

Wrocław, 14.06.2021r.

Sprawozdanie

Lasery na Bazie Struktur Półprzewodnikowych

Miłosz Rybak

nr albumu: 244765

kierunek: Inżynieria Kwantowa

rok/semestr: 1 sem. II st.

materiały: GaInAsSb, AlGaAsSb

Opis systemu materiałowego

Badane przeze mnie materiały (GaInAsSb, AlGaAsSb) są strukturami zbudowanymi ze związków grup III i V. Są aktywnie badane w ostatnich latach z powodu dużej liczby potencjalnych zastosowań w optoelektronice. Studnie kwantowe z tych materiałów charakteryzują pożądane właściwości fotoluminescencji czy absorpcji w kontekście budowy emiterów lub detektorów. Dlatego też częstym zastosowaniem jest używanie ich w obszarach aktywnych emiterów półprzewodnikowych. W zależności od budowy konkretnego laseru, czy składu procentowego poszczególnych komponentów, długości fal emitowanych fotonów mogą wynosić np. dla diód laserowych zbudowanych jako heterozłącza ze studniami kwantowymi InGaAsSb/AlGaAsSb: 2.5 μm [1], 2.1 μm [2], 1.9 μm [3], 2.24-3.04 μm [4] [5] lub diód lawinowych: 1.31 μm , 1.55 μm [6], 1.05 [7]. Standardowym zastosowaniem tych materiałów są też fotodetektory: 1.7-2.6 μm [8], 2.2-2.3 μm [9] czy ogniwa termofotowoltaiczne [10, 11, 12].

Tabela z najważniejszymi parametrami materiałowymi [13, 14]

	GaAs	GaSb	InAs	InSb	AlAs	AlSb
a_{ic} (Å)	5.65325	6.0959	6.0583	6.4794	5.6611	6.1355
E_g (eV)	1.519	0.812	0.417	0.235	3.099	2.386
α (meV/K)	0.5405	0.417	0.276	0.32	0.885	0.42
β (K)	204	140	93	170	530	140
VBO (eV)	-0.80	-0.03	-0.59	0	-1.33	-0.41
Δ_{SO} (eV)	0.341	0.76	0.39	0.81	0.28	0.676
γ_1	6.98	13.4	20.0	34.8	3.76	5.18
γ_2	2.06	4.7	8.5	15.5	0.82	1.19
γ_3	2.93	6.0	9.2	16.5	1.42	1.97
a_c	-7.17	-7.5	-5.08	-6.94	-5.64	-4.5
a_v	-1.16	-0.8	-1.00	-0.36	-2.47	-1.4
b	-2.0	-2.0	-1.8	-2.0	-2.3	-1.35
d	-4.8	-4.7	-3.6	-4.7	-3.4	-4.3
C_{11}	1221	884.2	832.9	684.7	1250	876.9
C_{12}	566	402.6	452.6	373.5	534	434.1
C_{44}	600	432.2	395.9	311.1	542	407.6
m_{HH}^*/m_0	0.55	0.37	0.36	0.38	0.81	0.9
m_{LH}^*/m_0	0.083	0.043	0.026	0.014	0.16	0.13
m_{SO}/m_0	0.165	0.12	0.14	0.10	0.30	0.317
par. nielini.	GaInAs	GaInSb	GaAsSb	InAsSb	AlGaAs	AlGaSb
E_g (eV)	0.477	0.415	1.43	0.67	-0.127+1.31x	-0.044+1.22x
VBO (eV)	-0.38	0	-1.06	0	0	0

Opis modeli i metod

Interpolacje trójskładnikowe:

$$P_{XY}(x) = xP_X + (1 - x)P_Y - x(1 - x)b_{XY},$$

Interpolacje czteroskładnikowe:

$$P_{WXYZ}(x) = (x(1 - x)[yP_{WX}(x) + (1 - y)P_{YZ}(x)] + y(1 - y)[xP_{WY}(y) + (1 - x)P_{XZ}(y)]) \cdot (x(1 - x) + y(1 - y))^{-1}$$

Wpływ temperatury:

$$alc(T) = alc + (300\text{ K} - T) \cdot alc(T)$$

$$Eg(T) = Eg(T = 0\text{ K}) - \alpha T^2 \beta + T$$

Grubość krytyczna (Matthews-Blakslee):

$$hc = b/2\pi f \cdot (1 - 0.25\nu)/(1 + \nu) (\ln(hc/b) + 1),$$

gdzie $b = alc \sqrt{2}$,

$$\nu = C_{12}/(C_{11} + C_{12}),$$

$$f = |alc_{\text{podłoża}} - alc|/alc.$$

Odształcenia materiałowe:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{||} = (alc_{\text{podłoża}} - alc)/alc - \text{odkształcenie planarne}$$

$$\epsilon_{\perp} = -2 C_{12}/C_{11} \epsilon_{||} - \text{odkształcenie prostopadłe}$$

Położenia pasm:

$$\delta E_{c,hydro} = ac(\epsilon_{\perp} + 2\epsilon_{||}) - \text{przesunięcie CB hydrostatyczne}$$

$$\delta E_{v,hydro} = av(\epsilon_{\perp} + 2\epsilon_{||}) - \text{przesunięcie VB hydrostatyczne}$$

$$\delta E_{v,biax} = b(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{||}) - \text{rozszczepienie}$$

$$\delta E_{v,biax} \pm = 0.5((\delta E_{v,biax} - \Delta_{so} \pm \sqrt{9(\delta E_{v,biax})^2 + 2E_{v,biax} \Delta_0 + (\Delta_0)^2})^{0.5} - \text{rozszczepienie}$$

$$E_c = E_{v,top}^{\epsilon=0} + E_{c-v,top}^{\epsilon=0} + \delta E_{c,hydro} - \text{położenie CB}$$

