Самосогласованный расчет туннельного тока в двухбарьерных гетероструктурах *w*-GaN/AlGaN (0001)

© С.Н. Гриняев ¶, А.Н. Разжувалов ¶

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете, 634050 Томск, Россия

(Получена 27 июня 2005 г. Принята к печати 7 ноября 2005 г.)

На основе совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона с учетом спонтанной и пьезоэлектрической поляризации изучены особенности туннельного тока в двухбарьерных вюрцитных структурах GaN/AlGaN (0001). Показано, что внутренние поля проявляют себя в асимметрии туннельного тока через величину электронного заряда в квантовой яме. Этот заряд больше, когда внешнее и внутреннее поля в яме компенсируют друг друга, что приводит к уменьшению сдвигов потенциала активной области и резонансных уровней от напряжения, увеличению сопротивления структуры и линейной зависимости тока от напряжения в широком интервале напряжений. При совпадении внешнего и внутерннего полей в токе возникает резкая структура отрицательной дифференциальной проводимости с отношением пик/долина ~ 4, подобная одной из ветвей вольт-амперной характеристики двухбарьерной структуры GaAs/AlGaAs (001), что свидетельствует о перспективности использования нитридных материалов в резонансно-туннельных приборах.

PACS: 73.63.Hs, 73.21.Fg

1. Введение

Нитридные вюрцитные гетероструктуры w-GaN/ AlGaN (0001) находят все более широкое применение в различных приборах электроники и оптоэлектроники высокочастотных транзисторах, светодиодах, лазерах, фотодетекторах, переключателях и т.д. [1]. Ведутся поиски возможностей использования этих материалов в других элементах наноэлектроники, в том числе устройствах с поперечным транспортом, свойства которых сильно зависят от внутренних электрических полей. Показано [2-5], что спонтанная и пьезоэлектрическая поляризации приводят к "красному" или "голубому" сдвигу резонансов в зависимости от толщины и положения барьеров по отношению к полярной оси, формируют штарковскую лестницу состояний в ограниченных сверхрешетках с ультратонкими слоями [2], вызывают наравномерное распределение плотности уровней в дырочных минизонах [3] и асимметрию тока в двойных структурах с барьером Шоттки [4,5]. В нашей предыдущей работе [6] туннельный ток в структурах и сверхрешетках на основе w-GaN/AlGaN (0001) исследовался в приближении плоских зон, что позволило объяснить его закономерности как результат перехода от линейного к квадратичному эффекту Штарка при компенсации внутреннего и внешнего полей в квантовой яме. Известно, однако, что в легированных структурах, например GaAs/AlGaAs (001), перераспределение электронного заряда приводит к заметному сдвигу пиков туннельного тока в область больших напряжений и уменьшению отношения пик/долина [7]. В сильно легированных нитридных структурах, имеющих большой разрыв зоны проводимости и изначально треугольный вид потенциальной ямы, эти эффекты также должны быть существенными.

В связи с этим в настоящей работе вольт-амперные характеристики в двухбарьерных структурах GaN/AlGaN/GaN (0001) исследованы на основе самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Проведен анализ влияния распределения заряда на резонансные состояния и электронный потенциал, установлены особенности туннельного тока в зависимости от толщины слоев, степени легирования и температуры.

2. Метод расчета

Рассмотрены нелегированные гетероструктуры $Al_{0.3}Ga_{0.7}N(nc_1)/GaN(kc_2)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(mc_1)$ $(nc_1, kc_2,$ *mc*₁ — толщины слоев вдоль гексагональной оси, *c*₁, с₂ — постоянные решетки), расположенные между контактными областями из GaN, легированными донорами — атомами кремния с энергией ионизации $E_d = 0.308 \, \text{эB}$ [8]. Движение электронов в области контактов описывалось в полуклассическом приближении, внутри двухбарьерной структуры — квантовым образом в баллистическом приближении. Внутренние поля, вызванные спонтанной и пьезоэлектрической поляризацией, учитывались в рамках макроскопического подхода [2].

