JOURNAL OF APPLIED SPECTROSCOPY September—October 1999

ЭФФЕКТЫ УШИРЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХРЕШЕТОК"

Д. В. Ушаков^а, В. К. Кононенко⁶*, И. С. Манак^а

УДК 539.293:621.382

^а Белорусский государственный университет, Минск ⁶Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, 220072, Минск, просп. Ф. Скорины, 68

(Поступила 4 февраля 1999)

Для легированных полупроводниковых сверхрешеток при различных уровнях возбуждения проведен расчет плотности энергетических состояний с учетом эффектов экранирования и флуктуаций концентраций примесей. Влияние хвостов плотности состояний на спектры спонтанного испускания исследовано для прямых переходов и в модели без правила отбора по волновому вектору электрона. Учет хвостов плотности состояний позволяет описать длинноволновое крыло и форму спектров спонтанного испускания в соответствии с экспериментальными данными.

Ключевые слова: легированная сверхрешетка, хвост плотности состояний, экранирование, спектр спонтанного испускания.

Легированные сверхрешетки (ЛС) со структурой кристалла типа n-i-p-i относятся к квазидвухмерным электронным системам, в которых края зоны проводимости и валентной зоны промодулированы периодическим электростатическим потенциалом, создаваемым заряженными примесями n- и p-типов. В зависимости от степени легирования и уровня накачки n-i-p-i-кристалла глубина и форма потенциального рельефа изменяются, что влияет на свойства и характеристики таких ЛС [1]. В настоящей работе учтены эффекты сильного легирования и дано адекватное описание спектров спонтанной рекомбинации.

При определении зонных параметров и оптических характеристик ЛС необходимо учитывать уширение энергетических уровней в результате флуктуаций электростатического потенциала из-за хаотического распределения заряженных примесей. Используя подход, развитый для объемных полупроводников [2], для распределений по энергии E двухмерной плотности состояний в зоне проводимости $\rho_c(E)$ и валентной зоне $\rho_v(E)$ находим [3]

$$\rho_{\rm c}(E) = \frac{m_{\rm c}}{2\pi - \hbar^2 N_{\rm p}} \sum_{n \ \nu} \operatorname{erfc}\left(\frac{E_{\rm c0} + E_{\rm cn\nu} - E}{\sigma_{\rm c}}\right) = \sum_{n \ \nu} \rho_{\rm cn\nu}(E), \qquad (1)$$

$$\rho_{v}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar^{2}N_{p}} \sum_{i} m_{vi\perp} \sum_{m} \sum_{v} \operatorname{erfc}\left(\frac{E - E_{v0} + E_{vimv}}{\sigma_{v}}\right) = \sum_{i} \sum_{m} \sum_{v} \rho_{vimv}(E).$$
(2)

Здесь N_p — число периодов ЛС; E_{c0} и E_{v0} — энергии дна зоны проводимости и потолка валентной зоны; E_{cnv} и E_{vimv} — уровни размерного квантования; m_c и m_{vi1} — эффективная масса электронов и поперечные компоненты эффективных масс тяжелых (i = h) и легких (i = l) дырок; σ_c и σ_v — характеристические параметры хвостов плотности состояний (ПС) в зоне проводимости и валентной зоне соответственно. Суммирование в (1) и (2) проводится по квантовым числам миниподзон v, подзон электронов n и дырок m. При σ_c , $\sigma_v \rightarrow 0$ полученные формулы переходят в известные выражения для ступенчатообразной плотности состояний [1].

В ЛС из-за пространственного разнесения потенциальных ям экранирование флуктуирующего электростатического потенциала осуществляется в отличие от объемных кристаллов отдельно электронами в *n*-областях и дырками в *p*-областях. Поэтому параметры хвостов ПС σ_c и σ_v зависят от средних концентраций донорных N_d и акцепторных N_a примесей и длин экранирования L_c и L_v в *n*- и *p*-областях, соответственно. Как и для объемных полупроводников [2, 4, 5], полагаем

$$\sigma_{\rm c} = \frac{e^2}{\varepsilon} \sqrt{4\pi b_{\rm c} N_{\rm d} L_{\rm c}} , \qquad \sigma_{\rm v} = \frac{e^2}{\varepsilon} \sqrt{4\pi b_{\rm v} N_{\rm a} L_{\rm v}} , \qquad (3)$$

