

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ВОЛИНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ЛЕСІ УКРАЇНКИ**

Кафедра теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського

На правах рукопису

Коцюба Марія Вікторівна

КВАНТОВО-РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ У НАНОСТРУКТУРАХ

Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»
Освітня програма 104 – Фізика та астрономія

Робота на здобуття освітнього ступеня «Магістр»

Науковий керівник:

Шигорін Павло Павлович
кандидат фіз.-мат. наук, доцент

РЕКОМЕНДОВАНО ДО ЗАХИСТУ

Протокол № _____

засідання кафедри теоретичної та
комп'ютерної фізики

імені А. В. Свідзинського

від _____ 2025 р.

Завідувач кафедри

доцент Сахнюк В.Є. _____

ЛУЦЬК – 2025

АНОТАЦІЯ

Коцюба М.В. Квантово-розмірні ефекти у наноструктурах. Рукопис.

Кваліфікаційна робота магістра за освітньою програмою 104 «Фізика та астрономія». Волинський національний університет імені Лесі Українки. Луцьк, 2025.

Кваліфікаційна робота магістра складається зі вступу, трьох розділів, висновків та списку використаних джерел.

Магістерська робота присвячена теоретичному дослідженню квантово-розмірних ефектів у напівпровідникових наноструктурах, зокрема в гетероструктурах на основі системи германій–кремній (Ge/Si). У роботі проаналізовано фундаментальні основи фізики низькорозмірних систем, особливості формування квантових ям, ниток і точок, а також вплив квантового обмеження та механічних напружень на електронну структуру наноматеріалів. Значну увагу приділено дослідженню зонної структури деформованих напівпровідників із застосуванням методу емпіричного псевдопотенціалу, віртуального кристалічного наближення та теорії потенціалу деформації. Розглянуто механізми самоорганізації квантових точок у гетероструктурах Ge/Si, вплив легування на електричні властивості наноструктур, а також експериментальні методи їх дослідження. Отримані результати мають важливе значення для розуміння фізичних властивостей квантово-розмірних систем і можуть бути використані при розробці сучасних електронних та оптоелектронних приладів на кремнієвій платформі.

Ключові слова: квантово-розмірні ефекти, наноструктури, гетероструктури Ge/Si, квантові точки, зонна структура, механічні напруження.

ANNOTATION

Kotsyuba M.V. Quantum size effects in nanostructures. Manuscript.

Master's thesis in the educational program 104 “Physics and Astronomy.”
Lesya Ukrainka Volyn National University. Lutsk, 2025.

The master's thesis consists of an introduction, three chapters, conclusions, and a list of references.

The master's thesis is devoted to the theoretical study of quantum size effects in semiconductor nanostructures, in particular in heterostructures based on the germanium-silicon (Ge/Si) system. The thesis analyzes the fundamental principles of low-dimensional systems physics, the peculiarities of quantum well, wire, and point formation, as well as the influence of quantum confinement and mechanical stresses on the electronic structure of nanomaterials. Considerable attention is paid to the study of the band structure of deformed semiconductors using the empirical pseudopotential method, the virtual crystal approximation, and the deformation potential theory. The mechanisms of self-organization of quantum dots in Ge/Si heterostructures, the influence of doping on the electrical properties of nanostructures, and experimental methods for their study are considered. The results obtained are important for understanding the physical properties of quantum-sized systems and can be used in the development of modern electronic and optoelectronic devices on a silicon platform.

Keywords: quantum-size effects, nanostructures, Ge/Si heterostructures, quantum dots, band structure, mechanical stresses.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ НАНОСТРУКТУР ТА КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ ЕФЕКТІВ.....	7
1.1. Класифікація наноструктур та фундаментальні квантові явища	7
1.2 Гетероструктури: типи, властивості та застосування	15
1.3. Система Ge/Si: структурні особливості та перспективи застосування	18
РОЗДІЛ 2 ЗОНИ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СТРУКТУР ДЛЯ ОБ'ЄМНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ.....	22
2.1 Кристалічна структура з двовісним деформаційним напруженням.....	22
2.2 Локальна інтерполяція псевдопотенціалу	24
2.3 Віртуальне кристалічне наближення	32
2.4 Теорія потенціалу деформації	38
РОЗДІЛ 3. КВАНТОВО-РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ У НАНОСТРУКТУРАХ Ge/Si..	46
3.1. Фундаментальні основи квантово-розмірних ефектів у гетероструктурах	46
3.2. Самоорганізація та формування квантових наноструктур Ge/Si.....	48
3.3. Зонна структура та енергетичні рівні в квантово-розмірних структурах ..	53
3.3.1. Квантово-розмірні ефекти у гетероструктурі Ge/Si.....	53
3.3.2. Зонна структура в гетероструктурах Ge/Si	54
3.3.3. Вплив механічних напружень на електронну структуру	55
3.4. Вплив легування на електричні властивості гетероструктур Ge/Si.....	56
3.4.1. Концентрація носіїв заряду в напружених наноплівках.....	56
3.4.2. Відносна зміна питомої електропровідності.....	57
3.4.3. Механізми переносу заряду в наноструктурах	59
3.5. Експериментальні методи дослідження квантово-розмірних структур.....	60
3.6. Практичне застосування та перспективи розвитку	66
3.7. Висновки	68
ВИСНОВКИ.....	71
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	73

ВСТУП

Сучасний етап розвитку мікро- та наноелектроніки характеризується переходом до створення приладів на основі наноструктур, розміри яких є співмірними з довжиною хвилі де Бройля носіїв заряду. За таких умов проявляються квантово-розмірні ефекти, що призводять до істотних змін електронних, оптичних і транспортних властивостей матеріалів порівняно з їх об'ємними аналогами.

Гетероструктури на основі системи германій–кремній (Ge/Si) привертають значну увагу дослідників завдяки сумісності з промисловою кремнієвою CMOS-технологією та можливості формування квантових точок шляхом самоорганізації за механізмом Странського–Крастанова. Невідповідність параметрів кристалічних ґраток Ge та Si (приблизно 4,2 %) зумовлює виникнення механічних напружень, які визначають морфологію наноструктур і водночас суттєво впливають на їх зонну структуру.

Квантово-розмірні ефекти в наноструктурах Ge/Si відкривають перспективи створення нового покоління електронних і оптоелектронних приладів, зокрема фотодетекторів для ближнього інфрачервоного діапазону, джерел випромінювання на кремнієвій платформі, високошвидкісних транзисторів та елементів квантової електроніки. У зв'язку з цим дослідження фундаментальних механізмів формування та функціонування таких наноструктур є актуальним завданням сучасної фізики твердого тіла та наноелектроніки.

Метою дослідження є теоретичний аналіз квантово-розмірних ефектів у наноструктурах Ge/Si та встановлення закономірностей впливу геометричних розмірів і механічних напружень на електронні властивості гетероструктур з метою оцінки перспектив їх практичного застосування в оптоелектроніці та високошвидкісній електроніці.

Об'єктом дослідження є напівпровідникові гетероструктури германій–кремній з квантово-розмірними ефектами.

Предметом дослідження є зонна структура та енергетичні характеристики напружених наноструктур Ge/Si залежно від їх геометричних параметрів і механічних напружень.

Для досягнення поставленої мети в роботі необхідно було розв'язати такі **завдання:**

- проаналізувати теоретичні основи фізики наноструктур і квантово-розмірних ефектів у низькорозмірних системах;
- розглянути класифікацію наноструктур та особливості густини електронних станів у дво-, одно- та нульвимірних системах;
- дослідити фізичні властивості напівпровідникових гетероструктур і основні типи зонного вирівнювання;
- проаналізувати структурні та електронні особливості гетероструктур Ge/Si;
- дослідити вплив механічних напружень і деформацій на зонну структуру напівпровідників;
- застосувати метод емпіричного псевдопотенціалу для аналізу енергетичних зон деформованих напівпровідникових структур;
- проаналізувати механізми формування квантових точок у системі Ge/Si та їх квантово-розмірні властивості;
- розглянути експериментальні методи дослідження наноструктур і перспективи їх практичного застосування.

РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ НАНОСТРУКТУР ТА КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ ЕФЕКТІВ

1.1. Класифікація наноструктур та фундаментальні квантові явища

На сьогоднішній день спостерігається перехід характерних розмірів елементів електроніки до розмірів, порівнянних з розмірами молекул та атомів. Ці розміри відповідають сотням, десяткам, одиницям нанометрів. Структури з такими розмірами називають наноструктурами. У наноструктурах проявляються хвильові властивості електрона, коли розміри структури стають порівнянними з довжиною хвилі де Бройля вільного електрона [8], [9], [26]. Довжина хвилі де Бройля для частинки з імпульсом p визначається співвідношенням за формолою (1.1) :

$$\lambda = h/p = h/\sqrt{2m^*E} \quad (1.1)$$

де h – стала Планка, m^* – ефективна маса носія заряду, E – енергія частинки [9], [8].

Для типових напівпровідників при кімнатній температурі довжина хвилі де Бройля становить декілька десятків нанометрів. З цього випливає, що поведінка електронів залежить від геометрії структури, коли розміри останньої стають порівнянними з довжиною хвилі де Бройля.

Вільний рух електронів у низькорозмірних структурах має бути обмежений хоча б в одному напрямі. Залежно від кількості напрямків обмеження наноструктури класифікують на двовимірні, одновимірні та нульвимірні системи. Кожен тип структури характеризується специфічним видом густини електронних станів, що принципово впливає на транспортні та оптичні властивості матеріалу. У тривимірних масивних напівпровідниках густина станів є неперервною функцією енергії, тоді як в низькорозмірних структурах вона набуває якісно іншого вигляду.

До двовимірних структур відносять квантові шари або квантові ями. У таких структурах квантове обмеження існує лише в одному напрямі, як правило перпендикулярно до площини шару, а в двох інших напрямках розміри залишаються довільними. Товщина квантової ями зазвичай становить від одного до десятків нанометрів. Електрони в квантових шарах називають двовимірним електронним газом [8], [11]. Для двовимірної системи густина станів є ступінчастою функцією енергії, що пов'язано з дискретизацією енергетичного спектру в напрямку обмеження. Кожна ступінька відповідає окремій підзоні розмірного квантування.

Густина станів для двовимірного електронного газу визначається за формолою (1.2):

$$\rho_2 D(E) = (m^*/(\pi \hbar^2)) \sum_i \Theta(E - E_i) \quad (1.2)$$

де m^* – ефективна маса електрона в площині шару, $\hbar$ – приведена стала Планка, E_i – енергія i -го рівня розмірного квантування, Θ – функція Хевісайда [8], [31].

Такий ступінчастий характер густини станів призводить до особливостей в оптичних спектрах та транспортних властивостях двовимірних систем. Зокрема, спостерігається різке зростання коефіцієнта поглинання на енергіях, що відповідають міжпідзонним переходам.

Енергії рівнів розмірного квантування в прямокутній квантовій ямі шириною L з нескінченно високими бар'єрами визначаються за формолою (1.3):

$$E_n = (\hbar^2 \pi^2 n^2) / (2m^* L^2) \quad (1.3)$$

де $n = 1, 2, 3, \dots$ – квантове число.

З цього виразу видно, що відстань між рівнями обернено пропорційна квадрату ширини ями та ефективній масі носія. Для реальних квантових ям зі скінченною висотою бар'єра розрахунок енергетичних рівнів є більш складним і вимагає розв'язання трансцендентних рівнянь, що впливають з умов неперервності хвильової функції та її похідної на межах ями.

Одновимірні структури представлені квантовими нитками або квантовими дротами. Ці структури обмежені в двох напрямках, а в третьому залишаються довільними. Поперечні розміри квантових ниток зазвичай становлять від декількох до десятків нанометрів. Електронний газ у таких структурах є одновимірним. Густина станів для одновимірної системи має характерні піки, що відповідають окремим одновимірним підзонам. Математично густина станів одновимірного електронного газу описується виразом формула (1.4):

$$\rho_1 D(E) = (1/\pi) \sqrt{(2m^*/\hbar^2)} \sum_i (E - E_i)^{-1/2} \Theta(E - E_i) \quad (1.4)$$

де сумування ведеться по всім одновимірним підзонам.

Характерна особливість одновимірної густини станів – сингулярність типу $(E - E_i)^{-1/2}$ біля дна кожної підзони. Ця особливість призводить до посилення екситонних ефектів та збільшення сили осцилятора оптичних переходів в одновимірних структурах порівняно з двовимірними та тривимірними системами [8], [11].

Нульвимірні структури включають квантові точки, розміри яких обмежені в усіх трьох напрямках дебройлівською довжиною хвилі. Такі структури часто називають штучними атомами через їхній дискретний енергетичний спектр, який подібний до атомного [8], [6]. Типові розміри квантових точок становлять від декількох до десятків нанометрів. Густина станів для нульвимірної системи являє собою набір дельта-функцій формула (1.5):

$$\rho_0 D(E) = \sum_i \delta(E - E_i) \quad (1.5)$$

де δ – дельта-функція Дірака, E_i – дискретні енергетичні рівні квантової точки [8].

Такий повністю дискретний спектр призводить до унікальних оптичних та електронних властивостей квантових точок. Зокрема, спектри поглинання та люмінесценції квантових точок складаються з набору вузьких ліній, положення яких визначається розмірами та формою точки.

Для практичного застосування низькорозмірні структури повинні знаходитися на підкладці і мати контакт з іншими структурами та функціональними елементами. До наноструктур також відносять нанотрубки, фулерени, надгратки, тонкі плівки та дендримери. Нанотрубки являють собою циліндричні структури, утворені згорнутими в трубку графеновими площинами. Вони можуть бути одностінними або багатостінними і демонструють унікальні механічні та електронні властивості [6], [19]. Фулерени є молекулами вуглецю сферичної або еліпсоїдальної форми, найбільш відомим представником яких є C_{60} . Надгратки представляють собою періодичні структури з чергуванням шарів різних матеріалів з періодом порядку декількох нанометрів. Дослідження фізичних явищ у нанорозмірних структурах дозволило створити швидкодіючі прилади твердотільної електроніки з характеристиками, недосяжними для класичних приладів на основі масивних напівпровідників [7], [8].

Поведінку носіїв заряду у нанорозмірних структурах визначають три групи фундаментальних явищ, які є типовими проявами квантово-механічної природи електрона. Перша група явищ пов'язана з балістичним транспортом носіїв заряду. Балістичний транспорт являє собою перенос носіїв заряду без розсіювання. На відміну від класичного дрейфового транспорту, який описується законом Ома, балістичний транспорт визначається фермієвською швидкістю носіїв, а не їх рухливістю. Для реалізації такого транспорту необхідно виключити розсіювання на дефектах кристалу, домішках та фононах [8], [9]. Це вимагає високої чистоти матеріалу та низьких температур або структур з розмірами, меншими за довжину вільного пробігу.

Ефекти, пов'язані з балістичним транспортом, визначаються відношенням між розміром структури L , в якій переносяться носії заряду, і довжиною вільного пробігу l . Коли $L \ll l$, транспорт є повністю балістичним, і провідність визначається квантуванням провідності. Квантова провідність виражається через квант провідності $G_0 = 2e^2/h$, де e – заряд електрона, h – стала Планка [9],

[8]. Для одноканальної квантової точки провідність дорівнює G_0 , для двоканальної – $2G_0$ і так далі. Це явище було експериментально продемонстровано в квантових точкових контактах та вуглецевих нанотрубках.

У металевих наноструктурах дуже важко здійснити балістичний транспорт, оскільки середня довжина вільного пробігу не перевищує десяти нанометрів при кімнатній температурі, що приблизно дорівнює розміру наноструктури. Це пов'язано з інтенсивним розсіюванням електронів на фононах та дефектах кристалічної структури. При зниженні температури довжина вільного пробігу збільшується, оскільки зменшується інтенсивність електрон-фононного розсіювання, і балістичний транспорт стає можливим при гелієвих температурах в достатньо чистих зразках [8], [17].

Транспорт носіїв заряду в напівпровідниках характеризується значно більшою середньою довжиною вільного пробігу електрона. Наприклад, у арсеніді галію середня довжина вільного пробігу електрона становить сто двадцять нанометрів при кімнатній температурі, а при низьких температурах може досягати декількох мікрометрів. Це означає, що в напівпровідниках балістичний транспорт носіїв реалізувати набагато простіше, ніж у металах. В високоякісних гетероструктурах на основі арсеніду галію балістичний транспорт спостерігається при температурах рідкого азоту і навіть при кімнатній температурі в структурах нанометрового масштабу.

Швидкість балістичного транспорту визначається фермієвською швидкістю електронів v_F , яка для типових напівпровідників становить близько 10^8 см/с. Це на порядок більше, ніж дрейфова швидкість насичення в класичному транспорті. Час проходження електроном балістичної ділянки довжиною L визначається як $\tau = L/v_F$. Для структури довжиною сто нанометрів цей час становить близько однієї пікосекунди, що відповідає частоті переключення порядку одного терагерца. Це робить балістичні прилади перспективними для ультрависокочастотної електроніки.

Друга група явищ пов'язана з квантовими обмеженнями. Квантові обмеження являють собою обмеження руху електронів або дірок у низьковимірній структурі, що спричиняє відмінність між мінімальною енергією та дискретністю спектра допустимих значень від нуля. Квантове обмеження відбувається за умови, коли вільний рух хвилі де Бройля електронів в одному з напрямків обмежується потенційними бар'єрами, за допомогою яких формується наноструктура. Це обмеження впливає на перенос носіїв заряду через наноструктуру, а також змінює діапазон допустимих енергетичних рівнів. Замість неперервного енергетичного спектру виникає дискретний набір дозволених енергетичних рівнів, відстань між якими визначається розмірами структури [8], [11].

Фізично квантове обмеження можна розглядати як квантування хвильового вектора в напрямку обмеження. Якщо розмір структури в напрямку z дорівнює L , то дозвалені значення хвильового вектора визначаються умовою формула (1.6):

$$kz = n\pi/L, n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.6)$$

Це призводить до дискретизації енергії в напрямку обмеження, тоді як в інших напрямках зберігається неперервний спектр. Повна енергія носія в квантовій ямі може бути записана як формула (1.7):

$$E(k_x, k_y, n) = E_n + (\hbar^2/2m^*)(k_x^2 + k_y^2) \quad (1.7)$$

де E_n – енергія n -го рівня розмірного квантування, k_x та k_y – компоненти хвильового вектора в площині ями [8], [9].

