

УДК 537. 311. 322

А.М. Король,
д-р фіз.-мат. наук, проф.
Національний університет
харчових технологій

ЗАЛЕЖНІСТЬ ЕНЕРГЕТИЧНОЇ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ КОНВЕНЦІЙНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАДГРАТОК ВІД ТОВЩИНИ ПОТЕНЦІАЛЬНИХ БАР'ЄРІВ

Пропонується методика розробки та використання імітаційних моделей об'єктів управління, розроблених на базі стандартних (МЕК 61131) мов програмування програмованих логічних контролерів (ПЛК), для відлагодження програмного забезпечення ПЛК та SCADA/HMI. Запропоновані формули та наведені приклади програм типових імітаційних блоків для ПЛК, які програмуються програмним пакетом UNITY PRO.

Ключові слова: об'єкт управління, імітаційна модель, програмований логічний контролер

Напівпровідникові надгратки (НГ) протягом останніх років викликають значний інтерес в наукових колах. Це викликано двома причинами, а саме, з одного боку НГ мають велике застосовне, практичне значення, з іншого, їх вивчення допомагає краще зрозуміти фізику сучасних напівпровідникових наноструктур. Нову хвилю зацікавленості в наноструктурних НГ викликало створення графену та його інтенсивне вивчення (див. нпр. [1–2]), але дослідження фізичних процесів в конвенційних НГ також залишаються широкими.

В наших попередніх роботах розглядалися різні типи НГ, зокрема, періодичні та неупорядковані [3], НГ Фібоначчі [4], ієрархічні структури [5], тощо. Однак питань, які потребують свого висвітлення, залишається ще багато. Одне з них пов'язане із надзвичайним прогресом в технології виготовлення наноструктур, у все більшому удосконаленні процесу їх якісної мініатюризації. Стосовно напівпровідникових НГ це, зокрема, виявляється у можливості виготовлення якісних дуже тонких потенціальних бар'єрів та квантових ям (аж до декількох моношарів речовини). У зв'язку із цим постає необхідність ретельного дослідження властивостей НГ із тонкими бар'єрами.

В даній роботі вивчається залежність енергетичної зонної структури періодичних напівпровідникових надграток з розсіювальними центрами в потенціальних бар'єрах від товщини бар'єрів.

Розглянемо одновимірну надгратку, складену із скінченного числа прямокутних бар'єрів висотою V та шириною d , розміщених вздовж осі Ox перпендикулярно до неї. Зліва направо вздовж цієї осі поширюється електронна хвиля з енергією E . Вважатимемо, що в кожному бар'єрі такої НГ є одна «домішкова площа глибоких рівнів» (див. [6]). В роботі [6] зазначалось, що хвильові функції центрів такої домішкової площини різко згасають лише в напрямку, перпендикулярному до гетеромереж. Ця обставина дає можливість моделювати потенціал домішкового центра δ — функцією з потужністю β . Тоді гамільтоніан розглядуваної системи можна представити у вигляді

$$\hat{H} = \frac{d^2}{dx^2} - 2m_b(V - E) + \beta\delta(x - x_j) \quad (1)$$

де m_b — ефективна маса електрона в бар'єрній області, x_j — координата домішкового центра; прийнято атомні одиниці вимірювання.

© Король А.М., 2012

Коефіцієнт трансмісії електронної хвилі крізь надгратку T обчислюється методом трансферних матриц. Інтервали енергій, для яких $T \approx 1$, утворюють дозволені енергетичні зони. Явний вигляд трансферних матриць, які переносять розв'язок рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) через гетеромережі та домішкову площину, наведено, наприклад, в наших роботах [3–5].

Результати розрахунків енергетичного спектра розглядуваної надгратки представлено на рисунку 1. На цьому зображено залежність енергетичної зонної структури від товщини потенціальних бар'єрів для НГ, побудованій на основі тунельно-резонансної структури кремній-карбід кремнію. Параметри цієї структури дорівнюють: висота потенціального бар'єру $V = 0,4 \text{ eV}$, ефективна маса електронів в бар'єрах і квантових ямах $m_d = m_w = 0,2 m_0$, де m_0 — маса вільного електрона. Інші параметри НГ взято такими: кількість періодів $L = 20$, ширина квантових ям $W = 110$ атомних одиниць, потужність d — потенціала $\epsilon = -0,12$ ат.од., домішкові площини розміщені посередині бар'єрів. Зони дозволених (резонансних) енергій на рисунку штриховані.

