ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 4, № 2 (2000) с. 165–168

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No. 2 (2000) p. 165–168

ЗАЛЕЖНІСТЬ СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНА НАПРУЖЕНОЇ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ ZnSe/GaAs ВІД ВІДСТАНІ МІЖ ДИСЛОКАЦІЯМИ НЕВІДПОВІДНОСТИ

Р. М. Пелещак[1], Б. А. Лукіянець[2], В. П. Тупичак[1]
[1] *Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. І. Франка, 24, Дрогобич, 82100, Львівська обл., Україна*
[2] *Державний університет "Львівська політехніка", вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна*

(Отримано 22 вересня 1999 р.; в остаточному вигляді — 23 травня 2000 р.)

У рамках моделі деформаційного потенціялу отримано вираз для усередненого деформаційного потенціялу, створеного дислокаційною стінкою залежно від відстані d між дислокаціями невідповідности. Показано, що в гетероструктурах з дислокаціями невідповідности енерґія основного стану електрона залежно від міждислокаційної відстані змінюється немонотонно.

Ключові слова: гетероструктури, деформаційний потенціял, дислокації невідповідности.

PACS number(s): 73.20.At, 73.20.Dx

I. ВСТУП

Гетероепітаксія напівпровідників з різними постійними ґраток вимагає обмежень у критичних товщинах епітаксіяльних шарів. Зокрема, в [1] експериментально досліджено, що нарощувані гетероепітаксіяльні шари ZnSe можуть бути як розтягнуті, так і стиснуті. Характер деформації в цьому випадку залежить від відстані h між шаром ZnSe й гетеромежею. У шарах ZnSe, товщини яких менші, ніж критичне значення h_c ($0 < h < h_c$, для ZnSe $h_c \simeq 0.15$ мкм [1]), виникають двовісні деформації стиску в площині, паралельній до гетероплощини, однакові для всіх шарів, які зумовлені розбіжністю параметрів ґраток контактуючих кристалічних систем. Ці деформації поступово спадають у діяпазоні $h_c < h < h_1 \approx 0.88$ мкм завдяки появі при h_c дислокацій невідповідности, які вибудовуються паралельно одна до одної на приблизно однаковій відстані "d" в стінку [1–4] (рис. 1).

У цій праці в рамках моделі деформаційного потенціялу [5] розраховано спектр електронних станів у потенціяльній ямі, створеній стінкою дислокацій невідповідности залежно від відстані d між дислокаціями в ZnSe/GaAs.

II. МОДЕЛЬ ПОТЕНЦІЯЛЬНОЇ ЯМИ, СТВОРЕНОЇ СТІНКОЮ ДИСЛОКАЦІЙ

Деформація $U_{mech.}(x,y) = Sp\hat{U}_{mech.}(x,y)$, створена дислокаційною стінкою краєвих дислокацій у ZnSe (площина ZOY) на відстані $h_c(OX)$ від межі контактуючих кристалічних систем ZnSe/GaAs (рис. 1), може бути описана співвідношенням [6]

$$U_{mech.}(x,y) = \frac{U_0 \sin(\theta y)}{[\mathrm{ch}(\theta|x|) - \cos(\theta y)]d}, \tag{1}$$

де $U_0 = \frac{b(1-2\nu)}{2(1-\nu)}$ ($\mathbf{b} = (b,0,0)$ - вектор Бюрґерса, ν — коефіцієнт Пуассона, для ZnSe $\nu \simeq 0.27$), $\theta = \frac{2\pi}{d}$.

Оскільки пружна енерґія локалізована в області товщиною d , яка прилягає до стінки дислокацій [4], то параметр механічної деформації $U_{mech.}(x,y)$ практично відрізняється від нуля тільки в об'ємі $\sim 2d\Delta a^2$($\Delta a = a_2 - a_1$, a_1, a_2 — параметри ґраток ZnSe і GaAs у площині нарощуваного шару). У результаті, замість параметра механічної деформації $U_{mech.}(x,y)$ у деформаційному потенціялі $V_{mech.}(x,y) = -|a_c|U_{mech.}(x,y)$ (a_c — константа деформаційного потенціялу, для ZnSe $a_c = -3.65eV$[8]), можна скористатись його середнім значенням, тобто $\bar{U}_{mech.}$

$$\bar{U}_{mech.} = \frac{1}{2d}\lim_{\Delta a \to 0}\frac{1}{\Delta a}\int\limits_{-d}^{+d}\int\limits_{a_1}^{a_2} U_{mech.}(x,y)dxdy. \tag{2}$$

