

УДК 535.37:537.311.33

С.В. Рудницький, Р.М. Пелешак

Дрогобицький державний педагогічний університет ім. І. Франка

СПЕКТР НОСІЇВ δ -ЛЕГОВАНИХ КРЕМНІЄМ ШАРІВ GaAs (100)

© Рудницький С.В., Пелешак Р.М., 2001

S.V. Rudnytsky, R.M. Peleshak

**SPECTRUM OF CARRIERS OF δ -DOPED
BY SILICON LAYERS GaAs (100)**

© Rudnytsky S.V., Peleshak R.M., 2001

У роботі розв'язана задача на знаходження енергетичного спектра GaAs періодично δ -легованого кремнієм. Розв'язання виконане в межах методу деформаційного потенціалу. Потенційний профіль моделювався δ -функцією Дірака. Отримано кількісні залежності параметра деформації (ϵ_{mech}) для GaAs і Si від товщини δ -шару (L_w) та міжшарової відстані (b). Ці залежності виявилися спадними з ростом L_w та зростаючими з ростом b . Пояснено наявність у спектрах фотолюмінесценції δ -лінії в діапазоні $h\nu = 1,47 - 1,48$ еВ, зокрема, при $L_w = 10$ Å досягнуто задовільного збігу з експериментальними даними з фотолюмінесценції.

Energetical spectra of δ -doped GaAs by Si have been solved. The solve has been studied by deformation's potencial method. We chosen Dirack's δ -function for potential profile. It is found L_w - (thickness of δ -layer) and b - (thickness of GaAs layer) dependences of deformation's parametrs (ϵ_{mech}), they decrease when L_w increases and increase when b increases. It is found L_w - and b - dependences of energetical spectra. They decrease for electron's level and decrease for hole's level. It is explain appearance in photoluminescence spectra δ -band near $h\nu = 1.47 + 1.48$ eV. We received results similar to experiment's near $L_w = 10$ Å.

Вступ. Останнім часом проводяться експериментальні дослідження гетероструктур, в котрих потенційні ями мають нетрадиційний непрямокутний характер [1 – 4]. Особливий інтерес становлять селективнолеговані гетероструктури з двовимірним електронним газом, а зокрема гетероструктури, котрі містять дельта(δ)-легований шар [5]. δ -шарами прийнято називати напівпровідники з гранично-неоднорідним характером легування, коли легуюча домішка, замість однорідного розподілу за об'ємом напівпровідника, зосереджена у дуже вузьких шарах, які в ідеалі утворюють моношар.

Експериментальні дослідження δ -шарів нерозривно пов'язані з технологією молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ). Фактично тільки ця технологія дозволяє дозовано вводити легуючу домішку в один фіксований моношар плівки, котра росте. Застосування δ -легування в напівпровідникових гетероструктурах, вирощених методом МПЕ, дозволяє покращувати параметри приладів, отриманих на їх основі, а також створювати нові типи квантово-розмірних структур. Зокрема ці структури використовуються для створення надвисокочастотних (НВЧ) транзисторів, в котрих потрібна висока рухливість електронів, а також для створення

фотодетекторів і великоформатних матриць, що чутливі для середнього і далекого інфрачервоного (ІЧ) випромінювання на основі широкозонних напівпровідників.

Проводились дослідження цієї гетероструктури методами фотолюмінесценції (ФЛ) [6 – 8], який є одним з найбільш інформативних методів дослідження двовимірних систем. Але у випадку з δ -шарами, застосування ФЛ затрудняється тим, що внутрішнє електричне поле переміщує неосновні носії за межі δ -шару, перешкоджаючи рекомбінації. Тому для проведення ФЛ досліджень використовують не одиничні шари, а структури, котрі забезпечують високу концентрацію носіїв (порядку 10^{20} см^{-3}) поблизу шару. З цією метою використовуються або багатошарові структури, в яких нерівноважні дірки локалізуються в максимумах потенційного рельєфу, або гетероструктури з додатковим обмеженням, оточуючими широкозонними шарами. Найбільш популярним матеріалом, який застосовують для створення δ -шарів для експериментальних досліджень, є GaAs, причому для донорних шарів в основному використовують домішку Si [1], а для акцепторних – Be [2].

