

УДК 621.315.592

ДИАГНОСТИКА ГЕТЕРОСТРУКТУР РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ ДИОДОВ В ПРОЦЕССЕ ЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА. I. ОЦЕНКА ТРЕБУЕМОЙ ТОЧНОСТИ ВЫРАЩИВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР

И. П. Казаков, М. А. Базалевский, В. В. Капаев, В. И. Цехош

На основе решения одноэлектронного уравнения Шрёдингера выполнено численное моделирование вольт-амперных характеристик резонансно-туннельного диода на основе GaAs/AlAs. Показано, что в процессе эпитаксиального выращивания активной области диода необходимо обеспечить точность выдерживания толщины слоёв не менее 1 монослоя.

Ключевые слова: резонансно-туннельный диод, гетероструктура, вольт-амперная характеристика, математическое моделирование, монослойная точность.

Электрофизические характеристики резонансно-туннельных диодов (РТД) чрезвычайно чувствительны к параметрам гетероструктур (ГС), в частности, к вариациям толщины слоёв активной области: туннельных барьеров и квантовых ям (КЯ). Например, в работах [1, 2] экспериментально показано, что для двухбарьерного РТД увеличение ширины барьеров AlAs, КЯ InGaAs или подъямы InAs на 1 монослой (МС) приводит к уменьшению пикового тока I_p на 56%, 19% и 18%, соответственно; а уменьшение мольной доли индия на 1% в КЯ InGaAs увеличивает пиковый ток на 10%. Несмотря на важность такого рода данных, в литературе не представлены систематические исследования этого вопроса, в частности, для РТД на ГС GaAs/AlAs. В настоящей работе сделаны оценки изменения вольт-амперной характеристики (ВАХ) простейшего двухбарьерного РТД в зависимости от вариаций толщины слоёв активной области: барьеров AlAs и КЯ GaAs.

Описание расчётной модели ВАХ РТД. Расчёты для выбранной ГС двухбарьерного РТД с барьерами AlAs и КЯ GaAs (рис. 1) были выполнены на основе известной модели, предложенной в [3] и базирующаяся на следующих предположениях:

ФИАН, 119991, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: ipkazakov@yandex.ru.

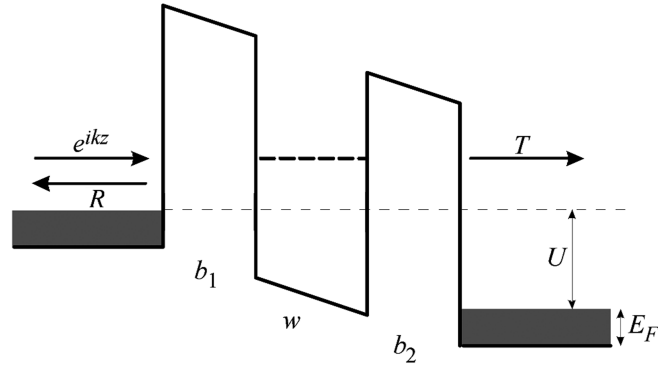


Рис. 1: Зона проводимости двухбарьерного РТД при приложении напряжения U .

1. Структура РТД разбивается на три области – эмиттерную, коллекторную и квантовую (резонансно-туннельную), причем первые две включают как n^+ контакты, так и прилегающие к ним буферные слои, а электроны в них считаются равновесными.

2. Квантовая область описывается одноэлектронным уравнением Шрёдингера в приближении эффективной массы.

3. Внутри квантовой области электроны движутся когерентно, т.е. отсутствует рассеяние.

4. Концентрация локализованных в квантовой области электронов незначительна и не влияет на распределение потенциала по диоду.

5. Перенос электронов ограничен квантово-механической прозрачностью квантовой области.

6. Коэффициент пропускания квантовой области зависит только от величины нормальной (по отношению к плоскости гетеропереходов) компоненты волнового вектора электрона k_z , параметров структуры (толщин барьеров, ширины КЯ, их материалов) и напряжения U , приложенного к ГС.

