
SPRAWOZDANIE

Imię	Jakub Pawłowski
Numer albumu	250193
Kierunek	Inżynieria Kwantowa
Rok/Semestr	Semestr letni 2020/2021
Materiał	AlGaAsSb
Data	25 kwietnia 2021



Politechnika Wrocławska

Spis treści

1	Opis systemu materiałowego	1
1.1	Zastosowania materiałów binarnych	1
1.2	Zastosowania stopów trójskładnikowych	2
2	Opis modeli i metod. Własności stopu czteroskładnikowego.	2
2.1	Schemat interpolacyjny	2
2.2	Parametry materiałów binarnych. Parametry nieliniowości.	3
2.3	Obliczone parametry stopów trójskładnikowych i stopu czteroskładnikowego. .	3
2.3.1	Ustalony x , zmienny y	5
2.3.2	Ustalony y , zmienny x	6
2.4	Odkształcenia przy wzroście epitaksjalnym na podłożu GaAs. Wpływ temperatury.	7
2.5	Profile energetyczne cienkich warstw.	13
2.6	Grubość krytyczna	14
3	Wyniki i dyskusja	16
	Dodatek: Wykresy parametrów materiałów trójskładnikowych	16
	Bibliografia	18

Spis rysunków

2.1	Wykres przedstawiający szerokość przerwy wzbronionej w zależności od parametru sieci. Zamknięta krzywa stanowi ścieżkę łączącą różne materiały trójskładnikowe.	4
2.2	Wykresy parametrów stopu czteroskładnikowego dla ustalonego ułamka molowego x , w funkcji ułamka molowego y	6
2.3	Wykresy parametrów stopu czteroskładnikowego dla ustalonego ułamka molowego y , w funkcji ułamka molowego x	7
2.4	Przekrój poprzeczny przez próbkę. Parametry sieciowe warstwy wzrostowej oraz podłoża oznaczone są odpowiednio a_e oraz a_s . Źródło: <i>Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors</i> , Adachi [28].	8
2.5	Zależności interpolowanej przerwy wzbronionej i parametru sieci dla stopów trójskładnikowych, i wybranych ułamków molowych x	9

2.6	Zależności interpolowanej przerwy wzbronionej i parametru sieci dla stopu czteroskładnikowego od temperatury. Odształcenia prostopadłe oraz planarne w funkcji temperatury.	10
2.7	To samo co na rysunku 2.6, ale dla innych ustalonych ułamków molowych x i y	10
2.8	Zależności energii czterech badanych pasm od temperatury.	11
2.9	To samo co rysunek 2.8, tylko dla innych wartości ułamków molowych.	12
2.10	Rysunek przedstawiający energie wszystkich pasm razem, dla materiału $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}_{0.4}\text{Sb}_{0.6}$. Widać, że w rozpatrywanej sytuacji temperatura ma największy wpływ na położenie pasma przewodnictwa. Pozostałe pasma w dobrym przybliżeniu nie zmieniają się z temperaturą.	12
2.11	Porównanie profili energetycznych badanej struktury bez uwzględnienia naprężeń oraz z odkształceniami. Przyjęto temperaturę $T = 300 \text{ [K]}$. Składy materiału B: (a) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$, (b) $\text{GaAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (c) $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (d) $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$	13
2.12	Porównanie profili energetycznych badanej struktury ze względu na temperaturę. odkształcenia zostały uwzględnione. Składy materiału B: (a) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$, (b) $\text{GaAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (c) $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (d) $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$	14
2.13	Wykres funkcji $f(h_c)$ dla różnych kilku różnych zestawów parametrów. Widoczne są miejsca interesujące nas miejsca zerowe tej funkcji, dla grubości rzędu kilku Å. Ponieważ dla dużych wartości h_c człon liniowy zaczyna dominować nad członem logarytmicznym, funkcja zaczyna maleć i po raz kolejny przecina zero. Jednak te miejsca zerowe będą odpowiadały dziesiątkom a nawet setkom Å i nie są interesującymi rozwiązaniami z punktu widzenia rzeczywistej grubości krytycznej.	15
2.14	Grubości krytyczne $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ odkładanego na podłożu GaAs, w temperaturze $T = 300\text{K}$. Panel (a) przedstawia zależność grubości krytycznej od ułamka molowego y , dla ustalonego x . Panel (b) przedstawia zależność grubości krytycznej od ułamka molowego x , dla ustalonego y	16
3.1	Wykresy parametrów stopów trójskładnikowych w funkcji ułamka molowego x	17

1. Opis systemu materiałowego

Badanym materiałem jest czteroskładnikowy stop AlGaAsSb. Znajduje on zastosowanie m.in. w budowie laserów na heterostrukturach [1], kaskadowych ogniw słonecznych [2] oraz w charakterze szerokopasmowego źródła światła wysokiej mocy, na zakresie spektralnym 2.2 μm do 2.5 μm , opartego na studni kwantowej [3].

Składa się on z 4 materiałów binarnych, związków III-V tj.:

- AlAs
- AlSb
- GaAs
- GaSb

Informacje o materiałach binarnych posłużą nam do wyznaczenia podstawowych parametrów materiałowych. Związki III-V w rozpatrywanym stopie czteroskładnikowym mieszają się, tworząc stopy trójskładnikowe. Są to:

- AlGaAs
- AlGaSb
- AlAsSb
- GaAsSb

1.1 Zastosowania materiałów binarnych

AlAs, GaAs, AlSb oraz GaSb tworzą kryształy o strukturze blendy cynkowej (stałe sieciowe odpowiednio 5.6611 Å, 5.6533 Å, 6.1355 Å oraz 6.0959 Å) i grupie przestrzennej $F\bar{4}3m$. Parametry materiałowe opisujące te związki można znaleźć w Adachi [4], Vurgaftman, Meyer, and Ram-Mohan [5], and Adachi [6, 7].

AlSb jest półprzewodnikiem grupy III-V o przerwie energetycznej 1.6 eV. Ze względu na możliwość hodowli dużych, pojedynczych kryształów o ruchliwości elektronów do 350 cm^2/Vs materiał ten jest wykorzystywany jako detektor fotonów [8].

GaAs jest półprzewodnikiem grupy III-V o przerwie energetycznej 1.441 eV. Jest to jeden z najbardziej popularnych półprzewodników. Stosowany zarówno w charakterze emitera promieniowania np. diody LED świecące w bliskiej podczerwieni [9] oraz absorbera, umożliwiając konstrukcję bardzo wydajnych ogniw słonecznych, zbliżających się do limitu Shockleya–Queissera [10].

GaSb jest półprzewodnikiem grupy III-V o wąskiej przerwie energetycznej 0.67 eV [11]. Materiał ten ma duży potencjał do zastosowań elektro-optycznych w zakresie bliskiej podczerwieni.

Homozłącza oparte na GaSb są dobrym kandydatem na szybkie fotodiody lawinowe o niskim szumie [12]. Ze względu na stałą sieciową zgodną z różnymi trój- i czteroskładnikowymi stopami III-V, pokrywającymi szeroki zakres spektralny od $0.8\mu\text{m}$ do $4.3\mu\text{m}$ znajduje on zastosowanie jako substrat do tworzenia źródeł i detektorów [13]. Wykorzystywany jest również do budowy diód laserowych oraz fotodetektorów o wysokiej wydajności kwantowej [14, 15].

AlAs jest półprzewodnikiem grupy III-V o skośnej przerwie wzbronionej 2.16 eV [16]. Materiał ten znajduje zastosowanie jako emiter, np. do budowy stosowanych w spektroskopii kwantowych laserów kaskadowych operujących na zakresie spektralnym odpowiadającym częstotliwością 3.4 THz do 5 THz co odpowiada bliskiej podczerwieni [17].

1.2 Zastosowania stopów trójskładnikowych

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ jest materiałem półprzewodnikowym zbliżonym pod względem stałej sieciowej do GaAs, jednak o większej przerwie wzbronionej, która zmienia się między 1.42 eV a 2.16 eV . Dla $x < 0.4$ przerwa fundamentalna jest prosta. Znajduje on zastosowanie do budowy wydajnych fotodetektorów opartych na studiach kwantowych i pracujących w zakresie podczerwieni [18]. W tym materiale zaobserwowane zostały również nieliniowe efekty optyczne [19].

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ jest materiałem półprzewodnikowym grupy III-V. Przypomina on $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ tylko o niższej przerwie wzbronionej. Znajduje on zastosowanie do budowy fotodetektorów pracujących w podczerwieni [20], w tym do diod lawinowych [14, 15].

$\text{AlAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ jest materiałem półprzewodnikowym grupy III-V. Stosowany jest w charakterze zarówno detektora, do budowy nisko zaszumionych diód lawinowych [21] oraz emitera, w kwantowych laserach kaskadowych o długości fali ok. $\lambda = 3.7\mu\text{m}$ w temperaturze pokojowej, a więc pracujących w zakresie bliskiej podczerwieni [22].

$\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ jest materiałem półprzewodnikowym grupy III-V. Stosowany jest głównie jako fotodetektor pracujący w bliskiej podczerwieni [23, 24]. Innym interesującą aplikacją tego materiału jest zwiększenie długości fali emitowanej z kropki kwantowej InAs/GaAs, poprzez naniesienie jego cienkiej warstwy zmniejszającej odkształcenia w kropce [25].

Parametry nieliniowości stopów trójskładnikowych mogą zostać znalezione w Vurgaftman, Meyer, and Ram-Mohan [5], Linnik and Christou [26], Adachi [6, 7], and Mozume et al. [27].

2. Opis modeli i metod. Własności stopu czteroskładnikowego.

2.1 Schemat interpolacyjny

W celu znalezienia parametrów stopów trójskładnikowych znając parametry materiałów binarnych możemy posłużyć się dobrze znanym schematem interpolacyjnym [4]. W najprostszym, liniowym przybliżeniu parametr T materiału trójskładnikowego może zostać wyznaczonych przy pomocy parametrów binarnych korzystając ze wzoru:

$$T_{A_xB_{1-x}C}(x) = xB_{AC} + (1-x)B_{BC} \equiv a + bx \quad (2.1)$$

gdzie $a = B_{BC}$ oraz $b = B_{AC} - B_{BC}$. W praktyce, niektóre parametry materiałowe znacznie odbiegają od relacji (2.1) i wykazują w przybliżeniu kwadratową zależność od ułamka molowego

x [7]:

$$T_{A_x B_{1-x} C}(x) = xB_{AC} + (1-x)B_{BC} - C_{A-B}x(1-x) \equiv a + bx + cx^2 \quad (2.2)$$

gdzie $a = B_{BC}$, $b = B_{AC} - B_{BC} + C_{A-B}$ oraz $c = C_{A-B}$. Parametr c to tzw. bowing parameter czyli parametr nieliniowości. Tym równaniem będziemy się posługiwali do wyznaczenia własności stopów trójskładnikowych, w przypadku liniowym podstawiając wartość 0 za parametr nieliniowości.