Плотность туннельного тока вычислялась в приближении изотропной эффективной массы из разности потоков электронов, налетающих слева и справа на квантовую область [7]:

$$j = \frac{em^*kT}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_m}^{\infty} D(E) \ln\left(1 + \exp\frac{E_F - E}{kT}\right) dE$$
$$-\frac{em^*kT}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_m}^{\infty} D(E) \ln\left(1 + \exp\frac{E_F - eV - E}{kT}\right) dE, \quad (1)$$

где *Е* — энергия, *E_m* — минимальная энергия электронов в области эмиттера, *е* — заряд электрона, *V* —

[¶] E-mail: shuvalov@phys.tsu.ru

^{¶¶} E-mail: gsn@phys.tsu.ru

напряжение на структуре, *Т* — температура, *k* — постоянная Больцмана. Энергия уровня Ферми *E_F* определялась из решения уравнения электронейтральности.

Коэффициент прохождения D(E) электронов через двухбарьерную структуру рассчитывался методом матрицы рассеяния [2,9]. Уравнение Шредингера решалось в однодолинном приближении метода огибающих волновых функций с учетом зависимости эффективной массы от энергии [2]:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{m^*}\frac{d\Psi}{dz}\right) + W(z)\Psi = E\Psi.$$
 (2)

Здесь $W(z) = e\Phi(z) + \Delta E_c(z)$ — потенциальная энергия электрона, ΔE_c — разрыв зоны проводимости, равный 0.8 эВ [2]. Электростатический потенциал $\Phi(z)$ определялся из уравнения Пуассона

$$\frac{d}{dz}\left[\varepsilon(z)\,\frac{d}{dz}\,\Phi(z)\right] = e\left[N_D^+ - n(z)\right],\tag{3}$$

где $\varepsilon(z)$ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость (для обоих материалов полагалась равной 10), N_D^+ — концентрация ионизованных доноров, n(z) концентрация электронов. Совместное решение уравнений (2) и (3) проводилось методом итераций с точностью нахождения $W(z) \sim 0.001$ эВ.

Концентрация электронов в контактных областях равна

$$n(z) = \frac{2kT(m^*/2)^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \\ \times \int_{W(z)}^{\infty} \frac{\ln\{1 + \exp[(E_F - E)/kT]\}}{\sqrt{E - W(z)}} dE, \quad z < z_1, \\ n(z) = \frac{2kT(m^*/2)^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \\ \times \int_{W(z)}^{\infty} \frac{\ln\{1 + \exp[(E_F - eV - E)/kT]\}}{\sqrt{E - W(z)}} dE, \quad z > z_2,$$
(4a)

в активной области

$$n(z) = N_1 \int_{W(z_1)}^{\infty} \frac{|\Psi_{\to}(E,z)|^2 \ln\{1 + \exp[(E_F - E)/kT]\}}{\sqrt{E - W(z_1)}} dE$$
$$+ N_2 \int_{W(z_2)}^{\infty} \frac{|\Psi_{\leftarrow}(E,z)|^2 \ln\{1 + \exp[(E_F - eV - E)/kT]\}}{\sqrt{E - W(z_2)}} dE,$$

$$z_1 \le z \le z_2, \tag{4b}$$

где Ψ_{\rightarrow} и Ψ_{\leftarrow} — волновые функции, отвечающие электронам, налетающим на квантовую область слева и справа соответственно; z_1 , z_2 — координаты левой и правой границ квантовой области. Константы N_1 и

N₂ определялись из условия непрерывности электронной плотности на границах квантовой и классической областей.

3. Результаты расчета и обсуждение

На рис. 1 приведены потенциальная энергия W(z) и концентрация электронов n(z) в двухбарьерной структуре GaN $(2c_1)$ /AlGaN $(5c_2)$ /GaN $(2c_1)$, вычисленные в отсутствие внешнего поля. Нижний резонансный уровень в такой структуре расположен значительно выше уровня Ферми $(E_F = 0.025 \text{ зB})$, поэтому в квантовой яме накапливается небольшой электронный заряд, слабо влияющий на профиль потенциала и коэффициент прохождения. Вблизи гетерограниц со стороны контактов формируются практически одинаковые области обедненного электронного заряда протяженностью ~ 100 Å.