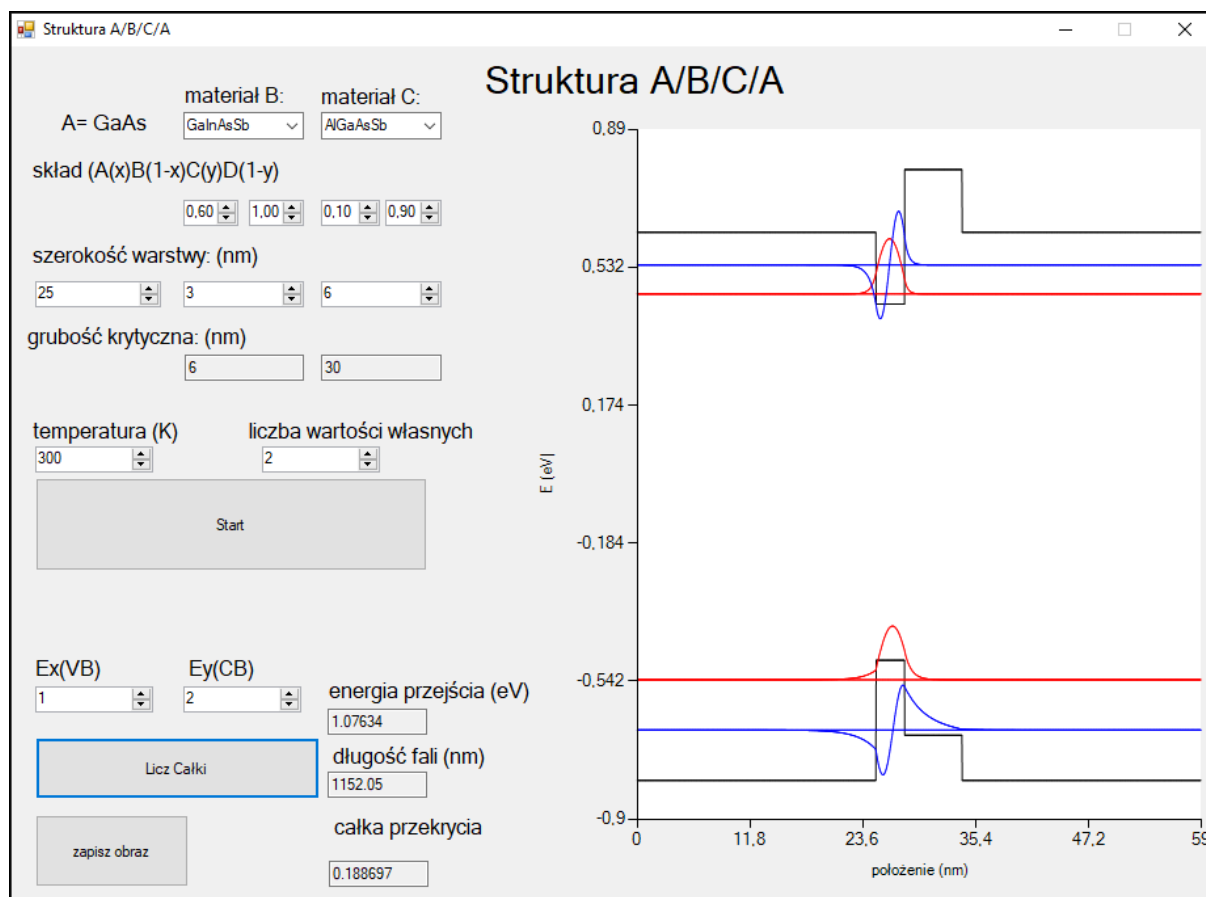
$$Ev,hh = E_{v,top}^{\epsilon=0} + \delta E_{v,hydro} - \delta E_{v,biax} - \text{położenie VB ciężkodziurowego}$$

$$Ev,lh = E_{v,top}^{\epsilon=0} + \delta E_{v,hydro} - \delta E_{v,biax}^+ - \text{położenie VB lekkodziurowego}$$

$$Ev,so = E_{v,top}^{\epsilon=0} + \delta E_{v,hydro} - \delta E_{v,biax}^- - \text{rozszczepienie spin-orbita}$$

Na podstawie powyższych formuł konstruowaną potencjał struktury, za pomocą którego rozwiązanie zagadnienie własne przy użyciu algorytmu Martina-Deana. Algorytm Martina-Deana to algorytm, korzystający z twierdzenia o wartościach własnych dla symetrycznej macierzy. W szczególnym przypadku możemy skorzystać z tego algorytmu dla symetrycznej macierzy trójapasmowej.

Opis i instrukcja obsługi aplikacji



Rys.1 Interfejs programu projektowego.

Program, który jest celem projektu „Lasery na bazie nanostruktur półprzewodnikowych” został napisany w dwóch językach programowania. Rdzeń programu i algorytmy zostały napisane w języku C++ i dołączone jako plik .dll do interfejsu graficznego napisanego w C#. Same składniki UI są częścią dołączonego do Microsoft Visual Studio pakietu Windows Forms. Został nazwany „Struktura A/B/C/A” co nawiązuje do zadania tego programu.

Aby uruchomić „Strukturę A/B/C/A” należy uruchomić plik o rozszerzeniu .exe. Konieczne jest, aby w tym samym folderze znajdował się plik DllLasery.dll.

Aplikacja okienkowa dzieli się zasadniczo na trzy segmenty.

Największy zajmuje całą prawą połowę obszaru aplikacji. Jest to wykres z naniesionymi wartościami potencjału dla pasma przewodnictwa i walencyjnego wraz z wartościami własnymi i odpowiadającymi im funkcjami własnymi dla struktury wybranej w lewej górnej ćwiartce.

