

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет радіоелектроніки  
Факультет Електронної та біомедичної інженерії  
(повна назва)  
Кафедра Кафедра мікроелектроніки, електронних приладів та пристроїв  
(повна назва)

## КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

### Пояснювальна записка

Рівень вищої освіти другий (магістерський)

ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРІВ ІЧ – ВИПРОМІНЮВАННЯ ІНЖЕКЦІЙНИХ  
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ЛАЗЕРІВ З БАГАТОШАРОВОЮ  
НАНОСТРУКТУРОЮ  
(тема)

Виконав:  
студент 2-го курсу, групи МНПм-21-1  
Сахарова Ганна Сергіївна  
(прізвище, ініціали)

Спеціальність  
153 Мікро- та наносистемна техніка  
(код і повна назва спеціальності)

Тип програми освітньо-професійна  
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма  
Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої  
(повна назва освітньої програми)

Керівник доц. каф. МЕЕПП Пашенко О.Г.  
(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри

\_\_\_\_\_  
(підпис)

Бондаренко І.М.  
(прізвище, ініціали)

2022 р.

Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет \_\_\_\_\_ Електронної та біомедичної інженерії \_\_\_\_\_

Кафедра \_\_\_\_\_ Мікроелектроніки, електронних приладів та пристроїв \_\_\_\_\_

Рівень вищої освіти \_\_\_\_\_ другий (магістерський) \_\_\_\_\_

Спеціальність \_\_\_\_\_ 153 Мікро- та наносистемна техніка \_\_\_\_\_  
(код і повна назва)

Тип програми \_\_\_\_\_ освітньо-професійна \_\_\_\_\_  
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма \_\_\_\_\_ Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої \_\_\_\_\_  
(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри \_\_\_\_\_  
(підпис)

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 р.

**ЗАВДАННЯ**  
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

студентові \_\_\_\_\_ Сахаровій Ганні Сергіївні \_\_\_\_\_  
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи «Дослідження спектрів ІЧ – випромінювання інжекційних напівпровідникових лазерів з багатошаровою наноструктурою»

затверджена наказом по університету від «14» 11 2022 року № 1473 Ст.

2. Термін подання студентом роботи \_\_\_\_\_ 10.12.2022 р. \_\_\_\_\_

3. Вихідні дані до роботи \_\_\_\_\_

- активна область інжекційного напівпровідникового лазера з багатошаровою періодичною наноструктурою (і – область, рін – діоду);

- матеріал наноструктури – арсенід галію/алюміній галій арсенід  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ;

- кількість квантово обмежених шарів наноструктури –  $N = 5$ ;

- вміст алюмінію у матеріалі бареру –  $x = 0,3$ ;

- напруженість зовнішнього електричного поля –  $E_0 = 0,01 \text{ В/м}$ .

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі

1. Оптичні властивостей наноструктур;

2. Оптичного поглинання і підсилення у напівпровідникових надгратках;

3. Параметри конструкції наноструктур, які впливають на їх оптичні властивості;

4. Математичне моделювання спектру енергетичних станів частинок і квазічастинок у багатошарових надгратках.

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій (слайдів)

Демонстраційний матеріал, представлений у форматі презентації, – 19 аркушів

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Отримання завдання	14.11.22 -	
	Опрацювання літературних та електронних інформаційних джерел	20.11.22	
2	Вибір та опрацювання математичної моделі	23.11.22 -	
		27.11.22	
3	Реалізація математичної моделі у середовищі математичного пакету Mathcad. Дослідження енергетичних станів частинок у надгратці	30.11.22 -	
		03.12.22	
4	Підготовка другого розділу пояснювальної записки	04.12.22 -	
		05.12.22	
5	Оформлення пояснювальної записки	05.12.22 -	
		07.12.22	
6	Підготовка презентації	07.12.22 -	
		08.12.22	
7	Отримання рецензії, проходження нормоконтролю, здача роботи на кафедрі	09.12.22 -	
		10.12.22	

Дата видачі завдання 14.11.2022

Студент Сахарова Г.С.  
(підпис)

Керівник роботи доц. Пащенко О.Г.  
(підпис) (посада, прізвище та ініціали)

## РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка містить: 63 с., 31 рис., табл., 14 джерел, 2 додатки.

НАНОСТРУКТУРА, НАДГРАТКА, ГУСТИНА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ, ЕНЕРГЕТИЧНА ЗОНА, ГЕТЕРОСТРУКТУРА, ОПТИЧНЕ ПІДСИЛЕННЯ, ТУНЕЛЮВАННЯ, РОЗДІЛЮВАЛЬНИЙ БАР'ЄР, ДОВЖИНА ХВИЛІ, СПЕКТР ВИПРОМІНЮВАННЯ.

Об'єктом дослідження є активна область інжекційного напівпровідникового лазера у вигляді п'ятишарової надгратки на основі періодичної гетероструктури GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

Метою даної атестаційної роботи є дослідження виникнення окремих ліній спектру випромінювання багатошарової надгратки, як у стаціонарному стані, так і під впливом зовнішнього, сталого у часі просторово симетричного електричного поля.

Метод дослідження – квантово-механічне моделювання руху носіїв у багатошарових надгратках

У роботі досліджено механізми виникнення енергетичних мінізон у багатошарових надгратках, оптичні переходи і оптичне підсилення у багатошарових квантових розмірних структурах.

## ABSTRACT

The explanatory note contains: 63 pp., 31 fig., Table, 14 sources, 2 appendices.

NANOSTRUCTURE, SUPERLATTICE, DENSITY OF ELECTRONIC STATES, ENERGY ZONE, HETEROSTRUCTURE, OPTICAL AMPLIFICATION, TUNNELING, SEPARATION BARRIER, WAVELENGTH, RADIATION SPECTRUM.

The object of research is the active region of an injection semiconductor laser in the form of a five-layer super-lattice based on a periodic GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterostructure.

The aim of this attestation work is to study the emergence of separate lines in a multilayer super-lattice radiation spectrum, both in a stationary state and under the influence of an external, spatially symmetric electric field stable in time.

The research method is quantum-mechanical modeling of carriers movement in multilayer super-lattices.

The mechanisms of energy minibands in multilayer super-lattices, optical transitions and optical amplification in multilayer quantum dimensional structures are investigated in the work.

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ .....	7
ВСТУП .....	8
1 БАГАТОШАРОВІ КВАНТОВО-РОЗМІРНІ СТРУКТУРИ СВІТЛОВИПРОМІНЮЮЧИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ПРИЛАДІВ .....	10
1.1 Технологічні методи виробництва напівпровідникових надграток.....	10
1.2 Особливості випромінювальної рекомбінації об'ємних матеріалів та квантово-розмірних структур .....	26
1.3 Використання надграток в активних областях оптоелектронних напівпровідникових приладів .....	30
2 ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРІВ ІЧ – ВИПРОМІНЮВАННЯ ІНЖЕКЦІЙНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ЛАЗЕРІВ З БАГАТОШАРОВОЮ НАНОСТРУКТУРОЮ .....	35
2.1 Загальний огляд багатошарової квантової розмірної структури .....	35
2.2 Виникнення окремих енергетичних мінізон носіїв у надгратках .....	37
2.3 Визначення спектру коефіцієнту підсилення випромінювання в багатошаровій наноструктурі .....	42
2.4 Розв'язання рівнянь Шредінгера для багатошарової квантово-розмірної структури з урахуванням зовнішнього впливу .....	44
2.5 Результати моделювання енергетичного спектру багатошарової наноструктури .....	45
ВИСНОВКИ.....	61
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ .....	62
ДОДАТОК А.....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
ДОДАТОК Б .....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

- ВРС – випромінювальна рекомбінація в квантово-розмірних структурах;  
ЗГФ МОС – зростання з газової фази з використанням металорганічних сполук;  
СВД – світловипромінювальний діод;  
ІНЛ – інжекційний напівпровідниковий лазер;  
ІЧ – інфра-червоний (діапазон);  
КРС – квантово-розмірна структура;  
КЯ – квантова яма;  
МПЕ – молекулярно променева епітаксія;  
ОГС – одинарна гетероструктура;  
ПДС – подвійна гетероструктура;  
QWS – quantum well structure.

## ВСТУП

В даний час як робочі речовини в лазерах використовуються різні матеріали. Генерація отримана більш ніж на ста речовинах: кристалах, активованих шибках, пластмасах, газах, рідинах, напівпровідниках, плазмі. Робочою речовиною можуть бути органічні сполуки, активовані іонами рідкісноземельних елементів. Вдалося отримати генерацію з використанням звичайної пари води і навіть повітря. Створено новий клас інжекційних напівпровідникових лазерів – квантово-розмірні лазери на основі різних квантово-розмірних структур.

Робочий діапазон існуючих оптичних квантових генераторів змінюється від ультрафіолетового випромінювання із довжиною хвилі 0,3 мкм до інфрачервоного із довжиною хвилі 300 мкм.

Головна цінність лазерів полягає в тому, що їх випромінювання має низку чудових властивостей. На відміну від світла, що випускається звичайними джерелами, воно є когерентним у просторі та часі, монохроматичним, поширюється дуже вузьким пучком (у малому азимутальному та тілесному кутах) та характеризується надзвичайно високою концентрацією енергії.

В даний час продовжуються інтенсивні теоретичні та експериментальні дослідження твердотільних структур, розміри яких в одному, двох або трьох напрямках можна порівняти з дебройлівською довжиною хвилі носіїв заряду. У таких структурах – наноструктурах, енергетичний спектр носіїв стає квазідискретним чи повністю дискретним. Це призводить до прояву в таких структурах ряду фізичних ефектів, які широко досліджуються та використовуються у багатьох напрямках твердотільної електроніки. Експериментальна можливість таких досліджень забезпечена сучасними успіхами нанотехнології.

Для поняття нанотехнологія немає вичерпного визначення, але за аналогією з існуючими нині мікротехнологіями слід, що нанотехнології – це

технології, що оперують величинами порядку нанометра. Тому перехід від "мікро" до "нано" – це якісний перехід від маніпуляції речовиною до маніпуляції окремими атомами.

Коли йдеться про розвиток нанотехнологій мається на увазі три напрямки:

- виготовлення електронних схем (у тому числі і об'ємних) з активними елементами, розмірами порівнянними з розмірами молекул і атомів;
- розробка та виготовлення наномашин;
- маніпуляція окремими атомами та молекулами та складання з них мікрооб'єктів.

Метою даної атестаційної роботи є дослідження виникнення окремих ліній спектру випромінювання багаточислової надгратки, як у стаціонарному стані, так і під впливом зовнішнього, сталого у часі просторово симетричного електричного поля.

## 1 БАГАТОШАРОВІ КВАНТОВО-РОЗМІРНІ СТРУКТУРИ СВІТЛОВИПРОМІНЮЮЧИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ПРИЛАДІВ

Термін «надгратка» зазвичай використовують для періодичних структур, що складаються з тонких шарів двох напівпровідників, що повторюються в одному напрямку. Період за товщиною зазвичай становить від кількох до десятків нанометрів, що менше довжини вільного пробігу електронів, але більше постійної кристалічної решітки. Такий періодичний потенціал надгратки істотно змінює зонну структуру вихідних напівпровідників, створюючи мінізони у просторі хвильового вектору та енергетичні підзони. У цьому відношенні надгратки можна розглядати як новий синтезований напівпровідник, що не існує в природі, який виявляє незвичайні електронні та оптичні властивості.

### 1.1 Технологічні методи виробництва напівпровідникових надграток

Надгратки являють собою багатошарові структури, одержувані шляхом послідовного вирощування на відповідній підкладці тонких (менше 20нм) шарів, що чергуються, щонайменше двох матеріалів (або одного матеріалу, легованого різним чином). Хоча для створення надграткових структур в принципі придатне дуже широке коло речовин, що створює значну свободу вибору, насправді для отримання бажаних властивостей потрібен жорсткий контроль атомної структури, дефектів, навмисно введених і залишкових домішок та ін. Таким чином, висока якість зростання є вирішальною умовою для прояву потенційних можливостей, закладених у понад ґратах. Для вирощування надграткових структур використовуються різні технологічні методи, але поки що деякі з них видаються здатними задовольнити суворим вимогам, що пред'являються до таких багатошарових структур.

Молекулярно-променева епітаксія (МПЕ) у своїй основній формі разом з різними новими ідеями, пов'язаними з кристалізацією у надвисокому вакуумі,

дозволяє сподіватися на отримання високоякісних структур, необхідних для досліджень і приладових застосувань. В основі цієї технології лежить можливість зростання по суті в кінетичному режимі на відміну від традиційних методів, де зростання йде в умовах, близьких до термодинамічної рівноваги. Такий кінетичний характер зростання дозволяє створювати однорідні метастабільні неупорядковані тверді розчини в системах, які в умовах рівноваги мали б область незмішуваності. Подібні тверді розчини за потреби можуть бути компонентами надграток.

Особливості, властиві технології МПЕ, роблять її зручною для дослідницьких цілей і для демонстрації нових ідей, пов'язаних з тонкими шарами та різкими межами. Але останнім часом у багатьох лабораторіях посилено розвивається технологія зростання з газової фази з використанням металорганічних сполук (ЗГФ МОС), що також дозволяє створювати складні багатошарові структури, у тому числі надгратки. Для опису цієї технології використовуються різні назви, такі як «металорганічна, або органометалева газофазна епітаксія», «металакільна газофазна епітаксія». Частіше застосовуватиметься термін «зростання з газової фази з використанням металорганічних сполук» в силу його більшої спільності, маючи на увазі використання будь-якої металорганічної сполуки та можливість зростання неепітаксціальних (полікристалічних або аморфних) плівок.

ЗГФ МОС являє собою метод вирощування, в якому необхідні компоненти доставляються в камеру росту у вигляді газоподібних металорганічних алкільних сполук (наприклад, триметилгалій (TMGa) і триметиларсин (TMAs) або триетилгалій (TEGa) і триетилфосфін (TEP)), і зростання шару здійснюється при термічному розкладанні (піролізі) цих газів і подальшої хімічної реакції між компонентами, що виникають на нагрітій пластині-підкладці.

Фізичні процеси, відповідальні за епітаксійне зростання матеріалів, при ЗГФ МОС менш зрозумілі, як із МПЕ. Вся ця нирка хімічних реакцій і фізична кінетика осадження деталей ще не досліджені. Очевидно, ці дві методики зростання мають лише деякі відмінності, пов'язані головним чином з наявністю в ЗГФ МОС

високого тиску газу-носія ( $H_2$  або  $N_2$ ). За допомогою ЗГФ МОС може вирощуватися більшість напівпровідникових сполук  $A^{III}B^V$ ,  $A^{II}B^{VI}$  і  $A^{IV}B^{VI}$ . Однак при зростанні зазначених матеріалів додаткові реакції між деякими алкілами та гідридами створюють постійну проблему підтримання в газовій фазі співвідношення компонентів 1:1. Для вирощування надграткових структур використовуються й інші технології, найбільш популярними з яких є рідинна епітаксія та метод гарячої стінки.

Рідинна епітаксія є процесом вирощування монокристалічних шарів з пересичених розчинів. Зростання шару досягається охолодженням рідкої фази, контактує з підкладкою, нижче температури насичення. Весь процес включає наступні стадії:

- приведення підкладки в контакт з розчином, склад якого відповідає кривою ліквідусу напівпровідникового з'єднання, що вирощується;
- вирощування бажаної плівки шляхом охолодження насиченого розчину строго контрольованим чином і, нарешті,
- видалення рідкої фази з вирощеної плівки для зупинки процесу зростання.

При вирощуванні структури надгратки епітаксійний процес складається з ряду ростових операцій, що використовують різні розчини, склад яких підбирається з метою забезпечити зростання необхідних шарів у надгратці. Операції зростання чергуються з операціями перенесення підкладки між різними рідкими фазами, що використовуються для вирощування надгратки.

Більшість надграток, досліджених до теперішнього часу, були вирощені методом МПЕ. Зараз це найпоширеніша технологія вирощування штучних напівпровідникових надграткових структур. Лише нещодавно конкурентоспроможним з МПЕ став спосіб ЗГФ МОС, особливо за нижчому тиску газу.

МПЕ є процесом епітаксійного росту тонких шарів різних сполук за рахунок реакцій між термічно створюваними молекулярними або атомними пучками відповідних компонентів і поверхнею підкладки, що знаходиться в надвисокому

вакуумі при підвищеній температурі. За своїми характеристиками МПЕ багато в чому відрізняється від інших технологій, що використовуються для створення надграткових структур, і характеризується:

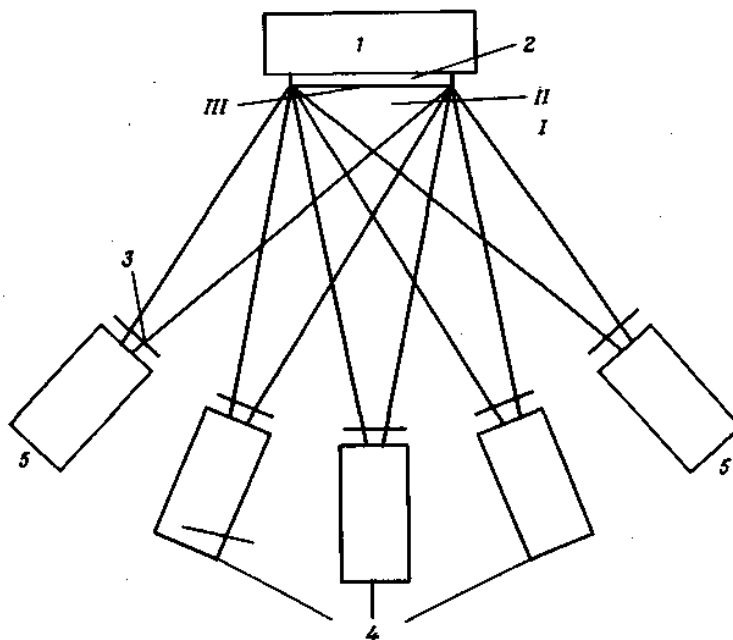
- малою швидкістю зростання близько 1 мкм/год;
- щодо низькою температурою зростання;
- можливостями різкого переривання та відновлення зростання за рахунок використання механічних заслінок поблизу ефузійних осередків для всіх компонентів;
- можливостями введення різних пароподібних компонентів для зміни складу шару та управління концентрацією примісей шляхом введення зручним чином додаткових джерел, що створюють необхідні молекулярні пучки;
- наявністю атомно-гладкої поверхні кристала, що росте;
- можливостями аналізу під час зростання.

Ці позитивні риси методу МПЕ дозволяють створювати з його допомогою епітаксійні шари та надгратки на основі різних сполук, за своєю якістю придатні для приладових застосувань [1].