У нашій роботі об'єктом дослідження вибрана гетероструктура, в котрій матриця GaAs періодично δ -легована кремнієм. При проведенні експериментальних досліджень цієї гетероструктури порівнювали спектри ФЛ двох структур: матриця GaAs, однорідно легована кремнієм, і матриця GaAs, періодично δ -легована кремнієм [6]. У спектрах ФЛ δ -легованих шарів поряд з лініями, виявлених в одноріднолегованій структурі, спостерігається додаткова лінія в області енергій $h\nu=1,475 - 1,480 \text{ eV}$, названа авторами δ -лінією, інтенсивність котрої збільшується зі збільшенням дози δ -легування. Дослідники припускають, що, можливо, δ -лінія зумовлена ефектами розмірного квантування у вузьких потенційних ямах в δ -легованих структурах, а саме, що вона може бути зумовлена випромінювальною рекомбінацією між електронами однієї з квантових підзон потенційних ям в δ -шарах у максимумах валентної зони, сформованих між δ -шарами. У нашій роботі перевірена гіпотеза, висунута експериментаторами. Саме виникнення розмірного квантування ми пов'язуємо з механіко-деформаційними ефектами, що виникають у напружених надгратках, завдяки неузгодженості параметрів ґраток на межі розподілу контактуючих компонент: кристалічна матриця (GaAs) – δ -легуєчий шар (Si).

Модель. Обчислювати енергетичний спектр будемо в межах методу деформаційного потенціалу. Тому для того, щоб отримати спектр ФЛ, нам потрібно обчислити деформаційні параметри.

У цій роботі вивчена гетероструктура, яка складається з двох компонент, неузгодженість параметрів ґратки для яких становить $\approx 4 \%$. Це спричиняє створення механічної напруженості на границі розподілу GaAs–Si. До того ж, оскільки товщина нарощуваного δ -шару в ідеалі близька до сталої ґратки, то цей шар можна вважати двовимірною кристалічною ґраткою.

Моделювання потенційного профілю потенціалом Кронінга-Пенні було б досить грубим, оскільки зміна потенціалу є плавною і через малу товщину δ -шару відхилення від прямокутної форми буде вносити велику похибку. Тому потенційну енергію в напрямку, перпендикулярному до нарощуваного шару, будемо моделювати періодичним δ -потенціалом, потужність якого визначатиметься через деформаційні параметри. Узагальнена δ -функція Дірка добре зарекомендувала себе в фізиці для аналізу величин, функціональна залежність яких має стрибкоподібний характер в дуже малому околі деякої точки.

Розрахунок енергетичного спектра носіїв та спектра ФЛ. Якщо a_{Si} і a_{GaAs} – об’ємні параметри ґраток кремнію і арсеніду галію, то складова параметра ґратки в площині нарощуваного шару визначатиметься [9]

$$a_{\parallel Si} = a_{\parallel GaAs} = \frac{a_{Si} G_{Si} L_w + b a_{GaAs} G_{GaAs}}{G_{Si} + b G_{GaAs}} \quad (1)$$

де G_{Si} , G_{GaAs} – модулі зсуву кремнію і арсеніду галію. Компонент складові параметра ґраток Si і GaAs, в напрямі, перпендикулярному до площини нарощуваного шару, визначатимуться як [9]

$$a_{\perp Si(GaAs)} = a_{Si(GaAs)} [1 - D_{001Si(GaAs)} \left(\frac{a_{\parallel}}{a_{Si(GaAs)}} - 1 \right)] \quad (2)$$

