

На правах рукописи

Разжувалов Александр Николаевич

**ТУННЕЛЬНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В НАПРЯЖЕННЫХ  
ВЮРТЦИТНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С СИЛЬНЫМИ  
ВСТРОЕННЫМИ ПОЛЯМИ**

Специальность 01.04.10 – физика полупроводников

Специальность 01.04.02 – теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико - математических наук

Томск – 2009

Диссертация выполнена в лаборатории теоретической физики ОСП "Сибирский физико – технический институт Томского государственного университета"

**Научный руководитель:**

кандидат физико-математических наук  
**Гриняев Сергей Николаевич**

**Официальные оппоненты:**

доктор физико-математических наук, профессор  
**Тютюрев Валерий Григорьевич**  
доктор физико-математических наук, профессор  
**Самсонов Борис Федорович**

**Ведущая организация:**

Институт физики полупроводников СО РАН, г. Новосибирск

Защита состоится "11" июня 2009 г. в 17-00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.267.07 в ГОУ ВПО "Томский государственный университет" по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке ГОУ ВПО "Томский государственный университет" по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 34 а

Автореферат разослан "6" мая 2009 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор физико-математических наук



Ивонин И. В.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Вюртцитные полупроводники GaN, AlN, InN находят все более широкое применение в различных приборах электроники и оптоэлектроники – мощных высокочастотных транзисторах, светодиодах, лазерах и т.д. [1] Ведутся попытки использования этих материалов в приборах с поперечным транспортом.

Квантовые структуры на основе GaN и твердого раствора  $Al_xGa_{1-x}N$  перспективны для разработки резонансно-туннельных диодов (РТД) субатомных размеров с рекордными параметрами вольт-амперных характеристик (ВАХ). Физические свойства таких структур существенно модифицируются сильными внутренними электрическими полями ( $\sim 10^7$  В/см), роль которых изучена недостаточно.

**Цель работы** состояла в теоретическом исследовании влияния сильных встроенных полей спонтанной и пьезополяризации на резонансное туннелирование электронов, их локализацию и туннельный ток (ТТ) в напряженных нитридных двухбарьерных гетероструктурах GaN/AlGaN.

**Методы исследования.** В ходе работы использовались: общие соотношения кристаллофизики; метод модельного псевдопотенциала; методы матрицы рассеяния, эффективной массы, итерационного решения уравнений Шредингера и Пуассона; баллистическое приближение.

**Научная новизна работы:** Впервые проведен расчет комплексной зонной структуры (КЗС) напряженных и свободных кристаллов GaN, AlN,  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$  для электронов, падающих нормально на гетерограницу (0001). Развита модель расчета ТТ в двухбарьерных гетероструктурах GaN/AlGaN в присутствии встроенных полей. Исследована роль электронного заряда квантовой ямы (КЯ) и типа поверхности роста в формировании петли гистерезиса. Обнаружен эффект всплеска ТТ, обусловленный внезапной сменой резонанса, ответственного за основную составляющую тока; сформулированы условия его наблюдения. Развита "конденсаторная" модель, допускающая наглядное толкование сложных процессов резонансного туннелирования. Исследовано влияние дефектов на ТТ и предложена интерпретация особенностей экспериментальных ВАХ туннельных диодов.

### На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Результаты псевдопотенциального расчета комплексной зонной структуры InN, GaN, напряженных AlN и твердого раствора  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ , а также коэффициента прохождения  $P$  электронов через напряженную двухбарьерную структуру GaN( $4c_2$ )/ $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ ( $3c_1$ ). Анализ матрицы рассеяния показывает, что при небольших концентрациях ( $x \leq 0.3$ ) и энергиях электронов до  $\sim 2$  эВ от дна зоны проводимости GaN основную роль в процессах туннелирования играют состояния вблизи Г-долины, что позволяет использовать для их описания однодолинный метод огибающей волновой функции с учетом зависимости эффективной массы от энергии и деформации.
2. В двухбарьерных нитридных структурах встроенные поля приводят к асимметрии ВАХ вследствие различия распределений электронного заряда и напряженностей суммарного поля в слоях структуры при прямом и обратном смещении. Величина заряда в квантовой структуре больше в случае, когда внешнее и внутреннее поля в яме направлены противоположно, что приводит к увеличению электронной плотности внутри

квантовой ямы с ростом напряжения и, как следствие, сильному эффекту отрицательной обратной связи, уменьшающему изменения потенциала и резонансных уровней от напряжения.

3. В ограниченных сверхрешетках  $(\text{GaN})_4(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N})_5$  встроенные поля формируют штарковскую лестницу электронных состояний даже в отсутствие внешнего поля. Штарковские состояния проявляются в пиках туннельного тока на той его ветви, для которой внешнее поле направлено в ту же сторону, что и однородное внутреннее эффективное поле. При противоположной ориентации полей имеет место усиление гибридизации состояний из соседних квантовых ям, приводящее к формированию мини-зоны, смыканию пиков и росту амплитуды тока.
4. В туннельном токе двухбарьерных структур  $w\text{-AlGaIn}/\text{GaIn}/\text{AlGaIn}$  может образовываться широкая петля гистерезиса при участии двух резонансов, когда внешнее и внутреннее поле в яме противоположны друг другу. В этом случае к моменту выбывания нижнего резонанса из процесса туннелирования в квантовой яме накапливается настолько большой электронный заряд, что его перераспределение между коллектором и эмиттером необратимо понижает потенциал активной области и приводит к смене резонанса, через который туннелируют электроны. В результате происходит переключение характеристик структуры на параметры следующего более широкого резонанса, сопровождаемое увеличением прозрачности структуры и всплеском тока.
5. Предложена "конденсаторная" модель для описания петли гистерезиса туннельного тока в двухбарьерных структурах  $w\text{-AlGaIn}/\text{GaIn}/\text{AlGaIn}(0001)$ , в которой области сосредоточения пространственного заряда в эмиттере, квантовой яме и коллекторе описаны с помощью двух совмещенных конденсаторов. Перезарядка пластин этих конденсаторов определяет сдвиги резонансных уровней, ширину петли и скачки тока на петле гистерезиса.
6. Моделирование влияния дефектов на туннельный ток показывает, что глубокие центры, локализованные вблизи двухбарьерной нитридной структуры, приводят к частичной компенсации поверхностного заряда на гетерограницах, созданного спонтанной и пьезо-поляризациями, и сдвигу пиков туннельного тока в сторону меньших напряжений. Когда глубокие уровни в коллекторе расположены несколько выше квазиуровня Ферми эмиттера, их перезарядка приводит к эффекту отрицательной обратной связи и возникновению петли гистерезиса туннельного тока.