Таким чином, тривимірний енергетичний спектр розщеплюється на набір двовимірних підзон, кожна з яких характеризується своїм квантовим числом n .

Транспортування носіїв здійснюється як паралельно, так і перпендикулярно потенційним бар'єрам, що демонструє хвильову природу електрона. Під час руху носіїв вздовж потенційних бар'єрів домінуючими ефектами є балістичний транспорт та квантова інтерференція. Квантова інтерференція виникає внаслідок накладання електронних хвиль, що пройшли

різними шляхами через структуру. Цей ефект особливо важливий в мезоскопічних системах, розміри яких є проміжними між атомними та макроскопічними масштабами. Квантова інтерференція призводить до появи осциляцій провідності як функції магнітного поля або енергії Фермі, що спостерігається експериментально.

Проходження носіїв заряду через потенційні бар'єри відбувається виключно через тунелювання, що забезпечує перенесення носіїв з однієї зони нанoeлектронного пристрою в іншу. Тунелювання є принципово квантово-механічним явищем, яке не має класичного аналога. Воно виникає внаслідок того, що хвильова функція частинки експоненціально спадає всередині класично заборонної області, але не обертається в нуль. Якщо товщина бар'єра є достатньо малою, хвильова функція може мати скінченну амплітуду по інший бік бар'єра, що відповідає ненульовій ймовірності проходження частинки [8], [31].

Третя група явищ пов'язана з тунелюванням електронів. Тунелювання електронів через потенційний бар'єр є типовим проявом хвильових властивостей частинок. Тунелювання означає перенесення частинки через область, обмежену потенційним бар'єром, висота якого перевищує енергію частинки. Класична частинка не може подолати такий бар'єр, але квантова частинка має скінченну ймовірність його подолання. Ймовірність тунелювання експоненціально залежить від ширини та висоти бар'єра.

Для прямокутного бар'єра висотою U_0 та шириною d коефіцієнт проходження в ВКБ-наближенні (Вентцеля-Крамерса-Бріллюена) визначається формулою (1.8):

$$T \approx \exp(-2\kappa d) \quad (1.8)$$

де $\kappa = \sqrt{2m^*(U_0 - E)/\hbar^2}$ – показник загасання хвильової функції всередині бар'єра, E – енергія падаючої частинки.

З цього виразу видно, що ймовірність тунелювання експоненціально зменшується зі збільшенням товщини бар'єра та квадратного кореня з різниці

між висотою бар'єра та енергією частинки. Для бар'єрів довільної форми інтеграл в показнику експоненти береться вздовж траєкторії руху частинки через бар'єр.

У низькорозмірних структурах явище тунелювання електрона набуває специфічних особливостей, пов'язаних з дискретністю заряду, що переноситься електроном, і з додатковим квантуванням енергетичних станів, викликаних квантовим обмеженням. Ці особливості найбільш характерні для одноелектронного тунелювання та резонансного тунелювання. Одноелектронне тунелювання спостерігається в системах з малою електричною ємністю, коли енергія кулонівського відштовхування окремого електрона $e^2/2C$ є порівнянною або більшою за теплову енергію kT . Тут C – електрична ємність острівця, e – заряд електрона, k – стала Больцмана, T – температура [8], [31].

В таких системах тунелювання окремих електронів стає енергетично не вигідним через кулонівську блокаду, і для забезпечення струму необхідно прикласти напругу, що перевищує порогове значення $e/2C$. Це явище використовується в одноелектронних транзисторах, де струм контролюється переносом окремих електронів. При температурах, достатньо низьких для спостереження кулонівської блокади, вольт-амперна характеристика такого пристрою демонструє так звану кулонівську сходинку – ділянки з нульовою провідністю, що чергуються з ділянками проходження струму.

Резонансне тунелювання виникає, коли енергія падаючого електрона збігається з одним із дискретних енергетичних рівнів у квантовій ямі, що призводить до різкого збільшення коефіцієнта проходження. Це явище спостерігається в структурах з подвійним бар'єром, де квантова яма розташована між двома тунельними бар'єрами. Коли енергія електрона співпадає з енергією одного з резонансних рівнів у ямі, коефіцієнт проходження наближається до одиниці, незважаючи на наявність двох бар'єрів. Це пов'язано з когерентним резонансним тунелюванням через квазістаціонарні стани в ямі.

Резонансне тунелювання знаходить практичне застосування в резонансно-тунельних діодах та інших квантових приладах [9]. Вольт-амперна характеристика резонансно-тунельного діода має характерну ділянку від'ємного диференціального опору, що виникає внаслідок виходу резонансного рівня із вікна енергій, доступних для тунелювання, при збільшенні прикладеної напруги. Ця особливість використовується для створення високочастотних генераторів та інших нелінійних приладів.

1.2 Гетероструктури: типи, властивості та застосування

Гетероструктурою називають вирощену на підкладці шарувату структуру з різних напівпровідників, які в загальному випадку відрізняються шириною забороненої зони. Гетероперехід являє собою контакт двох матеріалів, різних за своєю хімічною будовою, зокрема напівпровідників [8], [18]. Цей термін використовується на відміну від р-п-переходу, в якому існує контакт між двома областями одного і того ж матеріалу з різними типами легування. Основною перевагою гетероструктур є можливість незалежного управління електричними, оптичними та структурними властивостями різних шарів. Це дозволяє створювати пристрої з характеристиками, недосяжними для гомоструктур [8], [9], [26].

Залежно від взаємного розташування зон провідності та валентних зон контактуючих напівпровідників розрізняють три типи гетеропереходів. Перший тип характеризується тим, що обидві зони одного матеріалу повністю вміщуються в заборонену зону іншого. Такий тип вирівнювання характерний для систем на основі арсеніду галію та алюмінію-галієвих сполук. У цьому випадку носії обох типів локалізуються в одному матеріалі, що робить такі структури оптимальними для світловипромінюючих приладів [8], [17], [26].

Другий тип гетеропереходів характеризується частковим перекриттям зон провідності та валентних зон двох матеріалів, при цьому мінімум зони

провідності одного матеріалу знаходиться нижче мінімуму зони провідності іншого. В такій конфігурації електрони та дірки просторово розділені між різними шарами. Прикладом такої системи є гетероструктура германій-кремній. Третій тип гетеропереходів характеризується тим, що зона провідності одного матеріалу знаходиться нижче валентної зони іншого [17], [18]. Такий тип використовується рідко через складність реалізації та обмежені можливості застосування (рис 1.1).

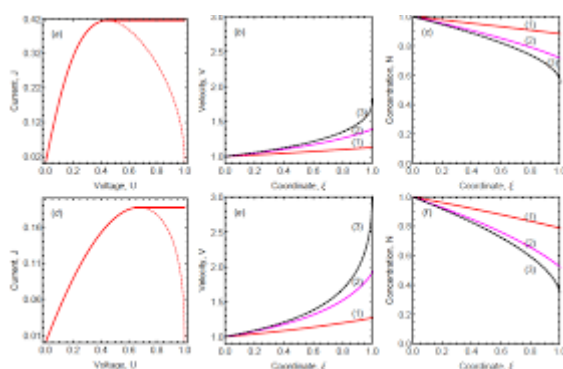


Рис 1.1 – Діаграми зонного вирівнювання для гетероструктур різних типів

Важливим класом приладів на основі гетероструктур є польові транзистори з селективним легуванням. Ці транзистори на основі з'єднань третьої та п'ятої груп періодичної системи здатні працювати на високих частотах і мають найкращі шумові характеристики в ультрависокочастотному діапазоні. У польовому транзисторі струм змінюється завдяки електричному полю, прикладеному перпендикулярно напрямку струму. Збільшення швидкодії польових транзисторів вимагає як високої електропровідності каналу, так і високої рухливості носіїв у каналі. Однак збільшення ступеня легування напівпровідника призводить до зменшення рухливості носіїв заряду внаслідок розсіювання на іонізованих домішках [18], [17].

Подолати цю суперечність стало можливим у гетероструктурних польових транзисторах. Транзистори такого типу характеризуються високими технологічними характеристиками, особливо високою швидкодією, що

досягається завдяки квантовим ефектам електронів у нанометрових потенційних ямах [9]. Структура таких транзисторів включає шар слабо легovanого напівпровідника на напівізоляційній підкладці, поверх якого знаходиться шар сильно легovanого широкозонного напівпровідника (рис 1.2).

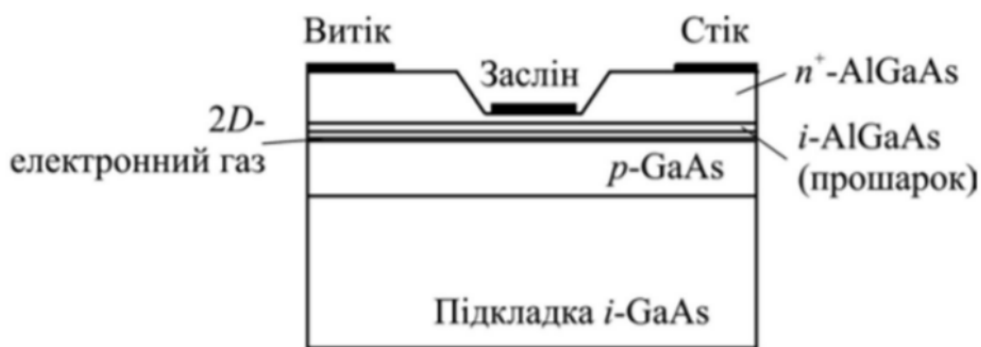


Рисунок 1.2 – Структура польового гетеротранзистора із селективним легуванням

Гетероперехід утворюється між широкозонним та вузькозонним напівпровідниками. За цих умов електрони сильно легovanого широкозонного матеріалу переходять у вузькозонний напівпровідник, в результаті чого виникає внутрішнє електричне поле. Це поле призводить до викривлення енергетичних рівнів та розриву дна зони провідності. Після переходу електронів вони потрапляють у потенційну яму і утворюють провідний канал. Рух електронів у цьому каналі має двовимірний характер, він є вільним вздовж каналу і обмеженим поперек каналу через те, що ширина потенційної ями становить всього кілька нанометрів.

Головна особливість цієї гетероструктури полягає в тому, що двовимірний електронний газ міститься у майже власному напівпровіднику і є просторово віддаленим від іонізованих донорів у легovanому шарі. З цього випливає, що електрони, які рухаються вздовж каналу, не розсіюються на домішках, а рухливість значно перевищує рухливість електронів у каналі звичайного транзистора [8], [11]. Для подальшого послаблення розсіювання в

структурі гетеропереходу утворюють тонкий нелегований шар, розташований між сильно легованим широкозонним напівпровідником і нелегованим вузькозонним напівпровідником. При збільшенні товщини нелегованого шару відбувається лінійне збільшення рухливості електронів у двовимірному газі в слабких електричних полях. Експериментально встановлено, що оптимальна товщина нелегованого шару становить два-три нанометри.

Інтерес до з'єднань третьої та п'ятої груп періодичної системи виник у середині двадцятого століття, коли були виявлені напівпровідникові властивості цих сполук. Дані з'єднання надають більш широкий вибір основних напівпровідникових параметрів, таких як ширина забороненої зони та рухливість носіїв заряду, порівняно з елементарними напівпровідниками четвертої групи. Поява іонної компоненти зв'язку в цих сполуках призвела до більших значень температури плавлення і ширини забороненої зони порівняно з ковалентним зв'язком у напівпровідниках четвертої групи [8], [26].

Особливий інтерес до таких з'єднань обумовлений потребами оптоелектроніки у високошвидкісних малогабаритних джерелах та приймачах випромінювання. На базі цих матеріалів створюються напівпровідникові лазери, світлодіоди, фотодетектори, фотокатоди, фотоелектронні множники, тунельні діоди, польові транзистори та генератори надвисокочастотних коливань [20], [22]да. Важливою властивістю багатьох матеріалів цього типу є висока ефективність випромінювальної рекомбінації нерівноважних носіїв. До напівпровідникових матеріалів цього класу відносяться сполуки бору, алюмінію, галію і індію з азотом, фосфором, миш'яком і сурмою. Вони кристалізуються, за винятком нітридів, у решітці типу сфалериту, тому відносяться до алмазоподібних структур [18], [21], [23].

1.3. Система Ge/Si: структурні особливості та перспективи застосування

Германій є напівпровідником з непрямою забороненою зоною шириною приблизно нуль цілих шістдесят шість електрон-вольт при кімнатній температурі. Завдяки вищій, порівняно з кремнієм, рухливості носіїв заряду, як електронів так і дірок, германій розглядається як привабливий матеріал для використання в швидкодіючих електронних та оптоелектронних пристроях [9], [26], [1]. Постійна ґратки германію становить п'ять цілих шістсот п'ятдесят вісім ангстрем, тоді як постійна ґратки кремнію дорівнює п'ять цілих чотириста тридцять один ангстрем. Невідповідність параметрів кристалічних ґраток цих двох матеріалів складає приблизно чотири цілих дві десятих відсотка [1], [26].

При формуванні гетероструктур германій-кремній виникає механічне напруження через невідповідність параметрів ґратки. Це напруження відіграє ключову роль у формуванні наноструктур і визначає їхні фізичні властивості. Невідповідність параметрів кристалічних ґраток германію і кремнію призводить до виникнення пружних напружень у плівці германію, вирощеній на кремнієвій підкладці. При досягненні критичної товщини, яка для чистого германію на кремнії становить три-чотири моношари, енергетично вигіднішим стає перехід від двовимірного пошарового росту до тривимірного острівцевого росту [5], [14], [13].

Цей процес відбувається за механізмом Странського-Крастанова. Спочатку відбувається змочування поверхні кремнію тонким шаром германію, який називають змочувальним шаром. Після досягнення критичної товщини утворюються тривимірні острівці германію. Острівці зростають, частково релаксуючи пружні напруження, що призводить до формування системи квантових точок [15], [16]. Рушійною силою утворення острівців є зменшення вільної енергії системи за рахунок пружної релаксації напружень у вершинах острівців. Хоча утворення додаткової поверхні вимагає енергетичних витрат, загальний енергетичний баланс виявляється вигідним для тривимірного росту.

Для гетероструктури германій-кремній характерне зонне вирівнювання другого типу. Зона провідності германію розташована нижче, ніж у кремнії,

тоді як валентна зона германію знаходиться вище, ніж у кремнії, приблизно на половину електрон-вольта (рис. 1.3) [18], [10]. Наслідком такого вирівнювання є утворення потенціальної ями для дірок у германії, що сприяє їх накопиченню в цьому шарі. Електрони, навпаки, не утримуються в германії, оскільки зона провідності кремнію є нижчою [10], [24]. Це призводить до формування двовимірного газу дірок, що є важливим для роботи транзисторів та сенсорів.

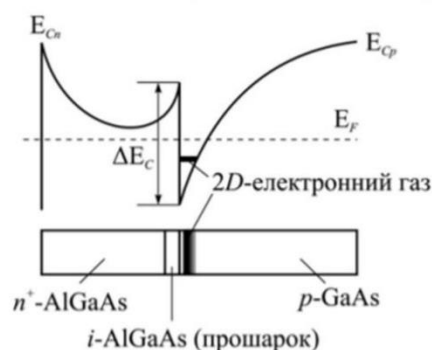


Рисунок 1.3 – Зонна діаграма польового гетеротранзистора із селективним легуванням

Механічні напруження в гетероструктурі призводять до додаткових змін зонної структури. Відбувається зміщення мінімумів зон провідності та максимумів валентної зони, зняття виродження валентної зони, а також можливий перехід від непрямої до квазіпрямої забороненої зони в германії. Ці ефекти критично важливі для оптоелектронних застосувань, оскільки можуть значно підвищити ефективність світловипромінювання [5], [13], [14].

Система германій-кремній має низку важливих переваг для практичних застосувань. По-перше, це сумісність з кремнієвою технологією. Можливість інтеграції з існуючою технологією комплементарних структур метал-оксид-напівпровідник є критично важливою для масового виробництва. Це дозволяє об'єднати переваги кремнію, такі як зрілість технології та низька вартість, з перевагами германію, такими як висока рухливість носіїв та оптичні властивості.

По-друге, система германій-кремній дозволяє керувати властивостями через напруження. Змінюючи склад твердого розчину у підкладці або буферному шарі, можна керувати величиною напружень i , відповідно, електронними властивостями структури. По-третє, механізм Странського-Крастанова дозволяє отримувати бездефектні квантові точки без використання складних літографічних процесів, що є проявом самоорганізації наноструктур. По-четверте, гетероструктури германій-кремній мають широкий діапазон застосувань, від високошвидкісної електроніки до оптоелектроніки та термоелектричних перетворювачів [3], [4].

Гетероструктури германій-кремній знаходять застосування в різних галузях мікроелектроніки. У високошвидкісній електроніці вони використовуються для створення гетеробіполярних транзисторів, польових транзисторів з високою рухливістю та модуляційно-легованих структур. В оптоелектроніці ці структури застосовуються для виготовлення фотодетекторів для ближнього інфрачервоного діапазону, потенційних джерел випромінювання на кремнієвій платформі та елементів інтегральної фотоніки. В термоелектриці гетероструктури германій-кремній використовуються для створення термоелектричних генераторів та елементів Патьє. У сенсоріці ці структури застосовуються для виготовлення високочутливих детекторів випромінювання та біосенсорів.

Подальший розвиток технології наноструктур на основі германію та кремнію може призвести до створення повністю інтегрованих оптоелектронних систем на кремнієвій платформі [15], [16], [6]. Це стане революцією в кремнієвій мікроелектроніці, оскільки дозволить об'єднати електронні та фотонні функції на одному чіпі. Такі інтегровані системи знайдуть застосування в високошвидкісних комунікаціях, обчисленнях з використанням фотонних компонентів, сенсорних мережах та інших перспективних напрямках розвитку мікроелектронної техніки.

