

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦ В МНОГОСЛОЙНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУРАХ

Введение. Использование наноструктур в качестве активных областей многих приборов современной электроники, квантовой электроники и микроэлектроники приобретает в последние годы всё более широкое распространение. В начале своего развития приборы с наноструктурами (квантово-размерными структурами – КРС) использовались в основном в качестве активных областей высоконаправленных светоизлучающих диодов инжекционных полупроводниковых лазеров (ИПЛ) и фотоприемных приборов [1]. На этом этапе задача исследователей и разработчиков квантово-размерных структур заключалась в основном в подборе таких материалов для исходных гетероструктур, сочетание которых в готовом приборе обеспечивало бы высокие оптические, электрические и эксплуатационные характеристики готового изделия. Во многих случаях удовлетворительных результатов позволяла достичь однослойная квантово-размерная структура, созданная с помощью двойной гетероструктуры на основе полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$, $A^{IV}B^{VI}$ и их тройных и четверных твёрдых растворов замещения. Дополнительные возможности по улучшению характеристик квантово-размерных приборов, или приборов с наноструктурами, предоставляет ставшие уже традиционными методы легирования полупроводников и полупроводниковых тонкоплёночных слоёв, использование в приборах наноэлектроники контактов металл-полупроводник в барьерами Шоттки, а также структур металл-диэлектрик-полупроводник, где под действием внешнего поля оказалось возможным реализовать квантовое ограничение движения носителей какого – либо одного знака. Легирование отдельных квантово-ограниченных слоёв наноструктур придаёт готовому прибору необходимые разработчикам свойства. При этом за счёт квантового ограничения легированных слоёв узкозонных и широкозонных полупроводников, составляющих КРС, основные оптические и электрические свойства наноструктуры не теряются под действием полей объёмных зарядов полностью ионизированных примесей вне зависимости от их концентрации и типа проводимости.

Параллельно с использованием квантово-размерных структур в оптоэлектронной и лазерной технике проводились работы по использованию таких структур в других областях электроники и микроэлектроники. В частности, на основе КРС были созданы и успешно используются такие приборы как: высокоэффективные катоды для СВЧ вакуумных приборов, полевые СВЧ – транзисторы с повышенной подвижностью носителей в канале, туннельные и резонансно-туннельные структуры, наноразмерные аналоги традиционных генераторных приборов микроэлектроники СВЧ, структуры с кулоновской блокадой и т.д. Особенностью этих и других применений квантово-размерных структур является то, что для эффективной работы приборов на их основе одного квантово-ограниченного слоя может оказаться недостаточно. Напротив, в приборах не оптоэлектронного применения оказывается необходимым выполнять такие операции как: пространственное разделение облака объёмных зарядов как одного, так и различных типов проводимости, задание диапазона энергий носителей, при котором происходит наиболее эффективное их туннелирование через структуру на этапе изготовления приборов, управление энергией связи квазичастиц и центров прилипания и локализации примесей, влияние на процессы электрон-фононного взаимодействия и даже на вид статистического распределения частиц в той или иной области прибора. В оптоэлектронных приборах на основе квантово-размерных структур существует проблема повышения излучаемой мощности в заданном частотном диапазоне, а также проблема эффективного управления спектром излучаемых и принимаемых частот. Таким образом, сразу же после создания первых приборов на квантово-размерных структурах как оптоэлектронного, так и не оптоэлектронного применения возникла объективная необходимость увеличения количества квантово-размерных структур в активной области одного и

того же прибора, усложнения их энергетического профиля, учёта влияния поверхностных состояний на гетерограницах. Удовлетворение различным (зачастую противоречивым) требованиям, предъявляемым к новым приборам, а также теоретические разработки и новейшие технологические методы привели к созданию сверхрешеток – искусственных структур, обладающих периодически повторяющимися физическими, оптическими, электрическими, механическими и другими свойствами, недостижимыми в монокристаллическом объёмном состоянии материалов, составляющих сверхрешетку [2].

В сверхрешетке, в отличие от единичной квантово-размерной структуры, энергетические состояния частиц и квазичастиц определяются не только энергетическими параметрами и линейными размерами отдельных квантово ограниченных слоёв полупроводника, входящих в сверхрешетку, но взаимным влиянием частиц, находящихся в соседних квантово ограниченных слоях, через ограничивающие (барьерные) слои, размеры которых в направлении квантового ограничения, также как и размеры квантово-ограниченных слоёв не превышают длины волны де – Бройля электронов в данном полупроводниковом материале.