Tam właśnie użytkownik wybiera materiały B i C z struktury A/B/C/A, wybiera skład procentowy danego pierwiastka, obiera grubości poszczególnych warstw (i podłoża), wybiera temperaturę układu oraz liczbę wartości/funkcji własnych, które wyrysują się na wykresie obok po naciśnięciu przycisku „Start” i możliwe będą do analizowania w ostatniej części obszaru użytkowego aplikacji. Oprócz tego w panelu tym znajdują się dwa małe okna wyświetlające grubości krytyczne dla danych stopów, co pozwala od razu określić fizyczność danej struktury.

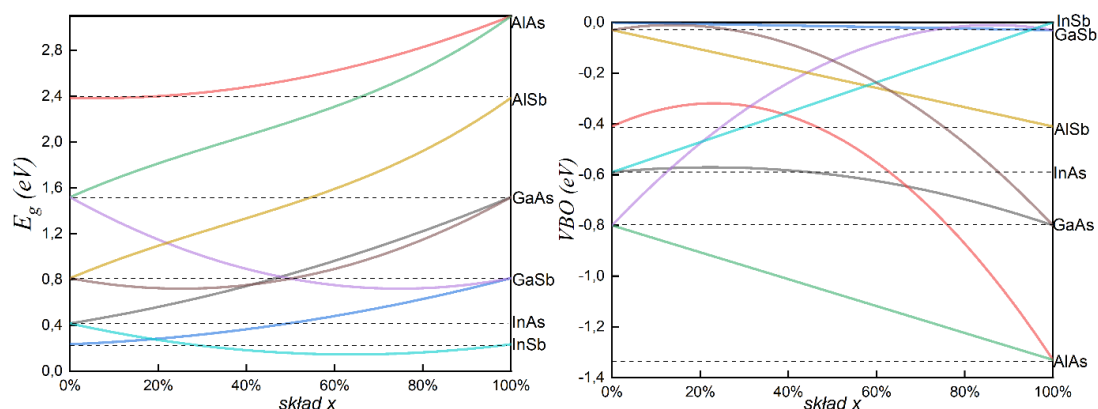
W ostatnim panelu możemy przeanalizować konkretne przejście. W Ex(VB) wybieramy wartość własną pasma walencyjnego, a w Ey(CB) wartość własną pasma przewodnictwa. Po naciśnięciu „Licz

Całki” program wyświetla energię takiego przejścia, długość fali emitowanego w takim przejściu fotonu oraz wartość całki przekrycia.

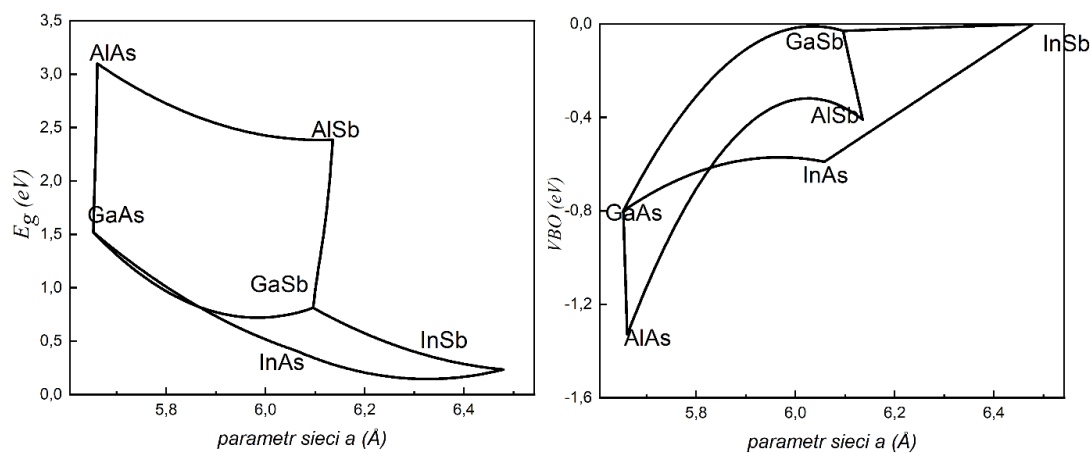
W lewym dolnym rogu aplikacji znajduje się przycisk, który pozwala zapisać wykres do pliku JPEG, który pojawia się w folderze, w którym znajduje się plik .exe.

Wyniki i dyskusja

Interpolacje trójskładnikowe:

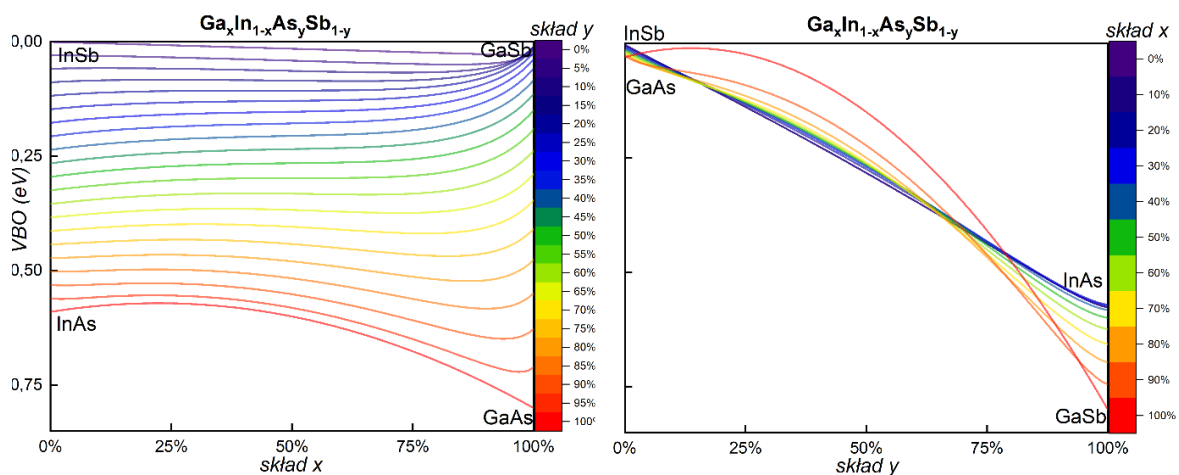


Wyk. 1 Zależności składu materiałów trójskładnikowych dla przerwy energetycznej i przesunięcia pasma walencyjnego.