**Практическая значимость работы.** Результаты исследования можно использовать для описания электронного транспорта в  $\text{GaIn}/\text{AlGaIn}$  или в аналогичных вюртцитных структурах со встроенными электрическими полями; в электронике, для разработки действующих РТД  $\text{GaIn}/\text{AlGaIn}$ ; для получения параметров, характеризующих бистабильность туннельного тока в двухбарьерных гетероструктурах ( $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ ,  $\text{GaIn}/\text{AlGaIn}$  и т.д.).

**Личный вклад автора** в диссертационную работу заключается в развитии моделей, разработке методов, алгоритмов и программ численных расчетов, активном участии при анализе и интерпретации полученных результатов.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались и обсуждались на 6-ой Всероссийской научной конференции студентов-физиков

и молодых ученых: ВНКСФ-6 (г. Томск, 2000 г.); на Международном научном семинаре: "Инновационные технологии - 2001 (проблемы и перспективы организации наукоемких производств)" (г. Красноярск, 2001 г.); на Международной конференции "Физико-химические процессы в неорганических материалах" (г. Кемерово, 2001 г., 2004 г., 2007 г.); на Международных конференциях "Оптика, оптоэлектроника и технологии" (г. Ульяновск, 2001 г., 2002 г.); на VII международной конференции "Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы" (г. Ульяновск, 2005 г.); на Всероссийской конференции "Арсенид галлия и полупроводниковые соединения группы III-V" (г. Томск, 2002 г., 2006 г.); на XI конференции по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов (г. Владивосток, 2007 г.); на VII Региональной научной конференции "Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование" (г. Владивосток, 2007 г.); на Всероссийских конференциях "Нитриды галлия, индия и алюминия - структуры и приборы" (г. Санкт-Петербург, 2005 г., 2008 г.; г. Москва, 2007 г.).

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 20 работ. Из них 5 статей и 15 тезисов конференций. Список основных публикаций приведен в конце автореферата.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, восьми глав, заключения и списка использованной литературы из 121 наименования. Работа содержит 191 страницу текста, 51 рисунок и 4 таблицы.

## Краткое содержание работы

**Во введении** обоснована актуальность выбранной темы, сформулированы цель и задачи исследования, изложена научная новизна и практическая значимость работы, приведены защищаемые положения и дана краткая аннотация диссертации.

**В первой главе** проведен обзор публикаций, затрагивающих перспективы и проблемы создания квантовых приборов на нитридах.

Анализ литературных данных показывает, что нитридные двухбарьерные структуры (ДБС) обладают рекордными приборными характеристиками. Однако, асимметричное поведение тока относительно смены полярности напряжения с широкой петлей гистерезиса ( $\sim 6$  В), деградация пиков тока при переключении напряжения  $V$  и бистабильность [2], не объясняются имеющимися теоретическими моделями. Влияние различных факторов затрудняет интерпретацию. Причины расхождений связывают с электронными ловушками [2], неучтенными токами утечки, сопротивлениями буферных слоев и свойствами контактов [3].

**Во второй главе** дается описание кристаллической решетки вюртцита и её симметрии, определены величины встроенных электрических полей спонтанной  $\vec{P}_{sp}$  и пьезоэлектрической  $\vec{P}_{pe}$  поляризации. Рассматривались двухбарьерные вюртцитные гетероструктуры GaN/AlGaN с тонкими напряженными барьерами в направлении роста  $z$  вдоль гексагональной оси [0001]. В таких структурах атомы решетки группируются в "двойных" слоях, сформированных ближайшими гексагональными слоями анионов и катионов. Вследствие биаксиального растяжения барьеров AlGaN в плоскости гетерограниц (0001) вектора  $\vec{P}_{sp}$  и  $\vec{P}_{pe}$  направлены противоположно полярной оси [0001] от аниона к ближайшему катиону.

Направления и величины внутренних электрических полей  $\vec{F}$  в слоях структуры зависят от граничных условий. Требование непрерывности нормальной составляющей электрической индукции на гетерограницах приводит к аналитическому решению для напряженностей  $F$  в нелегированных барьерах ( $b$ ) и квантовой яме ( $w$ ), и легированных контактах ( $I$  и  $V$ ) двухбарьерной структуры GaN/AlGaN при напряжении  $V = 0$ :

$$F_w = -\frac{2l_b}{(r_I + d/2 + l_w)\varepsilon_b + 2l_b\varepsilon_w} \cdot \frac{\sigma}{\varepsilon_0}, \quad (2.1a)$$

$$F_b = \frac{r_I + d/2 + l_w}{(r_I + d/2 + l_w)\varepsilon_b + 2l_b\varepsilon_w} \cdot \frac{\sigma}{\varepsilon_0}, \quad (2.1b)$$

$$F_I(z) = F_I^0 \cdot \exp^{-|z-z_2|/r_I}, \quad z \leq z_2, \quad (2.1c)$$

$$F_V(z) = \frac{F_V^0}{d} \cdot (z_5 + d - z), \quad z_5 \leq z \leq z_5 + d, \quad (2.1d)$$

$$F_I^0 = F_V^0 = F_w, \quad (2.1e)$$

где:  $\sigma = P_w - P_b$  – величина связанного поверхностного заряда на гетерограницах,  $P$  – суммарная поляризация слоя;  $l$  – ширина слоя;  $r_I$  и  $d$  – радиус Дебая и ширина полностью обедненного слоя в контактах  $I$  и  $V$ , прилегающих к гетерограницам с  $+\sigma$  и  $-\sigma$  соответственно;  $\varepsilon$  – статическая диэлектрические проницаемость материала;  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная;  $z_2, z_5$  – границы контактов двухбарьерной структуры.

Откуда получено выражение для средней концентрации ионизованных доноров в обедненной области  $\overline{N_d^+}$ :

$$\overline{N_d^+} \gg \frac{2l_b}{(l_w + 2l_b)^2} \frac{\sigma}{e}, \quad (2.2)$$

$e$  – заряд электрона, при которой встроенные поля в контактах оказываются полностью экранированными.

**В третьей главе** приводятся методы и результаты расчета комплексной зонной структуры и коэффициента прохождения, определяются границы применимости однодолинной модели метода эффективных масс, рассматривается влияние  $\vec{F}$  на туннелирование электронов в приближении полностью экранированных внутренних полей в контактах (ПЭВПК).

Результаты расчета КЗС показывают (рис.1), что в актуальном интервале энергий ( $0 \div 2$  эВ от энергии дна зоны проводимости  $E_c$ ) для электронов, нормально падающих на гетерограницу (0001), наиболее существенную роль в туннелировании играют состояния вблизи  $E_c$ , исходящие из одной центральной  $\Gamma$  долины. Другие решения локализованы вблизи гетерограницы на расстояниях  $4/10$  постоянной решетки и не дают вклада в асимптотику волновой функции на больших расстояниях.

