

И. РАММО

ПЛАВНЫЙ ГЕТЕРОПЕРЕХОД СО СМЕЩЕННОЙ ОБЛАСТЬЮ СМЕНЫ ТИПА ПРЕОБЛАДАЮЩЕЙ ПРИМЕСИ (РАВНОВЕСНОЕ СОСТОЯНИЕ)

(Представил К. К. Ребане)

Модель, и теория гетероперехода (ГП) были предложены Р. Л. Андерсоном в 1960 г. [1]. Теория Р. Л. Андерсона относится к идеализированной модели, согласно которой ГП является резким, смена типа преобладающей примеси (СТПП) происходит скачком, область СТПП и сам ГП совпадают. * В реальном ГП эти предположения выполняются лишь приближенно.

На примере системы GaAs—AlGaAs для равновесного состояния приводятся результаты численного расчета зонной энергетической диаграммы модели ГП, в которой вышеуказанные ограничения модели Р. Л. Андерсона сняты.

Модель гетероперехода и способ расчета

Исследования показали, что граница между GaAs и AlGaAs не является резкой. Наиболее близким к идеальному является ГП, у которого слои выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Толщина переходной области между слоями в таком случае составляет 10 Å. Слои, выращенные методом газовой эпитаксии, имеют переходную область протяженностью порядка 15 Å [2]. Наиболее полно исследована переходная область для слоев, выращенных методом жидкостной эпитаксии. В [3] показано, что в специальных условиях методом жидкостной эпитаксии можно вырастить слои, для которых переходная область имеет протяженность 25 Å — обычно она 100—200 Å [3–5], а в некоторых случаях значительно больше [2]. Следует отметить, что протяженность переходной области характеризуют длиной, на которой концентрация AlAs изменяется от 10 до 90% своего максимального значения. Закон изменения концентрации AlAs пока мало изучен. Данные, приведенные в [2], показывают, что он может значительно зависеть от условий роста слоев.

В настоящей работе предполагается, что переход от GaAs к $Al_{x_0}Ga_{1-x_0}As$ происходит согласно закону

$$x = \frac{x_0}{2} \cdot \left(1 + \operatorname{th} \frac{k - k'}{h_0} \right),$$

где x — концентрация AlAs, k — координата, k' — координата центра области, в которой происходят изменения концентрации AlAs (в дальнейшем центр ГП) и h_0 — характерная длина этого изменения (в дальнейшем характерная длина ГП). Ниже будем считать, что $k' = 0$. Приведенный закон изменения x впервые применялся для описания ГП в [6].

Теоретический расчет зонной энергетической диаграммы плавного

* Это не полный перечень предположений, определяющих модель Р. Л. Андерсона.

$n-n$ -гетероперехода проведен в [6], а $p-n$ -гетероперехода в [7]. Считалось, что СТПП происходит скачком и совпадает с центром ГП. Было установлено, что при увеличении протяженности переходной области уменьшается и наконец исчезает «пичок», возникающий на краю зоны проводимости из-за разности энергии электронного сродства веществ, образующих ГП. Позднее в [8, 9] рассматривался плавный ГП в случае приложенного внешнего напряжения.

Работы, в которых устанавливался бы профиль изменения концентрации донорной и акцепторной примеси около ГП, нам не известны. Поэтому в настоящей работе предполагалось, что концентрация доноров n_d и акцепторов n_a изменяются по законам

$$n_d = \frac{N_d - N'_d}{2} \cdot \left(1 + \operatorname{th} \frac{k - k_d}{h_d} \right) + N'_d,$$

$$n_a = \frac{N_a - N'_a}{2} \cdot \left(1 - \operatorname{th} \frac{k - k_a}{h_a} \right) + N'_a,$$

где n_d и n_a — концентрации донорной и акцепторной примесей соответственно, N_d и N_a — максимальные, а N'_d и N'_a — минимальные концентрации донорной и акцепторной примесей, k_d и k_a — координаты центра областей, в которых происходит изменение концентраций акцепторной и донорной примесей, h_d и h_a — характерные длины изменения концентраций донорной и акцепторной примесей. Чтобы установить длину, на которой концентрация АІАs или донорной, или акцепторной примеси изменяется от 10 до 90% своего максимального прироста, необходимо соответствующую характерную длину (h_0 , h_d или h_a) умножить на 2,197.

