

ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КВАНТОВО-ОГРАНИЧЕННЫХ СЛОЁВ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦ И КВАЗИЧАСТИЦ

При проектировании и производстве квантоворазмерных структур (КРС) и полупроводниковых приборов нанoeлектроники на их основе как оптоэлектронного, так и неоптоэлектронного назначения невозможно рассматривать процессы в активной области таких приборов без учёта влияния соседних областей – подложки, ограничивающих и разделительных слоёв, металлических контактов выводов и т.д.

Поскольку рабочие параметры и характеристики приборов нанoeлектроники определяются в первую очередь энергетическими состояниями частиц и квазичастиц, находящихся в активных областях таких приборов, то уже на этапе предварительных расчётов и проектирования необходимо учесть влияние энергетического профиля квантово-ограниченного слоя на состояния частиц в нём.

Энергетический профиль КРС может изменяться под действием следующих основных факторов:

- химического состава ограничивающих (барьерных) слоёв;
- ширины ограничиваемого слоя – слоя квантовой ямы;
- уровня легирования и типа проводимости каждого из слоёв, составляющих КРС;
- типа и концентрации дефектов и поверхностных состояний как в объёме квантово-ограниченного слоя, так и в области контактов различных слоёв;

Учёт этих и ряда других факторов позволяет наиболее точно описывать энергетические состояния частиц и квазичастиц, а также вероятности нахождения частиц и квазичастиц в этих состояниях в КРС, находящихся как в стационарном, так и в рабочем, возбуждённом состоянии. Кроме этого появляется возможность описывать процессы токопереноса, обмена и преобразования энергии по всей структуре прибора как в квантово-ограниченных, так и в барьерных слоях.

Учёт влияния уровня легирования, типа проводимости слоёв КРС, а также влияния поверхностных и объёмных дефектов и их концентрации на энергетические состояния частиц и квазичастиц в КРС требует совместного решения уравнения Шредингера, а также уравнений Больцмана и Пуассона в квантовом представлении, что требует значительных вычислительных затрат и невозможно без некоторого начального приближения.

В качестве такого приближения можно рассматривать энергетический профиль КРС, который формируется за счёт задания химического состава барьерных, ограничивающих слоёв и ширины квантово-ограниченного слоя.

В данной работе рассматриваются два вида квантоворазмерных структур – с равновысокими, симметричными, и разновысокими, несимметричными, ограничивающими слоями. Энергетические профили таких структур показаны на рис. 1 а и б соответственно.

Высоты барьеров для электронов в зоне проводимости и для лёгких и тяжёлых дырок в валентной зоне определялись из полуэмпирического правила Миллера [1]. Согласно этому правилу для соединений $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$ и их твёрдых растворов с элементами III и II групп высота потенциального барьера для электронов в зоне проводимости и для дырок в валентной зоне на гетерогранице между узкозонным и широкозонным материалами определяется как 65% и 35% от общей разности между шириной запрещённой зоны широкозонного и узкозонного материалов. Эффективные массы частиц и квазичастиц в каждом материале и их зависимость от молярных долей компонентов твёрдых растворов, составляющих тот или иной материал, а также ширина запрещённой зоны материала и её зависимость от химического состава конкретного соединения, определяются в приближении Латтингера и Кона [2] по соотношениям, представленным в табл. 1.

Таблица 1

Материал Параметр	GaAs	AlAs	Al _x Ga _{1-x} As
E _g , эВ	1,424	3,018	1,424+1,247·x, 0<x<0,45 1,424+1,247·x+1,427·(x-0,45), 0,45<x<1,0
m_e^*/m_0	0,067	0,124	0,067+0,057·x
γ_1	6,85	3,45	6,85-3,4·x
γ_2	2,1	0,68	2,1-1,42·x

В таблице 1 m_e^* – эффективная масса электрона, m_0 – масса свободного электрона, γ_1 и γ_2 – постоянные Латтингера. Согласно [2,3] эффективные массы тяжелой и легкой дырки могут быть вычислены по формулам

$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{(\gamma_1 - 2 \cdot \gamma_2)}, \quad (7)$$

$$m_{lh}^* = \frac{m_0}{(\gamma_1 + 2 \cdot \gamma_2)}, \quad (8)$$

где m_{hh}^* и m_{lh}^* – эффективные массы тяжелой и легкой дырок соответственно.