Коэффициенты прохождения ДБС в ”многозонном” расчете и ”однодолинном” приближении различаются по положению резонансной энергии  $E_r$  менее 0.02 эВ, поэтому для малых концентраций Al можно пользоваться методом эффективной массы с стандартными условиями сшивания огибающей волновой функции на границах.

Внутренние поля изменяют электронный потенциал  $W$  в слоях на величины, сравнимые с разрывами зон и делают его несимметричным, приводят к

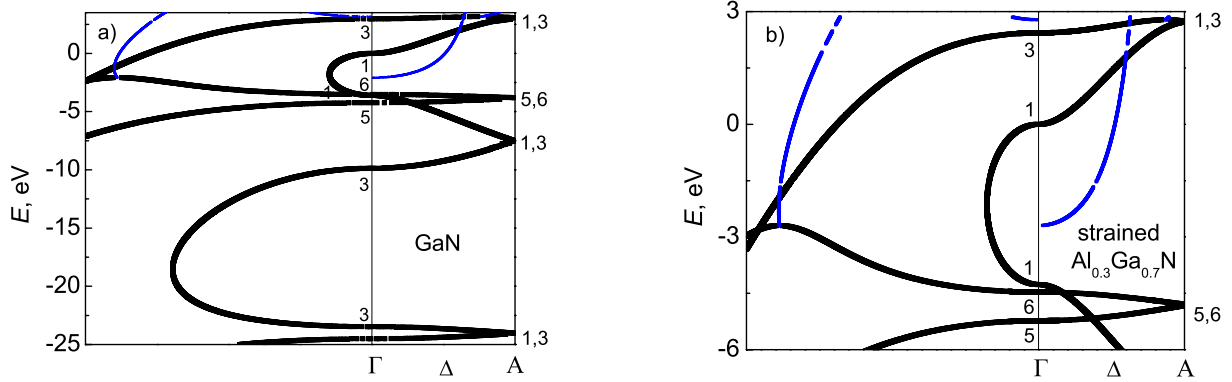


Рис. 1. Фрагменты КЗС а) свободного кристалла  $w$  – GaN и б) напряженного твердого раствора  $w$  –  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ . Справа от точки  $\Gamma$  показаны решения с чисто вещественными значениями волнового вектора вдоль гексагональной оси (жирные линии) и реальные части комплексных решений (тонкие линии), слева показаны чисто мнимые решения (жирные линии) и мнимые части комплексных решений (тонкие линии). Энергии в каждом материале отсчитаны от  $E_c$ .

асимметрии в локализации волновой функции  $\Psi$  в зависимости от направления падения электрона, а в ограниченной сверхрешетке, за счет разрушения сверхрешеточной гибридизации состояний отдельных ям, формируют штарковскую лестницу электронных состояний. Фазовое время столкновений в КЯ при энергиях резонанса меньше единиц пикосекунд.

**В четвертой главе** в несамосогласованном подходе приближения ПЭВПК исследуются причины асимметрии ТТ в ДБС и в ограниченной сверхрешетке.

Расчет показывает, что в симметричных ДБС  $w$ -GaN/AlGaN(0001) внутренние поля приводят к асимметрии ТТ, не имеющей аналогов в кубических структурах GaAs/AlGaAs, и связанной с отличием напряженности суммарного поля в слоях структуры при прямом и обратном смещении. Это, в свою очередь, вызвано разным направлением внутренних полей в барьерах и яме. Величина напряжения и тока в пике оказывается больше (рис.2а), когда внешнее поле компенсирует внутреннее поле в яме ( $V > 0$ ). В этом случае пик тока находится в области напряжений, где потенциал структуры имеет симметричный вид, а движение резонансного уровня замедляется за счет квадратичного эффекта Штарка.

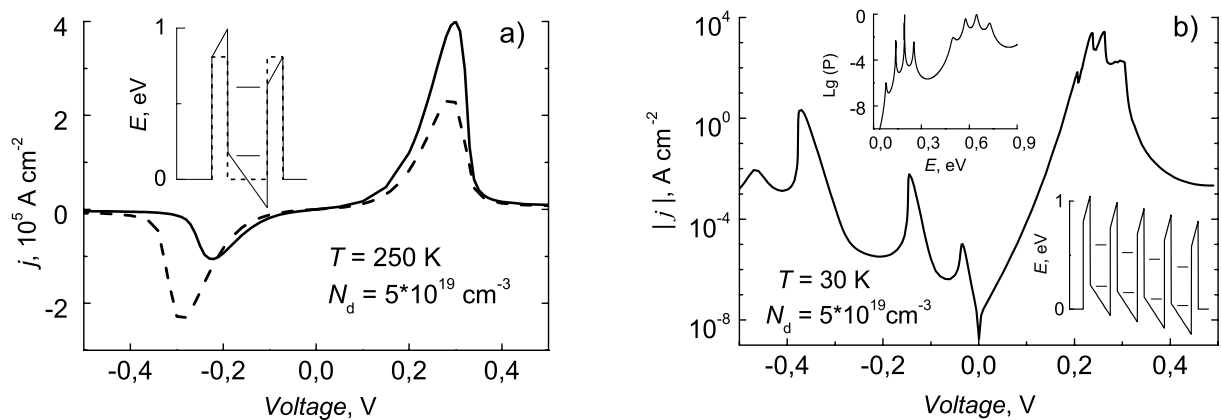


Рис. 2. Плотность туннельного тока  $j$  а) ДБС GaN(5 $c_2$ )/Al $_{0,3}$ Ga $_{0,7}$ N(2 $c_1$ ) и б) ограниченной сверхрешетки из 5-ти барьеров Al $_{0,3}$ Ga $_{0,7}$ N(2 $c_1$ ) и 4-х ям GaN(6 $c_2$ )

Для ограниченной сверхрешетки во внешнем поле штарковские состояния проявляются в пиках ТТ при малых напряжениях на той ветви, где внешнее поле усиливает однородное внутреннее эффективное поле  $F_{eff}$ . В противном

случае  $F_{eff}$  ослабевает, гибридизация состояний из соседних КЯ усиливается и для некоторых напряжений вновь приводит к формированию мини-зоны, сопровождающейся смыканием пиков и ростом амплитуды тока. ВАХ таких сверхрешеток обладают ярко выраженной асимметрией ТТ при изменении направления внешнего поля (рис.2b).

**В пятой главе** особенности ТТ в приближении ПЭВПК исследуются на основе совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона, развивается однорезонансная модель ТТ.