Очевидно, что исследование свойств приборов со сверхрешетками как оптоэлектронного, так и неоптоэлектронного применений основывается на рассмотрении следующих вопросов:

– как наличие соседних квантово ограниченных слоёв повлияет на энергетические состояния частиц и квазичастиц во всей структуре по сравнению со случаем единичной квантово-размерной структуры?

– приведёт ли наличие нескольких квантово-ограниченных слоёв, разделённых достаточно тонкими барьерными слоями, к изменениям спектра энергетических состояний частиц и квазичастиц в КРС. Иными словами, возникнут ли в сверхрешетке вырожденные энергетические уровни?

– как взаимное влияние частиц, находящихся в соседних квантово-ограниченных слоях сверхрешетки скажется на координатном перераспределении волновых функций в направлении, перпендикулярном плоскостям металлургических контактов гетеропереходов между квантово-ограниченными и барьерными слоями, то есть плоскостям квантового ограничения?

– при каких геометрических размерах и энергетических параметрах квантово ограниченных и барьерных слоёв сверхрешетки соседние квантово ограниченные слои можно считать невзаимодействующими – «развязанными»?

Энергетические и геометрические параметры двухслойной наноструктуры. Для решения задачи о нахождении собственных значений энергии частиц и квазичастиц и распределении их волновых функций в многослойной сверхрешетках, используемых в качестве активных областей светоизлучающих диодов и инжекционных полупроводниковых лазеров, в данной работе используется идеализированная физическая модель сверхрешетки, состоящей из двух одинаковых по толщине квантово ограниченных слоёв на основе GaAs, разделённых слоем $Al_xGa_{1-x}As$, толщина которого не превышает длины волны де – Бройля электронов для данного полупроводникового материала. Оба квантово-ограниченных слоя GaAs и разделяющий их слой $Al_xGa_{1-x}As$ находятся между объёмными (не квантово-ограниченными) слоями материала $Al_xGa_{1-x}As$, причём, молярная доля алюминия X в материалах внешних слоёв и разделительного слоя одинакова, а следовательно, одинаковы и высоты потенциальных барьеров для носителей, возникающих на металлургических границах контактов между узкозонными и широкозонными материалами. Структура такой сверхрешетки показана на рис. 1.

Описанная физическая модель двухслойной сверхрешетки является идеализированной по следующим основным причинам:

– ширина обоих квантово-ограниченных слоёв GaAs, предполагается одинаковой;

– химический состав разделительного и ограничивающих слоёв – $Al_xGa_{1-x}As$ также предполагается одинаковым по всем трём слоям;

– в качестве начального допущения принято, что вся структура или собственного типа проводимости или однородно легирована примесью одного типа, и вклад, вносимый объём-

ным зарядом полностью ионизированных носителей в энергетический профиль сверхрешетки таким образом можно не учитывать;

– в данной модели также не учитывается вклад, вносимый неоднородностями и дефектами, возникающими на металлургических контактах гетеропереходов, на энергетический профиль сверхрешетки, поскольку сами поверхности контактов предполагаются идеально гладкими.

