

УДК 519.634

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ<sup>1)</sup>

© 2016 г. К. К. Абгарян\*, Д. Л. Ревизников\*\*

(\*119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ РАН;

\*\*125993 Москва, Волоколамское ш., 4, МАИ)

e-mail: kristal83@mail.ru

Поступила в редакцию 12.03.2015 г.

Переработанный вариант 04.06.2015 г.

Представлена трехуровневая схема моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур с учетом эффектов спонтанной и пьезоэлектрической поляризации. Схема объединяет квантово-механические расчеты на атомарном уровне для получения плотности зарядов на гетероинтерфейсах, расчет распределения носителей в гетероструктуре на основе решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния. С целью ускорения вычислительного процесса при расчете электронной плотности в гетероструктуре применен подход, основанный на аппроксимации нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала в сочетании с линеаризацией уравнения Пуассона. Показана эффективность данного подхода в задачах рассматриваемого класса. Библ. 16. Фиг. 7.

**Ключевые слова:** численное моделирование, полупроводниковые гетероструктуры, уравнения Шрёдингера и Пуассона, электронная плотность, подвижность носителей заряда.

**DOI:** 10.7868/S004446691601004X

### ВВЕДЕНИЕ

Современной тенденцией развития высокочастотной полупроводниковой техники является стремление к миниатюризации и достижению максимальных концентраций носителей заряда при максимально возможной подвижности. С этой целью используются многослойные наноразмерные гетероструктуры, в которых, благодаря наличию потенциальных барьеров, ограничивается движение носителей заряда в одном или более направлениях (см. [1]). К основным факторам, влияющим на возникновение выделенных каналов переноса носителей (двумерного электронного газа) в окрестности гетерограницы, можно отнести концентрацию примесных носителей в барьерном слое и наличие поверхностного заряда на гетерогранице. Последний характерен для структур вюрцитного типа и обусловлен спонтанной и пьезоэлектрической поляризацией (см. [2]).

В ВЦ РАН реализована следующая схема многомасштабного моделирования полупроводниковых гетероструктур (см. [3]). Выделены три характерных масштабных уровня. Описание системы на атомарном уровне осуществляется с использованием кристаллографической информации (см. [4]) и квантово-механической модели, в основе которой лежит теория функционала электронной плотности (см. [5], [6]). Полученная информация передается в модель наномасштабного уровня, где используется для расчета распределения носителей заряда в гетероструктуре. На данном уровне математическая модель представляет собой систему уравнений Шрёдингера и Пуассона (см. [7]). Использование понятия эффективной массы электрона позволяет избежать детального рассмотрения взаимодействия электронов с ядерным остовом, давая тем самым возможность перейти от атомарных масштабов к реальным наноразмерам гетероструктур. Основным интересом при этом представляет распределение плотности носителей заряда поперек слоистой структуры и выделение локализованной зоны повышенной концентрации (двумерный

<sup>1)</sup>Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 14-11-00782).

электронный газ). Для гетеросистем, в которых квантовое ограничение достигается за счет легирования барьерного слоя примесями, характерно наличие в уравнении Пуассона распределенного источника. В системах, обладающих вюрцитной структурой, имеет место спонтанная и пьезоэлектрическая поляризация, в результате чего заряд концентрируется на межслойной границе. Это приводит к появлению мощного локализованного источника, что обуславливает необходимость высокого разрешения. Полученные в результате решения сопряженных уравнений Шредингера и Пуассона данные о волновых функциях и распределении плотности носителей заряда поперек слоистой структуры поступают в модель следующего масштабного уровня, где осуществляется расчет подвижности носителей в продольном направлении. При этом учитывается широкий спектр механизмов рассеяния электронов – рассеяние на оптических и акустических фононах, шероховатостях гетерограницы, на заряженных центрах и дислокациях, пьезоэлектрическое рассеяние (см. [3]).

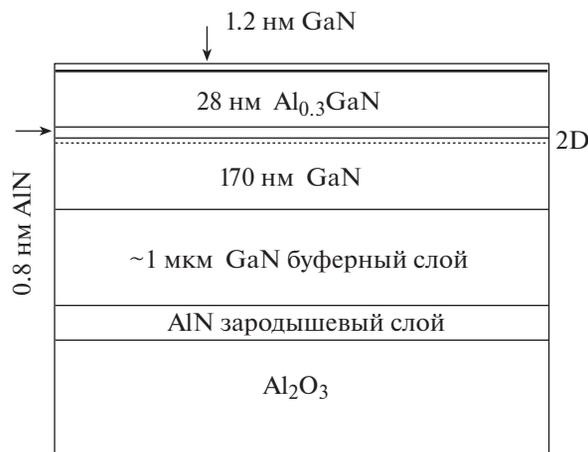
В настоящей работе основное внимание уделено вопросам численного моделирования на наномасштабном уровне. На данном уровне локальные вычислительные процедуры, используемые для решения уравнений Шредингера и Пуассона, объединены глобальным итерационным процессом, направленным на согласование решений. Принципиальным моментом является сильная взаимосвязь уравнений, характерная для рассматриваемого класса задач, что приводит к проблеме сходимости глобальных итераций. В особой мере эта проблема проявляется для вюрцитных структур, когда на гетероинтерфейсах появляется мощный локализованный источник заряда.

### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Типичная схема наноразмерной полупроводниковой гетероструктуры представлена на фиг. 1, заимствованной из [8].

