
В. М. Тулупенко
Р. О. Демедюк
О. С. Фоміна

ДЕЛЬТА-ЛЕГОВАНІ КВАНТОВІ ЯМИ
ДЛЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ДІАПАЗОНУ СПЕКТРА

Міністерство освіти і науки України
Донбаська державна машинобудівна академія (ДДМА)

В. М. Тулупенко
Р. О. Демедюк
О. С. Фоміна

**ДЕЛЬТА-ЛЕГОВАНІ КВАНТОВІ ЯМИ
ДЛЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ДІАПАЗОНУ СПЕКТРА**

Монографія

Затверджено
на засіданні вченої ради
Протокол № 2 від 30.09.2021

Краматорськ
ДДМА
2021

УДК 538.915:538.958:53.096

Т 82

Рецензенти:

Крижановський В. Г., д-р техн. наук, професор, Донецький національний університет імені Василя Стуса (м. Вінниця);

Надточій В. О., д-р фіз.-мат. наук, професор, Донбаський державний педагогічний університет (м. Слов'янськ);

Порошин В. М., д-р фіз.-мат. наук, професор, Інститут фізики НАН України (м. Київ).

Тулупенко В. М.

Т 82 Дельта-леговані квантові ями для терагерцового діапазону спектра : *монографія* / В. М. Тулупенко, Р. О. Демедюк, О. С. Фоміна. – Краматорськ : ДДМА, 2021. – 159 с.

ISBN 978-617-7889-11-2

Зроблено огляд можливостей перебудови структури енергетичних рівнів просторового квантування в уже існуючій квантовій ямі за допомогою іонізації дельта-шару мілкої домішки n-типу, розташованої у межах цієї квантової ями. Подано методи самоузгоджених розрахунків для модельної задачі та проаналізовані результати, які підтверджують можливість такої перебудови. Обговорений вплив різних параметрів квантової ями на зміну положення енергетичних рівнів просторового квантування. Проаналізований вплив іонізації домішок на оптичні властивості дельта-легованих квантових ям. Оцінена можливість практичного використання ефектів, які спостерігаються в дельта-легованих квантових ямах, на основі аналізування оптичних характеристик. Проаналізований вплив фонових домішок у гетероструктурі на зазначені вище ефекти, що є кроком до переходу від модельної до реальної задачі.

УДК 538.915:538.958:53.096

© В. М. Тулупенко,
Р. О. Демедюк,
О. С. Фоміна, 2021

© ДДМА, 2021

ISBN 978-617-7889-11-2

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА.....	6
РОЗДІЛ 1. Перебудова енергетичних рівнів в об'ємних матеріалах та у квантових ямах. Напружені квантові ями.....	10
1.1 Вплив зовнішніх чинників на перебудову енергетичних рівнів в об'ємних матеріалах	11
1.1.1 Гідростатичний тиск	11
1.1.2 Одноосьовий тиск	12
1.1.3 Електричне поле	14
1.1.4 Магнітне поле	15
1.1.5 Висновки	19
1.2 Квантові ями та зсув рівнів	20
1.2.1 Ефект Франца – Келдиша	20
1.2.2 Квантово-розмірний ефект Штарка	21
1.2.3 Квантово-каскадні лазери	22
1.2.4 Висновки	24
1.3 Напружені квантові ями на прикладі структур на основі кремнію	24
1.3.1 Критична товщина	25
1.3.2 Розщеплення Δ -мінімумів у зоні провідності кремнію	27
1.3.3 Розрив зон провідності кремнієвої КЯ і кремній-германієвої матриці	31
1.3.4 Висновки	32
РОЗДІЛ 2. Матеріали квантової ями та методика розрахунків.....	33
2.1 Параметри квантової ями	33
2.1.1 Концентрація дельта-шару домішок	35
2.1.2 Вплив внутрішнього напруження структур	36
2.1.3 Нехтування обмінно-кореляційною взаємодією	37
2.1.4 Про випадковий розподіл домішок	38
2.1.5 Інші зауваження	38
2.2 Метод розрахунку	39

2.2.1	Знаходження енергетичних рівнів просторового квантування та їх хвильових функцій	41
2.2.2	Розрахунок енергії зв'язку домішок	43
2.2.3	Розрахунок рівня Фермі та визначення потенціалу Хартрі	48
2.2.4	Висновки	50
РОЗДІЛ 3. Результати.....		51
3.1	Енергія зв'язку домішок у дельта-легованих квантових ямах	51
3.1.1	Результати	52
3.1.2	Порівняння отриманих результатів з даними інших авторів	55
3.2	Перебудова енергетичних рівнів просторового квантування в дельта-легованих квантових ямах	57
3.2.1	Порівняння результатів розрахунків при однорідному та гаусівському розподілах домішок дельта-шару	58
3.2.2	Керування енергетичним зазором між рівнями просторового квантування у КЯ	63
3.3	Висновки	71
РОЗДІЛ 4. Міжпідзонне поглинання в дельта-легованих квантових ямах.....		72
4.1	Попередні зауваження	72
4.2	Результати	75
4.2.1	Енергетичний зазор між рівнями, концентрація домішок, ступінь іонізації домішок	75
4.2.2	Матричні елементи	78
4.2.3	Поглинання в прямокутних та дельта-легованих КЯ	79
4.2.4	Іонізація дельта-шару та коефіцієнт поглинання	81
4.2.5	Залежність від концентрації домішок	83
4.2.6	Квантові ями різної ширини	85
4.3	Нелінійне поглинання та заломлення світла в дельта-легованих КЯ	86
4.3.1	Метод	87
4.3.2	Результати	89
4.4	Висновки	93
РОЗДІЛ 5. ТГЦ-модулятор на базі дельта-легованих КЯ.....		94
5.1	Результати	95
5.1.1	Попередні зауваження	95

5.1.2	Обговорення	97
5.2	Висновки	100
РОЗДІЛ 6. Дослідження реальних гетероструктур		102
6.1	Метод розрахунку	103
6.1.1	Визначення рівня Фермі	104
6.1.2	Підзони просторового квантування	105
6.1.3	Рівняння Пуассона	108
6.1.4	Розрахунок енергії зв'язку домішок	111
6.1.5	Самоузгоджена процедура розрахунків у випадку КЯ, дельта-легованої в центр	111
6.1.6	Самоузгоджена процедура розрахунків у випадку КЯ, дельта-легованої в край	113
6.2	Результати для КЯ, дельта-легованих в центр	118
6.2.1	Перехід до межі незбуреної прямокутної КЯ	118
6.2.2	Результати при температурі 4 К	121
6.2.3	Підвищена температура. Енергія зв'язку та концентрація електронів у КЯ 123
6.2.4	Енергетичний зазор між сусідніми рівнями при підвищених температурах	130
6.2.5	Низькі концентрації фонових домішок	131
6.3	Результати для КЯ, дельта-легованих у край	133
6.3.1	Опис отриманих результатів	133
6.3.2	Збіжність результатів до випадку $N_b=0$	136
6.3.3	Електрони та шари виснаження	138
6.3.4	Енергія зв'язку домішок	141
6.3.5	Хвильові функції та енергетичний зазор між сусідніми рівнями просторового квантування	145
6.4	Висновки	148
ПІСЛЯМОВА		150
ЛІТЕРАТУРА		153

ПЕРЕДМОВА

Розвиток нанотехнологій відкриває захоплюючі можливості для керування кількістю енергетичних рівнів, а також енергетичним зазором між ними в гетероструктурах, на базі яких створено різні види оптоелектронних приладів. У випадку (прямокутної) квантової ями (КЯ), це може бути зроблено шляхом зміни її глибини і ширини. Інший спосіб може бути представлений дельта-легованими КЯ V-виду. У цьому сенсі можна згадати дослідження дельта-шарів домішок в кремнії n-типу [1]. (Це тим більш доречно, тому що дана монографія також присвячена теоретичному дослідженню нових явищ у дельта-легованих кремнієвих КЯ n-типу.) Але у цій роботі, концентрація домішок настільки велика, що хвости густини станів знаходяться у забороненій зоні і тому всі домішки можна розглядати як іонізовані, а електрони знаходяться в електростатичній КЯ, що утворюється іонізованими домішками і вільними електронами. Глибина та (напів-) ширина ями і, відповідно, позиції енергетичних рівнів всередині КЯ залежать від концентрації домішок і напівширини дельта-шару [2]. Таким чином, приклад цих двох КЯ (прямокутної і V-виду) показує, що дослідники отримали можливість передбачати бажану структуру енергетичних рівнів (в тому числі і зазору між ними) на стадії проектування гетероструктури, що практично неможливо для об'ємних напівпровідників. Більше того, є також можливість регулювання відстані між енергетичними рівнями в тунельно-пов'язаних КЯ за допомогою поперечного електричного поля, як це було зроблено у деяких схемах квантово-каскадного лазера [3]. Тим не менш, незважаючи на очевидні успіхи в розробці структури з прогнозованими енергетичними рівнями, мрія багатьох поколінь дослідників про керування зазорів між ними в тій самій структурі відносно невеликим електричним полем не досягнута ще й до сих пір.

Між тим, поєднання цих двох видів КЯ може привести до бажаного результату. Тут мається на увазі дельта-легована прямокутна КЯ. Головне, що в цьому випадку концентрація домішок повинна бути досить невеликою, щоб можна було розглядати домішкові рівні, а не домішкові зони. Відомо, що енергія зв'язку домішок (ЕЗД) в такій структурі сильно залежить від ширини КЯ і положення домішки всередині КЯ, як було зазначено Бастардом [4] вперше більше ніж 30 років тому. А саме, максимальне значення енергії іонізації домішок, легованих в центр КЯ, приблизно в два рази більше, ніж в край. Цей висновок справедливий для КЯ з шириною $L > 3 \dots 4a_B$, де a_B – борівський радіус. З того часу багато авторів підтвердили ці результати для різних структур. Крім того, було досліджено залежність ЕЗД від різних характеристик КЯ, а також від зовнішніх чинників, таких як тиск, електричні і магнітні поля. Посилання на ці дослідження можна знайти в роботі [2]. Певний виняток можуть

складати публікації, де одним з головних завдань було вивчення залежності енергії іонізації домішок від концентрації домішок, у тому числі включаючи і відносно високі концентрації. Тут слід, однак, зазначити, що всі отримані результати справедливі тільки для низьких температур, коли електрони виморожені на домішках, які є нейтральними.

Інша ситуація виникає при більш високих температурах, коли домішки є частково іонізованими, і носії заряду з'являються на рівнях просторового квантування КЯ (термін «рівень просторового квантування» є еквівалентом поняття «дно відповідної підзони»). У результаті формується додатковий потенціал, що утворюється іонізованими домішками і вільними електронами (далі називатимемо його потенціалом Хартрі (ПХ)), який накладається на початковий (при низьких температурах) енергетичний профіль КЯ. Іншими словами, отримується нова КЯ, з новим набором енергетичних рівнів просторового квантування і, отже, з новим значенням ЕЗД [2]. Тут доречно підкреслити, що «набір енергетичних рівнів просторового квантування» залежить від ступеню іонізації домішок. Але іонізація мілких домішок може також бути викликана порівняно невеликим електричним полем. Це також означає, що дослідники можуть потенційно отримати можливість контролювано настроювати як відстані між енергетичними рівнями, так і ЕЗД за допомогою зміни зовнішнього електричного поля. Важливість подібного маніпулювання енергетичними підзонами і домішковими рівнями в КЯ добре видно на прикладі механізму внутрішньо центральної інверсії [5], який, як вважається, відповідає за генерацію терагерцового випромінювання Si/SiGe КЯ [6]. У відповідності до цього механізму, мілкі домішкові стани, що розташовані в забороненій зоні, спустошуються сильним (прикладеним в площині КЯ) електричним полем. Водночас як резонансні домішкові стани, розташовані у безперервному спектрі першого дозволеного рівня і прикріпленні до другої енергетичної підзони, заповнюються електронами через їх резонансне розсіювання (захоплення). У результаті інверсії заселеність електронів може відбуватися між цими рівнями в ТГц-діапазоні. Відомо, що енергетичні зазори між резонансними і локалізованими в забороненій зоні домішковими рівнями корелюють з енергетичними відстанями між відповідними підзонами [7].

Отже, завдання цієї монографії – оцінити зміни енергетичного положення рівнів просторового квантування у дельта-легованих КЯ, які обумовлені іонізацією дельта-шару домішок. На даному етапі досліджень в якості фактора, що регулює іонізацію домішок, замість електричного поля, було обрано температуру. Це пов'язано з потребою уникнути ускладнень при обчисленнях, які виникають при урахуванні домішкового пробою та урахуванні виділення Джоулевого тепла під час прикладення зовнішнього електричного поля.

Монографія структурована наступним чином. Перший розділ – це огляд літератури, в якому проаналізовані та порівняні дослідження, пов'язані з рухом рівнів в об'ємних матеріалах та КЯ. Також розглянуті

особливості напружених КЯ на основі кремнію, оскільки результати, які представлені в даній роботі отримані саме для таких гетероструктур.

У другому розділі обґрунтовується вибір структури та описуються її характеристики. Крім того тут представлений докладний опис методу самоузгодженого розрахунку, який був розроблений для дослідження кремнієвих КЯ, дельта-легованих мілкою домішкою n-типу.

У третьому розділі представлені результати дослідження зміни енергетичної відстані між рівнями просторового квантування в КЯ різної ширини, з різною концентрацією домішок дельта-шару та позицією дельта-легування, шляхом зміни температури. Тобто показана можливість керування енергетичним зазором між рівнями в КЯ.

Ця можливість знаходить своє відображення в дослідженні міжпідзонних оптичних переходів у КЯ, що є важливим інструментом для наукових цілей і дозволяє прояснити основні параметри КЯ (її симетрія, енергетична структура, заселеність підзон носіями заряду, і т. д.) [8]. З іншого боку, міжпідзонні оптичні переходи в прямокутних КЯ є основою для різного роду оптоелектронних пристроїв, таких як фотодетектори [9], модулятори [10], квантово-каскадні лазери [3], і т.д. Одним з основних параметрів для таких пристроїв є робоча частота, яка визначається різницею енергій між рівнями просторового квантування. Тому, якщо з'являється нова можливість зміни частоти, вона повинна бути ретельно вивчена. Цьому і присвячений розділ 4 монографії.

У розділі 5 висунута ідея про можливість створення ТГц-модулятора на основі напівпровідникової КЯ. Як було вище зазначено, іонізація дельта-шару призводить до зміни структури перших енергетичних рівнів в КЯ. Енергетичні зазори між цими рівнями в КЯ з шириною 10 та 20 нм відповідає ТГц-діапазону. Це означає, що описане явище може бути основою для розробки нового типу напівпровідникового ТГц-модулятора, який може перестроюватися на різну частоту. Дійсно, ТГц-випромінювання може легко проходити через КЯ при низькій температурі, коли електрони будуть виморожені на донорах (за відсутності зовнішнього електричного поля в площині КЯ). Прикладаючи електричне поле, маємо можливість змінювати ступінь іонізації домішки в дельта-шарі шляхом зміни цього поля. На енергетичних рівнях КЯ з'являються вільні носії, створюючи додатковий внесок в ПХ, що, в свою чергу, призводить до зміни енергетичного зазору між 1-, 2-м і іншими (якщо вони є) енергетичними рівнями просторового квантування. Ці зазори найважливіші в оптичних переходах і, отже, досягається резонансне поглинання фотона з енергією в ТГц-діапазоні. Це означає, що поглинання буде різко зростати, а прозорість структури буде падати. Вимикання електричного поля відновлює прозорість структури.

І останній, шостий розділ, – це дослідження впливу фонових домішок на перебудову енергетичних рівнів просторового квантування та домішкових рівнів в КЯ. В цьому розділі описана методика самоузгодженого розрахунку рівнянь Шрьодінгера та Пуасона, адаптована

для нової ускладненої задачі. Також тут подані та проаналізовані отримані результати для КЯ, дельта-легованих в центр або в край, з різною концентрацією фонових домішок, при різному ступені іонізації домішок дельта-шару. Відомо, що такі домішки завжди з'являються в гетероструктурі при її вирощуванні або вони можуть бути введені навмисно. Але, незважаючи на природу їх появи, фонові домішки призводять до вигину зони провідності біля інтерфейсів КЯ та до появи додаткових електронів в КЯ навіть при нульовій температурі. Це очевидно має вплив на ПХ, що безпосередньо відображається на енергетичних характеристиках КЯ. Отже, з одного боку цікаво простежити за впливом фонових домішок на розглянуті явища з наукової точки зору. З іншого боку, для наближення досліджуваної КЯ до реального пристрою, необхідно також враховувати наявність фонових домішок.

РОЗДІЛ 1

ПЕРЕБУДОВА ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ В ОБ'ЄМНИХ МАТЕРІАЛАХ ТА У КВАНТОВИХ ЯМАХ. НАПРУЖЕНІ КВАНТОВІ ЯМИ

Вчені, що працюють у сфері створення і використання оптоелектронних приладів, зокрема, таких як фотоприймачі і лазери, завжди мріяли про можливість легкої і зручної перебудови їхньої робочої частоти (довжини хвилі). Так, наприклад, в Україні, ще на початку 60-х років, коли вирішувались напрями дослідів нещодавно створених лазерів, було усвідомлено, що «головною загальною проблемою... буде реалізація перестроювання частоти генерації лазерів» [11]. З часів, коли Макс Планк [12] та Альберт Ейнштейн [13] ввели формулу $\Delta E_{ij} = E_j - E_i = h\nu_{ij}$, і стало зрозуміло, що світло випромінюється (поглинається), у тому числі через переходи електронів між різними рівнями енергії¹, ця проблема була перетворена у задачу зміни різниці енергії між енергетичними рівнями. До епохи нанотехнологій люди мали справу лише з енергетичними рівнями, які надавалися природою, і було надзвичайно важко змінити інтервал між цими рівнями при заданій температурі. Для цього використовувалися будь-які зовнішні впливи, такі як гідростатичний і одноосьовий тиск, електричне і магнітне поле та різні комбінації цих впливів. У першому підрозділі буде розглянуто ці впливи для напівпровідникових об'ємних матеріалів (їх тут доречно згадати, оскільки дана робота присвячена проблемі зміни структури енергетичних рівнів у напівпровідникових КЯ). Далі, дуже коротко буде сказано про перебудову рівнів у квантових ямах в електричному полі і буде приділено увагу огляду властивостей структури, КЯ з якої є предметом дослідження даної роботи

¹ Тут ми не торкаємося механізмів випромінювання світла, пов'язаних з прискореним або релятивістським (ефект Черенкова) рухом електронів.

1.1 Вплив зовнішніх чинників на перебудову енергетичних рівнів в об'ємних матеріалах

У цій частині розглядається вплив зовнішніх чинників на перебудову енергетичних рівнів у об'ємних матеріалах. І хоча ця робота присвячена перебудові енергетичних рівнів у КЯ, для того, щоб підкреслити переваги представленої ідеї перед існуючими методами, доречно проаналізувати ці методи, тим більше, що деякі з них знаходять застосування і у наноструктурах.

1.1.1 Гідростатичний тиск

Сміт у своїй відомій книзі Semiconductors [14] зазначає, що «мабуть, найбільш важливими параметрами, які слід досліджувати в умовах тиску (гідростатичного) є ширина забороненої зони ... і інші ширини зон (тобто відстань між відповідними рівнями енергії) у зонній структурі». Вплив гідростатичного (усестороннього) тиску на ширину забороненої зони, а відтак на зсув спектру фундаментального поглинання для кремнію досліджувався, у експериментальній роботі [15]. Було встановлено слабкий зсув краю поглинання у діапазоні використаних тисків – до 8 кбар для кремнію. Коефіцієнти зміни ширини забороненої зони з тиском були встановлені на рівні 1.3×10^{-12} еВ/дин \times см⁻². Доцільно нагадати, що одиниця тиску 1 бар \cong 1 атм, а одиниця сили у системі СГС 1 дина \cong 10⁻⁵ Н, тобто зазначені коефіцієнти є надзвичайно малими. У роботі [16] аналогічні дослідження проводились для складних напівпровідників груп А₂В₆, А₃В₅ і А₁В₇. Для прикладу, на рисунку 1.1, взятому з цієї роботи наведено графік залежності краю поглинання алюмінію-сурми від тиску.

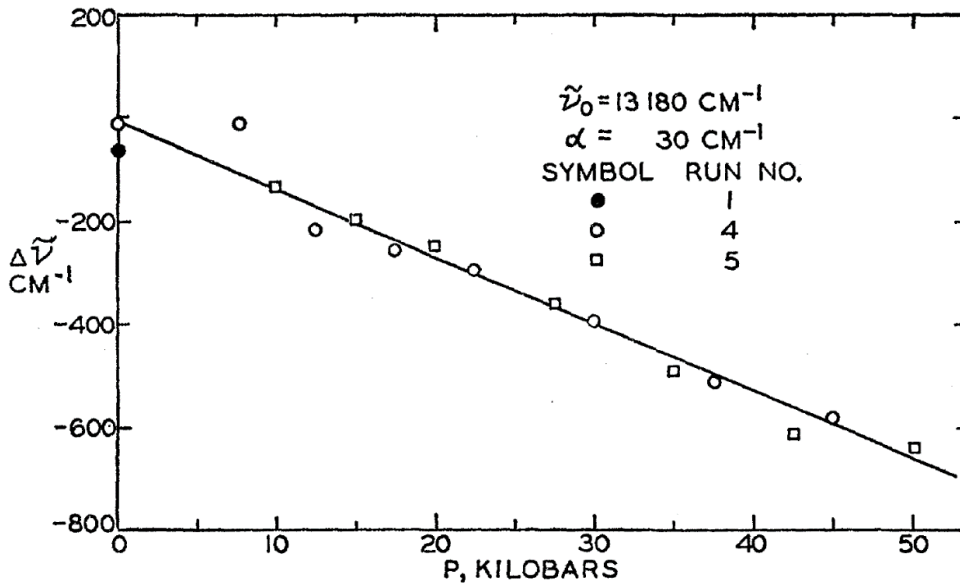


Рисунок 1.1 – Залежність зсуву фундаментального поглинання AlSb від гідростатичного тиску, рисунок 1 роботи [16]

Знову спостерігається незначний зсув при великих прикладених тисках. Якщо зважити на велику технічну складність утворення великих гідростатичних тисків, то можна прийти до висновку, що ця методика може застосовуватися лише для фундаментальних досліджень у спеціалізованих фізичних лабораторіях.

1.1.2 Одноосьовий тиск

Наслідки прикладання одноосьового тиску до напівпровідників є значно цікавішими у порівнянні з гідростатичним тиском з наукової точки зору, і, зокрема, з точки зору руху енергетичних рівнів. Справа в тому, що гідростатичний тиск не змінює симетрію кристалів, в той час як одноосьовий тиск призводить до появи виділеного напрямку, а відтак, до зменшення симетрії кристалу і до розщеплення вироджених енергетичних рівнів, при тому що величина розщеплення залежить від величини прикладеного тиску. Важливою обставиною є те, що набувають зміни як положення країв зон, так і положення домішкових рівнів.

Наприклад, на рисунку 1.2, взятому з роботи [17], показано зміну спектру поглинання германію, легованого мілкою домішкою Ga, за наявності одноосьового тиску. Але знов таки, складна технічна реалізація таких і подібних дослідів стала на заваді їхньому широкому використанню.

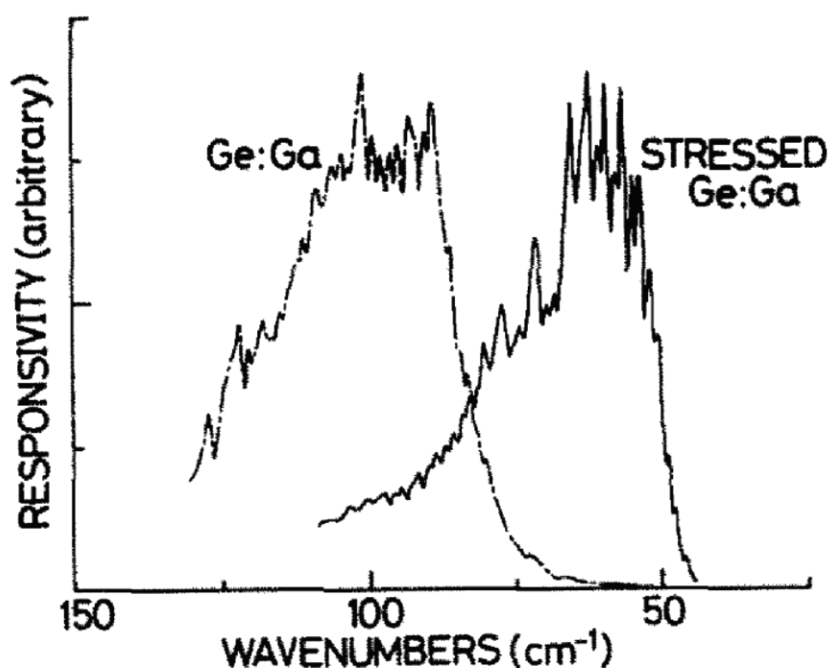
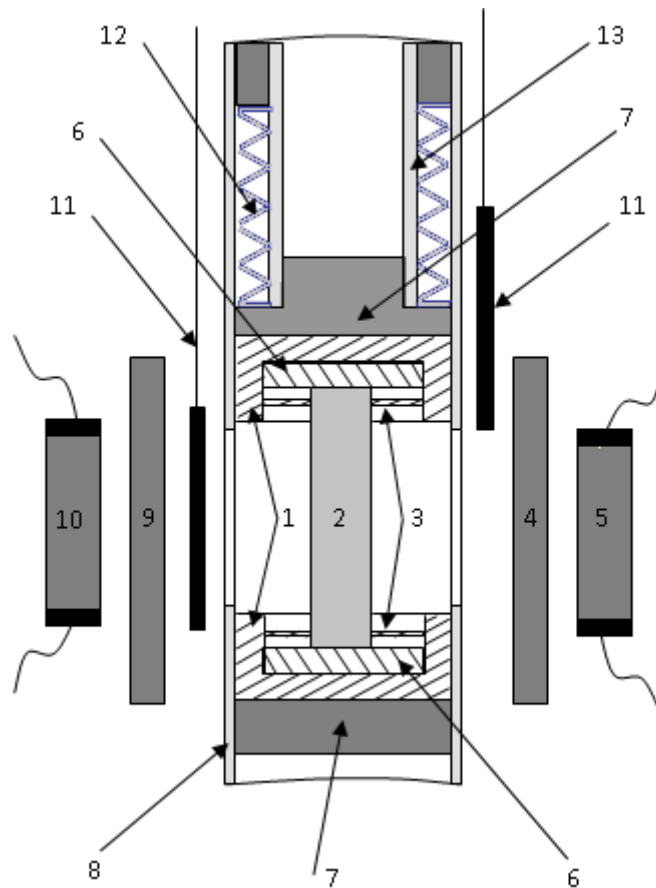


Рисунок 1.2 – Спектральна чутливість деформованого Ge:Ga фотодетектора (суцільна крива) і недеформованого Ge:Ga (пунктирна крива), рисунок 2 роботи [17]

Рисунок 1.3, на якому зображено камеру тиску, що використовувалась у досліді механізму стимульованого випромінювання з одноосьового стиснутого діркового германію [18–21], дозволяє оцінити складність таких експериментів. До того ж, на цьому рисунку ще багато чого не показано – наприклад елементи несучих конструкцій, електричні контакти, різного роду екрани і т. і. Таким чином, можна зазначити, що до початку ери нанотехнологій² використання одноосьового тиску, подібно до використання гідравлічного тиску, не вийшло за межі спеціалізованих наукових лабораторій.

² Автори відносять початок ери нанотехнологій на середину 80-х років минулого століття.



1 – тefлонові стакани, 2 – зразок, 3 – тefлонові опорні кільця,
 4 – фільтри (чорний поліетилен і кристалічний кварц), 5 – фотоприймач
 $Ge:Ga$, 6 – мідні пуансони, 7 – сталеві пуансони, 8 – зовнішня опорна
 сталева трубка, 9 – фільтр (чорний поліетилен), 10 – фотоприймач $Ge:Zn$,
 11 – рухомі шторки, 12 – пружина для попереднього підтиску,
 13 – внутрішня упорна сталева трубка
 Рисунок 1.3 – Конструкція камери тиску [18]

1.1.3 Електричне поле

Найбільш відомим проявом електричного поля у оптиці напівпровідників є ефект Франца – Келдиша, що полягає у появі поглинання фотонів з енергією, меншою ширини забороненої зони, у потужних електричних полях. Іншими словами, виглядає так, начебто зменшується ширина забороненої зони в електричному полі. Однак теорія говорить, що цей ефект обумовлений двома явищами, що виникають у напівпровідниках в електричному полі. Перше – це нахил зон провідності

і валентної, і друге – що хвильові функції електронів і дірок за наявності електричного поля описуються функціями Ейрі, що мають хвости у забороненій зоні. Перекриття цих хвостів і призводить до появи поглинання, як це показано на рисунку 1.4, взятому з інтернету [22].

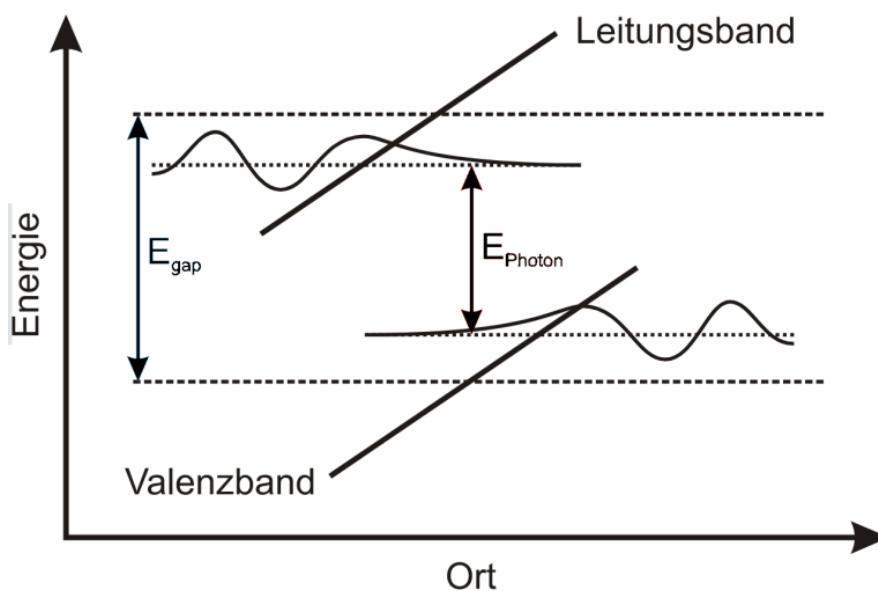


Рисунок 1.4 – Схема, що пояснює ефект Франца – Келдиша [22]

Ефект Штарка (розщеплення вироджених енергетичних рівнів) у об'ємних напівпровідниках виражений слабо, і він в основному проявляється у розщепленні і зміщенні ексітонних ліній поглинання.

1.1.4 Магнітне поле

Найбільш відомими проявами магнітного поля у напівпровідниках є циклотронний резонанс і ефект Зеємана. Коротко зупинимось на кожному з них.

Циклотронний резонанс. У магнітному полі B (прикладеному, наприклад уздовж осі z) енергію електрона у зоні провідності можна записати у вигляді [23]:

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.1)$$

де E_0 – енергія дна зони, \hbar – приведена постійна Планка, k_z – хвильове число електрону для руху уздовж осі z , m_e^* – ефективна маса електрону, ω_c – так звана циклотронна частота, $\omega_c = eB/m^*$. У виразі (1.1) другий член є енергія електрону, що рухається уздовж осі z , тобто, виходить, що магнітне поле не впливає на рух електронів уздовж поля. Третій член у (1.1) є енергія гармонійного осцилятора, яка може змінюватися тільки дискретним чином – порціями $\hbar\omega_c$. Значення енергії, що відповідають різним числам n також називають рівнями Ландау.

На рисунку 1.5, узятому з книги [23], показано спектр електронів у магнітному полі. З формули (1.1) випливає, що у магнітному полі мінімальна енергія електрону, або ж дно зони провідності є $E_0 + \hbar\omega_c/2$ – для $n = 0$.

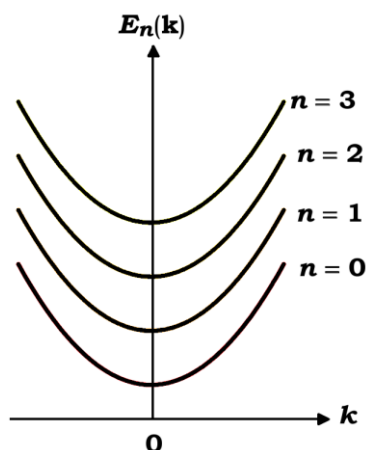


Рисунок 1.5 – Спектр електронів у магнітному полі, рисунок 5.1 роботи [23]

Аналогічна картина буде і для валентної зони з тією відмінністю, що у формулі для дірок, аналогічній формулі (1.1) буде стояти ефективна маса дірки m_h^* у другому члені. Доведено, що дозволені міжзонні оптичні переходи електронів відповідають правилу відбору $\Delta n = 0$. Це означає, що мінімальна енергія фотону тепер буде визначатися як

$$hw = E_g + \frac{1}{2} \hbar e B \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right) \quad (1.2)$$

і буде залежати від величини індукції магнітного поля B .

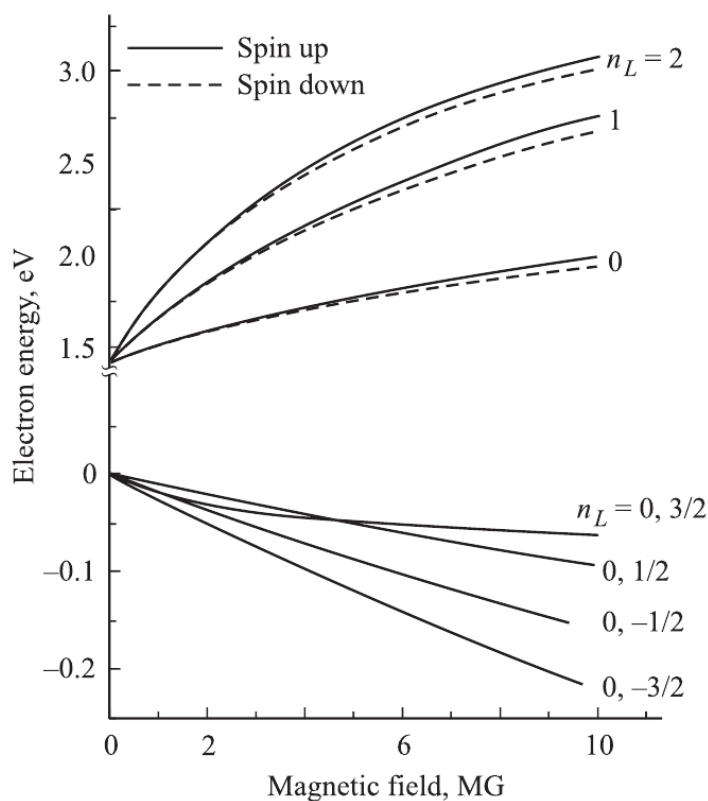


Рисунок 1.6 – Залежності енергій рівнів Ландау від магнітного поля у зоні провідності і у валентній зоні для арсеніду галія, рисунок 2 роботи [24]

На рисунку 1.6 показані розраховані у роботі [24] залежності енергій рівнів Ландау від магнітного поля у зоні провідності і у валентній зоні для арсеніду галія. Слід нагадати, що $1 \text{ Гс} = 10^{-4} \text{ Тл}$, тобто максимальне поле зображене на рисунку 1.6 відповідає $1\,000 \text{ Тл}$! Це означає, що для помітної зміни ширини забороненої зони треба застосовувати надзвичайно потужні магнітні поля, що не є легкою технічною задачею. На спектрах поглинання внаслідок квантування Ландау будуть спостерігатися осциляції поглинання, що відповідають переходам між рівнями Ландау з одним і тим же номером у валентній зоні і зоні провідності на зразок таких, як показані

на рисунку 1.7, взятому з роботи [25]. Аналогічним чином можна розглянути і внутрішньопідзонні переходи між рівнями Ландау. Слід зазначити, що необхідною умовою спостереження явищ, обумовлених циклотронним резонансом є $\hbar\omega_c > kT$, T – температура, а k – стала Больцмана. Іншими словами, необхідні потужні (надзвичайно потужні!) магнітні поля і низькі температури.

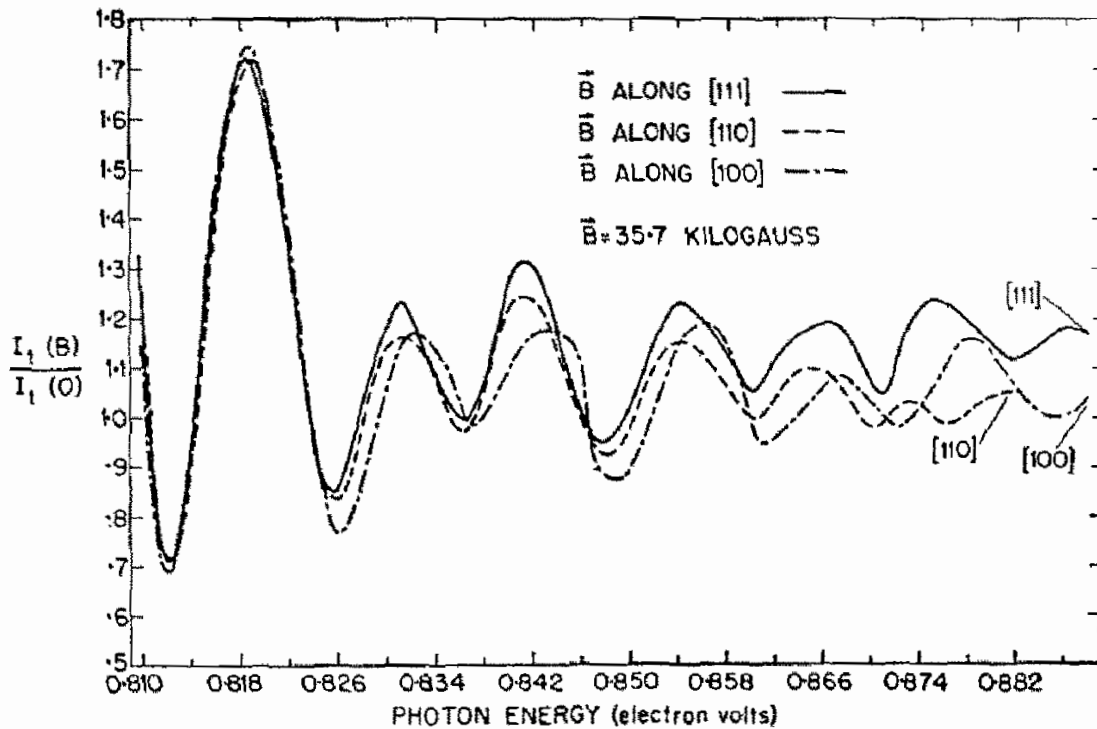


Рисунок 1.7 – Осциляції коефіцієнта поглинання у германії для магнітного поля B ($B=35,7$ кГс) прикладеного уздовж трьох кристалографічних напрямків, рисунок 1 роботи [25]

Ефект Зеємана. Ефект Зеємана полягає у розщепленні енергетичних рівнів електронів у магнітному полі. Оскільки розщеплення мале у порівнянні з розщепленням Ландау у циклотронному резонансі навіть у потужних магнітних полях, то його вивчали у напівпровідниках для мілких домішок, енергія зв'язку яких також мала, і тому, на її фоні можна помітити розщеплення, обумовлене наявністю магнітного поля. Але тут треба зазначити, що навіть без магнітного поля спектр мілких домішок виглядає досить складним, оскільки у малому проміжку енергії

знаходиться багато енергетичних рівнів. До того ж, як з'ясовано для донорів у кремнії [26], основний (і перші збуджені рівні) розщеплюються дуже слабо, і тому це розщеплення навіть не показується на відповідних графіках. Щоб оцінити величину розщеплення для більш високо лежачих рівнів у кремнії на рисунку 1.8 приведені розраховані спектри для збуджених станів взяті з роботи [26]. З цього рисунку видно, що у потужних магнітних полях розщеплення деяких рівнів може сягати 2 меВ, але складна структура цих рівнів стає на заваді їхньому практичному використанню, навіть якщо не брати до уваги проблему утворення зовнішніх потужних магнітних полів.

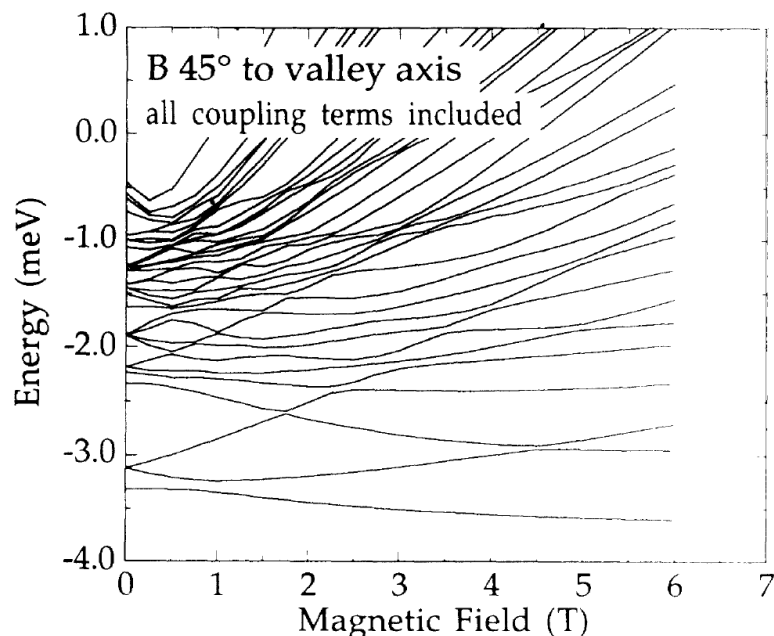


Рисунок 1.8 – Розраховане Зееманівське розщеплення збуджених станів мілкового донору у кремнії, рисунок 10 роботи [26]

1.1.5 Висновки

На підставі наведеного вище огляду літератури по спробам змінити енергію рівнів різними засобами, можна сказати, що, у принципі, можливий рух рівнів, але він дуже незначний, і усі ці можливості не

вийшли за межі спеціалізованих наукових лабораторій. Перш за все, через складність методики, а по друге, через малу величину змін енергій при надзвичайно складних і дорогих експериментальних засобах. Нові можливості відкрилися у цьому плані з розвитком нанотехнологій. Особливо важливим видається можливість отримати практично будь-яку структуру енергетичних рівнів у видимому і інфрачервоному діапазонах спектру за рахунок маніпуляції розмірами і складом наноструктур, і, зокрема квантових ям. Вперше з'явилася можливість отримати енергетичні рівні, а відтак і різницю між ними «не передбачені природою» ще на стадії проектування оптоелектронних приладів. Тепер інженери можуть планувати практично будь-яку структуру енергетичних рівнів. Але знов таки, залишається задача зміни відстані між енергетичними рівнями у вже виготовлених пристроях. У принципі, усі розглянуті вище методи можна використовувати і для КЯ. Гідростатичний тиск і потужне магнітне поле тут не будуть розглядатися внаслідок зазначених технічних проблем. А от використання електричного поля і одноосьового тиску отримали нові можливості і ефективність у зміні енергетичних рівнів у квантових ямах. Короткому огляду таких можливостей і присвячено наступний підрозділ.

1.2 Квантові ями та зсув рівнів

У цьому розділі розглянуто найбільш відомі ефекти по перебудові (зміщенню) енергетичних рівнів електричним полем у квантово-розмірних структурах – ефект Франца – Келдиша і квантово-розмірний ефект Штарка.

1.2.1 Ефект Франца – Келдиша

Прогрес у технологій отримання напівпровідникових плівок привів до більш поширеного використання ефекту Франца – Келдиша, наприклад у модуляторах випромінювання на базі арсеніду галію. Справа в тому, що

для ефективного використання ефекту необхідні поля порядку 10^5 В/см. Якщо товщина плівки GaAs порядку 1...10 мкм, то задача отримати такі поля не видається занадто складно. Інерційність перемикачів модуляторів Франца – Келдиша порядку 10^{-10} с. Суттєвим недоліком таких приладів є те, що вони можуть працювати тільки у вузькому діапазоні спектра.

1.2.2 Квантово-розмірний ефект Штарка

Ефектом Штарка називають зсув (і розщеплення) енергетичних рівнів атомів у електричному полі. На рисунку 1.9, взятому з інтернету, показано схему, що пояснює цей ефект.

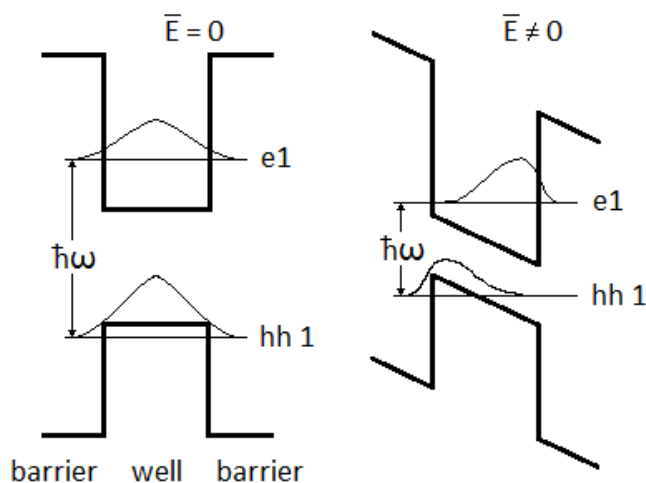
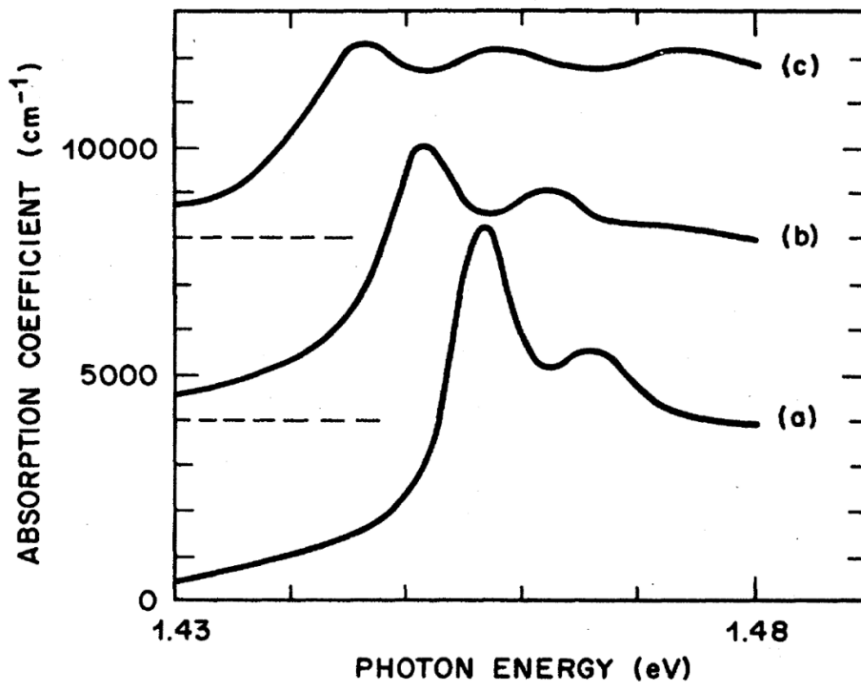


Рисунок 1.9 – Схема, що пояснює квантово-розмірний ефект Штарка

Тут на рисунку 1.9, а показано квантові ями для електронів і дірок з першим рівнем просторового квантування (тобто це є структура типу I) без електричного поля. Також показано хвильові функції електронів і дірок. На рис. 1.9, б показано те ж саме, але за наявності потужного електричного поля. Видно, що електричне поле змінює енергетичний профіль КЯ і, відповідно, зменшує енергії електронів і дірок. Також видно, що хвильові функції електронів і дірок зміщуються до різних гетероінтерфейсів; електронів – проти поля, а дірок – по полю. Очевидно, що це призводить до

зменшення ширини забороненої зони (і зменшення коефіцієнту поглинання внаслідок зменшення матричного елементу переходу). На рисунку 1.10 показані спектри поглинання структури GaAs/AlGaAs при різних величинах прикладеного електричного поля. Інерційність такого модулятора теж є на рівні 10^{-10} с [27], але він вигідно відрізняється від модулятора на ефекті Франці – Келдиша тим, що можна варіювати спектральним діапазоном перебудови за рахунок як ширини КЯ, так і за рахунок її глибини.



a – $E = 1 \times 10^4$ В/см; *б* – $E = 4.7 \times 10^4$ В/см; *в* – $E = 7.3 \times 10^4$ В/см

Пунктирною горизонтальною лінією показано зміщений нуль поглинання для кожної кривої, рисунок 5 роботи [27]

Рисунок 1.10 – Спекти поглинання при різних електричних полях

1.2.3 Квантово-каскадні лазери

Необхідно зазначити, що керування зміщенням енергетичних рівнів у електричному полі використовується в одному з найпоказовіших досягнень нанofізики – у квантово-каскадних лазерах. На рисунку 1.11 [3] наведено

схему такого лазеру³. Інверсія заселеностей і, відповідно, генерація випромінювання відбувається на переходах 3–2.

