ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 18, № 1 (2017) С. 94-101
DOI: 10.15330/pcss.18.1.94-101

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDSTATE
V. 18, № 1 (2017) P. 94-101

УДК 621.315.592

ISSN 1729-4428

В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.І. Пазюк

Мінізонна електропровідність у надґратках кубічних квантових точок гетеросистеми $InAs/Ga_xIn_{1-x}As$

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Стрийська,3, Дрогобич, 82100, Україна, ri.pazyuk@gmail.com

У даній роботі запропоновано модель надґраток кубічних квантових точок (НККТ) різної вимірності $InAs/Ga_xIn_{1-x}As$. Для визначення енергетичного спектру електронів та дірок надґратки квантових точок використано наближення ефективної маси та модифіковану модель Кроніга-Пенні. У рамках цієї моделі зміною відповідних відстаней між елементами НГ отримано спектри зарядів 3D-, 2D- та 1D-нграток. Обчислено детально залежність енергій від хвильового вектора електронних та діркових надґраткових підзон: підбар'єрних та надбар'єрних. Кількість підбар'єрних підзон визначається розмірами КТ, а ширина кожної підзони задається розміром КТ, відстанями між надґратковими елементами та номером підзони.

Отримано та проаналізовано залежність енергії Фермі та концентрації носіїв струму від температури, концентрації домішок, енергії домішкових рівнів. Враховано залежність часу релаксації електронів від температури, зумовлену розсіюванням носіїв як на фононах, так і на донорних центрах. Досліджено вплив домішкової системи на електропровідність НККТ. Показано, що за наявності глибоких домішок (-750 меВ) температурна залежність провідності $InAs/Ga_xIn_{1-x}As$ НГ має характерні максимуми, які визначаються концентраціями домішок та вимірностями НГ. Для домішок з енергією залягання -150 меВ отримуємо іншу температурну залежність провідності.

Ключові слова: квантова точка, надґратка, електронні стани, мінізона, електрична провідність.

Стаття поступила до редакції 07.02.2017; прийнята до друку 05.03.2017.

Вступ

В останні роки значно зростає інтерес дослідників, інженерів та технологів до низькорозмірних систем, особливий клас яких складають надґратки. Практична значимість таких систем для електроніки та оптоелектроніки пов'язана з підвищенням швидкодії і зниженням енергетичних втрат. Для фундаментальної науки надґратки, зокрема квантових точок, становлять інтерес як абсолютно нові типи штучних матеріалів з незвичайними фізичними властивостями. Шляхом конструювання [1] цих матеріалів сучасні технології дозволяють отримувати наноструктури з наперед заданими фізичними властивостями, які активно використовуються у конкретних електронних і оптоелектронних пристроях [2].

У роботах [3-5] розвинуто теорію електронної динамічної провідності для багатобар'єрних структур як плоскої, так і циліндричної форм,використовуючи моделі ефективних мас електрона та прямокутних потенціалів. Автори [6] досліджують надгратки тунельно зв'язаних КТ GaAs в матриці $Al_xGa_{1-x}As$, періодично розташованих вздовж еліптичного квантового дроту. В роботі показано, що енергетичний спектр електрона у таких надґратках є рядом мінізон енергій, а положення та кількість цих мінізон визначаються розмірами КТ. Ширина дозволених та заборонених мінізон залежить від товщини і висоти потенціальних бар'єрів.

Моделі тривимірних надґраток InAs/GaAs та Ge/Si квантових точок (КТ) різної геометрії (кубічної і тетрагональної) розглядаються у роботах [7, 8]. Авторами знайдено електронний та фононний спектри таких надґраток. Досліджено залежність тензора провідності надґратки від основних її параметрів і показано, що властивості надграток більш чутливі до міжточкових відстаней, ніж до форми квантових точок.

В роботі [9] в наближенні сильного зв'язку досліджуються електричні властивості надграток сферичних квантових точок (НСКТ) $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ різної вимірності, в залежності від енергії рівня Фермі та температури, концентрації алюмінію в матриці. Обчислено електропровідність, що містить внески *s*- і трьох *p*-мінізон для заданих параметрів

системи, максимум якої знаходиться біля центру мінізони. Ріст електропровідності спостерігається при зменшенні радіуса КТ та концентрації алюмінію, а також зі збільшенням вимірності НСКТ. Досліджено також температурну залежність електропровідності для різних параметрів таких систем.

У даній роботі запропоновано модель надґраток кубічних квантових точок (НККТ) різної вимірності $InAs/Ga_xIn_{1-x}As$. Досліджено зонний енергетичний спектр системи. Отримано та проаналізовано температурну залежність енергії Фермі домішкової НККТ. Враховано залежність часу релаксації електронів від температури, зумовлену розсіюванням носіїв як на фононах, так і на донорних центрах. Досліджено вплив домішкової системи на електропровідність НККТ.

