

Оптические и электрические параметры гетероструктур в физике полупроводниковых материалов: моделирование и эксперимент

А.В. Благин¹, Л.В. Благина², И.Г. Попова¹, В.В. Подольцев¹

¹*Донской государственной технической университет, Ростов-на-Дону*

²*Институт технологий ДГТУ, г. Волгодонск*

Аннотация: В работе содержится анализ результатов моделирования электрофизических параметров светоизлучательных твердых растворов GaInAsSb/GaSb. В работе построены графики зависимостей мощности излучения от силы тока и вольт-амперная характеристика (ВАХ) светодиодного устройства. Массив носителей описан статистикой Ферми. В явном виде раскрыты индикаторы моделирования, основанные на особенностях зонной структуры полупроводниковых систем. Обсуждены результаты экспериментов, показавшие удовлетворительное согласие с данными, полученными на основе расчетов.

Ключевые слова: твердые растворы, Sim Windows 1,5, излучающие структуры, токи, ограниченные пространственным зарядом, электрофизические параметры.

Введение

Многокомпонентные гетероструктуры, созданные на основе соединений III-V, II-VI и IV-VI групп Периодической системы вот уже более трёх десятилетий широко используются в электронной технике. Растёт номенклатура полупроводниковых материалов, имеющих прикладное значение.

Это обусловлено с одной стороны, прогрессом полупроводниковых технологий (возникновение и развитие ряда новых методов и модификация известных [1-3]). С другой стороны – возможностью комбинировать различные элементы указанных групп Периодической системы.

Следует отметить, что в последние 20 лет возникли возможности получения многокомпонентных гетероструктур термодинамически нестабильных в условиях кристаллизации [4]. В этой ситуации особую роль играет предварительное моделирование и имитация функций приборного материала, что можно эффективно осуществлять с помощью некоммерческой программы Sim Windows 1,5 (freeware software, автор-разработчик – Д.

Уинстон, Центр оптоэлектронных систем при Колорадском университете, Баулдер, США) [5].

В настоящей работе обсуждаются результаты моделирования и их сопоставление с экспериментальными значениями оптических и электрофизических параметров материалов электронной техники.

Прогнозирование характеристик многокомпонентных гетероструктур с использованием программной среды Sim Windows

Sim Windows – оболочка, позволяющая моделировать свойства гетероструктур в одномерном приближении. Уровни энергии в среде рассчитываются относительно дна зоны проводимости; учитываются дрейф носителей заряда, ток термоэлектронной эмиссии и туннельный ток через поверхность раздела. Процессы рекомбинации в модели включают в себя механизм спонтанной безызлучательной рекомбинации. То есть, Sim Windows рассматривает традиционные модели, что позволяет достичь большей точности.

Ядром программы является симулятор полупроводниковых устройств, который генерирует решение уравнений, статистически описывающих перенос электронов в гетероструктуре как в равновесных, так и в неравновесных условиях.

Базовые уравнения имеют вид [5]:

$$\eta_c(x) = \frac{E_{F_n}(x) - E_c(x)}{kT_n(x)};$$

$$\eta_v(x) = \frac{E_v(x) - E_{F_p}(x)}{\alpha T_p(x)},$$

где η_c и η_v – потенциалы Планка для электронов и дырок; E_c и E_v – уровни, соответствующие дну зоны проводимости и потолку валентной зоны

соответственно; T_n и T_p – температуры электронного и дырочного газа; E_{Fn} и E_{Fp} – уровни Ферми для электронов и дырок.

Общее уравнение эффективной плотности состояний запишем в виде:

$$N_{cv}(x) = \frac{1}{4\pi^{3/2}} \left(\frac{2m_{np}(x)kT_{np}(x)}{\hbar^2} \right)^{3/2};$$

$$n(x) = N_c F_{1/2}(\eta_c); \quad p(x) = N_v F_{1/2}(\eta_v),$$

где $F_{1/2}$ – интеграл Ферми;

$$N_D^+(\eta_c) = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\frac{E_D}{kT_n} + \eta_c}};$$

$$N_A^+(\eta_v) = \frac{N_A}{1 + g_A e^{\frac{E_A}{kT_p} + \eta_v}}$$

$$\text{и} \quad p(x) = q(p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^+(x)),$$

где N_{cv} – эффективная плотность состояний; N_{DA} – концентрация примесей (доноров и акцепторов); E_{DA} – энергия соответствующих примесных уровней; g_{DA} – параметр вырождения примесей; n – концентрация электронов; p – концентрация дырок; m_{np} – эффективная масса носителей.