РОЗДІЛ 2 ЗОНИ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СТРУКТУР ДЛЯ ОБ'ЄМНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ

2.1 Кристалічна структура з двовісним деформаційним напруженням

Ми використовуємо структуру алмазу, яку можна виразити у вигляді набору примітивних векторів перенесення $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ та $\vec{a}_3$, і, як правило, вибір цих примітивних векторів не є однозначним [9], [26], [32]. Ми беремо примітивні вектори для об'ємного матеріалу без деформації як формула (2.1)

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a_0(\hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2}a_0(\hat{x} + \hat{z}), \quad \vec{a}_3 = \frac{1}{2}a_0(\hat{x} + \hat{y}), \quad (2.1)$$

де a_0 — постійна решітки ненапруженого матеріалу.

Об'єм елементарної клітинки стає формула (2.2)

$$\Omega = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3| = \frac{1}{4}a_0^3 \quad (2.2)$$

а примітивні вектори перетворення решітки, взаємні до об'ємної fcc, можуть бути виражені як формула (2.3)

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a_0}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \quad (2.3)$$

Таким чином, взаємний вектор решітки буде набором формула (2.2):

$$\vec{G} = l_1\vec{b}_1 + l_2\vec{b}_2 + l_3\vec{b}_3 \quad (l_1, l_2, l_3 = 0, 1, 2 \dots) \quad (2.4)$$

Розглянемо, наприклад, двовісну деформацію структури fcc на межі (001).

Тоді ми можемо взяти вектори примітивної решітки як формула (2.5)

$$\vec{a}_1 = a_0(1 + \epsilon_{\parallel})\hat{x}, \quad \vec{a}_2 = a_0(1 + \epsilon_{\parallel})\hat{y}, \quad \vec{a}_3 = a_0(1 + \epsilon_{\perp})\hat{z} \quad (2.5)$$

де $\epsilon_{\parallel}$ і $\epsilon_{\perp}$ є компонентами деформації, паралельними та перпендикулярними до межі розділу, відповідно, а лінійна залежність між $\epsilon_{\parallel}$ і $\epsilon_{\perp}$ є такою (2.6):

$$\epsilon_{\perp} = -D_{001}^{bi}\epsilon_{\parallel}, \quad D_{001}^{bi} = 2C_{12}/C_{11} \quad (2.6)$$

Об'єм напруженої примітивної клітини буде дорівнювати (2.7):

$$\Omega = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3| = \frac{a_0^3}{4} (1 + \epsilon_{\parallel})^2 (1 + \epsilon_{\perp}) \quad (2.7)$$

і, таким чином, примітивні вектори перетворення взаємної решітки можна записати у вигляді (2.8):

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{a_0} \left[-\frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} \right] \hat{x} + \frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} \hat{y} + \frac{1}{1 + \epsilon_{\perp}} \hat{z} \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{a_0} \left[-\frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} \right] \hat{x} + \frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} \hat{y} + \frac{1}{1 + \epsilon_{\perp}} \hat{z} \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{2\pi}{a_0} \left[-\frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} \right] \hat{x} + \frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} \hat{y} + \frac{1}{1 + \epsilon_{\perp}} \hat{z} \end{aligned} \quad (2.8)$$

У випадку одноосного деформації [001] ми можемо взяти ті самі примітивні вектори решітки, що і в рівнянні 2.5, що призведе до тих самих обернених векторів решітки, що і в рівнянні 2.8. [14], [13], [32] Аналогічно, ми можемо взяти примітивні вектори для деформації інтерфейсу (110) як (2.9)

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a_0}{2} \left[-\left(\frac{\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}}{2}\right) \hat{x} + \left(1 + \frac{\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}}{2}\right) \hat{y} + (1 + \epsilon_{\parallel}) \hat{z} \right] \\ \vec{a}_2 &= \frac{a_0}{2} \left[\left(1 + \frac{\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}}{2}\right) \hat{x} - \left(\frac{\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}}{2}\right) \hat{y} + (1 + \epsilon_{\parallel}) \hat{z} \right] \\ \vec{a}_3 &= \frac{a_0}{2} (1 + \epsilon_{\perp}) (\hat{x} + \hat{y}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

а для напруги на межі розділу (111) (2.10):

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a_0}{2} \left[\frac{2}{3} (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \hat{x} + \left\{ 1 + \frac{1}{3} (2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}) \right\} \hat{y} + \left\{ 1 + \frac{1}{3} (2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}) \right\} \hat{z} \right] \\ \vec{a}_2 &= \frac{a_0}{2} \left[\left\{ 1 + \frac{1}{3} (2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}) \right\} \hat{x} + \frac{2}{3} (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \hat{y} + \left\{ 1 + \frac{1}{3} (2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}) \right\} \hat{z} \right] \\ \vec{a}_3 &= \frac{a_0}{2} \left[\left\{ 1 + \frac{1}{3} (2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}) \right\} \hat{x} + \left\{ 1 + \frac{1}{3} (2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}) \right\} \hat{y} + \frac{2}{3} (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \hat{z} \right] \end{aligned} \quad (2.10)$$

Таким чином, взаємні вектори решітки для деформації площин (110) і (111) стають такими (2.11):

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a_0} \frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a_0} \frac{1}{1 + \epsilon_{\parallel}} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \end{aligned}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0} \left(\frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} \hat{x} + \frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} \hat{y} - \frac{1}{1+\epsilon_{\parallel}} \hat{z} \right) \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a_0} \frac{1}{3} \left[- \left(\frac{4}{1+\epsilon_{\parallel}} - \frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} \right) \hat{x} + \left(\frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} + \frac{2}{1+\epsilon_{\parallel}} \right) \hat{y} + \left(\frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} + \frac{2}{1+\epsilon_{\parallel}} \right) \hat{z} \right] \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a_0} \frac{1}{3} \left[\left(\frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} + \frac{2}{1+\epsilon_{\parallel}} \right) \hat{x} - \left(\frac{4}{1+\epsilon_{\parallel}} - \frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} \right) \hat{y} + \left(\frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} + \frac{2}{1+\epsilon_{\parallel}} \right) \hat{z} \right] \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a_0} \frac{1}{3} \left[\left(\frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} + \frac{2}{1+\epsilon_{\parallel}} \right) \hat{x} + \left(\frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} + \frac{2}{1+\epsilon_{\parallel}} \right) \hat{y} - \left(\frac{4}{1+\epsilon_{\parallel}} - \frac{1}{1+\epsilon_{\perp}} \right) \hat{z} \right] \end{aligned} \quad (2.12)$$

Окрім спотворення кристалічної структури внаслідок деформації, слід враховувати додаткове зміщення кожного атома в елементарній комірці [14], [32]. Нові позиції атома в елементарній комірці визначаються за формулою (2.13),

$$\begin{aligned} \vec{\tau}_{(001)} &= [1 + e_{(001)}] \vec{\tau} \\ \vec{\tau}_{(110)} &= [1 + e_{(110)}] \vec{\tau} - \frac{a_0}{2} e_{xy,(110)} \zeta \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \vec{\tau}_{(111)} &= [1 + e_{(111)}] \vec{\tau} - \frac{a_0}{2} e_{xy,(111)} \zeta \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.13)$$

де 1 — одиничний тензор, ζ — параметр внутрішнього переміщення, отриманий за допомогою теоретичного розрахунку.

2.2 Локальна інтерполяція псевдопотенціалу

Як ми вже обговорювали в розділі 3, нам потрібно лише кілька локальних форм-факторів, щоб отримати дані, порівнянні з експериментальними для об'ємних напівпровідників. Всі необхідні параметри, включаючи локальні форми-фактори для нелокального розрахунку ЕРМ зі спіно-орбітальним взаємодією, наведені в таблицях 2.1, 2.2 і 2.3. Однак локальні форми фактори тільки при дискретних значеннях величини нерозтягнутого оберненого вектора решітки, $q = |\vec{G} - \vec{G}'| = \sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{8}, \sqrt{11}$ (в одиницях $2\pi/a_0$) є недостатніми при застосуванні деформації. Тому ми повинні застосувати інтерполяцію, щоб

отримати значення $V(q)$ форм-фактора при довільних значеннях q . Було запропоновано кілька різних схем інтерполяції для приведення у відповідність з експериментальними даними, такими як структура зон, ефективні маси та потенціали деформації [12], [8]. Застосували кубічну сплайн-інтерполяцію форм-факторів, припустивши також, що $V(q=0) = -2E_F/3$ і $V(q=3k_F) = 0$, де E_F і k_F – енергія Фермі вільних електронів і хвильовий вектор. Фішетті та ін. і Фрідель та ін. використовували вираз у вигляді в якому введено термін « $\tanh$ » для відсікання псевдопотенціалу на коротких хвилях ($q \rightarrow \infty$)

Таблиця 2.1. Параметри матеріалів, використані в цій роботі.

Кількість	Символ	Одиниця	Si	Ge
константа решітки	a_0		5.431	5.658
еластичні константи	C_{11}	10^{11} дин см^{-2}	16.577	12.853
	C_{12}	10^{11} дин см^{-2}	6.393	4.862
	C_{44}	10^{11} дин см^{-2}	7.962	6.680
енергія відсічення	E_{cut}	Ry	10	10
внутрішнє переміщення	ζ	-	0.45	0.51

Таблиця 2.2. Нелокальні та спин-орбітальні параметри ЕРМ. Надрядкові символи cat та anі позначають катіон та аніон у III-V.

Кількість	Символ	Одиниця	Si^a	Ge^a
глибина s-well	α_0^{cat}	Ry	0.55	0.0
	α_0^{ani}			
енергетична залежність s-well	β_0^{cat}	-	0.32	0.0
	β_0^{ani}			
глибина d-well	A_2^{cat}	Ry	0.0	0.295
	A_2^{ani}			
радіус ^b s-well	R_0^{cat}	$\text{\AA}$	1.06	0.0
	R_0^{ani}			
радіус ^c s-well	R_2^{cat}	$\text{\AA}$	0.0	1.22
	R_2^{ani}			
спін-орбіта	α	-	1.0	1.0
	μ	-	0.000214	0.002383

Таблиця 2.3. Емпіричні параметри локального псевдопотенціалу. Форм-фактори для Si, Ge та III-Vs скориговані відповідно до експериментальних зазорів енергійних зон

Кількість	Символ	Одиниця	Si	Ge
локальний форм-фактор	$V_{\sqrt{3}}^s$	Ry	-0.263	-0.236
	$V_{\sqrt{8}}^s$	Ry	-0.040	0.019
	$V_{\sqrt{11}}^s$	Ry	0.033	0.056
	$V_{\sqrt{3}}^a$	Ry	-	-
	$V_{\sqrt{4}}^a$	Ry	-	-
	$V_{\sqrt{11}}^a$	Ry	-	-
параметри кубічної сплайн-	$S_{\sqrt{3}}^s$	-	0.4	0.4
	$S_{\sqrt{8}}^s$	-	0.1	0.09
	$S_{\sqrt{11}}^s$	-	0.1	0.09

інтерполяції	$S_{\sqrt{3}}^a$	-	-	-
	$S_{\sqrt{4}}^s$	-	-	-
	$S_{\sqrt{11}}^s$	-	-	-
	a_5	a.u.	5.0	4.5
	a_6	a.u.	0.3	0.3
	$V^s(0)$	Ry	-1.113	-1.100
	$V^a(0)$	Ry	-	-

Поведінка локального псевдопотенціалу $V(q=0)$ при довгих хвилях, яка визначає акустичні деформаційні потенціали та роботу виходу з вакууму, була обговорена в декількох дослідженнях. Allen et. al. екстраполювали його до $V(q=0) = -2E_F/3$, що є значеннями «потенціалу моделі Гейне-Абаренкова-Анімалу» на поверхні Фермі, і зазначили, що вибір $V(q=0)$ не є унікальним, за винятком металів з майже вільними електронами. На відміну від цього, Беднарек та ін. продемонстрували кращу узгодженість з експериментальними даними щодо коефіцієнта поглинання Si, використовуючи $V(q=0) = 0$, що різко контрастує з пропозиціями. У нашому контексті навіть велика, але все ще реалістична деформація не може дослідити поведінку малого q , про яку йшлося вище. Таким чином, наші результати в основному нечутливі до цього питання. Проте, загалом емпіричні псевдопотенціали можуть також використовуватися в розрахунках суперклітин, що стосуються, наприклад, структури зон тонких гомо- та гетерошарів, квантових дротів та квантових точок. У цьому випадку також потрібна явна форма $V(q)$ при малих q , і ці значення повинно давати правильну роботу виходу та зсув зони [8], [29]. У попередніх дослідженнях напівпровідників груп IV та III-V група Зунгера використовувала єдиний гаусівський або лінійну комбінацію чотирьох гаусівських розподілів для вираження $V(q)$ з параметрами, обраними таким чином, щоб отримати експериментально спостережувану об'ємну структуру зон, ефективні маси та роботи виходу

Тому, щоб надати нашим емпіричним псевдопотенціалам більш загальний діапазон застосування, ми вирішили розглянути поведінку при малих значеннях q , щоб отримати правильну роботу виходу та вирівнювання зон. Параметри $V(q=0)$, які ми використовували, наведені в таблиці 2.3 і були отримані з посилання [8] для GaAs та з підгонок до відомих зміщень валентної зони, що відносяться до GaAs.

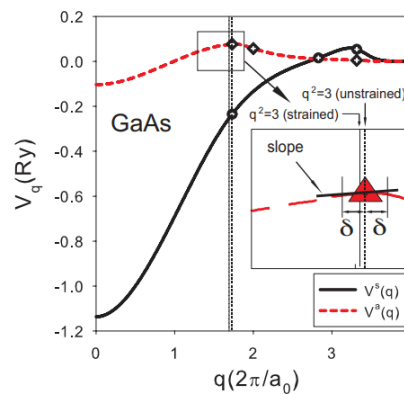


Рис. 2.1. Симетричний (суцільна лінія) та антисиметричний (пунктирна лінія) локальний псевдопотенціал для GaAs, отриманий за допомогою кубічної сплайн-інтерполяції з швидким відсіканням при великих значеннях q , де символи позначають локальні форми фактори при $q = \sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{8}, \sqrt{11}$ (в одиницях $2\pi/a_0$), наведених у таблиці 2.3. $V^{s,a}(q=0)$ посиляється на [8], які підігнані до експериментальної роботи виходу [3].

Крім того, ми використовуємо кубічну сплайн-інтерполяцію, яка дозволяє нам вільно регулювати нахили кривої при заданому q за допомогою q -залежного локального псевдопотенціалу, що виражається як формула (2.14):

$$V(q) = V(q)_{\text{cubic}} \times \left[\frac{1}{2} \tanh \left\{ \frac{a_5 - q^2}{a_6} \right\} + \frac{1}{2} \right] \quad (2.14)$$

де $V(q)_{\text{cubic}}$ є кубічною сплайн-інтерполяцією локальних форм-факторів, а частина « $\tanh$ » призначена для швидкого відсікання при великих $q (> 3k_F)$.

Для кубічної сплайн-інтерполяції $V(q)_{\text{cubic}}$ ми використовуємо одинадцять вхідних даних для симетричних і антисиметричних компонентів,

$V^s(q)_{\text{cubic}}$ і $V^a(q)_{\text{cubic}}$, відповідно. Три формули факторів повинні бути скориговані при $q = \sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{8}, \sqrt{11}$, ще одна для $V(q = 0)$ разом з обмеженням $V(3k_F) = 0$ для обох, $V^s(q)_{\text{cubic}}$ і $V^a(q)_{\text{cubic}}$. Крім того, нахил кривої (емпіричний параметр, який визначає, серед інших властивостей, зміну зазору з деформацією) вводиться, як показано на вставці на рис. 2.1, де дві сусідні точки при q визначаються при $\pm\delta = 0,01$ [4]. На рис. 2.1 показано нашу інтерполяцію симетричних ($V^s(q)$) та антисиметричних ($V^a(q)$) локальних псевдопотенціалів для GaAs з використанням співвідношень $V^s(q) = (V_{\text{Ga}}(q) + V_{\text{As}}(q))/2$ та $V^a(q) = (V_{\text{Ga}}(q) - V_{\text{As}}(q))/2$, де іонні потенціали для $V_{\text{Ga}}(q)$ та $V_{\text{As}}(q)$ при $q = 0$ відповідають даним [8]. Як зазначено вище, поведінка $V(q)$ на довгих хвилях (мале q) не є важливою в нашому контексті, оскільки зміна q внаслідок деформації при $q = \sqrt{3}$, наприклад, є дуже малим навіть при максимальному значенні деформації (5% розтягування), яке ми тут розглядали. У таблиці 2.3 ми наводимо фактори форми, що відповідають експериментальним зазорам у розслаблених матеріалах, та нахили кубічної сплайн-інтерполяції локальних псевдопотенціалів, що відповідають потенціалам деформації, отриманим з розрахунку зміни енергії залежно від деформації. Як ми бачимо в таблиці 2.4, значення зазору в різних точках симетрії в k -просторі добре узгоджуються з експериментальними даними, що дає нам впевненість у правильності отриманих форм факторів та схеми інтерполяції

Модуляція забороненої зони як функція деформації чітко простежується на рис. 2.2, де показано відносні зсуви енергії в різних точках симетрії в k -просторі як функція деформації вздовж інтерфейсів (001), (110) і (111), де двовісна деформація в площині $\epsilon_{\parallel}$ варіюється від 5% стискання до 5% розтягування. Ми бачимо, що три верхні валентні смуги (важка, легка та відокремлена дірка) розщеплюються у всіх напрямках деформації. Для провідних смуг мінімальне розщеплення Δ спостерігається у деформаціях (100) та (110), але не у (111). З іншого боку, розщеплення $L_{6,c}$ можна спостерігати як у (111), так і в (110), але не в (001) деформації. Це розщеплення енергетичних

зон викликане порушенням симетрії 1-ї BZ внаслідок деформації і може бути кількісно оцінене за допомогою потенціалів деформації, які можна безпосередньо витягти з наших розрахунків структури зон.

Таблиця 2.4. Структура зон без деформації для Si, Ge та III-Vs. E_{gap} розраховується від нижньої межі зони провідності до верхньої межі валентної зони. Для Si та Ge це непрямий проміжок, де мінімуми зони провідності розташовані вздовж Δ та L, відповідно. $E_g^{\Gamma_c-\Gamma_v}$, $E_g^{X_c-\Gamma_v}$ і $E_g^{L_c-\Gamma_v}$ є проміжком між першою зоною провідності в точках Γ , X та L відповідно та вершиною валентної зони. Для III-Vs, E_{gap} еквівалентний $E_g^{\Gamma_c-\Gamma_v}$, що показує прямий проміжок. Δ_{so} є спин-орбітальним розщепленням, а всі одиниці виміру є еВ.