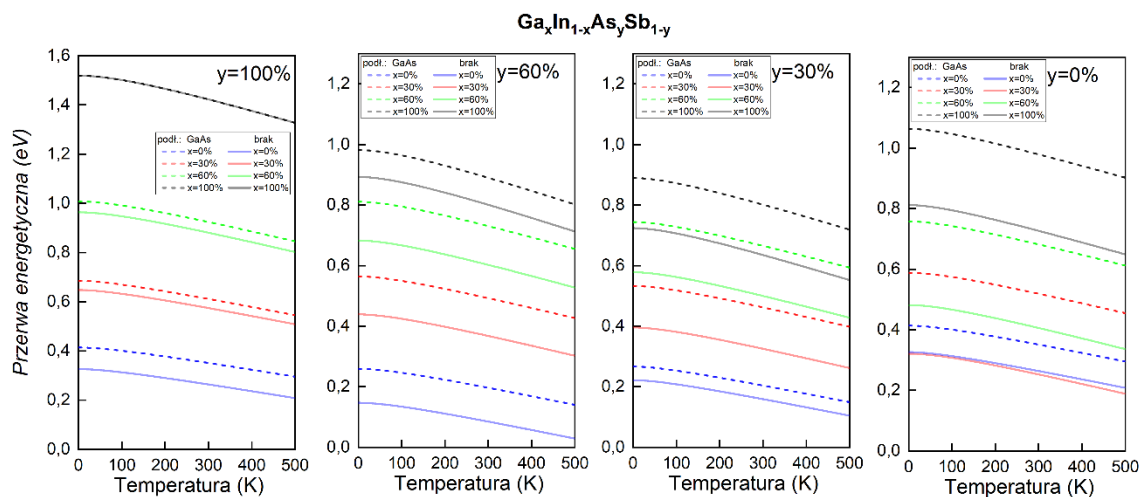
Wyk. 2 Zależności parametru sieci a materiałów trójskładnikowych dla przerwy energetycznej i przesunięcia pasma walencyjnego.

Interpolacje czteroskładnikowe

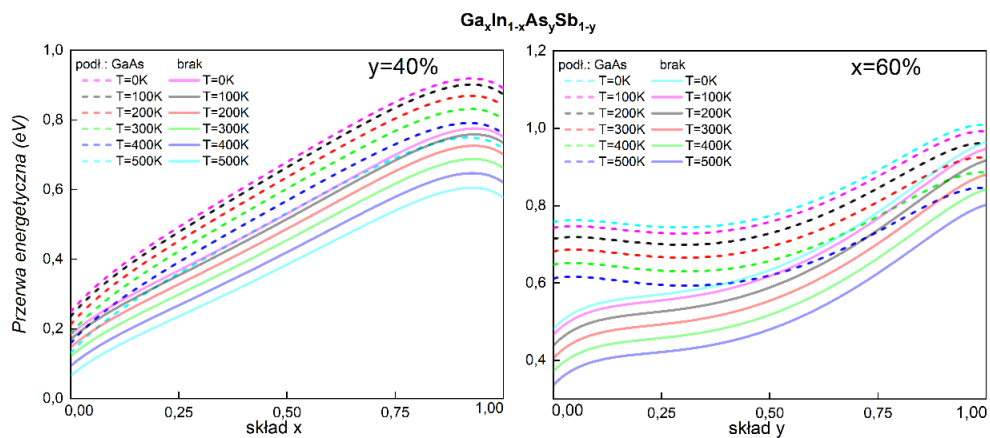


Wyk. 3 Wpływ poszczególnych składów materiałowych na wartość VBO.

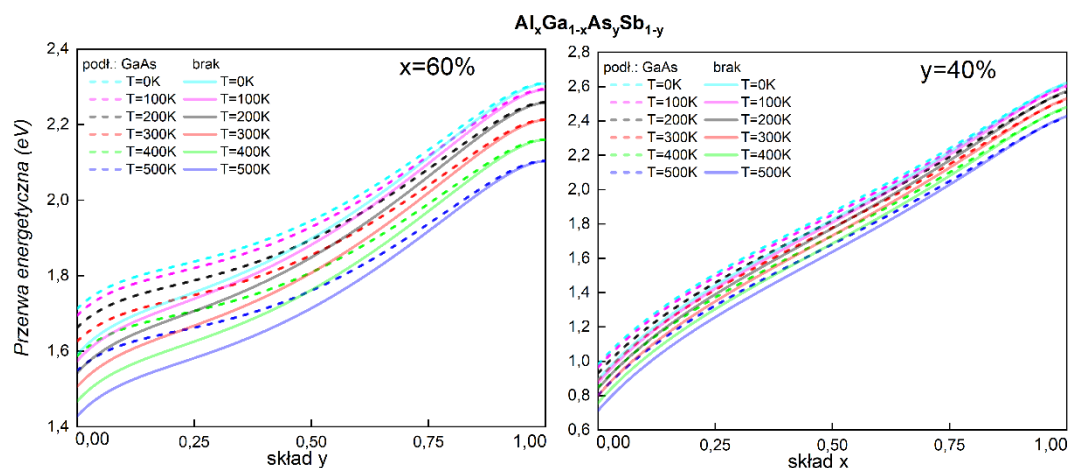
Zależności temperaturowe i naprężenia



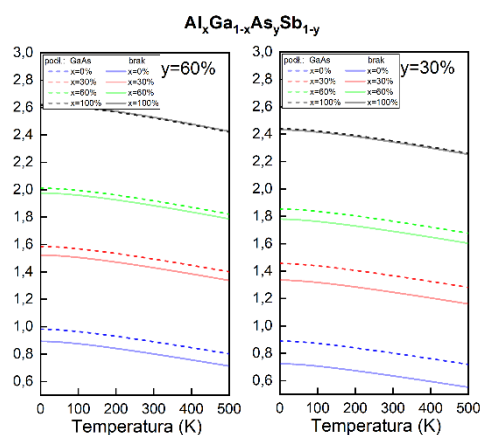
Wyk.4 wykresy przerwy energetycznych w funkcji temperatury dla różnych składów materiałowych oraz przy uwzględnieniu podłoża z GaAs dla GaInAsSb



