

УДК 539.37, 537.222.22

Формування $n - n^+$ переходів у напружених гетеросистемах із самоорганізованими нанокластерами

Пелещак Р. М., Кузик О. В., Галь Ю. М.

peleshchak@rambler.ru

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра загальної фізики,
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

Розвинуто теорію формування $n - n^+$ переходів у тришарових гетеросистемах із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами. Досліджено просторовий перерозподіл електронів провідності в гетероструктурі $GaAs/InAs/GaAs$, що містить точкові дефекти (міжвузлові атоми, вакансії) з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії.

Вступ

Останнім часом широке використання у мікроелектронних приладах знайшли гетероструктури $GaAs/InAs/GaAs$, $ZnTe/CdTe/ZnTe$ з напруженими квантовими ямами, які працюють в умовах інтенсивного опромінення швидкими частинками (нейтронами, α -частинками, осколками ділення ядер), γ -квантами, а також лазерного опромінення. У результаті, в таких структурах утворюється значна кількість точкових дефектів. У цих умовах важливу роль у просторовому перерозподілі точкових дефектів відіграє їхня нелінійна взаємодія з пружним середовищем напруженої гетероструктури. Самоорганізація індукованих дефектів, які взаємодіють один з одним через поле деформації пружного континууму, досліджувалася раніше в ізотропних твердих тілах [1-3] та гетеросистемах [4].

Наявність у гетероструктурі неоднорідної деформації, створеної як за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і самоорганізованих точкових дефектів, призводить до просторового перерозподілу електронів провідності та виникнення електростатичного потенціалу в околі деформаційно-дефектних структур внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку. В даній роботі досліджено роль електрон-деформаційної взаємодії у формуванні $n - n^+$ переходів у напружених тришарових гетероструктурах $GaAs/InAs/GaAs$, що містять уже сформовані самоорганізовані дефектно-деформаційні структури.

Модель

Розглянемо напружені тришарові гетеросистеми $GaAs/InAs/GaAs$, $ZnTe/CdTe/ZnTe$ з внутрішніми шарами $InAs$, $CdTe$ завтовшки $2a$ (рис.1).

Механічна деформація, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми при незначному градієнті деформації, моделюється параболічною функцією [5] (рис.1), де ε_0 – деформація на ге-

теромежах за рахунок невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів.

У тришаровій гетероструктурі із самоорганізованими дефектно-деформаційними (ДД) структурами виникає неоднорідна деформація $U(x)$, створена як за рахунок просторового перерозподілу точкових дефектів, так і неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів. Це призводить до деформації зони провідності, і, відповідно, до зміни концентрації носіїв струму та виникнення електростатичного потенціалу.

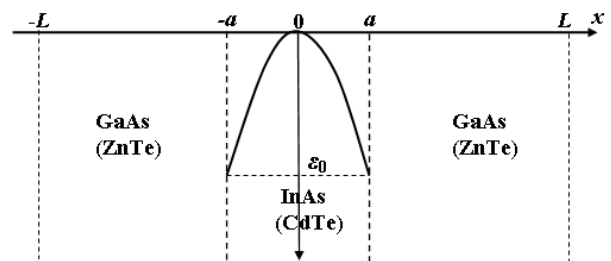


Рис.1. Модель гетероструктур $GaAs/InAs/GaAs$, $ZnTe/CdTe/ZnTe$ з напруженими шарами $InAs$, $CdTe$

Для знаходження зміни концентрації електронів провідності $\Delta n(x)$ та електростатичного потенціалу $\varphi(x)$ розв'язувалася самоузгоджена система рівнянь:

1) рівняння, яке визначає концентрацію електронів $n(x)$

$$n(x) = \sum_n \frac{\Psi_n^*(x) \Psi_n(x)}{\exp\left(\beta_0 (\tilde{\lambda}_n - \mu)\right) + 1}, \quad (1)$$

де $\tilde{\lambda}_n = \lambda_n - \lambda_0$, $\beta_0 = \frac{1}{kT}$, μ – хімічний потенціал;

2) рівняння Пуассона, з якого визначається електростатичний потенціал $\varphi(x)$

$$\nabla^2 \varphi(x) = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} \Delta n(x), \quad (2)$$

де ε – діелектрична проникність, ε_0 – електрична стала;

3) рівняння для знаходження хімічного потенціалу

$$\frac{\Omega_0}{V} \int_V n(x) dV = \bar{n}, \quad 0 \leq \bar{n} \leq 2, \quad (3)$$

