

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**С.В. КОНДРАТЕНКО**

**ОСНОВИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ**

Методичний посібник для студентів кафедри оптики  
фізичного факультету

2020

УДК 535.215; 621.383

**Рецензенти**

д-р фіз.-мат. наук, проф., член-кор НАН України В.С.Лисенко

д-р фіз.-мат. наук, проф. О.А.Єщенко

*Рекомендовано до друку вченю радою фізичного  
факультету  
(протокол № \_ від \_ лютого 2020 року)*

Кондратенко С.В.

**Основи наноелектроніки: Методичний посіб. для студентів  
фізичного факультету, які навчаються за спеціальністю  
«Метрологія і інформаційно-вимірювальна техніка» - К.:  
Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет",  
2020. – 153 с.**

Розглянуто основні електронні властивості нанорозмірних систем: структур з двовимірним електронним газом, квантових ниток, квантових точок і надграток. Викладено основні принципи розмірного квантування і умови спостереження квантоворозмірних ефектів, розглянуто особливості функції густини станів і статистики носіїв заряду в нанорозмірних системах, транспорт вnanoструктурах, оптичні та фотоелектричні властивості в напівпровідниковых гетероструктурах – оптичне поглинання, фотолюмінесценцію та фотопровідність.

Методичний посібник призначено для студентів оптики фізичного факультету, які вивчають курси «Основи наноелектроніки», «Фізика напівпровідників», «Оптика напівпровідників», а також може бути корисний для студентів молодших курсів Університетів для поглиблого вивчення окремих питань з курсів загальної фізики та радіоелектроніки.

**535.215; 621.383**

**© С.В. Кондратенко, 2020**

**© Київський національний університет імені Тараса Шевченка**

## ЗМІСТ

<b>ПЕРЕДМОВА.....</b>	5
<b>Розділ 1. Електрони в наноструктурах .....</b>	7
<b>1.1. Вступ до нанотехнологій.....</b>	7
<b>1.2. Ефекти розмірного квантування в наноструктурах.....</b>	9
<b>1.3. Кvantovі ями.....</b>	12
<b>1.4. Густина станів і статистика носіїв заряду в квантових ямах.....</b>	20
<b>1.5. Електронний спектр квантових ниток.....</b>	26
<b>1.6. Функція густини станів та концентрація носіїв заряду в квантових нитках.....</b>	29
<b>1.8. Гетеропереходи з нанорозмірними об'єктами .....</b>	43
<b>1.9. Напівпровідникові надрешітки .....</b>	49
<b>Розділ 2 Транспорт в нанорозмірних структурах.....</b>	57
<b>2.1. Вплив магнітного поля на електронний спектр кристалів. Рівні Ландау .....</b>	57
<b>2.2. Енергетичний спектр та функція густини станів квантової ями в магнітному полі .....</b>	62
<b>2.3. Ефект Холла в об'ємних напівпровідниках .....</b>	64
<b>2.3. Тензор електропровідності в магнітному полі .....</b>	67
<b>2.4. Провідність двовимірного електронного газу в магнітному полі...</b>	71
<b>2.5. Цілочисловий квантовий ефект Холла .....</b>	75
<b>2.6. Балістичний транспорт .....</b>	82
<b>2.7. Квантова провідність. Формула Ландауера .....</b>	89
<b>2.8. Кулонівська блокада .....</b>	91
<b>2.9. Атомно-силова мікроскопія .....</b>	97
<b>2.10. Електросилова мікроскопія .....</b>	104
<b>Розділ 3 Оптичні та фотоелектричні властивості наноструктур.....</b>	108
<b>3.1. Міжзонне поглинання в квантових ямах.....</b>	108
<b>3.2. Міжпідзонні переходи в квантових ямах.....</b>	113

3.3. Екситонне поглинання в квантових ямах .....	121
3.4. Зонно-зонна фотолюмінесценція в напівпровідниках .....	124
3.5. Квантово-розмірний ефект Штарка .....	136
3.6. Електрооптичні ефекти в надрешітках.....	139
3.7. Фотоелектричний ефект у гетеропереході.....	144
<b>3.8. Фотоелектричні властивості гетероструктур з квантовими ямами та квантовими точками.....</b>	<b>147</b>

## **ПЕРЕДМОВА**

Досягнення обчислювальної техніки, інформатики, радіоелектроники і інших високотехнологічних галузей обумовлені успіхами електроніки, які дозволили сформувати елементну базу всіх сучасних засобів приймання, передавання, зберігання і обробки даних. Створення першого транзистора в 1947 році привело до розвитку напівпровідниковых технологій, які є основою сучасної електроніки. Останніми роками розмір транзистора зменшився приблизно в сто тисяч разів за лінійним розміром і сьогодні ми спостерігаємо перехід від мікро- до наноелектроніки, зокрема появи транзисторов розміри яких обчислюються нанометрами, діодів з наноструктурами, наногетероструктур, світлодіодів і лазерів з квантовими ямами.

Наноелектроніка пов'язана з розробкою архітектур і технологій виробництва пристроїв електроніки з топологічними розмірами елементів, які не перевищують 10-100 нм. Головною її особливістю є домінування квантових ефектів, що відкриває нові можливості для зонної інженерії і розширення функціональних можливостей електронних пристроїв.

Досягнення в області синтезу і застосування нових матеріалів для виготовлення приладових структур ґрунтуються на дослідженнях і відкриттях в області фізики твердого тіла і твердотільної електроніки. Останніми роками розвиток фізики твердого тіла і оптоелектроніки спрямований на вивчення нанорозмірних об'єктів та електронних пристройв на їх основі. В таких системах більшість фізичних властивостей зазнають суттєвих змін у порівнянні з об'ємними матеріалами. Зокрема електронний спектр, транспорт носіїв заряду і оптичні властивості виявляються залежними від розмірів наноструктур.

Особливий інтерес в цій області досліджень займають фізичні процеси пов'язані в першу чергу з електронними і оптичними процесами в системах, де має місце просторове обмеження руху

носіїв заряду в одному, двох або трьох напрямках. Завдяки використанню напівпровідниковых гетероструктур з квантоворозмірними об'єктами (наногетероструктур) вдалось досягнути суттєвого покращення основних параметрів оптоелектронних пристроїв. Зокрема, створено надяскраві світлодіоди, високоефективні лазери та сонячні елементи.

Основне призначення методичного посібника – поглиблена вивчення окремих питань навчальної дисципліни «Основи наноелектроніки», пов’язаних з електронними і оптичними процесами в напівпровідниковых структурах з квантоворозмірними об'єктами (надрешітками, квантовими ямами, нитками і точками). Зокрема, в методичному посібнику розглянуто електронний спектр і функцію густини станів нанорозмірних систем: структур з двовимірним електронним газом, квантових ниток, квантових точок і надграток. Викладено основні принципи розмірного квантування і умови спостереження квантово-розмірних ефектів, розглянуто особливості функції густини станів і статистики носіїв заряду в нанорозмірних системах, транспорт вnanoструктуратах, оптичні та фотоелектричні властивості в напівпровідниковых гетероструктурах – оптичне поглинання, фотолюмінесценцію та фотопровідність. Розглянуті теми можуть бути корисними студентам, які поглиблено вивчають навчальні дисципліни «Оптична діагностика напівпровідників» та «Основи фотовольтаїки», що викладається студентам II курсу магістратури спеціальності «Метрологія та інформаційно-вимірювальна техніка».

Автор сподівається, що даний посібник буде корисний та цікавим для студентів фізичних спеціальностей університетів, аспірантів і молодих дослідників, які працюють в області оптики напівпровідників та оптоелектроніки.

С.В.Кондратенко

# **Розділ 1. Електрони в наноструктурах**

## **1.1. Вступ до нанотехнологій**

Електронні і оптичні властивості твердих тіл за звичайних умов не залежать від їх розмірів. Проте, таке твердження є справедливим лише в об'ємних кристалах, де рух носіїв заряду не є обмеженим. Якщо розмір кристалу в певному напрямку стає співрозмірним з дебройлівською довжиною хвилі носіїв заряду, то електронні і оптичні властивості матеріалів зазнають суттєвих змін і істотно залежать від розміру кристалу. Останніми роками розвиток фізики твердого тіла визначається тим, що основними об'єктами досліджень є фізичні процеси в тонких плівках, багатошарових гетероструктурах, нанорозмірних нитках і кристалітах малих розмірів. В таких системах змінюється переважна більшість фізичних властивостей у порівнянні з властивостями об'ємного матеріалу. Як наслідок, бурхливого розвитку зазнав напрямок, пов'язаний з отриманням та дослідженням напівпровідниковых наноструктур. Визначальною їх ознакою є просторове обмеження руху вільних носіїв заряду в одному, двох або трьох координатних напрямках, яке реалізується у так званих квантових ямах (КЯ), квантових нитках (КН) та квантових точках (КТ), відповідно (Рис.1.1).

Такі системи зазнають значної модифікації електронних властивостей у порівнянні з об'ємними матеріалами, що обумовлює спостереження нових фундаментальних ефектів, до яких належить квантовий ефект Хола, кулонівська блокада, синій зсув в спектрах оптичного поглинання та фотолюмінесценції, резонансне тунелювання крізь бар'єрні структури та ін. Як наслідок, були створені нові пристрої в основу роботи яких покладено використання квантово-розмірних ефектів. Оптичні переходи за участю квантово-розмірних станів в

напівпровідникових КТ та КЯ використано в лазерах, світлодіодах, фотодіодах та сонячних елементах, що дозволило досягнути суттєвого покращення основних параметрів та характеристик зазначених оптоелектронних пристройів.

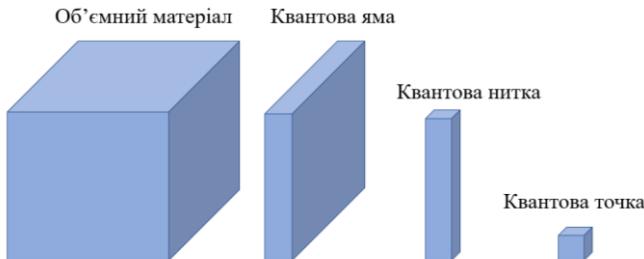


Рис.1.1. Типи наноструктур.

Створення напівпровідниковых наногетероструктур із наперед заданими фізичними властивостями, зокрема електронним спектром вимагає розробки методів, які дозволяють виготовляти зразки з високою кристалічною досконалістю, мінімальною концентрацією дефектів та дислокаций, високою однорідністю за розмірами та компонентному складу. Найбільшого прогресу досягнуто завдяки використанню ефектів самоорганізації наноструктур в епітаксіальних напівпровідникових гетеросистемах. Зокрема, для наногетероструктур Si/Ge та InGaAs/GaAs найбільш поширеним є механізм Странського-Крастанова, який включає в себе перехід від пошарового росту напруженеї плівки до утворення тривимірних островців. Провідну роль при формуванніnanoострівців SiGe та InGaAs відіграє накопичення деформацій в епітаксіальній плівці при нанесенні матеріалу з більшою сталою решітки у порівнянні з підкладкою. Подальший прогрес у створенні нових напівпровідникових наногетероструктур та пристройів на їх основі вимагає встановлення якнайбільшої кількості взаємозв'язків між фізичними властивостями та технологією росту.

## 1.2. Ефекти розмірного квантування в наноструктурах

Сучасний стан розвитку фізики напівпровідників та наноелектроніки характеризується тим, що основними об'єктами досліджень є не напівпровідникові кристали, а нанорозмірні об'єкти – тонкі плівки, багатошарові тонкоплівкові структури, надрешітки, нанонитки, наноострівці та кристалліти. Їх фізичні властивості суттєво відрізняються від властивостей об'ємних матеріалів, де рух носіїв заряду необмежений. Якщо розмір кристала в певному напрямку стає співроздмірним з дебройлівською довжиною хвилі носіїв заряду:

$$\Delta x \sim \sqrt{\frac{h^2}{m_e^* k T}}, \quad (1.1)$$

де  $m_e^*$  - ефективна маса електрона,  $T$  - температура, то електронні властивості зазнають суттєвих змін і істотно залежать від розміру кристала.

Рух електрона в об'ємних кристалах є необмеженим у трьох вимірах простору. Розмірність системи в такому випадку дорівнює трьом, а структури називають 3D-структурами. Якщо хоча б одному з вимірів простору рух електрона в кристалі є обмеженим, то розмірність системи знижується (електрон може рухатись вільно менше ніж у трьох напрямках). Структури з кількістю напрямків  $< 3$ , у яких немає квантового обмеження, називають *низькорозмірними*.

Залежно від кількості вимірів простору, в яких рух електрона є необмеженим, низькорозмірні структури поділяють на: *квантові ями* (2D-структури), *квантові нитки* (1D-структури) та *квантові точки* (0D-структури).

Квантова яма – це система з пониженою розмірністю, тобто двовимірна 2D-структура (надалі 2D-структура), в якій рух

електрона є обмеженим в одному напрямку, а в двох інших він може вільно рухатись.

Аналогічно, рух у квантових нитках не обмежений лише в одному напрямку, і вони класифікуються як 1D структури. Відповідно, квантові точки є нуль-розмірним (0D) матеріалом (табл.1.1).

У квантово-розмірних кристалах вступають у силу закони квантової механіки і відбувається зміна енергетичного спектра електронної системи порівняно з об'ємним матеріалом. Спектр стає дискретним для руху вздовж напрямку, в якому рух обмежений. Залежно від кількості напрямків із квантовим обмеженням, квантовомеханічна модель системи може бути одно-, дво- або тривимірною:

- *одновимірна квантова яма* (обмеження в одному напрямку);
- *дровимірна квантова яма* (обмеження в двох напрямках);
- *тривимірна квантова яма* (обмеження в трьох напрямках);

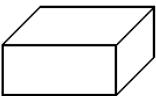
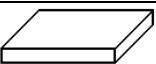
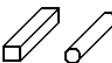
*Квантова яма* є 2D-структурою за геометричною класифікацією та одновимірною потенціальною ямою за квантовомеханічною моделлю системи.

*Квантова нитка* є 1D-структурою за геометричною класифікацією та дровимірною потенціальною ямою за квантовомеханічною моделлю системи.

*Квантова точка* є 0D-структурою за геометричною класифікацією та тривимірною потенціальною ямою за квантовомеханічною моделлю системи.

Табл. 1.1.

Назва системи	Геометричний образ системи	Розмірність некvantованого простору	Квантовомеханічна модель системи
---------------	----------------------------	-------------------------------------	----------------------------------

об'ємний кристал		3D	-
квантова яма		2D	одновимірна потенціальна яма
квантова нитка		1D	двовимірна потенціальна яма
квантова точка		0D	тривимірна потенціальна яма

Залежність фізичних властивостей кристала від його розміру називають *квантоворозмірним ефектом*. Постає питання: наскільки малим має бути розмір кристала, щоб спостерігати квантоворозмірні ефекти? Для електрона в типових напівпровідниках  $m_e^* = 0.1 \cdot m_0$  за кімнатної температури. Якщо скористаємося виразом (1.1), то отримаємо величину  $\Delta x = 5 \text{ нм}$ .

Для експериментального спостереження *квантоворозмірного ефекта*, крім обмеження руху в певних напрямках, необхідно виконання додаткових умов. По-перше, відстань між рівнями розмірного квантування  $E_n$  повинна перевищувати теплову енергію носіїв заряду:

$$E_{n+1} - E_n \gg kT. \quad (1.2)$$

По-друге, уширення енергетичних рівнів за рахунок розсіювання не має перевищувати відстані між рівнями розмірного квантування:

$$E_{n+1} - E_n \gg \frac{\hbar}{\tau} = \frac{\hbar e}{m^* \mu}, \quad (1.3)$$

де  $\tau$  - час релаксації квазіімпульсу,  $m^*$  - ефективна маса носіїв заряду,  $\mu$  - рухливість. З врахуванням того, що для потенціальної ями шириною  $a$  відстань  $\Delta E \sim \frac{\hbar^2}{m^* a^2}$ , а час релаксації

квазіімпульсу  $\tau \sim l \frac{am^*}{\hbar}$ , де  $l$  – довжина вільного пробігу носіїв заряду, умова (1.3) набуде вигляду:

$$a \ll l, \quad (1.4)$$

тобто розмір кристалу в напрямку обмеження руху повинен бути набагато меншим за довжину вільного пробігу носіїв заряду.

### 1.3. Квантові ями

Системи, в яких рух носіїв заряду обмеженим уздовж одного з напрямків, є структурами з двовимірним електронним газом або квантовими ямами. У таких системах рух носіїв заряду в одному напрямку (поперек ями) обмежений одновимірними потенціальними бар'єрами, проте в двох інших напрямках електрони залишаються вільними і їх рух необмежений.

Квантова яма є 2D-структурою за геометричною класифікацією (структурою з двовимірним електронним газом) та одновимірною потенціальною ямою за квантово-механічною моделлю системи. Однією з найпоширеніших на практиці структур з двовимірним електронним газом є напівпровідникові тонкі плівки, багатошарові гетероструктури та структури метал-окисел-напівпровідник. Наприклад, в тонких плівках одновимірна прямокутна потенційна яма утворюється за рахунок стрибка потенціалу на межі плівки з іншим матеріалом. Обмеження руху в такому випадку має місце як для електронів зони провідності, так і для дірок валентної зони.

Для опису електронного спектру в зазначених системах слід розглянути квантово-механічну задачу про рух частинки в одновимірній потенціальній ямі. Для одновимірної випадку з координатною віссю  $z$ , яка є перпендикулярною площині  $xy$  структури, рівняння Шредінгера набуде вигляду:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

де  $V(\mathbf{r})$  – потенціальна енергія електрона,  $m_e^*$  - ефективна маса електрона,  $E$  – енергія, відрахована від краю зони провідності відповідного необмеженого матеріалу,  $\psi(\mathbf{r})$  – хвильова функція електрона.

Рівняння (1.5) може бути розв'язане методом розділення змінних, якщо подати хвильову функцію у вигляді

$$\psi_{\mathbf{k}_{xy}n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} U_{\mathbf{k}_{xy}} \exp(i\mathbf{k}_{xy}\mathbf{r}_{xy}) \phi_n(z), \quad (1.6)$$

де  $S$  – площа квантової ями;  $\mathbf{k}_{xy} = k_x \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}$  – двовимірний квазіхвильовий вектор, що описує вільний (необмежений) рух носіїв заряду вздовж площини  $xy$  квантової ями,  $U_{\mathbf{k}_{xy}}$  – двовимірна функція, періодична з періодом кристалічної решітки вздовж квантової ями. Функцію  $\phi_n(z)$  називають обвідною. Для її знаходження розв'язують одновимірне рівняння Шредінгера, яке описує рух носіїв заряду поперек квантової ями, вздовж координатної осі  $z$ :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right\} \phi(z) = E\phi(z). \quad (1.7)$$

У випадку нескінченно глибокої прямокутної квантової ями шириною  $a$  потенціальна енергія електрона визначається виразом:

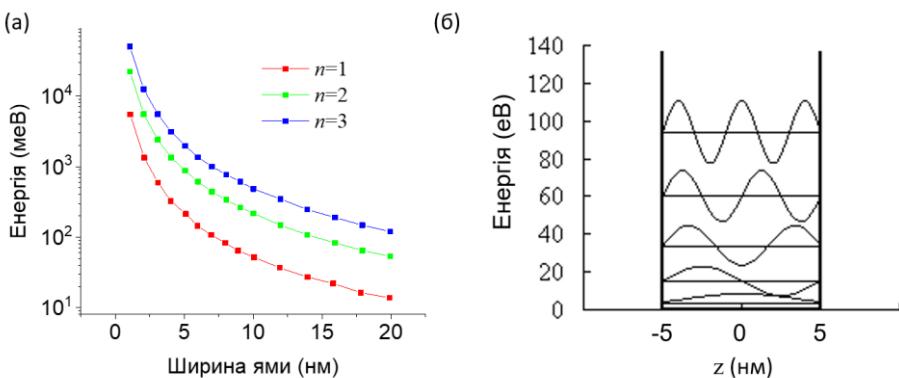
$$V(z) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2} \\ \infty, & \frac{a}{2} \leq |z| \end{cases} \quad (1.8)$$

Розв'язок рівняння (1.7) з граничними умовами  $\phi\left(-\frac{a}{2}\right)=\phi\left(+\frac{a}{2}\right)=0$  дає вирази для хвильових функцій та енергій квантово-розмірних станів:

$$\phi_n(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi n}{a} z\right), & \text{для непарних } n \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} z\right), & \text{для парних } n \end{cases}, \quad (1.9)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_e^* a^2}, \quad (1.10)$$

де  $n$  - ціле число. В даному випадку дозволені значення енергій  $E_n$  мають дискретний характер та залежать від розміру КЯ, зокрема збільшуються при зменшенні її ширини. На рис. 1.2 наведено результат розрахунків положення трьох перших рівнів електронів в нескінченно глибокій квантовій ямі GaAs із  $m_e^* = 0.067 m_0$ .



**Рис. 1.2.** Розраховані положення трьох перших рівнів електронів в нескінченно глибокій квантовій ямі GaAs із  $m_e^* = 0.067 m_0$  (а). Хвильові функції електронів (б).

Хвильові функції станів є симетричними по відношенню до відбивання в площині  $z=0$ . З отриманих результатів також випливає те, що компонента квазіхвильового вектора  $k_z$  може приймати лише дискретні значення енергії:

$$k_z = \frac{\sqrt{2m_e^* E}}{\hbar} = \frac{\pi}{a} n. \quad (1.11)$$

Висновок про квантування енергії руху носіїв заряду справедливий лише для напрямку поперек потенціальної ями. Рух носіїв паралельно границям плівки в площині  $xy$  не є обмеженим і характеризуються квадратичною залежністю енергії електрона від компонент квазіімпульсу  $p_x$  та  $p_y$ :

$$E = \frac{p_{xy}^2}{2m_e^*} = \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_e^*}, \quad (1.12)$$

де  $p_x = \hbar k_x$ ,  $p_y = \hbar k_y$ ,  $k_{xy}^2 = k_x^2 + k_y^2$ . Тому, повна енергія електронів в квантовій ямі (тонкій плівці) є дискретно-неперервною величиною:

$$E = E_c + E_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e^*} = E_c + E_n + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_e^*}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.13)$$

де  $E_c$  - положення дна зони провідності відповідного об'ємного матеріалу, з якого виготовлена квантова яма.

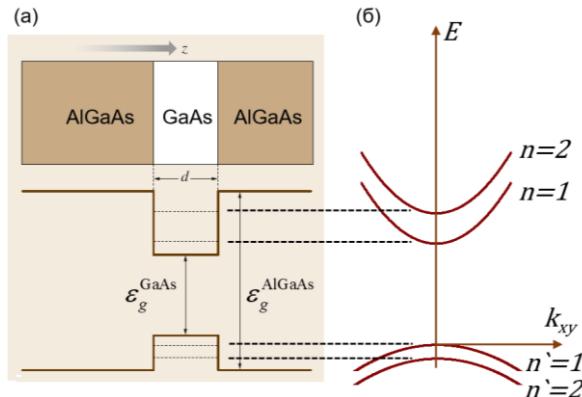
Внаслідок обмеження руху в одному напрямку зона провідності квантової ями складається з підзон розмірного квантування, кожна з яких характеризується певним квантовим числом  $n$ . Дно кожної підзони виявляється зміщеним відносно  $E_c$  на величину  $E_n$ . Дозволені значення енергії при фіксованих значеннях  $E_n$  та будь-яких величинах  $k_{xy}$  являють собою підзону розмірного квантування, а квантове число  $n$  є номером підзони. Відзначимо, що за рахунок неперервної компоненти

енергетичного спектра електрони, які належать одній підзоні можуть мати повну енергію від  $E_n$  до  $\infty$ .

За умови обмеження руху дірок в тонкій плівці валентна зона також буде складатись з підзон розмірного квантування, кожна з яких характеризується квантовим числом  $n'$ . Для знаходження власних значень енергії та хвильових функцій дірок з ефективною масою  $m_h^*$  слід застосовувати підхід, аналогічний до описаного вище для електронів зони провідності квантової ями.

**Потенціальна яма скінченої глибини.** Нескінченно глибока квантова яма є ідеалізованим випадком, який дозволив розглянути основні особливості двовимірного електронного газу. Проте, для опису ефектів розмірного квантування в електронних пристроях необхідно врахувувати скінченність глибини потенціальної ями. Прикладом КЯ скінченої глибини є тришарова гетероструктура, що складається з нанорозмірної плівки GaAs з шириною забороненої зони  $\epsilon_g \sim 1.43$  еВ при 300 К, яка з обох боків оточена напівпровідником з більшою шириною забороненої зони –  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $\epsilon_g \sim 2$  еВ при  $T = 290$  К та  $x = 0.3$ ). Внаслідок різних положень зони провідності в контактуючих матеріалах (різних величин електронних спорідненостей), утворюється профіль потенціальної енергії, близький до прямокутного (Рис.1.3,а). Причому, рух і електронів, і дірок в такого типу КЯ є обмеженим, внаслідок чого зона провідності і валентна зона складаються з підзон розмірного квантування з квантовими числами  $n$  і  $n'$ , відповідно (Рис.1.3,б). Зазначена гетеросистема є прикладом КЯ типу I. Зустрічається й інший випадок гетероструктури, коли потенціальна яма утворюється лише для носіїв заряду одного знаку (електронів в зоні провідності або дірок валентної зони). Такі КЯ відносять до II типу. Їх прикладом є гетеросистема Ge/Si, де обмеженим є рух

дірок у валентній зоні КЯ Ge, в той самий час, коли рух електронів не є обмеженим.



**Рис. 1.3.** Прямоугутна потенціальна яма GaAs, яка сформована в гетеропереході AlGaAs-GaAs-AlGaAs.

Для розрахунку положення підзон розмірного квантування розглянемо найпростіший випадок симетрічної потенціальної ями прямоугутної форми глибиною  $V_0$  та шириною  $d$ . Рівняння Шредінгера матимуть вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_b^*} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + V_0 \phi(z) = E \phi(z), \quad z \geq \frac{d}{2} \quad (\text{область I}) \quad (1.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_a^*} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} = E \phi(z), \quad (\text{область II}) \quad (1.15)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_b^*} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + V_0 \phi(z) = E \phi(z), \quad z \leq -\frac{d}{2} \quad (\text{область III}) \quad (1.16)$$

де  $m_a^*$  та  $m_b^*$  - ефективні маси носіїв заряду в матеріалі КЯ та бар'єрних шарах, відповідно.

Загальні розв'язки рівняннь (1.14)-(1.16) в областях I-III при  $E < V_0$  можна подати у вигляді:

$$\phi_I(z) = A \exp(qz), \quad (1.17)$$

$$\phi_I(z) = B \exp(ikz) + C \exp(-ikz), \quad (1.18)$$

$$\phi_{III}(z) = D \exp(-qz), \quad (1.19)$$

де  $k = \sqrt{2m_a^* E / \hbar}$ ,  $q = \sqrt{2m_b^*(V_0 - E) / \hbar}$ .

Розв'язки записані з врахуванням того, що  $\phi_I(z) \rightarrow 0$  при  $z \rightarrow -\infty$  та  $\phi_{III}(z) \rightarrow 0$  при  $z \rightarrow \infty$ . З умови неперервності хвильових функцій та їх похідних на границях між матеріалами  $z = \pm \frac{d}{2}$  отримаємо транцендентне рівняння:

$$\cos(kd) + \frac{1}{2} \left( \gamma - \frac{1}{\gamma} \right) \sin(kd) = 0, \quad (1.20)$$

де  $\gamma = \sqrt{\frac{m_a^*}{m_b^*} \left( \frac{V_0}{E} - 1 \right)}$ . Отримане рівняння визначає дозволені значення  $k_n$ , які задовільняють умовам даної задачі, де індексом  $n = 1, 2, 3, \dots$  пронумеровано їх в порядку зростання. Відповідні дозволені значення енергії визначаються з рівняння:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_e^*} \quad (1.21)$$

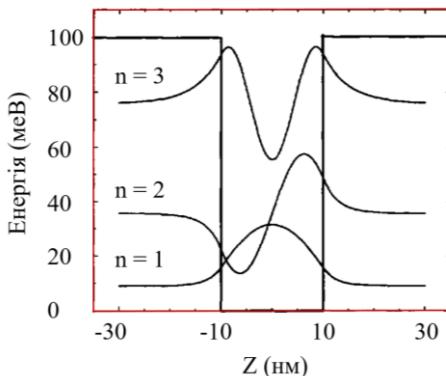
Їх кількість  $m$  задовільняє умові:

$$1 \leq m \leq 1 + \frac{\pi}{a} \frac{\sqrt{2m_a^* V_0}}{\hbar}. \quad (1.22)$$

Відзначимо, що у огинаючих хвильових функцій  $\phi_n(z)$  з'являються експоненційні хвости, характерна глибина проникнення яких в барірні шари (області I та III) рівна оберненій величині коефіцієнта загасання

$$q = \sqrt{\frac{2m_b^*(V_0 - E_n)}{\hbar^2}} \quad (1.23)$$

Як приклад, розглянемо прямокутну квантову яму GaAs глибиною 100 мeВ та ширину 20 нм в оточенні бар'єрних шарів більш широкозонного AlGaAs. За таких параметрів розв'язок рівняння (1.20) дав три власні значення енергії  $E_n$  КЯ, хвильові функції яких наведено на рис.1.4. Має місце проникнення хвильових функцій електронів в бар'єрні шари на відстані порядка 5-10 нм.



**Рис. 1.4.** Хвильові функції електронів для перших трьох енергетичних рівнів прямокутної квантову яму GaAs глибиною 100 мeВ та ширину 20 нм в оточенні бар'єрних шарів AlGaAs.

**Двовимірний електронний газ в модульовано-легованих гетероструктурах.** Іншим прикладом напівпровідникової структур, в яких виникає обмеження руху носіїв заряду в одному напрямку, є модульовано-леговані гетеропереходи GaAs/AlGaAs. Потенціальний профіль, зокрема залежність положення зони провідності від координати, наведена на Рис.1.4. Найбільш характерною особливістю такого типу структур є утворення квантової ями для електронів внаслідок просторового перерозподілу носіїв заряду поблизу контакту між легованим напівпровідником AlGaAs з n-типовим провідності та спеціально нелегованим (власним) GaAs. Форма такого типу потенціальної ями поблизу гетерограниці, зазвичай, є близькою до трикутної.

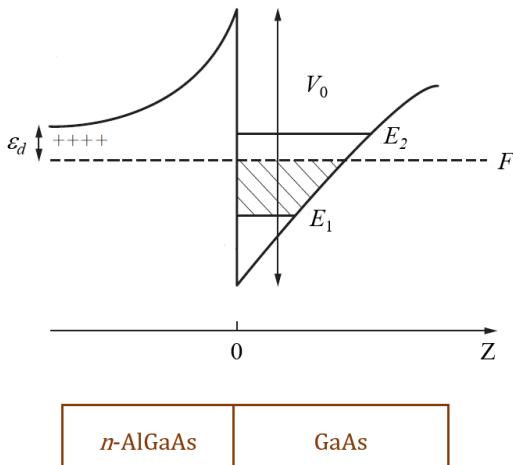


Рис. 1.4. Координатна залежність положення дна зони провідності гетероструктури GaAs/AlGaAs.

## 1.4. Густинна станів і статистика носіїв заряду в квантових ямах

Крім електронного спектра, внаслідок обмеження руху носіїв заряду в напівпровідникових квантово-розмірних структурах істотних змін зазнає вигляд функції густини станів, що в свою чергу обумовлює кардинальні зміни у оптичних властивостей і транспорту носіїв заряду. Знайдемо вираз для густини станів в квантових ямах, де обмеження існує в напрямку  $z$ . Зафіксуємо значення  $n$ , тобто будемо розраховувати густину станів для однієї з підзон розмірного квантування КЯ.

Умовно розіб'ємо КЯ на однакові прямокутні ділянки з розмірами  $L_x$  та  $L_y$  вздовж координатних осей  $x$  та  $y$ , відповідно. Їх розмір повинен бути набагато більшим за довжину хвилі де-Бройля в даному матеріалі. Запишемо періодичні граничні умови Борна-Кармана у вигляді:

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L_x, y, z) \quad (1.24)$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x, y + L_y, z) \quad (1.25)$$

Виконання таких умов для хвильової функції (1.6) призводить до того, що:  $e^{ik_x L_x} = 1$  та  $e^{ik_y L_y} = 1$ . Звідси можна отримати дозволені значення величин  $k_x, k_y$ :

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad (1.26)$$

де  $n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  Кожному набору квантових чисел  $(n_x, n_y)$  відповідає стан електрона, квазіхвильові числа якого визначається рівняннями (1.26). Різниця між двома послідовними значеннями  $k_x, k_y, k_z$  рівна  $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}, \Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y}$ , відповідно. Тому, дозволені значення величини  $k_{xy} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  для підзони розмірного квантування можна зобразити у вигляді точок (Рис.1.5,а) на площині  $(k_x, k_y)$ . При цьому, кожен дозволений стан буде займати в  $k$ -просторі площеу, рівну  $\frac{(2\pi)^2}{L_x L_y} = \frac{(2\pi)^2}{S}$ , де  $S$  - площа виділеної ділянки квантової ями.

Розрахуємо кількість енергетичних станів в діапазоні від  $k_{xy}$  до  $k_{xy} + dk_{xy}$ . Всі вони будуть знаходитись всередині області кругового кільця, обмеженого колами радіусом  $k_{xy}$  та  $k_{xy} + dk_{xy}$ . Тоді кількість електронних станів  $dN$  рівна відношенню його площи  $2\pi k_{xy} dk_{xy}$  до площи, яка припадає на один стан  $\Delta k_x \Delta k_y = \frac{(2\pi)^2}{L_x L_y}$ .