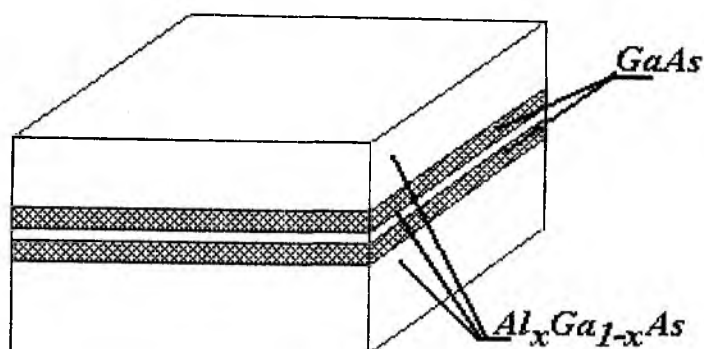


Рис. 1

Несмотря на принятые допущения, выдвинутая модель может считаться вполне корректной для описания квантовых и оптических процессов в двухслойной сверхрешетке. Во-первых, хотя современные технологические методы создания наноструктур не позволяют произвести двух абсолютно одинаковых квантово-ограниченных слоёв, их отличие может составлять не более трёх – пяти атомных слоёв. Во-вторых, химический состав тройных растворов замещения материалов группы $A^{III}B^V$ при использовании технологии молекулярно-лучевой эпитаксии может быть выдержан с очень высокой точностью, вплоть до тысячных долей моля, что для большинства практически важных случаев бывает вполне достаточным. В третьих, как толщина квантово ограниченных слоёв, так и разделительного слоя, составляющих собственно сверхрешетку, а также толщина всей структуры в целом, как правило, в реальных приборах не превышают диффузионных длин носителей в материалах составляющих сверхрешетку, потому распределение поля объёмного заряда ионизированных носителей по всей ширине сверхрешетки можно считать однородным и постоянным и на первом этапе расчётов не учитывать. В четвёртых, для гетерограниц переходов GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ различие в постоянных решетки составляет тысячные, а во многих случаях десятитысячные доли ангстрема и вклад деформационного потенциала, возникающего в месте контакта двух кристаллических решеток, в энергетическую диаграмму сверхрешетки можно не учитывать. Кроме того, эпитаксиальные технологии позволяют выращивать атомарно гладкие слои полупроводников и полупроводниковых соединений различного химического состава, структурные дефекты в которых возможны лишь в результате ресорбции ранее осажденных атомов или молекул, или же неравномерного поверхностного распределения осаждаемых атомов, но концентрация таких дефектов незначительна и энергетический вклад, вносимый такими дефектами, при необходимости может быть учтён в последующих расчётах.

Итак, энергетическая диаграмма сверхрешетки, показанной на рис. 1, с учётом принятых допущений может быть изображен так, как это показано на рис. 2 а. Здесь, как и в случае одномерной квантово-размерной структуры или объёмного материала энергия электронов отсчитывается от дна зоны проводимости «вверх», а энергия лёгких и тяжелых дырок от потолка валентной зоны «вниз». Начало отсчёта координаты « Z » в общем случае можно выбрать произвольно. В данной работе начало отсчёта координаты « Z », перпендикулярной плоскостям гетерограниц (плоскостям квантового ограничения) выбрано в центре одного из квантово ограниченных слоёв GaAs. Таким образом, задача по определению собственных значений энергии и волновых функций частиц и квазичастиц (электронов, лёгких и тяжелых

дырок) в двухслойной сверхрешетке сводится к решению стационарного уравнения Шредингера для частицы, движущейся в области двух прямоугольных квантовых ям, разделённых потенциальным барьером конечной ширины, высота которого равна высоте ограничивающих барьеров. Схема координатного распределения потенциальной энергии для такой задачи показана на рис. 2 б).

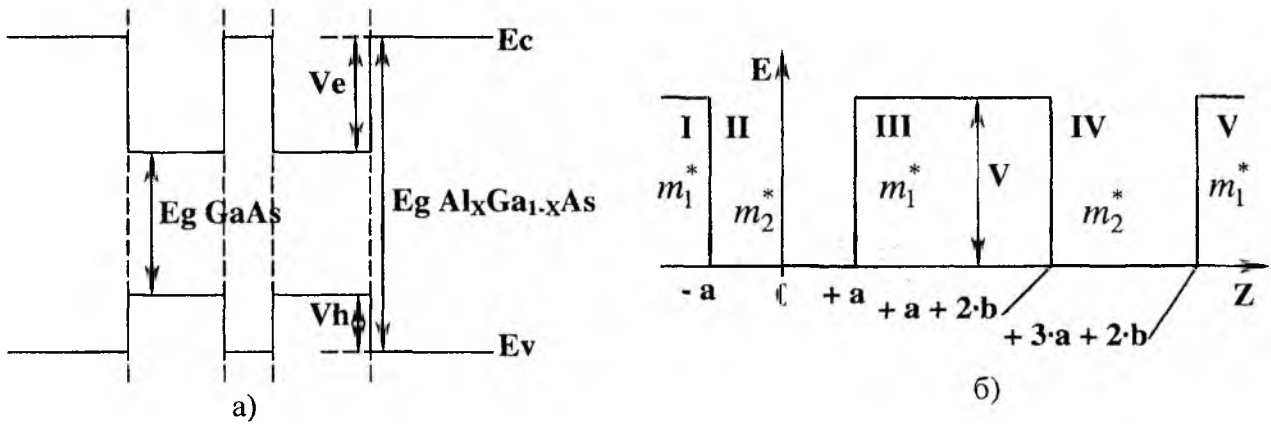


Рис. 2

Здесь I, III, V – области ограничительных и разделительного барьеров; II и IV – области прямоугольных квантовых ям; a – полуширина квантовой ямы; b – полуширина разделительного барьера; m_1^* – эффективная масса носителей в барьерах; m_2^* – эффективная масса носителей в яме; V – высота потенциального барьера.

