

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ТУННЕЛЬНО-РЕЗОНАНСНЫХ СТРУКТУРАХ

© 2011 В. В. Филиппов¹, А. А. Заворотный¹, Е. Н. Бормонтов²

¹Липецкий государственный педагогический университет, ул. Ленина 42, 398020 Липецк, Россия

²Воронежский государственный университет, Университетская пл. 1, 394006 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 20.07.2011 г.

Аннотация. Выполнена оценка смещений уровней энергетического спектра в прямоугольной квантовой яме с дополнительным провалом, служащая основой при расчетах контрастности вольт-амперных характеристик туннельно-резонансных структур. Показано, что смещения положений основного и первого возбужденного уровней качественно определяются рельефом и глубиной квантовой ямы.

Ключевые слова: квантовая яма, волновая функция, уравнение Шредингера, туннельно-резонансный диод.

ВВЕДЕНИЕ

В современной полупроводниковой микро- и наноэлектронике широкое применение получили слоистые структуры с переменным составом или непостоянным профилем легирования [1—2]. Особые структуры пониженной размерности позволяют создавать приборы качественно нового уровня [3]. Как правило, для объяснения свойств и режимов работы указанного типа полупроводниковых приборов необходимо прибегать к квантовомеханическому описанию моделей устройств [4, 5].

Одним из перспективных приборов наноэлектроники является резонансно-туннельный диод (РТД). Для создания нового поколения РТД и гетеролазеров с отдельным электронным и оптическим ограничением [6, 7] применяются структуры с прямоугольными квантовыми ямами, в центре которых имеется дополнительный провал (рис. 1). Благодаря энергетическому провалу возникают новые возможности для управления положением квантовых уровней в широкой основной части ямы. В литературе отсутствует достаточно полное тео-

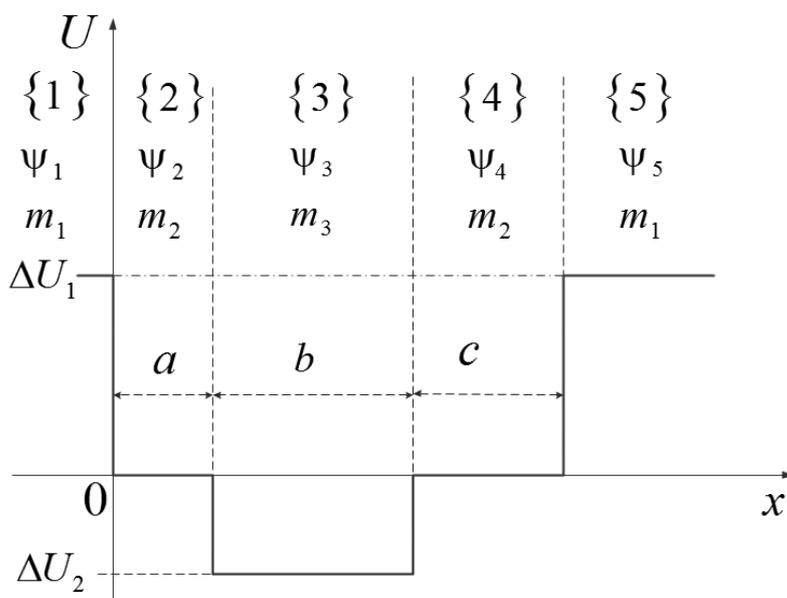


Рис. 1. Схема дна зоны проводимости в слоистой структуре, образующей квантовую яму со сложным профилем

ретическое описание зависимости энергетического спектра от положения и ширины провала в квантовых ямах сложной формы, позволяющее описывать характеристики некоторых приборов нанoeлектроники.