Численное моделирование показывает, что в гетероструктурах GaN/AlGaN распределение электронного заряда важно для точного описания ВАХ. Перераспределение электронов, во-первых, приводит к падению доли внешнего напряжения на приконтактные области, а, во-вторых, растущий заряд в яме вызывает замедление в движении резонансного уровня от напряжения.

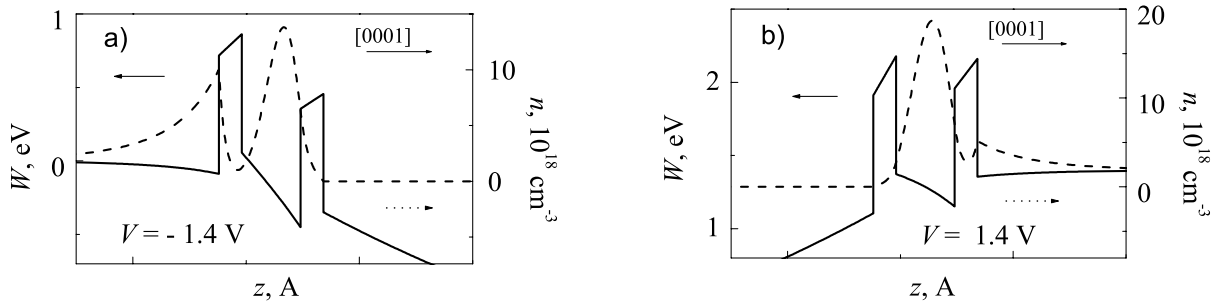


Рис. 3. Потенциальная энергия  $W$  и концентрация электронов в ДБС GaN(5c<sub>2</sub>)/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N(2c<sub>1</sub>) при напряжениях  $V = \pm 1.4 \text{ В}$ .

Встроенные поля нитридов проявляют себя в движениях уровней и асимметрии ТТ через величину заряда в КЯ, локализация которого различна для прямого и обратного смещения. Заряд больше в случае, когда внешнее поле направлено против внутреннего поля в яме ( $V > 0$ , рис.3). Это, наряду со штарковским эффектом, приводит к частичному закреплению резонансных уровней и росту сопротивления, в результате чего выбывание резонанса из туннелирования происходит при существенно большем значении  $V$ . Кроме того, ТТ в ДБС обнаруживает линейную зависимость на протяженном интервале напряжений и хорошо описывается в приближении изолированного лоренцевского резонанса. Например, в структуре GaN(6c<sub>2</sub>)/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N(2c<sub>1</sub>) линейная зависимость тока от напряжения сохраняется вплоть до  $\sim 4 \text{ В}$  (рис.4a).

Однорезонансное приближение позволяет выразить сопротивление структуры через параметры резонанса, расположенного в окрестности квазиуровня Ферми эмиттера  $E_F^{em}$ :  $R = 8\pi\hbar^2\tau_r/(em^*SP_r\beta)$ , где  $S$  – площадь поперечного сечения;  $\tau_r$  – время жизни квазистационарного состояния,  $P_r$  – значение коэффициента прохождения при  $E_r$ ;  $\beta = \Delta(E_F^{em} - E_r)/\Delta V$  – средняя ”скорость” изменения  $E_r$  относительно  $E_F^{em}$  на интервале линейной зависимости тока от  $V$ .

При совпадении направлений внешнего и внутреннего полей ( $V < 0$ ) потенциальная яма эффективно заужается, поэтому в ней накапливается меньший заряд, оказывающий слабое влияние на резонансные уровни. В результате в ВАХ наблюдается обычный максимум тока с прилегающей к нему областью отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП). Например, для структуры GaN(6c<sub>2</sub>)/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N(2c<sub>1</sub>) резкая ОДП характеристика ТТ с отношением пик/долина  $\sim 5$  наблюдается при  $V \approx -0.7 \text{ В}$  в широком интервале температур и легирования (рис.4a).

**В шестой главе** исследуется явление гистерезиса ТТ, устанавливается



корреляция ТТ и электронного заряда в КЯ, проводится интерпретация петли гистерезиса в структурах с Ga- и N- поверхностями роста.

Увеличение электронного заряда в КЯ с ростом внешнего напряжения приводит к новым явлениям – широкому гистерезису и резким скачкам ТТ симметричных ДБС.

Благодаря росту заряда и сильному эффекту отрицательной обратной связи, проявляющемуся в замедленном приближении  $E_r$  к  $E_F^{em}$ , к моменту выравнивания уровней ( $E_r = E_m$ ) в яме накапливается настолько большой заряд, что его исход из ямы при  $E_r < E_m$  вызывает понижение потенциала  $W$  активной области, сравнимое с энергетическим зазором между резонансными уровнями (рис.4b). В результате второй более широкий резонансный уровень оказывается вблизи  $E_F^{em}$ , что приводит к увеличению прозрачности структуры и всплеску тока (рис.4a).

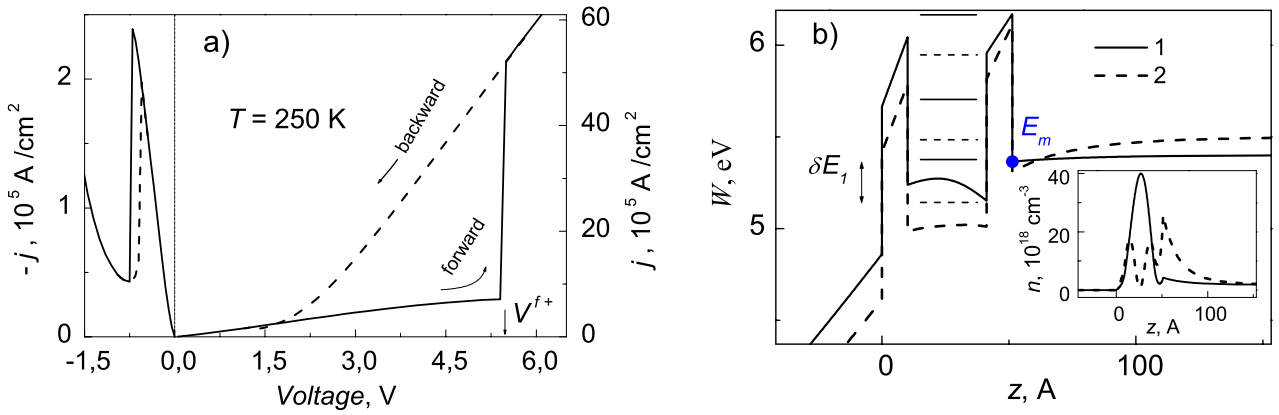


Рис. 4. a) Плотность туннельного тока  $j$  в ДБС GaN(6c<sub>2</sub>)/AlGaN(2c<sub>1</sub>) при постоянной концентрации ионизированных доноров в контактах  $N_d^+(z)$ . b) Потенциальная энергия  $W$  структуры вблизи напряжения скачка тока  $V^{f+}$  случая a): 1 – для напряжения  $V_d^{f+} = 5.40$  В; 2 – для напряжения  $V_u^{f+} = 5.50$  В. В интервале  $V_d^{f+} < V^{f+} < V_u^{f+}$  решение уравнений Шредингера и Пуассона неустойчиво. На вставке приведены объемные концентрации электронов  $n$ , соответствующие  $V_d^{f+}$  и  $V_u^{f+}$ .