Показана гетероструктура, выращенная в Институте физики полупроводников СО РАН на основе нитрида галлия и тройных растворов (см. [8]). Наличие слоев, выполненных из полупроводников с различной шириной запрещенной зоны, в сочетании с поляризационными эффектами обеспечивает создание в окрестности гетерограницы в слое с меньшей шириной запрещенной зоны (GaN) квантового колодца для электронов шириной порядка нескольких нанометров. Движение электронов в направлении, нормальном к гетерогранице, ограничено, энергетические уровни квантованы. При этом электроны на этих уровнях могут свободно двигаться в плоскости гетерограницы. Образуется двумерный электронный газ (ДЭГ) (схематично область образования двумерного электронного газа показана точками на фиг. 1).

Математическая модель, описывающая распределение электронов в таких структурах, представляет собой систему уравнений Шредингера и Пуассона (см. [7], [9]). Отметим, что в полупроводниковых приборах движение носителей заряда может ограничиваться не только в одном (двумерный электронный газ), но и в двух (квантовая нить), а также в трех (квантовая точка) направлениях (см. [1]). Как правило, это достигается приложением напряжения в соответствующих



Фиг. 1. Многослойная полупроводниковая гетероструктура (см. [8]).

зонах. Таким образом, в общем случае задача моделирования полупроводниковых гетероструктур ставится в пространственной постановке. Математическая модель имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left( \frac{1}{m^*} \nabla \psi \right) + (-e\varphi + \Delta E_c) \psi = E \psi, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) = -e(N_D(z) - N_A(z) - n(\mathbf{r})) + \sum_l \sigma_l \delta(z - z_l), \quad (2)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i (\psi_i(\mathbf{r}))^2 n_i, \quad (3)$$

$$n_i = k_B T \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right). \quad (4)$$

Здесь  $E_i$  и  $\psi_i(\mathbf{r})$  – энергетические уровни и соответствующие им волновые функции,  $n(\mathbf{r})$  – электронная плотность,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $e$  – заряд электрона,  $m^*$  – эффективная масса электрона,  $E_F$  – положение уровня Ферми,  $\varphi(\mathbf{r})$  – электростатический потенциал,  $N_D, N_A$  – концентрации донорной и акцепторной примесей,  $\sigma_l$  – плотности зарядов на интерфейсах,  $\delta$  – дельта-функция,  $z_l$  – местоположения интерфейсов,  $\varepsilon$  – диэлектрическая постоянная материала,  $\Delta E_c$  – сдвиг зоны проводимости материала,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура. В модели (1)–(4) отражен тот факт, что значения  $m^*$ ,  $\varepsilon$  и  $\Delta E_c$  могут меняться от слоя к слою. При этом температура в гетероструктуре предполагается постоянной.

При записи уравнений (1)–(4) выделено направление поперек слоев (координата  $z$ ), что отражает послойный рост структуры и зависимость ряда характеристик только этой координаты.

Задача (1)–(4) решается, как правило, в прямоугольной области  $\Omega$  (пример двумерной области представлен на фиг. 1), что характерно для большинства полупроводниковых устройств. Постановка условий на границе  $\Gamma$  области  $\Omega$  отражает специфику функционирования гетероструктуры. Область  $\Omega$  в расчетах обычно значительно больше области, где реализуется квантовое ограничение, так что справедливым является постановка однородного условия Дирихле для волновой функции на границах –  $\psi|_{\Gamma} = 0$ . Для электростатического потенциала в зависимости от условий функционирования гетероструктуры на различных участках границы могут задаваться как значения приложенных напряжений (граничные условия Дирихле,  $\varphi|_{\Gamma} = \varphi_g$ ), так и значения напряженности электрического поля (граничные условия Неймана,  $\frac{\partial \varphi}{\partial \eta}|_{\Gamma} = f_g$ , где  $\frac{\partial \varphi}{\partial \eta}$  – производная по нормали к границе). Первый вариант характерен, например, для задач, в которых квантовые ограничения достигаются за счет внешнего электрического поля (квантовые нити в двумерном случае и квантовые точки в трехмерном случае), а также в зонах контакта полупроводника с металлами. Второй вариант часто используется на границе со стороны подложки, где задается нулевое значение напряженности (однородное условие Неймана).

Решение спектральной задачи (1) (уравнение Шрёдингера) зависит от электростатического потенциала  $\varphi$ , распределение которого в структуре  $\varphi(\mathbf{r})$  определяется уравнением Пуассона (2). При этом в правую часть уравнения Пуассона входит электронная плотность  $n(\mathbf{r})$ , которая, в свою очередь, определяется энергетическими уровнями  $E_i$  и волновыми функциями  $\psi_i(\mathbf{r})$  согласно статистике Ферми–Дирака (3), (4). Задача, таким образом, имеет ярко выраженный сопряженный характер.

Самосогласованное решение этой системы дает искомые энергетические уровни  $E_i$  и соответствующие им волновые функции  $\psi_i(\mathbf{r})$ , профиль потенциальной ямы  $V(\mathbf{r})$ , а также распределение электронной плотности в гетероструктуре  $n(\mathbf{r})$ .

Кратко остановимся на том, как в математической модели отражены основные факторы, влияющие на возникновение выделенных каналов переноса носителей в окрестности гетерограницы.

Выражение для потенциальной энергии электрона в уравнении (1)  $V = -e\varphi + \Delta E_c$  включает величину сдвига зоны проводимости полупроводниковых материалов  $\Delta E_c$ , что обуславливает создание потенциального барьера, удерживающего электроны в квантовом колодце.