где є — диэлектрическая постоянная кристалла. С помощью коэффициентов b_c и b_v учитывается квантовая поправка, связанная с величиной эффективной массы носителей тока, и степень ионизации примесей [5]. Если n_n и p_n — средние концентрации электронов и дырок в *n*-области толщиной d_n , а n_p и p_p – средние концентрации электронов и дырок в *n*-области толщиной d_n , а n_p и p_p – средние концентрации электронов и дырок в *n*-области толщиной d_n , а n_p и p_p – средние концентрации электронов и дырок в *p*-области толщиной d_n , то полагаем

$$b_{\rm c} = 1 - \frac{n_n - p_n}{N_{\rm d}}, \qquad b_{\rm v} = 1 - \frac{p_p - n_p}{N_{\rm a}}.$$
 (4)

Экранирование в линейном приближении может быть описано в модели двухмерного электронного газа [6] или объемного кристалла [4, 5, 7]. В дальнейшем численные расчеты для ЛС на GaAs будем проводить с использованием объемной длины экранирования.

Уровни энергии и потенциальный профиль ЛС находятся путем самосогласованного расчета уравнений Шредингера и Пуассона [1]. Значения концентраций носителей тока определяются видом огибающих волновых функций вдоль оси ЛС, которые нормируются на период $d = d_n + d_p + 2d_i$, где d_i — толщина *i*-слоя. Очевидно, что величина n_n не превышает n/d_n , а p_p , соответственно, — p/d_p , где n и p — двухмерные концентрации электронов и дырок. Изменение зонного спектра и эффективной ширины запрещенной зоны $E'_g = E_{c0} - E_{v0}$ с увеличением уровня возбуждения $r = n/N_d d_n$ зависит от типа ЛС и ее периода d. Так как p = n + N, где $N = N_a d_p - N_d d_n$, то коэффициенты b_c и b_v связаны между собой соотношением $b_v \approx (N_d d_n/N_a d_p) b_c$, которое строго выполняется при $d_i = 0$. Для компенсированной ЛС (N = 0) значение r > 0, и величины b_c и b_v изменяются практически от 1 до 0. Для ЛС pтипа, когда N > 0, коэффициент $b_c > b_v$. Для ЛС n-типа (N < 0), наоборот, $b_v > b_c$.

Если дополнительно учесть "фоновое" экранирование из-за корреляции в распределении примесей, возникающей в процессе легирования [4, 8—10], то получим

$$L_{\rm c} = L_{\rm d} \left(1 + L_{\rm d}^2 / L_n^2 \right)^{-1/2}, \qquad \qquad L_{\rm v} = L_{\rm a} \left(1 + L_{\rm a}^2 / L_p^2 \right)^{-1/2}, \tag{5}$$

где

$$L_{n} = \left(\frac{4\pi e^{2}}{\varepsilon} \left(\frac{dn_{n}}{d\zeta_{e}} + \frac{dp_{n}}{d\zeta_{h}}\right)\right)^{-1/2}, \quad L_{p} = \left(\frac{4\pi e^{2}}{\varepsilon} \left(\frac{dp_{p}}{d\zeta_{h}} + \frac{dn_{p}}{d\zeta_{e}}\right)\right)^{-1/2}$$
$$L_{d} = \left(\frac{4\pi e^{2}N_{d}}{\varepsilon kT_{0}}\right)^{-1/2}, \quad L_{a} = \left(\frac{4\pi e^{2}N_{a}}{\varepsilon kT_{0}}\right)^{-1/2}.$$

Здесь $\zeta_e = F_e - E_{c0}$; $\zeta_h = E_{v0} - F_h$; F_e и F_h — квазиуровни Ферми для электронов и дырок соответственно; T_0 — температура "замораживания" примесей. Далее расчеты зонного спектра ЛС при заданном уровне возбуждения *r* можно провести методом итераций. За исходные длины экранирования в *n*- и *p*-областях можно принять фоновые значения L_d и L_a и соответствующие им значения σ_c и σ_v при условии $b_c = b_v = 1$. Затем, рассчитав уровни энергии и распределение ПС, определить длину экранирования в *n*- и *p*-областях, а используя (3) — характеристические параметры σ_c и σ_v . Процедура повторяется до получения требуемой точности нахождения энергетического спектра ЛС.