Смещение области СТПП относительно ГП может произойти вследствие диффузии легирующей примеси из одного слоя в другой в процессе роста (см., напр., [10]). Если $p-n$ -переход создается методом диффузии легирующей примеси в готовый ГП (см., напр., [11, 12]), то точного совпадения области СТПП с ГП очень трудно достичь. Иногда смещение $p-n$ -перехода относительно ГП используется для управления свойствами приборов, созданных на их основе [13]. Поэтому в настоящей работе расстояния между областями СТПП и ГП варьируют в широких пределах. Нам не известны работы, в которых рассматривалось бы влияние этого параметра, а также протяженности области СТПП на энергетическую диаграмму ГП.

В нашей модели роль поверхностных состояний, которые могут возникнуть на гетерогранице, не учитывалась ввиду их малой концентрации в системе GaAs—AlGaAs. По данным [14–16], концентрация таких состояний порядка 10^9 см^{-2} и поэтому вряд ли может влиять на свойства ГП. Параметры валентной зоны и трех минимумов зоны проводимости, а также диэлектрическая постоянная взяты из [8]. Концентрации свободных электронов $n(k)$ и дырок $p(k)$ рассчитывались на основе статистики Больцмана. Предполагалось, что донорные и акцепторные примеси полностью ионизированы при 300 К.

Для установления зонной диаграммы такого ГП было решено уравнение Пуассона

$$-\frac{d}{dk} \left(\epsilon(k) \frac{d\psi}{dk} \right) = q(p(k) - n(k) + n_d(k) - n_a(k)),$$

где ψ — электростатический потенциал, $\epsilon(k)$ — статическая диэлектрическая постоянная. В условиях термодинамического равновесия это уравнение можно преобразовать так, чтобы единственным неизвестным параметром в нем оставалось расстояние от уровня Ферми до дна зоны проводимости $\mu(k)$

$$-\frac{d}{dk} \left(\varepsilon(k) \cdot \frac{d\mu(k)}{dk} \right) = \frac{d}{dk} \left(\varepsilon(k) \cdot \frac{d\Delta\varepsilon_c(k)}{dk} \right) + \\ + q(p(k) - n(k) + n_d(k) - n_a(k)).$$

Здесь $\Delta\varepsilon_c(k)$ — разрыв зоны проводимости между GaAs и AlGaAs.

Для решения сформулированной выше задачи на ЭВМ был применен метод конечно-разностной аппроксимации дифференциального уравнения. Применялась неравномерная сетка. Полученная система нелинейных уравнений решалась методом Ньютона. Расчеты проводились на ЭВМ М-4030 Института физики АН ЭССР.

Результаты расчетов

В наших расчетах было принято, что характерные длины изменения концентраций донорной и акцепторной примесей равны между собой, т. е. $h_d = h_a = h_2$ (в дальнейшем характерная длина СТПП) и $k_d = k_a = k''$ (в дальнейшем центр области СТПП). Остальные геометрические параметры модели варьировались. Кроме того, было принято, что максимальная концентрация AlAs равна 0,45, максимальные концентрации примесей $N_d = N_a = 1,001 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, а минимальные $N'_d = N'_a = 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

На рис. 1—3 и 5 продемонстрировано влияние протяженности области СТПП и его смещения относительно ГП на форму энергетической диаграммы ГП *p*-GaAs—*n*-AlGaAs.

Влияние величины h_2 (характеризует протяженность области СТПП) на форму энергетической диаграммы * *p*-GaAs—*n*-AlGaAs показано на рис. 1, где центр области СТПП совпадает с центром ГП при характерной длине ГП $h_0 = 0,01 \text{ мкм}$. Протяженность области СТПП с $h_2 = 0,1 \text{ мкм}$ (кривые 2 и 2') сравнима с протяженностью области пространственного заряда ГП, а протяженность СТПП с $h_2 = 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ мкм}$ (кривые 1 и 1') близка к предельно маленькой. Из рис. 1 видно, что при увеличении протяженности области СТПП (h_2) высота «пичка» зоны проводимости $\Delta\varepsilon_c$ увеличивается. За высоту «пичка» принята разность между энергиями вершины «пичка» и дна рядом стоящего «провала». Подчеркнем еще раз, что это утверждение относится к ГП, в котором центры области СТПП и ГП совпадают.