На рис. 1 энергия электронов отсчитывается от дна зоны проводимости снизу вверх, а энергия дырок – от потолка валентной зоны вниз так, как это принято в физике полупроводников; Lz – ширина квантово-ограниченного слоя (не более длины волны де-Бройля для ограничиваемого материала, в данном случае для GaAs эта величина составляет приблизительно 140 Å).

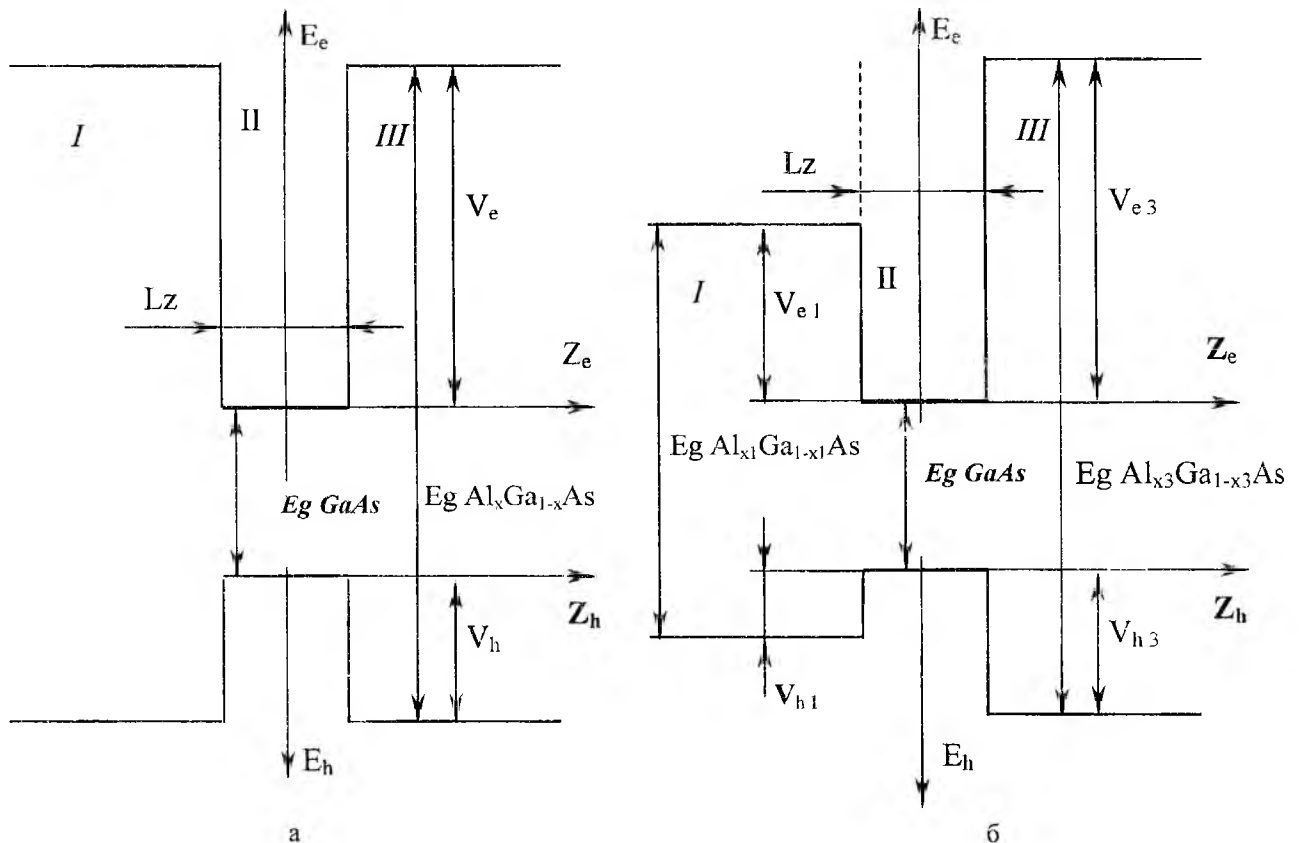


Рис. 1

Таким образом для рис. 1, а:

$$V_e = 0,65 \cdot (E_g \text{ Al}_x \text{ Ga}_{1-x} \text{ As} - E_g \text{ GaAs}), \quad (1)$$

$$V_h = 0,35 \cdot (E_g \text{ Al}_x \text{ Ga}_{1-x} \text{ As} - E_g \text{ GaAs}), \quad (2)$$

а для рис 1, б:

$$V_{e1} = 0,65 \cdot (E_g \text{ Al}_{x1} \text{ Ga}_{1-x1} \text{ As} - E_g \text{ GaAs}), \quad (3)$$

$$V_{h1} = 0,35 \cdot (E_g \text{ Al}_{x1} \text{ Ga}_{1-x1} \text{ As} - E_g \text{ GaAs}), \quad (4)$$

$$V_{e3} = 0,65 \cdot (E_g \text{ Al}_{x3} \text{ Ga}_{1-x3} \text{ As} - E_g \text{ GaAs}), \quad (5)$$

$$V_{h3} = 0,35 \cdot (E_g \text{ Al}_{x3} \text{ Ga}_{1-x3} \text{ As} - E_g \text{ GaAs}), \quad (6)$$

где V_e, V_{e1}, V_{e3} – высоты потенциальных барьеров для электронов в зоне проводимости на соответствующих гетерограницах, эВ; V_h, V_{h1}, V_{h3} – высоты потенциальных барьеров для дырок в валентной зоне, эВ; x, x_1, x_3 – молярные доли алюминия в соответствующих слоях арсенида галлия; E_g – ширина запрещённой зоны соответствующего материала, эВ.

