

ФОРМИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА МНОГОСЛОЙНОЙ СИММЕТРИЧНОЙ КВАНТОВОРАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ GaAs/Al_{x1}Ga_{1-x1}As/Al_{x2}Ga_{1-x2}As. Часть 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Бурное развитие нанoeлектроники в конце XX, начале XXI века привело к созданию большого количества нанoeлектронных квантоворазмерных приборов различного функционального назначения, производимых на основе широкой номенклатуры полупроводниковых материалов и их соединений, с использованием как традиционных технологий, так и с помощью специально разработанных нанoeлектронных технологий.

Среди всего множества нанoeлектронных приборов различного назначения и конструкций видное место занимают полупроводниковые излучающие приборы – высоконаправленные светодиоды и инжекционные полупроводниковые лазеры на квантоворазмерных структурах (ИПЛ на КРС). Развитие этого класса приборов, их модернизация, совершенствование конструкций, расширение и удешевление элементной базы обусловлено развитием средств связи, оптоволоконных линий, оптических и магнитооптических носителей информации, систем оптической обработки, записи и считывания информации, построением оптических систем контроля и диагностики на основе ИПЛ на КРС в различных отраслях науки и промышленности. Именно с появлением этого класса приборов началось развитие нанoeлектроники как отдельной области науки. Кроме того, разработка ИПЛ на КРС привела к открытию ряда принципиально новых физических эффектов, на основе которых стала возможной разработка квантоворазмерных приборов неоптоэлектронного применения, и технологий их производства – собственно нанoeлектронных технологий [1 - 5].

К настоящему времени известно большое количество конструкций ИПЛ на КРС, появление которых связано с необходимостью удовлетворения противоречивых эксплуатационных требований, предъявляемых к ИПЛ на КРС как к приборам: высокая излучаемая оптическая мощность, малые потребляемые токи, возможность работы в непрерывном режиме в широком температурном диапазоне, высокая степень монохроматичности, малое и однородное уширение спектра излучения, широкая полоса модуляции и т.д. Одним из технологических путей решения некоторых из перечисленных проблем является повышение размерности квантования структур, а также создание многослойных и многоэлементных структур.

В зависимости от направлений, в которых осуществляется квантовое ограничение движения носителей зарядов, различают одномерные, двумерные и трёхмерные КРС, называемые также слоистыми, нитевидными структурами, и структурами на основе квантовых точек, квантовых капель или «сверхатомов». Очевидно, что наиболее простыми и дешевыми при серийном производстве являются слоистые структуры или структуры с одномерным квантовым ограничением. Данные структуры по своим конструктивно-технологическим особенностям также могут быть разделены на:

- симметричные и несимметричные однослойные структуры – с одним квантово-ограниченным слоем (с одной квантовой ямой для носителей);
- симметричные и несимметричные многослойные структуры – с одним активным квантово-ограниченным слоем и соседними слоями, в которых также наблюдается эффект квантового ограничения движения носителей (как одностороннего, так и двустороннего ограничения);

– симметричные и несимметричные многослойные структуры -- с чередующимися слоями квантовых ям и барьеров, электрические свойства которых от слоя к слою могут или повторяться или отличаться – сверхрешетки. Необходимо отметить, что сверхрешетками также называют чередующиеся структуры с двумерным и трёхмерным квантовым ограничением.

Названия «симметричные» и «несимметричные» характеризуют КРС согласно энергетической высоты, геометрической формы и протяженности барьерных ограничивающих и разделительных слоёв.