Сполука	E_{gap}	$E_g^{\Gamma_c-\Gamma_v}$	$E_g^{X_c-\Gamma_v}$	$E_g^{L_c-\Gamma_v}$
Si	1.6 1.14 ^b , 1.17 ^c	3.46 3.5 ^a , 3.43 ^c	1.3 1.12 ^a	2.3 2.29 ^a , 2.33 ^c
Ge	0.794 0.744 ^a , 0.79 ^b	0.923 0.928 ^b , 0.9 ^c	0.178 1.16 ^c	- -
GaAs	1.518 1.52 ^d , 1.519 ^e	- -	2.003 2.03 ^a , 2.35 ^b	1.812 1.82 ^a , 1.815 ^e
GaSb	0.812 0.811 ^a , 0.812 ^e	- -	1.152 1.72 ^a , 1.41 ^e	0.912 1.22 ^a , 0.875 ^e
InAs	0.416 0.418 ^a , 0.417 ^e	- -	1.477 1.433 ^e , 1.37 ^f	1.14 1.13 ^e , 1.07 ^f
InSb	0.234 0.235 ^d , 0.235 ^e	- -	1/632 1.63 ^e , 1.63 ^f	0.97 0.93 ^e , 1.0 ^g
InP	1.425 1.42 ^d , 1.4236 ^e	- -	2/252 2.38 ^e , 2.21 ^f	1.931 2.01 ^e , 1.95 ^g

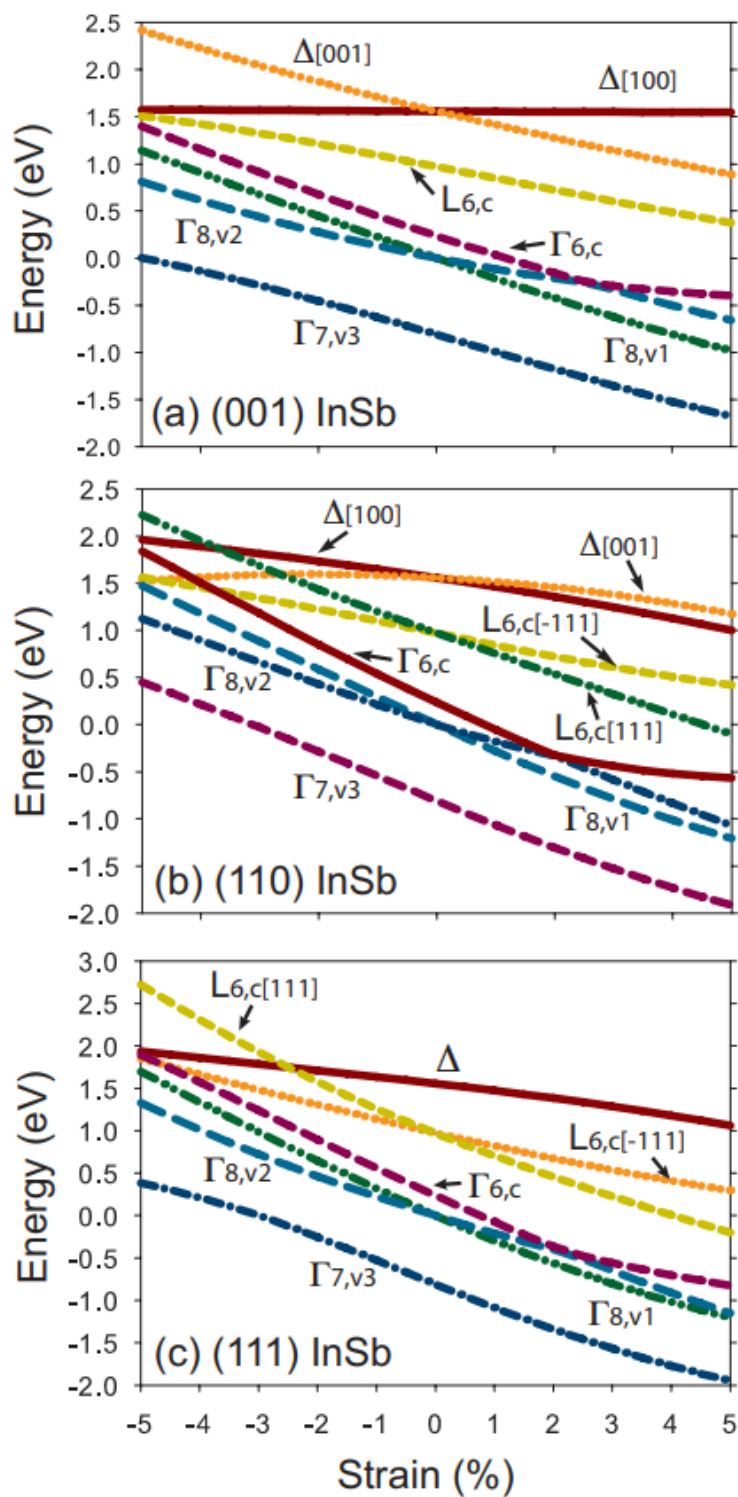


Рис. 2.2. Розраховані відносні зсуви екстремумів смуги для InSb у різних точках симетрії, спричинені двовісною деформацією на площинах (001), (110) і (111). Енергетична шкала фіксується шляхом довільного встановлення верхньої межі валентної смуги на нуль при нульовій деформації.

2.3 Віртуальне кристалічне наближення

Одним з найпростіших підходів, що застосовується для обчислення електронної структури зон неупорядкованих напівпровідникових сплавів в рамках ЕРМ, є наближення віртуального кристала (VCA), яке широко використовувалося раніше. У схемі VCA можна уявити безладний сплав як наближений до впорядкованого кристала, в якому один іон є «віртуальним» іоном, що є результатом лінійної інтерполяції псевдопотенціалів і параметрів двох легуючих іонів. Безладність зрештою буде врахована як збурення, що впливає на електронний транспорт через розсіювання сплаву. Однак було відомо, що VCA дає вигин забороненої зони, що не узгоджувалося з експериментальними спостереженнями. Запропонували просту схему псевдопотенціалу, яка включає ефект безладності складу шляхом введення ефективного потенціалу безладності з регульованим параметром. Однак ефекти, зумовлені атомним об'ємом Ω у, можна об'єднати в єдиний параметр підгонки P^{loc} , що дає наступне досить просте вираження для локального псевдопотенціалу (2.16):

$$V^{loc}(q) = xV_{AC}^{loc}(q) + (1 - x)V_{AC}^{loc}(q) - P^{loc}[x(1 - x)](\lambda_{AC}^s - \lambda_{BC}^s), \quad (2.16)$$

де P^{so} є ще одним емпіричним параметром.

Навпаки, ми використовуємо VCA без введення будь-яких емпіричних параметрів P^{nloc} для нелокальних потенціалів. Натомість ми лінійно інтерполюємо іонні параметри (включаючи еластичні константи) (2.17):

$$\alpha_{0,cat} = x\alpha_{0,A(AC)} + (1 - x)\alpha_{0,B(BC)} \quad (2.17)$$

де $\alpha_{0,cat}$ — глибина s-ямки для «віртуального» катіона. Ми віддаємо перевагу цій стратегії, оскільки створені таким чином віртуальні атоми успадковують свої атомні властивості, такі як радіус ямки, як від (AC), так і від (BC) [29].

Застосовуючи цей підхід, ми можемо отримати більшу гнучкість в емпіричному плані для трикомпонентних сплавів, щоб привести результати структури зон до відомих експериментальних даних. На рис. 2.3 показано зсуви екстремумів зон у різних точках симетрії в першій BZ розслаблених $In_xGa_{1-x}As$ і $In_xGa_{1-x}Sb$ з використанням $P^{loc} = -0,405$ та $-0,6$, а $P^{so} = 2,1$ і $-1,5$ відповідно, коли мольна частка In x змінюється від 0 (GaAs і GaSb) до 1 (InAs і InSb). Показано, що важкі ($\Gamma_{8,v1}$) і легкі ($\Gamma_{8,v2}$) діркові зони вироджуються в усьому діапазоні x . Крім того, екстремуми смуг змінюються нелінійно, викликаючи ефект вигину забороненої зони. Це чітко показано на рис. 2.4 для прямої забороненої зони при Γ як функції x для $In_xGa_{1-x}As$ і $In_xGa_{1-x}Sb$, де ми порівнюємо наші теоретичні результати з експериментальними даними, наведеними в [9] та посиланнях у ньому. На рис. 2.4 вигин енергетичної щілини від «ЕРМ (0K)», отриманий з наших розрахунків, добре узгоджується з експериментальними даними. Крім того, дані «ЕРМ (300K)», отримані з «ЕРМ (0K)» з використанням температурної залежності $E_g(T)$ з посилання, показують ще кращу кількісну узгодженість. На Рис. 2.5 ми показуємо різні тенденції вигину забороненої зони, такі як $E_g(X)$, $E_g(L)$ і $E_g(sp)$, а також $E_g(\Gamma)$ як функцію x [27].

Щоб відтворити правильну ширину забороненої зони при довільному x , нам потрібно кількісно оцінити ефекти вигину забороненої зони за допомогою так званого рівняння вигину, яке зазвичай виражається як квадратичний многочлен, де коефіцієнт квадратичного члена називається

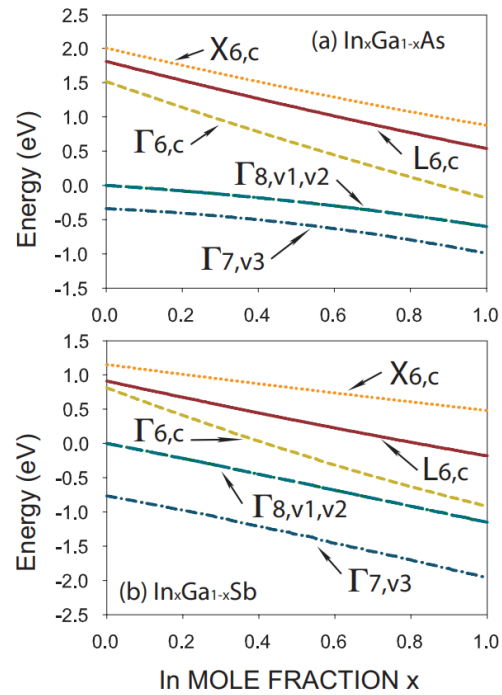


Рис. 2.3. Відносні зсуви енергії екстремумів енергетичних зон розслаблених (а) $In_xGa_{1-x}As$ і $In_xGa_{1-x}Sb$ як функція мольної частки In x , де верх валентної зони доволіно встановлений на нуль при $x = 0$. Зони важких дірок ($\Gamma_{8,v1}$) і легких дірок ($\Gamma_{8,v2}$) є виродженими.

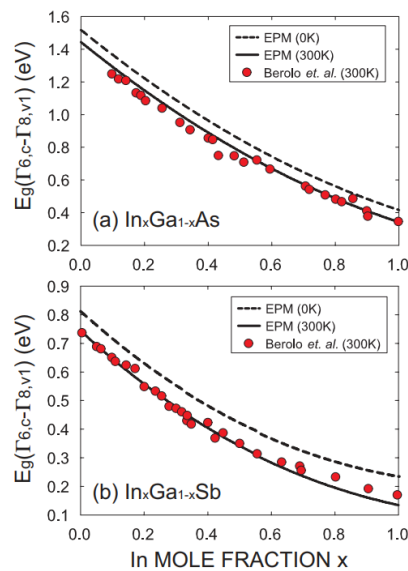


Рис. 2.4. Пряме викривлення забороненої зони в точці Γ у k -просторі розслаблених (а) $In_xGa_{1-x}As$ та (б) $In_xGa_{1-x}Sb$ як функція мольної частки x . ЕРМ (0К) (пунктирна лінія) отримано з розрахунку структури зони в цій роботі,

ЕРМ (300К) (суцільна лінія) для $In_xGa_{1-x}As$ та $In_xGa_{1-x}Sb$ отримано з використанням температурної залежності рівнянь зазору, наведених у та посиланнях у ньому, (300К) (символ) взято з [9] та посилань у ньому.

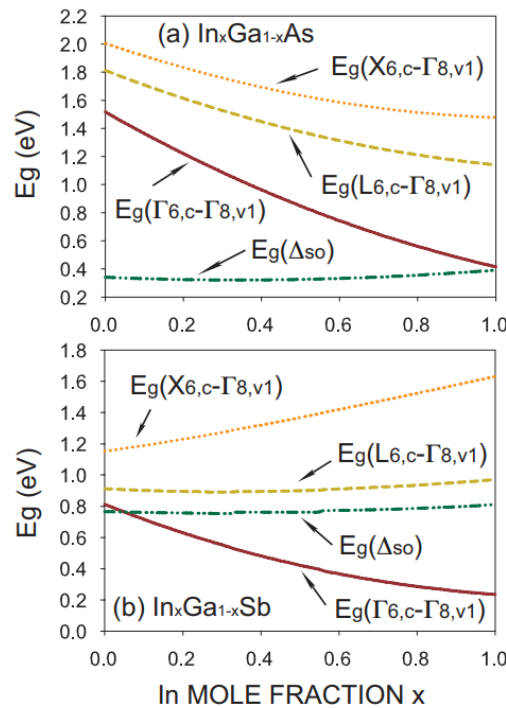


Рис. 2.5. Вигин забороненої зони розслаблених (а) $In_xGa_{1-x}As$ і (б) $In_xGa_{1-x}Sb$ як функція мольної частки In x , де різні заборонені зони в різних точках симетрії розраховуються від вершини валентної зони ($\Gamma_{8,v1}$). параметра вигину забороненої зони (вираженого в одиницях eV). Параметри вигину забороненої зони для різних заборонених зон можна витягти за допомогою методу найменших квадратів.

Рівняння вигину для розслабленого $In_xGa_{1-x}As$ такі (2.19):

$$\begin{aligned}
 E_g(\Delta_{so}) &= 0.763 - 0.45x + 0.092x^2 \\
 E_g(\Gamma_{6,c} - \Gamma_{8,v1}) &= 0.811 - 0.985x - 0.410x^2 \\
 E_g(\Gamma_{6,c} - \Gamma_{8,v1}) &= 0.909 - 0.099x - 0.164x^2 \\
 E_g(\Gamma_{6,c} - \Gamma_{8,v1}) &= 1.148 - 0.396x - 0.092x^2
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

де параметри вигину прямої забороненої зони становлять $b_{gap} = 0,473$ еВ та $b_{gap} = 0,410$ еВ для $In_xGa_{1-x}As$ та $In_xGa_{1-x}Sb$ відповідно.

Наші параметри вигину забороненої зони b_{gap} добре узгоджуються з низькотемпературними теоретичними та експериментальними даними, наведеними в та посиланнях у ньому, і дають для прямої забороненої зони E_g^Γ значення 0,816 еВ для InP з решіткою, що відповідає $In_{0.53}Ga_{0.47}As$. Варто зазначити, що отримані нами параметри вигину є позитивними (увігнутими вгору) для різних ширин забороненої зони як у релаксованих $In_xGa_{1-x}As$, так і в $In_xGa_{1-x}Sb$.

$In_xGa_{1-x}As$ на InP вважається дуже перспективним напівпровідником для високошвидкісних електронних пристроїв та оптоелектронних застосувань. У цьому матеріалі можна легко контролювати коефіцієнт деформації в площині, змінюючи мольну частку In, що впливає на структуру зон. Існують як теоретичні, так і експериментальні спостереження вигину забороненої зони при зміні мольної частки In або Ga від 0 до 1 в $In_xGa_{1-x}As$ на підкладках (001) InP. Однак експериментальна інформація про параметри вигину інших проміжків (а саме, для $E_g(X)$, $E_g(L)$ та $E_g(\Delta_{so})$ як функції x для $In_xGa_{1-x}As/(110)$ InP або (111) InP все ще відсутня [28]. У цьому дослідженні ми надаємо теоретичні прогнози щодо структури зон та значень різних параметрів вигину забороненої зони в двоосному напруженому $In_xGa_{1-x}As$ на підкладках (001), (110) та (111) InP як функції мольної частки In x . Ми починаємо з порівняння на рис. 2.6 обчисленого вигину прямої ширини забороненої зони ($E_g(\Gamma_{6,c} - \Gamma_{8,v1})$) для деформованого $In_xGa_{1-x}As$ /(001)-на-InP з експериментальними та теоретичними спостереженнями з посилань. Теоретичні та експериментальні дані досить добре узгоджуються, особливо для $0,4 < x < 0,6$. Слід зазначити, що ми маємо розрив у похідній ширини забороненої зони відносно мольної частки x при $x = 0,53$ через перетин смуг важких дірок ($\Gamma_{8,v1}$) та легких дірок ($\Gamma_{8,v2}$)

На рисунку 2.7 показано варіацію параметрів вигину забороненої зони, включаючи пряму заборонену зону, показану на рисунку 2.6 для InP з відповідною решіткою $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ як функцію x для різних орієнтацій інтерфейсу, (001), (110) і (111). У міру віддалення x від недеформованого значення $x = 0,53$, виродження смуг у всіх точках симетрії, X , L та Γ , втрачається, і смуги починають розщеплюватися при застосуванні двовісної деформації як для $x < 0,53$ (розтяжна деформація), так і для $x > 0,53$ (стискаюча деформація). Крім того, смуги важких і легких дірок перетинаються при $x=0,53$, що спричиняє розрив нахилу кривої, про що вже згадувалося вище і що було експериментально спостережено в посиланнях. Це призводить до різних параметрів вигину забороненої зони при $x < 0,53$ і $x > 0,53$ для всіх орієнтацій інтерфейсу. Зверніть також увагу на розщеплення долин X для випадків (001) і (110) та розщеплення долин L для випадків (111) і (110), що очікується від порушеної симетрії, спричиненої деформацією в площині. Таким чином, ми можемо очікувати, що параметри вигину забороненої зони сильно залежать від

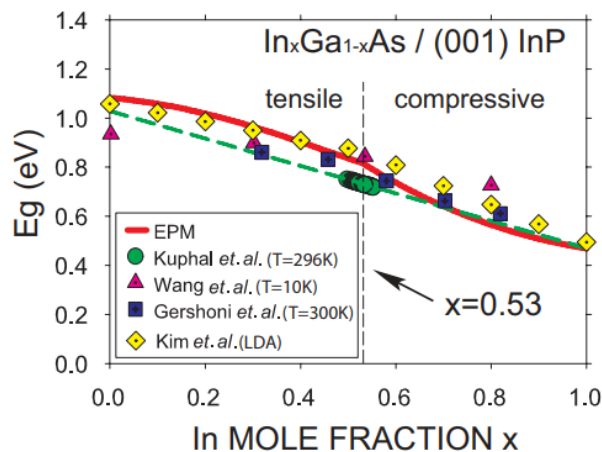


Рисунок 2.6. Розрахунок ЕРМ (пряма лінія) прямої ширини забороненої зони $E_g(\Gamma_{6,c} - \Gamma_{8,v1})$ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на підкладці (001) InP порівнюється з різними експериментальними даними та теоретичними розрахунками (символи). Горизонтальна пунктирна лінія отримана шляхом лінійної екстраполяції

результату з посилення. Дуже хороша збіжність спостерігається при молярній частці $\text{In } 0,4 < x < 0,6$.