З врахуванням можливого заповнення цього стану двома електронами з протилежними спінами отримаємо вираз для їх кількості:

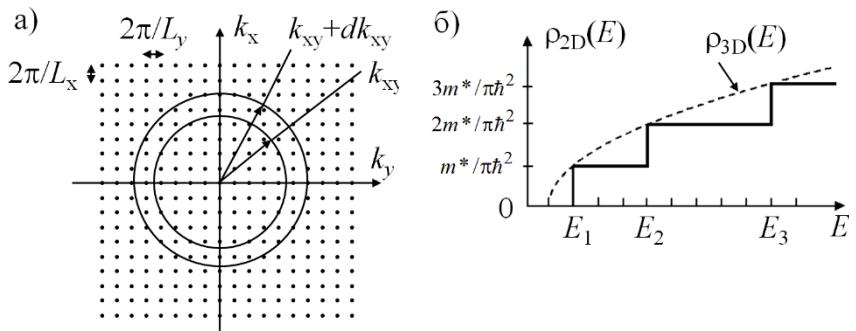
$$dN = 2 \frac{2\pi k_{xy} dk_{xy}}{(2\pi)^2 / L_x L_y}. \quad (1.27)$$

Двовимірна густина станів (тобто кількість станів в проміжку  $k_{xy} \div k_{xy} + dk_{xy}$ , що припадають на одиницю площині квантової ями):

$$\rho_{2D}^n(k_{xy}) = \frac{1}{S} \frac{dN}{dk_{xy}} = \frac{1}{L_x L_y} \frac{dN}{dk_{xy}} = \frac{k_{xy}}{\pi}. \quad (1.28)$$

Для розрахунку кількості станів в енергетичному проміжку  $E \div E + dE$ , які припадають на одиницю площині КЯ, слід врахувати, що  $\rho_{2D}^n(k_{xy}) dk_{xy} = \rho_{2D}^n(E) dE$ . В результаті отримаємо:

$$\rho_{2D}^n(E) = \rho_{2D}^n(k_{xy}) \frac{dk_{xy}}{dE} = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2}, \text{ при } E > E_n \quad (1.29)$$



**Рисунок 1.5.** Стани  $(k_x, k_y)$  в  $k$ -просторі (а) та функція густини станів (б) квантової ями.

Варто відзначити, що двовимірна функція густини станів в розрахунку на одну підзону квантової ями не залежить від енергії. Отриманий вираз справедливий для будь-якої підзони. Тому, за наявності кількох підзон розмірного квантування густина станів є сходинковою функцією (Рис.1.5,6):

$$\rho_{2D}(E) = \sum_n \rho_{2D}^n(E) = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} \sum_n \theta(E - E_n), \quad (1.30)$$

де  $\theta$  – сходинкова функція.

Для знаходження концентрації певного типу носіїв в КЯ (наприклад, електронів в підзоні зони провідності з номером  $n$ ) скористаємось отриманим виразом для густини станів  $\rho_{2D}^n(E)$  в одиничному енергетичному інтервалі  $dE$  та врахуємо ймовірність заповнення цих станів. Концентрація електронів з енергією в діапазоні  $E \div E + dE$  визначається виразом:

$$dn_{2D}^n = \rho_{2D}^n(E) f(E, T) dE, \quad (1.31)$$

де  $f(E, T)$  - ймовірність того, що електрон буде знаходитись в квантовому стані, енергія якого  $E$ , визначатиметься функцією Фермі-Дірака:

$$f(E, T) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-F}{kT}}}, \quad (1.32)$$

$F$  - енергія Фермі або електрохімічний потенціал.

Таким чином, поверхнева концентрація електронів в підзоні  $n$  зони провідності становить:

$$n_{2D}^n = \int_{E_n}^{\infty} \rho_{2D}^n(E) f(E, T) dE \quad (1.33)$$

Враховуючи вираз для густини станів КЯ підзони розмірного квантування (1.29) отримаємо:

$$n_{2D}^n = \int_{E_n}^{\infty} \frac{(2m_e^*)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-F}{kT}\right)} dE = n_c \ln\left(1 + e^{-\frac{F-E_n}{kT}}\right), \quad (1.34)$$

$$n_c = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} kT = \rho_{2D}^n(E) kT \quad - \text{критична концентрація електронів в підзоні } n.$$

Повна поверхнева концентрація електронів в зоні провідності квантової ями є сумою концентрацій для всіх підзон:

$$n_s = \sum_n n_{2D}^n. \quad (1.35)$$

Рівняння (1.34) та (1.35) дозволяють однозначно визначити положення рівня Фермі в квантовій ямі, якщо відома поверхнева концентрація носіїв заряду.

Для невиродженого електронного газу, коли  $E_1 - F \gg 1$  або  $e^{\frac{F-E_1}{kT}} \ll 1$  з рівняння (1.35) випливає, що

$$n_s \approx n_c \cdot e^{\frac{F}{kT}} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-\frac{E_i}{kT}}. \quad (1.36)$$

За умови, якщо енергетична відстань між підзонами перевищує теплову енергію ( $E_2 - E_1 \gg kT$ ) і заповненою є переважно 1-а підзона, можна отримати наближені вирази для  $n_s$  та  $F$  у вигляді:

$$n_s = n_c e^{-\frac{E_1 - F}{kT}}, \quad (1.37)$$

$$F = E_1 - kT \ln \left( \frac{n_s}{n_c} \right). \quad (1.38)$$

У випадку сильного виродження, при  $n_s \gg n_c$ , отримаємо:

$$n_s = n_c \sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{F - E_n}{kT}. \quad (1.39)$$

Якщо ж переважна кількість носіїв заряду заповнює 1-у підзону і рівень Фермі є вищим за положення  $E_1$ , матиме:

$$n_s = n_c \frac{F - E_1}{kT} = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} (F - E_1), \quad (1.40)$$

$$F = E_1 + n_s \frac{\pi \hbar^2}{m_e^*}. \quad (1.41)$$

**Приклад.** Розрахуємо густину станів і критичну концентрацію електронів для квантової ями GaAs із ефективною масою електронів  $m_e^* = 0.067 m_0$ .

Густина станів електронів для одної з підзон розмірного квантування становить:

$$\rho_{2D}^n(E) = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} = 2.78 \cdot 10^{13} \text{ eV} \cdot \text{см}^{-2} \quad (1.42)$$

В такому випадку критична концентрація електронів при температурі 300 К становить:

$$n_c = \rho_{2D}^n(E) kT = 7.2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2} \quad (1.43)$$

Це означає, що квантова яма, легована до рівня  $n_s = 10^{12} \text{ см}^{-2}$  є виродженою. Рівень Фермі в ній, згідно виразу (1.41), знаходиться вище дна 1-ої підзони розмірного квантування на відстані:

$$F = E_1 = 10^{12} \text{ см}^{-2} / 2.78 \cdot 10^{13} \text{ eV} \cdot \text{см}^{-2} = 36 \text{ мeV} \quad (1.44)$$

Варто відзначити, що наведені вище вирази стосувались опису функції густини станів та концентрації електронів зони провідності квантової ями. Для опису дірок валентної зони, за умови обмеження їх руху в одному з напрямків, необхідно використовувати аналогічний підхід. Зокрема, густина станів валентної зони становить:

$$\rho_{2D}(E) = \sum_m \rho_{2D}^m(E) = \frac{m_h^*}{\pi \hbar^2} \sum_m \theta(E - E_m), \quad (1.20)$$

де  $m_h^*$  - ефективна маса дірок валентної зони,  $m$  - номер підзони розмірного квантування валентної зони,  $E_m$  - власні значення енергії дірок, які визначаються з розв'язку рівняння Шредінгера для одновимірної потенціальної ями.

## 1.5. Електронний спектр квантових ниток

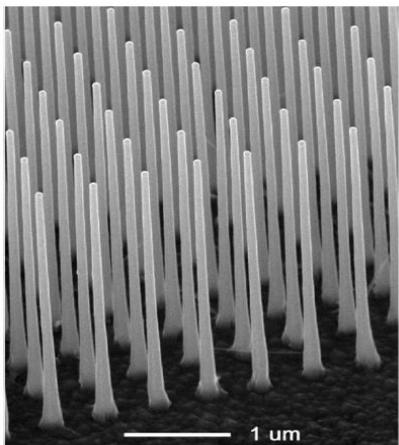


Рис.1.6. Електронно-мікроскопічне зображення квантових ниток InP. напівпровідникових підкладок. Приклад такої системи зображенено на рис.1.6.

Модель двовимірного електронного газу, розглянута в п.1.3, дозволяє легко перейти до опису поведінки електронів в квантових нитках. Розглянемо одновимірну систему, в якій рух носіїв заряду обмежений в двох напрямках. Оскільки довжина КН значно перевищує довжину хвилі де Броїля, то рух в лише в одному напрямку  $x$  не є обмеженим. В такому випадку потенціальна енергія носіїв заряду  $v(y, z)$  є функцією двох координат ( $y$  та  $z$ ). Розв'язок рівняння Шредінгера (1.5) будемо шукати у вигляді:

$$\psi_{k_x nm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} U_{k_x} \exp(ik_x x) \phi_{nm}(y, z), \quad (1.21)$$

де  $k_x$  - компонента квазіхвильового вектора, яка відповідає вільному руху вздовж координатного напрямку  $x$ ,  $U_{k_x}$  - одновимірна функція, періодична з періодом кристалічної решітки вздовж квантової ями  $\phi_{nm}(y, z)$  - обвідна функція, що описує рух в площині перерізу перпендикулярного до осі нитки. Для її знаходження слід розв'язати рівняння:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + V(y, z) \right\} \phi_{nm}(y, z) = E_{nm} \phi_{nm}(y, z). \quad (1.22)$$

Повна енергія електронів в квантовій нитці визначається співвідношенням:

$$E = E_c + E_{nm} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}. \quad (1.23)$$

В такому випадку рух в площині  $xy$  квантується, тобто енергія може приймати дискретні значення. В окремому випадку КН з прямокутним поперечним перетином розміром  $a \times b$  можна скористатись найпростішою моделлю прямокутної двовимірної потенціальної ями. В такому випадку дозволені значення  $E_{nm}$  визначаються двома квантовими числами  $n$  та  $m$ :

$$E_{nm} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* L_y^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 m^2}{2m^* L_z^2}, \quad n, m = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.24)$$

а хвильові функції

$$\phi_{nm}(y, z) = \phi_n(y) \phi_m(z). \quad (1.25)$$

Причому, вигляд функцій  $\phi_n(y)$  і  $\phi_m(z)$  визначається виразом (1.9).

Розглянемо задачу про густину станів одновимірного електронного газу. Зафіксуємо значення  $n$  та  $m$ , тобто будемо розраховувати густину станів для однієї з підзон. В такому випадку дозволені значення  $k_x$  можна зобразити у вигляді точок (рис.1.7,а) на прямій, а відстань між сусідніми станами

складатиме  $\frac{2\pi}{L_x}$ , де  $L_x$  - розмір квантової нитки вздовж координатної осі  $x$ .

Кількість електронних станів  $dN$ , які припадають на інтервал від  $k_x$  до  $k_x + dk_x$  становить:

$$dN = 2 \frac{dk_x}{\frac{2\pi}{L_x}} = \frac{L_x dk_x}{\pi}, \quad (1.26)$$

а одновимірна густина станів (тобто кількість станів в проміжку  $k_x \div k_x + dk_x$ , що припадають на одиницю довжини квантової нитки):

$$\rho_{1D}^{nm}(k_x) = \frac{1}{L_x} \frac{dN}{dk_x} = \frac{1}{\pi} \quad (1.27)$$

Для розрахунку енергетичної густини станів,  $\rho_{1D}(E)$ , слід врахувати, що  $\rho_{1D}^{nm}(k_x) dk_x = \rho_{1D}^{nm}(E) dE$ . Із врахуванням виразу (1.23) отримаємо:

$$\rho_{1D}^{nm}(E) = \rho_{1D}^{nm}(k_x) \frac{dk_x}{dE} = \frac{\sqrt{2m_e^*}}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{E - E_{nm}}}. \quad (1.45)$$

Загалом, за наявності кількох підзон розмірного квантування густина станів квантової нитки є сумою величин  $\rho_{1D}^{nm}(E)$  для кожної підзонон (Рис.1.7,б):

$$\rho_{1D}(E) = \sum_{nm} \rho_{1D}^{nm}(E) = \sum_{nm} \frac{\sqrt{2m_e^*}}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{E - E_{nm}}}. \quad (1.29)$$

Таким чином, вигляд функції густини станів КН суттєво відрізняється як від об'ємних матеріалів, для яких  $\rho_{1D}(E) \sim \sqrt{E - E_c}$ , так і від сходинкової функції (1.30) для КЯ.

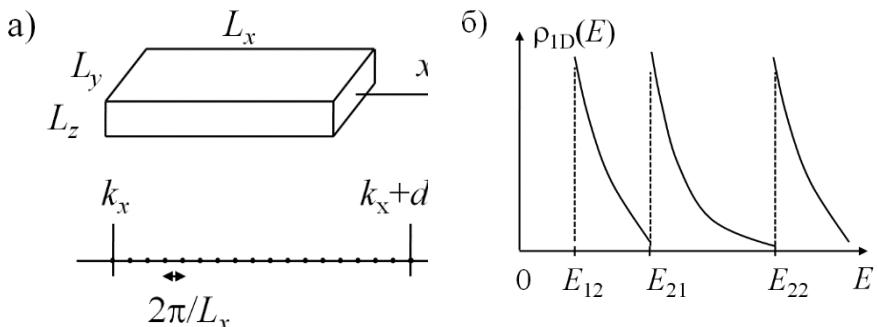


Рис.1.7. Стани  $k_x$  в  $k$ -просторі (а) та функція густини станів (б) квантової нитки.

## 1.6. Функція густини станів та концентрація носіїв заряду в квантових нитках

Для знаходження концентрації певного типу носіїв в квантових нитках (наприклад, електронів в підзоні зони провідності) необхідно виходити з густини станів  $\rho(E)$  в одиничному енергетичному інтервалі  $dE$  та ймовірності заповнення цих станів  $f(E, T)$ . Концентрація електронів в  $nm$  підзоні зони провідності, енергія яких знаходиться в межах від  $E$  до  $E+dE$  становить:

$$dn_{1D}^{nm} = \rho_{1D}^{nm}(E)f(E, T)dE, \quad (1.46)$$

а повна концентрація електронів в цій підзоні:

$$n_{1D}^{nm} = \int_{E_{nm}}^{\infty} \rho_{1D}^{nm}(E)f(E, T)dE. \quad (1.47)$$

Враховуючи вираз для густини станів КН отримаємо:

$$n_{1D}^{nm} = \int_{E_{nm}}^{\infty} \frac{\sqrt{2m_e^*}}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{E - E_{nm}}} \frac{dE}{1 + \exp\left(\frac{E - F}{kT}\right)} \quad (1.48)$$

Введемо позначення  $\frac{E - E_{nm}}{kT} = \varepsilon$  та  $\frac{F - E_{nm}}{kT} = \eta$ , які дозволять подати вираз (1.48) як:

$$n_{1D}^{nm} = \frac{\sqrt{2m_e^* kT}}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{E - E_{nm}}} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{-\frac{1}{2}}}{1 + \exp(\varepsilon - \eta)} d\varepsilon. \quad (1.49)$$

Значення інтегралу (1.49) залежить від параметра  $\eta$ . Даний вираз відомий як інтеграл Фермі-Дірака з індексом  $-1/2$ , який не може бути записаний через елементарні функції:

$$\Phi_{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{-\frac{1}{2}}}{1 + \exp(\varepsilon - \eta)} d\varepsilon \quad (1.50)$$

Вираз (2.7) із врахуванням (2.8) набуде вигляду:

$$n_{1D}^{nm} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_e^* kT}{\pi}} \Phi_{-1/2}(\eta). \quad (1.51)$$

Для невиродженого випадку, коли  $E_{nm} - F \gg kT$  і  $\exp(\varepsilon - \eta) \gg 1$  останній вираз допускає спрощення:

$$\Phi_{-1/2} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(\eta) \int_0^{\infty} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \exp(-\varepsilon) d\varepsilon \quad (1.52)$$

або

$$\Phi_{1/2} \approx \exp(\eta), \text{ оскільки } \int_0^{\infty} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \exp(-\varepsilon) d\varepsilon = \sqrt{\pi} \quad (1.53)$$

Таким чином, вираз для концентрації електронів в підзоні  $nm$  зоні провідності невиродженої КН набуде вигляду:

$$n_{1D}^{nm} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_e^* kT}{\pi}} \exp\left(-\frac{E_{nm} - F}{kT}\right). \quad (1.54)$$

Розглянемо випадок сильного виродження, коли рівень Фермі розташований в зоні провідності вище дна відповідної підзони  $nm$ . При цьому в інтегралі Фермі-Дірака справедливим є наближення  $\exp(\varepsilon - \eta) \ll 1$  і:

$$\Phi_{-1/2} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta \varepsilon^{-\frac{1}{2}} d\varepsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \eta^{1/2}. \quad (1.55)$$

Вираз для концентрації електронів в підзоні зони провідності КН набуде вигляду:

$$n_{1D}^{nm} \approx \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_e^* kT}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta \varepsilon^{-\frac{1}{2}} d\varepsilon = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_e^*(F - E_{nm})}{\pi}}. \quad (1.56)$$

Повна концентрація електронів в зоні провідності квантової нитки є сумою концентрацій для всіх підзон:

$$n_{1D} = \sum_{n,m} n_{1D}^{nm}. \quad (1.57)$$

Розрахунок концентрації дірок  $p$  в підзоні розмірного квантування валентної зони КН з енергією  $E_{n'm'}$  є подібним до розрахунку концентрації електронів в зоні провідності:

$$p_{1D}^{nm} = \int_{-\infty}^{E_{n'm'}} \rho_v^{n'm'}(E) f_p(E, T) dE, \quad (1.58)$$

де  $\rho_v^{n'm'}(E) = \frac{\sqrt{2m_h^*}}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{E_{n'm'} - E}}$  - функція густини станів для валентної зони напівпровідника,  $f_p(E, T)$  - ймовірність того, що квантово-розмірний стан з енергією  $E$  не зайнятий електроном.

Якщо ввести позначення в спосіб подібний до того, як це було зроблено розрахунку концентрації електронів в зоні провідності, а саме:

$$\frac{E_{n'm'} - E}{kT} = \varepsilon^* \text{ та } \frac{E_{n'm'} - F}{kT} = \eta^*, \quad (1.59)$$

то можна подати вираз для концентрації дірок у вигляді:

$$p_{1D}^{n,m} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_h^* kT}{\pi}} \Phi_{-1/2}(\eta^*), \quad (1.60)$$

де  $\Phi_{-1/2}^*(\eta^*)$  - інтеграл Фермі-Дірака.

## 1.7. Квантові точки

В квантових точках рух носіїв заряду обмежений в усіх трьох координатних напрямках. Формально під терміном «точка» слід було б розуміти нескінченно малі розміри об'єкта. Реальні квантові точки можуть містити достатньо високу кількість атомів ( $\sim 10^2\text{-}10^6$ ) і зберігати нанорозмірний масштаб. Такі об'єкти також називають нанокластерами. Як приклад, на Рис.1.8,а наведено електронно-мікроскопічне зображення нанокластера InGaAs в оточенні GaAs.

В таких об'єктах хвильові функції  $\phi_{nml}(x, y, z)$ , що є розв'язком тривимірного рівняння Шредінгера, залежать від трьох квантових чисел  $n, m, l$ . Енергетичний спектр носіїв заряду є дискретним і має атомоподібний вигляд. Як наслідок, дуже часто квантові точки називають «штучними» атомами.

Розглянемо найпростіший випадок, коли обмежуючий потенціал  $V(\mathbf{r})$  рівний нулю всередині прямокутної потенціальної ями розмірами  $L_x, L_y$  та  $L_z$  і рівний нескінченості поза цим об'ємом. В такому спрощеному прикладі потенціальну енергію носіїв заряду в квантовій точці можна подати у вигляді суми потенціальних енергій трьох прямокутних нескінченно глибоких ям:

$$V(\mathbf{r}) = V_a(x) + V_b(y) + V_c(z), \quad (1.30)$$

а обвідна функція буде добутком трьох функцій виду (1.9):

$$\phi_{nml}(\mathbf{r}) = \phi_{nml}(x, y, z) = \phi_n(x) \phi_m(y) \phi_l(z), \quad (1.31)$$

Енергія рівнів розмірного квантування є сумою енергій руху вздовж кожної з координатних осей:

$$E_{nml} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \left[ \left( \frac{n}{L_x} \right)^2 + \left( \frac{m}{L_y} \right)^2 + \left( \frac{l}{L_z} \right)^2 \right], \quad (1.32)$$

де  $n, m, l = 1, 2, \dots, \infty$ . Слід відзначити, що рівні  $E_{nml}$  можуть буди виродженими, наприклад, в тих випадках, коли два чи три розміри такої квантової точки є однаковими.

Оскільки в квантових точках енергетичний спектр є дискретним, то функція густини станів є набором піків з нескінченно малою шириною (рис.1.8,б). На практиці піки є дещо уширеними внаслідок взаємодії носіїв заряду з фононами і домішковими атомами решітки, неідеальності кристалічної решітки та ін.

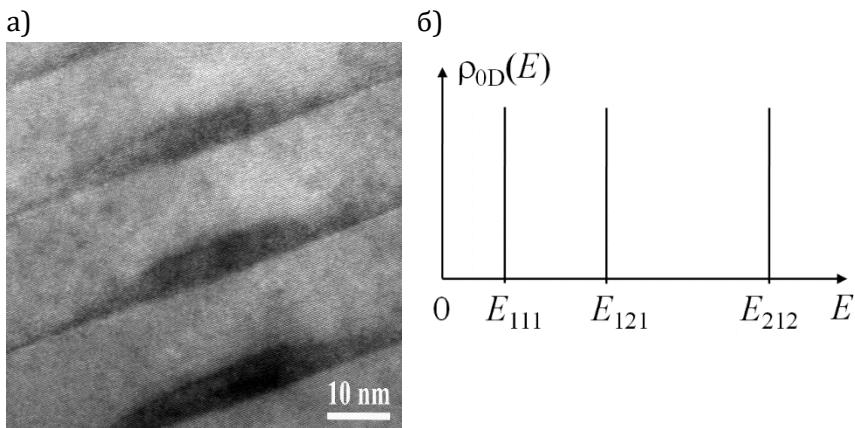


Рис.1.8. а) Електронно-мікроскопічне зображення нанокластера InGaAs в оточенні GaAs, виміряне вздовж напрямку [100]; б) функція густини станів для квантової точки.

Існує три загальновідомі методи епітаксіального росту КТ на напівпровідниковых підкладках, що залежать від величини невідповідності сталих граток між епітаксіальним матеріалом та

підкладкою. В ненапружених, або слабко напружених системах (наприклад, GaAs/Al(Ga)As), утворюються лише двовимірні плівки – механізм Франка-дер-Мерве. В системах, де різниця сталих граток перевищує 1.8 % на початку росту відбувається формування двомірного «змочувального» шару, після чого утворюються тривимірні острівці. Це так званий механізм Странскі-Крастанова, який на сьогодні реалізується в більшості практично важливих випадків. Наприклад, різниця сталих граток для InAs/GaAs приблизно 7 %, для Ge/Si – 4.2 %. У випадку, якщо різниця сталих граток перевищує 12 %, тривимірне зростання відбувається без формування змочувального шару – це механізм Фольмера-Вебера. Три основні механізми росту наноострівців наведено на рис. 1.9.

Гетероструктури з наноострівцями SiGe на поверхні монокристалічного Si (як і InAs на поверхні GaAs) отримують методом молекулярно-променевої епітаксії в режимі Странскі-Крастанова, який вирізняється різким переходом від двовимірного (2D) росту до росту 0D наноострівців, коли ключовим фактором є енергетичний виграв за рахунок зменшення величини механічних напружень за рахунок зміни топології плівки. На початковій стадії нанесення напівпровідникового матеріалу на поверхню кристалу з меншою сталою решітки ріст наноострівців може відбуватися пошарово. Перші кілька шарів ростуть псевдоморфно, за механізмом вандер-Мерве, коли формується так званий змочувальний шар. Різниця сталих граток призводить до того, що плівка Ge (або InAs) росте стисненою в площині підкладки. Пружна енергія плівки зростає зі збільшенням її товщини, і при перевищенні деякої критичної товщини, яку називають товщиною змочувального шару, відбувається релаксація пружних напружень шляхом виникнення тривимірних острівців.



**Рис.1.9.** Основні механізми росту наноострівців на напівпровідникових поверхнях.

Конкуруючим процесом щодо релаксації пружних напруженень і, відповідно, утворення 3D наноострівців є виникнення дислокацій невідповідності. Їх утворення стає більш вірогідним при збільшенні кількості осадженого матеріалу. За умови перевищення деякої критичної товщини накопиченої пружної енергії стає достатньо, щоб подолати енергетичний бар'єр утворення дислокацій невідповідності (5 eV для гетеросистеми Ge-Si). В місці виникнення дислокацій відбувається локальне зменшення величини пружних напруженень, що може призводити до дифузії осадженого матеріалу в цю область і утворення тривимірних острівців.

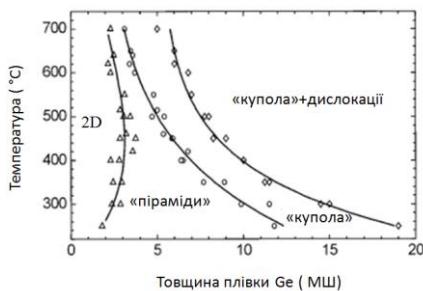
Розглянемо основні подробиці переходу від двовимірного (2D) до тривимірного (3D) росту, і особливості початкової стадії зародження піраміdalьних («hut»)-кластерів. Експерименти на гетеросистемах Si/Ge та InAs/GaAs продемонстрували можливість утворення тривимірних когерентно напруженіх, бездислокаційних острівців методом молекулярно-променевої епітаксії. Було теоретично показано, що формування тривимірних напруженіх наноострівців при відносно невеликому об'ємі ( $\sim 10^6$  атомів) більш вигідно, ніж утворення дислокацій. За певних умов росту виявилось можливим виростити масиви наноострівців з вузьким розподілом за

розмірами та виявлено впорядкування у розташуванні на поверхні.

Для зародження острівця об'ємом  $V$ , який має фасети (грані) нахилені під кутом  $\Theta$  до ростової поверхні, необхідно подолати енергетичний бар'єр

$$\Delta E = 4\Gamma V^{2/3} \operatorname{tg}^{1/3} \Theta - 6AV \operatorname{tg} \Theta , \quad (1.36)$$

де  $\Gamma = \gamma_s / \sin \Theta - \gamma_p \operatorname{ctg} \Theta$  - збільшення поверхневої енергії,  $\gamma_s$  та  $\gamma_p$  - поверхнева енергія на одиницю площини для змочувального шару та фасети, нахиленої під кутом  $\Theta$ , відповідно,  $A = \sigma_{xx}^2 (1 - \nu) / 2\pi\mu$ , де  $\sigma_{xx}$  - компонента тензора



**Рис.1.10.** Залежність топології плівки Ge, яка вирощена на поверхні Si(001) від температури росту і критичної товщини осадженого Ge.

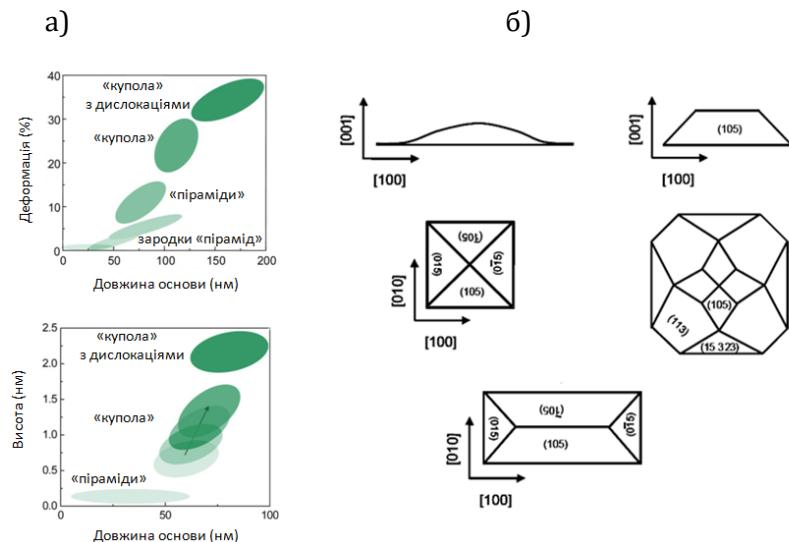
острівця  $V_{\text{крит}} = (4\Gamma/9A) \operatorname{ctg}^2 \Theta$ , а потім зменшується при збільшенні  $V$ . Відзначимо, що критична енергія  $E_{\text{крит}}$  залежить від деформації за законом  $\varepsilon_{xx}^{-4}$ . Тому, чим більше невідповідність сталих граток плівки і підкладки при зародженні острівців, тим меншою є товщина псевдоморфної плівки при якій втрачається її морфологічна стабільність. Таким чином, для зародження острівців необхідна значна концентрація  $x$  в твердих розчинах

деформацій паралельна поверхні росту,  $v$  і  $\mu$  - коефіцієнт Пуассона і модуль зсуву підкладки. Для гетеросистеми Ge/Si величина  $\Delta E$  спочатку зростає з об'ємом острівця до максимального (критичного) значення  $E_{\text{крит}} = 64\Gamma^3 \operatorname{ctg} \Theta / 243A^2$

при критичному об'ємі

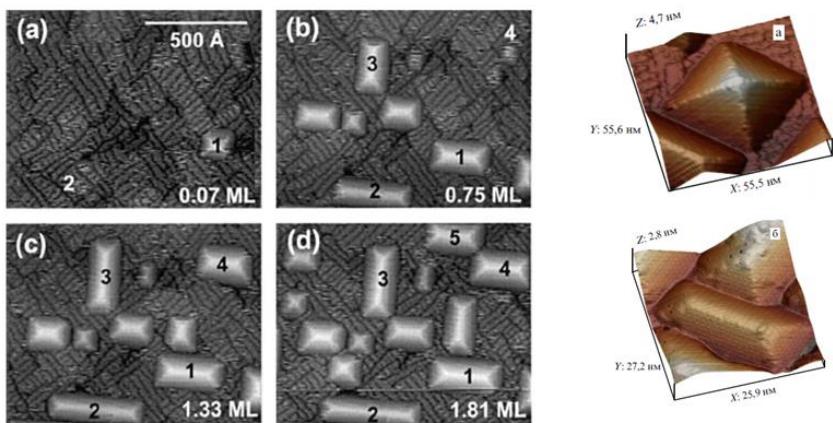
$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  або в  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  і висока температура підкладки. Для системи  $\text{Ge}/\text{Si}$  (001) критична товщина зменшується від  $\approx 5$  монолітів (МШ) до  $\approx 3$  МШ при збільшенні температури від 500 до 800 °C. Як приклад, на Рис.1.10 наведена залежність топології плівки Ge, яка вирощена на поверхні  $\text{Si}(001)$  від температури росту і критичної товщини осадженого Ge. При епітаксії  $\sim 3$  монолітів (МШ) виникає однорідна плівка. Подальше осадження Ge призводить до появи піраміdalних кластерів і наноострівців з куполоподібною формою поверхні.

Суттєва неоднорідність пружної релаксації острівця за його висотою призводить до залежності енергетичних витрат на утворення острівця від його форми (Рис.1.11). Наприклад, при рості нанокластерів SiGe спостерігають кілька стадій еволюції форми в процесі збільшення їх об'єму. З'являються кілька енергетично найбільш вигідних форм («піраміди», «куполи», «надкуполи»).



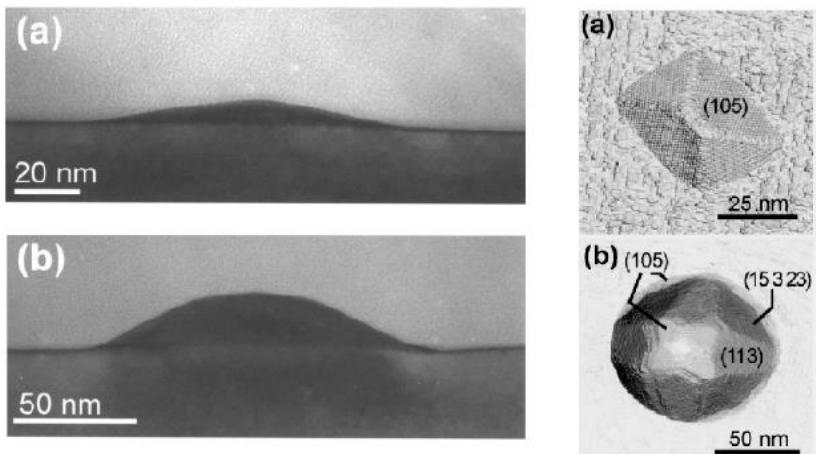
**Рис. 1.11.** Залежності висоти та величин деформацій від діаметру для різних типів нанокластерів SiGe, які можуть бути сформовані на поверхні підкладки  $\text{Si}$  (001) (а); схематичне представлення різних типів нанокластерів SiGe (б).

Еволюція росту наноострівців SiGe на Si підкладці наведена на рис. 1.12, де подано залежності висоти та величин деформацій від діаметру для різних типів нанокластерів SiGe, які можуть бути сформовані на поверхні підкладки Si (001). Одразу після переходу від пошарового росту до тривимірного утворюються передпіраміdalні острівці, що мають мале відношення висоти до латерального розміру. Такі кластери, як показали дослідження скануючої тунельної мікроскопії, є накопиченням багатоатомних сходинок. В процесі росту таких кластерів відбувається збільшення відношення висоти до латерального розміру, і за досягнення деякої критичної величини механічних напружень, вони трансформуються в наноострівці з прямокутною основою - «піраміди» - нанокластери, що мають фасети (105), відношення довжини до ширини основи 10:1 та кут між основою та фасетами  $\approx 11^\circ$ . В площині підкладки їх основи орієнтовані вздовж направлень  $\langle 100 \rangle$ . Крім нанокластерів з квадратною основою і формою правильних пірамід, існують також клиновидні кластери з прямокутною основою. На рис.1.13 наведено СТМ зображення піраміdalьних кластерів з квадратною основою і формою правильної піраміди (а) та кластеру, який має клиновидну форму і прямокутну основу (б). Вони також огранені площинами (105) та мають відношення довжини до ширини основи 10:1. Відмінною особливістю такого різновиду кластерів є те, що довжини основи не зв'язані з їх шириною.



**Рис. 1.12.** СТМ зображення піраміdalних кластерів з квадратною основою і формою правильної піраміди (а) та кластеру, який має клиновидну форму і прямокутну основу (б).

При подальшому збільшенні кількості осадженого матеріалу ріст піраміdalних наноострівців SiGe відбувається пропорційно зі збереженням їх форми. За досягнення деякого критичного об'єму піраміdalні наноострівці трансформуються у куполоподібні («dome»-острівці), яким властиві грані (105), (113) та (15 3 23), більше відношення висоти до латерального розміру. Релаксація механічних напружень в таких кластерах відбувається більш ефективно. Електронно-мікроскопічні зображення Ge наноострівців (зліва) та відповідні атомно-силові зображення (справа) піраміdalного кластера та куполоподібного наноострівця, які сформовані на поверхні (001) підкладки Si наведено на рис. 1.13.



**Рис. 1.13.** Електронно-мікроскопічні зображення Ge наноострівців (зліва) та відповідні атомно-силові зображення (справа) піраміdalного кластера (а) та куполоподібного наноострівця (б), які сформовані на поверхні (001) підкладки Si.

