УДК 621.315.02 DOI: https://doi.org/10.34680/2076-8052.2020.2(118).27-30

АНАЛИЗ КОНФИГУРАЦИЙ ПРОСТРАНСТВЕННО ОБЪЕДИНЁННЫХ ТРЕУГОЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ЯМ

О.Ф.Задорожный, В.Н.Давыдов

CONFIGURATIONS ANALYSIS OF SPATIALLY UNITED TRIANGULAR QUANTUM WELLS

O.F.Zadorozhny, V.N.Davydov

Томский государственный университет системы управления и радиоэлектроники, Oleg9300@mail.ru

Рассматривается энергетический спектр и излучающие свойства комбинированной треугольной квантовой ямы, полученной вертикальным совмещением двух ям треугольной формы разной толщины и наклона. Из условия Бора—Зоммерфельда найдены значения энергий уровней размерного квантования. Установлена возможность управления их положением путём изменения геометрических и фундаментальных параметров веществ верхней и нижней треугольных ям. Определено, что увеличение эффективной массы свободных носителей в верхней треугольной квантовой яме оказывает сильное влияние на положение первого возбуждённого состояния для электрона, а также приводит к уплотнению спектра в верхней области комбинированной треугольной квантовой ямы. Показано, что интенсивность излучения квантовой ямы комбинированного профиля может превышать интенсивность излучения одиночной треугольной квантовой ямы до нескольких раз.

Ключевые слова: треугольная квантовая яма, уровни размерного квантования, правило Бора—Зоммерфельда, комбинированный профиль

This study investigates triangular quantum wells with a staggered profile obtained by using the combination of two wells with different tilts. The position of the allowed energy values in the TQW with the staggered profile can be found using the Bohr–Sommerfeld quantization rule. It was established that it is possible to control the position of the energy levels by changing the geometric and fundamental parameters of the substances of the top and bottom triangular wells. It was found that the top and bottom quantum wells can both thicken and expand the density spectrum of energy levels. It is clear that an increase in the effective mass of free carriers in the top triangular quantum well has a strong effect on the position of the first electron state, and also leads to a spectrum densification in the top region of the combined triangular quantum well. The influence of the effective mass of charge carriers of the top and bottom wells on the density of energy levels in the well with a staggered profile is estimated.

Keywords: triangular quantum well, energy spectrum, Bohr–Sommerfeld quantization rule, a staggered profile

Повышение эффективности излучения светодиодных гетероструктур с множественными квантовыми, а также создание элементов электронной техники, в частности источников когерентного и некогерентного излучения, является одной из приоритетных задач развития приборостроения.

В настоящее время для генерации излучения используют гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) прямоугольной формы, энергетический спектр которых стандартен и задается размерами ямы [1,2]. Однако в ряде практических приложений встает задача получения гетероструктур, эмиссионные свойства которых, в частности спектр излучения, предопределен параметрами будущего прибора и отличается от стандартного спектра КЯ. Изменение спектра излучения может быть достигнуто вариацией профиля и размеров КЯ. Поэтому получение требуемого спектра излучения, отличающегося от стандартного, а также повышение эффективности преобразования электрического тока в световое излучение невозможно без анализа топологии гетероструктур, поиска новых профилей КЯ.

В работе [3] рассматривается теоретическая модель прямоугольной КЯ, внутри которой имеется дополнительная потенциальная яма, именуемая авторами энергетическим «провалом». Выяснено [4], что изменением параметров провала можно управлять спектральными свойствами основной КЯ.

Однако наряду с КЯ прямоугольного профиля в современной микро- и наноэлектронике большую роль играют квантовые ямы треугольной формы (ТКЯ), образующиеся на границах раздела слоёв из различных полупроводниковых материалов, а также на границах «полупроводник—диэлектрик». Оптимизация их параметров позволит улучшить характеристики приборов, использующих свойства межфазных границ раздела: линейка приборов на основе структур «диэлектрик—полупроводник», HEMT транзисторов, квантово-размерных лазеров и т.д. Отметим, что информации по свойствам ТКЯ в научной литературе недостаточно.

Целью данной работы является рассмотрение энергетического спектра треугольной квантовой ямы комбинированного профиля, получаемого пространственным совмещением двух и более ТКЯ с разными наклонами верхней и нижней ям.