W przypadku, gdy interesują nas własności stopu czteroskładnikowego postaci $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$, a znamy już własności stopów trójskładnikowych składających się na ten materiał możemy posłużyć się następującym związkiem [7]:

$$Q(x, y) = \frac{x(1-x)[yT_{ABC}(x) + (1-y)T_{ABD}(x)]}{x(1-x) + y(1-y)} \quad (2.3)$$

$$+ \frac{y(1-y)[xT_{ACD}(y) + (1-x)T_{BCD}(y)]}{x(1-x) + y(1-y)} \quad (2.4)$$

2.2 Parametry materiałów binarnych. Parametry nieliniowości.

Większość wykorzystanych parametrów materiałów binarnych oraz parametrów nieliniowości pochodzi z pracy przeglądowej “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys”, Vurgaftman, Meyer, and Ram-Mohan [5], za wyjątkiem mas efektywnych dziur lekkich, ciężkich oraz odpowiednich parametrów nieliniowości, które zostały zaczerpnięte z książki *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Adachi [28]. Parametry materiałów binarnych zostały przedstawione w tabeli 2.1

Tabela 2.1: Parametry materiałów binarnych [5, 28]

Parametr	AlAs	AlSb	GaSb	GaAs
E_g^Γ (eV)	3.099	2.386	0.812	1.519
VBO (eV)	-1.33	-0.41	-0.03	-0.80
Δ_{SO} (eV)	0.28	0.676	0.76	0.341
a_{lc} (Å)	5.6611	6.1355	6.0959	5.65325
m_e^*	0.15	0.14	0.039	0.067
m_{hh}^{DOS}	0.81	0.9	0.37	0.55
m_{lh}^{DOS}	0.16	0.13	0.043	0.083

Parametry nieliniowości zostały przedstawione w tabeli 2.2. Masa efektywna elektronu w $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ wyrażona jest wzorem [28]:

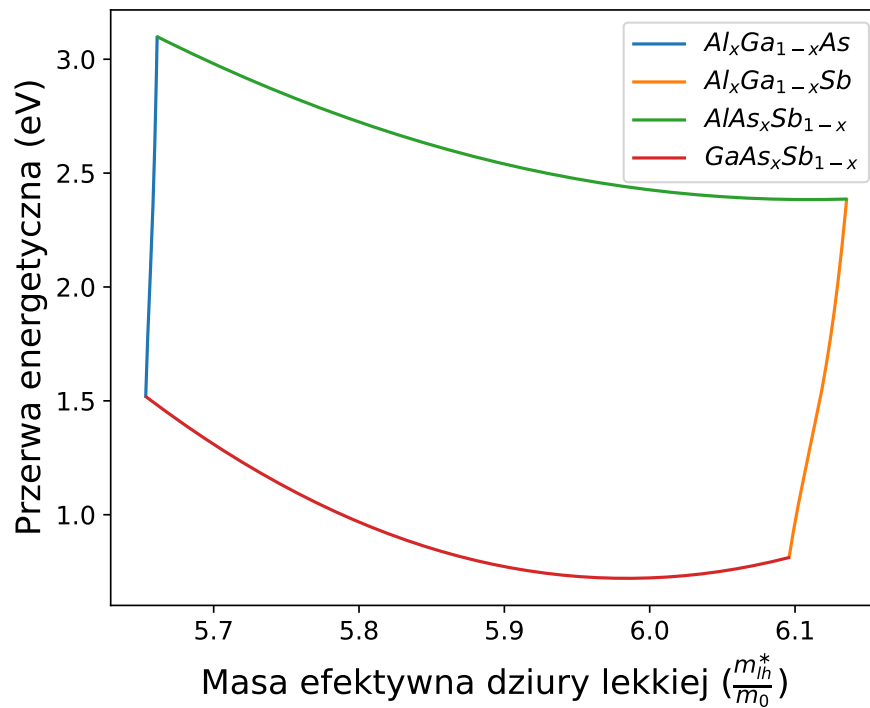
$$m_e^*(x) = 0.039 + 0.014x + 0.014x^2 \quad (2.5)$$

2.3 Obliczone parametry stopów trójskładnikowych i stopu czteroskładnikowego.

Schematy interpolacyjne opisane w 2.1 zostały zaimplementowane w języku Python. Wyniki obliczeń przedstawiono na wykresach.

Tabela 2.2: Parametry nieliniowości stopów trójskładnikowych [5, 28]. Brak parametru nieliniowości oznaczony został “—”.

Parametr	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$	$\text{AlAs}_x\text{Sb}_{1-x}$	$\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$
E_g^Γ (eV)	$-0.127 + 1.310x$	$-0.044 + 1.22x$	0.8	1.43
VBO (eV)	—	—	-1.71	-1.06
Δ_{SO} (eV)	—	0.3	0.15	0.6
a_{lc} (Å)	—	—	—	—
m_e^*	—	—	—	(2.5)
m_{hh}^{DOS}	—	—	—	—
m_{lh}^{DOS}	—	—	—	—



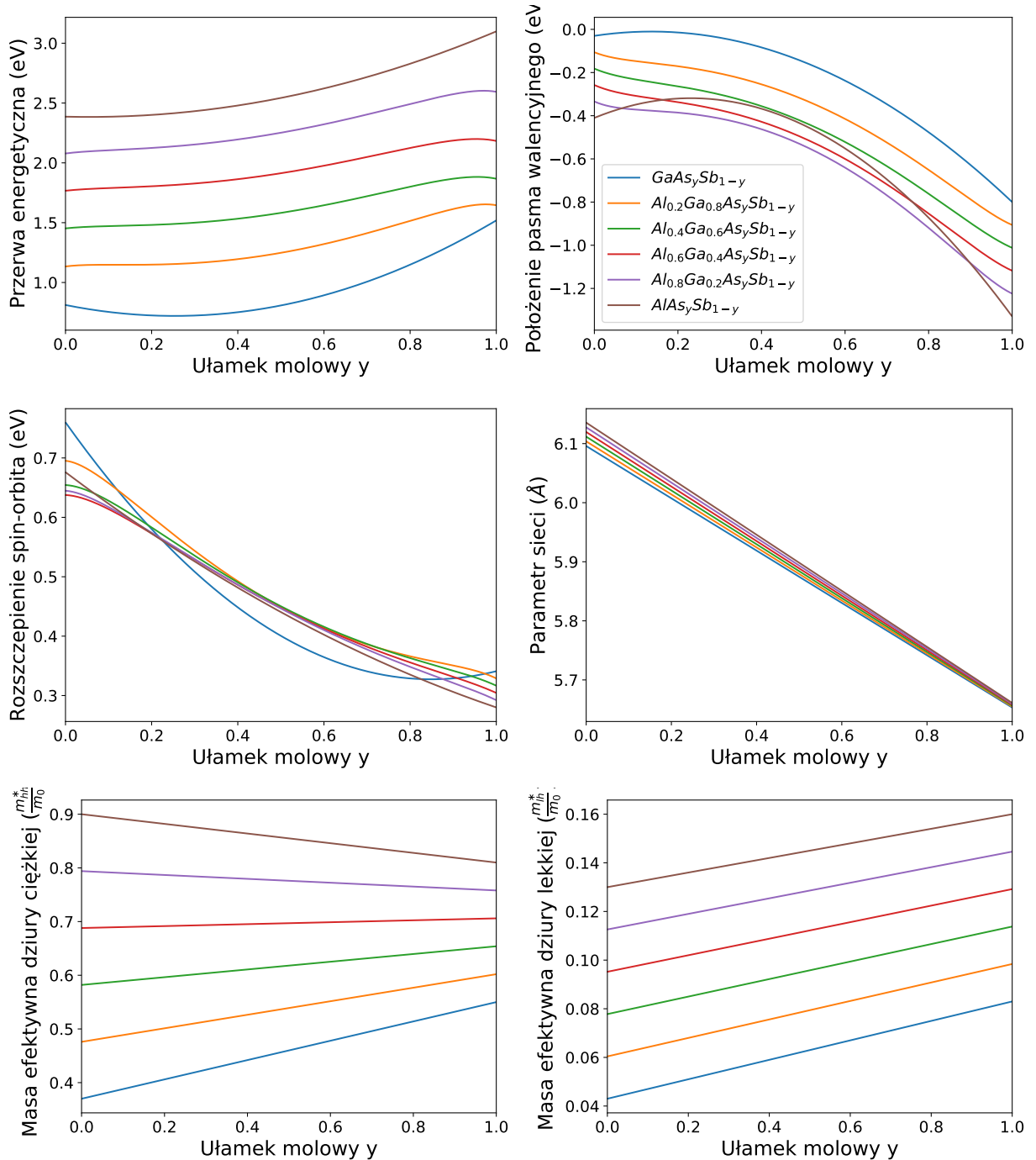
Rysunek 2.1: Wykres przedstawiający szerokość przerwy wzbronionej w zależności od parametru sieci. Zamknięta krzywa stanowi ścieżkę łączącą różne materiały trójskładnikowe.

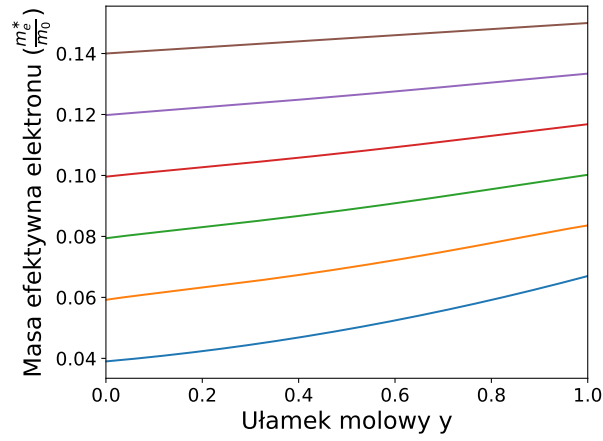
Pozostałe wykresy dotyczące parametrów materiałów trójskładnikowych zostały przedstawione w [Dodatku](#).

Przejdźmy teraz to przedstawienia wyników dla badanego materiału czteroskładnikowego tj. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$. Otrzymano dwie serie wykresów, najpierw dla ustalonego x w funkcji ułamka molowego y , a potem dla ustalonego y w funkcji x . Warto zwrócić uwagę na przypadki graniczne tj. $x = 0.0$, $x = 1.0$ lub $y = 0.0$, $y = 1.0$. Wówczas otrzymujemy krzywe zgodne z wynikami dla stopów trójskładnikowych, przedstawionymi w [Dodatku](#).

