

УДК 537.311

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ И КОЭФФИЦИЕНТ ПОГЛОЩЕНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ

В.Л. АЗИЗ АХЧЕГАЛА

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 20 октября 2010 г.)

Изучено влияние взаимной диффузии атомов Al и Ga на ограничивающий потенциал, зонную структуру и коэффициент межзонного поглощения в одномерной сверхрешетке, состоящей из квантовых ям GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, с изначально прямоугольным ограничивающим потенциалом в рамках модели модифицированного потенциала Вуда–Саксона. Показано, что взаимная диффузия приводит к уширению энергетических минизон и наблюдаемому в эксперименте голубому смещению спектра поглощения.

1. Введение

В последнее время наблюдается нарастающий интерес к исследованию влияния взаимной диффузии составляющих компонент полупроводниковых гетероструктур на электронные и оптические свойства квантовых ям (КЯ) [1-3] и квантовых точек (КТ) [4,5] с целью практических применений. Уже имеются многообещающие результаты, касающиеся применения взаимной диффузии, индуцированной быстрым термическим отжигом на послеростовом этапе, с целью создания приборов с контролируемыми параметрами. Экспериментальные измерения и теоретические расчеты указывают на значительное голубое смещение и сокращение ширины спектра фотолюминесценции в КЯ [6,7] и КТ [8,9] вследствие диффузии, стимулированной послеростовым термическим отжигом.

В течение последних десятилетий был достигнут впечатляющий прогресс в области производства упорядоченных структур, таких как одномерные [10], двумерные [11-13] и трехмерные [14,15] сверхрешетки (СР). Такие гетероструктуры могут быть использованы в качестве активной среды в солнечных элементах и в лазерах на гетероструктурах. Показано, что диффузия, осуществленная послеростовым термическим отжигом, приводит к улучшению как термальной стабильности, так и электронных характеристик таких систем [16].

В данной работе изучено влияние взаимной диффузии атомов Al и Ga на ограничивающий потенциал, зонную структуру и межзонное поглощение монохроматического излучения в одномерной СР, состоящей из изначально

прямоугольных КЯ GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Показано, что вследствие диффузии квантовое взаимодействие между КЯ, составляющими СР, усиливается, приводя к значительному уширению минизон и к голубому смещению спектра межзонного поглощения, наблюдаемому в экспериментах с КЯ [1,2].

2. Ограничивающий потенциал и первая минizona

Рассмотрим влияние диффузии атомов Al и Ga на ограничивающий потенциал одномерной СР, состоящей из изначально прямоугольных квантовых ям GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

Выражение для концентрации диффундированных атомов в одномерной СР, которое получается как решение уравнения Фика [3] с начальным условием

$$x(z, 0) = x_0 \left[1 - \sum_{z_i} \theta(z_0 - |z - z_i|) \right], \quad (1)$$

принимает следующий вид

$$x(z, L) = x_0 \left(1 - \frac{1}{2} \sum_{z_i} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{z_0 - (z - z_i)}{L} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{z_0 + (z - z_i)}{L} \right) \right] \right), \quad (2)$$

где x_0 – начальная концентрация атомов Al, z_0 – полуширина КЯ до начала процесса диффузии ($\tau = 0$), $L = (4\pi D\tau)^{1/2}$ – диффузионная длина, D – коэффициент диффузии, τ – время, $\theta(\xi)$ – функция единичного скачка, $\operatorname{erf}(\xi)$ – интеграл ошибок. Суммирование проводится по координатам центров КЯ z_i .

Ширина запрещенной зоны СР дается выражением

$$E_g(x) = E_{g0} + Cx(z, L), \quad (3)$$

где $C = 1.247$ эВ, E_{g0} – ширина запрещенной зоны GaAs.

