

---

## SPRAWOZDANIE

---

<b>Imię</b>	Jakub Pawłowski
<b>Numer albumu</b>	250193
<b>Kierunek</b>	Inżynieria Kwantowa
<b>Rok/Semestr</b>	Semestr letni 2020/2021
<b>Materiał</b>	AlGaAsSb
<b>Data</b>	14 czerwca 2021



Politechnika Wrocławska

---

# Spis treści

<b>1</b>	<b>Opis systemu materiałowego</b>	<b>1</b>
1.1	Zastosowania materiałów binarnych . . . . .	1
1.2	Zastosowania stopów trójskładnikowych . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Opis modeli i metod. Własności stopu czteroskładnikowego.</b>	<b>2</b>
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
2.7	Przybliżenie paraboliczne. Struktura pasmowa i gęstość stanów. . . . .	16
2.8	Gęstość nośników . . . . .	20
	<b>Dodatek 1: Wykresy parametrów materiałów trójskładnikowych</b>	<b>23</b>
	<b>Dodatek 2: Zależność gęstości stanów od składu i grubości cienkiej warstwy</b>	<b>24</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>25</b>

# 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 odształceniami. 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. odształcenia 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. Po zachowaniu przebiegu funkcji widoczne są dwa miejsca zerowe. Nas będzie interesowało do drugie miejsce zerowe, ponieważ otrzymane z niego grubości krytyczne poprawnie przewidują wykładniczy wzrost grubości krytycznej wraz ze wzrostem koncentracji GaAs w stopie czteroskładnikowym. . . . .	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
2.15	Struktury pasmowe oraz gęstości stanów materiałów binarnych. (a) AlAs, (b) GaAs, (c) AlSb, (d) GaSb . . . . .	18
2.16	Struktury pasmowe oraz gęstości stanów materiału czteroskładnikowego. Odształcenia dla temperatury $T = 300 \text{ K}$ . (a) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ , (b) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}$ , (c) $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ , (d) $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$ . . . . .	18
2.17	Struktury pasmowe oraz gęstości stanów materiału czteroskładnikowego, z uwzględnieniem odształceń temperaturowych. (a) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.3}\text{Sb}_{0.7}$ , (b) $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ , (c) $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ , (d) $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$ . . . . .	19
2.18	Poglądowy rysunek przedstawiający gęstość stanów w paśmie przewodnictwa, rozkład Fermiego-Diraca oraz ich iloczyn. Pole zacieniowanego obszaru to szukana koncentracja elektronów, dana równaniem (2.20). . . . .	20
2.19	Zależność koncentracji nośników od położenia poziomu Fermiego w $T = 300 \text{ K}$ . Poziom Fermiego jest przesunięty tak, by wartość 0 eV odpowiadała VBO. Linia ciągłą narysowana jest koncentracja elektronów, a linią przerywaną koncentracja dziur z pasma lekko- i ciężkodziurowego. Kolejne panele przedstawiają różne grubości warstwy AlGaAsSb: (a) 100 nm, (b) 200 nm, (c) 400 nm, (d) 500 nm. . . . .	21
2.20	Zależność temperaturowa poziomu Fermiego oraz koncentracji nośników w równowadze elektrycznej. Kolejne pary paneli przedstawiają różne grubości warstwy AlGaAsSb: (a) 100 nm, (b) 200 nm, (c) 400 nm, (d) 500 nm. . . . .	22

2.21	Wykresy parametrów stopów trójskładnikowych w funkcji ułamka molowego $x$ .	24
2.22	Zależność gęstości stanów od składu oraz grubości cienkiej warstwy. Pierwszy rząd przedstawia gęstość stanów w paśmie przewodnictwa dla grubości: (a) 100 nm, (b) 300 nm, (c) 500 nm. Drugi rząd przedstawia gęstość stanów w paśmie walencyjnym dla grubości: (d) 100 nm, (e) 300 nm, (f) 500 nm. . . . .	24

# 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  $\mu\text{m}$  do 2.5  $\mu\text{m}$ , 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  $\text{cm}^2/\text{Vs}$  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  $2.16\text{ eV}$  [16]. Materiał ten znajduje zastosowanie jako emiter, np. do budowy stosowanych w spektroskopii kwantowych laserów kaskadowych operujących na zakresie spektralnym odpowiadającym częstotliwością  $3.4\text{ THz}$  do  $5\text{ THz}$  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  $1.42\text{ eV}$  a  $2.16\text{ eV}$ . 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
$E_g^\Gamma$ (eV)	3.099	2.386	0.812	1.519
VBO (eV)	-1.33	-0.41	-0.03	-0.80
$\Delta_{SO}$ (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]:

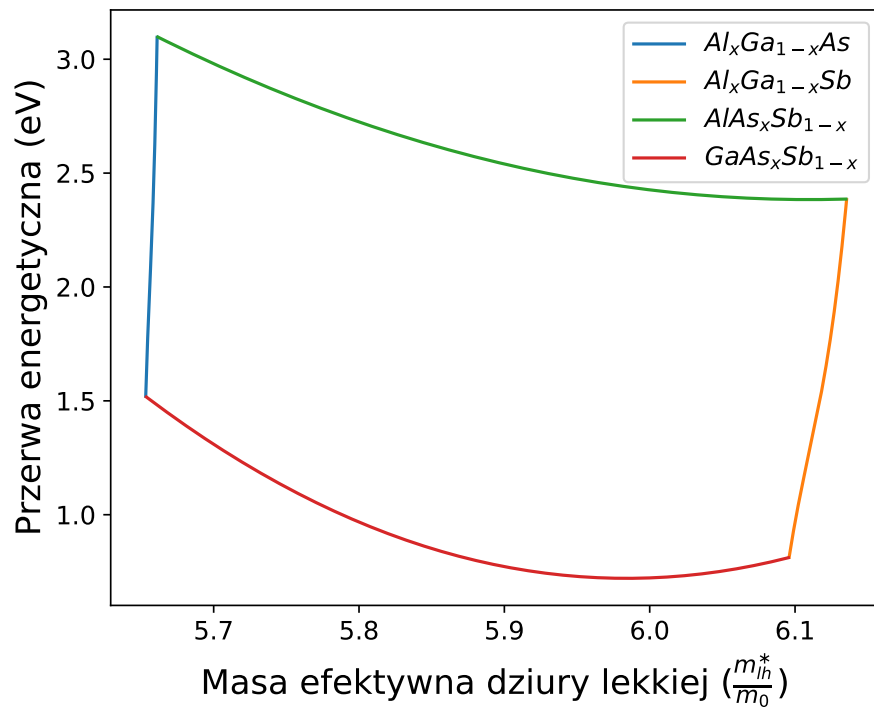
$$m_e^*(x) = 0.039 + 0.014x + 0.014x^2 \quad (2.5)$$

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



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

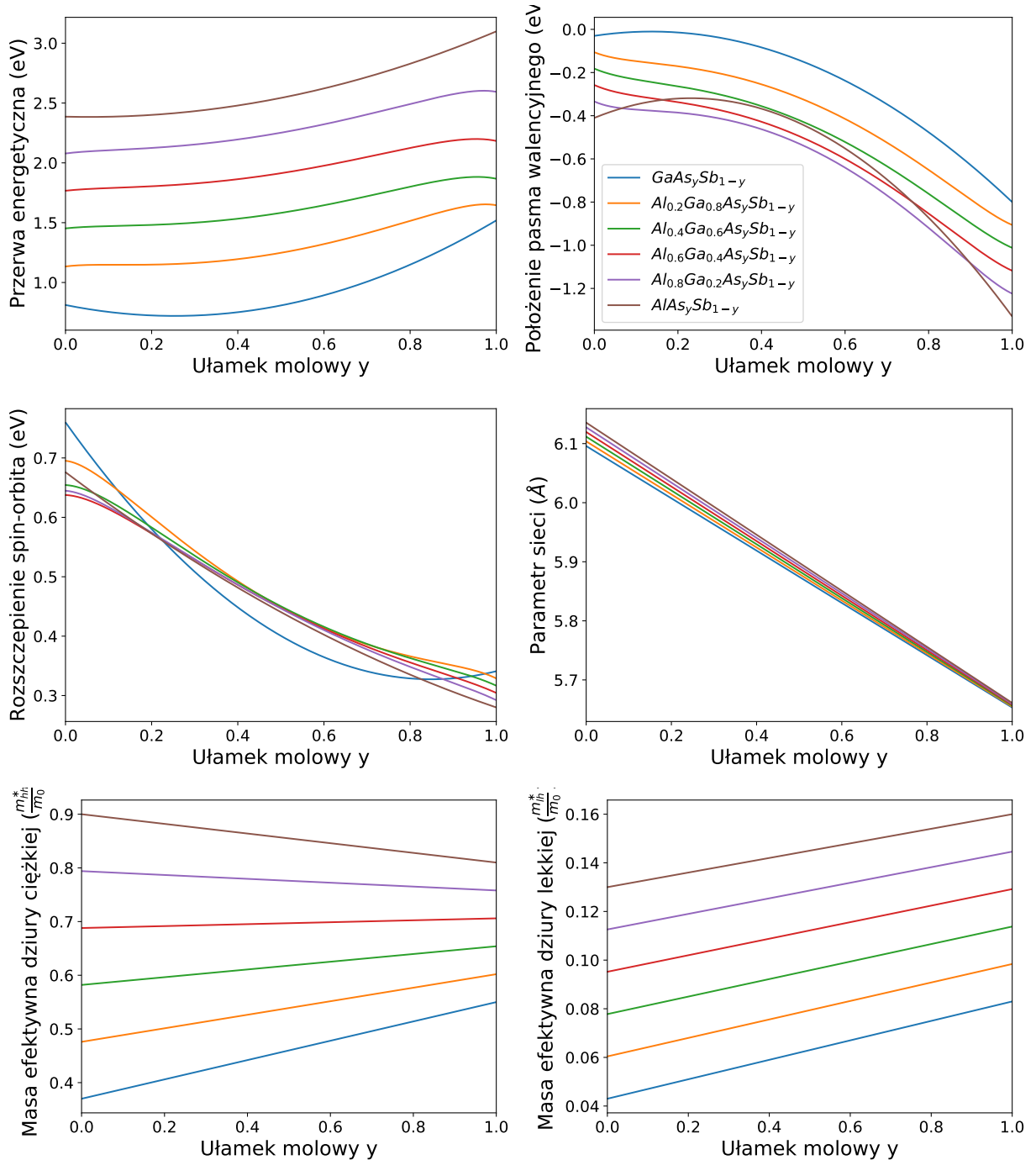


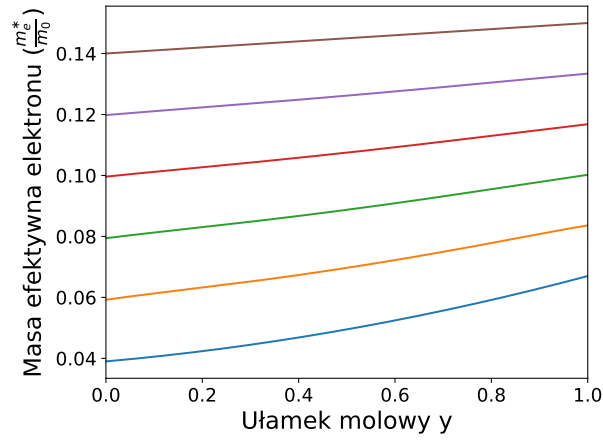
Pozostałe wykresy dotyczące parametrów materiałów trójskładnikowych zostały przedstawione w [Dodatku](#).

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 1](#).

