

GaAs/AlGaAs 量子阱中电子浓度的 自洽计算*

杨悦非 朱蔚雯 王渭源

(中国科学院上海冶金研究所, 上海)

1988年2月6日收到

应用波函数展开方法, 自洽计算了调制掺杂 AlGaAs/GaAs/AlGaAs 量子阱中电势能分布、子能级位置、2DEG 浓度分布和 2DEG 面浓度 n_s , 以及这些参数与量子阱宽度、不掺杂 AlGaAs 厚度等材料参数的关系。计算表明, 量子阱中 2DEG n_s 比单异质结 n_s 大 2 倍左右, 量子阱宽度在 200—300 Å 之间 n_s 有个最大值; 量子阱太宽时, 2DEG 主要集中在两边异质结界面附近, 变为双异质结。

主题词: 调制掺杂量子阱, GaAs/AlGaAs 异质结, 2DEG 浓度。

一、引言

近年来高电子迁移率晶体管 (HEMT) 作为高速电子器件已很普遍, 但由于通常 HEMT 是用 GaAs/AlGaAs 单异质结制作的, HEMT 性能进一步提高受到二维电子气 (2DEG) 面浓度 n_s 、电子饱和速度 v_s 和迁移率随电场变化 $\mu(E)$ 的限制^[1,2]。 v_s 和 $\mu(E)$ 由材料本身特性决定, 因此增大 n_s 是提高 HEMT 性能的一个重要途径。关于增大 2DEG n_s , 在 GaAs/AlGaAs 双异质结和量子阱 HEMT 中已有初步实验结果^[3,4], 并已制成相应的 HEMT 功率器件, 而且具有大的 n_s 、高的输出电流密度和大的跨导^[5]。虽然量子阱 HEMT 的有关理论计算有过报道, 但都偏重于量子阱中电子波函数的分布情况^[6]或计算中将 n_s 固定于某值^[7], 而量子阱中 n_s 和调制掺杂参数的关系未见报道。本文应用波函数展开方法, 自洽计算了调制掺杂 AlGaAs/GaAs/AlGaAs 量子阱中电势能分布、子能级位置、2DEG 浓度分布和 n_s , 以及这些参数与量子阱宽度、不掺杂 AlGaAs 厚度等材料参数的关系。

二、计算方法

调制掺杂量子阱结构如图 1, 量子阱宽度为 $2a$, 不掺杂 AlGaAs 厚度为 W_{np} , 量子阱两边对称。已报道的计算结果表明, 电子在 AlGaAs 中的几率很小^[6], 可以忽略, 故设电子在 AlGaAs 中的波函数为零。只考虑一维情况, 电子在量子阱中满足薛定谔方程

* 中国科学院科学基金资助课题

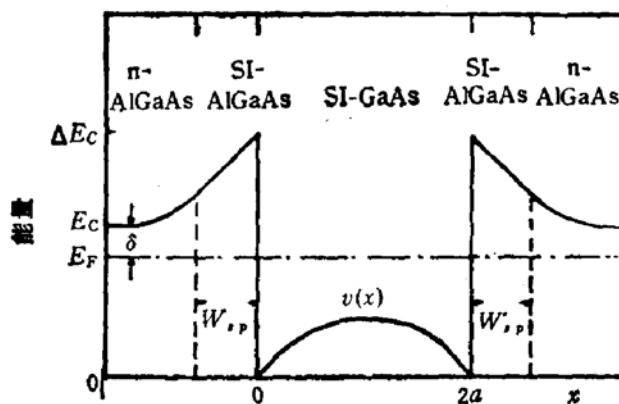


图1 调制掺杂量子阱结构示意图

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_i(x) = E_i \psi_i(x) \quad (1)$$

其中 $\psi_i(x)$ 为 2DEG 的波函数, E_i 为量子阱中子能级, m^* 为 GaAs 的电子有效质量, \hbar 为普朗克常数, $V(x)$ 为电子势能函数。由于电子之间相互作用能对势能的贡献不大^[8,9], 忽略多体系统的相关交换效应, 则有

$$V(x) = -q\varphi(x) \quad (2)$$

其中 $\varphi(x)$ 为 2DEG 产生的电势, 由泊松方程确定, 忽略 GaAs 中电离杂质离子, 则 $V(x)$ 满足下列方程

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -q^2n(x)/\epsilon_w \quad (3)$$

