

# Зависимость энергетического спектра механически напряженной сверхрешетки ZnSe/ZnS от концентрации носителей

© Р.М. Пелешак, Б.А. Лукиянец

Дрогобычский государственный педагогический университет,  
293720 Дрогобыч, Украина

(Получена 27 октября 1999 г. Принята к печати 28 октября 1999 г.)

В рамках модели самосогласованной электрон-деформационной связи показано, что вблизи гетероконтакта механически напряженной сверхрешетки ZnSe/ZnS внутри основной квантовой ямы (ZnSe) и над основным барьером (ZnS) возникают дополнительные периодические локальные электрон-деформационные ямы и барьеры. Установлено, что при толщине наращиваемого слоя ZnSe от 10 до 20 Å энергия основного состояния электрона  $E_{0c}$  монотонно уменьшается с увеличением концентрации электронов проводимости  $n_c$ , а при толщине, большей 20 Å, концентрационная зависимость  $E_{0c} = f(n_c)$  имеет немонотонный характер с минимумом, который при увеличении толщины слоя смещается в сторону меньших концентраций  $n_c$ .

## 1. Введение

В современной микроэлектронике широко используются полупроводниковые гетероструктуры, в том числе гетероструктуры с механическими напряжениями [1,2]. Для получения гетеросистем, находящихся в механически напряженном состоянии, разработан целый ряд технологий (таких, например, как молекулярно-лучевая эпитаксия) [2–5]. Изучаются явления, связанные с деформированной областью гетеросистем, что дает возможность, с одной стороны, подавлять нежелательные явления, а с другой — использовать эти явления для разработки микроэлектронных устройств с заданными характеристиками.

Механико-деформационная модель, описывающая гетероструктуры с напряжениями, учитывает механические искажения, которые возникают в области контакта кристаллических систем вследствие несогласованности параметров решеток или вследствие флуктуаций толщины наращиваемого слоя или состава твердого раствора [3–7].

В действительности на напряженное состояние гетеросистемы влияет также взаимодействие механических деформаций решетки с электронами проводимости. Электрон-деформационное взаимодействие, которое существенно зависит от концентрации носителей, может быть учтено с помощью так называемой электрон-деформационной модели [8]. Эта модель и будет использоваться в настоящей работе для описания напряженных состояний гетеросистем.

## 2. Теория

Рассмотрим сверхрешетку, слои которой содержат напряжения, возникающие вследствие рассогласования постоянных решетки или других кристаллографических характеристик контактирующих материалов. Как известно, подобная ситуация имеет место в случае гетероструктур ZnSe/ZnS [5,9].

Расчет энергетического спектра механически напряженной сверхрешетки с учетом электрон-деформационного взаимодействия основан на решении одномерного стационарного уравнения Шредингера

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha^{*\beta}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_\alpha^\beta(x, L_w, b, n_\alpha) \right] \times \Psi_\alpha^\beta(E, x) = E \Psi_\alpha^\beta(E, x), \quad (1)$$

где индекс  $\alpha = c, v$  относится к зоне проводимости и валентной зоне соответственно,  $\beta = i, j$ . Индекс  $i$  соответствует области  $-L_w \leq x \leq 0$  узкощелевого материала (ZnSe, ширина запрещенной зоны  $E_{0g} = 2.822$  эВ) с толщиной слоя  $L_w$  (см. рис. 1), а  $j$  — области  $0 < x \leq b$  материала с широкой запрещенной зоной (ZnS, ширина запрещенной зоны  $E_{0g} = 3.840$  эВ) и толщиной слоя  $b$ . Здесь  $m_\alpha^{*\beta}$  — эффективная масса электрона (дырки),  $n_\alpha$  — концентрация носителей;  $V_\alpha^\beta(x, L_w, b, n_\alpha)$  — периодический потенциал сверхрешетки,