В данной работе выполнена оценка смещений уровней энергетического спектра в прямоугольной квантовой яме, в которой имеется дополнительный провал, расположенный несимметрично относительно стенок ямы. Полученные значения энергий определяют положения пиков ВАХ туннельно-резонансных структур, имеющих сложный профиль легирования или гетерограницы внутри активной части резонансного устройства.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Рассмотрим энергетический спектр носителей заряда в сложной яме, содержащей провал, учитывая, что эффективные массы носителей зарядов изменяются в зависимости от рельефа потенциальной энергии (рис. 1). Проанализируем модель туннельно-резонансного диода, представляющую квантовую яму, состоящую из пяти областей [6, 7], схема которой указана на рис. 1. На данном рисунке m_i — эффективная масса носителей заряда в каждом из материалов структуры; ΔU_1 и ΔU_2 — положения дна зон проводимости; a, b, c — толщины нанослоев, образующих среднюю область резонансно-туннельной структуры.

Как известно, в каждой из областей сложной ямы квантование энергии описывается уравнением:

$$\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_i(x)}{\partial x^2} + (E - U_i) \psi_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 5. \quad (1)$$

Значения потенциальных энергий и эффективных масс в выражении (1) распределяются следующим образом:

$$U_i = \begin{cases} \Delta U_1, & x \leq 0, x > l, \\ 0, & 0 < x \leq a, s < x \leq l, \\ -\Delta U_2, & a < x \leq s, \end{cases} \quad (2)$$

$$m_i^* = \begin{cases} m_1, & x \leq 0, x > l, \\ m_2, & 0 < x \leq a, s < x \leq l, \\ m_3, & a < x \leq s, \end{cases} \quad (3)$$

где $s = a + b, l = a + b + c$.

Решение уравнения Шредингера для каждой из пяти областей представимо в виде:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 \cdot \exp(k_1 x), \\ \psi_2 = A_2 \cdot \cos(k_2 x) + B_2 \cdot \sin(k_2 x), \\ \psi_3 = A_3 \cdot \cos(k_3(x-a)) + B_3 \cdot \sin(k_3(x-a)), \\ \psi_4 = A_4 \cdot \cos(k_2(x-s)) + B_4 \cdot \sin(k_2(x-s)), \\ \psi_5 = B_5 \cdot \exp(-k_1(x-l)), \end{cases} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= \sqrt{2m_1(\Delta U_1 - E)} / \hbar, k_2 = \sqrt{2m_2 E} / \hbar, \\ k_3 &= \sqrt{2m_3(E + \Delta U_2)} / \hbar. \end{aligned} \quad (6)$$

Граничные условия, следующие из требований непрерывности волновой функции и плотности потока, образуют систему уравнений:

$$\begin{cases} A_1 - A_2 = 0, \\ \frac{k_1}{m_1} A_1 - \frac{k_2}{m_2} B_2 = 0, \\ A_2 \cdot \cos(k_2 a) + B_2 \cdot \sin(k_2 a) - A_3 = 0, \\ -A_2 \frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 a) + B_2 \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 a) - B_3 \frac{k_3}{m_3} = 0, \\ A_3 \cdot \cos(k_3 b) + B_3 \cdot \sin(k_3 b) - A_4 = 0, \\ -A_3 \frac{k_3}{m_3} \sin(k_3 b) + B_3 \frac{k_3}{m_3} \cos(k_3 b) - B_4 \frac{k_2}{m_2} = 0, \\ A_4 \cdot \cos(k_2 A) + B_4 \cdot \sin(k_2 A) - B_5 = 0, \\ -A_4 \frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 A) + B_4 \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 A) + B_5 \frac{k_1}{m_1} = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Полученная система (7) имеет нетривиальные решения относительно неизвестных значений энергий лишь тогда, когда определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных, равен нулю. В итоге получаем выражение для определения энергии связанных состояний, которое удобно представить в виде:

$$\begin{aligned} & (k_2^2 m_2^2 (k_3^2 m_1^2 - k_1^2 m_3^2) + (k_1^2 k_3^2 m_2^4 - k_2^4 m_1^2 m_3^2) \times \\ & \quad \times \operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c)) \operatorname{tg}(k_3 b) + k_2 m_2 \times \\ & \quad \times (k_3 m_3 (k_2^2 m_1^2 - k_1^2 m_2^2) + k_1 m_1 (k_3^2 m_2^2 + k_2^2 m_3^2) \times \\ & \quad \times \operatorname{tg}(k_3 b)) (\operatorname{tg}(k_2 a) + \operatorname{tg}(k_2 c)) + 2k_1 k_2^2 k_3 m_1 m_2^2 m_3 \times \\ & \quad \times (\operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c) - 1) = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Необходимо отметить, что решения уравнения (8) позволяют определять спектр энергий при $\Delta U_1 > E > 0$. Аналогично, путем решения соответствующей краевой задачи, получаем условия кван-

тования для связанных состояний энергии при $0 \geq E > \Delta U_2$:

$$\begin{aligned} & (k_2^2 m_2^2 (k_1^2 m_3^2 - k_3^2 m_1^2) + (k_2^4 m_1^2 m_3^2 - k_1^2 k_3^2 m_2^4) \times \\ & \quad \times \operatorname{th}(k_2 a) \operatorname{th}(k_2 c)) \operatorname{tg}(k_3 b) + k_2 m_2 \times \\ & \quad \times (k_3 m_3 (k_2^2 m_1^2 + k_1^2 m_2^2) + k_1 m_1 (k_2^2 m_3^2 - k_3^2 m_2^2) \times \\ & \quad \times \operatorname{tg}(k_3 b)) (\operatorname{th}(k_2 a) + \operatorname{th}(k_2 c)) + 2k_1 k_2^2 k_3 m_1 m_2 m_3 \times \\ & \quad \times (1 + \operatorname{th}(k_2 a) \operatorname{th}(k_2 c)) = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

В случае ямы с высоким потенциальным барьером ΔU_1 можно воспользоваться моделью бесконечно глубокой ямы. В данном случае условия квантования энергии при $E > 0$:

$$\begin{aligned} & (k_2^2 m_3^2 - k_2^2 m_2^2 \operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c)) \operatorname{tg}(k_3 b) + \\ & \quad + k_2 m_2 k_3 m_3 (\operatorname{tg}(k_2 a) + \operatorname{tg}(k_2 c)) = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Соответственно для энергий $0 \geq E \geq \Delta U_2$:

$$\begin{aligned} & (k_2^2 m_3^2 + k_2^2 m_2^2 \operatorname{th}(k_2 a) \operatorname{th}(k_2 c)) \operatorname{tg}(k_3 b) + \\ & \quad + k_2 m_2 k_3 m_3 (\operatorname{th}(k_2 a) + \operatorname{th}(k_2 c)) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Для ямы с бесконечно высокими стенками при $E > 0$ выражение для коэффициентов, определяющих волновую функцию с точностью до нормировочного множителя A , принимают вид:

$$\begin{aligned} & A_1 = A_2 = B_5 = 0, B_2 = A, A_3 = A \cdot \sin(k_2 a), \\ & B_3 = A \frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} \cos(k_2 a), \\ & A_4 = A \left[\frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} \cos(k_2 a) \sin(k_3 b) + \right. \\ & \quad \left. + \sin(k_2 a) \cos(k_3 b) \right], \\ & B_4 = -A_4 \operatorname{ctg}(k_2 c). \end{aligned} \quad (12)$$

Таким образом, получены выражения, позволяющие определять вероятность нахождения

электрона в той или иной области квантовой структуры в зависимости от положения и ширины провала, а также соотношения эффективных масс.

Построим графическую зависимость квадрата волновой функции в основном $\psi_{(1)}^2(x)$ и первом возбужденном $\psi_{(2)}^2(x)$ состояниях в зависимости от координаты x (рис. 2). Для построения графических зависимостей были взяты данные из работы [7]: $a=c=9\text{\AA}$, $b=18.4\text{\AA}$, $\Delta U_2=0.24\text{ эВ}$, $m_2=0.046m_0$, $m_3=0.023m_0$, где m_0 — масса электрона. Для сравнения на рис. 2 приведены квадраты соответствующих волновых функций для простой квантовой ямы с бесконечно высокими стенками, имеющей ширину $l=a+b+c$ (пунктирная линия). Видно, что наличие провала приводит к уменьшению вероятности положения электрона в области с меньшей энергией как для основного (рис. 2a) так и возбужденного (рис. 2b) состояния. Указанное явление объясняется тем, что при финитном движении внутри ямы электрон испытывает частичное отражение при движении над ямой [4].

