

基于量子微扰的 AlGa_N/Ga_N 异质结 波函数半解析求解^{*}

李培咸 郝跃 范隆 张进城 张金凤 张晓菊

(西安电子科技大学微电子研究所, 西安 710071)

(2002 年 11 月 20 日收到, 2003 年 5 月 27 日收到修改稿)

基于量子力学微扰理论的分析, 得到 AlGa_N/Ga_N 异质结波函数的半解析模型, 给出了模型的理论分析和计算结果. 对于相同问题, 给出了与差分算法的对照结果. 与传统的差分方法相比, 半解析方法具有收敛性强、大规模问题计算效率高的特点, 更适合作为 AlGa_N/Ga_N 异质结量子阱的求解算法.

关键词: AlGa_N, Ga_N, 量子阱, 薛定谔方程

PACC: 0530, 7280E, 7360L

1. 引言

宽禁带半导体材料近年来受到广泛的关注, 其中的 Ga_N 相关材料和器件在工艺技术方面领先于其他宽禁带半导体(如 SiC 和金刚石), 从而更具吸引力. Ga_N 材料具有以下优点: 宽禁带(3.4 eV), 高击穿电场(3×10^6 V/cm); 可形成 AlGa_N/Ga_N 异质结量子阱, 在界面处获得高浓度、高迁移率的二维电子气; 有比传统半导体材料高的热导率; 可通过调整 Al 组分在 3.4—6.2 eV 范围内对 AlGa_N 材料的禁带宽度进行裁剪设计.

由于具有上述这些独到的优势, Ga_N 相关材料在光电器件^[1]、微波器件^[2]、高压器件^[3]和功率器件^[4]等方面得到了广泛的应用. 国际范围内对 Ga_N 材料和相关器件进行了广泛的研究, 在材料生长^[5]、理论分析^[6-9]和器件应用^[10, 11]方面都取得了一定的进展. 随着材料结构、器件应用研究的深入, 需要以理论研究为基础对材料结构和器件结构进行优化设计. 由于异质结场效应晶体管(HFET)、高电子迁移率晶体管(HEMT)等高性能的器件均以界面量子阱作为导电沟道, 因此对于量子阱中二维电子气的研究具有重要的意义. 在对二维电子气的各种特性有了详尽把握的基础上才可以进一步对器件的总体性能进行模拟研究.

量子阱问题求解的典型方法有三角近似方法^[12]和迭代自洽解方法^[7, 8]. 三角近似需要在界面以无限深势阱作近似, 但由于 AlGa_N/Ga_N 异质结的界面导带断续的典型值为 0.4 eV, 典型的势阱深度为 0.2 eV, 因此无限深势阱并非一个好的近似. 且用无限深势阱作近似还无法考虑由于波函数渗透作用迁移到 AlGa_N 一侧的沟道二维电子, 这与实际情况有较大偏差. 迭代自洽解一般采用差分方法求解定态薛定谔方程和泊松方程, 差分方法是一种普适的微分方程求解算法, 但不能针对 AlGa_N/Ga_N 量子阱的特点进行求解, 当计算规模增大时复杂度过高、收敛性降低.

通过对迭代求解过程的分析, 可发现在求解的过程中需要反复求解薛定谔方程得到量子阱对应的波函数, 对波函数求解算法的改进将直接影响迭代算法的性能. 本文提出一种基于量子微扰理论的薛定谔方程求解算法. 该算法以理论分析为基础, 针对 AlGa_N/Ga_N 异质结量子阱的势函数特点, 得到了本征能量和本征波函数的半解析解, 并与差分解的结果进行了比较. 该算法对问题的规模敏感性低, 适合作为器件分析中量子阱求解的内层算法.

2. 理论分析

对于典型的 AlGa_N/Ga_N 异质结构具有如图 1 所

^{*} 国防科技预研项目(批准号: 41308060106)资助的课题.

示的导带底形态. 考虑到在区域 I 中存在的是由区域 II 的波函数渗透产生的少量二维电子, 这里的势函数对区域 II 中二维电子的波函数主体影响很小, 可用台阶势垒近似. 在区域 II 和区域 III 利用三角势阱和台阶势垒综合考虑, 调整图 1 中虚线的斜率, 使原有 E_c 曲线同虚线相交所包含的面积最小, 以此作为区域 II 中的三角近似阱和相应的区域 III 中台阶势垒的形态. 近似的偏差可使用量子微扰理论进行修正.