На рис. 1.1 показано спрощену схему МПЕ. У надвисокому вакуумі створюються молекулярні пучки за допомогою ефузійних осередків кнудсенівського типу, температура яких ретельно контролюється, як правило, за допомогою ЕОМ. Інтенсивність пучків визначаються температурами ефузійних осередків. Вибираючи належним чином температури підкладки і осередків, одержують епітаксійні плівки необхідного хімічного складу. За допомогою заслінок можна швидко змінювати потоки різних речовин, створюючи різкі профілі складу та легування [1, 2]. Однорідність складу плівки та її кристалічна структура визначаються однорідністю молекулярних пучків за площею підкладки.

Як випливає з рис. 1.1 всю установку МПЕ можна розділити на три зони, в яких відбуваються різні фізичні явища. Перша – зона створення молекулярних пучків. Друга – зона перетинання пучків від різних джерел, де змішуються випаровуються речовини, створюючи вельми специфічну газову фазу, що вступає

в контакт з підкладкою, на якій відбувається кристалізація. Поверхня підкладки, де розігрується основна частина кінетичних реакцій між компонентами, може розглядатися як третя зона в системі МПЕ.



I – зона генерації молекулярних пучків, II – зона змішування елементів, що випаровуються, III – зона кристалізації на під ложці. Межі рисунку відповідають внутрішній будові камери надвисокого вакууму; 1 – блок нагріву, 2 – підкладка, 3 – заслінка окремого осередку, 4 – ефузійні осередки основних компонентів плівки, 5 – ефузійні осередки легуючих домішок.

Рисунок 1.1 – Основні вузли установки МПЕ для одержання легованих потрійних з'єднань

Ефузійні осередки, що використовуються в системах МПЕ, зазвичай являють собою або циліндричні тиглі з внутрішнім діаметром 1...2 см і довжиною 5...10 см, що мають на виході циліндричну круглу діафрагму діаметром  $d_0 = 5...8$  мм і товщиною  $L_0 = 0,5$  мм, або одноканальні конічні тиглі аналогічних розмірів. Для виготовлення тиглів використовується піролітичний графіт високої чистоти або піролітичний нітрид бору BN. Перевагами графіту є низька вартість і легкість в обробці, що допускає створення термостабільної конструкції з точним

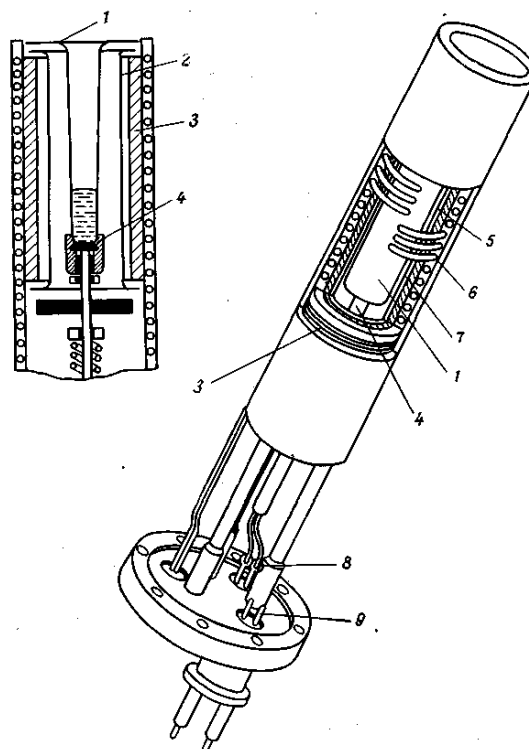
регулюванням температури. На жаль, графіт важче знегаджується і він більш хімічно активний, ніж BN (наприклад, графітові осередки не можна використовувати для випаровування алюмінію). Тому для спеціальних цілей вибирають BN, незважаючи на його високу вартість і той недолік, що осередки з BN не допускають остаточної обробки і повинні використовуватися у вихідному вигляді, що погіршує точність контролю температури [2].

Тигель, заповнений речовиною, призначеною до випаровування, розташовується вздовж осі резистивного нагрівача з окису алюмінію. У стандартних конструкціях ефузійних осередків дротяна спіраль танталового нагрівача фіксується двома концентричними циліндрами  $Al_2O_3$ . Внутрішній циліндр ової форми містить тигель, який у своїй нижній частині є теплоізолюваним чорним тілом, що містить припаяну термопару [1]. Провід термопару пропускаються крізь легкі трубки з окису алюмінію так, щоб спай термопару міг торкатися дна тигля. Зовнішній циліндр з окису алюмінію оточується кількома шарами тонкої гофрованої фольги танталової для ефективної теплоізоляції окремих осередків. Кожен ефузійний осередок монтується на молібденовому тримачі, що забезпечує можливість точного юстування та швидкого демонтажу. Для всіх кріплень та електричних з'єднань у комірках використовуються винятково тантал або молібден.

На рис. 1.2 показано ефузійний осередок, що використовується в установці МПЕ фірми VG Semicon.

Важливою особливістю цієї моди є використання високоефективних танталових тепловипромінюючих елементів, що самопідтримуються. Ці елементи разом утворюють набір тепловипромінювачів великої площі, здатний працювати при високій температурі. Завдяки малій тепловій масі осередок швидко реагує на зміни температури.

Притиснута пружиною термопара W/Re забезпечує контроль та керування температурою. Весь осередок має загальну водяну сорочку, що ефективно теплоізолює її від навколишнього середовища.



1 – конічний тигель з піролітичного BN, графіту або скловуглецю, 2 – нагрівальний пристрій з «перегрітим кінцем», 3 – радіаційні екрани, 4 – термопара W/Re , притиснута пружиною, 5 – оболонка нагрівача, 6 – водяне охолодження, 7 – з фольги, 8 – висновки термопари, 9 – силовий введення.  
Рисунок 1.2 – Схема ефузійного осередку, що використовується в тимчасовій системі МПЕ

Перший теоретичний аналіз розподілу потоків у молекулярному пучку належить Кнудсену, який вивчав ефузію з малого отвору в ефузійному осередку, що містить ідеальний газ. Він показав, що потік через поверхню, що перетинає молекулярний пучок, пропорційний, крім іншого, трьом параметрам:

- косинусу кута між нормаллю до площини отвору комірки та лінією, що з'єднує отвір та поверхню;
- косинусу кута між нормаллю до поверхні та лінією, що з'єднує поверхню та отвір;
- зворотному квадрату відстані від отвору до поверхні.

Ці результати, строго кажучи, справедливі лише для справжніх кнудсенівських осередків. Ідеальний кнудсенівський осередок містить пар, що знаходиться в рівновазі з конденсованою фазою, і має ефузійну апертуру у вигляді малого отвору площею  $a$  на нескінченно тонкій кришці осередку (отвір не має стінок). По одну сторону отвору знаходиться газ під тиском  $p_1$ ; з іншого боку тиск дорівнює  $p_2$ , причому  $p_1 > p_2$ . Лінійні розміри отвору не перевищують довжину вільного пробігу при обох зазначених тисках і можуть бути значно меншими за цю довжину. Газові резервуари поза ( $p_2$ ) і всередині ( $p_1$ ) осередки настільки великі, що молекули стикаються один з одним значно частіше, ніж зі стінками.

За зазначених умов, якщо справедливі такі припущення : молекули мають однакові точкові маси, сили взаємодії між молекулами відсутні, розподіл молекул за швидкостями є максвелівським, газ є ізотропним, то повне число молекул  $N$ , що пройшли в одиницю часу через отвір назовні, дорівнює (1.1):

$$N = \left( \frac{p_1 - p_2}{m} \right) \cdot a \cdot \left( \frac{\mu}{2 \cdot \pi \cdot R \cdot T} \right)^{1/2}, \quad (1.1)$$

де  $m$  – маса молекули,

$\mu$  – молекулярна вага,

$R$  – газова постійна,

$T$  – абсолютна температура, що вважається однаковою по обидва боки

$a$ . Якщо  $p_2 = 0$  (ефузія у високий вакуум), а тиск в комірці  $p_1$  позначати через  $p$ , то виходить добре відоме кнудсенівське рівняння ефузії (1.2):

$$N = \frac{p \cdot a \cdot N_A}{(2 \cdot \pi \cdot \mu \cdot R \cdot T)^{1/2}}, \quad (1.2)$$

де  $N_A$  – Число Авогадро. Якщо  $p$  вимірювати в міліметрах ртутного стовпа, то швидкість ефузії (1.3):

$$N = 3,51 \cdot 10^{22} \frac{p \cdot a}{(\mu \cdot T)^{1/2}} \text{ молекул} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (1.3)$$

Результати, отримані Кнудсеном, корисні при розгляді ефузійних осередків з отворами великого діаметра. При цьому отвір розглядають як комбінацію малих точкових отворів і створювані ними потоки складають. Але при значній товщині отвору виникають складності. У цьому випадку отвір надає колімуючий вплив на молекулярний пучок.

Для циліндричних отворів цей ефект вивчався Клаузингом. Відповідно до його теорії, до рівняння ефузії (1.2) повинен бути введений поправочний множник  $W_u$ , званий фактором проходження отвору. Цей фактор має сенс імовірності того, що молекула, що досягла з внутрішньої сторони отвору в кришці ефузійного осередку, виходить у вакуум, що викидає (де  $p_2 = 0$ ) без зворотного розсіювання всередину осередку.

Епітаксіальне зростання напівпровідникових з'єднань методом МПЕ включає ряд послідовних подій, найважливішими з яких є:

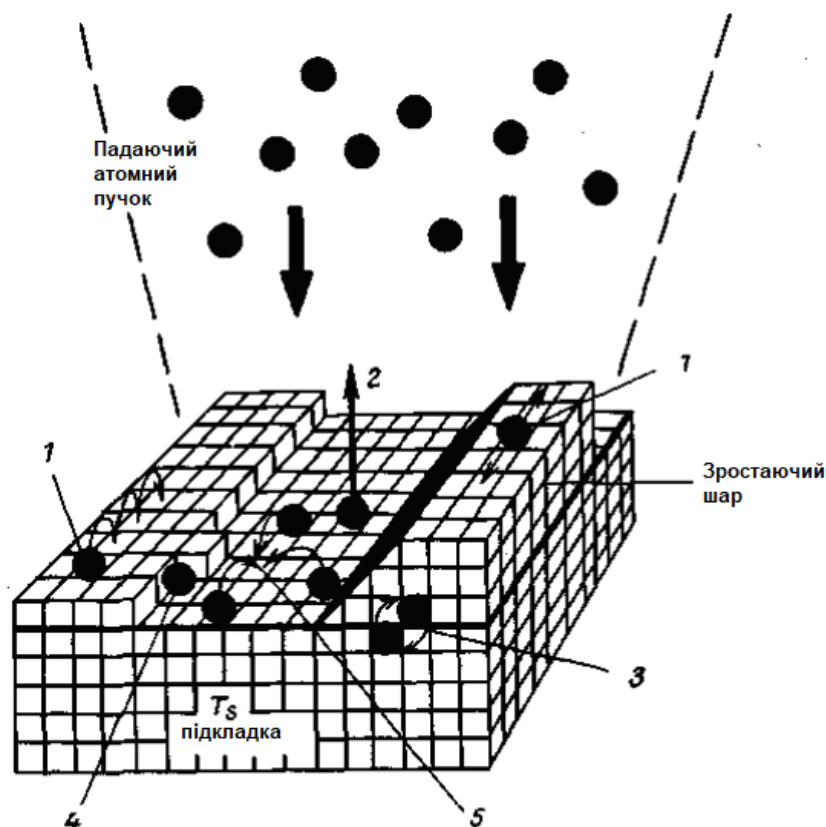
- адсорбція складових речовина атомів та молекул;
- міграція та дисоціація адсорбованих частинок;
- пристосування складових атомів до підкладки, що призводить до зародка освіти і зростання.

Зростаюча таким чином тонка плівка має кристалографічну структуру, що визначається підкладкою.

Утворення плівки на твердій підкладці незмінно пов'язане з фазовим перетворенням, характерним обраного методу зростання. У методі МПЕ це перехід із сильно нерівноважної парової фази (наприклад, у напівпровідникових системах  $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$  за типових умов МПЕ парціальні тиски в пучках компонент у 10 разів перевищують рівноважний тиск пари) в тонкоплівкову тверду фазу [1, 2].

При такому фазовому переході необхідно враховувати вищезгадані поверхневі процеси, схематично показані на рис. 1.3. Поверхня кристала розділена у своїй на звані «кристалічні вузли», із якими можуть взаємодіяти

налітаючі молекули чи атоми. Кожен кристалічний вузол - це мала частина кристалічної поверхні, що характеризується своєю власною хімічною активністю. Вузол може створюватися обірваним зв'язком, вакансією, кристалічною сходинкою та ін.



1 – поверхнева дифузія, 2 – десорбція, 3 – взаємодифузія, 4 – вбудовування в решітку, 5 – поверхнева агрегація (зародкоутворення).

Рисунок 1.3 – Основні поверхневі процеси, що відбуваються під час вирощування тонкої плівки методом МПЕ

Названі поверхневі процеси характеризуються сукупністю відповідних кінетичних параметрів, що описують їх кількісно.

Швидкість надходження описується потоком (інтенсивністю пучка) речовин, що надходять, тобто. числом атомів, що падають за 1с на одиницю площі поверхні. При МПЕ напівпровідникових з'єднань типові значення відповідних потоків лежать між  $10^{14}$  і  $10^{16}$  атом·см<sup>-2</sup> с<sup>-1</sup>. Потік речовин, що надходять, може бути обчислений за формулою (1.3).

Атоми, які підлітають до поверхні підкладки мають розподіл за швидкостями, яке визначається, у свою чергу, температурою в місці свого народження. В даному випадку МПЕ це температура ефузійного осередку  $T_i$ . Після попадання на поверхню підкладки, що має температуру  $T_s$  менше, ніж  $T_i$  атом може або негайно знову випаруватися, або обмінюватися енергією з атомами підкладки аж до досягнення рівноважної температури  $T_s$ . Для кількісного опису цього процесу можна ввести коефіцієнт термічної акомодатії (1.4):

$$\alpha_A = \frac{T_i - T_e}{T_i - T_s}. \quad (1.4)$$

Справді, якщо  $T_e$  – температура атомів, які повторно випаровуються з поверхні, – дорівнює  $T_s$ , то коефіцієнт акомодатії дорівнює одиниці. Таким чином, цей коефіцієнт характеризує ступінь, до якої атом, що надійшов, досягає теплової рівноваги з підкладкою.

Важливо розрізнити введений вище коефіцієнт акомодатії та коефіцієнт прилипання, або конденсації  $\alpha_s$ . Останній визначається як відношення числа атомів, адсорбованих поверхнею, до повного числа частинок, що підлітають (1.5):

$$\alpha_s = \frac{N_{ад}}{N_{полн}}. \quad (1.5)$$

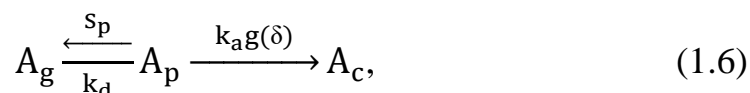
Коефіцієнт прилипання у багатьох випадках менше одиниці. Він може бути навіть дуже малим при малій енергії адсорбції атомів або за високої температури підкладки. Припустимо, що  $\alpha_A = 1$ , тобто всі атоми акомодуються на поверхні підкладки. Але це не означає, що вони будуть там постійно. Вони, як і раніше, мають кінцеву, залежну від температури підкладки, можливість придбати енергію, достатню для подолання сил тяжіння і відходу з підкладки. Якщо конденсація (агрегація адсорбованих атомів) відсутня, всі атоми зрештою випаровуватися. Таким чином, коефіцієнт прилипання може бути близьким до

нуля навіть при одиничному коефіцієнті акомодациї. Однак при  $\alpha_A < 1$  за визначенням  $\alpha_S$ , не може дорівнювати одиниці.

Можливі два типи адсорбції. Перший – фізична адсорбція, яка часто називається фізсорбцією, відповідна нагоді, коли відсутнє перенесення електронів між адсорбатом і адсорбентом і сили тяжіння є вандерваальсовими та (або) електростатичними. Другий тип – хемосорбція, що відповідає наявності електронного перенесення, тобто хімічної реакції між адсорбатом та адсорбентом. Енергія адсорбції при фізичній адсорбції в загальному випадку менша, ніж при хімічній.

Експерименти підтверджують, що зростання кристала при МПЕ у багатьох випадках, коли використовуються молекулярні джерела, є процесом двоступінчастої конденсації, при якому молекули речовини приходять в хемосорбований стан попередньо фізсорбованої фази.

Подібна етапна конденсація в найпростішому випадку може йти згідно наступної схемою (1.6):



У виразі (1.6)  $A_g, A_p, A_c$  відносяться до адсорбату в газоподібному, фізсорбованому та хемосорбованому станах. Швидкості реакцій  $s_p$  і  $k_d$  описують конденсацію та десорбцію фізсорбованої фази-попередника, а  $k_a g(\delta)$  відноситься до конверсії цієї фази в хемосорбовану. Швидкість такої конверсії вважається пропорційною  $g(\delta)$  – ймовірності наявності в хемосорбованому стані необхідних вільних вузлів, де  $\delta$  вимірюється в одиницях моношарів, що покривають поверхню.

Інший можливий сценарій процесу конденсації через фазу-попередник може мати такий вигляд як на рис. 1.4:

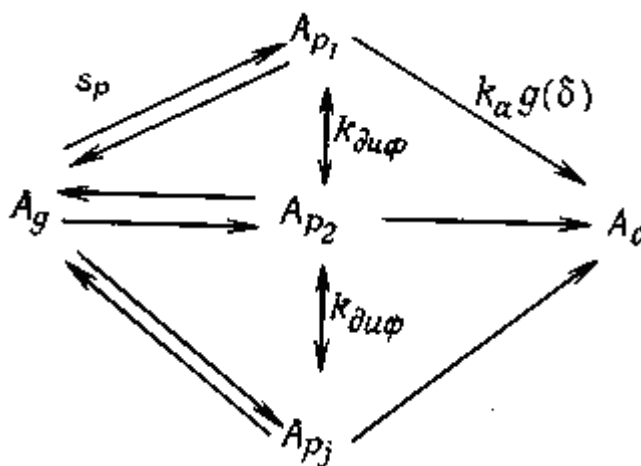


Рисунок 1.4 – Можливий сценарій процесу конденсації

Ця модель подібна до показаної на рисунку 1.3 з тією лише різницею, що у випадку, коли вузол, в який приходять молекула фази- попередника, виявляється зайнятий хемосорбованою фазою, молекула якого може дифундувати по поверхні зі швидкістю  $k_{диф}$  до іншого вузла.