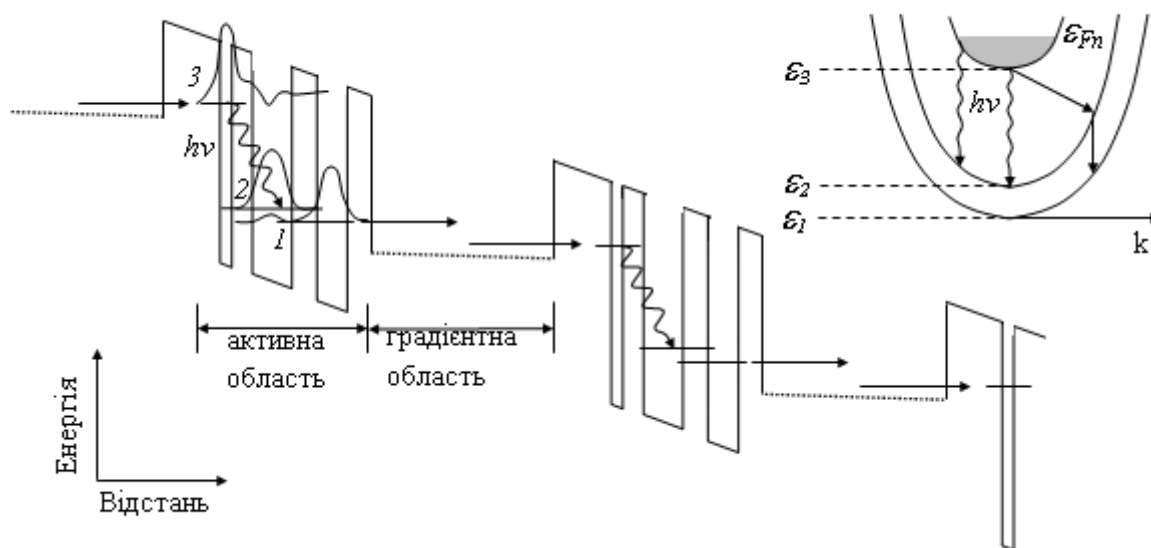


Рисунок 1.11 – Енергетична діаграма зони провідності періоду (1 з 25: активна область плюс інжектор) квантово-каскадного лазера, рисунок 1 роботи [3]

За відсутності електричного поля, у градієнтній області ширина забороненої зони збільшується зліва направо. Коли електричне поле перевищує порогове, то нахил градієнтної області стає майже нульовим і верхній рівень 3 заповнюється внаслідок інжекції електронів з цієї області.

Відстань між другим і першим рівнями відповідає енергії оптичного фону, і тому рівень 2 ефективно спустошується внаслідок емісії оптичного фону з майже нульовим імпульсом. Час життя електронів на 3 рівні відносно емісії оптичного фону значно більший, оскільки для цього потрібні фони з великим імпульсом, як це показано на вкладці рисунку 1.11. Є сенс навести декілька цифр, що характеризують квантово-каскадний лазер. Порогове поле генерації сягає приблизно 10^5 В/см (при загальному, прикладеному до лазера, напруженні майже 8 В). Порогова

³ У подальшому подібних схем було запропоновано дуже багато. Незмінним залишається той факт, що електрон каскадно проходить через багато квантових ям в електричному полі.

величина щільності струму генерації порядку 10^4 А/см², що відповідає струму 850 мА через зразок. Потужність випромінювання складала приблизно 10 мВт на довжині хвилі 4.26 мкм при температурі 10 К.

1.2.4 Висновки

Відомо, що найбільш зручним засобом контролювати перебудову спектру різного роду оптоелектронних приладів є електричне поле. І нанотехнології надали нові можливості для маніпулювання енергетичними рівнями, а відтак і зазором між ними. Перш за все тут слід згадати квантово-розмірний ефект Штарка, який дозволяє змінювати спектр поглинання у вже існуючій структурі (як правило структури з багатьох КЯ) за рахунок зменшення ширини забороненої зони (тобто міжзонного поглинання) в електричному полі. Нажаль, це можливо в вузькому діапазоні спектру. Рух рівнів у сусідніх тунельно-пов'язаних квантових ямах у одній зоні (як правило – зоні провідності) у електричному полі використовується для отримання інверсії населеності у квантово-каскадному лазері. Нові можливості використання механічних напружень для перебудови спектру електронів також було отримано у зв'язку з розвитком нанотехнологій. Наступний підрозділ огляду присвячено саме цій тематиці.

1.3 Напружені квантові ями на прикладі структур на основі кремнію

Для знаходження положення енергетичних рівнів просторового квантування у кремнієвій квантовій ямі необхідно розв'язувати відповідне рівняння Шрьодінгера. Значно легше це робити для квантових ям n-типу, ніж для аналогічних структур p-типу. Це видається тим більш

справедливим, коли йдеться, як у нашому випадку, про обґрунтування оригінальної ідеї. Тому наші досліди були проведені на прикладі напруженої кремнієвої ями n-типу, розміщеної у кремній-германієвій матриці. Така структура відповідає типу II КЯ, показаної на рисунку 1.12.



Рисунок 1.12 – Структура квантової ями типу II

Більш детально про вибір структури досліджень обговорено у наступному розділі. КЯ тут є тільки для електронів зони провідності, в той час як для дірок валентної зони кремній являє собою бар'єр. Оскільки в розрахунках не було враховано перехід електронів з валентної зони у зону провідності, то вплив деформації розтягування на структуру валентної зони тут не розглядається. Натомість у цьому розділі увагу буде зосереджено на таких питаннях як критична товщина напруженої плівки кремнію, вплив деформації розтягування на структуру енергетичних рівнів зони провідності кремнію, розриви у зонах провідності кремнієвої КЯ і кремнієво-германієвої підкладки і інші параметри напруженого кремнію, які були використані у розрахунках.

1.3.1 Критична товщина

На початку ери квантових ям перевага віддавалась сполукам з приблизно однаковою сталою решітки, яких на жаль, дуже мало і тому в основному використовувались структури з GaAs/AlGaAs, для яких постійні кристалічної ґратки практично однакові у широкому діапазоні

концентрацій алюмінію. Виходили при цьому з того, що різні постійні ґратки продукують деформації, які, у свою чергу призводять до появи проростаючих дислокацій для зняття цих деформацій, і які негативно впливають на рухливість носіїв заряду у КЯ. Водночас, подальша мініатюризація складних інтегральних схем (побудованих на підставі кремнію – основного матеріалу сучасної електроніки) потребувала високої рухливості електронів і це, до речі, призвело до появи концепції модуляційного легування КЯ [28–30]. Іншим шляхом збільшення рухливості стало, як це не дивно, саме використання напружених кремнієвих сполук [31–34]. Справа в тому, що з розвитком технологій вирощування вдалося отримати напружені КЯ при умові, що товщина такої плівки не буде перевищувати так звану критичну [35,36]. На рисунку 1.13, взятому з роботи [36] показано теоретичну залежність критичної товщини від процентної долі германію у SiGe-підкладці.

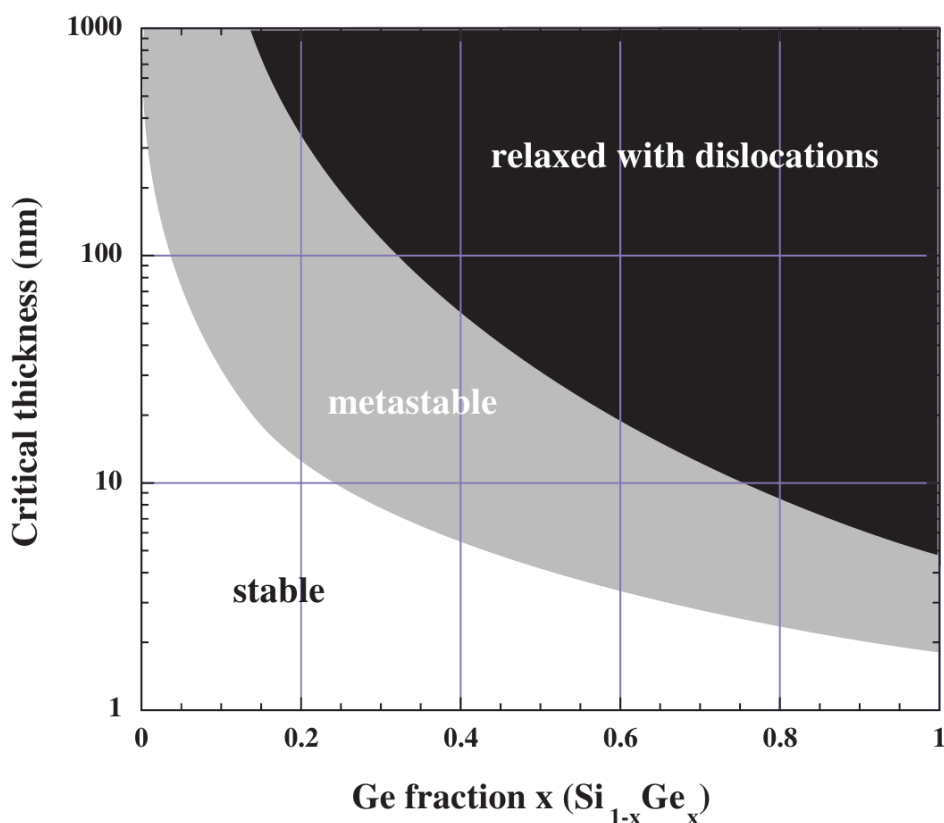


Рисунок 1.13 – Залежність критичної товщини від долі германію, рисунок 4 роботи [36]

Водночас, у роботі [36] зазначається, що експериментальні значення критичної товщини, отримані різними авторами, значно перевищують теоретичні передбачення. З урахуванням останнього, максимальна товщина напруженого активного шару (ширина КЯ) в даній роботі вибрана такою, що не перевищує 20 нм.

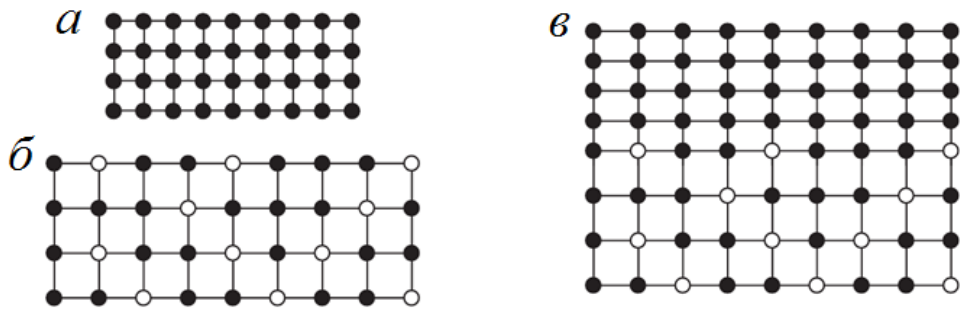
1.3.2 Розщеплення Δ -мінімумів у зоні провідності кремнію

Напружені структури мають ряд переваг перед ненапруженим кремнієм. По перше, такі структури розширюють перелік кремнієвих матеріалів для використання, і, по друге, внаслідок розщеплення вироджених енергетичних рівнів у активному (напруженому) матеріалі дають додаткові можливості у конструюванні оптоелектронних приладів. Оскільки матеріалом досліджень даної роботи є напружені кремнієві КЯ на підкладці з кремній-германію, то видається доречним зупинитися більш детально на зміні зонної структури напруженого кремнію. Добре відомо, що постійна ґратки кремнію складає 0.5431 нм, а германію – 0.5657 нм, на 4.2 % більше. Стала сплаву $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ обчислюється за формулою [37]:

$$a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 0.5431 + 0.011992x + 0.0002744x^2 \quad (1.3)$$

Для досліджуваної у цій роботі структури $x=0.2^4$, і таким чином постійна ґратки підкладки з $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ складає 0.5455 нм. На рисунку 1.14 показано схематичне зображення об'ємних кремнію – *a*), кремній-германію – *б*), і плівки кремнію на поверхні кремній-германієвої підкладки – *в*) [36]. Видно, що кремнієва КЯ розтягнута у площині (x,y) , перпендикулярній до напрямку вирощування структури – *z*. Це призводить до важливих наслідків у зонній структурі кремнію.

⁴ Про вибір $x=0.2$ див. розділ 2



а – ненапруженої кремнієвої ґратки (КЯ), б – кремній-германієвої підкладки, в) – кремній-германієвої плівки, вирощеної на кремній-германієвій підкладці, рисунок 3 роботи [36]

Рисунок 1.14 – Схематичне зображення

Спрощена⁵ схема зонної структури недеформованого кремнію показано на рисунку 1.15, а. Відомо що мінімуми енергії у зоні провідності лежать на відстані $0.85\pi/a$ від центру зони Брілюена у напрямі $[100]$ – так звані Δ мінімуми. Усього, таким чином є 6 еквівалентних мінімумів або долин, поверхнями постійної енергії яких є еліпсоїди обертання, показані на рисунку 1.15, б.

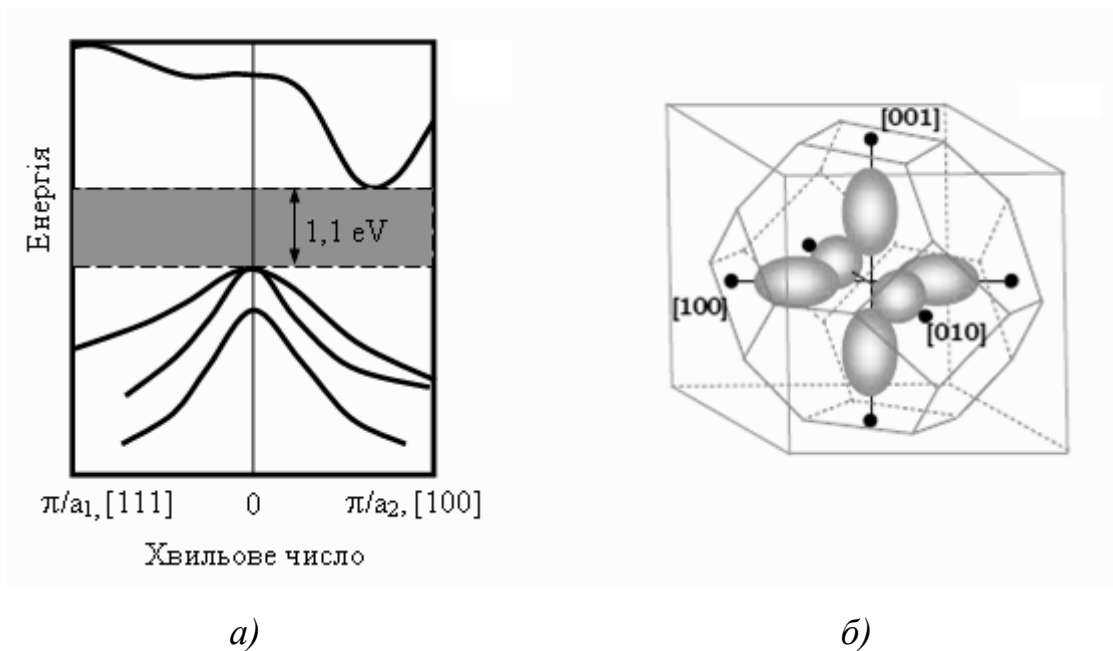


Рисунок 1.15 – Спрощена зонна структура кремнію (схематично) – а), еліпсоїди постійної енергії – б) [23]

⁵ Спрощена у тому сенсі, що тут показано тільки закон дисперсії для нижньої підзони у зоні провідності

Іншими словами, маємо шестикратне виродження мінімуму енергії. Той факт, що структура є напруженою, призводить до того, що долини опиняються у різному становищі з точки зору механічних напружень, як це показано на рисунку 1.16, узятому з інтернету.

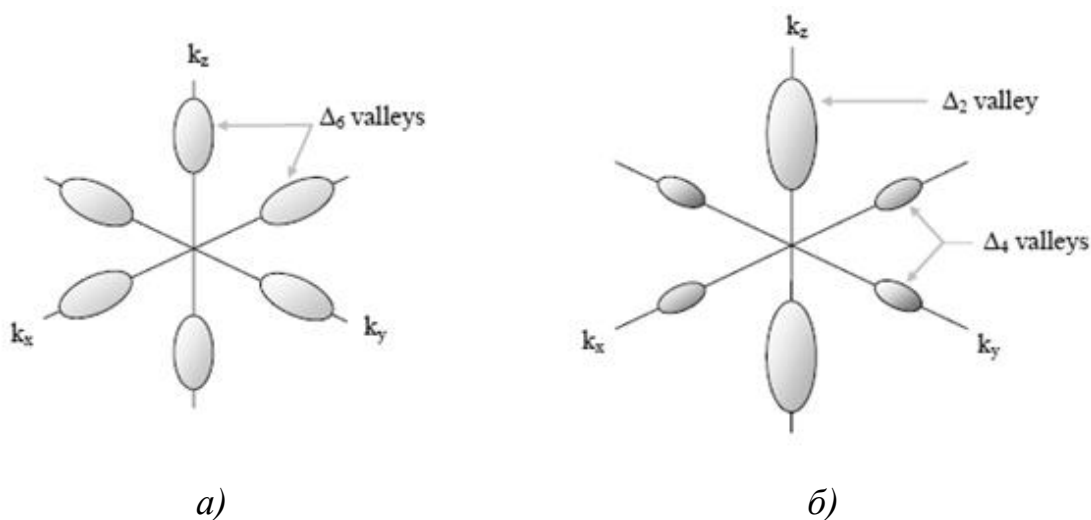


Рисунок 1.16 – Еквівалентні долини у зоні провідності кремнію у рівноважних умовах – а) та за наявності розтягуючих напружень у площині КЯ – б)

Тут ліворуч показані усі еквівалентні долини, а праворуч, – ситуація з наявністю розтягуючих напружень у площині КЯ, що відповідає ситуації зображеній на рис. 1.14, в). З цього рисунку видно, що чотири і дві долини опиняються у різних умовах. Це призводить до розщеплення шестикратно виродженого мінімуму енергії на двократно і чотирикратно виродження долин. Двократно вироджені долини опускаються вниз по шкалі енергій, а чотирикратно вироджені долини збільшують свою енергію. Величина розщеплення визначається як:

$$\Delta E_C^\Delta = \begin{cases} +\frac{2}{3}\Xi_u^\Delta(\varepsilon_\perp - \varepsilon_\parallel), & \text{для } \Delta_2; \\ -\frac{1}{3}\Xi_u^\Delta(\varepsilon_\perp - \varepsilon_\parallel), & \text{для } \Delta_4. \end{cases} \quad (1.4)$$

де Ξ_u^Δ – деформаційний потенціал для Δ -мінімуму, теоретичне значення якого, за даними різних авторів складає від 9.29 еВ до 10.5 еВ,

а експериментальне значення (8.6 ± 0.4) еВ [26]; ε_{\perp} , ε_{\parallel} – компоненти тензора деформації, $\varepsilon_{\parallel} = (a_{\parallel} - a_{Si})/a_{Si}$, $\varepsilon_{\perp} = (a_{\perp} - a_{Si})/a_{Si}$, a_{\parallel} і a_{\perp} – ϵ постійними решітки кремнію у площині і перпендикулярно шару кремнію, відповідно. Для досліджуваних умов $a_{\parallel} = a_{SiGe}$, (слід нагадати, що частка германію складає 20%) а a_{\perp} пов'язано з a_{\parallel} співвідношенням [39]:

$$a_{\perp} = a_{Si} \left[1 - 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \left(\frac{a_{\parallel}}{a_{Si}} - 1 \right) \right]. \quad (1.5)$$

де C_{12} та C_{11} – пружні константи для кремнію, які дорівнюють відповідно 6.5×10^6 Н/см² та 16.75×10^6 Н/см². Розрахунок розщеплення Δ -мінімумів, зроблений на підставі формул (1.4), (1.5) дають величину 120 меВ, що знаходиться у відповідності до результатів, представлених у роботі [38] і показаних на рисунку 1.17, взятому з цієї ж роботи. Слід зазначити, що приблизно таке ж розщеплення для $y=0.2$ наводиться у роботі [40], але в ній воно приведено у незручній формі, і тому тут не подано.

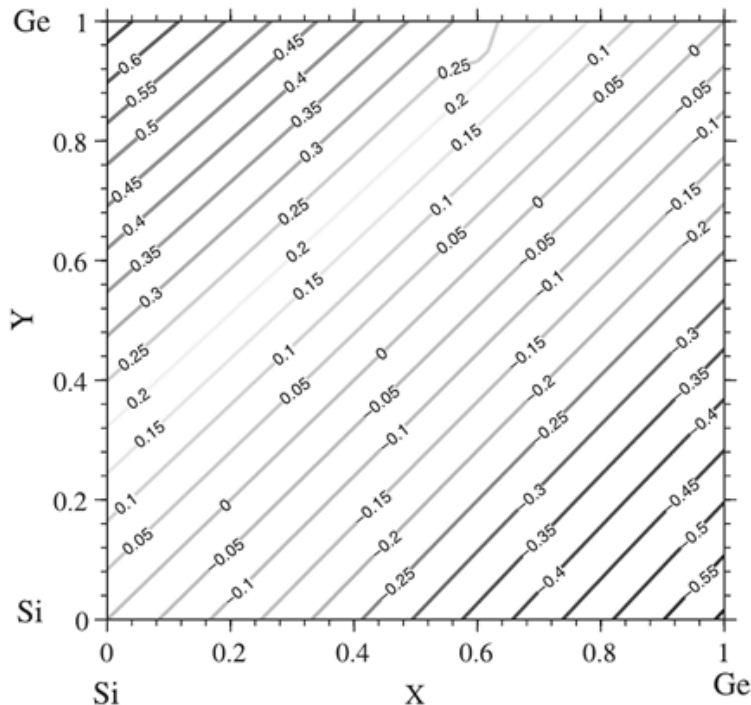


Рисунок 1.17 – Розщеплення Δ -мінімумів активного шару $Si_{1-x}Ge_x$ на підкладці релаксованого $Si_{1-y}Ge_y$, рисунок 8 роботи [38]

1.3.3 Розрив зон провідності кремнієвої квантової ями і кремній-германієвої матриці

Як вже зазначалось раніше, для наших розрахунків використовувалися параметри кремнію і кремній-германію, наведені у роботі Рієгера і Вогла [40]. На рисунку 1.18 показано розриви зон провідності (глибина КЯ) для різних наборів матеріалів.

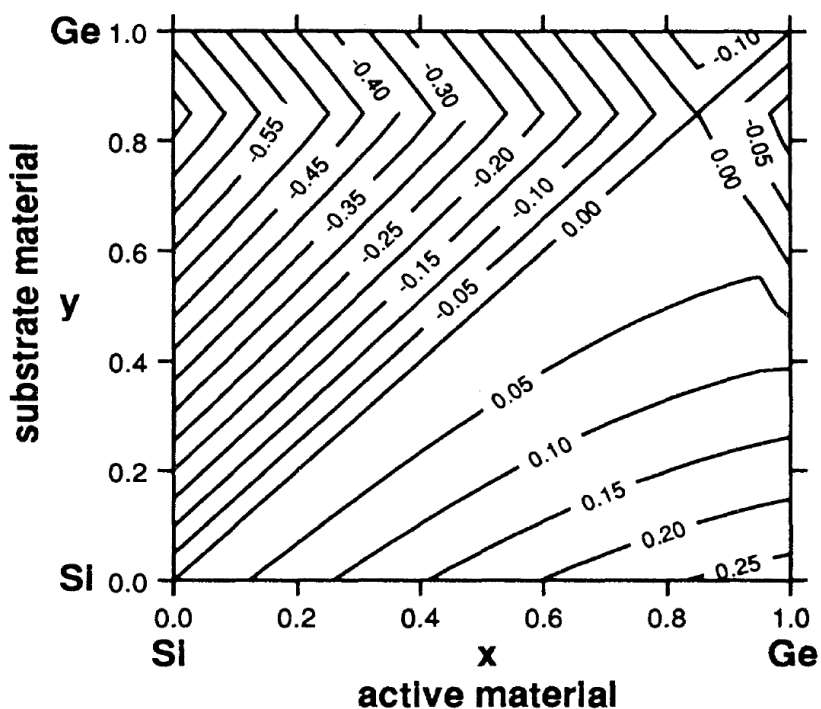


Рисунок 1.18 – Розриви зон провідності (conduction band offsets) матеріалів КЯ (active material) і підкладки (substrate material), рисунок 7 роботи [40]

Цифри на кожній з прямих у лівій верхній половині рисунку вказують ці розриви в еВ. Випадку, який розглядається в даній роботі відповідають значення $x = 0$ і $y = 0.2$. Про вибір цих параметрів сказано в пункті 2. З рисунку видно, що глибина КЯ з кремнію на підкладці з $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ складає 200 меВ. Саме таке значення було використано у розрахунках. Але виявляється доречним тут згадати, що у літературі [36,38] існують і інші значення глибини КЯ при таких x і y . Дискусія на цю тему буде нижче, у наступному розділі.

1.3.4 Висновки

Використання напружених КЯ дає досліднику (інженеру) нові, додаткові важелі для впливу на їхню структуру енергетичних рівнів. Такими важелями є склад активного матеріалу (квантової ями) і підкладки (бар'єрів). Змінюючи склад, можна отримати бажані розщеплення як підзон (долин) у зоні провідності, як це показано вище, так і розщеплення валентних підзон, якщо використовувати квантові ями *p*-типу. Разом з можливостями просторового квантування це надає проектувальнику оптоелектронних приладів можливість замовити технологам будь-яку структуру енергетичних рівнів. Разом з тим, необхідно зазначити, що на вже виготовлених структурах змінити цю структуру рівнів залишається надзвичайно важкою задачею. І саме цій можливості присвячено наступні розділи.

РОЗДІЛ 2

МАТЕРІАЛИ КВАНТОВОЇ ЯМИ ТА МЕТОДИКА РОЗРАХУНКІВ

У попередньому розділі було показано переваги у використанні КЯ у порівнянні з об'ємними матеріалами. А саме, у КЯ, змінюючи склад матеріалів ями і бар'єрів, можна отримати будь-яку структуру рівнів. Але у вже виготовленій КЯ змінити цю структуру рівнів було практично неможливо. Саме тому у цій роботі ми робимо спробу обійти цю неможливість. Значною мірою, особливо на першому етапі, це залежить від вдалого вибору матеріалу ями. Чому і присвячено цей розділ. Він має наступну структуру. У першій частині описується вибір структур, що досліджуються, та обґрунтовується перевага матеріалів КЯ, вибраних для розрахунків, в порівнянні з іншими матеріалами. Також тут детально розглядаються параметри обраної структури, та обмеження і наближення, які використовуються під час розрахунків. У другій частині розділу детально описаний метод розрахунку.

2.1 Параметри квантової ями

Усі розрахунки, описані в цій роботі, зроблені для $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ n-типу шириною 5, 10 та 20 нм. КЯ дельта-легована фосфором в центр або край, з нескінченно довгими бар'єрами з обох сторін КЯ. Досліджувались випадки ширин дельта-шару 1, 2, 3 нм. Також вивчалися та порівнювалися між собою однорідний та гаусівський розподіли домішок вздовж ширини дельта-шару. Передбачається, що структура вирощена в [001] кристалографічному напрямку, який зазвичай позначається як вісь z [41,42].

Вибір відсоткового вмісту матеріалів в бар'єрах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x=0,2$) був зроблений спираючись на наступні міркування. Збільшення вмісту германію призведе до підвищення внутрішнього напруження КЯ, а відповідно до збільшення дислокацій. Крім того, з рисунку 1.13 виходить, що зменшується критичне значення товщини напруженого активного шару (КЯ), звужуючи тим самим діапазон для маніпуляції параметрами структури. З іншого боку, менший вміст германію SiGe-сполуки призводить до зменшення глибини КЯ (див. рис. 1.18). У свою чергу при високих температурах це може привести до викиду електронів з КЯ у бар'єри. Однак, на даному етапі, коли головною метою є дослідити вплив іонізації дельта-шару на перерозподіл електронів між новими рівнями просторового квантування, необхідно звести всі побічні явища (як зазначений викид електронів) до мінімуму. Таким чином, значення $x=0,2$ є розумним компромісом при урахуванні перерахованих фактів. На користь такого вибору також слугує той факт, що аналогічна структура використовувалась для теоретичного дослідження механізму внутрішньоцентрової інверсії в роботі [7]. Це дає можливість порівняння деяких з отриманих результатів цієї роботи для перевірки наших результатів, коли це можливо (більш детально про це йдеться в підрозділі 3.1, коли аналізуються отримані результати). Ще одним важливим фактом, що пов'язаний з вибором структури є те, що енергія зв'язку фосфору (без урахування хімічного зсуву) для цієї КЯ, легованої в центр при температурі $T = 4\text{K}$ складає 29meV [7] і це приблизно в два рази більше, у порівнянні з випадком КЯ легованої в край при тій же температурі. В об'ємному Si, у якому ЕЗД також дорівнює 29meV (знову без урахування хімічного зсуву), більшість домішок іонізовані при $T = 300\text{K}$, що означає, що ПХ і, відповідно, ЕЗД будуть помітно змінюватися в температурному діапазоні $4 \dots 77 \dots 300\text{K}$, який є найбільш цікавим у фізиці напівпровідників. Наслідком цього, як вже говорилося, буде і новий набір енергетичних рівнів просторового квантування з новим енергетичним зазором між ними. Нагадаємо ще раз, що під рівнем просторового квантування мається на увазі дно відповідної підзони в КЯ.

2.1.1 Концентрація дельта-шару домішок

Важливим питанням у представлених розрахунках є концентрація фосфору у дельта-шарі. З одного боку, щоб отримати максимальний вплив на енергетичний профіль початкової, прямокутної КЯ (при $T = 4$ К), ПХ повинен бути якомога більший, що потребує високої концентрації іонізованих донорів N_D^+ , а отже і наявності вільних електронів n_f у енергетичних підзонах. З іншого боку, концентрація повинна бути відносно невеликою для того, щоб можна було розглядати домішки як ізолювані, тому що тільки в цьому випадку можна простежити зміни ПХ іонізацією домішок. Іншими словами, у вирішенні поставленої задачі, концентрація домішок повинна бути менше критичного значення N_M для переходу Мотта метал-діелектрик. N_M може бути оцінена із співвідношення, взятого з роботи [43]:

$$a_B N_M^{1/2} \approx 0.37 \quad (2.1)$$

(для вибраних матеріалів $a_B \cong 2$ нм, див. нижче) і дорівнює $3.4 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. У різних публікаціях наводяться різні величини констант у співвідношенні (2.1). Ми вибрали найбільш близьке до середньої величини. Таким чином, і щоб напевне бути на напівпровідниковій стороні переходу Мотта, повну концентрацію донорів було взято $N_D = 0.6, 1.2, 2.4 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

Тут слід зазначити, що малий борівський радіус, що, як видно із співвідношення (2.1), збільшує критичну величину N_M , також слугує на користь вибраної SiGe/Si/SiGe КЯ у порівнянні, наприклад, з КЯ A_3B_5 , такою як AlGaAs/GaAs/AlGaAs. Для $a_B \cong 10$ нм (для матеріалу GaAs) отримуємо критичне значення $N_M = 0.14 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Тобто робочій діапазон значно звужується, а отже і очікувані ефекти будуть помітно менш вираженими.

Також слід зазначити, що багато різних досліджень, присвячених структурам які містять дельта-шар домішок, представлено в літературі. Але слід зауважити, що в усіх них концентрація домішок є настільки великою, що хвости густини станів знаходяться в забороненій зоні і тому всі домішки можна вважати іонізованими. Як приклад можна згадати роботу [44].

2.1.2 Вплив внутрішнього напруження структур

Також потрібно сказати про значення ефективної маси електронів та борівського радіусу, що використовуються в оцінках і розрахунках. Ці значення знаходяться в тісному зв'язку з тим фактом, що кремнієва КЯ повинна бути напруженою через невідповідність постійної ґратки між матеріалами ями та бар'єрів (про що вже згадувалось у п. 1.3.2), що може розглядатися як еквівалентне одноосьове розтягування, вздовж напрямку росту структури. Відомо [45], що одноосьове розтягування уздовж [001] кристалографічного напрямку зсуває долини виродження зони провідності в Si. Це означає, що дві долини опустяться вниз, а чотири інші піднімуться за шкалою енергій і для вибраного складу розрив між ними становитиме близько 100 меВ [45]. Це позначається в розрахунках такими фактами: транспортна ефективна маса $m_{\parallel} = 0.19m_0$ (m_0 є маса вільного електрона) і ефективна маса густини станів $m^* = 2(m_{\parallel}^2 m_{\perp})^{1/3}$, де 2 – кількість найнижчих долин, а $m_{\perp} = 0.92m_0$. Тут m_{\perp} – ефективна маса електрона, в напрямку, перпендикулярному до площини КЯ (тобто в напрямку росту структури), що відповідає поздовжній ефективній масі в об'ємному Si; m_{\parallel} – ефективна маса в площині КЯ, що відповідає поперечній ефективній масі в об'ємному Si. Відповідно, борівський радіус $a_B = a_0 \frac{\varepsilon \times m_0}{m^*} \cong \cong 2 \times 10^{-9}$ м, де $a_0 = 5.29 \times 10^{-11}$ м – борівський радіус атома водню та $\varepsilon = 11.7$ – діелектрична проникність Si. Також, як і в роботі [7], було

знехтувано невеликою різницею у значеннях паралельної ефективної маси та діелектричної проникності для матеріалів бар'єру та КЯ. Так само передбачається, що енергетичні підзони є ізотропними та параболічними в площині КЯ [7], що дозволяє використовувати наближення ефективної маси.

2.1.3 Нехтування обмінно-кореляційною взаємодією

У наведених розрахунках, не враховано наявність фонових домішок у бар'єрах, тобто, концентрації вільних електронів n_f у всіх зайнятих енергетичних підзонах дорівнює концентрації іонізованих домішок: $n_f = N_D^+$. З порівняння середньої відстані між вільними електронами ($d_f = d^+ \approx 11$ нм) і довжини хвилі де Бройля ($\lambda \approx 25$ нм, $\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{m_{\parallel} k_B T}}$, де h – константа Планка і k_B – константа Больцмана) видно, що для вільного електрону при температурі $T=300$ К, умова $d_f > \lambda$ не виконується, що дозволило би ігнорувати багатоелектронні явища. Аналогічно при $T = 77$ К: $\lambda \approx 49$ нм $>$ $d_f = 18$ нм. Це означає, що, в принципі, в гамільтоніані повинен бути член V_{XC} , відповідальний за обмінно-кореляційну взаємодію. Однак, аналізуючи дані інших авторів, які цілеспрямовано вивчали цей ефект, можна зробити висновок, що її урахування призводить до зниження енергетичних підзон і рівня Фермі в КЯ [1]. І що є важливим, результати цієї роботи, збігаються чисельно досить добре з результатами, представленими в даній роботі. Тобто, користуючись даними цих робіт, можна зробити висновок, що для вибраних параметрів ці значення нехтувано малі – близько 0.25 меВ для $T=300$ К і менше 0.1 меВ для $T = 77$ К. Таким чином, ці оцінки дозволяють опустити вплив обмінно-кореляційної взаємодії в представлених розрахунках.

2.1.4 Про випадковий розподіл домішок

Випадковий розподіл домішок створює флуктуаційний потенціал, який також, в принципі, повинен бути врахованим в гамільтониані. У роботі [46] було показано, що існує максимальний розмір області r_S , для якого флуктуаційний потенціал не може бути екранований. У поданому випадку кількість вільних електронів дорівнює кількості іонізованих домішок, і це означає, що $r_S = d^+$ [46], і, що більш важливо, відстань між іонізованими домішками d^+ (а, отже й r_S) менше, ніж довжина хвилі де Бройля λ як для кімнатної температури так і для температури рідкого азоту: $d^+ < \lambda$. Як показано в роботі [1] – ця умова дозволяє вільному електрону на рівні не “відчувати” флуктуаційний потенціал, і тому потенціал Хартрі буде розглядатися постійним в площині КЯ. Для вільного електрону реальний розподіл домішок є неважливим, якщо поширення хвильової функції домішки більше, ніж ширина дельта шару, тобто $1.3a_B > \delta$. Для ширини шару $\delta = 1,2$ нм, ця умова виконується, для $\delta = 3$ нм – не виконується. Але для того, щоб побачити тенденцію були зроблені розрахунки і для цієї ширини дельта-шару.

2.1.5 Інші зауваження

Слідуючи роботі [7], було знехтувано невеликою різницею в діелектричній проникності для матеріалів бар'єрів та ями і припущено, що енергетичні підзони є ізотропними і параболічними в площині КЯ. Також не було взято до уваги невеликі температурні зміни ефективної маси, діелектричної проникності і глибини КЯ. (Слід зауважити, що нехтування навіть невеликими температурними змінами цих параметрів наближає отримані результати до тих, які можна отримати за допомогою електричного поля замість температури в якості фактора, що регулює іонізацію домішок).

Після описаних вище зауважень, гамільтоніан задачі стає достатньо спрощеним і положення енергетичних підзон, а також ЕЗД для різних температур можуть бути знайдені з самоузгодженого розв'язання рівнянь Шрьодінгера, Пуасона, і електронейтральності. Для знаходження енергії іонізації домішок був використаний метод, розроблений Вінтером [47]. Такий підхід дозволяє розрахувати як основний, так і збуджені енергетичні стани домішки [84–86]. Але, оскільки наш інтерес полягає в пошуку енергетичних рівнів розмірного квантування, які залежать від ступеня іонізації домішок, увагу сконцентровано на розрахунку тільки основного стану домішки.

2.2 Метод розрахунку

Як було сказано вище, в даній роботі представлені результати для двох позицій дельта-легування: в центр та в край. У випадку дельта-легування в центр обчислення значно спрощуються зважаючи на те, що гетероструктура має симетричний вигляд. Тому в цьому підрозділі представлений метод розрахунку для КЯ, дельта-легованої в край а, там де будуть виникати суттєві відмінності в порівнянні з випадком легування в центр, будуть представлені додаткові обґрунтування.

Для розрахунку енергетичного профілю $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ був використаний метод самоузгодженого чисельного розрахунку рівнянь Шрьодінгера і Пуасона та рівняння електронейтральності. Далі отримані результати використовувались для розрахунку енергії зв'язку домішок дельта-шару. Весь цикл обчислень виконаний у вигляді ітераційної процедури, яку можна представити блок-схемою представленою на рисунку 2.1.

На першому кроці ітерацій енергетичний профіль КЯ приймався прямокутним:

$$V(z) = \begin{cases} U, & z \geq \left| \frac{L}{2} \right| \\ 0, & z \leq \left| \frac{L}{2} \right| \end{cases}, \quad (2.2)$$

де $U = 200$ меВ – розрив зони провідності для матеріалів КЯ та бар'єру (п. 1.3.3), L – ширина КЯ. Починаючи з другого кроку енергетичний профіль КЯ модифікується за рахунок додавання ПХ (електростатичного потенціалу), що створюється вільними електронами та іонізованими донорами дельта-шару.

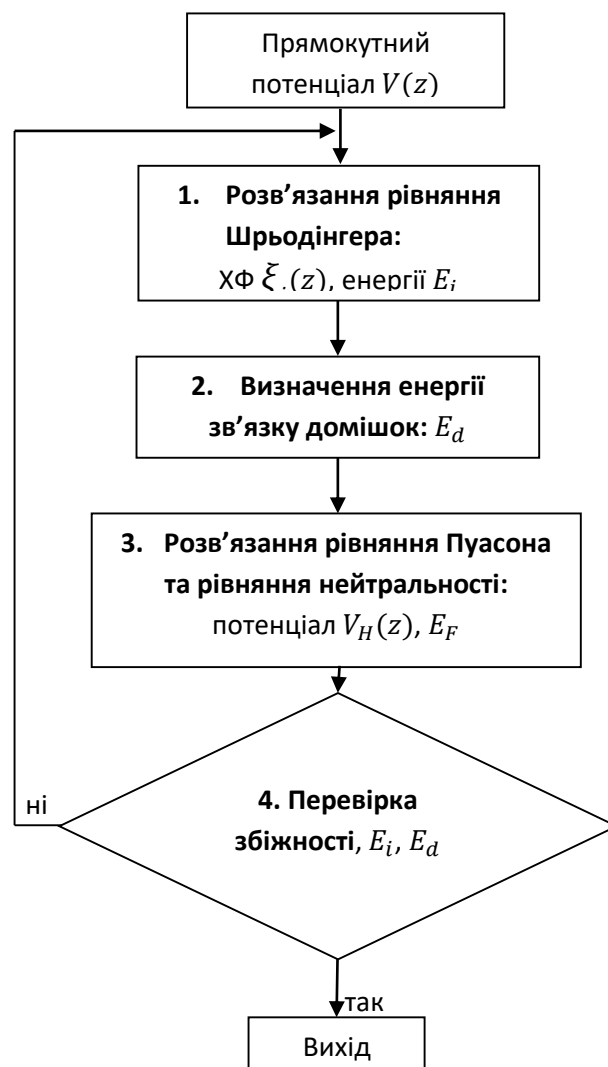


Рисунок 2.1 – Блок-схема розрахунків

2.2.1 Знаходження енергетичних рівнів просторового квантування та їх хвильових функцій

Енергетичні рівні E_i та їх хвильові функції $\xi_i(z)$ є обмеженими в z -напрямку та визначаються як власні значення та власні функції одновимірного гамільтоніану:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + V_H(z), \quad (2.3)$$

де m_{\perp} – ефективна маса в напрямку, перпендикулярному до площини КЯ; $V(z)$ – потенціал прямокутної КЯ, визначений виразом (2.2); $V_H(z)$ – потенціал Хартрі (на першому кроці $V_H(z) \equiv 0$).

Відповідне рівняння Шрьодінгера записується у вигляді

$$H_0 \xi_i(z) = E_i \xi_i(z) \quad (2.4)$$

Розв'язки даного рівняння знаходяться методом стрільби [2]. Перепишемо рівняння (2.4) у вигляді

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(z) + V_H(z) \right] \xi_i(z) = E_i \xi_i(z). \quad (2.5)$$

де E_i – енергія i -го рівня просторового квантування; $\xi_i(z)$ – хвильова функція цього рівня.

Рівняння (2.5) розв'язувалося чисельно, як процедура від E , мінімальне значення якої відповідало дну КЯ на першій ітерації та мінімуму потенціалу Хартрі (мінімуму складної КЯ), починаючи з другої ітерації. Максимальне – дорівнювало U (рис. 2.2).

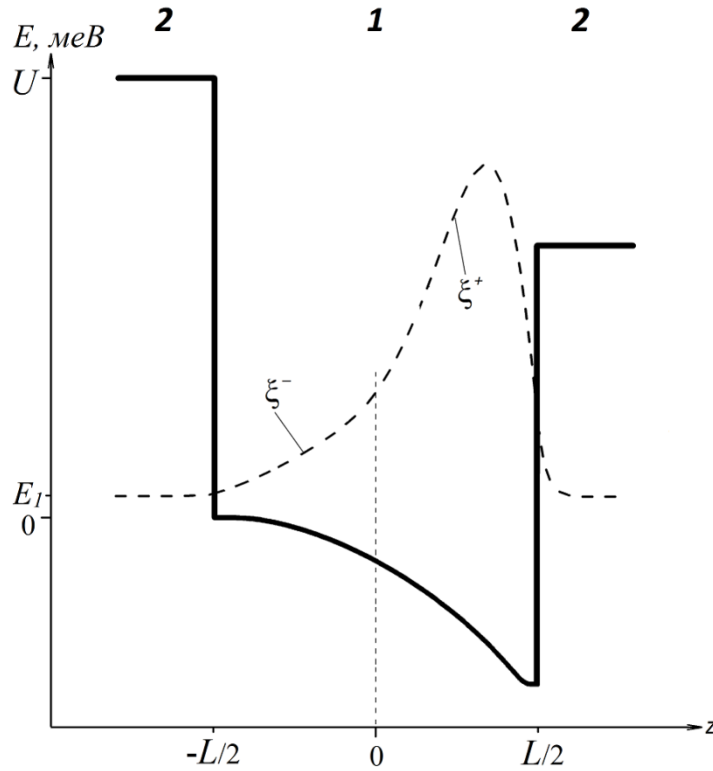


Рисунок 2.2 – Енергетичний профіль КЯ – суцільна лінія. Хвильова функція першого рівня розмірного квантування (E_1). Область 1 – Si-КЯ, шириною L , області 2 – SiGe-бар’єри; ξ^- , ξ^+ – розв’язки рівнянь (2.6), (2.7) відповідно. Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

Для кожного значення E чисельно розв’язувалось два рівняння з відповідними граничними умовами:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{\partial^2 \xi^-(z)}{\partial z^2} + (V(z) + V_H(z) - E)\xi^-(z) = 0, \quad (2.6)$$

$$\xi^-(z_1) = 0, \quad \left. \frac{\partial \xi^-(z)}{\partial z} \right|_{z=z_1} = 0;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{\partial^2 \xi^+(z)}{\partial z^2} + (V(z) + V_H(z) - E)\xi^+(z) = 0, \quad (2.7)$$

$$\xi^+(z_2) = 0, \quad \left. \frac{\partial \xi^+(z)}{\partial z} \right|_{z=z_2} = 0;$$

У рівняннях (2.6), (2.7) $z_1 = -L$, $z_2 = L$. Тут звичайно ми повинні були б взяти $z_1 = -\infty$, $z_2 = +\infty$. Але розрахунок показує, що беручи розрахунковий проміжок шириною $2L$ і збільшуючи його, ніяких змін в розв'язках не спостерігається, оскільки в цих межах $\xi_i(z)$ практично не відрізняється від 0. Тому проміжок шириною $2L$ є цілком достатній для отримання коректних результатів.

