

УДК 537.311

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ Al И Ga НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs

В.Н. МУГНЕЦЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 15 декабря 2008 г.)

В рамках метода модифицированного потенциала Вуда–Саксона исследовано влияние взаимной диффузии атомов Al и Ga на ограничивающий потенциал и зонную структуру трехмерной сверхрешетки, состоящей из изначально сферических квантовых точек GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Показано, что диффузия приводит к исчезновению сферической симметрии составляющих сверхрешетку квантовых точек и к уширению энергетических минизон сверхрешетки.

1. Введение

Исследование влияния взаимной диффузии компонент полупроводниковых гетероструктур на электронные и оптические свойства квантовых точек (КТ) представляет большой интерес, особенно с точки зрения прикладной физики. Имеются многообещающие результаты, касающиеся применения взаимной диффузии, индуцированной быстрым термическим отжигом на послеростовом этапе с целью создания устройств с контролируемыми параметрами [1-6]. Проведенные в работах [7,8] теоретические расчеты указывают на увеличение порога поглощения КТ вследствие диффузии, что соответствует голубому смещению спектра фотолюминесценции, наблюдаемому на опыте [6].

В настоящее время ведутся интенсивные исследования в области технологий по получению упорядоченных систем – двумерных [9-11] и трехмерных [12,13] сверхрешеток (СР), состоящих из КТ почти одинаковой формы и размеров, с целью их применения, в частности, в солнечных элементах и лазерах на КТ.

Появились теоретические работы, посвященные исследованию электронных и оптических свойств сверхрешеток из квантовых точек (СРКТ) [14,15]. Так, например, в [14] вычислены сверхрешеточные минизоны в зоне проводимости и валентной зоне трехмерной СР, состоящей из КТ, имеющих форму параллелепипеда, а в [15] изучено влияние внешнего электрического поля на коэффициент поглощения света однослойной СР, состоящей из сферических КТ. В этих работах применяется модель КТ с прямоугольным ограничивающим потенциалом. Однако взаимная диффузия составляющих гетероструктуру компонент, а также поля внутренних напряжений, приводят к сглаживанию профиля

ограничивающего потенциала КТ, что приводит к значительным изменениям различных характеристик систем, состоящих из КТ [16-18].

В данной работе исследовано влияние взаимной диффузии атомов Al и Ga на ограничивающий потенциал и минизонную структуру трехмерной СР, состоящей из изначально сферических КТ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Показано, что вследствие диффузии сферическая симметрия КТ, составляющих СР, исчезает, а квантовое взаимодействие между ними усиливается, что приводит к значительному изменению минизонной структуры СР. Расчеты проведены в рамках метода сильной связи с применением модифицированного потенциала Вуда-Саксона для описания потенциала отдельной КТ.

2. Потенциал сверхрешетки

Рассмотрим влияние диффузии атомов алюминия и галлия на ограничивающий потенциал сверхрешетки, состоящей из изначально сферических КТ Ga_{1-x}Al_xAs / GaAs.

Трехмерное уравнение диффузии с начальным условием

$$x(\mathbf{r}, 0) = x_0 \left\{ 1 - \sum_{\mathbf{r}_i} \theta(r_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \right\} \quad (1)$$

можно решить аналогично случаю одиночной КТ [7,17], в результате чего для концентрации диффундирующих атомов получаем:

$$x(\mathbf{r}, L) = x_0 - \frac{x_0 L}{2\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{r}_i} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \left\{ \exp \left[- \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| + r_0}{L} \right)^2 \right] - \exp \left[- \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| - r_0}{L} \right)^2 \right] \right\} - \frac{x_0}{2} \sum_{\mathbf{r}_i} \left[\Phi \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| + r_0}{L} \right) + \Phi \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| - r_0}{L} \right) \right], \quad (2)$$