орієнтація інтерфейсу підкладки. У таблиці 2.5 наведено різні рівняння вигину забороненої зони для $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на (001), (110) та (111) InP для двох випадків $x > 0,53$ та $x < 0,53$. Параметри вигину для прямої забороненої зони $E_g(\Gamma_{6,c} - \Gamma_{8,v1})$ є додатними (увігнутими вгору), коли сплав піддається стискаючому напруженню ($x > 0,53$) для всіх орієнтацій інтерфейсу InP , які ми розглядали. Навпаки, параметри вигину є від'ємними (увігнутими вниз), коли сплав розтягується ($x > 0,53$) на (001) та (110), але не для випадку (111). Крім того, коли сплав деформується на (001) InP , величина параметра вигину для прямого зазору більша, ніж значення, отримані для випадків (110) і (111).

2.4 Теорія потенціалу деформації

Деформація кристалічної структури внаслідок напруги змінює електронні енергії в різних точках симетрії в першій зоні Бріллюена (BZ). Параметри, які описує ці зміни, відомі як потенціали деформації. Наприклад, деформація вздовж напрямку $[001]$, перпендикулярного площині (001), спричиняє розщеплення валентних зон у точці Γ та між 4-кратними виродженими мінімумами вздовж ліній Δ у напрямку точок симетрії X , що лежать вздовж площин $[100]$, $[100]$, $[010]$ та $[010]$, а також між двома мінімумами, що лежать на лініях симетрії Λ у напрямку точок Z уздовж напрямків $[001]$ і $[001]$ поза площиною, як показано на рис. 2.2. Параметри, пов'язані з розщепленням валентної зони, — це потенціал деформації b і d , що відповідають деформації вздовж $[001]$ і $[111]$ відповідно.

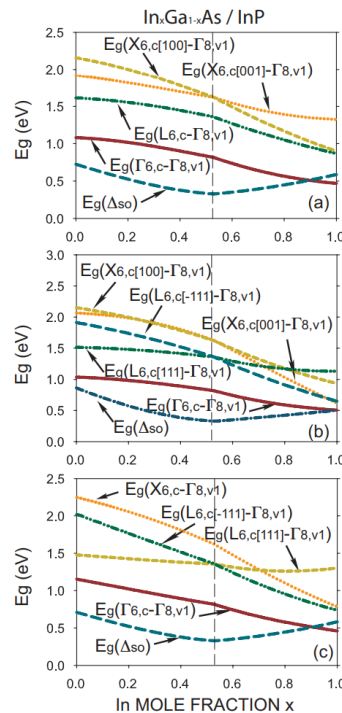


Рис. 2.7. Різні зміни ширини забороненої зони від вершини валентної зони ($\Gamma_{8,v1}$) $In_xGa_{1-x}As$ на (a) (001), (b) (110) і (c) (111) InP. Різні вигини забороненої зони спостерігаються між $x > 0,53$ (стискання) та $x < 0,53$ (розтягнення)

Коли деформація невелика, електронні розщеплення енергії як валентних, так і провідних зон можна вважати лінійно пропорційними деформації. Розглянемо спочатку валентні зони, позначені їхніми квантовими числами загального кутового моменту $(J, J_z)[70, 50]$, $v_1 \left(J = \frac{3}{2}, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right| \right)$, $v_2 \left(J = \frac{3}{2}, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right| \right)$, $v_3 \left(J = \frac{1}{2}, \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| \right)$, ми можемо слідувати Van de Walle et. al. [85, 84] і посилатися на середню енергію цих зон при Γ як $E_{v,av}$, де зсуви валентних зон для одноосного деформації вздовж [001], що якісно еквівалентно двоосному деформації на (001), відносно зваженого середнього $E_{v,av}$ як формула (2.20),

$$\Delta E_{v2} = \frac{1}{3} \Delta_{so} - \frac{1}{2} \delta E_{001}$$

$$\Delta E_{v1} = -\frac{1}{6} \Delta_{so} + \frac{1}{4} \delta E_{001} + \frac{1}{2} \left[\Delta_{so}^2 + \Delta_{so} \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2 \right]^{1/2}$$

$$\Delta E_{v3} = -\frac{1}{6}\Delta_{so} + \frac{1}{4}\delta E_{001} - \frac{1}{2}\left[\Delta_{so}^2 + \Delta_{so}\delta E_{001} + \frac{9}{4}(\delta E_{001})^2\right]^{1/2} \quad (2.20)$$

де $\delta E_{001} = 2b(e_{zz} - e_{xx})$. Константа b є потенціалом деформації, а компоненти тензора деформації e_{xx} та e_{zz} є відповідно $\epsilon_{\parallel}$ та $\epsilon_{\perp}$.

Для деформації вздовж $[111]$, що за якістю також еквівалентна двовісній деформації на (111) , рівняння 2.20 залишається дійсним, але δE_{001} замінюється на $\delta E_{001} = 2\sqrt{3}de_{xy}$, де $e_{xy} = (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel})/3$. Однак не існує аналітичного виразу для розщеплення валентної зони внаслідок деформації вздовж $[110]$, в якому розщеплення є сумішшю потенціалу деформації b і d . У цьому випадку розщеплення валентної зони можна обчислити, вирішуючи власні значення матриці (2.21)

$$\begin{bmatrix} \frac{\Delta_{so}}{3} - \frac{1}{8}(\delta E_{001} + 3\delta E_{111}) & -\frac{\sqrt{3}}{8}(\delta E_{001} - \delta E_{111}) & \frac{\sqrt{6}}{8}(\delta E_{001} - \delta E_{111}) \\ -\frac{\sqrt{3}}{8}(\delta E_{001} - \delta E_{111}) & \frac{\Delta_{so}}{3} + \frac{1}{8}(\delta E_{001} + 3\delta E_{111}) & \frac{\sqrt{6}}{8}(\delta E_{001} - \delta E_{111}) \\ \frac{\sqrt{6}}{8}(\delta E_{001} - \delta E_{111}) & \frac{\sqrt{2}}{8}(\delta E_{001} + 3\delta E_{111}) & -\frac{2}{3}\Delta_{so} \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

де $\delta E_{001} = 4b(e_{xx} - e_{zz})$ і $\delta E_{111} = (4/\sqrt{3})de_{xy}$. Компоненти тензора деформації є $e_{xx} = (\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel})/2$, $e_{zz} = \epsilon_{\parallel}$ і $e_{xy} = (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel})/2$.

Для зсуву зони провідності в умовах деформації Herring et. al. запропонували вираз для зсуву енергії долини і для однорідної деформації, яка описується тензором деформації e як (2.22),

$$\Delta E_c^i = [\mathcal{E}_d 1 + \mathcal{E}_u \{\hat{a}_i \hat{a}_j\}] : e \quad (2.22)$$

де $\mathcal{E}_u$ і $\mathcal{E}_d$ називаються одноосною і дилатаційною деформаційною потенціалами відповідно, 1 — одиничний тензор, $\hat{a}_i$ — одиничний вектор, паралельний вектору $\vec{k}$ долини і, $\{\}$ позначає діадичну форму з I. Balslev, а діадичний добуток $a : b$ визначається як (2.23)

$$a : b = \sum_i \sum_{j \leq i} a_{ij} b_{ij} \quad (2.23)$$

З рівняння 2.22 ми можемо виразити зсуви окремих смуг відносно середнього значення $E_{c,av}$. При одноосному деформуванні вздовж напрямку [001] смуги вздовж [001] відокремлюються від смуг вздовж [100] і [010]. Тоді рівняння 2.22 вздовж [001] можна записати так (2.24):

$$\begin{aligned}\Delta E_c^{001} &= \Xi_d 1:e + \Xi_u \{\hat{a}_{001} \hat{a}_{001}\}:e \\ &= \Xi_d 1:e + \Xi_u D_{001}:e\end{aligned}\quad (2.24)$$

де ми визначаємо $(D_{001})_{ij} = (\hat{a}_{001} \hat{a}_{001})_{ij} i j$. Тоді перший член у правій частині можна розкласти як (2.25)

$$\begin{aligned}\Xi_d 1:e &= \Xi_d [1_{11}e_{11} + 1_{21}e_{21} + 1_{22}e_{22} + 1_{31}e_{31} + 1_{32}e_{32} + 1_{33}e_{33}] \\ &= \Xi_d [1_{11}e_{11} + 1_{12}e_{12} + 1_{13}e_{13} + 1_{22}e_{22} + 1_{23}e_{23} + 1_{33}e_{33}]\end{aligned}\quad (2.25)$$

за симетрією 1 і e. Другий член у правій частині стає таким:

$$\begin{aligned}\Xi_u D_{001}:e &= \Xi_u \{(D_{001})_{11}e_{11} + (D_{001})_{12}e_{12} + (D_{001})_{13}e_{13} + (D_{001})_{22}e_{22} + \\ &\quad (D_{001})_{23}e_{23} + (D_{001})_{33}e_{33}\}\end{aligned}\quad (2.26)$$

Тоді рівняння 2.24 можна розкласти так:

$$\begin{aligned}\Delta E_c^{001} &= \Xi_d \{1_{11}e_{11} + 1_{12}e_{12} + 1_{13}e_{13} + 1_{22}e_{22} + 1_{23}e_{23} + 1_{33}e_{33}\} + \\ &\quad \Xi_u \{(D_{001})_{11}e_{11} + (D_{001})_{12}e_{12} + (D_{001})_{13}e_{13} + (D_{001})_{22}e_{22} + (D_{001})_{23}e_{23} + \\ &\quad (D_{001})_{33}e_{33}\}\end{aligned}\quad (2.27)$$

Подібно до цього,

$$\begin{aligned}\Delta E_c^{100} &= \Xi_d \{1_{11}e_{11} + 1_{12}e_{12} + 1_{13}e_{13} + 1_{22}e_{22} + 1_{23}e_{23} + 1_{33}e_{33}\} \\ &+ \Xi_u \{(D_{001})_{11}e_{11} + (D_{001})_{12}e_{12} + (D_{001})_{13}e_{13} + (D_{001})_{22}e_{22} + (D_{001})_{23}e_{23} + \\ &\quad (D_{001})_{33}e_{33}\}\end{aligned}\quad (2.28)$$

Отже, розщеплення зон провідності вздовж [001] і [100] можна записати так:

$$\begin{aligned}\Delta E_c^{001} - \Delta E_c^{100} &= \\ &\Xi_u \{ \{(D_{001})_{11} - (D_{100})_{11}\}e_{11} + \{(D_{001})_{12} - (D_{100})_{12}\}e_{12} \} + \{(D_{001})_{13} - \\ &\quad (D_{100})_{13}\}e_{13} + \{(D_{001})_{22} - (D_{100})_{22}\}e_{22} + \{(D_{001})_{23} - (D_{100})_{23}\}e_{23} + \\ &\quad \{(D_{001})_{33} - (D_{100})_{33}\}e_{33}\end{aligned}\quad (2.29)$$

Де

$$(D_{001})_{ij} = (\hat{a}_{001}\hat{a}_{001})_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, (D_{001})_{ij} = (\hat{a}_{001}\hat{a}_{001})_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

Тоді ми можемо спростити рівняння 2.29 таким чином:

$$\begin{aligned} \Delta E_c^{001} - \Delta E_c^{100} &= \Xi_u(e_{33} - e_{11}) \\ &= \Xi_u(e_{zz} - e_{ee}) \\ &\quad \Xi_u(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \end{aligned} \quad (2.31)$$

де надрядковий індекс Δ на Ξ_u вказує, який тип долини зони провідності (при Δ або L). Аналогічно, розщеплення зон провідності вздовж $[001]$ і $[010]$ можна показати так:

$$\Delta E_c^{001} - \Delta E_c^{100} = \Xi_u(e_{33} - e_{11}) = \Xi_u(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \quad (2.32)$$

Ми можемо помітити, що рівняння 2.31 і рівняння 2.32 є еквівалентними, тому ми можемо просто записати як

$$\Delta E_c^{001} - \Delta E_c^{100,010} = \Xi_u^{\Delta}(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \quad (2.33)$$

Зсув зони провідності в долині L також можна отримати аналогічним чином, використовуючи рівняння 2.24. Однак деформація вздовж напрямку $[001]$ не впливає на розщеплення зони провідності в долині L . Натомість деформація вздовж $[110]$ і $[111]$ розщеплює зони в долині L [2]. Розщеплення зон провідності в долині L внаслідок деформації $[111]$ можна представити так:

$$\Delta E_c^{111} - \Delta E_c^{111,111,111} = \frac{8}{3}\Xi_u^L e_{xy} = \frac{8}{9}\Xi_u^L(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \quad (2.34)$$

і через деформацію $[110]$ становить

$$\Delta E_c^{111,111} - \Delta E_c^{111,111} = \frac{4}{3}\Xi_u^L e_{xy} = \frac{2}{3}\Xi_u^L(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \quad (2.35)$$

Зсув середньої енергії мінімуму зони провідності визначається за формулою

$$\Delta E_c \left(\Xi_d + \frac{1}{3}\Xi_u \right) 1:e \quad (2.36)$$

а зміщення середньої енергії максимуму валентної зони в точці Γ визначається як

$$\Delta E_v = a 1:e \quad (2.37)$$

де a є потенціалом деформації розширення валентної зони, а ΔE_v часто називають гідростатичним зсувом. Отже, зсув середньої енергетичної щілини можна показати за допомогою рівнянь 2.24 і 2.27 як

$$\Delta E_g \left(\varepsilon_d + \frac{1}{3} \varepsilon_u - a \right) 1: e \quad (2.38)$$

Тепер ми можемо витягти відносні зсуви мінімумів валентної та провідної смуг, що відповідають потенціалам деформації b , d , ε_u^Δ , ε_u^L та лінійній комбінації що відповідають відносним зсувам екстремумів смуг як функції деформації вздовж напрямків $[001]$ та $[111]$.

Витяг цих потенціалів деформації з розрахунку структури зон за допомогою ЕРМ з деформацією є простим [30]. Наприклад, на рис. 2.8 ми зобразили три верхні зони валентності як за допомогою ЕРМ (символи), так і за допомогою теорії лінійного потенціалу деформації (лінії) для двовісної деформації на інтерфейсі (111) GaAs, щоб витягти потенціал деформації d як параметр підгонки. Ми модулюємо d , поки «DFT» (лінії) не збігається з «ЕРМ» (символи) в невеликому діапазоні деформації (або лінійній області), наприклад

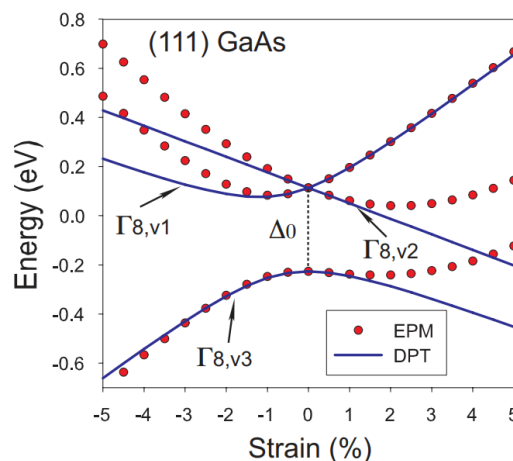


Рисунок 2.8. Розраховані максимуми трьох найвищих енергетичних валентних зон для GaAs під двовісною деформацією на площині (111) . Червоні символи отримані з ЕРМ, а сині лінії — з наближення лінійного потенціалу деформації, $\delta E_{111} = 2\sqrt{3}de_{xy}$. Потенціал деформації d визначається шляхом припасування синіх ліній до червоних символів.

від -0,01 до 0,01, що відповідає 1% стискаючій та розтягуючій деформації відповідно. У цьому випадку потенціал деформації d визначається як -4,5. Також можна помітити, що $\Delta 1 + \Delta E_{\Gamma_{8,v1}} + \Delta E_{\Gamma_{8,v3}} + \Delta E_{\Gamma_{8,v1}} = 0$ на рис. 2.8, як і очікувалося з рівняння 2.20. Однак потенціали деформації розширення E_d і a пов'язані з абсолютними зсувами екстремумів смуги, які просто не можуть бути вилучені з розрахунку ЕРМ з періодичними граничними умовами, оскільки абсолютне положення енергетичного рівня в нескінченному періодичному кристалі не є чітко визначеним для розрахунку так званого «абсолютного потенціалу деформації». Було запропоновано кілька підходів до обчислення абсолютного потенціалу деформації з використанням «теорії модельних твердих тіл», «методу ab initio всіх електронів та гармонічного розкладу решітки», підбору рухливості носіїв за відомими експериментальними даними тощо. Однак у цьому дослідженні ми не обчислюємо абсолютний потенціал деформації. Натомість ми безпосередньо витягуємо лінійну комбінацію $(E_d + \frac{1}{3}E_u - a)$ з ЕРМ, як зазначено вище, шляхом встановлення довільного значення верхньої межі валентного діапазону.