Конфигурации ТКЯ

В ТКЯ традиционного профиля с известной глубиной положение уровней размерного квантования энергии электрона определяется шириной и глубиной ямы [4], которые задают угол наклона потенциала ямы, что эквивалентно наличию встроенного внутреннего электрического поля.

Данное обстоятельство рассматривается как полезное в связи с возможностью компенсацией этим

полем отрицательного влияния пьезоэлектрического и пироэлектрического полей в КЯ из соединений $A^{III}N$, ослабляющих излучательную рекомбинацию электронов и дырок в прямоугольной яме за счёт разделения носителей в пространстве.

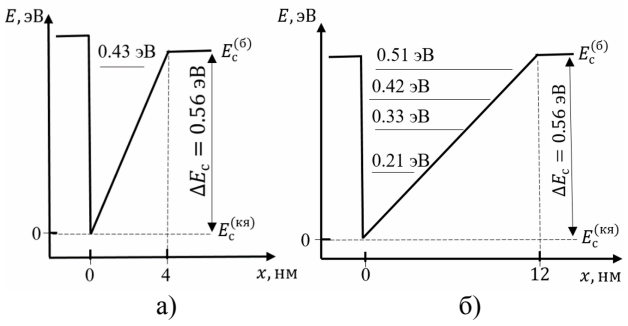

Рис.1. Энергетические спектры узкой ТКЯ (толщиной 4 нм) и широкой ТКЯ (толщиной 12 нм)

В качестве примера спектральных свойств ТКЯ на рис.1 представлены энергетические спектры электронов в ТКЯ различной ширины: узкой (рис.1а) и широкой (рис.1б). Из рисунка видно, что «узкие» КЯ обладают одним-двумя уровнями, что в итоге даст узкий спектр излучения и малую интенсивность излучения. «Широкие» ямы имеют большее число уровней в минизоне и потому потенциально способны генерировать свет более высокой интенсивности и в широком спектральном диапазоне. Таким образом, объединяя ТКЯ разной ширины в яму с комбинированным профилем, можно получить источники светового излучения с требуемыми спектральными и энергетическими характеристиками.

Для того чтобы оценить эмиссионные свойства ТКЯ комбинированного профиля необходимо составить аналитические выражения, описывающие профиль таких ям. Эта задача решается для двух предельных случаев, когда узкая яма находится внизу, а широкая — вверху и в обратном порядке (рис.2). В первом случае (рис.2а), когда узкая яма с наклоном, описываемым линейной зависимостью $Y_1(x)$, находится внизу, а широкая яма с зависимостью $Y_2(x)$ — вверху, суммарный профиль $Y^{(a)}(x)$ можно описать так [5]:

$$Y^{(a)}(x) = \frac{Y_1(x)Y_2(x)}{Y_1(x)+Y_2(x)} = \frac{F_1(x)F_2(x)}{F_1(x)+F_2(x)}. \qquad (1)$$

Во втором случае (рис.2б) при обратном расположении объединяемых ТКЯ суммарный профиль будет [5]:

$$Y^{(б)}(x) = Y_1(x)+Y_2(x) = F_1(x)+F_2(x). \qquad (2)$$

Энергии уровней размерного квантования (УРК) в ТКЯ комбинированного профиля можно найти, используя правило квантования Бора—Зоммерфельда [6]:

$$\sqrt{2m_{1,2}} = \int_0^{a_2} \sqrt{E - qF_{1,2}(x)} = 2\pi n\hbar, \qquad (3)$$

где $F_{1,2}(x) = Y^{(a,б)}(x)$ — суммарный потенциал двух ТКЯ $F_1(x)$ и $F_2(x)$, описывается в зависимости от выбранного профиля по формулам (1) и (2); $m_{1,2}$ — эффективные массы электронов нижней и верхней ТКЯ соответственно.