Постановка задачі

Розглянемо систему просторово впорядкованих кубічних квантових точок однакового розміру, що знаходяться у матриці, як показано на рис.1, – надґратку кубічних квантових точок (НККТ). Якщо $a_1 = a_2 = a_3$, то НККТ будемо називати 3D-надґраткою, коли ж $a_3 = a_1 \neq a_2$ – 2D-надґраткою, а для $a_3 \neq a_1 = a_2$ – 1D-надґраткою. Зрозуміло, що вектор трансляції над ґратки:

$$\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3,$$

де n_i $(0, \pm1, \pm2, ...)$, $\vec{a}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ – основні вектори трансляції, які за напрямками збігаються з осями декартової системи координат.

Нас цікавлять наногетеросистеми широкозонних напівпровідників. Теоретичне дослідження таких систем часто призводить до потреби розв'язання рівняння Шредінгера для електронів чи дірок. Задачу можна розв'язувати різними методами: скінчених елементів [10], приєднаних плоских хвиль [11] чи псевдопотенціалу [12] та ін. Ми обмежимося дослідженнями НККТ з малими розмірами (2-10 нм) напівпровідникових квантових точок, для яких характерне розмірне квантування заряджених частинок. Через те при визначенні енергій та хвильових функцій не лише електронів, але й дірок (важких дірок) використаємо однозонне наближення та наближення ефективної маси.

Рівняння Шредінгера, яке описує рух однієї зарядженої частинки (електрона чи дірки) в НККТ, можна записати в наступному вигляді:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\nabla\frac{1}{m(\vec{r})}\nabla + V(\vec{r})\right]\psi_\nu(\vec{r}) = E\psi_\nu(\vec{r}), \qquad (1)$$

Періодичний потенціал $V(\vec{r})$, який відповідає нескінченній послідовності кубічних квантових точок:

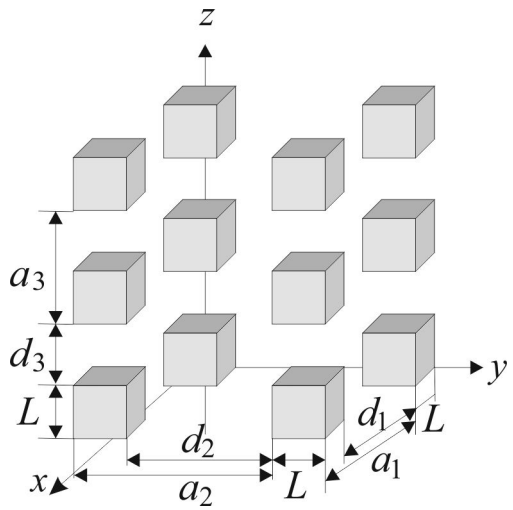

Рис. 1. Геометрична схема надґратки кубічних квантових точок.

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \begin{cases} n_1a_1 \le x \le n_1a_1 + L \\ n_2a_2 \le y \le n_2a_2 + L \\ n_3a_3 \le z \le n_3a_3 + L \end{cases} \\ U_0, & \text{в іншій області простору,} \end{cases} \qquad (2)$$

де $m(\vec{r})$ – ефективна маса частинки.

Рівняння Шредінгера (1) точно розв'язати не можна. Спростимо вираз (2) для потенціальної енергії частинки і наближено зобразимо $V(\vec{r})$ у вигляді суми трьох незалежних періодичних функцій координат *x, y* і *z:*

$$V(\vec{r}) = V(x) + V(y) + V(z).$$

Для розрахунку енергетичного спектра електронів (дірок) у надґратці необхідно розв'язати рівняння Шредінгера з періодичним потенціалом:

$$V(x_i) = \begin{cases} 0, & n_ia_i \le x_i \le n_ia_i + L \\ U_0, & n_ia_i + L \le x_i \le (n_i+1)a_i \end{cases}, \qquad (3)$$

де $i = 1, 2, 3$; $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$. Такий вибір потенціалу дозволяє розділити рух зарядженої частинки за трьома напрямками. Тривимірне рівняння Шредінгера (1) в цьому випадку перепишеться у вигляді трьох ідентичних одновимірних рівнянь. Тоді обвідна хвильова функція рівняння (1) може бути представлена як добуток трьох одновимірних власних функцій:

$$\psi_\nu(\vec{r}) = \psi_{\nu_1,\nu_2,\nu_3}(x_1, x_2, x_3) = \prod_{i=1}^{3}\varphi_{\nu_i}(x_i), \qquad (4)$$

а енергія $E_\nu = E_{\nu_1} + E_{\nu_2} + E_{\nu_3}$. Для визначення E_{ν_i} та φ_{ν_i} необхідно використати рівняння:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{1}{m(\vec{r})}\frac{\partial}{\partial x_i} + V(x_i)\right]\varphi_{\nu_i}(x_i) = E_{\nu_i}\varphi_{\nu_i}(x_i),\ i = 1, 2, 3 \qquad (5)$$

Рівняння Шредінгера (5) відповідають відомій моделі Кроніга-Пенні. Згідно цієї моделі розв'язок кожного рівняння (5) відомий [13]. Енергія системи визначається з відповідних дисперсійних рівнянь в

різних областях енергії частинки.

