

ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ ТА ЕКОНОМІЧНІ НАУКИ

УДК 5

Олеся ДАНЬКІВ,
Олег КУЗИК

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНІВ У ГЕТЕРОСИСТЕМІ З НАНОКЛАСТЕРАМИ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ

У межах методу деформаційного потенціалу отримано рівняння, які дають змогу розрахувати енергетичний спектр електрона в тришаровій гетеросистемі, що містить кластер точкових дефектів у квантовій ямі. Досліджено залежність різниці енергій електрона в першому збудженому та основному станах від середньої концентрації точкових дефектів виду центру розтягу при різних значеннях ефективної маси електрона в матеріалі нанокластера.

Ключові слова: деформаційний потенціал, енергетичний спектр, квантова яма, кластер.

In the basis of the deformation potential equations were obtained which gives possibilities to calculate the electron energy spectrum in the three-layers heterosystem with the cluster of points defects in the quantum well. The dependence of electron energy difference in the first excited and the ground state on the average concentration of point defects for different values of effective electron masses in the nanocluster materials was studied.

Keywords: deformation potential, energy spectrum, quantum well, cluster.

1. Вступ

Останнім часом широко використовуються у мікроелектронних приладах гетероструктури як з напруженими границями, так і без них. Відомо, що оптичні та електричні властивості напівпровідникових приладів на основі квантових ям значно залежать від деформації ґратки й просторового розподілу точкових дефектів. Такі дефекти можуть проникати ззовні або виникати в процесі росту. Також у технології виготовлення оптоелектронних приладів відіграють важливу роль дифузійні процеси, пов'язані з введенням домішок у напівпровідникову структуру. Додаткові дефекти генеруються під впливом зовнішніх факторів, а саме: нагрівання, деформації, опромінення частинками та ін. Вказаний вплив може здійснюватися цілеспрямовано на певних етапах технологічного циклу створення напівпровідникового приладу

(опромінення [1, 2], введення домішкових атомів [3]), або бути небажаним, наприклад, при роботі в умовах підвищеної радіації. Взаємодія точкових дефектів із самоузгодженим полем деформації, яке може виникати як через наявність цих дефектів, так і через неоднорідність кристалічної системи (наприклад, гетеромежа), призводить до просторового перерозподілу дефектів і (при певних умовах) до утворення самоорганізованих дефектно-деформаційних структур [4, 5] (кластерів та періодичних структур).

Неоднорідна деформація, зумовлена наявністю кластерів дефектів у гетероструктурах, внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до локальної зміни ширини забороненої зони і, відповідно, до зміни потенціальної енергії носіїв струму.

У цій роботі встановлено закономірності перебудови локалізованих електронних рівнів у тришарових гетеросистемах під впливом деформації, спричиненої наявністю кластера точкових дефектів у квантовій ямі.

2. Модель

У роботах [4, 5] показано, що у гетероструктурах з точковими дефектами, середня концентрація N_{d0} яких перевищує певне критичне значення, можуть формуватися дефектно-деформаційні структури. Зокрема, при концентрації дефектів у діапазоні $N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc}$ утворюється кластер, в околі якого деформація $U(x)$ описується формулами [4, 5]:

$$U(x) = \text{sign } \theta_d \frac{A}{B + \text{sh}(-\sqrt{ax})}, \quad N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc2}, \quad (1)$$

$$U(x) = \text{sign } \theta_d \frac{A}{B + \text{ch}(\sqrt{ax})}, \quad N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}, \quad (2)$$

$$\text{де } N_{dc} = \frac{\rho c_i^2 kT}{\theta_d^2}; N_{dc1} = N_{dc} \left(\frac{l_0}{l_d} \right)^2; N_{dc2} = N_{dc} \left(1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta} \right);$$

$$\frac{2\alpha^2}{9\beta} = \frac{4}{9}$$

$$[6]; A = 3\sqrt{2}|a| \left(|9ca - 2f^2| \right)^{-\frac{1}{2}}; B = \sqrt{2}f \left(|9ca - 2f^2| \right)^{-\frac{1}{2}};$$

$$a = \frac{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}}}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; f = \frac{|\alpha|}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; c = \frac{\beta}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; \rho \quad - \text{ густина}$$

середовища; c_l – поздовжня швидкість звуку; $\theta_d = K_A \Delta\Omega$ – потенціал деформації; $\Delta\Omega$ – зміна об'єму кристалу одним дефектом; K_A – всебічна константа пружності; l_d та l_0 – характеристична довжина взаємодії дефектів з атомами кристалу та атомів один з одним, відповідно; α, β – константи пружного ангармонізму, T – температура, k – стала Больцмана.

