

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Електронної та біомедичної інженерії
(повна назва)

Кафедра Мікроелектроніки, електронних приладів та пристроїв
(повна назва)

АТЕСТАЦІЙНА РОБОТА

Пояснювальна записка

рівень вищої освіти другий (магістерський)

Формування енергетичних мінізон у багатошарових
наноструктурах
(тема)

Виконала:
студентка 2 курсу, групи МНПМ-18
Гулієва Е.Г.
(прізвище, ініціали)

Спеціальність 153 «Мікро- та наносистемна
техніка»

Тип програми освітньо-професійна

Освітня програма «Мікро- та наноелектронні
прилади і пристрої»

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

Допускається до захисту

Зав. кафедри

Бондаренко І.М.
(підпис) (прізвище, ініціали)

2019 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» _____

Тип програми _____ освітньо-професійна _____

Освітня програма _____ «Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої» _____

ЗАТВЕРДЖУЮ:
Зав. кафедри МЕЕПП

_____ І.М.Бондаренко

« _____ » _____ 2019р.

ЗАВДАННЯ НА АТЕСТАЦІЙНУ РОБОТУ

студентові _____ Гулієвій Еліні Гошгарівні _____
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Формування енергетичних мінізон у багатошарових наноструктурах

затверджена наказом по університету від 04 листопада 2019 р. № 1636 ст

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії 12 12 2019р.

3. Вихідні дані до роботи Тришарова квантова розмірна структура на основі GaAs/AlGaAs

– напівширина квантових обмежених шарів $a=10-40\text{Å}$

– молярна доля алюмінію у матеріалі бар'єра $x=0.1-0.6$

– напруженість зовнішнього поля 0.001 В/м

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі _____

– особливості енергетичного спектра електронів в системах низької розмірності;

– основні напівпровідникові квантово розмірні структури;

– енергетичний спектр;

– рух носіїв у багатошаровій періодичній наноструктурі.

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій (16 слайдів) комп'ютерна презентація 16 слайдів

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Пошук інформаційних джерел і аналіз	04.11.2019	
2	Підготовка першого розділу роботи	5.11-15.11	
3	Складання і опрацювання математичної моделі досліджуваних процесів	16.11-06.12	
4	Підготовка третього розділу роботи	06.12-12.12	
5	Подання роботи на кафедрі	12.12.2019	

Дата видачі завдання _____ 2019_р.

Студент _____ (підпис) Гулієва Е.Г.

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

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка містить: 37 с., 13 рис., 15 джерел, 2 додатки.

СТРУКТУРА КВАНТОВОРОЗМІРНА, ЕЛЕКТРОН, ВАЖКА ДІРКА, ЛЕГКА ДІРКА, СПЕКТР ЕНЕРГЕТИЧНИЙ, ФУНКЦІЯ ХВИЛЬОВА, БАР'ЄР ПОТЕНЦІЙНИЙ, ЯМА КВАНТОВА.

Об'єктом досліджень є багат шарова квантоворозмірна структура на основі GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

Метою даної дипломної роботи є розгляд енергетичних станів частинок та квазічастинок, які знаходяться в трьохшаровій КРС, яка складається з трьох квантово обмежених областей, побудованих на основі GaAs та розмежованих двома квантово – обмеженими бар'єрними шарами на основі Al_xGa_{1-x}As.

Методом рішення є аналітичний підхід до рішення рівняння Шредингера, тобто розкладення рішення за власними функціями.

В роботі розглянуті випадки коли трьохшарова КРС знаходиться в стаціонарному стані, і під дією зовнішнього сталого електричного поля.

Розроблена методика розрахунку власного значення енергії, хвильової функції та густини розподілу ймовірності частинок для трьохшарової КРС на основі GaAs/Al_xGa_{1-x}As з використанням математичного пакету Mathcad 2000 pro.

ABSTRACT

Master graduation work: 37 p., 13 fig., 15 sources, 2 applications.

QUANTUM STRUCTURE, ELECTRON, MINIZONE, SUPERLATTICE, ENERGY SPECTRUM, WAVE FUNCTION, POTENTIAL BARRIER, QUANTUM WELL.

Object of research is a multilayer quantum structure based on GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Purpose of this master work is to consider the energy states of particles and quasiparticles, which are three-layered quantum-dimensional structure, consisting of three quantum confined areas, based on GaAs and differentiated two quantum – limited barrier layers based $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. The method of solution is analytical approach to solving Schrödinger equation, means the decomposition solution on its own functions.

In this work considered when the three-layered quantum-dimensional structure is in steady state, and stable under external electric field.

The method of calculating the value of its own energy, wave function and probability density distribution of particles from three-layered quantum-dimensional structure GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ using mathematical package Mathcad 2000 pro.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ	7
ВСТУП.....	8
1 ОСОБЛИВОСТІ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНІВ В СИСТЕМАХ НИЗЬКОЇ РОЗМІРНОСТІ	10
1.1 Розмірне квантування при надбар'єрному прольоті електронів.....	10
1.2 Квантові стани в системах низької розмірності	12
2 ОСНОВНІ НАПІВПРОВІДНИКОВІ КВАНТОВО РОЗМІРНІ СТРУКТУРИ. 14	
2.1 Матеріали напівпровідникових наноструктур.....	14
2.2 Напівпровідникові і напівметалеві плівки	15
2.3 Гетероструктури	15
2.4 Надгратки.....	17
2.5 Періодична наноструктура 1-го типу	19
3 ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР	22
3.1 Енергетичний спектр ізольованих наноструктур	22
3.2 Одномірні надгратки.....	22
4 РУХ НОСІЇВ У БАГАТОШАРОВІЙ ПЕРІОДИЧНІЙ НАНОСТРУКТУРІ	26
4.1 Постановка завдання	26
4.2 Визначення енергетичного стану частинок і квазічастинок в тришаровій наноструктурі	28
4.3 Вплив зовнішнього постійного електричного поля на енергетичний стан часток в тришаровій КРЗ	33
ВИСНОВКИ	35
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	36
Додаток А. Відомість атестаційної магістерської роботи.....	38
Додаток Б. Презентація	39

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

КЯ – квантова яма;

КРС – квантова розмірна структура;

КЕХ – квантовий ефект Холла;

НГ – надгратка.

ВСТУП

Мікроелектроніка як науково-технічний напрямок виникла в середині ХХ століття і до теперішнього часу зробила виключно великий вплив на всі галузі науки і техніки, освоєння космосу, інформаційні технології, якість життя і прогрес усього людства. В результаті безперервного зменшення розмірів виробів мікроелектроніки і їх елементів були виготовлені транзистори величиною в кілька десятих часток мікрона з довжиною каналу МДП-транзистора до 0,1 мкм і навіть менш.

Фізика низькорозмірних структур найактуальніша і найбільш динамічно розвиваюча область сучасної фізики твердого тіла. Інтерес до цієї області пов'язаний як з принципово новими фундаментальними науковими проблемами і фізичними явищами, так і з перспективами створення на основі вже відкритих явищ абсолютно нових квантових пристроїв і систем з широкими функціональними можливостями для опто- та наноелектроніки, вимірювальної техніки, інформаційних технологій нового покоління.

Результатом досліджень низькорозмірних систем стало відкриття принципово нових, а тепер уже широко відомих явищ, таких як цілочисельний і дробовий й квантовий ефект Холла (КЕХ) в двовимірному електронному газі, вігнеровская кристалізація квазидвомерних електронів і дірок, виявлення нових композитних квазичастиц і електронних збуджень з дробовими зарядами,

Перший принцип фізики нанопристроїв полягає в тому, що на нього сильно впливають квантові ефекти. Тут потрібно розібратися з різноманітними ефектами, які стають досить важливими, такими як квантування електронної щільності станів та значення, яке це має для електронних властивостей наноструктур. Прямим результатом цього ефекту квантування є результуюче квантування провідності через наноструктуру. Ці два ефекти йдуть рука об руку, забезпечуючи одне з найцікавіших спостережень у наноструктурах –

наявність специфічних режимів розповсюдження, подібно до мікрохвильового хвилеводу. Дійсно, саме хвилеподібна природа електронів спостерігається в цих експериментах. Також із цією ж ідеєю наявність квантових інтерференцій є ще одним головним спостереженням у наноструктурах. Тобто хвиля може поширюватися по парі траєкторій, подібно до експерименту з двома щілинами, і отримане хвилеве втручання чітко спостерігається в експериментальних дослідженнях. Тунелювання, яке може виникнути внаслідок хвильових властивостей електронів, також легко спостерігається і призвело до ряду цікавих пристроїв.

1 ОСОБЛИВОСТІ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНІВ В СИСТЕМАХ НИЗЬКОЇ РОЗМІРНОСТІ

1.1 Розмірне квантування при надбар'єрному прольоті електронів

Надбар'єрне проходження електронів може служити одним з найпростіших прикладів квантових розмірних ефектів. Останні проявляються в цьому випадку в квазіперіодичній осциляції коефіцієнта проходження електронів при зміні поперечної складової їх енергії ε_{\perp} .