Якщо $0 < E_{\nu} < U_0$, то дисперсійне рівняння має вигляд:

$$\cos(k_i a_{\nu_i}) - \cos(\chi_{\nu_i} L)\,\mathrm{ch}(\xi_{\nu_i} d) + \frac{\left(\chi_{\nu_i} m_2\right)^2 - \left(\xi_{\nu_i} m_1\right)^2}{2\chi_{\nu_i} m_2 \cdot \xi_{\nu_i} m_1} \sin(\chi_{\nu_i} L)\,\mathrm{sh}(\xi_{\nu_i} d) = 0, \quad (6, a)$$

Коли ж $E_{\nu} > U_0$, то:

$$\cos(k_i a_{\nu_i}) - \cos(\chi_{\nu_i} L)\cos(\xi_{\nu_i} d_{\nu_i}) + \frac{\left(\chi_{\nu_i} m_2\right)^2 + \left(\xi_{\nu_i} m_1\right)^2}{2\chi_{\nu_i} m_2 \cdot \xi_{\nu_i} m_1} \sin(\chi_{\nu_i} L)\sin(\xi_{\nu_i} d_{\nu_i}) = 0, \quad (6, б)$$

де $\chi_{\nu_i} = \sqrt{\frac{2m_1\left(U_0 + E_{\nu_i}\right)}{\mathbf{h}^2}}$, $\xi_{\nu_i} = \sqrt{\frac{2m_2\left|E_{\nu_i}\right|}{\mathbf{h}^2}}$, m_1, m_2 – ефективні маси квазічастинки всередині та ззовні КТ. Отже,

$$E_{\nu}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^{3} E_{\nu_i}(k_i),\ \nu = \{\nu_1, \nu_2, \nu_3\}, \quad (7)$$

Знаючи закон дисперсії електронів та дірок у НККТ, можна визначити питому електропровідність системи. Помістимо дану систему в однорідне електричне поле. Якщо напруженість цього поля відносно невелика, то вектор густини струму визначається такою загальною формулою [14]:

$$\mathbf{j} = \frac{e^2}{4\pi^3}\int \tau(T,E)\,\mathbf{v}\,\frac{\partial f}{\partial E}\left(\mathbf{v}, \nabla\Phi\right) d\mathbf{k}, \quad (8)$$

де f – функція розподілу електронів, $\mathbf{v}$ – їх середня швидкість, $\tau(T)$ – час релаксації; напруженість зовнішнього електростатичного поля виражено через скалярний потенціал $\left(\mathbf{E} = -\nabla\Phi\right)$.

Співвідношення (8) можна записати так:

$$j_i = \sum_{i'} \sigma_{ii'} E_{i'}, \quad (8')$$

У формулі (8') для тензора провідності враховано внесок усіх заповнених електронних мінізон структури, тому:

$$\sigma_{ii'} = \sum_{n} \sigma_{ii'}^{e,n} + \sum_{m} \sigma_{ii'}^{h,m}, \quad (9)$$

де $\sigma_{ii'}^{e,n}$, $\sigma_{ii'}^{h,m}$ – компоненти тензорів електронної та діркової провідності. Зокрема, для електронної провідності маємо:

$$\sigma_{ii'}^{e,n} = \frac{e^2}{4\pi^3 k_B T}\iiint_{BZ} \tau(T,E)\, v_i^{e,n}\left(\mathbf{k}\right) v_j^{e,n}\left(\mathbf{k}\right) \frac{\exp\left[\frac{E_e^n\left(\mathbf{k}\right) - E_F}{k_B T}\right]}{\left\{\exp\left[\frac{E_e^n\left(\mathbf{k}\right) - E_F}{k_B T}\right] + 1\right\}^2} d\mathbf{k}, \quad (10)$$

У формулі (10) введено позначення: e – заряд електрона, k_B – стала Больцмана, T – температура, E_F – енергія рівня Фермі системи електронів, $v_j^n\left(\mathbf{k}\right)$ – i-складова вектора групової швидкості електрона n-підзони:

$$v_i^n\left(k_1, k_2, k_3\right) = \frac{1}{\mathbf{h}} \frac{\partial E_e^n\left(k_1, k_2, k_3\right)}{\partial k_i}.$$

Інтегрування в (10) здійснюється по квазізоні Бріллюена. Аналогічним чином можна записати вираз для матричних елементів діркової провідності.