В результате интегрирования (3) получено следующее выражение для случая ТКЯ комбинированного профиля «узкая — широкая»:

$$E_n^{(n/w)} = \left[\frac{3n\pi\hbar qF_1}{2\sqrt{2m_1}} - \frac{\sqrt{2m_2}F_1}{\sqrt{2m_1}F_2}\left(\left(qF_2(a_2+a_1) - \frac{E_aF_2}{F_1}\right)^{3/2} - \right.\right.$$
$$\left.\left. -E_0^{3/2} - \frac{E_aF_2}{F_1}^{3/2}\right) + (qF_2a_2)^{3/2}\right]^{2/3}. \qquad (4)$$

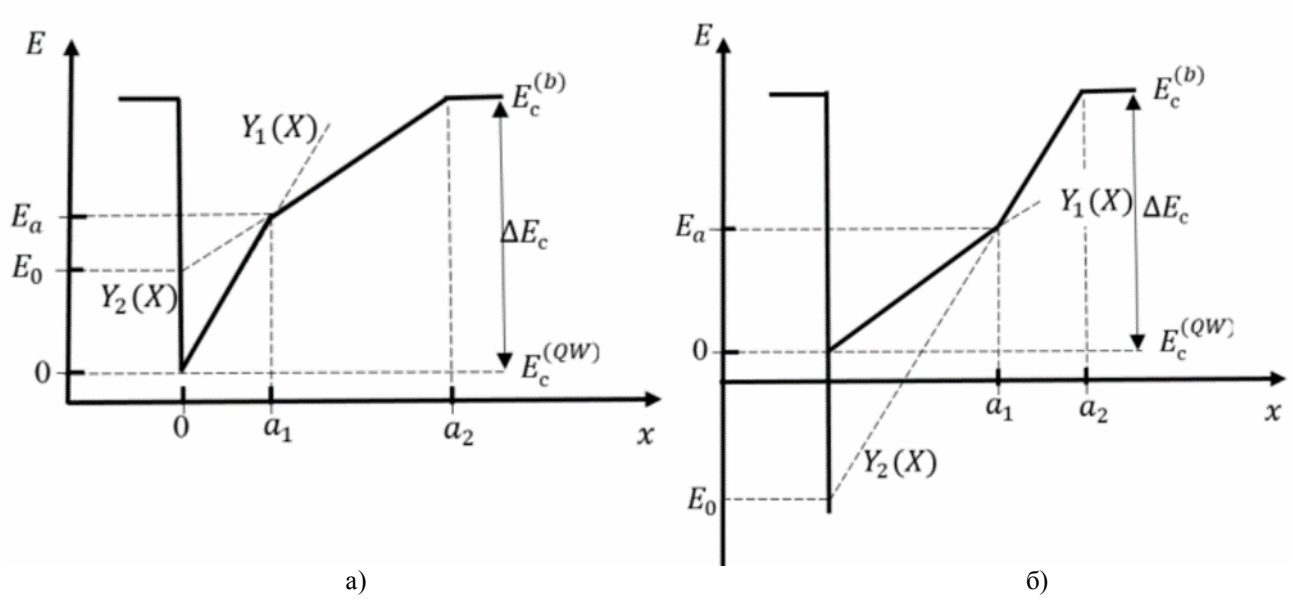

Рис.2. Возможные конфигурации треугольной КЯ с комбинированным профилем: а) «узкая — широкая» б) «широкая — узкая». Здесь обозначено: $Y_1(x) = qF_1x$, тогда $Y_2(x) = E_0 + qF_2x$, где $E_a = qF_1a_1$ и $E_0 = E_a - qF_2a_1$

И для случая «широкая — узкая»:

$$E_n^{(w/n)} = \left[\frac{3n\pi\hbar qF_1}{2\sqrt{2m_1}} - \frac{\sqrt{2m_2}F_1}{\sqrt{2m_1}F_2} \times \right.$$

$$\times \left(\left(q(F_2(a_2 - a_1) + 2F_1 a_1) - \frac{E_a F_2}{F_1} \right)^{3/2} - \right.$$

$$\left. \left. -E_0^{3/2} \right) + (qF_2 a_2)^{3/2} \right]^{2/3}. \qquad (5)$$

Влияние углов наклона

Численные оценки энергий уровней размерного квантования в ТКЯ комбинированного профиля проводились по выражениям (4),(5). На рис.3 представлены энергетические спектры в минизоне проводимости ТКЯ комбинированного профиля с различными наклонами и одинаковыми эффективными массами.