де $\bar{n} = n_0 \Omega_0$ – задана середня кількість електронів на одному вузлі, n_0 – середня концентрація електронів, Ω_0 – об'єм елементарної комірки;

4) стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\left[\nabla_x^2 - \frac{W}{\alpha^*} + \frac{e}{\alpha^*} \varphi(x) \right] \Psi_n(x) = -\frac{1}{\alpha^*} (\lambda_n - \lambda_0) \Psi_n(x), \quad (4)$$

де $\alpha^* = \hbar^2/(2m^*)$, λ_0 – енергія дна зони провідності в недеформованій кристалічній матриці, λ_n – власні значення оператора Шредінгера, потенціальна енергія для електронів провідності у тришаровій гетеросистемі з самоорганізованими ДД-структурами описується співвідношенням:

$$W^{(i)}(x) = \begin{cases} S^{(i)} U^{(i)}(x), & i = 1, 3, \\ \Delta E_c + S^{(i)} U^{(i)}(x), & i = 2, \end{cases} \quad (5)$$

де $i = 1, 3$ відповідає шарам $GaAs$ ($ZnTe$), $i = 2$ – внутрішні шари $InAs$ ($CdTe$); $S^{(i)}$ – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності i -го матеріалу; ΔE_c – розрив зон провідності контактуючих матеріалів гетеросистеми.

Відлік енергії проводиться від дна зони провідності недеформованого матеріалу широкозонного напівпровідника ($GaAs$, $ZnTe$). Потенціальна енергія електрона в квантовій ямі складається з двох доданків: 1) розриву зон провідності ΔE_c контактуючих матеріалів гетеросистеми; 2) зсуву дна зони провідності під дією як механічної деформації, спричиненої наявністю точкових дефектів і неузгодження параметрів ґраток, так і електронної складової деформації, що виникає за рахунок просторового перерозподілу електронів провідності $\Delta n^{(i)}(x)$ внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку [6].

Зміна концентрації електронів провідності $\Delta n^{(i)}(x)$ визначається у лінійному наближенні співвідношенням [6]

$$\Delta n^{(i)}(x) = R_s^{(i)} (e\varphi^{(i)}(x) - W^{(i)}(x)), \quad (6)$$

де R_s – величина, яка залежить від ступеня заповнення електронами зони провідності, пружних сталей та константи деформаційного потенціалу зони провідності.

Із врахуванням (6) рівняння Пуассона (2) в кожному шарі гетероструктури набуває вигляду:

$$\Delta \varphi^{(i)}(x) - g_s^{(i)2} \varphi^{(i)}(x) = -\frac{S^{(i)} g_s^{(i)2}}{e} U^{(i)}(x), \quad (7) \quad i = 1, 3,$$

$$\Delta \varphi^{(i)}(x) - g_s^{(i)2} \varphi^{(i)}(x) = -\frac{S^{(i)} g_s^{(i)2}}{e} U^{(i)}(x) - \frac{\Delta E_c g_s^{(i)2}}{e}, \quad i = 2, \quad (8)$$

де $g_s^{(i)2} = e^2 R_s^{(i)} / (\epsilon^{(i)} \epsilon_0)$.

Розв'язки рівнянь (7), (8) повинні задовольняти наступним граничним умовам:

$$\begin{cases} \varphi^{(1)}(-a) = \varphi^{(2)}(-a); \\ \epsilon_1 \frac{d\varphi^{(1)}(-a)}{dx} = \epsilon_2 \frac{d\varphi^{(2)}(-a)}{dx}; \\ \varphi^{(3)}(a) = \varphi^{(2)}(a); \\ \epsilon_3 \frac{d\varphi^{(3)}(a)}{dx} = \epsilon_2 \frac{d\varphi^{(2)}(a)}{dx}; \\ \varphi^{(1)}|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{d\varphi^{(1)}}{dx}|_{x \rightarrow -\infty} = 0; \\ \varphi^{(3)}|_{x \rightarrow \infty} = \frac{d\varphi^{(3)}}{dx}|_{x \rightarrow \infty} = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Розв'язки рівнянь Пуассона (7), (8) мають вигляд:

$$\begin{aligned} \varphi^{(i)}(x) = & C_1^{(i)} e^{g_s^{(i)} x} + C_2^{(i)} e^{-g_s^{(i)} x} + \\ & - \left\{ \frac{S^{(i)} g_s^{(i)}}{2e} e^{g_s^{(i)} x} \int U^{(i)}(x) \cdot e^{-g_s^{(i)} x} dx + \frac{S^{(i)} g_s^{(i)}}{2e} e^{g_s^{(i)} x} \int (U^{(i)}(x) + \frac{\Delta E_c}{S^{(i)}}) \cdot e^{-g_s^{(i)} x} dx \right. \\ & + \left. \left\{ \frac{S^{(i)} g_s^{(i)}}{2e} e^{-g_s^{(i)} x} \int U^{(i)}(x) \cdot e^{g_s^{(i)} x} dx, \quad i = 1, 3, \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{S^{(i)} g_s^{(i)}}{2e} e^{-g_s^{(i)} x} \int (U^{(i)}(x) + \frac{\Delta E_c}{S^{(i)}}) \cdot e^{g_s^{(i)} x} dx, \quad i = 2, \right. \right\} \end{aligned} \quad (10)$$

де константи шукаємо з граничних умов (9).

Для знаходження параметра $U^{(i)}(x)$ розв'язувалося нелінійне диференційне рівняння для деформації із врахуванням електрон-деформаційної взаємодії [4]. Розв'язок системи рівнянь для електростатичного потенціалу та деформації кристалічної ґратки проводився числовими методами із заданою точністю для потенціалу 10^{-6} В та для деформації 10^{-5} . У першому наближенні параметр деформації $U^{(i)}(x)$ матеріалу гетеросистеми знаходився без врахування електрон-деформаційної взаємодії і для середньої концентрації дефектів з діапазону $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ описується формулою [4] (симетричний кластер)

$$U^{(i)}(x) = \frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}} N_{d0} + \text{sign} \theta_d^{(i)} \frac{A^{(i)}}{B^{(i)} + ch(\sqrt{a^{(i)}} x)} +$$

$$+ \begin{cases} 0, & i = 1, 3, \\ C_1(N_{d0}) e^{-\sqrt{a^{(2)}} x} + \\ + C_2(N_{d0}) e^{\sqrt{a^{(2)}} x} + \frac{\epsilon_0 \frac{\pi^2}{8}}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}} + b_1 x + b_0, & i = 2, \end{cases}$$

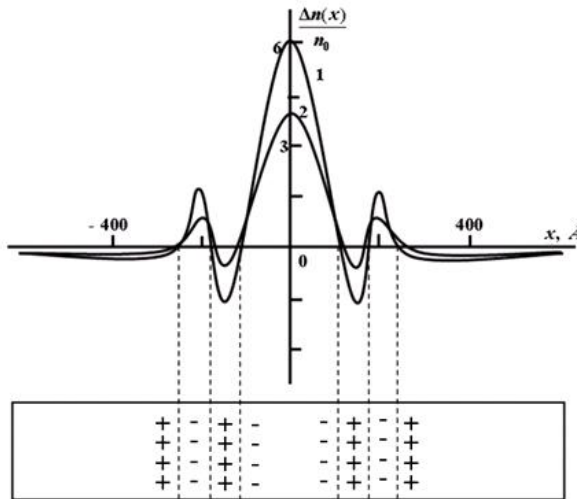


Рис.2. Просторовий розподіл електронів у гетероструктурі $GaAs/InAs/GaAs$ з точковими дефектами ($\theta_d > 0$) при різних значеннях їх середньої концентрації: 1 – $n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; 2 – $n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; $N_{d0}/N_{dc} = 0.59$; $a = 18 \text{ нм}$

де $A^{(i)}$, $B^{(i)}$, $a^{(i)}$ – константи, які залежать від середньої концентрації дефектів N_{d0} ; N_{dc} , N_{dc2} – деякі критичні значення концентрації дефектів ($N_{dc} = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_{dc2} = 10^{19} \text{ см}^{-3}$); $\theta_d^{(i)}$ – деформаційний потенціал; $K^{(i)}$ – модуль всестороннього стиску.

Підставивши (10) в (6), отримаємо формулу для визначення просторового перерозподілу носіїв струму в тришаровій напруженій гетеросистемі з точковими дефектами (міжвузловими атомами та вакансіями).

Таким чином, у гетеросистемах з дефектно-деформаційними структурами виникають $n - n^+$ переходи за рахунок як різних електронних характеристик контактуючих напівпровідникових матеріалів, так і самоузгодженої взаємодії електронної підсистеми з пружно-деформованим середовищем гетероструктури.