### 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.

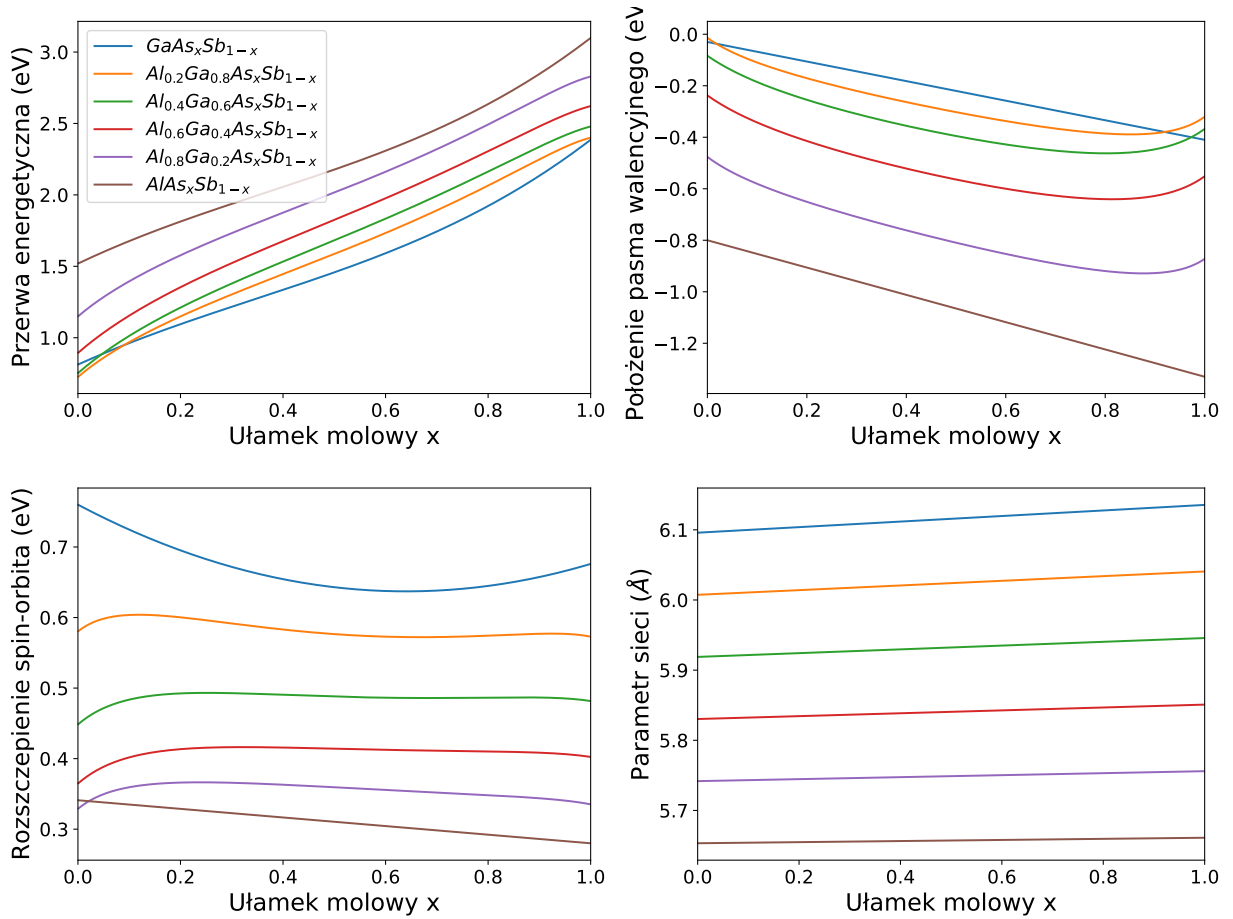


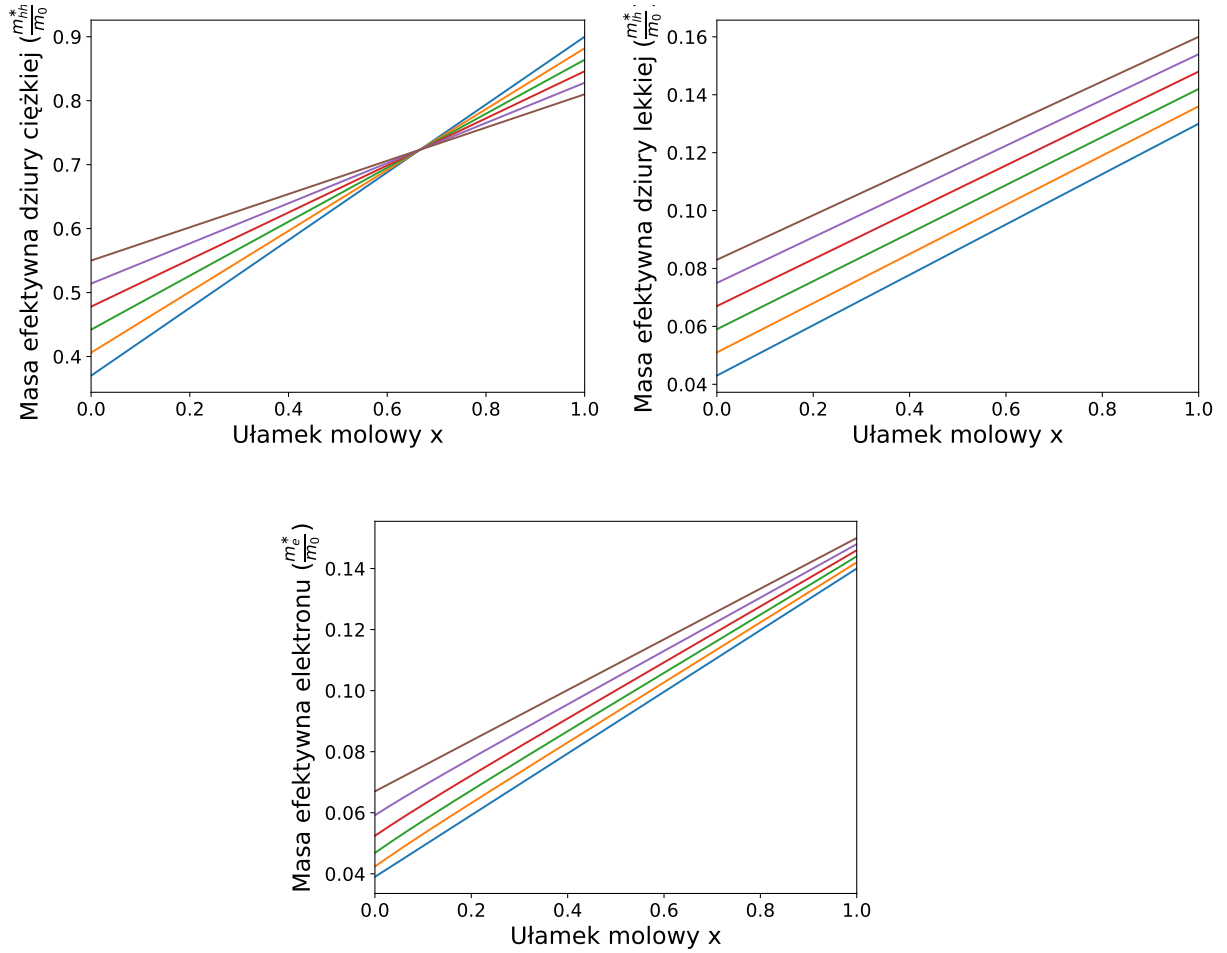


Rysunek 2.2: Wykresy parametrów stopu czteroskładnikowego dla ustalonego ułamka molowego  $x$ , w funkcji ułamka molowego  $y$ .

### 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.





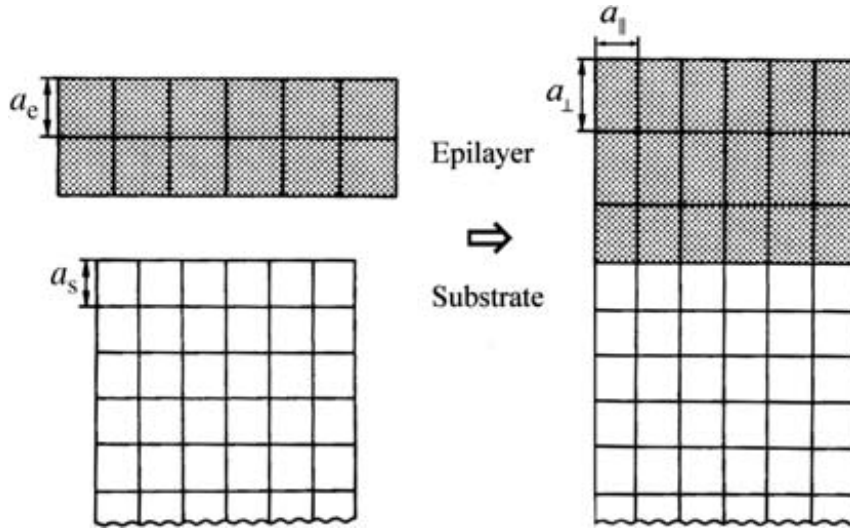
Rysunek 2.3: Wykresy parametrów stopu czteroskładnikowego dla ustalonego ułamka molowego  $y$ , w funkcji ułamka molowego  $x$ .

## 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
$\alpha$ (meV/K)	0.885	0.42	0.417	0.5405
$\beta$ (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  $\alpha$  i  $\beta$  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:

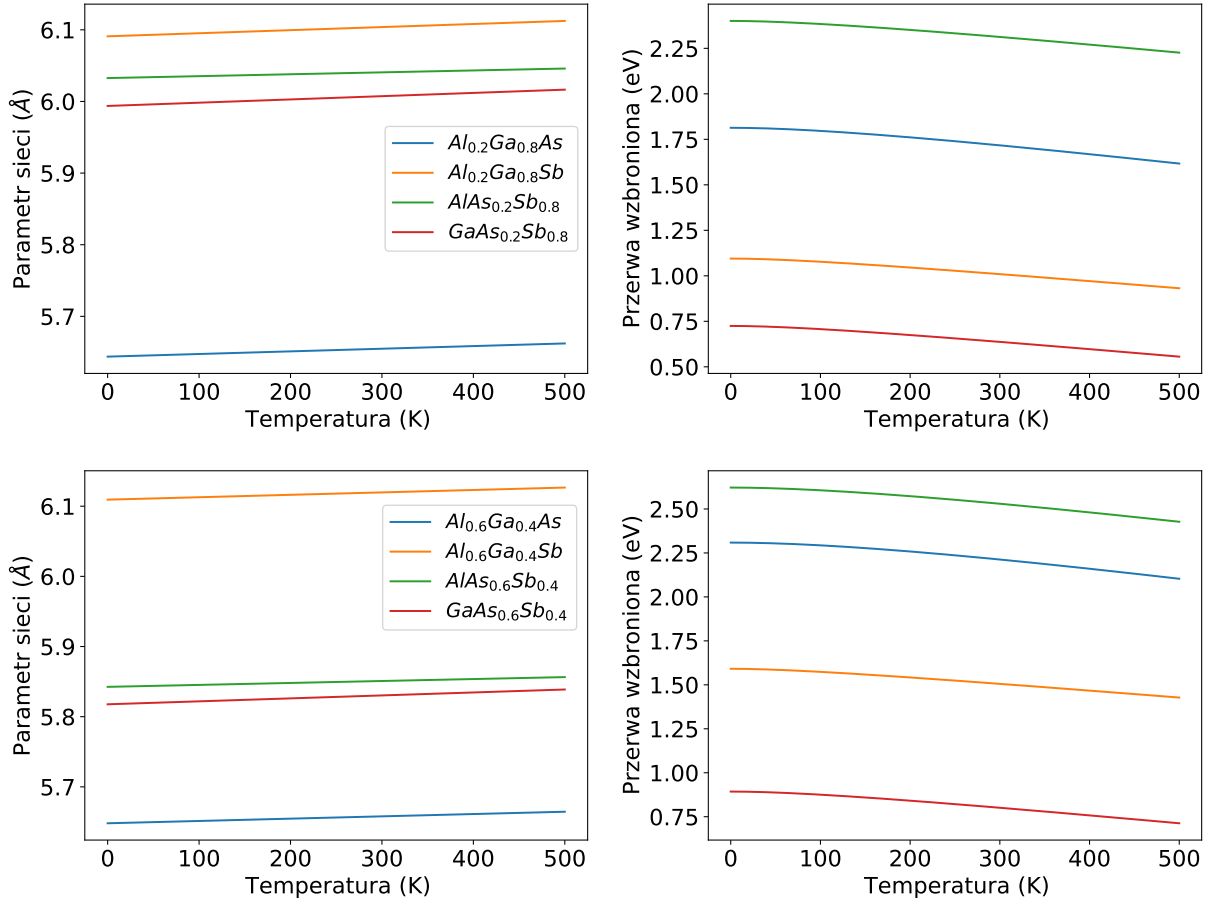
$$a_{lc}(T) = a_{lc}(T = 0) + a_{lc}^T \cdot 10^{-5} \cdot (T - 300) \quad (2.7)$$