Підставимо вираз $U_{mech.}(x,y)$ (1) у формулу (2) і проінтеґруємо за y. Матимемо:

$$\bar{U}_{mech.} = \frac{U_0}{\theta}\frac{1}{2d^2}\int\limits_{-d}^{+d} F(x)dx, \tag{3}$$

де

$$F(x) = \lim_{\Delta a \to 0}\frac{1}{\Delta a}\ln\left|\frac{A(x) - \cos(\theta a_2)}{A(x) - \cos(\theta a_1)}\right|, \tag{4}$$

$$A(x) = \mathrm{ch}(\theta|x|).$$

Оскільки деформація локалізована в околі стінки дислокації $x \sim 0$ [4,7], то $A(x) \simeq 1$. Ураховуючи останю умову,

$$F \simeq \lim_{\Delta a\to 0}\frac{1}{\Delta a}\ln\left|\frac{1-\cos(\theta a_2)}{1-\cos(\theta a_1)}\right|$$

$$=\lim_{\Delta a\to 0}\frac{1}{\Delta a}\ln\left|\frac{\sin^2(\frac{\theta}{2}a_2)}{\sin^2(\frac{\theta}{2}a_1)}\right| = \frac{2\pi}{d}\mathrm{ctg}\left(\frac{\pi a_1}{d}\right). \qquad (5)$$

Підставивши (5) у (3) і проінтеґрувавши, отримаємо

$$\bar{U}_{mech.} = \frac{U_0}{d}\mathrm{ctg}\left(\frac{\pi a_1}{d}\right), \quad d \neq \frac{a_1}{k}, \quad k = 1, 2, 3\ldots \qquad (6)$$

Таким чином, потенціяльну деформаційну яму для електрона, створену стінкою дислокацій, можна описати двомірним усередненим потенціялом

$$\bar{V}_{mech.} = \begin{cases} -|a_c|U_0\cdot\frac{\mathrm{ctg}(\frac{\pi a_1}{d})}{d}, & 0\le\rho\le d\\ 0, & \rho > d\end{cases}, \qquad (7)$$

де $\boldsymbol{\rho} = \{x, y\}$;

Як видно з формули (7), при $d > \frac{2a_1}{2k+1}$ потенціял $\bar{V}_{mech.}$ має притягувальний характер, а при $\frac{a_1}{k+1} < d < \frac{2a_1}{2k+1}$ — відштовхувальний.

Зі збільшенням відстані d між дислокаціями невідповідности глибина $\bar{V}_{mech.}$ потенціяльної деформаційної ями (7) зменшується і при $d\to\infty$ дорівнює

$$\bar{V}_{mech.}(d\to\infty) = -\frac{|a_c|U_0}{\pi a_1}. \qquad (8)$$

Цей випадок (збільшення d) може фізично реалізуватись у гетероструктурах зі спадним характером розбіжности параметрів ґраток на межі $\left(\frac{\Delta a}{a}\simeq\frac{b}{d}\to 0\right)$.

Спектр електрона в деформаційній потенціяльній ямі (7) стінки дислокацій знаходимо з рівняння Шредингера

$$\hat{H}\Psi_{n_\rho,m}(\rho,\varphi,z) = E\Psi_{n_\rho,m}(\rho,\varphi,z), \qquad (9)$$

де

$$\hat{H} = -\alpha^*\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]+\bar{V}_{mech.}(\rho) \quad (10)$$

— гамільтоніян електрона в полі деформаційного потенціялу (7) стінки дислокацій, напрям яких збігається з віссю Z (рис. 1), записаний у циліндричній системі координат; $\alpha^* = \frac{\hbar^2}{2m^*}$.

Власні функції оператора $\hat{H}$ можна записати у вигляді

$$\Psi_{n_\rho m}(\rho,\varphi,z) = R_{n_\rho|m|}(\rho)exp[i(m\varphi+k_z z)], \qquad (11)$$

де $m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$. Функція $R_{n_\rho|m|}(\rho)$ при $E_{n_\rho|m|} < 0$ задовольняє рівняння

$$-\alpha^*_{||}\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right]R_{n_\rho|m|}(\rho)+\bar{V}_{mech.}(\rho)R_{n_\rho|m|}(\rho)$$

$$= E_{n_\rho|m|}R_{n_\rho|m|}(\rho), \qquad (12)$$

де $\alpha^*_{||} = \frac{\hbar^2}{2m^*_{||}}$, $m^*_{||}$ — ефективна маса носіїв у площині нарощуваного шару ZnSe.