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

Полученные условия для квантования энергий позволяют проанализировать влияние положения и ширины дополнительного провала на энергетический спектр носителей заряда в приборах нанoeлектроники, основу которых составляют гетеропереходы и структуры с переменным профилем легирования. Выражения, определяющие волновую функцию в квантовой яме, позволяют находить локализацию электрона в зависимости от потенциального рельефа и профиля легирования.

На рис. 3 показаны зависимости смещений положений основного уровня E_1 и возбужденного уровня E_2 от положения провала для ямы конечной глубины (a) и ямы с бесконечно высокими стенка-

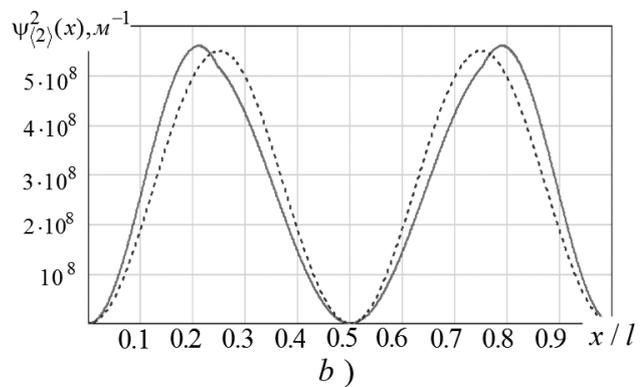
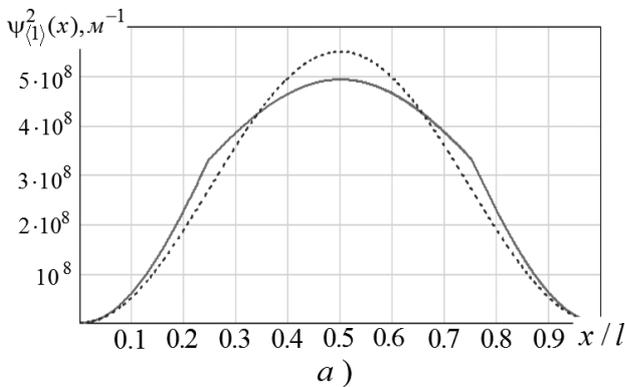


Рис. 2. Зависимость квадрата волновой функции основного состояния (a) и первого возбужденного (b) от координаты в квантовой яме с бесконечно высокими стенками

ми (*b*). Значения эффективных масс и энергий электрона в яме, а также общая ширина потенциальной ямы взяты из работы [7]: $a = c = 9 \text{ \AA}$, $b = 18.4 \text{ \AA}$, $\Delta U_2 = 0.24 \text{ эВ}$, $m_2 = 0.046 m_0$, $m_3 = 0.023 m_0$, где m_0 — масса электрона.

Как показывают выполненные расчеты, смещение области провала от края к центральной области способствует увеличению разности между первым (основным) уровнем энергий и возбужденным состоянием. Видно, что в различных моделях квантовых ям количественные отличия величин энергий связанных состояний весьма значительны, однако, общая картина характера изменений неизменна. Вышеуказанное позволяет полагать, что на характер смещения уровней в яме наибольшее влияние оказывает рельеф провала, а не форма

внешних границ структуры. На рис. 3 также показано изменение относительного положения основного и первого возбужденного состояния ($\Delta E = E_2 - E_1$). Известно, что разность между уровнями в квантовой яме увеличивает контрастность ВАХ РТД. Результаты данных расчетов указывают на то, что при расположении провала по центру ямы контрастность ВАХ РТД максимальна. Необходимо отметить, что изменение рельефа квантовой ямы наиболее сильно сказывается на положении возбужденного состояния.