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:

$$\varepsilon_{\parallel} \equiv \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_{GaAs} - a_{AlGaAsSb}}{a_{AlGaAsSb}} \quad (2.8)$$

$$\varepsilon_{\perp} \equiv \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{\parallel}$$

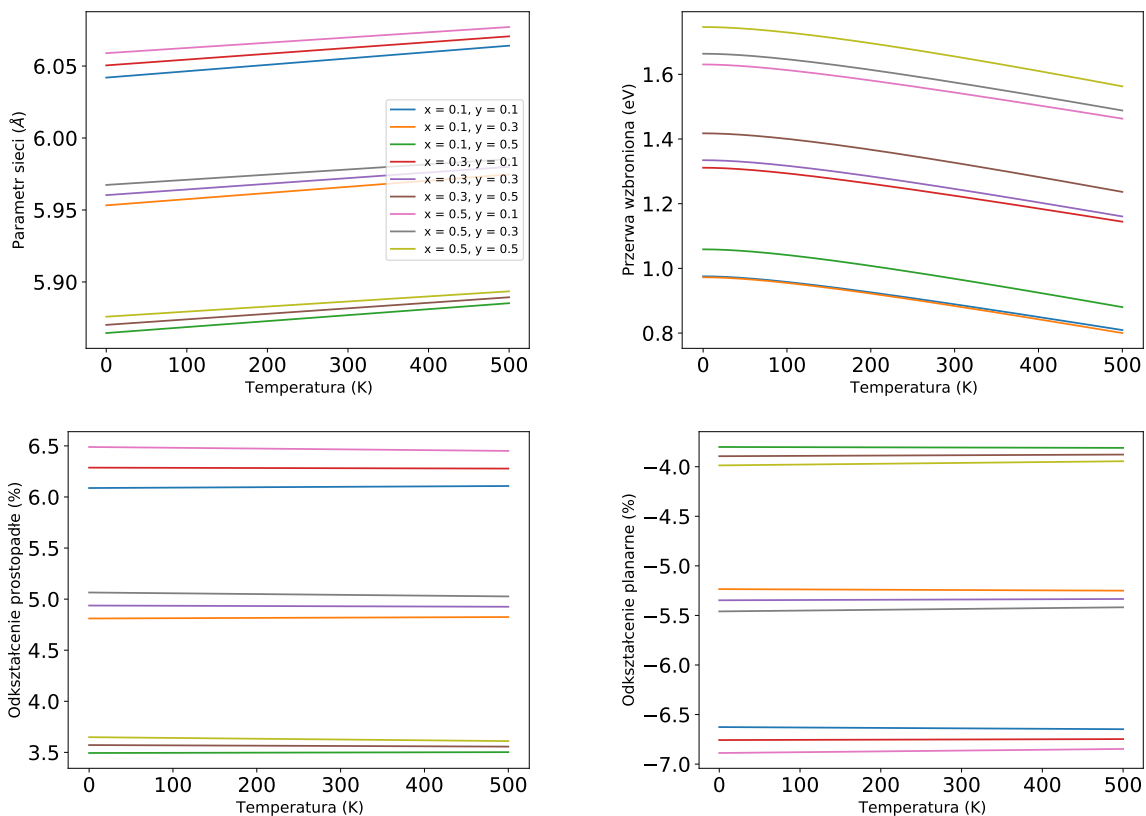
$$\delta E_{c,hydro} = a_c (\varepsilon_{\perp} + 2\varepsilon_{\parallel})$$

$$\delta E_{v,hydro} = a_v (\varepsilon_{\perp} + 2\varepsilon_{\parallel})$$

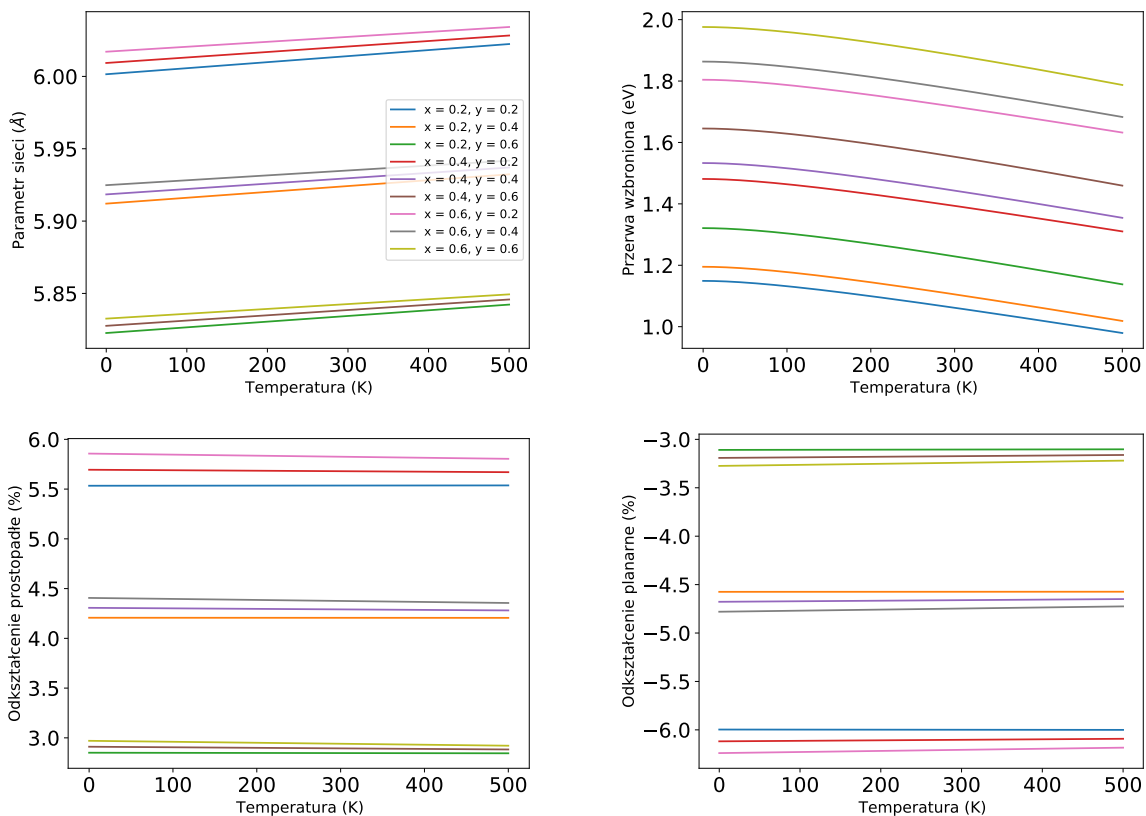
$$\delta E_{v,biax} = b (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel})$$

$$\delta E_{v,biax}^{\pm} = \frac{1}{2} \left( \delta E_{v,biax} - \Delta_{SO} \pm \sqrt{9\delta E_{v,biax}^2 + 2\delta E_{v,biax}\Delta_{SO} + \Delta_{SO}^2} \right)$$

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.

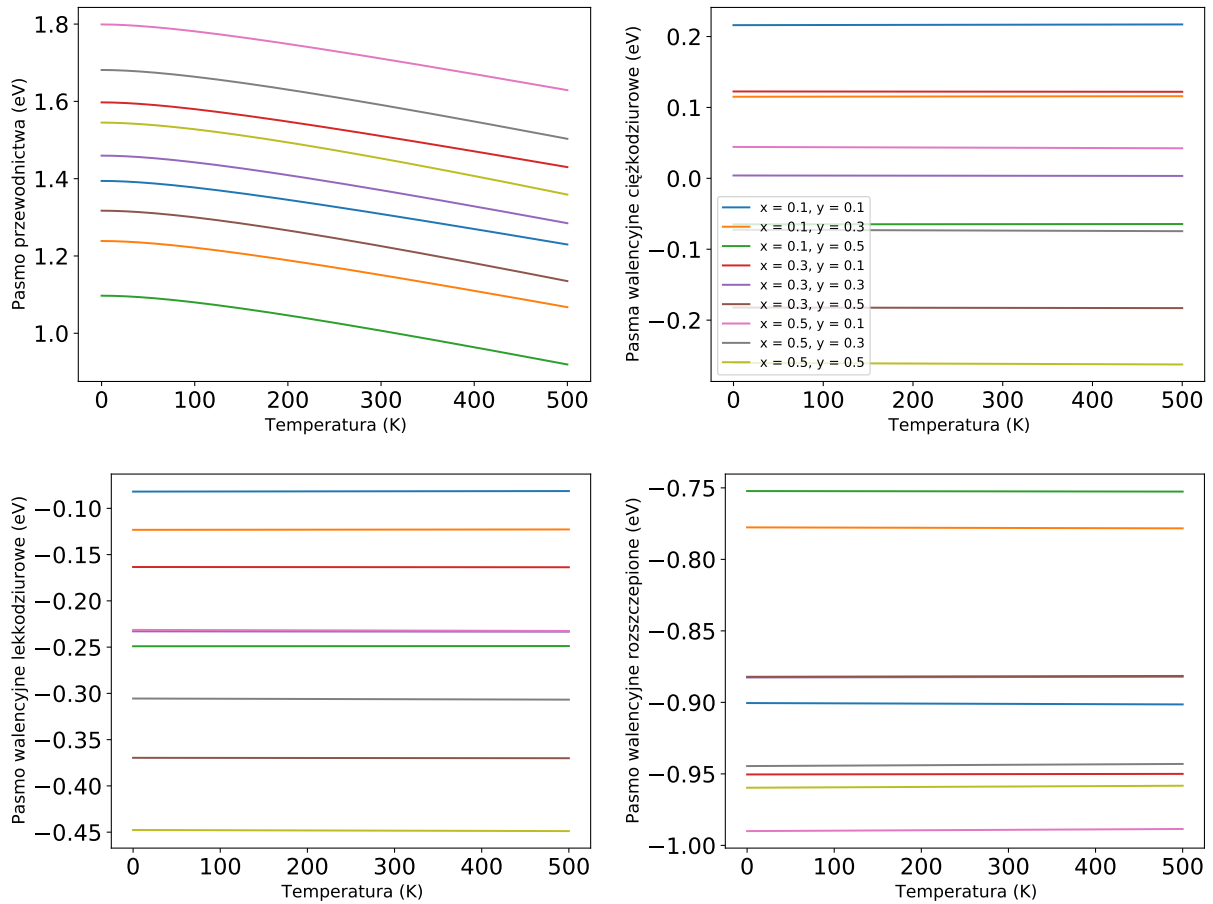


Rysunek 2.7: To samo co na rysunku 2.6, ale dla innych ustalonych ułamków molowych  $x$  i  $y$ .