При середній концентрації дефектів $N_{d0} > N_{dc}$ у гетеросистемі формуються періодичні дефектно-деформаційні структури [5].

Неоднорідна деформація, що виникає в околі кластера, призводить до зміщення дна зони провідності на величину $\Delta W(x) = a_c U(x)$, де $a_c < 0$ – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності.

Розглянемо тришарову гетероструктуру (наприклад, GaAs/InAs/GaAs), що містить кластер дефектів у квантовій ямі. Потенціальна енергія електрона у такій структурі описується співвідношенням:

$$W(x) = \begin{cases} \Delta E_c, & |x| \geq b \\ a_c U(x), & |x| \leq b, \end{cases} \quad (3)$$

де ΔE_c – розрив зон провідності матеріалів гетеросистеми, що контактують; $2b$ – ширина квантової ями (внутрішнього шару гетероструктури).

На рис.1 графічно представлена координатна залежність потенціальної енергії електрона (суцільна лінія) та її апроксимація прямокутним потенціалом (пунктирна лінія) у тришаровій гетероструктурі з нанокластером точкових дефектів виду центрів розтягу ($\theta_d > 0$, рис.1, а) та виду центрів стиску ($\theta_d < 0$, рис.1, б). Енергія відраховується від дна зони провідності недеформованого матеріалу внутрішнього шару гетероструктури. Електрон-деформаційна взаємодія призводить до того, що потенціальна яма набуває складної форми з додатковою впадиною (додатковим бар'єром) при наявності кластера точкових дефектів, в околі якого виникає неоднорідна деформація розтягу (стиску).

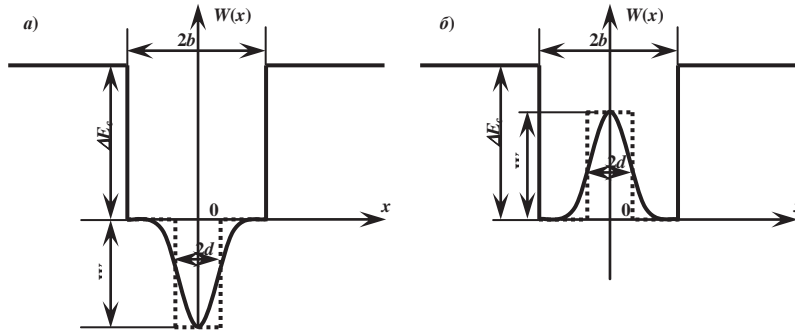


Рис. 1. Координатна залежність потенціальної енергії електрона у гетеросистемі з кластером дефектів
a) $\theta_d > 0$; б) $\theta_d < 0$.

Для конкретнішого опису потенціальної енергії електрона в околі кластера замінимо прямокутним потенціалом з умовою рівності кількості дефектів у реальній та модельній потенціальних ямах [6]. Потенціал (3) можна апроксимувати функцією:

$$W(x) = \begin{cases} \Delta E_c, & |x| \geq b \\ 0, & d \leq |x| \leq b, \\ -W_0, & |x| \leq d \end{cases} \quad (4)$$

де $W_0(N_{d0}) = \text{sign } \theta_d \frac{|a_c| A(N_{d0})}{B(N_{d0}) + 1}$ – енергетична глибина додат-

кової ями (висота додаткового бар'єру), яка збігається з максимальною глибиною реальної потенціальної ями (висотою потенціального бар'єру); $2d(N_{d0})$ – ширина додаткової ями (додаткового бар'єру), яка визначається з умови рівності кількості дефектів у реальній та модельній потенціальних ямах. Враховуючи (2), а також те, що у лінійному наближенні концентрацію дефектів можна представити у

