

Моделирование резонансно-туннельных явлений в наногетероструктурах с квантовыми ямами в среде LabVIEW и Matlab

Я.В. Иванова¹, В.И. Зубков¹

¹Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Профессора Попова 5, Санкт-Петербург, Россия, 197376

Аннотация. В работе предложен эффективный численный метод моделирования ключевых электрофизических параметров наногетероструктур с квантовыми ямами (КЯ), основанный на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона, реализованный в среде LabVIEW. Также рассчитывается туннельная прозрачность системы, обусловленная наличием резонансно-туннельного пропускания через двухбарьерную структуру, образованную изгибом дна зоны проводимости вблизи гетероинтерфейса. Исследуются особенности резонансного туннелирования носителей через квазирезонансный уровень в верхней области КЯ, представляющий собой условно свободное состояние, квадрат волновой функции которого локализован в яме. Показано, что эмиссия носителей заряда происходит через этот уровень. Для анализа туннельного пропускания была разработана программа, реализующая метод внутренней задачи путем интеграции скрипта на языке Matlab в графическую среду LabVIEW. Таким образом, используются плюсы каждого программного пакета: достигается высокая скорость и точность вычислений, при этом сохраняется удобство оперирования данными через файловую систему, и графическая обработка результатов в LabVIEW. Результаты моделирования сопоставляются с экспериментальными данными.

1. Введение

Развитие современной опто- и СВЧ-электроники связано с применением полупроводниковых наногетероструктур. Квантовые ямы (КЯ) на основе соединений АЗВ5 уже не одно десятилетие используются при создании лазерных и светодиодных структур, высокоэффективных преобразователей солнечного излучения, НЕМТ-транзисторов и т.д. Очень перспективным является применение квантово-размерных эффектов, обусловивших переход к новым принципам электроники, включающим конструирование приборов на интерференционных явлениях, одноэлектронном и резонансном туннелировании, спинтронике [1]. Особую роль при производстве таких структур играет контроль параметров как в процессе роста [2-3], так и постростовые измерения их ключевых характеристик. Численное математическое моделирование является эффективным инструментом при анализе особенностей функционирования нанообъектов. Оно может быть основано на использовании простых, но оптимальных по скорости расчета математических моделях [4-6], или же включать большие объемы вычислительной информации и высокую нагруженность вычислительных ресурсов [7]. В обзоре по моделированию параметров, связанных с радиационной стойкостью НЕМТ-

транзисторов, представленном в [8], отмечается, что для получения корректных результатов при численных расчётах необходимым является наличие исходных точных экспериментальных данных, таких как толщины и уровни легирования слоев, концентрация и подвижность электронов в активной области. В настоящей работе демонстрируется эффективность совместного использования математического моделирования и результатов исследований реальных наногетероструктур. Такой подход дал возможность выявить новые закономерности протекания эмиссионных процессов в наноразмерных областях. Были исследованы образцы с одиночной КЯ, в которых методами адмиттансной спектроскопии было обнаружено и детально проанализировано явление резонансного туннелирования, возникающее вследствие формирования в верхней области КЯ двухбарьерной структуры, обусловленной легированием обкладок ямы [9]. В качестве математического аппарата нами использовалось самосогласованное решение уравнений Шредингера и Пуассона в квантовом ящике в сочетании с независимым расчетом туннельной прозрачности по методу внутренней задачи [10, 11]. Описанные методики были реализованы в двух программных пакетах, обеспечивая оптимальное сочетание быстродействия с удобством интерфейса.

2. Эксперимент

Проводились исследования наногетероструктур, выращенных методом МOCVD, содержащих одиночную КЯ $\text{In}_x\text{GaAs}_{1-x}/\text{GaAs}$. Экспериментальные температурные спектры проводимости, полученные для образцов с КЯ для $x=0.3$ на установке адмиттансной спектроскопии представлены на Рис. 1. Они выявили горизонтальные участки в области низких температур (до 77 К), которые связаны с наличием высокой доли туннельного тока пропускания.