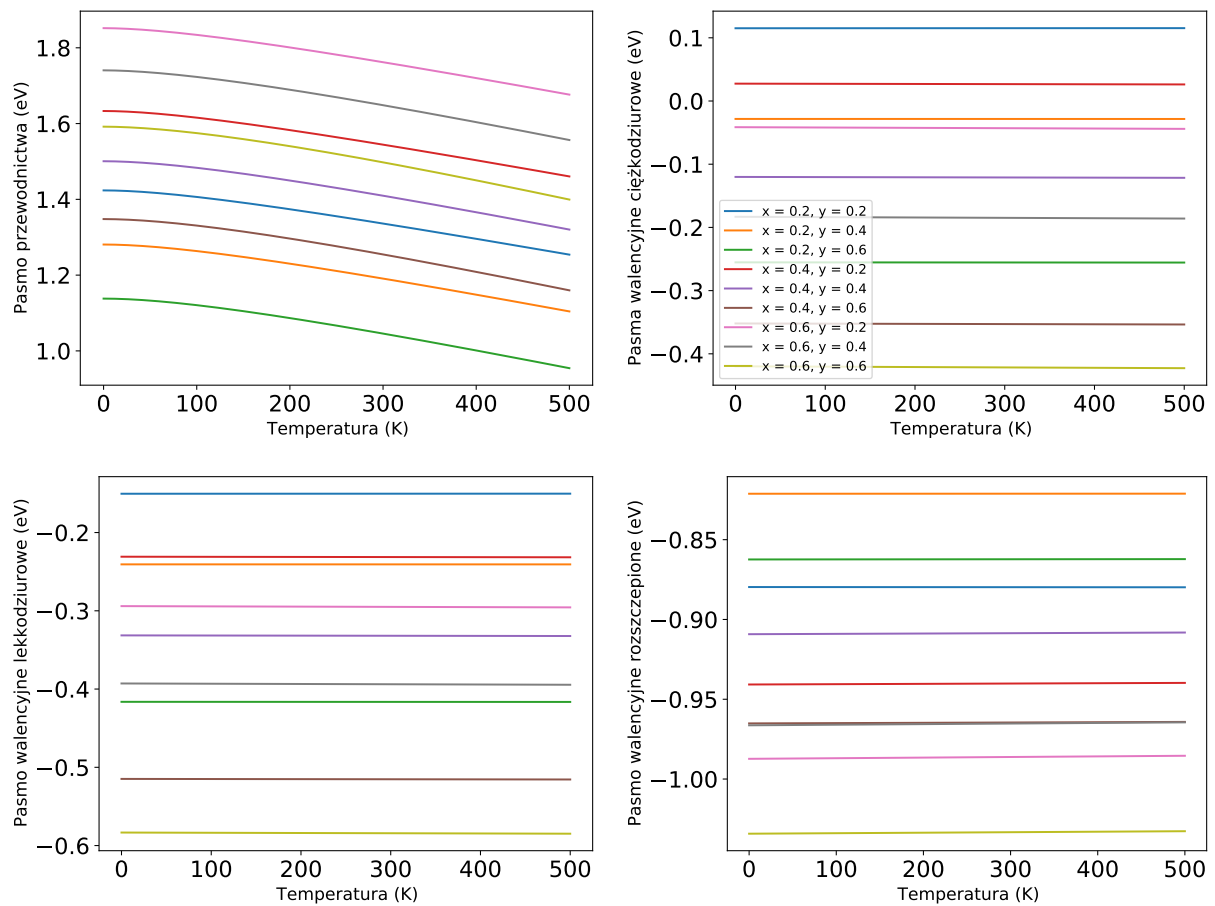
Powyższe obliczenia pozwoliły na uzyskanie energii pasm w funkcji temperatury, z uwzględnieniem jej wpływu na Odkształcenia. Policzono odpowiednio: energię pasma przewodnictwa, energię pasma walencyjnego dziur ciężkich, energię pasma walencyjnego dziur lekkich oraz energię pasma walencyjnego rozszczepionego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

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

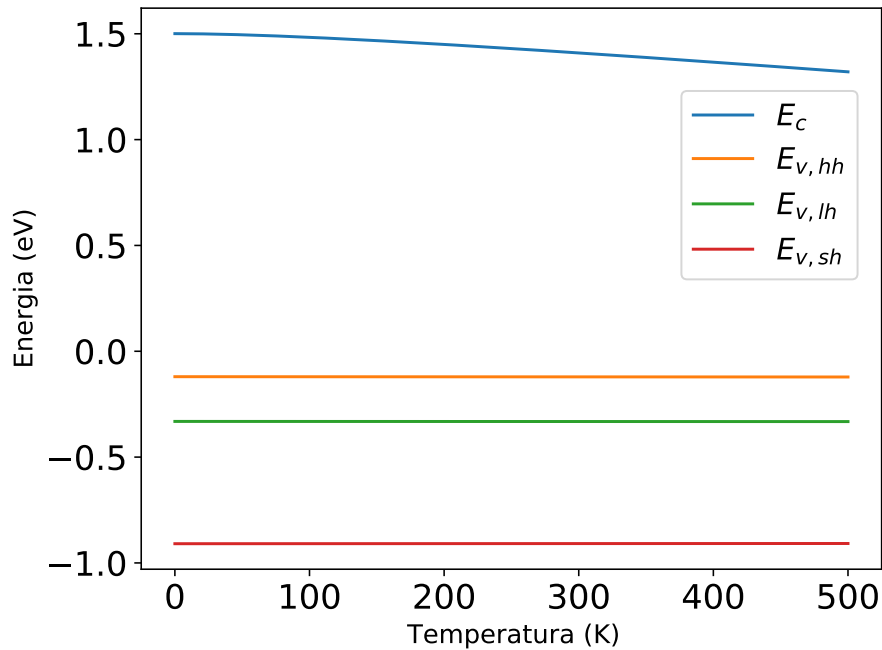
Poniżej przedstawiono rezultaty obliczeń w funkcji temperatury, dla wybranych wartości ułamków molowych  $x$  oraz  $y$ .



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.

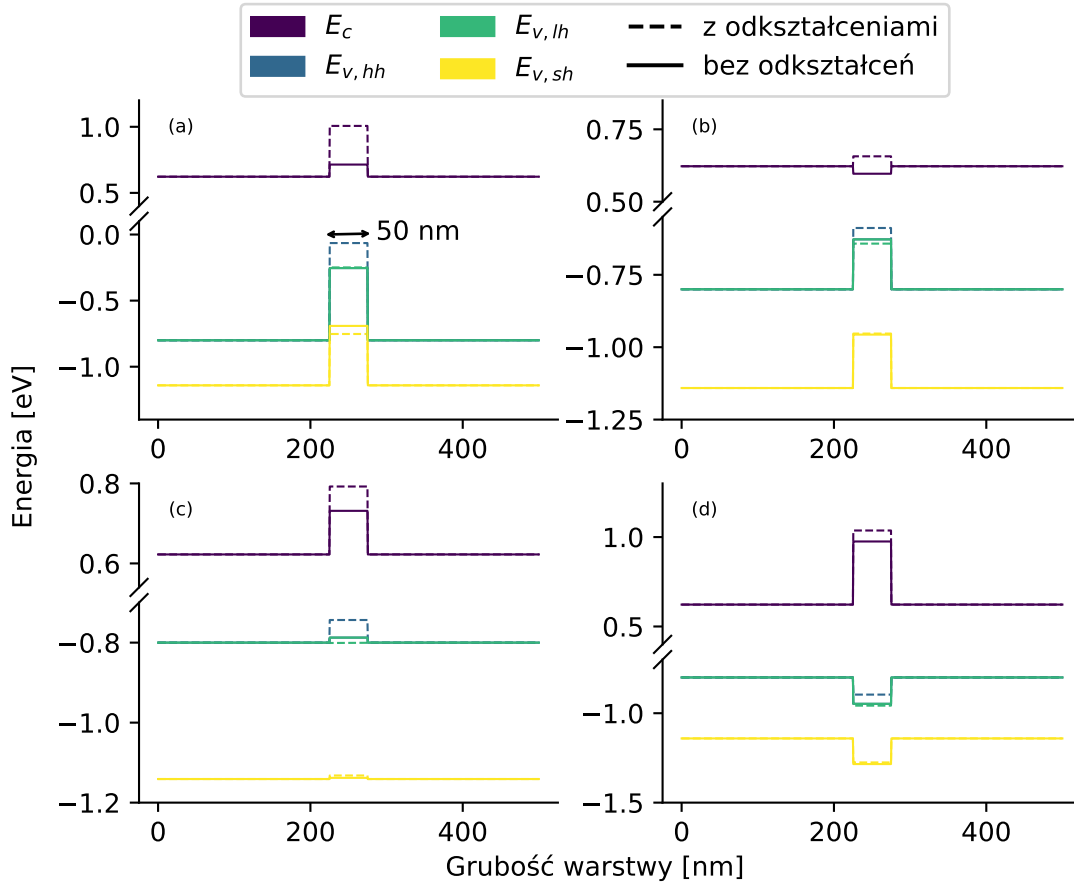


Rysunek 2.10: Rysunek przedstawiający energie wszystkich pasm razem, dla materiału  $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}_{0.4}\text{Sb}_{0.6}$ . Widać, że w rozpatrywanej sytuacji temperatura ma największy wpływ na położenie pasma przewodnictwa. Pozostałe pasma w dobrym przybliżeniu nie zmieniają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



## 2.5 Profile energetyczne cienkich warstw.

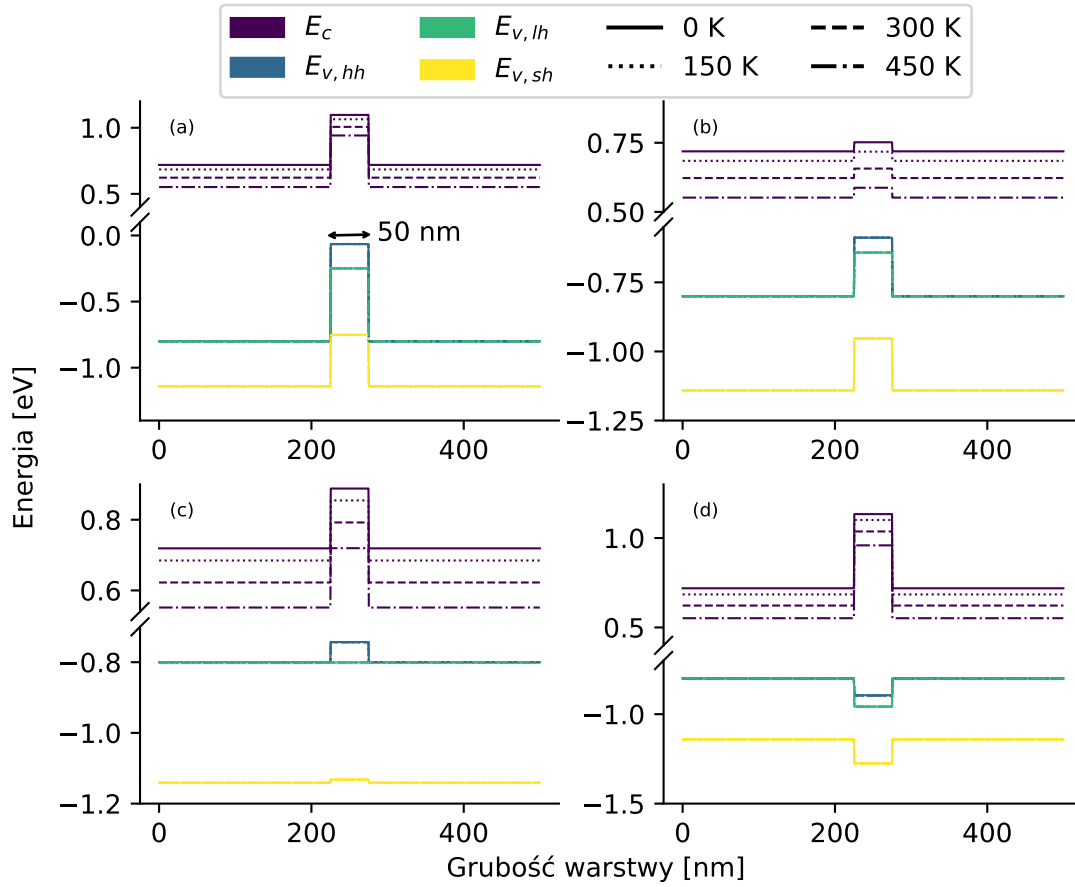
W tej sekcji przedstawimy profile energetyczne cienkich warstw typu A/B/A, gdzie materiał A to GaAs a materiał B to nasz stop czteroskładnikowy czyli  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ . Grubość całej warstwy wynosi 500nm, a grubość materiału czteroskładnikowego to 50nm. Znajduje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