Для прямокутного бар'єру висотою $V_{\perp} < \varepsilon_{\perp}$ (рис. 1.1, а) період осциляцій відповідає резонансним рівням.

$$a_n b = n\pi \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (1.1)$$

при яких товщина бар'єру b дорівнює цілому числу півхвиль де Бройля для електрона з енергією

$$\Delta\varepsilon_n = \varepsilon_{\perp, n} - V_{\perp} > 0, \quad (1.2)$$

і хвильовим вектором

$$a_n = \frac{2\pi}{\Lambda_n} = \frac{1}{\hbar} (2m_n^* \Delta\varepsilon_n)^{1/2}, \quad (1.3)$$

а коефіцієнт проходження електронів за відсутності розсіювання в кристалі обертається в одиницю:

$$|T_t|^2 = \left[\frac{1}{4} \frac{\sin^2 \alpha b}{\frac{\varepsilon_{\perp}}{V_{\perp}} \left(\frac{\varepsilon_{\perp}}{V_{\perp}} - 1 \right)} \right]^{-1}. \quad (1.4)$$

З огляду на (1.3), резонансну умову (1.1) можна записати у вигляді:

$$\frac{\varepsilon_{\perp}}{V_{\perp}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n^* b V_{\perp}} n^2 = \frac{V_0}{V_{\perp}} n^2 \text{ або } \frac{\Delta \varepsilon_n}{V_0} = n^2, \quad (1.5)$$

де
$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n^* b^2}, \quad (1.6)$$

дорівнює енергії нижнього резонансного рівня електрона, локалізованого всередині потенційної ями шириною b з нескінченно високими стінками. Таким чином, коефіцієнт проходження обертається в одиницю при співпадінні значення енергії електрона з енергією n -го рівня такої ями.

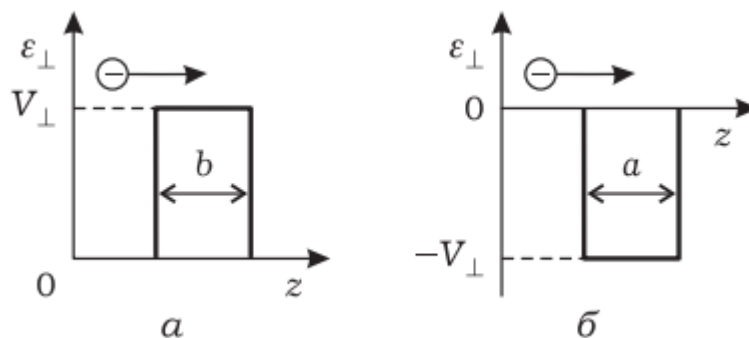


Рисунок 1.1 – Проходження електрона над потенційним бар'єром (а) і ямою (б)

Аналогічна ситуація має місце при проходженні електронів над потенційною ямою (рис. 1.1, б). Коефіцієнт проходження в цьому випадку описується формулами (1.2) – (1.4) з заміною в них V_{\perp} на $-V_{\perp}$ і осцилює збільшенням ε_{\perp} .

В обох випадках періодичний характер зміни коефіцієнта проходження є результатом інтерференції електронних хвиль, відбитих від стрибків потенціалу на кордонах бар'єру або ями.

У напівпровідникових структурах спостерігати і використовувати на практиці квантові осциляції ймовірності надбар'єрного проходження носіїв заряду важко, оскільки амплітуда осциляцій швидко падає зі збільшенням енергії електронів, а теплової розкид їх енергій заміщує відповідні осциляції на вольт-амперній характеристиці структури.

За відсутності розсіювання електронів і ідеальної однорідності структури помітні аномалії (ділянки з ОДП) на вольтамперній характеристиці структури AlGaAs – Ga As можна очікувати лише для дуже тонких і високих бар'єрів ($b \leq 5 \text{ нм}, V_{\perp} > 0,5 \text{ eV}$)[1-2].

1.2 Квантові стани в системах низької розмірності

Як було зазначено вище, в шаруватих гетероструктурах, якщо товщина шарів досить мала, рух електронів, перпендикулярний площині гетеропереходу, квантується, оскільки в квантових ямах, утворених вузькозонними напівпровідниками, енергетичний спектр дискретний:

$$\varepsilon_n - \varepsilon_c = \frac{\pi^2 n^2}{2m_n a^2}, \quad (1.7)$$

де n – квантове число,

a – ширина ями.

В напрямках, паралельних площинах гетеропереходу, хвильову функцію електрона можна представити у вигляді двовимірної Блохівської функції, а співвідношення, що зв'язує енергію електрона з хвильовим вектором, має вигляд:

$$\varepsilon - \varepsilon_c = \frac{\hbar^2}{2m_n} (k_x^2 + k_y^2). \quad (1.8)$$

Таким чином, кожен рівень, який визначається рівнянням (1.7), відповідає цілій енергетичній підзоні.

Щільність станів у кожній підзоні можна визначити шляхом підрахунку числа станів з хвильовими векторами, що лежать в інтервалі $(k, k + dk)$. Відповідна площа в k -просторі дорівнює $2\pi k dk$. Шукане число станів у зразку одиничних розмірів дорівнює:

$$dN = \frac{4\pi k dk}{(2\pi)^2}. \quad (1.9)$$

З урахуванням співвідношення (1.8) маємо: $dN = D_g d\varepsilon$,

де D_g - щільність станів в одній підзоні, що визначається співвідношенням:

$$D_g = \frac{m_n}{\pi \hbar^2}.$$

Стани першої (нижньої) підзони перекриваються станами другої підзони для енергій, більших, ніж енергія другого енергетичного рівня і так далі. Таким чином, повна щільність станів $g(\varepsilon)$ в двовимірній квантовій структурі має ступінчастий вигляд (рис. 2.1, б).

На основі багат шарових структур з квантовими ямами можливе створення надграток, в яких на періодичний потенціал кристалічної решітки напівпровідника накладається додаткова просторова модуляція потенційної енергії електрона – потенціал надгратки. Періодичність надгратки призводить до зняття виродження квантових рівнів окремих ям – утворюються міні-зони (валентні і провідності) [5].

2 ОСНОВНІ НАПІВПРОВІДНИКОВІ КВАНТОВО РОЗМІРНІ СТРУКТУРИ

2.1 Матеріали напівпровідникових наноструктур

Надгратка складається з тонких шарів двох напівпровідників, що повторюються в одному напрямку. Період по товщині 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 в просторі хвильового вектору і енергетичні підзони. В цьому відношенні надгратку можна розглядати як синтезований напівпровідник, який існує в природі, який виявляє незвичайні електронні та оптичні властивості.

Можна розрізняти два типи таких «штучних» надграток. Це композиційні надгратки, або надгратки з гетероструктурами, що складаються з періодичної послідовності двох напівпровідників різного хімічного складу, і леговані надгратки, що представляють собою послідовність шарів n - і p -типу з можливими бездомішковими шарами між ними ($nipi$ -кристали), вирощених в гомогенному масивному напівпровіднику.

Потенціал надгратки створюється в композиційних надрешітках за рахунок періодичного зміни ширини енергії забороненої зони в напрямку росту кристалу; в $nipi$ -кристалах він обумовлений електростатичним потенціалом іонізованих домішок, який може бути частково компенсований рухливими електронами і дірками, що знаходяться в шарах n - і p -типу відповідно.

Що стосується вимог до двох напівпровідників, з яких складається наноструктура, то можна відзначити головне, це те, що бажано підбирати пари з хорошим узгодженням решіток на гетерограницях, щоб уникнути дефектів і

напруження на гранях. Іншими словами, має бути схожість кристалічних решіток двох напівпровідників [2].

2.2 Напівпровідникові і напівметалеві плівки

Найбільш очевидним прикладом структур з двовимірним електронним газом є тонкі напівпровідникові і напівметалеві плівки. Одновимірна прямокутна потенційна яма в цих структурах виникає за рахунок стрибка потенціалу на кордоні плівки з вакуумом і має місце як для електронів, так і для дірок. Енергія рівнів розмірного квантування визначається товщиною плівки, а концентрація носіїв заряду в ній рівнем легування. Історично квантові розмірні ефекти вперше спостерігалися в провідності напівметалевих плівок Ві [2]. Плівки, які мають необхідну товщину, високу рухливість і якісна поверхня досить легко виходять методом вакуумного випаровування [6]. Однак суттєвим недоліком цих плівок з точки зору прояви квантових розмірних ефектів є наявність високої щільності поверхневих станів, що грають роль розсіюючих центрів. При цьому довжина вільного пробігу плівки стає рівною її товщині.