где $L = 2(Dt)^{1/2}$ – диффузионная длина, D – коэффициент диффузии, изменяющийся в пределах $0.1 \times 10^{-18} \div 40 \times 10^{-18}$ см² / с для значений температуры отжига 800 ÷ 950 К [19], x_0 – начальная концентрация атомов алюминия, t – время, r_0 – начальный ($t = 0$) радиус КТ, $\theta(\xi)$ – функция единичного скачка, $\Phi(\eta)$ – интеграл ошибок, а суммирование проводится по координатам \mathbf{r}_i центров КТ. Если пренебречь влиянием примеси на состояние среды, то ширину запрещенной зоны СР можно представить в виде

$$E_g(x) = E_{g_0} + bx, \quad (3)$$

где $b = 1.247$ эВ [20], E_{g_0} – ширина запрещенной зоны GaAs, а x дается выражением (2).

Значение потенциала СР в зоне проводимости, рассчитанное от значения потенциала в области барьеров, до начала диффузии можно представить в виде [17]

$$V = Q[E_{g_0} - E_g(x)] = -Qbx, \quad (4)$$

где $Q = 0.6$ – доля разрыва, приходящаяся на зону проводимости.

На рис.1 представлены зависимости безразмерного потенциала (в единицах $V_0 = Qbx_0$) от безразмерных (в единицах r_0) декартовых координат X и Y в плоскости $Z = 0$ для различных значений безразмерной диффузионной длины $l = L/r_0$ для кубической СР (постоянные решетки по трем направлениям $|\mathbf{a}_x| = |\mathbf{a}_y| = |\mathbf{a}_z| \equiv a = 3r_0$). Видно, что диффузия приводит к уменьшению глубины потенциальной ямы КТ. Понижение потенциала в областях барьеров обусловлено конечным отношением объема СР к объему, занимаемому КТ до начала диффузии. Следует также отметить, что с увеличением диффузионной длины форма КТ стремится к кубическому, характерной для симметрии решетки.

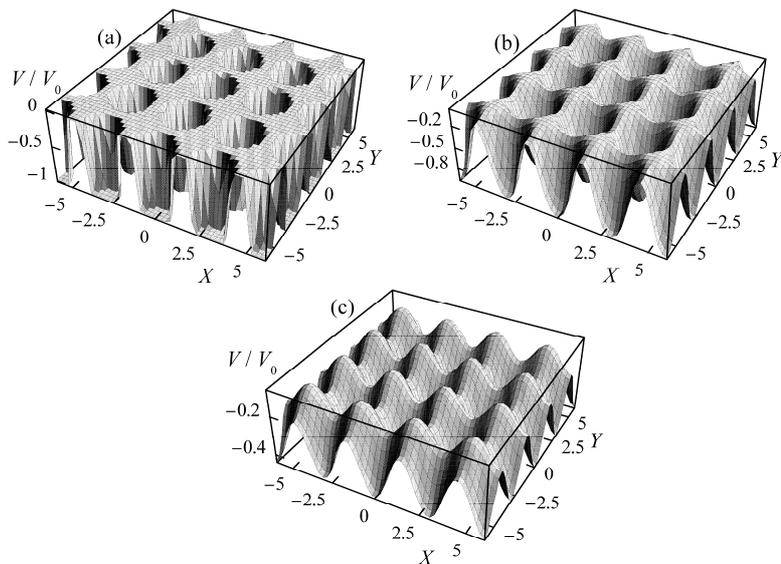


Рис.1. Зависимость потенциала СР от декартовых координат X и Y в плоскости $Z = 0$ для значений безразмерной диффузионной длины $l = 0.1$ (a), $l = 0.5$ (b), $l = 1$ (c).

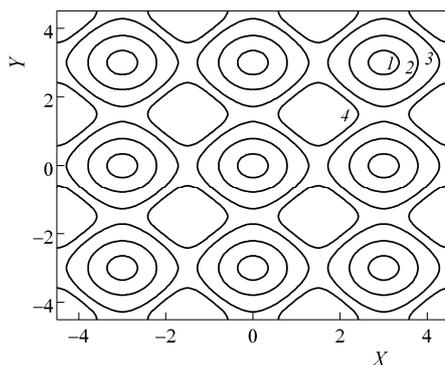


Рис.2. Эквипотенциальные линии потенциала СР для значений параметров $l = 1$, $a = 3r_0$: 1) $V/V_0 = -0.4$, 2) $V/V_0 = -0.3$, 3) $V/V_0 = -0.2$, 4) $V/V_0 = -0.15$.