У таблицях 2.6 і 2.7 ми наводимо потенціали деформації для валентної та провідної смуг відповідно, отримані з розрахунків ЕРМ, у порівнянні з даними, доступними в літературі. Потенціали деформації валентної зони b і d є від'ємними, а величина d більша за b , що означає, що зсуви енергії валентної зони є більшими під двовісною деформацією (111), ніж під (001). Потенціал одноосної деформації E_u більший при мінімумах L , ніж при мінімумах Δ у всіх напівпровідниках, що означає, що мінімуми провідної зони при L також більш чутливі до деформації (111), ніж до (001). Лінійна комбінація потенціалу деформації розширення $(E_d + E_u/3 - a)$ при мінімумах Δ більша, ніж при мінімумах L . Крім того, для Si і Ge вони мають протилежні знаки при Δ і L , що означає протилежну поведінку середніх щілин $\Gamma - L$ і $\Gamma - \Delta$ при двоосному деформуванні. Як ми вже згадували раніше, потенціали деформації є

чутливими до параметрів кубічної сплайн-інтерполяції, особливо до нахилів локального псевдопотенціалу при заданому q . Також відомо, що d і E_u^L є чутливими до внутрішнього параметра зміщення ζ .

РОЗДІЛ 3. КВАНТОВО-РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ У НАНОСТРУКТУРАХ Ge/Si

3.1. Фундаментальні основи квантово-розмірних ефектів у гетероструктурах

Гетероструктури з просторовим обмеженням носіїв заряду у всіх трьох вимірах (квантові точки) реалізують граничний випадок розмірного квантування в напівпровідниках, коли модифікація електронних властивостей матеріалу є найбільш вираженою. Електронний спектр ідеальної квантової точки (КТ) являє собою набір дискретних рівнів, розділених областями заборонених станів, і відповідає електронному спектру одиночного атома, хоча реальна квантова точка при цьому може складатися з сотень тисяч атомів.

Германій (Ge) є напівпровідником з непрямою забороненою зоною шириною приблизно 0,66 еВ при кімнатній температурі. Завдяки вищій, порівняно з кремнієм, рухливості носіїв заряду (електронів та дірок), германій розглядається як привабливий матеріал для використання в швидкодіючих електронних та оптоелектронних пристроях [25].

Рушійною силою утворення кластера, в загальному випадку, є прагнення системи до стану з мінімальною вільною енергією. Основні закономірності зародження острівців в епітаксимальній гетеросистемі визначаються балансом поверхневої енергії плівки і підкладки, а також енергії межі розділу плівка-підкладка та внутрішньої енергії об'єму острівця. Вільна енергія новоутвореного зародка на поверхні підкладки може бути виражена у вигляді трьох складових формула (3.1):

$$\Delta = -V\Delta\mu = s\gamma + E_i(V, h/l) \quad (3.1)$$

де перший член – робота утворення нового зародка об'єму V , $\Delta\mu$ – термодинамічна рушійна сила кристалізації (пересичення);

другий член – робота, необхідна для створення додаткової поверхні s , γ – поверхнева енергія зародка. Третій член представляє додаткову енергію, що виникає через пружну деформацію зародка.

Якщо два перші члени цього виразу представляють класичний варіант теорії зародження, то останній член з'являється тільки у випадку вирощування напружених плівок. Внесок поверхні в зміну вільної енергії системи найбільш значний для кластерів малого розміру. Вплив пружної деформації зростає в міру збільшення розміру кластера.

При формуванні гетероструктур Ge/Si виникає механічне напруження через невідповідність ґратки ($\sim 4.2\%$), що спричиняє автокаталітичне формування наноструктур — зокрема квантових точок — за механізмом Странского-Крастанова. У таких системах утворюється потенціальний профіль, який обмежує рух носіїв у певних напрямках, що призводить до квантового розмірного ефекту.

У Ge/Si-наноструктурах спостерігаються квантово-розмірні ефекти, коли розміри структури стають співмірними з довжиною хвилі де Бройля носіїв заряду (рис. 3.1). Це призводить до дискретизації енергетичних рівнів у зоні провідності та валентній зоні, а також до зменшення ефективної ширини забороненої зони. Квантові точки германію на кремнії демонструють енергетичний спектр, подібний до атомного, що визначає їх спектральні характеристики у фотолюмінесценції.

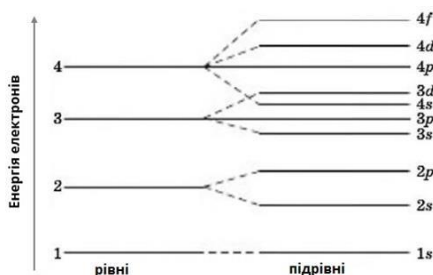


Рисунок 3.1. Схематичне зображення енергетичних рівнів в квантовій точці Ge/Si з дискретним спектром

З приладової точки зору, атомоподібний електронний спектр носіїв в квантових точках у випадку, якщо відстань між рівнями помітно більша за теплову енергію, дає можливість усунути основну проблему сучасної мікро- і оптоелектроніки – «розмиття» носіїв заряду в енергетичному вікні порядку kT, що призводить до деградації властивостей приладів при підвищенні робочої температури [25].

3.2. Самоорганізація та формування квантових наноструктур Ge/Si

З 1992 року почалися зміни в технології отримання структур з квантовими точками. До цього часу основним способом створення таких структур була фотолітографія, з притаманним цьому методу обмеженням в мінімальних розмірах. Прояв ефекту самоорганізації впорядкованих масивів острівців нанометрових розмірів в гетеросистемах Ge-Si дозволив отримувати бездефектні квантові точки гранично малих розмірів (10-100 нм) з густиною 10^{10} - 10^{11} см⁻² і призвів до більш чіткого прояву атомоподібних характеристик в електронних і оптичних спектрах цих об'єктів.

У першому наближенні ключовим фактором переходу від двовимірної шарового до тривимірної острівцевого росту псевдоморфних плівок є зниження енергії напружень у вершинах острівців через пружну релаксацію. Визначальну роль морфологічної нестабільності поверхні плівок відіграють пружні напруження невідповідності, що призводять до релаксації плівки шляхом утворення острівців.

На прикладі гетеросистеми германій на кремнії давно вивчається перехід від шарового росту плівки до утворення 3D острівців (механізм Странського-Крастанова) (рис.3.2). При відносно низьких температурах синтезу, такі острівці не містять дислокацій невідповідності (ДН), навіть після суттєвого перевищення ними критичних товщин.



Рис. 3.2. Схема росту за механізмом Странського-Крастанова

Процес утворення нової фази включає такі основні стадії як зародкоутворення, незалежний ріст центрів і, нарешті, їх розвиток у взаємодії один з одним. Початкова стадія росту Ge на чистій поверхні Si(100) така ж як для гомоепітаксії кремнію. В початковому стані на поверхні підкладки знаходиться пересичений адсорбат, і на першому етапі відбувається зародження 2D центрів.

Далі настає другий етап росту центрів, в процесі якого відбувається зниження пересичення навколо центрів, але останні ще не взаємодіють. Тому зародження нових центрів в місцях, віддалених від вже утворених острівців, продовжується. Після того, як області дифузійного «живлення» центрів перекриваються і пересичення між острівцями знижується, ймовірність появи нових центрів падає, настає третій етап – етап корельованого росту. Великі острівці ростуть, малі зникають.

У випадку безперервної подачі атомів на поверхню (відкрита система) острівці розростаються до стикання і утворюється суцільний моношар. Потім ситуація повторюється, але через невідповідність ґраток, плівка германію виявляється стиснутою, і в міру збільшення товщини зростає енергія пружних деформацій. Так, у випадку росту Ge на Si саме наявність цих деформацій призводить до переходу від пошарового росту до утворення 3D кластерів на поверхні підстелювального шару германію, тобто реалізації механізму Странського-Крастанова.

Ретельні дослідження Ge/Si (001) дозволяють зрозуміти ключові фундаментальні механізми, які лежать в основі методики росту. У 1990 році було досліджено ріст когерентних 3D островців Ge. Зокрема, були представлені явні утворення «хат-острівців» (hut islands), обмежених {105} гранями [27].

Істотна неоднорідність пружної релаксації островця по його висоті призводить до залежності енергетичного виграшу від форми островця. З'являються декілька дискретних енергетично найбільш вигідних форм («hut», «dome», «superdome»). Пружні спотворення по периферії кластера і в прилеглій області підкладки зростають зі збільшенням його розмірів, що змінює закономірності приєднання адатомів до кластера (рис. 3.3).

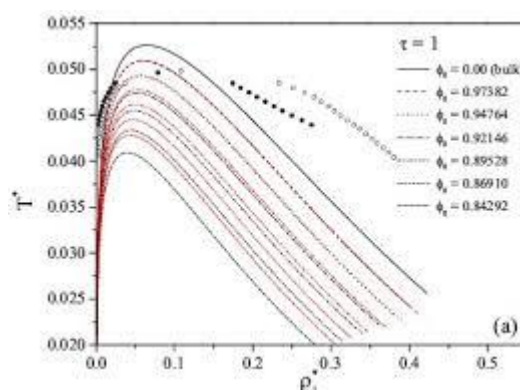


Рис. 3.3. АСМ-зображення різних морфологічних форм квантових точок Ge

Через взаємодію обірваних зв'язків, атоми в приповерхневій області прагнуть перебудуватися в більш енергетично вигідні положення, утворюючи на поверхні двовимірну періодичну структуру. Атоми ідеальної поверхні (100) мають дві ненасичені зв'язки, одна з двох обірваних зв'язків поверхневого атома разом з відповідним зв'язком сусіднього атома утворює нову димерну зв'язок. Сусідні атоми притягуються один до одного, утворюючи пари, що веде до подвоєння елементарної комірки в напрямку перпендикулярному рядам димерів.

Через таку реконструкцію поверхні, поверхнева дифузія стає анізотропною. Адатоми «бігають» вздовж димерних рядів значно швидше, ніж поперек. При малих швидкостях осадження Ge і достатній температурі, анізотропія поверхневої дифузії призводить до того, що острівці мають витягнуту форму.

Процес самоорганізації викликає появу в системі острівців переважних значень їх характеристик: розмірів, форми, відстаней між острівцями та їх взаємного розташування. Це є результатом мінімізації сумарної вільної енергії системи. Наявність обраних характеристик повинна проявлятися в спектрах розсіяння і дифракції електронів та рентгенівських променів при взаємодії з поверхнею, що містить наноструктури, а також в електронних і оптичних спектрах.

Основний механізм, що веде до вирівнювання розмірів острівців, полягає в тому, що великі острівці напружені біля основи сильніше, тому атомам германію вигідніше вбудуватися в менший острівець, де пружні напруження менші. Тому ріст пружної деформації в підкладці і в основі кластера зі збільшенням розміру останнього зменшує швидкість його росту. Це призводить до помітного звуження розподілу острівців за розмірами.

Серед можливих шляхів покращення однорідності розмірів острівців можна виділити наступні: (а) використання відхилених підкладок; (б) спеціального методу організації одночасного синхронного зародження кластерів.

Ширина розподілу острівців за розмірами залежить від швидкості росту. Розподіл стає вузьким зі збільшенням швидкості. Така поведінка підтверджує важливість одномоментного гетерогенного зародження. Зі збільшенням швидкості росту підвищується ймовірність зародження острівців в самому початку процесу і внаслідок цього острівці ростуть рівні часи і мають близькі розміри.

При вирощуванні структур з декількома шарами Ge квантових точок, які заростаються матеріалом, узгодженим з підкладкою (Si), помічено, що новий шар острівців росте так, що острівці виявляються розташованими один під одним у вертикальному напрямку і призводить до покращення впорядкування острівців за їх розмірами. Збурення полів пружної деформації від кластера проникають на різні відстані в заростаючий шар, в залежності від об'єму конкретного острівця та від їх скупчення. На поверхні заростаючого шару створюються місця переважного зародження нових острівців на наступному «поверсі» (рис. 3.4).

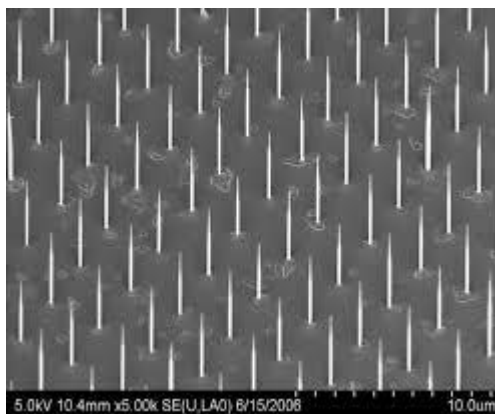


Рисунок 3.4. Схема вертикального впорядкування квантових точок у багатошарових структурах Ge/Si

Такі багатошарові гетероструктури з квантовими точками мають прикладне значення в зв'язку з відкриваючимися новими можливостями (наприклад, електронний зв'язок кластерів по вертикалі, формування тривимірних ґраток, що складаються з острівців-кластерів, часто називаних «штучними атомами»).

Дослідження твердих розчинів GeSi з великим вмістом Si дуже зручні для модельних експериментів, що дозволяють легко з'ясувати основні закономірності формування острівців внаслідок їх відносно великих розмірів. Зі зростанням частки Si напруження в кластері зменшуються, і необхідний вигреш енергії за рахунок пружної релаксації острівців настає при їх більших розмірах.

Однак практичний інтерес дослідників концентрується на системах з розміром наноострівців близько 10 нм і менше (чистий Ge на Si), що, в першу чергу, пов'язано з їх оптичними властивостями. Густина острівців має також велике значення, оскільки відгук системи на зовнішній вплив безпосередньо пов'язаний з числом острівців, а значить і з їх густиною.

Обидва ці параметри (розмір і густина) залежать від таких умов вирощування, як температура підкладки і швидкість росту. Зниження температури росту, також як і збільшення потоку Ge ведуть до зменшення дифузійної довжини Ge адатомів на підкладці. Відповідно, область збору адатомів для одного острівця зменшується, зменшуються і його розміри, а густина зростає.

3.3. Зонна структура та енергетичні рівні в квантово-розмірних структурах

3.3.1. Квантово-розмірні ефекти у гетероструктурі Ge/Si

Германій є напівпровідником з непрямою забороненою зоною шириною приблизно 0,66 eV при кімнатній температурі. Завдяки вищій, порівняно з кремнієм, рухливості носіїв заряду (електронів та дірок), германій розглядається як привабливий матеріал для використання в швидкодіючих електронних та оптоелектронних пристроях.

При формуванні гетероструктур Ge/Si виникає механічне напруження через невідповідність ґратки ($\sim 4.2\%$), що спричиняє автокаталітичне формування наноструктур — зокрема квантових точок — за механізмом Странского-Крастанова. У таких системах утворюється потенціальний профіль, який обмежує рух носіїв у певних напрямках, що призводить до квантового розмірного ефекту.

У Ge/Si-наноструктурах спостерігаються квантово-розмірні ефекти, коли розміри структури стають співмірними з довжиною хвилі де Бройля носіїв

заряду. Це призводить до дискретизації енергетичних рівнів у зоні провідності та валентній зоні, а також до зменшення ефективної ширини забороненої зони. Квантові точки германію на кремнії демонструють енергетичний спектр, подібний до атомного, що визначає їх спектральні характеристики у фотолюмінесценції.

Завдяки квантово-розмірним ефектам енергетичні рівні гетероструктури дискретизуються — утворюються підзони в зоні провідності та валентній зоні. Це зумовлює зсув спектрів поглинання/випромінювання, особливо в ІЧ-діапазоні. Зонна структура Ge змінюється через напруження (strain), яке може призвести до переходу від непрямої до майже прямої забороненої зони — що особливо актуально для світловипромінювання.

3.3.2. Зонна структура в гетероструктурах Ge/Si

У гетероструктурі Ge/Si відбувається утворення зонного вигину (band bending) на границі розділу двох напівпровідників, які мають різну ширину забороненої зони та відмінне розташування зон провідності і валентної зони відносно вакуумного рівня.

Залежно від матеріалів, гетероструктура може мати три типи зонного вирівнювання:

- Тип I (сприятливе вирівнювання) — обидві зони (провідності і валентна) одного матеріалу повністю вміщуються в заборонену зону іншого.
- Тип II (нестабільне або каскадне вирівнювання) — тільки одна зона перекривається.
- Тип III (розрив забороненої зони) — непридатне для більшості пристроїв.

Для гетероструктури Ge/Si характерне вирівнювання типу II (так зване staggered band alignment):

- Зона провідності Ge розташована нижче, ніж у Si, однак не перекривається повністю.
- Валентна зона Ge знаходиться вище, ніж у Si приблизно на 0,5–0,6 еВ.

Наслідками такого вирівнювання є утворення потенціальної ями для дірок у Ge, що сприяє накопиченню дірок у цьому шарі. Електрони, навпаки, не утримуються в Ge, бо зона провідності Si — нижча. Тому в Ge/Si-структурах утворюється двовимірний газ дірок (2DHG — two-dimensional hole gas), що важливо для транзисторів та сенсорів (рис. 3.5).

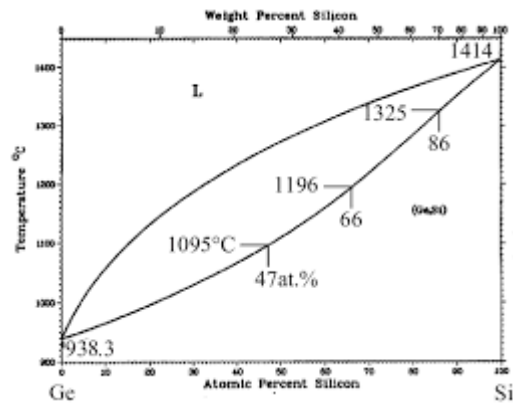


Рисунок 3.5. Діаграма зонного вирівнювання типу II в гетероструктурі Ge/Si

За рахунок деформацій (механічних напружень) відбувається зміщення мінімумів зон провідності та максимумів валентної зони, що змінює ефективну масу носіїв і їх рухливість.

3.3.3. Вплив механічних напружень на електронну структуру

Шорстка поверхня напруженого шару має меншу сумарну енергію внаслідок пружної релаксації напружень у вершинах виступів. Збільшення поверхневої енергії є фактором, що протидіє розвитку рельєфу плівки, однак лише частково зменшує енергетичний виграш за рахунок релаксації. Чим

більше невідповідність параметрів ґратки плівки і підкладки, тим при меншій товщині псевдоморфної плівки втрачається її морфологічна стабільність [27].