Обращение напряжения восстанавливает первоначальную форму  $W$  с запаздыванием. В результате, напряжение возврата первого резонанса в токоперенос оказывается заметно меньше напряжения его выбывания из этого процесса, что формирует широкую петлю гистерезиса (рис.4). Петля ”дву-резонансного” гистерезиса довольно широкая ( $\sim 4$  В), вследствие большой разницы зарядов в яме и темпов движения уровней на двух ветвях тока. Параметры петли связаны с характеристиками двух резонансов – мощностями пиков коэффициентов прохождения ( $N = \hbar P_r / \tau_r$ ), величиной заряда в яме и скоростью движения резонансов относительно  $E_F^{em}$ .

При  $V < 0$  ширина петли гистерезиса имеет небольшое значение  $\sim 0.1$  В, вследствие малого изменения заряда в момент проваливания нижнего резонанса.

В диссертации объяснена корреляция плотности туннельного тока и поверхностной концентрации электронов в КЯ. Обнаружено, что вклад электронного газа КЯ в токоперенос при  $V > 0$  и  $V < 0$  различен. Для  $V < 0$  ток обусловлен большим числом вовлеченных в токоперенос электронов. При обратной полярности напряжения ток определяется небольшой долей электронов КЯ. Основная же часть таких электронов формирует потенциальный профиль ямы, задерживаясь в ней из-за сильной локализации волновых функций.

В несимметричных структурах возникает зависимость тока от толщины слоев и поверхности роста в направлении полярной оси (в структурах с Ga-

поверхностью роста последним в ”двойном” слое выступает слой из атомов Ga, в структурах с N- поверхностью - слой из атомов N). В гетероструктурах  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N(2c_1)/GaN(6c_2)/Al_{0.3}Ga_{0.7}N(3c_1)$  (0001) смена поверхности роста не сводится к простой инверсии ТТ подобно тому, как это имеет место для симметричной структуры (262) с идеальными границами, поскольку потенциал возмущения, вызванный внутренними полями, меняет свой знак и несимметричен относительно отражения в плоскости, проходящей через центр ямы. В результате изменений в положении  $E_r$ , величине заряда КЯ, скорости движения резонанса меняется и ТТ. Например, для структуры (263) переход от Ga-поверхности к N- поверхности роста привел к исчезновению петли гистерезиса при совпадении направлений внешнего и внутреннего поля в яме.

**В седьмой главе** предложена ”конденсаторная” модель гистерезиса ТТ, в которой скачки тока, изменения потенциала и электрического поля в структуре рассматриваются как результат перезарядки двух совмещенных конденсаторов.

Поясним суть модели.

Результаты самосогласованного расчета вариации электростатического потенциала  $\delta\varphi(z) = \varphi_u(z) - \varphi_d(z)$ , где  $\varphi_d$  и  $\varphi_u$  – электростатические потенциалы структуры до  $d$  и после  $u$  провала или появления резонансного уровня на краях переходного интервала, и электронной концентрации  $\delta n(z) = n_u(z) - n_d(z)$  показывают, что их поведение характерно для системы из трех заряженных пластин, две из которых с поверхностными зарядами  $\delta\sigma_c = e \int_{\text{collector region}} \delta n(z) dz$ ,

$\delta\sigma_w = e \int_{\text{quantum region}} \delta n(z) dz$  расположены в точках экстремумов концентрации

$\delta n(z)$  в коллекторе  $z_c$  и квантовой яме  $z_w$ , а третья – протяженная пластина находится в эмиттере и имеет экспоненциально распределенный на расстояниях порядка радиуса Дебая поверхностный заряд  $\delta\sigma_e = e \int_{\text{emitter region}} \delta n(z) dz$ .

Край третьей пластины совмещен с экстремумом концентрации  $\delta n(z)$  в точке  $z_e$ . Систему трех пластин можно рассматривать как два совмещенных конденсатора, на общей пластине которых заряд  $\delta\sigma_w$  поделен на две части  $\delta\sigma_{we} + \delta\sigma_{wc} = \delta\sigma_w$ . Схема ”конденсаторной” модели приведена на рис.5b.

Поверхностные заряды ”эмиттерного” и ”коллекторного” конденсаторов характеризуют перераспределение электронов квантовой ямы ( $\delta\sigma_w$ ), поэтому они удовлетворяют условию электронейтральности  $\delta\sigma_e + \delta\sigma_w + \delta\sigma_c = 0$  и могут быть выражены через интервал напряжения перехода  $\Delta V = V_u - V_d$ , заряд  $\delta\sigma_w$  и геометрию конденсаторов:

$$\delta\sigma_e = -\frac{l_c}{r_D + l_e + l_c} \left( \delta\sigma_w + \frac{\varepsilon\varepsilon_0\Delta V}{l_c} \right), \quad \delta\sigma_c = -\frac{r_D + l_e}{r_D + l_e + l_c} \left( \delta\sigma_w - \frac{\varepsilon\varepsilon_0\Delta V}{r_D + l_e} \right). \quad (7.1)$$

Волновая функция  $\Psi$  нижнего резонанса сильно локализована в квантовой яме, поэтому сдвиг резонансного уровня пропорционален среднему значению вариации потенциала в области квантовой ямы  $\overline{\delta\varphi}$ , которую в ”конденсаторной” модели легко найти:

$$\delta E_1 = e \int |\Psi(E_1, z)|^2 \delta\varphi(z) dz \approx e\overline{\delta\varphi} = e\delta\varphi_e - (r_D + b + \frac{a}{2}) \frac{e\delta\sigma_e}{\varepsilon\varepsilon_0} - \frac{(a + b - l_e)^2}{2a} \frac{e\delta\sigma_w}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad (7.2)$$

где:  $a$  – ширина квантовой ямы;  $b$  – толщина барьера;  $e\delta\varphi_e$  – вариация электростатического потенциала, связанная с выбором начала отсчета энергии ( $\delta\varphi_e = 0$ , если  $V < 0$ ;  $\delta\varphi_c = 0$ , если  $V > 0$ );  $r_D = \sqrt{\varepsilon\varepsilon_0 kT/e^2 n_0}$  – радиус Дебая, отвечающий значению концентрации электронов в глубине эмиттера равной  $n_0$ .