Енергію Фермі знайдемо з умов електронейтральності. Розглянемо випадок легування матриці одним типом одновалентних донорних домішкових атомів. Тоді для визначення енергії Фермі, як функції температури, отримаємо рівняння:

$$\sum_{n,\mathbf{k}} \frac{2}{\exp\left(\frac{E_e^n(\mathbf{k}) - E_F}{k_B T}\right) + 1} = \sum_{m,\mathbf{k}} \frac{2}{\exp\left(\frac{E_F - E_h^m(\mathbf{k}) +}{k_B T}\right) + 1} + \frac{n_D}{\exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_B T}\right) + 1}, \quad (11)$$

де n_D – концентрація донорів, E_D – енергія залягання донорного рівня, E_F – енергія Фермі гетеросистеми, енергія електронних $E_e^{(\rho)}(\mathbf{k})$ та діркових $E_h^{(m)}(\mathbf{k})$ підзон, енергія залягання донорних

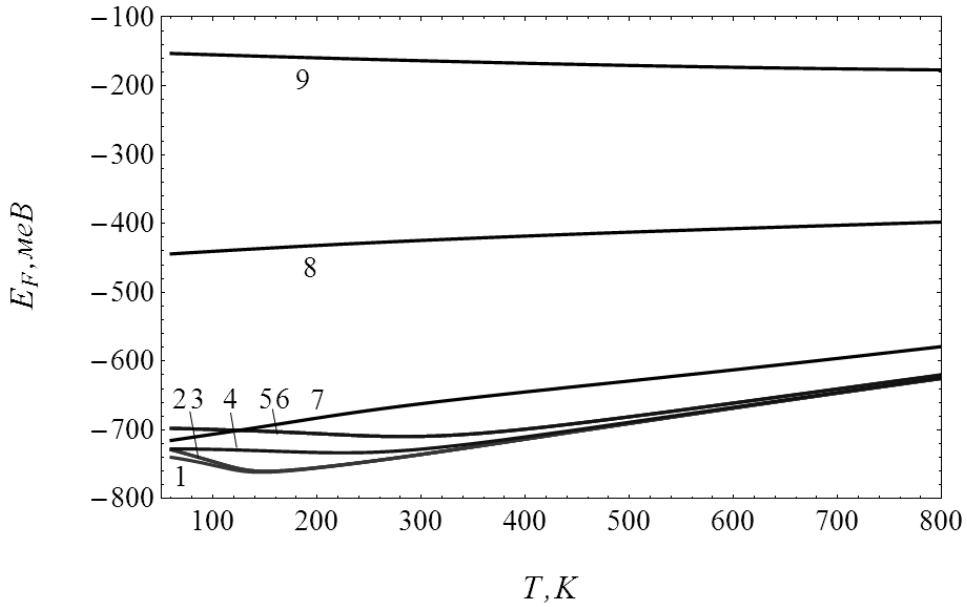

Рис. 2. Температурна залежність енергії рівня Фермі 3D-НККТ InAs/GaAs (L = 96 Å) при різних концентраціях домішок (10^{14} см$^{-3}$ – криві 1, 2, 3; 10^{16} см$^{-3}$ – криві 4, 5, 6; 10^{18} см$^{-3}$ – криві 7, 8, 9) та енергіях залягання домішкового рівня (-750 меВ – криві 1, 4, 7; -450 меВ – криві 2, 5, 8; -150 меВ – криві 3, 6, 9).

станів E_D відрахована від дна зони провідності напівпровідникової матриці. Ліва частина рівняння (11) задає концентрацію електронів у електронних підзонах, перший доданок у правій частині – концентрацію дірок у діркових підзонах, а другий – доданок правої частини рівняння – концентрацію дірок на домішкових рівнях.

З формули (10) видно, що провідність $\sigma_{ij}^{e,n}$ визначається також часом релаксації $\tau(T,E)$. Більшість авторів для простоти припускають, що час релаксації τ є сталим і рівним, наприклад, $\tau_0 = 10^{-12}$ с [8]. При невеликих змінах температури таке припущення у першому наближенні є обґрунтованим. Однак, відомо, що для більшості напівпровідників [15] маємо значну нелінійну зміну часу релаксації з температурою. Ця залежність $\tau = \tau(T,E)$ зумовлена розсіянням електронів як на фононах, так і на донорних центрах. Розсіювання на акустичних фононах за рахунок потенціалу деформації дозволяє записати час релаксації у вигляді [16]:

$$\tau_a = C_a E^{r_a},$$

де $r_a = -\frac{1}{2}$, $C_a = \frac{(2\pi)^2 \mathbf{h}^2}{2B_a\sqrt{2m^3}} = \frac{\pi M c_S^2 \mathbf{h}^4}{V_0 kTE_1^2\sqrt{2m^3}}$, (12)

c_S ; $10^{-5}\frac{см}{с}$ – усереднена фазова швидкість звукових хвиль, m – ефективна маса квазічастинки, V_0 – об'єм елементарної комірки.

Тоді як розсіювання на поляризаційних фононах характеризується наступним часом релаксації:

$$\tau_p = C_p E^{r_p},$$

де $r_p = +\frac{1}{2}$,

$$C_p = \frac{(2\pi)^2 \mathbf{h}^2}{2B_p\sqrt{2m^3}} = \frac{V_0 M_1 M_2 \mathbf{h}^2 \omega_0^2}{4\pi kTe^4 (M_1 + M_2)\sqrt{2m}}, \quad (13)$$

Врахування розсіювання на донорних центрах:

$$\tau_D = C_D E^{r_D},$$

де $r_D = +\frac{3}{2}$,

$$C_D = \frac{(2\pi)^2 \mathbf{h}^2}{2B_D\sqrt{2m^3}} \approx \frac{\varepsilon^2 E^{3/2}\sqrt{2m}}{\pi n_D e^4} \ln^{-1}\left(\frac{8mEr_0}{\mathbf{h}^2}\right), \quad (14)$$

r_0 – радіус екранування, n_D – концентрація донорної домішки.