Wyk. 5 wykresy przerwy energetycznych w funkcji składu dla różnych składów materiałowych oraz przy uwzględnieniu podłoża z GaAs dla GaInAsSb

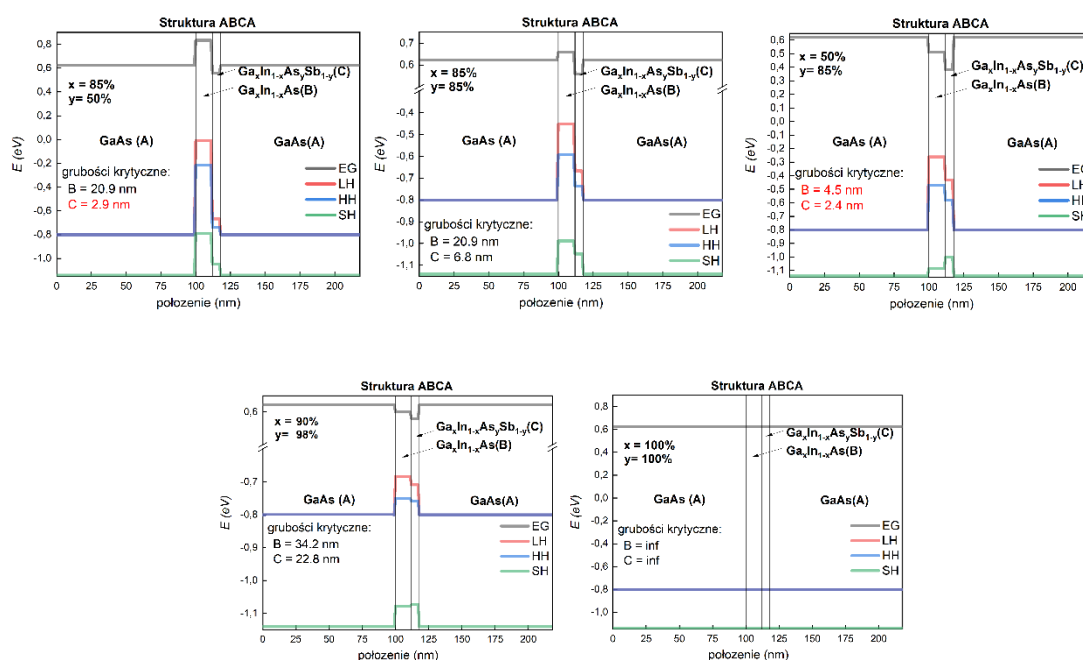


Wyk.6 wykresy przerwy energetycznych w funkcji temperatury dla różnych składów materiałowych oraz przy uwzględnieniu podłoża z GaAs dla AlGaAsSb



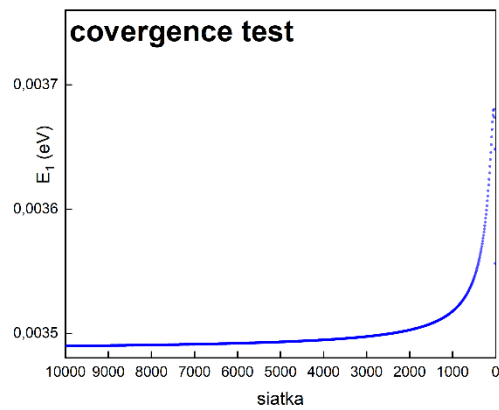
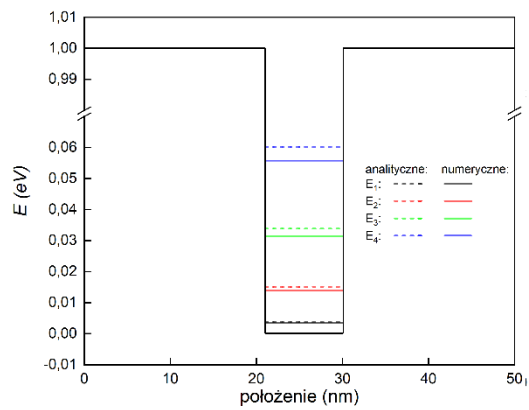
Wyk. 7 wykresy przerwy energetycznych w funkcji składu dla różnych składów materiałowych oraz przy uwzględnieniu podłoża z GaAs dla AlGaAsSb

Profile energetyczne

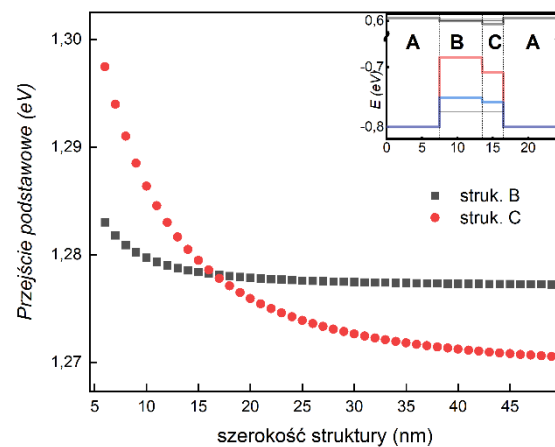
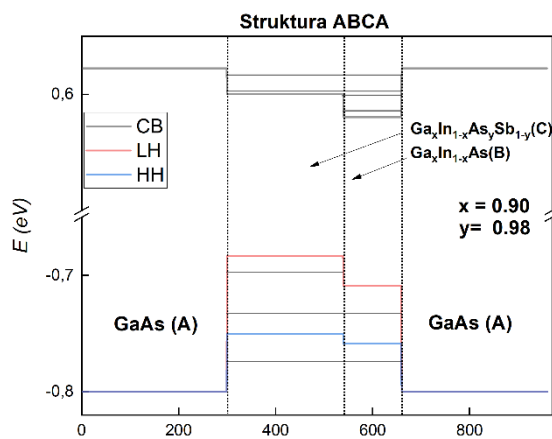