Для кожного E фіксувались розв'язки рівнянь (2.6) і (2.7) в точці $z = 0$: $\xi^-(0)$ і $\xi^+(0)$ та їх перші похідні: $\left. \frac{\partial \xi^-(z)}{\partial z} \right|_{z=0}$ і $\left. \frac{\partial \xi^+(z)}{\partial z} \right|_{z=0}$, та знаходився вронскіан:

$$W = \xi_1^-(0) \left. \frac{\partial \xi_1^+(z)}{\partial z} \right|_{z=0} - \xi_1^+(0) \left. \frac{\partial \xi_1^-(z)}{\partial z} \right|_{z=0} \quad (2.8)$$

Значення енергії, при яких $W = 0$ і є розв'язками рівняння (2.5).

2.2.2 Розрахунок енергії зв'язку домішок

Енергію зв'язку домішок дельта-шару можна знайти шляхом включення до моделі, що описується гамільтоніаном (2.4), кулонівського потенціалу іонізованого атому домішки. Використовуючи симетричність задачі, зручно перейти до циліндричних координат r, θ, z , як запропоновано в роботі [47]. Повна хвильова функція має вигляд

$$\Psi(R, \theta, z) \equiv \exp(im\theta) \psi_m(R, z), \quad (2.9)$$

де $i = \sqrt{-1}$, m – азимутальне квантове число.

Для того щоб знайти $\psi(R, z)$ треба розділити гамільтоніан на дві частини:

$$H = H_0 + H_1, \quad (2.10)$$

де H_0 залежить тільки від координати z (рівняння 2.3, 2.4). У свою чергу H_1 включає в себе всі інші координати, причому в кулонівському члені вони є нероздільними:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{R^2 + (z - z_D)^2}}, \quad (2.11)$$

де m_{\parallel} – поздовжня (в площині КЯ) ефективна маса, z_D – позиція домішкового центру. Далі розкладемо невідому ХФ повного гамільтоніану (2.10) в ряд власних хвильових функцій $\xi_j(z)$ гамільтоніану H_0 :

$$\Psi(R, \theta, z) \equiv \exp(im\theta) \sum_j f_j^m(R, z) \xi_j(z) \quad (2.12)$$

де m – азимутальне квантове число, i – уявна одиниця. Вставимо вираз (2.12) в рівняння Шрьодінгера з повним гамільтоніаном:

$$\left[H_0 - \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{R^2 + (z - z_D)^2}} \right] \Psi(R, \theta, z) = E\Psi(R, \theta, z). \quad (2.13)$$

Диференціюючи рівняння (2.13) по θ і помножуючи на $\xi_N^*(z)$, ($N = 0, 1, 2, \dots$) та інтегруючи по z , приходимо до рівняння:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{d}{dR} + \left(k_N^2 - \frac{m^2}{R^2} \right) \right] f_N^m(R) = U_{Nn}(R) f_n^m, \quad (2.14)$$

де $U_{Nn}(R) = \frac{2m_{\parallel}}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \xi_N^*(R) \frac{e^2}{\sqrt{R^2 + (z - z_D)^2}} \xi_n(z) dz$, $k_N^2 = \frac{2m_{\parallel}}{\hbar^2} (E - E_N)$,

E_N ($N = 1, 2, 3, \dots$) – енергетичні рівні розмірного квантування.

Якщо права частина рівняння (2.14) дорівнює нулю (без кулонівського члену), то воно має вигляд рівняння Бесселя цілого порядку m , та дозволена хвильова функція може бути отримана тільки для $E > E_N$. Тоді загальний розв'язок буде сума функцій Бесселя першого (J) та другого (N) роду:

$$f_N^m(R) = C_N J_m(k_N R) + S_N N_m(k_N R), \quad (2.15)$$

де C_N та S_N – деякі сталі. Завдяки тому, що функція Бесселя другого роду має сингулярність при нульовій координаті, то коефіцієнт S_N також повинен дорівнювати нулю, відповідно:

$$\Psi(R, \theta, z) = C_N \exp(im\theta) J_m(k_N R) \xi_N(z). \quad (2.16)$$

Але наша задача знайти розв'язки для $E < E_N$ (це означає, що $k_N^2 < 0$) повного рівняння (2.14). В цьому випадку замість (2.14) маємо:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{d}{dR} - \left(k_N^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) \right] f_N(R) = \sum_n U_{Nn}(R) f_n. \quad (2.17)$$

Розв'язки даного рівняння будемо знаходити використовуючи функцію Гріна [89], яка буде розв'язком рівняння

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{d}{dR} - \left(k_N^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) \right] G_N(R, R', E) = \frac{1}{R} \delta(R - R'). \quad (2.18)$$

І у відповідності до виразів (2.13) та (2.14):

$$G_N(R, R', E) = \begin{cases} -K_m(k_N R') I_m(k_N R), & R < R' \\ -I_m(k_N R') K_m(k_N R), & R > R' \end{cases} \quad (2.19)$$

де K_m та I_m – модифіковані функції Бесселя. Таким чином, за визначенням функції Гріна:

$$\begin{aligned}
f_N(R) &= \\
&= \int_0^{\infty} R' dR' G_N(R, R', E) \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R') = \\
&= -K_m(k_N R) \int_0^R R' dR' I_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R') - \\
&- I_m(k_N R) \int_R^{\infty} R' dR' K_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R').
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Останнє рівняння можна переписати в більш зручному вигляді, подібно (2.15):

$$f_N(R) = C_N J_m(k_N R) + S_N N_m(k_N R), \tag{2.21}$$

де

$$\begin{aligned}
C_N(R) &= - \int_R^{\infty} R' dR' K_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R'), \\
S_N(R) &= - \int_0^R R' dR' I_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R').
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Диференціюючи (2.22) по змінній верхній границі (по параметру R), отримаємо:

$$\begin{aligned}
\frac{dC_N}{dR} &= R K_m(k_N R) \sum_n U_{Nn}(R) f_n(R), \\
\frac{dS_N}{dR} &= -R I_m(k_N R) \sum_n U_{Nn}(R) f_n(R).
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Підставляючи (2.21) у (2.23), маємо:

$$\begin{aligned}
\frac{dC_N}{dR} &= R K_m(k_N R) \sum_n U_{Nn}(R) [C_n(R) I_m(k_n R) + S_n(R) K_m(k_n R)], \\
\frac{dS_N}{dR} &= -R I_m(k_N R) \sum_n U_{Nn}(R) [C_n(R) I_m(k_n R) + S_n(R) K_m(k_n R)].
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Ця система неперервних диференціальних рівнянь може бути розв’язана чисельно методом Рунге – Кутти. Є ряд необхідних припущень, які приймаються для розв’язання даної системи рівнянь:

- кількість рівнянь системи повинна бути скінченною, це означає, що кількість рівнів розмірного квантування які беруться для розрахунку, повинна бути скорочена (в представлених розрахунках використовуються 7 рівнів);

- діапазон інтегрування по R обмежений деяким значенням R_{max} взятий із загальних міркувань – хвильова функція при R_{max} повинна бути нехтовно малою (в представлених розрахунках використовуються $R_{max} = 6a_B$);

- повинно бути вибране деяке початкове значення для $C_N(R)$ та $S_N(R)$. Враховуючи властивості модифікованих функцій Бесселя, можна взяти граничні умови: $C_N(\infty) = S_N(R_{max}) = S_N(0) = 0$, та $C_N(0) = S_N(R_{max}) = \delta_{Nn}$. Ці граничні умови як для $R = 0$, так і для $R = R_{max}$ тільки доповнюють дискретний ряд E . Для знаходження таких значень, використовується метод стрільби. Він полягає в тому, що вибравши деяке проміжне значення R_0 ($0 < R_0 < R_{max}$) та інтегруючи для всіх n від 0 до R_0 , розраховуються $C_{Nn}(R_{0-})$ та $S_{Nn}(R_{0-})$. Аналогічно, інтегруючи для всіх n від R_0 до R_{max} , розраховуються $C_{Nn}(R_{0+})$ та $S_{Nn}(R_{0+})$. Величина R_0 була вибрана, як $R_0 = 3a_B$. Далі, оскільки функції є неперервними, кожне з отриманих значень зі знаком “-” повинно бути рівним кожному відповідному значенню зі знаком “+”. Як в роботі [47], це можна записати:

$$\begin{aligned} \sum_n C_{Nn}(R_{0-})C_n(0) &= \sum_n C_{Nn}(R_{0+})S_n(R_{max}), \\ \sum_n S_{Nn}(R_{0-})C_n(0) &= \sum_n S_{Nn}(R_{0+})S_n(R_{max}). \end{aligned} \tag{2.25}$$

Система (2.25) є системою алгебраїчних лінійних рівнянь з невідомими змінними $C_N(0)$ та $S_N(R_{max})$. Умовою її розв’язку буде рівність нулю відповідного визначника (що є функцією енергії).

У поданому випадку маємо визначник матриці 14x14 (при урахуванні 7 рівнів розмірного квантування). Це достатня величина, для забезпечення прийнятної точності в розрахунках ЕЗД: різниця між їх значеннями, які розраховані з урахуванням 6 і 7 підзон, є меншою ніж 0,1 меВ. Також абсолютна більшість вільних електронів в структурах, що розглядаються, розподіляються в перших 7-ми підзонах навіть при підвищених температурах.

2.2.3 Розрахунок рівня Фермі та визначення потенціалу Хартрі

Після розрахунків, які наведені в пунктах 2.2.1, 2.2.2, маємо новий набір рівнів розмірного квантування та нове значення ЕЗД. Очевидно, що цей факт призводить до нового розподілу електронів по структурі, а значить і до зміни ПХ. Для його розрахунку треба розв'язати відповідне рівняння Пуасона, але перед цим необхідно визначити положення рівня Фермі, за допомогою якого знайти новий розподіл носіїв в напрямку z [2]. Для цього скористаємося рівнянням електронейтральності:

$$n_{QW}^- = n_d^+ \quad (2.26)$$

де $n_{QW}^-(z)$ – поверхнева концентрація електронів у КЯ:

$$n_{QW}^- = \sum_{j=1}^7 n_j \int_{-\infty}^{+\infty} |\xi_j(z)|^2 dz, \quad (2.27)$$

n_j , у свою чергу, це концентрація електронів на j -му рівні:

$$n_j = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_j}{kT} \right) \right], \quad (2.28)$$

де E_F – положення рівня Фермі. n_d^+ в рівнянні (2.26) – поверхнева концентрація іонізованих атомів домішки:

$$n_d^+ = \frac{n_d}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - (E_1 - E_d)}{kT}\right)}, \quad (2.29)$$

E_d – енергія зв'язку домішок (відносно першого рівня), n_d – поверхнева концентрація домішок в дельта-шарі.

Далі, підставляючи (2.27) та (2.29) в (2.26), отримаємо рівняння відносно E_F .

Нарешті можна переходити до рівняння Пуассона:

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = \frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon} [N_d^+(z) - N_{QW}^-(z)], \quad (2.30)$$

$N_d^+(z)$ – розподіл атомів іонізованої домішки уздовж дельта-шару. Рахувались як однорідний розподіл:

$$N_d^+(z) = \begin{cases} \frac{n_d^+}{s}, & |z - z_0| \leq \frac{s}{2}; \\ 0, & |z - z_0| \geq \frac{s}{2}. \end{cases} \quad (2.31)$$

так і гаусівський:

$$N_{d \text{ гаус}}^+(z) = n_d^+ f(z),$$

де $f(z) = \frac{e^{-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma^2}}}{\sigma\sqrt{2\pi}}$ – функція нормального розподілу. Тут σ – стандартне відхилення, а z_0 – положення домішкового центру. Для ширини Δz на напівмаксимумі гаусіана $\Delta z = s = 2\sqrt{2\ln 2}\sigma = 2,355\sigma$, звідки

$\sigma = s/2.355$, s – товщина дельта-шару, n_d^+ – кількість іонізованих домішок, розрахована по формулі (2.29).

$N_{QW}^-(z)$ в рівнянні (2.30) – просторова концентрація електронів у КЯ:

$$N_{QW}^-(z) = \sum_{j=1}^7 n_j |\xi_j(z)|^2 \quad (2.32)$$

Отже, розв'язавши рівняння (2.30) отримаємо новий потенціал Хартрі.

2.2.4 Висновки

У пунктах 2.3.1–2.3.3 описаний один крок ітераційної процедури (рис. 2.1). Після проходження кожного кроку ітерації самоузгоджених обчислень виконується перевірка збіжності усіх отриманих параметрів, насамперед: положення рівнів розмірного квантування E_j та глибина залягання домішки E_d (пункт 4 на рис. 2.1). Критерієм збіжності є величина δ – різниця в енергіях зв'язку (оскільки ця величина найбільш чутлива при розрахунках), отримані на поточній та попередній ітераціях: $\delta = E_d^n - E_d^{n-1}$. Якщо значення δ не набуло потрібної точності, виконується наступний крок ітерації (пункти 1–3 на рис. 2.1) з вхідними даними структури, які були отримані під час розрахунків на поточному кроці (E_j , ξ_j , E_d , $V_H(z)$ і т. д.). Точність, з якою були отримані всі результати: $\delta \leq 0,1$ меВ. Для досягнення такого значення, у випадку легування в центр, знадобилося 3–5 кроків ітераційних обчислень, у випадку легування в край – 4–7.

РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ

У цьому розділі подані та проаналізовані результати проведених розрахунків для $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ, дельта-легованих в центр або край при різних температурах ($T=4, 77$ та 300 К). Ширина КЯ – $L=5, 10$ та 20 нм; ширина дельта-шару – $s=1, 2$ та 3 нм; концентрація домішок дельта шару – $N_d = 6, 12$ та $24 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. У підрозділі 3.1 подані результати дослідження впливу іонізації домішок на ЕЗД дельта-шару в КЯ. Вплив іонізації домішок на перебудову енергетичних рівнів просторового квантування в дельта-легованих КЯ досліджується в підрозділі 3.2.

3.1 Енергія зв'язку домішок у дельта-легованих квантових ямах

Домішки в КЯ є цікавим об'єктом досліджень. Як вже згадувалося, ми не розглядаємо ані високу концентрацію домішок (коли хвости густини станів знаходяться в забороненій зоні), ані середню концентрацію (коли з'являються домішкові зони). Усю увагу звернено на випадок не дуже великих домішкових концентрацій, коли домішка може трактуватися як ізольована. У цьому випадку її енергія зв'язку дуже чутлива до положення домішки всередині КЯ та до її ширини, як це вперше було відзначено Бастардом [4]. Багато різних досліджень (в основному теоретичних), пов'язаних з вивченням залежності енергії зв'язку домішки від великої кількості інших параметрів гетероструктур або зовнішніх впливів, представлено в літературі. Деякі з цих посилань можна знайти в наших роботах [2,48–50]. Але серед безлічі різних факторів є один, в нашому розумінні, до сих пір не вивчений, а саме – вплив перерозподілу носіїв в межах КЯ обумовлений іонізацією дельта-шару домішок, розташованого всередині ями. Завдяки тому, що домішка є мілкою, її іонізація може бути легко досягнута прикладанням відносно невеликого зовнішнього

електричного поля або підвищенням температури. Як тільки дельта-шар іонізований (частково), новий потенціал (потенціал Хартрі), утворений як вільними електронами на енергетичних рівнях просторового квантування, так і іонізованим дельта-шаром, накладається на первинний незбурений (з нейтральним домішковим дельта-шаром) прямокутний енергетичний профіль КЯ. Це означає, що утворюється нова КЯ з новим набором енергетичних рівнів просторового квантування і, відповідно, з новою енергією зв'язку домішок. Виходячи з викладеного вище, мета цього підрозділу – подання наших результатів в дослідженні цього явища.

3.1.1 Результати

Результати розрахунків подані в таблиці 3.1, де показані енергії зв'язку домішок та середня відстань $\langle |z - z_0| \rangle$ між вільним електроном та іонізованим атомом для легуваних в центр або в край КЯ при температурах 4 і 300 К. Для обчислення середньої відстані був використаний вираз [2]

$$\langle |z - z_0| \rangle = \int |\varphi|^2 |z - z_0| dz . \quad (3.1)$$

Видно, що енергія зв'язку у випадку легування в центр КЯ при $T = 300$ К більша, ніж при $T = 4$ К. Ще слід звернути увагу, це те, що при $T = 300$ К енергії зв'язку близькі за значенням при порівнянні випадків дельта-легування в центр і край, на відміну від температури $T = 4$ К. Ці висновки можна зрозуміти за допомогою рисунка 3.1, де зображено енергетичні профілі, перші енергетичні рівні просторового квантування та їх хвильові функції, а також рівні основного домішкового стану для обох випадків досліджуваних КЯ.

Таблиця 3.1 – Енергія зв'язку домішок E_d та середня відстань $\langle |z - z_0| \rangle$ між вільним електроном та іонізованим атомом для випадків дельта-легування в центр і в край КЯ

T, K	E_d, meV		$\langle z - z_0 \rangle, \text{nm}$	
	центр	край	центр	край
4	29,6	17,2	3,11	9,50
300	34,3	33,3	1,42	1,61

У цьому аналізі ми ігноруємо вищі рівні просторового квантування, оскільки саме перший енергетичний рівень дає основний внесок у формування домішкових станів. При низькій температурі $T = 4 \text{ K}$ (рис. 3.1 а), домішка не іонізована.

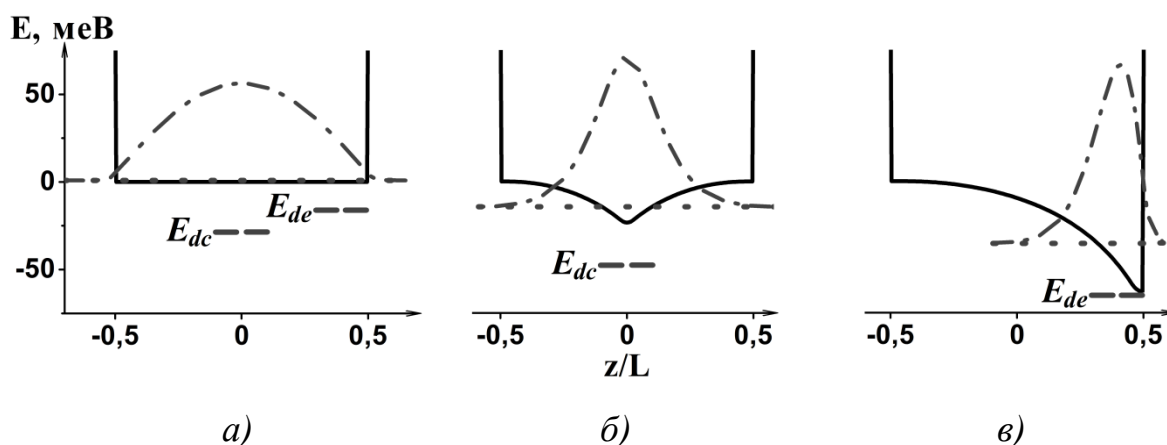


Рисунок 3.1 – Енергетичний профіль – суцільні лінії; перші рівні просторового квантування та їх хвильові функції – точкові та штрих пунктирні лінії, відповідно; основний домішковий стан при дельта-легуванні в центр E_{dc} та в край E_{de} – пунктирні лінії. Ширина КЯ – $L=20 \text{ nm}$, $T=4\text{K}$ – а); $T=300\text{K}$, дельта-легування в центр – б), $T=300\text{K}$, дельта-легування в край – в). Нуль енергії відповідає дну КЯ при $T=4\text{K}$

Це означає, що вільних електронів немає навіть у першій підзоні, і відповідно немає перерозподілу заряду у всій КЯ. Отже, енергетичний профіль КЯ залишається незмінним, а взаємозв'язок між значеннями енергій зв'язку домішок для випадків легування в центр та в край відповідають отриманим у цитованих вище посиланнях. Відповідно до закону Кулона різниця в цих енергіях пояснюється більшою середньою відстанню $\langle |z - z_0| \rangle$ між вільним електроном та домішковим атомом для

КЯ, легованих у край, ніж у випадку легування в центр. Варто зазначити, що енергія зв'язку домішок для КЯ легованих в центр при $T = 4\text{K}$ у таблиці 3.1 (29,6 меВ) практично збігається з енергією, отриманою в [7] для такої ж КЯ.

Підвищення температури супроводжується іонізацією домішок та появою електронів у підзонах просторового квантування. Потенціали іонізованих домішок та електронів у підзонах створюють ПХ. Це призводить до викривлення початкового (при $T=4\text{K}$) енергетичного профілю КЯ так, що іонізований дельта-шар ніби викопує власну КЯ, яка накладається на прямокутну, як показано на рисунку 3.1, б, в при дельта-легуванні в центр та в край, відповідно. Ці нові КЯ мають власні значення енергії іонізації домішок. Спочатку розглянемо і порівняємо випадки легування в центр для різних температур (рис. 3.1, а для $T=4\text{ K}$ та рис. 3.1, б для $T=300\text{ K}$). З рисунка виходить, що хвильова функція першого рівня просторового квантування помітно змінюється з температурою – вона стає вищою і вузкою у центрі КЯ. Це призводить до більшої локалізації вільного електрона в області центру КЯ із збільшенням температури і, отже, до зменшення середньої відстані $\langle |z - z_0| \rangle$.

Далі розглянемо та порівняємо результати для випадку дельта-легування в край (рис. 3.1, а та в). У цьому випадку $z_0 = 0.95L/2$ з початком координати z в центрі КЯ. Підвищення температури до 300 К супроводжується модифікацією енергетичного профілю КЯ потенціалом Хартрі. Це призводить до наступного. По-перше, як хвильова функція першого рівня просторового квантування в цілому, так і її максимум зміщуються до краю КЯ, ближче до атома домішки. Крім того, максимум хвильової функції при $T = 300\text{ K}$ помітно вищий, ніж при $T = 4\text{K}$. Це все означає, що вільний електрон тепер знаходиться ближче до атома домішки, що призводить до збільшення енергії зв'язку домішки. По-друге, протяжність хвильової функції в напрямку z стає меншою, що безпосередньо призводить до збільшення енергії зв'язку домішок [42].

Порівнюючи рисунки 3.1, б і в та відповідні дані таблиці 3.1 виходить, що зміна середньої відстані між вільним електроном та домішковим атомом із температурою помітно більша при дельта-легування в край, ніж при дельта-легуванні в центр КЯ. З цього випливає менша відносна зміна енергії зв'язку домішки для останнього випадку, ніж для першого. Також видно, що при $T = 300$ К енергії зв'язку для КЯ легованих в центр та край майже однакові. Це можна пояснити порівнянням відповідних середніх відстаней. В обох випадках максимальна ймовірність розташування електрона знаходиться поблизу домішкового атома, а відповідні середні відстані між вільним електроном та іоном майже однакові, що автоматично означає дуже близькі енергії зв'язку домішок.

Хімічний зсув і розщеплення основного домішкового стану (через невідповідність ґратки) не були враховані при розрахунку енергії зв'язку домішки. Щоб скорегувати результати щодо цих факторів, ми дотримуємось підходу, використаного в роботі [7] для такої ж КЯ. Було показано, що до енергії зв'язку домішок у випадку прямокутної (при температурі 4К) КЯ, легованої в центр, потрібно додати близько 8 мєВ, а при легуванні в край – нічого не додавати. Що стосується результатів при $T = 300$ К, ми припускаємо, що при дельта-легуванні в центр до енергії зв'язку необхідно додати ті ж 8 мєВ, що в результаті дасть значення 42 мєВ. Для легування в край КЯ при $T = 300$ К треба додати 7 мєВ. Ця пропозиція ґрунтується на значенні зміщення домішки по відношенню до ширини КЯ, яка становить близько 0,3 для КЯ з потенціалом Хартрі, показано на рисунку 3.1, в, і на рисунку 7 з роботи [7]. Отже, повна енергія зв'язку домішок для КЯ, дельта-легованої в край при кімнатній температурі, повинна становити близько 40 мєВ.

3.1.2 Порівняння отриманих результатів з даними інших авторів

Для перевірки отриманих результатів було б добре порівняти їх з даними інших авторів, які досліджують такі ж самі структури. Можна

згадати деякі дослідження впливу іонізованого дельта-шару на енергетичний профіль КЯ [1,44]. Але концентрація домішок у цих роботах була прийнята настільки великою, що всі домішки були повністю іонізованими вже при низьких температурах. Тому подібні роботи не стосуються обраного напрямку. Експериментальних досліджень по даній д-легованій структурі не проводилося зовсім. Проте є теоретичні дослідження, зокрема робота [7]. Тут автори досліджують донорні стани в такій самій структурі. Таким чином, з'являється можливість для перевірки результатів обчислень.

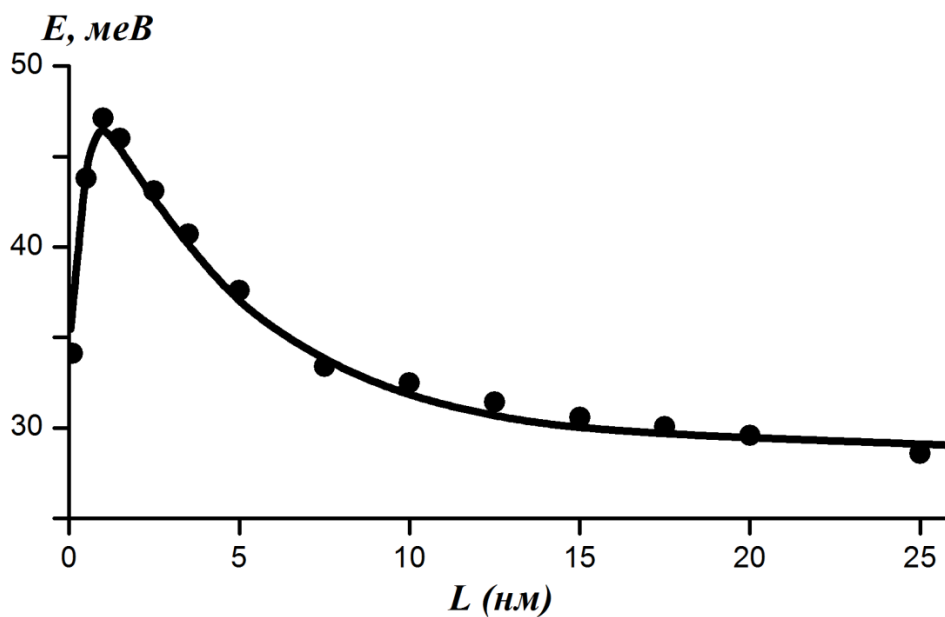


Рисунок 3.2 – Залежність енергії зв'язку домішки від ширини КЯ при $T=4K$, суцільна лінія – дані роботи [7] (рис. 3), кружками відмічені дані, представлені в даній роботі

На рисунку 3.2 суцільною кривою зображено залежність енергії зв'язку мілкої домішки в КЯ, легової в центр, від ширини КЯ – рисунок 3 роботи [7]. Кружками відмічені результати, які представлені у даній роботі. Не зважаючи на те, що був використаний інший метод розрахунків, а саме самоузгоджений, результати практично повністю відтворюють криву і рисунок підкреслює дуже добру збіжність.

3.2 Перебудова енергетичних рівнів просторового квантування в дельта-легованих квантових ямах

Розвиток нанотехнологій відкриває можливості для керування кількістю енергетичних рівнів, а також енергетичним зазором між ними в гетероструктурах, на базі яких створено різні види оптоелектронних пристроїв. У випадку (прямокутної) квантової ями (КЯ), це може бути зроблено шляхом зміни її глибини і ширини. Інший спосіб може бути представлений дельта-легованими КЯ V-виду [42]. Глибина та (напів-) ширина ями і, відповідно, позиції її енергетичних рівнів залежать від концентрації домішок і напівширини дельта-шару. За допомогою дельта-легування можна отримати великі поверхневі концентрації домішок у наноструктурах, і, власне, ця концепція була започаткована саме з такою метою. Тому в літературі, перш за все, досліджувались великі концентрації домішок дельта-шару, при яких вже не можна говорити про енергію іонізації домішок – вони усі знаходяться у хвостах густини станів у забороненій зоні, тобто усі вони вже є іонізованими. Це означає, що для зміни структури рівнів необхідно міняти концентрацію домішок у ньому, тобто необхідно вирощувати нову структуру. Але якщо концентрація домішок дельта-шару є відносно невеликою, коли можна говорити про енергію іонізації цих домішок, то з'являється можливість керувати профілем електростатичної V-подібної квантової ями, а відтак і структурою енергетичних рівнів просторового квантування у ній, контролюючи ступінь іонізації дельта-шару. Додаткові можливості для керування структурою енергетичних рівнів з'являються, якщо помістити дельта шар (з невеликою концентрацією домішок) у КЯ.

Дельта-легована КЯ при низькій температурі має прямокутний енергетичний профіль (за умови нехтування легуванням бар'єрів). Інша ситуація спостерігається при більш високих температурах, коли домішки є частково іонізованими, і електрони з'являються на рівнях просторового

квантування КЯ. В результаті формується додатковий потенціал (потенціал Хартрі), що утворюється іонізованими домішками і вільними електронами, який накладається на початковий (при низьких температурах) прямокутний енергетичний профіль (рис. 3.1). Іншими словами, отримується нова КЯ, з новим набором енергетичних рівнів просторового квантування. Таким чином, у випадку дельта-шару мілкої домішки, розташованого в межах КЯ, стає можливим змінювати енергетичний зазор між першими рівнями просторового квантування шляхом іонізації цієї домішки, в одній і тій самій структурі. Було прийнято рішення вивчити цей ефект більш ретельно, оскільки саме перші рівні просторового квантування є найважливішими в міжпідзонних оптичних переходах, через те що першими з усіх заселяються електронами. Вони є основою різного роду оптоелектронних пристроїв. А можливість керування структурою рівнів потенційно дає можливість для маніпулювання оптичними властивостями цих пристроїв.

3.2.1 Порівняння результатів розрахунків при однорідному та гаусівському розподілах домішок дельта-шару

У таблиці 3.2 представлені результати енергетичного зазору між першим та другим рівнями просторового квантування при однорідному та гаусівському розподілах домішок по ширині дельта-шару КЯ шириною $L = 20$ нм, дельта-легованої в центр або в край. Концентрація донорів – $1.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Також тут відображені результати, отримані для трьох різних товщин дельта-шару $s = 1, 2, 3$ нм. У розрахунках координату z середини дельта-шару для легованої в край КЯ було прийнято як $z = (1 / 2) (L - s)$. Це означає, що не зовсім коректно порівнювати результати для різної товщини дельта-шару навіть для тієї ж самої КЯ. Очевидно, те ж саме можна сказати про результати з різною шириною КЯ, але з однаковою товщиною дельта-шару. Однак, ці дослідження були

проведені для того, щоб побачити тенденцію поведінки отриманих результатів.

Таблиця 3.2 – Енергетичний зазор ΔE_{21} (меВ) між першим та другим рівнями просторового квантування в КЯ, дельта-легованих у центр або в край при різних температурах та з різними товщинами дельта-шару s (нм). Ширина КЯ $L=20$ нм. Концентрація домішок дельта-шару – $12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$

s , нм	Дельта-легування в центр КЯ				Дельта-легування в край КЯ			
	$T=4\text{К}$	$T=77\text{К}$	$T=300\text{К}$		$T=4\text{К}$	$T=77\text{К}$	$T=300\text{К}$	
		одно- рідний розподіл	одно- рідний розподіл	гаусівсь- кий розподіл		одно- рідний розподіл	одно- рідний розподіл	гаусівсь- кий розподіл
1	2.8	3.8	11.1	10.9	2.8	6.2	19.7	19.5
2	2.8	3.8	10.7	10.3	2.8	5.8	19.0	19.0
3	2.8	3.8	10.3	9.7	2.8	5.1	18.2	18.0

Аналізуючи дані таблиці 3.2, видно, що енергетичний зазор між першим та другим рівнями просторового квантування зростає з підвищенням ступеня іонізації домішок (що регулюється температурою) як для однорідного, так і для гаусівського розподілу домішок. Це відбувається як для легованих в центр (у меншій мірі), так і для легованих в край (більшою мірою) КЯ. Рисунок 3.3, дозволяє зрозуміти цю тенденцію. При низькій температурі $T = 4\text{К}$ (рис. 3.3, а) практично всі домішки є нейтральними. Це означає, що немає вільних електронів навіть на першому рівні, і, відповідно, немає перерозподілу заряду в КЯ. Тому енергетичний профіль КЯ залишається незмінним для КЯ дельта-легованих як в центр, так і в край. Як результат ідентичні результати для енергетичного зазору між першим та другим рівнями просторового квантування в цих випадках, навіть при різних товщинах дельта-шару (табл. 3.2, дані для $T=4\text{К}$).

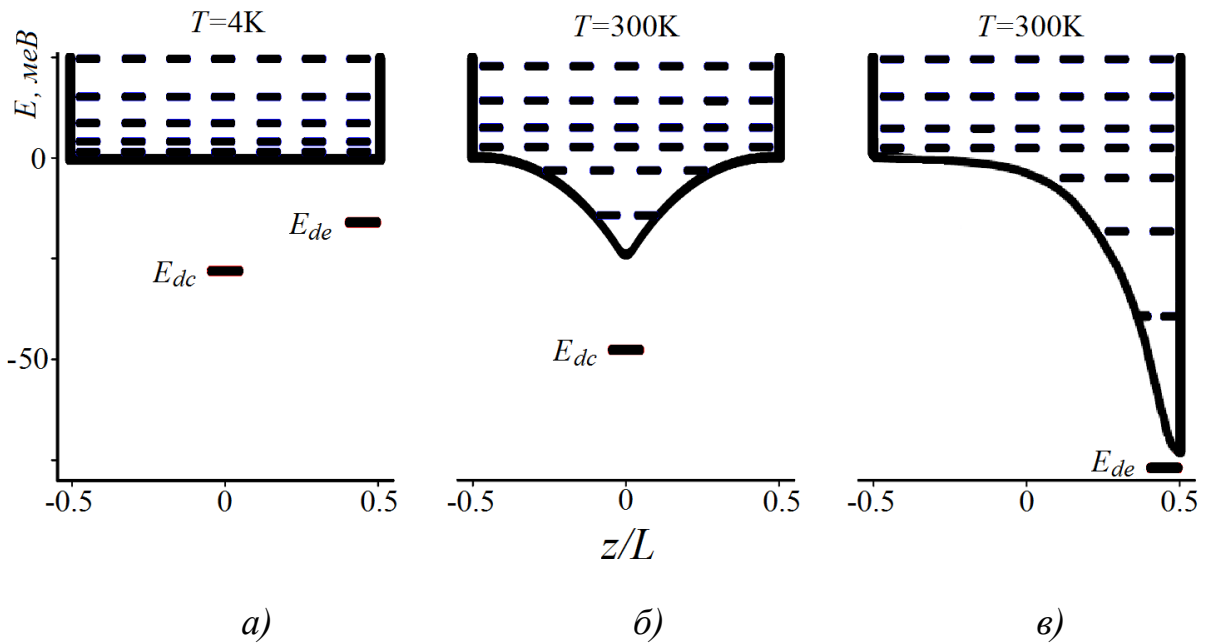


Рисунок 3.3 – Енергетичний профіль КЯ – суцільні лінії; перші рівні розмірного квантування – пунктирні лінії; КЯ легована в центр – а) і б), в край, – в). Температура (К): 4 – а); 300 – б) і в). Основний стан домішки КЯ, дельта-легованої в центр – E_{dc} , в край – E_{de} . Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

Зростання температури супроводжується процесом іонізації домішок, тобто появою електронів у підзонах КЯ. Іонізовані донори та електрони на рівнях просторового квантування в КЯ формують ПХ. Це призводить до викривлення первинного прямокутного (при $T = 4\text{K}$) енергетичного профілю (рис. 3.4). На малюнку виглядає так, що іонізований дельта-шар «створює» власну КЯ, яка накладається на початковий прямокутний енергетичний профіль.

Розглянемо та порівняємо спочатку випадок легування в центр при різних температурах – рисунок 3.4, а–в. Додаткова V-подібна КЯ, яка накладається на прямокутний енергетичний профіль, стає глибшою з підвищенням ступеню іонізації домішок. З рисунка виходить, що зі збільшенням температури збільшується енергетичний зазор між першими двома рівнями просторового квантування (сіра область на рисунку зміщується у більш вузьку частину КЯ).

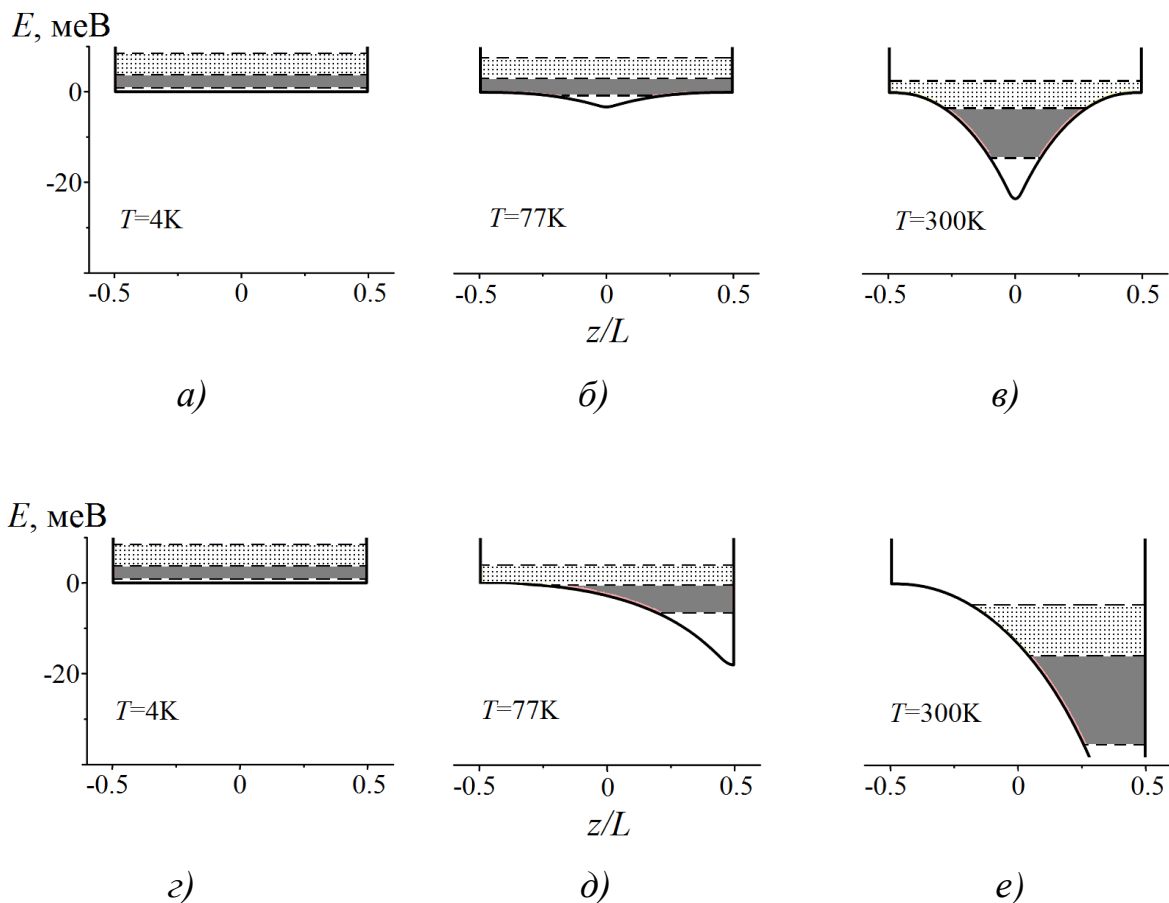


Рисунок 3.4 – Суцільна лінія – енергетичний профіль КЯ, дельта легованої в центр – а)-в), та в край – г)-е). Пунктирна лінія – перші три рівні просторового квантування. Ширина КЯ – $L=20$ нм, концентрація домішок дельта-шару – $12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. $T=4\text{K}$ – а), г); $T=77\text{K}$ – б), д); $T=300\text{K}$ – в), е). Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

У випадку дельта-легування в край спостерігається схожа ситуація. А саме, зі збільшенням ступеню іонізації домішок, збільшується енергетичний зазор між першими двома рівнями просторового квантування (табл. 3.2, сіра область на рис. 3.4, г–е). Відмінність в тому, що при рівних умовах додаткова електростатична КЯ, утворена біля бар'єру є вужчою на напіввисоті, ніж в області центру – рисунок 3.3, випадки в і е (причиною цього є відштовхування електронів бар'єрами). Наслідком є більший енергетичний зазор між першим та другим рівнями просторового квантування у випадку дельта-легування в край в порівнянні з дельта-легуванням в центр.

На рисунках 3.4 також відображено енергетичний зазор між другим та третім рівнями просторового квантування (точкова область на малюнках). Але видно, що зміна цього зазору з підвищенням ступеню іонізації домішок в більшості випадків є незначною. Суттєві відмінності спостерігаються лише у випадку дельта-легування в край при високому ступені іонізації домішок – рисунок 3.4, е. Тому тут ми концентруємо увагу тільки на енергетичному зазорі між першими двома рівнями, які є найбільш чутливими до зміни ступеня іонізації домішок.

Порівнюючи результати для однорідного і гаусівського розподілів домішок по дельта-шару у випадку дельта-легування в центр, помітні невеликі відмінності в енергетичному зазорі між першими двома рівнями (табл. 3.2). А саме, при гаусівському розподілі домішок енергетичний зазор на кілька десятих меВ менше ніж при однорідному. Це явище можна пояснити незначним збільшенням ширини додаткової електростатичної КЯ на напіввисоті.

Результати у випадку дельта-легування КЯ в край виглядають дещо інакше у порівнянні з дельта-легуванням в центр. Проте пояснення зменшення енергетичного зазору між першим та другим рівнями просторового квантування для гаусівського розподілу домішок, у порівнянні з однорідним, є аналогічним для випадку КЯ, дельта-легованої в центр.

Важливим практичним висновком є те, що ефект однорідного розподілу домішок збігається з більш реалістичним гаусівським розподілом домішок з точністю, яка не перевищує 0.6 меВ. Насправді для точного визначення позицій рівнів просторового квантування ця величина не є суттєвою, за умови, що невизначеність в оцінках хімічного зсуву для ЕЗД значно більша [7]. Тому в подальших розрахунках ми можемо розглядати лише однорідний розподіл домішок.

При порівнянні результатів для КЯ з різною товщиною дельта-шару, можна сказати, що при дельта-легуванні в центр, невеликі зміни

спостерігається лише при високому ступеню іонізації (табл. 3.2, випадок легування в центр при 300К). У випадку дельта-легування в край відмінності в енергетичних зазорах між першим та другим рівнями просторового квантування вже помітні при температурі 77К і збільшуються при подальшому підвищенні температури. Всі ці відмінності можна також пояснити незначним збільшенням ширини додаткової електростатичної КЯ на напіввисоті, внаслідок збільшення товщини дельта-шару. Але знову ж таки, всі ці зміни є незначними (менше 2 меВ при дельта-легуванні в край і менше 1 меВ при дельта-легуванні в центр, при високому ступені іонізації домішок) і тому в подальших дослідженнях нами використовується товщина дельта-шару $s = 1$ нм, оскільки в цьому випадку спостерігаються більші зміни в енергетичних зазорах при збільшенні ступеня іонізації домішок.

3.2.2 Керування енергетичним зазором між рівнями просторового квантування у КЯ

У першому розділі вже говорилося, про важливість задачі зміни енергетичного зазору між рівнями простим контрольованим способом. І найзручніше, звичайно, було б використовувати невелике електричне поле. Уже згадувалося, що ПХ, створений як іонізованими донорами дельта-шару, так і вільними електронами на рівнях розмірного квантування у КЯ, змінює потенціал енергетичного профілю КЯ і, відповідно, змінює набір рівнів у структурі. У результатах, поданих у цій роботі, температура, а не електричне поле використовується як фактор, що змінює ступінь іонізації домішок. Але, як вже відмічалось маєтся на увазі, що в можливішому реальному пристрої це також можна легко реалізувати за допомогою невеликого електричного поля, прикладеного в площині КЯ. З цього випливає інтерес простежити за зміною енергетичного зазору між рівнями просторового квантування у КЯ залежно від ступеня іонізації

домішок. Деякі результати наведені в таблиці 3.3, а рисунок 3.3 може допомогти зробити їх більш наочними.

Таблиця 3.3 – Положення перших трьох рівнів просторового квантування (E_i , меВ) та різниця між найбільш важливими для оптичних переходів енергетичними рівнями ($\Delta E_{i+1,i}$, меВ) при різній температурі та при двох значеннях початкової концентрації донорів ($N_d \times 10^{11}$, см⁻²). Також відображений відсоток іонізованих донорів (N_d^+ , %). Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

T, K	Дельта-легування в центр КЯ					Дельта-легування в край КЯ				
	4	77		300		4	77		300	
$N_d \times 10^{-11}, \text{см}^{-2}$	6	6	24	6	24	6	6	24	6	24
$E_1, \text{меВ}$	0.9	-0.3	-1.3	-8.3	-21.9	0.9	-4.9	-8.1	-25.1	-46.4
$\Delta E_{21}, \text{меВ}$	2.9	3.6	4.1	7.9	15.9	2.9	5.3	7.3	14.9	24.5
$E_2, \text{меВ}$	3.8	3.3	2.8	-0.4	-6.0	3.8	0.4	-0.8	-10.2	-21.9
$\Delta E_{32}, \text{меВ}$	4.7	4.5	4.5	4.9	6.1	4.7	4.3	4.4	8.5	13.8
$E_3, \text{меВ}$	8.5	7.8	7.3	4.5	0.1	8.5	4.7	3.6	-1.7	-8.1
$N_d^+, \%$	0	13.5	6.6	81.7	54.7	0	21.0	9.1	80.8	50.3

При $T = 4 K$ всі домішки є нейтральними, а ЕЗД залежить тільки від положення дельта-шару в межах КЯ, тому позиції енергетичних рівнів на енергетичній шкалі є однакові для КЯ, дельта-легованих і в центр, і в край. З рисунку 3.3 видно, що електростатична КЯ, що утворена іонізацією дельта-шару домішок, яка накладається на початкову КЯ, є значно вузчою, ніж прямокутна КЯ. Це призводить до більшого зазору між енергетичними рівнями в електростатичній КЯ. Цей ефект сильно залежить як від ступеня іонізації, так і від положення дельта-шару в КЯ. Дійсно, той факт, що найбільш значимі зміни спостерігаються в КЯ, дельта-легованих в край, можна пояснити двома причинами. По-перше, початкове значення ЕЗД для КЯ, легової в край, є меншим, ніж для КЯ, легової в центр. Після «включення» потенціалу Хартрі, легована в край структура при однакових температурах (або електричних полях) має глибшу електростатичну потенціальну яму в порівнянні з КЯ, леговою в центр. По-друге, із порівняння рисунків 3.3, б і в видно, що електростатична КЯ, утворена біля

бар'єру початкової КЯ, є значно вужчою на напіввисоті, ніж у центра. Це відбувається через відштовхування електронів бар'єром.