Загальний час релаксації визначається з рівняння: $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_a} + \frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_D}$.

Аналіз отриманих результатів

Конкретні числові розрахунки проведено для надграток кубічних квантових точок гетеросистеми InAs/Ga_xIn_{1-x}Asз наступними параметрами:

$$m_{1e} = 0,023\, m_0,\ m_{2e} = (0,023 + 0,044x)m_0,$$

$$V_e = 0,77 \text{ еВ}$$

$$m_{1h} = 0,55\, m_0,\ m_{2h} = (0,55 + 0,04x)m_0,$$

$$V_h = 0,33 \text{ еВ}$$

З формули (10) видно, що для визначення питомої провідності НККТ необхідно в першу чергу визначити енергію Фермі гетеросистеми.

На рис. 2 криві температурних залежностей рівня

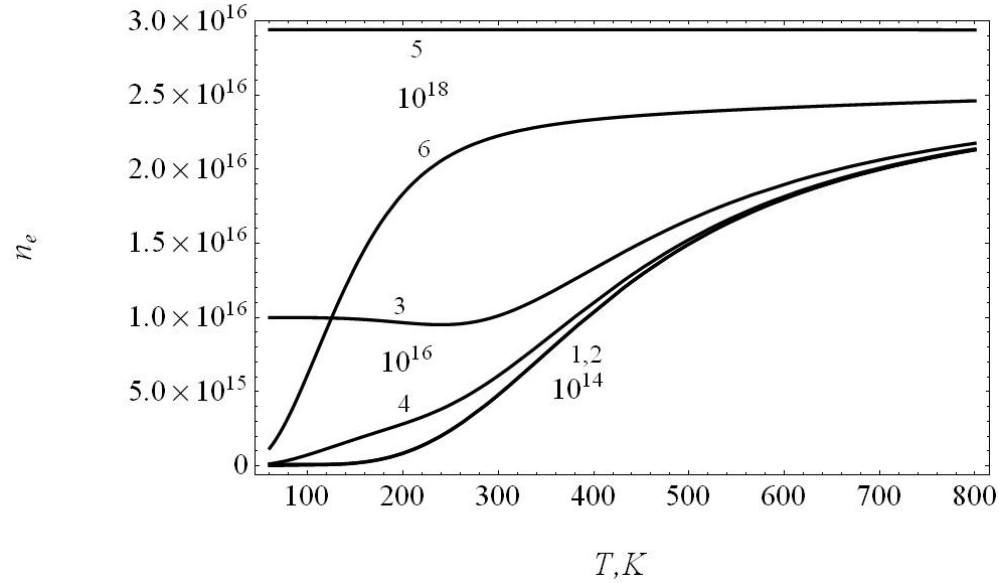

Рис. 3. Температурна залежність концентрації електронів основного стану 3D-НККТ InAs/$Ga_{0.15}In_{0.85}As$ (L = 96 Å) для різних концентрацій домішок (10^{14} см$^{-3}$ – криві 1,2; 10^{16} – криві 3,4; 10^{18} см$^{-3}$ – криві 5, 6) та енергіях залягання домішкового рівня (-150 меВ – криві 1, 3, 5; -750 меВ – криві 2, 4, 6).

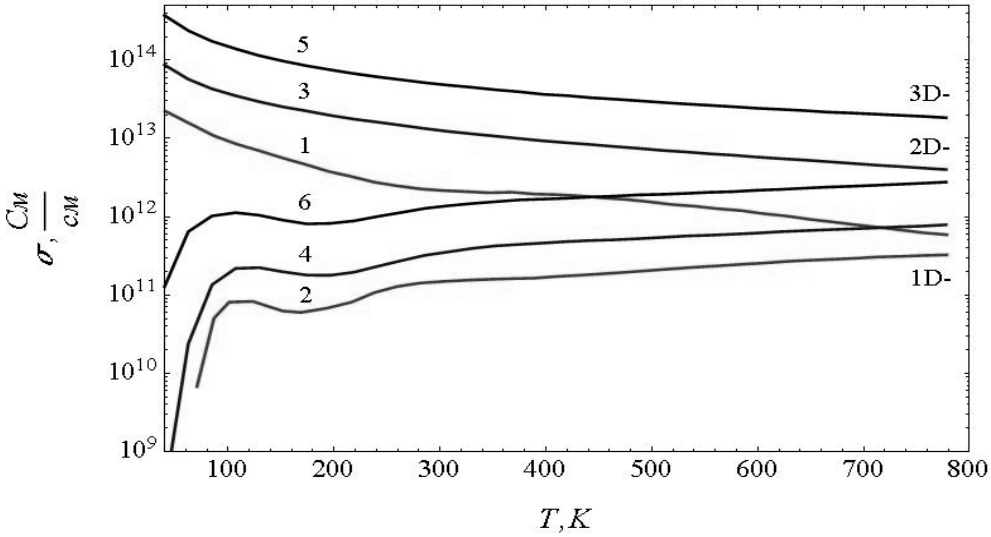

Рис. 4. Температурна залежність електропровідності НККТ InAs/$Ga_{0.15}In_{0.85}As$ (L = 96 Å) різних вимірностей (1D – криві 1, 2; 2D – криві 3, 4; 3D – криві 5, 6), енергій залягання домішкового рівня E_D (-150 меВ – криві 1, 3, 5; -750 меВ – криві 2, 4, 6) та концентрації домішок 10^{18} см$^{-3}$.