Протяженность области СТПП оказывает заметное влияние на зависимость $\Delta\varepsilon_c$ от характерной длины ГП. Последняя зависимость для

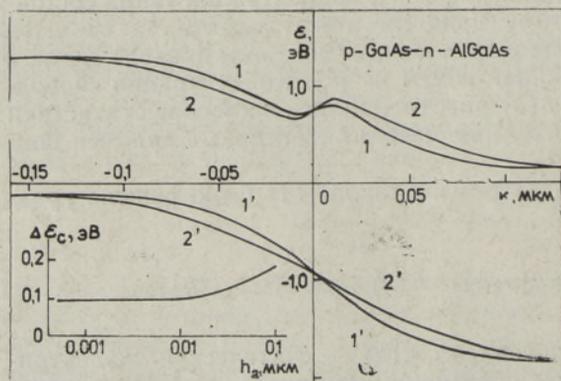


Рис. 1. Энергетические диаграммы ГП при характерной длине области СТПП $h_2 = 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ мкм}$ (1 и 1'), $h_2 = 0,1 \text{ мкм}$ (2 и 2') и зависимость высоты «пичка» зоны проводимости $\Delta\varepsilon_c$ от h_2 . 1 и 2 — край зоны проводимости, 1' и 2' — край валентной зоны. Для всех кривых $h_0 = 0,01 \text{ мкм}$ и $h_1 = 0$.

* Уровень Ферми на этих и последующих энергетических диаграммах совмещен с осью абсцисс.

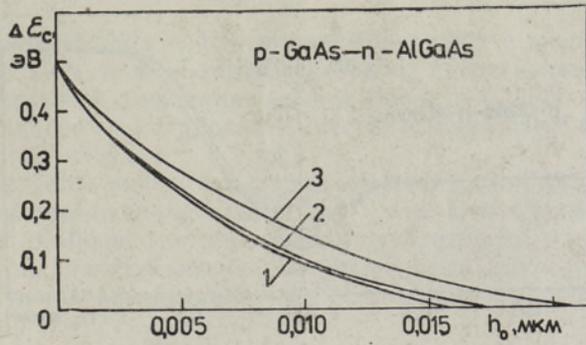
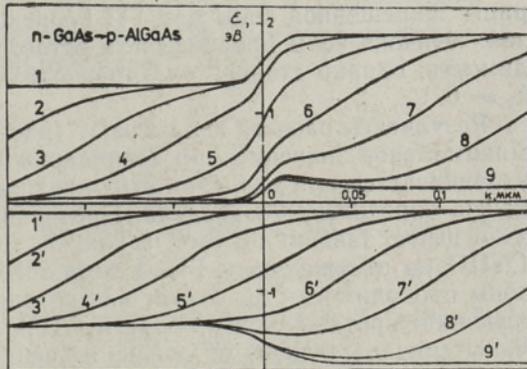
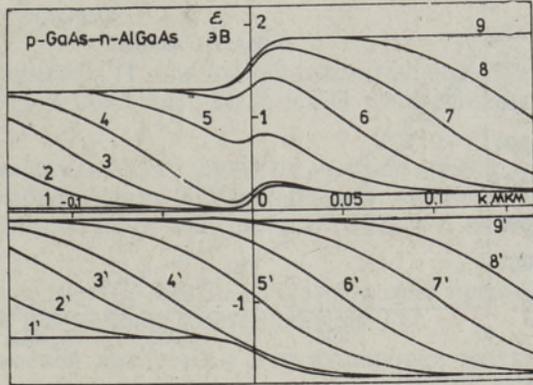


Рис. 2. Зависимость высоты «пичка» зоны проводимости $\Delta \epsilon_c$ от характерной длины ГП h_0 при $h_2 = 0,5 \cdot 10^{-3}$ мкм (1), $h_2 = h_0$ (2) и $h_2 = 0,5 \cdot 10^{-1}$ мкм (3). Для всех кривых $h_1 = 0$.