和 $V(x)$ 的边界条件

$$V(0) = 0 \quad (4a)$$

$$V(2a) = 0 \quad (4b)$$

$$\left. \frac{dV}{dx} \right|_0 = -\left. \frac{dV}{dx} \right|_{2a} = qE(0) \quad (5)$$

式(5)的条件等价于下式^[10]

$$n_s = 2 \left\{ \left[(W_{s,p} N_D)^2 + \frac{2\epsilon_b N_D}{q^2} (\Delta E_c - E_p - \delta) \right]^{\frac{1}{2}} - W_{s,p} N_D \right\} \quad (6)$$

上述各式中, $n(x)$ 为 2DEG 浓度分布函数, ϵ_b 和 ϵ_w 分别为 AlGaAs 和 GaAs 的介电常数, q 为电子电量, E 为电场强度, ΔE_c 为 AlGaAs/GaAs 异质结界面导带能隙差, E_p 为费米能级, δ 为 n-AlGaAs 导带与费米能级差, N_D 为 n-AlGaAs 中施主掺杂浓度。式(3)中 $n(x)$ 由二维系统的费米-狄喇克统计确定

$$n(x) = \frac{m^* k T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=0} F_0[(E_p - E_i)/kT] |\psi_i(x)|^2 \quad (7)$$

其中

$$F_0(x) = \ln [1 + \exp(x)] \quad (8)$$

2DEG 面密度为

$$n_s = \int_0^{2a} n(x) dx = \frac{m^* k T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=0} F_0[(E_p - E_i)/kT] \quad (9)$$

有了以上方程, 原则上用数值方法可进行自治计算, 但计算过程过于复杂, 计算量较大。为了简化计算, 把 $\phi_i(x)$ 、 $V(x)$ 和 $n(x)$ 用一维无限深量子阱的波函数作为基函数展开,

$$\phi_i(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{n=1} C_n^i \sin \frac{n\pi}{2a} x \quad (10)$$

$$V(x) = \sum_{k=1} V_k \sin \frac{k\pi}{2a} x \quad (11)$$

$$n(x) = \sum_{l=1} n_l \sin \frac{l\pi}{2a} x \quad (12)$$

其中 C_n^i 、 V_k 和 n_l 分别为 $\phi_i(x)$ 、 $V(x)$ 和 $n(x)$ 的展开系数。另外, 式(11)已经满足式(4), 但还须满足式(5)的边界条件, 由此得

$$V_k = 0 \quad (\text{当 } k \text{ 为偶数})$$

这样式(11)变为

$$V(x) = \sum_{m=0} V_{2m+1} \sin \frac{2m+1}{2a} \pi x \quad (13)$$

把式(12)和(13)代入式(3)中, 并乘 $\sin \frac{2m+1}{2a} \pi x$ 后积分得

$$V_{2m+1} = \frac{q^2}{\epsilon_w} \left[\frac{2a}{(2m+1)\pi} \right]^2 n_{2m+1} \quad (14)$$

根据式(12)的反变换式, 并利用式(7)和(10)得

$$n_{2m+1} = \frac{m^* k T}{\pi \hbar^2 a} \sum_{i=0} F_0 [(E_F - E_i)/kT] C_i^i C_n^i I(l, n, 2m+1) \quad (15)$$

其中 I 为

$$I(l, n, 2m+1) = \frac{1}{a} \int_0^a \sin \frac{l\pi x}{2a} \sin \frac{n\pi x}{2a} \sin \frac{2m+1}{2a} \pi x dx \quad (16)$$

可直接计算得到。把式(10)和(13)代入方程(1)并乘 $\sin \frac{l\pi}{2a} x$ 后积分得到久期方程

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{l\pi}{2a} \right)^2 - E_i \right] C_i^i + \sum_{m=0} \sum_{n=1} V_{2m+1} C_n^i I(l, n, 2m+1) = 0 \quad (17)$$

在一定的精度下, 取 $l = 1$ 至一个有限值, 解方程(17)可得到量子阱中子能级 E_i 和波函数的展开系数 C_i^i , 由式(6)和(9)定出 E_F , 由式(15)和(14)得 n_{2m+1} 和 V_{2m+1} , 再代入方程(17). 重复计算直到自治为止, 最后由式(9)、(10)、(13)和(12)得到 $\phi_i(x)$ 、 $V(x)$ 、 $n(x)$ 和 n_i .