2.3.1 Ustalony x , zmienny y

W pierwszej serii wykresów ułamek molowy x przyjmuje ustalone wartości wynoszące $[0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0]$, a ułamek molowy y przyjmuje 1000 równoodległych wartości między 0.0 i 1.0.

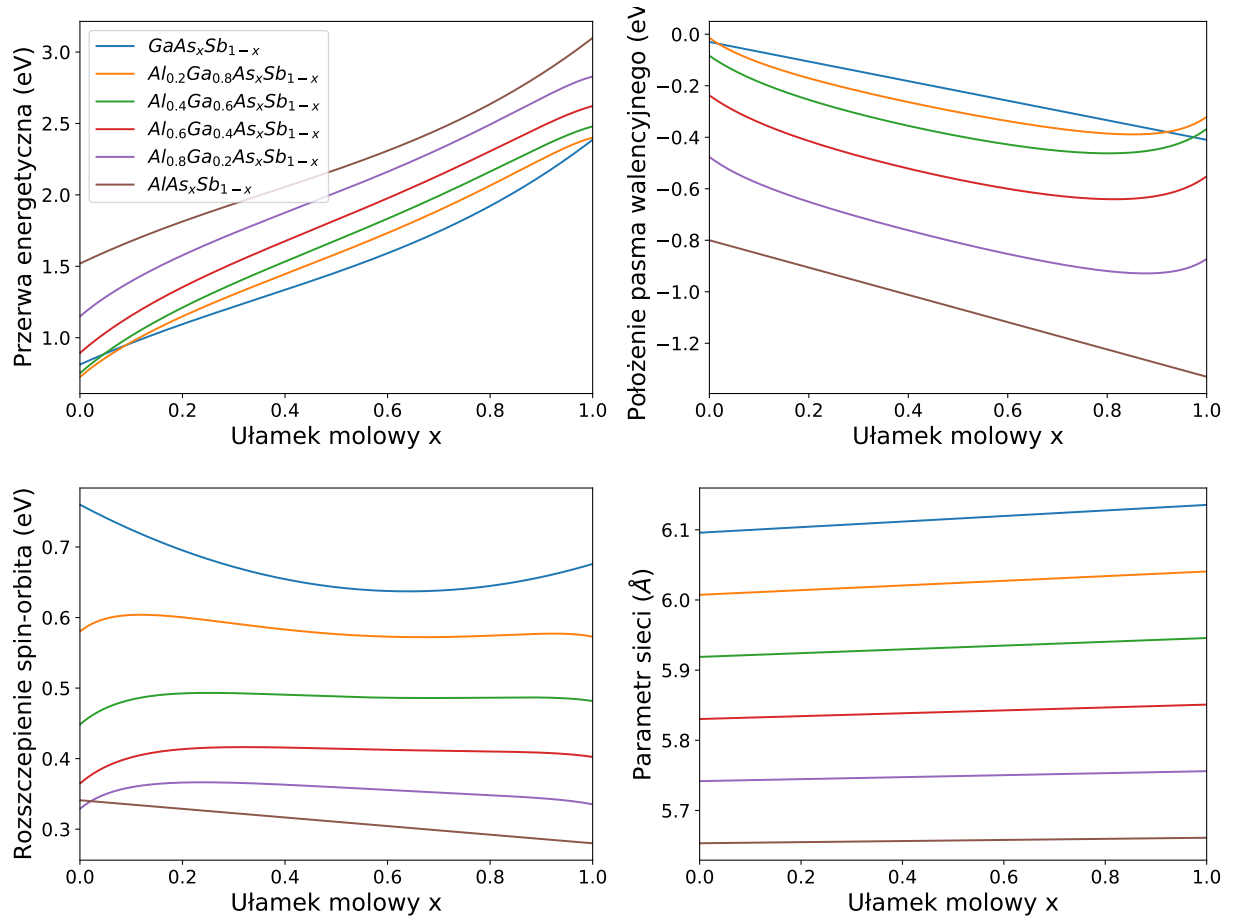


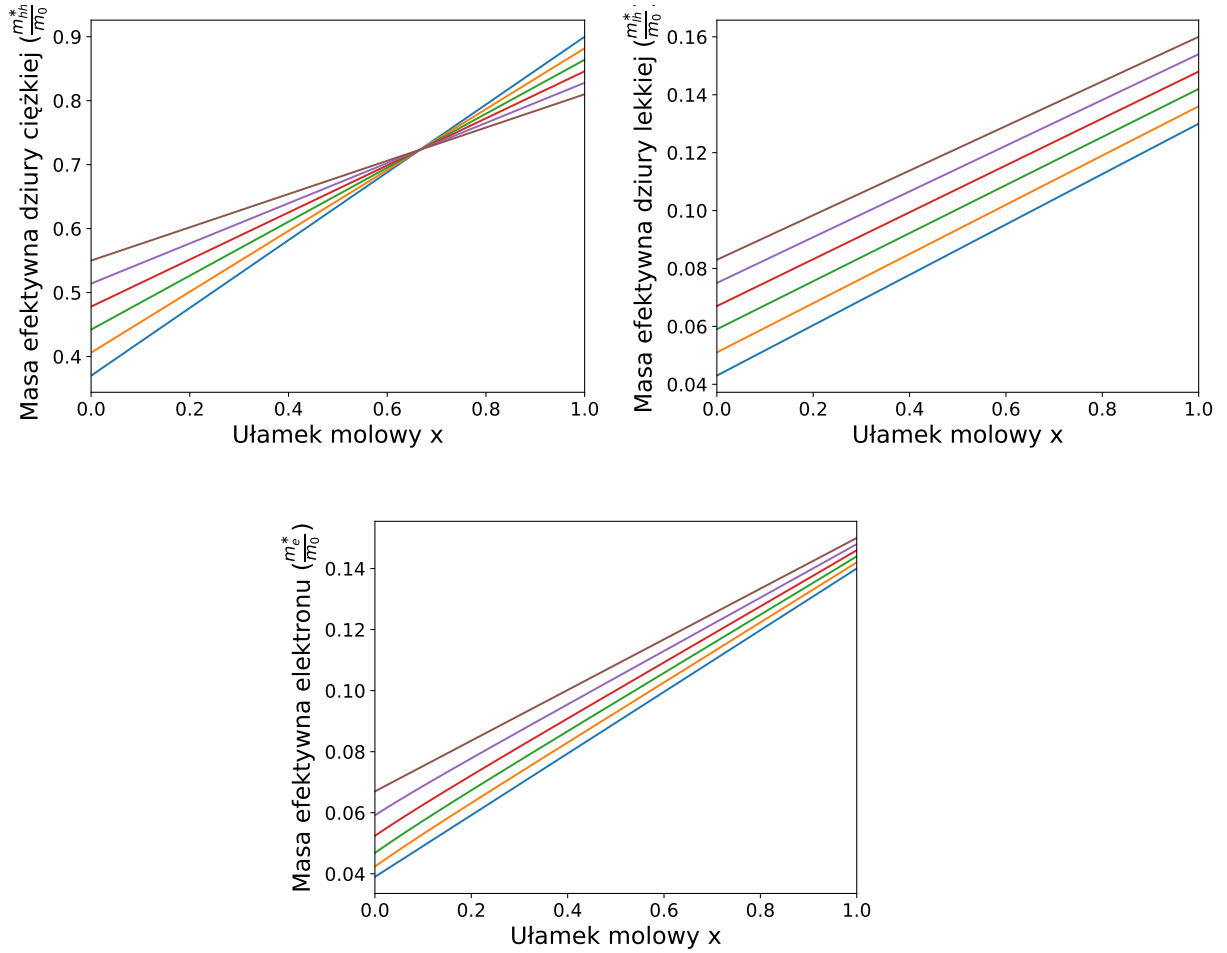


Rysunek 2.2: Wykresy parametrów stopu czteroskładnikowego dla ustalonego ułamka molowego x , w funkcji ułamka molowego y .

2.3.2 Ustalony y , zmienny x

W drugiej serii wykresów ułamek molowy y przyjmuje ustalone wartości wynoszące $[0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0]$, a ułamek molowy x przyjmuje 1000 równoodległych wartości między 0.0 i 1.0.





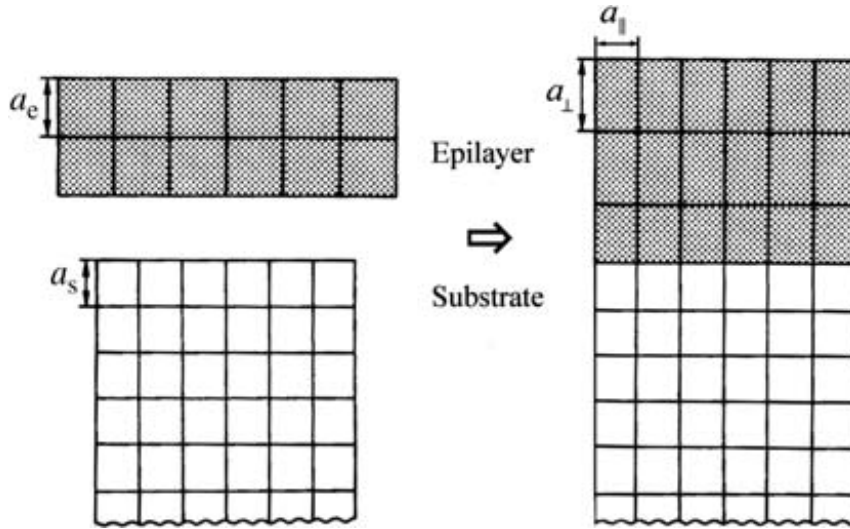
Rysunek 2.3: Wykresy parametrów stopu czteroskładnikowego dla ustalonego ułamka molowego y , w funkcji ułamka molowego x .

2.4 Odształcenia przy wzroście epitaksjalnym na podłożu GaAs. Wpływ temperatury.

W tej sekcji przeanalizujemy wpływ naprężeń na energie pasm w AlGaAsSb, odkształcenia zostaną wprowadzone jako konsekwencja wzrostu epitaksjalnego na podłożu GaAs.

Tabela 2.3: Parametry Varshiego materiałów binarnych. Zależności parametru sieci od temperatury.

Parametr	AlAs	AlSb	GaSb	GaAs
α (meV/K)	0.885	0.42	0.417	0.5405
β (K)	530	140	140	204
a_{lc}^T (Å/K)	2.9	2.6	4.72	3.88



Rysunek 2.4: Przekrój poprzeczny przez próbkę. Parametry sieciowe warstwy wzrostowej oraz podłoża oznaczone są odpowiednio a_e oraz a_s . Źródło: *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Adachi [28].