Неравновесное состояние задаётся внешним полем. В модели, используемой в Sim Windows, это внешнее поле задаётся уравнением Пуассона:

$$\nabla D(x) - p(x) = 0,$$

где D – модуль электростатической индукции (смещения),
и уравнениями потенциалов Планка для электронов:

$$\nabla \left(\frac{J_n(x)}{q} - U_{\text{рек}}(x) \right) = \frac{\partial n}{\partial t}$$

и дырок

$$\nabla \left(\frac{J_p(x)}{q} - U_{\text{рек}}(x) \right) = \frac{\partial p}{\partial t}$$

где J_n и J_p – плотность электронного и дырочного тока; $U_{\text{рек}}$ – скорость рекомбинации электронов и дырок.

Ранее отмечалось, что в Sim Windows возможен учёт трёх типов тока – дрейфа, термоэлектронной эмиссии и туннелирования через потенциальные барьеры.

Уравнения модели обсуждаются в [6]. Носители с малой энергией описываются в рамках классической статистики, с высокой – распределением Ферми-Дирака.

Модель оболочки оперирует массивами внешних и внутренних фотонов (генерация которых осуществляется внешними устройствами и внутри устройства, например, светоизлучающего диода). Устройство моделируется дискретными элементами в виде двумерных квадратных матриц. Схема дискретизации приведена на рисунке 1.

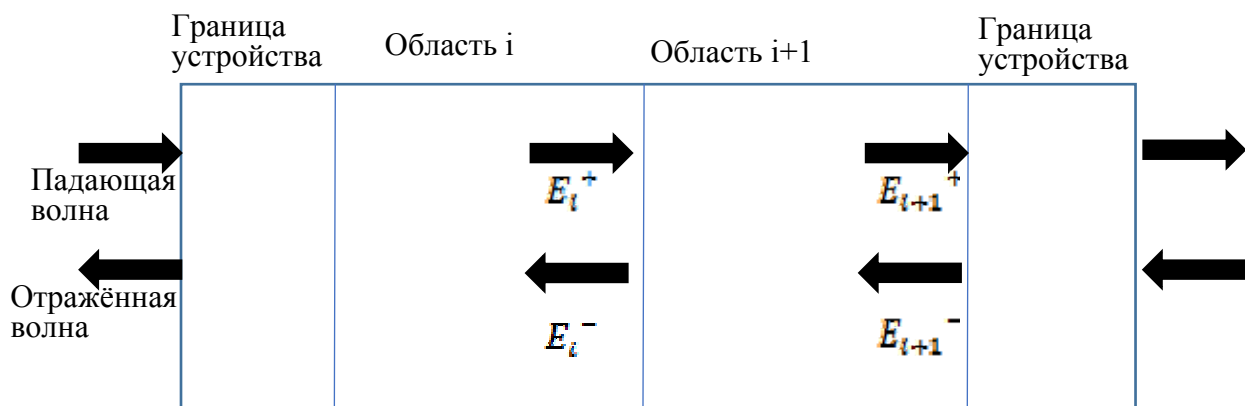


Рис. 1. – Дискретизация оптоэлектронного устройства

Уравнение, описывающее волну в i -ой области, запишем как

$$E_i = E_i^+ e^{i(\omega t - k\eta_i(x-x_h))} + E_i^- e^{i(\omega t + k\eta_i(x-x_h))}$$

Магнитная компонента имеет вид:

$$H_i = \frac{E_i^+}{Z_i} e^{i(\omega t - k\eta_i(x-x_i))} + \frac{E_i^-}{Z_i} e^{i(\omega t + k\eta_i(x-x_i))},$$

где $\eta_i = [\eta] - i\frac{\alpha}{2k}$; $Z_i = \frac{Z_0}{\eta_i}$; k - волновое число; E_i - электрическая составляющая поля в i -й области; Z_i - относительный комплексный импеданс; η_i - показатель преломления i -й области; α - показатель поглощения; $[\eta]$ - действительная часть η_i .