Потенциал СР в зоне проводимости имеет вид

$$V = Q[E_{g0} - E_g(x)] = -QCx(z, L), \quad (4)$$

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

На рис.1 представлены зависимости потенциала СР от безразмерной координаты $t = z/z_0$ вдоль направления роста СР при различных значениях безразмерной диффузионной длины $l = L/z_0$ для значения периода СР $\beta = 2.5t_0$ ($t_0 = 2z_0/a_B$, $a_B = 104$ Å – эффективный радиус Бора в GaAs) и для значения начальной концентрации атомов Al в области барьера $x_0 = 0.2$. Из рисунка очевидно, что диффузия приводит к сглаживанию прямоугольного профиля ограничивающего потенциала. Глубина ям, как и высота барьеров, уменьшаются, и в предельном случае $l \rightarrow \infty$ ямы и барьеры исчезают.

В рамках приближения сильной связи волновая функция $\psi_{1k}(z)$ и энергия электрона в первой минизоне E_{1k} в одномерной СР даются следующими выражениями [17]:

$$\psi_{1k}(z) = \sum_{t_i} \exp(ikt_i) \psi_1(t - t_i), \quad (5)$$

$$E_{1k} = E_1 + \Delta_1 + 2E_{1a} \cos(k\beta), \quad (6)$$

где

$$\Delta_1 = \int |\psi_1(t)|^2 [V(t) - V_0(t)] dt, \quad (7)$$

$$E_{1a} = \int \psi_1^*(t + t_i) [V(t) - V_0(t)] \psi_1(t) dt, \quad (8)$$

E_1 и $\psi_1(t)$ – энергия и волновая функция основного состояния электрона в одиночной КЯ, соответственно, $V(t)$ – потенциал СР, $V_0(t)$ – потенциал одиночной КЯ, $t_i = z_i/z_0$.

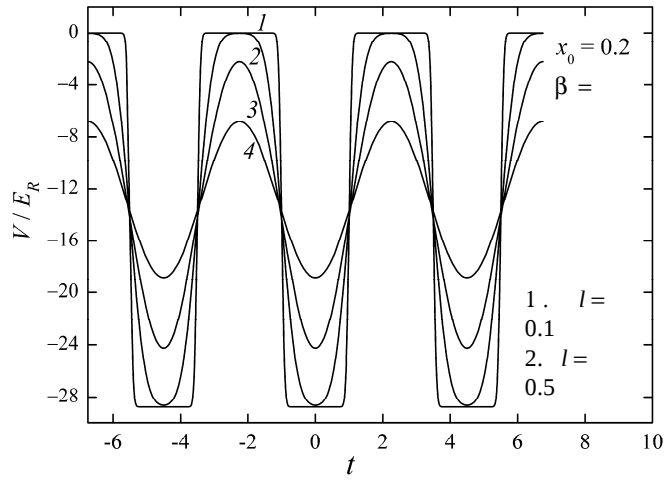


Рис.1. Зависимости потенциала СР от координаты вдоль направления роста СР.

Заменой реального ограничивающего потенциала модифицированным потенциалом Вуда–Саксона приходим к следующему выражению для волновой функции электрона в одиночной КЯ [18]:

$$\psi_1(y) = Ay^v (1-y)^\mu {}_2F_1(v+\mu, v+\mu+1, 2v+1; y), \quad (9)$$

где

$$y = \{1 + \exp[(|t| - q(l))/\alpha(l)]\}^{-1}, \quad (10)$$

$q(l)$ и $a(l)$ – безразмерные параметры, обеспечивающие наилучшее соответствие между диффузионным потенциалом и модифицированным потенциалом Вуда–Саксона, ${}_2F_1(a, b, c; z)$ – гипергеометрическая функция [19].

Энергию основного состояния находим из следующих граничных условий:

$$\begin{cases} \psi_1'(y(0)) = 0, & \psi(x) = \psi(-x), \\ \psi_1(y(0)) = 0, & \psi(x) = -\psi(-x). \end{cases} \quad (11)$$