Утворення острівців є крайнім проявом морфологічної нестійкості напружених плівок і зазвичай спостерігається в системах з великою невідповідністю параметра ґраток плівки і підкладки (>2%), типовими представниками яких є Ge-Si і InAs-GaAs.

У випадку гомоепітаксії на достатньо чистій поверхні практично для всіх напівпровідників об'ємні острівці не утворюються, а ріст плівок йде або за рахунок руху ступенів (ступенево-шаровий ріст), або шляхом формування і зрощення двовимірних острівців. Зонна структура Ge змінюється через напруження (strain), яке може призвести до переходу від непрямої до майже прямої забороненої зони — що особливо актуально для світловипромінювання.

3.4. Вплив легування на електричні властивості гетероструктур Ge/Si

3.4.1. Концентрація носіїв заряду в напружених наноплівках

Теоретичні розрахунки зонної структури нелегованої та легованої донорною домішкою наноплівки германію, вирощеної на підкладці Ge_(x)Si_(1-x), проводились у роботах [10, 11]. Відповідні вирази для концентрацій носіїв струму в напруженій наноплівці германію мають вигляд:

$$n_{L_1} = \left(\frac{2}{d} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{h^2 n^2}{8m_{L_1} k T d^2}} \right) \frac{2\pi m_{\perp}^{L_1} k T}{h^2} \cdot e^{\frac{E_F - E_{L_1}}{k T}}, n_{\Delta_1} = \left(\frac{2}{d} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{h^2 n^2}{8m_{L_1} k T d^2}} \right) \frac{2\pi m_{\perp}^{\Delta_1} k T}{h^2} \cdot e^{\frac{E_F - E_{\Delta_1}}{k T}}, \quad (3.2)$$

$$p_1 = \left(\frac{2}{d} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{h^2 n^2}{8m_1 k T d^2}} \right) \frac{2\pi m_1 k T}{h^2} \cdot e^{\frac{E_F - E_{V_1}}{k T}}, p_2 = \left(\frac{2}{d} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{h^2 n^2}{8m_2 k T d^2}} \right) \frac{2\pi m_2 k T}{h^2} \cdot e^{\frac{E_F - E_{V_2}}{k T}}, \quad (3.3)$$

Тут запроваджені наступні позначення: n_{L_1}, n_{Δ_1} — концентрації електронів в L_1 - та Δ_1 -мінімумах зони провідності наноплівки германію; p_1 та p_2 —

концентрації легких та важких дірок для віток валентної зони; d – товщина наноплівки $m_e^{L_1} = 0.082m_0, m_e^{L_1} = 1.58m_0, m_e^{\Delta_1} = 0.32m_0, m_h^2 = 0.28m_0$ – ефективні маси носіїв провідності в L_1 -, Δ_1 -мінімумах та для зон легких та важких дірок відповідно; m_0 – маса вільного електрона; E_F – енергія Фермі; $E_{L_1}, E_{\Delta_1}, E_{V_1}, E_{V_2}$ – енергія мінімумів зони провідності та віток валентної зони напруженої наноплівки германію.

Концентрації електронів та дірок в зоні провідності та валентній зоні визначаються виразами:

$$\begin{aligned} n &= n_{L_1} + n_{\Delta_1} \\ p &= p_1 + p_2 \\ n_i &= \sqrt{n \cdot p} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Тоді як концентрація власних носіїв струму в ненапруженій наноплівці германію має вигляд:

$$n_i(0) = \sqrt{\frac{8\pi^2(kT)^2}{h^3d}} m_{L_1} m_p \cdot \exp\left(-\frac{E_g(0)}{4kT}\right) \quad (3.5)$$

де $m_p=0.193 m_0$ – ефективна маса провідності для дірок, $E_g = 0.66$ eV.

3.4.2. Відносна зміна питомої електропровідності

З врахуванням формул (3.2) – (3.5) відносну зміну питомої електропровідності напруженої наноплівки германію, легованої донорною домішкою можна записати у вигляді (3.6):

$$\frac{\sigma(\varepsilon)}{\sigma(0)} = \frac{n(\varepsilon) \frac{\mu_{L_1} A + \mu_{\Delta_1}}{1+A} + \frac{n_i^2(\varepsilon) \mu_1 B + \mu_2}{n(\varepsilon) \frac{1}{1+B}}}{n(0) \mu_{L_1} + \frac{n_i^2(0)}{n(0)} \mu_p(0)} \quad (3.6)$$

Тут μ_{L_1} та μ_{Δ_1} – рухливості електронів в L_1 - та Δ_1 - мінімумах зони провідності, μ_1 та μ_2 – рухливості легких та важких дірок, $\mu_p(0)$ – рухливість дірок в ненапруженій наноплівці.

У даній роботі був проведений чисельний аналіз залежності концентрації власних носіїв струму та електронів для нелегованої та легованої мілкою донорною домішкою наноплівки германію від її товщини. Результати представлені на Рис. 3.6.

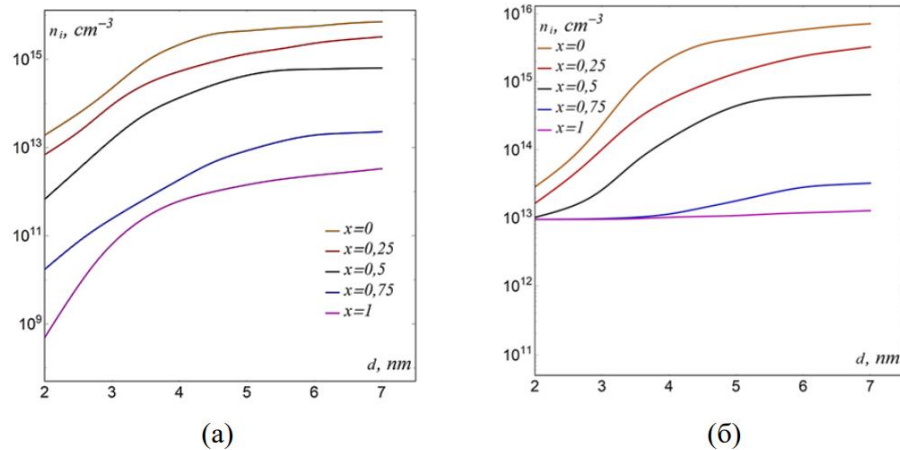


Рис. 3.6. Теоретична залежність концентрації власних носіїв струму для нелегованої та легованої мілкою донорною домішкою наноплівки германію від її товщини: (а) – нелегована наноплівка; (б) – легована наноплівка донорами, з концентрацією $N_d = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

Одержані теоретичні криві показують, що нелегована і ненапружена наноплівка германію (Рис. 3.6(а) випадок $x=1$) з товщиною $d=2$ нм буде діелектриком. Збільшення товщини наноплівки збільшує концентрацію власних носіїв струму і, таким чином виникає фазовий перехід діелектрик-напівпровідник. Інший спосіб переходу з діелектричного стану в напівпровідний полягає у збільшенні відсоткового вмісту кремнію в підкладці (Рис. 3.6(а) випадки $x \neq 1$). Це пов'язано зі збільшенням внутрішніх механічних напружень в наноплівці.

Як слідує з Рис. 3.6(б). легування плівки германію донорною домішкою також призводить до фазового переходу діелектрик-напівпровідник.

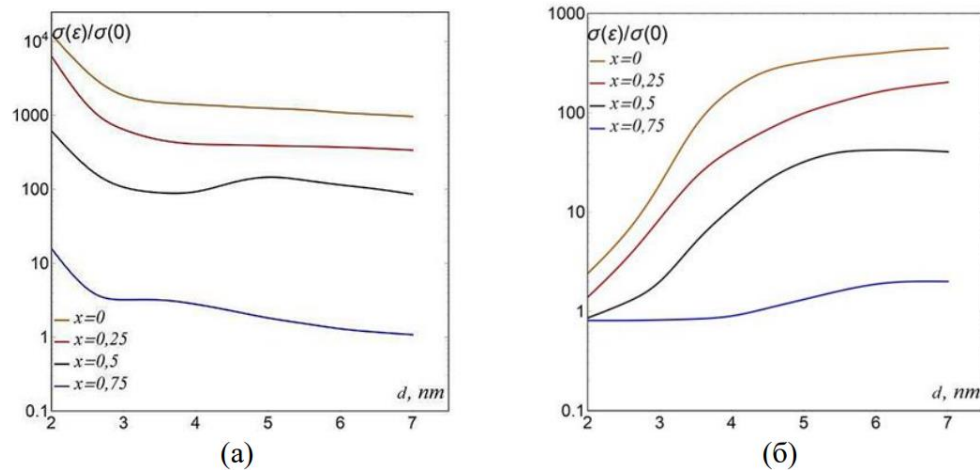


Рис. 3.7. Теоретична залежність відносної зміни питомої електропровідності для нелегованої та легованої мілкою донорною домішкою наноплівки германію від її товщини: (а) – нелегована наноплівка; (б) – легована наноплівка донорами, з концентрацією $N_d = 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Рис. 3.7 показують, що відносне значення питомої електропровідності нелегованої наноплівки германію зменшується зі збільшенням її товщини, тоді як легованої наноплівки – навпаки зростає. Причина такої поведінки відносної питомої електропровідності пов'язане з тим, що в нелегованій та ненапруженій наноплівці більш ефективно проявляються квантово-розмірні ефекти, котрі призводять до значної зміни в півці концентрації власних носіїв при зміні товщини наноплівки від 2 до 7 нм. Натомість легування наноплівки донорною домішкою призводить до зменшення ролі квантово-розмірних ефектів. Зростання величини відносної питомої електропровідності при відсотковому збільшенні вмісту кремнію в підкладці $\text{Ge}(x)\text{Si}(1-x)$ пов'язане зі збільшенням концентрації власних носіїв струму.

3.4.3. Механізми переносу заряду в наноструктурах

Перенос заряду в наноструктурах Ge/Si визначається низкою факторів: напруженням у структурі, розподілом електричного поля, гетерозонною вирівняністю, розміром і формою квантових точок або плівок. Залежно від розмірів структури і рівня легування можуть домінувати різні механізми провідності: тунелювання, термоелектронна емісія або дифузійне перенесення.

У таких наноструктурах можливе формування двовимірного газу носіїв заряду, що виникає внаслідок накопичення носіїв на інтерфейсі Ge/Si, який має сприятливу зонну структуру для утворення потенціальної ями. Це особливо актуально для МДН-структур і польових транзисторів з наноканалами.

Інтерес до дослідження оптичних властивостей КТ обумовлений яскраво вираженою практичною спрямованістю і рядом переваг таких об'єктів порівняно з двовимірними надгратками. Особливістю КТ є, по-перше, можливість управління спектральною смугою фотовідгуку шляхом попереднього заселення дискретних станів з необхідною енергією переходів; по-друге, наявність латерального квантування в нульвимірних системах знімає заборону на оптичні переходи, поляризовані в площині фотоприймача, а значить, надає можливість здійснити поглинання світла при нормальному падінні фотонів; по-третє, в КТ очікується сильне збільшення часу життя фотозбуджених носіїв внаслідок так званого ефекту «вузького фононного горла».

3.5. Експериментальні методи дослідження квантово-розмірних структур

Епітаксіальний ріст – це процес, в якому шари матеріалу осаджуються на підкладку, зберігаючи кристалічну структуру підкладки. Існує декілька методів епітаксіального росту: рідинно-фазна епітаксія, газофазна епітаксія, хімічне парофазне осадження, осадження металоорганічних сполук з газоподібної фази. Порівняно з усіма цими техніками епітаксіального росту, техніка молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) дозволяє використовувати більш широкий діапазон

матеріалів, має точний контроль росту, умови росту найбільш віддалені від теплової рівноваги, відсутній ефект пам'яті, а також має ряд інших переваг.

По суті МПЕ – це конденсація молекулярних пучків в надвисокому вакуумі. Сам процес полягає у випаровуванні основного матеріалу епітаксiальної плівки спільно з легуючими домішками. У надвисокому вакуумі довжина вільного пробігу частинок достатньо велика, і потоки атомів потрапляють на підкладку, практично не взаємодіючи один з одним. Таким чином, при випаровуванні формуються незалежні потоки частинок, які залежать тільки від часу випаровування.

Відсутність проміжних реакцій в сукупності з високою термічною швидкістю дозволяють швидко змінювати властивості зростаючого шару при зміні параметрів джерела, зокрема простим закриттям заслінки випарника. Висока чистота молекулярних пучків забезпечується безтигельними методами випаровування, такими як електронне бомбардування, в результаті якого розплав контактує тільки з кристалічною фазою цього ж матеріалу, що виключає можливість забруднення частинками зі стінок тигля.

Низька температура епітаксії, а також пошаровий ріст дозволяють отримувати надтонкі шари з різкими змінами складу на границях, внаслідок відсутності взаємної дифузії і розмиття профілів (рис. 3.8).

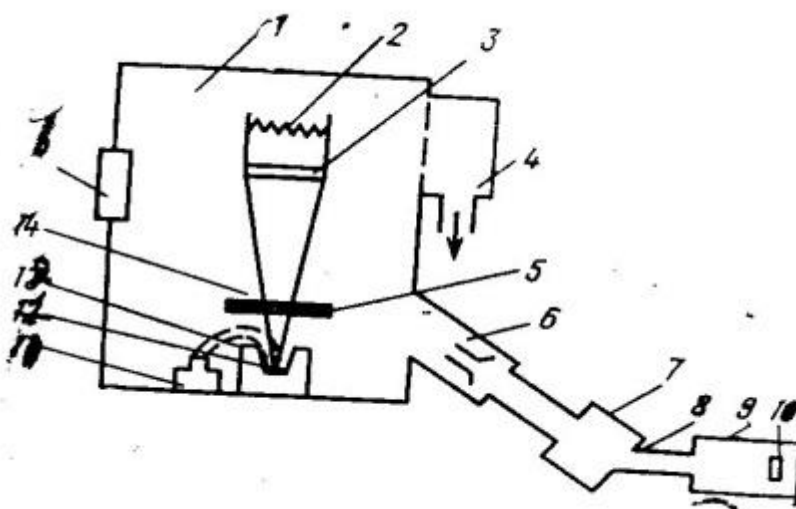


Рис. 3.8. Схема установки молекулярно-променевої епітаксії для вирощування структур Ge/Si

Кінетика поверхневих процесів при епітаксiальному рості включає в себе наступні елементарні процеси, що протікають в зоні росту:

- Адсорбція (прилипання) атомів або молекул, що падають на підкладку, які складають вирощувану сполуку
- Міграція (поверхнева дифузія) адсорбованих атомів по поверхні підкладки, яка може передуватися дисоціацією (розпадом) молекул вирощуваної сполуки
- Вбудовування атомів, що складають гетероструктуру, в кристалічну ґратку підкладки або зростаючий моноатомний шар
- Термічна десорбція (відрив) атомів, не вбудованих в кристалічну ґратку
- Утворення і подальший ріст двовимірних зародків кристала на підкладці або поверхні зростаючого шару
- Взаємна дифузія атомів, вбудованих в кристалічну ґратку

Кожний твердотільний матеріал може бути вирощений пошарово при фіксованій швидкості росту. Температура підкладки забезпечує оптимальну для даної сполуки швидкість поверхневої дифузії. Оскільки хімічні зв'язки в різних матеріалах різні, то відрізняються і енергії активації поверхневої дифузії атомів, що входять до складу цих сполук.

Дифракція швидких електронів на відбиття є поширеним методом аналізу структури поверхні плівок в процесі МПЕ [31]. Велике поширення цього методу пов'язане з простотою використання методики і наявністю великого вільного простору перед зразком.

Ще однією з переваг ДШЕ (на відміну від дифракції повільних електронів) є те, що через велику різницю за енергією між пружно розсіяними електронами і фоном непружного розсіяння, відсутня необхідність ретельної

енергетичної фільтрації (рис. 3.9). А достатність енергії первинних електронів для збудження світіння люмінесцентного екрану не вимагає їх повторного прискорення.

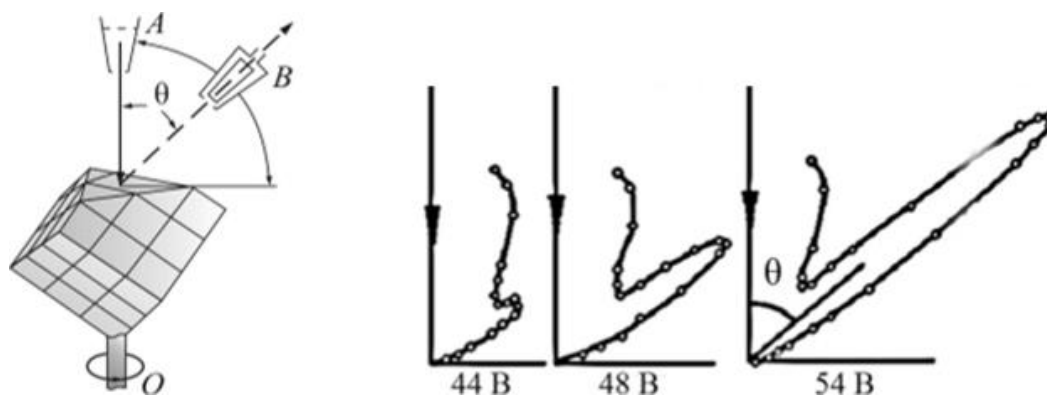


Рис. 3.9. Схема методики дифракції швидких електронів на відбиття

ДШЕ дозволяє безперервно (*in situ*) стежити за ростом епітаксіальних плівок на поверхні, внаслідок того, що фронтальна частина зразка стає доступною для джерел, що випаровуються. Використання падіння з малими кутами ковзання робить цей метод чутливим до мікрорельєфу.

Якісну картину виникнення ДШЕ-осциляцій ілюструє наступний опис. Атомарно гладка поверхня дає максимальне значення інтенсивності дзеркального рефлексу. Утворення двовимірних острівців висотою в один моношар призводить до зменшення інтенсивності дзеркального рефлексу, що пов'язано з розсіянням відбитого пучка на атомних ступенях. Зменшення інтенсивності відбувається до ступеня заповнення $\theta=0.5$, а потім інтенсивність знову починає рости. Ріст інтенсивності пов'язаний зі зрощенням двовимірних острівців і збільшенням внаслідок цього гладкості поверхні.