Для полупроводников с кристаллической структурой сфалерита важнейшим фактором является концентрация доноров в барьерном слое  $N_D$ , входящая в правую часть уравнения Пуассона. Для полупроводников с вюрцитной кристаллической структурой определяющую роль играют поляризационные эффекты и связанные с ними поверхностные заряды на гетерограницах. Этот фактор представлен в математической модели слагаемым  $\sum_l \sigma_l \delta(z - z_l)$  в уравнении Пуассона. Здесь двумерный электронный газ возникает даже без введения доноров в барьерный слой. Эффекты спонтанной и пьезоэлектрической поляризации описываются квантово-механическими моделями на атомарном уровне, что позволяет получить плотности поверхностного заряда на интерфейсах (см. [10]).

Разумеется, на распределение электронной плотности в слоистой гетероструктуре влияют толщины и расположение слоев, а также другие параметры математической модели.

Многие задачи расчета и оптимизации слоистых полупроводниковых структур решаются в пространственно-одномерной постановке, позволяющей определить основные характеристики двумерного электронного газа. Математическая модель в этом случае выглядит следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi}{dz} \right) + V(z)\psi(z) = E\psi(z),$$

$$\frac{d}{dz} \left( \varepsilon(z) \frac{d\varphi}{dz} \right) = -e(N_D(z) - N_A(z) - n(z)) + \sum_l \sigma_l \delta(z - z_l),$$

$$V(z) = -e\varphi(z) + \Delta E_c(z),$$

$$n(z) = \sum_i (\psi_i(z))^2 n_i(z),$$

$$n_i(z) = k_B T \frac{m^*(z)}{\pi \hbar^2} \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right).$$

Отметим, что сложности, связанные со сходимостью глобальных итераций для получения самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, отчетливо проявляются при решении задачи в одномерной постановке. Поэтому анализ, проводимый в настоящей работе, базируется на этой модели.

Остановимся подробнее на постановке граничных условий.

На границах системы ( $z = 0$ ,  $z = L$ , где  $L$  – общая толщина слоистой структуры) должны выполняться условия равенства нулю волновых функций:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L) = 0.$$

На левой границе ( $z = 0$ ), как правило, задается потенциальный барьер  $\varphi_b$ , образующийся в приконтактном слое полупроводника, граничащего с металлом (барьер Шоттки). Кроме того, возможно задание смещения  $\varphi_s$  вследствие приложенного напряжения. На правой границе ( $z = L$ ) поведение потенциала определяется положением зоны проводимости соответствующего материала относительно уровня Ферми. В большинстве случаев естественным условием здесь представляется отсутствие электрического поля. Таким образом, граничные условия для уравнения Пуассона имеют вид

$$\varphi(0) = \varphi_b + \varphi_s, \quad \varphi'(L) = 0.$$

## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ

Как отмечалось выше, сопряженный характер задачи обуславливает необходимость итерационного согласования решений уравнений Шрёдингера и Пуассона. С этой целью локальные вычислительные процедуры, служащие для решения уравнений, объединены глобальным итерационным циклом. Вычислительный процесс можно схематично представить следующим образом.

В результате выполнения очередной итерации имеется распределение электронной плотности в системе  $n^{(k)}(\mathbf{r})$ .

С использованием этой информации решается уравнение Пуассона:

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \varphi^{(k+1)}) = -e(N_D - N_A - n^{(k)}) + \sum_i \sigma_i \delta(z - z_i).$$

Полученное распределение потенциала в системе  $\varphi^{(k+1)}$  используется при последующем решении уравнения Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left( \frac{1}{m^*} \nabla \psi^{(k+1)} \right) + (-e\varphi^{(k+1)} + \Delta E_c) \psi^{(k+1)} = E^{(k+1)} \psi^{(k+1)}.$$

В результате получаются значимые (вносящие вклад в повышение концентрации носителей) уровни энергии и соответствующие им волновые функции  $E_i^{(k+1)}$ ,  $\psi_i^{(k+1)}$ .

После этого с использованием статистики Ферми–Дирака рассчитывается новое распределение электронной плотности в системе:

$$n^{(k+1)} = \sum_i (\psi_i^{(k+1)})^2 k_B T \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i^{(k+1)}}{k_B T} \right) \right).$$

Для рассматриваемого класса задач характерна сильная взаимосвязь уравнений, что приводит к проблеме сходимости последовательных приближений. Для достижения сходимости возможно использование нижней релаксации:

$$\bar{n}^{(k+1)} = \omega n^{(k+1)} + (1 - \omega) n^{(k)},$$

где  $\bar{n}^{(k+1)}$  – итоговое распределение электронной плотности на данной итерации.

При этом, согласно вычислительным экспериментам, проведенным для широкого класса полупроводниковых гетероструктур, приходится использовать очень малый параметр релаксации  $\omega$  (типичный уровень значений параметра  $\omega \approx 0.025$ ), что существенно сказывается на скорости сходимости глобальных итераций. В ряде задач удается построить алгоритм с адаптивным релаксационным параметром, однако трудно добиться универсальности такого подхода. Отметим, что подобные сложности применительно к моделированию структур сфалеритного типа отмечались в [11]. Положение существенно осложняется при рассмотрении полупроводников с вюрцитной кристаллической структурой, когда появляются локализованные на гетерограницах заряды.

В настоящей работе для решения данного класса задач применяется подход, основанный на локальной аппроксимации неявной зависимости электронной плотности от потенциала (см. [11]). Этот подход хорошо зарекомендовал себя при моделировании распределения носителей заряда в гетероструктурах сфалеритного типа (см. [12], [13]). Аппроксимационное выражение для электронной плотности получено с использованием теории возмущений и имеет следующий вид:

$$n(\varphi) \approx \sum_i \psi_i^2 k_B T \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i + e(\varphi - \varphi^{(k)})}{k_B T} \right) \right), \tag{5}$$

где  $\varphi^{(k)}$  – потенциал, полученный на предыдущей глобальной итерации.