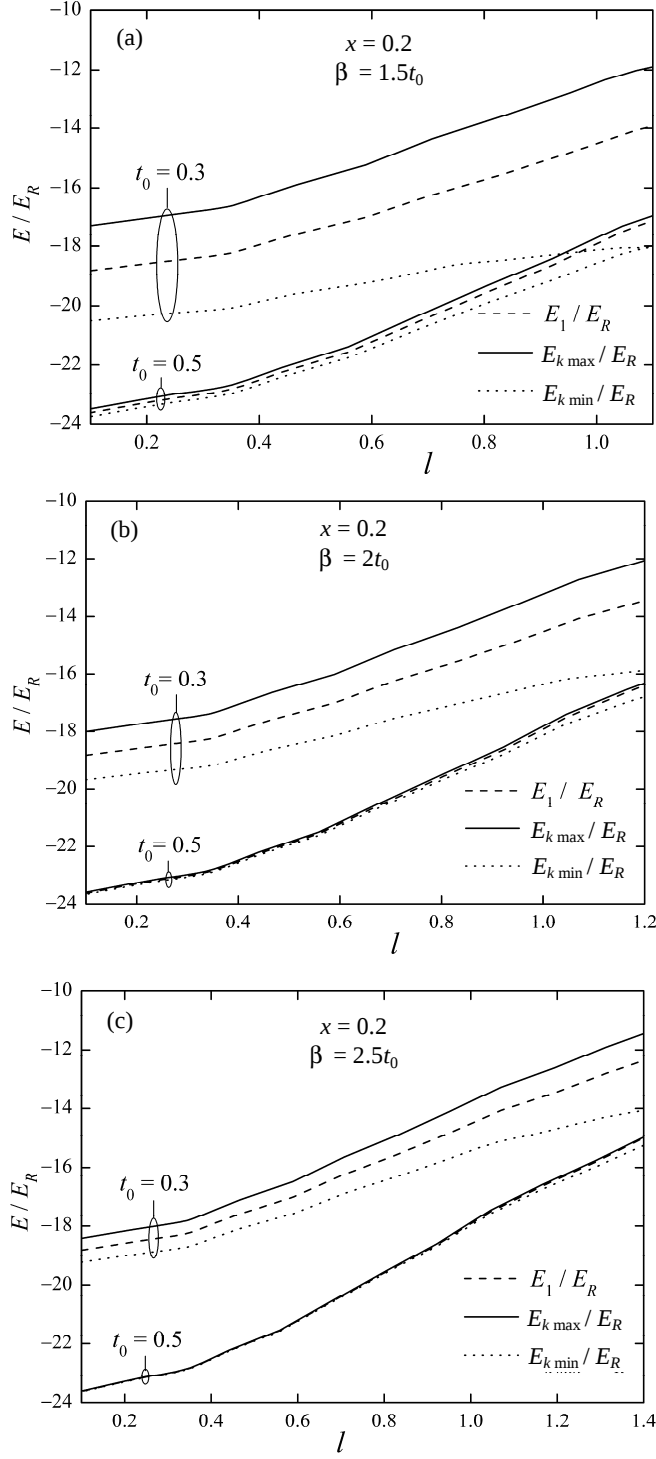


Рис.2. Зависимости энергии основного состояния (пунктирные линии), дна (точечные линии) и потолка (сплошные линии) первой минизоны от диффузионной длины при различных значениях β .

На рис.2 представлены зависимости энергии основного состояния электрона в одиночной КЯ (пунктирные линии), а также краев первой минизоны проводимости СР для различных значений ширины барьеров и ям от диффузионной длины. Видно, что при малых значениях ширины ямы энергия основного состояния и первая минизона расположены сравнительно выше вследствие сильного квантования. В этом случае ширина первой минизоны больше при всех значениях диффузионной длины вследствие усиленного туннелирования между ямами СР. В случае $t_0 = 0.5$ дно и потолок минизоны в начале диффузии почти совпадают, так как электронные волновые функции соседних ям почти не перекрываются. С течением процесса диффузии ширина минизоны увеличивается как при $t_0 = 0.3$, так и при $t_0 = 0.5$, так как эффект туннелирования становится более значительным для сглаженного профиля потенциала СР. Сравнивая рис.2а,б и с, можно убедиться в том, что увеличение периода СР β приводит к уменьшению ширины минизон для всех значений диффузионной длины. При этом увеличение ширины минизоны с увеличением диффузионной длины тем сильнее, чем меньше значение параметра β . Это объясняется сильной деградацией узких барьеров в течение диффузии, что приводит к усилению эффекта туннелирования между соседними ямами. Из всех трех рисунков видно, что разность дна минизоны и основного состояния в одиночной яме больше соответствующей разности между потолком минизоны и энергией основного состояния. Это объясняется тем, что значение средней потенциальной энергии электрона в СР меньше ее значения в одиночной яме, в результате чего первая минизона понижается одновременно с увеличением ее ширины в процессе диффузии.