На рис.2 приведены эквипотенциальные линии, соответствующие различным фиксированным значениям потенциала СР в плоскости $Z=0$ при значении диффузионной длины $l=1$. Из рисунка можно заметить, что изменение симметрии потенциала КТ сильно выражено для больших значений потенциала. Максимальное уменьшение значения потенциала происходит в точках $\mathbf{r}_{\min} = \mathbf{a}_p n + \mathbf{a}_q / 2$ ($p, q = X, Y, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), а наименьшее уменьшение – в точках $\mathbf{r}_{\max} = \mathbf{a}_p n + (\mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y + \mathbf{a}_z) / 2$ (см. рис.1), чем и обусловлен тот факт, что значение потенциала меньше $-0.15V_0$ в точках, находящихся вблизи точек \mathbf{r}_{\min} , но больше $-0.15V_0$ вблизи точек \mathbf{r}_{\max} (кривые 4 на рис.2).

3. Расчет основной минизоны

Как показано в работе [17], истинный диффузионный потенциал с достаточно высокой точностью можно заменить модифицированным потенциалом Вуда–Саксона, для которого известны энергия и волновая функция основного состояния.

В рамках приближений сильной связи [15,21] и ближайших соседей, для СР, обладающей кубической симметрией, заменой потенциала отдельной диффундированной КТ модифицированным потенциалом Вуда–Саксона, для зависимости энергии основной минизоны от волнового вектора \mathbf{k} получим:

$$E(\mathbf{k}) = E_1 + \Delta + 2E_a [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)], \quad (5)$$

где

$$\Delta = \int |\psi_1(r)|^2 [V(\mathbf{r}, l) - W(r, l)] d\mathbf{r} \quad (\Delta < 0), \quad (6)$$

$$E_a = \int \psi_1^*(|\mathbf{r} + \mathbf{a}|) [V(\mathbf{r}, l) - W(r, l)] \psi_1(r) d\mathbf{r} \quad (E_a < 0), \quad (7)$$

$$W(r, l) = -V_0 u(l) \{1 + \exp[(r - q(l)r_0) / \alpha(l)r_0]\}^{-1} \quad (8)$$

есть модифицированный потенциал Вуда–Саксона, $u(l)$, $q(l)$ и $\alpha(l)$ – параметры, зависящие от диффузионной длины, E_1 и $\psi_1(r)$ – энергия и волновая функция основного состояния электрона в отдельной КТ, соответственно [17].

На рис.3 изображены зависимости дна и потолка основной минизоны в зоне проводимости от диффузионной длины для различных значений постоянной кубической СР при значениях параметров $x_0 = 0.4$, $r_0 = 0.5a_B$ (a_B – боровский радиус в GaAs). На рисунке также приведены зависимости значения потенциального барьера в точках \mathbf{r}_{\min} от диффузионной длины (точечные линии). Для значений параметров $a = 3.5r_0$ и $a = 4r_0$ (рис.3б,с) как дно, так и потолок минизоны поднимаются с увеличением l ввиду увеличения энергии в отдельной КТ, а ширина минизоны увеличивается вследствие увеличения интеграла перекрытия из-за диффузии. При этом, чем меньше значение постоянной СР, тем быстрее происходит увеличение ширины минизоны с увеличением диффузионной длины. При достаточно малых значениях l дно и потолок минизоны почти

совпадают, т.е. до начала процесса диффузии мы имеем дело с системой КТ, квантовым взаимодействием между которыми можно пренебречь. Когда постоянная СР $a = 3r_0$, дно минизоны достигает максимума при $l \approx 0.915$ и начинает уменьшаться с дальнейшим увеличением l , так как увеличение ширины минизоны СР начинает преобладать над увеличением энергии отдельной КТ (рис.3а). Отметим также, что для значений постоянной СР $a = 3r_0$ и $a = 3.5r_0$, начиная с некоторого значения $l = l_{\min}(a)$, потолок минизоны проходит через уровень энергии потенциального барьера в точках \mathbf{r}_{\min} (рис.3а,б). Это значит, что для значений $l > l_{\min}(a)$ состояние, являющееся связанным в отдельной КТ, перестает быть связанным в СР.