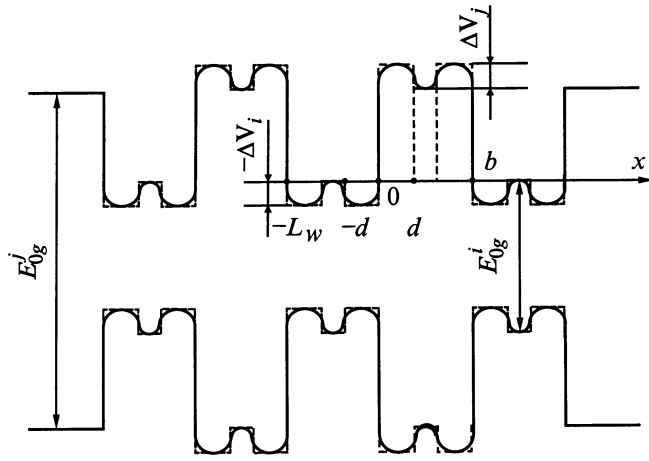
$$V_\alpha^\beta(x, L_w, b, n_\alpha) = \Delta E_{0\alpha} + \Delta E_{\alpha \text{ mech}}(L_w, b) + \Delta E_{\alpha \text{ el-d}}^\beta(x, L_w, b, n_\alpha). \quad (2)$$

Первое слагаемое в потенциале (2),  $\Delta E_{0\alpha} = E_{0\alpha}^j - E_{0\alpha}^i$ , описывает разрыв между зонами проводимости или валентными зонами контактирующих материалов в недеформированной сверхрешетке.

Второе слагаемое,  $\Delta E_{\alpha \text{ mech}}(L_w, b)$ , описывает изменение потенциальной энергии электронов (дырок), которое обусловлено механическими искажениями решетки, возникающими на гетерогранице из-за рассогласования параметров решеток  $a^i$  и  $a^j$ :

$$\Delta E_{\alpha \text{ mech}}(L_w, b) = (-1)^n [a_\alpha^j \varepsilon_{\text{mech}}^j(L_w, b) - a_\alpha^i \varepsilon_{\text{mech}}^i(L_w, b)]. \quad (3)$$

Здесь  $n = 0$  при  $\alpha = c$  и  $n = 1$  при  $\alpha = v$ ;  $a_\alpha^i$ ,  $a_\alpha^j$  — константы гидростатического деформационного



**Рис. 1.** Схематическое изображение зонной диаграммы механически напряженной сверхрешетки с локальными электрон-деформационными ямами и барьерами (модифицированная модель Кронига–Пени). Штриховой линией показана аппроксимация периодического потенциала  $V_\alpha^\beta$  (2) механически напряженной сверхрешетки, которая учитывает электрон-деформационное взаимодействие.

потенциала  $\alpha$ -зоны  $j$ -го и  $i$ -го материалов:

$$\varepsilon_{\text{mech}}^\beta(L_w, b) \equiv \text{Sp } \varepsilon_{\text{mech}}^\beta = \frac{1}{a^\beta} [2a_{\parallel} + a_{\perp}^\beta] - 3, \quad (4)$$

где  $a_{\parallel}$  — параметр решетки в плоскости гетероконтакта, а  $a_{\perp}^\beta$  — параметр решетки в направлении оси сверхрешетки [6];

$$a_{\parallel}(L_w, b) = \frac{a^i G^i L_w + b a^j G^j}{G^i L_w + b G^j}, \quad (5)$$

где  $G^i, G^j$  — модули сдвига в  $i$ - и  $j$ -м материалах;

$$a_{\perp}^\beta = a^\beta \left[ 1 - D^\beta \left( \frac{a_{\parallel}}{a^\beta} - 1 \right) \right], \quad (6)$$

где  $D^\beta$  — определяемый отношением упругих постоянных коэффициент, который зависит от кристаллографической ориентации решетки (в частности, для ориентации [001] мы получаем  $D^\beta = 2C_{12}^\beta / C_{11}^\beta$  [6]).