2.3 Гетероструктури

Найбільш чітко ефекти розмірного квантування проявляються в гетероструктурах – контактах між напівпровідниками з різною шириною забороненої зони, отриманих за допомогою молекулярно-променевої епітаксії [4]. На такому контакті краю енергетичних зон сприймають скачки, які відіграють роль потенційних бар'єрів - стінок квантової ями для носіїв заряду. На рис. 2.1 [1]. наведена типова зонна діаграма одиночного гетеропереходу між напівпровідниками n і p типу, подібна до діаграмою МДП-структури. Так само як і там в вузькозонних напівпровідниках поблизу зони розділу може утворюватися інверсійний шар, який грає роль потенційно ями для електронів, в якій існують рівні розмірного квантування.

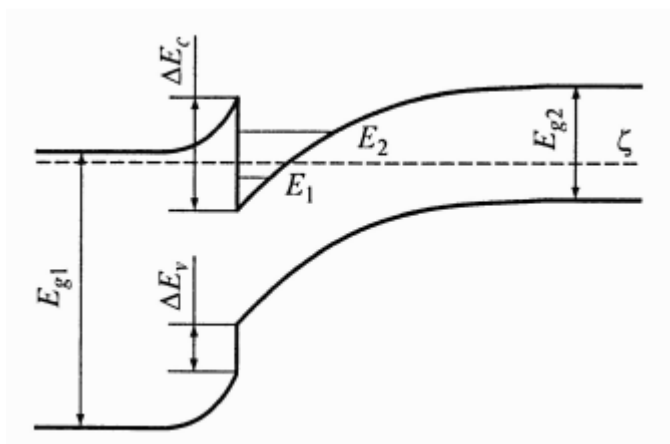


Рисунок 2.1 – Зонна діаграма одиночного гетеропереходу

Найважливішою перевагою гетеропереходу є висока якість гетеромежі, яка можна добитися вибором в якості компонент гетеропари речовин з хорошим сумісністю постійних решіток. Прикладом такої гетеропари є вузькозонний GaAs і широкозонний твердий розчин $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

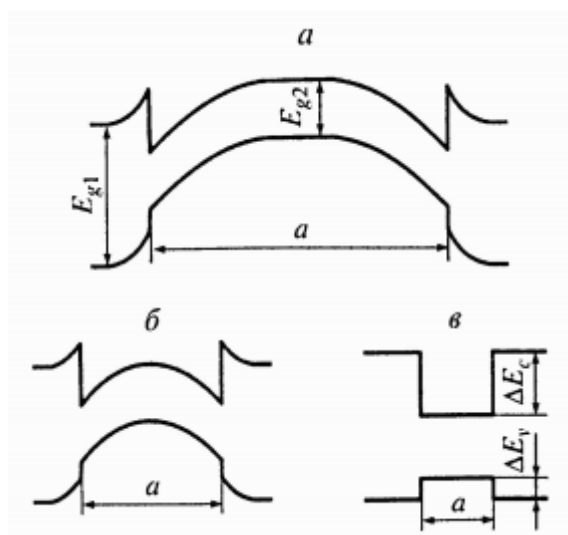


Рисунок 2.2 – Зонна діаграма подвійної гетероструктури при різних товщині вузькозонного шару

У гетероструктурах з цими напівпровідниками було отримано рекордне значення рухливості електронів, перевершує $10^7 \text{ см}^2 / (\text{В} \cdot \text{с})$, тоді як для кращих Si-МДП-структур $\mu \approx 5 \cdot 10^4 \text{ см}^2 / (\text{В} \cdot \text{с})$ [1].

В гетероструктурі на рис. 2.1. потенційна яма для електронів утворена з одного боку розривом зони провідності, а з іншого боку електростатичним полем переходу. На базі одиночної можна створити подвійну гетероструктуру $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs} / \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, в якій товщина вузькозонного шару a значно менше довжини екранування електростатичного потенціалу. При цьому виходить гетероструктура, яка є аналогом тонкої плівки (рис. 2.2.).

2.4 Надгратки

Штучна структура, що складається із сукупності квантових об'єктів – квантових ям, ниток, точок, між якими можливе перенесення носіїв заряду, називається надграткою (НГ). Існують періодичні надгратки, в яких квантові об'єкти чергуються періодично, неперіодичні надгратки і квазіперіодичні. Отже, можна говорити про НГ з КЯ, КН і КТ. Перенесення носіїв заряду в НГ між окремими квантовими об'єктами називається вертикальним на відміну від перенесення в ізольованих КЯ і КН, який називається планарним. У зв'язку з цим НГ називають низькорозмірними структурами з вертикальним перенесенням. Якщо в даних структурах вертикальне перенесення між квантовими об'єктами неможливе, їх називають структурами з безліччю ізольованих КЯ, КН, КТ. Властивості таких структур, як правило, збігається з властивостями окремих квантових об'єктів, оскільки вклади від всіх них просто підсумовуються.

Найбільш вивченими до теперішнього часу є періодичні надгратки з КЯ [8]. До них відносяться напівпровідникові композиційні та леговані НГ, НГ типу напівметал-напівпровідник, НГ на основі кремнію і МДП структур [11]. Всі решітки діляться на дві великі групи контрваріантна і коваріантні. Контрваріантними або першого типу називаються НГ в яких КЯ для електронів і

дірок на відміну від коваріантних НГ знаходяться в одному і тому ж місці (шарі), тобто носії заряду в них просторово не розділені.

Наявність вертикального перенесення призводить до того, що НГ з КЯ займають перехідне значення між двох і тривимірними електронними системами.

Композиційними НГ називаються структури з періодично повторюваними шарами різних напівпровідників, тобто решітки на основі гетероструктур. До них відносяться ізоперіодичні, з напруженими шарами і політипні НГ (рис. 2.3) [3].

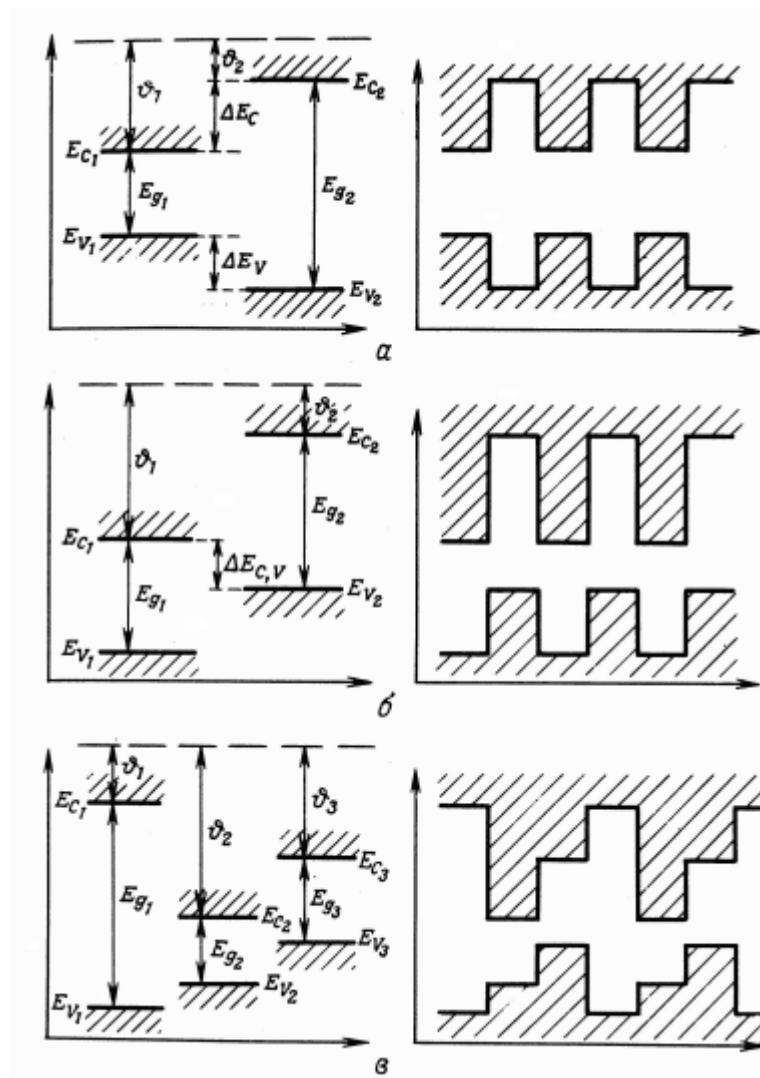


Рисунок 2.3 – Розташування країв зони провідності і валентної зони

На рис. 2.3 зображено розташування країв зони провідності і валентної зони щодо вакуумного рівня (штрихова лінія) в окремих неконтактуючих речовинах (ліворуч) і в композиційних надрешітках різних типів (праворуч):

а – надгратка типу I (контрваріантна);

б – надгратка типу II (коваріантна);

в – політипна надгратка.