Результаты расчетов параметров энергетического спектра ЛС на GaAs приведены на рис. 1. Для примера рассматривалась ЛС *p*-типа ($N_p = 6$) с типичными концентрациями примесей и толщинами легированных слоев: $N_a = 8 \cdot 10^{18}$ см⁻³, $N_d = 5 \cdot 10^{18}$ см⁻³, $d_p = d_n = 15$ нм и $d_i = 0$. При расчетах значения эффективных масс принимались, как при кристаллографической ориентации квантоворазмерных слоев GaAs {100}: $m_c = 0.067m_e$, $m_{vh} = 0.34m_e$, $m_{vl} = 0.094m_e$, $m_{vh\perp} = 0.11m_e$, $m_{vl\perp} = 0.20m_e$. Здесь m_{u} и m_{vl} — продольные компоненты эффективных масс дырок, задающие спектр уровней размерного квантования в потенциальных ямах.

Как видно из рис. 1, с увеличением уровня возбуждения ЛС длины экранирования в *n*- и *р*областях заметно уменьшаются, особенно в *n*-области, и, соответственно, сокращаются хвосты ПС.



Рис. 1. Изменение длин экранирования L_c и L_v (*a*) и параметров хвостов ПС σ_c и σ_v (*b*) в *n*- (*l*) и *p*-областях (*c*) в зависимости от уровня возбуждения *r* ЛС *p*-типа; $T_0 = 1500$ K, $\varepsilon = 12.5$, $E_g = 1.42$ эВ, температура кристалла 300 K

При малых накачках (r < 0.1) хвост ПС в *n*-области определяется в основном фоновым экранированием, а в *p*-области эффект корреляции в распределении примесей ослаблен из-за экранирования примесного потенциала равновесными дырками. Фоновое экранирование задается средними концентрациями легирующих примесей и характеристической температурой T_0 . Величина T_0 может быть принята близкой к температуре плавления кристалла (1500 K) [8, 9]. При выращивании ЛС температура подложки обычно гораздо ниже и составляет ~820 K [11]. Однако, как показывают численные оценки, изменение величины T_0 в этих пределах не влияет на конечные расчеты хвостов ПС и спектров испускания.

Скорость излучательной рекомбинации рассчитывалась как в случае прямых переходов (ПП) [12], так и в модели без правила отбора (БПО) по волновому вектору электрона [1, 13]. В модели ПП с учетом хвостов ПС спектр спонтанного излучения описывается выражением [14]

$$r_{\rm sp}(h\nu) = \frac{A_{\rm ev}}{2\pi\hbar^2 N_{\rm p} d} \sum_{i} m_{ri\perp} \sum_{n} \sum_{m} \sum_{\nu} \operatorname{erfc} \left(-\frac{h\nu - h\nu_{mmi\nu}}{\sigma_{\rm ev}} \right) |I_{nmi\nu}|^2 f_{\rm e}(E_{\rm cnmi\nu}) f_{\rm h}(E_{\rm vnmi\nu})$$

где A_{cv} — коэффициент Эйнштейна; $m_{ri\perp}$ — приведенная масса; $hv_{nmiv} = E'_g + E_{cnv} + E_{vimv}$; $\sigma_{cv} = \sqrt{\sigma_c^2 + \sigma_v^2}$; I_{nmiv} — интеграл перекрытия огибающих волновых функций электронов и дырок; $f_e(E_{cnmiv}) u f_h(E_{vnmiv})$ — функции распределения Ферми — Дирака для электронов и дырок с энергиями, определяемыми как

$$E_{cnmiv} = E_{c0} + \frac{m_{ri\perp}}{m_c} \left(hv - E'_g\right) + \frac{m_{ri\perp}}{m_{vi\perp}} E_{cnv} - \frac{m_{ri\perp}}{m_c} E_{vimv},$$

$$E_{vnmiv} = E_{v0} - \frac{m_{ri\perp}}{m_{vi\perp}} \left(hv - E'_g\right) + \frac{m_{ri\perp}}{m_{vi\perp}} E_{cnv} - \frac{m_{ri\perp}}{m_c} E_{vimv}.$$

Здесь полагается, что флуктуации энергий краев зоны проводимости и валентной зоны в *n*- и *p*областях ЛС независимы, и для уровней энергии E_{cnmiv} и E_{vnmiv} в зонах, между которыми происходят оптические переходы, берутся средние значения, как и в случае флуктуационного механизма уширения спектральных линий в квантоворазмерных гетеролазерах [15]. Также учитывается зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника E_g от температуры *T*.