Потенціали взаємодії з поверхнею, що впливають нормалі до неї на підлітаючу молекулу, показані на рис. 1.4 для хемосорбованої фази та фази- попередника. Видно, що молекула, адсорбована у фазу- попередник, для подальшої хемосорбції на поверхні повинна подолати менший бар'єр, ніж для випаровування у вакуум, оскільки  $E_a < E_{dp}$ . Тут показаний лише характерний приклад, хоча насправді можуть бути інші зміни потенціалу.

Технології МПЕ слід використовувати відповідні методи аналізу поверхні. До цих методів належать відбивна дифракція швидких. електронів, електронна оже-спектроскопія, мас-спектроскопія вторинних іонів та ін. В даний час більшість дослідницьких та значна частина технологічних установок МПЕ містять окремі елементи зазначеного аналітичного обладнання.

Дифракція швидких електронів є дуже чутливим методом дослідження поверхневої структури, мікроструктури та ступеня гладкості. Вона використовується також для контролю за зміною структури верхніх атомних шарів у ході епітаксійного росту плівок при різних параметрах росту та для спостереження топографії поверхні (особливо на ранніх стадіях росту).

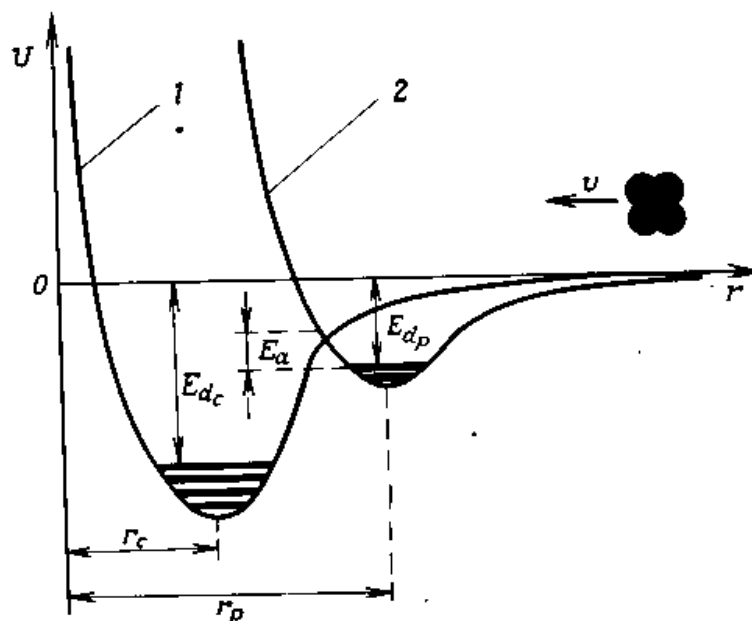


Рисунок 1.5 – Залежність потенціалу взаємодії  $U$ , що діє на тетрамеричну молекулу, що налітає перпендикулярно до поверхні підкладки, від відстані до цієї поверхні  $r$  для хемосорбованої фази (крива 1) та фізсорбованої фази-попередника (крива 2)

Метод електронної оже-спектроскопії використовується для вивчення хімічного складу поверхні даної конкретної підкладки, докази збагачення поверхні домішками під час епітаксійного зростання, визначення хімічного складу зростаючого шару [1,2].

Мас-спектроскопія вторинних іонів є потужним методом визначення хімічного складу зовнішніх атомних шарів твердого тіла. Її перевагами перед оже-спектроскопією є висока абсолютна чутливість до багатьох елементів, хороша елементарна вибірковість і висока роздільна здатність. Якщо за допомогою великого потоку первинних іонів довести швидкість травлення до значення близько  $1 \text{ нм/с}$ , цей метод можна також використовувати для об'ємного аналізу матеріалу та дослідження профілю поверхні. Квадрупольний мас-спектрометр, що використовується в цій аналітичній апаратурі, можна застосовувати також для ефективного діагностики залишкових газів, для аналізу

складу матеріалу джерел і для вивчення десорбційних явищ на поверхні епітаксійного шару.

Дані щодо поверхневої кінетики росту та легування можуть бути отримані за допомогою методики модульованого молекулярного пучка. У цій методиці зміна падаючого молекулярного пучка призводить до зміни в часі концентрації адсорбованих молекул на поверхні підкладки і завдяки цьому – зміни швидкості десорбції, що може бути виміряно за допомогою мас-спектрометрії.

З іншого боку, модулюючи потік десорбції, можна безпосередньо визначити, які атоми та молекули йдуть з поверхні, виділивши їх на тлі залишкових газів. Додаткове використання методів електронної спектроскопії та дифракції швидких електронів дозволяє отримувати детальні відомості про поверхню підкладки на будь-якій стадії процесу, а разом із програмованою термодесорбцією дає також додаткову інформацію про стехіометрії поверхні.

В даний час найбільш дослідженим матеріалом для МПЕ є арсенід галію. Тому для ілюстрації процесів, що відбуваються при зростанні та легуванні напівпровідників методом МПЕ, будемо використовувати дані, що належать до цього матеріалу.

Для вирощування плівок GaAs за допомогою МПЕ можна використовувати дві методики. У першій їх плівка зростає під впливом пучків тетрамерних молекул миш'яку ( $As_4$ ) і атомів Ga. У другій методиці необхідні компоненти плівки, що росте, подаються на нагріту підкладку у вигляді пучків димерних молекул миш'яку ( $As_2$ ) і атомів Ga. Молекулярний пучок  $As_4$  створюється при навантаженні ефузійного осередку чистим миш'яком, а створення пучка  $As_2$  в осередок поміщають GaAs.

На практиці плівки  $Al_xGa_{1-x}As$  з високим ступенем кристалічної досконалості можуть вирощуватися просто шляхом одночасного спрямування на підкладку пучків Ga, Al та надмірної кількості  $As_4$ . Оскільки коефіцієнт прилипання Al на GaAs дорівнює одиниці, неважко здійснювати управління складом плівки, що росте, шляхом зміни густин потоків елементів III групи.

Детальний аналіз кінетики відповідних поверхневих процесів призводить до висновку, що принципово обмежуючим фактором при зростанні потрійних сполук  $A_x^{III}B_{1-x}^{III}C^V$  за допомогою МПЕ є стійкість до нагрівання менш стійкого з двох сполук  $A^{III}B^V$ , складових цей твердий розчин. Таким чином, поверхневий склад твердого розчину  $A_x^{III}B_{1-x}^{III}C^V$  визначається ставленням потоків лише елементів III групи, якщо зростання йде при температурах нижче за межу термічної стійкості GaAs при зростанні  $Al_xGa_{1-x}As$ , InAs при зростанні  $Ga_xIn_{1-x}As$  або InP при зростанні  $Ga_xIn_{1-x}P$ . Це пояснює причину, через яку використання для вирощування системи  $Al_xGa_{1-x}As$  технологічних параметрів, відпрацьованих у застосуванні до зростання GaAs, не створює проблем щодо композиційної однорідності твердого розчину. Велика термічна стійкість AlAs порівняно з GaAs призводить до того, що за умов МПЕ саме стійкість GaAs визначає композиційну однорідність  $Al_xGa_{1-x}As$ .

В даний час однорідні шари GaAs та  $Al_xGa_{1-x}As$  стандартно вирощують за допомогою МПЕ на підкладках розміром  $30 \times 30$  мм<sup>2</sup>. При зростанні на реконструйованій  $(2 \times 4)$  або з  $(2 \times 8)$  As – стабілізованої поверхні в інтервалі температур підкладки від 450 до 610 °C виходять, як правило, плівки із дзеркально-гладкою поверхнею.

Введення домішок при МПЕ зазвичай здійснюється за допомогою додаткових ефузійних осередків, що містять необхідний легуючий елемент. Результируючі електричні та оптичні властивості плівок, що вирощуються, визначаються при цьому в основному двома факторами. По-перше, вони залежать від потоку домішкових атомів на поверхню зростання, від їхнього коефіцієнта прилипання та часу життя на поверхні, особливо при великих потоках атомів основних речовин. Другим фактором є характер реального вбудовування домішок у ґрати та ступінь їхньої електричної активності. Багато домішок, які використовуються при інших формах епітаксії, виявляються непридатними для МПЕ.

В даний час для GaAs виявлено чотири акцепторні домішки, придатні для використання в МПЕ: берилій, магній, германій та іонізований цинк. Найбільш

вдалою лігатурою є берилій, що дозволяє отримувати p-GaAs з концентрацією до  $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  при досконалої поверхневої морфології легованого шару.

Донорні домішки, мабуть, легше вбудовуються в ґрати GaAs при МПЕ, ніж акцепторні. На сьогоднішній день досліджено вирощування методом МПЕ GaAs з шістьма типами донорних домішок, але практичне значення мають лише три: кремній, германій і олово. Найбільш зручною домішкою n-типу в GaAs є олово. Леговані оловом плівки GaAs, виготовлені за допомогою МПЕ, мають дуже малий ступінь компенсації. Концентрація активних донорів GaAs прямо пропорційна потоку Sn в молекулярному пучку і може бути легко доведена до  $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Єдиним істотним недоліком олова є його властивість накопичуватися у поверхні GaAs, що росте, при МПЕ. З цієї причини останнім часом найбільш активно досліджуваною донорною домішкою при МПЕ GaAs і  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  став кремній [2].

Також за допомогою МПЕ можна здійснювати прецизійний контроль за профілем розподілу за товщиною як хімічного складу, так і легування. Монокристалічні надґраткові структури з товщинами шарів лише в кілька постійних ґрат без праці вирощуються на основі багатьох напівпровідникових матеріалів. Виняткова гнучкість цієї епітаксійної технології в єднанні з багатокамерними багатоцільовими системами МПЕ, що з'явилися недавно, робить її одним з найважливіших способів створення напівпровідникових приладів [1].

## 1.2 Особливості випромінювальної рекомбінації об'ємних матеріалів та квантово-розмірних структур

З теорії лазерів відомо, що генерація лазерного випромінювання у системі енергетичних рівнів можлива лише за створенні інверсної населеності більш високому їх. Крім цього, у разі напівпровідника потрібна досить велика кількість вакансій, які могли б зайняти частки після рекомбінації. При розбиранні джерел лазерного випромінювання з урахуванням напівпровідників з p-n – переходами

становлять інтерес як чисті матеріали, де переважають зона – зонні випромінювальні переходи, а й матеріали сильно леговані, де переважають зона – домішкові чи домішка – зонні переходи (для напівпровідників, легованих акцепторами та донорами відповідно). Але незалежно від механізму випромінювальної рекомбінації енергії переходів, так само як і в чистому напівпровіднику будуть лежати в межах  $h\nu = E_C - E_V$  для міжзонних переходів і  $h\nu = F_n - F_p$  – для переходів за участю домішки, де  $F_n - F_p$  рівні Фермі для електронів і дірок відповідно, які у разі сильно легованого напівпровідника будуть визначатися концентраціями введених домішок, а не лише умовами порушення термодинамічної рівноваги, як у разі чистого напівпровідника. Відповідну зміну зазнаватиме і кількість випромінюваних фотонів, оскільки порогова швидкість накачування залежить від кількості введеної домішки.

Випромінювальна рекомбінація в квантоворозмірних структурах (ВРС), що становлять основу активної області цілого класу високонаправлених світловипромінювальних діодів (СВД) та інжекційних напівпровідникових лазерів (ІНЛ) істотно відрізняється від випромінювальної рекомбінації в об'ємному матеріалі. Як відомо, щільність станів об'ємного матеріалу може бути апроксимована параболічною функцією у просторі зворотної решітки (хвильових векторів) та енергетичні стани в зонах характеризуються безперервним спектром. При цьому згідно з правилами відбору в процесі випромінювальної рекомбінації можуть брати участь ті електрони і дірки, квазіімпульс яких однаковий і мінімальний з усіх можливих в цій випромінювальній системі. Оскільки носії розподілені по зонах згідно з функцією розподілу Фермі-Дірака, можна стверджувати, що випромінювальна рекомбінація об'ємних матеріалів найбільш ефективна в тому випадку, якщо ці матеріали є прямозонними, а їхня температура стабілізована. Але навіть у цьому випадку кількість носіїв, що безпосередньо беруть участь у рекомбінації, вкрай мала, оскільки крім квантових закономірностей та ефектів на процес рекомбінації впливають такі фактори як оже-рекомбінація, об'ємне розтікання носіїв, зв'язування рекомбінуючих носіїв на пастках та дефектах у кристалі тощо.

Досягнення високої температурної стабільності реального приладу в робочому режимі є окремим інженерно – технічним завданням, вирішення якого пов'язане з цілим рядом проблем, вирішення яких у ряді випадків може позначитися на випромінювальних характеристиках СВД або ІНЛ.

Більшості перелічених недоліків позбавлений ІНЛ на ВРС. Для ВРС характерна ступінчаста функція станів високий рівень монокристалічності, дискретний енергетичний спектр носіїв. На відміну від об'ємного кристала, де розподіл носіїв сильно залежить від температури, в ВРС енергетичні стани носіїв характеризуються значною температурною стабільністю та просторовою локалізацією. Подібна поведінка енергетичних рівнів носіїв у ВРС пояснюється екрануючою дією потенціалу квантового обмеження руху носіїв перпендикулярно до площин металургійних меж гетеропереходів, що утворюють ВРС. Наявність локалізованих стабільних енергетичних рівнів носіїв дозволяє отримати від ІСЛ на ВРС спектрально вузькі лінії випромінювання високої оптичної потужності. Крім цього, виникнення ступінчастої функції розподілу станів носіїв у зонах, що виникає під дією потенціалу квантового обмеження, частково знімає обмеження, що накладаються на випромінювальні переходи правилом відбору за хвильовим вектором, що у свою чергу призводить до збільшення пар рекомбінуючих електронів та дірок [3].

Процеси рекомбінації поділяються на два класи: пряму рекомбінацію зона – зона та рекомбінацію за участю домішок та дефектів. У першому випадку вільний електрон із зони провідності рекомбінує з вільною діркою у валентній зоні в одному елементарному акті. У процесах другого класу вільні електрони рекомбінують із зв'язаними дірками на домішках чи дефектах, а вільні дірки – із зв'язаними електронами.

Процеси, які забезпечують виконання законів збереження, можуть бути різні. Це може бути випромінювання кванта електромагнітного випромінювання – фотона певної частоти  $\omega$  [4]. І тут відбувається випромінювальна рекомбінація.

Темп випромінювальної рекомбінації зона – зона великий у вузькозонних напівпровідниках. Вона може бути переважаючою і в широкозонних

напівпровідниках з прямими переходами (GaAs та ін.) [4]. Однак дуже часто в напівпровідниках із широкою забороненою зоною основну роль відіграють процеси рекомбінації за участю домішок та структурних дефектів. Процес рекомбінації за участю локальних рівнів (пасток) є двоступінчастим і складається із захоплення електрона із зони провідності на порожній центр рекомбінації (пастку) та захоплення дірки із валентної зони на заповнений центр рекомбінації. При цьому самі центри рекомбінації не змінюються та відіграють роль своєрідного каталізатора процесу рекомбінації.

Якщо в напівпровіднику присутні донорна та акцепторна домішки з енергією іонізації відповідно  $E_d$  і  $E_a$ , то вони можуть утворити пари, які діятимуть як нерухомі молекули, занурені в кристал (рис. 1.6).

Домішкові рівні можуть займати дискретні положення у ґратах, відстань у донорно-акцепторній парі змінюється кінцевими порціями. Це має зумовити наявність у спектрі тонкої структури. При великих відстанях між донором і акцептором ( $r > 4,0$  нм) лінії випромінювання перекриваються, утворюючи широкий спектр.

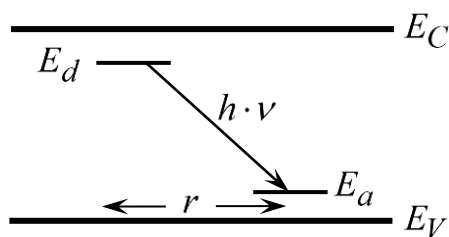


Рисунок 1.6 – Донорно-акцепторний перехід із випромінюванням

Спектральне становище як широкої смуги, так і структури вузьких ліній повинно залежати від типу домішок. При цьому залежно від місць, які займають домішками, можуть утворюватися різні типи пар. Якщо донор і акцептор займають у ґратах однакові місця, то утворюються пари типу I. Якщо донор і акцептор займають різні місця, виникають пари типу II.

### 1.3 Використання надграток в активних областях оптоелектронних напівпровідникових приладів

Однією з привабливих особливостей с верхрешіток є те, що, змінюючи розташування атомів різних елементів у надрешітці, можна керувати видом її функції щільності станів  $\rho(E)$  – найважливішого параметра, що визначає електричні та оптичні властивості напівпровідникових кристалів. Для будь-якого однорідного кристала або сплаву  $\rho(E)$  має параболічний вигляд, що обертається на нуль на краю зони. З іншого боку, в надгратковій структурі  $\rho(E)$  має ступінчасту форму і кінцева навіть за мінімально можливої енергії. Подібний вид функції щільності станів дає надгратки перевагу над однорідним кристалом щодо оптичних властивостей. Ця перевага вже використовується для створення лазерних діодів з рекордно низьким граничним струмом, де активна область подвійної лазерної гетероструктури містить систему квантових ям [1,3].

Активна область подібного лазера є фрагмент надгратки, що має анізотропну структуру. Це дає ряд переваг приладам на основі багатошарових квантових систем.

Аналіз правил відбору для електронно-діркової рекомбінації в аналізованій анізотропній структурі та енергетичних зазорів між рівнями важких і легких дірок у квантових ямах дає підстави очікувати, що оптичне посилення для моди ТЕ (поперечної електричної) у хвилеводній системі квантових ям буде суттєво більшим, ніж для моди ТМ (поперечної магнітної). Експерименти показують, що посилення для моди ТЕ поблизу порога перевищує посилення для моди ТМ на  $120 \text{ см}^{-1}$ , тоді як для звичайної подвійної гетероструктури ця різниця не перевищує  $20 \text{ см}^{-1}$ . Подібна велика анізотропія оптичного посилення в структурах з квантовими ямами робить лазери на їх основі дуже привабливим джерелом випромінювання стабільної поляризації ямами характеризуються більш крутим спектром оптичного поглинання, ніж звичайні подвійні гетероструктури, що пов'язано зі ступінчастим видом щільності станів двомірних. Тому на довжинах хвиль, що відповідають лазерній генерації, оптичне

поглинання у квантових ямах значно менше, ніж у подвійній гетероструктурі. Це означає, що хвилеводи з квантовими ямами можуть використовуватися у всіх ланцюгах інтегральної оптики, включаючи як активні, так і пасивні хвилеводні елементи на пластині. Завдяки ступінчастій щільності станів ширина смуги оптичного посилення структури з квантовими ямами невелика і становить  $1/2$ - $1/3$  від значення для звичайної подвійної гетероструктури. Тому в лазері із квантовими ямами легко здійснити одномодовий режим генерації. Це було підтверджено при порівнянні спектральної ширини сигналу звичайного лазера та лазера з квантовими ямами при високочастотній (500 Мбіт/с) модуляції.