Матрица распространения поля в области $(i+1)$ задаётся параметрами i -й области:

$$\begin{bmatrix} E_{i+1}^+ \\ E_{i+1}^- \end{bmatrix} = \left\{ \begin{bmatrix} e^{-ik\eta_{i+1}(x_{i+1}-x_i)} & 0 \\ 0 & e^{ik\eta_{i+1}(x_{i+1}-x_i)} \end{bmatrix} \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{1}{2Z_i} \begin{bmatrix} Z_i + Z_{i+1} & Z_i - Z_{i+1} \\ Z_i - Z_{i+1} & Z_i + Z_{i+1} \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} E_i^+ \\ E_i^- \end{bmatrix}$$

После ряда преобразований выражения - вычислители параметров волны в устройстве принимают вид:

$$\begin{bmatrix} E_{i+1}^+ \\ E_{i+1}^- \end{bmatrix} = \frac{1}{2Z_i} \begin{bmatrix} (Z_i + Z_{i+1})e^{ik\eta_{i+1}(x_{i+1}-x_i)} & (Z_i - Z_{i+1})e^{-ik\eta_{i+1}(x_{i+1}-x_i)} \\ (Z_i - Z_{i+1})e^{ik\eta_{i+1}(x_{i+1}-x_i)} & (Z_i + Z_{i+1})e^{-ik\eta_{i+1}(x_{i+1}-x_i)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_i^+ \\ E_i^- \end{bmatrix}$$

Sim Windows допускает иерархическую структуру материалов устройства, так, в роли материалов могут выступать слои многокомпонентных твёрдых растворов. Их характеристики (такие, как

коэффициент преломления, ширина запрещённой зоны) заносятся в файл параметров материала с возможностью изменения и дополнения.

Особый интерес как с практической точки зрения, так и в отношении анализа интересных эффектов, отслеживаемых в процессе моделирования, представляют излучающие структуры с вертикальным резонатором, состоящим из брэгговских отражателей. Их разделяет рабочая область толщиной порядка 50 нм. Схема лазерного светодиода с вертикальным резонатором представлена на рисунке 2.