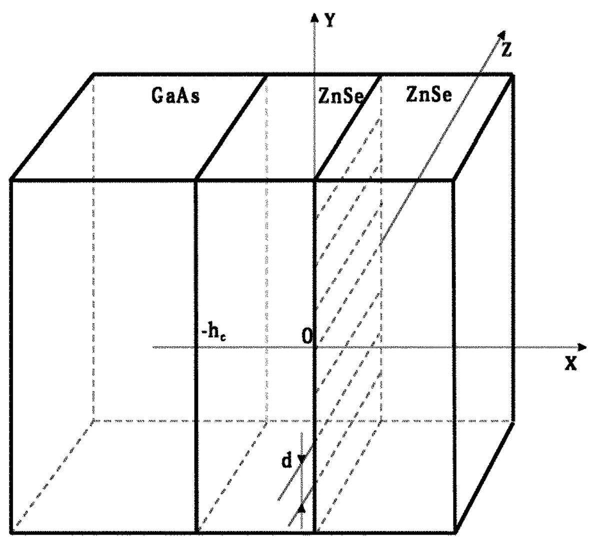

Рис. 1. Схематичне зображення гетероепітаксійного шару ZnSe зі стінкою краєвих дислокацій на підкладці GaAs (100). Штриховими лініями позначено стінку краєвих дислокацій, відстань між якими d.

З урахованням конкретного вигляду потенціялу (7) і крайових умов

$$R_{n_\rho|m|}(0) = 0, \quad R_{n_\rho|m|}(+\infty) = 0 \qquad (13)$$

розв'язок рівняння (12) матиме вигляд [9,10]

$$R_{n_\rho|m|}(\rho) = \begin{cases} C_1 J_{|m|}\left(\sqrt{\frac{1}{\alpha^*_{||}}\left(|a_c|U_0\frac{\mathrm{ctg}(\pi a_1/d)}{d} - |E_{n_\rho|m|}|\right)}\cdot\rho\right), & 0<\rho<d\\ C_2 K_{|m|}\left(\sqrt{\frac{1}{\alpha^*_{||}}|E_{n_\rho|m|}|}\cdot\rho\right), & \rho > d\end{cases}, \qquad (14)$$

де $K_{|m|}$ — функція Макдональда, $J_{|m|}$ — функція Бесселя.

Умови неперервности хвильової функції (14) і її похідної в точці $\rho = d$ приводять до співвідношення

$$\sqrt{| E_{n_\rho|m|} |}J_{|m|}\left(\sqrt{\frac{d^2}{\alpha^*_{||}}\left(|a_c|U_0\frac{\mathrm{ctg}(\pi a_1/d)}{d} - | E_{n_\rho|m|} |\right)}\right)K'_{|m|}\left(\sqrt{\frac{d^2}{\alpha^*_{||}} | E_{n_\rho|m|} |}\right) \tag{15}$$

$$= \sqrt{|a_c|U_0\frac{\mathrm{ctg}(\pi a_1/d)}{d} - | E_{n_\rho|m|} |}J'_{|m|}\left(\sqrt{\frac{d^2}{\alpha^*_{||}}\left(|a_c|U_0\frac{\mathrm{ctg}(\pi a_1/d)}{d} - | E_{n_\rho|m|} |\right)}\right) \cdot K_{|m|}\left(\sqrt{\frac{d^2}{\alpha^*_{||}} | E_{n_\rho|m|} |}\right),$$

з якого визначають енерґетичні рівні дискретного спектра $\left(-|a_c|U_0\frac{\mathrm{ctg}(\pi a_1/d)}{d} < E_{n_\rho|m|} < 0\right)$.

Розглянемо випадок неглибокої потенціальної ями

$$k_0 d << \mathrm{tg}(\pi a_1/d), \tag{16}$$

де $k_0 = \frac{2|a_c|}{\alpha^*_{||}}U_0$.