Для изучения влияния изменения ширины квантово-ограниченного слоя на энергетические состояния частиц и квазичастиц в КРС были проведены расчёты собственных значений энергии электронов, лёгких и тяжёлых дырок для трёх произвольно заданных значений ширины квантово-ограниченного слоя – квантовой ямы $L_z = 100, 50$ и 25 Å как для симметричной КРС, так и для несимметричной КРС. Все полупроводниковые слои, составляющие квантоворазмерную структуру, предполагаются нелегированными, т.е. имеющими собственную проводимость. Это позволяет на данном этапе расчётов не учитывать влияния на форму энергетического профиля рассматриваемой КРС поверхностных состояний на гетерограницах и объёмных зарядов в слоях.

Энергетические состояния частиц и квазичастиц (электронов и дырок) в квантоворазмерной структуре, показанной на рис. 1, находящейся в невозбуждённом состоянии, определяются из решения стационарного уравнения Шредингера для каждой из областей ямы и барьеров с учётом непрерывности волновых функций и их первых производных по координате на границах раздела слоёв. Значения энергии частиц и квазичастиц определяются из графического или численного решения трансцендентных уравнений вида [3]:

$$\operatorname{tg}(k_2 a) = \frac{m_2^*}{m_1^*} \cdot \frac{k_1}{k_2}, \quad (9)$$

$$-\operatorname{ctg}(k_2 a) = \frac{m_2^*}{m_1^*} \cdot \frac{k_1}{k_2}. \quad (10)$$

- для симметричной структуры.

$$\operatorname{tg}(k_2 a) = \frac{1}{2} \cdot \frac{m_2^*}{m_1^*} \cdot \frac{k_1}{k_2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{m_2^*}{m_3^*} \cdot \frac{k_3}{k_2}, \quad (11)$$

$$-\operatorname{ctg}(k_2 a) = \frac{1}{2} \cdot \frac{m_2^*}{m_1^*} \cdot \frac{k_1}{k_2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{m_2^*}{m_3^*} \cdot \frac{k_3}{k_2}. \quad (12)$$

- для несимметричной структуры.