де D – коефіцієнт, який визначається через відношення пружних сталей і залежить від кристалографічної орієнтації, зокрема:

$$D_{001} = 2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \quad (3)$$

Параметр деформації (відносна зміна об’єму елементарного кубика) для ґраток матриці і нарощеного δ -шару в приконтактній області визначатимуть так:

$$\varepsilon_{mech}^{Si(GaAs)} = \frac{1}{a_{Si(GaAs)}} (2a_{\parallel} + a_{Si(GaAs)}) - 3 \quad (4)$$

Оскільки $a_{\parallel} = a_{\parallel}(L_w, b)$ і $a_{\perp} = a_{\perp}(a_{\parallel})$, то і параметр деформації буде залежати від L_w і b .

Механіко-деформаційні ефекти призводять до зміни потенційного профілю на межі розподілу цієї гетероструктури. Потенційний профіль з врахуванням деформації запишемо у вигляді

$$E_{c(v)}(\dot{a}_{mech}) = \dot{A}_{c(v)} + V_{c(v) mech}(L_w, b) \quad (5)$$

$$V_{c(v) mech}(L_w, b) = a_{c(v)} \varepsilon_{mech}(L_w, b) \quad (6)$$

де $V_{c(v) mech}(L_w, b)$ – доданки, котрі описують зміну потенційної енергії носіїв, зумовлену механічним спотворенням ґраток на межі гетеророзподілу, $a_{c(v)}$ – константи статичного деформаційного потенціалу зони провідності та валентної зони.

На рис. 1 суцільною лінією позначені рівні енергії з урахуванням деформації, пунктирною лінією – без урахування деформації. Згідно з проведеними розрахунками, в досліджуваному інтервалі товщин шарів контактуючих компонент ($L_w = 5 - 17 \text{ \AA}$, $b = 100 - 700 \text{ \AA}$) справедлива нерівність

$$E_v^{Si} - E_v^{GaAs} < V_{v mech}^{Si} - V_{v mech}^{GaAs} \quad (7)$$

тобто змінюється також характер потенційного профілю гетероструктури. Положення дна зони провідності та валентної зони промодельюємо періодичною функцією, яка буде сумою доданків, котрі виражаються через δ -функцію Дірака. Період утвореної функції $d = L_w + b$.

Якщо розглядати окремо потенційну енергію для електронів і окремо для дірок, то, взявши для електронів за початок відліку дно зони провідності матриці з врахуванням деформації ($E_c^{GaAs}(\varepsilon_{mech})$), а для дірок за початок відліку взяти енергетичний рівень дна валентної зони матриці $E_v^{GaAs}(\varepsilon_{mech})$ і вісь $0E_v$ спрямувати в напрямку, протилежному до $0E_v^{Si}$, то потенційний профіль для носіїв матиме вигляд [10]

$$V_{c(v)}(z) = -\ddot{A}V_{c(v)mech}L_w \sum_k \ddot{a}(z - \frac{d}{2}(2k+1)) \quad (8)$$

$$\Delta V_{c(v)mech} = a_{c(v)}^{GaAs} \epsilon_{mech}^{GaAs}(L_w, b) - a_{c(v)}^{Si} \epsilon_{mech}^{Si}(L_w, b) \quad (9)$$

де z – координата вздовж осі, перпендикулярної до площини нарощуваного шару. Якщо ввести позначення

$$\dot{U}_{e(h)} = \frac{\ddot{A}V_{c(v)mech} L_w}{2\dot{a}_{e(h)}^*} \quad (10)$$

де $\alpha_{e(h)}^* = \frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}^*}$ і m_e^{*GaAs} , m_h^{*GaAs} – ефективні маси електрона та дірки в кристалі матриці, то запис потенціальної енергії буде таким:

$$V_{c(v)}(z) = -\frac{\hbar^2 \dot{U}_{e(h)}}{m_{e(h)}^*} \sum_k \ddot{a}(z - \frac{d}{2}(2k+1)). \quad (11)$$