Третье слагаемое в (2) — это изменение потенциальной энергии носителей зоны  $\alpha$ , обусловленное локальным перераспределением электронной плотности  $\Delta n_\alpha^\beta(x, L_w, b, n_\alpha)$  в окрестности механически напряженной из-за электрон-деформационного взаимодействия гетерограницы [8]. Иными словами — это локальное искажение профиля потенциала  $V_\alpha^\beta(x, L_w, b, n_\alpha)$ , а именно

$$\Delta E_{\alpha \text{ el-d}}^\beta(x, L_w, b, n_\alpha) = -\frac{(a_\alpha^\beta)^2}{K^\beta} \Delta n_\alpha^\beta(x, L_w, b, n_\alpha), \quad (7)$$

где  $K^\beta$  — всесторонняя упругая постоянная материала  $\beta$ ;  $\Delta n_\alpha^\beta$  ( $\Delta n_\alpha^i > 0, \Delta n_\alpha^j < 0$ ) — локальное изменение электронной (дырочной) плотности. Выражения для  $\Delta n_\alpha^\beta$

представляют собой фурье-преобразования соответствующих корреляторов на основе одночастичных функций Грина. Такие функции Грина могут быть получены в результате отыскания самосогласованного решения системы пяти уравнений [10], учитывающих следующие величины: 1) концентрацию носителей; 2) электростатический потенциал, возникающий в окрестности механически напряженной гетерограницы вследствие изменения электронной (дырочной) плотности  $\Delta n_\alpha^\beta$ ; 3) волновую функцию электрона (дырки) в окрестности механически напряженной гетерограницы; 4) функции Грина; 5) химический потенциал.

В конечном счете мы имеем

$$\Delta n_\alpha^\beta(x, L_w, b, n_\alpha) = R_\alpha^\beta [e\varphi_\alpha^\beta(x) - [\Delta E_{0\alpha} + \Delta E_{\alpha \text{ mech}}^\beta(L_w, b)]], \quad (8)$$

где

$$R_\alpha^\beta = \left( \frac{3}{8\pi^4} \right)^{1/3} \frac{2m_\alpha^{*\beta}}{\hbar^2} \frac{n_\alpha^{1/3} [1 + P_\alpha^\beta n_\alpha^{1/3}]^{1/2}}{1 - (3/2)P_\alpha^\beta n_\alpha^{1/3} [1 + P_\alpha^\beta n_\alpha^{1/3}]}, \quad (9)$$

$$P_\alpha^\beta = \frac{2(a_\alpha^\beta)^2 m_\alpha^{*\beta}}{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 K^\beta}.$$

Электростатический потенциал  $\varphi_\alpha^\beta(x)$ , возникающий в окрестности механически напряженной гетерограницы в результате локального перераспределения электронов (дырок), может быть получен путем решения уравнений Пуассона для  $i$ - и  $j$ -й областей сверхрешетки.

За начало отсчета потенциала квантовой ямы механически деформированной сверхрешетки выбраны дно ямы — для электронов и ее потолок — для дырок:

$$\frac{d^2 \varphi_\alpha^i}{dx^2} - (\lambda_\alpha^i)^2 \varphi_\alpha^i = 0,$$

$$(\lambda_\alpha^i)^2 = e^2 R_\alpha^i / \varepsilon^i \varepsilon_0 \quad \text{при } -L_w \leq x \leq 0; \quad (10)$$

$$\frac{d^2 \varphi_\alpha^j}{dx^2} - (\lambda_\alpha^j)^2 \varphi_\alpha^j = -\frac{(\lambda_\alpha^j)^2}{e} [\Delta E_{0\alpha} + \Delta E_{\alpha \text{ mech}}^j(L_w, b)],$$

$$(\lambda_\alpha^j)^2 = e^2 R_\alpha^j / \varepsilon^j \varepsilon_0 \quad \text{при } 0 \leq x \leq b. \quad (11)$$

Здесь  $\varepsilon^\beta$  — статические диэлектрические проницаемости. Решения таких уравнений могут быть представлены в виде

$$\varphi_\alpha^i = A_\alpha^i \exp(\lambda_\alpha^i x) + B_\alpha^i \exp(-\lambda_\alpha^i x), \quad (12)$$

$$\varphi_\alpha^j = A_\alpha^j \exp(\lambda_\alpha^j x) + B_\alpha^j \exp(-\lambda_\alpha^j x) + \frac{1}{e} [\Delta E_{0\alpha} + \Delta E_{\alpha \text{ mech}}^j(L_w, b)], \quad (13)$$