3. Коэффициент поглощения

Рассмотрим поглощение плоской монохроматической электромагнитной волны, обусловленное оптическими переходами между первыми минизонами валентной зоны и зоны проводимости. Для расчета коэффициента поглощения воспользуемся известным выражением [20]

$$\alpha = \frac{4\pi^2 e^2}{m_0^2 \omega V_{eff} c n} \sum_{i,f} |\langle \Psi_f | \xi \hat{\mathbf{p}} | \Psi_i \rangle|^2 [f(E_i) - f(E_f)] \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (12)$$

где суммирование проводится по всем начальным (i) и конечным (f) состояниям, $\Psi_{i(f)}$ и $E_{i(f)}$ – соответственно, волновые функции и энергии начальных (конечных) состояний, $f(E)$ – функция распределения Ферми–Дирака, ω – частота падающего излучения, ξ – вектор поляризации волны, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса, c – скорость света в вакууме, n – коэффициент

преломления, V_{eff} – эффективный объем образца, e и m_0 – заряд и масса свободного электрона, соответственно.

Выражение для матричного элемента переходов между первыми минизонами принимает следующий вид:

$$\langle \Psi_f | \hat{\xi} \hat{p} | \Psi_i \rangle = (\xi \mathbf{M}_{cv}) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{q, q'} \int_{V_{eff}} \Psi_c^*(\mathbf{r}) \Psi_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (13)$$

где $\mathbf{M}_{cv}$ – матричный элемент межзонных переходов, $\Psi_{c(v)}(\mathbf{r})$ – волновая функция электрона в одиночной КЯ в зоне проводимости (в валентной зоне). Присутствие символов Кронекера $\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ и $\delta_{q, q'}$ в выражении (13) указывает на правила отбора для волновых векторов плоского движения ($\mathbf{k} = \mathbf{k}'$) и для волновых векторов движения вдоль оси роста СР ($q = q'$), т.е. поглощение происходит только за счет прямых межзонных переходов [21,22].

Применяя волновые функции основного состояния в одиночной КЯ с модифицированным потенциалом Вуда–Саксона, подставляя (13) и (6) в (12) и проведя суммирование по всем состояниям первых минизон в зонах валентности и проводимости, приходим к следующему результату:

$$\alpha = \alpha_0 \frac{1}{\Omega \beta t_0} \left| \int_{V_{eff}} \Psi_c^*(\mathbf{r}) \Psi_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \int_{-\pi}^{\pi} \theta[\Omega - (\varepsilon_c - \varepsilon_v) - (\eta_e - \eta_h) - 2(\varepsilon_{ae} - \varepsilon_{ah}) \cos x] dx, \quad (14)$$

где

$$\alpha_0 = \frac{e^2}{m_0^2 \hbar c n a_B E_R} \left(\frac{1}{m_e} - \frac{1}{m_h} \right)^{-1} |\xi \mathbf{M}_{cv}|^2, \quad (15)$$

$\eta_{e(h)} = \Delta_{1e(h)}/E_R$, $\varepsilon_{ae(h)} = E_{1ae(h)}/E_R$, $\varepsilon_{c(v)} = E_{1c(v)}/E_R$, $\Omega = \hbar\omega/E_R$ – безразмерная энергия падающего фотона (E_R – ридберговская энергия в GaAs), $m_{e(h)}$ – эффективная масса электрона (тяжелой дырки).