Як відомо, дифузія домішок призводить до розпорядження надграткових структур і в кінцевому рахунку до перетворення їх на випадковий твердий розчин. Можливість практичного використання цього ефекту була реалізована при виготовленні смужкового лазера за допомогою дифузії Zn. У такому лазері активні шари з квантовими ямами на обох кінцях смужки були перетворені на випадковий твердий розчин з шириною забороненої зони, більшою, ніж в іншій активній області, і тому захищає дзеркальні відколи лазера від світлового руйнування. При цьому гранична вихідна потужність, що призводить до руйнування дзеркал, збільшилася втричі і досягла 120 мВт на межу.

Лазери з квантовими ямами володіють багатьма перевагами, внаслідок чого їх вигідно використовувати як джерела світла в системах оптичного зв'язку. Але для виготовлення таких лазерів для довгохвильового діапазону необхідно використовувати інші напівпровідникові системи, ніж GaAs – AlAs. Можливими кандидатами є системи  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} - \text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  і  $\text{GaSb} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ . У першому випадку потенційну яму в квантовій структурі утворює потрійне з'єднання  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , в якому атоми In і Ga випадково розподілені по вузлах, призначених для атомів групи. При ширині ями порядку всього лише 30 атомних шарів така хаотичність може призвести до розширення квантових енергетичних рівнів електронів і дірок і ліквідувати переваги, що існують структурам з квантовими ямами і надгратками. Навпаки, у системі  $\text{GaSb} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  роль потенційної ями відіграє шар бінарної сполуки (GaSb), де немає статистичної невизначеності в

розташуванні атомів. Тому можна очікувати, що вказана система матиме ті ж переваги, що і GaAs.  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Надгратки в такій системі вирощуються методом МПЕ відносно легко, і деякі їх фундаментальні оптичні властивості вже описані. Нещодавно за допомогою МПЕ було успішно створено інжекційний лазер на квантових ямах GaSb.  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$  працює в імпульсному режимі при кімнатній температурі. Його пороговий струм становить  $8,9 \text{ кА/см}^2$ , а характеристика температури дорівнює 60 К. Завданням найближчого майбутнього є доповнення такої прецизійної технології, як МПЕ, деякими процесами субмікронної і нанометрової літографії, зокрема використовують сфокусовані іонні пучки. При цьому виникнуть нові принципи створення матеріалів та приладів. Прикладами можуть бути дво- і тривимірні надграткові структури і зарощені гетеролазери на квантових ямах з розподіленим зворотним зв'язком. Крім поліпшення характеристик гетеролазерів, яке може бути досягнуто при використанні квантових ям і надграток, у зазначених лазерних структурах можуть спостерігатися і різні фундаментальні ефекти. Деякі з них, включаючи електрон-діркову асиметрію, особливості збору носіїв, генерацію фононів, утворення кластерів у твердих розчинах, розпорядження шарів, ефекти високого тиску та переходи прямої – непрямий напівпровідник під впливом розмірного квантування.

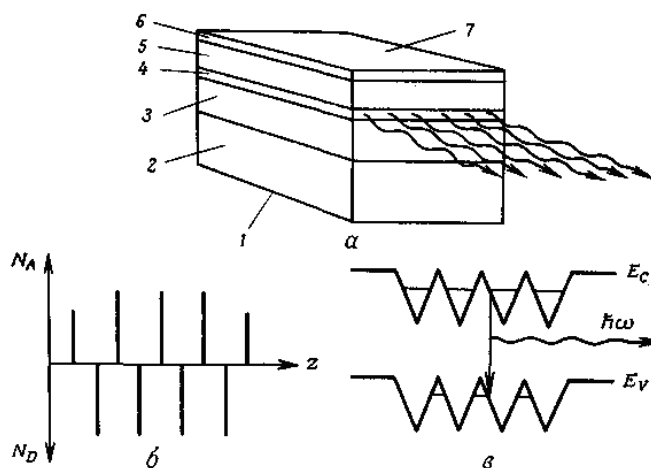
Надгратки знаходять застосування і в світлодіодах. Зокрема, введення в такий діод активної області у вигляді напруженої надгратки виключає необхідність використовувати для приладів лише ізоперіодичні напівпровідникові системи або вирощувати варізонні ділянки для боротьби з дислокаціями невідповідності. Ця перевага проявилася при створенні світлодіодів на основі надгратки GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ .

Інший світлодіод з пилкоподібною надрешіткою на основі GaAs. Схема такого надграткового діода, що генерує крайове випромінювання, показано на рис. 1.7, а. Ця структура вирощувалась методом МПЕ на сильно легованій  $n^+$ -підкладці GaAs. Для оптичного обмеження використовуються епітаксійні  $n$ - і  $p$ -шари  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , що локалізують світло в області з пилкоподібним надгратковим потенціалом. Верхній шар  $p^+$ -GaAs полегшує створення омичного контакту.

Профіль легування активної області є послідовністю  $\delta$ -функцій (рис. 1.7, б). Він створюється шляхом переривання звичайного «режиму кристалічного зростання» при МПЕ і переходу до «режиму росту домішок» за рахунок закривання заслінки біля джерела Ga і відкривання – у джерела відповідної домішки Be або Si, що легує, при постійно відкритому джерелі As. В цьому випадку атоми донорів або акцепторів розташовуються на товщині одного моноатомного шару в ґратах цинкової обманки.

Активна область містить 20 легуючих площин з двовимірними концентраціями  $N_D^{(2)} = N_A^{(2)} = 5 \cdot 10^{12} \text{см}^{-2}$  розділених шарами нелегованого GaAs товщиною 10 нм. Площа світлодіодів становить приблизно  $0,4 \times 0,5 \text{мм}^2$ .

Електрони з донорів і дірки з акцепторів рекомбінують, у результаті активна область світлодіоду повністю збіднюється вільними носіями. Розподіл донорів і акцепторів в активній області створює пилюподібний потенціал, що модулює краї зон (див. рис. 1.7, в).



а – послідовність шарів, вирощених на сильно легованій підкладці  $n^+$ -GaAs (1 – контакт AuGe / Ni, 2 – підкладка  $n^+$ -GaAs, 3 –  $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , 4 – надґратки, 5 –  $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , 6 –  $p^+$ -GaAs, 7 – контакт Cr/Au ); б – профіль легування активної області, що складається з піків у вигляді  $\delta$ -функцій; в – пилюподібний профіль зони провідності та валентної зони у напрямку зростання кристала.

Рисунок 1.7 – Структура світлодіода на основі пилюподібної надґратки GaAs

Нерівноважні електрони та дірки, створені оптичним збудженням або інжекцією, заповнюють енергетичні рівні, що утворюються в К-подібних потенційних ямах за рахунок квантового розмірного ефекту. Ці надлишкові електрони та дірки рекомбінують «квазівертикальним» способом в силу просторової близькості квантованих електронних і діркових станів, що призводить до малого часу життя і високої випромінювальної ефективності. Ширина забороненої зони надгратки залишається стабільною навіть при високих інтенсивностях збудження [5].

Спектри електролюмінесценції двох світлодіодів, що працюють при температурі 300 К, мають максимуми при  $\lambda = 925$  нм і 965 нм у добрій згоді зі значеннями, що очікувалися для даних параметрів надрешітки. На таких довжинах хвиль GaAs при 300 К неможливо отримати ефективне випромінювання. На довжині хвилі, що відповідає ширині забороненої зони вихідного GaAs сигнал люмінесценції відсутня. Цей результат вказує на надгратковий характер активної області світлодіода. Ширина спектру електролюмінесценції на піввисоті становила 60 меВ. Така велика ширина смуги в експерименті швидше за все пов'язана з флуктуаціями розміру V-подібних потенційних ям. Енергія максимуму випромінювання залежить від струму інжекції за зміни його більш ніж три порядку ( $2 \text{ mA} < I < 2 \text{ A}$ ). Така стабільність забороненої зони надгратки дуже важлива при використанні приладів з пилкоподібною надрешіткою в оптоелектроніці. Сумарна інтенсивність електролюмінесценції, лінійно залежить від струму інжекції, як і слід очікувати для діодів, які спонтанно генерують монохроматичне, але некогерентне випромінювання [1,5].

Метою даної атестаційної роботи є дослідження виникнення окремих ліній спектру випромінювання багатошарової надгратки, як у стаціонарному стані, так і під впливом зовнішнього, сталого у часі просторово симетричного електричного поля.

## 2 ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРІВ ІЧ-ВИПРОМІНЮВАННЯ ІНЖЕКЦІЙНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ЛАЗЕРІВ З БАГАТОШАРОВОЮ НАНОСТРУКТУРОЮ

### 2.1 Загальний огляд багатошарової квантової розмірної структури

У даній кваліфікаційній роботі розглядається нелегована п'ятишарова періодична квантово-розмірна структура (КРС), створена за допомогою гетеропереходу першого типу – GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (рис. 2.1). у цій структурі шари вузькозонного напівпровідника GaAs розташовані між шарами широкозонного матеріалу GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. При цьому шари матеріалів з поперемінно вузькою та широкою забороненими зонами утворюють періодичну наноструктуру, оскільки товщини однотипних шарів поміж собою рівні і не перевищують довжини хвилі де Бройля для даного матеріалу. Такі структури вбудовуються в нейтральні області різн структур різноманітних напівпровідникових приладів – світлодіодів, лазерних діодів і ін.

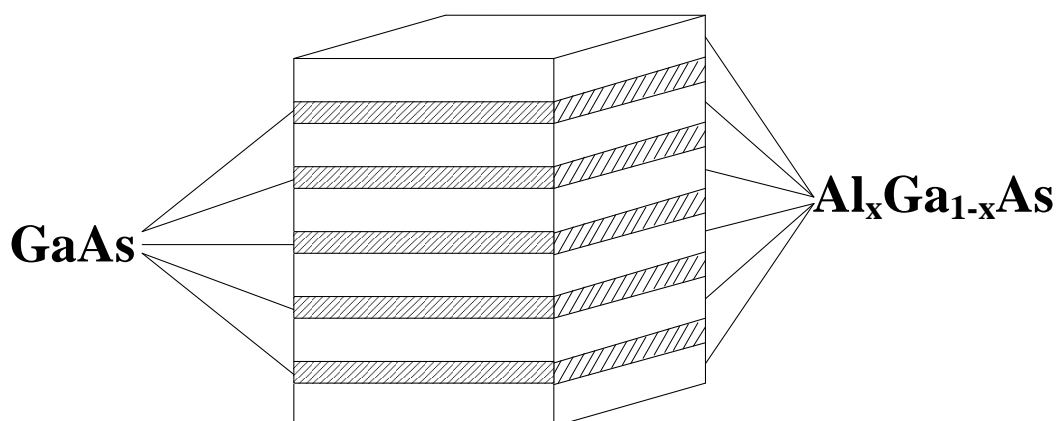


Рисунок 2.1 – Загальний вигляд нелегованої п'ятишарової наноструктури

Енергетична діаграма п'ятишарової наноструктури показана на рис. 2.2. Оскільки КРС на основі матеріалів GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, належать до КРС першого типу, як і гетероперехід, за допомогою якого наноструктура створена, то

квантове обмеження руху будуть відчувати носії які належать до матеріалу з вузькою забороненою зоною. В даному випадку це арсенід галію – GaAs. Тому більша концентрація носів буде спостерігатися у квантово-обмежених шарах, що, у свою чергу призведе до зростання діелектричної проникності  $\epsilon$ , кінець кінцем, – до зростання коефіцієнту оптичного заломлення.

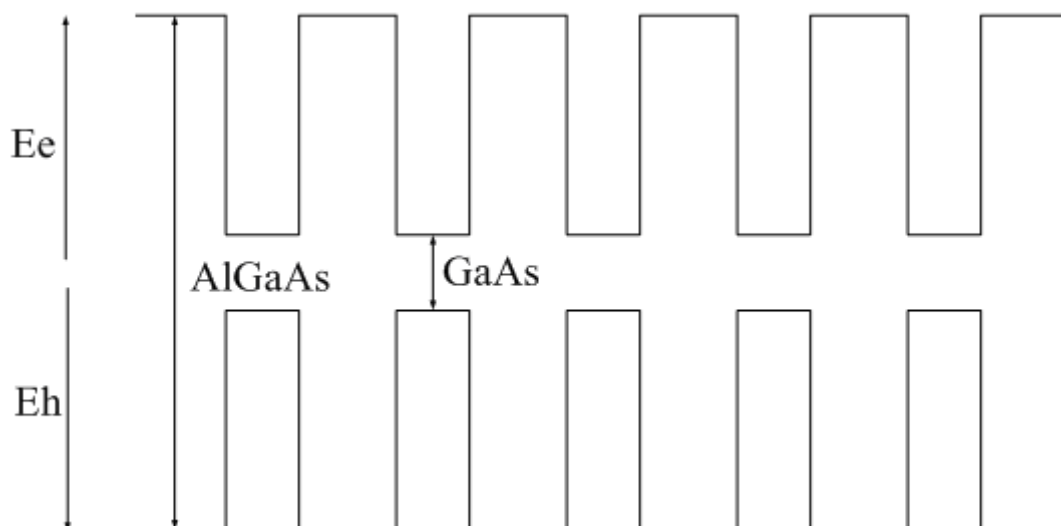


Рисунок 2.2 – Енергетична діаграма п'ятишарової наноструктури

КРС на рис. 2.2 симетрична для електронів у зоні провідності і важких і легких дірок у валентній зоні, тому схема задачі зі знаходження енергетичних станів і хвильових функцій носіїв обох типів може виглядати, як показано на рис. 2.3:

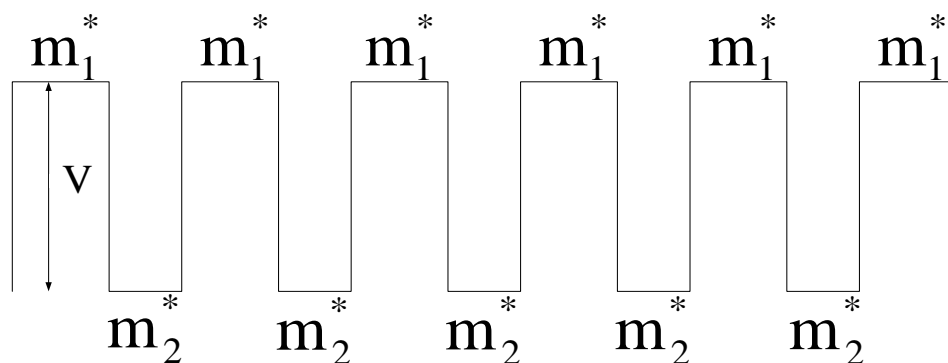


Рисунок 2.3 – Схема задачі зі знаходження енергетичних станів і хвильових функцій носіїв обох типів

## 2.2 Виникнення окремих енергетичних мінізон носіїв у надгратках

Для знаходження власних значень енергій і власних функцій носіїв у наноструктурі показаній на рис. 2.1., відповідно до схеми на рис. 2.2. треба розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера [6]:

$$\hat{H} \cdot \Psi = E \cdot \Psi, \quad (2.1)$$

де  $\hat{H}$  – оператор Гамільтона (оператор повної енергії);

$E$  – власне значення енергії носія;

$\Psi$  – хвильова функція (власна функція частинки або квазічастинки).

Рівняння (2.1) для структури показаній на рис. 2.1, може бути подано у вигляді системи (2.2-2.12):

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_1, \quad (2.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial z^2} + V \cdot \Psi_2 = E \cdot \Psi_2, \quad (2.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_3, \quad (2.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1} \frac{\partial^2 \Psi_4}{\partial z^2} + V \cdot \Psi_4 = E \cdot \Psi_4, \quad (2.5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \frac{\partial^2 \Psi_5}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_5, \quad (2.6)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1} \frac{\partial^2 \Psi_6}{\partial z^2} + V \cdot \Psi_6 = E \cdot \Psi_6, \quad (2.7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \frac{\partial^2 \Psi_7}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_7, \quad (2.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1} \frac{\partial^2 \Psi_8}{\partial z^2} + V \cdot \Psi_8 = E \cdot \Psi_8, \quad (2.9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \frac{\partial^2 \Psi_9}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_9, \quad (2.10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1} \frac{\partial^2 \Psi_{10}}{\partial z^2} + V \cdot \Psi_{10} = E \cdot \Psi_{10}, \quad (2.11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \frac{\partial^2 \Psi_{11}}{\partial \cdot z^2} = E \cdot \Psi_{11}. \quad (2.12)$$

Система рівнянь (2.2-2.12) для подальшого розв'язання приведена до однорідного до виду (2.13-2.23):

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_1}{\partial \cdot z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_1 = 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_2}{\partial \cdot z^2} + \chi_1^2 \cdot \Psi_2 = 0, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_3}{\partial \cdot z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_3 = 0, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_4}{\partial \cdot z^2} + \chi_1^2 \cdot \Psi_4 = 0, \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_5}{\partial \cdot z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_5 = 0. \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_6}{\partial \cdot z^2} + \chi_1^2 \cdot \Psi_6 = 0 \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_7}{\partial \cdot z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_7 = 0 \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_8}{\partial \cdot z^2} + \chi_1^2 \cdot \Psi_8 = 0 \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_9}{\partial \cdot z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_9 = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_{10}}{\partial \cdot z^2} + \chi_1^2 \cdot \Psi_{10} = 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial^2 \cdot \Psi_{11}}{\partial \cdot z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_{11} = 0 \quad (2.23)$$