где  $A_\alpha^i, B_\alpha^i, A_\alpha^j, B_\alpha^j$  — постоянные, которые определяются из условия непрерывности электростатических потенциалов  $\varphi_\alpha^i(x)$  и  $\varphi_\alpha^j(x)$  на гетерогранице, т. е. при  $x = 0$ , и из условия периодичности потенциала

$$\varphi_\alpha^i(b) = \varphi_\alpha^i(-L_w)$$

и нормальной составляющей вектора электрического смещения

$$D_{\alpha}^{in}(0) = D_{\alpha}^{in}(0) \text{ и } D_{\alpha}^{in}(b) = D_{\alpha}^{in}(-L_w).$$

$$\Delta E_{\alpha \text{ el-d}}^i(x, L_w, b, n_{\alpha}) = -\frac{(a_{\alpha}^i)^2 R_{\alpha}^i}{K^i} [A_{\alpha}^i \exp(\lambda_{\alpha}^i x) + B_{\alpha}^i \exp(-\lambda_{\alpha}^i x)] \text{ при } -L_w \leq x \leq 0, \quad (14)$$

$$\Delta E_{\alpha \text{ el-d}}^j(x, L_w, b, n_{\alpha}) = -\frac{(a_{\alpha}^j)^2 R_{\alpha}^j}{K^j} [A_{\alpha}^j \exp(\lambda_{\alpha}^j x) + B_{\alpha}^j \exp(-\lambda_{\alpha}^j x)] \text{ при } 0 \leq x \leq b. \quad (15)$$

### 3. Результаты расчета и их обсуждение

Спектр носителей в механически напряженной сверхрешетке с периодическим потенциалом, учитывающим электрон-деформационное взаимодействие, определяется решением одномерного уравнения Шредингера (1) с аппроксимирующим кусочно-постоянным электрон-деформационным потенциалом  $\tilde{V}_{\alpha}^{\beta}(x, L_w, b, n_{\alpha})$  (рис. 1, штриховая линия), который описывает периодический потенциал  $V_{\alpha}^{\beta}(x, L_w, b, n_{\alpha})$  (2) механически напряженной сверхрешетки. Последний получен методом самосогласованной электрон-деформационной связи [8]:

$$\tilde{V}_{\alpha}^{\beta}(x, L_w, b, n_{\alpha}) = \begin{cases} -\Delta V_{\alpha}^i(\varepsilon_{\text{mech}}, n_{\alpha}) & \text{при } -L_w \leq x \leq -L_w + d, \\ 0 & \text{при } -L_w + d < x < -d, \\ -\Delta V_{\alpha}^i(\varepsilon_{\text{mech}}, n_{\alpha}) & \text{при } -d \leq x \leq 0, \\ V_{0\alpha}(\varepsilon_{\text{mech}}) + \Delta V_{\alpha}^j(\varepsilon_{\text{mech}}, n_{\alpha}) & \text{при } 0 < x \leq d, \\ V_{0\alpha}(\varepsilon_{\text{mech}}) & \text{при } d < x \leq b - d, \\ V_{0\alpha}(\varepsilon_{\text{mech}}) + \Delta V_{\alpha}^j(\varepsilon_{\text{mech}}, n_{\alpha}) & \text{при } b - d < x \leq b, \end{cases} \quad (16)$$

где  $\Delta V_{\alpha}^i(\varepsilon_{\text{mech}}, n_{\alpha}) \equiv \Delta E_{\alpha \text{ el-d}}^i(x \rightarrow 0-; L_w, b, n_{\alpha})$  — глубина дополнительной локальной ямы, которая образовалась на гетероконтакте в основной квантовой яме (ZnSe) вследствие электрон-деформационного взаимодействия (см. рис. 1). В частности, для сверхрешетки ZnSe/ZnS при  $n_c = 10^{17} \text{ см}^{-3}$  и  $L_w = 10 \text{ \AA}$  имеем  $\Delta V_c^{\text{ZnSe}} \approx 0.07 \text{ мэВ}$ , а при  $n_c = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $L_w = 10 \text{ \AA}$  имеем  $\Delta V_c^{\text{ZnSe}} \approx 0.3 \text{ мэВ}$ . Здесь  $\Delta V_{\alpha}^j(\varepsilon_{\text{mech}}, n_{\alpha}) \equiv \Delta E_{\alpha \text{ el-d}}^j(x \rightarrow 0+; L_w, b, n_{\alpha})$  — высота локального дополнительного барьера, появляющегося на гетерогранице над основным барьером (ZnS) вследствие электрон-деформационного взаимодействия;  $V_{0\alpha}(\varepsilon_{\text{mech}}) \equiv \Delta E_{0\alpha} + \Delta E_{\alpha \text{ mech}}(L_w, b)$ .