По осі абсцис просторова координата, по осі ординат – енергія [10].

Ізоперіодичними композиційними називаються НГ, в яких використовуються напівпровідники з однаковим або близьким сталим кристалічної решітки. При цій умові гетерограниця становиться досконалою – без утворення дефектів невідповідності, що необхідно для прояву квантово-розмірних ефектів. Найбільш вивченими ґратками такого типу є контрваріантні НГ типу $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ при значенні параметра сплаву в твердому розтворі $x < 0.35$. Зонна діаграма цієї НГ представлена на рис. 2.3 а.

Наявність КЯ для електронів і дірок в одному і тому ж шарі вузькозонного напівпровідника $GaAs$ пов'язане з тим, що розриви дна зони провідності і вершини валентної зони на гетерограниці мають різний знак [4].

2.5 Періодична наноструктура 1-го типу

Перша композиційна надгратка першого типу була вирошена в системі $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. На рис. 2.4 показана послідовність шарів в такій надгратці. Розриви зон на гетерограниці служать потенційними бар'єрами для електронів і дірок і тим самим створюють періодичний надгратки потенціал в зоні провідності і у валентній зоні. Характерною рисою такої надгратки є те, що вузькозонний шар, затиснутий між двома ширококутними напівпровідниками, утворює дві прямокутні квантові ями – одну для електронів і одну для дірок. Глибини цих потенційних ям залежать від того, яка частина різниці ширини забороненої зони припадає на розрив в зоні провідності, а яка – на розрив в валентній зоні.

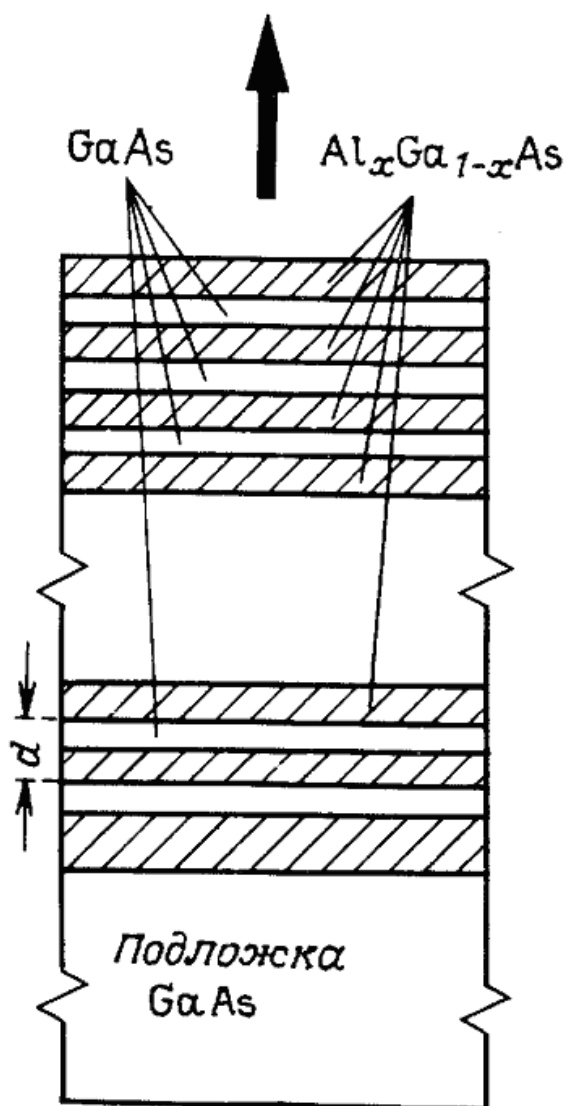


Рисунок 2.4 – Схема розташування послідовності шарів у надгратці

Результати перших експериментальних досліджень різних ефектів в прямокутних квантових ямах $GaAs$ узгоджуються зі значеннями $\Delta E_{\bar{N}} = (0,85 \pm 0,03)\Delta E_g$ і $\Delta E_V = (0,15 \pm 0,03)\Delta E_g$ [10]. Але дослідження параболічних квантових ям, вирощених в системі $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, привели до висновку про те, що розрив ΔE_g ділиться майже порівну між зоною провідності і валентною зоною. Пояснення цього протиріччя в тому, що експериментальні дані як для прямокутних, так і для параболічних квантових ям на основі $GaAs$ можна узгодити, якщо припустити, що розрив в зоні провідності $\Delta E_{\bar{N}} = 0,57\Delta E_g$

($\Delta E_V = 0,43\Delta E_g$), а носії в квантових ямах характеризуються ефективними масами:

$$-m_e^* = 0,0665m_0 \text{ для електронів,}$$

$$-m_{hh}^* = 0,34m_0 \text{ для важких дірок,}$$

$$-m_{lh}^* = 0,094m_0 \text{ для легких дірок.}$$

Згідно з іншими експериментальним результатам, найбільш правдоподібні значення розривів зон в гетеропереході GaAs/Al_xGa_{1-x}As складають $\Delta E_{\bar{N}} = 0,60\Delta E_g$ і $\Delta E_V = 0,40\Delta E_g$ незалежно від молярної частки Al в потрібному з'єднанні [1].

3 ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР

3.1 Енергетичний спектр ізольованих наноструктур

Згідно зонної теорії твердого тіла енергетичний спектр і хвильової функції носіїв заряду в зовнішньому полі є рішенням стаціонарного рівняння Шредінгера в наближенні ефективної маси [4].

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi(r) = E\psi(r), \quad (3.1)$$

де $V(r)$ – енергія носія заряду в зовнішньому полі,

E – енергія, відрахована від краю зони носіїв заряду за відсутності зовнішнього поля,

m^* – ефективна маса носіїв заряду біля краю зони,

$\psi(r)$ – хвильова функція в наближенні ефективної маси - огибаюча.

3.2 Одномірні надгратки

У надгратках з квантових ям носії заряду з енергією нижче потенційного бар'єру можуть тунельним способом переходити з однієї потенційної ями в іншу. У разі періодичних НГ хвильові функції в наближенні ефективної маси є рішенням рівняння з періодичною функцією потенційної енергії вздовж осі росту (симетрії) ґратки. Якщо вісь z збігається з віссю симетрії, огибаюча хвильові функції, відповідно до теореми Блоха, приймає наступний вигляд:

$$\psi_{mk}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(ikr) \varphi_{mk_z}(z), \quad (3.2)$$

де $\varphi_{k_z m}(z)$ – періодична частина функції Блоха, відповідної руху вздовж осі z .

$$\varphi_{k_z m}(z + d \cdot n) = \varphi_{k_z m}(z), \quad (3.3)$$

де $d = a + b$ – період НГ, що складається з квантової ями і бар'єру шириною a і b відповідно; n -ціле число. Власні значення енергії функції (3.2) дорівнюють:

$$E_m(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_{\perp}^2 + E_m(k_z), \quad (3.4)$$

де $E_m(k_z)$ – періодична функція енергії, відповідна функції $\varphi_{k_z m}(z)$

$$E_m(k_z + \frac{2\pi}{d}n) = E_m(k_z), \quad (-\frac{N}{2} \leq n \leq \frac{N}{2}) \quad (3.5)$$

де N – число періодів НГ.

Згідно з теоремою Блоха, нееквівалентні значення компоненти хвильового вектору k_z змінюються в межах першої зони Бріллюена НГ [4].

$$-\frac{\pi}{d} \leq k_z \leq \frac{\pi}{d}. \quad (3.6)$$

Всі рівні енергії при заданому значенні m складають мінізони, в якій енергія є квазінепереривною функцією хвильового вектора k . Квантове число m відповідає номеру мінізони [1].

У випадку прямокутних квантових ям і бар'єрів-наближення Кроніга-Пенні-значення енергії $E_m(k_z)$ є рішенням трансцендентного рівняння.

$$\cos(ka)ch(sb) + \frac{1}{2}\left(\gamma - \frac{1}{\gamma}\right)\sin(ka)sh(cb) = \cos(k_z d), \quad (3.7)$$

де

$$k = \frac{\sqrt{2m_a^* E}}{\hbar}; \quad s = \frac{\sqrt{2m_b^*(V_b - E)}}{\hbar}; \quad \gamma = \frac{sm_a^*}{km_b^*}. \quad (3.8)$$

У рівнянні (3.7) використані ті ж позначення, що і в рівнянні (3.1). При $sb \rightarrow \infty$, що має місце при $V_b > E$ і $b \rightarrow \infty$, рівняння (3.8) переходить в рівняння (3.2) для ізольованих прямокутних КЯ кінцевої глибини. При $sb \gg l$, коли ймовірність тунелювання між КЯ стає малою, НГ називаються ґратками зі слабо взаємодіючими КЯ. Наближення, яке використовується для розрахунку енергетичного спектру і хвильових функцій таких НГ, називається наближенням сильного зв'язку. Назва цього наближення враховує той факт, що носії заряду, за рахунок сильної взаємодії з КЯ, в якій знаходяться, майже весь час проводять в ній, лише зрідка тунелює в інші ями [1]. Для енергетичного спектра носіїв заряду з рішення рівняння (3.7) в наближенні сильної взаємодії отримуємо

$$E_m(k_z) = E_m + (-1)^m \frac{\Delta m}{2} \cos(k_z d), \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.9)$$

де E_m – рішення рівняння,

Δm – ширина мінізони.

