

УДК 538.915; 538.935

Ю.В. Нестор, І.В. Бойко канд. фіз.-мат. наук, доц.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Україна

## САМОУЗГОДЖЕНИЙ РОЗРАХУНОК ПОТЕНЦІАЛЬНОГО ПРОФІЛЮ AlN/GaN НАНОСТРУКТУР

J.V. Nestor, I.V. Boyko Ph.D, Assoc. Prof.

### SELF-CONSISTENT CALCULATION OF AlN/GaN NANOSTRUCTURES POTENTIAL PROFILE

Робота сучасних квантових каскадних лазерів (ККЛ) та квантових каскадних детекторів (ККД) [1-4] створених на основі напівпровідників GaAs, InAs, AlAs визначається рядом обмежуючих факторів, зокрема необхідністю обходження наноприладів та вузьким частотним діапазоном їх роботи.

Новим напрямком, який тільки починає розвиватися, є розробка ККЛ та ККД на основі нітридних напівпровідників AlN, GaN, та теоретичне дослідження процесів, що відбуваються у резонансно-тунельних структурах (РТС) на їх основі. Особливість вищезгаданих нітридних напівпровідникових матеріалів є те, що для AlN/GaN наноструктур, внаслідок їх анізотропних властивостей результуючий дипольний момент, елементарної ґратки виявляється некомпенсованим, що є фактором виникнення спонтанної поляризації напівпровідника. Крім того, на гетеромежах експериментально реалізованих наноструктур присутня неузгодженість сталих ґраток контактних матеріалів, що спричиняє п'єзоелектричну поляризацію. Дослідження потенціальних профілів таких РТС, становить важливу теоретичну проблему, вирішення якої дозволяє з'ясувати особливості електронного тунельного транспорту у таких наносистемах.

У пропонованій роботі, з використанням моделі ефективних мас електрона та прямокутних потенціальних ям і бар'єрів з урахуванням макроскопічної поляризації РТС знайдено самоузгоджені розв'язки системи рівнянь Шредінґера:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{m(E, z)} \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \right) + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (1)$$

та Пуассона:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon(z) \frac{\partial \varphi_H(z)}{\partial z} \right) = -e \rho(z), \quad (2)$$

де густина зарядів, локалізованих у межах РТС:

$$\rho(z) = \sum_{p=0}^5 \sigma(z_p) [\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1})] + e(N_D^+(z) - n(z)), \quad (3)$$

де :

$$\sigma(z_p) = P(z) \Big|_{z=z_p+0} - P(z) \Big|_{z=z_p-0}, \quad (4)$$

а  $P$  - величина поляризації, яка виникає у довільному шарі РТС напівпровідникового типу  $A_x B_{1-x} N$ , виражається сумою спонтанної  $P_{SP}$  та п'єзоелектричної  $P_{PZ}$  поляризацій, залежно від:

$$P = P(x) = P_{ABN} = P_{ABN}^{PZ}(x) + P_{ABN}^{SP}(x). \quad (5)$$

Ефективний потенціал для електрона визначається як:

$$V(z) = \Delta E_C(z) + e\varphi_H(z) + V_{ex}(z) + V_E(z), \quad (6)$$

де  $\Delta E_C(z)$  - потенціальний профіль РТС для електрона, розрахований без урахування зовнішніх полів,  $V_{ex}(z) = -\left(\frac{9}{4\pi^2}\right)^{1/3} \left[1 + \frac{0,6213r_s}{21} \ln\left(1 + \frac{21}{r_s}\right)\right] \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_s \epsilon(z) a_B^*(z)}$  - обмінно-кореляційний потенціал, розрахований у апроксимації Федіна-Лундквіста,  $V_E(z)$  - потенціал, зумовлений полями макроскопічної поляризації та зовнішнім електричним полем.

Безпосередні розрахунки виконувались для експериментально реалізованої РТС, що слугувала каскадом ККД [4]. Геометричні параметри РТС такі: товщини потенціальних бар'єрів:  $\Delta_1 = 2$  nm;  $\Delta_2 = 1$  nm;  $\Delta_3 = 1$  nm, ширини потенціальних ям:  $d_1 = 2.08$  nm;  $d_2 = 15$  nm.

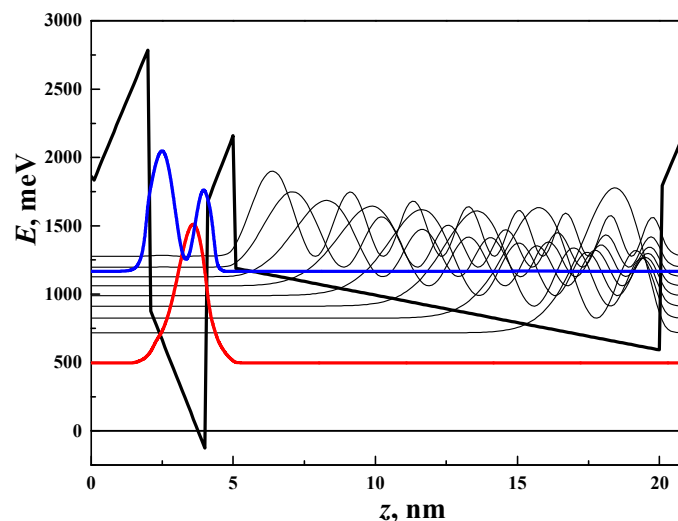


Рисунок 1. Енергетична структура каскаду ККД з вказаними енергетичними рівнями стаціонарних станів електрона та відповідними розподілами ймовірності його знаходження у межах РТС

На Рис. 1. приведено енергетичну структуру каскаду ККД з вказаними енергетичними рівнями стаціонарних станів електрона та відповідними розподілами ймовірності його знаходження у межах РТС. Безпосереднім розрахунком встановлено, що розрахована робоча частота ККД відрізняється від експериментально реалізованої не більш як на 3%.

### Література

1. J.M. Wolf, A. Bismuto, M. Beck, and J. Faist. Distributed-feedback quantum cascade laser emitting at 3.2  $\mu\text{m}$  // Optics Express, 22(2), pp. 2111-2118 (2014).
2. Boyko I.V. Role of Two-Photon Electronic Transitions in the Formation of Active Dynamic Conductivity in a Three-Barrier Resonance Tunneling Structure with an Applied DC Electric Field // Ukr. J. Phys. 2016, Vol. 61, N 1, p.66-74
3. I.V. Boyko, A.M. Gryshuk. The Spectrum of Transverse Acoustic Phonons in Planar Multilayer Semiconductor Nanostructures // J. Nano- Electron. Phys. 8 No 4(1), 04001 (2016).
4. S. Sakr, E. Giraud, M. Tchernycheva, N. Isac, P. Quach, E. Warde, N. Grandjean, and F. H. Julien. A simplified GaN/AlGaIn quantum cascade detector with an alloy extractor // Appl. Phys. Lett., 101, pp. 251101-1-251101-4 (2012).