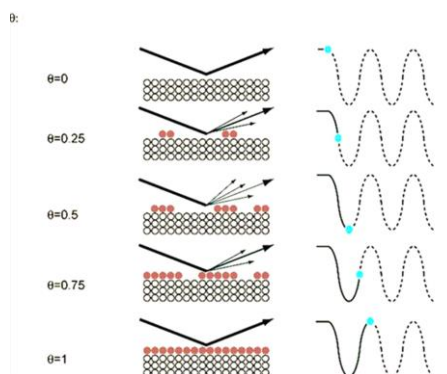


Рис. 3.10. Зміна інтенсивності дзеркального рефлексу в процесі осадження та характерні дифракційні картини від поверхні Si(100) з різною товщиною плівки Ge

Метод ДШЕ дозволяє:

1. Якісно оцінити структурну досконалість поверхні (від добре впорядкованої поверхні спостерігається ДШЕ картина з чіткими яскравими рефlekсами і низьким рівнем фону)
2. Визначити обернену ґратку поверхні з геометрії дифракційної картини
3. Визначити атомну структуру поверхні шляхом порівняння залежностей інтенсивності дифракційних рефlekсів від кута падіння первинного пучка електронів (криві гойдання), розрахованих для структурних моделей, з залежностями, отриманими в експерименті
4. Визначити структуру тривимірних острівців, сформованих на поверхні
5. Контролювати пошаровий ріст епітаксціальних плівок з атомарною точністю за осциляціями інтенсивності дифракційного пучка

Морфологія поверхні гетероструктур $\text{Ge}_{(0.3)}\text{Si}_{(0.7)}/\text{Si}(100)$ вивчалася за допомогою сканувальної тунельної мікроскопії та атомно-силової мікроскопії. Були отримані залежності числа, розміру та густини острівців при різних температурах росту.

Дифракційні картини процесів росту германію та плівок GeSi на кремнії(100) подібні. На першому етапі епітаксialного росту спостерігаються дифракційні картини від плоскості поверхні смачивального шару і картини початку тривимірного росту. Зі зростанням товщини осаджуваного шару ростуть пружні напруження, викликані невідповідністю параметрів ґратки Si і плівок GeSi.

Починаючи з деякого критичного значення товщини відбувається перехід від двовимірного до тривимірного росту, при цьому частина напружень релаксує, що є енергетично вигідним, оскільки знижується вільна енергія системи. Ця товщина, звана також товщиною смачивального шару, залежить від умов росту: температури і концентрації атомів сплаву $\text{Ge}_{(1-x)}\text{Si}_x$.

Момент переходу 2D-3D визначається по різкому збільшенню інтенсивності рефлексу від тривимірного об'єкта, що проходить в напрямку дзеркального рефлексу на дифракційній картині.

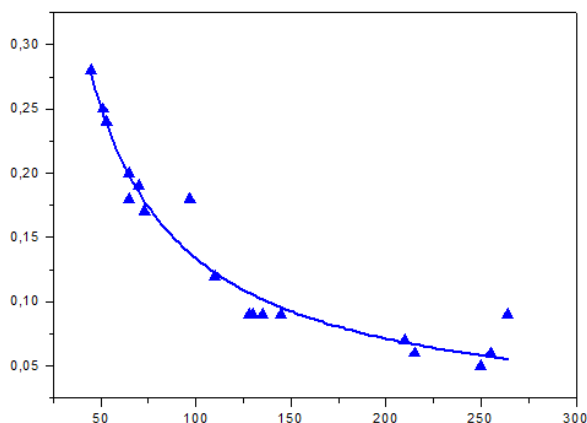


Рисунок 3.11. СТМ-зображення та залежності відношення ширини острівців до їх довжини

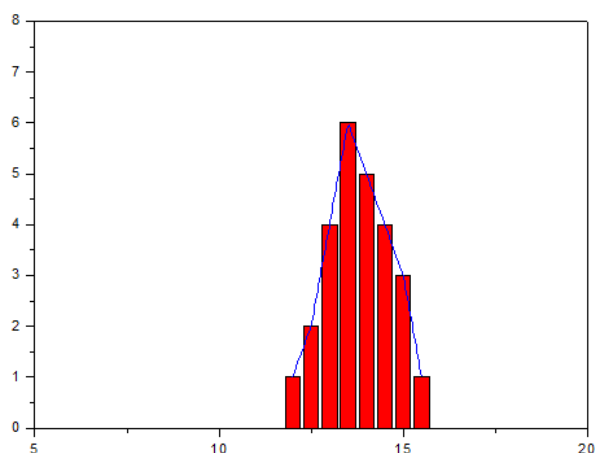


Рис. 3.12 розподіл числа нанониток від їх ширини

Відмінною характеристикою процесів росту германію і плівок GeSi на Si(100) є те, що під час росту не спостерігаються осциляції дзеркального рефлексу. Це означає, що двовимірний ріст плівок GeSi відбувається за рахунок руху атомарних ступенів.

3.6. Практичне застосування та перспективи розвитку

Оптичні властивості наноструктур Ge/Si також значною мірою залежать від їх морфології. Квантові точки можуть поглинати й випромінювати світло в ближньому інфрачервоному діапазоні, що робить їх придатними для застосування у фотодетекторах, сенсорах та ІЧ-лазерах. Інтенсивність випромінювання залежить від дефектності, ступеня напруження та ефективності радіаційної рекомбінації.

Квантово-розмірне обмеження в Ge/Si-структурах зменшує ширину забороненої зони, зсуваючи спектр фотолюмінесценції в довгохвильову область. Завдяки CMOS-сумісності кремнієвих підкладок, інтеграція Ge/Si-наноструктур в оптоелектронні пристрої є стратегічно важливим напрямом розвитку сучасної мікроелектроніки. Наноструктури Ge на Si можуть слугувати як активними елементами (світловипромінювачі, фотодетектори), так і

пасивними (хвилеводи, резонатори), розширюючи функціональність кремнієвих мікросхем.

Зростання інтересу до нанокластерів Ge/Si пов'язано з рядом обставин. Це успіхи в розробці технології отримання досить однорідного за розміром масиву нанокластерів Ge. Розміри нанокластерів вдалося зменшити до значень, що забезпечують прояв ефектів розмірного квантування та електрон-електронної взаємодії аж до кімнатної температури. Розроблені методи сумісні з існуючою кремнієвою технологією виготовлення дискретних приладів і схем.

Ріст Si/Ge розчинів, з низьким вмістом дефектів, і Ge/Si гетеропереходів має велике значення для прикладних цілей, таких, наприклад, як електронних і оптичних приладів великої потужності. Технологія A_3B_5 продемонструвала більш кращі характеристики, порівняно з кремнієвою, не дивлячись на це, кремнієва технологія залишається популярнішою на ринку. Головна причина – це ціна. Вартість виготовлення схем, на один квадратний сантиметр, на основі КМОП в сто разів дешевше аналогічних, що використовують A_3B_5 технологію.

По цій причині системи на основі поєднання германію і кремнію давно приваблюють дослідників для можливості отримання приладів з новими характеристиками. Одним з напрямків досліджень на основі поєднання германію і кремнію стало створення структур, що містять $Ge_xSi_{(1-x)}$ нанокластери в кремнієвій матриці.

Такі розробки, що вважалися до останнього часу екзотичними, можуть призвести до справжньої революції в кремнієвій інтегральній технології. Світловипромінюючі та фотоприймальні кремній-германієві пристрої дозволять кремнієвій технології успішно конкурувати з традиційно оптоелектронними матеріалами, такими як сполуки A_3B_5 [21].

Окрім просто наукового інтересу, острівці Ge на Si потенційно можуть застосовуватися як стресори, які змінюють електронні властивості Si, при розсіянні фононів для зменшення теплопровідності та одноканальні надструмові транзистори.

Останні 10 років йде бурхливе зростання досліджень механізмів утворення напружених наноострівців та особливостей їх самоорганізації, як таких що мають практичне застосування в нанoeлектроніці. На основі результатів експериментальних досліджень можна зробити наступні висновки:

1. На основі досліджень росту Ge на шарі твердого розчину GeSi в діапазоні температур 300-700°C отримано масив квантових точок високої густини з однорідністю до 10%.
2. Шляхом відпалу смачивального шару Ge отримано масив нанониток з довжиною більше 200 нм.
3. Отримано масив структур у вигляді чотирьох наноколодязів, званих «quantum fortress».

3.7. Висновки

На основі проведеного аналізу квантово-розмірних ефектів у наноструктурах Ge/Si можна зробити наступні висновки:

1. Фундаментальні основи квантово-розмірних ефектів: Квантово-розмірні ефекти в гетероструктурах Ge/Si призводять до дискретизації енергетичних рівнів та атомоподібного електронного спектру, що відкриває нові можливості для створення високопродуктивних приладів. Електронний спектр ідеальної квантової точки представляє собою набір дискретних рівнів, розділених областями заборонених станів.
2. Самоорганізація за механізмом Странского-Крастанова: Механічне напруження через невідповідність ґратки (~4.2%) забезпечує формування бездефектних квантових точок розмірами 10-100 нм з густиною 10^{10} - 10^{11} см⁻², що є оптимальним для практичних застосувань. Процес самоорганізації викликає появу в системі острівців переважних значень їх характеристик: розмірів, форми, відстаней між острівцями та їх взаємного розташування.

3. Зонна структура та гетеровирівнювання: Гетеровирівнювання типу II в структурах Ge/Si призводить до утворення двовимірного газу дірок, що важливо для високошвидкісних транзисторів. Механічні напруження модифікують зонну структуру, що дозволяє керувати електронними та оптичними властивостями. Валентна зона Ge знаходиться вище, ніж у Si приблизно на 0,5–0,6 eV.

4. Фазовий перехід діелектрик-напівпровідник: Встановлено, що нелегована ненапружена наноплівка германію товщиною $d < 3$ нм перебуває в діелектричному стані. Збільшення товщини, легування донорною домішкою або підвищення вмісту кремнію в підкладці призводить до фазового переходу діелектрик-напівпровідник.

5. Електропровідність та квантово-розмірні ефекти: Відносна питома електропровідність нелегованих наноплівок зменшується зі збільшенням товщини через квантово-розмірні ефекти, тоді як для легованих плівок спостерігається протилежна тенденція. В нелегованій та ненапруженій наноплівці більш ефективно проявляються квантово-розмірні ефекти, котрі призводять до значної зміни концентрації власних носіїв при зміні товщини наноплівки від 2 до 7 нм.

6. Експериментальні методи: Комбінація методів молекулярно-променевої епітаксії, дифракції швидких електронів та сканувальної зондової мікроскопії забезпечує повний контроль над процесом формування та характеристики квантово-розмірних структур. Метод ДШЕ дозволяє безперервно стежити за ростом епітаксціальних плівок та контролювати перехід від 2D до 3D росту.

7. Практичне значення: Сумісність з CMOS-технологією та унікальні електронні і оптичні властивості роблять Ge/Si-наноструктури перспективними для застосування в інтегральній фотоніці, високошвидкісній електроніці, сенсорах та термоелектричних пристроях. Світловипромінюючі та

фотоприймальні кремній-германієві пристрої дозволять кремнієвій технології успішно конкурувати з традиційно оптоелектронними матеріалами.

Отримані результати підтверджують, що квантово-розмірні ефекти у наноструктурах Ge/Si відіграють визначальну роль у формуванні їх фізичних властивостей і відкривають широкі перспективи для розробки нового покоління електронних та оптоелектронних приладів.

ВИСНОВКИ

У магістерській роботі виконано комплексний теоретичний аналіз квантово-розмірних ефектів у напівпровідникових наноструктурах на основі гетеросистеми германій–кремній. Розглянуто фундаментальні фізичні механізми, що визначають електронні властивості низькорозмірних систем, а також проаналізовано роль геометричних параметрів і механічних напружень у формуванні зонної структури наноструктур Ge/Si.

У першому розділі узагальнено основні положення фізики наноструктур і квантово-розмірних ефектів, наведено класифікацію низькорозмірних систем та розглянуто особливості густини електронних станів у дво-, одно- та нульвимірних структурах. Показано, що просторове квантове обмеження призводить до дискретизації енергетичного спектра та істотної модифікації електронних і оптичних властивостей матеріалів. Окрему увагу приділено гетероструктурам Ge/Si як перспективним об'єктам сучасної наноелектроніки.

У другому розділі розглянуто теоретичні підходи та методи дослідження зонної структури напівпровідників з урахуванням деформаційних напружень. Проаналізовано кристалічну структуру деформованих напівпровідникових систем, метод емпіричного псевдопотенціалу, віртуальне кристалічне наближення та теорію потенціалу деформації. Показано, що врахування механічних напружень є необхідним для коректного опису електронних властивостей гетероструктур Ge/Si.

У третьому розділі досліджено квантово-розмірні ефекти в наноструктурах Ge/Si та проаналізовано механізми формування самоорганізованих квантових точок за механізмом Странського–Крастанова. Показано, що поєднання квантового обмеження та деформаційних напружень призводить до зсуву країв зон, зміни ефективних мас носіїв заряду та перерозподілу густини електронних станів. Проаналізовано вплив розмірів і морфології наноструктур на їх електронні властивості.

Отримані результати підтверджують, що гетероструктури Ge/Si є перспективною платформою для створення сучасних електронних і оптоелектронних приладів, зокрема елементів високошвидкісної електроніки та інфрачервоної оптоелектроніки. Матеріали роботи можуть бути використані в подальших теоретичних і експериментальних дослідженнях напівпровідникових наноструктур, а також у навчальному процесі при вивченні курсів з фізики твердого тіла та наноелектроніки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Adachi, S. Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors. Wiley, 2009.
2. Adachi, S. Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2–4- μm optoelectronic device applications. *Journal of Applied Physics* 61(10) (1987), 4869–4876.
3. Allen, P.B., Cardona, M. Theory of the temperature dependence of the direct gap of germanium. *Physical Review B* 23(4) (1981), 1495–1505.
4. Allen, P.B., Cardona, M. Temperature dependence of the direct gap of Si and Ge. *Physical Review B* 27(8) (1983), 4760–4769.
5. Balslev, I. Influence of uniaxial stress on the indirect absorption edge in silicon and germanium. *Physical Review* 143(2) (1966), 636–647.
6. Bester, G. Electronic excitations in nanostructures: an empirical pseudopotential based approach. *Journal of Physics: Condensed Matter* 21(2) (2009), 023202.
7. Cohen, M.L. Nanotubes, nanoscience, and nanotechnology. *Materials Science and Engineering: C* 15 (2001), 1–11.
8. Cohen, M.L., Chelikowsky, J.R. *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
9. Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*. 7th ed., John Wiley & Sons, 1966.
10. Harris, C., O'Reilly, E.P. Nature of the band gap of silicon and germanium nanowires. *Physica E* 32 (2006), 341–345.
11. Delley, B., Steigmeier, E.F. Size dependence of band gaps in silicon nanostructures. *Applied Physics Letters* 67 (1995), 2370.
12. Harrison, W.A. *Pseudopotentials in the Theory of Metals*. W.A. Benjamin, New York, 1966.

13. Fischetti, M.V., Laux, S.E. Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys. *Journal of Applied Physics* 80 (1996), 2234.
14. Nielsen, O.H., Martin, R.M. Stresses in semiconductors: Ab initio calculations on Si, Ge, and GaAs. *Physical Review B* 32(6) (1985), 3792–3805.
15. , Y.-W., Savage, D.E., Lagally, M.G. Kinetic pathway in Stranski–Krastanov growth of Ge on Si(001). *Physical Review Letters* 65(8) (1990), 1020–1023.
16. , D.J., Cerullo, M. Dislocation-free Stranski–Krastanov growth of Ge on Si(100). *Applied Physics Letters* 58(20) (1990), 2276–2278.
17. Schäffler, F. High-mobility Si and Ge structures. *Semiconductor Science and Technology* 12(12) (1997), 1515–1549.
18. , D.J. Si/SiGe heterostructures: from material and physics to devices and circuits. *Semiconductor Science and Technology* 19(10) (2004), R75–R108.
19. Yakimov, A.I., Bloshkin, A.A., Dvurechenskii, A.V., Nikiforov, A.I. Infrared photoresponse from Ge quantum dots in Si p–i–n structures. *Semiconductors* 36(11) (2002), 1315–1318.
20. Liu, J., Kimerling, L.C., Michel, J. High-performance Ge-on-Si photodetectors. *Nature Photonics* 1(7) (2007), 433–435.
21. Wada, K. Silicon photonics — toward monolithic integration. *Electronics Letters* 44(7) (2008), 374–376.
22. Michel, J., Liu, J., Kimerling, L.C. High-performance Ge-on-Si photodetectors. *Nature Photonics* 4 (2010), 527–534.
23. Soref, R. Mid-infrared photonics in silicon and germanium. *Nature Photonics* 4(8) (2010), 495–497.
24. , W., Xiang, J., Timko, B.P., Wu, Y., Lieber, C.M. One-dimensional hole gas in germanium/silicon nanowire heterostructures. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 102(29) (2005), 10046–10050.

25. Chu, S.N.G., Macrander, A.T., Strege, K.E., Johnston Jr., W.D. Misfit stress in InGaAs/InP heteroepitaxial structures grown by vapor-phase epitaxy. *Journal of Applied Physics* 57 (1985), 249–257.
26. Madelung, O. (Ed.). *Semiconductors: Group IV Elements and III–V Compounds*. Springer-Verlag, 1991.
27. Luniov, S.V. Calculation of Electron Mobility for the Strained Germanium Nanofilm. *Journal of Nano- and Electronic Physics* 11(2) (2019), 02023.
28. Luniov, S.V. Calculation of band structure of the strained germanium nanofilm, doped with a donor impurity. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 118 (2020), 113954.
29. Fischetti, M.V. Theory and calculation of the deformation potential electron–phonon scattering rates in semiconductors. In: *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*, K. Hess (Ed.), Kluwer Academic Publishers, 1991.
30. Herring, C., Vogt, E. Transport and deformation-potential theory for many-valley semiconductors with anisotropic scattering. *Physical Review* 101(3) (1956), 944–961.
31. Nolan, M., O’Callaghan, S., Fagas, G., Greer, J.C., Frauenheim, T. Silicon nanowire band gap modification. *Nano Letters* 7(1) (2007), 34–38.
32. Nye, J.F. *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*. Oxford University Press, 1985.