Рис. 3 и 4. Энергетические диаграммы ГП при разных смещениях h_1 центров области СТПП и ГП относительно друг друга: $h_1 = -0,3$ мкм (1 и 1'), $h_1 = -0,15$ мкм (2 и 2'), $h_1 = -0,1$ мкм (3 и 3'), $h_1 = -0,05$ мкм (4 и 4'), $h_1 = 0$ (5 и 5'), $h_1 = 0,05$ мкм (6 и 6'), $h_1 = 0,1$ мкм (7 и 7'), $h_1 = 0,15$ мкм (8 и 8') и $h_1 = 0,3$ мкм (9 и 9'). Кривые 1—9 представляют край зоны проводимости, а 1'—9' край валентной зоны. Для всех кривых $h_0 = h_2 = 0,01$ мкм.



$h_2 = 0$ была рассчитана в [6, 7]. Как видно из рис. 2, $\Delta \epsilon_c$ возрастает из-за увеличения характерной длины СТПП тем более, чем больше характерная длина ГП (ср. кривые 1 и 3). Кривая 2 соответствует случаю, когда характерная длина ГП и области СТПП равны между собой. Мы предполагаем, что эта кривая соответствует действительности лучше, чем кривые 1 и 3.

Результаты расчета энергетических диаграмм ГП при разных смещениях h_1 между центрами ГП и областью СТПП приведены на рис. 3.

Пары кривых 1, 1' и 9, 9' (рис. 3) представляют края зоны проводимости и валентной зоны для $h_1 = -0,3$ и $0,3$ мкм соответственно. Фактически мы имеем здесь энергетические диаграммы $n-n$ - и $p-p$ -гетеропереходов (удаленных достаточно далеко от $p-n$ -гомопереходов). Дальнейшее увеличение $|h_1|$ не вызывает заметного изменения формы энергетических диаграмм указанных ГП. При уменьшении же $|h_1|$ форма энергетической диаграммы ГП становится очень чувствительной к небольшим смещениям области СТПП относительно ГП. Если область СТПП смещается в сторону AlGaAs ($h_1 > 0$), то почти все изменение ширины запрещенной зоны происходит за счет искривления дна зоны проводимости вверх. Величина «пичка» зоны проводимости может даже

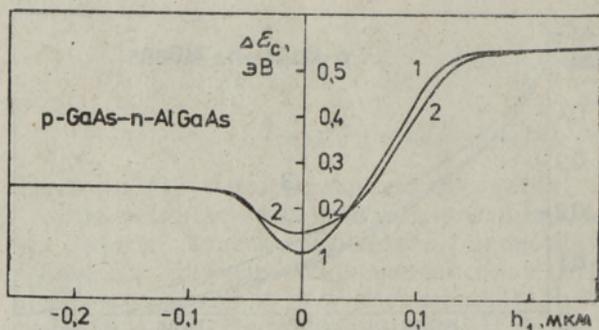


Рис. 5. Зависимость высоты «пика» зоны проводимости $\Delta\epsilon_c$ от смещения h_1 центров области СТПП и ГП относительно друг друга при $h_2 = 0.01$ (1) и 0.05 мкм (2). Для обеих кривых $h_0 = 0.01$ мкм.

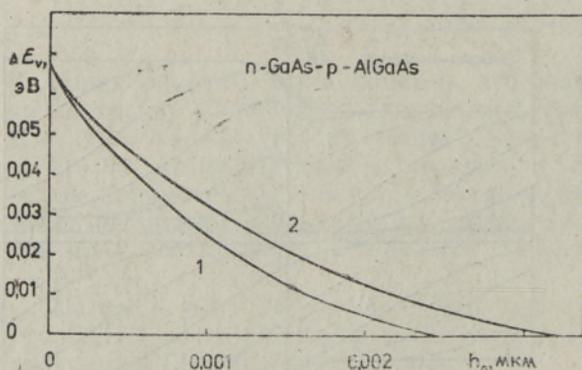


Рис. 6. Зависимость высоты «пика» валентной зоны $\Delta\epsilon_v$ от характерной длины ГП h_0 при $h_2 = 0.5 \cdot 10^{-3}$ мкм и $h_2 = h_0$ (1) и $h_0 = 0.5 \cdot 10^{-1}$ мкм (2).