表 1 计算中所用的一些固定参数

m^*	0.067 m_e	$\Delta E_c(\text{eV})$	0.3
$E_F(\text{meV})$	66	$\epsilon_s(\text{F/cm})$	1.08×10^{-12}
$T(\text{K})$	77	$\epsilon_w(\text{F/cm})$	1.17×10^{-12}
a	0.3		

用式(6)计算 n_s 时, 需要知道 δ , 而 δ 值的大小由 N_D 和 AlGaAs 中施主杂质的激活能 E_D 决定^[11], 但低温时的 E_s 值未见文献报道, 本文采用 150—300K 之间适用的近似式 $E_D = (707x - 140)$ (meV) 计算 E_D ^[22], $0.22 < x < 0.4$, x 为 AlAs 浓度。本文计算中所用的一些固定参数如表 1。

三、计算结果与讨论

图 2 给出了一定的 $N_D (1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3})$ 和 $W_{sp} (50 \text{ \AA})$, 不同量子阱宽度的 $n(x)$ 和 $V(x)$ 的变化曲线。当阱宽为 100 Å 时, 2DEG 主要集中在量子阱中间, 阵宽为 200 Å 时, 2DEG 分布变得较为平坦, 随着阱宽进一步增加, 2DEG 分布就主要集中在异质结界面附近, 这时变成双异质结的情况(图 2(d))。电子占据子能级的情况也随着阱宽增大而由基态到第一激发态和第二激发态。此外, 量子阱阱底向上凸起随着阱宽增大而增加。