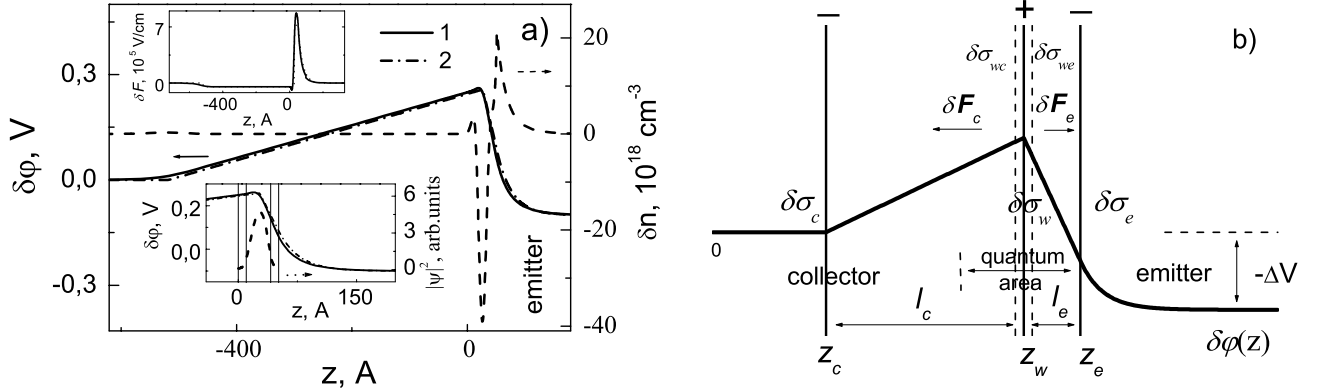


Рис. 5. а) Вариация электростатического потенциала  $\delta\varphi$  при  $V^{f+}$  (см. рис.4): 1 – точный расчет, 2 – ”конденсаторная” модель. Пунктирная линия – вариация концентрации  $\delta n$ . На вставках приведены  $\delta F = -\delta(\delta\varphi)/\delta z$  и фрагмент  $\delta\varphi$  вблизи квантовой области (вертикальные линии – границы барьеров) с профилем волновой функции  $|\Psi(E_r, z)|^2$ . б) Схема ”конденсаторной” модели случая а).

Значения  $\delta E_1$  полученные из модели и точного расчета практически совпадают, откуда следует, что изменение энергии уровня непосредственно связано с величиной заряда  $\delta\sigma_w$ , накопленного к моменту выравнивания уровней  $E_r = E_m$ . Оценка по (7.1) показывает, что при переходах заряд в основном перетекает из КЯ в эмиттер, что хорошо согласуется с результатами прямого интегрирования.

”Конденсаторная” модель позволяет выразить скачок  $j$  при  $V > 0$  через  $\delta\sigma_w$  и провести интерпретацию зависимости ширины петли гистерезиса от распределения заряда в структуре. Показано, что узкая петля гистерезиса связана с переносом заряда между эмиттером и коллектором, а образование широкой петли гистерезиса вызвано перераспределением электронного заряда между коллектором и квантовой ямой.

**В восьмой главе** проводится расчет  $W$  и ТТ с учетом точного распределения внутренних полей в слоях структуры; делается сопоставление приближений; моделируется влияние дефектов на ТТ; проводится сопоставление имеющихся экспериментальных данных по ТТ в РТД с результатами диссертационной работы.

Первопринципные расчеты показывают [4], что  $\sigma$  сосредоточен в пределах ”двойного” слоя, прилегающего к общему азоту. Поэтому в диссертации в дальнейших расчетах заряд  $\sigma$  непосредственно размещался на границах в тонких слоях толщиной  $\delta \sim 2.6 \text{ \AA}$ .

Расчет показал, что в активной области (барьеры и яма) профиль точного  $W$  хорошо согласуется с профилем  $W$ , полученным в приближении ПЭВПК. Отличия проявляются в контактах, где на расстояниях порядка длины Дебая от гетерограниц возникают дополнительные потенциалы отталкивания (при заряде  $-\sigma$ ) и притяжения (при заряде  $+\sigma$ ), которые выравнивают мощности барьеров и делают потенциал активной области более симметричным.

Изгибы в контактных областях приводят к росту числа туннелирующих электронов для  $V < 0$ , и его уменьшению при  $V > 0$ . Кроме того, в последнем случае с ростом  $|V|$  уменьшается и симметричность потенциала актив-

ной области, что ослабляет локализацию  $|\Psi|$  и, в конечном итоге, подавляет описанный ранее эффект отрицательной обратной связи. В результате в ВАХ точного расчета (рис.6a) наблюдается заметный рост напряжения и пика максимума тока для  $V < 0$ , а также подавление тока при положительных напряжениях.

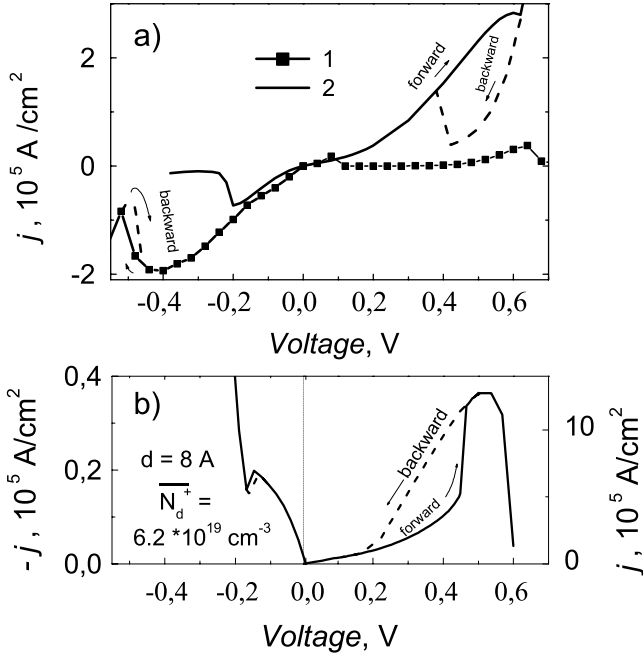


Рис. 6. Плотность туннельного тока в ДБС GaN(7c<sub>2</sub>)/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N(2c<sub>1</sub>) (0001). a) 1 – Прямой расчет с поверхностными зарядами  $\sigma$ , сосредоточенными в приграничных областях толщиной  $\delta$ ; 2 – Приближение ПЭВПК. b) Прямой расчет по программе [5] с  $\sigma$ , сосредоточенными в  $\delta$  и  $\overline{N}_d^+$ , полученной по формуле (2.2).