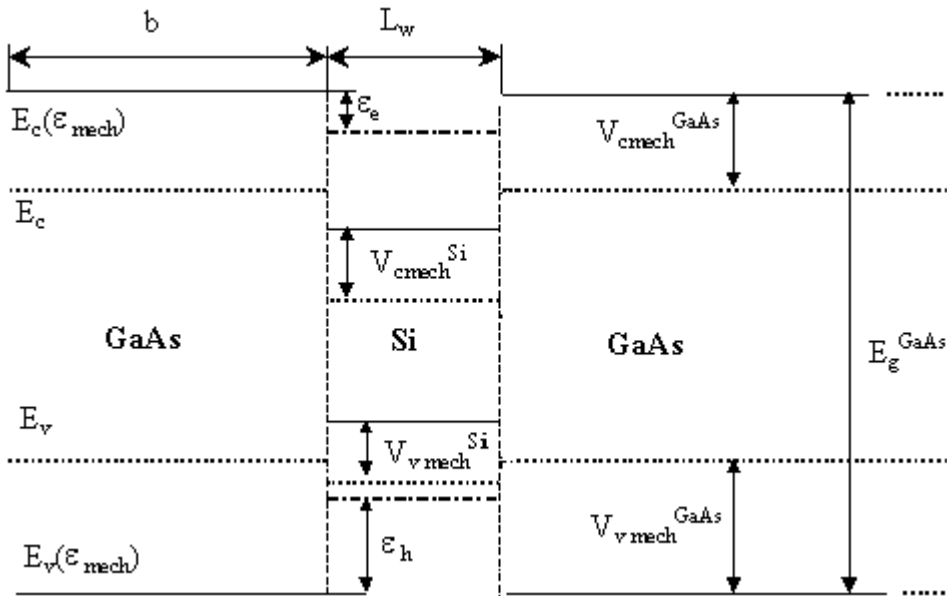


Рис. 1. Потенційний профіль гетероструктури GaAs–Si (δ)

Для отримання енергетичного спектра носіїв у полі надгратки запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера і оператор кінетичної енергії у вигляді двох доданків, перший з яких буде функцією від z , а другий – не залежить від z :

$$[-\frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}^*} \nabla_{//}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{c(v)}(z)] \Psi(x, y, z) = E_{e(h)} \Psi(x, y, z) \quad (12)$$

де $\nabla_{//}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$, $E_{e(h)}$ – власне значення енергії, $\Psi(x, y, z)$ – хвильова функція носія.

Оскільки операторна частина є сумою двох доданків, котрі залежать від різних змінних, то хвильова функція матиме вигляд

$$\Psi(x, y, z) = e^{ik_{//}r_{//}} \varphi(z) \quad (13)$$

Провівши певні спрощення та ввівши позначення $\varepsilon_{e(h)} = E - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{e(h)}^*}$,

$-2m_{e(h)}^* \varepsilon_{e(h)} / \hbar^2 = \alpha_{e(h)}^2$, отримаємо рівняння (12)

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\Omega_{e(h)} \sum_k \delta(z - \frac{d}{2}(2k+1)) \right] \varphi(z) = \alpha_{e(h)}^2 \varphi(z) \quad (14)$$

Розглянемо рух носіїв в інтервалі: $-d/2 < z < d/2$. Оскільки на даному інтервалі $V(z)=0$, то позначивши хвильову функцію через $\varphi_0(z)$ отримаємо

$$\varphi_0(z) = Ae^{\alpha z} + Be^{-\alpha z} \quad (15)$$

На інтервалі $d/2 < z < 3d/2$ позначимо хвильову функцію $\varphi_I(z)$ і, скориставшись теоремою Блоха, отримаємо

$$\varphi_I(z) = e^{ik_z d} [Ae^{\alpha(z-d)} + Be^{-\alpha(z-d)}] \quad (16)$$

Для знаходження рівняння спектра скористаємося граничними умовами в точці $z = \frac{d}{2}$.

Першу умову отримуємо з неперервності хвильової функції в точці $z = \frac{d}{2}$:

$$\varphi_0\left(\frac{d}{2} - 0\right) = \varphi_I\left(\frac{d}{2} + 0\right) \quad (17)$$

Умову гладкості хвильової функції запишемо з урахуванням скінченності δ -подібного потенціалу. Для цього проінтегруємо рівняння Шредінгера (24) в інтервалі $d/2 - 0 < z < d/2 + 0$ і, провівши спрощення, отримаємо

$$\varphi_I'\left(\frac{d}{2} + 0\right) = \varphi_0'\left(\frac{d}{2} - 0\right) - 2\Omega_{e(h)} \varphi_0\left(\frac{d}{2} - 0\right) \quad (18)$$

Розв'язавши систему рівнянь (17), (18), отримуємо рівняння спектра для носіїв

$$ch(\alpha_{e(h)} d) - \frac{\dot{U}_{e(h)}}{\alpha_{e(h)}} sh(\alpha_{e(h)} d) = 1 \quad (19)$$

Однак значення енергій $\varepsilon_e(L_w, b)$ і $\varepsilon_h(L_w, b)$ необ'єктивно характеризують енергетичний спектр носіїв. Це можна побачити з (рис. 1), де штрих-пунктирною лінією позначені рівні енергій ε_e і ε_h , що виникають за рахунок ефекту розмірного квантування. При цьому ε_e відраховується від дна зони провідності матриці, з урахуванням деформації, а енергія ε_h відраховується від дна валентної зони матриці (GaAs), теж при врахуванні деформації. Отже, щоб об'єктивно досліджувати залежність енергетичного спектра носіїв від L_w і b , потрібно відраховувати енергію від єдиного енергетичного рівня, котрий би не залежав від деформації. За такий рівень, наприклад, можна вибрати дно зони провідності широкозонного матеріалу (GaAs) без урахування деформації, відносно якого глибини залягання дискретних рівнів енергії визначатимемо за формулами

$$E_e(L_w, b) = V_c^{GaAs} (\varepsilon_{mech}^{GaAs}) + \varepsilon_e(L_w, b) \quad (20)$$

$$E_v(L_w, b) = -E_g^{GaAs} + V_h^{GaAs} (\varepsilon_{mech}^{GaAs}) + \varepsilon_h(L_w, b) \quad (21)$$

де V_c^{GaAs} і V_v^{GaAs} – деформаційний стрибок дна зони провідності та валентної зони в матеріалі кристалічної матриці (GaAs), E_g^{GaAs} – ширина забороненої зони в GaAs. Появу δ -лінії в

спектрах ФЛ ми пояснюємо оптичними переходами між цими двома рівнями. Тоді енергію кванта, що випромінюється при цих міжзонних переходах, можна визначити так:

$$E_{\delta}(L_w, b) = hv_{\delta}(L_w, b) = E_e(L_w, b) - E_h(L_w, b) \quad (22)$$

Числові розрахунки. Ми розраховували залежність параметрів деформації GaAs та Si від міжшарової відстані b при фіксованому L_w .

Графічні залежності $\varepsilon_{mech}^{Si}(b)$, $\varepsilon_{mech}^{GaAs}(b)$, показані на (рис. 2).

Бачимо, що $\varepsilon_{mech}^{Si} > 0$, $\varepsilon_{mech}^{GaAs} < 0$, тобто у приконтатній області в площині нарощуваного шару відбувається розтяг кремнію і стиск арсеніду галію. А в напрямі, перпендикулярному до площини нарощуваного δ -шару, відбувається стиск кремнію і розтяг арсеніду галію.

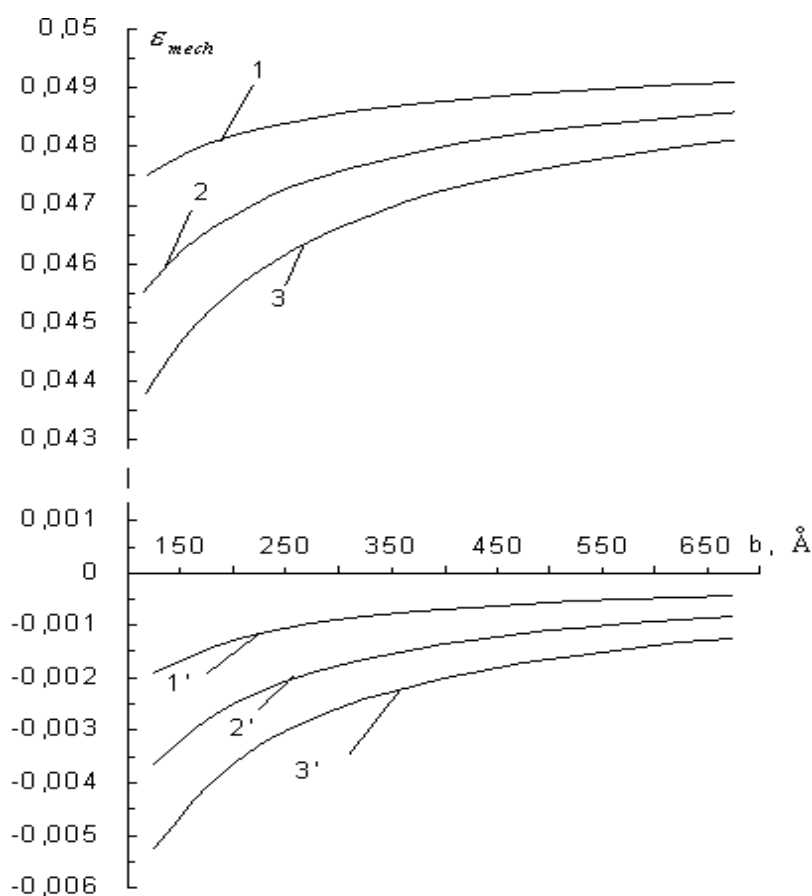


Рис. 2. Залежність параметра деформації від міжшарової відстані для Si при L_w , Å: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 15; для GaAs при L_w , Å: 1' – 5, 2' – 10, 3' – 15

Досліджені нами залежності енергії міжзонних переходів від міжшарової відстані b при фіксованих значеннях товщини нарощуваного шару L_w ($E_{\delta L_w}(b)$) показані на рис. 3.

Як бачимо, енергія кванта, який випромінюється при міжзонних оптичних переходах у δ -шарі зменшується як з ростом міжшарової відстані (b), так і з ростом товщини δ -шару.

Розрахунки деформаційних параметрів та енергії, що випромінюється при цих міжзонних переходах, проводили при даних, наведених в таблиці.

	a, Å	$G \cdot 10^{-10}$, Па	D_{001}	E_g , eV	E_c , eV	E_v , eV	a_c , eV	a_v , eV	m_e/m_0	m_h/m_0
Si	5,43	3,641	0,776	1,17	-5,86	-7,03	1,98	2,46	0,26	0,56
GaAs	5,65	2,522	0,934	1,52	-5,4	-6,92	-7,17	1,16	0,07	0,45

