по предложенному методу. Штриховой линией показаны границы КЯ.

поправки к энергии не превышает сотой доли мэВ, что позволяет считать процедуру быстросходящейся.

Электростатический потенциал зарядов обедненного слоя и КЯ приводит к существенному изменению энергетического профиля структуры, при котором КЯ смещается вверх по энергетической шкале по отношению к первоначальному положению. При этом уровень размерного квантования E_1 поднимается вверх почти на 0,1 эВ. Сравнение наших результатов расчета положения уровня размерного квантования с результатами численных расчетов, проведенных по

ТАБЛИЦА 1. Величина энергии уровня размерного квантования и ширины обедненного слоя в зависимости от номера шага итерации.

Номер шага итерации	Значение E_1 , мэВ	Ширина обедненного слоя ζ_0
1	47,7582	0
2	52,1217	7,279
3	51,7003	7,181
4	51,7580	7,186
5	51,7535	7,185
6	51,7529	7,185

методике, описанной в [3], дает погрешность менее 0,5%. В основе предлагаемого метода расчета лежит предположение о том, что приближенная волновая функция мало отличается от реальной.

В качестве иллюстрации на рис. 3 показаны обе функции: рассчитанная по методике работы [3] и по формуле (7) с параметрами, соответствующими конечному шагу итераций. Как видно из рисунка, обе функции отличаются вне квантовой ямы. Это отличие мы связываем с обрезкой барьера Шоттки и введением эффективной глубины квантовой ямы. Этим обусловлено и расхождение результатов расчета энергий.

Отметим, что выражение (6) позволяет оценить концентрацию носителей в квантовой яме, которая рассчитывается через длину обедненного слоя. Как показывают расчеты, длина обедненного слоя слабо зависит от номера итераций (см. таблицу), т.е. хорошая оценка для 2D-концентрации получается сразу после первой итерации.

4. ВЫВОДЫ

В настоящей работе предложен полуаналитический метод расчета структуры с одиночной КЯ в однородно легированной матрице. При этом использованы приближения, которые позволили уйти от численного решения нелинейного уравнения Пуассона. Предложенный метод обладает хорошей сходимостью и позволяет получить такие параметры, как энергия первого уровня размерного квантования, положение уровня Ферми относительно дна КЯ, концентрацию носителей заряда в яме, а также длину слоя обедненного заряда в барьерах, сохранив при этом хорошую точность.

Развитый нами подход справедлив только для низких температур ($kT < E_D$) и для структур, в которых уровень Ферми находится в первой зоне размерного квантования.

Работа поддержана МОН Украины и Фондом фундаментальных исследований Украины.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. A. A. Grinberg, *Phys. Rev. B*, **32** (1985).
2. В. Э. Каминский, *ФТП*, **23**: 662 (1989).
3. В. И. Зубков, *ФТП*, **40**: 10 (2006).
4. K. Kreher, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **135**: 597 (1993).
5. V. Mitin, V. Kochelap, and M. A. Strosio, *Quantum Heterostructures, Microelectronics and Optoelectronics* (London: Cambridge University Press: 1999).
6. J. H. Davies, *Physics of Low-Dimensional Semiconductors* (New York: Cambridge University Press: 1998).
7. В. А. Ильина, П. К. Силаев, *Численные методы для физиков-теоретиков* (Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований: 2003).