Зазначена трансформація форми є енергетично вигідною, адже енергія пружних деформацій куполоподібного острівця менша, за енергію піраміdalного острівця того ж самого об'єму. Перехід від «пірамід» («hut»-кластерів) до «куполів» («dome»-острівців) супроводжується збільшенням ступеня релаксації напружень. Енергетична вигідність цих двох форм залежить від об'єму острівців. За певних умов можливе їх співіснування та бімодальність в розподілі за розмірами. Перехід від SiGe «пірамід» до «куполів» завершується при товщинах  $\sim 10$  МШ. При цьому, на поверхні формується ансамбль наноострівців із малим розкидом за розмірами ( $\sim 6\%$ ). Матеріал «dome»-острівців є частково релаксованим, а частка пружних напружень складає  $80\div90\%$ . Зароджені піраміdalні острівці є переважно Ge, а острівці більшого розміру є твердим розчином  $Si_{1-x}Ge_x$  внаслідок того, що кремній проникає в глибину острівців шляхом

дифузії з підкладки. Такий процес зменшує величину пружних напружень. Так, в куполоподібних острівцях вміст Ge варіється від 0.6 до 0.35 при використанні температур росту від 500°C до 800 °C.

Останньою стадією зміни морфології та структури наноострівців SiGe є утворення «надкуполів», які є пластично деформовані та містять дислокації невідповідності поблизу межі поділу з кремнієвою підкладкою. Причиною цього є те, що при рості «надкуполів» Ge енергія підвищується до такого критичного рівня, що пружна релаксація напруженень менш вірогідна, і релаксація накопиченої енергії відбувається за рахунок утворення дислокаций.

Іншим механізмом релаксації механічних напруженень в наноострівцях SiGe, вирощених на поверхні Si (001), є розрив змочувального шару та утворення заглиблення (канавки) навколо основи наноострівця. Причиною є те, що в області поблизу границі бічної поверхні наноострівця та змочувального шару локалізовані найбільші деформації стискання, і знаходження атомів Ge в цьому місці є найменш енергетично вигідно. Канавки утворюються навколо острівців всіх типів. У випадку росту піраміdalних острівців утворення канавок є конкуруючим процесом щодо релаксації напруженень шляхом утворення дислокацій невідповідності. Характерним є те, що при температурах 500-600°C спочатку утворюються дислокації, а при більш високих температурах 700-800°C першими утворюються канавки. Вирощені куполоподібні наноострівці, як правило, оточені канавками, глибина яких пропорційна розміру основи. В процесі 3D росту в об'ємі острівця проникає переважно кремній, який знаходився в підкладці на місці утвореної канавки. Після повного зникнення змочувального шару поблизу основи острівця кремній дифундує в наноострівець переважно через область поблизу основи, оскільки даний механізм масопереносу є ефективнішим у порівнянні з об'ємною дифузією через межу

поділу острівець-підкладка, що обумовлює суттєву неоднорідність компонентного вмісту та розподілу механічних напружень в об'ємі наноострівця та формуванню варізонного переходного шару між наноострівцем та його кремнієвим оточенням. Слід зауважити, що з точки зору подальшого практичного застосування в оптоелектроніці та наноелектроніці SiGe наноострівці, збагачені Si, є менш привабливі, оскільки мають вужчий робочий спектральний діапазон.

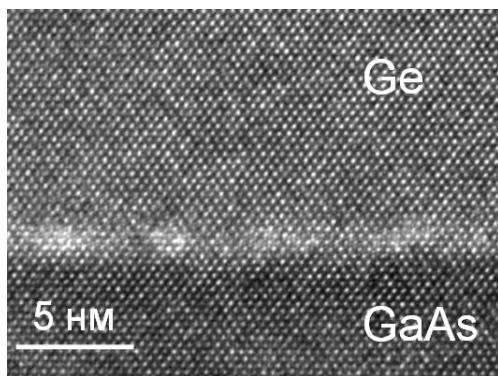
Епітаксіальний ріст острівців Ge на поверхні кремнію не дозволяє створювати наноострівці із діаметром  $< 10$  нм та високою ( $\sim 10^{12}$  см $^{-2}$ ) поверхневою густинорою. Для вирощування таких наноострівців необхідною є модифікація поверхні Si. Осадження на поверхні кремнію 1 монолітну сурми або вуглецю стимулює зародження наноострівців при подальшому осадженні Ge, що дозволяє збільшити їх поверхневу густину до  $\sim 10^{11}$  см $^{-2}$ . Найбільшої поверхневої густини можна досягнути при осадженні Ge на окислену поверхню кремнію з товщиною окислу 0.3 – 0.5 нм. За таких умов формуються наноострівці, які мають високу  $\sim 2 \cdot 10^{12}$  см $^{-2}$  густину та напівсферичну форму поверхні. Виявлено також можливість використання більш товстих оксидів, що призводило до формування кристалічних та аморфних нанокластерів Ge, відокремлених від підкладки Si шаром окислу.

Експерименти на InGaAs/GaAs також виявили можливість формування тривимірних напруженіх наноострівців без утворення дислокацій. Для гетеросистеми InAs/GaAs(001) дослідження морфології утворених наноострівців виявили, що утворення тривимірних острівців InAs виникає при осадженні критичної масової товщини 1.6 – 1.7 МШ. При цьому утворюються наноострівці малого розміру та великим розкидом за розмірами. Збільшення товщини осадженого In до 4 МШ дозволило отримати масив наноострівців в формі пірамід з

квадратною основою, що орієнтована вздовж кристалографічних напрямків [100] та [010], а її довжина складає 12 нм.

## 1.8. Гетеропереходи з нанорозмірними об'єктами

Гетеропереходом називають контакт двох матеріалів із різною шириною забороненої зони. Їх можна отримати, якщо виростити монокристалічну плівку одного з напівпровідників на монокристалічній підкладці іншого. Прикладами гетеропереходів є такі пари напівпровідників: Ge-Si, Ge-GaAs, InGaAs-GaAs, CdTe-CdSe та ін. На Рис.1.14 наведено електронно-мікроскопічне зображення гетеропереходу Ge-GaAs, де видно інтерфейс між матеріалами. Залежно від типу домішок, обидва напівпровідники можуть мати як одинаковий, так і протилежний типи провідності. Якщо їх тип провідності одинаковий ( $n - n^+$  або  $p - p^+$ ), то такий гетеропереход називається *ізотипним*. Електричні, оптичні та фотоелектричні властивості гетеропереходів мають певні особливості порівняно з властивостями  $p - n$ -переходів з одинакових матеріалів.



**Рисунок 1.14.** Електронно-мікроскопічне зображення високої роздільної здатності гетеропереходу Ge-GaAs.

Електричні та оптичні властивості гетеропереходу істотно залежать від енергетичної діаграми. Розглянемо методику побудови енергетичної діаграми гетеропереходу на прикладі системи Ge-GaAs. Ці напівпровідники мають структуру типу алмазу (две зсунуті одна відносно одної гранецентровані кубічні решітки). Вона характеризується розміром грані кубічної кристалічної решітки  $a$  (Табл.1.2). Зауважимо, що в структурі типу алмазу відстань між атомами та чотирма його найближчими сусідами становить  $\sqrt{3}a$ . Сталі решітки Ge та GaAs відрізняються лише на 0.8 %, що робить їх привабливими з точки зору ненапружених гетеропереходів.

Таблиця 1.2.

Напівпровідник	$\epsilon_g$ , eВ	Тип зоної структурі	Стала решітки $a$ , о А	$\chi$ , eВ
Si	1.11	непрямозонний	5.431	4.01
Ge	0.66	непрямозонний	5.658	4.13
GaAs	1.43	прямозонний	5.654	4.07
ZnSe	2.67	прямозонний	5.667	4.09
AlAs	2.15	непрямозонний	5.661	3.5
GaP	2.25	непрямозонний	5.451	4.3
AlSb	1.6	непрямозонний	6.136	3.65
GaSb	0.68	прямозонний	6.095	4.06
InAs	0.36	прямозонний	6.058	4.9
ZnTe	2.26	прямозонний	6.103	3.5
CdTe	1.44	прямозонний	6.477	4.28
InSb	0.17	прямозонний	6.479	4.59

Загалом матеріали гетеропереходу мають різну ширину забороненої зони  $\epsilon_g$ , роботу виходу електрона  $\phi$  та електронну спорідненість  $\chi$ . Робота виходу та електронна спорідненість

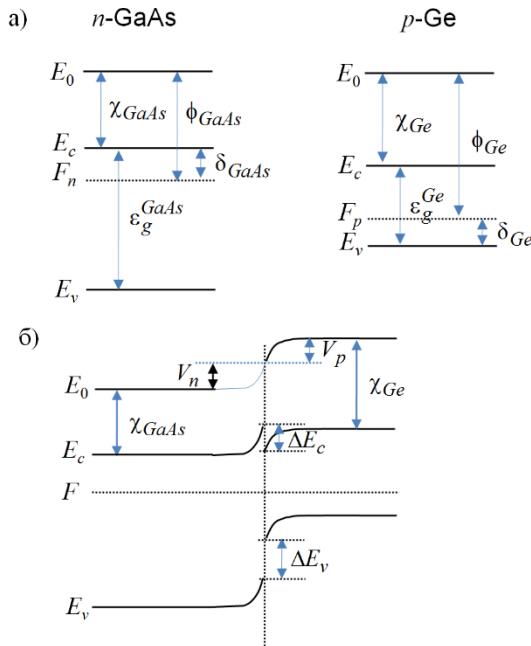
дорівнюють енергіям, які необхідні для переведення електрона відповідно з рівня Фермі і з дна зони провідності за межі напівпровідника (на рівень вакууму). У таблиці 1.2 наведені ширина забороненої зони, електронна спорідненість, стала решітки та тип зонної структури типових напівпровідників, що використовувалися для створення гетеропереходів.

При побудові енергетичної діаграми для визначеності вважатимемо, що GaAs легований донорами з концентрацією  $10^{16} \text{ см}^{-3}$  має  $n$ -тип провідності, а  $p$ -Ge легований акцепторами з концентрацією  $3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Розглянемо енергетичні діаграми напівпровідників окремо, до їх безпосереднього контакту (рис.1.15,а). Як видно з рисунку, рівні вакууму співпадають, а рівень Фермі в  $n$ -GaAs євищим у порівнянні з його положенням в  $p$ -Ge. Після приведення напівпровідників в контакт має відбутись вирівнювання рівнів Фермі внаслідок переходів частини електронів з GaAs в Ge. Переміщення електронів залишить некомпенсованим додатній заряд іонізованих донорів в GaAs, тобто поблизу гетерограниці виникне електричне поле і матиме місце вигин зон вгору. Аналогічний вигин зон донизу виникне в Ge. Позначимо величини вигину зон в GaAs та Ge як  $V_n$  та  $V_p$ , відповідно. Різниця рівнів Фермі в матеріалах становить:

$$F_p - F_n = (\chi_{Ge} + \epsilon_g^{Ge} - \delta_{Ge}) - (\chi_{GaAs} + \delta_{GaAs}) = V_n + V_p, \quad (1.61)$$

і дорівнює контактній різниці потенціалів  $U_k = (V_n + V_p) / e$  даних напівпровідників, тобто сумарному вигину зон.

Позначимо різницю положень краю зон провідності двох матеріалів як  $\Delta E_c$ , а валентних зон як  $\Delta E_v$ . Якщо відкладати вниз від рівня вакууму  $E_0$  величини  $\chi_{Ge}$  і  $\chi_{GaAs}$ , отримаємо положення дна зони провідності. Оскільки величини  $\chi_{Ge}$  і  $\chi_{GaAs}$  в загальному випадку є різними, то на межі розділу переходу утвориться розрив зони провідності.



**Рисунок 1.15.** Енергетична діаграма двох ізольованих напівпровідників (а) та *p-n* гетеропереходу GaAs-Ge (б).

З рис.1.15,б можна отримати вираз для розриву зони провідності:

$$\Delta E_c = \delta_{GaAs} + V_n - (\epsilon_g^{Ge} - \delta_{Ge}) + V_p, \quad (1.2)$$

яке з врахуванням виразу (1.1) можна подати як:

$$\Delta E_c = \chi_{Ge} - \chi_{GaAs}. \quad (1.3)$$

Таким чином, розрив зони провідності рівний різниці електронних спорідненностей контактуючих матеріалів.

В аналогічний спосіб, з рис.1.15,а, отримаємо вираз для розриву валентної зони:

$$\Delta E_v = \epsilon_g^{GaAs} + \chi_{GaAs} - \epsilon_g^{Ge} - \chi_{Ge} = -\Delta E_c + \epsilon_g^{GaAs} - \epsilon_g^{Ge} \quad (1.4)$$

або

$$\Delta E_v + \Delta E_c = \varepsilon_g^{GaAs} - \varepsilon_g^{Ge} \quad (1.5)$$

Розрахуємо величини розривів валентної зони та зони провідності GaAs-Ge гетеропереходу. Величина  $\Delta E_c$ , зумовлена різницею величин електронної спорідненості Ge ( $\chi_{Ge} = 4.13$  eВ) та GaAs ( $\chi_{GaAs} = 4.07$  eВ), дорівнює 0.06 eВ. Враховуючи, що  $\varepsilon_g^{Ge} = 0.66$  eВ та  $\varepsilon_g^{GaAs} = 1.43$  eВ при 290 К отримаємо, що  $\Delta E_v = 0.69$  eВ.

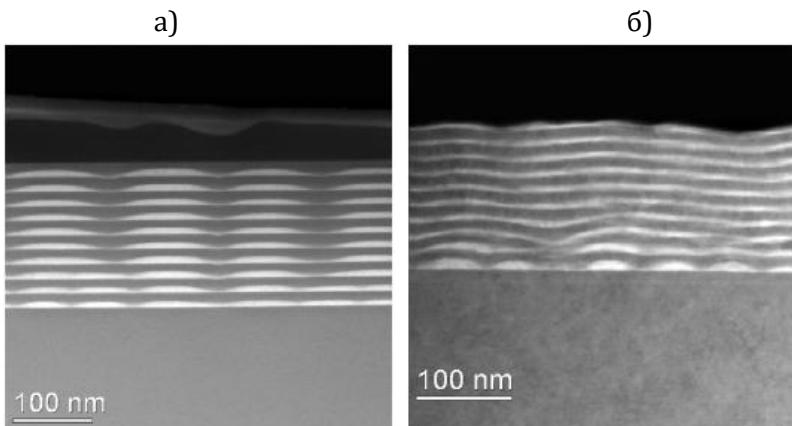
Залежно від співвідношення величин електронної спорідненості, ширини забороненої зони двох напівпровідників, концентрації та типу домішок розрив зон може мати вигляд «стінки» або «гака». На рис.1.15,б наведено розрив типу «стінки» для зони провідності та розрив типу «гака» для валентної зони.

Зарощеніnanoострівці, коли вони виявляються вбудованими в матрицю іншого матеріалу, є джерелом пружних напружень, що поширяються на значні (у порівнянні з розміром nanoострівців) відстані. При повторному рості nanoострівців на поверхні зарощеної гетроструктури реалізується інший випадок – ріст в неоднорідному статичному полі пружних напружень, які виникають в покровному шарі nanoострівців. Неоднорідні поля впливають на кінетику міграції поверхневих атомів.

Багатошарові гетроструктури з InGaAs або SiGe КТ демонструють вертикальне впорядкування, яке зумовлене просторовим розподілом механічних напружень в проміжному шарі Si, вирощеному над nanoострівцями. Приклад багатошарових гетроструктур SiGe/Si, вирощених методами молекулярно-променевої епітаксії та хімічного нанесення у вакумі наведено на рис. 1.16.

Спостережуваний ефект можна пояснити на прикладі гетеросистеми Si/Ge. У випадку Si-Ge систем вертикальне впорядкування зумовлено частковою еластичною релаксацією напружень поблизу вершини  $Si_{1-x}Ge_x$  nanoострівця, які

зумовлюють деформації розтягу в Si над наноострівцями. Це локально зменшує механічні напруження і робить більш енергетично вигідним утворення наноострівців в наступному шарі з наноострівцями. При збільшенні товщини проміжних шарів Si ефект впорядкування зменшується. Критична товщина Si, при якій зникає впорядкування залежить від умов вирощування структур. Проте, загалом сильного вертикального впорядкування можна досягнути, якщо товщина проміжних шарів Si не перевищує 22 нм, в той час, коли часткове впорядкування реалізовано і при товщинах поблизу 100 нм.



**Рис. 1.16.** Електронно-мікроскопічні зображення поперечного перерізу багатошарових гетероструктур SiGe/Si, вирощених методом МПЕ (а) та ХВН (б).

Напівпровідникові гетероструктури з нанорозмірними об'єктами на сьогоднішній день виготовляють головним чином за допомогою методу молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) та хімічного вакуумного напилення (ХВН). Техніка ХВН використовує хімічні реакції (перетворення) в оточенні таких газів, як  $\text{GeV}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{Si}_2\text{H}_6$  або  $\text{SiCl}_2\text{H}_2$ . Розрізняють кілька підгруп ХВН: в ультрависокому вакуумі, швидке термічне ХВН та ХВН при атмосферному тиску. Досить висока контролюваність та

відтворюваність росту досягнуто при вирощуванні Si-Ge наноструктур.

## **1.9. Напівпровідникові надрешітки**

Надрешіткою звуться періодична структура, яка складається з великої кількості тонких шарів двох чи більше матеріалів, які періодично чергуються в одному напрямку. Зазвичай, період повторення в таких системах становить від одиниць до десятків нанометрів і є більшим за довжину вільного пробігу електронів. При цьому, відстань між сусідніми ямами має бути достатньо малою для того, щоб їх хвильові функції перекривались.

В 1969 році Есакі та Тсу вперше виявили можливість зонної інженерії в надрешітках та багатошарових гетероструктурах з тонкими епітаксіальними шарами (квантовими ямами). Варіювання компонентного складу та рівня легування в таких гетероструктурах зробило можливим створити велику кількість квантово-розмірних напівпровідниковых пристроїв, зокрема транзисторних структур з високою рухливістю електронів (HEMTs), гетеро-біполярних транзисторів (HBTs), міжзонних світлодіодів та лазерних діодів, фотодіодів, інфрачервоних фотодетекторів з квантовими ямами. Більшість структур виявили унікальні електронні та оптоелектронні властивості насамперед завдяки використанню епітаксіальних технологій на основі  $A^{III}B^V$  сполук. Причинами широкого практичного впровадження були добре вивчена зонна структура матеріалів, їх пряmozонність, наявність квантового обмеження як для електронів, так і для дірок. Подальшим кроком у розвитку багатошарових напівпровідниковых гетероструктур є їх інтеграція з низьковимірними об'єктами, в яких обмеження руху носіїв існує в кількох напрямках. Це відкриває нові можливості при створенні новітніх оптоелектронних пристроїв.

В основному розрізняють два типи надграток: *композиційні*, які складаються з періодичної послідовності напівпровідників різного хімічного складу, та *леговані*, що являють собою періодичну послідовність шарів з n- та p-типом провідності з бездомішковими прошарками між ними (*піри*-надгратки). На рис.1.17,а наведено електронно-мікроскопічне зображення композиційної надрешітки, яка утворена періодичним повторенням тонких плівок InAs та InAsSb. Потенціальний профіль в такого типу надгратках формується внаслідок періодичної зміни ширини забороненої зони та електронної спорідненості в напрямку, перпендикулярному площині тонких плівок (напрямок зросту структури).

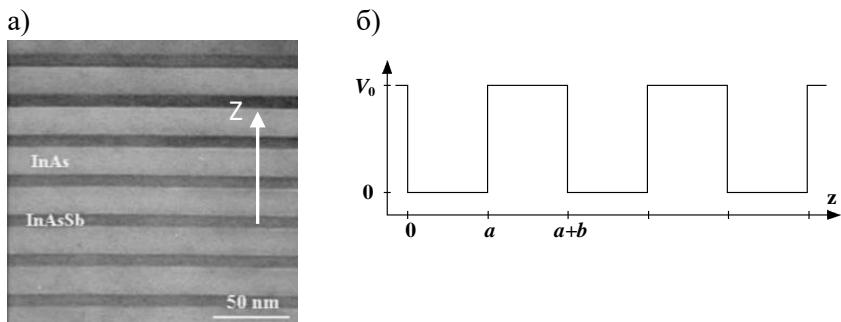


Рис. 1.17. а) електронно-мікроскопічне зображення надрешітки, яка утворена періодичним повторенням напівпровідників InAs та InAsSb; б) періодичний потенціал в надрешітці.

Для опису електронного спектру надграток розглянемо періодичний набір прямокутних потенціальних ям із періодом  $d = a + b$ , де  $a$ ,  $b$  – товщини матеріалів  $A$  та  $B$  відповідно. Запропонований потенціал є спрощеним у порівнянні з потенціалом реальних надграток, проте дозволяє описати всіх їх основні закономірності. Ця модель отримала назву *моделі Кроненіга-Пенні*. Розв'язок даної задачі є загальновідомим і може

бути знайдений в будь-якому підручнику з фізики твердого тіла. Тому наведемо лише основні його деталі.

У надгратках, які містять періодично розташовані 2D квантові ями, носії заряду з енергією  $E < V_0$  можуть тунелювати з однієї тонкої плівки (квантової ями) в іншу. При цьому, хвильові функції в наближенні ефективної маси є розв'язком рівняння Шредінгера з періодичною функцією потенційної енергії. Відповідно до теореми Блоха, хвильова функція електрона в надгратці може бути записана у вигляді

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} U_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \phi(z), \quad (1.62)$$

де  $\phi_{mk_z}(z + d \cdot l) = \phi_{mk_z}(z)$  - періодична частина функцій Блоха, яка відповідає руху в перпендикулярному по відношенню до площини квантових ям напрямку  $z$ ,  $U_{\mathbf{k}}$  - функція, періодична з періодом кристалічної решітки,  $d = a + b$  - період надгратки,  $a$ ,  $b$  - ширина квантової ями і бар'єра між сусідніми ямами, відповідно,  $l$  - ціле число.

Для внутрішніх областей ями, в матеріалі А (потенціальна яма), де  $V = 0$ , шукатимо розв'язки рівняння Шредінгера у вигляді:

$$\phi(z) = A e^{ik_z z} + B e^{-ik_z z}, \quad (1.63)$$

де  $k_z^2 = \frac{2m_a^* E}{\hbar^2}$ , де  $m_a^*$  - ефективна маса носіїв заряду в матеріалі А.

Внаслідок ефектів тунелювання хвильові функції поширюються всередину енергетичного бар'єру висотою  $V_0$  і шириною  $b$ . Хвильові функції всередині бар'єрних шарів шукатимо у вигляді:

$$\phi(z) = C e^{qz} + D e^{-qz}, \quad (1.64)$$

причому

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_b^*}, \quad (1.65)$$

$m_b^*$  - ефективна маса носіїв заряду в матеріалі В.

З умови неперервності хвильових функцій і їх похідних при  $z=0$  і  $z=a$  можна отримати такі співвідношення:

$$A + B = C + D, \quad (1.66)$$

$$ik_z(A + B) = q(C - D). \quad (1.67)$$

З умови періодичності випливає, що  $\phi(a) = \phi(-b)\exp(ikd)$ . Якщо скористатись цим співвідношенням для хвильових функцій електронів, записаних для потенціальних ям (1.63) та бар'єрних шарів (1.64), то можна отримати:

$$A\exp(ik_z a) + B\exp(-ik_z a) = (C\exp(-qb) + D\exp(qb))\exp(ik_z d), \quad (1.68)$$

$$ik_z(A\exp(ik_z a) + B\exp(-ik_z a)) = q(C\exp(qb) - D\exp(-qb))\exp(ik_z d) \quad (1.69)$$

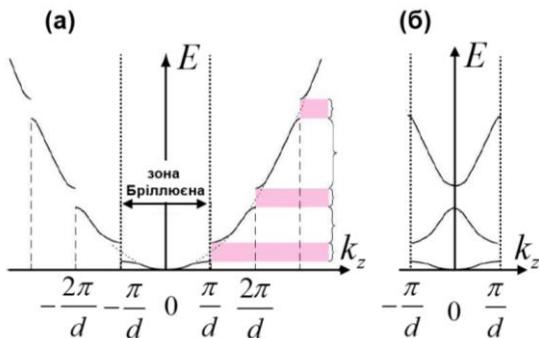
Система рівнянь (1.66) - (1.69) для чотирьох амплітуд  $A, B, C$  і  $D$  може мати нетривіальний розв'язок за умови рівності нулю д детермінанта коефіцієнтів. Після відповідних перетворень отримаємо трансцендентне рівняння, яке визначає зв'язок енергії електрона з блохівським хвильовим вектором,  $E_n(k_z)$ , при  $E < V_0$ :

$$\cos(k_z a)ch(qb) + \frac{1}{2} \left( \gamma - \frac{1}{\gamma} \right) \sin(k_z a)sh(qb) = \cos(qd), \quad (1.70)$$

$$\text{де } \gamma = \sqrt{\frac{m_a^*}{m_b^*} \left( \frac{V_0}{E} - 1 \right)}.$$

Одержане рівняння легко розв'язується числовими методами. На Рис.1.18 наведений типовий закон дисперсії надгрратки та результат його приведення до першої зони Бріллюена. Як бачимо, енергетичний спектр складається з зон дозволених і заборонених значень енергії (щілин). Параболічна залежність,

очікувана для об'ємних кристалів, розривається на кілька зон і щілин на границях зон Бріллюєна при значеннях  $k_z = \pm\pi n/d$ . Дозволеним зонам відповідають такі енергії  $E$ , для яких значення правої частини рівняння (1.70) знаходиться в межах від -1 до + 1, а величина  $k_z$  є дійсною. Діапазони енергій, яким не відповідають дійсні значення  $k_z$ , називають забороненими щілинами енергій (забороненими зонами).



**Рисунок 1.18.** Закон дисперсії надгратки (а) та енергетична діаграма приведеної першої зони Бріллюєна.

Таким чином, зона провідності надгратки розпадається на кілька зон. Оскільки, період надгратки зазвичай набагато більший за період кристалічної решітки твердого тіла, то ширина заборонених і дозволених зон в надгратках завжди набагато менша за ширину зони напівпровідника. Внаслідок цього дозволені і заборонені зони енергій в надгратках називають міні-зонами та міні-щілинами, відповідно.

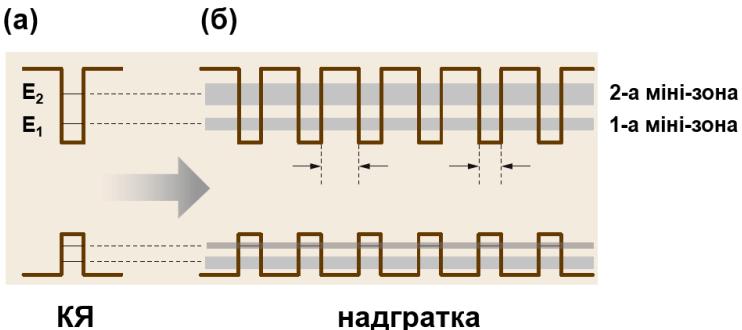
Якщо бар'єрні шари є достатньо широкими ( $b \rightarrow \infty$ ), тобто за відсутності тунелювання між сусідніми ямами, рівняння (1.70) переходить в рівняння (1.20) для прямокутної КЯ скінченої глибини. При зменшенні ширини бар'єру сусідні квантові ями починають взаємодіяти і багатошарова гетероструктура з

квантовими ямами перетворюється в надрешітку. При  $qb \gg 1$ , коли імовірність тунелювання між сусідніми ямами є малою, отримаємо структуру зі слабко взаємодіючими КЯ. Наближення, яке використовується для розрахунку енергетичного спектра і хвильових функцій таких надграток, називають *наближенням сильного зв'язку*. Ця назва відображає той факт, що носії заряду за рахунок сильної локалізації в певній КЯ майже весь час перебувають в ній, і лише зрідка тунелюють в сусідні ями. Для енергетичного спектра носіїв заряду з розв'язку рівняння (1.70) в наближенні сильної взаємодії отримаємо:

$$E_n(k_z) = E_n + S_n + 2t_n \cos(k_z d), \quad (1.71)$$

де  $n = 1, 2, \dots$ ,  $E_n$  – розв'язки рівняння (1.20) для прямокутної КЯ скінченої глибини,  $S_n = -F(E_n) \frac{dE}{dF}$ ,  $t_n = -\frac{1}{2} \frac{dE}{dF}$ , значення похідних розраховуються при  $E = E_n$ ,  $F(E)$  – ліва частина рівняння (1.70).

Схема енергетичних рівнів одиночної квантової ями та надрешітки наведені на рис.1.19 (а, б). Як випливає з (1.71) взаємодія між ямами, по-перше, зсуває локалізовані стани  $E_n$  на величину. По-друге, у системі з  $N$  невзаємодіючих квантових ям ці стани  $N$ -кратно вироджені. Взаємодія між ямами знімає це виродження. При цьому хвильові функції в надрешітці, навпаки, є делокалізованими і поширяються в усі квантової ями структури, формуючи мінізони ширину  $4t_n$ . Ширина мінізон в надрешітці є значно меншою ширини енергетичних зон матеріалів шарів, які її утворюють; вона зростає при збільшенні взаємодії між квантовими ямами (тобто за зменшення висоти і ширини бар'єрів) і порядкового номера міні-зони.



**Рисунок 1.19.** Схема енергетичних рівнів одиночної квантової ями (а) та надрешітки з міні-зонами для електронів і дірок відповідно (б).

В реальних системах електрон може рухатись в трьох напрямках. Вираз для повної енергії повинен враховувати й кінетичну енергію руху електронів в площині  $(x, y)$ . Рух носіїв заряду вздовж площини квантових ям надгратки є вільним. Таким чином, енергія електрона в  $n$ -ій мінізоні надгратки може бути подана у вигляді:

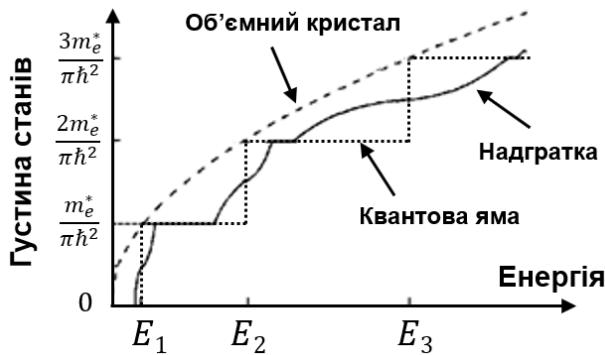
$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_e^*} + E_n + S_n + 2t_n \cos(k_z d). \quad (1.72)$$

Функція густини станів електронів в надгратці можна отримана виходячи з виразу (1.29) для одночної квантової ями. Після інтегрування по  $k_z$  в межах першої зони Бріллюєна від  $-\pi/d$  до  $\pi/d$  отримаємо вираз для  $n$ -ої міні-зони надгратки:

$$\rho_{\text{нг}}^n = N \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} \cos^{-1} \left( \frac{E - E_n - S_n}{2t_n} \right). \quad (1.73)$$

На рис.1.20 наведено функцію густини станів надгратки у порівнянні з функцією  $\rho(E)$  для КЯ та об'ємного кристалу. Відзначимо, що при  $E = E_n$  (тобто при значеннях енергії, які

співпадають з рівнями енергій підзон розмірного квантування КЯ) функція густини станів надгратки рівна половині значення для окремої КЯ.



**Рисунок 1.20.** Функції густини станів для одночної квантової ями та надрешітки.

Equation Chapter (Next) Section 2

## Розділ 2

### Транспорт в нанорозмірних структурах

#### 2.1. Вплив магнітного поля на електронний спектр кристалів. Рівні Ландау

Розглянемо вплив однорідного магнітного поля на енергетичний спектр електронів в об'ємному кристалі. Нехай магнітне поле з індукцією  $B$  спрямовано вздовж осі  $z$ , а електрони зони провідності характеризуються ізотропною ефективною масою  $m_e^*$ . Без врахування спінового магнітного момента спрощений гамільтоніан електронів матиме вигляд:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e^*} (\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A})^2, \quad (2.1)$$

де  $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$  - оператор імпульса,  $\mathbf{A}$  - вектор-потенціал магнітного поля,  $e$  - елементарний заряд. Індукція магнітного поля зв'язана з  $\mathbf{A}$  співвідношенням:

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (2.2)$$

Оберемо вектор-потенціал у формі  $A_x = A_z = 0$ ,  $A_y = Bx$ , що забезпечить наявність тільки однієї відмінної від нуля компоненти вектора індукції магнітного поля  $B_z \neq 0$ .

Перетворимо вираз (2.1) з врахуванням перестановочних співвідношень:

$$A_j P_j - P_j A_j = i\hbar \frac{\partial A_j}{\partial P_j}, \quad j = x, y, z \quad (2.3)$$

Будемо вважати, що вектор-потенціал задовільняє умові:

$$\mathbf{B} = \text{div } \mathbf{A}. \quad (2.4)$$

З врахуванням (2.3) та (2.4) гамільтоніан може бути приведений до вигляду:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 + \frac{1}{m_e^*} \left[ eBx \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] + \frac{e^2 B^2 x^2}{2m_e^*} \quad (2.5)$$

або записаний в еквівалентній формі:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieBx}{\hbar} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]. \quad (2.6)$$

Відповідне рівняння Шредінгера матиме вигляд:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieBx}{\hbar} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2m_e^* E}{\hbar^2} \right] \psi(x, y, z) = 0. \quad (2.7)$$

Компоненти вектор-потенціала не залежать від  $y$  та  $z$ , тому розв'язок (2.7) будемо шукати у вигляді:

$$\psi(x, y, z) = \varphi(x) e^{i(k_y y + k_z z)}. \quad (2.8)$$

Після його підстановки в рівняння (2.7) отримаємо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{1}{2m_e^*} \left( \hbar k_y - eBx \right)^2 \varphi(z) = \left( E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} \right) \varphi(z). \quad (2.9)$$

Зручно ввести позначення

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*}, \quad x = x_0 + \vec{x}, \quad (2.10)$$

де  $x_0 = \frac{\hbar k_y}{eB}$ . Тоді рівняння (2.9) матиме вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{e^2 B^2}{2m_e^*} \vec{x}^2 \varphi(z) = E' \varphi(z), \quad (2.11)$$

яке співпадає з рівнянням Шредінгера для гармонічного осцилятора, що коливається з частотою  $\omega_c = \frac{eB}{m_e^*}$ . Його

розв'язками є:

$$E = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.12)$$

де  $n = 0, 1, 2, \dots$

Розглянемо напівпровідник з невиродженими, параболічними та сферично симметричними в  $\mathbf{k}$  - просторі зонаю провідності та валентною зоною. За відсутності магнітного поля їх енергії визначаються співвідношеннями:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.13)$$

$$E_p(\mathbf{k}) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (2.14)$$

де  $E_c$  і  $E_v$  - положення дна зони провідності і високоенергетичного краю валентної зони напівпровідника за відсутності магнітного поля.