Для цього випадку арґументи циліндричних функцій у співвідношенні (15) малі. При $m = 0$ з урахуванням формул

$$J_0(x) \approx 1, \quad J'_0(x) \approx -\frac{x}{2}, \quad K_0(x) \approx ln(\frac{2}{x}), \quad K'_0(x) \approx -\frac{1}{x},$$

справедливих при $x << 1$, співвідношення (15) набуває вигляду

$$\frac{d^2}{4\alpha^*_{||}}\left(|a_c|U_0\frac{\mathrm{ctg}(\pi a_1/d)}{d} - | E_{n_\rho 0} |\right)\ln\left(\frac{4\alpha^*_{||}}{d^2 | E_{n_\rho 0} |}\right) \approx 1. \tag{17}$$

З розв'язку рівняння (17) можна отримати енерґію основного стану електрона E_{00} залежно від d — відстані між дислокаціями невідповідности в ZnSe/GaAs. На рис. 2 наведені чисельні розрахунки такої залежности. З нього випливає, що при значеннях d більших, ніж 14 Å, енерґія E_{00} має немонотонний характер. Таку її поведінку, очевидно, можна пояснити тим, що з ростом d відбувається аналогічна зміна профілю потенціальної ями (7), створеної стінкою дислокацій. При цьому мінімальне значення E_{00} досягається при $d = 29$ Å і дорівнює -45 meV.

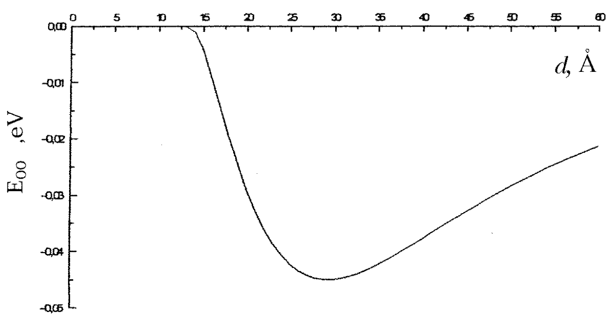

Рис. 2. Зміна енерґії основного стану електрона E_{00} залежно від відстані d між дислокаціями невідповідности.

На експерименті така зміна енерґії основного стану електрона від d, очевидно, повинна проявитись на зміщенні піка енерґії $h\nu$ при резонансній екситонній люмінесценції [1]. Зокрема, для гетероструктур ZnSe/GaAs і ZnSe/ZnS, $h\nu_{\mathrm{ZnSe/GaAs}} < h\nu_{\mathrm{ZnSe/ZnS}}$, оскільки $\frac{\Delta a}{a} = \frac{b}{d}$ для ZnSe/GaAs становить приблизно 0.5%, а для ZnSe/ZnS$\simeq$ 4%.

Таким чином, у межах цієї моделі задачі можна зробити такі висновки:

1. При великій відстані між дислокаціями невідповідности $\left(\frac{d}{a_1} >> 1\right)$ потенціальну деформаційну яму описуємо виразом

$$\bar{V}_{mech.}(d \to \infty) = -\frac{|a_c|U_0}{\pi a_1}.$$

2. У гетероструктурах з дислокаціями невідповідности енерґія основного стану електрона залежно від міждислокаційної відстані d змінюється немонотонно.

[1] М. С. Бродин, В. В. Тищенко, Н. В. Бондарь, А. В. Коваленко, А. Ю. Мекекечко, Укр. фіз. журн. **37**, 1802 (1992).
[2] T. Yao, Y. Okado, S. Matsui, K. Ishida, J. Cryst. Growth **81**, 518 (1987).
[3] K. Shahzad, Phys. Rev. B **38**, 8309 (1988).
[4] Л. А. Пастур, Э. П. Фельдман, Физ. тверд. тела **14**, 2689 (1972).
[5] М. А. Разумова, В. Н. Хотяинцев, Физ. тверд. тела **31**, 275 (1989).
[6] А. М. Габович, Физ. мет. металлов. **51**, 1113 (1981).
[7] Н. В. Фомин, Д. В. Шанцев, Физ. тверд. тела **38**, 76 (1996).
[8] G. Chris, Van de Walle, Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989).
[9] М. В. Ткач, В. П. Жаркой, О. М. Маханець, Укр. фіз. журн. **42**, 493 (1997).
[10] В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган, *Задачи по квантовой механике* (Наука, Москва, 1981).

DEPENDENCE OF ELECTRON SPECTRUM OF THE ZnSe/GaAs STRAINED HETEROSTUCTURE ON THE DISTANCE BETWEEN MISFIT DISLOCATIONS

R. M. Peleshchak[1], B. A. Lukiyanets[2], V. P. Tupychak[1]
[1] *Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, 24 I. Franko Str., Drogobych, UA–82100, Lviv Region, Ukraine*
[2] *State University "Lvivska Polytechnica", Department of Physics, 12 Bandery Str., Lviv, UA–79013, Ukraine*

In the framework of deformation potential model the dependence of average deformation potential induced by the dislocation wall on the inter–dislocation distance d is obtained. It is shown that in the heterostructure with misfit dislocation the electron energy of ground state non–monotonously depends on d.