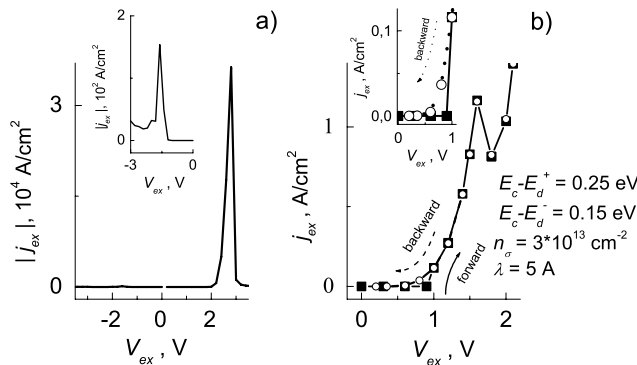


Рис. 7. Плотность туннельного тока в ДБС из [6]: a) при отсутствии глубоких центров; b) при неоднородном распределении дефектов, как в [7], с учетом изменения их зарядового состояния.

возникает гистерезис с пиком при  $V_{ex} \sim (1.5 \div 2.0)$  В. Отметим, что для принятых в [6] положительных напряжениях  $V_{ex}$  пик тока наблюдается при совпадающих внешнем и внутреннем полях КЯ.

Согласие с экспериментом по положению максимума тока было достигнуто при введении некоторых глубоких центров, как в [7], с концентрациями, экспоненциально спадающими от гетерограниц, и уровнем  $E_d$ , лежащим в запрещенной зоне. Качественно воспроизвести гистерезис удалось, предположив возможность изменения зарядового состояния дефектов при туннелиро-

Увеличение степени легирования контактов приводит к восстановлению эффекта отрицательной обратной связи, росту напряжения выбывания нижнего резонанса из туннелирования, формированию широкого гистерезиса и скачку тока (рис.6b). Численный анализ показывает, что экранировка полей в контактах достигается при концентрациях доноров, согласующихся с оценкой (2.2).

Проведено **сопоставление теории** с недавним экспериментальным исследованием проводимости нелегированной симметричной двухбарьерной структуры w-GaN(1c<sub>2</sub>)/AlN(1c<sub>1</sub>) (0001) со спейсер слоями из GaN, заключенной между легированными контактами [6]. Обнаруженный при помощи иглы атомно-силового микроскопа ток связывался в [6] с резонансным туннелированием и демонстрировал особенности (бистабильность, широкую петлю гистерезиса, скачок тока), приписываемые влиянию дефектов.

На рис.7 приведены результаты расчета ТТ, моделирующего [6], для различных распределений и уровней дефектов. Пики тока обусловлены резонансом в квантовой яме. В случае отсутствия глубоких центров (рис.7a) пикам тока отвечают напряжения  $V_{ex}^{f+} = 2.8$  В и  $V_{ex}^{f-} = -1.6$  В. Эти результаты отличаются от данных [6], где при  $V_{ex} < -3$  В наблюдается скачкообразный переход между двумя токовыми состояниями, а при  $V_{ex} > 0$

вании.

В данной модели уровни глубоких центров  $E_d^\alpha$ ,  $\alpha = \{-, 0, +\}$ , расположены в областях обеднения и обогащения соответственно выше и ниже  $E_F$  контактов и их зарядовые состояния противоположны зарядам  $\mp\sigma$  соответствующих гетерограниц. При  $V_{ex} > 0$  за счет туннелирования заполнение центров коллектора может определяться близостью  $E_d^\alpha$  и  $E_F^{em}$ , а последовательное прохождение  $E_F^{em}$  энергий центра будет менять заряд центра  $Q^+ \rightarrow Q^0, Q^0 \rightarrow Q^-$ . На фоне большого заряда  $-\sigma$  такой механизм приводит к эффекту отрицательной обратной связи и возникновению петли гистерезиса туннельного тока, связанной с запаздыванием компенсации провала потенциала ( $\sim 0.6$  эВ) при обратной перезарядке (с  $Q^-$  на  $Q^+$ ) центров. Найдено, что энергия уровня  $E_d^0 = 0.1$  эВ приводит к широкой (1.27 В) петле гистерезиса, близкой к [6]. Однако, направление тока в петле остается противоположным [6]. Возможной причиной такого расхождения могут являться неучтенные токи через дефекты.

Поведение тока при  $V_{ex} < 0$  нам воспроизвести не удалось. Однако заметим, что скачок тока здесь подобен нашим результатам, когда в формировании токов участвуют два резонанса (два уровня).

**В заключении** сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы:

1. Методом псевдопотенциала рассчитана КЗС вюртцитных свободных InN, GaN и напряженных AlN, Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N для нормального падения электрона на гетерограницу (0001).

2. Впервые показано, что в напряженных вюртцитных структурах GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N(0001) многозонный расчет характеристик туннелирующих электронов при ( $x \leq 0.3$ ) описывается однодолинной моделью метода огибающей волновой функции при учете зависимости эффективной массы от энергии и деформации.

3. Выраженные резонансные пики коэффициента прохождения и особенности туннельного тока двухбарьерных структур GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N(0001) наблюдаются для толщин барьеров, содержащих несколько монослоев. ВАХ нитридных структур подобны току GaAs/AlGaAs(001) структур при толщинах слоев AlGaAs примерно в 2 раза меньших. Фазовые времена столкновения в области резонанса  $\sim 1$  пс.

4. Внутренние электрические поля спонтанной и пьезоэлектрической поляризации приводят к красному или голубому сдвигу резонансных уровней в зависимости от толщины и расположения барьеров по отношению к полярной оси. В сверхрешетках (GaN)<sub>n</sub>(Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N)<sub>m</sub> внутренние поля формируют штарковскую лестницу электронных состояний при небольшом числе ( $n, m$ ) ультратонких слоев даже в отсутствие внешнего поля.

5. В симметричных ДБС спонтанная и пьезоэлектрическая поляризация приводят к асимметрии ВАХ при изменении направления внешнего поля, а в несимметричных структурах возникает дополнительная зависимость тока от расположения слоев вдоль полярной оси. В ограниченных сверхрешетках штарковская лестница электронных состояний проявляется в пиках тока при малых внешних напряжениях, отвечающих полям  $\sim 10$  кВ/см.

