

Температурні зміни енергії електрона в наноплівках $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ різної товщини та складу бар'єрного матеріалу

Д.В. Кондрюк, В.М. Крамар

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, 58012 Чернівці, Україна

(Одержано 04.07.2014; у відредагованому вигляді – 24.11.2014; опубліковано online 29.11.2014)

У рамках моделі прямокутної квантової ями скінченної глибини розраховано температурні залежності енергії дна основної мінізони електрона в наноплівках $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ різної товщини з різною концентрацією (x) бар'єрного матеріалу. Розрахунки виконані методом функцій Гріна з використанням наближення ефективних мас для електронної системи та моделі діелектричного континууму – для фононної. Взято до уваги взаємодію з усіма гілками спектра оптичних фононів: обмежених у ямному матеріалі, напівобмежених – у бар'єрному та інтерфейсних. Показано, що зростання температури від 0 до 300 К може викликати збільшення величини довгохвильового зміщення дна основної мінізони електрона приблизно на 25-30 %, залежно від товщини наноплівки та концентрації x .

Ключові слова: Наногетероструктура, Квантова яма, Електрон, Енергія.

PACS number: 73.21.Fg

1. ВСТУП

Низьковимірні напівпровідникові структури володіють унікальними властивостями, що дають змогу створювати на їх основі новітні пристрої оптико- та наноелектроніки [1]. Така можливість зумовлена розробкою та впровадженням технологій одержання нанорозмірних кристалічних структур різної вимірності [2-4].

Стійка увага дослідників в галузі фізики напівпровідників до вивчення властивостей названих структур пояснюється необхідністю створення адекватних моделей та послідовних теоретичних методів, які пояснюють спостережувані або прогнозують нові явища, пов'язані з особливостями руху квазічастинок та їх взаємодії, спричинених наявністю просторових обмежень.

На даний час опубліковано чимало робіт, присвячених дослідженню механізмів формування енергетичного та оптичного спектрів наногетероструктур з квантовими ямами (КЯ). Зокрема, у роботі [5] наведено методичку і результати розрахунків залежності енергетичного спектра електрона в плоских напівпровідникових наноструктурах з подвійним гетеропереходом – наноплівках (НП) $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ від їх товщини та складу бар'єрного середовища. Проте, температурні зміни спектрів таких наносистем не розглядалася.

Дослідження температурної залежності енергії носіїв струму в наносистемах можливе у рамках методу функцій Гріна [6]. У цій статті наведені результати виконаного вказаним методом розрахунку залежності енергії основного стану електрона від температури та товщини НП $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з різною концентрацією алюмінію в бар'єрному середовищі.

Конкретні розрахунки виконані з використанням значень сталих ґраток a_0 GaAs (5,653 Å) і AlAs (5,661 Å), а також діелектричних проникностей ϵ_0 (13,18 і 10,06) та ϵ_∞ (10,89 і 8,16 відповідно) [7] і концентрацій алюмінію $x = 0,2; 0,3; 0,4$. Указані параметри визначають величину обмежуючого потенціалу носія у КЯ, значення його ефективної маси у бар'єрному середовищі, а також енергії напівобмеженого та інтерфейсного фононів [8, 9].

Результати розрахунків свідчать про те, що взаємодія з оптичними поляризаційними фононами викликає зміщення дна основної мінізони електрона в КЯ у бік менших значень енергії. У області низьких температур зміщення становить, залежно від товщини НП $a = Na_0$ (тут N – кількість шарів GaAs у плівці) та концентрації x , 2,75 – 4 меВ. Збільшення температури наносистеми від 0 до 300 К викликає зростання величини зміщення приблизно на 25-30 %. Причиною вказаних температурних змін є взаємодія електрона з фононами – переважно обмеженими у наноплівках товщиною понад 60 нм, та інтерфейсними – у тонших (до 10 нм).

2. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ РОЗРАХУНКІВ

Результати розрахунку залежності зміщення Δ дна основної мінізони електрона у КЯ [5, 6] від температури T , при фіксованих значеннях товщини НП та концентрації, наведені на рис. 1. Як видно, характер цієї залежності різний у НП різної товщини за різних значень x . У НП, що складаються з понад 70 шарів GaAs, збільшення температури викликає монотонне нелінійне зростання величини зміщення дна основної мінізони електрона у бік менших значень енергії; у тонших – її приріст може бути практично відсутнім (див. криву $N = 1$ на рис. 1б), або мати протилежний знак (див. криві $N = 5$ на рис. 1а; $N = 1$ та $N = 20$ на рис. 1в). Зміна знаку приросту величини зміщення при зміні температури в ультратонких плівках пояснюється особливостями взаємодії електрона з інтерфейсними фононами [6].

Графіки залежності зміщень дна основної мінізони електрона від товщини НП a при фіксованих значеннях температури T та концентрації x наведені на рис. 2. Видно, що зі збільшенням товщини НП дно основної мінізони зміщується в бік менших енергій немонотонно (і тим сильніше, чим вища температура), досягаючи максимуму в ультратонких (5-7 нм, залежно від значення x) плівках. При $a > 20$ нм зростання товщини НП приводить до повільного зменшення

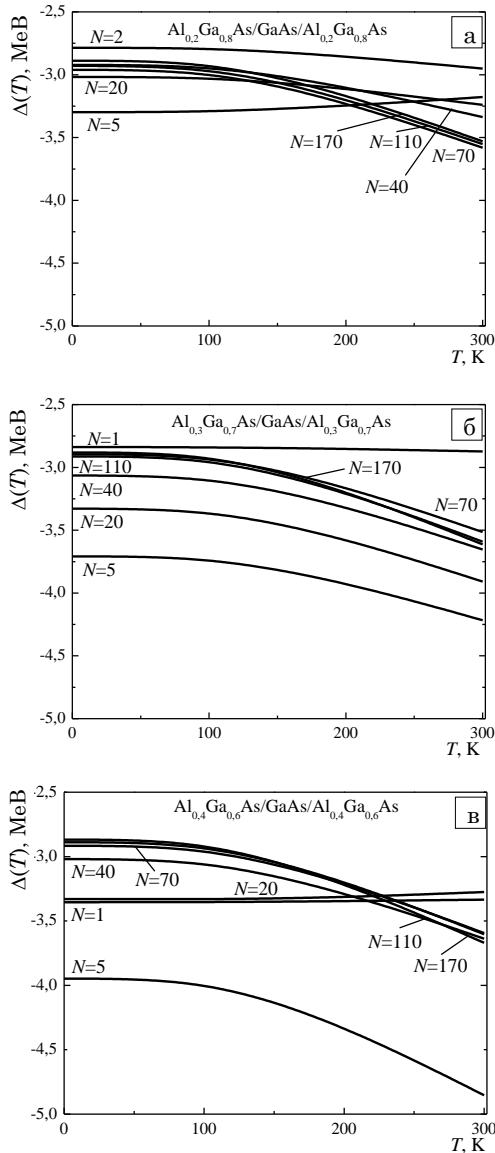


Рис. 1 – Залежність зміщення Δ дна основної мінізони електрона, викликаного взаємодією з оптичними фононами, від температури T при різних значеннях товщини НП N і концентрації x : а) 0,2; б) 0,3; в) 0,4

величини довгохвильового зміщення дна основної мінізони електрона у КЯ до значення, характерного для масивного GaAs. Це пояснюється характером відповідних змін парціальних зміщень, викликаних взаємодією з обмеженими, напівобмеженими та інтерфейсними фононами – при збільшенні товщини НП роль перших зростає, тоді як останніх – зменшується.

Збільшення температури НП викликає як зростання висоти максимуму, так і його зсув у бік більших товщин; положення і початкова (при $T = 0$) висота максимуму залежать від x .