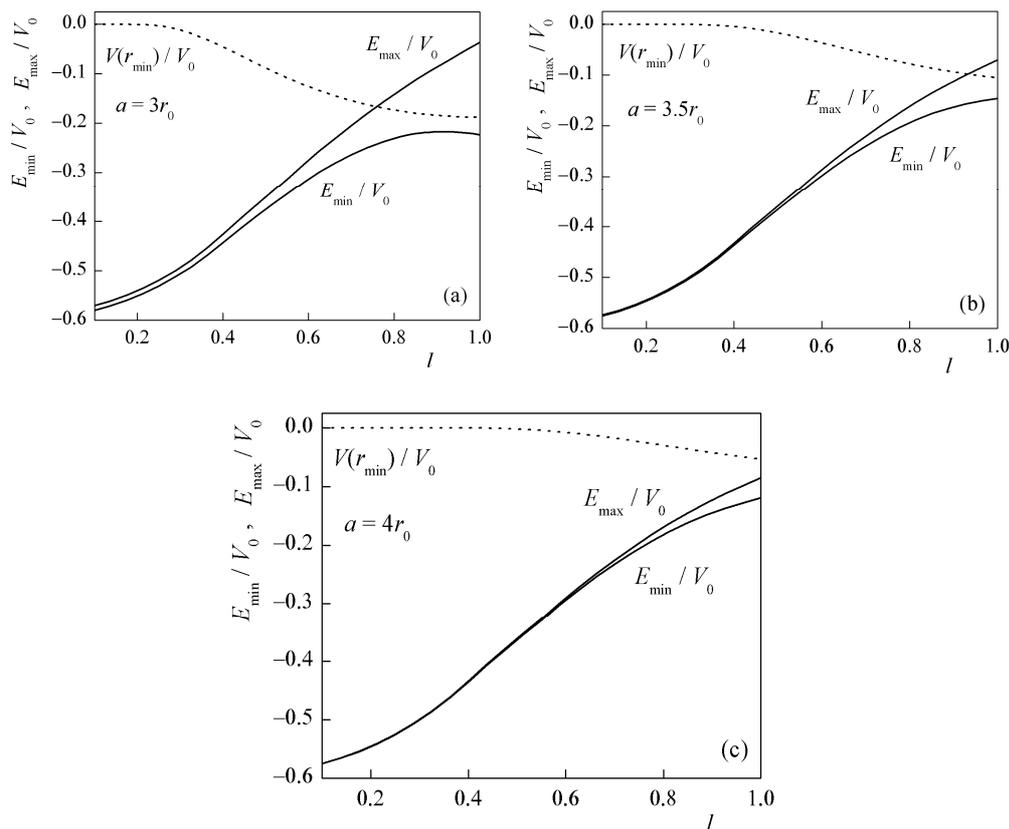


Рис.3. Зависимости дна (E_{\min}/V_0) и потолка (E_{\max}/V_0) основной минизоны в зоне проводимости от безразмерной диффузионной длины для различных значений постоянной кубической СР и при значениях параметров $x_0 = 0.4$, $r_0 = 0.5a_B$.

Полученные результаты указывают на возможность учета взаимной диффузии при расчете различных характеристик наногетероструктур. В частности, в лазерах на КТ, в которых роль активной резонансной среды играет СР из КТ, диффузия приведет к размытию уровней энергии и, как следствие, к ухудшению его рабочих параметров.

