

5. Комаров Ф.Ф., Комаров А.А., Жуковски П. и др. // ЖТФ. 2003. Т. 7. № 5. С. 109.
6. Komarov F.F., Kamarou A.A., Zukowski P. et al. // Vacuum. 2003. Vol. 70. P. 215.
7. Sielanko J., Szysko W. // Nucl. Instr. and Meth. 1986. Vol. B16. P. 340.
8. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф., Миронов А.М. // Поверхность. 1997. № 6. С. 68.
9. Komarov A.F., Komarov F.F., Zukowski P. et al. // Nukleonika. 1999. Vol. 44. № 2. P. 363.
10. Комаров А.Ф., Комаров Ф.Ф., Шукан А.Л. и др. // Весці НАН Беларус Сер. фіз.-тэхн. 1999. № 3. С. 19.
11. Komarov A.F., Komarov F.F., Zukowski P. et al. // Vacuum. 2001. Vol. 63. № 4. P. 495.

Поступила в редакцию 18.02.2004.

Александр Фадеевич Комаров – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ.

УДК 53:621.38

А.В. БОРЗДОВ, В.О. ГАЛЕНЧИК

САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ И ИХ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ СЕЛЕКТИВНО-ЛЕГИРОВАННОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

The influence of aluminium content x in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ layer on electron energy levels and their populations in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterostructure quantum well at temperatures $T = 77$ and 300 K is examined. The system of the Schrodinger and Poisson equations is solved self-consistently taking into account the dependence of electrophysical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ layer on aluminium content x .

В настоящее время в микроэлектронике большое внимание уделяется полевым транзисторам на селективно-легированных гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Известно, что электронные и электрофизические свойства этих структур должны зависеть от состава слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [1].

Оценим влияние доли x алюминия в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на значения энергий и заселенностей двумерных электронных подзон, образующихся в потенциальной яме у границы гетероперехода при температурах $T = 77$ и 300 К путем численного самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона для соответствующей гетероструктуры.

Состояния электронов в потенциальной яме можно описать волновой функцией вида [1, 2]

$$\Psi_i(z, \mathbf{r}) = \psi_i(z) \exp(-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}),$$

где $\mathbf{k}$ и $\mathbf{r}$ – двумерные волновой вектор и радиус-вектор в плоскости, параллельной границе гетероперехода, $\psi_i(z)$ – огибающая волновой функции электронов i -й подзоны. Ось z направлена в глубь слоя GaAs перпендикулярно плоскости гетероперехода.

Запишем систему уравнений Шредингера и Пуассона, решая которую можно рассчитать огибающие волновых функций электронов и энергии подзон в потенциальной яме гетероструктуры. При этом учтем, что от доли алюминия зависят эффективная масса электрона в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, величина диэлектрической проницаемости $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и разрыва дна зоны проводимости на границе гетероперехода. Тогда система уравнений Шредингера и Пуассона будет иметь вид [3, 4]

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_z(z)} \frac{d\psi_i(z)}{dz} + V(z)\psi_i = E_i\psi_i, \\ \epsilon_0 \frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d\phi(z)}{dz} = e \sum_i N_i |\psi_i(z)|^2 - \rho_{depl}, \end{cases} \quad (1)$$

где

$$N_i = \frac{m_d k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \frac{E_F - E_i}{k_B T} \right],$$

$$V(z) = -e\phi(z) + V_h(z) + V_{xc}(z) + V_{im}(z).$$

Здесь $\hbar$ – редуцированная постоянная Планка; $m_z(z)$ – эффективная масса электрона; ϵ_0 – электрическая константа; $\epsilon(z)$ – относительная диэлектрическая проницаемость; e – абсолютная величина заряда электрона; N_i – заселенность i -й подзоны; ρ_{depl} – плотность заряда ионизованных примесей; m_d – эффективная масса плотности состояний в GaAs; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; E_F – энергия Ферми; E_i – энергия i -й подзоны; $V(z)$ – потенциальная энергия электрона; $-e\phi(z)$ – электростатический потенциал; $V_h(z)$ – потенциал гетероструктуры, описывающий характер разрыва зоны проводимости; $V_{xc}(z)$ – обменно-корреляционный и $V_{im}(z)$ – потенциал отображения (заметим, что здесь под потенциалом мы понимаем потенциальную энергию электрона). Начало координаты $z=0$ соответствует границе раздела $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs. Предполагается, что GaAs однородно легирован акцепторной примесью, а $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ – донорной. При этом между легированными областями находится тонкий нелегированный слой $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (так называемый спейсер).

