

УДК 539.23

А.В. ВОЙЦЕХОВСКИЙ, Д.И. ГОРН

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПИСАНИЯ СПЕКТРОВ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ СТРУКТУР КРТ С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

Представлено описание теоретической модели расчёта спектров фотолюминесценции структур на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ (КРТ) с потенциальными и квантовыми ямами (КЯ), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Особенностью представленной модели является, в частности, то, что при расчётах была учтена зависимость электронного сродства от состава КРТ.

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

В настоящее время значительное количество работ, как российских, так и зарубежных, посвящено экспериментальному исследованию фотолюминесценции структур КРТ с КЯ [1–4].

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

Для расчёта профиля энергетических зон в структуре решается уравнение Пуассона:

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

где φ – электростатический потенциал в структуре; ε – относительная диэлектрическая проницаемость материала; n , p – концентрации электронов и дырок; N_a^- , N_d^+ – концентрации ионизированных акцепторных и донорных центров.

В структурах, содержащих квантовые ямы, для описания электрофизических и оптических свойств необходим расчёт 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. Для корректного расчета зонной диаграммы структуры с квантовой ямой необходимо находить самосогласованное решение уравнений (1) и (2).

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).

Для выяснения явного вида зависимостей $n(z, \varphi)$ и $p(z, \varphi)$ в уравнении (1), рассматривая структуру, энергетическая диаграмма которой приведена на рис. 1, можно получить

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

$$p(z, \varphi) = N_v \exp\left[\frac{E_v - F}{kT}\right] = p_0 \exp\left[-\frac{(q\varphi(z) + \Delta\chi(z) + \Delta E_g(z))/kT}{\left(m_v^*(z)/m_v^*\right)^{3/2}}\right],$$

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 выражениями $\Delta\chi(z) = \chi(z) - \chi_{\text{П}}$ и $\Delta E_g(z) = E_g(z) - E_{g\text{П}}$, где $\chi_{\text{П}}$ и $E_{g\text{П}}$ – электронное сродство и ширина запрещённой зоны в однородном слое П. Остальные обозначения являются общепринятыми.

Выражения для двумерных концентраций электронов и дырок в КЯ рассчитывались из общеизвестных выражений, приведённых в [5].

Для расчёта спектра фотолюминесценции будем использовать выражение для объёмных полупроводников, полученное в рамках теории Ван-Русбрека – Шокли:

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

где n – показатель преломления; τ_R – излучательное время жизни в КРТ; $\alpha(\omega)$ – спектральная зависимость коэффициента поглощения при данном типе оптического перехода. Для $\alpha(\omega)$ будем использовать выражение для межзонного поглощения в КЯ, описанное в [6].

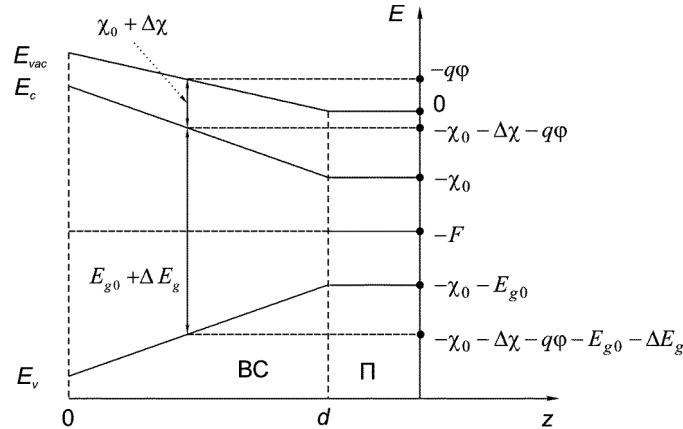


Рис. 1. Схематическая энергетическая диаграмма структуры варизонный слой – однородный полупроводник

Для расчёта электронного сродства будем использовать выражение, полученное нами ранее:

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

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

$$N_d^+(x) = (1,26x - 0,26) \cdot 10^{16}, \quad N_a^-(x) = (-26,1x + 16,7) \cdot 10^{15} \text{ [см}^{-3}\text{]}.$$

Таким образом, 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 $\chi(x, T)$, полученная авторами работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tonheim C.R. et al. // J. Phys.: Conference Series. – 2008. – V. 100. – P. 042024.
2. Naakenaasen R. et al. // J. Electron. Mater. – 2010. DOI: 10.1007/s11664-010-1211-7. – 10 p.
3. Баженов Н.Л. и др. // ФТП. – 2012. – Т. 46. – № 6. – С. 792.
4. Гуменюк-Сычевская Ж.В. и др. // Прикладная физика. – 2012. – № 1. – С. 101.
5. Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф. Физика низкоразмерных систем / под ред. А.Я. Шика. – СПб.: Наука, 2001. – 160 с.
6. Воробьев Л.Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Шалыгина В.А. Оптические свойства наноструктур: учеб. пособие / под ред. Е.Л. Ивченко и Л.Е. Воробьева. – СПб.: Наука, 2001. – 188 с.

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия
E-mail: vav@elefot.tsu.ru

Поступила в редакцию 15.06.12.