Влияние самосогласованного распределения заряда усиливается, когда резонансные уровни приближаются к уровню Ферми. Это имеет место в структурах с широкими квантовыми ямами, в которых накапливается большой электронный заряд, вызывающий сдвиг потенциала активной области и резонансных уровней вверх (таблица).

Подобный эффект имеет место и при включении внешнего поля, потенциал которого приближает нижний резонансный уровень к уровню Ферми. В результате растущего заряда в яме изменение энергии резонансного уровня от напряжения замедляется, а сопротивление структуры увеличивается. На рис. 2 приведена вольт-амперная характеристика структуры $GaN(2c_1)/AlGaN(5c_2)/GaN(2c_1)$ при T = 250 К. При положительных напряжениях левая контактная область заряжена положительно. Максимумы туннельного тока



Рис. 1. Потенциальная энергия W(z), концентрация электронов n(z) и резонансные уровни в двухбарьерной структуре Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c₁)/GaN(5c₂)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c₁) в отсутствие внешнего поля. На вставке приведен фрагмент W(z) в активной области вблизи уровня Ферми. $z_1 = 638$ Å, $z_2 = 684$ Å.

Физика и техника полупроводников, 2006, том 40, вып. 6

Резонансные уровни в двухбарьерных гетероструктурах $Al_{0.3}Ga_{07}N(nc_1)/GaN(kc_2)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(mc_1)$ относительно края зоны проводимости в глубине контактов при V=0

n-k-m	E_r^s	E_r^{ns}	n_w^s/n_c
2-5-2	0.158 0.608	0.148 0.599	0.36
2-6-2	0.124 0.498	0.105 0.481	0.95
2-7-2	0.105 0.425	0.072 0.394	1.67
2-8-2	0.091 0.370	0.046 0.328	2.21
3-8-3	0.095 0.395	0.025 0.329	2.21
2-5-3	0.124 0.567	0.104 0.549	1.13
3-5-2	0.191 0.644	0.185 0.639	0.16
3-5-3	0.149 0.595	0.141 0.588	0.35
3-6-3	0.118 0.500	0.093 0.477	1.28
3-7-3	0.104 0.438	0.056 0.393	2.37

Примечание. E_r^s — энергии резонансных уровней, самосогласованный расчет; E_r^{ns} — энергии резонансных уровней, несамосогласованный расчет; n_w^s/n_c — отношение максимальной концентрации электронов в яме n_w^s к концентрации электронов в глубине контактов $n_c = 1.83 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Энергии приведены в эВ.

*j*_{max} в несамосогласованном расчете отвечают напряжениям V_{max}, при которых резонансные уровни в квантовой яме совпадают с уровнем Ферми. В самосогласованном расчете наблюдаются резкие обрывы тока при совпадении резонансных уровней в квантовой яме с минимумом зоны проводимости в эмиттере $(E_r = E_m)$. Видно, что в то время как в несамосогласованном расчете особенности тока проявляются на обеих ветвях напряжений, в самосогласованном расчете при совпадении направлений внешнего и внутреннего полей в яме (V < 0) наблюдается один пик, а при противоположных направлениях полей пики тока в области $0 < V < 3 \,\mathrm{B}$ вообще отсутствуют. Это связано с тем, что в приближении плоских зон все падение напряжения приходится на квантовую область, тогда как при учете самосогласованного распределения электронного заряда заметное падение напряжения приходится и на приконтактные области, причем основное падение напряжения приходится на достаточно протяженную обедненную электронами область коллектора. Поэтому условие возникновения обрыва тока ($E_r = E_m$) выполняется при бо́льших напряжениях. Электронный заряд локализуется в квантовой яме и эмиттере, величина заряда зависит от направления внешнего поля. При V > 0 внешнее и внутреннее поля в яме направлены противоположно, потенциал активной



Рис. 2. Туннельный ток в двухбарьерной структуре $Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c_1)/GaN(5c_2)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c_1)$: сплошная линия — самосогласованный расчет, штриховая — несамосогласованный расчет. На вставках — профили потенциальных энергий W(z), вычисленные при напряжениях, отвечающих первым максимумам тока, рассчитанного в модели плоских зон. Резонансные уровни в ямах показаны для самосогласованного расчета.