W pierwszej kolejności uwzględniony zostanie wpływ temperatury na szerokość w przerwy wzbronionej oraz parametru sieci materiałów binarnych. Zależność temperaturowa przerwy wzbronionej opisana jest przy pomocy parametrów Varshiego α i β oraz równania [5]:

$$E_g(T) = E_g(T = 0) - \frac{\alpha \cdot T^2}{T + \beta} \quad (2.6)$$

Zależność temperaturowa parametru sieci dana jest równaniem:

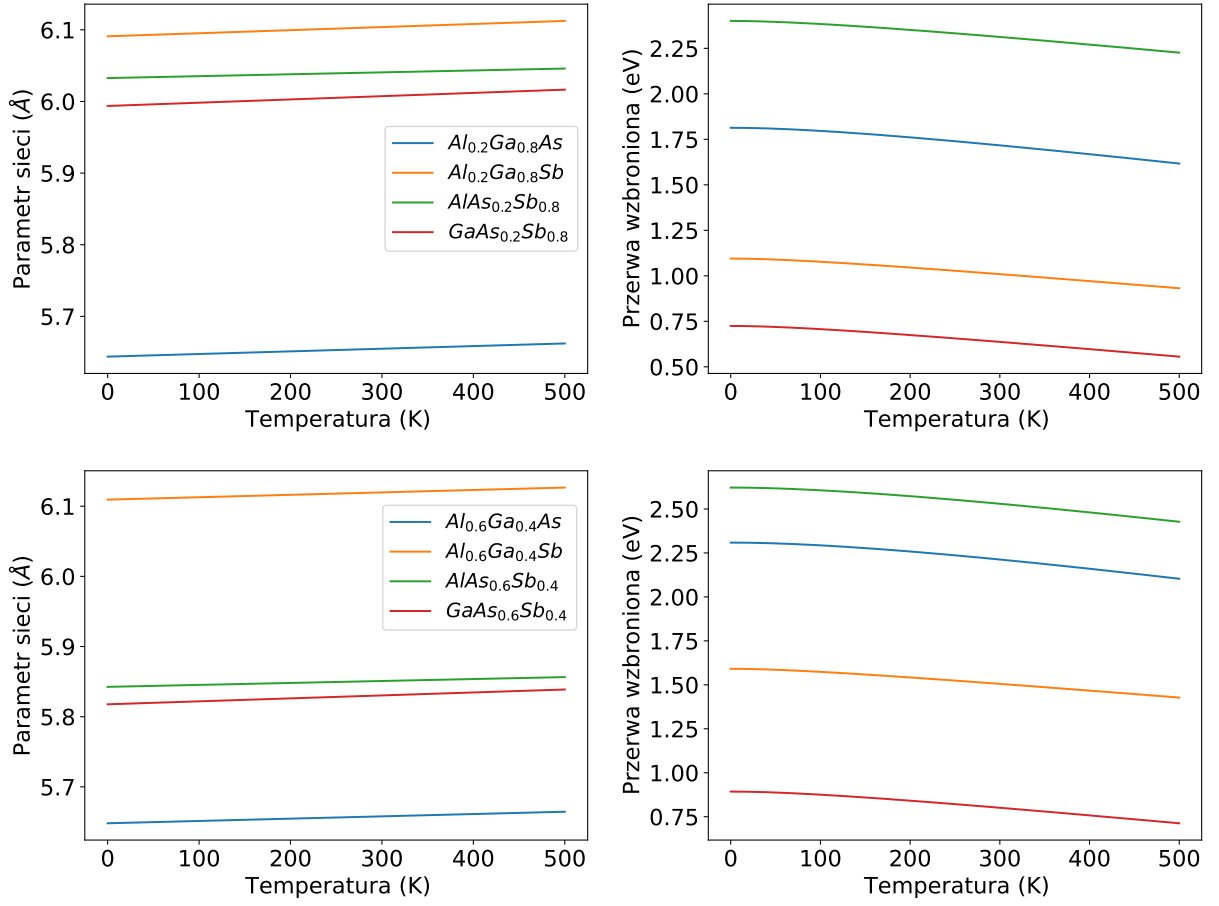
$$a_{lc}(T) = a_{lc}(T = 0) + a_{lc}^T \cdot 10^{-5} \cdot (T - 300) \quad (2.7)$$

Parametry Varshiego materiałów binarnych, oraz zależności parametru sieci od temperatury przedstawione są w tabeli 2.3:

W celu wyznaczenia temperaturowej zależności parametrów dla stopów trójskładnikowych i czteroskładnikowego, posłużono się schematem interpolacyjnym opisanym w 2.1.

Tabela 2.4: Potencjały deformacyjne oraz parametry sztywności materiałów binarnych [5].

Parametr	AlAs	AlSb	GaSb	GaAs
a_c (eV)	-5.64	-4.5	-7.5	-7.17
a_v (eV)	-2.47	-1.4	-0.8	-1.16
b (eV)	-2.3	-1.35	-2.0	-2.0
C_{11} (GPa)	1250	876.9	884.2	1221
C_{12} (GPa)	534	434.1	402.6	566



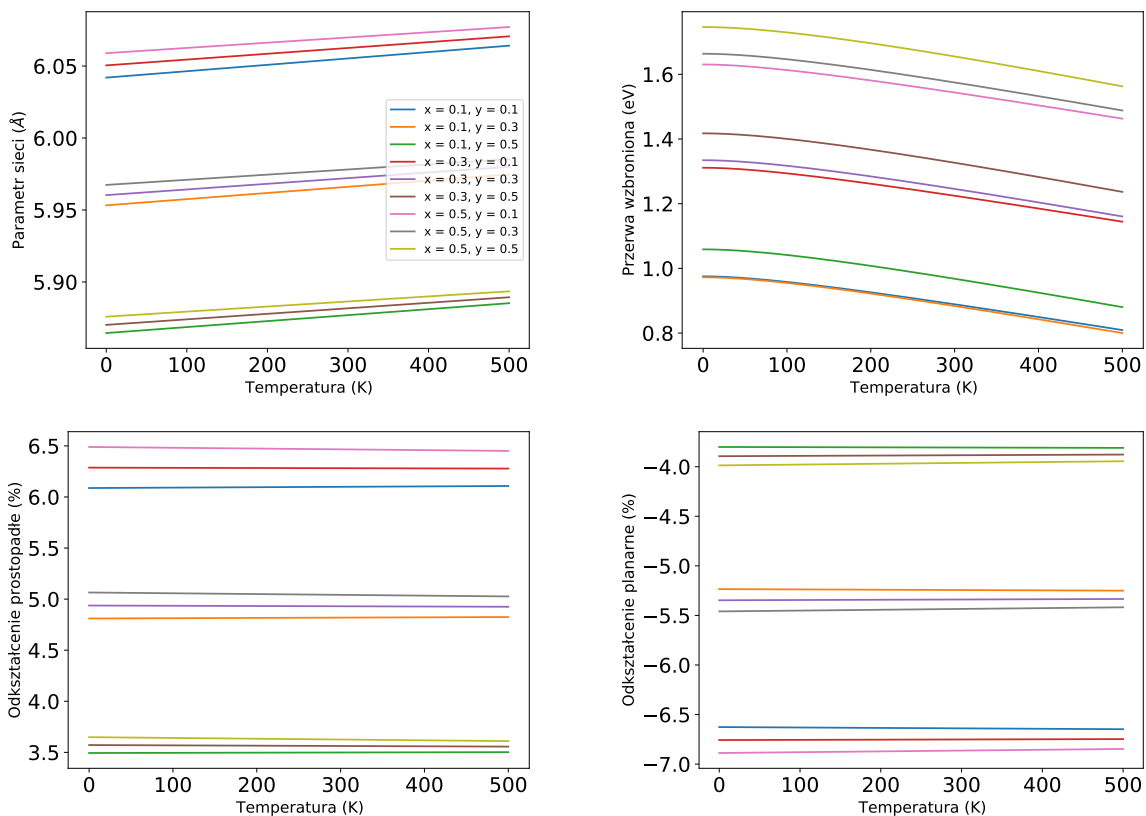
Rysunek 2.5: Zależności interpolowanej przerwy wzbronionej i parametru sieci dla stopów trójskładnikowych, i wybranych ułamków molowych x .

Znając zależność temperaturową stopu czteroskładnikowego oraz podłoża policzono odkształcenia występujące w próbce. Potrzebne potencjały deformacyjne oraz parametry sztywności zostały wyznaczone przy pomocy standardowego schematu interpolacyjnego dla stopu czteroskładnikowego. Ze względu na brak dostępności parametrów nieliniowości ograniczono się do interpolacji liniowej.

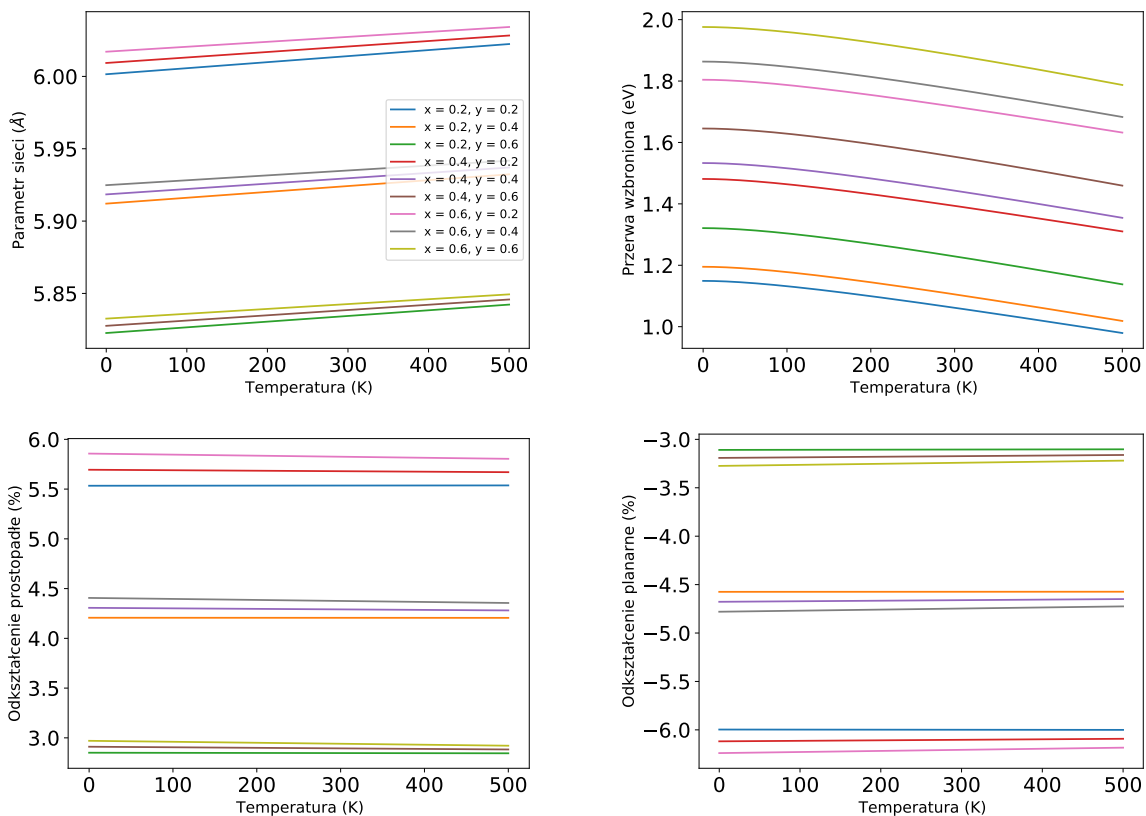
Do obliczenia wpływu naprężeń posłużono się następującymi wzorami:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\parallel} &\equiv \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_{GaAs} - a_{AlGaAsSb}}{a_{AlGaAsSb}} \\ \varepsilon_{\perp} &\equiv \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{\parallel} \\ \delta E_{c,hydro} &= a_c (\varepsilon_{\perp} + 2\varepsilon_{\parallel}) \\ \delta E_{v,hydro} &= a_v (\varepsilon_{\perp} + 2\varepsilon_{\parallel}) \\ \delta E_{v,biax} &= b (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel}) \\ \delta E_{v,biax}^{\pm} &= \frac{1}{2} \left(\delta E_{v,biax} - \Delta_{SO} \pm \sqrt{9\delta E_{v,biax}^2 + 2\delta E_{v,biax}\Delta_{SO} + \Delta_{SO}^2} \right)\end{aligned}$$