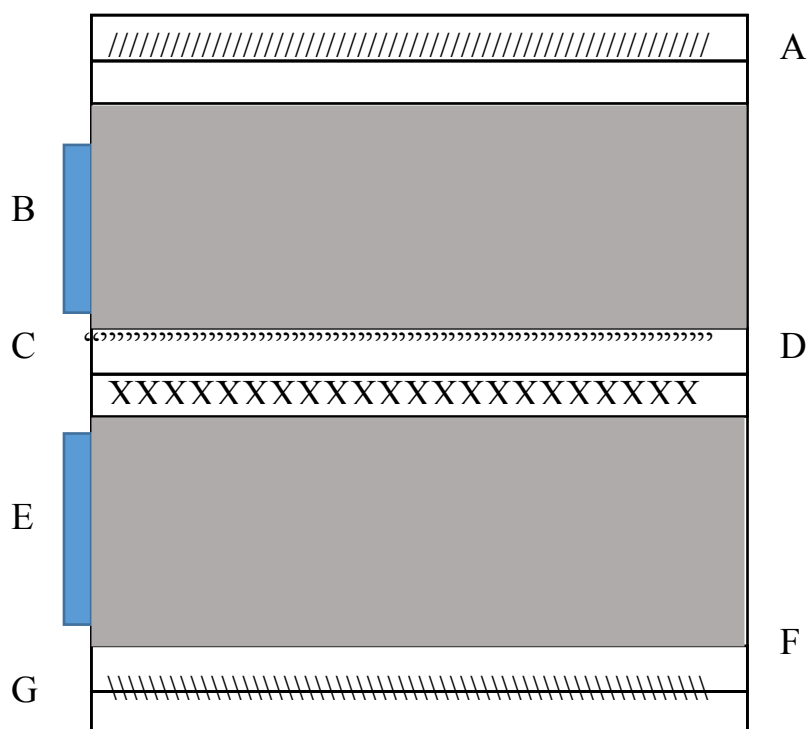


Рис. 2. – Схема лазерного светодиода с вертикальным резонатором
A – контактный слой GaSb(p+); B, E – брэгговские отражатели; C – слой GaInSbAs с мезоструктурой; D – рабочая область (GaInSb<Bi>); F – контактный слой GaSb(n-); G – подложка GaSb.

Результаты моделирования и их сравнение с экспериментом

Нами была рассчитана гетероструктура GaInAsSb/GaSb в среде Sim Windows. Построены графики зависимостей мощности излучения от силы тока и вольт-амперная характеристика (ВАХ) светодиодного устройства. Массив носителей описывается статистикой Ферми. На рисунке 3, а) приведена ВАХ устройства и несколько экспериментальных точек. На рисунке 3, б) дана зависимость мощности излучения от силы тока.