Рис. 3. Потенциальные энергии W(z) (сплошная линия) и концентрации электронов n(z) (пунктирная) в двухбарьерной структуре Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2 c_1)/GaN(5 c_2)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2 c_1) при $V = \pm 1.4$ B.

области с ростом напряжения становится более симметричным. Это приводит к большей локализации волновой функции и увеличению заряда в яме, вызывающему сдвиг потенциала активной области вверх (рис. 3). При отрицательных напряжениях внешнее и внутреннее поля в яме совпадают по направлению, потенциал двухбарьерной структуры с ростом |V| становится менее симметричным, величина заряда в яме и связанный с ним сдвиг потенциала уменьшаются. Заряд в области эмиттера зависит от мощности прилегающего к эмиттеру барьера. При V < 0 потенциал такого барьера имеет эффективно большую мощность (рис. 3), поэтому вблизи контакта накапливается больший заряд. Результирующие изменения потенциала квантовой области сводятся к его сдвигу как целого за счет изгиба в области эмиттера $E_m - E_c$ (Е_с — край зоны проводимости в глубине эмиттера) и деформации, вызывающей штарковский свдиг уровня относительно середины ямы за счет однородной [6] и неоднородной компонент электрического поля (изгиба дна ямы). Это приводит к асимметрии в зависимости резонансного уровня от напряжения. С ростом напряжения резонансный уровень сдвигается медленнее при V > 0, чем при V < 0. Поэтому для положительных напряжений сопротивление структуры больше и особенности тока сильнее сдвинуты в сторону бо́льших напряжений. При напряжении $V = -1.5 \,\mathrm{B}$ уровни E_r и E_m выравниваются, заряд в яме скачком убывает, потенциал активной области понижается. Нижний резонанс с этого момента вклада в ток не дает, что проявляется в резком обрыве тока. С дальнейшим ростом отрицательных напряжений ток постепенно увеличивается за счет вклада от второго резонанса.

При напряжениях -1.2 < V < 3 В в туннельном токе выделяются два линейных участка, связанных с влиянием только нижнего резонанса, что позволяет дать им модельное объяснение. Основной вклад в ток дает узкая область коэффициента прохождения вблизи энергии резонанса E_r , где D(E) имеет лоренцевский вид [10]:

$$D(E) \approx D(E_r) \,\frac{\hbar^2/(2\tau_r)^2}{(E - E_r)^2 + \hbar^2/(2\tau_r)^2}.$$
 (5)

Здесь τ_r — вермя жизни квазистационарного состояния, $\Gamma = \hbar/\tau_r$ — ширина резонансного пика. С учетом слабой по сравнению с D(E) энергетической зависимостью логарифма в формуле (1) получаем

$$j = \frac{em^*kT}{2\pi^2\hbar^3} D(E_r) \ln\left\{\frac{1 + \exp[(E_F - E_r)/kT]}{1 + \exp[(E_F - eV - E_r)/kT]}\right\}$$
$$\times \frac{\hbar}{2\tau_r} \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg}\frac{E_m - E_r}{\hbar/2\tau_r}\right). \tag{6}$$

В рассматриваемом интервале напряжений полуширина $\Gamma/2 \approx 0.005$ эВ много меньше разности энергий $E_m - E_r \approx 0.05$ эВ, поэтому

$$j = \frac{em^*kT}{4\pi\hbar^2\tau_r} D(E_r) \ln\left\{\frac{1 + \exp[(E_F - E_r)/kT]}{1 + \exp[(E_F - eV - E_r)/kT]}\right\}.$$
(7)



Рис. 4. Сравнение точного (сплошная линия) и модельных расчетов по формуле (7) (точки) и по формуле (9) (штриховая линия) туннельного тока в двухбарьерной структуре Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c₁)/GaN(5c₂)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c₁). На вставках время жизни квазистационарного состояния τ_r , значение коэффициента прохождения в резонансе $D(E_r)$, изменение расположения резонансных уровней E_r относительно E_c .