Наилучшими свойствами по отдельному управлению электрическими и оптическими свойствами квантоворазмерных светоизлучающих приборов обладают многослойная структура и сверхрешетка. При этом в информационной технике и технике волоконно-оптической связи, где используются сравнительно маломощные источники и требования к частотным и спектральным характеристикам излучения высоки, используются, как правило, многослойные симметричные и несимметричные структуры. В навигационных, диагностических и технологических системах, системах накачки мощных твердотельных и жидкостных лазеров и т.п. используются в основном ИПЛ на КРС, созданных на основе сверхрешеток [1, 6 - 8]. Особенности формирования энергетического спектра сверхрешеток могут быть описаны теоретически с помощью методов квантовой механики, разработанных для движения заряженных частиц в поле периодически меняющегося потенциала, например, в поле атомов кристаллической решетки твёрдого тела (модель Кронига-Пени, кр - метод и т.д.) [9 - 10]. В этой связи актуальной задачей является описание особенностей формирования энергетического спектра частиц в многослойных структурах, поскольку современные технологии позволяют реализовать сколь угодно разнообразную и сложную многослойную структуру с произвольным энергетическим профилем. В пользу более детального изучения симметричных и несимметричных многослойных квантоворазмерных структур свидетельствует также и то, что в последние годы развивается тенденция создания мощных ИПЛ на КРС с соблюдением высоких требований по частотным и спектральным характеристикам выходного излучения, повышения их быстродействия и т.д. Одним из возможных методов создания таких лазеров является создание сверхрешеток, в которых многослойная структура с заданными электронными и оптическими свойствами используется в качестве повторяющейся ячейки. На принципиальную технологическую возможность создания таких структур указывал Херман в [2].

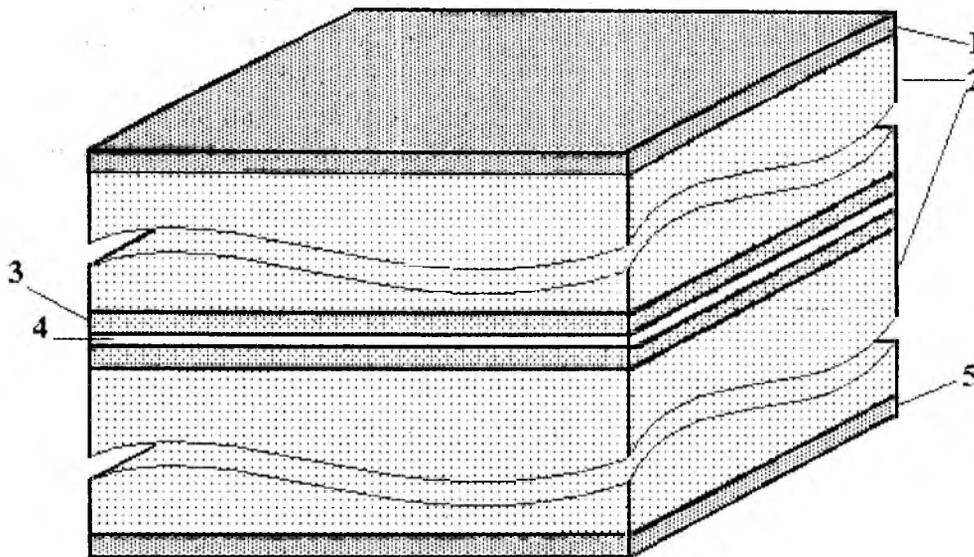
В данной работе рассматривается многослойная симметричная квантоворазмерная структура, созданная на основе $\text{GaAs}/\text{Al}_{x_1}\text{Ga}_{1-x_1}\text{As}/\text{Al}_{x_2}\text{Ga}_{1-x_2}\text{As}$. Исследованы особенности формирования энергетического спектра носителей в такой структуре и его отличия от энергетических спектров частиц в однослойных, симметричных и несимметричных структурах.

На рис. 1 показана структура полупроводникового кристалла, содержащего КРС на основе $\text{GaAs}/\text{Al}_{x_1}\text{Ga}_{1-x_1}\text{As}/\text{Al}_{x_2}\text{Ga}_{1-x_2}\text{As}$.

На рис. 2 показана энергетическая диаграмма исследуемой симметричной многослойной КРС, здесь также приведены обозначения эффективных масс частиц и квазичастиц, отличающихся от слоя к слою. Необходимо отметить в качестве одного из основных допущений при исследовании энергетического спектра носителей в данной структуре изотропность эффективных масс носителей и неизменность их в пределах каждого слоя [1, 2, 4].