Для анализа влияния ширины провала на структуру состояний внутри ямы нами построены графические зависимости энергий связанных состояний от ширины провала ($b/l, l = \text{const}$), представленные на рис. 4. Выполненные расчеты показывают

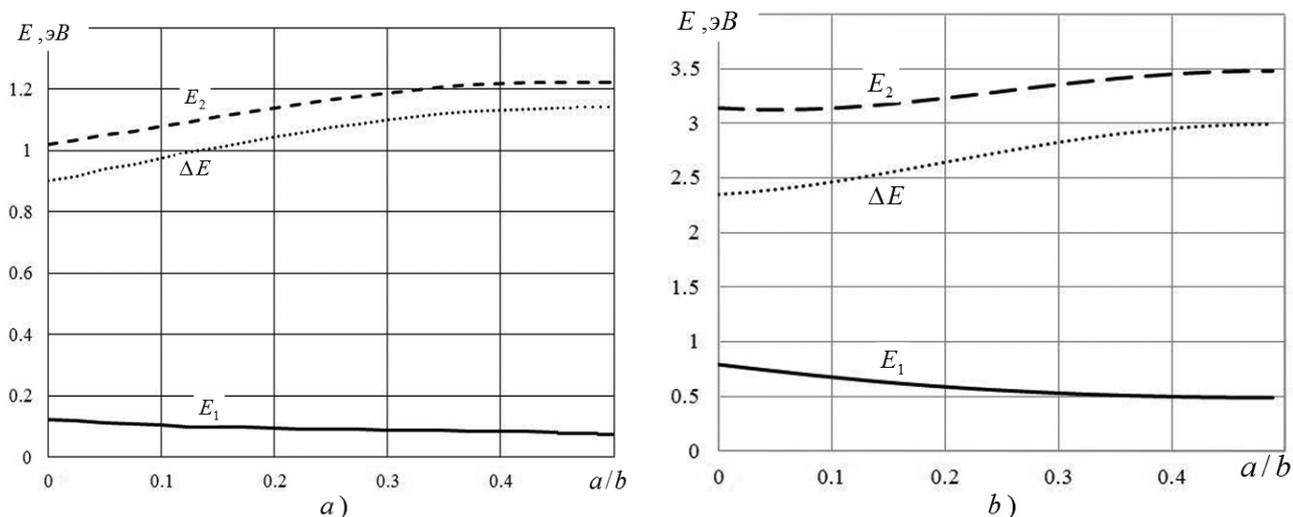


Рис. 3. Зависимость положений нижних энергетических уровней E_1, E_2 и энергетической щели ΔE между ними от положения провала для ямы конечной глубины (*a*) и бесконечно глубокой ямы (*b*)