Так как использование зависимости (5) позволяет существенно повысить эффективность вычислительных алгоритмов, приведем здесь схему ее вывода.

Рассмотрим приращение потенциала  $\delta\varphi = \varphi - \varphi^{(k)}$ . Ему соответствует приращение электронной плотности  $\delta n$ , обусловленное изменением волновых функций  $\delta\psi_i$  и энергетических уровней  $\delta E_i$ :

$$\delta n = A \sum_i (\psi_i + \delta\psi_i)^2 \ln \left( 1 + \exp \left( F_i - \frac{\delta E_i}{k_B T} \right) \right) - A \sum_i (\psi_i)^2 \ln(1 + \exp F_i),$$

где  $A = k_B T \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$ ,  $F_i = \frac{E_F - E_i}{k_B T}$ .

В линейном приближении  $\delta n$  имеет вид

$$\delta n = -A \sum_i \psi_i^2 \frac{\delta E_i}{k_B T} \frac{\exp F_i}{1 + \exp F_i} + 2A \sum_i \psi_i \delta \psi_i \ln(1 + \exp F_i).$$

Согласно линейной теории возмущений (см. [14])

$$\delta E_i = -e(\psi_i, \delta \phi \psi_i), \quad \delta \psi_i = -e \sum_{j \neq i} \psi_j \frac{(\psi_j, \delta \phi \psi_i)}{E_i - E_j},$$

где  $(\psi_j, \delta \phi \psi_i) = \int_{\Omega} \psi_j \delta \phi \psi_i dV$ .

С учетом симметричности второго слагаемого по индексам выражение для приращения электронной плотности примет вид

$$\begin{aligned} \delta n &= Ae \sum_i \psi_i^2 \frac{(\psi_i, \delta \phi \psi_i)}{k_B T} \frac{\exp F_i}{1 + \exp F_i} - \\ &- Ae \sum_i \sum_{j \neq i} \psi_i \psi_j (\psi_j, \delta \phi \psi_i) \frac{\ln(1 + \exp F_i) - \ln(1 + \exp F_j)}{E_i - E_j} \approx \\ &\approx \frac{Ae}{k_B T} \sum_i \psi_i^2 (\psi_i, \delta \phi \psi_i) \frac{\exp F_i}{1 + \exp F_i} + \frac{Ae}{k_B T} \sum_i \sum_{j \neq i} \psi_i \psi_j (\psi_j, \delta \phi \psi_i) \frac{\exp F_i}{1 + \exp F_i}. \end{aligned}$$

Свойство ортонормированности волновых функций дает  $\sum_{j \neq i} \psi_j (\psi_j, \delta \phi \psi_i) = \delta \phi \psi_i - \psi_i (\psi_i, \delta \phi \psi_i)$ , что приводит к следующему выражению:

$$\delta n = \frac{Ae}{k_B T} \sum_i \psi_i^2 \frac{\exp F_i}{1 + \exp F_i} \delta \phi.$$

Это позволяет получить искомую аппроксимацию зависимости электронной плотности от потенциала:

$$\begin{aligned} n(\phi) &\approx n^{(k)} + \delta n = A \sum_i \psi_i^2 \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right) + \\ &+ \frac{Ae}{k_B T} \sum_i \psi_i^2 \frac{\exp F_i}{1 + \exp F_i} \delta \phi \approx A \sum_i \psi_i^2 \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i + e \delta \phi}{k_B T} \right) \right). \end{aligned}$$

Использование такого подхода приводит к модифицированному уравнению Пуассона с явно заданным нелинейным слагаемым  $n(\phi)$ :

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = -e(N_D - N_A - n(\phi)) + \sum_l \sigma_l \delta(z - z_l).$$

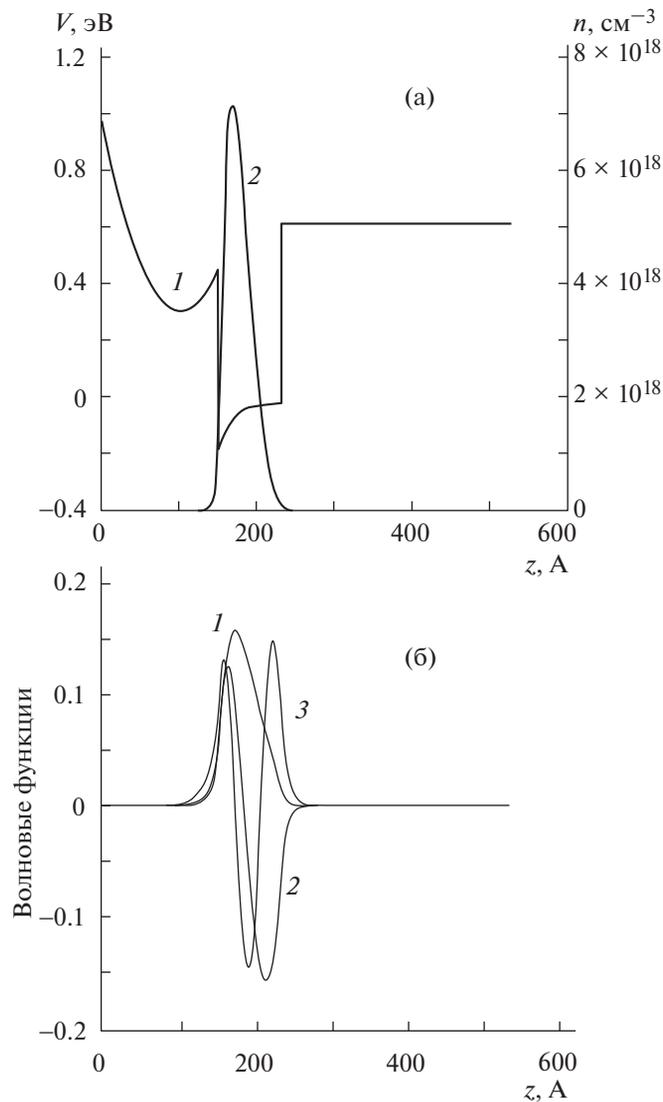
Для решения модифицированного уравнения Пуассона эффективным приемом является линеаризация (метод Ньютона – Рафсона) (см. [15]):