В рассматриваемой структуре слой узкозонного материала GaAs толщиной не более длины волны де Бройля электронов в GaAs, ограничен с двух сторон равноширокими слоями более широкозонных материалов $\text{Al}_{x_1}\text{Ga}_{1-x_1}\text{As}$, ширина

которых также не превышает длины волны де Бройля электронов в $Al_{x1}Ga_{1-x1}As$. Содержание алюминия – $x1$, в твёрдых растворах замещения ограничивающих материалов одинакова, что обеспечивает одинаковую высоту ограничивающих потенциальных барьеров, а следовательно и симметрию всех квантово-ограниченных слоёв. Структура $Al_{x1}Ga_{1-x1}As/GaAs/Al_{x1}Ga_{1-x1}As$ в свою очередь заключена между ещё более широкозонными слоями $Al_{x2}Ga_{1-x2}As$, которые служат материалами подложки и низкоомных контактных площадок. Содержание алюминия - $x2$ в материалах слоёв $Al_{x2}Ga_{1-x2}As$ также одинаково, что обеспечивает полную симметрию структуры $GaAs/Al_{x1}Ga_{1-x1}As/Al_{x2}Ga_{1-x2}As$, кроме того, толщина слоёв $Al_{x2}Ga_{1-x2}As$ намного превышает длину волны де Бройля электронов в $Al_{x2}Ga_{1-x2}As$ и эти слои, таким образом, являются барьерными или ограничивающими (неквантоворазмерными).



- 1, 5 – металлизация контактных площадок разводки и общего электрода подложки;
- 2 – слои подложки и ограничивающие (буферные) слои $Al_{x2}Ga_{1-x2}As$;
- 3 – квантоворазмерные ограничивающие (барьерные) слои $Al_{x1}Ga_{1-x1}As$;
- 4 – квантово-ограниченный слой GaAs.

Рис. 1

Эффективные массы частиц и квазичастиц в каждом материале и их зависимость от мольных 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 [11] по соотношениям, представленным в табл. 1.

Таблица 1

Материал	GaAs	AlAs	$Al_xGa_{1-x}As$
Параметр			
$E_g, эВ$	1,424	3,018	$1,424+1,247 \cdot x, 0 < x < 0,45$ $1,424+1,247 \cdot x+1,427 \cdot (x-0,45), 0,45 < x < 1,0$
m_e^*/m_0	0,067	0,124	$0,067+0,057 \cdot x$
γ_1	6,85	3,45	$6,85-3,4 \cdot x$
γ_2	2,1	0,68	$2,1-1,42 \cdot x$

В табл. 1 m_e^* - эффективная масса электрона; m_0 - масса свободного электрона; γ_1 и γ_2 - постоянные Латтингера. Согласно [11] эффективные массы тяжелой и легкой дырок могут быть вычислены по формулам:

$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{(\gamma_1 - 2 \cdot \gamma_2)}, \quad (1)$$

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

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

Высоты барьеров для электронов в зоне проводимости и для легких и для тяжелых дырок в валентной зоне определяются из полуэмпирического правила Миллера [15]. Согласно этому правилу (для соединений $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$ и их твердых 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 относятся как 65% и 35% от общей разности между шириной запрещенной зоны широкозонного и узкозонного материалов. На рис. 2 показана энергетическая диаграмма структуры, изображенной на рис. 1.