Ширина локальной дополнительной электрон-деформационной ямы  $d_{\alpha}^i$  (локального барьера  $d_{\alpha}^j$ ) выбиралась из условия  $d_{\alpha}^{\beta} = (1/e) \sqrt{\varepsilon^{\beta} \varepsilon_0 / R_{\alpha}^{\beta}}$ , где  $\varepsilon^{\beta}$  — статическая диэлектрическая проницаемость  $\beta$ -го материала, а  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная.

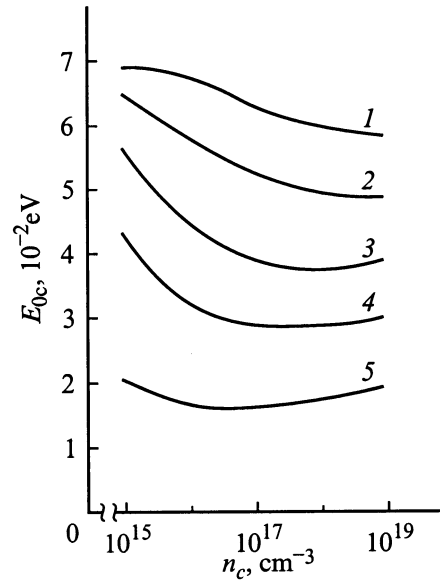


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния электрона  $E_{0c}$  в механически напряженной сверхрешетке ZnSe/ZnS от концентрации электронов проводимости  $n_c$  при толщине наращиваемого слоя ZnSe  $L_w = 12$  (1), 20 (2), 30 (3), 40 (4) и 60 Å (5).

Из условия непрерывности волновой функции  $\Psi_{\alpha}^{\beta}(E, x)$  и ее производной на границах раздела областей ( $x = -L_w + d$ ,  $x = -d$ ,  $x = 0$ ,  $x = b - d$ ) сверхрешетки, а также периодичности  $\Psi_{\alpha}^{\beta}(b) = \Psi_{\alpha}^{\beta}(-L_w) \exp[ik(L_w + b)]$  было получено дисперсионное уравнение для определения зависимости спектра носителей от средней концентрации носителей  $n_{\alpha}$  при разной толщине  $L_w$  наращиваемого слоя ZnSe.

На рис. 2 представлены результаты численного расчета энергии основного состояния электрона  $E_{0c}$  механически напряженной сверхрешетки ZnSe/ZnS. При расчете использовались следующие параметры материалов и их зонной структуры:  $m_{0c}^{\text{ZnSe}} = 0.17m_0$ ,  $a_c^{\text{ZnS}} = -2.78 \text{ \AA}$ ,  $a_c^{\text{ZnSe}} = -3.65 \text{ \AA}$ ,  $K^{\text{ZnSe}} = 0.379 \text{ эВ/\AA}^3$ ,  $a_c^{\text{ZnSe}} = 5.6687 \text{ \AA}$ ,  $a_c^{\text{ZnS}} = 5.4093 \text{ \AA}$ ,  $b = 59.5 \text{ \AA}$ ,  $\Delta E_{0c} = 0.198 \text{ эВ}$ ,  $\varepsilon^{\text{ZnSe}} = 8.1$ ,  $\varepsilon^{\text{ZnS}} = 8.3$  [5,6]. Как следует из рис. 2, в рассматриваемом диапазоне концентраций электронов ( $10^{15} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ) зависимость положения уровня основного состояния от концентрации получается различной при разной толщине  $L_w$  наращиваемого слоя. При толщине 10–20 Å она монотонна, тогда как при толщине  $L_w$ , большей 20 Å, зависимость приобретает немонотонный характер с минимумом, положение которого определяется толщиной  $L_w$ : чем больше  $L_w$ , тем при меньших концентрациях реализуется минимум уровня основного состояния. Такое нетривиальное поведение уровня основного состояния можно качественно объяснить, используя следующие соображения. Энергия основного состояния определяется двумя факторами, связанными с изменением концентрации носителей. С одной стороны,