$$\begin{aligned} \phi &= \phi^{(p)} + \xi, \\ \nabla \cdot (\epsilon \nabla \xi) &= g \xi + q, \\ g &= e \frac{\delta n}{\delta \phi}(\phi^{(p)}), \end{aligned}$$

$$q = -\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi^{(p)}) + (-e(N_D - N_A - n(\phi^{(p)}))) + \sum_l \sigma_l \delta(z - z_l).$$

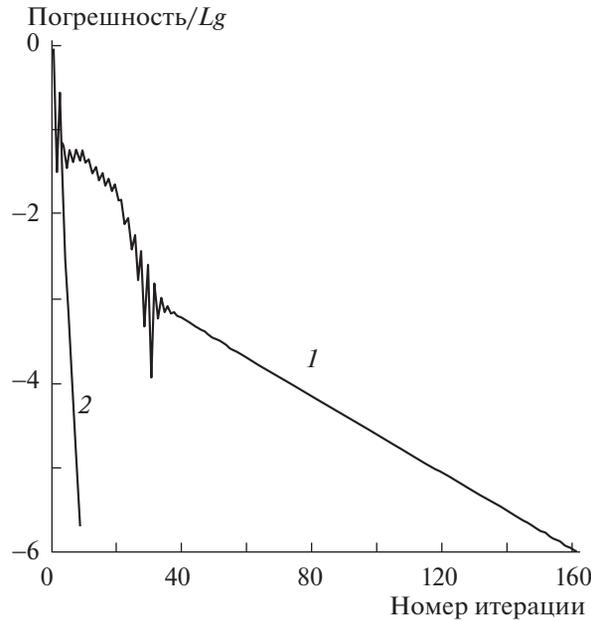
Здесь индекс  $(p)$  указывает на функцию, полученную на предыдущей локальной итерации.

Для решения уравнений Шрёдингера и Пуассона в настоящей работе применяются конечно-разностные методы. Аппроксимация производных с использованием центрально-разностных отношений позволяет свести задачу на каждой глобальной итерации к решению спектральной



**Фиг. 2.** (а) – распределение потенциальной энергии (1, левая шкала) и электронной плотности (2, правая шкала) по толщине гетероструктуры, (б) – волновые функции, соответствующие трем нижшим энергетическим уровням. Вариант кристаллической структуры сфалерита.

задачи для симметричной разреженной матрицы ленточной структуры (дискретный аналог уравнения Шрёдингера) и к решению системы алгебраических уравнений (дискретный аналог уравнения Пуассона). С учетом того, что размерности матриц могут быть достаточно велики в связи с необходимостью должного разрешения относительно тонкого слоя, содержащего двумерный электронный газ, а также того, что вычисления многократно повторяются в итерационном процессе, важным требованием к алгоритмам является экономичность вычислений. Наибольшие вычислительные затраты связаны с решением дискретного аналога уравнения Шрёдингера. В этой связи существенную роль играет учет особенностей расположения значимых энергетических уровней. Согласно статистике Ферми–Дирака вклад в повышение концентрации носителей в двумерном электронном газе вносят электроны, находящиеся на нижних энергетических уровнях. Информация о нижней границе поступает из решения уравнения Пуассона на текущей глобальной итерации:  $E_i^{(k)} > \min V^{(k)}(\mathbf{r})$ . Верхний уровень может быть оценен с использованием зависимости (4). Здесь принципиально то, что в силу особенностей распределения Ферми–Дирака количество электронов, обладающих энергией, превышающей уровень Ферми более чем на  $k_b T$ , убывает практически экспоненциально. Такая локализация позволяет использовать экономичные методы поиска собственных значений в сочетании с обратными итерациями для определения сеточных волновых функций.