У рівняннях 2.7-2.11:

$$\chi_1^2 = \frac{2 \cdot m_1}{\hbar^2} \cdot (E - V), \quad (2.24)$$

$$k_2^2 = \frac{2 \cdot m_2}{\hbar^2} \cdot E. \quad (2.25)$$

Розв'язок системи (2.7-2.11) відносно хвильових функцій  $\Psi_1 - \Psi_5$  записується у вигляді (2.26-2.36):

$$\Psi_1 = A_1 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot z) + B_1 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot z), \quad (2.26)$$

$$\Psi_2 = A_2 \cdot \exp(i \cdot \chi_1 \cdot z) + B_2 \cdot \exp(-i \cdot \chi_1 \cdot z), \quad (2.27)$$

$$\Psi_3 = A_3 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot z) + B_3 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot z), \quad (2.28)$$

$$\Psi_4 = A_4 \cdot \exp(i \cdot \chi_1 \cdot z) + B_4 \cdot \exp(-i \cdot \chi_1 \cdot z), \quad (2.29)$$

$$\Psi_5 = A_5 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot z) + B_5 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot z), \quad (2.30)$$

$$\Psi_6 = A_6 \cdot \exp(i \cdot \chi_1 \cdot z) + B_6 \cdot \exp(-i \cdot \chi_1 \cdot z), \quad (2.31)$$

$$\Psi_7 = A_7 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot z) + B_7 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot z), \quad (2.32)$$

$$\Psi_8 = A_8 \cdot \exp(i \cdot \chi_1 \cdot z) + B_8 \cdot \exp(-i \cdot \chi_1 \cdot z), \quad (2.33)$$

$$\Psi_9 = A_9 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot z) + B_9 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot z), \quad (2.34)$$

$$\Psi_{10} = A_{10} \cdot \exp(i \cdot \chi_1 \cdot z) + B_{10} \cdot \exp(-i \cdot \chi_1 \cdot z), \quad (2.35)$$

$$\Psi_{11} = A_{11} \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot z) + B_{11} \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot z). \quad (2.36)$$

Згідно умови безперервності хвильової функції і її першої похідної по координаті на межі розділу областей в системі (2.26-2.36), невідомі амплітудні коефіцієнти хвильової функції  $B_1$  і  $A_5$  в областях I і V (рис. 2.3) треба прийняти рівними нулю [7]. З урахуванням симетрії енергетичного профілю задача відносно центру квантово-обмеженого шару GaAs (відносно середини квантової ями) і вираз хвильових функцій в областях I – V у вигляді гармонічних функцій, співвідношення (2.26-2.36), можливо переписати так (2.37-2.47):

$$\Psi_1 = A_1 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot (z + 5 \cdot a + 4 \cdot b)), \quad (2.37)$$

$$\Psi_2 = A_2 \cdot \cos(k_2 \cdot (z + 4 \cdot (a + b))), \quad (2.38)$$

$$\Psi_3 = A_3 \cdot \operatorname{ch}(k_1 \cdot (z + 3 \cdot (a + b))) + B_3 \cdot \operatorname{sh}(k_1 \cdot (z + 3 \cdot (a + b))), \quad (2.39)$$

$$\Psi_4 = A_4 \cdot \cos(k_2 \cdot (z + 2 \cdot (a + b))), \quad (2.40)$$

$$\Psi_5 = A_5 \cdot \operatorname{ch}(k_1 \cdot (z + (a + b))) + B_5 \cdot \operatorname{sh}(k_1 \cdot (z + (a + b))), \quad (2.41)$$

$$\Psi_6 = A_6 \cdot \cos(k_2 \cdot z), \quad (2.42)$$

$$\Psi_7 = A_7 \cdot \operatorname{ch}(k_1 \cdot (z - (a + b))) + B_7 \cdot \operatorname{sh}(k_1 \cdot (z - (a + b))), \quad (2.43)$$

$$\Psi_8 = A_8 \cdot \cos(k_2 \cdot (z - (a + b))), \quad (2.44)$$

$$\Psi_9 = A_9 \cdot \operatorname{ch}\left(k_1 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))\right) + B_9 \cdot \operatorname{sh}\left(k_1 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))\right), \quad (2.45)$$

$$\Psi_{10} = A_{10} \cdot \cos(k_2 \cdot (z - 4 \cdot (a + b))), \quad (2.46)$$

$$\Psi_{11} = B_{11} \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot (z - 5 \cdot a - 4 \cdot b)). \quad (2.47)$$

У системі (2.19-2.23):

$$k_1^2 = \frac{2 \cdot m_1}{\hbar^2} \cdot (V - E) \text{ і } \chi_1^2 = -k_1^2, \quad (2.48)$$

де  $a$  – половинна ширина квантово-обмеженого шару (квантової ями);

$b$  – половинна ширина квантово-розмірного розділювального бар'єру.

Беручи до уваги парність енергетичних станів і можливості виникнення хвиль ймовірності, тих що розповсюджуються і тих що відбиваються, у розділювальних бар'єрах, розв'язок системи (2.37-2.47) щодо хвильових функцій утворює шістнадцять систем, по одинадцять рівнянь.

Згідно умов безперервності хвильової функції і її першої похідної на межі розділу середовищ записуються трансцендентні рівняння для знаходження власних значень енергії частинок і коефіцієнтів розкладання хвильових функцій для частинок і квазічастинок. Можна отримати рекурентні формули, що дозволяють проводити розрахунок для будь-якої кількості шарів [7, 9].

$$F1 = \frac{1}{N} \cdot \left( \operatorname{arctg}\left(\frac{k_1 \cdot m_2}{m_1 \cdot k_2}\right) + (N - e1) \cdot \operatorname{arctg}\left(\frac{k_1 \cdot m_2}{m_1 \cdot k_2} \cdot \operatorname{th}(k_1 \cdot b)\right) \right) + \\ + \frac{1}{N} \left( (N - (N - e1 + 1)) \cdot \operatorname{arctg}\left(\frac{k_1 \cdot m_2}{m_1 \cdot k_2} \cdot \frac{1}{\operatorname{th}(k_1 \cdot b)}\right) \right) + n \cdot \pi - k_2 \cdot a \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned}
F2 = & \frac{1}{N} \cdot \left( \operatorname{arctg} \left( \left( -\frac{k1 \cdot m2}{m1 \cdot k2} \right)^{-1} \right) + (N - e1) \right. \\
& \left. \cdot \operatorname{arctg} \left( \left( -\frac{k1 \cdot m2}{m1 \cdot k2} \cdot \operatorname{th}(k1 \cdot b) \right)^{-1} \right) \right) + \\
& + \frac{1}{N} \cdot \left( (N - (N - e1 +)) \cdot \operatorname{arctg} \left( \left( -\frac{k1 \cdot m2}{m1 \cdot k2} \cdot \frac{1}{\operatorname{th}(k1 \cdot b)} \right)^{-1} \right) \right) + n \cdot \pi - k2 \cdot a \quad (2.50)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A1 = & \left( \frac{(\cos(k2 \cdot a))^2}{k1} + N \cdot \left( a + \frac{\sin(2 \cdot k2 \cdot a)}{2 \cdot k2} \right) \right)^{-\frac{1}{2}} + \\
& + \left( (N - e1) \cdot \frac{(\cos(k2 \cdot a))^2}{(\operatorname{ch}(k1 \cdot b))^2} \cdot \left( \frac{\sin(2 \cdot k1 \cdot b)}{2 \cdot k1} + b \right) \right)^{-\frac{1}{2}} + \\
& + \left( (N - (N + 1 - e1)) \cdot \frac{(\cos(k2 \cdot a))^2}{(\operatorname{sh}(k1 \cdot b))^2} \cdot \left( \frac{\sin(2 \cdot k1 \cdot b)}{2 \cdot k1} - b \right) \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B1 = & \left( \frac{(\sin(k2 \cdot a))^2}{k1} + N \cdot \left( a - \frac{\sin(2 \cdot k2 \cdot a)}{2 \cdot k2} \right) \right)^{-\frac{1}{2}} + \\
& + \left( (N - e1) \cdot \frac{(\sin(k2 \cdot a))^2}{(\operatorname{sh}(k1 \cdot b))^2} \cdot \left( \frac{\operatorname{sh}(2 \cdot k1 \cdot b)}{2 \cdot k1} - b \right) \right)^{-\frac{1}{2}} + \\
& + \left( (N - (N + 1 - e1)) \cdot \frac{(\sin(k2 \cdot a))^2}{(\operatorname{ch}(k1 \cdot b))^2} \cdot \left( \frac{\sin(2 \cdot k1 \cdot b)}{2 \cdot k1} + b \right) \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.52)
\end{aligned}$$

Загальний вигляд хвильових функцій (2.37-2.47) на тлі енергетичної діаграми наноструктури визначається обчисленням невідомих амплітудних коефіцієнтів хвильових функцій за допомогою нормування самої функції на одиницю по всьому координатному простору.

### 2.3 Визначення спектру коефіцієнту підсилення випромінювання в багатошаровій наноструктурі

У площині потенційної ями – вздовж меж гетеропереходів, (рис. 2.1), рух носіїв не обмежується. Носії мають два ступеня свободи руху, тому функція густини станів для кожного дискретного значення енергії як в зоні провідності, так і в валентній зоні буде мати вигляд «східців» [3] (2.53):

$$\rho(E) = \sum_n \left( \frac{m^*}{\pi \cdot \hbar^2} \right) \cdot H(E - E_{(C,H,L)n}). \quad (2.53)$$

З огляду на співвідношення (2.53), коефіцієнт оптичного підсилення квантово-розмірної структури дорівнює [10, 23] (2.54):

$$\begin{aligned} g(h \cdot \nu) = & \frac{e^2 \cdot \hbar \cdot M^2}{\epsilon_0 \cdot m_0^2 \cdot c \cdot \bar{n} \cdot h \cdot \nu} \cdot \left( \frac{m_{rH}}{\hbar^2} \cdot \sum_n H(h \cdot \nu - E_{Cn} - E_{Hn}) \times \right. \\ & \times \left\{ f_C \left[ E_{Cn} + \frac{m_H^*}{m_C^* + m_H^*} (h \cdot \nu - E_{Cn} - E_{Hn}) \right] - \right. \\ & \left. \left. - f_V \left[ E_{Hn} - \frac{m_C^*}{m_C^* + m_H^*} (h \cdot \nu - E_{Cn} - E_{Hn}) \right] \right\} + \right. \\ & + \frac{m_{rL}}{\hbar^2} \cdot \sum_n H(h \cdot \nu - E_{Cn} - E_{Ln}) \cdot \left\{ f_C \left[ E_{Cn} + \frac{m_L^*}{m_C^* + m_L^*} (h \cdot \nu - E_{Cn} - E_{Ln}) \right] - \right. \\ & \left. \left. - f_V \left[ E_{Ln} - \frac{m_C^*}{m_C^* + m_L^*} (h \cdot \nu - E_{Cn} - E_{Ln}) \right] \right\} \right), \quad (2.54) \end{aligned}$$

де  $e$  – заряд електрона, Кл;

$\hbar$  – постійна Дірака;

$\epsilon_0$  – діелектрична стала;

$m_0$  – маса вільного електрона, кг;

$c$  – швидкість світла, м/с;

$\bar{n}$  – показник заломлення активної області;

$h \cdot \nu$  – енергія, що випромінюється фотонами, eВ;

$M \leftrightarrow$  – матричний елемент переходу для напівпровідникових з'єднань  $A^{III}B^V$ ;

$m_C^*$  – наведена маса електрона в зоні провідності вузькозонного матеріалу структури, кг;

$m_H^*$  – наведена маса «важкої» дірки у валентній зоні вузькозонного матеріалу структури, кг;

$m_L^*$  – наведена маса «легкої» дірки у валентній зоні вузькозонного матеріалу структури, кг;

$m_{rH}$  – наведена маса «важкого» екситона у вузькозонному матеріалі структури, кг;

$m_{rL}$  – наведена маса «легкого» екситона у вузькозонному матеріалі структури, кг;

$E$  – поточне значення енергії, eВ;

$E_{Cn}$  – власне значення  $n$ -го енергетичного рівня електрона в зоні провідності вузькозонного, квантово-обмеженого матеріалу, eВ;

$E_{Hn}$  – власне значення  $n$ -го енергетичного рівня важкої дірки в зоні провідності вузькозонного, квантово-обмеженого матеріалу, eВ;

$E_{Ln}$  – власне значення  $n$ -го енергетичного рівня легкої дірки в зоні провідності вузькозонного, квантово-обмеженого матеріалу, eВ;

$f_{C,V}$  – функції розподілу Фермі-Дірака для частинок в вузькозонному матеріалі, в зоні провідності –  $C$  і в валентній зоні –  $V$ , відповідно.

Для напівпровідникових з'єднань  $A^{III}B^V$  в об'ємному, чи у квантово-обмеженому стані кристала квадрат матричного елемента, який описує оптичний перехід між зонами, може бути визначений як [3] (2.55):

$$M^2 = \frac{m_0}{m_C^*} \cdot \frac{m_0 \cdot E_g \cdot (E_g + \Delta)}{12 \cdot (E_g + 2 \cdot \Delta / 3)}, \quad (2.55)$$

де  $\Delta$  – енергія спин-орбітального розщеплення валентної зони, eВ.

У тому випадку, коли товщина квантово-розмірного шару мала і носії локалізуються завдяки наявності достатньо високих бар'єрів, різниця між найнижчим і наступним квантовими рівнями може бути значно більше, при цьому максимальне значення коефіцієнта оптичного підсилення визначається носіями, які знаходяться на межі найнижчій підзони.

#### 2.4 Розв'язання рівнянь Шредінгера для багатошарової квантово-розмірної структури з урахуванням зовнішнього впливу

Хвильові функції і власні значення енергії носіїв у структури, показаної на рис. 2.4, знаходяться при розв'язанні стаціонарного рівняння Шредінгера. Частинки і квазічастинки усередині цієї структури перебувають в іонізованому стані. Поле об'ємного заряду, яке виникає, буде вносити збурення. Для того щоб розв'язати рівняння Шредінгера використовується теорія збурень [8, 9] оператор Гамільтона, в цьому разі, може бути записаний так (2.56):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0 + \hat{V}', \quad (2.56)$$

де  $\hat{V}'$  – оператор збурення (2.57).

$$\hat{V}' = -e\vec{E}\vec{z}, \quad (2.57)$$

де  $e$  – заряд електрона;

$\vec{E}$  – напруженість поля.

Згідно (2.58) і (2.59) рівняння Шредінгера може бути записане як (2.58):

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}_0 - e\vec{E}\vec{z})\Psi = E\Psi. \quad (2.58)$$

У виразі (2.58) незбурений гамільтоніан має вигляд (2.59):

$$\hat{H}_0 + \hat{V}_0 = \hat{H}^0, \quad (2.59)$$

де  $\hat{H}^0$  – гамільтоніан, власні значення енергії якого  $E^0$  і власні функції  $\Psi^0$  задовольняють стаціонарному рівнянню Шредінгера.

Згідно (2.58) рівняння (2.59) можна переписати у вигляді (2.60):

$$\left(\hat{H}^0 - e\vec{E}\vec{z}\right)\Psi = E\Psi. \quad (2.60)$$

Відповідно до теорії малих збурень рішення для  $E$  і  $\Psi$  записуються у вигляді безкінечних рядів (2.61-2.62):

$$E = E^0 + E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)} + \dots, \quad (2.61)$$

$$\Psi = \Psi^0 + \Psi^{(1)} + \Psi^{(2)} + \Psi^{(3)} + \dots, \quad (2.62)$$

де  $E^{(1)}$ ,  $\Psi^{(1)}$  – величини першого порядку малості щодо  $E^0$  і  $\Psi^0$ ;

$E^{(2)}$ ,  $\Psi^{(2)}$  – величини другого порядку малості щодо  $E^0$  і  $\Psi^0$  і так далі.

## 2.5 Результати моделювання енергетичного спектру багатошарової наноструктури

Власні значення енергії електронів для структури, показаної на рис. 2.4, розраховувалися в даній роботі на підставі виразів (2.47-2.54) з використанням математичного пакета Mathcad 11. Власні значення енергії електронів в зоні провідності на тлі зміни її профілю показані на рис. 2.4

Функція густини станів електронів в зоні провідності, відповідна спектру енергетичних станів, показаному на рис. 2.4 показана на рис. 2.5.

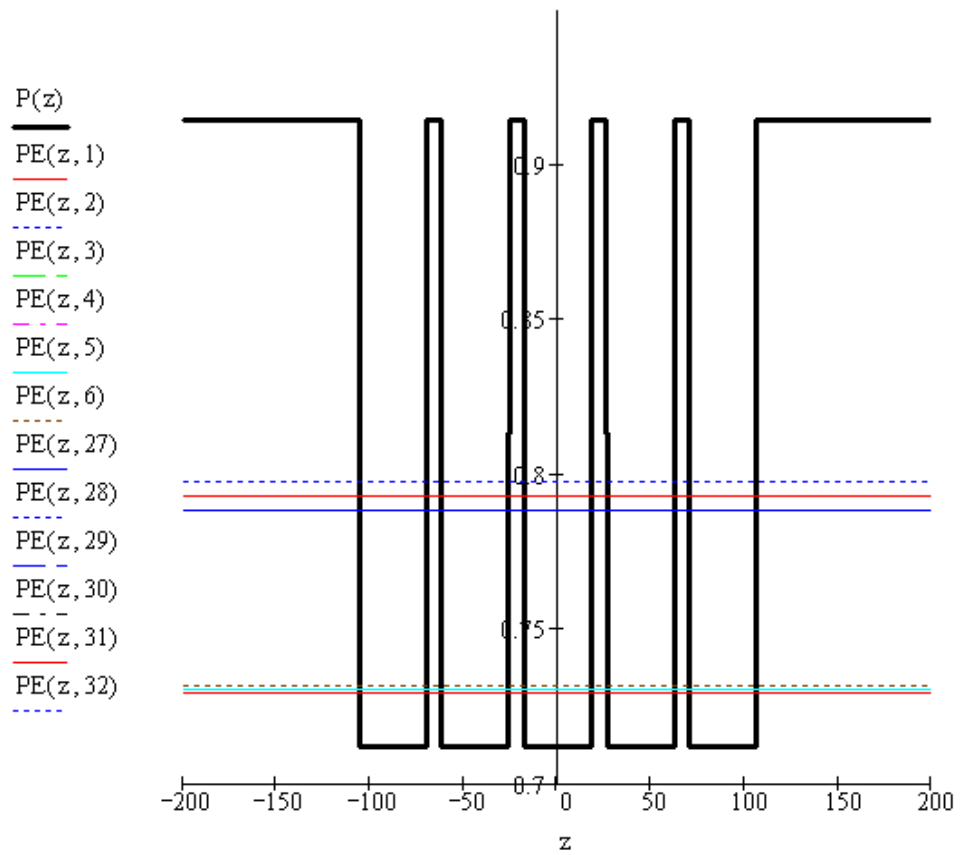


Рисунок 2.4 – Власні значення енергії електронів в зоні провідності

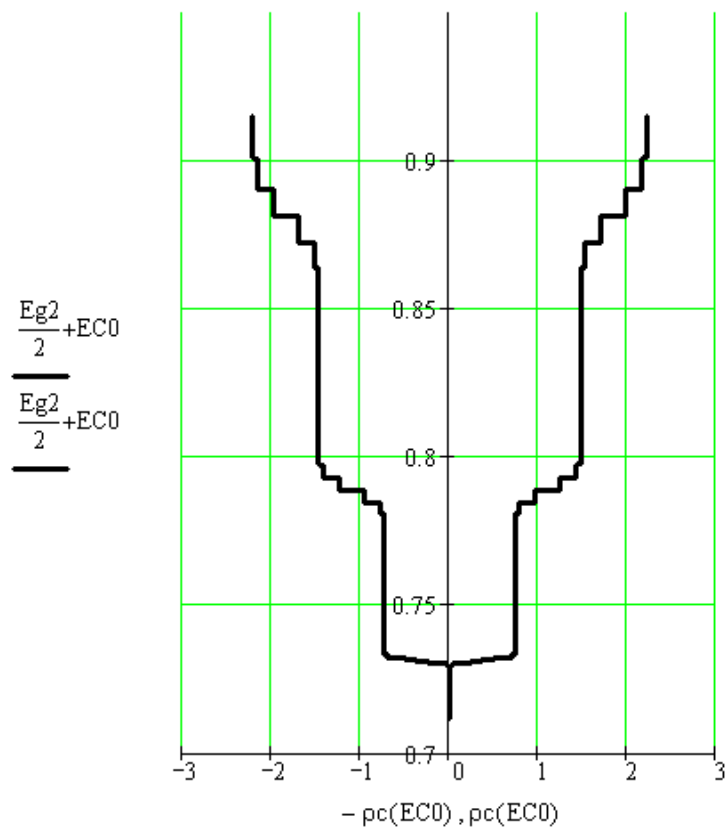


Рисунок 2.5 – Густина станів електронів у зоні провідності

З аналізу результатів моделювання енергетичних станів електронів, наведених на рис. 2.4 і 2.5, випливає, що власні значення енергії розподілені нерівномірно по глибині кантової ями, крім того, деякі стани у багатошаровій структурі є виродженими, тобто одному значенню енергії частинки відповідають кілька хвильових функцій, що підтверджується розрахунком координатного розподілу хвильових функцій електронів, як показано на рис. 2.6.