Считаем, что в области эмиттера и коллектора выполняется условие плоских зон и заданы энергии Ферми E_F . На основании численного решения уравнения Шрёдингера для огибающей волновой функции Ψ :

$$-\nabla \frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla \Psi + (E_c(z) - E)\Psi = 0, \quad (1)$$

где \hbar – постоянная Планка, m_n – эффективная масса электронов в слое, E_c – энергия дна зоны проводимости, E – энергия электрона, используя метод матрицы переноса, решаем задачу рассеяния, т.е. вычисляем зависимость пропускания структуры от энергии падающего электрона $T(E_z)$.

При приложении электрического поля профиль потенциала аппроксимируется кусочно-постоянной функцией, количество узлов n выбирается из условий сходимости результатов. Обычно достаточно $n = 100$.

Коэффициент пропускания квантовой области зависит только от величины нормальной (по отношению к плоскости гетеропереходов) компоненты волнового вектора электрона k_z , параметров структуры (толщин барьеров, ширины КЯ, их материалов) и напряжения U , приложенного к структуре. При этом плотность тока вычисляется по формуле:

$$J(V) = \frac{em^*k_B\theta}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dE_z \cdot T(E_z) \ln \left(\frac{1 + \exp((E_F - E_z)/k_B\theta)}{1 + \exp((E_F - E_z - eU)/k_B\theta)} \right), \quad (2)$$

здесь e – заряд электрона, k_B – постоянная Больцмана, θ – температура, $T(E_z)$ – коэффициент прохождения, E_F – уровень Ферми в эмиттере, m^* – эффективная масса электрона в эмиттере и коллекторе, $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$, U – напряжение на квантовой области. Формула (2) подразумевает равенство эффективных масс в контактах. Конкретные расчеты выполнены, принимая эффективные массы электронов в GaAs – $0.067m_0$, в AlAs – $0.15m_0$ (m_0 – масса электрона в вакууме), скачок края зоны проводимости на гетерогранице $\Delta E_c = 0.894$ эВ при комнатной температуре и концентрацию носителей в эмиттере и коллекторе 10^{18} см $^{-3}$ ($E_F = 42$ мэВ). Основная задача состояла в определении изменения тока в пике ВАХ и его положения при изменении ширин слоев на 1 МС.

Моделирование ВАХ в зависимости от вариации толщины слоёв гетероструктуры РТД. На рис. 2 представлены ВАХ, рассчитанные при различных ширинах барьеров. Увеличение ширины коллекторного барьера слабо изменяет значение тока в пике (сравните кривые 1 и 2 рис. 2), тогда как увеличение эмиттерного барьера на ту же величину приводит к уменьшению тока в пике почти в три раза (кривые 1 и 3). Такое сложное поведение объясняется влиянием двух факторов: уменьшением ширины пика пропускания при увеличении ширин барьеров и изменением значения пропускания в максимуме. Известно, что для системы, содержащей два одинаковых барьера, пропускание в максимуме равно единице. При приложении электрического поля симметрия барьеров нарушается (эффективно мощность коллекторного барьера уменьшается). В результате в поле, соответствующем максимуму ВАХ, пропускание оказывается отличным от единицы. Пример зависимостей пропускания от энергии для различных ширин барьеров представлен на рис. 3. Для одинаковых барьеров шириной в 20 Å $T_{\max} = 0.45$.

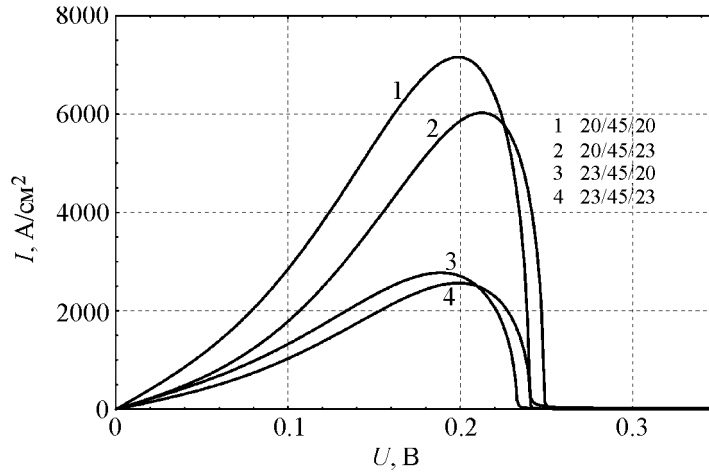


Рис. 2: ВАХ РТД с шириной КЯ $w = 45 \text{ \AA}$ и шириной барьеров (\AA): 1 – 20/20; 2 – 20/23; 3 – 23/20; 4 – 23/23.

