

УДК 004.415:621.383.9

А.В. ПОПЛАВСЬКИЙ, І.А. ІВАНОВ, О.А. ІВАНОВ, Н.С. ЧЕРТОВА

УНІВЕРСАЛЬНЕ ПРОГРАМНЕ СЕРЕДОВИЩЕ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА МОДЕЛЮВАННЯ КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ ГЕТЕРОНАНОСТРУКТУР

*Вінницький національний технічний університет.
вул. Хмельницьке шосе, 95, Вінниця, Україна*

Анотація. Стаття присвячена дослідженню квантово-розмірних гетероструктур на основі GaAs. Також у статті приведені результати моделювання та розрахунку квантових неоднорідностей вищезазначених структур, з використанням розробленого програмного комплексу.

Аннотация. Статья посвящена исследованию квантово-размерных гетероструктур на основе GaAs. Также в статье приведены результаты моделирования и расчета квантовых неоднородностей вышеуказанных структур, с использованием разработанного программного комплекса.

Abstract. Article describes the quantum-dimensional heterostructures based on GaAs. Also in the article the results of simulation and calculation of quantum inhomogeneities above mentioned structures, with use of developed software.

Ключові слова: напівпровідниковий лазер, гетероструктури, програмний комплекс, квантові ями, квантові точки.

ВСТУП

Квантово-розмірні гетероструктури (КРС) стали за останні роки одним з основних об'єктів досліджень у фізиці, техніці і технології напівпровідників. Так називають структури, активні області яких, тобто області в яких відбуваються основні електронні процеси, мають характерні розміри близько де-бройлівської довжини хвилі електронів, що призводить до квантування їх енергії. Ці структури класифікують по розмірності електронного газу в активних областях на гетероструктури з двовимірним (2D) газом або гетероструктури з квантовими ямами, одновимірним (1D) газом або гетероструктури з квантовими нитками та нуль вимірним (0D) газом або гетероструктури з квантовими точками. Друга назва підкреслює основну особливість таких структур, з якою пов'язані їх основні властивості і застосування - це наявність квантування електронного газу, обумовленого просторовим обмеженням руху електронів в одному, двох або всіх трьох напрямках. Крім відносно простих структур з ізольованими квантово-розмірними областями широко вивчаються і більш складні структури, в яких має місце взаємодія цих областей між собою, що призводить до нових квантових ефектів. На даний момент найбільш добре вивчені гетеронаноструктури, що містять періодичну послідовність пов'язаних квантових ям, - гетероструктури з квантовими надгратках [1].

Також великої уваги заслуговують масиви пов'язаних квантових точок, оскільки квантово-розмірні області мають характерні розміри порядку одиниць або десятки нанометрів. Область електроніки, пов'язана з вивченням і застосуванням КРС і інших подібних структур отримала назву наноелектроніки. В даний час найбільшу зацікавленість дослідників викликають гетеронаноструктури з квантовими ямами та квантовими точками на основі арсеніду галію (GaAs) та його твердих розчинів ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ і $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) різного складу $x = 0,1-1$. Ці матеріали мають відповідну для застосування в багатьох оптоелектронних приладах (світло діодах, лазерах та ін.), так звану прямозонну енергетичну структуру з шириною забороненої зони $E_g \sim 1\text{eV}$, і відносно малу ефективну масу електронів $m_e \sim 0,05 m_0$, де m_0 - маса електрона у вакуумі, що полегшує створення умов для розмірного квантування. Основне технічне застосування таких структур знайде своє місце у розробках світловипромінюючих приладів, перш за все лазерів для волоконнооптичних ліній зв'язку. У зв'язку з найвищим рівнем розвитку кремнієвої мікроелектронної технології було б бажано створити ефективні джерела випромінювання на основі кремнію - основного матеріалу сучасної напівпровідникової електроніки. Проте через несприятливу зонну структуру Si, випромінюючі структури на його основі поки не можуть конкурувати зі структурами на основі GaAs [1-3].

КВАНТОВОРОЗМІНИЙ ЕФЕКТ І КРС

Відповідно до законів квантової механіки обмеження руху частинки в просторі в будь-якому напрямку стінками потенційної ями, ширина якої L порівнянна з де-бройлевскою довжиною хвилі частинки

$$\lambda_e = h / (2m_e E)^{1/2},$$

де m_e – ефективна маса частки, E – її кінетична енергія, призводить до квантування відповідної компоненти енергії, яка може приймати тільки дискретні значення. У GaAs ефективна маса електронів в зоні провідності $m_e = 0,07m_0$. У валентній зоні GaAs є два сорти дірок: легкі і важкі, але в КРС підзона легких дірок зазвичай витісняється з потенційної ями, і основну роль в електричних явищах грають важкі дірки з ефективною масою $m_h = 0,5m_0$. Кінетична енергія теплового руху електронів і дірок при кімнатній температурі $E \approx 0,025$ еВ і, отже, $\lambda_e = 8$ нм для електронів, і ≈ 3 нм для дірок. Нанометровий масштаб і визначає характерний розмір структур, в яких проявляється розмірне квантування [3].