ЛИТЕРАТУРА

1. **R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva, S.Ruvimov, Z.Liliental-Weber.** Phys. Rev. B, **58**, R4262 (1998).
2. **C.Lobo, R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva.** Appl. Phys. Lett., **72**, 2850 (1998).
3. **S.J.Xu, X.C.Wang.** Appl. Phys. Lett., **72**, 3335 (1998).
4. **X.C.Wang, S.J.Xu.** J. Appl. Phys., **86**, 2687 (1999).
5. **S.Fafard, C.N.Allen.** Appl. Phys. Lett., **75**, 2374 (1999).
6. **Y.Ji, W.Lu, G.Chen, X.Chen, Q.Wang.** J. Appl. Phys., **93**, 1208 (2003).
7. **J.A.Barker, E.P.O'Railly.** Physica. E, **4**, 231 (1999).
8. **O.Gunawan, H.S.Djie, B.S.Ooi.** Phys. Rev. B, **71**, 205319 (2005).
9. **S.Kohmoto, H.Nakamura, T.Ishikawa, K.Asakawa.** Appl. Phys. Lett., **75**, 3488 (1999).
10. **S.Kohmoto, H.Nakamura, T.Ishikawa, K.Asakawa.** J. Electron. Mater., **29**, 525 (2000).
11. **H.Nakamura, S.Kohmoto, T.Ishikawa, K.Asakawa.** Physica E, **7**, 331 (2000).
12. **S.Kohmoto, H.Nakamura, S.Nishikawa, K.Asakawa.** Physica E, **13**, 1131 (2002).
13. **G.Springholz, M.Pinczolics, P.Mayer, et al.** Phys. Rev. Lett., **84**, 4669 (2000).
14. **D.L.Nika, E.P.Pokatilov, Q.Shao, A.A.Balandin.** Phys. Rev. B, **76**, 125417 (2007).
15. **M.G.Barseghyan, A.A.Kirakosyan.** Physica E, **27**, 474 (2005).
16. **Л.С.Петросян.** Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 173 (2002).
17. **В.Н.Мугнецян, А.А.Киракосян.** Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 83 (2007).
18. **В.Н.Мугнецян, А.А.Киракосян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 268 (2008).
19. **T.E.Schlesinger, T.Kuech.** Appl. Phys. Lett., **49**, 519 (1986).
20. **S.Adachi.** Appl. Phys., **53**, R1 (1985).
21. **Дж.Займан.** Принципы теории твердого тела. М., Мир, 1966.

Al-ի ԵՎ Ga-ի ՓՈՒԽԱՂԱՐՁ ԴԻՖՈՒԶԻԱՅԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ
GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԳԵՐՑԱՆՑՈՒՄ
ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՎՐԱ

Վ.Ն. ՄՈՒՂՆԵՑՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Վուդ–Սաքսոնի ձևափոխված պոտենցիալի մեթոդի շրջանակներում ուսումնասիրված է Al-ի և Ga-ի ատոմների փոխադարձ դիֆուզիայի ազդեցությունը նախապես գնդային համաչափությամբ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs քվանտային կետերից բաղկացած եռաչափ գերցանցի սահմանափակող պոտենցիալի և գոտիական կառուցվածքի վրա: Ցույց է տրված, որ դիֆուզիան բերում է գերցանցը կազմող քվանտային կետերի գնդային համաչափության վերացման և գերցանցի էներգիական մինիգոտիների լայնացման:

EFFECT OF Al AND Ga INTERDIFFUSION ON THE ELECTRONIC STATES
IN GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs SEMICONDUCTOR SUPERLATTICE

V.N. MUGHNETSYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The effect of interdiffusion of Al and Ga atoms on the confining potential and band structure of a three-dimensional superlattice, composed of initially spherical GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum dots, is investigated in the framework of the modified Wood–Saxon potential model. It is shown that the interdiffusion leads to the disappearance of the quantum dots' spherical symmetry and to the broadening of the superlattice energy minibands.