W przypadku braku indeksu górnego lub dolnego, przyjmujemy że stałe są obliczone dla stopu czteroskładnikowego. Przyjmujemy, że nasz materiał ma wzór stechiometryczny $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$.



Rysunek 2.6: Zależności interpolowanej przerwy wzbronionej i parametru sieci dla stopu czteroskładnikowego od temperatury. Odształcenia prostopadłe oraz planarne w funkcji temperatury.

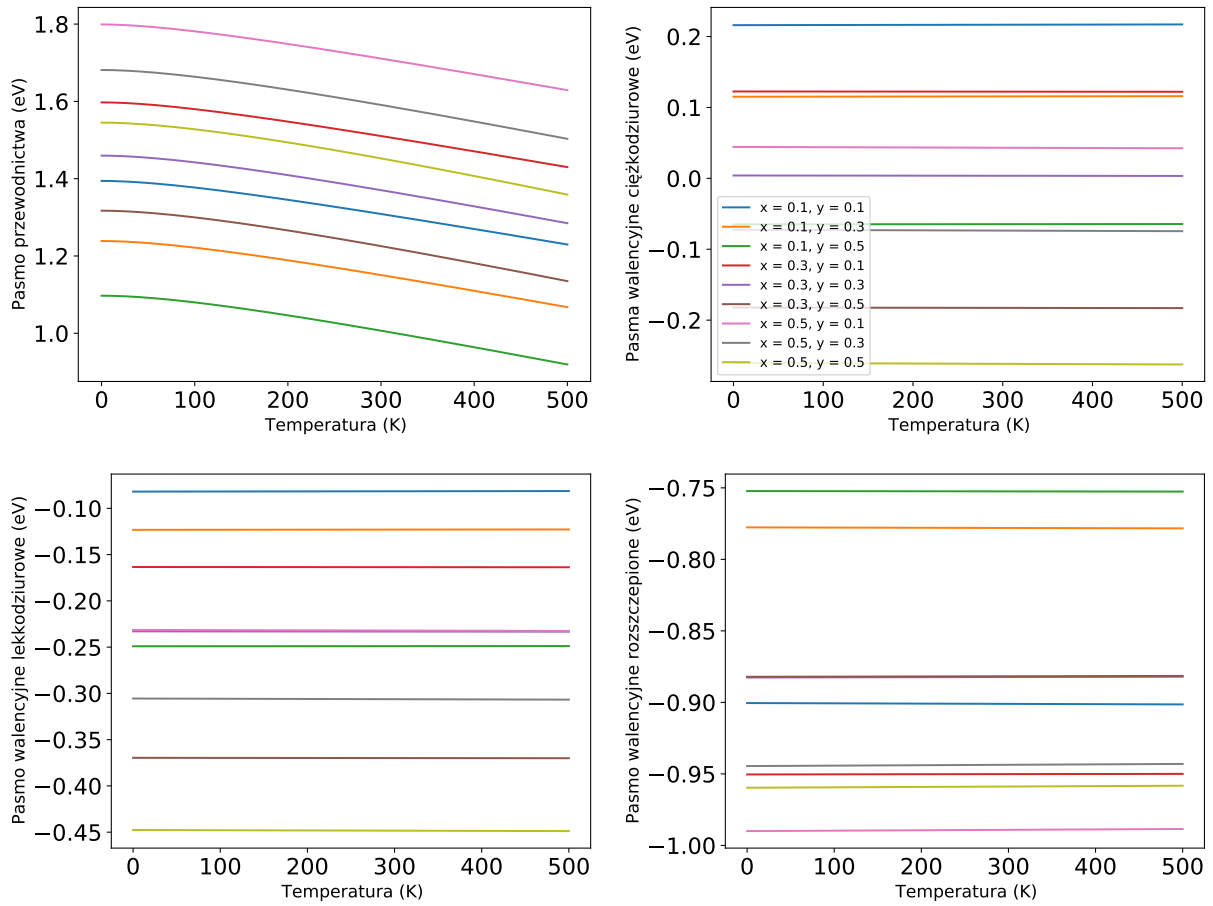


Rysunek 2.7: To samo co na rysunku 2.6, ale dla innych ustalonych ułamków molowych x i y .

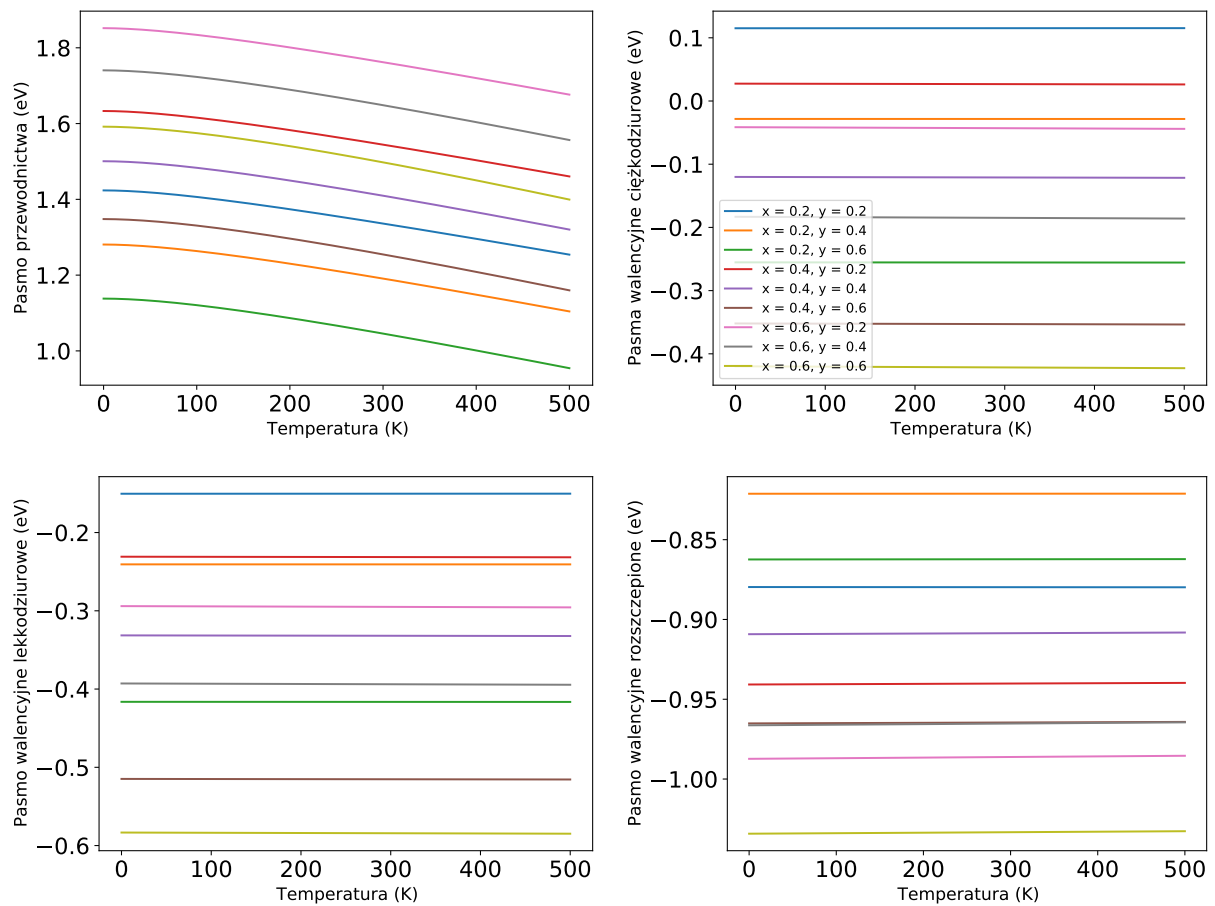
Powyższe obliczenia pozwoliły na uzyskanie energii pasm w funkcji temperatury, z uwzględnieniem jej wpływu na Odkształcenia. Policzono odpowiednio: energię pasma przewodnictwa, energię pasma walencyjnego dziur ciężkich, energię pasma walencyjnego dziur lekkich oraz energię pasma walencyjnego rozszczepionego poprzez oddziaływanie spin-orbitalne. Wszystkie energie liczone są w punkcie Γ strefy Brillouina, czyli w poniższych sumach nie pojawia się wkład związany z energią kinetyczną.

$$\begin{aligned}
 E_c &= \text{VBO} + E_g + \delta E_{c,hydro} \\
 E_{v,hh} &= \text{VBO} + \delta E_{v,hydro} - \delta E_{v,biax} \\
 E_{v,lh} &= \text{VBO} + \delta E_{v,hydro} + \delta E_{v,biax}^+ \\
 E_{v,sh} &= \text{VBO} + \delta E_{v,hydro} + \delta E_{v,biax}^-
 \end{aligned}$$