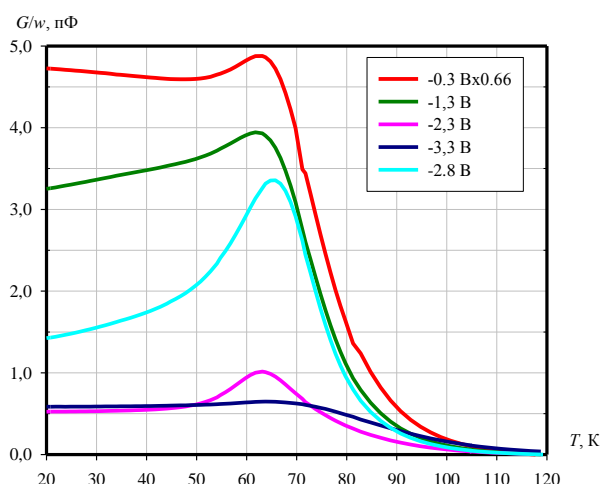


Рисунок 1. Экспериментальные температурные спектры проводимости для наногетероструктуры с одиночной КЯ $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ для разных обратных смещений.

Графики Аррениуса (Рис. 2) также демонстрировали нелинейность, указывающую на туннельный характер эмиссионных процессов. Такое поведение кривой вызывает неоднозначность определения энергии активации носителей заряда. Определенная стандартным образом, она имела разброс значений от 36 до 70 мэВ. О том, что данные результаты свидетельствует именно о резонансно-туннельном механизме говорит тот факт, что максимальный отклик от наногетероструктуры был зафиксирован при минимальном значении обратного смещения -0,3 В, то есть когда ООЗ еще не достигла КЯ. Дальнейшее его увеличение приводило к резкому спаду уровня сигнала. [9] Исследование резонансно-туннельного пропускания сводилось к расчету коэффициента пропускания и положения уровней размерного квантования.

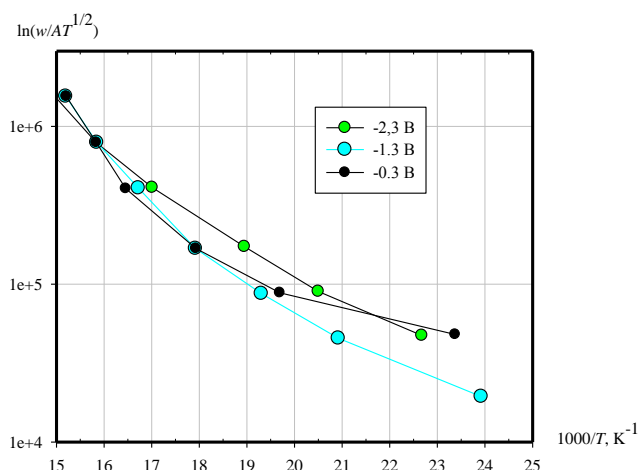


Рисунок 2. Графики Аррениуса для наногетероструктуры с одиночной КЯ $In_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ для разных обратных смещений.

3. Математическое моделирование

3.1. Самосогласованное решение уравнений Шредингера и Пуассона

Современные полупроводниковые приборы выращиваются с использованием планарной технологии и представляют собой последовательность эпитаксиальных слоев различного состава и концентрации. Выходные характеристики определяются профилем легирования, уровнями размерного квантования при наличии квантово-размерных областей, размытием и качеством гетерограниц. Самосогласованное решение уравнения Шредингера в приближении эффективной массы на неоднородной сетке

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi_i(z) \right) + V(z) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z) \tag{1}$$

и нелинейного уравнения Пуассона

$$\epsilon_0 \frac{d}{dz} \left(\epsilon(z) \frac{d\phi(z)}{dz} \right) = e \left[N_D^+(z) - n(z) \right] \tag{2}$$

позволяет в одноэлектронном приближении рассчитать электрический потенциал, в котором движутся свободные носители заряда, а также определить положение уровней размерного квантования. Возможности метода для диагностики полупроводниковых наноразмерных слоев были изложены в [12]. Отметим, что суть расчета сводится к численному решению уравнений (1) - (2) итерационным способом с уровнем сходимости по потенциалу в 10^{-8} В. (Рис. 3).