В пределе $T \to 0$ эта формула переходит в выражение, полученное в [10]. Расчет тока по формуле (7) с параметрами резонанса E_r , τ_r и $D(E_r)$ дает хорошее согласие с точным расчетом (рис. 4). Некоторые отличия наблюдаются лишь в области отрицательных напряжений, где D(E) имеет нелоренцевский вид, поскольку $E_r \approx E_m$. Для напряжений V > 1.5 В выполняются условия

$$|E_F - eV - E_r| \ll kT \ll E_r - E_F, \tag{8}$$

при которых формула (7) принимает простой вид:

$$j = -\frac{em^*}{4\pi\hbar^2\tau_r} D(E_r) \left(\ln 2 + \frac{E_F - eV - E_r}{2kT}\right).$$
(9)

При V > 0 потенциал квантовой области, а вместе с ним и величины $D(E_r)$, τ_r практически неизменны, тогда как энергия резонансного уровня меняется в зависимости от напряжения почти линейно (рис. 4). Поэтому вольт-амперная характеристика имеет линейный характер, причем рост тока вызван только увеличением числа туннелирующих электронов. За счет эффекта замедления движения резонансного уровня условия (8) выполняются в довольно широкой области положительных напряжений. При отрицательных напряжениях этот эффект слабее, поэтому результаты, полученные по формуле типа (9), справедливы в более узкой области напряжений и на рис. 4 не показаны.

С ростом температуры и степени легирования плотность электронов увеличивается, длина Дебая уменьшается. Поэтому туннельный ток и падение напряжения на



Рис. 5. Туннельный ток в двухбарьерной структуре $Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c_1)/GaN(5c_2)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c_1)$ для разных температур и уровней легирования: I - T = 250 K, $N_d = 5 \cdot 10^{19}$ см⁻³; 2 - T = 300 K, $N_d = 10^{19}$ см⁻³; 3 - T = 300 K, $N_d = 5 \cdot 10^{19}$ см⁻³. 4 -ток в структуре $Al_{0.3}Ga_{0.7}As(5a)/GaAs(5a)/Al_{0.3}Ga_{0.7}As(5a)$ при $N_d = 5 \cdot 10^{18}$ см⁻³ и T = 250 K.

квантовой области увеличиваются, а пиковое напряжение V_{max} уменьшается (рис. 5).

С увеличением ширины ямы или барьеров пик коэффициента прохождения становится более узким, вследствие чего сопротивление структуры растет, а туннельный ток уменьшается.

Для сравнения подобный саомогласованный расчет туннельного тока был проведен для симметричной двухбарьерной структуры Al_{0.3}Ga_{0.7}As(5a)/ $GaAs(5a)/Al_{0.3}Ga_{0.7}As(5a)$ (*a* — постоянная решетки). Контактные области из GaAs легировались донорами с концентрацией $N_d = 5 \cdot 10^{18} \, \mathrm{cm}^{-3}$ и уровнем ионизации $E_d = 5$ мэВ. Энергия нижнего резонансного уровня в этой структуре почти совпадает с энергией резонанса в AlGaN $(2c_1)$ /GaN $(5c_2)$ /AlGaN $(2c_1)$. При отрицательных напряжениях заряды в квантовых ямах GaAs и GaN сопоставимы по величине, близкими оказываются и вольтамперные характеристики двух структур. При положительных напряжениях ток в GaAs/AlGaAs/GaAs ведет себя симметрично, тогда как в GaN/AlGaN/GaN из-за влияния встроенных полей величина тока уменьшается, а пики сдвигаются в сторону больших напряжений.