Фермі наведені для випадку 3D-НККТ InAs/GaAs (L = 96 Å) при різних концентраціях донорних домішок $n_D = 10^{14}, 10^{16}, 10^{18}$ см$^{-3}$ та різних значень енергії залягання домішкового рівня $E_D = -150, -450, -750$ меВ. Отримано різний характер залежностей енергії Фермі від температури для різних величин концентрації n_D. Так, у випадку концентрації $n_D = 10^{18}$ см$^{-3}$ функції $E_F = E_F(T)$ (криві 7,8,9) є монотонними, тоді як при менших концентраціях $n_D = 10^{14}, 10^{16}$ см$^{-3}$ (криві 1-6) отримуємо мінімуми при певних температурах. Зміна енергії залягання домішкового рівня E_D значно змінює енергію E_F за наявності великих концентрацій донорів ($n_D = 10^{18}$ см$^{-3}$). Для малих n_D ($n_D = 10^{16}$ см$^{-3}, 10^{14}$ см$^{-3}$) хімічний потенціал слабо залежить від E_D, а якщо $T > 600$K і $n_D = 10^{16}$ см$^{-3}$ та $T > 100$K і $n_D = 10^{14}$ см$^{-3}$, то $E_F \neq E_F(E_D)$.

Наступний етап роботи стосувався дослідження залежності концентрації носіїв струму в підзонах від зазначених параметрів.

Обчислення концентрації електронів n_e у підзонах показали, що залежно від енергії залягання донорних рівнів можливі різні типи залежностей для заданих концентрацій домішок. При енергії донорів $E_D < \min E_{осн}(\mathbf{k}) = -714$ меВ $< \min E_{збуд}(\mathbf{k}) = -609$ меВ,

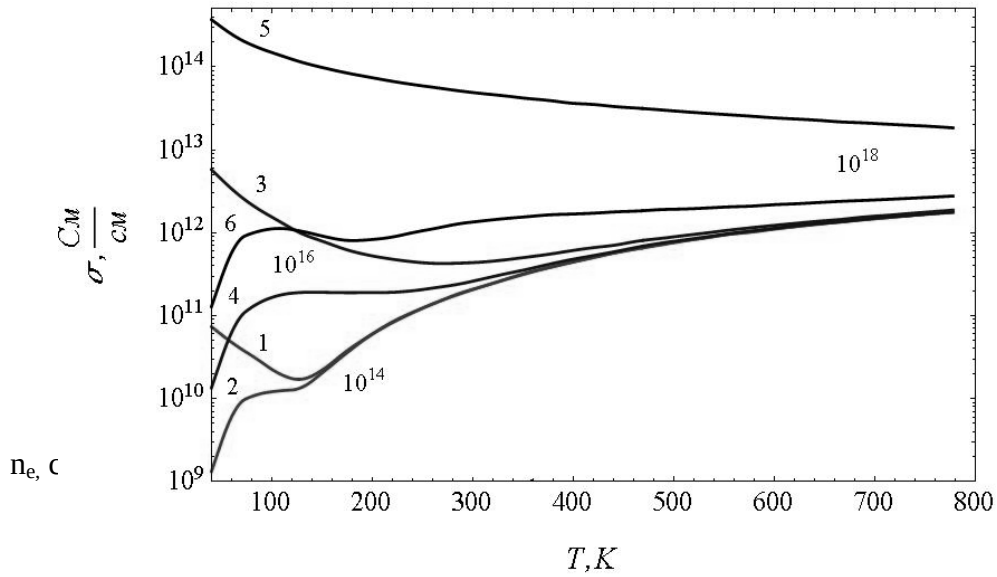

Рис. 5. Температурна залежність електропровідності 3D-НККТ InAs/$Ga_{0.15}In_{0.85}As$ (L = 96 Å) для різних концентрацій домішок: 10^{14} $см^{-3}$ – криві 1, 2; 10^{16} $см^{-3}$ – криві 3, 4; 10^{18} $см^{-3}$ – криві 5, 6) та енергіях залягання домішкового рівня (-150 меВ – криві 1, 3, 5; -750 меВ – криві 2, 4, 6).