Дані залежності суттєво змінюються в магнітному полі  $\mathbf{B}$ , в саме рух електрона (дірки) стає квантованим. З врахуванням (2.12) отримаємо:

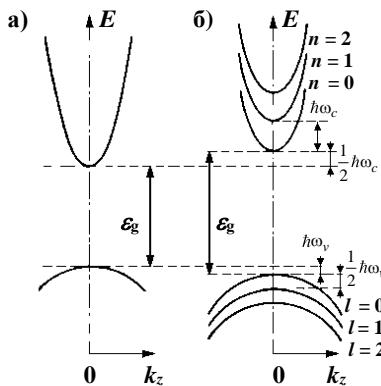
$$E_n(\mathbf{k}) = E_c + \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

$$E_p(\mathbf{k}) = E_v - \hbar\omega_v \left( l + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_h^*}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.16)$$

де  $\omega_c$  та  $\omega_v$  - циклотронні частоти електронів та дірок, відповідно,  $\omega_v = \frac{eB}{m_h^*}$ .

В останніх виразах враховано, що на рух електрона вздовж поля (вздовж осі  $z$ ) магнітне поле не впливає, а енергія, пов'язана з цим рухом, не квантована. Рух в площині  $(x, y)$ , перпендикулярній напрямку магнітного поля, є іншим - електрон рухається по колам певного радіусу з частотою  $\omega_c$ .

Енергія, пов'язана з цим рухом, є квантована (дискретна), а відстань між сусідніми можливими її значенням становить  $\hbar\omega_c$ .



**Рисунок 2.1.** Енергетичні зони прямозонного напівпровідника за відсутності магнітного поля (а) та при  $H > 0$  (б).

В однорідному магнітному полі валентна зона та зона провідності розщеплюються на ряд підзон, кожній з яких відповідає певне орбітальне квантове число  $l$ , яке може приймати цілі значення. Найнижча підзона зони провідності, яка відповідає  $n = 0$ , розташована на  $\frac{\hbar\omega_c}{2}$  вище края зони провідності за відсутності магнітного поля. Аналогічно, найвища підзона валентної зони, яка відповідає  $l = 0$  розташована нище на  $\frac{\hbar\omega_v}{2}$  края валентної зони при  $B = 0$ . Енергетичні відстані між підзонами зони провідності та підзонами валентної зони рівні  $\hbar\omega_c$  та  $\hbar\omega_v$ , відповідно (рис.2.1).

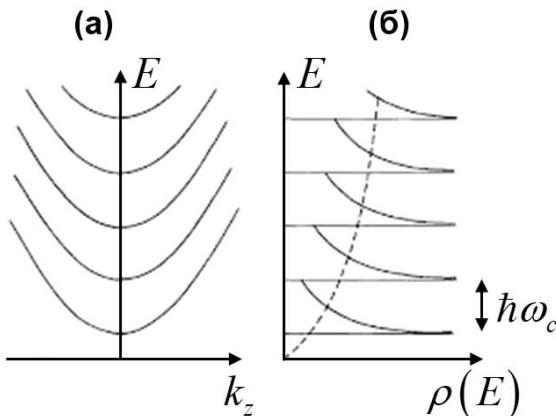
Розглянемо вплив магнітного поля на енергетичну густину станів. З курсу фізики твердого тіла відомо, що під впливом магнітного поля  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  дозволені стани носіїв заряду

«перерозподіляються» між набором концентричних циліндрів, вісь яких паралельна прикладеному магнітному полю. Кожен циліндр містить  $g = \frac{eB}{\pi h}$  станів, тобто  $e$ -кратно виродженим.

Енергетична густина станів в напівпровіднику зазнає змін внаслідок прикладення магнітного поля. Її вигляд для електронів зони провідності і дірок валетної зони (рис.2.2) є подібним до функції густини станів квантових ниток, зокрема

$$\rho_c(E) = \frac{eB\sqrt{2m_e^*}}{(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{E - E_c - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)}}, \quad (2.17)$$

$$\rho_v(E) = \frac{eB\sqrt{2m_v^*}}{(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{E_v - \hbar\omega_v\left(l + \frac{1}{2}\right) - E}}. \quad (2.18)$$



**Рисунок 2.2.** Підзони зони провідності (а) та енергетична функція густини станів (б) напівпровідника в магнітному полі.

## **2.2. Енергетичний спектр та функція густини станів квантової ями в магнітному полі**

В попередньому розділі було показано, що об'ємних кристалах під впливом магнітного поля рух носіїв заряду квантується лише в площині, перпендикулярній  $\mathbf{B}$ . В квантових ямах в залежності від орієнтації магнітного поля відносно площини двовимірного шару можуть бути реалізовані два випадки. У випадку орієнтації магнітного поля вздовж площини КЯ основним результатом буде збільшення величин  $E_n$  за рахунок додаткового обмеження руху носіїв заряду магнітним полем. Принципово нових ефектів можна очікувати, якщо магнітне поле орієнтоване в напрямку квантового обмеження КЯ, тобто вектор  $\mathbf{B}$  спрямований вздовж осі  $z$ , напрямку квантового обмеження. В результаті, повна енергія електрона є дискретною величиною:

$$E_{nm} = E_n + \hbar\omega_c \left( m + \frac{1}{2} \right), \quad (2.19)$$

де  $n$  - номер підзони розмірного квантування КЯ,  $E_n$  - положення її мініума при  $B = 0$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$  - номер рівня Ландау.

З цього випливає, що функція густини станів для  $n$ -ої підзони КЯ, яка за відсутності магнітного поля є сталою ( $\rho_{2D}^{B=0} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}$ ), зазнає суттєвих змін (Рис.2.3). Як і для ОД систем (квантових точок), її спектр в ідеальному випадку складається з набору  $\delta$ -функцій. В дійсності, ці рівні є розширеними внаслідок розсіювання носіїв заряду на домішках, взаємодії з коливанням решітки (фононами) та ін. Кожному енергетичному рівню  $E_{nm}$  відповідає певна кількість електронних станів, тобто система є вироджена. Відстань між сусідніми рівнями однакова і становить  $\hbar\omega_c$ . Для розрахунку кратності виродження рівня Ландау

врахуємо, що після накладання магнітного поля всі стани підзони розмірного квантування КЯ в інтервалі енергій  $\hbar\omega_c$  «конденсуються» в один загальний рівень. Тому його кратність виродження можна визначити за допомогою виразу:

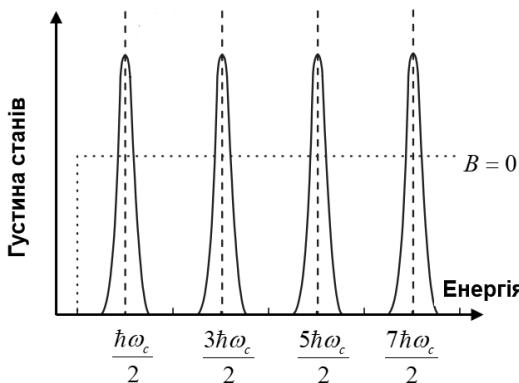
$$g = \frac{1}{2} \rho_{2D}^{B=0} \hbar \omega_c = \frac{1}{2} \frac{\dot{m}}{\pi \hbar^2} \frac{\hbar e B}{m^*} = \frac{eB}{h}, \quad (2.20)$$

який демонструє лінійне зростання  $g$  з магнітним полем. Для його отримання ми скористались виразом (1.29), але без врахування виродження по спіну, тому його домножили на  $1/2$ .

Зручно ввести коефіцієнт заповнення рівня:

$$\nu = \frac{n_s}{g} = \frac{\hbar n_s}{eB}, \quad (2.21)$$

тобто відношення поверхневої концентрації електронів до ступеня виродження кожного з рівнів. Зазвичай коефіцієнт не є цілим числом, але при  $T = 0$  і будь-якому числі повністю заповнених рівнів Ландау (за умови незаповнених всіх інших рівнів) коефіцієнт  $\nu$  буде цілим.



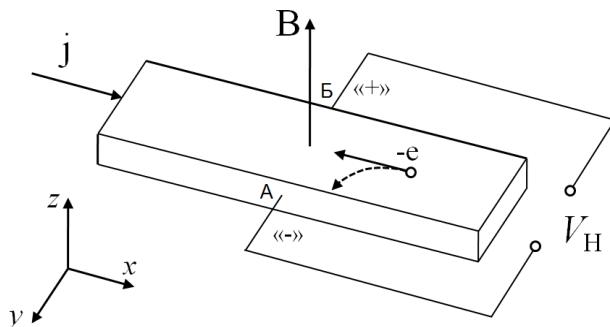
**Рисунок 2.3.** Залежність функції густини станів двовимірного електронного газу від енергії в магнітному полі та за його відсутності. Напрямок прикладеного магнітного поля співпадає з напрямком КЯ, в якому рух носіїв заряду є обмеженим за відсутності магнітного поля.

Значення магнітного поля  $B_N$ , при якому відбувається повне заповнення рівнів Ландау ( $v = N$ ), можуть бути визначені з виразу (2.21):

$$N = \frac{hn_s}{eB_N} \quad \text{або} \quad B_N = \frac{hn_s}{e} \frac{1}{N}, \text{де } N=1,2,3,\dots \quad (2.22)$$

### 2.3. Ефект Холла в об'ємних напівпровідниках

Кінетичні явища, що відбуваються в напівпровідниках за одночасної дії електричного та магнітного полів, називають гальваномагнітними. Вони зумовлені переважно тим, що траєкторії носіїв заряду в магнітному полі є викривленими під дією сили Лоренца.



**Рисунок 2.4.** Ефект Холла в напівпровіднику  $n$ -типу.

Ефект Холла полягає у тому, що при проходженні струму через пластину перпендикулярно до прикладеного магнітного поля виникає поперечна різниця потенціалів (Рис.2.4). За відсутності магнітного поля різниця потенціалів між контактами, розміщеними на еквіпотенціальніх поверхнях А та Б дорівнює нулю. Якщо зразок знаходиться в магнітному полі, орієтованому перпендикулярно до напрямку струму  $j_x$  і

площині зразка, то між поверхнями А і Б виникне різниця потенціалів  $V_H$ , яку називають *холівською електрорушійною силою або ЕРС Холла*.

З експерименту відомо, що ЕРС Холла пропорційна індукції магнітного поля при малих її величинах:

$$V_H = R_H jBd, \quad (2.23)$$

де  $R_H$  - стала Холла,  $d$  - ширина пластини,  $j$  - густина струму в зразку.

Фізичною причиною виникнення ЕРС Холла є дія сили Лоренца:

$$\mathbf{F}_L = (\pm e)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}], \quad (2.24)$$

де знаки «+» та «-» відповідають дірці та електрону, відповідно,  $\mathbf{v}$  - швидкість дрейфу носіїв заряду. Розглянемо для визначеності напівпровідник з  $n$ -типом провідності. При проходженні струму вздовж осі  $x$ , як це показано на Рис.2.4, електрони відхиляються в напрямку до поверхні А, обумовлюючи її від'ємний заряд. З протилежного боку пластини з  $n$ -типом провідності залишається нескомпенсований додатній заряд. Це призводить до появи електричного поля з напруженістю  $\epsilon_H = V_H / a$ , де  $a$  - ширина пластини (відстань між площинами А і Б), яке діє на електрони з силою  $F = (-e)\epsilon_H$ . З умови, що поперечне поле врівноважує дію сили Лоренца, а саме  $F_L = F = (-e)\epsilon_H$ , знаходимо

$$\epsilon_H = vB. \quad (2.25)$$

Враховуючи, що  $v = j / en$ , отримаємо

$$\epsilon_H = \frac{jB}{(-e)n}. \quad (2.26)$$

Порівнюючи отриманий вираз з (2.23) матимемо

$$R_H = -\frac{1}{en}. \quad (2.27)$$

Розглянемо рух дірок в напівпровіднику з  $p$ -типом провідності. Примітно, що дірки рухаються вздовж осі  $x$  і відхиляються магнітним полем в напрямку до контакту A, в тому самому напрямку, що і електрони. З протилежного боку пластини залишається нескомпенсованим від'ємний заряд іонізованих акцепторів. В результаті, знак ЕРС Холла буде протилежним по відношенню до електронного напівпровідника, а стала Холла:

$$R_H = \frac{1}{ep}. \quad (2.28)$$

Для напівпровідника зі змішаним типом провідності, коли концентрації електронів та дірок порівняні між собою, стала Холла розраховується за таким виразом

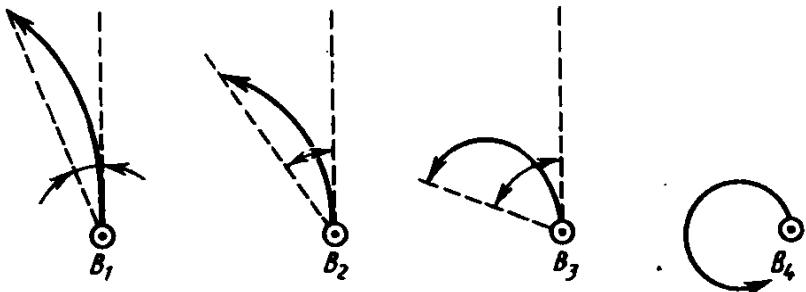
$$R_H = \frac{1}{e} \frac{\mu_p^2 p - \mu_n^2 n}{(p\mu_p + n\mu_n)^2}. \quad (2.29)$$

Ефект Холла в об'ємних напівпровідниках використовують на практиці для вивчення електричних властивостей напівпровідників. Вимірювши сталу Холла можна розрахувати концентрацію носіїв заряду, а за напрямком ЕРС визначити їх знак.

Як було зазначено вище, ЕРС Холла пропорційна індукції магнітного поля при малих її величинах. Критерієм «слабкості» магнітного поля є вимога:

$$B\mu \ll 2\pi, \quad (2.30)$$

що фактично є умовою невеликого викривлення траєкторії носія заряду в магнітному полі за час вільного пробігу. Наприклад, в Ge та Si величини рухливості електронів 0.38 та 0.16 м<sup>2</sup>/(В·с), відповідно, слабкими полями є ті, для яких  $B < 16$  Тл. При зростанні величини  $B$  траєкторія зазнає все більшого викривлення за час вільного пробігу (Рис.2.5), і стала Холла починає залежати від індукції магнітного поля.



**Рисунок 2.5.** Зміни траєкторії руху носія заряду в магнітних полях різної індукції ( $B_1 < B_2 < B_3 < B_4$  ).

### 2.3. Тензор електропровідності в магнітному полі

Розглянемо зразок в якому магнітне поле  $\mathbf{B}$  прикладене в напрямку вісі  $z$ , а електричне поле із напруженістю  $\mathbf{E}$  в довільному напрямку. Рух електрона в магнітному полі можна описати за допомогою рівняння руху:

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{m^* \mathbf{v}}{\tau} + (-e)(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]), \quad (2.31)$$

де  $\tau$  - середній час вільного пробігу електрона, який визначається процесами розсіювання. В рівноважних умовах, коли  $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0$ , можна записати вираз для дрейфової швидкості електрона:

$$\frac{m^* \mathbf{v}_d}{\tau} = (-e)(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]) \quad (2.32)$$

Для трьох компонент швидкості руху  $\mathbf{v}$  вздовж осей  $x, y, z$  можна отримати:

$$\begin{aligned}
 \frac{m^* v_x}{\tau} &= (-e) [E_x + v_y B_z] \\
 \frac{m^* v_z}{\tau} &= (-e) [E_y - v_x B_z] \\
 \frac{m^* v_x}{\tau} &= (-e) E_z
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Помножимо рівняння на  $(-e)n$  і врахуємо, що  $\mathbf{j} = (-e)n\mathbf{v}_d$ . Для зручності введемо позначення:

$$\sigma_0 = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \text{ та } \omega_c = \left| \frac{eB}{m^*} \right| \tag{2.34}$$

де  $\sigma_0$  - провідність при  $B = 0$ ,  $\omega_c$  - циклотронна частота.

Із використанням запропонованих позначень система рівнянь (5.2.3) набуде вигляду:

$$\begin{aligned}
 j_x &= \sigma_0 E_x + \omega_c \tau j_y \\
 j_y &= \sigma_0 E_y - \omega_c \tau j_x \\
 j_z &= \sigma_0 E_z
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

З системи рівнянь (2.35) знайдемо три компоненти густини струму:

$$\begin{aligned}
 j_x &= \frac{\sigma_0}{1 - (\omega_c \tau)^2} (E_x + \omega_c \tau E_y) \\
 j_y &= \frac{\sigma_0}{1 - (\omega_c \tau)^2} (-\omega_c \tau E_x + E_y) \\
 j_z &= \sigma_0 E_z
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

На основі (2.36) можна ввести для електронів узагальнений тензор магнітопровідності  $\bar{\sigma}(B)$  у вигляді:

$$\mathbf{j} = \bar{\sigma} \mathbf{E} \tag{2.37}$$

тобто

$$\begin{cases} j_x = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y + \sigma_{xz}E_z \\ j_y = \sigma_{yx}E_x + \sigma_{yy}E_y + \sigma_{yz}E_z \\ j_z = \sigma_{zx}E_x + \sigma_{zy}E_y + \sigma_{zz}E_z \end{cases} \quad (2.38)$$

або

$$\hat{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau & 0 \\ -\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_c^2 \tau^2 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Таким чином, можна зробити два висновки щодо того, яким чином магнітне поле впливає на транспорт носіїв заряду:

1) провідність в напрямку, перпендикулярному до магнітного поля зменшується в  $[1 + \omega_c^2 \tau^2]$  разів. Відповідне збільшення опору зразка в магнітному полі отримало називу *магнітоопір*. Фізичне пояснення ефекту є таким. У магнітному полі, перпендикулярному напрямку струму, траєкторія руху носія заряду буде являти собою ділянку циклоїди довжиною  $l$  (довжина вільного пробігу) і за час вільного пробігу вздовж поля частинка пройде менший шлях, рівний  $l_x \approx l \left(1 - \frac{\mu B^2}{2}\right)$ . Оскільки за час вільного пробігу носій заряду вздовж прикладеного електричного поля пройде менший шлях, то це еквівалентно зменшенню дрейфової швидкості, а значить зменшенню рухливості і провідності. Величина зростання питомого опору напівпровідника в магнітному полі (магнітоопір) визначається виразом:

$$\Delta \rho(B) = \rho(0) \mu^2 B^2. \quad (2.40)$$

2) магнітне поле індуктує струм в напрямку, перпендикулярному до прикладеного електричного поля. Це призводить до спостереження *ефекту Холла*.

Використовуючи тензор магнітопровідності можна отримати вираз для ЕРС Хола та сталої Хола. Як зазначалось вище, для спостереження ефекту Хола використовують зразок у формі прямокутного бруска, до якого підведені електричні контакти. Нехай електричне поле з напруженістю  $E_x$  спрямоване вздовж вісі  $x$ , а магнітне поле  $B$  вздовж вісі  $z$ . За законом Лоренца носії заряду, які дрейфують в напрямку зазнають  $x$  відхилень в перпендикулярному напрямку  $y$ . Це призводить до появи струму в цьому напрямку, хоча в даному напрямку немає прикладеного електричного поля, а контакти А та Б розімкнені. В результаті заряди протилежних знаків накопичуються на двох різних поверхнях зразка і виникає електричне поле  $E_y$ , яке компенсує дію сили Лоренца. Оскільки контакти розімкнені, то густина електричного поля рівна нулеві  $j_y = 0$ :

$$0 = \sigma_0 E_y + \omega_c \tau j_y \text{ або } E_y = -\frac{\omega_c \tau j_y}{\sigma_0} = -\frac{\frac{eB}{m^*} \tau j_x}{\frac{e^2 n \tau}{m^*}} = -\frac{B j_x}{en}, \quad (2.41)$$

а струм в напрямку  $x$  рівний  $j_x = \sigma_0 E_x$ .

Величинами, які вимірюються експериментально, є  $j_x$ ,  $E_y$  та  $B$ . Тому коефіцієнт Хола вводиться як відношення:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = -\frac{1}{ne}. \quad (2.42)$$

Відзначимо, що знак  $R_H$  залежить від знаку носіїв заряду. Для електронів коефіцієнт Хола є від'ємним. Якщо ж розглянути рух дірок в магнітному полі, то ми прийдемо до того, що коефіцієнт  $R_H$  є додатнім. Таким чином, вимірювання коефіцієнту Хола дозволяє отримати інформацію як про концентрацію основних носіїв заряду, так і про їхній знак в домішковому напівпровіднику.

## 2.4. Провідність двовимірного електронного газу в магнітному полі

Нехай в квантовій ямі рух носіїв заряду обмежений в одному напрямку, вдовж осі  $z$ . Тензор провідності двовимірного електронного газу у в магнітному полі в загальному випадку має вигляд:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

де  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2}$ ,  $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{\sigma_0 \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}$ ,  $\sigma_0 = \frac{e^2 n_s \tau}{m^*}$  - провідність

при  $B = 0$ ,  $n_s$  - поверхнева концентрація електронів в КЯ,  $\omega_c = \sqrt{\frac{eB}{m^*}}$

- класична циклотронна частота.

Вирази для діагональної (дисипативної) та недіагональної (холлівської) компонент тензора електропровідності для квантової можна подати таким чином:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 n_s \tau}{m^* (1 + \omega_c^2 \tau^2)}, \quad (2.44)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 n_s \omega_c \tau^2}{m^* (1 + \omega_c^2 \tau^2)}, \quad (2.45)$$

Проаналізуємо залежності компонент  $\sigma_{xx}$  та  $\sigma_{xy}$  від магнітного поля в області сильних магнітних полів ( $\omega_c \tau \gg 1$ ). В такому випадку:

$$\sigma_{xx} \approx \frac{e^2 n_s}{m^* \omega_c^2} \tau^{-1}, \quad (2.46)$$

$$\sigma_{xy} \approx \frac{e^2 n_s}{m^* \omega_c} = \frac{en_s}{B}. \quad (2.47)$$

Компонента  $\sigma_{xx}$  виявилась пропорційною імовірності розсіювання  $\tau^{-1}$ , а холівська провідність (недіагональна компонента тензора електропровідності) від розсіювання не залежала. Фізично це зумовлено характером руху електронів в схрещених (взаємно перпендикулярних) полях  $E$  та  $H$ . Він є обертанням за коловими орбітами при одночасному дрейфі центра орбіти зі швидкістю  $v_{dp} = \frac{[E \times H]}{H^2}$ . При цьому, середнє зміщення електрона вздовж  $E$  відсутнє і з'являється лише за наявності розсіювання.

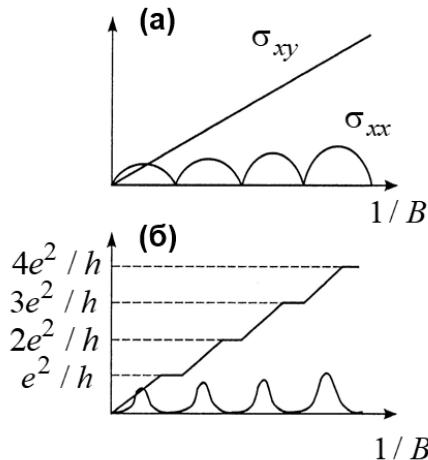
Двовимірний електронний газ в сильних магнітних полях та за низьких температур поводить себе подібно до напівпровідника з шириною забороненої зони, яка дорівнює відстані між сусідніми рівнями Ландау  $\hbar\omega_c$ . Зокрема, якщо рівень Фермі розташований між двома рівнями Ландау за температури  $T < \hbar\omega_c / k$ , то матеріал буде ізолятором. Низька температура необхідна для того, щоб виключити можливість теплового збудження електронів в з  $n$ -го на  $n+1$ -ий рівень. Фізично це означає, що деяка кількість рівнів заповнена електронами, а інші повністю вільні.

Якщо певна кількість рівнів Ландау заповнена електронами, то за принципом Паулі електронних переходів всередині рівнів не може бути. При пружному розсіюванні неможливі також переходи на вільні стани вищих рівнів Ландау, оскільки це потребує додаткової енергії. Тому розсіювання носіїв заряду за умов  $kT \ll \hbar\omega_c$  і  $\omega_c\tau \gg 1$  буде відсутнє, що формально означатиме  $\tau \rightarrow \infty$ . На практиці це матиме місце при індукціях магнітного поля, які визначаються рівнянням (2.22). Як випливає з (2.46), діагональні компоненти  $\sigma_{xx}$  та  $\sigma_{yy}$  в такому випадку гранично наближаються до нуля. Після підстановки величин  $B_N$  у (2.47)

отримаємо недіагональні компоненти тензора електропровідності квантової ями:

$$\sigma_{xy} \approx \frac{e^2 n_s}{m * \omega_c} = \frac{en_s}{B_N} = \frac{e^2}{h} N . \quad (2.48)$$

Розглянемо залежності  $\sigma_{xx}$  та  $\sigma_{xy}$  від індукції магнітного поля. В сильних магнітних полях, як випливає з (2.47), графік залежності  $\sigma_{xy}$  від  $\frac{1}{B}$  буде лінійним з нахилом  $en_s$ . Діагональні компоненти тензора залежать від  $B$  внаслідок того, що імовірність розсіювання пропорційна величині  $\tau^{-1}$ , яка в свою чергу визначається коефіцієнтом заповнення рівня Ландау  $v = hn_s / eB$ . На рис. 2.6,а наведено теоретичні залежності діагональної і недіагональної компонент тензора електропровідності від індукції магнітного поля для ідеального двовимірного електронного газу. Нулі функції  $\sigma_{xx}$  будуть при індукціях магнітного поля, які визначаються виразом (2.22) та відповідають випадкам, коли деяке число рівнів Ландау повністю заповнено електронами, а інші є незаповненими. Реальні експерименти проводять при температурах кілька градусів Кельвіна і магнітних полях порядка 10 Тл, тому імовірність теплового викиду з  $n$ -го на  $n+1$ -ий рівень Ландау повністю виключити не можна. Це призводить до того, що діагональні компоненти при  $B = B_N$  будуть малими, проте відмінними від нуля величинами. В експериментальних роботах описано зменшення провідності в  $10^6$ - $10^7$  разів у порівнянні з величиною при  $B = 0$ . Максимальні значення компоненти  $\sigma_{xx}$  очікуються у випадку, коли розсіювання максимальне, а один з рівнів Ландау наполовину заповнений електронами.



**Рисунок 2.6.** Залежності величин  $\sigma_{xx}$  та  $\sigma_{xy}$  від  $\frac{1}{B}$  в сильних магнітних полях для двовимірного електронного газу: (а) теорія для ідеального випадку, (б) спостережувані експериментально криві.

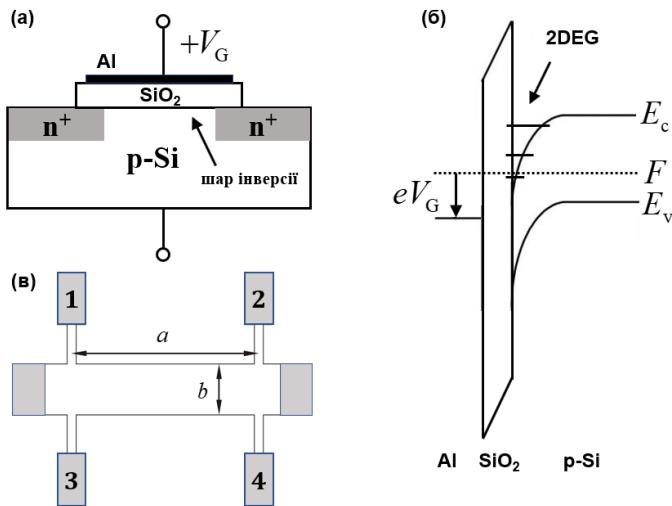
Експериментальна перевірка залежностей (2.46) та (2.47) виявила суттєві розбіжності між теорією і експериментом. Характерною ознакою виявилась рівність нулю діагональної компоненти тензора електропровідності і рівність недіагональної компоненти значенням (2.48) не тільки в окремих точках при  $B = B_N$ , а в достатньо широких інтервалах магнітних полів (Рис. 2.6, б). Таким чином, значення  $\sigma_{xy}$ , які відповідали цим плато, були кратними  $\frac{e^2}{h}$ , тобто не залежали від параметрів зразка, індукції магнітного поля чи температури. Вони визначались тільки світовими константами, які відомі з високою точністю. Відзначимо, що в експерименті для тих самих величин магнітних полів, при яких спостерігається плато для компонент тензора  $\sigma_{xy}$  та  $\sigma_{yy}$ , інші компоненти тензора

електропровідності були близькі до нуля або демонстрували глибокий мінімум в польових залежностях. Відзначимо, що для того, щоб спостерігати плато для  $\sigma_{xy}$  та суттєве зменшення  $\sigma_{xx}$  можна змінювати не тільки індукцію магнітного поля, але й поверхневу концентрацію електронів в квантовій ямі шляхом прикладення різних значень напруги до затвору польового транзистора на основі структури метал-діелектрик-напівпровідник з двовимірним електронним газом. За відкриття цих особливостей, які отримали називу цілочисловий ефект Холла, К. фон Клітцингу в 1985 р. була присуджена Нобелевська премія. Деталі експерименту та фізична модель квантового ефекту Холла буде описана в наступному параграфі.

## **2.5. Цілочисловий квантовий ефект Холла**

Як вже зазначалось, зміна індукції магнітного поля  $B$  або поверхневої концентрації  $n_s$  призводить до зміни кратності виродження рівнів Ландау, що може в свою чергу впливати на процеси переносу. Типовою структурою для спостереження цілочислового ефекта Холла в квантових ямах є структура метал-діелектрик-напівпровідник (МДН), яка являє собою плоский конденсатор, обкладинками якого є шари металу і напівпровідника. На Рис.2.7 наведена МДН-структурата, виготовлена на підкладці монокристалічного кремнію р-типу, що вкрита шаром діоксиду кремнію. Роль затвору відіграє алюмінієвий електрод. Після прикладення додатньої напруги  $V_G$  між електродом та підкладкою в приповерхневій області напівпровідника утворюється потенціальна яма для електронів і виникає тонкий шар інверсії з підвищеною (у порівнянні з об'ємом напівпровідника) концентрацією електронів

проводності. В такій системі зміна прикладеної напруги дозволяє варіювати концентрацію електронів в квантовій ямі.



**Рисунок 2.7.** МДН-структурата, виготовлена на підкладці монокристалічного кремнію р-типу (а), її енергетична діаграма (б), вид зверху та схема виготовлення електродів для вимірювання ефекта Холла.

Слід відзначити, що в багатьох експериментах зазвичай через зразок пропускають заданий струм і вимірюють різницю потенціалів між електродами 1 – 2 і 1 - 3. Після чого визначають величини

$$\rho_{xy} = \frac{U_{12}}{J_x} \frac{a}{b}, \quad (2.49)$$

$$\rho_{xx} = \frac{U_{13}}{J_x}, \quad (2.50)$$

де  $U_{12}$ ,  $U_{13}$  - різниця потенціалів між електродами 1 – 2 і 1 - 3, відповідно,  $J_x$  - сила струму через зразок,  $a$  - відстань між електродами 1 – 2,  $b$  - ширина зразка.

Тензор питомої провідності є оберненим до тензора електропровідності, а компоненти обох тензорів зв'язані співвідношеннями:

$$\sum_{\beta} \rho_{i\beta} \sigma_{\beta j} = \delta_{ij}, \quad (2.51)$$

де  $i, j, \beta = x, y$ ,  $\delta_{ij}$  - символ Кронекера.

Розв'язок системи рівнянь (2.51) дозволяє отримати співвідношення:

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2}, \quad (2.52)$$

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2}. \quad (2.53)$$

Ці величини в областях холівського плато рівні

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2} = 0, \quad (2.54)$$

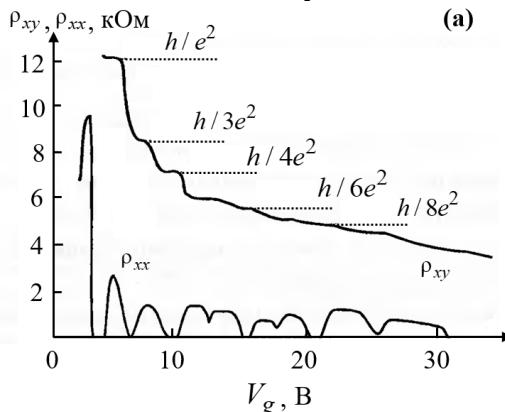
$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{N}, \quad (2.55)$$

тобто діагональна компонента тензора питомого опору дорівнює нулеві, а недіагональна компонента приймає дискретні значення.

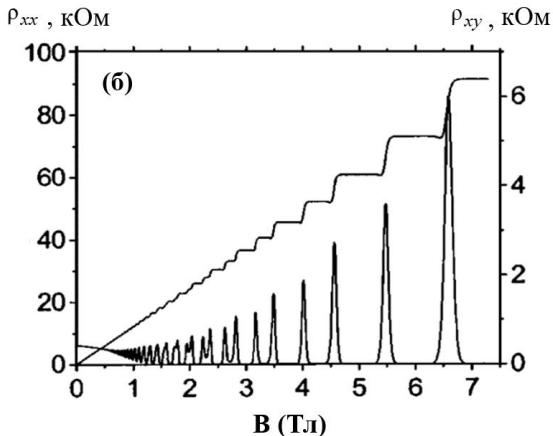
На Рис. 2.8 наведена експериментальна залежність компонент тензора питомого опору від напруги на затворі МДН-структурі на основі Al-SiO<sub>2</sub>-pSi, виміряна при  $B=18,9$  Тл і  $T=1,5$  К. Виявилося, що залежність холівського опору (компоненти  $\rho_{xy}$ ) має сходинковий характер, причому значення на плато не залежать ні від властивостей матеріалу, ні від величини струму чи температури, а визначається лише світовими константами – зарядом електрона та сталою Планка. Діагональна компонента тензора має оцилюючий характер. При тих значень напруги на затворі польового транзистора, де спостерігається плато на

залежності  $\rho_{xy} = f(V_g)$ , величина  $\rho_{xx}$  демонструє мінімальні значення. Експерименти показали, що відношення максимальних до мінімальних значень досягає  $10^7$  разів.

Двовимірний електронний газ можна також сформувати, наприклад, в гетероструктурі квантовою ямою InAs в оточенні AlSb або в гетероструктурі. В таких структурах концентрація носіїв заряду визначається рівнем легування квантової ями. Зміна магнітного поля впливає на відстань між рівнями Ландау та на кратність їх заповнення електронами.



**Рисунок 2.8.** Залежність компонент тензора питомого опору від напруги на затворі, виміряна при  $B=18,9$  Тл і  $T=1,5$  К.

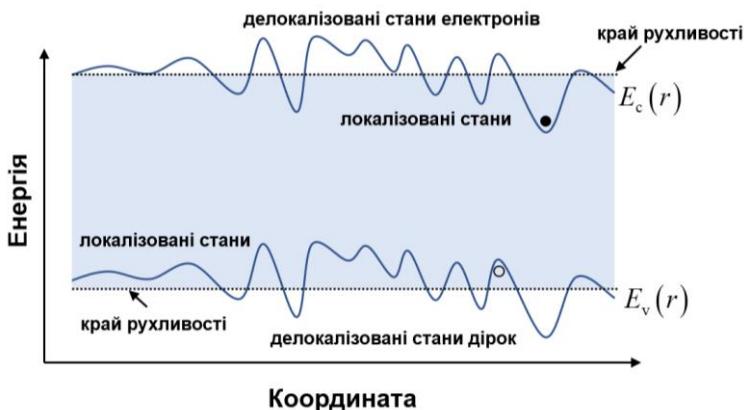


**Рисунок 2.9.** Залежність компонент тензора питомого опору від індукції магнітного поля для квантової ями InAs в оточенні AlSb, вимірюя при температурі  $T=70$  мК.