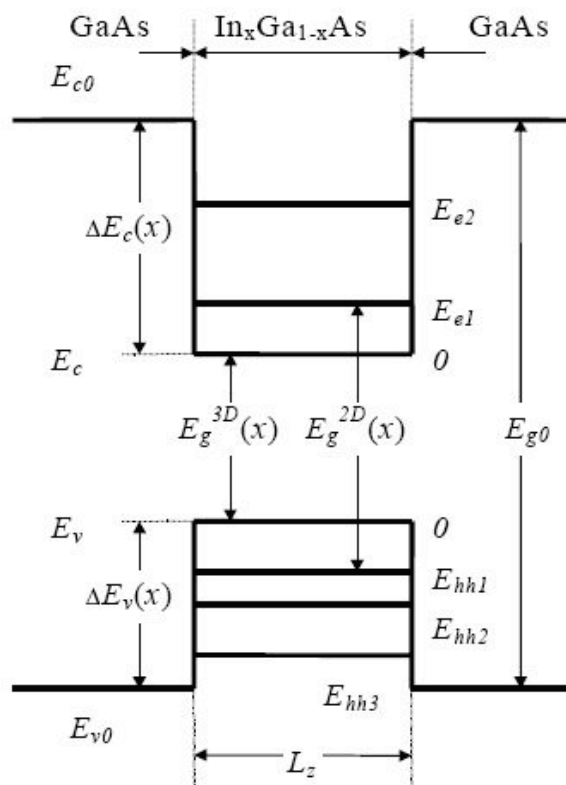


Рис. 1. Енергетична діаграма квантової ями InGaAs в GaAs

На рис. 1 наведена енергетична діаграма квантової ями (КЯ), створеної шляхом вбудовування тонкої, шириною $L \sim 1 \div 10$ нм, прошарку твердого розчину $In_xGa_{1-x}As$ ($x \sim 0,1-0,4$) у відносно більш товстий (~ 1 мкм) шар GaAs. У квантовій точці (КТ) подібна потенційна яма обмежує рух електронів і дірок по всіх трьох напрямках. Ширина забороненої зони твердого розчину $In_xGa_{1-x}As$ $E_g(x)$ менше ширини забороненої зони GaAs 1,43 еВ і лінійно зменшується з ростом x до значення 0,36 еВ в InAs. На кордоні цих матеріалів виникає гетероперехід так званого "охоплюючого" типу, при якому розриви зони провідності $\Delta E_c(x)$ і валентної зони $\Delta E_v(x)$ утворюють просторово суміщені потенційні ями відповідно для електронів і дірок [3].

Дискретний енергетичний спектр електронів E_{en} і дірок E_{hn} в нескінченно глибокої одномірної потенційній ямі шириною L_z описуються виразом:

$$E_{e(h)n} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{e(h)} L_z^2} n^2, \quad (1)$$

де $\hbar = h/(2\pi)$, квантове число $n = 1, 2, 3, \dots$. Вираз (1) визначає квантовані положення дна енергетичних підзон в квантовій ямі з безперервним для руху в площині (x, y) енергетичним спектром. Ширина забороненої зони розмірно-квантового шару, визначає енергію основного оптичного переходу в КЯ $E_{e1} - E_{h1}$ [4],

$$\Delta E_g^{2D}(x, L_z) = \Delta E_g^{3D}(x) + E_{e1}(x, L_z) + \Delta E_{h1}(x, L_z), \quad (2)$$

де $\Delta E_g^{3D}(x)$ - ширина забороненої зони в тривимірному матеріалі складі угідь ва x . Величини E_{e1} ($h1$) в загальному випадку залежать не тільки від L_z , але і від x . У такому ж наближенні квантову точку можна розглядати як куб зі сторонами $L_x = L_y = L_z$ і нескінченно високими потенційними стінками на границях. Енергетичний спектр квантової точки дається в цьому випадку сумою виразів виду (1) з кожного напрямку. Принципова відмінність енергетичного спектру квантової крапки від спектру квантової ями полягає в тому, що він повністю дискретний, як в атомах. Квантову точку з повною підставою можна розглядати як штучний над-атом, так як вона зазвичай складається з десятків і навіть сотень тисяч звичайних атомів. Їх роль полягає у формуванні потенційної ями з дискретним енергетичним спектром для одного електрона чи дірки [4-6].