наприклад, $E_D = -750$ меВ, електрони як в збуджених, так і основній підзонах практично відсутні і концентрація носіїв заряду n_e монотонно зростає з температурою (криві 2, 4, 6 на рис. 3) для всіх значень n_D (10^{14},10^{16},10^{18} $см^{-3}$ відповідно). Для значень енергії донорів $E_D > \max E_{збуд}\left(\mathbf{k}\right) = -340$ меВ $> \max E_{осн}\left(\mathbf{k}\right) = -666$ меВ, наприклад, $E_D = -150$ меВ, залежність від температури концентрації n_e є різною. Для кожного n_D існує своя область температур, в якій концентрація носіїв струму від температури не залежить. Зокрема, якщо $n_D = 10^{16}$ $см^{-3}$, то такою областю є $T < 260$ K, а якщо $n_D = 10^{16}$ $см^{-3}$ – $T < 160$ K. Якщо температура є вища, то маємо монотонне зростання n_e з температурою. Зауважмо, що для $n_D = 10^{18}$ $см^{-3}$ у розглядуваній області $T \le 800$ K n_e не змінюється з температурою.

Помістимо досліджувану систему у зовнішнє електричне поле. Нехай напруженість електричного поля направлена вздовж осі координат Oz для надграток різних вимірностей. Для 3D-надґратки, яка має кубічну симетрію, провідність не залежить від напрямку напруженості, тому σ можна вважати скаляром. Коли ж маємо 2D- чи 1D-надґратки, то густина струму НККТ є анізотропна величина, тобто залежить від напрямку вектора $\mathbf{E}$.

Питома провідність надґратки InAs/$Ga_{0.15}In_{0.85}As$ також залежить як від концентрації та енергії іонізації донорів, так і температури. На рис.4 наведено температурну залежність електропровідності систем різних вимірностей (1D – криві 1, 2; 2D – криві 3, 4; 3D – криві 5, 6) та енергій залягання домішкового рівня E_D (-150 меВ – криві 1, 3, 5; -750 меВ – криві 2,4,6) при концентрації домішок $n_D = 10^{18}$ $см^{-3}$. Для заданих систем вибрано наступні параметри: розміри КТ – L = 96 Å при відстанях між ними d=12 Å. Як видно з рисунку, зі збільшенням вимірності системи провідність зростає при заданій температурі. При цьому температурна залежність провідності для різних значень E_D – різна. Коли енергія залягання домішкового рівня $E_D = -150$ ì åÂ (криві 1, 3, 5 на рис. 4) електропровідність НККТ має «металічний» характер – монотонно спадає з ростом температури. При $E_D = -750$ меВ (криві 2, 4, 6 на рис. 4) електропровідність росте зі збільшенням температури. Немонотонний характер її в області низьких температур $(T < 300$ K$)$, на нашу думку, пояснюється наявністю двох взаємопоборюючих механізмів: росту концентрації носіїв струму (електронів) та зменшення їх часу релаксації.

Збільшення концентрації домішок n_D до значення 10^{18} $см^{-3}$ легуванням матриці одновалентною донорною домішкою призводить до росту на порядки провідності (криві 5, 6 на рис. 5) порівняно з $n_D = 10^{16}$ $см^{-3}$ (криві 3,4) та $n_D = 10^{14}$ $см^{-3}$ (криві 1, 2).В області низьких температур $(T < 300$ K$)$ електропровідність σ суттєво залежить як від концентрації n_D, так і енергії E_D донорів. Як видно з рис.5, при $n_D = 10^{14}$ $см^{-3}$, починаючи з $T > 160$ K, зникає залежність $\sigma(E_D)$ (для концентрації $n_D = 10^{16}$ $см^{-3}$ – при $T > 560$ K). Одночасно при високих температурах $(T > 500$ K$)$ провідність слабо залежить і від концентрації домішок n_D. Це можна пояснити тим, що при таких температурах суттєвими стають переходи електронів

з підзон валентної зони на електронні підзони зони провідності.

Висновки

У роботі досліджено властивості системи просторово впорядкованих кубічних квантових КТ, що знаходяться у матриці (НГ квантових точок). Розглянуто випадок НП наногетероструктури $InAs/Ga_xIn_{1-x}As$. Для визначення енергетичного спектру електронів та дірок НГ квантових точок використано наближення ефективної маси та модифіковану модель Кроніга-Пенні. У рамках цієї моделі зміною відповідних відстаней між елементами НГ можна отримати спектри зарядів 3D-, 2D- та 1D-нграток.

Конкретні обчислення проведено для НККТ з малими розмірами квантових точок 96 Å для КТ InAs. Отримано детальну залежність енергій від хвильового вектора електронних та діркових надґраткових підзон. Підзони є двох типів: підбар'єрні, енергія яких менша енергії розриву зони провідності та валентної зони, та надбар'єрні підзони з більшою енергією. Кількість підбар'єрних підзон визначається розмірами КТ, а ширина кожної підзони задається розміром КТ, відстанями між надґратковими елементами та номером підзони.