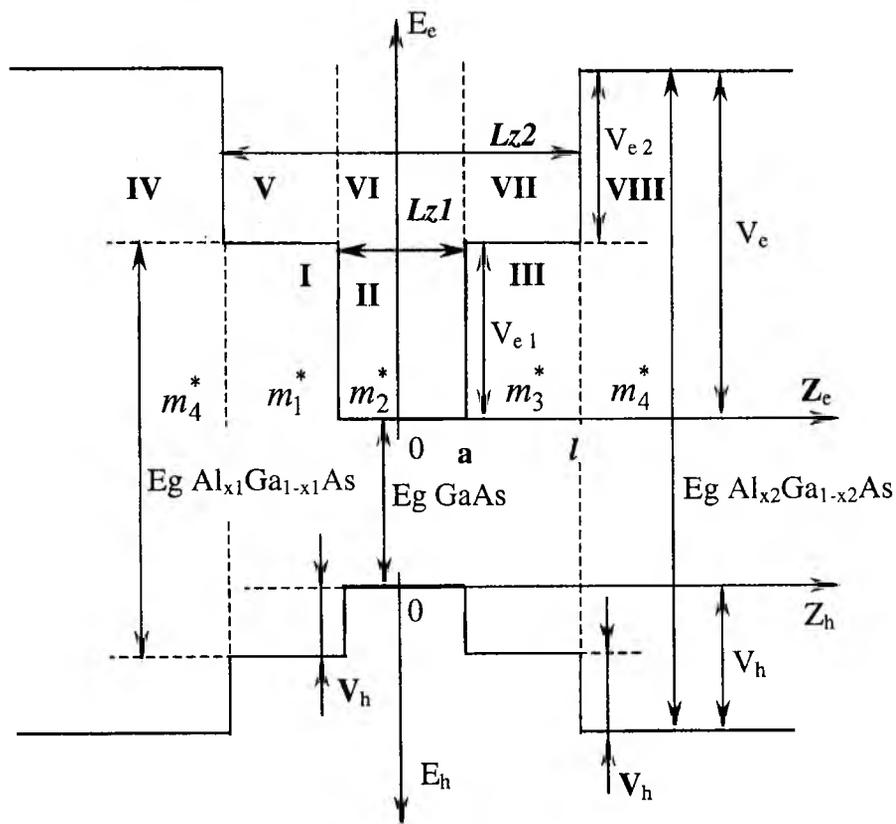


Рис. 2

На рис. 2 энергия электронов отсчитывается от дна зоны проводимости 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 А).

Таким образом, на рис. 2 для областей I, III, V и VII:

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

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

а для областей IV и VIII:

$$V_{e2} = 0,65 \cdot (E_g \text{Al}_{x2}\text{Ga}_{1-x2}\text{As} - E_g \text{Al}_{x1}\text{Ga}_{1-x1}\text{As}), \quad (5)$$

$$V_{h2} = 0,35 \cdot (E_g \text{Al}_{x2}\text{Ga}_{1-x2}\text{As} - E_g \text{Al}_{x1}\text{Ga}_{1-x1}\text{As}), \quad (6)$$

где V_{e1}, V_{e2} - высоты потенциальных барьеров для электронов в зоне проводимости на соответствующих гетерограницах, эВ;

V_{h1}, V_{h2} - высоты потенциальных барьеров для дырок в валентной зоне, эВ;

x_1, x_2 - молярные доли алюминия в соответствующих слоях арсенида галлия;

E_g - ширина запрещённой зоны материала, эВ.

Для определения собственных значений энергии электронов, лёгких и тяжелых дырок в квантоворазмерной структуре, энергетический профиль которой показан на рис. 2 необходимо решить стационарное уравнение Шредингера, которое для каждой из областей записывается так:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial z^2} + V_1 \cdot \Psi_1 = E \cdot \Psi_1, \quad \left\{ \begin{array}{l} -l \leq z \leq -a \\ 0 < E \leq V_1 \end{array} \right\}, \quad (7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_2, \quad \left\{ \begin{array}{l} -a \leq z \leq +a \\ 0 < E \leq V_1 \end{array} \right\}, \quad (8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial z^2} + V_1 \cdot \Psi_3 = E \cdot \Psi_3, \quad \left\{ \begin{array}{l} +a \leq z \leq +l \\ 0 < E \leq V_1 \end{array} \right\}, \quad (9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_3} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_4}{\partial z^2} + (V_1 + V_2) \cdot \Psi_4 = E \cdot \Psi_4, \quad \left\{ \begin{array}{l} -\infty \leq z \leq -l \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_5}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_5, \quad \left\{ \begin{array}{l} -l \leq z \leq -a \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_6}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_6, \quad \left\{ \begin{array}{l} -a \leq z \leq +a \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (12)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_7}{\partial z^2} = E \cdot \Psi_7, \quad \left\{ \begin{array}{l} +a \leq z \leq +l \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (13)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_3} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_8}{\partial z^2} + (V_1 + V_2) \cdot \Psi_8 = E \cdot \Psi_8, \quad \left\{ \begin{array}{l} +l \leq z \leq +\infty \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}. \quad (14)$$

В уравнениях (7) - (14) нумерация волновых функций Ψ - (1 - 8) соответствует нумерации областей (I - VIII) на рис. 2.