В случае оптических переходов БПО по волновому вектору электрона для скорости спонтанной рекомбинации получаем, что

$$r_{\rm sp}(h\nu) = \frac{A}{d^2} \sum_{i} \sum_{n} \sum_{m} \sum_{\nu} \int_{\rho_{\rm cnv}} (E) \rho_{\nu im\nu} (E - h\nu) |I_{nmi\nu}|^2 f_{\rm e}(E) f_{\rm h}(E - h\nu) dE,$$

где $A = 32\pi a_0^3 A_{cv}$ — вероятность оптических переходов БПО; a_0 — эффективный боровский радиус примеси; ПС в миниподзонах ρ_{cnv} и ρ_{vinv} соответствуют (1) и (2). Для вероятности оптических переходов берется значение, как для объемных сильно легированных полупроводников с $a_0 = 1.7$ нм, и не учитывается зависимость A от размеров квантовых ям [16], которая может быть существенна в случае короткопериодных ЛС.

Рассчитанные спектры спонтанного испускания ЛС с параметрами, как на рис. 1, представлены на рис. 2. Интенсивность и спад спектра испускания на коротковолновом крыле определяется ферми-распределением неравновесных носителей тока, т. е. уровнем возбуждения и температурой кристалла. Длинноволновое крыло спектров зависит от распределения на хвостах ПС и тоже изменяется с накачкой кристалла. Увеличение *г* приводит к сокращению хвостов ПС и, соответственно, возрастанию наклона зависимости интенсивности *r*_{sp} от частоты света v на длинноволновом крыле спект-



Рис. 2. Скорость спонтанной рекомбинации $r_{sp}(hv)$ для ПП (*a*) и в модели БПО (б) при различных значениях параметра накачки *r* (цифры у кривых)

ров. При этом ширина полосы испускания слабо изменяется с *r*. Расчеты для разных механизмов излучательной рекомбинации приводят практически к одинаковым результатам, что видно из сравнения рис. 2, *a* и б.

Для установления применимости развитого подхода описания спектров спонтанного излучения ЛС проведем анализ экспериментальных данных [7, 17]. Измеренные при T = 90 К спектры фотолюминесценции ЛС на GaAs обнаруживают широкий низкоэнергетический хвост и отсутствие структуры, связанной с размерным квантованием [7]. Теоретические спектры для обоих механизмов рекомбинации имеют аналогичную гладкую форму (см. рис. 3). Уровень возбуждения анализируемой структуры $\Delta F = F_e - - F_h$ подбирался таким образом, чтобы высокоэнергетический край расчетного спектра совпадал с экспериментально измеренным в относительных единицах. В отличие от модифицированной модели экспоненциальных хвостов ПС, предложенной в [7], развитый подход хорошо описывает спектр спонтанного излучения при слабом возбуждении. С ростом возбуждения ЛС до $r \approx 0.1$ и выше длинноволновый край спектра на опыте не сокращается, а даже незначительно расширяется. Это противоречие между экспериментальными и теоретическими спектрами можно, по-видимому, снять при более детальном анализе характера экранирования примесного потенциала и степени ионизации примесей, а также учете релаксационного механизма уширения спектральных линий.



Рис. 3. Спектры спонтанного испускания ЛС на GaAs, рассчитанные для различных уровней возбуждения: $\Delta F = 0.85$ эВ, r = 0.001 (a); $\Delta F = 1.08$ зВ, r = 0.1 (б). $N_s = 10^{19}$ см⁻³, $N_d = 4.10^{18}$ см⁻³, $d_p = 35$ нм, $d_n = 25$ нм, $d_i = 0$, T = 90 К, $E_g = 1.50$ зВ. Сплошная линия — экспериментальные данные [7], — случай ПП, Δ — модель БПО

Результаты расчетов спектров излучения δ-ЛС на GaAs приведены на рис. 4. Как видно, хвосты ПС сглаживают спектры спонтанного излучения и обусловливают длинноволновое крыло. Рассчитанные спектры хорошо согласуются с экспериментальными данными [17] как в случае слабого возбуждения, так и при значительном уровне накачки электрическим током. Таким образом, развитый подход с учетом гауссовых флуктуаций примесного потенциала адекватно описывает спектры люминесценции δ-ЛС. Расчеты спектров предложенным методом менее трудоемкие по сравнению с моделью [17], где используется асимметричная функция распределения плотности вероятности флуктуирующего потенциала в зависимости от координаты вдоль оси ЛС.