На рис. 3.1 представлений енергетичний спектр першої (основної) і другої (першої збудженої) мінізон, які визначаються за формулою (3.9).

Для основної мінізони дисперсія енергії по k_z має вигляд

$$E_1(k_z) = E_1 - \frac{\Delta}{2} \cos(k_z d). \quad (3.10)$$

При малих значеннях k_z , розкладаючи в ряд функцію косинуса, для носіїв заряду можна ввести ефективну масу уздовж осі z

$$E_1(k_z) = E_1 - \frac{\Delta}{2} + \frac{\hbar^2}{2m_z^*} k_z^2, \quad (3.11)$$

де
$$m_z^* = \frac{2\hbar^2}{\Delta d^2}. \quad (3.12)$$

Отже, енергетичний спектр носіїв заряду в оточенні дна мінізони, з урахуванням енергії вільного руху вздовж КЯ, можна описати за допомогою тензора анізотропної ефективної маси. Значення m_z^* , за рахунок її залежності від ширини мінізони, можна змінювати в широких межах, змінюючи конструктивні параметри НГ. Для вузьких мінізон $m_z^* \gg m^*$ [5].

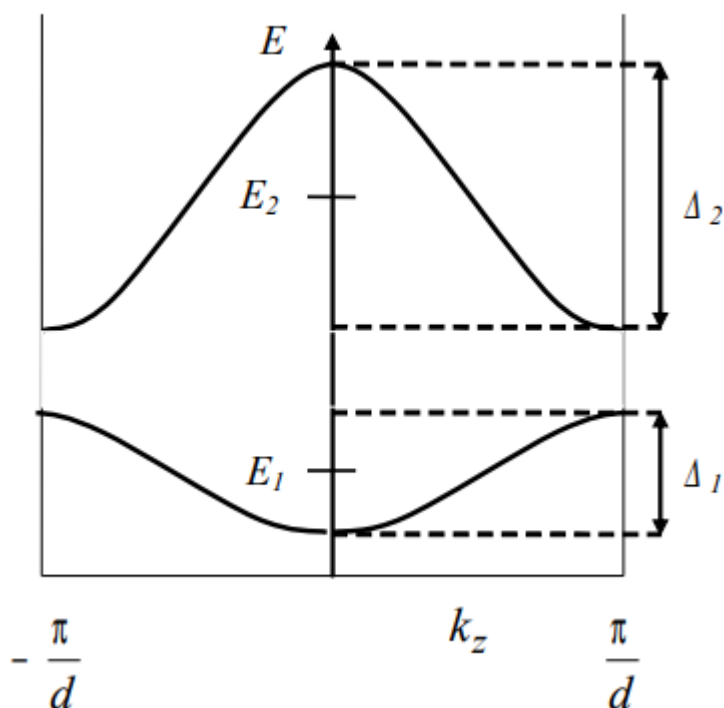


Рисунок 3.1 – Енергетичний спектр основної і першої збудженої мінізони НГ в наближенні сильного зв'язку

4 РУХ НОСІЇВ У БАГАТОШАРОВІЙ ПЕРІОДИЧНІЙ НАНОСТРУКТУРІ

4.1 Постановка завдання

У даній атестаційній роботі розглядаються енергетичні стани частинок і квазічастинок, що знаходяться в тришарових квантово розмірних структурах, що складається з трьох квантово обмежених областей, створених на основі GaAs, розділених двома квантово обмеженими розділовими бар'єрами, на основі AlGaAs і поміщених між двома напівнескінченними обмежувальними бар'єрами того ж хімічного складу – AlGaAs.

Знаходження власних значень за методом Кроніга-Пенні за формулою:

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \cdot \sinh \beta b \cdot \sin \alpha d + ch\beta b \cdot \cos \alpha d - \cos k(d + b) = 0, \quad (4.1)$$

з урахуванням ефективних мас носіїв і реальних висот, що обмежують бар'єри, є складним, оскільки облік зазначених параметрів у формулі (4.1) робить чисельне рішення вкрай неточним. Крім того, даний метод не дає можливості збереження інформації про парності енергетичного стану частинки або квазічастинки, що є важливим для вивчення спектрів випромінювання і поглинання багат шаровими структурами. Тому, більш зручним є аналітичний підхід до вирішення рівняння Шредінгера, тобто розкладання рішення по власних функціях.

Енергія електронів в квантово розмірних структурах, створених на основі напівпровідникових гетероструктур відраховується від «дна» зони провідності «вгору», а енергія важких і легких дірок від «стелі» валентної зони «вниз», також як і у випадку звичайного напівпровідника. У зв'язку з цим, енергетична

схема завдання виглядає однакою, як для електронів, так і для дірок. Енергетичний профіль даної структури показаний на рисунку 4.1.

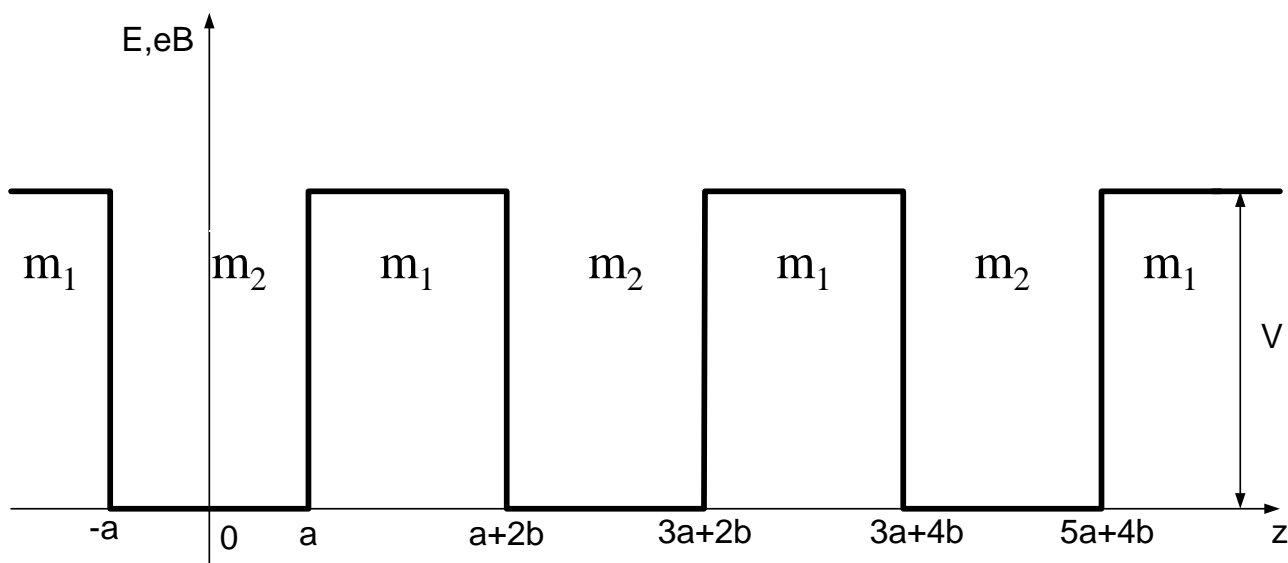


Рисунок 4.1 – Енергетичний профіль багат шарової КРС

Стационарне рівняння Шредінгера для областей I – VII (рисунок 4.1) може бути записане таким чином:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \cdot \frac{d^2\psi_1}{dz^2} + V\psi_1 = E\psi_1, \quad (4.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \cdot \frac{d^2\psi_2}{dz^2} = E\psi_2, \quad (4.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \cdot \frac{d^2\psi_3}{dz^2} + V\psi_3 = E\psi_3, \quad (4.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \cdot \frac{d^2\psi_4}{dz^2} = E\psi_4, \quad (4.5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \cdot \frac{d^2\psi_5}{dz^2} + V\psi_5 = E\psi_5, \quad (4.6)$$

де m_1 і m_2 ефективні маси частинок або квазічастинок в матеріалах бар'єру і ями відповідно;

\hbar – постійна Дірака;

V – висота обмежувального бар'єру;

E – шукане значення енергії частинки або квазічастинки (власне значення енергії).