Введём обозначения:

$$\frac{2m_1}{\hbar^2} \cdot (V_1 - E) = k_1^2, \quad (15)$$

$$\frac{2m_2}{\hbar^2} \cdot E = k_2^2, \quad (16)$$

$$\frac{2m_3}{\hbar^2} \cdot (V_1 + V_2 - E) = k_3^2, \quad (17)$$

$$\frac{2m_1}{\hbar^2} \cdot E = k_4^2. \quad (18)$$

С учётом обозначений (15) - (18) систему уравнений (7) - (14) можно переписать так:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial z^2} - k_1^2 \cdot \Psi_1 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} -l \leq z \leq -a \\ 0 < E \leq V_1 \end{array} \right\}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_2 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} -a \leq z \leq +a \\ 0 < E \leq V_1 \end{array} \right\}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial z^2} - k_1^2 \cdot \Psi_3 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} +a \leq z \leq +l \\ 0 < E \leq V_1 \end{array} \right\}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_4}{\partial z^2} - k_3^2 \cdot \Psi_4 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} -\infty \leq z \leq -l \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_5}{\partial z^2} + k_4^2 \cdot \Psi_5 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} -l \leq z \leq -a \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_6}{\partial z^2} + k_2^2 \cdot \Psi_6 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} -a \leq z \leq +a \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (24)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_7}{\partial z^2} + k_4^2 \cdot \Psi_7 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} +a \leq z \leq +l \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}, \quad (25)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_8}{\partial z^2} - k_3^2 \cdot \Psi_8 = 0, \quad \left\{ \begin{array}{l} +l \leq z \leq +\infty \\ V_1 \leq E \leq V_2 \end{array} \right\}. \quad (26)$$

Решения уравнений (19) - (26) могут быть записаны в виде [1, 9, 10]:

$$\Psi_1 = A_1 \cdot \exp(k_1 z) + B_1 \cdot \exp(-k_1 z), \quad (27)$$

$$\Psi_2 = A_2 \cdot \cos(k_2 z) + B_2 \cdot \sin(k_2 z), \quad (28)$$

$$\Psi_3 = A_3 \cdot \exp(k_1 z) + B_3 \cdot \exp(-k_1 z), \quad (29)$$

$$\Psi_4 = A_4 \cdot \exp(k_3 z) + B_4 \cdot \exp(-k_3 z), \quad (30)$$

$$\Psi_5 = A_5 \cdot \cos(k_4 z) + B_5 \cdot \sin(k_4 z), \quad (31)$$

$$\Psi_6 = A_6 \cdot \cos(k_2 z) + B_6 \cdot \sin(k_2 z), \quad (32)$$

$$\Psi_7 = A_7 \cdot \cos(k_4 z) + B_7 \cdot \sin(k_4 z), \quad (33)$$

$$\Psi_8 = A_8 \cdot \exp(k_3 z) + B_8 \cdot \exp(-k_3 z). \quad (34)$$

Требования непрерывности волновой функции и её первой производной на границах раздела яма – барьер дают трансцендентные уравнения для определения собственных значений энергии частиц и квазичастиц для чётных и нечётных функций:

$$\operatorname{tg}(k_2 \cdot a) = \frac{k_1}{m_1^*} \cdot \frac{m_2^*}{k_2}, \left\{ \begin{array}{l} -a \leq z \leq +a \\ 0 \leq E \leq V1 \end{array} \right\} - \text{чётные решения}, \quad (35)$$

$$\operatorname{ctg}(k_2 \cdot a) = -\frac{k_1}{m_1^*} \cdot \frac{m_2^*}{k_2}, \left\{ \begin{array}{l} -a \leq z \leq +a \\ 0 \leq E \leq V1 \end{array} \right\} - \text{нечётные решения}, \quad (36)$$

$$\operatorname{tg}(k_4 \cdot l) = \frac{k_3}{m_4^*} \cdot \frac{m_1^*}{k_4}, \left\{ \begin{array}{l} -l \leq z \leq +l \\ V1 \leq E \leq V2 \end{array} \right\} - \text{чётные решения}, \quad (37)$$

$$\operatorname{ctg}(k_4 \cdot l) = -\frac{k_3}{m_4^*} \cdot \frac{m_1^*}{k_4}, \left\{ \begin{array}{l} -l \leq z \leq +l \\ V1 \leq E \leq V2 \end{array} \right\} - \text{нечётные решения}. \quad (38)$$