вигляді $N_d(x) \approx \frac{K_A}{\theta_d} U(x)$ [4], ширину додаткової потенціальної

ями можна визначити з умови:

$$\int_{-b}^b U(x)dx = 2d \cdot U(0) = \frac{2d \cdot A}{B+1}.$$

Випадок, який зображено на рис.1, б, може бути реалізований тільки при значних концентраціях дефектів ($\sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$). Це пов'язано з тим, що деформаційний потенціал θ_d для дефектів виду центрів стиску (вакансій, домішок заміщення з іонним радіусом меншим, ніж іонний радіус атомів матриці) є значно меншим від деформаційного потенціалу міжвузлових атомів, які є центрами розтягу [7]. І, відповідно, критична концентрація N_{dc2} , при якій можливе утворення кластерів, є значно більшою, ніж для дефектів виду центрів розтягу. Тому надалі обмежимося тільки першим випадком (рис.1, а), що відповідає існуванню кластера дефектів виду центрів розтягу в квантовій ямі. Потенціальна яма з таким профілем використовується у резонансно-тунельних діодах [8, 9]. У роботах [8, 9] показано, що вольт-амперні характеристики (ВАХ) такого резонансно-тунельного діода є більш контрастними (відношення струму у максимумі до струму у мінімумі є більшим), ніж відповідні характеристики резонансно-тунельного діода з простою ямою.

Енергетичний спектр та хвильові функції електрона в досліджуваній системі знаходимо з розв'язку рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (5)$$

з гамільтоніаном:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^{(i)}} \Delta + W,$$

де $m^{(i)}$ – ефективна маса електрона у зовнішніх шарах гетероструктури ($i = 1$), у широкій ямі ($i = 2$) та у вузькій ямі ($i = 3$).

Оскільки потенціал є інваріантним відносно інверсії $W(-x) = W(x)$, то розв'язки рівняння (5) повинні бути парними або непарними.

Парні розв'язки ($\psi(-x) = \psi(x)$) в області $x \geq 0$ можна записати у вигляді:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{-k_1(x-b)}, \quad x \geq b \quad (6)$$

$$\psi_2(x) = A_2 \cos(k_2 x) + A_3 \sin(k_2 x), \quad d \leq x \leq b \quad (7)$$

$$\psi_3(x) = A_4 \cos k_3 x, \quad 0 \leq x \leq d \quad (8)$$

$$\text{де } k_1 = \sqrt{\frac{2m_1(\Delta E_c - E)}{\hbar^2}}, k_2 = \sqrt{\frac{2m_2 E}{\hbar^2}}, k_3 = \sqrt{\frac{2m_3(W_0 + E)}{\hbar^2}}.$$

У розв'язку (6) забезпечено регулярність хвильової функції при $x \rightarrow \infty$. Окрім цього, повинні виконуватися умови неперервності хвильових функцій і густини потоку ймовірності у точках $x = b$ та $x = d$:

$$\begin{cases} \psi_1(b) = \psi_2(b); \\ \frac{1}{m_1} \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=b} = \frac{1}{m_2} \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=b}; \\ \psi_2(d) = \psi_3(d); \\ \frac{1}{m_2} \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=d} = \frac{1}{m_3} \frac{d\psi_3}{dx} \Big|_{x=d} \end{cases} \quad (9)$$

Система рівнянь (9) має нетривіальний розв'язок для $E > 0$ при умові:

$$tg(k_2(b-d)) - \frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} + \frac{m_2 k_3}{m_3 k_2} tg(k_3 d) + \frac{m_2^2 k_1 k_3}{m_1 m_3 k_2^2} tg(k_3 d) tg(k_2(b-d)) = 0 \quad (10)$$

та для $E < 0$ при умові:

$$-th(k_2(b-d)) - \frac{m_2 k_1}{m_1 k_2} + \frac{m_2 k_3}{m_3 k_2} tg(k_3 d) + \frac{m_2^2 k_1 k_3}{m_1 m_3 k_2^2} tg(k_3 d) th(k_2(b-d)) = 0 \quad (11)$$

з яких можна визначити енергію основного стану електрона, що залежить від концентрації дефектів та пружних сталей матеріалу.