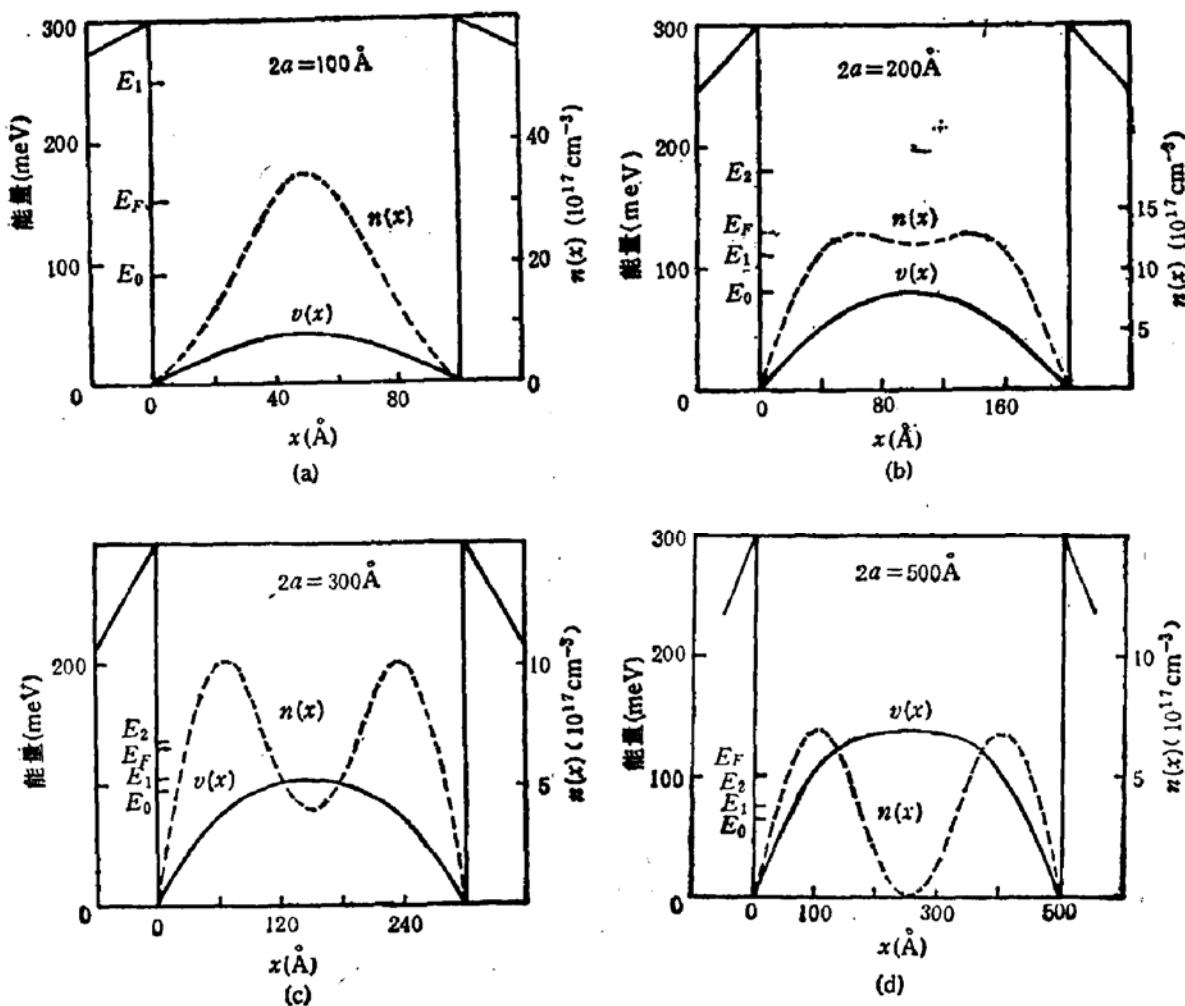
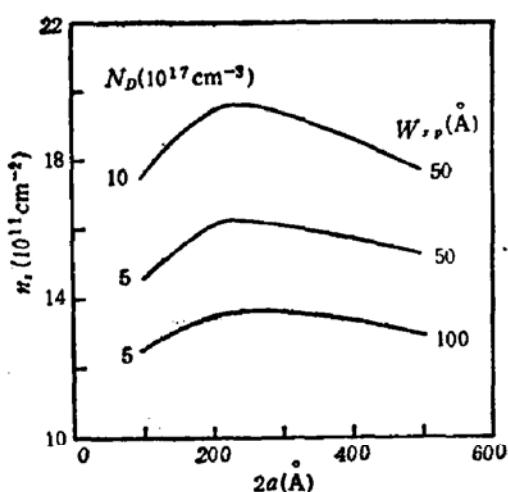
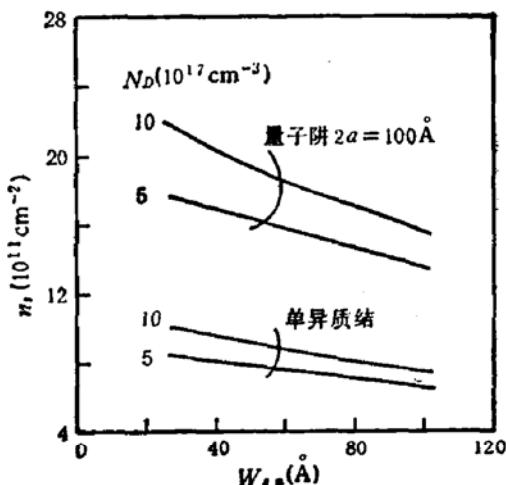


图 2 量子阱中 $n(x)$ 和 $V(x)$ 的分布曲线 ($N_D = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $W_{sp} = 50 \text{ \AA}$)

2DEG n_s 随阱宽的变化曲线如图 3, 量子阱宽度在 200—300 Å 之间, n_s 有一个最大值, 阵宽太宽或太窄都会降低 n_s 。而且, 量子阱太宽时(如 500 Å), 2DEG 集中在两异质

图 3 n_s 随量子阱宽度的变化曲线图 4 n_s 随不掺杂 AlGaAs 厚度的变化曲线

结界面附近形成双层导电沟道，这样会影响 HEMT 的正常栅控特性，就象多沟道 HEMT 中所表现的跨导随栅偏压变化曲线具有低谷特性^[4]。因此选择合适的量子阱宽度对获得较大的 n_s 和高性能 HEMT 有一定的好处。