Наведені моделі ціличислового ефекта Холла передбачають дискретні значення холівського опору (компонента  $\rho_{xy}$ ) та нульові значення  $\rho_{xx}$  при  $B = B_N$ , проте не дають пояснення наявності «плато» Холла, тобто постійності значень  $\rho_{xy}$  при достатньо великих діапазонах зміни індукції магнітного поля (Рис.2.8) або поверхневої концентрації носіїв заряду (Рис.2.9). Їх наявність можна пояснити впливом локалізованих електронних станів, які є наслідком розупорядкованості (неоднорідності) кристалічної решітки, що призводить до флюктуацій електростатичного потенціалу.

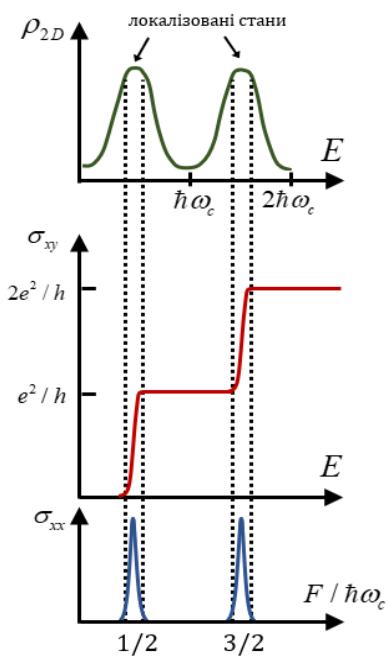
У загальному випадку можна виокремити два типи неоднорідностей. До першого типу відносять неоднорідності, що викликають флюктуації ширини забороненої зони. Такі просторові флюктуації можуть бути зумовлені неоднорідним розподілом механічних напружень, зміною складу кристала, флюктуаціями ширини ями (енергії розмірного квантування).

У неоднорідностях другого типу ширина забороненої зони для різних областей кристала вважається сталою, а положення дна зони провідності та вершини валентної зони однаковим чином змінюється в координатному просторі (рис.2.10). Найпростішим прикладами є флюктуації потенціалу, спричинені випадковим розташуванням іонізованих домішок в кристалі, неоднорідності діелектричного шару МДН структури та шорсткість поверхні напівпровідника. Зазвичай можна вважати, що зміни потенціалу, зумовленого неідеальністю кристалічної решітки відбуваються в просторі значно повільніше у порівнянні з періодом внутрішньокристалічного поля.



**Рисунок 2.10.** Викривлення зон напівпровідника випадковим електричним полем.

В ідеальному кристалі будь-який стан в зоні є делокалізованим, тобто електрони, які в них перебувають, можуть вільно рухатись по всьому матеріалу. За наявності неоднорідностей, електрони (дірки), які заповнюють стани поблизу локальних мінімумів (максимумів) потенціального профілю та можуть бути обмежені в певній області зразка (Рис.2.10). Границя між локалізованими і делокалізованими станами отримала назву «край рухливості». Основні уявлення



**Рисунок 2.11.** Схематичне зображення графіка функції густини станів і осциляцій компонент тензора електропровідності залежно від положення рівня Фермі для квантової ями в сильному

локалізовані стани. Внесок електрони, що заповнюють делокалізовані стани. В інтервалі концентрації носіїв заряду, коли рівень Фермі розташований а області локалізованих станів між рівнями Ландау, число заповнених делокалізованих станів не змінюється, а тому й величина  $\rho_{xy}$  залишається також сталою. Наведені міркування пояснюють сам факт спостереження плато, проте жодним чином

про локалізовані стани були сформульовані Андерсоном в 1958 р. Ними можна скористатись для опису функції густини станів неідеальної двовимірного електронного газу в магнітному полі. Для ідеальної квантової ями в магнітному полі вона матиме вигляд експонентно розташованих  $\delta$ -функцій. Випадковий потенціал знімає виродження і призводить до гаусового закону розподілу функції густини станів, яка

$$\text{пропорційна } \sim \exp\left[\frac{E - E_N}{\Gamma}\right]^2,$$

де  $E_N$  - енергія рівня Ландау,  $\Gamma$  - параметр, який характеризує ширину піка (рис.2.11). На рисунку наведені також «крайя рухливості», які розділяють делокалізовані та

в провідність вносять лише

електрони, що заповнюють делокалізовані стани. В інтервалі концентрації носіїв заряду, коли рівень Фермі розташований а області локалізованих станів між рівнями Ландау, число заповнених делокалізованих станів не змінюється, а тому й величина  $\rho_{xy}$  залишається також сталою. Наведені міркування пояснюють сам факт спостереження плато, проте жодним чином

не дають відповіді на питання якою буде величина провідності для них. Дійсно, якщо делокалізованою є лише частина електронів, то в усіх формулах, зокрема у (2.48), замість  $n_s$  слід підставити концентрацію делокалізованих станів. Проте, більш детальні розрахунки показали, що внаслідок взаємодії електронів з випадковим потенціалом дрейфова швидкість зростає таким чином, що ця формула залишається справедливою в загальному випадку, тобто має універсальний характер.

## **2.6. Балістичний транспорт**

В об'ємних матеріалах руху носіїв заряду в електричному полі зазвичай розглядається за умови, коли розміри зразка значно перевищують довжину вільного пробігу носіїв заряду. В сучасних електронних пристроях, наприклад в польових транзисторах, відстань сток-виток є величиною порядку десятків нанометрів. За таких умов електрони в каналі транзистора прискорюються практично без зіткнень. Такі електрони отримали назву *балістичних*, а їх дрейфові швидкості можуть досягати значень порядку  $10^7$  см/с, що в кілька разів перевищує дрейфову швидкість насичення для об'ємних напівпровідників.

Найпростіший спосіб опису поведінки вільних носіїв заряду у зовнішньому електричному полі полягає у тому, щоб розглядати їх як частинки, що здійснюють хаотичний тепловий рух, на який при ввімкненні електричного поля накладається спрямований рух – *дрейф*. Зовнішня сила, яка на діє носії заряду, впорядковує рух, а процеси розсіювання прагнуть цей рух розвпорядкувати. За відсутності процесів розсіювання зовнішнє електричне поле з напруженістю  $F$  надає носіям заряду прискорення:

$$a = \frac{qF}{m_*}, \quad (2.56)$$

а значить величина квазіімпульсу мала б зростати до нескінченості. В реальних напівпровідниках рухомі носії заряду зазнають багатьох зіткнень (з домішковими атомами, фононами і т.п.). Такі процеси розсіювання в напівкласичній моделі можуть

розглядатись як деяка сила «тертя»  $F_{\text{tp}} = -\frac{m^* v_d}{\tau}$ , що протидіє

руху. В такому наближенні можна записати другий закон Ньютона у вигляді:

$$m^* \frac{dv_d}{dt} = qF - \frac{m^* v_d}{\tau}, \quad (2.57)$$

що формально описує рух носія заряду з ефективною масою  $m^*$  із дрейфовою швидкістю  $v_d$ . Останній вираз записано з врахуванням того, що сила тертя пропорційна дрейфовій швидкості, а характерний параметр  $\tau$ , що має назву характерний час релаксації, фактично визначає той часом, за який дрейфова швидкість носія заряду спаде в  $e$  разів після вимкнення електричного поля. Закон зменшення дрейфової швидкості після вимкнення поля в момент  $t = 0$  визначається рівнянням:

$$v_d = v_d(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (2.58)$$

З рівняння (2.57) випливає, що в стаціональному стані (тобто при русі, коли сума зовнішніх сил, які діють на носій заряду, а значить і  $\frac{dv_d}{dt}$  рівні нулю) дрейфова швидкість є сталою величиною і визначається виразом:

$$v_d = \frac{q\tau}{m^*} F = \mu F. \quad (2.59)$$

Коефіцієнт пропорційності між дрейфовою швидкістю та величиною напруженості електричного поля назвали рухливістю:

$$\mu = \frac{q\tau}{m^*} . \quad (2.60)$$

Виходячи з виразу (2.60) можна записати вирази для рухливості електронів  $\mu_e$  та дірок  $\mu_h$  як:

$$\mu_e = \frac{q\tau_e}{m_e^*} \text{ та } \mu_h = \frac{q\tau_h}{m_h^*} , \quad (2.61)$$

де  $m_e^*$  та  $m_h^*$  - ефективні маси електронів та дірок, відповідно.

**Таблиця 2.1.**

Величини рухливостей електронів та дірок для різних напівпровідників.

	$\mu_e$	$\mu_h$ , $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$
Si	1300	500
Ge	4500	3500
GaAs	8800	400
GaN	300	180
InSb	77 000	750
InAs	33 000	460
InP	4600	150
ZnO	230	8

Рухливість носіїв зарядів залежить від механізму їх розсіювання в кристалічній решітці. Рухливості електронів і дірок в напівпровіднику мають різне значення ( $\mu_e > \mu_h$ ) і, як буде показано нижче, визначаються температурою, концентрацією домішок і типом процесів розсіювання. Знаючи рухливість і концентрацію носіїв зарядів у напівпровіднику, можна легко визначити його питому електропровідність ( $\sigma$ ) як:

$$\sigma = q(n\mu_e + p\mu_h) , \quad (2.62)$$

де  $n$  та  $p$  - концентрації електронів та дірок, відповідно. Останній вираз є наслідком того, що в напівпровідниках внесок у струм дають як електрони, так і дірки. Типові величини

рухливостей напівпровідників при кімнатній температурі наведено в табл. 3.1.

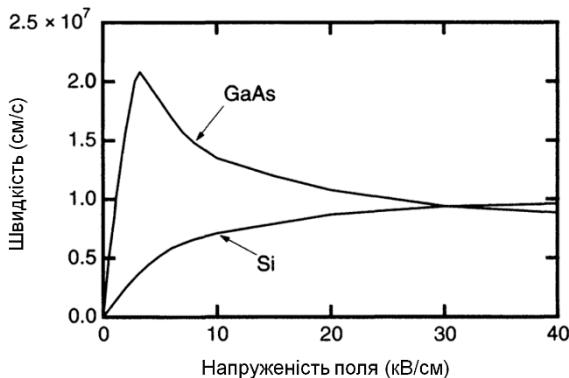
При описі процесів переносу ми розглядали випадок впливу на напівпровідник слабкого електричного поля, коли струм через кристал підпорядковується закону Ома:

$$j = \sigma E = q(n\mu_e + p\mu_h)E. \quad (2.63)$$

При означенні рухливості як коефіцієнта пропорційності між дрейфовою швидкістю та величиною напруженості електричного поля на підставі виразу (2.59) вважалось, що величина  $\mu$  не залежить від швидкості електрона, а значить і напруженості електричного поля. Електричні поля, в яких виконується така умова (а отже і закон Ома) називають *слабкими*.

Для більшості напівпровідників закон Ома перестає виконуватись при електричних полях, які перевищують  $10^4$  В/см. Фізично це пов'язано з тим, що електричне поле збільшує теплову швидкість електронів на деяку величину. Слабким полям відповідають рівноважні стани, коли кристалічна решітка отримує від рухомих носіїв заряду стільки енергії, скільки їм віддає. У рівноважному стані температура носіїв заряду  $T_e$  збігається з температурою кристалічної решітки  $T$ . Якщо ж швидкість набуття енергії носіями вища за швидкість, з якою вони віддають енергію решітці, то порушується стан теплової рівноваги між носіями заряду та решіткою. Розрізняють кілька нерівноважних випадків. Носії заряду можуть перебувати в тепловій рівновазі між собою, але не з решіткою. Тоді можна стверджувати, що носіїв перебувають в квазітепловій рівновазі, їх розподіл характеризується розподілом Фермі-Дірака з температурою, відмінною від температури зразка (решітки). Оскільки температура носіїв вища за температуру решітки,  $T_e > T$ , то їх називають *гарячими*. Може бути реалізований й інший випадок, коли носії заряду не можуть бути описані рівноважним розподілом Фермі-Дірака і, як наслідок, не можуть бути

охарактеризовані певною температурою. Називати такі носії заряду гарячими некоректно. Більш точна їх назва – нерівноважні носії.



**Рисунок 2.12.** Залежність дрейфової швидкості електронів від напруженості електричного поля для GaAs і Si.

Властивості гарячих електронів відрізняються від властивостей рівноважних (теплових) носіїв заряду. Одним з прикладів є залежність дрейфової швидкості електронів від напруженості електричного поля для GaAs і Si (Рис.2.12). Для величин напруженості електричного поля  $F < 10^3 \text{ В/см}$  дрейфова швидкість лінійно зростає при збільшенні електричного поля, тобто виконується закон Ома, а рухливість не залежить від  $F$ . В Si при більш сильних полях зростає з полем сублінійно і перестає залежати від поля при величині напруженості  $F \sim 10^7 \text{ В/см}$ . Такий ефект називають *насиченням дрейфової швидкості* носіїв заряду в сильних електрических полях. В  $n$ -GaAs має місце більш складна залежність: швидкість має максимум, а величина  $v_d$  перевищує відповідну величину в області насичення. Даний ефект спостерігається для таких напівпровідників, як GaAs, InP та InGaAs, і має назву ефект перевищення швидкості. В  $n$ -GaAs при

полях в діапазоні від  $3 \cdot 10^3$  В/см до  $2 \cdot 10^5$  В/см швидкість електронів спадає при збільшенні напруженості електричного поля, наслідком чого є спостереження *від'ємного диференційного опору*. Фізичне пояснення ефекту буде наведено нижче.

Пояснимо ефект насичення швидкості. Його спостереження означає, що в сильних полях енергія носіїв заряду більше не зростає з електричним полем. Таким чином, повинен існувати ефективний механізм втрат енергії, який стає домінуючим при великих її середніх значеннях  $\langle E \rangle$ . Найбільш імовірно, що таким механізмом є розсіювання на оптичних фононах. Можна уявити таку модель явища. При слабких полях домінує пружне розсіювання на акустичних фононах, що призводить до релаксації імпульсу носіїв заряду. Розподіл носіїв заряду за швидкостями залишається симетричним, проте зміщеним на величину  $v_d$ . При подальшому підвищенні напруженості поля величина  $\langle E \rangle$  стає достатньою для того, щоб деякі носії зі швидкістю, більшою за середнє значення, почали непружно розсіюватись на оптичних фононах. Це призводить до спотворення симетричного розподілу за швидкостями, і сублінійного зростання  $\langle E \rangle$  з полем. При збільшенні поля все більша частина носіїв заряду зазнаватиме непружного розсіювання. За умови, коли швидкість набуття кінетичної енергії носіями заряду врівноважується швидкості втрат за рахунок випромінювання оптичного фонона з енергією  $\hbar\omega_{\text{opt}}$  дрейфова швидкість перестає залежати від напруженості електричного поля. При цьому, рух носіїв заряду стає таким: відразу після випромінювання фонона електрон опиняється в центрі зони Бріллюена при  $k = 0$ , і знову починає прискорюватись, а величина  $k$  зростає за законом:

$$k(t) = \frac{qF}{\hbar} t. \quad (2.64)$$

Такий прискорений рух відбуватиметься доти, поки енергія електрона не стане рівною  $\hbar\omega_{\text{opt}}$ :

$$\frac{\hbar^2 k_{\text{rp}}^2}{2m_e^*} = \hbar\omega_{\text{opt}} \quad (2.65)$$

або дрейфова швидкість не досягне величини

$$v_{\max} = \frac{\hbar k_{\text{rp}}}{m_e^*} = \sqrt{\frac{2\hbar\omega_{\text{opt}}}{m_e^*}} \quad (2.66)$$

В результаті, розподіл електронів за швидкостями стає рівномірним між  $v=0$  та  $v=v_{\max}$ , а середня швидкість рівною

$$\langle v \rangle = \frac{v_{\max}}{2} \text{ і незалежною від величини електричного поля.}$$

Розглянемо часову залежність дрейфової швидкості (максимальної дрейфової швидкості) в динамічному режимі в наноструктурах, коли довжина вільного пробігу носіїв заряду набагато більша за розмір системи. Прикладемо до наноструктури електричне поле у вигляді прямокутного імпульса тривалістю, яка менша за середній час між зіткненнями в даному матеріалі. Протягом дії імпульса електричного поля  $t$  електрон набуде швидкості, яка визначається виразом:

$$v_d = \frac{qF}{m_e^*} t, \quad t < \tau. \quad (2.67)$$

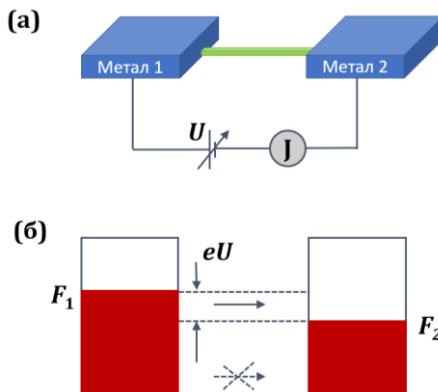
Таким чином, можна очікувати, що в сильних електрических полях швидкість  $v_d$  досягне величин, значно більших за граничні величини  $v_{\max}$ , що спостереються у випадку дії більш тривалого імпульсу, коли впливають механізми розсіювання. Таке явище називають ефектом спалаху дрейфової швидкості, використання якого дозволяє підвищити високочастотні характеристики транзисторів.

## 2.7. Квантова провідність. Формула Ландауера

Розглянемо процеси переносу в квантових нитках, довжина яких набагато менша за середню довжину вільного пробігу електронів. За таких умов рух електронів буде мати балістичний характер, тобто відбудуватиметься без розсіювання. Нехай квантова нитка має ідеальні металеві електроди, приєднані до двох резервуарів електронів, які характеризуються рівнями Фермі  $F_1$  та  $F_2$ . Прикладення різниці потенціалів  $U$  між ними обумовить появу струму  $J$ , внесок в який за низьких температур будуть давати лише носії заряду, які заповнюють енергетичні рівні в інтервалі енергій (див. Рис.2.13)

$$F_1 < eU < F_2. \quad (2.68)$$

Поза цим інтервалом в обох металах енергетичні стани або незаповнені електронами (при  $E > F_1$ ) або повністю заповнені (при  $E < F_2$ ). Неможливість тунелювання електронів між заповненими станами пояснюється принципом Паулі.



**Рисунок 2.13.** (а) Електрична схема ввімкнення одновимірної структури (квантової нитки) для спостереження квантованої провідності. (б) Енергетична діаграма системи метал – квантова нитка – метал.

Величина внеску в загальний струм електронів підзони  $nm$  розмірного квантування КН буде визначатись виразом

$$J = en_{\text{ID}}v_d = \frac{1}{2}e\rho_{\text{ID}}(E)v_d eU, \quad (2.69)$$

де  $\rho_{\text{ID}}(E)$  - енергетична функція густини станів КН, яка описується виразом (1.45),  $v_d$  - дрейфова швидкість. За умови балістичного руху енергія електрона зв'язана з дрейфовою швидкістю як

$$E - E_{nm} = \frac{m_e^* v_d^2}{2}. \quad (2.70)$$

Коефіцієнт  $1/2$  у виразі (2.69) обумовлений тим, в розглядуваній системі електрони можуть рухатись лише в одному напрямку, тобто слід врахувати тільки половину станів з  $k > 0$ . Як наслідок, вираз (2.69) набуде вигляду:

$$J = \frac{1}{2}e \frac{\sqrt{2m_e^*}}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{E - E_{nm}}} \sqrt{\frac{2(E - E_{nm})}{m_e^*}} eU \quad (2.71)$$

або

$$J = \frac{2e^2}{h} U. \quad (2.72)$$

Провідність ( $G = J / U$ ), при цьому, становить

$$G = \frac{2e^2}{h} \quad (2.73)$$

і не залежить від довжини провідника (навідміну від класичної провідності, обернено пропорційній довжині провідника). Відношення

$$G_0 = \frac{e^2}{h} \quad (2.74)$$

називають квантовою одиницею провідності, а обернену величину

$$R_0 = \frac{h}{e^2} = 25.812807 \text{ Ом} \quad (2.75)$$

квантовим опором.

Слід відзначити, що наведений вище розгляд передбачав рух електронів в КН, які перебували в енергетичних станах лише однієї з підзон розмірного квантування. Враховуючи можливість інжекції електрона в одну з підзон КН і подальший його перехід в іншу підзону (паралельний канал провідності) можна узагальнити вираз (2.73) таким чином:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m}^N |t_{nm}|^2, \quad (2.76)$$

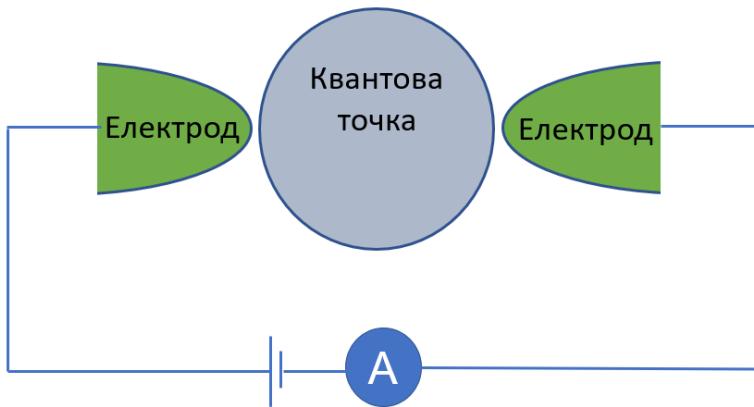
де  $|t_{nm}|^2$  - імовірність інжекції електрона з контакту в  $m$ -ий канал провідності і після взаємодії з розсіючим центром опинитись в каналі  $n$ ,  $N$  - повна кількість каналів провідності.

В першому експерименті щодо виявлення квантування провідності, проведенному Візом у 1988 році [van Wees B.J. (1988), Phys.Rev.Lett., 60, 848], були використані квантові точкові контакти в гетероструктурі AlGaAs/GaAs. При зміні напруги між електродами змінювалась кількість каналів провідності, що в свою чергу призводило до її стрибкоподібної зміни з кроком, рівним  $\frac{2e^2}{h}$ .

## 2.8. Кулонівська блокада

Як відомо, в електронних пристроях густота струму знижується при зменшенні його розмірів. При переході до нанорозмірних пристройів постає питання про можливі межі зазначененої тенденції, про те, що буде відбуватись якщо розглянатимутися струми, які створюються одним електроном. Розглянемо напівпровідникову наноструктуру, квантову точку,

до якої приєднано два металеві електроди. При цьому електрони можуть потрапляти в нанооб'єкт (або виходити з нього) шляхом квантово-механічного тунелювання крізь потенціальні бар'єри при контактної області. На Рис.2.14 наведена схема такого експерименту.



**Рисунок 2.14.** Схема експерименту для спостереження кулонівської блокади.

Нехай між електродами зовнішнім джерелом створена різниця потенціалів  $U$ . Електростатична енергія системи становить:

$$E = \frac{Q^2}{2C}, \quad (2.77)$$

де  $Q$  - заряд наноструктури. Внаслідок дискретності заряду мінімальна зміна енергії системи

$$\Delta E = \frac{e^2}{2C}, \quad (2.78)$$

де  $e$  - елементарний заряд електрона.

Тунелювання електрона є можливим за умови, якщо надати електрону енергію  $eU$  більшу за величину  $\Delta E$ :

$$eU \geq \Delta E = \frac{e^2}{2C} \quad (2.79)$$

Таким чином, при придених напругах

$$-\frac{e}{2C} < U < \frac{e}{2C} \quad (2.80)$$

тунелювання неможливе. На вольт-амперній характеристиці структури струм у цьому діапазоні напруг відсутній. Даний ефект отримав назву **кулонівська блокада** – явища відсутності струму при прикладанні напруги до тунельного переходу внаслідок кулонівського відштовхування.

Для спостереження кулонівської блокади необхідно також, щоб мінімальна зміна енергії була більшою за температурні флюктуації:

$$\Delta E = \frac{e^2}{2C} \gg kT . \quad (2.81)$$

З останнього виразу можна отримати величину ємності, для якої ефект можливий за температури  $T$ :

$$C \ll \frac{e^2}{2kT} . \quad (2.82)$$

Наприклад, при температурі 4.2 К ємність повинна бути набагато меншою за  $10^{-16}$  Ф, при температурах 77 К та 290 К -  $10^{-17}$  Ф і  $3 \cdot 10^{-18}$  Ф, відповідно. Крім того, для спостереження ефектів, зумовлених рухом одного електрона (одноелектронне тунелювання) необхідно, щоб їх кількість не зазнавала флюктуацій в рівноважному стані. Для оцінки припустимо, що час переходу електрона в наноструктуру або виходу з неї має порядок  $\Delta t \sim RC$ , де  $R$  - еквівалентний опір бар'єру. Виходячи з принципу невизначеності можна записати спiввiдношення:

$$\Delta E \Delta t = \frac{e^2}{2C} RC > h, \quad (2.83)$$

звідки отримаємо умову спостереження кулонівської блокади:

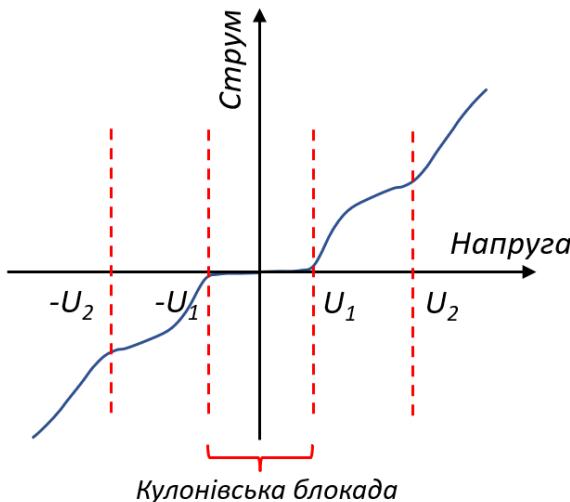
$$R > \frac{h}{e^2} = 25.8 \text{ k}\Omega. \quad (2.84)$$

Проаналізуємо форму вольт-амперної характеристики. При прикладених напругах поза діапазону (2.80) через структуру протікає струм  $i$ , загалом, наноструктура може містити  $n$  електронів. В такому випадку зміна енергії системи становить:

$$\Delta E = \frac{((n+1)e)^2}{2C} - \frac{(ne)^2}{2C} = \frac{e^2}{2C}(2n+1). \quad (2.85)$$

При значеннях напруги  $U_n = \frac{e}{2C}(2n+1)$  величина струму буде

змінюватись стрибком, а вольт-амперна характеристика буде мати сходинкоподібний вигляд, який називають **кулонівською сходинкою** (рис.2.15).



**Рисунок 2.15.** Вольт-амперна характеристика квантової точки (наноструктури).

Описаний вище підхід є спрощеним і не здатен описати експериментальні ВАХ з кількох причин. По-перше, нанооб'єкти є поляризовані електричним полем зарядів домішок та дефектів в їх найближчому оточенні, який можна охарактеризувати деякою усередненою величиною  $Q_0$ , яка, загалом, не є кратною елементарному заряду  $e$ . По-друге, нанооб'єкт зв'язаний з металевими електродами і еквівалентна схема тунельного переходу «електрод-нанооб'єкт-електрод» містить дві бар'єрні ємності  $C_1$  та  $C_2$  та опори бар'єрів  $R_1$  та  $R_2$ . В такому випадку вираз (2.77) набуде вигляду:

$$E = \frac{(ne + Q_0)^2}{2(C_1 + C_2)}. \quad (2.86)$$

Зміна енергії системи при додаванні одного електрона становить:

$$\Delta E = \frac{((n+1)e + Q_0)^2}{2(C_1 + C_2)} - \frac{(ne + Q_0)^2}{2(C_1 + C_2)} = \frac{e^2}{2(C_1 + C_2)} \left( 2n + 1 + \frac{2Q_0}{e} \right). \quad (2.87)$$

З останнього виразу випливає, що при

$$Q_0 = -\frac{e}{2}(2n+1) \quad (2.88)$$

величина  $\Delta E = 0$ , а значить при таких величинах індукованого заряду буде відсутня зміни електростатичної енергії системи при протіканні струму через наноструктуру.

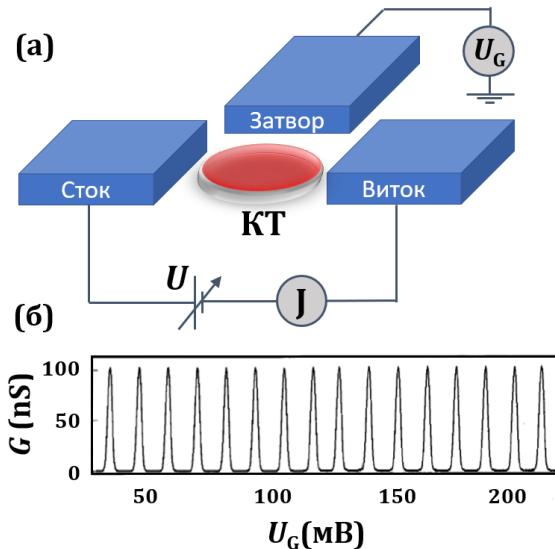
На основі явища кулонівської блокади виявилось можливим розробити новоий класу пристроїв – одноелектронних транзисторів і пристроїв на їх основі. На рис. 2.16,а наведений приклад одноелектронного транзистора, що складався з наноструктури (квантової точки), тунельно-зв'язаної з двома

електродами (сток і виток). Затвор використовують для зміни індукованого в КТ заряду на величину

$$\Delta Q_0 = C_G U_G, \quad (2.89)$$

де  $C_G$  - емність системи затвор-КТ,  $U_G$  - напруга на затворі.

Навідміну від заряду, пов'язаного з рухом електронів від витоку до стоку через квантову точку, цей заряд може змінюватись неперервно.



**Рисунок 2.16.** Схема одноелектронного транзистора (а) та залежність струму в його каналі від напруги на затворі (б).

Розглянемо випадок, коли між стоком і витоком прикладена невелика різниця потенціалів такої величини, що виконується умова кулонівської блокади і струм відсутній. Проте, підлаштувавши напругу на затворі можна досягнути випадку, коли  $\Delta E = 0$ . За такої умови, електрон буде здатен тунелювати через наноструктуру і буде рееструватись струм в каналі

транзистора. Таким чином, з умови (2.88) випливає, що електрони будуть тунелювати в КТ кожен раз, коли напруга на затворі зміниться на величину

$$\Delta U_G = e / C_G. \quad (2.90)$$

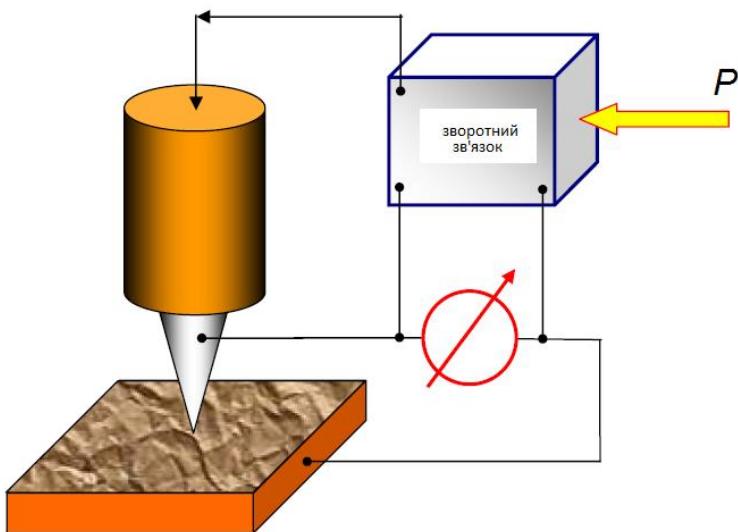
Як наслідок, провідність каналу транзистора буде оцилювати при зміні напруги на затворі (Рис.2.16,б).

## 2.9. Атомно-силова мікроскопія

Атомно-силова мікроскопія (ACM) є одним з методів дослідження морфології та локальних властивостей поверхні твердого тіла з високою просторовою роздільною здатністю.

В скануючих зондових мікроскопах дослідження мікрорельефу поверхні та її локальних властивостей проводиться за допомогою спеціальним чином приготуваних зондів у вигляді голок. Робоча частина таких зондів (голок) має розміри порядку десяти нанометрів. Характерна відстань між зондом та поверхнею зразків в зондових мікроскопах за порядком величини складає 0,1 – 10 нм.

Розглянемо основні характеристики, властиві різним типом атомно-силових мікроскопів. Нехай взаємодія зонда з поверхнею характеризується деяким параметром  $P$ . За умови, якщо існує різка і однозначна залежність даного параметра від відстані зонд-поверхня  $P = f(z)$ , то цей параметр може бути використаний для організації системи зворотного зв'язку, яка дозволить контролювати відстань між зондом та досліджуваною поверхнею. Принципова схема зворотного зв'язку скануючого зондового мікроскопа наведена на рис. 2.17.



**Рисунок 2.17.** Схема зворотного зв'язку скануючого зондового мікроскопа.

Система зворотного зв'язку підтримує значення параметра  $P$  сталою. Якщо відстань між зондом та поверхнею змінюється, то відбувається й відповідна зміна параметру зворотного зв'язку. Величина зміни параметра  $\Delta P$  підсилюється до потрібного значення і подається на керуючий елемент, який наближає (віддаляє) зонд до поверхні до тих пір, поки різницевий сигнал  $\Delta P$  не стане рівним нулю. В результаті можна контролювати відстань між зондом та досліджуваною поверхнею з високою точністю порядка  $\sim 0.01 \text{ \AA}$ . При переміщенні зонда вздовж поверхні зразка відбувається зміна параметра взаємодії  $P$ , зумовлена рельєфом поверхні. Система зворотного аналізує ці зміни в такий спосіб, що сигнал на керуючому елементі виявляється пропорційний рельєфу поверхні.

Для отримання зображення поверхні здійснюють процес сканування, при якому зонд рухається над поверхнею вздовж

певної лінії. При цьому, величина сигналу на керуючому елементі записується в пам'ять комп'ютера. Після цього зонд повертається в вихідну точку і переходить на наступний рядок сканування і процес повторюється. Записаний в такий спосіб сигнал зворотного зв'язку опрацьовується і будується комп'ютерне зображення рельєфу поверхні  $Z = f(x,y)$

В основу роботи атомно-силового мікроскопа покладена сила взаємодія між зондом та поверхнею, для реєстрації якої використовують зондові датчики у формі пружної консолі з вістрям (рис. 2.18). Сила, яка діє з боку досліджуваної поверхні на зонд, призводить до вигину консолі. Реєстрація величини вигину робить можливим контроль сили взаємодії зонда з поверхнею, а отже й аналіз рельєфу поверхні за допомогою системи зворотного зв'язку.