Увеличение ширины коллекторного барьера симметризует структуру при конечном напряжении, увеличивая таким образом величину T_{\max} (кривая 2 на рис. 2, но при этом уменьшается ширина пика $T(E)$). В результате ток в пике ВАХ несколько уменьшается. При увеличении ширины эмиттерного барьера уменьшается как T_{\max} , так и ширина уровня (кривая 3 на рис. 3), т.е. оба фактора действуют в одну сторону. В результате происходит значительное уменьшение тока в пике.

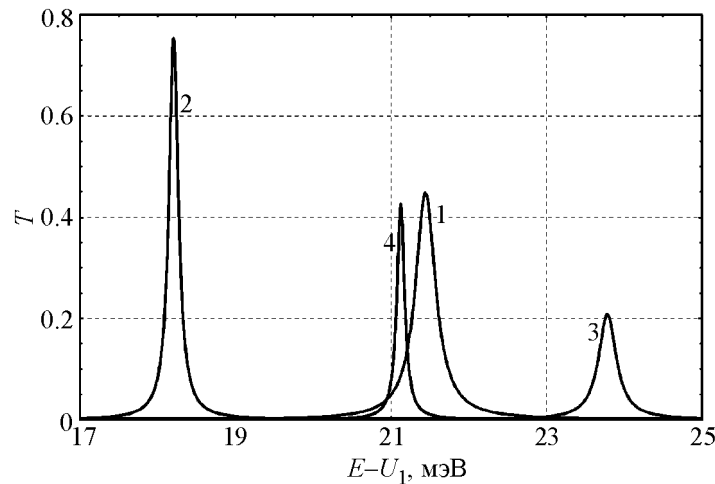


Рис. 3: Зависимость пропускания от энергии $T(E)$ в максимуме ВАХ РТД с шириной КЯ $w = 45 \text{ \AA}$ и шириной барьеров (\AA): 1 – 20/20; 2 – 20/23; 3 – 23/20; 4 – 23/23.

Рис. 4 иллюстрирует изменение ВАХ при изменении ширины КЯ. В этом случае основным фактором является повышение уровня размерного квантования в КЯ E_r с уменьшением ширины, что приводит к увеличению ширины пика пропускания и, как следствие, к увеличению тока в пике.

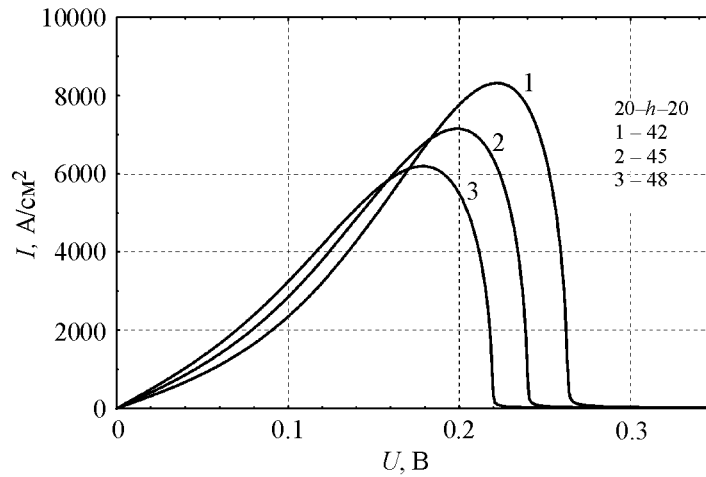


Рис. 4: ВАХ РТД с шириной барьеров $b_1 = b_2 = 20 \text{ \AA}$ и КЯ ($h, \text{ \AA}$): 1 - 42; 2 - 45; 3 - 48.

Рост E_r приводит к увеличению напряжения, соответствующего максимуму тока.