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

Wielkości występujące w tym równaniu to:

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

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

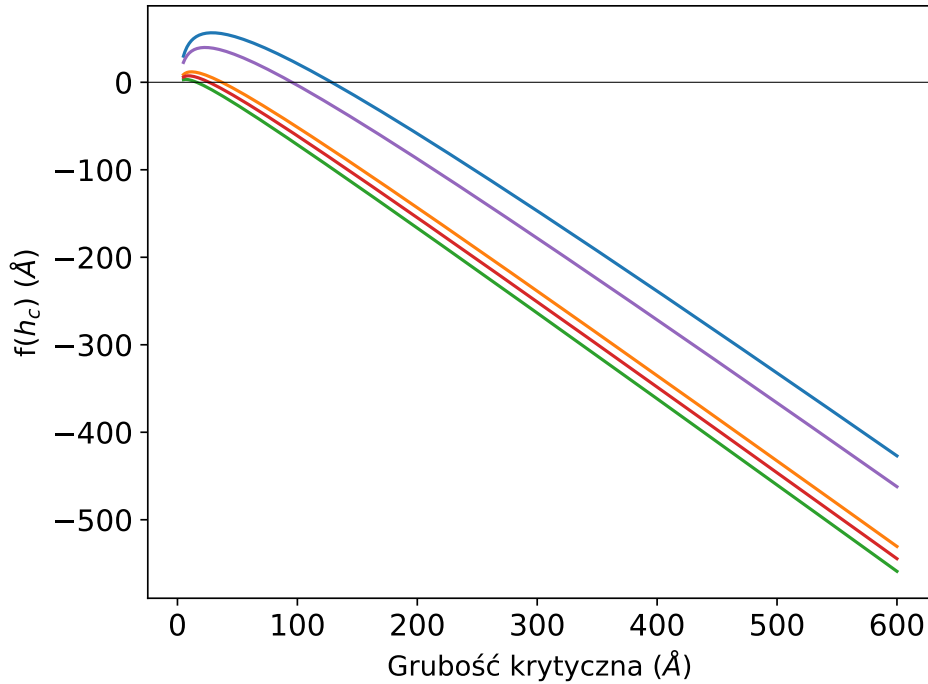
$$f = \left| \frac{a_s - a}{a} \right| - \text{odkształcenie}$$

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

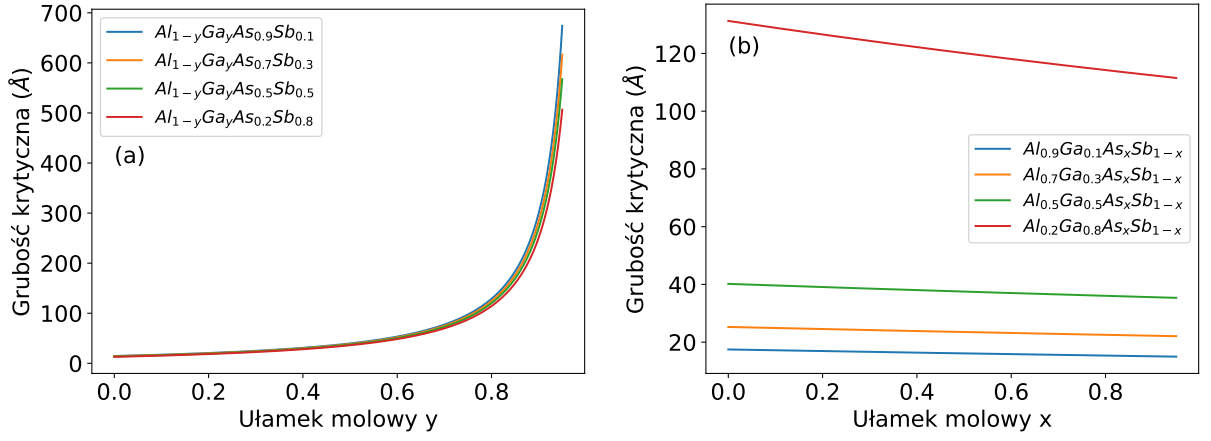
$$f(h_c) = \frac{b}{2\pi f} \frac{1 - 0.25\nu}{1 + \nu} \left( \ln \frac{h_c}{b} + 1 \right) - h_c \quad (2.10)$$

i poszukamy miejsc zerowych funkcji  $f(h_c)$ . Prawdziwa grubość krytyczna znajduje się zazwyczaj pomiędzy wyznaczoną z równania 2.10 a jej dwukrotnością.



Rysunek 2.13: Wykres funkcji  $f(h_c)$  dla różnych kilku różnych zestawów parametrów. Po zachowaniu przebiegu funkcji widoczne są dwa miejsca zerowe. Nas będzie interesowało do drugie miejsce zerowe, ponieważ otrzymane z niego grubości krytyczne poprawnie przewidują wykładniczy wzrost grubości krytycznej wraz ze wzrostem koncentracji GaAs w stopie czteroskładnikowym.

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  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  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  $y$ .

Wyniki numerycznego poszukiwania pierwiastków równania 2.10 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. Ponadto, wraz ze zbliżaniem się koncentracji GaAs do jedności, grubość krytyczna rośnie do nieskończoności, co odzwierciedla fakt, że w przypadku dobrego dopasowania sieciowego możemy nanieść bardzo grubą warstwę na podłoże.

## 2.7 Przybliżenie paraboliczne. Struktura pasmowa i gęstość stanów.

Teraz zajmiemy się analizą struktury pasmowej badanych materiałów, wykorzystując do tego przybliżenie paraboliczne. Rozważamy diagonalny Hamiltonian postaci:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{v,hh} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{v,lh} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{v,sh} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

gdzie elementy diagonalne mają postać:

$$E_c = E_v + E_g + E_{c,k} + \delta E_{c,a} \quad (2.12)$$

$$E_{v,hh} = E_v - E_{hh,k} + \delta E_{v,a} - \delta E_{b,v} \quad (2.13)$$

$$E_{v,lh} = E_v - E_{lh,k} + \delta E_{v,a} + \delta E_{b,v}^+ \quad (2.14)$$

$$E_{v,sh} = E_v - E_{sh,k} + \delta E_{v,a} + \delta E_{b,v}^- \quad (2.15)$$

Wielkości występujące w powyższych równaniach zostały zdefiniowane w (2.8). Dodatkowo pojawiła się wielkość  $E_{i,k}$ , zdefiniowana wzorem:

$$E_{i,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \frac{1}{m_i} \quad (2.16)$$

gdzie  $m_i$  jest masą efektywną elektronu/dziury. Interesuje nas struktura pasmowa na kierunku [001]. Masy efektywne na tym kierunku wyrażone są poprzez liniowe kombinacje parametrów Luttingera:

$$\begin{aligned} m_c &= m_c^* \\ m_{hh} &= \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \\ m_{lh} &= \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \\ m_{sh} &= \frac{1}{\gamma_1} \end{aligned}$$

$m_c^*$  to masa efektywna w paśmie przewodnictwa, policzona przy pomocy schematu interpolacyjnego.

Tabela 2.5: Parametry Luttingera materiałów binarnych [5].

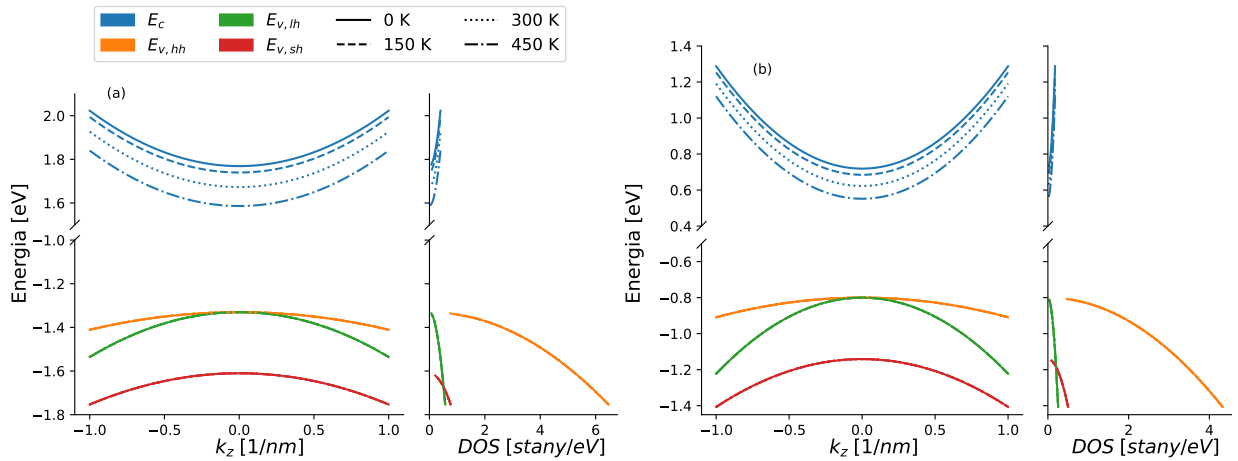
Parametr	AlAs	AlSb	GaSb	GaAs
$\gamma_1$	3.76	5.18	13.4	6.98
$\gamma_2$	0.82	1.19	4.7	2.06

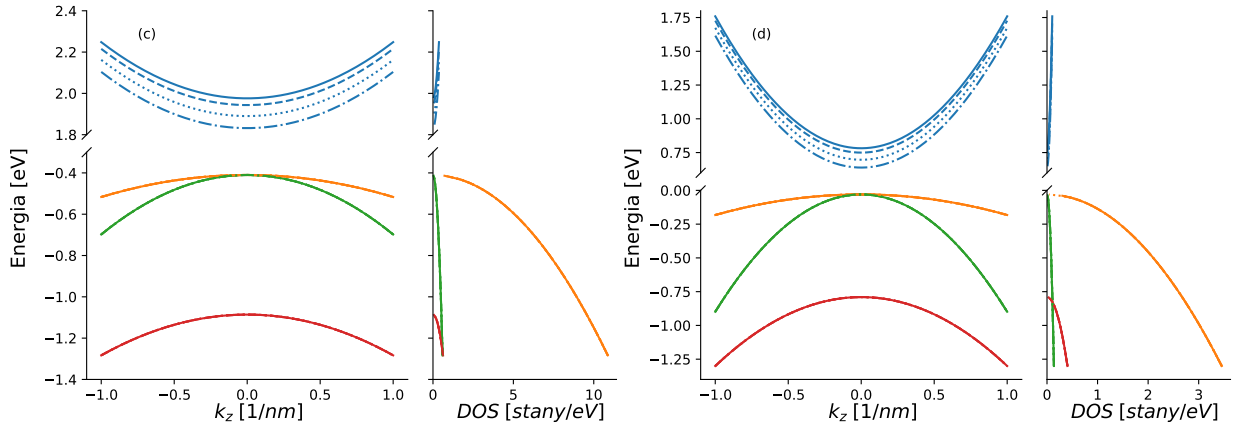
Parametry Luttingera dla materiału czteroskładnikowy zostały otrzymane przy pomocy schematu interpolacyjnego, opisanego w 2.1.