превышать величину разрыва между зонами GaAs—AlGaAs. Если же область СТПП смещается в сторону GaAs ($h_1 < 0$), то изменение ширины запрещенной зоны при ГП происходит за счет искривления обеих зон. «Пичок» зоны проводимости остается меньше разрыва зоны проводимости, однако становится заметно больше «пичка», получаемого при $h_1 = 0$.

Результаты расчета показывают (рис. 5), что величина «пичка» имеет минимальное значение при совпадении центров областей СТПП и ГП, увеличивается при удалении этих центров друг от друга и достигает, наконец, определенного предела. Предельное значение $\Delta\epsilon_c$, как было указано выше, зависит от того, в какую сторону смещается центр области СТПП по отношению к ГП. Кроме того, из рис. 5 видно, что «пичок» зоны проводимости $\Delta\epsilon_c$ может как возрастать, так и уменьшаться с увеличением протяженности области СТПП. Направление изменения величины «пичка» зависит от смещения центров СТПП и ГП.

Далее, приведем результаты расчета для ГП n -GaAs— p -AlGaAs. Известно, что на резком ГП n -GaAs— p -AlGaAs имеется «пичок» лишь на краю валентной зоны. Кривые 1 и 2 (рис. 6) показывают зависимость высоты «пичка» валентной зоны $\Delta\epsilon_v$ от характерной длины ГП h_0 соответственно при очень малой ($0.5 \cdot 10^{-3}$ мкм) и весьма большой ($0.5 \cdot 10^{-1}$ мкм) протяженности области СТПП. Кривая для ГП с $h_2 = h_0$ расположена незначительно выше кривой 1 и при использованном масштабе неотличима от нее. Таким образом, общие закономерности изменения величины «пичка» $\Delta\epsilon_v$ сходны с таковыми для $\Delta\epsilon_c$ (рис. 2). Однако для n -GaAs— p -AlGaAs величина $\Delta\epsilon_v$ по сравнению с величиной $\Delta\epsilon_c$ значительно меньше и достигает нуля при весьма малых значениях h_0 . Поэтому можно заключить, что на ГП n -GaAs— p -AlGaAs, выращенном методом жидкостной эпитаксии, ощутимого «пичка» на краю валентной зоны не получается.

На рис. 4 пары кривых 1, 1' и 9, 9' представляют энергетические диа-

граммы p - p - и n - n -гетеропереходов и фактически совпадают с энергетическими диаграммами p - p - и n - n -гетеропереходов, представленными на рис. 3. При уменьшении смещения центров области СТПП и ГП форма энергетической диаграммы становится чувствительной даже к небольшим изменениям этого смещения.

Из проведенных нами расчетов видно, что форма энергетической диаграммы ГП зависит как от протяженности самого ГП, так и от протяженности области СТПП, а особенно от их смещения относительно друг друга. Эти зависимости столь значительны, что могут являться одной из причин, затрудняющих получение воспроизводимых результатов при производстве приборов на базе ГП.

Выводы

1. Форма энергетической диаграммы ГП изменяется значительно даже при небольших смещениях центров области СТПП и ГП относительно друг друга.
2. «Пичок», возникающий на энергетической диаграмме из-за разности энергии электронного сродства образующих ГП материалов, увеличивается с увеличением смещения между центрами области СТПП и плавного ГП.
3. «Пичок» зоны проводимости в системе GaAs—AlGaAs может превышать разрыв зоны проводимости материалов, составляющих ГП.
4. Изменения зонной энергетической диаграммы при изменении протяженности области СТПП зависят как от протяженности самого ГП, так и от смещения области СТПП относительно ГП. «Пичок» на энергетической диаграмме может при этом как возрастать, так и уменьшаться.