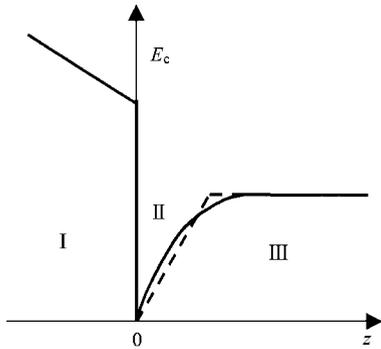


图 1 AlGaN/GaN 异质结的导带结构

2.1. 近似阱本征值问题求解

简化后的近似势阱形状如图 2 所示, 将势函数分为三个区域 (I, II, III), 可对该问题进行简便的求解. 对于二维电子气, 我们主要关心的是基态的能量和波函数.

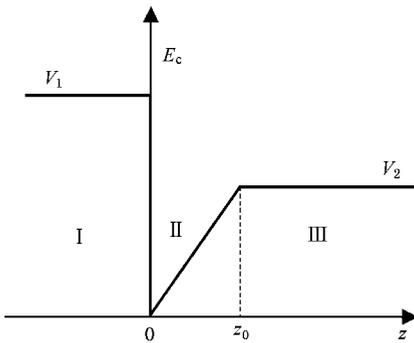


图 2 对问题进行简化后的导带形状

为简化表示形式, 下列推导过程中的 E 与 V 均直接表示电子能量和势能, 在区域 I, II, III 中, 薛定谔方程的形式分别为

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{d^2 \psi_I}{dz^2} + (V_1 - E)\psi_I = 0, \quad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{d^2 \psi_{II}}{dz^2} + \left(z \frac{V_2}{z_0} - E \right) \psi_{II} = 0, \quad (2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{d^2 \psi_{III}}{dz^2} + (V_2 - E)\psi_{III} = 0, \quad (3)$$

式中 m_1^* 为 AlGaN 中电子的有效质量, m_2^* 为 GaN 中电子的有效质量.

对于束缚态, 有 $E < V_2 < V_1$, 则方程(1)(2), (3)有限解的形式分别为

$$\psi_I = A \exp\left(\frac{\sqrt{2m_1^*(V_1 - E)}}{\hbar} z\right), \quad (4)$$

$$\psi_{II} = B \text{Airy}\left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\beta z - \frac{z_0 E}{V_2}\right)\right], \quad (5)$$

$$\psi_{III} = C \exp\left(-\frac{\sqrt{2m_2^*(V_2 - E)}}{\hbar} z\right). \quad (6)$$

在(5)式中引入参量 β 的原因是由于当区域 II 和区域 III 为无限三角形势阱时, 区域 II 的解为标准的 Airy 函数. 而当区域 III 为松束缚状态的台阶势垒时, 将造成波函数一定程度上的展宽, 这里使用参量 β 表述这种展宽效应, 当束缚态能级同 V_2 相差较大时, β 趋近于 1.

为确定束缚态电子的能量本征值和本征波函数, 在边界 ($z = 0, z = z_0$) 处, 使用(7)式中所示的连续性边界条件

$$\begin{aligned} \frac{\psi'_I(0)}{\psi_I(0)} &= \frac{\psi'_{II}(0)}{\psi_{II}(0)}, \\ \frac{\psi'_{II}(z_0)}{\psi_{II}(z_0)} &= \frac{\psi'_{III}(z_0)}{\psi_{III}(z_0)}, \end{aligned} \quad (7)$$

可得

$$\begin{aligned} &\frac{\sqrt{2m_1^*(V_1 - E)}}{\hbar} \\ &= \left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\beta \text{Airy}'\left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0}\right)^{\frac{1}{3}} \left(-\frac{z_0 E}{V_2}\right)\right]}{\text{Airy}\left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0}\right)^{\frac{1}{3}} \left(-\frac{z_0 E}{V_2}\right)\right]}, \\ &\frac{\sqrt{2m_2^*(V_2 - E)}}{\hbar} \\ &= \left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\beta \text{Airy}'\left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\beta z_0 - \frac{z_0 E}{V_2}\right)\right]}{\text{Airy}\left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\beta z_0 - \frac{z_0 E}{V_2}\right)\right]}. \end{aligned} \quad (8)$$