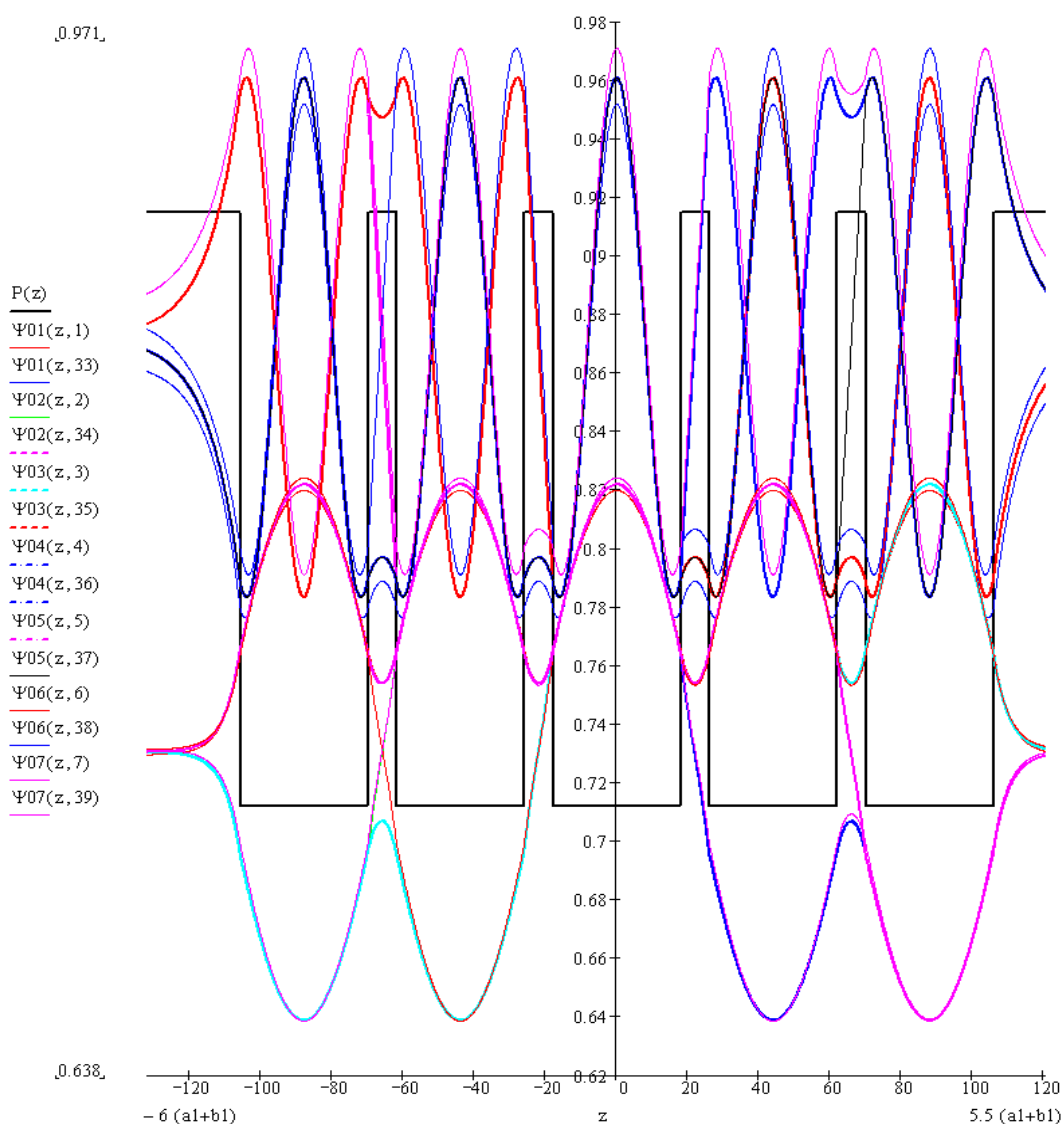


Рисунок 2.6 – Загальний вигляд хвильових функцій електронів в області квантового обмеження

Наявність в розглянутій наноструктурі великої кількості енергетичних рівнів електронів, що характеризуються однаковою парністю, в тому числі і вироджених, пов'язане з можливістю виникнення падаючих і відбитих хвиль ймовірності в бар'єрах кінцевої ширини, і пов'язаних з ним комбінацій енергетичних станів. Нерівномірність розподілу енергій носіїв по квантовій ямі пояснюється тим, що між енергетичними станами в квантово-обмеженому шарі GaAs і такими ж станами в «необмеженому» матеріалі (за бар'єром) можуть виникати ефекти тунелювання - проходження частинок під бар'єром без втрати енергії. Такі явища справляють безпосередній вплив на локалізацію частинок в області квантового обмеження, чим більше енергія носія, чим ближче носій до стану континууму тим менше він локалізується в ямі. Така поведінка частинок добре узгоджується з густиною розподілу ймовірності носіїв в області квантового обмеження, як показано на рис. 2.7.

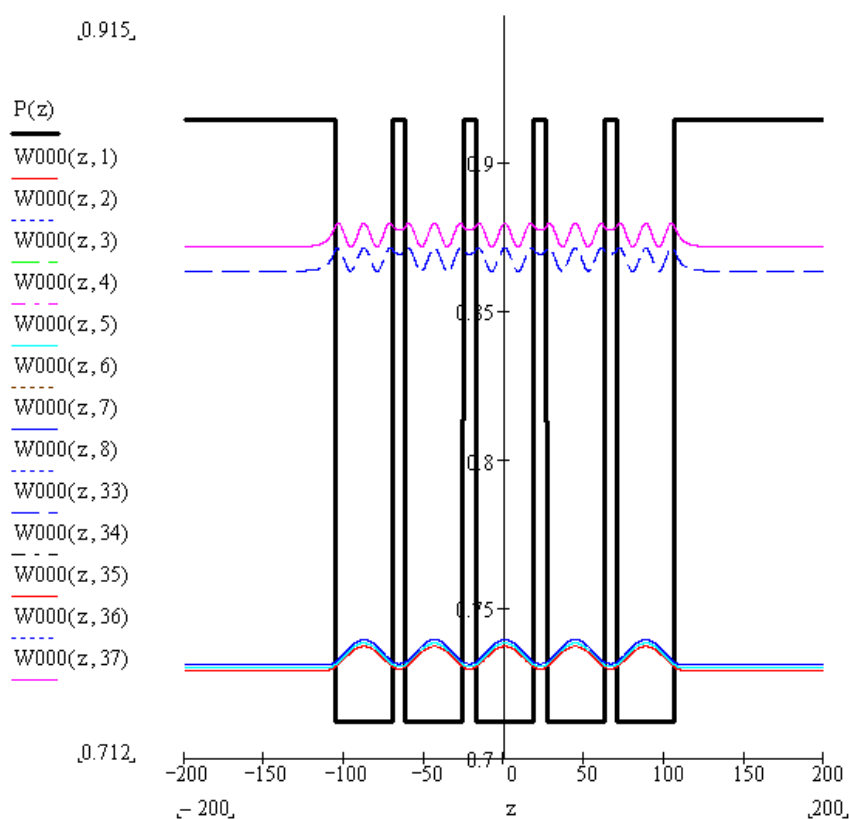


Рисунок 2.7 – Густина розподілу ймовірності електронів в зоні провідності в області квантового обмеження

На рис. 2.8 добре проглядається виродження енергетичних рівнів, другий і четвертий енергетичні рівні виродилися чотири рази, а третій – шість разів.

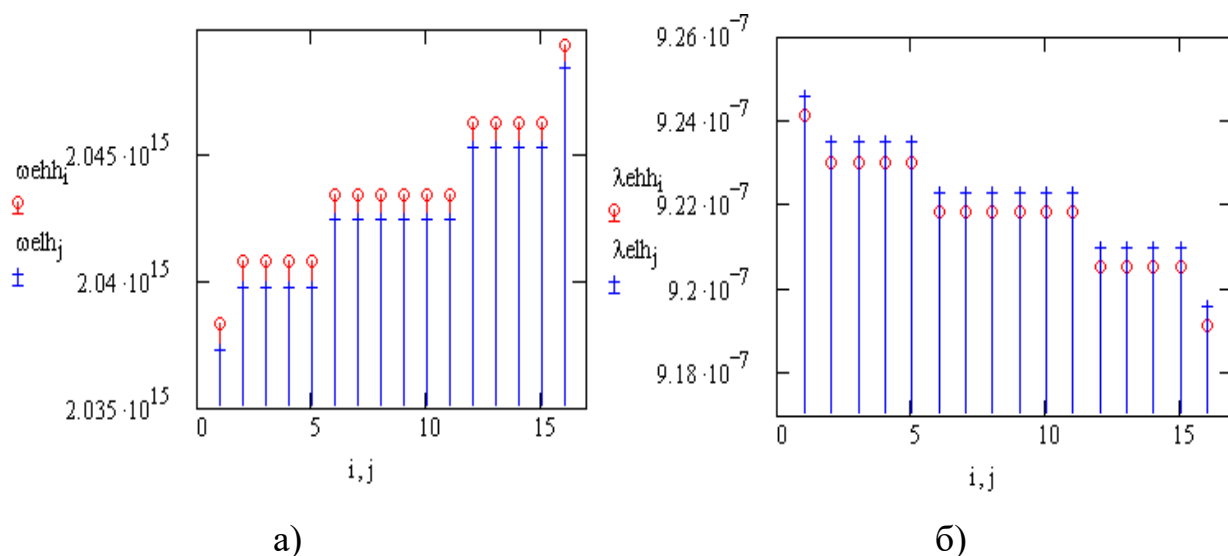


Рисунок 2.8 – Частоти (довжини хвиль) випромінювальних переходів між станами електрон-важка дірка і електрон-легка дірка

На рис. 2.9 показано розподіл носіїв по квантових ямах в стаціонарному стані. Слід зазначити, що за відсутності зовнішнього збурення потенціалу обмеження носії рівномірно розподілені по всіх квантово-розмірних шарах.

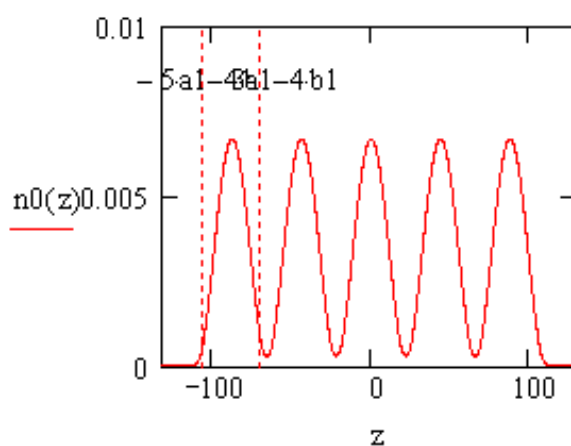


Рисунок 2.9 – Розподіл носіїв по квантово обмежених шарах у стаціонарному стані

Використання структур з кулонівською блокадою, подібних розглянутій в даній роботі структурі неможливо без легування даних структур за умовами технологічного циклу виготовлення конкретного приладу, в якому такі структури використовуються. Різниця типів і концентрацій легування конкретних шарів призводить до нерівномірного перерозподілу об'ємних зарядів іонів повністю іонізованих домішок. Для дослідження впливу зовнішнього електричного поля на енергетичний профіль досліджуваної структури, в даній атестаційній роботі була використана теорія малих збурень. Зміна енергетичного профілю структури і зміна координатного розподілу хвильових функцій електронів і густини розподілу вірогідностей знаходження частинок, розраховані в першому наближенні теорії малих збурень показані на рис. 2.10 і 2.11 відповідно.

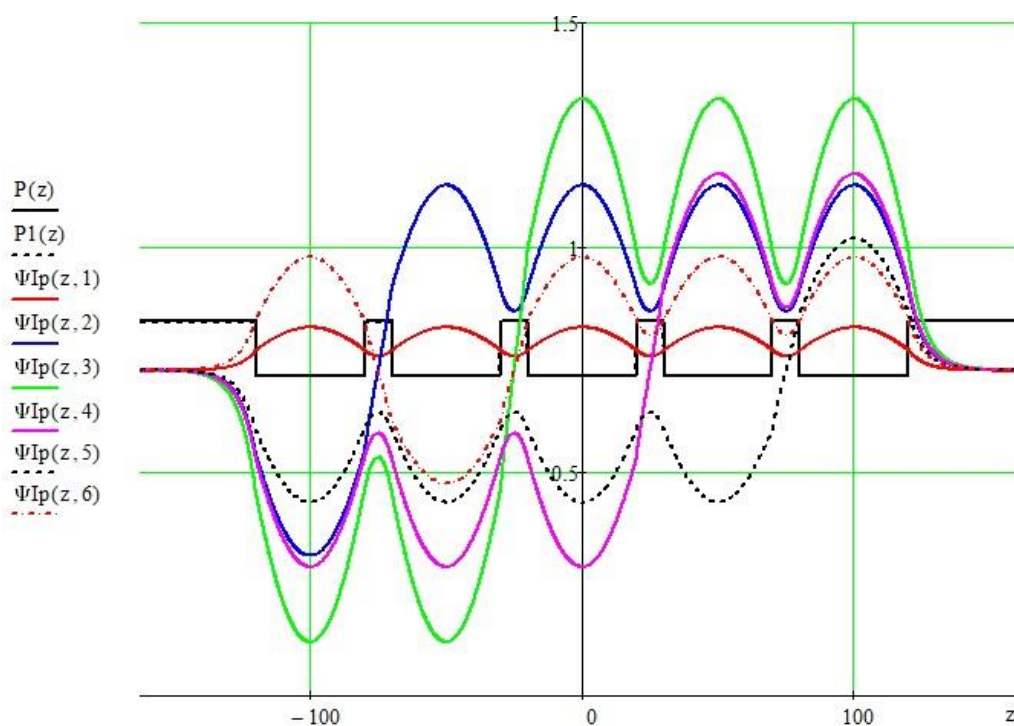


Рисунок 2.10 – Координатні залежності хвильових функцій електронів у області квантового обмеження, розраховані в першому наближенні теорії збурень

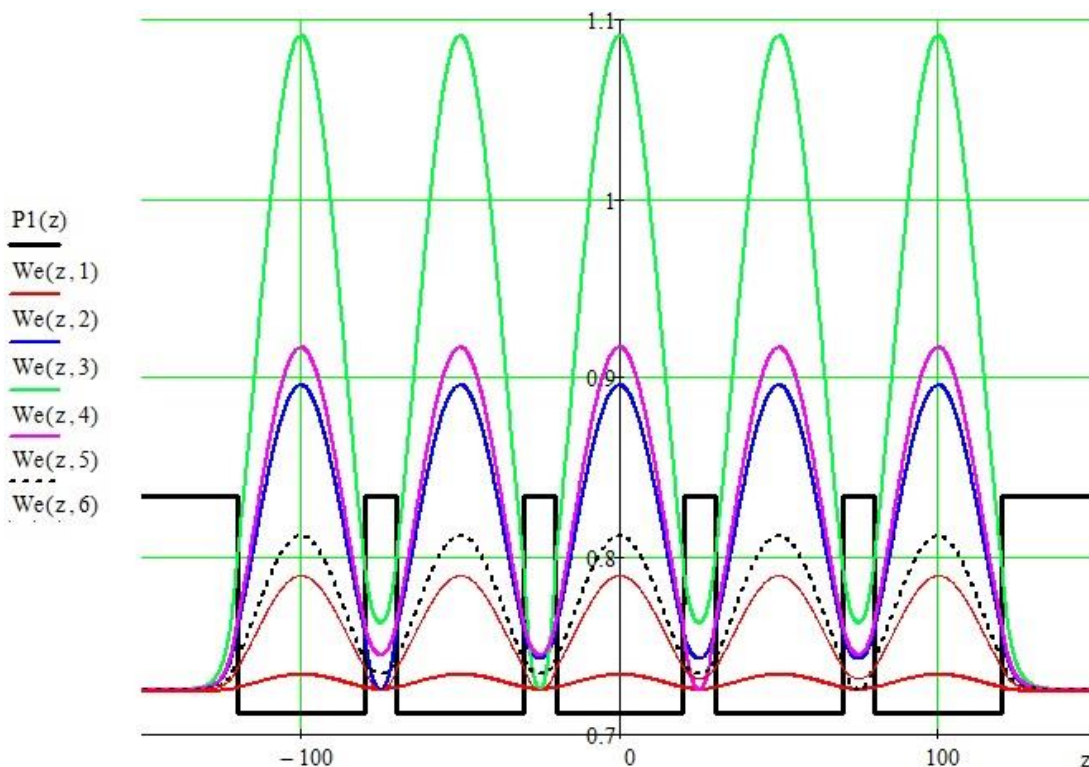


Рисунок 2.11 – Густина ймовірності знаходження електронів в зоні провідності квантово-обмеженого (вузькозонного) матеріалу

З аналізу результатів чисельного моделювання, представлених на рис. 2.10 і 2.11 можливо зробити висновок про те, що під дією зовнішнього сталого у часі електричного поля, хвильові функції частинок і квазічастинок змінюють свою парність, це в свою чергу призводить до того, що густини ймовірності розподілу часток по квантово-обмеженим шарам перерозподіляються. Зокрема частинки, відповідні «першому», «третьому», «п'ятому» і т.д. енергетичним рівням локалізуються в «непарних» квантовій ямі, а частинки відповідні «другому», «четвертому», «шостому» і т.д. енергетичним рівням локалізуються у «парних» квантових ямах. Подібний перерозподіл пояснюється характером зовнішнього впливу – напруга змінюється лінійно в межах активної області та є непарною функцією координати.