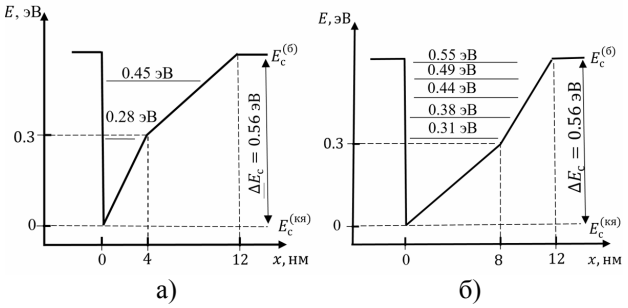

Рис.3. Энергетический спектр ТКЯ с комбинированным профилем: а) «узкая — широкая» (толщиной a_1 = 4 нм; a_2 = 8 нм), б) «широкая — узкая» (толщиной a_1 = 8 нм; a_2 = 4 нм)

Анализ спектров ТКЯ комбинированного профиля в приближении равенства масс в узкой и широкой ямах показал, что изменение наклона верхней и нижней квантовой ямы может как разряжать, так и уплотнять спектр уровней энергии, а также менять положения первого энергетического уровня. Наклон нижней квантовой ямы в основном влияет на положения первого возбуждённого состояния, а следовательно, и на длину волны генерируемого излучения. Наклон в верхней КЯ определяет плотность спектра, а значит, и энергетические возможности КЯ за счет накопления большего числа электронов и дырок в ТКЯ с комбинированным профилем.

Для случая, когда геометрия ТКЯ комбинированного профиля совпадает с геометрией традиционных ТКЯ, т. е. углы наклона верхней и нижней КЯ совпадают $(F_1 = F_2)$, а также когда эффективные массы свободных носителей в пределах всей глубины комбинированной ТКЯ равны $(m_1 = m_2)$, после всех упрощений ($qFa = E_a$, $E_0 = 0$), выражение (4) может быть записано в следующем виде:

$$E_n = \left[\frac{3n\pi\hbar qF_1}{2\sqrt{2m_1}} - (qF_1 a_1)^{3/2} + (qF_2 a_2)^{3/2} \right]^{2/3} \rightarrow$$

$$\rightarrow E = \left[\frac{3n\pi\hbar qF_1}{2\sqrt{2m_1}} \right]^{2/3}, \qquad (6)$$

которое хорошо согласуется с классическим выражением для определения спектра энергий УРК в ТКЯ. Этот результат свидетельствует о том, что выражения (4) и (5) не противоречат традиционным представлением о распределении уровней энергий в ТКЯ, а лишь дополняют его, для двух придельных конфигураций, описанных выше.

Влияние эффективных масс

На положение УРК также оказывает влияние величины эффективных масс в нижней и верхней ТКЯ. Используя выражения (4),(5) определено влияние эффективной массы носителей зарядов в верхней и нижней КЯ на положения УРК (см. рис.4).

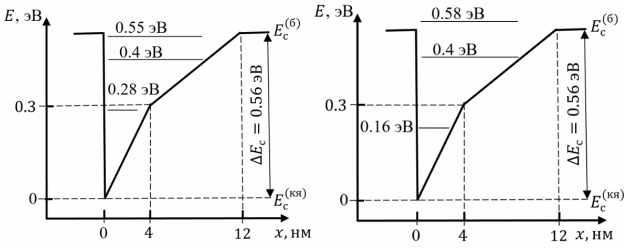

Рис.4. Энергетический спектр ТКЯ с комбинированным профилем узкая — широкая» а) (m_1>m_2), б) (m_1<m_2)

Как следует из рис.4, уменьшение эффективной массы в нижней ТКЯ приводит к добавлению, а также уплотнению энергетического спектра в области верхней ТКЯ. Более высокие уровни энергий с верхней ТКЯ опускаются ниже, смещая более глубокие уровни энергии в сторону нижней КЯ. Увеличение массы в верхней КЯ оказывает сильное влияние на положение первого возбуждённого уровня, а также приводит к небольшому уплотнению спектра в верхней квантовой яме. Изменение соотношения эффективных масс свободных носителей в верхней и нижней ТКЯ создает наряду с шириной и глубиной КЯ дополнительную степень свободы для контроля плотности распределения УРК под заданные условия излучения.