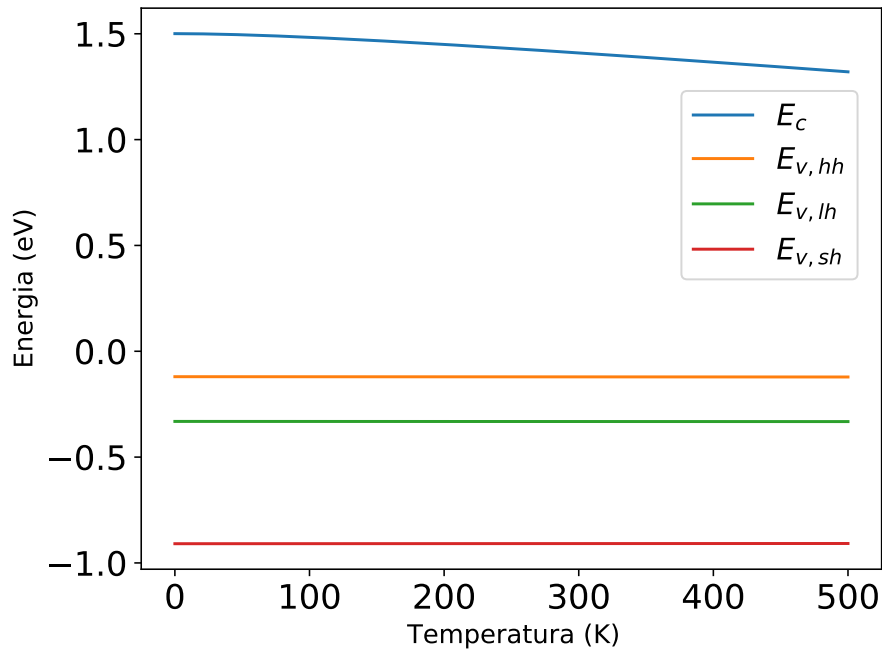
Poniżej przedstawiono rezultaty obliczeń w funkcji temperatury, dla wybranych wartości ułamków molowych x oraz y .



Rysunek 2.8: Zależności energii czterech badanych pasm od temperatury.



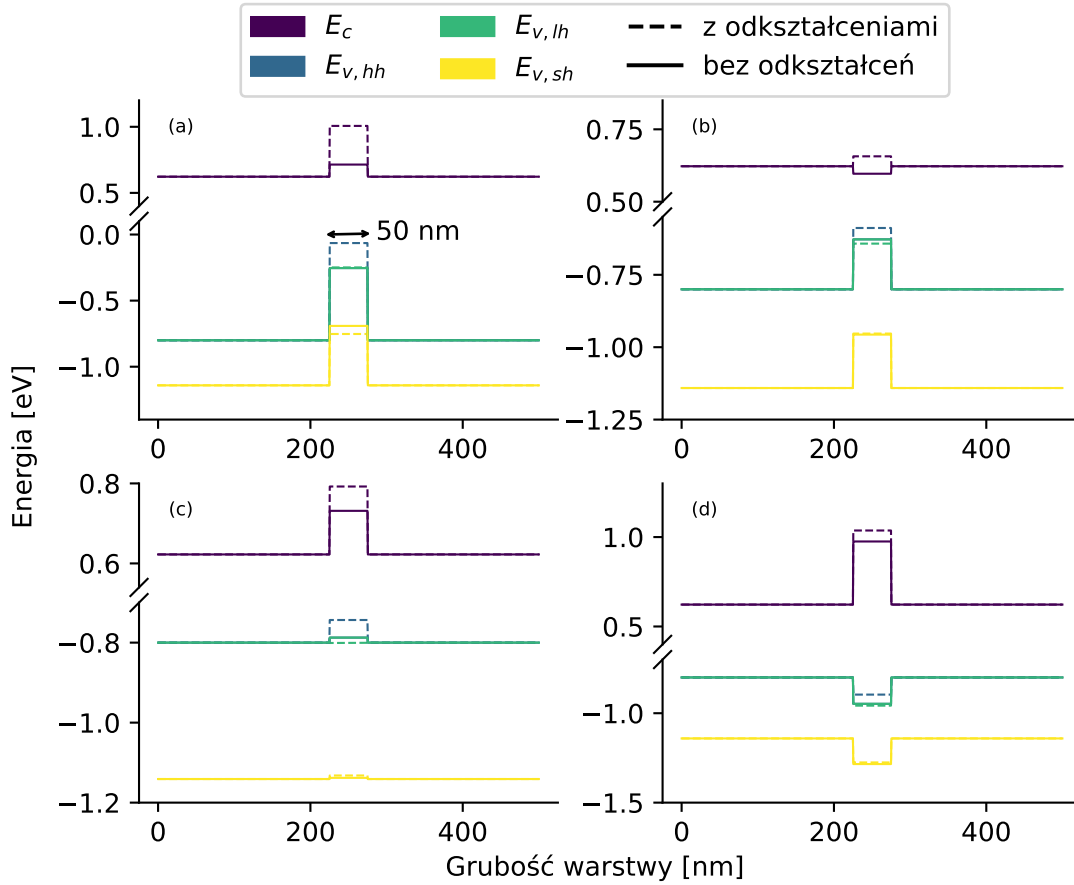
Rysunek 2.9: To samo co rysunek 2.8, tylko dla innych wartości ułamków molowych.



Rysunek 2.10: Rysunek przedstawiający energie wszystkich pasm razem, dla materiału $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}_{0.4}\text{Sb}_{0.6}$. Widać, że w rozpatrywanej sytuacji temperatura ma największy wpływ na położenie pasma przewodnictwa. Pozostałe pasma w dobrym przybliżeniu nie zmieniają się z temperaturą.

2.5 Profile energetyczne cienkich warstw.

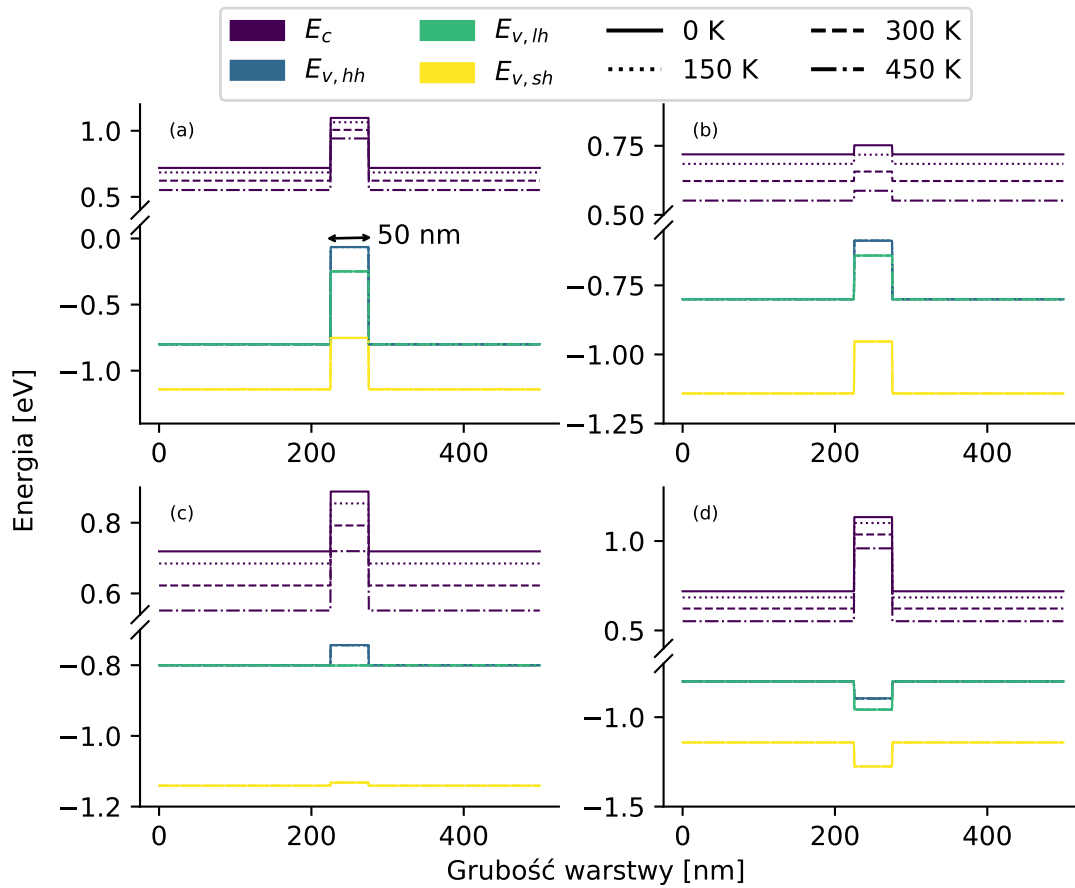
W tej sekcji przedstawimy profile energetyczne cienkich warstw typu A/B/A, gdzie materiał A to GaAs a materiał B to nasz stop czteroskładnikowy czyli $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$. Grubość całej warstwy wynosi 500nm, a grubość materiału czteroskładnikowego to 50nm. Znajduje się on dokładnie w środku warstwy tj. pomiędzy 225 a 275 nm.



Rysunek 2.11: Porównanie profili energetycznych badanej struktury bez uwzględnienia naprężeń oraz z odkształceniami. Przyjęto temperaturę $T = 300 [K]$. Składy materiału B: (a) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$, (b) $\text{GaAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (c) $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (d) $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$

Na Rysunku 2.11 przedstawiono wpływ odkształceń na profil energetyczny badanej cienkiej warstwy w temperaturze $T = 300[K]$. Uwzględnienie odkształceń prowadzi do podniesienia się pasma przewodnictwa, oraz do rozszczepienia pasma walencyjnego na pasmo ciężkodziurowe, lekkodziurowe i rozszczepione spin-orbitalnie. Są to wyniki zgodne z otrzymanymi w sekcji 2.4. Obserwujemy różne typy nieciągłości pasm np. Typ I na panelu (d) oraz Typ III na panelu (a) i (b). Widać również zależność typu nieciągłości od składu.

Na Rysunku 2.12 znajdują się profile energetyczne z odkształceniami, dla różnych wartości temperatury. Jedyną widoczną zależność temperaturową występuje dla energii pasma przewodnictwa E_c , która maleje wraz ze wzrostem temperatury (por. Rysunek 2.9 oraz Rysunek 2.10). Pozostałe pasma bardzo słabo zależą od temperatury i nie jest to widoczne w profilu energetycznym struktury.



Rysunek 2.12: Porównanie profili energetycznych badanej struktury ze względu na temperaturę. odkształcenia zostały uwzględnione. Składy materiału B:

(a) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$, (b) $\text{GaAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (c) $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, (d) $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$

2.6 Grubość krytyczna

W tej części zajmiemy się oszacowaniem grubości krytycznej, jaką może osiągnąć cienka warstwa $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ wzrastająca na podłożu GaAs. Ponieważ między substratem a cienką warstwą występuje niedopasowanie sieciowe, komórki elementarne materiału cienkiej warstwy są rozciągane w jednym kierunku i ściskane w drugim. Wraz z dokładaniem kolejnych warstw materiału naprężenia rosną, aż dochodzi do powstania pęknięcia bądź innego defektu, co prowadzi do zmniejszenia naprężeń w strukturze. Maksymalną grubość warstwy, którą możemy osadzić na podłożu nazywamy grubością krytyczną h_c .