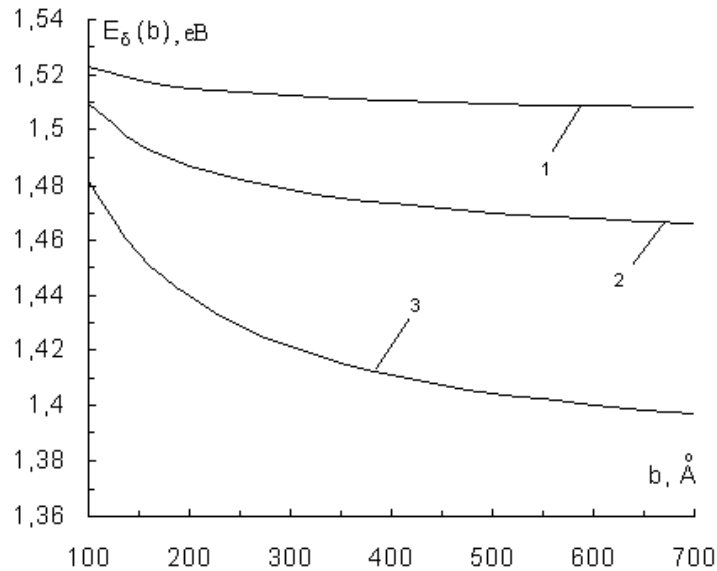


Рис. 3. Залежність енергії міжзонних оптичних переходів від товщини шару матриці $E_{\delta L_w}(b)$ при товщині δ -шару L_w , Å: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 15

Висновки. 1. З ростом товщини δ -шару (L_w) в приконтактній області збільшується стиск кристалічного шару GaAs і відповідно зменшується розширення шару Si і навпаки – з ростом товщини шару матриці (b) стиск GaAs зменшується і розширення Si збільшується;

2. деформаційні ефекти змінюють характер потенційного профілю досліджуваної гетероструктури, тобто потенційний бар'єр для дірок у матеріалі кремнію змінюється на потенційну яму, що призводить до зміни фізичних властивостей гетероструктури;

3. енергія, яка випромінюється при міжзонних оптичних переходах спадає з ростом товщин шарів обох компонентів надгратки. Зокрема при $L_w=10$ Å теоретичні розрахунки задовільно узгоджуються з експериментальними даними з фотолюмінісценції.

1. Ploog K., Fischer A., Künzel H. // *J. Electrochem. Soc.* 1981. 128, № 2. P. 400 – 410.
2. Koenraad P.M., Blam F.A.P., Langerak C.J.G.M., Leys M.R. // *Semicond. Sci. Techn.* 1990. 5, № 8. P. 861 – 866.
3. Wood C. E. C., Metze G., Berry J., Eastman L. F. // *J. Appl. Phys.* 1980. 51, № 1. P. 383 – 387.
4. Usui A., Watanabe H. // *J. de Phys.* 1987. 48. Suppl. C5. P. 21 – 28.
5. Шук А.Я. Полупроводниковые структуры с δ -слоями. // *ФТП.* 1992. 26, №12. С. 1161 – 1179.
6. Мокеров В.Г., Федоров Ю.В., Гук А.В., Галиев Г.Б., Страхов В.А., Яременко Н.Г. Оптические свойства легированных кремнием слоев GaAs (100), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. // *ФТП.* 1998. 32, №9. С. 1060 – 1063.
7. Васильев А. М., Копьев П.С., Надточий М.Ю., Устинов В.М. Переходы с участием размерно-квантованных подзон в спектре фотолюминесценции δ -легированого GaAs. // *ФТП.* 1989. 23, № 12. С. 1233 – 1237.
8. Бачеріков Ю.Ю., Нечипорук Б.Д., Охріменко О.Б., Родіонов В.Є., Рудько Г.Ю., Юхимчук В.А. // *УФЖ.* 1998. 43, № 3. С. 329 – 330.
9. Chris G., Van de Walle // *Phys. Rev. B.* 1989. 39, № 3. P. 1871 – 1883.
10. Гусейнов Н.М, Гашидзе Н.Ф., Гаджиев А.Т. Полярон в сверхрешетке с δ -образными потенциалами. // *ФТТ.* 1997. 39, № 1. С. 181 – 184.