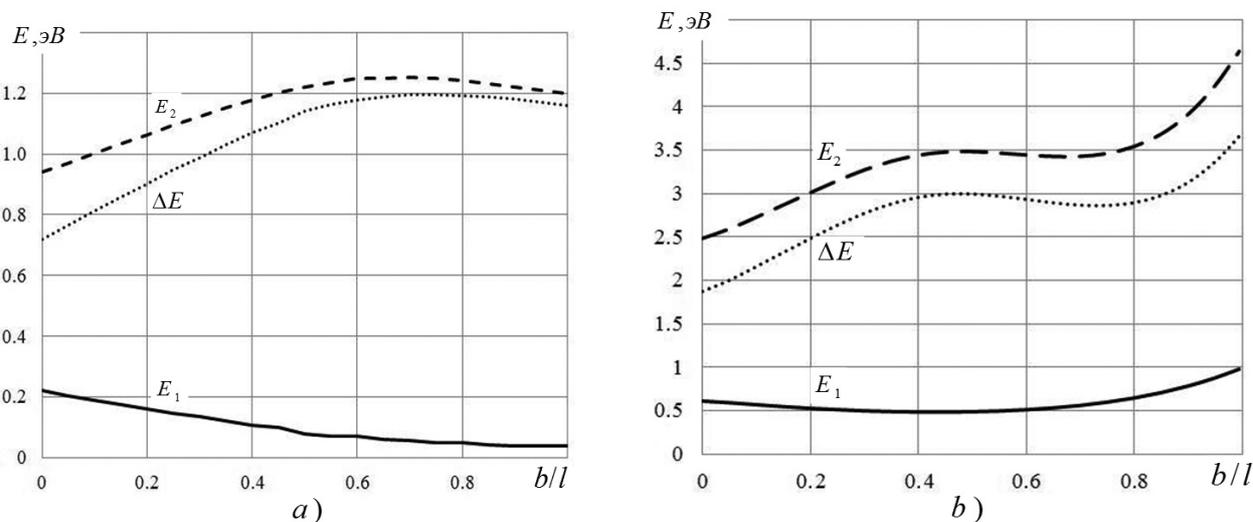


Рис. 4. Зависимость положений нижних энергетических уровней E_1 и E_2 , а также энергетической щели ΔE между ними от ширины провала для ямы конечной глубины (*a*) и бесконечно глубокой ямы (*b*)

монотонное снижение положения основного состояния E_1 с ростом ширины провала в модели ямы конечной глубины. Зависимость положения первого возбужденного состояния E_2 от ширины провала не является однообразной и носит более сложный характер, обусловленный тем, что волновая функция с увеличением основного квантового числа имеет большее число узловых точек и более сложный характер влияния границ. Видно, что при относительной ширине провала $b/l=0.5$ получаем примерно такое же значение, как и в случае, если бы материал, образующий провал, составлял всю область ямы. В модели квантовой ямы с бесконечно-высокими стенками получаем несколько отличные результаты, что говорит о влиянии границ на смещение уровней.

Как показывает расчет, выполненный согласно выражениям (9), в случае относительно глубокого или широкого провала (для рассматриваемых структур при $b/l \geq 0.5$, $a=c$) возникают отрицательные уровни энергий. Таким образом, появляется возможность захвата электрона в области провала при его туннелировании через структуру РТД и появления эффекта кулоновской блокады [5, 8], что, несомненно, уменьшает амплитудные значения резонансного тока.

Относительное смещение положений основного и первого возбужденного состояний можно качественно объяснить на основании теории возмущения [4]. В первом приближении собственные значения энергий могут быть представлены выражением:

$$E_{(n)}^{(2)} \approx E_{(n)}^{(0)} + \Delta E_{(n)}^{(1)}, \Delta E_{(n)}^{(1)} = \langle \psi_{(n)}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{(n)}^{(0)} \rangle, \quad (13)$$

где $E_{(n)}^{(0)}$ и $\psi_{(n)}^{(0)}$ — невозмущенные значения энергий и волновых функций состояния с номером n , \hat{V} — оператор возмущения. Для случая положения провала шириной b , глубиной $-\Delta U_2$ посередине бесконечно глубокой квантовой ямы шириной S получаем:

$$\begin{aligned} \Delta E_{(1)}^{(1)} &= -\Delta U_2 \frac{b}{s} - \frac{\Delta U_2}{\pi} \sin\left(\frac{\pi b}{s}\right); \\ \Delta E_{(2)}^{(1)} &= -\Delta U_2 \frac{b}{s} + \frac{\Delta U_2}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi b}{s}\right). \end{aligned} \quad (14)$$

Как показывают выражения (14), смещения положений энергетических уровней в квантовой яме приводят к понижению положений уровней, как основного, так и возбужденного состояний. Очевидно, что для объяснения положительного смещения возбужденного состояния необходимо