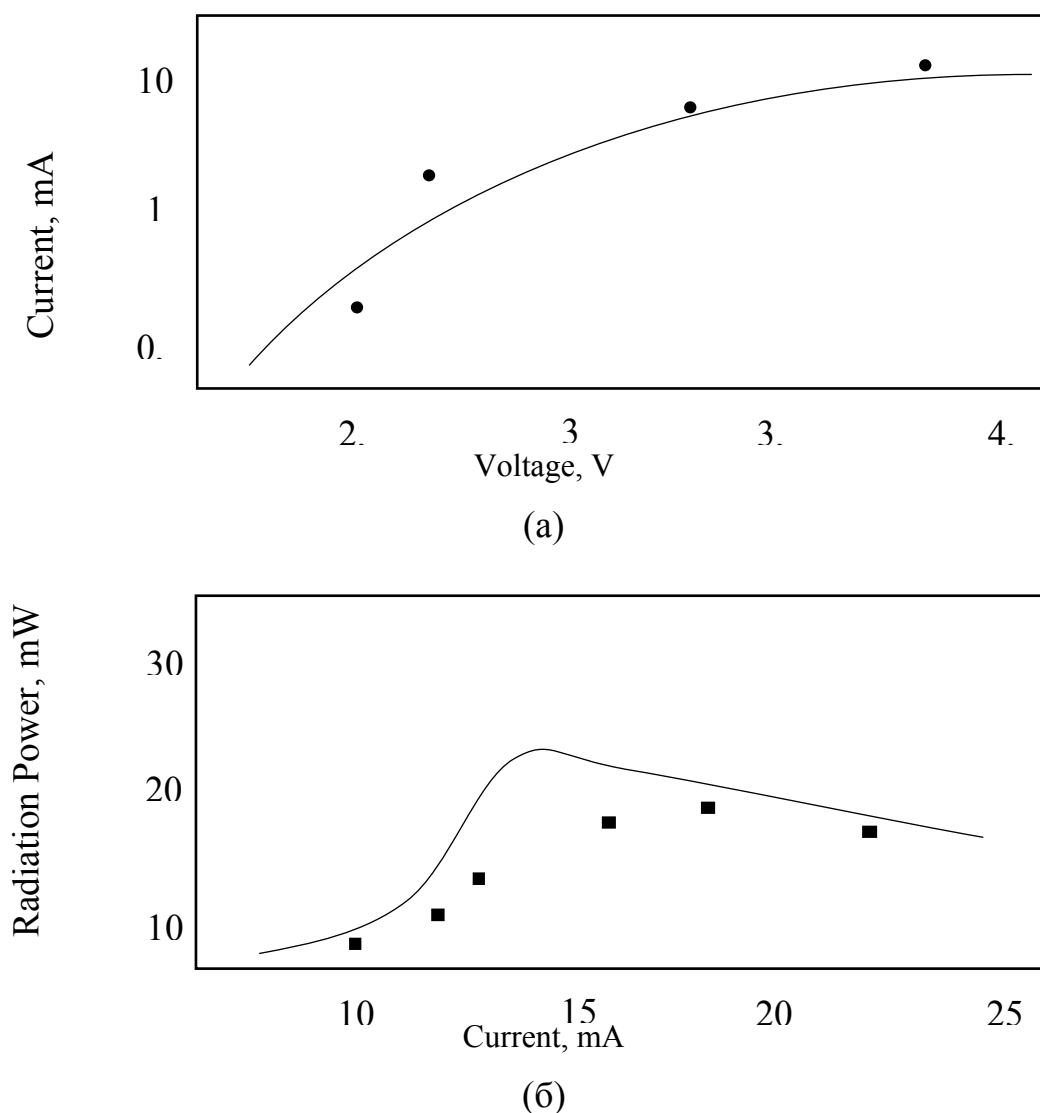


Рис. 3. – Зависимость электрических параметров лазерного светодиода на основе гетероструктуры GaInAsSb/GaSb

а) – вольт-амперная характеристика; б) – мощность излучения; Сплошные кривые – результаты моделирования Sim Windows; Значки ■, ● – экспериментальные данные.

На ВАХ получено более удовлетворительное соответствие модели эксперименту. Экспериментально измеренная мощность излучения (тестер FOD1203A/B, Россия) была ниже спрогнозированной, причём, $\Delta P \neq \text{const}$, что требует проведения дополнительных исследований. Возможно, реальный уровень инжекции ниже расчётного. Однако расхождение в 3-5 мВт не является существенным.

Гетероструктуры GaInAsSb/GaSb получены методом градиентной жидкофазной эпитаксии [3]. Физические свойства базовых твердых растворов, образующих данный материал, описаны в работах [7,8]. Технологические аспекты приведены в [9]. Был проведен также анализ характеристик p - n -переходов. Наблюдалось существенное снижение квантового выхода люминесценции. Нами были проведены исследования причин, вызывающих деградацию люминесцентных свойств, что становится все более актуальной задачей [10].

Вольт-амперные характеристики p - n -переходов хорошо аппроксимируются выражением:

$$I = I_s \exp\left(\frac{eU}{\beta kT}\right).$$

В диапазоне смещений 1,35...1,72 В значение $\beta=2$. Это свидетельствует о том, что основным процессом является рекомбинация в области пространственного заряда. При более высоких напряжениях, если вычесть из напряжения падение потенциала на последовательном сопротивлении p - n -перехода, наблюдается участок с $\beta=1$, что указывает на процесс рекомбинации в нейтральной области. У термообработанных диодов фактор

неидеальности значительно больше двух. Вольт-амперные характеристики этих диодов, перестроенные в двойном логарифмическом масштабе (рис. 4, а), имеют участки, характерные для протекания токов, ограниченных пространственным зарядом (ТОПЗ).

В эксперименте (рис.4, б) ток обратно пропорционален кубу толщины пленки, что согласуется с теорией и свидетельствует о возможности использования ТОПЗ для интерпретации ВАХ. Таким образом, в процессе термообработки вблизи активной зоны возникает скомпенсированная область с высоким сопротивлением.