6. В ДБС w-GaN/AlGaAs(0001) со слабым легированием контактов влияние встроенных полей на туннельный ток проявляется через изгибы потенциала контактов. С ростом легирования встроенные поля ДБС проявляют себя в асимметрии тока через величину электронного заряда в квантовой яме. Этот

заряд больше, когда внешнее и внутреннее поле в яме компенсируют друг друга, что приводит к замедлению движения резонансных уровней от напряжения, увеличению сопротивления структуры и линейной зависимости тока в широком интервале напряжений.

7. Найдено, что при экранировании внутренних полей в контактах, в ВАХ диодов формируется петля гистерезиса, ширина которой зависит от взаимной ориентации внешнего и внутреннего полей в яме. В случае, когда эти поля имеют противоположные направления широкая ( $\sim 4$  В) петля гистерезиса образуется при участии двух резонансов даже в геометрически симметричных структурах. В несимметричных структурах изменение типа поверхности роста приводит к усилению либо подавлению петли гистерезиса в зависимости от чередования неэквивалентных барьеров.

8. В рамках однорезонансного приближения развита модель туннельного тока ДБС, получена связь параметров петли гистерезиса с образующими её резонансными состояниями, объяснена корреляция туннельного тока с поверхностной концентрацией электронов квантовой ямы.

9. Развита "конденсаторная" модель гистерезиса, в которой скачки тока, изменения  $W$  и  $F$  в структуре на разных ветвях петли рассматриваются как результат перезарядки двух совмещенных конденсаторов, пластины которых расположены в положениях экстремумов вариации электронной плотности в области эмиттера, квантовой ямы и коллектора. Модель воспроизводит результаты самосогласованного расчета и дает наглядную интерпретацию процессов туннелирования.

10. В рамках "конденсаторной" модели проанализировано участие зарядов различных областей структуры в скачках уровней и формировании гистерезиса. Показано, что при компенсации внешнего и внутреннего полей в яме основную роль в формировании широкой петли гистерезиса играет перераспределение заряда между квантовой ямой и коллектором. При одном направлении полей узкая "однорезонансная" петля гистерезиса сопровождается перетеканием электронного заряда из эмиттера в коллектор.

11. Влияние дефектов на ток нитридных структур существенно зависит от природы дефектов через положение их уровней, зарядовое состояние, пространственное распределение и концентрацию. Качественное согласие с экспериментальной ВАХ достигнуто для одной полярности напряжения, при которой возникает обычная ОДП структура. Оно получено путем введения локализованных вблизи гетерограниц многозарядных глубоких центров, уровни которых расположены на 0.25 эВ ниже дна зоны проводимости GaN.

### **Основные результаты диссертации опубликованы в работах:**

1. Резонансное туннелирование электронов в напряженных структурах GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N(0001) с учетом спонтанной поляризации и пьезоэффекта / С. Н. Гриняев, А. Н. Разжувалов // Физика твердого тела. – 2001. – Т. 43. – № 4. – С. 529-535.

2. Разжувалов А. Н. Влияние внутренних полей на асимметрию туннельного тока напряженных сверхрешеток GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N (0001) / А. Н. Разжувалов, С. Н. Гриняев // Инновационные технологии - 2001 (проблемы и перспективы организации наукоемких производств) : Материалы международного научного семинара. 20-22 июня 2001 г. / В 2 т. – Красноярск, 2001. – Т. 1. – С. 256-259.

3. Разжувалов А. Н. Туннельный ток в двухбарьерных гетероструктурах GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N(0001) и GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As(001) / А. Н. Разжувалов, С. Н. Гриняев // Восьмая российская конференция "Арсенид галлия и полупроводниковые соединения группы III-V" : Материалы конференции. 1-4 октября 2002 г. – Томск, 2002. – С. 124-126.

4. Влияние внутренних полей на туннельный ток в напряженных структурах GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N(0001) / С. Н. Гриняев, А. Н. Разжувалов // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т. 37. – № 4. – С. 450-455.

5. Разжувалов А. Н. Модель гистерезиса туннельного тока в двухбарьерных гетероструктурах w-GaN/AlGaН(0001) / А. Н. Разжувалов, С. Н. Гриняев // Девятая конференция "Арсенид галлия и полупроводниковые соединения группы III-V" : Материалы конференции. 3-5 октября 2006 г. – Томск, 2006. – С. 333-336.

6. Самосогласованный расчет туннельного тока в двухбарьерных гетероструктурах w-GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N(0001) / С. Н. Гриняев, А. Н. Разжувалов // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40. – № 6. – С. 695-700.

7. Разжувалов А. Н. Особенности туннельного тока в двухбарьерных структурах w-GaN/AlGaН(0001) с Ga- и N- поверхностями роста / А. Н. Разжувалов, С. Н. Гриняев // Конференция аспирантов и молодых ученых : Труды XI конференция по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов. 13-16 июня 2007 г. – Владивосток, 2007. – С. 205-209.

8. Гистерезис туннельного тока в двухбарьерных структурах w-GaN/AlGaН(0001) / С. Н. Гриняев, А. Н. Разжувалов // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42. – № 5. – С. 595-603.

9. "Конденсаторная" модель гистерезиса туннельного тока в структурах w-GaN/AlGaН(0001) / С. Н. Гриняев, А. Н. Разжувалов // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 51. – № 1. – С. 178-188.

### Список использованной литературы

[1] Group III nitride and SiC based MEMS and NEMS: materials properties, technology and applications / V. Cimalla, J. Pezoldt and O. Ambacher // J. Phys. D : Appl. Phys. – 2007. – V. 40. – P. 6386-6434.

[2] Current-voltage instabilities in GaN/AlGaН resonant tunnelling structures / С. Т. Foxon, S. V. Novikov, A. E. Belyaev, et al. // Phys. St. Sol. C. – 2003. – V. 0. – P. 2389-2392.

[3] Vertical transport in group III-nitride heterostructures and application in AlN/GaN resonant tunneling diodes / M. Hermann, E. Monroy, A. Helman, et al. // Phys. St. Sol. C. – 2004. – V. 1. – № 8. – P. 2210-2227.

[4] Macroscopic polarization and band offsets at nitride heterojunctions / F. Bernardini, V. Fiorentini // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 57. – № 16. – P. R9427-R9430.

[5] WinGreen, URL: <http://www.fz-juelich.de/isg/mbe/software.html> (дата обращения: 07.03.2009)

[6] Bi-stable behaviour in GaN-based resonant tunnelling diode structures / S. Leconte, S. Golka, G. Pozzovivo, et al. // Phys. St. Sol. C. – 2008. – V. 5. – № 2. – P. 431-434.

[7] Leakage mechanism in GaN and AlGaН Schottky interfaces / T. Hashizume, J. Kotani, H. Hasegawa // Appl. Phys. Lett. – 2004. – V. 84. – № 24. – P. 4884-4886.