При проведении расчетов полагалось, что эффективная масса электрона в GaAs постоянна и равна $0,067m_0$, где m_0 – масса свободного электрона, относительная диэлектрическая проницаемость этого слоя также полагалась постоянной и равной 13,18. Величины эффективной массы электрона и диэлектрической проницаемости в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ рассчитывались по формулам, приведенным в [5, 6]:

$$m_z = (0,067 + 0,083x)m_0,$$

$$\epsilon = 13,18 - 3,12x.$$

Величина разрыва дна зоны проводимости на гетерогранице определялась в соответствии с моделью, использованной в [5]:

$$\Delta E_c = 0,693x + 0,222x^2.$$

Граничные условия для огибающей волновой функции обычно имеют вид

$$\psi(\pm\infty) = 0,$$

однако численно реализовать это требование невозможно. Тем не менее, учитывая, что в глубине слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs волновая функция убывает со скоростью экспоненты, можно считать, что она отлична от нуля в конечной области вблизи границы гетероперехода [4]. При расчетах было принято, что $\psi_i(z) \neq 0$ на отрезке от -20 до 100 нм.

Уравнение Пуассона решалось с граничными условиями

$$\phi'(-z_{depl1} - d_{sp}) = \phi'(z_{depl}) = 0,$$

где z_{depl1} и z_{depl} – толщина области обеднения в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs соответственно, d_{sp} – толщина спейсера.

Толщина области обеднения в GaAs оценивалась из предположения, что при возникновении двумерного электронного газа внешние поля полностью экранируются электронами, и определялась по формуле [7]

$$z_{depl} = \sqrt{\frac{4\epsilon\epsilon_0 k_B T \ln(N_A/n_i)}{e^2 N_A}},$$

где N_A – концентрация акцепторов в GaAs, n_i – собственная концентрация электронов в GaAs при температуре T .

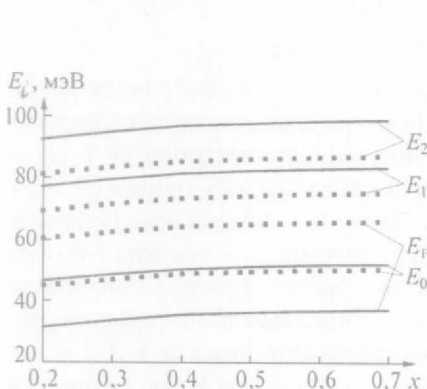


Рис. 1. Зависимости энергий подзон E_i и уровня Ферми E_F от доли x алюминия в слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $T=77$ (штриховая линия) и $T=300$ К (сплошная линия)

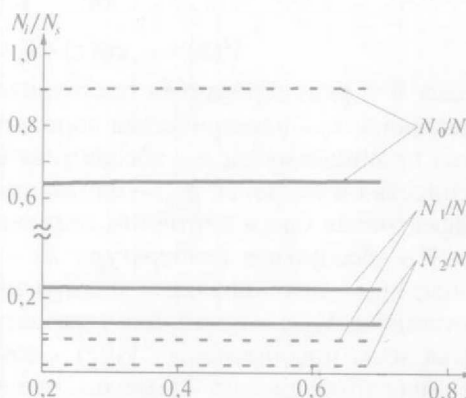


Рис. 2. Зависимости относительных заселенностей подзон N_i/N_s от доли x алюминия в слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $T=77$ (штриховая линия) и $T=300$ К (сплошная линия)

Толщину слоя пространственного заряда в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ можно определить из условия электронейтральности, т. е. равенства нулю суммарного поверхностного заряда в GaAs и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [8]:

$$Q_1 + Q_s + Q = 0, \quad (2)$$

где Q_1 , Q_s , Q – величины поверхностных плотностей зарядов легированного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, двумерного электронного газа и GaAs соответственно. В предположении полной ионизации примесей равенство (2) можно переписать в виде

$$eN_D \cdot z_{depl} - eN_s - eN_A \cdot z_{depl} = 0, \quad (3)$$

где N_D – концентрация доноров в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, N_s – поверхностная концентрация электронов двумерного газа, N_A – концентрация акцепторов в GaAs. Из (3) легко найти z_{depl} .