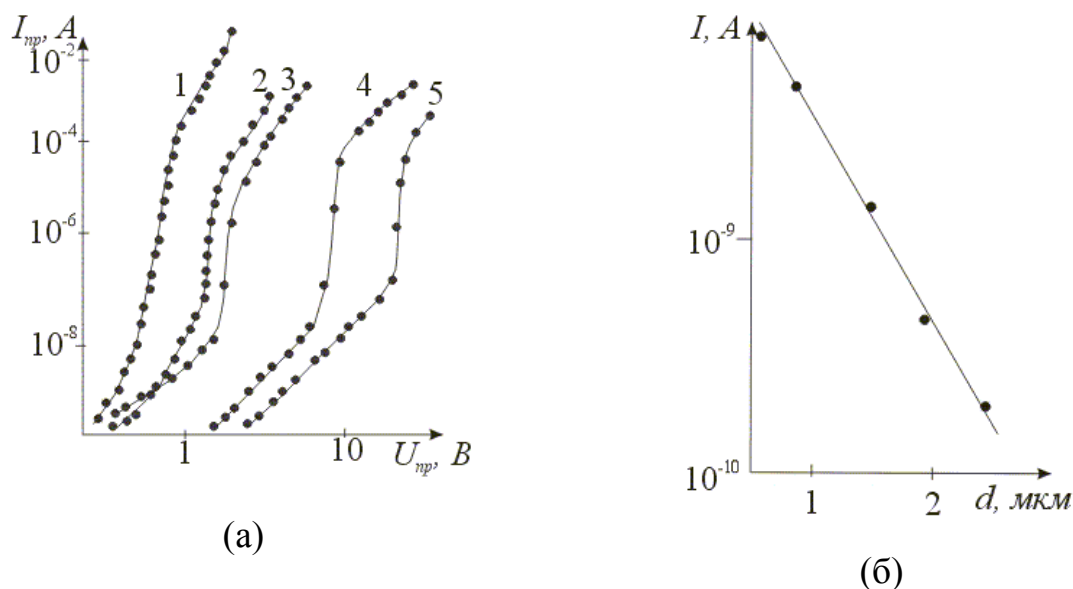


Рис. 4. – Электрофизические характеристики светодиодных пленок GaInAsSb/GaSb

а) – ВАХ пленок, 1 – без отжига; 2 – с отжигом при $T= 713 \text{ K}$; 3 – 753 K ; 4 – 890 K ; 5 – 923 K ; б) - зависимость тока от толщины высокоомной области.

Оценка содержания рекомбинационных центров в высокоомной области была выполнена двумя способами. На вольт-амперных характеристиках (рис. 1, а) наблюдаются участки резкого возрастания тока, связанные с заполнением ловушек.

Потенциал, при котором происходит заполнение ловушек, позволяет оценить их концентрацию:

$$N_T = \frac{U_x \varepsilon \varepsilon_0}{ed^2},$$

где U_x – потенциал компенсации ловушек; d – ширина высокоомной зоны. Концентрация ловушек, определенная по этой формуле, приведена в таблице.

Таблица 1

Концентрация ловушек в p – n -переходах термообработанных эпитаксиальных пленок $GaAsP<Bi>$

Температура обработки, К	Концентрация, определенная по ВАХ, см^{-3}	Концентрация, определенная из емкостных измерений, см^{-3}	Относительная яркость
Не подвергались термообработке	$8,5 \cdot 10^{13}$	$1,5 \cdot 10^{14}$	1,0
713	$3,6 \cdot 10^{14}$	$2,2 \cdot 10^{14}$	0,85
753	$5,4 \cdot 10^{14}$	$4,3 \cdot 10^{14}$	0,08
890	$7,9 \cdot 10^{14}$	$5,5 \cdot 10^{14}$	0,06
923	$9,4 \cdot 10^{14}$	$5,7 \cdot 10^{14}$	0,03

Из экспериментов следует, что при термообработке пленок определяющую роль в электрофизических параметрах играют токи, ограниченные пространственным зарядом. Концентрация ловушек существенно зависит от структурного совершенства пленок.

Метод моделирования можно считать перспективным для прогнозирования электрических и оптических характеристик новых материалов.

Заключение

В статье обсуждается методика компьютерного моделирования сложных полупроводниковых систем в среде Sim Windows. Методика отработана на четырёхкомпонентных светоизлучающих гетероструктурах GaInAsSb/GaSb.

В явном виде раскрыты индикаторы моделирования, основанные на особенностях зонной структуры полупроводниковых систем. Обсуждены результаты экспериментов, показавшие удовлетворительное согласие с данными, полученными на основе расчетов.