В уравнениях (9) – (12) $a = L_z/2$ – полуширина квантово ограниченного слоя (область II на рис. 1); m_1^*, m_2^*, m_3^* – эффективные массы частиц или квазичастиц в первой, второй и третьей областях КРС согласно рис. 1.

$$k_1^2 = \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (V_1 - E), \quad (13)$$

$$k_2^2 = \frac{2m_2^*}{\hbar^2} E, \quad (14)$$

$$k_3^2 = \frac{2m_3^*}{\hbar^2} (V_3 - E). \quad (15)$$

В качестве $m_{...}^*$ и $V_{...}$ каждый раз при расчётах подставляются соответствующие эффективные массы частиц или квазичастиц и высоты потенциальных барьеров. Таким образом, уравнения (9) – (15) являются инвариантными по отношению к сорту частиц, ширине квантово-ограниченного слоя и химическому составу контактирующих полупроводниковых слоёв.

Энергетические состояния электронов в симметричных структурах определялись при решении уравнений (9), (10), в несимметричной структуре – при решении уравнений (11), (12), с учётом соотношений (13)-(15). Аналогичные расчёты энергетических состояний электронов могут быть проведены для различных высот ограничивающих барьеров в случае симметричных структур и различных соотношений высот ограничивающих барьеров в случае несимметричных структур, а также для раз-

личных значений ширины квантово-ограниченного слоя, в частности, 50 и 25 Å. Расчёты для лёгких и тяжёлых дырок проводятся аналогично.

В табл. 2 приведены собственные значения энергии электронов, тяжёлых и лёгких дырок, рассчитанные для симметричных и несимметричных квантоворазмерных структур с шириной квантово-ограниченного слоя 100, 50 и 25 Å.

Для исследования влияния высоты ограничивающих барьеров на энергетические состояния частиц и квазичастиц в однослойной КРС при различной ширине квантово-ограниченного слоя высоты барьеров в симметричных КРС выбирались равными высотам какого либо из барьеров в несимметричной структуре.

Как видно из результатов приведенных в табл. 2 на энергетические состояния частиц и квазичастиц существенное влияние оказывает ширина квантово-ограниченного слоя — чем уже квантовая яма, тем меньше в ней энергетических уровней частиц, тем больше энергетическое расстояние между ними и тем выше относительно «дна» квантовой ямы находится первый энергетический уровень.

Таблица 2

n	L = 100 Å			L = 50 Å			L = 25 Å		
	X = 0.5	Ve = 0,443, эВ Vh = 0,238, эВ		X = 0.5	Ve = 0,443, эВ Vh = 0,238, эВ		X = 0.5	Ve = 0,443, эВ Vh = 0,238, эВ	
	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ
1	0,00386	0,00063	0,00275	0,014	0,00237	0,01	0,05	0,00855	0,034
2	0,015	0,0025	0,011	0,057	0,00949	0,04	0,191	0,034	0,128
3	0,035	0,00563	0,025	0,127	0,021	0,089	0,379	0,076	0,23
4	0,062	0,01	0,044	0,222	0,038	0,153	--	0,132	--
5	0,096	0,016	0,068	0,334	0,059	0,22	--	0,197	--
6	0,138	0,023	0,098	0,436	0,084	--	--	--	--
7	0,186	0,031	0,132	--	0,114	--	--	--	--
8	0,242	0,04	0,169	--	0,148	--	--	--	--
	X = 0.25	Ve = 0,203, эВ Vh = 0,109, эВ		X = 0.25	Ve = 0,203, эВ Vh = 0,109, эВ		X = 0.25	Ve = 0,203, эВ Vh = 0,109, эВ	
	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ
1	0,00363	0,00061	0,00255	0,013	0,00222	0,00874	0,04	0,00755	0,026
2	0,014	0,00242	0,01	0,05	0,00887	0,034	0,141	0,03	0,088
3	0,032	0,00545	0,023	0,109	0,02	0,073	--	0,065	--
4	0,057	0,00967	0,04	0,179	0,035	0,109	--	0,105	--
5	0,089	0,015	0,062	--	0,054	--	--	--	--
6	0,126	0,022	0,089	--	0,077	--	--	--	--
7	0,167	0,029	0,109	--	0,101	--	--	--	--
8	--	0,038	--	--	--	--	--	--	--
	X1 = 0.25	Ve1 = 0,203, эВ Vh1 = 0,109, эВ		X1 = 0.25	Ve1 = 0,203, эВ Vh1 = 0,109, эВ		X1 = 0.25	Ve1 = 0,203, эВ Vh1 = 0,109, эВ	
	X3 = 0.5	Ve3 = 0,443, эВ Vh3 = 0,238, эВ		X3 = 0.5	Ve3 = 0,443, эВ Vh3 = 0,238, эВ		X3 = 0.5	Ve3 = 0,443, эВ Vh3 = 0,238, эВ	
n	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ	E e, эВ	E hh, эВ	E lh, эВ
1	0,00352	0,00061	0,00249	0,012	0,00225	0,00839	0,037	0,00774	0,025
2	0,014	0,00244	0,00994	0,048	0,00899	0,033	0,143	0,031	0,093
3	0,032	0,00548	0,022	0,108	0,02	0,074	--	0,068	--
4	0,056	0,00974	0,04	0,187	0,036	--	--	--	--
5	0,088	0,015	0,062	--	0,056	--	--	--	--
6	0,126	0,022	0,088	--	0,08	--	--	--	--
7	0,17	0,049	--	--	0,106	--	--	--	--
8	--	0,061	--	--	--	--	--	--	--

Влияние высот ограничивающих барьеров (фактически, химического состава барьерных слоёв) также существенно, однако, оно более выражено в «узких» квантово-ограниченных слоях. Уменьшение концентрации алюминия приводит к снижению потенциального барьера и, как следствие, к

умножению количества энергетических уровней в квантово-ограниченном слое. Кроме того, в квантовых ямах с меньшими ограничивающими барьерами энергетические состояния частиц расположены немного (меньше kT) ниже соответствующих состояний в квантовых ямах с более высокими барьерами. В этой связи результаты, полученные для несимметричных структур, являются вполне прогнозируемыми – значения энергии частиц не столь малы как в структурах с симметричными высокими барьерами, но в тоже время и не повторяют значений энергии частиц в структурах с невысокими симметричными барьерами. Подобный результат можно объяснить тем, что в несимметричных структурах потенциал ограничения высокого барьера экранируется близостью «континуума» со стороны низкого, и благодаря этому энергетические уровни располагаются несколько выше, чем в симметричных структурах с низкими барьерами. Подобное поведение энергетических уровней частиц и квазичастиц как в симметричных, так и в несимметричных КРС более ярко проявляется в «узких» квантово-ограниченных слоях.

Распределение энергетических состояний электронов для квантово-ограниченного слоя шириной 100 Å показано на рис. 2. На рис 2 а) приведена симметричная КРС с содержанием алюминия в материале барьеров $x = 0,5$, на рис. 2 б) – симметричная КРС с содержанием алюминия $x = 0,25$, на рис. 2 в) – несимметричная КРС с содержанием алюминия в одном ограничивающем слое $x_1 = 0,25$, а в другом $x_3 = 0,5$.