Результати розрахунків та їх обговорення

Числовий розрахунок концентраційного профілю електронів вздовж осі гетероструктури проводився для кристалічної системи $GaAs/InAs/GaAs$ для різних значень середньої концентрації точкових дефектів при наступних значеннях параметрів: $\alpha^* = 1.646 \text{ еВ} \cdot \text{нм}^2$, $S^{(1)} = -7.17 \text{ еВ}$, $S^{(2)} = -5.08 \text{ еВ}$, $\varepsilon^{(1)} = 12$, $\varepsilon^{(2)} = 12.8$, $\Omega_0 = 0.18 \text{ нм}^3$, $K^{(1)} = 490 \text{ еВ/нм}^3$, $K^{(2)} = 540 \text{ еВ/нм}^3$, $\varepsilon_0 = -0.07$, $\theta_d^{(i)} = 10 \text{ еВ}$, $N_{dc} = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $\Delta E_c = -0.83 \text{ еВ}$, $B^{(i)} = 1.4$, $A^{(i)} = 0.24$.

На рис.2 показано координатну залежність зміни концентрації електронів $\Delta n(x)/n_0$ відносно їх просторово однорідного розподілу в напруженій тришаровій гетероструктурі $GaAs/InAs/GaAs$ з концентрацією дефектів виду центру розтягу

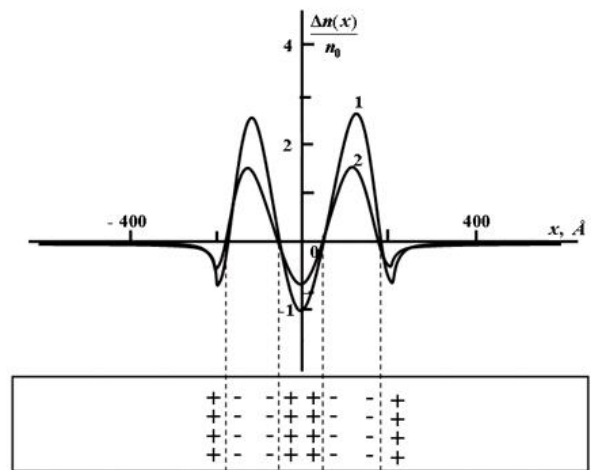


Рис.3. Просторовий розподіл електронів в гетероструктурі $GaAs/InAs/GaAs$ з точковими дефектами ($\theta_d < 0$) при різних значеннях їх середньої концентрації: 1 – $n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; 2 – $n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; $N_{d0}/N_{dc} = 0.59$; $a = 18 \text{ нм}$

при різних значеннях середньої концентрації основних носіїв струму n_0 .

Як показують результати числових розрахунків (рис.2), електрони локалізуються в основному в центрі квантової ями гетероструктури, де їх концентрація відповідно зростає в 7 та 5 разів при $n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ та $n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ порівняно з просторово однорідним значенням. Крім цього, спостерігаються ще два концентраційні піки на межах напруженої квантової ями тришарової структури, де концентрація носіїв струму зростає в середньому в 2.5 рази відносно середньої концентрації. Таким чином, у тришаровій гетероструктурі із середньою концентрацією точкових дефектів в інтервалі $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ виникає каскад $n - n^+$ переходів (рис.2). Такий просторовий перерозподіл електронів провідності пояснюється зміною глибини потенціальної ями під впливом самоузгоджених електрон-деформаційно-дифузійних ефектів.

В областях гетероструктури, які зазнають деформації розтягу за рахунок значної концентрації дефектів виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) [4], глибина потенціальної ями $W^{(i)}$ зростає ($S^{(i)}U^{(i)}(x) < 0$), що призводить до збільшення ступеня просторової локалізації носіїв струму. І, навпаки, в околі площин $x = \pm 16 \text{ нм}$, де матеріал гетероструктури зазнає деформації стиску, глибина потенціальної ями для електронів зменшується ($S^{(i)}U^{(i)}(x) > 0$) і, відповідно, зменшується концентрація електронів. Причому, відносна зміна концентрації носіїв струму $\Delta n(x)/n_0$ під дією електрон-деформаційних ефектів є більш суттєвою для меншої середньої концентрації електронів n_0 (рис.2). Це пояснюється тим, що зона провідності з частковим ступенем заповнення електронами є більш чутливою до деформації ґратки [6].