Важливим є той факт, що помітні зміни в енергетичному зазорі між рівнями просторового квантування існують навіть при такому невеликому ступені іонізації домішки, як 6–21 % – (див. дані табл. 3.3 для 77 К). Подібних результатів можна легко досягти за допомогою прикладання відносно невеликого електричного поля у площині КЯ. Таким чином, представлені результати демонструють, що у випадку дельта-шару мілкої домішки, розташованого в межах КЯ, стає можливим легко змінювати енергетичний зазор між основним та збудженими рівнями просторового квантування шляхом іонізації цієї домішки.

Цікаво простежити, як впливає зміна параметрів КЯ на залежність енергетичного зазору між першими рівнями просторового квантування, а відтак і на поглинання гетероструктурою (цьому присвячений розділ 4), від ступеню іонізації домішок. В даному розділі аналізується цей ефект для КЯ різної ширини, з різною концентрацією домішок дельта-шару та з двома позиціями дельта-легування всередині КЯ (в центр або край).

Квантові ями різної ширини

Розглянемо спочатку випадок КЯ, дельта-легованої в центр. З таблиці 3.4 виходить, що ΔE_{21} зростає при підвищенні ступеня іонізації домішок (який регулюється температурою) для будь-якої ширини КЯ, як це відмічалось при аналізуванні таблиці 3.2. Але чітко простежується тенденція, що зміна енергетичного зазору між першими двома рівнями з підвищенням температури є більш вираженою для більш широких КЯ. У структурах з шириною $L=5$ та 10 нм ця зміна несуттєва, порівняно з випадком КЯ шириною 20 нм. Це пояснюється тим, що поява додаткової V-подібної ями та подальший її вплив на положення перших рівнів просторового квантування є несуттєвим для вузьких КЯ. З таблиці 3.4 виходить, що тільки в випадку високої іонізації домішок перший рівень

локалізований в межах V-подібної частини КЯ з шириною $L=10$ нм. Інша ситуація спостерігається в широких КЯ. Навіть при такому низькому ступеню іонізації, як 9.5 % (табл. 3.3, дані для $T=77\text{К}$, $L=20$ нм) перший рівень вже знаходиться в межах вузької додаткової КЯ.

Таблиця 3.4 – Положення перших рівнів просторового квантування E_1, E_2 (меВ), різниця між найбільш важливими для оптичних переходів енергетичними рівнями $\Delta E_{21}, \Delta E_{32}$ (меВ) та відсоток іонізованих домішок $N_d^+, \%$ при різній температурі та для КЯ, дельта-легованих у центр, шириною $L=5, 10$ та 20 нм. Концентрація домішок дельта-шару – $12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

$T, \text{К}$		$L=5$ нм	$L=10$ нм	$L=20$ нм
4	E_1	11.8	3.5	0.9
	ΔE_{21}	34.8	10.3	2.9
	E_2	46.6	13.8	3.8
	ΔE_{32}	56.0	17.3	4.7
	N_d^+	0	0	0
77	E_1	11.7	3.1	-0.7
	ΔE_{21}	34.9	10.6	3.8
	E_2	46.6	13.7	3.1
	ΔE_{32}	55.9	17.1	4.5
	N_d^+	3.9	6.1	9.5
300	E_1	9.9	-2.2	-14.4
	ΔE_{21}	35.9	13.6	17.7
	E_2	45.8	11.4	-3.3
	ΔE_{32}	55.6	16.5	5.9
	N_d^+	50.5	61.3	70.0

Цей ефект добре демонструють рисунки 3.4, а–в на яких сірим кольором зображено енергетичний зазор між першими двома рівнями. Видно, що з підвищенням ступеню іонізації, червона область на малюнку зміщується у більш вузьку V-подібну частину КЯ, збільшуючи тим самим ΔE_{21} .

Також цікаво простежити за зміною енергетичного зазору між другим та третім рівнями (точкова область на рис. 3.4). З таблиці 3.4 виходить, що ΔE_{32} не так сильно змінюється з підвищенням ступеню

іонізації, в порівнянні зі зміною ΔE_{21} (що є цілком природнім, оскільки заселеність рівнів зменшується зі збільшенням їх номеру). Для вузьких КЯ спостерігається монотонне зменшення ΔE_{32} зі збільшенням ступеню іонізації. А у випадку широкої КЯ цей зазор спочатку зменшується, а при високому ступені іонізації починає збільшуватися (табл. 3.4). Це можна пояснити тим, що при низькому ступеню іонізації, точкова область знаходиться в прямокутній частині КЯ (рис. 3.4, а, б). А при більш високому, значна частина цієї області знаходиться в більш вузькій V-подібній частині КЯ.

Таблиця 3.5 – Положення перших рівнів просторового квантування E_1, E_2 (меВ), різниця ΔE_{32} між найбільш важливими для оптичних переходів енергетичними рівнями ΔE_{21} , (меВ) та відсоток іонізованих домішок N_d^+ , % при різній температурі та для КЯ, дельта-легованих в край, шириною $L=5, 10$ та 20 нм. Концентрація домішок дельта-шару – $12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

$T, \text{ K}$		$L=5 \text{ нм}$	$L=10 \text{ нм}$	$L=20 \text{ нм}$
4	E_1	11.8	3.5	0.9
	ΔE_{21}	34.8	10.3	2.9
	E_2	46.6	13.8	3.8
	ΔE_{32}	56.0	17.3	4.7
	N_d^+	0	0	0
77	E_1	10.9	0.9	-6.5
	ΔE_{21}	34.6	10.3	6.2
	E_2	45.5	11.2	-0.3
	ΔE_{32}	56.0	17.1	4.4
	N_d^+	7.9	12.0	15.3
300	E_1	5.4	-13.9	-35.5
	ΔE_{21}	34.3	16.9	19.7
	E_2	39.7	3.0	-15.8
	ΔE_{32}	55.8	16.0	11.2
	N_d^+	55.5	62.8	67.4

Розглянемо випадок КЯ, дельта-легованої в край. Аналізуючи дані таблиці 3.5, можна зробити висновок, що всі твердження, які були сказані для випадку дельта-легування в центр, справедливі і для випадку дельта-

легування в край, але з відмінністю у тому, що всі ефекти є більш вираженими. Так, наприклад, з рис. 3.4, г–е) видно, що сіра область збільшується навіть при невисокому ступеню іонізації домішок ($T=77\text{K}$). Це пояснюється тим, V-подібна частини КЯ стає глибшою та вужчою в порівнянні з випадком дельта-легування в центр при однаковій температурі.

Квантові ями з різною концентрацією домішок дельта-шару

При аналізі результатів для КЯ з різною концентрацією домішок дельта-шару розглянемо гетероструктури шириною $L=20$ нм, оскільки, як було показано вище, ефекти, які ми обговорюємо, є найбільш вираженими саме для широких КЯ.

Таблиця 3.6 – Положення перших рівнів просторового квантування E_1, E_2 (меВ), різниця між найбільш важливими для оптичних переходів енергетичними рівнями $\Delta E_{21}, \Delta E_{32}$ (меВ) та відсоток іонізованих домішок $N_d^+, \%$ при різній початковій концентрації домішок дельта-шару: 6,12 та $24 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ для КЯ, дельта-легованих в центр, шириною $L=20$ нм. Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

T, K		N_d	N_d	N_d
4	E_1	0.9	0.9	0.9
	ΔE_{21}	2.9	2.9	2.9
	E_2	3.8	3.8	3.8
	ΔE_{32}	4.7	4.7	4.7
	N_d^+	0	0	0
77	E_1	-0.3	-0.7	-1.3
	ΔE_{21}	3.6	3.8	4.1
	E_2	3.3	3.1	2.8
	ΔE_{32}	4.5	4.5	4.5
	N_d^+	13.5	9.5	6.6
300	E_1	-8.3	-14.4	-21.9
	ΔE_{21}	7.9	11.1	15.9
	E_2	-0.4	-3.3	-6.0
	ΔE_{32}	4.9	5.9	6.1
	N_d^+	81.7	70.0	54.7

Природнім є те, що тенденції, які були описані вище, виконуються незалежно від початкової концентрації донорів. І це стосується як легування в центр, так і край (табл. 3.6, 3.7). Тому зосередимо увагу тільки на ефект перебудови енергетичних рівнів в КЯ залежно від ступеня іонізації домішок при різній початковій концентрації цих домішок.

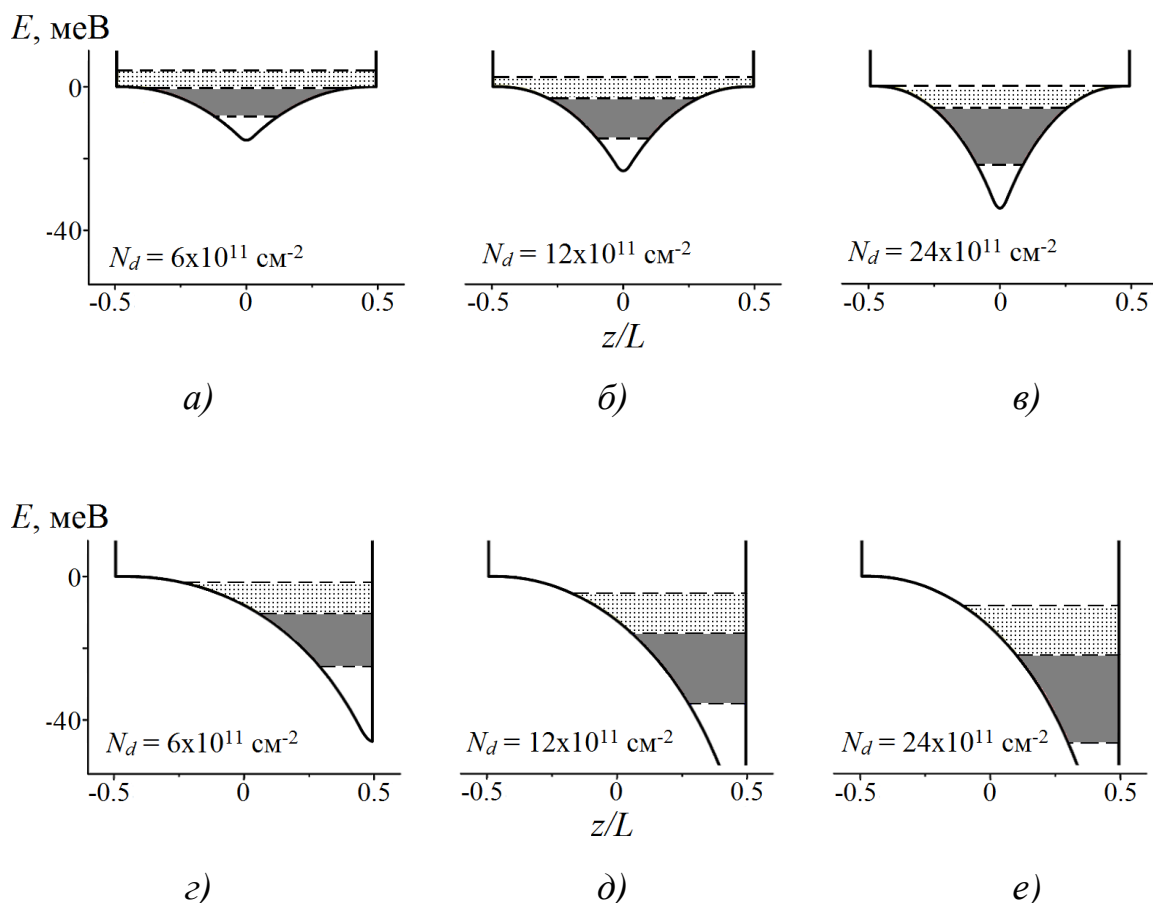


Рисунок 3.5 – Чорна суцільна лінія – енергетичний профіль КЯ, дельта легованої в центр – а)-в), та в край – г)-е). Синя суцільна лінія перші три рівні просторового квантування. Ширина КЯ $L=20$ нм, концентрація домішок дельта-шару: $6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ – а), г); $12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ – б), д); $24 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ – в), е). $T=300\text{K}$. Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

Таблиця 3.6 відповідає випадку КЯ, дельта-легованої в центр. Помітно, що чим більша початкова концентрація донорів, тим більший енергетичний зазор між першими рівнями просторового квантування з ростом температури. При підвищенні температури, вільні електрони починають з'являтися на рівнях просторового квантування, створюючи

разом з позитивними іонами додаткову вузьку КЯ, яка накладається на початкову прямокутну. На рисунку 3.5 зображено дно КЯ для трьох різних концентрацій донорів при $T=300\text{K}$. Видно, що чим більша початкова концентрація донорів, тим більш глибоку та вузьку форму має потенціал Хартрі, що і сприяє збільшенню енергетичного зазору між першими рівнями. Причому, при високому ступеню іонізації, це стосується і ΔE_{21} , і ΔE_{32} , оскільки вони повністю або частково локалізовані в межах вузької V-подібної частини КЯ.

Таблиця 3.7 – Положення перших рівнів просторового квантування E_1, E_2 (меВ), різниця між найбільш важливими для оптичних переходів енергетичними рівнями $\Delta E_{21}, \Delta E_{32}$ (меВ) та відсоток іонізованих домішок $N_d^+, \%$ при різній початковій концентрації домішок дельта-шару: $6,12$ та $24 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ для КЯ, дельта-легованих в край, шириною $L = 20$ нм. Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

T, K		N_d	N_d	N_d
4	E_1	0.9	0.9	0.9
	ΔE_{21}	2.9	2.9	2.9
	E_2	3.8	3.8	3.8
	ΔE_{32}	4.7	4.7	4.7
	N_d^+	0	0	0
77	E_1	-4.9	-6.5	-8.1
	ΔE_{21}	5.3	6.2	7.3
	E_2	0.4	-0.3	-0.8
	ΔE_{32}	4.3	4.4	4.4
	N_d^+	21.0	14.0	9.1
300	E_1	-25.1	-35.5	-46.4
	ΔE_{21}	14.9	19.7	24.5
	E_2	-10.2	-15.8	-21.9
	ΔE_{32}	8.5	11.2	13.8
	N_d^+	80.8	65.1	50.3

Розглянемо випадок дельта-легування в край КЯ. Відзначимо, як виходить з таблиць 3.6 та 3.7, енергетичні зазори ΔE_{21} або ΔE_{32} є однаковими, оскільки початкові КЯ (при $T=4\text{K}$) є повністю ідентичними, тому що всі домішки є вимороженими на донорах і немає викривлення енергетичного профілю, незалежно від концентрації донорів та позиції дельта-легування. Як видно з таблиці 3.7, чим більша початкова

концентрація донорів, тим більше зростання енергетичного зазору між першими рівнями просторового квантування, як і у випадку дельта легування КЯ в центр. Відмінність лише в тому, що амплітуда збільшення є більшою у випадку дельта-легування в край, що добре демонструє рисунок 3.5. Це обумовлено тим, що електростатична КЯ, утворена біля бар'єру початкової КЯ, є вужче, ніж біля центра. Це відбувається через відштовхування електронів бар'єрами.

3.3 Висновки

У цьому розділі досліджений вплив ПХ, що виникає при іонізації дельта-шару домішки, на енергію зв'язку домішки $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ. Були проаналізовані випадки дельта-легування в центр та край КЯ. Для випадку $T = 4$ К отримані результати відповідають відомим з літератури, тоді як при високих температурах енергія зв'язку домішок збільшується. Результати при високих температурах пояснюються тим, що при іонізації дельта-шару виникає електростатична квантова яма, яка накладається на прямокутну КЯ. У цій новій КЯ протяжність хвильової функції першого рівня просторового квантування істотно менша, ніж у початкової КЯ (при $T = 4$ К). Відповідно, хвильова функція стає вищою та вужчою, а це означає, що середня відстань між електроном і домішковим атомом зменшується, що призводить до збільшення енергії зв'язку домішки. Таким чином, результати показують, що енергія зв'язку домішки в КЯ залежить від ступеня іонізації цієї ж домішки.

Також, продемонстрована можливість керування енергетичним зазором між першими рівнями просторового квантування в дельта-легованій КЯ шляхом зміни ступеню іонізації домішок дельта-шару. Крім того, проаналізована залежність енергетичного зазору від початкових параметрів КЯ, що дає можливість ще на стадії проектування гетероструктури передбачати бажані оптичні характеристики майбутнього приладу на базі цієї структури. Результати, представлені в цьому розділі, підштовхують до дослідження оптичних властивостей гетероструктур, що розглядаються. Розрахунку і аналізу коефіцієнта поглинання дельта-легованих КЯ і присвячений наступний розділ.

РОЗДІЛ 4

МІЖПІДЗОННЕ ПОГЛИНАННЯ В ДЕЛЬТА-ЛЕГОВАНИХ КВАНТОВИХ ЯМАХ

Напряом міжпідзонних оптичних переходів в КЯ є дуже важливим у фізиці наноструктур. Зокрема, ці оптичні переходи в прямокутних квантових ямах є основою для різного роду оптоелектронних пристроїв, таких як фотоприймачі [9], модулятори [10], квантово-каскадні лазери [3], і так далі. Одним з основних параметрів для таких пристроїв є робоча частота, яка визначається різницею енергій між рівнями просторового квантування. Для деяких цілей стабілізація робочої частоти пристрою є абсолютно необхідною, але для інших задач, бажано мати подібні пристрої з робочою частотою, яку можна змінювати. Тому, якщо з'являється нова можливість зміни частоти, вона повинна бути ретельно вивчена, що і є об'єктом дослідження даного розділу. Можливість зміни енергетичного зазору між рівнями просторового квантування іонізацією цієї ж домішки була показана в попередньому розділі. Слід відмітити, що перші енергетичні рівні в КЯ відіграють домінуючу роль у міжпідзонному оптичному поглинанні, оскільки вони першими з усіх заселяються електронами в процесі іонізації домішок. Таким чином, оптичний спектр поглинання КЯ з (частково) іонізованим дельта-шаром повинен відрізнятися від випадку КЯ без дельта-шару. Отже, існують дві основні цілі даного розділу, які залежать одна від одної. Перша полягає у тому, щоб простежити вплив іонізації дельта-шару на коефіцієнт міжпідзонного поглинання, та друга – у тому, щоб уточнити, наскільки істотною може бути різниця між коефіцієнтами поглинання для прямокутної КЯ і КЯ зміненою енергетичним профілем потенціалу Хартрі.

4.1 Попередні зауваження

З урахуванням вищезазначених цілей, коефіцієнт поглинання міжпідзонних оптичних переходів був розрахований для КЯ з різним

ступенем іонізації домішки дельта-шару та для чистих прямокутних КЯ. Під «чистою прямокутною КЯ» мається на увазі КЯ, в якій передбачається, що іонізація домішки не викривлює її енергетичний профіль. Як і раніше, параметром, що регулює ступінь іонізації домішок, є температура T , хоча маємо на увазі, що це може бути здійснено і за допомогою інших чинників – наприклад, оптичною іонізацією домішок або зовнішнім електричним полем, прикладеним в площині КЯ. Коефіцієнт поглинання розраховувався для двох найважливіших температур фізики напівпровідників – температури рідкого азоту ($T = 77$ К) і кімнатної температури – 300К. В якості матеріалу вибрана структура $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ, дельта-легована фосфором в центр або край, що була детально описана в пункті 2.1.

Для розрахунку коефіцієнта поглинання α , використовувалась формула [51]

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega\mu_0ce^2}{n} \sum_{i,j} |M_{ij}|^2 \frac{\sigma_{ij}\Gamma}{(E_j - E_i - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad (4.1)$$

де $\sigma_{ij} = \frac{m_{\perp}^*k_bT}{L\pi\hbar^2} \ln\left[\frac{1+\exp[(E_f-E_i)/k_bT]}{1+\exp[(E_f-E_j)/k_bT]}\right]$, та $M_{ij} = \int \psi_i^*(z)z\psi_j(z)dz$ – матричний елемент. E_i та E_j – положення рівнів просторового квантування, що залучені до процесу поглинання, та ψ_i , ψ_j – їх відповідні хвильові функції. E_f – рівень Фермі, $n = 3,49$ – показник заломлення для Si. Константами в (4.1) є: μ_0 – магнітна проникність, c – швидкість світла у вакуумі, e – елементарний заряд, k_b – стала Больцмана, \hbar – стала Планка. Всі вони були взяті в системі СІ. Для уширення було взято значення $\Gamma = 2$ меВ, визначене експериментально та підтвержене теоретичними розрахунками для структури, подібної до вибраної [52]. Автори цієї роботи за допомогою теоретичних розрахунків дослідили вплив різних факторів, таких як температура, ширина КЯ, якість поверхні, концентрація донорів та показали що $\Gamma \approx 2$ меВ в температурному діапазоні 4–300 К. Основний внесок (1,8 меВ) в цю величину, складає дефект бар'єрів, «який

поширюється в області множинних КЯ». Крім того, вони говорять, що в оптимізованих зразках може бути досягнуто уширення менше 1 меВ. У цій роботі, однак, приймається 2 меВ, оскільки це значення є розумним компромісом між оцінкою в роботі [52] та невизначеністю значення Γ для дельта-легованої КЯ. Що стосується чистих прямокутних КЯ, то спектр енергетичних рівнів з їх хвильовими функціями було знайдено з розв'язання рівняння Шрьодінгера для прямокутного енергетичного профілю, обумовленого лише матеріалами та шириною гетероструктури, – без урахування потенціалу Хартрі.

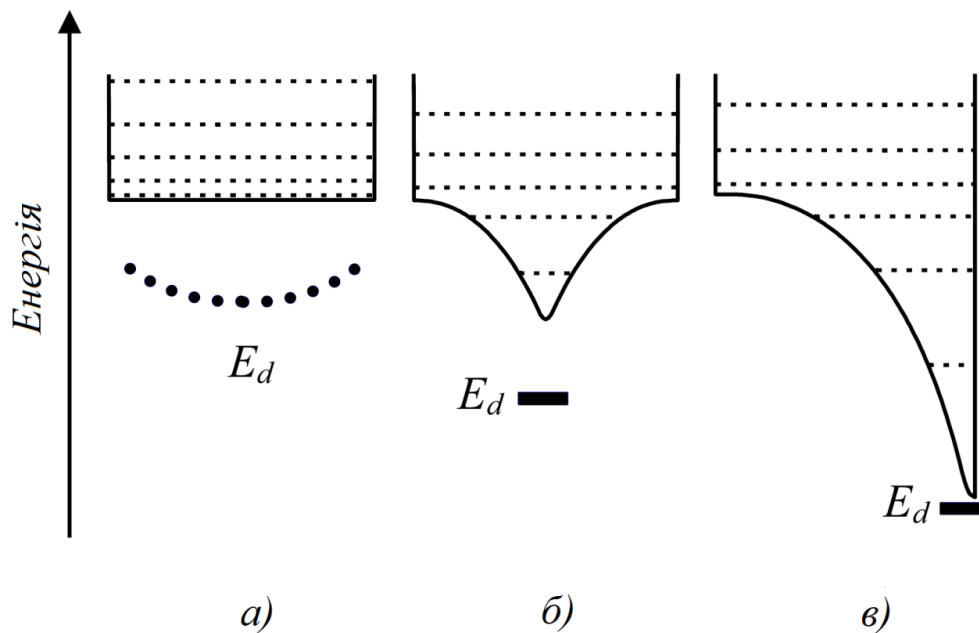


Рисунок 4.1 – Енергетичний профіль КЯ (суцільна лінія) з декількома першими рівнями просторового квантування (пунктирна лінія) при температурі 4К – а) та при підвищеній температурі – б) та в). Точкова лінія на рисунку а) схематично зображує залежність енергії основного стану донорів E_d від його положення всередині КЯ. Аналогічно на рисунках б) та в) E_d відповідає випадкам дельта-легування в центр та край

У цьому випадку виключається вплив іонізованих домішкових центрів на потенційний профіль і замість обчислення ступеня іонізації вважається, що концентрація вільних електронів є фіксованою. Для кращого порівняння вона була прийнята рівною тому ж значенню, яке було отримано для еквівалентної КЯ з потенціалом Хартрі при тій самій

температурі. Далі було знайдено енергію Фермі, за допомогою розв'язання рівняння електронейтральності (пункт 2.2.3) із заданою концентрацією вільних електронів. Щоб наблизити отримані результати до реальної ситуації, був врахований деполяризаційний зсув γ за формулою [51]

$$\tilde{E}_{ji}^2 = E_{ji}^2(1 + \gamma_{ji}), \quad (4.2)$$

де E_{ji} – «старий» набір енергетичних рівнів, що був отриманий з розв'язання рівняння Шрьодінгера, а \tilde{E}_{ji} – «новий» набір, що враховує деполяризаційний зсув, який був порахований як [51]

$$\gamma_{ji} = \frac{2e^2(N_i - N_j)}{\varepsilon_0 \varepsilon E_{ji}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left(\int_{-\infty}^z \psi_i(z') \psi_j(z') dz' \right)^2, \quad (4.3)$$

де N_i та N_j – густина електронів на відповідному рівні, $\varepsilon = 11.7$ – діелектрична проникність Si.

4.2 Результати

Для КЯ, що досліджується, величина та позиція піків поглинання міжпідзонних оптичних переходів залежить від декількох факторів, які обговорюються нижче.

4.2.1 Енергетичний зазор між рівнями, концентрація домішок, ступінь іонізації домішок

Числові дані енергії переходів для різних випадків представлені в таблицях 4.1–4.3. Спочатку порівняємо енергію переходів для КЯ з чистим прямокутним енергетичним профілем R і аналогічну КЯ з потенціалом Хартрі $R+H$ – таблиця 4.1. Слід зазначити, що зміни в енергії переходів

через деполяризаційний зсув майже однакові для обох енергетичних профілів, що розглядаються. Тому всі зміни, що обговорюються, зумовлені появою потенціалу Хартрі у випадку дельта-легованої КЯ. В таблиці 4.1 показані лише перші три енергії переходів, оскільки інші практично не залежать від температури. Також для дельта-легованої в центр КЯ шириною 10 нм енергія переходу при 77 К не змінюється, і видно, що потенціал Хартрі збільшує енергетичний зазор лише між першим та другим рівнями при 300 К.

Таблиця 4.1 – Енергія переходу $i-j$, меВ для КЯ, дельта-легованих в центр та край з різною шириною L та при різній температурі T . Енергетичний профіль: R – чиста прямокутна КЯ; $R+N$ – КЯ з прямокутним профілем та потенціалом Хартрі. Концентрація домішок $N = 1.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$

Енергетичний профіль	$T, \text{ К}$	Дельта-легування в центр КЯ						Дельта-легування в край КЯ					
		$L = 10 \text{ нм}$			$L = 20 \text{ нм}$			$L = 10 \text{ нм}$			$L = 20 \text{ нм}$		
		1-2	2-3	3-4	1-2	2-3	3-4	1-2	2-3	3-4	1-2	2-3	3-4
R	77,300	11	17	24	3	5	7	11	17	24	3	5	7
$R+N$	77	11	17	24	4	5	7	11	15	26	7	5	7
$R+N$	300	15	17	25	12	7	7	18	17	24	20	12	7

Більш помітні зміни спостерігаються для КЯ, шириною 20 нм, особливо для випадку дельта-легування в край при 300 К. Тут спостерігаються досить великі зміни для 1-2 та 2-3 енергії переходів. Цікаво також порівняти зсуви для $R+N$ енергетичних профілів при різних температурах. Дані таблиці 4.1 свідчать про те, що найбільш значні зміни відбуваються у випадку більш широких дельта-легованих в край КЯ, при більш високих температурах.

Таблиця 4.2 – Енергія переходу $i-j$, меВ для КЯ з шириною $L = 20$ нм, дельта-легованих в центр та край, з різною концентрацією домішок N_d , при температурі $T = 300$ К. Енергетичний профіль: R – чиста прямокутна КЯ; $R+H$ – КЯ з прямокутним профілем та потенціалом Хартрі

Енергетичний профіль	N_d , 10^{11} см^{-2}	Дельта-легування в центр КЯ			Дельта-легування в край КЯ		
		1–2	2–3	3–4	1–2	2–3	3–4
R	6–24	3	5	7	3	5	7
$R+H$	6	8	5	7	15	9	6
	12	12	7	7	20	12	7
	24	17	7	8	26	14	9

Енергії переходів для різних концентрацій домішок дельта-шару наведено в таблиці 4.2. Видно, що збільшення енергії переходів (знову з найбільш вираженими переходами 1–2 у випадку КЯ, легової в край) супроводжується підвищенням концентрації дельта-шару. Але слід пам'ятати, що навіть для найбільшої концентрації домішок, значення повинно лежати на напівпровідниковій стороні переходу Мотта метал-напівпровідник (пункт 2.1.1).

Варто також зазначити, що відсоток іонізованих домішок зменшується зі збільшенням концентрації домішок, як про це свідчить таблиця 4.3.

Таблиця 4.3 – Ступінь іонізації домішок N_d^+/N_d , % для КЯ, з шириною $L = 20$ нм, з різною концентрацією домішок N_d та при різній температурі T

N_d , 10^{11} см^{-2}	Дельта-легування в центр КЯ		Дельта-легування в край КЯ	
	$T = 77 \text{ К}$	$T = 300 \text{ К}$	$T = 77 \text{ К}$	$T = 300 \text{ К}$
6	14	82	21	81
12	9	70	14	65
24	7	55	9	50

4.2.2 Матричні елементи

Матричні елементи (МЕ) оптичних переходів між сусідніми енергетичними рівнями КЯ з енергетичним профілем $R+H$ є більш чутливими до зміни температури, в порівнянні з енергетичними зазорами між відповідними парами рівнів. Це добре видно з таблиці 4.4, де представлені квадрати МЕ для перших шести сусідніх оптичних переходів. Наприклад, помітні зміни між результатами, отриманими для енергетичних профілів $R+H$ та R у випадку дельта-легованих в край КЯ, шириною 20 нм, для перших п'яти оптичних переходів.

Таблиця 4.4 – Квадрати матричних елементів (10^{-18} м^2) між сусідніми енергетичними рівнями $i-j$ для КЯ, дельта-легованих в центр та край з різною шириною L та при різній температурі T . Енергетичний профіль: R – чиста прямокутна КЯ; $R+H$ – КЯ з прямокутним профілем та потенціалом Хартрі. Концентрація домішок $N = 1.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$

$T, \text{ K}$	Енергетичний профіль	Дельта-легування в центр КЯ						Дельта-легування в край КЯ					
		1-2	2-3	3-4	4-5	5-6	6-7	1-2	2-3	3-4	4-5	5-6	6-7
$L = 10 \text{ нм}$													
77,300	R	3.9	4.6	4.8	5.0	5.2	5.5	3.9	4.6	4.8	5.0	5.2	5.5
77	$R+H$	3.8	4.6	4.8	5.0	5.2	5.5	3.8	4.5	4.8	4.9	5.2	5.5
300	$R+H$	3.0	4.9	4.9	5.1	5.2	5.5	1.6	3.9	4.5	4.8	5.1	5.6
$L = 20 \text{ нм}$													
77,300	R	14	17	17	18	18	18	14	17	17	18	18	18
77	$R+H$	11	18	18	18	18	18	4	13	16	17	17	18
300	$R+H$	4	14	19	20	19	19	1.3	4	9	14	16	17

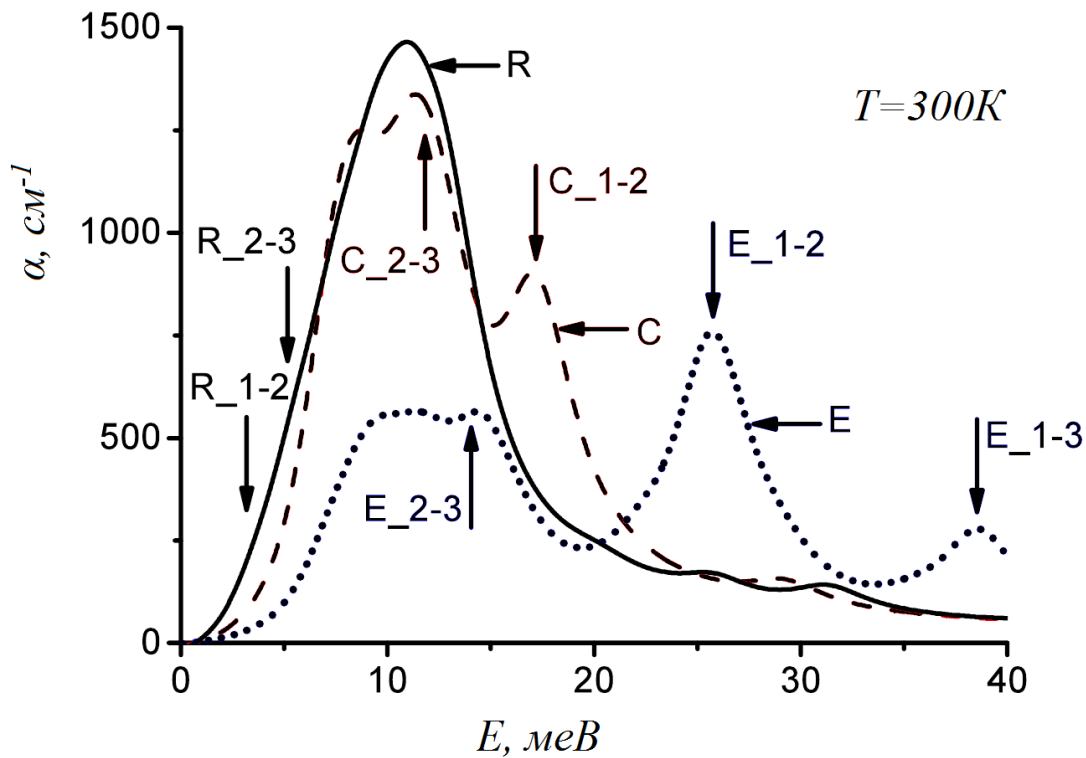
Тоді як енергетичний зазор змінюються лише для перших двох (табл. 4.1). МЕ 1–2 переходів зменшуються з температурою для всіх розглянутих випадків у таблиці 4.4, причому найбільш різке зниження (більше, ніж на порядок) у випадку широкої, дельта-легованої в край КЯ при 300 К. Водночас МЕ для переходів між вищими енергетичними

рівнями у випадку КЯ, дельта-легованої в центр, може бути більшим для КЯ з потенціалом Хартрі, ніж для чистої прямокутної КЯ. Це, очевидно, пов'язано з різною структурою хвильових функцій і, отже, різним їх перекриттям для V-подібної частини енергетичного профілю порівняно з випадком прямокутної частини КЯ.

4.2.3 Поглинання в прямокутних та дельта-легованих КЯ

Цікаво проаналізувати, наскільки значними є відмінності коефіцієнтів поглинання в прямокутних та дельта-легованих КЯ. З таблиці 4.1 видно, що найбільш виражені зміни слід очікувати для більш широких КЯ з більшою концентрацією домішок та при більш високій температурі. Тому на рисунку 4.2 зображено криві коефіцієнтів поглинання для КЯ, шириною 20 нм, з концентрацією домішок $N = 2,4 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$, при температурі $T = 300 \text{ К}$ для чистої прямокутної (R), дельта-легованої в центр (С), та край (Е) КЯ. Для наочності вертикальними стрілками показано лише 1–2 та 2–3 лінії поглинання для всіх КЯ, а також 1–3 для випадку легування в край.

Як відомо, енергія сусідніх переходів збільшується зі збільшенням номеру початкового стану для прямокутних КЯ. Але це не так у випадку з дельта-легованими КЯ для (принаймні) кількох перших оптичних переходів. Для випадку дельта-легування в центр основний «червоний» пік, максимум якого становить близько 10 меВ, майже такий самий, як у випадку прямокутної КЯ, за винятком лише того, що лінія поглинання 2–3 має більшу енергію переходу, ніж інші, такі як 3–4, 4–5, 5–6 оптичні переходи (не показано на рис. 4.2), а найбільша енергія переходу – у лінії 1–2, що є результатом іонізації дельта-шару. Дельта-легування в центр не змінює симетрію структури, і тому правила відбору є ідентичними як і для випадку прямокутної КЯ.



Чистої прямокутної КЯ – суцільна лінія; дельта-легованої в центр КЯ – пунктирна лінія; дельта-легованої в край КЯ – точкова лінія. Вертикальні стрілки зображують оптичні переходи між 1–2, 2–3 та 1–3 енергетичними рівнями. Позначення R (rectangular), C (center) та E (edge) відповідають випадкам прямокутної, дельта-легованої в центр та в край КЯ. Концентрація домішок $N = 2.4 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Ширина КЯ $L = 20 \text{ нм}$
Рисунок 4.2 – Коефіцієнти поглинання

Поглинання у випадку дельта-легування в край відрізняється в більшій мірі, як за формою, так і за амплітудою від випадку дельта-легування в центр в порівнянні з аналогічною прямокутною КЯ, і це також є результатом іонізації дельта-шару. У першу чергу це стосується синій зсув ліній поглинання 1–2 та 2–3. Крім того, МЕ всіх розглянутих переходів при дельта-легуванні в край є меншими, ніж при дельта-легуванні в центр (табл. 4.4), і це призводить до менших “червоних” піків у випадку КЯ, легової в край. Дельта-легування в край змінює симетрію КЯ в напрямку z і, отже, порушує правила відбору в тому сенсі, що переходи між рівнями однакової парності тепер стають дозволеними.

4.2.4 Іонізація дельта-шару та коефіцієнт поглинання

Розглянемо вплив зміни ступеню іонізації домішок на коефіцієнти поглинання для КЯ дельта-легованих в центр та край. Результати відповідних обчислень представлені на рисунку 4.3. Ступінь іонізації для випадків, розглянутих на даному рисунку, наведено в таблиці 4.3. Спочатку проаналізуємо очевидні особливості представлених кривих. Різна шкала по вертикальній осі на рисунках 4.3, а та 4.3, б зумовлена тим, що підвищення ступеню іонізації домішок і, отже, збільшення кількості електронів на перших рівнях супроводжується збільшенням коефіцієнта поглинання.

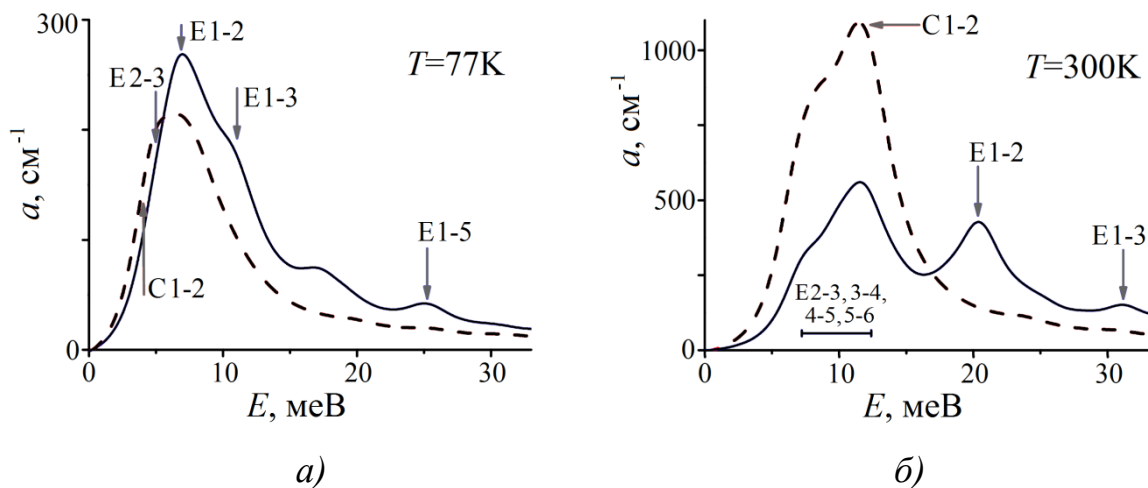


Рисунок 4.3 – Коефіцієнти поглинання для КЯ, дельта-легованих в центр (пунктирна лінія) та дельта-легованих в край (суцільна лінія) при температурі 77К – а) та 300К – б). Концентрація домішок $N = 1.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Ширина КЯ $L = 20 \text{ нм}$. Позначення С (center) та Е (edge) відповідають випадкам дельта-легованої в центр та в край КЯ

Крім того, можна побачити різну поведінку коефіцієнтів поглинання для випадків легованих в центр та край КЯ в різних спектральних діапазонах як при 77 К, так і при 300 К. Така поведінка потребує більш ретельного розгляду. На рисунку 4.3, а видно, що поглинання при $T = 77 \text{ К}$ для випадку легування в центр, вище, ніж для легування в край на

«червоному» кінці спектру (нижче 5 меВ), хоча ступінь іонізації є меншою, як видно з таблиці 4.3. Це пов'язано з тим, що для КЯ, дельта-легованої в центр, найнижча енергія переходу становить 4 меВ, тоді як для легованої в край – 5 меВ, а амплітуди поглинання для обох переходів приблизно рівні. І з даних таблиці 4.1 можна зробити висновок, що енергія сусідніх переходів послідовно збільшується, починаючи з переходу 1–2 для випадку дельта-легування в центр, у відповідності з випадком прямокутної КЯ. Це означає, що V-подібна добавка до прямокутної КЯ в цьому випадку є дуже малою, і це лише незначно збільшує енергію переходу 1–2 порівняно з чистою прямокутною КЯ. Але у випадку дельта-легування в край, V-подібна частина КЯ є глибшою, і перший енергетичний рівень розташований глибоко всередині вузької частини енергетичного профілю, а енергія переходу 1–2 сильно зростає і стає більшою ніж енергія переходу 2–3. Усі інші переходи підкоряються згаданому правилу щодо збільшення енергії для послідовних переходів, і в обох випадках найбільш виражені переходи (2–3, 3–4, 4–5, 5–6), які охоплюють енергетичний діапазон 5–11 меВ. Ще раз важливо відзначити, що дельта-легування в центр не змінює правила відбору, а дельта-легування в край порушує симетрію структури, а тому заборонені для чистих прямокутних КЯ переходи на зразок 1–3, 1–5 стають тепер дозволеними. Що стосується рисунку 4.3, б, можна побачити важливий факт, що переходи 1–2 мають найбільшу енергію (див. також таблицю 4.1) серед сусідніх переходів як для дельта-легування в центр, так і для дельта-легування в край. Тому інші переходи з першого енергетичного рівня також мають синій зсув з температурою (наприклад, положення ліній поглинання E 1–3 на рисунку 4.3, а та б). Також спостерігається той факт, що поглинання у випадку дельта-легування в центр значно вище, ніж у випадку дельта-легування в край в низькому енергетичному діапазоні, а, приблизно при 17 меВ, ситуація змінюється на протилежну. Пояснення цього є подібним поданому в 4.2.3 – тобто тому, що ME для переходів E при низьких значеннях енергії (рис. 4.3, б) є меншими, ніж для переходів C – таблиця 4.4.

4.2.5 Залежність від концентрації домішок

Для аналізування впливу концентрації домішок дельта-шару на міжпідзонне поглинання, розглянемо спочатку результати для КЯ, дельта-легованих в край, з різними концентраціями домішок – рисунок 4.4.

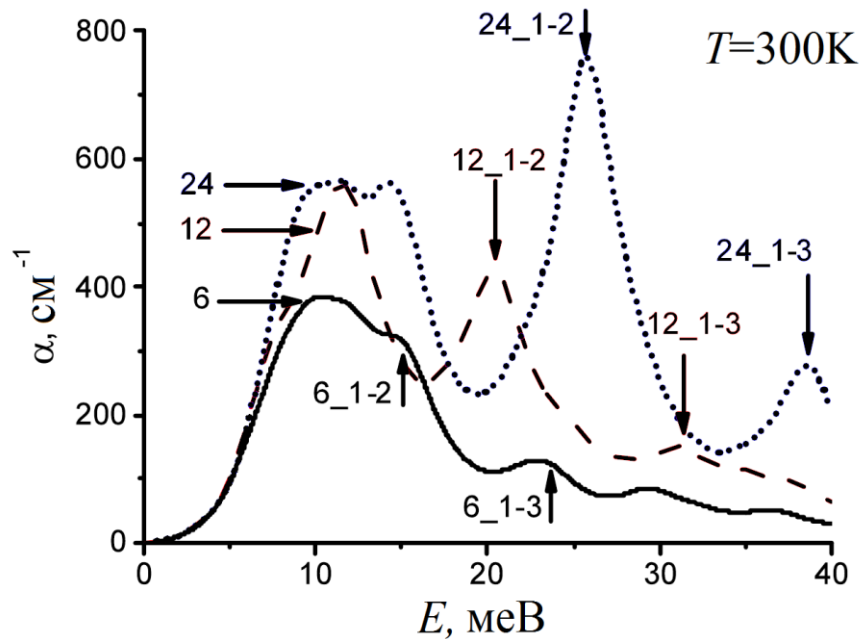


Рисунок 4.4 – Криві поглинання для КЯ, дельта-легованих в край з різною концентрацією домішок: суцільна лінія – $N = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, пунктирна лінія – $N = 12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ та точкова лінія – $N = 24 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$.
Ширина КЯ $L = 20 \text{ нм}$. $T=300 \text{ К}$

Числа поруч із парою номерів рівнів, які задіяні в переході, вказують концентрацію домішок, для якої були обчислені криві, в одиницях 10^{11} см^{-2} . Щоб не ускладнювати зображення, лінії поглинання відображені лише для переходів 1–2 та 1–3. Водночас на ці переходи найбільше впливає концентрація домішок. Слід зазначити, що всі інші більш-менш помітні лінії поглинання з більш високими початковими енергетичними станами розташовані в області низьких енергій для кожної з кривих рисунку 4.4. Вже були розглянуті особливості поглинання КЯ, дельта-легованих в край з концентраціями $12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ та $24 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (див. обговорення рис. 4.2 і 4.3, б). Тому сфокусуємо увагу на те,

що підвищення концентрації домішок супроводжується збільшенням енергії переходу в першу чергу для переходів із першого початкового енергетичного стану. Ще однією особливістю є той факт, що всі криві для температури 300 К мають різний ступінь іонізації домішок, як показано в таблиці 4.3. Але, тим не менш, кількість іонізованих донорів збільшується зі збільшенням концентрації домішок при тій самій температурі, і, що є природнім, потенціал Хартрі залежить від кількості електронів та іонізованих домішок, а не від ступеня іонізації.

Порівнюючи випадки КЯ, дельта-легованих в край та центр, можна сказати, що у випадку легування в центр (так само, як і у випадку легування в край) спостерігається збільшення енергії переходу, в першу чергу для переходів із першого початкового енергетичного стану, насамперед переходи 1–2 (рис. 4.5, 4.6).