З аналізу даних, представлених на рис. 2.12 випливає, що під дією зовнішнього стаціонарного електричного поля в квантово-обмежених системах чітко спостерігається квантово-обмежений ефект Штарка, що виявляється в

розширенні енергетичного зазору між сусідніми станами частинок. На тлі ефекту мультиплікативності енергетичного стану, який відбувається внаслідок тунелювання частинок, що знаходяться на близьких енергетичних рівнях в сусідніх квантових ямах, відбувається значний зсув «першого» енергетичного стану по енергетичній шкалі «вниз» в заборонену зону. Приблизно на ту ж величину «другий» енергетичний рівень зміщується «вгору». У меншій мірі таке ж проблема може виникнути з «третьим» і «четвертим» енергетичними рівнями і іншими вище лежачими енергетичними рівнями частинок і квазічастинок. Зі збільшенням напруженості зовнішнього поля відбувається навіть явище «переплутування» енергетичних станів.

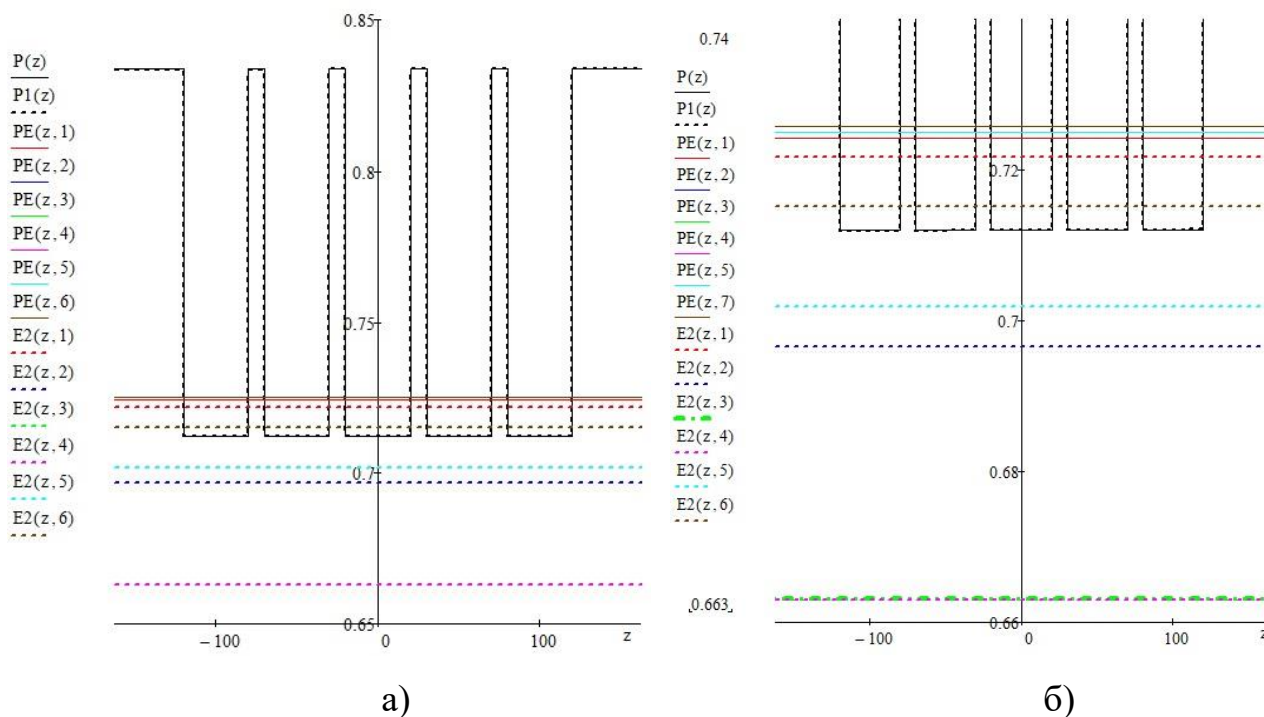


Рисунок 2.12 – Зміна власних значень енергії електронів під впливом зовнішнього електричного поля

На рис. 2.13 представлені в табличному вигляді, для наочності, власні значення енергій частинок в стаціонарному стані і під впливом зовнішнього поля. Добре видно, що відбулося не тільки зміщення рівнів по осі енергії, але і їх перемішування. Графічно це показано на рис. 2.14.

$E_{2e} =$		$E_{e1}^{(0)} =$	
	0		0
0	0	0	0
1	$9.664 \cdot 10^{-3}$	0.012	0.012
2	-0.015	0.013	0.013
3	-0.049	0.013	0.013
4	-0.049	0.013	0.013
5	-0.01	0.013	0.013
6	$3.191 \cdot 10^{-3}$	0.013	0.013
7	0.015	0.014	0.014
8	0.015	0.014	0.014
9	0.016	0.014	0.014
10	0.193	0.014	0.014
11	0.015	0.014	0.014
12	0.015	0.014	0.014
13	0.014	0.014	0.014
14	0.014	0.014	0.014
15	...	0.014	0.014
		15	...

Рисунок 2.13 – Порівняння власних значень енергії електронів в стаціонарному і в збуреному стані, розраховані у другому наближенні теорії малих збурень

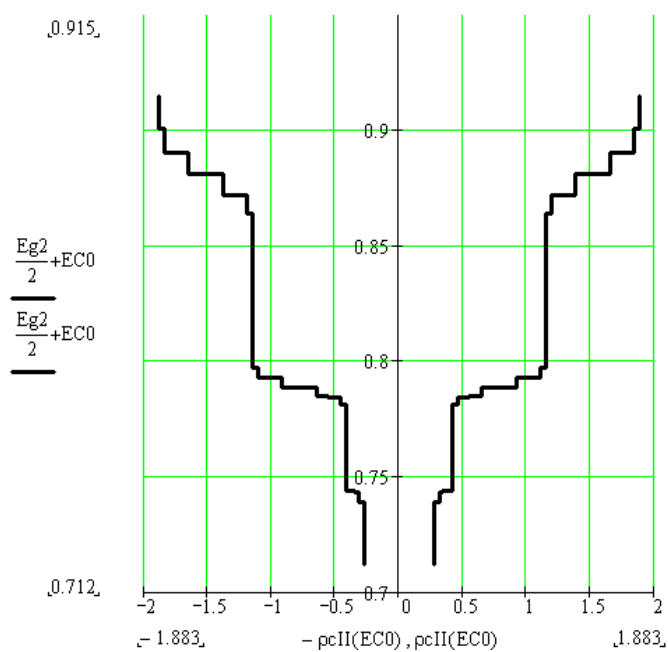


Рисунок 2.14 – Густина станів електронів в зоні провідності (друге наближення)

На рис. 2.15 – 2.19 представлені результати моделювання КРС в другому наближенні теорії збурень.

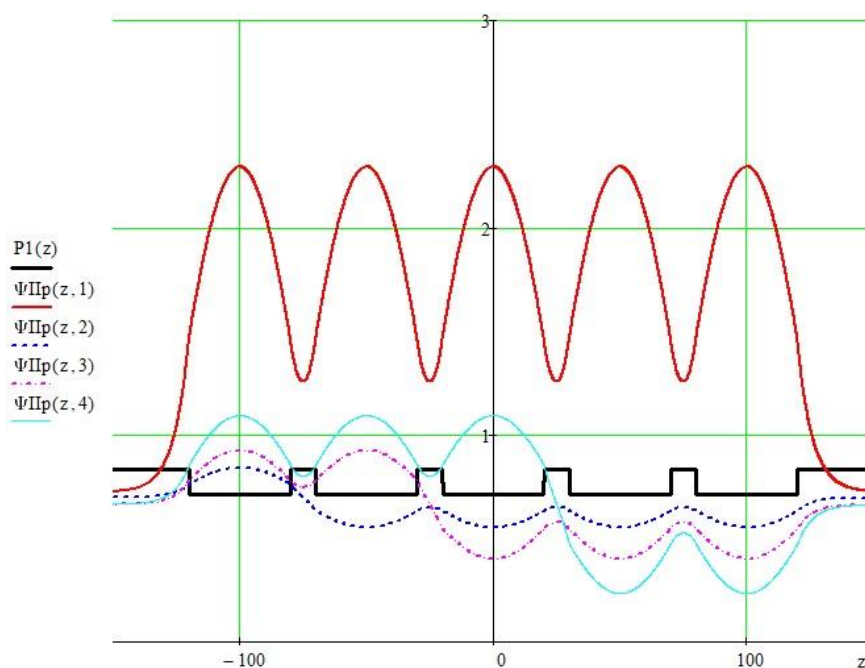


Рисунок 2.15 – Вигляд хвильових функцій електронів розраховані в другому наближенні теорії малих збурень

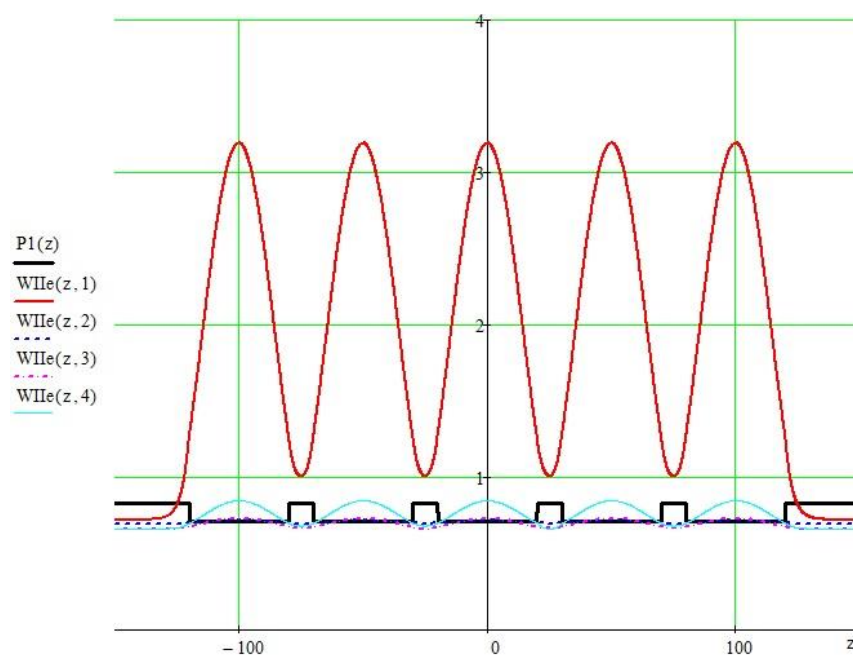


Рисунок 2.16 – Густина ймовірності знаходження електронів в зоні провідності квантово-обмеженого (вузькозонного) матеріалу

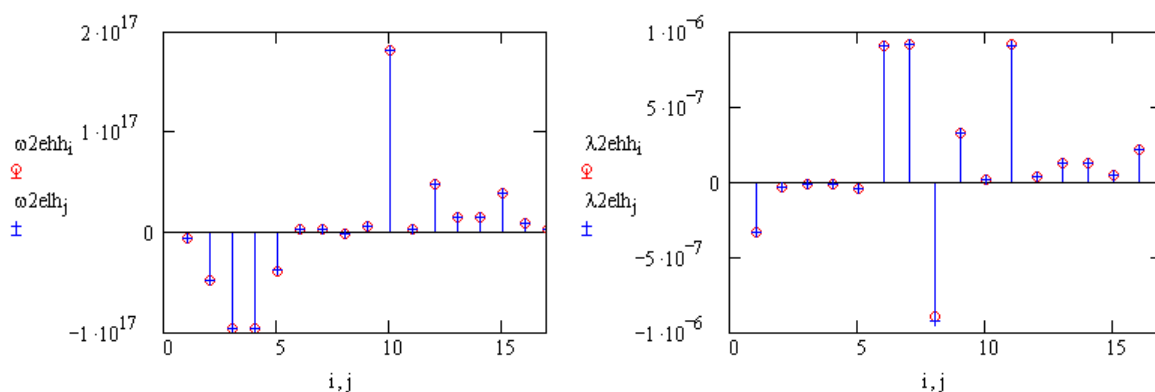


Рисунок 2.17 – Частоти (довжини хвиль) випромінювальних переходів між енергетичними станами електрон-важка дірка і електрон-легка дірка

На рис. 2.18 показано перерозподіл носіїв заряду у п'ятишаровій КРС під дією зовнішнього постійного в часі електричного поля.

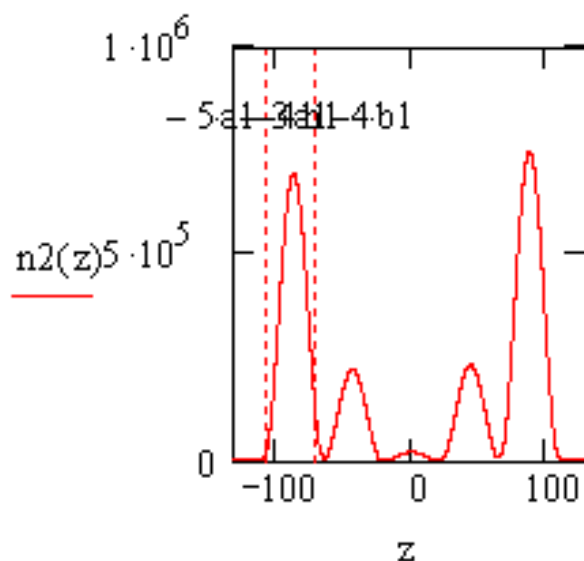


Рисунок 2.18 – Розподіл носіїв по квантово-обмежених шарах за наявності зовнішнього поля, розрахованих у другому наближенні теорії збурень

З аналізу отриманих результатів можна зробити наступний висновок: в багатошаровій КРС навіть невеликий вплив зовнішнього постійного в часі електричного поля призводить до сильної взаємодії частинок і квазічастинок, що відбивається в збільшенні амплітуд хвильових функцій. На тлі цього

збільшення амплітуд, потенціал бар'єрів стає помітним тільки на рисунку з логарифмічною шкалою. Імовірність взаємодії частинок різко зростає, що відбивається в збільшенні енергетичного відстані між рівнями.

Негативні значення частот і довжин хвиль на рис. 2.18 свідчать про те, що на цих частотах відбувається не генерація випромінювання, а поглинання енергії.

На рис. 2.19 наведені коефіцієнти оптичного підсилення для стаціонарного випадку і для випадку впливу зовнішнього обурює потенціалу.

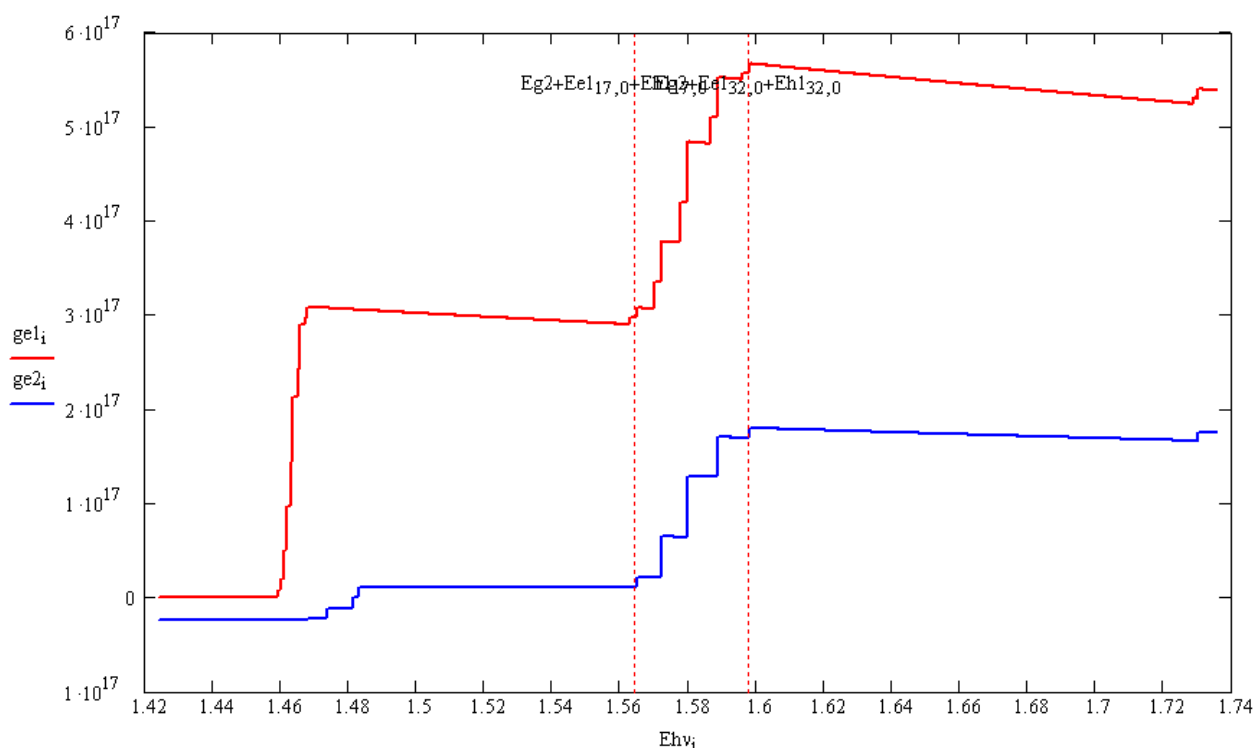


Рисунок 2.19 – Коефіцієнти оптичного підсилення в стаціонарному стані і при впливі зовнішнього електричного поля

З результатів моделювання, представлених на рис. 2.19 можна зробити наступний висновок: при додатку зовнішнього постійного в часі електричного поля відбувається зміщення коефіцієнта підсилення в більш короткохвильову область і зменшення підсилення в заданій смузі частот.

На рис. 2.20 – 2.25 показані результати моделювання п'ятишарової КРС для молярної частки алюмінію  $x = 0,3$ , яка знаходиться у стаціонарному стані.