3. ВИСНОВКИ

Аналіз результатів розрахунків свідчить, що у плівках $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs} / \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ товщиною до 10 нм довгохвильові зміщення дна основної мінізони електрона викликані переважно взаємодією з інтер-

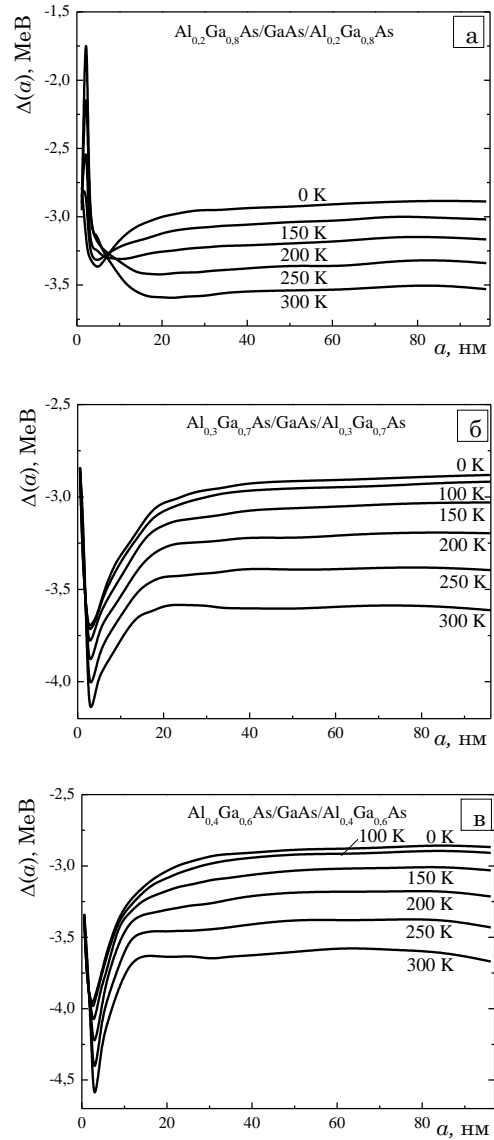


Рис. 2 – Залежність від товщини НП a зміщення Δ дна основної мінізони електрона, викликаного взаємодією з оптичними фононами, за різних значеннях температури (вказані цифрами біля кривих) і концентрації x : а) 0,2; б) 0,3; в) 0,4

фейсними, а при збільшенні їх товщини понад 60 нм – з обмеженими фононами. У НП товщиною приблизно від 10 до 60 нм (залежно від x) вплив обох названих типів фононів сумірний; напівобмежені фонони вносять малий внесок у значення енергії електрона порівняно з внеском інтерфейсних (до 25%). За суттєвого збільшення товщини НП (понад 100 нм) вплив інтерфейсних фононів зменшується до нуля, а величина зміщення, викликаного обмеженими фононами наближається до значення, характерного для масивного GaAs (2,9 меВ).

Збільшення концентрації алюмінію в бар'єрному середовищі приводить до зростання величини сумарного зміщення дна основної мінізони електрона у КЯ. У надтонких плівках товщиною до 10 нм його приріст сягає 0,73 меВ (23%) при зміні x від 0,2 до 0,4 переважно за рахунок посилення взаємодії з ін-

терфейсними фононами; у НП товщиною від 20 до 50 нм – 0,1 меВ (5%), відповідно, – за рахунок взаємодії з обмеженими та інтерфейсними фононами.

Збільшення температури від 0 до 300 К викликає зміну величини довгохвильового зміщення дна основної мінізони електрона. Величина і напрям зміни залежить як від товщини НП, так і від концентрації розчину $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. У НП товщиною понад 35-40 нм величина зміщення зростає, залежно від концентрації, приблизно на 25-30%.