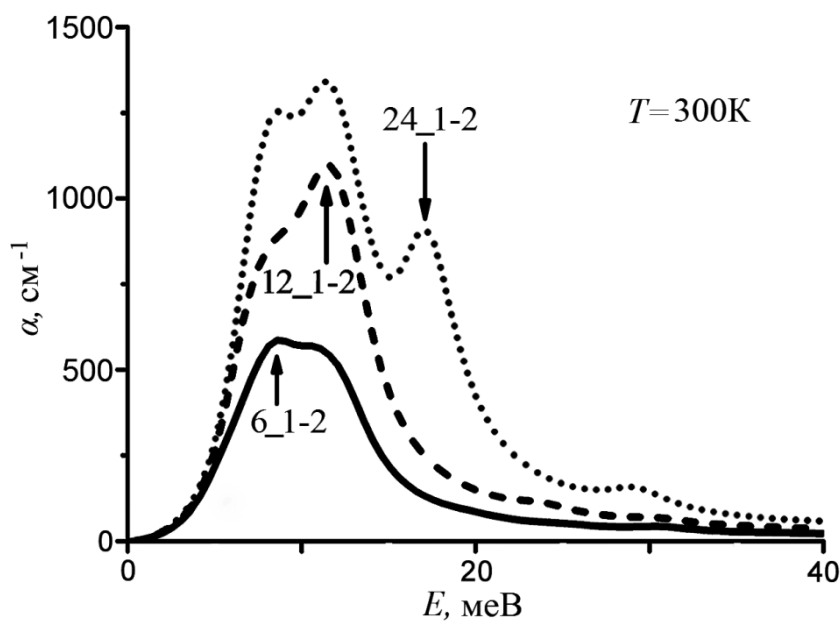


Рисунок 4.5 – Криві поглинання для КЯ, дельта-легованих у центр з різною концентрацією домішок: суцільна лінія – $N = 6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, пунктирна лінія – $N = 12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ та точкова лінія – $N = 24 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.
Ширина КЯ $L = 20 \text{ nm}$. $T=300 \text{ K}$

Але, синій зсув цих переходів є меншим, ніж у випадку дельта-легування в край, за величиною, а піки поглинання є вищими. Це пояснюється тим, що квадрати МЕ відповідних переходів у випадку

дельта-легування в край є меншими, ніж у випадку дельта-легування в центр (табл. 4.4).

4.2.6 Квантові ями різної ширини

Вплив ширини КЯ на коефіцієнт поглинання для дельта-легованих КЯ представлено на рисунку 4.6, де зображено криві поглинання для вузької (велика літера N біля вертикальної стрілки) та широкої (велика літера W біля вертикальної стрілки) КЯ з їх шириною $L=10$ і 20 нм для кривих N та W відповідно. Обидві КЯ є дельта-легованими фосфором з концентрацією $N_d = 12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

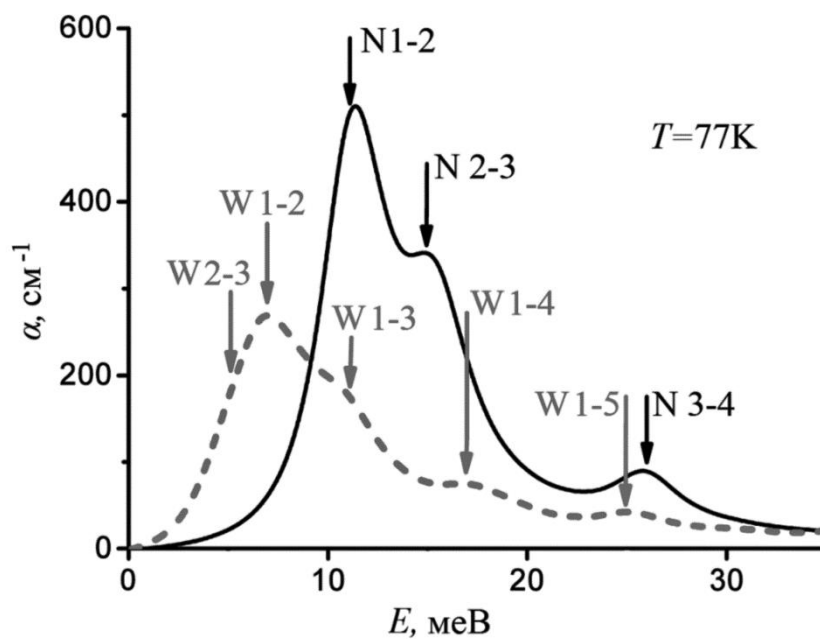


Рисунок 4.6 – Криві поглинання для вузької (суцільна лінія) та широкої (пунктирна лінія) дельта-легованої в край КЯ. Ширина – $L = 10$ нм та $L = 20$ нм відповідають літерам N (narrow) та W (wide). Концентрація домішок – $N = 12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Ступінь іонізації становить 12 та 14 % для вузьких та широких КЯ, відповідно

Випадок широкої дельта-легованої КЯ при температурі $T=77\text{K}$ вже був обговорений (див. пояснення до рис. 4.3, а). Тут лише слід відзначити,

що енергії оптичних переходів 3–4, 4–5, 5–6 лежать між вертикальними стрілками W_{2-3} та W_{1-3} . Отже, розглянемо випадок вузької КЯ. З рисунка видно, що всі лінії поглинання мають синій зсув у порівнянні з кривими для більш широких КЯ. Але набагато цікавішим є той факт, що всі лінії поглинання широких КЯ (1–2, 2–3) розташовані в протилежному порядку в порівнянні з більш вузькими КЯ, хоча ступінь іонізації не сильно відрізняється. Вони становлять 14 % для КЯ, шириною 20 нм та 12 % для КЯ, шириною 10 нм. Розрахунки показують, що це тому, що в разі широкої КЯ перший енергетичний рівень розміщується всередині вузької V-подібної добавки до енергетичного профілю КЯ, тоді як у випадку вузької КЯ перший рівень все ще знаходиться у прямокутній частині КЯ. У результаті негативний заряд електронів на перших підзонах широкої КЯ локалізується у її V-частині – ближче до позитивно зарядженого дельта-шару, що робить потенціал Хартрі глибшим в порівнянні з випадком вузької КЯ. Все це означає, що енергія переходу 1–2 більше, ніж 2–3 для широкої КЯ, а для вузької – навпаки. Тому на енергетичну структуру вузької КЯ сильно не впливає іонізація дельта-шару.

4.3 Нелінійне поглинання та заломлення світла в дельта-легованих КЯ

У цьому розділі розрахований та проаналізований вплив нелінійних оптичних ефектів (ефект Керра) на загальний коефіцієнт поглинання в $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ, дельта-легованих в центр, або в край при різних температурах. Метою даного дослідження є спроба оцінити наскільки нелінійні ефекти зменшують лінійну частину поглинання при падаючому лазерному випромінюванні з інтенсивністю $I = 0,5 \text{ МВт}/\text{см}^2$. Це типове значення інтенсивності i , як ми вважаємо, може дати уявлення про ступінь впливу нелінійних ефектів на загальне поглинання.

4.3.1 Метод

Лінійна частина коефіцієнта поглинання $\alpha_{ij}^{(1)}(\omega)$ розраховувалась за формулою (4.1), а нелінійна $\alpha_{ij}^{(3)}(\omega, I)$ знайдена як [53]:

$$\alpha_{ij}^{(3)}(\omega, I) = -\frac{\omega\mu_0 I}{2n^2\varepsilon\varepsilon_0} |M_{ij}|^2 \frac{\sigma_{ij}\Gamma}{\{(E_{ji} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2\}^2} \times$$

$$\times \left[4|M_{ij}|^2 - \frac{|M_{jj} - M_{ii}|^2 \{(E_{ji} - \hbar\omega)^2 - \Gamma^2 + (E_{ji} - \hbar\omega)\}}{E_{ji}^2 + \Gamma^2} \right], \quad (4.4)$$

де ω – кутова частота фотона що поглинається, ε – діелектрична проникність (11.7 для кремнію), μ_0 – магнітна проникність, $n = \sqrt{\varepsilon}$ – коефіцієнт заломлення матеріалу (3,4926 для кремнію), E_i та E_j – енергетичні рівні початкової та кінцевої підзон поглинального переходу, $E_{ji} = E_j - E_i$ – енергія переходу, I – оптична інтенсивність падаючої електромагнітної хвилі (було прийнято однаковою для всіх частот $I = 0.5$ МВт/см²), $\Gamma = \hbar/\tau$ – уширення (напівширина) лінії поглинання, де τ – час міжпідзонної безвипромінюваної релаксації. σ_{ij} – різниця концентрацій носіїв між i та j підзонами:

$$\sigma_{ij} = \frac{m^* k_b T}{L\pi\hbar^2} \ln \left[\frac{1 + \exp[(E_f - E_i)/k_b T]}{1 + \exp[(E_f - E_j)/k_b T]} \right], \quad (4.5)$$

де m^* – ефективна маса електронів, k_b – стала Больцмана, T – температура решітки, L – ширина КЯ. Дипольний матричний елемент:

$$M_{ab} = \int \psi_a^*(z) |e| z \psi_b(z) dz, \quad (a, b = 1 \dots N_S), \quad (4.6)$$

де N_S – кількість найнижчих врахованих рівнів, z – координата вздовж напрямку росту структури, e – одиничний заряд, $\psi_a^*(z)$ та $\psi_b^*(z)$ – хвильові функції відповідних рівнів. Кількість врахованих підзон було обрано $N_S = 7$ (обґрунтування даного вибору було наведено в 2.2.2).

Відповідно, повний коефіцієнт поглинання:

$$\alpha_{ij}(\omega) = \alpha_{ij}^{(1)}(\omega) + \alpha_{ij}^{(3)}(\omega, I), \quad (4.7)$$

де

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \sum_{i=1}^{N_S-1} \sum_{j=i+1}^{N_S} \alpha_{ij}^{(1)}(\omega), \quad (4.8)$$

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = \sum_{i=1}^{N_S-1} \sum_{j=i+1}^{N_S} \alpha_{ij}^{(3)}(\omega, I). \quad (4.9)$$

Лінійна $\frac{\Delta n_{ij}^{(1)}(\omega)}{n}$ та нелінійна $\frac{\Delta n_{ij}^{(3)}(\omega, I)}{n}$ зміни коефіцієнта відбиття, що визначаються переходами між i та j підзонами, обчислювалися [53]:

$$\frac{\Delta n_{ij}^{(1)}(\omega)}{n} = \frac{1}{2n^2 \varepsilon \varepsilon_0} |M_{ij}|^2 \frac{\sigma_{ij}(E_{ji} - \hbar\omega)}{(E_{ji} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n_{ij}^{(3)}(\omega, I)}{n} = & -\frac{\mu_0 c I}{4n^3 \varepsilon \varepsilon_0} |M_{ij}|^2 \frac{\sigma_{ij}}{[(E_{ji} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]^2} \times \\ & \times \left[4(E_{ji} - \hbar\omega) |M_{ij}|^2 - \frac{(M_{jj} - M_{ii})^2}{E_{ji}^2 + \Gamma^2} \times [(E_{ji} - \hbar\omega)[(E_{ji} - \hbar\omega)E_{ji} - \Gamma^2(2E_{ji} - \hbar\omega)]] \right]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Відповідно, зміна повного коефіцієнта відбиття:

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n}, \quad (4.12)$$

де

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n} = \sum_{i=1}^{N_S-1} \sum_{j=i+1}^{N_S} \frac{\Delta n_{ij}^{(1)}(\omega)}{n}, \quad (4.13)$$

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n} = \sum_{i=1}^{N_S-1} \sum_{j=i+1}^{N_S} \frac{\Delta n_{ij}^{(3)}(\omega, I)}{n}. \quad (4.14)$$

Енергетичні рівні, а також їх хвильові функції, рівень Фермі були отримані чисельно з використанням самоузгодженого розв'язання рівнянь Шрьодінгера, Пуассона та електронейтральності в поєднанні з розрахунком ЕЗД (підрозділ 2.2).

У цьому розділі досліджується $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ, дельта-легована фосфором в центр або в край (вибір структури та її параметри детально обговорювались в пункті 2). Ширина КЯ $L = 20$ нм. Концентрація донорів – $N_d = 1.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Товщина дельта-шару 1 нм.

4.3.2 Результати

На рисунку 4.7 зображено енергетичні профілі та перші 7 хвильових функцій, положення яких на осі енергій задається відповідним рівнем просторового квантування, двох структур (дельта-легована в центр КЯ – а) та дельта-легована в край КЯ – б)), для випадку $T = 300 \text{ K}$, який сприяє найбільшому викривленню енергетичного профілю. Розрахунки були виконані для трьох температур – 77 K , 200 K , 300 K .

З рисунка 4.7 виходить, що ПХ, який утворений іонізованим дельта-шаром домішок і електронами на рівнях створюють додаткову яму, яка накладається на прямокутну КЯ. В результаті найпомітніші відмінності

між двома профілями з точки зору оптичних властивостей це: по-перше, глибший ПХ у випадку дельта-легування в край, що призводить до більшої енергії переходу^{1–2}; та, по-друге, КЯ, дельта-легована в край, є несиметричною, що дозволяє переходи між підзонами однакової парності, заборонені правилами вибору для симетричних структур. Те ж саме (хоча і меншою мірою) спостерігається і для більш низьких температур. У поданому випадку на кожен з розрахованих характеристик впливають декілька різних переходів, що є особливо важливим для більш високих температур.

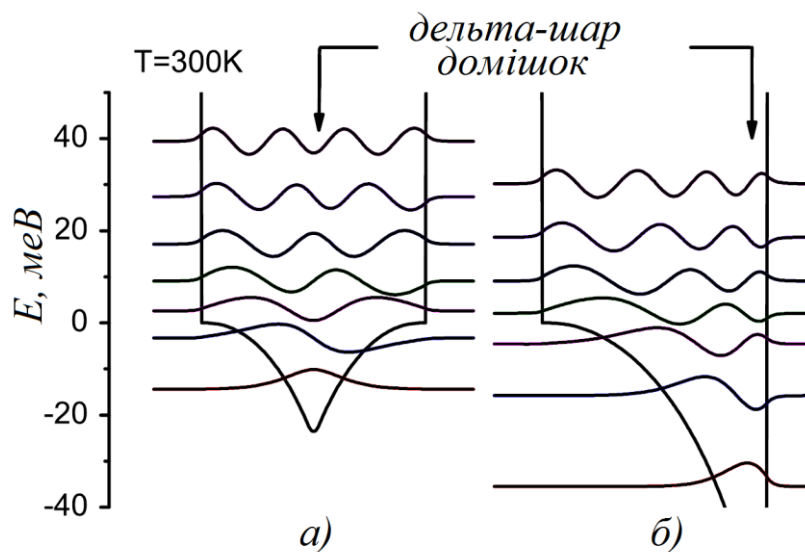


Рисунок 4.7 – Енергетичні профілі та перші сім хвильових функцій КЯ, дельта-легованих в центр – а) та край – б). Нуль по енергії відповідає дну прямокутної КЯ

Нелінійне поглинання

Нелінійна частина поглинання в представленій моделі (ефект Керра) завжди є негативною і пропорційною до інтенсивності падаючого випромінювання I , і її можна екстраполювати на інші значення I . Однак при вибраній досить помірній інтенсивності лазера $0,5 \text{ МВт/см}^2$ його відносне значення є досить великим (але все ще недостатньо велике, щоб зробити яму на вершині піку, як повідомлялося, наприклад, у [54]), а для більшої інтенсивності модель може стати неприйнятною.

Як правило, нелінійне поглинання зменшує лінійну частину (рис. 4.8): створює найпомітніше відносне зменшення навколо найбільших піків поглинання.

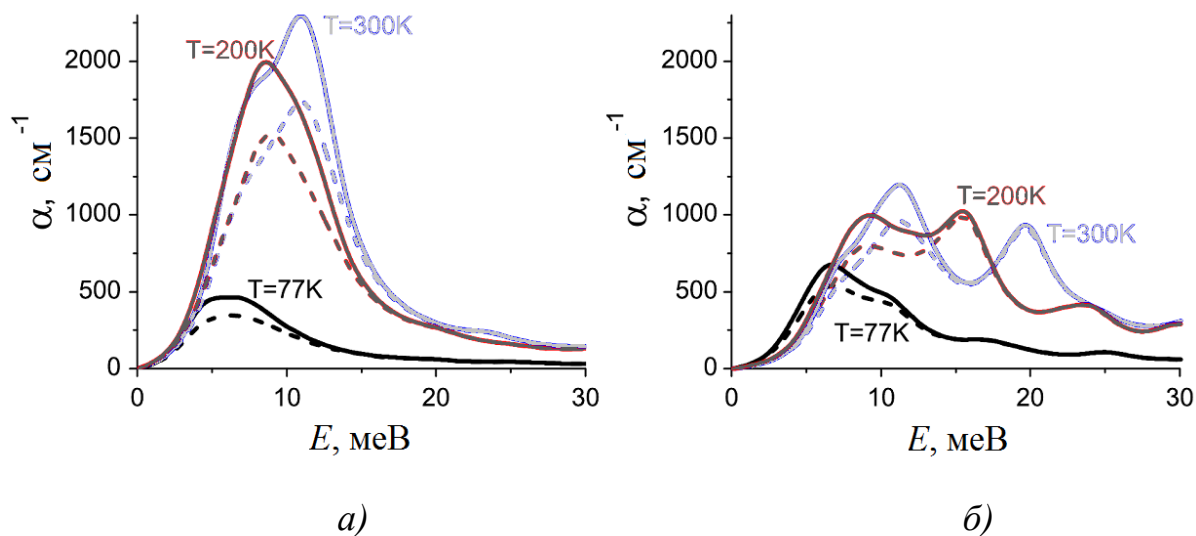


Рисунок 4.8 – Коефіцієнт поглинання для КЯ, дельта-легованих у центр – а) та край – б) при різних температурах. $T=77, 200, 300\text{K}$. Суцільні лінії – лінійне поглинання, пунктирні лінії – повне поглинання, включаючи нелінійну частину (ефект Керра). Інтенсивність лазерного випромінювання – $I = 0.5 \text{ МВт/см}^2$

Слід зауважити, однак, що другий пік поглинання (спричинений майже виключно переходом 1–2) у випадку КЯ, дельта легованої в край, при більш високих температурах (рис. 4.8, б) має дуже малий вплив нелінійних ефектів, порівняно з першим піком (викликаний низкою інших переходів між найближчими підзонами, таких як 2–3, 3–4 і т. д.). Причина полягає в тому, що відносна нелінійність для переходів між вищими рівнями є більшою, ніж для переходів між нижчими (таких як 1–2), навіть незважаючи на дещо меншу заселеність. Це також є причиною того, що відносна нелінійна частина поглинання для широких структур більша, ніж для дворівневих систем.

Зміна коефіцієнта заломлення

На відміну від поглинання зміна показника заломлення (рис. 4.9) є порівняно невеликою і, ймовірно, нею можна нехтувати при проектуванні

електронних пристроїв на базі представлених структур. Несподівано нелінійна зміна показника заломлення є порівняною за порядком з лінійною.

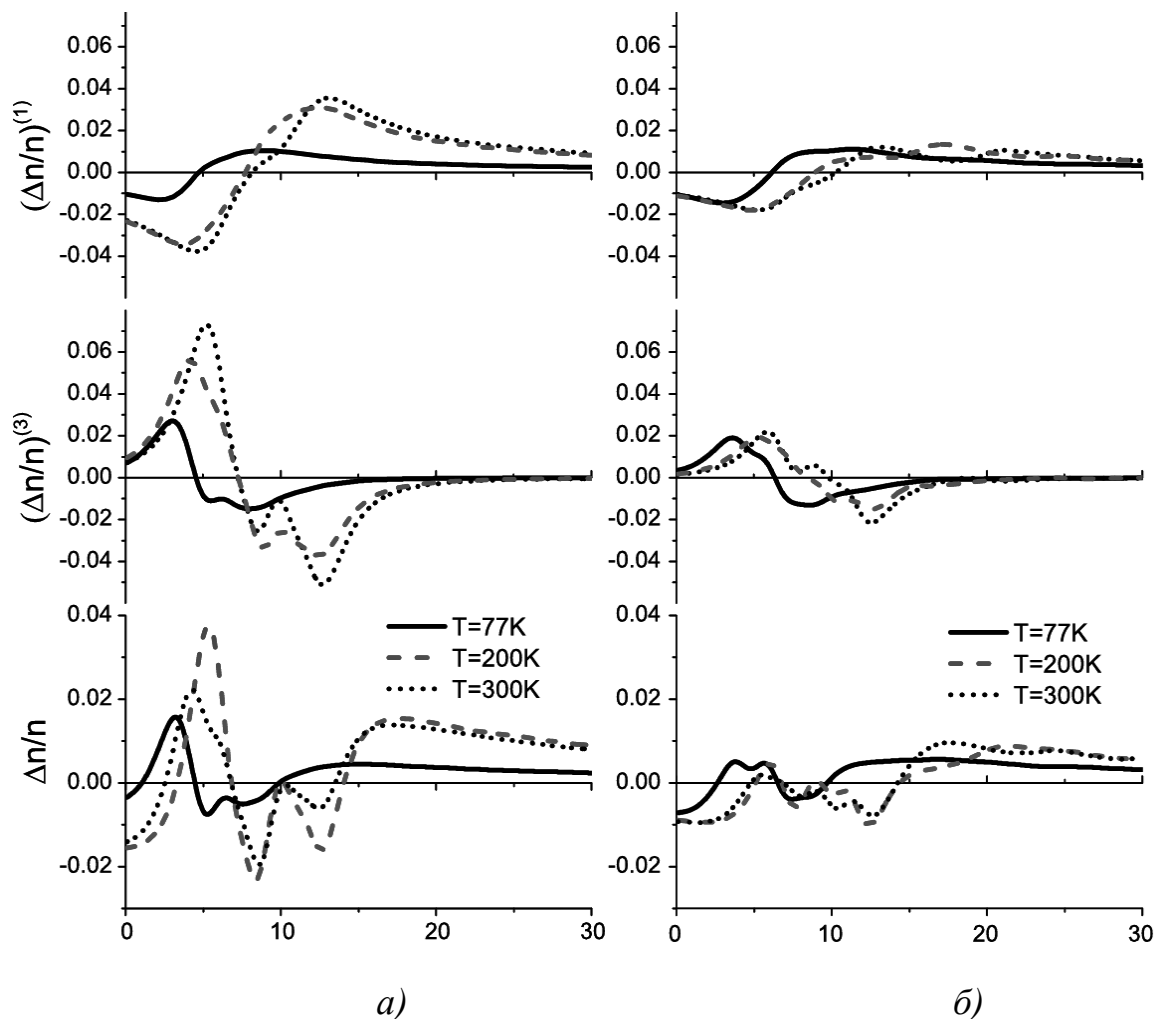


Рисунок 4.9 – Лінійна, нелінійна та повна (зверху вниз) зміна відносного коефіцієнта заломлення для КЯ, дельта-легованих в центр – а) та край – б), при різних температурах

Але оскільки зміна заломлення насправді є реальною частиною сприйнятливості, а поглинання є уявною [53], припущення про те, що нелінійна частина менша, ніж лінійна, все ще виконується. Поки лінійні та нелінійні частини зміни показника заломлення мають протилежні знаки, нелінійність ефективно послаблює повну зміну заломлення навколо пікових позицій, зменшуючи її на кілька відсотків. Уся складна структура підзон забезпечує певні хаотичні стрибки, хоча їх можна повністю згладити в разі вибору більшої величини уширення.

4.4 Висновки

У цьому розділі досліджений вплив іонізації дельта-шару домішок, розташованого в межах КЯ, на міжпідзонне поглинання КЯ. Була використана $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ, дельта-легована фосфором в центр або край. Вивчений вплив ступеню іонізації домішок, ширини КЯ та концентрації домішок на міжпідзонне поглинання КЯ. Було виявлено, що поява та подальша зміна ПХ внаслідок іонізації дельта-шару призводить до значних змін у коефіцієнті міжпідзонного поглинання КЯ. Також показано, що найбільш примітною особливістю є синій зсув 1–2 (більш виражений) та 2–3 (менш виражений) лінії поглинання, які є найважливішими для міжпідзонного поглинання. Цей зсув для 1–2 лінії поглинання досягає 23 меВ в широких КЯ, дельта-легованих в край, і 14 меВ дельта-легованих в центр, як видно з таблиці 4.2. Ця особливість може бути використана для модуляції ТГц випромінювання (детальніше про це йдеться в розділі 5). Ще одна особливість полягає в тому, що дельта-легування в край змінює симетрію КЯ у напрямку росту z . Це означає, що стають дозволеними оптичні переходи між станами з однаковою парністю, що заборонені для прямокутних КЯ. Було також показано, що МЕ для міжпідзонних оптичних переходів більш чутливі до зміни потенціалу Хартрі, ніж до величини міжпідзонної енергії.

Що стосується впливу нелінійної частини поглинання, можна підсумувати, що вона впливає, сильніше на переходи між вищими підзонами, ніж на переходи між нижчими, тому нелінійна частина поглинання в широких структурах сильніша, ніж в дворівневих системах. Зміна нелінійного показника заломлення при пікових значеннях є порівнянною з лінійною частиною і сильно послаблює її в областях максимумів поглинання. Досліджені явища можуть бути корисними для створення нових типів перетворюваних оптичних приладів у ТГц-області на основі поглинання дельта-легованих КЯ.

РОЗДІЛ 5

ТГЦ-МОДУЛЯТОР НА БАЗІ ДЕЛЬТА-ЛЕГОВАНИХ КЯ

У якості моделі для дослідження була використана $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}/\text{Si}/\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ КЯ, шириною 10 та 20 нм, дельта-легована фосфором в центр або край. До обґрунтування вибору матеріалу, що представлений в 2.1, також можна додати, що вибраний матеріал є більш привабливим для використання в ТГц діапазоні, в порівнянні з III-V сполуками, оскільки він не є полярним, а тому має більш низьке поглинання в цьому діапазоні.

Для теоретичної перевірки ідеї було б добре обчислити коефіцієнти міжпідзонного поглинання у КЯ, залежно від прикладеного електричного поля. Але для цього необхідно самоузгоджено розв'язати рівняння Шрьодінгера, Пуассона та електронейтральності, включаючи моделювання домішкового пробою методом Монте-Карло, оскільки лише цей метод може дати прийнятну картину процесу. Однак оскільки використання цього методу моделювання не є ціллю даної роботи, на етапі висування теоретичної ідеї можна піти іншим шляхом [55]. Можна припустити, що є можливість отримати будь-яку прийнятну ступінь іонізації домішок, яка досягається шляхом прикладення зовнішнього електричного поля, результат якої відповідає вже дослідженому раніше (табл. 3.3, 3.4, 4.3, 4.4) відсотковому вмісту іонізації домішок, використовуючи лише температуру (без застосування електричного поля) в діапазоні 4–300К. Це означає, що є відомими як структура енергетичних рівнів просторового квантування, так і відповідні хвильові функції. Далі, задаючи ступінь іонізації, можна обчислити енергію Фермі з рівняння електронейтральності. Потім, розв'язуючи рівняння Пуассона (пункт 2.2.3), з температурою зразка 4 або 77 К, знаходимо ПХ. В результаті чого, розв'язуючи рівняння Шрьодінгера (пункт 2.2.1), і знаходячи новий набір енергетичних рівнів та їх хвильових функцій, знову підставляємо їх в рівняння електронейтральності та Пуассона з тим же рівнем іонізації домішок, і т. д. Після декількох ітерацій

отримуємо стабільний розв'язок, коли різниця між останнім та попереднім значеннями рівня Фермі стає менше 0,1 меВ і обчислення зупиняються. Отримані таким чином рівні енергії (включаючи енергію Фермі) та їх хвильові функції додатково використовуються для обчислення коефіцієнта міжпідзонного поглинання, за методом, який описаний в розділі 4.1.

5.1 Результати

Одним з найважливіших параметрів будь-якого модулятора, включаючи ТГц, може бути відношення максимальної I_{max} та мінімальної I_{min} інтенсивностей випромінювання, що проходить через пристрій. Виходячи із закону Бугера, можна написати, що це співвідношення буде пропорційним до $\exp [(\alpha_{max} - \alpha_{min}) l]$, де l – оптична довжина в активному середовищі і α_{max} , α_{min} – максимальний та мінімальний коефіцієнти поглинання відповідно на одній і тій же частоті. Отже, подивимося на результати розрахунків з цієї точки зору.

5.1.1 Попередні зауваження

На рисунках 5.1, 5.2 зображено криві поглинання для КЯ, шириною 10 нм та на рисунках 5.3, 5.4 для КЯ шириною 20 нм. Найбільш вираженого впливу ступеня домішкової іонізації на прозорість структури очевидно слід очікувати при низьких температурах, коли без електричного поля всі електрони є вимороженими на донорах і ТГц випромінювання може легко пройти через структуру.

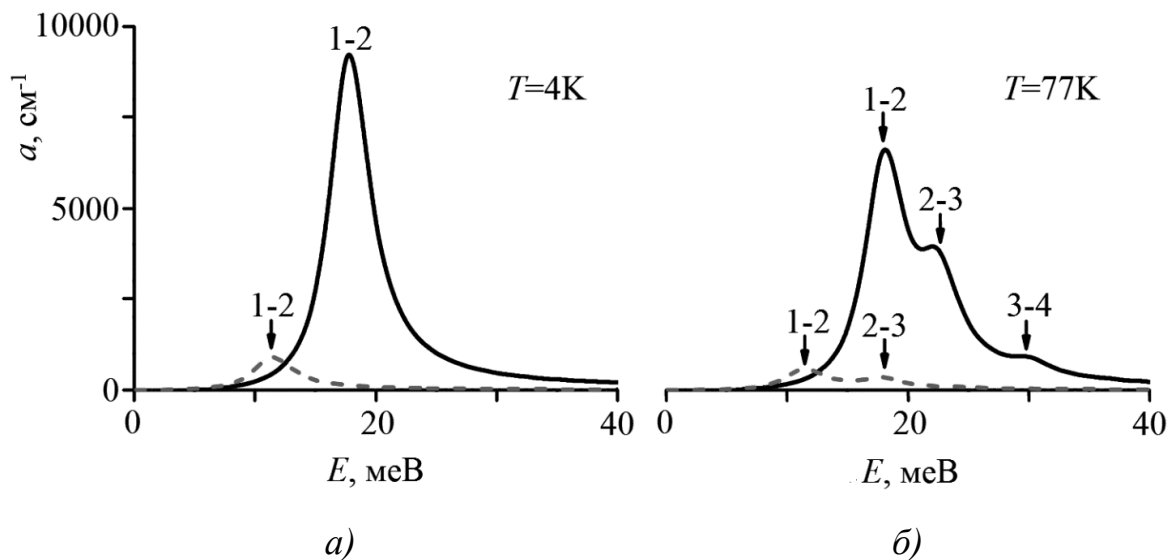


Рисунок 5.1 – Коефіцієнти поглинання для КЯ, дельта-легованих в центр, шириною 10 нм. Температура зразка $T = 4 \text{ К}$ – а) та $T = 77 \text{ К}$ – б).
 Ступінь іонізації: 6 % – пунктирна лінія та 61 % – суцільна лінія

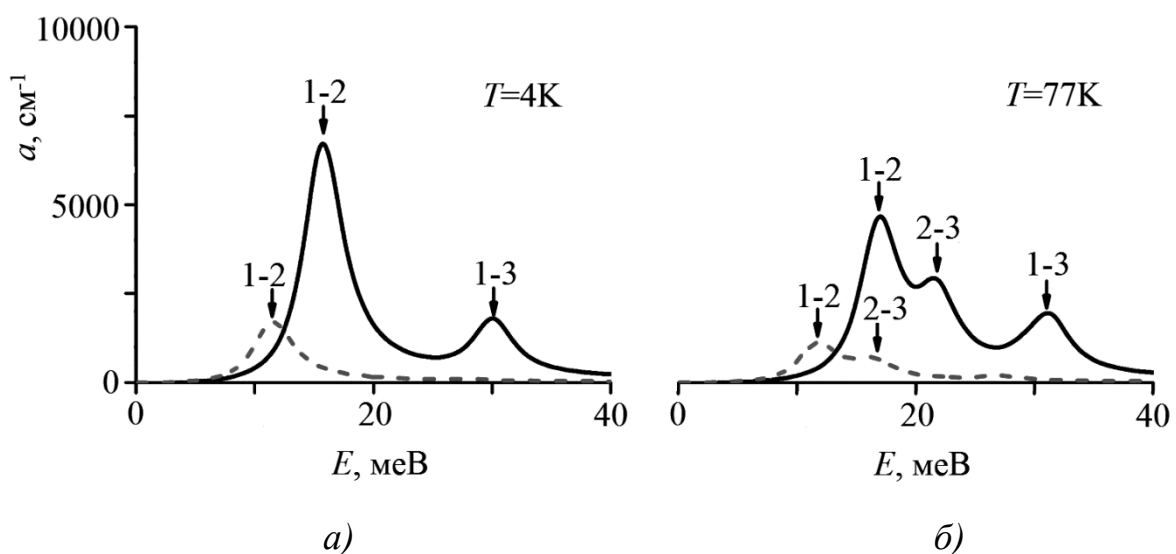


Рисунок 5.2 – Коефіцієнти поглинання для КЯ, дельта-легованих в край, шириною 10 нм. Температура зразка $T = 4 \text{ К}$ – а) та $T = 77 \text{ К}$ – б).
 Ступінь іонізації: 12 % – пунктирна лінія та 63 % – суцільна лінія

Але також очевидно, що чим вища робоча температура пристрою, тим потенційний пристрій має більш широкий діапазон застосування. Тому і були зроблені розрахунки як для 4, так і для 77 К. Для аналізу рисунків слід мати на увазі наступне. По-перше, представлені КЯ n-типу поглинають лише випромінювання, поляризоване уздовж напрямку росту

структур. По-друге, домішки є мілкими, тому температура електронів в електричному полі практично відповідає температурі решітки, яка і визначає повністю розподіл електронів по підзонах. По-третє, для меншої ширини КЯ енергетичний зазор між сусідніми енергетичними рівнями значно більший, ніж для більш широких КЯ.

5.1.2 Обговорення

На рисунку 5.1 представлені коефіцієнти поглинання для КЯ, дельта-легованих в центр, шириною 10 нм з двома ступенями іонізації домішок, з температурою ґратки 4 та 77 К. Видно, що, відповідно до оголошених очікувань, співвідношення $\alpha_{max}/\alpha_{min}$ є найбільшим при 4К, оскільки в цьому випадку спостерігається максимальна різниця коефіцієнтів поглинання між двома ступенями іонізації домішок. Також слід зазначити, що легування в центр не змінює симетрію структури (рис. 4.7), а це означає, що правила відбору оптичних переходів у КЯ з (частково) іонізованим дельта-шаром такі ж, як у прямокутній КЯ. При 4К всі звільнені з домішок електрони займають найнижчий (1-й) рівень просторового квантування, і спостерігається лише головний максимум 1–2 переходу, тоді як при 77К деяка частина електронів також знаходиться на збуджених підзонах, і тому оптичні переходи 2–3 і навіть 3–4 також впливають на загальне поглинання. У результаті максимум 1–2 лінії поглинання стає меншим, ніж при 4К.

Результати для КЯ, шириною 10 нм, дельта-легованих в край, представлені на рисунку 5.2. Тут можна побачити, що навіть при 4К (рис. 5.2, а) спостерігається додаткова (до основного максимуму 1–2 переходу) лінія поглинання 1–3 переходу у спектральному діапазоні, що розглядається. Саме через дельта-легування в край порушується симетрія КЯ (рис. 2.1) і оптичні переходи, які були заборонені в симетричних КЯ, стають дозволеними в несиметричних. Як наслідок, головний максимум

1–2 переходу стає меншим, ніж у випадку дельта-легування в центр. Підвищення температури (рис. 5.2, б з тим же ступенем іонізації домішок, як на рис. 5.2, а), передбачає появу електронів на більш високих енергетичних рівнях просторового квантування. Це призводить до подальшого зменшення максимуму поглинання 1–2 та появи 2–3 оптичних переходів, що і спостерігається на рисунку 5.2, б.

Результати, що представлені на рисунках 5.3 та 5.4 для КЯ з шириною 20 нм, цікаві з точки зору порівняння їх із відповідними даними для КЯ, шириною 10 нм. Видно, що на рисунку 5.3, а є два додаткові невеликі максимуми 1–4 та 1–6 для більш високого ступеня іонізації.

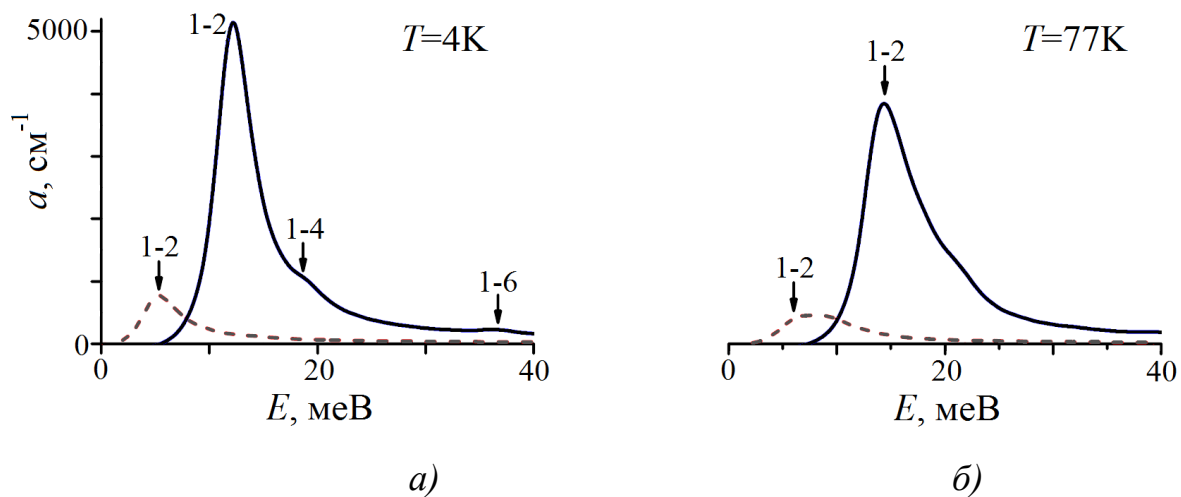


Рисунок 5.3 – Коефіцієнти поглинання для КЯ, дельта-легованих в центр, шириною 20 нм. Температура зразка $T = 4\text{ K}$ – а) та $T = 77\text{ K}$ – б).
 Ступінь іонізації: 6 % – пунктирна лінія та 61 % – суцільна лінія

Вони з'являються через зменшення енергетичного зазору між рівнями при більш широких КЯ, і це також передбачає зменшення величини основного максимуму 1–2 переходу. Щодо піків поглинання, представлених на рисунку 5.3, а, можна сказати, що декілька переходів (1–2, 2–3, 3–4, 4–5) із близькими енергіями роблять свій внесок в основні максимуми при різних ступенях іонізації домішки, що призводять до збільшення півширини максимумів.

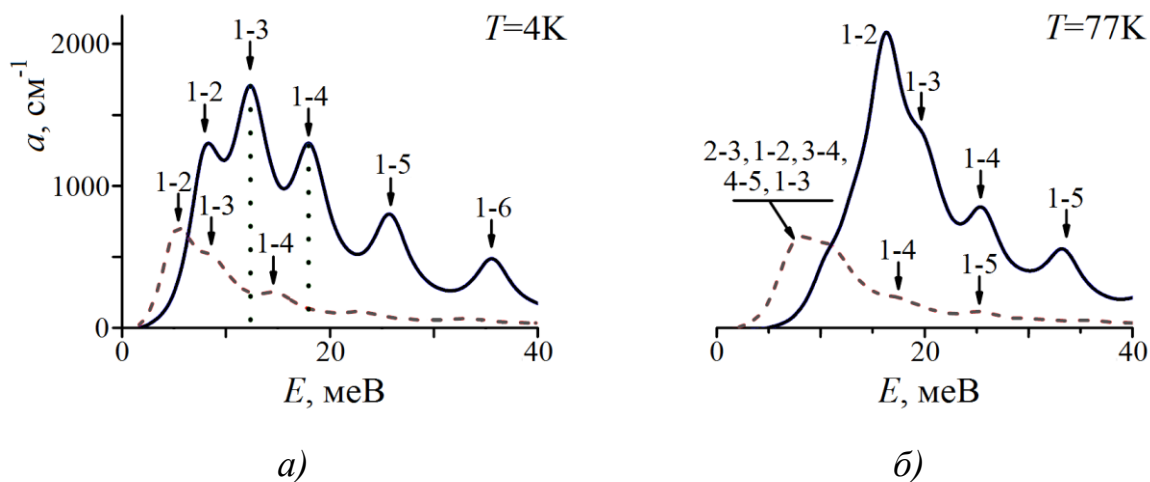


Рисунок 5.4 – Коефіцієнти поглинання для КЯ, дельта-легованих в край, шириною 20 нм. Температура зразка $T = 4 \text{ К}$ – а) та $T = 77 \text{ К}$ – б). Ступінь іонізації: 14 % – пунктирна лінія та 65% – суцільна лінія

Щоб не ускладнювати зображення, на рисунку представлено лише позиції для найбільших ліній поглинання 1–2 оптичних переходів.

Розглянемо рисунок 5.4, де подані досить несподівані результати. А саме, спостерігаються максимуми обумовлені оптичними переходами лише від першого до всіх інших (включаючи однакову парність) енергетичних рівнів просторового квантування. Це також стосується і рисунку 5.4, б, але тут, для більш високого ступеня іонізації, прослідковуються несподівано великі енергетичні зміщення всіх переходів ($\sim 8 \text{ меВ}$) порівняно з розташуванням тих же переходів на рисунку 5.4, а), тоді як для нижчого ступеня іонізації цей зсув є майже такий же (приблизно 2 меВ), як на рисунках 5.1–5.3. Пояснення даного факту може бути наступним. При низькій (4 К) температурі вільні електрони займають лише перший рівень просторового квантування, і електрони локалізовані в області центру КЯ. Це призводить до вузької V-подібної добавки, а це означає, що 1-й рівень виштовхується на енергетичній шкалі до більш широкої частини цієї ями. З цього випливає, що енергетичний зазор між першим та всіма іншими рівнями просторового квантування не сильно змінюється в порівнянні в випадком прямокутної КЯ (без іонізації домішок). При підвищеній температурі (77К) вільні електрони заповнюють кілька рівнів просторового

квантування, і загальна локалізація електронів стає більш поширеною по ширині КЯ, що, в свою чергу, означає, що V-подібна КЯ стає більш широкою (але вузкою, ніж прямокутна частина КЯ) і тепер вона містить більше енергетичних рівнів з більшим енергетичним зазором між ними. Є ще одна особливість широкого спектра поглинання на рисунку 5.4, яка теж заслуговує на обговорення. Використовуючи таку чи подібну структуру, стає можливою одночасна модуляція декількох частот в терагерцовому діапазоні з приблизно однаковою ефективністю. Як приклад, дві такі лінії поглинання показані на рисунку 5.4, а вертикальними точковими лініями.

5.2 Висновки

На кожному з рисунків 5.1–5.4 є основна вершина для кожного з двох ступенів іонізації домішок – низького та порівняно високого. Це означає, що настройка поглинання структури може бути виконана за допомогою досить невеликого електричного поля, прикладеного в площині КЯ, в діапазоні, що відповідає різниці між положеннями цих вершин на енергетичній шкалі. На рисунку 5.5 зображений діапазон настройки в одиницях ТГц, для демонстрації можливостей потенційного приладу. Природно, кожна частота будь-якого із випадків, представлених на рисунку, має своє значення співвідношення I_{max}/I_{min} , але в залежності від мети можна передбачити характеристики на етапі проектування КЯ: або найвище значення даного співвідношення, або велика ширина діапазону, або одночасна модуляція декількох ТГц смуг. Крім того, до настройки бажаних характеристик величиною електричного поля також може бути використаний додатковий параметр регулювання – температура. Або температуру можна використовувати як додатковий параметр для калібрування можливого пристрою на необхідні умови.

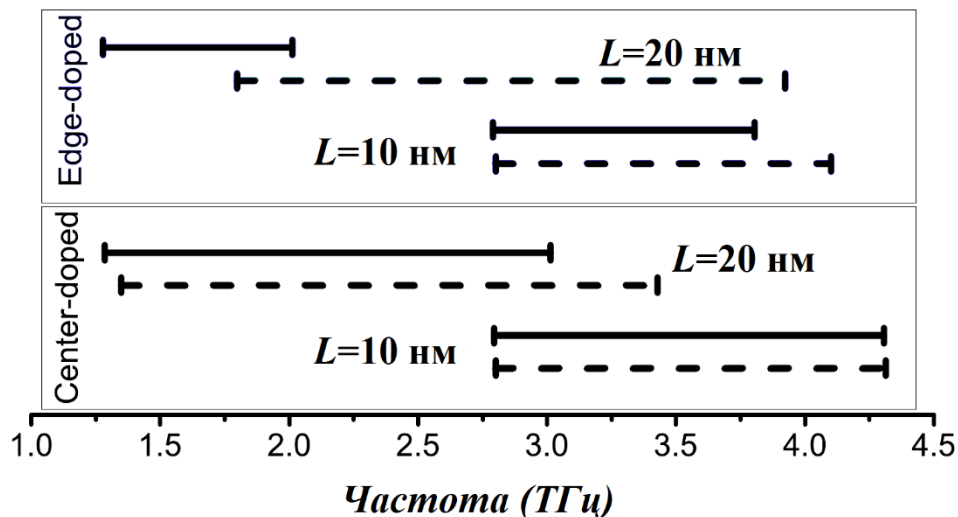


Рисунок 5.5 – Спектральний діапазон настройки для $Si_{0.8}Ge_{0.2}/Si/Si_{0.8}Ge_{0.2}$ КЯ (рух положення піку поглинання зі збільшенням ступеня іонізації) розрахованих ступенів іонізації домішок. Суцільна лінія – $T = 4$ К, пунктирна лінія – $T = 77$ К

Щодо частоти імпульсів модулятора, то можна сказати, що з фізичної точки зору її максимальне значення визначається безвипромінювальним часом життя електронів на збуджених рівнях і воно обернено пропорційне уширенню, яке в розрахунках приймалося – 2 меВ (пункт 4.1). Щодо перешкод, які можуть виникнути на шляху розробки запропонованого модулятора – може виникнути нестабільність, яка виникає при гелієвій температурі при домішковому пробої у малому електричному полі [56]. Але цього можна уникнути, приклавши невелике магнітне поле [57], або використовуючи більш високе електричне поле. При підвищеній (азотній) температурі подібних обмежень не передбачається.

РОЗДІЛ 6 ДОСЛІДЖЕННЯ РЕАЛЬНИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Для демонстрації поданих вище ефектів (керування структурою енергетичних рівнів просторового квантування в КЯ, а також енергію залягання домішки) було досліджено модельну задачу. А саме, форма дна зони провідності $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ визначалася тільки розривом зон (із-за невідповідності постійної ґратки матеріалів $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ та Si) і потенціалом Хартрі (що виникає завдяки перерозподілу заряду внаслідок часткової іонізації дельта-шару). Наближаючись до експериментальної частини досліджень, постає питання: які чинники можуть суттєво впливати на виявлені ефекти в реальних структурах?

На нашу думку, одним із суттєвих факторів є фонові домішки, які очевидно завжди присутні в будь-якій структурі (або можуть бути навмисно введені з тих чи інших причин) [58,59]. Але незалежно від того, чи домішки введені навмисно чи ні, вони призводять до додаткового вигину зони провідності поблизу інтерфейсів навіть при нульовій температурі, та до появи зайвих електронів у КЯ, які, очевидно, змінюють потенціал Хартрі.

Отже, ціллю даного розділу є дослідження впливу фонових домішок на перебудову енергетичних рівнів в дельта-легованих КЯ. В якості об'єкта для нашого дослідження було взято аналогічну гетероструктуру, яка описана в підрозділі 2.1 – це Si КЯ, шириною 20 нм, та товщиною дельта-шару 1 нм, оточену нескінченно довгими бар'єрами $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$. Концентрація фонових домішок була розглянута в межах $10^{15} \text{ см}^{-3} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Ми вважаємо, що ці концентрації в основному охоплюють усі можливі експериментальні ситуації. Крім того, для теоретичної перевірки конвергенції отриманих результатів до раніше отриманих (без фонових домішок) були розглянуті концентрації в межах $10^{14} - 10^5 \text{ см}^{-3}$ при температурі $T = 4 \text{ К}$. Для перевірки були також проведені розрахунки для $N_b = 10^{12} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300 \text{ К}$.

6.1 Метод розрахунку

Для вирішення заявлених завдань, ми повинні знайти ЕЗД для домішок, розташованих у вигляді дельта-шару всередині КЯ з урахуванням вигину бар'єрів біля гетероінтерфейсів, спричиненим перерозподілом заряду внаслідок іонізації фонових домішок в бар'єрах, при різних температурах.

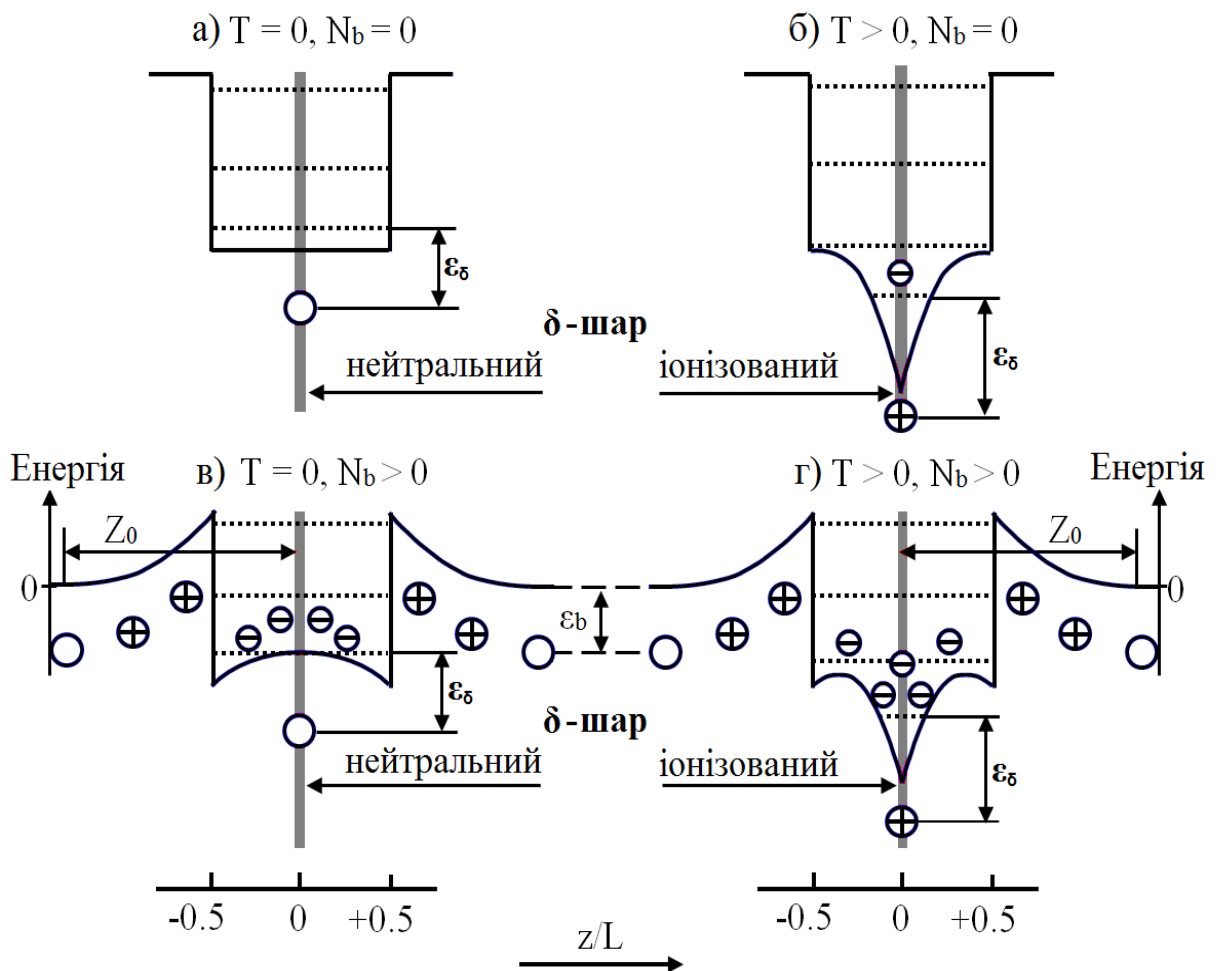


Рисунок 6.1 – Схематичне зображення енергетичного профілю (суцільна лінія) дельта-легованої КЯ, з декількома першими рівнями просторового квантування (точкові лінії) при $T=0$ – а), в) та $T>0$ – б), г); з концентрацією фонових домішок $N_b = 0$ – а), б) та $N_b > 0$ – в), г)

Аналогічно до методу, описаному в 2.2, розрахунки проведені в рамках наближення ефективних мас, виконуючи самопогоджений

розв'язок рівнянь Шредінгера та Пуассона для ситуації, схематично показаної на рисунку 6.1, в ($T = 4$ К) та 6.1, г ($T = 77$ або 300 К). Наскільки нам відомо, така техніка розрахунків для напівпровідникових наноструктур була описана в книзі Бастарда [60]. Розв'язуючи рівняння Шредінгера, ми базуємось на методі, розробленому Вінтером [47], детально описаним у пункті 2.2.2.

6.1.1 Визначення рівня Фермі

Щоб знайти енергетичний профіль КЯ та прилеглих областей, необхідно вирішити рівняння Пуассона для всієї структури, включаючи КЯ. Але для цього треба знати положення рівня Фермі. Завдяки нескінченно довгим бар'єрам з обох сторін КЯ в нашій моделі, очевидним буде припущення, що положення рівня Фермі в рівновазі повинно визначатися фоновими домішками в бар'єрах. У цьому випадку його можна знайти з рівняння електронейтральності, записаного для областей, де енергетичний профіль зони провідності плоский (розташованих далі, ніж $L/2 + Z_0$ від центру КЯ):

$$N_0^- = N_b^+ + P_0, \quad (6.1)$$

де N_0^- , N_b^+ і P_0 є концентрації електронів, іонізованих фонових домішок дірок у валентній зоні, які обчислюються як [61]:

$$N_0^- = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c \Phi_{1/2} \left(\frac{E_F - E_c}{kT} \right), \quad P_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_v \Phi_{1/2} \left(\frac{E_v - E_F}{kT} \right), \quad (6.2)$$

$$N_b^+ = \frac{N_b}{1 + 2 \exp \left(\frac{E_F - E_b}{kT} \right)}, \quad (6.3)$$

де $\Phi_{1/2} = \left(\frac{E_{c,v} - E_F}{kT} \right)$ – інтеграл Фермі-Дірака, E_c і E_v – є відповідно краями

зони провідності та валентної зони, а N_c і N_v – ефективні густини станів відповідно для зони провідності та валентної зони. У рівнянні (6.3) N_b – загальна концентрація фонових домішок, E_F – енергія Фермі та E_b – енергія основного стану фонових домішок. Для визначення енергії Фермі з (6.1) також повинні бути відомі значення забороненої зони та енергії зв'язку домішок в $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$. Використане значення забороненої зони було 1,08 еВ (при 77 К), взятому з [62], і знехтувано його залежність від температури, оскільки розрахунки показали, що на положення енергії Фермі практично не впливає зміна її величини, яка відповідає зміні температури в діапазоні $4 \div 300$ К. Це не стосується впливу самої температури на положення рівня Фермі на енергетичному масштабі. Щодо енергії зв'язку домішок беремо значення $\varepsilon_b = 39$ меВ, яке близьке до 39,2 меВ, отримане в роботі [63], відповідно $E_b = E_c - \varepsilon_b$. З формули (6.1) виходить, що ми не вважаємо напівпровідники компенсованими, оскільки нам цікаво перевірити максимальний вплив додаткових (до тих, що отримуються при іонізації дельта-шару в КЯ) електронів у КЯ на явища, викликані іонізацією дельта-шару. Очевидно, що для компенсованого напівпровідника кількість додаткових (через фонові домішки) електронів буде меншою, ніж для некомпенсованого.

6.1.2 Підзони просторового квантування

Аналогічно методу, описаному в підрозділі 2.2.1, енергетичні рівні E_j та огинаючі функції $\zeta_j(z)$, обмежені у z -напрямку, є власними значеннями та власними функціями одновимірного (залежного лише від координати z) Гамільтониана (2.3), в якому $V_H = e\varphi(z)$, де $\varphi(z)$ – електростатичний потенціал, що утворюється внаслідок нерівномірного розподілу зарядів по осі z в межах $|z| \leq Z_0$ (потенціал Хартрі).

Розв'язок рівняння Шрьодінгера (2.4), знову ж таки, знаходимо методом стрільби, використовуючи граничні умови на гетероінтерфейсах

$|z| = L/2$, як умова неперервності хвильової функції та її похідної відносно z . Кількість врахованих енергетичних рівнів просторового квантування N ($j = 1, 2, \dots, N$), було обрано спираючись на наступні чинники.

Перший полягає в тому, що різниця між енергіями N -го та 1-го рівнів не повинна бути меншою ніж $3kT$: $E_N - E_1 \geq 3kT$, маючи на увазі, що за цієї умови заселенність N -ї підзони електронами стає малою і не може суттєво впливати на потенціал $\phi_{КЯ}$ всередині КЯ.

Другий полягає в тому, що різниця між енергіями основного стану домішки, обчислена з N та $N-1$ рівнями просторового квантування, повинна бути меншою, ніж 0,1 меВ: $E_\delta^N - E_\delta^{N-1} \leq 0.1 \text{ meV}$.

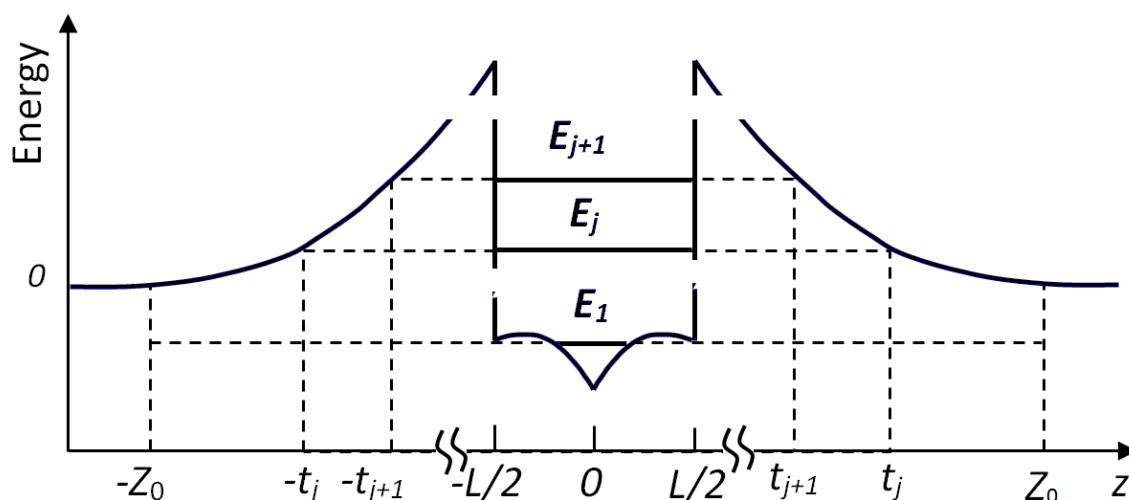


Рисунок 6.2 – Схематичне пояснення вибору квантового ящика для квазірезонансних рівнів E_j для $j > 4$ при температурі 4 К

Розрахунки показали, що для першої умови $N = 9$ (при температурі 300 К), а для другої $N = 7$. Відповідно, було враховано 7 енергетичних рівнів просторового квантування для температур 4 та 77 К та 9 таких рівнів при температурі 300 К. Тут слід зазначити, що z -діапазон інтегрування в методі стрільби мінявся залежно від енергії E . У випадку негативної енергії $E_j < 0$ інтегрування починали від початкового $z = -Z_0$ (див. рис. 6.2) і до 0. При $E_j > 0$ відповідні енергетичні рівні просторового квантування стають резонансними, що дає можливість переходу електронів з цих рівнів у нескінченність.

Для вирішення цієї проблеми застосовувався метод квантового ящика [61]. Це означає, що для енергій $E_j > 0$ ми в принципі повинні додатково розв'язати рівняння Шредінгера для вільного простору для відстаней $-Z_0 < z < -t_j$ (див. рис. 6.2) з прирівнюванням хвильових функцій та їх похідних на відповідних границях. Однак ми розв'язуємо рівняння Шредінгера лише для КЯ та областей виснаження, і діапазон інтегрування починається з $z = -t_j$, так що $e\varphi(-t_j) = E_j$, щоб гарантувати, що межі інтегрування не знаходяться в континуумі зони провідності у бар'єрі. У певному сенсі це також той самий метод квантової ящика, але із залежною від енергії шириною квантової ящику. Ми розуміємо, що формальним запереченням проти нашого підходу може бути той факт, що помилки в енергії $E_j > 0$ просторово-квантованих рівнів енергії та відповідних їм хвильових функцій $\xi_j(z)$ зростають із числом рівнів енергії.

Для відхилення цього заперечення можна сказати, що така ситуація спостерігалася для $j = 6$ та 7 лише при температурі 77 K^6 та найменшій довжині $t_7 = 22 \text{ нм}$. Для Si (а також $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$) така довжина бар'єру є достатньо великою, щоб нехтувати тунелюванням через нього. Додатково ми можемо посилатися на публікацію [1], в якій зазначалося, що для довжин бар'єру (Si), більших за 15 нм , явищем тунелювання між сусідніми КЯ можна знехтувати.

І, нарешті, результати, представлені в цьому розділі, підтвердили використаний підхід. Хочемо підкреслити, що енергетичне розщеплення між чотирма верхніми долинами та двома нижніми (див. пункт 1.3.2) більше, ніж різниця між верхнім та нижнім рівнями енергії, що врахувалися: $\Delta_4 - \Delta_2 > E_9 - E_1$. Це означає, що в наших розрахунках не було необхідності враховувати рівні просторового квантування верхніх долин.

⁶ При температурі 300 K усі 9 врахованих в енергетичних рівнів мали негативну енергію. Це є наслідком того, що підвищення температури зумовлює зсув рівня Фермі ближче до середини забороненої зони. У свою чергу, рівень Фермі тягне за собою всю квантову яму вниз в енергетичному масштабі.

6.1.3 Рівняння Пуассона

Потенціал Хартрі $\varphi(z)$ знаходимо з рівняння Пуассона, записаного для області квантової ями та областей виснаження, де заряди розподіляються нерівномірно вздовж z :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} N^\pm(z), \quad (6.4)$$

де $N^\pm(z)$ – концентрація заряду, що дорівнює різниці концентрацій іонізованих донорних центрів $N_D^+(z)$ і вільних електронів $N^-(z)$:

$$N^\pm(z) = N_D^+(z) - N^-(z), \quad (6.5)$$

де, як і в (6.1) ми нехтуємо дірками, вважаючи, що її кількість невелика. Це дозволяє пропустити розгляд ускладнень у валентній зоні навколо КЯ. Іонізовані донори – це ті, що знаходяться в бар'єрах та в дельта шарі:

$$N_D^+(z) = \begin{cases} N_b^+(z) = \frac{N_b}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_b - e\varphi(z)}{kT}\right)}, & |z| > \frac{L}{2} \\ N_\delta^+(z) = \frac{N_\delta}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_\delta}{kT}\right)}, & |z| < \frac{s}{2} \\ 0 - \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.6)$$

Тут ми використовуємо такі припущення. (i) Ми нехтуємо фоновими домішками в КЯ, оскільки їхній внесок у загальну кількість електронів навіть за їхньої найбільшої концентрації (10^{17} см^{-3}) та повної іонізації (що далеко не так, як це буде видно далі) приблизно на порядок менший, ніж внесок дельта-шару (рівняння (6.6), другий рядок). Відповідно, цей внесок буде пропорційно меншим для менших концентрацій фонових домішок. (ii)

Ми вважаємо, що розподіл домішки по ширині дельта-шару s є рівномірним: $N_\delta(z) = \begin{cases} N_\delta = \frac{n_\delta}{s}, & |z| < s/2 \\ 0, & |z| \geq s/2 \end{cases}$, що обґрунтовано в пункті 3.2.1.

(iii) ЕЗД однакова по ширині дельта-шару і розраховується для центру КЯ, як описано у пункті 2.2.2: $\varepsilon_\delta(z) = \text{const} = \varepsilon_\delta(z = 0)$, $\varepsilon_\delta = E_l - E_\delta$ (E_l – енергія першої квантованої підзони). Причиною є порівняно мала ширина дельта-шару s . Зауважимо, що в (6.6) N_b^+ відрізняється від (6.3) наявністю потенціалу Хартрі. Розподіл електронів $N^-(z)$ в зоні нашого інтересу складається з електронного газу у підзонах розмірного квантування та електронного газу в необмеженому континуумі:

$$N^-(z) = N_{QW}(z) + N_{3D}(z),$$

де

$$N_{QW}(z) = \frac{m_{||}kT}{\pi\hbar^2} \sum_j^N \ln \left(1 + \exp \frac{E_F - E_j}{kT} \right) |\xi_j(z)|^2. \quad (6.7)$$

Відповідно, повна поверхнева концентрація електронів у підзонах КЯ становить:

$$n_{QW} = \int_{-\infty}^{\infty} N_{QW}(z) dz = \frac{m_{||}kT}{\pi\hbar^2} \sum_j^N \ln \left(1 + \exp \frac{E_F - E_j}{kT} \right), \quad (6.8)$$

що впливає з умови нормування хвильових функцій. Зауважимо, що нескінченність у (6.8) у нашому випадку змінюється на «ефективну нескінченність», як було описано вище. Концентрація електронів N_{3D} становить

$$N_{3D} = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c \Phi_{1/2} \left(\frac{E_F - e\varphi(z) - E_c}{kT} \right), & |z| > L/2 \\ \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c^* \Phi_{1/2} \left(\frac{E_F - E_m}{kT} \right) & |z| \leq \frac{L}{2}, T = 300K, m > 9 \\ 0, & |z| \leq \frac{L}{2}, T = 4 \text{ або } 77K \end{cases} \quad (6.9)$$

відповідно до (6.2). Тут треба дати пояснення по другому та третьому рядках. Для температури $T = 300$ К вважаємо, що найвищі енергетичні рівні E_m , розташовані вище 9-го (загалом наша КЯ має 14 енергетичних рівнів-підзон), можуть бути слабо заселені електронами, і водночас вони є квазірезонансними з континуумом. І другий рядок (6.9) відображає цей випадок. Іншими словами, це означає, що ми вважаємо континуум вище 9-го рівня енергії $N_c^* = N_c/3$) через те, що для діапазону $z \leq L/2$ все ще є 2 долини провідності з 6. Тут ми ще раз підкреслюємо, що для пошуку ЕЗД з точністю до 0,1 меВ достатньо 9 енергетичних рівнів, а врахування сукупності вищих «енергетичних рівнів» зроблено лише для правильного рішення рівняння Пуассона у всьому діапазоні, який нас цікавить – від $-Z_0$ до $+Z_0$.

Щодо третього рядку (6.9) можна сказати лише, що при низьких (4 та 77 К) температурах електрони заселяють лише найнижчі рівні енергії, і тому тим більше немає підстав враховувати їх вище КЯ. Умова електронейтральності для всієї структури має вигляд

$$\int_{-\infty}^{\infty} N^{\pm}(z) dz = 0. \quad (6.10)$$

Як було сказано в попередньому підрозділі, з практичних причин ми обмежили фактичну область чисельної процедури зонами виснаження по обидва боки квантові ями відстанню Z_0 від центру КЯ до краю зони (див. рис. 6.1). Передбачається, що електрони з бар'єрів падають до квантової ями за винятком тих, що збуджені температурою (див. формулу (6.9)). Таким чином, заряд розподіляється нерівномірно в області КЯ, включаючи зони виснаження, і враховуючи симетрію структури відносно $z = 0$, умова електронейтральності має вигляд

$$\int_{z=-z_0}^0 N^{\pm}(z) dz = 0. \quad (6.11)$$

Розв'язання цього рівняння дозволяє знайти довжину області виснаження Z_0 .

6.1.4 Розрахунок енергії зв'язку домішок

Енергію зв'язку домішок дельта-шару можна знайти шляхом включення до Гамільтоніану (2.4), кулонівського потенціалу іонізованого атому домішки. Цей метод, запропонований Вінтером [47], детально був описаний у пункті 2.2.2.

6.1.5 Самоузгоджена процедура розрахунків у випадку КЯ, дельта-легованої в центр

Самоузгоджена процедура є ітераційним процесом, який, наприкінці, призводить до отримання комплексу коректних (в рамках математичної моделі, описаної в 6.1.1–6.1.4) параметрів і величин, включаючи довжину зони виснаження Z_0 , енергії підзон КЯ E_j та їх хвильові функції, і енергію зв'язку домішок дельта-шару ε_{δ} . Специфіка процедури, що використовується полягає в наступному: (i) рівень Фермі приймається фіксованим, (ii) вона включає розрахунок енергії зв'язку домішок і (iii) Z_0 використовується як змінний параметр. Початкове значення довжини зони виснаження було прийнято, використовуючи відому формулу теорії p-n переходів $Z_0 \approx \left(\frac{2\varepsilon_0\varepsilon V}{e^2 N_b}\right)^{\frac{1}{2}}$. Слід зауважити, що значення $V=200$ меВ (глибина КЯ) дає верхню межу для Z_0 . ЕЗД у дельта-шарі спочатку приймали рівним

значенню, який був отриманий при тій же температурі, але не враховуючи фонових домішок в бар'єрах (підрозд. 3.1). З чисельних міркувань на першій (і лише першій) ітерації електронами над бар'єрами в зоні виснаження було знехтувано, тобто $N^-(z) = N_{QW}(z)$ в (6.5). Також концентрація електронів на рівнях в КЯ для (тільки) першої ітерації приймалася рівною загальному позитивному заряду в області, а розподіл електронів в КЯ був прийнятий однорідним:

$$N_{QW}(z) = \begin{cases} 2 \left(\int_{z=-L/2}^0 N_b(z') dz' + n_{\delta}^+ \right) / L, & |z| < L/2 \\ 0, & |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (6.12)$$

Спочатку, розв'язуючи (6.1), знаходиться енергія Фермі, яка відрахована від нуля енергії, що відповідає дну зони провідності в об'ємному матеріалі бар'єру, як описано в пункті 6.1.1. Потім ітераційний процес запускається наступним чином.

1. Довжина зони виснаження Z_0 чисельно знаходиться шляхом розв'язання рівняння електронейтральності для області КЯ (6.11). Це реалізовується самоузгоджено з розв'язанням рівняння Шредінгера (2.4) таким чином:

а) для знаходження лівої частини рівняння (6.11) при заданому Z_0 , рівняння Пуассона (6.4) розв'язується чисельно з граничними умовами $\varphi(-Z_0) = 0$ та $\frac{d\varphi(-Z_0)}{dz} = 0$;

б) інтегрування від $z = -Z_0$ до $z = 0$. Якщо це перша ітерація, то в точці $z = -L/2$ процес призупиняється для оцінки (6.11), яка використовується для інтегрування після точки $z = -L/2$. У наступних ітераціях вираз (6.7) використовується замість (6.12) з енергіями підзон КЯ E_j і відповідними хвильовими функціями $\zeta_j(z)$, які були отримані в попередній ітерації;

в) E_j та $\zeta_j(z)$ знаходяться за допомогою отриманого на попередньому кроці $\varphi(z)$, шляхом розв'язання (2.4) методом стрільби, як описано в пункті 2.2.1. Залежно від значення лівої частини рівняння (6.11) для заданого Z_0 , нове значення Z_0 вибирається за допомогою алгоритму розбиття. Потім кроки а) і б) виконуються до тих пір, поки похибка повної концентрації заряду з (6.11) не стане досить малою (10^9 см^{-2}).

2. ЕЗД дельти-шару ε_δ знаходиться за допомогою методу, описаному в пункті 2.2.2, як енергія, що відповідає 0 визначника системи рівнянь (2.25).

3. Кроки 1 і 2 виконуються ітераційно. Процес зупиняється, коли різниця між значеннями ЕЗД двох останніх ітерацій стає досить малою $\varepsilon_\delta^k - \varepsilon_\delta^{k-1} \leq 0.1 \text{ меВ}$. Для досягнення заявленої точності, зазвичай потрібно виконати 5...7 ітерацій зовнішнього циклу при температурі 300 К і 3... 4 – для нижчих використовуваних температур. Внутрішній цикл зазвичай виконували приблизно 30 разів за кожен ітерацію зовнішнього циклу $\zeta_j(z)$.

6.1.6 Самоузгоджена процедура розрахунків у випадку КЯ, дельта-легованої в край

Ми знаходимо ЕЗД та положення енергетичних рівнів просторового квантування на енергетичній шкалі в процесі самоузгоджених рішень рівнянь Пуасона та Шрьодінгера, як описано вище. Однак дельта-легування в край КЯ порушує дзеркальну симетрію структури відносно площини, що проходить через центр КЯ (рис. 6.3), де подані схематичні зображення двох якісно різних найбільш імовірних ситуацій для дельта-легованої в край (праворуч) КЯ. Рисунок 6.3, а відповідає низьким температурам – 77 К, та рисунок 6.3, б – високим температурам – 300 К, при відносно низьких концентраціях (10^{15} см^{-3} та менше) фонових домішок. Тут ми в основному концентруємось на відмінностях в алгоритмі через порушення симетрії задачі [64].

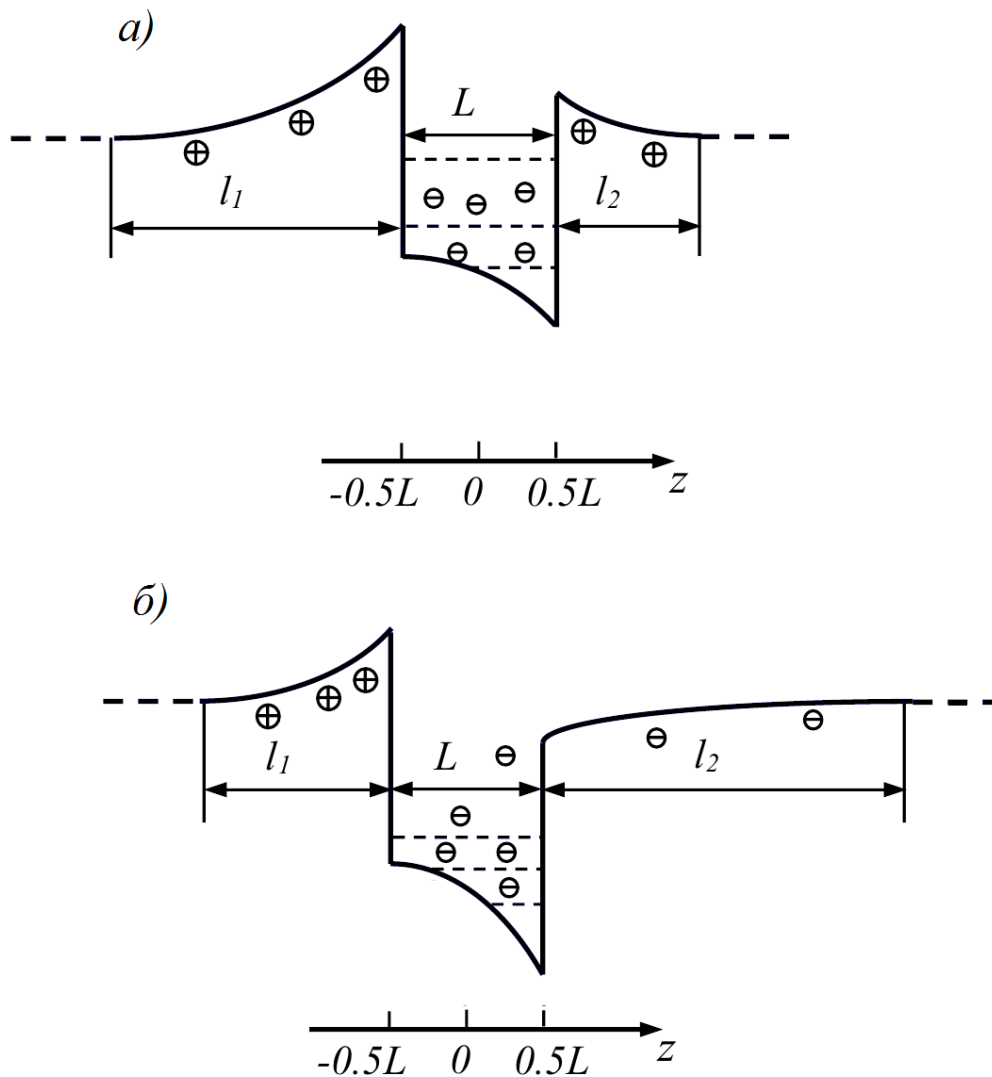


Рисунок 6.3 – Схематичне зображення енергетичного профілю для КЯ, дельта-легованої в край: а) – при низьких температурах, б) – при високих температурах та відносно низькій концентрації фонових домішок

Зони виснаження – це шари навколо КЯ з порушеним балансом заряду, так що частина електронів з цих зон падає у КЯ. Як тільки задача стає несиметричною, зони виснаження мають різну ширину: z_1 – ширина лівої зони виснаження, z_2 – ширини правої (на рис. 6.3 і 6.4 – остаточно (див. нижче) z_1 позначається як l_1 і, відповідно, остаточно z_2 як l_2). Частина структури за межами області, яка включає КЯ та зони виснаження, вважаються зарядженою нейтрально і точно відповідають ситуації рівноваги об’ємного матеріалу. Отже, умова електронейтральності з чисельних причин може бути обмежена до цієї області:

$$\int_{-L/2-l_1}^{L/2+l_2} N^{\pm}(z) dz = 0. \quad (6.13)$$

Примітно, що порушення балансу заряду в зоні виснаження може бути як на користь позитивного заряду, так і на користь негативного заряду, як це можна бачити на правій стороні рисунка 6.4, б. У цьому випадку фонові домішки фактично іонізовані в меншій мірі, ніж ті, що знаходяться в областях об'ємного матеріалу з непорушеним балансом заряду. Однак для рівномірності підходу ми все ще називаємо ці області «шарами виснаження». Запропонована математична модель однаково правильна для обох типів шарів виснаження: позитивно і негативно заряджених. Єдиним примітним припущенням є те, що для статистичних даних область за межами КЯ, але з від'ємним $\varphi(z)$, розглядається як тривимірний континуум, в той час як технічно вона повинна забезпечувати ряд квантованих рівнів енергії в напрямку z . Однак у нашому конкретному випадку досліджувана КЯ досить глибока і містить багато рівнів, тоді як області виснаження ширші порівняно з шириною КЯ. Отже, можна припустити, що кількість рівнів у зоні негативно зарядженого виснаження настільки велика, а енергетичні зазори між рівнями настільки малі, що їх практично неможливо відрізнити від безперервного спектра.

Самоузгоджена процедура. Проблема порівняно з описаною в попередньому підрозділі втрачає симетрію та отримує новий параметр для коригування. У випадку симетричної задачі, ми регулювали ширину зони виснаження, використовуючи електронейтральність як критерій. Тепер нам потрібно регулювати z_1 і z_2 , для чого потрібні два числові критерії. Перший – це електронейтральність, як раніше, а другий побудований із використанням загальної філософії та досвіду методу стрільби таким чином. З заданими z_1 і z_2^0 та граничними умовами $\varphi(-z_1 - L/2) = \varphi(z_2^0 + L/2) = 0$ і $\frac{\partial \varphi(-z_1 - L/2)}{\partial z} = \frac{\partial \varphi(z_2^0 + L/2)}{\partial z} = 0$, чисельно інтегруємо від лівої межі

до правого краю КЯ, отримуючи $\varphi_l(L/2)$, потім інтегруємо від правої межі до тієї ж точки, отримуючи $\varphi_r(L/2)$. Тепер, якщо $\Delta\varphi = \varphi_l(L/2) - \varphi_r(L/2)$ не дорівнює нулю (або досить близько до нуля), це означає, що прийняті значення z_1 і z_2^0 не є взаємоузгодженими. Ця ситуація показана на рисунку 6.4, а. Тоді наше завдання – дійти до потенційної безперервності. У наших розрахунках ми реалізували це, зафіксувавши z_1 і знайшовши узгоджений $z_2(z_1)$, вирішивши чисельно рівняння $\Delta\varphi=0$ для змінної z_2 з точністю $\Delta\varphi \leq 10^{-3}$ мВ. Таким чином ми дійшли до ситуації, показаної на рисунку 6.4, б. Отже, алгоритм складається з першого кроку, який визначає початкові значення, та самоузгодженої процедури, яка складається з двох вкладених циклів (внутрішнього та зовнішнього).

Початкові значення такі самі, як і у пункті 6.1.5. Як і в попередньому випадку, ми нехтуємо електронами над бар'єрами на першій (тільки на першій) ітерації зовнішнього циклу (тобто беремо $N^-(z) = N_{QW}(z)$ і приймаємо електронну густину в ямі рівномірною (не залежить від хвильових функцій підзон). Потім ми виконуємо вкладені цикли.

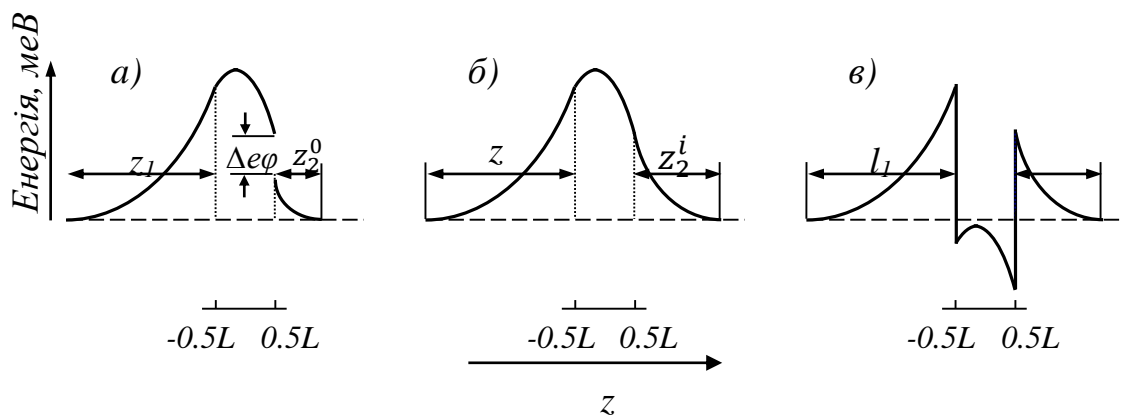


Рисунок 6.4 – Схема, що пояснює розрахунок енергетичного профілю для легованої в край КЯ. а) – розв'язання рівняння Пуассона для лівого шару виснаження (z_1) і КЯ представлено у відповідності з розв'язанням для правого шару виснаження довільної довжини z_2^0 на правому гетероінтерфейсі; б) – узгоджені рішення для обох шарів виснаження КЯ після i -го кроку для корегованого z_2 з фіксованим z_1 ; в) результуючий енергетичний профіль всієї структури. Пунктирні горизонтальні лінії відповідають нулю енергії

У зовнішньому циклі ми змінюємо ЕЗД, поки вона не зійдеться.

1. Виконуємо внутрішній цикл (див. нижче), який надає енергетичні положення підзон E_j та хвильові функції $\xi_j(z)$, а також довжини зон виснаження l_1 та l_2 для наступного кроку.

2. Обчислюємо ЕЗД на дельта-рівні ε_δ (п. 2.2.2), використовуючи всі дані, отримані на попередньому кроці.

3. Якщо ЕЗД змінюється слабо в порівнянні з попередньою ітерацією $\varepsilon_\delta^k - \varepsilon_\delta^{k-1} \leq 0.1$ меВ, тоді цикл припиняється. Це означає, що всі знайдені значення, включаючи довжину шарів вичерпання l_1 та l_2 (див. рис. 6.4, в), взаємно узгоджуються.

У внутрішньому циклі для заданої ЕЗД ми знаходимо послідовний комплекс ширини зон виснаження z_1 та z_2 , енергетичних положень E_j і хвильові функції $\xi_j(z)$ підзон КЯ та потенціал Хартрі $\varphi(z)$. На першій ітерації зовнішнього циклу ми приймаємо початкові значення E_j і $\xi_j(z)$, як для прямокутної КЯ, далі беремо їх із попереднього виконання внутрішнього циклу, щоб прискорити процес. Подібним чином, на першій ітерації зовнішнього циклу z_1 береться із загальних міркувань, так що порядок його величини є реалістичним. Далі z_1 переноситься з попередньої ітерації:

1. Знаходимо z_2 для даного z_1 , E_j і $\xi_j(z)$ разом із відповідним $\varphi(z)$, використовуючи критерій потенційної безперервності, як описано вище. Тут розв'язується рівняння Пуассона.

2. Для цього $\varphi(z)$ розв'язується рівняння Шрьодінгера (2.4) методом стрільби, отримуючи E_j і $\xi_j(z)$.

3. Обчислюємо концентрацію заряду структури (ліва частина формули (6.13)), використовуючи z_1 , z_2 , E_j , $\xi_j(z)$ та $\varphi(z)$.

4. Якщо абсолютне значення отриманої концентрації менше 10^9 см⁻¹, зупиняємо цикл і отримуємо $l_1=z_1$ та $l_2=z_2$. У протилежному випадку вибираємо нове z_1 , застосовуючи метод бісекції для рівняння

$$\left(\begin{array}{c} z_2(z_1) + \frac{L}{2} \\ \int_{z=-z_1 - \frac{L}{2}} N^\pm(z) dz \\ z = -z_1 - \frac{L}{2} \end{array} \right) (z_1) = 0 \quad \text{і виконуємо наступну ітерацію.}$$

6.2 Результати для КЯ, дельта-легованих у центр

6.2.1 Перехід до межі незбуреної прямокутної КЯ

Одне з головних питань, на яке ми маємо відповіді – це надійність вибраної моделі і, відповідно, отриманих результатів. У літературі не було знайдено жодних експериментальних даних, з якими можна було б безпосередньо порівняти представлені розрахунки. Тому дуже важливими є теоретичні результати, отримані іншими науковцями і, зокрема, у роботі [7], присвячені тій же структурі, що і у нас. Автори цієї публікації не розглядали вигин зон і застосували інший метод для розв'язання рівняння Шрьодінгера (діагоналізація повного гамільтоніана).

Наші результати (розділ 3) для КЯ, дельта-легованих у центр, без фонових домішок, точно зійшлися з результатами роботи [7] (як відмічалось в 3.1.2) для різної ширини КЯ. Це означає, що ми можемо зробити висновок, що наші дані щодо випадку без фонових домішок можна вважати достовірними.

Таким чином, основним способом перевірки результатів, отриманих з урахуванням фонових домішок, є простеження збігання нових результатів до результатів без їх урахування. З цією метою були зроблені додаткові обчислення для нижнього діапазону концентрацій фонових домішок при температурі $T = 4$ К для КЯ, дельта-легованих як в центр, так і в край. Ця температура є зручною для такої перевірки, оскільки домішки дельта-шару ще не іонізуються і тому не створюють додаткового потенціалу, що впливає на енергетичні профіль КЯ, як показано на рисунку 6.5 для широкого діапазону концентрацій фонових домішок.

Добре видно, що зі зменшенням концентрації фонових домішок форма потенціалу КЯ наближається до прямокутного вигляду – *якісного* результату, який, очевидно, слід очікувати. Кількісні результати наведені в таблиці 6.1.

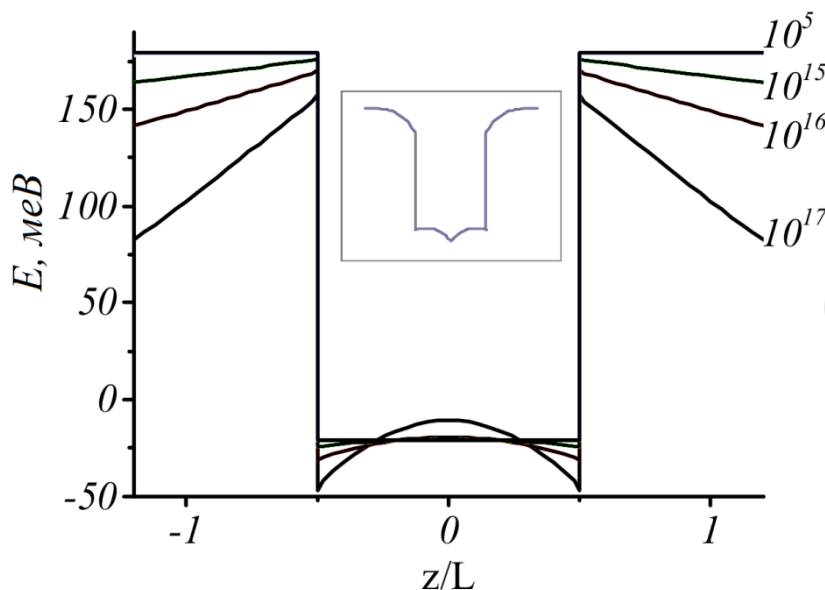


Рисунок 6.5 – Енергетичні профілі КЯ при $T = 4\text{K}$. Цифри поруч із кривими вказують на концентрації фонових домішок у см^{-3} . На вставці в центрі рисунка схематично зображений енергетичний профіль КЯ при концентрації 10^{12}см^{-3} при температурі 300K

Тут подані значення ЕЗД (різниця між першим енергетичним рівнем просторового квантування та основним домішковим станом) дельта-шару, розташованого як у центрі (ε_{δ}^c), так і на краю (ε_{δ}^e) КЯ, різниця між сусідніми парами кількох перших енергетичних рівнів просторового квантування та поверхнева концентрація електронів у КЯ (n_{QW}) для різних значень фонових домішок. Дані у першому стовпчику таблиці (позначені *) взяті з розділу 3. Зауважимо, що величина ЕЗД для такої значно широкій (20 нм) легованої в центр Si-КЯ (29,6 меВ) дуже близька до даних, отриманих для об'ємного Si (29,0 меВ), в рамках теорії ефективних мас варіаційним методом [65], що також може розглядатися як додаткове підтвердження надійності результатів. Видно, що дані всіх значень у таблиці 6.1 мають свої межі у відповідних значеннях для чистої прямокутної КЯ.

Тут ми наголошуємо ще раз, що таке добре збігання результатів було можливе лише після врахування енергетичних рівнів просторового квантування з позитивною енергією. Таким чином, наш метод з різними діапазонами інтегрування (див. п. 6.1.2) дозволив отримати не тільки стабільні значення ЕЗД, але й забезпечує збіжність результатів до граничного випадку – відсутності фонових домішок. Друге зауваження полягає в тому, що різниці між сусідніми енергетичними рівнями просторового квантування однакові при дельта-легуванні в край та в центр КЯ лише при $T = 4$ К. Для підвищених температур, коли дельта-шар домішок стає частково іонізованим, вони, звичайно, відмінні. Тепер, після перевірки збігання наших результатів із результатами, для КЯ, які не мають фонових домішок, а також з даними, взятими з літератури, ми можемо почати обговорювати представлені дані більш детально.

*Таблиця 6.1 – Енергія зв'язку домішок для КЯ, дельта-легованих в центр (ε_s^c) та край (ε_s^e), поверхнева концентрація електронів в КЯ (n_{QW}) та різниця між сусідніми енергетичними рівнями (ΔE_{ij}), при різних концентраціях фонових домішок N_b . $T = 4$ К. Результати першого стовпчика, позначені *, взяті з розділу 3*

N_b, cm^{-3}	0*	10^5	10^{12}	10^{15}	10^{16}	10^{17}
$\varepsilon_s^c, \text{meV}$	29.6	29.5	29.5	28.9	28.1	25.6
$\varepsilon_s^e, \text{meV}$	17.0	17.0	17.7	19.7	22.3	26.5
$\Delta E_{21}, \text{meV}$	2.9	2.9	2.8	2.1	1.4	0.4
$\Delta E_{32}, \text{meV}$	4.7	4.7	4.8	4.7	4.8	5.9
$\Delta E_{43}, \text{meV}$	6.7	6.7	6.7	6.6	6.6	6.0
n_{QW}, cm^{-2}	0	10^6	1.2×10^8	1.0×10^{11}	3.2×10^{11}	8.6×10^{11}

6.2.2 Результати при температурі 4 К

Проаналізуємо спочатку ЕЗД. З даних таблиці 6.1 виходить, що найбільш вражаючими є результати при найбільшій концентрації фонових домішок, які показані в останньому стовпчику – ЕЗД для випадку дельта-легування в край КЯ є більшою, ніж для випадку дельта-легування в центр! Це рішуче суперечить аналогічним результатам, отриманим без фонових домішок, та представленим у першій колонці таблиці 6.1. Вище ми вже згадували, що випадок, коли ЕЗД для домішки на краю КЯ значно менше, ніж для домішки в центрі КЯ, підтверджений у численних публікаціях [2,4,41,48]. Зниження концентрації фонових домішок тягне за собою різну поведінку даних – ЕЗД для легування в центр збільшується, тоді як для легування в край зменшується, і, нарешті, приходять до їх звичайного співвідношення.

Таким чином, ми маємо незвичайний результат, який суперечить описаному в цих статтях. Для розуміння такої неординарної поведінки ми поклали енергетичні профілі, перші енергетичні рівні просторового квантування з їх хвильовими функціями та домішковим основним станом для різних концентрацій фонових домішок на рисунку 6.6. На рисунку нуль енергії відповідає дну зони провідності далеко від області збіднення заряду.

Ми бачимо, що поведінка хвильової функції із збільшенням концентрації фонових домішок є типовою (див. наприклад [66]) для хвильової функції основного стану двох тунельно пов'язаних КЯ із збільшенням відстані між ними. Ці дві додаткові КЯ – кишені біля кожного з інтерфейсів, які стають глибшими та розташовуються одна за одною із збільшенням концентрації фонових домішок [60]. Через те, що всі донори дельта-шару при цій температурі є нейтральними, кожна крива на цій фігурі співпадає для обох концентрацій домішок у дельта-шарі: $n_{\delta}=0.6 \times 1.2 \times 10^{12} \text{см}^{-2}$. Тут ми, природно, припускаємо, що хвильова функція 1-го

енергетичного рівня просторового квантування вносить основний внесок у формування огинаючої функції домішкового основного стану та у значення ЕЗД (хоча для отримання *точного* значення необхідно було враховувати принаймні 7 рівнів (див. п. 6.1.2).

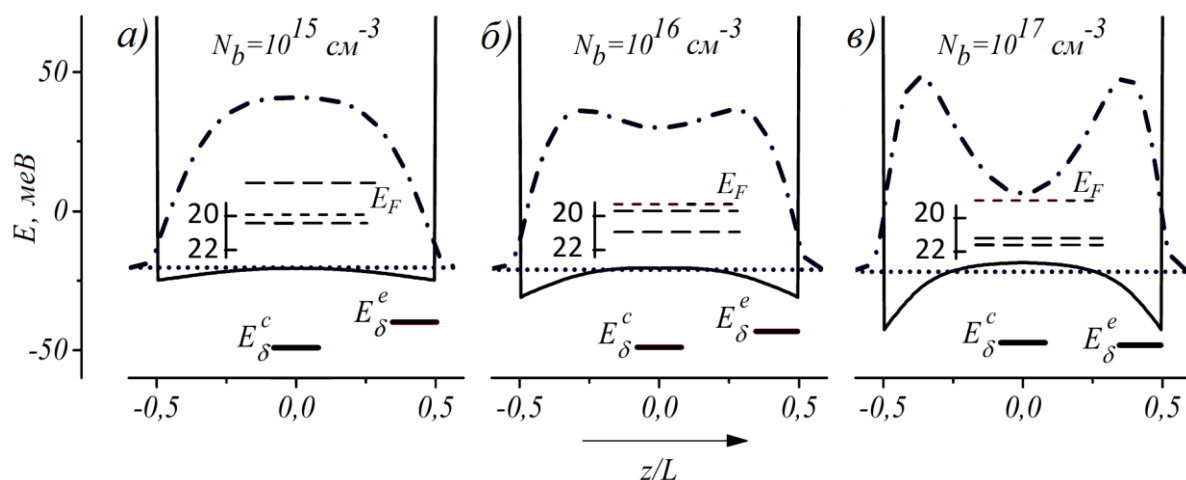


Рисунок 6.6 – Енергетичний профіль (суцільна лінія), перший рівень просторового квантування та його хвильова функція (точкова та штрихпунктирна лінії відповідно), та основні домішкові стани $E_{\delta}^c, E_{\delta}^e$ для КЯ, дельта-легованих в центр та край (короткі суцільні лінії) для різних концентрацій фонових домішок. Температура $T=4$ К. При цій температурі кожний малюнок відповідає обом дослідженим концентраціям донорів дельта-шару: $n_{\delta}=0.6\times$, та $1.2\times 10^{12}\text{см}^{-2}$. Всі представлені хвильові функції зображено в однаковому масштабі. Нуль енергії відповідає дну зони провідності в бар'єрах, далеко від збідненого шару

На рисунку 6.6 добре видно, що «центри тяжіння» для електронів на рівнях просторового квантування зміщуються в бік бар'єрів із збільшенням концентрації фонових домішок. Це означає, що кулонівська взаємодія з домішками, які знаходяться в центрі КЯ, стає меншою і, що, очевидно, відображається на зменшенні ЕЗД. Для легування в край ситуація стає протилежною: зміщення щільності електронів із збільшенням концентрації фонових домішок у напрямку інтерфейсу передбачає зменшення відстані між атомом домішки та вільним електроном, що супроводжується збільшенням ЕЗД.

Тепер розглянемо різницю між сусідніми рівнями енергії. Дані таблиці 6.1 говорять нам про те, що, коли поблизу інтерфейсів ще немає

квантових кишень, фонові домішки не впливають на них суттєво в діапазоні концентрацій $10^5 \dots 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Ми бачимо монотонне збільшення енергетичної відстані зі збільшенням номеру рівнів для кожної концентрації в цьому діапазоні, і така поведінка притаманна будь-якій прямокутній КЯ. Виняток лише чітко видно для концентрації фонових домішок 10^{17} см^{-3} , мається на увазі надзвичайно мала різниця ΔE_{12} та значно велика різниця ΔE_{23} . Це можна пояснити тим, що рівні 2 і 3 мають різне походження. Рівень 2 створений однією із вузьких КЯ поблизу гетероінтерфейсів, а рівень 3 в основному породжується всією (прямокутною) частиною КЯ. І настільки мала різниця $\Delta E_{21} = 0,4 \text{ меВ}$ при цій концентрації фонових домішок є результатом зняття виродження енергетичних рівнів у двох ідентичних та тунельно-зв'язаних КЯ біля кожного інтерфейсу великої «прямокутної» КЯ, як показано на рисунку 6.6, в.

Аналізування даних з концентрацією 10^{16} см^{-3} виявляє, що другий енергетичний рівень в основному породжується з квантових кишень, і це означає, що те ж саме слід сказати про цю концентрацію, а саме рівні 1 і 2 є результатом зняття виродження в двох ідентичних тунельно-зв'язаних КЯ. Для концентрації фонових домішок 10^{15} см^{-3} перший енергетичний рівень просторового квантування не перетинає дно КЯ, а це означає, що він утворюється в основному прямокутною частиною КЯ. Дані концентрації електронів у КЯ (останній рядок у табл. 6.1) демонструє загальновідомий факт, що домішки в бар'єрах (залишкові або навмисно введені) контролюють кількість електронів у КЯ і, отже, міжпідзонне поглинання в КЯ навіть при гелієвій температурі.

6.2.3 Підвищена температура. Енергія зв'язку та концентрація електронів у КЯ

Звернемо свою увагу на результати іонізованих (частково) донорів у дельта-шарі, які подані в таблиці 6.2. Тут можна побачити дані енергії зв'язку ε_δ (лише для КЯ, легуваних в центр), щільність електронів у КЯ

n_{QW} , щільність іонізованих донорів дельта-шару n_{δ}^+ , що дорівнює щільності електронів, які породжуються іонізацією дельта-шару, а також положення рівня Фермі при різних концентраціях фонових домішок N_b і при температурі 77 і 300 К для двох різних концентрацій домішок дельта-шару n_{δ} . Зауважимо, що рівень Фермі при кожній температурі та для кожної концентрації фонових донорів однаковий для обох досліджених концентрацій домішок n_{δ} у дельта-шарі. Це відбувається тому, що він контролюється фоновими домішками, розташованими далеко від інтерфейсів.

Таблиця 6.2 – ЕЗД (ϵ_{δ} , меВ), повна щільність електронів в КЯ (n_{QW} , см^{-2}), внесок електронів, породжених іонізацією дельта-шару (n_{δ}^+ , см^{-2}) в повну щільність, та положення рівня Фермі (E_F) для двох концентрацій домішок дельта-шару при температурах 77 та 300 К, та при різних концентраціях фонових домішок (N_b , см^{-3}). Нуль енергії відповідає дну зони провідності за межами області збіднення заряду

T, K	77								300							
n_{δ} , см^{-2}	6×10^{11}				12×10^{11}				6×10^{11}				12×10^{11}			
N_b , см^{-3}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0* 10^{12}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0* 10^{12}
ϵ_{δ} , meV	24.1	28.2	29.6	29.7	24.4	28.5	29.8	30.0 30.5	30.6	32.4	32.7	32.3	32.8	33.7	33.9	33.4 34.0
n_{QW} , 10^{11} см^{-2}	9.0	3.2	1.5	0.8	9.2	3.5	1.8	1.1 1.1	10.5	6.1	4.8	4.9	13.5	9.2	8.0	8.4 7.7
n_{δ}^+ , 10^{11} см^{-2}	0.2	0.3	0.5	0.8	0.4	0.6	0.8	1.1 1.1	4.4	4.8	4.9	4.9	7.7	8.2	8.4	8.4 8.5
E_F , meV	-34	-43	-55		-34	-43	-55	- 100	- 146	- 205	- 265		-146	-205	-265	-443

Положення рівня Фермі для випадку, позначеного зірочкою *, визначалися з іншого рівняння електронейтральності – без наявності

фонових домішок, і тому немає сенсу заносити їх до таблиці. Рисунок 6.7 допомагає в аналізі даних цієї таблиці. Тут енергетичні профілі КЯ при різних досліджуваних умовах та з однаковою енергетичною шкалою показані у верхній частині (рис. 6.7, а, б та в). (Випадок такої низької концентрації фонових домішок, як 10^{12} см⁻³, буде розглянуто окремо, у пункту 6.2.5).

Як і на рисунку 6.6, тут зображено енергетичні профілі дна квантових ям, оскільки лише її форма значною мірою утворює структуру перших рівнів просторового квантування, а отже, і домішкові стани дельта-шару, які є об'єктом нашого дослідження.

Для наочності та порівняння результатів, отриманих при різних концентраціях фонових домішок і при різних температурах (77 і 300 К), ми змістили їх так, щоб чітко проглядалися відмінності в формі дна енергетичних профілів. Енергетична шкала зліва призначена лише для оцінки змін форми дна. Нуль шкали відповідає положенню перших рівнів просторового квантування (E_1 – суцільні горизонтальні лінії) для всіх концентрацій фонових домішок при температурі 300 К для більшої концентрації домішок дельта-шару. (Насправді, звичайно, ці рівні мають різну енергією).

Також показані аналогічні енергетичні рівні для нижчої концентрації $n_\delta = 0,6 \times 10^{12}$ см⁻² при $T = 300$ К – пунктирні горизонтальні лінії. У нижній частині рисунка 6.5 зображено хвильові функції (також у тому ж масштабі) перших енергетичних рівнів просторового квантування. Слід зазначити, що криві при температурі 4 К виглядають дуже близькими до відповідних при $T = 77$ К, і щоб не ускладнювати рисунок, вони тут не представлені. Крім того, вони є на рисунку 6.6.

Загальний висновок, зроблений з рисунка 6.7, полягає в тому, що форма дна КЯ формується двома групами електронів. «Кишені» біля інтерфейсів, в основному, зумовлені електронами, що вивільняються з бар'єрів, тоді як V-подібна потенційна квантова яма в центральній частині викликається іонізацією дельта-шару. Це означає, що підвищення концентрації фонових домішок тягне за собою поглиблення кишень, але підвищений рівень іонізації домішок дельта-шару супроводжується поглибленням V-частини КЯ.

(1) ЕЗД при $T = 77\text{К}$. При цій температурі рівень іонізації дельта-шару для обох його концентрацій становить менше 10 % (див. відповідні дані таблиці 6.2), а дно КЯ майже повністю (як при $T = 4\text{ К}$) формується електронами в кишнях поблизу інтерфейсів (див. криві 1, 2 верхньої частини рис. 6.7), і тому аналіз для ЕЗД дельта-шару при цій температурі аналогічний проведеному для $T = 4\text{ К}$. Наприклад, як видно з таблиці 6.2, коли концентрація фонових домішок зменшується, ЕЗД дельта-шару має тенденцію до свого граничного значення при $N_b = 0$. Далі ми бачимо, що при однаковій концентрації фонових домішок енергетичні профілі дуже схожі один на одного для обох концентрацій домішок ($6\times$ та $12\times 10^{11}\text{ см}^{-2}$) у дельта-шарі. Тому не дивно, що хвильові функції перших рівнів просторового квантування для відповідних випадків також виглядають однаково – див. криві 1, 2 в нижній частині рисунка 6.7.

Така схожість хвильових функцій відображається в дуже невеликій різниці (не більше 0,3 меВ) у ЕЗД для цих випадків, при меншому значенні – для меншої концентрації домішок у дельта-шарі – див. дані табл. 6.2 щодо температури 77 К для двох концентрацій донорів дельта-шару. Ми розглядаємо це для середньої концентрації фонових домішок 10^{16} см^{-3} . Інші випадки можна пояснити аналогічно.

З таблиці 6.2 видно, що кількість іонізованих донорів дельта-шару (що дорівнює кількості вивільнених електронів) вдвічі більше для більшої концентрації домішок дельта-шару. У свою чергу, це призводить до того, що енергетичний профіль дна КЯ для $n_\delta = 12\times 10^{11}\text{ см}^{-2}$ майже такий самий, як і для $n_\delta = 6\times 10^{11}\text{ см}^{-2}$, як виходить з рисунка 6.7, б). Це означає, що кишні біля інтерфейсів ближче один до одного. Це, у свою чергу, призводить до двох наслідків, відомих з квантової механіки. По-перше, розщеплення основного та єдиного енергетичного рівня⁷ утвореного кишнями за рахунок тунельного зв'язку між ними будуть трохи більшими для більшої концентрації домішок у дельта-шарі.

⁷ На шкалі рис. 6.5 вона перекривається енергетичним профілем, і щоб не ускладнювати рисунок, вона не відображається.

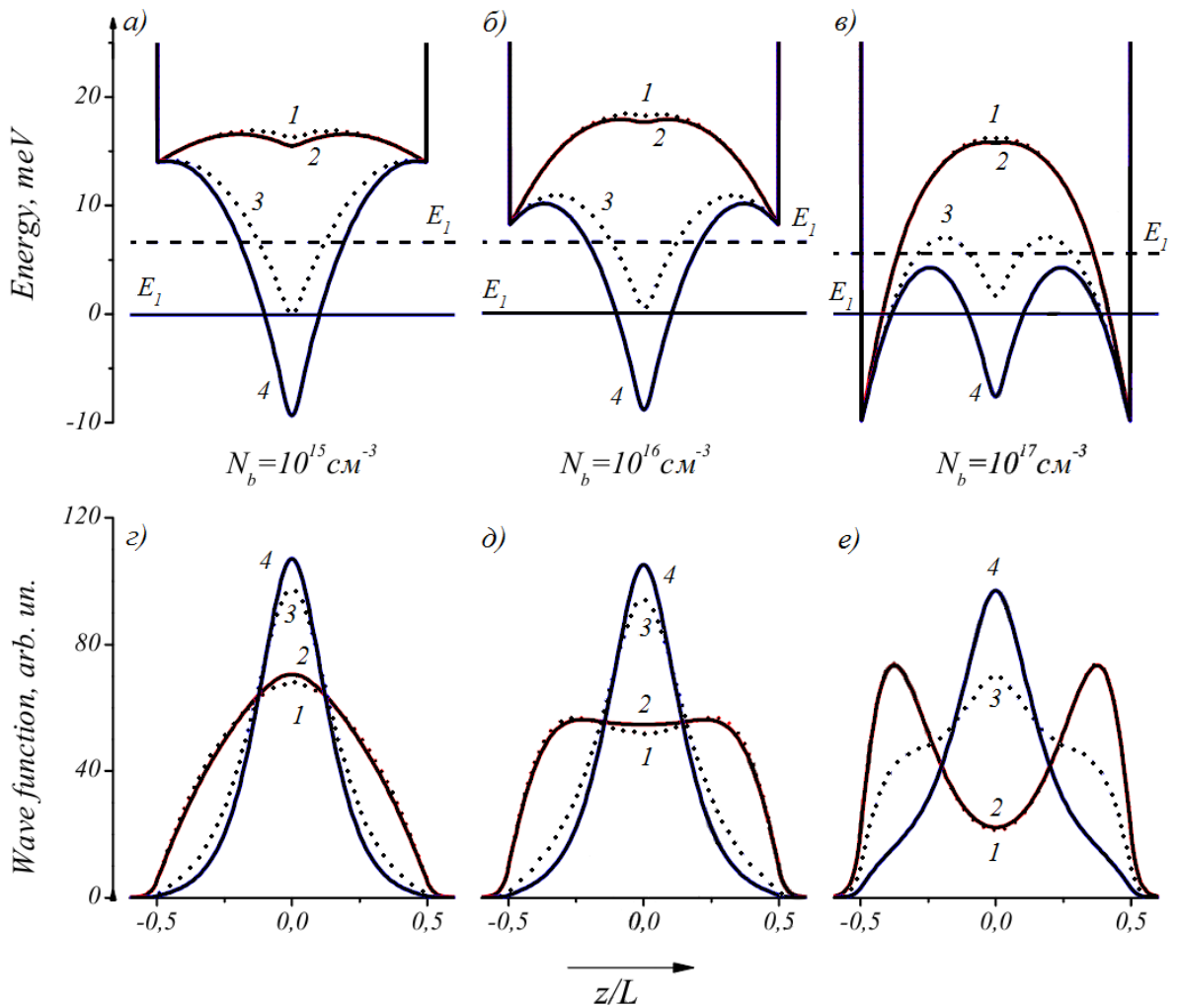


Рисунок 6.7 – Енергетичні профілі – а), б), в) (верхня частина рисунку), та хвильові функції першого рівня просторового квантування – з), д), е) (нижня частина рисунка). Концентрації фонових домішок, N_b , cm^{-3} : а) та з) – 10^{15} ; б) та д) – 10^{16} ; в) та е) – 10^{17} . Температура T , К: 1 та 2 – 77; 3 та 4 – 300. Концентрації донорів дельта-шару n_δ , cm^{-2} : 1 та 3 пунктирні лінії – 0.6×10^{12} ; 2 та 4 суцільні лінії – 1.2×10^{12} . Верхня пунктирна горизонтальна пряма лінія (позначена E_1 праворуч) відповідає першому рівню просторового квантування для $N_\delta = 0.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ при $T = 300 \text{ K}$, та нижня суцільна лінія (також позначена E_1 , але ліворуч) зображує положення першого рівня просторового квантування для $N_\delta = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ при $T = 300 \text{ K}$. У верхній частині рисунку енергетичні профілі для всіх N_b зміщені таким чином, щоб E_1 співпадав з нулем енергії для $N_\delta = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ та $T = 300 \text{ K}$. Усі криві на рисунках а), б) та в) мають однаковий масштаб на осі енергій. Усі хвильові функції в нижній частині рисунка мають однаковий масштаб також

Дійсно, це підтверджується результатами таблиці 6.3 (див. різницю ΔE_{21}), де вказані відстані між парами найближчих рівнів енергії. Другий наслідок – збільшення хвильової функції в бар'єрі між двома тунельно-зв'язаними КЯ, що ми бачимо на рис. 6.7, е).

Збільшення хвильової функції електронів у центрі КЯ призводить до збільшення енергії зв'язку домішки. Тут ми хочемо підкреслити, що той факт, що наші результати дозволяють пояснити такі невеликі відмінності в ЕЗД для різних концентрацій домішок у дельта-шарі, по-перше, вказує на правильність методу розрахунку, по-друге, вказує на те, що тільки аналіз хвильової функції 1-го рівня просторового квантування дозволяє судити про різницю енергії зв'язку домішок у квантовій ямі.

(2) *ЕЗД при $T = 300$ К.* Підвищення рівня іонізації дельта-шару при температурі 300 К призводить до того, що V-частина КЯ грає важливішу роль у формуванні дна КЯ, що є найбільш наочним для випадку рисунка 6.7, а та б. Цікавим є те, що незважаючи на те, що різниця між енергетичними профілями для двох концентрацій дельта-шару на цих рисунках (див. різниці між кривими 3 та 4) за цієї температури кидається в очі, відповідні хвильові функції на рисунку 6.7, г) і д) (криві 3 і 4) знову мають схожий вигляд, і коливання в ЕЗД – лише $1,5$ меВ, з меншим значенням, знову ж таки, для меншої концентрації донорів дельта-шару. На нашу думку, для цього є дві причини. По-перше, що збільшена кількість електронів (для більшої концентрації донорів у дельта-шарі) «викопує» глибшу V-подібну КЯ. Це означає, що хвильова функція електрона менше проникає до бар'єрів, і, отже, її амплітуда збільшується в центрі КЯ [2], що призводить до збільшення ЕЗД. Друга причина полягає в тому, що перший рівень просторового квантування для більш глибокої КЯ розташований у вузькій частині КЯ, що також призводить до збільшення ЕЗД.

Те саме, в принципі, можна сказати і про рисунки 6.7, в та е, хоча тут насамперед помічається різниця у хвильових функціях, а не в енергетичних профілях, які, здавалося б, схожі між собою. Різниця хвильових функцій

відображає різний внесок «кишень» і центральної частини дна енергетичного профілю в перерозподіл електронів (що заповнюють першу підзону) по ширині КЯ. Це відразу призводить до того, що ЕЗД відрізняються більше ніж на 2 меВ. Таким чином, ми бачимо, що чим більшою є схожість хвильових функцій, тим меншою є різниця у ЕЗД. І навпаки, існує кардинальна відмінність форм і значень хвильових функцій для $T = 77$ і 300 К для однакових концентрацій n_δ на рисунку 6.7, е, а таблиця 6.2 говорить про велику різницю ЕЗД (понад 6 меВ) для цих випадків. Той факт, що ЕЗД донорів дельта-шару збільшується зі зменшенням концентрації фонових домішок, відображає той факт, що поглиблення КЯ супроводжується збільшенням ЕЗД.

(3) *Іонізовані донори дельта-шару та електрони в КЯ.* Дивлячись на дані таблиці 6.2, можна помітити дивну, на перший погляд, поведінку концентрації іонізованих донорів у дельта-шарі зі збільшенням енергії зв'язку домішок. Насправді, здавалося б, що при зменшенні енергії зв'язку ступінь іонізації донорів (див. дані про n_δ^+) повинен збільшитися, але ми бачимо протилежну картину. Усе, однак, стає зрозумілим, якщо згадати, що концентрація іонізованих донорів залежить не лише від енергетичного положення основного домішкового стану відносно 1-ї підзони, але і від положення рівня Фермі, а точніше – визначається різницею між енергією рівня Фермі та енергією основного стану домішки – див. другий рядок у формулі (6.6). Наприклад, для $n_\delta = 12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $T = 300$ К і $N_b = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $E_F - E_\delta = -40$ меВ, а для $N_b = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $E_F - E_\delta = -33$ меВ, у результаті чого концентрація іонізованих донорів n_δ^+ є вищою для більшої ЕЗД.

Щодо рівня Фермі, ми бачимо, що його поведінка є цілком звичайною – зі збільшенням концентрації фонових домішок він наближається до дна зони провідності, а підвищення температури переміщує його до середини зони – і така поведінка пояснює залежність кількості іонізованих домішок у дельта-шарі від концентрації фонових домішок. Але найбільш помітним в таблиці 6.2 серед даних концентрації

електронів у КЯ є той факт, що фонові домішки в бар'єрах дозволяють збільшувати кількість електронів у КЯ у кілька разів, що, у свою чергу, може підвищити ефективність оптоелектронних пристроїв, що використовують міжпідзонні оптичні переходи в КЯ [55].

Варто також зазначити, що при температурі 77 К концентрація електронів, що породжені дельта-шаром, завжди менша, ніж концентрація електронів у КЯ, тоді як при температурі 300 К це відношення зростає зі зменшенням концентрації фонових домішок і навіть стає протилежним – концентрація електронів за рахунок іонізації дельта-шару більша, ніж концентрація електронів у КЯ. Розрахунки показують, що це тому, що деяка частина електронів у КЯ збуджується температурою до рівнів $E_m > E_g$, а отже, вони тепер перебувають у бар'єрах (див. другий рядок у формулі (6.9) та пояснення до неї).

6.2.4 Енергетичний зазор між сусідніми рівнями при підвищених температурах

Дані про енергетичні відстані між сусідніми рівнями просторового квантування при температурах 77 і 300 К та при різних концентраціях фонових домішок представлені в таблиці 6.3.

Ці дані вказують на те, що в цілому їх значення для різної концентрації фонових домішок залишають той самий порядок величини, який відповідає для випадку без їх наявності. Але, тим не менш, цікаво зазначити, що, наприклад, для $N_b = 10^{15} \text{см}^{-3}$ динамічний діапазон зміни ΔE_{12} становить $(11,2-2,9) \text{ меВ} = 8,4 \text{ меВ}$, тоді як для $N_b = 0$ той самий діапазон $(11,1-3,8) \text{ меВ} = 7,3 \text{ меВ}$ при зміні температури від 77 до 300 К. Інші випадки можна порівняти та проаналізувати аналогічно. Ми ставимо цей приклад, щоб нагадати, що динамічний діапазон легко змінюється електричним полем при тій же початковій температурі (якщо ігнорувати Джоулеве нагрівання). Таким чином, фонові домішки не скасовують зміни

енергетичного розподілу між парами енергетичних рівнів просторового квантування, але в деяких випадках надають додаткові можливості для неї.

6.2.5 Низькі концентрації фонових домішок

Вище згадувалося, що для перевірки також було зроблено розрахунки для такої низької концентрації фонових домішок, як 10^{12} см^{-3} при температурі 77 та 300 К. Результати при температурі 77 К є цілком звичайними, і ми не знаходимо жодної необхідності обговорювати їх тут.

Таблиця 6.3 – ЕЗД (ε_s , meV), повна щільність електронів в КЯ (n_{QW} , см^{-2}), внесок електронів, породжених іонізацією дельта-шару (n_{δ^+} , см^{-2}) в повну щільність, та положення рівня Фермі (E_F) для двох концентрацій домішок дельта-шару при температурах 77 та 300 К, та при різних концентраціях фонових домішок (N_b , см^{-3}). Нуль енергії відповідає дну зони провідності за межами області збіднення заряду

T, K	77								300								
	6×10^{11}				12×10^{11}				6×10^{11}				12×10^{11}				
$N_b, \text{см}^{-3}$	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	10^{12}	0*
$\Delta E_{21}, \text{meV}$	0.3	1.4	2.6	3.6	0.3	1.5	2.9	3.8	2.1	6.5	7.8	7.9	5.8	10.1	11.2	11.5	11.1
$\Delta E_{32}, \text{meV}$	7.1	4.7	4.5	4.5	6.9	4.6	4.4	4.5	3.0	4.1	4.8	4.9	2.5	4.9	5.9	6.2	5.9
$\Delta E_{43}, \text{meV}$	5.6	6.6	6.7	6.7	5.8	6.7	6.7	6.6	7.5	6.6	6.6	6.6	6.8	6.3	6.6	6.4	6.5
$\Delta E_{54}, \text{meV}$	8.2	8.4	8.5	8.4	8.1	8.4	8.5	8.4	8.0	8.3	8.2	8.1	8.2	8.1	8.0	8.0	8.0

Випадок 300 К заслуговує на окремий розгляд, оскільки, як ми бачимо на вставці рисунка 6.5, енергетичний профіль структури виглядає дещо незвично – енергетичний профіль бар'єрів поблизу гетероінтерфейсів змінює свій нахил. Але перш ніж розпочати обговорення цього питання, слід сказати кілька слів про порівняння даних у нашій статті [58] та

поданих тут. У цій роботі подані дані лише для концентрації дельта-шару $n_\delta = 12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ при температурі 300 К. Тут, як видно з попередніх частин, обговорюється більш повний набір результатів.

Помітна невелика невідповідність між даними публікації [58] та поданими в таблицях 6.2 та 6.3 у частинах, де їх можна порівняти. Поясненням цього є те, що в роботі [58] ми, слідуючи [60], вважали, що всі електрони зі збіднених шарів потрапляють у квантову яму, тобто N_{3D} в (6.9) було прийнято рівним 0. Але в цій роботі ми беремо до уваги той факт, що в області збіднення заряду можуть існувати деякі електрони, і відповідно N_{3D} обчислювались за допомогою формули (6.9). Природно, що можна очікувати, що роль електронів у збідненому шарі стає важливішою при підвищенні температури, особливо при зниженні концентрації фонових домішок. І випадок $N_b = 10^{12} \text{ см}^{-3}$ при температурі 300 К є саме таким серед усіх наших результатів. Це прямо вказує на те, що при низькій концентрації фонових домішок абсолютно необхідно враховувати електрони в області збіднення заряду.

Справа в тому, що неможливо задовольнити рівняння електронейтральності (6.11) без електронів у бар'єрах для будь-якої довжини збідненого шару L_0 – кількість позитивних зарядів залишається більшою, ніж кількість електронів у КЯ навіть при $L_0 \rightarrow 0$. Розв'язок знаходиться лише тоді, коли ми розглядаємо електрони в бар'єрах відповідно до (6.9). Фізично це означає, що частина електронів, які викидаються з КЯ за рахунок теплового руху, стає більшою за кількість іонізованих донорів у бар'єрах, а загальний електричний заряд в областях, які є суміжними з гетеропереходом, стає негативним, що відображається на зміні нахилу в них.

При таких низьких концентраціях донорів у бар'єрах, як 10^{12} см^{-3} , вони вже не утримують рівень Фермі поблизу дна зони провідності, а температура переміщує його до середини забороненої зони разом із КЯ. Це добре видно з даних про положення рівня Фермі в таблиці 6.2. Це означає,

що для таких умов існує необхідність обліку переходу електронів із валентної зони як до шару збіднення заряду (який зараз не є шаром збіднення), так і до КЯ. Тому дані, наведені в таблицях 6.2 та 6.3 щодо концентрації фонових домішок 10^{12} см^{-3} , слід сприймати лише приблизними, тоді як дані про концентрації 10^{15} , 10^{16} та 10^{17} см^{-3} можна вважати досить достовірними. Останнє твердження доводиться також тим, що різниці між результатами, отриманими з і без електронів для концентрації фонових домішок 10^{15} , 10^{16} та 10^{17} см^{-3} при температурі 300 К є занадто малими для їх обговорення.

6.3 Результати для КЯ, дельта-легованих у край

6.3.1 Опис отриманих результатів

У цьому підрозділі представлені результати, отримані для легованої в край КЯ для двох найважливіших температур в експериментальній фізиці, 77 і 300 К. Випадок температури 4 К було обговорено в пункті 6.2.2. Ми досліджуємо дві поверхневі концентрації донорів (фосфору) у дельта-шарі ($n_{\delta} = 6 \times 10^{11}$ та 12×10^{11} см^{-2}) для концентрацій фонових домішок (також фосфору) $N_b = 10^{15}$, 10^{16} та 10^{17} см^{-3} . Крім того, для перевірки збіжності отриманих даних до даних без фонових домішок, додатково були проведені розрахунки для концентрації $N_b = 10^{12}$ см^{-3} при $n_{\delta} = 12 \times 10^{11}$ см^{-2} .

Енергетичні профілі всіх досліджених випадків показані на рисунку 6.8. Він складається з 4 блоків, кожен з яких присвячений результатам розрахунків однієї концентрації дельта-легування (6×10^{11} або 12×10^{11} см^{-2}) при одній з двох вказаних температур. Кожен блок має 4 графіки, що представляють результати для 4 концентрацій фонових домішок, які вказані на відповідному рисунку. Діапазон енергетичної шкали на всіх рисунках становить 300 меВ, але мінімальні та максимальні значення були обрані із зручності сприйняття зображення.

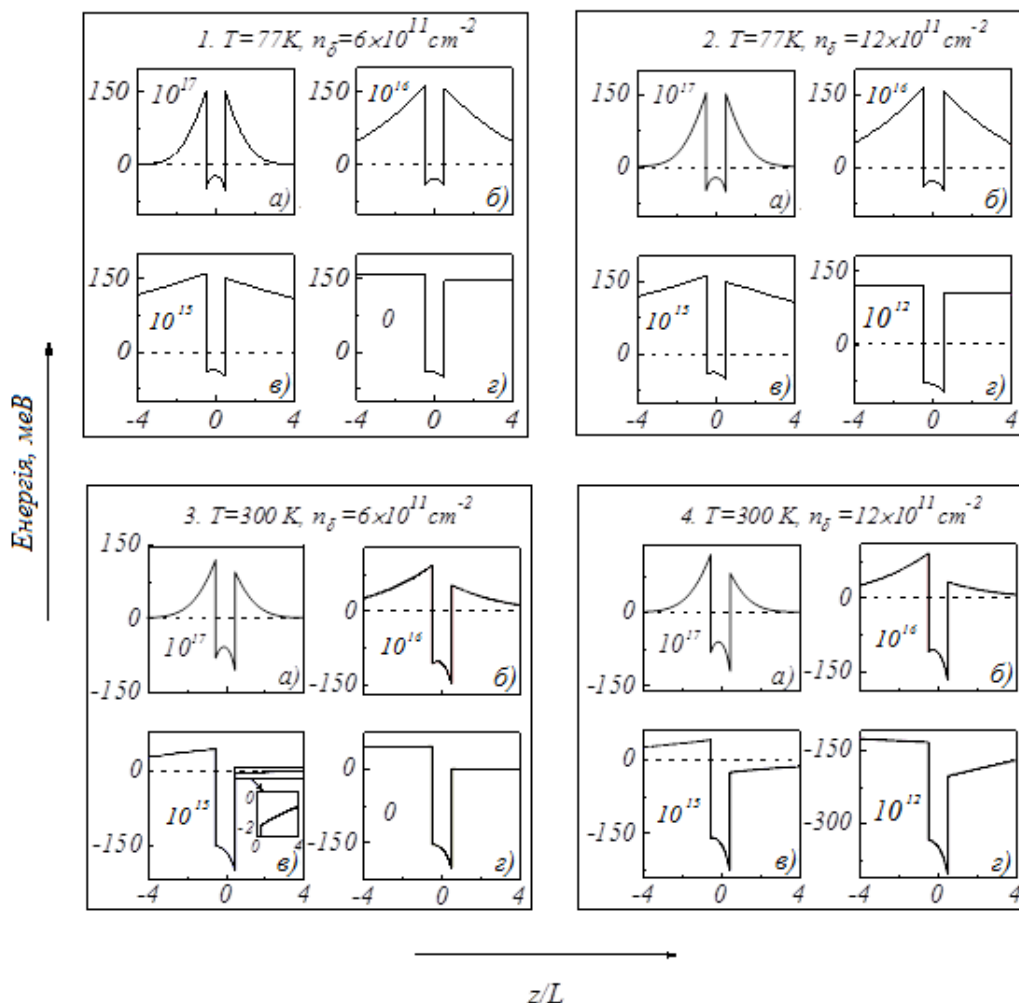


Рисунок 6.8 – Енергетичні профілі КЯ при температурах $T = 77$ (блоки 1 і 2) і $T = 300$ К (блоки 3 і 4). Концентрації донорів дельта-шару становлять $6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (блоки 1 та 3) та $12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (блоки 2 та 4). На кожному графіку вказані концентрації фонових домішок (см^{-3}), які становлять, : а) – 10^{17} ; б) – 10^{16} ; в) – 10^{15} ; г) – 10^{12} (блоки 3 та 4) і 0 (блоки 1 та 3)

Тут ми наголошуємо, що всі графіки з ненульовою концентрацією фонових домішок отримуються на однаковій основі щодо положення рівня Фермі, яке було визначено з рівняння електронейтральності, записаного для діапазонів з нульовою кривизною зони провідності в бар'єрах. Це призводить до того, що сама КЯ має різні позиції щодо нуля енергії для різної концентрації фонових домішок при одній і тій же температурі та для однакових концентрацій дельта-шару.

Це не так очевидно в масштабі на рисунку 6.8 для температури 77 К (блоки 1 і 2), але цілком зрозуміло для температури 300 К (блоки 3 і 4).

Слід зазначити, що графіки для нульової концентрації фонових домішок в блоках 1) та 3) (рисунки в)) показані для того, щоб підкреслити відмінність між випадками з фоновими домішками та без них. Положення рівня Фермі для цього випадку були знайдені іншим способом [41], і тому нуль енергії цих графіків має лише схематичне значення. Рис. 6.8 дає загальне уявлення про вплив концентрацій фонових домішок N_b і дельта-шару n_δ , а також температури на положення квантової ями щодо нуля енергії, форми дна квантової ями, форми та довжини шарів виснаження. З іншого боку, відмінності між відповідними кривими стають помітними при температурі 300 К – блоки 3 і 4. Це особливо видно для концентрацій фонових домішок 10^{16} і 10^{15} см⁻³. Також видно, що для концентрацій 10^{15} см⁻³ праве плече КЯ змінює свій нахил – це означає, що цей шар збагачується електронами, а для концентрації 10^{12} см⁻³ обидва плечі мають більше електронів, ніж позитивних іонізованих донорів (див. рис. г блоку 4).

Аналізуючи результати, ми виходимо з природного припущення, що хвильова функція першого рівня просторового квантування головним чином утворює огинаючу домішкової хвильової функції i , відповідно, робить вирішальний внесок до енергії зв'язку домішок дельта-шару. Тому, перш за все, ми звертаємо увагу на форму дна енергетичного профілю КЯ, оскільки саме ця частина КЯ відповідає за формування першого енергетичного рівня. У підрозділі 6.2, аналізуючи результати при температурах 77 і 300 К у випадку дельта-легування в центр, ми спиралися на рисунок 6.7, який демонструє енергетичні профілі нижньої частини КЯ та відповідні хвильові функції першого енергетичного рівня. Рисунок 6.9, складений подібним чином, відображає аналогічні результати для випадку дельта-легування в край. Зауважимо, що однакові підписи і позначення до рисунків 6.7 та 6.9 дозволяють порівняти основні особливості дельта-легування в центр та в край КЯ. Єдина різниця між цими малюнками полягає в тому, що масштабний коефіцієнт на рисунку 6.9 вдвічі перевищує коефіцієнт на рисунку 6.7.

6.3.2 Збіжність результатів до випадку $N_b = 0$

Зазвичай за відсутності експериментальних даних, критерієм надійності нових результатів є їх зближення з тими, які вважаються надійними. У випадку дельта-легування в край збіжність перевірялася шляхом порівняння з попередніми розрахунками без фонових домішок аналогічно тому, як описано у пункті 6.2.1 для випадку дельта-легування в центр. Аналізуючи рисунок 6.8, можна зробити висновок, що це зручно робити при низькій температурі 77 К, коли бар'єрні рукави КЯ для всіх концентрацій фонових домішок мають однаковий знак нахилу, надаючи більший набір концентрацій фонових домішок. Іншими словами, для ситуацій, зображених у блоці 2 цього рисунку. На рисунку 6.10 ми розмістили всі криві цього блоку разом з випадком відсутності фонових домішок і змістили всі профілі так, щоб ліві гетероінтерфейси співпадали з гетеро інтерфейсом при найвищій концентрації фонових домішок 10^{17} см^{-3} .

Ліва та права вставки внизу фігури в збільшеному масштабі показують ліве та праве плечі КЯ для концентрацій фонових домішок 0 і 10^{12} см^{-3} . Чітко видно, що зі зменшенням концентрації фонових домішок енергетичні профілі наближаються до профілю без фонових домішок.

Щодо температури 300 К, зауважимо, що через різний знак нахилів рукавів КЯ при цій температурі для різних концентрацій фонових домішок графічне зображення таких ситуацій, аналогічно рисунку 6.10, не виглядає переконливим, тому ми не робимо цього тут, хоча довжини шарів виснаження та інші величини при цій температурі також мають тенденцію до своїх граничних значень у випадку без фонових домішок, що буде обговорено нижче.

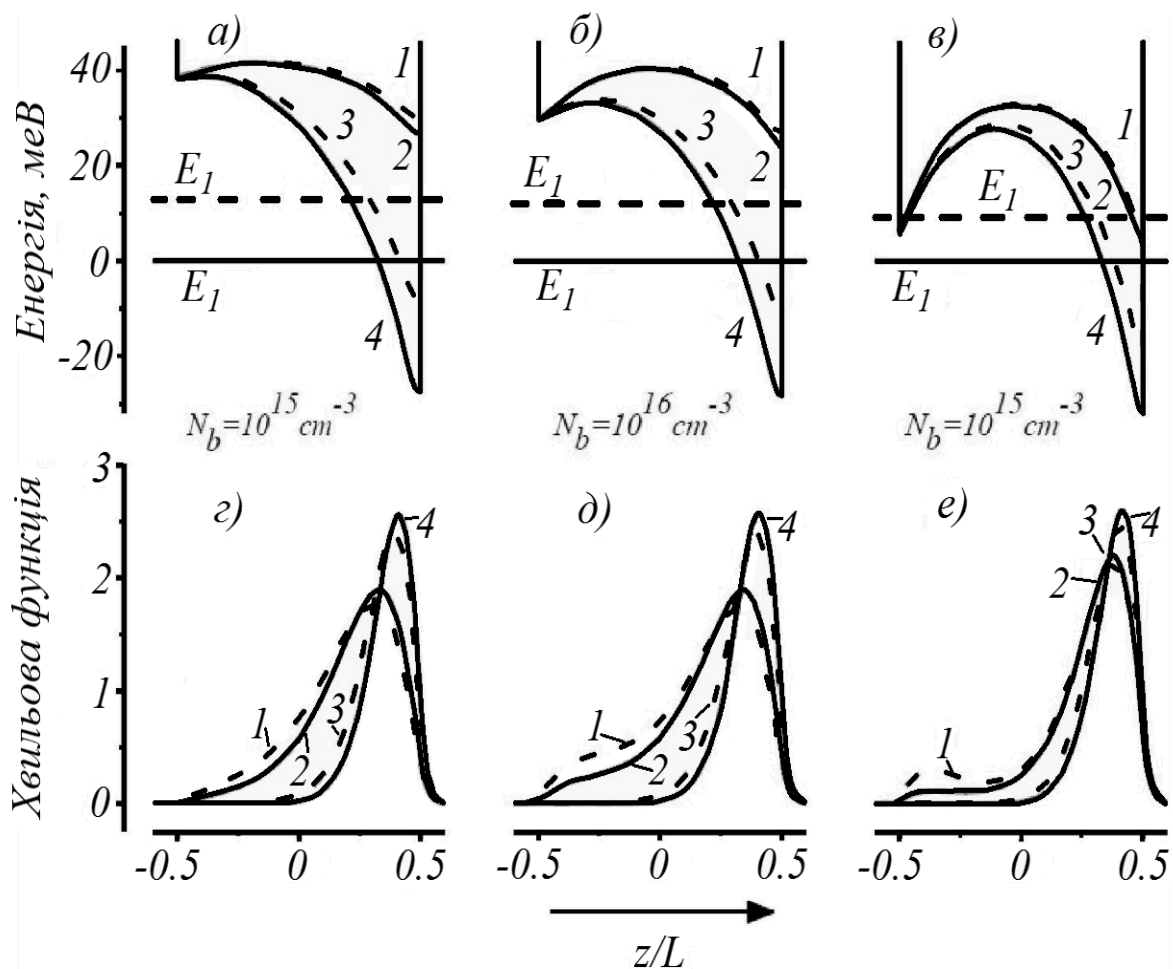


Рисунок 6.9 – Енергетичні профілі – а), б), в) (верхня частина рисунку), та хвильові функції першого рівня просторового квантування – з), д), е) (нижня частина рисунку). Концентрації фонових домішок, N_b , см^{-3} : а) та з) – 10^{15} ; б) та д) – 10^{16} ; в) та е) – 10^{17} . Температура T , К: 1 та 2 – 77; 3 та 4 – 300. Концентрації донорів дельта-шару n_δ , см^{-2} : 1 та 3 пунктирні лінії – 0.6×10^{12} ; 2 та 4 суцільні лінії – 1.2×10^{12} . Верхня пунктирна горизонтальна пряма лінія (позначена E_1 праворуч) відповідає першому рівню просторового квантування для $N_\delta = 0.6 \times 10^{12} \text{см}^{-2}$ при $T = 300$ К, та нижня суцільна лінія (також позначена E_1 , але ліворуч) зображує положення першого рівня просторового квантування для $N_\delta = 1.2 \times 10^{12} \text{см}^{-2}$ при $T = 300$ К. В верхній частині рисунку енергетичні профілі для всіх N_b зміщені таким чином, щоб E_1 співпадав з нулем енергії для $N_\delta = 1.2 \times 10^{12} \text{см}^{-2}$ та $T = 300$ К. Всі криві на рисунках а), б) та в) мають однаковий масштаб на осі енергій. Всі хвильові функції в нижній частині рисунку мають однаковий масштаб також

6.3.3 Електрони та шари виснаження

Проаналізуємо перерозподіл електронів в КЯ і бар'єрах та внесок у цей перерозподіл іонізованих донорів дельта-шару залежно від концентрації фонових домішок, температури та концентрації донорів у дельта-шарі. У цьому нам допоможе таблиця 6.4. У ній подано загальну щільність електронів в КЯ n_{QW} (включаючи збуджені до квазірезонансних енергетичних рівнів при температурі 300 К), щільність іонізованих донорів дельта-рівня n_{δ}^+ , надлишок вільних електронів над бар'єрами (поверхнева концентрація в лівому n_1 та правому n_2 рукавах КЯ).

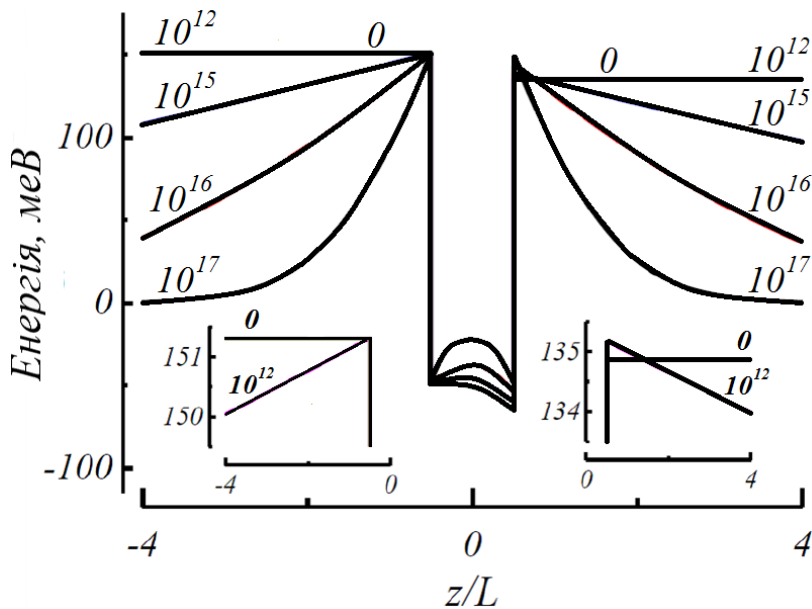


Рисунок 6.10 – Енергетичні профілі КЯ з різною концентрацією фонових домішок (вказані над кожною з кривих). Температура $T = 77$ К і концентрація донорів у дельта-шарі $N_{\delta} = 1.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Лівий гетероінтерфейс кожної КЯ збігається з гетероінтерфейсом для концентрації фонових домішок 10^{17} см^{-3} . Ліва і права вставки в нижній частині рисунку показують у більшому масштабі ліве і праве плечі КЯ для концентрацій фонових домішок 0 і 10^{12} см^{-3}

Крім того, два нижні рядки показують довжину виснаження лівого та правого шарів, нормалізовану до ширини КЯ — l_1/L та l_2/L , відповідно. У певному сенсі таблицю 6.4 можна розглядати як додаток до рисунка 6.8, оскільки тут представлені всі кількісні характеристики кожного з графіків

на ньому. Слід звернути увагу, що рівняння електронейтральності, яке для позначень таблиці 6.4 має вигляд $n_{QW} = n_{\delta}^+ + n_1 + n_2$, задовольняється для кожного з стовпчиків. Негативні значення n_1 та n_2 при температурі 300 К означають, що в цих конкретних випадках густина електронів у бар'єрі вища за щільність іонізованих донорів, що відображається зміною знака нахилу на графіках (в) (блоки 3 та 4) та (г) (блок 4). У свою чергу, зірочка перед певною довжиною означає, що цей шар збагачений електронами.