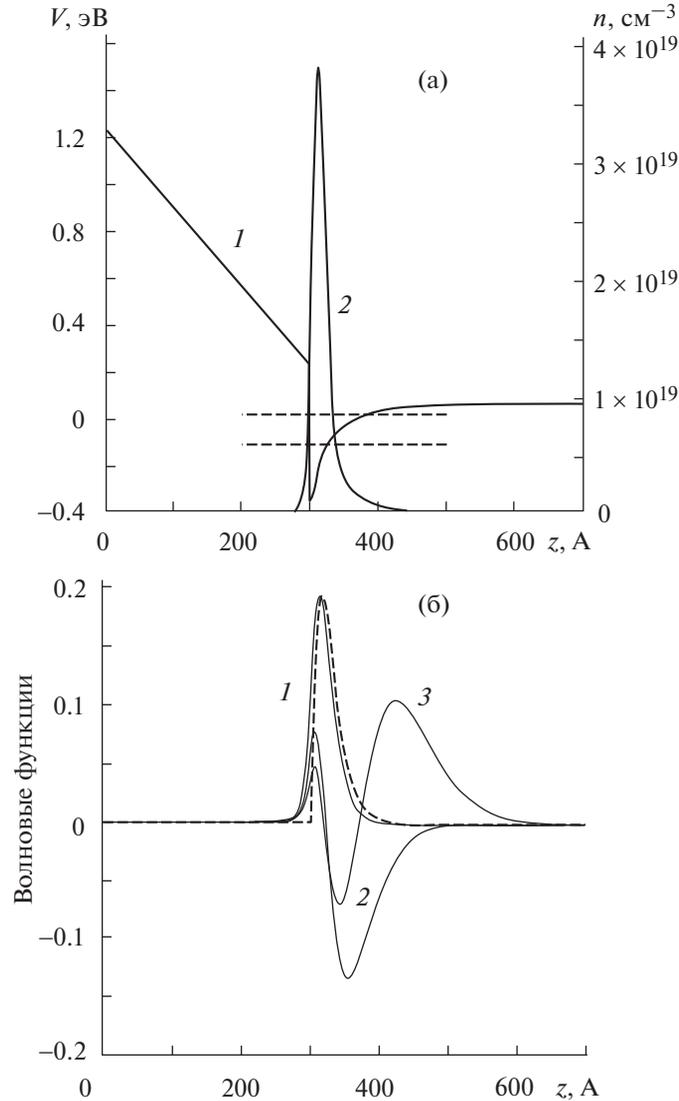


**Фиг. 3.** Сходимость глобальных итераций. 1 — метод последовательной нижней релаксации, 2 — аппроксимация нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала. Вариант кристаллической структуры сфалерита.

### ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Сначала рассмотрим вариант, когда полупроводниковые материалы имеют кристаллическую структуру сфалерита. В качестве примера возьмем трехслойную гетероструктуру  $\text{Al}_{0.3}\text{GaN}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{GaN}$  (см. [16]). Толщины слоев следующие — барьерный слой  $\text{Al}_{0.3}\text{GaN}$  — 15.2 нм, слой  $\text{GaN}$  — 8 нм, слой  $\text{Al}_{0.3}\text{GaN}$  — 30 нм. Остальные исходные данные следующие (см. [16]). Диэлектрические проницаемости материалов равны  $8.9\epsilon_0$  для  $\text{GaN}$  и  $8.5\epsilon_0$  для  $\text{Al}_{0.3}\text{GaN}$ , где  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная. Эффективные массы электрона принимались равными  $0.228m_0$  для обоих материалов ( $m_0$  — масса покоя электрона). Сдвиг зоны проводимости  $\Delta E_c$  полагался равным 0.63 эВ. Потенциал на внешней поверхности гетероструктуры определялся из условия  $-e\phi(0) = 1$  эВ (отсчет энергии ведется от уровня Ферми).

Как уже отмечалось, в случае сфалеритной кристаллической структуры создание надлежащих потенциальных барьеров осуществляется с использованием легирования барьерного слоя донорной примесью. В рассматриваемом варианте объемная концентрация примеси равна  $6 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Здесь и далее в этом разделе задача решается в одномерной постановке. На фиг. 2 приведены распределения по толщине гетероструктуры потенциальной энергии (фиг. 2а, кривая 1, отнесена к левой шкале), электронной плотности (фиг. 2а, кривая 2, отнесена к правой шкале) и волновых функций (фиг. 2б, нумерация кривых соответствует возрастанию энергетических уровней от самого нижнего). На фиг. 2а отчетливо видны изгиб на кривой потенциальной энергии вследствие легирования барьерного слоя и потенциальная яма в слое  $\text{GaN}$ , что приводит к образованию локализованной зоны повышенной концентрации электронов (двумерный электронный газ). Суммарная концентрация электронов в ДЭГ равна  $3 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Полученные результаты хорошо согласуются с данными, приведенными в [16]. На фиг. 3 проиллюстрирована сходимость глобальных итераций для рассматриваемого варианта. Здесь кривая 1 соответствует методу последовательных приближений с нижней релаксацией, кривая 2 — локальной аппроксимации зависимости электронной плотности от потенциала (нижняя релаксация не требуется). В качестве погрешности рассматривалась разность между наименьшими энергетическими уровнями (минимальное собственное значение для уравнения Шрёдингера), полученными на смежных итерациях. Видно, что ускорение сходимости в последнем случае значительно. В сочетании с линеаризацией уравнения Пуассона данный подход позволяет, таким образом, существенно сократить вычислительные затраты. Отметим, что выбор в качестве величины, характеризующей погрешность, разности между наименьшими энергетическими уровнями обусловлен тем, что



**Фиг. 4.** (а) – распределение потенциальной энергии (1, левая шкала) и электронной плотности (2, правая шкала) по толщине гетероструктуры, (б) – волновые функции, соответствующие трем нижним энергетическим уровням. Вариант кристаллической структуры вюрцита.