У НП, тонших ніж 10 нм, при збільшенні температури величина зміщення може зростати, зменшуватись або залишатись практично незмінною, залежно від значень товщини a та концентрації x . Причиною немотонності вказаних температурних змін є особливості взаємодії електрона з інтерфейсними фононами – дисперсійна залежність функції зв'язку з ними забезпечує можливість зміни внеску, зумовленого процесами поглинання, до величини сумарного зміщення Δ у НП різної товщини [6].

Temperature Dependences of the Electron Energy in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Nanofilms of Different Thickness and Composition of the Barrier Material

D.V. Kondryuk, V.M. Kramar

Yuriy Fed'kovych Chernivtsi National University, 2, Kotsiubynskogo Str., 58012 Chernivtsi, Ukraine

Temperature dependences of the energy of electron ground state in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ nanofilms of different thickness and concentrations (x) of the barrier material were calculated. Calculations were performed by using the Green functions method, approximation of the effective masses for the electronic system and model of the dielectric continuum – for phonons. The interaction of all branches of the optical phonons: confined in the well material, semi-spaced – in barrier medium and interface has been taken into account. It is shown that the increase in the temperature from 0 to 300 K can cause the increase in the magnitude of long-wave shift of the electron energy about 25-30% depending on the nanofilm thickness and concentration x .

Keywords: Nanoheterostructure, Quantum well, Electron, Energy.

Температурные изменения энергии электрона в нанопленках $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ различной толщины и состава барьерного материала

Д.В. Кондрюк, В.М. Крамарь

*Черновицкий государственный университет имени Юрия Федьковича,
ул. Коцюбинского, 2, 58012 Черновцы, Украина*

В рамках модели прямоугольной квантовой ямы конечной глубины рассчитаны температурные зависимости энергии дна основной минизоны электрона в нанопленках $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ различной толщины с разной концентрацией (x) барьерного материала. Расчеты выполнены методом функций Грина с использованием приближения эффективных масс для электронной системы и модели диэлектрического континуума – для фононной. Учтено взаимодействие со всеми ветвями спектра оптических фононов: ограниченных в ямном материале, полуограниченных – в барьерном и интерфейсных. Показано, что возрастание температуры от 0 до 300 К может вызывать увеличение величины длинноволнового смещения дна основной минизоны электрона примерно на 25-30%, в зависимости от толщины нанопленки и концентрации x .

Ключевые слова: Наногетероструктура, Квантовая яма, Электрон, Энергия.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Е.Л. Ивченко, *Оптика квантовых ям и сверхрешеток: В кн. Оптика наноструктур* (Под ред. А.Ф. Федорова) (Недра: СПб: 2005).
2. V. Shchukin, N.N. Ledentsov, D. Bimberg, *Epitaxy of Nanostructures* (Springer: Berlin: 2003).
3. A.B. Krysa, J.S. Roberts, R.P. Green, L.R. Wilson, M. Garcia, J.W. Cockburn, *J. Crystal Growth* **272**, 682 (2004).
4. M.J. Manfra, [arXiv:1309.2717](https://arxiv.org/abs/1309.2717) [cond-mat.mes-hall].
5. D.V. Kondryuk, V.M. Kramar, O.P. Kroitor, *Semicond. Phys. Quant. Electron. Opt.* **17**, 160 (2014).
6. М.В. Ткач, В.М. Крамар, *Укр. фіз. журн.* **53**, 1110 (2008) (M.V. Tkach, V.M. Kramar, *Ukr. J. Phys.* **53**, 1110 (2008)).
7. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
8. G.Q. Hai, F.M. Peeters, J.T. Devreese, *Phys. Rev. B* **48**, 4666 (1993).
9. М.В. Ткач, В.М. Крамар, *Укр. фіз. журн.* **53**, 810 (2008) (M.V. Tkach, V.M. Kramar, *Ukr. J. Phys.* **53**, 810 (2008)).