В розглядуваних надгратках товщина бар'єрів грає роль відстані між атомами в періодичних структурах, складених з цих атомів, — при великих d енергетичний спектр являє собою набір ізольованих ліній, які при зменшенні d перетворюються на енергетичні зони. В наведеній на рисунку конкретній залежності звертають на себе увагу такі особливості. При великих товщинах бар'єрів енергетична діаграма складається із спектра двобар'єрної ТРС без домішок (який за даних параметрів має три резонансні лінії E^0_1, E^0_2, E^0_3) плюс резонанс відповідної однобар'єрної структури (тобто, з тим ж значенням v, d, ϵ, m_g ; резонансні значення енергії для однобар'єрної структури показані штриховою лінією). Прослідкуємо за змінами енергетичного спектра, які відбуваються при переході від більших значень d до менших. На рисунку видно, що чотири резонансні лінії перетворюються на чотири мінізони, що розширюються, — три з них походять із резонансів двобар'єрної структури, а четверта — від резонанса однобар'єрної ТРС. При подальшому зменшенні d трансформації спектра зводяться до подальшого розширення зон, їх зміщення і на певних ділянках осі абсцис — до злиття двох зон в одну, так що їх загальна кількість змінюється від чотирьох до трьох. Ці зміни спектра пояснюються, звичайно, сильною взаємодією резонансних станів в бар'єрах між собою та з резонансами в квантових ямах. Зазначимо, що енергетичне положення резонанса в однобар'єрної ТРС залежить від d , зміщуючись в бік менших енергій при зменшенні d (дивись штрихову лінію на рисунку).

Зона, яка походить від резонанса в ОБТРС («бар'єрна»), пов'язана з положенням цього резонанса і тому теж зменшується в бік менших енергій. При цьому відбувається злиття «бар'єрної» зони спочатку з зоною, пов'язаною із середнім резонансом квантової ями, а потім і з нижньою зоною. Нарешті, «бар'єрна» зона опускається в підбар'єрну область, але продовжує чинити сильний вплив на ширини та розташування мінізон, пов'язаних із резонансами квантової ями.

Нарешті, звернемо увагу на те, що глибокі рівні в надгратках можуть відігравати роль, яка істотно відрізняється від того, що відбувається в об'ємі напівпровідника. В НГ ширина зони, що утворюється із резонансів домішкових центрів, є одного порядку із шириною зон, утворених із резонансів квантових ям, і сильна взаємодія резонансних станів може приводити до вельми істотного зміщення енергетичних мінізон, а також до їх перекриття.

Висновок. Проаналізовано залежність енергетичної зонної структури напівпровідникової надгратки на основі Si — SiC від товщини потенціальних бар'єрів. Показано, що «бар'єрні» електронні стани чинять сильний вплив на положення та ширину зон резонансних станів в квантових ямах, і цей вплив істотно залежить від товщини потенціальних бар'єрів (при малих їх значеннях).

ЛІТЕРАТУРА

1. Wang L-G., Zhu S-Y. Electronic band gaps in graphene superlattices // Phys. Rev. B. 2010. — Vol. 81. — P. 205444 — 205452.
2. Bliokh Y.P., Freilikher V., Nori F., Savel'ev S. Transport and localization in periodic graphene superlattices // Phys. Rev. B. 2009. — Vol. 79. — 075123 — 075130.
3. Korol A.M. Effect of scattering in the potential barriers on the tunneling transparency of a disordered superlattice // Physical Review B. — 1994. — 50. — №4. — P. — 2661–2663.
4. Korol A.M. On tunneling spectra of a new version of Fibonacci superlattices // Physica Status Solidi (b). — 1994. — 183. — P. K51–K53.
5. Король А.Н. Об энергетическом спектре иерархической сверхрешетки с примесями в потенциальных барьерах // Письма в ЖЭТФ. — 1994. — 59. — №10. — С.659 — 662.
6. Beltram F., Capasso F. Interaction phenomena between deep levels and minibands in semiconductor superlattices // Phys. Rev. B. — 1988. — 38. — P. 3580 — 3582.

А.М. Король

**Зависимость энергетической зонной структуры
конвенционных полупроводниковых сверхрешеток
от толщины потенциального барьера**

Рассматривается полупроводниковая сверхрешетка, состоящая из прямоугольных потенциальных барьеров с рассеивателями. В рамках метода эффективной массы рассчитывается зонная структура данной сверхрешетки и анализируется ее зависимость от толщины барьеров. Расчет проведен для полупроводниковой структуры: кремний-карбид кремния.

Ключевые слова — полупроводниковая сверхрешетка, электронные состояния в потенциальных барьерах и квантовых ямах, кремний — карбид кремния.

А.М. Korol'

**The dependence of energetic band structure
of conventional semiconductor superlattices on the thickness
of the potential barrier**

Semiconductor superlattice consisting of the rectangular potential barriers with diffusers is considered. In the framework of the methods of effective mass band structure of the superlattice is calculated and its dependence on the barrier thickness is analyzed. The calculation is performed for the semiconductor structure: silicon-silicon carbide.

Key words: semiconductor superlattice, electronic states in potential barriers and quantum wells, silicon — silicon carbide.

e-mail: jimp@ukr.net

Надійшла до редколегії 10.04.2012 р.