Непарні розв'язки ($\psi(-x) = -\psi(x)$) в області $x \geq 0$ можна записати у вигляді:

$$\psi_1(x) = B_1 e^{-k_1(x-b)}, \quad x \geq b \quad (12)$$

$$\psi_2(x) = B_2 \cos(k_2 x) + B_3 \sin(k_2 x), \quad d \leq x \leq b \quad (13)$$

$$\psi_3(x) = B_4 \sin k_3 x. \quad 0 \leq x \leq d \quad (14)$$

У цьому випадку система рівнянь (9) має нетривіальний розв'язок для $E > 0$ при умові:

$$tg(k_2(b-d)) + \frac{m_1 k_2}{m_2 k_1} + \frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} tg(k_3 d) - \frac{m_1 m_3 k_2^2}{m_2^2 k_1 k_3} tg(k_3 d) tg(k_2(b-d)) = 0 \quad (15)$$

та для $E < 0$ при умові:

$$th(k_2(b-d)) + \frac{m_1 k_2}{m_2 k_1} + \frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} tg(k_3 d) + \frac{m_1 m_3 k_2^2}{m_2^2 k_1 k_3} tg(k_3 d) th(k_2(b-d)) = 0 \quad (16)$$

з яких можна визначити енергію першого збудженого стану електрона.

3. Результати розрахунків та обговорення

З використанням співвідношень (10), (11), (15) та (16) були розраховані енергія електрона в основному стані E_0 , енергія електрона у першому збудженому стані E_1 та різниця між ними $\Delta E = E_1 - E_0$. Різниця енергій електрона у першому збудженому та основному станах є важливим параметром для ВАХ резонансно-тунельних діодів [9]. А саме, величина ΔE визначає значення сили струму у мінімумі ВАХ. Збільшення величини ΔE призводить до зменшення сили струму у мінімумі і, відповідно, до збільшення контрастності ВАХ резонансно-тунельних структур. Розрахунки проводилися для гетеросистеми GaAs/InAs/GaAs при наступних значеннях параметрів: $\Delta E_c = 0,83 \text{ eV}$; $a_c = -5,08 \text{ eV}$; $m_1 = 0,065 m_0$; $m_2 = 0,057 m_0$; $b = 40 \text{ \AA}$; $l_0 = 5 \text{ \AA}$, $l_d = 16 \text{ \AA}$.

На рис. 2 наведена залежність різниці енергій електрона у першому збудженому та основному станах ΔE у гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs з нанокластером у квантовій ямі InAs від середньої концентрації дефектів при різних значеннях ефективної маси електрона у матеріалі кластера m_3 . Така залежність має немонотонний характер з максимумом в околі точки $N_{d0} \approx 0,5 \cdot N_{dc}$. При концентрації точкових дефектів $N_{d0} \sim 0,1 \cdot N_{dc}$ розмір кластера є малим ($d \rightarrow 0$) і величина ΔE дорівнює відповідному значенню для гетероструктури без кластера дефектів, яке при цих параметрах становить $0,2 \text{ eV}$. При збільшенні концентрації дефектів до значення $N_{d0} = 0,56 \cdot N_{dc}$ (рис. 2, крива 1) збільшується розмір нанокластера і, відповідно, ширина додаткової потенціальної ями для електронів, що призводить до пониження основного й підвищення

першого збудженого енергетичних рівнів та збільшення різниці ΔE . При подальшому збільшенні концентрації дефектів зростає розмір кластера, але зменшується глибина додаткової потенціальної ями W_0 , що виникає при наявності нанокластера, і при $N_{d0} \rightarrow N_{dc}$ глибина потенціальної ями W_0 прямує до нуля. Це призводить до збільшення енергії електрона в основному та першому збудженому станах. Однак підвищення першого збудженого електронного рівня є незначним і величина ΔE зменшується.