Решения системы (27) - (34) записаны отдельно для собственных значений энергии частиц, лежащих ниже потенциального барьера $V1$ (- выражения (35), (36)) и ниже $V2$, но выше $V1$ (- выражения (37), (38)) как для чётных, так и для нечётных состояний.

Расчеты конкретных значений энергии частиц проводились по данным, приведенным в табл. 2, там же приведены численные значения энергии электронов, рассчитанные для заданных параметров несимметричной КРС. Отсчет энергии электронов ведется от границы зоны проводимости наиболее узкозонного в данной структуре материала – GaAs.

Расчёты собственных значений энергии лёгких и тяжёлых дырок проводятся по аналогичной методике по тем же формулам ((35) – (38)), с той лишь разницей, что для дырок подставляются соответствующие значения эффективных масс и высоты ограничивающих барьеров, рассчитываемые по формулам (1), (2) и (4), (6) соответственно.

В таблице 2 также приведены собственные значения энергии электронов, рассчитанные для симметричных КРС, с шириной квантово-ограниченного слоя, соответствующей как “узкой”, так и “широкой” частям несимметричной КРС и с высотами ограничивающих барьеров, соответствующих как $V1$, так и $V1+V2$ несимметричной КРС.

Таблица 2

	A = 20 A, l = 60 A	a = 60 A		a = 20 A	
	X1 = 0,3; x2 = 0,9	x = 0,3	x = 0,9	x = 0,3	x = 0,9
№	Ve1 = 0,243 eB, Ve2 = 0,822 eB	Ve = 0,243 eB	Ve = 1,065 eB	Ve = 0,243 eB	Ve = 1,065 eB
1	0,017	2,615 10 ⁻³	2,801 10 ⁻³	0,02	0,024
2	0,067	0,01	0,011	0,076	0,095
3	0,149	0,023	0,025	0,162	0,213
4	0,241	0,042	0,045	0,242	0,375
5	0,26	0,065	0,07	-	0,578
6	0,311	0,093	0,101	-	0,809
7	0,395	0,125	0,137	-	1,023
8	0,513	0,162	0,179	-	-
9	0,664	0,201	0,226	-	-
10	0,846	0,239	0,279	-	-
11	1,057	-	0,337	-	-
12	-	-	0,401	-	-
13	-	-	0,47	-	-
14	-	-	0,544	-	-
15	-	-	0,622	-	-

Список литературы: 1. Физика полупроводниковых лазеров: Пер. с японск. /Под ред. Х. Такумы. М.: Мир, 1989. 310с. 2. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки: Пер с англ. М.: Мир 1989. 240 с. 3. Бузанёва Е.В. Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь, 1990. 304 с. 4. Т. Андо и др. Электронные свойства двумерных систем: Пер. с англ. М.: Мир, 1985. 416 с. 5. Л. Эсаки Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры.: Пер с англ. /Под ред. Л.Ченга, К. Плога. М.: Мир 1989. 584 с. 6. Полупроводниковые инжекционные лазеры. Динамика, модуляция, спектры: Пер. с англ. /Под ред У. Тсанга. М.: Радио и связь, 1990. – 320 с. 7. Гауэр Дж. Оптические системы связи: Пер. с англ. М.: Радио и связь, 1989. 504 с. 8. Справочник по лазерной технике: Пер. с нем. М.: Энергоатомиздат, 1991. 504 с. 9. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников М.: Наука, 1978. 615 с. 10. Ч. Куммель Квантовая теория твёрдых тел: Пер. с англ. М.: Наука, 1967. 491 с. 11. 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.

Харьковский национальный
университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 20.03.2002