Интенсивность излучения

Интенсивность излучения ТКЯ с комбинированным профилем может быть оценена с помощью выражения [4]:

$$I_{\text{ТКЯ}} = \hbar\omega \cdot B_r \cdot \sum_{k=1}^{m} \left\{ \sum_{s=1}^{N} \left[\frac{n_{2D}^{(e)}(E_s) \cdot f_n(E_s)}{a_1(x) \cdot E_s \cdot qF} \cdot a_1(x) \right] \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{l=1}^{P} \left[\frac{n_{2D}^{(h)}(E_l) \cdot f_h(E_l)}{a_2(x) \cdot E_l \cdot qF} \cdot a_2(x) \right] \right\}. \qquad (7)$$

Здесь B_r — вероятность излучательной рекомбинации электронов из n-КЯ и дырок из p-КЯ толщиной a; $n_{2D}(E)$ — плотность состояний в электронной и дырочной КЯ [1]; $f_n(E)$, $f_p(E)$ — функции Ферми для заполнения уровня размерного квантования электронами в n-КЯ и дырками в p-КЯ соответственно; N — число уровней размерного квантования для электронов; P — число уровней для дырок.

Установлено, что комбинирование профиля ТКЯ из двух ям различного наклона позволяет в широких пределах управлять спектром излучения, а также повысить эффективность гетероструктуры на основе КЯ комбинированного профиля. Показано, что наибольшая интенсивность излучения комбинированной ТКЯ достигается при минимальном наклоне нижней ТКЯ и максимальным наклоне верхней ТКЯ. Интенсивность излучения ТКЯ комбинированного профиля может превышать интенсивность излучения одиночной треугольной квантовой ямы до нескольких раз. Полученные результаты могут быть использованы при разработке топологий КЯ в светодиодных источниках когерентного и некогерентного излучения, изготавливаемых на основе соединений $A^{III}N$, обладающих большим полем пьезо- и пирополяризации.

1. Мартинес-Дуарт Дж.М., Агулло-Руеда Ф., Мартин-Палма Р.Дж Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники / Пер.с англ. А.В.Хочояна; под ред. Е.Б.Якимова. М.: Техносфера, 2007. 368с.
2. Шуберт Ф. Светодиоды / Пер. с англ.; под ред. А.Э.Юновича. М.: Физматлит, 2008. 496 с.
3. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г, Гридчин В.А. Основы наноэлектроники. М.: Физматкнига, 2006. 496 с.
4. Пат. 045023 РФ, МКИ6 А 61 Н 1/0 №2019123050/14. Светодиодная гетероструктура с квантовыми ямами комбинированного профиля / В.Н.Давыдов, О.Ф.Задорожный, В.И.Туев и др. Заявл. 17.07.19. Опубл. 23.04.2020.
5. Давыдов В.Н., Харитонов С.В., Лугина Н.Э., Мельник К.П. Составление аналитического выражения физического процесса по экспериментальной кривой с изломами // ФТП. 2017. Т.51. Вып. 9. С.1223-1228.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: ГИФМЛ. 1963. 702 с.

References

1. Martinez-Duart D. M. World of materials and technologies. Nanotechnology for micro- and optoelectronics. Moscow, Technosphere, 2007, 368 p.
2. Schubert F. Light-emitting diodes. New York, 2003 (Rus. edition: Svetodiody. Moscow, Fizmatlit Publ., 2008, 496 p.)
3. Dragunov V.P., Neizvestnyy I.G, Gridchin V.A. Osnovy nanoelektroniki [Fundamentals of Nanoelectronics]. Moscow, Lotus; Fizmatkniga, 2006, 496 p.
4. Davydov V.N., Zadorozhnyy O.F., Tuev V.I., Davydov M.V., Soldatkin V. S., Vilisov A. A., Svetodiodnaya geterostruktura s kvantovymi yamami kombinirovannogo profilya [LED heterostructure with quantum wells of a combined profile]. Patent RF, no. 2019123050/14, 2020.
5. Davydov V.N., Kharitonov S.V., Lugina N.E., Mel'nik K.P. Sostavlenie analiticheskogo vyrazheniya fizicheskogo protsessa po eksperimental'noy krivoy s izlomami [Compilation of the analytical expression of the physical process according to the experimental curve with kinks]. FTP, 2017, vol. 1, vol.9, pp.1223-1228.
6. Landau L.D., Lifshits E.M. Teoreticheskaya fizika. T.III. Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya. [Theoretical physics. Vol. 3.I Quantum mechanics. Nonrelativistic theory]. Moscow, GIFFL, 1963, 702 p.