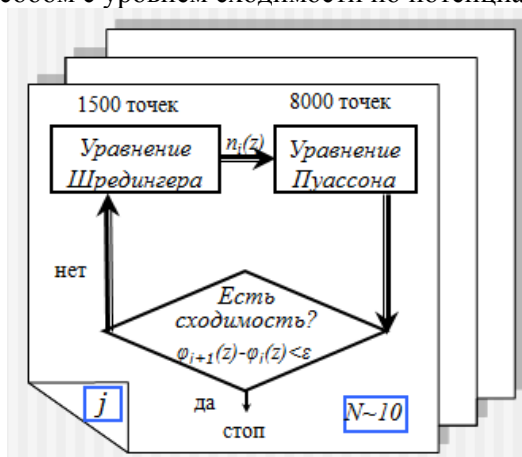


Рисунок 3. Схематичное изображение алгоритма самосогласованного расчета уравнений Шредингера и Пуассона.

Уравнение Шредингера решается в области так называемого «квантового ящика», размеры которого выбраны на основании сходимости итерационного процесса и соответствия решения граничным условиям Дирихле. На Рис. 4 представлена лицевая панель разработанной программы в среде LabVIEW, реализующая расчет потенциальной энергии, уровней размерного квантования, а также концентрации свободных носителей заряда в подзонах. Моделирование для реальных образцов показало, что в КЯ имеется одно связанное состояние с $E < 0$ и квазирезонансный уровень в области положительных энергий. Квадрат его волновой функции сосредоточен в яме, а, значит, это состояние нельзя назвать свободным.

Аналитические расчеты для двухбарьерной структуры показывают, что стопроцентное пропускание обеспечивается высокой идентичностью потенциальных барьеров, приводящей к формированию стоячей электронной волны за счет интерференции. Чтобы применить эти выводы к экспериментальным данным, требуется провести детальный анализ коэффициента прозрачности системы барьеров, образованной в легированной гетероструктуре с КЯ InGaAs/GaAs. Таким образом, дальнейшие исследования сводились к изучению особенностей туннельной эмиссии.

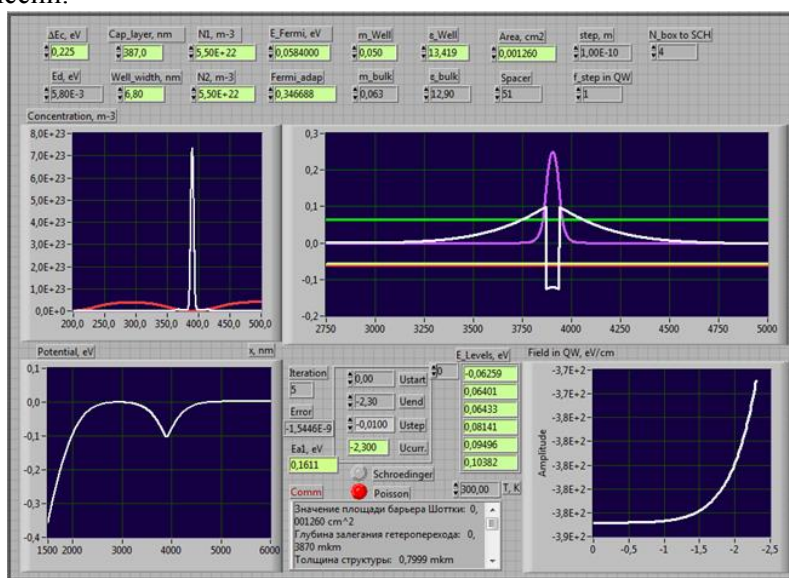


Рисунок 4. Программа самосогласованного расчета уравнений Шредингера и Пуассона.

3.2. Расчет прозрачности системы барьеров

Туннельная прозрачность системы потенциальных барьеров характеризуется коэффициентом прохождения, иначе говоря прозрачностью. Расчет этой характеристики аналитически осуществляется в предположении, что электрон налетает на барьер из бесконечности. При этом решается уравнение Шредингера с граничными условиями и волновой функцией, представляющей собой суперпозицию падающих, отраженных и прошедших волн [10]. Известно, что если в системе имеется два тонких потенциальных барьера с малой прозрачностью, идентичных по своей геометрии, то суммарная прозрачность системы резко возрастает за счет образования стоячей электронной волны – явление резонансного туннелирования [13]. В случае реальной легированной гетероструктуры потенциальный профиль дна зоны проводимости имеет сложный вид (см. Рис.4), который нельзя описать в прямоугольном приближении, а потому оценка его туннельной прозрачности требует использования численных методов расчета. В настоящей работе реализован метод решения внутренней задачи [6,11], в котором характеристики рассеяния выражаются через волновую функцию, заданную во внутренней области квантового ящика. метод был реализован в виде согласованной работы сразу двух программных пакетов- LabVIEW и Matlab. Такой способ позволяет сочетать в себе удобство программирования, вариативность интерфейса, файловую систему «ввода-вывода» LabVIEW и мощный математический аппарат Matlab. Основная часть