Przeanalizujemy również, jak wygląda gęstość stanów w rozważanym przybliżeniu parabolicznym. Jest ona dana wzorem:

$$D_i(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( 2 \frac{m_{DOS}^i}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_i)^{\frac{1}{2}} \quad (2.17)$$

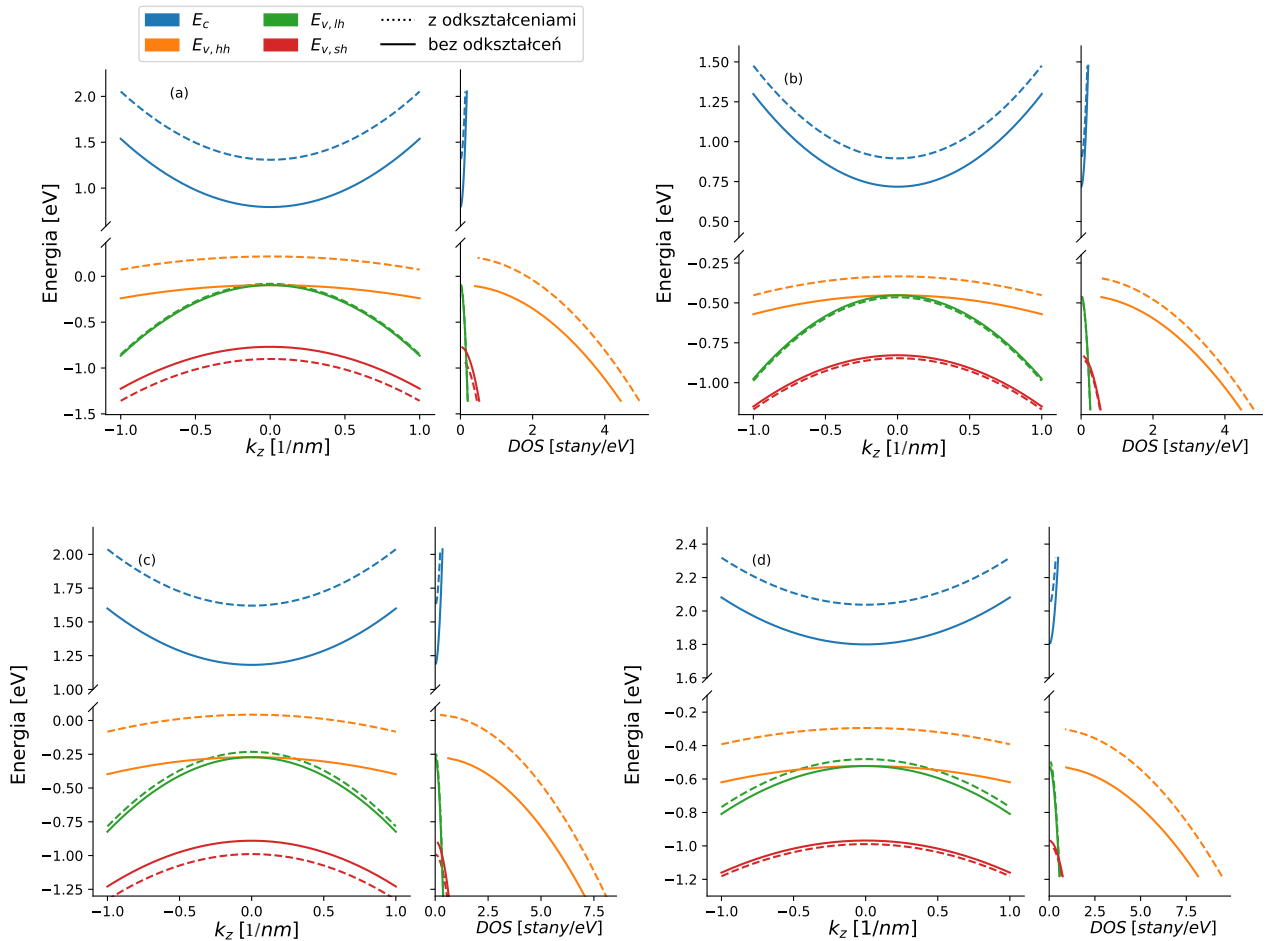
Masy efektywne  $m_{DOS}^i$  są interpolowanymi masami z Tabeli 2.1. Poniżej przedstawione zostały wykresy struktur pasmowych oraz gęstości stanów dla materiałów binarnych.





Rysunek 2.15: Struktury pasmowe oraz gęstości stanów materiałów binarnych. (a) AlAs, (b) GaAs, (c) AlSb, (d) GaSb

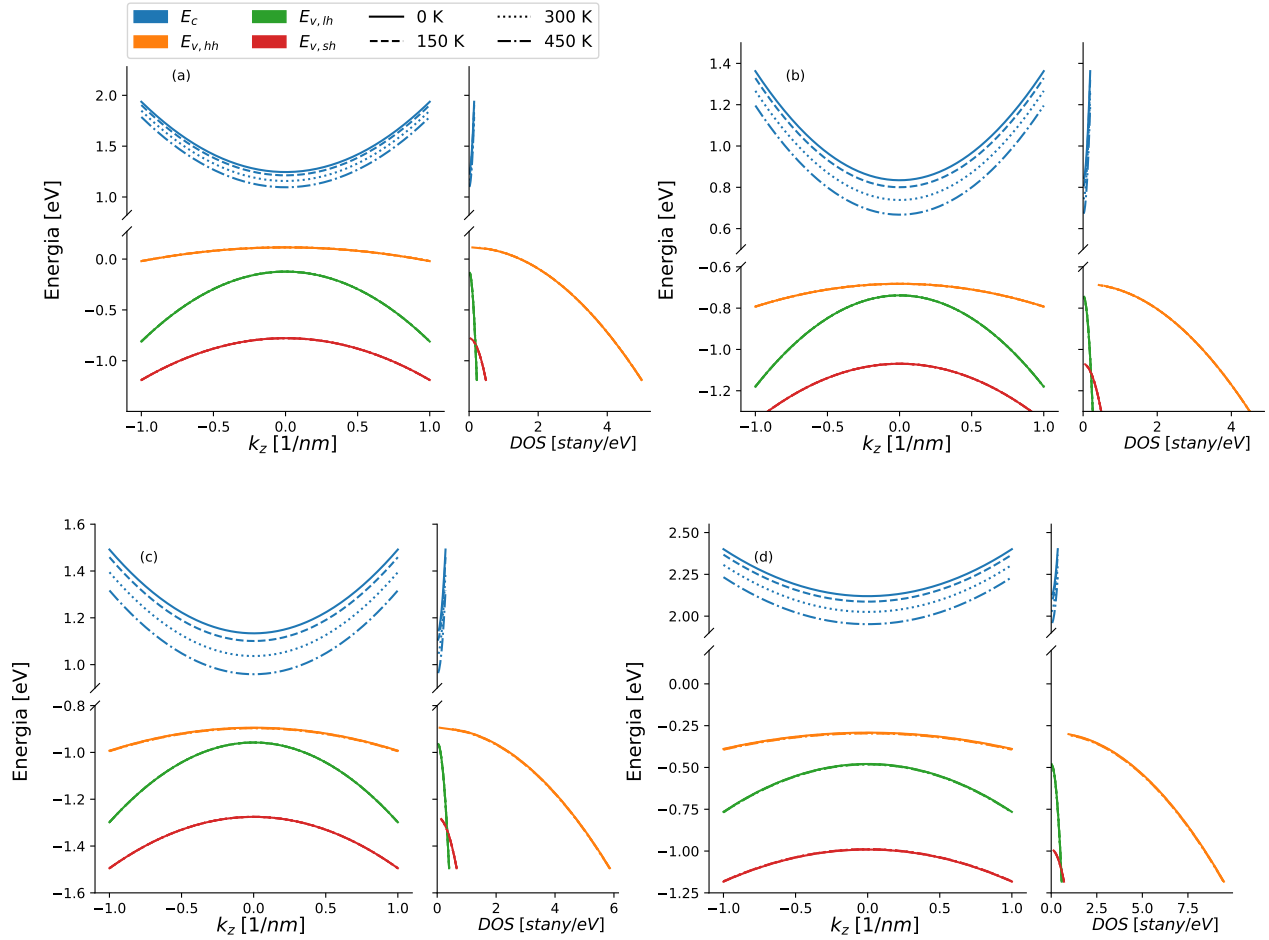
W następnej kolejności chcemy przeanalizować zależność struktury pasmowej materiału czteroskładnikowego na podłożu GaAs od składu oraz odkształceń.



Rysunek 2.16: Struktury pasmowe oraz gęstości stanów materiału czteroskładnikowego. Odkształcenia dla temperatury  $T = 300$  K.

(a)  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ , (b)  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}$ , (c)  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ , (d)  $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$

Największy wpływ odkształcenia mają na pasmo przewodnictwa, oraz walencyjne pasmo ciężkołdziurowe. Jest to zgodne z poprzednimi wynikami - patrz Rysunek 2.11.



Rysunek 2.17: Struktury pasmowe oraz gęstości stanów materiału czteroskładnikowego, z uwzględnieniem odkształceń temperaturowych.

(a)  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.3}\text{Sb}_{0.7}$ , (b)  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ , (c)  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ , (d)  $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$

Zmiana temperatury ma największy wpływ na pasmo przewodnictwa. Jest to wynik oczekiwany, ponieważ temperatura słabo wpływa na zmianę energii, a w paśmie przewodnictwa uwzględniona jest przerwa energetyczna, która zależy od temperatury poprzez równanie (2.6).

Gęstości stanów zależą od odkształceń jakościowo podobnie do odpowiadających im pasm energetycznych. Największe wartości gęstości stanów przyjmuje dla ciężkich dziur, ponieważ mają one największą masę efektywną, a gęstość stanów zależy od niej potęgowo.

Lokalna gęstość stanów bierze pod uwagę niejednorodności próbki, czyli zależność gęstości elektronowej od położenia wewnątrz próbki. W naszych obliczeniach zakładamy jednorodność próbki, więc gęstość stanów przyjmuje takie same wartości w każdym jej miejscu.