Wyk.8. Profile energetyczne struktur A/B/C/A, gdzie A to podłożo GaAs, B- stop trójskładnikowy GaInAs, a C- strop czteroskładnikowy GaInAsSb wraz z umieszczonymi informacjami na temat grubości krytycznych. Powyższe profile różnią się składem procentowym poszczególnych stopów.

Energie własne

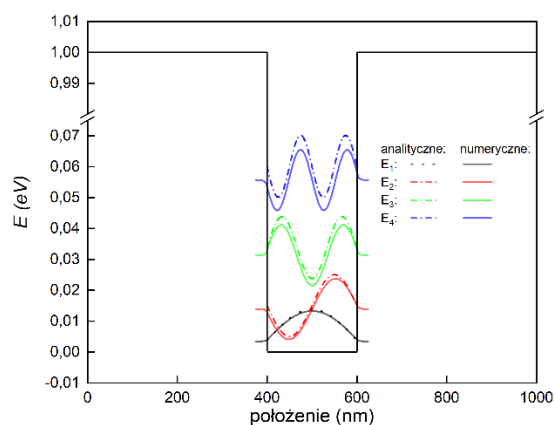


Wyk.9. Jama potencjału o głębokości 1 eV- porównanie wartości analitycznych (dla nieskończonej studni kwantowej) z numerycznymi oraz test zbieżności siatki (dla E_1 tzn. energii stanu podstawowego dla jamy potencjału o głębokości 1 eV).

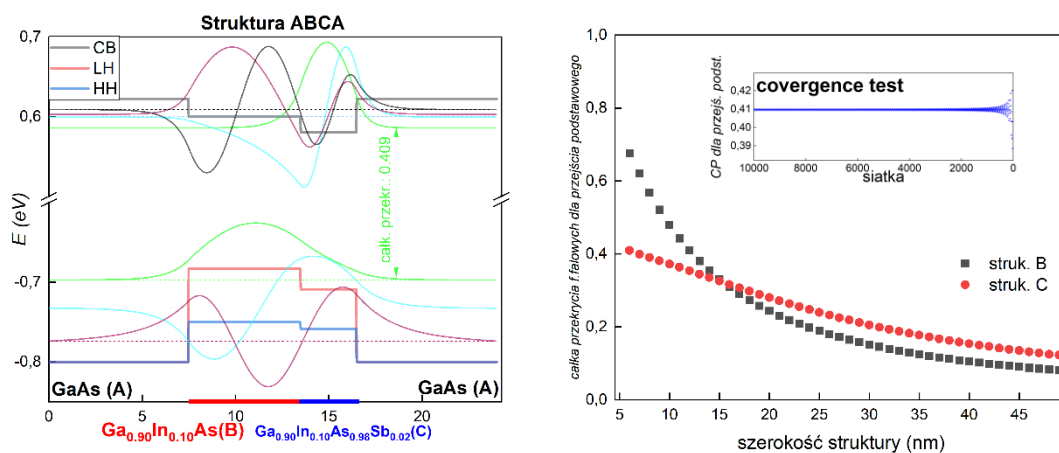


Wyk.10. Profil energetyczny wybranej struktury A/B/C/A wraz z naniesionymi wartościami własnymi oraz zmiana energii przejścia podstawowego dla wspomianej struktury w funkcji szerokości warstwy aktywnej.