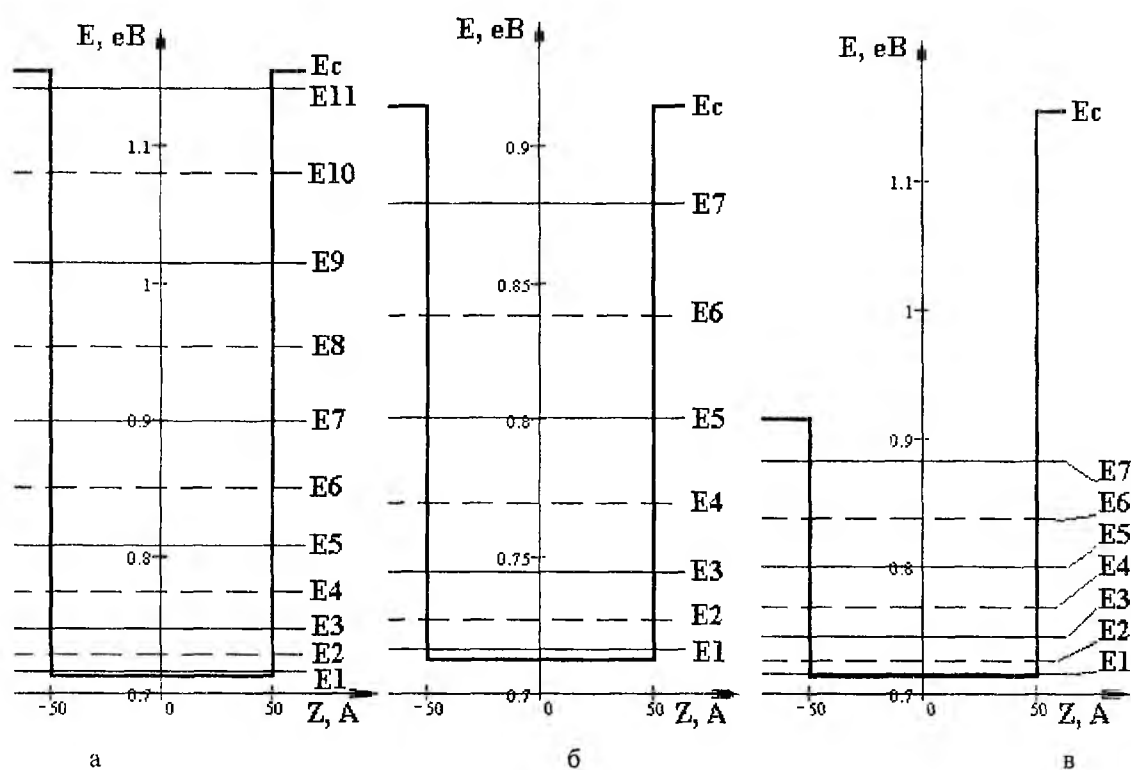


Рис. 2

Таким образом, за счёт создания несимметричных квантоворазмерных структур с разновысокими ограничивающими барьерами можно относительно легко управлять положением энергетических уровней электронов, лёгких и тяжёлых дырок в активной части прибора без ущерба его электрическим свойствам. Варьируя концентрацию алюминия в твёрдом растворе материала приконтактных, или разделительных слоёв, можно создавать неомические контакты с металлизацией разводки.

Список литературы: 1. Emmanuel Anemogiannis, Elias N. Glytsis, Thomas V. Gaylord. Quasi – Bound States Determination Using a Perturbed Wavenumbers Method in a Large Quantum Box // IEEE J. Quantum Electronics. 1998. Vol. 33, N 5. P. 742-752. 2. J.M. Luttinger, W. Kohn. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // Phys. Rev. Ser. B. 1955. Vol. 97, No 4. P. 869–883. 3. Физика полупроводниковых лазеров: Пер. с японск. / Под ред. Х. Такумы. М.: Мир, 1989. 310с.