учесть разность эффективных масс, в соответствие с этим, в модели квантовой ямы с бесконечно высокими стенками получаем:

$$\begin{aligned} \Delta E_{(n)}^{(1)} &= \frac{2}{s} \int_{(s-b)/2}^{(s+b)/2} \sin\left(\frac{\pi n x}{s}\right) \times \\ &\times \left(\frac{\hat{p}^2}{2m_3} - \frac{\hat{p}^2}{2m_2} - \Delta U_2 \right) \sin\left(\frac{\pi n x}{s}\right) dx = \\ &= \left(\frac{\pi n^2 \hbar^2}{2s^2} \left(\frac{1}{m_3} - \frac{1}{m_2} \right) - \Delta U_2 \right) \times \\ &\times \left(\frac{b}{s} - \frac{(-1)^n}{n\pi} \sin\left(\frac{2\pi n b}{s}\right) \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Причина смещения возбужденного уровня заключается в том, что гамильтониан частицы в яме с провалом отличается не только потенциальной энергией, но также и кинетической энергией из-за отличия эффективных масс в различных частях ямы. Как было показано ранее, изменение потенциального профиля простой ямы за счет провала глубиной $-\Delta U_2$ должно приводить к понижению уровня, в то время как разность кинетических энергий при $m_3 < m_2$ способствует подъему уровней. Для первого возбужденного состояния ($n=2$) влияние различия эффективных масс оказывается сильнее, и поэтому возбужденный уровень в яме с дополнительным провалом располагается выше возбужденного уровня в простой яме. Необходимо отметить, что в рамках линейной теории возмущений возможно качественно пояснить поведение смещений энергий лишь при малых величинах b/l , с ростом ширины провала необходимо учитывать более высокие степени приближений.

Таким образом, полученные результаты показывают, что положение и ширина энергетического провала в РТД со сложным профилем легирования оказывают значительное влияние на его свойства. Полученные выражения, определяющие энергетический спектр носителей заряда в квантовых ямах сложной формы, могут быть полезны при проектировании и моделировании туннельно-резонансных структур, используемых в современных быстродействующих устройствах электроники.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вдовин Е. Е., Ханин Ю. Н. // ФТП. 2005. Т. 39. № 5. С. 445.
2. Ремнев М. А., Катеев И. Ю., Елесин В. Ф. // ФТП. 2010. Т. 44. № 8. С. 1068.

3. Алферов Ж. И. // ФТП. 1998. Т. 32. № 1. С. 3.
4. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы нанoeлектроники. М.: Физматкнига, 2006. С. 496.
5. Демиховский В. Я., Вугальтер Г. А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. С. 248.
6. Дымников В. Д., Константинов О. В. // ФТП. 1995. Т. 29. № 1. С. 133.
7. Broekaert T. P. E., Lee W., Fonstad C. G. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 53. № 16. P. 1545.
8. Абрамов И. И., Новик И. И. // ФТП. 1999. Т. 33. № 11. С. 1388.

Филиппов Владимир Владимирович — к.ф.-мат.н., доцент, Липецкий государственный педагогический университет; тел.: (4742) 328385, (4742)- 328383, e-mail: wwfilippow@mail.ru

Заворотний Анатолий Анатольевич — аспирант, Липецкий государственный педагогический университет; тел.: (4742) 328385, 328383, e-mail: aazavorotny@rambler.ru

Бормонтов Евгений Николаевич — д.ф.-мат.н., профессор кафедры физики полупроводников и микроэлектроники, Воронежский государственный университет; тел.: (4732) 208633, e-mail: PIPhys@main.vsu.ru

Filippov Vladimir V. — PhD (physical and mathematical sciences), associate professor, Lipetsk State Pedagogical University; tel.: (4742) 328385, 328383, e-mail: wwfilippow@mail.ru

Zavorotny Anatoly A. — post-graduate student, Lipetsk State Pedagogical University; tel.: (4742) 328385, 328383, e-mail: aazavorotny@rambler.ru

Bormontov Evgeniy N. — grand PhD (physical and mathematical science), professor, chair of physic of semiconductor and microelectronics, Voronezh State University; tel.: (4732) 208821, e-mail: PIPhys@main.vsu.ru