Funkcje własne



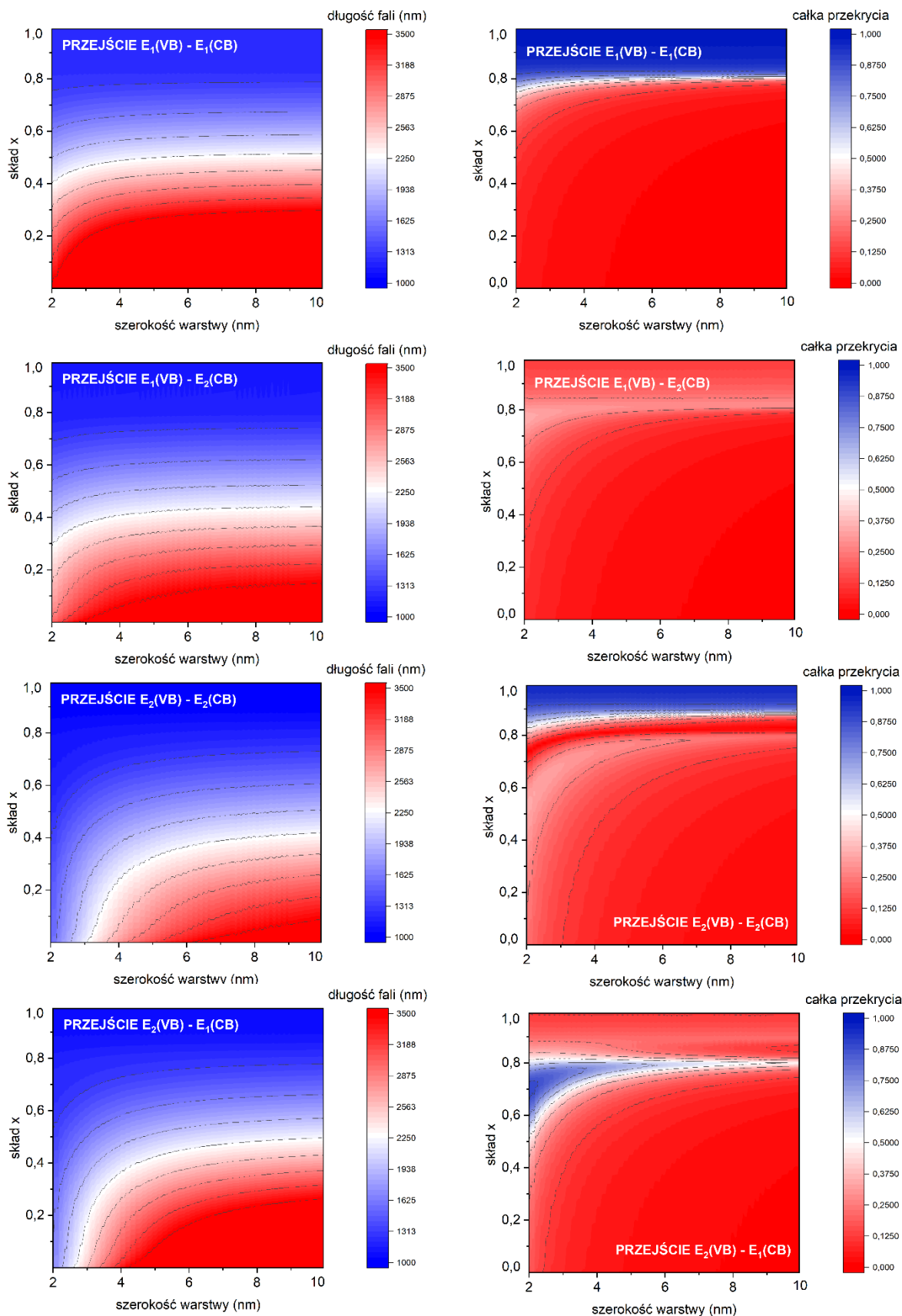
Wyk.11. JAMA potencjału o głębokości 1eV- porównanie funkcji własnych analitycznych z numerycznymi. F. własne zostały pomniejszone o 90% w celu lepszego odwzorowania relacji.



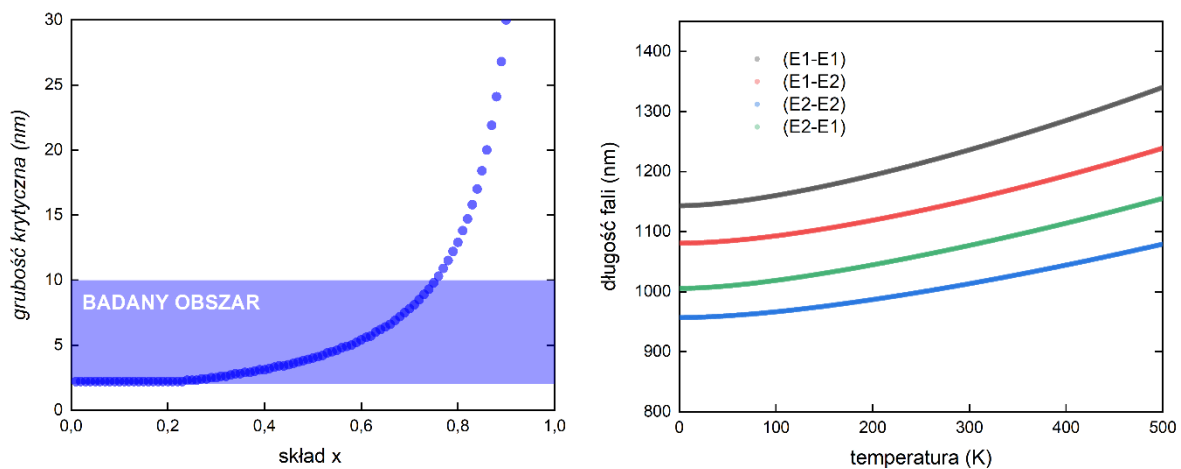
Wyk.12. Profil energetyczny wybranej struktury A/B/C/A wraz z naniesionymi funkcjami własnymi oraz całka przekrycia funkcji własnych dla energii odpowiadającej przejściu podstawowemu dla wspomnianej struktury w funkcji szerokości warstwy aktywnej.

Asymetryczna studnia kwantowa $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0,6}\text{In}_{0,4}\text{As}/\text{Al}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{As}_x\text{Sb}_{1-x}$:

Rozważana struktura jest postaci A/B/C/A, gdzie A i B nie podlegają zmianom: szerokość GaAs- 50nm (podłoże), szerokość $\text{Ga}_{0,6}\text{In}_{0,4}\text{As}$ -3nm, natomiast materiał C był badany w funkcji składu i grubości. Symulacje zostały przeprowadzone dla temperatury 300K, oraz został sprawdzony jakościowy wpływ temperatury na przejścia. Analizowano przejścia między dwoma stanami związanymi pasma walencyjnego oraz przewodnictwa.



Wyk.13. Wykresy przedstawiające długość fali odpowiadającej przejściu dla przejść między dwoma stanami związanymi z pasma walencyjnego i pasma przewodnictwa w funkcji opisanego wyżej składu i szerokości warstwy oraz odpowiadające im wykresy całek przekrycia.



Wyk.14. Wykres grubości krytycznej w.w. stopu w funkcji składu oraz wpływ temperatury na długość fali odpowiadającej przejściu dla rozważanych przejść.