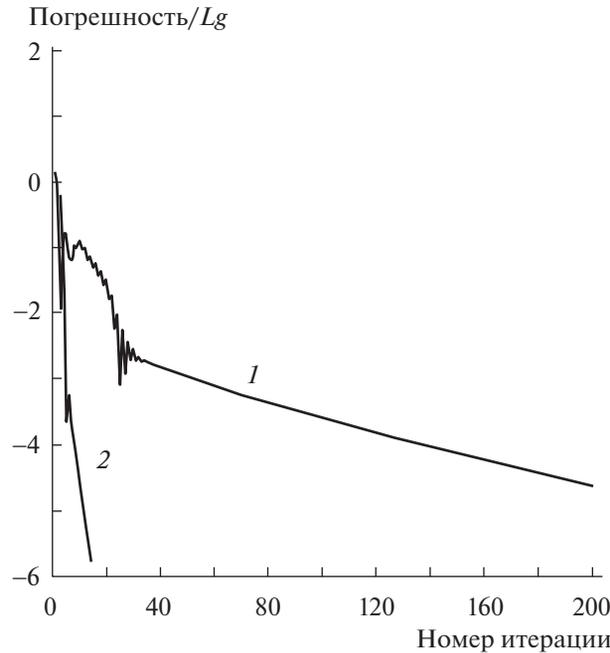
согласно многочисленным вычислительным экспериментам сходимость по наименьшим значениям энергии практически гарантирует сходимость по другим возможным критериям, так как электроны, обладающие такой энергией, вносят решающий вклад в распределение электронной плотности, что в конечном итоге отражается и на распределении электростатического потенциала.

Перейдем к полупроводниковым материалам с вюрцитной кристаллической структурой. Рассмотрим двухслойный вариант  $\text{Al}_{0.3}\text{GaN}/\text{GaN}$  (толщина слоя  $\text{Al}_{0.3}\text{GaN}$  30 нм), хорошо изученный экспериментально и теоретически (см. [2]). Здесь и далее исходные данные для расчетов определялись по аппроксимационным зависимостям (см. [2]):

$$\epsilon_{\text{AlGa}}(x) = (0.03x + 10.28)\epsilon_0,$$

$$\Delta E_c(x) = 0.7(E_g(x) - E_g(0)), \quad E_g(x) = 6.13x + 3.42(1 - x),$$

$$-e\phi_b = 1.3x + 0.84,$$



**Фиг. 5.** Сходимость глобальных итераций. 1 – метод последовательной нижней релаксации, 2 – аппроксимация нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала. Вариант кристаллической структуры вюрцита.

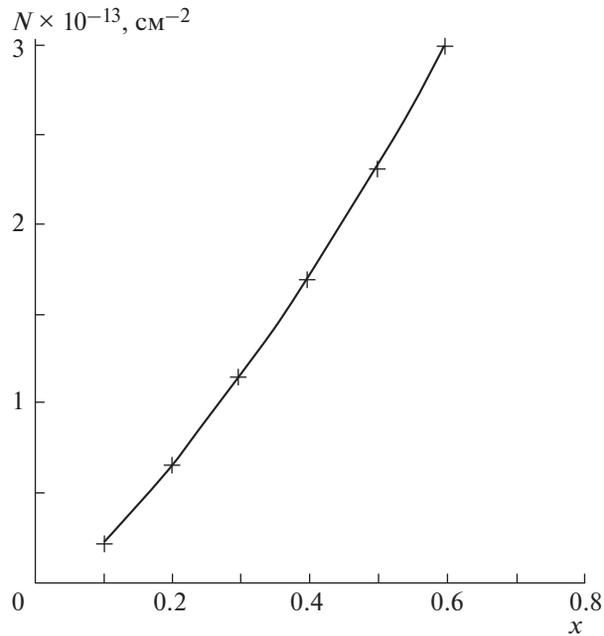
где  $x$  – мольная доля алюминия в сплаве AlGaN. Использовалось граничное условие для потенциала  $\varphi(0) = \varphi_b$ .

На фиг. 4 представлены распределения потенциальной энергии и электронной плотности по толщине гетероструктуры, а также волновые функции. Нумерация кривых аналогична нумерации фиг. 2. Здесь профиль потенциальной ямы и образование двумерного электронного газа обусловлены наличием поверхностного заряда на гетерогранице. Плотность заряда согласно проведенным *ab initio* квантово-механическим расчетам (см. [10]) равна  $1.34 \times 10^{13}$  е Кл/см<sup>2</sup>. Полученная в данном варианте суммарная концентрация электронов в ДЭГ равна  $1.14 \times 10^{13}$  см<sup>-2</sup>, что существенно выше, чем аналогичная величина для материалов с кристаллической структурой сфалерита. Фиг. 5 иллюстрирует сходимость глобальных итераций (нумерация кривых аналогична таковой на фиг. 3). Видно, что по сравнению с вариантом кристаллической структуры сфалерита сходимость последовательных приближений в данном случае замедляется. Использование аппроксимации нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала позволяет существенно (в рассмотренном случае – практически на порядок) ускорить сходимость глобальных итераций.

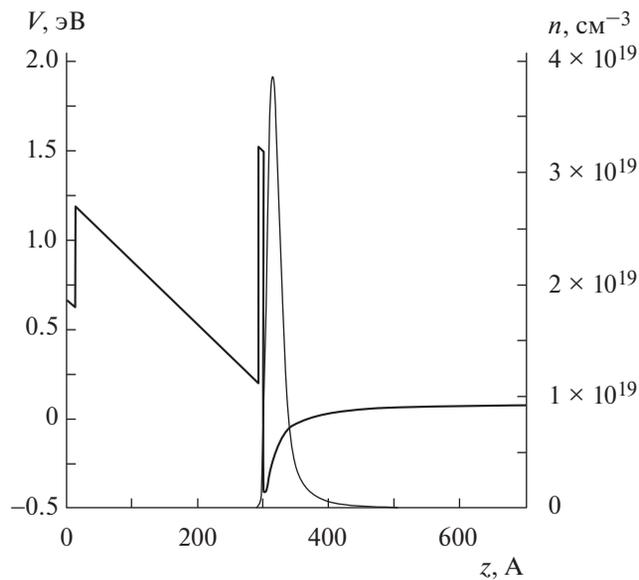
На фиг. 6 представлены зависимости суммарной концентрации электронов в ДЭГ от содержания Al в слое Al<sub>x</sub>GaN. Сплошная кривая соответствует результатам численного моделирования, маркеры – аппроксимации экспериментальных данных (см. [2]). Видно, что расчетные и экспериментальные результаты хорошо согласуются.