При розрахунку спектру розмірного квантування реальних КЯ і КТ $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ необхідно враховувати кінцеву глибину потенційної ями, яка визначається розривами зон на гетеромежі і зазвичай не перевищує $\sim 0,5$ eV, і пружні напруги, що виникають із-за відмінності постійних ґраток $In_xGa_{1-x}As$ та $GaAs$ і викликають суттєві зміни енергетичного спектра електронів і дірок. На енергетичний спектр КРС, природно, впливають розміри і форма потенційної ями (остання визначається розподілом хімічного складу всередині розмірно-квантової сполуки), а також деякі інші фактори. У реальних квантових ямах і точках зазвичай є невелике число рівнів квантування [5].

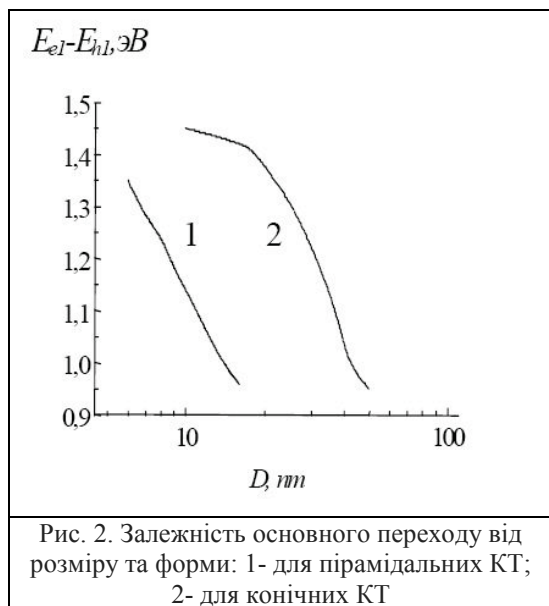


Рис. 2. Залежність основного переходу від розміру та форми: 1- для пірамідальних КТ; 2- для конічних КТ

Найбільш важким при розрахунку енергетичного спектру КТ є врахування їх форми, яка, як випливає з результатів експериментальних досліджень, може бути найрізноманітнішою в залежності від технологічних умов отримання ГКТ. До того ж часті КТ не повністю ізольовані один від одного, а мають деяке загальне підґрунтя у вигляді змочувального шару з того ж матеріалу, який веде себе як КЯ. У подібних випадках змінні в рівнянні Шредінґера не розділяються, і воно може бути вирішено тільки чисельно. В даний час проведені багато-чисельні розрахунки енергетичного спектра для деяких форм КТ, зокрема для КТ InAs в GaAs, що мають форму піраміди з квадратною основою зі стороною D і бічними гранями типу (110) , що стоїть на змочувальну шарі завширшки в один моношар, і конічних КТ з кутом при підставі ≈ 120 (такий кут вибраний з міркувань спрощення розрахунків). На рис. 2 показана залежність енергії основного переходу та $E_{e1} - E_{h1}$ від D для цих двох випадків [1-3].

Як видно з рисунку, при близьких значеннях розмірів основи піраміди і конуса D , пірамідальні КТ значно сильніше зменшують енергію основного переходу, ніж конічні КТ. Очевидно, це пов'язано з тим, що вони мають значно більший обсяг. Існують мінімальний і максимальний розмір тривимірної потенційної ями, при якій КТ виявляє свої властивості: перший визначається вимогою, щоб у КТ існував

хоча б один електронний рівень, другий, – щоб відстань між першим і другим рівнями в КТ було більше kT . Для кубічної КТ обидва розміри визначаються виконанням нерівностей [6]:

$$kT \leq E_1^{QW} \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e D^2} \leq \Delta E_c,$$

де E_1^{QW} – перший рівень у прямокутній квантовій ямі з шириною D з нескінченно високими стінками. Оцінка показала, що у системі GaAs/InAs для електронів $D_{\min} \approx 4 \text{ нм}$, $D_{\max} \approx 20 \text{ нм}$, тобто оптимальний розмір квантової ями лежить у доволі вузьких межах. Для дірок обидва значення ще менші.