программы написана на языке LabVIEW, а ядро расчета реализовано в специальном функциональном программном узле «Matlab Script». Лицевая панель программы представлена на Рис. 5. Она позволяет проводить расчет как для модельных форм потенциала (прямоугольных), так и для самосогласованного потенциала Хартри, полученного для реальной легированной структуры.

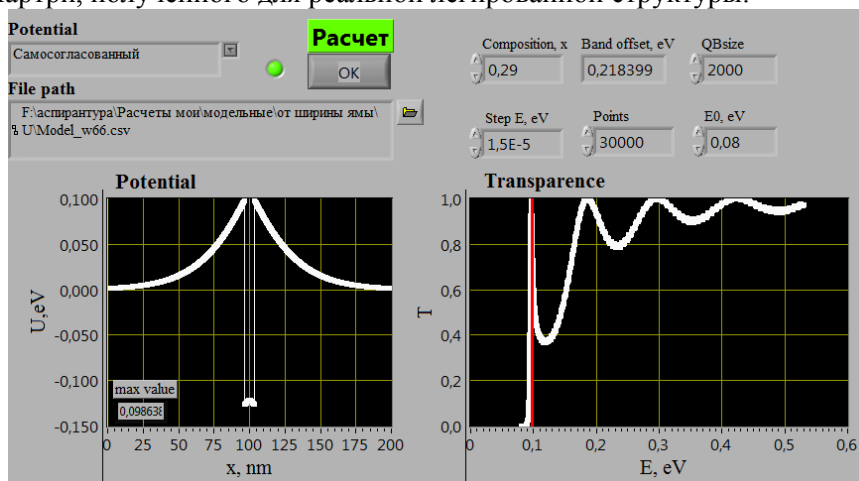


Рисунок 5. Программа расчета прозрачности системы барьеров.

На Рис. 6 представлен пример расчета туннельной прозрачности с помощью разработанной программы. Демонстрируется формирование резонанса в прозрачности – в классическом представлении это образование стоячей волны в результате интерференции на двух идентичных прямоугольных барьерах (Рис. 6А). Оригинальным результатом данной работы является появление резонансного пика в расчете для легированной структуры (Рис. 6Б). При этом положение пика по энергии, соответствующее стопроцентному туннельному пропусканию совпало с положением квазирезонансного уровня, полученного ранее в п 3.1. Это дает основание утверждать, что полученные в эксперименте высокие уровни сигнала в проводимости при малых обратных смещениях, не зависящие от температуры, обусловлены резонансным туннелированием.

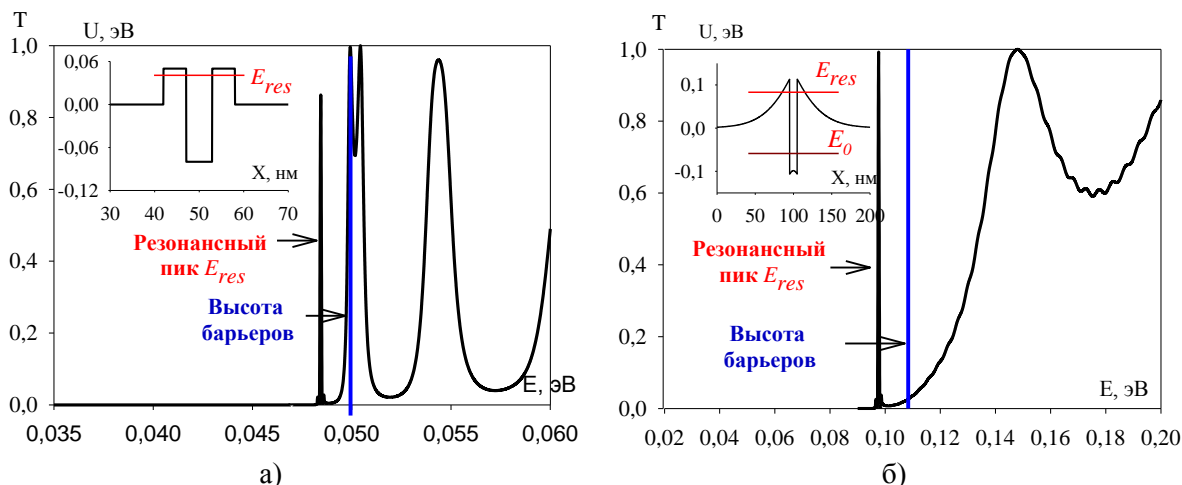


Рисунок 6. Пример расчета туннельной прозрачности с помощью разработанной программы: А – для прямоугольных потенциалов. Б – для реальной легированной гетероструктуры.

С помощью разработанной программы были также проведены расчеты туннельной прозрачности для структуры с различной шириной КЯ и составом. (Рис. 7) Видно, что образование стоячей волны, соответствующей резонансному пропусканию возможно только для ям определенной ширины. (Рис. 7А) Уменьшение мольной доли индия в составе твердого

раствора и соответствующее уменьшение глубины ямы приводит к делокализации квазирезонансного уровня, а, значит, к уширению пика пропускания. (Рис. 7Б).

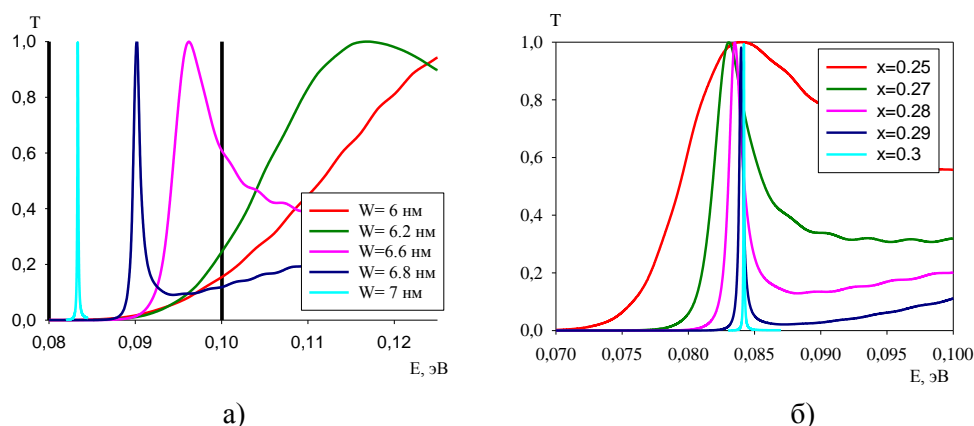


Рисунок 7. Расчет резонансно-туннельной прозрачности с помощью разработанной программы: А – для разных значений W ширины КЯ (состав $x=0,3$), вертикальная линия обозначает высоту барьеров; Б – для различных составов x (ширина ямы 7 нм).

Незначительный сдвиг пика по энергии на Рис. 7Б связан с изменением положения квазирезонансного уровня при изменении состава квантовой ямы.

4. Заключение

В настоящей работе кратко изложена методика исследования эмиссионных процессов в наногетероструктурах с КЯ методом расчета уровней размерного квантования и туннельного пропускания для самосогласованного потенциала Хартри. Методика реализована в программной среде LabVIEW и Matlab. Учет легирования позволил объяснить экспериментальные данные, полученные для реальных образцов с КЯ InGaAs/GaAs наличием резонансно-туннельного пропускания при малых обратных смещениях. При увеличении обратного смещения край ООЗ достигает ямы, симметрия барьеров нарушается. Расчет прозрачности при этих смещениях фиксирует исчезновение туннельно-резонансного вклада. На спектрах проводимости это выражается резким падением сигнала. Составляющая, связанная с простым туннелированием, присутствует всегда, но вклад ее значительно уступает резонансному и термоактивационному.

Расчет туннельной прозрачности для различных параметров КЯ выявил, что его возникновение возможно только для ям определенной ширины, что соответствует теоретическим данным о резонансно-туннельной эмиссии. А зависимость от состава подтверждает, что эмиссия из ямы происходит через квазирезонансный уровень, положение которого по энергии как раз определяется глубиной ямы.