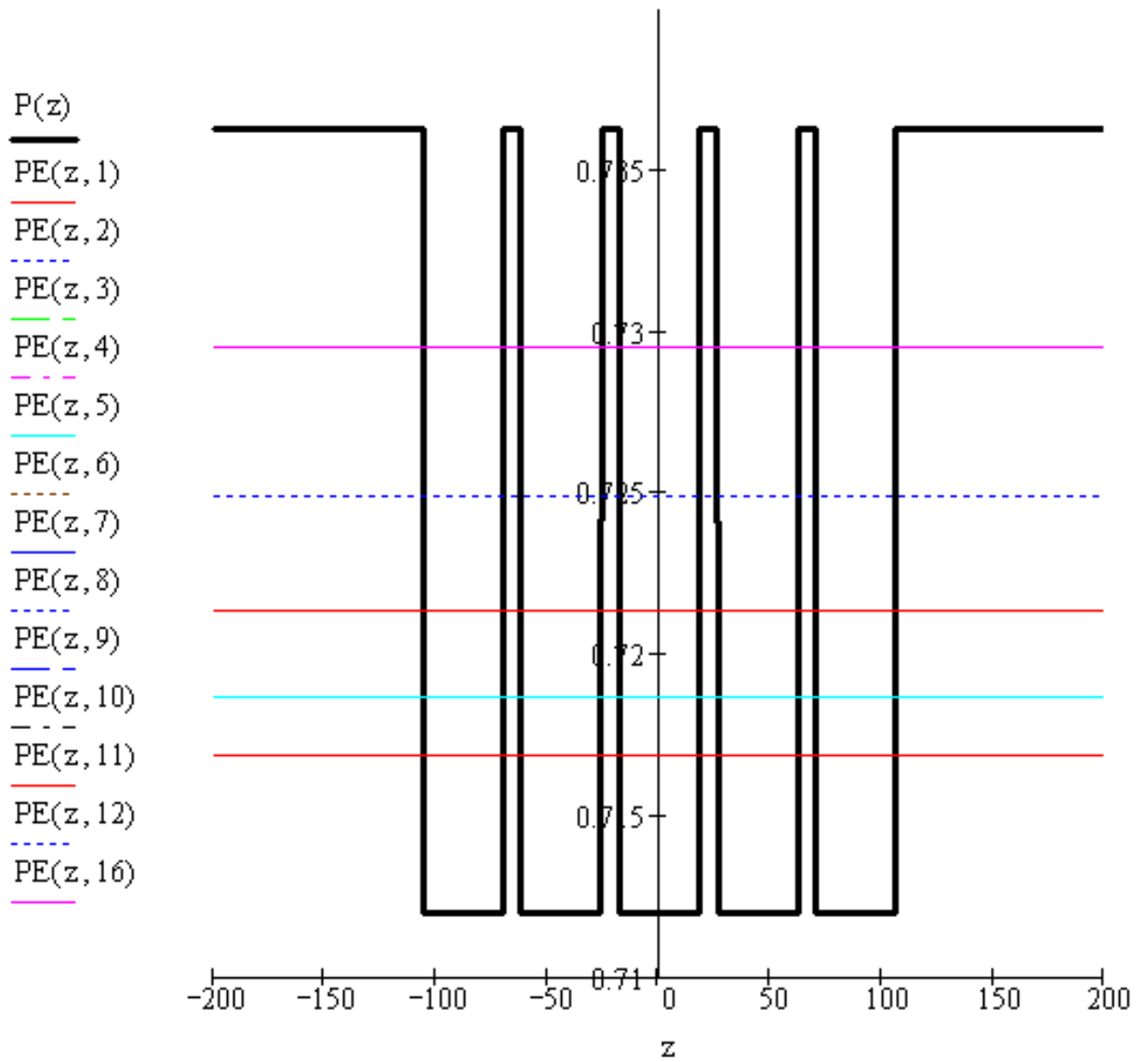


Рисунок 2.20 – Власні значення енергії електронів в зоні провідності ( $x = 0,3$ )

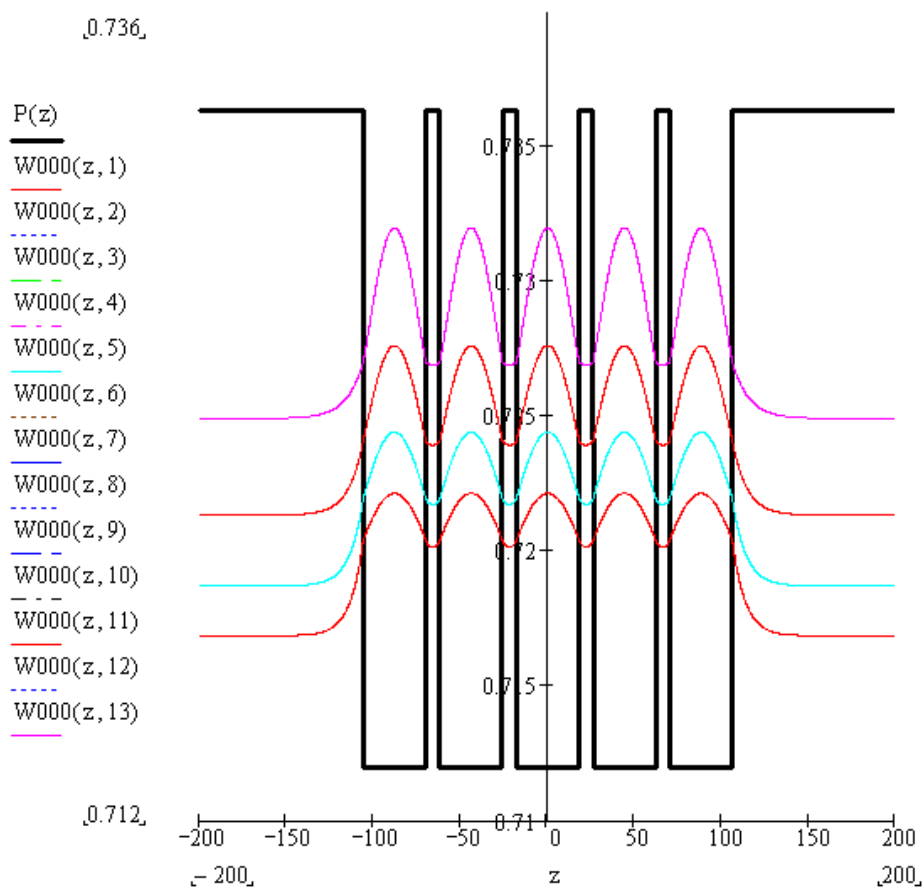


Рисунок 2.21 – Густини ймовірності знаходження електронів в зоні провідності квантово-обмеженого матеріалу при  $x = 0,3$

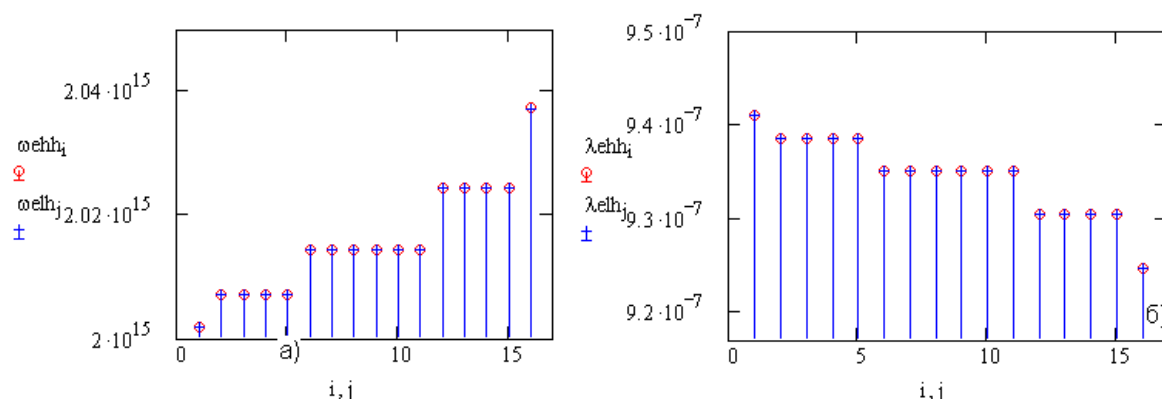


Рисунок 2.22 – Частоти (довжини хвиль) випромінювальних переходів між енергетичними станами електрон-важка дірка і електрон-легка дірка, при  $x = 0,3$

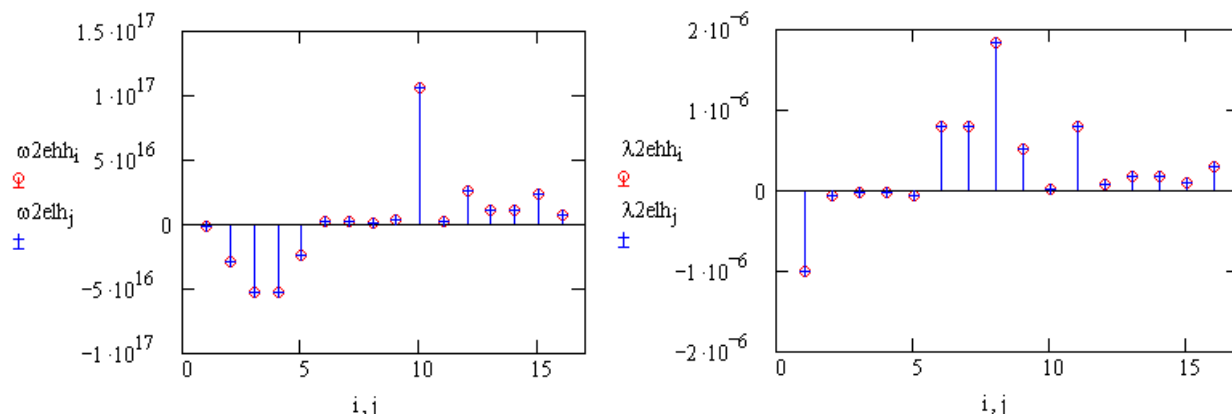


Рисунок 2.23 – Частоти (довжини хвиль) випромінювальних переходів між енергетичними станами електрон – важка дірка і електрон – легка дірка, під впливом зовнішнього поля при  $x = 0,3$

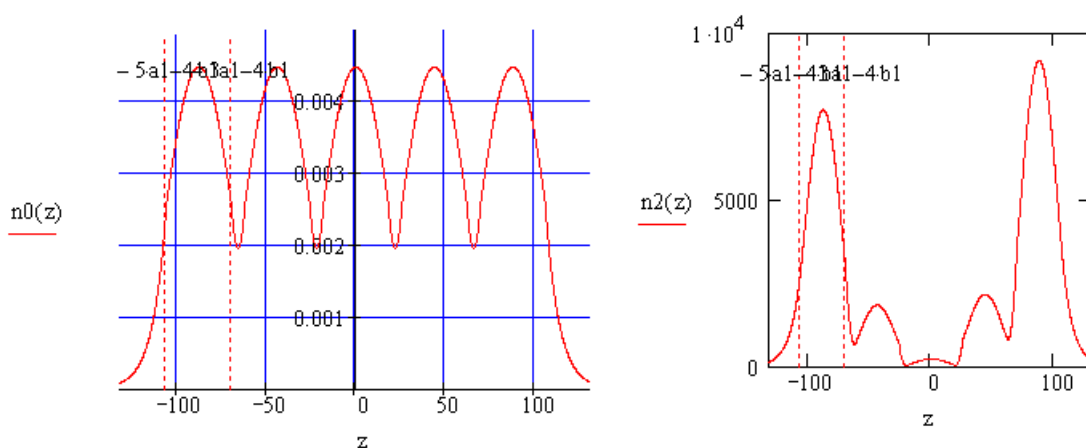


Рисунок 2.24 – Розподіл носіїв по квантово обмежених областях в стаціонарному стані і при наявності зовнішнього поля розрахований у другому наближенні теорії збурень ( $x = 0,3$ )

При зменшенні вмісту алюмінію в матеріалі бар'єрів спостерігається зменшення потенціалу обмеження. Це, у свою чергу, призводить до зменшення кількості власних значень енергії частинок і квазічастинок і енергетичних відстаней між ними, а також між невиродженими і виродженими рівнями. Зменшення кількості енергетичних рівнів частинок і квазічастинок звукує

спектр випромінюваних частот що підвищує монохроматичність випромінювання ИПЛ в цілому.

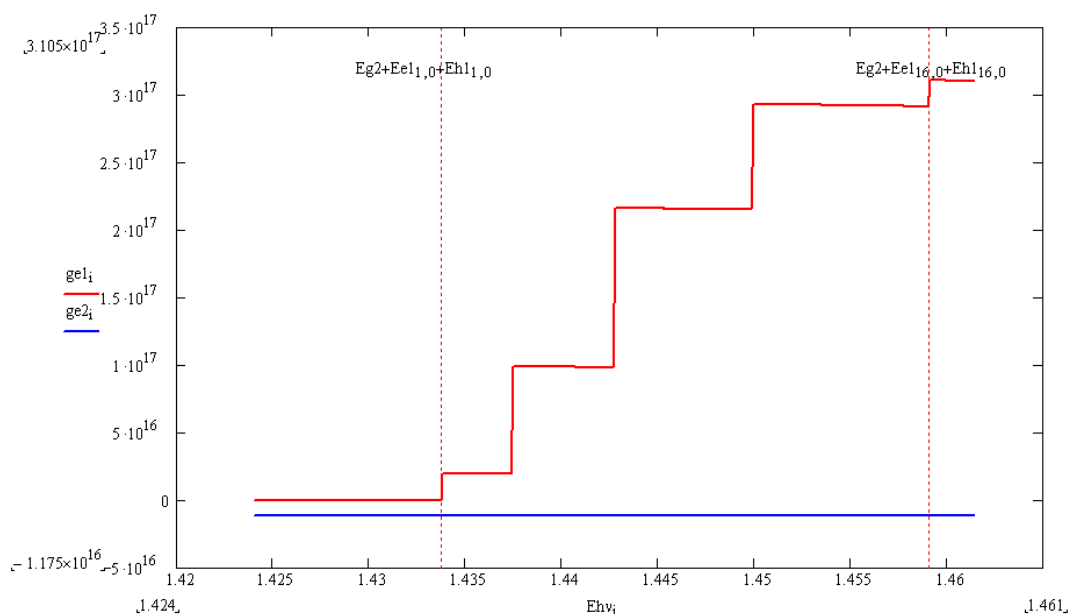


Рисунок 2.25 – Коефіцієнт оптичного підсилення в стаціонарному стані і при впливі зовнішнього електричного поля ( $x = 0,3$ )

Або вибірковості фотоприймача з такою структурою. На енергетичному спектрі коефіцієнта підсилення подібний процес буде виражатися появою широкої ступінчастої області, перша і остання «щабель» будуть відповідати переходам між невиродженими рівнями, друга і четверта – чотири рази виродженим рівням, третя – шестикратно виродженому рівню. Кількість «сходинок», таким чином, відповідає кількості квантово-обмежених областей (для даної роботи – п'ять), а ширина кожної «сходинки» пропорційна внеску, які вносять випромінювальні переходи між відповідними станами в загальний процес оптичного підсилення, і, відповідно пропорційна ступеню виродження.

## ВИСНОВКИ

З аналізу результатів моделювання енергетичних станів електронів, важких і легких дірок випливає, що власні значення енергії розподілені нерівномірно по глибині кантових ям багат шарової наноструктури, крім того, деякі стани у багат шаровій структурі – вироджені, тобто одному значенню енергії частинки відповідають кілька хвильових функцій.

Наявність в розгляданій наноструктурі великої кількості енергетичних рівнів частинок, що характеризуються однаковою парністю, в тому числі і вироджених, пов'язане з можливістю виникнення падаючих і відбитих хвиль ймовірності у бар'єрах скінченної ширини, і пов'язаних з ним комбінацій енергетичних станів носіїв.

Під дією зовнішнього стаціонарного електричного поля в квантово-обмежених матеріалах спостерігається квантово-обмежений ефект Штарка, що проявляється в розширенні енергетичного зазору між сусідніми станами частинок. На тлі ефекту збільшення енергетичних станів, який виникає внаслідок тунелювання носіїв, що знаходяться на близьких енергетичних рівнях в сусідніх квантових ямах. Разом зі збільшенням напруженості зовнішнього поля відбувається навіть явище «переплутування» енергетичних станів.

При додаванні зовнішнього сталого у часі електричного поля відбувається зміщення коефіцієнта підсилення в більш короткохвильову область і зменшення підсилення в заданій смузі частот.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников – Москва: Наука, 1977. 650 с.
2. Кейси Х. Лазеры на гетероструктурах. Москва: Мир, 1981. 374 с.
3. Елисеев П.Г. Введение в физику инжекционных лазеров. Москва: Наука, 1983. 295 с.
4. Ривлин Л.А. Динамика излучения полупроводниковых квантовых генераторов. Москва: Советское радио, 1976. 210 с.
5. Зи, С. Физика полупроводниковых приборов. Том 1. Москва: Мир, 1984. 350 с.
6. Пащенко А.Г. Квантовое ограничение частиц в наноструктуре с энергетическим профилем сложной формы. Харків. Радиотехника. Всеукр. міжвед. науч.-техн. сб. 2008. Вып. 154. С. 134 – 137.
7. Тсанг У., Ван дер Зил Дж., Лау К., Ярив А. Полупроводниковые инжекционные лазеры. Динамика, модуляция, спектры. / за ред. У. Тсанга Москва: Радио и связь, 1990. 251 с.
8. Усанов Д.А., Скрипаль Ал.В., Скрипаль Ан.В., Абрамов А.В. Компьютерное моделирование наноструктур: Учеб. пособие для студентов факультета nano- и биомедицинских технологий – Саратов, 2013. 100 с.
9. Пащенко А.Г., Ванцан В.М. Локализация носителей в многослойных наноструктурах, обусловленная интерференционной передислокацией волновых функций. Харків. Радиотехника. Всеукр. міжвед. науч.-техн. сб. 2011. Вып. 164. С. 133 - 138.
10. Грибковский, В.П. Полупроводниковые лазеры. Учеб. Пособие по спец. «Радиофизика и электроника» Мінськ. Университетское, 1988. 213 с.
11. Гауэр, Дж. Оптические системы связи. Москва: Радио и связь. 1989. – 504 с.

12. Пащенко О.Г., Галат О.Б., Бабиченко О.Ю. Напівпровідникові квантові генератори з наноструктурами. Навчальний посібник для студентів спеціальностей 171 Електроніка, 153 Мікро- та наносистемна техніка – Харків. ХНУРЕ, 2019. – 236 с.
13. Борисенко С.И. Физика полупроводниковых наноструктур: учебное пособие Томск, изд-во Томского политехнического университета, 2010. 115 с.
14. Такума, Х. Физика полупроводниковых лазеров. Москва: Мир, 1989. 310 с.