Автор выражает искреннюю благодарность П. Лыуку за полезные замечания, сделанные им при чтении рукописи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Anderson, R. L. Proc. Int. Conf. Semicond., Prague, 1960, 563—566.
2. Garner, C. M., Su, G. Y., Spicer, W. E. J. Vac. Sci. Technol., **16**, № 5, 1521—1524 (1979).
3. Nijman, W., Leswin, W. J., Thijs, P. IEEE J. Quant. Electron., **QE-17**, № 5, 767—775 (1981).
4. Garner, C. M., Shen, Y. D., Kim, J. S., Pearson, G. L., Spicer W. E., Harris, J. S., Edwall, D. D. J. Appl. Phys., **48**, № 7, 3147—3149 (1977).
5. Chandra, A., Eastman, L. E. Solid-State Electron., **23**, № 6, 599—603 (1980).
6. Oldham, W. G., Milnes, A. G. Solid-State Electron., **6**, № 2, 121—132 (1963).
7. Cheung, D. T., Chiang, S. Y., Pearson, G. L. Solid-State Electron., **18**, № 3, 263—266 (1975).
8. Casey, H. C., Panish, M. B. Heterostructure Lasers, Part A. New York, San Francisco, London, 1978.
9. Lee, S. C., Pearson, G. L. Solid-State Electron., **24**, № 6, 563—568 (1981).
10. Chandra, A., Eastman, L. F. Electron. Lett., **15**, № 3, 90—91 (1979).
11. Katz, J., Bar-Chaim, N., Chen, P. C., Margalit, S., Ury, I., Will, D., Yust, M., Yariv, A. Appl. Phys. Lett., **37**, № 2, 211—213 (1980).
12. Yonezu, H., Sakuma, I., Kobayashi, K., Kamejima, T., Ueno, M., Nannichi, Y. Jap. J. Appl. Phys., **12**, № 10, 1585—1592 (1973).
13. Kressel, H., Lackwood, H. F., Hawrylo, F. Z. J. Appl. Phys., **43**, № 2, 561—567 (1972).
14. Lang, D. V., Logan, R. A. Appl. Phys. Lett., **31**, № 10, 683—684 (1977).
15. Nelson, R. J. J. Vac. Sci. Technol., **15**, № 4, 1475—1477 (1978).
16. Schulman, J. N., McGill, T. C. J. Vac. Sci. Technol., **15**, № 4, 1456—1458 (1978).

I. RAMMO

**NIHUTATUD DOMINEERIVA LISANDITÜÜBI VAHETUMISE PIIRKONNAGA
SUJUV HETEROSIIRE (TASAKAALULINE OLUKORD)**

Töös on analüüsitud heterosiiret, milles üleminek ühelt heterosiiret moodustavalt materjalilt teisele ja ühelt domineerivalt lisanditüübilt teisele toimub sujuvalt (järkjärguliselt) eeldusel, et nimetatud ülemineku piirkonnad ei lange ruumiliselt kokku. Sellise mudeli numbriline arvutus GaAs—AlGaAs-i baasil näitas, et heterosiirde energeetilise diagrammi kuju on tundlik nii heterosiirde enda kui ka lisanditüübi vahetuse piirkonna ulatuse suhtes, eriti aga viimase kahe piirkonna omavahelise nihke suhtes. On toodud esile mõned heterosiirde iseärasused, millele varem pole kirjanduses tähelepanu juhitud.

I. RAMMO

**GRADED HETEROJUNCTION WITH A DISPLACED CHANGE REGION
OF THE TYPE OF DOMINANT IMPURITY (CASE OF THERMODYNAMICAL
EQUILIBRIUM)**

A graded heterojunction is analysed in case of which the change from one material of heterojunction to another as well as from one dominant impurity to another occurs gradually. It is assumed that the transition regions are shifted with respect to each other. A numerical calculation of such model on the basis of GaAs—AlGaAs shows that the form of the energetic diagram of the heterojunction depends strongly on the extent of the heterojunction as well as that of the change of the impurity type and that it is especially sensitive to the shift of one region in relation to the other. Some peculiarities of heterojunctions earlier not referred to in literature are pointed out.