4.2 Визначення енергетичного стану частинок і квазічастинок в тришаровій наноструктурі

Загальне рішення системи (4.2) – (4.6) щодо хвильових функцій частинок (власних функцій оператора Гамільтона) мають вигляд:

$$\psi_1 = A_1 e^{k_1 z}, \quad (4.7)$$

$$\psi_2 = A_2 \cos(k_2 z) + B_2 \sin(k_2 z), \quad (4.8)$$

$$\psi_3 = A_3 \cosh(k_1 (z - (a + b))) + B_3 \sinh(k_1 (z - (a + b))), \quad (4.9)$$

$$\psi_4 = A_4 \cos(k_2 (z - 2(a + b))) + B_4 \sin(k_2 (z - 2(a + b))), \quad (4.10)$$

$$\psi_5 = A_5 \cosh(k_1 (z - 3(a + b))) + B_5 \sinh(k_1 (z - 3(a + b))), \quad (4.11)$$

$$\psi_6 = A_6 \cos(k_2 (z - 4(a + b))) + B_6 \sin(k_2 (z - 4(a + b))), \quad (4.12)$$

$$\psi_7 = B_7 e^{-k_1 z}, \quad (4.13)$$

де k_1 і k_2 коефіцієнти, що містять невідомі значення енергії (власні значення оператора Гамільттона) і фізичні константи, необхідного при розрахунку.

Коефіцієнти k_1 і k_2 визначаються за формулами:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2}(V - E)}, \quad (4.14)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_2}{\hbar^2}E}. \quad (4.15)$$

Рішення системи (4.2) – (4.6) щодо власних значень енергії частинок або квазічастинок проводиться з урахуванням граничних умов – хвильова функція і її перша похідна по координаті повинні бути безперервними на межі поділу середовищ – «бар'єр» «яма» і «яма» – «бар'єр». Математично ці умови виражаються співвідношеннями:

$$\Psi_n|_{Z=n \cdot (a+2(n-1) \cdot b)} = \Psi_{n+1}|_{Z=n \cdot (a+2(n-1) \cdot b)} - \text{рівність функцій}, \quad (4.16)$$

$$\frac{1}{m_n^*} \cdot \frac{d}{dz} \Psi_n \Big|_{Z=n \cdot (a+2(n-1) \cdot b)} = \frac{1}{m_{n+1}^*} \cdot \frac{d}{dz} \Psi_{n+1} \Big|_{Z=n \cdot (a+2(n-1) \cdot b)} -$$

$$- \text{рівність похідних}. \quad (4.17)$$

Застосовуючи поділ спільного рішення щодо хвильових функцій на «симетричне» і «несиметричне» (парне і непарне), з огляду на можливість виникнення падаючої і відбитої хвилі потоку ймовірності в розділових бар'єрів і задовольняючи граничним умовам (4.16) і (4.17), остаточно рішення для власних значень енергії частинок і квазічастинок, можна записати у вигляді: для парних функцій в ямах і бар'єри:

$$\text{tg}(k_2 a) = \frac{1}{3} \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} (1 + 2 \text{th}(k_1 b)), \quad (4.18)$$

для парних функцій в ямах і непарних функцій в бар'єрах:

$$tg(k_2 a) = \frac{1}{3} \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} (1 + 2cth(k_1 b)), \quad (4.19)$$

для парних функцій в ямах, а також парної функції в одному бар'єрі і непарній – в іншому:

$$tg(k_2 a) = \frac{1}{3} \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} (1 + th(k_1 b) + cth(k_1 b)), \quad (4.20)$$

для непарних функцій в ямах і бар'єри:

$$ctg(k_2 a) = -\frac{1}{3} \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} (1 + 2cth(k_1 b)), \quad (4.21)$$

для непарних функцій в ямах і парних функцій в бар'єрах:

$$ctg(k_2 a) = -\frac{1}{3} \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} (1 + 2th(k_1 b)), \quad (4.22)$$

для непарних функцій в ямах, а також парної функції в одному бар'єрі і непарній – в іншому:

$$ctg(k_2 a) = -\frac{1}{3} \frac{k_1 m_2}{k_2 m_1} (1 + th(k_1 b) + cth(k_1 b)). \quad (4.23)$$

Рівняння (4.18) – (4.23) є трансцендентними щодо власних значень енергії і вирішуються в даній дипломній роботі чисельно за допомогою математичного пакета MathCad 2000 pro.

Власні значення енергії, хвильові функції і щільність розподілу ймовірності частинок для тришарової квантово розмірних структурах на основі AsGa / AlGaAs в стаціонарному стані показано на рисунках 4.2 – 4.4:

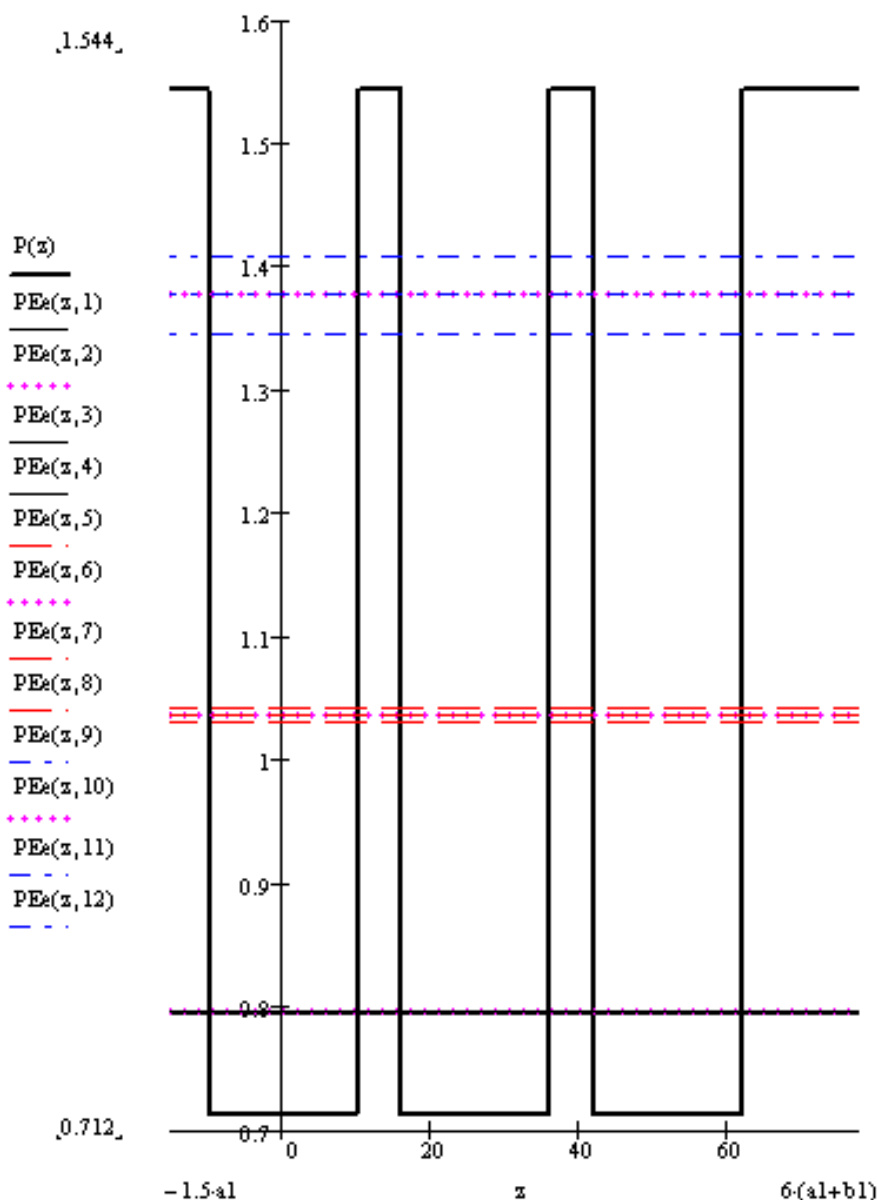


Рисунок 4.2 – Власні значення енергії частинок в тришаровій КРС

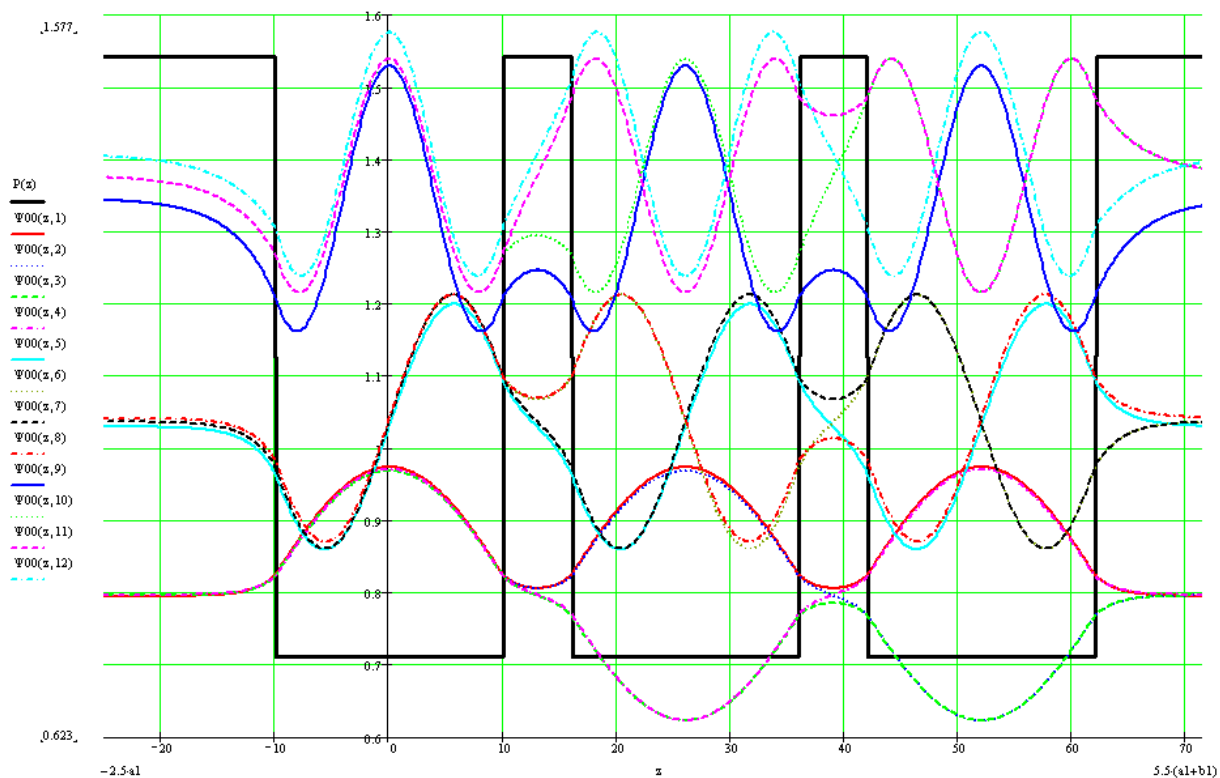


Рисунок 4.3 – Власні функції електрона в тришаровій КРС у стаціонарному стані

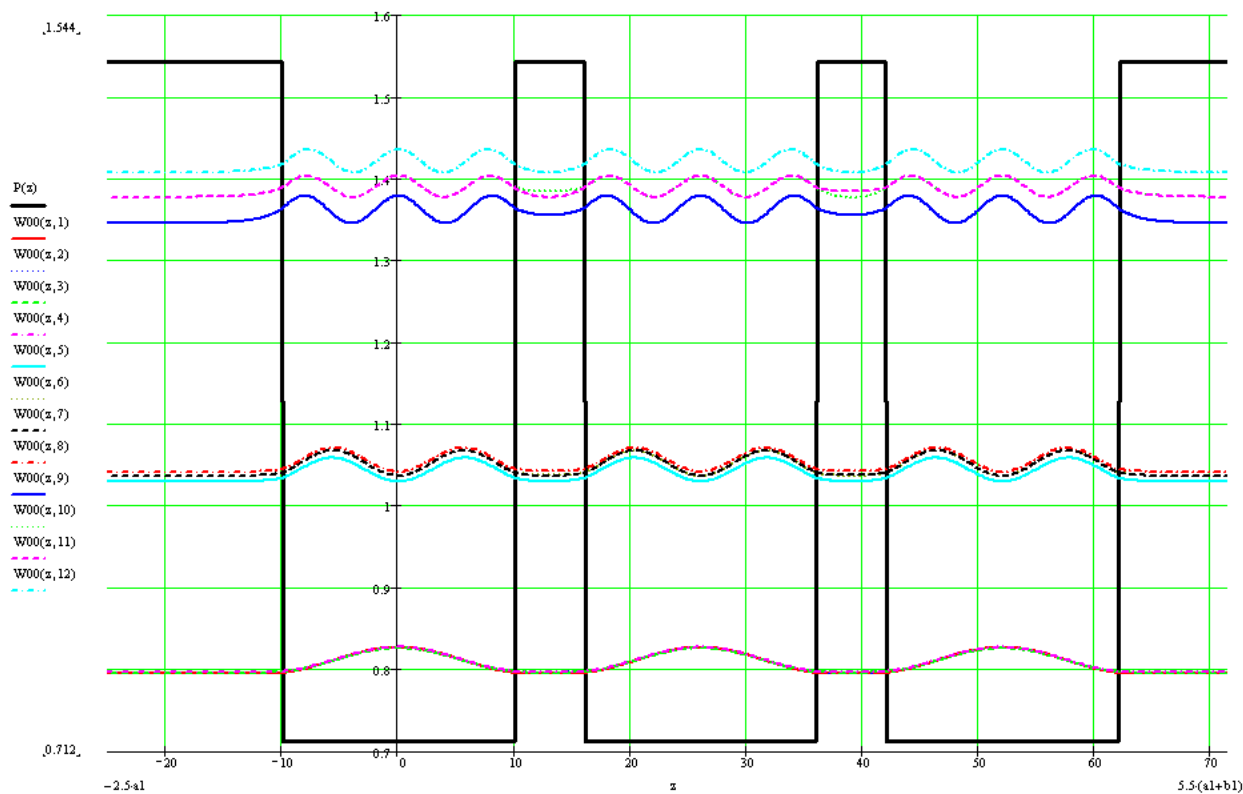


Рисунок 4.4 - Квадрати модулів хвильових функцій електронів в зоні провідності тришарової КРС у стаціонарному стані

4.3 Вплив зовнішнього постійного електричного поля на енергетичний стан часток в тришаровій КРЗ

Власні значення, хвильові функції і щільності розподілу ймовірності частинок для тришарової КРЗ створеної на основі AsGa / AlGaAs, і знаходяться під дією зовнішнього постійного електричного поля показані на рис. 4.5 – 4.7.

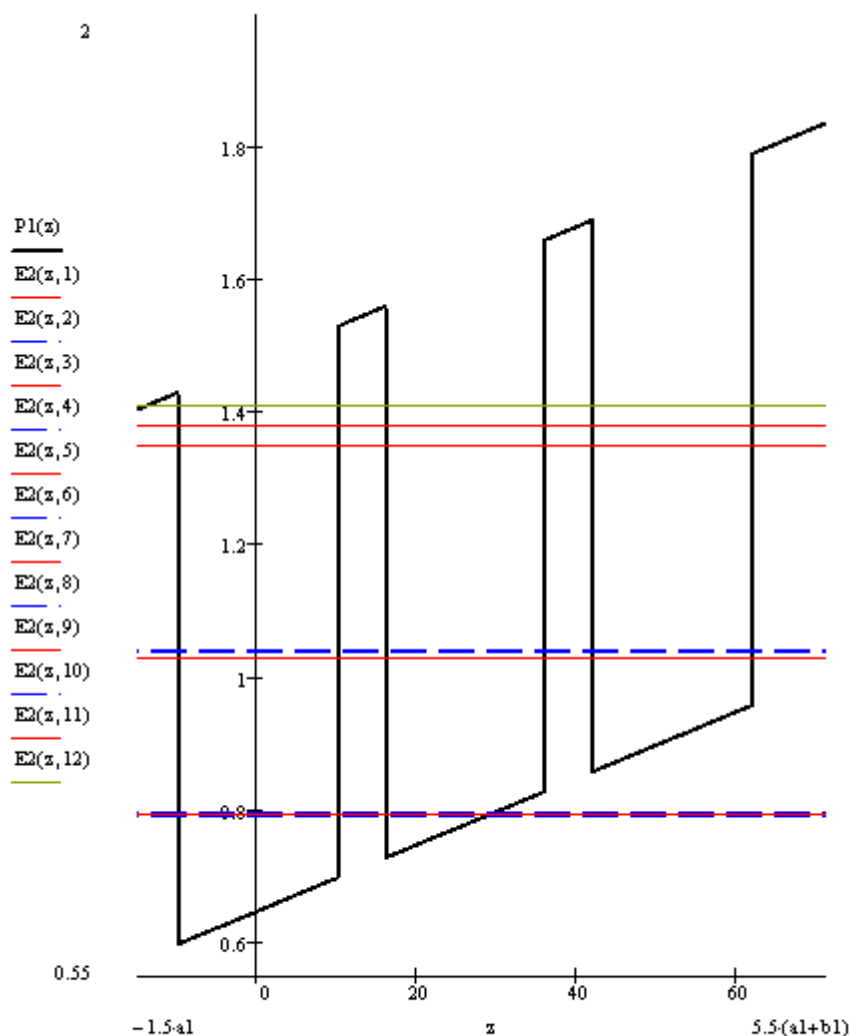


Рисунок 4.5 – Власні значення енергії електронів в зоні провідності тришарової КРЗ, що знаходиться під дією постійного електричного поля