Литература

1. Алфимова Д.Л., Благин А.В., Гусев Д.А., Лунина М.А., Сысоев И.А. Формирование массивов квантовых точек $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ в процессе ионно-лучевого осаждения // Неорганические Материалы, 2014. Т.50. №3. С. 237-243.
 2. Patrick McCray. MBE deserves a place in the history books // Nature, Vol.2. 2007. pp. 259.
 3. Лунина Л.С., Благин А.В., Алфимова Д.Л., Попов А.И., Разумовский П.И. Физика градиентной эпитаксии полупроводниковых гетероструктур. Ростов-на-Дону. Изд-во СКНЦ ВШ, 2008. 212 с.
 4. Середин П.В. Спинодальный распад в эпитаксиальных твёрдых растворах гетероструктур $Al_xGa_{1-x}As/GaAs(100)$ и $Ga_xIn_{1-x}P/GaAs(100)$. Самарского центра РАН. Т.11. №3, 2009. С. 46-52.
 5. Winston D.W. Faculty of the Graduate School of the University of Colorado, 1997. Physical Simulation of Optoelectronic Semiconductor Devices. URL: wemif.pwr.wroc.pl/zpp/laboratoria/labo_opto/labo_opto.php.
 6. Yang K., East J.R., Haddad G.I. Numerical Modeling of Abrupt Heterojunctions Using a Thermoionic Field Emission Boundary Condition// Solid State Electron. Vol. 36. 1994. pp.321-330.
-

7. Благин А.В., Благина Л.В., Нефедова Н.А., Попова И.Г., Политов О.А. Физические свойства светоизлучательных твердых растворов, изопериодных антимониду галлия // Инженерный вестник Дона, 2017. №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4613.

8. Благин А.В., Благина Л.В., Кодин В.В., Нефедова Н.А., Попова И.Г. Физические свойства многокомпонентных узкозонных твердых растворов с мезоструктурой // Инженерный вестник Дона, 2018. №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4830

9. Благин А.В., Благина Л.В., Кодин В.В., Нефедова Н.А., Попова И.Г. Структура эпитаксиальных слоев узкозонных твердых растворов и компенсация дефектов // Инженерный вестник Дона, 2018. №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4820

10. Никифоров С. Проблемы, теория и реальность светодиодов для современных систем отображения информации высокого качества // Компоненты и технологии, 2005. №5. URL: kit-e.ru/articles/led/2005_5_48.php.

References

1. Alfimova D.L., Blagin A.V., Gusev D.A., Lunina M.A., Sysoev I.A. /Neorganicheskie Materialy, 2014. Vol.50. №3. pp. 237-243.

2. Patrick McCray. Nature. Vol.2.2007. P. 259.

3. Lunina L.S., Blagin A.V., Alfimova D.L., Popov A.I., Razumovskij P.I. Fizika gradientnoj epitaksii poluprovodnikovyx geterostruktur. [Gradient epitaxy physics of semiconductor heterostructures]. Rostov-na-Donu. Izd-vo SKNC VSH, 2008. 212 p.

4. Seredin P.V. Samarskogo centra RAN, Vol.11. №3. 2009. pp. 46-52.

5. Winston D.W. Faculty of the Graduate School of the University of Colorado, 1997. Physical Simulation of Optoelectronic Semiconductor Devices. URL: wemif.pwr.wroc.pe/zpp/laboratoria/lab0_opto/lab0_opto.php.



6. Yang K., East J.R., Haddad G.I. Solid State Electron. Vol. 36. 1994. pp. 321-330.
7. Blagin A.V., Blagina L.V., Nefedova N.A., Popova I.G., Politov O.A. Inzhenernyj vestnik Dona (Rus), 2017. №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4613.
8. Blagin A.V., Blagina L.V., Kodin V.V., Nefedova N.A., Popova I.G. Inzhenernyj vestnik Dona (Rus), 2018. №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4830
9. Blagin A.V., Blagina L.V., Kodin V.V., Nefedova N.A., Popova I.G. Inzhenernyj vestnik Dona (Rus), 2018. № 2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4820.
10. Nikiforov S. Komponenty i tekhnologii, 2005. № 5. URL: kit-e.ru/articles/led/2005_5_48.php.