Як бачимо, наявність кластера дефектів виду центрів розтягу призводить до збільшення величини ΔE на 80% при $N_{d0} = 0,56N_{dc}$, що повинно відобразитися на ВАХ резонансно-тунельних діодів у зменшенні мінімального значення сили струму.

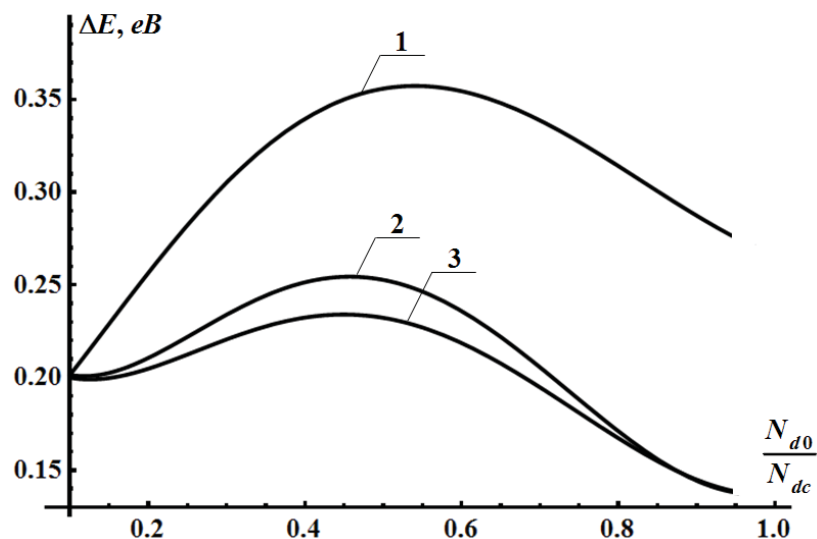


Рис. 2. Залежність різниці енергій ΔE електрона у першому збудженому та основному станах у гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs з нанокластером у квантовій ямі InAs від середньої концентрації дефектів:

$$1-m_3 = 0,03m_0, 2-m_3 = 0,07m_0, 3-m_3 = 0,09m_0$$

Ефект зміни різниці енергій електрона в першому збудженому та основному станах суттєво залежить від ефективної маси електрона (рис. 2). А саме: збільшення величини ΔE суттєво проявляється тільки при малих значеннях ефективної маси електрона в матеріалі нанокластера. У випадку, коли ефективна маса електрона в матеріалі нанокласте-

ра є більшою від ефективної маси електрона в матеріалі основної ями (InAs), збільшення ΔE є незначним, а при $N_{d0} > 0,7N_{dc}$ різниця енергій електрона в першому збудженому та основному станах є меншою від відповідного значення для цієї структури без кластера дефектів. Цей ефект пояснюється тим, що в досліджуваній структурі зміна енергії електрона визначається двома факторами: 1) зміною потенціальної енергії електрона, спричиненою деформаційними ефектами при наявності кластера; 2) зміною кінетичної енергії при відмінності ефективних мас. У першому випадку (ефективна маса електрона в матеріалі нанокластера є меншою від відповідного значення в основній ямі) обидва фактори є причиною збільшення величини ΔE . У протилежному випадку (ефективна маса електрона в матеріалі нанокластера є більшою від відповідного значення в основній ямі) ці фактори конкурують, а саме, збільшення ефективної маси є причиною зменшення різниці енергій електрона ΔE в першому збудженому та основному станах.

1. Показано, що наявність нанокластера точкових дефектів виду центрів розтягу у внутрішньому шарі тришарової гетероструктури призводить до утворення додаткової потенціальної ями, а дефектів виду центрів стиску – потенціального бар'єру.

2. Отримано дисперсійні рівняння, що дають змогу розрахувати енергетичний спектр електрона у тришаровій гетероструктурі, який містить кластер точкових дефектів у квантовій ямі.

3. Досліджено залежність різниці енергій електрона у першому збудженому та основному станах від середньої концентрації точкових дефектів при різних значеннях ефективної маси електрона у матеріалі нанокластера. Показано, що різниця енергій електрона в першому збудженому та основному станах у гетероструктурі з нанокластером є більшою за відповідне значення у структурі, що не містить кластера дефектів, якщо ефективна маса електрона в нанокластері є меншою від ефективної маси електрона в квантовій ямі.