Для моделювання описаних структур використано спеціально створений програмний комплекс, який дозволяє розраховувати основні параметри напівпровідникового лазера на основі квантово-розмірних структур. Результатом роботи програми є можливість наочно представити результати розрахунків, та отримати графіки залежності досліджуваних параметрів.

Необхідність цього комплексу пов'язана з дорогим технологічним процесом виготовлення квантово-розмірних структур і складністю безпосереднього розрахунку самої структури. Даний комплекс дозволяє в автоматизованому режимі розраховувати необхідні параметри середовища, потужності лазера, довжину хвилі генерації, не використовуючи складні та об'ємні математичні обрахунки.

На рис. 3. Продемонстрований розрахунок основних параметрів активного тіла. Комплекс включає в себе можливість вибору необхідних матеріалів з запропонованого списку, також є можливість підібрати підкладки р-, n-типу, довжини хвилі на якій буде відбуватися генерація та бажані розміри лазера. В результаті підрахунків ми отримуємо необхідні концентрації для компонентів активного елемента, модель можливого лазера, також, значення ширини забороненої зони (в eV), питому провідність (в Сім/м) і показник заломлення.

На рис. 4 представлені результати розрахунку і графічна інтерпретація таких параметрів, як потужність для заданої довжини хвилі та пороговий струм, необхідний для її генерації. В залежності від вибраних типів відображення можливе представлення результатів роботи в вигляді двовимірного та тривимірного графіків.