Энергетические состояния частиц в многослойных периодических наноструктурах. Стационарное уравнение Шредингера для каждой области I – V записывается в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} + V \cdot \psi_1 = E \cdot \psi_1, \quad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} = E \cdot \psi_2, \quad (2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z^2} + V \cdot \psi_3 = E \cdot \psi_3, \quad (3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_4}{\partial z^2} = E \cdot \psi_4, \quad (4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_5}{\partial z^2} + V \cdot \psi_5 = E \cdot \psi_5. \quad (5)$$

После приведения уравнений системы (1) – (5) к однородному виду её решение относительно волновых функций частиц и квазичастиц ψ в каждой из областей с учётом свойств чётности функций в каждой отдельной квантовой яме и возможной перемены или сохранения знака функции при «переходе» функции через барьер можно записать так [3]:

$$\psi^{++} = \begin{cases} B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ B_2 \cdot \frac{\cos(k_2 \cdot a)}{\operatorname{ch}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{ch}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (6)$$

$$\psi^{--} = \begin{cases} -A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ -A_2 \cdot \frac{\sin(k_2 \cdot a)}{\operatorname{sh}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{sh}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (7)$$

$$\psi^{+-} = \begin{cases} B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ -B'_2 \cdot \frac{\cos(k_2 \cdot a)}{\operatorname{sh}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{sh}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ -B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ -B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (8)$$

$$\psi^{-+} = \begin{cases} -A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ A'_2 \cdot \frac{\sin(k_2 \cdot a)}{\operatorname{ch}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{ch}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ -A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ -A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (9)$$

В выражениях (6) – (9) первый знак «+» или «-» в обозначении волновой функции, показывает чётность или нечётность решения, второй знак «+» — сохранение знака функции при «переходе» через барьер, знак «-» показывает соответственно перемену знака волновой функции. Постоянные B_2 , A_2 , B'_2 и A'_2 отыскиваются из условия нормировки волновой функции на единицу во всём координатном пространстве решения. Применение условий нормировки к решениям (6) – (9) приводит к следующим выражениям для неизвестных коэффициентов:

$$B_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a + \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\operatorname{ch}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\operatorname{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} + 2 \cdot b \right)}}, \quad (10)$$

$$A_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a - \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\text{sh}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\text{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} - 2 \cdot b \right)}}, \quad (11)$$

$$B'_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a + \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\text{sh}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\text{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} - 2 \cdot b \right)}}, \quad (12)$$

$$A'_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a - \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\text{ch}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\text{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} + 2 \cdot b \right)}}, \quad (13)$$

Решения для собственных значений энергии частиц и квазичастиц следуют из условия непрерывности волновых функций и их первых производных по координате с учётом чётности и перемены или сохранения знака функции при «переходе» через разделительный барьер. Трансцендентные уравнения для нахождения всех возможных собственных значений энергии частиц и квазичастиц для наноструктуры, показанной на рис. 1, имеют вид:

$$\text{tg}(k_2 \cdot a) = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{th}(k_1 \cdot b)), \quad (14)$$

$$\text{ctg}(k_2 \cdot a) = -\frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{cth}(k_1 \cdot b)), \quad (15)$$

$$\text{tg}(k_2 \cdot a) = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{cth}(k_1 \cdot b)), \quad (16)$$

$$\text{ctg}(k_2 \cdot a) = -\frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{th}(k_1 \cdot b)). \quad (17)$$

В выражениях (14) – (17) $k_1^2 = \frac{2 \cdot m_1}{\hbar^2} \cdot (V - E)$, $k_2^2 = \frac{2 \cdot m_1}{\hbar^2} \cdot E$.

Вывод. Выражения (6) – (17) полностью описывают энергетические состояния частиц и квазичастиц в двухслойной наноструктуре, состоящей из двух однослойных симметричных квантово-размерных структур первого типа в невозмущенном (стационарном) состоянии.

Список литературы: 1. Бузанёва Е.В. Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь, 1990. 304 с. 2. Андо Т. и др. Электронные свойства двумерных систем.: Пер. с англ. М.: Мир, 1985. 416 с. 3. Флюгге З. Задачи по квантовой механике Т.1.: Пер. с англ. М.: Мир, 1974. – 314 с.

Харьковский национальный
университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 15.12.2003