W celu oszacowania tej grubości posłużymy się równaniem Matthews-Blakeslee dla mieszanin związków III-V:

$$h_c = \frac{b}{2\pi f} \frac{1 - 0.25\nu}{1 + \nu} \left(\ln \frac{h_c}{b} + 1 \right) \quad (2.8)$$

Wielkości występujące w tym równaniu to:

$$b = \frac{a}{\sqrt{2}} - \text{wektor Burgersa}$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} - \text{współczynnik Poissona}$$

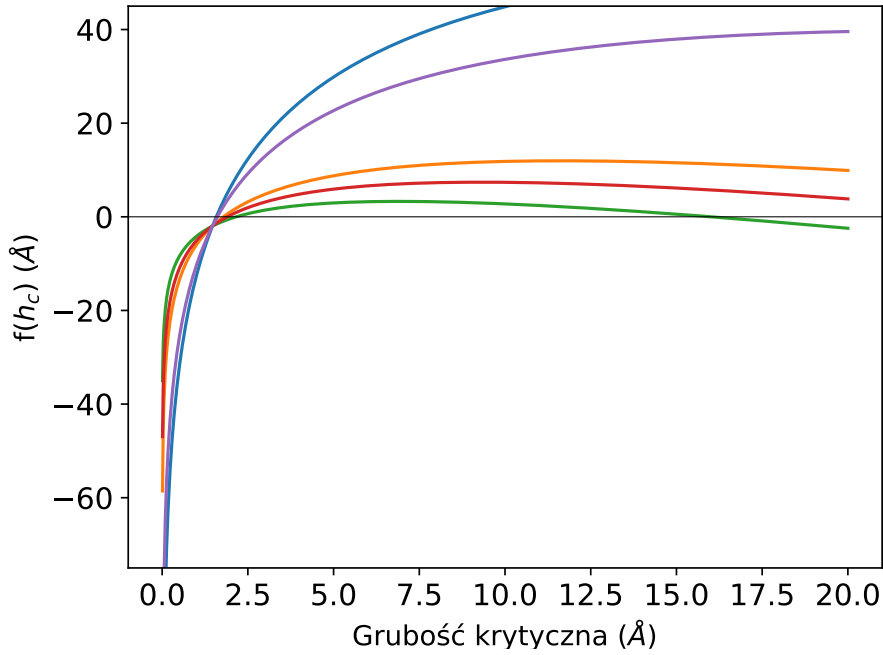
$$f = \left| \frac{a_s - a}{a} \right| - \text{odkształcenie}$$

Parametr a_s jest stałą sieci GaAs i został wzięty z tabeli 2.1. Parametry a , C_{11} , C_{12} to odpowiednio stała sieci oraz parametry sztywności $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ wyznaczone poprzez interpolacje parametrów materiałów binarnych z tabeli 2.1 oraz 2.4.

Równanie 2.8 jest nieliniowym, uwikłanym równaniem i nie możemy znaleźć analitycznego rozwiązania. W celu jego numerycznego rozwiązania przedstawimy je w postaci:

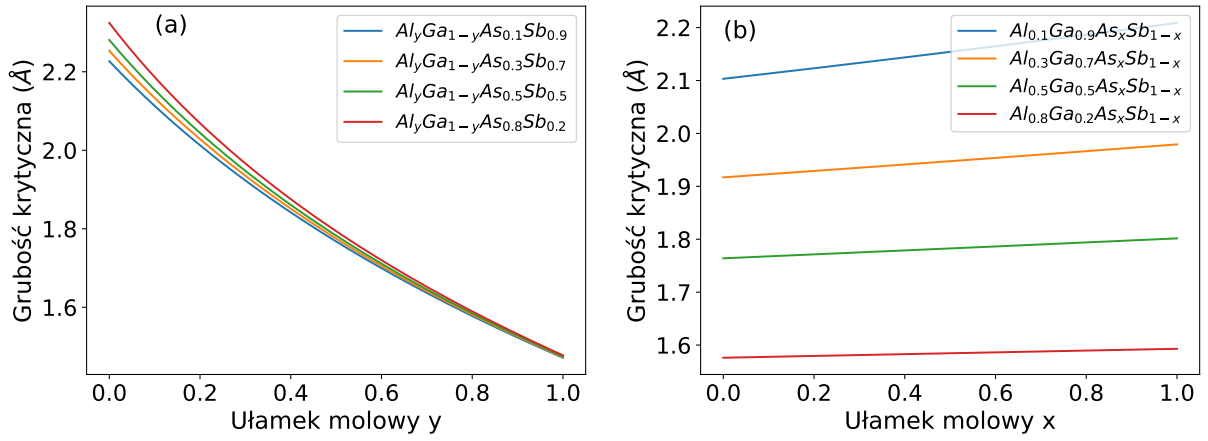
$$f(h_c) = \frac{b}{2\pi f} \frac{1 - 0.25\nu}{1 + \nu} \left(\ln \frac{h_c}{b} + 1 \right) - h_c \quad (2.9)$$

i poszukamy miejsc zerowych funkcji $f(h_c)$.



Rysunek 2.13: Wykres funkcji $f(h_c)$ dla różnych kilku różnych zestawów parametrów. Widoczne są miejsca interesujące nas miejsca zerowe tej funkcji, dla grubości rzędu kilku Å. Ponieważ dla dużych wartości h_c człon liniowy zaczyna dominować nad członem logarytmicznym, funkcja zaczyna maleć i po raz kolejny przecina zero. Jednak te miejsca zerowe będą odpowiadały dziesiątkom a nawet setkom Å i nie są interesującymi rozwiązaniami z punktu widzenia rzeczywistej grubości krytycznej.

Jak widać na rysunku 2.13, funkcja $f(h_c)$ ma prosty przebieg, i do znalezienia jej pierwiastków nie potrzeba wyrafinowanych metod numerycznych. Dla prostoty posłużymy się implementacją w języku Python metody Brenta, będącą hybrydą metody bisekcji, metody siecznych oraz odwrotnej interpolacji kwadratowej [29].



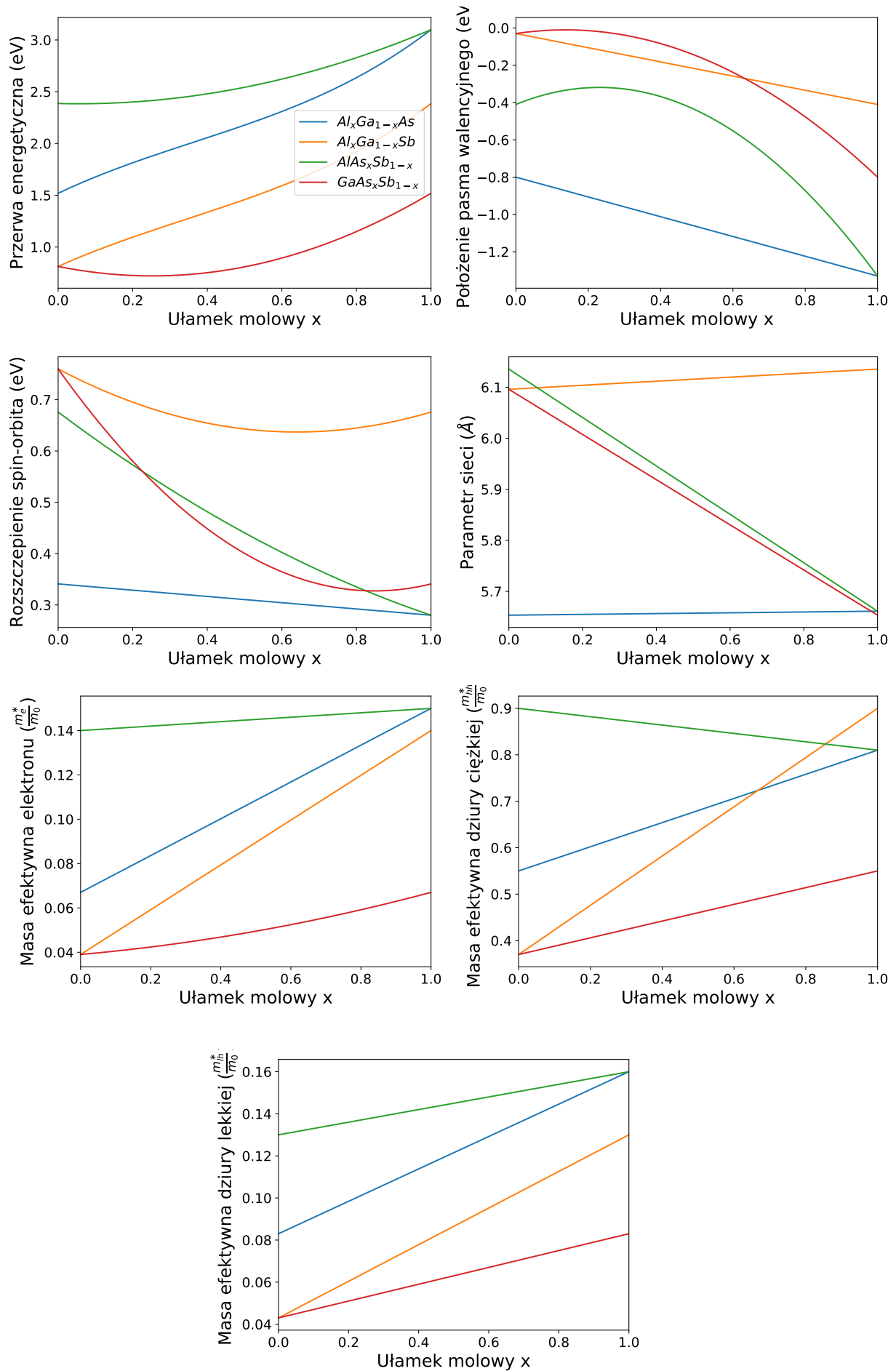
Rysunek 2.14: Grubości krytyczne $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ odkładanego na podłożu GaAs, w temperaturze $T = 300K$. Panel (a) przedstawia zależność grubości krytycznej od ułamka molowego y, dla ustalonego x. Panel (b) przedstawia zależność grubości krytycznej od ułamka molowego x, dla ustalonego y.