求解联立方程(8)可得到束缚态的能量. 可设定初始 $\beta = 1$ 利用不动点的方法进行修正, 由于 β 趋近于

1, 一般三次迭代修正即可确定最终的能量. 对于典型的 AlGaIn/GaN 异质结构, 一般具有两个束缚态能

量. 将求得的能量 E_n 与相应的 β_n 分别代入(5)式, 即可得到对应的束缚态波函数

$$\psi_{\parallel n} = B \text{Airy} \left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\beta_n z - \frac{z_0 E_n}{V_2} \right) \right]. \quad (9)$$

在 $z=0$ 处, 有 $\psi_{\perp}|_{z=0} = \psi_{\parallel}|_{z=0}$, 则

$$\psi_{\perp n} = B \text{Airy} \left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0} \right)^{\frac{1}{3}} \left(-\frac{z_0 E_n}{V_2} \right) \right] \exp \left(\frac{\sqrt{2m_1^* (V_1 - E_n)}}{\hbar} z \right). \quad (10)$$

用同样方法可确定 $\psi_{\parallel n}$, 其中参量 B 可利用整体波函数的归一化条件确定.

最终得到的波函数可分段表示为

$$\psi_n = \begin{cases} B \text{Airy} \left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0} \right)^{\frac{1}{3}} \left(-\frac{z_0 E_n}{V_2} \right) \right] \exp \left(\frac{\sqrt{2m_1^* (V_1 - E_n)}}{\hbar} z \right) & (z < 0), \\ B \text{Airy} \left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\beta_n z - \frac{z_0 E_n}{V_2} \right) \right] & (0 \leq z \leq z_0), \\ B \text{Airy} \left[\left(\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \frac{V_2}{z_0} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\beta_n z_0 - \frac{z_0 E_n}{V_2} \right) \right] \exp \left(-\frac{\sqrt{2m_2^* (V_2 - E_n)}}{\hbar} z \right) & (z > z_0). \end{cases} \quad (11)$$

2.2. 微扰修正

对以上得到的近似阱的能级和波函数, 利用量子力学的微扰理论可作进一步的修正. 如图 1 中所示, 记初始势阱形状和三角近似阱的偏离为 \hat{H}' , 则量子微扰矩阵元为

$$H'_{mn} = \int \psi_m^* \hat{H}' \psi_n d\tau. \quad (12)$$

对于能量本征值和本征函数可作如下修正:

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn},$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}. \quad (13)$$

从前面得到的结论可以看出, 对于图 1 和图 2 表示的近似方法, 能量和波函数的修正与哈密顿量微扰算符的矩阵元密切相关. 可以在微扰修正后以 $\min \left\{ \int \psi_0^* \hat{H}' \psi_0 d\tau \right\}$ 为目标对近似阱的形状重新确定. 重复上述过程, 能得到更为精确的结果.

3. 结果及讨论

利用本文中的算法对典型的 AlGaIn/GaN 异质结构计算中遇到的量子阱问题进行了计算. 计算使用的结构参数: Al_{0.2}Ga_{0.8}N 层厚度为 20 nm, GaN 层厚度为 20 nm. 迭代中典型的势阱形状为 AlGaIn/GaN 界面导带断续 0.4 eV, GaN 一侧台阶势垒高度 0.2 eV. 计