Зависимости коэффициента поглощения от безразмерной энергии падающего фотона для различных значений периода СР, ширины ям и диффузионной длины представлена на рис.3. Начальная концентрация алюминия $x_0 = 0.2$. Из рисунка видно, что коэффициент поглощения отличен от нуля только в определенной области значений Ω , которая по существу соответствует области значений энергий первой минизоны в зоне проводимости, так как ширина первой минизоны в валентной зоне пренебрежимо мала. Резкое увеличение коэффициента поглощения начиная с некоторого значения Ω обусловлено соответствующим увеличением числа состояний с одинаковой энергией в зоне Бриллюэна. Поведение кривых на графиках похоже на поведение функции плотности состояний в одномерной СР. Для значений Ω , больших значения энергии потолка минизоны, наблюдается слабое убывание коэффициента поглощения с увеличением Ω . Функция плотности состояний в этой области не изменяется, и убывание кривой объясняется инертностью электрона (математически это выражается

множителем $1/\Omega$ в выражении (14)). Можно также заметить, что максимумы кривых, соответствующих большим значениям диффузионной длины, расположены сравнительно ниже вследствие малого значения функции плотности состояний у потолка минизоны, которая расширилась в результате диффузии. Увеличение ширины барьеров приводит к уменьшению коэффициента поглощения вследствие уменьшения интеграла перекрытия волновых функций электрона и тяжелой дырки. Кроме того, можно заметить, что кривые, соответствующие значению $\beta = 2.5t_0$, имеют более резкое поведение по сравнению с кривыми, соответствующими значению $\beta = 1.5t_0$, что объясняется узостью минизоны, в которой функция плотности состояний принимает большие значения. Влияние взаимной диффузии на коэффициент поглощения выражено слабо в случаях $\beta = 2.5t_0$ или $t_0 = 0.5$, вследствие малого изменения ширины минизон (см. рис.2). Сравнивая рис.3а,б, можно заметить, что значение коэффициента поглощения при $t_0 = 0.5$ отличается от значения в случае $t_0 = 0.3$ вследствие малого значения матричного элемента, выражающего степень перекрытия огибающих функций в зонах валентности и проводимости. Отметим также, что вследствие диффузии наблюдается голубое смещение спектра поглощения при любых значениях прочих параметров, что было ранее наблюдалось в экспериментах для систем КЯ и КТ [1,2].

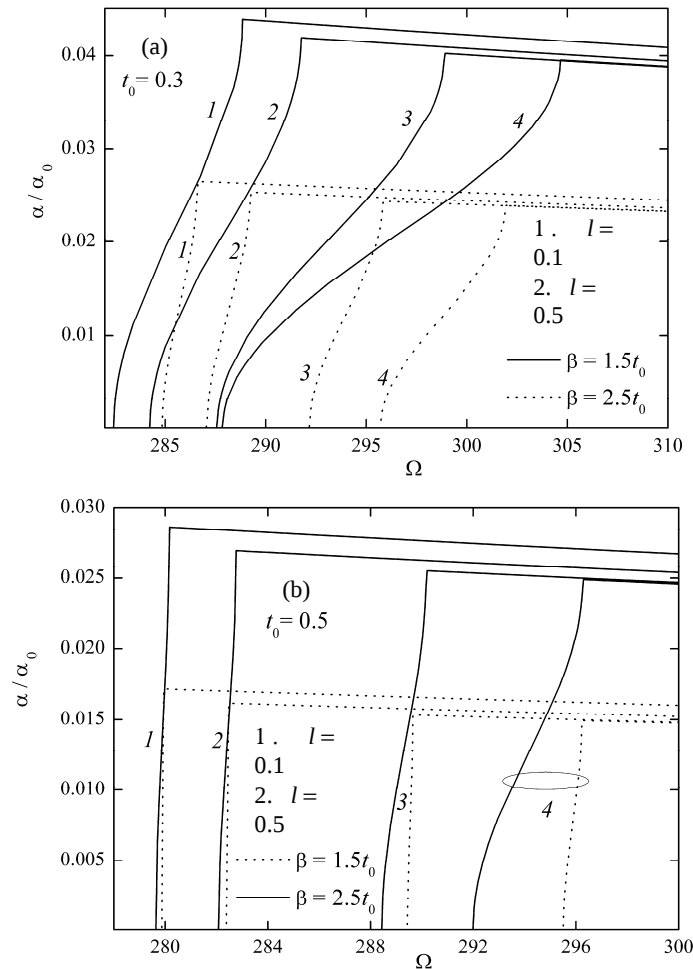


Рис.3. Зависимости коэффициента поглощения
от энергии падающего фотона.