Для легованої донорними домішками матриці, за наявності домішок одного типу, досліджено залежність рівня Фермі, концентрації носіїв струму від температури ($40 \le T \le 800$ К), концентрації домішок (10^{14} см$^{-3}$, 10^{16} см$^{-3}$, 10^{18} см$^{-3}$), енергії домішкових рівнів від дна зони провідності напівпровідникової матриці (-750 меВ, -150 меВ).

Встановлено, зокрема, що температурна залежність концентрації електронів та дірок у підзонах НГ визначається положенням донорних рівнів відносно основної електронної підзони. Коли енергія домішкових рівнів менша за дно основної електронної підзони, то збільшення температури НГ спричиняє монотонне зростання концентрації носіїв струму. Якщо ж донорні рівні знаходяться вище за вершину цієї підзони, то маємо монотонно спадну функціональну залежність концентрації електронів від температури, яка виходить на насичення з ростом T.

Порівняння ступеня заповнення основної та збуджених підзон показує, що для більшої області температур ($T \le 500$ К) заповнення основної підзони значно більше, ніж збуджених підзон. Зокрема, для невеликих напруженостей електричних полів, коли виконується закон Ома, обчислено густину провідності 3D-, 2D-, 1D-надграток. Показано, що за наявності глибоких домішок (-750 меВ) температурна залежність провідності НГ має характерні максимуми, які визначаються концентраціями домішок та вимірностями НГ. Для домішок з енергією залягання -150 меВ отримуємо іншу температурну залежність провідності.

Бойчук В.І. - доктор фізико-математичних наук, професор кафедри теоретичної і прикладної фізики та комп'ютерного моделювання, директор Інституту фізики, математики, економіки та інноваційних технологій;
Білинський І.В. - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної і прикладної фізики та комп'ютерного моделювання;
Пазюк Р.І. - старший викладач кафедри інформатики та обчислювальної математики.

[1] P. Yu, M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (Springer, Berlin, 2010).
[2] R. Tsu, Superlattice to nanoelectronics (Elsevier, Oxford, 2010).
[3] Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, Физ. техн. полупр. 45, 387 (2011).
[4] M.V. Tkach et al., Rom. J. Phys. 57, 620 (2012).
[5] Ju.O. Seti, M.V. Tkach, I.V. Boyko, J. Optoelectron. Adv. Mater. 14, 393 (2012).
[6] V.A. Holovatsky, V.I. Gutsul, O.M. Makhanets, Rom. Journ. Phys. 52, 327 (2007).
[7] O.L. Lazarenkova, A.A. Balandin, Journal of Applied Physics 89 (10), 5509 (2001).
[8] O.L. Lazarenkova, A.A. Balandin, Phys. Rev. B 66, 245319 (2002).
[9] [9] В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.І. Пазюк, Фізика і хімія твердого тіла 17(№3), 320 (2016).
[10] M.A. Cusack, P.R. Briddon, and M. Jaros, Phys. Rev. B 54, R2300 (1996).
[11] C. Goffaux, V. Lousse, and J.P. Vigneron, Phys. Rev. B 62, 7133 (2000).
[12] Jianping Wang, Ming Gong, Guang-Can Guo, Lixin Condensed Matter 24 (47), 475302 (2012).
[13] G. Bastard, Phys. Rev. B25, 7584 (1982).
[14] В. Бойчук, Основи теорії твердого тіла (Коло, Дрогобич, 2010).
[15] R. Mohan, Y. Liang, Cutting Edge Nanotechnology (In Tech, 2010).
[16] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников, Физика полупроводников (Наука, Москва, 1990).

V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.I. Pazyuk

Miniband Electroconductivity in Superlattices of Cubic Quantum Dots of the $InAs/Ga_xIn_{1-x}As$ Heterosystem

Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, 3 Stryiska St, Drohobych, 82100, Ukraine, ri.pazyuk@gmail.com

In this paper, the model of $InAs/Ga_xIn_{1-x}As$ cubic quantum dot superlattices (CQDS) of various dimensionality has been proposed. The energy spectra of electrons and holes of the quantum dot superlattice have been determined in the effective mass approximation and modified Kronig-Penney model. In the frame of this model, the spectra of charges of 3D, 2D and 1D-superlattices can be obtained by changing respective distances between the elements of the superlattice. The energy dependence of the electron and hole subbands (under-the-barrier subbands and over-the-barrier subbands) on the wave vector of the superlattice has been calculated. The number of under-the-barrier subbands is determined by QD size and width of each subband is defined by QD size, distances between superlattice elements and subband numerical index.

The dependences of the Fermi energy and concentration of charge carriers on temperature, concentration of impurities, energy of impurity levels have been obtained and analyzed. We have taken account of the dependence of electron relaxation time on temperature caused by scattering of carriers on both phonons and donor centers. The effect of the impurity system on electroconductivity of the CQDS is investigated. It has been shown that in the presence of deep impurities (-750 meV) the temperature dependence of conductivity of the superlattice has characteristic peaks, which are defined by concentrations of impurities and dimensionality of the superlattice. A different temperature dependence of conductivity has been observed for impurities with the energy of occurrence -150 meV.

Key words: quantum dot, superlattice, electronic states, miniband, electroconductivity.