Jak możemy zobaczyć na Wyk. 13 długości fali emitowanego fotonu odpowiadające przejściu silnie zależą od składu danego stopu oraz szerokości/ grubości danej warstwy. Zależność ta jest nieliniowa. Całki przekrycia odpowiadające danym przejściom również silnie zależą od składu i szerokości warstwy. Widzimy, że zmniejszenie szerokości warstwy w ogólności zwiększa wartości całki przekrycia dla tego układu, co zgodne jest z intuicją, gdyż funkcje falowe są wtedy bardziej zlokalizowane. Wraz ze wzrostem szerokości warstwy rośnie długość fali (zmniejsza się energia przejścia) co zauważyliśmy już we wcześniejszych zadaniach, gdyż dla szerszej studni kwantowej stany znajdują się bliżej dna.

Uzyskane wyniki dopuszczają utworzenie struktury o emisji odpowiadającej II (1300nm) i III (1550nm) telekomunikacyjnemu oknu transmisyjnemu. Symulacje grubości krytycznych z Wyk.14 również pozwalają zapostulować, iż taka struktura jest możliwa do realizacji. Problemem może być natomiast niska wartość całki przekrycia, która wiąże się z intensywnością emisji. Istotnym czynnikiem jest również temperatura, która pozwalałaby „dostroić” fizycznie zrealizowaną strukturę do danego okna transmisyjnego.

Wnioski:

W ramach kursu przyswoiłem wiedzę z zakresu fizyki półprzewodników, analizy numerycznej i programowania.

Udało mi się stworzyć prostą aplikację okienkową, która rozwiązuje zagadnienie własne dla rzeczywistych struktur materiałowych. W czasie rozwiązywania zadań domowych przeanalizowałem wpływ czynników zewnętrznych, takich jak temperatura, naprężenia, na strukturę półprzewodnikową. Poznałem metody tworzenia stopów z półprzewodników grupy III-V. Ostatecznie przeprowadziłem badania teoretyczne w poszukiwaniu kandydatów na emitery w zakresie II i III okna transmisyjnego.

BIBLIOGRAFIA:

- [1] G.Kim, L.Shterengas, R. U. Martinelli, G. L. Belenky, D.Z. Garbuzov, W.K. Chan, Room-temperature 2.5 μm InGaAsSb/AlGaAsSb diode laser emitting 1W continous waves, Appl. Phys. Lett. 81, 3146 (2002); <https://doi.org/10.1063/1.1517176>.
- [2] H.K. Choi, S. J. Eglash, High-power multiple- quantum- well GaInAsSb/AlGaAsSb diode lasers emitting at 2.1 μm with low threshold current denisty, Appl. Phys. Lett. 61, 1154 (1992); <https://doi.org/10.1063/1.107630>.
- [3] H.K. Choi, G. W. Turner, S. J. Eglash, High- power GaInAsSb-AlGaAsSb multiple-quantum well diode lasers emitting at 1.9 μm , IEEE Photonics Technology Letters, vol. 6, no. 1, pp. 7-9, Jan. 1994; <https://doi.org/10.1109/68.265873>.
- [4] C.Lin, M. Grau, O. Dier, M. C. Amann, Low threshold room- temperature continous waves operation of 2.24-3.04 μm GaInAsSb/AlGaAsSb quantum-well lasers, Appl. Phys. Lett 84, 5088 (2004);<https://doi.org/10.1063/1.1760218>.
- [5] MBE Growth of Graded Structures for Polarized Electron Emitters, A. Moy, T. Maruyama, F. Zhou, A. Brachmann, AIP Conference Proceedings 1149, 1038 (2009); <https://doi.org/10.1063/1.3215589>
- [6] J.S. Ng and C. H. Tan, „AlGaAsSb Avalanche Photodiodes,” 2018 IEEE Photonics Conference (IPC), Reston, Va, USA, 2018, pp. 1-2; <https://doi.org/10.1109/IPCon.2018.8527084>.
- [7] Kagawa, T., & Motosugi, G. AlGaAsSb Photodiodes Lattice- Matched to GaSb. Japanese Journal of Applied Phycis, 18(5), 1001-1002 (1979). <https://doi.org/10.1143/jjap.18.1001>.
- [8] I. Shafir, N. Snapi, D. Cohen- Elias, N.Sicron, M. Katz, High responsivity InGaAsSb p-n photodetecor for extended WIR detection. Appl. Phys. Lett. 118, 063503 (2012); <https://doi.org/10.1063/5.0037192>.
- [9] Kunitsyna, E.V., Royz, M.A., Andreev, I.A. et al. Photodiodes for Detecting the Emission of Quantum-Sized Disc Lasers Operating in the Whispering Gallery Modes (2.2–2.3 μm). Semiconductors 54, 796–802 (2020). <https://doi.org/10.1134/S1063782620070052>.
- [10] Qi Lua, r. Beanland, D. Montesdeoca, P. Carrington, A. Marshall, A. Krier, Low bandgap GaInAsSb thermophotovoltaic cells on GaAs substrate with advenced metamorphic, Solar Energy Materials and Solar Cells (2019); <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.11.036>.
- [11] Electro-optic properties of GaInAsSb/GaAs quantum well for high-speed integrated optoelectronic devices, J. Toma, B. Liang, C. Reyner, T. Ochalski, D. Williams, S. Hegarty, D. Huffaker, F. Huyet, Appl. Phys. Lett. 102, 013120 (2013); <https://doi.org/10.1063/1.3775371>.
- [12] Qi Lu, Richard Beanland, Denise Montesdeoca, Peter J. Carrington, Andrew Marshall, Anthony Krier, Low bandgap GaInAsSb thermophotovoltaic cells on GaAs substrate with advanced metamorphic buffer layer, Solar Energy Materials and Solar Cells, <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.11.036>
- [13] i. Vurgaftman and J. r. Meyer, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, Journal of Applied Phycis 89:11, 5815 (2001); <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
- [14] S. Adachi, P. Capper, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, John Wiley& Sons,, Inc. 2009