Таким образом, взаимная диффузия играет значительную роль в изменении электрооптических свойств полупроводниковых СР и может быть использована как эффективное средство при проектировании приборов с наперед заданными характеристиками.

Автор выражает глубокую благодарность проф. А.А. Киракосяну и В.Н. Мугнецяну за постоянную помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H.F.Liu, V.Dixit, N.Xiang.** J. Appl. Phys., **99**, 013503 (2006).
2. **P.L.Gareso, M.Buda, H.H.Tan, C.Jagadish, S.Ilyas, M.Gal.** Semicond. Sci. Technol., **21**, 829 (2006).
3. **F.Bollet, W.P.Gillin, M.Hopkinson, R.Gwilliam.** J. Appl. Phys., **93**, 3881 (2003).
4. **R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva, S.Ruvimov, Z.Liliental-Weber.** Phys. Rev. B, **58**, R4262 (1998).
5. **C.Lobo, R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva.** Appl. Phys. Lett., **72**, 2850 (1998).
6. **Y.X.Dang, W.J.Fan, S.T.Ng, S.Wicaksono, S.F.Yoon, D.H.Zhang.** Thin Solid Films, **515**, 4435 (2007).
7. **T.Lin, K.Zheng, C.L.Wang, X.Y.Ma.** J. Crystal Growth, **309**, 140 (2007).
8. **S.Fafard, C.N.Allen.** Appl. Phys. Lett., **75**, 2374 (1999).
9. **Y.Ji, W.Lu, G.Chen, X.Chen, Q.Wang.** J. Appl. Phys., **93**, 1208 (2003).
10. **F.Agullo-Rueda, E.E.Mendez, J.M.Hong.** Phys. Rev. B, **40**, 1357 (1989).
11. **S.Kohmoto, H.Nakamura, T.Ishikawa, K.Asakawa.** Appl. Phys. Lett., **75**, 3488 (1999).
12. **S.Kohmoto, H.Nakamura, T.Ishikawa, K.Asakawa.** J. Electron. Mater., **29**, 525 (2000).
13. **H.Nakamura, S.Kohmoto, T.Ishikawa, K.Asakawa.** Physica E, **7**, 331 (2000).
14. **S.Kohmoto, H.Nakamura, S.Nishikawa, K.Asakawa.** Physica E, **13**, 1131 (2002).
15. **G.Springholz, M.Pinczolits, P.Mayer, et al.** Phys. Rev. Lett., **84**, 4669 (2000).
16. **G.Adolfsson, S.Wang, M.Sadeghi, J.Bengtsson, A.Larsson, J.Lim, V.Vilokkinen, P.Melanen.** J. Quantum Electronics, **44**, 607 (2008).
17. **J.Ziman.** Principles of the theory of solids. Cambridge, 1972.
18. **V.N.Mughnetsyan, A.A.Kirakosyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **42**, 55 (2007).
19. **M.Abramovitz, I.A.Stegun,** Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables. National Bureau of Standards, Washington, 1972.
20. **P.K.Basu.** Theory of Optical Processes in Semiconductors, Bulk and Microstructures. Oxford, Clarendon Press, 1997.
21. **M.G.Barseghyan, A.A.Kirakosyan.** Physica E, **27**, 474 (2005).
22. **V.N.Mughnetsyan, A.A.Kirakosyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **43**, 173 (2008).

EFFECT OF INTERDIFFUSION ON THE BAND STRUCTURE AND ABSORPTION
COEFFICIENT OF A ONE-DIMENSIONAL SEMICONDUCTOR SUPERLATTICE

V.L. AZIZ AGHCHEGALA

The effect of interdiffusion of Al and Ga atoms on the confining potential, band structure and absorption coefficient of electromagnetic radiation of a one-dimensional superlattice, composed of GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells with the initially rectangular potential profile, is studied in the framework of the modified Wood–Saxon potential model. It is shown that the interdiffusion leads to the widening of the energy minibands and to the blueshift of the absorption spectrum observed in experiments.