Рис. 4. Спектры спонтанного испускания δ -ЛС на GaAs, рассчитанные для различных уровней возбуждения: $\Delta F = 1.17$ эВ, r = 0.25 (a); $\Delta F = 1.43$ эВ, r = 0.76 (б). $N_a = 8 \cdot 10^{19}$ см⁻³, $N_d = 6 \cdot 10^{19}$ см⁻³, $d_p = d_n = 1$ нм, $d_i = 14$ нм, T = 50 K, $E_g = 1.51$ эВ. Сплошная линия — экспериментальные данные [17], штриховая линия — расчет без учета хвостов ПС,0 — случай ПП, Δ — модель БПО

Проведенный анализ показывает, что для описания оптических спектров ЛС необходимо учитывать флуктуации концентраций легирующих примесей и процессы экранирования с изменением уровня возбуждения. Длинноволновое крыло спектров испускания определяется в основном распределениями в хвостах ПС в зоне проводимости и валентной зоне. Уровни размерного квантования явно не проявляются в форме кривых спектров испускания, которые практически не зависят от правила отбора. Развитая методика расчета скорости оптических переходов позволяет описать не только спектры фото- и электролюминесценции ЛС, но и изменение их спектров усиления и поглощения с накачкой.

Список цитируемой литературы

1. V. K. Kononenko, I. S. Manak, D. V. Ushakov. Proc. SPIE, 3580 (1998) 10-27

2. E. O. Kane. Phys. Rev., 131 (1963) 79---88

3. Д. В. Ушаков, В. К. Кононенко, И. С. Манак. Тр. III Конф. по лазерной физике и спектроскопии, Гродно, 1997; Минск, 1 (1997) 384—386

4. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников, Москва (1979)

5. В. К. Кононенко. Перенос заряда и экранирование в сильно легированных полупроводниках, препринт Ин-та физики АН БССР, Минск, № 224 (1980)

6. А. Я. Шик. ФТП, **29** (1995) 1345—1381

7. M. Renn, C. Metzner, G. H. Döhler. Phys. Rev. B, 48 (1993) 11220-11227

8. Л. В. Келдыш, Г. П. Прошко. ФТТ, 5 (1963) 3378—3389

9. F. Stern. Phys. Rev. B, 3 (1971) 3559-3560

10. В. К. Кононенко. Журн. прикл. спектр., 41 (1984) 106-110

11. К. Плог. В кн.: "Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры", под ред. Л. Ченга и К. Плога, Москва (1989) 428-461

12. D. V. Ushakov, V. K. Kononenko. In: "Physics, Chemistry, and Application of Nanostructures", Singapore (1997) 121-124

13. D. V. Ushakov, V. K. Kononenko. Proc. SPIE, 3423 (1998) 120-123

14. Д. В. Ушаков, В. К. Кононенко, И. С. Манак. Квантовая. электроника: Материалы II Межгосуд. науч.-техн. конф., Минск (1998) 20—21

15. Д. В. Карасев, В. К. Кононенко. Журн. прикл. спектр., 61 (1994) 404-408

16. А. А. Афоненко, В. К. Кононенко, И. С. Манак, В. А. Шевцов. ФТП, 31 (1997) 1087-1091

17. C. Metzner, K. Schrüfer, U. Wieser, M. Luber, M. Kneissl, G. H. Döhler. Phys. Rev. B, 51 (1995) 5106-5115

РАЗМЕРЫ СЛОЕВ ПОЛОЖИТЕЛЬНОГО ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА В ВЫСОКОЧАСТОТНОМ РАЗРЯДЕ**

Л. Н. Орлов⁴*, В. В. Ажаронок⁶

УДК 537.523

^а Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072, Минск, просп. Ф. Скорины, 68 ^бИнститут молекулярной и атомной физики НАН Беларуси, Минск

(Поступила 30 декабря 1998)

На основании исследования пространственного распределения интенсивности излучения в молекулярных полосах ионов азота определены ширины слоев положительного пространственного заряда в смесях молекулярных газов при поперечном ВЧ возбуждении. Показано, что в отличие от предсказаний простейшей теории эти ширины относительно слабо зависят от частоты возбуждения и давления газа.

Ключевые слова: высокочастотный емкостный разряд, спектроскопия плазмы, молекулярный лазер.

Характерная особенность α-фазы емкостного высокочастотного разряда (ВЧЕР) — существование четко выраженных областей вблизи электродов, отличающихся и по свечению, и по составу плазмы, с избытком нескомпенсированного ионного заряда — слоев положительного пространственного заряда (СППЗ) [1]. Учитывая особую роль, которую играют СППЗ в плазменных технологиях и в физике газоразрядных лазеров с поперечным ВЧЕР (ПВЧЕР) возбуждением, исследованию СППЗ в последнее время уделяется особое внимание.

В основе большинства работ лежит простейшая модель α-фазы ВЧЕР [2], предсказывающая, что ширина СППЗ