Результаты расчета зависимостей величин уровней энергии подзон E_i и относительных заселенностей этих подзон N_i/N_s от доли алюминия x при $T=77$ и 300 К приведены на рис. 1 и 2. При расчетах использовались следующие значения параметров полупроводниковых слоев: $N_A = 10^{20} \text{ м}^{-3}$, $N_D = 10^{24} \text{ м}^{-3}$, $N_s = 5 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$, толщина спейсерного слоя $d_{sp} = 5$ нм. Система уравнений (1) решалась самосогласованно с учетом заселенностей трех нижайших подзон.

Проведенные исследования выявили достаточно слабую зависимость величин энергий подзон и их заселенностей от параметра x при изменении его в диапазоне от 0,2 до 0,7, что может быть объяснено следующим: высота потенциального барьера для электронов на границе гетероперехода при данных значениях x является достаточно большой, вследствие чего кванто-

вое ограничение для электронов велико. При этом уровни энергий электронов лежат значительно ниже края потенциальной ямы, и изменение высоты барьера, связанное с изменением x , не оказывает значительного влияния на положение уровней в яме. Вместе с тем необходимо отметить, что эти условия могут нарушаться с изменением уровней легирования слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs , поскольку последнее приводит к изменению энергий подзон E_i . В этом случае электроны, заселяющие верхние энергетические подзоны, могут переходить из квазидвумерного состояния в трехмерное.

1. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия. М., 1991.
2. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М., 1985.
3. Stern F., Das Sarma S. // Phys. Rev. 1984. Vol. 30B. № 2. P. 840.
4. Yokoyama K., Hess K. // Phys. Rev. 1986. Vol. 33B. № 8. P. 5595.
5. Ping E. X., Jiang H. X. // Phys. Rev. 1989. Vol. 40B. № 17. P. 11792.
6. Fu Y., Chen Q., Willander M. et al. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. № 3. P. 1874.
7. Зи С. Физика полупроводниковых приборов: В 2 кн. М., 1984.
8. Ando T. // J. Phys. Soc. Jpn. 1982. Vol. 51. № 12. P. 3900.

Поступила в редакцию 24.03.2004.

Андрей Владимирович Борздов – аспирант кафедры физической электроники. Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Ф.Ф. Комаров.

Вадим Освальдович Галенчик – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник НИЛ материалов и приборных структур микро- и нанoeлектроники.

УДК 535.372; 541.426

А.А. ЗАЖОГИН, А.П. ЗАЖОГИН, А.И. КОМЯК, А.И. СЕРАФИМОВИЧ, Ж.И. БУЛОЙЧИК

ИССЛЕДОВАНИЕ КООРДИНАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ИОНА УРАНИЛА В РАСТВОРАХ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Using the method of IR-absorption spectroscopy, construction of the first coordination sphere of uranyl ion in solutions has been studied on the basis of a coordination ion solvation model. It has been shown that the first coordination sphere of a uranyl ion involves five ligand molecules.

Во всем многообразии химических и физико-химических свойств растворов и протекающих в них процессов определяющая роль принадлежит сольватации, которая сопровождается взаимодействиями, близкими к ион-молекулярному, ион-ионному и межмолекулярному. Химические аспекты ионной сольватации в растворах весьма существенны, поскольку связаны как с природой реагентов (атомно-молекулярных частиц, растворителей), так и с влиянием на них физико-химических свойств растворителей, внешних условий, состава и др. Ограниченность описания химических аспектов сольватации ионов связана со значительным разрывом между объемом накапливаемой информации о свойствах растворов разной природы и ее обобщением на основе учета их взаимодействий. Следует отметить, что ни один из методов исследования не дает полной информации о структуре растворов. Проблема может быть решена, на наш взгляд, только при разумном сочетании результатов различных методов.

В общем случае, прежде чем перейти к количественному описанию условий равновесия какой-либо реакции в растворе, необходимо выбрать четко определенную ее химическую модель. Для этого нужна информация о количестве и природе находящихся в растворе химических частиц. Извест-