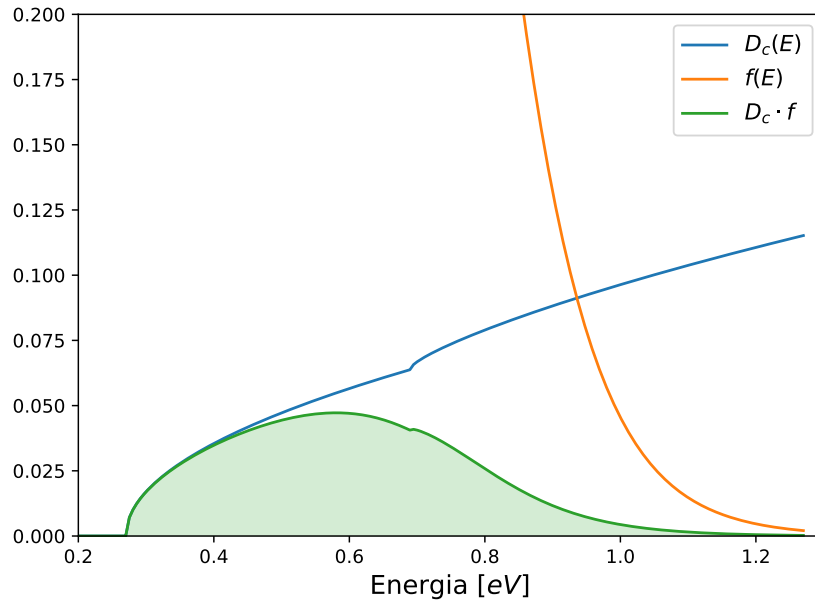
## 2.8 Gęstość nośników

Gęstość nośników określa ilość nośników ładunku na jednostkę objętości i zazwyczaj podawana jest jako wartość średnia na obszarze całego materiału. Jest to istotna wielkość, występująca w równaniach dotyczących przewodnictwa elektrycznego i termicznego. Teoretycznie można ją wyznaczyć poprzez całkowanie gęstości stanów z funkcją rozkładu Fermiego-Diraca:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_b T}}} \quad (2.18)$$

W obliczeniach posługujemy się prostym przybliżeniem parabolicznym, więc gęstość stanów jest dana równaniem (2.17). Badamy heterostrukturę  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{GaAs}$ , złożoną z dwóch warstw GaAs o grubości 500 nm oraz warstwy  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  pomiędzy nimi. Grubość centralnej warstwy zmienia się od 100 nm do 500 nm. Dla uproszczenia ustalamy  $y = 0.9$  i będziemy zmieniali tylko  $x$ . W celu wyznaczenia średniej gęstości stanów w heterostrukturze posłużymy się średnią ważoną, za wagi przyjmując grubości poszczególnych warstw. Wzór na średnią gęstość stanów przyjmuje postać:

$$D_i = \frac{2 \cdot D_i^{\text{GaAs}} \cdot d_{\text{GaAs}} + D_i^{\text{AlGaAsSb}} \cdot d_{\text{AlGaAsSb}}}{2 \cdot d_{\text{GaAs}} + d_{\text{AlGaAsSb}}} \quad (2.19)$$



Rysunek 2.18: Poglądowy rysunek przedstawiający gęstość stanów w paśmie przewodnictwa, rozkład Fermiego-Diraca oraz ich iloczyn. Pole zacieniowanego obszaru to szukana koncentracja elektronów, dana równaniem (2.20).

Gęstość elektronów wyznaczymy więc ze wzoru:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} D_c(E) f(E) dx \quad (2.20)$$

gdzie  $E_c = \min \{E_c^{\text{GaAs}}, E_c^{\text{AlGaAsSb}}\}$  czyli jest krawędzią pasma przewodnictwa. Natomiast gęstość dziur możemy policzyć ze wzoru:

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} (D_{lh}(E) + D_{hh}(E)) (1 - f(E)) dx \quad (2.21)$$



gdzie  $E_v$  jest największą wartością spośród krawędzi pasm walencyjnych. Funkcja rozkładu dla dziur ma postać:

$$1 - f(E) = 1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_b T}}} = \frac{1}{1 + e^{\frac{-E + E_F}{k_b T}}} \quad (2.22)$$

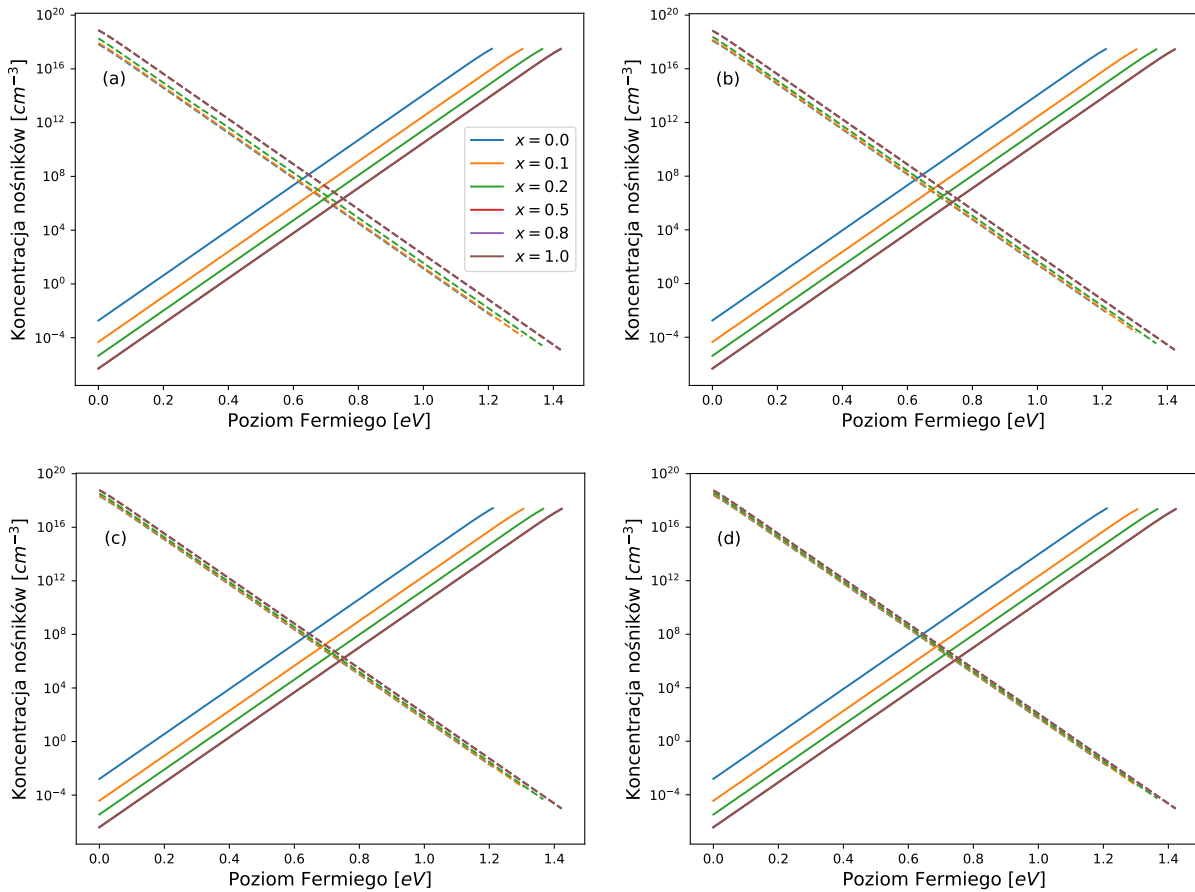
Interesującą nas koncentrację elektronów oraz dziur wyznaczmy wykonując całki (2.20) oraz (2.21) numerycznie. Innym podejściem jest przybliżenie rozkładu Fermiego-Diraca poprzez klasyczny rozkład Maxwella-Boltzmanna (przybliżenie to jest słuszne dla  $|E - E_f| \gg k_b T$ , co jest spełnione dla półprzewodników w pobliżu temperatury pokojowej). Pozwala to na przeprowadzenie całkowania w sposób analityczny i prowadzi do wyników:

$$n \sim \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_b T}\right) \quad (2.23)$$

$$p \sim \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_b T}\right) \quad (2.24)$$

Przybliżenia te pozwolą na zweryfikowanie poprawności numerycznego całkowania.

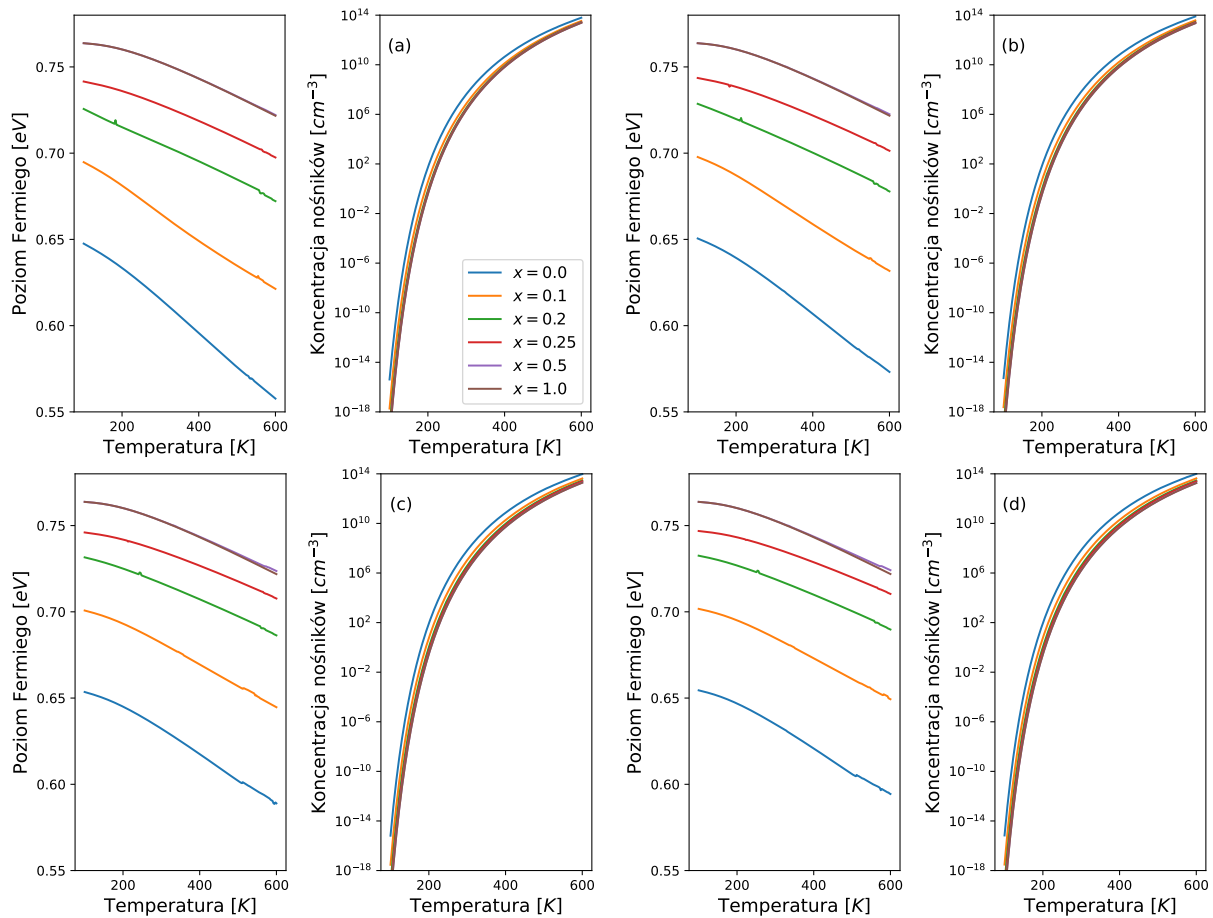
A priori nie znamy położenia poziomu Fermiego potrzebnego do wyznaczenia funkcji rozkładu. Możemy jednak wykreślić w jaki sposób zmieniają się koncentrację nośników wraz z jego położeniem.



Rysunek 2.19: Zależność koncentracji nośników od położenia poziomu Fermiego w  $T = 300 \text{ K}$ . Poziom Fermiego jest przesunięty tak, by wartość 0 eV odpowiadała VBO. Linia ciągłą narysowana jest koncentracja elektronów, a linią przerywaną koncentracja dziur z pasma lekko- i ciężkodziurowego. Kolejne panele przedstawiają różne grubości warstwy AlGaAsSb: (a) 100 nm, (b) 200 nm, (c) 400 nm, (d) 500 nm.