Таблиця 6.4 – Повна щільність електронів у КЯ (n_{QW}), щільність іонізованих донорів у дельта-шарі (n_{δ}^+), надлишок вільних електронів над бар'єрами в лівому (n_1) та правому (n_2) плечах виснаження, безрозмірна довжина цих лівого (l_1) та правого (l_2) плечей для двох концентрацій домішок у дельта-шарі (n_{δ}), при температурах 77 і 300 К, та при різних концентраціях залишкових домішок (N_b). Знак «-» перед n_1 та n_2 та зірочка перед довжиною шару виснаження означають, що ці шари збагачені електронами. Дані при нульовій концентрації фонових домішок взяті з [41]. Нуль енергії співпадає з дном (без кривизни) зони провідності в бар'єрах

T, K	77							300						
$n_{\delta}, \text{cm}^{-2}$	6×10^{11}			12×10^{11}				6×10^{11}			12×10^{11}			
N_b, cm^{-3}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	10^{12}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	10^{12}
			0				0			0				0
$n_{QW}, 10^{11}, \text{cm}^{-2}$	8.9	3.4	1.9	9.0	3.8	2.3	1.7	10.8	6.3	5.0	13.3	9.1	8.0	7.7
			1.3				1.6			4.9				7.8
$n_{\delta}^+, 10^{11}, \text{cm}^{-2}$	0.1	0.5	1.0	0.2	0.9	1.3	1.7	4.0	4.7	4.9	6.9	7.7	8.0	8.1
			1.3				1.7			4.9				7.8
$n_1, 10^{11}, \text{cm}^{-2}$	4.4	1.5	0.5	4.4	1.5	0.5	0.0	3.6	1.0	0.2	3.6	1.0	0.2	-0.1
			0				0			0				0
$n_2, 10^{11}, \text{cm}^{-2}$	4.4	1.4	0.5	4.4	1.4	0.5	0.0	3.1	0.7	-0.02	2.8	0.5	-0.2	-0.4
			0				0			0				0
l_1/L	4.61	11.3	32	4.62	11.3	32	876	3.5	10.1	26	3.5	10.0	2.5	*510
l_2/L	4.60	11.2	31	4.60	11.2	31	829	3.2	8.4	*8	3.1	7.1	*21	*57

Звичайно, слід також підкреслити, що дані в таблиці 6.4 чисельно підтверджують рисунок 6.10 – усі подані тут концентрації мають свою межу у відповідних значеннях при відсутності фонових домішок при температурі 77 К. Цікаво відмітити, що загалом ці концентрації виявляють подібну поведінку також при температурі 300 К. Незначна розбіжність між

випадками низьких концентрацій фонових домішок та їх відсутністю (див. останні стовпчики для температури 300 К) пояснюється значним збудженням електронів в КЯ до квазірезонансних енергетичних рівнів і до бар'єрів. Таке збудження не враховувалось у випадку відсутності фонових домішок. Проте з таблиці 6.4 видно, що навіть при температурі 300 К зниження концентрації фонових домішок пов'язане зі збільшенням довжини шарів виснаження, і, незважаючи на різні нахили, можна очікувати, що вони будуть всі прямувати до межі нульової концентрації, яка дорівнює нескінченності. Варто також зазначити, що кількість (щільність) електронів у КЯ, надлишок позитивно заряджених донорів в обох плечах КЯ зменшується, тоді як щільність іонізованих донорів у дельта-шарі зростає із збільшенням концентрації фонових домішок у кожному відповідному рядку таблиці 6.4. Щоб зрозуміти це, слід мати на увазі, що положення рівня Фермі при кожній конкретній температурі залежить від концентрації фонових домішок: зменшення концентрації зміщує рівень Фермі до середини забороненої зони. Це означає, що в нашій енергетичній шкалі член $\exp\left(\frac{E_F - E_n}{kT}\right)$ стає меншим із зменшенням концентрації фонових домішок. У свою чергу, це призводить до збільшення щільності іонізованих донорів у дельта-шарі згідно з другим рядком у формулі (6.6) та до зменшення кількості електронів у КЯ згідно з формулою (6.7). Ще однією особливістю результатів, на яку слід звернути увагу, яку виходить з рисунка 6.8 (блоки 3 і 4) і з таблиці 6.4, є те, що перехід від справді виснаженого шару до збагаченого електронами шару в рукавах КЯ виникає раніше для КЯ з більшою концентрацією домішок у дельта-шарі. На наш погляд, пояснення цього може бути наступним. Очевидно (і це також видно з таблиці 6.4), що при однаковій температурі та концентрації фонових домішок (і, відповідно, при однаковому положенні рівня Фермі), кількість електронів у КЯ завжди більша при вищій концентрації донора в дельта-шарі, ніж при меншій. Ці електрони виривають глибшу трикутну КЯ поблизу правого гетероінтерфейсу (див.

верхню частину рис. 6.9), що призводить до глибшого положення на енергетичній шкалі всієї послідовності енергетичних рівнів, включаючи квазірезонансні рівні та дно дна провідності в правому бар'єрі. Таке зниження позицій енергетичних рівнів призводить до збільшення їхньої заселеності електронами згідно з формулами (6.7) та (6.9). У свою чергу, це сприяє додатковому (у порівнянні з випадком меншої концентрації донорів в дельта-шарі) потоку електронів у праве плече КЯ через два основні канали. Перший – це перенесення електронів від енергетичних рівнів (включаючи ті, що знаходяться у валентній зоні при температурі 300 К), використовуючи енергію фонона, а другий – тунелювання від резонансних рівнів з тією ж енергією. І останнє, але не менш важливе, хоча загальна кількість електронів у КЯ для випадку легування в край приблизно така ж, як і при легуванні в центр, слід мати на увазі, що в першому випадку більшість електронів знаходиться в одній трикутній КЯ, що розташована біля правого бар'єру, тоді як у другому випадку, вони в основному розподіляються по трьом КЯ – двох однакових КЯ поблизу гетероінтерфейсів та V-подібній КЯ в центральній частині великої КЯ. У результаті виявляється, що трикутна КЯ приблизно вдвічі глибша за V-подібну КЯ. Усе це може по-різному проявлятися в оптичних властивостях КЯ із дельта-легуванням у центр і в край.

6.3.4 Енергія зв'язку домішок

Енергетичні характеристики, такі як енергія зв'язку домішки, енергетичний зазор між парами сусідніх рівнів та енергія Фермі, представлені в таблиці 6.5. Нагадаємо, нуль по енергії співпадає з дном зони провідності поза областями виснаження. Спочатку розглянемо ЕЗД при температурі 77 К і концентрації фонових домішок 10^{17} см⁻³. Перш за все, зауважимо, що незвичний результат, який ми зафіксували в [61], при температурі 4 К також зберігається при температурі 77 К, а саме ЕЗД для

найвищої розглянутої концентрації фонових домішок більше при легування в край, ніж при легуванні в центр⁸ для обох концентрацій дельта-шару: 27,3 мэВ проти 24,1 мэВ для $n_\delta = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ та 27,5 мэВ проти 24,4 мэВ для $n_\delta = 12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Саме при цій концентрації фонових домішок (10^{17} см^{-3}) іонізація дельта-шару відіграє незначну роль у формуванні дна всієї КЯ, як це видно з даних таблиці 6.4 та блоків 1 та 2 на рисунку 6.8. Домінуючу роль відіграють електрони з шарів виснаження поблизу КЯ, які утворюють майже рівні "кишені" поблизу гетероінтерфейсів, і тому аналіз аналогічний аналізу при $T = 4\text{К}$ (див. пункт 6.2.2). Тут ми коротко зауважимо, що збільшення концентрації фонових домішок призводить до зсуву електронної густини в бік бар'єрів, що послаблює кулонівську взаємодію при легуванні в центр і, відповідно, зменшує ЕЗД.

Таблиця 6.5 – ЕЗД ε_δ , енергетичний зазор між сусідніми енергетичними рівнями ΔE_{ij} , ($i = 2, 3, 4; j = i - 1$), енергія Фермі E_F для двох концентрацій домішок в дельта-шарі n_δ , при температурах 77 і 300 К та при різних концентраціях залишкових домішок N_b . Дані при нульовій концентрації фонових домішок взяті з [41]. Нуль енергії співпадає з дном (без кривизни) зони провідності в бар'єрах. ЕЗД відрахована відносно E_1

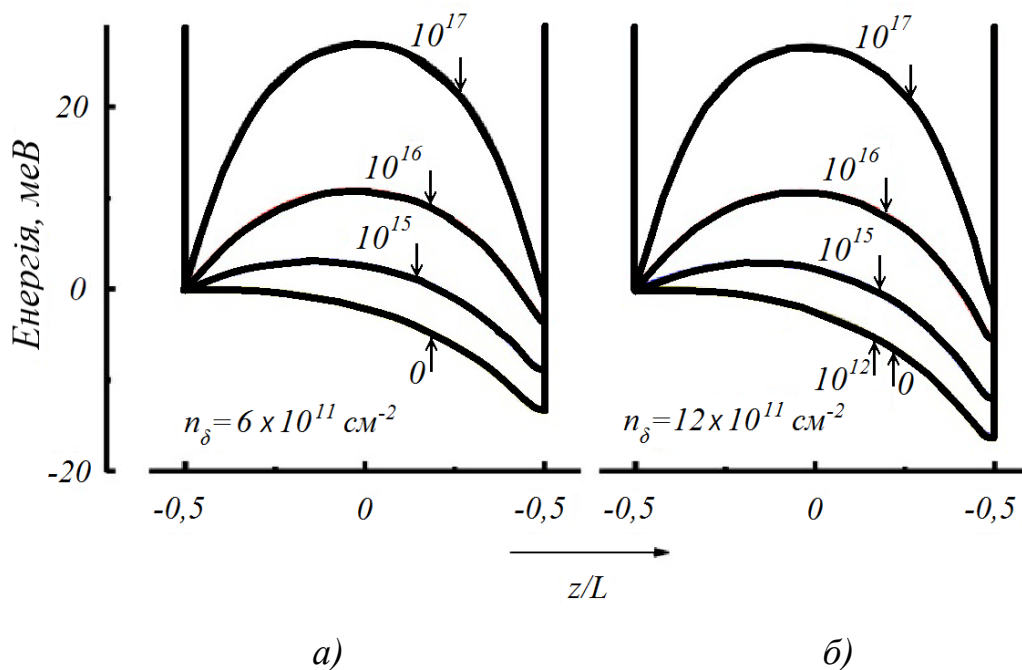
Т, К	77								300										
	6×10^{11}			12×10^{11}					6×10^{11}			12×10^{11}							
$n_\delta, \text{ см}^{-2}$																			
$N_b, \text{ см}^{-3}$	10^{17}	10^{16}	10^{15}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0*
			0*				10^{12}				0*				10^{12}				10^{12}
$E_1, \text{ меВ}$	-27.7	-30.3	-39.0	-28.2	-31.2	-40.6	-84.1	-79	-126	-181	-89	-141	-198	-376					
$\varepsilon_\delta, \text{ меВ}$	27.3	23.8	22.9	27.5	24.5	23.8	23.4	30.3	29.0	28.7	31.9	31.2	31.1	30.0					
			22.4				23.7			27.4				31.0					
$\Delta E_{12}, \text{ меВ}$	0.8	1.8	3.7	1.6	2.6	4.7	6.2	16.0	15.6	15.5	21.2	20.5	20.6	19.7					
			5.3				5.7			14.9				20.7					
$\Delta E_{23}, \text{ меВ}$	7.2	4.8	4.2	6.9	4.5	4.0	4.4	1.3	7.4	8.9	3.8	11.1	12.2	11.2					
			4.3				4.3			8.5				12.5					
$\Delta E_{34}, \text{ меВ}$	5.5	6.4	6.5	5.6	6.4	6.5	6.3	7.3	4.8	6.0	6.2	5.5	7.5	6.7					
			6.4				6.4			5.9				8.1					
$\Delta E_{23}, \text{ меВ}$	8.2	8.4	8.5	8.2	8.4	8.5	8.3	7.5	7.8	7.5	7.3	7.0	7.0	7.0					
			8.3				8.4			7.5				7.2					
$E_F, \text{ меВ}$	-34	-43	-55	-34	-43	-55	-100	-146	-205	-265	-146	-205	-265	-443					

⁸ Дані для випадку дельта-легування в центр наведені в таблиці 6.2

Для легування в край при низьких рівнях іонізації дельта-шару ситуація протилежна – збільшення концентрації фонових домішок збільшує кулонівську взаємодію, що еквівалентно збільшенню ЕЗД. Таким чином, при певній концентрації фонових домішок (у нашому випадку вона становить 10^{17} см^{-3}) енергія зв'язку при легуванні в край стає більшою, ніж при легуванні в центр КЯ.

Розглянемо поведінку ЕЗД в інших випадках, проаналізувавши рисунок 6.9. Видно, що, як у випадку дельта-легування в центр, нижня частина КЯ формується двома групами електронів. При низькій температурі 77 К ця форма в основному контролюється електронами з шарів виснаження. При високій температурі 300 К та зменшенні концентрації фонових домішок іонізація дельта-шару відіграє все більшу роль у формуванні дна КЯ. Отже, можна було б очікувати збільшення хвильової функції першого енергетичного рівня і, відповідно, енергії зв'язку домішок дельта-шару. Однак результати таблиці 6.5 демонструють протилежну поведінку ЕЗД – вона зменшується із зменшенням концентрації фонових домішок як для температур 300, так і для 77 К, а діапазони зниження більші при температурі 77 К, ніж при кімнатній. Подібну поведінку демонструють максимуми хвильових функцій першого енергетичного рівня – їх величина зменшується із зменшенням концентрації фонових домішок, а це означає, що кореляція між ЕЗД та максимумами хвильової функції першого енергетичного рівня залишається чинною для всіх випадків. Рисунок 6.11 допомагає зрозуміти таку поведінку ЕЗД. Тут при температурі 77 К ми знову розміщуємо дно КЯ із загальним лівим гетероінтерфейсом і нульовою енергією в найнижчій точці. Цифри поруч із кожною кривою вказують на концентрацію фонових домішок. Рисунок 6.11, а відповідає меншій концентрації домішок дельта-шару ($n_{\delta} = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$), а рисунок 6.11, б – вищій концентрації ($n_{\delta} = 12 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$), крім того, на цьому малюнку профілі для $N_b = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ і $N_b = 0$ збігаються. Стрілки вказують місця перетину

першого енергетичного рівня з відповідним енергетичним профілем. Іншими словами, це означає, що відстань між правим гетероінтерфейсом і точкою перетину є ширина трикутної КЯ в місці розташування першого енергетичного рівня. Чітко видно, що точка перетину зміщується в бік лівого гетероінтерфейсу зі зменшенням концентрації фонових домішок. Це означає, що трикутна КЯ біля правого гетероінтерфейсу (де розташований дельта-шар) стає ширшою при цій енергії, і теорія передбачає⁹, що чим ширша КЯ, тим менше ЕЗД [4, 60]. Також можна побачити суттєву кореляцію між ЕЗД (табл. 6.5) та шириною трикутної КЯ в місці розташування першого енергетичного рівня для всіх розглянутих ситуацій, крім випадку нульової концентрації фонових домішок.



*a – 6×10^{11} , б – 12×10^{11} при температурі 77 К
Концентрація фонових домішок (см^{-3}) вказана біля відповідної кривої.
Стрілки вказують місця перетину першого енергетичного рівня
з відповідним енергетичним профілем
Рисунок 6.11 – Дно енергетичних профілів КЯ з концентрацією домішок
дельта-шару, см^{-2}*

⁹ Дане твердження виконується, якщо ширина КЯ більша ніж радіус Бора. Для нашої структури радіус Бора становить 2 нм.

6.3.5 Хвильові функції та енергетичний зазор між сусідніми рівнями просторового квантування

З рисунка 6.9 виходить, що хвильові функції першого енергетичного рівня для всіх випадків при температурах 300 і 77 К відрізняються одна від одної в значно меншій мірі, ніж хвильові функції для подібних випадків при дельта-легуванні в центр КЯ (рис. 6.7). Більш того, хвильові функції при легуванні в край виглядають досить звичайними в порівнянні з хвильовими функціями при легуванні в центр. Можна лише повторити (це можна побачити у великих масштабах), що значення максимуму хвильової функції зменшується зі зменшенням концентрації фонових домішок (у тому числі включаючи випадок $N_b = 0$) для обох концентрацій донорів дельта-шару, що супроводжується зниженням ЕЗД для цих станів. І, тим не менш, існує важлива особливість хвильових функцій дельта-легованих в край КЯ, яка притаманна лише цьому випадку і відсутня у випадку легування в центр КЯ. Ця особливість полягає в розщепленні рівнів енергії за рахунок тунельного зв'язку двох асиметричних КЯ, тоді як для легування в центр відбувається розщеплення рівнів двох симетричних КЯ, або взагалі немає розщеплення для однієї КЯ. Тут слід зазначити, що асиметричні подвійні КЯ [67] є надзвичайно цікавими об'єктами дослідження – набагато цікавішими за симетричні КЯ.

Але, однак, оскільки метою цієї роботи не є вивчення асиметричних подвійних КЯ, ми не зупиняємось цій темі. З іншого боку, ми також хочемо привернути увагу до того факту, що леговані в край КЯ (з легованими бар'єрами), можуть представляти нову модель асиметричних подвійних КЯ. Вище, коли ми згадували тунельно-пов'язані КЯ, ми наводили величину розщеплення між першим та другим рівнями енергії як докази. Однак у літературі зазвичай квадрати хвильових функцій [67] подаються як доказ тунельного зв'язку та розщеплення рівня. Тому ми також йдемо цим шляхом і, як приклад на рисунку 6.12, подано квадрати хвильових функцій

першого та другого енергетичних рівнів для ситуацій, зображених на рисунках 6.9, д та е пунктирними лініями 1. Іншими словами, для $n_{\delta} = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ при температурі 77 К. Верхня – а) частина рисунка для $N_b = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ і нижча – б) частина – для $N_b = 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Крім того, для кожного з випадків ми також вказали розщеплення енергії $\Delta E_{21} = E_2 - E_1$ та ширину локального бар'єру L_b між точками перетину для першого рівня просторового квантування. Рисунок 6.12 демонструє типову поведінку квадратів хвильових функцій для розщеплення енергетичних рівнів через тунельну взаємодію двох КЯ: на рисунку 6.12, а, коли ширина бар'єру $L_b = 10,8 \text{ нм}$, розщеплення невелике – $\Delta E_{21} = 0,8 \text{ меВ}$, а збільшення розщеплення на рисунку 6.12, б супроводжується зменшенням ширини бар'єру – $\Delta E_{21} = 1,8 \text{ мєВ}$ для $L_b = 8,4 \text{ нм}$. Більш того, форма квадратів хвильових функцій вказує, яка з КЯ вужча, а яка ширша [67]. У нашому випадку хвильова функція 1 бере початок із ширшої КЯ (поруч з правим гетероінтерфейсом) та хвильова функція 2 – у вужчій КЯ (біля лівого гетероінтерфейсу) [67]. На рисунку 6.12 також пояснюється, чому хвильові функції 1 і 2 ліворуч від QW на рисунку 6.9, д більші за відповідні хвильові функції на рисунку 6.9, е – це просто через те, що бар'єр між трикутними КЯ стає вужчим, збільшується його прозорість для тунелювання, що призводить до більшої ймовірності знаходження електрона в лівій трикутній КЯ (у лівій “кишені” великої КЯ).

Звернемо увагу на дані енергетичного зазору між парами сусідніх рівнів, які разом з ЕЗД та енергією Фермі подані в таблиці 6.5 для всіх випадків, показаних на рисунку 6.9. Перш за все, звернемо увагу, що фонове легування не тільки не скасовує діапазон перебудови енергетичних рівнів, встановлений для ситуації без фонового легування, але додає нові ступені свободи в керуванні їх зміною (під діапазоном перебудови тут мається на увазі різниця, $E_{ij}|_{T=300} - E_{ij}|_{T=77}$, що відповідає рівню іонізації дельта-шару при кімнатній температурі та температурі рідкого азоту). Такі ступені свободи надають більш широкий діапазон налаштування більшості енергетичних зазорів між рівнями та тунельне

розщеплення між деякими рівнями як при рідкому азоті (див. вище), так і при кімнатній температурі. Наприклад, з таблиці 6.5 виходить, що при температурі 300 К та концентрації фонових домішок $N_b = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ рівні 2 та 3 розщеплюються через тунельне зчеплення асиметричних КЯ, розташованих поблизу кожного з інтерфейсів для обох концентрації донорів дельта-шару.

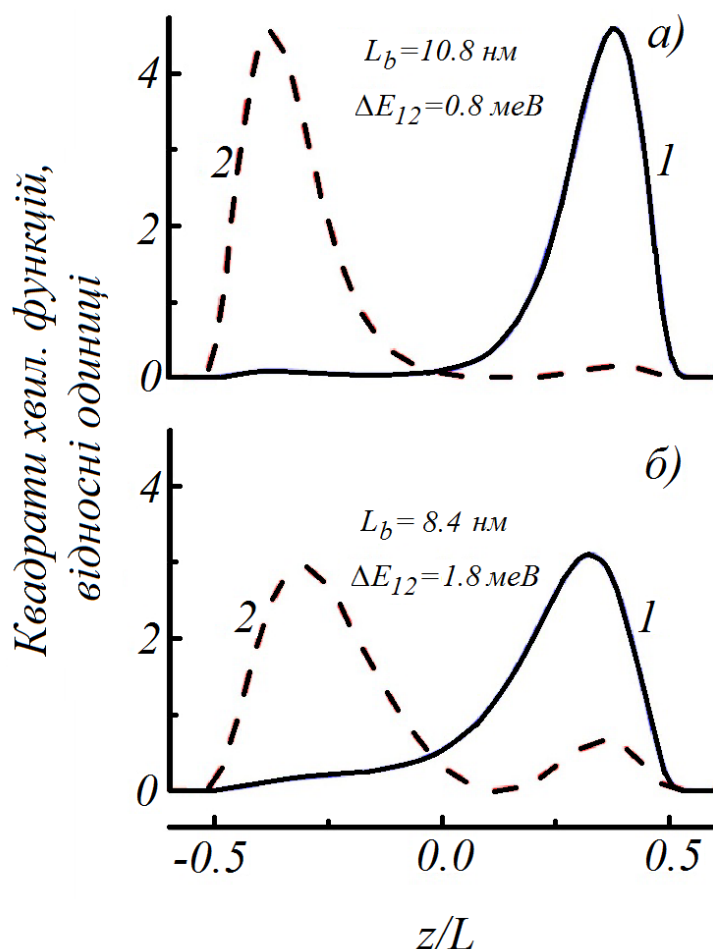


Рисунок 6.12 – Квадрати хвильових функцій першого (1 – суцільна лінія) та другого (2 – пунктирна лінія) енергетичних рівнів просторового квантування з концентрацією фонових домішок а) – $N_b = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ та б) – $N_b = 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Концентрація донорів дельта-шару $n_\delta = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, температура $T=77\text{К}$. ΔE_{21} – енергетичне розщеплення, L_b – ширина локального бар'єру в точках перетину першого енергетичного рівня

Нарешті, порівнюючи дані з таблиць 6.5 та 6.3, можна побачити, що діапазон налаштування при легуванні в край майже вдвічі більший, ніж при легуванні в центр для будь-якої пари енергетичних рівнів. Беручи до уваги той факт, що переходи між будь-якими енергетичними рівнями

з будь-якою парністю є дозволеними при легуванні в край, можна зробити висновок, що цей випадок разом із легуванням у бар'єри в багатьох аспектах є більш привабливим для маніпулювання енергетичними зонами між енергетичними рівнями просторового квантування.

6.4 Висновки

В даному розділі досліджено вплив іонізації фонових домішок у бар'єрах КЯ та домішок, розташованих у вигляді дельта-шару, розташованого у центрі КЯ, на ЕЗД та на перебудову енергетичних рівнів просторового квантування. З цією метою було використано дві послідовні процедури для розв'язання рівнянь Шрьодінгера та Пуассона. По-перше, необхідно було знайти самоузгоджений енергетичний профіль усієї структури враховуючи ЕЗД дельта-шару, знайденого у так званому внутрішньому циклі або взятого з попереднього кроку зовнішнього циклу. Параметром регулювання в обох циклах була довжина шару виснаження Z_0 . В якості критерію конвергенції було виконання рівняння електронейтральності для шару виснаження та КЯ. У зовнішньому циклі на основі знаходження енергетичного профілю всієї структури внутрішнього циклу було знайдено ЕЗД та розташування енергетичних рівнів просторового квантування. Було показано, що форма дна КЯ є результатом конкуренції між потенціалами, створеними зарядами області виснаження та звільненими шляхом іонізації дельта-шару. При найвищій дослідженій концентрації фонових домішок 10^{17}см^{-3} та при низькій температурі 4К ЕЗД при легуванні в край КЯ стає більшою, ніж для випадку легування в центр. Це суперечить традиційній точці зору на взаємозв'язок ЕЗД для випадків легування в край та центр КЯ. При підвищених температурах ступінь іонізації дельта-шару залежить від концентрації фонових домішок – чим більша концентрація, тим нижчий рівень іонізації дельта-шару. Але основним висновком може бути те, що фонові домішки не анулюють явищ, пов'язаних з іонізацією дельта-шару, розташованого в центрі КЯ. Ці явища є

зміна ЕЗД дельта-шару, і, що є найважливішим на нашу думку, зміна енергетичного зазору між парами енергетичних рівнів просторового квантування.

Що стосується випадку дельта-легування в край КЯ. ЕЗД дельта-шару має дві наступні особливості. 1) Збільшення концентрації фонових домішок спричинює збільшення ЕЗД дельта-шару. 2) При температурі 77 К та концентрації фонових домішок 10^{17} см^{-3} ЕЗД при легуванні в край стає більшою ніж у випадку легування в центр КЯ. Що стосується перебудови енергетичних рівнів, то ефект фонового легування найбільш помітний при перебудові перших трьох рівнів просторового квантування. По-перше, динамічний діапазон зміни енергетичного зазору між парами цих рівнів приблизно вдвічі більший, ніж у випадку легування в центр КЯ. По-друге, залежно від ступеня легування дельта-шару, або перший, і другий енергетичні рівні, або другий і третій, можуть бути тунельно-пов'язані. Це забезпечує додаткові ступені свободи для керування положенням енергетичних рівнів і, отже, оптичними властивостями КЯ, порівняно із випадком легування в центр КЯ. Крім того, є ще дві особливості дельта-легування в край КЯ. По-перше, у цьому випадку майже всі електрони знаходяться у трикутній КЯ, розташованій у місці дельта-легування, тоді як при легуванні в центр КЯ, ці електрони розподіляються по трьох КЯ – двох трикутних, розташованих поблизу гетероінтерфейсів і третій, V-подібний, розташованій у центрі великої КЯ. Це також відобразатиметься в оптичних властивостях дельта-легованих в край КЯ. І останнє, але не менш важливе те, що легування в край забезпечує ще одну модель асиметричних тунельно-пов'язаних КЯ. Такі КЯ широко вивчаються та використовуються у сучасній фізиці наноструктур. Властивості нової системи, такі як глибина КЯ, ширина бар'єру між ними, розщеплення енергетичних рівнів, можна легко змінити за допомогою слабого електричного поля, прикладеного в площині КЯ.

ПІСЛЯМОВА

Ця монографія присвячена перебудові енергетичних рівнів у дельта-легованих КЯ в залежності від ступеня іонізації домішкового дельта-шару. Метою було дослідити природу цієї перебудови та за можливістю запропонувати ідею практичного використання даного ефекту. Як відмічалось, зміна енергетичного зазору між рівнями в КЯ спричиняє зміну робочої частоти потенційного оптоелектронного пристрою, створеного на основі цієї КЯ.

Дійсно, як показано в розділі 3, при підвищенні температури з'являються як вільні електрони на рівнях просторового квантування КЯ, так і позитивні іони в межах області дельта-шару. Ці заряди формують потенціал Хартрі, який накладається на прямокутний (при $T=4$ К) потенціальний профіль. Таким чином, отримується нова гетероструктура, з новим набором рівнів просторового квантування. Причому, як було також показано, енергетичний зазор між першими рівнями збільшується зі збільшенням ступеню іонізації домішок [42]. Цей ефект є цікавим і потенційно корисним, оскільки саме перші рівні в КЯ є найбільш заселеними електронами, і саме вони (рівні) є найважливішими в міжпідзонних оптичних переходах. Крім того, енергетичний зазор між рівнями в КЯ відповідає ТГц діапазону, що додає актуальності цьому напрямку досліджень.

Для демонстрації вищезгаданого ефекту був адаптований метод самоузгодженого розрахунку, детально описаний в розділі 2, за допомогою якого було досліджено КЯ з різною шириною, дельта-леговані мілкою домішкою n-типу або в центр, або край; з різною товщиною дельта-шару; з різними початковими концентраціями домішок; різним розподілом домішок по дельта-шару; та при різних температурах [2, 41].

Для аналізування оптичних властивостей розглянутих гетероструктур був досліджений вплив іонізації дельта-шару домішок, розташованого в межах КЯ, на міжпідзонне поглинання КЯ (розділ 4). Виявлено, що поява та подальша зміна ПХ внаслідок іонізації дельта-шару призводить до значних змін у загальному коефіцієнті міжпідзонного поглинання у КЯ. Ще однією особливістю є те, що дельта-легування в край змінює симетрію КЯ у напрямку росту гетероструктури. Це означає, що тепер стають дозволеними оптичні переходи між станами з однаковою парністю, заборонені для прямокутних КЯ. Крім того, такі параметри, як початкова концентрація донорів та ширина КЯ теж мають вплив на міжпідзонне поглинання. Дослідження цього впливу розширює можливості ще на стадії проектування у виборі бажаних характеристик потенційного приладу, таких як збільшення або зменшення динамічного діапазону перестроювання та збільшення або зменшення коефіцієнту поглинання в окремих областях цього діапазону.

На основі результатів досліджень, описаних вище було сформульовано оригінальну ідею створення модулятора ТГц випромінювання на базі δ -легованих КЯ (розділ 5). В описаних дослідженнях в якості фактора, який впливає на ступінь іонізації домішок обрано температуру, але такого ж результату можна досягнути, прикладаючи зовнішнє електричне поле в площині КЯ. Було досліджено оптичні властивості і діапазон настройки потенційного модулятора при різних характеристиках КЯ, на основі яких він сформований. Серед цих характеристик: ширина КЯ, позиція дельта-легування всередині КЯ, температура ґратки. В результаті проведеного дослідження можна зробити висновок, що ще на етапі проектування приладу можна прогнозувати його характеристики, такі як: ширина діапазону налаштування та можливість одночасної модуляції декількох ТГц смуг. Крім того, з настройкою бажаних характеристик електричним полем також може бути використаний додатковий параметр регулювання (або калібрування) – температура.

Крок до наближення запропонованої модельної задачі до реальної, зроблений в розділі 6, де розглянутий вплив фонових домішок (разом з іонізацією дельта-шару) на перебудову рівнів просторового квантування в КЯ та на ЕЗД дельта-шару. Було показано, що формування потенціалу Хартрі визначається конкуренцією потенціалів, створених вільними електронами дельта-шару та областей виснаження. Найважливішим висновком даного дослідження є те, що фонові домішки не анулюють можливість керування енергетичним зазором між першими рівнями просторового квантування в КЯ шляхом іонізації дельта-шару та фонових домішок. Більше того, з'являється додаткові ступені свободи для керування спектром енергетичних рівнів.

Таким чином, ця робота демонструє, що ідея побудови як пасивних, так і активних перестроюваних оптичних пристроїв на основі $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ КЯ, дельта-легованих мілкою домішкою, які працюють в терагерцовій частині середньої інфрачервоної області, є цілком прийнятною.

ЛІТЕРАТУРА

1. L.M.R. Scolfaro, D. Beliaev, R. Enderlein, J.R. Leite. Electronic structure of n-type δ -doping multiple layers and superlattices in silicon. *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* 1994. V. 50, p. 8699.
2. V. Tulupenko, A. Abramov, Y. Belichenko, V. Akimov, T. Bogdanova, V. Poroshin, O. Fomina. The influence of the ionized impurity delta-layer potential in the quantum well on impurity binding energy. *J. Appl. Phys.* – 2011. – Vol. 109. – p. 064303.
3. J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Satori, A.L. Hutchinson, A.Y. Cho. Quantum cascade laser. *Science.* – 1994. – V. 264. – p. 553.
4. G. Bastard. Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model. *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* – 1981. – Vol. 24. – p. 4714.
5. S.T. Yen, V.N. Tulupenko, E.S. Cheng, P.K. Chung, C.P. Lee, A.T. Dalakyan, K.A. Chao. Evidence for capture of holes into resonant states in boron-doped silicon. *J. Appl. Phys.* – 2004. – Vol. 96. – p. 4970.
6. I.V. Altukhov, E.G. Chirkova, V.P. Sinis, M.S. Kagan, Y.P. Gousev, S.G. Thomas, K.L. Wang, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich. Towards $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ quantum-well resonant-state terahertz laser. *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – Vol. 79. – p. 3909.
7. A. Blom, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, K.-A. Chao. Donor states in modulation-doped Si/SiGe heterostructures. *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* – 2003. – V. 68. – p. 165338.
8. Vorob'ev L.E., Titkov I.E., Firsov D.A., Shalygin V.A., Toropov A.A., Shubina T.V., Tulupenko V.N., Towe E. Light absorption and refraction due to intersubband transitions of hot electrons in coupled GaAs/AlGaAs quantum wells. *Semiconductors* – 1998. – Vol. 32 (7), pp. 757–761.
9. B.F. Levine. Quantum-well infrared photodetectors. *Appl. Phys. Lett.* – 1993. – Vol. 74. – R1.
10. W.L. Chan, H.-T. Chen, A.J. Taylor, I. Brener, M.J. Cich, D.M. Mittleman. A spatial light modulator for terahertz beams. *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – Vol. 94. – p. 213511.

11. М.С. Соскін, Блискучий початок та прекрасне продовження (спогади колеги до 80-річчя академіка М.С. Бродина). Укр. фіз. журн. – 2011. – Vol. 56. – p. 1141–1144.
12. M. Planck. On the Theory of the Energy Distribution Law of the Normal Spectrum. *Verh. Deut. Phys. Ges.* – 1900. – Vol. 2. – p. 237.
13. A. Einstein. Concerning an Heuristic Point of View Toward the Emission and Transformation of Light. *Ann. Phys. Ser.* – 1905. – Vol. 17. – p. 132.
14. R.A. Smith. Semiconductors, 2-nd edition. *Cambridge University Press*. 1978.
15. W. Paul, G.L. Pearson. Pressure Dependence of the Resistivity of Silicon. *Phys. Rev.* – 1955. – Vol. 98. – p. 1755.
16. A.L. Edwards and H.G. Drickamer. Effect of Pressure on the Absorption Edges of Some III-V, II-VI, and I-VII Compounds. *Phys. Rev.* – 1961. – Vol. 122. – p. 1149.
17. N. Hiromoto, T. Itabe, T. Aruga and other. Stressed Ge:Ga photoconductor with a compact and stable stressing assembly. *Infrared Phys.* – 1989. – Vol. 29, – P. 255–259.
18. Тулупенко В.М. Інвертовані стани носіїв струму у напівпровідниках для середньої ($\lambda \approx 10...50$ мкм) і далекої інфрачервоної ($\lambda \approx 50...200$ мкм) областей спектру: дис. ... д. фіз.-мат. наук : 01.04.10 / Тулупенко Віктор Миколайович ; Київський університет імені Тараса Шевченка. – К., 1999.
19. Aleshkin V.Ya., Gavrilenko A.V., Gavrilenko V.I., Kozlov D.V., Dalakjan A.T., Tulupenko V.N. On the impurity photoconductivity of uniaxially stressed p-Ge. *Physica Status Solidi C: Conferences.* – 2003. – Vol. 2, – P. 680–682.
20. Abramov A.A., Akimov V.I., Bondar V.M., Poroshin V.N., Tulupenko V.N. Influence of uniaxial stress on the polarization of spontaneous emission from p-Ge. *Materials Science Forum.* – 2002. – Vol. 384-385, – P. 221–226.
21. Bondar V., Tomchuk P., Tulupenko V. Polarization of far-IR radiation from p-type germanium under uniaxial pressure and strong electric field. *Fizika Nizkikh Temperatur.* – 2001. – Vol. 27, – P. 767–768.
22. https://ru.wikipedia.org/wiki/Файл:Franz_keldysh_effekt.svg

23. Третьяк О.В. Основы физики полупроводников / Третьяк О.В., Лозовський І.З.: Видавництво «Київський університет». 2007. – т.1. – 338с.
24. В.Я.Алешкин, Н.В. Закревский. Оптическая ширина запрещенной зоны GaAs в мегагауссных магнитных полях. ФТТ. – 2007. – Vol. 49. – p. 602.
25. В.Lax, L.M.Roth and S. Zwerdling. Quantum magneto-absorption phenomena in semiconductors. J. Phys. Chem. Solids. – 1959. – Vol. 8. P. 311.
26. AnnaLena Thilderkvist, Mats Kleverman, Gunter Grossmann, and Hermann G. Grimmeiss. Quadratic Zeeman effect of shallow donors in silicon. Phys.Rev. B. – 1994. – Vol. 49. – p. 14270.
27. D.A.B. Miller, D.S. Chemla, T.S. Damen, A.C. Gossard, W. Wiegmann, T.H. Wood, C.A. Burrus. Electric field dependence of optical absorption near band gap of quantum-well structures. Phys. Rev. B. – 1985. – Vol. 32. – P.1043–1060.
28. R. Dingle, H.L. Stromer, A.C. Gossard. Electron mobilities in modulationdoped semiconductor heterojunction superlattices. Appl. Phys. Lett. – 1978. – Vol. 33. – p. 665–667
29. Vainberg V.V., Gudenko Y.N., Poroshin V.N., Tulupenko V.N., Cheng N.N., Yang Z.P., Mashanov V., Wang K.Y. Energy characteristics of boron impurity in Si/Si_{1-x}Ge_x heterostructures with on-center and on-edge selective doping of quantum wells. Low Temperature Physics. – 2007. – Vol. 33(10). – p. 869–871
30. Abramov A.,Akimov V.,Tulupenko V.,Fomina O.,Ryzhkov V. Analytical approach to the impurity scattering in quantum wells. Physica Status Solidi (B) Basic Research. – 2007. – Vol. 244 – p. 2002–2009
31. Welser, J. L. Hoyt, and J. F. Gibbons. NMOS and PMOS transistors fabricated in strained silicon/relaxed silicon-germanium structures. Tech. Dig. - Int. Electron Devices Meet. – 1992, 1000.
32. Belykh V.G., Tulupenko V.N. Hole subbands in quantum wells: Exact solution for six-dimensional Luttinger-Kohn Hamiltonian. Semiconductor Science and Technology. – 2009. – Vol. 24(2) – Article number 025006

33. Cheng H.H., Dalakyan A., Yang Z.P., Mashanov V., Tulupenko V., Belikh V., Ryzkov V., Barzheyev R. Different physics for edge and centre delta-doping into a QW. Proceedings of CAOL 2005: 2nd International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers. – 2005. – Vol. 2 – p. 39
34. Yen S.T., Tulupenko V., Cheng E.S., Dalakyan A., Lee C.P., Chao K.A., Belykh V., Abramov A., Ryzhkov V. Direct experimental evidence of the hole capture by resonant levels in boron doped silicon. AIP Conference Proceedings. – 2004. – Vol. 772 – p. 1192–1193
35. J.W. Matthews and A.E. Blakeslee. Defects in epitaxial multilayers: III. Preparation of almost perfect multilayers. J. Cryst. Growth. – 1976. – Vol. 32. – p. 265–273.
36. D.J. Paul. Si/SiGe heterostructures: from material and physics to devices and circuits. Semicond. Sci. Technol. – 2004. – Vol. 19 (10). – R75–R108.
37. V.T. Bublik, S.S. Gorelic, A.A. Zaitcev and A.Y. Polyakov. Calculation of the Binding Energy of Ge–Si Solid Solution. Phys. Status Solidi (b). – 1974. – Vol. 65. – K79.
38. S. Sant, S. Lodha, U. Ganguly, S. Mahapatra, F.O. Heinz, L. Smith, V. Moroz, and S. Ganguly. Band gap bowing and band offsets in relaxed and strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys by employing a new nonlinear interpolation scheme. J. Appl. Phys. – 2013. – Vol. 113. – p. 033708.
39. Friedrich Schaffler. High-mobility Si and Ge structures. Semicond. Sci. Technol. – 1997. – Vol. 12 (12). – p. 1515–1549.
40. M.M. Rieger and P. Vogl. Electronic-band parameters in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys on $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrates. Phys. Rev. B. – 1993. – Vol. 48. – p. 14276.
41. V. Tulupenko, C.A. Duque, R. Demediuk, V. Belykh, A. Tiutiunnyk, A.L. Morales, V. Akimov, R.L. Restrepo, M.E. Mora-Ramos, V. Poroshin, O. Fomina. On some new effects in delta-doped QWs. Physica E. – 2015. – Vol. 66. – p. 162–169.

42. V. Tulupenko, C. A. Duque, R. Demediuk, Ya. Belichenko, C.M. Duque, V. Akimov, V. Poroshin, and O. Fomina. On the possibility of tuning the energy separation between space-quantized levels in a quantum well. *Philos. Mag. Lett.* – 2013. – Vol. 93. – p. 42.

43. А.Г. Кязым-заде. О критерии перехода Мотта в плоских решетках. *ФТП.* – 1995. – Vol. 29. – p.10.

44. Z. Huang, R. Yu, C. Jiang, T. Lin, Z. Zhang and J. Chu. Influence of δ doping position on subband properties in $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ heterostructures. *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* – 2002. – Vol. 65. – p. 205312.

45. G.L. Bir and G.E. Pikus. *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors.* Wiley. New York. 1974.

46. B.I. Shklovskii and A.L. Efros. *Electronic Properties of Doped Semiconductors.* Springer. Heidelberg. 1984.

47. B. Vinter. Influence of charged impurities on Si inversion-layer electrons. *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* – 1982. – Vol. 26. – p. 6808.

48. Tulupenko V., Duque C.A., Demediuk R., Fomina O., Akimov V., Belykh V., Dmitrichenko T., Poroshin V. Impurity binding energy for δ -doped quantum well structures. *Bulletin of Materials Science.* – 2014. – Vol. 37(6). – p. 1347–1351.

49. Tiutiunnyk A., Tulupenko V., Akimov V., Demediuk R., Morales A.L., Mora-Ramos M.E., Radu A., Duque C.A. Study of electron-related intersubband optical properties in three coupled quantum wells wires with triangular transversal section. *Superlattices and Microstructures.* – 2015. – Vol. 87. – p. 131–136.

50. Tiutiunnyk A., Akimov V., Tulupenko V., Mora-Ramos M.E., Kasapoglu E., Morales A.L., Duque C.A. Electron and donor-impurity-related Raman scattering and Raman gain in triangular quantum dots under an applied electric field. *European Physical Journal B.* – 2016. – Vol. 89(4). – Article number 107.

51. V. Tulupenko, C.A. Duque, V. Akimov, R. Demediuk, V. Belykh, A. Tiutiunnyk, A. Morales, R. Restrepo, M. Mora-Ramos, O. Fomina. On

intersubband absorption of radiation in delta-doped QWs. *Physica E.* – 2015. – Vol. 74. – p. 400–406.

52. M. Virgilio, D. Sabbagh, M. Ortolani, L. Di Gaspare, G. Capellini, M. De Seta. Physical mechanisms of intersubband-absorption linewidth broadening in s-Ge/SiGe quantum wells. *Phys. Rev.* – 2014. – Vol. 90. – p. 155420.

53. C.A. Duque, V. Akimov, R. Demediuk, V. Belykh, A. Tiutiunyk, A.L. Morales, R.L. Restrepo, O. Fomina, V. Tulupenko. Intersubband linear and nonlinear optical response of the delta-doped SiGe quantum well. *Superlattices and Microstructures.* – 2015. – Vol. 87. – p. 125–130.

54. E. Ozturk, Y. Ozdemir. Linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficient and refractive index change in n-type δ -doped GaAs structure. *Opt. Commun.* – 2013. – Vol. 294. – p. 361–367

55. C.A. Duque, V. Akimov, R. Demediuk, V. Belykh, A. Tiutiunyk, A.L. Morales, R.L. Restrepo, O. Nalivayko, O. Fomina, V. Tulupenko. About possible THz modulator on the base of delta-doped QWs. *Superlattices and Microstructures.* – 2015. – Vol. 87. – p. 5–11.

56. G. Hupper, K. Pyragas, E. Scholl. Complex dynamics of current filaments in the low-temperature impurity breakdown regime of semiconductors. *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol. 47. – p. 15515.

57. R.V. Aldridge, K. Davis, M. Holloway. An investigation of the effect of a magnetic field on the forward characteristics of some silicon diodes at low temperatures. *J. Phys. D.* – 1975. – Vol. 8. – p. 4–68.

58. Tulupenko V., Duque C.A., Morales A.L., Tiutiunyk A., Demediuk R., Dmytrychenko T., Fomina O., Akimov V., Restrepo R.L., Mora-Ramos M.E. Background impurities in $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ n-type δ -doped QW. *Physica Status Solidi (B) Basic Research.* – 2017. – Vol. 254(4). – Article number 1600464.

59. Tulupenko V., Akimov V., Demediuk R., Duque C., Fomina O., Sushchenko D. Effect of Sparse Doping in Barriers on the Energy Structure of Center-Delta-Doped QW. 2019 IEEE 39th International Conference on Electronics and Nanotechnology, ELNANO 2019 – Proceedings. – 2019. – p. 177–180.

60. Bastard G. – 1991. – Wave mechanics applied to semiconductor nanostructures (Wiley-Interscience, 1 ed.)
61. Akimov V., Tulupenko V., Duque C.A., Morales A.L., Demediuk R., Tiutiunnyk A., Laroze D., Kovalov V., Sushchenko D. Background impurities and a delta-doped QW. Part I: Center doping. *Semiconductor Science and Technology*. – 2019. – Vol. 34(12). – Article number 125009.
62. Braunstein R., Moore A.R. and Herman F. Intrinsic Optical Absorption in Germanium-Silicon Alloys. *Phys. Rev.* – 1958. – Vol. 109(3). – p. 695.
63. Krussmann R., Vollmer H. and Labusch R. The Activation Energy of Phosphorus Donors in Silicon-Rich Silicon–Germanium Alloys. *Phys. Stat. Sol. B*. – 1983. Vol. 118(1). – p. 275–282.
64. Akimov V., Tulupenko V., Duque C.A., Morales A.L., Demediuk R., Tiutiunnyk A., Laroze D., Kovalov V., Sushchenko D. Background impurities in a delta-doped QW. Part II: Edge doping. *Semiconductor Science and Technology*. – 2021. – Vol. 36(4). – Article number 045011.
65. Kohn W. and Luttinger J.M. Theory of Donor States in Silicon. *Phys. Rev.* – 1955. – Vol. 98(4). – p. 915.
66. Ozturk E., Sari H., Ergun Y. and Sokmen I. The effect of the donor distribution on the electronic structure of two coupled Si δ -doped layers in GaAs. *Phys. B*. – 2003. – Vol. 334. – p. 1–8.
67. Ram J. and Dhariwal S.R. Analytical expressions for asymmetric double quantum wells and their application to semiconductor heterostructures. – 2006. – Vol. 86(36). – p. 5825–5835.

Наукове видання

ТУЛУПЕНКО Віктор Миколайович
ДЕМЕДЮК Роман Олександрович
ФОМІНА Оксана Сергіївна

**ДЕЛЬТА-ЛЕГОВАНІ КВАНТОВІ ЯМИ
ДЛЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ДІАПАЗОНУ СПЕКТРА**

Монографія

За авторською редакцією

Комп'ютерне верстання

І. І. Дьякова

137/2021. Формат 60 x 84/16.. Ум. друк. арк. 9,3.
Обл.-вид. арк. 5,82. Тираж 300 прим. Зам. № 53

Донбаська державна машинобудівна академія
84313, м. Краматорськ, вул. Академічна, 72.
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру
серія ДК № 1633 від 24.12.03.