ее увеличение сопровождается понижением дна потенциальной ямы из-за электрон-деформационного взаимодействия. Само по себе оно сопряжено с опусканием уровня основного состояния. С другой стороны, увеличение концентрации носителей приводит к уменьшению ширины  $d$  (см. рис. 1) и в результате — к поднятию уровня. Таким образом, его окончательное положение определяется конкуренцией упомянутых противоположных факторов. Как следует из сказанного выше, первый из них пропорционален  $n_c^{1/3}$ , тогда как второй — пропорционален  $n_c^{-1/3}$ , что и является причиной того, что суммарная зависимость приобретает немонотонный характер. Исходя из приведенных соображений можно предположить, что такой же немонотонный характер будет иметь зависимость положения уровня основного состояния от концентрации и при толщине  $L_w$ , попадающей в область 10–20 Å, но при концентрациях, более высоких, чем рассмотренные в данной работе.

Приведенные соображения позволяют качественно объяснить существование минимума  $E_{0c}(n_c)$ . Количественно положение уровня определяется эффектами, которые были достаточно строго учтены в рассматриваемой задаче.

## Список литературы

- [1] Молекулярно-лучевая эпитаксия гетероструктуры, под ред. Л. Ченга, К. Плога (М., Мир, 1989).
- [2] А.Е. Жуков, А.Ю. Егоров, В.М. Устинов, А.Ф. Цацунников, М.В. Максимов, Н.Н. Фалеев, П.С. Копьев. ФТП, **31**, 19 (1997).
- [3] А.В. Кавокин, С.И. Кохановский, А.И. Несвижский, М.Э. Сасин, Р.П. Сейсян, В.М. Устинов, А.Ю. Егоров, А.Е. Жуков, С.В. Гупалов. ФТП, **31**, 1121 (1997).
- [4] М.С. Бродин, В.В. Тищенко, Н.В. Бондарь, А.В. Коваленко, А.Ю. Мекекечко. УФЖ, **37**, 1802 (1991).
- [5] T. Taguchi, Y. Kawakami, Y. Yamada. Physica B, **191**, 23 (1993).
- [6] G. Chris, Van de Walle. Phys. Rev. B, **39**, 1871 (1989).
- [7] В.Я. Алешкин, В.И. Гавриленко, И.В. Ерофеева, Д.В. Козлов, О.А. Кузнецов, М.Д. Молдавская. ФТП, **32**, 1240 (1998).
- [8] И.В. Стасюк, Р.М. Пелешак. УФЖ, **36**, 1744 (1991).
- [9] М. Херман. Полупроводниковые сверхрешетки (М., Мир, 1989) гл. 3, с. 125.
- [10] Р.М. Пелешак, Б.А. Лукиянец. Письма ЖТФ, **24**, 37 (1998).

Редактор Л.В. Шаронова

## Energy spectrum dependence on concentration of carriers in a mechanically strained ZnSe/ZnS superlattice

R.M. Peleshchak, B.A. Lukianets

Drogobych State Pedagogical University,  
293720 Drogobych, Ukraine

**Abstract** Within the frame of the self-consistent electron-deformation binding model, data are presented that in the vicinity of a heterocontact in the interior of the primary barrier (ZnS) in a mechanically strained ZnSe/ZnS superlattice arise secondary periodical local electron-deformation wells and secondary local electron-deformation barriers.

It is established that for layer thicknesses from 10 Å to 20 Å the energy of ground electron state  $E_{0c}$  monotonically decreases with increasing conduction electron concentration  $n_c$  and for the thickness above 20 Å concentration dependence  $E_{0c} = f(n_c)$  is nonmonotone.