图 4 为 n_s 随不掺杂 AlGaAs 厚度变化曲线，同时也给出了单异质结的计算结果，比较后可看出，量子阱中 n_s 比单异质结的 n_s 大 2 倍左右。

表 2 为文献中 n_s 的实验结果和本文计算结果比较。其中本文计算结果和文献[4]的结果符合较好，和文献[3]的结果有一定误差，其原因主要是实验上 N_D 的数值有一定误差，加上 E_D 没有确定的实验值，而且它和材料生长条件、杂质补偿度和掺杂浓度有关^[12,13]，因此不可能正确得到 δ。再则，本文的计算只考虑理想的情况，对实际量子阱材料，GaAs 中有一定的杂质浓度，GaAs/AlGaAs 界面存在一定的界面态和异质结界面有一定的过渡区，这些都是降低 n_s 的因素。所以，实验值略低于理论值也是合理的。

表 2 n_s 的实验结果和计算结果 (77K)

2a (Å)	W _{AlGaAs} (Å)	N _D (10 ¹⁷ cm ⁻³)	n _s (10 ¹¹ cm ⁻²)	文献	n _s (10 ¹¹ cm ⁻²)
300	50	10	18	[4]	19.3
300	100	10	12.7	[3]	15.8

利用数值计算方法，不考虑调制掺杂参数而固定 n_s 的情况已有文献报道^[14]。同样，本文中若不考虑式(6)而固定 n_s 进行计算，所得结果和文献[14]的结果比较表明，两者的 V(x) 差别不大，而本文的 |φ₀(x)|² 和 |φ₁(x)|² 稍向量子阱中间偏移，主要原因是在本文计算中忽略了波函数，在 AlGaAs 中穿透部分，但波函数分布形状很相似，因此本文的计算结果较好地反映了调制掺杂量子阱中 2DEG 浓度分布、电势分布和子能级分裂情况的性质。

参 考 文 献

- [1] T. J. Drummond, R. Fischer, S. L. Su, W. G. Lyons and H. Morkoc, *Appl. Phys. Lett.*, **42**, 262 (1983).

- [2] W. T. Masselink, T. Henderson, J. Klen, W. Kopp and H. Morkoc, *IEEE Trans.*, ED-33, 639 (1986).
- [3] K. Inoue and H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 23, L61 (1984).
- [4] N. H. Sheng, C. P. Lee, R. T. Chen, D. L. Miller and S. J. Lee, *IEEE Electron. Dev. Lett.*, EDL-6, 307 (1985).
- [5] K. Hikosaka, Y. Hirachi, T. Mimura and M. Abe, *IEEE Electron. Dev. Lett.*, EDL-6, 341 (1985).
- [6] C. Hamaguchi, K. Miyatsuji and H. Hihara, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 23, L131 (1984).
- [7] K. Inoue, H. Sakaki, J. Yoshino and T. Hotta, *J. Appl. Phys.*, 58, 4277 (1985).
- [8] T. Ando and S. Mori, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 47, 1518 (1979).
- [9] T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 51, 3893 (1982).
- [10] 杨悦非、王渭源, 1987年全国GaAs会议文集。
- [11] H. C. Casey, *Heterostructure Laser, Part A*, Academic Press. (1978).
- [12] N. Chand *et al.*, *Phys. Rev. B*, 30, 4481 (1984).
- [13] T. Ishibashi, S. Tarucha and H. Okamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 21, L476 (1982).
- [14] H. Sakaki, *IEEE Trans.*, QE-22, 1845 (1986).

A

Self-Consistent Calculation of Electron Concentrations in GaAs/AlGaAs Quantum Well

Yang Yuefei, Zhu Weiwen and Wang Weiyuan
(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

Abstract

The potential energy function, subband level, 2DEG concentration distribution and sheet density n_s in modulation doped AlGaAs/GaAs/AlGaAs quantum well are self-consistently calculated using the method of wave function expansion. The relationship between these parameters and material parameters such as the quantum well width and the thickness of undoped AlGaAs layer are also presented. The calculated results show that 2DEG n_s in quantum well is approximately twice as high as that in single-heterojunction, a maximum n_s is obtained at quantum well width of 200—300 Å and 2DEG accumulates near the both sides of heterojunction interface when the quantum well width is higher than 500 Å. In the later case, the quantum well becomes the double-heterojunction systems.

KEY WORDS: Modulation doped quantum well, GaAs/AlGaAs heterojunction, 2DEG concentration