

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ФОТООТРАЖЕНИЯ
СПЕКТРА ЭЛЕКТРОННО - ДЫРОЧНЫХ СОСТОЯНИЙ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТОРОСТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

Дипломная работа
студента 605 группы
Мещанкина
Андрея Вячеславовича

Допущена к защите «25» декабря 2014г.

Зав.кафедрой общей физики
д.ф.-м.н., профессор
_____ А.М. Салецкий

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент
_____ П.Ю. Боков

Москва 2014

Содержание

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Введение | 2 |
| 2 | Полупроводниковые структуры на основе InGaAsP/InGaAs и методика исследования энергетического спектра электронов и дырок в них | 3 |
| 2.1 | Гетероструктуры | 3 |
| 2.2 | Квантовая яма, нить и точка | 4 |
| 2.3 | Методы роста полупроводниковых гетероструктур | 5 |
| 2.3.1 | Эпитаксия | 5 |
| 2.3.2 | Молекулярно-пучковая эпитаксия | 5 |
| 2.3.3 | Жидкофазная эпитаксия | 5 |
| 2.3.4 | Газофазная эпитаксия | 6 |
| 2.4 | Применение полупроводниковых гетероструктур в современной нано- и оптоэлектронике | 6 |
| 2.4.1 | Размерное квантование электронных состояний | 9 |
| 2.5 | Спектроскопия фотоотражения | 11 |
| 2.5.1 | Модуляционная спектроскопия | 11 |
| 2.5.2 | Метод фотоотражения | 13 |
| 2.5.3 | Низкополевой случай | 15 |
| 2.5.4 | Среднеполевой случай | 16 |
| 2.6 | Анализ модуля сигнала фотоотражения в низкополевом случае | 16 |
| 2.7 | Скачок потенциала | 18 |
| 2.8 | Цели и задачи | 19 |
| 3 | Образцы и методика эксперимента | 20 |
| 3.1 | Исследуемые образцы | 20 |
| 3.2 | Методика эксперимента | 21 |
| 4 | Спектры фотоотражения полупроводниковых структур с квантовыми ямами различной глубины. Скачок потенциала на гетерогранице InGaAs/InGaAsP | 23 |
| 4.1 | Спектры фотоотражения и их обработка | 23 |
| 4.2 | Методика определения скачка потенциала | 28 |
| 4.3 | Моделирование | 33 |
| 5 | Заключение | 36 |

1 Введение

Гетероструктуры с квантовыми ямами на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ представляют собой основу современных приборов электроники. Квантовые ямы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в составе гетероструктур используют в качестве каналов полевых транзисторов, областей формирования излучения в светодиодах и лазерах [1], используемых в средствах волоконно-оптической связи [2, стр. 7]. Основная особенность такого рода структур – проявление эффектов размерного квантования электронов и дырок в области квантовой ямы [2, стр. 19-24].

Недостаток гетероструктур типа $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ заключается в существующих в них механических напряжениях, обусловленных различием постоянных решеток InGaAs и GaAs . Решение этой проблемы оказалось возможным с применением четвертных растворов, таких как $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$. В структурах такого рода возможно практически независимое изменение ширины запрещенной зоны и ширины квантовой ямы за счет изменения мольных долей x (In) и y (P) [3].

Для бесконтактной неразрушающей диагностики энергетического спектра электронов и дырок в квантовых ямах полупроводниковых гетероструктур используют методы люминесценции [4], возбуждения люминесценции [4], спектроскопии поглощения [5], а также, методы модуляционной спектроскопии [6]. Преимущество последних методов заключается в их сравнительно высокой чувствительности к особенностям зонной структуры. Недостатки - трудная интерпретация спектров.

В данной работе приведены результаты исследования серии гетероструктур с квантовыми ямами различной глубины на основе соединений $\text{InGaAs}/\text{InGaAsP}$. Метод исследования - спектроскопии фотоотражения. Измерены спектры фотоотражения. Произведена идентификация компонент спектров фотоотражения, выделена группа линий, соответствующая межзонным переходам в области квантовой ямы InGaAs .

По энергетическому спектру наблюдаемых межзонных переходов сделано заключение о глубинах квантовых ям. Предложена методика оценки скачка потенциала на гетерогранице по данным фотоотражения и результатам моделирования энергетического спектра квантовой ямы в рамках модели огибающей волновой функции. Оценены скачок потенциала на гетерогранице $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InGaAsP}$ и мольная доля индия в соединении $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

2 Полупроводниковые структуры на основе InGaAsP/InGaAs и методика исследования энергетического спектра электронов и дырок в них

2.1 Гетероструктуры

Возможность управления типом проводимости полупроводника с помощью легирования различными примесями и идея инжекции неравновесных носителей заряда были тем началом, из которого выросла полупроводниковая электроника. Гетероструктуры дают возможность решить значительно более общую проблему управления фундаментальными параметрами в полупроводниковых кристаллах и приборах, такими как ширина запрещенной зоны, эффективная масса носителей и их подвижность, показатель преломления, энергетический спектр электронов и дырок и т.д. [1].

Полупроводниковая гетероструктура – структура, представляющая собой контакт двух различных по химическому составу полупроводников. Отличие гетеропереходов, например Ge –GaAs, от обычного p-n перехода заключается в том, что в обычных p-n переходах используется полупроводник одного и того-же сорта, например, p-Si –n-Si [2, стр. 8].

В конце двадцатого начале двадцать первого века полупроводниковые гетероструктуры оказались в фокусе исследований многих ученых, занимающихся физикой полупроводников и полупроводниковой электроникой. В 1956, 2000, 2009, 2014 годах были присуждены нобелевские премии за открытия в области физики полупроводников. В настоящее время основные исследования в области физики полупроводников ведутся с тройными соединениями, при этом становится ясно, что для увеличения точности управления фундаментальными параметрами требуется более сложное соединение - четвертное [1]. В отличие от тройных соединений, четвертные позволяют практически независимо управлять постоянной решетки и шириной запрещенной зоны. Это делает возможным изготовление так называемых решеточно-согласованных четвертных растворов $A_xB_{1-x}C_{1-y}D_y$ с наперед заданной шириной запрещенной зоны [1]. Несмотря на все плюсы четвертных соединений, они не лишены недостатков, таких как: трудность изготовления слоев необходимой степени однородности, недостаточная изученность фундаментальных характеристик таких материалов.

2.2 Квантовая яма, нить и точка

Квантовая яма – структура, в которой носители заряда ограничены в одном из направлений. Другими словами, носители проявляют волновые свойства в одном измерении, но ведут себя почти как свободные частицы в двух других. Характерной особенностью движения носителей заряда в квантовой яме является дискретность спектра разрешенных значений её энергии. Такие квантово-размерные эффекты в квантовой яме начинают существенно проявляться в том случае, когда ее ширина сопоставима с длиной волны Де-Бройля находящейся в ней частицы.

Простейшая квантовая яма - это тонкая металлическая или полупроводниковая пленка. Глубина такой квантовой ямы равна работе выхода носителя заряда. Зонная диаграмма (а) и схематический вид структуры (б) с квантовой ямой GaAs и барьером AlAs изображен на рис. 1 [7, стр. 14 - 19].

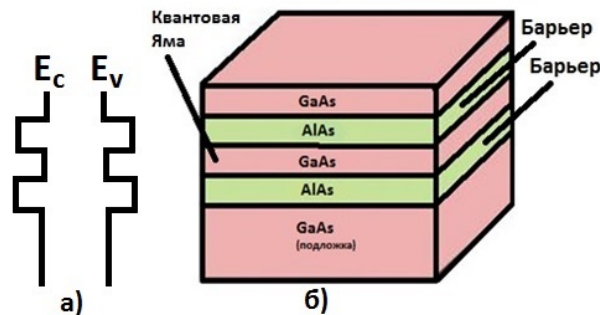


Рис. 1: а) Зонная диаграмма гетероструктуры б) гетероструктура с квантовой ямой GaAs; AlAs - барьерный слой

Квантовые проволоки (провода) представляют собой одномерные структуры (сформированные, как правило, из полупроводникового материала), в которых в силу ограничения движения носителей заряда, реализованного по двум перпендикулярным направлениям, проявляются квантово-размерные эффекты.

Квантовой точкой может считаться любой кусочек полупроводника, ограниченный по всем трем пространственным координатам, размеры которого таковы, что проявление квантово-размерных эффектов становится существенным в силу ограничения движения носителей по трем взаимно перпендикулярным направлениям [8]. На рисунке 2 изображен схематический вид квантовой проволоки и квантовой точки на подложке [9].

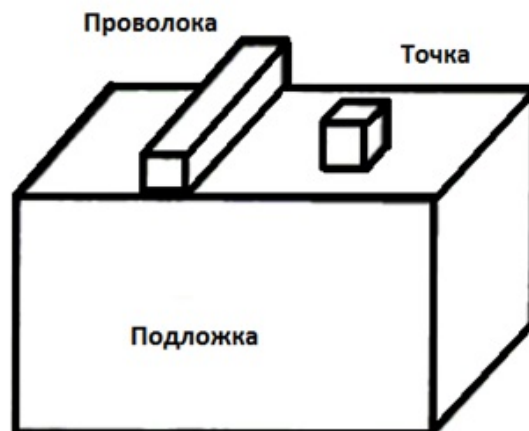


Рис. 2: Схематическое изображение (слева на право) квантовой проволоки и квантовой точки

2.3 Методы роста полупроводниковых гетероструктур

2.3.1 Эпитаксия

Эпитаксия — процесс выращивания пленок на подложке, при котором структура выращиваемой пленки в точности копирует структуру подложки [10, стр. 19]. К наиболее распространенным методам эпитаксии относят молекулярно-пучковую эпитаксию и газофазную эпитаксию.

2.3.2 Молекулярно-пучковая эпитаксия

При молекулярно-пучковой эпитаксии рост структуры происходит за счет напыления пленок атомарной толщины из исходных материалов. Молекулярный пучок формируется при нагревании исходного материала до испарения в ячейке с малым отверстием (эффузионной ячейке). Когда пар выходит из ячейки через это отверстие, его молекулы образуют хорошо коллимированный пучок. Коллимированность пучка объясняется в том числе сверхвысоким вакуумом вне ячейки (около 10^{-8} Па [11]). Обычно на подложку, на которой происходит эпитаксиальный рост пленки, направлено несколько молекулярных пучков, содержащих элементы, необходимые как для образования полупроводника так и для его легирования [10–13].

2.3.3 Жидкофазная эпитаксия

Для реализации роста структур методом жидкофазной эпитаксии готовится смесь (шихта) из вещества наращиваемого слоя, легирующей примеси, которая может быть донорной или акцепторной, и металла-растворителя, имеющего низкую температуру

плавления и хорошо растворяющего материал подложки (Ga, Sn, Pb). Процесс проводят в атмосфере азота и водорода (для восстановления оксидных пленок на поверхности подложек и расплава) или в вакууме после предварительного восстановления поверхностной оксидной пленки. Расплав наносится на поверхность подложки, частично растворяя ее и удаляя загрязнения и дефекты. После выдержки при высокой температуре система медленно охлаждается, расплав из насыщенного состояния переходит в пересыщенное, и избыток полупроводника осаждается на подложку, играющую роль затравки [10, стр. 26].

2.3.4 Газофазная эпитаксия

В газофазной эпитаксии газы, содержащие необходимые химические элементы, вступают в реакцию на подложке полупроводника. Стандартная реакция для получения пленки Si таким способом имеет следующий вид: $\text{SiH}_4 \xrightarrow{\text{тепло}} \text{Si} \downarrow + 2\text{H}_2 \uparrow$. Кремний осаждается на подложке, водород из камеры роста (реактора) удаляют методом продувки реактора. По типу используемых в методе газофазной эпитаксии соединений, ее часто называют ростом из металлоорганической фазы. Метод газофазной эпитаксии позволяет реализовать легирование с хорошей точностью дозирования примеси [10, стр. 20 - 21].

2.4 Применение полупроводниковых гетероструктур в современной нано- и оптоэлектронике

Развитие технологии производства и масштабность проведения фундаментальных исследований полупроводниковых гетероструктур широко отразились в нашей повседневной жизни. Электронные устройства на основе гетероструктур используются практически каждым человеком ежедневно: телекоммуникационные системы, системы спутникового телевидения, светодиоды на основе гетероструктур, биполярные и полевые транзисторы [1].

Как показали исследования, гетероструктуры на основе GaAs/InGaAs/InGaAsP оказались наиболее подходящими для создания лазеров генерирующих излучение в среднем ИК- диапазоне рис. 3. В этих структурах, активными областями являются квантовые ямы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, заключенные между барьерами GaAs или $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$. Формирование заданной частоты генерации в том числе достигается путем варьирования доли In в слое квантовой ямы [14].

Приборы на основе гетероструктур InGaAsP/InP используют в качестве биполярных транзисторов с двойным гетеропереходом (рис. 4). Такое устройство с эмиттером

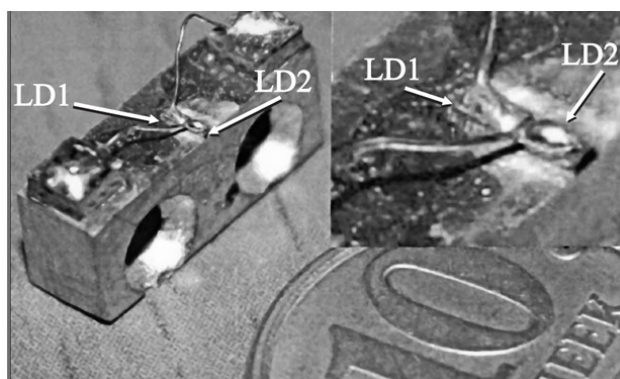


Рис. 3: Фотография двухчипового лазера. В верхнем правом углу приведено увеличенное изображение двухчипового лазера, где LD1 - лазер, излучающий в длинноволновом диапазоне, LD2 - лазер, излучающий в коротковолновом диапазоне [14]

площадью 15 мкм^2 имеет граничную частоту коэффициента передачи тока в 170 ГГц и предельную частоту коэффициента передачи тока базы 256 ГГц. Напряжение пробоя равно 8.3 В, что является лучшим показателем для такого типа приборов. К сожалению, при работе на таких частотах не удастся избежать перегрева такого устройства. [15].

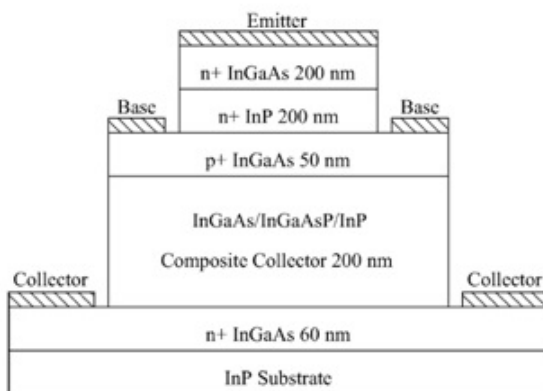


Рис. 4: Схематическое изображение биполярного транзистора с двойным гетеропереходом на основе InGaAsP [15]

Солнечные батареи, основанные на гетероструктурах, являются одним из наиболее многообещающих средств преобразования солнечной энергии, т.к. появляется возможность управления спектром поглощения такой структуры. Недавние исследования показали, что солнечные батареи на основе InAlAs/InGaAsP/InGaAs (рис. 5) могут достигать эффективности более 51% одновременно являясь одними из самых дорогостоящих источников энергии [3].

Одним из приложений гетероструктур с квантовыми ямами стало создание источников и приемников излучения, работающих в системах волоконно-оптической связи.

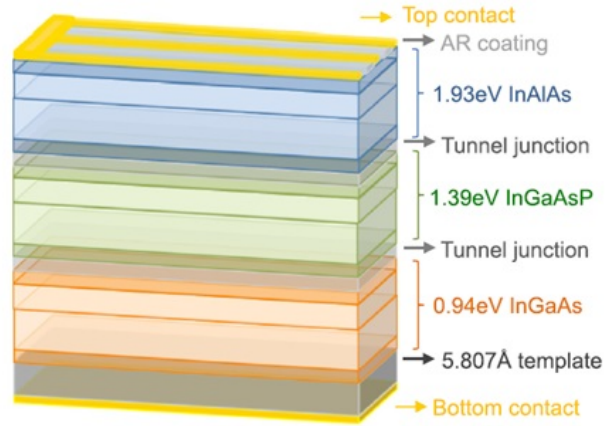


Рис. 5: Схематическое изображение гетероструктуры $InAlAs/InGaAsP/InGaAs$ солнечной батареи [3]

Сравнительно распространенной для этих целей гетеропар является $GaAs/InGaAs$ [16]. В такого рода структуре слои квантовой ямы и барьеров оказываются напряженными, из-за различия постоянной решетки барьера и ямы. Эти деформации приводят к сдвигам дна зоны проводимости и потолка валентной зоны как в слоях квантовых ям, так и в слоях барьеров. Коэффициент рассогласования решеток данной структуры ϵ можно получить из формулы $\epsilon = \frac{a_0 - a_s}{a_s}$, где a_0 - постоянная решетки $InGaAs$, а a_s - постоянная решетки $GaAs$. Таким образом $\epsilon = 0,038$. То есть при создании структур на основе $GaAs/InGaAs$, $InGaAs$ подвержен довольно сильным механическим деформациям. Это означает невозможность изготовления гетероструктур с толстыми слоями $InGaAs$. При изготовлении толстых (>100 нм) слоев в них будут формироваться дислокации несоответствия. В то же время толстые слои являются частью большинства полупроводниковых приборов. Чаще всего такие слои выполняют две роли: буфера, предназначенного для минимизации рассогласований решетки, и теплоотвода.

Возможным вариантом создания решеточно-согласованной гетеропары стало использование четвертных твердых растворов, таких как $AlInGaP$, $InGaAsP$ [17]. Тонкая подстройка ширины запрещенной зоны вариацией состава многокомпонентного соединения и периода кристаллической решетки в паре с материалами $GaAsP$ и $InGaAs$ позволяют создавать ненапряженные гетероструктуры с заданной зонной диаграммой. Приборы на основе $InGaAsP/InGaAs$ гетеропереходов являются востребованными в том числе и в связи с ростом инфраструктуры волоконно-оптических средств связи [18]. В то же время, гетероструктуры этого типа в настоящее время изучены не достаточно хорошо: если на базе гетеропары $AlInGaP/GaAsP$ уже много лет изготавливают светоизлучающие диоды желто-зеленой области спектра, то в для волоконно-оптических средств связи основным остается материал $GaAs/InGaAs$, несмотря на преимущества

использования менее напряженных слоев типа InGaAsP/InGaAs [19].

Все это указывает на актуальность исследования гетероструктур с квантовыми ямами на основе InGaAsP/InGaAs [20].

2.4.1 Размерное квантование электронных состояний

В настоящее время разработаны методы расчета квантовых состояний в наноструктурах, основанные на моделях псевдопотенциала или сильной связи. В приближенных подходах огибающая волновой функции электрона или дырки внутри каждого слоя многослойной структуры записывается в виде суперпозиции линейно независимых объемных решений, а для сшивки на гетерограницах вводятся граничные условия для этой огибающей и ее производной по нормальной координате [21].

Рассмотрим структуру с одиночной квантовой ямой A с толщиной a , заключенной между барьерами B (рис. 6). В случае простой изотропной зоны проводимости, огибающая волновой функции записывается в виде:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{(irk_{\parallel}\psi(z))}, \quad (1)$$

где Z – ось структуры, совпадающая с направлением роста, k – двумерный волновой

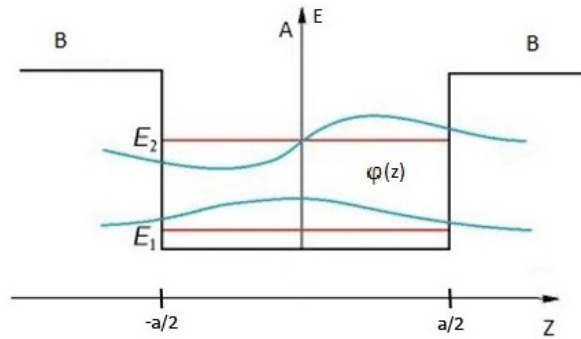


Рис. 6: Зонная диаграмма структуры с одиночной квантовой ямой, где A - квантовая яма, B - барьеры. Показаны два нижних энергетических уровня и две волновые функции (четная и нечетная)

вектор с компонентами k_x и k_y , он описывает движение электрона в плоскости (x, y) . Зависящая от z огибающая $\phi(z)$ удовлетворяет следующим уравнениям Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_A} \phi(z) = E\phi(z) \text{ (для ямы)}, \quad (2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_B} + V_B \right) \phi(z) = E\phi(z) \text{ (для барьера)}, \quad (3)$$

где $m_{A,B}$ – эффективная масса электронов в материалах A и B соответственно. При конечной высоте барьера V_B имеются два вида решений уравнений. Если значение $E - V_B - (\hbar^2 k^2)/(2m_B)$ положительно, решения в пределах каждого слоя являются линейными комбинациями двух плоских волн и энергетический спектр в этой области энергии непрерывен даже при фиксированном значении двухмерного волнового вектора k . В области энергии с отрицательным значением $E - V_B - (\hbar^2 k^2)/(2m_B)$, которая рассматривается в дальнейшем, внутри ямы функция $\phi(z)$ есть линейная комбинация плоских волн $\exp(\pm ikz)$, а в левом и правом барьерах она экспоненциально спадает как $\exp(\pm i\kappa z)$, где

$$k = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2}}, \quad (4)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_B(V_B - E)}{\hbar^2}}. \quad (5)$$

Рассматриваемая система $B/A/B$ симметрична относительно операции отражения $z \rightarrow -z$, если за начало координат выбрать середину квантовой ямы. Поэтому совокупность собственных решений уравнения Шредингера разбивается на подгруппы четных и нечетных решений, так что $\phi(-z) = \pm\phi(z)$. Огибающая $\phi(z)$ для четных размерно-квантованных состояний записывается в виде:

$$\phi(z) = \begin{cases} C \cos(kz), & |z| \leq a/2 \\ D \exp(-\kappa(|z| - \frac{a}{2})), & |z| \geq a/2 \end{cases}. \quad (6)$$

Коэффициенты C и D находятся из условия нормировки волновой функции $\phi(z)$ и граничных условий, связывающих огибающие ϕ_A , ϕ_B и их производные по обе стороны гетерограницы между материалами A и B :

$$\phi(z) = \begin{cases} \phi_A = \phi_B, \\ \frac{1}{m_A} \frac{d\phi}{dz} \Big|_A = \frac{1}{m_B} \frac{d\phi}{dz} \Big|_B \end{cases}. \quad (7)$$

Граничные условия обеспечивают непрерывность огибающей функции и потока частиц

через гетерограницу. В итоге для коэффициентов C и D справедливы соотношения:

$$\begin{aligned} C \cos \frac{ka}{2} &= D, \\ \frac{k}{m_A} C \sin \frac{ka}{2} &= \frac{\kappa}{m_B} D. \end{aligned} \quad (8)$$

Отсюда получаем уравнение для вычисления энергии чётных решений:

$$\operatorname{tg} \frac{ka}{2} = \eta = \frac{m_A \kappa}{m_B k} \quad (9)$$

Для нечётных решений огибающая $\phi(z)$ имеет вид:

$$\phi(z) = \begin{cases} C \sin(kz), & |z| \leq a/2 \\ D \operatorname{sign}(z) \exp(-\kappa(|z| - \frac{a}{2})), & |z| \geq a/2 \end{cases}, \quad (10)$$

а энергию можно вычислить из уравнения:

$$\operatorname{ctg} \frac{ka}{2} = -\eta. \quad (11)$$

Таким образом, уравнения 9 и 11 являются трансцендентными относительно значения энергий. Один из способов решения таких уравнений - графический рис. 7.

В случае бесконечно высоких барьеров, размерноквантованные значения волнового вектора:

$$k = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2} - k_{||}^2}, \quad (12)$$

и энергии E принимают значения:

$$\begin{aligned} k &= \frac{n\pi}{a}, \\ E(k_{||}) &= \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 + k_{||}^2 \right), \end{aligned} \quad (13)$$

где $n=1,3,\dots,2n+1,\dots$ для четных решений и $n=2,4,\dots,2n,\dots$ для нечетных [2, 21].

2.5 Спектроскопия фотоотражения

2.5.1 Модуляционная спектроскопия

Современные задачи оптоэлектроники требуют детального изучения оптических свойств полупроводниковых материалов. Речь идет о спектральных особенностях, связанных как с зонными состояниями, так и с участием локальных состояний в запрещенной зоне полупроводника. По составу локальные центры в полупроводниках довольно сложны. В них присутствуют неконтролируемые примеси, специально вводимые при-

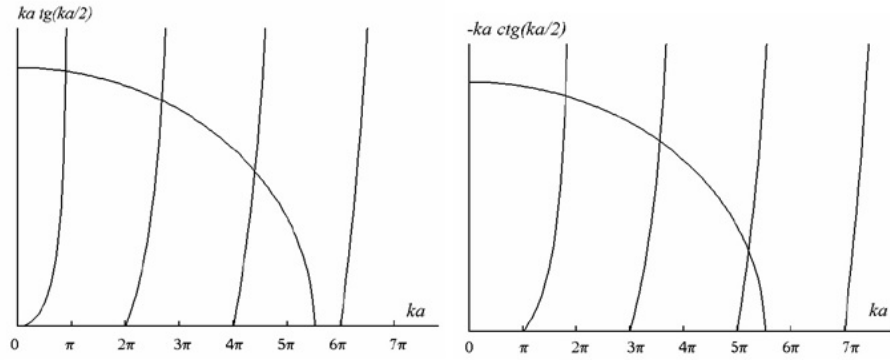


Рис. 7: Определение положения четных и нечетных (слева на право) энергетических состояний в прямоугольной квантовой яме по точкам пересечений функций $\text{tg} \frac{ka}{2}$ с η и $\text{ctg} \frac{ka}{2}$ с $-\eta$ соответственно [2, стр. 101 - 104]

миси, собственные дефекты решетки и т.д. Все это обуславливает наличие широких бессруктурных полос в оптическом спектре. Это затрудняет экспериментальное исследование материалов. Трудности могут быть преодолены, если измерять не обычный оптический спектр полупроводника, а изменения в спектре, вызванные малым, периодически меняющимся возмущением или малыми изменениями параметров световой волны. Методы, основанные на обозначенных выше принципах называют методами модуляционной спектроскопии.

С помощью методов модуляционной спектроскопии удастся выявить и усилить структуру, обусловленную электронными переходами в критических точках дисперсионной кривой, связанных с экстремумами диэлектрической функции ϵ , если предположить, что измеряемый сигнал ϵ_1 при регистрации диэлектрической функции вблизи критической точки ω_E описывается выражением:

$$\epsilon_1 = \epsilon(\omega - \omega_E)K(\omega) + K_1, \quad (14)$$

где ω - частота света, $K(\omega)$ - чувствительность измерительной аппаратуры, K_1 - постоянный фон, который может быть большим по сравнению с сигналом, обусловленным спектральной особенностью. В результате дифференцирования ϵ_1 при модуляции по выбранному параметру ξ постоянный фон исключается, а регистрируемый сигнал будет описываться следующим выражением:

$$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial \xi} = K(\omega) \frac{\partial \epsilon(\omega - \omega_g)}{\partial (\omega - \omega_g)} \frac{\partial (\omega - \omega_g)}{\partial \xi} + \frac{\partial K(\omega)}{\partial \xi} \epsilon(\omega - \omega_g). \quad (15)$$

Первый член этого выражения в критической точке резко возрастает, давая возможность лучше выявить спектральную особенность. Слагаемое, пропорциональное про-

изводной от чувствительности установки вблизи критических точек, соответствующих экситонным и межзонным электронными переходам, обычно пренебрежимо мало [22].

Возникают две возможности выбора параметра дифференцирования: частота света и спектральное положение критической точки. Последнее осуществляется в случае модулирования электрическим полем, внешним давлением или температурой. Дифференцирование диэлектрической функции (или другого, связанного с ней, оптического параметра, например коэффициента отражения) по частоте осуществляют используя луч света, модулированный по длине волны. Это обеспечивается колебанием щели, дифракционной решетки, зеркала в монохроматоре или другого соответствующего устройства. [10, стр. 282 - 283].

Среди модуляционных методов наибольшее распространение получили методы, основанные на модуляции электрического поля полупроводника. Примерами электро-модуляционных методов являются методы спектроскопии электроотражения и фотоотражения.

2.5.2 Метод фотоотражения

В методе фотоотражения модуляция электрического поля осуществляется периодической генерацией электронно-дырочных пар, создаваемых периодической подсветкой образца лазерным излучением рис. 8 [23]. Энергия фотона излучения должна быть большей чем энергия запрещенной зоны изучаемого полупроводника [6].

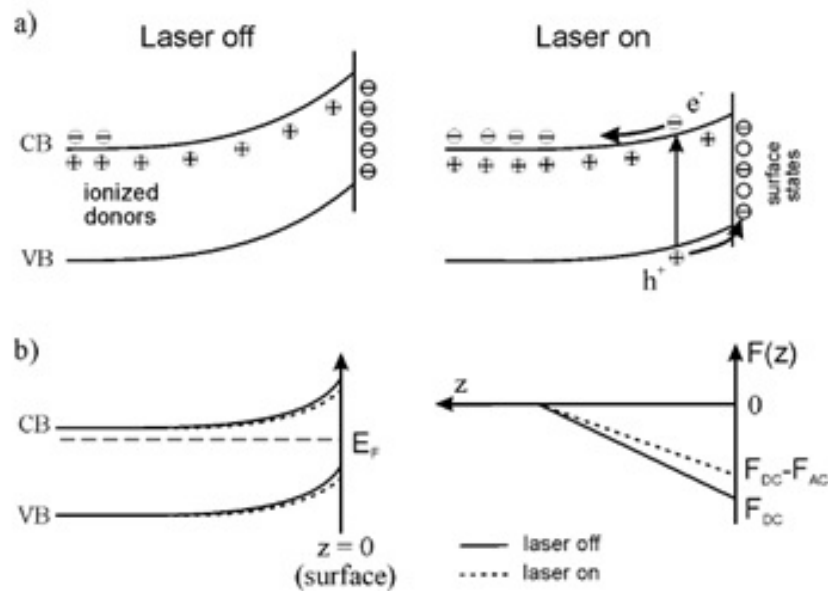


Рис. 8: Модуляция электрического поля в полупроводнике при воздействии лазерного излучения [23]

Для регистрации спектров фотоотражения используют технику синхронного детектирования. Сигнал фотоотражения может быть представлен в виде:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{off} - R_{on}}{R_{off}} \quad (16)$$

где R_{off} – коэффициент отражения в отсутствии действия излучения на полупроводник, а R_{on} – коэффициент отражения при его наличии [25].

При условии малости амплитуды модуляции соотношение (16) можно представить в виде:

$$\frac{\Delta R}{R} = \beta_r \Delta \epsilon_r + \beta_i \Delta \epsilon_i, \quad (17)$$

где

$$\beta_r = \frac{\partial \ln R}{\partial \epsilon_r}, \beta_i = \frac{\partial \ln R}{\partial \epsilon_i}, \quad (18)$$

ϵ_r – действительная часть диэлектрической функции, ϵ_i – мнимая часть диэлектрической функции, $\Delta \epsilon_r$ и $\Delta \epsilon_i$ – изменение действительной и мнимой части диэлектрической функции, вызванные модуляцией электрического поля. На рисунке 9 показано, что значение мнимой части диэлектрической функции под действием электрического поля слабо меняется, но если рассматривать изменение мнимой части, то мы можем наблюдать резкий скачок в области оптического перехода. Таким образом, используя модуляцию, мы работаем с более резкими линиями, чем при обычном поглощении [10, стр. 283 - 284].

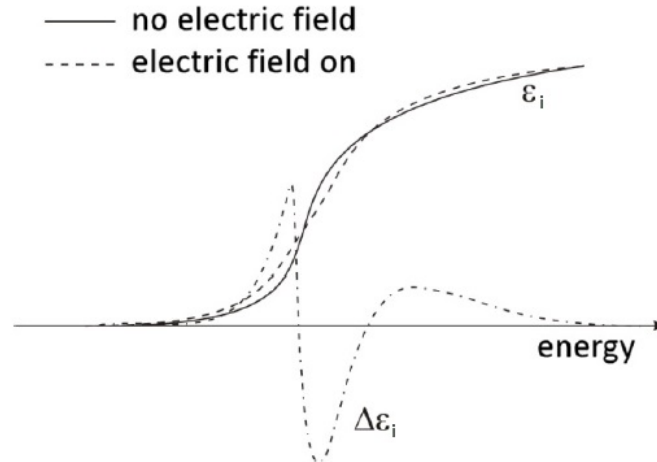


Рис. 9: Мнимая часть диэлектрической функции в отсутствии электрического поля (сплошная линия), под действием электрического поля (штриховая линия) и изменение мнимой части (штрих с точкой) [23]

Спектры фотоотражения полупроводниковых гетероструктур представляют собой довольно сложную структуру. На рисунке 10 изображен типичный спектр фотоотраже-

ния $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ полученный при температуре 77К [26, 27].

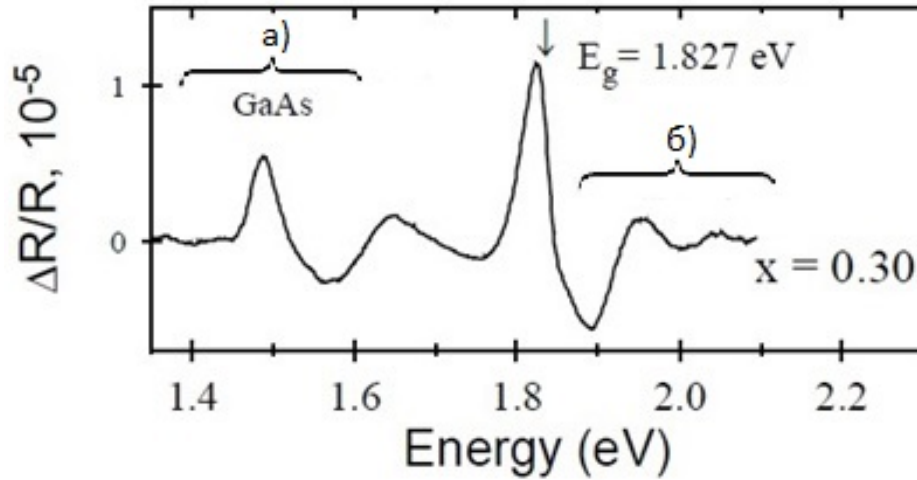


Рис. 10: Пример спектра фотоотражения $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ полученного при температуре 77К. Стрелкой отмечена энергия запрещенной зоны $Al_xGa_{1-x}As$, а) низкополевой случай, б) среднеполевой случай

Отметим, что для исследования эффектов размерного квантования методами люминесценции требуется применение низких температур порядка 80К, и, при этом, данные методы позволяют получать информацию лишь о низшем энергетическом состоянии электронов и дырок [24].

2.5.3 Низкополевой случай

Сигнал фотоотражения слабелегированных ($n < 10^{16} \text{ см}^{-3}$ для соединений GaAs) образцов вблизи фундаментального перехода и сигнал от области квантовых ям чаще всего описывают в рамках низкополевой модели. Модуляционный спектр в этом случае от области вблизи фундаментального перехода представляет собой линию с двумя экстремумами разных знаков (рис. 10а). Согласно работе Аспнеса [23], такие спектры описываются выражением:

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re}(Ae^{i\phi}(E - E_g + i\Gamma)^{-n}), \quad (19)$$

где E_g - ширина запрещенной зоны, Γ - феноменологический параметр уширения, A и ϕ - амплитудный и фазовый параметры соответственно, E - энергия зондирующего излучения, n - параметр, определяемый видом критической точки, в окрестности которой осуществляется электронно-дырочный переход [28].

2.5.4 Среднеполевой случай

Сигнал фотоотражения слаболегированных ($n > 10^{17}$ см $^{-3}$ для соединений GaAs) образцов вблизи фундаментального перехода чаще всего описывают в рамках среднеполевой модели. Различия между сплошной и штриховой линией в области $E > E_g$ в среднеполевом случае становится более существенным (рис. 9), в спектре появляются так называемые осцилляции Франца — Келдыша (рис. 10б).

Критерий малости электрического поля формулируют как $eFa_0 \ll E_g$, где F - модуль вектора напряженности встроенного электрического поля полупроводника, a_0 - постоянная решетки [29]. В среднеполевом случае в области энергии $E > E_g$ электромультиплицированный сигнал описывают с помощью функции Эйри. Аспнесом и Штудной было получено сравнительно простое приближение описывающее осцилляторный характер электромультиплицированного спектра $\Delta R/R$:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{E^2(E - E_g)} \exp(-2(E - E_g)^{1/2} \frac{\Gamma}{(\hbar\Omega)^{3/2}}) \cos\left(\frac{4}{3} \left(\frac{E - E_g}{\hbar\Omega}\right)^{3/2} + \Theta\right) \quad (20)$$

где Θ - фазовый параметр, $\hbar\Omega$ - электрооптическая энергия:

$$\hbar\Omega = \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{2m^*}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (21)$$

где m^* - приведенная эффективная масса электрона и дырки. Из выражения (20) видно, что при $\Gamma < \hbar\Omega$ (слабое затухание) в электромультиплицированном спектре наблюдаются осцилляции Франца — Келдыша.

2.6 Анализ модуля сигнала фотоотражения в низкополевом случае

В низкополевом случае экспериментальные данные чаще всего аппроксимируют по методу наименьших квадратов суммой выражений (19). Для аппроксимации необходимо задавать начальные приближения основных параметров каждой спектральной линии: A_i , ϕ_i , E_i , Γ_i . Самым неочевидным из них оказывается фазовый параметр ϕ_i . Неточное задание начального приближения для этого параметра делает подгонку многокомпонентного спектра с одной стороны затруднительной, с другой - неоднозначной.

Джефом Хоси (Hosea) было предложено рассматривать не реальную часть изменения коэффициента отражения, а его модуль [30]:

$$M(E) = \left| \frac{Ae^{i\phi}}{((E - E_j) + i\Gamma)^n} \right| \quad (22)$$

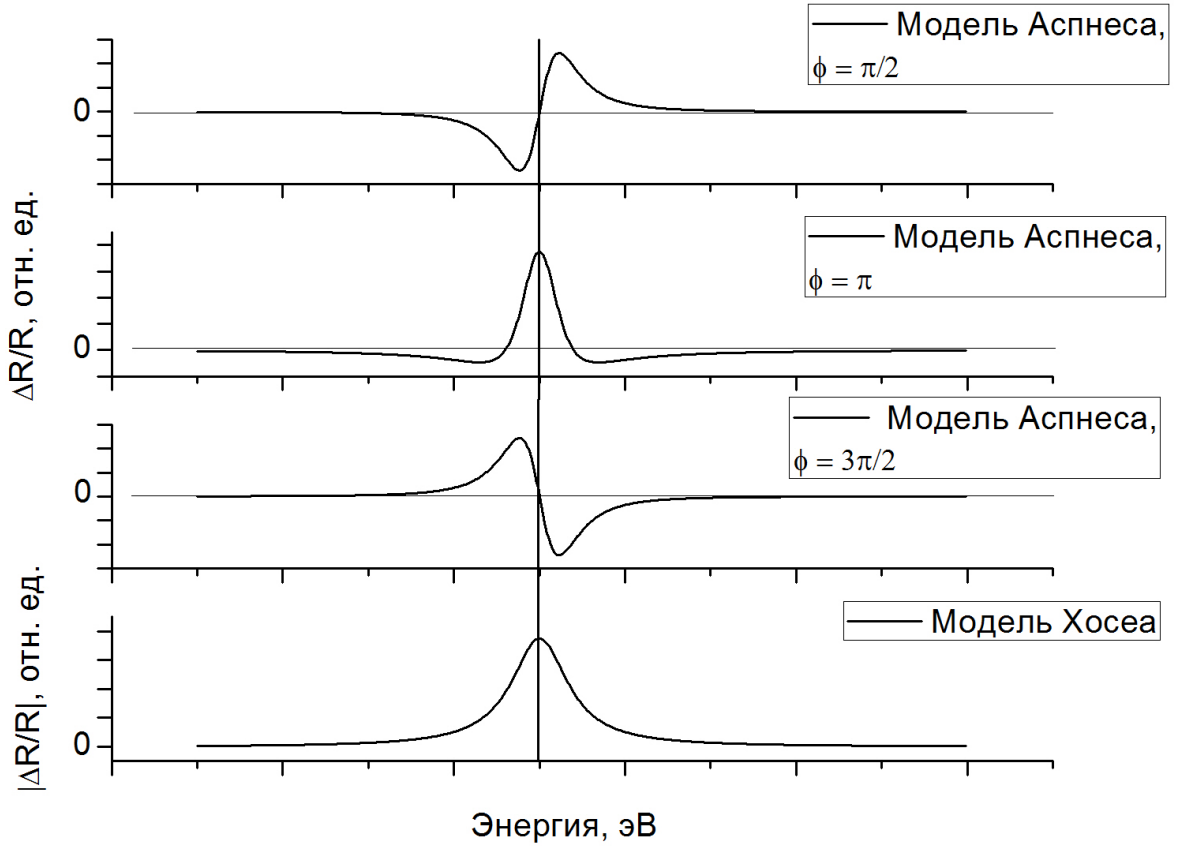


Рис. 11: Модель Аспнеса с различным значением фазового параметра ϕ и модель Хосеа, исключая фазовый параметр

Внешний вид спектра, описываемого модулем изменения коэффициента отражения напоминает лоренцев контур (рис. 11). Преимуществами рассмотрения модуля коэффициента отражения являются большая наглядность, простота задания начальных параметров подгонки, и меньшее на один количество параметров для каждой спектральной линии, т.к при таком рассмотрении теряется информация о фазовом параметре ϕ_i .

В эксперименте измеряется относительное изменение коэффициента отражения на частоте модуляции $\Delta R/R$. Как известно,

$$M(E) = \left(\left(\frac{\Delta R(E)}{R(E)} \right)^2 + I^2(E) \right)^{1/2}, \quad (23)$$

где $I(E)$ – мнимая часть изменения коэффициента отражения, $\Delta R(E)/R(E)$ – действительная часть относительного изменения коэффициента отражения (в соответствии с формулой Аспнеса (20) - экспериментальные данные). Мнимую часть можно найти из

экспериментальных данных с помощью соотношений Крамера-Кронига:

$$I(E') = \frac{-2E'}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Delta R(E)}{R(E)} \frac{dE}{E^2 - E'^2}, \quad (24)$$

где интеграл берется в смысле главного значения.

2.7 Скачок потенциала

Зная состав тройного соединения, можно вычислить значения ширины запрещенной зоны барьера и квантовой ямы в соответствии с законом Вергарда. В случае гетероперехода с контравариантными изменениями положений потолка валентной зоны и дна зоны проводимости, вычитая из ширины запрещенной зоны барьера ширину запрещенной зоны квантовой ямы можно получить суммарную глубину квантовых ям валентной зоны и зоны проводимости ΔE_g . Для разделения глубин квантовых ям зоны проводимости ΔE_C и валентной зоны ΔE_V используют параметр, называемый скачком потенциала Q_C . В соответствии с определением скачка потенциала, глубины квантовых ям в зоне проводимости и валентной зоне определяются следующим образом [31] (рис. 12):

$$\begin{aligned} \Delta E_C &= \Delta E_g Q_C, \\ \Delta E_V &= \Delta E_g (1 - Q_C), \end{aligned} \quad (25)$$

где ΔE_C , ΔE_V - глубины квантовых ям зон проводимости и валентной соответственно. Очевидно, что:

$$Q_V = 1 - Q_C. \quad (26)$$

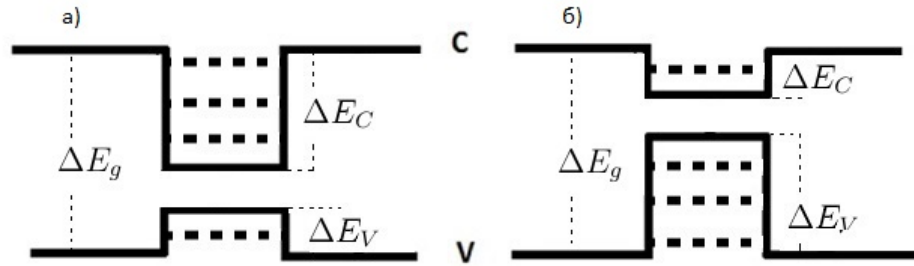


Рис. 12: Пример различия в зонной структуре при различном значении скачка потенциала

Данный параметр является неизменным свойством пары материалов, формирующих гетеропереход [32]. Скачок потенциала оказывает влияние на энергии межзонных переходов. Одно из качественных соображений, которое дает оценку отношения разры-

вов зон, $\Delta E_C/\Delta E_V$, - правило общего аниона. Пусть два бинарных или квази- бинарных соединения с ионно-ковалентной связью содержат одинаковые атомы в анионной подрешетке и различаются атомами в катионной (например, GaAs и $Al_{1-x}Ga_xAs$). Большая часть валентных электронов образована в обоих соединениях электронами анионов (в данном примере - атомами As). Поэтому можно считать, что положения краев валентных зон в обоих соединениях слабо отличается друг от друга. Отсюда следует правило, что на гетерогранице между двумя этими соединениями разрыв зон ΔE_V по абсолютной величине заметно меньше, чем разрыв зон на краях зоны проводимости (рис. 12а):

$$|\Delta E_V/\Delta E_C| < 1 \quad (27)$$

Если же соединения с ионно-ковалентной связью содержат одинаковые атомы в катионной подрешетке и различаются атомами в анионной подрешетке, то знак неравенства, по предположению, должен быть противоположным (рис. 12б):

$$|\Delta E_V/\Delta E_C| > 1 \quad (28)$$

Эти качественные правила дают ориентировку, например, для гетерограниц типа InGaAs/InP, но не могут претендовать на количественный анализ.

Есть еще одно существенное обстоятельство для реальных гетероструктур, которое необходимо принимать во внимание при оценке разрывов зон: деформации, возникающие на гетерограницах при рассогласовании постоянных решеток. Деформации сами по себе должны изменять разрывы зон на гетерограницах, поскольку потенциалы деформации у двух материалов пары различны; кроме того, один из полупроводников оказывается сжатым вдоль плоскости (x, y) , а другой – растянутым [33].

2.8 Цели и задачи

Цель настоящей работы - определение скачка потенциала на гетерогранице гетеропары InGaAs/InGaAsP. Для достижения данной цели необходимо последовательно разобраться со следующими задачами:

1. Провести эксперименты по исследованию методом спектроскопии фотоотражения серии гетероструктур InGaAs/InGaAsP с квантовыми ямами InGaAs различной глубины;
2. Идентифицировать линии в полученных спектрах фотоотражения.
3. Разработать методику определения скачка потенциала по данным фотоотражения

3 Образцы и методика эксперимента

3.1 Исследуемые образцы

Для достижения поставленной цели были выбраны четыре полупроводниковые гетероструктуры с квантовыми ямами InGaAs/InGaAsP различной глубины (технологические номера 3911, 3912, 3914, 3917). Структуры были выращены методом газофазной эпитаксии в НИФТИ ННГУ им. Н.И. Лобачевского в технологической группе Б.Н. Звонкова.

Образцы выращивались на подложках GaAs с ориентацией поверхности (100). На подложке последовательно выращивались барьерный слой InGaAsP (толщина 1.3 мкм), первая квантовая яма InGaAs (толщина 10 нм), барьерный слой InGaAsP (толщина 210 нм), вторая квантовая яма (толщина 10 нм), барьер InGaAsP (30 нм толщиной), защитный слой GaAs (10 нм толщиной). Барьерные слои InGaAsP легированы кремнием до 10^{17} см $^{-3}$. Примерный состав слоев InGaAsP в образцах 3911, 3912, 3914 – $\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}_{0.9}\text{P}_{0.1}$, а в образце 3917 – $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{As}_{0.83}\text{P}_{0.17}$ (рис. 13). Концентрация индия в два раза меньше концентрации фосфора в барьерном слое InGaAsP – этим достигается режим роста, при котором постоянная решетки InGaAsP практически совпадает с постоянной решетки подложки GaAs, т.е. барьерные слои оказываются ненапряженными [17]. Достаточно тонкая квантовая яма, наоборот, напряжена. Ее постоянная решетки в результате действия механических напряжений должна совпадать с постоянной решетки слоев InGaAsP и GaAs. Мольная доля In в образцах 3912, 3917 в два раза больше чем в образце 3911, мольная доля In в образце 3911 в два раза больше чем в образце 3914.

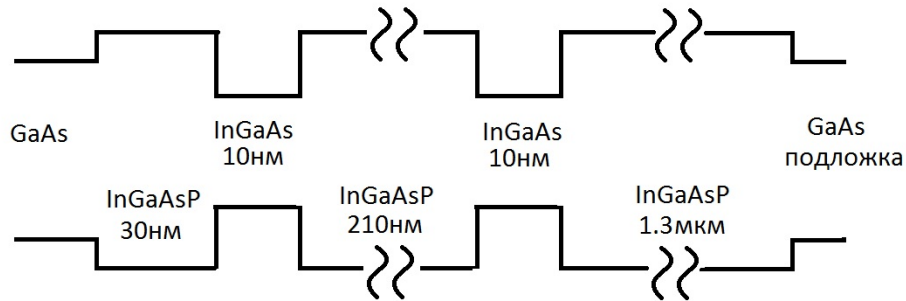


Рис. 13: Зонная диаграмма исследуемой серии образцов

3.2 Методика эксперимента

Работа проводилась на экспериментальной установке для исследования полупроводниковых структур методом спектроскопии фотоотражения. Излучение спектральной лампы 1 (мощностью 50 Вт) фокусировалось оптической системой 2 на входную щель первого монохроматора 3(I), проходило через него и оптической системой 4 направлялось на образец 5. В ту же точку образца падало излучение He-Ne лазера 10, которое модулировалось механическим прерывателем 11. Частота модуляции могла изменяться в пределах 50 -1500 Гц. Отраженное от образца 5 зондирующее излучение (на рис. 14 штриховая линия) направлялось объективом 6 на входную щель второго монохроматора 3(II) из его выхода поступало на фотодиод 7 (ФДК -263), подключенный к малошумящему усилителю. Амплитудно-частотная характеристика усилителя была оптимизирована для работы в полосе 50-1500 Гц. Сигнал с усилителя поступал на синхронный детектор 8 селективного нановольтметра Unipan – 232В. В качестве опорного напряжения синхронного детектора использовался сигнал с фотодиода 13, на который поступало отражение от образца 5 модулирующее излучение от лазера 10 (рис. 14). Таким образом напряжение на выходе синхронного детектора 8 было пропорционально изменению коэффициента отражения R образца 5 на частоте модуляции.

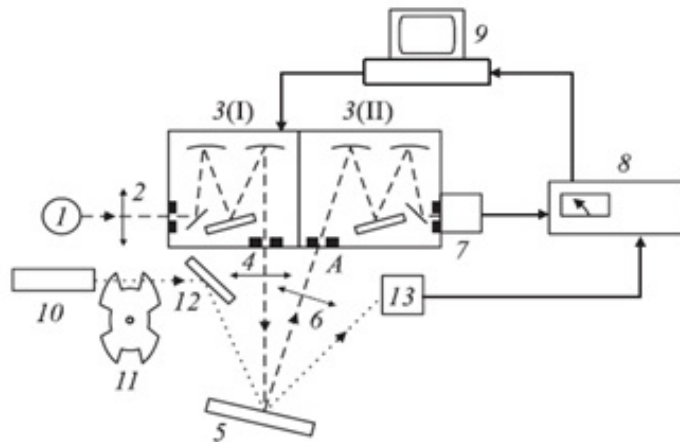


Рис. 14: Блок-схема экспериментальной установки для регистрации спектров фотоотражения: 1 – спектральная лампа, 2,4,6 – объективы, 3 – двойной монохроматор МДР - 6, 5 – образец, 7 – фотоприемник с малошумящим усилителем, 8 – селективный нановольтметр Unipan-232В, 9 – компьютер с микропроцессорным модулем сопряжения, 10 – He-Ne лазер, 11 – прерыватель, 12 – поворотное зеркало, 13 – фотоприемник опорного сигнала [34]

Спектральная ширина щелей монохроматора не превышала 1.5 мЭВ, измерения спектров фотоотражения происходило при комнатной температуре.

Используемая оптическая схема на базе двойного монохроматора позволяет уменьшить неконтролируемый разогрев образца и связанный с фотогенерацией носителей изгиб зон, что дает возможность проводить регистрацию спектров фотоотражения с минимальным воздействием модулирующего и зондирующего излучений на образец. [34].

4 Спектры фотоотражения полупроводниковых структур с квантовыми ямами различной глубины. Скачок потенциала на гетерогранице InGaAs/InGaAsP

4.1 Спектры фотоотражения и их обработка

На рис. 15 приведены спектры фотоотражения исследуемых структур. В спектрах можно выделить 2 группы линий: в области энергий < 1.45 эВ (соответствуют электронно-дырочным переходам в квантовых ямах), и в области энергий > 1.45 эВ (соответствуют краю поглощения барьерных слоев InGaAsP).

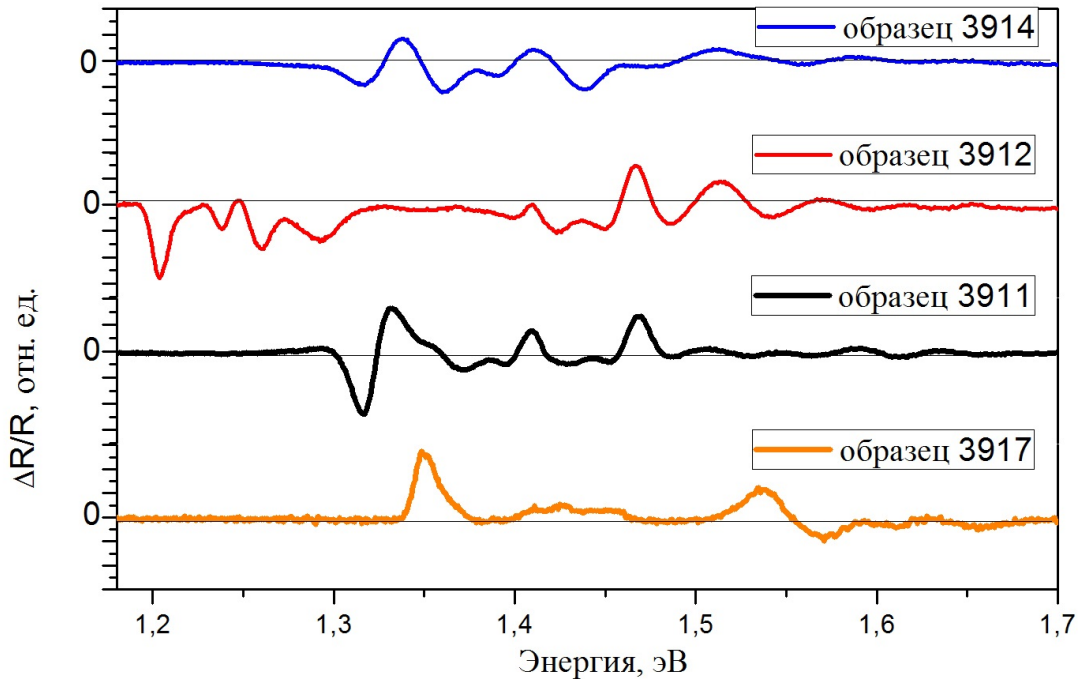


Рис. 15: Спектры фотоотражения исследуемых гетероструктур

Линии, связанные с переходами в области квантовых ям, соответствуют низкополевому случаю и могут быть описаны в рамках модели Аспнеса [23]. Линии, связанные с межзонным переходом в области барьеров InGaAsP, представляют собой осцилляции Франца-Келдыша [29]. Определение параметров спектральных линий, связанных меж-

зонными переходами в области квантовых ям, возможно с помощью МНК - аппроксимации суммой выражений Аспнеса (19). По нашему опыту, МНК - аппроксимация экспериментального контура содержащего две и более низкополевые линии, неустойчива из-за большого числа варьируемых параметров. Поэтому аппроксимация модуля сигнала фотоотражения представляется более оправданной. В первую очередь это связано с отсутствием фазового параметра ϕ (19), для которого сложно задать начальное приближение. В рамках методики предложенной Хоси вычислены мнимая часть сигнала фотоотражения и его модуль [30]. Результаты преобразования спектров приведены на рисунке 16. В дальнейшем мы будем рассматривать часть спектров, расположенных левее линии "А", правее этой линии оказывается сигнал от барьеров InGaAsP, который не описывается в рамках методики Хоси. Т.е. аппроксимировать экспериментальные данные суммой Лоренцевых контуров мы будем в области оказавшейся левее линии "А".

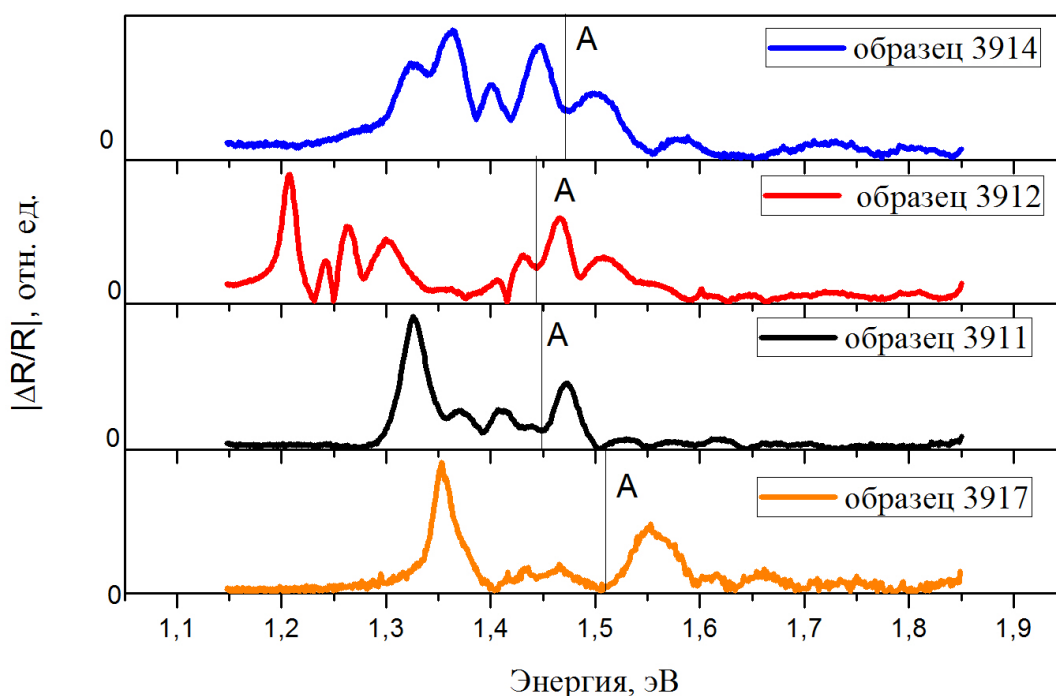


Рис. 16: Модуль спектра фотоотражения исследуемых гетероструктур

Большое число близкорасположенных линий в спектрах требует обоснования возможности аппроксимации отдельными Лоренцевыми линиями. Для подтверждения воз-

возможности аппроксимации близких спектральных линий без приобретения ложных пиков было проведено моделирование спектра, состоящего из пары низкополевых линий, разнесенных друг относительно друга на интервалы от 2Γ до 10Γ , где Γ - параметр уширения каждой из линий. Результаты моделирования приведены на рисунке 17. Видно, что в модуле сигнала фотоотражения отдельные линии различимы вплоть до расстояния между ними, соответствующего 2Γ . Следовательно максимумы, которые мы видим левее линии "А" на рис.16, соответствуют положениям спектральных линий.

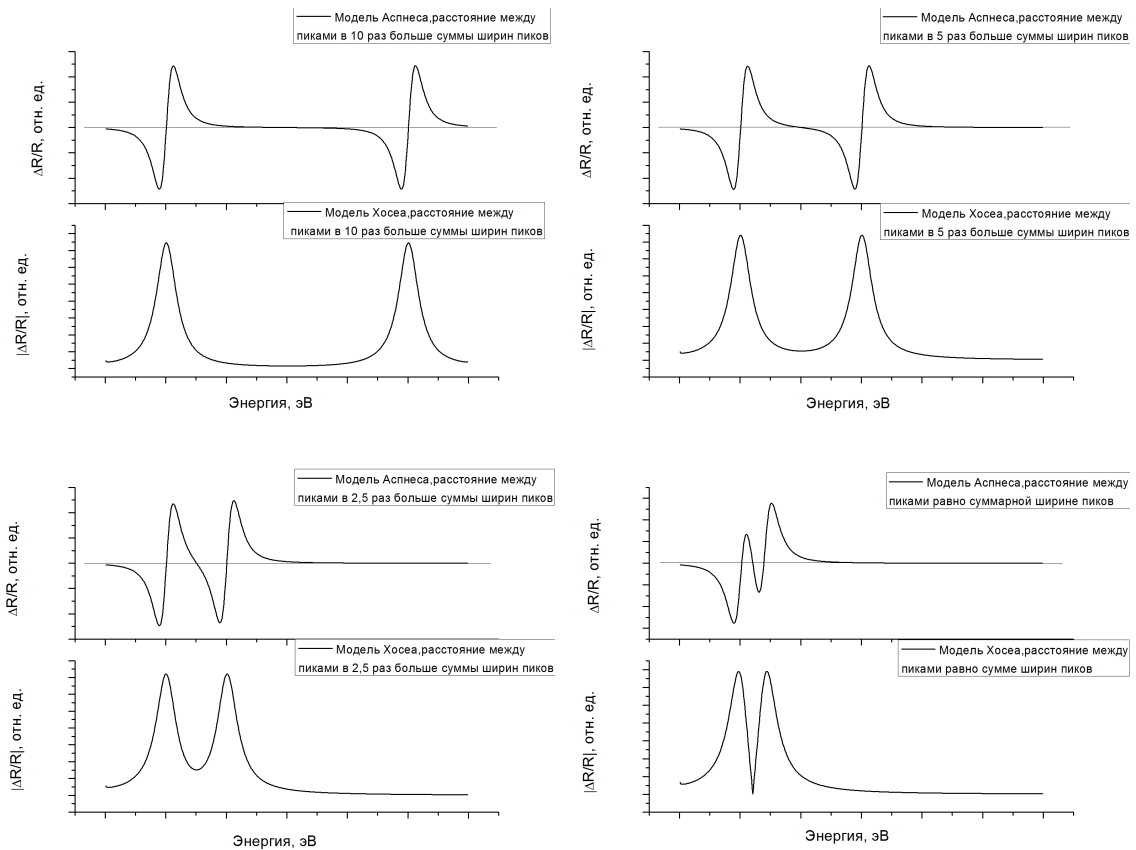


Рис. 17: Моделирование спектра фотоотражения, состоящего из двух линий, разнесенных на интервал от 2Γ до 10Γ

Таким образом, параметры спектральных линий (рис.16) мы определяли путем МНК - аппроксимации суммой Лоренцевых контуров. Данная аппроксимация производилась с использованием программы Fityk [36]. Результаты подгонки и разница между экспериментальными значениями и результатами аппроксимации представлены на рис. 18.

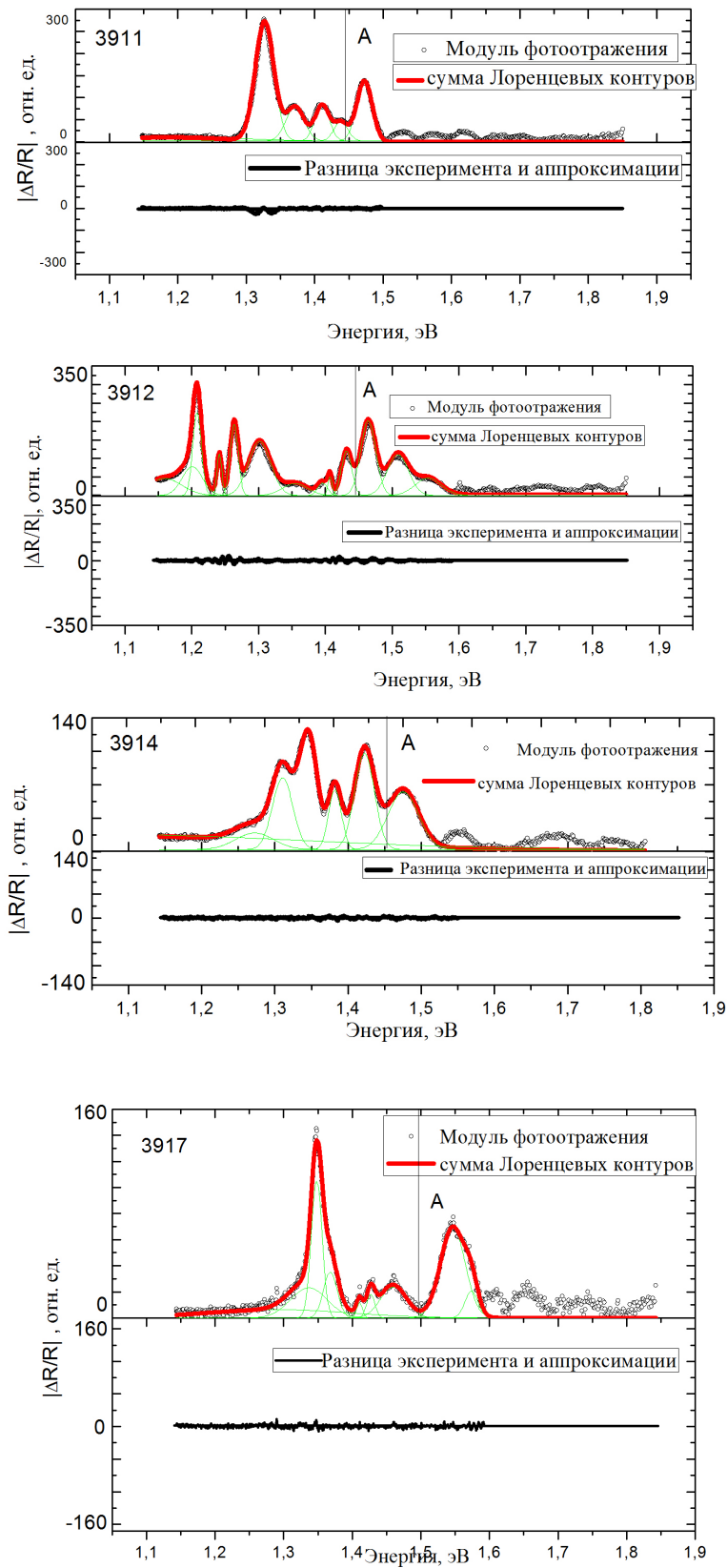


Рис. 18: Модуль спектра фотоотражения исследуемых гетероструктур и разница между аппроксимацией и экспериментом

Результаты аппроксимации спектров (энергии электронно-дырочных переходов в области квантовой ямы) приведены в таблице 1. Среди них мы выделяем энергию фундаментального перехода барьерных слоев InGaAsP. В работе [35] представлена формула для расчета ширины запрещенной зоны барьера $E_g(x, y)$, структуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y$:

$$E_g(x, y) = xyE_g(\text{GaAs}) + (1-x)yE_g(\text{InAs}) + x(1-y)E_g(\text{GaP}) + (1-x)(1-y)E_g(\text{InP}), \quad (29)$$

где x, y - мольные доли индия и фосфора.

Таблица 1: Результаты обработки спектров фотоотражения: Положения спектральных линий, связанных с межзонными переходами в области квантовой ямы

| Образец, № | Энергии перехода, (эВ) | Амплитуда, $ \Delta R/R $, (отн. ед) | Состав слоя квантовой ямы | Ширина запрещенной, зоны барьера (эВ) | Глубина квантовых ям в зонах проводимости и валентной зоне |
|------------|---|---|---|---------------------------------------|--|
| 3911 | 1,326±0.001 1,371±0.001 1,411±0.001 1,438±0.001 1,472±0.001 | 270±5 78±1 82±1 44,1±0.5 138±2 | $\text{In}_{2x}\text{Ga}_{1-2x}\text{As}$ | 1.456 | промежуточная |
| 3912 | 1,200±0.002 1,207±0.003 1,241±0.001 1,301±0.006 1,395±0.003 1,406±0.001 1,431±0.001 | 72±1 207±2 104,4±0.5 136,592±3 32,1±0.3 47,4±0.1 112±1 | $\text{In}_{4x}\text{Ga}_{1-4x}\text{As}$ | 1.456 | самая глубокая |
| 3914 | 1,285±0.001 1,326±0.001 1,362±0.001 1,401±0.001 1,444±0.001 | 17,4±0.6 75±0.9 113±2 62,3±0.7 100±2 | $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ | 1.505 | самая мелкая |
| 3917 | 1,337±0.002 1,348±0.001 1,367±0.001 1,410±0.001 1,427±0.001 1,46±0.002 | 23,74±0.7 103.84±0.9 34.53±0.5 14,43±0.7 14.03±0.2 14.23±0.3 | $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ | 1.550 | самая мелкая |

Получив экспериментально энергию запрещенной зоны для InGaAsP, воспользовавшись формулой 29 и условием согласования постоянных решеток GaAs и InGaAsP ($y/x = 2$), можно получить мольные доли индия и фосфора. Видно что, для образцов 3911, 3912, 3914 данное соотношение выполняется существенно лучше, чем для образца 3917, т.е слои InGaAsP в образце 3917 подвергнуты большим механическим напряжениям, сравнительно с другими образцами. Это может быть одной из причин невысокого качества спектра фотоотражения данного образца.

Таблица 2: Экспериментально полученные мольные доли In(x) и P(y) в барьерном слое InGaAsP

| Образец | мольная доля In (x) | мольная доля P (y) | y/x |
|---------|-------------------------|------------------------|-------|
| 3911 | 0.05 | 0.1 | 2 |
| 3912 | 0.05 | 0.1 | 2 |
| 3914 | 0.075 | 0.155 | 2.07 |
| 3917 | 0.095 | 0.22 | 2.32 |

Состав слоев InGaAs изготовителем образцов также указан ориентировочно. Однако, понятно, что в образце с концентрацией индия $4x$ глубина потенциальной ямы будет больше, т.к. InAs более узкозонный материал по сравнению с GaAs. Следовательно, в спектре фотоотражения образца с большей глубиной квантовой ямы должно присутствовать большее количество спектральных линий, связанных с межзонными переходами в области квантовой ямы. Это видно из таблицы: образцы 3912 и 3914.

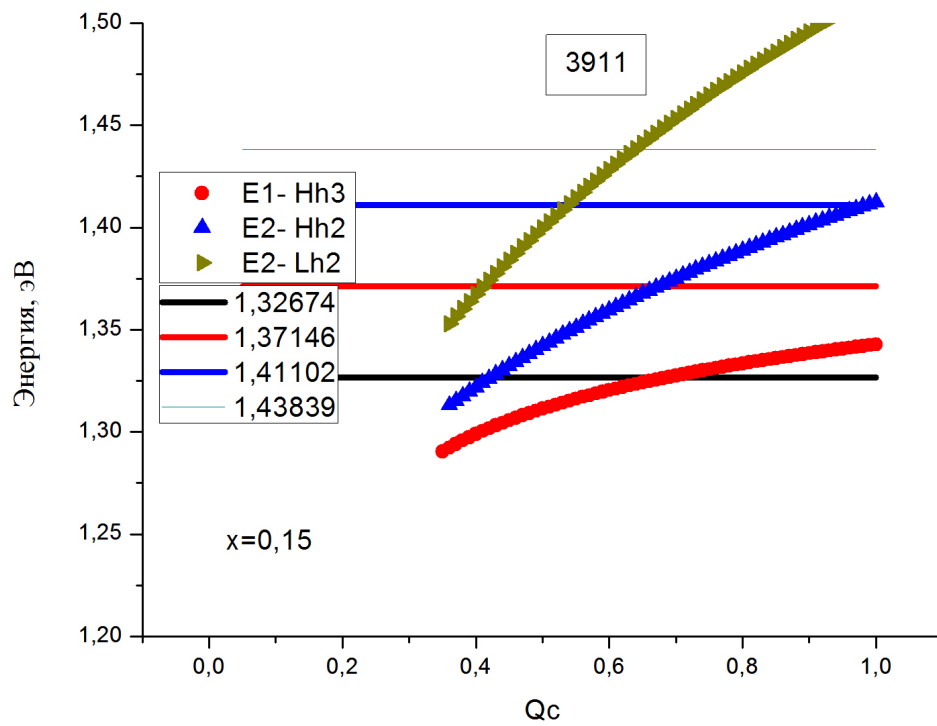
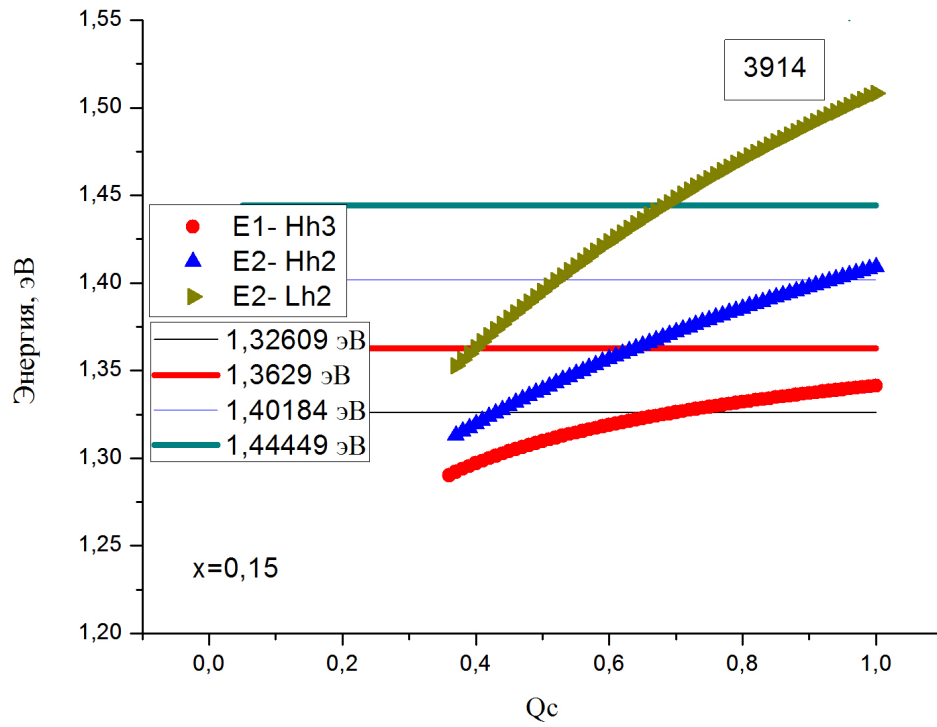
4.2 Методика определение скачка потенциала

Поскольку нам неизвестно соотношение глубины квантовой ямы в зоне проводимости и в валентной зоне, возникла необходимость в разработке алгоритма описания спектров, позволяющего по энергиям межзонных переходов в квантовой яме оценить данный параметр [38].

Были проведены расчеты энергий уровней электронов и дырок в квантовой яме InGaAs (30, 31). Далее, по результатам компьютерного моделирования энергетического спектра квантовой ямы строилась зависимость межзонных переходов в квантовой яме от скачка потенциала Q_C при различных значениях x (мольной доли индия в слое квантовой ямы InGaAs). Мольные доли индия варьировались в пределах, указанных технологами, скачок потенциала менялся от 0.01 до 1, с шагом 0.01. После, мы сравнивали результаты моделирования с экспериментальными данными рис. 19, значение Q_C

считалось найденным, если наблюдалось соответствие между совокупностью теоретических и экспериментальных значений для данного Q_C .

Для уточнения этих данных были построены зависимости сумм квадратов разности экспериментальных и теоретических значений энергий межзонных переходов от значений скачка потенциала рис. 20. Минимум на этих зависимостях указывает на наилучшее совпадение экспериментальных и теоретических данных.



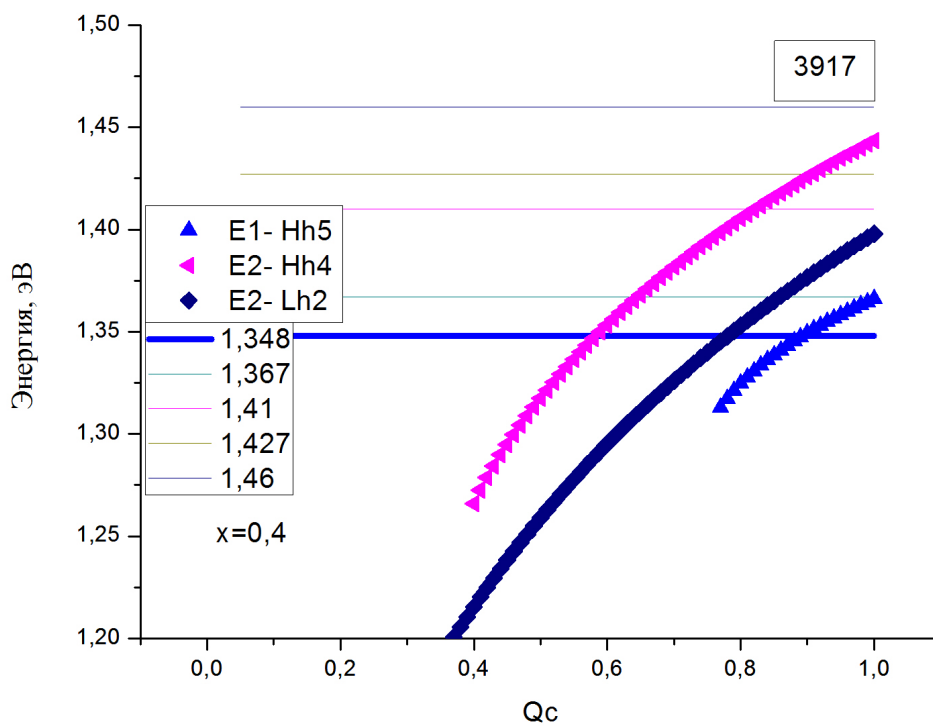
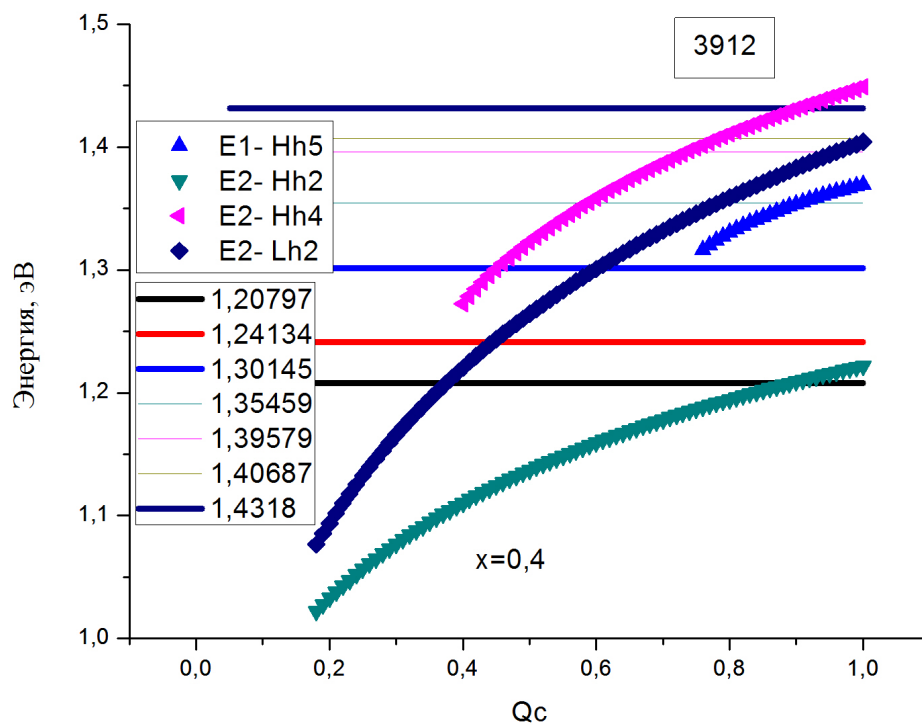


Рис. 19: Теоретические и экспериментальные зависимости энергий межзонных переходов от скачка потенциала Q_c , для исследуемой серии образцов

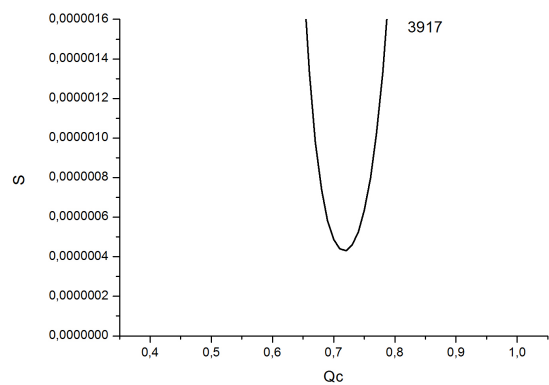
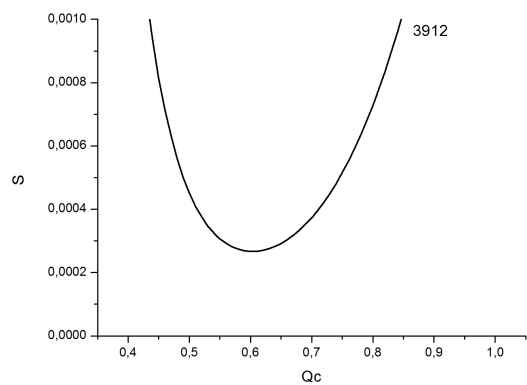
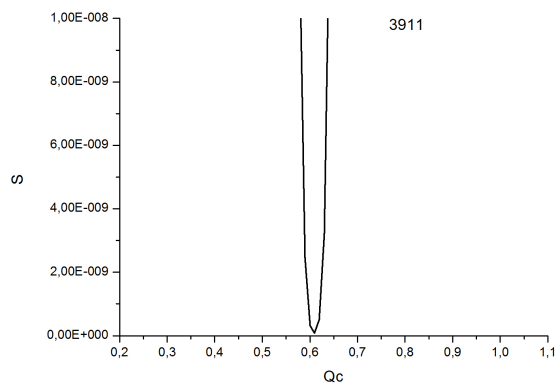
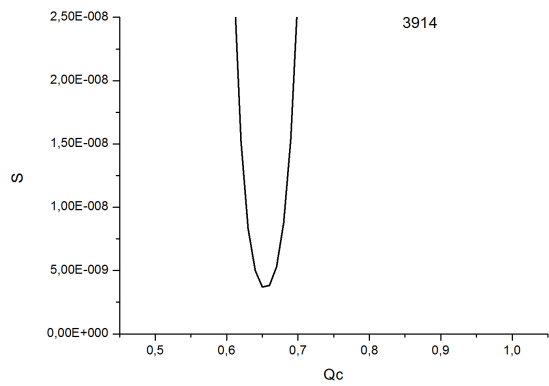


Рис. 20: Зависимости сумм квадратов разности экспериментальных и теоретических значений энергий межзонных переходов от значений скачка потенциала

Для образцов 3914, 3911, 3912, 3917 минимум указанных зависимостей наблюдается при Q_C равном 0.65, 0.61, 0.6, 0.7. Данным минимумам соответствует наилучшее согласие теоретических и экспериментальных данных, следовательно в рассматриваемой серии образцов InGaAs/InGaAsP для случая решеточно-согласованного роста InGaAsP на GaAs, значение скачка потенциала на гетерогранице в зоне проводимости составляет $(0.6...0.7)\Delta E_g$.

Таблица 3: Полученные значения мольной доли In и скачка потенциала на гетерогранице InGaAs/InGaAsP

| Образец | Мольная доля In, x | Скачок потенциала, Q_C |
|---------|----------------------|--------------------------|
| 3914 | 0.15 | 0.65 |
| 3911 | 0.15 | 0.61 |
| 3912 | 0.4 | 0.6 |
| 3917 | 0.4 | 0.7 |

4.3 Моделирование

Все необходимые расчеты выполнялись с применением самостоятельно разработанного программного обеспечения.



Рис. 21: Блок-схема программы

Для моделирования энергетического спектра квантовой ямы была написана программа, идея работы которой представлена на рисунке 21. Программа была реализована на языке Javascript, что делает ее кроссплатформенной и дает возможность легкого размещения в сети internet. Пользовательский интерфейс представляет собой набор различных форм для ввода данных (рис. 22).

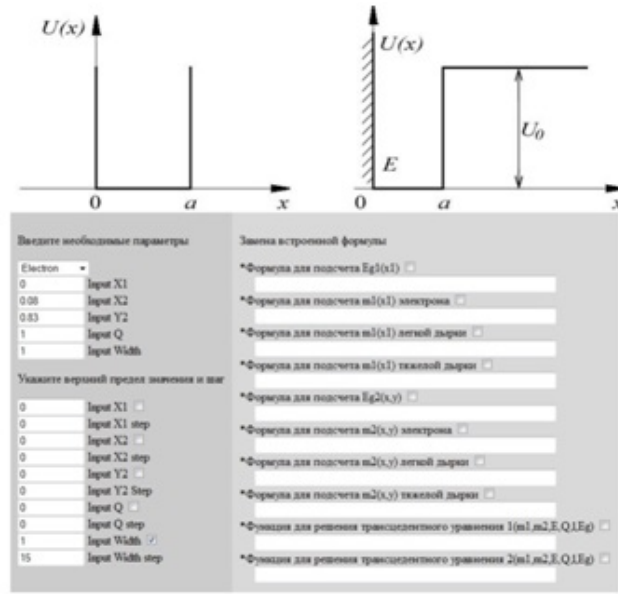


Рис. 22: Пользовательский интерфейс программы

После ввода значений в соответствующие поля, пользователю предлагается нажать на кнопку "Пуск", что инициирует основной цикл программы. В основном цикле программы (тело программы) происходит решение трансцендентного уравнения:

1) Для квантовой ямы с барьерами конечной величины

$$\sin(L_w \sqrt{\frac{m_1^* E_i}{m_2^*}} - \frac{1}{2} (\sqrt{\frac{m_1^* (V - E_i)}{m_2^* E_i}} - \sqrt{\frac{m_2^* E_i}{m_1^* (V - E_i)}}) \cos(L_w \sqrt{\frac{m_1^* E_i}{m_2^*}}) = 0 \quad (30)$$

2) Для приповерхностной квантовой ямы

$$\tan(L_w \sqrt{\frac{m_1^* E_i}{2\hbar^2}} - \frac{1}{2} (\sqrt{\frac{m_1^* (V - E_i)}{m_2^* E_i}} - \sqrt{\frac{m_2^* E_i}{m_1^* (V - E_i)}}) = 0 \quad (31)$$

где L_w - ширина квантовой ямы, E_i - положение спектральной особенности, m_1^* - эффективная масса носителей в квантовой яме, m_2^* - эффективная масса носителей в барьерном слое. При нажатии кнопки "График", после того, как данное трансцендентное уравнение решено, мы можем наблюдать графическое решение рис. 22.

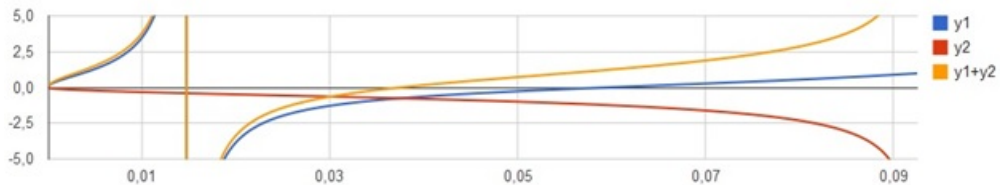


Рис. 23: Графическое решение трансцендентного уравнения

После, программа выводит на экран набор энергетических уровней для тяжелых дырок, легких дырок и электронов в пределах выбранной мольной доли. Далее, при нажатии кнопки analysis, программа находит истинные переходы, состоящие из линейной комбинации энергетических переходов легких дырок, тяжелых дырок и электронов. Проводится сортировка в соответствии с правилами отбора по четности, а также производится визуализация энергии перехода в зависимости от заданного параметра (рис. 24). Таким образом конечным результатом моделирования являются межзонные переходы, наблюдаемые при заданных пользователем мольных долях и скачке потенциала.

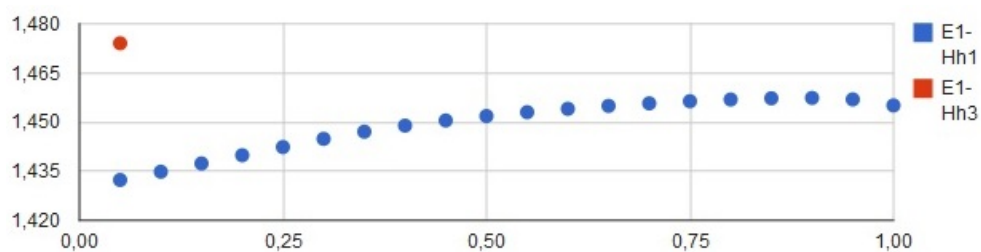


Рис. 24: Визуализация энергии перехода в зависимости от заданного параметра (в данном случае скачок зоны проводимости)

5 Заключение

Получены спектры фотоотражения серии гетероструктур InGaAs/InGaAsP для случая решеточно-согласованного роста InGaAsP на GaAs. В спектрах фотоотражения обнаружены две группы линий: осциляции Франца-Келдыша от барьеров InGaAsP и серия низкополевых линий, связанная с межзонными переходами в квантовых ямах InGaAs.

Проведен анализ спектров фотоотражения в рамках методики Хоси для модуля электромультипликативного сигнала. Из параметров осцилляции Франца-Келдыша оценены мольные доли x и y In и P для InGaAsP. Для образцов 3914: $x = 0.075$, $y = 0.155$; 3911: $x = 0.05$, $y = 0.1$; 3912: $x = 0.05$, $y = 0.1$; 3917: $x = 0.095$, $y = 0.22$.

Разработана программа для расчета энергий уровней размерного квантования электронов и дырок в прямоугольных квантовых ямах с симметричными и несимметричными барьерами.

Из сравнения результатов моделирования энергетического спектра электронов и дырок в квантовых ямах с экспериментальными данными определены мольная доля In в слое InGaAs для трех образцов, и скачок потенциала на гетерогранице InGaAs/InGaAsP. Для образцов 3914, 3911, 3912, 3917 мольная доля равна 0.15, 0.15, 0.4 и 0.4 соответственно, при этом скачок потенциала на гетерогранице InGaAsP/InGaAs в зоне проводимости образцов равен 0.6...0.7 .

Список литературы

- [1] Ж.И. Алферов "История и будущее полупроводниковых гетероструктур" ФТП, том 32, стр. 3 - 17 (1998)
- [2] А.В. Федоров "Физика и технология гетероструктур, оптика квантовых наноструктур" ИТМО, (2009)
- [3] S. Leite, Marina, L. Woo, N. Robyn, L. Munday, J. Jeremy, L. Hong, D. William, F. Mesropian, J. Shoghig, C. Daniel, M. Atwater, A. Harry "Towards an optimized all lattice-matched InAlAs/InGaAsP/InGaAs multijunction solar cell with efficiency > 50%" Appl. Phys. Lett., vol.102 p.2073 (2013)
- [4] R. Leon, S. Fafard, D. Leonard, J. L. Merz, P. M. Petroff "Visible luminescence from semiconductor quantum dots in large ensembles" Applied Physics Letters, vol.67, p.521-523 (1995)
- [5] D. D. Sell, H. C. Casey, "Optical absorption and photoluminescence studies of thin GaAs layers in GaAs/AlGaAs double heterostructures" Journal of Applied Physics, vol.45, p.800-807 (1974)
- [6] F.H. Pollak, H. Shen "Modulation spectroscopy of semiconductors: bulk/thin film, microstructures, surfaces /interfaces and devices" Materials Science and Engineering, vol.10, p.0-100 (1993)
- [7] М. Херман "Полупроводниковые сверхрешетки" Мир (1989)
- [8] S. Adhikary, N. Halder, S. Chakrabarti, S. Majumdar, S.K. Ray, M. Herrera, M. Bonds, N.D. Browning "Investigation of strain in self-assembled multilayer InAs/GaAs quantum dot heterostructures" Journal of Crystal Growth vol.312, p.724-729 (2010)
- [9] "Квантовые нити" НАНОТЕХНОЛОГИИ стр.96-97 (2009)
- [10] М. Кардона, Ю. Питер "Основы физики полупроводников" Физматлит (2002)
- [11] Л. Ченг, К. Плог "Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры" Мир (1989)
- [12] Herman, Marian, Sitter, Helmut "Fundamentals of the MBE Growth Process" Springer (1989)
- [13] R. Hey, I. Gorbunova, M. Ramsteiner, M. Wassermeier, L. Däweritz, K.H. Ploog "Growth-mode-induced surface morphology and its relation to optical properties of GaAs single quantum wells" Journal of Crystal Growth, vol.175-176, p.1167-1172 (1997)

- [14] Б.Н. Звонков "Генерация излучения разностной частоты в духчиповом лазере"ФТП, том 436 стр.220-223 (2009)
- [15] W. Cheng, Z. Yan, G. Hanchao, C. Chen, Y. Naibin "High-speed InGaAs/InP double heterostructure bipolar transistor with high breakdown voltage"Chin Phys Lett, vol.25 p.2683 (2008)
- [16] T. Chung,G. Walter, N. Holonyak "Coupled strained-layer InGaAs quantum-well improvement of an InAs quantum dot AlGaAs–GaAs–InGaAs–InAs heterostructure laser"Journal of Applied Physics Letters, vol.79 p.4500-4502 (2001)
- [17] J. R. Flemish, H. Shen, K. A. Jones, M.Dutta, V. S. Ban "Determination of the composition of strained InGaAsP layers on InP substrates using photorefectance and double-crystal x-ray diffractometry"Journal of Applied Physics, vol.70 p.2152-2155 (1991)
- [18] Г.В. Скрынников and Г.Г. Зегря and Н.А. Пихтин and С.О. Слипченко and В.В. Шахов and И.С. "О внутреннем квантовом выходе стимулированного излучения InGaAsP/InP - гетеролазеров"ФТП, том 37, стр.1457-1461 (2003)
- [19] Н.А. Пихтин and С.О. Слипченко and И.С. Тарасов "Анализ пороговой плотности тока и усиления в квантово-размерных лазерах на основе твердых растворов InGaAsP"ФТП, том 36, стр.364-374 (2002)
- [20] Л.С. Вавилова, Д.А. Винокуров, В.А. Капитонов, А.В. Мурашова, В.Н. Неведомский, Н.К. Полетаев, А.А. Ситникова, И.С. Тарасов "Оптические и структурные свойства твердых растворов InGaAsP, полученных способом МОС-гидридной эпитаксии на подложках GaAs(001) в области несмешиваемости"ФТП, том 37, стр.1104-1108 (2003)
- [21] G. Bastard, "Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation"Phys. Rev., vol. 25, p.7584-7597 (1982)
- [22] А. Н. Георгобиани, "Модуляционная спектроскопия полупроводников"Соровский образовательный журнал, том 7 (2001)
- [23] D.E. Aspnes «Third-derivative modulation spectroscopy with low-field electroreflectance» // Surf. Science. Vol. 37, p. 418 (1973)
- [24] S. Perkowitz "Optical Characterization of Semiconductors"Academic Press (1933)

- [25] Jan Misiewicz, Piotr Sitarek, Grzegorz Sek, Robert Kudrawiec "Semiconductor heterostructures and device structures investigated by photoreflectance spectroscopy" *Materials science*, vol.21, p.264-320 (2003)
- [26] A. Podhorodecki, J. Andrzejewski, R. Kudrawiec, J. Misiewicz, and J. Wojcik, B. J. Robinson, T. Roschuk, D. A. Thompson, P. Mascher, "Photoreflectance investigations of quantum well intermixing processes in compressively strained InGaAsP/InGaAsP quantum well laser structures emitting at 1.55 μm " *Journal of Applied Physics*, vol.100, p.013111 - 013111-12 (2006)
- [27] W.M. Theis "Excitonic transitions in GaAs/GaAlAs quantum wells observed by photoreflectance spectroscopy: Comparison with a first-principles theory" *Phys. Rev.*, vol.37, p.3042-3051 (1988)
- [28] M. Sydor, J. Angelo, J.J. Wilson "Photoreflectance from GaAs and GaAs/GaAs interfaces" *Phys. Rev.*, vol.40, p.8473-8484 (1989)
- [29] P.J. Hughes, B.L. Weiss, T.J.C. Hosea "Analysis of Franz-Keldysh oscillations in photoreflectance spectra of a AlGaAs/GaAs single quantum well structure" *J. Appl. Phys.*, vol.77, p.6472-6480 (1995)
- [30] T. J. C. Hosea, "Estimating Critical-Point Parameters from Kramers-Kronig Transformations of Modulated Reflectance Spectra" *physica status solidi (b)*, vol.182, p.K43-K47 (1994)
- [31] J. Menendez, A. Pinczuk, "Light scattering determinations of band offsets in semiconductor heterostructures" *Quantum Electronics*, vol.24, p.1698-1711 (1988)
- [32] M. H. Meynadier, C. Delalande, G. Bastard, M. Voos, F. Alexandre, J. L. Li'evin, "Size quantization and band-offset determination in GaAs-GaAlAs separate confinement heterostructures" *Phys. Rev. B*, vol.31, p.5539-5542 (1985)
- [33] J. J. O'Shea, C. M. Reaves, S. P. DenBaars, M. A. Chin, V. Narayanamurti "Conduction band offsets in ordered GaInP/GaAs heterostructures studied by ballistic electron emission microscopy" *Applied Physics Letters*, vol.69, p.3022-3024 (1996)
- [34] Л.П. Авакянц, П.Ю. Боков, А.В. Червяков. «Автоматизированная установка для регистрации спектров фотоотражения с использованием двойного монохроматора» *Журнал технической физики*, том 75, вып. 10, стр. 66 – 68 (2005)

- [35] B. Bouhafs, H. Aourag, M. Ferhat, A. Zaoui, M. Certier. «Theoretical analysis of disorder effects on electronic and optical properties in InGaAsP quaternary alloy» J.Appl.Phys., Vol.82, p. 4923 - 4930, No.10 (1997)
- [36] <http://fityk.nieto.pl/> (дата обращения 20.12.2014)
- [37] Р.А. Хабибуллин, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, Д.С. Пономарев, И.С. Васильевский, В.А. Кульбачинский, П.Ю. Боков, Л.П. Авакянц, А.В. Червяков, П.П.Мальцев. "Электрофизические и оптические свойства приповерхностных квантовых ям AlGaAs/InGaAs/AlGaAs с различной глубиной залегания"ФТП, том 47, вып. 9, стр. 1215 - 1220 (2013)
- [38] Л.П. Авакянц, П.Ю. Боков, А.В. Червяков. "Исследование разрыва зон на гетеропереходе напряженных короткопериодных сверхрешеток GaAs/GaAsP методом спектроскопии фотоотражения"ФТП, том 38, вып. 12, стр.1429-1434 (2004)