4. Заключение

В работе показано, что в нитридных гетероструктурах GaN/AlGaN самосогласованное распределение заряда играет важную роль для точного описания вольтамперных характеристик. Встроенные поля проявляют себя в асимметрии туннельного тока через величину заряда в области квантовой ямы. Заряд больше в случае, когда внешнее поле направлено против внутреннего поля в яме. Это наряду со штарковским эффектом приводит к частичному закреплению резонансных уровней и росту сопротивления. В двухбарьерной структуре AlGaN $(2c_1)$ /GaN $(5c_2)$ /AlGaN $(2c_1)$ туннельный ток линейно зависит от напряжения вплоть до ~ 3 В, что хорошо описывается в приближении изолированного лоренцовского резонанса. При совпадении направлений внешнего и внутреннего полей потенциальная яма оказывается эффективно зауженной, поэтому в ней накапливается меньший заряд, оказывающий слабое влияние на резонансные уровни. При $V \approx -1.5 \,\mathrm{B}$ в туннельном токе наблюдается резкая характеристика с отрицательной дифференциальной проводимостью и отношением пик/долина ~ 4 в широких интервалах температур и легирования. Эта характеристика подобна одной из ветвей тока симметричной структуры GaAs/AlGaAs/GaAs с более толстыми барьерами, что показывает перспективность использования нитридных материалов в качестве резонансно-туннельных диодов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 04-02-17508, грантом Президента РФ НШ-1743.2003.2 и вычислительными ресурсами Санкт-Петербургского филиала МСЦ.

Список литературы

- S. Nakamura. Introduction to Nitride Semiconductor Blue Lasers and Light Emitting Diodes (London, Taylor & Francis, 2000).
- [2] С.Н. Гриняев, А.Н. Разжувалов. ФТТ, 43 (4), 529 (2001).
- [3] F. Assaoui, P. Pereyra. J. Appl. Phys., **91** (8), 5163 (2002).
- [4] M. Singh, J. Singh, U. Mishra. J. Appl. Phys., 91 (5), 2989 (2002).
- [5] M. Zervos, A. Kostopoulos, G. Gonstantinidis, M. Kayambaki, A. Georgakilas. J. Appl. Phys., 91 (7), 4387 (2002).
- [6] С.Н. Гриняев, А.Н. Разжувалов. ФТП, 37 (4), 450 (2003).
- [7] M. Cahay, M. McLennen, S. Data, M.S. Lundstrom. Appl. Phys. Lett., 50 (10), 612 (1987).
- [8] H. Wang, A.-B. Chen. J. Appl. Phys., 87 (11), 7859 (2000).
- [9] D.Y. Kei, J.C. Inkson. Phys. Rev. B, **38** (14), 9945 (1988).
- [10] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. Физика квантовых низкоразмерных структур (М., Логос, 2000).

Редактор Л.В. Шаронова

Self-consistent calculation of a tunneling current in double-barrier heterostructures w-GaN/AIGaN (0001)

S.N. Grinyaev, A.N. Razzhuvalov

V.D. Kuznetsov Siberian Physical-Technical Institute at Tomsk State University, 634050 Tomsk, Russia

Abstract On the basis of a self-consistent solution of Schrodinger and Poisson equations with allowance for spontaneous and piezoelectric polarizations, the features of tunneling current in double-barrier wurtzite heterostructures GaN/AlGaN (0001) have been investigated. It is shown, that the internal fields exhibit themselves in asymmetry of the tunneling current through the electronic charge magnitude in the quantum well. This charge is more, when external and internal fields in the quantum well compensate one the other, that produces desrease of the active area potential and resonant levels shifts with voltage, increase of the resistance and linear current-voltage relation in the broad voltage range. When the external and internal fields coincide sharp structures are observed in the current with a ratio pike/valley ~ 4 in the likeness of a voltage-current characteristic of two-barrier GaAs/AlGaAs (001) structure. This fact demonstrates nitride materials as perspective for applications in resonance-tunneling devices.