Література

1. Войцеховский А. В. Облучение высокоэнергетическими электронами и γ – квантами эпитаксиальных пленок КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии / Войцеховский А. В., Коханенко А. П., Коротяев А. Г., Григорьев Д. В., Варавин В. С., Дворецкий С. А., Сидоров Ю. Г., Михайлов Н. Н. // Прикладная физика. – 2003. – № 5. – С. 99 – 101.

2. Бобиль А. В. Рентгенодифракционные и электронно-микроскопические исследования влияния γ – излучения на многослойные гетероструктуры AlGaAs/InGaAs/GaAs / Бобиль А. В., Гуткин А. А., Брунков П. Н., Загорянская И. А., Яговкина М. А., Мусихин Ю.Г., Саксеев Д. А., Конников С. Г.,

Устинов В. М., Копьев П. С., Пунин В. Т., Ильяев Р. И., Алфёров Ж. И. // ФТП.– 2006. – Т. 40, № 6. – С. 707 – 710.

3. Вилисова М. Д. Легирование слоев GaAs кремнием в условиях низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии / Вилисова М. Д., Куницын А. Е., Лаврентьева Л. Г., Преображенский В. В., Пулято М. А., Семягин Б. Р., Торопов С. Е., Чалдышев В. В. // ФТП.– 2002. – Т. 14, № 11. – С. 3157 – 3161.

4. Пелешак Р. М. Вплив деформаційних ефектів на електричні властивості структури метал – напівпровідник – легований напівпровідник / Пелешак Р. М., Кузик О. В., Даньків О. О. // УФЖ.– 2010. – Т. 55, № 4. – С. 437 – 442.

5. Пелешак Р. М. Самоорганізований дифузійно-деформаційний розподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах / Пелешак Р. М., Кузик О. В. // УФЖ. – 2007. – Т. 52. – № 7. – С. 689 – 694.

6. Власов Н. М. Влияние атомов примеси на процесс размножения краевых дислокаций / Власов Н. М., Зазноба В. А. // ЖТФ.– 2001. – Т. 71, № 1. – С. 53 – 56.

7. Emel'yanov V. I. The Entropy barrier and the rate of diffusion-strain nucleation of clusters of point defects in laser-irradiated solids / Emel'yanov V. I., Shlykov Yu. G. // LaserPhysics. – 1996. – Vol. 6, № 4. – P. 713 – 720.

8. White B. D. Electrical, spectral, and chemical properties of 1.8 MeV proton irradiated AlGaIn/GaN HEMT structures as a function of proton fluence / White B. D., Bataiev M., Goss S. H., Hu X., Karmarkar A., Fleetwood D. M., Schrimpf R. D., Schaff W. J., Brillson L. J. // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2003. – Vol. 50, № 6. – P. 1934 – 1941.

9. Дымников В. Д. Уровни энергий в квантовой яме с прямоугольными стенками сложной формы / Дымников В. Д., Константинов О. В. // ФТП.– 1995. – Т. 29, № 1. – С. 133 – 139.

УДК 5

**Роман ЛЕШКО,
Леся ТУРЯНСЬКА**

ДИСКРЕТНИЙ СПЕКТР ВОДНЕВОПОДІБНОЇ ДОМІШКИ У ДВОШАРОВІЙ СФЕРИЧНІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ ВІДКРИТОГО ТИПУ

У роботі на основі точного розв'язку рівняння Пуассона для двошарової квантової точки з позитивно зарядженим іоном донора у її центрі визначено потенціальну енергію взаємодії іона домішки з електроном з урахуванням різних відомих значень діелектричних проникностей Si та SiO_2 . Використовуючи знайдену потенціальну енергію, точно розв'язано рівняння Шредингера для водневоподібної домішки у цій системі, досліджено вплив зовнішнього й внутрішнього радіусів на спектр електрона.

Ключові слова: водневоподібна домішка, потенціальна енергія, двошарова квантова точка.