Na wykresie 2.19 widzimy, że w skali logarytmicznej koncentracje nośników są liniowymi funkcjami poziomu Fermiego. Jest to zgodne z wzorami (2.24). Łatwo zauważyć, że wraz ze wzrostem grubości rośnie koncentracja dziur. Prawdopodobnie dzieje się tak, ponieważ gęstość stanów w paśmie walencyjnym materiału czteroskładnikowego jest większa niż w GaAs, a wraz ze wzrostem grubości warstwy AlGaAsSb rośnie jej wkład do średniej gęstości stanów (por. rysunki w sekcji 2.7). Dokładne zależności gęstości stanów od grubości warstwy oraz składu przedstawione są w Dodatku 2. Wraz ze wzrostem ułamka molowego  $x$  (stopniowym przechodzeniem od  $\text{GaAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$  do  $\text{AlAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ ) rośnie koncentracja dziur a maleje koncentracja elektronów. Ten wzrost spowalnia wraz ze wzrostem grubości cienkiej warstwy.

Koncentracje dziur oraz elektronów przecinają się w dokładnie jednym miejscu. Oznacza to, że istnieje takie  $E_F$  dla którego  $n = p$ . Jest to tzw. warunek równowagi elektrycznej i wykorzystamy go do systematycznego wyznaczenia wartości poziomu Fermiego, dla którego osiągana jest równowaga w danej temperaturze. W tym celu będziemy szukali miejsce zerowych funkcji  $g(E_F) = n(E_F) - p(E_F)$  w ustalonej temperaturze. Posłużymy się znaną już metodą Brenta [29].



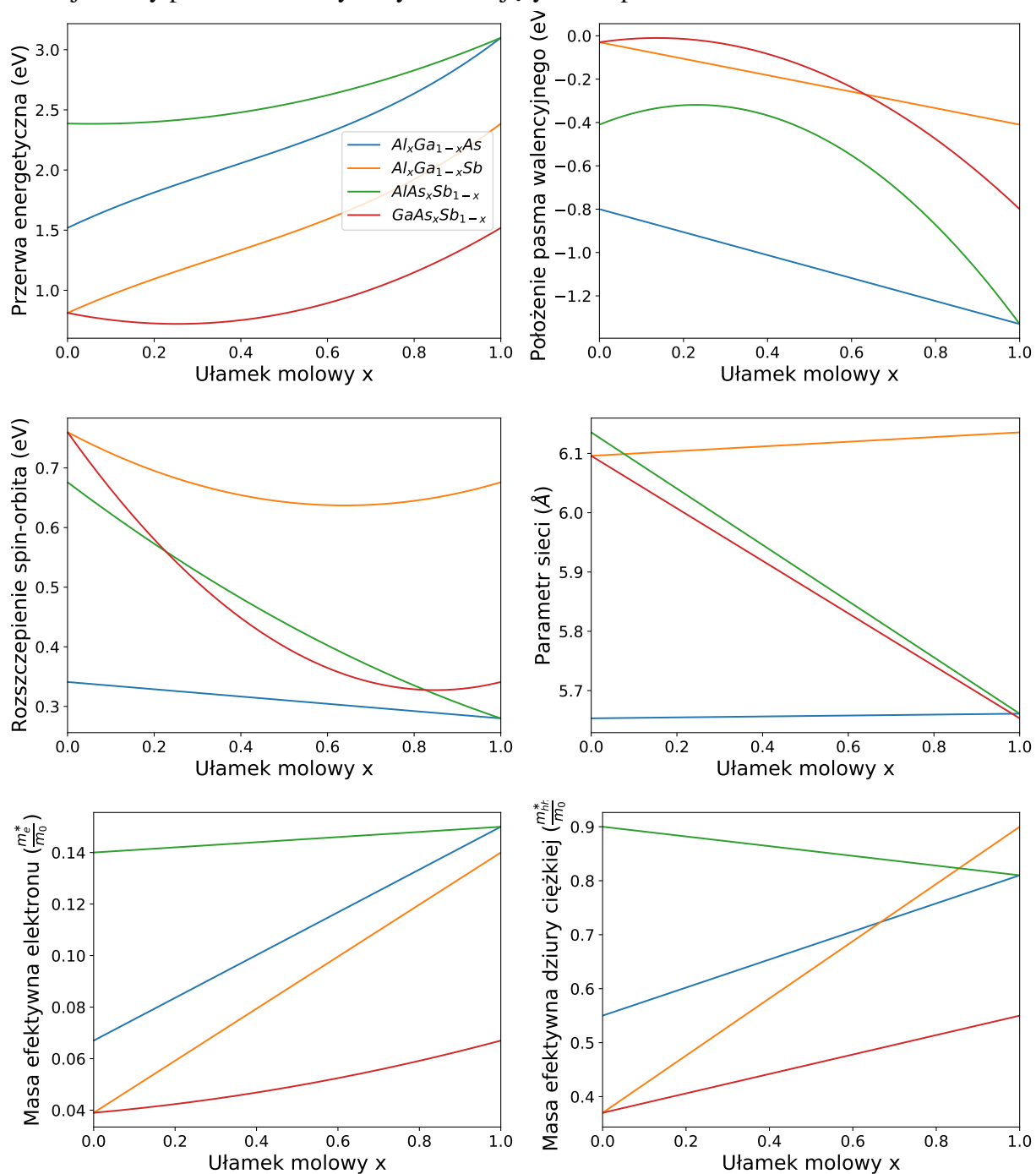
Rysunek 2.20: Zależność temperaturowa poziomu Fermiego oraz koncentracji nośników w równowadze elektrycznej. Kolejne pary paneli przedstawiają różne grubości warstwy AlGaAsSb: (a) 100 nm, (b) 200 nm, (c) 400 nm, (d) 500 nm.

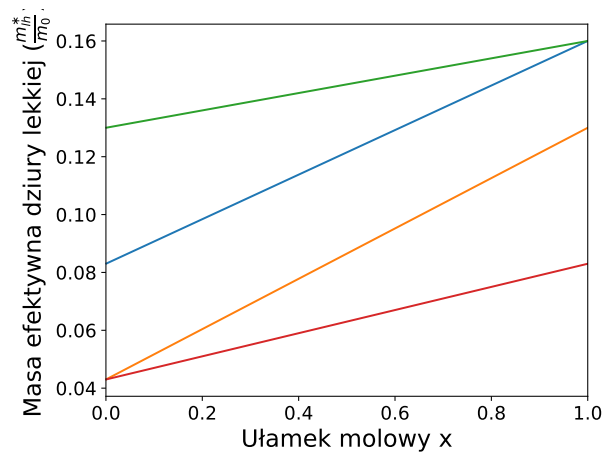
Na rysunku 2.20 widzimy, że poziom Fermiego maleje wraz z temperaturą. Z kolei zmiana grubości cienkiej warstwy powoduje zmniejszenie nachylenia poziomu Fermiego w funkcji temperatury. Zmieniając ułamek molowy  $x$  na zakresie od 0 do 1 poziom Fermiego rośnie, co jest zgodne z 2.19. Największe różnice widoczne są pomiędzy jego małymi wartościami. Dla

$x \gtrsim 0.5$  nie obserwujemy znaczących zmian wraz z dalszym wzrostem ułamka molowego.

## Dodatek 1: Wykresy parametrów materiałów trój-składnikowych

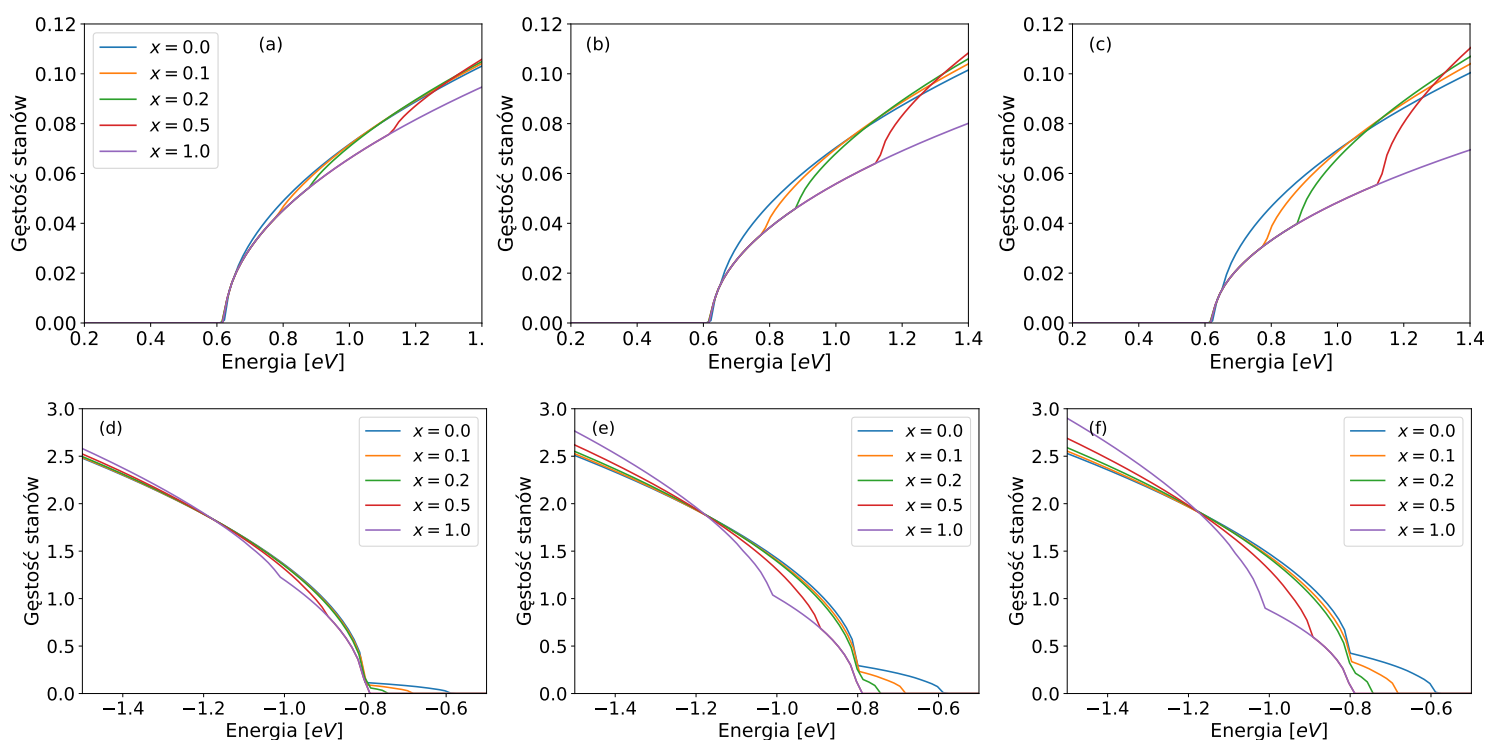
Poniżej zostały przedstawione wykresy interesujących nas parametrów:





Rysunek 2.21: Wykresy parametrów stopów trójskładnikowych w funkcji ułamka molowego  $x$ .

## Dodatek 2: Zależność gęstości stanów od składu i grubości cienkiej warstwy



Rysunek 2.22: Zależność gęstości stanów od składu oraz grubości cienkiej warstwy. Pierwszy rząd przedstawia gęstość stanów w paśmie przewodnictwa dla grubości: (a) 100 nm, (b) 300 nm, (c) 500 nm. Drugi rząd przedstawia gęstość stanów w paśmie walencyjnym dla grubości: (d) 100 nm, (e) 300 nm, (f) 500 nm.

# 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  $\mu\text{m}$  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://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/2483575/).
- [4] Sadao Adachi. “GaAs, AlAs, and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>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<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, and In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub>”. 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<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>Sb". 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<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>Sb 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).