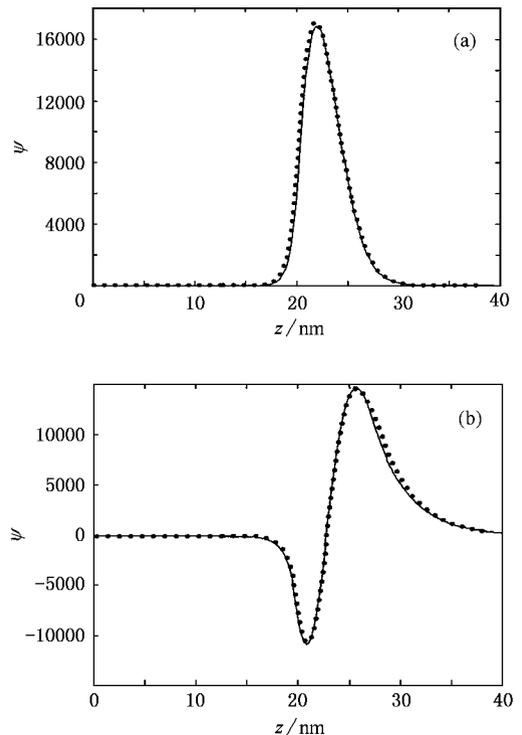


图 3 计算结果与差分结果的比较 (a)为基态波函数, (b)为第一激发态波函数. 图中实线为解析算法的计算结果, 圆点为差分算法的计算结果

算表明, 该深度的势阱具有两个量子化的本征态. 图 3 给出了计算得到的本征波函数和利用差分算法所

得结果的比较,两者符合良好.

当网格数目增多时差分算法计算复杂度过高,而本文采用的半解析算法在涉及复杂结构的器件分析中对网格密度敏感性低.对于典型量子阱计算的测试显示,在 z 轴方向的格点数目为 400 时,半解析算法程序波函数求解耗时 0.08 s,差分算法去除格点初始化时间,单纯求解耗时 0.09 s;当格点数目增加至 800 时,半解析算法耗时 0.12 s,而差分算法耗时 0.32 s.并且,差分算法是纯数值计算方法,格点初始化需要消耗较长时间(800 格点时为 2 s).比较结果表明,半解析算法作为 AlGaIn/GaN 量子结构内

层迭代波函数的求解算法具有一定的优势.

4. 结 论

本文基于量子力学的微扰理论,得到了求解 AlGaIn/GaN 量子阱束缚态能级和波函数的半解析算法.与差分算法对同样问题的对照计算表明具有同样的求解精度,但避免了在计算规模增大时由于差分网格过多造成的计算复杂度增高、收敛性降低的问题.因此,本文采用的半解析算法更适合于作为量子阱问题迭代计算的内层算法.

- [1] Oder T N ,Lin J Y ,Jianga H X 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 12
- [2] Lu W ,Yang J ,Khan M A 2001 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **48** 581
- [3] Zhang N Q ,Keller S ,Parish G *et al* 2000 *IEEE Electron. Dev. Lett.* **21** 421
- [4] Eastman L F ,Tilak V ,Smart J *et al* 2001 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **48** 479
- [5] Tavernier P R ,Eitzkom E V ,Wang Y *et al* 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 1804
- [6] Ambacher O ,Smart J ,Shealy J R *et al* 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 3222
- [7] Zhang Y F ,Singh J 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 587
- [8] Stengel F ,Mohammad S N ,Morkoc H 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 3031
- [9] Li Z F ,Lu W ,Ye H J *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1614 (in Chinese) 李志锋、陆 卫、叶红娟等 2000 物理学报 **49** 1614]
- [10] McCarthy L S ,Kozodoy P ,Rodwell M J W *et al* 1999 *IEEE Electron. Dev. Lett.* **20** 277
- [11] Javorka P ,Alam A ,Wolter M *et al* 2002 *IEEE Electron. Dev. Lett.* **23** 4
- [12] Ma Y T ,Liu L T ,Li Z J 1999 *J. Tsinghua University* (Natural Science Edition) **39** (Suppl 1) 1 (in Chinese) 马玉涛、刘理天、李志坚 1999 清华大学学报(自然科学版) **39** (增刊 1) 1]

AlGaIn/GaN heterojunction wavefunction half analytic model based on quantum disturbance^{*}

Li Pei-Xian Hao Yue Fan Long Zhang Jin-Cheng Zhang Jin-Feng Zhang Xiao-Ju

(Institute of Microelectronics ,Xi'an University ,Xi'an 710071 ,China)

(Received 20 November 2002 ; revised manuscript received 27 May 2003)

Abstract

Based on the quantum disturbance theory ,a half-analytic model was achieved that can be used in the calculation of the eigen function and eigen energy of the two-dimensional electron gas in a AlGaIn/GaN heterojunction. The theoretical analysis and calculation result of the model were given. The calculation result was compared with that of the difference method. The method in this paper is superior to the difference method when solving a large-scale problem because of its convergence and efficiency and is well fitted for the calculation of the quantum well problem in the AlGaIn/GaN heterostructure.

Keywords : AlGaIn , GaN , quantum well , Schrödinger equation

PACC : 0530 , 7280E , 7360L