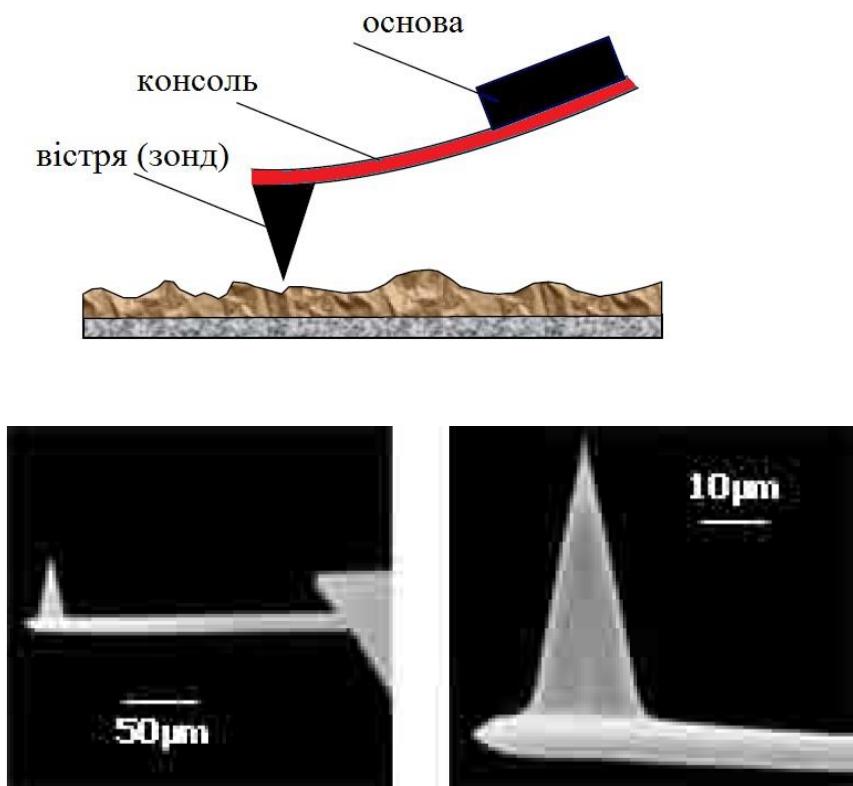
Контроль величини вигину консолі зонда здійснюється за допомогою лазера та чотирьохквадрантного фотодіода (рис.2.19). Оптична система лазер + фотодіод налаштовується таким чином, щоб випромінювання напівпровідникового лазера фокусувалось точно в центрі фотодіода з чотирма секціями. Контрольованими параметрами є відповідні різниці сигналів з різних секторів фотодіода:

$$S_1 = (I_1 + I_4) - (I_2 + I_3) \quad (2.91)$$

$$S_2 = (I_1 + I_2) - (I_3 + I_4), \quad (2.92)$$

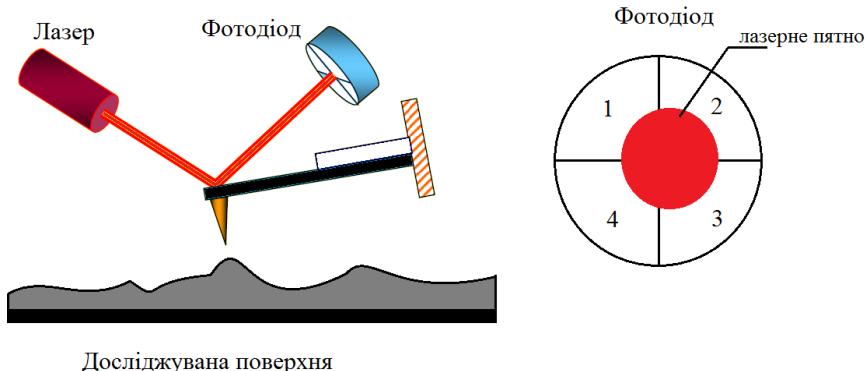
які однозначно визначають величину та напрямок вигину консолі з зондом.

Сигнал  $S_1$  пропорційний вигину консолі під дією складової сили, яка спрямована вздовж нормалі до поверхні зразка. Сигнал  $S_2$  характеризує вигин консолі під впливом поздовжніх (латеральних) сил.



**Рисунок 2.18.** Зображення зонда атомно-силового мікроскопу.

Для організації роботи системи зворотного зв'язку використовують параметр  $S_1$ , що дозволяє підтримувати сталою величину вигину консолі ( $\Delta z$ ). Данна величина визначається (обирається) оператором і залежить від особливостей досліджуваної поверхні. При скануванні зразка в режимі  $\Delta z = \text{const}$  зонд переміщується вздовж поверхні, при цьому напруга на z-електроді сканера записується в пам'ять комп'ютера як рельєф поверхні  $z = f(x,y)$ .



**Рисунок 2.19.** Методика контролю вигину консолі зонда.

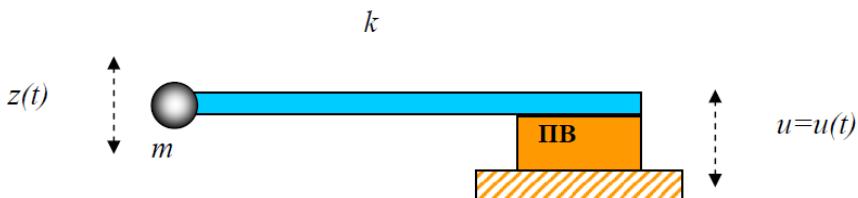
Методи отримання інформації про рельєф поверхні за допомогою атомно-силового мікроскопа можна розділити на дві групи – контактні квазістатичні та безконтактні коливальні. В контактних методиках вістря зонда перебуває в безпосередньому контакті з поверхнею. При цьому, сили відштовхування та притягання, які діють на зонд з боку поверхні, врівноважуються силою пружності деформації консолі. Особливістю такого методу є вплив зонда на досліджувану поверхню, яку можна мінімізувати використанням зондів з малим коефіцієнтом жорсткості. В контактному режимі вимірювань зображення рельєфу поверхні формується або при сталій сили взаємодії зонда з поверхнею (стало величина вигину консолі) або сталій середній відстані між вістрям та поверхнею зразка. Останній випадок характеризує просторовий розподіл сили взаємодії зонда з поверхнею. Як правило, його використовують для аналізу поверхонь з малим (порядку кількох ангстрем) перепадами висот.

Недоліком контактних методик є безпосередня механічна взаємодія зонда з поверхнею. Це зазвичай призводить до руйнування зондів та пошкодженню досліджуваної поверхні.

Таким чином, контактні методики не можна використовувати для дослідження зразків з малою механічної жорсткістю.

Суттєво меншою є величина взаємодії зонда з досліджуваною поверхнею в безконтактних (або напівконтактних) методиках АСМ, в яких відбувається реєстрація параметрів взаємодії вимушених коливань зонда з поверхнею, що дозволяє зменшити механічну взаємодію в процесі сканування. На рис. 2.20 наведена схема зондового датчика з консоллю жорсткістю  $k$ , який використовується для реалізації безконтактної методики. Консоль з вістрям розміщується на п'єзоелектричному вібраторі (ПВ), який здійснює гармонічні коливання з частотою  $\omega$ :

$$U(t) = U_0 \cos(\omega t). \quad (2.93)$$



**Рисунок 2.20.** Схема зондового датчика з консоллю жорсткістю  $k$  для реалізації безконтактної методики.

В такому випадку рівняння, що описує рух зонда при малій амплітуді коливань матиме вигляд:

$$\frac{d^2z}{dt^2} + \frac{\omega_0}{Q} \frac{dz}{dt} + \omega_0^2 (z - z_0) = \Delta z \omega_0^2 \cos(\omega t), \quad (2.94)$$

де  $z_0$  - відстань зонд-зразок при нульовій амплітуді коливань,  $z(t)$  - відстань зонд-зразок в момент часу  $t$ ,  $\omega_0$  - власна резонансна частота коливань,  $\omega$  - частота вимушених коливань,

$\Delta z$  - амплітуда коливань закріпленого на п'єзодрайвері кінця консолі (амплітуда збудження),  $Q$  - добротність.

Вимушені коливання утворюються з двох різних типів коливних процесів – переходного і стаціонарного. Переходний процес описує загальний розв'язок рівняння (2.94) при  $\Delta z = 0$ ; він загасає з часом і інтересу не становить. Стационарне процес – це гармонічне коливання з частотою  $\omega$  і амплітудою збудження  $\Delta z \neq 0$ . Амплітуда вимушених коливань зонда має вигляд:

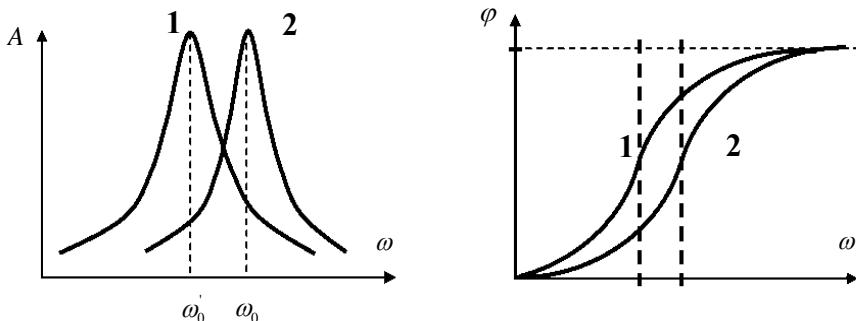
$$A = \Delta z \sqrt{\frac{Q^2 \omega_0^4}{\omega_0^2 \omega^2 + Q^2 (\omega_0^2 - \omega^2)^2}}, \quad (2.95)$$

Зсув фази  $\varphi$  коливань незакріпленого кінця консолі відносно закріпленого визначається виразом:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{1}{Q} \frac{\omega \omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad (2.96)$$

При наближенні зонда до поверхні на нього починає діяти додаткова сила взаємодії, що призводить до зміщення резонансної частоти системи:

$$\omega_0 = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{1}{k} \frac{\partial F}{\partial z}} \quad (2.97)$$

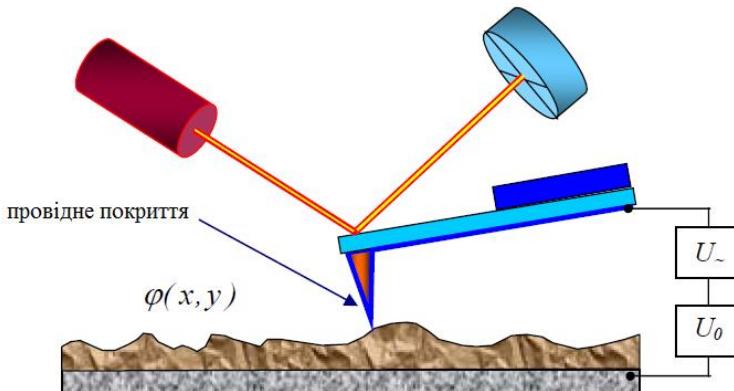


**Рисунок 2.21.** Зміна амплітудно-частотних та фазо-частотних характеристик після (1) та до (2) наближення зонда до поверхні.

Оскільки частота виміщених коливань зонда підтримується сталою і рівною  $\omega_0$  у вільному стані, то при наближенні зонда до поверхні амплітуда коливань вільного кінця консолі зменшується. Ця амплітуда реєструється за допомогою оптичної системи і виокремлюється за допомогою синхронного детектора. Для формування зображення поверхні визначаються: зміна амплітуди чи зміна фази.

## 2.10. Електросилова мікроскопія

Метод електросилової мікроскопії використовує електричну взаємодію між зразком та зондом, який повинен мати електропровідне покриття. Принципова схема методу наведена на рис. 2.22. Між зондом та поверхнею має бути прикладена постійна напруга  $U_0$  та змінна напруга  $U_1 \sin(\omega t)$ .



**Рисунок 2.22.** Принципова схема методу електросилової мікроскопії.

Якщо досліджуваним зразком є напівпровідник або діелектрик, то на поверхні зразка існує розподіл потенціалу

$\varphi(x,y)$ . В такому випадку різницю потенціалів між зондом та поверхнею можна подати у вигляді:

$$U = U_0 + U_1 \sin(\omega t) - \varphi(x,y) \quad (2.98)$$

Система зонд - зразок характеризується ємністю  $C$ , а енергія такої системи може бути подана як:

$$W = \frac{CU^2}{2} \quad (2.99)$$

В такому випадку сила взаємодії  $\mathbf{F}$ :

$$\mathbf{F} = -\operatorname{grad}(W) \quad (2.100)$$

Її  $z$ -складова може бути подана у вигляді:

$$F_z = -\frac{\partial W}{\partial z} = -\frac{1}{2}U^2 \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.101)$$

Таким чином,  $z$ -складова сили  $\mathbf{F}$  має три складові:

$$F_z^0 = -\frac{1}{2} \left( U_0 - \phi(x,y) + \frac{U_1^2}{2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.102)$$

$$F_z^\omega = - \left( (U_0 - \phi(x,y))U_1 \sin(\omega t) \right) \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.103)$$

$$F_z^{2\omega} = \left( \frac{1}{4}U_1^2 \cos(2\omega t) \right) \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.104)$$

Вимірювання амплітуди коливань на частоті  $2\omega$  дозволяє дослідити розподіл величини  $\frac{\partial C}{\partial z}$  вздовж поверхні. Метод отримав назву **скануюча ємнісна мікроскопія**, який дозволяє досліджувати локальні діелектричні властивості приповерхневих шарів.

Величина  $\frac{\partial C}{\partial z}$  залежить від відстані між зондом та поверхнею, тому при дослідженнях використовують двопрохідну методику. При першому проході досліджується рельєф поверхні. Після цього зонд підводиться на деяку відстань  $z_0$ , між зондом и зразком прикладається змінна напруга з частотою  $\omega$  і

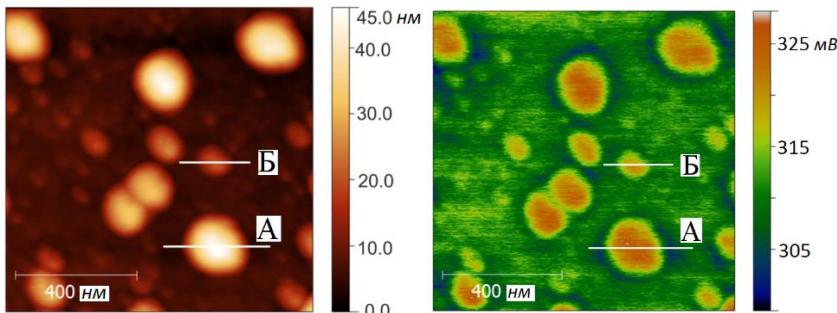
здійснюється повторне сканування. При другому проході зонд рухається вздовж траекторії, яка повторює рельєф поверхні зразка, тобто відстань між зондом та поверхнею є сталою. При цьому, зміна амплітуди коливань на частоті  $2\omega$  буде зумовлена локальною зміною ємності системи зонд – поверхня внаслідок зміни діелектричних властивостей зразка.

Вимірювання сигналу на частоті  $\omega$  дозволяє дослідити розподіл поверхневого потенціала  $\phi(x, y)$  (**метод зонда Кельвіна**). Метод є двопрохідним і ґрунтуються на тому, що при другому проході в кожній точці реалізується наступна процедура. А саме, підбирається величина постійної складової прикладеної напруги  $U_0$  таким чином, що амплітуда коливань зонда на частоті  $\omega$  стає рівною нулеві. Як випливає з рівняння (2.103) це відбувається якщо

$$U_0 = \phi(x, y) \quad (2.105)$$

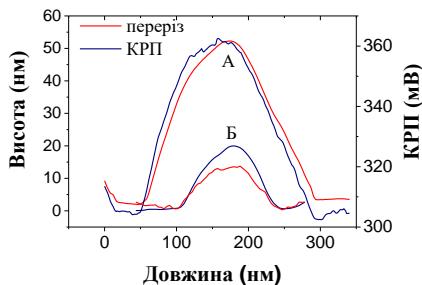
в даній точці поверхні, що і дозволяє виміряти розподіл поверхневого потенціалу.

Як приклад, на Рис. 2.23 наведено АСМ зображення поверхні з Ge нанокластерами (а) та просторовий розподіл контактної різниці потенціалу між поверхнею Ge і зондом (б). З аналізу отриманих зображень випливає, що досліджувана поверхня містить як великі за розмірами НК з діаметром близько  $\sim 250$  нм і висотою  $\sim 50$  нм, так і менші НК з поперечними розмірами  $\sim 150$  нм і висотою порядку 10–20 нм. Форма поверхні нанокластерів Ge виявилась куполоподібною. При цьому, утворення пірамід не спостерігається у зв'язку з тим, що виготовлення структур відбувалась при температурі підкладки Si  $\sim 600$  °C, що відповідало температурі утворення кластерів саме куполоподібної форми.



**Рисунок 2.23.** (а) ACM зображення Si/Ge гетероструктури з Ge нанокластерами та (б) відповідна картина КРП.

На рис.2.23,б, видно відмінності між значеннями  $\phi(x, y)$  у Ge наноструктурах і ділянками поверхні підкладки без НК Ge. А саме, германієві нанокластери різних розмірів дають помітно різний внесок у просторовий розподіл поверхневого потенціалу. На рис.2.24 наведено профілі поверхневого потенціалу вздовж двох різних нанокластерів. Як видно, більші нанокластери характеризуються більшим потенціалом. Максимальне значення  $\phi(x, y)$  спостерігалося при розташуванні зонда над вершиною нанокластера, у той час, як потенціал підкладки залишився майже однаковим і становив близько 310 мВ.



**Рисунок 2.24.** Переріз та локальні профілі потенціалу вздовж великого (А) та малого (Б) нанокластерів Ge. Профілі отримані з ліній А,Б на рис.2.23. Equation Chapter (Next) Section 3

## **Розділ 3**

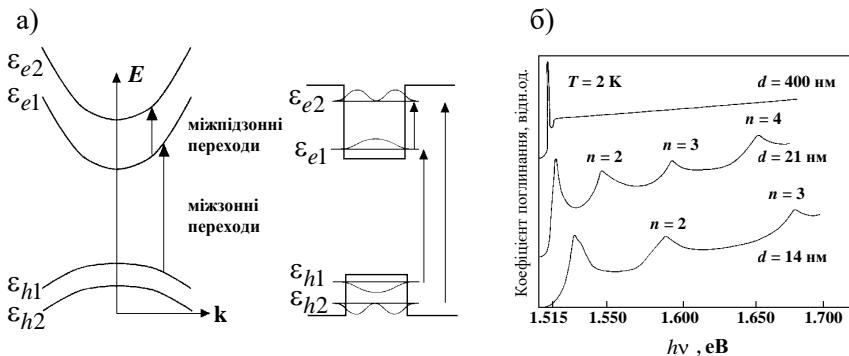
# **Оптичні та фотоелектричні властивості наноструктур**

Аналіз спектрів поглинання та випромінювання світла в низько-вимірних структурах з квантовими ямами, квантовими нитками, квантовими точками та надгратками є одним з найпоширеніших методів їх аналізу. В даному розділі розглянуто механізми поглинання світла в наноструктурах, проаналізовано їх відмінності від аналогічних процесів в об'ємних матеріалах.

### **3.1. Міжзонне поглинання в квантових ямах**

Оптичне поглинання напівпровідниківих гетероструктур з нанорозмірними об'єктами має особливості, зумовлені квантуванням енергетичного спектру. При освітленні гетероструктур I та II типу з КЯ можуть відбуватися переходи між різними її квантово-розмірними станами. Розрізняють три типи переходів: (I) – *міжзонний переход*, при якому електрон з валентної підзони може бути переведений у підзону провідності; (II) – *міжпідзонний переход*, за якого електрон переміщується з однієї підзони в іншу, залишаючись у межах однієї зони; (III) – *внутрішньопідзонний переход*, при якому електрон переходить у різні стани  $\mathbf{k}$  в межах тієї самої підзони  $n$ . Останній тип переходів може мати місце разом із процесами розсіяння. При цьому для здійснення необхідного обміну енергією та імпульсом між електроном та решіткою потрібна взаємодія з фононом або домішкою.

За достатньої енергії  $h\nu$  може відбутись *міжзонний переход* електрона з підзони валентної зони в одну з підзон зони провідності. На рис.3.1,а зображені міжзонні переходи з підзони  $n=1$  у валентній зоні у підзону  $n=1$  зони провідності квантової ями, а також перехід між підзонами зони провідності.



**Рисунок 3.1.** Оптичні переходи в квантовій ямі за двох дозволених рівнів у валентній зоні та зоні провідності (кількість рівнів у потенціальній ямі визначається шириною ями (а); спектр оптичного поглинання квантових ям GaAs різної товщини при 2 К, яка розміщена між двома більш широкозонними бар'єрами Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As (б).

Для розгляду міжзонних переходів скористаємося відомим золотим правилом Фермі, за яким кількість переходів за одиницю часу  $W_{i \rightarrow f}$  визначається виразом:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{h} |H_{if}|^2 \rho(E_f), \quad (3.1)$$

де  $H_{if}$  – матричний елемент переходу, який зв'язує стани системи  $i$  та  $f$ ,  $\rho(E_f)$  – енергетична щільність кінцевих станів.

Розглянемо більш детально матричний елемент такого переходу, що дозволить визначити правила відбору. Якщо випромінювання поширюється вздовж координати  $z$ , то

коливання вектора  $\mathbf{E}$  відбуваються в площині  $xy$ . Відзначимо, що для квантових ям напрямки  $x$  та  $y$  фізично еквівалентні. Для визначеності надалі вважатимемо, що коливання вектора здійснюються вздовж напрямку  $x$ . Подамо матричний елемент переходу в дипольному наближенні (дипольний момент переходу) як

$$H_{if} = \langle f | x | i \rangle = \int \psi_f^*(\mathbf{r}) x \psi_i(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (3.2)$$

Слід відзначити, що

$$\langle f | x | i \rangle = \langle f | y | i \rangle \neq \langle f | z | i \rangle. \quad (3.3)$$

Хвильові функції для початкового та кінцевого станів квантової ями визначаються такими виразами:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} u_v(\mathbf{r}) \phi_n^h(z) e^{i\mathbf{k}_{xy}\mathbf{r}_{xy}}, \quad (3.4)$$

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} u_c(\mathbf{r}) \phi_n^e(z) e^{i\mathbf{k}'_{xy}\mathbf{r}_{xy}}, \quad (3.5)$$

де  $u_v(\mathbf{r})$  та  $u_c(\mathbf{r})$  – періодичні блохівські хвильові функції.

За міжзонного поглинання в квантових ямах зберігається дновимірний хвильовий вектор  $\mathbf{k}_{xy} = \mathbf{k}'_{xy}$ . Таким чином, такі переходи на зонній діаграмі слід зображувати вертикальними лініями (рис.3.1,а).

Після підстановки виразів (3.4) та (3.5) у (3.2) отримаємо матричний елемент переходу, який можна подати як добуток двох складових:

$$H_{if} = H_{cv} \cdot H_{nn}, \quad (3.6)$$

де  $H_{cv}$  – це матричний елемент, що відповідає дипольному моменту переходів між блохівськими станами в валентній зоні та зоні провідності:

$$H_{cv} = \int u_c^*(\mathbf{r}) x u_v(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad (3.7)$$

а  $H_{nn'}$  – фактор перекриття електронних і діркових хвильових функцій у квантовій ямі:

$$H_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^{*e}(z) \varphi_n^h(z) dz . \quad (3.8)$$

Інтеграл (3.8) визначає правила відбору при міжзонних переходах. Для нескінченно глибоких квантових ям функції  $\varphi_n^e(z)$  та  $\varphi_n^h(z)$  є однаковими і для електронів і для дірок, тому інтеграл буде відрізнятися від нуля лише при  $\Delta n = n - n' = 0$ . Для ям скінченної глибини таке правило відбору все одно існує, але воно не таке жорстке. Якщо потенціал ями симетричний (прямокутна яма), то функції  $\varphi$  характеризуються певною парністю відносно  $z$ , будуть парними за непарних  $n$  і непарними функціями при парних  $n$ . При цьому інтеграл  $H_{nn'}$  рівний нулеві, якщо  $n$  та  $n'$  мають різну парність. Обов'язкової рівності  $n = n'$  вже не вимагається. В асиметричних ямах переходи можливі для будь-яких  $n$  та  $n'$ . Проте за  $\Delta n \neq 0$  поглинання є значно слабшим, ніж при  $n = n'$  для більшості типів квантових ям.

Розглянемо форму спектра поглинання, зумовленого міжзонними переходами в квантових ямах (рис.3.1,б). Перш за все відзначимо, що мінімальна енергія фотона, за якої відбудеться таке поглинання, дорівнює:

$$h\nu = \varepsilon_g + \varepsilon_{e1} + \varepsilon_{h1} , \quad (3.9)$$

де  $\varepsilon_g$  – ширина забороненої зони об'ємного матеріалу, з якого утворена квантова яма. Наведена формула ілюструє важливий результат: край оптичного поглинання квантової ями зсунутий у високоенергетичну область на величину  $(\varepsilon_{e1} + \varepsilon_{h1})$  у порівнянні з краєм міжзонного поглинання об'ємного матеріалу. Оскільки величини  $\varepsilon_{e1}$  та  $\varepsilon_{h1}$  збільшуються при зменшенні товщини плівки, то край оптичного поглинання квантової ями буде

суттєво залежати від її розміру. Це є одним з проявів ефекту розмірного квантування.

У квантових ямах комбінована функція густини станів є сходинковою функцією:

$$g(E) = \frac{A}{\pi} \left( \frac{\mu}{\hbar^2} \right) \sum_n \theta(E - E_n), \quad (3.10)$$

де  $A$  – стала,  $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_h^*} + \frac{1}{m_e^*}$ ,  $\theta$  – сходинкова функція.

Це означає, що спектр коефіцієнта поглинання буде мати сходинковий характер. Поява нової сходинки зумовлена внеском переходів із більшим  $n$ . Енергетичне положення переходу між  $n$ -ими підзонами валентної зони та зони провідності визначається співвідношенням:

$$hv_n = \varepsilon_g + \frac{\hbar^2 n^2}{2\pi^2 m_e^* a^2} + \frac{\hbar^2 n^2}{2\pi^2 m_h^* a^2} = \varepsilon_g + \frac{\hbar^2 n^2}{2\pi^2 \mu a^2}. \quad (3.11)$$

Слід також підкреслити, що коефіцієнт поглинання при міжзонних переходах у квантових ямах не залежить від поляризації надхідного випромінювання.

Відзначимо, що кількість рівнів у потенціальній ямі GaAs залежить не тільки від ширини ями, а також від висоти бар'єру, яка визначається шириною забороненої зони бар'єрних  $Al_xGa_{1-x}As$ . За  $x < 0,4$  розрив зони провідності  $\Delta E_c$  (висота бар'єру в валентній зоні) пропорційний вмісту Al:  $\Delta E_c = 0,836 \cdot x$  eВ. Підбором вмісту Al та товщини шару GaAs в процесі вирощування можна створити квантоворозмірну структуру, яка має електронні та оптичні властивості, що задовольняють наперед заданим вимогам. Це прорегатива квантової інженерії.

Даний експериментальний спектр не відповідає наведеній теорії міжзонного поглинання в квантових ямах. А саме, замість очікуваної сходинкової залежності спостерігались піки. Причина розбіжності теорії з експериментом полягає в тому, що форма

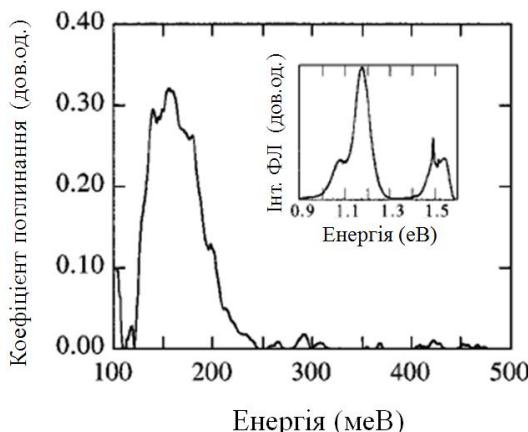
спектра поглинання розраховувалась у найпростішій моделі без урахування кулонівської взаємодії електронів і дірок. Екситонні ефекти можуть помітно спотворити форму спектра поглинання  $\alpha(hv)$ . Як наслідок, поблизу кожної сходинки з'являються екситонні піки. Крім того, кулонівський потенціал змінює щільність станів поблизу кожної граничної енергії, тому форма кривої  $\alpha(hv)$  відрізняється від прямокутних сходинок.

В гетероструктурах I типу з нескінченно глибокими КЯ можливі міжзонні переходи між квантово-розмірними станами з однаковим квантовим числом  $n$ . Для ям скінченної глибини таке правило відбору все одно існує, але воно не таке жорстке. В асиметричних ямах переходи можливі для будь-яких  $n$  та  $n'$ , проте за  $\Delta n \neq 0$  поглинання є значно слабшим, ніж при  $n = n'$  для більшості типів КЯ. Спектр коефіцієнта поглинання буде мати сходинковий характер, зміщується в високогенеретичну область при зменшенні її товщини і не залежить від поляризації збуджуючого випромінювання. Як приклад, на Рис.7.18,б наведено спектр оптичного поглинання квантової ями GaAs різної товщини при  $T = 2$  К, яка розміщена між двома більш широкозонними бар'єрами  $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ . Форма даного спектра зумовлена міжзонними оптичними переходами в квантовій ямі GaAs. При зменшенні товщини GaAs енергія переходу між відповідними підзонами зсувається в бік більших енергій.

### **3.2. Міжпідзонні переходи в квантових ямах**

Внутрішньозонні переходи за участю квантово-розмірних станів зумовлюють оптичне поглинання гетероструктур з КЯ в середньому та далекому інфрачервоному діапазоні. При нормальному падінні світла внутрішньозонні переходи за участю локалізованих станів заборонені в дипольному наближенні. Для

спостереження таких переходів світло повинно мати поляризацію в напрямку обмеження, тобто для ТМ оптичної моди. Для їх спостереження в гетероструктурах з квантовими ямами застосовують хвилевідну геометрію, яка до того ж збільшує чутливість методу. На Рис. 3.2 наведено спектр оптичного поглинання структури InAs/GaAs з квантовими точками, який зумовлено електронним переходом з основного стану КТ в делокалізовані стани зони провідності змочувального шару.

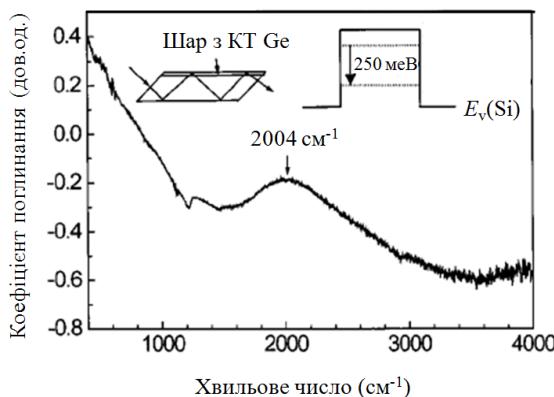


**Рисунок 3.2.** Спектр оптичного поглинання структури InAs/GaAs з КТ *n*-типу.

Внутрішньозонні переходи носіїв заряду за участю локалізованих станів зони провідності або валентної зони КТ можливі лише за наявності носіїв заряду в основному стані наноострівців. Існує кілька способів задоволити цю вимогу: використовувати леговані структури; збільшити концентрацію носіїв в КТ за рахунок потужної міжзонної накачки; розташувати епітаксіальні шари з КТ або КЯ в області просторового заряду бар'єру Шоттки або *p-i-n* структури. Останній дозволяє найточніше контролювати рівень заселення основного стану

носіями заряду, що знайшло широке практичне застосування при створенні інфрачервоних фотодетекторів з КТ або КЯ здатних працювати за кімнатних температур.

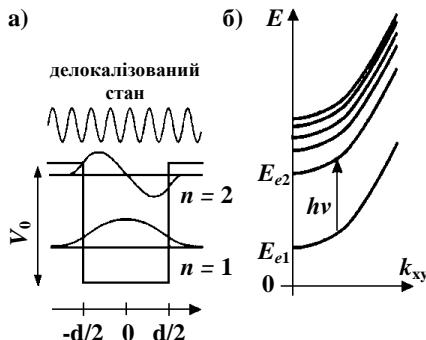
Внесок в інфрачервоне поглинання Si-Ge гетероструктур з наноострівцями в спектральному діапазоні 3-20 мкм обумовлений внутрішньозонними переходами за участю квантово-розмірних станів валентної зони. Враховуючи малий об'єм наноострівців Ge, вимірювання спектрів поглинання прямыми оптичними методами є ускладненим. Збільшення чутливості методу досягається застосуванням геометрії вимірювань, що передбачає багатократне проходження світла через епітаксіальні шари з КТ. Для заселення основного стану Ge наноострівців дірками активна область *i-Si* розміщувалась всередині контактних шарів *p<sup>+</sup>-Si*, легованих бором із концентрацією  $5 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. На Рис.3.3 наведено спектр поглинання такої структури, виміряний в геометрії багатократного проходження світла при кімнатній температурі. Спостережуваний пік поблизу 2004 см<sup>-1</sup> зумовлений переходами дірок між локалізованими станами валентної зони наноострівців.



**Рисунок 2.3.** Спектр оптичного поглинання *p<sup>+</sup>-i-p<sup>+</sup>* гетероструктури Si-Ge з 30 шарами наноострівців Ge.

Переходи дірок за участю станів валентної зони Ge наноострівців досліджувались також методом фотоіндукованого поглинання. При використанні інтенсивного ( $> 10 \text{ Вт}/\text{см}^2$ ) підсвічування гетероструктури світлом в області міжзонного поглинання Si в ІЧ області спектра з'являється пік поглинання із максимумом  $\sim 300 \text{ мeВ}$  за умови заповнення дірками основного квантово-розмірного стану наноострівців Ge.

Кванти світла з енергією, меншою за край міжзонного поглинання, можуть викликати переходи між підзонами розмірного квантування (Рис. 3.4). При міжпідзонних переходах початковий та кінцевий стани електрона належать одній і тій же зоні. Це призводить до правил відбору, суттєво відмінних від правил відбору для міжзонних переходів. А саме, в квантових ямах внутрізонне поглинання є суттєво різним для світла різної поляризації. Якщо світло поширюється вздовж напрямку, в якому існує обмеження, то коливання вектора  $\mathbf{E}$  відбуваються в площині тонкої плівки, де електрони поводять себе як вільні. Тому світло з такою поляризацією може призводити до звичайного внутрізонного поглинання, що спостерігається в об'ємних кристалах.



**Рисунок 3.4.** Квантова яма з двома зв'язаними станами (а) та відповідні дисперсійні криві (б). Стрілкою позначено міжпідзонний перехід у валентній зоні.