В заключение, на фиг. 7, приведем результаты расчета многослойной структуры, представленной на фиг. 1. Нумерация кривых здесь аналогична нумерации на фиг. 2а, 4а. В данной структуре слой GaN на поверхности барьерного слоя предотвращает его окисление. Роль тонкого слоя AlN можно проследить на фиг. 7. Видно небольшое различие в распределении концентрации носителей в окрестности гетероинтерфейса на фиг. 4а и 7. Наличие прослойки AlN приводит к менее выраженному прониканию электронов в барьерный слой, что способствует более высокой подвижности электронов в ДЭГ. При этом различие в суммарных концентрациях электронов незначительно.

Таким образом, разработанные методы и средства численного моделирования позволяют оперативно проводить многовариантный анализ многослойных наноразмерных гетероструктур



**Фиг. 6.** Зависимость суммарной электронной плотности в двумерном электронном газе от концентрации Al в барьерном слое. Сплошная кривая – численное решение, маркеры – аппроксимация экспериментальных данных (см. [2]).



**Фиг. 7.** Распределение потенциальной энергии (1, левая шкала) и электронной плотности (2, правая шкала) поперек многослойной гетероструктуры (см. [8]).

с учетом поляризационных эффектов. В сочетании с возможностью моделирования подвижности носителей заряда в таких структурах (см. [3]) это создает основу для решения ряда оптимизационных задач, актуальных для современной СВЧ-электроники. К таким задачам можно отнести синтез гетероструктур, обеспечивающих максимальную концентрацию при максимальной подвижности носителей (максимальную проводимость), обратные задачи по определению недоступных в прямом измерении характеристик выращенных гетероструктур на основе экспериментальных данных по концентрации и подвижности носителей в двумерном электронном газе.

## ВЫВОДЫ

Представлена трехуровневая схема моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур с учетом эффектов спонтанной и пьезоэлектрической поляризации. Схема объединяет квантово-механические расчеты на атомарном уровне для получения плотности зарядов на гетероинтерфейсах, расчет распределения носителей заряда в гетероструктуре на основе решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния. С целью ускорения вычислительного процесса при расчете электронной плотности в гетероструктуре применен подход, основанный на аппроксимации нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала в сочетании с линеаризацией уравнения Пуассона. Показана эффективность данного подхода в задачах рассматриваемого класса. Разработанные методы и средства математического моделирования открывают перспективы решения оптимизационных задач, актуальных для развития СВЧ-электроники.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борисенко В.Е., Воробьева А.И., Уткина Е.А. Нанoeлектроника. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009.
2. Ambacher O., Majewski J., Miskys C., Link A., Hermann M., Eickhoff M., Stutzmann M., Bernardini F., Fiorentini V., Tilak V., Schaff B., Eastman L. F. Pyroelectric properties of Al(In)Ga<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> hetero- and quantum well structures // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. V. 14. P. 3399–3434.
3. Abgaryan K., Mutigullin I., Reviznikov D. Computational model of 2DEG mobility in the AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> heterostructures // Phys. Status Solidi. 2015. C12. № 2. P. 407–411.
4. Абгарян К.К., Хачатуров В.Р. Компьютерное моделирование устойчивых структур кристаллических материалов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т. 49. № 8. С. 1517–1530.
5. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev. 1965. V. 140. A1133–A1138.
6. Kresse G., Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. 1996. B 54. 11169.
7. Vasileska D., Goodnick S.M., Goodnick S. Computational electronics: semiclassical and quantum device modeling and simulation. CRC Press, 2010.
8. Протасов Д.Ю., Малин Т.В., Тихонов А.В., Цацульников А.Ф., Журавлев К.С. Рассеяние электронов в гетероструктурах AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> с двумерным электронным газом // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. Вып. 1. С. 36–47.
9. Зубков В.И. Моделирование вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовыми ямами с помощью самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона // Физика и техника полупроводников. 2006. Т. 40. Вып. 10. С. 1236–1240.
10. Supryadkina I., Abgaryan K., Bazhanov D., Mutigullin I. Study of the polarizations of (Al,Ga,AlGa)<sub>N</sub> nitride compounds and the charge density of various interfaces based on them // Semiconductors. 2013. V. 47. № 12. P. 1621–1625.
11. Trellakis A., Galick A.T., Pacelli A., Ravaoli U. Iteration scheme for solution of the two-dimensional Schrodinger-Poisson equations in quantum structures // J. Appl. Phys. 1997. V. 81. № 12. P. 7880–7884.
12. Trellakis A., Ravaoli U. Computational issues in the simulation of semiconductor quantum wires // Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg. 2000. V. 181. P. 437–449.
13. Trellakis A., Galick A.T., Pacelli A., Ravaoli U. Comparison of iteration schemes for the solution of the multidimensional Schrodinger–Poisson equations // VLSI DESIGN. 1997. V. 8. № 1–4. P. 105–109.
14. Коэн-Таннуджи К., Диу Б., Лалоз Ф. Квантовая механика. Т. 2. М.: УРСС, 2015.
15. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. М.: Изд. дом Интеллект, 2008.
16. Yarar Z., Ozdemir B., Ozdemir M. Mobility of electrons in a AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> QW: effect of temperature, applied field, surface roughness and well width // Phys. Stat. Sol. (b). 2005. V. 242. № 14. P. 2872–2884.