5. Литература

- [1] Асеев, А.Л. Наноматериалы и нанотехнологии для современной полупроводниковой электроники / Российские нанотехнологии. Обзоры. – 2006. – № 1-2. – С. 97-110.
- [2] Макеев, М.О. Исследование термической деградации омических контактов AlAs/GaAs резонансно-туннельных диодов на основе анализа кинетики вольт-амперных характеристик / М.О. Макеев, С.А. Мешков, В.Ю. Синякин, А.Е. Смирнов, Ю.А. Иванов // Электromеталлургия. – 2017. – № 9. – С. 24-30.
- [3] Казаков, И.П. Оптическая диагностика поверхности наногетероструктур в процессе выращивания / И.П. Казаков, Е.В. Глазырин, С.А. Савинов, В.И. Цехош, С.С. Шмелев // ФТП. – 2010. – Т. 44, № 11. – С. 1489-1493.
- [4] Абрамов, И.И. Теоретическое исследование приборных структур, содержащих резонансно-туннельные диоды / И.И. Абрамов, А.В. Королев // ЖТФ. – 2001. – Т. 71, № 9. – С. 128-133.

- [5] Моделирование эмиссионных процессов в среде Matlab / К.А. Никифоров, Н.В. Егоров // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 10. Прикл. матем. информ. проц. упр. – 2013. – № 2. – С. 128-135.
- [6] Абросимов, А.С. Численное моделирование резонансно-туннельных структур на основе барьера Шоттки и гетероперехода GaAs/AlGaAs / А.С. Абросимов, В.Н. Агарев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2018. – № 11. – С. 9-18.
- [7] Поляков, С.В. Моделирование задач нанoeлектроники с помощью параллельных вычислительных систем [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://agora.guru.ru/abrau2008/pdf/065.pdf> (30.04.2015).
- [8] Тарасова, Е.А. Моделирование радиационной стойкости НЕМТ (обзор) // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2014. – Т. 2, № 1. – С. 100-115.
- [9] Иванова, Я.В. Экспериментальное обнаружение резонансного туннелирования в легированной структуре с одиночной квантовой ямой методом адмиттансной спектроскопии / Я.В. Иванова, В.И. Зубков / ПЖТФ. – 2018. – Т. 44, № 24. – С. 112-119.
- [10] Сатанин, А.М. Динамика электронов в наноструктурах. – Н. Новгород: ННГУ, 2006. – 96 с.
- [11] Иванова, Я.В. Численный расчет коэффициента прозрачности легированной гетероструктуры с квантовой ямой методом внутренней задачи / Я.В. Иванова, В.И. Зубков. / Изв. СПбГЭТУ «ЛЭТИ». – 2018. – С. 5-10.
- [12] Зубков, В.И. Диагностика гетероструктур с квантовыми ямами $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ методом вольт-фарадных характеристик: разрывы зон, уровни квантования, волновые функции / ФТП. – 2007. – Т. 41, № 3. – С. 331-337.
- [13] Драгунов, В.П. Основы нанoeлектроники / В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. – Новосибирск, 2000. – 331 С.

Modeling of resonant-tunneling effects in nanoheterostructures with quantum well in LabVIEW and Matlab

I.V. Ivanova¹, V.I. Zubkov¹

¹St. Petersburg State Electrotechnical University (LETI), Professor Popov Street 5, St. Petersburg, Russia, 197376

Abstract. In this paper, an effective numerical method for modeling the general electronics parameters of heterostructures with quantum wells (QW), based on self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations, implemented in LabVIEW software, is proposed. Features of resonant tunneling of charge carriers through the quasidegenerate energy level in upper part of the QW (at $E > 0$) are investigated. We have shown that this level possesses the square of wave function localized in the QW, and the emission of charge carriers from the well occurs predominantly through this level. The tunnel transparency of a single QW with doped barriers, due to the presence of resonance-tunnel transmission through the two-barrier structure formed by bending the bottom of conduction band near the heterointerface, is also calculated. The developed program implements the internal task method and integrates a Matlab script in graphical environment LabVIEW. Thus, the advantages of each software package are used: high speed and accuracy of calculations are achieved, while maintaining the convenience of data handling through the graphical processing of results in LabVIEW. The simulation results are compared with the experimental data.