При падінні світла, в якого коливання вектора  $\mathbf{E}$  відбуваються перпендикулярно до напрямку квантового обмеження, спостерігаються оптичні переходи між підзонами. Іншими словами, *міжпідзонний переход може бути зумовлений лише з - компонентою вектора  $\mathbf{E}$  електромагнітної хвилі*. Оскільки підзони паралельні, переходи при сталому  $\mathbf{k}$  призводять до енергетичних резонансів у спектрах поглинання (переходи з однією й тією ж енергією між парою підзон мають місце в широкому діапазоні значень  $\mathbf{k}$ ). Отже, спектральна залежність міжпідзонного поглинання являє собою ряд вузьких резонансних  $\delta$ -смуг. Наприклад, для ями шириною 10 нм,  $m_e^* = 0.1 \cdot m_0$ ,  $E_1 = 38$  мeВ,  $E_2 = 151$  мeВ,  $E_3 = 339$  мeВ, а отже, міжпідзонні переходи можуть спостерігатися за енергій:  $h\nu_1 = E_2 - E_1 = 113$  мeВ,  $h\nu_2 = E_3 - E_2 = 188$  мeВ, і т.п. Ці енергії квантів відповідають інфрачервоній області спектра, що робить можливим створення інфрачервоних фотоприймачів і лазерів із квантовими ямами.

Розглянемо поширення світла, яке поляризоване перпендикулярно до площини квантоворозмірного шару. Наявність або відсутність переходу між підзонами визначається матричним елементом імпульсу  $P_{mn}$ :

$$P_{mn} = -i\hbar \int \phi_m^*(z) \frac{d\phi_n(z)}{dz} dz. \quad (3.12)$$

Зазначимо, що функції  $\phi_n(z)$  та  $\frac{d\phi_n(z)}{dz}$  мають різну парність.

Для симетричних квантових ям функції  $\phi(z)$  в початковому та кінцевому стані повинні мати різну парність, щоб  $P_{mn} \neq 0$  і переход був дозволений. Іншими словами електрони з первого рівня можуть переходити лише на другий, четвертий і т.д., і ніяк не на третій, п'ятий і т.д. Якщо яма є несиметричною, то переходи можуть відбуватись між будь-якими підзонами.

Правила відбору змінюються за умови, якщо квантова яма має скінченну глибину ( $0 < V_0 < \infty$ ), а ефективні маси носіїв у ямі та бар'єрному шарі різні. Як наслідок, стають можливими переходи під дією світла, поляризованого в площині структури (під дією  $x$ -та  $y$ -компонент вектора  $\mathbf{E}$ ). Ці переходи можуть відбуватися лише між підзонами однакової парності ( $1 \rightarrow 3, 2 \rightarrow 4, \dots$ ). Для квантovих ям GaAs/AlGaAs коефіцієнт поглинання світла з поляризацією в здовж квантоворозмірних шарів на кілька порядків менший, ніж для світла з  $z$ -поляризацією.

У квантovих ямах скінченної глибини, крім дискретних підзон, існує континуум делокалізованих станів з енергіями,вищими за край ями ( $E > V_0$ ). Світло з достатньо великою енергією квантів  $h\nu > V_0 - E_{el}$ , крім переходів між підзонами, може зумовлювати переходи з основної підзони  $E_{el}$  в континуум. За аналогією з процесами в атомах, такі переходи називають *фотоіонізацією квантovих ям*.

Для розрахунку матричних елементів таких переходів необхідно знати хвильові функції станів континууму  $\psi_n$  (при цьому хвильові функції зв'язаних станів  $E < V_0$  матимуть той самий вигляд, що і для ями нескінченної глибини). Для прямокутної ями, зображеній на Рис.3.4, розв'язок є відомим із курсу квантової механіки:

$$\psi_n = \begin{cases} A \exp(ikz) + B \exp(-ikz), & z < -d/2, \\ C \sin(Kz), C \cos(Kz), & -d/2 \leq z \leq d/2, \\ -A \exp(-ikz) - B \exp(ikz), & z > d/2 \end{cases}, \quad (3.13)$$

$$\text{де } k = \left( \frac{2m_e^* \varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \quad K = \left( \frac{2m_e^*(V_0 - \varepsilon)}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \quad \text{де } \varepsilon = E - V_0.$$

При розгляді розв'язку задачі ми повинні враховувати, що функції  $\psi_n(z)$  повинні бути неперервними, і, як наслідок, усі

розв'язки (3.13) мають збігатися при  $z = \pm d/2$ . Причому в наближенні однакової ефективної маси електрона в потенціальній ямі та за її межами повинні також збігатися похідні хвильових функцій.

Відповідні розрахунки показують, що для непарної хвильової функції в області ями коефіцієнт  $C$  визначається таким виразом:

$$C^2 = \frac{m_e^* k}{\pi \hbar^2 \left( k^2 \sin^2 \frac{Kd}{2} + K^2 \cos^2 \frac{Kd}{2} \right)}. \quad (3.14)$$

У загальному випадку  $C^2 \propto k \propto \sqrt{\varepsilon}$ , і при малих енергіях  $\varepsilon \rightarrow 0$   $C^2 \rightarrow 0$ . Це означає, що електрон, який рухається поза ямою з малою енергією  $\varepsilon$ , ефективно відбивається від стінок ями і практично не проникає всередину, тобто в область  $|z| < d/2$ . Окремим випадком є резонансні ями, для яких виконується умова:

$$\cos^2 \frac{Kd}{2} = 0. \quad (3.15)$$

У такому випадку  $C^2 \propto 1/k \propto 1/\sqrt{\varepsilon} \rightarrow \infty$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Електрон із малою енергією, який перебуває в ямі, ніби резонансно підсилюється. Можна сказати, що така квантова яма є резонатором Фабрі-Перо для електронних хвиль де-Бройля.

За  $E \ll V_0$  умова (3.15) еквівалентна

$$\frac{Kd}{2} = (2n-1) \frac{\pi}{2} \text{ або } \frac{\sqrt{2m_e^* V_0}}{\hbar} \frac{d}{2} = (2n-1) \frac{\pi}{2}, \quad (3.16)$$

звідки

$$V_0 = (2n-1)^2 \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\pi}{d} \right)^2. \quad (3.17)$$

Порівняємо отриманий вираз із формулою, яка визначає положення енергетичних рівнів у нескінченно глибокій потенціальній ямі відносно її дна. Можна зробити висновок, що

для станів континууму з *непарною* хвильовою функцією дана яма є *резонансною*, якщо її глибина дорівнює енергії будь якого непарного рівня для нескінченної ями такої ж глибини.

Форми спектральних залежностей  $\alpha(h\nu)$  при фотойонізації суттєво залежать від того, чи є квантова яма *резонансною* або *нерезонансною*. При енергіях квантів світла, близьких до  $\hbar\omega_0 = V_0 - E_{el}$ , електрони з енергетичного рівня  $E_{el}$  переходят у стани з малими енергіями  $\varepsilon = \hbar\omega - V_0 + E_l$ . Якщо яма є *нерезонансною* і  $\cos^2 \frac{Kd}{2} \neq 0$ , то поблизу її границь хвильова функція електронів має малу амплітуду, а хвильова функція першого рівня  $\psi_1$  локалізована переважно в квантовій ямі. У такому випадку будь-які матричні елементи переходів дорівнюють нулю, а значить, і коефіцієнт поглинання поблизу порогової енергії буде малим. Для резонансних ям коефіцієнт поглинання поблизу порога фотойонізації, навпаки, необмежено зростає. Це пояснюється тим, що амплітуда кінцевого стану в цій області визначається коефіцієнтом  $C$ .

Точні розрахунки показують, що:

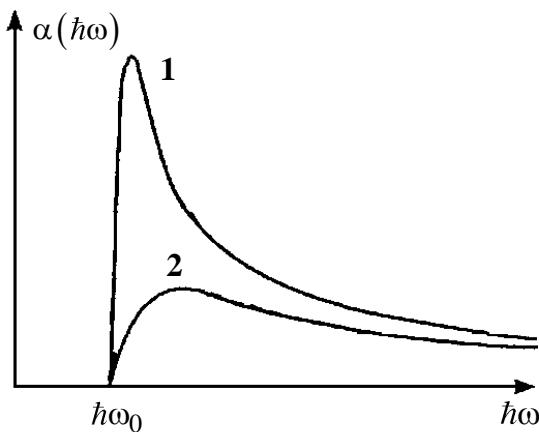
$$\alpha(\hbar\omega) \propto C \propto \begin{cases} (\hbar\omega - V_0 + |E_{el}|)^{1/2}, & \text{для резонансних ям;} \\ (\hbar\omega - V_0 + |E_{el}|)^{-1/2}, & \text{для нерезонансних ям.} \end{cases} \quad (3.18)$$

При більших частотах світла електрони переходят у стани з більшою енергією, які практично не збурені потенціалом ями. Властивості електронів у таких станах близькі до властивостей електронів в об'ємних напівпровідниках, і коефіцієнт поглинання прямує до нуля при збільшенні  $\hbar\omega$  поки не почнуться зон-зонні переходи.

При аналізі форми спектрів міжпідзонних переходів та спектрів фотойонізації необхідно враховувати той факт, що для світла, поляризованого вздовж  $z$ -напрямку, високочастотне

електричне поле повинно задовольняти умову неперервності електричної індукції. Поле, яке реально діє на електрони, відрізняється від поля електромагнітної хвилі на величину діелектричної проникності матеріалу квантової ями. Як відомо, поблизу частот світла, які відповідають сильному (резонансному) поглинанню,  $\alpha(\omega)$  істотно змінюється з частотою. Наведений ефект, який в літературі називають *ефектом деполяризації*, може істотно вплинути на форму спектра поглинання.

На Рис.3.5 схематично наведено спектри фотойонізації резонансних (крива 1) та нерезонансних (крива 2) квантових ям.



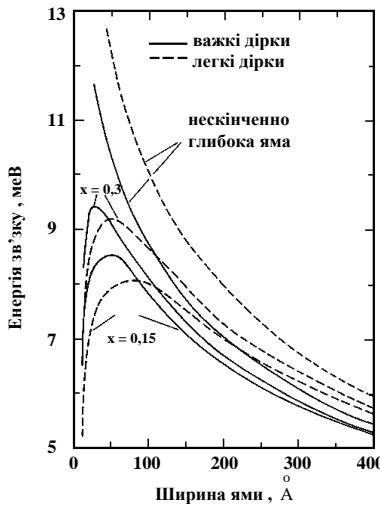
**Рисунок 3.5.** Спектри фотойонізації резонансних (крива 1) та нерезонансних (крива 2) квантових ям.

### 3.3. Екситонне поглинання в квантових ямах

У кванторозмірних структурах, де рух електронів є обмеженим порівняно з об'ємними кристалами, экситонні

ефекти набувають дуже важливого значення. Енергія зв'язку, необхідна для формування екситону в нанорозмірних кристалах, значно перевищує відповідну величину в об'ємному кристалі. Як наслідок, екситонні ефекти в таких системах спостерігаються навіть за кімнатної температури.

Збільшення енергії зв'язку в квантових ямах можна пояснити таким чином. В об'ємному напівпровіднику GaAs енергія зв'язку екситона рівна 4,8 мeВ, а відповідний борівський радіус  $a_B^* = 11,6$  нм. У випадку, коли борівський радіус набагато менший за ширину квантової ями, то ніякого обмеження руху немає, як це має місце в об'ємних кристалах. При зменшенні ширини квантової ями, коли  $d \ll a_B^*$ , відстань між електроном і діркою обмежена, що призводить до збільшення кулонівського притягання. Іншими словами, електрон і дірка перебуватимуть в квантовій ямі на менших відстанях, а потенціальна енергія їх взаємодії буде більшою, ніж це мало б місце в об'ємних матеріалах. На Рис.3.6 наведені енергії зв'язку екситону в квантовій ямі GaAs в залежності від її ширини  $d$ . У тих випадках, коли ширина ями набагато більша за борівський радіус екситону, величина енергії зв'язку практично не відрізняється від величини в об'ємі. При ширині  $d < a_B^*$  екситони в ямі поступово стискаються, зростає кулонівська взаємодія, і при товщинах 3-4 нм енергія зв'язку стає максимальною. Причому її максимальне значення приблизно втрічі перевищує величину енергії зв'язку для об'ємного GaAs. За подальшого зменшення товщини (в області  $d < 3 \div 4$  нм) для ям скінченної глибини спостерігається зменшення енергії зв'язку. Це пояснюється тим, що при малих розмірах квантової ями хвильові функції електронів (а також дірок) починають долати потенційний бар'єр, що зменшує ефективну локалізацію екситону, а значить і енергію зв'язку.

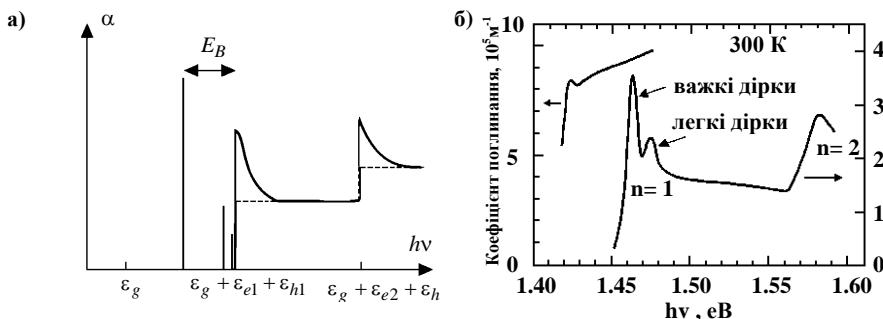


**Рисунок 3.6.** Залежність енергії зв'язку для екситонів в квантовій ямі GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As від ширини.

Слід відзначити, що кулонівська взаємодія може вплинути на рух електрон-діркової пари лише в напрямку, паралельному межі розділу (площина  $xy$ ). Порівняно з потенціалом обмеження, кулонівський потенціал несуттєво впливає на рух у перпендикулярному напрямку. Тому екситон у квантовій ямі подібний до «дводимірного» атома водню. Власні значення енергії екситону в такому наближенні визначатимуться виразом:

$$E_n = \varepsilon_g + \varepsilon_{le} + \varepsilon_{lh} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{ex}^2}{2M} - \frac{R^*}{(n-1/2)^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.19)$$

де  $\varepsilon_g$  – ширина забороненої зони об'ємного напівпровідника,  $R^*$  – ефективна стала Ридберга для екситону. Відзначимо, що дводимірний екситон характеризується в чотири рази більшою енергією зв'язку порівняно з еквівалентним об'ємним екситоном.



**Рисунок 3.7.** Спектри оптичного поглинання квантової ями: (а) – теорія, (б) – експеримент для GaAs при 290 К.

Спектр поглинання системи з квантовою ямою, модифікований кореляцією електронів і дірок, тобто екситонами, наведено на Рис.3.7. Для порівняння пунктирною кривою зображене спектр міжзонного поглинання без урахування кулонівської взаємодії між електроном і діркою (ступінчаста залежність). Проте тепер хвильові функції електрона та дірки виявляються зміненими внаслідок кулонівської взаємодії. Це призводить до істотної зміни форми спектрів поглинання. По-перше, кожна сходинка, яка зумовлена переходом електрона з підзони валентної зони у відповідну підзону зони провідності, деформується вузьким (екситонним) піком. Електрон і дірка, які виникають при цьому, не є зв'язаними. По-друге, переходи у зв'язані екситонні стани призводять до спостереження дискретних ліній при опроміненні системи квантами з енергіями  $h\nu < \epsilon_g + E_{le} + E_{lh}$  (Рис.3.7).

### 3.4. Зонно-зонна фотолюмінесценція в напівпровідниках

Зонно-зонною або крайовою люмінесценцією називають спонтанне випромінювання квантів світла з енергією, близькою

до ширини забороненої зони напівпровідника, що виникає при рекомбінації нерівноважних носіїв заряду. Механізми зонно-зонної рекомбінації, як і зонно-зонного поглинання, відрізняються в прямозонному й непрямозонному напівпровідниках.

Розглянемо фотолюмінесценцію в прямозонних напівпровідниках, де екстремуми дисперсійних кривих  $E(k)$  валентної зони та зони провідності знаходяться в центрі зони Бріллюєна при  $k=0$ . Переход електрона з початкового стану в зоні провідності в кінцевий стан в валентній зоні відбувається з випромінюванням фотона з енергією  $h\nu$ .

Закон збереження квазіімпульсу вимагає рівності:

$$\hbar\mathbf{k}_i = \hbar\mathbf{k}_f + \hbar\mathbf{k}_\phi, \quad (3.20)$$

де  $\hbar\mathbf{k}_f$ ,  $\hbar\mathbf{k}_i$  – квазіімпульси електрона в кінцевому ( $f$ ) та початковому ( $i$ ) стані відповідно,  $\hbar\mathbf{k}_p$  – імпульс фотона. Проте абсолютне значення імпульсу фотона  $\hbar k_p = \frac{h}{\lambda}$  є значно меншим від розмірів зони Бріллюєна  $\hbar k_a = \frac{h}{a}$ , де  $a$  – стала гратки Браве, оскільки  $\lambda \gg a$ . Тому на діаграмі  $E(\mathbf{k})$  (рис.3.8) відрізки прямих (стрілки), проведених між точками початкових та кінцевих станів, виглядають вертикальними, а відповідні переходи називають прямими міжзонними переходами. Прикладами прямозонних напівпровідників є GaAs та InAs.

Закон збереження енергії для прямих переходів має такий вигляд:

$$h\nu = E_f - E_i = \varepsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r^*}, \quad (1.38)$$

де  $\nu$  – частота оптичного випромінювання,  $m_r^*$  – зведена ефективна маса:  $\frac{1}{m_r^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$ ,  $E_i = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$  – енергія електрона в початковому стані,  $E_f = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$  – енергія електрона в кінцевому стані,  $E_c$  та  $E_v$  – енергетичні положення дна зони провідності та верху валентної зони відповідно.

На рис.3.8 показаний прямий перехід, який зумовлений поглинанням збуджувального випромінювання (пунктирна стрілка) та перехід електрона з зони провідності в стан валентної зони, який власне й зумовлює зонно-зонну люмінесценцію (суцільна стрілка). Зауважимо, що крайова люмінесценція не є процесом, що є просто зворотним до оптичного поглинання. Дійсно, якщо при поглинанні світла можуть бути задіяні всі пари електронних станів, для яких  $h\nu > \epsilon_g$ , то в люмінесценції можуть бути задіяні лише термалізовані в екстремумах нерівноважні носії заряду. Як наслідок, спектр зонно-зонної люмінесценції являє собою вузьку смугу, низькоенергетичний край якої знаходиться поблизу  $h\nu \sim \epsilon_g$ .

Переходи між станами валентної зони та зони провідності з різними величинами  $\mathbf{k}_f \neq \mathbf{k}_i$ , називаються *непрямими*. Непрямий перехід лише за рахунок поглинання фотона неможливий внаслідок невиконання закону збереження квазіімпульсу. Очевидно, що потрібні певні інші процеси, які б дозволяли відбуватись таким переходам.

Механізм непрямих зонно-зонних переходів, як правило, пов'язаний з одночасним випромінюванням (або поглинанням) фонона з хвильовим вектором  $\mathbf{q} = \pm(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)$ , тому закон збереження квазіімпульсу виконується. На рис.3.9 наведені

зонно-зонні переходи з поглинанням (пунктирні стрілки) та випромінюванням фононів (суцільні стрілки) в непрямозонному напівпровіднику.

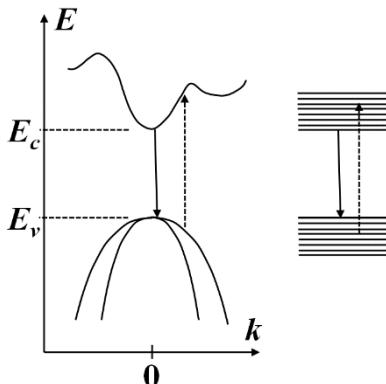


Рис.3.8. Пряний перехід, який зумовлений поглинанням збуджувального випромінювання (пунктирна стрілка) та перехід електрона з зони провідності в стан валентної зони, який зумовлює зонно-зонну люмінесценцію (суцільна стрілка).

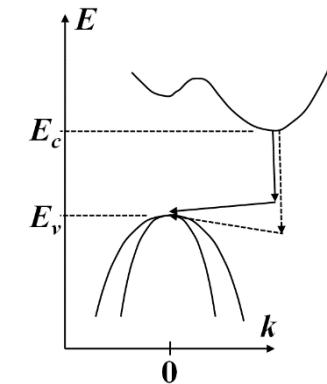


Рис.3.9. Зонно-зонні переходи з поглинанням (пунктирні стрілки) та випромінюванням фононів (суцільні стрілки) в непрямозонному напівпровіднику.

Закони збереження енергії та імпульсу для випадку непрямих переходів мають вигляд:

$$\begin{aligned} h\nu &= E_f - E_i \pm \hbar\omega_q \\ \mathbf{k}_f &= \mathbf{k}_i + \mathbf{q}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

де  $\hbar\omega_q$ ,  $\mathbf{q}$  – енергія та імпульс фонона. Знак "+" відповідає випадку поглинанню фонона, а знак "-" випромінюванню.

Іншими словами, при оптичному переході, який супроводжується випромінюванням фонона, випромінюються кванти світла з енергією меншу, ніж ширина забороненої зони напівпровідника  $h\nu = \varepsilon_g - h\omega_q$ . Натомість, при переходах з поглинанням фонона випромінюється фотон із більш високою енергією, яка не менша ніж  $h\nu = \varepsilon_g + h\omega_q$ .

Наявні експериментальні дані вказують на потенціальну можливість створення на основі гетероструктур з SiGe або InGaAs наноострівцями новітніх оптоелектронних пристрій. Дослідження фізичних властивостей SiGe/Si гетероструктур з самоорганізованими квантовими точками показали, що наявність островців призводить до появи в спектрах фотолюмінесценції та електролюмінесценції сигналу в області довжин хвиль 1.3 – 1.55 мкм, що є важливим з точки зору передачі інформації системами оптоволоконного зв'язку. Було показано, що низьковимірні структури з SiGe наноострівцями мають чисельні переваги у порівнянні зі структурами з квантовими ямами. Однією з особливостей гетероструктур з наноострівцями є можливість керування спектральною смugoю фотодетекторів шляхом попереднього заселення/спустощення квантово-розмірних станів з потрібною енергією переходу. Наприклад, робота інфрачервоних Si фотодетекторів з SiGe квантовими точками, вбудованими в шар просторового заряду, в області 1.3 – 1.55 мкм ґрунтуються на міжзонних оптических переходах з тунелюванням електронів з квантово-розмірних станів валентної зони SiGe в зону провідності оточення Si. До того ж, наявність квантування руху носіїв заряду в поздовжньому напрямку, яке реалізується в SiGe/Si та InGaAs/GaAs гетеросистемах з квантовими точками, робить можливим використання внутрішньозонних переходів за участю квантово-розмірних станів для роботи фотодетекторів середнього та дальнього ІЧ діапазонів при нормальному падінні світла. Успішне

практичне застосування наногетероструктур SiGe/Si та InGaAs/GaAs в оптоелектроніці вимагає знання насамперед їх оптичних властивостей та їх взаємозв'язку з морфологією нанорозмірних об'єктів.

Розглянемо прояв ефектів розмірного квантування в спектрах випромінювання низькорозмірних структур. В залежності від типу гетероструктури формується переход I або II типу. Для систем  $Si_{1-x}Ge_x/Si$  при  $x > 0.3$  формується потенціальна яма для дірок у валентній зоні – маємо випадок гетероструктури II типу. В гетероструктурах I типу, прикладом яких є системи InGaAs/GaAs спостереження фотолюмінесценції зумовлено оптичними переходами між локалізованими станами зони провідності та валентної зони наноострівців.

Основними закономірностями фотолюмінесценції в квантоворозмірних гетероструктурах I та II типу є:

- 1) короткохвильовий зсув спектра фотолюмінесценції при зменшенні розміру нанорозмірних об'єктів;
- 2) неоднорідне уширення смуги фотолюмінесценції, зумовлене флюктуаціями товщини, компонентного складу та величин пружних деформацій квантових точок;
- 3) поляризаційну анізотропію випромінювання низьковимірних гетероструктур.

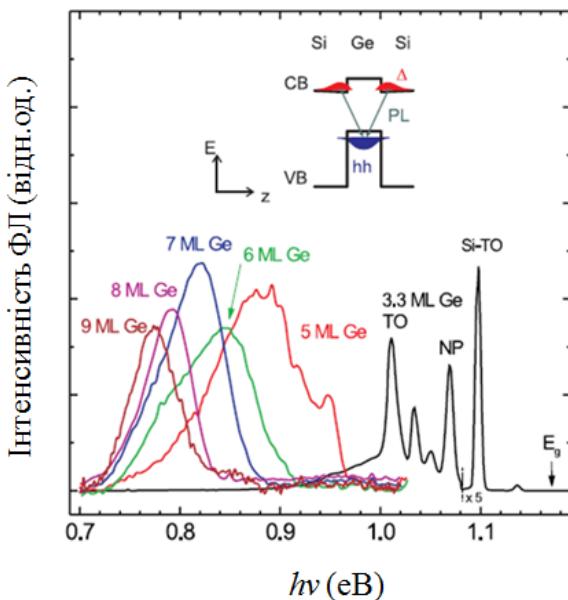
Процеси випромінювальної рекомбінації в непрямозонних Si та Ge є ускладненими внаслідок розташування в різних точках  $k$ -простору екстремумів зони провідності та валентної зони. Суттєвого зростання інтенсивності люмінесценції непрямозонних напівпровідників вдалося досягнути за рахунок локалізації носіїв заряду в кванторозмірних гетероструктурах Ge-Si. Механізм фотолюмінесценції в гетеросистемі Si-Ge є таким. Оскільки досліджувані об'єкти є гетеропереходом II типу, і наноострівці Ge є потенціальними ямами для дірок, які акумулюються в островцях та заряджають їх позитивно. Внаслідок кулонівського відштовхування локалізовані дірки

зосереджуються вздовж межі поділу наноострівця та його Si оточення. Додатній заряд створює поблизу островів квантову яму для електронів зони провідності Si оточення. В такому випадку люмінесценція в Ge наноострівцях зумовлена оптичними переходами фотозбуджених електронів з зони провідності оточення Si в локалізовані стани валентної зони наноострівців. Оптичні переходи виявляються прямыми в імпульсному просторі та непрямыми в координатному, оскільки електрони та дірки виявляються локалізованими по різні боки від межі поділу.

Спектроскопія фотолюмінесценції є одним з найбільш розвинених методів визначення оптичних властивостей та енергетичного спектру напівпровідниківих гетероструктур. Як приклад, на рис.3.10 наведені спектри фотолюмінесценції плівок Ge, вирощених на підкладці Si при температурі 510 °C, які підтверджують вищий квантовий вихід люмінесценції Ge КТ у порівнянні з КЯ. В структурах Ge-Si спостерігається смуга ФЛ в області 1.1 eВ, пов'язана з випромінюальною рекомбінацією електрон-діркових пар в Si та широка смуга ФЛ в області 0.7 - 0.9 eВ, пов'язана з випромінюальною рекомбінацією дірок, локалізованих в наноострівцях, та електронів, які перебувають в Si оточенні поблизу гетерограниці II типу.

При товщині Ge у 3.3 мношару (МШ) тривимірні острові не утворюються, і спостерігається характерний для КЯ спектр люмінесценції, який обумовлений випромінюальними переходами без випромінювання фонона та з випромінюванням ТО-фонона. При зростанні номінальної товщини до 5.5 МШ утворювались тривимірні острові і спектр ФЛ зазнавав змін – спостерігалась широка смуга із максимумом поблизу 0.9 eВ. При зростанні товщини Ge смуга ФЛ зазнавала зміщення в довгохвильову область, що є проявом ефектів розмірного квантування, коли зростання розмірів Ge КТ призводить до

збільшення енергії активації для дірок в валентній зоні Ge і зменшенням енергії оптичного переходу.

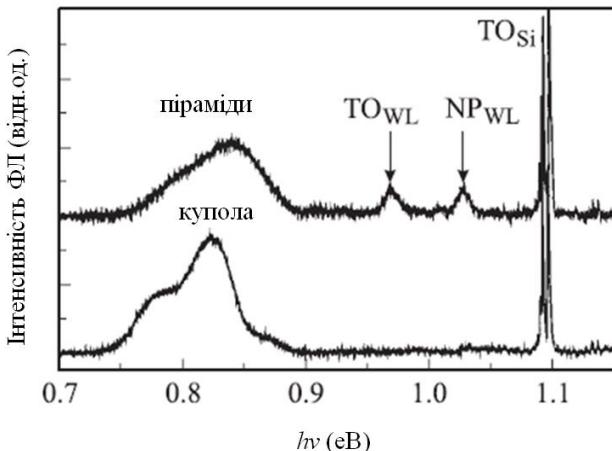


**Рисунок 3.10.** Спектри фотолюмінесценції плівок Ge при температурі 8 К із різною номінальною товщиною, вирощених на підкладці Si при температурі 510 °C.

В Ge-Si структурах локалізація електронів в потенціальній ямі зони провідності поблизу КТ не є ефективною. Суттєвого збільшення інтенсивності ФЛ (приблизно в 50 разів) досягнуто за рахунок легування структури домішкою *n*-типу. Іншим фактором, який суттєво впливає на люмінесцентні властивості Ge наноострівців є утворення твердого розчину в процесі осадження Ge при  $T > 600$  °C, що спричинено прискореною напруженнями дифузією Si в об'єм наноострівців. Даний ефект призводить до зменшення глибини потенціальної ями для дірок

в валентній зоні наноострівців  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  зміщення смуги ФЛ в високоенергетичну область спектра.

На рис.3.11 наведено спектри ФЛ гетероструктур з наноострівцями SiGe із формою «пірамід» та «куполів». В спектрах структур з SiGe пірамідами спостерігались безфононний (NP) та фононний піки (TO) піки, зумовлені переходами із зони провідності c-Si в квантово-розмірні стани важких дірок змочувального шару. Для обох типів нанострівців в області 0.7 – 0.9 еВ спостерігалася широка смуга, пов’язана з переходами електронів, локалізованих в Si оточенні в локалізовані стани валентної зони наноострівців. Пік куполоподібних острівців виявився зміщеним в область менших енергій, що пояснюється зменшенням впливу розмірного квантування в острівцях більшого розміру.



**Рисунок 3.11.** Спектри ФЛ гетероструктур з наноострівцями SiGe різної форми, які вирощені на напруженому шарі  $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ .

Гетероструктури InGaAs-GaAs з КТ або КЯ також випромінюють в спектральному діапазоні поблизу 1.3 мкм, проте мають на кілька порядків вищу квантову ефективність у порівнянні зі структурами з Ge КТ. Насамперед це зумовлено

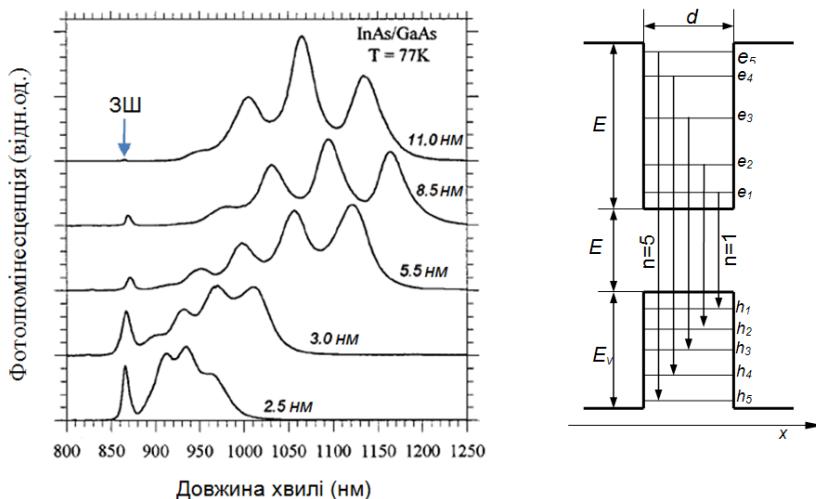
прямозонністю InGaAs та обмеженням руху як електронів, так і дірок. Після збудження електронно-діркові пари ефективно захоплюються локалізованими станами КТ і випромінювано рекомбінують за участю квантових станів зони провідності і валентної зони з однаковим квантовим номером. Як наслідок, спектри ФЛ InGaAs/GaAs гетероструктур з КТ обумовлені рекомбінацією нерівноважних електрон-діркових пар між дискретними енергетичними рівнями КТ.

Внаслідок значної більшості швидкості внутрішньозонної релаксації носіїв електронів (дірок) між квантово-розмірними станами зони провідності (валентної зони) у порівнянні з темпом міжзонної рекомбінації в спектрах ФЛ гетероструктур I типу за низької густини потужності збудження ( $< 0.1 \text{ Вт}/\text{см}^2$ ) переважно спостерігаються лише переходи за участю основних станів. Наприклад, для InGaAs КТ час життя нерівноважної електрон-діркової пари складає величину  $\sim 1 \text{ нс}$ . Для спостереження випромінювальних переходів за участю збуджених станів використовують високі потужності, достатні для заповнення нерівноважними носіями основного та збуджених станів КТ, що призводить до появи додаткових високоенергетичних смуг. На рис. 3.12 наведено спектри фотолюмінесценції InAs/GaAs гетероструктур з КТ різного розміру, виміряні за сильного збудження при 77 К. Смуга поблизу 870 нм зумовлена міжзонними випромінювальними переходами в змочувальному шарі. Поява інших смуг ФЛ на спектрах спричинена переходами електронів між квантово-розмірними станами зони провідності та валентної зони InAs КТ з однаковим квантоюм числом. Як бачимо, має місце короткохвильовий зсув смуг ФЛ від КТ при зменшенні висоти, і зменшення кількості спостережуваних міжзонних переходів між квантово-розмірними станами.

Одним із основних чинників, який зумовлює неоднорідне уширення смуг ФЛ гетероструктур InGaAs/GaAs та SiGe/Si є розкид за розмірами КТ, який призводить до розкиду енергій

міжзонних переходів. Іншими причинами уширення є флюктуації компонентного складу всередині КТ, які можуть бути мінімізовані вибором оптимальних умов росту, та просторовий розподіл механічних напружень.

Наприклад, при низьких температурах типове значення ширини смуги фотолюмінесценції в наноострівцях SiGe/Si складає 60-80 мeВ. Основний внесок в неоднорідне уширення смуги ФЛ SiGe КТ вносить розмірна залежність енергії квантового обмеження в наноструктурах. В куполоподібних острівцях великого розміру основний внесок в неоднорідне уширення смуги вносять флюктуації компонентного складу наноострівців і просторовий розподіл деформацій. При зниженні температури ширина смуги, як правило, зменшується, а максимум зміщується в короткохвильову область спектра.