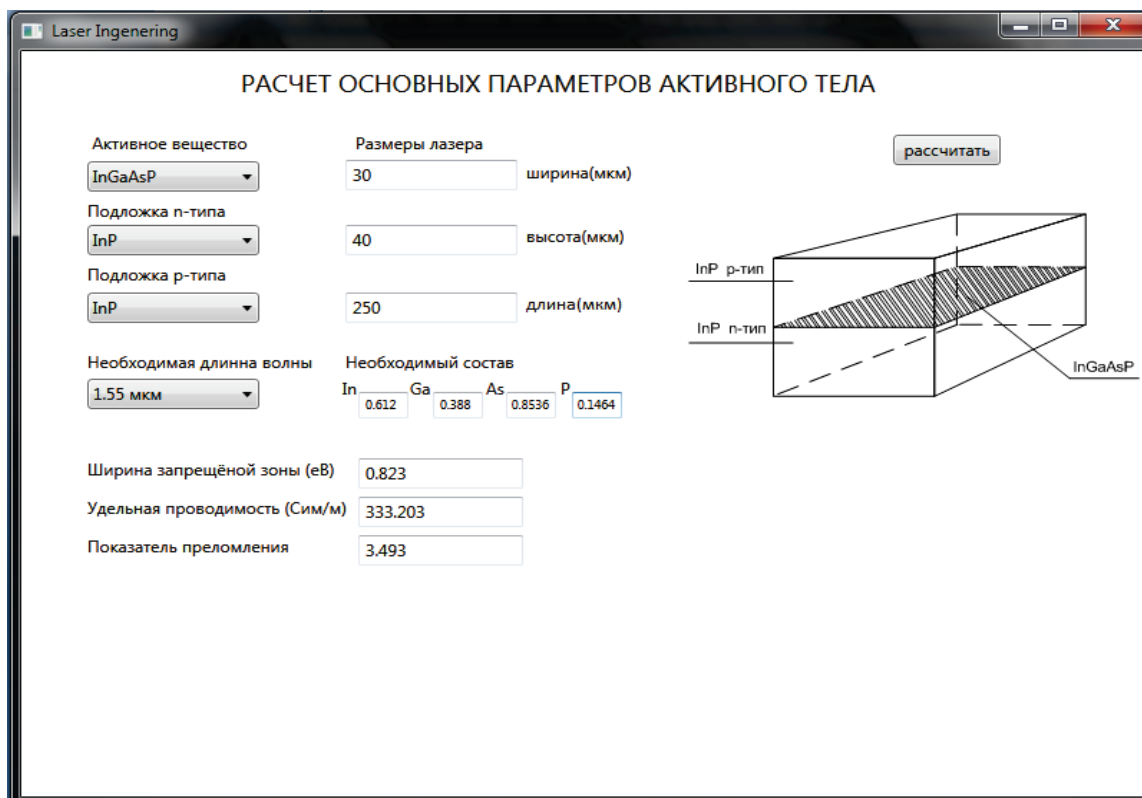


Рис. 3. Розрахунок основних параметрів активного тіла

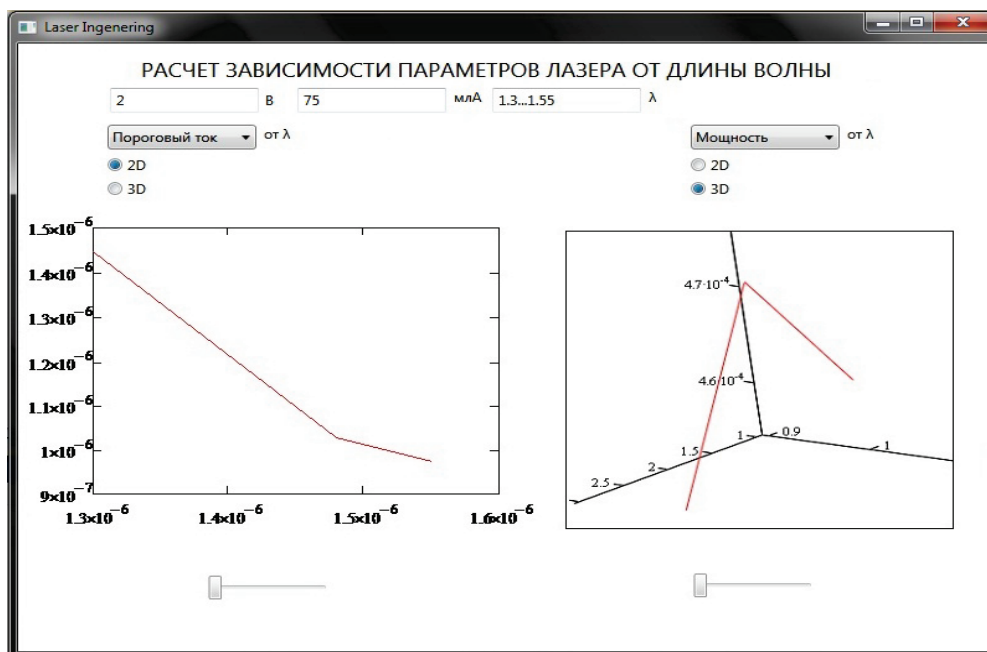


Рис. 4. Розрахунок основних параметрів лазера в залежності від довжини хвилі

В залежності від потреб можливо використовувати інші матеріали активного тіла, інформація про які вноситься в комплекс на програмному рівні. Також комплекс дає можливість розв'язувати обернені задачі, такі як знаходження оптимальних розмірів структури для генерації заданої довжини хвилі при заданій потужності.

ВИСНОВКИ

КРС являються головною технологією для виготовлення сучасних напівпровідникових лазерів, з низьким порогом генерації, можливістю вільного підбору довжини хвилі генерації, випромінюваної потужності. Розширення цієї технології призведе до суттєвого покращення якості лазерів та створення принципово нових систем на квантовому рівні з використанням передових здобутків сучасних нанотехнологій та автоматизованих систем проектування.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Демиховский В.Я. Физика квантовых низкоразмерных структур: [Монография] / В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. – М.: “Логос”, 2000. – 245с.
2. Карпович И.А. Фотоэлектрическая диагностика квантоворазмерных гетеро структур: [учебное пособие] / И.А. Карпович, Д.О. Филатов. – Изд. ННГУ: Н. Новгород, 1999. – 422с.
3. Байбородин Ю.В. Основы лазерной техники / Ю.В. Байбородин. – К: Вища Школа, 1981. – 378с.
4. James S. Harris. Semiconductor Optoelectronic Devices [Електронний ресурс] / James S. Harris // Center for Integrated Systems (CIS), Stanford University. – p. 328. – Тип доступу: <http://www-leland.Stanford.EDU/class/ee243> .
5. Yuri M. Galperin. Introduction to Modern Solid State Physics [Електронний ресурс] / Galperin M. Yuri . – 234p. – Тип доступу: <http://www.edu.ioffe.ru/> .
6. Alferov Zh. I. Semiconductor heterostructures [Електронний ресурс] / Zh. I. Alferov, V. M. Andreev, N. N. Ledentsov. – Тип доступу: <http://www.edu.ioffe.ru/> .

Надійшла до редакції 16.11.2010р.

ПОПЛАВСЬКИЙ А.В. – к.т.н., доцент кафедри інформаційного менеджменту, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна.

ІВАНОВ І.А. – студент 4-го курсу кафедри лазерної та оптоелектронної техніки, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна.

ІВАНОВ О.А. – аспірант кафедри лазерної та оптоелектронної техніки, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна.

ЧЕРТОВА Н.С. – студентка 4-го курсу кафедри адміністративного та інформаційного менеджменту, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна.