

УДК 539.23

Методика расчёта спектров фотолюминесценции структур КРТ МЛЭ с потенциальными и квантовыми ямами

А.В. Войцеховский, Д.И. Горн

В работе представлено описание теоретической модели расчёта спектров фотолюминесценции структур на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и содержащих потенциальные и квантовые ямы (КЯ). В основу модели положен расчёт зонной диаграммы посредством самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шрёдингера. Особенностью представленной модели является, в частности, то, что при расчётах была учтена зависимость электронного сродства от состава КРТ.

PACS: 78.55.Et

Ключевые слова: фотолюминесценция, КРТ, МЛЭ, квантовая яма, зонная диаграмма, компьютерное моделирование.

Введение

В настоящее время большое количество теоретических и экспериментальных исследований посвящено изучению свойств структур с квантовыми ямами на основе твёрдого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ), а также разработке приборов оптической инфракрасной электроники на основе данных структур. Повышенный интерес к подобным структурам обусловлен, в первую очередь, их уникальными свойствами, связанными с размерным квантованием и позволяющими преодолеть некоторые фундаментальные недостатки КРТ [1]. Наряду с этим, интерес в данной области стимулируется значительным прогрессом в последние годы базового метода синтеза эпитаксиального КРТ, а именно, метода молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), позволяющего прецизионно выращивать многослойные структуры, в том числе и с наноразмерными слоями.

Значительное количество работ, как российских, так и зарубежных, посвящено экспериментальному исследованию фотолюминесценции структур КРТ с квантовыми ямами (КЯ) [2–5]. Фотолюминесценция является мощным инструментом исследования структур с КЯ, позволяющим судить о влиянии размерного квантования на свойства структуры. При этом эксперименты по получению излучения позволяют приблизить-

ся к созданию эффективных светоизлучающих устройств на основе структур КРТ МЛЭ с КЯ.

Для проведения теоретических исследований и расчётов характеристик структур КРТ МЛЭ с квантовыми ямами, результаты которых могут составить основу для конструирования устройств оптоэлектроники на основе сложных наногетероструктур (НГЭС) на основе КРТ МЛЭ, необходима методика, позволяющая оперировать с произвольными распределениями составов по координате и дающая точность вычислений, обеспечивающую хорошее сопоставление с экспериментом.

Целью данной работы является разработка теоретической модели описания спектров фотолюминесценции структур с квантовыми ямами, учитывающей специфику материала КРТ МЛЭ.

Постановка задачи

Одной из первоочередных задач, решаемых при исследовании многослойных полупроводниковых структур и моделировании их характеристик, является нахождение распределения электростатического потенциала в рассматриваемой структуре. Зная распределение потенциала, можно определить энергии носителей заряда в структуре и её зонную диаграмму. Данная задача решается посредством численного решения уравнения Пуассона для структуры, т.е.:

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} = \frac{\rho(z, \varphi)}{\varepsilon_0 \varepsilon(z)} = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon(z)} [n(z, \varphi) - p(z, \varphi) + N_a^-(z) - N_d^+(z)], \quad (1)$$

где φ — электростатический потенциал в структуре, ρ — распределение линейной плотности заряда в структуре, ε — относительная диэлектрическая

Войцеховский Александр Васильевич, зав. кафедрой.

Горн Дмитрий Игоревич, аспирант.

Томский государственный университет
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

Тел. (3822) 413–517.

E-mail: vav@elefot.tsu.ru; gorn_dim@elefot.tsu.ru

Статья поступила в редакцию 20 сентября 2013 г.

© Войцеховский А.В., Горн Д.И., 2013

проницаемость материала, n , p — концентрации электронов и дырок, а N_a^-, N_d^+ — концентрации ионизированных акцепторных и донорных центров, ϵ_0 — электрическая постоянная, q — заряд электрона. Чтобы записать выражения для распределения концентраций, нужно знать положение уровня Ферми в структуре. Для этого совместно с (1) необходимо решать уравнение электронейтральности для однородного объёма полупроводника, где отсутствуют электрические поля:

$$n_0 + N_a^- = p_0 + N_d^+.$$

С другой стороны, для НГЭС, содержащей квантовые ямы, для описания её электрофизических и оптических свойств необходимо решение задачи о нахождении энергий уровней размерного квантования, которые ищутся путём численного решения одномерного стационарного уравнения Шрёдингера для области квантовой ямы:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right] \psi_i(z) = E_i \psi_i(z), \quad (2)$$

где $\psi_i(z)$ — волновая функция на i -м уровне размерного квантования, E_i — энергия уровня размерного квантования, $U(z)$ — профиль потенциальной энергии в структуре.

Сложность заключается в том, что для решения уравнения необходимо знать распределение потенциала (поскольку $U(z) = -q\phi$), которое найдется из решения уравнения Пуассона. При этом распределение объёмного заряда в структуре, составляющее правую часть уравнения Пуассона, зависит от решения уравнения Шрёдингера. В связи с этим для корректного расчета зонной диаграммы структуры с квантовой ямой и, следовательно, её электрофизических и оптических свойств, необходимо находить самосогласованное решение уравнений (1) и (2).

При этом при постановке задачи о нахождении распределения электростатического потенциала в структурах КРТ мы будем исходить из того, какими свойствами обладают гетероструктуры, выращенные методом МЛЭ на установке «Обь-М»

в Институте физики полупроводников СО РАН (г. Новосибирск).

Концентрации «объёмных» носителей заряда в структуре

Выясним явный вид зависимостей $n(z, \phi)$ и $p(z, \phi)$ в уравнении, отражающих распределение носителей заряда в структуре. В общем случае будем рассматривать структуру, состоящую из однородного полупроводникового слоя П и слоя ВС переменного состава. Схематически энергетическая диаграмма такой структуры приведена на рис. 1. Энергию будем отсчитывать от положения уровня

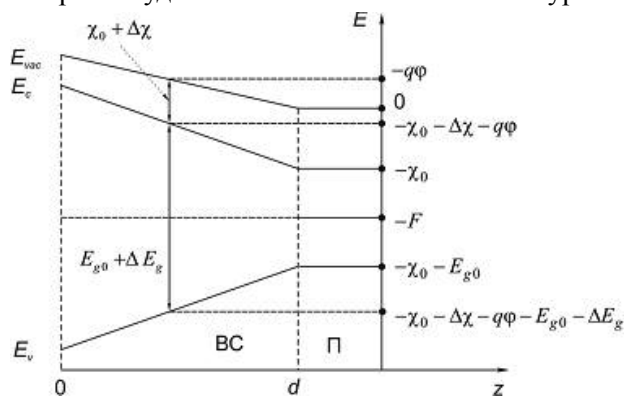


Рис. 1. Схематическая энергетическая диаграмма структуры варизонный слой — однородный полупроводник.

вакуума E_{vac} в однородном слое П.

В своих рассуждениях учтём, что эффективная плотность квантовых состояний в валентной зоне N_v слабо зависит от состава в КРТ. Также можно показать, что в диапазоне концентраций носителей заряда, реализующихся в реальных структурах КРТ МЛЭ, выращенных на установке «Обь-М», для температурного интервала 77—300 К газ носителей заряда является полностью невырожденным как для КРТ электронного типа проводимости, так и для дырочного. В связи с этим для концентраций электронов и дырок можем использовать приближённые выражения [6].

С учётом сказанного можно получить следующие выражения для распределения концентраций электронов и дырок в рассматриваемой структуре:

$$n(z, \phi) = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right) = n_0 \exp\left(\frac{(q\phi(z) + \Delta\chi(z))}{kT}\right) \left(\frac{m_c^*(z)}{m_c^*}\right)^{3/2},$$

$$p(z, \phi) = N_v \exp\left(\frac{E_v - F}{kT}\right) = p_0 \exp\left(-\frac{(q\phi(z) + \Delta\chi(z) + \Delta E_g(z))}{kT}\right)$$

где n_0 , p_0 , m_c^* — равновесные концентрации электронов и дырок, а также эффективная масса электронов в области П, а величины $\Delta\chi(z)$ и $\Delta E_g(z)$ определяются следующими выражениями

$$\Delta\chi(z) = \chi(z) - \chi_{\Pi},$$

$$\Delta E_g(z) = E_g(z) - E_{g\Pi},$$

где χ_{Π} и $E_{g\Pi}$ — электронное сродство и ширина запрещенной зоны в однородном слое Π . Остальные обозначения являются общепринятыми.

$$n_{0n}^{2D}(z) = \frac{m_e^* kT}{\pi \hbar^2} \ln \left(\exp \left[\frac{(F - E_{en})}{kT} \right] + 1 \right) |\Psi_{en}(z)|^2,$$

$$p_{0n}^{2D}(z) = \frac{m_h^* kT}{\pi \hbar^2} \ln \left(\exp \left[\frac{(E_{hn} - F)}{kT} \right] + 1 \right) |\Psi_{hn}(z)|^2,$$

где положение уровней размерного квантования относительно уровня Ферми F в структуре определяется следующим образом:

$$(F - E_{cn}) = |\Delta E_c| - |F - E_c| - (E_{cn} - E_c),$$

$$(E_{hn} - F) = |\Delta E_v| - |E_v - F| - (E_v - E_{hn}),$$

а положение уровней размерного квантования относительно дна краёв соответствующих зон определяется в результате самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шрёдингера. Схематическая зонная диаграмма квантовой ямы изображена на рис. 2.

Методика расчёта зонной диаграммы

Для запуска алгоритма поиска самосогласованного решения уравнений и необходимо задать начальные приближения для положения уровней размерного квантования в рассматриваемой КЯ. Их можно найти в рамках модели прямоугольной квантовой ямы с барьерами конечной глубины [8].

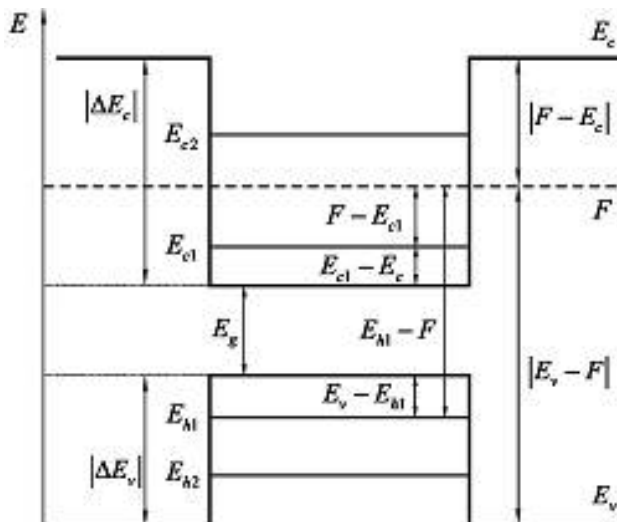


Рис. 2. Схематическое изображение зонной диаграммы структуры с квантовой ямой

Концентрации «двумерных» носителей заряда в структуре

В области квантовой ямы в уравнении Пуассона необходим учёт наличия связанных двумерных носителей заряда. Выражения для концентраций электронов и дырок в квантовой яме в подзоне размерного квантования с номером n являются общеизвестными [7]:

Далее, в первом приближении, рассчитывается профиль потенциала в структуре с КЯ посредством решения уравнения Пуассона, в котором учитываются найденные значения энергий уровней размерного квантования. Уравнение Пуассона решается методом прогонки в конечно-разностной схеме с применением метода квазилинеаризации, суть которого заключается в том, что к искомому потенциалу прибавляется малая добавка:

$$\varphi = \varphi_0 + \delta\varphi,$$

после чего правая часть уравнения разлагается в ряд. Далее полученное уравнение решается относительно параметра φ_0 .

После нахождения распределения потенциала приступаем к решению уравнения Шрёдингера, в результате чего получаем выражение для волновых функций носителей заряда на уровнях размерного и энергии уровней. Для уравнения Шрёдингера решается задача на собственные значения методом конечных разностей.

Неравновесные носители заряда при оптической генерации

В результате включения источника света в структуре происходит генерация носителей заряда с постоянной скоростью. Если внешнее воздействие вызывает в течение длительного времени генерацию избыточных носителей тока с постоянной во времени скоростью, концентрация избыточных носителей, в конце концов, достигнет некоторого стационарного значения [9]:

$$\Delta n_{ст}, \Delta p_{ст} = \beta \alpha I \tau,$$

где τ — время жизни носителей заряда, определяемое для узкозонного КРТ механизмом Оже-рекомбинации, β — квантовый выход внутреннего фотоэффекта, α — коэффициент поглощения (в единицах см^{-1}), а I — интенсивность падающего света, измеряемая числом квантов излучения на

качки, падающих на единицу поверхности полупроводника в единицу времени ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$).

Обычная плотность мощности накачки в экспериментах по фотолюминесценции, которые рассматриваются в наших исследованиях, составляет величину 120 Вт/см^2 . В качестве лазера накачки используется полупроводниковый лазер с длиной волны $0,808 \text{ мкм}$. Для стационарной избыточной концентрации носителей заряда получим значение $\Delta n_{\text{ст.}}, \Delta p_{\text{ст.}} \cong 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$.

Очевидно, что величина избыточной концентрации в данных условиях пренебрежимо мала по сравнению с концентрацией основных носителей заряда в КРТ как электронного (10^{14} – 10^{15} см^{-3}), так и дырочного ($\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$) типа проводимости.

Расчёт спектра фотолюминесценции

Для расчёта спектра фотолюминесценции в первом приближении будем использовать выражение

$$\alpha_n(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm_0^2 \omega} \left| \langle u_f | \mathbf{e} \cdot \bar{\mathbf{p}} | u_i \rangle \right|^2 \frac{1}{(a+b)} \frac{m_{eh}}{\pi \hbar^2} \Theta(\hbar\omega - E_{cn} + E_{hm}),$$

где $\langle u_f | \mathbf{e} \cdot \bar{\mathbf{p}} | u_i \rangle$ — матричный элемент оператора импульса, a, b — ширина ямы и барьера в структуре с множественными КЯ, m_{eh} — приведённая эффективная масса, Γ — полуширина линии, E_{cn} , E_{hm} — положение уровней размерного квантования электронов и дырок, Θ — ступенчатая функция.

$$E_g(x, T) = -0,302 + 1,93x - 0,81x^2 + 0,832x^3 + 5,35 \cdot 10^{-4} (1 - 2x)T,$$

$$\varepsilon(x) = 20,5 - 15,6x + 5,7x^2,$$

$$n_i(x, T) = (5,585 - 3,82x + 0,001753T - 0,01364xT) 10^{14} E_g^{3/2}(x, T) T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g(x, T)}{2kT}\right),$$

$$m_c^*(x, T) = m_0 \left(\frac{3}{2} \frac{E_g(x, T)}{E_p(x)} \right) \left(\Delta + \frac{3}{2} E_g(x, T) \right) \left(\Delta + E_g(x, T) \right),$$

где $E_p(x) = 18 + 3x$, $\Delta = 1 \text{ эВ}$ — энергия спин-орбитального расщепления валентной зоны,

$$m_h^*(x, T) = \left(m_{hh}^{*3/2} + m_{hl}^{*3/2}(x, T) \right)^{2/3},$$

$$m_{hl}^*(x, T) \cong m_c^*(x, T) \quad m_{hh}^* = 0,55m_0,$$

Композиционная и температурная зависимости электронного сродства для КРТ была определена нами в [13] и имеет следующий вид:

$$\chi(x, T) = 5,59 - 1,29x + 0,54x^2 - 0,56x^3 + 7,13 \cdot 10^{-4} Tx$$

Для концентраций ионизированных акцепторных и донорных центров N_a^-, N_d^+ на основании экспериментальных данных, предоставленных сотрудниками ИФП СО РАН, нами были получены следующие

для объёмных полупроводников, полученной в рамках теории Ван-Русбрека-Шокли:

$$I_n(\omega) = \frac{8\pi k_B^2 T^3}{(2\pi\hbar)^3 c^2} \frac{\alpha_n(\omega) n^2 \hbar \omega}{e^{k_B T} - 1} \tau_R,$$

где n — показатель преломления материала, k_B — постоянная Больцмана, c — скорость света в вакууме, τ_R — излучательное время жизни в КРТ, а $\alpha(\omega)$ — спектральная зависимость коэффициента поглощения при данном типе оптического перехода.

В рассмотренных нами экспериментальных работах авторами наблюдались пики излучения при оптической накачке, обусловленные только межзонными оптическими переходами. В связи этим в своём рассмотрении мы будем учитывать только межзонное поглощение. Тогда для коэффициента поглощения при межзонных переходах между уровнями с номером n в КЯ можно записать следующее выражение:

Параметры материала КРТ МЛЭ

При расчётах в рамках данной модели нами используются следующие композиционные и температурные зависимости параметров материала КРТ [1, 10–12]:

композиционные зависимости. Для нелегированных структур КРТ, имеющих электронный тип проводимости концентрация собственных дефектов будет определяться следующим выражением:

$$N_d^{+int}(x) = (1,26x - 0,26) \cdot 10^{16} \text{ [см}^{-3}\text{]}.$$

Для вакансионно-легированного КРТ, имеющего дырочный тип проводимости, концентрация ионизированных акцепторных уровней будет равна

$$N_a^{-vac}(x) = (-26,1x + 16,7) \cdot 10^{15} \text{ [см}^{-3}\text{]}.$$

Заключение

В данной работе описана теоретическая методика расчёта зонной диаграммы и спектров фотолюминесценции неногетероструктур КРТ МЛЭ с квантовыми ямами, которая основана на численном самосогласованном решении уравнений Пуассона и Шрёдингера для исследуемой структуры. Особенностью представленной модели является то, что при расчётах учитывается зависимость электронного сродства от состава КРТ и температуры, чего ранее для материала КРТ не производилось. В расчётах использована оригинальная зависимость для электронного сродства $\chi(x,T)$, полученная авторами работы. Также при моделировании зонной диаграммы учитываются значения концентраций ионизированных примесных центров, рассчитанных из выражений, полученных на основании измерений равновесных концентраций для однородных гетероструктур КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии.

Литература

1. Рогальский А. Инфракрасные детекторы. Новосибирск: Наука, 2003.
2. Tonheim C. R. et al. // J. Physics: Conference Series. 2008. V. 100. P. 042024.
3. Naakenaasen R. et al. // J. Electron. Mater. 2010. DOI: 10.1007/s11664-010-1211-7.
4. Баженов Н. Л. и др. // ФТП. 2012. Т. 46. № 6. С. 792.
5. Гуменюк-Сычевская Ж. В. и др. // Прикладная физика. 2012. № 1. С. 101.
6. Шалимова К.В. Физика полупроводников.— М.: Энергия, 1976.
7. Шик А.Я. Физика низкоразмерных систем.— СПб.: Наука, 2001.
8. Воробьев Л.Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Шалыгина В.А. Оптические свойства наноструктур: учеб. пособие — СПб.: Наука. 2001
9. Блекмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках.— М.: Мир, 1964.
10. Hansen G. L. et al. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. P. 7099.
11. Любченко А. В. Физические основы полупроводниковой ИК-фотоэлектроники. Современные тенденции, новые материалы.— Киев: Наук. думка, 1984.
12. Н. Н. Берченко, В. Е. Кревс, В. Г. Средин; Полупроводниковые твёрдые растворы и их применение: Справочные таблицы.— М.: Воениздат, 1982.
13. Voitsekhovskii A. V. et al. // Opto-Electronics Review. 2010. V. 18, No. 3. P. 241.

Procedure of calculation for the photoluminescence spectra of $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ structures with potential and quantum wells

A.V. Voitsekhovskii and D.I. Gorn

Tomsk State University
36 Lenin av., Tomsk, 634050, Russia
E-mail: vav@elefot.tsu.ru; gorn_dim@elefot.tsu.ru

A theoretical model of calculation for the photoluminescence spectra of $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ structures with potential and quantum wells is presented in this work.

PACS: 78.55.Et

Keywords: photoluminescence, $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, quantum well, energy band diagram, computer simulation.

Bibliography — 13 references

Received September 20, 2013