На рис.3 відображено результати теоретичних досліджень відносної зміни концентрації еле-

ктронів $\Delta n(x)/n_0$ в напруженій гетероструктурі $GaAs/InAs/GaAs$ з концентрацію дефектів виду центру стиску при різних значеннях середньої концентрації основних носіїв струму n_0 .

У такій кристалічній системі з дефектно-деформаційними структурами відбувається делокалізація носіїв струму в центрі квантової ями завдяки самоузгоджених електрон-деформаційно-дифузійних ефектів. Однак в квантовій ямі в околі площин $x = \pm 12$ нм спостерігаються два амплітудних піки концентрації електронів провідності, де концентрація основних носіїв струму збільшується приблизно в 3 та 4.8 разів відносно її просторово однорідного значення, яке відповідно становить $n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ та $n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Такий характер поведінки зміни концентрації електронів пояснюється зміною потенціального профілю квантової ями в околі ДД-структур. У центрі внутрішнього шару $InAs$ в результаті деформаційно-дифузійного перерозподілу вакансій відбувається додатковий стиск матеріалу гетеросистеми, а в околі площин $x = \pm 12$ нм – відносний розтяг. Це призводить до того, що в центрі квантової ями відбувається зменшення її глибини, а в околі площин $x = \pm 12$ нм – збільшення на величину $S^{(i)}U^{(i)}(x)$. В результаті цього у напруженому шарі $InAs$ гетероструктури $GaAs/InAs/GaAs$ формуються дві квантові ями в околі гетеромеж $x \in (-18; -6)$ нм та $x \in (6; 18)$ нм, які розділені потенціальним бар'єром.

Аналогічно, як і у випадку присутності міжвузлових атомів, у кристалічних системах з вакансійними дефектно-деформаційними структурами в результаті самоузгодженої електрон-деформаційно-дифузійної взаємодії відносна зміна концентрації носіїв струму $\Delta n(x)/n_0$ є більш сут-

тєвою при зменшенні середньої концентрації електронів n_0 .

При зростанні середньої концентрації точкових дефектів виду центру стиску область локалізації електронів провідності зміщується до центру внутрішнього шару гетероструктури.

Висновки

1. Побудовано нелінійну модель формування $n - n^+$ переходів у напруженій тришаровій гетероструктурі зі самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами.
2. Показано, що із зменшенням середньої концентрації електронів провідності у напруженій тришаровій гетероструктурі $GaAs/InAs/GaAs$ з точковими дефектами (міжвузлові атоми, вакансії) $n - n^+$ перехід стає більш різким, що пояснюється більшою чутливістю до деформації кристалічної ґратки при частковому заповненні зони провідності.
3. Встановлено, що у тришаровій гетероструктурі $GaAs/InAs/GaAs$ з вакансіями із середньою концентрацією в інтервалі $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ відбувається делокалізація електронів провідності в центрі квантової ями та зростання їх концентрації в околі площин $x = \pm 12$ нм в 3.8 разів порівняно з просторово-однорідним значенням ($n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Такий характер поведінки локальної зміни концентрації електронів провідності пояснюється зміною потенціального профілю квантової ями в результаті самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу вакансій, який призводить до додаткового неоднорідного стиску матеріалу в околі центру внутрішнього шару гетеросистеми та розтягу в околі площини $x = \pm 12$ нм.

Бібліографія

- [1] Винценц С.В., Зайцева А.В., Плотников Г.С. Самоорганизация лазерноиндуцированных точечных дефектов на начальных стадиях неупругих фотодеформаций германия // ФТП. – 2003. – 37, № 2. – С. 134–141.
- [2] Емельянов В.И., Панин И.М. Образование нанометровых упорядоченных дефектно-деформационных структур в твердых телах при воздействии на них потоков энергии // ФТТ. – 1997. – 39, № 11. – С. 2029–2035.
- [3] Емельянов В.И. Экранировка поля деформации в твердом теле точечными дефектами // ФТТ. – 2001. – 43, № 4. – С. 637–638.
- [4] Пелещак Р.М., Кузик О.В. Самоорганізований дифузійно-деформаційний розподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах // УФЖ. – 2007. – 52, № 7. – С. 689–694.
- [5] Хапачев Ю.П., Чуховский Ф.Н. Методы структурного анализа. – М.: Наука, 1989. – 378 с.
- [6] Стасюк І.В., Пелещак Р.М. Деформаційні і електронні стани напівпровідника поблизу межі поділу областей з різними механічними напруженостями // УФЖ. – 1994. – 39, № 7. – С. 856–861.