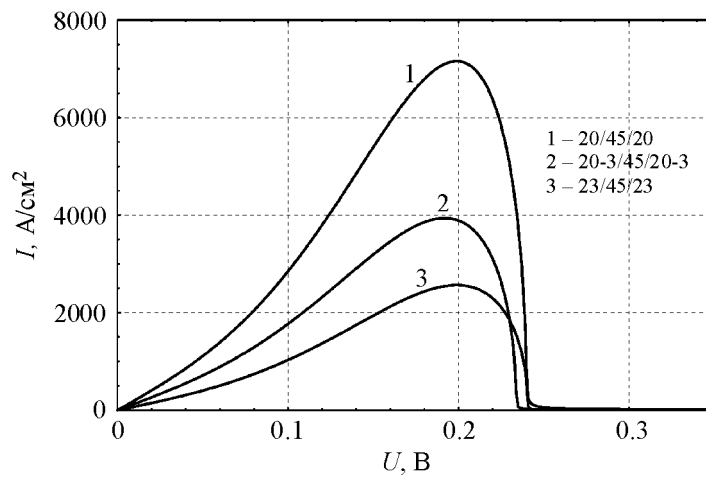


Рис. 5: ВАХ РТД с шириной ямы $w = 45 \text{ \AA}$ и барьерами: 1 - 20 \AA ; 2 - составной барьер - $\text{AlAs}(20 \text{ \AA}) + \text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ (3 \AA); 3 - 23 \AA .

Рис. 5 иллюстрирует изменения ВАХ, вызванные возможной размытостью гетерограницы. Кривая 3 на рис. 5 соответствует случаю составных барьеров: 20 \AA состава

AlAs и $3 \text{ \AA} - \text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$. Сопоставление кривых рис. 5 показывает значительное влияние этого фактора на значение тока в пике.

Выше мы пользовались простейшей моделью протекания тока в РТД. В частности, мы пренебрегали образованием областей пространственного заряда в коллекторе и эмиттере. Учет этих эффектов в основном приводит к уменьшению доли внешнего напряжения, действующего непосредственно на резонансно-туннельную структуру. Т.е. учет распределения поля в контактных областях приведет к увеличению напряжения, соответствующего максимуму тока. Это можно учесть, решая совместно с уравнением Шрёдингера уравнения Пуассона для распределения потенциала. Сдвиг этот обычно не превышает 0.1 В. В принципе при этом изменяются и значения токов в пике, их же соотношения при изменении ширины барьеров остаются практически такими же. Мы считали перенос носителей в РТД баллистическим, т.е. пренебрегали рассеянием носителей в ГС. Такой подход достаточно хорошо описывает ток в пике ВАХ, рассеяние же определяет значение тока в долине. Основные механизмы рассеяния слабо зависят от геометрических размеров КЯ и барьеров, т.е. проведенное рассмотрение адекватно описывает влияние технологических разбросов на ВАХ РТД.

Как видно из полученных результатов, точность выдерживания толщины слоёв в активной области двухбарьерного РТД должна быть не менее 1 МС, что накладывает жёсткие требования на качество аппаратуры МПЭ и её калибровку. Средства непрерывного контроля за процессом формирования ГС РТД могут существенно упростить задачу отработки технологии и повысить воспроизводимость процесса выращивания. Понятно, что такой контроль не должен воздействовать на ростовую поверхность. Во второй статье данного цикла – (II. Методики контроля на основе метода отражения) – будут представлены исследования, направленные на решение данной проблемы.

Работа выполнена в рамках ФЦП (ГК № 16.513.11.3079) и при частичной поддержке РФФИ (гранты № 11-02-00432-а, 11-02-12133-офи-м).

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] F. G. Celii, Y.-C. Kao, A. J. Katz, T. S. Moise, J. Vac. Sci. Technol. A **13**(3), 733 (1995).
- [2] T. S. Moise, Y.-C. Kao, A. J. Katz, T.P.E. Broekaert, F. G. Celii, Appl. Phys. **78**(10), 6305 (1995).
- [3] R. Tsu, L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **22**(11), 562 (1973).

Поступила в редакцию 29 мая 2012 г.