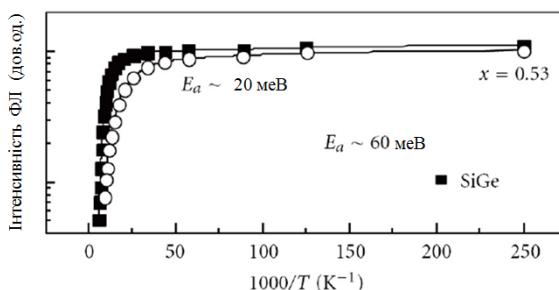


**Рисунок 3.12.** Спектри фотолюмінесценції InAs/GaAs гетероструктур з КТ різної висоти, виміряні при 77 К та збуджені із густиною потужності  $\sim \text{kBt}/\text{cm}^2$ .

Типові температурні залежності фотолюмінесценції гетероструктур з наноострівцями SiGe наведені на рис.3.13. При низьких температурах сигнал фотолюмінесценції практично не залежить від температури, а при збільшенні температури експоненціально зменшується зі зростанням  $T$ . Температурну залежність фотолюмінесценції наноострівців SiGe або InGaAs в багатьох випадках можна описати залежністю:

$$I(T) = \frac{I_0}{1 + C_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{a1}}{kT}\right) + C_2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{a2}}{kT}\right)}, \quad (3.22)$$

де  $\varepsilon_{a1}$ ,  $\varepsilon_{a2}$  - енергії активації температурного гасіння фотолюмінесценції,  $C_1$ ,  $C_2$  - константи.



**Рисунок 3.13.** Температурні залежності фотолюмінесценції гетероструктур з наноострівцями  $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ .

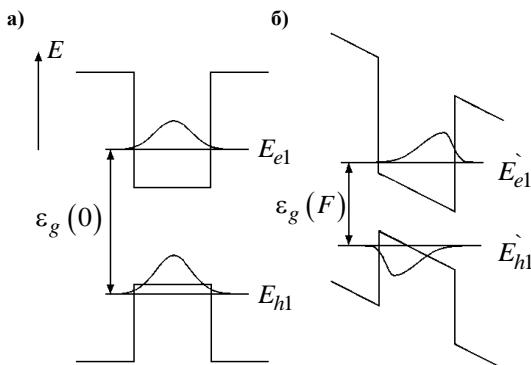
У випадку гетероструктур SiGe/Si  $\varepsilon_{a1} \sim 10$  меВ є енергією дисоціації екситону, локалізованого в наноострівцях. Значення  $\varepsilon_{a2}$  визначається термічною емісією дірок з основного квантоворозмірного стану наноострівців. В наноострівцях  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , збагачених Ge, типові значення енергії активації складають 300-

400 мeВ, і значна кількість дірок виявляються локалізовані в КТ. Це робить можливим спостереження фотолюмінесценції в гетероструктурах SiGe/Si при кімнатній температурі.

### 3.5. Квантово-розмірний ефект Штарка

Зовнішнє електричне поле може істотно змінювати оптичні характеристики напівпровідниківих структур. Такі зміни отримали назву *електрооптичних ефектів*. Якщо електричне поле змінює коефіцієнт відбивання, тоді маємо *ефект електровідбивання*. Зі зміною коефіцієнта поглинання пов'язаний *ефект електропоглинання*. Електрооптичні ефекти використовують в оптоелектронних пристроях для керування світлом за допомогою електричних полів. Ефект Франца-Келдиша в об'ємних напівпровідниках занадто слабкий, щоб використовувати його на практиці. У низькорозмірних структурах просторова локалізація призводить до нових ефектів електропоглинання, які набагато сильніші, ніж в об'ємних матеріалах. Зокрема, це робить можливим створювати на базі квантово-розмірних структур оптичні модулятори на основі ефектів електропоглинання та фотопровідності.

Розглянемо електрооптичний ефект в квантовій ямі. У випадку, коли вектор напруженості електричного поля паралельний площині квантової ями, ситуація дуже подібна до випадку об'ємного напівпровідника, оскільки електрони можуть вільно рухатись у цьому напрямку. Якщо ж електричне поле прикладене перпендикулярно до площини квантової ями, то його дія на енергетичний спектр електронів подібна до ефекту Штарка в атомах. Як наслідок, спостережуваний ефект зміни форми спектра оптичного поглинання КЯ в електричному полі називають *квантово-розмірним ефектом Штарка*.



**Рисунок 3.14.** Зонна структура та хвильові функції основних станів квантової ями за відсутності (а) та наявності (б) постійного електричного поля, прикладного перпендикулярно до її площини.

Розглянемо вплив однорідного електричного поля на спектр дозволених станів прямокутної потенціальної ями скінченної глибини. Якщо спрямувати поле вздовж осі  $z$  (перпендикулярно до площини квантової ями), то потенціальну енергію електрона в зоні провідності можна подати у вигляді:

$$U(z) = V(z) + qFz, \quad (3.23)$$

де  $F$  - напруженість електричного поля,  $V(z)$  - потенціальний рельєф квантової ями за відсутності електричного поля.

Наслідком прикладення електричного поля вздовж напрямку квантового обмеження є деформація хвильових функцій і зменшення енергії локалізованих станів носіїв заряду. На рис.3.14 показано, яким чином потенціальний рельєф прямокутної потенціальної ями для електронів нахиляється під дією поля (при  $F \neq 0$ ). Хвильові функції носіїв заряду протилежного знака (електронів і дірок) деформуються по-різному. А саме, хвильові функції електронів зміщуються в бік, протилежний до напрямку поля, а хвильові функції дірок - у напрямку прикладеного поля.

При невеликих напруженостях електричного поля

$$\left( eFd \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* d^2} \right),$$

розв'язуючи рівняння Шредінгера, можна отримати аналітичний вираз (у другому порядку теорії збурень) для зміщення енергії основного стану, локалізованого в квантовій ямі:

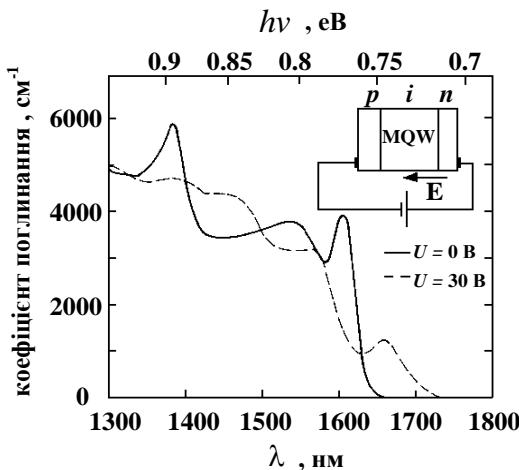
$$\Delta E = E_1(F) - E_1(0) = -\frac{2.19 \times 10^{-3}}{\hbar^2} e^2 m^* d^4 F^2, \quad (3.24)$$

де  $m^*$  - ефективна маса,  $d$  - ширина квантової ями.

Зниження енергії локалізованих станів носіїв заряду призводить до зсуву краю смуги міжзонного поглинання квантових ям в область менших енергій (так званий «червоний» зсув). Відзначимо дуже сильну залежність величини зсуву від ширини КЯ ( $\sim d^4$ ) та квадратичну залежність від напруженості електричного поля. Крім того, внаслідок лінійної залежності  $\Delta E$  від величини ефективної маси величина зсуву для важких дірок на практиці виявляється значно більшою, ніж для рівнів електронів і легких дірок. Наприклад, для квантової ями товщиною 10 нм у GaAs/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As рівняння (2.7) передбачає зсув для рівнів важких дірок та електронів - 10 та - 2 мeV відповідно. Внаслідок цього викликане електричним полем зменшення ширини забороненої зони квантової ями зумовлюється переважно внеском важких дірок.

На рис. 3.15 показаний зсув енергій міжзонних переходів у квантовій ямі під впливом електричного поля. Для досліджень була обрана гетероструктура, яка складалася зі структури, що містила 100-періодну структуру з шарів InGaAs товщиною 10 нм та шарів InP товщиною 10 нм – тобто багатошарова яма (MQW). Для спостереження квантово-розмірного ефекту Штарка квантові ями розміщують в  $i$ -області  $p-i-n$ -діода, що дозволяє досягти значних величин напруженостей електричного поля.

При освітленні поверхні гетероструктури генерувався фотострум, пропорційний добутку коефіцієнта поглинання на потік випромінювання. Відповідна експериментальна схема наведена на вставці до рис.2.9.



**Рисунок 3.15.** Квантово-розмірний ефект Штарка в багатошаровій гетероструктурі з InGaAs.

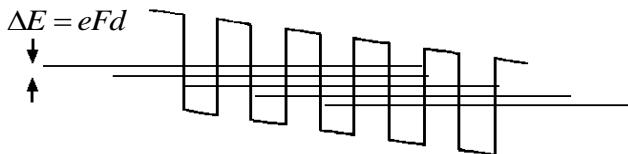
Квантово-розмірний ефект Штарка використовують для модуляції інтенсивності світла, що проходить через структуру. Причому, ефективність модуляції є значно вища в порівнянні з приладами на основі об'ємних напівпровідників.

### 3.6. Електрооптичні ефекти в надрешітках

В зв'язаних КЯ та надрешітках прикладене електричне поле сильно впливає на взаємодію між ямами. Насамперед, це пов'язано з лінійною залежністю в однорідному електричному полі електростатичної енергії електронів від відстані. При цьому,

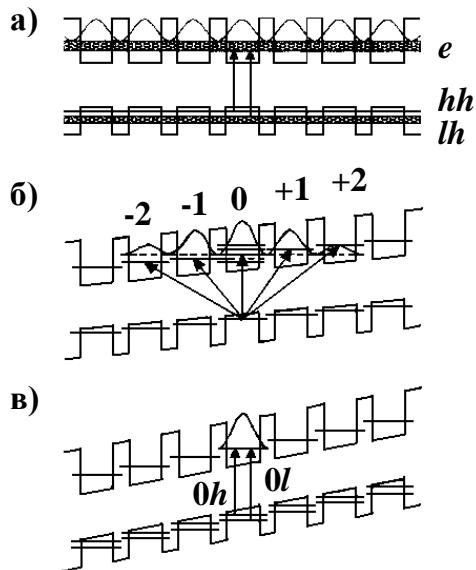
має місце зсув енергетичних рівнів між сусідніми КЯ на величину  $\Delta E = qFd$ , де  $d$  - відстань між сусідніми КЯ (Рис.3.16).

Розглянемо, яким чином прикладання сталого електричного поля змінює електронні та оптичні властивості надрешіток. Як уже зазначалося, хвильові функції носіїв заряду в надрешітках можуть бути повністю делокалізованими, а їх енергії розподіляються в мінізонах завдяки сильному зв'язуванню між квантовими ямами. Мінізони в надрешітках можна розглядати як суперпозицію станів одиночних квантових ям, утворених завдяки взаємодії між ямами. У подібний спосіб зони в об'ємному кристалі розглядають як суперпозицію станів окремих атомів.



**Рисунок 3.16.** Зона провідності надрешітки за наявності електричного поля.

У надрешітках електричне поле, прикладене вздовж напрямку росту структури, дуже сильно впливає на взаємодію між ямами. При слабкому електричному полі  $F$  ( $eFd < \Delta$ , де  $F$  - напруженість прикладеного електричного поля,  $d$  - період надрешітки,  $\Delta$  - ширина мінізони) виродження енергій в мінізонах зникає, що призводить до появи серії еквідистантних енергетичних рівнів. Систему рівнів, яка виникає при цьому, називають *сходинками Ванньє-Штарка* (рис. 3.17). Відстань між станами складає  $\Delta E = eFd$ , а їх хвильові функції поширюються на кілька періодів надрешітки з довжиною локалізації  $L = \frac{\Delta}{eF}$ .



**Рисунок 3.17.** Зонна діаграма надгратки I типу за відсутності (а) та наявності (б) і (в) поперечного електричного поля.

При значеннях напруженості електричного поля порядку  $F \approx \frac{\Delta}{ed}$  довжина локалізації  $L$  стає рівною одному періоду. Це відповідає режиму повної локалізації – стани сходинки Штарка стають локалізованими в певній квантовій ямі. Такий випадок отримав назву *режиму локалізації Ванньє-Штарка*.

Прикладання електричного поля до надрешіток робить можливим спостереження оптичних переходів за участю станів сходинок Ванньє-Штарка. За відсутності електричного поля в надрешітках можуть відбуватися лише переходи між краями мінізон зони провідності та валентної зони – так звані *внутріямні переходи* (рис.3.17,а). При напруженості поля  $F < \frac{\Delta}{ed}$

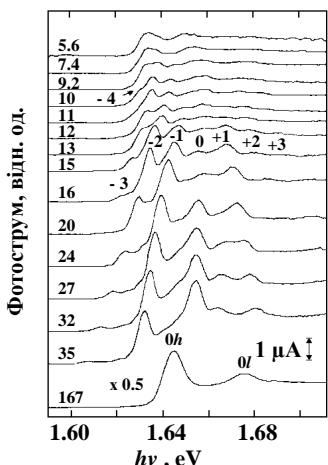
спектр оптичного поглинання розщеплюється на серію піків, які відповідають *переходам між ямами* за участю різних станів сходинок Штарка (рис.3.17,б). Енергії таких міжзонних переходів між штарківськими станами валентної зони та зони провідності з індексами  $\ell$  та  $m$  визначаються виразом:

$$E_{mn} = E_0(F) + (n - m)eFd, \quad (2.8)$$

де  $E_0$  – енергія міжзонного переходу в ізольованій квантовій ямі.

Оскільки ймовірність оптичного переходу між двома станами пропорційна перекриванню відповідних електронних та діркових хвильових функцій, то інтенсивність між'ямних переходів ( $v = n - m \neq 0$ ) швидко зменшується при збільшенні величини  $|n - m|$ . Тому кількість між'ямних переходів, які спостерігаються на практиці, є обмеженою. Слід також враховувати, що завдяки великій ефективній масі стани важких дірок різних квантових ям зв'язані слабко і стають повністю локалізованими вже за достатньо малих напруженостей електричного поля.

У більш сильних електричних полях,  $\left( F > \frac{\Delta}{ed} \right)$ , коли реалізується випадок локалізації Штарка, переходи між ямами зникають і спостерігається лише пік, який відповідає переходам усередині ями (Рис.3.17,в). Границя енергія такого переходу складає  $E_0 + (\Delta_e + \Delta_h)/2$ .



**Рисунок 3.18.** Спектри фотоструму в надрешітці ( $40/20 \text{ \AA}$ ) на основі  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  при різних величинах прикладеного електричного поля. Цифрами позначено індекси переходів між станами сходинок Штарка.

одної квантової ями, а внесок 6-и інших – між'ямним переходам із  $v = \pm 1, \pm 2, \pm 3$ . При подальшому збільшенні електричного поля поступово зникали переходи з більшим індексом  $v$ . При  $F = 167 \text{ kV/cm}$  знову спостерігалися лише внутріямні переходи, що відповідало режиму локалізації Ванньє. Енергії цих переходів зазнали зсуву в область більших енергій («червоний» зсув) порівняно з енергіями переходів у надрешітці за відсутності електричного поля.

Як приклад, на рис. 3.18 наведені спектри фотоструму в надрешітці ( $40/20 \text{ \AA}$ ) на основі  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  за різних величин прикладеного електричного поля. При напруженості  $\sim 6 \text{ kV/cm}$  спостерігалися лише внутріямні переходи за участю станів важких ( $0h$ ) і легких дірок ( $0l$ ). При збільшенні напруженості спостерігалися також між'ямні переходи з індексами  $v = \pm 1, \pm 2, \dots$ . Зокрема, за величини напруженості поперечного поля  $\sim 16 \text{ kV/cm}$  спостерігався внесок 7-ми типів міжзонних переходів: один із них відповідав електронним переходам у межах

### 3.7. Фотоелектричний ефект у гетеропереході

На основі матеріалів з гетеропереходом можна створити фотодіод. Зазвичай світло падає з боку напівпровідника, ширина забороненої зони якого більша (Рис. 3.19). У такому випадку кванти світла з енергіями  $h\nu$  в діапазоні від  $E_{g1}$  до  $E_{g2}$  вільно (без поглинання) проходять крізь широкозонний напівпровідник і поглинаються в матеріалі з меншою ширинорою забороненої зони. Внаслідок цього утворюються нерівноважні електронно-діркові пари поблизу межі розділу.

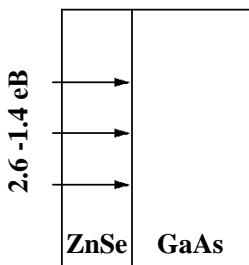
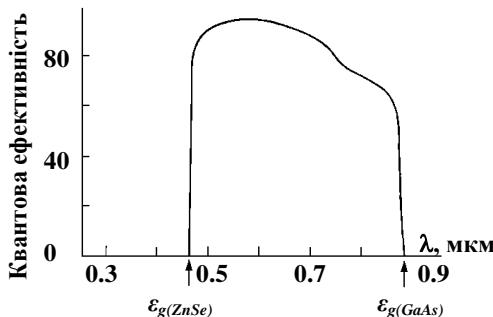


Рисунок 3.19. Гетероперехідний фотодіод.

Кванти світла з енергіями  $h\nu > \epsilon_g 2$  поглинаються в приповерхневому шарі і не досягають області просторового заряду гетеропереходу. Спектральна залежність фотоструму матиме вигляд, наведений на Рис.3.20. Як бачимо, фотострум спостерігається лише при освітленні квантами з енергіями  $\epsilon_g(\text{GaAs}) < h\nu < \epsilon_g(\text{ZnSe})$  з боку широкозонного напівпровідника (ZnSe). Цей ефект відомий як «ефект вікна». Він має істотне практичне значення, оскільки дозволяє відносно легко мінімізувати негативний вплив поверхневої рекомбінації на величину фоточутливості. Для гетеропереходів можна створити межу розділу на відстані від поверхні, достатній для усунення впливу поверхневої рекомбінації.

У фотодіодах, виготовлених з одного матеріалу, створювати переход на великий відстані від освітлювальної поверхні недоцільно. Значна кількість квантів буде поглинатися поза областью просторового заряду, що істотно зменшує величину фоточутливості. У гетеропереходах широкозонний матеріал використовується як «вікно», прозоре для оптичного випромінювання заданого спектрального діапазону. Це дозволяє збільшити відстань від площини переходу до освітленої поверхні, тобто зменшити вплив поверхневої рекомбінації без оптичних втрат.

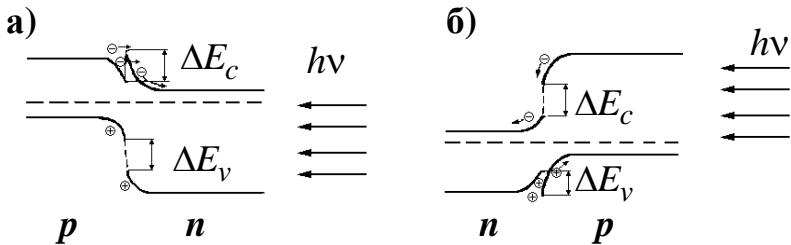


**Рисунок 3.20.** Спектральна залежність квантової ефективності ZnSe-GaAs гетеропереходу.

Розглянемо інші особливості перебігу нерівноважних процесів у гетеропереходах.

Поява фотоструму (фотоЕРС) в гомо- та гетеропереходах зумовлена просторовим розділенням нерівноважних електрон-діркових пар контактним полем переходу, тобто пов'язана з проходженням фотозбуджених носіїв через межу розділу. Величина фотовідгуку в гетероструктурах визначається формою та товщиною потенціального бар'єру та рекомбінацією через стани межі розділу. У загальному випадку гетеропереходи характеризуються розривом як у зоні провідності, так і в валентній зоні. При освітленні гетероструктур із боку широкозонного напівпровідника розриви зон заважають розділенню нерівноважних носіїв заряду (рис. 3.21). Наприклад, якщо широкозонний матеріал має  $n$ -тип провідності, а вузькозонний має  $p$ -

тип утворюється розрив зони провідності типу «гак» і типу «стінка» в валентній зоні (рис.3.21,а). Зі зміною типів провідності матеріалів гетеропереходу на протилежні, навпаки, розрив зони провідності типу «стінка» має місце в зоні провідності.



**Рисунок 3.21.** Енергетичні діаграми гетеропереходів.

Для бар'єру в зоні провідності висотою  $\Delta E_c$ , який наведено на рис. 3.21,а, фотострум може зумовлюватися двома механізмами – надбар'єрним проходженням електронів і тунельним проходженням крізь бар'єр. У випадку, коли  $\Delta E_c \gg kT$  та  $h\nu \leq \epsilon_g^{\max} + \Delta E_c$ , домінуючу роль у виникненні фотоструму відіграє тунелювання. Якщо напруга зміщення прикладена в зворотному напрямку, величина  $\Delta E_c$  залишається незмінною, а товщина шару просторового заряду зростає як  $w \sim (U_k - U)^{1/2}$ ,  $N_d \ll N_a$ . При цьому, товщина бар'єру на висоті  $\Delta E_c$  зменшується. Відтак фотострум, зумовлений тунелюванням неосновних нерівноважних носіїв заряду крізь бар'єр, зростає зі збільшенням прикладеної напруги зміщення  $U$ :

$$I_\phi = I_0 \exp\left(-\frac{e(U_k - U)^{-1/2}}{kT}\right). \quad (3.25)$$

### **3.8. Фотоелектричні властивості гетероструктур з квантовими ямами та квантовими точками**

Оптичні переходи за участю локалізованих станів квантових точок SiGe та InGaAs використовуються в інфрачервоних фотодетекторах, які здатні працювати при кімнатних температурах. Активна область таких фотодетекторів містить, як правило, кілька десятків шарів з квантовими точками, які розділені проміжними шарами того ж матеріалу, з якого виготовлена підкладка.

Фоточутливість гетероструктур SiGe/Si та InGaAs/GaAs в області спектра, де матеріал підкладки (Si або GaAs відповідно) є прозорим, може бути зумовлена різними типами оптичних переходів – міжзонними або внутрішньозонними. Фотострум при міжзонному поглинанні світла з енергією квантів  $h\nu < \epsilon_g^{Si}$ , вперше зареєстровано за допомогою фотодіодів на основі гетероструктур Ge/Si з нанокластерами Ge в області просторового заряду *p-n* переходу. Фотострум в області  $h\nu < 1.0$  еВ зумовлений оптичними переходами з локалізованих станів валентної зони Ge КТ в зону провідності Si оточення (Рис.3.22).

У випадку гетероструктур I типу, до яких належить гетеросистема InGaAs/GaAs, міжзонні переходи в InAs КТ здійснюються за участю локалізованих станів зони провідності та валентної зони. Спектр фотоструму *p-i-n* гетероструктури InGaAs-GaAs з КТ InAs в області *i*-GaAs при 290 К наведено на рис.3.23. Для того, щоб дати внесок в фотострум або фотоЕРС нерівноважні носії заряду, локалізовані в КТ InAs, мають опинитись в делокалізованих станах GaAs. Встановлено, що в *p-i-n* гетероструктурах основним механізмом емісії носіїв з локалізованих станів КТ є термічно-активоване тунелювання (схематично даний процес зображене на вставці до рис.3.23).

Загальна швидкість викиду  $\tau^{-1}$  внаслідок такого процесу є сумою

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{th}} + \frac{1}{\tau_{tun}}.$$

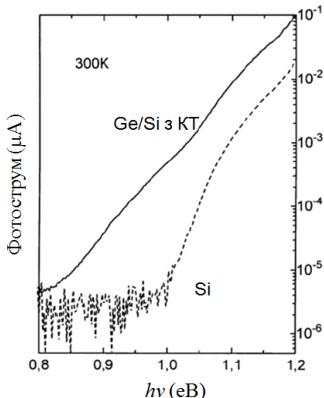


Рис. 3.22. Спектр фотоструму фотодіоду на основі гетероструктури Ge-Si при 290 К у порівнянні зі структурою без Ge наноострівців в області просторового заряду.

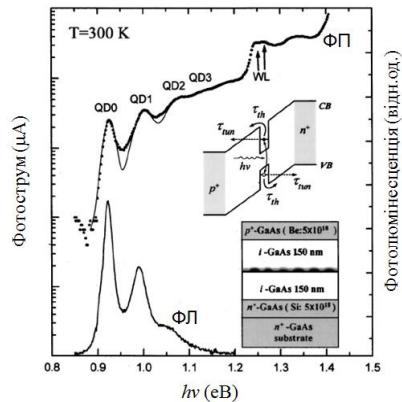


Рис.3.23. Спектр фотоструму  $p$ - $i$ - $n$  гетероструктури InGaAs-GaAs з InAs KT в області  $i$ -GaAs при 290 К. Для порівняння наведено спектр ФЛ, зумовлений міжзонними переходами в InAs KT.

Швидкість термічного викиду  $1/\tau_{th}$  в потенціальній ямі шириною  $L_z$  залежить від різниці енергій квантово-розмірного  $E_n$  та енергії проміжного рівня  $E_I$ :

$$\frac{1}{\tau_{th}} = \frac{\hbar\pi}{4m^*L_z} \exp\left[-(E_n - E_I)/kT\right]. \quad (3.26)$$

Швидкість викиду внаслідок тунелювання з проміжного рівня із глибиною залягання  $E_I$  рівна:

$$\frac{1}{\tau_{tun}} = \frac{eF}{4\sqrt{2m^*}} E_I^{1/2} \exp\left[ \frac{-4\sqrt{2m^*} E_I^{3/2}}{3eF\hbar} \right], \quad (3.27)$$

де  $F$  - напруженість електричного поля поблизу КТ.

Таким чином, механізм фоточутливості гетероструктур з нанооб'єктами в області міжзонного оптичного поглинання містить такі етапи:

1. Генерацію електрон-діркових пар внаслідок міжзонних переходів за участю локалізованих станів нанооб'єктів.
2. Емісію в матеріал оточення нерівноважних носіїв, локалізованих в квантово-розмірних станах нанооб'єктів.
3. Дифузію та/або дрейф нерівноважних носіїв заряду.
4. Просторове розділення нерівноважних електронів та дірок внутрішнім електричним полем потенціального бар'єру.

Перевагою розміщення нанооб'єктів в області просторового заряду  $p-n$  переходів, гетеропереходів або бар'єрів Шотткі є можливість регулювання заселеності носіями заряду квантово-розмірних станів, що дозволяє спостерігати як міжзонні, так і внутрішньозонні переходи за участю квантово-розмірних станів в залежності від величини прикладеної напруги зміщення.

Дискретний енергетичний спектр напівпровідниковых гетероструктур з КТ дозволяє створювати на їх основі фоточутливі пристрої, що здатні працювати в середньому та дальньому інфрачервоному діапазоні. В основу їх роботи покладено використання внутрішньозонних переходів між квантово-розмірними станами. Фотодетектори на основі гетероструктур InAs/GaAs як правило працюють на основі переходів за участю станів зони провідності. Значний ( $\sim 0.7x$  еВ) розрив валентної зони для гетеропереходів  $Si_{1-x}Ge_x$ -Ge дозволяє використовувати переходи між станами валентної зони КТ  $Si_{1-x}Ge_x$  або КЯ у фотодетекторах середнього ІЧ діапазону. Як приклад, на рис.3.24 наведено спектри фотоструму багатошарової  $p^+ - i - p^+$  гетероструктури з 10 шарами Ge КТ в активній області  $i$ -Si, виміряні при нормальному падінні

збуджувального випромінювання. Поздовжній розмір наноострівців ~ 70 нм, висота ~ 6.5 нм, а поверхнева густина наноострівців складала  $4.5 \cdot 10^9$  см<sup>-2</sup>. Фотострум в діапазоні 200 – 600 мeВ при 20 К зумовлений переходами дірок з основного квантово-розмірного стану валентної зони КТ Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> в делокалізовані стани валентної зони Si та змочувального шару.

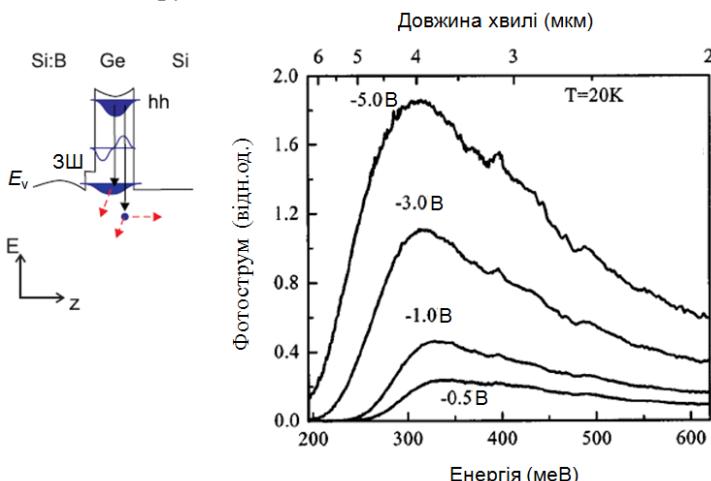


Рис. 3.24. Спектри фотоструму  $p^+ - i - p^+$  гетероструктури з 10 шарами Ge КТ в активній області  $i$ -Si при 20 К та різних величинах прикладеної напруги зміщення.

Спектр фоточутливої InAs/GaAs багатошарової гетероструктури з InAs КТ, розділеними проміжними шарами GaAs, наведено на Рис.3.25. Фотострум в інфрачервоній області зумовлений електронними переходами з локалізованих станів КТ в делокалізовані зони провідності InAs. Регулювання заселеності електронами станів КТ здійснювалось шляхом прикладання напруги зміщення між контактними шарами  $n^+$ -GaAs. Це дозволило спостерігати електронні переходи за участю основного електронного стану КТ двох різних розмірів із максимумами поблизу 5.6 мкм та 10 мкм. Так, за невеликих напруг ( $\sim -0.4$  В) заповнений електронами був лише

основний стан КТ більшого розміру, для яких квантово-розмірний стан розташований глибше відносно дна зони провідності GaAs, що і зумовило спостереження смуги фотоструму поблизу 5.6 мкм.

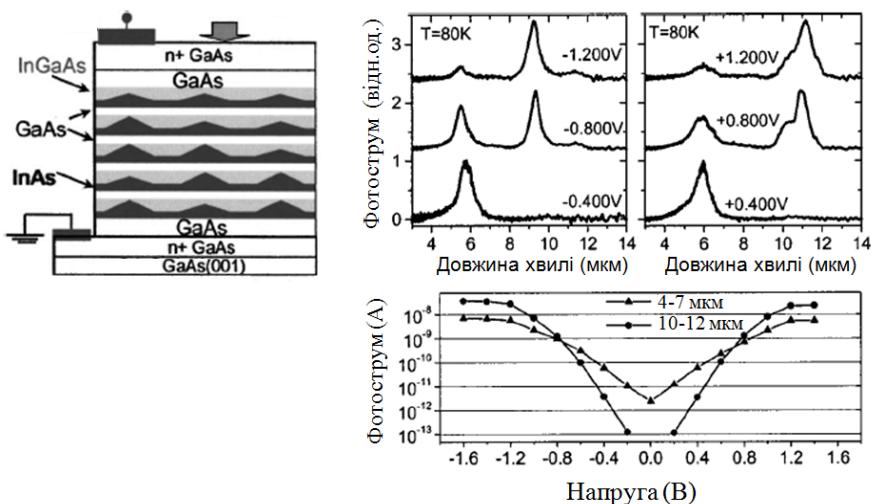


Рис. 3.25. Схема InAs/GaAs багатошарової гетероструктури з InAs КТ, спектри фотоструму при різних напругах зміщення та залежності фотоструму від прикладеної напруги.

Перевагами інфрачервоних фотодетекторів з КТ є:

1. низький темновий струм;
2. можливість працювати за кімнатних температур в близькому та середньому ІЧ діапазоні;
3. можливість спостереження внутрішньозонних переходів при нормальному падінні збуджувального випромінювання.

[Equation Section \(Next\)](#)

## **Література**

1. Питер Ю, Мануэль Кардона. Основы физики полупроводников. – М. Физматлит, 2002. – 560 с.
2. Розеншер Э., Винтер Б. Оптоэлектроника. – М. Техносфера, 2006. – 592 с.
3. Мартинес-Дуарт Дж. М., Мартин-Палма Р.Дж. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. – М. Техносфера, 2007. – 368 с.
4. Mark Fox. Optical properties of solids / Oxford University Press, 2001. – 281 р.
5. О.В.Вакуленко, М.П.Лисица. Оптическая перезарядка примеси в полупроводниках. – К. Наукова думка, 1992. – 206 с.
6. Л.Е.Воробьев, Е.Л.Ивченко, Д.А.Фирсов, В.А.Шалыгин. Оптические свойства наноструктур: Учеб. пособие / Под. ред. Е.Л.Ивченко и Л.Е.Воробьева СПб. Наука, 2001. – 188 с.
7. Ю.И.Уханов. Оптические свойства полупроводников. – М., Наука, 1977. – 368 с.
8. Оптические свойства полупроводников (полупроводниковые соединения типа A<sup>III</sup>B<sup>V</sup>) / Под. ред. Р.Уиллирдсона и А.Бира. М. Мир, 1970. – 488 с.
9. Б.Ридли.Квантовые процессы в полупроводниках.– М. Мир, 1986. – 304 с.
10. John H. Davies. The physics of low-dimensional semiconductors. An introduction. – Cambridge university press, 1998. – 425 p.
11. R.L.Greene, K.K.Bajaj, D.E.Phelps. The energy levels of Wannier excitons in GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum-well structures. // Phys.Rev.B. – 1984. – v.29, N4. – p.1807- 1812.
12. Вакуленко М.О., Вакуленко О.В. Тлумачний словник із фізики. 6644 статті. – К.: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2008. – 767 с.
13. В.Л.Бонч-Бруевич, С.Г.Калашников. Физика полупроводников. – М. Наука, 1990. – 672 с.

14. Анималу А. Квантовая теория кристаллических тел. – М.: Мир, 1981.
15. А.Милнс, Д.Фойхт. Гетеропереходы и переходы металл-полупроводник. – М. Мир, 1975. – 432 с.
16. А.Фаренбрух, Р.Бьюб. Солнечные элементы: теория и эксперимент. – М. Энергоатомиздат, 1987. – 280 с.
17. В.В.Сердюк. Физика солнечных элементов. – О. Логос, 1994. – 365 с.
18. Electronic states and optical transitions in semiconductor heterostructures. Fedor T. Vasko, Alex V. Kuznetsov. N -Y, Springer, 1998.
19. Рогальский А. Инфракрасные детекторы /А. Рогальский; Пер. с англ. А.В. Войцеховский, С.Н. Несмелов, А.Г. Коротаев. Новосибирск. Наука. 2003.
20. H.T. Grahn. Semiconductor superlattices. Grown and electronic properties. – World scientific 2008.
21. C. Klingshirn. Semiconductor optics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
22. В.В. Покропивний, Л.В. Поперенко. Фізика наноструктур, Київ, 2008, 220c.
23. S.R. Elliott. The Physics and Chemistry of Solids, John Wiley & Sons Ltd., Chichester 1998, 770p.