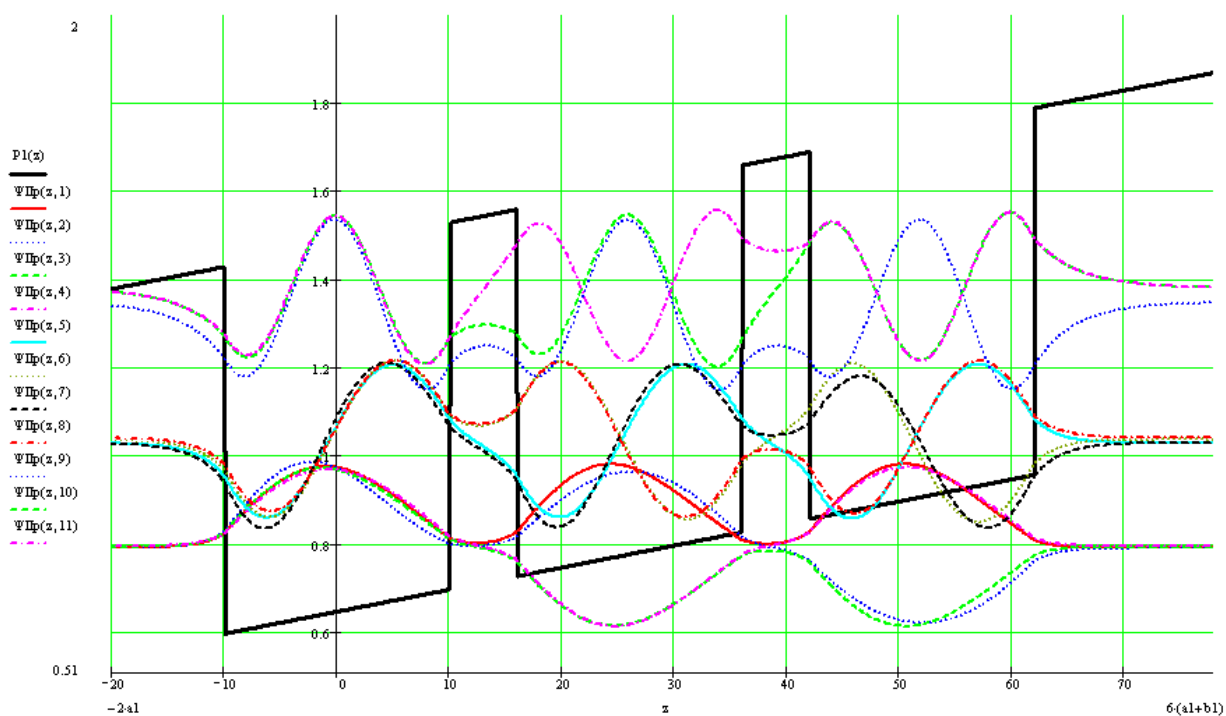


Рисунок 4.6 – Власні функції електрона при впливі на КРС електричного поля

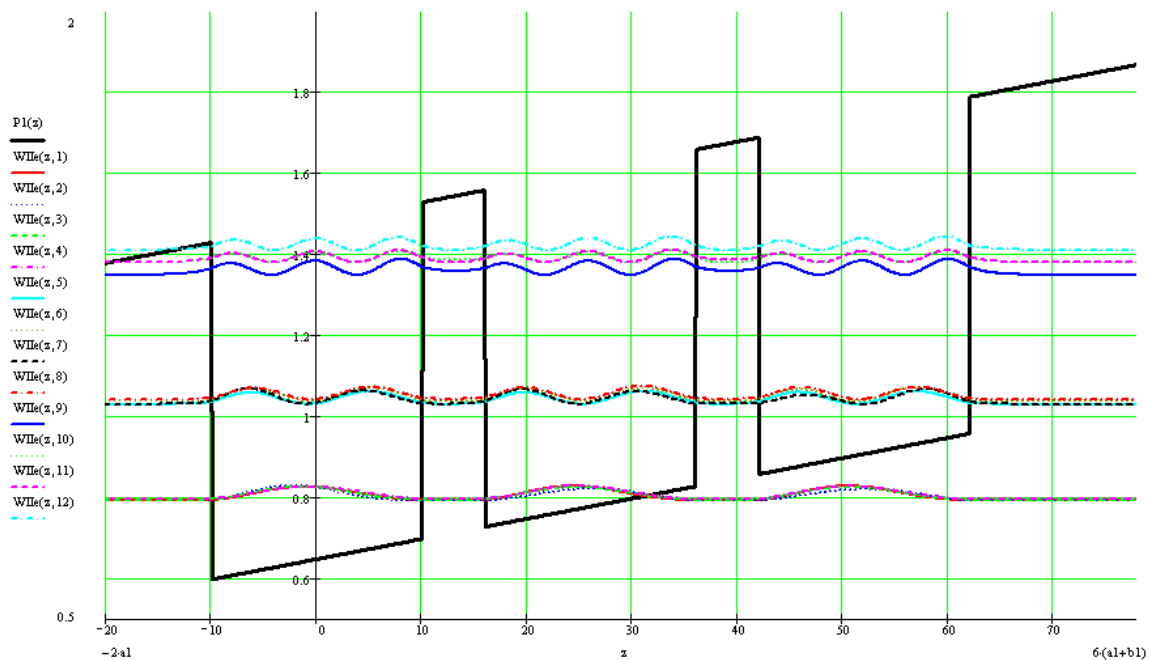


Рисунок 4.7 – Квадрати модулів хвильових функції електронів в зоні провідності тришарової КРС, що знаходиться під дією постійного електричного ПОЛЯ

ВИСНОВКИ

В результаті виконання атестаційної роботи можливо стверджувати наступне:

– велика кількість квантово обмежених областей (квантових ям) призводить до виродження енергетичних станів частинок і квазічастинок, тобто одному значенню енергії в деяких випадках можуть відповідати в тришаровій структурі дві хвильові функції;

– вплив зовнішнього електричного поля, вектори напруженості \vec{E} , якого спрямовані перпендикулярно площинам квантового обмеження, ініціює внутрішньозонну взаємодію частинок, яке в свою чергу призводить до часткового або повного зняття виродження. Також як і в одношаровій структурі, вплив зовнішнього поля призводить до розрідження енергетичного спектра – «розсуванню енергетичних рівнів», тобто квантово-обмеженому ефекту Штарка. Одночасно, зміщення рівнів в тришаровій структурі менш помітно, ніж в одношаровій, оскільки взаємодія великого числа частинок і пов'язаних з ними енергетичних станів може привести до часткового екранування зовнішнього поля.

Отже в результаті виконання атестаційної роботи зроблено наступне:

– проведено огляд літератури з моделювання енергетичних станів частинок у багатошарових структурах;

– проведено математичне моделювання енергетичних станів частинок в тришаровій КРС на основі GaAs / AlGaAs;

– досліджено вплив на енергетичний стан частинок і квазічастинок в тришаровій КРС постійного електричного поля.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Херман А.М. Полупроводниковые сверхрешетки. – М.: Высш. шк., 1986. – 243 с.
2. Пасынков В.В., Чирикин Л.К., Шинков А.Д. Полупроводниковые приборы. – М.: Высш. шк., 1973. – 400 с.
3. Пасынков В.В., Чирикин Л.К. Полупроводниковые приборы. – М.: Высш. шк., 1987. – 480 с.
4. Ченг Л., Плог К. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры. – М.: Высш. шк., 1979. – 521 с.
5. Фридрихов С.А., Мовнин С.М. Физические основы электронной техники. – М.: Высш. шк., 1982. – 608 с.
6. Бондаренко М.Ф., Биков М.М., Дзюбенко М.І., Пащенко О.Г., Пащенко Ж.Ф. Прилади та пристрої квантової електроніки. – Харків 2002 – 388 с.
7. Носов Ю.Р. Оптоэлектроника. – М.:Советское радио, 1977 – 232 с.
8. Жданов Г.С. Физика твердого тела. – М.: Ленинские горы, 1962 – 503 с.
10. ГОСТ 12.2.007.0-75 ССБТ. Изделия электротехнические. Общие требования безопасности.
11. Справочная книга по светотехнике / Под ред. Ю.Б.Айзенберга. - М.: Энергоиздат, 1983. - 427 с.
12. Шиляев П.А., Павлов Д.А. Полупроводниковые гетероструктуры: гетеропереход. Учебно-методическое пособие. Н.Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2009.
13. Ильин В.И., Мусихин С.Ф., Шик А.Я. Варизонные полупроводники и гетероструктуры. СПб.: Наука, 2000.

14. Кардона Ю. П. Основы физики полупроводников / Пер. с англ. И.И. Решиной. / Под ред. Б.П. Захарчени. – 3-е изд. М.: Физматлит, 2002.

15. Гуртов В.А. Твердотельная электроника: Учеб. пособие. Петрозаводск: ПетрГУ, 2004.