Wyniki numerycznego poszukiwania pierwiastków równania 2.9 przedstawione są na rysunku 2.14. Widać, że czynnikiem mającym największy wpływ na grubość krytyczną jest zawartość GaAs w naszym stopie czteroskładnikowym. Jest wynik zgodny z intuicją, ponieważ większa zawartość GaAs skutkuje lepszym dopasowaniem sieciowym do podłoża i tym samym mniejszymi naprężeniami w badanej strukturze.

3. Wyniki i dyskusja

Dodatek: Wykresy parametrów materiałów trójskładnikowych

Poniżej zostały przestawione wykresy interesujących nas parametrów:



Rysunek 3.1: Wykresy parametrów stopów trójskładnikowych w funkcji ułamka molowego x .

Bibliografia

- [1] M. B.Z. Morosini et al. “Low-Threshold GaInAsSb/GaAlAsSb Double-Heterostructure Lasers Grown by LPE”. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 29.6 (1993), pp. 2103–2108. ISSN: 15581713. DOI: [10.1109/3.234475](https://doi.org/10.1109/3.234475).
- [2] Michael L. Timmons and S. M. Bedair. “AlGaAsSb/GaAsSb CASCADE SOLAR CELLS.” In: *Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference*. 1981, pp. 1289–1293. URL: <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1981pvsp.conf.1289T/abstract>.
- [3] M. B. Wootten et al. “Broadband 2.4 μm superluminescent GaInAsSb/AlGaAsSb quantum well diodes for optical sensing of biomolecules”. In: *Semiconductor Science and Technology* 29.11 (Nov. 2014). ISSN: 13616641. DOI: [10.1088/0268-1242/29/11/115014](https://doi.org/10.1088/0268-1242/29/11/115014). URL: [/pmc/articles/PMC4283575/%20/pmc/articles/PMC4283575/?report=abstract%20https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4283575/](https://pmc/articles/PMC4283575/%20/pmc/articles/PMC4283575/?report=abstract%20https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4283575/).
- [4] Sadao Adachi. “GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As”. In: *Journal of Applied Physics* 58.3 (Aug. 1985), R1–R29. ISSN: 00218979. DOI: [10.1063/1.336070](https://doi.org/10.1063/1.336070). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.336070>.
- [5] I Vurgaftman, J R Meyer, and L R Ram-Mohan. “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys”. In: *Journal of Applied Physics* 89.11 I (2001), pp. 5815–5875. ISSN: 00218979. DOI: [10.1063/1.1368156](https://doi.org/10.1063/1.1368156). URL: <https://doi.org/10.1063/1.1368156>.
- [6] Sadao Adachi. “Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, Al_xGa_{1-x}As, and In_{1-x}Ga_xAs yP_{1-y}”. In: *Journal of Applied Physics* 66.12 (Dec. 1989), pp. 6030–6040. ISSN: 00218979. DOI: [10.1063/1.343580](https://doi.org/10.1063/1.343580). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.343580>.
- [7] Sadao Adachi. “Iii-v ternary and quaternary compounds”. In: *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*. 2017, pp. 725–741. DOI: [10.1007/978-3-319-48933-9_30](https://doi.org/10.1007/978-3-319-48933-9_30).
- [8] K. Seeger and E. Schonherr. “Microwave dielectric constant of aluminium antimonide”. In: *Semiconductor Science and Technology* 6.4 (Apr. 1991), pp. 301–302. ISSN: 02681242. DOI: [10.1088/0268-1242/6/4/013](https://doi.org/10.1088/0268-1242/6/4/013). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0268-1242/6/4/013%20https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0268-1242/6/4/013/meta>.
- [9] R. N. Hall et al. “Coherent light emission from GaAs junctions”. In: *Physical Review Letters* 9.9 (Nov. 1962), pp. 366–368. ISSN: 00319007. DOI: [10.1103/PhysRevLett.9.366](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.9.366). URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.9.366>.
- [10] Xufeng Wang et al. “Design of gaas solar cells operating close to the shockley-queisser limit”. In: *IEEE Journal of Photovoltaics* 3.2 (2013), pp. 737–744. ISSN: 21563381. DOI: [10.1109/JPHOTOV.2013.2241594](https://doi.org/10.1109/JPHOTOV.2013.2241594).

- [11] S. K. Dubey et al. "Study of optical properties of swift heavy ion irradiated gallium antimonide". In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. Vol. 244. 1. North-Holland, Feb. 2006, pp. 141–144. DOI: [10.1016/j.nimb.2005.11.131](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2005.11.131).
- [12] A. G. Milnes and A. Y. Polyakov. *Gallium antimonide device related properties*. June 1993. DOI: [10.1016/0038-1101\(93\)90002-8](https://doi.org/10.1016/0038-1101(93)90002-8).
- [13] P. S. Dutta, H. L. Bhat, and Vikram Kumar. "The physics and technology of gallium antimonide: An emerging optoelectronic material". In: *Journal of Applied Physics* 81.9 (May 1997), pp. 5821–5870. ISSN: 00218979. DOI: [10.1063/1.365356](https://doi.org/10.1063/1.365356). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.365356>.
- [14] O. Hildebrand, W. Kuebart, and M. H. Pilkuhn. "Resonant enhancement of impact in Ga_{1-x}Al_xSb". In: *Applied Physics Letters* 37.9 (Nov. 1980), pp. 801–803. ISSN: 00036951. DOI: [10.1063/1.92086](https://doi.org/10.1063/1.92086). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.92086>.
- [15] O. Hildebrand et al. "Ga_{1-x}Al_xSb Avalanche Photodiodes: Resonant Impact Ionization with Very High Ratio of Ionization Coefficients". In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 17.2 (1981), pp. 284–288. ISSN: 15581713. DOI: [10.1109/JQE.1981.1071068](https://doi.org/10.1109/JQE.1981.1071068).
- [16] Nadir Bouarissa and Mustapha Boucenna. "Band parameters for AlAs, InAs and their ternary mixed crystals". In: *Physica Scripta* 79.1 (Dec. 2009), p. 7. ISSN: 00318949. DOI: [10.1088/0031-8949/79/01/015701](https://doi.org/10.1088/0031-8949/79/01/015701). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0031-8949/79/01/015701%20https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0031-8949/79/01/015701/meta>.
- [17] L. Schrottke et al. "Terahertz GaAs/AlAs quantum-cascade lasers". In: *Applied Physics Letters* 108.10 (Mar. 2016), p. 102102. ISSN: 00036951. DOI: [10.1063/1.4943657](https://doi.org/10.1063/1.4943657). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4943657>.
- [18] A. Köck et al. "Double wavelength selective GaAs/AlGaAs infrared detector device". In: *Applied Physics Letters* 60.16 (Apr. 1992), pp. 2011–2013. ISSN: 00036951. DOI: [10.1063/1.107127](https://doi.org/10.1063/1.107127). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.107127>.
- [19] J. S. Aitchison et al. "The nonlinear optical properties of AlGaAs at the half band gap". In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 33.3 (Mar. 1997), pp. 341–348. ISSN: 00189197. DOI: [10.1109/3.556002](https://doi.org/10.1109/3.556002).
- [20] H. David Law et al. "The GaAlAsSb Quaternary and GaAlSb Ternary Alloys and Their Application to Infrared Detectors". In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 17.2 (1981), pp. 275–283. ISSN: 15581713. DOI: [10.1109/JQE.1981.1071074](https://doi.org/10.1109/JQE.1981.1071074).
- [21] Chee Hing Tan, Shiyu Xie, and Jingjing Xie. "Low noise avalanche photodiodes incorporating a 40 nm ALASSB avalanche region". In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 48.1 (2012), pp. 36–41. ISSN: 00189197. DOI: [10.1109/JQE.2011.2176105](https://doi.org/10.1109/JQE.2011.2176105).
- [22] Quankui Yang et al. "Room-temperature short-wavelength GaInAsAlAsSb quantum-cascade lasers". In: *Applied Physics Letters* 88.12 (Mar. 2006), p. 121127. ISSN: 00036951. DOI: [10.1063/1.2190455](https://doi.org/10.1063/1.2190455). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.2190455>.
- [23] Xiaoguang Sun et al. "GaAsSb A novel material for near infrared photodetectors on GaAs substrates". In: *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics* 8.4 (July 2002), pp. 817–822. ISSN: 1077260X. DOI: [10.1109/JSTQE.2002.800848](https://doi.org/10.1109/JSTQE.2002.800848).
- [24] Ziyuan Li et al. "Room temperature GaAsSb single nanowire infrared photodetectors". In: *Nanotechnology* 26.44 (Oct. 2015), p. 445202. ISSN: 13616528. DOI: [10.1088/0957-4484/26/44/445202](https://doi.org/10.1088/0957-4484/26/44/445202). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/26/44/445202%20https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/26/44/445202/meta>.

- [25] H. Y. Liu et al. “Long-wavelength light emission and lasing from InAsGaAs quantum dots covered by a GaAsSb strain-reducing layer”. In: *Applied Physics Letters* 86.14 (Apr. 2005), pp. 1–3. ISSN: 00036951. DOI: [10.1063/1.1897850](https://doi.org/10.1063/1.1897850). URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1897850>.
- [26] M. Linnik and A. Christou. “Optical properties of AlGaAsSb, AlGaInP, AlGaInAs, and GaInAsP for optoelectronic applications”. In: *Materials Research Society Symposium - Proceedings*. Vol. 579. Cambridge University Press, 2000, pp. 201–206. DOI: [10.1557/proc-579-201](https://www.cambridge.org/core/journals/mrs-online-proceedings-library-archive/article/abs/optical-properties-of-algaassb-algalnp-algainas-and-gainasp-for-optoelectronic-applications/09557DFA2729E248A295F674B76190AE). URL: <https://www.cambridge.org/core/journals/mrs-online-proceedings-library-archive/article/abs/optical-properties-of-algaassb-algalnp-algainas-and-gainasp-for-optoelectronic-applications/09557DFA2729E248A295F674B76190AE>.
- [27] T. Mozume et al. “Optical functions of AlAsSb characterized by spectroscopic ellipsometry”. In: *Physica Status Solidi (A) Applications and Materials Science* 205.4 (Apr. 2008), pp. 872–875. ISSN: 18626300. DOI: [10.1002/pssa.200777811](https://doi.org/10.1002/pssa.200777811). URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/pssa.200777811>.
- [28] Sadao Adachi. *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, Mar. 2009, pp. 1–400. ISBN: 9780470744383. DOI: [10.1002/9780470744383](https://doi.org/10.1002/9780470744383). URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/9780470744383>.
- [29] R. P. Brent. “Algorithms for Minimization Without Derivatives”. In: *IEEE Transactions on Automatic Control* 19.5 (1974), pp. 632–633. ISSN: 15582523. DOI: [10.1109/TAC.1974.1100629](https://doi.org/10.1109/TAC.1974.1100629).